

Benemérita Universidad Autónoma de Puebla

FACULTAD DE CIENCIAS FISICO MATEMATICAS

LICENCIATURA EN FISICA

Simulación computacional de Detector de Fotón único

TESIS

PARA OBTENER EL TITULO DE LICENCIADO EN FISICA

PRESENTA

Omar Rodrigo García García

DIRECTORES DE TESIS

Dr. Eduardo Moreno Barbosa

Dr. Javier Miguel Hernández López

PUEBLA, PUE.

DIC 2018

Dedicatoria

A todos mis seres amados quienes me dieron el soporte necesario para terminar este trabajo.

Agradecimientos

Quiero agradecer a mis asesores, los Dres. Eduardo Moreno Barbosa y Javier Miguel Hernández López por su guía y arduo esfuerzo a lo largo de este trabajo que fue posible lograr gracias a ellos.

Índice

Introducción.....	1
1. Capítulo 1 Detectores de partículas basados en semiconductores	3
1.1.Física de semiconductores.....	3
1.1.1. Estructura cristalina.....	3
1.1.2. La teoría de bandas.....	5
1.1.3. Interacción de radiación con la materia y generación de transportadores de carga en semiconductores.....	9
1.1.4 Adición de cargas libres: Dopaje y defectos en la estructura cristalina de Semiconductores.....	13
1.1.5. Recombinación y vida media de transportadores.....	16
1.2. Dispositivos a base de semiconductores.....	17
1.2.1 Semiconductores como detectores de radiación.....	20
1.3 Proyecto Medipix.....	22
2. Capítulo 2 Simulación computacional vía método Montecarlo.....	25
2.1.Introducción y motivos para el uso de métodos Montecarlo.....	25
2.2.Implementación computacional de generadores de números aleatorios.....	28
2.2.1 Técnicas de muestreo.....	29
2.3 Aplicación de técnicas Montecarlo en física medica: simulación del transporte de radiación a través de la materia.....	31
2.3.1. Modelación para el mecanismo de transporte.....	32
2.3.2. Transporte en medios homogéneos y uniformes.....	35
2.3.3. Transporte de fotones.....	36
2.3.4. Transporte de electrones.....	38
3. Capítulo 3 Procedimiento y metodología.....	41
3.1.Geant4.....	41
3.1.1. Funcionamiento general de Geant4.....	42
3.1.2. Procesos físicos en Geant4.....	44
3.2.Arreglo experimental.....	46
3.2.1. Implementación.....	46
3.2.2 Error estándar de la distribución espacial.....	49
3.2.3 pruebas de volumen y voltaje.....	52
4. Capítulo 4 Conclusiones.....	56
Bibliografía.....	57

Simulación computacional de Detector de Fotón único

2019

Introducción

Para poder abordar un problema físico en la actualidad es posible utilizar cuantiosos y diversos métodos, uno de ellos y el que ha probado ser de muy alta utilidad de manera contundente es la simulación computacional; que tiene la ventaja de poder modelar experimentos en condiciones de laboratorio y ponerlos a prueba haciendo uso de los marcos teóricos más recientes con el fin de obtener resultados lo más cercanos posibles a la realidad, y al mismo tiempo, al no estar una simulación restringida por las mismas leyes Físicas que el mundo real se puede sacar provecho de esto para concentrarnos en los aspectos más importantes del estudio y ahorrarse mucho trabajo que se traduce en tiempo y eficiencia que otros métodos no ofrecen, o incluso estudiar de manera detallada aspectos que no podrían ser observados en un experimento convencional . Además siendo este un método predictivo, se puede por ejemplo revisar la viabilidad de un experimento incluso antes de realizarlo, es más, repetir un experimento una cantidad enorme de veces en un tiempo relativamente corto, que ahorraría muchas horas de trabajo en un laboratorio y hace que recolectar estadísticas sea una operación menos laboriosa.

Por otra parte una de las áreas de investigación de mayor interés en la actualidad es la medicina, en la medida en la que se pueda prevenir y diagnosticar enfermedades a tiempo para procurar un tratamiento adecuado es que el paciente tendrá una mejor perspectiva de vida y bienestar, y es ahí donde cobra relevancia y utilidad la física. Una de las áreas de desarrollo científico es la utilización de radiación para el tratamiento de enfermedades y diagnóstico, en principio, en la forma de imagen médica. Para esto se pueden aprovechar diferentes mecanismos en los que partículas interactúen con los materiales biológicos y transmitirán información sobre el medio, la detección de estas partículas entonces es de fundamental importancia ya que se requiere de la precisión más delicada posible y de la eliminación de posibles fuentes de errores y ruido. Es por esto que desde el descubrimiento de los materiales semiconductores, su posterior utilización como detectores de radiación en física de partículas y el continuo refinamiento en la microelectrónica han hecho viables su uso y disponibilidad no solo en ambientes restringidos de investigación de punta para altas energías, sino en estudios más generales y enfocado a explorar sus aplicaciones en otras áreas. Esto motiva a preguntarnos si es posible utilizar este tipo de detectores como sensores de rayos X, que es el principal método de imagen médica, y aprovechar las ventajas que ofrecen estos detectores para que puedan ser considerados en un futuro como candidatos para radiografías digitales.

Haciendo uso de los conocimientos en física de semiconductores y simulación computacional, este trabajo de tesis está enfocado a modelar un detector delgado de estado sólido y ponerlo a prueba en condiciones médicas para corroborar que en efecto es posible generar radiografías con él, caracterizar la respuesta que tiene este modelo al variar ciertos parámetros internos y encontrar una configuración de características físicas del sensor que hagan optima la detección de rayos X.

Capítulo 1: Detectores de partículas basados en semiconductores

El descubrimiento de los materiales semiconductores a mediados del siglo XX, y su posterior uso en la gran mayoría de la electrónica moderna, significó un avance revolucionario no solo en el desarrollo tecnológico y científico sino en la vida cotidiana. Las propiedades únicas de estos materiales hacen que su aplicación sea particularmente versátil para diversos campos de investigación, desde ingeniería, electrónica, industria hasta física nuclear, astronomía, física de materiales etc. El presente trabajo se enfocará en su uso como detectores de radiación cuya energía cae en el rango utilizado para aplicaciones médicas y en específico el tipo de detectores de pixeles semiconductores de fotón único y su potencial para imágenes médicas con rayos X.

1 Física de semiconductores

1.1.1 Estructuras cristalinas

El tipo de semiconductores más comunes y de especial interés para el presente trabajo son aquellos compuestos a base de silicio, que pertenece al grupo químico 14. Los elementos de este grupo tienen la característica particular de poseer exactamente cuatro electrones en su capa atómica más externa y así, la capacidad de formar estructuras cristalinas con enlaces covalentes. (Lutz, 2007)

Una cristal está definido como una estructura periódica en la que sus bloques constituyentes son idénticos; para entender esta estructura es importante definir dos conceptos: la *red de Bravais* que es un conjunto infinito de puntos espaciales que determinan el ordenamiento periódico de los componentes del cristal, esta es una abstracción matemática ya que en realidad no existen estructuras infinitas y solamente son útiles para hacer una descripción estructural del cristal; en los cristales naturales estas redes siempre presenta algún tipo de simetría que las hace invariantes ante operaciones de traslación y rotación, sin embargo se han fabricado cristales sintéticos que no tienen grupos de simetría y esto les da características electrónicas particulares. Las *bases* que son grupos de átomos ligados a cada punto de la red, cabe destacar que también átomos singulares pueden ser bases para la red; en conjunto estos dos elementos conforman a la estructura cristalina (Mishra Umesh K. & Singh, 2008) En particular el grupo básico de la red cúbica simple, con cuatro puntos en las esquinas de un cubo, y aquellas más complejas que pueden ser construir a partir de esta, por ejemplo, con un punto extra en el centro del cubo (Kittel, 2005)

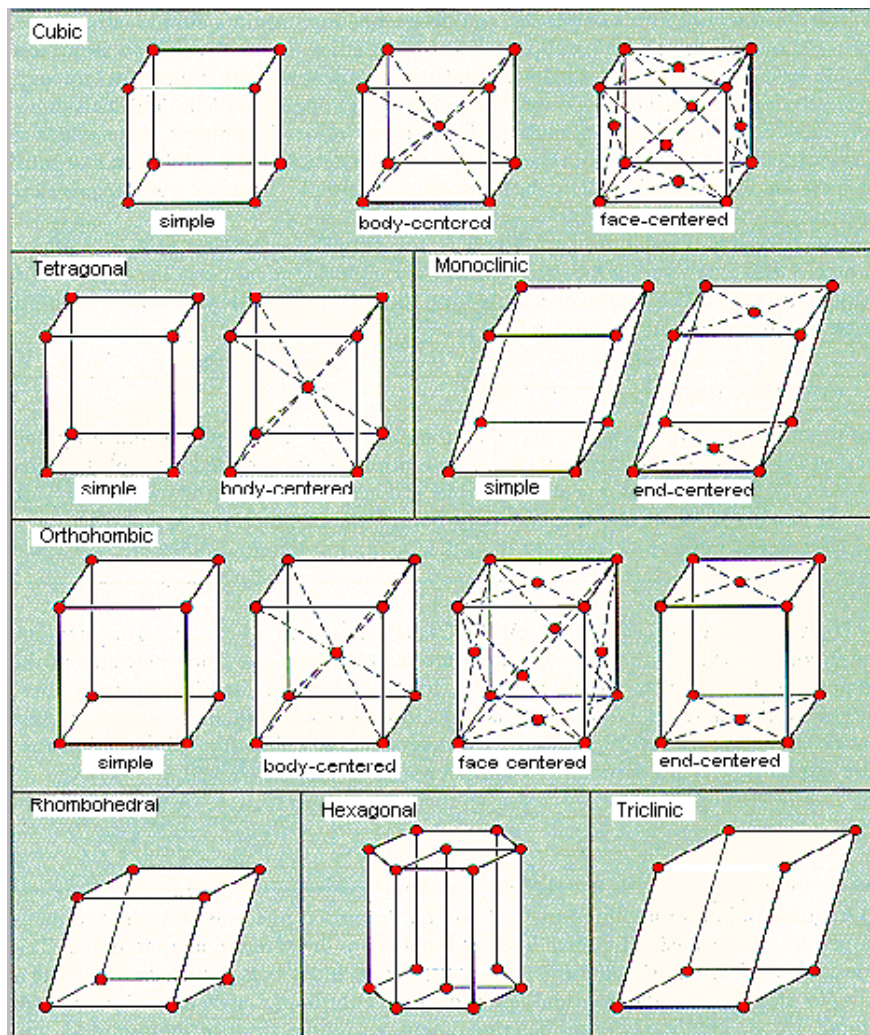


Figura 1.1: Redes de bravías, imagen obtenida de:

<http://chemed.chem.purdue.edu/genchem/topicreview/bp/ch13/unitcell.php>

La configuración cúbica tipo diamante (en el caso de materiales compuestos se le conoce como unión de zinc) es una de las más importantes ya que tanto los materiales semiconductores puros, por ejemplo el germanio y el silicio, como los materiales compuestos, el arseniuro de galio GaAs por citar un caso, siguen este ordenamiento especial. Esta configuración es una de las más fuertes estructuralmente, lo que permite una amplia variedad de presentaciones físicas macroscópicas, y brinda una amplia gama de posibilidades. Además, como veremos más adelante, el ordenamiento cúbico facilita enormemente la movilidad de portadores de corriente haciéndolo idóneo para procesos de medición.

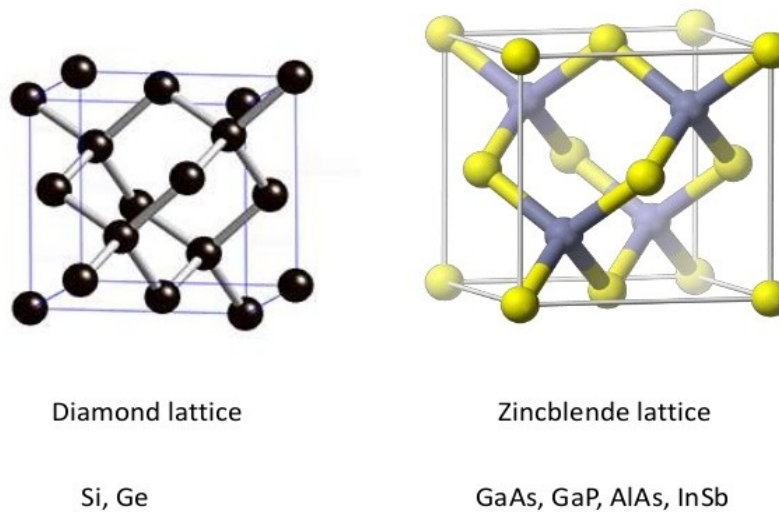


Figura 1.2: Diferencias entre la estructura tipo diamante para silicio y germanio y la unión de zinc, imagen obtenida de: <https://www.slideshare.net/chinkitkit/crystal-structure-52857672>

1.1.2. La teoría de bandas

Para poder explicar teóricamente el comportamiento de los electrones internos de un material necesitamos de las herramientas y el marco teórico de la mecánica cuántica a fin de describir de manera fenómenos como el transporte de cargas y deriva de electrones dentro de un material (Mishra Umesh K. & Singh, 2008)

“Los materiales semiconductores tienen la característica particular de que sus electrones están restringidos a sus bandas de conducción y de valencia, con una “brecha” (band gap) que las separa, esta es una región donde no existen energías permitidas para los electrones del material.”(Lutz, 2007)

Se puede utilizar el *modelo de bandas*, que describe la interacción de electrones *libres* con un potencial periódico, análogo a la naturaleza de las estructuras cristalinas, y es muy útil para explicar casi completamente los comportamientos electrónicos macroscópicos de algunos materiales.

Se parte desde la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para electrones libres en el espacio con un potencial de fondo $U(r)$.

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2m_0} \Delta^2 + U(r) \right] \Phi(r) = E \Phi(r)$$

Para un potencial constante U_0 la función de onda se extenderá por todo el espacio y tendrá el mismo valor de probabilidad para todo el volumen V (que en este caso es considerado un cubo de lado L con una sola partícula como el caso ideal más sencillo) que se considere, las soluciones normalizadas de la ecuación son de la forma:

$$\Phi(r) = \frac{e^{ik \cdot \vec{r}}}{\sqrt{V}}$$

Y las energías disponibles para los electrones serán: $E = \frac{(\hbar k)^2}{2m_e} - U_0$

Donde $\hbar k$ es el momento del electrón y m_e su masa.

Pero en este caso el potencial periódico cumple $U(r) = U(r+R)$ donde R es la periodicidad del potencial. Esto nos lleva a las siguientes características de las soluciones. En primer lugar las soluciones también son periódicas. El teorema de Bloch nos dice que las soluciones para la ecuación de onda serán del tipo (Mishra Umesh K. & Singh, 2008)

$$\Phi_k(r) = e^{ik \cdot \vec{r}} \cdot u_k(r)$$

Donde $u_k(r)$ es una función con la misma periodicidad que $U(r)$. Pero las soluciones para la energía en este caso no son fáciles de resolver algebraicamente por lo que se tiene que recurrir a métodos numéricos computacionales. Por otra parte, según el principio de exclusión de Pauli, dos electrones no pueden tener exactamente los mismos números cuánticos dentro de un mismo sistema, por lo que, tomando en cuenta que un cristal es un solo sistema cuántico, podemos combinar tanto este principio y la solución de la ecuación de Schrödinger para deducir que cuando numerosas partículas forman una estructura los niveles energéticos de los átomos se sobreponen y degeneran, formando nuevos niveles disponibles para los electrones. Sin embargo, debido a la enorme cantidad de átomos en un sólido ($\sim 10^{22}$), la degeneración de estados es tan grande y la diferencia energética entre ellos es insignificante que pueden ser considerados como un continuo de energías, formando *bandas* alrededor de los niveles originales. Además, dependiendo de la separación de los niveles energéticos originales pueden existir diferentes bandas bien definidas, limitadas por regiones intermedias de energías prohibidas llamadas *brechas*. Las bandas más

importantes son las que ocupan los electrones más exteriores de los átomos, llamadas respectivamente:

- banda de valencia, formado por aquellos electrones encargados de las uniones químicas del átomo.
- banda de conducción, que como su nombre indica, son los electrones “libres” o débilmente ligados al átomo que determinan la conductividad del material.

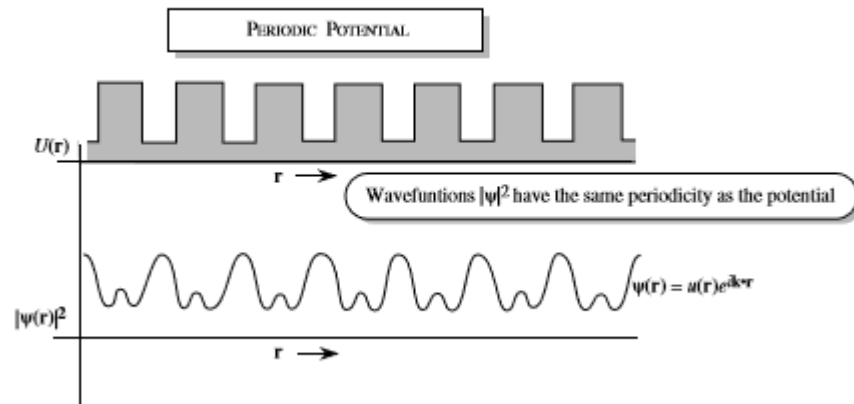


Figura 1.3: Potencial periódico y la solución de la ecuación de Schrödinger imagen obtenida de Semiconductor Device Physics and Design Mishra Umesh K. & Singh, 2008.

La forma de las bandas y de las brechas energéticas se puede calcular teóricamente suponiendo que los átomos individuales del cristal empiezan separados por una distancia infinita, así los niveles discretos de cada uno de ellos están bien definidos, al ir reduciendo la distancia entre los átomos estos niveles interactúan entre ellos y empiezan a degenerar, abriendo los niveles originales, esta degeneración es función de la distancia atómica y al llegar a la distancia molecular real, toman forma las bandas eléctricas del material y sus brechas energéticas intermedias, y retomando el tema estas tendrán la forma siguiente:

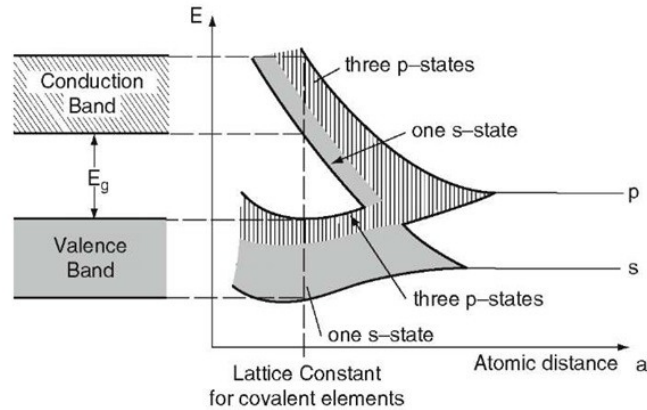


Figura 1.4: Degeneración de estados respecto a la separación atómica, imagen obtenida de: <http://what-when-how.com/electronic-properties-of-materials/semiconductors-electrical-properties-of-materials-part-1/>

Estas bandas representan las energías disponibles para los electrones del material, sin embargo, como estamos tratando con partículas subatómicas regidas por la mecánica cuántica estas se comportan de manera no determinista, de modo que la probabilidad de ocupación de estos estados esta descrita por la distribución de Fermi-Dirac:

$$F(E) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E - E_f}{kT}\right)}$$

Para entender mejor esta distribución se introduce el nivel de Fermi $F(E_f)$ que es aquel cuya probabilidad de ocupación es de $\frac{1}{2}$ sin importar la temperatura del material y que depende directamente de la cantidad promedio de partículas en el material, cabe mencionar que este nivel no necesariamente le corresponde a un estado energético permitido en el sistema (Lutz, 2007), la energía a la que este nivel se encuentre en relación a la forma y distribución de las bandas es fundamental para entender las propiedades eléctricas de los materiales; por ejemplo, en un aislante la separación de las bandas de conducción y valencia es muy grande, y el nivel de Fermi está aproximadamente a la mitad de la brecha energética, muy lejos de cualquier estado energético disponible, por otra parte en los conductores el nivel de Fermi está dentro de la banda de conducción. El caso de los semiconductores es especial ya que aunque el nivel de Fermi está a la mitad de la brecha energética, el grosor de esta es mucho menor que en los aislantes, y como se verá más adelante, la introducción de impurezas dentro de la estructura del material creara niveles de energía intermedios que acercaran el nivel de Fermi a la banda de conducción.

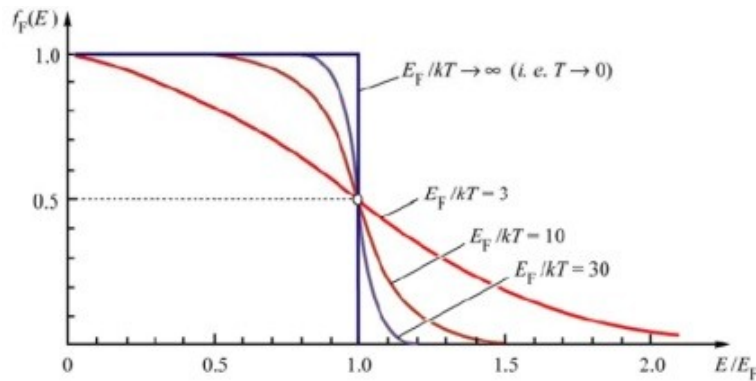


Figura 1.5: Distribución de Fermi-Dirac para distintas temperaturas con el nivel de fermi como punto de simetría, imagen obtenida de: <https://dayinlab.com/2016/03/13/el-nivel-de-fermi-y-la-temperatura-del-sol/>

“A bajas temperaturas la banda de valencia está completamente llena y la de conducción completamente vacía, es decir, un semiconductor es un aislante perfecto” (Mishra Umesh K. & Singh, 2008). Sin embargo a medida que se aumenta la temperatura de estos materiales, los electrones de la banda de valencia experimentan una excitación térmica y pueden ganar suficiente energía para romper los enlaces covalentes y pasar a la banda de conducción, dejando una vacante vacía en la banda de valencia que puede ser llenada por un electrón vecino, este proceso puede ser modelado como si el electrón faltante fuera una partícula de carga positiva y son conocidas como *hoyos* (Boylestad, 1997), estas cargas libres producen una ligera conductividad en el material.

1.1.3 Interacción de radiación con la materia y generación de transportadores de carga en semiconductores

La generación de transportadores de carga es un proceso en el que electrones pasan de la banda de valencia hacia la banda de conducción, generando pares de electrones-hoyos y cambiando la conductividad del material. Como se vio anteriormente el principal mecanismo con el que se generan cargas libres es la excitación termal, sin embargo esta también es la causa primaria de ruido dentro de los dispositivos basados en semiconductores, para equilibrar estos efectos se necesita diseñar materiales que tengan una baja probabilidad de ionización a temperatura ambiente o en su defecto operar los detectores a bajas temperaturas (Lutz, 2007). Existen distintos mecanismos además de la excitación termal, y que son de mayor interés para la detección de partículas:

Generación de cargas por radiación electromagnética. Este es el efecto fotoeléctrico, un fotón que atraviesa el material puede transferir parte de su energía a un electrón de la banda de valencia; si la

energía transferida es suficiente romperá el enlace covalente el electrón pasara a la banda de conducción.

Generación de cargas por partículas cargadas: cuando partículas ionizantes atraviesan un material pierden parte de su energía mediante colisiones elásticas y otros tipos de interacción con los electrones de los átomos que lo conforman. Se ha estudiado arduamente este tipo de interacciones, desde una interpretación clásica por Bohr, hasta el tratamiento cuántico realizado por Bethe en 1930, Bloch en 1933 y Landau en 1944 que condujeron a la fórmula de Bethe-Bloch para la tasa de energía perdida por ionización de una partícula atravesando materia (Lutz, 2007):

$$\frac{dE}{dx} = 2\pi N_0 r_e^2 m_e c^2 \rho \frac{Z}{A} \frac{z^2}{\beta^2} \left[\ln \left(\frac{2 m_e \gamma^2 v^2 W_{max}}{I^2} \right) - 2\beta^2 - \delta - 2 \frac{C}{Z} \right]$$

Donde los parámetros de la ecuación son los siguientes:

- $2\pi N_0 r_e^2 m_e c^2 = 0.1535 \text{ MeV } c^2/g$
- x es el camino recorrido por la partícula medido en g/cm²
- $r_e = \frac{e^2}{4\pi m_e c^2} \approx 2.817 \times 10^{-15} \text{ m}$ es el radio clásico (también llamado de Lorentz) del electrón
- m_e es la masa del electrón
- $N_0 = 6.022 \times 10^{23} \text{ mol}^{-1}$ El número de Avogadro
- I Es el potencial efectivo de ionización promedio
- Z es el número atómico del material
- A es el peso atómico del material
- ρ su densidad
- z es la carga de la partícula que atraviesa el material;
- $\beta = v/c$, es su velocidad medida en relación a la velocidad de la luz

- $\gamma = \frac{1}{\sqrt{1-\beta^2}}$ es el factor gamma de la relatividad especial

- δ es una corrección de densidad

- C corrección de Bloch

- W_{max} es la máxima energía transferida en una colisión

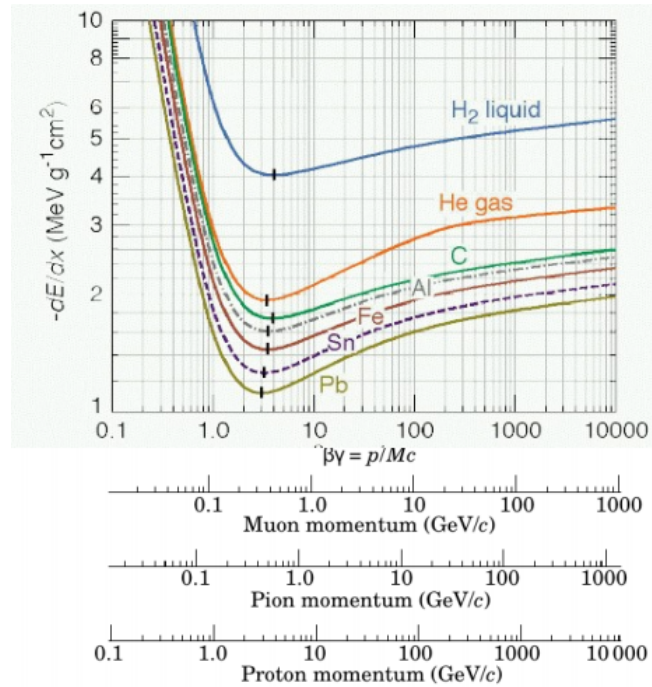


Figura 1.6 ecuación de Bethe Bloch para varios materiales y distintas escalas para las partículas específicas, imagen obtenida de: http://www.courses.physics.helsinki.fi/fys/nucphys/empp14_KM_bethebloch.pdf

La fórmula de Bethe-Bloch es compleja y en específico el factor dentro del logaritmo no es sencillo de calcular y dependen de medidas experimentales, además esta función es sensible a efectos relativistas para partículas altamente energéticas se necesitan correcciones extra que tomen en cuenta la densidad del material y la llamada corrección de Bloch (llamada también Shell Correction) que es proporcional al cubo de la carga de la partícula z^3 (Lutz, 2007) Por último el depósito de energía por unidad de longitud estará directamente ligado al tipo de partícula que atraviesa el detector y el material del que está hecho, para el caso de semiconductores:

- Fotones visibles y ultravioletas (3.10-10.25eV): en general dentro de este rango los fotones solo tienen suficiente energía para generar un par de electrón hoyo y luego serán absorbidos a poca profundidad de la superficie del detector.
- Rayos γ (100eV-100keV): se producirán varios pares de electrón hoyo en una región relativamente pequeña. El número de pares generados se puede estimar con la energía promedio de extinción (3.6eV para el silicio).
- Partículas α : la ionización que este tipo de partículas provoca depende sensiblemente del inverso de su velocidad, por lo que a medida que frena la partícula más portadores de carga se generan, y al final de su recorrido se genera una subida pronunciada en la densidad de ionizaciones, que se conoce como pico de Bragg y es característica de partículas masivas cargadas.
- Radiación β (electrones): ya que los electrones tienen una masa menor que las partículas alfa interactúan de manera más débil, por lo que penetrarán profundamente o incluso atravesarán completamente el material, la tasa de ionizaciones será aproximadamente constante a su paso y solo aumentará al final de su recorrido.
- Protones y iones pesados: a velocidades no relativistas estas partículas cargadas pesadas producirán ionizaciones a una tasa inversamente proporcional a su energía que disminuye a medida que avanza en el medio y directamente proporcional al cuadrado de su carga z , esto provocará un pico de Bragg más pronunciado que en electrones o partículas α .

Estos son las partículas relevantes para el área médica y sus efectos con un detector, sin embargo otros tipos de partículas, como neutrones o fotones muy energéticos, también pueden interactuar con el material a través de procesos más complicados, como la creación de electrón positrón para fotones muy energéticos, pero estos efectos tienen una probabilidad muy baja para materiales semiconductores por lo que no se les tomara en cuenta. (Lutz, 2007)

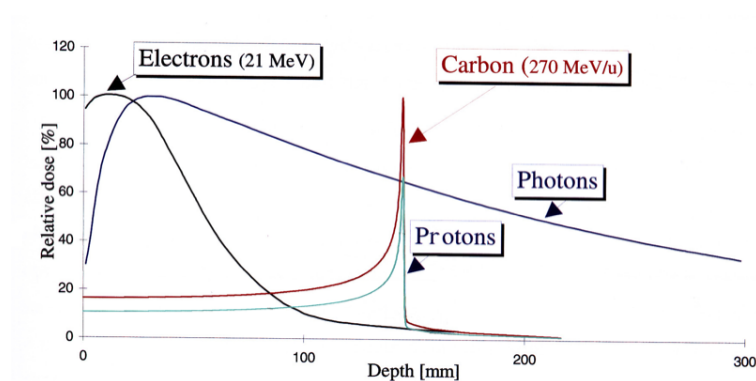


Figura 1.7: Depósito de energía de distintas partículas y los picos característicos de algunas de ellas, imagen obtenida de <https://larevoluciondelosquanta.wordpress.com/2014/02/11/de-los-rayos-x-a-los-haces-de-iones/>

Proceso de multiplicación si un transportador de carga tiene la suficiente energía cinética, puede transmitir a partir de colisiones elásticas una parte a otros electrones para que pasen a la banda de conducción y así nuevos portadores de carga disponibles, eso se conoce como multiplicación, y ocurre cuando una partícula transfiere una parte considerable de su energía a un transportador de carga o puede ser logrado artificialmente aplicando un voltaje externo al material para atraer las cargas libres hacia los electrodos del aparato. Al entrar a una región con un fuerte campo eléctrico dentro del semiconductor los electrones son acelerados de tal manera que ganan energía suficiente para producir pares de electrón-hoyo adicionales, si estos a su vez son acelerados lo suficiente como para repetir el proceso de multiplicación pueden provocar una *avalancha* y a pesar de que este efecto pueda provocar malfuncionamientos dentro de los detectores mal diseñados, es el mecanismo que se aprovecha para amplificar la señal del aparato. (Lutz, 2007)

1.1.4 Adición de cargas libres: Dopaje y defectos en la estructura cristalina de semiconductores

Dependiendo de la pureza del material los semiconductores se clasifican en dos: *Intrínsecos*, que son cristales puros con muy pocos defectos cuyas cargas libres provienen casi completamente de las excitaciones térmicas. *Extrínsecos*, materiales a los que deliberadamente se les han agregado impurezas, es decir, átomos de elementos ajenos que reemplazan a los de la estructura cristalina con un exceso o déficit de electrones de valencia, con el fin de aumentar artificialmente el número de cargas libres disponibles, a este proceso se le conoce como *dopaje*. Los materiales intrínsecos son usualmente poco ocupados para dispositivos semiconductores ya que es extremadamente difícil obtener materiales cristalinos de alta pureza y porque la mayoría del tiempo estos son dopados intencionalmente para obtener algún efecto electrónico de interés. (Mishra Umesh K. & Singh, 2008)

Por ejemplo, en un cristal de silicio se puede dopar con átomos de arsénico (con valencia +5) y producir un semiconductor tipo n, con un exceso de electrones para donar; o con átomos de boro con valencia (+3) que dejan vacante un espacio en uno de sus enlaces que puede aceptar un electrón y así generar un exceso de hoyos; se obtiene entonces un semiconductor tipo p. (Lutz, 2007)

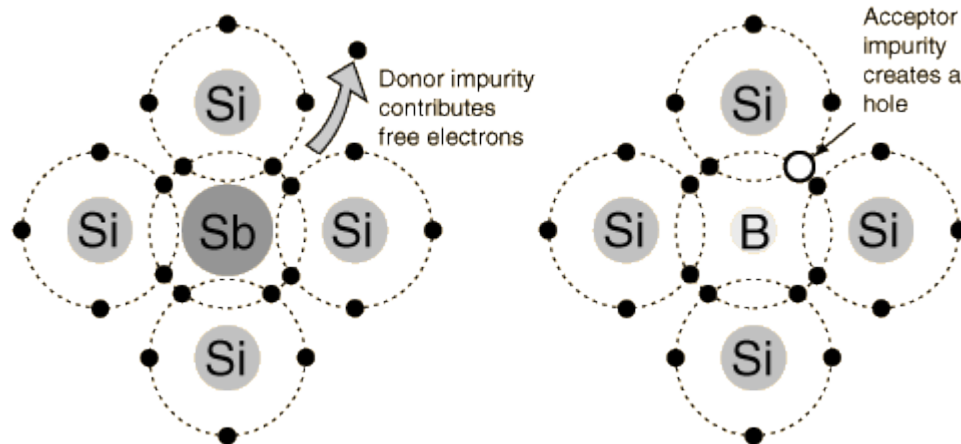


Figura 1.8: Dopaje del silicio con antimonio Sb con valencia +5 para el tipo n y boro B con valencia +3 para el tipo p. imagen obtenida de: <http://hyperphysics.phy-astr.gsu.edu/hbasees/Solids/dope.html>

Algunos puntos importantes a considerar son: La introducción de dopantes puede ser durante el crecimiento del cristal, o en su procesamiento (cortado y pulido del material). Además ciertos dopantes pueden ser *activados* después de la fabricación mediante un tratamiento térmico (Lutz, 2007).

Las propiedades eléctricas de los semiconductores intrínsecos pueden ser modificadas de manera sensible según el tipo y cantidad de impurezas que se agreguen a la estructura del cristal.)

Defectos en el cristal: Al dopar un material la intención es que los átomos ajenos tomen los lugares originales de los átomos del cristal en la posición adecuada. Idealmente estas impurezas no deberían alterar la estructura física del cristal, el tránsito de los electrones o sus propiedades químicas, solamente deberían aumentar el número de cargas libres disponibles de manera controlada, sin embargo, en la práctica esto no es siempre posible. La manipulación del cristal produce defectos, como átomos faltantes o incrustaciones en la red atómica, además de los defectos tipo Frenkel (llamadas así por el físico de la unión soviética Yakob Frenkel en 1926) que ocurre cuando uno de los átomos del cristal se desplaza de su posición original hacia el espacio vacío dentro del cristal atraído por uno de sus átomos vecinos, generando así un desbalance en la carga, estos son conocidos como defectos puntuales. Una imperfección puede afectar a toda una línea del cristal distorsionando su estructura. Además puede ocurrir que numerosos defectos se concentren en una región produciendo un conglomerado, y dependiendo de la carga total de estos grupos, pueden atraer o dispersar a los transportadores de carga creando trampas que disturban el tránsito interno de estos. Estos defectos no necesariamente son inmóviles, y a través de un proceso llamado “acarreo”

se puede aprovechar la movilidad de estos conglomerados para atraerlos a la superficie y después pulirlos mecánicamente para eliminarlos. (Lutz, 2007)

Es importante considerar la cantidad de defectos del cristal ya que aunque estos pueden aumentar el número de cargas libres disponibles de manera imprevista, también facilitarían su captura ya que los defectos funcionan como centros de atrapamiento, aumentando así la tasa de recombinaciones y como resultado macroscópico atenúan la señal. Además a medida que aumenta la cantidad de defectos dentro del material más se verá afectada la movilidad de las cargas libres y por consiguiente la conductividad del material.

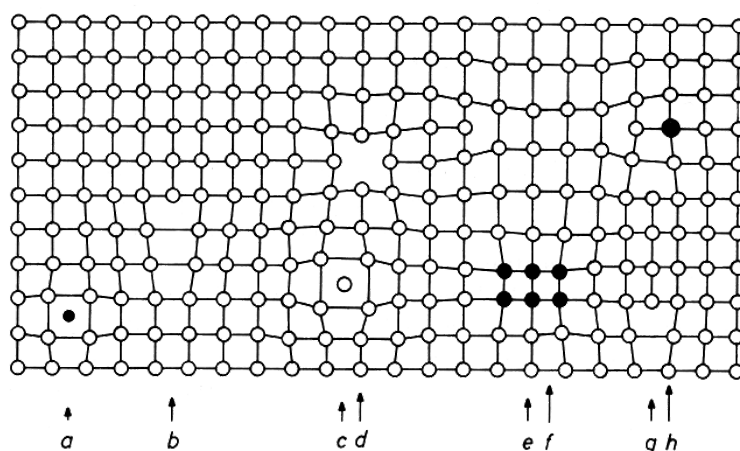


Figura 1.9 a) impureza incrustada, b) dislocación, c) átomo base incrustado, d) vacante, e) precipitación de impurezas, f) dislocación por un conglomerado de vacantes, g) dislocaciones por conglomerado de átomos base h) sustitución por átomo de impureza, imagen obtenida de: https://www.tf.uni-kiel.de/matwis/amat/def_en/

A pesar de los defectos y de los átomos dopantes, en un semiconductor bien diseñado, la simetría en el interior del cristal es casi perfecta, sin embargo cerca de la superficie esta simetría se rompe. Los enlaces covalentes quedan incompletos y empiezas a re-arreglarse, usualmente reaccionan entre ellos, dejando cubos incompletos, y con elementos del ambiente, haciendo materiales compuestos. Si el semiconductor se encuentran en contacto con la atmosfera la reacción más usual es la oxidación de la superficie, en particular los semiconductores basados en silicio tendrán una capa delgada de óxido de silicio SiO_2 en sus bordes, que es un material aislante. Esto no es necesariamente negativo, y se hace intencionalmente la mayoría del tiempo para producir una capa protectora contra futuras contaminaciones y en ocasiones como una parte activa de la electrónica interna del dispositivo.

Como hemos visto la introducción de dopantes explica cómo se generan nuevos transportadores de carga desde las bandas ya que nuevos niveles energéticos estarán disponibles dentro de la brecha energética prohibida, este modelo es complementario con el de las cargas extra introducidos a los enlaces por los átomos dopantes.

Aun con cargas libres extras los semiconductores son considerados eléctricamente neutros, ya que este exceso se compensa con las fuerzas de atracción de los átomos dopantes, además el movimiento aleatorio total de las cargas debido a la excitación térmica es cero (las corrientes internas se cancelan unas con otras). Sin embargo las cargas libres móviles del semiconductor se pueden desplazar por dos mecanismos(Lutz, 2007):

-*Difusión*, que surge por una distribución no uniforme de los transportadores en el cristal, estos se redistribuirán de la región donde abundan, hacia las regiones con deficiencia de carga siguiendo caminos aleatorios, con un comportamiento descrito por las ecuaciones de difusión.

- *Deriva*, si se aplica un campo eléctrico al cristal las cargas libres serán aceleradas en la dirección del campo (los electrones en una dirección y los hoyos en la opuesta). Con campos eléctricos suficientemente grandes (el orden típicos que se usan en detectores semiconductores es de alrededor de 100kV/cm) la aceleración que estos imprimen sobre los electrones genera velocidades que superan a la velocidad media del proceso de difusión, permitiéndonos ignorar dichos efectos.

1.1.5 Recombinación y vida media de transportadores

En general el número total de cargas en un semiconductor en equilibrio térmico no cambia, todo el tiempo están ocurriendo de manera simultánea generación de portadores de carga mediante excitación termal y procesos que balancean la carga neta del material conocidos como recombinación, que consiste de manera básica en la neutralización de un electrón y un hoyo. Esto ocurre a través de diversos mecanismos (Lutz, 2007):

Recombinación de banda a banda: al generarse un par electrón-hoyo, a través de iluminación del material por ejemplo, estos se recombinaran directamente al regresar el electrón en la banda de conducción al espacio vacío dejado en la banda de valencia, este proceso es seguido por la emisión de un fotón con la energía extra necesaria para generar el par, este proceso es más común en semiconductores intrínsecos ya que en materiales dopados en los niveles extra dentro de brecha energética permitirá proceso de recombinación en dos pasos, que requieran menos energía, como la

recombinación asistida por captura: este proceso ocurre cuando existen niveles energéticos extra en la brecha entre bandas debido a las impurezas agregadas, a los defectos del cristal y a las distribuciones asimétricas de las cargas, estos niveles extra pueden quedar *neutralizados* cuando dos cargas opuestas (electrón y hoyo) las ocupan en secuencia, a este mecanismo se le conoce como atrapamiento, y es seguido usualmente por una liberación de carga, dependiendo del tipo de semiconductor (n o p), esto favorecerá a alguna polaridad.

La vida media de los transportadores es un factor que se debe considerar y que además es diferente de la recombinación. Si se considera un material en equilibrio térmico las cargas libres generadas aleatoriamente serán equilibradas mediante la recombinación a un mismo ritmo. Sin embargo, si por ejemplo el material se mantiene bajo iluminación la tasa de generación superara la de recombinación; cuando se retira la iluminación el tiempo en que tarda en volver al ritmo de recombinación normal será el tiempo de vida media para los transportadores. Otro ejemplo de vida media es cuando las cargas generadas son retiradas del cristal por la aplicación de un voltaje externo, reduciendo las cargas libres que produzcan recombinaciones, el tiempo en que tarde en recobrase de esta deficiencia de transportadores de carga está relacionado con el tiempo muerto del detector y por ende con su eficiencia de medición. (Lutz, 2007)

1.2 Dispositivos a base de semiconductores

En la actualidad existen dispositivos electrónicos compactos de muy alta complejidad, esto solamente fue posible con la implementación de semiconductores en la microelectrónica, de la misma forma los detectores de radiación han pasado de ser grandes cámaras de ionización a pequeños aparatos electrónicos, por esta razón es de interés para este trabajo estudiar algunas de las estructuras electrónicas básicas que permitieron el desarrollo de esta tecnología. Cabe mencionar que Los aparatos mencionados en esta sección están basados en silicio dopado.

-*La unión PN:* este es probablemente el dispositivo más importante de la electrónica moderna, se construye uniendo dos piezas de semiconductores indirectos con dopajes de polaridad opuesta. Para modelar teóricamente el comportamiento de este aparato se supone que antes de entraren contacto ambas piezas tienen una distribución uniforme de cargas libres y están en equilibrio térmico, es decir no se están generando nuevos portadores de carga en sus respectivos volúmenes. El semiconductor tipo p tiene un exceso de hoyos por lo que los electrones extra de la región n se dispersaran en ese volumen y se neutralizaran por medio de recombinaciones tipo atrapamiento, lo mismo ocurre en el semiconductor n con los hoyos de la región p, creando así una región sin cargas libres en la unión de los materiales llamada *zona de agotamiento*, de este modo las cargas de los

átomos dopantes de ambos semiconductores no podrán ser compensados, generándose así un voltaje interno que funciona como barrera para las cargas libres en los extremos de cada región. Si el voltaje interno se iguala a las corrientes de difusión en cada región estas se cancelan y se llega al equilibrio (Boylestad, 1997). Para obtener utilidad de estas uniones se agregan contactos metálicos en los extremos con el fin de unirlos a otros componentes eléctricos, a este dispositivo se le conoce como diodo. A través de los contactos se puede aplicar un voltaje polarizado externo al diodo con el fin de manipular su conductividad. Si se aplica un voltaje negativo, desde la región p hacia la n, más electrones entrarán a la región con exceso de hoyos en el semiconductor positivo y viceversa, aumentando el grosor de la región de agotamiento y disminuyendo la conductividad del dispositivo. Por otra parte al aplicar un voltaje positivo los transportadores de carga en las proximidades de la región de agotamiento son empujados hacia esta, y se recombinarán con las cargas extra de los átomos dopantes, así disminuyendo el grosor de la región de agotamiento, adicionalmente los electrones más profundos sentirán una fuerza atractiva hacia el electrodo positivo de la unión y ya que la barrera de potencial que representa la región de agotamiento se ve acortada, algunos de estos electrones podrán cruzarla gracias al efecto de túnel cuántico y así completar el circuito, aumentando la conductividad del dispositivo (Lutz, 2007).

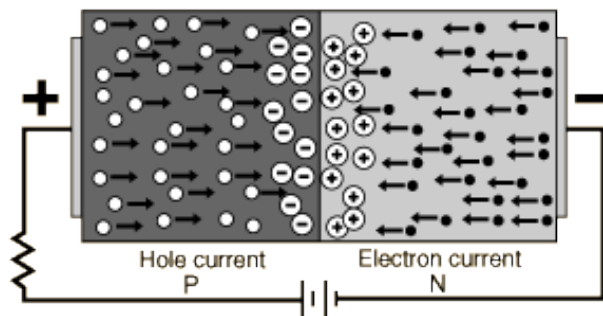


Figura 1.10 funcionamiento esquemático de un diodo pn, imagen obtenida de: <http://hyperphysics.phy-astr.gsu.edu/hbasees/Solids/diod.html>

Estos diodos pueden ser utilizados como detectores, ya que si una partícula los atraviesa puede romper el estado de atrapamiento de unos de los centros de recombinación en la región de agotamiento, desacoplando un par de electrón hoyo que serán arrastrados hacia los contactos metálicos del diodo por el voltaje natural de este, además de que se puede afectar la sensibilidad del detector con el efecto que el voltaje tiene sobre el grosor de la región de agotamiento.

-Contacto metal-semiconductor: este aparato tiene la capacidad de rectificar corrientes eléctricas. Consiste en un semiconductor acoplado a un material metálico. Como el metal tiene una cantidad

enorme de cargas disponibles en su banda de conducción las fuerzas electrostáticas internas se neutralizan entre ellas y el campo eléctrico interno en el metal se puede considerar como cero con una densidad de carga constante en la frontera (Boylestad, 1997). Para modelar teóricamente este dispositivo primero se hace la suposición de que los materiales se encuentran en el vacío, ahora, se introduce la llamada *función de trabajo* que es la energía necesaria para llevar un electrón desde el interior un material al vacío, esta función será diferente para cada material y en el caso del semiconductor utilizado dependerá en gran parte de la cantidad de dopaje. Se asume además que la función de trabajo para un metal Φ_m es mayor que para un semiconductor Φ_s . Al entrar en contacto, se observa un efecto similar al de la unión n-p, en la región de la frontera se generara una diferencia de potencial $V_{bi} = \Phi_m - \Phi_s$ debido a que los niveles energía de Fermi en cada material se tienen que alinear, esto funciona como una barrera de potencial que impide que los electrones del metal fluyan hacia la región positiva del semiconductor, los transportadores de carga se re- arreglan y dependiendo del voltaje que se aplique al extremo metálico el aparato tendrá distintos comportamientos, si el voltaje es positivo respecto al sentido de rectificación el dispositivo reduce la barrera de potencial y la corriente puede fluir a través de él, si es negativa la barrera aumentara y restringirá el paso de las cargas libres. (Lutz, 2007)

- *Estructura metal-óxido-semiconductor (MOS)*: este es el dispositivo más importante para este trabajo, esta unión de tres materiales y la manipulación de su conductividad con voltajes externos es lo que permite el funcionamiento del dispositivo para la detección de partículas y radiación en distintos rangos energéticos, estos aparatos son el principal componente en microelectrónica de los llamados *dispositivos acoplados de carga* o *CCD's* por sus siglas en ingles que se encuentran usualmente en los aparatos de imagen óptica, es decir en muchas las cámaras digitales de la actualidad (Boylestad, 1997). Su función esquemática simplificada es parecida a la de un capacitor; se coloca una delgada capa de aislante, oxido de silicio en este caso, entre una capa metálica y el bulto semiconductor negativo. Cuando este dispositivo está en equilibrio térmico y sin voltaje externo es eléctricamente neutro, pero cuando el voltaje externo es negativo respecto al semiconductor se juntaran electrones en la interfaz de metal oxido y esto atraerá a los portadores de carga positivos libres dentro del semiconductor negativo, induciendo una capacitancia dentro del dispositivo; dependiendo de qué tan intenso sea el voltaje externo la capacitancia del dispositivo cambiara proporcionalmente. La importancia de estos dispositivos en los detectores de radiación es que pueden recoger la carga generada por la ionización de un medio y convertirá en una señal digital para su posterior análisis.

1.2.1 Semiconductores como detectores de radiación

Aprovechando los efectos físicos discutidos en las secciones anteriores de este capítulo los materiales semiconductores son idóneos como detectores de radiación, específicamente se pueden destinar a dos propósitos: medir la energía depositada en el material y rastrear la posición de la partícula detectada. Por supuesto que se pueden combinar ambos tipos de mediciones pero se deben tener en cuenta las restricciones en la incertidumbre cuántica.

Utilizar semiconductores como detectores de radiación tiene ventajas claras sobre otros tipos de detectores principalmente en la durabilidad del detector y su estabilidad en el funcionamiento así como su tamaño que en comparación es más compacto. Además todos los semiconductores presentan características similares, la brecha energética a temperatura ambiente (alrededor de 1.12eV) entre la banda de conducción y de valencia es pequeña comparada con la energía promedio necesaria para generar pares de electrón-hoyo (3.8 MeV/cm) y en consecuencia se produce una gran cantidad de cargas libres por unidad de energía depositada, además la alta densidad de estos materiales (para el silicio 2.33 g/cm^3) asegura que la radiación que atraviesa el material depositará una gran parte de su energía en ellos, por esta razón se pueden diseñar detectores, que pese a ser muy delgados, producen señales lo suficientemente intensas para ser detectadas. Además, a pesar de la alta densidad de estos materiales su forma cristalina hace que los electrones y hoyos puedan desplazarse con mucha facilidad y apenas ser influenciados por los átomos dopantes, lo que permite que estos detectores puedan recolectar rápidamente la carga generada y así, trabajar a una alta frecuencia. Los cristales de silicio son lo suficientemente rígidos como para mantener su estructura sin necesidad de un contenedor, como en el caso de los detectores gaseosos. (Lutz, 2007)

A pesar de que existen muchos detectores, el funcionamiento general de estos es producir una región del detector que sea sensible al tipo de radiación que se quiere estudiar y que a su paso deje ionizado el medio, usualmente esta es la región de agotamiento del dispositivo, ya que la energía requerida para romper el estado de atrapamiento de un centro de recombinación en la región neutra es menor que la necesaria para arrancar un electrón de la banda de valencia de alguno de los átomos del material; las cargas generadas por esta ionización serán atraídas hacia los extremos del detector por un voltaje externo en la mayoría de los casos y estos serán convertidos en una señal eléctrica que siga una función conocida y así relacionarlo con la energía de la partícula que atravesó el detector.

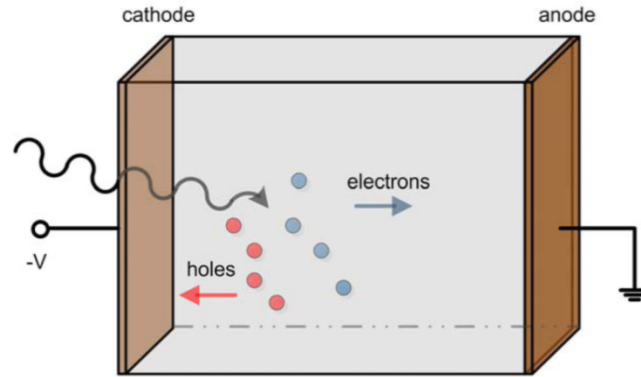


Figura 1.11: funcionamiento general de un detector de partículas basado en semiconductores, imagen obtenida de: https://openi.nlm.nih.gov/detailedresult.php?img=PMC3649434_sensors-13-02447f1&req=4

Hablando específicamente del silicio es el semiconductor más ampliamente usado para la fabricación de aparatos electrónicos, por lo que se ha desarrollado la tecnología para manipularlo según las necesidades además como los circuitos electrónicos también son fabricados de silicio, el detector puede tener todos sus componentes integrados en espacios muy reducidos.

Dispositivos de posicionamiento de partículas: como ya se vio en la sección anterior la energía depositada en el detector se puede medir mediante la señal eléctrica generada por la ionización primaria en él. Ahora para poder detectar la posición de la partícula existen varios métodos, un primer ejemplo es dividir la señal generada en numerosos canales con su sistema de medición individual, la energía de la partícula será proporcional a la corriente total recuperada por los canales y la posición de la partícula podrá ser deducida mediante una interpolación de las señales medidas en cada canal y el espacio que hay entre cada uno de ellos. Un método más sofisticado y que solo fue posible hasta la implementación de la microelectrónica es el de los detectores pixelados, que son aquellos que tienen un arreglo de dispositivos sensibles que recolectaran la carga producida por la ionización de un medio y la traducirán a una señal eléctrica que será proporcional a la energía de la partícula que atravesó el medio, aquí la resolución espacial está dictada por las dimensiones de los pixeles y su cantidad, del mismo modo la incertidumbre en la determinación de la posición de la partícula estará regida por las dimensiones de estos. Los siguientes efectos deben ser tomados en cuenta ya que afectaran a las mediciones del detector (Lutz, 2007):

- La distribución espacial de los pares de electrones hoyos creados por la radiación incidente
- La separación de esos pares debido al campo eléctrico aplicado dentro de la región sensible del detector

- Efectos de difusión de los transportadores de carga durante el tiempo de llegada y recolección de la señal
- Una respuesta no lineal del detector cuando es sometido a campos magnéticos.

1.3 Proyecto Medipix

El Medipix es un detector delgado basado en semiconductores, este proyecto empezó en 1999 en CERN, con la intención de aplicar la tecnología desarrollada para la medición de partículas de alta energía y así crear un detector con pixeles de fotón único basado en uniones complementarias de metal-oxido-semiconductor (CMOS) capaz de rastrear de forma sensible rayos X y que posteriormente se pudiera utilizar en imagen médica, específicamente en radiología. En palabras de la colaboración internacional que desarrollo este dispositivo: *“Los detectores híbridos pixeles son útiles en experimentos de física de altas energías porque producen imágenes casi libres de ruido”* (Campbell, 2011)

El sensor consiste en un *bulto* de silicio dopado de alta resistividad (13 kilo-ohm) con dimensiones de 300 micrómetros de grosor y 14.08mm de lado. El bulto está unido a un chip de lectura a través de piezas de soldadura de aluminio, conocidos como “bump bonds”, que serán los canales por los que entren los electrones generados en el sensor hacia él; y con un adhesivo aislante que evite la transferencia de una señal eléctrica desde una de las uniones a otra. La utilización de silicio de alta resistividad fue elegida ya que, como vimos en las secciones anteriores, este material tiene excelentes propiedades mecánicas y una homogeneidad casi perfecta, se cuenta con un buen entendimiento de los procesos de ionización que ocurren dentro de este material, además de que es abundante y puede ser fabricado por un bajo costo ya que la industria de la microelectrónica lo ocupa a grandes escalas (Gimenez et al., 2011)

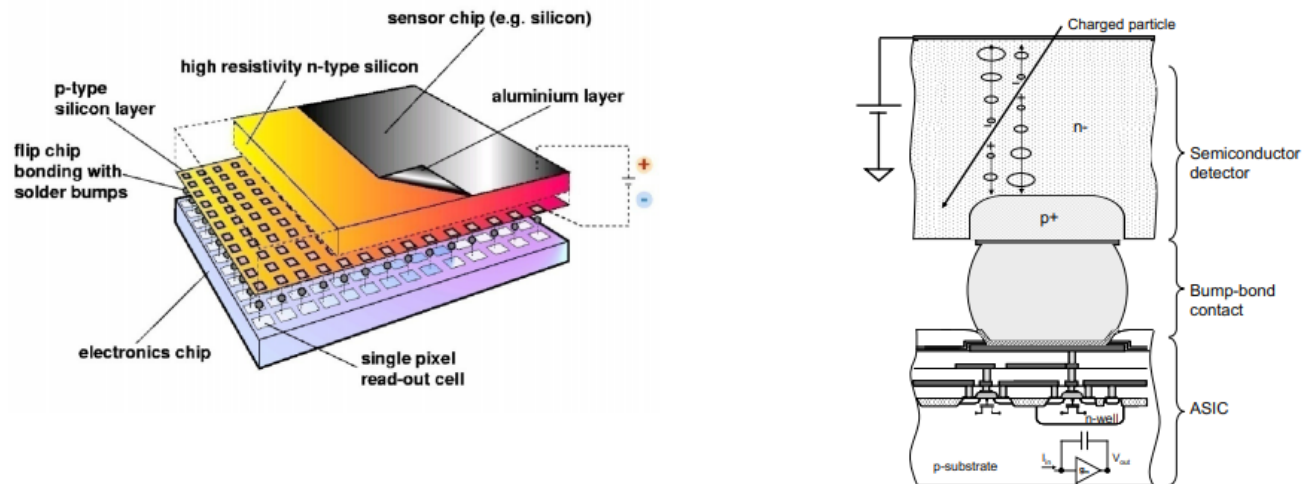


Figura 1.12: Arquitectura y funcionamiento del Medipix, imagen obtenida de:

https://indico.cern.ch/event/466934/contributions/2524825/attachments/1490020/2316052/MCampbell_Venice_2017_New_169.pdf

El chip de lectura consiste en una matriz cuadrada de 265x265 pixeles cuadrados individuales de 55 micrómetros de lado que coinciden con las dimensiones de la superficie del bulto, cada pixel cuenta con una micro electrónica integrada que puede ser operada individualmente, esta consiste en un preamplificador, un doble discriminador, que compara la señal con dos umbrales (uno superior y uno inferior) con el fin de separar las señales que corresponden a partículas que estén dentro de determinados rangos energéticos, y un contador análogo a digital, además todo el sistema está conectado a un reloj global que controla el tiempo de obturación y de procesamiento.

El Timepix es una variante del Medipix, tiene las mismas características que este, pero no cuenta con un segundo discriminador, además, este puede operar en tres modos. (George et al., 2015)

-Conteo: cada vez que un pulso supera el umbral inferior el contador digital aumenta, este es el modo de operación básico en que trabaja el mediáis

-Time Of Arrival (TOA): el pixel calcula el tiempo de llegada de la partícula desde que el pulso supera al umbral del discriminador hasta que acaba la adquisición

-Time Over Threshold (TOT). El pixel cuenta el tiempo desde que el pulso es más alto que el umbral hasta que está por debajo otra vez actuado como un ACD tipo Wilkinson midiendo el tiempo de descarga.

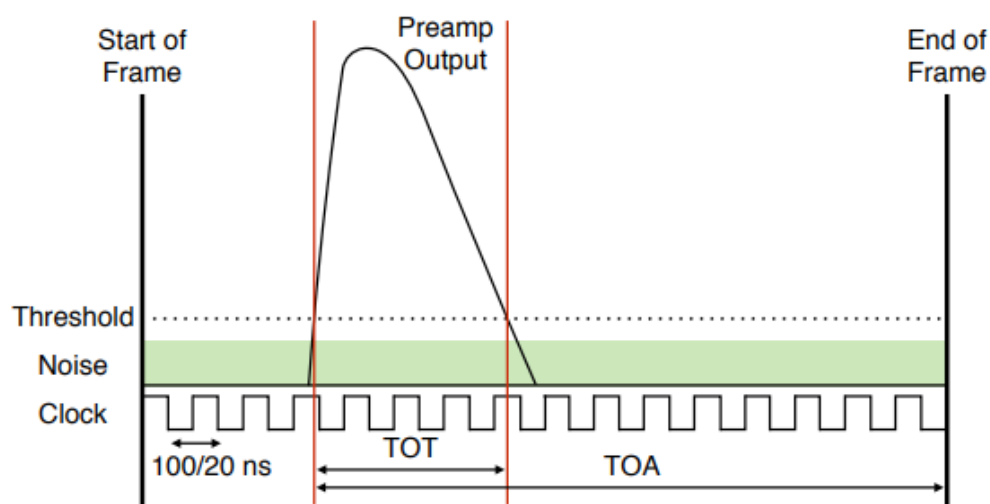


Figura 1.13 Modos de adquisición de datos del Timepix, imagen obtenida de: Particle tracking with a Timepix based triple GEM detector, S.P. George et al. 2015

Este es el detector en el que nos basaremos para hacer la simulación, por ahora nos centraremos solamente en el sensor del dispositivo, ya que la simulación para microelectrónica es muy compleja, el primer objetivo será aproximarse lo más posible al funcionamiento de este dispositivo.

Capítulo 2: Simulación computacional vía método Montecarlo

En este capítulo revisaremos los fundamentos de métodos Montecarlo para su aplicación y uso en la simulación computacional, específicamente en el transporte de partículas a través de la materia.

2.1 Introducción y motivos para el uso de métodos Montecarlo

Desde mediados del siglo pasado la invención, desarrollo y optimización de las computadoras ha permitido atacar problemas que por su complejidad superaban por mucho a las capacidades humanas. La importancia de los métodos computacionales en la física moderna radica en la diversidad de problemas que pueden ser resueltos mediante estos procesos y la eficiencia con que estos resultados son obtenidos en comparación a otras metodologías.

Mediante simulaciones computacionales se puede poner a prueba los modelos matemáticos utilizados para describir el comportamiento de fenómenos naturales, en especial aquellos que son demasiado complejos como para ser resueltos analíticamente, de manera que si la simulación arroja resultados suficientemente cercanos a los datos experimentales, el modelo en el que está basado tendrá más evidencia que lo respalde como válido. De este modo las simulaciones computacionales son ocupadas en numerosas áreas como medicina, biología y física de partículas, entre otras, para poner a prueba teorías nuevas.

Los métodos MC son métodos numéricos en los que el experimento simulado es resuelto mediante la generación continua de números pseudo aleatorios que siguen la distribución de probabilidad conocida del fenómeno investigado, de esta manera el método Montecarlo permite modelar cada aspecto del experimento de forma fidedigna y en algunos casos sin utilizar ninguna aproximación, para reproducir el efecto como si de verdad estuviera ocurriendo (Nikjoo, Uehara, & Emfietzoglou, 2012). La implementación de métodos estocásticos para resolver problemas de forma numérica como alternativa al método analítico se remonta al siglo XVIII, con uno de los ejemplos más conocidos y simples que hay (la aguja de Buffon): “se tiran *palillos* de cierta longitud L a un tablero con líneas horizontales paralelas separadas por una distancia $d > L$, si se obtiene la probabilidad p de que uno de estos palillos cruzan alguna de las líneas se obtiene aproximadamente”:

$$p = \frac{2L}{d\pi}$$

Que puede ser utilizada para obtener un valor aproximado de π que dependerá del número total de líneas y de palillos utilizados. (Seco & Verhaegen, 2013)

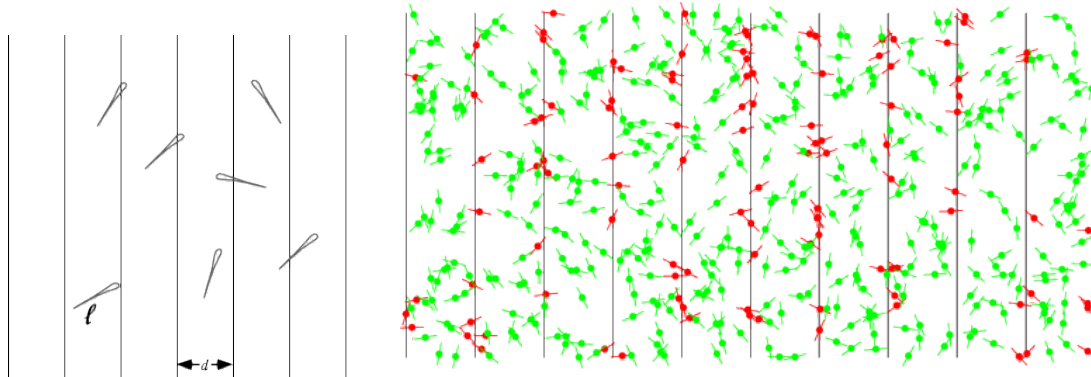


Figura 2.1 Esquema del experimento de Buffon, imagen obtenida de:

<http://mathworld.wolfram.com/BufonsNeedleProblem.html>

Una aplicación práctica es el cálculo de áreas de figuras irregulares: si se tiene una figura irregular con numerosos lados, algunos curvos inclusive, no es fácil calcular de manera exacta el área que ocupa. Una alternativa es encerrarla esta figura en algún lugar geométrico regular de área conocida, un rectángulo por ejemplo, y hacer un muestreo de puntos aleatorios. El área de la figura irregular es aproximadamente igual al área conocida multiplicada por el cociente de los puntos que cayeron dentro de la figura irregular entre el total de eventos, es decir la probabilidad de que un punto aleatorio caiga dentro de la figura irregular.

$$A_i \approx A_0 \frac{n}{N} = A_0 p(n)$$

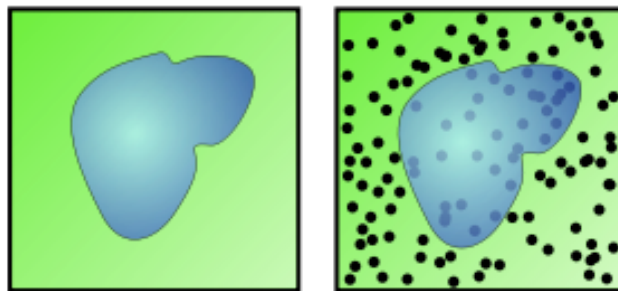


Figura 2.2 cálculo de áreas irregulares usando métodos Montecarlo imagen obtenida de:

<http://www.fadu.edu.uy/viaje2015/columnas/erase-una-vez-un-area/>

De manera concisa se puede asegurar que: “Monte Carlo es un método numérico con el que se pueden resolver ecuaciones diferenciales o integrales complejas utilizando un muestreo de números

aleatorios” (Seco & Verhaegen, 2013) y este es el aspecto que nos interesa entender para cumplir con los objetivos del trabajo.

Un ejemplo más útil y concreto para la implementación de este método en numerosas áreas de investigación es la integración de una función cualquiera $f(x)$ en el intervalo a-b. Se elige un número aleatorio x_0 dentro del intervalo y se evalúa la función en ese punto, una primera aproximación de la integral será el área $A_0 = (a-b) \cdot f(x_0)$. Después se refina la aproximación considerando un nuevo punto aleatorio x_1 obteniendo una nueva área siguiendo los mismos pasos, posteriormente se realiza una suma ponderada de las áreas (Seco & Verhaegen, 2013):

$$A_1 = \frac{1}{2}[(a-b) \cdot f(x_1) + A_0] = \frac{1}{2}(a-b)[f(x_1) + f(x_0)]$$

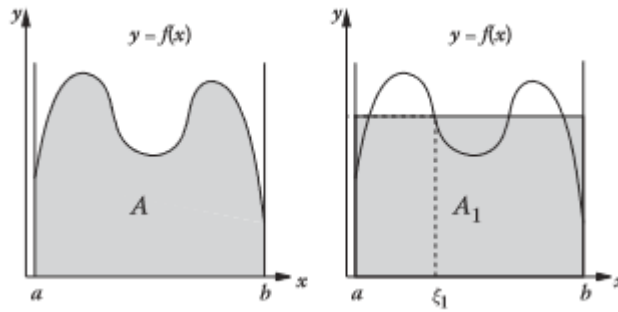


Figura 2.3 primera aproximación para el área A mediante integración Montecarlo, imagen obtenida de: Monte Carlo Techniques in Radiation Therapy, J. Seco & F. Verhaegen 2013.

Si se repite este proceso un número N de veces, con los números x_i uniformemente distribuidos en el intervalo de integración, se obtendrá la expresión:

$$\int_a^b f(x) dx \cong \frac{(a-b)}{N} \sum_{i=0}^N f(x_i)$$

Que converge al valor real de la integral a medida que N tiende a infinito. Además podemos definir el valor medio de la función como:

$$\langle f(x) \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=0}^N f(x_i)$$

A primera vista este método numérico no parece tener muchas diferencias a otros que implementan una secuencia progresiva de números enteros en lugar de números aleatorios y pudiera parecer que no presenta ninguna ventaja sobre las alternativas y esto es cierto para funciones sencillas de una sola dimensión. Pero el método Montecarlo cobra relevancia cuando se trata de funciones multidimensionales, o ecuaciones diferenciales acopladas, en donde la gran cantidad de variables hace impráctica una solución analítica o secuencial y el resultado obtenido a través de la evaluación de una serie de vectores aleatorios distribuidos en el espacio fase de interés es suficiente cercana para satisfacer la aproximación deseada mediante una simulación Montecarlo. (Seco & Verhaegen, 2013)

2.2 Implementación computacional de generadores de números aleatorios

El problema de entrada para una simulación Montecarlo es la generación de números aleatorios. Numerosos fenómenos naturales, como la desintegración atómica, producen este tipo de eventos pero para introducirlos como datos digitales se requiere de un sensor que mida el evento y lo transforme a una señal eléctrica que la computadora puede interpretar a través de una interfaz, esto es impráctico tanto en el montaje del equipo necesario como en el tiempo que consume la comunicación entre el sensor, la interfaz y la computadora. Además, un factor clave dentro de una simulación es la capacidad de ser repetible, con el fin de encontrar y eliminar errores que se presenten en su desarrollo. Es por eso que se opta por utilizar métodos matemáticos que sigan una formula bien definida (Bielajew, 2001)

Sin embargo, una computadora en principio está diseñada de forma tal que todos sus procesos internos sean predecibles, en otras palabras, los datos generados por una computadora siempre cumplen con una relación de recurrencia determinista, muy lejos de un evento aleatorio. Tomando esto en cuenta existe la alternativa de imitar procesos estocásticos a través de algoritmos especiales que generen largas secuencias de números con propiedades cercanas a la aleatoriedad y con un periodo de recurrencia lo suficientemente largo para que los datos no se repitan o sea prácticamente imposible encontrar la correlación entre ellos. Estos números cumplen varias propiedades, una de las más importantes es que estén distribuidos uniformemente en el intervalo deseado. Como resultado se obtiene un conjunto de números conocidos como pseudo aleatorios. (Seco & Verhaegen, 2013)

Existen varios métodos para producir cadenas de números pseudo aleatorios. Los algoritmos básicos más comunes para este fin son los llamados *generadores lineales congruenciales* (LCG por sus

siglas en ingles) que producen números enteros l_i entre 0 y un entero $m-1$ siguiendo una relación de recurrencia de la siguiente forma (Bielajew, 2001):

$$l_{i+1} = \text{mod } m(a \cdot l_i + c)$$

Con los parámetros:

- a multiplicador
- c intervalo
- m modulo
- l_0 semilla

El periodo de la secuencia depende principalmente del módulo, y en el mejor de los casos la longitud máxima de la secuencia pseudo aleatoria es igual al valor del módulo menos uno antes de que se repitan los valores de la secuencia, sin embargo esta longitud también es sensible al multiplicador y al intervalo, por lo que para poder obtener el valor máximo del periodo posible se necesitan hacer algunas consideraciones que no son nada sencillas:

- El modulo m y el incremento c deben ser primos entre si
- El multiplicador menos uno ($a-1$) debe ser divisible entre todos los factores de m
- En el caso en que ($a-1$) sea divisible entre 4 m también debe ser divisible entre 4

Estas tres consideraciones son conocidas como el teorema de Hull–Dobell. (T. E. Hull, 1962)

Sabiendo esto y tomando en cuenta que la arquitectura actual de las computadoras permite el uso de procesadores desde 32 bits existe la posibilidad de generar alrededor de 4billones de números aleatorios, 64 bits con 1.8×10^{19} números y en computadoras especializadas de hasta 128 bits con 3.4×10^{38} números aleatorios disponibles.

2.2.1 Técnicas de muestreo

Con algunas excepciones, la gran mayoría de las leyes que describen fenómenos naturales aleatorios no siguen distribuciones uniformes, sino que tienden a comportarse según una función de densidad de probabilidad específica. Con fines prácticos, si se desea estudiar estos fenómenos a través de una simulación computacional, se debe utilizar algún procedimiento que convierta cadenas de números aleatorios uniformes (que son los más fáciles de producir) en distribuciones que correspondan al experimento a realizar.

Existen dos casos generales: si esta función es discreta en un intervalo de N números, entonces se utiliza el siguiente procedimiento:

Primero se divide el intervalo $[0,1]$ en N sub intervalos $I_1 = [0, p_1]$, $I_2 = [p_1, p_2]$...

$I_N = [p_N, 1]$ que se asociaran con los N valores de la distribución y cuya longitud

$p_i - p_{i-1}$ es igual a la probabilidad de obtener cada uno de estos valores, es decir, sigue la función de densidad de probabilidad discreta. Después se obtiene una cadena de números aleatorios uniformemente distribuidos en el intervalo $[0,1]$, esto se realiza utilizando LCGs estándar, y dividiendo los números obtenidos entre el modulo del generador. Cada uno de los números aleatorios obtenidos estará dentro de alguno de los sub intervalos previamente designados, y por consiguiente, asignado a uno de los valores posibles de la distribución de probabilidad. (Nelson, Hirayama, & Rogers, 1985)

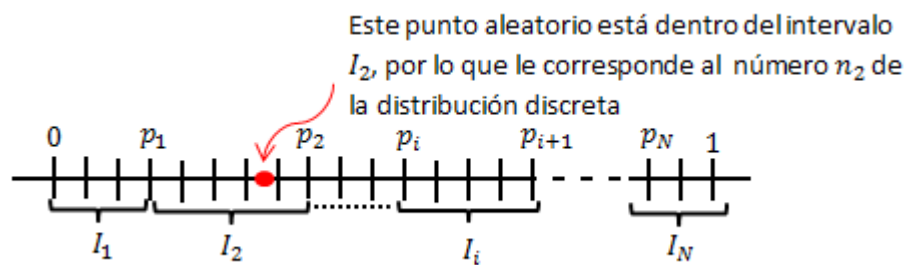


Figura 2.4 diagrama de los sub intervalos para el método de muestreo discreto

Si la función de densidad de probabilidad $p(x)$ es continua en el intervalo a-b se ocupan principalmente dos métodos:

-transformación inversa:

Se empieza por encontrar la función de probabilidad acumulada:

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

Con $x' \in [a, b]$ y los valores de la función $P(x) \in [0,1]$. Esto se puede interpretar como si la función $P(x)$ mapeará exactamente en el mismo rango de una función aleatoria η distribuida uniformemente en el intervalo $[0,1]$, es decir $P(x_i) = \eta_i$ con $\eta_i \in \eta$, esta relación puede ser invertida de tal forma que $P^{-1}(\eta_i)$ mapee dentro del rango de la variable x , pero

debido a que la naturaleza del conjunto η es aleatorio entonces se obtendrá una secuencia ξ , también aleatoria, de elementos x_i pertenecientes al dominio de $P(x)$, es decir:

$$\xi = P^{-1}(\eta)$$

Este proceso también es conocido como el *método directo* que es útil solamente cuando se tiene una función de probabilidad acumulada unidimensional *sencilla* que además sea invertible, lo que restringe mucho su aplicación. A pesar de que la inversa de una función pueda ser calculada de manera numérica, esto no es siempre práctico y puede consumir mucho tiempo de procesamiento. Alternativamente existe el **método de prueba-rechazo** que involucra un proceso numérico para la generación de los números aleatorios (Bielajew, 2001):

-primero se escala la función de distribución de probabilidad dividiéndola sobre su valor máximo, que ocurre en $x = x_{max}$:

$$f(x) = \frac{p(x)}{p(x_{max})}$$

Este método está restringido para las distribuciones finitas, e incluso si el valor de $p(x_{max})$ es difícil de obtener, siempre se puede sobre estimar su valor real con resultados satisfactorios pero menos certeros (Bielajew, 2001)

-posteriormente se eligen dos números aleatorios r_1 y r_2 de una distribución uniforme r en el intervalo $[0,1]$, uno de ellos se utilizara para generar un miembro del dominio

$x_1 \in [a, b]$ de la función de probabilidad siguiendo la fórmula:

$$x_1 = a + (b - a) \cdot r_1$$

-luego se evalúa la función de probabilidad en x_1 , si se da el caso en que $r_2 < f(x_1)$ el

número r_2 es aceptado, en caso contrario se vuelve al paso 2 y se elige otro par de números aleatorios.

A pesar de que este proceso *desperdicia* algunos pares de números aleatorios, esta es la opción más eficiente para problemas multidimensionales y con distribuciones de probabilidad complejas en términos del tiempo computacional requerido. (Bielajew, 2001)

2.3 Aplicación de técnicas Montecarlo en física medica: simulación del transporte de radiación a través de la materia

La aplicación de técnicas Montecarlo de mayor interés para este trabajo y para numerosos campos de investigación es el del transporte de partículas a través de la materia. Haciendo uso de los modelos aceptados para la interacción de radiación con la materia y para la caracterización de materiales se pueden simular desde casos hipotéticos hasta ejemplos ampliamente estudiados de detectores de partículas.

Cada uno de los tipos de partícula y sus interacciones estarán regidas por modelos diferentes directamente relacionadas con factores como:

- el rango energético con el que se trabaja
- la geometría del problema
- el material con el que interactúan las partículas, o de forma más específica, la sección eficaz de los átomos internos del material con la que las partículas entraran en contacto

Los mecanismos computacionales para el transporte de partículas funcionan llevando el registro de una colección de variables dinámicas conocidas como *espacio fase* que expresa de manera precisa el estado de la partícula. Las más relevantes son su posición, la dirección en la que viaja y la energía de la partícula, pero adicionalmente se pueden agregar cualquier número de variables que se desee, incluso algunas que no sea posible medir en un experimento real, como un indicador de la región en la que se encuentra la partícula, un índice de identificación para las tipos de partícula generada, el espín entre otras (Bielajew, 2001)

2.3.1 Modelación para el mecanismo de transporte

La trayectoria real de una partícula moviéndose dentro de un material tiene a ser muy complicada ya que está determinada por las interacciones que tendrá con los numerosos átomos del material en las que depositará parte de su energía a través de distintos procesos. En una simulación se aproxima esta trayectoria con una *traza* construida a partir de segmentos rectos que pueden cambiar de dirección con cada interacción. La longitud del segmento, los ángulos φ y θ con los que será deflectada la partícula y la energía que pierda, y por extensión el tipo de interacción que se llevó a

cabo, serán determinadas por los modelos matemáticos que son en principio procesos probabilísticos aleatorios (Bielajew, 2001).

De manera general si se tiene una partícula viajando a través de un medio en una dirección $\vec{k}$ partiendo de la posición $\vec{x}_0$ la probabilidad p de que sobreviva una distancia

$s = \vec{k} \cdot (\vec{x} - \vec{x}_0)$ esta dada por la ecuación:

$$d p_s(s) = -p_s(s) \mu(E) ds$$

En esta ecuación el signo menos indica la disminución de la probabilidad a medida que aumenta la distancia s , la dependencia de $p_s(s)$ en el lado derecha de la ecuación indica que en principio se tendrá una relación de atenuación exponencial, la función $\mu(E)$ se conoce como coeficiente de interacción y resume todos los cambios que la partícula puede experimentar en su trayectoria (Bielajew, 2001)

La distancia $s = \vec{k} \cdot (\vec{x} - \vec{x}_0)$ será medida a partir del punto en el que ocurre una interacción en línea recta hasta la siguiente. Con el fin de que las operaciones puedan ser resueltas computacionalmente se tiene que aplicar una traslación seguida de una rotación al vector de posición en forma matricial, de tal manera que siempre ocurra que $\vec{x}_0 = (0,0,0)$ y

$\vec{k} = (0,0,1)$ con el fin de que sea un problema unidimensional en todo momento. Al desarrollar esta expresión simplificada se obtiene:

$$\frac{d p_s(s)}{p_s(s)} = -\mu(E) \Longleftrightarrow p_s(s) = \exp \left(-\int_0^s \mu(E) ds' \right)$$

La probabilidad $c(s)$ de que la partícula interactúe con el medio será complementaria de p_s , de manera que $c(s) = 1 - p_s(s)$, que coincide con la *función de probabilidad acumulada* $P(\lambda)$. Diferenciándola obtenemos que:

$$p(s) = \frac{dc(s)}{ds} = \frac{d(1-p_s)}{ds} = \mu(E) \exp \left(-\int_0^s \mu(E) ds' \right) = \mu(E) p_s(s)$$

Utilizando los métodos descritos en la sección anterior, si se cuenta con un conjunto uniformemente distribuido ξ entre 0 y 1 se puede obtener un conjunto de longitudes λ

$$\xi = P(\lambda) \Longleftrightarrow \lambda = P^{-1}(\xi) = -\ln(1-\xi)$$

A pesar de que los desplazamientos de las partículas es un proceso geométrico relativamente sencillo el cálculo de las interacciones es un mecanismo detallado y en particular complicado. En principio el coeficiente $\mu(E)$ representa la probabilidad total de interacción con el medio. En términos prácticos simplificados se puede ver como si este coeficiente fuera una función que transforma una partícula incidente con energía inicial E en una con energía E' y angulos de deflexión φ y θ a través de una densidad de probabilidad p dada (Bielajew, 2001)

$$\mu(E) = \mu(E) \cdot p(E, E', \varphi, \theta)$$

Pero de manera real esta función de probabilidad tiene que ver con el número total de centros de deflexión que encontrara la partícula en su camino, y estos se pueden describir directamente en términos de su sección eficaz microscópica total.

$$\mu(E) = n \sigma_t$$

Donde n es la cantidad de centros de dispersión dentro del material, que puede ser calculado

analíticamente como:

$$n = \frac{\rho}{A} N_a \rightarrow \mu(E) = \frac{\rho}{A} N_a \sigma_t$$

Con ρ la densidad del material A el peso atómico y N_a el número de Avogadro. La sección eficaz total resume todas las interacciones posibles que la partícula puede experimentar en su trayecto, pero no solo el número y tipo de interacciones depende de la especie de partícula que se estudia sino que la probabilidad de que alguno de ellos ocurra depende sensiblemente de la energía con que la partícula llega a un centro de interacción, en otras palabras la sección eficaz total es la suma de las secciones eficaces individuales (Nelson et al., 1985):

$$\sigma_t = \sum_{i=0}^n \sigma_i$$

La probabilidad de que ocurra el evento i -ésimo es proporcional al tamaño de su sección eficaz, y ya que los mecanismos de interacción son finitos la distribución de probabilidad $p(i)$ y la de probabilidad acumulada $P(i)$ que los rige serán discretas:

$$p(i) = \frac{\sigma_i}{\sigma_t} \Leftrightarrow P(i) = \frac{1}{\sigma_t} \sum_{j=0}^i \sigma_j$$

Por ultimo cada sección eficaz individual también es una distribución de probabilidad que determina tanto los ángulos de deflexión como la cantidad de energía que la partícula pierde mediante depósitos en el medio o creación de partículas secundarias, clásicamente se define como la porción de las partículas iniciales que son deflectadas dentro de un ángulo sólido $d\Omega$ (Nikjoo et al., 2012). Cada sección eficaz es una función de la energía de la partícula $\sigma_i = \sigma_i(E)$, por lo que estas serán diferentes para cada rango energético y por ende la distribución de probabilidad total también lo será.

2.3.2 Transporte en medios homogéneos y uniformes

Este es la aproximación ideal más sencilla para describir a un material puro. En el caso específico en el que la partícula seguirá un camino indefinidamente a través de un medio infinito, uniforme y homogéneo se asume que $\mu(E)$ es constante, de manera que la ecuación para la probabilidad de interacción se transforma en la conocida *ley de atenuación*:

$$p(s) = \mu \cdot \exp\left(-\int_0^s \mu ds'\right) = \mu \cdot e^{-\mu s}$$

En el que la partícula irá perdiendo energía de manera exponencial hasta que sea absorbida completamente por el medio. Un concepto útil para entender esta distribución es el camino libre medio, que es la distancia promedio entre interacciones. Se considera que la partícula llega la superficie del material y este continua su camino indefinidamente, es decir:

$$\langle s \rangle = \int_0^{\infty} s \cdot p(s) ds = \mu(E) \int_0^{\infty} s \cdot e^{-\mu(E)s} ds = \frac{1}{\mu(E)}$$

Así la ley de atenuación puede ser expresada en términos del camino medio a través de la transformación:

$$\lambda = \frac{s}{\langle s \rangle} = \mu(E) \cdot s$$

Con el fin de simplificar la expresión: $\langle s \rangle \cdot p(\lambda) = e^{-\lambda}$

Y al evaluar esta distribución mediante los métodos de muestreo nos darán como resultado una traza recta que mide una cantidad n de caminos libres hasta el próximo punto de interacción.

Sin embargo este modelo no es realista y además para una simulación tampoco es práctico, ya que todos los modelos que se pueden generar computacionalmente deben ser en principio finitos; entonces se debe aplicar una corrección al coeficiente de atenuación que tome en cuenta una frontera para hacer un corte a la densidad de probabilidad y se debe tener un algoritmo que permita identificar cuando una partícula llega a una como parte de la simulación (Nelson et al., 1985):

1. Se calcula el camino medio $\langle s \rangle$ que corresponde al medio en el que la partícula está actualmente posicionada
2. Se define $t_1 = n \langle s \rangle$ como el número de caminos medios que la partícula se desplazara en la dirección $\vec{k}$ y corresponde a la evaluación de la distribución de probabilidad.
3. Se calcula la distancia d en la dirección $\vec{k}$ a la frontera más cercana
4. El desplazamiento real de la partícula t_2 será el menor de entre los dos números anteriores
5. Si $t_2 = t_1$ entonces la partícula interactúa con el material y se repite el proceso desde el paso 2.
6. Si $t_2 = d$ una frontera es alcanzada, se llevan a cabo el registro de este evento y si el material de la frontera es diferente del actual se va al paso 1, de otra manera se va al paso 2 (Nelson et al., 1985)

2.3.3 Transporte de fotones

Los fotones de energía E que atraviesan un material tienen la probabilidad de interactuar con el medio en una distancia s dada por la ley de atenuación (Nikjoo et al., 2012):

$$p(s)ds = \mu(E)e^{-\mu(E)s} ds$$

Esta es una distribución de probabilidad que determina la longitud de los segmentos rectos de las trazas que los fotones seguirán a través del material en términos de la cantidad de caminos medios libres, así se puede desarrollar un algoritmo que construya estas trazas a partir de una longitud fija.

Obtenemos entonces la función de probabilidad acumulada para $p(\lambda)$:

$$P(\lambda) = \int_0^{\lambda} p(\lambda') d\lambda' = \int_0^{\lambda} e^{-\lambda'} d\lambda' = 1 - e^{-\lambda}$$

Esta expresión nos da las distancias entre interacciones. Para determinar el tipo de interacción que se llevará a cabo se necesitan los modelos de las secciones eficaces para cada mecanismo de interacción, en el caso de los fotones son los siguientes (Bielajew, 2001):

-producción de pares debido al campo nuclear. Un fotón muy energético puede ser frenado por la interacción con un núcleo, es decir perderá parte de su energía y por consiguiente su frecuencia se verá reducida, una fracción de 1022keV (que es el doble de la masa de un electrón 511keV) de esa energía se *materializa* en un par de electrón positrón y dependiendo de cuanta energía extra haya perdido el par de partículas ganara momento lineal, la sección eficaz para este proceso está dado por la siguiente aproximación:

$$\sigma^{pp}(\alpha) = \sigma_0^{pp} Z^2 \left(\ln(2\alpha) - \frac{109}{42} \right)$$

Donde $\sigma_0^{pp} = 1.8 \times 10^{-27} \text{ cm}^2/\text{nucleos}$, Z es el número atómico del material y α es la energía del fotón dividida entre la masa en reposo del electrón $E_\gamma/m_e c^2$, es importante remarcar que esta sección eficaz es cero para energías menores de 1022keV, ya que el fotón no cuenta con energía suficiente para producir el par electrón positrón.

- dispersión incoherente o efecto Compton. Es un rebote inelástico con un electrón de las capas exteriores de alguno de los átomos del material, este proceso se conoce como incoherente ya que los fotones reducen su frecuencia al perder energía con el momento que le transfieren al electrón. Para energías altas la sección eficaz se puede modelar como:

$$\sigma^{inc}(\alpha) = \sigma_0^{inc} \frac{Z}{\alpha}$$

Donde $\sigma_0^{inc} = 3.33 \times 10^{-25} \text{ cm}^2/\text{nucleos}$. Para bajas energía, es decir por debajo de las energías de unión entre los electrones y sus átomos, la sección eficaz se vuelve una constante:

$$\sigma^{inc}(\alpha) = 2 \sigma_0^{inc} Z$$

-efecto fotoeléctrico. Este mecanismo domina las interacciones a bajas energías, aquí el fotón es absorbido por uno de los electrones superficiales de los átomos del medio y llevado a la banda de conducción donde contribuye a la conductividad del material. La sección eficaz para este efecto sin embargo es complicada y usualmente se describe como:

$$\sigma^{ph}(E_\gamma) \propto \frac{Z^m}{E_\gamma^n}$$

Donde los coeficientes m y n dependen de la energía del fotón incidente, por ejemplo a bajas energías (100keV) $m=4$, $n=3$ y a medida que se acerca a energías por encima de 500keV $m=4.6$, $n=1$

- **interacción de Raleigh (dispersión coherente).** La sección eficaz para ese efecto es mucho menor que la del fotoeléctrico (alrededor de un orden de magnitud) este consiste en una dispersión elástica sin pérdidas de energía, es decir el fotón conservara su longitud de onda.

2.3.4 Transporte de electrones

El transporte de electrones es enormemente más complicado que el de los fotones ya que son partículas cargadas, lo que significa por una parte que no interactuaran con el medio a través de colisiones elásticas simples, sino que estos *sentirán* el efecto de múltiples partículas del medio simultáneamente y como consecuencia las secciones eficaces para sus interacciones tienen una forma más complicada que la de los fotones y el tamaño de estas también se incrementa, por otra parte los electrones pierden energía constantemente, esto en términos computacionales es imposible ya que los recursos de cálculo y memoria son siempre finitos sin importar que tan complejos o avanzado sea la tecnología que se ocupa. Es por esto que se ocupa la técnica de *historias condensadas* (Nikjoo et al., 2012)

Esta aproximación modela la degradación de los electrones como un número relativamente pequeño de eventos discretos y utiliza pérdidas de energías restringidas que involucran tanto a los mecanismos de ionización como de excitación para describir al frenado del electrón por el medio, estos se resumen en dos tipos de mecanismos(Nikjoo et al., 2012):

1. **ionización:** bremsstrahlung inducido por un electrón y dispersión elástica (dispersión de Møller).
2. **excitación:** bremsstrahlung inducido por posición, dispersión inelástica (dispersión de Bhabha) y aniquilación en vuelo.

Adicionalmente las reacciones de los electrones con el medio producen partículas secundarias, fotones extra en el caso del bremsstrahlung y de la aniquilación en vuelo, y electrones extra en el caso de las dispersiones de Bhabha y Møller.

La sección eficaz para la dispersión de Møller está dada por:

$$\frac{d\sigma^{M\theta}}{dw} = \frac{2\pi Z r_e^2}{T^2 \beta^2} \left[\frac{1}{\varepsilon^2} + \frac{1}{(1+\varepsilon)^2} + \frac{T^2}{(1+T)^2} - \frac{1}{\varepsilon(1-\varepsilon)} \frac{2T+1}{(1+T)^2} \right]$$

En la que T es la energía del electrón inicial y w la energía transferida al electrón secundario, $\varepsilon = T/w$ es el cociente de estos dos.

Y para la dispersión de Bhabha:

$$\frac{d\sigma^{Bh}}{dw} = \frac{2\pi Z r_e^2}{T^2} \left[\frac{1}{\varepsilon} \cdot \left(\frac{1}{\varepsilon \beta^2} - B_1 \right) + B_2 + \varepsilon (\varepsilon B_4 - B_3) \right]$$

Como se puede observar la forma de las secciones eficaces para los electrones son mucho más complicadas que para fotones, es por esto que se debe recurrir a técnicas computacionales como la integración numérica, pre calcularlas para el rango energético en el que se trabaja, o hacer uso de tablas en las que venga tabulada su valor y el rango de aplicación.

Capítulo 3 Procedimiento y metodología

En la actualidad existen diversos métodos de detección de una imagen médica utilizando rayos x, sin embargo algunos de ellos o son poco sensibles o contaminan el ambiente. La finalidad de este trabajo es caracterizar vía simulación computacional y de una manera detallada las posibilidades de aplicación de un detector tipo Medipix3 para uso radiológico.

El primer objetivo del trabajo es realizar un modelo y simulación computacional de un detector de rayos X cuyas características sean similares a los de un sensor basado en materiales semiconductores, es decir, que las características físicas sean lo más cercanas posibles a las del detector original. Posteriormente será sometido a pruebas simuladas en condiciones médicas (rayos X desde 0.1KeV hasta alrededor de 1MeV (Attix, 2004) para identificar la respuesta del sensor. Posteriormente se variaran distintos parámetros con el fin de caracterizar la dependencia que la respuesta del detector tendrá respecto a estos parámetros y encontrar una combinación óptima para la detección de rayos x.

3.1 Geant4

“Geant4 es una serie de herramientas computacionales desarrolladas por el CERN en 1998 específicamente diseñado para la simulación de partículas, su interacción y transporte a través de la materia haciendo uso de métodos Montecarlo. Incluye un vasto número de funciones tales como rastreo de partículas, geometrías y diferentes modelos físicos para elegir. Los procesos físicos simulados comprenden un amplio rango dinámico incluyendo procesos electromagnéticos, hadronicos y ópticos, una biblioteca extensa de materiales, elementos y partículas de diferentes especies cuyas escalas energéticas disponible van desde unos cuantos cientos de eV hasta varios TeV. Este software está diseñado para manejar modelos físicos con y geometrías complejas de forma sencilla con la finalidad de adaptarse a diferentes aplicaciones de forma óptima. Esta herramienta es el resultado de la colaboración mundial entre físicos y expertos en software. Se desarrolló siguiendo la programación orientada a objetos y basándose en el lenguaje C++ se ha usado en aplicaciones de física de partículas, física nuclear, diseño de aceleradores de partículas, ingeniería espacial y física médica.” (Apostolakis et al., 2009)

Haciendo uso de esta herramienta computacional se modelaron los aspectos básicos más relevantes del detector, tales como: la geometría y materiales del sensor, el medio del laboratorio, el haz de rayos X y el blanco con el que el haz interactuara, además de aspectos más complejos y sensibles

como el campo eléctrico al que estarán sometidas las cargas libres dentro del sensor. Se tendrá en consideración las limitaciones del software utilizados así como del manejo de los mismos.

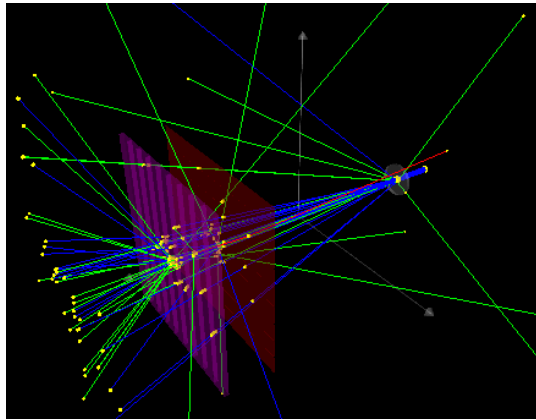


Figura 3.1: implementación de Geant4 para dispersión de hadrones, imagen obtenida de: <https://nukephysik101.wordpress.com/2016/01/30/a-geant4-simulation/>

3.1.1 Funcionamiento general de Geant4

En particular Geant4 cuenta con una vasta biblioteca de clases que definen volúmenes geométricos y todos los aspectos relacionados con ellos, organizados de manera tal que sea relativamente fácil su empleo para los usuarios. En primer lugar existen objetos geométricos básicos como paralelepípedos, cilindros, esferas, etc. Que están definidos por la menor cantidad de parámetros necesarios, por ejemplo una caja estará definida únicamente por las dimensiones de sus 3 lados; los objetos también pueden ser contruidos por secciones, un *tubo* por mencionar un caso, estará definida por su altura y los radios exterior e interior del cilindro que lo conforman, si además se necesita solamente una sección del tubo se requerirá especificar a qué ángulos debe ser recortado, geometrías más complejas incluirán combinaciones de volúmenes y solidos contruidos a partir de operaciones booleanas entre varios objetos geométricos (Geant Collaboration, 2017a)

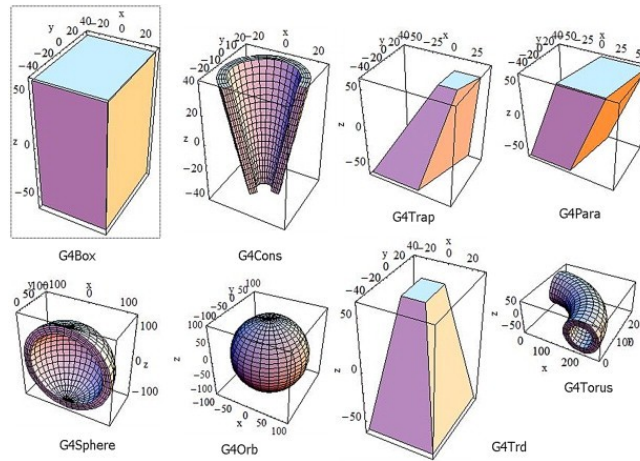


Figura 3.2 ejemplos de la geometría en geant4 imagen obtenida de: <https://nukephysik101.wordpress.com/2016/01/30/a-geant4-simulation/>

Una vez descrito un volumen se debe asignar propiedades relacionadas con la composición química del material, en principio estos pueden ser elementos puros (esta clase puede ser *invocada* con una nomenclatura G4_+ el símbolo químico del elemento) y a partir de ellos crear mezclas en proporciones expresadas en porcentajes, además se pueden definir moléculas complejas de estos elementos a partir de sus fórmulas químicas; una forma más avanzada de definir materiales es describiendo características como la sección transversal, su densidad y otras que no serán de interés para este trabajo, la forma más simple es remitirse a la base de datos de Geant4 donde predefinen compuestos estándar para la experimentación (Geant Collaboration, 2017a)

En Geant4 existe un sistema de jerarquías en el que los volúmenes más generales, y en consecuencia más grandes, llamados *volumen madre* contienen a otros de menor jerarquía llamados *volúmenes hijos*, estos heredan propiedades de sus volúmenes padres como rotaciones, traslaciones y campos electromagnéticos aplicado, de esta manera el volumen de mayor jerarquía y tamaño es el *mundo*, donde se llevarán a cabo interacciones con el ambiente, importantes a considerar para aproximarse de manera más realistas a las condiciones de un laboratorio donde no se puede eliminar el ambiente.

3.1.2 procesos físicos en Geant4

Geant4 utiliza los métodos convencionales de transporte de partículas que se vieron en el capítulo anterior, se lleva registro de la posición de la partícula actual, se calcula el camino libre medio para el material en el que se encuentra y se utilizan métodos Montecarlo para obtener los parámetros con los que se transportara a la partícula a la siguiente posición considerando las respectivas pérdidas de energía y los efectos de interacción con el medio, en el caso de geant4 se pre calculan las secciones eficaces totales previamente al inicio de la simulación (Geant Collaboration, 2017b) pero como este tiene un rango dinámico muy amplio que contempla desde la física para altas energías como para experimentos de unos cuantos eV, es importante considerar con anticipación el rango en el que se realizara la simulación ya que se tiene la opción de solamente utilizar los modelos físicos de interés para una determina escala energética, lo que puede recortar significativamente el tiempo de computo. Para este trabajo se utilizó la *opción electromagnética estándar 3* ya que es ideal para condiciones médicas (Geant Collaboration, 2017b).

Uno de los aspectos físicos fundamentales que se deben considerar en la simulación de detectores son los campos electromagnéticos presentes en el experimento, estos pueden ser internos, es decir producidos por componentes del detector como parte de su funcionamiento; o externos, debido a las condiciones ambientales. Para introducir un campo electromagnético en algún volumen del detector es necesario escribir la ecuación que lo describe que tienden a ser complicadas. En el caso específico de un campo uniforme y constante, solo se requerirá de la dirección en la que apunta y su intensidad. Como se sabe, del campo eléctrico depende la fuerza a las que serán sometidas las partículas cargadas dentro de una región espacial y por consiguiente se puede obtener la ecuación de movimiento que seguirán, sin embargo estas ecuaciones diferenciales tienden a ser complicadas y tomando en cuenta que la computadora debe utilizarlas como parte de los cálculos, una solución analítica no es viable ni práctica, por lo que estas deberán ser resueltas a través de métodos numéricos. Geant4 ocupa numerosos métodos numéricos pero por defecto se utilizará Runge-Kutta de grado 4 para 8 variables (posición x,y,z; momentos en los ejes x,y,z, energía total de la partícula y tiempo). Al ser este un método numérico, la curva real que describe el movimiento de la partícula será aproximada por segmentos rectos; la longitud de estos segmentos será declarada previamente al inicio de la simulación y es importante considerarla ya que de esta medida depende tanto a la precisión de la simulación como el tiempo total de procesamiento computacional.

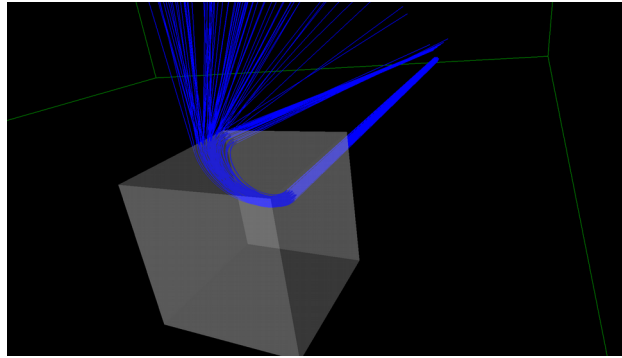


Figura 3.3 deflexión de partículas cargadas debido a campo eléctrico en geant4, imagen obtenida de:
<http://hypernews.slac.stanford.edu/HyperNews/geant4/get/emfields.html?inline=-1>

Para simular las partículas incidentes primarias se recurre a una clase llamada *particle gun*, en la que se puede describir la especie deseada a partir de una lista predefinida, además se les puede dar características como la posición de partida, dirección y energía total de las partículas entre otras. Se puede aprovechar el hecho de que Geant 4 está basado en métodos Montecarlo para la simulación de eventos para generar haces de partículas complejos, las características del haz de partículas pueden seguir distribuciones aleatorias tanto de posición como energéticas y así, definiendo estas funciones, se pueden generar diferentes frentes de onda, simular efectos de dispersión y espectros energéticos con el fin de aproximarse a una fuente de radiación real.

Para obtener la información de la simulación Geant4 ocupa dos tipos de *mecanismos virtuales* que sirven además para modelar las partes sensibles del detector. Una es el *scorer simple*, que genera un boxelizado de una región, es decir un volumen dividido en cubos idénticos de dimensiones específicas, al finalizar la simulación cada cubo da información general del estado del volumen que encierra como la energía o carga depositada, fluencia de partículas, entre otras, y las despliega en un formato de n-tupla, esta opción puede ser utilizada para generar volúmenes sensibles complejos para detectores con geometrías intrincadas.

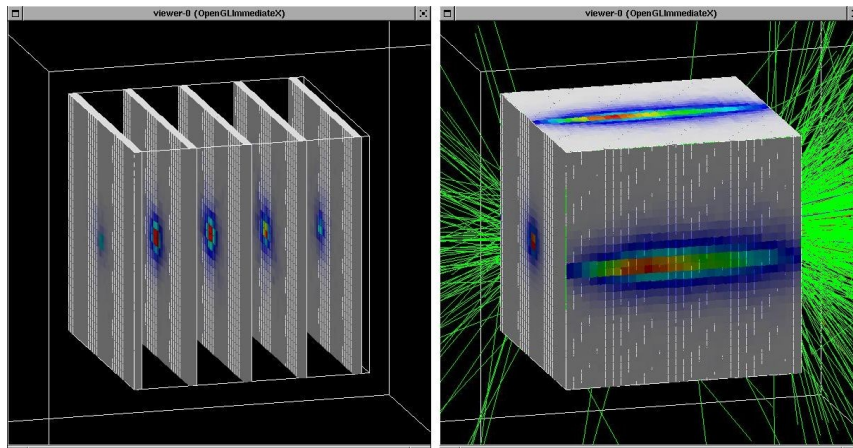


Figura 3.4 visualización de boxelizado en una siumulacion, imagen obtenida de:

<http://www.sixiangguo.net/code/geant4/AppDevelop/ch04s08.html>

La otra opción es usar una superficie delgada sensible conocida como *espacio fase*, en la que toda la información de las partículas que atraviesan esta superficie es almacenada en un archivo de ROOT para su posterior procesamiento, esta opción es más versátil para el manejo de datos ya que a ROOT es una herramienta específicamente diseñada para presentar fácilmente información estadística de manera gráfica a partir de volúmenes considerables de datos, y ya que la geometría del experimento es sencilla esta es la opción que usaremos.

3.2 Arreglo experimental

3.2.1 Implementación

En el caso conciso del presente trabajo se utilizó como mundo un paralelepípedo cuya cara frontal es de 10cm x 10cm y 32cm de largo, el detector está constituido por dos piezas principales, un bulto de silicio de cara frontal cuadrada con 1.408 cm de lado y una anchura inicial de 300um (más adelante se cambiara el grosor del bulto como parte de las pruebas realizadas) que funciona como el elemento pasivo del detector, es decir, el medio semiconductor donde se llevarán a cabo las ionizaciones con el fin de producir cargas libres; una película delgada de aluminio de 10µm de ancho como el electrodo frontal del dispositivo y un espacio fase en la parte posterior del arreglo como la parte activa del detector, se aplicará un voltaje a través de todo el arreglo de 100V que concuerda con el valor de funcionamiento real aplicado al medipix 3 que servirá para arrastrar a los portadores de carga generados en el bulto hacia la parte sensible del detector.

Como el objetivo del presente trabajo es simular la generación de una radiografía en condiciones médicas el objeto que formará, la “sombra”, será en forma de hueso. Como material de referencia se ocupó plomo ya que este material tiene suficiente poder de frenado como para absorber todos los fotones que lo atraviesen y así generar imágenes bien definidas, más adelante se usaran materiales biológicos, que son parte de la biblioteca de Geant4. El objeto se colocara entre el detector y la “fuente de rayos X” a 12cm del origen y a 5cm del sensor.

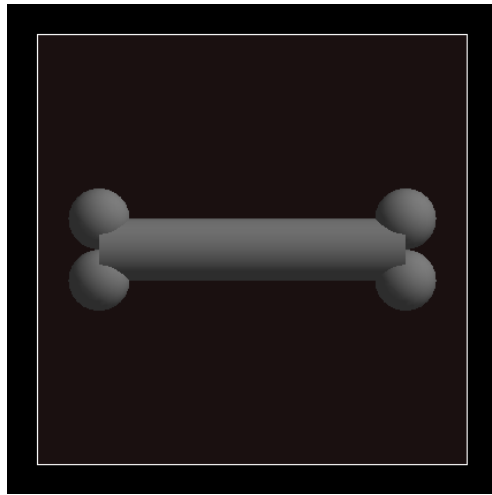


Figura 3.5 Vista frontal del *hueso* que servirá como obstáculo para formar la imagen para todas las pruebas a realizar

La fuente de rayos X será simulado mediante un cañón de fotones mono energéticos dentro del rango médico, la posición inicial estará a 17 cm del sensor y a 12cm del blanco, abarcará toda la superficie del detector y la posición dentro del plano X-Y será aleatoria para destacar el comportamiento estocástico de una fuente de rayos X. En la siguiente imagen se muestra como llegan las partículas al detector

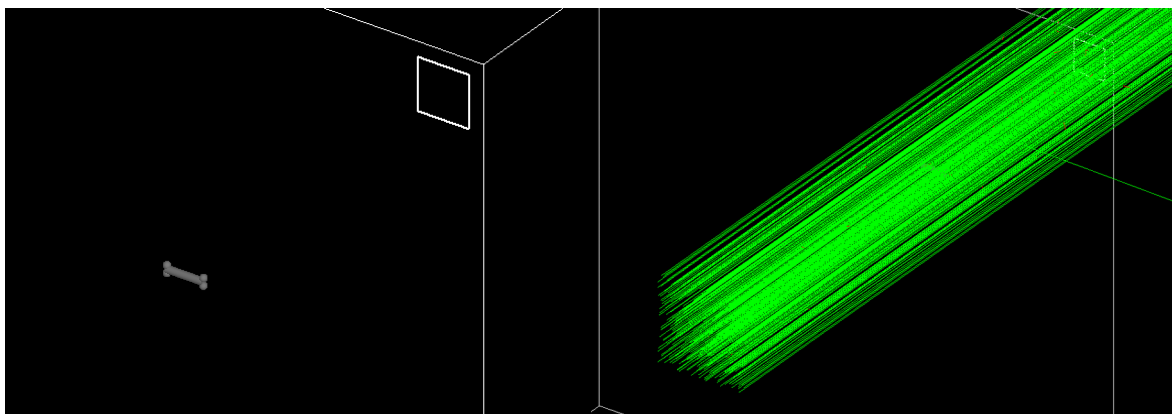


Figura 3.5 (izquierda) arreglo experimental en posición para disparo, (derecha) disparo de prueba con un haz de fotones plano aun no enfocado en el área del detector

En una primera instancia se intentó utilizar los recursos computacionales con los que contaba el laboratorio de física médica. Sin embargo el gran número de partículas que se requieren para lograr la simulación implicaba que el tiempo de procesamiento no era razonable para una computadora normal, por lo que se tuvo que hacer uso de los recursos computacionales del *Laboratorio de Súper cómputo del Sureste (LNS)*. El LNS dispone de la supercomputadora Cuetlaxcoapan que cuenta con un clúster Intel Xeon familia Haswell de 228 nodos de cálculo Thin (5472 núcleos) [<http://www.lns.org.mx/?q=infraestructura%20>], de los cuales se tuvo acceso a un nodo con 24 núcleos de procesamiento. Como se verá más adelante la parte de la simulación que demandó más recursos computacionales fueron las pruebas de “conteos vs voltaje y anchura” que requería de 8 pasos para la anchura, 6 para el voltaje y 8 repeticiones para cada configuración de estas dos cantidades, es decir un total de 384 simulaciones diferentes que requerían de una semilla aleatoria única, además de que era necesario cambiar los parámetros internos del detector en cada configuración, por lo que se realizaron diversos proyectos auxiliares a lo largo del estudio con el fin de automatizar casi todo el proceso de simulación, colecta de datos, procesamiento y post procesamiento de los datos.



Figura 3.6 Supercomputadora Cuetlaxcoapan con sede en el LNS de la BUAP, imagen obtenida de: <http://www.lns.org.mx/?q=infraestructura%20>

3.2.2 Error estándar de la distribución espacial

El experimento se realizó por partes y se analizaron múltiples aspectos del sensor. El primer paso fue establecer la relación entre el error estadístico en la fluencia provocado por la naturaleza probabilística de la simulación contra el número de partículas primarias generadas. Como hipótesis inicial se consideró que el error decrecerá de manera exponencial a medida que el número de partículas aumenta, se aplicara entonces una regresión exponencial para generar la mejor curva que se ajuste a los datos obtenidos y así estudiar el comportamiento del error. Además se relacionará esta cantidad con el tiempo de cómputo, que crecerá exponencialmente con el número de partículas iniciales en teoría, con el fin de ponderar un error estadístico por debajo de un nivel satisfactorio en tiempos razonable.

En esta primera parte se utilizó plomo (G4_Pb $\rho = 11.35 \text{ gr/cm}^3$) como material de referencia para el obstáculo, ya que este material tiene un poder de frenado suficiente para absorber a casi todos los fotones dentro del volumen designado y los bordes de la imagen estarán bien definidos, la geometría del detector estará delimitada por un grosor de $300 \text{ }\mu\text{m}$ que es el estándar para este tipo de detector, la energía para el cañón de partículas estará fija en 120 keV que está dentro del rango médico medio para rayos X (Attix, 2004) El experimento consistió en variar el número de partículas desde 10^2 hasta 10^9 en potencias de 10 enfocándonos en una región de interés que ocupaba el cuadrante inferior izquierdo del sensor (una superficie de 13.7 mm^2), fuera del área ocupada por el obstáculo, en el que se calculó el *Error estándar de la Distribución Espacial (EDE)* de la siguiente forma:

$$\varepsilon^{EDE} = \sqrt{\frac{\sigma}{c}}$$

En el que c son los conteos del detector, es decir es el número de partículas que pudieron sobrevivir hasta el área de interés, estos estarán esparcidos dentro de la región de interés y la separación entre ellos estará caracterizada por la desviación estándar σ , entonces el error estándar nos dará una mediada de la dispersión espacial de los conteos dentro del área de interés. El análisis de error estándar se realizara para fotones y electrones por separado, por una parte los fotones generaran *sombras* más detalladas; sin embargo en la práctica serán los electrones que logren alcanzar la parte sensible del detector lo que formara la imagen digital, es el estudio del comportamiento de los electrones el que nos dirá la calidad y las limitaciones de la simulación, con el fin de mejorarla en trabajos posteriores.

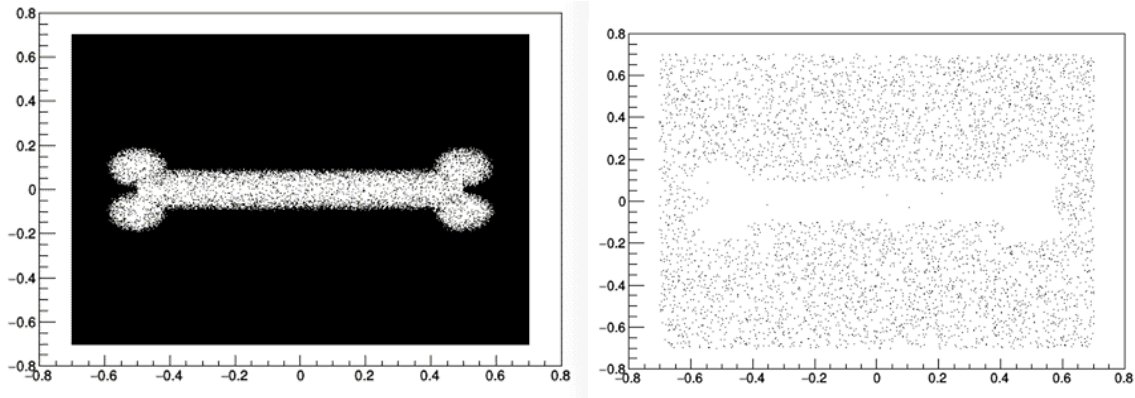
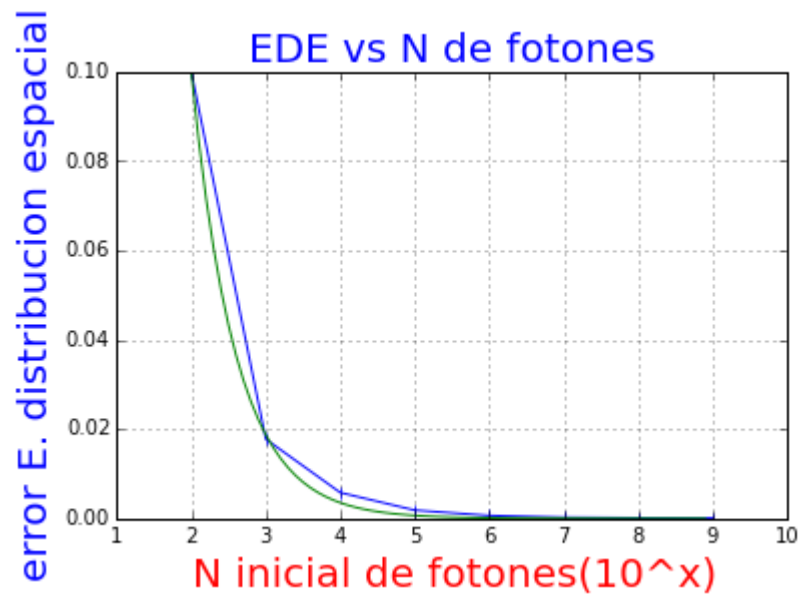


Figura 3.7 Comparación entre la imágenes de prueba formadas por (izquierda) 10^9 fotones iniciales y (derecha) los electrones generados por la ionización del medio, se utilizó G4_B-100_BONE como material para el obstáculo

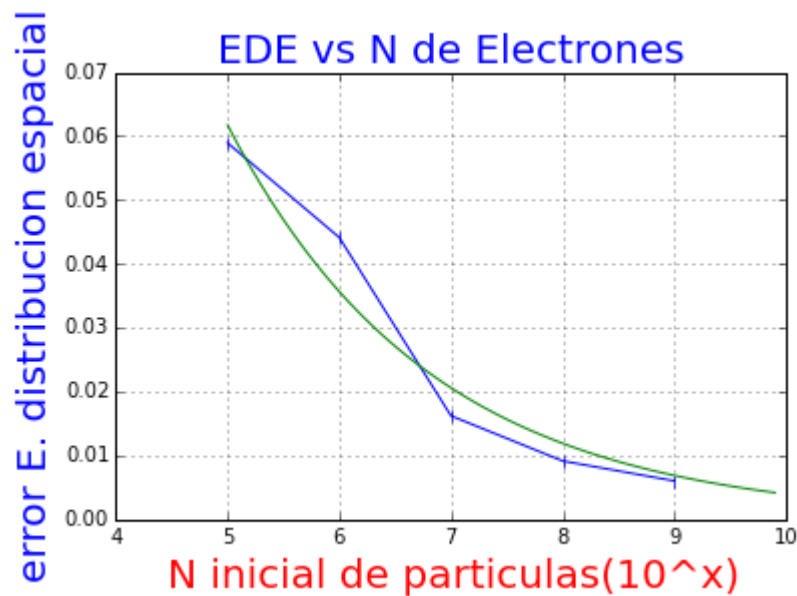
Para cada valor de n de partículas primarias iniciales, y tomando en cuenta los recursos computacionales con los que se cuenta, se repite la medición del error estándar 8 veces con semillas aleatorias diferentes, que por la naturaleza estocástica de la simulación arrojará resultados diferentes, pero dado que las condiciones físicas son exactamente iguales los resultados estarán distribuidos alrededor de un valor central, entonces los 8 valores del *EDE* serán ocupados para obtener un promedio que es la mejor aproximación para el valor central y se ocupará la desviación estándar de estos valores como el *error de medición*, es decir, las cifras que reportaremos son de siguiente forma:

$$v_c = \frac{1}{8} \sum_{i=1}^8 \varepsilon_i^e \sigma_c = \sqrt{\frac{1}{8} \sum_{i=1}^8 (v_c - \varepsilon_i^e)^2}$$

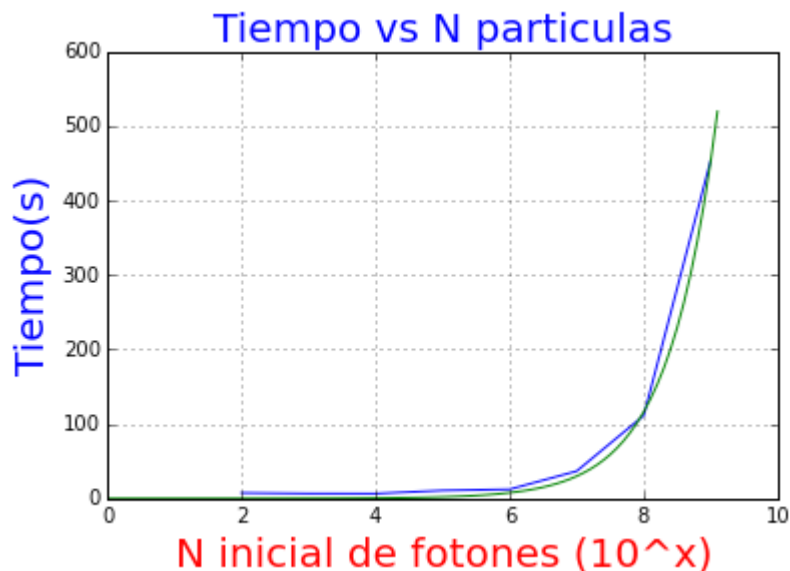
Este estudio se complementará obteniendo el tiempo computacional que tarda cada corrida de datos en terminar, al igual que para el error estándar, se saca el tiempo promedio para cada conjunto de 8 simulaciones y su respectivo error de medición con el fin de encontrar el mejor estimado del tiempo real para cada configuración inicial. Estos resultados se ocupan en conjunto para obtener un número de partículas iniciales que minimicen el *error estándar espacial* por debajo de un 0.05%. A continuación los resultados obtenidos presentados en gráficas con el eje que representa al número inicial de fotones en escala logarítmica en base diez con el fin de hacerlas más compactas:



Aquí se muestra el decrecimiento del EDE respecto al número inicial de fotones, se puede observar que hay poca discrepancia entre la curva teórica y los datos obtenidos.



El EDE para los electrones decrece de la misma forma a medida que aumentan el número de fotones iniciales, pero la curva teórica no se ajusta tan bien con los datos simulados.



El tiempo computacional por otra parte aumenta de forma exponencial a medida que el número de partículas aumenta.

3.2.3 pruebas de volumen y voltaje

Esta es la prueba principal de este trabajo, consistió en variar el grosor del bulto de silicio y el voltaje aplicado para estudiar la respuesta en la sensibilidad del detector, es decir los conteos registrados en el espacio fase, esto será hecho en condiciones médicas y para eso es necesario cambiar el material del obstáculo por uno biológico. Geant4 cuenta con 3 versiones diferentes de hueso, presentados a continuación (Geant Collaboration, 2017a):

Nomenclatura			Composición química en porcentaje
G4_B-100_BONE			H-6.54709%, C-53.6944%, N-2.15% O-3.2085%, F-16.7411%, Ca-17.6589%
G4_BONE_COMPACT_ICRU			H- 6.4%, C-27.8%,N-2.7%,O-41%, Mg-0.2%, P-7%,S-0.2%,Ca-14.7%
G4_BONE_CORTICAL_ICRP		.0	H-3.4%, C-15.5%, N-4.2%, O-4.35%, Na-0.1%, Mg-0.2%, P-10.3%, S-0.3%, Ca-22.5%

Para poder elegir el material que se utilizó en la simulación se hicieron pruebas rápidas de comparación en la atenuación de los materiales, ya que la mejor imagen será producida por el material que produzca el mejor contraste.

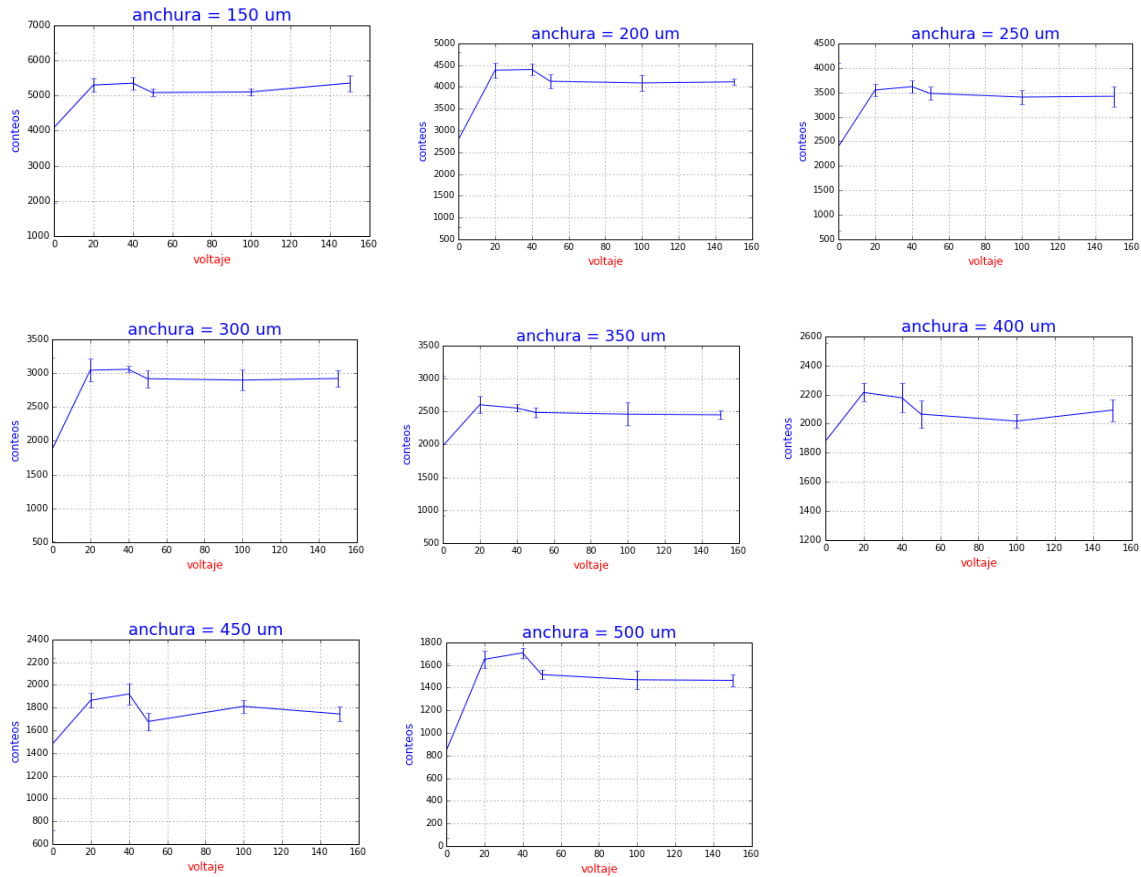
El haz para esta prueba rápida consistió en 10^6 fotones iniciales con una energía de 10 keV con 5 repeticiones para cada variante del material, las repeticiones tuvieron semillas aleatorias diferentes entre sí, pero se ocupó el mismo conjunto de semillas para cada material con el fin de hacer una comparación con las mismas condiciones iniciales y enfocarse únicamente en la atenuación del medio.

Los resultados del promedio de los conteos se muestran continuación, seguidos del error estándar que se encontró entre las repeticiones y el porcentaje que este representa:

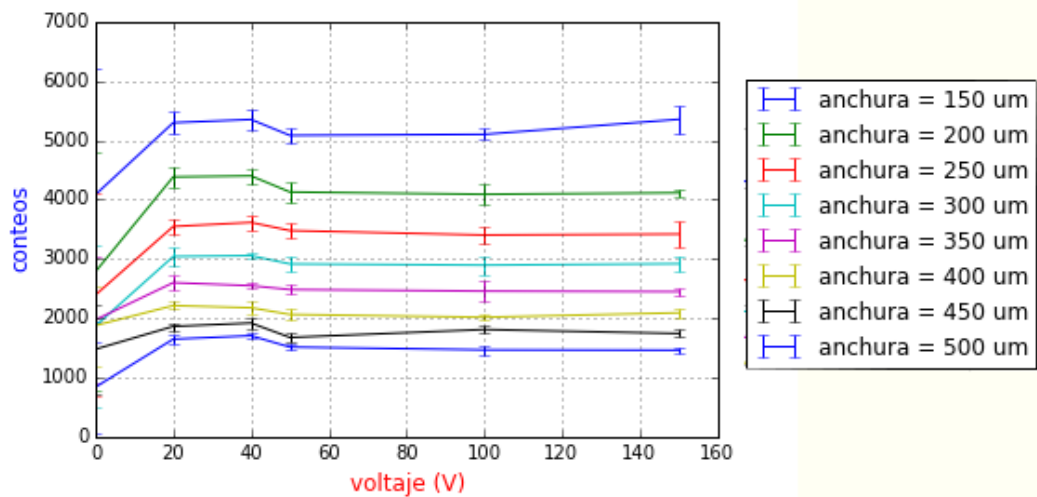
Nomenclatura	Conteos	Error	Error porcentual
G4_B-100_BONE			
G4_BONE_COMPACT_ICRU			
G4_BONE_CORTICAL_ICRP			

Se puede apreciar que a pesar de las diferencias en la composición química de los materiales, las diferencias de atenuaciones entre ellos son relativamente bajas, tomando G4_B-100_BONE como referencia, G4_BONE_COMPACT_ICRU disminuye los conteos en un 0.03% y G4_BONE_CORTICAL_ICRP en un 0.06% por lo que este último, aunque por un pequeño margen, es el que produce una mayor atenuación, entonces será el que se elija para las pruebas.

El grosor se varió desde 150 μ m hasta 500 μ m en pasos regulares de 50 μ m, esto abarca el rango para grosores típicos de detectores delgados. El voltaje se varió en dos partes, primero en intervalos regulares de 50 volts desde 50 hasta 150 volts que es el rango usual para este tipo de detectores, y luego se varió dentro del rango 0V, 20V, 30V, debido a que se presentaron irregularidades en las mediciones a bajos voltajes y se necesitaba un estudio más detallado. A continuación las gráficas generadas por el análisis de todas las configuraciones estudiadas:

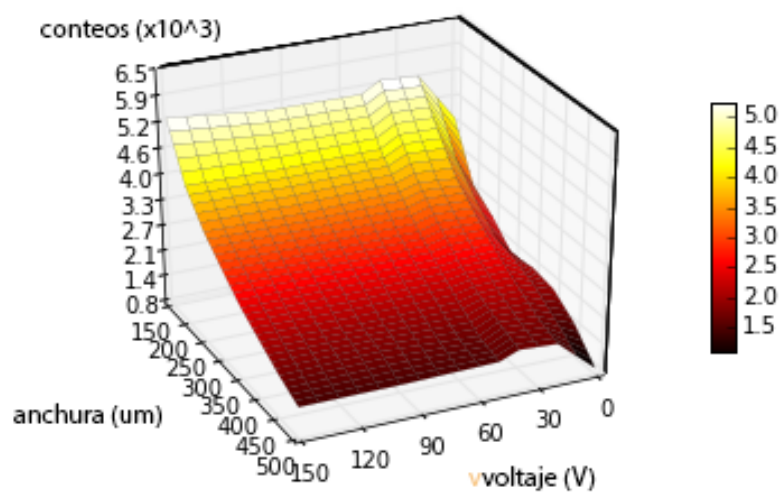


A continuación se pueden ver la comparación de todas estas las respuestas del detector a diferentes grosores combinadas en una sola gráfica:



Como se puede observar en esta grafica comparativa la respuesta del detector sigue un comportamiento bien definido que relaciona el voltaje de alimentación con la sensibilidad de medida, y este es común para todos los grosores del bulto estudiados

Combinando la información de estas dos variables se construyó un espacio fase que se representa gráficamente en la siguiente imagen como una *sábana* en 3 dimensiones, esta resume la respuesta del detector obtenida.



Capítulo 4 Conclusiones

A partir de los resultados obtenidos en la simulación se puede observar claramente una dependencia bien definida tanto en el voltaje de alimentación como en el grosor del bulto. A cero volts se tiene un numero inicial de conteos relativos bajo, a medida que aumenta el voltaje se llega a un máximo de conteos alrededor de los 40 volts que cae rápidamente, los conteos llegan a una plateau o meseta en el rango de 50 hasta 150 volts. Este es un comportamiento en común para todas las anchuras estudiadas, por otra parte el comportamiento de conteos vs anchura es el esperado ya que estos caen a medida que aumenta el grosor del bulto, lo que indica naturalmente la atenuación del medio.

De manera sistemática encontramos un comportamiento diferente en 0 volts que provocaba que alrededor del 50% de las mediciones tuviera variaciones estadísticas significativas, el alto valor para el error estadístico en este voltaje se debe al bajo número de electrones que llegan a sensor en alrededor de la mitad de las corridas, que se puede deber a una irregularidad en los procesos internos de Geant4 como un caso límite en el valor del campo eléctrico aplicado. Otra opción (que no se exploró debido a las limitaciones del tiempo) pudo ser el tamaño de la partición en el transporte condensado para electrones dentro de un campo eléctrico.

En general el comportamiento de la respuesta del sensor es el esperado, de acuerdo a lo observado en detectores de radiación.

En conclusión, la caracterización del sensor fue completada de forma exitosa, las pruebas muestran que la simulación del detector tiene una respuesta adecuada para el rango energético que se ocupa en física médica. Por último nuestros resultados pueden ocuparse para estudios posteriores con el fin de mejorar la simulación y los arreglos experimentales con este detector.

Bibliografía

- Apostolakis, J., Asai, M., Bogdanov, A. G., Burkhardt, H., Cosmo, G., Elles, S., ... Wright, D. H. (2009). Geometry and physics of the Geant4 toolkit for high and medium energy applications. *Radiation Physics and Chemistry*, 78(10), 859–873. <https://doi.org/10.1016/j.radphyschem.2009.04.026>
- Attix, F. H. (2004). *Introduction to Radiological Physics and Radiation Dosimetry*. Madison: WILEY-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, Weinheim All.
- Bielajew, A. F. (2001). Fundamentals of the Monte Carlo method for neutral and charged particle transport. *SciencesNew York*, 1–338. <https://doi.org/10.1007/s11746-007-1072-2>
- Boylestad, R. (1997). *Electrónica: Teoría de Circuitos y Dispositivos Eléctricos* (Vol. 6). <https://doi.org/10:0-8400-5444-0>
- Campbell, M. (2011). 10 years of the Medipix2 Collaboration. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research, Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, 633(SUPPL. 1), S1–S10. <https://doi.org/10.1016/j.nima.2010.06.106>
- Geant Collaboration. (2017a). Book For Application Developers.
- Geant Collaboration. (2017b). Physics Reference Manual.
- George, S. P., Murtas, F., Alozy, J., Curioni, A., Rosenfeld, A. B., & Silari, M. (2015). Particle tracking with a Timepix based triple GEM detector. *Journal of Instrumentation*, 10(11). <https://doi.org/10.1088/1748-0221/10/11/P11003>
- Gimenez, E. N., Ballabriga, R., Campbell, M., Horswell, I., Llopart, X., Marchal, J., ... Turecek, D. (2011). Characterization of Medipix3 with synchrotron radiation. *IEEE Transactions on Nuclear Science*, 58(1 PART 2), 323–332. <https://doi.org/10.1109/TNS.2010.2089062>
- Kittel, C. (2005). *Introduction to Solid State*. John Wiley & Sons, Inc. <https://doi.org/10.1103/PhysRev.108.1175>
- Lutz, G. (2007). *Semiconductor Radiation Physics*. Munich: Springer.
- Mishra Umesh K., & Singh, J. (2008). *Semiconductor Device Physics and Design*. Dordrecht: Springer.
- Nelson, W. R., Hirayama, H., & Rogers, D. (1985). The EGS4 Code System. *Report SLAC-265, Stanford Linear Accelerator Centre, Stanford, California*, 265. [https://doi.org/10.1002/1098-108X\(198707\)6:4<455::AID-EAT2260060402>3.0.CO;2-5](https://doi.org/10.1002/1098-108X(198707)6:4<455::AID-EAT2260060402>3.0.CO;2-5)
- Nikjoo, H., Uehara, S., & Emfietzoglou, D. (2012). *Interaction of Radiation with Matter*. Boca Raton: CRC Press.
- Seco, J., & Verhaegen, F. (2013). *Monte Carlo Techniques in Radiation Therapy*. Boca Raton: CRC Press Taylor & Francis Group, LLC.
- T. E. Hull, A. R. D. (1962). 10.0000@chagall.med.cornell.edu@generic-09BF4C49D642.pdf. STOR.