



Caracterización de las propiedades físico-químicas más relevantes en la respuesta T2-Dosis para gel dosimétrico en el rango de baja dosis

Camilo Andrés Mateus Ortigoza

Pontificia Universidad Javeriana
Facultad de Ciencias, Departamento de Física
Bogotá, Colombia
2021

Caracterización de las propiedades físico-químicas más relevantes en la respuesta T2-Dosis para gel dosimétrico en el rango de baja dosis

Camilo Andrés Mateus Ortigoza

Trabajo de grado presentada(o) como requisito parcial para optar al título de:
Magister en Física Médica

Directora:
Dr.Sc Andrea Abril Fajardo

Línea de Investigación:
Proyecto de investigación de la Facultad de Ciencias de la PUJ con ID:20000
Grupo de Investigación:
Grupo de Investigación en Física médica

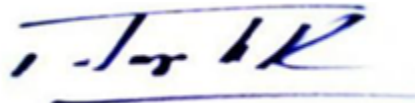
Pontificia Universidad Javeriana
Facultad de Ciencias, Departamento de Física
Bogotá, Colombia
2021

CARACTERIZACIÓN DE LAS PROPIEDADES FÍSICO-QUÍMICAS MÁS RELEVANTES
EN LA RESPUESTA T2-DOSIS PARA GEL DOSIMÉTRICO EN EL RANGO DE BAJA DOSIS

Camilo Andrés Mateus Ortigoza



Jhon Jairo Sutachan Rubio, Ph.D
Director de Posgrados
Facultad de Ciencias



Alba Alicia Trespalacios Rangel, Ph.D
Decana
Facultad de Ciencias

Bogotá, agosto de 2021

Pontificia Universidad Javeriana

Maestría en Física Médica

Trabajo de Grado revisado y aprobado por:

Tutora

Andrea Abril Fajardo, Dsc



Jurados

Pilar Infante, Ph.D.



Germán Alexander Pabón, D.Sc.




PARA: César Augusto Sierra, D.Sc.


U-JAYERIANA

Fecha de aprobación: 2 de Agosto de 2021

A todas las personas que hicieron posible el desarrollo de este trabajo, en especial a mis padres, que con su apoyo me brindaron la oportunidad de instruirme en este campo tan hermoso de la física.

El Maestro no habla; actúa. Cuando su tarea concluye, la gente dice: «Asombroso: ¡lo hemos hecho nosotros!».

Lao Tse

Resumen

En este trabajo se hace uso de simulaciones Monte Carlo para entender el comportamiento del proceso de polimerización radio-inducido en los geles dosimétricos PGD a bajas dosis. Se analiza el comportamiento de la dosis absorbida en materiales como el BANG-2 y se estudia como afecta variar parámetros de fabricación del gel como la densidad o el espesor. Para esto se realizaron las simulaciones mediante GEANT-4, y se usaron las librerías convencionales para simular la irradiación de un cubo de gel, como también la librería especializada en microdosimetría GEANT4-DNA para analizar la generación de los radicales libres. Los resultados obtenidos permiten proponer parámetros de fabricación del gel con los que se puede optimizar la dosis absorbida, mejorando así la sensibilidad del gel, como también tener una mayor localización de los radicales libres radioinducidos.

Palabras clave: Gel dosimétrico; Monte Carlo; Calibración, GEANT-4

Abstract

In this work, Monte Carlo simulations are used to understand the behavior of the radio-induced polymerization process in PGD dosimetric gels at low doses. The behavior of the absorbed dose in materials such as BANG-2 is analyzed and it is studied how it affects to change gel manufacturing parameters such as density or thickness. For this, the simulations were carried out using GEANT-4, and the conventional libraries were used to simulate the irradiation of a gel cube, as well as the specialized library in microdosimetry GEANT4-DNA to analyze the generation of free radicals. The results obtained make it possible to propose gel manufacturing parameters with which the absorbed dose can be optimized, thus improving the sensitivity of the gel, as well as having a greater localization of the radio-induced free radicals.

Keywords: Gel dosimeter; Monte Carlo; Calibration, GEANT-4

Lista de Figuras

2-1 Secciones eficaces por efecto fotoeléctrico y compton en agua	4
2-2 Secciones eficaces para el aire y el gel BANG-2	5
2-3 Ejemplo de ajuste de decaimiento para hallar T2	8
2-4 Ejemplo de simulación en GEANT4. Se ve la generación de 10 fotones de 25 keV de energía inicial y su interacción con dos volúmenes de agua.	10
3-1 Composición elemental del gel dosimétrico BANG-1	12
3-2 Composición elemental del gel dosimétrico BANG-2	12
3-3 Promedios ponderados de energía y coeficientes	13
3-4 Ventana de entrada de parámetros de energía incidente de los electrones y definición de la composición elemental del material del sustrato en PENELOPE.	15
3-5 En esta figura se ve la distribución de probabilidad de retrodispersión del electrón en función de su energía final. Se puede ver un máximo de probabilidad alrededor de 65 keV.	16
3-6 En esta figura se grafica la probabilidad de retrodispersión en función de distintos porcentajes de gelatina en la composición del gel. Esto varía la densidad entre 1.05 - 3.06 g/cm ³	16
3-7 Se muestra el resultado de la atenuación para una lámina de plomo de distinto grosor. El grosor de la lámina aumenta de esta forma: a) 0 cm b) 0.02 cm c) 0.04 cm c) 0.08 cm	18
3-8 Atenuación de la dosis absorbida en el bloque de CsI	18
3-9 Izquierda: Se muestra el comportamiento de la radiación al atravesar el material de cubo de aire, a la Derecha: en un cubo de agua	20
3-10 A la Izquierda: Se muestra la distribución de la dosis absorbida en un cubo de aire, a la Derecha: en un cubo de agua	21
3-11 En sentido horario: a) Se muestra el perfil de dosis depositada en la superficie del cubo de agua, en b) la dosis depositada en un corte central y c) la deposición de dosis en profundidad.	22
3-12 Esta figura es una representación del montaje experimental. El eje Z es paralelo al momentum inicial de los fotones incidentes. El volumen se divide en 10 x 10 x 10 vóxeles.	23
3-13 Dosis absorbida y Energía depositada en el cubo de gel	24

3-14 Perfil de dosis en Z para $[X, Y = 2.5 \text{ cm}]$, el ancho del cubo es de 5 cm. Se puede ver la dosis depositada en profundidad para tres geles con diferente densidad.	24
3-15 Dosis absorbida y Energía depositada en un vóxel superficial $[Z=0 \text{ cm}]$ del cubo	25
3-16 Perfil de dosis en X para un voxel superficial $[Y = 2.5 \text{ cm}, Z = 0 \text{ cm}]$	26
3-17 Perfil de dosis en X para un voxel de intermedio $[Y, Z = 2.5 \text{ cm}]$ con ajuste gaussiano.	26
3-18 Dosis absorbida en función de la densidad del gel para espesor 2 cm con ajuste gaussiano.	27
3-19 a y b) Se puede ver la trayectoria que recorre un electrón con energía de 10 KeV que inicia su recorrido desde el centro de una caja de $5 \mu\text{m}$ de ancho. También se aprecia las partículas secundarias al lado de la trayectoria de la partícula principal. b) Realizando zoom a la trayectoria principal se puede ver con más detalle el comportamiento de los radicales libres radioinducidos.	28
3-20 Esta figura permite ver la trayectoria que recorre un electrón simulado en GEATN4-DNA con energía de 1 MeV que inicia su recorrido desde la superficie de una caja de 1 mm de ancho, en este caso la alta energía le permite al electrón superar las dimensiones de la caja.	29
3-21 Se puede ver la trayectorias que recorren electrones con energías de 150 keV, 300 keV, 450 keV, 600 keV, 850 keV y 1000 keV respectivamente que inician en la superficie de un cubo de agua. La distancia recorrida el cubo se incrementa al aumentar la energía y con 850 keV son suficientes para tener una trayectoria mayor a las dimensiones del cubo con $L = 0.25 \text{ cm}$	30
3-22 Se ven dibujadas cuatro trayectorias que corresponden a la simulación de cuatro electrones de 150 keV que inician su recorrido en la superficie de una caja de 0.25 mm de ancho y poseen un momentum inicial paralelo al eje Z. Cada una sigue procesos aleatorios aunque el recorrido máximo de los electrones es similar.	31
3-23 Esta figura permite ver la interacción tipo Compton que lleva a cabo un fotón con energía inicial de 150 keV que inicia su recorrido fuera del cubo de agua de 5 cm^3 de volumen.	32
3-24 Esta figura permite ver la trayectoria que recorre un electrón generado por la interacción compton que lleva a cabo el fotón con energía de 150 KeV. En la trayectoria que recorre el electrón se ve como se crean los electrones secundarios que luego mediante ionización con las moléculas de agua generarán los radicales libres.	33
3-25 En esta figura se ve como un fotón con energía inicial de 150 keV realiza dos interacciones tipo Compton que lleva a cabo en el cubo de agua de 5 cm^3 de volumen.	33

3-26 En esta figura se puede ver la trayectoria que recorren los dos electrones generados mediante interacción por el fotón de la figura anterior con 150 keV de energía inicial.	34
3-27 Esta figura presenta las trayectorias recorridas por varios fotones con energía inicial de 150 keV que inician su recorrido fuera de un cubo de agua de 5 cm^3	34
3-28 Esta gráfica presenta la distancia promedio que recorrieron los radicales libres desde el electrón que los generó en función de la energía depositada por los fotones en un cubo de agua de 5 cm^3 de volumen.	35
4-1 Área normalizada en función de la densidad para curvas de perfil X [Y=Z=2.5 cm]	36
4-2 Área normalizada en función de la densidad para curvas de perfil X con las coordenadas [Y = 2.5cm, Z = 0cm]	37
4-3 a) Se puede ver como cambia la dosis absorbida en el cubo al variar el porcentaje de gelatina. Se encuentra un pico de dosis en 9.27%. b) La sensibilidad de la dosis al variar el porcentaje de gelatina [Luci et al., 2007] presenta un comportamiento similar al obtenido en el experimento in silico.	38
4-4 a) Se puede ver como cambia la dosis absorbida en el cubo al variar el porcentaje de gelatina. Se encuentra un pico de dosis en 9.85% al usar un rango mayor de porcentaje de gelatina.	39
4-5 Este histograma muestra la distribución de las distancias entre un electrón con 50 keV de energía y las reacciones entre las diferentes especies generadas por la radiolisis a medida que deposita su dosis. Estos productos luego iniciarán las cadenas de polimerización en el gel.	40
4-6 Este histograma muestra la distribución de las distancias entre un electrón de 100 keV y las reacciones entre las diferentes especies generadas por la radiolisis a medida que deposita su dosis. Estos productos luego iniciarán las cadenas de polimerización en el gel.	41
4-7 Este histograma muestra la distribución de las distancias entre un electrón de 150 keV y las reacciones entre las diferentes especies generadas por la radiolisis a medida que deposita su dosis. Estos productos luego iniciarán las cadenas de polimerización en el gel.	41
4-8 Este histograma muestra la distribución de las distancias entre un electrón de 200 keV y las reacciones entre las diferentes especies generadas por la radiolisis.	42
4-9 En esta figura se puede ver el comportamiento de la distancia promedio de las reacciones entre los radicales libres y el electrón que va depositando la dosis en el gel en función de la energía inicial del electrón. Se realiza un ajuste lineal a los datos entregados por las simulaciones.	42

4-10 En esta figura se puede ver el comportamiento de la el promedio del rango de distancia más probable entre las reacciones de los radicales libres generados y el electrón que va depositando la dosis en el gel. Esto en función de la energía inicial del electrón. Se realiza un ajuste lineal a los datos entregados por las simulaciones.	43
4-11 En estas dos figuras se puede ver el comportamiento de la distancia promedio y la distancia más probable (promedio del rango más probable de distancias) de las reacciones entre los radicales libres y el electrón que va depositando la dosis en función de la densidad del gel. Se realiza un ajuste lineal a los datos entregados por las simulaciones.	44
4-12 Esta figura permite ver la distribución de las distancias de los radicales libres radioinducidos por fotones de 150 keV como visto en las figuras 3-23 y 3-25 respectivamente. Se puede ver la diferencia entre una interacción sencilla y dos interacciones en el material.	45
4-13 Esta figura muestra la generación de radicales libres que lleva a cabo un fotón para cada una de sus interacciones compton, la primera a profundidad de 4.98 cm y la segunda interacción a 4.56 cm de profundidad. La mayoría de radicales se generan en la primera interacción.	46
4-14 Se ve en esta figura en forma de histogramas la distribución espacial de los radicales libres radioinducidos por fotones con energía inicial variable que empiezan su recorrido fuera de un cubo de agua de 5 cm^3 de volumen con una densidad de 1.396g/cm^3 (densidad hallada para gel con 9% de gelatina). Las distancias tienden a agruparse cerca a un rango y se puede distinguir a simple vista cuáles tuvieron varias interacciones: el fotón de 50 keV y el de 150 keV.	47
4-15 En estas dos figuras se puede ver el comportamiento de la distancia promedio y la distancia más probable de la distribución de los radicales libres en función de la energía inicial del fotón. Se realiza un ajuste lineal a los datos entregados por las simulaciones.	48
4-16 a) Curva de intensidad de señal con el valor de T2 correspondiente a una dosis absorbida de 1 Gy. b) Curva de calibración [Fong et al., 2001] que relaciona la dosis absorbida con un valor de $R2 = 1/T2$ para un gel dosimétrico irradiado mediante un acelerador lineal.	49
4-17 En esta figura se observan cuatro curvas de señal de intensidad. Cada señal corresponde a un valor de T2 hallado al evaluar cada función de calibración para dosis de 1 Gy.	50
4-18 En esta figura se observan cuatro curvas de señal de intensidad. Cada señal corresponde a un valor de T2 hallado al evaluar la función de calibración $R2 = 0.30D - 3.82$ para varios valores de dosis absorbida.	50

4-19	En esta figura se observan cuatro curvas de señal de intensidad. Cada señal	
	corresponde a un valor de T2 hallado al evaluar la función de calibración	
	$R2 = 0.519D - 6.40$.	51
4-20 superior:	Se encuentra el TEmax para la diferencia que dan dos valores de	
	dosis, 1 Gy y 5 Gy siguiendo la curva de calibración $R2(D) = 0.30D - 3.82$.	
	El TEmax es de 0.21 s. inferior: Se escogen valores más pequeños de dosis y	
	se puede ver que se disminuye de forma significativa la diferencia apreciable	
	entre las curvas.	52
4-21	Esta figura muestra el decaimiento de la intensidad de la señal medida median-	
	te IRM para un ROI del tubo 1 el cuál recibió $7.9 \mu Gy$ de dosis. Realizando	
	el ajuste exponencial a los datos se halla el valor de $T2 = 444.5 \text{ ms}$.	53
4-22	En esta figura se muestra la curva de calibración resultante del ajuste lineal	
	a los valores de los $R2 = 1/T2$ medidos para cada tubo en función de su	
	correspondiente dosis entregada.	54
4-23	Se observan cuatro curvas de señal de intensidad, cada señal corresponde a un	
	valor de T2 hallado al evaluar la función de calibración $R2(D) = 0.0057(0.0019)D +$	
	$2.331(0.083)$.	54
4-24	Se ve en esta figura curvas de decaimiento de la intensidad para dos valores	
	de dosis: $30 \mu Gy$ y $60 \mu Gy$. El tiempo de eco TEmax es el tiempo óptimo en	
	el cuál la diferencia es máxima para esta calibración, para esta diferencia se	
	encuentra $TEmax = 0.39 \text{ s}$.	55

Lista de Tablas

2-1 Etapas de especies radio-inducidas	8
3-1 Parámetros de la simulación en PENELOPE	15
3-2 Parámetros de la simulación en GEANT4	17
3-3 Parámetros de la simulación en GEANT4	20
3-4 Parámetros de la simulación en GEANT4	23
3-5 Parámetros de la simulación en GEANT4-DNA	28
3-6 Parámetros de la simulación en GEANT4-DNA	32
4-1 Irradiación de los tubos de calibración	53

Contenido

Resumen	VII
Lista de figuras	IX
Lista de tablas	XV
1 Introducción	2
2 Conceptos Preliminares	4
2.1 Interacción radiación-materia	4
2.2 Resonancia Magnética Nuclear, Polarización y T2	6
2.3 Geles Poliméricos y su relación Dosis-T2	7
2.4 Simulación Monte Carlo	9
2.4.1 Monte Carlo con GEANT4	10
3 Simulaciones Monte Carlo	11
3.1 Materiales y simulaciones preliminares	11
3.1.1 Composición del gel	11
3.1.2 Cálculo de Tasa de Dosis	13
3.1.3 Simulaciones preliminares: Simulación con PENELOPE	15
3.1.4 Simulaciones preliminares: Experimento de atenuación	17
3.1.5 Simulaciones preliminares: Simulaciones en cubo de agua y aire	20
3.2 Simulaciones de un cubo de gel con GEANT4	23
3.3 Simulaciones de electrones mediante GEANT4-DNA	28
3.4 Simulaciones de fotones mediante GEANT4-DNA	32
4 Discusión y análisis de resultados	36
4.1 Análisis de dosis depositada en cubo de gel	36
4.2 Análisis radicales libres: simulación de electrón	40
4.3 Análisis radicales libres: simulación de fotón	45
4.4 Calibración de geles dosimétricos	49
4.4.1 Secuencias de IRM	52
4.4.2 Calibración experimental de gel dosimétrico	53

5 Conclusiones y recomendaciones	56
5.1 Conclusiones	56
5.2 Recomendaciones	57
Bibliografía	59

1 Introducción

Los geles dosimétricos han sido desarrollados desde los años 50s y actualmente se usan en la verificación de tratamientos complejos en radioterapia [McJury et al., 2000]. Su principio de funcionamiento es la polimerización, que sucede en el gel cuando los monómeros de vinilo que lo componen interactúan con los radicales libres radio-inducidos. Las cadenas de polímero resultantes de aquella interacción alteran la estructura molecular del compuesto, influyendo sobre la capacidad de movimiento de los espines de los protones de las moléculas del gel. Los cambios en esta propiedad están relacionados con el valor del observable tiempo de relajación espín-espín (T2), el cual se puede medir mediante el uso de resonancia magnética nuclear (RMN) [Baldock et al., 2010]. La mayoría de las curvas de respuesta dosis-T2 de los geles dosimétricos son ajustadas con un modelo lineal o mono-exponencial en el rango de dosis usado en los aceleradores de terapia [2 Gy-10 Gy]. Sin embargo a la fecha estos modelos no se ajustan bien a la respuesta en la región de baja dosis [0 Gy-1 Gy] [De Deene et al., 2000].

La dosimetría de gel posee la capacidad de medir distribuciones de dosis en 3D, lo que sumado a su bajo costo y alta versatilidad la hacen relevante frente a otras herramientas dosimétricas unidimensionales (1D) como cámaras de ionización y bidimensionales (2D) como películas radiográficas [Baldock et al., 2010]. Estudiar la relación dosis-T2 desde el proceso físico, permite determinar cuáles parámetros de fabricación hacen que el proceso de polimerización radio-inducido sea más efectivo a bajas dosis. Estos parámetros pueden ser tenidos en cuenta desde la fabricación del gel, lo cual ampliaría las perspectivas de su uso a: dosimetría en el rango de bajas dosis, estudios dosimétricos donde se requiera medir la distribución tridimensional y como detectores de imágenes híbridas RMN-Medicina Nuclear [Abril, 2016]. Esto último porque las dosis entregadas en aplicaciones de medicina nuclear son del orden de los 100 cGy¹ [Donohoe et al., 2003]. Mediante el uso de herramientas de simulación Monte Carlo se pueden modificar los parámetros estructurales del gel y entender cuál es la relación entre la dosis absorbida y la polimerización.

En el contexto clínico la dosimetría en gel mediante imágenes de resonancia magnética (IRM) tiene relevancia por su capacidad de obtener mejor resolución de la información tridimensional de la dosis [Abril, 2016], propiedad que contrasta con la amplia variedad de técnicas dosimétricas disponibles [Watanabe et al., 2017]. Esta propiedad de registrar información en 3D es útil en planeación de tratamientos en radioterapia [Eckhardt et al., 1987]

¹La referencia para esta dosis es el procedimiento de gammagrafía ósea.

[Gear et al., 2006]. Tres tipos de geles dosimétricos se encuentran en uso actualmente: dosímetros de geles poliméricos (PGD), dosímetros de geles ferrosos (FGD) y de forma solida como dosímetro de plástico sólido (SPD). Los geles ferrosos FRICKE presentan mayores cambios en T1 [Bäck, 1998], mientras que el gel polimérico a usar en este trabajo presenta mayores cambios en T2 [Seco and Verhaegen, 2013]. El primer gel dosimétrico desarrollado tuvo el nombre clave de BANANA y fue desarrollado por MGS Research en la década de los 90s. Su posterior desarrollo introdujo un nuevo gel que está disponible actualmente con el nombre comercial de: BANG. Se han implementado técnicas de IRM para medir la dosis absorbida en el gel dosimétrico. Con métodos Monte Carlo se ha estudiado la distribución de la dosis en gel, sin embargo no se ha reportado un modelo funcional a partir de esos estudios.

El proceso de deposición de dosis empieza con la interacción del fotón incidente con el material del gel, y esto ioniza electrones de los átomos que componen el material mediante interacción fotoeléctrica o compton. Estos electrones generan los radicales libres radioinducidos en el gel al interactuar con las moléculas de agua del sustrato. Posteriormente los radicales libres radioinducidos iniciaran los procesos de polimerización reaccionando con los monómeros de vinilo, y así cambiano la estructura del gel al formarse las cadenas de polímero. Mediante las simulaciones se estudió el efecto que tiene variar los parámetros físicos del gel dosimétrico, esto se realizó de dos formas: analizando los efectos de variar parámetros físicos en la distribución de la dosis depositada en un sólido compuesto por gel dosimétrico con geometría cúbica, y analizando mediante el paquete de librerías especializada en microdosimetría GEANT4-DNA los efectos de variar los parámetros en la distribución espacial de los radicales libres radioinducidos. Esto permitiría proponer parámetros de fabricación del material que permitan optimizar la dosis absorbida en el gel dosimétrico, mejorando la sensibilidad del mismo; lo cual permitiría una mejor resolución de las dosis leídas en el gel.

2 Conceptos Preliminares

A continuación se definirán los conceptos físicos y herramientas necesarias para el desarrollo de este trabajo de grado:

2.1. Interacción radiación-materia

La radiación interactúa con la materia mediante distintos procesos que tienen diferente probabilidad en función de la energía de la radiación incidente y la composición del material irradiado. Los procesos más probables son: efecto fotoeléctrico, efecto Compton y producción de pares (posible cuando $E_{fotón} > 1.022MeV$). La sección eficaz de cada proceso depende del material del blanco y de la energía del fotón incidente, como se puede ver en la Fig. [2-1](#).

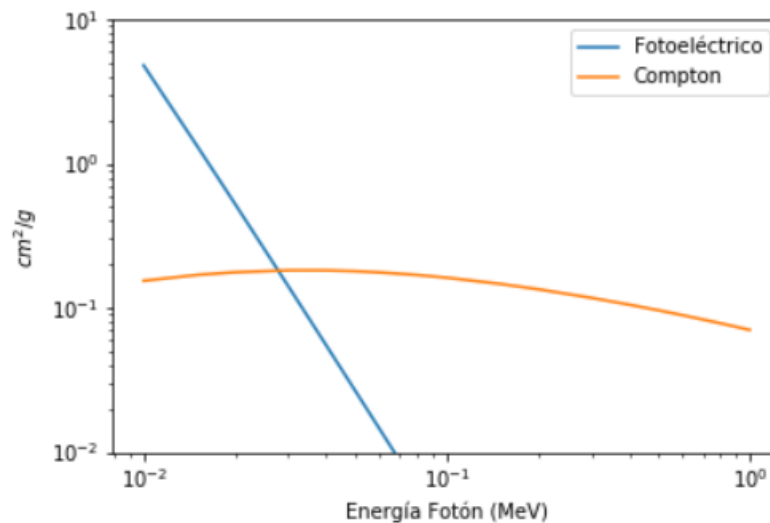


Figura 2-1: Secciones eficaces por efecto fotoeléctrico y Compton en agua

Se ve entonces en la Fig. [2-1](#) datos de sección eficaz vs energía del fotón para cada proceso (fotoeléctrico, Compton) en la región de bajas energías [0.01 MeV - 1 MeV] obtenido usando la herramienta XCOM [\[Berger and Hubbell, 1987\]](#). Para los valores más bajos de energía el efecto fotoeléctrico presenta un comportamiento dominante, sin embargo al aumentar la energía su relevancia disminuye. Para energías mayores a 80 KeV la relevancia del efecto Compton se sobrepone al efecto fotoeléctrico. En la Fig. [2-2](#) se comparan las secciones

eficaces del gel BANG-2 con las del aire teniendo en cuenta ambos efectos, compton y fotoeléctrico.

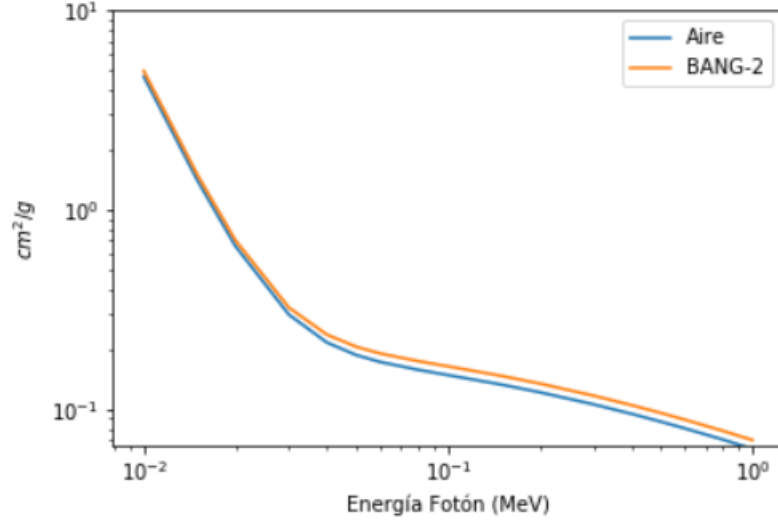


Figura 2-2: Secciones eficaces para el aire y el gel BANG-2

Se puede ver como el gel BANG-2 tiene una mayor sección eficaz que el aire en todo el rango de energías, y la diferencia se acentúa para energías más altas.

Kerma y dosis entregada

Para determinar los parámetros iniciales en las simulaciones en el contexto de medicina nuclear es necesario hallar una relación entre el número de fotones irradiados por el radio-nucléido que interactúan con el gel y la dosis que será entregada en el mismo. La dosis que se le puede entregar a un gel a una cierta distancia de un radionucleido con una actividad A se puede encontrar haciendo uso de la relación entre la tasa de Kerma y la actividad:

$$\dot{K}_{air} = \Gamma_{\delta} \cdot \frac{A}{d^2} \quad (2-1)$$

Donde \dot{K}_{air} es la tasa de kerma en aire en la superficie del gel, Γ_{δ} es la constante de tasa de kerma en aire, y d es la distancia al gel.

Así, la tasa de dosis en aire en condiciones de equilibrio electrónico (CPE) se determina de la siguiente manera:

$$\dot{D}_{air} \approx \dot{K}_{el,air} = \dot{K}_{air}(1 - \bar{g}_{air}) \quad (2-2)$$

Para hallar la tasa de dosis absorbida en el gel se debe tener en cuenta el coeficiente másico de absorción de energía del gel para cada energía de fotón del radionucleido que contribuya a la dosis:

$$\dot{D}_{med} = \dot{K}_{air}(1 - \bar{g}_{air})[\bar{\mu}_{en}(k)/\rho]_{gel,air} \quad (2-3)$$

2.2. Resonancia Magnética Nuclear, Polarización y T2

En partículas con espín, como los protones, la dirección del momento angular de espín es llamado eje de polarización de espín. Para una muestra en equilibrio en ausencia de campos magnéticos externos, los ejes de polarización de espín apuntan hacia todas las direcciones posibles. Esto resulta en una distribución de momentos magnéticos completamente isotrópica. Si un campo magnético externo B es introducido, estos momentos magnéticos precesarán alrededor de la dirección de B . Esta frecuencia de precesión ω_o toma el nombre de frecuencia de Larmor; es proporcional al campo magnético aplicado [Brown et al., 2014]:

$$\omega^0 = -\gamma \cdot B \quad (2-4)$$

Al ser aplicado un campo magnético sobre un material, los espines que poseen los protones del mismo tenderán a alinearse con el campo magnético de forma paralela o anti-paralela. Sin embargo, siempre habrá un exceso de espines que generará una magnetización de equilibrio M_0 , que representa el equilibrio entre la tendencia del sistema de espines para alinearse con el campo externo (el estado de menos energía) y su habilidad para ganar energía del contacto térmico [Levitt, 2008]. Para saber como se comporta la magnetización de equilibrio de una especie por un campo magnético aplicado se usa la distribución de Boltzmann, la cuál nos dice que la probabilidad de encontrar un sistema con energía ϵ mientras este esta en contacto con un reservorio de temperatura T es:

$$P(\epsilon) = \frac{e^{\frac{\epsilon}{kT}}}{Z} \quad (2-5)$$

Donde Z es el factor de normalización $z = \sum_{\epsilon} e^{\frac{\epsilon}{kT}}$. Así que el promedio de μ_z que tendrá un grupo de moléculas es:

$$M_0 = \rho_0 \sum_{-s}^s P(\epsilon(m)) \mu_z(m) = \rho_0 \frac{\sum_{-s}^s \mu_z(m) e^{\frac{\epsilon}{kT}}}{\sum_{-s}^s e^{\frac{\epsilon}{kT}}} \quad (2-6)$$

La energía relacionada a cada nivel m por el campo externo es: $\epsilon = -m\hbar\omega_0$. Así que el factor del exponencial quedaría de la forma: $m \cdot \frac{\hbar\omega_0}{kT}$. Cambiando de variable $u = \frac{\hbar\omega_0}{kT}$, la expresión quedaría:

$$M_0 = \rho_0 \frac{\sum_{-s}^s \mu_z(m) e^{mu}}{\sum_{-s}^s e^{mu}} = \rho_0 \gamma \hbar \frac{\sum_{-s}^s m e^{mu}}{\sum_{-s}^s e^{mu}} \quad (2-7)$$

El pequeño exceso de espines al ser aplicado un campo magnético a un material se puede apreciar en el factor de Boltzmann $u = \frac{\hbar\omega_0}{kT}$, ya que la energía magnética es mucho más pequeña que la energía térmica a temperatura ambiente.

Como el término de la exponencial mu es pequeño y se puede realizar la expansión polinomial de la exponencial, se llega a la siguiente expresión:

$$\underline{\underline{M_0 = \rho_0 \gamma^2 \hbar^2 \frac{S(S+1)}{3kT} B_0}} \quad (2-8)$$

El hidrógeno ^1H tiene $S = 1$ y la razón giro magnética más elevada ($42.57 \text{ MHz} \cdot \text{T}^{-1}$). Siendo que la magnetización es proporcional al cuadrado de γ el ^1H es la especie que tendrá más señal, por lo que es usado en su mayoría en las aplicaciones de RMN. El campo externo B genera un pequeño sesgo en la distribución de polarización de los espines en equilibrio térmico y la muestra adquiere un momento magnético longitudinal, sin embargo esta magnetización es casi indetectable, siendo mucho menor que el diamagnetismo de la muestra. Así que en vez de analizar la magnetización longitudinal, se tiene en cuenta el comportamiento de la magnetización transversa.

Aplicando un radiopulso que posea una frecuencia alrededor de ω_0 transversalmente a la muestra, la polarización de cada espín es rotada $\pi/2$ radianes alrededor del eje x . Así que este pulso rota toda la distribución de magnetización nuclear, y la muestra adquiere una Magnetización Transversa. Si suponemos que el pulso es súbitamente apagado, los componentes de la magnetización transversa nuclear M^{nuc} después de un tiempo t se comportan de la siguiente manera [Levitt, 2008]:

$$\begin{aligned} M_y^{nuc} &= -|M^{nuc}| \cos(\omega_0 t) \exp(-t/T_2) \\ M_x^{nuc} &= |M^{nuc}| \sin(\omega_0 t) \exp(-t/T_2) \end{aligned} \quad (2-9)$$

La constante de tiempo de relajación espín-espín (T_2) toma en cuenta el *decaimiento homogéneo* de la magnetización nuclear macroscópica. Esta magnetización transversa oscila con frecuencia de Larmor ω_0 decayendo lentamente al mismo tiempo.

El método de Spin-Echo (SE) usa varios pulsos separados por un tiempo de eco (TE), lo cual permite distinguir el *decaimiento homogéneo* incluso cuando el campo magnético aplicado no es homogéneo. Variando el TE se puede encontrar el T_2 en función del decaimiento como se puede ver en la Fig. 2-3.

2.3. Geles Poliméricos y su relación Dosis-T2

Los geles poliméricos consisten en una matriz de gelatina donde son disueltos monómeros de vinilo. Este gel funciona como medio radiosensitivo cuyos monómeros se polimerizan dependiendo de la dosis entregada [Baldock et al., 2010]. Este proceso de polimerización es iniciado mediante los radicales libres que se generan en el agua del gel al interactuar con la

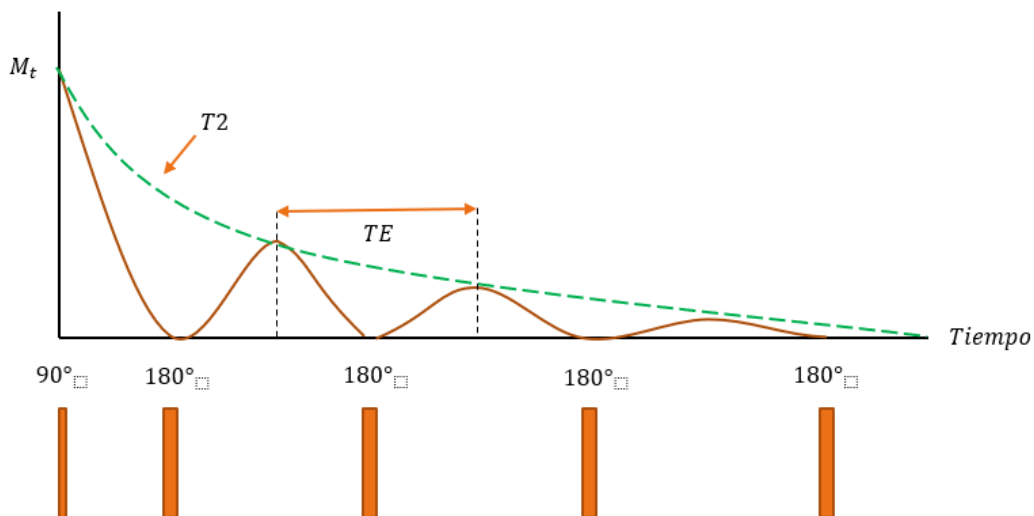


Figura 2-3: Ejemplo de ajuste de decaimiento para hallar T2

radiación. El número de los productos radiolíticos generados dependen de la dosis absorbida. Los radicales, luego, interactúan con los monómeros del gel para iniciar los procesos de polimerización. [De Deene, 2004] [Ibbott, 2006] [Watanabe et al., 2017]

Radio-hidrólisis del agua

El porcentaje de agua en los geles dosimétricos es de aprox. 90%. La radiación ionizante tiene la capacidad de disociar las moléculas de agua en varios iones y radicales reactivos en lo que se denomina como radio-hidrólisis del agua [Baldock et al., 2010]. Los primeros cambios producidos por la radiación en el agua son la creación de la molécula ionizada H_2O^+ , la molécula excitada H_2O^* y electrones subexcitados e^- ; esto para un $t < 10^{-15}s$. Los productos que se obtienen para un intervalo de transcurrido luego de la interacción ionizante son expuestos en la Tabla 2-1 [Turner, 2008].

Tiempo	Eventos
Etapa Física $t \geq 10^{-15}s$	Formación de H_2O^+ , H_2O^* y electrones subexcitados e^-
Etapa Prequímica $10^{-15}s \leq t \leq 10^{-15}s$	Las tres primeras especies se transforman en: H_3O^+ , OH , e_{aq}^- , H y H_2
Etapa Química $10^{-12}s \leq t \leq 10^{-6}s$	Las cuatro especies: H_3O^+ , OH , e_{aq}^- y H reaccionan o se difunden hasta alejarse ampliamente

Tabla 2-1: Etapas de especies radio-inducidas

En un principio previo irradiación no hay moléculas polimerizadas y solo existen los monómeros de vinilo disueltos. Luego al ser irradiado, los radicales libres son producidos en el agua

y estos inician los procesos de polimerización. La polimerización cambia el parámetro R_2 ($R_2=1/T_2$) porque las cadenas de polímero interfieren con la relajación de los espines y cambian la dinámica de relajación de los mismos, por lo que se hace posible medir la dosis absorbida al gel midiendo el R_2 mediante RMN. Para realizar la medición de la radiación absorbida al gel se usa el parámetro $R_2=1/T_2$, ya que la tasa de cambio de R_2 es proporcional a la dosis absorbida por el gel [Baldock et al., 2010]:

$$D \propto |\Delta R_2| \quad (2-10)$$

La respuesta de los geles dosimétricos a la dosis entregada depende de varias propiedades físico-químicas. Por ejemplo en geles donde el proceso de polimerización se basa en la copolimerización en cadenas cruzadas de dos monómeros: Acrilamida (C_3H_5NO) y BIS ($(CH_2CHCONH)_2CH_2$), la densidad influye en la disponibilidad de los monómeros en las reacciones de polimerización. Además se han realizado estudios en donde se evidencia como geles con diferentes composiciones poseen distinta sensibilidad a la dosis entregada [Jirasek and Duzenli, 2001]. Así que la concentración de monómeros disueltos, la razón de la concentración de los dos monómeros y el porcentaje de gelatina en el gel son parámetros candidatos para variar en las simulaciones. El espesor del gel es un parámetro de fabricación que también puede variarse para optimizar la dosis absorbida en las condiciones impuestas (rango baja dosis, distancia fuente-detector).

2.4. Simulación Monte Carlo

El método Monte Carlo es una técnica de muestreo usada en el análisis de fenómenos físicos que tengan un comportamiento estocástico [Eckhardt et al., 1987]. Es una herramienta útil para la simulación del transporte de fotones y su proceso de interacción. Los códigos que se han desarrollado, como por ejemplo: PENELOPE, GEANT4, tienen la capacidad de modelar procesos de dispersión compton, absorción fotoeléctrica, aniquilación y creación de positrones en materiales de variada composición [Sandev, 2010]. La probabilidad $p(s)$ que un fotón interactúe después de una distancia s en el material se puede describir como [Seco and Verhaegen, 2013]:

$$p(s)ds = \mu(E)exp(-\mu(E)s)ds \quad (2-11)$$

De esta distribución se obtiene que el camino libre medio recorrido calculado en el material es: $\langle s \rangle = 1/\mu(E)$. Escribiendo la atenuación en términos del camino libre medio recorrido se tiene:

$$\mu = \frac{s}{\langle s \rangle} = \mu(E) \cdot s \quad (2-12)$$

Así que la ecuación 2-11 puede expresarse como:

$$p(\lambda)d\lambda = exp(-\lambda)d\lambda \quad (2-13)$$

Esta ecuación de atenuación nos permite escribir la distribución de probabilidad acumulativa de la siguiente forma:

$$p(\lambda) = \int_0^\lambda d\lambda' p(\lambda') = \int_0^\lambda d\lambda' \exp(-\lambda') \quad (2-14)$$

Usando el método de transformación y un número aleatorio $\eta_1 \in [0, 1)$ podemos hallar la distancia que recorre el fotón hasta el primer lugar de interacción λ_1 [Abril, 2016]:

$$\lambda_1 = \ln(1 - \eta_1) \quad (2-15)$$

De esta forma se realiza el seguimiento (*tracking*) del fotón y su primer lugar de interacción a través de λ_1 . En este trabajo el λ_1 está asociado a la composición del gel.

2.4.1. Monte Carlo con GEANT4

GEANT4 es un paquete de librerías desarrollado por una colaboración científica internacional en cabeza del CERN que permite simular los efectos del paso de partículas a través de la materia. Su desarrollo se basa en programación orientada a objetos escrito en el lenguaje C++. Sus usos son bastante amplios abarcando desde física de partículas y física nuclear hasta ingeniería aeroespacial y física médica [Agostinelli et al., 2003].

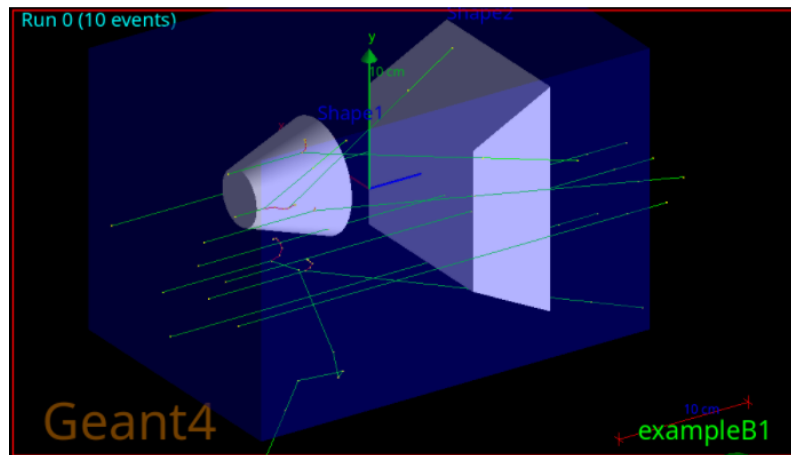


Figura 2-4: Ejemplo de simulación en GEANT4. Se ve la generación de 10 fotones de 25 keV de energía inicial y su interacción con dos volúmenes de agua.

El conjunto de librerías del software GEANT4 permite modelar todos los aspectos del proceso de simulación: la geometría del sistema, los materiales involucrados, las partículas fundamentales de interés, la generación de partículas primarias de eventos, el rastreo de partículas a través de materiales y los procesos físicos que gobiernan las interacciones de las partículas. Para el análisis de los resultados se encuentran librerías para la generación de datos de eventos, el almacenamiento de eventos y pistas, la visualización de las trayectorias de las partículas, y la captura para el análisis posterior de los datos de simulación en diferentes niveles de detalle y refinamiento.

3 Simulaciones Monte Carlo

Las simulaciones Monte Carlo permiten estudiar el efecto que tiene variar distintos parámetros físicos del gel dosimétrico (i.e composición, geometría, densidad) en la interacción que tiene la radiación ionizante con el material. De esta forma se pueden proponer parámetros de fabricación del material que permitan, por ejemplo, optimizar la dosis absorbida.

Se realizaron simulaciones preliminares para entender el proceso de una simulación Monte Carlo. Usando el software PENELOPE se profundizó en la definición del sustrato y se obtuvieron datos de las interacciones de las partículas secundarias con el material. Posteriormente, se validó el uso de las librerías de GEANT4 mediante una simulación preliminar que permitió comparar el efecto de atenuación de un material con el mismo reportado por en NIST [Hubbell and Seltzer, 1995]. Esto permitió luego realizar los experimentos donde se estudió la distribución de la dosis absorbida en un cubo de material de gel tipo BANG-2. Posteriormente se hizo uso de la librería especializada en microdosimetría, GEANT4-DNA, para poder estudiar la relación que tiene variar distintos parámetros físicos con la producción de los radicales libres radioinducidos.

3.1. Materiales y simulaciones preliminares

3.1.1. Composición del gel

En este apartado se describirán las composiciones de distintos geles dosimétricos tipo BANG (Bis-Acrylamide Nitrogen Gelatin). Esto nos permite construir un sustrato en las simulaciones Monte Carlo que se asemeje al gel que se fabrica en el laboratorio. De esta forma se puede investigar el efecto que tiene las variaciones en la composición elemental sobre los procesos de polimerización radio-inducida en el gel.

Composición de Bang-1

El gel dosimétrico tipo BANG-1 está compuesto de gelatina acuosa, infundido con acrilamida y monómeros de N,N'-metilen-bis-acrilamida y tratado de forma hipóxica mediante saturación de nitrógeno [Shani, 2000]. Este gel se elabora agregando típicamente 5% de gelatina a agua desgasificada a temperatura ambiente. Luego se deja disolver y se calienta a aproximadamente 50°C. Luego se añade acrilamida(C₃H₅NO) al 3% a la solución, seguido de BIS (CH₂CHCONH)₂CH₂ al 3%. La irradiación del gel cambia su estructura provocando

localizadas cadenas de polímero, que, a su vez, reducen los tiempos de relajación de RMN transversal de los protones de agua. En la Fig. 3-1 se puede observar cómo es la composición elemental del sustrato de gel dosimétrico tipo BANG-1.

MOLECULA	%W_COMPUESTO	ELEMENTO	%W_MOL	C	H	N	O
Gelatin	0.05	C	0.5073	0.0254			
		H	0.0801		0.0040		
		N	0.1740			0.0087	
		O	0.2385				0.0119
Acrylamide	0.03	C	0.5069	0.0152			
		H	0.0709		0.0021		
		N	0.1971			0.0059	
		O	0.2251				0.0068
Bis	0.03	C	0.5453	0.0164			
		H	0.0654		0.0020		
		N	0.1817			0.0055	
		O	0.2076				0.0062
Water	0.89	H	0.1119		0.0996		
		O	0.8879				0.7902
%TOTAL				0.05693	0.1077	0.0201	0.8151

Figura 3-1: Composición elemental del gel dosimétrico BANG-1

Composición de gel dosimétrico BANG-2

Hay varios tipos de gel BANG en uso actualmente, aunque son posibles muchas variaciones de la fórmula básica [Taylor et al., 2009]. BANG-1 se elabora con acrilamida en forma de polvo, mientras que en los geles BANG-2 se reemplaza con ácido acrílico junto con NaOH para alterar el pH. Esta segunda fórmula del gel polimérico fue desarrollada reemplazando acrilamida con ácido acrílico, lo que implica mayores tasas de relajación espín-espín por unidad de dosis, mejorando la respuesta del gel. Además se ha estudiado la acrilamida y se clasifica como un neurotóxico que es de peligroso manejo. El ácido acrílico disminuye el riesgo de la elaboración del gel dosimétrico.

MOLECULA	%W_COMPUESTO	ELEMENTO	%W_MOL	C	H	N	O	Na
Gelatin	0.05	C	0.5073	0.0254				
		H	0.0801		0.0040	0.0000		
		N	0.1740				0.0087	
		O	0.2385					0.0119
Acrylic Acid	0.03	C	0.5000	0.0150				
		H	0.0101		0.0003	0.0000		
		O	0.4441					0.0133
Bis	0.03	C	0.5453	0.0164				
		H	0.0654		0.0020			
		N	0.1817			0.0055		
		O	0.2076					0.0062
NaOH	0.01	Na	0.5747					0.0057
		H	0.0252		0.0003	0.0000		
		O	0.4000					0.0040
Water	0.88	H	0.1119		0.0985			
		O	0.8879					0.7814
%TOTAL				0.0567	0.1050	0.0142	0.8168	0.0057

Figura 3-2: Composición elemental del gel dosimétrico BANG-2

3.1.2. Cálculo de Tasa de Dosis

Para interpretar las simulaciones Monte Carlo en el contexto de un gel irradiado por un radionucleido se precisa saber la energía y la cantidad de fotones que se deben simular con el propósito de entregarle al gel una dosis especificada. Así que el primer paso sería encontrar la tasa de dosis que se le entregaría a un gel cuando un radionucleido dado (^{99m}Tc para nuestro caso) se encuentra a una distancia de la superficie del gel (30 cm para este caso).

Probabilidad	Energía (keV)	$(\mu/\rho)_{\text{aire}}$	$(\mu_{\text{en}}/\rho)_{\text{aire}}$	$(\mu_{\text{en}}/\rho)_{\text{agua}}$	$(1-g)_{\text{aire}}$
89,1%	140,51	0,139	0,0024	0,0027	0,9999
4,0%	18,37	1,050	0,798	0,819	1
2,1%	18,25	1,070	0,817	0,839	1
Prom. Ponderado	132,7	0,198	0,054	0,0554	0,99991

Figura 3-3: Promedios ponderados de energía y coeficientes

Para el radionucleido ^{99m}Tc el fotopico más predominante con el 89.1% de probabilidad de ocurrencia posee una energía de 140,51 KeV. Seguido por dos fotopicos de menor energía (18.37 keV y 18.25 keV) y menos probables y otros que no se toman en consideración por su baja probabilidad de ocurrencia. En la Fig. **3-3** se pueden ver los promedios ponderados de la energía, coeficiente de atenuación para el aire, coeficiente másico de absorbsión de energía para el agua y el aire, y el factor energía perdida por radiación de partículas secundarias cargadas; estos factores son necesarios para determinar la cantidad de eventos a simular y su relación con la dosis.

Primero se procede a calcular la tasa de kerma en aire en la superficie del radionucleido. Para esto es necesario la constante Γ_{AKR} de tasa de kerma en aire (para el ^{99m}Tc se tiene que $\Gamma_{AKR} = 14.10 \mu/m^2\text{GBq} \cdot h$). Las actividades de ^{99m}Tc típicas administrada via ingestión para gammagrafía de tiroides son de (1-10 mCi) [Kane and Davis, 2020] lo que equivale a (37 - 370 GBq), tomando 370 GBq se calcula:

$$\dot{K}_{\text{aire}}(0) = \Gamma_{AKR} \cdot \frac{A}{d^2} = 14.10 \frac{\mu}{m^2\text{GBq}} \cdot \frac{370 \text{ GBq}}{(0.3 \text{ m})^2} = \mathbf{0.05797 \text{ Gy/h}} \quad (3-1)$$

Sin embargo esta tasa de kerma no es la misa que llega al aire de la superficie del gel porque hay atenuación del haz. Para una distancia de 30 cm se tiene:

$$t_{\text{aire}} = 30\text{cm} \cdot 1.2045 \times 10^{-3} \text{ g/cm}^3 = 0.036135 \text{ g/cm}^2 \quad (3-2)$$

$$\dot{K}_{\text{aire}}(t_{\text{aire}}) = K_{\text{air}}(0)e^{-\mu_{\text{air}} \cdot t_{\text{aire}}} = 0.057967 e^{-0.198 \cdot 0.036135} = \mathbf{0.05755 \text{ Gy/h}} \quad (3-3)$$

Para encontrar la tasa de dosis en aire usando la tasa de kerma hallada se multiplica por el factor $(1 - g)_{aire}$:

$$\dot{D}_{aire} = K_{air}(t_{aire}) \cdot (1 - g)_{aire} = 0.05755 \text{ Gy/h} \cdot 0.99991 = \mathbf{0.057548 \text{ Gy/h}} \quad (3-4)$$

Ahora para hallar la tasas de dosis en el gel (el cual en su mayoría está compuesto de agua) empleamos la razón entre los coeficientes másicos de absorpsi3n de energía para el aire y el agua:

$$\dot{D}_{agua} = \dot{D}_{aire} \cdot \frac{(\frac{\mu_{en}}{\rho})_{agua}}{(\frac{\mu_{en}}{\rho})_{aire}} = 0.057548 \text{ Gy/h} \cdot \frac{0.0554}{0.0540} = \mathbf{0.05904 \text{ Gy/h}} \quad (3-5)$$

Número de fotones a simular

Para obtener la cantidad de fotones a simular debemos saber cuanto tiempo t debe exponerse el gel al radionucleido para que en la configuración experimental propuesta se le entregue la dosis especificada (para este caso se toma 0.01 Gy):

$$\dot{D}_{agua} \cdot t = D_{agua} \quad \longrightarrow \quad t = \frac{D_{agua}}{\dot{D}_{agua}} = \frac{0.01}{0.05904} = 0.169h \quad (3-6)$$

Con esto y la actividad del radionucleido (que se aproxima a ser constante porque el tiempo de exposición es mucho más pequeña que la vida media) se puede encontrar el número de fotones de energía ponderada 132.7 keV que se deben simular para entregar 1 cGy al gel:

$$\#Fotones = Actividad \cdot t = (370 \times 10^6 \text{ 1/s}) \cdot (0.169 \text{ h} \cdot \frac{3600 \text{ s}}{h}) \approx \mathbf{225 \times 10^{11} \text{ Fotones}}$$

3.1.3. Simulaciones preliminares: Simulación con PENELOPE

Experimento <i>in silico</i> mediante PENELOPE	
Parámetros de simulación	
Partículas	Electrones
Energía partícula	132.7 keV
N° de eventos	10 ⁵ eventos
Geometría y dimensiones	Sustrato monocapa
Material del sólido	BANG de composición variable
Variables	Densidad, Composición elemental

Tabla 3-1: Parámetros de la simulación en PENELOPE

Las simulaciones Monte Carlo con PENELOPE permiten caracterizar la interacción de electrones que poseen una energía inicial y el sustrato en función de su composición y densidad:

Retrodispersión de los electrones en gel dosimétrico

Para este experimento se analizó la capacidad del material para producir retrodispersión en las trayectorias de los electrones. Primero se escogió la energía de los electrones y la composición del sustrato como se ve en la Fig. 3-4. Para cambiar la densidad se aumenta la proporción de gelatina que compone el gel y se disminuye la proporción de agua. Luego se hace uso de este material introduciendo la nueva composición elemental.

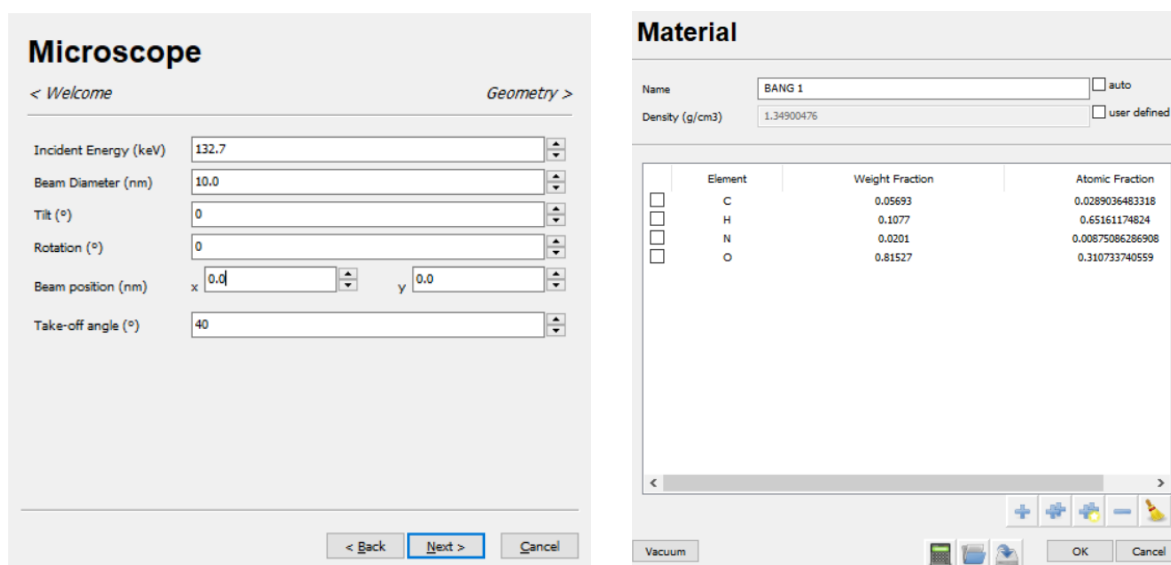


Figura 3-4: Ventana de entrada de parámetros de energía incidente de los electrones y definición de la composición elemental del material del sustrato en PENELOPE.

En la Fig. 3-5 se ve los resultados de la probabilidad de retrodispersión en función de la energía final del electrón retrodispersado. Se puede ver que hay un máximo cuando la energía final del electrón se encuentra alrededor de 60 keV. También, para analizar el efecto que tiene la densidad del material en la probabilidad de retrodispersión se puede ver en la Fig. 3-6 como a medida que aumenta el porcentaje de gelatina (y con esto la densidad), hay una leve tendencia a disminuirse la probabilidad de retrodispersión.

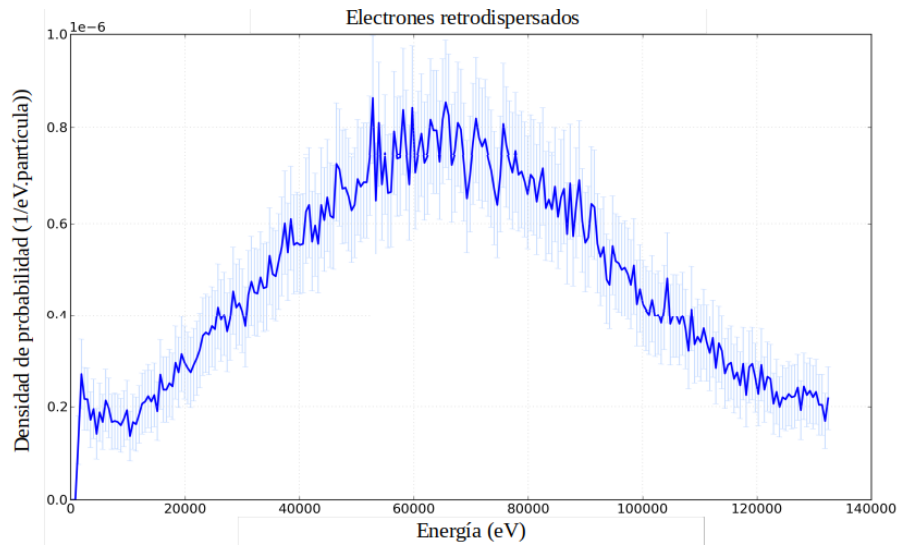


Figura 3-5: En esta figura se ve la distribución de probabilidad de retrodispersión del electrón en función de su energía final. Se puede ver un máximo de probabilidad alrededor de 65 keV.

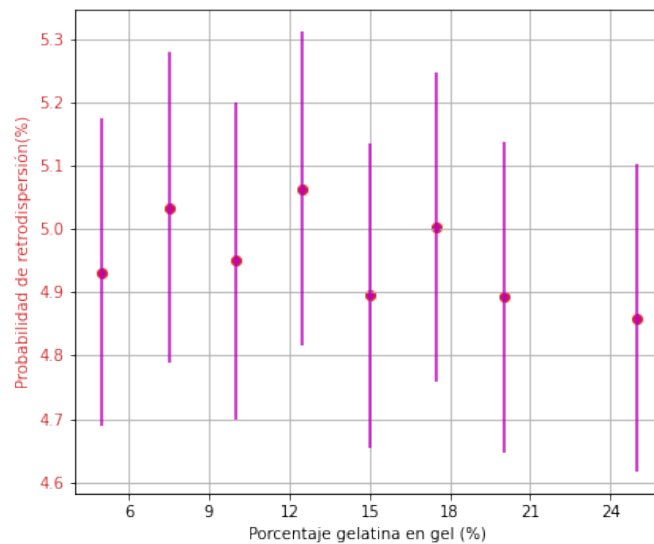


Figura 3-6: En esta figura se grafica la probabilidad de retrodispersión en función de distintos porcentajes de gelatina en la composición del gel. Esto varía la densidad entre 1.05 - 3.06 g/cm³.

3.1.4. Simulaciones preliminares: Experimento de atenuación

En este experimento se realizan varias simulaciones para poder observar el comportamiento de la atenuación de la radiación que produce una lámina de plomo de diferente grosor ubicada entre la fuente y un detector de CsI. Se realizó obteniendo la dosis absorbida total en un bloque de solido compuesto por CsI al irradiarlo con fotones de 100 keV. Este experimento permite entender el diseño del sólido en la simulación con su respectivo material, como también la cantidad de eventos y tipo de partícula con su posición y energía inicial.

Experimento <i>in silico</i> mediante GEANT4	
Parámetros de simulación	
Partícula incidente	Fotón
Energía partícula	100 keV
N° de eventos	10 ⁴ eventos
Geometría y dimensiones	Cúbico de tamaño 5cm x 5cm x 1cm
Material del sólido	CsI
Variables	Espesor de la lámina de plomo

Tabla 3-2: Parámetros de la simulación en GEANT4

Partículas y energía

En este experimento las partículas son fotones con energía de 100 KeV cada uno. Las simulaciones se realizan con 10⁴ eventos. La posición inicial de las partículas se comporta como una distribución homogénea en una zona cuadrada a 5 cm del centro de una cara del cubo. Y el vector unitario del momentum inicial es (0,0,1).

Geometría y materiales

La estructura del experimento consta de dos objetos, una lámina de plomo con grosor variable y un bloque de CsI que funciona como detector. Estos dos objetos se encuentran separados por una distancia de 5 cm entre sus centros.

Resultados

Para analizar cuantitativamente el comportamiento de la atenuación de la lámina de plomo se utiliza el *scorer* de dosis absorbida en el volumen total del objeto detector, en este caso el bloque de CsI, y se realiza un ajuste exponencial a los resultados de la simulación.

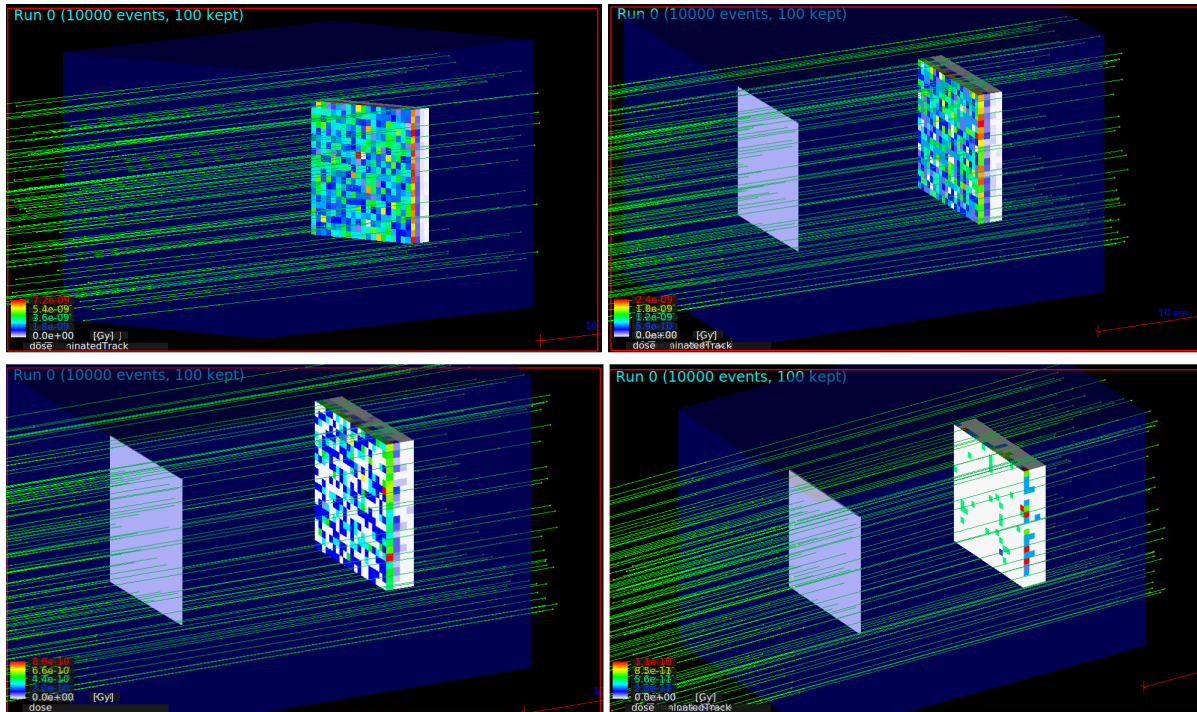


Figura 3-7: Se muestra el resultado de la atenuación para una lámina de plomo de distinto grosor. El grosor de la lámina aumenta de esta forma: **a)** 0 cm **b)** 0.02 cm **c)** 0.04 cm **c)** 0.08 cm

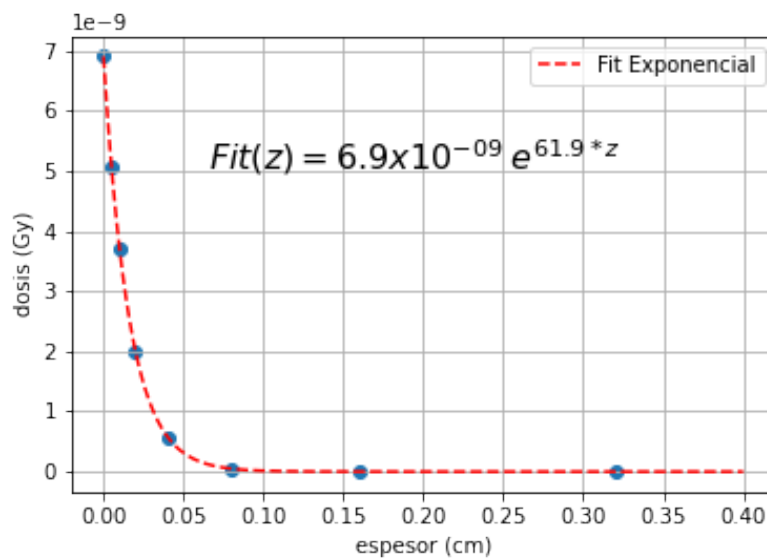


Figura 3-8: Atenuación de la dosis absorbida en el bloque de CsI

Se puede ver en la Fig. 3-8 como a medida que se dobla el espesor de la lámina de plomo la dosis absorbida disminuye de manera que muestra un comportamiento exponencial, siguiendo

la ley de atenuación exponencial: $I = I_0 \exp[-(\mu)z]$ donde μ es el coeficiente de atenuación lineal y z su espesor. El coeficiente de atenuación másico se define como $\mu_m = \frac{\mu}{\rho}$ donde ρ sería la densidad del plomo, $\rho = 11.3 \text{ g/cm}^3$. Del NIST [Hubbell and Seltzer, 1995] podemos obtener que el valor experimental de μ_m para el plomo con fotones de energía de 100 keV es $\mu_m = 5.549 \text{ g/cm}^3$, por lo tanto:

$$\mu_m = \frac{61.9 \text{ cm}^{-1}}{11.3 \text{ g/cm}^3} = 5.48 \text{ cm}^2/\text{g} \quad \longrightarrow \quad \% \text{Dif} = 100 \times \left(1 - \frac{5.48}{5.549}\right) = \boxed{1.24 \%} \quad (3-7)$$

Con este experimento se obtuvo el coeficiente de atenuación másico del plomo para fotones de energía 100 keV, el cual tiene una discrepancia de 1.24 % con el valor experimental reportado en el NIST. De esta manera se valida el correcto funcionamiento de las librerías de GEANT4 para ser implementadas en las simulaciones del gel dosimétrico posteriores. Esto nos permite analizar la distribución de la deposición de la dosis en un cubo de material al variar distintos parámetros de simulación.

3.1.5. Simulaciones preliminares: Simulaciones en cubo de agua y aire

En esta simulación se realiza la irradiación con fotones de un cubo de agua y aire para determinar el comportamiento del programa sus características y funcionalidades. Para esto se escoge la geometría del sólido y el material con su composición elemental y su densidad. También se varía la cantidad de eventos a simular evaluando así la dosis depositada y el tiempo que requiere la simulación.

Experimento <i>in silico</i> mediante GEANT4	
Parámetros de simulación	
Partícula incidente	Fotón
Energía partícula	140 keV
N° de eventos	10^3 - 10^6 eventos
Geometría y dimensiones	Cubo de tamaño 5cm x 5cm x 5cm
Variables	Material del sólido: Agua o aire

Tabla 3-3: Parámetros de la simulación en GEANT4

Partículas y energía

En este experimento las partículas son fotones con energía de 140 KeV cada uno. Se realizan simulaciones con diferentes cantidades de partículas, desde 10^3 hasta 10^6 eventos. La posición inicial de las partículas se comporta como una distribución homogénea en una zona cuadrada a 2 cm del centro de una cara del cubo. Y el vector unitario del momentum inicial es (0,0,1).

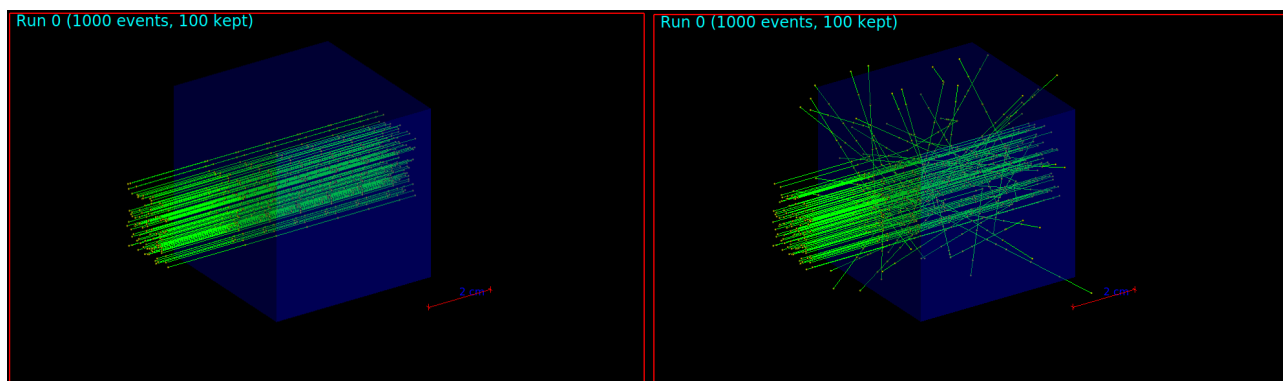


Figura 3-9: Izquierda: Se muestra el comportamiento de la radiación al atravesar el material de cubo de aire, a la Derecha: en un cubo de agua

Geometría y material

El objeto a irradiar es un cubo de 5 cm de lado compuesto de agua con densidad de 1 g/cm³.

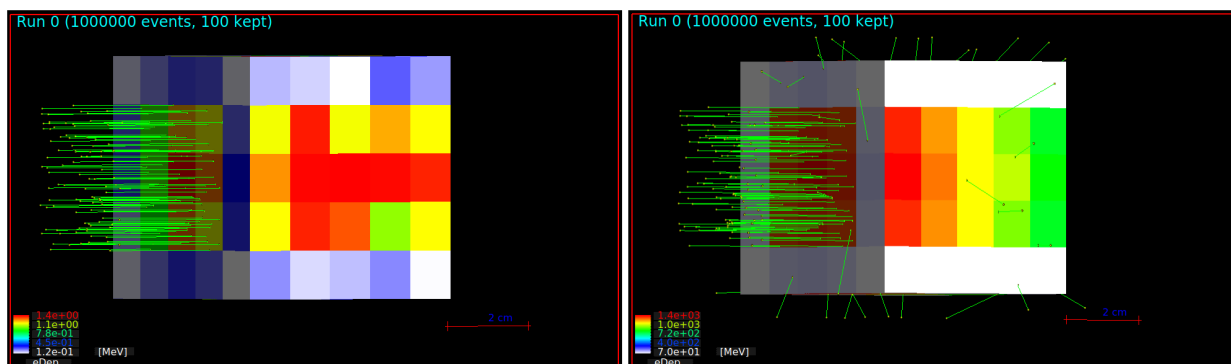


Figura 3-10: A la **Izquierda:** Se muestra la distribución de la dosis absorbida en un cubo de aire, a la **Derecha:** en un cubo de agua

Scoring

Para obtener la información y los datos de la simulación en GEANT4 está la capacidad de crear una malla virtual subdividida en vóxeles de un tamaño determinado. Esta malla permite luego, con el uso de diferentes *scorers*, obtener la información del proceso de interacción requerida. Para esta simulación se crearon mallas del tamaño del cubo subdividida en 5x5x5, 10x10x10 y 100x100x100 vóxeles. Los *scorers* son atributos que permiten obtener información de la simulación para una malla dada, y comprenden una gran cantidad de medidas, por ejemplo: Energía depositada, Dosis absorbida, número de trayectos y número de pasos por vóxel.

Resultados

Como se puede ver en la Fig. [3-9](#) un aumento en la densidad del material (de aire a agua) hace que resulte más dispersión de la radiación que interactúa con el cubo. Esto cambiaría la distribución de la dosis absorbida en el gel como se puede ver en la Fig. [3-10](#). Para baja densidad (aire) la distribución de la dosis tiende al máximo en toda la región central, mientras que con mayor densidad (agua) se ve una disminución de la dosis al aumentar la profundidad y una distribución de dosis más homogénea. En la Fig. [3-11](#) se puede ver el mismo experimento con una mayor cantidad de eventos (10^6) en un cubo de agua. Se aprecia como se deposita mayor dosis en superficie y como disminuye al aumentar la profundidad.

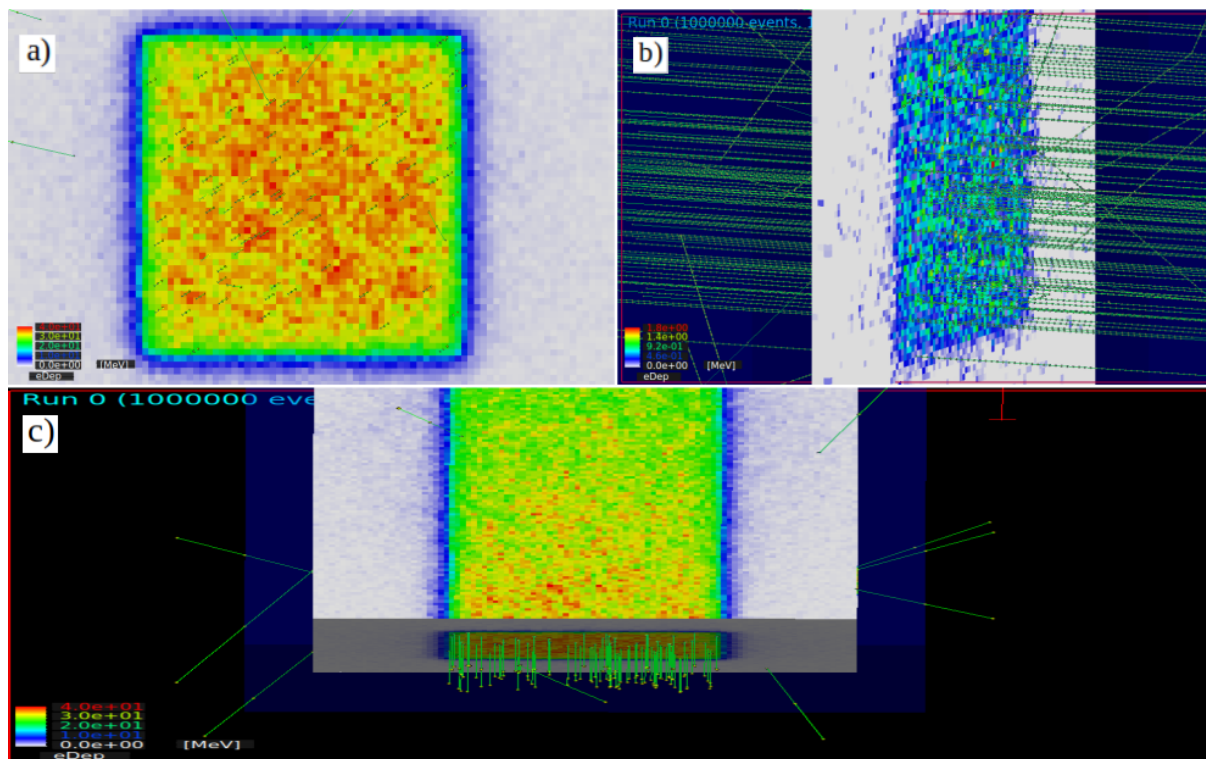


Figura 3-11: En sentido horario: a) Se muestra el perfil de dosis depositada en la superficie del cubo de agua, en b) la dosis depositada en un corte central y c) la deposición de dosis en profundidad.

3.2. Simulaciones de un cubo de gel con GEANT4

En este experimento se realizaron varias simulaciones para entender el cambio que se produce en la dosis absorbida cuando la composición del gel cambia y con esto su densidad. Se tomaron más eventos que en simulaciones previas para mejorar la estadística, y los cambios en el material se hicieron variando el porcentaje de gelatina que compone el gel y reduciendo el porcentaje de agua de la composición.

Experimento <i>in silico</i> mediante GEANT4	
Parámetros de simulación	
Partícula incidente	Fotón
Energía partícula	140 keV
N° de eventos	10^8 eventos
Geometría y dimensiones	Cubo de tamaño 5cm x 5cm x 5cm
Material del sustrato	Gel dosimétrico BANG-2
Variables	Densidad (% de gelatina), espesor

Tabla 3-4: Parámetros de la simulación en GEANT4

Geometría y materiales

Para este experimento se usó un cubo de 5 cm de lado y el material es un gel con composición variable. Para variar esta composición se cambiaron los porcentajes de gelatina en el gel reduciendo así mismo el porcentaje de agua. Esto se realizó aumentando la cantidad de gelatina en cada paso, pasando del 5% al 30% de la composición. Para esto se altera la composición elemental del material cambiando la proporción de los compuestos.

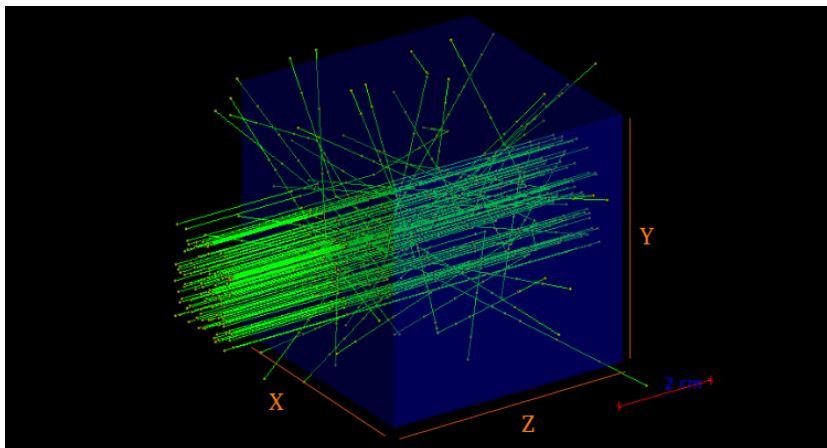


Figura 3-12: Esta figura es una representación del montaje experimental. El eje Z es paralelo al momentum inicial de los fotones incidentes. El volumen se divide en 10 x 10 x 10 vóxeles.

Partículas y energía

En este experimento las partículas son fotones con energía de 140 KeV cada uno. Las simulaciones se realizan con 10^8 eventos. La posición inicial de las partículas se comporta como una distribución homogénea en una zona cuadrada a 10 cm del centro de una cara del cubo. El vector unitario del momentum inicial es (0,0,1).

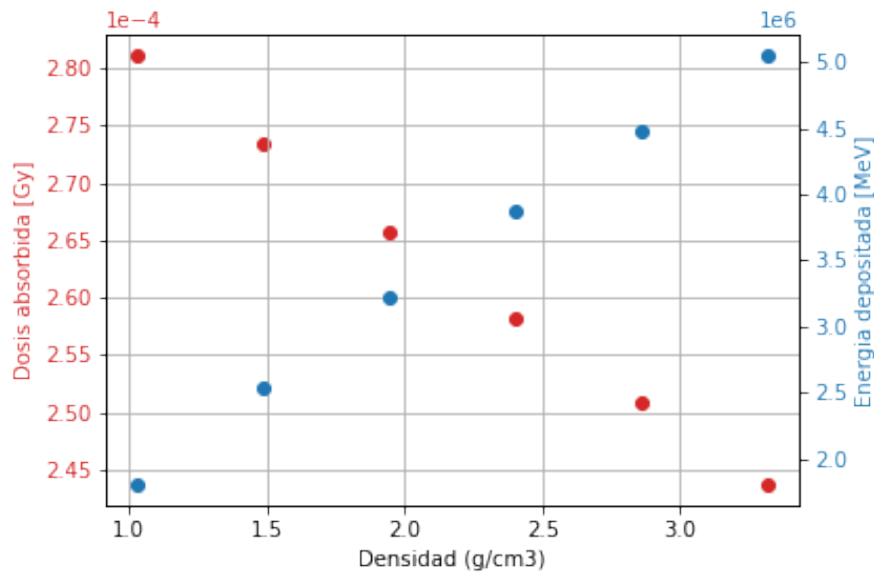


Figura 3-13: Dosis absorbida y Energía depositada en el cubo de gel

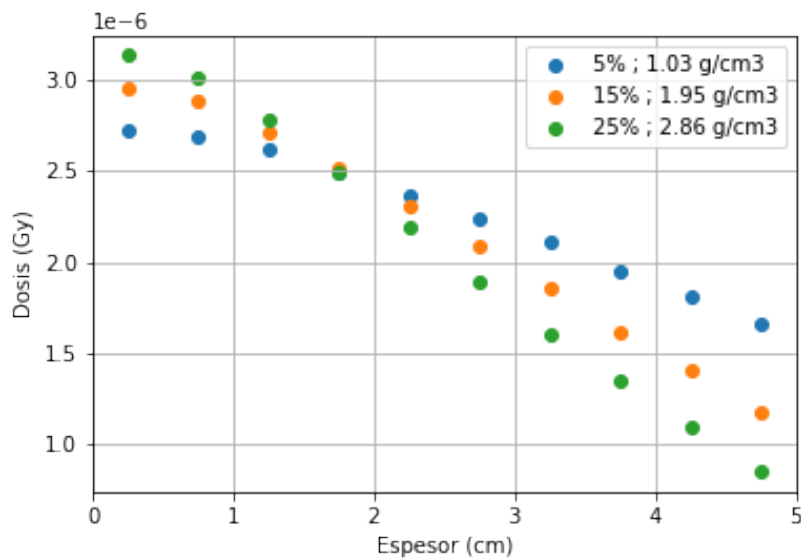


Figura 3-14: Perfil de dosis en Z para [X,Y = 2.5 cm], el ancho del cubo es de 5 cm. Se puede ver la dosis depositada en profundidad para tres geles con diferente densidad.

Resultados

Para ver como se comporta la dosis absorbida y la energía depositada en el cubo irradiado al cambiar el porcentaje de gelatina se analizó primero el resultado de ambas medidas en el total del cubo en función de la densidad del gel. En la Fig. [3-13](#) se ve como la energía depositada aumenta a medida que la densidad del gel aumenta, sin embargo la dosis absorbida disminuye. Esto se podría entender porque a pesar que la dosis esté directamente relacionado con la energía depositada esta también depende de la masa de la forma $Dosis = eDep/masa$. Al aumentar la densidad del gel cada vóxel recibe más energía depositada sin embargo su masa aumenta más rápido, por lo que en promedio el cubo presenta menor dosis absorbida.

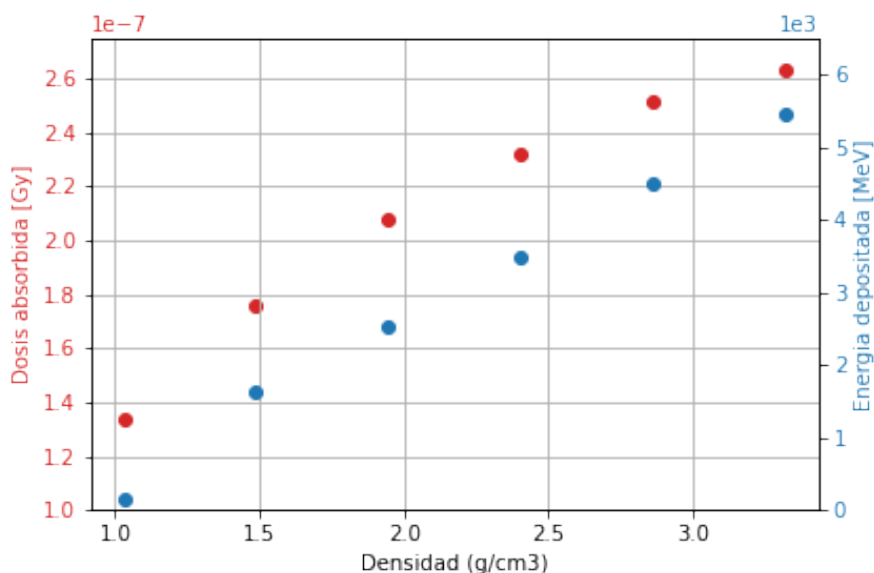


Figura 3-15: Dosis absorbida y Energía depositada en un vóxel superficial [$Z=0$ cm] del cubo

Para entender mejor cómo cambia la deposición de la dosis con un cambio en la densidad se realizan perfiles de dosis en Z variando la densidad del gel en la Fig. [3-14](#). Se puede apreciar que la deposición de dosis no es homogénea, y cambia su comportamiento en función de la densidad dependiendo de la profundidad del vóxel. Se puede ver que desde una profundidad de 0 cm hasta aproximadamente 1.75 cm hay una región en la que la dosis se deposita en mayor medida y tiende a aumentar la deposición a medida que aumenta la densidad.

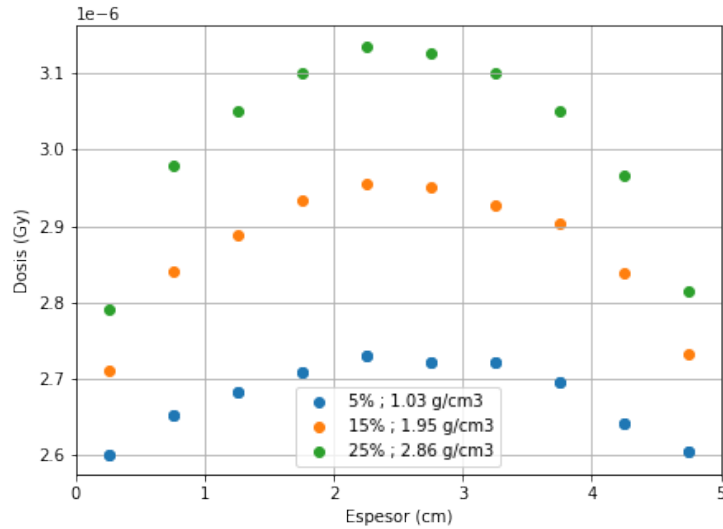


Figura 3-16: Perfil de dosis en X para un voxel superficial [$Y = 2.5$ cm, $Z = 0$ cm].

En la Fig. 3-16 se puede ver como se comporta la curva de dosis absorbida al variar la coordenada X y mantener constantes $Y = 2.5$ cm y $Z = 0$ cm. En este perfil superficial se puede ver como la dosis absorbida se comporta como una distribución gaussiana con pico en la mitad del cubo. También es importante notar que la dosis absorbida aumenta a medida que aumenta la densidad del gel, por lo que una mayor densidad del gel favorece la dosis absorbida en zonas superficiales de alta concentración de dosis. Este comportamiento es contrario al visto para vóxeles de mayor profundidad como se observa en la Fig. 3-17.

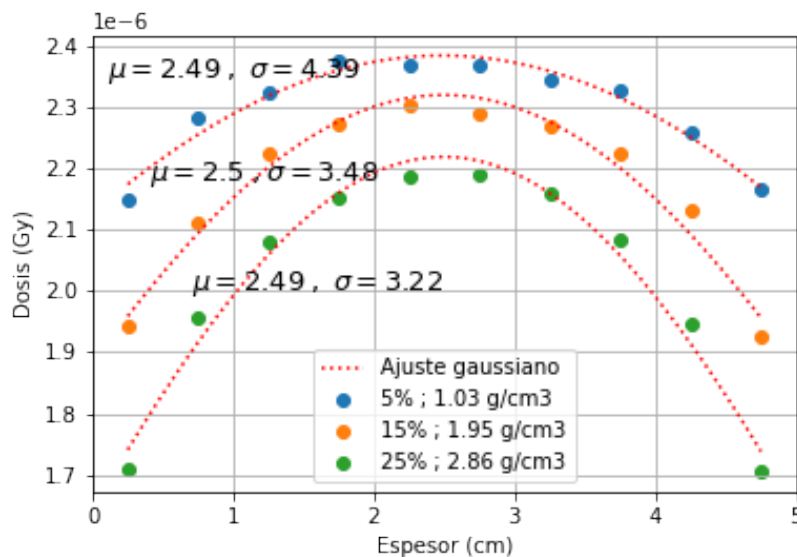


Figura 3-17: Perfil de dosis en X para un voxel de intermedio [$Y, Z = 2.5$ cm] con ajuste gaussiano.

Sólido más delgado

Como se puede apreciar en los anteriores perfiles analizados hay una discrepancia en el comportamiento del gel a mayor profundidad. Por esto se realiza un nuevo experimento con una geometría que le de menos profundidad al gel, así que se toma el cubo anterior pero se reduce su espesor a 2 cm en la dirección Z, la misma dirección de irradiación.

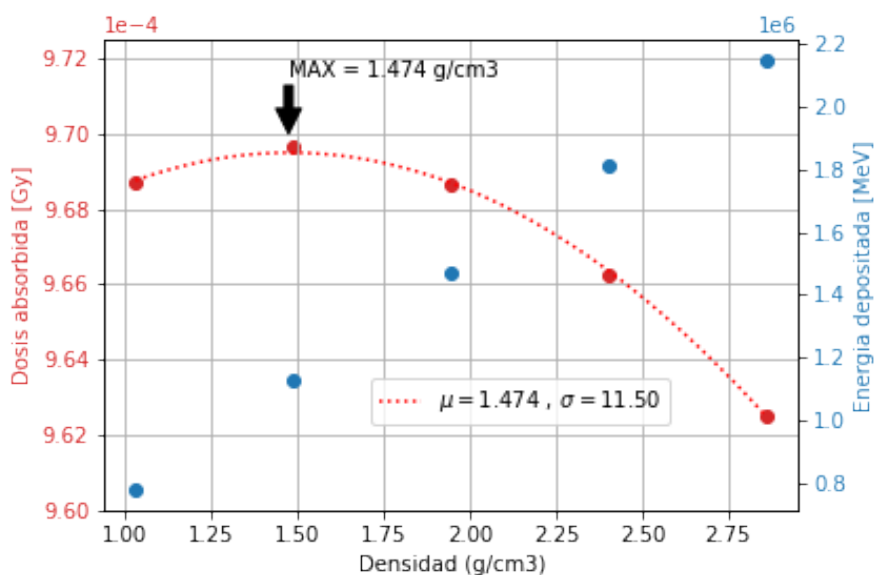


Figura 3-18: Dosis absorbida en función de la densidad del gel para espesor 2 cm con ajuste gaussiano.

Se puede ver en la Fig. 3-18 como para un menor espesor del gel la dosis total absorbida no disminuye linealmente con la densidad como se veía en la Fig. 3-13 para un cubo de 5 cm. Esto indica que el espesor del gel influye en la forma en que se absorbe la dosis. Para un menor espesor el aumento de la masa que implica el aumento de la densidad aún hace disminuir la dosis absorbida sin embargo se puede ver un comportamiento gaussiano que indica que existe un máximo de dosis absorbida total para una densidad de gel. Esta densidad correspondería a la densidad óptima de gel para absorber la mayor cantidad de dosis.

3.3. Simulaciones de electrones mediante GEANT4-DNA

En las librerías de GEANT-4 se encuentra la librería DNA, esta librería extendida está diseñada para el modelaje de daño biológico inducido por radiación ionizante en la escala del tamaño de la molécula de ADN [\[Incerti et al., 2010\]](#).

Experimento <i>in silico</i> mediante GEANT4-DNA	
Parámetros de simulación	
Partícula incidente	Electrón
Energía partícula	50 keV - 200 keV
N° de eventos	1-4 eventos
Geometría y dimensiones	Cubo de tamaños 0.05cm^3 a 1cm^3
Material del sustrato	H2O
Variables	Densidad, Energía

Tabla 3-5: Parámetros de la simulación en GEANT4-DNA

En este experimento se hace uso de la librería GEANT4-DNA para realizar experimentos que permiten estudiar la dinámica de generación de los radicales libres generados por la interacción entre la radiación y las moléculas de agua, el principal compuesto del gel dosimétrico. En la Fig. **3-19** se ve la trayectoria de un electrón de 10 keV.

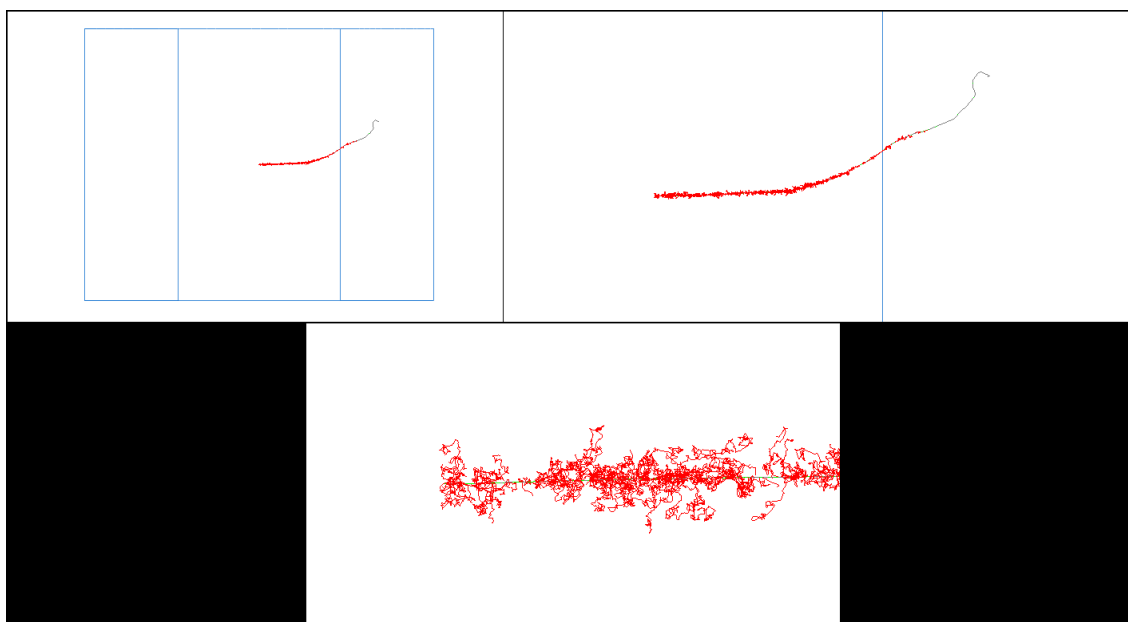


Figura 3-19: a y b) Se puede ver la trayectoria que recorre un electrón con energía de 10 KeV que inicia su recorrido desde el centro de una caja de $5\mu\text{m}$ de ancho. También se aprecia las partículas secundarias al lado de la trayectoria de la partícula principal. **b)** Realizando zoom a la trayectoria principal se puede ver con más detalle el comportamiento de los radicales libres radioinducidos.

Párticulas y energía

Las simulaciones con la librería GEANT4-DNA permiten escoger entre varias partículas con su respectiva energía, siendo el electrón la partícula simulada en este experimento. La simulación comienza calculando el trayecto recorrido por la partícula principal y las partículas secundarias que se generan mediante los procesos de Compton y efecto fotoeléctrico.

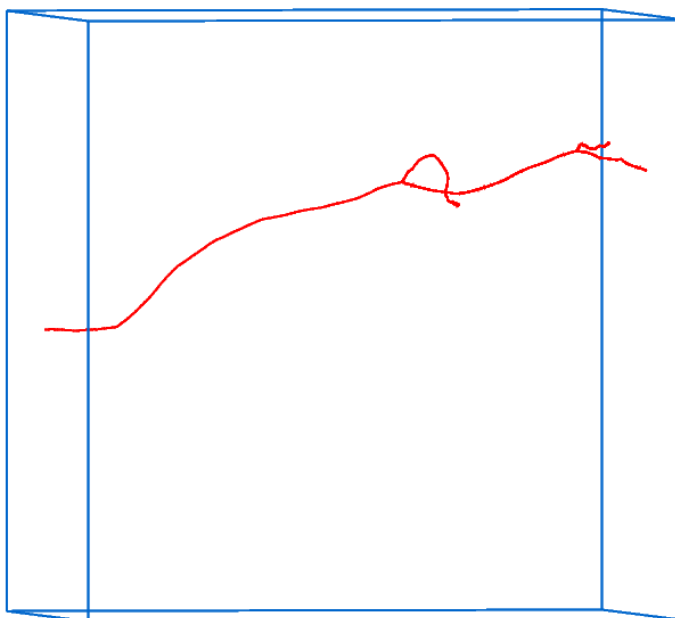


Figura 3-20: Esta figura permite ver la trayectoria que recorre un electrón simulado en GEANT4-DNA con energía de 1 MeV que inicia su recorrido desde la superficie de una caja de 1 mm de ancho, en este caso la alta energía le permite al electrón superar las dimensiones de la caja.

Geometría y materiales

En estas simulaciones de GEANT4-DNA se modifica la geometría y composición del volumen de manera similar que en los experimentos con densidad variable realizados anteriormente. Sin embargo para este experimento se analiza la trayectoria de una partícula y la generación de los radicales libres a partir de sus interacciones, por lo que el tamaño del cubo es correspondiente a las dimensiones relativas de las trayectorias de los radicales libres. Esto debe cambiar dependiendo de la energía, ya que a medida que aumenta la energía la trayectoria aumenta siendo necesario un mayor tamaño del cubo, como se puede ver en la Fig. 3-20. También es importante notar que el material predeterminado es el agua, siendo posible cambiar el valor de la densidad en el algoritmo de simulación y evaluar las implicaciones físicas. Aunque no es el material específico del gel, la dinámica de la producción de radicales libres puede analizarse teniendo en cuenta que el gel es en su mayoría agua y que en el agua es donde suceden los procesos de radiolisis.

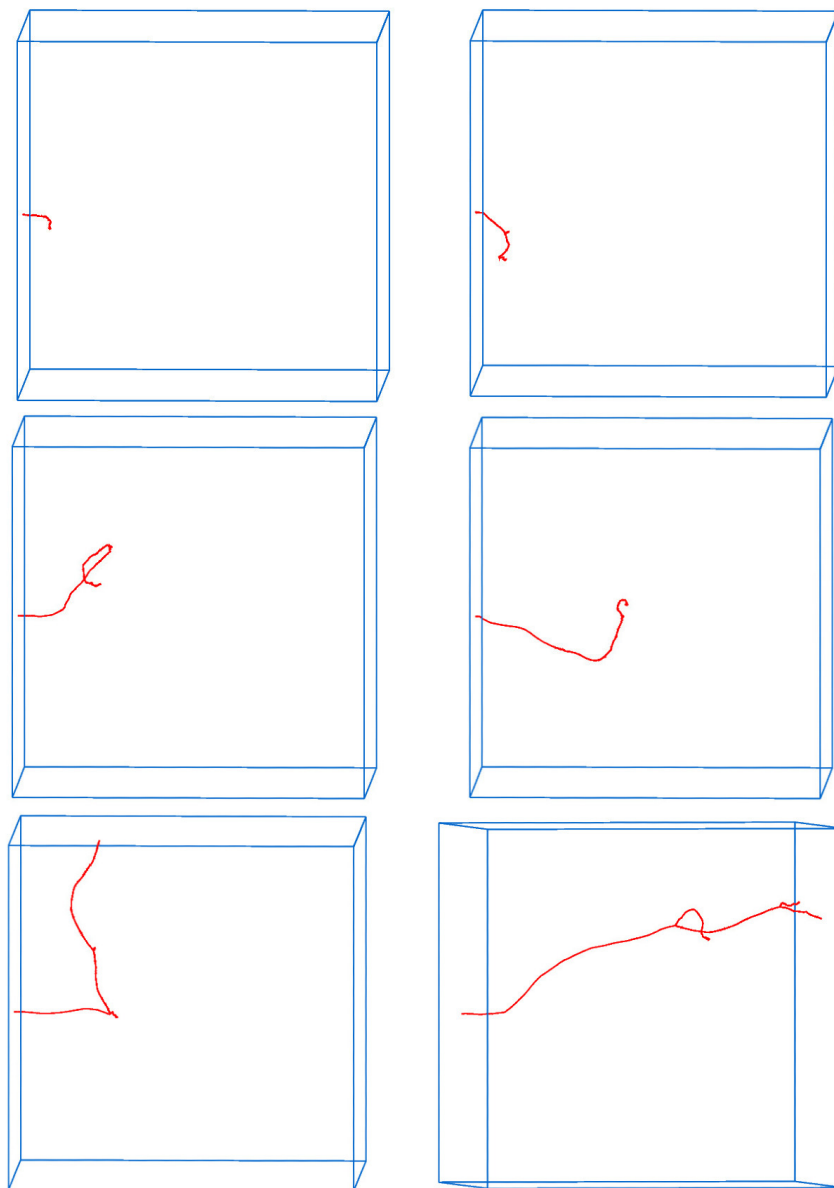


Figura 3-21: Se puede ver la trayectorias que recorren electrones con energías de 150 keV, 300 keV, 450 keV, 600 keV, 850 keV y 1000 keV respectivamente que inician en la superficie de un cubo de agua. La distancia recorrida el cubo se incrementa al aumentar la energía y con 850 keV son suficientes para tener una trayectoria mayor a las dimensiones del cubo con $L = 0.25 \text{ cm}$

Scoring y tracking

La información de la simulación es almacenada y posteriormente analizada. La información se divide en dos procesos: el físico, que entrega las coordenadas correspondientes a las procesos de excitación e ionización, y el químico, que nos permite saber las posiciones en las que se llevan a cabo las reacciones químicas de los radicales libres. También se obtiene información del tiempo en el que se llevan a cabo las reacciones y los productos resultantes.

Resultados

Estas simulaciones evalúan el comportamiento de un electrón que posee una energía dada y va depositando su dosis a lo largo de su trayectoria. En la Fig. [3-21](#) se puede analizar como a medida que la energía inicial del electrón se incrementa la distancia total recorrida por la partícula antes de ser absorbida aumenta. También se observa que con 150 keV de energía inicial un electrón no alcanza a recorrer una décima parte del ancho de del cubo de agua ($L = 0.25$ cm), con aproximadamente 500 keV de energía inicial llega a la mitad del cubo y con más de 850 keV lo recorre por completo.

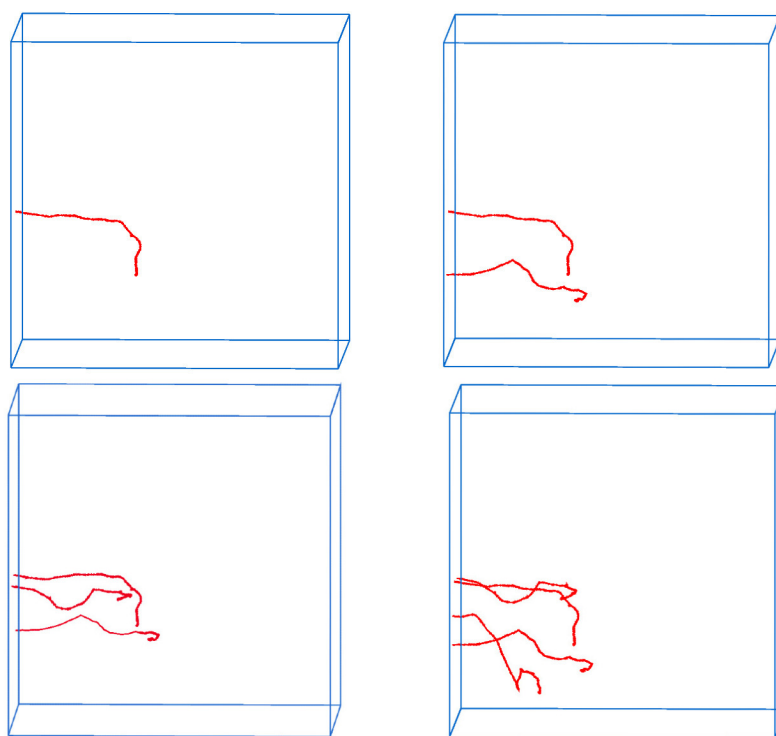


Figura 3-22: Se ven dibujadas cuatro trayectorias que corresponden a la simulación de cuatro electrones de 150 keV que inician su recorrido en la superficie de una caja de 0.25 mm de ancho y poseen un momentum inicial paralelo al eje Z. Cada una sigue procesos aleatorios aunque el recorrido máximo de los electrones es similar.

Al ser el ancho de la caja 0.25 cm se podría aproximar que el recorrido máximo posible del electrón y sus partículas secundarias es del orden de 0.1 mm para energías cercanas a 100 keV, de 1 mm para energías cercanas a 500 KeV y mayores a 2.5 mm para energías que superen los 850 keV. En la trayectoria de la Fig. [3-21e](#)) se puede ver que el electrón desvía su trayectoria y deposita su dosis de forma más superficial. Con respecto a eso en la Fig. [3-22](#) se puede ver que las trayectorias de varios electrones con la misma energía difieren a raíz de los procesos estocásticos, sin embargo tienen una tendencia a terminar sus trayectorias con un recorrido máximo similar.

3.4. Simulaciones de fotones mediante GEANT4-DNA

Este experimento se desarrolló con los mismos parámetros que los descritos en la sección [3.3](#) pero en este caso la partícula es un fotón que tiene su origen fuera de la caja y realiza varias interacciones con las moléculas de agua del cubo previo a evaluar su respuesta. Mediante estas interacciones se deposita la energía en el sólido y se analizan las interacciones de los electrones secundarios que recorren una trayectoria en el material. A su vez, durante ese recorrido estos interactúan con las moléculas del agua, ionizando y creando los radicales libres que luego serán los iniciadores de los procesos de polimerización en el gel dosimétrico.

Experimento <i>in silico</i> mediante GEANT4	
Parámetros de simulación	
Partícula incidente	Fotón
Energía partícula	140 keV
N° de eventos	1 evento
Geometría y dimensiones	Cubo de tamaño 5cm x 5cm x 5cm
Material del sólido	H2O
Variables	Densidad, Energía

Tabla 3-6: Parámetros de la simulación en GEANT4-DNA

En la Fig. [3-23](#) se puede observar el comportamiento de un fotón con 150 keV de energía inicial que realiza una interacción de tipo Compton en un cubo de agua de 5 cm^3 de volumen. Esta interacción se lleva a cabo a una profundidad de 4.64 cm y se puede ver un electrón debido a un proceso Compton con energía de 39 keV que luego realiza una trayectoria en el material generándose nuevos eventos y radicales libres en el cubo.

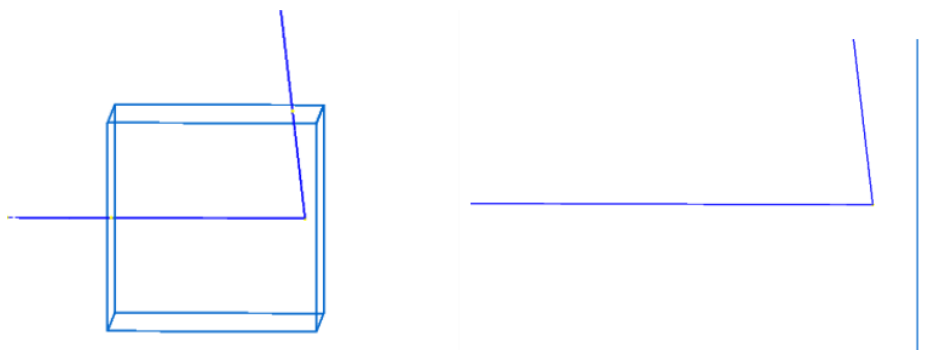


Figura 3-23: Esta figura permite ver la interacción tipo Compton que lleva a cabo un fotón con energía inicial de 150 keV que inicia su recorrido fuera del cubo de agua de 5 cm^3 de volumen.

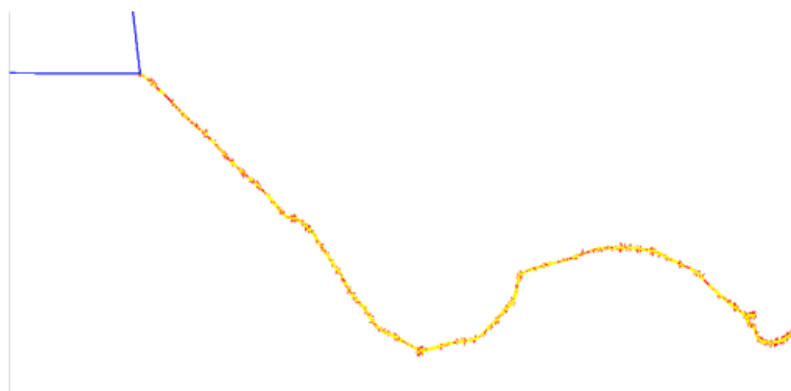


Figura 3-24: Esta figura permite ver la trayectoria que recorre un electrón generado por la interacción Compton que lleva a cabo el fotón con energía de 150 KeV. En la trayectoria que recorre el electrón se ve como se crean los electrones secundarios que luego mediante ionización con las moléculas de agua generarán los radicales libres.

La trayectoria del electrón y los radicales libres se pueden ver en la Fig. 3-24. Estos radicales libres reaccionan entre ellos y con la información generada de estas reacciones podemos registrar la especie de radical producido, la posición del mismo y el producto de la reacción que lleva a cabo con otro radical libre. En esta figura muestra la trayectoria del electrón y los radicales libres que se generan a medida que el electrón deposita su energía ionizando moléculas de H₂O. Este electrón se origina por una interacción Compton sencilla sin embargo un fotón puede realizar varias interacciones Compton subsecuentes en el material como se puede ver en la Fig. 3-25.

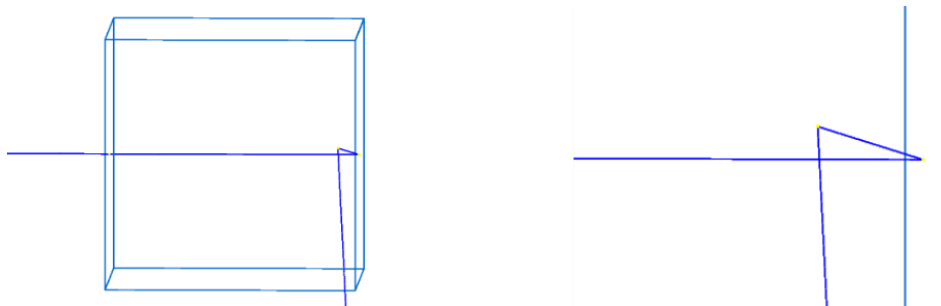


Figura 3-25: En esta figura se ve como un fotón con energía inicial de 150 keV realiza dos interacciones tipo Compton que lleva a cabo en el cubo de agua de 5 cm³ de volumen.



Figura 3-26: En esta figura se puede ver la trayectoria que recorren los dos electrones generados mediante interacción por el fotón de la figura anterior con 150 keV de energía inicial.

Así que esta trayectoria del fotón generará dos electrones que depositaran la dosis en el material. En la Fig. 3-26 se puede apreciar la distinta trayectoria que recorre cada electrón. Esta diferencia en los procesos estocásticos se controla mediante la elección de dos números que corresponden a la semilla de los números aleatorios en la simulación. Cambiando la semilla se puede observar distintos comportamientos del fotón, en la Fig. 3-27 se ven las trayectorias de varios fotones con energía inicial de 150 keV. En su trayectoria el fotón puede interactuar una o varias veces, en varias profundidades y depositar distintas cantidades de energía en el material. El fotón también podría no interactuar en absoluto o realizar interacción fotoeléctrica aunque esto es menos probable en este rango de energías, asociado a las distribuciones de probabilidad de cada proceso.

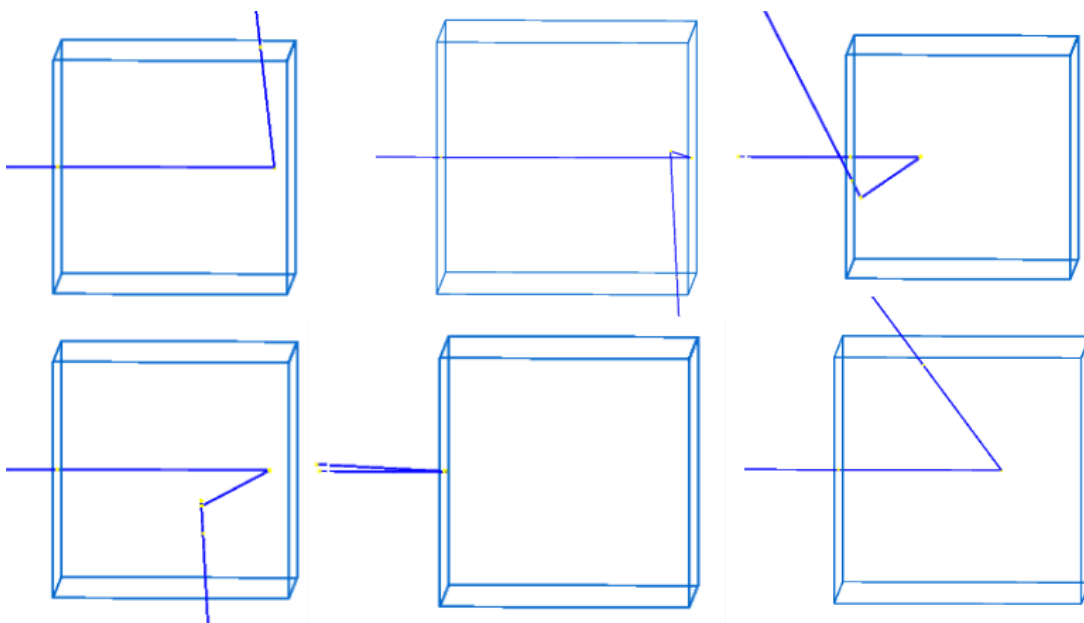


Figura 3-27: Esta figura presenta las trayectorias recorridas por varios fotones con energía inicial de 150 keV que inician su recorrido fuera de un cubo de agua de 5 cm^3 .

Se puede entonces obtener la energía depositada en el material por cada fotón con distinta trayectoria e interacciones y en la Fig. 3-28 se ve la relación entre la energía depositada y la distancia promedio entre los radicales libres radioinducidos y los fotoelectrones que los generan. Aunque se ve una tendencia positiva entre estas dos variables la relación no es muy clara y esto se puede deber a que al fotón realizar varias interacciones los electrones generados en el material se dividen la energía depositada; por lo tanto las distancias promedio entre los radicales libres y cada electrón que los genera disminuye.

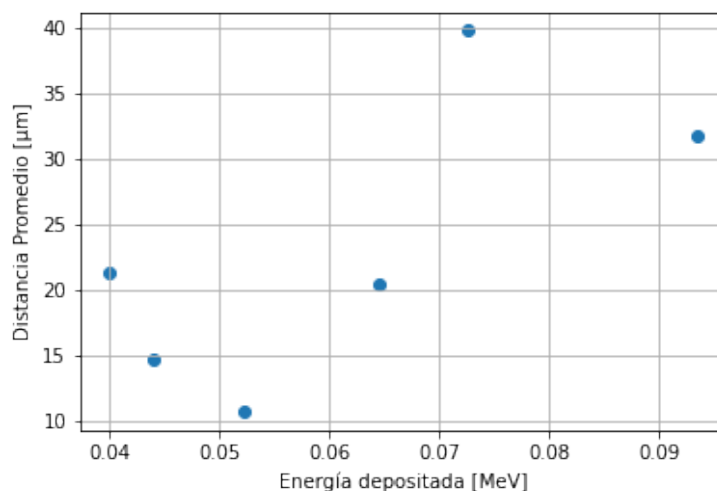


Figura 3-28: Esta gráfica presenta la distancia promedio que recorrieron los radicales libres desde el electrón que los generó en función de la energía depositada por los fotones en un cubo de agua de 5 cm^3 de volumen.

4 Discusión y análisis de resultados

4.1. Análisis de dosis depositada en cubo de gel

En la sección [3.2](#) se mostró el resultado de la simulación al variar el espesor y la densidad de un sólido con geometría cúbica y material de gel dosimétrico tipo BANG-2 que es irradiado por 10^8 fotones con una energía inicial de 150 keV. Se obtuvo información de la distribución de la dosis absorbida en el gel y del efecto que tiene variar la densidad y el espesor en la dosis absorbida. Se puede entonces relacionar este cambio de densidad con un cambio en el porcentaje de gelatina en la composición del gel y hallar un porcentaje de gelatina que optimice la dosis absorbida en el gel dosimétrico.

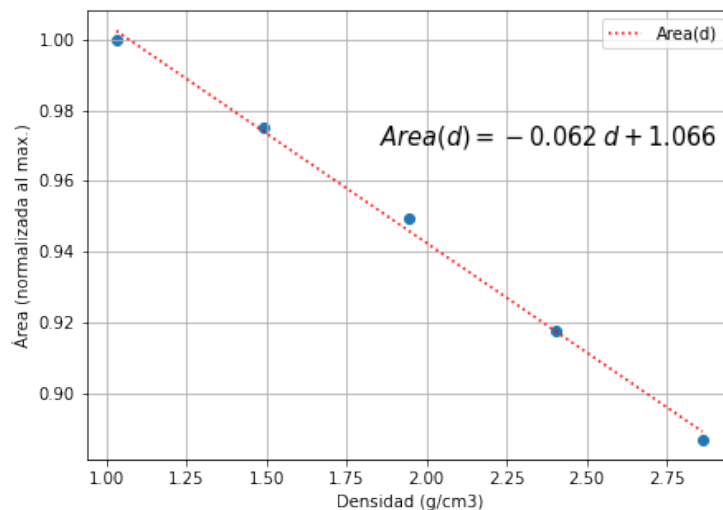


Figura 4-1: Área normalizada en función de la densidad para curvas de perfil X [Y=Z=2.5 cm]

En la Fig. [3-17](#) del anterior capítulo vimos como se comporta la curva de dosis absorbida al variar la coordenada X y mantener constantes Y = Z = 2.5 cm. En este perfil del interior del cubo se puede ver como la dosis absorbida disminuye a medida que aumenta la densidad del gel. También vimos como para vóxeles de menor profundidad (Z = 0 cm) la dosis absorbida aumentaba a medida que la densidad aumentaba.

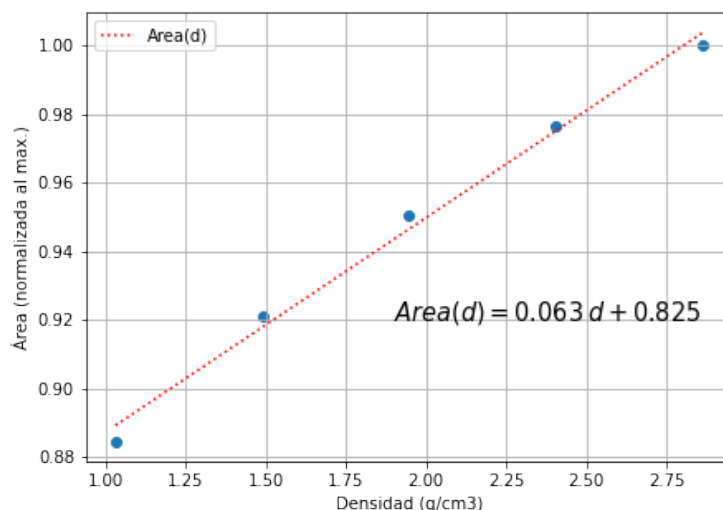


Figura 4-2: Área normalizada en función de la densidad para curvas de perfil X con las coordenadas [Y = 2.5cm, Z = 0cm]

Para analizar el comportamiento de la dosis absorbida al variar la densidad se toma el área bajo la curva de los diferentes perfiles y se normalizan con respecto a la mayor área bajo la curva. Esto se puede apreciar en la Fig. 4-1 para un perfil en la mitad del cubo [Z=2.5 cm] y en la Fig. 4-2 para un perfil más superficial [Z=0 cm]. Como se ve para el perfil superficial el área bajo la curva aumenta a medida que la densidad aumenta, mientras que en la mitad del cubo, a 2.5 cm de profundidad, el área bajo la curva disminuye con un aumento de la densidad, también se realiza un ajuste lineal a los datos en ambos casos.

Porcentaje de gelatina óptimo

Se puede analizar entonces a más detalle como influye el cambio de la composición del gel si en lugar de la densidad tomamos como variable el porcentaje de gelatina en la composición del gel. Así pues en la Fig. 4-3a), se muestra el comportamiento de la dosis absorbida en el gel para porcentajes de gelatina que van desde el 6% hasta el 12%. Se puede notar el comportamiento gaussiano con pico de dosis absorbida en 9.27%. Existe una alta correlación entre la dosis absorbida por el material y la sensibilidad a la dosis impartida ya que el número de eventos se mantuvo constante, así que bajo este criterio se puede observar que alrededor de 9% de gelatina sería un porcentaje óptimo para la composición del gel.

Resulta interesante comparar este resultado con uno obtenido por [Luci et al., 2007] que se puede ver en la Fig. 4-3b). Los datos corresponden a la sensibilidad a la dosis que se calcula de las curvas de calibración usadas para hallar la dosis en el gel como se ve en la sección 4.4. Se puede ver como se comporta de manera similar los valores de dosis absorbida del experimento *in silico* con un pico similar alrededor del 9% de gelatina en la composición.

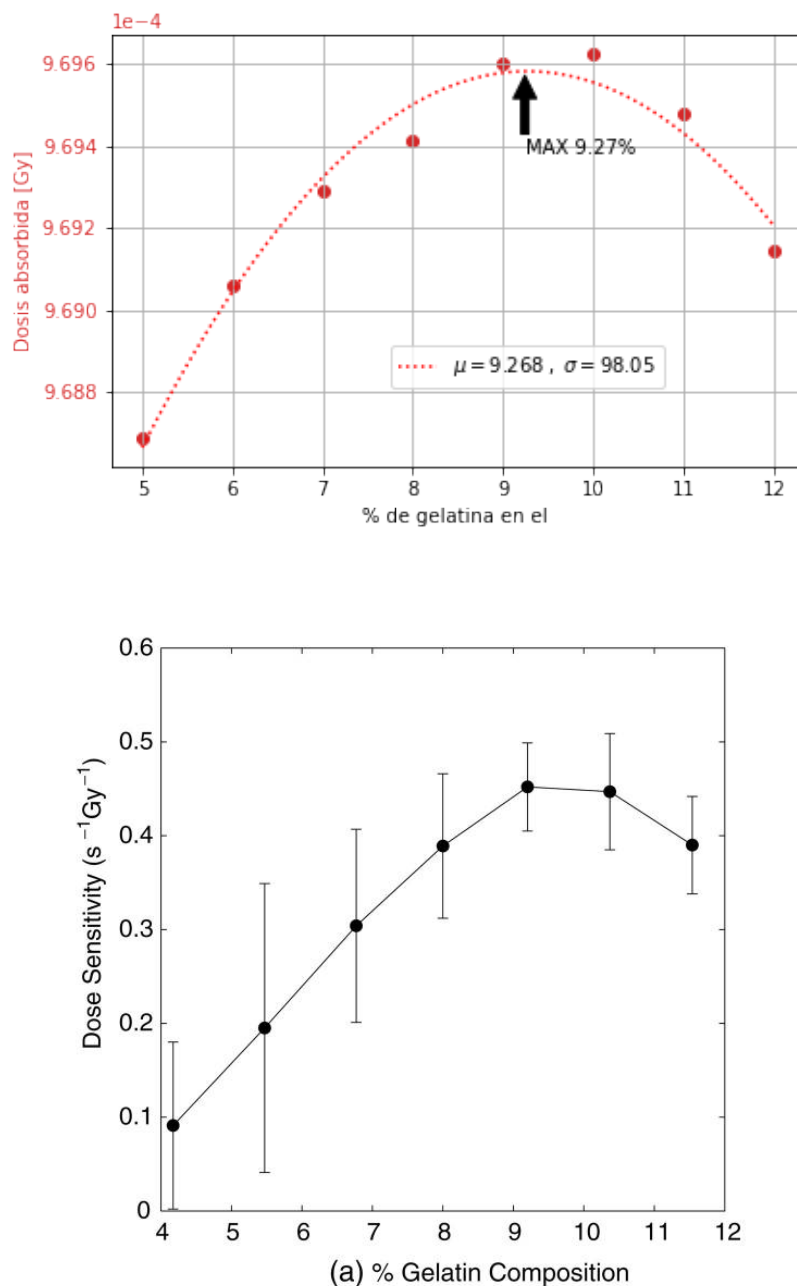


Figura 4-3: a) Se puede ver como cambia la dosis absorbida en el cubo al variar el porcentaje de gelatina. Se encuentra un pico de dosis en 9.27%. b) La sensibilidad de la dosis al variar el porcentaje de gelatina [Luci et al., 2007] presenta un comportamiento similar al obtenido en el experimento *in silico*.

Esto puede deberse a que, aunque la dosis absorbida total registrada en el experimento *in silico* no necesita una curva de calibración para medirse, el número de partículas a interactuar se mantiene constante y el cambio en la dosis absorbida al cambiar la densidad da muestra de la sensibilidad que tiene el material a una dosis impartida.

Analizando la curva de dosis absorbida en función del porcentaje de gelatina se puede ver en la Fig. 4.4 una distribución ancha, sin embargo para valores de porcentaje de gelatina superiores al 12% la dosis absorbida disminuye progresivamente y aunque se ajustan a la curva se salen del rango de interés.

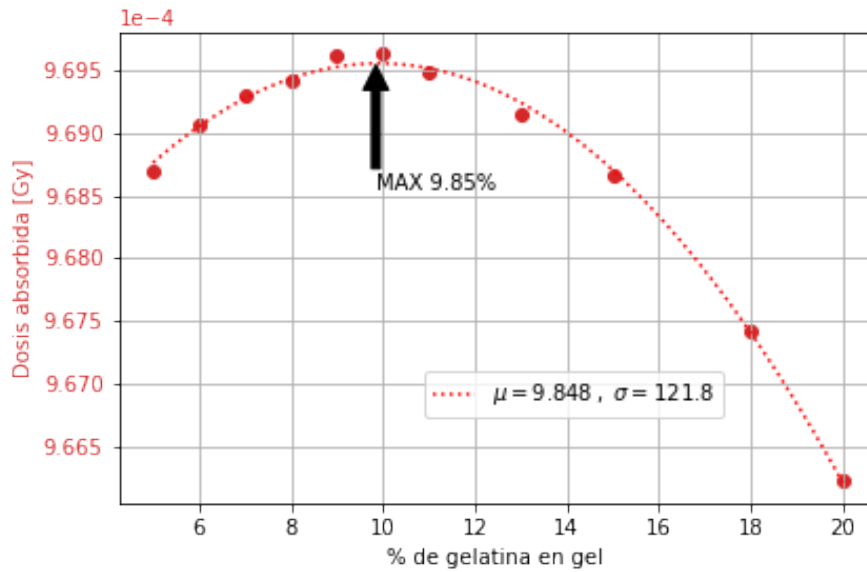


Figura 4-4: a) Se puede ver como cambia la dosis absorbida en el cubo al variar el porcentaje de gelatina. Se encuentra un pico de dosis en 9.85% al usar un rango mayor de porcentaje de gelatina.

4.2. Análisis radicales libres: simulación de electrón

Las coordenadas a las que se encuentran los radicales libres del electrón generador para un tiempo dado son registradas y almacenadas. También se registra la reacción que se lleva a cabo en ese tiempo entre las especies de radicales libres y el producto de la reacción, así como la coordenada de ese producto final. Podemos ver entonces el comportamiento de la distancia de los radicales libres a medida que se cambian las variables de energía inicial del electrón y la densidad del agua.

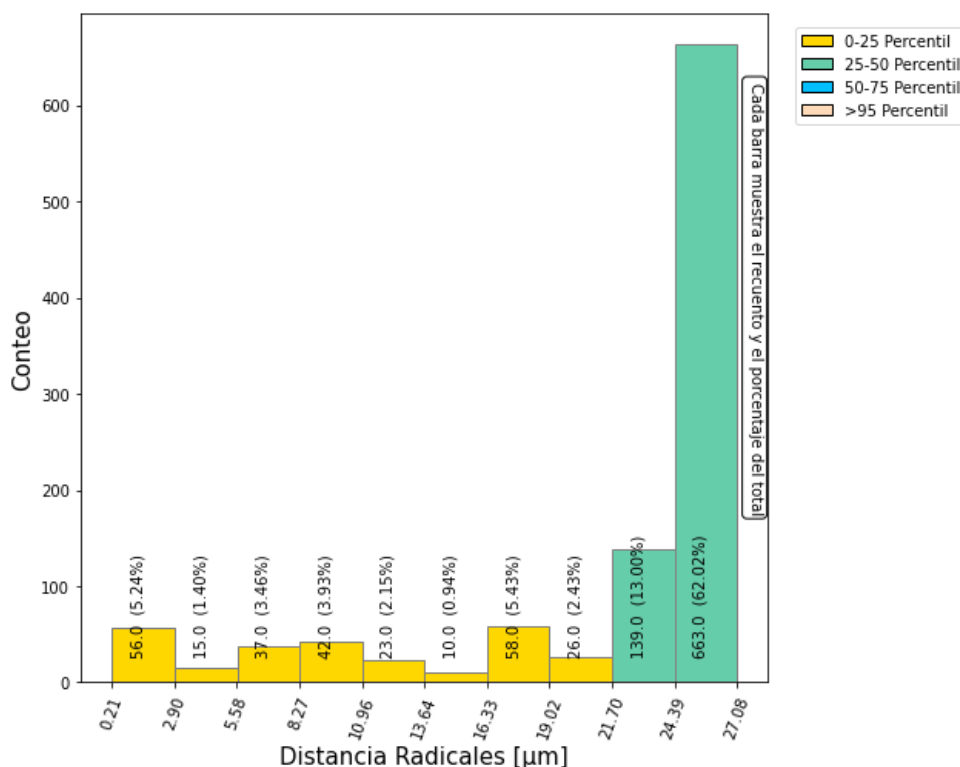


Figura 4-5: Este histograma muestra la distribución de las distancias entre un electrón con 50 keV de energía y las reacciones entre las diferentes especies generadas por la radiólisis a medida que deposita su dosis. Estos productos luego iniciarán las cadenas de polimerización en el gel.

Esta información acerca de la distribución de la generación de los radicales libres nos permite entender dónde se podrán iniciar los procesos de generación de las cadenas de polímero en el gel. Se puede ver en los histogramas como se comporta la distancia entre el electrón que deposita la dosis y los radicales libres generados, lo que puede ser un indicador de la resolución espacial en la correlación dosis-T₂. Las Fig. 4-5 hasta la 4-8 corresponden a electrones con energías iniciales de 50 keV, 100 keV, 150 keV y 200 keV respectivamente.

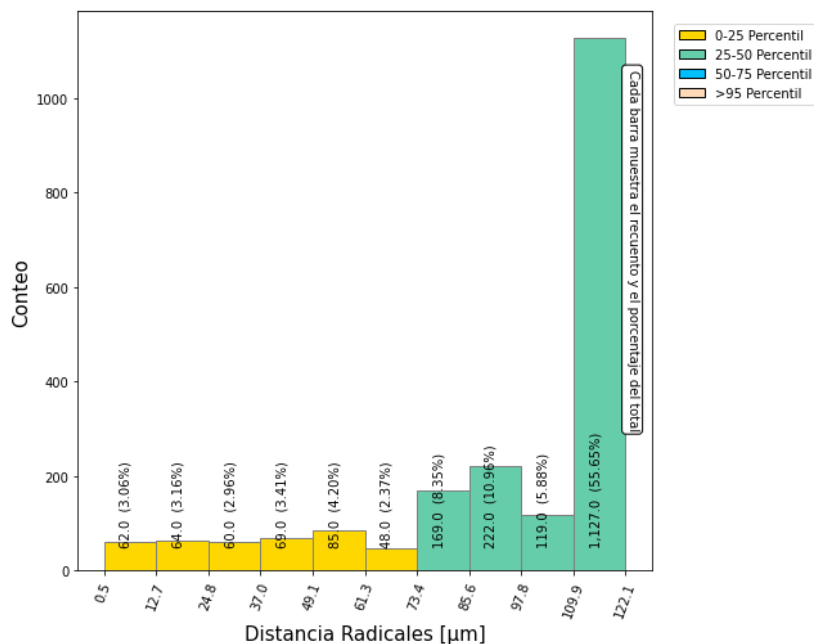


Figura 4-6: Este histograma muestra la distribución de las distancias entre un electrón de 100 keV y las reacciones entre las diferentes especies generadas por la radiohidrolisis a medida que deposita su dosis. Estos productos luego iniciarán las cadenas de polimerización en el gel.

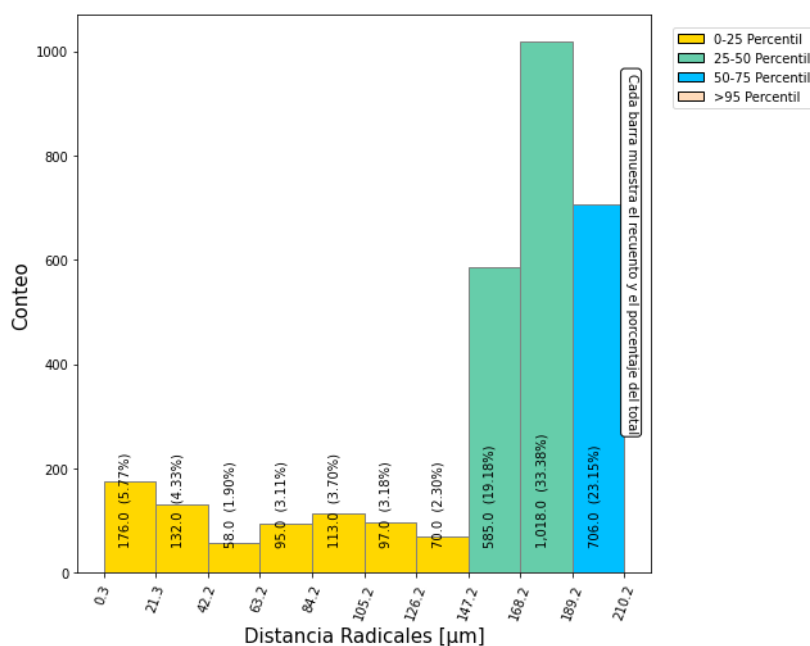


Figura 4-7: Este histograma muestra la distribución de las distancias entre un electrón de 150 keV y las reacciones entre las diferentes especies generadas por la radiohidrolisis a medida que deposita su dosis. Estos productos luego iniciarán las cadenas de polimerización en el gel.

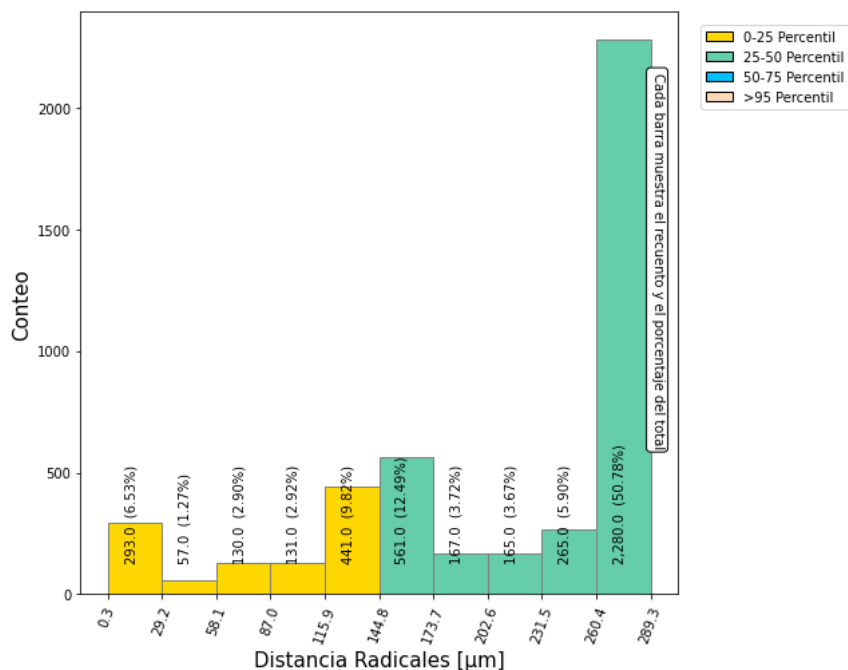


Figura 4-8: Este histograma muestra la distribución de las distancias entre un electrón de 200 keV y las reacciones entre las diferentes especies generadas por la radihidrólisis.

Analizando los histogramas se ve como la distribución de las distancias entre el electrón y los radicales libres tienden a agruparse en un rango cerca a la distancia máxima de generación. Por ejemplo para una energía inicial de 50 keV se encuentran radicales libres a $0,22 \mu\text{m}$ hasta $27 \mu\text{m}$ de distancia, sin embargo el 62 % están en el rango de $24,4 \mu\text{m}$ a $27 \mu\text{m}$.

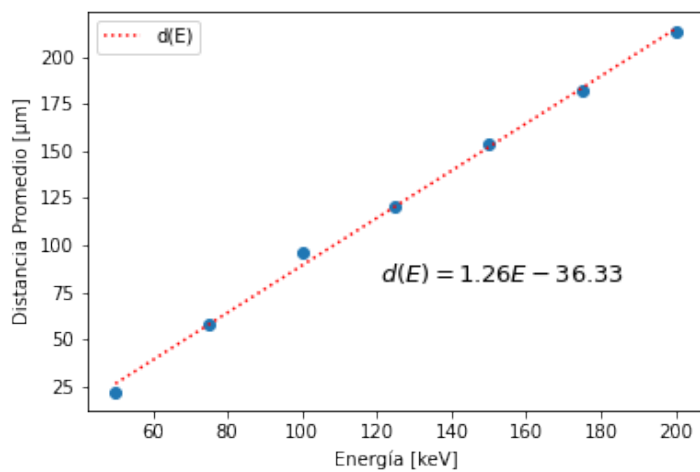


Figura 4-9: En esta figura se puede ver el comportamiento de la distancia promedio de las reacciones entre los radicales libres y el electrón que va depositando la dosis en el gel en función de la energía inicial del electrón. Se realiza un ajuste lineal a los datos entregados por las simulaciones.

Para una energía mayor, por ejemplo, para 100 keV se halla que la distancia más probable en la que se encuentran agrupados los radicales libres aumenta a $122.1 \mu m$, y para un electrón de 200 keV es más probable que se encuentren a $289 \mu m$. Analizando la distribución en los histogramas a medida que aumenta la energía inicial no se encontró una tendencia hacia una menor o mayor agrupación. Así que se ve en principio como un aumento de la energía inicial del electrón tiene como consecuencia un aumento en las distancias a las que se encuentran los radicales libres.

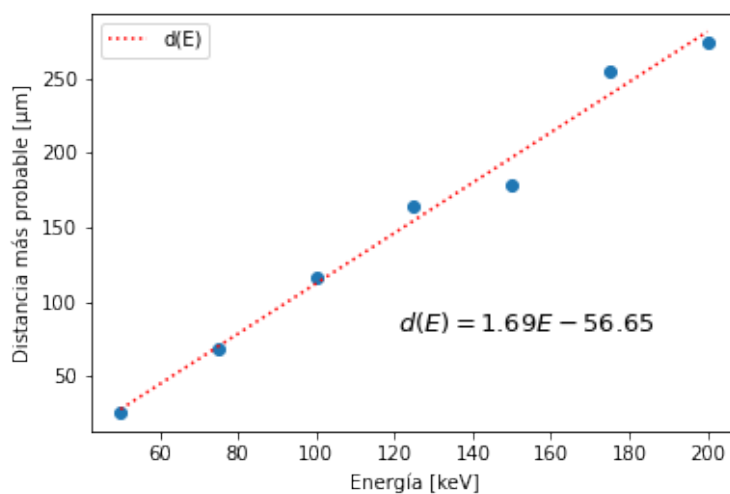


Figura 4-10: En esta figura se puede ver el comportamiento de la el promedio del rango de distancia más probable entre las reacciones de los radicales libres generados y el electrón que va depositando la dosis en el gel. Esto en función de la energía inicial del electrón. Se realiza un ajuste lineal a los datos entregados por las simulaciones.

Para analizar el efecto de variar la energía inicial del electrón en la distribución espacial de los radicales libres se utilizaron dos resultados, primero la distancia promedio de todos los radicales libres, que se halla tomando las coordenadas de los productos de las reacciones entre los radicales libres radioinducidos y el electrón. Segundo, la distancia más probable, que se toma como el intervalo de distancias donde se agrupa la mayor cantidad de radicales libres. Esto se justifica por la alta agrupación en la distribución hacia una distancia máxima entre el electrón y los radicales libres. En las Fig. 4-9 y Fig. 4-10 se han graficado en función de la energía inicial del electrón la distancia promedio y distancia más probable respectivamente. Se puede ver como existe una proporcionalidad entre la energía y la distancia de los radicales libres, y el comportamiento se puede ajustar linealmente como se ve en ambas gráficas.

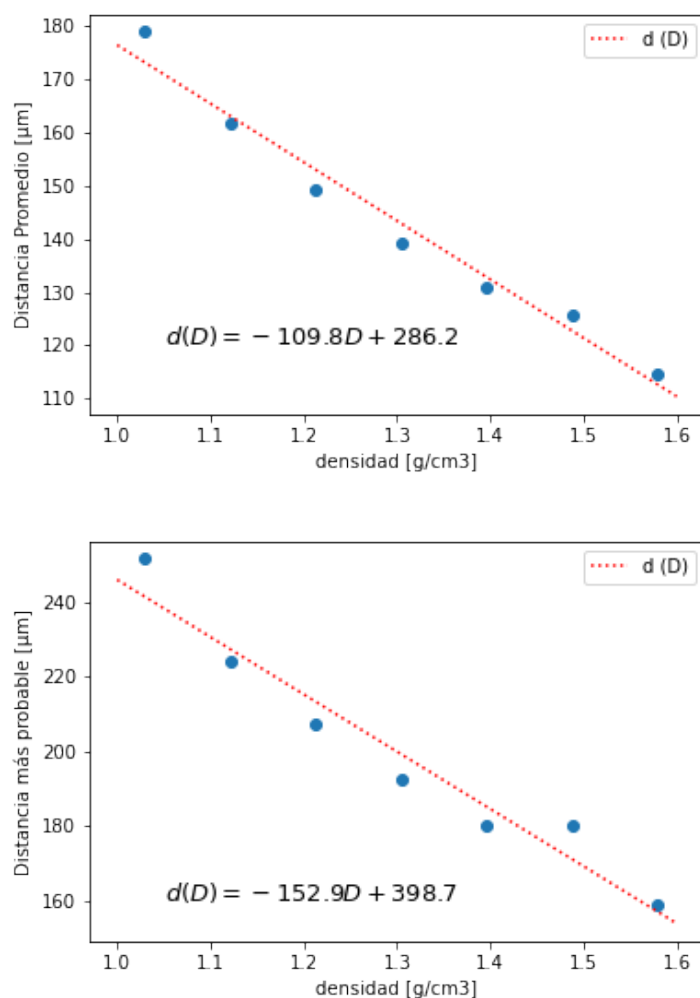


Figura 4-11: En estas dos figuras se puede ver el comportamiento de la distancia promedio y la distancia más probable (promedio del rango más probable de distancias) de las reacciones entre los radicales libres y el electrón que va depositando la dosis en función de la densidad del gel. Se realiza un ajuste lineal a los datos entregados por las simulaciones.

Así mismo se hizo un análisis del efecto que tiene variar la densidad del sustrato (en este caso agua) en la distribución de los radicales libres en el material. En la Fig. 4-11 se ve que a medida que aumenta la densidad del material ambos resultados (distancia más probable y distancia promedio) disminuyen, por lo que se ve una relación inversamente proporcional entre la densidad y la dispersión de los radicales libres en el material. La tendencia se comporta de manera lineal y se realiza un ajuste como se ve en ambas gráficas. Aumentar la densidad podría mejorar la resolución de la distribución de dosis evaluada a través de T2 en el gel dosimétrico ya que este aumento se relaciona con una disminución de la distancia más probable entre el electrón y los radicales libres que genera; por lo que los procesos de polimerización se iniciarían más cerca a la ubicación donde se deposita la dosis en el gel.

4.3. Análisis radicales libres: simulación de fotón

Para este experimento se toma como partícula incidente un fotón que inicia desde fuera de un cubo de agua e interactúa depositando la dosis en el material, los electrones secundarios que recorren una trayectoria en el gel generan a su paso radicales libres que luego iniciarán los procesos de polimerización de los monómeros de vinilo del gel dosimétrico.

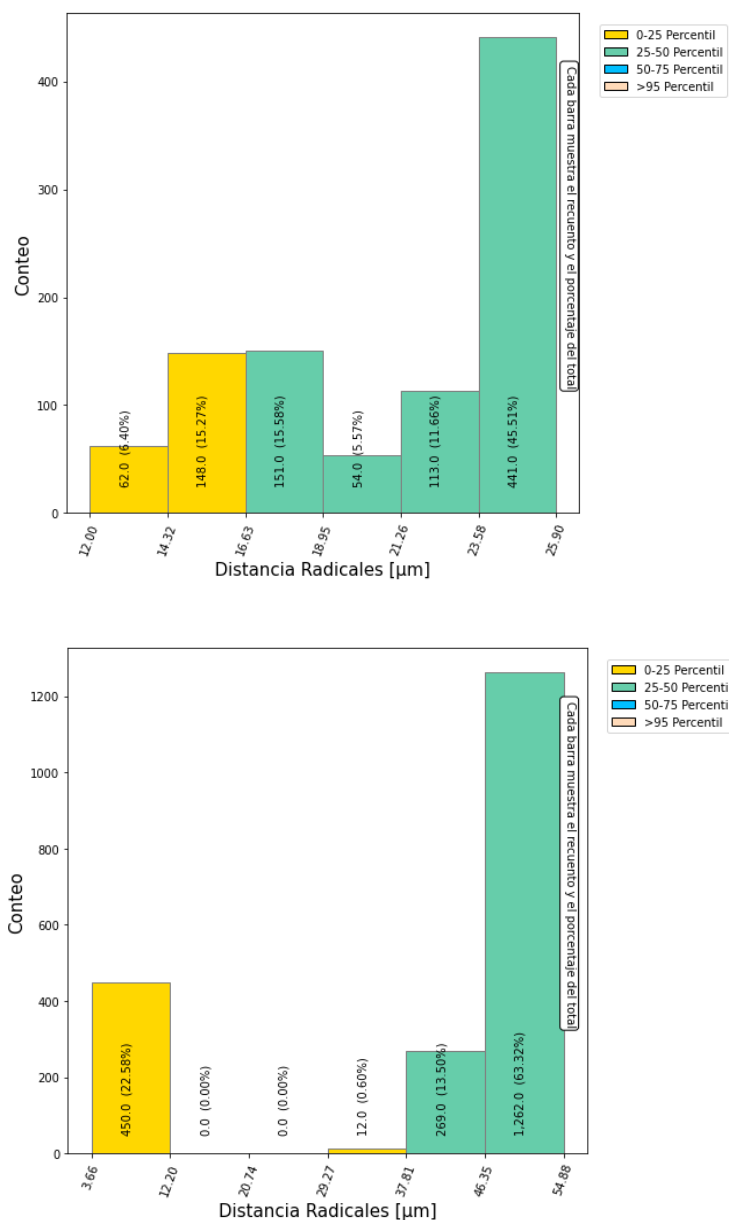


Figura 4-12: Esta figura permite ver la distribución de las distancias de los radicales libres radio-inducidos por fotones de 150 keV como visto en las figuras [3-23](#) y [3-25](#) respectivamente. Se puede ver la diferencia entre una interacción sencilla y dos interacciones en el material.

Al igual que en el análisis para la simulación de electrones se realiza el análisis de la distribución espacial de los radicales libres generados por el fotón mediante la información registrada por la simulación. Con esto se realizan histogramas y se cambian las dos variables (energía inicial del fotón y densidad del material) para ver el efecto que tiene sobre la dispersión de los radicales libres. Se puede ver entonces en la Fig. 4-12 a) un histograma para energía iniciales de 150 keV; en donde se aprecia de nuevo una agrupación de la distribución de las distancias cerca a un máximo. También se observa otro histograma en la Fig. 4-12 b) que corresponde a una interacción con varios procesos Compton. En este caso no se agrupan todas las distancias cerca de un solo máximo.

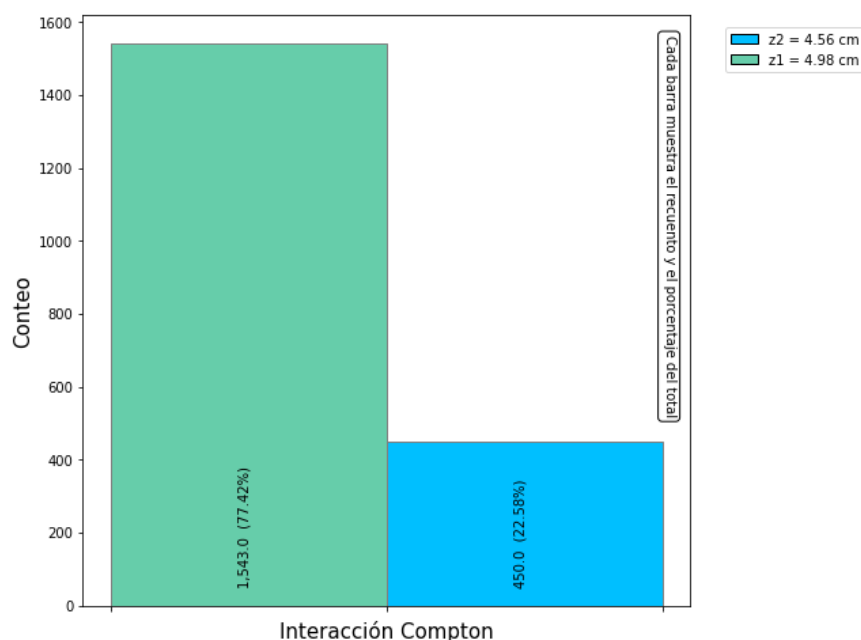


Figura 4-13: Esta figura muestra la generación de radicales libres que lleva a cabo un fotón para cada una de sus interacciones compton, la primera a profundidad de 4.98 cm y la segunda interacción a 4.56 cm de profundidad. La mayoría de radicales se generan en la primera interacción.

Para analizar las distancias de los radicales libres generados por fotones que realicen varias interacciones en el material se debe poder discernir cuál electrón es el generador del radical libre y así medir la distancia entre ambos. Las distancias entre interacciones del fotón son más grandes por varios ordenes de magnitud que las distancias entre un electrón y sus radicales libres radioinducidos, por lo que usando un criterio de cercanía se puede hacer el análisis tomando las distancias medidas como la distancia entre el radical libre y el electrón que se encuentre más cerca. En la Fig. 4-13 se puede ver como se compara la generación de radicales para un fotón que realiza dos interacciones; se ve que en la primera interacción compton a mayor profundidad se genera una mayor cantidad de radicales libres que en la interacción compton subsecuente.

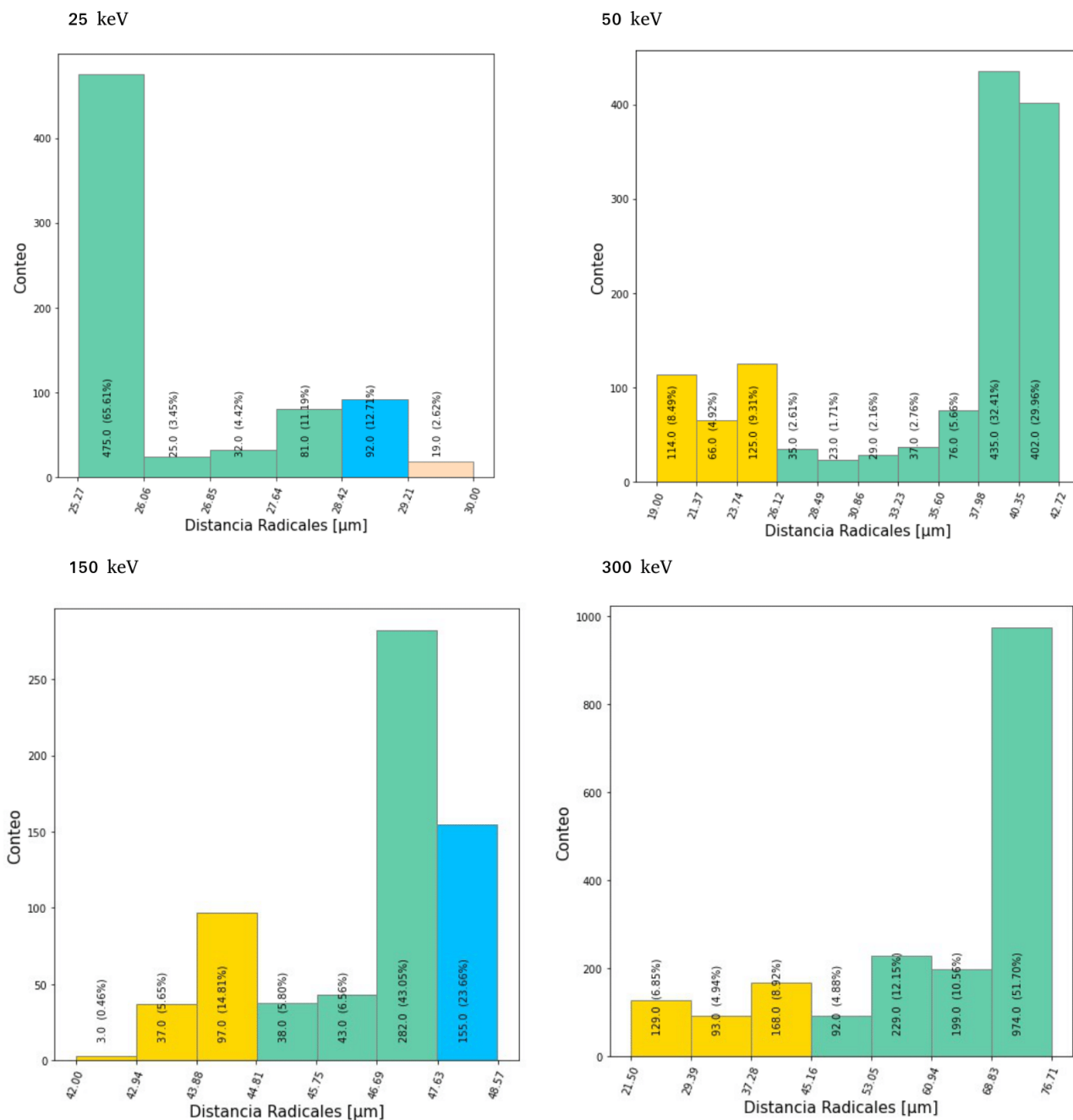


Figura 4-14: Se ve en esta figura en forma de histogramas la distribución espacial de los radicales libres radioinducidos por fotones con energía inicial variable que empiezan su recorrido fuera de un cubo de agua de 5 cm^3 de volumen con una densidad de 1.396 g/cm^3 (densidad hallada para gel con 9% de gelatina). Las distancias tienden a agruparse cerca a un rango y se puede distinguir a simple vista cuáles tuvieron varias interacciones: el fotón de 50 keV y el de 150 keV.

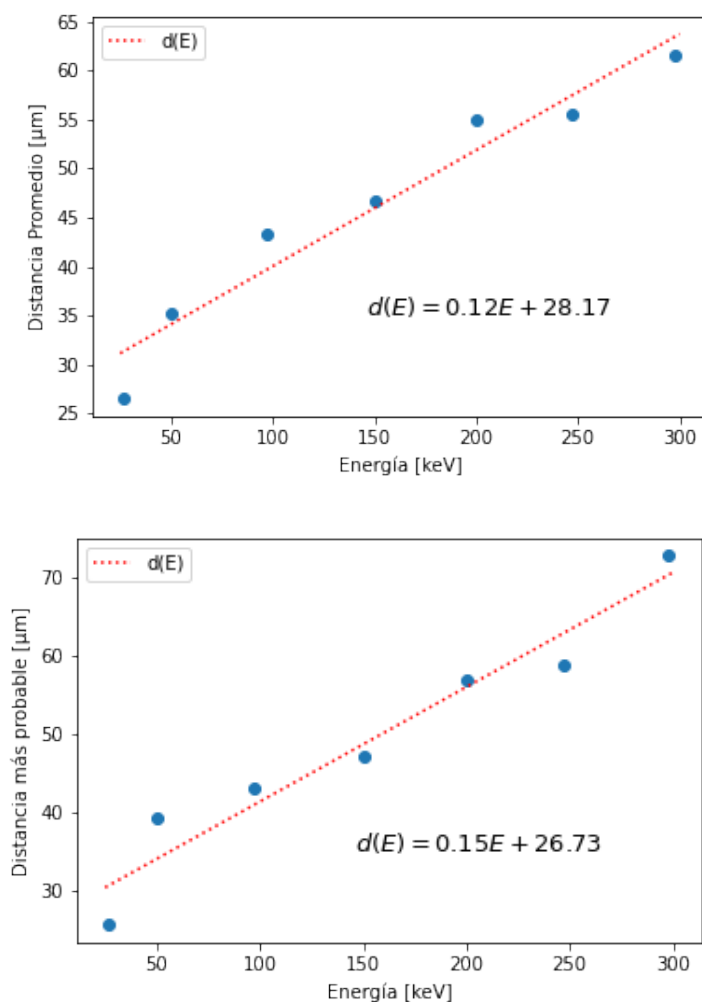


Figura 4-15: En estas dos figuras se puede ver el comportamiento de la distancia promedio y la distancia más probable de la distribución de los radicales libres en función de la energía inicial del fotón. Se realiza un ajuste lineal a los datos entregados por las simulaciones.

En la Fig. 4-14 se ve que debido a la capacidad del fotón de tener varias interacciones la distribución de las distancias tiende a agruparse cerca al rango máximo de distancias para cada interacción, por lo que la distribución se ve de forma más heterogénea. Por ejemplo en el histograma para energía inicial de fotón de 50 keV se distinguen a simple vista dos procesos de interacción Compton. Esto explica por qué la tendencia entre la energía depositada por el fotón y la distancia promedio en la Fig. 3-28 del capítulo anterior no es muy clara, ya que al ser posible varias interacciones cada electrón subsecuente puede tener una mayor o menor energía impartida por el fotón. De forma similar a lo hallado con los electrones se puede ver que hay una relación de proporcionalidad entre la energía inicial del fotón incidente y la distribución de las distancias de los radicales libres radioinducidos como se puede ver en la Fig. 4-15, donde se realiza un ajuste lineal a los datos.

4.4. Calibración de geles dosimétricos

En los capítulos anteriores se estudió el comportamiento de la interacción de la radiación con el gel y la subsecuente producción de radicales libres radioinducidos. Estos radicales libres luego polimerizan los monómeros que componen el gel. En este capítulo se hace uso de IRM como herramienta para la lectura de la dosis recibida en el gel a partir de la polimerización. Para poder obtener los valores de dosis absorbida en el gel polimérico se debe realizar la lectura del gel por IRM a través de una secuencia SE, para calcular los valores de T2 que corresponden a cada sección del gel. Estos valores de T2 deben ser luego relacionados con un valor de dosis absorbida, y para esto se construye una curva de calibración. A modo de ejemplo se exponen curvas de calibración obtenidas en trabajos previos [Fong et al., 2001] [Abril, 2016] que emplearon un tipo similar de gel. Aunque se mide el valor de T2 las calibraciones se realizan midiendo el parámetro $R2 = 1/T2$ para observar la relación directamente proporcional entre dosis y los cambios estructurales del gel dosimétrico.

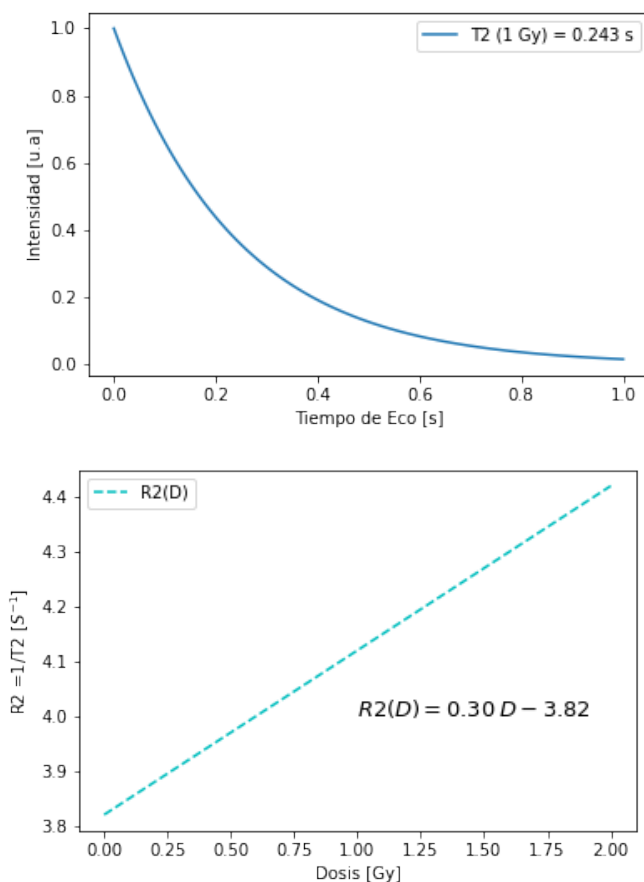


Figura 4-16: a) Curva de intensidad de señal con el valor de T2 correspondiente a una dosis absorbida de 1 Gy. b) Curva de calibración [Fong et al., 2001] que relaciona la dosis absorbida con un valor de $R2 = 1/T2$ para un gel dosimétrico irradiado mediante un acelerador lineal.

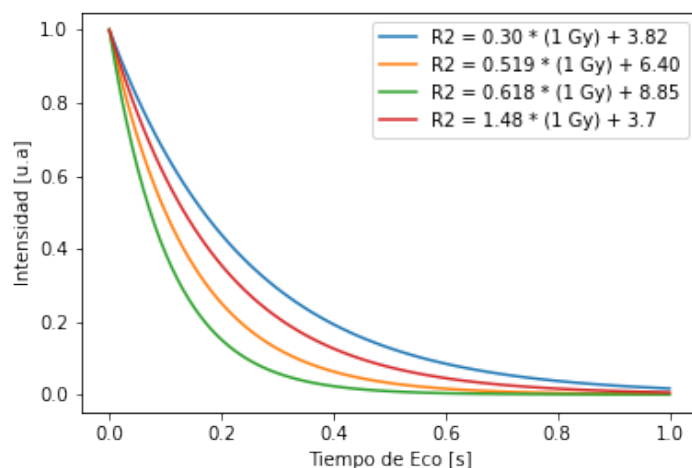


Figura 4-17: En esta figura se observan cuatro curvas de señal de intensidad. Cada señal corresponde a un valor de T2 hallado al evaluar cada función de calibración para dosis de 1 Gy.

Se tomaron varias calibraciones de estudios previos realizadas para geles dosimétricos [Abril, 2016] [Fong et al., 2001] y se comparó como se comportaría la señal de intensidad usando la ecuación en el caso en que fuese irradiado con una dosis de 1 Gy. Como se puede apreciar en la Fig. 4-17 el valor de R2 calculado para cada calibración en función de una dosis de 1 Gy entra como parámetro en la Eq. 2-9 y nos resulta en las distintas señales de decaimiento exponencial graficadas. La discrepancia de las señales obtenidas muestra por qué es importante obtener una curva de calibración previo al uso de un gel dosimétrico.

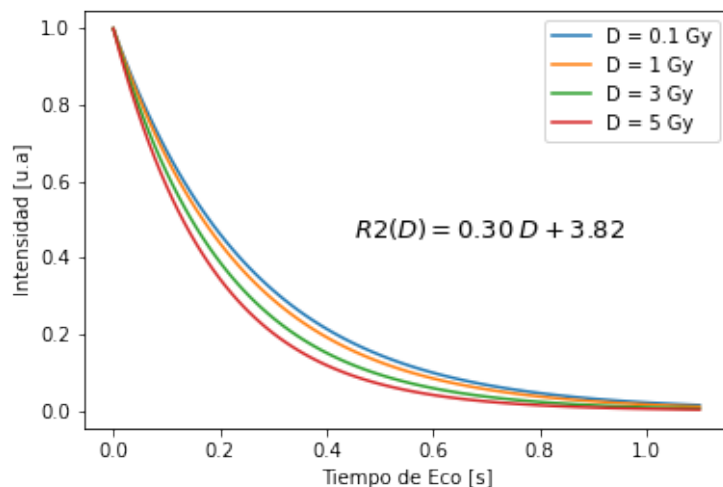


Figura 4-18: En esta figura se observan cuatro curvas de señal de intensidad. Cada señal corresponde a un valor de T2 hallado al evaluar la función de calibración $R2 = 0.30D + 3.82$ para varios valores de dosis absorbida.

Para analizar el comportamiento de la señal para varias dosis absorbidas se tomó la función de calibración $R2(D) = 0.30D - 3.82$ y en la Fig. 4-18 se puede ver como sería la señal de decaimiento exponencial en función de los distintos valores de T2 que entrega la calibración para cada valor de dosis. Se puede apreciar que para dosis mayores de 1 Gy las diferencias de dosis son más visibles en la curva de señal que para valores de dosis menores a 1 Gy. Esto también se puede apreciar en la Fig. 4-19 donde se hace uso de una segunda función de calibración $R2 = 0.519D - 6.40$. Se puede ver como la capacidad de distinguir las señales disminuye al usar esta segunda función de calibración.

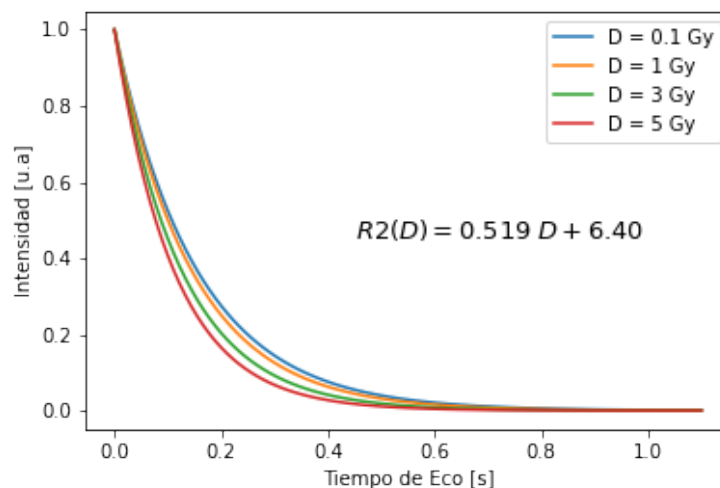


Figura 4-19: En esta figura se observan cuatro curvas de señal de intensidad. Cada señal corresponde a un valor de T2 hallado al evaluar la función de calibración $R2 = 0.519D - 6.40$.

4.4.1. Secuencias de IRM

Mediante la secuencia de SE, con los subsecuentes radiopulsos de 90° , podemos obtener la curva de decaimiento de la magnetización transversa de una muestra. El TE es el intervalo de tiempo que sucede entre cada radiopulso. De esta forma el TE está relacionado con el muestreo de la señal de decaimiento obtenida mediante IRM. Para mejorar la resolución de las dosis leídas se debe intentar maximizar la diferencia resultante en las señales medidas al entregar distintas dosis en el gel. Para este fin se puede ver en la Fig. 4-20 el comportamiento de la diferencia entre las curvas de señal para dosis de 1 Gy y 5 Gy siguiendo la curva de calibración $R2(D) = 0.30D - 3.82$. El TE a usar se encuentra optimizando la diferencia entre las curvas que se puede ver graficada a la derecha en esta figura. De esta forma el TE óptimo hallado para diferencias del orden de 10^0 Gy es de $TE_{max} = 0.21$ s. Para diferencias menores de 10^{-1} Gy el $TE_{max} = 0.26$ s aunque se puede ver que las dos curvas se sobrepone de tal forma que es muy difícil distinguir ambas dosis.

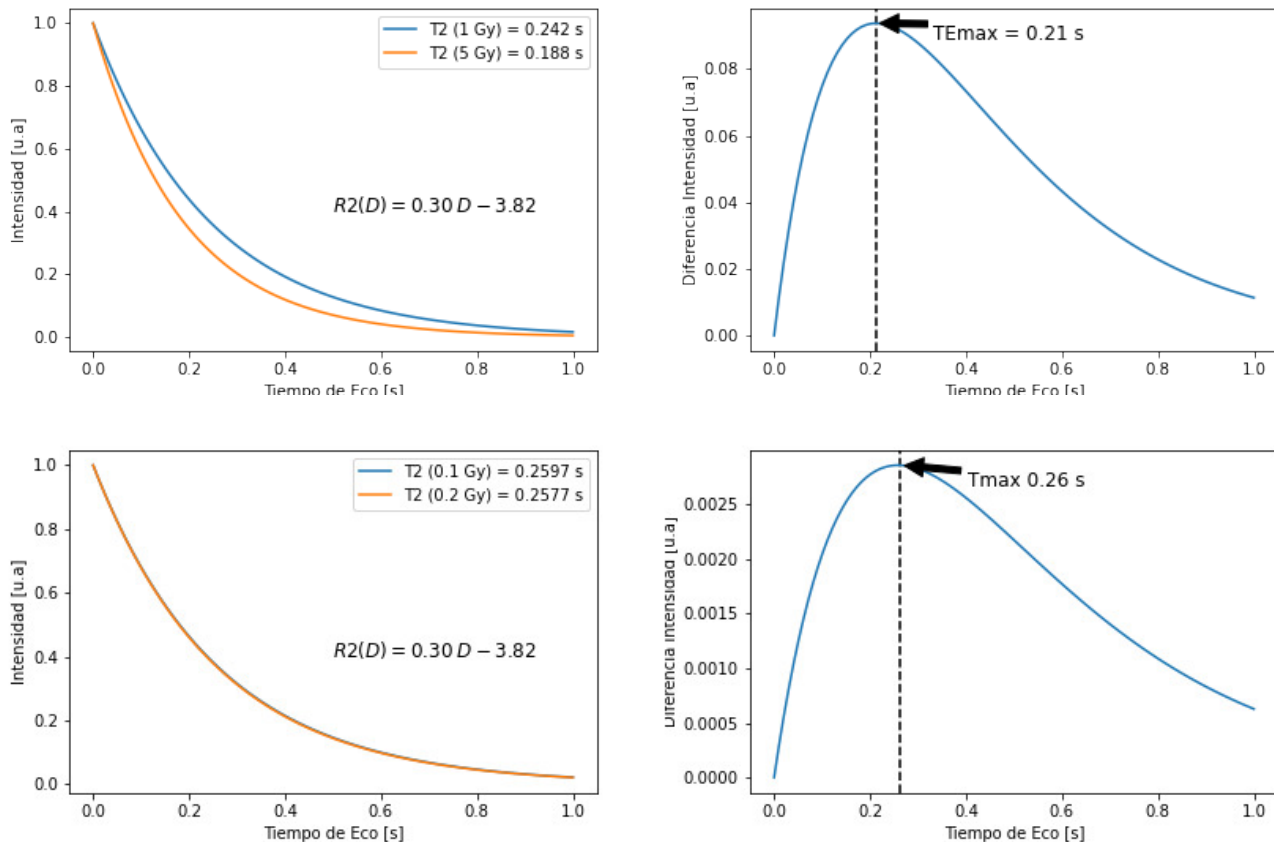


Figura 4-20: superior: Se encuentra el TE_{max} para la diferencia que dan dos valores de dosis, 1 Gy y 5 Gy siguiendo la curva de calibración $R2(D) = 0.30D - 3.82$. El TE_{max} es de 0.21 s. **inferior:** Se escogen valores más pequeños de dosis y se puede ver que se disminuye de forma significativa la diferencia apreciable entre las curvas.

4.4.2. Calibración experimental de gel dosimétrico

Este análisis se realizó en el marco del proyecto de investigación de la Facultad de Ciencias de la PUJ con ID:20000, en conjunto con el trabajo *Estudio de dosis en imagen cardiaca de medicina nuclear a través de gel polimérico e IRM* [Gómez, 2021]. Para este procedimiento se usaron 14 tubos que contenían gel dosimétrico tipo BANG fabricado en laboratorio, los tubos fueron nombrados de acuerdo a la Tabla. 4-1 siendo del 1-9 irradiados usando una fuente de ^{99m}Tc entregando dosis que van hasta los $70 \mu\text{Gy}$. Las imágenes adquiridas mediante IRM representan un grupo de tubos obteniendo una imagen para cada TE por corte. Mediante el software IMAGE J se puede medir la señal de intensidad como el valor promedio de intensidad en una región de interés (ROI) de la imagen. Realizando estas medidas en la imagen para cada tubo a distintos TE se puede obtener una curva de decaimiento de señal con la cual hallar los valores de T2 correspondientes como se ve en la Fig. 4-21.

Tabla 4-1: Irradiación de los tubos de calibración

Tubo	1	2	3	4	5	6	7	8	9
$t_{exp}(min)$	6.00	12.51	18.00	24.01	30.00	36.50	42.18	48.00	54.00
$D(\mu\text{Gy})$	7.90	17.00	23.90	32.30	40.10	48.10	56.10	63.20	71.10
$A(\text{MBq})$	203.73	201.07	199.09	196.81	194.56	192.30	190.02	187.95	185.80

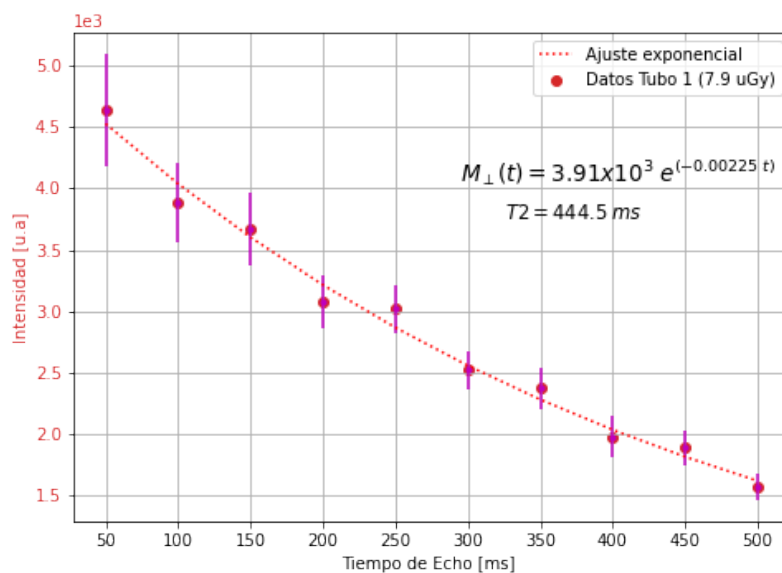


Figura 4-21: Esta figura muestra el decaimiento de la intensidad de la señal medida mediante IRM para un ROI del tubo 1 el cuál recibió $7.9 \mu\text{Gy}$ de dosis. Realizando el ajuste exponencial a los datos se halla el valor de $T_2 = 444.5 \text{ ms}$.

De esta forma se pueden obtener los valores de $R_2 = 1/T_2$ correspondientes a diferentes cantidades de dosis entregada en cada tubo, y con esta información se ajusta una curva de calibración $R_2(D) = 0.0057 (0.0019) D + 2.331(0.083)$ como se puede ver en la Fig. 4-22.

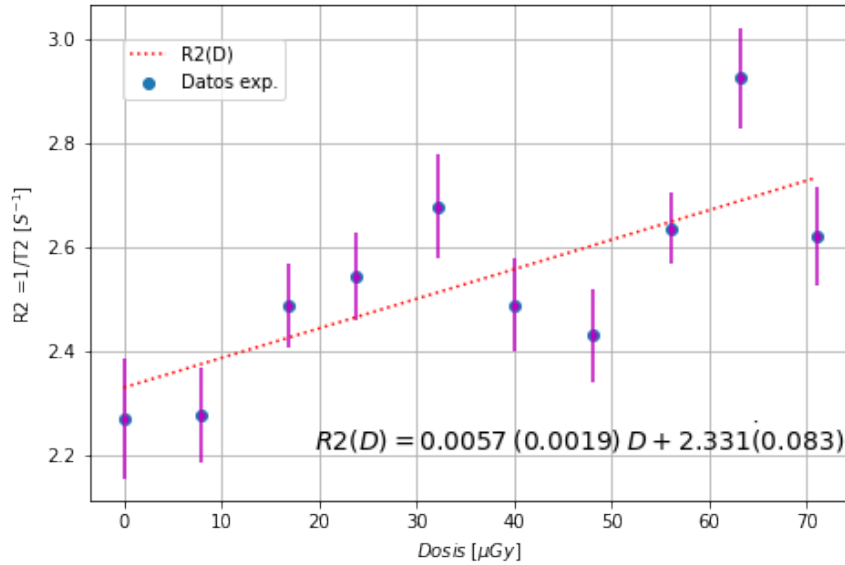


Figura 4-22: En esta figura se muestra la curva de calibración resultante del ajuste lineal a los valores de los $R2 = 1/T2$ medidos para cada tubo en función de su correspondiente dosis entregada.

Se puede entonces realizar el mismo procedimiento descrito en la sección 4.4 para la curva de calibración hallada. En la Fig. 4-23 se puede ver la sensibilidad de resolución entre curvas de decaimiento que tienen como parámetro exponencial distintos valores de $T2$ relacionados mediante la curva de calibración con distintos valores de dosis. La diferencia resultante entre señales es mínima y por esto es importante hallar el TE óptimo para maximizar diferencias.

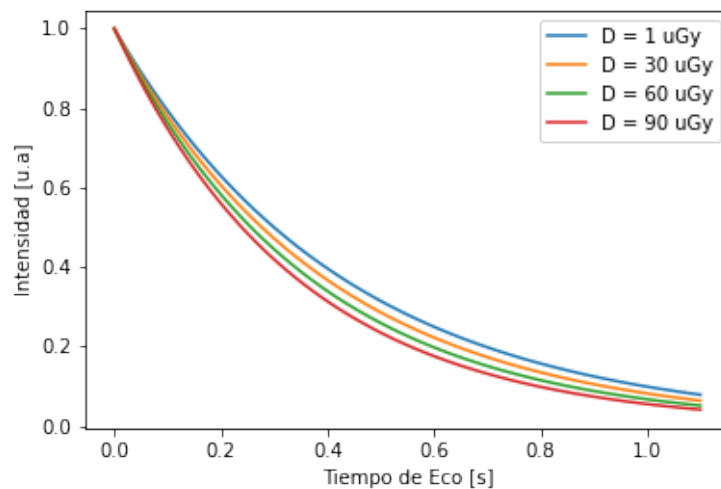


Figura 4-23: Se observan cuatro curvas de señal de intensidad, cada señal corresponde a un valor de $T2$ hallado al evaluar la función de calibración $R2(D) = 0.0057 (0.0019) D + 2.331(0.083)$.

Se realiza también el mismo proceso para escoger el parámetro de TE de la secuencia de IRM, esto mejoraría la resolución de las dosis leídas al maximizar la diferencia resultante en las señales obtenidas para distintas dosis en el gel. Para este fin se ve en la Fig. 4-24 el comportamiento de la diferencia entre las curvas de señal para distintas dosis de $30 \mu Gy$ y $60 \mu Gy$ siguiendo la curva de calibración hallada $R2(D) = 0.0057(0.0019) D + 2.331(0.083)$. Para este caso el TE óptimo calculado es de $TE_{max} = 0.39$ s. Así que el tiempo de eco óptimo calculado para esta diferencia es mayor que el TE óptimo calculado anteriormente para otras curvas de calibración empleadas en el rango de altas dosis.

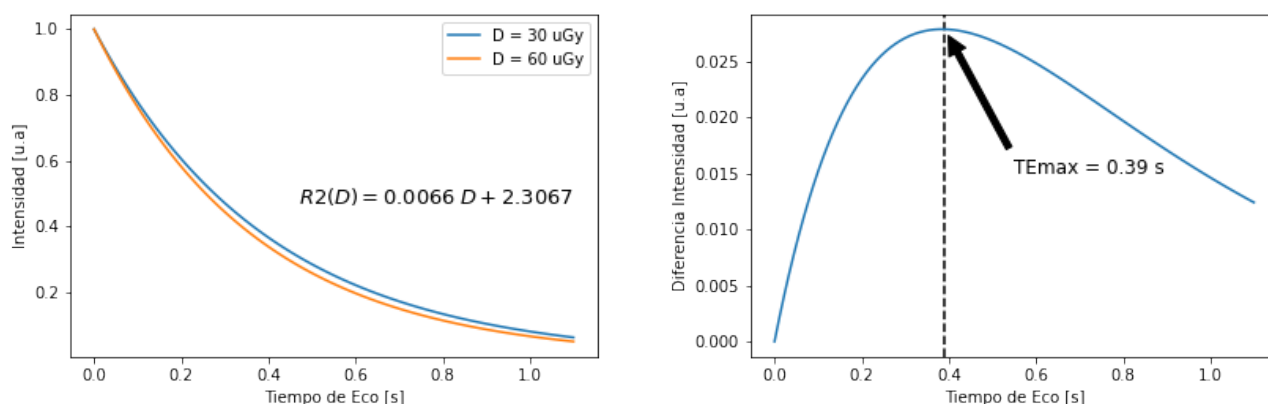


Figura 4-24: Se ve en esta figura curvas de decaimiento de la intensidad para dos valores de dosis: $30 \mu Gy$ y $60 \mu Gy$. El tiempo de eco TE_{max} es el tiempo óptimo en el cual la diferencia es máxima para esta calibración, para esta diferencia se encuentra $TE_{max} = 0.39$ s.

Vale la pena resaltar que estas dosis (del orden de $10 \mu Gy$) son muy bajas si se compara con los valores usados en radioterapia (10^6 veces más pequeño que 10 Gy). Por lo que realizando esta calibración se puede tener una resolución en el rango de bajas dosis que permite distinguir intervalos de dosis mucho más pequeños que con las calibraciones revisadas de estudios anteriores, las cuales se centraban en un rango de dosis de $[2Gy - 20Gy]$.

5 Conclusiones y recomendaciones

5.1. Conclusiones

1. En la Sección [3.2](#) se describe el experimento que permite determinar el grosor óptimo para que el gel sea usado como dosímetro. Se observa en la Fig. [3-14 b\)](#) como cambia la deposición de dosis en función de la densidad al variar el espesor del material, y en las Fig. [3-16](#) y Fig [3-17](#) se ven las diferencias en los perfiles de dosis en función de la densidad para una región superficial del sustrato y una región más profunda. Se resalta que para una forma cúbica con lados de 5 cm la dosis absorbida aumenta al aumentar la densidad solo para espesores menores a aproximadamente 2 cm. Se concluye que al escoger una geometría del volumen de gel, el espesor es un parámetro importante a tener en cuenta ya que al disminuir el espesor a un valor de 2 cm (y a su vez el volumen total del gel) se puede calcular una densidad del gel que optimiza la dosis absorbida.
2. La curva representada en Fig. [3-18](#) describe la dosis absorbida en función de la densidad y se encuentra que valores de densidad alrededor de 1.50 g/cm^3 podrían optimizar la dosis absorbida. Este valor de densidad se puede relacionar a un valor de porcentaje de gelatina en la composición del gel. Haciendo un ajuste más detallado en la Fig. [4-3 a\)](#) se encuentra que alrededor de 9.27 % de gelatina en el gel optimiza la dosis absorbida. Esto concuerda con resultados de estudios previos [\[Luci et al., 2007\]](#) de sensibilidad a la dosis en función del porcentaje de gelatina en el gel (alrededor de 9%).
3. Al usar las librerías de microdosimetría GEANT4-DNA se pudo analizar la distribución espacial de los radicales libres radioinducidos. La localización de los radicales libres dan una idea de la localización de los procesos de polimerización en el gel, y esto a su vez da una idea de la resolución espacial de la dosis leída. Se puede ver en la Fig. [4-11](#) como al aumentar la densidad del material la distancia más probable entre los radicales libres y su electrón generador disminuye. De estos resultados se puede concluir que aumentar la densidad del gel puede mejorar la resolución espacial de la dosis leída. Esto se da porque se localiza la distribución espacial de los radicales libres generados, así que los procesos de polimerización suceden más cerca al lugar donde se deposita la dosis.
4. Para medir los valores de T2 en la muestra del gel se emplean IRM, las cuales usan una secuencia de espín-eco con varios radiopulsos separados por un TE. Se realizó al análisis de las diferencias en las señales de decaimiento exponencial al usar distintos

valores de T2 relacionados mediante la curva de calibración con las dosis entregadas al gel. Como se ve en la Fig. [4-24](#) el tiempo de eco óptimo hallado para optimizar las diferencias entre curvas de decaimiento exponencial siguiendo la calibración experimental del gel fue 0.39 s, siendo mayor que los tiempos de eco para calibraciones en el rango de alta dosis, por ejemplo 0.21 s para $(T2)^{-1} = 0.30D - 3.82$ como se ve en la Fig. [4-20](#).

5. Conociendo la estructura del gel se puede mejorar los mecanismos de medida del mismo, lo cual contribuye al uso de la dosimetría en gel en condiciones que no han sido típicamente estudiadas: usando fuentes gamma y con bajos niveles de dosis medida (inferior a 1 Gy) por ejemplo en áreas de radio diagnóstico en medicina nuclear. Estos parámetros físicos estudiados (como lo son la densidad y el espesor) pueden tenerse en cuenta en la fabricación del gel para optimizar la dosis absorbida y mejorar la resolución espacial de la distribución de dosis medida en el gel bajo estas condiciones.

5.2. Recomendaciones

Los resultados obtenidos de las simulaciones permiten hacer las siguientes recomendaciones:

Las simulaciones Monte Carlo requieren de un intenso uso de procesamiento en el computador por lo que se debe tener en cuenta la cantidad de eventos a simular, bajo el criterio de poder obtener la estadística suficiente para realizar los análisis posteriores. La estadística resultante de las simulaciones en GEANT-4 usando 10^8 eventos tienen un comportamiento tal que la incertidumbre es tres ordenes de magnitud menor que el resultado (resultado en μGy e incertidumbre en $picoGy$). El tiempo requerido fue de 142 minutos por lo que en promedio el tiempo por evento para un procesador Intel Core i7 es de 8.5×10^{-5} segundos/evento. Así que para mejorar la estadística se podría: aumentar el poder de procesamiento (ej: mediante un clúster), paralelizar la simulación o aumentar los tiempos de simulación a más de dos horas y media por simulación.

Para las simulaciones realizadas de deposición de dosis se usó una geometría cúbica, por lo que se vió que al variar el parámetro de espesor cambiaba el comportamiento de la dosis absorbida total en el gel en función de la densidad. Para futuros estudios se puede investigar distintas geometrías (tubos, esferas, anatómicos) y el impacto de variar sus dimensiones en la relación entre dosis absorbida y su composición. Sería también pertinente indagar en otras composiciones de geles dosimétricos (BANG-3, MAGIC, MAGAT) y ver el impacto que puede tener una diferente formulación en la dosis absorbida del gel, teniendo en cuenta que esto cambia la composición elemental del mismo.

En el estudio de microdosimetría mediante GEANT4-DNA se pudo obtener información de la distribución espacial de los radicales libres radioinducidos luego de su primera reacción entre ellos. El programa también tiene la capacidad de entregar las diferentes especies químicas y sus reacciones, como también la posición de los reactantes, productos y los tiempos en que ocurren. Por lo que podría ser de interés ahondar en la distribución de las distintas especies de radicales libres que se generan, ya que la reactividad química de cada especie es diferente y por consecuencia varía la capacidad del radical para iniciar las interacciones con los compuestos responsables de formar las cadenas de polímero en el gel.

También se puede recomendar para trabajos futuros el estudio más detallado de las reacciones químicas que parten de la interacción entre el radical libre y el monómero radiosensible, desde donde inician los procesos de polimerización que cambian la estructura del gel. Estudiar estos procesos permitiría conocer más a fondo el impacto de la distribución de los radicales libres radioinducidos en el gel, y por lo tanto permitiría estudiar nuevos parámetros químicos (como saturación de oxígeno, concentración de monómeros, estabilizantes de pH, tipo de matriz de gelatina) para así progresar en el entendimiento del uso de geles poliméricos en condiciones de baja dosis.

Bibliografía

- [Abril, 2016] Abril, A. (2016). Mri- detector hybrid system.
- [Agostinelli et al., 2003] Agostinelli, S., Allison, J., Amako, K. a., Apostolakis, J., Araujo, H., Arce, P., Asai, M., Axen, D., Banerjee, S., Barrand, G. ., et al. (2003). Geant4—a simulation toolkit. *Nuclear instruments and methods in physics research section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, 506(3):250–303.
- [Bäck, 1998] Bäck, S. Å. J. (1998). Implementation of mri gel dosimetry in radiation therapy.
- [Baldock et al., 2010] Baldock, C., De Deene, Y., Doran, S., Ibbott, G., Jirasek, A., Lepage, M., McAuley, K. B., Oldham, M., and Schreiner, L. J. (2010). Polymer gel dosimetry. *Physics in Medicine and Biology*, 55(5).
- [Berger and Hubbell, 1987] Berger, M. J. and Hubbell, J. (1987). Xcom: Photon cross sections on a personal computer. Technical report, National Bureau of Standards, Washington, DC (USA). Center for Radiation
- [Brown et al., 2014] Brown, R. W., Cheng, Y.-C. N., Haacke, E. M., Thompson, M. R., and Venkatesan, R. (2014). *Magnetic resonance imaging: physical principles and sequence design*. John Wiley & Sons.
- [De Deene, 2004] De Deene, Y. (2004). Essential characteristics of polymer gel dosimeters. 3:34–57.
- [De Deene et al., 2000] De Deene, Y., Hanselaer, P., De Wagter, C., Achten, E., and De Neve, W. (2000). An investigation of the chemical stability of a monomer/polymer gel dosimeter. *Physics in Medicine & Biology*, 45(4):859.
- [Donohoe et al., 2003] Donohoe, K. J., Brown, M. L., Collier, B., et al. (2003). Society of nuclear medicine procedure guideline for bone scintigraphy. *Bone Scintigraphy*, 205:209.
- [Eckhardt et al., 1987] Eckhardt, R., Ulam, S., and Von Neumann, J. (1987). the monte carlo method. *Los Alamos Science*, (15):131.
- [Fong et al., 2001] Fong, P. M., Keil, D. C., Does, M. D., and Gore, J. C. (2001). Polymer gels for magnetic resonance imaging of radiation dose distributions at normal room atmosphere. *Physics in Medicine & Biology*, 46(12):3105.

- [Gear et al., 2006] Gear, J., Flux, G., Charles-Edwards, E., Partridge, M., Cook, G., and Ott, R. (2006). The application of polymer gel dosimeters to dosimetry for targeted radionuclide therapy. *Physics in Medicine & Biology*, 51(14):3503.
- [Gómez, 2021] Gómez, S. L. (2021). Estudio de dosis en imagen cardiaca de medicina nuclear a través de gel polimérico e irm.
- [Hubbell and Seltzer, 1995] Hubbell, J. H. and Seltzer, S. M. (1995). Tables of x-ray mass attenuation coefficients and mass energy-absorption coefficients 1 keV to 20 MeV for elements $Z=1$ to 92 and 48 additional substances of dosimetric interest. Technical report, National Inst. of Standards and Technology-PL, Gaithersburg, MD (United
- [Ibbott, 2006] Ibbott, G. S. (2006). Clinical applications of gel dosimeters. *Journal of Physics: Conference Series*, 56(1):108–131.
- [Incerti et al., 2010] Incerti, S., Baldacchino, G., Bernal, M., Capra, R., Champion, C., Francis, Z., Guèye, P., Mantero, A., Mascialino, B., Moretto, P., et al. (2010). The geant4-dna project. *International Journal of Modeling, Simulation, and Scientific Computing*, 1(02):157–178.
- [Jirasek and Duzenli, 2001] Jirasek, A. and Duzenli, C. (2001). Effects of crosslinker fraction in polymer gel dosimeters using FT-Raman spectroscopy. *Physics in Medicine & Biology*, 46(7):1949.
- [Kane and Davis, 2020] Kane, S. M. and Davis, D. D. (2020). Technetium-99m. *StatPearls [Internet]*.
- [Levitt, 2008] Levitt, M. H. (2008). *Spin dynamics: basics of nuclear magnetic resonance*. John Wiley & Sons.
- [Luci et al., 2007] Luci, J., Whitney, H., and Gore, J. (2007). Optimization of magic gel formulation for three-dimensional radiation therapy dosimetry. *Physics in Medicine & Biology*, 52(10):N241.
- [McJury et al., 2000] McJury, M., Oldham, M., Cosgrove, V., Murphy, P., Doran, S., Leach, M., and Webb, S. (2000). Radiation dosimetry using polymer gels: methods and applications. *The British Journal of Radiology*, 73(873):919–929.
- [Sandev, 2010] Sandev, T. (2010). Monte Carlo simulation of buildup factors for single and multi-layer shields by using penelope code. In *CONFERENCE ON MEDICAL PHYSICS AND BIOMEDICAL ENGINEERING*, page 72.
- [Seco and Verhaegen, 2013] Seco, J. and Verhaegen, F. (2013). *Monte Carlo techniques in radiation therapy*. CRC press.

-
- [Shani, 2000] Shani, G. (2000). *Radiation dosimetry instrumentation and methods*. CRC press.
- [Taylor et al., 2009] Taylor, M., Franich, R., Trapp, J., and Johnston, P. (2009). A comparative study of the effect of calibration conditions on the water equivalence of a range of gel dosimeters. *IEEE Transactions on Nuclear Science*, 56(2):429–436.
- [Turner, 2008] Turner, J. E. (2008). *Atoms, radiation, and radiation protection*. John Wiley & Sons.
- [Watanabe et al., 2017] Watanabe, Y., Warmington, L., and Gopishankar, N. (2017). Three-dimensional radiation dosimetry using polymer gel and solid radiochromic polymer: From basics to clinical applications. *World Journal of Radiology*, 9(3):112.