

Centro de Investigación Científica y de Educación Superior de Ensenada



**"DEPOSITO DE ENERGIA EN LiF ANTE
IRRADIACION CON PARTICULAS CARGADAS
PESADAS Y SU RELACION CON LA RESPUESTA
TERMOLUMINISCENTE DEL MATERIAL"**

TESIS

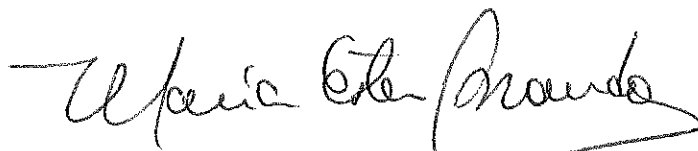
DOCTORADO EN CIENCIAS

OLGA LETICIA AVILA AGUIRRE

Ensenada, Baja Cfa., Mexico.

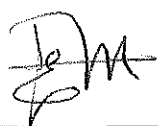
Enero de 2000.

TESIS DEFENDIDA POR
Olga Leticia Avila Aguirre
Y APROBADA POR EL SIGUIENTE COMITÉ



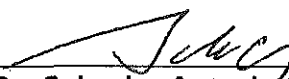
Dra. María Ester Brandan Siqués

Director del Comité



Dra. Mercedes Rodríguez Villafuerte

Miembro del Comité



Dr. Salvador Antonio Cruz Jiménez

Miembro del Comité



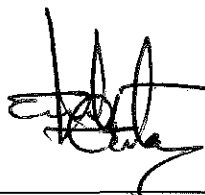
Dr. Héctor Octavio Murrieta Sánchez

Miembro del Comité



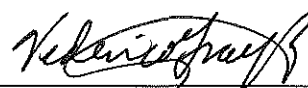
Dr. Mario Humberto Farías Sánchez

Miembro del Comité



Dr. Leonel Susano Cota Araiza

*Jefe del Departamento de Física de
Materiales*



Dr. Federico Graef Ziehl

Director de Estudios de Posgrado

31 de enero del 2000

**CENTRO DE INVESTIGACIÓN CIENTÍFICA
Y DE EDUCACIÓN SUPERIOR DE ENSENADA**

**DIVISIÓN DE FÍSICA APLICADA
DEPARTAMENTO DE FÍSICA DE MATERIALES**

**“DEPÓSITO DE ENERGÍA EN LiF ANTE IRRADIACIÓN CON
PARTÍCULAS CARGADAS PESADAS Y SU RELACIÓN CON
LA RESPUESTA TERMOLUMINISCENTE DEL MATERIAL”**

TESIS

que para cubrir parcialmente los requisitos necesarios
para obtener el grado de
Doctor en Ciencias
presenta:

OLGA LETICIA ÁVILA AGUIRRE

Ensenada, Baja California, México, Enero de 2000.

RESUMEN de la tesis de Olga Leticia Avila Aguirre presentada como requisito parcial para la obtención del grado de **DOCTOR EN CIENCIAS EN FÍSICA DE MATERIALES**. Ensenada, Baja California, México. Enero 2000.

DEPÓSITO DE ENERGÍA EN LiF ANTE IRRADIACIÓN CON PARTÍCULAS CARGADAS PESADAS Y SU RELACION CON LA RESPUESTA TERMOLUMINISCENTE DEL MATERIAL

Resumen aprobado por:


Dra. Maria Ester Brandan-Siqués
Directora de Tesis

Se describe el transporte de iones de baja energía y de sus electrones secundarios en LiF mediante un procedimiento de simulación Monte Carlo (MC) que considera explícitamente la naturaleza sólida del material. Como resultado de este procedimiento se obtienen curvas de distribución radial de dosis MC para helios y protones de varias energías entre 1 y 20 MeV /nucleón. Se utilizan modelos teóricos que relacionan la etapa inicial de depósito de energía con la emisión de luz termoluminiscente (TL) para predecir valores de eficiencia. Se aplica la teoría de estructura de trazas (TST) para obtener eficiencias TL relativas para la señal total de LiF de protones y helios respecto de radiación gamma usando las distribuciones radiales de dosis MC. Se compara con medidas recientes de eficiencia de alta transferencia lineal de energía (LET en inglés), lo que sugiere un valor óptimo de tamaño de volumen sensible entre 50 y 100 Å. Se aplica la teoría de estructura de trazas modificada (TSTM) para obtener eficiencias TL relativas usando las distribuciones radiales de dosis MC y rayos-X de 8.1 keV como radiación de prueba. Las predicciones teóricas obtenidas con los dos modelos están en buen acuerdo con los valores experimentales aunque las predicciones muestran una dependencia con la energía más fuerte que los datos. Se discute el papel de la energía de corte introducida en el procedimiento MC para generar electrones secundarios y su efecto en los resultados. Se obtienen valores del radio de saturación de la traza sugerido por el modelo TSTM y se compara con predicciones de otro modelo. Se discute el efecto de la elección particular de la radiación de prueba en los resultados. Este trabajo incluye la naturaleza sólida de LiF en el cálculo de distribuciones radiales de dosis considerando en detalle las interacciones de los electrones secundarios en este material y particularmente a través de la función dieléctrica de LiF. Esta información es indispensable para el cálculo de eficiencias TL y puede ser esencial para la mejor comprensión de la termoluminiscencia en LiF inducida por partículas cargadas pesadas.

Palabras clave: Termoluminiscencia, LiF, Depósito de Energía, Monte Carlo, Perfiles de Dosis, Partículas de alto LET, Eficiencias Termoluminiscentes

SUMMARY of Olga Leticia Avila Aguirre's thesis submitted in partial fulfillment of the requirements for the degree of **DOCTOR EN CIENCIAS EN FÍSICA DE MATERIALES**. Ensenada, Baja California, México. January 2000.

**ENERGY DEPOSITION IN LiF BY HEAVY CHARGED PARTICLE
IRRADIATION AND ITS RELATION TO THE THERMOLUMINESCENT
RESPONSE OF THE MATERIAL**

Approved by


Dr. Maria Ester Brandah-Siques
Thesis' Director

A description of low energy ion and secondary electron transport in LiF is performed by means of a Monte Carlo (MC) simulation which considers explicitly the solid state nature of the material. The procedure is used to obtain MC radial dose distributions for proton and helium ions at several energies between 1 and 20 MeV/nucleon incident on LiF. Models which relate the initial energy deposition to the final thermoluminescent (TL) emission are used to predict TL efficiencies. Track structure theory (TST) is applied to calculate proton-to-gamma and helium-to-gamma relative TL efficiencies using the MC radial dose distributions for the total signal of LiF. Comparison with recent high linear energy transfer (LET) efficiency measurements suggests an optimum value for the target size within the interval 50 -100 Å. Modified track structure theory (MTST) relative TL efficiencies were calculated using the MC radial dose distributions and 8.1 keV X-rays as test radiation. It is found that both theories show good agreement with the data, though both predict an energy dependence stronger than observed. The importance of the cutoff energy for secondary energy generation in the MC code is discussed. Values of the "saturation radius" suggested by the MTST are compared to values of core radius predicted by another model. The effect of the particular choice of test radiation in the MTST results is discussed. This work includes the solid state effects in the calculated radial dose distributions in LiF by considering in detail the interactions of secondary electrons in this material and particularly by means of introducing the LiF dielectric function. These calculations are necessary for the evaluation of efficiency values and may prove to be essential in the understanding of heavy charged particle induced thermoluminescence in LiF.

Key Words: Thermoluminescence, LiF, Energy Deposition, Monte Carlo, Dose Profiles, Thermoluminescence Efficiencies

DEDICATORIA

A Ernesto, Andrea y Pablo

A la memoria de Olga Cisneros

Agradecimientos

Le agradezco enormemente a la Dra. María Ester Brandan la dirección de este trabajo pero aunado a esto deseo agradecerle todo aquello que con su dedicación, tiempo y calidez constituyó una parte importante de mi vida durante los años del desarrollo de esta investigación. Ha sido mucho mas que una asesora para mi, que sabe exigir mucho pero también sabe dar mucho. Por su paciencia casi infinita. Y, por su toque de dulzura. La palabra “gracias” es insuficiente.

Agradezco asimismo a las personas e instituciones que se enumeran a continuación:

A las autoridades del CICESE, en particular al Dr. Federico Graef Ziehl, por permitirme contarme entre sus egresados así como por la oportunidad de hacerlo como estudiante del Instituto de Física de la UNAM en la ciudad de México a través del convenio CICESE-IFUNAM.

Al Dr. Leonel Cota, director del entonces laboratorio de IFUNAM en Ensenada y ahora Centro de Ciencias de La Materia Condensada de la UNAM.

A las autoridades del Instituto Nacional de Investigaciones Nucleares que autorizaron que mi tiempo y trabajo de investigación pudiera ser enfocado a la obtención del doctorado. En especial deseo agradecer al Dr. Federico García Santibáñez, al Dr. Jaime Vega y al Dr. Miguel Balcázar por concederme su apoyo constante y por otorgar múltiples facilidades.

A las autoridades del Instituto de Física de la UNAM, y en particular al Departamento de Física Experimental por admitirme como estudiante asociado y concederme todas las facilidades en cuanto a uso de computadoras y biblioteca.

Al Dr. Francesc Salvat y al Dr. José María Fernández-Varea de la Universidad de Barcelona por su ayuda en la comprensión de las interacciones de electrones con sólidos y la simulación Monte Carlo.

Al Dr. Alberto Gras-Martí de la Universidad de Alicante que al permitirme una estancia en su laboratorio proporcionó las bases para iniciar el tema de la investigación que se sustenta en este trabajo.

A los miembros del Comité de Tesis y Sinodales, Dr. Salvador Cruz Jiménez, Dr. Héctor Murrieta Sánchez, Dr. Mario Fariás y Dra. Mercedes Rodríguez-Villafuerte por su interés en la investigación y por sus comentarios, sugerencias y discusiones en torno a esta expresadas en las reuniones de avance.

A la Dra. Isabel Gamboa de Buen por su ayuda incondicional en diversas etapas de la investigación y en especial por su apoyo en la comprensión del método de cálculo de la teoría de estructura de trazas y por su valiosa amistad.

A los coordinadores del posgrado en el ahora Centro de Ciencias de la Materia Condensada de la UNAM en Ensenada, Dr. Jesús Siqueiros, Dr. Enrique Sámano, Dr. Mario Fariás y Dr. Noboru Takeuchi por su actitud siempre dispuesta a cooperar y estar pendientes a distancia de todo requisito necesario a cumplir.

Al personal administrativo de CICESE, en especial a Margarita Jaúregui por brindar facilidades para todo tipo de trámites.

A la M. en C. Ana Elena Buenfil y al Fís. César Ruiz Trejo por su interés en mi investigación y su amistad así como a todos y cada uno de los estudiantes asociados al grupo de “Interacción de radiación con la materia” que dirige la Dra. Brandan con quienes conviví y compartí las siempre interesantes y esclarecedoras reuniones de trabajo.

A las secretarias, María Teresa Cázares del departamento de Física Experimental de IFUNAM y María Acosta del departamento de Física del ININ por su siempre atenta disposición a la realización de diversos trámites así como por su amistad.

Al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología por otorgar beca de colegiatura 88648 y ayuda financiera a través del “Apoyo para investigadores para la obtención del doctorado”, 940158.

A DGAPA-UNAM, proyectos IN10093 e IN100396.

A todas aquellas personas que no he podido mencionar aquí con quienes he convivido y hacen agradable los días y años de trabajo.

A las más importantes personas en mi vida, Andrea, Pablo y Ernesto que han tenido que cargar junto conmigo, por mas tiempo del que quisiera expresar, todo aquello que significó mi compromiso de realizar un trabajo de doctorado.

CONTENIDO

	Página
I INTRODUCCIÓN	1
I.1 Presentación del problema y objetivos de la tesis	1
I.2 Conceptos Básicos	1
I.2.A Termoluminiscencia	5
I.2.A.1 Materiales termoluminiscentes	5
I.2.A.2 Teoría de bandas, defectos e impurezas	6
I.2.A.3 Teoría general de la curva de brillo	11
I.2.A.4 Fluoruro de Litio	15
1) Impurezas	15
2) Supralinealidad	16
3) Eficiencia termoluminiscente	19
I.2.B Modelos Teóricos	28
I.2.B.1 Teoría de estructura de trazas	28
1) Generalidades	28
2) Probabilidades de activación y secciones de activación	31
3) Distribuciones radiales de dosis	32
4) Eficiencias termoluminiscentes relativas de LiF:Mg,Ti	33
5) Respuesta termoluminiscente a rayos γ	33
6) Respuesta termoluminiscente a partículas cargadas pesadas	34
7) Método de cálculo TST de eficiencias TL relativas	37
I.2.B.2 Teoría de estructura de trazas modificada	40
1) Generalidades	40
2) Radiación de prueba	41
3) Determinación de $\eta_{\delta\gamma}$	42
4) Valores $\bar{W}_{\gamma}$ y $\bar{W}_{PCP}$	44
I.2.C Interacción de partículas cargadas con materia	45
I.2.C.1 Interacción de partículas cargadas pesadas con materia	45
1) Pérdida de energía	45
a) Poder de frenado electrónico	46
a.1) Región de altas energías	46
a.2) Región de bajas energías	48
a.3) Región de energías intermedias	49
b) Poder de frenado nuclear	53
2) Alcance	54
I.2.C.2 Interacción de electrones con sólidos	54

I.2.D Distribuciones Radiales de Dosis	59
I.2.D.1 Sección eficaz de emisión de electrones secundarios	59
I.2.D.2 Distribuciones radiales de dosis tipo TST, método propuesto por Katz y colaboradores	61
I.2.D.3 Modelo químico de Chatterjee y colaboradores	66
I.2.D.4 Distribuciones radiales de dosis, método de Montret	69
I.2.D.5 Distribuciones radiales de dosis obtenidos mediante <i>simulación Monte Carlo en gases tejido-equivalentes</i>	70
I.2.D.6 Distribuciones radiales de dosis experimentales	73
II MÉTODO	75
II.1 Método Monte Carlo	75
II.1.A Variables aleatorias y números aleatorios	76
II.1.A.1 Variable aleatoria	76
II.1.A.2 Números aleatorios y pseudoaleatorios	76
II.1.B Métodos de sorteo aleatorio	77
II.1.B.1 Método de transformación inversa	78
1) Distribuciones discretas	79
2) Distribuciones numéricas	81
II.1.B.2 Método de rechazo	85
II.2 Descripción de Procesos de Depósito de Energía en LiF	87
II.2.A Acoplamiento de transporte de iones y electrones mediante simulación Monte Carlo	87
II.2.A.1 Generación de electrones secundarios	88
II.2.B Transporte de electrones	92
II.2.B.1 Interacciones elásticas	93
II.2.B.2 Interacciones inelásticas	95
1) Ionización en capas internas	96
2) Interacciones dieléctricas	97
II.2.C Actualización de las coordenadas de los electrones	102
II.2.D Resumen del funcionamiento de la simulación Monte Carlo	105
III. RESULTADOS	112
III.1 Validación del método	112
III.1.A Espectro de energía de electrones secundarios	112
III.1.B Fracción de energía total depositada por electrones secundarios	114
III.1.C Energía total depositada por electrones secundarios	114
III.1.D Alcances de partículas cargadas pesadas	116
III.1.E Alcances de electrones	116
III.2 Distribuciones radiales de dosis	119

III.3 Eficiencias termoluminiscentes relativas, modelo TST	125
III.4 Resultados del modelo TSTM	131
III.4.A Eficiencias termoluminiscentes relativas, modelo TSTM	131
III.4.B Radio de saturación	131
III.4.C Integral de dosis acumulada	133
III.4.D Efecto de usar distintas funciones $f_{\delta}(D)$	133
III.5 Energía de corte	138
 IV. DISCUSIÓN	 142
IV.1 Validación del método	142
IV.1.A Espectro de energía de electrones secundarios	142
IV.1.B Fracción de energía total depositada por electrones secundarios	142
IV.1.C Energía total depositada por electrones secundarios	143
IV.1.D Alcances de partículas cargadas pesadas	143
IV.1.E Alcances de electrones	143
IV.2 Distribuciones radiales de dosis	144
IV.3 Eficiencias termoluminiscentes relativas, modelo TST	147
IV.4 Resultados del modelo TSTM	148
IV.4.A Eficiencias termoluminiscentes relativas	148
IV.4.B Radio de saturación	150
IV.4.C Integral de dosis acumulada	151
IV.4.D Efecto de la elección particular de $f_{\delta}(D)$	151
 V. CONCLUSIONES	 153
 LITERATURA CITADA	 155

LISTA DE FIGURAS

Figura	Página
1 Defectos en un cristal típico. a) Defecto de Schottky (1) Defecto de Frenkel (2) □ vacancia ⊕ ion en posición intersticial b) Centro F	8
2 Impurezas en un cristal típico. El símbolo ○ representa a un ion de especie diferente a los componentes del cristal.	9
3 Esquema simple para los modelos termoluminiscentes. a) Esquema del mecanismo de excitación de electrones y agujeros en un cristal. b) Esquema del mecanismo de recombinación de los electrones y agujeros excitados en un cristal.	10
4 Curva de brillo de LiF: Mg,Ti (TLD-100) irradiado con partículas alfa de 5.3 MeV.	12
5 Curva de brillo de LiF: Mg,Ti (TLD-100) irradiado con protones de 1.5 MeV y separada mediante deconvolución en sus picos componentes.	13
6 Respuesta TL de TLD-100 expuestos a rayos X para la señal TL total y los picos 3 a 9. Las líneas punteadas corresponden a una respuesta lineal.	18
7 Compilación de medidas de eficiencia relativa de la señal TL total de dosímetros de LiF:Mg,Ti expuestos a partículas cargadas pesadas respecto de radiación gamma. (Kalef-Ezra, J. y Horowitz, Y.S., 1982). Protones (▲▼▲ y +), alfas (●○), iones pesados, C, O, Ne y Ar, (■□), fragmentos de fisión (↔) Se incluyen medidas para protones y helios dadas en (Geiss, O.B. <i>et al.</i>, 1998) y las realizadas en el IFUNAM para protones(△) y helios (⊙) (ver texto)	22
8 Compilación de medidas de eficiencia relativa (señal integrada del pico 5) de dosímetros de LiF:Mg,Ti expuestos a partículas cargadas pesadas respecto de radiación gamma. (Kalef-Ezra J. y Horowitz, Y.S., 1982). Protones (▲▼▲), alfas (○), iones pesados, Ne, Cu y Kr, (■□). Se incluyen otros datos de protones (Schmidt P. <i>et al.</i>, 1990) (▼▲) y las medidas realizadas en el IFUNAM para protones (△) y helios (⊙) (ver texto)	23

LISTA DE FIGURAS (continuación)

Figura		Página
9	Eficiencia de dosímetros TLD-700 como función de la pérdida de energía promedio. Comparación entre medidas (símbolos) y cálculos (líneas) (Geiss, O.B. <i>et al.</i> , 1998)	25
10	Eficiencia de dosímetros de LiF: Mg,Ti como función de la pérdida de energía promedio para señal total de protones (▲) y helios (●) respecto a ^{60}Co (TLD-100, IFUNAM) y respecto de radiación X de 250 kVp (TLD-700, Geiss O. <i>et al.</i> , 1998), protones (▲) y helios (●).	26
11	Esquema simple de la distribución espacial de dosis debida a partículas cargadas pesadas y a radiación gamma en un cristal.	29
12	Curva dosis-respuesta para la señal TL total de TLD-100 expuestos a rayos γ de ^{60}Co . Las líneas corresponden a ajustes de dos componentes (de 1 y 2 impactos) usando el modelo de Katz, suponiendo diferentes contribuciones relativas. Se indican los valores de b, E_{01} , (1-b) y E_{02} .	35
13	Función de supralinealidad $f_{\delta}(D)$ para la señal total inducida por rayos-X de 8.1 keV en TLD-100. (Gamboa-deBuen I. <i>et al.</i> , 1998a).	43
14	Esquema general del poder de frenado dE/dx para partículas cargadas incidentes en un medio. Se pueden distinguir tres regiones de energía en las que se aplican distintas descripciones.	47
15	Trazas de PCP (a) y de electrones (b) en un medio dispersor. Se muestra la trayectoria de la partícula incidente así como la de los electrones secundarios generados.	56
16	Sección eficaz y espectro de emisión de electrones por protones en N_2 . (Toburen L.H., 1971).	60
17	Distribución radial de dosis $\bar{E}(z_{ef}, \beta, t, a_0)$ para helios de 5.3 MeV en LiF obtenida de manera analítica según el procedimiento de TST propuesto por Katz y colaboradores usando $a_0 = 100 \text{ \AA}$.	65
18	Representación de la sección transversal de una traza de una PCP en agua. La región central es el carozo de radio r_c ; el siguiente círculo indica el límite del carozo químico con radio r_q y el círculo más externo con radio r_p marca el límite de la penumbra.	68

LISTA DE FIGURAS (continuación)

Figura		Página
19	Sección eficaz de transferencia de energía de PCP a electrones, T. Se indica la energía de corte T_c .	90
20	La función pérdida de energía para LiF (Palik, E.D. y Hunter, W.R., 1985)	99
21	Relación entre los cosenos directores y los ángulos de dispersión.	103
22	Trayectoria de un electrón que interacciona en los puntos E_1 , E_2 y E_3 .	106
23	Traza de una PCP dividida en secciones cilíndricas transversales.	109
24	Cilindros longitudinales concéntricos en los que se deposita energía alrededor de la trayectoria de la PCP.	110
25	Diagrama de flujo del procedimiento de simulación Monte Carlo para la generación de electrones, transporte de electrones y depósito de energía.	111
26	Espectro de energías de electrones secundarios. La curva sólida representa la sección eficaz para emisión de electrones por protones de 1 MeV en N_2 medida por Toburen (Toburen, L.H., 1971). Las cruces representan el número de electrones generados por 10000 historias de protones de 1 MeV en LiF en este trabajo.	113
27	Porcentaje de energía que se usa para generar electrones secundarios en un cálculo MC de traza completa, como función de la energía inicial del ion.	115
28	Alcance de electrones en LiF como función de su energía. Alcance de Bethe para electrones en LiF (Fernández-Varea <i>et al.</i> , 1996) (■) y distancia total recorrida por los electrones en LiF obtenida mediante el procedimiento MC (✱)	117
29	Promedio de la penetración máxima de electrones en LiF obtenida en este trabajo, en función de su energía considerando dos dimensiones (xy) y tres dimensiones (xyz). Se compara con las relaciones entre energía y alcance del electrón usadas en otros trabajos.	118

LISTA DE FIGURAS (continuación)

Figura		Página
30	Distribuciones radiales de dosis de protones de 1.43 MeV en LiF. Cálculo de traza completa. La distancia total en la dirección z se dividió en 8 secciones como se muestra. Las etiquetas de la curva se refieren al número de sección. Se indica la energía del protón conforme entra a cada sección en distinta profundidad en LiF. El alcance proyectado es de 21.2 μm . 1 Gy corresponde a 2.635×10^{-20} erg $\text{\AA}^{-3}$ en LiF ($\rho = 2.635 \text{ g cm}^{-3}$).	121
31	Distribuciones radiales de dosis de helios de 4 MeV en LiF. Traza completa. En este caso, la distancia total en la dirección z se dividió en 6 secciones. El alcance proyectado es de 14 μm .	122
32	a) Poder de frenado dE/dz en función de la energía para protones en LiF. b) Poder de frenado dE/dz en función de la energía para helios en LiF.	123
33	Cálculo de distribución radial de dosis (segmento de traza) obtenido en este trabajo para helios de 3 MeV en LiF (línea sólida) comparado con medidas en gas tejido-equivalente (Wingate C. y Baum J.W., 1976) (○) y con cálculos MC en vapor de agua (Krämer M. y Kraft, G., 1994) (+).	124
34	Cálculo de distribución radial de dosis (segmento de traza) obtenido en este trabajo para helios de 4 MeV en LiF (línea sólida) comparado con cálculo analítico (Montret, M., 1980) (línea punteada).	126
35	a) Cálculo MC de segmento de traza para helios de 5.3 MeV en LiF (línea sólida) comparado con cálculo analítico de blanco puntual mediante el método TST (línea punteada) b) Cálculo MC de segmento de traza para protones de 0.7 MeV en LiF (línea sólida) comparado con cálculo analítico de blanco puntual mediante el método TST (línea punteada)	127
36	a) Cálculo de blanco extendido usando distribuciones radiales de dosis MC (segmento de traza) para helios de 5.3 MeV en LiF (línea sólida) y usando distribuciones radiales de dosis analíticas (línea punteada) según el modelo TST b) Cálculo de blanco extendido usando distribuciones radiales de dosis MC (segmento de traza) para protones de 0.7 MeV en LiF (línea sólida) y usando distribuciones radiales de dosis analíticas (línea punteada) según el modelo TST	128

LISTA DE FIGURAS (continuación)

Figura		Página
37	Eficiencias TL relativas en LiF de protones y helios respecto de radiación gamma de ^{60}Co en función del LET en agua. Se muestran medidas experimentales y predicciones del modelo TST usando las distribuciones radiales de dosis calculadas en este trabajo con distintos tamaños de a_0 .	130
38	Eficiencias TL relativas en LiF de protones y helios respecto de radiación gamma de ^{60}Co en función del LET en agua. Medidas experimentales y predicciones del modelo TSTM usando distribuciones radiales de dosis MC y la $f_d(D)$ proveniente de rayos-X de 8.1 keV	132
39	Radio de saturación obtenido al aplicar TSTM a helios de 6.76 MeV en LiF	134
40	Radio de saturación obtenido al aplicar TSTM a protones de 2.94 MeV en LiF	135
41	Integral acumulada de la dosis y del producto $D \cdot f_d(D)$ en función de la distancia radial de la trayectoria de la PCP para protones de 1.43 MeV (segmento de traza)	136
42	Distintas funciones $f_d(D)$ de la radiación de prueba que se introducen en el cálculo de eficiencia TL relativa con el modelo TSTM	137
43	Efecto de usar distintas radiaciones de prueba al calcular las eficiencias TL de protones respecto de gamma en LiF con el modelo TSTM	139
44	Efecto de usar distintas radiaciones de prueba al calcular las eficiencias TL de helios respecto de gammas en LiF con el modelo TSTM	140
45	Distribuciones radiales de dosis para protones de 0.7 MeV en LiF obtenidas con distintos valores de T_c .	141

LISTA DE TABLAS

Tabla		Página
I	Radio del carozo y radio de la penumbra para iones con distintas energías en agua (Magee J.L. y Chatterjee, A., 1984)	67

“DEPÓSITO DE ENERGÍA EN LiF ANTE IRRADIACIÓN CON PARTÍCULAS CARGADAS PESADAS Y SU RELACIÓN CON LA RESPUESTA TERMOLUMINISCENTE DEL MATERIAL”

I. INTRODUCCIÓN

I.1 Presentación del problema y objetivos de la tesis.

El interés principal de este trabajo se centra en el estudio de la termoluminiscencia (TL) inducida por partículas cargadas pesadas (PCP). La termoluminiscencia es la emisión de luz que exhiben algunos materiales al ser calentados después de exponerlos a radiación. La importancia de su estudio está ligada al hecho de que algunos materiales que poseen esta propiedad se utilizan en dosimetría. El panorama del conocimiento actual y el grado de complejidad del fenómeno TL se ha descrito en los trabajos de Horowitz, (Horowitz Y.S., 1981 y Horowitz Y.S., 1984). Por un lado, la respuesta de un material a un campo dado de radiación no es siempre lineal, mostrando supralinealidad a dosis lo suficientemente altas y saturación a dosis aún más altas. Por otro lado, no se ha llegado a una comprensión total de la forma en que la eficiencia TL a exposición con PCP depende de la densidad de ionización. La investigación en este tema ha cobrado gran interés recientemente debido al uso de PCP en terapia médica y a la necesidad de contar con métodos confiables y prácticos en la determinación de dosis en el caso de exposición en vuelos espaciales.

En este estudio se realiza una investigación teórica de la respuesta TL de fluoruro de litio a irradiación con PCP que describe el proceso de depósito de energía considerando la

naturaleza sólida de LiF. Este estudio está relacionado con una serie de medidas que se han llevado a cabo en el Instituto de Física de la UNAM, (Gamboa-deBuen I., *et al.*, 1996, Gamboa-deBuen I., *et al.*, 1998a, Avilés P. *et al.*, 1998, Avilés P., 1998, Gamboa-deBuen I., *et al.*, 1998b y Rodríguez-Villafuerte, M., *et al.*, aceptado, sept. 1999) y que aspiran a dar una visión sistemática de la respuesta TL en función del tipo de partícula, energía y dosis proporcionada por la radiación incidente.

De manera simple, se puede dividir el proceso termoluminiscente en dos etapas, una inicial en la cual la energía es absorbida por el material al ser irradiado, y una etapa final en la cual el cristal emite luz al ser calentado. En este estudio se realiza una evaluación de la importancia de la primera etapa en el proceso TL, esto es, el depósito de energía en el material y su relación con la emisión final de luz. Las etapas TL se relacionan mediante la eficiencia termoluminiscente α , que se define como el cociente entre la energía promedio emitida como luz TL y la energía promedio impartida por el campo de radiación, (Kalef-Ezra J. y Horowitz Y.S., 1982). Dado que el proceso TL involucra varios mecanismos complejos intermedios previos a la emisión de luz, la investigación en TL se ha concentrado en estudiar propiedades relativas, por ejemplo, la respuesta TL a PCP relativa a la respuesta TL a una radiación de referencia que generalmente es radiación gamma de ^{60}Co . Los modelos actuales que abordan la descripción de la respuesta TL a PCP en términos del depósito inicial de energía en el medio son la teoría de estructura de trazas, propuesta originalmente por Butts y Katz, (Butts J.J. y Katz R., 1967), y la teoría de estructura de trazas modificada (Kalef-Ezra J. y Horowitz Y.S., 1982). Ambas teorías proponen

procedimientos para evaluar eficiencias TL relativas a partir del conocimiento de las distribuciones radiales de dosis alrededor de la trayectoria de las PCP y que representan la primera etapa del proceso TL.

En este trabajo se describen los procesos de depósito de energía en LiF mediante la simulación Monte Carlo del transporte de iones y de sus electrones secundarios en el cristal. A partir de esta descripción se calculan distribuciones radiales de dosis en el material y teniendo éstas se aplican los modelos TST y TSTM para evaluar eficiencias TL relativas.

A continuación se enumeran los objetivos de este trabajo:

- Describir los procesos de depósito de energía por PCP y sus electrones secundarios en LiF considerando su naturaleza sólida, lo que permite conocer y evaluar la primera etapa del fenómeno termoluminiscente inducido por PCP en fluoruro de litio.
- Calcular distribuciones radiales de dosis en LiF alrededor de la traza de la PCP usando el método de simulación Monte Carlo.
- Relacionar la etapa inicial de depósito de energía y la etapa final de emisión de luz TL a través del cálculo de eficiencias TL relativas:
 - i) Mediante el método de la teoría de estructura de trazas y usando las distribuciones de dosis Monte Carlo evaluar probabilidades de activación, secciones de activación y eficiencias TL de protones y helios respecto de radiación gamma.
 - ii) Mediante la teoría de estructura de trazas modificada y usando las distribuciones radiales de dosis Monte Carlo encontrar predicciones para el valor de la eficiencia TL relativa de protones y helios respecto de radiación gamma.

- Comparar los resultados de ambos modelos con medidas experimentales recientes realizadas por el grupo de interacción de radiación con materia de IFUNAM, México.
- Analizar el efecto de las hipótesis empleadas, en particular del valor de la energía de corte para la generación de electrones secundarios en los resultados de eficiencia TL usando ambos modelos y el uso de distintas radiaciones de prueba al aplicar la TSTM.

Las publicaciones Ávila *et al.* (1996) y Ávila *et al.* (1999) contienen los resultados totales y finales de este trabajo.

La presentación de la tesis queda dividida de la siguiente manera: el capítulo I engloba los antecedentes generales y el estado del arte del fenómeno termoluminiscente; conceptos básicos, modelos teóricos asociados, distribuciones radiales de dosis y pérdida de energía de iones y electrones en sólidos. El capítulo II describe el formalismo general de la simulación tipo Monte Carlo y posteriormente el método que se desarrolló en este trabajo para la descripción del depósito de energía en LiF. En el capítulo III se muestran los resultados que son discutidos detalladamente en el capítulo IV. Finalmente el capítulo V presenta las conclusiones.

I.2 Conceptos Básicos.

I.2.A Termoluminiscencia

La termoluminiscencia (TL) es la emisión de luz en materiales que son calentados después de haber sido irradiados. Este fenómeno se ha explicado cualitativamente en base a la existencia de defectos e impurezas en el cristal (Cameron, J. *et al.*, 1968, McKeever, S.W.S., 1988). La irradiación de la materia mediante rayos gamma o partículas cargadas tiene por efecto, entre otros, la ionización del medio. Los portadores de carga creados, electrones o agujeros, pueden moverse dentro del sólido hasta quedar “atrapados” en estados metaestables asociados con defectos o impurezas dentro del material. Un aporte exterior de energía puede lograr que los electrones o agujeros salgan de sus “trampas”. La recombinación de electrones y agujeros conduce a entidades excitadas que pueden regresar a sus estados fundamentales mediante la emisión de luz. Cuando la energía se proporciona en forma de calor, tenemos el fenómeno de termoluminiscencia.

I.2.A.1 Materiales termoluminiscentes

Distintos materiales exhiben propiedades termoluminiscentes, entre ellos minerales que pueden ser cristales inorgánicos, materiales cerámicos y vidrios, así como compuestos orgánicos como polímeros y materiales biológicos. El interés en la termoluminiscencia comenzó cuando se hizo evidente su utilidad en dosimetría de la radiación. Diversos materiales dopados se han estudiado desde este punto de vista, entre ellos: fluoruro de litio, $\text{LiF}:\text{Mg,Ti}$, $\text{LiF}:\text{Mg,Cu,P}$; borato de litio, $\text{Li}_2\text{B}_4\text{O}_7:\text{Mn}$; óxido de berilio, BeO ;

fluoruro de calcio, CaF_2 natural y $\text{CaF}_2:\text{Dy}$; sulfato de calcio, $\text{CaSO}_4:\text{Mg}$; óxido de aluminio, Al_2O_3 ; etc. Las principales características deseables en un dosímetro son : intervalo amplio de linealidad en su respuesta a la dosis, poca sensibilidad a la luz, estabilidad, reusabilidad bajo determinados tratamientos térmicos, etc. Para dosimetría aplicada a usos médicos conviene que el material posea, además de las propiedades previamente mencionadas, un número atómico efectivo similar al del tejido ($Z_{ef} = 7.4$), lo que se conoce como material tejido-equivalente. El fluoruro de litio, que posee propiedades dosimétricas adecuadas y es casi tejido-equivalente ($Z_{ef} = 8.2$), es un material que ha sido muy estudiado y ampliamente utilizado. En la sección I.2.A.4 se discutirá con más detalle el comportamiento TL de este material.

I.2.A.2 Teoría de bandas, defectos e impurezas

Como se mencionó anteriormente, los defectos e impurezas en los cristales están relacionados con su capacidad para exhibir termoluminiscencia. Recordemos que un sólido cristalino se caracteriza porque los átomos que lo constituyen presentan un arreglo ordenado en tres dimensiones y sus niveles de energía se representan por medio de bandas. Dado que los átomos del sólido se encuentran tan cercanos unos de otros, los niveles de energía de sus electrones se traslapan de modo que no se tienen niveles individuales de energía para cada átomo sino bandas continuas de energías permitidas separadas por intervalos que corresponden a energías que no pueden poseer los electrones y que se denominan bandas prohibidas. En la realidad, los cristales presentan imperfecciones que pueden ser, entre otras, vacancias o impurezas. Las vacancias se presentan cuando se tiene la ausencia de un ion

dentro de la red cristalina, que también se llama defecto de Schottky. Cuando un ion deja el sitio que ocupa normalmente, puede inmovilizarse en una posición intersticial constituyendo el defecto de Frenkel. Un tipo de defecto común en un sólido es el centro F constituido por una vacancia de ion halógeno (el flúor en el caso de LiF) que capta un electrón. La figura 1 muestra estos defectos. Se le llama impureza a todo átomo de una especie química normalmente extraña al cristal. Pueden estar colocadas en posición intersticial o sustitucional (figura 2). Algunas existen en el cristal de manera accidental y no controlada y otras son añadidas de manera intencional y controlada. Las impurezas introducidas en un cristal termoluminiscente dan lugar a niveles de energía que, al no corresponder con los del sólido, caen dentro de la banda prohibida, constituyendo estados metaestables que funcionan como trampas de electrones y agujeros.

Un modelo simplificado del fenómeno termoluminiscente es el que sigue (McKeever, S.W.S., 1988): al incidir radiación ionizante en el cristal, se libera un electrón de la banda de valencia, el cual pasa a la banda de conducción dejando un agujero en la banda de valencia. El electrón y el agujero se mueven libremente hasta que son atrapados en algún estado metaestable como los descritos anteriormente. Al calentar el cristal, se le puede dar suficiente energía al electrón atrapado de modo que pueda alcanzar la banda de conducción y moverse libremente hasta que se recombine con el agujero atrapado, emitiendo luz (figura 3). Ocurre un proceso similar cuando es el agujero el que recibe suficiente energía. Evidentemente, esta explicación supone que la irradiación del material es espacialmente uniforme.

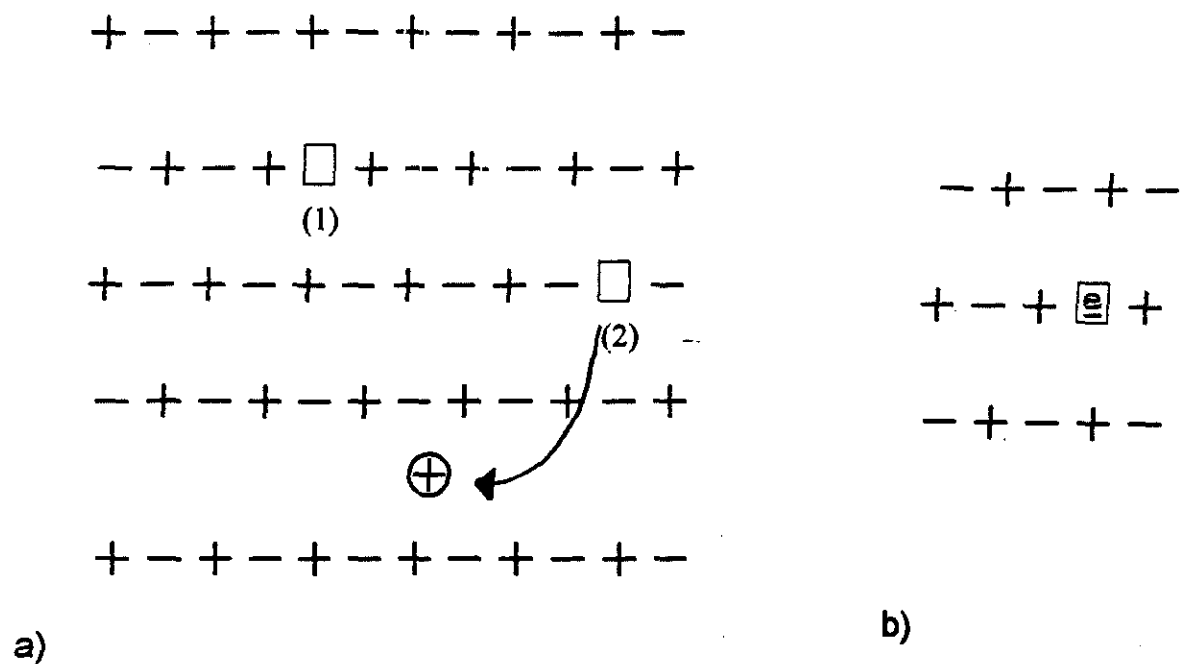


Figura 1. Defectos en un cristal típico.

a) Defecto de Schottky (1) Defecto de Frenkel (2)

□ vacancia ⊕ ion en posición intersticial

b) Centro F

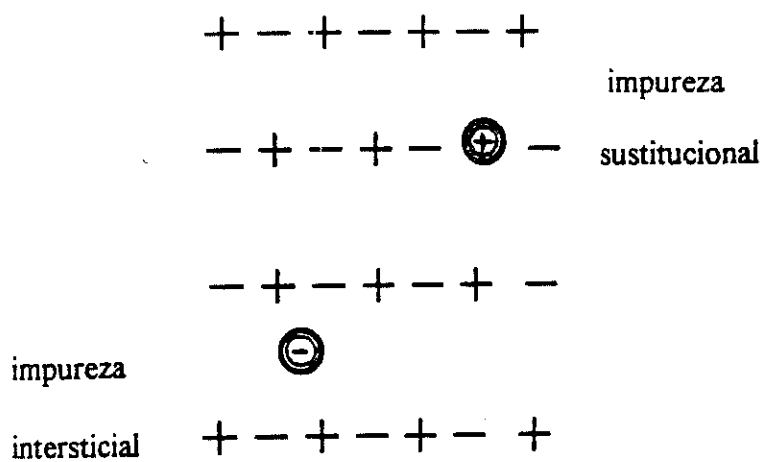


Figura 2. Impurezas en un cristal típico.
El símbolo ⊕ representa a un ion de especie diferente a los componentes del cristal.

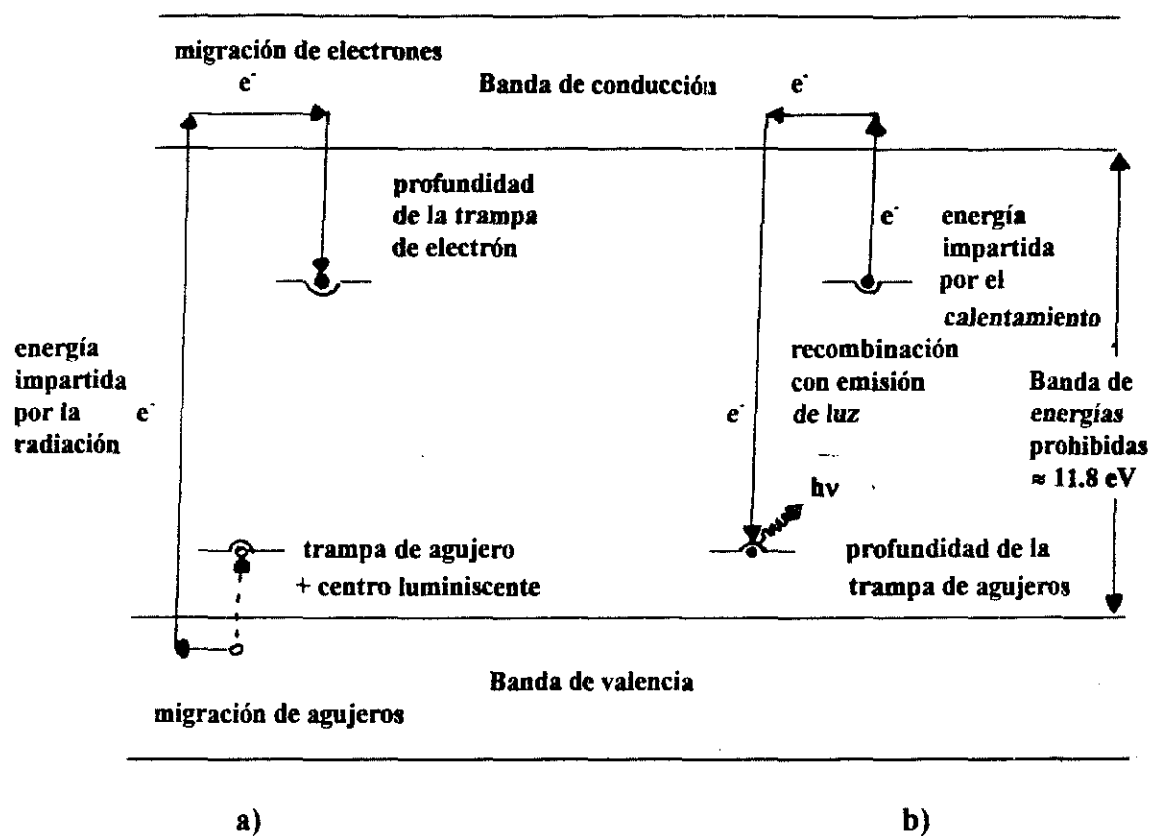


Figura 3. Esquema simple para los modelos termoluminiscentes.

- a) Esquema del mecanismo de excitación de electrones y agujeros en un cristal.
- b) Esquema del mecanismo de recombinación de los electrones y agujeros excitados en un cristal.

L2.A.3 Teoría general de la curva de brillo

Los cristales termoluminiscentes exhiben, al ser calentados, una serie de picos o máximos en su emisión luminosa como función de la temperatura. La luz se detecta por un tubo fotomultiplicador cuya salida, en forma de corriente eléctrica, es proporcional a la intensidad luminosa. A la corriente, o a su integral (generalmente en nC), se le llama respuesta o señal TL. La relación entre la señal TL y la temperatura de la muestra se conoce como curva de brillo y los distintos máximos están relacionados con las diferentes profundidades (en energía) de las trampas. La figura 4 muestra la curva de brillo para el LiF:Mg,Ti bajo irradiación con partículas cargadas de baja energía y en la figura 5 se ve una curva similar descompuesta en las contribuciones de las diferentes trampas. En este trabajo, al hacer referencia a la señal o respuesta TL debe siempre entenderse como la integral de uno o más picos en la curva de brillo.

La primera interpretación teórica para explicar la liberación térmica de los electrones atrapados se debe a Randall y Wilkins (Randall J.T., y Wilkins, M.H.F., 1945). El modelo se basa en las siguientes suposiciones :

- sólo existe un tipo de trampa aislada con una profundidad E por debajo de la banda de conducción ;
- una vez que un electrón es liberado de una trampa, la probabilidad de que vuelva a caer en ella es despreciable y siempre se recombina con un agujero (a esto se le conoce como

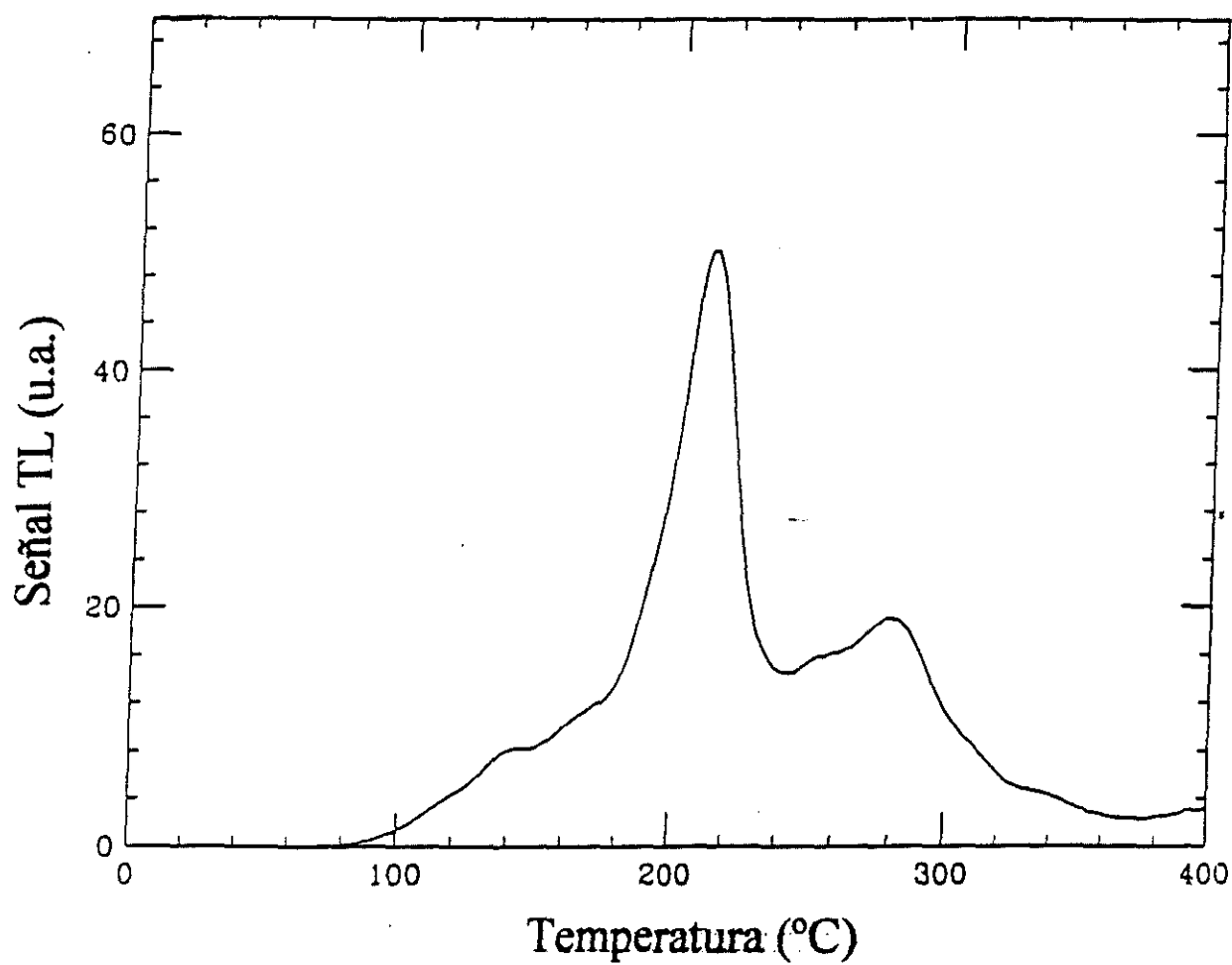


Figura 4. Curva de brillo de LiF: Mg,Ti (TLD-100) irradiado con partículas alfa de 5.3 MeV.

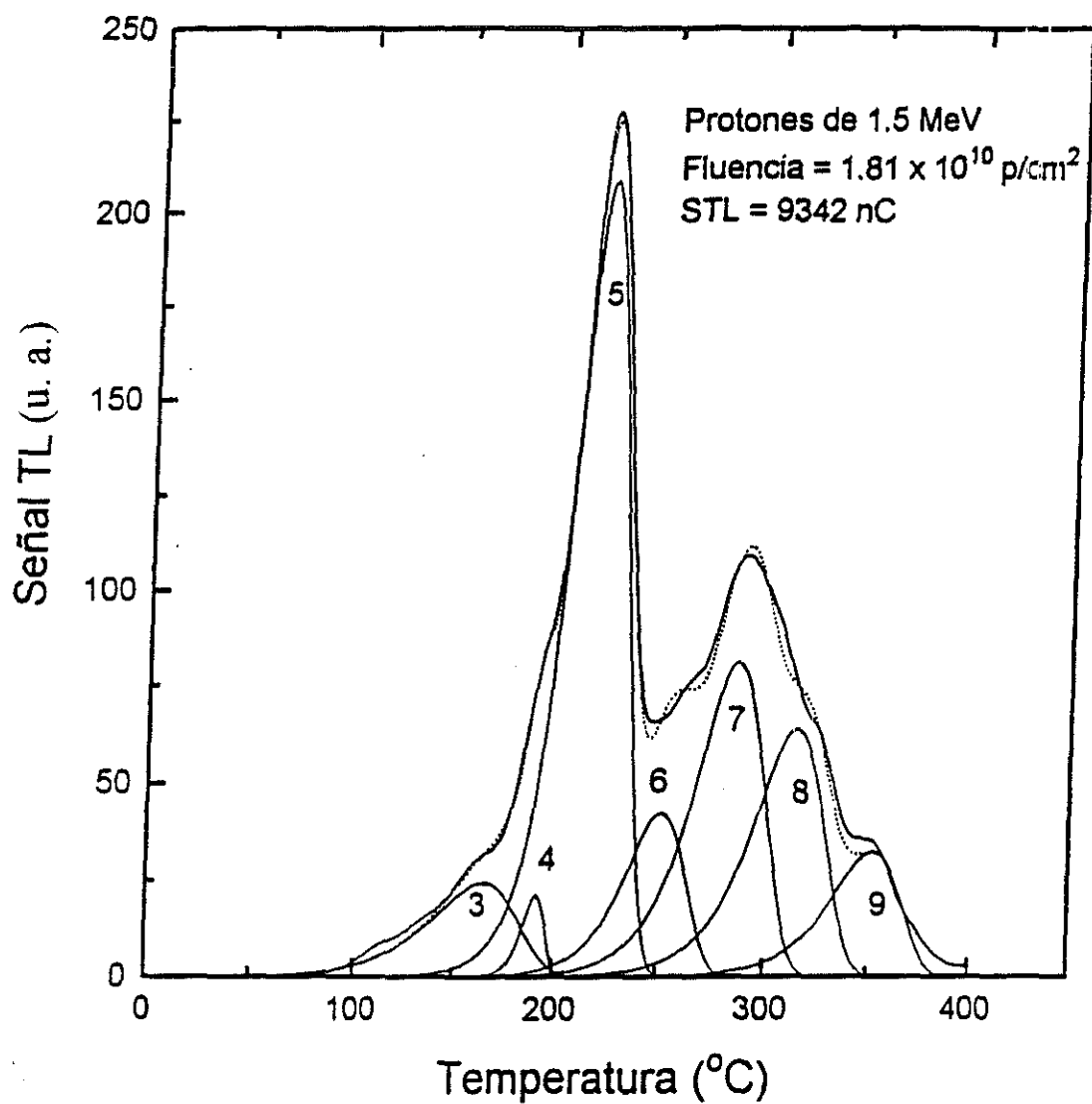


Figura 5. Curva de brillo de LiF: Mg,Ti (TLD-100) irradiado con protones de 1.5 MeV y separada mediante deconvolución en sus picos componentes.

cinética de primer orden). Para estas condiciones, la tasa de liberación de electrones de las trampas está dada por la relación :

$$\frac{dn}{dt} = -ns \exp\left(\frac{-E}{kT}\right), \quad (1)$$

donde n es el número de electrones atrapados, s es un factor de frecuencia (que representa la frecuencia de vibración del electrón en la trampa), k es la constante de Boltzmann y T es la temperatura absoluta del material en el instante t .

Si β es la tasa de calentamiento (dT/dt), supuesta constante :

$$-\frac{dn}{dt} = -\beta \frac{dn}{dT} = ns \exp\left(\frac{-E}{kT}\right) \quad (2)$$

El número de electrones todavía atrapados a la temperatura T es :

$$n = n_0 \exp\left[-\int_{T_0}^T \frac{s}{\beta} \exp\left(\frac{-E}{kT'}\right) dT'\right] \quad (3)$$

donde T_0 es la temperatura inicial de calentamiento y n_0 es el número de electrones atrapados originalmente.

Si el tiempo de permanencia del electrón en la banda de conducción es muy corto, la intensidad luminosa es proporcional a la velocidad de liberación de los electrones de sus trampas:

$$I = -\frac{dn}{dt} = n_0 s \exp(-E/kT) \exp\left[-\frac{s}{\beta} \int_{T_0}^T \exp(-E/kT') dT'\right] \quad (4)$$

Garlick y Gibson (Garlick, G.F., y Gibson, A.F., 1948) sugieren otra aproximación en la que suponen la existencia de recombinación y reatrapamiento y que la probabilidad de ocurrencia

de ambos es igual; a este tratamiento se le conoce como cinética de segundo orden. Halperin y Braner (Halperin A., y Braner, A.A., 1960) propusieron otro modelo teórico más detallado que admite un cierto número de niveles discretos localizados en la banda de energía prohibida tanto para electrones como para agujeros, con sus correspondientes concentraciones de ocupación. Presentan dos submodelos que investigan las distintas posibilidades de movimiento de los electrones liberados antes de recombinarse y proponen un método para encontrar la profundidad de las trampas a partir de la curva de brillo. Chen, (Chen, 1969) desarrolla otro método para la determinación de las energías de las trampas y de los factores de frecuencia a partir de la curva de brillo considerando la forma del pico y la semianchura. También investiga casos en que el factor de frecuencia sea dependiente de la temperatura y da un criterio para distinguir entre procesos de cinética de primer- o segundo-orden. Posteriormente y hasta la fecha se han propuesto distintos modelos más elaborados que en esencia se enfocan a proponer métodos prácticos para determinar profundidades de trampa y orden de los parámetros cinéticos. Entre ellos conviene mencionar los siguientes: (Chen R. y Bowman S.G.E., 1979), (Chen R. *et al.*, 1981), (Mische E.F. y McKeever S.W.S., 1989), (Fain J. *et al.*, 1994), etc.

L2.A.4 Fluoruro de Litio.

1) Impurezas

Como se mencionó previamente el fluoruro de litio es el material con propiedades termoluminiscentes más estudiado. También ha sido utilizado ampliamente en dosimetría haciendo uso de la señal TL proveniente del pico 5 (ver figura 5). La compañía Harshaw/

Bicron, de USA, ha comercializado varios dosímetros basados en LiF, entre ellos se tiene el TLD-100 (7% de ^6Li y 92.5% de ^7Li), el TLD-600 ($\approx 92.5\%$ ^6Li y 4.8% ^7Li) y el TLD-700 (0.007% ^6Li y $\approx 99.995\%$ de ^7Li). Estos contienen impurezas de magnesio y titanio, en aproximadamente 300 ppm y 15 ppm, respectivamente. Las impurezas de Mg^{2+} están relacionadas con los centros tipo trampa en el material (Horowitz, Y.S., 1984) mientras que el titanio está asociado con los centros luminiscentes. La concentración de Ti en el volumen de LiF se correlaciona con la eficiencia del dosímetro. Estudios sobre la estructura de la curvas de brillo de LiF como función de la concentración de Mg y de Ti han mostrado alteración en los picos individuales, lo que sugiere que el Ti puede también participar en la formación de trampas, o la existencia de correlaciones espaciales entre los centros de atrapamiento y los centros luminiscentes. Esto lleva a pensar que separar los papeles de Mg y Ti como responsables de la formación de trampas y de los centros luminiscentes, respectivamente, es una sobresimplificación (Mahesh, K.D.Y.R., 1985).

2) Supralinealidad.

Estudios sobre el comportamiento de los TLDs han mostrado que, en general, la respuesta TL de estos dosímetros a rayos X y gamma es lineal en función de la dosis hasta unos pocos Gy, presenta supralinealidad a dosis más altas hasta aproximadamente 10^3 Gy y sublinealidad a dosis aun más altas (Horowitz Y.S., 1984). La función de supralinealidad o “función dosis respuesta” definida por Horowitz, (Horowitz Y.S., 1984) está dada por:

$$f(D) = \frac{F(D)/D}{F(D_0)/D_0} \quad (5)$$

Aquí $F(D)$ es la señal o respuesta TL obtenida a una dosis D y $F(D_0)$ es la señal TL obtenida a una dosis baja D_0 donde la respuesta es lineal. Esta función mide el grado de desviación de la linealidad en la respuesta TL como función de la dosis.

Estudios de la respuesta de TLDs a rayos-X y gamma han mostrado que el umbral de supralinealidad depende del lote (grupo de dosímetros obtenidos del mismo cristal original), de condiciones experimentales (tratamientos térmicos y tasa de calentamiento) y temperatura del pico de brillo (McKeever, S.W.S. *et al.*, 1995). Independientemente de los factores previamente mencionados, se ha establecido que el grado de supralinealidad aumenta cuando la energía del fotón aumenta (Horowitz, Y.S., 1984, Nariyama, N. *et al.*, 1993). Recientemente, el grupo de interacción de la radiación con materia del IFUNAM, México, ha publicado resultados de la respuesta TL de TLD-100 a radiación gamma de ^{60}Co y rayos-X de energía efectiva igual a 8.1 keV, (Gamboa-deBuen, I. *et al.*, 1998a), encontrando, mediante técnicas de deconvolución, la función de supralinealidad para la señal total y varios de los picos individuales. En general, la respuesta TL sigue un comportamiento lineal-supralineal-sublineal. La figura 6 muestra las medidas para rayos-X de 8.1 keV que serán utilizados como radiación de prueba en este trabajo.

En relación a irradiación con partículas cargadas pesadas (PCP), la literatura reporta casos concretos en que se ha observado supralinealidad para ciertos iones a energías específicas y para el comportamiento individual de ciertos picos y de la señal total. Entre estos estudios se tienen los de Montret (Montret, M., 1980), Fäin (Fäin *et al.*, 1980), Mische y McKeever (Mische E.F. McKeever, S.W.S., 1989) y Horowitz y sus colaboradores

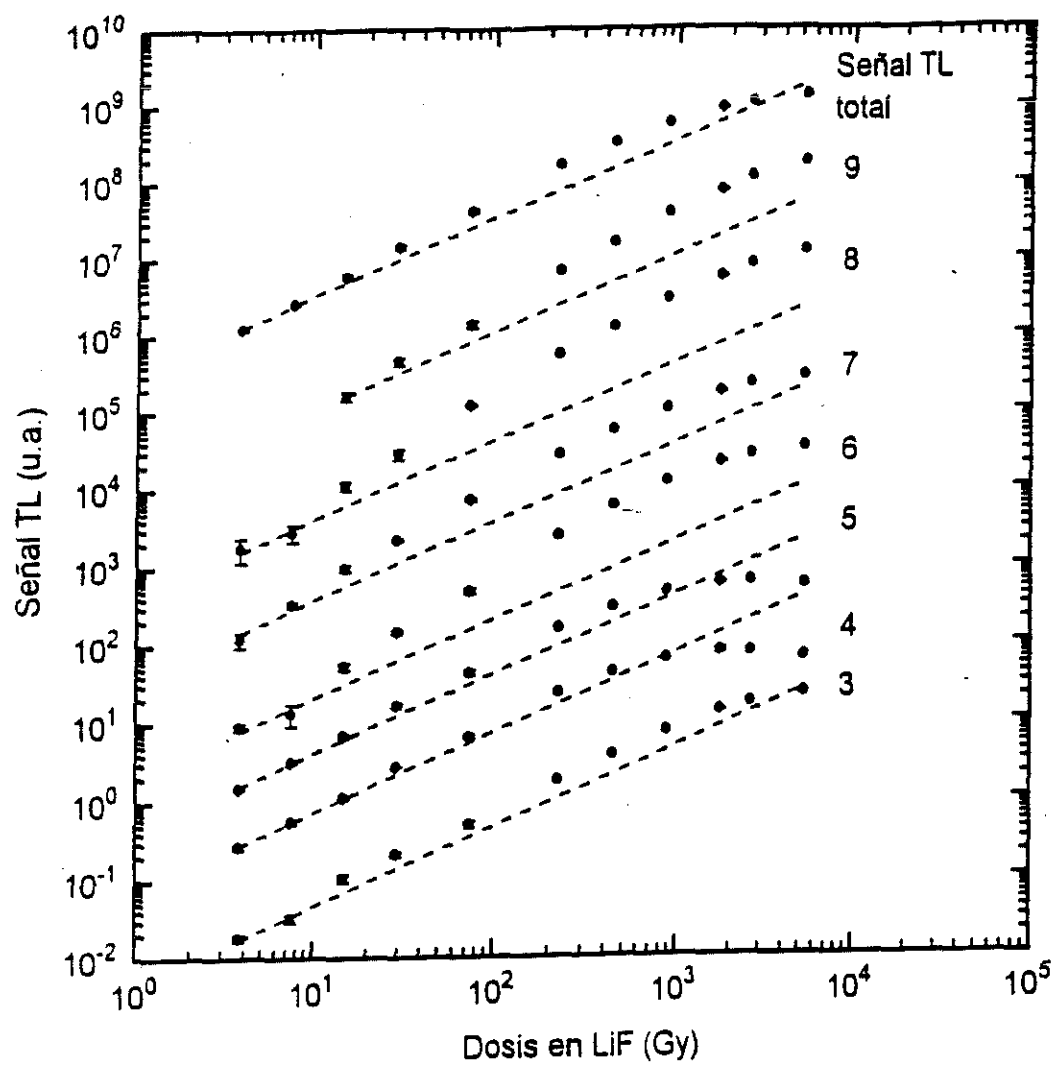


Figura 6. Respuesta TL de TLD-100 expuestos a rayos X de 8.1 keV para la señal TL total y los picos 3 a 9. Las líneas punteadas corresponden a una respuesta lineal.

(Moscovitch, M. y Horowitz, Y.S., 1986, Rosenkrantz, M. y Horowitz, Y.S., 1993, Horowitz Y.S. y Rosenkrantz, M., 1990, Moscovitch, M. y Horowitz, Y.S., 1988). El grupo del IFUNAM también ha medido respuesta de TLD-100 a protones de 0.7, 1.5 y 3 MeV (Gamboa-deBuen I. *et al.*, 1998b, Avilés P. *et al.*, 1998 y Avilés P., 1998), y a helios de 3.0, 5.3 y 7.5 MeV (Gamboa-de Buen I. *et al.*, 1996 y Rodríguez-Villafuerte, M., *et al.*, aceptado, sept. 1999). De los estudios con protones se ha concluido que la respuesta TL de TLD-100 para las energías mencionadas presenta un comportamiento lineal-supralineal-sublineal para la señal total y varios de los picos, y que el grado de supralinealidad aumenta con la energía del haz incidente y con la temperatura de los picos.

En general, tanto para PCP como para rayos-X y gamma, la supralinealidad disminuye con la transferencia lineal de energía (LET por sus siglas en inglés) que se define como la tasa lineal promedio de depósito de energía en un medio irradiado por una partícula cargada y su valor es prácticamente igual al del poder de frenado $-dE/dx$.

3) Eficiencia termoluminiscente

De manera simple, se puede dividir el proceso termoluminiscente en dos etapas, una inicial en la cual la energía es absorbida por el material al ser irradiado, y una etapa final en la cual el cristal emite luz al ser calentado. Las etapas TL se relacionan mediante la eficiencia termoluminiscente α , que se define como el cociente entre la energía promedio emitida como luz TL, $\bar{\varepsilon}_0$, y la energía promedio impartida por el campo de radiación, $\bar{\varepsilon}$, (Kalef-Ezra J. y Horowitz Y.S., 1982) :

$$\alpha = \frac{\bar{\varepsilon}_0}{\bar{\varepsilon}} \quad (6)$$

Dado que en el proceso TL se presentan varios mecanismos complejos intermedios previos a la emisión de luz, la investigación en TL se ha concentrado en estudiar propiedades relativas, por ejemplo, la respuesta TL a PCP relativa a la respuesta TL a una radiación de referencia, que generalmente es radiación gamma de ^{60}Co .

La eficiencia relativa TL mide la señal TL producida por unidad de masa irradiada del material por unidad de dosis de la radiación de interés con respecto a la que produce una radiación de referencia y se expresa de la siguiente manera:

$$\eta_{k,r} = \frac{R_k/D_k}{R_r/D_r} \quad (7)$$

Donde R_k y R_r son la respuesta TL por unidad de masa para la radiación k y la radiación de referencia, (usualmente radiación γ de ^{60}Co), a dosis en el material D_k y D_r , respectivamente. Las dosis D_k y D_r deben ser bajas de manera que R_k y R_r se encuentren dentro de la zona lineal de respuesta. El valor de eficiencia relativa indica cuánta luz emite el material (por unidad de masa irradiada y por unidad de dosis) al ser expuesto a la radiación de interés con respecto de la que emite al ser expuesto a la radiación de referencia.

Las medidas de eficiencia relativa pueden ser influenciadas por las condiciones experimentales. Los factores que pueden afectar su valor son los tratamientos térmicos, el protocolo de lectura, la tasa de calentamiento y el intervalo de temperaturas que se incluye al integrar la corriente correspondiente ya sea a la señal total o a uno de los picos (intervalo de integración).

Existen, en la literatura, varias medidas de eficiencia relativa de TLD-100 para rayos X con respecto de radiación gamma de ^{60}Co . Gamboa-deBuen y colaboradores (Gamboa-

deBuen, I. *et al.*, 1998a) enumeran las referencias anteriores sobre eficiencias relativas de radiación X a distintas energías relativas a ^{60}Co y reportan medidas de la eficiencia relativa de rayos X de 8.1 keV con respecto de ^{60}Co para la señal total y algunos de los picos individuales. Es importante enfatizar que estas medidas fueron realizadas en el mismo laboratorio siguiendo un mismo protocolo de lectura y de deconvolución. En general, las eficiencias relativas para la señal total y los picos de baja temperatura son menores que, o consistentes con, la unidad y para los picos de alta temperatura se tienen valores mayores que uno.

Respecto de partículas cargadas pesadas, Horowitz (Horowitz, Y.S., 1984) realizó una recopilación de las medidas de eficiencia relativa respecto de radiación gamma de ^{60}Co anteriores a 1980 para la señal total y el pico 5 de LiF:Mg,Ti (TLD-100, -600 o -700).

Las figuras 7 y 8 muestran estos valores como función de la transferencia lineal de energía. En estas figuras (en que el LET es expresado como $dE/d\xi$, con $\xi = \rho x$, ρ es la densidad del LiF) se han añadido datos de eficiencia para TLD-100 y TLD-700 realizados por Schmidt y colaboradores (Schmidt, P., *et al.*, 1990) para protones con energías entre 2 y 8 MeV.

Simultáneamente a las medidas de supralinealidad realizadas por el grupo del IFUNAM mencionadas en la sección anterior, se han realizado medidas de eficiencia para protones de 0.7, 1.5 y 3 MeV (Gamboa-deBuen I., *et al.*, 1998b, Avilés P., *et al.*, 1998 Avilés P., 1998), alfas de 5.3 MeV (Gamboa-deBuen, I., *et al.*, 1996) y helios de 3.0, 5.3 y 7.5 MeV (Rodríguez-Villafuerte, M., *et al.*, aceptado, sept 1999). Estos valores también se incluyeron en las figuras 7 y 8.

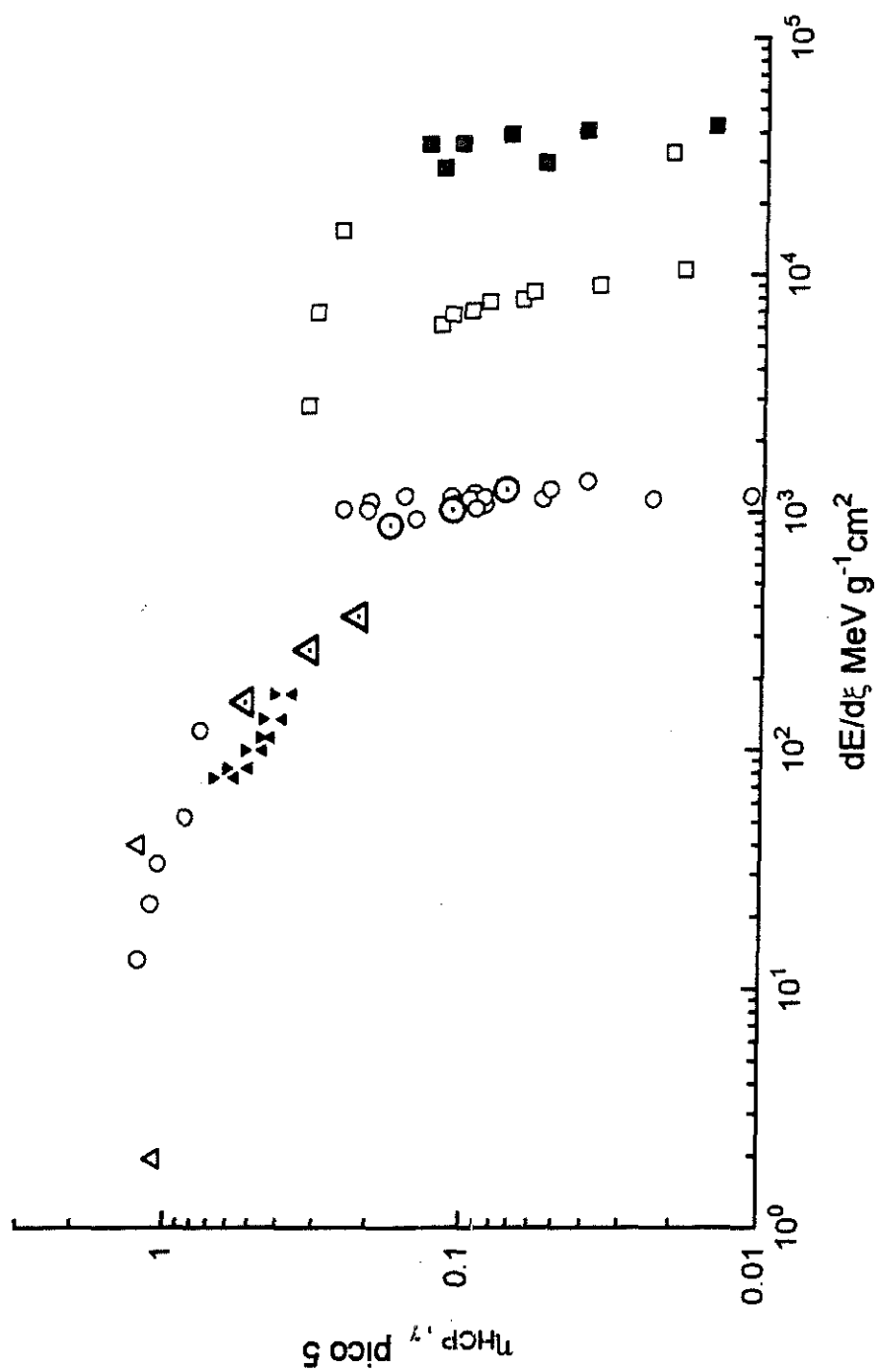


Figura 8. Compilación de medidas de eficiencia relativa (señal integrada del pico 5) de dosímetros de LiF:Mg,Ti expuestos a partículas cargadas pesadas respecto de radiación gamma. (Kalef-Ezra J. y Horowitz, Y.S., 1982). Protones (Δ○), alfas (○), iones pesados, Ne, Cu y Kr, (●○). Se incluyen otros datos de protones (Schmidt P. *et al*, 1990) (▼▲) y las medidas realizadas en el IFUNAM para protones (▲) y helios (⊙) (ver texto)

Muy recientemente, Geiss y colaboradores (Geiss O.B. *et al.*, 1998) hicieron un estudio amplio de medidas de eficiencias de LiF para distintos iones : ^1H , ^2He , ^3Li , ^4Be , ^5B , ^6C , ^8O , ^{28}Ni , ^{51}Sb , y ^{54}Xe . La figura 9 muestra sus medidas de eficiencia relativa respecto de radiación X de 250 kVp junto con predicciones obtenidas usando un modelo propuesto por ellos mismos que describe bien sus propias medidas. En la figura 10 se comparan sus resultados para protones y helios con los medidos por el grupo del IFUNAM, encontrándose que los valores de Geiss y colaboradores discrepan significativamente con los del IFUNAM. Sus resultados, incluidos en la figura 7, tampoco están en buen acuerdo con el resto de medidas previas existentes en la literatura. En su publicación, Geiss y colaboradores no comparan sus resultados con medidas previas y no proporcionan información completa de su método, sin embargo, se deduce que para obtener sus valores de eficiencia, tanto experimental como teórica, utilizan la respuesta a dosis de rayos-X medida en otro laboratorio, con dosímetros TLD-700 de otro lote, usando otro protocolo de trabajo. En la literatura se ha hecho hincapié en la importancia de realizar el trabajo en el mismo laboratorio, con dosímetros del mismo lote sujetos al mismo protocolo (tratamiento térmico y lectura) ya que los resultados son dependientes de todo esto. Con respecto a las diferencias con las medidas del IFUNAM se tiene además la conjunción de diversos factores: el uso de distinta radiación de referencia, distintos protocolos de trabajo y diferente intervalo de integración para lo que se llama señal total. Este análisis lleva a la conclusión de que los resultados de Geiss y colaboradores no son comparables con las medidas realizadas en el IFUNAM lo que llevaría a cuestionar sobre la forma correcta de definir eficiencia TL.

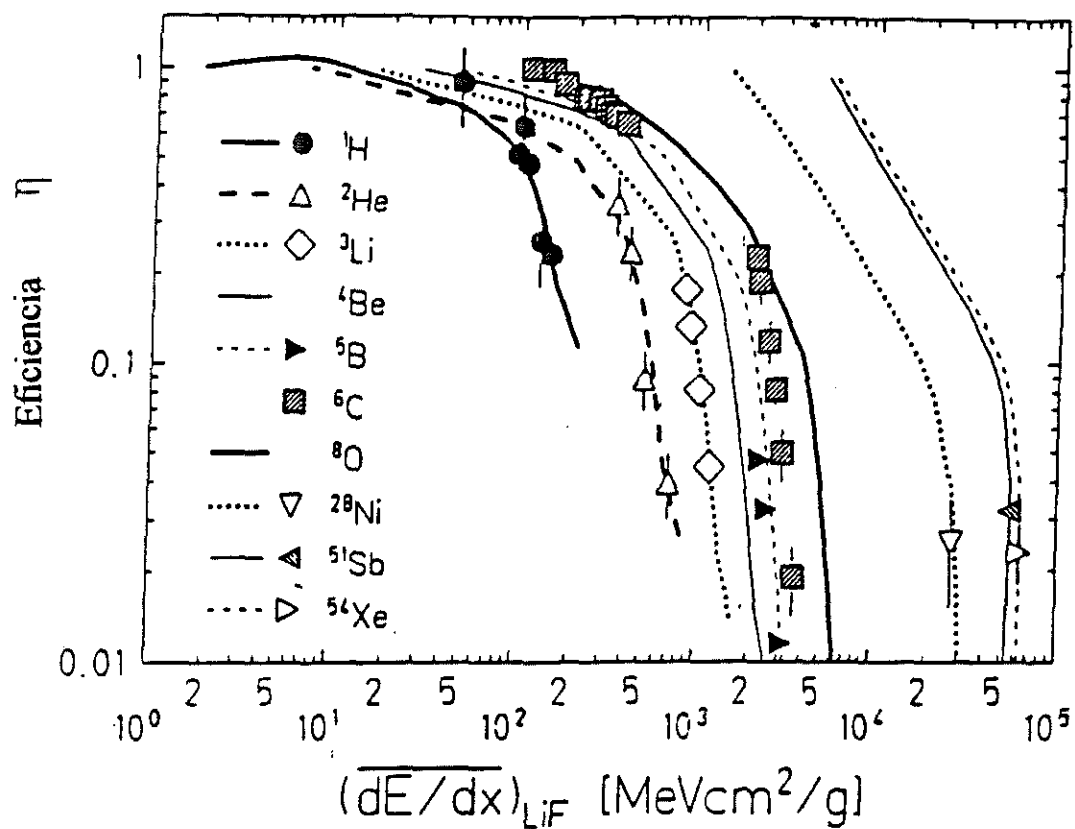


Figura 9. Eficiencia de dosímetros TLD-700 como función de la pérdida de energía promedio. Comparación entre medidas (símbolos) y cálculos (líneas) (Geiss O.B. *et al.*, 1998)

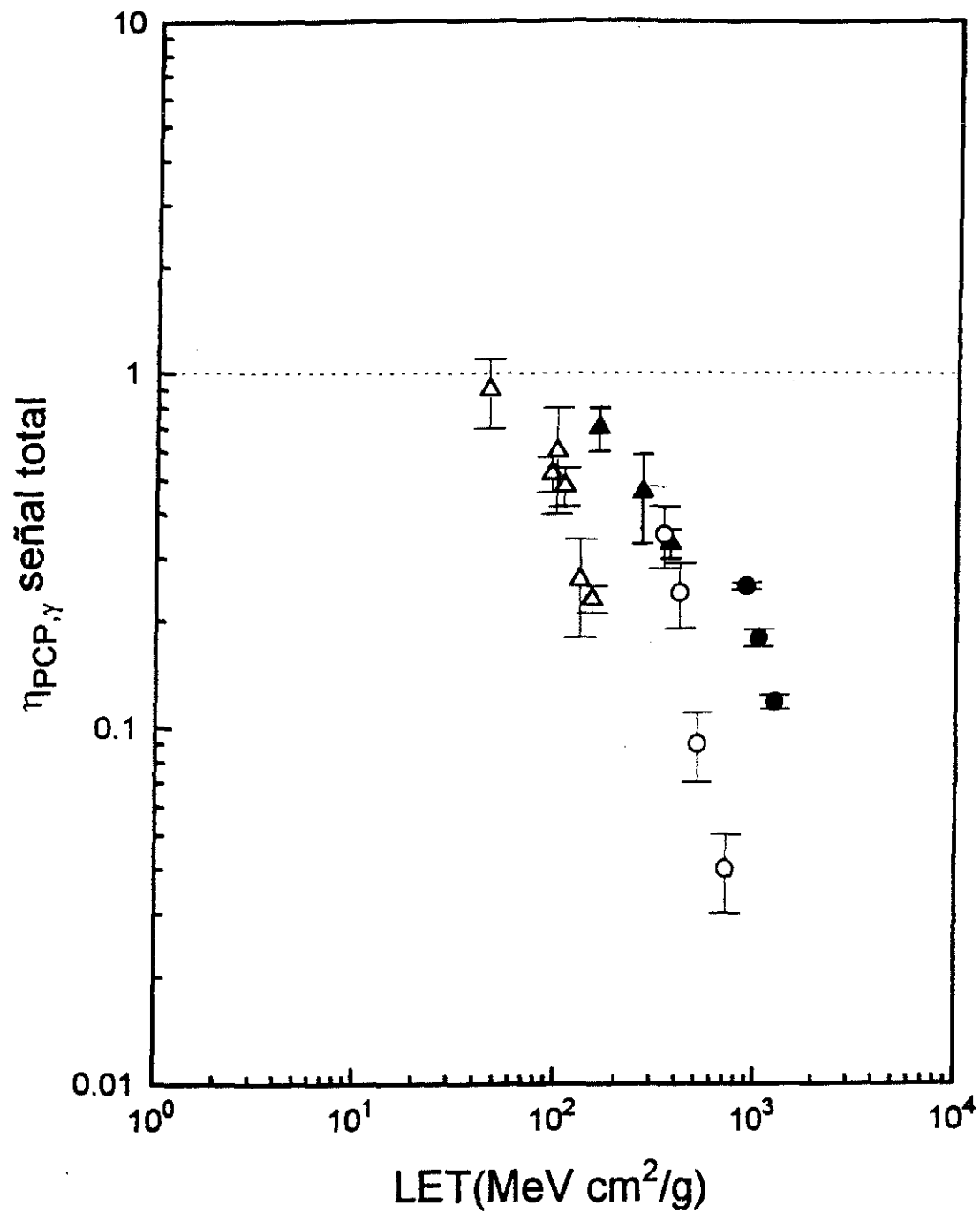


Figura 10. Eficiencia de dosímetros de LiF:Mg,Ti como función de la pérdida de energía promedio para señal total de protones (▲) y helios (●) respecto a ^{60}Co (TLD-100, IFUNAM) y respecto de radiación X de 250 kVp (TLD-700, Geiss O. *et al.*, 1998), protones (△) y helios (○).

Aquí sólo podemos añadir que las medidas realizadas en el IFUNAM estan dentro de la tendencia exhibida por resultados previos, no siendo este el caso para los valores dados por Geiss y colaboradores. Es lamentable que estos autores no hayan comparado sus resultados con medidas previas y explicado ellos mismos las diferencias.

De los datos existentes a la fecha se ha deducido que la eficiencia TL relativa depende del campo de radiación y muestra una tendencia general a disminuir al aumentar el LET de la radiación incidente siendo diferente para dos partículas diferentes del mismo LET.

Las teorías de estructura de trazas, TST y TSTM sugieren métodos para calcular eficiencias TL relativas a partir de la distribución microscópica de dosis alrededor de la trayectoria de la partícula ionizante incidente. Estos modelos se discuten en detalle en las secciones siguientes.

I.2.B Modelos Teóricos

I.2.B.1 Teoría de Estructura de Trazas.

1) Generalidades.

La teoría de estructura de trazas (TST) fue propuesta originalmente por Butts y Katz, (Butts J.J. y Katz R., 1967) para explicar la respuesta de enzimas y virus a la irradiación con iones pesados. Esta teoría establece que la respuesta de un medio físico, químico o biológico a irradiación con partículas cargadas pesadas resulta primordialmente de la contribución de los electrones secundarios y de mayor orden (llamados rayos delta) generados por la radiación incidente. Los rayos delta transportan la energía perdida por el ion a distancias de varias decenas de micrometros en la materia condensada. Aunque la radiación débilmente ionizante también genera electrones secundarios, en este caso la dosis impartida se distribuye uniformemente en el medio, mientras que la radiación con PCP, durante el proceso de pérdida de energía por ionización, produce en el medio trayectorias casi rectas, altamente localizadas, que resultan en una distribución de dosis sumamente inhomogénea . Esto se ilustra en la figura 11. La TST supone que las diferencias en la respuesta a irradiación con PCP respecto de la respuesta a irradiación gamma (i.e. eficiencias $\neq 1$) provienen de diferencias en la distribución espacial de dosis y propone que es factible conocer la respuesta a PCP si se conoce la respuesta a radiación gamma y se determinan ciertos parámetros.

Esta teoría trata al medio irradiado como una matriz que está formada por un conjunto de elementos sensibles que podrían ser átomos, moléculas o células. Para describir

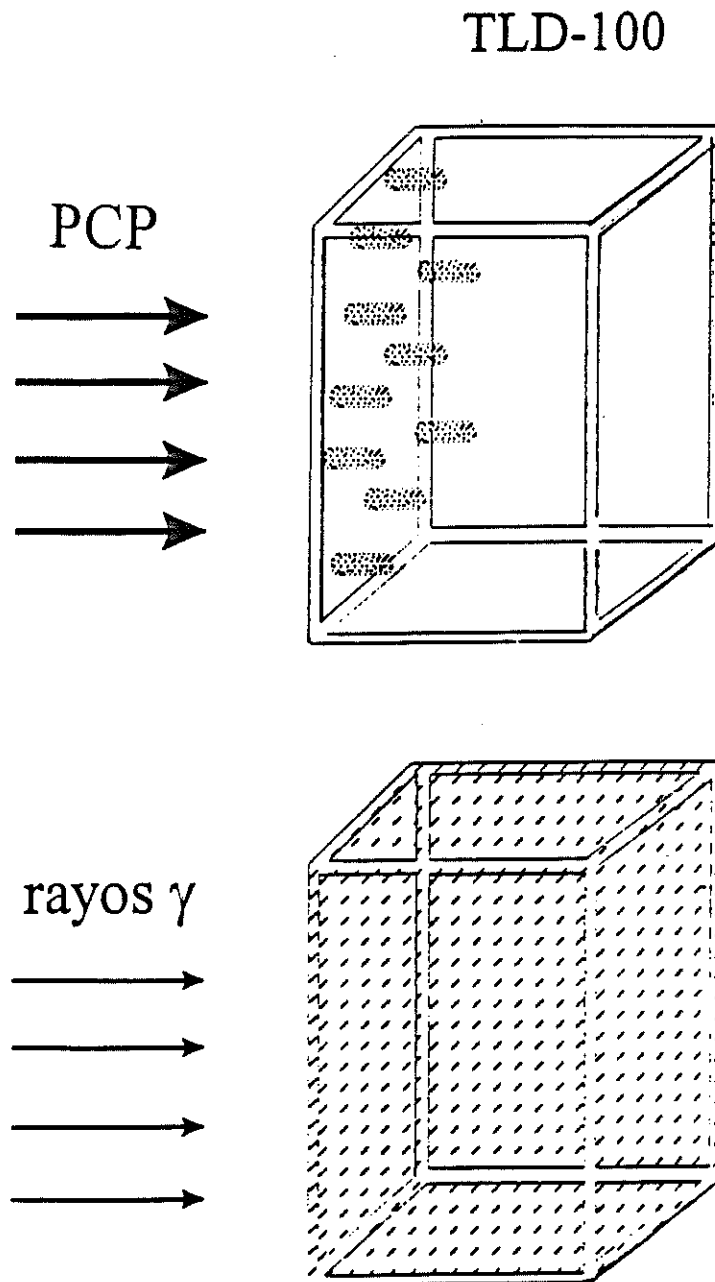


Figura 11. Esquema simple de la distribución espacial de dosis debida a partículas cargadas pesadas y a radiación gamma en un cristal.

la respuesta del medio se usan los modelos “multi-impactos” y “multiblancos” que provienen de radiobiología. De acuerdo con el modelo de multi-impactos los elementos sensibles del medio pueden ser activados mediante “impactos” o golpes, (hits), causados por la radiación incidente. La densidad de impactos está relacionada con la dosis depositada en el medio por los electrones secundarios. Para obtener la respuesta a radiación gamma se usa estadística de Poisson. La probabilidad de que un elemento sensible del medio reciba impactos un número x de veces es :

$$P = \frac{A^x e^{-A}}{x!} \quad (8)$$

Aquí, A es el número promedio de impactos por elemento sensible y está dado por $A = D / E_0$ donde D es la dosis macroscópica a la cual se irradia el medio y E_0 es la llamada dosis característica para la cual se tiene un promedio de un impacto por elemento sensible. El valor de E_0 describe la respuesta del medio ante radiación gamma.

La probabilidad de que un elemento sensible o blanco reciba c -o-más impactos es:

$$P(c, A) = \sum_{x=c}^{\infty} \frac{A^x e^{-A}}{x!} = 1 - \sum_{x=0}^{c-1} \frac{A^x e^{-A}}{x!} \quad (9)$$

En este caso se dice que el sistema es multi-impactos.

El modelo multiblancos supone que más de un elemento sensible debe recibir impactos para que ocurra activación. Para este caso, la probabilidad de activación es :

$$P(m, A) = (1 - e^{-A})^m \quad (10)$$

donde m es el número de blancos golpeados. En este caso se dice que el detector es multiblancos.

Cuando $m = c = 1$, las expresiones (9) y (10) son iguales y se tiene un detector de uno-o-más impactos en un solo blanco y la probabilidad de que se tengan uno-o-más impactos es :

$$P = 1 - e^{-A} \quad (11)$$

esta probabilidad es lineal en función de la dosis hasta que se satura.

2) Probabilidades de activación y secciones eficaces de activación.

La probabilidad de que un elemento sensible reciba uno-o-más impactos y sea activado por una PCP está dada por la función de distribución de Poisson, ecuación (11):

$$P(c = 1, z_{ef}, \beta, t, a_0, E_0) = 1 - \exp(-\bar{E}(z_{ef}, \beta, t, a_0) / E_0) \quad (12)$$

y la probabilidad de que reciba dos-o-más impactos es:

$$P(c = 2, z_{ef}, \beta, t, a_0, E_0) = 1 - (1 + \bar{E}(z_{ef}, \beta, t, a_0) / E_0) \exp\{-\bar{E}(z_{ef}, \beta, t, a_0) / E_0\} \quad (13)$$

Aquí, z_{ef} y β son la carga efectiva y la velocidad reducida (con respecto a la velocidad de la luz) del ion, respectivamente y t es la distancia entre el centro del elemento y la trayectoria de la PCP. $P(z_{ef}, \beta, t, a_0, E_0)$ representa la fracción de elementos sensibles activados por el ion incidente y $\bar{E}(z_{ef}, \beta, t, a_0)$ es la densidad de energía promedio transferida al volumen sensible, también llamada *distribución radial de dosis*. El tamaño del volumen sensible a_0 es un parámetro del modelo que debe ser ajustado y se puede determinar en base a datos de dosis-respuesta del medio irradiado con PCP.

Para encontrar el efecto total producido por una sola partícula o por un haz de partículas con carga efectiva z_{ef} y velocidad β es necesario llevar a cabo una integración de $P(z_{ef}, \beta, t, a_0, E_0)$ sobre todas las distancias t del eje de la trayectoria del ion hasta el alcance máximo de los rayos delta t_{max} . Esta integración proporciona la sección total de activación

$\sigma(z_{ef}, \beta, a_0, E_0)$ que es la probabilidad de que una sola partícula active un elemento sensible en un medio que contiene uno de esos elementos por unidad de area. La sección se expresa entonces de la siguiente manera :

$$\sigma(z_{ef}, \beta, a_0, E_0) = \int_0^{t_{\max}} 2\pi t P(c, z_{ef}, \beta, t, a_0, E_0) dt \quad (14)$$

Si el medio irradiado es un cristal TLD-100 y la energía de las PCP no cambia significativamente al atravesarlo, se considera que el dosímetro o detector es delgado y en este caso se tiene un cálculo de segmento de trayectoria. Cuando el detector es grueso, se integra la ecuación (14) sobre el largo de trayectoria de los iones incidentes. En ese caso, la respuesta de un detector grueso donde las partículas con energía inicial T_i se detienen y depositan toda su energía está dada por:

$$\bar{\sigma}R = \int_0^R \sigma dr = \int_{T_i}^0 \sigma / LdT \quad (15)$$

aquí R , T y L son el alcance, la energía y la transferencia lineal de energía (LET) de las PCP en el medio irradiado. En este caso, se dice que el cálculo es de trayectoria completa.

3) Distribuciones radiales de dosis.

Esta teoría también ofrece un método analítico para encontrar distribuciones de dosis alrededor de la trayectoria del ion incidente. Estas, son necesarias para evaluar eficiencias TL relativas. En la sección I.2.D se discutirán distintos métodos de obtener distribuciones de dosis incluyendo el dado por TST.

4) Eficiencias TL relativa de LiF:Mg,Ti.

La respuesta de LiF :Mg,Ti muestra un comportamiento lineal-supralineal para la señal total (respuesta TL medida desde temperatura ambiente hasta 400°C) y los picos 5 y 7. De acuerdo a TST, este comportamiento se ha representado como la suma de dos componentes, una componente de uno-o-más impactos que describe la zona lineal y otra componente de dos-o-más impactos que describe la zona supralineal de la respuesta TL de dosímetros TLDs mediante el ajuste de los parámetros c , E_0 y la contribución relativa de cada componente (Larsson L. y Katz, 1976, Waligorski, M.P.R. y Katz, R., 1980a) . Conociendo esto, la TST propone un procedimiento para evaluar eficiencias TL relativas de PCP con respecto a radiación gamma.

5) Respuesta TL a rayos γ .

Si un dosímetro recibe una dosis D_i de radiación gamma, su respuesta TL está dada por:

$$TL_{\gamma}(D_i) = bP(c = c_1, D_i / E_{01}) + (1 - b)P(c = c_2, D_i / E_{02}) \quad (16)$$

donde, según la ecuación (11) la probabilidad de que haya uno-o-más impactos es :

$$P(c = 1, A) = 1 - e^{-A} \quad (17)$$

y la probabilidad de que haya dos-o-más impactos es :

$$P(c = 2, A) = 1 - (1 + A)e^{-A} \quad (18)$$

donde $A = D / E_0$ es el número promedio de impactos por blanco. Los factores b y $(1-b)$ son las contribuciones relativas de cada una de las dos componentes y sus valores se obtienen de ajustar la ecuación (16) a la respuesta TL experimental a radiación gamma.

Como parte de los estudios realizados en el IFUNAM referentes a la respuesta termoluminiscente de TLD-100 Gamboa-deBuen y colaboradores (Gamboa-deBuen, I. *et al.*, 1998b) aplicaron el método sugerido por TST ajustando a dos componentes las medidas de la respuesta TL de radiación gamma de ^{60}Co y encontraron $b = 0.36$ (figura 12). Este valor es necesario para evaluar la respuesta a PCP mediante TST y posteriormente la eficiencia TL relativa. Esto se describe en las siguientes secciones.

6) Respuesta TL a partículas cargadas pesadas.

La respuesta de un dosímetro a PCP se obtiene mediante la expresión :

$$TL_{PCP} = bk_1 + (1-b)k_2 \quad (19)$$

donde k_1 y k_2 son las respuestas debidas a cada componente.

Para la componente de uno-o-más impactos se tiene que la probabilidad de inducir un proceso TL está dada por la probabilidad de activar un elemento sensible :

$$k_1 = 1 - e^{-\sigma_1 F} = 1 - e^{-\sigma_1 D_1 / L} \quad (20)$$

donde $D_1 = FL$ es la dosis depositada por un haz de partículas que transporta una fluencia F (número de partículas/cm²) y σ_1 es la sección eficaz de activación para una sola partícula. La sección σ_1 se obtiene mediante la ecuación (14) o (15) según que se realice un cálculo de segmento de trayectoria (detector delgado) o trayectoria completa (detector grueso). Para ambos casos, la probabilidad de activación se encuentra usando (12) y $E_0 = E_{01}$.

La función $k_1(D)$ es lineal hasta que se satura, es decir que la componente de un impacto de la respuesta no produce supralinealidad para irradiación con PCP para ningún valor de LET.

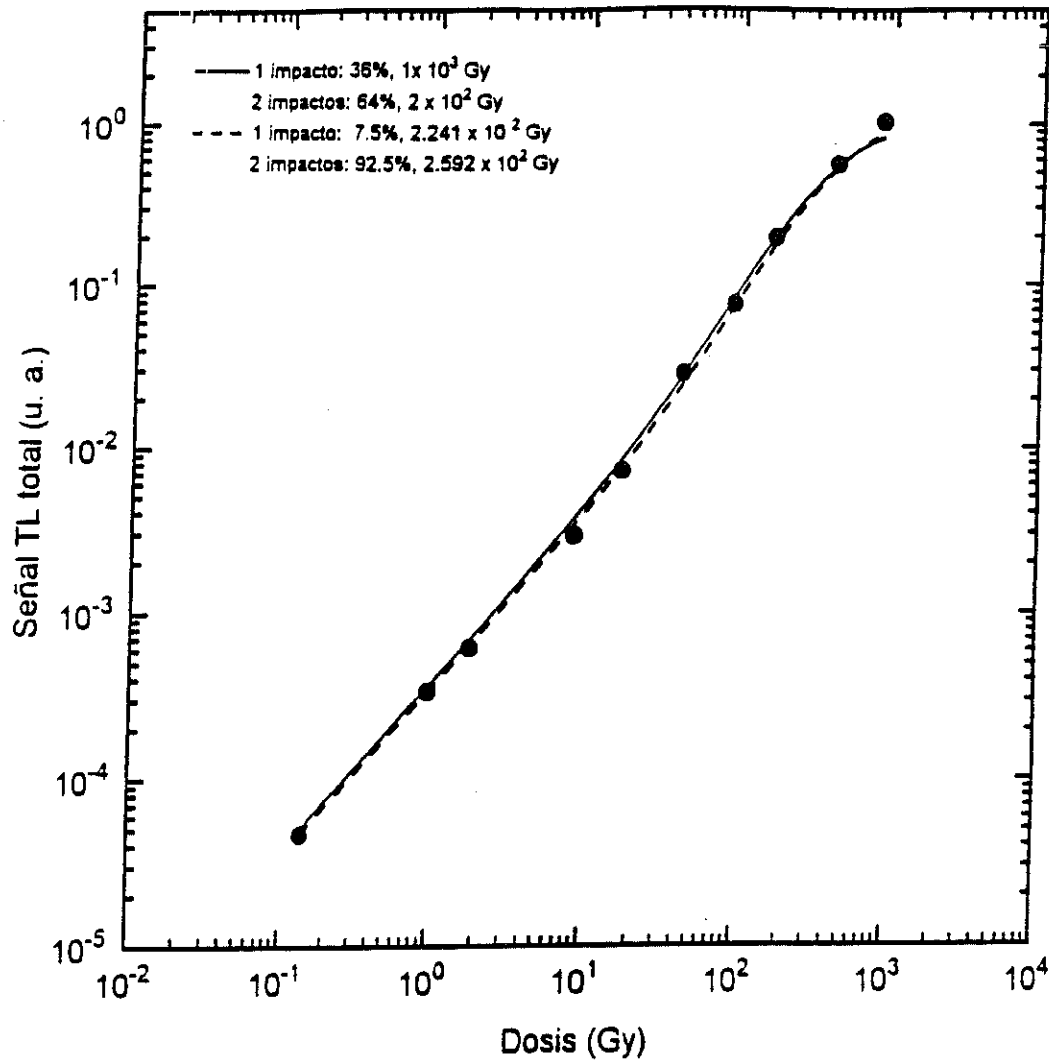


Figura 12. Curva dosis-respuesta para la señal TL total de TLD-100 expuestos a rayos γ de ^{60}Co . Las líneas corresponden a ajustes de dos componentes (de 1 y 2 impactos) usando el modelo de Katz, suponiendo diferentes contribuciones relativas. Se indican los valores de b , E_{01} , $(1-b)$ y E_{02} .

Siguiendo el formalismo de Katz (Katz R., 1978), la componente de dos-o-más impactos incluye dos modos posibles de activación del elemento sensible; el modo de activación por un solo ion, Π_i , llamado “ion-kill”, y el modo de activación a través de rayos delta liberados por distintos iones, Π_γ , llamado “gamma-kill”.

En el caso de modo de activación por un solo ion, el medio es activado por rayos delta provenientes de un mismo ion durante su tránsito. La probabilidad de que un elemento sensible no sea activado cuando el medio es irradiado con una fluencia F es:

$$\Pi_i = e^{-\sigma_i F} \quad (21)$$

Este proceso sigue una estadística exponencial y se interpreta como de un impacto impartido por la partícula cargada más que por un solo electrón.

La fracción de la dosis depositada por el haz incidente que contribuye al modo de activación por un solo ion es :

$$P_i = \frac{\sigma_2}{\sigma_0} \quad (22)$$

aquí $\sigma_0 = 1.18\pi a_0^2$ es la sección eficaz de saturación y corresponde a la sección transversal geométrica multiplicada por un factor que considera el efecto de los rayos delta que rodean la trayectoria de la PCP y σ_2 es la sección eficaz de activación para una sola partícula y se obtiene aplicando la ecuación (14) para segmento de trayectoria o la ecuación (15) para trayectoria completa. En ambos casos, se usa la expresión (13) para encontrar la probabilidad $P(z_{ef}, \beta, t, a_0, E_0)$ con $E_0 = E_{02}$.

Para el caso de activación por rayos delta provenientes de distintos iones, la probabilidad de que un elemento sensible no sea activado es :

$$\Pi_{\gamma} = 1 - P\left(c = 2, \frac{(1 - P_i)FL}{E_{02}}\right) \quad (23)$$

donde $P\left(c = 2, \frac{(1 - P_i)FL}{E_{02}}\right)$ se obtiene usando la expresión (18).

Entonces, tenemos que la probabilidad de que un elemento sensible sea activado es

$1 - \Pi_i \Pi_{\gamma}$, y la componente k_2 de dos-o-más impactos de la respuesta TL está dada por :

$$k_2 = 1 - \Pi_i \Pi_{\gamma} \quad (24)$$

Una vez evaluados k_1 y k_2 se encuentra TL_{PCP} debida a PCP utilizando la expresión (19).

7) Método de cálculo TST de eficiencias termoluminiscentes relativas .

De acuerdo a TST, la eficiencia termoluminiscente relativa de partículas cargadas pesadas respecto de una radiación de referencia es el cociente entre la señal TL para PCP dada por la ecuación (19) y la señal TL de la radiación de referencia, en este caso radiación gamma, dada por la ecuación (16), calculadas para una dosis baja D_0 para la cual la respuesta de ambas es lineal, esto es :

$$\eta_{PCP,\gamma} = \frac{TL_{PCP}(D_0)}{TL_{\gamma}(D_0)} \quad (25)$$

Para poder evaluar esta expresión es necesario conocer los valores de algunos parámetros que se obtienen de ajustar a datos experimentales. Estos son :

- las dosis características, E_{01} , E_{02} y la contribución de cada una de las componentes b y

(1- b) que se obtienen de la respuesta a radiación gamma.

- El tamaño del elemento de volumen sensible a_0 , que se obtiene de medidas de eficiencia TL relativa de PCP respecto de gamma.

El modelo TST ha tenido éxito en diversas aplicaciones. Entre ellas : producción de radicales (Katz, R. and Huang, G-R, 1989), lioluminiscencia (Bartlett, D.T. y Edwards, A.A. 1980), inactivación de enzimas y virus, (Butts, J.J. y Katz, R. 1967 y Waligorski, M.P.R. *et al.*, 1987), películas de tinte radiocrómico (Hansen, J.W. y Olsen, K.J., 1984), termoluminiscencia, (Larsson, L. y Katz, R., 1976, Waligorski, M.P.R. y Katz, R., 1980a, Waligorski, M.P.R. y Katz, R., 1980b), centelladores, emulsiones, RBE (efectividad biológica relativa) de varios sistemas biológicos, etc.

Como se mencionó previamente, TST se aplica ajustando ciertos parámetros que son el número de impactos c , la dosis característica E_0 y el tamaño de volumen sensible a_0 . En general, se ha cuestionado el significado físico del tamaño de volumen sensible y más aún en el caso particular de su aplicación en termoluminiscencia. Al describir la supralinealidad de los picos 5 y 6 de TLD-700, Waligorski y Katz (Waligorski, M.P.R. y Katz, R., 1980b) encontraron valores de tamaño sensible de 100 Å y 400 Å respectivamente y sugirieron la posibilidad de que a_0 estuviera relacionado con el espaciamiento entre impurezas en el material. En referencia a estos resultados, Kalef-Ezra y Horowitz (Kalef-Ezra, J, y Horowitz, Y.S, 1982) por un lado sugieren que estos valores podrían corresponder a recorridos libres medios de los electrones secundarios generados por la radiación incidente tanto en la etapa de irradiación como en la etapa de calentamiento pero indican que son

mayores que lo esperado. Por otro lado, interpretan que TST no podría describir correctamente la supralinealidad en LiF en base a volúmenes sensibles ya que si se toma en cuenta la dependencia de la supralinealidad con la energía de los electrones se requerirían valores de α_0 enormes, del orden de $10^6 \text{ \AA}$. Finalmente, argumentan en contra del uso de parámetros que no tienen un significado físico preciso y aportan el modelo TSTM que se describe en la sección I.2.B.2.

Tomando en cuenta que históricamente TST fue el primer modelo que abordó la descripción de la respuesta de un medio ante irradiación con PCP, su buen desempeño en diversas aplicaciones, especialmente biológicas, y el hecho de haber sido utilizado en termoluminiscencia, es necesario considerarlo en este trabajo. Debido a ello se usa el método propuesto por TST para evaluar eficiencias TL relativas de PCP respecto de radiación gamma. En el capítulo IV se analiza el papel del parámetro α_0 .

1.2.B.2 Teoría de Estructura de Trazas “Modificada”.

1) Generalidades

La teoría de estructura de trazas modificada (TSTM) propuesta por Kalef-Ezra y Horowitz (Kalef-Ezra, J. y Horowitz, Y.S., 1982) toma como base el modelo de estructura de trazas (TST) pero hace énfasis en las grandes diferencias que se observan en el espectro de energías y distribución espacial de los electrones secundarios generados por PCP y por radiación gamma. Para una PCP de unos cuantos MeV/amu (energía cinética por nucleón, amu = atomic mass unit), los electrones secundarios tienen energía promedio alrededor de 500 eV, mientras que los rayos gamma del decaimiento de ^{60}Co con energías de 1.17 y 1.33 MeV producen electrones que tienen en promedio una energía de 0.588 MeV (Attix, F.H., 1986). De acuerdo a los autores, esta diferencia impide una comparación directa entre la respuesta a PCP y la respuesta a radiación gamma. La TSTM requiere, para su aplicación, una radiación de prueba que simule, lo mejor posible, tanto el espectro de energías como la distribución espacial producida por los electrones secundarios liberados por las PCP, y propone que la eficiencia relativa $\eta_{PCP,\gamma}$ se obtiene evaluando la siguiente expresión :

$$\eta_{PCP,\gamma} = \eta_{\delta,\gamma} \frac{\overline{W}_{\gamma} \int_0^{R_{\text{max}}} \int_0^{r_{\text{max}}} f_{\delta}(D) D(r, l, E) 2\pi r dr dl}{\overline{W}_{PCP} \int_0^{R_{\text{max}}} \int_0^{r_{\text{max}}} D(r, l, E) 2\pi r dr dl} \quad (26)$$

donde $\eta_{\delta,\gamma}$ es la respuesta TL relativa de los electrones secundarios de las PCP respecto de la obtenida con rayos γ de ^{60}Co . $\overline{W}_{\gamma}$ y $\overline{W}_{PCP}$ son las energías medias requeridas para producir un par electrón-agujero en el medio por radiación gamma y PCP, respectivamente.

$D(r, l, E)$ es la distribución radial de dosis alrededor de la trayectoria de la PCP, R_{max} y r_{max} son las máximas distancias axial y lateral alcanzadas en la etapa de absorción por los portadores de carga emitidos por las PCP y $f_d(D)$ la “función dosis respuesta” TL medida usando una radiación de prueba adecuada y que está dada por :

$$f_d(D) = \frac{F(D) / D}{F(D_0) / D_0} \quad (27)$$

Aquí $F(D)$ es la señal TL obtenida a una dosis D y $F(D_0)$ es la señal TL obtenida a una dosis baja donde la respuesta TL es lineal. A $f_d(D)$ también se le llama “función de supralinealidad”.

2) Radiación de prueba

Encontrar una radiación de prueba que reproduzca el espectro de energías y volumen irradiado por los electrones secundarios de las PCP de manera exacta no es posible. Las radiaciones de prueba a considerar como posibles serían: electrones de la misma energía que la de los rayos delta, partículas beta provenientes de fuentes radiactivas y rayos X de baja energía. Usar como radiación de prueba electrones de energías comparables a las de los rayos delta tiene el problema de no cumplir con el requisito espacial ya que los alcances de las PCP de unos pocos MeV/amu son del orden de micrometros, mientras que las de los electrones de unos pocos keV son del orden de cientos de Angstroms. Este hecho, aunado a dificultades técnicas, elimina a los electrones como posible radiación de prueba. Kalef-Ezra y Horowitz, (Kalef-Ezra, J. and Horowitz, Y.S., 1982), han usado como radiación de prueba partículas beta de tritio que tienen $E_{max} = 18 \text{ keV}$ ($\bar{E} \approx 6$

keV) aunque el volumen de irradiación es alrededor de 25 veces menor al irradiado por una partícula alfa de 4 MeV. Una radiación de prueba adecuada son los rayos X de baja energía, que cumplen aproximadamente con las condiciones mencionadas anteriormente. Idealmente, la radiación de prueba debería, además, tener una distribución de dosis en profundidad aproximadamente igual a la de la partícula cargada pesada. Para ello, si se utilizan dosímetros con espesor d mayor al alcance R de las PCP, la distribución de dosis ideal debe cumplir con :

$$D(x) = \begin{cases} D_0 & 0 \leq x \leq R \\ 0 & R \leq x \leq d \end{cases} \quad (28)$$

con lo cual se simula, aproximadamente, la distribución de dosis-profundidad de la PCP. En este trabajo se utilizó como radiación de prueba rayos X de energía efectiva 8.1 keV medidos por Gamboa-deBuen y colaboradores (Gamboa-deBuen, I. *et al.*, 1998a). Su “función dosis respuesta” o función de supralinealidad (ecuación 27) se muestra en la figura 13. Esta función indica la desviación de la linealidad en la respuesta TL de TLD-100 a ésta radiación en función de la dosis. Se discutirá su papel en el valor de la eficiencia TL en el capítulo IV.

3) Determinación de $\eta_{s,\gamma}$.

El factor $\eta_{s,\gamma}$ en la ecuación (26) es la respuesta TL relativa de los electrones secundarios de las PCP respecto de la obtenida con radiación γ de ^{60}Co . No es posible evaluar este factor directamente usando los electrones secundarios generados por PCP

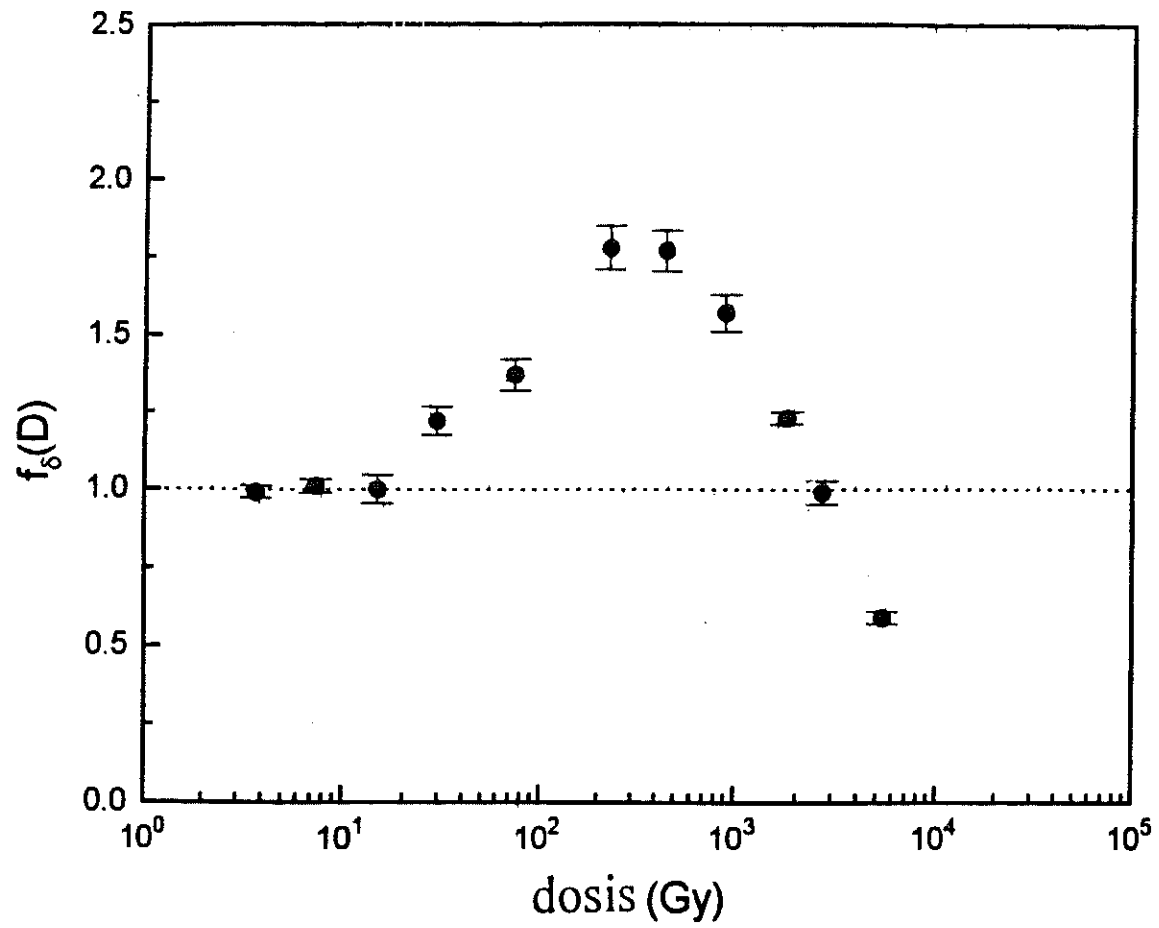


Figura 13. Función de supralinealidad $f_s(D)$ para la señal total inducida por rayos-X de 8.1 keV en TLD-100. (Gamboa-deBuen I. *et al.* 1998a).

por lo que se obtiene mediante el uso de la radiación de prueba. Kalef-Ezra y Horowitz, (Kalef-Ezra, J. y Horowitz, Y.S., 1982), hicieron medidas con rayos X ultra suaves de 4.1 y 4.7 keV y encontraron que la eficiencia TL relativa comparada con ^{60}Co es muy cercana a la unidad, siendo $\eta_{X,\gamma} = 0.97 \pm 0.08$ y $\eta_{X,\gamma} = 1.09 \pm 0.07$ respectivamente.

Para rayos X de 8.1 keV Gamboa-deBuen (Gamboa-deBuen, I., *et al.*, 1998a) también obtuvo un valor consistente con la unidad siendo éste:

$$\eta_{X,\gamma} = 1.04 \pm 0.08 \quad (29)$$

4) Valores $\bar{W}_\gamma$ y $\bar{W}_{PCP}$

En este trabajo se usaron los valores promedio $\bar{W}_\gamma = 33.97 \text{ eV}$ y $\bar{W}_{PCP} = 36 \text{ eV}$ dados por Attix (Attix, F.H., 1986) y Fäin y colaboradores (Fäin, J., *et al.*, 1974), respectivamente. Estos valores fueron obtenidos para vapor de agua y gases tejido-equivalentes.

I. 2.C Interacción de Partículas Cargadas con Materia

I.2.C.1 Interacción de Partículas Cargadas Pesadas con Materia.

1) Pérdida de Energía

Cuando una partícula cargada pesada (PCP) penetra en un material, interacciona con los átomos del medio y pierde energía a lo largo de su trayectoria a través de diversos mecanismos:

- (i) Ionización y excitación. Este es el principal mecanismo para la pérdida de energía de iones a altas velocidades. Las PCP transfieren su energía a los electrones atómicos del medio, llevando a algunos de los átomos a estados ionizados o excitados. A la pérdida de energía debida a ionización y excitación se le llama pérdida de energía electrónica.
- (ii) Colisiones nucleares. Los iones transfieren energía a los núcleos blanco a través de colisiones elásticas. Este mecanismo cobra importancia a bajas energías de las PCP. Se le conoce como pérdida de energía nuclear.
- (iii) Generación de fotones. Este mecanismo tiene lugar sólo a velocidades relativistas. Las PCP emiten fotones al desacelerarse en el medio (Bremsstrahlung).
- (iv) Para ciertas combinaciones de proyectil, energía y blanco, si la energía supera el valor de la barrera coulombiana entre el ion incidente y un núcleo blanco, se pueden presentar reacciones nucleares.

Dentro del contexto de este trabajo son importantes los dos primeros mecanismos. Se considera que el poder de frenado total es la suma del poder de frenado electrónico mas el poder de frenado nuclear.

a) Poder de frenado electrónico

La descripción del poder de frenado electrónico se divide en tres regiones de energía : energías bajas (I), intermedias (II) y altas (III). (figura 14).

a.1) Región de altas energías

Para PCPs con velocidades altas $v > v_0 Z_1^{2/3}$, (donde $v_0 = c/137$ con c la velocidad de la luz) la sección de frenamiento electrónico se representa por la fórmula de Bethe (Bethe, H., 1930) :

$$[S_e]_B = \frac{1}{N} \frac{\Delta E}{\Delta x} = \frac{2\pi Z_1^2 Z_2 e^4}{mv^2} \frac{2mv^2}{\langle I \rangle} \quad (30)$$

donde v es la velocidad del ion, Z_1 y Z_2 son los números atómicos del proyectil y blanco, respectivamente, e es la carga del electrón, N es la densidad atómica del blanco y m es la masa del electrón. Aquí, $\langle I \rangle$ corresponde a la energía media de ionización del blanco que es un promedio pesado de todos los procesos de ionización y excitación de un medio dado y usualmente se determina de manera experimental.

La expresión 30 para el poder de frenado electrónico se ha corregido considerando la naturaleza cuántica del problema, efectos relativistas y otros, obteniéndose (Bethe, H.A., 1953) :

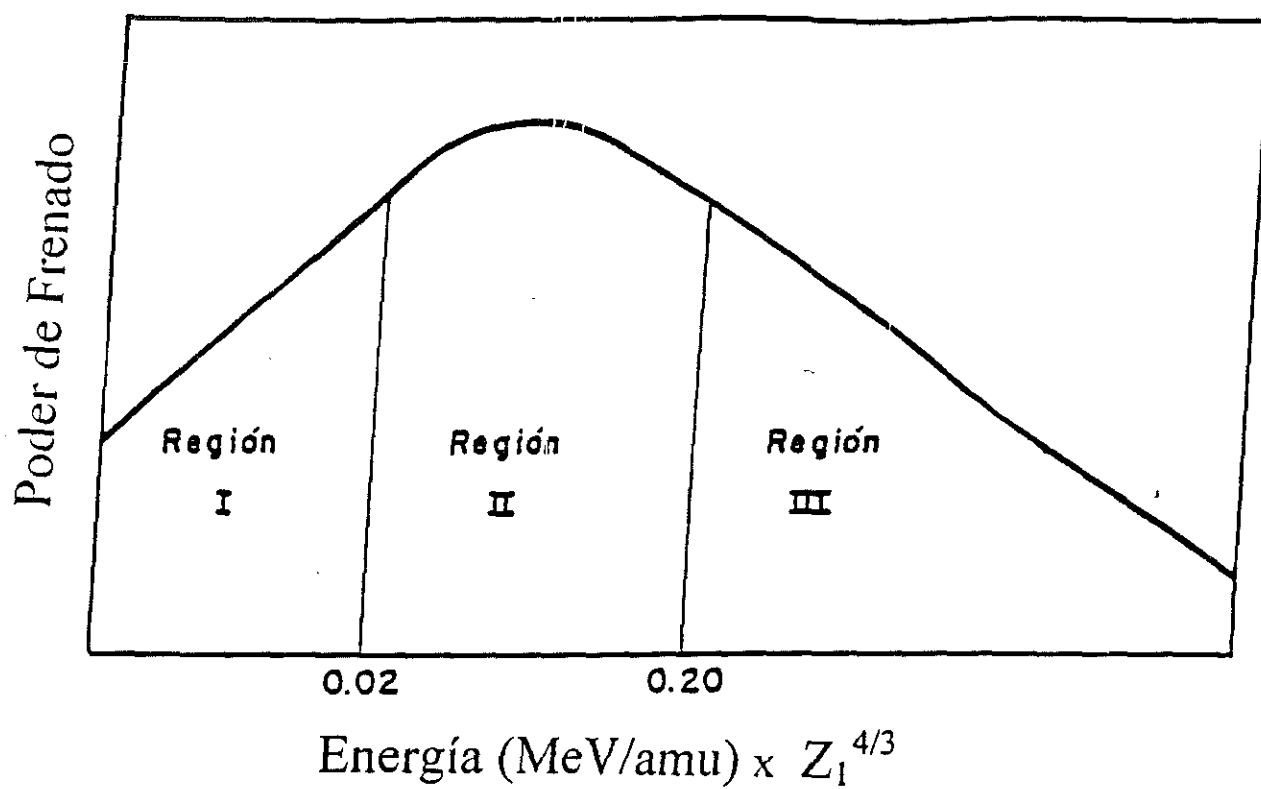


Figura 14. Esquema general del poder de frenado dE/dx para partículas cargadas incidentes en un medio. Se pueden distinguir tres regiones de energía en las que se aplican distintas descripciones.

$$S_e = \frac{1}{N} \frac{\Delta E}{\Delta x} = \frac{Z_1^2 Z_2 e^4}{mv^2} \left[\ln \left(\frac{2mv^2}{I} \right) - \ln \left(1 - \frac{v^2}{c^2} \right) - \frac{v^2}{c^2} - \frac{C}{Z_2} - \frac{\delta}{2} \right] \quad (31)$$

Aquí, los términos que contienen v^2 / c^2 son las correcciones relativistas, C/Z_2 es un término dependiente de la velocidad que es importante a bajas velocidades y que se incluye para corregir el poder de frenado por la no participación de los electrones de las capas internas en ionización y excitación por proyectiles a bajas velocidades. El término $\delta / 2$ corrige por el efecto de densidad, importante sólo a muy altas velocidades, que consiste en que el campo eléctrico de la PCP incidente polariza el medio.

Un resultado básico de la teoría de Bethe es que la pérdida de energía es una propiedad del medio, función de la velocidad del proyectil. La naturaleza de la partícula incidente entra sólo como una propiedad de escalamiento Z_1^2 en la expresión 31. Esto permite que se pueda encontrar el poder de frenado de un proyectil conociendo el de otro.

La expresión de Bethe se basa en la suposición de que la partícula se mueve mucho más rápido que los electrones atómicos del medio, por lo que sólo es válida mientras esta suposición se cumpla. A bajas energías, el término logarítmico se vuelve negativo y, por otro lado, una partícula cargada pesada comienza a capturar y perder electrones conforme se mueve. Esto se discute más adelante.

a.2) Región de bajas energías.

Las teorías que describen la pérdida de energía de iones con velocidades bajas, $v \ll v_0 Z_1^{2/3}$, predicen un comportamiento de la pérdida de energía proporcional a la velocidad. En esta zona, tanto el proyectil como el blanco son prácticamente neutros. La

teoría de Lindhard-Scharff, (Lindhard J. y Scharff, M., 1961) propone la siguiente expresión para la sección de frenamiento electrónico:

$$\left[S_e(E) \right]_{LS} = \frac{1}{N} \frac{\Delta E}{\Delta x} = \frac{1.212 Z_1^{7/6} Z_2}{\left(Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3} \right)^{3/2} m_1^{1/2}} E^{1/2} \quad (32)$$

a.3) Región de energías intermedias

Cuando la energía del ion se reduce de modo que su velocidad es del orden de la velocidad promedio de los electrones orbitales, el ion empieza a capturar electrones, de modo que su carga nuclear Z es apantallada. No se cuenta con tratamientos teóricos precisos en esta región de energía, pero el uso de una carga efectiva ha sido ampliamente utilizado. De acuerdo a este concepto, la carga del ion se puede representar por una carga efectiva. La carga efectiva incluye el estado de carga del ion, así como los efectos de apantallamiento y la perturbación de los electrones del ion. La carga efectiva Z_{ef} se introduce en la fórmula de Bethe sustituyendo a Z_1 para evaluar la pérdida de energía. Existen varias expresiones semiempíricas para Z_{ef} deducidas a partir de medidas experimentales. Una de las más utilizadas es la fórmula de Barkas (Barkas, W.H., 1963):

$$Z_{ef} = Z_1 \left[1 - \exp(-125 \beta Z^{-3/2}) \right] \quad (33)$$

donde $\beta = v/c$.

Medidas posteriores realizadas por Anthony y Lanford (Anthony, J.M. y Lanford W.A., 1982) sugieren la siguiente expresión:

$$Z_{ef} = Z_1 \left[1 - A \exp(\lambda Z_1^{-2/3} v / v_o) \right] \quad (34)$$

$$\begin{aligned} \text{con} \quad A &= 1.16 - 1.91 \times 10^{-3} Z_T + 1.26 \times 10^{-5} Z_T^2 \\ \text{y} \quad \lambda &= 1.18 - 7.5 \times 10^{-3} Z_T + 4.53 \times 10^{-5} Z_T^2 \end{aligned} \quad (35)$$

aquí v_o es la velocidad de Bohr y Z_T el número atómico del blanco.

Más adelante se discutirá brevemente la descripción del poder de frenado en sólidos realizada por Cruz y colaboradores (Montenegro E.C. *et al.*, 1982), quienes proponen la siguiente ecuación para la carga efectiva:

$$Z_{ef} = Z_1 \left[1 - \exp(-\alpha u) - 1/6 \alpha u \exp(-2\alpha u) \right] \quad (36)$$

con $\alpha = Z_1^{-2/3}$ y $u = v / v_o$.

El uso de la carga efectiva permite seguir usando la expresión de Bethe en la región de energías intermedias.

Otra manera de describir el poder de frenado electrónico en la zona de energías intermedias es mediante el uso de fórmulas semiempíricas. Biersack y Haggmark, (Biersack J.P. and Haggmark L.G., 1980) sugieren la siguiente interpolación que combina las formulaciones de Bethe y de Lindhard-Scharff:

$$[S_e(E)]_{BH}^{-1} = (S_e(E))_{LS}^{-1} + (S_e(E))_B^{-1} \quad (37)$$

aquí, los subíndices BH , LS y B abrevian Biersack-Haggmark, Lindhard-Scharff y Bethe, respectivamente.

Entre los estudios orientados a la descripción del poder de frenado en sólidos se tiene el trabajo de Cruz y colaboradores (Montenegro E.C. *et al.*, 1982) que reportan una ecuación universal para el poder de frenado electrónico de iones válida a energías no relativistas en todos los blancos sólidos y que no depende de parámetros ajustables. Los autores deducen sus resultados en forma semifemenológica iniciando a partir de un postulado fundamental (basado en el teorema aditivo de la teoría de probabilidades) que permite asignar una estructura aditiva a la sección de frenado electrónica para todo el intervalo de velocidades, considerando la probabilidad de ocurrencia de los diferentes procesos que participan en el fenómeno de pérdida de energía, conforme la velocidad del proyectil cambia. Una vez que se establece la estructura general de la ecuación, la deducción de su forma explícita se realiza tomando en consideración los resultados de la aproximación de Born de ondas planas (PWBA) para ionización y excitación (Montenegro, E.C. *et al.*, 1981) y los resultados de Lindhard (Lindhard, J., 1954) y Firsov (Firsov, O.B., 1959) para el frenado a bajas energías junto con resultados de la teoría de carga efectiva y las correcciones de capa de primer orden de Bethe (Fano, U., 1963). Adicionalmente, se imponen los límites asintóticos apropiados al requerir que la ecuación propuesta se reduzca a la ecuación de Bethe para altas energías y a un comportamiento proporcional a la velocidad a bajas energías. Esto conduce a los autores a proponer la siguiente ecuación :

$$S_e = \left\{ Z_1^2 \frac{(1 - e^{-\alpha u} - 1/6\alpha u e^{-2\alpha u})^2}{(1 - e^{-u} - 1/6u e^{-2u})^2} \right\} S_p \quad (38)$$

Aquí α y u son los descritos previamente en relación con la ecuación 36 y S_p es la sección eficaz de frenado para protones dada por :

$$S_p = Kue^{-u} + au^{-2} \ln(1 + bu^2) - c(1 + du^2)^{-1} + fu^4(1 + eu^2)^{-3} - \beta(gu^2)^{3/2}(1 + gu^2)^{-4} / 6b^2 \quad (39)$$

donde $\beta = a / 9.5616Z_2$, Z_1 y Z_2 son el número atómico del proyectil y del blanco, respectivamente. La constante K se obtiene de la teoría de Lindhard mientras que a y b se obtienen de la teoría de Bethe :

$$a = 8\pi\alpha_0^2 I_H Z_2, \quad b = 4I_H / \langle I \rangle \quad (40)$$

donde a_0 es el radio de Bohr, $\langle I \rangle$ el potencial medio de ionización para el átomo blanco e I_H la energía de ionización del átomo de hidrógeno.

Los coeficientes restantes que entran en la expresión 39 están dados por :

$$\begin{aligned} c &= ab \\ d &= K / c + b / 2 + Z_2^* / 9Z_2 \\ e &= 3b^2 d (Z_2^{1.4} b d^2 + b^2 + d^2) \\ f &= ce^3 / d \\ g &= 2\beta / 3c \end{aligned} \quad (41)$$

Z_2^* es el número de electrones externos en el átomo blanco con velocidad orbital del orden de v_0 . La expresión 38 es válida para velocidades no relativistas y para todas las combinaciones de ion incidente en blanco sólido y ha probado estar en buen acuerdo con medidas experimentales cualitativa y cuantitativamente.

b) Poder de frenado nuclear

El poder de frenado nuclear sólo contribuye en un pequeño porcentaje al poder de frenado total en la región de energías altas e intermedias pero es importante a bajas energías. El poder de frenado nuclear se obtiene generalmente de cálculos que siguen los siguientes pasos: i) la determinación de un potencial de dispersión proyectil-blanco adecuado; ii) la determinación de la sección eficaz de dispersión elástica mediante un cálculo de mecánica clásica; iii) la evaluación de la energía transferida a los átomos blanco en colisiones elásticas. Con respecto al primer paso existen distintas prescripciones, este problema ha sido analizado con detalle por Ziegler y colaboradores (Ziegler *et al.*, 1985).

En general se acostumbra calcular potenciales para un gran número de combinaciones proyectil-blanco y adoptar un potencial unico que provee una buena aproximación a todas las combinaciones. Ziegler y colaboradores obtienen una expresión universal para la sección de frenamiento nuclear:

$$S_n = \frac{8.462 \times 10^{-15} Z_1 Z_2 M_1 S_n(\varepsilon)}{(M_1 + M_2)(Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})} eV / (atom / cm^2) \quad (42)$$

donde ε es la energía reducida dada por:

$$\varepsilon = \frac{32.53 M_2 E}{Z_1 Z_2 (M_1 + M_2)(Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})} \quad (43)$$

y $S_n(\varepsilon)$ es la sección de frenamiento nuclear reducida dada por:

$$\begin{aligned} \text{para } \varepsilon \leq 30: \quad S_n(\varepsilon) &= \frac{\ln(1 + 1.138\varepsilon)}{2[\varepsilon + .013\varepsilon^{.212} + .196\varepsilon^3]} \\ \text{para } \varepsilon > 30: \quad S_n(\varepsilon) &= \frac{\ln(\varepsilon)}{2\varepsilon} \end{aligned} \quad (44)$$

2) Alcance

El alcance de una PCP es la distancia que viaja hasta llegar al reposo. El inverso del poder de frenado da la distancia recorrida por unidad de pérdida de energía. Es decir, el alcance $R(T)$ de una partícula con energía cinética T es la integral de esta cantidad hasta energía cero:

$$R(T) = \int_T^0 \left(-\frac{dE}{dx} \right)^{-1} dE \quad (45)$$

I.2.C.2 Interacción de electrones con sólidos.

Los electrones, siendo partículas cargadas como los iones, tienen también la capacidad de ionizar y excitar a los átomos del medio que penetran. Las diferencias, respecto de PCPs en su interacción con la materia, se deben a que su masa es muy pequeña, su carga es constante y son indistinguibles de aquellos electrones con los que interaccionan. Debido a su masa pequeña, cuando un electrón tiene una colisión con otro electrón puede perder una fracción importante de su energía. Como los electrones son indistinguibles, la pérdida de energía se define tomando al electrón de menor energía como el electrón golpeado. Por otro lado, para electrones con alta energía, las pérdidas de energía radiativas (Bremsstrahlung) son más importantes que en el caso de iones. Para el caso de electrones en agua, el umbral de energía a partir del cual las pérdidas radiativas comienzan a contribuir al poder de frenado es alrededor de 50 MeV.

En este trabajo, las PCPs con energías de algunos MeV por nucleón liberan electrones de unos pocos keV. Para estas energías, sólo contribuyen al poder de frenado los eventos que provienen de colisiones electrónicas.

Las interacciones de electrones con materia se clasifican en :

i) interacciones elásticas que se refieren a la interacción de un electrón con un núcleo del medio. Debido a la gran diferencia de masas, la pérdida de energía asociada a un evento de este tipo es despreciable, pero el electrón sufre un cambio de dirección.

ii) interacciones inelásticas que son eventos electrón-electrón; estos procesos se dividen en eventos que conducen a la ionización y excitación en las capas internas, y en interacciones dieléctricas que involucran a electrones libres, electrones de la banda de valencia e interacciones colectivas con plasmones. Las oscilaciones de plasmón resultan de fuerzas coulombianas entre los electrones de valencia de un sólido. Si se tiene una fluctuación en la densidad de electrones de valencia, causada por ejemplo por el paso de un electrón de alta energía, se produce una fuerza de restauración, que a su vez produce oscilaciones en la densidad electrónica.

Las interacciones de tipo inelástico son las responsables de la pérdida de energía de los electrones y también llevan asociado un cambio en la dirección del electrón incidente. Por su masa pequeña y las grandes desviaciones que pueden sufrir los electrones al chocar con núcleos del medio, sus trayectorias, a diferencia de las de PCP, son tortuosas. Esto se ilustra de manera visual en la figura 15 que compara trazas de PCP y de electrones.

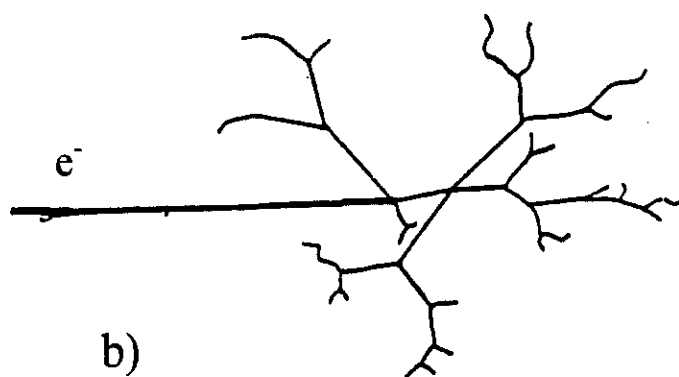
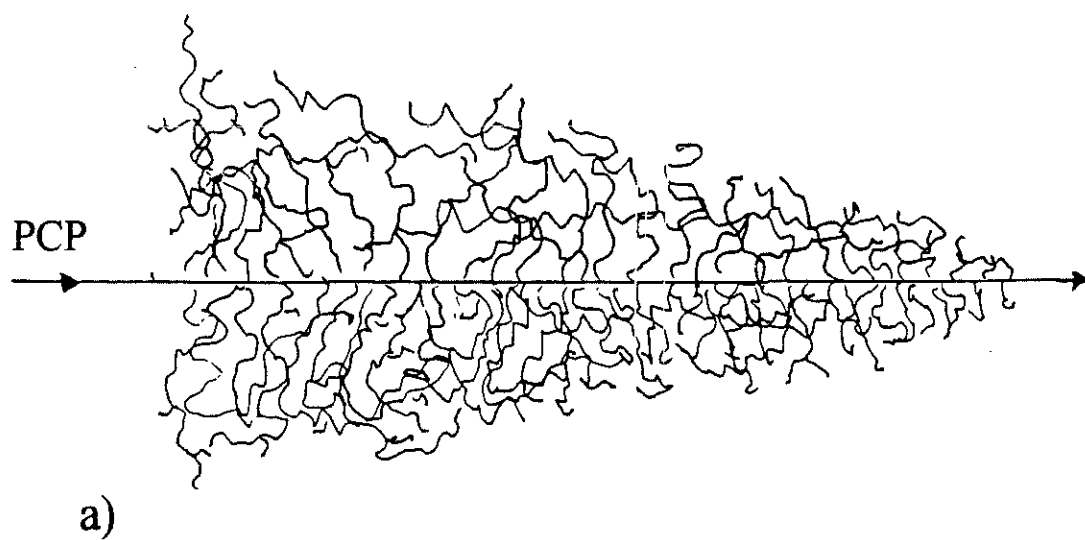


Figura 15. Trazas de PCP (a) y de electrones (b) en un medio dispersor. Se muestra la trayectoria de la partícula incidente así como la de los electrones secundarios generados.

Al igual que para las PCP, Bethe (Bethe, H., 1930) describió el poder de frenado suponiendo que los electrones pierden energía de manera continua al atravesar un material. De acuerdo con Bethe, el poder de frenado para electrones en un medio está dado por :

$$-\left(\frac{dE}{dx}\right) = 2\pi e^4 N_A \frac{\rho}{A} \frac{1}{E} \ln \frac{1.166E}{J} \quad (46)$$

donde N_A , ρ y A son el número de Avogadro, la densidad y el peso atómico del medio, respectivamente, y J es la energía media de ionización que representa todos los posibles procesos que conducen a una pérdida de energía del electrón. Esta es la llamada aproximación de frenado continuo (CSDA, por sus iniciales en inglés) y su validez ha sido justificada (Inokuti, M., 1971).

Berger y Seltzer (Berger M.J. y Seltzer S.M., 1964) proponen la siguiente fórmula empírica para la energía media de ionización J :

$$\frac{J}{Z} = 9.76 + 58.8Z^{-1.19} \quad (47)$$

La expresión de Bethe deja de ser válida a energías de los electrones menores que las energías promedio de ionización y, en particular, el término logarítmico se vuelve negativo para $E < J/1.166$. Rao-Sahib y Wittry (Rao-Sahib T.S. y Wittry D.B., 1974) extrapolaron empíricamente la ecuación de Bethe para bajas energías pero su método carece de bases

físicas y diverge cuando E tiende a cero. Ritchie y colaboradores (Ritchie, R.H. *et al.*, 1969) mostraron que es posible sumar por separado distintas contribuciones inelásticas al poder de frenado.

En este trabajo se siguen en detalle las interacciones de los electrones con el medio mirando por separado cada tipo de interacción de acuerdo con la aproximación de Fitting y Reinhardt (Fitting, H.J. y Reinhardt, J., 1985). Esto se discutirá en la sección II.2.B.

El alcance para electrones puede definirse igual que el de las PCP (ecuación 45). Esta definición supone que la energía cinética de la partícula cambia de manera continua conforme se va frenando en el material. Esta suposición puede ser adecuada para PCP, pero no lo es siempre para electrones que pueden perder una enorme fracción de su energía en una sola colisión. Sin embargo, esta expresión se usa y proporciona un valor para el “alcance”, que corresponde a la longitud de trayectoria promedio que un electrón viaja. A partir de simulaciones Monte Carlo en agua se ha encontrado que, en promedio, la máxima penetración se aproxima de manera gruesa a la mitad del alcance, entendido como longitud completa de trayectoria (Turner J.E., 1995).

I.2.D Distribuciones radiales de dosis.

Las distribuciones radiales de dosis alrededor de la trayectoria del ion incidente representan la etapa inicial del fenómeno TL ya que cuantifican la energía impartida al medio por la radiación. Su conocimiento es indispensable para la obtención de la eficiencia termoluminiscente relativa. Antes de describir los métodos tradicionales para la obtención de los perfiles radiales de dosis se hace referencia al espectro de emisión de electrones secundarios producidos por las PCP, que se necesita conocer para calcular las distribuciones radiales de dosis.

I.2.D.1 Sección eficaz de emisión de electrones secundarios.

Desafortunadamente, no existen medidas experimentales de secciones de emisión de electrones de baja energía producidos al irradiar la materia condensada con partículas cargadas pesadas con energías del orden de unos pocos MeV/amu. Sin embargo, en la literatura sí se encuentran medidas de secciones doble-diferenciales en energía y ángulo para la emisión de electrones en medios gaseosos que poseen propiedades de interacción similares a las del tejido para protones con energías entre 0.2 y 2 MeV. Los medios estudiados son, nitrógeno molecular, vapor de agua, etano, metano, benceno, entre otros. Algunas de las medidas más utilizadas, que han sido adaptadas mediante correcciones por densidad a materia condensada, son las de Toburen para protones en nitrógeno, (Toburen, L.H., 1971), figura 16, y las de Toburen y Wilson, para protones en vapor de agua (Toburen L.H. y Wilson, W.E., 1977).

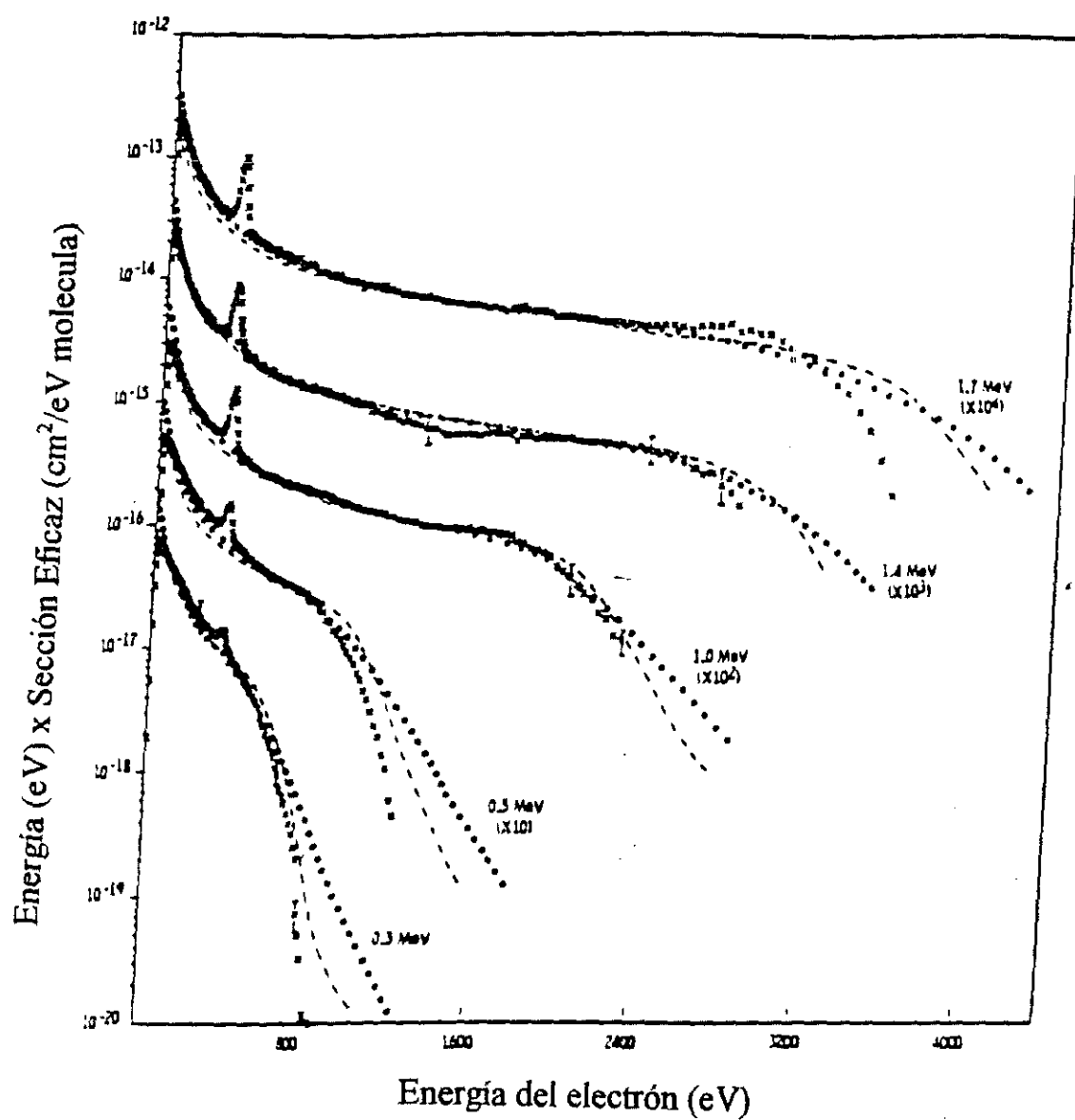


Figura 16. Sección eficaz y espectro de emisión de electrones por protones en N_2 . (Toburen, L.H., 1971).

También, se pueden calcular estas secciones eficaces de manera analítica e incorporarlas a cálculos de distribución radial de dosis como se describe para la TST.

I.2.D.2 Distribuciones radiales de dosis tipo TST, método propuesto por Katz y colaboradores.

La teoría de estructura de trazas propone un método analítico para la obtención de las curvas radiales de dosis requeridas por las ecuaciones 12 y 13. Para calcular la dosis depositada por los electrones secundarios emitidos por las partículas cargadas pesadas que interaccionan con los electrones atómicos del medio se utiliza la teoría de Bethe (Bethe, H.A., 1953, Fano, U., 1963). La energía de amarre de los electrones atómicos se desprecia y se describe la interacción entre las PCP y estos electrones libres del medio mediante el formalismo de dispersión de Rutherford. La energía de los rayos delta (como son llamados los electrones secundarios más energéticos) se describe por :

$$\omega = 2mc^2\beta^2(1 - \beta^2)^{-1} \cos^2 \theta \quad (48)$$

donde θ es el ángulo de emisión del electrón con respecto a la dirección incidente en el sistema de laboratorio. La sección eficaz diferencial para un electrón, que es emitido en un ángulo polar entre θ y $\Delta\theta$, está dada por :

$$\sigma_\theta = \frac{2\pi e^4 z_{ef}^2}{mc^2 \beta^4} \frac{\sin \theta}{\cos^3 \theta} d\theta \quad (49)$$

La ecuación 48 muestra que los electrones de mayor energía se emiten preferencialmente hacia adelante, mientras que los de baja energía se emiten en dirección perpendicular a la trayectoria del ion incidente. La ecuación 49 muestra que la mayoría de

los electrones se emite a ángulos mayores que 45° . En base a esto, TST supone, entonces, que todos los electrones son emitidos perpendicularmente a la trayectoria de la PCP. También, supone que los electrones viajan en línea recta y que pierden energía de manera continua.

La sección eficaz, para la emisión de un electrón con energía entre ω y $\Delta\omega$, está dada por:

$$\sigma_\omega = \frac{2\pi e^4}{mc^2} \frac{z_{ef}^2}{\beta^2} \frac{d\omega}{\omega^2} \quad (50)$$

y el número de electrones emitidos por unidad de longitud de trayectoria de la partícula cargada pesada es la sección σ_ω multiplicada por el número N de electrones por unidad de volumen en el medio:

$$dn = N\sigma_\omega = N \frac{2\pi e^4}{mc^2} \frac{z_{ef}^2}{\beta^2} \frac{d\omega}{\omega^2} = C \frac{z_{ef}^2}{\beta^2} \frac{d\omega}{\omega^2} \quad (51)$$

Para calcular la energía que depositan los rayos delta la teoría de estructura de trazas hace uso de una relación de potencia entre el alcance y la energía de los electrones secundarios obtenida por Hansen y Olsen (Hansen, J.W. y Olsen, K.J., 1984) al ajustar a datos experimentales y provenientes de aproximaciones teóricas en distintos medios físicos (Paretzke, H.G. y Berger, M.J., 1978, Ashley, J.C., 1982 y Cole, A., 1969) y que tiene la forma :

$$r = \frac{1}{\rho} \kappa \omega^\alpha \quad (52)$$

donde r es el alcance de los electrones, ρ es la densidad del medio en g/cm^3 , $\kappa = 5.2 \times 10^{-11} \text{ g/(\text{cm}^2 \text{ eV}^\alpha)}$ y $\alpha = 1.67$. De acuerdo con esta aproximación, el alcance máximo de los electrones es:

$$t_{\max} = \frac{1}{\rho} \kappa \omega_{\max}^\alpha \quad (53)$$

aquí $\omega_{\max} = 2mc^2 \beta^2 / (1 - \beta^2)$ es la máxima energía transferida a los electrones por la PCP.

Usando esta fórmula, el poder de frenado de los electrones emitidos se deduce de la siguiente manera: un electrón con energía inicial ω_r y alcance r tendrá una energía residual ω_{r-t} dada por:

$$\omega_{r-t} = \left(\frac{r-t}{\kappa} \right)^{\alpha^{-1}} = \left(\frac{r}{\kappa} \right)^{\alpha^{-1}} \left(1 - \frac{t}{r} \right)^{\alpha^{-1}} = \omega_r \left(1 - \frac{t}{r} \right)^{\alpha^{-1}} \quad (54)$$

después de viajar una distancia t . El cociente diferencial da el poder de frenado a la distancia t :

$$\frac{d\omega_{r-t}}{dt} = -\omega_r \frac{1}{\alpha} \frac{1}{r} \left(1 - \frac{t}{r} \right)^{(\alpha^{-1}-1)} \quad (55)$$

La energía total, $ET(z_{ef}, \beta, t)$, depositada por los rayos delta, en el intervalo entre t y $t + dt$ de la trayectoria del ion, es el producto del número de rayos delta y sus respectivos poderes de frenado integrados sobre todas las energías. Esto lleva a:

$$ET(z_{ef}, \beta, t) = C \frac{z_{ef}^2}{\beta^2} \frac{1}{\alpha} \frac{1}{t} dt \left(1 - \frac{t}{t_{\max}} \right)^{\alpha^{-1}} \quad (56)$$

y la densidad de energía $E(z_{ef}, \beta, t)$ depositada en una rodaja cilíndrica de área $2\pi t dt$ y de longitud unitaria alrededor de la trayectoria del ion es:

$$E(z_{ef}, \beta, t) = \frac{ET}{2\pi t dt} = \frac{C}{2\pi} \frac{z_{ef}^2}{\beta^2} \frac{1}{\alpha} \frac{1}{t^2} \left(1 - \frac{t}{t_{max}}\right)^{\alpha-1} \quad (57)$$

Esta es la distribución de dosis para un blanco puntual (tamaño de blanco $a_0 \approx 0$).

Aquí $C = \frac{2\pi N e^4}{m c^2} = 2.46 \times 10^{-7} \frac{n_e \rho}{A}$, n_e , ρ y A son el número de electrones por

molécula, la densidad y el peso molecular del medio irradiado, respectivamente.

Para el cálculo de blanco extendido, la dosis al elemento sensible se calcula como la dosis promedio en un cilindro de longitud unitaria, cuyo eje es paralelo a la trayectoria del ion y con radio de tamaño a_0 , obteniéndose (Hansen, J.W. y Olsen, K.J., 1984, Hansen, J.W., 1984):

$$\bar{E}(z_{ef}, \beta, t, a_0) = \frac{1}{\pi a_0^2} \int_{t-a_0}^{t+a_0} E(z_{ef}, \beta, t') A(t', a_0) dt' \quad (58)$$

$$y \quad A(t, a_0) = 4a \tan \sqrt{\frac{a_0^2 - (t_0 - t)^2}{(t + t_0)^2 - a_0^2}} \quad \text{para } (t_0 + t) > a_0 \quad (59)$$

$$A(t, a_0) = 2\pi \quad \text{para } (t_0 + t) \leq a_0$$

Para calcular la densidad de energía o dosis depositada por los electrones secundarios, se utiliza la ecuación (58) para distancias menores a $3a_0$ y la ecuación (57) para distancias mayores a $3a_0$. La figura 17 muestra el resultado de calcular $\bar{E}(z_{ef}, \beta, t)$ usando la ecuación (58) con $a_0 = 100 \text{ \AA}$.

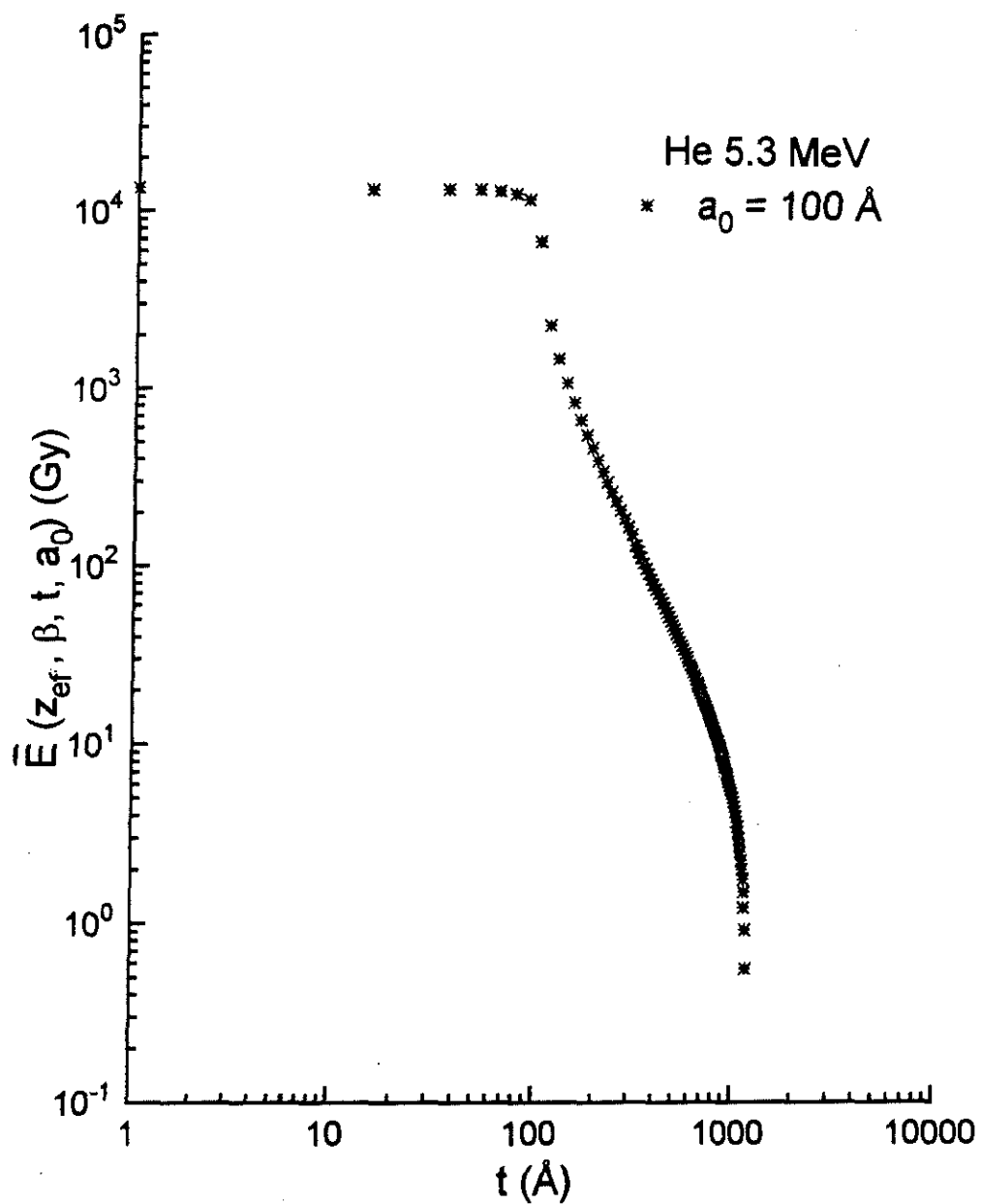


Figura 17. Distribución radial de dosis $\bar{E}(z_{ef}, \beta, t, a_0)$ para helios de 5.3 MeV en LiF obtenida de manera analítica según el procedimiento de TST propuesto por Katz y colaboradores usando $a_0 = 100 \text{ \AA}$.

I.2.D.3 Modelo químico de estructura de trazas de Chatterjee *et al.*

Este modelo, propuesto por Chatterjee y colaboradores (Chatterjee A. *et al.*, 1973, Chatterjee, A. y Schaefer, H.J., 1976, Magee, J.L. y Chatterjee, A., 1984) describe los procesos químicos que tienen lugar en tejido o en medios acuosos expuestos a radiación ionizante. Se distinguen dos zonas principales en las trazas producidas por PCP, el carozo o “core” y la penumbra. El carozo es una zona central estrecha de radio r_c donde la disipación de energía tiene lugar principalmente a través de procesos de excitación y de oscilaciones colectivas de los electrones, se supone que la mitad de la disipación total de energía ocurre de esta manera. El radio del carozo está dado por la condición adiabática de Bohr :

$$r_c = \frac{\beta c}{(4\pi n e^2 / m)^{1/2}} \quad (60)$$

donde $\beta = v/c$, e y m son la carga y la masa del electrón respectivamente y n es la densidad de electrones en agua, igual a 3×10^{23} electrones/cm³.

La penumbra es una zona periférica, con radio máximo r_p , que rodea al carozo. En la penumbra, el depósito de energía ocurre principalmente en eventos de ionizaciones debidos a los electrones secundarios liberados por el ion incidente en el centro del carozo. Las dimensiones físicas de la penumbra se determinan por el alcance máximo r_{max} de los electrones liberados por las PCP que tienen energías hasta un máximo igual a $2mv^2(1-\beta^2)^{-1}$. Se muestran algunos valores para r_c y r_p en la tabla I para trazas de PCP de distintas energías incidentes en agua (Magee J.L. y Chatterjee, A., 1984).

Adicionalmente al carozo y la penumbra, se tiene el radio químico r_q que se encuentra en la zona intermedia entre r_c y r_p y se determina por la competencia de reacciones químicas.

La figura 18 ilustra esquemáticamente una sección transversal de una traza de PCP en agua mostrando los radios mencionados.

En el capítulo IV se hará referencia al radio del carozo y se compararán los resultados de este trabajo con los de este modelo.

Tabla I. Radio del carozo y radio de la penumbra para iones con distintas energías en agua (Magee J.L. y Chatterjee, A., 1984).

Energía (MeV/amu)	r_c (nm)	r_p (nm)
10	1.496	2.1×10^3
8	1.340	1.6×10^3
6	1.163	1.1×10^3
4	0.951	6.2×10^2
2	0.673	2.4×10^2
1	0.477	9.6×10^1
0.8	0.426	7.1×10^1
0.6	0.369	4.8×10^1
0.4	0.302	2.8×10^1
0.2	0.213	1.1×10^1

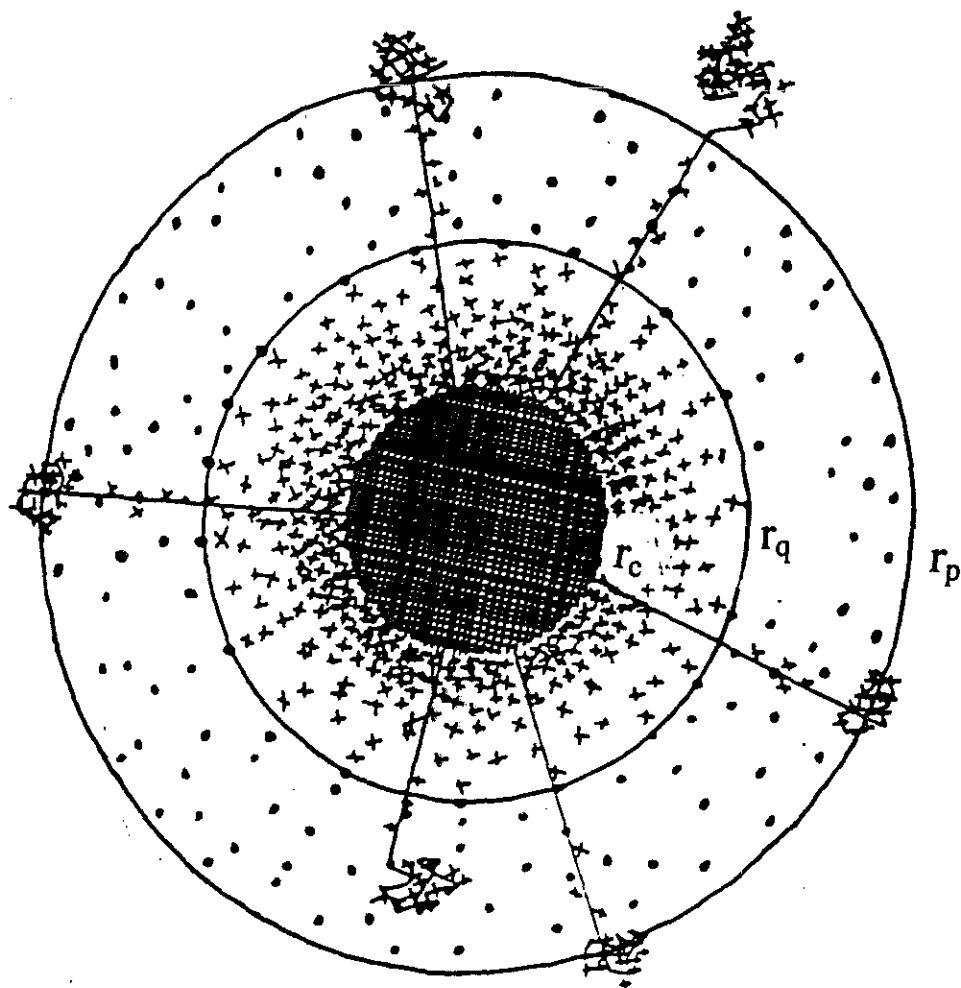


Figura 18. Representación de la sección transversal de una traza de una PCP en agua. La región central es el carozo con radio r_c ; el siguiente círculo indica el límite del carozo químico con radio r_q y el círculo más externo con radio r_p marca el límite de la penumbra.

I.2.D.4 Distribuciones radiales de dosis, método de Montret.

Montret, en su tesis doctoral, (Montret, 1980), hace un análisis del depósito de energía en LiF por irradiación con partículas cargadas pesadas, tomando como base el trabajo previo de Fäin y colaboradores (Fäin, J., *et al.*, 1973, y Fäin, J., *et al.*, 1974). Estos autores se refieren a “energía primaria” como aquella energía liberada dentro de las moléculas directamente por la partícula incidente (esta liberación de energía tiene lugar en un carozo de radio del mismo orden de magnitud que el radio atómico y el depósito puede ser de dos tipos, “energía primaria de excitación”, y la energía que se requiere para superar la energía de amarre de los electrones emitidos). Por “energía secundaria” se refieren a la producción de electrones secundarios y al subsiguiente depósito de energía. Este modelo usa la teoría clásica de encuentros binarios para el cálculo del espectro de energías de los electrones secundarios con distribuciones angulares, de acuerdo a la cinemática clásica que describe la interacción entre una partícula incidente y un electrón libre. El depósito de energía por electrones secundarios se calcula, de manera analítica, usando resultados provenientes de simulación MC realizada por Berger (Berger, M.J., 1971), que dan la distribución espacial de la energía depositada por electrones emitidos de una fuente lineal. Este procedimiento, que no es válido para electrones con energía menor que 500 eV (Berger, M.J., 1973), usa valores para el alcance de los electrones de acuerdo a la aproximación de frenado continuo (CSDA) dados por Cole, (Cole, A., 1969) e ICRU, (ICRU, 1970). Dentro del contexto de este modelo se hace, además, una partición de la

energía depositada por electrones secundarios según que ésta sea debida a ionizaciones, excitaciones o vibraciones moleculares. Los cálculos se realizan en agua. Este modelo se ha usado para calcular valores promedio de $\bar{W}$ (la energía necesaria para crear un par de iones) en varios gases. Las distribuciones radiales de dosis obtenidas de esta manera son similares a las obtenidas mediante el método propuesto por TST (sección I.2.D.2) y se han aplicado a estudios de termoluminiscencia en LiF corrigiendo por densidad. En el capítulo III se compararán estos perfiles de dosis con resultados de este trabajo.

I.2.D.5 Distribuciones radiales de dosis obtenidas mediante simulación Monte Carlo en gases tejido-equivalentes.

El método Monte Carlo es adecuado para estudiar el depósito de energía. La principal contribución, basada en teoría de estructura de trazas y utilizando simulación Monte Carlo se debe a Paretzke. El programa original MOCA desarrollado por Paretzke, (Paretzke, H.G., 1973), que posteriormente ha sido optimizado y actualizado, (Wilson, W. y Paretzke, H.G., 1980), fue escrito específicamente para vapor de agua y tiene las siguientes características:

- los procesos básicos considerados en los cálculos para depósito de energía en el medio son: ionización directa y excitación por protones, dispersión elástica e inelástica de electrones;
- se usa la aproximación de encuentros binarios (García, J.D., 1969) para calcular secciones de ionización de capas internas y externas, así como las distribuciones de energía de los electrones secundarios.

- la distribución angular de los electrones secundarios emitidos se representa mediante un algoritmo basado en una aproximación empírica a partir de los datos de Toburen, (Toburen, L.H., 1971), para protones en nitrógeno ;
- la colisión elástica de los electrones emitidos se trata usando la fórmula de Rutherford con correcciones de apantallamiento; los parámetros de apantallamiento y la dependencia angular se ajusta a datos experimentales en agua obtenidos por Bromberg (Bromberg, J.P., 1970)
- las interacciones ionizantes se describen usando una fórmula semiempírica basada en datos de vapor de agua, (Schutten J. *et al.*, 1966) y (Opal J.B. *et al.*, 1972) ;
- las transferencias discretas de energía al medio debido a electrones secundarios se simulan de la siguiente manera: entre dos interacciones sucesivas, elásticas o ionizantes, se supone que el electrón secundario pierde energía a través de excitación en uno o más cuantos de energía fija ≈ 5 eV. El número de cuantos se obtiene del producto del poder de frenado parcial por excitación y del recorrido entre dos colisiones sucesivas. El poder de frenado restringido a excitación se calcula restando del poder de frenado total el poder de frenado para ionización y la energía cinética de los secundarios. Cada electrón secundario se sigue hasta que su energía es menor que 12.6 eV, que es el valor supuesto para el potencial de ionización en el medio.

También Krämer y Kraft (Krämer M., y Kraft, G., 1993 y 1994, Krämer, M., 1995) han desarrollado códigos MC basados en TST que permiten estimar distribuciones radiales

de dosis provenientes de irradiación de gases (vapor de agua, gas tejido-equivalente o propano) con partículas cargadas pesadas.

Sus cálculos tienen las siguientes características :

- El punto de inicio es la creación de electrones a lo largo del camino de la PCP.
- Cada colisión ionizante de una PCP con una molécula se trata de manera individual, con un recorrido libre medio entre interacciones obtenido de acuerdo a la sección eficaz total para este proceso.
- El ángulo de emisión y la energía del electrón liberado se sortea de la sección doblemente diferencial apropiada.
- La energía media de los electrones liberados es del orden de 100 eV, el máximo de esta energía se determina por la cinemática de una colisión binaria entre un proyectil y un blanco. Para este intervalo de energías, un electrón sufre miles de interacciones antes de que su energía disminuya hasta un umbral de 10 eV debajo del cual deja de ser considerado en el cálculo.
- El transporte de electrones sigue los lineamientos dados en las referencias (Berger, M.J., 1963, Grosswendt B. y Waibel E., 1978, y Paretzke H.G. y Berger, M.J., 1978) . Las interacciones básicas de transporte de electrones son tratadas de manera más simple que con el método de Paretzke, pues consideran que la mayor incertidumbre proviene de la inexactitud en la sección de producción de electrones por PCP.
- Cada interacción de electrones se trata de manera individual tomando en cuenta: dispersión elástica, ionización y excitación.

- Hasta donde es posible, los autores se basan en datos experimentales para la construcción de tablas de secciones eficaces.
- Se hacen dos tipos de cálculos, uno para PCP ligeras y sin estructura y otro para PCP pesadas y con estructura.

I.2.D.6 Distribuciones radiales de dosis experimentales.

Existen algunas medidas experimentales de distribuciones radiales de dosis en gas tejido-equivalente, nitrógeno molecular o propano para proyectiles ligeros e intermedios, (Wingate C. y Baum J.W., 1976, Varma, M.N. *et al.*, 1976, 1977, 1980, Varma, M.N. y Baum J.W., 1980 y Toburen L.H. *et al.*, 1990). Las medidas de Wingate y Baum, (Wingate, C.L., y Baum, J.W., 1976) son de especial interés en relación a este trabajo. Ellos realizaron medidas de distribuciones radiales de dosis y transferencia lineal de energía (LET) restringida radialmente para haces de protones y helios en hidrógeno y en gas tejido-equivalente. Estos autores usaron haces con energías entre 1 y 3 MeV provenientes de un acelerador Van de Graaff. El método consistió en usar una cámara de ionización larga de forma cilíndrica llena con gas tejido-equivalente o hidrógeno a una presión baja variable para la medición del LET. Para la determinación de la dosis radial utilizaron otra cámara de ionización pequeña y móvil con la cual midieron la ionización debida a electrones secundarios alrededor del haz de partículas cargadas. Presentan resultados para tejido simulado para radios entre 10 y unos cuantos miles de angstroms. Estas medidas son de interés en estudios de efectos biológicos de la radiación y también han sido utilizadas para estudios de termoluminiscencia escalando a la densidad del material TL.

En las secciones anteriores se ha hecho referencia a distintos métodos de obtención de perfiles de dosis radial ante irradiación de un medio por PCP. En este trabajo se desarrolla un método para encontrar distribuciones radiales de dosis en LiF similar a los métodos descritos en la sección anterior en cuanto al uso de la simulación Monte Carlo, pero a diferencia de éstos, el depósito de energía no se realiza en un medio gaseoso sino en LiF considerando su naturaleza sólida y siguiendo en detalle las interacciones de los electrones secundarios generados por las PCP en el material. El tratamiento que conduce a la obtención de perfiles radiales de dosis en LiF se presentará en el capítulo II.

Los perfiles radiales de dosis se identifican en general con el símbolo $D(r,l,E)$ con $\dot{D}$ dosis, r distancia radial de la trayectoria de PCP, l distancia axial y E energía inicial de la PCP, esto es equivalente a la notación $\bar{E}(z_{ef}, \beta t, a_0)$ utilizada por el método analítico propuesto por TST mostrado en la sección I.2.D.2 y en la cual se usa t para referirse a la distancia radial de la trayectoria de PCP.

II. MÉTODO

II.1 Método Monte Carlo

La simulación tipo Monte Carlo (MC) utiliza números aleatorios para encontrar la solución de un problema. En este contexto el interés se enfoca a la descripción de procesos físicos. La formulación MC se da en forma directa cuando el problema físico a resolver es de naturaleza probabilística, pero también se aplica con éxito a la resolución de problemas de naturaleza determinista o analítica.

A partir del desarrollo y accesibilidad de las computadoras rápidas, la simulación MC se ha convertido en una herramienta reconocida para realizar cierto tipo de cálculos que no permiten una aproximación más clásica. Se puede afirmar que, en la actualidad, los procesos de simulación en investigación, y en particular los que utilizan el método Monte Carlo, son un arma que permite obtener resultados de manera complementaria a los aportados experimentalmente, especialmente en aquellos casos en que las medidas no son realizables o algunas variables asociadas no son controlables y, también, pueden constituir una alternativa a los análisis teóricos cuando un modelo analítico no existe o se encuentra incompleto. La simulación Monte Carlo es adecuada para describir la penetración y pérdida de energía de partículas cargadas (iones y electrones) en materia. La historia (trayectoria) de una partícula puede verse como una secuencia aleatoria de recorridos libres caracterizados por cambios de energía y/o de dirección.

En este trabajo, la descripción de la etapa inicial del fenómeno termoluminiscente, en la cual las partículas cargadas pesadas penetran en el material TL y depositan su energía (a través de los electrones secundarios), se llevará a cabo mediante simulación MC.

Los aspectos formales del método Monte Carlo, que a continuación se discuten brevemente, se pueden encontrar en forma completa en el libro de Rubinstein, (Rubinstein, R. Y., 1981) y en forma resumida en el artículo de James, (James, F., 1980).

II.1.A Variables aleatorias y números aleatorios.

II.1.A.1 Variable aleatoria.

Una variable aleatoria es una variable que puede tomar más de un valor (de un intervalo continuo o discreto de valores) y para la cual el valor particular que tome no puede predecirse de antemano. Aún cuando el valor de la variable es impredecible, la distribución de probabilidad de la variable puede ser conocida.

II.1.A.2 Números aleatorios y pseudo-aleatorios.

En principio, un número aleatorio es simplemente un valor particular que toma una variable aleatoria. Sin embargo, en estudios MC, frecuentemente, se usa la palabra aleatorio con distintos significados. Aquí, se utiliza en referencia a secuencias de números que, una vez determinados, no son en realidad aleatorios en el sentido estadístico, pero que tienen propiedades similares a una secuencia “verdaderamente aleatoria” (truly random). Se debe distinguir entre secuencias de números aleatorios verdaderos y números pseudo-aleatorios. Una secuencia verdadera de números aleatorios es impredecible y por lo tanto irreproducible. Una secuencia de este tipo sólo puede generarse por medio de un proceso

físico aleatorio, por ejemplo decaimiento radiactivo, ruido térmico en dispositivos electrónicos, tiempo de registro de rayos cósmicos, etc. Utilizar un proceso físico de este tipo para un cálculo de tipo MC está justificado, pero en la práctica resulta difícil construir generadores físicos lo suficientemente rápidos y, al mismo tiempo, precisos y sin ninguna polarización. Los números aleatorios que se usan más frecuentemente en simulaciones MC son los llamados números pseudo-aleatorios. Estos, se generan de acuerdo a una fórmula matemática rígida y reproducible y no son aleatorios en el sentido matemático, pero son indistinguibles de una secuencia aleatoria verdadera.

II.1.B Métodos de sorteo aleatorio.

El ingrediente esencial para realizar cálculos de tipo Monte Carlo es el muestreo o sorteo de las variables aleatorias con funciones de distribución de probabilidad específicas (FDP). En esta sección se describen distintas técnicas para generar valores aleatorios de una variable x distribuida en el intervalo (a, b) de acuerdo a una FDP dada $p(x)$.

En general, los algoritmos de sorteo se basan en el uso de números pseudo-aleatorios ξ distribuidos uniformemente en el intervalo $(0, 1)$.

En este trabajo se usa el generador congruencial simple multiplicativo :

$$R_n = 7^5 R_{n-1} \pmod{2^{31} - 1}, \quad \xi_n = R_n / (2^{31} - 1) \quad (61)$$

que produce una secuencia de números, ξ_n , uniformemente distribuidos en $(0, 1)$ a partir de una “semilla” $R_0 (< 2^{31} - 1)$. Este generador posee propiedades aleatorias adecuadas (Press W.H. y Teukolski A., 1992). En realidad, como es el caso para números pseudo-aleatorios, la secuencia generada no es verdaderamente aleatoria ya que se obtiene a partir de un

algoritmo determinista, pero es extremadamente improbable que las correlaciones sutiles entre los valores tengan un efecto apreciable en los resultados de una simulación. La secuencia es periódica, con una frecuencia del orden de 2^{31} , lo cual es lo suficientemente grande para impedir la reiniciación en una misma corrida de simulación.

II.1.B.1 Método de transformación inversa.

Recordamos que una distribución $p(x)$ es una función positiva normalizada a la unidad, esto es :

$$p(x) \geq 0 \quad \text{y} \quad \int_a^b p(x) dx = 1 \quad (62)$$

Esta definición incluye distribuciones singulares como la distribución δ de Dirac, que es útil para describir las variables aleatorias discretas.

La función de distribución acumulativa (FDA) de x se define por:

$$P(x) = \int_a^x p(x') dx' \quad (63)$$

Esta función aumenta monótonicamente desde $P(a) = 0$ hasta $P(b) = 1$ y por tanto tiene una función inversa univaluada. La transformación $\xi = P(x)$ define una nueva variable aleatoria que tiene lugar en el intervalo $(0,1)$. La FDP $\pi(\xi)$ de esta variable y la FDP $p(x)$ están relacionadas por $\pi(\xi) d\xi = p(x) dx$, de modo que :

$$\pi(\xi) = p(x) \left(\frac{d\xi}{dx} \right)^{-1} = 1 \quad (64)$$

esto es, ξ está distribuido uniformemente en el intervalo $(0,1)$.

Se tiene, entonces, que si ξ es un número aleatorio, la variable x definida por $x = P^{-1}(\xi)$ está distribuida uniformemente en el intervalo (a, b) con FDP $p(x)$. La aleatoriedad de x se garantiza por la aleatoriedad de ξ . Conviene hacer notar que x es la raíz (única) de la ecuación :

$$\xi = \int_a^x p(x') dx' \quad (65)$$

a la cual se le llama ecuación de sorteo de la variable x . A este procedimiento de sorteo se le conoce como método de transformación inversa; es particularmente adecuado para FDPs $p(x)$ dadas por expresiones analíticas simples tales que la ecuación de sorteo (65) pueda ser resuelta analíticamente. Se toma como ejemplo la distribución exponencial del recorrido libre s entre eventos de dispersión :

$$p(s) = \frac{1}{\lambda_T} \exp(-s/\lambda_T) \quad (66)$$

Aquí λ_T representa el camino libre medio entre interacciones. En este caso la ecuación 65 se resuelve fácilmente obteniéndose la fórmula de sorteo :

$$s = -\lambda_T \ln(1 - \xi) = -\lambda_T \ln \xi \quad (67)$$

La última igualdad se sigue del hecho que $1 - \xi$ es también un número aleatorio distribuido en $(0,1)$.

1) Distribuciones discretas.

El método de transformación inversa también se aplica a distribuciones discretas. Se considera que la variable x puede tomar valores discretos $x = 1, \dots, N$ con probabilidades puntuales $p_1, \dots, p_N$ respectivamente. La FDP se puede expresar como :

$$p(x) = \sum_{i=1}^N p_i \delta(x-i) \quad (68)$$

donde $\delta(x)$ es la distribución de Dirac. Aquí $p(x)$ está definida en un intervalo (a, b) con $a < 1$ y $b > N$. La función de probabilidad acumulativa correspondiente es :

$$P(x) = \sum_{i=1}^{[x]} p_i \quad (69)$$

donde $[x]$ denota la parte entera de x , i.e. el mayor entero que es menor que x . Entonces la ecuación 65 conduce a la siguiente fórmula de sorteo :

$$\begin{aligned} x = 1 & \quad \text{si } \xi \leq p_1 \\ x = 2 & \quad \text{si } p_1 < \xi \leq p_1 + p_2 \\ & \dots\dots\dots (70) \\ x = j & \quad \text{si } \sum_{i=1}^{j-1} p_i \leq \xi < \sum_{i=1}^j p_i \\ & \dots\dots\dots \end{aligned}$$

Se definen las cantidades :

$$P_0 = 0, \quad P_1 = p_1, \quad P_2 = p_1 + p_2, \quad \dots\dots\dots, \quad P_N = \sum_{i=1}^N p_i \quad (71)$$

Para sortear x se genera un número aleatorio ξ y se hace x igual al índice i de modo que :

$$P_{i-1} < \xi \leq P_i \quad (72)$$

Si el número N de valores x es grande, este algoritmo de sorteo puede ser muy lento por el gran número de comparaciones que se requieren. Una manera simple de reducir el número

de comparaciones necesarias es usar búsqueda binaria en lugar de búsqueda secuencial. El procedimiento que sigue el algoritmo de búsqueda binaria es el siguiente :

- (i) Se asignan los valores $i = 1$ y $j = N$.
- (ii) $k = 0[(i + j) / 2]$.
- (iii) Si $P_k < \xi$, entonces $i = k$; de otra manera $j = k$.
- (iv) Si $j - i > 1$, regresar al paso (ii).
- (v) proporcionar el valor i .

Cuando $2^n < N < 2^{n+1}$, el valor de i se obtiene después de $n + 1$ comparaciones. Este número de comparaciones es evidentemente mucho menor que el que se requiere cuando se usa búsqueda puramente secuencial.

2) Distribuciones numéricas.

El método de transformación inversa también puede usarse para sorteo aleatorio de una FDP $p(x)$ dada en forma numérica. Se supone que la función $p(x)$ es finita y continua en el intervalo (a, b) , y que los valores $p_i = p(x_i)$ de la FDP para cada uno de los puntos del dominio $0 < a = x_1 < x_2 < \dots < x_N$ están dados. Es importante notar que los puntos del dominio están dados en orden estrictamente creciente. Puntos repetidos ocasionarían errores computacionales (overflows). Además, para evitar otro tipo de errores computacionales los valores x_i y p_i deben ser estrictamente mayores que cero (aunque tan pequeños como sea necesario para reproducir la FDP con la precisión requerida). Si el dominio (a, b) , donde $p(x)$ es diferente de cero, incluye valores negativos de x es necesario introducir la variable

desplazada $x' = x - a$ de modo de evitar tomar el logaritmo de números negativos (ver discusión subsecuente).

Se considera que la FDP (continua) $p(x)$ puede reconstruirse de manera precisa a partir de la tabla (x_i, p_i) usando la interpolación de tipo log-log lineal que se describe a continuación.

Explícitamente se supone que la FDP se puede aproximar por :

$$p(x) = p_i \left(\frac{x}{x_i} \right)^{a_i - 1} \quad \text{si} \quad x_i < x \leq x_{i+1} \quad (73)$$

lo cual da una función lineal lisa a trozos cuando se gráfica en una representación log-log.

Cualquier FDP puede representarse en esta forma, siempre y cuando los puntos del dominio x_i estén espaciados adecuadamente.

Los parámetros a_i se determinan por la condición :

$$p_{i+1} = p_i \left(\frac{x_{i+1}}{x_i} \right)^{a_i - 1} \quad (74)$$

que da

$$a_i = \frac{\ln(p_{i+1}/p_i)}{\ln(x_{i+1}/x_i)} + 1 \quad (75)$$

La función de distribución de probabilidad acumulativa de la FDP interpolada es :

$$P(x) = P_i + \int_{x_i}^x p_i \left(\frac{x'}{x_i} \right)^{a_i - 1} dx' \quad (76)$$

donde $P_i \equiv 0$ y

$$P_j = P_{j-1} + \int_{x_{j-1}}^{x_j} p_j \left(\frac{x'}{x_j} \right)^{a_j-1} dx' \quad \text{si } j > 1 \quad (77)$$

y el índice i satisface las condiciones $x_i < x < x_{i+1}$. En particular, se tiene:

$$P(x_i) = P_i \quad (78)$$

Las integrales en las ecuaciones 76 y 77 se pueden evaluar analíticamente para dar :

$$\int_{x_i}^x p_i \left(\frac{x'}{x_i} \right)^{a_i-1} dx' = \frac{p_i x_i}{a_i} \left[\left(x/x_i \right)^{a_i} - 1 \right] \quad \text{si } |a_i| > 10^{-12} \quad (79)$$

$$= p_i x_i \ln(x/x_i) \quad \text{si } |a_i| < 10^{-12}$$

donde el valor de conexión 10^{-12} se introduce para evitar errores de cómputo cuando a_i es cercana a cero.

Para obtener la fórmula de sorteo para la FDP interpolada , ecuación 73, se inicia con la ecuación 65. Introduciendo el resultado dado por la ecuación 76 y considerando que la FDP de entrada $p(x)$ pueda no estar normalizada (i.e. $P_N \neq 1$), se obtiene :

$$P_i + \int_{x_i}^x p_i \left(\frac{x'}{x_i} \right)^{a_i-1} dx' = \xi P_N \quad (80)$$

o, de manera equivalente,

$$\int_{x_i}^x p_i \left(\frac{x'}{x_i} \right)^{a_i-1} dx' = t(P_{i+1} - P_i) \quad (81)$$

donde

$$t = \frac{\xi P_N - P_i}{P_{i+1} - P_i} \quad (82)$$

y el índice i es tal que

$$P_i < \xi P_N \leq P_{i+1} \quad (83)$$

Nótese que $0 < t \leq 1$. Usando el resultado dado por la ecuación 79, la ecuación 81 se resuelve para x dando :

$$\begin{aligned} x &= x_i \left\{ t \left[\left(\frac{x_{i+1}}{x_i} \right)^{a_i} - 1 \right] + 1 \right\}^{1/a_i} & \text{si } |a_i| > 10^{-12} \\ &= x_i \left(\frac{x_{i+1}}{x_i} \right)^t & \text{si } |a_i| < 10^{-12} \end{aligned} \quad (84)$$

Entonces, para sortear un valor x de la FDP interpolada se adopta el siguiente algoritmo :

- (i) Se genera un número aleatorio ξ .
- (ii) Se determina el valor del índice i que satisfaga las condiciones dadas por la ecuación 83. El número de comparaciones necesarias para encontrar i puede minimizarse usando el método de búsqueda binaria descrito anteriormente.
- (iii) Se calcula el valor de t a partir de la ecuación 82.
- (iv) Se obtiene el valor aleatorio x usando las expresiones 84.

Este algoritmo de sorteo está completamente especificado por las cantidades x_i , a_i y P_i ($i = 1, \dots, N$) que son las únicas que deben estar almacenadas en memoria. Por otro lado, este algoritmo es exacto, i.e. la FDP de los valores x generados coincide con la FDP interpolada dada por la ecuación 73.

Las rutinas SAMPLO y SAMPLT, usadas para la inicialización y generación de números aleatorios en la simulación desarrollada en este trabajo se basan en este algoritmo (Fernández-Varea *et al.*, 1994).

II.1.B.2 Método de rechazo.

El método de transformación inversa para sorteo aleatorio se basa en una correspondencia uno a uno entre valores x y ξ , lo que se expresa en términos de una función univaluada. Existe otro tipo de métodos de sorteo propuestos por Von Neumann, que consiste en sortear una variable aleatoria de una cierta distribución (diferente de $p(x)$) y sometiéndola a una prueba aleatoria, se determina si se acepta o se rechaza. Los métodos de rechazo llevan a técnicas muy generales para sortear a partir de cualquier FDP.

Un método de rechazo está completamente especificado representando la FDP $p(x)$ en la forma :

$$p(x) = C\pi(x)r(x) \quad (85)$$

donde $\pi(x)$ es una FDP, C es una constante ≥ 1 y la función $r(x)$ satisface las condiciones $0 < r(x) \leq 1$. El algoritmo de rechazo para sortear de $p(x)$ procede como sigue :

- (i) Se genera un valor aleatorio x de $\pi(x)$.
- (ii) Se genera un número aleatorio ξ .
- (iii) Si $\xi > r(x)$, ir a (i)
- (iv) proporcionar x .

El paso (i) produce valores x en el intervalo $(x, x + dx)$ con probabilidad $\pi(x)dx$, estos valores se aceptan con probabilidad $r(x)$ y, por lo tanto, (aparte de una constante de normalización)

la probabilidad de proporcionar un valor en el intervalo $(x, x + dx)$ es igual a $p(x)dx$ como se requiere. La eficiencia del algoritmo, i.e. la probabilidad de aceptar un valor x generado es:

$$\varepsilon = \int_a^b r(x) \pi(x) dx = \frac{1}{C} \quad (86)$$

Para una $\pi(x)$ dada, la constante C está sujeta a la condición $C \pi(x) \geq p(x)$ para toda x , i.e. $p(x)$ nunca excede $\pi(x)$, ya que $r(x) \leq 1$. Gráficamente, la eficiencia es igual al cociente entre las áreas debajo de las curvas $p(x)$ y $C\pi(x)$ que son 1 y C , respectivamente. El mínimo valor de C , que satisface la igualdad $C \pi(x) = p(x)$ para algún x , da la óptima eficiencia. Si la función $R(x) \equiv p(x) / \pi(x)$ toma su valor máximo $R_{\max}$ en el punto $x = x_{\max}$, la óptima eficiencia se obtiene al hacer :

$$r(x) = \frac{R(x)}{R_{\max}} \quad y \quad C = R_{\max} \quad (87)$$

de modo que $r(x_{\max}) = 1$.

La FDP $\pi(x)$ en la ecuación 85 debe seleccionarse de tal manera que el algoritmo de sorteo resultante sea lo más rápido posible. En particular, el sorteo aleatorio de $\pi(x)$ debe llevarse a cabo con rapidez, i.e. por el método de transformación inversa. También, es deseable una alta eficiencia pero no es decisiva. Se obtiene 100% de eficiencia sólo cuando $\pi(x)=p(x)$ (pero el sorteo aleatorio de esta FDP es justamente el problema que se desea resolver); cualquier otra FDP da una menor eficiencia. La utilidad del método de rechazo estriba en el hecho de que una pérdida de eficiencia puede ser compensada por la facilidad de sortear x de $\pi(x)$ en lugar de sortearlo de $p(x)$.

II.2 Descripción de procesos de depósito de energía en LiF

Con el fin de evaluar la primera etapa del fenómeno termoluminiscente inducido por partículas cargadas pesadas es necesario describir los procesos de depósito de energía en el material, esto conduce a la obtención de distribuciones radiales de dosis en LiF sólido.

II.2.A Acoplamiento de transporte de iones y electrones mediante simulación

Monte Carlo

Para describir el depósito de energía en el material ante irradiación con partículas cargadas pesadas se utiliza la simulación Monte Carlo acoplando transporte de iones con transporte de electrones siguiendo el método usado por Martin y Ghoniem (Martin, R.C. y Ghoniem, N.M., 1987) modificándolo para fluoruro de litio. Generalmente, el transporte de iones se basa en la aproximación de colisiones binarias entre un ion incidente y un átomo del material (Ziegler, J. *et al.*, 1985). En este trabajo el transporte de iones se simula como en el código Monte Carlo TRIPOS (Chou P. y Ghoniem, N.M., 1983, 1987) que hace uso de la aproximación de la ley de potencia para ajustar al potencial Thomas-Fermi en la región de altas energías y al potencial de Born-Mayer a bajas energías. El formalismo separa la pérdida de energía en pérdida de energía nuclear y pérdida de energía electrónica, pero no sigue las interacciones individuales de los electrones con los que el ion incidente choca a su paso sino que considera la pérdida electrónica como una pérdida de energía continua al medio. Sin embargo, dada la importancia que tienen los rayos delta en el proceso de depósito de energía es necesario seguir con mayor detalle sus interacciones dentro del material hasta que son frenados.

II.2.A.1 Generación de electrones secundarios

A continuación se describe el método utilizado dentro del programa de simulación para “generar” electrones secundarios, es decir generar computacionalmente electrones con las características que tendrían los electrones liberados por partículas cargadas pesadas al interactuar con el medio.

Resulta conveniente usar la teoría clásica de Bohr (Bohr, N., 1913, 1948) a la descripción del poder de frenado electrónico a altas energías, en lugar de la teoría de Bethe, ya que esto permite introducir la generación de electrones secundarios. De acuerdo con la aproximación de Bohr, el poder de frenado electrónico a altas energías ($v > v_0 Z_1^{2/3}$), se expresa como sigue (Evans, R., 1955):

$$\frac{\Delta E}{\Delta x} = \frac{2\pi Z_1^2 Z_2 e^4 N}{mv^2} \ln \frac{T_{max}}{T_{min}} \quad (88)$$

donde v es la velocidad del ion, v_0 es la velocidad de Bohr, Z_1 y Z_2 son los números atómicos del proyectil y blanco, respectivamente, e es la carga del electrón, N es la densidad atómica del blanco y m es la masa del electrón. T_{min} es la mínima energía transferida y está asociada con el máximo parámetro de impacto. T_{max} representa la máxima energía cinética transferida a una partícula blanco dada por:

$$T_{max} = \frac{4m_1 m_2}{(m_1 + m_2)^2} E \quad (89)$$

con m_2 masa del blanco y E energía del ion incidente. Para un protón incidente de 3 MeV, $T_{max} = 6536$ eV.

En el régimen de altas energías, la sección eficaz para transferencia de energía está representada por la sección de Rutherford entre el ion incidente y un electrón del medio:

$$d\sigma = \pi \left(\frac{b}{2} \right)^2 T_{\max} \frac{dT}{T^2} \quad (90)$$

donde b es el parámetro de impacto y T representa la energía cinética transferida por el proyectil a la partícula blanco. Esta relación se muestra en la figura 19.

Si introducimos arbitrariamente una energía de corte T_c , la ecuación (88) para frenado electrónico puede escribirse de la siguiente forma :

$$\begin{aligned} \frac{\Delta E}{\Delta x} &= C \ln \left[\frac{T_{\max}}{T_{\min}} \right] = C \ln \left[\frac{T_{\max}}{T_c} \frac{T_c}{T_{\min}} \right], \\ \frac{\Delta E}{\Delta x} &= C \ln \left(\frac{T_{\max}}{T_c} \right) + C \ln \left(\frac{T_c}{T_{\min}} \right) \end{aligned} \quad (91)$$

donde C es la colección de constantes en la ecuación 88. Las transferencias de energía con magnitud mayor que T_c pueden mirarse como transferencias de energía discretas a electrones secundarios de altas energías que pueden viajar lejos de la trayectoria del ion incidente, y las transferencias de energía menores que T_c representan transferencias de energía continua cercana a la trayectoria. La función de distribución de probabilidad para transferencias de energía cinética a electrones está dada por la ecuación 90 y por la figura 19. En esta figura se observa cómo T_c separa las transferencias en continuas y discretas.

La función de distribución acumulativa (FDA) se obtiene de la siguiente forma :

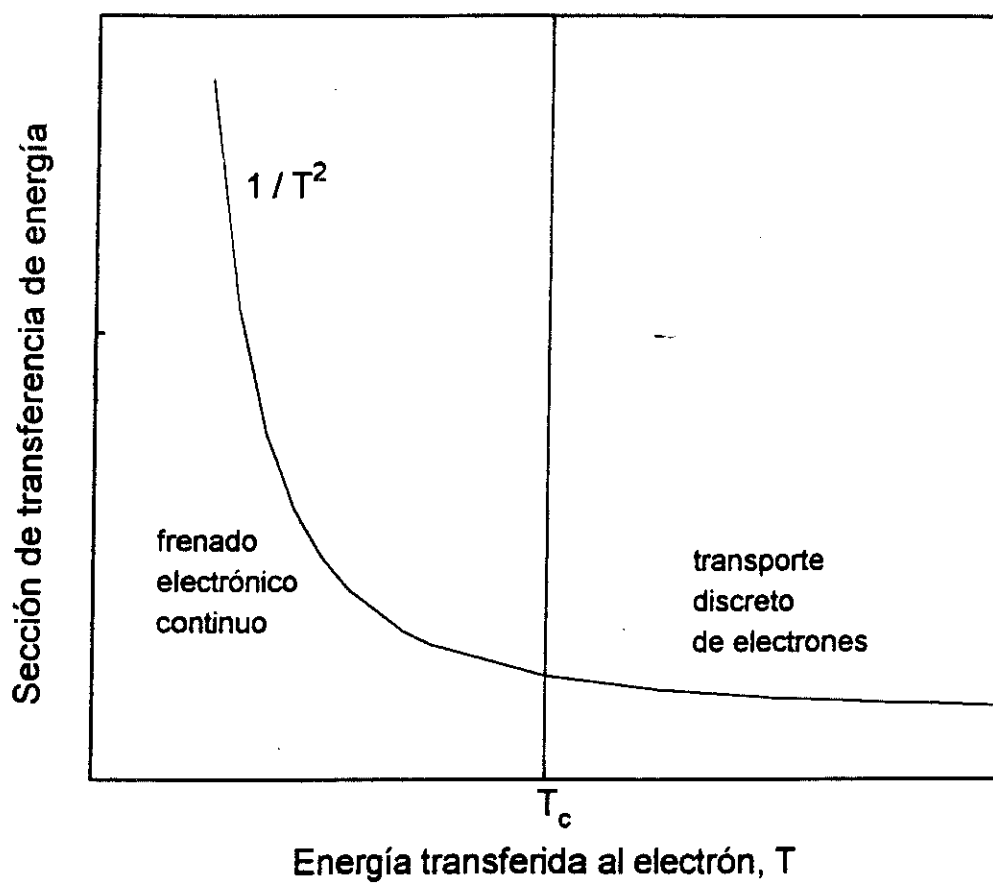


Figura 19. Sección eficaz de transferencia de energía de PCP a electrones, T . Se indica la energía de corte T_c .

$$FDA = \frac{\int_{T_c}^T \frac{dT}{T^2}}{\int_{T_c}^{T_{max}} \frac{dT}{T^2}} = \left[\frac{T_{max} \cdot T_c}{T_{min} - T_c} \right] \left[\frac{1}{T_c} - \frac{1}{T} \right] \quad (92)$$

donde T es la energía cinética transferida al electrón. Aplicando el método Monte Carlo se escoge aleatoriamente un número entre cero y uno y se iguala con la FDA, de modo que se calcula directamente la energía T y se le asigna a un electrón generado. Otro número aleatorio se usa para asignar la posición de este electrón a lo largo de la trayectoria del ion, entre colisiones sucesivas del ion incidente con núcleos del medio (colisiones nucleares). La energía cinética del electrón generado se compara con la componente discreta de la pérdida de energía electrónica, es decir la fracción de energía que será usada para generar electrones secundarios (primer término de la ecuación 91) entre colisiones nucleares sucesivas. Esta comparación da un peso relativo (w) a cada electrón generado, dado por:

$$w = \frac{\Delta E_d}{E_e} \quad (93)$$

donde ΔE_d es la componente discreta de energía y E_e es la energía del electrón. Si este peso es menor que 1.0, la componente discreta de pérdida de energía electrónica entre dos colisiones nucleares del ion no es suficiente para generar electrones y ese electrón se desecha. Por el contrario, si es suficiente, la energía y posición de ese electrón se almacena y a la componente discreta se le resta esa energía, se repite el proceso de encontrar aleatoriamente nuevas energías para tantos electrones secundarios como sea posible hasta agotar la componente discreta. Se pasa a la siguiente colisión nuclear del ion y nuevamente se generan electrones secundarios. La generación de electrones secundarios se realiza

mientras el ion esté en el régimen de energías altas e intermedias (ecuaciones 30 y 40).

Cuando el ion se frena, se siguen las trayectorias de los electrones generados. Esto se repite para un gran número de historias.

II.2.B Transporte de electrones.

Shimizu y Ze-Jun, (Shimizu, R. y Ze-Jun, D., 1992) resumen el progreso reciente en transporte de electrones en sólidos. Los mecanismos de interacción de electrones se dividen en elásticos e inelásticos. Las colisiones elásticas corresponden a interacciones entre un electrón y un núcleo del material, en este caso, litio o flúor. En estas interacciones, el electrón cambia su dirección pero la pérdida de energía asociada es despreciable debido a la gran diferencia de masas. Las interacciones inelásticas involucran pérdida de energía al medio, así como cambio de dirección. Los procesos inelásticos consisten de procesos de ionización en las capas internas y de procesos dieléctricos con los electrones del medio. Para poder evaluar la energía transferida al medio es necesario seguir sus trayectorias. Esto se realiza haciendo uso nuevamente del método Monte Carlo; primeramente se encuentra el recorrido libre medio entre interacciones de la siguiente manera :

$$\lambda = -\lambda_{tot} \ln(\xi) = -(\Sigma \lambda_i^{-1})^{-1} \ln(\xi) \quad (94)$$

donde ξ es un número aleatorio en el intervalo (0,1) y λ_i es el recorrido libre medio para cada tipo de interacción y λ_{tot} es el recorrido libre medio total.

El tipo de interacción que tiene lugar se decide usando el método Monte Carlo :

$$P_{i-1} \leq \xi \leq P_i \quad (95)$$

$$P_0 = 0, \quad P_1 = \frac{\lambda_{tot}}{\lambda_{el}}, \quad P_2 = \lambda_{tot} \left(\frac{1}{\lambda_{el}} + \frac{1}{\lambda_d} \right), \quad P_3 = \lambda_{tot} \left(\frac{1}{\lambda_{el}} + \frac{1}{\lambda_d} + \frac{1}{\lambda_c} \right) = 1 \quad (96)$$

donde λ_{el} , λ_d y λ_c son los recorridos libres medios asociados con interacción elástica, dieléctrica e ionización de electrones de las capas ligadas, respectivamente. El recorrido libre medio elástico total λ_{el} se encuentra a partir de $\lambda_{el(ii)}$ y de $\lambda_{el(f)}$ según que se tenga una interacción del electrón con un núcleo de litio o con un núcleo de flúor. Más adelante se dan las expresiones con las que se calcula cada uno de los λ_i .

II.2.B.1 Interacciones elásticas.

La descripción de la dispersión elástica, usualmente, se realiza empleando un potencial de Rutherford apantallado. La sección eficaz diferencial de Rutherford está dada por la expresión :

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{Z^2 e^4}{4E^2 (1 - \cos\theta + 2a_s)^2} \quad (97)$$

donde Z es el número atómico del elemento blanco, E y θ son la energía y el ángulo polar de dispersión del electrón, y a_s es un factor de apantallamiento. Esta es una expresión analítica fácil de introducir en una simulación por lo que ha sido ampliamente utilizada pero deja de ser válida para elementos con número atómico grande ($Z > 30$), especialmente en la región de bajas energías. En rigor, considerando las propiedades ondulatorias de los electrones, la sección diferencial debe calcularse en base a la mecánica cuántica. Mott, (Mott, 1929) dedujo la representación relativista de la sección eficaz diferencial como :

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\vartheta)|^2 + |g(\vartheta)|^2 \quad (98)$$

con amplitudes de dispersión

$$f(\vartheta) = \frac{1}{2iK} \sum_{l=0}^{\infty} \left[(l+1)(e^{2i\delta_l^+} - 1) + l(e^{2i\delta_l^-} - 1) \right] P_l(\cos \vartheta) \quad (99)$$

$$g(\vartheta) = \frac{1}{2iK} \sum_{l=1}^{\infty} \left(-e^{2i\delta_l^+} + e^{2i\delta_l^-} \right) P_l^1(\cos \vartheta) \quad (100)$$

donde δ_l^+ y δ_l^- son corrimientos de fase de la onda parcial l y $P_l(\cos \vartheta)$ y $P_l^1(\cos \vartheta)$

son los polinomios de Legendre y asociados de Legendre, respectivamente.

En este trabajo, las interacciones elásticas de los electrones se simularon mediante la aplicación de la siguiente aproximación intermedia. Se utiliza la sección de Rutherford (ecuación 97) pero se calculan los factores de apantallamiento α , tanto para el litio como para el flúor a partir de secciones elásticas calculadas usando el método de ondas parciales mediante los programas desarrollados por Salvat y Mayol, (Salvat F. y Mayol R., 1992). Los valores de α , se calculan para un cierto número de energías, tanto para litio como para flúor y se leen de una tabla. Se incorporó, en el programa, un mecanismo de interpolación para encontrar α , correspondiente a la energía del electrón. Teniendo α , se calculan las secciones elásticas para dispersión del electrón con un núcleo de litio y con un núcleo de flúor, mediante la ecuación 97. A partir de ellas, se calculan los recorridos libres medios elásticos para colisiones con un núcleo de litio y con un núcleo de flúor en un medio con la densidad atómica del LiF, así como el recorrido elástico total. Para ello, se utilizan las siguientes expresiones:

$$\lambda_{el(i)} = \frac{1}{N\sigma_{el(i)}} , \quad \lambda_{el(f)} = \frac{1}{N\sigma_{el(f)}} \quad (101)$$

y

$$\frac{1}{\lambda_{el(tot)}} = \frac{1}{\lambda_{el(i)}} + \frac{1}{\lambda_{el(f)}}$$

El cambio en la dirección del electrón, después de sufrir un proceso elástico, se encuentra aplicando el método Monte Carlo (Fitting H.J. y Reinhardt J., 1985):

$$\theta_{el} = \arccos \left[1 - \frac{2a_s \xi_{el}}{1 + a_s - \xi_{el}} \right] \quad (102)$$

donde ξ_{el} es un número aleatorio.

II.2.B.2 Interacciones inelásticas.

Las interacciones inelásticas se han tratado, frecuentemente, mediante la expresión teórica de Bethe, (Bethe, 1930) para describir el poder de frenado de electrones en sólidos. En ésta, todos los posibles procesos de excitación que conllevan una pérdida de energía están representados por la energía media de ionización J (ecuación 46). Esta es la llamada aproximación de frenado continuo (Continuous Slowing Down Approximation, CSDA) y presenta algunos problemas, en particular, deja de ser válida para electrones con energías menores que 10 keV. Debido a ello, es necesario considerar las contribuciones inelásticas a la pérdida de energía por separado.

1) Ionización en capas internas.

La ionización en capas internas suele ser tratada mediante la teoría de Gryzinski (Gryzinski, M., 1965). De acuerdo a esta teoría, la pérdida de energía debida a un evento inelástico de este tipo está dada por :

$$-\frac{dE}{dx} = \pi e^4 N n_j \frac{1}{E} \left[\frac{E - E_j}{E + E_j} \right]^{1.5} \left[\ln \left(\frac{E}{E_j} \right) + \frac{4}{3} \ln \left(2.7 + \sqrt{\frac{E}{E_j} - 1} \right) \right] \quad (103)$$

donde N es el número de átomos por unidad de volumen, n_j es el número de electrones en la capa j , E_j es la energía de excitación de la capa j y E es la energía del electrón secundario. En este trabajo se usa la aproximación propuesta por Fitting y Reinhardt, (Fitting, H.J. y Reinhardt, J., 1985) ya que permite describir de manera conjunta tanto la ionización en capas internas como los procesos dieléctricos con buenos resultados, en este caso la pérdida de energía asociada con un evento de ionización en una capa interna esta dado por:

$$-\frac{dE}{dx} = A \frac{1}{E} \ln \left[\frac{E}{I_c} \right] \quad (104)$$

I_c representa la energía de ionización promedio de las capas ligadas y A es un conjunto de constantes que provienen de la expresión (103) para la pérdida de energía dada por Gryzinski. Evaluando I_c y A para LiF se tiene $I_c = 218$ eV y $A = 240$ eV²/Å. El recorrido libre medio asociado con ionización en una capa interna es :

$$\lambda_c = \frac{I_c E}{A \ln \left(\frac{E}{I} \right)} \quad (105).$$

El cambio en la dirección del electrón dado por una interacción de este tipo viene dado por :

$$\sin^2 \theta \cong \frac{I_c}{E} \quad (106).$$

2) Interacciones dieléctricas.

El formalismo teórico que describe la dispersión inelástica de un electrón que penetra en un sólido se basa en la función dieléctrica. De acuerdo a este formalismo la sección eficaz diferencial para dispersión inelástica es (Shimizu, R., y Ze-Jun, D., 1992) :

$$\frac{d^2 \lambda^{-1}}{d(\Delta E) dq} = \frac{1}{\pi E} \text{Im} \left(\frac{-1}{\varepsilon(q, \omega)} \right) \frac{1}{q} \quad (107)$$

aquí, la cantidad λ^{-1} es equivalente a la sección de dispersión inelástica σ_{inel} y un electrón de energía $E = \hbar^2 k^2 / 2m_e$ sufre una pérdida de energía $\Delta E = \hbar \omega$ conectada con una transferencia de momento $\hbar q$. Aún cuando esta expresión es válida, a la fecha sólo se han deducido valores teóricos de $\varepsilon(q, \omega)$ para los metales de tipo gas de electrones libres. Sin embargo, existen medidas experimentales de las constantes dieléctricas ópticas, $\varepsilon(0, \omega)$ para un gran número de materiales, (Palik, E.D. y Hunter, W.R., 1985). Existen modelos ópticos (Penn D.R., 1987, Fernández-Varea *et al.*, 1993) asociados al tratamiento dieléctrico que construyen la función dieléctrica completa $\varepsilon(q, \omega)$ a partir de datos ópticos; estos modelos llevan a la descripción de todas las interacciones de tipo inelástico.

En este trabajo se sigue el tratamiento propuesto por Fitting y Reinhardt (Fitting, H.J., y Reinhardt, J., 1985) haciendo uso exclusivamente de la función dieléctrica óptica. Siguiendo este tratamiento se describen por separado interacciones que llevan a ionización de capas ligadas como se discutió en la sección anterior y los procesos dieléctricos que

incluyen interacciones con electrones libres, electrones de la banda de valencia e interacciones colectivas con plasmones.

En las compilaciones dadas por Palik se tabulan el índice de refracción, n , y el coeficiente de extinción, k , para distintas energías. A partir de ellos se encuentra la función pérdida de energía, $\text{Im}(-1/\epsilon)$, para el LiF de la siguiente manera :

$$\frac{1}{\epsilon} = \frac{1}{\epsilon_1 + i\epsilon_2} = \frac{(1,0)}{(\epsilon_1, \epsilon_2)} \quad (108)$$

realizando esta operación se encuentra :

$$\frac{1}{\epsilon} = \frac{\epsilon_1}{\epsilon_1^2 + \epsilon_2^2} - \frac{i\epsilon_2}{\epsilon_1^2 + \epsilon_2^2} \quad (109)$$

y entonces

$$\text{Im}\left(\frac{1}{\epsilon}\right) = \frac{\epsilon_2}{\epsilon_1^2 + \epsilon_2^2} \quad (110)$$

Pero $\epsilon_1 = n^2 - k^2$ y $\epsilon_2 = 2nk$ (111)

por lo tanto

$$\text{Im}\left(\frac{1}{\epsilon}\right)_E = \frac{2nk}{(n^2 + k^2)^2} \quad (112)$$

La función $\text{Im}(-1/\epsilon)$ para LiF se muestra en la figura 20. Las pérdidas de tipo dieléctrico se restringen a un máximo de $\Delta E = 100$ eV, y pérdidas mayores se representan como ionización de capas ligadas. Una vez conociendo esta función es posible encontrar la pérdida de energía asociada con una interacción electrón-electrón de este tipo. Para ello se usa el método Monte Carlo sorteando aleatoriamente el valor de la pérdida de energía dieléctrica a partir de la función acumulativa :

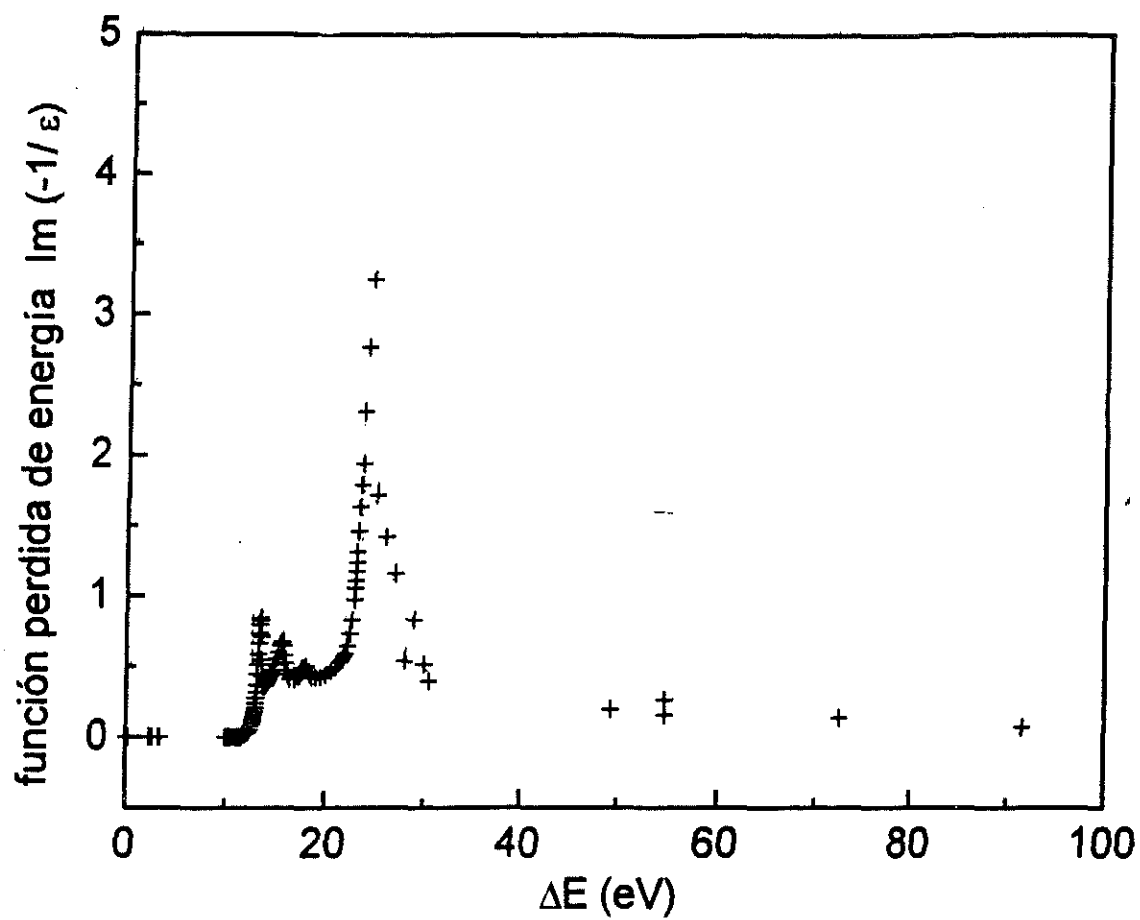


Figura 20. La función pérdida de energía para LiF (Palik, E.D. y Hunter, W.R., 1985)

$$\xi_d = \frac{\int_0^{\Delta E} \text{Im}\left(-\frac{1}{\varepsilon}\right) dE}{\int_0^{100\text{eV}} \text{Im}\left(-\frac{1}{\varepsilon}\right) dE} \quad (113)$$

donde ξ_d es un número aleatorio.

El ángulo θ_d asociado a una interacción dieléctrica se encuentra también aleatoriamente a través de la siguiente relación :

$$\xi_\alpha = \frac{\ln \frac{E + E' - 2(EE')^{0.5} \cos \theta_d}{E + E' - 2(EE')^{0.5}}}{\ln \frac{E + E' - 2(EE')^{0.5} \cos \theta_f}{E + E' - 2(EE')^{0.5}}} \quad (114)$$

donde ξ_α es un número aleatorio, E' es la energía del electrón después de la colisión (igual a $E - \Delta E$) y θ_f está dado por :

$$\cos \theta_f = \frac{2E - \Delta E - \left(\frac{\hbar^2 q_{\max}^2}{2m_e}\right)}{2E \left[1 - \left(\frac{\Delta E}{E}\right)\right]^{0.5}} \quad (115)$$

con $\hbar^2 q_{\max}^2 / 2m_e \approx 20$ eV (Fitting H.J. y Reinhardt J., 1985).

El ángulo θ_f se evalúa usando la ecuación 115 y θ_d se obtiene a partir de :

$$\cos \theta_d = \frac{E + E'}{2(EE')^{0.5}} (1 - B) + B \quad (116)$$

con B dado por :

$$B = \frac{E + E' - 2(EE')^{0.5} \cos \theta_f}{E + E' - 2(EE')^{0.5}} \quad (117)$$

Los ángulos de dispersión calculados para los distintos tipos de interacción representan desviaciones de la trayectoria original del electrón. El ángulo azimutal, también, se determina aleatoriamente entre 0 y 2π .

El recorrido libre medio dieléctrico se encuentra a partir del recorrido libre medio total inelástico (para el cual existen parametrizaciones), sabemos que :

$$\frac{1}{\lambda_{ine}} = \frac{1}{\lambda_d} + \frac{1}{\lambda_c} \quad (118)$$

donde λ_{ine} , λ_d y λ_c son el recorrido libre medio total entre interacciones inelásticas, el recorrido libre medio para interacciones dieléctricas y el recorrido libre medio asociado con ionización de capas ligadas, respectivamente.

El recorrido libre medio total para interacciones inelásticas se evalúa usando la parametrización propuesta por Fernández-Varea *et al.*, 1992 :

$$\frac{1}{\lambda_{ine}} = \frac{N\pi e^4}{ER} \left[Mt^2 \ln\left(\frac{4a_1 E}{R}\right) + a_2 \left(\frac{R}{E}\right) + a_3 \left(\frac{R}{E}\right)^2 \right] \quad (119)$$

donde R es la energía de Rydberg (13.6 eV), y para LiF, $N = 0.612$ moléculas por unidad de volumen, $Mt^2 = 3.0061$ y los parámetros $a_1 = 0.5718$, $a_2 = -69.65$ y $a_3 = 566.9$ se obtienen al ajustar la ecuación 119 a los recorridos libres medios obtenidos mediante el modelo óptico descrito por Fernández-Varea y colaboradores (Fernández-Varea, *et al.*, 1992).

Se han mostrado las expresiones necesarias para evaluar pérdida de energía (ecuaciones 104 y 113), cambio en dirección (ecs 102, 106 y 114) y recorridos libres medios (ecs 101, 105 y 118) para cada tipo de interacción de electrones.

II.2.C Actualización de coordenadas de los electrones.

Cada vez que se sortea la pérdida de energía y el cambio en la dirección, se deben actualizar las coordenadas del electrón. La posición del ion entre dos eventos sucesivos al generar electrones determina la dirección inicial de cada electrón. Sea $\bar{p}_i = (u, v, w)$ la dirección inicial del electrón y suponemos que está dada respecto de un sistema de referencia que no varía a lo largo de la trayectoria y que llamamos sistema de referencia de la muestra, con cosenos directores u_i , v_i y w_i ; $\bar{p}_i$ es unitario. Las ecuaciones 106 y 114, que dependen de la sección eficaz diferencial para cada tipo de interacción, determinan aleatoriamente el cambio en θ . El ángulo azimutal ϕ puede tomar cualquier valor entre 0 y 360°. Al sortear, encontramos los ángulos θ y ϕ con que se desvía el electrón de la posición inicial en un sistema de referencia cuyo eje z coincide con la dirección inicial $\bar{p}_i$ y que identificamos con la letra (r). En el sistema de referencia (r), la nueva dirección viene dada por:

$$\bar{p}_{i+1}^{(r)} = (\sin \theta \cos \phi, \sin \theta \sin \phi, \cos \theta) \quad (120)$$

Para proseguir con la simulación es necesario conocer las componentes de ese vector en el sistema de referencia de la muestra,

$$\bar{p}_{i+1} = (u', v', w') \quad (121)$$

La figura 21 ilustra la definición de coordenadas.

La matriz de cambio de coordenadas que pasa del sistema de referencia de la muestra al sistema de referencia (r) es :

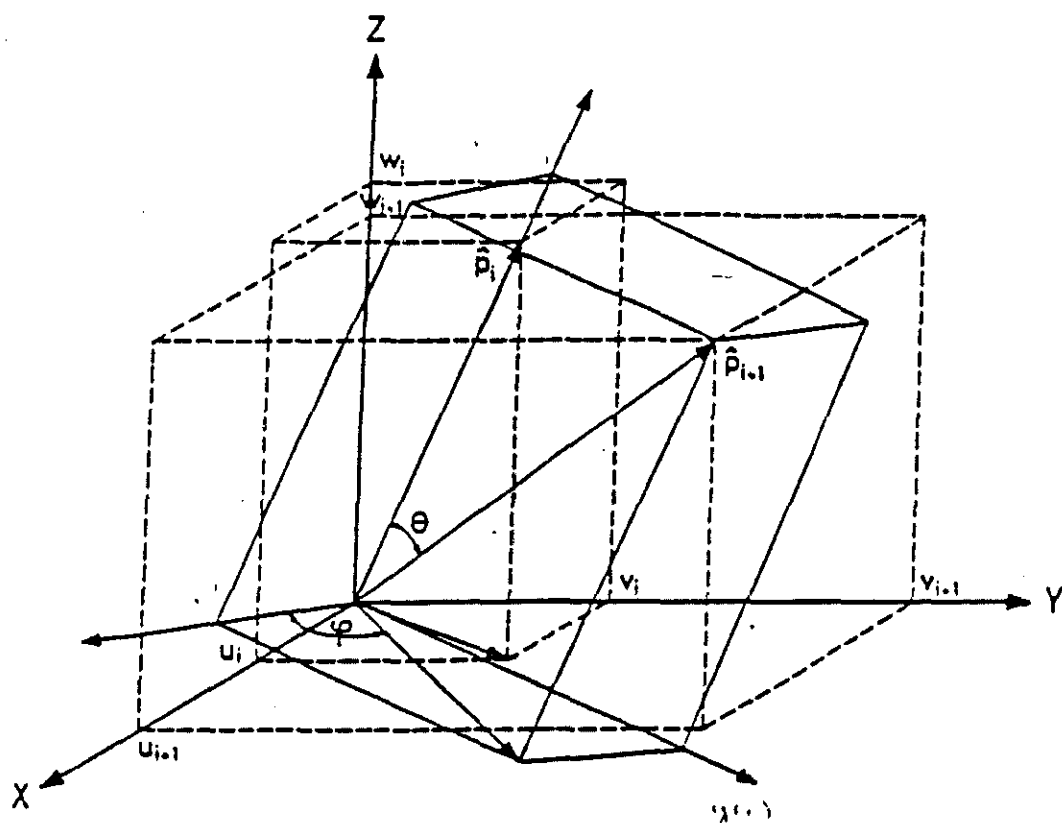


Figura 21. Relación entre los cosenos directores y los ángulos de dispersión.

$$A = \begin{Bmatrix} \frac{wu}{\sqrt{1-w^2}} & \frac{wu}{\sqrt{1-w^2}} & -\sqrt{1-w^2} \\ -\frac{v}{\sqrt{1-w^2}} & \frac{u}{\sqrt{1-w^2}} & 0 \\ u & v & w \end{Bmatrix} \quad (122)$$

que corresponde a una rotación con ángulos de Euler (Arfken, G., 1981) tales que

$$\begin{aligned} \cos \alpha &= \frac{u}{\sqrt{1-w^2}} \\ \cos \beta &= w \\ \gamma &= 0 \end{aligned} \quad (123)$$

Por lo tanto $\bar{p}_{i+1} = A^{-1} \bar{p}_{i+1}^{(r)}$ (124)

Puesto que A es ortonormal, $A^{-1} = A^T$, donde A^T la matriz transpuesta de A . Después de operar, queda :

$$\begin{aligned} u' &= u \cos \theta + \left(\frac{\sin^2 \theta}{1-w^2} \right)^{1/2} (uw \cos \phi - v \sin \phi) \\ v' &= v \cos \theta + \left(\frac{\sin^2 \theta}{1-w^2} \right)^{1/2} (uw \cos \phi - u \sin \phi) \\ w' &= w \cos \theta - \left(\frac{\sin^2 \theta}{1-w^2} \right)^{1/2} (1-w^2) \cos \phi \end{aligned} \quad (125)$$

Cuando w^2 es muy próximo a la unidad, el denominador en las ecuaciones 125 se hace muy pequeño y el cálculo no se puede efectuar de esa forma. Sin embargo, en ese caso, el sistema de la muestra y el sistema girado (r) prácticamente coinciden; podemos considerar que tiene la misma expresión en los dos sistemas :

$$u' = \sin \theta \cos \phi$$

$$v' = \text{sen } \theta \text{ sen } \phi \quad (126)$$

$$w' = \frac{w}{|w|} \cos \theta$$

La figura 22 ilustra el cambio en la dirección de un electrón.

II.2.D Resumen del funcionamiento de la simulación Monte Carlo.

En la simulación MC desarrollada en este trabajo se describe el transporte de iones, cuando las PCP están en el régimen de energías altas e intermedias generan electrones secundarios a los que se les asigna aleatoriamente energía y posición. Esto se hace entre colisiones nucleares sucesivas de las PCP. Para cada historia de ion se siguen, individualmente, las trayectorias de los electrones secundarios. Para cada electrón, con determinada energía asignada, se encuentran los valores de los recorridos libres medios (rlm) asociados a cada tipo de interacción, esto es rlm elástico con un núcleo de litio, rlm elástico con un núcleo de flúor, rlm elástico total, (ecuaciones 101), rlm inelástico total, rlm asociado a ionización en una capa ligada y rlm inelástico asociado a una interacción dieléctrica (ecuaciones 119, 105 y 118). Una vez teniendo estos valores de los rlm se aplica primero la ecuación 94 para encontrar el camino λ recorrido por el electrón y después las ecuaciones 96 con las que se decide aleatoriamente qué tipo de interacción tiene ese electrón a esa energía. Si la interacción es elástica, se evalúa el cambio en la dirección del electrón, si el evento es inelástico se evalúa la pérdida de energía y el cambio de dirección asociados de acuerdo a las expresiones dadas para cada caso. Se actualizan las coordenadas del electrón.

Cada vez que hay pérdida de energía, ésta se le resta a la energía que tenía el electrón y se deposita en las coordenadas geométricas respectivas en rodajas cilíndricas concéntricas

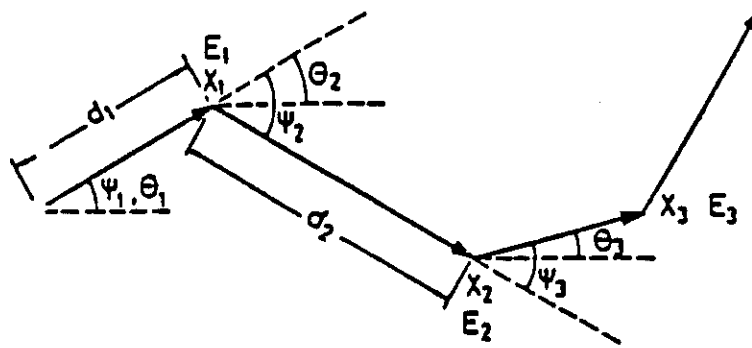


Figura 22. Trayectoria de un electrón que interacciona en los puntos E_1 , E_2 y E_3 .

alrededor de la trayectoria de la PCP incidente. Para este electrón se repite el procedimiento de sortear recorrido, sortear tipo de interacción, encontrar cambio de dirección y, cuando es el caso, la pérdida de energía asociada. Se sigue al electrón hasta que le quedan 50 eV.

Cuando la energía restante es menor a 50 eV, toda la energía cinética se deposita localmente en la posición geométrica que tiene el electrón en ese momento. Se toma el siguiente electrón y se sigue su recorrido de igual modo al descrito y así sucesivamente hasta terminar con todos los electrones generados por una PCP. El procedimiento se repite para el número de historias de PCP que se consideren. Una vez terminado el cálculo se obtiene densidad de energía dividiendo la energía acumulada dentro de cada rodaja por el volumen de la rodaja.

El volumen de cada rodaja $V(r_n)$ se calcula haciendo :

$$V(r_n) = V(r_{n+1}) - V(r_n) \quad (127)$$

y, como sabemos, para un cilindro de longitud l y radio r_i , el volumen es $V(r_i) = \pi l r_i^2$.

De este modo se obtiene la distribución radial de densidad de energía. Esta se puede convertir a distribución radial de dosis por ser más conveniente en el análisis posterior al aplicar el modelo TSTM. La dosis absorbida es energía por unidad de masa, y para LiF (con densidad $\rho = 2.635 \text{ g/cm}^3$), 1 Gy corresponde a $2.635 \times 10^{-20} \text{ erg/\AA}^3$. Las rodajas cilíndricas longitudinales alrededor de la trayectoria del ion se tomaron de ancho radial igual a 1 Å y éstas se extienden lateralmente tanto como sea necesario dependiendo de las energías máximas de los electrones generados, que dependen a su vez de la energía de la PCP de acuerdo con la ecuación 31. Por otro lado, también se divide la traza en segmentos transversales, también cilíndricos, en la dirección de penetración de la PCP en el material.

Estos segmentos tienen distinta extensión radial ya que la forma de las trazas de las PCP se acerca más a una forma cónica que a un cilindro, pues conforme la PCP penetra va perdiendo energía por lo que los electrones generados son menos energéticos y recorren distancias laterales más cortas (ver Fig. 15 a). Esto permite un cálculo correcto de la dosis ya que se considera sólo la masa irradiada (figura 23). La figura 24 muestra las rodajas concéntricas donde se deposita la energía. Para un caso típico, protones de 2.94 MeV, se consideraron 10 cilindros transversales entre su punto de incidencia y los 68 μm de su alcance. La longitud de cada uno de los cilindros transversales se consideró igual a 7.23 μm encontrando al finalizar el cálculo que el último cilindro sólo acumuló dosis en los primeros 2.84 μm . El primer cilindro transversal se rompió en 2044 rodajas longitudinales que alcanzan hasta 6400 Å en distancia radial. Los siguientes cilindros transversales alcanzan distancias radiales de 5200, 4600, 3700, 3200, 2700, 2100, 1745, 989 y 360 Å respectivamente.

La figura 25 esquematiza el procedimiento de simulación Monte Carlo (programa pcpe.for).

Una vez que se tienen las distribuciones radiales de dosis en LiF, éstas son utilizadas dentro de los modelos TST y TSTM para la predicción de eficiencias TL relativas. Esto se discutirá en los capítulos III y IV.

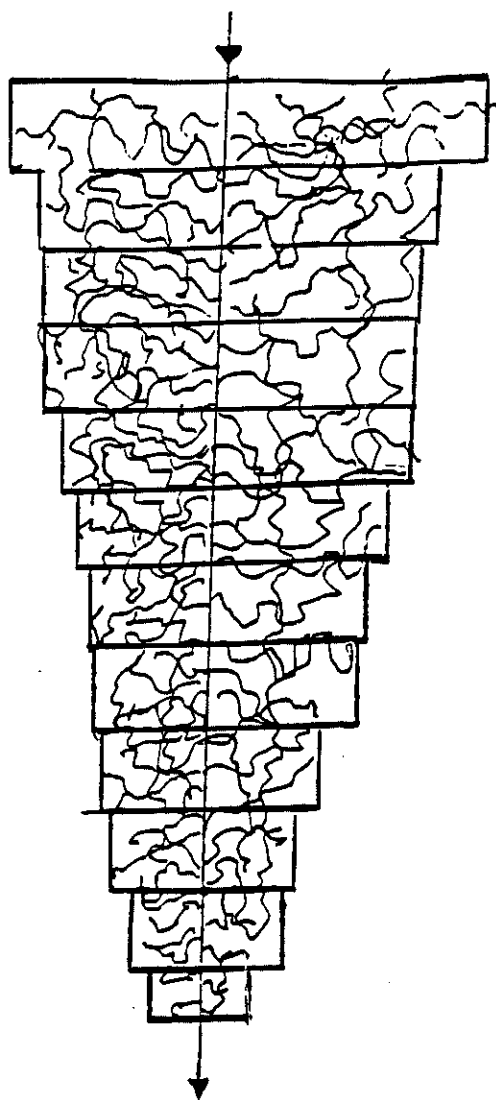


Figura 23. Trazas de una PCP dividida en secciones cilíndricas transversales.

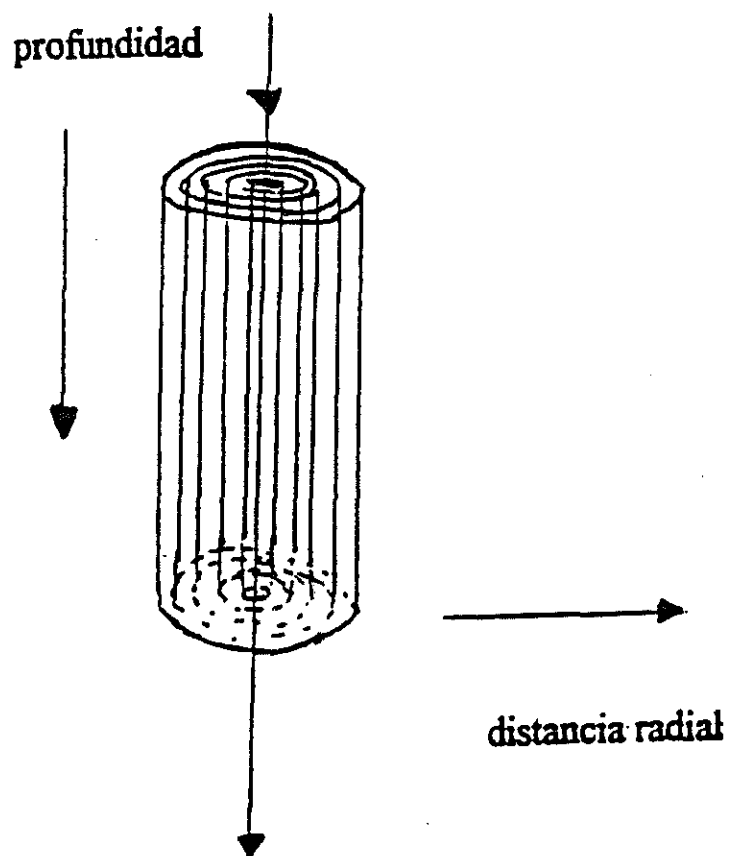


Figura 24. Cilindros longitudinales concéntricos en los que se deposita energía alrededor de la trayectoria de la PCP.

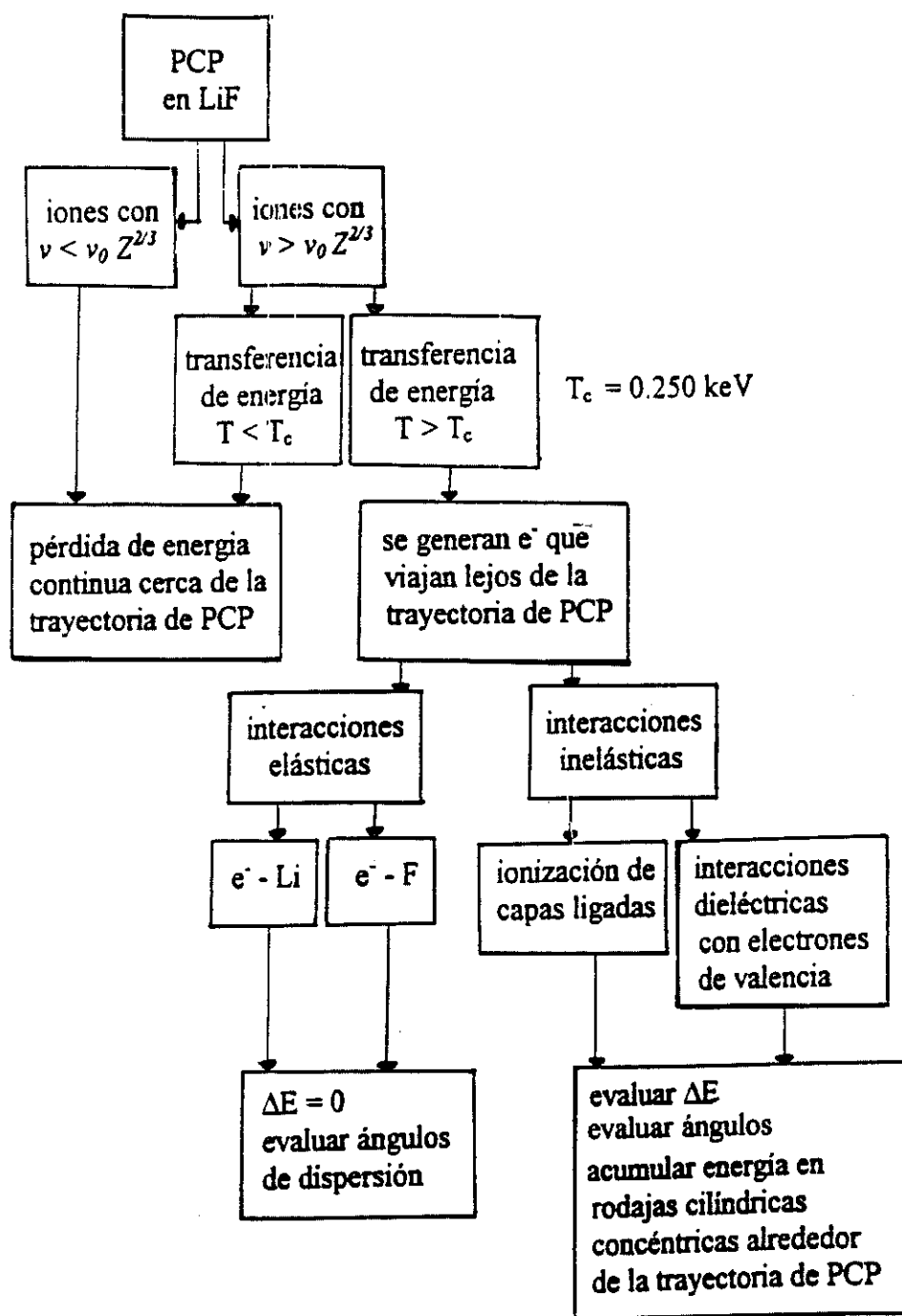


Figura 25. Diagrama de flujo del procedimiento de simulación Monte Carlo para la generación de electrones, transporte de electrones y depósito de energía.

III RESULTADOS

Para confirmar la validez del procedimiento Monte Carlo y de las predicciones teóricas que se derivan de éste es necesario verificar sus resultados en distintas etapas, así como realizar pruebas de autoconsistencia.

III.1 Validación del método

En las simulaciones computacionales de procesos físicos se requiere introducir de manera artificial algunos parámetros para poder implementar la manera en que el cómputo proporcione resultados congruentes con lo que se observa experimentalmente. Ese es el caso de la energía de corte de las PCP ya que para transferencias de energía mayores que la energía de corte (ec. 91) se generan electrones secundarios que son los que depositan su energía y llevan a la obtención de perfiles radiales de dosis. La energía de corte utilizada en este trabajo fue $T_c = 250$ eV y con este valor se obtuvieron los resultados presentados. En el capítulo IV se discutirá con más detalle su papel en los resultados obtenidos.

III.1.A Espectro de energía de electrones secundarios

Una prueba de validación del método Monte Carlo consiste en observar el espectro de emisión de electrones secundarios generados y comparar con datos existentes en la literatura. La figura 26 muestra el espectro de energías de electrones secundarios obtenido mediante la aplicación del método descrito en la sección II.2.A.1 para 1000 historias de protones de 1 MeV incidentes en LiF (cálculo de segmento de traza). Para este cálculo se usó un segmento transversal de traza de $0.65 \mu\text{m}$ de largo, que es aproximadamente un vigésimo del alcance total de protones de 1 MeV en LiF. En esta distancia cada proton de 1

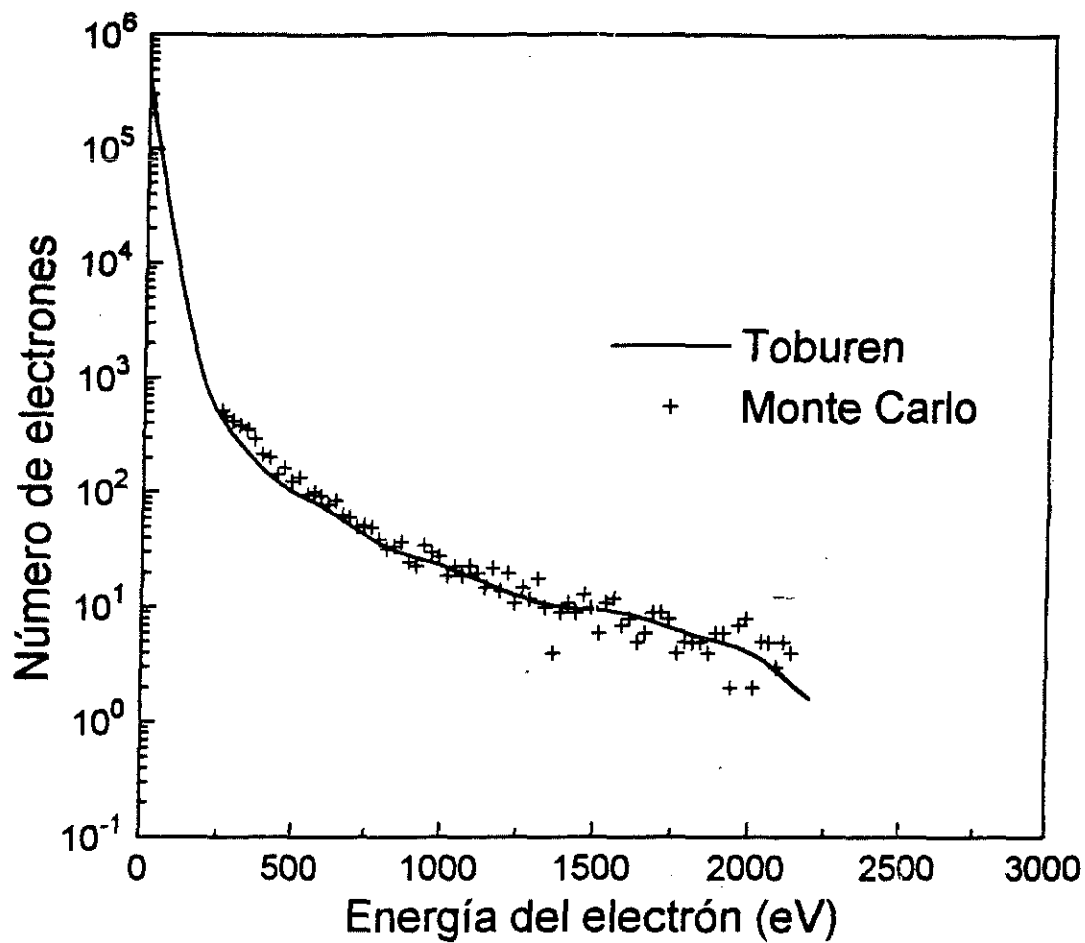


Figura 26. Espectro de energías de electrones secundarios. La curva sólida representa la sección eficaz para emisión de electrones por protones de 1 MeV en N_2 medida por Toburen, (Toburen, L.H., 1971). Las cruces representan el número de electrones generados por 10000 historias de protones de 1 MeV en LiF en este trabajo.

MeV pierde 0.036 MeV y genera del orden de 20 electrones secundarios. A cada electrón se le asigna aleatoriamente una energía entre $T_e = 250$ eV y $T_{\max} = 2190$ eV. En la figura 26 se compara con secciones de emisión de electrones por protones en nitrógeno molecular (Toburen, L.H., 1971) y el acuerdo es bueno. Esta prueba, también, se realizó para protones y helios de varias energías, encontrando en cada caso buen acuerdo.

III.1.B Fracción de energía total del ion que se deposita por medio de los electrones secundarios.

Los iones no depositan el 100 % de su energía en el medio a través de los electrones secundarios (Paretzke, H.G. *et al.*, 1995) pues parte de su energía se usa en liberar energías de amarre de los electrones y en excitación de átomos neutros. En este trabajo, el uso de la energía de corte permite separar la cantidad de energía que se deposita a través de electrones secundarios. En la figura 27 se grafica la fracción de energía del ion que es depositada en el medio por los electrones secundarios generados mediante el procedimiento de simulación Monte Carlo, como función de la energía incidente tanto para protones como para helios. Estos resultados están dentro de lo esperado.

III.1.C Energía total depositada por electrones.

El valor total de la energía depositada por electrones se obtiene sumando el valor de la energía que pierde cada electrón en cada interacción inelástica. Recordemos que una vez que la energía del electrón es menor que 50 eV, se considera que ésta se deposita localmente en las coordenadas actualizadas del electrón (ver II.2.D). Al realizar un cálculo para un ion

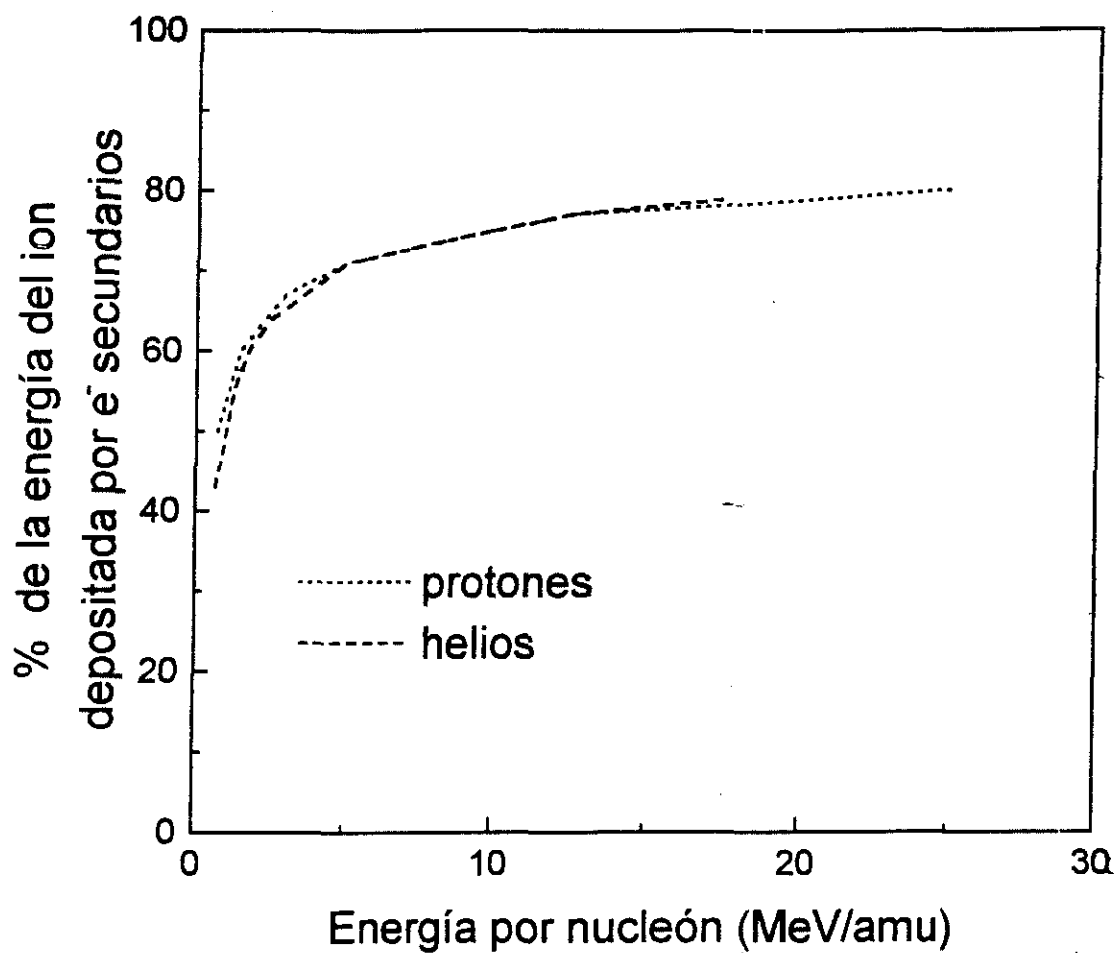


Figura 27. Porcentaje de energía que se usa para generar electrones secundarios en un cálculo MC de traza completa, como función de la energía inicial del ion.

específico con energía inicial determinada se confirmó que el valor total de la energía depositada en el medio es igual a la fracción de energía del ion usada para generar electrones secundarios. Esto es una prueba de autoconsistencia de nuestro procedimiento de simulación Monte Carlo.

III.1.D Alcances de partículas cargadas pesadas

Es importante verificar que la profundidad dentro del material a la que los electrones generados por las PCP depositan su energía sea la esperada. Esto se relaciona con el alcance de las PCP en el medio. En este trabajo, el transporte de iones utilizado (Chou, P y Ghoniem, N.M., 1987) proporciona valores para el alcance de las PCP que caen dentro de un 2 % de los alcances dados por el programa TRIM (Biersack, J.P. y Ziegler, J.F., 1989).

III.1.E Alcance de electrones

Recordemos que, debido a lo tortuoso de las trayectorias de los electrones en un medio, se tiene, por un lado, el concepto de alcance entendido como el largo de la trayectoria total recorrida por el electrón desde su generación hasta frenarse, y por otro lado, la distancia máxima que penetran. El alcance de los electrones secundarios obtenido en este trabajo se muestra en la figura 28. Se compara con estimaciones independientes del alcance de Bethe (ecuación 45) para transporte de electrones (Fernández-Varea *et al.*, 1996). El acuerdo es óptimo siendo ésta una prueba más de validación del método. La figura 29 muestra el promedio de la distancia máxima de penetración de los electrones en dos y tres dimensiones, obtenida en este trabajo. Se le llama penetración en tres dimensiones a la distancia entre el punto de la trayectoria de la PCP en que un electrón es

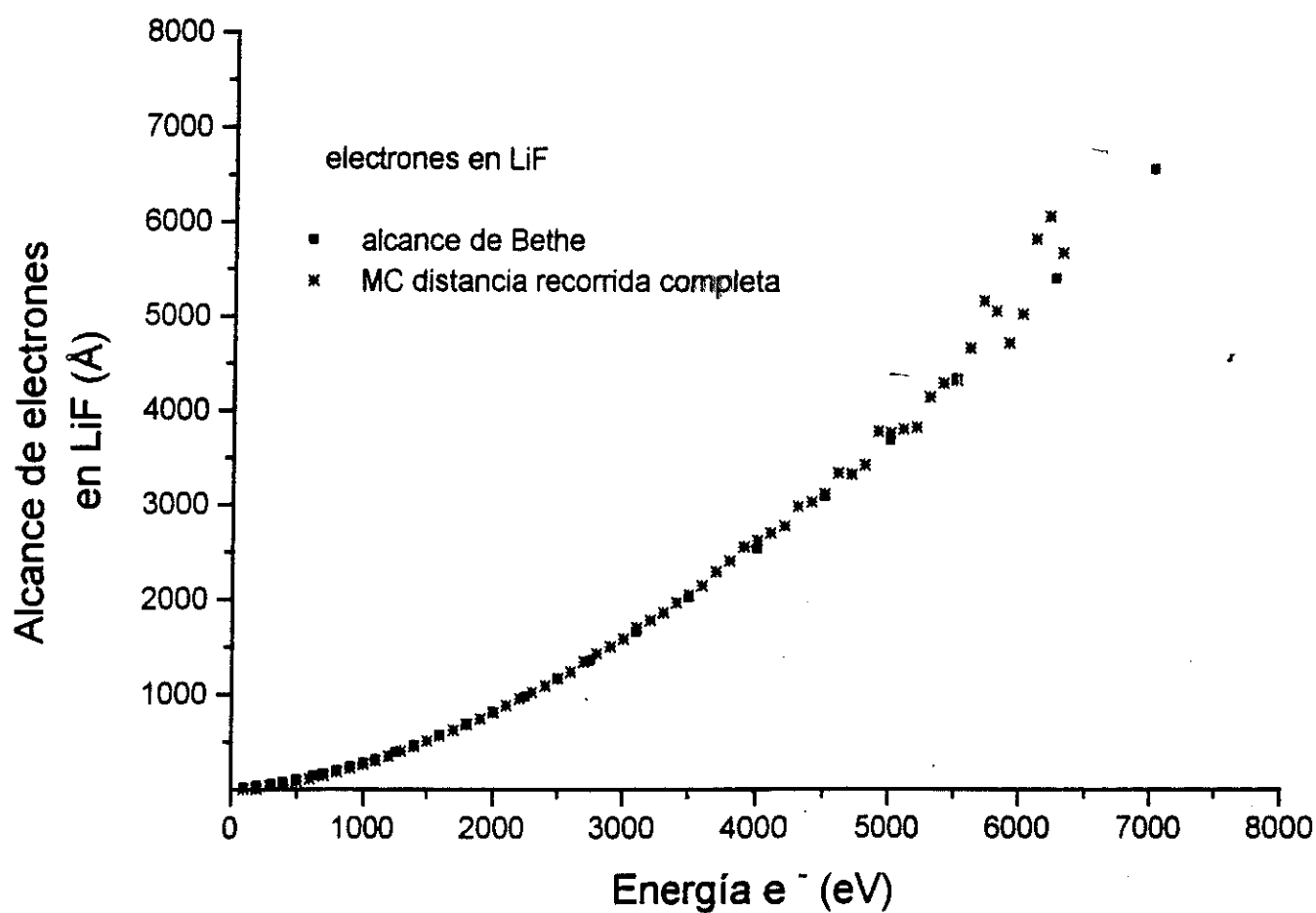


Figura 28. Alcance de electrones en LiF como función de su energía. Alcance de Bethe para electrones en LiF (Fernández-Varea *et al.*, 1996) (■) y distancia total recorrida por los electrones en LiF obtenida mediante el procedimiento MC (*).

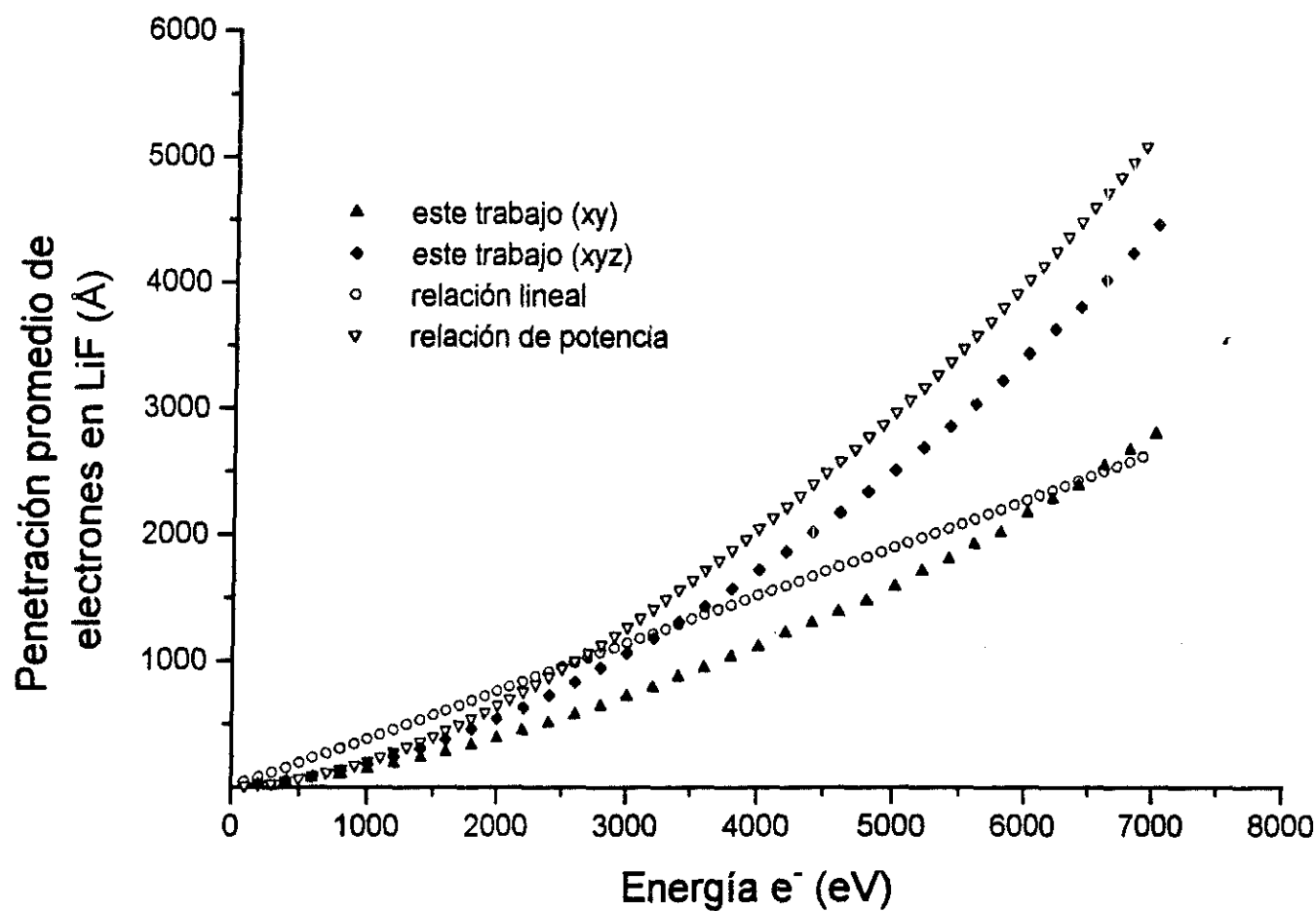


Figura 29. Promedio de la penetración máxima de electrones en LiF obtenida en este trabajo, en función de su energía considerando dos dimensiones (xy) y tres dimensiones (xyz). Se compara con las relaciones entre energía y alcance del electrón usadas en otros trabajos.

generado y el máximo valor de $\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$ al que ese electrón depositó energía. Se le llama penetración en dos dimensiones a la distancia en el plano xy entre el punto de la trayectoria de la PCP en que un electrón es generado y el máximo del valor $\sqrt{x^2 + y^2}$ al que ese electrón depositó energía.

En la figura 29 se observa que la penetración en tres dimensiones resulta ser aproximadamente dos tercios del largo de trayectoria total recorrida. Se comparan los resultados de este trabajo con las relaciones lineal y de potencia entre energía y alcance que han utilizado con frecuencia Katz y sus colaboradores al aplicar TST (Hansen, J.W. y Olsén, K.J., 1984). En el capítulo IV se discutirá con más detalle la influencia de estos resultados en los perfiles radiales de dosis.

III.2 Distribuciones radiales de dosis

El procedimiento de simulación Monte Carlo desarrollado describe el depósito de energía en el medio siguiendo las trayectorias de cada uno de los electrones secundarios generados por PCPs incidentes en LiF. Si estos cálculos se realizan para un número suficientemente grande de historias de PCPs, y por lo tanto de electrones, las distribuciones radiales de dosis obtenidas serán equivalentes a las que se medirían experimentalmente. La estadística a utilizar en este trabajo se determinó calculando para un número de historias de PCPs tal que el resultado, es decir la curva de distribución radial de dosis, fuese independiente de la semilla y equivalente al producido por un cálculo con un número aún mayor de historias de PCPs. Esto resultó ser del orden de 10^4 historias de PCP, lo que lleva

a generar típicamente alrededor de 10^7 historias de electrones para un protón de baja energía.

Las distribuciones radiales de dosis son el resultado principal del procedimiento Monte Carlo, sin embargo, también constituyen pruebas de validación del método por las características que exhiben. Se hará referencia a esto al presentar cada curva.

Las figuras 30 y 31 muestran resultados para cálculos de traza completa realizados usando la simulación Monte Carlo para protones de 1.43 MeV y helios de 4 MeV. En ellas, se muestran distintas distribuciones radiales de dosis que corresponden a distintas profundidades dentro del detector, ilustrando el efecto causado por la dependencia del poder de frenado dE/dz con la energía y en consecuencia con z , la dirección en profundidad dentro del material (ver figura 32). El caso de protones de 1.43 MeV se ilustra con 8 segmentos hacia adentro del detector, en la misma figura se muestra el valor de la profundidad y la energía al inicio de cada segmento. El caso de helios de 4 MeV se ilustra dividiendo el espacio en 6 segmentos, mostrando, también, los valores de profundidad y energía. El hecho de que las distribuciones radiales de dosis exhiban este comportamiento constituye otra prueba de validación del método.

La figura 33 muestra un cálculo de segmento de traza para helios de 3 MeV incidentes en LiF comparado con resultados de simulación MC independientes en vapor de agua (Krämer, M. y Kraft, G., 1994) y con medidas experimentales en gas tejido-equivalente (Wingate, C. y Baum, J.W., 1976); ambos escalados a LiF. Las características del cálculo realizado en este trabajo son similares a las ilustradas en las figuras anteriores.

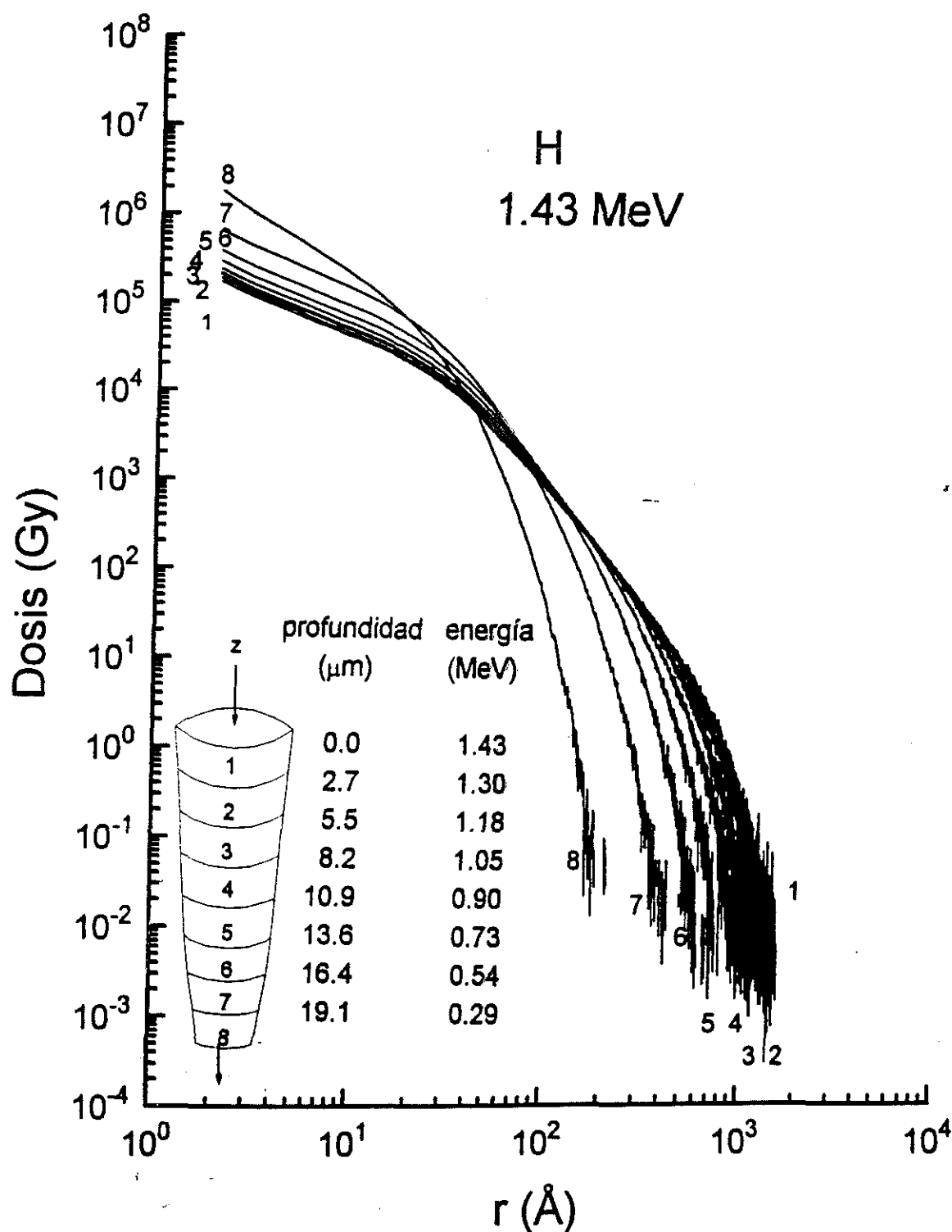


Figura 30. Distribuciones radiales de dosis de protones de 1.43 MeV en LiF. Cálculo de traza completa. La distancia total en la dirección z se dividió en 8 secciones como se muestra. Las etiquetas de la curva se refieren al número de sección. Se indica la energía del protón conforme entra a cada sección en distinta profundidad en LiF. El alcance proyectado es de $21.2 \mu\text{m}$. 1 Gy corresponde a $2.635 \times 10^{-20} \text{ erg } \text{\AA}^{-3}$ en LiF ($\rho = 2.635 \text{ g cm}^{-3}$).

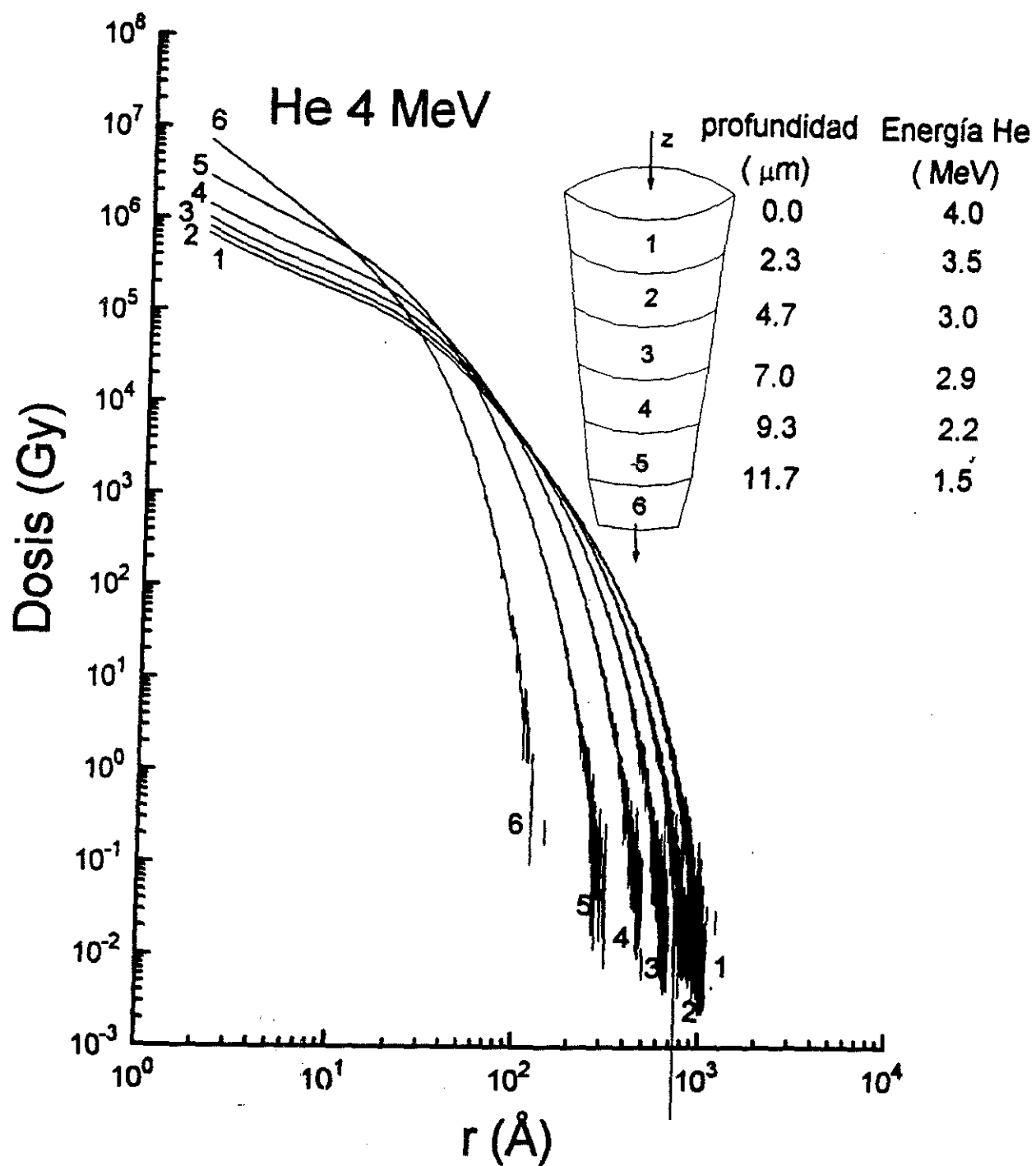


Figura 31. Distribuciones radiales de dosis de helios de 4 MeV en LiF. Trazo completa. En este caso, la distancia total en la dirección z se dividió en 6 secciones. El alcance proyectado es de 14 μm .

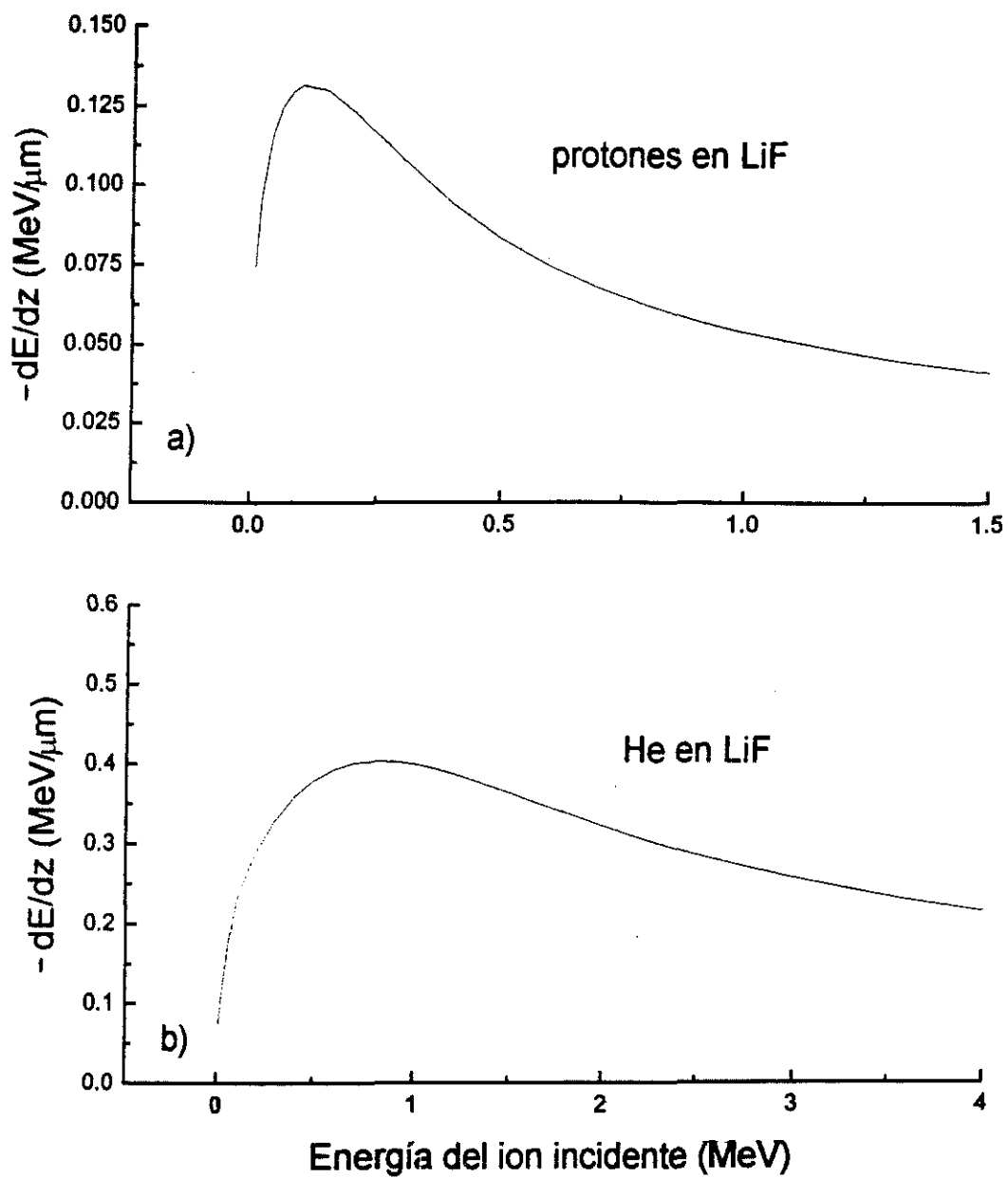


Figura 32. a) Poder de frenado dE/dz en función de la energía para protones en LiF.
b) Poder de frenado dE/dz en función de la energía para helios en LiF.

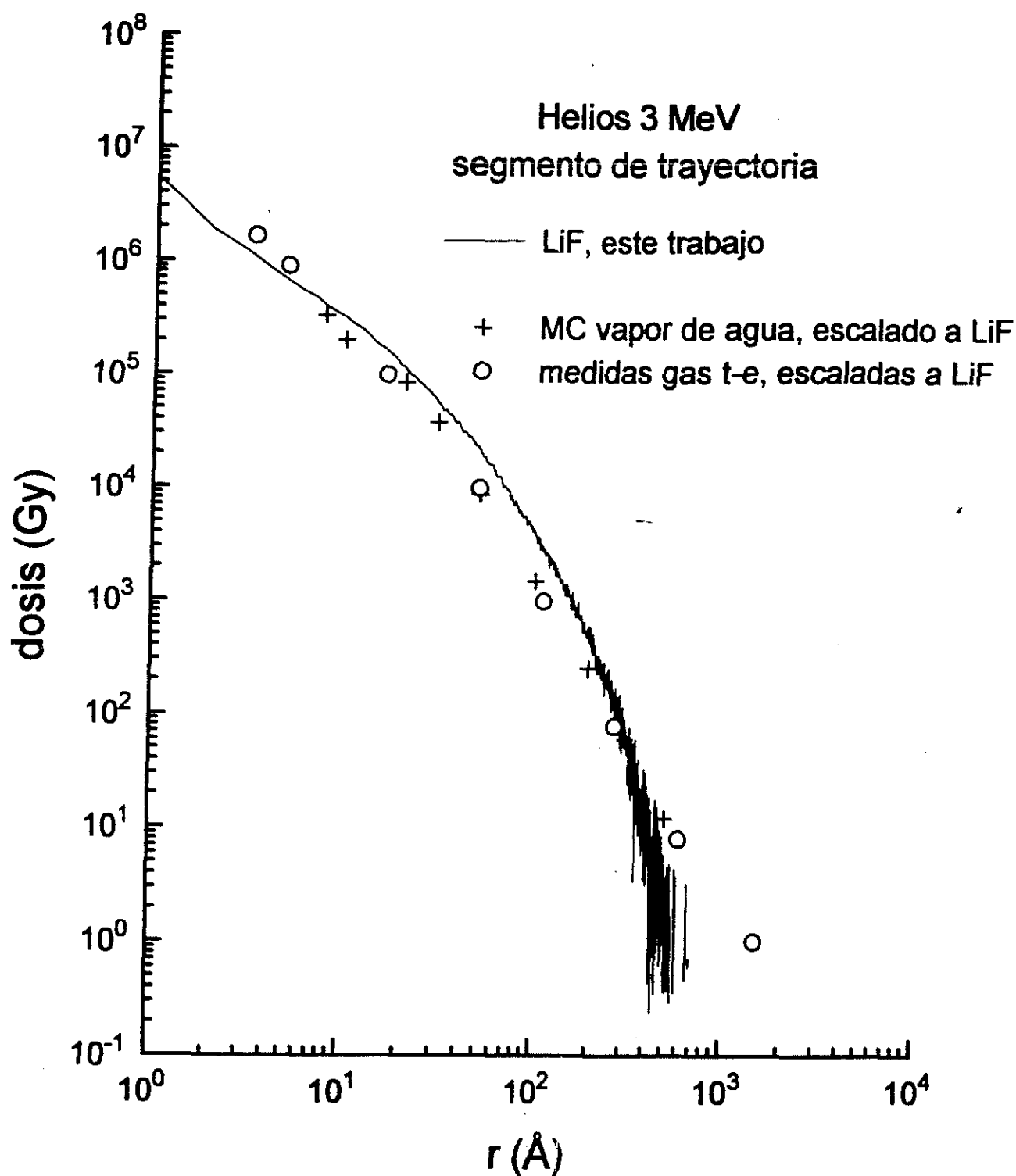


Figura 33. Cálculo de distribución radial de dosis (segmento de traza) obtenido en este trabajo para helios de 3 MeV en LiF (línea sólida) comparado con medidas en gas tejido-equivalente (Wingate C. y Baum J.W., 1976) (○) y con cálculos MC en vapor de agua (Krämer M. y Kraft, G., 1994) (+).

La figura 34 muestra una curva de distribución radial de dosis para un segmento de traza para helios de 4 MeV en LiF comparada con un cálculo analítico realizado por Montret (Montret, 1980) en vapor de agua y corregido por densidad. Este último cálculo se realizó según el método descrito en la sección I.2.D.4 suponiendo pérdidas por ionización, excitación y vibración. Se observa que las dos distribuciones difieren en magnitud y en forma radial lo que es una indicación de lo diferente que pueden ser los resultados al aplicar distintos métodos y de la conveniencia de realizar el cálculo en LiF sólido.

La figura 35 muestra distribuciones radiales de dosis (segmento de traza) comparadas con cálculos analíticos de acuerdo al modelo TST para blanco puntual (ecuación 57) para el caso de protones de 0.7 MeV y helios de 5.3 MeV. Para estos mismos casos, la figura 36 muestra distribuciones radiales de dosis promediadas siguiendo el método de cálculo de blanco extendido (ecuación 58) tanto usando las dosis MC, como usando las analíticas correspondientes a blanco puntual. Las diferencias entre las figuras obtenidas en este trabajo y las provenientes del tratamiento analítico se discutirán en el siguiente capítulo.

III.3 Eficiencias termoluminiscentes relativas, modelo TST

El cálculo de las eficiencias TL relativas de PCP respecto de radiación gamma, de acuerdo al modelo TST, se realiza mediante el procedimiento indicado en la sección I.2.B.1. En este trabajo, se utilizaron las distribuciones radiales de dosis MC en LiF obtenidas mediante el procedimiento descrito en II.2 y ejemplificadas por las figuras 30, 31, 33 y 34. Todos los estudios previos de TST aplicado a termoluminiscencia en LiF han usado distribuciones radiales de dosis analíticas (sección I.2.D.2).

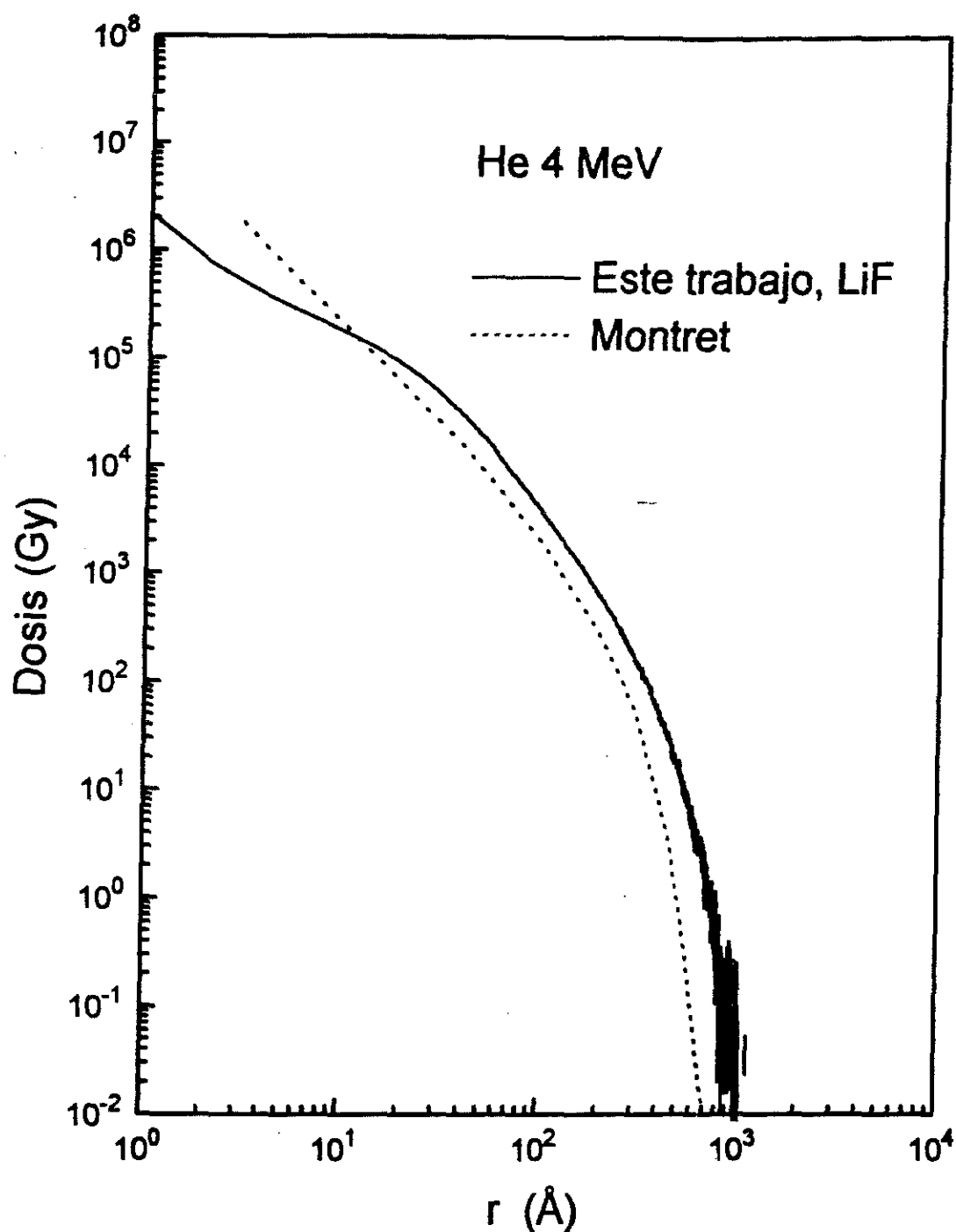


Figura 34. Cálculo de distribución radial de dosis (segmento de traza) obtenido en este trabajo para helios de 4 MeV en LiF (línea sólida) comparado con cálculo analítico (Montret, M., 1980) (línea punteada).

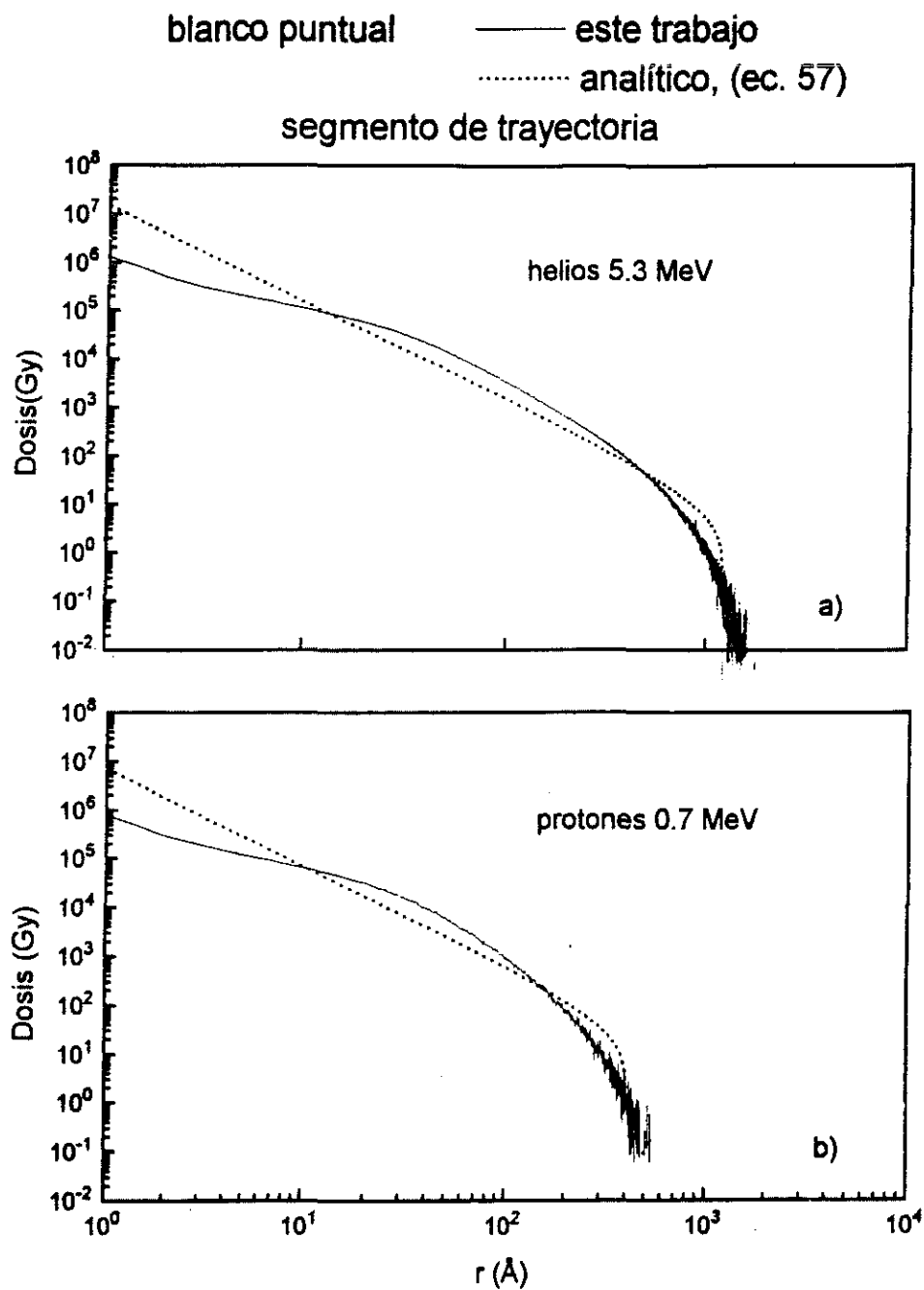


Figura 35. a) Cálculo MC de segmento de traza para helios de 5.3 MeV en LiF (línea sólida) comparado con cálculo analítico de blanco puntual mediante el método TST (línea punteada)
 b) Cálculo MC de segmento de traza para protones de 0.7 MeV en LiF (línea sólida) comparado con cálculo analítico de blanco puntual mediante el método TST (línea punteada)

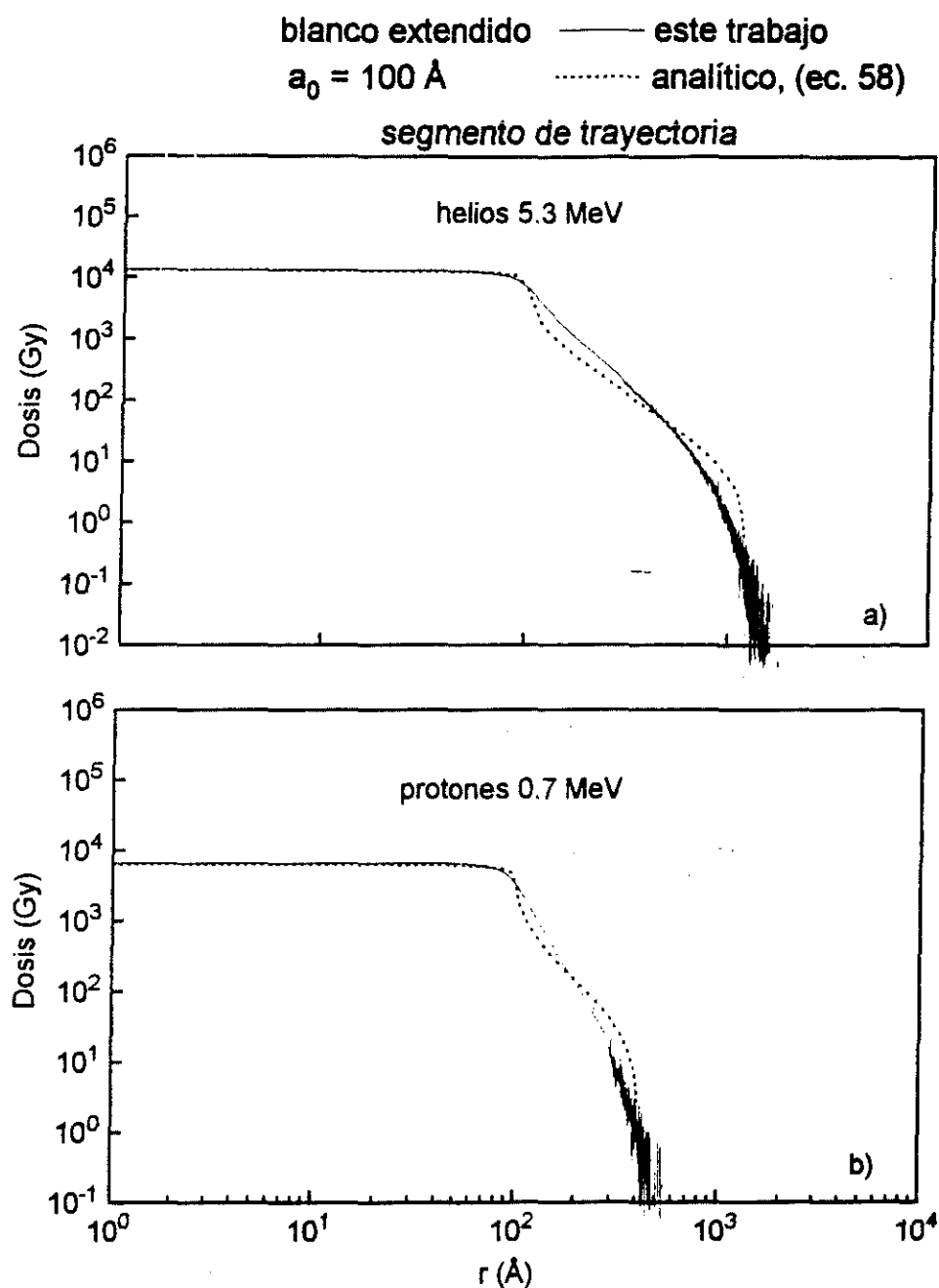


Figura 36. a) Cálculo de blanco extendido usando distribuciones radiales de dosis MC (segmento de traza) para helios de 5.3 MeV en LiF (línea sólida) y usando distribuciones radiales de dosis analíticas (línea punteada) según el modelo TST. b) Cálculo de blanco extendido usando distribuciones radiales de dosis MC (segmento de traza) para protones de 0.7 MeV en LiF (línea sólida) y usando distribuciones radiales de dosis analíticas (línea punteada) según el modelo TST.

Los perfiles de dosis entran en las expresiones 12 y 13 para evaluar probabilidades de activación de 1-o más y de 2-o más impactos. Teniendo estas probabilidades, se calculan las secciones de activación correspondientes σ_1 y σ_2 evaluando la ecuación 14. Para esto, se desarrolló el programa *kolt.for*. Para un cálculo de traza completa, que se realiza cuando el detector es grueso y la PCP deposita toda su energía, este programa proporciona las secciones de activación σ_1 y σ_2 para cada segmento transversal en profundidad de la traza de la PCP. Teniendo estas secciones de activación, se integran para calcular $\sigma_1 R$ y $\sigma_2 R$ (ecuación 15) que, a su vez, son utilizados para el cálculo de k_1 y k_2 y la evaluación de TL_{PCP} (ecuación 19, sección I.2.B.1). Siguiendo el método descrito en la sección I.2.B.1 se obtiene TL_γ y finalmente el valor de la eficiencia TL relativa (ecuación 25). Para esta segunda fase del cálculo se desarrolló el programa *eftst.for*.

Se obtienen valores de eficiencia TST para protones y helios de distintas energías en el intervalo aproximado de 1 a 20 MeV por nucleón, que corresponde a LET en agua entre 2 y 34 keV/ μm para protones y entre 12 y 144 keV/ μm para helios. La figura 37 muestra los cálculos de traza completa para tres valores diferentes de a_0 , y se comparan con datos experimentales medidos en IFUNAM (Gamboa-deBuen *et al.*, 1998b, Avilés, P. *et al.*, 1998, Rodríguez-Villafuerte, M. *et al.*, aceptado, sept. 1999). Los valores de a_0 son similares a los usados con anterioridad por Katz y sus colaboradores (Waligórski, M.P.R. y Katz, R., 1980a, 1980b). Los cálculos teóricos describen la dependencia de las medidas de eficiencia con el LET.

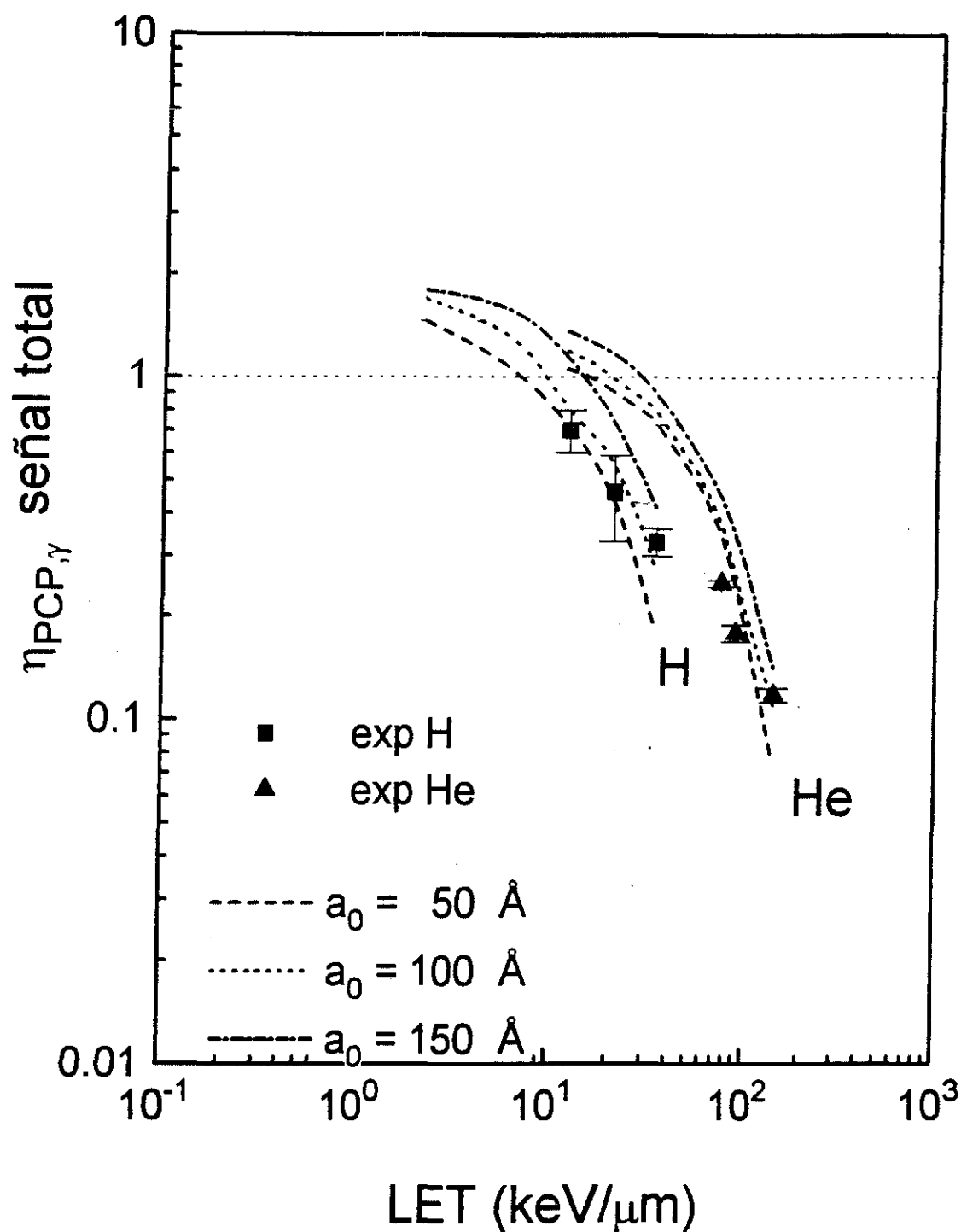


Figura 37. Eficiencias TL relativas en LiF de protones y helios respecto de radiación gamma de ^{60}Co en función del LET en agua. Se muestran medidas experimentales y predicciones del modelo TST usando las distribuciones radiales de dosis calculadas en este trabajo con distintos tamaños de a_0 .

III.4 Resultados del modelo TSTM

III.4.A Eficiencias termoluminiscentes relativas, modelo TSTM

Para obtener valores de eficiencia termoluminiscente relativa de acuerdo al modelo TSTM es necesario evaluar la ecuación 26. Esto se hizo utilizando las distribuciones de dosis $D(r, l, E)$ en LiF calculadas para protones y helios de distintas energías en el mismo intervalo descrito en la sección III.3 y se usaron rayos X de 8.1 keV como radiación de prueba. La función de supralinealidad $f_{\alpha}(D)$ de esta radiación de prueba fue medida recientemente en IFUNAM (Gamboa-deBuen *et al.*, 1998a) y se mostró en la figura 13. El programa etax.for lee los perfiles $D(r, l, E)$, correspondientes a cada segmento en profundidad de la traza de la PCP y con ellas integra, radialmente y en profundidad, los valores del numerador y del denominador de la ecuación 26 y proporciona el valor de la eficiencia TL de PCP respecto a radiación gamma de ^{60}Co de acuerdo al modelo TSTM. La figura 38 muestra las eficiencias termoluminiscentes relativas como función del LET comparandolas con las medidas realizadas en IFUNAM. El acuerdo es satisfactorio para los dos iones estudiados.

III.4.B “Radio de saturación”

Dentro del modelo TSTM es posible definir un “radio de saturación” o, “radio del carozo” como aquel radio que limita la región de la traza cercana a la trayectoria de PCP, donde la dosis depositada es mayor que la dosis alta para la cual la función $f_{\alpha}(D)$ tiende a cero. La figura 13 indica, extrapolando a dosis altas, que el valor de esta dosis es aproximadamente 2×10^4 Gy. El radio de saturación cambia a medida que la PCP penetra

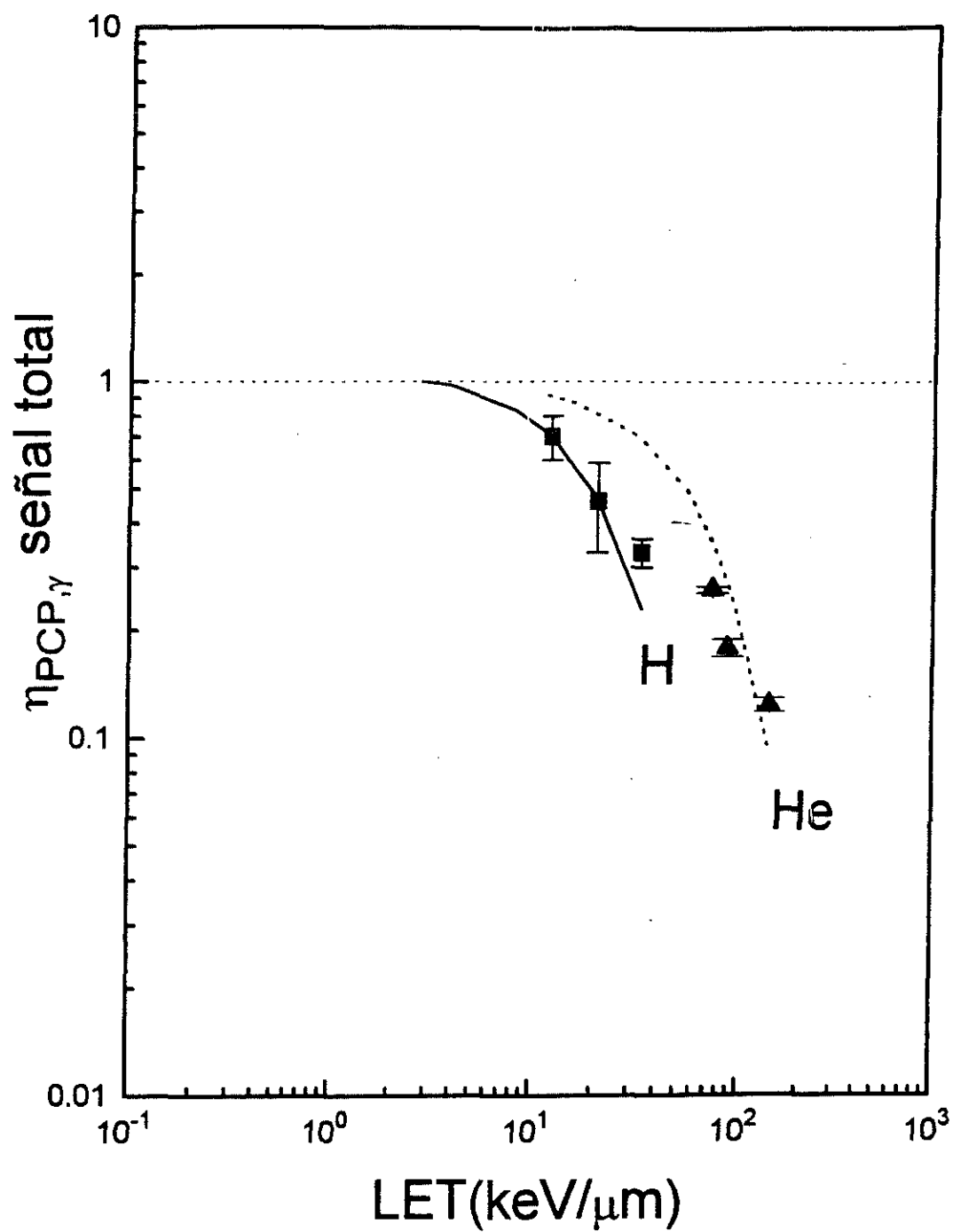


Figura 38. Eficiencias TL relativas en LiF de protones y helios respecto de radiación gamma de ^{60}Co en función del LET en agua. Medidas experimentales y predicciones del modelo TSTM usando distribuciones radiales de dosis MC y la $f_d(D)$ proveniente de rayos-X de 8.1 keV.

en el material, tal como lo muestran las figuras 39 y 40. En estas figuras se observa la dependencia del radio de saturación respecto de la profundidad de la PCP en el medio (eje izquierdo) y de la energía de la PCP (eje derecho). Los ejes verticales indican en dirección hacia abajo el aumento en profundidad y la correspondiente disminución en energía de la PCP.

III.4.C Integral de dosis acumulada

La figura 41 muestra los valores de la dosis acumulada en función de la distancia radial de la traza, así como el valor acumulado del producto de $f_d(D) \cdot D$, cantidades importantes en la evaluación de la eficiencia (ecuación 26), para un segmento de traza de protones de 1.43 MeV en LiF. Se aprecia cómo la mayor parte de la dosis, el 85 %, se deposita en distancias menores que 200 Å para protones de baja energía.

III.4.D Efecto de la elección particular de $f_d(D)$

La eficiencia termoluminiscente relativa obtenida mediante la aplicación del modelo TSTM depende de la distribución radial de dosis y de la función de supralinealidad $f_d(D)$ de la radiación de prueba utilizada (ecuación 26). Se realizaron cálculos con distintas radiaciones de prueba para evaluar el efecto que esta elección puede tener en el valor calculado de la eficiencia. La figura 42 muestra 5 distintas funciones, siendo $f_d(D)_1$ la correspondiente a rayos-X de 8.1 keV; $f_d(D)_2$ corresponde a una función igual a uno para dosis bajas, igual a una constante mayor que uno en un intervalo de dosis intermedias, y súbitamente toma el valor de cero en la zona de daño y saturación. Las funciones $f_d(D)_3$ y $f_d(D)_4$ son iguales a uno en un intervalo amplio de dosis cayendo bruscamente a cero para

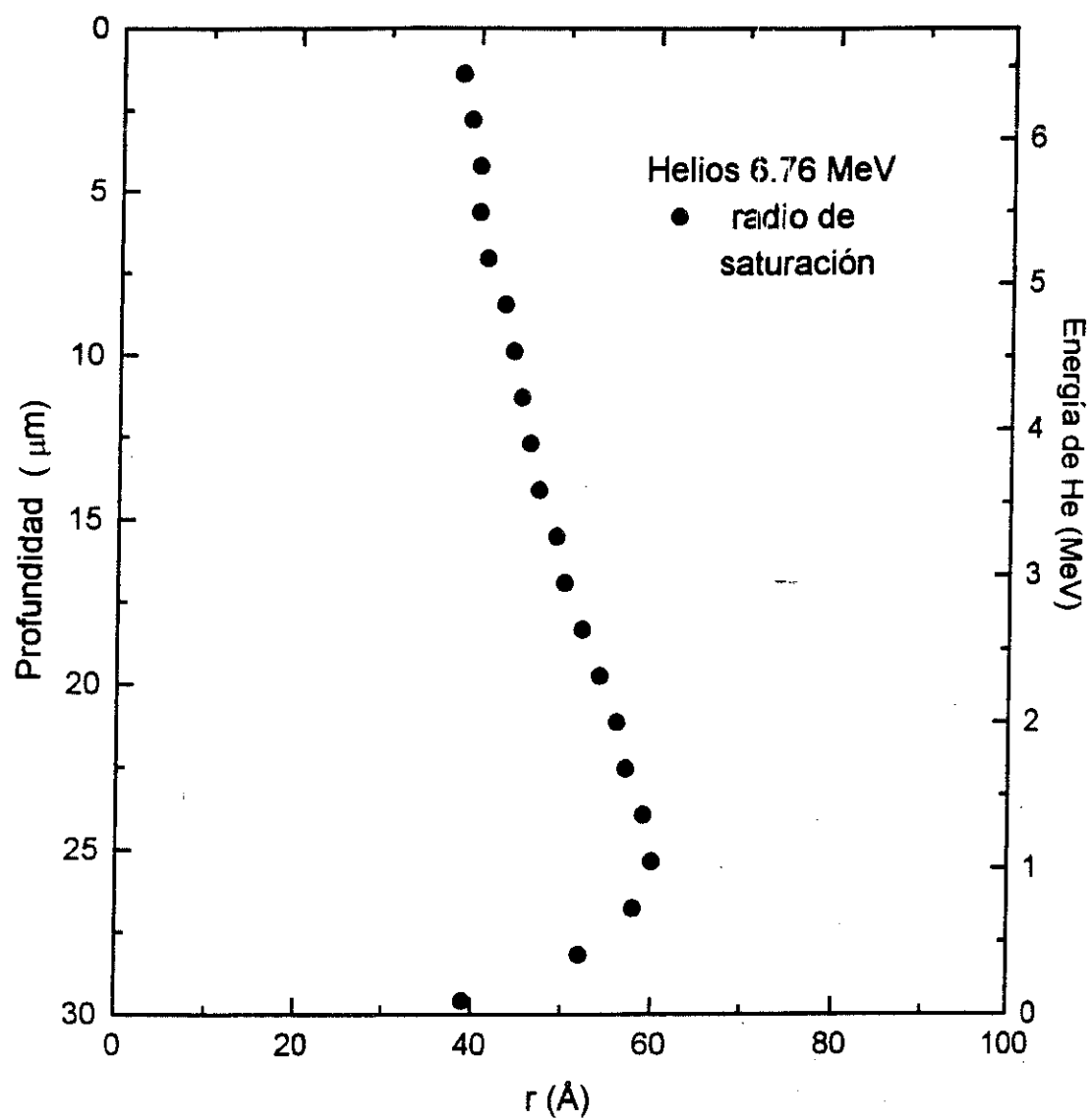


Figura 39. Radio de saturación obtenido al aplicar TSTM a helios de 6.76 MeV en LiF.

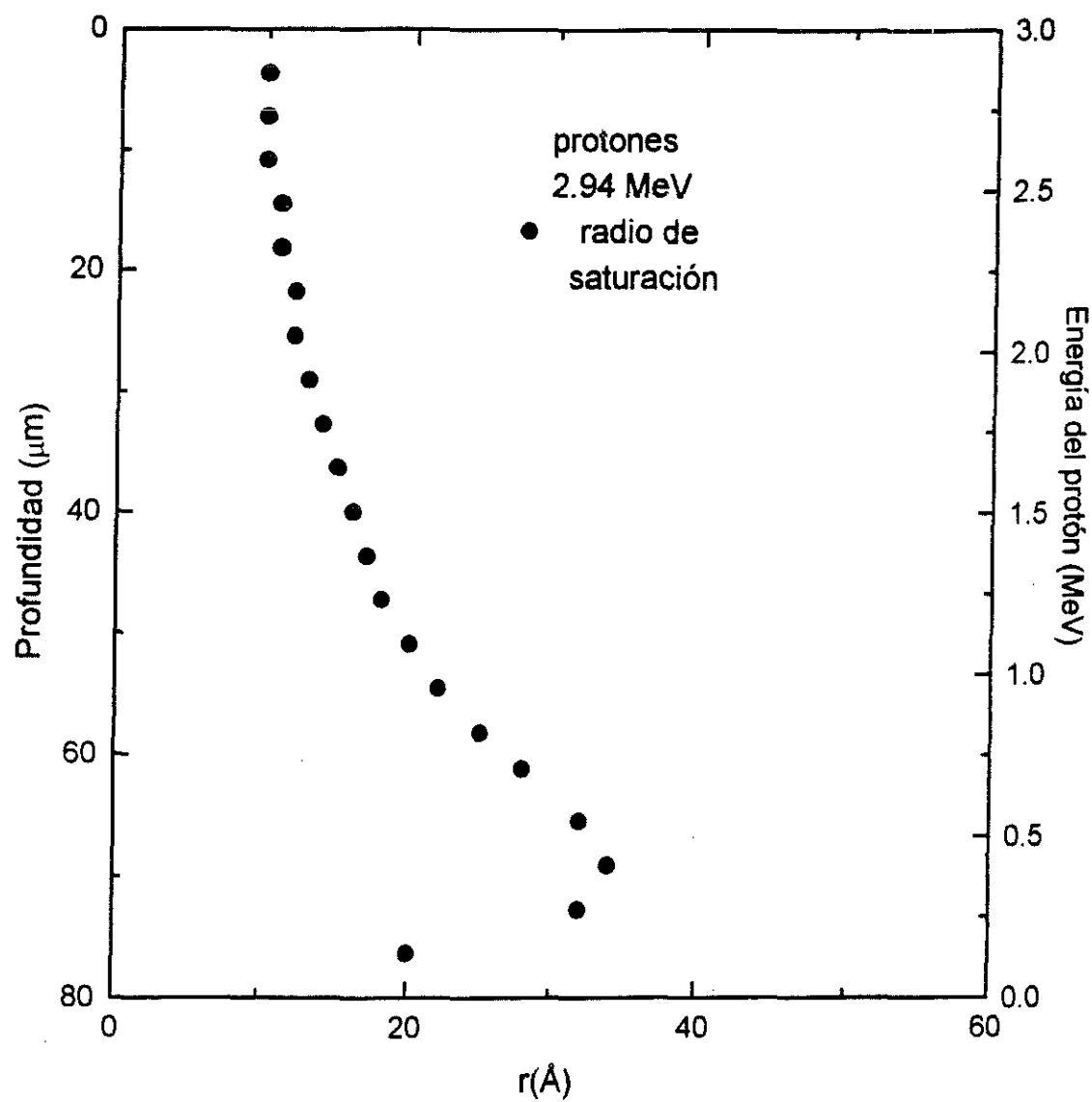


Figura 40. Radio de saturación obtenido al aplicar TSTM a protones de 2.94 MeV en LiF.

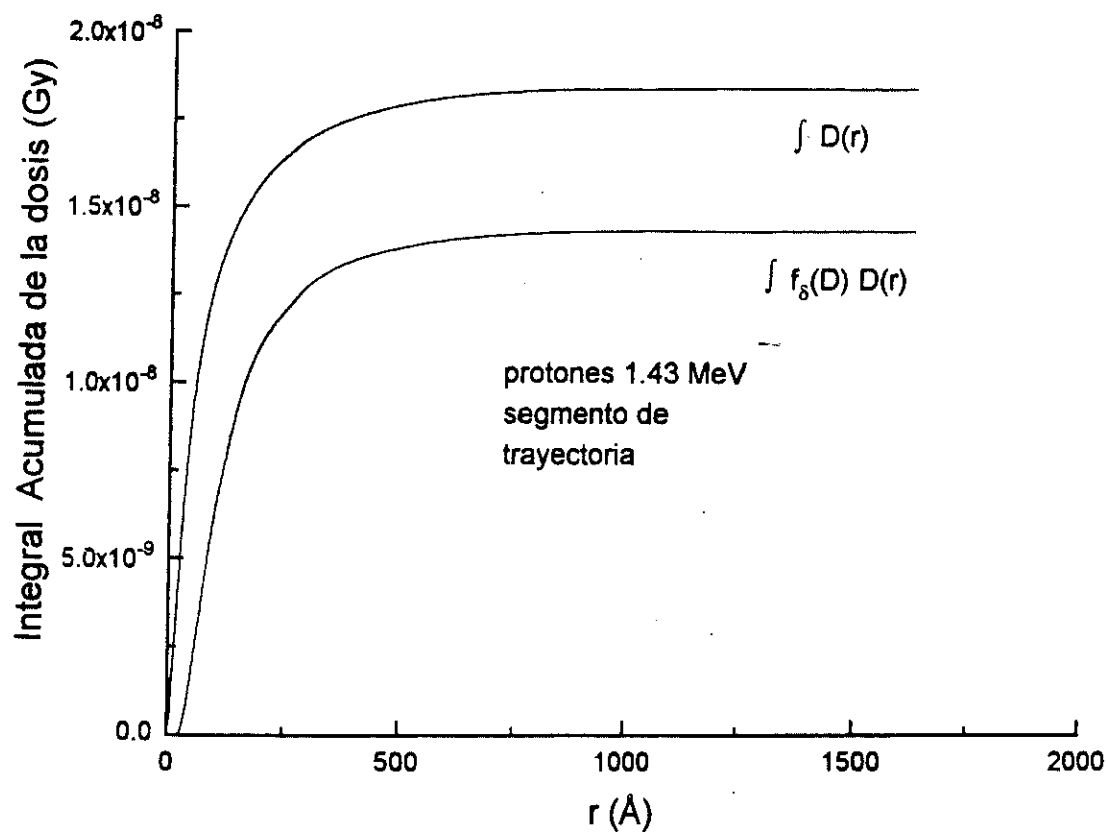


Figura 41. Integral acumulada de la dosis y del producto $D \cdot f_\delta(D)$ en función de la distancia radial de la trayectoria de la PCP para protones de 1.43 MeV (segmento de traza).

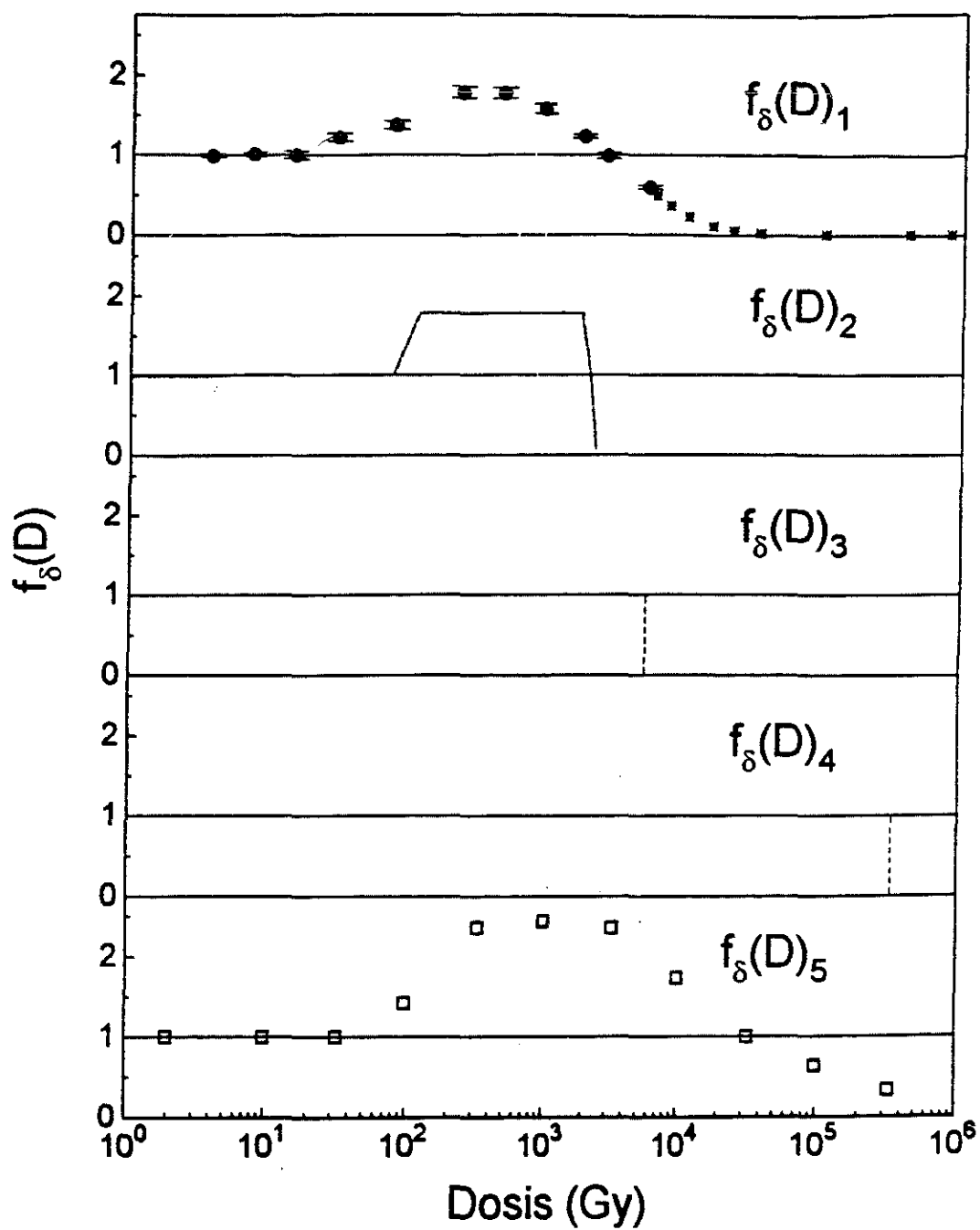


Figura 42. Distintas funciones $f_\delta(D)$ de la radiación de prueba que se introducen en el cálculo de eficiencia TL relativa con el modelo TSTM

dosis mayores que 5×10^3 y 3×10^5 Gy, respectivamente. Finalmente, la función $f_d(D)$, está dada por valores experimentales para LiF expuesto a radiación beta de ^3H (Kalef-Ezra J. y Horowitz Y.S., 1982). En las figuras 43 y 44 se observan los valores de eficiencia en función del LET en agua obtenidos para protones y helios utilizando las funciones mostradas en la figura 42. Puede observarse que esta elección puede influir de manera importante en el valor de la eficiencia calculada.

III.5 Energía de corte

Si se varia la energía de corte T_c lo que cambia es la energía mínima con que son generados los electrones secundarios. Como se mencionó previamente en este trabajo se usó $T_c = 250$ eV y con este valor se obtuvieron todos los resultados mostrados. La figura 45 muestra 3 distribuciones radiales de dosis calculadas para 1000 historias de protones de 0.7 MeV en LiF con T_c igual a 100, 200 y 300 eV. En esta figura se observa que a menor T_c se tiene una dosis mayor en la zona cercana a la trayectoria de la PCP. En el capítulo IV se hará referencia a esta figura al discutir la influencia de T_c en los valores obtenidos de eficiencia TL relativa.

En el próximo capítulo se discuten en detalle todos los resultados obtenidos y sus consecuencias.

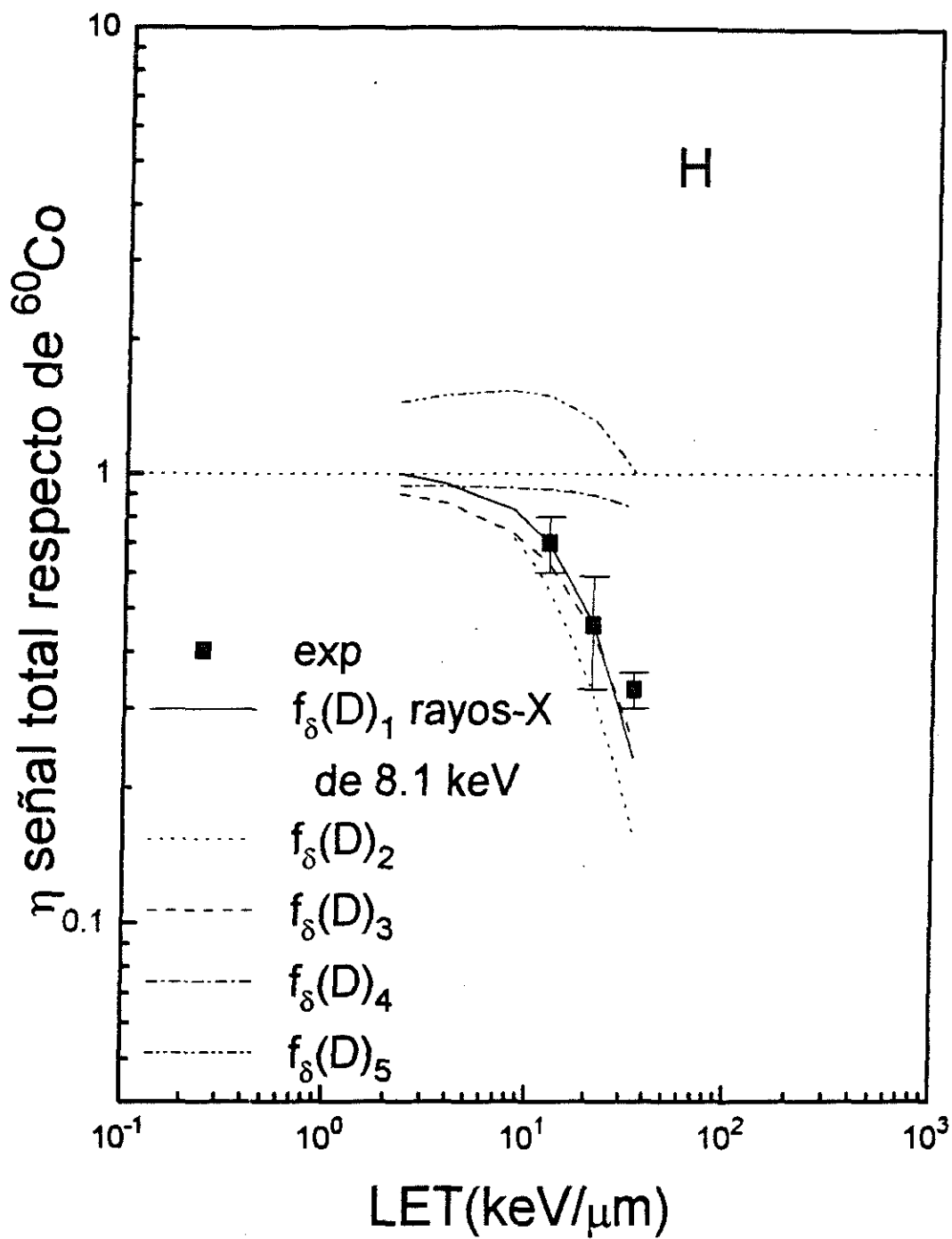


Figura 43. Efecto de usar distintas radiaciones de prueba al calcular las eficiencias TL de protones respecto de gamma en LiF con el modelo TSTM

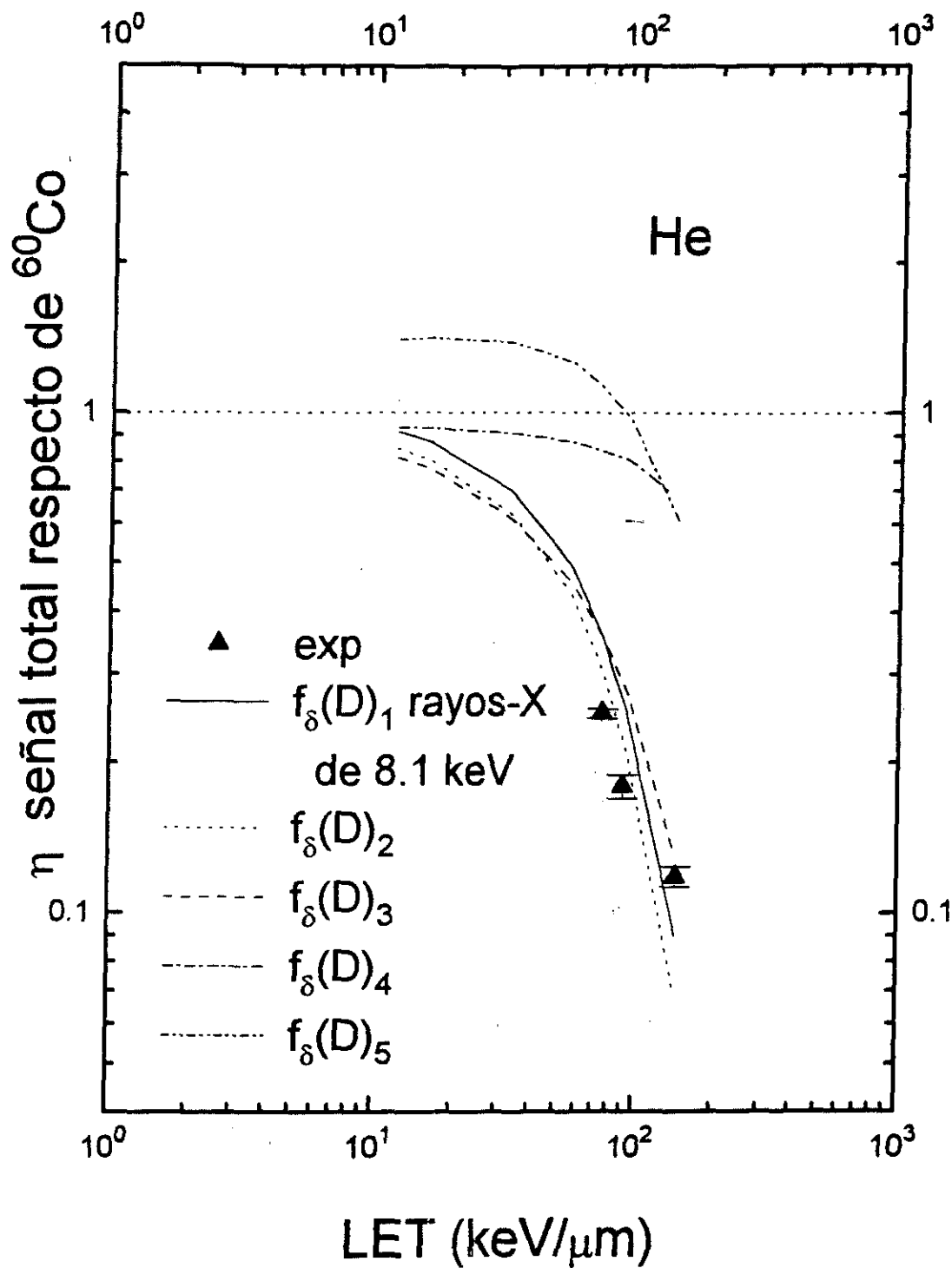


Figura 44. Efecto de usar distintas radiaciones de prueba al calcular las eficiencias TL de helios respecto de gammas en LiF con el modelo TSTM

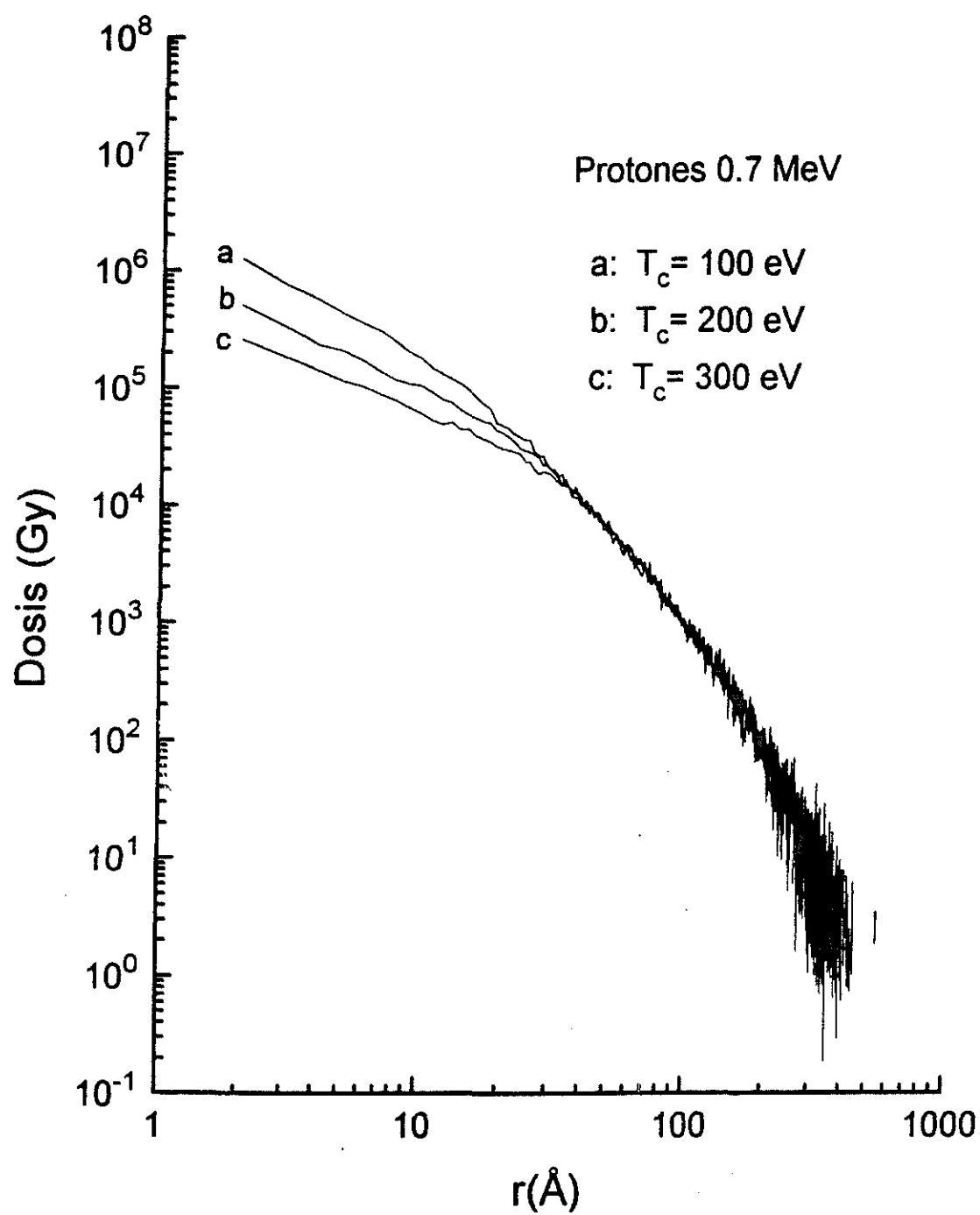


Figura 45. Distribuciones radiales de dosis para protones de 0.7 MeV en LiF obtenidas con distintos valores de T_c .

IV DISCUSIÓN

En este capítulo se analizan y discuten cada uno de los resultados presentados en el capítulo III.

IV.1 Validación del método

IV.1.A Espectro de energía de electrones secundarios

Respecto a la generación de electrones secundarios se observa en la figura 26 un muy buen acuerdo entre el espectro de energías calculado en este trabajo (sección II.2.A.1) y los datos experimentales (Toburen, L.H., 1971). Esto otorga confiabilidad al método seguido en cuanto a la generación de electrones secundarios, tanto en sus asignaciones aleatorias de energía como en el número de electrones con energías dentro de un intervalo determinado. Se observa también en la figura 26, que no se generan electrones secundarios de energías bajas; esto se debe al uso de la energía de corte T_c , que en este caso se optimizó a 250 eV, para permitir el mejor ajuste a las eficiencias TL relativas lo que se discutirá mas adelante.

IV.1.B Fracción de energía total depositada por electrones secundarios

Un segundo resultado importante de validación del método es el porcentaje de energía inicial del ion incidente que se usa para generar electrones secundarios y que, por lo tanto, se deposita alrededor de la trayectoria. La figura 27 muestra este porcentaje en función de la energía inicial de protones y helios usando $T_c = 250$ eV. Se sabe que iones con energías entre 0.5 y 100 MeV/ amu depositan alrededor de 65 a 75% de su energía inicial a través de

la impartición de energía cinética de sus electrones secundarios (Paretzke, H.G. *et al.*, 1995). Los porcentajes encontrados en este trabajo están en buen acuerdo con lo esperado.

IV.1.C Energía total depositada por electrones secundarios

El hecho de comprobar que toda la energía que se separó mediante la energía de corte para generar electrones secundarios es depositada demuestra la autoconsistencia del método, permite eliminar la posibilidad de introducir errores provenientes de energía no tomada en cuenta y conduce a obtener resultados confiables de las distribuciones radiales de dosis.

IV.1.D Alcances de partículas cargadas pesadas

Las distribuciones radiales de dosis deben ser correctas tanto en distancia radial como en profundidad. Al confirmar que el procedimiento MC proporciona alcances de PCP comparables (dentro de un 2%) a los que se reportan en la literatura, se valida el depósito de energía en profundidad.

IV.1.E Alcances de electrones

Los alcances de los electrones definen la distancia radial máxima a la que se deposita la energía y por lo tanto su importancia es fundamental en el cálculo de distribuciones radiales de dosis. Los resultados del alcance MC entendido como distancia total recorrida por los electrones se muestra en la figura 28. Aquí se comparan estos alcances con los resultados MC de transporte de electrones dado por Fernández-Varea y colaboradores (Fernández-Varea J.M. *et al.*, 1996) mostrando un excelente acuerdo con estos últimos, lo que valida el procedimiento MC. Sin embargo, es importante recordar que en realidad las

trayectorias de los electrones son tortuosas y la cantidad que define qué tan lejos radialmente de la traza del ion llegan los electrones es el promedio de la penetración máxima (para muchos electrones de la misma energía). Esta cantidad, obtenida con el procedimiento MC desarrollado en este trabajo, no es un resultado de validación sino uno de los resultados de nuestro tratamiento y se muestra en la figura 29 para dos y para tres dimensiones. Se comparan con dos relaciones entre la energía y el alcance de los electrones utilizadas por la TST, una relación de potencia (ecuación 52) y una relación lineal (ecuación 52 pero con $\alpha=1$ y $\kappa=10^{-8} \text{ g/cm}^2/\text{eV}$). En la siguiente sección se hará referencia al papel que juegan estas cantidades en los perfiles de dosis.

IV.2 Distribuciones radiales de dosis

Pasamos ahora a discutir las distribuciones radiales de dosis obtenidas mediante la simulación Monte Carlo.

Las figuras 30 y 31 muestran, para el caso de trayectoria completa, distribuciones radiales de dosis calculadas con el método MC en LiF para protones de 1.43 MeV y helios de 4 MeV, respectivamente. Se muestran perfiles para varios segmentos en la dirección de penetración de las PCP en LiF. Las características de estas curvas ilustran el efecto del poder de frenado a lo largo de la trayectoria de las PCP. Observando la figura 32, el poder de frenado electrónico aumenta conforme la energía del ion disminuye hasta alcanzar un máximo llamado pico de Bragg (situado a 100 keV para protones) antes de disminuir para energías más bajas. En las figuras 30 y 31 se observa que cerca de la trayectoria de la PCP,

las curvas correspondientes a los primeros segmentos en profundidad de la traza (cuando el ion tiene más energía) muestran unas 10 veces menos dosis que los últimos segmentos (cuando el ion tiene menos energía y el poder de frenado es mayor). A distancias radiales mayores, son los perfiles iniciales los que muestran mayores dosis debido a que sus electrones secundarios se emiten con mayor energía cinética y viajan más lejos. Nuevamente, este comportamiento es una prueba más de validez del método.

En la figura 33 se comparan resultados de distribución radial de dosis MC para helios de 3 MeV (este trabajo) con simulación MC en vapor de agua (Krämer, M. y Kraft, G., 1994) y con medidas en gas tejido-equivalente (Wingate, C. y Baum, J.W., 1976) después de escalar a LiF por densidad y alcance de electrones, según el método descrito por Kalef-Ezra y Horowitz (Kalef-Ezra J. y Horowitz, Y.S., 1982). La simulación MC en LiF muestra dosis mayores a partir de 6 Å y una menor distancia radial alcanzada. Esto último se puede comprender en base a los distintos métodos de considerar el alcance de los electrones.

La figura 34 muestra distribuciones radiales de dosis obtenidas mediante el método MC descrito en este trabajo para un cálculo de segmento de traza de helios de 4 MeV en LiF comparado con un cálculo analítico en vapor de agua y corregido a LiF por densidad (Montret, 1980). La gran diferencia observada en los valores de dosis aplicando estos dos métodos diferentes sugiere la conveniencia de incluir la naturaleza sólida de LiF al realizar el cálculo. Los resultados obtenidos en este trabajo mediante el procedimiento MC incluyen los procesos dieléctricos que no son considerados por Montret.

Las figuras 35 y 36 nos muestran comparaciones, tanto para protones como para helios de distintas distribuciones radiales de dosis obtenidas para blanco puntual y para blanco extendido, respectivamente, usando tanto dosis MC como dosis analíticas según el modelo TST.

Para analizar estas figuras es conveniente recordar las diferencias entre los alcances de electrones usados en este trabajo y los utilizados por TST. En este trabajo, la cantidad relevante para el depósito de la dosis en las rodajas cilíndricas concéntricas alrededor de la traza de la PCP es el promedio de la penetración máxima en tres dimensiones (figura 29), pues nuestra simulación es tridimensional. Los cálculos TST han utilizado para el alcance de electrones tanto la relación lineal como la relación de potencia mostradas en la figura 29. Se ha demostrado que la relación de potencia conduce a obtener distribuciones radiales de dosis que derivan en mejores acuerdos con medidas experimentales, por lo que esta relación es la que se usó para obtener las curvas de dosis TST mostradas en las figuras 35 y 36.

Se analizan ahora, con detalle, las figuras 35 a y b. Se observa que el cálculo analítico predice mayores dosis cerca de la trayectoria de la PCP, en esta zona, el resultado MC está influenciado por la energía de corte T_c (no se generan electrones con energías bajas), en la zona intermedia el cálculo MC predice mayores dosis que el analítico y lejos de la traza esto se invierte. Además, el cálculo MC muestra que los electrones alcanzan a depositar energía a distancias más lejanas de la trayectoria de lo que predice el máximo alcance TST (ecuación 35). Observando la figura 29 vemos que para un electrón con determinada energía, el promedio de la penetración máxima obtenido en este trabajo es menor que el alcance dado

por la relación de potencia de la TST. Esto propicia que el depósito de energía en la zona intermedia sea mayor para la distribución de dosis calculada en este trabajo que para la dada por TST. Se observa el mismo comportamiento para las distintas PCP mostradas. El cálculo analítico de TST le va restando energía al electrón de manera continua y según le va quedando distancia por recorrer (en un plano normal a la trayectoria de la PCP, esto es en dos dimensiones, sección I.2.D.2); por otro lado, en el cálculo MC el electrón tiene aleatoriamente algunas interacciones en las que no pierde energía (elásticas) pero en las que sí recorre distancia en dirección tortuosa (tres dimensiones) y también tiene interacciones inelásticas en las que sí pierde energía y la deposita localmente antes de cambiar nuevamente de dirección y seguir su transporte en el medio.

Respecto a las figuras 36 a y b, al hacer el cálculo de blanco extendido, el método TST aplanar la dosis en la zona cercana a la traza mediante el parámetro α_0 . Esta zona es la zona de alta dosis donde se tiene saturación y al aplanar se minimiza el efecto que tiene esta zona en el cálculo de las eficiencias termoluminiscentes. Como se observa, el efecto de aplanar es equivalente para las distribuciones de dosis tanto analíticas como MC. Las diferencias en las formas de las distribuciones para radios mayores a α_0 son las mismas que se discutieron en el párrafo anterior para las figuras 35 a y b.

IV.3 Eficiencias termoluminiscentes relativas, modelo TST

La figura 37 muestra medidas de eficiencia TL relativa para la señal total de protones y helios respecto de radiación gamma en LiF comparadas con las predicciones del método

TST para valores de a_0 de 50, 100 y 150 Å. El acuerdo general es satisfactorio, a pesar de que los datos parecen mostrar una dependencia más suave con el LET que los valores calculados. El mejor acuerdo con las medidas estaría dado por un tamaño de blanco entre 50 y 100 Å.

Conviene recordar que el tamaño de volumen sensible a_0 aplana la zona de alta dosis cercana a la trayectoria de las PCP donde se tiene saturación (ver Fig. 36). Mediante el uso de a_0 el modelo TST minimiza la contribución de esta zona a los valores de la eficiencia.

Se encontró que estos resultados no cambian si se varía el valor de la energía de corte en el procedimiento MC.

IV.4 Resultados del modelo TSTM

IV.4.A Eficiencias termoluminiscentes relativas, modelo TSTM

La figura 38 muestra predicciones del modelo TSTM para los valores de eficiencias termoluminiscentes de protones y helios respecto de radiación gamma (^{60}Co) como función del LET en agua. Podemos interpretar estos resultados en base a la ecuación 26, los perfiles radiales de dosis $D(r, l, E)$ y la función $f_d(D)$ mostrada en la figura 13. Las dosis mayores que 2×10^4 Gy (valor supuesto de la dosis alta para el cual la función $f_d(D)$ tiende a cero) se multiplican en el numerador de la ecuación 26 por un factor pequeño, lo que quiere decir que las dosis muy cercanas a la trayectoria de la PCP no contribuyen de manera significativa al valor de la eficiencia. De hecho, para un cálculo de segmento de traza de protones de 1.43 MeV encontramos que la mitad de la dosis se deposita en un radio menor que 50 Å (ver Fig. 41) mientras que la mitad del valor de la eficiencia (ecuación 26) proviene de regiones

comprendidas entre 30 y 110 Å. Las dosis comprendidas en el intervalo de 15 a 2.6×10^3 Gy se multiplican por un factor mayor que uno (zona en la que $f_{\alpha}(D)$ muestra supralinealidad) y las dosis menores que 15 Gy, en las zonas mas alejadas de la trayectoria de la PCP se multiplican por uno. Entonces, el efecto de la función $f_{\alpha}(D)$ es, por un lado, eliminar contribuciones provenientes de la zona de saturación de la traza, y por el otro, aumentar el peso de aquéllas provenientes de una zona radial intermedia. El valor final de la eficiencia es el resultado de un equilibrio complicado entre las contribuciones del perfil de dosis y la función $f_{\alpha}(D)$ en la ecuación 26.

Se observa un buen acuerdo entre las predicciones de eficiencia del modelo TSTM y los valores experimentales mostrados, tanto para protones como para helios.

Estos resultados dependen del valor seleccionado para la energía de corte T_c utilizada para la generación de electrones secundarios en el programa MC. Recordemos que estos resultados fueron obtenidos con $T_c = 250$ eV, esto es, los electrones secundarios se generaron con energías entre 250 eV y la máxima energía posible transferida por la PCP de acuerdo a su propia energía. Este valor de T_c fue el que produjo el óptimo acuerdo con los datos experimentales tanto de protones como de helios. Si se varía el valor de T_c entre 80 y 300 eV se encuentra que los valores calculados de la eficiencia varían en aproximadamente 20 %. El valor de la eficiencia viene de un balance delicado entre el numerador y el denominador en la expresión 26. Al variar T_c , lo que cambiamos es la energía mínima que tendrán los electrones secundarios, (ver figura 45), los electrones de baja energía no pueden

viajar lejos de la trayectoria de la PCP, por lo que, si se disminuye el valor de T_c aumenta la dosis en la zona de saturación y ésta no contribuye al valor de eficiencia.

IV.4.B “Radio de saturación”

Se puede definir un “radio de saturación” de la traza que limita la región cercana a la trayectoria de la PCP con valores mayores que el valor de dosis alta para el cual $f_d(D)$ tiende a cero. Como se discutió en la sección anterior, la energía depositada dentro de este radio no contribuye a la eficiencia. El valor de este radio cambia como función de la profundidad. De las distribuciones radiales de dosis MC para trazas completas encontramos, por ejemplo, que el radio de saturación para iones de helio de 6.76 MeV va desde 38 a 60 Å como función de la profundidad, mientras que para protones de 2.94 MeV el radio de saturación varía entre 10 y 35 Å (figuras 39 y 40). Se observa en estas figuras que el radio de saturación primero aumenta conforme la PCP penetra en el medio (y pierde energía) y después disminuye al final de su trayectoria. Recordemos que el poder de frenado aumenta conforme la PCP pierde energía, esto conduce a mayor dosis a mayor profundidad y esto a su vez conduce a un mayor radio de saturación. La disminución en el radio de saturación al final de la traza se explica por el hecho de que en la parte final de la trayectoria la PCP genera electrones con energía bajas que no pueden viajar lejos de la traza.

Se comparan ahora algunos valores obtenidos en este trabajo para el radio de saturación con los que predice el modelo químico dado en la sección I.2.D.3 para el radio del carozo. De la figura 40 se observa que para protones de 2 MeV se tiene un radio de saturación de 11 Å ($0.29 \mu\text{g}/\text{cm}^2$) en LiF comparado con un radio de ≈ 7 Å en agua (0.07

$\mu\text{g}/\text{cm}^2$) dado por el modelo químico (tabla I). En la figura 39 se observa que para helios de 4 MeV (1 MeV/u) el radio de saturación es de $45 \text{ \AA}$ ($1.1 \mu\text{g}/\text{cm}^2$) comparado con $\approx 5 \text{ \AA}$ ($0.05 \mu\text{g}/\text{cm}^2$) dado en la tabla 1. De las diferencias observadas se deduce que el modelo TSTM sugiere un radio de saturación cuantitativamente distinto del que propone el modelo químico, pero cualitativamente similar. Es decir, en el modelo químico el carozo es una zona de la traza de PCP en medios líquidos, en donde la disipación de energía ocurre por medio de excitaciones y oscilaciones colectivas de los electrones mientras que en el modelo TSTM para termoluminiscencia en sólidos el carozo o zona de saturación es una zona de la traza con alta dosis donde no se contribuye al valor de la eficiencia TL.

IV.4.C Integral de dosis acumulada

En la sección IV.4.A se hizo referencia a la figura 41 que permite conocer en que zona radial se ha depositado la mayor parte de la dosis así como la región que contribuye de manera más importante al valor de la eficiencia.

IV.4.D Efecto de la elección particular de $f_d(D)$

Por supuesto, la función $f_d(D)$ también influye en las predicciones de eficiencias TL de acuerdo al modelo TSTM. Las figuras 43 y 44 muestran resultados de eficiencia como función de LET para protones y helios, respectivamente, usando distintas funciones $f_d(D)$ dadas en la figura 42.

Se observa que, en realidad, la función $f_d(D)_1$ proveniente de rayos X de 8.1 keV describe optimamente las medidas, lo que sugiere que la selección de esta radiación de prueba es apropiada para estas PCP. Conviene enfatizar que esta $f_d(D)_1$ fue obtenida

siguiendo el mismo protocolo de horneado, lectura y almacenamiento en el uso de los dosímetros que el utilizado en las irradiaciones con PCP y rayos gamma que conducen a la obtención de las medidas de eficiencia.

La función $f_{\alpha}(D)_2$ proporciona un acuerdo satisfactorio para helios, no así para protones. La función $f_{\alpha}(D)_3$ muestra que una función igual a uno eliminando dosis mayores que 5×10^3 en el cálculo de eficiencia proporciona un acuerdo similar, aunque menos bueno, que el dado por la función $f_{\alpha}(D)_1$. La función $f_{\alpha}(D)_4$ igual a uno pero que elimina las contribuciones a la eficiencia a dosis mucho mayores da resultados totalmente fuera de lo esperado. Finalmente, es importante hacer notar cuánto difieren de los valores experimentales las eficiencias encontradas usando la $f_{\alpha}(D)_5$ proveniente de rayos beta de ^3H ($E_{\text{max}} = 18 \text{ keV}$). En este caso, se tiene $f_{\alpha}(D)_5$ mayor que uno en una zona muy amplia de dosis, lo que contribuye de manera exagerada al valor de la eficiencia.

V CONCLUSIONES

En este trabajo se describen las interacciones de PCP y sus electrones secundarios en LiF, considerando su naturaleza de estado sólido. Se desarrolló un programa de simulación Monte Carlo detallado y completo de un proceso físico difícil de medir. Este programa describe la pérdida de energía de las PCP y de sus electrones secundarios al penetrar el medio y permite evaluar el depósito de energía en LiF.

Se han obtenido distribuciones radiales de dosis de PCP en LiF cuya confiabilidad se demuestra mediante diversas pruebas en las distintas etapas del procedimiento de simulación Monte Carlo, en su reproducibilidad y, finalmente, en su eficacia al usarse dentro de los modelos TST y TSTM. Estas distribuciones radiales de dosis son necesarias para la evaluación de eficiencias TL relativas y pueden resultar esenciales para adquirir un entendimiento más profundo de los procesos inducidos por PCP en LiF.

Se desarrolló software que implementa los métodos propuestos por los modelos TST y TSTM, y que, usando los perfiles de dosis MC obtenidos en este trabajo, permite obtener predicciones de eficiencia TL relativa de protones y helios de distinto LET respecto de radiación gamma.

Se encontró un buen acuerdo entre las medidas experimentales y las predicciones de eficiencia TL relativas, tanto usando el modelo TST como el TSTM que suponen que la eficiencia TL depende, principalmente, de la etapa inicial de absorción de la radiación.

Se discutió la importancia del valor de la energía de corte utilizada en el procedimiento MC y su efecto en los resultados.

Respecto del modelo TST se identificó la importancia del tamaño del volumen sensible al minimizar el efecto de la zona de saturación en los valores de eficiencia.

Se analizó, con detalle, el modelo TSTM discutiendo la zona de saturación sugerida por el modelo, las regiones de depósito de energía que contribuyen al valor de la eficiencia y el efecto de la elección de la radiación de prueba en las predicciones de valores de eficiencias termoluminiscentes relativas.

El método desarrollado en este trabajo para calcular distribuciones radiales de dosis en LiF se describe en (Ávila, O. *et al.*, 1996). Los resultados totales y finales que incluyen perfiles de dosis, cálculos TST y TSTM de eficiencias, análisis del modelo TSTM, radio de saturación, importancia de la energía de corte, etc. se publicaron en (Ávila, O. *et al.*, 1999).

Es evidente que es necesario contar con medidas de eficiencia confiables como función de LET, así como llevar a cabo investigaciones que involucren tanto la etapa de depósito como la etapa de calentamiento, con el fin de entender mejor la termoluminiscencia inducida por partículas cargadas pesadas.

LITERATURA CITADA

- Anthony, J.M. and Lanford, W.A., 1982, Stopping power and effective charge of heavy ions in solids, *Phys.Rev.* A25, 1868 -1871
- Arfken, G., 1981, *Métodos Matemáticos para Fisicos*, Diana, México.
- Ashley, J.C., 1982, Energy losses on inelastic mean free path of low-energy electrons in polyethylene. *Radiat. Res.* 90, 433-436
- Attix, F.H., 1986, *Introduction to Radiological Physics and Radiation Dosimetry*, (John Wiley & Sons, New York)
- Ávila O., Brandan, M.E., Salvat, F. and Fernández-Varea, J.M., 1996, *Radiat. Prot. Dosim.*, 65, 1-4, 37-40
- Ávila O., Gamboa-deBuen, I. and Brandan, 1999, M.E., Study of the energy deposition in LiF by heavy charged particle irradiation and its relation to the thermoluminescent efficiency of the material, *J. Phys. D : Appl. Phys.* 32, 1175-1181
- Avilés, P., Gamboa-deBuen, I., Rodríguez-Villafuerte M., Buenfil, A.E., Ruiz C.G., López, K., and Brandan M.E., 1998, Thermoluminescence response of TLD-100 to low energy protons, in : *Proceedings of the II Mexican Symposium on Medical Physics*, Mexico City, AIP, eds. M.E. Brandan, G. Herrera-Corral and R. Ortega-Martínez
- Avilés, P. , 1998, *Tesis de Maestría, Respuesta termoluminiscente de LiF :Mg,Ti irradiado con protones de 1.5 y 3 MeV*, Universidad Nacional Autónoma de México

- Barkas, W.H., 1963, Nuclear Research Emulsions : Techniques and Theory (Academic Press, New York)
- Bartlett, D.T. y Edwards, A.A., 1980, Investigation of the dependence of lyoluminescence response on radiation quality and its relationship with the gamma dose response function, Nucl. Instr. and Meth., 175, 126-128
- Berger, M.J., 1963, Monte Carlo calculation of the penetration and diffusion of fast charged particles. Methods.Comp.Phys. 1, 135-215
- Berger, M.J., 1964, Studies in the penetration of charged particles in matter, NAS-NRC Report 1133, National Academy of Sciences, Washington, D.C., 205-211
- Berger M.J., 1971, Energy deposition by low energy electrons : delta-rays effects in track structure and microdosimetric event-size spectra, Proceedings of the Thirth Symposium on Microdosimetry, Stresa (H.G. Ebert, Ed.), EUR 4810, Vol. 1, 157-177
- Bethe, H.A., 1930, Zur theorie des durchgangs schneller korpuskularstrahlen durch materie Ann. Phys. 5, Leipzig, 325-400
- Bethe, H.A., 1953, Molière's theory of multiple scattering, Phys.Rev. 89, 5, 1256-1266
- Biersack J.P. and Haggmark L.G., 1980, A Monte Carlo computer program for the transport of energetic ions in amorphous targets, Nucl. Instr. and Meth., 174, 257-269
- Biersack, J.P. and Ziegler, J.F., 1989, TRIM versión 92.12
- Bohr,N., 1913, Phil.Mag., 25,6,10

- Bohr, N., 1948, *Mat.Fys.Medd.Dan.Vid.Selsk.* 18, 8
- Bromberg, J.P., 1970, Absolute differential cross sections of elastically scattered electrons.
 III. Co and N₂ at 500, 400 and 300 eV, *J.Chem.Phys.*, 52, 1243-1247
- Butts J.J., Katz, R., 1967, Theory of RBE for heavy ion bombardment of dry enzymes and viruses, *Radiat.Res.*, 30, 855-871
- Cameron J.R., Suntharalingam N. and Kenney G.N., 1968, *Thermoluminescent Dosimetry* (University of Wisconsin Press).
- Chatterjee, A., Maccabee, H.D. and Tobias, C.A., 1973, Radial cutoff LET and radial cutoff dose calculations for heavy charged particles in water, *Radiat.Res.*, 54, 479-494
- Chatterjee, A. and Schaefer H.J., 1976, Microdosimetric structure of heavy ion tracks in tissue. *Radiat. Environ. Biophys.* 13, 215-227
- Chen, R., 1969, On the calculation of activation energies and frequency factors from glow curves, *J.Appl.Phys.*, 40, 2, 570-585
- Chen R. and Bowman, S.G.E., 1979, Superlinear growth of TL due to competition during irradiation, *PACT*, 3, 325-332
- Chen R., McKeever, S.W.S. and Durrani, S.A., 1981, Solution of the kinetic equations governing trap filling. Consequences concerning dose dependence and dose rate effects, *Phys.Rev.B.*, 24, 4931-4937
- Chou, P., and Ghoniem, N.M., 1987, Applications of the Monte Carlo code TRIPOS to surface and bulk ion transport problems, *Nucl.Instr.and Meth. In Phys.Res.* B28, 175-184

- Cole, A., 1969, Absorption of 20 eV to 50 000 eV electron beams in air and plastic,
Radiat.Res., 38, 7-33
- Evans, R.D., 1955, *The Atomic Nucleus*, (McGraw-Hill Book Company, Inc.)
- Fäin, J., Monnin, M. and Montret, M., 1973, Energy density deposited by a heavy ion
around its path, *Proceedings 4th Symposium on Microdosimetry*, 169-187
- Fäin, J., Monnin, M. and Montret, M., 1974, Spatial energy distribution around heavy-
ion path, *Radiat.Res.*, 57, 379-389
- Fäin, J., Montret, M., and Sahraoui, L., 1980, Thermoluminescent response of $\text{CaF}_2:\text{Dy}$
and $\text{LiF}:\text{Mg,Ti}$ under heavy ion bombardment, *Nucl.Instr. and Meth.* 175,
37-39
- Fäin, J., Sanzelle, S., Miallier, D., Montret, M. and Pilleyre, Th., 1994, A TL model based
on deep traps competition, *Radiat.Meas.*, 23, 287-291
- Fano, U., 1963, Penetration of protons, alpha particles and mesons, *Ann.Rev.Nucl.*
Sci., 13, 1-66
- Fernández-Varea, J.M., Mayol, R., Liljequist, D. and Salvat, F., 1993, Inelastic scattering of
electrons in solids from a generalized oscillator strength model using optical and
photoelectric data, *J.Phys: Condensed Matter*, 5, 3593-3610
- Fernández-Varea J.M., Liljequist D. and Salvat F., 1994, Sampling procedures using optical-
data and partial wave cross sections in a Monte carlo code for simulating
kilovolt electron and positron transport in solids. (University of Stockholm,
Department of physics) USIP Report 94-03, 1-35

- Fernández-Varea J.M., Liljequist D., Csillag, S., Rätty, R., and Salvat F., 1996, Monte Carlo simulation of 0.1-100 keV electron and positron transport in solids using optical data and partial wave methods, Nucl. Instr. and Meth. B108, 35-50
- Firsov, O.B., 1959, A qualitative interpretation of the mean electron excitation energy in atomic collisions, Zh.Ekzp.Teor.Fys. 36, 1517-1521 [Sov.Phys. JETP 36, 1076-1080]
- Fitting, H.J. and Reinhardt, J., 1985, Monte Carlo simulation of keV-electron scattering in solid targets. Phys.Status.Solidi a88, 245-259
- Gamboa-deBuen, I., Buenfil A.E., Rodríguez-Villafuerte, M., Ruiz C.G., Zárate-Morales, A., and Brandan, M.E., 1996, Supralinearity in the response of TLD-100 to 5.3 MeV alpha particles, Radiat.Prot.Dosim., 65, 13-16
- Gamboa-deBuen, I., Buenfil, A.E., Ruiz, C.G., Rodríguez-Villafuerte M., Flores, A., and Brandan, M.E., 1998a, Thermoluminescent response and relative efficiency of TLD-100 exposed to low energy X-rays, Phys.Med.Biol., 43, 2073-2083
- Gamboa-deBuen, I., Ruiz, C.G., Oliver, A., López K., and Brandan M.E., 1998b, Measurement of the thermoluminescent response (supralinearity and efficiency) of LiF :Mg,Ti exposed to 0.7 MeV protons, Nucl.Instrum.Meth. in Phys. Res. B134, 136-148
- García J.D., 1969, Ejected electron distributions, Phys.Rev., 177, 1, 223-229
- Garlick G.F.J. and Gibson A.F., 1948, The electron trap mechanism of luminescence in sulphide and silicate phosphors, Proc.Roy.Soc., 60, 574-590

- Geiss O.B., Krämer M. and Kraft, G., 1998, Efficiency of thermoluminescent detectors to heavy charged particles. Nucl.Instr. and Meth. Phys.Res. B142, 592-598
- Grosswendt, B. and Waibel, E., 1978, Transport of low energy electrons in nitrogen and air. Nucl.Instr.and Meth. 155, 145-156
- Gryzinski, M., 1965, Classical theory of atomic collisions. I. Theory of inelastic collisions. Phys.Rev. 138 (2A), 336-358
- Halperin A. and Braner A.A., 1960, Evaluation of thermal activation energies from glow curves, Phys.Rev., 117, 2, 408-415
- Hansen, J.W. and Olsen, K.J., 1984, Experimental and calculated response of a radiochromic dye film dosimeter to high LET radiations, Radiat. Res., 97, 1-15
- Hansen, J.W., 1984, Experimental investigation of the suitability of the track structure theory in describing the relative effectiveness of high-LET radiation of physical radiation detectors, PhD thesis, Riso National Laboratory, Dinamarca
- Henke, B.L., Lee, P., Tanaka, T.J., Shimabukuro, R.L. and Fujikawa, B.K., 1982, Low-energy x-ray interaction coefficients : Photoabsorption, scattering and reflection. At. Nucl.Data Tables 27, 1-144
- Horowitz, Y.S., 1981, The microdosimetric and theoretical basis of thermoluminescence and applications to dosimetry, Phys.Med.Biol., 26, 765-824
- Horowitz, Y.,S., 1984, Thermoluminescence and Thermoluminscent dosimetry, Vol I, II y III, Boca Raton, CRC press.

- Horowitz, Y.S. and Rosenkrantz, M., 1990, Track interaction theory for heavy charged particle TL supralinearity, *Radiat.Prot.Dosim.*31, 71-76
- ICRU , 1970, ICRU Report 16
- Inokuti, M., 1971, Inelastic collisions of fast charged particles with atoms and molecules_ The Bethe theory revisited, *Rev.Mod.Phys.*, 43, 3, 297-347
- James, F., 1980, Monte Carlo theory and practice, *Rep.Prog.Phys.*, 43, 1146-1189
- Kalef-Ezra, J., and Horowitz, Y., S., 1982, Heavy charged particle thermoluminescent dosimetry : Track structure theory and experiments, *Int.J.Appl.Radiat.Isot.*, 33, 1085-1100
- Katz, R., 1978, Track structure theory in radiobiology and in radiation detection, *Nucl.Track,Det.*, 2, 1, 1-28
- Katz, R. and Huang, G-R., 1989, Track “core” effects in heavy ion radiolysis, *Radiat. Phys.Chem.*, Vol 33, No 4, 345-349
- Krämer, M., y Kraft, G., 1993, Heavy ion track structure calculations, *Radiat.Eff. Defects.Solids.*, 126, 49-52
- Kraft, G. and Krämer M., 1993, LET and track structure, GSI report GSI-93-06
- Krämer,M. y Kraft,G., 1994, Calculations of heavy-ion track structure, *Radiat. Environ. Biophys.*,33, 91-109
- Krämer, M., 1995, Calculations of heavy-ion track structure, *Nucl.Instr.Meth.Phys.Res.*, B105, 14-20

- Larsson, L. and Katz, R., 1976, Supralinearity of thermoluminescent dosimeters, Nucl. Instr. Meth. Phys. Res., 138, 631-636
- Lindhard, J., 1954, K. Dan. Vidensk. Selsk. Mat.-Fys. Medd. 28, 8
- Lindhard, J. and Scharff M., 1961, Energy dissipation by ions in the keV region, Phys. Rev., 124, 128-130
- Magee, J.L. and Chatterjee A., 1984, Track reactions of radiation chemistry in : Kinetics of non-homogeneous processes, Ed. G.R. Freeman, John Wiley and Sons, 171-214
- Mahesh, K.Y.D.R., 1985, Techniques of radiation dosimetry, Wiley Eastern Limited, India
- Martin, R.C., y Ghoniem, N.M., 1987, Monte Carlo simulation of coupled ion-electron transport in semiconductors Phys. Status. Solid., 104, 743-754
- McKeever, S.W.S., 1988, Thermoluminescence of Solids, Cambridge University Press
- McKeever, S.W.S., 1995, Moscovitch, M. and Townsend, P.D., 1995, Fluorides, Thermoluminescence dosimetry materials: properties and uses (Nuclear Technology Publishing) 80-92
- Mische, E.F. and McKeever S.W.S., 1989, Mechanisms of supralinearity in lithium fluoride thermoluminescence doseimeters, Radiat. Prot. Dosim., 29, 159-175
- Montenegro, E.C., de Pinho, A.G. and Baptista, G.B., 1981, The K-shell excitation function in the plane-wave Born approximation : transition to the continuum and discrete (H atom) states, J. Phys. B: At. Mol. Phys., 14, 1607-1611

- Montenegro, E.C., Cruz, S.A. and Vargas-Aburto, C., 1982, A universal equation for the electronic stopping of ions in solids, *Phys.Lett.* 92A, 195-202
- Montret, M., 1980, Distribution spatiale de l'énergie déposée par des ions énergétiques dans les milieux condensés. *Etude par thermoluminescence*. Thèse, Université de Clermont-Ferrand II, France, sin publicar.
- Moscovitch, M. and Horowitz, Y.S., 1986, Microdosimetric track interaction model applied to alpha particle induced supralinearity and linearity in LiF:Mg,Ti, *Radiat.Prot.Dosim.*, 17, 487-491
- Moscovitch, M. and Horowitz, Y.S., 1988, Microdosimetric track interaction model applied to alpha particle induced supralinearity and linearity in LiF:Mg,Ti, *J.Phys.D:Appl.Phys.*, 21, 804-814
- Mott, N.F., 1929, The scattering of fast electrons by atomic nuclei, *Proc.Roy.Soc.*, (London) A124, 425-442
- Nariyama, N., Tanaka,S., Yoshizawa, M., Hirayama, H., Ban, S., Nakashima, H., Namito, Y. and Nakane, Y., 1993, Responses of LiF TLDs to 10-40 keV monoenergetic photons from synchrotron radiation, *Radiat.Prot.Dosim.*, 49, 451-455
- Opal, J.B., Beaty, E.C., Peterson W.K., 1972, Tables of secondary-electron -production cross sections . *Atomic Data* 4, 209-253
- Palik, E.D. and Hunter, W.R., 1985, Handbook of optical constants in solids, De. E.D. Palik (Academic Press, New York), 675-693

- Paretzke H.G., 1973, Comparison of track structure calculations with experimental results, in : Proceedings of the fourth symposium on microdosimetry, eds. J. Booz, H.G. Ebert, R. Eickel and A. Walker, 141-165
- Paretzke, H.G., and Berger, M.J., 1978, Stopping power and energy degradation for electrons in water vapor. In : Booz, J. And Ebert H.G., (Eds) Proceedings of the 6th Symposium on Microdosimetry. Harwood, Brussels, 749-758
- Paretzke, H.G., Goodhead, D.T., Kaplan, I.G., and Terrisol M., 1995, in : Atomic and molecular data for radiotherapy (IAEA, Vienna), Ch 9
- Penn, D.R., 1987, Electron mean free path calculation using a model dielectric function, Phys.Rev., B35, 482-486
- Press W.H. and Teukolski, A., 1992, Computers in Physics 6, 522
- Randall J.T. and Wilkins M.H.F., 1945, The phosphorescence of various solids, Proc.Roy.Soc. London Ser. A, 184, 347-364
- Rao-Sahib T.S. and Wittry, D.B., 1974, X-ray continuum from thick elemental targets for 10-50 keV electrons, J. Appl.Phys., 45, 5060-5068
- Rodríguez-Villafuerte, M., Buenfil, A.E., Gamboa-deBuen, I., Ruiz-Trejo, C., Brandan, M.E., Yossian, D., Satinger, D., Horowitz, Y.S., Study of the TL response of LiF :Mg,Ti to 3 and 7.5 MeV He ions : measurements and interpretation in terms of the track interaction model, aceptado en Nucl. Instr. and Meth. Phys.Res. B, septiembre 1999

- Rosenkrantz, M. and Horowitz, Y.S., 1993, Alpha particle induced TL supralinearity in TLD-100: Dependence on vector properties of the radiation field, Radiat.Prot.Dosim. 47, 27-30
- Rubinstein, R. Y., 1981, Simulation and the Monte Carlo method (Wiley, New York)
- Salvat, F. and Mayol R., 1993, Elastic scattering of electrons and positrons by atoms. Schrödinger and Dirac partial wave analysis, Comput.Phys.Commun. 74, 358-374
- Schmidt, P., Fellingner, J. and Hubner, K., 1990, Experimental determination of the TL response for protons and deuterons in various detector materials, Radiat. Prot. Dosim. 33, 171-173
- Shimizu R. and Ze-Jun D., 1992, Monte Carlo modelling of electron-solid interactions, Rep.Prog.Phys., 487- 531
- Schutten J., deHeer, F.J., Moustafa, H.R., Boerboom, A.J.H., Kistemaker, J., 1966, Gross and partial ionization cross sections for electrons on water vapor in the energy range 0.1-20 keV., J.Chem.Phys., 44(10) : 3924-3928
- Toburen , L.H., 1971, Distributions in energy and angle of electrons ejected from molecular nitrogen by 0.3 to 1.7 MeV protons, Phys.Rev., A3, 216-228
- Toburen L.H. and Wilson W.E., 1977, Energy and angular distributions of electrons ejected from water vapor by 0.3-1.5 MeV protons, J.Chem.Phys. 66(11) , 5202-5213

- Toburen L.H., Braby L.A., Metting, N.F., Kraft, G., Scholz, M., Kraske, F., Schmidt-Böcking, H., Dörner, R., Seip, R., 1990, Radial distributions of energy deposited along charged particle tracks, *Radiat. Prot. Dosim.*, 31
- Turner, J.E., 1995, *Atoms, Radiation and Radiation Protection*, Second Edition, (John Wiley and Sons, New York)
- Varma, M.N., Paretzke, H.G., Baum, J. W., Lyman, J.T. and Howard, J., 1976, Dose as a function of radial distance from a 930 MeV ^4He ion beam. In: Booz J., Ebert, H.G., Smith, B.G.R., (Eds) *Proceedings of the 5th Symposium on Microdosimetry*. Luxembourg, Commission of the European Communities, 75-79
- Varma, M.N., Baum, J.W., Kuehner, A.V., 1977, Radial Dose, LET, and W for ^{16}O ions in N_2 and tissue-equivalent gases. *Radiat. Res.* 70, 511-518
- Varma, M.N., Baum, J.W., Kuehner, A.V., 1980, Stopping power and radial dose distribution for 42 MeV bromine ions, *Phys. Med. Biol.*, 25/4: 651-656
- Varma, M.N. and Baum, J.W., 1980, Energy deposition in nanometer regions by 377 MeV/nucleon ^{20}Ne ions, *Radiat. Res.* 81, 355-363
- Waligórski, M.P.R. and Katz, R., 1980a, Supralinearity of peak 5 and peak 6 in TLD-700, *Nucl. Instr. and Meth.*, 172, 463-470
- Waligórski, M.P.R. and Katz, R., 1980b, Supralinearity of peak 5 and peak 6 in TLD-700, *Nucl. Instr. Meth.*, 175, 48-52

- Waligorski, M.P.R., Kim Sun Loh and Katz, R., 1987, Inactivation of dry enzymes and viruses by energetic heavy ions, *Int. J. Radiat. Appl. Instrum., Part C: Radiat. Phys. Chem.*, 30, 201-206
- Wilson, W.E. and Paretezke, H.G., 1980, Calculation of ionization frequency distributions in small sites, *Radiat. Res.*, 81, 326-335
- Wingate, C. and Baum, J.W., 1976, Measured radial distributions of dose and LET for alpha and proton beams in hydrogen and tissue equivalent gas, *Radiat. Res.*, 65, 1-19
- Ziegler, J.F., 1980, Handbook of stopping cross sections for energetic ions in all elements, (Pergamon Press, New York)
- Ziegler, J., Biersack, J.P. and Littmark, U., 1985, The stopping and range of ions in solids, vol 1 (Pergamon Press, New York)

```

C      Programa PCPE
C      Este programa acopla transporte de iones con transporte
C      de electrones en LiF
C      Olga Avila

      implicit integer*4(i-n)
      implicit real*8(a-h,o-z)
      real*8 rnd

C
C      DIMENSION ALMACEN(50000,6)

      dimension c(4,5)
      dimension asname(5)
      dimension tcut(5),ge(5),xk(5),a12(5),am(5)
      dimension tcutcm(5),egcm(5)
      dimension cn(4,5)
      dimension gamma(5),ip(5)
      dimension eee(5),ea(5),eb(5),ec(5)
      dimension entpt(5),estpt(5)
      common/store/ iit(12:13,1000,1), record(12:13,1000,7)
      common/final/erre(5),irre(5),irtr(5),irab(5)
      dimension reee(5,5),ra12(5,5)
      dimension rc(4,5,5)
      dimension oi(5),cst(5),cbb(5)
      common/elecst/ oii(5,5),csti(5,5),cbbi(5,5)
      common/rcoil/rcn(4,5,5),rxk(5,5),ram(5,5),xm2(5),z2(5),
&          rgamma(5,5),tsig(5),sgm(5),sm(4),cm(4),
&          rea(5,5),reb(5,5),rec(5,5),xn(5),sbe(5),wd,be
      common/plot/ x1(60),y1(60),y2(60),y3(60),y4(60),y5(60),y6(60),
&          lbx(4),lby(4),title1(5),title2(5),lbb(4),lcy(4),
&          l1(4),l2(4),l3(4),l4(4),l5(4)
      common/slice/zbmin(6),zbmax(6),estpbn(6),slwide(6),sll(6)

co   parameter(nmp=500)
      dimension xe(nmp),dimxe(nmp)
co   common/csamp/xl(nmp),p(nmp),a(nmp),ntab

co   common/screen/eli(50),asli(50),elf(50),asf(50)

co   dimension zgmin(6),zgmax(6)
      common/rseed/rnd
      real*8 ranf
      real*4 tstart,tend
      real mw,nv

C  ENTRA LO DE SE -----
co
co   agrego arreglos para graf
co

      dimension nbil(6)
      dimension bing(101),vbing(101),rd(101)
      dimension binen(6,101),vbinen(6,101),volrod(101),dosis(6,101)
      dimension rad(101)

      totdis=0.00 !SUMATORIA ACUMULATIVA
      transd=0.0 !SUMATORIA ACUMULATIVA
      timtot=0.0

      disset=0.0
      transs=0.0

```

```

nhien=0
jflag=1
zem=0.0
trod=25.e-8
co .....
co constantes para recorrido elastico
co por separado Li y F
co .....
pi=4.*atan(1.)
conlli=4.*8.854e-12/(3.*1.6022e-19)
conlf=4.*8.854e-12/(9.*1.6022e-19)
con2=4.*pi*25.94e4/(2.635*6.022e23)

kllk=0

```

```

C FIN SE DATOS-----
open(5,file='a.in',status='old')
open(6,file='a.out',status='unknown')
open(1,file='li.as',status='old')
open(12,file='f.as',status='old')
open(3,file='ima.dat',status='old')
open(4,file='a.graf',status='unknown')
open(18,file='a.dos',status='unknown')
open(14,file='integ.out',status='unknown')

pi=4.0*atan(1.0)
nn=12
mm=13
one=11.0
tz=0.0
tdl=0.0
rhoz=0.0
rhotl=0.0
dis=0.0
iab=0
itr=0
ire=0
ere=0.0
dlsum=0.0
numdl=0
cm(1)=1.0
sm(1)=1.0
cm(2)=0.5
sm(2)=2.0
cm(3)=1./3.
sm(3)=3.
cm(4)=0.0
sm(4)=1.0
jflag=0
entot=0.0
estpbn(1)=0.0
estpbn(2)=0.0
estpbn(3)=0.0
estpbn(4)=0.0
estpbn(5)=0.0
nh=1

```

```

CO
read(5,*)nm
read(5,*)z1,(z2(i),i=1,nm),xm1,(xm2(i),i=1,nm)
read(5,*) (xn(i),i=1,nm),e0,ed,be

```

```

      read(5,*) (sbe(i),i=1,nm),nhistorias,zth
      read(5,9998) (asname(i),i=1,nm)
9998  format(a)
      read(5,*) wd, alpha, efi, fact, rnd
      read(5,*) cutoff, xmin, xmax, ymin, ymax, zmin, zmax, semin
      read(5,*) wtmin, wtzmin, aklnum
      read(5,*) zbmin1, zbmin2, zbmin3, zbmin4, zbmin5, zbmin6
      read(5,*) (slwide(i),i=1,6)

```

C TOMA VALORES PARA SE

```

co
co      lee parametros as para li y f
co      dispersion elastica de los se
co
      do 111 i=1,50
      read(1,*)ee,asi
      eli(i)=log(ee)
      asli(i)=log(asi)
111  continue
      do 113 j=1,50
      read(12,*)ee,asi
      elf(j)=log(ee)
      asf(j)=log(asi)
113  continue
C
co      lee energia,im(-1/eps) para perdidas
co      dielectricas e inicializa sampl0
co
      read(3,*)nxe
      do 115 i=1,nxe
      read(3,*)xe(i),dimxe(i)
115  continue

      call sampl0(xe,dimxe,nxe)

```

amk=1837.*xm1

C

```

      if ( rnd .eq. 0.0 )rnd=1
      fact=fact*e0
      ed2=2*ed
      write(6,8805)e0,alpha,ed,zth,nhistorias,nm,z1,xm1,
&(asname(i),i,z2(i),i,xm2(i),i,xn(i),i=1,nm),cutoff,rnd,
&semin,wtmin,wtzmin,zbmin1,zbmin2,zbmin3,zbmin4,zbmin5,zbmin6

```

co

copara mas de un material poner en el format nm antes de parentesis

co

```

8805  format(' e0=',e13.6,/, ' alpha=',f6.3,/, ' ed=',f7.3,/, ' zth=',
&e13.6,/, ' number of histories studied',i5,/, ' number of species in
& the medium',i5,/, ' z1=',f7.3,/, ' xm1=',f7.3,/,2(1x,a8,/, ' z2(',
&i2,')=',f7.3,/, ' xm2(',i2,')=',f10.5,/, ' xn(',i2,')=',f10.5,/)
&,/, 'cutoff =',f9.2,/, ' seed =',f7.2,/, ' se min en =',f8.2,/,
&' min se weight =',f6.3,/, ' discrete en cutoff term =',f6.3,/,
&'slices start at (microns):',/,6e13.2,/)
      zbmin(1)=zbmin1
      zbmin(2)=zbmin2
      zbmin(3)=zbmin3
      zbmin(4)=zbmin4
      zbmin(5)=zbmin5
      zbmin(6)=zbmin6

```



```

do 32 nml=1,6
  zbmax(nml)=zbmin(nml)+slwide(nml)
  zgmin(nml)=zbmin(nml)-5000.
32  zgmax(nml)=zbmax(nml)+5000.
  xnn=0.0
do 100 i=1,nm
  if ( z2(i) .lt. 13.0 ) oi(i)=12.0+7.0/z2(i)
  if ( z2(i) .ge. 13.0 ) oi(i)=9.76+58.5/z2(i)**1.19
  cst(i)=5.0
  if ( z1 .lt. 3.0 ) cst(i)=100*z1/z2(i)
  cbb(i)=2*1837.*pi*xm1*z1**2*z2(i)*14.4**2*xn(i)
100  xnn=xnn+xn(i)
  piat=1/xnn**(0.333333)
do 110 i=1,nm
110  sgm(i)=1/piat
do 200 i=1,nm
  am(i)=xm1/xm2(i)
  a12(i)=0.4683/(z1**(2./3.)+z2(i)**(2./3.))**(0.5)
  gamma(i)=4*am(i)/(1.+am(i))**2
  c(1,i)=0.5*1.5708*a12(i)**2*am(i)*(z1*z2(i)*28.8/a12(i))**2
  c(2,i)=0.327*1.5708*a12(i)**2*am(i)**(0.5)*(z1*z2(i)*28.8/a12(i))
  c(3,i)=1.309*1.5708*a12(i)**2*am(i)**(cm(3))
  & * (z1*z2(i)*28.8/a12(i))**(2./3.)
  c(4,i)=24*1.5708*.209**2
do 210 k=1,4
  if ( k .ge. 4 ) c(k,i)=c(k,i)
  if ( k .lt. 4 ) c(k,i)=c(k,i)*sm(k)
210  cn(k,i)=c(k,i)*xn(i)
  xk(i)=xn(i)*1.212*z2(i)*z1**(7./6.)/xm1**0.5/
  & (z1**.66666+z2(i)**0.66666)**1.5
  write(6,8810) (c(kk,i),kk=1,4),a12(i),am(i),xk(i)
8810  format(4e14.6,/,7x,3e14.5)
  eee(i)=z1*z2(i)*14.4/a12(i)/(1+am(i))
  ea(i)=0.0234*(a12(i)/.209)**3*((xm1+xm2(i))/xm2(i))**2*eee(i)
  eb(i)=0.0369*eee(i)
  ec(i)=5.0*eee(i)
  write(6,8815)i,ea(i),eb(i),ec(i)
8815  format(' i=',i3,3x,' ea=',e13.6,' eb=',e13.6,' ec=',e13.6)
do 200 j=1,nm
  ram(j,i)=xm2(j)/xm2(i)
  ra12(j,i)=0.4683/(z2(j)**(2./3.)+z2(i)**(2./3.))**(0.5)
  rgamma(j,i)=4*ram(j,i)/(1.+ram(j,i))**2
  rc(1,j,i)=0.5*1.5708*ra12(j,i)**2*ram(j,i)
  & * (z2(j)*z2(i)*28.8/ra12(j,i))**2
  rc(2,j,i)=0.327*1.5708*ra12(j,i)**2*ram(j,i)**(0.5)
  & * (z2(j)*z2(i)*28.8/ra12(j,i))
  rc(3,j,i)=1.309*1.5708*ra12(j,i)**2*ram(j,i)**(cm(3))
  & * (z2(j)*z2(i)*28.8/ra12(j,i))**(2./3.)
  rc(4,j,i)=24*1.5708*.209**2
do 220 k=1,4
  if ( k .ge. 4 ) rc(k,j,i)=rc(k,j,i)
  if ( k .lt. 4 ) rc(k,j,i)=rc(k,j,i)*sm(k)
220  rcn(k,j,i)=rc(k,j,i)*xn(i)
  rxk(j,i)=xn(i)*1.212*z2(i)*z2(j)**(7./6.)/xm2(j)**0.5/
  & (z2(j)**.66666+z2(i)**0.66666)**1.5
  reee(j,i)=z2(j)*z2(i)*14.4/ra12(j,i)/(1+ram(j,i))
  rea(j,i)=0.0234*(ra12(j,i)/.209)**3*((xm2(j)+xm2(i))/xm2(i))
  & **2*reee(j,i)
  reb(j,i)=0.0369*reee(j,i)
  rec(j,i)=5.0*reee(j,i)

```

```

      write(6,8820)j,i,rea(j,i),reb(j,i),rec(j,i)
8820  format(' j=',i3,3x,'i=',i3,3x,' rea=',e13.5,' reb=',e13.5,' rec=',
&e13.5,/,/, ' se#',6x,'en',9x,'wt',9x,'x',10x,'y',10x,'z')
      if ( z2(i) .lt. 13.0 ) oii(j,i)=12.0+7.0/z2(i)
      if ( z2(i) .ge. 13.0 ) oii(j,i)=9.76+58.5/z2(i)**1.19
      csti(j,i)=5.0
      if ( z2(j) .lt. 3.0 ) csti(j,i)=100.*z2(j)/z2(i)
200  cbbi(j,i)=2*1837.*pi*xm2(j)*z2(j)**2*z2(i)*14.4**2*xn(i)
      ccos=4.0*atan(1.0)/180.
      thetai=alpha*ccos
      iri=nm+1
      kl=0
      estbbz=0.
      continz=0.
      totsec=0.
      ndl=0
      do 4433 in=1,6
      do 4433 jn=1,101
4433  binen(in,jn)=0.0d0
C

```

C ENTRA AQUI EL LOOP PRINCIPAL

```

      DO 1001 KK=1,NHISTORIAS
      kl11=0
      INDICE=1
C
      do 999 i=1,nh
      irec=0
      esmall=1.0
      ttdl=0.0
      dl=0.0
      phii=0.0
      ai=sin(thetai)*cos(phii)
      bi=sin(thetai)*sin(phii)
      gi=cos(thetai)
      xx=0.
      y=0.
      z=0.
      ao=ai
      bo=bi
      go=gi
      tint=0.0
      if ( e0 .le. 5. ) go to 640
      e=e0
1000  do 300 k=1,nm
          if ( e .le. ea(k) ) go to 310
          if ( e .le. eb(k) ) go to 320
          if ( e .le. ec(k) ) go to 330
          ip(k)=1
          go to 340
310  ip(k)=4
          go to 340
320  ip(k)=3
          go to 340
330  ip(k)=2
340  ge(k)=gamma(k)*e
          if ( ip(k) .eq. 4 ) cut cut(k)=ge(k)/exp(sgm(k)/cn(ip(k),k))
          if ( ip(k) .le. 3 ) cut cut(k)=1./ (sgm(k)/cn(ip(k),k)*e**cm(ip(k)
& )+1./ge(k)**cm(ip(k)))**sm(ip(k))

```

```

      gg=gamma(k)*fact
      if ( ge(k) .lt. gg ) go to 350
      if ( gg .gt. tcut(k) ) tcut(k)=gg
350    if ( z .gt. 15. ) go to 360
      if ( tcut(k) .gt. sbe(k) ) tcut(k)=sbe(k)
360    if ( ip(k) .ne. 4 ) tcutcm(k)=1./tcut(k)**cm(ip(k))
      egcm(k)=1./ge(k)**cm(ip(k))
      if ( ip(k) .ge. 4 ) tsig(k)=cn(ip(k),k)*log(ge(k)/tcut(k))
300    if ( ip(k) .lt. 4 ) tsig(k)=cn(ip(k),k)/
&      e**cm(ip(k))*(tcutcm(k)-egcm(k))
      ttsig=0.0
      do 370 k=1,nm
370        ttsig=ttsig+tsig(k)
      pnrt=ranf(0.0d0 )
      prt=0.0
      do 380 k=1,nm
        prt=prt+tsig(k)/ttsig
        ir=k
380        if (prt .ge. pnrt) go to 390
390      rn2=ranf(0.0d0 )
      if ( ip(ir) .lt. 4 ) tint=1/(tcutcm(ir)*(1.-rn2)+
&      rn2*egcm(ir))**sm(ip(ir))
      if ( ip(ir) .ge. 4 ) tint=ge(ir)**rn2*tcut(ir)**(1-rn2)
      if ( tint .lt. ed ) go to 395
      if ( tint .lt. ed2 ) dis=dis+1
      if ( tint .ge. ed2 ) dis=dis+tint/ed2*0.8
395    thetar=2*asin((tint/ge(ir))**(0.5))
      tanX=sin(thetar)/(am(ir)+cos(thetar))
      sec2=1.+tanX*tanX
      cost=1/sqrt(sec2)
      sint=tanX*cost
      if ( tanX .lt. 0.0 ) cost=-cost
      rn0=ranf(0.0d0 )
      phi=6.28318*rn0
co    .....
      u=ai
      v=bi
      w=gi
      cdt=cost
      df=phi
      call direct(cdt,df,u,v,w)
      ao=u
      bo=v
      go=w
co    call angle(ai,bi,gi,ao,bo,go,sint,cost,phi,jflag)
co    .....
      rn1=ranf(0.0d0 )
      dl=log(1./rn1)/ttsig
      if ( dl .gt. piat .and. z .lt. piat ) dl=piat
      dlsum=dlsum+dl
      numdl=numdl+1
      els=0.0
      ens=0.0
      e12dl=sqrt(e)*dl
c
      do 400 k=1,nm
        ndl=ndl+1
        est1=xk(k)*e12dl
        estls=est1*(1-est1/4./e)
        est2=4.0/(1837.0*xm1*z2(k)*oi(k))

```

```

est3=e*est2
est4=est3*z2(k)*oi(k)/cutoff
tmax=4.*e/(1837.*xml)
const=(tmax-cutoff)/(tmax*cutoff)
emin=cutoff*1837.*(xml+(1./1837.))*2/4./xml
estbb=dl*cbb(k)*log(est3+1.0+cst(k)/est3)/e
estp=estbb*estls/(estbb+estls)
if (e .lt. emin) go to 488
discrt=dl*cbb(k)*log(est4+1.)/e
correc=estp/estbb
discrt=correc*discrt
estbbz=estbbz+discrt
do 38 nb=1,6
  if (( z .gt. zbmin(nb)) .and. ( z .lt. zbmax(nb))) then
    estpbn(nb)=estpbn(nb)+estp-discrt
  endif
38 continue
  wtz=0.
  iflag=1
  zb=z+dl*gi
do 481 klm=1,2
  rnen=ranf(0.0d0 )
  secend=1./((1./cutoff)-(const*rnen))
  wty=discrt/secend
  if (wty .ge. wtmin ) then
    estbbd=discrt
    wtx=1./wty
    wtz=wtz+wtx
    go to 484
  endif
481 continue
if ( wty .ge. wtmin ) go to 484
482 continz=continz+discrt
go to 488
483 iflag=iflag+1
484 kl=kl+1
  if (iflag. eq. 1) then
    secenk=secend
    wt=wty
    go to 485
  endif
  rnen=ranf(0.0d0 )
  secenk=1./((1./cutoff)-(const*rnen))
  wt=estbbd/secenk
  wtx=1./wt
  wtz=wtz+wtx
485 rnpos=ranf(0.0d0 )
  dist=dl*rnpos
  sx=xx+dist*ai
  sy=y+dist*bi
  szkl=z+dist*gi
  askl=ao
  biskl=bo
  giskl=go
  eenkl=e
  totsec=totsec+secenk
  discrt=discrt-secenk
ALMACEN(INDICE,1)= secenk
ALMACEN(INDICE,2)= szkl
ALMACEN(INDICE,3)= askl

```

```

    ALMACEN(INDICE,4)= biskl
    ALMACEN(INDICE,5)= giskl
    ALMACEN(INDICE,6)= eenkl
    INDICE=INDICE+1
    kl11=kl11+1

```

```

404  entot=entot+secenk
      if (wtz .lt. wtzmin ) go to 483
      go to 482

```

```

488  estpt(k)=estpt(k)+estp
      els=els+estp
      if ( tcut(k) .lt. esmall ) go to 400
      if ( ip(k) .eq. 1 ) entp=cn(ip(k),k)/e*log(tcut(k)/esmall)*dl
      if ( ip(k) .gt. 1 .and. ip(k) .ne. 4 )
&    entp=cn(ip(k),k)/(1.-cm(ip(k)))/
&    e**cm(ip(k))*tcut(k)**(1.-cm(ip(k)))*dl
      entpt(k)=entpt(k)+entp

```

```

400  ens=ens+entp
      entpt(ir)=entpt(ir)+tint
      en=e-tint-ens-els
      irz=z/wd+1
      if ( irz .gt. 50 ) irz=51
      if ( tint .gt. ed ) go to 510
      y2(irz)=y2(irz)+tint
      y3(irz)=y3(irz)+els
      y6(irz)=y6(irz)+ens
      go to 520
510  y3(irz)=y3(irz)+els
      y6(irz)=y6(irz)+ens+tint
520  if ( en .ge. 0.0 ) go to 530
      dl=e/els*dl
      en=0.0
530  if ( en .lt. efi ) go to 630
      if ( z .gt. zth ) go to 640
      if ( z .lt. 0.0 ) go to 650
      if ( z .eq. 0.0 .and. go .lt. 0.0 ) go to 650
      xx=xx+dl*ai
      y=y+dl*bi
      z=z+dl*gi
      z02=z
      ttnt=tint-be
      if ( tint .gt. 1.0e+6 ) then
        write (6,545) tint
      endif

```

```

545  format (/, ' recoil energy is ',e13.4,/)
      if ( ttnt .lt. sbe(ir) ) go to 540
      if ( z .ge. 20. ) ean=ed
      if ( z .lt. 20. ) ean=sbe(ir)+z*(ed-sbe(ir))/20.
      if ( ttnt .lt. ean ) go to 540
      irec=irec+1
      tanX=sin(thetar)/(1.-cos(thetar))
      sec2=1.+tanX*tanX
      cosr=1/sqrt(sec2)
      sinr=tanX*cosr
      if ( tanX .lt. 0.0 ) cosr=-cosr
      rphi=phi-3.14159

```

```

co  .....
    u=ai
    v=bi
    w=gi
    cdt=cosr

```

```

df=rphi
call direct(cdt,df,u,v,w)
ar=u
br=v
gr=w
co .....
iit(nn,irec,1)=ir
record(nn,irec,1)=ttnt
record(nn,irec,2)=xx
record(nn,irec,3)=y
record(nn,irec,4)=z
record(nn,irec,5)=ar
record(nn,irec,6)=br
record(nn,irec,7)=gr
540 e=en
ai=ao
bi=bo
gi=go
go to 1000
630 iix=z/wd+1
if ( iix .gt. 49 ) iix=50
y1(iix)=y1(iix)+1
tz=tz+z
tdl=tdl+tttdl
rhoz=rhoz+z*z
rhotl=rhotl+tttdl*tttdl
iab=iab+1
go to 710
640 itr=itr+1
go to 710
650 e=e-z*els/dl/gi
tttdl=tttdl+z/gi
z=0.0
z02=z
ire=ire+1
ere=ere+e
710 if ( irec .le. 0 ) go to 740
numrec=irec
call recoil(irec,nm,nn,mm,zth,piat,ed)
if ( nn .eq. 12 ) go to 720
nn=12
mm=13
go to 730
720 nn=13
mm=12
730 go to 710
740 iprint=i/1000
xprint=i/1000.
vprint=float(iprint)
if ( vprint .eq. xprint ) go to 750
go to 999
750 if ( iab .gt. 0 ) tz1=tz/iab
if ( iab .gt. 0 ) tdl1=tdl/iab
if ( iab .gt. 1 ) dz=sqrt(rhoz/(iab-1)-tz1*tz1)
if ( iab .gt. 1 ) dtl=sqrt(rhotl/(iab-1)-tdl1*tdl1)
write(6,8835) tz1, dz, tdl1, dtl, i
8835 format('range',2e11.4,/, 'path',2e11.4,/, 'nh=',i5)
999 continue
c

```

C ENTRA SE *****

```
INDICE=1
do 301 iii=1,kl11
sx=0.0
sy=0.0
  secen=ALMACEN(INDICE,1)
  sz=ALMACEN(INDICE,2)
  ais=ALMACEN(INDICE,3)
  bis=ALMACEN(INDICE,4)
  gis=ALMACEN(INDICE,5)
  een=ALMACEN(INDICE,6)
  INDICE=INDICE+1
sztemp=sz
timei=0.0
ncore=0
gammak=4.*amk/(1.+amk)**2.
gek=gammak*een
energy=secen
if ( energy .gt. 100000. ) then
  energy=100000.
  nhien=nhien+1
endif
geksin=(energy/gek)**.5
if ( geksin .gt. 1.0 ) geksin=1.0
thetas=2.*asin(geksin)
tans=sin(thetas)/(1.-cos(thetas))
sec2s=1.+tans**2
coss=1./sqrt(sec2s)
sins=tans*coss
if ( tans .lt. 0.0 ) coss=-coss
rnphi=ranf(0.0d0 )
phith=6.28318*rnphi
```

co

```
u=ais
v=bis
w=gis
cdt=coss
df=phith
call direct(cdt,df,u,v,w)
as=u
bs=v
gs=w
```

co

```
do 201 j=1,9999
  jj=j+1
  entemp=energy
```

co
co alamr elastic mean free path
co alamc core ionization mfp (LiF)
co alamin inelastic mean free path
co alamd dielectric mfp
co alamt total mfp

co
co cambio calculo elastico,uso as de li y de f
co

```
call intpol(energy,asubb,1)
asubl=asubb
call intpol(energy,asubb,2)
```

```

asubf=asubb
alamrl=con1l1**2*con2*asubl*(1.+asubl)*energy**2
alamrf=con1f**2*con2*asubf*(1.+asubf)*energy**2
alamri=1./alamrl + 1./alamrf
alamr=1./alamri
if ( energy .gt. 10000. ) then
rndls=ranf(0.0d0 )
dls=-alamr*log(rndls)
go to 112
endif

```

```

co      Para alamc uso parametros A=240,Ic=218 para LiF
co
co

```

```

alamc=218.*energy/(240.*log(energy/218.))

```

```

c      calculo de alamin usando Tanuma,Powell y Penn
co      para energy menor a 300evs(si semin es menor)
co      y JMFV,Salvat para energy entre 300 y 10000 evs
co

```

```

co      datos para LiF mw peso molecular ,densidad y no de
co      electrones de valencia Ep plasmon energy,Eg band gap energy ,
co

```

```

mw=25.94
rho=2.635
nv=8.
ep=25.9622
eg=11.8

```

```

co      evaluo formula tanuma para mfp
co
co

```

```

If(energy.lt.300.) then
ulam= (nv*rho)/mw
dlam= 53.4 -20.8*ulam
facd= dlam/energy**2
clam= 1.97 - 0.91*ulam
facc= clam/energy
gamlam= 0.191*(rho**(-0.5))
epeg= sqrt(ep**2 +eg**2)
betlam= -0.0216 +0.944/epeg + (7.39e-4)*rho
betlog= betlam*log(gamlam*energy)
facbet= betlog - facc + facd
alamin= energy/((ep**2)*facbet)
go to 888
endif

```

```

c      Para E mayor a 300 eV uso formula
co      JMFV,Salvat con parametros a1,a2 y a3
co
c

```

```

If(energy.le.10000.) then
term1=3.00661*log((4.*.1578*energy)/13.6)
term2=(-69.65)*13.6/energy
term3=566.9*(13.6/energy)**2
term4=(.0612*pi*(14.4**2))/(13.6*energy)
ainv=term4*(term1+term2+term3)
alamin=1.0/ainv
endif

```

```

c
888      alamd=alamc*alamin/(alamc-alamin)
      alamti=1./alamr+1./alamc+1./alamd
      alamt=1./alamti

```



```

112      rndls=ranf(0.0d0 )
      dls=-alamt*log(rndls)
      sx=sx+dls*as
      sy=sy+dls*bs
      sz=sz+dls*gs
      ai=as
      bi=bs
      gi=gs
      if ( energy .gt. 10000. ) go to 899
      rns2=ranf(0.0d0 )
      if ( rns2 .lt. (alamt/alamrl)) then
      asubs=asubl
      go to 901
      endif
      if ( rns2 .lt. ((alamt/alamrl)+(alamt/alamrf))) then
      asubs=asubf
      go to 901
      endif
      if ( rns2 .lt. ((alamt/alamrl)+(alamt/alamrf)
&+(alamt/alamc))) go to 921
      if ( rns2 .lt. ((alamt/alamrl)+(alamt/alamrf)
&+(alamt/alamc)+(alamt/alamd))) go to 940
co
899      rnsr=ranf(0.0d0 )
      if( rnsr.lt.(alamr/alamrl))asubs=asubl
      if( rnsr.lt.((alamr/alamrl)+
&(alamr/alamrf)))asubs=asubf
901      rns3=ranf(0.0d0 )
      elscat=1.-(2.*asubs*rns3)/(1.+asubs-rns3)
      scat=acos(elscat)
      tans=tan(scat)
      sec2s=1.+tans**2
      coss=1./sqrt(sec2s)
      sins=tans*coss
      if ( tans .lt. 0.0 ) coss=-coss
      rnphi=ranf(0.0d0 )
      phith=6.28318*rnphi
co
      .....
      u=ai
      v=bi
      w=gi
      cdt=coss
      df=phith
      call direct(cdt,df,u,v,w)
      as=u
      bs=v
      gs=w
co      call angle(ai,bi,gi,as,bs,gs,sins,coss,phith,jflag)
co      .....
co
co      higher energy electrons
co      mean ionization potential para Li=40
co      para F=122
co      deds formula 4.21 RCM
co
co      para electrones con e mayor a 10 keVs uso
co      z=12 y N=0.0612 mol/vol en LiF

      if ( energy.gt.10000. ) then
          deds=956.836*log(1.166*energy/94.)/energy

```

```

enloss=deds*dls
energy=energy-enloss
go to 222
endif

```

```

go to 223

```

```

co
co      ....   core ionization angles (Ic=218 para LiF)      ....
921      scat=asin((218./energy)**0.5)
          tans=tan(scat)
          sec2s=1.+tans**2
          coss=1./sqrt(sec2s)
          sins=tans*coss
          if ( tans .lt. 0.0 ) coss=-coss
          rnphi=ranf(0.0d0 )
          phith=6.28318*rnphi
co      .....
          u=ai
          v=bi
          w=gi
          cdt=coss
          df=phith
          call direct(cdt,df,u,v,w)
          as=u
          bs=v
          gs=w
co      call angle(ai,bi,gi,as,bs,gs,sins,coss,phith,jflag)
co      .....
          enloss=218.
          energy=energy-enloss
          ncore=ncore+1
          go to 222
co      .....
co      dielectric eloss evaluation
co      .....
co      Aqui uso samplt para evaluar la
co      perdida de energia dielectrica,se lee de
co      ima.dat E,Im(-1/eps)
940      enloss=samplt(0.0d0 )
          anum1=2.*energy-20.-enloss
          denom1=2.*energy*(1.-enloss/energy)**0.5
          cosalf=anum1/denom1
          eprime=energy-enloss
          anum2=energy+eprime-2.*(energy*eprime)**0.5*cosalf
          denom2=energy+eprime-2.*(energy*eprime)**0.5
          bfac=anum2/denom2
          discat=(energy+eprime)*(1.-bfac)/2./(energy*eprime)**0.5
          &+bfac
          if ( discat .gt. 1.0 ) discat=1.0
          scat=acos(discat)
          tans=tan(scat)
          sec2s=1.+tans**2
          coss=1./sqrt(sec2s)
          sins=tans*coss
          if ( tans .lt. 0.0 ) coss=-coss
          rnphi=ranf(0.0d0 )
          phith=6.28318*rnphi

```

```

co      .....
        u=ai
        v=bi
        w=gi
        cdt=coss
        df=phith
        call direct(cdt,df,u,v,w)
        as=u
        bs=v
        gs=w
        energy=energy-enloss
222     do 238 nb=1,6
        if (( sz .gt. zbmin(nb)) .and. ( sz .le. zbmax(nb))) then
co      binloc=sqrt(sx**2+sy**2)
        if(binloc .lt. 2500.) then
            numbin = 1 + int(binloc/25.)
        else
            numbin=101
        endif
co      binen(nb,numbin)=binen(nb,numbin)+enloss
        zem es max z donde e- depositan energía
        if(sz.gt.zem) zem=sz
        if (energy.lt.semin) binen(nb,numbin)=binen(nb,numbin)+energy
        endif
238     continue
223     vel=sqrt(entemp*3.51765e31)
        timei=timei+dls/vel
        if ( sz .lt. 0.0 ) go to 250
        if ( energy .lt. semin) go to 250
201     continue
        write(6,128) energy
128     format(/,' limit of 10000 steps has been reached at',f10.2,/)
250     if ( sz .lt. 0.0 ) then
        kllk=kllk-1
        go to 301
        else
            disttr=sqrt(sx**2+sy**2)
            transd=transd+disttr
            transs=transs+disttr**2
            distse=sqrt(sx**2+sy**2+(sz-sztemp)**2)
            totdis=totdis+distse
            disset=disset+distse**2
            timtot=timtot+timei
        endif
301     continue
        do 5959 nb=1,6
        do 5959 numbin=1,101
            vbinen(nb,numbin)=vbinen(nb,numbin)
            &+binen(nb,numbin)*binen(nb,numbin)
5959     continue
C HASTA AQUI LOOP PRINCIPAL

        KLLK=KLLK+KLLL
1001     CONTINUE
        nh=nhistorias
C AQUI ENTRA PEDAZO DEL MAIN
        ss=0.0
        do 900 i=1,nm
900     ss=ss+entpt(i)+estpt(i)

```

```

do 910 i=1,nm
  fns=entpt(i)/ss
  fes=estpt(i)/ss
  sumup=continz+totsec
  write (6,8840) estbbz,sumup
8840  format (/, ' estbbz =',e11.4,/, ' continz + totsec =',e11.4)
  write (6,8845) continz
8845  format (' continz =',e13.4)
  write (6,8850) kl
8850  format (' kl =',i10,/)
co
co  regreso a mormalizar por nh
  factor=estbbz/totsec/real(nh)

910  write(6,8855)asname(i),fns,fes
8855  format(1x,a8,' accounts for ',/,5x,f7.5,' nuclear stopping ',
&/,5x,'and ',f7.5,' electronic stopping')
  if ( iab .gt. 0 ) tz=tz/iab
  if ( iab .gt. 0 ) tdl=tdl/iab
  dis=dis/nh
  write(6,8860)ere
8860  format(' total energy reflection',e14.6)
  ere=ere/e0/nh
  write(6,8865)ere
8865  format(' energy reflection coefficient',e14.6)
  write(6,8870)tz,tdl,dis
  write(6,8875)iab,itr,ire
8875  format(' number of absorbed particles',i5,/,
&      ' number of transmitted particles',i5,/,
&      ' number of reflected particles',i5)
8870  format(' averaged deposition depth',e13.6,/,
&      ' averaged length travelled',e13.6,/,
&      ' averaged displacement',e13.6)
  if ( iab .gt. 1 ) dz=sqrt(rhoz/(iab-1)-tz*tz)
  if ( iab .gt. 1 ) dtl=sqrt(rhotl/(iab-1)-tdl*tdl)
  write(6,8880)dz,dtl
8880  format(' standard deviation for depth is',e13.6,/,
&      ' standard deviation for length is',e13.6)
  do 920 i=1,nm
920  write(6,8885)asname(i),erre(i),irre(i),irtr(i),irab(i)
8885  format(1x,a8,/, 'er=',e13.6,/, ' ir=',i6,/, ' it=',i6,/, ' ia=',i6)
  do 930 i=1,50
  y5(i)=2.*(i-1)
930  x1(i)=wd*(i-1)

```

C HASTA AQUI ENTRO PEDAZO DEL MAIN

```

  write (6,411) nhien
411  format(/, ' number of se with en above 25 kev =',i5,/)
  totdis=totdis/real(kllk)
  vart=(disset/real(kllk))-(totdis/real(kllk))**2
  sdt=sqrt(vart)
  transd=transd/real(kllk)
  varr=(transs/real(kllk))-(transd/real(kllk))**2
  sdr=sqrt(varr)
  timtot=timtot/kllk
  write (6,414) totdis,sdt,transd,sdr,timtot
414  format(' ave total distance by se is:',f10.3,
&      '+/- ',f7.2,/,
&      'transverse ave distance by se is:',f10.3,

```

```

&' +/- ',f7.2,/,
&'ave time for se to complete track is:',e13.5)
do 416 nb=1,6
  toteh=0.0
  estpbn(nb)=estpbn(nb)/real(nh) !/3.6
  write(6,421) nb,estpbn(nb)
cot  write(9,911) nb,estpbn(nb)
421  format('slice bin    dep energy  ',3x,'dep e sq',
&3x,'radius',/,13x,'e-h pairs',/,i5,' 1 ',e15.4)
cot 911 format (i5,2(1pe14.4))
  do 418 nb1=1,100
    binen(nb,nb1)=binen(nb,nb1)*factor !/3.6
    vbinen(nb,nb1)=vbinen(nb,nb1)*factor
    rad(nb1)=(real(nb1)-1.)*25.+12.5
co
co ...if para no imprimir ceros cuando no deposita energia
co
cdos      if(binen(nb,nb1).ne.0.0)then
cdos      write(6,422) nb1,binen(nb,nb1),vbinen(nb,nb1),rad(nb1)
cdos      else
cdos      nbil(nb)=nb1-1
cdos      endif

422      format(5x,i3,2x,2e15.4,f8.1)
      toteh=toteh+binen(nb,nb1)
418      continue
write (6,441)
441      format(5x)

      write (6,441)
      binen(nb,101)=factor*binen(nb,101)
      vbinen(nb,101)=factor*vbinen(nb,101)
write(6,423) binen(nb,101)
423      format(6x,'101',6x,e15.4)
      toteh=(toteh+binen(nb,101))
      write (6,547) toteh
547      format (/, ' total e-h deposition in this slice = ',e13.4,///)
416      continue
co
co .....
co      agrego ifs para calcular corretamente
co      volumen del ultimo cilindro antes
co      de calcular la dosis
co
co .....
do 211 nb=1,6
211      sll(nb)=slwide(nb)
      if(zem.gt.zbmin1.and.zem.lt.zbmin2) sll(1)=zem-zbmin1
      if(zem.gt.zbmin2.and.zem.lt.zbmin3) sll(2)=zem-zbmin2
      if(zem.gt.zbmin3.and.zem.lt.zbmin4) sll(3)=zem-zbmin3
      if(zem.gt.zbmin4.and.zem.lt.zbmin5) sll(4)=zem-zbmin4
      if(zem.gt.zbmin5.and.zem.lt.zbmin6) sll(5)=zem-zbmin5
      if(zem.gt.zbmin6) sll(6)=zem-zbmin6

co      agrego dosis =e dep/vol (ev/angs cub)

      write(18,209) zem
209      format(//,3x,'maximum electron depth=',2x,e15.3)
co
      do 719 nb=1,6
      dostot=0.0
      write(18,204) nb

```

```

204     format(//,'slice =',2x,i3)
       write(18,203)
203     format(/,7x,'bin',5x,'radio',7x,'dosis',/)
       volrod(1)=pi*s11(nb)*rad(1)**2
       do 618 nb1=2,100
618     volrod(nb1)=pi*s11(nb)*((rad(nb1)**2)-(rad(nb1-1)**2))
       write(14,601)
601     format(//,5x,'slice',1x,'bin',5x,
&'int d(r)',6x,'int f(d)d(r) ',//)
       do 718 nb1=1,100
       dosis(nb,nb1)=binen(nb,nb1)/volrod(nb1)
co     cambio a erg/cm cub
       dosis(nb,nb1)=dosis(nb,nb1)*1.602e+12
       dostot=dostot+dosis(nb,nb1)
       if(dosis(nb,nb1).ne.0.0)then
       write (18,202) nb1,rad(nb1)*1.0e-8,dosis(nb,nb1)
       else
       nbil(nb)=nb1-1
       endif
602     format(3x,2I5,2e15.4)
718     continue
       write (18,548) dostot
548     format (/, 'total dose in this slice =',e13.4,/,//)

719     continue
202     format(6x,i3,2x,e15.4,2x,e15.4)
co     .....
co     agrego call graf
co     .....
       rnh=real(nh)
       do 116 nb=1,6
       do 117 nb1=1,nbil(nb)
       rd(nb1)=nb1
       bing(nb1)=binen(nb,nb1)
       vbing(nb1)=vbinen(nb,nb1)
       if(nh .lt. 3) then
       vbing(nb1)=0.05*bing(nb1)
       go to 117
       else
       vbing(nb1)=3.0*sqrt(vbing(nb1)-bing(nb1)*bing(nb1)/rnh)
       endif
117     continue
       nf=1
       nl=nbil(nb)
       write(4,810)nb
cdos     call graf(rd,bing,vbing,nf,nl,4)
116     continue
810     format(/,8x,'slice =',i5,/)

       close(7)
       close(9)

C FIN SE *****

       write (6,8892) e,emin
8892     format(' final ion energy =',e13.4,7x,/,
&' minimum ion energy for se gen =',e13.4,/)
       entot=entot/real(kl)
       write(6,8897) entot
8897     format(/,' ave se energy at creation is:',f10.3,/)

```

```

      write (6,8705) numdl
8705 format(' # of ion path steps =',i10)
      dlsum=dlsum/real(numdl)
      write (6,8715) dlsum
8715 format(' ave path step length =',e13.3)
      elpath=estpt(1)/numdl
      write (6,8725) elpath
8725 format(' ave el stopping energy per step =',e13.4)
c      call dclock@(tend)
c      telpse=tend-tstart
c      write(6,8890) telpse
8890 format(' time elapsed ',e13.6)
      close(6)
      close(5)
      call exit(1)
      end

c
      subroutine recoil(irec,nm,nn,mm,zth,piat,ed)
      implicit integer*4(i-n)
      implicit real*8(a-h,o-z)
      dimension tcut(5),ge(5)
      dimension tcutcm(5),egcm(5)
      dimension ip(5)
      common/store/ iit(12:13,1000,1), record(12:13,1000,7)
      common/final/erre(5),irre(5),irtr(5),irab(5)
      common/elecst/ oii(5,5),csti(5,5),cbbi(5,5)
      common/rcoil/rcn(4,5,5),rxk(5,5),ram(5,5),xm2(5),z2(5),
&          rgamma(5,5),tsig(5),sgm(5),sm(4),cm(4),
&          rea(5,5),reb(5,5),rec(5,5),xn(5),sbe(5),wd,be
      common/plot/ x1(60),y1(60),y2(60),y3(60),y4(60),y5(60),y6(60),
&          lbx(4),lby(4),title1(5),title2(5),lbb(4),lcy(4),
&          l1(4),l2(4),l3(4),l4(4),l5(4)
      jflag=0
      nrec=0
      nnr=1
666  if ( nnr .gt. irec ) go to 999
      dl=0.0
      esmall=1.0
      irr=iit(nn,nnr,1)
      e=record(nn,nnr,1)
      xx=record(nn,nnr,2)
      y=record(nn,nnr,3)
      z=record(nn,nnr,4)
      ai=record(nn,nnr,5)
      bi=record(nn,nnr,6)
      gi=record(nn,nnr,7)
      nnr=nnr+1
      if ( z .le. 0.0 .and. gi .lt. 0.0 ) go to 991
      tint=0.0
1    do 100 k=1,nm
      if ( e .le. rea(irr,k) ) go to 31
      if ( e .le. reb(irr,k) ) go to 32
      if ( e .le. rec(irr,k) ) go to 33
      ip(k)=1
      go to 34
31   ip(k)=4
      go to 34
32   ip(k)=3
      go to 34
33   ip(k)=2

```

```

34   ge(k)=rgamma(irr,k)*e
      tcut(k)=sbe(k)/3.
      if ( ge(k) .lt. sbe(k) ) tcut(k)=ge(k)/3
      if ( ip(k) .ne. 4 ) tcutcm(k)=1./tcut(k)**cm(ip(k))
      egcm(k)=1./ge(k)**cm(ip(k))
100  if ( ip(k) .ge. 4 ) tsig(k)=rcn(ip(k),irr,k)*log(ge(k)/tcut(k))
      if ( ip(k) .lt. 4 ) tsig(k)=rcn(ip(k),irr,k)/
&e**cm(ip(k))*(tcutcm(k)-egcm(k))
      ttsig=0.0
      do 56 k=1,nm
56      ttsig=ttsig+tsig(k)
      pnrt=ranf(0.0d0 )
      prt=0.0
      do 57 k=1,nm
          prt=prt+tsig(k)/ttsig
          ir=k
57      if ( prt .ge. pnrt ) go to 58
58      rn2=ranf(0.0d0 )
      if ( ip(ir) .lt. 4 ) tint=1/(tcutcm(ir)*(1.-rn2)+
&rn2*egcm(ir))**sm(ip(ir))
      if ( ip(ir) .ge. 4 ) tint=ge(ir)**rn2*tcut(ir)**(1-rn2)
      thetar=2*asin((tint/ge(ir))**(0.5))
      tanY=sin(thetar)/(ram(irr,ir)+cos(thetar))
      sec2=1.+tanY*tanY
      cost=1/sqrt(sec2)
      sint=tanY*cost
      if ( tanY .lt. 0.0 ) cost=-cost
      rn0=ranf(0.0d0 )
      phi=6.28318*rn0
co   .....
      u=ai
      v=bi
      w=gi
      cdt=cost
      df=phi
      call direct(cdt,df,u,v,w)
      ao=u
      bo=v
      go=w
co   call angle(ai,bi,gi,ao,bo,go,sint,cost,phi,jflag)
co   .....
      rn1=ranf(0.0d0 )
      ttsigo=ttsig
      dl=log(1./rn1)/ttsig
      if ( abs(dl) .gt. zth ) write(6,5556) dl,rn1, ttsig
5556 format('dl overflow',3e13.6)
      els=0.0
      ens=0.0
      e12dl=sqrt(e)*dl
      do 114 k=1,nm
          est1=rxk(irr,k)*e12dl
          estls=est1*(1.-est1/4./e)
          est2=4./(1837.*xm2(irr)*z2(k)*oii(irr,k))
          est3=e*est2
          estbb=dl*cbbi(irr,k)*log(est3+1.0+csti(irr,k)/est3)/e
          estp=estbb*estls/(estbb+estls)
          els=els+estp
          if ( tcut(k) .lt. esmall ) go to 114
          if ( ip(k) .eq. 1 ) entp=rcn(ip(k),irr,k)/e*log(tcut(k)
&/esmall)*dl

```



```

      if ( ip(k) .gt. 1 .and. ip(k) .ne. 4 )
&entp=rcn(ip(k),irr,k)/(1.-cm(ip(k)))/
&e**cm(ip(k))*tcut(k)**(1.-cm(ip(k)))*dl
114   ens=ens+entp
      en=e-tint-ens-els
      if ( en .ge. 0.0 ) go to 333
      dl=e/els*dl
      en=0.0
333   if ( en .lt. sbe(irr) ) go to 3
      if ( z .gt. zth ) go to 4
      esbe=sbe(irr)/gi/gi
      enn=en+z*els/dl/gi
      if ( z .lt. 0.0 .and. enn.gt. esbe ) go to 5
      if ( z .eq. 0.0 .and. go .lt. 0.0 ) go to 5
      if ( dl .gt. 1.0e+05 ) write(6,2728) dl
2728  format(' dl overflow',e13.6)
      xx=xx+dl*ai
      y=y+dl*bi
      z=z+dl*gi
      if ( abs(z) .gt. zth ) go to 5555
      ai=ao
      bi=bo
      gi=go
      e=en
      ttnt=tint-be
      if ( ttnt .lt. sbe(ir) ) go to 444
      if ( z .gt. 20 ) ean=ed
      if ( z .le. 20 ) ean=sbe(ir)+z*(ed-sbe(ir))/20.
      if ( ttnt .lt. ean ) go to 444
      nrec=nrec+1
      tanY=sin(thetar)/(1.0-cos(thetar))
      sec2=1.+tanY*tanY
      cosr=1/sqrt(sec2)
      sinr=tanY*cosr
      if ( tanY .lt. 0.0 ) cosr=-cosr
      rphi=phi-3.14159
co    .....
      u=ai
      v=bi
      w=gi
      cdt=cosr
      df=rphi
      call direct(cdt,df,u,v,w)
      ar=u
      br=v
      gr=w
co    call angle(ai,bi,gi,ar,br,gr,sinr,cosr,rphi,jflag)
co    .....
      iit(mm,nrec,1)=ir
      record(mm,nrec,1)=ttnt
      record(mm,nrec,2)=xx
      record(mm,nrec,3)=y
      record(mm,nrec,4)=z
      record(mm,nrec,5)=ar
      record(mm,nrec,6)=br
      record(mm,nrec,7)=gr
444   if ( z .le. 0.0 .and. en .le. esbe ) go to 555
      go to 1
555   zn=z
      z=abs(z)

```

```

gi=-gi
go to 1
3 iiz=z/wd+1
  irab(irr)=irab(irr)+1
  go to 6
4 irtr(irr)=irtr(irr)+1
  go to 6
991 esbe=sbe(irr)/gi/gi
    if ( e .ge. esbe ) go to 992
    go to 666
992 e=e-sbe(irr)
    iiz=e/2.+1
    if ( iiz .gt. 49 ) iiz=50
    y4(iiz)=y4(iiz)+1
    irre(irr)=irre(irr)+1
    erre(irr)=erre(irr)+e
    go to 666
5 e=enn-sbe(irr)
    iiz=e/2.+1
    if ( iiz .gt. 49 ) iiz=50
    y4(iiz)=y4(iiz)+1
    irre(irr)=irre(irr)+1
    erre(irr)=erre(irr)+e
6 go to 666
5555 write(6,1000) z
1000 format('z overflow',e13.6)
999 continue
    irec=nrec
    return
end

C *****
  function ranf(dummy)
    implicit real*8 (a-h,o-z),integer*4 (i)
    common/rseed/rnd
    irnd=rnd+0.5d0
    rnd=dmod(1.6807d4*irnd,2.147483647d9)
    ranf=rnd*4.65661287524579d-10
    return
  end

C
C *****
  SUBROUTINE INTPOL(ENERGY,ASUBB,IU)
  .....
co  programa que interpola valores de as
co  para dispersion elastica de electrones
co  .....
  implicit integer*4(i-n)
  implicit real*8(a-h,o-z)
  common/screen/eli(50),asli(50),elf(50),asf(50)
  el=log(energy)
  ie=(0.43429448190325183d0*el-2.0d0)*20+1

C
  if(iu.eq.1)then
    del=(el-eli(ie))/(eli(ie+1)-eli(ie))
    asubb=dexp(asli(ie)+del*(asli(ie+1)-asli(ie)))
  else
    del=(el-elf(ie))/(elf(ie+1)-elf(ie))
    asubb=dexp(asf(ie)+del*(asf(ie+1)-asf(ie)))
  endif
C

```

```
return
end
```

```
*****
```

```
                SUBROUTINE SAMPLO
```

```
*****
```

```
    SUBROUTINE SAMPLO(X,PDF,N)
```

```
    INITIALIZATION ROUTINE FOR RANDOM SAMPLING FROM A TABULATED
    PDF, WHICH IS TRANSFORMED INTO A CONTINUOUS FUNCTION BY MEANS
    OF LOG-LOG LINEAR INTERPOLATION.
```

```
    INPUT ARGUMENTS:
```

```
        X(I) ..... GRID POINTS,
        PDF(I) ..... VALUE OF THE PDF AT X(I),
        N ..... NUMBER OF GRID POINTS.
```

```
    implicit integer*4(i-n)
    IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
    PARAMETER(NMP=500)
    DIMENSION X(NMP),PDF(NMP)
    COMMON/CSAMP/XL(NMP),P(NMP),A(NMP),NTAB
    NTAB=N
```

```
    P(1)=0.0D0
    XL(1)=DLOG(X(1))
    DO 1 I=1,NTAB-1
        XL(I+1)=DLOG(X(I+1))
        TST=DMAX1(-80.0D0,DMIN1(80.0D0,DLOG(PDF(I+1)/PDF(I))))
        AA=1.0D0+TST/(XL(I+1)-XL(I))
        IF(DABS(AA).GT.1.0D-12) THEN
            DP=PDF(I)*X(I)*(DEXP(AA*(XL(I+1)-XL(I)))-1.0D0)/AA
            A(I)=AA
        ELSE
            DP=PDF(I)*X(I)*(XL(I+1)-XL(I))
            A(I)=0.0D0
        ENDIF
        P(I+1)=P(I)+DP
1    CONTINUE
    A(NTAB)=0.0D0
    RETURN
    END
```

```
*****
```

```
                FUNCTION SAMPLE
```

```
*****
```

```
    FUNCTION SAMPLT(DUMMY)
```

```
    RANDOM SAMPLING FROM A TABULATED PDF.
```

```
    implicit integer(i-n)
    IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
    PARAMETER(NMP=500)
    COMMON/CSAMP/XL(NMP),P(NMP),A(NMP),NTAB
```

```
    **** POINTER.
```

```
    PT=RANF(0.0D0)*P(NTAB)
```

```
    **** BINARY SEARCH.
```

```
    I=1
```

```
    J=NTAB
```

```
1    K=(I+J)/2
```

```
    IF(PT.GT.P(K)) THEN
```

```

      I=K
    ELSE
      J=K
    ENDIF
    IF(J-I.GT.1) GO TO 1

    T=(PT-P(I))/(P(I+1)-P(I))
    IF(DABS(A(I)).GT.1.0D-12) THEN
      S=DLOG(1.0D0+T*(DEXP(A(I)*(XL(I+1)-XL(I)))-1.0D0))/A(I)
    ELSE
      S=T*(XL(I+1)-XL(I))
    ENDIF
    SAMPLT=DEXP(XL(I)+S)
    RETURN
  END

```

```

*****
                      SUBROUTINE GRAF
*****
SUBROUTINE GRAF(X,Y,DY,NF,NL,IW)

```

```

  THIS SUBROUTINE PLOTES THE DISCRETE POINTS (X,Y) OF A DOUBLE
  ARRAY. THE VALUES OF THE X VARIABLE HAVE TO BE EQUALLY SPACED.
  IF DY (THE ABSOLUTE ERROR IN THE Y VALUES) IS NOT ZERO, THE
  ERROR BARS ARE ALSO PLOTTED.
  X ..... ORDERED ABCISES.
  Y ..... CORRESPONDING ORDINATES.
  DY ..... ABSOLUTE ERROR IN Y.
  NF, NL ..... FIRST AND LAST PLOTTED POINTS.
  IW ..... OUTPUT UNIT.

```

```

  implicit integer*4(i-k,m-n)
  IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H,O-Z)
  IMPLICIT CHARACTER*1 (L)
  DIMENSION X(NL),Y(NL),DY(NL),L(91),S(9)
  DATA L1/'+'/,L2/' '/,L3/'I'/,L4/'*'/,L5/'-'/,L6/'('/,
1      L7/')'/'/'
  YMAX=0.0D0
  YMIN=0.0D0
  DO 1 I=NF,NL
    E=DABS(DY(I))
    YMAX=DMAX1(Y(I)+E,Y(I)-E,YMAX)
1  YMIN=DMIN1(Y(I)+E,Y(I)-E,YMIN)
    F=YMAX-YMIN
    IF(F.LE.0.0D0) RETURN
    IF(YMIN.LT.0.0D0) GO TO 2
    IZERO=1
    D=YMAX/1.8D1
    GO TO 5
  2 CONTINUE
    IF(YMAX.GT.0.0D0) GO TO 3
    IZERO=19
    D=-YMIN/1.8D1
    GO TO 5
  3 K=19
  4 K=K-1
    D=F/DFLOAT(K)
    IZERO=IDINT(-YMIN/D)+1
    I=IDINT(YMAX/D)+1
    IF(IZERO+I.GT.18) GO TO 4
    IZERO=IZERO+1

```

```

5 F=1.0D1
  IF(D.GT.1.0D1) F=0.1D0
  D=D/F
  DO 6 I=1,90
    D=D*F
    IF(D.LT.1.0D1.OR.D.GE.1.0D2) GO TO 6
    D=DFLOAT(IDINT(D)+1)/F**(I-1)
    GO TO 7
6 CONTINUE
7 DO 8 I=1,9
8 S(I)=DFLOAT(I+I-IZERO)*D
  D=0.2D0*D
  IZERO=5*(IZERO-1)+1
  YMIN=(DFLOAT(1-IZERO)-0.5D0)*D
  WRITE(IW,101) (S(I),I=1,9)
  WRITE(IW,102)
  DO 12 I=NF,NL
    L(1)=L1
    L(91)=L1
    DO 9 J=2,90
9 L(J)=L2
    L(IZERO)=L3
    E=DABS(DY(I))
    K=IDINT((Y(I)-YMIN)/D)+1
    K1=IDINT((Y(I)-E-YMIN)/D)+1
    K2=IDINT((Y(I)+E-YMIN)/D)+1
    IF(K1.GE.K2) GO TO 11
    DO 10 J=K1,K2
10 L(J)=L5
    L(K1)=L6
    L(K2)=L7
11 L(K)=L4
    WRITE(IW,103) X(I), (L(K),K=1,91),Y(I),E
12 CONTINUE
    WRITE(IW,104)
    WRITE(IW,105) (S(I),I=1,9)
    RETURN
101 FORMAT(1H ,7X,'Y :',3X,1P,D9.2,1X,8(D9.2,1X))
102 FORMAT(1H ,1X:',9X,9('+----I----'),'+',4X,'Y +- DY :')
103 FORMAT(1H ,1P,D10.3,3X,91A1,3X,D10.3,' +- ',D8.1)
104 FORMAT(1H ,13X,9('+----I----'),'+')
105 FORMAT(1H ,13X,1P,D9.2,1X,8(D9.2,1X))
END

```

```

C *****
C SUBROUTINE DIRECT
C *****
C SUBROUTINE DIRECT(CDT,DF,U,V,W)

```

```

C THIS SUBROUTINE COMPUTES THE DIRECTION COSINES OF THE PAR-
C TICLE VELOCITY AFTER A COLLISION WITH GIVEN POLAR AND AZIMU-
C THAL SCATTERING ANGLES.

```

```

C INPUT:   U,V,W ..... INITIAL DIRECTION COSINES,
C          CDT ..... COSINE OF THE POLAR SCATTERING ANGLE,
C          DF ..... AZIMUTHAL SCATTERING ANGLE (RAD).

```

```

C OUTPUT:  U,V,W ..... NEW DIRECTION COSINES.
C          CDT AND DF REMAIN UNCHANGED.
C

```

```
implicit integer*4 (i-n)
IMPLICIT REAL*8 (A-H,O-Z)
SDF=DSIN(DF)
CDF=DCOS(DF)
AW=DABS(W)
```

C

```
IF(AW.LT.0.99D0) THEN
G=1.0D0-W*W
F=DSQRT((1.0D0-CDT*CDT)/G)
UO=U
WCDF=W*CDF
U=U*CDT+F*(U*WCDF-V*SDF)
V=V*CDT+F*(V*WCDF+UO*SDF)
W=W*CDT-F*G*CDF
ELSE
```

C

```
**** POLAR DIRECTION COSINE OF THE INITIAL DIRECTION NEAR 1.
C (A CICLIC PERMUTATION OF AXES IS PERFORMED).
```

C

```
SAVE=U
U=V
V=W
W=SAVE
G=1.0D0-W*W
F=DSQRT((1.0D0-CDT*CDT)/G)
UO=U
WCDF=W*CDF
U=U*CDT+F*(U*WCDF-V*SDF)
V=V*CDT+F*(V*WCDF+UO*SDF)
W=W*CDT-F*G*CDF
SAVE=W
W=V
V=U
U=SAVE
ENDIF
```

C

```
**** ENSURE NORMALIZATION.
FNORM=1.0D0/DSQRT(U*U+V*V+W*W)
U=FNORM*U
V=FNORM*V
W=FNORM*W
RETURN
END
```

```

CO .....
CO PROGRAMA KOLT.FOR
CO este programa lee dosis (r) de salida de pcpe
CO deberia ser erg/angstroms cubicos
CO e01,e02 erg/angstroms
CO y calcula sección de activacion TST
CO pero usando siempre D(r) de Monte Carlo
CO .....
CO implicit integer*4 (i-n)
CO implicit real*8 (a-h,o-z)
CO dimension nu(12),rad(12,5000),dos(12,5000)
CO dimension eavb(0:25),eavbt(0:25),p1b(0:25),p2b(0:25)
CO dimension p1ca(5000),p2ca(5000),ah(5000)
CO dimension p1cb(5000),p2cb(5000)
CO open(4,file='kolt.in',status='old')
CO open(5,file='dint.dos',status='old')
CO open(6,file='kolt.out',status='unknown')
CO read(4,*)ncil
CO read(4,*)(nu(i),i=1,ncil)
CO read(4,*) acero,n1,trod,e01,e02
CO write(6,50)acero
50 format(/,10x,' A0 = ', 2x, f5.1,/)
CO do 33 nb=1,ncil
CO ndos=nu(nb)
CO do 10 nb1=1,ndos
10 read(5,*)rad(nb,nb1),dos(nb,nb1)
CO write(6,44)nb
44 format(/,10x,'slice=',i2)
CO .....
CO la sección se calcula con ec 4.12 (ISA) pero
CO en tres regiones, de lim inicial a acero,
CO de acero a 3 veces acero y de 3acero hasta
CO maxima dist lateral de la traza del ion
CO .....
CO pero antes de 4.12 se evalua AH,A(t,a0) de
CO Hansen y ecuación 4.18
CO primera zona
CO .....
CO pi=4.*atan(1.)
CO cotain=1.
CO cots1=((3.*acero)/2.)/trod
CO eava=0.0
C la variable tcero es la "t" en ec 4.12 y tcero en
C ecuacion 4.18, la variable que corre en 4.18 es tprima.
CO do 15 nb1=1,cots1
CO tcero=0.5*acero
CO ac2=tcero
C tb=amax1(rad(nb,1),(tcero-acero))
C h=(tcero+acero-tb)/n1
C tprima=tb+(h*nb1)/trod
CO tprima=rad(nb,nb1)
CO tat=tcero+tprima
CO if(tat.gt.acero)then
CO sqnum=acero**2-(tprima-tcero)**2
CO sqden=((tprima+tcero)*(tprima+tcero)-acero*acero)
CO sqa=dsqrt(sqnum/sqden)
CO ah(nb1)=4.*atan(sqa)
CO else
CO ah(nb1)=2.*pi

```

```

endif
15 eava=eava+dos(nb,nb1)*ah(nb1)*tprima*trod
   eavat=eava/(pi*(acero**2))
   pla=1-dexp(-eavat/e01)
   tem1=dexp(-eavat/e02)
   tem2=1+eavat/e02
   p2a=1-tem2*tem1
co .....
co sigla y sig2a estan evaluados en "t" = tcero = acero/2
co .....
   sigla=pi*pla*(ac2**2-cotain**2)
   sig2a=pi*p2a*(ac2**2-cotain**2)
c   write(6,100)tcero*1.0e-8,sigla*1.0e-16,tcero*1.0e-8,
c   &sig2a*1.0e-16
100 format(//,2x,'sección 1 (' ,1e13.4,') 1 impacto =' ,2x,1e13.4,1x,
&'cm2',/,2x,'sección 1 (' ,1e13.4,') 2 impactos=' ,2x,1e13.4,1x,
&'cm2')
co .....
co segunda zona, integral sigma (4.12) de acero a
co tres veces acero
co .....
co primero 4.18, 20 veces, es decir 20 ptos
co para la ec 4.12, la cual se integra de acero
co a 3*acero, esos 20 ptos se obtienen con "t",
co para el caso de acero=50 A, los 20 ptos son de 55
co a 150 de 5 en 5. (trod=5), y se hace tcero = t
co en 4.18, y tprima es la variable
co que corre en 4.18
co NONONONO trod=1
co .....
   sig1b=0.0
   sig2b=0.0
   h2=(3.*acero-acero/2)/25.
   do 20 i=0,24
   eavb(i)=0.0
   plb(i)=0.0
   p2b(i)=0.0
   t=acero/2+h2*i
   if(t.gt.rad(nb,ndos))go to 20
   tb2=max(rad(nb,1),(t-acero))
   coti2=nint(tb2/trod)
   cots2=nint((t+acero)/trod)
c   if(cots2.gt.ndos)cots2=ndos
   if(cots2.gt.2000)cots2=2000
   do 25 nb1=coti2,cots2
   tcero=t
   tprima=rad(nb,nb1)
   tat2=(tcero+tprima)
   if(tat2.gt.acero)then
   sqnum=acero**2-(tprima-tcero)**2
   sqden=(tprima+tcero)**2-acero**2
   sqa=dsqrt(sqnum/sqden)
   ah(nb1)=4.*atan(sqa)
   else
   ah(nb1)=2.*pi
   endif
25 eavb(i)=eavb(i)+dos(nb,nb1)*ah(nb1)*tprima*trod
   eavbt(i)=eavb(i)/(pi*acero**2)
   plb(i)=1.-dexp(-eavbt(i)/e01)
   tem1=dexp(-eavbt(i)/e02)

```



```

temb2=1.+(eavbt(i)/e02)
p2b(i)=1.-temb2*temb1
sig1b=sig1b+2*pi*p1b(i)*t*h2
sig2b=sig2b+2*pi*p2b(i)*t*h2
20  continue
c    write(6,150) sig1b*1.0e-16, sig2b*1.0e-16
150  format(//,2x,'sección 2  1 impacto =',2x,1e13.4,1x,'cm2',
&/,2x,'sección 2  2 impactos=',2x,1e13.4,1x,'cm2')
co   .....
co   ahora viene la zona 3 que es mas sencilla
co   solo uso 4.10, para cada rodaja y hago
co   la integral 4.12 de 3 acero hasta el maximo
co   de nbin
co   .....
sig1c=0.0
sig2c=0.0
co   .....
co   ahora divido la zona 3 en dos,
co   una con rodajas de 1 angstroms (trod=1) hasta 2500
co   y otra de rodajas de 100 angstroms despues de 2500
co   .....
scl1a=0.0
sc2a=0.0
scl1b=0.0
sc2b=0.0
coti3=((3.*acero)+1.)/trod
cots3=2000
do 30 nb1=coti3,cots3
t=rad(nb,nb1)
plca(nb1)=1.-dexp(-dos(nb,nb1)/e01)
tem1c=dexp(-dos(nb,nb1)/e02)
tem2c=1.+(dos(nb,nb1)/e02)
p2ca(nb1)=1.-tem2c*tem1c
scl1a=scl1a+2*pi*plca(nb1)*t*trod
30  sc2a=sc2a+2*pi*p2ca(nb1)*t*trod
if(ndos.le.2000)go to 1111
trod2=100.
coti3b=2001
cots3b=ndos
do 40 nbb=coti3b,cots3b
t=rad(nb,nbb)
p1cb(nbb)=1.-dexp(-dos(nb,nbb)/e01)
t1cb=dexp(-dos(nb,nbb)/e02)
t2cb=1.+(dos(nb,nbb)/e02)
p2cb(nbb)=1.-t2cb*t1cb
scl1b=scl1b+2*pi*p1cb(nbb)*t*trod2
40  sc2b=sc2b+2*pi*p2cb(nbb)*t*trod2
1111 sig1c=scl1a+scl1b
sig2c=sc2a+sc2b
c    write(6,200) sig1c*1.0e-16, sig2c*1.0e-16
200  format(//,2x,'sección 3, 1 impacto =',2x,1e13.4,1x,'cm2',
&/,2x,'sección 3, 2 impactos=',2x,1e13.4,1x,'cm2')
s1tot=sig1a+sig1b+sig1c
s2tot=sig2a+sig2b+sig2c
write(6,250) s1tot*1.0e-16, s2tot*1.0e-16
250  format(//,2x,'sección de activacion 1 impacto =',2x,1e13.4,
&1x,'cm2',/,2x,'sección de activacion 2 impactos=',2x,1e13.4,
&1x,'cm2')
33  continue
end

```

```

c .....
c PROGRAMA EFTST.FOR
c programa que calcula eficiencia conociendo
c sigma*R segun TST
c sr en cm cub, zmax en cm , eo en MeV, acero en cm
c .....
c implicit integer*4 (i-n)
c implicit real*8 (a-h,o-z)
c dimension sr1(2,3),sr2(2,3)
c dimension acero(3),ec2(2),tlgam(2),tlpcp(3)
c dimension efi(2,3)
c acero(1)=50.*1.e-8
c acero(2)=100.*1.e-8
c acero(3)=150.*1.e-8
c traza completa
c tlgam(1)=.000367793
c tlgam(2)=.000489338
c ec2(1)=5.27e+6
c ec2(2)=4.743e+6
c open(4,file='efi.efi',status='old')
c read(4,*)eo,zmax
c do 10 j=1,2
c do 10 i=1,3
10 read(4,*)sr1(j,i),sr2(j,i)
c pi=4.*atan(1.)
c do 20 j=1,2
c do 30 i=1,3
c sdl=(sr1(j,i)*2.635e+04)/(eo*1.6e-6)
c rkuno=1.-(exp(-sdl))
c ckuno=.36*rkuno
c sigo=1.18
c denpl=sigo*pi*(acero(i)**2)
c xnumpl=sr2(j,i)/zmax
c pl=xnumpl/denpl
c if (pl.lt.1.) then
c paa=(2.635e+4*(1.-pl))/ec2(j)
c pepe=1.-(1.+paa)*exp(-paa)
c pigam=1.-pepe
c else
c pigam=1.
c endif
c sbdl=(sr2(j,i)*2.635e+4)/(eo*1.6e-6)
c pii=exp(-sbdl)
c rkdos=1.-(pii*pigam)
c ckdos=.64*rkdos
c tlpcp(i)=ckuno+ckdos
c efi(j,i)=tlpcp(i)/tlgam(j)
30 write(*,*)j,i,' efi=',efi(j,i)
20 continue
end

```

```

C .....
C PROGRAMA ETSTM.FOR
C programa que calcula eficiencia con el modelo
C TSTM usando D(r) Monte Carlo
C .....
C implicit real*8 (a-h,o-z), integer*4 (i-n)
C
C dimension sll(22),nu(22)
C ENTRA LO DE SE -----
C dimension dosis(22,5000),rad(5000)
co spline es la subrutina de interpolacion que uso, es de
co numerical recipes, cambio el nombre por tspline
C
C ypl es la derivada al inicio de la funcion f(d)
C ypn es la derivada al final de la funcion f(d)
cccc inicia tspline
C INTEGER*4 NP
C PARAMETER(NP=16)
C REAL*8 ypl,ypn,xa(NP),ya(NP),yy2(NP)
C data xa/5.27e+4,2.635e+5,8.775e+5,2.635e+6,8.775e+6,
C * 2.635e+7,8.775e+7,2.635e+8,8.775e+8,2.635e+9,8.775e+9
C */
C data ya/1.00,1.00,1.00,1.42,2.36,2.44,2.36,1.73,
C * 1.0,0.64,0.33/
C data xa/9.80e+4,1.96e+5,3.92e+5,7.83e+5,1.96e+6,
C * 5.97e+6,1.175e+7,2.35e+7,4.70e+7,7.05e+7,1.42e+8,
C * 1.9e+8,2.77e+8,3.28e+8,4.00e+8,4.34e+8/
C data ya/0.99,1.01,1.00,1.22,1.37,1.78,1.77,1.57,
C * 1.23,0.99,0.59,0.43,0.24,0.15,0.05,0.01/
C ypl=0.0
C ypn=-5.05e-11
C ypn=-2.83e-9
C ypn=-1.176e-9
C call tspline(xa,ya,NP,ypl,ypn,yy2)
ccc termina iniciacion tspline
CEBM FIN SE DATOS-----
C open(16,file='size.in',status='old')
C open(18,file='eta.in',status='old')
C open(14,file='int.out',status='unknown')
C read(16,*) ncut
C read(16,*) ncil
C read(16,*) (nu(i),i=1,ncil)
C read(16,*) widel,slwide,widef
C sll(1)=widel
C do 511 nb=2,ncil-1
511 sll(nb)=slwide
C sll(ncil)=widef
C pi=4.*atan(1.)
C ncut=1
C dosal=0.0
C dosaf1=0.0
C do 719 nb=1,22
C nbnb=nu(nb)
C dostot=0.0
C dosal=0.0
C dosaf1=0.0
C dosa=0.0
C dosaf=0.0
C write(14,601)
601 format(//,5x,'slice',1x,'bin',5x,

```

```

&'int d(r)',6x, 'int f(d)d(r) ',//)
do 718 nb1=1,nbnb
  if(nb1.lt.2001)then
    trod=1.
  else
    trod=100.
  endif
  read(18,*)rad(nb1),dosis(nb,nb1)
co   tengo erg/angs cub
co   quiero erg/cm cub
  dosis(nb,nb1)=dosis(nb,nb1)*1.0e+24
co   .....
co   ahora si me interesa calcular etahe,
co   las unidades de dosis son erg/angs cubicos
co   y la f(d) esta en erg/cm cub
co   .....
  if(nb1.lt.ncut)then
    go to 500
  else
    if(nb1.eq.1)then
      dosal=dosis(nb,1)*pi*(rad(1)*1.e-8)**2
      dx1=dosis(nb,1)
      dosaf1=dosal*fd(dx1,yy2)
      dosa=dosal
      dosaf=dosaf1
    else
      dosa=dosa+dosis(nb,nb1)*2*pi*(rad(nb1-1))*1.e-8
&*trod*1.e-8
      dx=dosis(nb,nb1)
      dosaf=dosaf+dosis(nb,nb1)*fd(dx,yy2)
&*2*pi*(rad(nb1-1))*1.e-8*trod*1.e-8
    endif
  endif
c     if(dosis(nb,nb1).ne.0.0)then
c       if(nb.eq.1)then
500    continue
      write(14,602) nb,nb1,dosa,dosaf
c       endif
602    format(3x,2I5,2e15.4)
718    continue
c     .....
c     agrego integral en l , cambiando sll de angstroms a cm
c     .....
      dosal=dosal+dosa*sll(nb)*1.e-8
      dosaf1=dosaf1+dosaf*sll(nb)*1.e-8
      write(14,603)
603    format(/,4x,'slice',6x,'int d(r,l)',5x,
& 'int f(d)d(r,l)',/)
      write(14,604) nb,dosal,dosaf1
604    format(/,3x,I5,2x,2e15.4,/)
719    continue
c     .....
c     calculo etahe, eficiencia relativa
c     entre heavy ion y electrones de rayos x, 35 kvp ?
c     el .94 es de multiplicar por 1 (eta delta gama)
c     y por 33.97/36, (Wgama/Wpcp)
c     .....
      etahe=0.94*(dosaf1/dosal)
      write(14,549) etahe
549    format(/,'relative TL efficiency heavy to electron ='

```

&,e15.4,//)

end

```
real function fd(x,yy2)
implicit integer*4(i-n)
implicit real*8(a-h,o-z)
INTEGER*4 NP
PARAMETER(NP=16)
REAL*8 x,y,yp1,ypn,xa(NP),ya(NP),yy2(NP)
data xa/5.27e+4,2.635e+5,8.775e+5,2.635e+6,8.775e+6,
* 2.635e+7,8.775e+7,2.635e+8,8.775e+8,2.635e+9,8.775e+9
*/
data ya/1.00,1.00,1.00,1.42,2.36,2.44,2.36,1.73,
* 1.0,0.64,0.33/
data xa/9.80e+4,1.96e+5,3.92e+5,7.83e+5,1.96e+6,
* 5.97e+6,1.175e+7,2.35e+7,4.70e+7,7.05e+7,1.42e+8,
* 1.9e+8,2.77e+8,3.28e+8,4.00e+8,4.34e+8/
data ya/0.99,1.01,1.00,1.22,1.37,1.78,1.77,1.57,
* 1.23,0.99,0.59,0.43,0.24,0.15,0.05,0.01/
yp1=0.0
ypn=-5.05e-11
ypn=-2.83e-9
ypn=-1.176e-9
call tspline(xa,ya,NP,yp1,ypn,yy2)
if(x.lt.(4.34e+8))then
if(x.lt.(1.42e+8))then
if(x.lt.(8.775e+9))then
call splint(xa,ya,yy2,NP,x,y)
else
y=0.0
endif
dy=y
if(dy.lt.0.0) dy=0.0
fd=dy
return
END
```

```
SUBROUTINE tspline(x,y,n,yp1,ypn,y2)
implicit integer*4(i-n)
implicit real*8(a-h,o-z)
INTEGER*4 n,NMAX
REAL*8 yp1,ypn,x(n),y(n),y2(n)
PARAMETER (NMAX=500)
INTEGER*4 i,k
REAL*8 p,qn,sig,un,u(NMAX)
if (yp1.gt..99e30) then
y2(1)=0.
u(1)=0.
else
y2(1)=-0.5
u(1)=(3./(x(2)-x(1)))*((y(2)-y(1))/(x(2)-x(1))-yp1)
endif
do 11 i=2,n-1
sig=(x(i)-x(i-1))/(x(i+1)-x(i-1))
p=sig*y2(i-1)+2.
y2(i)=(sig-1.)/p
u(i)=(6.*((y(i+1)-y(i))/(x(i+1)-x(i-1)))-sig*
*1)-x(i))-(y(i)-y(i-1))/(x(i)-x(i-1)))/(x(i+1)-x(i-1))-sig*
*u(i-1))/p
11 continue
```

```

if (ypn.gt..99e30) then
  qn=0.
  un=0.
else
  qn=0.5
  un=(3./(x(n)-x(n-1)))*(ypn-(y(n)-y(n-1))/(x(n)-x(n-1)))
endif
y2(n)=(un-qn*u(n-1))/(qn*y2(n-1)+1.)
do 12 k=n-1,1,-1
  y2(k)=y2(k)*y2(k+1)+u(k)
12 continue
return
END

```

```

SUBROUTINE splint(xa,ya,y2a,n,x,y)
implicit integer*4(i-n)
implicit real*8(a-h,o-z)
INTEGER*4 n
REAL*8 x,y,xa(n),y2a(n),ya(n)
INTEGER*4 k,khi,klo
REAL*8 a,b,h
klo=1
khi=n
1 if (khi-klo.gt.1) then
  k=(khi+klo)/2
  if(xa(k).gt.x) then
    khi=k
  else
    klo=k
  endif
goto 1
endif
h=xa(khi)-xa(klo)
if (h.eq.0.) pause 'bad xa input in splint'
a=(xa(khi)-x)/h
b=(x-xa(klo))/h
y=a*ya(klo)+b*ya(khi)+((a**3-a)*y2a(klo)+
&(b**3-b)*y2a(khi))*(h**2)/6.
return
END

```

RADIAL ENERGY DISTRIBUTIONS IN LiF BY ALPHA PARTICLE IRRADIATION USING MONTE CARLO SIMULATION

O. Avila†, M. E. Brandan‡, F. Salvat§ and J. M. Fernandez-Varea§

†Instituto Nacional de Investigaciones Nucleares

A.P. 18-1027, México 11801 D.F., Mexico

‡Instituto de Física, UNAM

A.P. 20-364, México 01000 D.F., Mexico

§Facultat de Física (ECM), Universitat de Barcelona

Diagonal 647, 08028 Barcelona, Spain

Abstract — Monte Carlo calculations of radial energy distributions in LiF irradiated with protons and alpha particles have been performed coupling ion and electron transport according to the scheme proposed by Martin and Ghoniem. Electron interactions are followed in detail as they slow down and transfer their energy along the material. Results for 1, 2 and 3 MeV protons, 1 and 4 MeV alphas are presented. Their comparison with data in tissue-equivalent gas, Monte Carlo calculations performed in water vapour, and analytical calculations in LiF show that important differences arise from the contribution of dielectric energy loss interactions.

INTRODUCTION

To achieve an adequate application of thermoluminescence dosimetry it is important to understand the processes involved from the irradiation of the material to the final emission of light. The first stage of these processes refers to the energy deposition in the material after irradiation. According to track structure theories^(1,2), the response of a physical, chemical or biological medium to heavy charged particle (HCP) irradiation results mainly from the contribution of the secondary electrons. This means that, in order to evaluate radial energy distributions around the track of the HCP, it is necessary to consider in great detail the contribution of these secondary electrons.

METHOD

An appropriate method to study these processes is by means of Monte Carlo simulation. In this work the scheme proposed by Martin and Ghoniem⁽³⁾ was used to couple ion and electron transport and apply it to LiF. Usually, ion transport^(4,5) is treated using the binary collision approximation and separating the nuclear and electronic energy losses assuming a continuous electronic energy loss to the medium, without following the secondary electron interactions. Due to the relevant role that secondary electrons play in the energy deposition it is important to consider their interactions in detail as they slow down and transfer their energy to the material. In what follows the coupled ion-electron transport scheme is described briefly.

Ion transport is simulated using the Monte Carlo code TRIPOS⁽⁶⁾; the mechanism to generate the secondary electrons is given in detail by Martin and Ghoniem⁽³⁾ and is summarised here. Electrons are generated by HCP with velocities $V > V_{0z}^{2/3}$ (where $V_0 = c/137$);

energy transfers greater than a certain cut-off energy are seen as discrete energy transfers to high energy secondary electrons which will travel a considerable distance away from the ion path. Energy transfers of magnitude less than the cut-off represent continuous energy transfers to electrons close to the ion path. Each HCP will have a certain fraction of its energy available to generate secondary electrons and the Monte Carlo approach is used to assign randomly an energy to a secondary electron. As long as the ion has energy left it will continue to generate electrons until the remaining energy is insufficient. A cut-off energy equal to 0.3 keV was used in the calculations.

Once the secondary electrons are generated their individual interactions are followed, evaluating the energy they transfer to the medium. The interaction mechanisms of electrons with solids may be classified as elastic and inelastic. Elastic processes are those in which an electron interacts with a nucleus of the material changing its direction but with no energy loss associated due to the great mass difference between the electron and the nucleus. Inelastic processes are electron-electron interactions and consist of either ionisation of core electrons or dielectric interactions with the valence electrons. The path length between secondary electron interactions is obtained from:

$$\lambda = -\lambda_{\text{tot}} \ln(\xi) = -(\sum \lambda_i^{-1})^{-1} \ln(\xi) \quad (1)$$

where ξ is a random number between 0 and 1, λ_{tot} is the total mean free path and λ_i are the mean free paths for each kind of interaction. The type of interaction i that takes place is determined randomly, again using the Monte Carlo method as described⁽³⁾ which makes use of the mean free paths associated with elastic, dielectric and core ionisation interactions.

Elastic scattering

Elastic scattering is usually described by a screened Rutherford potential. A more adequate treatment consists in calculating the differential cross section according to the partial wave method. In this work the Rutherford cross section was used but the screening factors for lithium and fluorine were calculated from partial wave total elastic cross sections using the programs described by Salvat and Mayol⁽⁶⁾. The screening factors are calculated for several energies and stored in a table. Every time an elastic interaction takes place, the appropriate screening factor is interpolated. From the cross sections, the values of the mean free paths for an elastic interaction with a lithium or a fluorine nucleus are calculated.

Inelastic scattering

Inelastic interactions have been treated frequently using the theoretical expression given by Bethe⁽⁷⁾ to describe the stopping power of electrons in solids. In this expression all possible modes of excitation which involve an energy loss are represented by the mean ionisation energy J . This is the so-called continuous slowing down approximation, CSDA, and it is approximately valid for electrons with energies greater than 10 keV. Instead, in this work the inelastic contributions to the energy loss are considered discretely.

The ionisation of core electrons within a material represents a significant energy loss mechanism for an ener-

getic electron. These interactions are usually described by the semiclassical approach given by Gryzinski⁽⁸⁾. In this work the more simplified approach used by Fitting et al⁽⁹⁾ is used:

$$-\frac{dE}{ds} = A \frac{1}{E^P} \ln \left[B \frac{E}{I_c} \right] \quad (2)$$

where E is the energy of the secondary electrons and the parameters P and $B \approx 1$. I_c represents the average ionisation energy for the bound shells and A is a group of constants. The values of $I_c = 218$ eV and $A = 240$ eV²/Å were obtained for LiF and used in the calculations. The evaluation of the associated mean free path was approximated as in Ref. 9.

The interaction of electrons with free electrons, valence band electrons and the collective interaction with plasmons can be described by the dielectric energy loss function⁽¹⁰⁾,

$$\frac{\partial^2 \sigma_D}{\partial(\Delta E) \partial \Omega} \sim \frac{1}{q^2} \text{Im} \left(-\frac{1}{\epsilon} \right) = \frac{1}{q^2} \frac{\epsilon_1}{\epsilon_1^2 + \epsilon_2^2} \quad (3)$$

where the polarisable medium is characterised by the complex dielectric constant $\epsilon = \epsilon_1 + i\epsilon_2$ and the electron with energy $E = \hbar^2 k^2 / 2m_e$ suffers an energy loss $\Delta E = \hbar\omega$ connected with a momentum transfer $\hbar q$ and the electron energy after the interaction is $E' = E - \Delta E = \hbar^2 k'^2 / 2m_e$. To describe these interactions the approach given in Ref. 9 was used. The dielectric energy loss is evaluated from the energy loss function, $\text{Im}(-1/\epsilon)$,

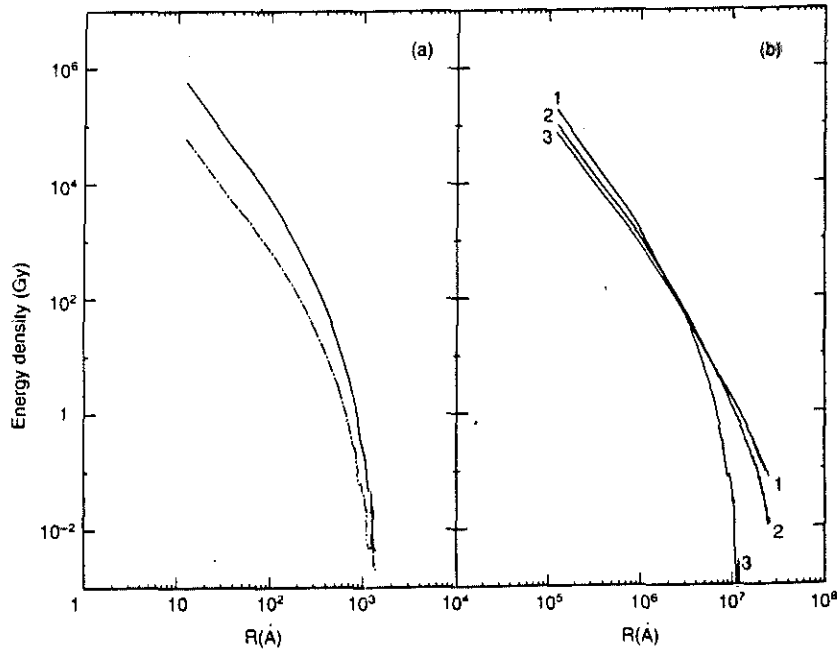


Figure 1. Radial energy density distribution calculated for charged particles stopped in LiF. (a) 4 MeV alphas. The solid line shows this work's calculations described in the text, and the dot-dashed curve represents the effect of subtracting the contribution from dielectric energy losses. (b) This work's calculations for 1, 2 and 3 MeV protons.

which for LiF can be found from optical data given in Refs. 11 and 12. A random number gives the dielectric energy loss ΔE by sorting randomly from the loss function using the sampling routines described in Ref. 13. The dielectric mean free path is obtained from:

$$\frac{1}{\lambda_{\text{incl}}} = \frac{1}{\lambda_D} + \frac{1}{\lambda_c} \quad (4)$$

where λ_{incl} , λ_c and λ_D are the total inelastic, core ionisation and dielectric mean free paths, respectively. The total inelastic mean free path is evaluated using the method described in Ref. 14.

The electrons are followed down to an energy of 200 eV.

Each time an electron loses energy this is accumulated in its geometric position in concentric cylindrical shells around the HCP path. Energy density is obtained for each shell dividing accumulated energy by the shell volume.

RESULTS AND DISCUSSION

Figure 1(a) shows radial energy density distributions for 4 MeV alpha particles in LiF for 1000 ion histories which involve $\approx 10^6$ electrons, this represents a complete track calculation with the alpha particles' initial energy of 4 MeV slowing down and stopping in the medium. Also shown in the figure is a calculation sub-

tracting the contribution of the dielectric energy losses. It may be seen that these inelastic losses in solids contribute significantly to the value of the calculated energy density. In Figure 1(b), curves for 1, 2 and 3 MeV protons show the energy dependence of the radial energy distribution. For increasing initial proton energy, the energy density has a smaller value near the ion track and a larger value far from it, showing that projectiles with higher energy produce secondary electrons which transfer their energy farther away radially. A similar behaviour has been observed for experimental data of 1, 2 and 3 MeV alpha particles in tissue-equivalent gas⁽¹⁵⁾. In Figure 2(a), a track segment calculation using the method described in this work for 1 MeV alphas in LiF is compared with experimental data in tissue-equivalent gas⁽¹⁵⁾ and to Monte Carlo calculations due to Paretzke⁽¹⁶⁾ performed in water vapour. The choice was made to compare calculations in LiF with data in gas and other simulations in water vapour because of the lack of comparable information in solids. Calculations show the largest dose values; this is probably due to the combined effect of the difference in density and the contribution from dielectric energy losses of the secondary electrons in LiF. Figure 2(b) compares a track segment calculation for 4 MeV alpha particles in LiF with analytical calculations by Montret⁽¹⁷⁾ who assumes that the energy deposition of secondary electrons is in the form of ionisation, excitation and vibration. Mon-

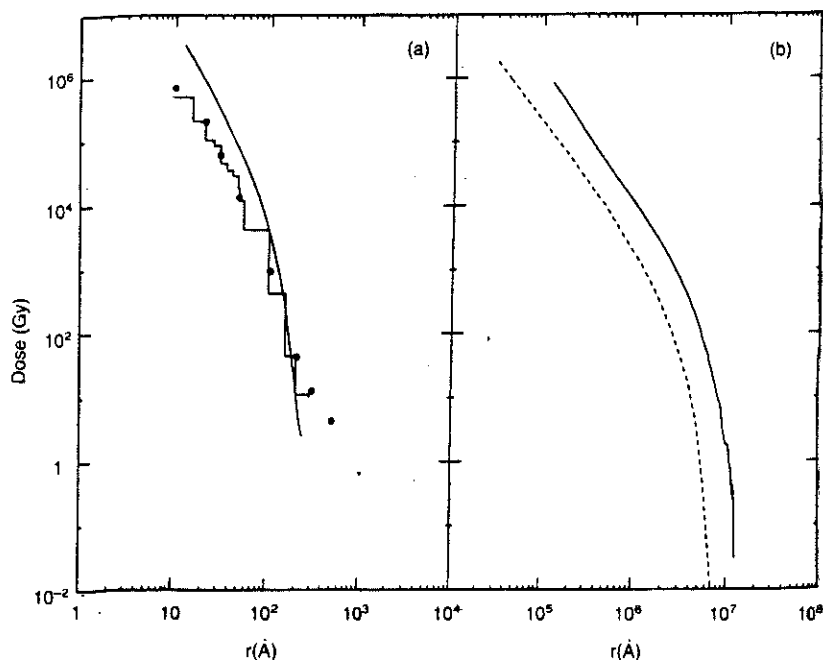


Figure 2. (a) Track segment calculation for 1 MeV alphas in LiF (solid line); data in tissue-equivalent gas⁽¹⁵⁾ (solid dots); and Monte Carlo calculations in water vapour⁽¹⁶⁾ (histogram). (b) Radial dose distribution (track segment) for 4 MeV alpha particles in LiF. The solid line shows the results of the calculations performed in this work, the dashed line shows calculations performed by Montret⁽¹⁷⁾ and discussed in the text.

Montret's calculations were done in water and density-corrected for LiF. A large difference is observed, which may be attributed to other energy loss mechanisms present in solids and considered explicitly in this work.

CONCLUSIONS

Comparing the values obtained for radial dose distributions performing the solid state coupled ion-electron transport scheme described in this work to data and calculations in tissue-equivalent gases, as well as with analytical calculations in LiF, important differences may be appreciated. These consistently suggest larger values of

dose if energy loss contributions of collective interactions are included. These contributions may be relevant in the evaluation of first stage processes in LiF HCP-induced thermoluminescence, and particularly in relation to track structure theory⁽²⁾ applied to thermoluminescence.

ACKNOWLEDGEMENTS

The authors would like to thank R. C. Martin and A. Gras-Marti for helpful discussions. This work is partially supported by CONACYT and DGAPA-UNAM, grant IN100193.

REFERENCES

1. Katz, R., Sharma, S. C. and Homayoonfar, M. *The Structure of Particle Tracks*. In: Topics in Radiation Dosimetry, Suppl. 1. Ed. F. H. Attix (New York: Academic Press) pp. 317-383 (1972).
2. Kalef-Ezra, J. and Horowitz, Y. S. *Heavy Charged Particle Thermoluminescent Dosimetry: Track Structure Theory and Experiments*. Int. J. Appl. Radiat. Isot. **33**, 1085-1100 (1982).
3. Martin, R. C. and Ghoniem, N. M. *Monte Carlo Simulation of Coupled Ion-electron Transport in Semiconductors*. Phys. Status Solid **104**, 743-754 (1987).
4. Ziegler, J., Biersack, J. P. and Littmark, U. *The Stopping and Range of Ions in Solids*, Vol 1 (New York: Pergamon Press) (1985).
5. Chou, P. and Ghoniem, N. M. *Applications of the Monte Carlo Code Triplos to Surface and Bulk Ion Transport Problems*. Nuclear. Instrum. Methods Phys. Res. **B28**, 175-184 (1987).
6. Salvat, F. and Mayol, R. *Elastic Scattering of Electrons and Positrons by Atoms. Schrödinger and Dirac Partial Wave Analysis*. Comput. Phys. Commun. **74**, 358-374 (1993).
7. Bethe, H. *Theorie des durchgangs schneller korpuskularstrahlen durch materie*. Ann. Phys. (Leipzig) **5**, 325-400 (1930).
8. Gryzinski, M. *Classical Theory of Atomic Collisions. I. Theory of Inelastic Collisions*. Phys. Rev. **138**(2A), 336-358 (1965).
9. Fitting, H. J. and Reinhardt, J. *Monte Carlo Simulation of keV-Electron Scattering in Solid Targets*. Phys. Status Solidi a **88**, 245-259 (1985).
10. Raether, H. *Solid State Excitations by Electrons*. Springer Tracts Mod. Phys. **38** (Berlin: Springer-Verlag) pp. 84-102 (1965).
11. Palik, E. D. and Hunter, W. R. *Handbook of Optical Constants in Solids*. Ed. E. D. Palik (New York: Academic Press) pp. 675-693 (1985).
12. Henke, B. L., Lee, P., Tanaka, T. J., Shimabukuro, R. L. and Fujikawa, B. K. *Low-Energy X-ray Interaction Coefficients: Photoabsorption, Scattering and Reflection*. At. Nucl. Data Tables **27**, 1-144 (1982).
13. Fernández-Varea, J. M., Liljequist, D. and Salvat, F. *Sampling Procedures using Optical-data and Partial Wave Cross Sections in a Monte Carlo Code for Simulating Kilovolt Electron and Positron Transport in Solids*. (University of Stockholm, Department of Physics) USIP Report 94-03, pp. 1-35 (1994).
14. Fernández-Varea, J. M., Mayol, R., Liljequist, D. and Salvat, F. *Inelastic Scattering of Electrons in Solids from a Generalized Oscillator Strength Model using Optical and Photoelectric Data*. J. Phys.: Condens. Matter **5**, 3593-3610 (1993).
15. Wingate, C. L. and Baum, J. W. *Measured Radial Distributions of Dose and LET for Alpha and Proton Beams in Hydrogen and Tissue-Equivalent Gas*. Radiat. Res. **65**, 1-19 (1976).
16. Paretzke, H. G. *Radiation Track Structure Theory*. In: Kinetics of Nonhomogeneous Processes, Ed. G. R. Freeman (Toronto: John Wiley) pp. 89-170 (1987).
17. Montret, M. *Distribution Spatiale de l'Energie deposee par des Ions Energetiques dans les Milieux Condenses. Etude par Thermoluminescence*. These, Université de Clermont-Ferrand, France (1980).

Study of the energy deposition in LiF by heavy charged particle irradiation and its relation to the thermoluminescent efficiency of the material

O Avila†||, I Gamboa-deBuen‡ and M E Brandan§

† Instituto Nacional de Investigaciones Nucleares, AP 18-1027, 11801, DF, Mexico

‡ Instituto de Ciencias Nucleares, UNAM, AP 70-543, 04510 DF, Mexico

§ Instituto de Física, UNAM, AP 20-364, 01000 DF, Mexico

Received 7 September 1998

Abstract. The initial energy deposition stage of the thermoluminescent (TL) process is investigated. A coupled ion–electron Monte Carlo (MC) transport code developed for LiF considering its solid-state nature is used to obtain radial dose distributions for incident proton and helium ions at several energies. Models which relate the initial energy deposition to the final TL light emission are used to predict TL efficiencies. Track structure theory (TST) efficiency calculations using the MC radial dose distributions and target sizes of 50, 100 and 150 Å were performed for the total signal of LiF. Comparison with recent high linear energy transfer (LET) efficiency measurements suggests a value for the target size within the interval 50–100 Å. Modified TST (MTST) proton-to-gamma and helium-to-gamma relative TL efficiency calculations were performed with the MC radial dose distributions and 8.1 keV x-rays as test radiation. It is found that both theories show good agreement with the data, though both predict an energy dependence stronger than observed. A ‘core radius’ for a given ion may be found by applying MTST. The importance of the cut-off energy for secondary electron generation in the MC code is discussed. The fraction of ion energy deposited by the secondary electrons around the heavy charged particle (HCP) path obtained from the MC simulation is in accordance with known values. This work includes solid-state effects in the calculated radial dose distributions in LiF providing dose profiles which are necessary for the calculation of efficiency values and may prove to be essential for further understanding of HCP induced thermoluminescence in LiF.

1. Introduction

The thermoluminescent (TL) response of dosimetric materials to heavy charged particles (HCP) is a very complex issue (see, for instance, the work by Horowitz [1, 2]). On the one hand, the response of a given material to a given radiation field is not always linear, generally displaying supralinear and saturation response at the highest doses. On the other hand, the efficiency to HCP exposure depends on radiation quality in ways which have not yet been thoroughly understood, either experimental or theoretically. Interest on this subject was revived recently due to the use of HCP in medical therapy and the need for reliable and practical methods to assess absorbed doses in space flight exposures. In this work, we perform a theoretical investigation of the TL response of lithium fluoride to HCP, involving the energy deposition processes in the solid state. The study is correlated to a series

of measurements performed at Instituto de Física, UNAM [3–6] and aims to provide an overall view of TL response as a function of dose, particle type and energy carried by the incident radiation.

In simple terms, thermoluminescence may be viewed as consisting of an initial stage, in which energy is absorbed by the material, and a final stage, in which light is emitted from the crystal as it is heated. This work is directed towards evaluating the importance of the first stage process, that is, energy deposition in the material, in relation to the final emission of light for cases of very low imparted doses. These two stages are related in terms of the TL efficiency α , which is defined as the ratio of the mean energy emitted as TL light $\bar{\epsilon}_0$, to the mean energy imparted to the TL material by the radiation field, $\bar{\epsilon}$ [7]

$$\alpha = \frac{\bar{\epsilon}_0}{\bar{\epsilon}}. \quad (1)$$

As the TL process in fact involves several complex, intermediate mechanisms prior to the actual emission of

|| Graduate student at CICESE, Mexico.

light, TL research has been concentrated on studying relative TL properties, for instance, TL response to HCP relative to TL response to a reference radiation. Current theoretical models which address the description of HCP TL response in terms of the initial energy absorption by the medium are track structure theory [8] (TST), and modified track structure theory [7] (MTST). TST was first proposed by Katz and Butts in 1967. This theory states that the response of a physical, chemical or biological medium to HCP irradiation results mainly from the contribution of the secondary and higher order electrons generated by the incident radiation. Although weakly ionizing radiation also generates secondary electrons the imparted dose is distributed rather uniformly in the medium, while HCP radiation produces highly localized, almost straight paths, resulting in a very inhomogeneous spatial distribution of dose. TST assumes that differences in HCP response relative to gamma radiation response arise from these spatial differences and offers a specific method to calculate relative HCP-to-gamma TL efficiency, provided some parameters measured from gamma radiation response are known. Usually γ rays from ^{60}Co are used as the reference radiation. [9] outlines the procedure to obtain relative TL efficiency $\eta_{HCP,\gamma}$ according to TST by calculating

$$\eta_{HCP,\gamma} = \frac{TL_{HCP}(D_0)}{TL_{\gamma}(D_0)} \quad (2)$$

where TL_{HCP} and TL_{γ} are the TL signals obtained from HCP and gamma irradiation, respectively, calculated at a low dose D_0 , where the response to both types of radiation is linear. Parameters inherent to this theory are obtained from the experimental measurement of TL response to the reference gamma radiation.

MTST, proposed by Kalef-Ezra and Horowitz [7], modifies TST by arguing that the energy spectra and spatial distribution of radiation produced by HCP secondary electrons is very different from those produced by ^{60}Co gamma radiation. MTST then introduces the use of a 'dose response function' measured using a reference test radiation which simulates, as much as possible, the energy spectra and irradiated volume produced by the secondary electrons arising from the HCP radiation under investigation. MTST states that the relative HCP-to-gamma efficiency $\eta_{HCP,\gamma}$ may be found by

$$\eta_{HCP,\gamma} = \eta_{\delta,\gamma} \frac{\bar{W}_{\gamma} \int_0^{R_{max}} \int_0^{r_{max}} f_{\delta}(D) D(r, l, E) 2\pi dr dl}{\bar{W}_{HCP} \int_0^{R_{max}} \int_0^{r_{max}} D(r, l, E) 2\pi dr dl} \quad (3)$$

where $\eta_{\delta,\gamma}$ is the relative TL response to the secondary electrons of the HCP with respect to the one obtained with ^{60}Co γ rays, $\bar{W}_{\gamma}$ and $\bar{W}_{HCP}$ are the mean energies required to produce an electron-hole pair by the gamma and HCP radiation, respectively, $D(r, l, E)$ is the microscopic radial dose distribution around the HCP path, R_{max} and r_{max} are the maximum axial and radial penetration distances reached at the radiation absorption stage by the charge carriers emitted from the HCP path and $f_{\delta}(D)$ is the measured TL 'dose response function' of the reference test radiation, given by

$$f_{\delta}(d) = \frac{F(D)/D}{F(D_0)/D_0} \quad (4)$$

Here, $F(D)$ is the TL signal obtained at a dose D and $F(D_0)$ is the TL signal obtained at a low dose D_0 where the TL response is linear.

In order to obtain relative TL efficiencies using either TST or MTST it is necessary to know the radial dose distributions $D(r, l, E)$ produced by the secondary electrons around the HCP path. In this work, radial dose distributions in LiF were obtained using a coupled ion-electron Monte Carlo (MC) transport code [10] which considers the solid-state nature of LiF explicitly. We find no previous calculations of $D(r, l, E)$ performed in LiF crystals in the literature. These MC dose distributions were used to predict values of relative HCP-to-gamma TL efficiencies within the realm of the TST and MTST models.

2. Monte Carlo simulation

For heavy charged particles having a few MeV per nucleon, energy deposition in LiF is produced within $\approx 1000 \text{ \AA}$ from the HCP path. Considering these dimensions it has not been possible to measure radial dose profiles in lithium fluoride. Although radial dose distributions in LiF have been obtained from analytical calculations [8, 11–13], from MC calculations performed in water vapour [14, 15] or from experimental measurements in tissue equivalent gases [16] correcting for density, it is important to remember that lithium fluoride detectors consist of crystals with condensed matter characteristics and a fairly ordered structure. Therefore, in addition to energy deposition events arising from ionization and excitation, collective interactions of valence band electrons should be included in a radial dose profile calculation. These considerations lead us to believe that a MC approach in the solid state is an adequate tool to better describe and understand HCP-induced thermoluminescence in LiF. The MC method used to obtain radial dose distributions in LiF was presented in [10] and for completeness it is briefly described again here.

Electron transport is coupled to ion transport following the scheme proposed by Martin and Ghoniem [17], ion transport is simulated as in TRIPOS [18]. The slowing down of ions in solids is described in terms of their nuclear and electronic energy losses. Except at low ion velocities, electronic stopping is the dominant mechanism. For ion velocities $v > v_0 Z_1^{2/3}$ (where $v_0 = c/137$, c is the speed of light and Z_1 is the atomic number of the incident ion) the electronic stopping power is described by the Bethe-Bloch formula.

Usually, ion transport evaluates electronic energy loss as a continuous loss to the medium without following the secondary electrons in detail. As was mentioned before, secondary electrons are responsible for the microscopic energy deposition so it is necessary to follow their interactions in detail along the crystal as they lose energy. The MC approach generates secondary electrons at ion velocities where the Bethe-Bloch formula holds, by introducing a cut-off energy. Energy transfers greater than this cut-off energy are used to generate secondary electrons, while energy transfers smaller than this cut-off are seen as continuous energy losses located near the HCP path.

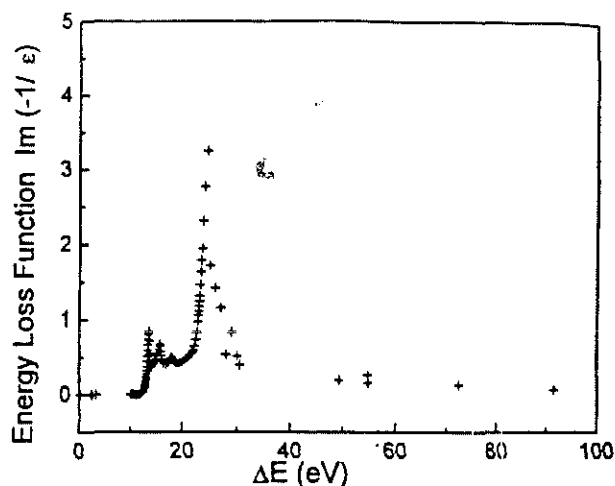


Figure 1. The energy loss function for LiF. From [18].

Applying this method between successive HCP scatterings, a certain fraction of the HCP energy will generate secondary electrons with energies randomly assigned until the ion has no energy left to liberate electrons. A cut-off energy equal to 250 eV was used in these calculations. Once the electrons are generated their individual paths are followed.

Electron interactions with solids consist of elastic and inelastic interactions. Elastic interactions are electron-nuclei interactions with no energy loss associated, but which involve a change in direction. Inelastic electron processes may be classified as interactions which involve the ionization and excitation of core electrons and dielectric energy losses which group together valence electron excitations and collective interactions with plasmons. This is simulated as in [17] introducing parameters obtained for LiF to evaluate core ionizations, and the LiF energy loss function [19] shown in figure 1 to evaluate dielectric energy losses. The MC method decides randomly which kind of electron interaction takes place, if it is elastic it calculates the change in direction, if it is inelastic it calculates both the change in direction and the energy loss associated depending on it being a core ionization or a dielectric process. Electrons are followed down to an energy of 50 eV. Each time an electron loses energy this is accumulated in concentric cylindrical shells around the HCP path. Energy density is obtained dividing the accumulated energy within each shell by the shell volume. The results presented later have been converted to absorbed dose (energy deposited per unit mass) in order to provide an easier comparison with the 'dose response function' $f_d(D)$ which is presented as a function of dose.

Results from the MC calculations, at different stages in the simulation procedure, have the following characteristics:

- (i) ion ranges for the HCP in this study (see [18]) were found to fall within 2% of those given by TRIM [20].
- (ii) Energy spectrum and yield of secondary electrons agrees with experimental values obtained in a gas as illustrated in figure 2 where the energy spectrum of secondary electrons from 1 MeV protons in LiF obtained with the MC code are drawn together with measurements by Toburen [21] in nitrogen gas.

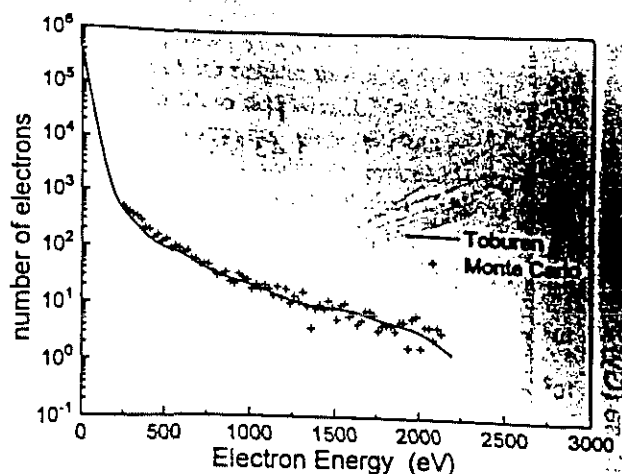


Figure 2. The energy spectrum of secondary electrons. The full curve represents the measured [21] cross section for electrons ejected by 1 MeV protons in N_2 . The crosses represent the number of electrons generated by 10 000 histories of 1 MeV protons in LiF.

- (iii) It was found, as expected, that for complete track calculations, where the incident HCP deposits all its energy in the crystal, the amount of energy used to generate secondary electrons equals the total energy deposited around the HCP path by the delta rays.
- (iv) The effect of the ion stopping power dE/dx along a complete track may be visualized in figure 3 where $D(r, z, E)$ for eight slices in the direction of the beam (z) are shown for 1.43 MeV protons incident on LiF. As expected, as the ion travels further inside the crystal and its energy decreases, its stopping power increases reaching a maximum as it approaches the energy of the Bragg peak.
- (v) Simulated electron ranges, meaning total pathlength, agree within 3% with those calculated using the MC programmes for electron interactions in solids described in [22].

Figure 4 illustrates the radial dose distribution calculated for a track-segment of 4 MeV helium ions in LiF obtained by two methods, the solid state MC procedure described in this work and an analytical calculation performed in water vapour and density corrected for LiF [23]. A track-segment calculation corresponds to a very thin detector where the HCP loses a negligible amount of energy. The large differences observed in the radial dose distributions obtained from the two different approaches stress the importance of including solid-state effects in the calculation.

The correct statistics for the MC calculations were determined by choosing a number of HCP histories that produced dose profiles independent of the seed and equivalent with ones produced with an even greater number of ion histories. This was around 10^4 HCP histories, leading typically to some 10^7 electron histories for a low-energy proton.

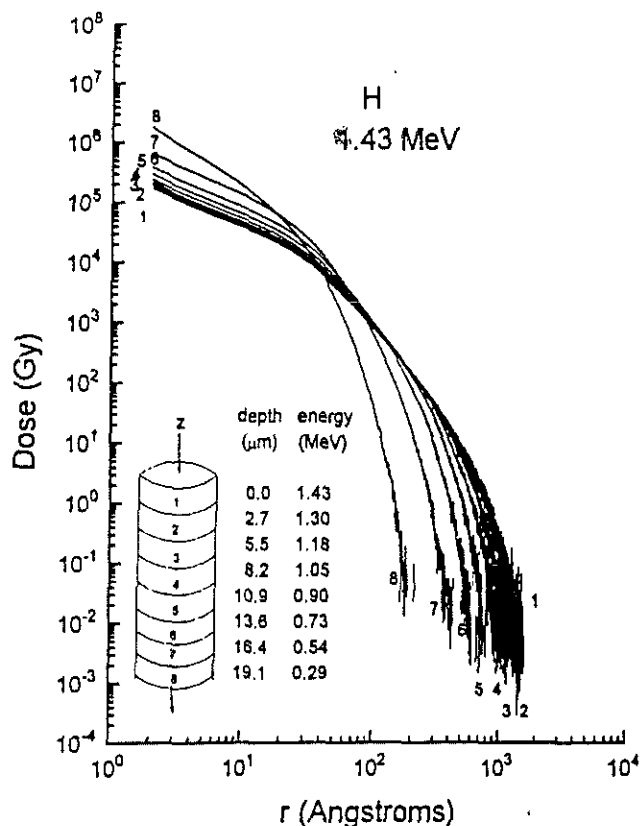


Figure 3. The radial dose distributions of 1.43 MeV protons in LiF. The total distance along the z direction was divided into eight slices as shown. Labels on the curves refer to the slice number. The mean proton energy when entering each slice is indicated as a function of depth in LiF. The projected range is 21.2 μm . 1 Gy corresponds to 2.635×10^{-20} erg $\text{\AA}^{-3}$ in LiF ($\rho = 2.635$ g cm^{-3}).

3. Results

3.1. Relative TL efficiencies, according to track structure theory

As mentioned previously, TST provides a method to evaluate relative TL efficiencies. TST assumes that the irradiated medium consists of a set of sensitive volume elements of target size a_0 which may be activated after irradiation through 'c-hit' processes with probabilities following Poisson statistics. The parameters which enter into the probability calculations are the characteristic dose E_0 , the hittedness c and the target size a_0 . Applications of TST to LiF:Mg,Ti [9] have shown that peak 5 in the TL glow curve, which has a linear-supralinear response, may be considered to consist of a (1 + 2)-hit mixture. In [9] Waligórski and Katz developed the formalism to calculate the response of a two-component c-hit detector in terms of their respective sets of parameters: (c_1, E_{01}, R) and $(c_2, E_{02}, 1 - R)$ with R and $(1 - R)$ representing the relative contributions of the 1-hit and 2-hit components.

Gamboa-deBuen *et al* [6] measured the γ response of TLD-100 detectors to ^{60}Co irradiation and found fitted values of the characteristic dose E_0 and relative contributions for 1-hit and 2-hit components of the total TL signal, peak 5 and peak 7, all of which show linear-supralinear behaviour as a function of dose. Using these values, we have calculated

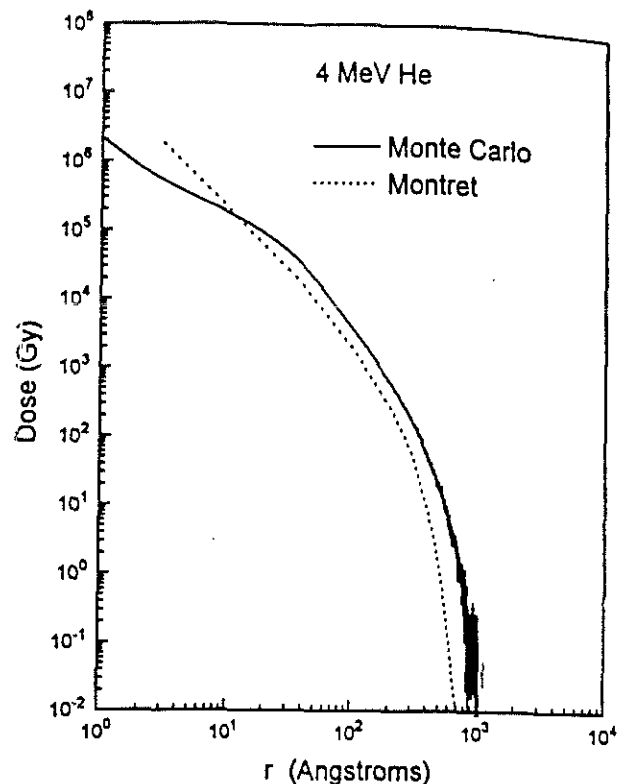


Figure 4. The track-segment radial dose distribution for 4 MeV helium ions in LiF. The full curve is calculated from the Monte Carlo simulation. The broken curve is an analytical calculation [23] in water vapour, density corrected for LiF.

TL_{γ} in equation (2) according to the method described in [9]. In order to evaluate TL_{HCP} , it is also necessary to calculate the 1- and 2-hit activation cross sections which depend on 1- and 2-hit activation probabilities, which in turn are obtained from radial dose distributions. In this work, TST efficiency calculations were performed using the radial dose profiles obtained through the MC simulation and applying the method given by Hansen and Olsen [12] to evaluate average dose to the sensitive element with radius a_0 in order to have an extended dose distribution. Complete track calculations were performed for target size values equal to 50, 100 and 150 $\text{\AA}$ for protons and helium ions in LiF and they are shown in figure 5. Since the ion track has a conic shape, in order to use in the dose calculations the correct irradiated mass, the ion track length was divided into 10 slices of different radial extent and values of activation cross sections were found for each of them, integrating along the axial direction to obtain TL_{HCP} . It was found that by further increasing the number of slices rendered activation cross-section values did not change.

3.2. Relative TL efficiencies, according to modified track structure theory

To obtain relative TL efficiencies MTST proposes performing the convolution of the dose deposited by secondary electrons around the HCP track with the dose response function $f_d(D)$ produced by a test reference radiation which simulates the energy spectrum and volume distribution of the secondary electrons produced by the HCP. Once $f_d(D)$ is known, expression (3) must be evaluated. The calculations were

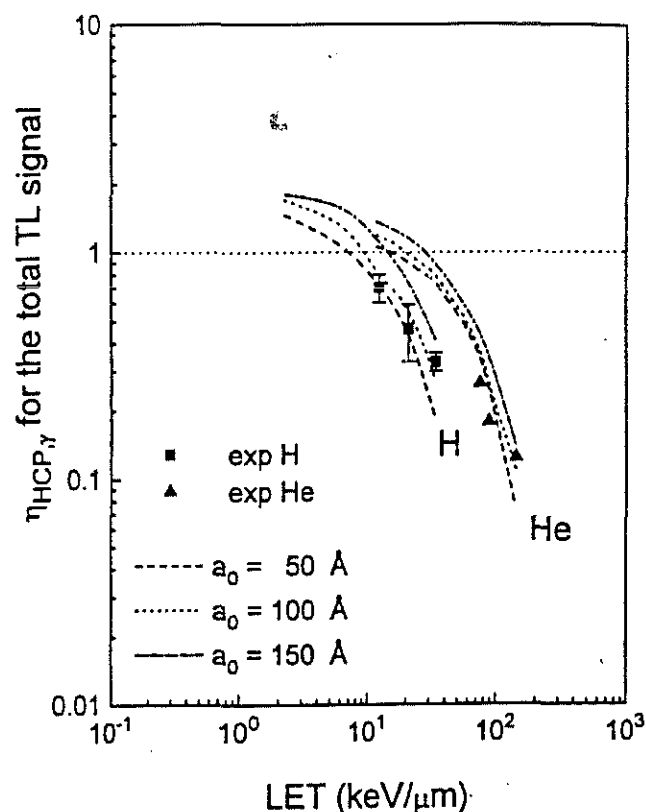


Figure 5. Proton-to-gamma and helium-to-gamma relative LiF TL efficiencies against LET in water compared to TST. Squares are experimental values [4, 5] at 0.7, 1.4 and 2.9 MeV proton energies and triangles are data for 2.6, 4.9 and 6.8 MeV helium energies [25]. Helium experimental uncertainties are smaller than the plotting symbols. Dashed, dotted and dash-dotted curves are complete track TST calculations assuming different target sizes and MC radial dose distributions in LiF.

performed using 8.1 keV effective energy x-rays as the reference test radiation. Its dose response function $f_d(D)$ was measured by Gamboa-deBuen *et al* [6] and it is shown in figure 6. It can be observed that, according to its definition in equation (4), the TL response to this radiation is linear up to ≈ 15 Gy, then becomes supralinear up to 2.6×10^3 Gy, and slowly decreases for higher doses. The values of the average energy required to produce an electron-hole pair used were $\bar{W}_\gamma = 33.97$ eV [24] and $\bar{W}_{HCP} = 36.0$ eV [11]. The value of $\eta_{d,\gamma}$ was set equal to 0.97 as Kalef-Ezra and Horowitz [7] have suggested. Again, to obtain relative TL efficiencies with this model the radial dose distributions calculated with the MC code and 10 slices were used for integration in the axial direction.

3.3. Experimental TL efficiencies

The experimental relative TL efficiency is defined as [2]

$$\eta = \frac{(RTL/D_0)_k}{(RTL/D_0)_l} \quad (5)$$

where RTL represents the TL response per unit irradiated mass measured at a low-dose D_0 where the response is linear, subscripts k and l refer to the radiation under study (HCP) and a reference low LET radiation, respectively. Measurements of LiF:Mg,Ti (TLD-100) relative TL efficiencies for 0.7, 1.4

and 2.9 MeV proton energies and 2.6, 4.9 and 6.8 MeV helium energies with respect to γ rays from ^{60}Co have been performed at Instituto de Física, UNAM, Mexico [3–6, 25]. All these measurements were performed in the same laboratory following a common procedure for annealing, irradiation, reading and deconvolution. Efficiencies for the total signal are found from the TL response obtained when heating the crystals from room temperature up to 400°C [4].

4. Discussion

Figure 5 shows TST efficiency predictions against LET in water. The overall agreement is good, in spite of the softer energy dependence shown by the data. A target size between 50 and 100 Å gives the best description of the observations.

Figure 7 shows MTST efficiency against LET in water. We can interpret these results based on equation (3), the radial dose profiles and the function $f_d(D)$ in figure 6. Doses larger than about 2×10^4 Gy (assumed dose value for which $f_d(D)$ tends to zero) are multiplied in the numerator of equation (3) by a small factor, meaning that doses very near the ion path do not contribute significantly to the efficiency. In fact, for 1.43 MeV protons we find that half of the dose is deposited at radii smaller than 50 Å, while half of the efficiency (equation (3)) arises from regions between 30 and 110 Å. The effect of $f_d(D)$ has been, on the one hand to eliminate contributions from the 'core' of the track, and on the other, to enhance those from an intermediate radial region. The final efficiency is the result of a complex interplay between the profile of dose deposition and the dose response function.

One can define a 'core radius' that limits the region near the ion path with doses greater than the high dose value for which $f_d(D)$ tends to zero. As discussed before, energy deposited within the core radius will not contribute to the efficiency. This core radius varies as a function of penetration distance. From the MC radial dose distributions for complete tracks we find for instance, for 6.8 MeV helium ions a core radius going from 42 to 59 Å as a function of depth and for 2.9 MeV protons a core radius which goes from 12 to 35 Å. Kaplan and Mitrev [26], estimated an ion core radius for 10 MeV helium ions in water, based on analytical calculations that take into account the ion velocity and the lowest transition energy involved in the excitation of a molecule by the primary ion. They obtain $0.7 \mu\text{g cm}^{-2}$ while our result for this case is $0.9 \mu\text{g cm}^{-2}$, in overall agreement.

Agreement between calculated and experimental efficiencies is good, and MTST calculations—as did TST—predict a steeper dependence of the efficiency on the LET than the measurements. These results are influenced by the chosen value of the cut-off energy for secondary electron generation in the MC procedure. As mentioned previously, results shown in this work were performed with a cut-off energy equal to 250 eV. This means electrons are generated with energies between 250 eV and the maximum energy transfer according to the HCP energy. This cut-off value provided optimum agreement with the efficiency measurements of both proton and helium ions. Variation of the cut-off value between 80 and 300 eV results in $\approx 20\%$ variation of the predicted efficiency when using MTST. Roughly, increasing

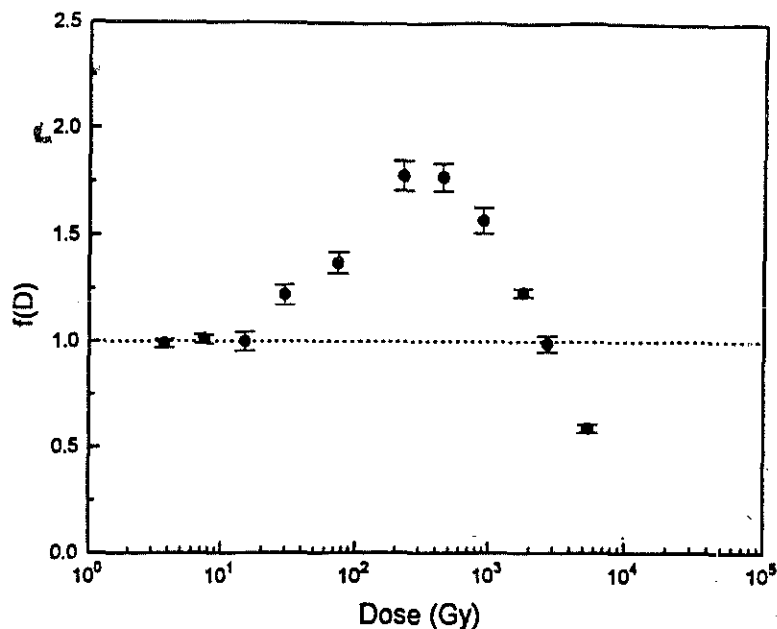


Figure 6. The dose response function $f(D)$ for the total signal induced by 8.1 keV x-rays incident on TLD-100. From [6].

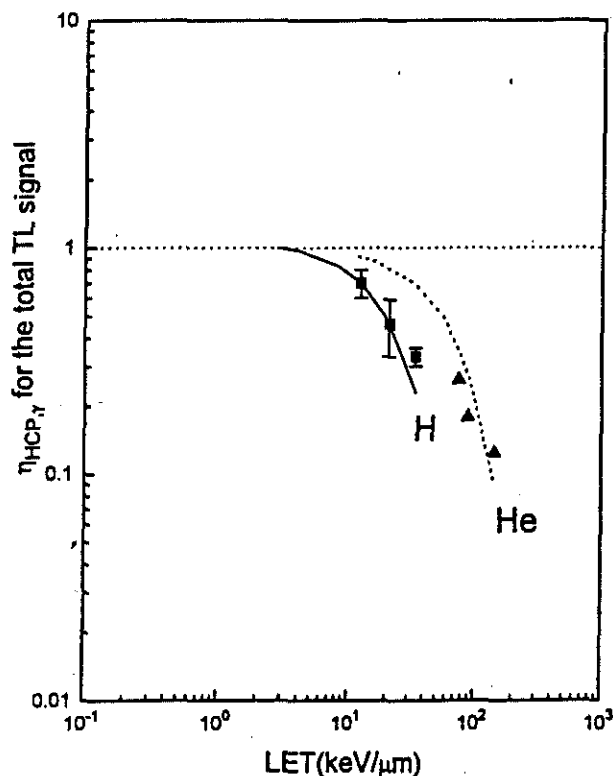


Figure 7. Proton-to-gamma and helium-to-gamma relative LiF TL efficiencies against LET in water compared to MTST. Squares are experimental values [4, 5] at 0.7, 1.4 and 2.6 MeV proton energies and triangles are data for 2.6, 4.9 and 6.8 MeV helium energies [25]. The full and broken curves are complete track calculations according to MTST for proton and helium, respectively. MC radial dose distributions in LiF and $f(D)$ from 8.1 keV x-rays were used in the calculations.

the cut-off energy results in greater efficiency, though the value obtained comes from a delicate balance between the numerator and denominator in equation (3). The TST formalism showed to be insensitive to the particular choice of the cut-off energy in the MC simulation.

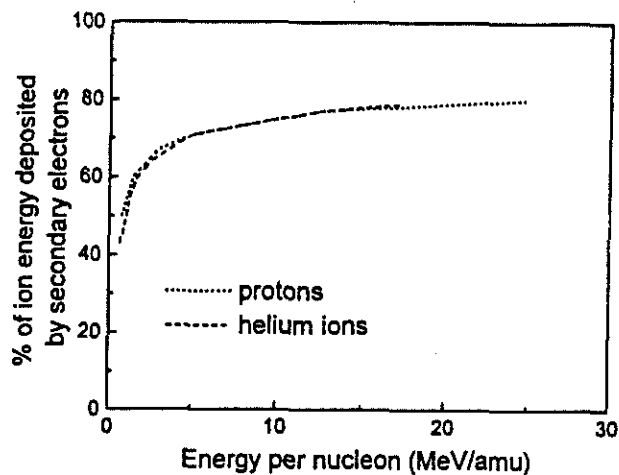


Figure 8. The percentage of incident proton and helium energy that is used to generate secondary electrons by the Monte Carlo simulation in a complete track calculation as a function of the incident ion energy.

The cut-off value also determines the per cent of initial ion energy that will be used to generate secondary electrons and, therefore, will be deposited around the ion path. The fraction of ion energy that is released via kinetic energy of secondary electrons for ions with energy in the range 0.5–100 MeV/u is known to be around 65–75% [27]. The fraction of ion energy deposited by the secondary electrons in our calculations are shown in figure 8. These values are similar to those expected.

In a previous work, Horowitz and Kalef-Ezra [28] used a different $f_s(D)$ measured after exposure of LiF (Harshaw TLDs) to tritium beta particles ($E_{max} = 18$ keV). The use of their $f_s(D)$ together with our radial dose profiles resulted in efficiencies greatly different from our experimental values. This may simply argue in favour of the well known advice of performing the complete work under the same experimental protocol.

In summary, the overall magnitude of ISI and MISTI predictions agree with the measurements, as figures 5 and 7 have shown. However, both models, which assume that TL efficiency depends only on the radiation absorption stage, predict a steeper LET dependence than observed at the lowest energies.

The recent work of Geiss *et al* [29] has reported measurements and analytic calculations of relative TL efficiency for the TLD-700 dosimeter exposed to a variety of heavy ion-beams. The general features of the dependence of efficiency with LET agree with the results presented in this work.

The method presented in this work provides us with solid-state radial dose distributions in LiF, which are necessary for the calculation of efficiency values, and may prove to be essential in order to acquire further insight in the understanding of HCP induced processes. Reliable efficiency measurements as a function of LET are badly needed, as well as further investigations involving the heating stage, in order to better understand thermoluminescence after HCP exposure.

Acknowledgments

The authors wish to thank F Salvat and J M Fernández-Varea for helpful discussions regarding electron transport in solids. This work was partially supported by DGAPA-UNAM, grant No IN100396 and CONACYT, grant Nos 88648 and 940158.

References

- [1] Horowitz Y S 1981 The microdosimetric and theoretical basis of thermoluminescence and applications to dosimetry, *Phys. Med. Biol.* **26** 765–824
- [2] Horowitz Y S 1984 *Thermoluminescence and Thermoluminescent Dosimetry* vol 2 (Boca Raton, FL: CRC Press)
- [3] Gamboa-deBuen I, Buenfil A E, Rodríguez-Villafuerte M, Ruiz C G, Zárate-Morales A and Brandan M E 1996 Supralinearity in the response of TLD-100 to 5.3 MeV alpha particles *Radiat. Prot. Dosim.* **65** 13–16
- [4] Gamboa-deBuen I, Ruiz C G, Oliver A, López K and Brandan M E 1998 Measurement of the thermoluminescent response (supralinearity and efficiency) of LiF: Mg,Ti exposed to 0.7 MeV protons *Nucl. Instrum. Methods B* **134** 136–48
- [5] Avilés P, Gamboa-deBuen I, Rodríguez-Villafuerte M, Buenfil A E, Ruiz C, López K and Brandan M E 1998 Thermoluminescent response of TLD-100 to low energy protons *Proc. II Mexican Symp. on Medical Phys. (Mexico City) (AIP Conf. Proc. 440)* ed G Herrera-Corral *et al* (New York: AIP) pp 15–33
- Avilés P 1998 Respuesta termoluminiscente de LiF:Mg,Ti irradiado con protones de 1.5 y 3 MeV *MSc Thesis* Universidad Nacional Autónoma de México unpublished
- [6] Gamboa-deBuen I, Buenfil A E, Ruiz C G, Rodríguez-Villafuerte M, Flores A and Brandan M E 1998 Thermoluminescent response and relative efficiency of TLD-100 exposed to low energy x-rays *Phys. Med. Biol.* **43** 2073–83
- [7] Kalef-Ezra J and Horowitz Y S 1982 Heavy charged particle thermoluminescence dosimetry: track structure theory and experiments *Int. J. Appl. Radiat. Isot.* **33** 1085–100
- [8] Butts J J and Katz R 1967 Theory of RBE for heavy ion bombardment of dry enzymes and viruses *Radiat. Res.* **30** 855–71
- [9] Waligórski M P R and Katz R 1980 Supralinearity of peak 5 and peak 6 in TLD-700 *Nucl. Instrum. Methods* **172** 463–70
- [10] Avila O, Brandan M E, Salvat F and Fernández-Varea J M 1996 Radial energy density distributions in LiF by alpha particle irradiation using Monte Carlo simulation *Radiat. Prot. Dosim.* **65** 37–40
- [11] Fain J, Monnin M and Montret M 1974 Spatial energy distribution around heavy-ion path *Radiat. Res.* **57** 379–89
- [12] Hansen J W and Olsen K J 1984 Experimental and calculated response of a radiochromic dye film dosimeter to high LET radiations *Radiat. Res.* **97** 1
- [13] Waligórski M P R, Hamm R N and Katz R 1986 The radial distribution of dose around the path of a heavy ion in liquid water *Nucl. Tracks Radiat. Meas.* **11** 309–19
- [14] Paretzke H G 1973 Comparison of track structure calculations with experimental results *Proc. 4th Symp. on Microdosimetry (Pallanza)* ed J Booz *et al* (EUR-5122 d-e-f) pp 141–65
- [15] Kramer M and Kraft G 1994 Calculations of heavy-ion track structure *Radiat. Environ. Biophys.* **33** 91–109
- [16] Wingate C and Baum J W 1976 Measured radial distributions of dose and LET for alpha and proton beams in hydrogen and tissue equivalent gas *Radiat. Res.* **65** 1–19
- [17] Martin R C and Ghoniem N M 1987 Monte Carlo simulation of coupled ion-electron transport in semiconductors *Phys. Status Solidi a* **104** 743–54
- [18] Chou P and Ghoniem N M 1987 Applications of the Monte Carlo code TRIPOS to surface and bulk ion transport problems *Nucl. Instrum. Methods B* **28** 175–84
- [19] Palik E D and Hunter W R 1985 *Handbook of Optical Constants in Solids* ed E D Palik (New York: Academic) pp 675–93
- [20] Biersack J P and Ziegler J F 1989 *TRIM* Version 92.12
- [21] Toburen L H 1971 Distributions in energy and angle of electrons ejected from molecular nitrogen by 0.3 to 1.7 MeV protons *Phys. Rev. A* **3** 216–28
- [22] Fernández-Varea J M, Liljequist D, Csillag S, Rätty R and Salvat F 1996 Monte Carlo simulation of 0.1–100 keV electron and positron transport in solids using optical data and partial wave methods *Nucl. Instrum. Methods B* **108** 35–50
- [23] Montret M 1980 Distribution spatiale de l'énergie déposée par des ions énergétiques dans les milieux condensés. Etude par thermoluminescence *Thèse Université de Clermont-Ferrand II* France unpublished
- [24] Attix F H 1986 *Introduction to Radiological Physics and Radiation Dosimetry* (New York: Wiley)
- [25] Brandan M E *et al* Collaboration between UNAM, Mexico and Ben Gurion University, Israel, Work in progress
- [26] Kaplan I G and Miterov A M 1987 *Advances in Chemical Physics* vol 68, ed I Porigogine and S A Rice (New York: Wiley) p 369
- [27] Paretzke H G, Goodhead D T, Kaplan I G and Terrisol M 1995 *Atomic and Molecular data for Radiotherapy* (Vienna: IAEA) ch 9
- [28] Horowitz Y S and Kalef-Ezra J 1980 Relative thermoluminescent yield of heavy charged particles: theory and experiment *Nucl. Instrum. Methods* **175** 29–30
- [29] Geiss O B, Krämer M and Kraft G 1998 Efficiency of thermoluminescent detectors to heavy charged particles *Nucl. Instrum. Methods B* **142** 592–8

