



**UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL
ESTADO DE MÉXICO**



FACULTAD DE CIENCIAS

**“CÁLCULOS MONTE CARLO DE LA EFICIENCIA RELATIVA DE
DOSÍMETROS TERMOLUMINISCENTES USANDO MODELOS
MICRODOSIMÉTRICOS”**

MODALIDAD

(TESIS POR ARTICULOS ESPECIALIZADOS)

QUE PARA OBTENER EL GRADO DE:

DOCTOR EN CIENCIAS

P R E S E N T A:

M. en C. BENJAMÍN LEAL ACEVEDO

DIRECTOR DE TESIS:

Dr. Pedro Guillermo Reyes Romero

Dra. María Isabel Gamboa de Buen

TOLUCA, ESTADO DE MÉXICO

2022

Índice

	Página
Carta de voto aprobatorio	1
Carta de solicitud de Jurado	2
Anteproyecto de investigación	4
Cronograma de actividades	8
Artículo	
“Effect of the Target Size in the Calculation of the Energy Deposited Using PENELOPE Code”	9
Artículo	
“Dose distribution calculation with MCNP code in a research irradiator”	13
Discusión general	18
Conclusiones	26
Bibliografía	28

ANTEPROYECTO DE INVESTIGACIÓN

Título:

Cálculos Monte Carlo de la eficiencia relativa de dosímetros termoluminiscentes usando modelos microdosimétricos

Presenta:

**M en C Benjamín Leal Acevedo
Aspirante para ingresar al Doctorado en Ciencias**

Tutores académicos:

Dra. María Isabel Gamboa de Buen (ICN-UNAM)

Dr. Fermín Castillo Mejía (ICN-UNAM)

Dr. Pedro Guillermo Reyes Romero (FC-UAEMex)

Introducción

Los dosímetros termoluminiscentes (TLD) son ampliamente utilizados en aplicaciones médicas, industriales, monitoreo ambiental, investigaciones en el espacio, etc. donde las características como tamaño pequeño, alta sensibilidad, número atómico efectivo cercano al agua lo hacen de un sistema de detección óptimo.

Los TLD son materiales cristalinos que contienen impurezas, del orden de partes por millón, que pueden asociarse a trampas, centros luminiscentes o ambos, en donde son atrapados los electrones y huecos liberados durante su exposición a la radiación ionizante. Tales portadores de carga pueden ser liberados de la estructura cristalina mediante calentamiento. La relación entre portadores de carga y su liberación fue establecida en 1945 por Randal-Wilkins. El TLD más utilizado es el LiF con dopantes como Mg, Ti, Cu, P.

Una característica importante de los TLD es la eficiencia intrínseca, pues sólo una parte de la dosis absorbida en el TLD es emitida como luz cuando se calienta el material. El cociente entre la respuesta termoluminiscente (RTL) del TLD por unidad de masa entre la dosis absorbida en el dosímetro se conoce como eficiencia termoluminiscente intrínseca. Para el caso del LiF (TLD-100) tal valor es del orden de 0.4%.

La teoría de cavidad de Burlin establece una relación entre dos medios homogéneos, con condiciones bien definidas, mediante la cual la dosis medida en un medio puede servir para determinar la dosis en el otro. Teniendo en cuenta que se pueden realizar mediciones, con un dosímetro, del kerma en aire en un punto determinado del campo de radiación bajo las condiciones establecidas, es posible determinar la dosis recibida en la cavidad de interés.

Actualmente varios grupos de investigación se dedican a comprender los mecanismos mediante los cuales las radiaciones ionizantes interaccionan con las estructuras cristalinas de los TLD para luego relacionar las señales obtenidas con la energía depositada en el cristal. La eficiencia relativa requiere del conocimiento de la respuesta relativa definida como la RTL por unidad de kerma en aire medida para la radiación de interés entre el mismo cociente obtenido para una radiación de referencia.

Para calcular la eficiencia relativa se usa la microdosimetría que investiga el depósito de la energía de la radiación ionizante a nivel microscópico, en objetos de dimensiones que van desde alrededor de 1 nm a 10 micras. En microdosimetría, se define un volumen de interés (volumen blanco), donde se consideran los eventos de depósito de energía por una partícula ionizante. En el dosímetro irradiado la distribución de la energía depositada en diferentes volúmenes no es uniforme ya que la energía de la radiación se transfiere a la materia en forma de eventos discretos espacialmente correlacionados, como ionizaciones y excitaciones. La energía depositada en el volumen blanco durante un solo evento, normalizada por la masa, se llama la energía específica, z , (análogo estocástico de la dosis absorbida) y la normalizada por la longitud promedio de la cuerda del volumen sensible se llama energía lineal, y . Como z e y son magnitudes estocásticas, se utilizan las distribuciones de frecuencias y de energía específica de un evento simple.

Antecedentes

Si se sigue de manera general la idea de los libros especializados en dosimetría o física de radiaciones, no se esperarían diferencias entre las respuestas energéticas de los TLD LiF:Mg,Ti y LiF:Mg,Cu,P. Sin embargo, los datos experimentales muestran diferencias en el intervalo de energía de fotones de 20 a 250 keV, teniéndose que la microdosimétrica brindó explicaciones coherentes en función de la densidad promedio de ionización en blancos de 24 micras de espesor.

Para radiación de baja LET (fotones y electrones), los modelos microdosimétricos han sido desarrollados y aplicados para calcular la respuesta como función de la dosis, la respuesta como función de la energía del haz incidente y la eficiencia relativa de dosímetros TL (LiF:Mg,Ti) después de su exposición a rayos X y gamma de diferente calidad, explicando la discrepancia entre la respuesta medida y calculada de tales detectores.

Se ha visto que disminuir el diámetro del blanco de LiF de 40 a 8 nm produce un incremento en la energía promedio específica de 50 a 3040 Gy, pasando de la parte supralineal a la región de saturación, donde la energía depositada es perdida en parte en producción de la señal TL disminuyendo la eficiencia relativa. Procedimientos similares pueden aplicarse para predecir la respuesta en energía del detector LiF:Mg,Ti en un campo de fotones.[1-3]

Para rayos X de baja energía se producen trazas pequeñas de electrones que depositan de manera local una alta dosis lo que conlleva a una respuesta supralineal, que no se ha visto en LiF:Mg,Ti sensibilizados, donde no se cuenta con respuesta supralineal después de irradiarlos con rayos gamma a dosis mayores que 1Gy. Al utilizar las curvas medidas de la RTL como función de la dosis para el LiF después de ser irradiado con gammas y los cálculos de dosis locales obtenidas con simulaciones Monte Carlo ha sido posible predecir la eficiencia relativa para rayos X de diferentes energías.[4]

Motivación

Varios grupos alrededor del mundo se han dedicado a estudiar la respuesta relativa de los dosímetros termoluminiscentes irradiados con partículas cargadas pesadas, electrones y fotones. Encontrando que en caso de las partículas con carga son generadas trayectorias en la dirección inicial que producen electrones secundarios responsables del depósito de energía de manera local. En el caso de los fotones se supone un campo homogéneo que permita irradiar el volumen completo, para este caso se necesita encontrar un equivalente de la distribución radial de dosis utilizada con partículas con carga. En el estudio a niveles microscópicos se conoce a dicha función como la distribución de frecuencias de energía específica. De la literatura consultada se ve claramente que hacen falta estudios en el campo de la microdosimetría empleando haces de fotones a diferentes energías. Por ello el objetivo central del trabajo versa sobre la simulación de materiales termoluminiscentes y su respuesta a diferentes campos de radiación ionizante.

Objetivo General

Estudiar la respuesta de dosímetros termoluminiscentes expuestos a rayos X de baja energía, para entender los procesos microscópicos de interacción de los fotones con la materia.

Objetivos particulares

1. Calcular la dosis impartida al dosímetro y el kerma en aire en el seno de aire por los haces de fotones utilizados en el experimento, simulando las condiciones experimentales en las que se realizaron las medidas.
2. Calcular la respuesta relativa como función de la energía efectiva.
3. Calcular la distribución de energía en las regiones de nm o micras en las que se divide un dosímetro.

4. Calcular la eficiencia relativa como función de la energía usando un modelo microdosimétrico.
5. Comparar los resultados experimentales con los cálculos Monte Carlo para determinar si el modelo microdosimétrico explica la respuesta y eficiencia relativas para los materiales dosimétricos estudiados.

Material e infraestructura

Para el desarrollo del proyecto se cuenta con los programas MCNP 4B y PENELOPE basados en código Monte Carlo. Para la parte de la simulación de la respuesta relativa, se cuenta con acceso a un servidor del mismo instituto dedicado a la simulación con varios programas con códigos Monte Carlo empleando varios núcleos que facilitan la carga de trabajo.

Referencias

- 1.-Olko, P., P. Bilski, et al. (2006). "On the relationship between dose-, energy- and LET-response of thermoluminescent detectors." *Radiation Protection Dosimetry* 119(1-4): 15-22
- 2.- Olko, P., P. Bilski, et al. (2006). "Microdosimetric modelling of the response of thermoluminescence detectors to low- and high-LET ionising radiation." *Radiation Protection Dosimetry* 122(1-4): 378-381
- 3.-Olko, P., P. Bilski, et al. (2002). "Microdosimetric interpretation of the photon energy response of LiF:Mg,Ti detectors." *Radiation Protection Dosimetry* 100(1-4): 119-122
- 4.-Davis, S., Ross, C., et al. (2003). "The response of LiF Thermoluminescence dosimeters to photon beams in the energy range from 30 kV X rays to Co-60 gamma rays" *Radiation Protection Dosimetry* 106(1): 33-43

Cronograma de Actividades

Actividad	Periodo
Investigación Bibliográfica	1er semestre
Análisis de los datos experimentales y generación de los archivos de entrada para los programas de simulación con código montecarlo.	2do semestre
Cálculo de la distribución de frecuencias de energías específicas, de la eficiencia relativa como función de la energía usando un modelo microdosimétrico.	3er y 4to semestres
Comparación de los datos obtenidos con los reportados en publicaciones internacionales. Presentación de avances en Congresos Nacionales e Internacionales	3er y 4to semestres
Redacción y envío de artículo a una revista especializada con arbitraje	5to semestre
Escritura y defensa de tesis.	6to semestre

M en C Benjamín Leal Acevedo

Vo. Bo.

Dr. Pedro Guillermo Reyes Romero

Dra. María Isabel Gamboa de Buen



Dr. Fermín Castillo Mejía

Discusión general

La mayoría de los dosímetros termoluminiscentes presentan efectos no lineales en su respuesta termoluminiscente (*RTL*) como función de la dosis como se muestra en la Figura 1 (McKeever 1995). En particular, el dosímetro de fluoruro de litio con impurezas de Mg y Ti (LiF:Mg,Ti) tiene una región de respuesta lineal, seguida de una supralineal y después de una sublineal conforme la dosis aumenta.

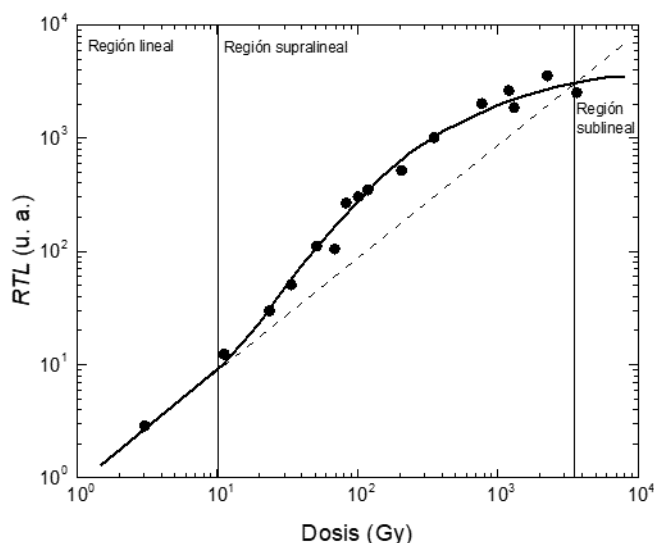


Figura 1 Respuesta termoluminiscente como función de la dosis del LiF:Mg,Ti . La curva discreta corresponde a una respuesta lineal. Adaptada de (McKeever 1995).

Durante la interacción de la radiación ionizante con la materia, los electrones liberados generan electrones secundarios alrededor de la trayectoria de la radiación incidente. A la región en la que se distribuyen los electrones se le denomina traza.

Cuando las dosis son bajas la energía absorbida en el blanco se debe a los electrones generados en la traza de un solo fotón en este caso la respuesta es lineal. Al aumentar la dosis las trazas de los fotones están más cerca de manera que a la energía absorbida también contribuye la energía depositada por electrones liberados en la traza de otros fotones, en este caso la respuesta es supralineal.

Respuesta y eficiencia relativas

A lo largo del tiempo se han realizado experimentos para analizar el comportamiento de la respuesta de los dosímetros termoluminiscentes como función de la energía efectiva del haz de rayos X que incide sobre ellos. Para el LiF:Mg,Ti se tiene que en el intervalo de energía entre 10 y 100 keV es muy notable la dependencia, teniéndose una respuesta relativa máxima de alrededor de 1.4 a una energía efectiva de ~ 30 keV.

La respuesta relativa, $S'(E)$, que es la respuesta por unidad de kerma en aire determinada para el haz de rayos X de energía efectiva E_{ef} dividida por la misma cantidad para una radiación de referencia, ref , se determina a partir de la relación (1).

$$S'(E) = \frac{\left(\frac{RTL}{K_{aire}}\right)_E}{\left(\frac{RTL}{K_{aire}}\right)_{ref}} \quad 1$$

donde RTL es la respuesta termoluminiscente del volumen sensible en la región de respuesta lineal y K_{aire} es el kerma en aire en el mismo volumen.

Para la determinación de la $S'(E)$ de LiF:Mg, Ti se han utilizado como radiación de referencia rayos gamma de Co-60 (Davis 2003) (González 2007) (Nunn 2008) (Tedgren 2011), rayos gamma de Cs-137 (Olkob 2006a) (Olkoc 2006b) (Carinou 2008) o rayos X de 4 MV (Das 1996) obtenida en la región de respuesta lineal,

Una aproximación teórica de la respuesta relativa se obtiene mediante el cociente de los coeficientes másicos de absorción de energía, $\left(\frac{\mu_{en}}{\rho}\right)$, del dosímetro, DTL , y el medio de interés, $aire$, para la radiación X con respecto al cociente obtenido para la radiación de referencia ref .

$$\mu'(E) = \frac{\left(\frac{\left(\frac{\mu_{en}}{\rho}\right)_{DTL}}{\left(\frac{\mu_{en}}{\rho}\right)_{aire}}\right)_X}{\left(\frac{\left(\frac{\mu_{en}}{\rho}\right)_{DTL}}{\left(\frac{\mu_{en}}{\rho}\right)_{aire}}\right)_{ref}} = \left(\frac{\left(\frac{\mu_{en}}{\rho}\right)_{DTL}}{\left(\frac{\mu_{en}}{\rho}\right)_{aire}}\right)_X \quad 2$$

Dado que el dosímetro no es puntual se puede considerar la atenuación del haz dentro de él multiplicando la ecuación 2 por:

$$k_{at} = \frac{1 - e^{-\left(\frac{\mu(E)}{\rho}\right)_{DTL} (\rho t)_{DTL}}}{\left(\frac{\mu(E)}{\rho}\right)_{DTL} (\rho t)_{DTL}}$$

Donde ρ y $(\rho t)_{DTL}$ son la densidad y el espesor másico del DTL

Entonces

$$\mu'(E) = \left(\left(\frac{\mu_{en}}{\rho} \right)_{DTL}^{DTL} \right)_{aire}^{ref} \left[\frac{1 - e^{-\left(\frac{\mu(E)}{\rho} \right)_{DTL} (\rho t)_{DTL}}}{\left(\frac{\mu(E)}{\rho} \right)_{DTL} (\rho t)_{DTL}} \right] \quad 3$$

La respuesta relativa simulada con códigos Monte Carlo se determina vía el cociente de la energía absorbida en el dosímetro, D_{DTL} , y el kerma en aire, K_{aire} , a partir de

$$\mu'_{MC}(E) = \frac{\left(\frac{D_{DTL}}{K_{aire}} \right)_X}{\left(\frac{D_{DTL}}{K_{aire}} \right)_{ref}} \quad 4$$

La eficiencia relativa, que es la magnitud que proporciona la respuesta intrínseca del dosímetro, está dada por:

$$\eta(E) = \frac{\left(\frac{RTL}{D_{DTL}} \right)_X}{\left(\frac{RTL}{D_{DTL}} \right)_{ref}} \quad 5$$

Experimentalmente se determina a partir de las ecuaciones 1 y 3, obteniendo

$$\eta(E) = \frac{S'(E)}{\mu'(E)} \quad 6$$

La eficiencia relativa se puede calcular con la convolución de la respuesta como función de la dosis medida, $R(z)$, para un haz de rayos gamma de ^{60}Co con la función de distribución por evento como función de la energía específica, $f_1(z)$, obtenida para regiones del orden de micras o nm, usando (Olkoa 2002):

$$\eta(E) = \frac{\frac{1}{z_F^i} \int_0^\infty R(z) f_1^i(z) dz}{\frac{1}{z_F^{ref}} \int_0^\infty R(z) f_1^{ref}(z) dz} \quad 7$$

donde $\overline{z_F^i}$ y $\overline{z_F^{ref}}$ son las energías específicas promedio por frecuencia para las calidades de haz de interés y de referencia.

La energía depositada en el volumen blanco durante un solo evento, normalizada por la masa, se llama la energía específica, z , (análogo estocástico de la dosis absorbida) y la normalizada por la longitud promedio de la cuerda del volumen sensible se llama energía lineal, y . Como

z y y son magnitudes estocásticas, se utilizan las funciones de distribución por evento y por dosis como función de la energía específica de un evento simple (Attix 2008).

Las funciones de distribución por evento y por dosis, $d_1(z)$, están relacionadas mediante (Kellerer 1975):

$$d_1(z) = \frac{z}{Z_F} f_1(z) \quad 8$$

Las funciones de distribución $f_1(z)$ y $d_1(z)$ se pueden determinar a través de medidas en vapor de agua y escalando a densidad 1 g/cm^3 o usando códigos Monte Carlo.

Se utilizan estructuras de dimensiones que van desde alrededor de 10 micras a 10 nm, definiendo un volumen de interés (volumen blanco), donde se consideran los eventos de depósito de energía por una partícula ionizante. En el dosímetro irradiado la distribución de la energía depositada en diferentes volúmenes no es uniforme ya que la energía de la radiación se transfiere a la materia en forma de eventos discretos espacialmente correlacionados, como ionizaciones y excitaciones.

Códigos Monte Carlo

Con la ventaja de contar con computadoras cada vez más veloces y con mayor capacidad de memoria es posible realizar simulaciones con estructuras complejas o con un número muy alto de partículas iniciales, del orden de 2×10^9 , lo que disminuye la incertidumbre en los registros obtenidos. El código Monte Carlo reproduce la fenomenología de la interacción del campo de radiaciones mediante las secciones eficaces diferenciales de interacción en cada una de las historias generadas. Los códigos dan seguimiento a cada interacción, calculando la energía transferida a los electrones y la absorbida en el medio, la deflexión angular del proyectil y la generación de partículas secundarias de las cuales también se registra la dirección y la energía transferida y absorbida para considerar su contribución en cada región del dosímetro. El primer programa utilizado es el MCNP (Monte Carlo Neutron-Transport) útil en el transporte de fotones, electrones, neutrones y combinaciones de ellos (Briesmeister 2000). El segundo programa implementado es el PENELOPE (Penetration and Energy Loss of Positrons and Electrons) el cual se enfoca en el transporte de electrones y fotones (Salvat 2008).

Monte Carlo es un código de transporte de propósito general, de energía continua, de geometría generalizada y dependiente del tiempo, el cual es acoplado al tratamiento de varias conjugaciones de partículas.

No resuelve la ecuación de transporte, en su lugar obtiene información del comportamiento promedio de la partícula, siguiéndola desde su inicio en la fuente hasta el fin de su recorrido en la simulación.

Proporciona la corriente, el flujo y/o la energía depositada por las partículas en un registro de salida normalizado por partícula inicial.

Es de extrema importancia recordar que los intervalos de confianza se refieren exclusivamente a la precisión del código y NO a la exactitud del resultado comparado con el valor físico esperado.

Ponderación de partícula inicial

Si el Monte Carlo simulara exactamente el transporte de la partícula desde el punto de vista físico, cada historia simulada representaría sólo una partícula física con ponderación unitaria. Lo que asigna el código es una ponderación W que representa el número de partículas de la fuente.

En lugar de simular W partículas físicas lo que se hace es simular una historia que represente esas W partículas. Pudiera entenderse que no es del todo una simulación exacta, sin embargo, el sentido de la simulación se conserva pues cada historia es un promedio estadístico.

El código Monte Carlo tiene dos modelos de interacción de fotones: simple y detallado.

En el modelo simple no se contempla la dispersión coherente de Thompson, mientras que el modelo detallado si se toma en cuenta. El modelo simple está diseñado, en principio, para fotones de alta energía, pero no es de utilidad para materiales de alto número atómico Z .

Los procesos involucrados son:

Efecto fotoeléctrico: tratado como absorción pura

Producción de pares: el fotón desaparece

Proceso Compton: el objetivo es conocer la energía del fotón dispersado y el ángulo de dispersión.

En el punto de la colisión se registra la energía depositada y la nueva dirección del fotón. La sección eficaz que toma en cuenta es la dada por Klein-Nishina.

Para el caso de electrones se toma en cuenta el cambio de energía en su trayectoria y se registra el cambio en energía determinado a partir del poder de frenado. La dispersión angular es tomada de la relación Goudsmit-Saunderson.

Radiación de frenado.

A cada subpaso del electrón el código revisa tablas de la probabilidad de producción de fotones y determina la generación de radiación de frenado. Para los electrones dispersados por electrones se utiliza la sección eficaz de Moller.

Para el análisis del transporte de las partículas secundarias, se requiere que la energía transferida sea mayor que una energía de corte.

Una vez analizada la probabilidad de generación de partículas secundarias, se asigna un valor aleatorio de dirección y se registra en los resultados.

1.1 Archivos de entrada de PENELOPE y MCNP

Como condición general, en ambos códigos es necesario un archivo de entrada que contenga la información geométrica del problema, los materiales a utilizar, la descripción del término fuente, los registros de salida y las técnicas de reducción de varianza.

Determinación de la función R(Z)

Se realizó una simulación MC en la que se calculó la distribución de dosis en el irradiador GammaBeam del ICN con el código MCNP y se comparó con medidas en un plano para determinar las posiciones dentro de la cámara de irradiación del GammaBeam en las que se colocaron los dosímetros termoluminiscentes con los que se determinó la respuesta como función de la dosis medida, $R(z)$ (ecuación 9), utilizada para obtener la eficiencia relativa dada por la ecuación 7 (Leal-Acevedob 2019).

Una vez validado el Monte Carlo se determinaron los tiempos de exposición y se irradiaron los dosímetros termoluminiscentes de LiF:Ti,Mg junto con dosímetro Fricke para determinar la dosis de manera precisa.

La función $R(Z)$ obtenida está dada por:

$$R(Z) = 0.36(1 - e^{-D/1000}) + 0.64 \left(1 - \left(1 + \frac{D}{180} \right) e^{-D/200} \right) \quad 9$$

Respuesta relativa

Para determinarla se utilizó el código PENELOPE, se consideró un paralelepípedo de LiF:Mg,Ti de $3 \times 3 \times 0.9$ mm³ sostenido en aire expuesto a un haz paralelo monoenergético de fotones. Como primer objetivo del proyecto se obtuvo la energía depositada en cubos con dimensiones de decenas de nm de arista que fueron simulados mediante celdas unitarias desplazadas en los 3 ejes coordenados. Para tener un comparativo de los resultados, se utilizaron los registros de la energía depositada por cubo por fotón [MeV] y la energía depositada por unidad de masa por cubo por fotón [MeV/g] (Briesmeister 2000) (Salvat 2008) para un intervalo de energía que va de 20 keV a 2 MeV.

Como primer paso se calculó la respuesta relativa para compararla con las mediciones realizadas para TLD-100 (LiF:Mg,Ti).

Después de definir los parámetros geométricos y del haz de rayos X en los archivos de entrada se calcularon la dosis absorbida en el TLD-100 y el kerma en aire para cada calidad de haz, se obtuvo la respuesta relativa usando la ecuación 4. Los resultados obtenidos se presentan en la Figura 2 junto con medidas experimentales y el cálculo analítico realizado con la ecuación 3.

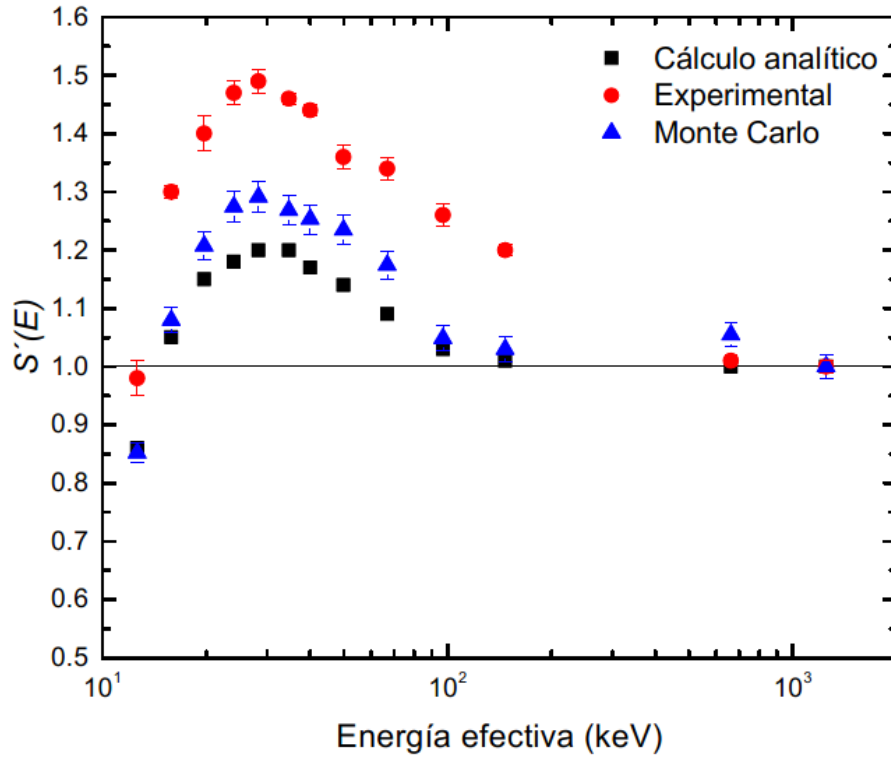


Figura 2 Respuesta relativa como función de la energía del haz de fotones calculada con el código PENELOPE y con la relación analítica y medida (Ixquiac-Cabrera 2013).

Funciones de distribución por evento

Una vez validada la simulación se realizó el cálculo de las energías lineal y específica (Leal-Acevedo 2018) demostrándose que la disminución de estas al aumentar el tamaño de blanco desde 20 nm hasta 1 μm no sigue un comportamiento geométrico. Esto puede deberse al efecto de los electrones secundarios que dejan el blanco sin depositar energía en los blancos más pequeños. En la Figura 3 se presentan las funciones de distribución por evento, $f_1^i(z)$, obtenidas para tamaños de blanco de 20 y 60 nm utilizadas para calcular la eficiencia relativa con la ecuación 7.

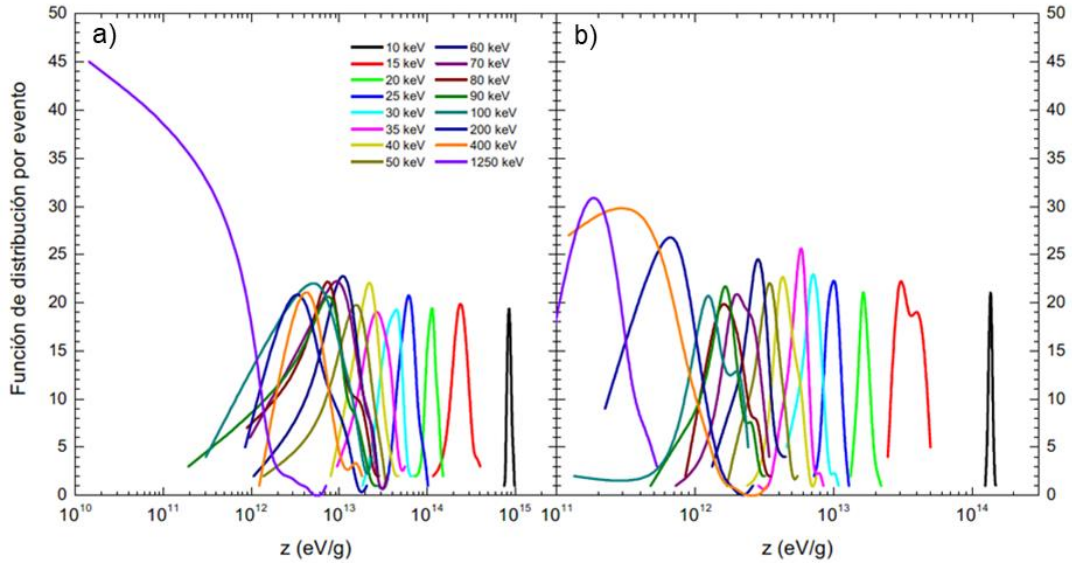


Figura 3 Funciones de distribución por evento como función de la energía específica para tamaños de blanco de a) 20 nm y b) 60 nm.

Eficiencia Relativa

La eficiencia relativa (ecuación 7) se determinó a partir de la convolución de las funciones de distribución de dosis obtenidas para cubos de 20, 40 y 60 nm (Figura 3) y la respuesta como función de la dosis (ecuación 9), no se consideró la atenuación en el dosímetro.

En la Figura 4 se muestran las eficiencias relativas calculadas para tamaños de blanco de 20, 40 y 60 nm También se presenta la eficiencia relativa obtenida para un conjunto de medidas (Ixquiac-Cabrera 2013). Se observa que las medidas concuerdan con los cálculos obtenidos para 20 nm para energías entre 20 y 200 keV.

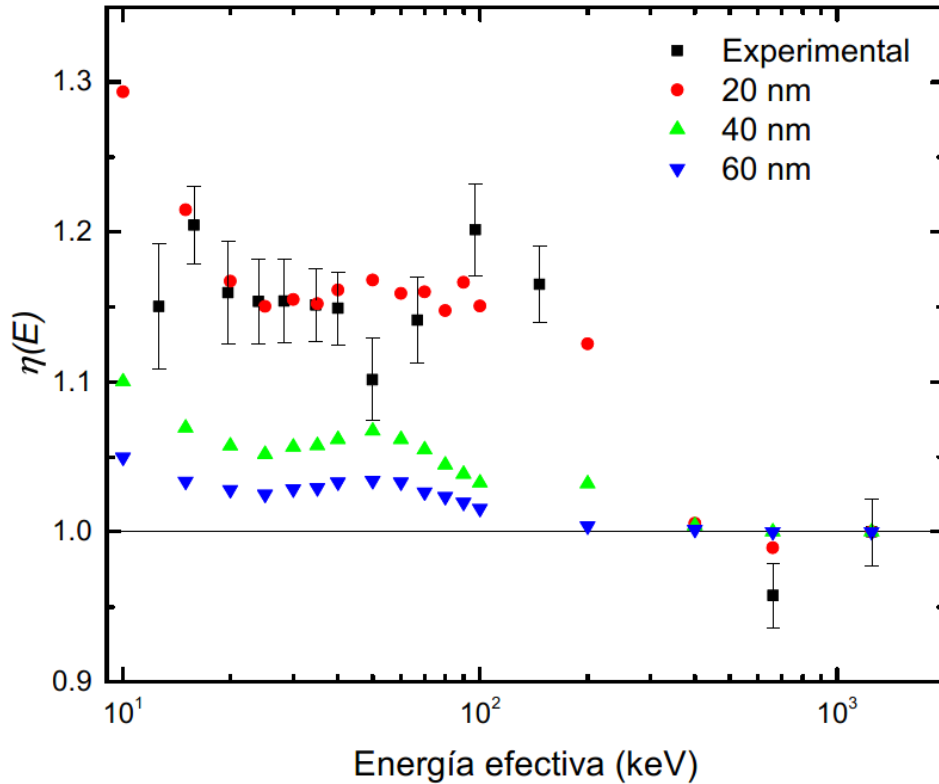


Figura 4. Eficiencia relativa como función de la energía efectiva obtenida para 20, 40 y 60 nm. Se presentan medidas experimentales [Marcelo].

Conclusiones

Con respecto a la respuesta relativa las medidas son mayores que los cálculos, esto puede deberse a que en estos sólo se considera el proceso de interacción de los fotones y no se toma en cuenta el del calentamiento de los dosímetros. Los resultados concuerdan con los valores reportados en la literatura (Davis 2003) (Nunn 2008) (Tedgren 2011).

El código MCNP no es el adecuado para realizar simulaciones de geometrías con tamaños de micras o nanómetros. Esto se debe al tipo de seguimiento que hace el programa a todas las partículas secundarias que se generan durante la colisión de las partículas primarias con el medio. Como principal desventaja se tiene que la incertidumbre en el valor promedio reportado de la energía depositada no cumple con las 10 pruebas estadísticas que requiere el código para validar la simulación. Como desventaja secundaria es que el tiempo de simulación es tan grande que la generación de pseudo números aleatorios dejan de serlo. Lo anterior ocasiona que no puedan construirse las funciones de distribución para blancos del tamaño que se necesitan.

Con el código PENELOPE se pudieron obtener las funciones de distribución en un intervalo de tamaño entre 90 micras y 20 nanómetros, observando que las incertidumbres con mayor peso se obtienen para energías superiores a los 600 keV del haz primario. Con la variación

de las energías de corte, se pudo analizar el depósito de energía sólo del haz primario y del haz primario con los electrones secundarios, lo que nos permite observar que

Las energías específicas y lineales, obtenidas para los fotones primarios y los electrones secundarios al mismo tiempo, concuerdan con las reportadas para blancos de agua esféricos (Villegas 2014). Como se esperaba, las energías específicas y lineales disminuyen con el tamaño del blanco, pero no siguiendo un comportamiento geométrico. Esto puede deberse al efecto de los electrones secundarios que abandonan el blanco sin depositar energía en los blancos más pequeños. Se recomienda analizar mediante el archivo de espacio-fase la contribución de las partículas de segunda generación para comprender cómo se deposita la energía en volúmenes micro y nano métricos.

La eficiencia relativa medida concuerda con la calculada para el tamaño de blanco de 20 nm, esto puede deberse a que la energía específica es mayor que la obtenida para blancos más grandes y a que el intervalo de las energías específicas aumenta conforme disminuye el tamaño de blanco como se observa en la Figura 3 de la referencia (Leal-Acevedo 2018).

Bibliografía

- Attix, F. H. Introduction to radiological physics and radiation dosimetry. New York: John Wiley & Sons, Inc., 2008.
- Briesmeister, J. F. "MCNPTM-A general Monte Carlo N-particle transport code. Version 4C." LA-13709-M, Los Alamos National Laboratory 2 (2000).
- Carinou, E., Boziari, A., Askounis, P., Mikulis, A., Kamenopoulou, V. "Energy dependence of TLD 100 and MCP-N detectors." Radiation Measurements 43 (2008): 599-602.
- Das, R. K., Li, Z., Perera, H, Williamson, J. F. "Accuracy of Monte Carlo photon transport simulation in characterizing brachytherapy dosimeter energy-response artefacts." Physics in Medicine & Biology 41 (1996): 995.
- Davis, S. D., Ross, C. K., Mobit, P. N., der Zwan Van, L., Chase, W. J., Shortt, K. R. "The response of lif thermoluminescence dosimeters to photon beams in the energy range from 30 kV x rays to 60Co gamma rays." Radiation protection dosimetry 106 (2003): 33-43.
- González, P. R., Furetta, C., Azorin, J. "Comparison of the TL responses of two different preparations of LiF: Mg, Cu, P irradiated by photons of various energies." Applied radiation and isotopes 65 (2007): 341-344.
- Ixquiac-Cabrera, J. M. "Comunicación personal." 2013.
- Kellerer, A., Chmelevsky, D. "Concepts of microdosimetry, II.- Probability distributions of the microdosimetric variables." Rad. and Environm. Biophysics 12 (1975): 205-216.
- Leal-Acevedo, B., Reyes-Romero, P. G., Castillo, F., Gamboa-deBuen, I. "Effect of the Target Size in the Calculation of the Energy Deposited Using PENELOPE Code." J. Nucl. Phys. Mat. Sci. Rad. A. 6 (2018): 67-70.
- Leal-Acevedob, B., Gamboa-deBuen, I. "Dose distribution calculation with MCNP code in a research irradiator." Radiation Physics and Chemistry, 2019: In press, Available online 6 May 2019, Article 108320.
- McKeever, S.W.S., Moscovitch, M., Townsend, P.D. Thermoluminescence Dosimetry materials: properties and uses. Nuclear Technology Publishing, 1995.
- Nunn, A. A., Davis, S. D., Micka, J. A., DeWerd, L. A. "LiF: Mg, Ti TLD response as a function of photon energy for moderately filtered x-ray spectra in the range of 20-250 kVp relative to 60Co." Medical physics 35 (2008): 1859-1869.
- Olkoa, P., Bilski, P., Kim, J. L. "Microdosimetric interpretation of the photon energy response of LiF:Mg,Ti detectors." Radiation Protection Dosimetry 100 (2002): 119-122.
- Olkob, P., Bilski, P., El Faramawy, N. A., Göksu, H. Y., Kim, J. L., Kopec, R., Waligorski, M. P. R. "On the relationship between dose-, energy-and LET-response of thermoluminescent detectors." Radiation protection dosimetry, 2006a: 15-22.
- Olkoc, P., Bilski, P., Budzanowski, M., Czopyk, L., Swakon, J., Waligorski, M. P. R. "Microdosimetric modelling of the response of thermoluminescence detectors to low-and high-LET ionising radiation." Radiation protection dosimetry 122 (2006b): 378-381.
- Salvat, F., Fernández-Varea, J. M., Sempau, J. "PENELOPE-2008: A code system for Monte Carlo simulation of electron and photon transport." Issy-les-Moulineaux: OECD Nuclear Energy Agency, 2008.
- Tedgren, Å. C., Hedman, A., Grindborg, J. E., Carlsson, G. A. "Response of LiF: Mg, Ti thermoluminescent dosimeters at photon energies relevant to the dosimetry of brachytherapy (< 1 MeV)." Medical physics 38 (2011): 5539-5550.

Villegas, F., Tilly, N., Bäckström, G., Ahnesjö, A. "Cluster pattern analysis of energy deposition sites for the brachytherapy sources ^{103}Pd , ^{125}I , ^{192}Ir , ^{137}Cs , and ^{60}Co ." *Physics in Medicine & Biology* 59 (2014): 5531.

Artículos de investigación publicados



Effect of the Target Size in the Calculation of the Energy Deposited Using PENELOPE Code

B. Leal-Acevedo^{1,2*}, P.G. Reyes-Romero², F. Castillo³ and I. Gamboadebuen¹

¹Institute of Nuclear Sciences, National Autonomous University of Mexico (UNAM), PO Box 70-543, 04510 Mexico City, Mexico

²Science Facultad, Autonomous University of the State Mexico, 100 Instituto Literario avenue, 50000 Toluca, Mexico

³Spectroscopy Laboratory, Institute of Physical Sciences, National Autonomous University of Mexico (UNAM), PO Box 48-3, 62251 Cuernavaca Morelos, Mexico

*Email: benjamin.leal@nucleares.unam.mx

ARTICLE INFORMATION

Received: June 14, 2018

Revised: July 07, 2018

Accepted: July 15, 2018

Published online: August 6, 2018

Keywords:

Specific energy; Linear energy, PENELOPE code

DOI: [10.15415/jnp.2018.61011](https://doi.org/10.15415/jnp.2018.61011)

ABSTRACT

The specific and linear energy was calculated in target sizes of 10 μm , 5 μm , 1 μm , 60 nm, 40 nm and 20 nm by taking into account the contribution of the primary photon beams and the electrons generated by them in LiF: Mg, Ti (TLD-100). The simulations were carried out by the code PENELOPE 2011. Using different histories of primary particles, for each energy beams the mean deposited energy is the same, but to achieve a statistical deviation lower than 1% the value of 10^8 was fixed. We find that setting the values $C1 = 0.1$ $C2 = 0.1$ and $W_{cc} = W_{er} = 50$ eV the time of simulation decreases around the 25%. The uncertainties (1 SD) in the specific energy increases with energy for all target sizes and decreases with target size, with values from 1.7 to 94% for 20 nm and between 0.1 and 0.8% for 10 μm . As expected, the specific and linear energies decrease with target size but not in a geometrical behavior.

1. Introduction

In the 70s Kellerer and Rossi [1, 2, 3] laid the groundwork for the ICRU to include as base quantities, the specific energy (z) and linear energy (y) to be used in microscopic structures size, these quantities correspond to dose and LET in the macroscopic world. The importance of these magnitudes is useful in the fields where the size of the structures requires the determination of the energy deposited in nanometer volumes. For the physical systems some authors [4, 5] calculated the specific energy and lineal energy where the objective is to obtain the frequency distribution for several sources and spherical water targets. In the last two decades it has been studied with special interest the capabilities of several programs using the Monte Carlo code, evaluating the position of a single interaction and the energy deposited by the secondary electrons with a lower energy threshold, regardless of the primary particle beam targets with micrometer or smaller sizes. This has been done by using simulations called event-by-event, where the coordinates of energy transfer and the energy deposited in the event are obtained [6, 7, 8]. Olko *et al.* [9] used electron transport in water vapor of unit density to determine the mean linear energy and the relative TL efficiency for LiF:Mg,Cu,P with a target sized of 60 nm and for $\text{Al}_2\text{O}_3\text{:C}$ with target

sized of 170 nm. The aim of this work is to investigate the interaction of monoenergetic low energy photons in the TLD-100 chip using the PENELOPE code, considering the geometry used in experiments performed to determine the relative TL response and efficiency of TLD-100 for photons beams, for different sizes of the target volume.

2. Materials and Methods

In this work we used PENELOPE (version 2011) [10] where is necessary an input file that holds the geometrical information of the problem, the material and the energy and position of the source. In order to keep simple the simulation we fix the geometry of the TLD chip, the beam (point parallel beam using $\alpha = 0$) and the TLD material (LiF:Mg,Ti). To calculate the specific energy (z) and linear energy (y) photon energies from 10 to 1250 keV as the primary beam were used. To achieve CPE, around the TLD was placed a layer of PMMA with thickness according to X-ray beam energy. During this work was analyzed the behavior of the statistical uncertainty in the absorbed energy due to different primary histories, from 10^6 to 10^8 primary particles. The average and maximum specific energy (z) were obtained in target sizes of 10 μm , 5 μm , 1 μm , 60 nm, 40 nm and 20 nm.

To determine the values of the elastic scattering dimensionless parameters C1 and C2, the cutoff energy for inelastic collisions for electrons W_{ic} and the bremsstrahlung cutoff energy W_{cr} , that will be use in the simulation, three combinations of values were compared to allow us to obtain the dose and kerma in LiF. For dose, the primary photons generated secondary electrons, which were followed by the code, while for the kerma, photons deposited on the first interaction all their energy. The deposited energy as a function of depth from the source position to the last layer of PMMA was obtained, which allowed us to analyze the behavior of the beam in the different layers of materials. For all the beams the cut-off energies were set up to 100 eV for the case of photons and positrons and 50 eV for electrons, $C1 = C2 = 0.1$ and the values for $W_{ic} = W_{cr} = 50$ eV. The beam was at the center of the TLD impinging on an arrange of $1 \times 1 \times 300$ cubes (a raw of 300 cubes in the beam axis) for 20 nm to 1 μ m, $1 \times 1 \times 180$ for the case of 5 μ m and $1 \times 1 \times 90$ for 10 μ m. From the calculation was obtained the specific energy for each volume size and then, dividing the energy imparted by the length cord, was calculated the linear energy.

3. Results

Using different histories of primary particles, for each energy beam the mean deposited energy is the same, but to achieve a statistical deviation lower than 1% the value of 10^8 was fixed. The statistical difference increases as function of the energy beam. The values of C1, C2, W_{ic} and W_{cr} analyzed include the recommendation of the manual that implies that C1 and C2 have value of 0.1 and W_{ic} and W_{cr} needs to be an energy two orders lower than the energy of the primary beam. In table 1 it is shown the combinations of values for these parameters for the case of cubes of 60 nm and a 1250 keV beam. From figure 1 it can be seen that the variation of those parameters from table 1 do not modify the absorbed dose in the volume of interest but the time of simulation decreases around the 25% for the case of $C1 = C2 = 0.1$ and $W_{ic} = W_{cr} = 50$ eV.

Table 1. Values of the mean free path between hard elastic events, maximum average fractional energy loss, cutoff energy for inelastic collisions for electrons and bremsstrahlung cutoff energy used to optimized the simulation time.

C1	C2	W_{ic} (eV)	W_{cr} (eV)	Nomenclature
0.1	0.1	12500	12500	a
0.1	0.10	50	50	b
0.2	0.2	0	0	c
0	0	0	0	d

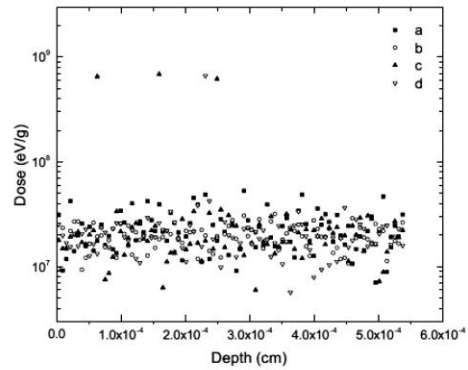


Figure 1. Dose as a function of depth for cubes of 60 nm and a 1250 keV beam for the combination of the parameters values shown in Table 1.

The average and the maximum specific energies as a function of beam energy are shown in figure 2, where for all target sizes, the maximum specific energy decreases, has a minimum value at about 70 keV and then increases with energy and decreases with the size of the target. This behavior takes place because, although the probability of interaction decreases with the beam energy, the range of secondary electrons increases with energy, so it is more probably that electrons released by higher energy beams in a given volume deposit their energy into another, increasing the maximum specific energy. The same behavior is observed for the average specific energy, except for target sizes greater than 1 mm and at low energies where Z_{avg} is lower for 10 keV than for 15 keV due to beam attenuation. The uncertainties (1 SD) in the specific energy increases with energy for all target sizes and decreases with target size, with values from 1.7 to 94% for 20 nm and between 0.1 and 0.8% for 10 mm.

As can be seen in figure 3, the maximum specific energy decreases rapidly, with target size (TS). The geometrical behavior is proportional $1/TS^3$, meanwhile the Z_{max} goes about $1/TS^{2.4}$, this might be because the probability of secondary electrons scattered away from the incident direction without depositing energy in the smallest targets. In this work we calculate the specific energy by taking into account the contribution of the primary beam and at the same time the contribution of secondary electrons, as a comparison we get the same behavior (Z decreases with TS with a power lower than 3) than that obtained by Olko [11] for the case of photons of Cs-137 striking spherical water targets.

In figure 4 it is shown the lineal energy decreases a function of the target size as seen in calculations in spherical water targets [11]. The difference between the geometric behavior (inversely proportional to $2L/3$) can also be due to the effect of the secondary electrons that leave the target.

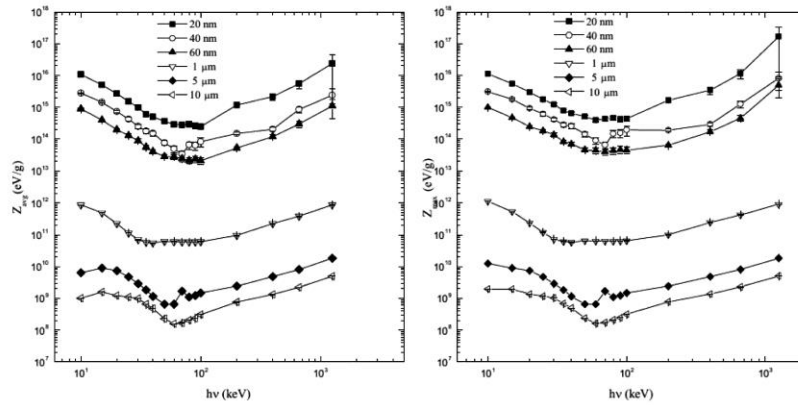


Figure 2. Average and maximum specific energies as a function of photon beam energy calculated for target sizes from 20 nm to 10 μm.

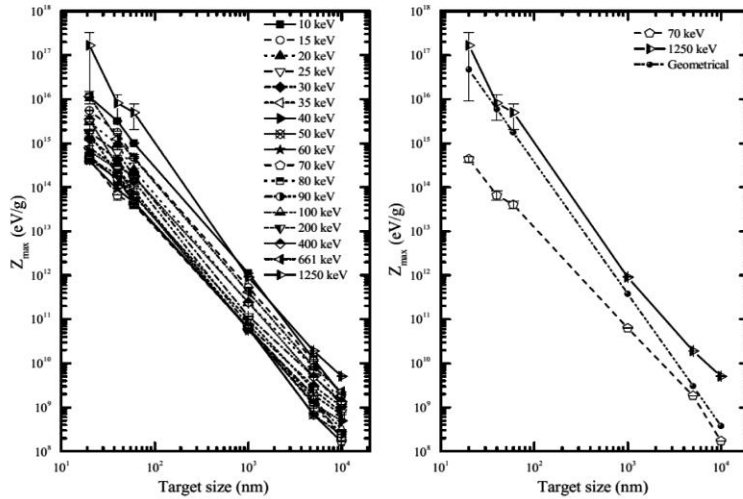


Figure 3. Maximum specific energy as a function of target size for all energies (Left) and for the energies with the lower and greater values of Z_{max} and the geometrical behavior (Right).

4. Conclusions

The specific and linear energies, obtained for both the primary photons and secondary electrons at the same time, are in good agreement with those reported for spherical water targets [11]. As expected, the specific and linear energies decrease with target size but not in a geometrical

behavior. This can be due to the effect of the secondary electrons that leave the target without depositing energy in the smallest targets. It is recommended to analyze by means of the space-phase file the contribution of second generation particles to understand the way of how energy is deposited in micrometric volumes.

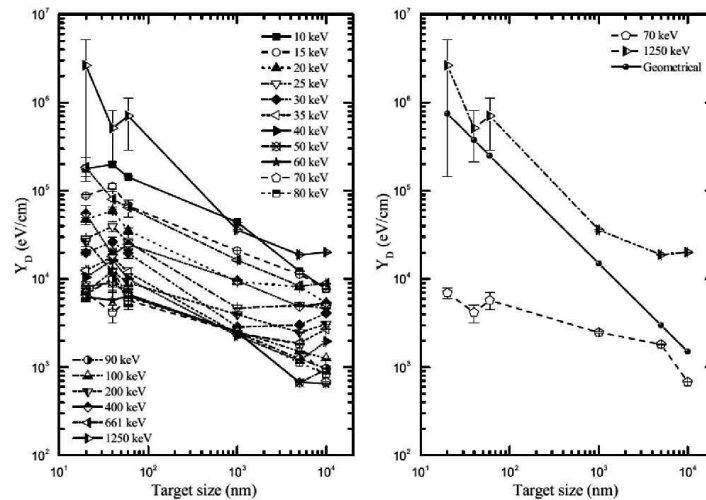


Figure 4. Lineal energy as a function of target size for all energies (Left) and for the energies with the lower and greater values of YD and the geometrical behavior (Right).

Acknowledgment

The authors want to thank the support on computational work done by Antonio Ramírez Fernández, Juan Luciano Díaz González, Juan Eduardo Murrieta León, Enrique Palacios Boneta and Martín Cruz Villafañe

References

- [1] M. Bernal and J. Liendo, *Med Phys* **36**, 620–625, (2009). <https://doi.org/10.1118/1.3056457>
- [2] A. Kellerer and D. Chmelevsky, Concepts of microdosimetry, I. Quantities. *Radiat Environ Biophys* **12**, 61–69, (1975). <https://doi.org/10.1007/BF02339810>
- [3] A. Kellerer and D. Chmelevsky, *Radiat Environ Biophys* **12**, 205–216 (1975). <https://doi.org/10.1007/BF01327348>
- [4] P. Olko, *Radiat Prot Dosimetry* **65**, 151–158, (1996). <https://doi.org/10.1093/oxfordjournals.rpd.a031610>
- [5] P. Olko, *Henryk Niewodniczanski Institute of Nuclear Physics*. (2002).
- [6] P. Olko, P. Bilski, M. Budzanowski, L. Czopyk, J. Swakon, *et al.*, *Radiat Prot Dosimetry* **122**, 378–381, (2006). <https://doi.org/10.1093/rpd/nc46>
- [7] H. Rossi, *Radiat Environ Biophys* **17**, 29–40, (1979). <https://doi.org/10.1007/BF01323118>
- [8] F. Salvat, J. M. Fernández-Varea and J. Sempau, PENELOPE-2011: A Code System for Monte Carlo Simulation of Electron and Photon Transport (No. NEA/NSC/DOC (2011 5). In *Nuclear Energy Agency Workshop Proceedings. Barcelona*, (2011).
- [9] B. Scott and H. Schöllnberger, *Radiat Prot Dosimetry* **91**, 377–384, (2000). <https://doi.org/10.1093/oxfordjournals.rpd.a033247>
- [10] F. Villegas, N. Tilly and A. Ahnesjö, *Phys Med Biol* **58**, 6149–6162, (2013).
- [11] F. Villegas, N. Tilly, G. Bäckström, A. Ahnesjö, *Phys Med Biol* **59**, 5531–5543, (2014). <https://doi.org/10.1088/0031-9155/59/18/5531>



Contents lists available at ScienceDirect

Radiation Physics and Chemistry

journal homepage: www.elsevier.com/locate/radphyschem

Dose distribution calculation with MCNP code in a research irradiator

B. Leal-Acevedo^{a,b,*}, I. Gamboa-deBuen^{a,**}^aInstituto de Ciencias Nucleares, Universidad Nacional Autónoma de México, A.P. 70-543, 04510, DF, Mexico^bFacultad de Ciencias, Universidad Autónoma del Estado de México, Instituto Literario 100, 50000, Toluca, Estado de México, Mexico

ARTICLE INFO

ABSTRACT

Keywords:

Research irradiator
Dose distribution
MCNP code calculations

By comparing the data obtained experimentally, the flux density calculations and simulation results using MCNP we can correlate all the results to ensure that the dose imparted to industrial products is appropriate. We have characterized the 3 fields of the irradiator to maximize the volume of irradiation. Percentage discrepancies below 15%, between the data, are due to parameters such as activity per unit length and by comparing line sources (theoretical calculation) and volume sources (simulations). The results allow us to evaluate the dose uniformity ratio (DUR) in the simulation of material with densities from 0.1 to 1.0 g/cm³.

1. Introduction

The use of cobalt-60 in industrial irradiators is widely accepted in the field of medical device sterilization, food processing, agriculture, and research, as a quality control procedure. To establish a suitable dose range for each product, each country refers to national regulations and/or international specifications and/or specific studies for a particular product (George and Pradhan, 2008). A problem faced by all industrial irradiators is the density of the product to be treated since deposited dose in the volume of interest depends strongly on this. To evaluate the absorbed dose nonhomogeneity in the material the dose uniformity ratio (DUR) which is the ratio of maximum dose to minimum dose deposited in the same volume is evaluated. This parameter depends directly on the arrangement of the material and its density and nominal activity in the irradiator (Biju et al., 2009).

In industrial irradiators, Co-60 sources are in one plane, that measures 230 × 211 cm, with a nominal activity range from 280 kCi to 5 MCi, which generates a radiation field approximately homogeneous in the irradiation plane of the material to sterilize. In the simulation of an industrial irradiator, with coplanar sources, the complexity is only the number of sources since they are placed side by side and, in many cases, they have the same activity. In industrial irradiators, according to their reload configuration, there are DUR values up to approximately 3. For example, the DUR varies from 1.2 to 1.7 for the irradiator JS-10000 and from 1.6 to 2.3 for the 2P Pallet in the density range of 0.05–0.4 g/cm³ (Nordion Sotera Health, 2018) which implies that the dose inhomogeneity in the materials can be up to 230%.

Van Hung and An (2010), Portugal et al., (2010) and Oliveira et al.,

(2000) performed Monte-Carlo simulations of industrial irradiators (Van Hung and An, 2010) reporting percentage differences between measured and calculated doses between 3 and 15%.

The design of our facility was intended to meet the research needs of various disciplines and at the same time provide a semi-industrial service, for this reason, the geometry of the rack form an “L-shaped” irradiator, generating 3 different iso-dose rate fields. This arrangement limits the maximum volume of the product within the irradiation chamber.

After cobalt-60 replenishment, we measure the dose rate in each field using radiochromic films and/or Fricke solution to calibrate some irradiator spots. To make a comparison between experimental data from the last two replenishments we used the Monte-Carlo code (MC) MCNP 4A to simulate the irradiator in the same conditions, and when the results showed good agreement, we simulate different densities. At the same time, we use the Sievert integral to estimate the photon flux density for the case of one, two or several sources to compare them to simulation results with the same cases (George and Pradhan, 2008; Kase and Nelson, 1972).

In the past, because of the non-standardize product dimensions, the deposited dose was obtained by extrapolation of experimental data, making so difficult to evaluate the DUR. For this reason, now we are using the same box dimensions for all the product, setting all the variables (length, width, and height), except the density, fixed.

The objective of this work is to compare the measured and calculated dose rate distributions (analytical and simulation) for the general source arrangement, determining the optimal irradiation volume, the maximum density of the material to be irradiated and the DUR.

* Corresponding author. Facultad de Ciencias, Universidad Autónoma del Estado de México, Instituto Literario 100, 50000, Toluca, Estado de México, Mexico.

** Corresponding author.

E-mail addresses: benjamin.leal@nucleares.unam.mx (B. Leal-Acevedo), gamboa@nucleares.unam.mx (I. Gamboa-deBuen).

<https://doi.org/10.1016/j.radphyschem.2019.05.010>

Received 13 December 2018; Received in revised form 3 May 2019; Accepted 5 May 2019

Available online 06 May 2019

0969-806X/ © 2019 Elsevier Ltd. All rights reserved.

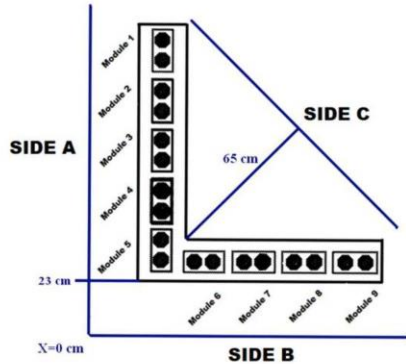


Fig. 1. Source position in their modules. Drawn not to scale.

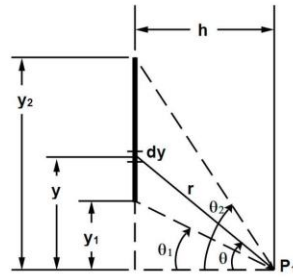


Fig. 2. Geometric diagram and the Sievert integral equation. (Single column fitting)

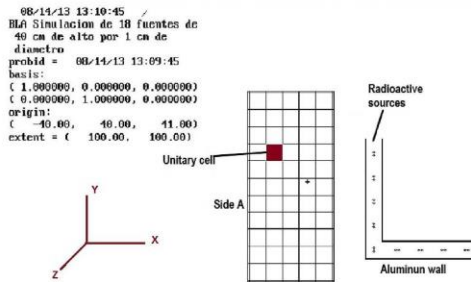


Fig. 3. Schematic diagram and cell repeated structure representation.

2. Materials and methods

The GammaBeam 651 PT irradiator is a semi-industrial irradiator built both for research and to sterilize industrial material. Unlike an industrial irradiator, it has 9 independent L-shaped modules with two sources each as shown in Fig. 1, with the sources located between Y = 23 cm and 100 cm. Cobalt-60 pencils are steel cylinders 1 cm diameter by 45 cm long containing therein radioactive material in several pellets. The modules are separated 4 in and the sources are separated 1 in and do not have the same activity. The axis of the sources is parallel to the Z axis and its center is located 47 cm from the floor (X-Y plane).

The original idea is to be able to generate complex fields using different configurations of the modules that will be placed in the irradiation position.

The purpose of the irradiator is to achieve a high dose rate near the sources, where for safety, there are aluminum plates to prevent sources to come out of their modules and get out of control (AECL, 1986).

The irradiator is designed for low-density products (0.1–0.5 g/cm³) requiring a dose range from 0.1 to 10 kGy.

There are 18 sources with activities from 55 to 400 TBq, distributed symmetrically with respect to the vertex, with a total activity of 3.15 PBq. The dose rate at the position where the industrial materials are irradiated is of the order of 4 kGy/h.

2.1. Experimental dosimetry

Doses at different points were measured with FWT-60 radiochromic films (Far West Technology®). 120 films were placed, two per position, in an area of 120 × 130 cm² on side A of the irradiator with a separation of 20 cm between each measured point.

The films were irradiated for 3 h and read between 24 and 48 h after irradiation in a Cary 100 spectrophotometer at a wavelength of 604 nm in absorption mode to obtain the increase in optical density of the irradiated film with respect to the not irradiated.

The films were calibrated in the irradiator placing them in positions with dose rates previously determined with Fricke solution exposing them at doses between 1 and 13 kGy obtaining a linear-quadratic relationship between the increase in optical density and the dose. Uncertainty in dose measurements is about 10%.

2.2. Monte-Carlo simulation

We define the Co-60 source as two photons with an energy of 1.25 MeV per disintegration, instead of a spectrum with two lines of 1.17 and 1.33 MeV due to percental differences between absorbed doses calculated considering the average energy instead of the two lines are lower than 1%. We use the Average Energy Deposited in each cell (Tally × F8) in MeV per photon per cell of interest (Briesmeister, 1997). The repeated structure lattice of 10 × 10 × 10 cm is shown in Fig. 3 together with the coordinate system used where X and Y are in the plane of the floor, perpendicular to the sources and Z corresponds to the height and is parallel to the sources axes. Side A is parallel to the Y axis.

The material in structure lattice is water, which varies in density from 0.1 to 1.0 g/cm³. The literature reports a density of 0.5 g/cm³ as the maximum value for an acceptable DUR; however, our facility accepts aqueous material with a density of 1.0 g/cm³ with well-established dimensions.

Due to the uncertainty of the source's activities (about 10%) and the lack of precise geometric details of sources and some irradiator components, we cannot reduce this uncertainty making analytical calculations and simulation data.

2.3. Analytical calculation

For calculating the photon flux density is assumed that the distribution of radioactive material in the source is homogeneous, not considering neither a build-up factor nor a self-attenuation process. In the case of a line source it defines the source intensity per unit length as S_L [photons/cm s], h as the perpendicular distance from the axis of the source to the point of interest, y_1 as the heights and θ_1 as angles from the floor to the height as shown in Fig. 2, the photon flux density for homogeneous linear source is obtained by equation (1) (Kase and Nelson, 1972).

$$\varphi_1 = \frac{S_L}{4\pi} \int_{y_1}^{y_2} \frac{dy}{r^2} = \frac{S_L}{4\pi} \int_{-61}^{\theta_2} \frac{\sec^2 \theta}{h^2 \sec^2 \theta} d\theta = \frac{S_L}{4\pi h} (\theta_2 - \theta_1) \tag{1}$$

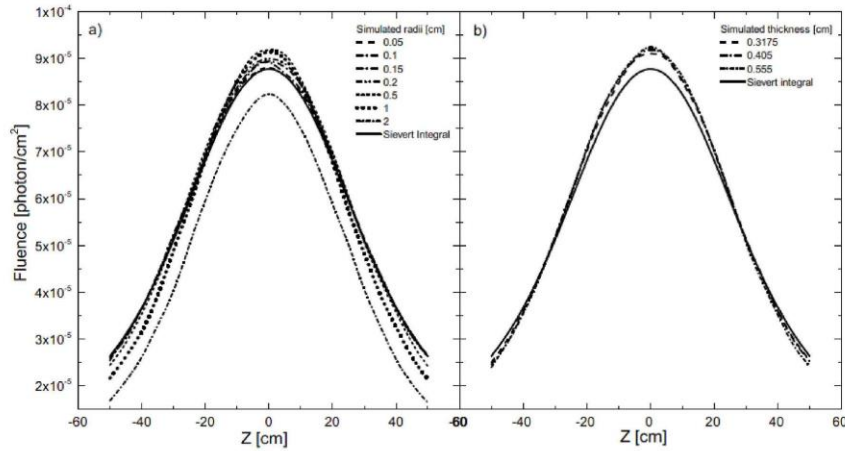


Fig. 4. Comparison between Sievert integral to a) radii simulation and b) different capsule.

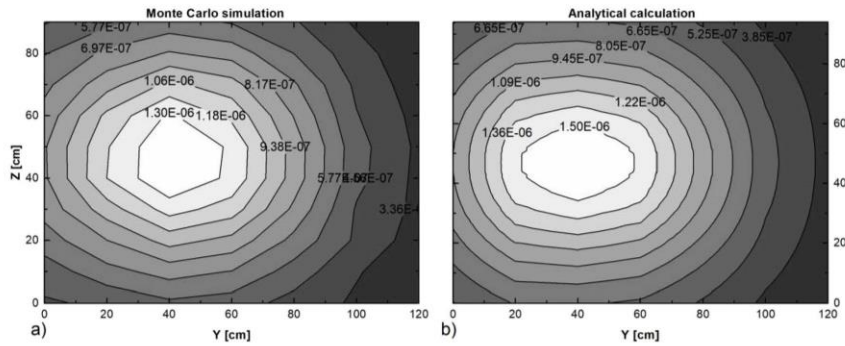


Fig. 5. Results from a) MCNP simulation and b) analytical calculation in units of MeV/g per photon.

3. Results and discussion

3.1. Comparison between MC and analytical results

As a first case, we varied the radii of a single simulated source to observe the self-attenuation factor, where the Z axis is 23 cm from the source parallel to its axis and Z = 0 corresponds to the middle of the source. Analytical calculation of the photon flux density at a point against the data obtained with the cylindrical volumetric source simulation show a discrepancy percentage of 4% at source center and 7% at the ends in the case of a 0.5 cm radius source, see Fig. 4a. As expected in the case of a 2 cm radius source percentage discrepancy reaches 37%. We simulated the different thicknesses of the source capsule to see how the photon flux density is affected. From Fig. 4b, we observe a discrepancy of 6% if it is not considered the steel capsule.

As can be seen in Fig. 5 simulation and analytical calculation of photon flux density in side A shows the same behavior. The maximum dose is located at 47 cm from the floor. The elliptical behavior because the most intense sources, three per side, were placed in modules 2, 3, 4, 6, 7 and 8 to have a greater dose rate and a more homogeneous field. Analytical calculations values are greater than Monte-Carlo data simulation by 15%. Recall that Sievert integral is solved for the case of a

linear source and in the simulations, we use volumetric sources if corrected for this effect the percentage difference decreases to 7%.

3.2. Comparison between dose rates measurements and simulated

Fig. 6 shows the comparison between FWT-60 film dosimetry in side A (Fig. 6a) and the dose rate obtained by Monte-Carlo code (Fig. 6b) in kGy/h observing the same behavior. Dose rate distributions are elliptical as in Fig. 5.

At floor level, measured doses are between 5 and 19% greater than those simulated with Monte-Carlo, probably due to the dispersion of primary photons in the floor that are not considered in the simulation. In general, measured dose rates are lower than that calculated for Z values between 10 and 90 cm, possibly since in the simulation two steel structures in the apex of the aluminum walls were not considered so the attenuation of the photons is lower in the simulation. The average percentage difference between the measurement and the calculation is of 12% with a greater difference of 30% for Y = 120 cm and Z = 90 cm.

For heights greater than 90 cm measured doses are between 10 and 30% lower than simulated.

It should be noted that the behavior of the other two sides have the same trend, allowing us to confidently modify parameters such as

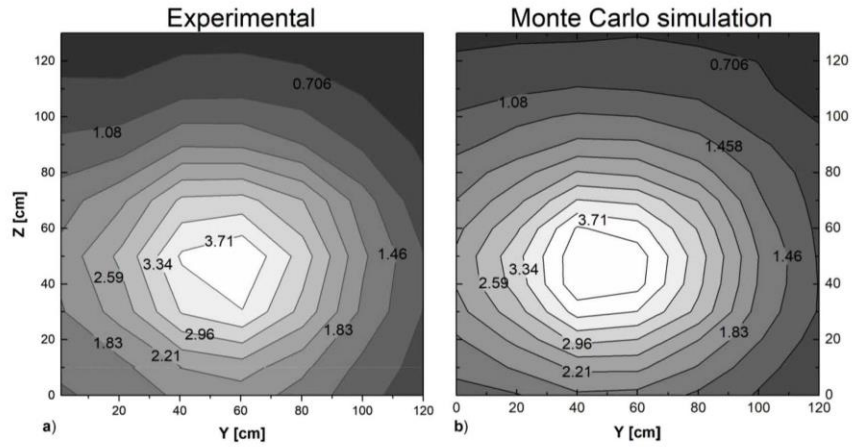


Fig. 6. a) Experimental iso-dose rates curves and b) Monte-Carlo simulation results, in kGy/h.

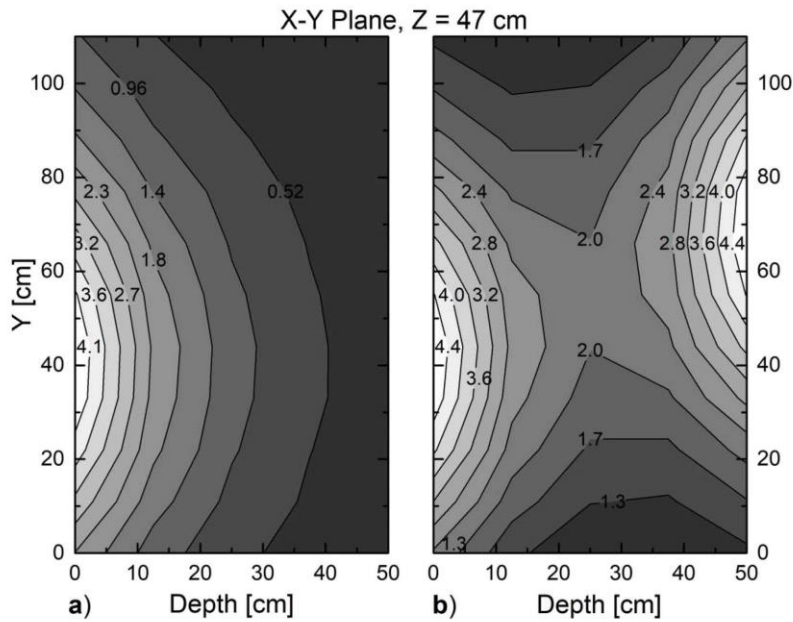


Fig. 7. Iso-dose rates curves are perpendicular to sources in Gy/h.

volume and density of the material to evaluate different dose uniformity ratios.

3.3. Comparison between single and double irradiation faces

The advantage to simulate a repeated structure volume allows us to know the energy deposited by photon per second in each cell, counting not only the entrance dose in the material but also the behavior of the deposited dose in every plane within the material. Fig. 7 shows the MC

dose rate in kGy/h in a plane X-Y perpendicular to the sources axis at the point of maximum dose ($Z = 47$ cm) as a function of material depth in the case of a material with a density of 1.0 g/cm^3 . In the Fig. 7a, it is shown the behavior of attenuation within the material assuming one face irradiated only. When the cycle is complete, i. e. material is rotated 180° with respect to the Z-axis (Fig. 7b), the dose deposited in the material increases. On the surface, the dose increases between 4 and 18% and in the center of the 48–200% with increasing the value of Y. Given the above, the material to be sterilized is rotated 180° . When the

complete cycle is used, the dose on the surface increases between 4 and 18% and in the center from 48 to 200% when increasing the value of Y . Given the above, the material to be sterilized is rotated 180°.

3.4. Dose uniformity ratio

The advantage of understanding previous simulations become important when calculating the dose uniformity ratio, which will allow us to define the useful regions of the irradiator to ensure dose uniformity requested by customers. While the theoretical value of DUR is unity, industrial irradiators work with values between 1.5 and 3. Considering this DUR range, results allow us to establish that the maximum dimensions of the irradiation region are 80 cm in height (from $Z = 0$ –80 cm), 100 cm in width (from $Y = 0$ to 100) and 40 cm in thickness ($X = -40$ to 0 cm). If dimensions greater than established are used we can obtain a DUR greater than 7 and 20 for densities of 0.1 g/cm³ and 1.0 g/cm³, respectively.

The density of 0.5 g/cm³ is taken as the maximum upper limit to provide an optimum irradiation service.

4. Conclusions

In the case of calculating photon flux density is necessary to consider the case of volume sources, not just linear attenuation using self-attenuation values in the Sievert integrals.

In the irradiation area determined in the YZ plane, for values of DUR between 1.5 and 3 and densities lower than or equal to 0.5 g/cm³, the percentual difference varies between 1 and 20% with the greatest difference near the vertex of the irradiator with an average value of 9%. Given the complexity of our irradiator and considering that the difference between the measured and simulated doses for industrial irradiators is up to 15%, we consider that the MC calculation is adequate and meets the needs of the irradiator to determine the irradiation time required for each product as a function of its density. In addition,

absorbed doses in the material are verified experimentally and the clients verify that their products pass the quality control with respect to the microbial count.

The differences found between the dose rates measured and calculated with Monte-Carlo simulation may be because the simulation did not include iron components, generating greater values than those results obtained by measurements. However, the behavior is the same allowing us to ensure that phenomenology is preserved.

Based on results obtained, the geometry of the Monte-Carlo simulation is being improved considering steel structures in the apex of the aluminum walls, with which it is expected that the discrepancies between the measured and MC calculated doses will be reduced because the calculated doses will be lower due to attenuation in steel structures.

References

- AECL, 1986. Industrial Irradiation Division, "Cobalt-60 Irradiator Model GB-651PT Unit Serial No 02". Technical Publications.
- Biju, K., Selvam, T.P., Lavale, D.S., 2009. Monte Carlo simulation of various source-product geometries for a proposed multi-product gamma irradiator facility. *Health Phys.* 97 (3), 187–194.
- Briesmeister, J., 1997. "MCNP—A General Monte Carlo N-Particle Transport Code" LANL LA-12625 manual, 1997 Briesmeister, J.F. MCNP—a general Monte Carlo N-particle transport code. Los Alamos National Laboratory Report, LA-12625-M.
- George, J.R., Pradhan, A.S., 2008. Theoretical evaluation of dose distribution in product in radiation processing plants. *Radiat. Phys. Chem.* 77 (2), 186–191.
- Kase, Kenneth, Nelson, Walter, 1972. "Concepts of Radiation Dosimetry" National Technical Information Service. U. S. Department of Commerce.
- Nordion Sotera Health, 2018. Nordion Gamma Irradiators Datasheet 2018. https://www.nordion.com/wp-content/uploads/2018/11/Nordion_Gamma_Irradiators_Datasheet_2018.pdf consulted online May 3rd, 2019.
- Oliveira, C., Salgado, J., Botelho, M.L., Ferreira, L.M., 2000. Dose determination by Monte Carlo — a useful tool in gamma radiation process. *Radiat. Phys. Chem.* 57 (3–6), 667–670.
- Portugal, L., Cardoso, J., Oliveira, C., 2010. Monte Carlo validation of the irradiator parameters of the Portuguese gamma irradiation facility after its replenishment. *Appl. Radiat. Isot.* 68 (1), 190–195.
- Van Hung, T., An, T.K., 2010. Dose mapping using MCNP code and experiment for SVST-Co-60/B irradiator in Vietnam. *Appl. Radiat. Isot.* 68 (6), 1104–1107.



Toluca, México; a 25 de Marzo de 2022

**Carta de autorización para la incorporación de
objetos digitales en el Repositorio Institucional de
la Universidad Autónoma del Estado de México.**

**UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MÉXICO
P R E S E N T E**

El/la/los que suscribe/n Benjamín Leal Acevedo, con fundamento en los artículos 13 fracción I, 18, 21 22, 27, 30 y demás aplicables de la Ley Federal del Derecho de Autor y su Reglamento vigentes, firmo/mamos la presente Licencia de Uso Gratuita, No Exclusiva y No remunerada para la incorporación al Repositorio Institucional de la Universidad Autónoma del Estado de México de la obra literaria (artículo, capítulo de libro, libro, tesis de posgrado, entre otros.) que lleva por título Cálculos Monte Carlo de la eficiencia relativa de dosímetros termoluminiscentes usando modelos microdosimétricos

Asimismo, declaro/ramos bajo protesta de decir verdad ser el/la/los autor/a/res y/o legítimo/a/s titular/es de la obra literaria y sus derivados visuales; y que responderé/remos de la autoría/titularidad, originalidad y nivel de acceso de la obra de mérito y del ejercicio pacífico de los derechos que se licencian en este acto, manifestando que no existe ninguna otra persona física o moral a la que le pertenezcan; por lo cual libero/ramos en este acto de toda responsabilidad a la Universidad Autónoma del Estado de México, así como de cualquier demanda o reclamación que llegara a formular alguna persona física o moral que considere vulnerados sus derechos o que se suponga con derecho sobre la obra mencionada, asumiendo todas las consecuencias legales y económicas a que hubiera lugar.




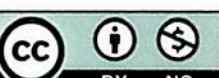
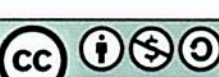

Por lo anterior, autorizo que la Oficina de Conocimiento Abierto perteneciente a esta Máxima Casa de Estudios, realice lo propio para el almacenamiento, preservación y difusión de la obra, con fines académicos y culturales en formato de acceso abierto y sin fines de lucro en los términos siguientes:

1. De los Derechos de Autor.

Reconozco la importancia de protección de mi obra y el movimiento de Acceso Abierto del cual forma parte la Universidad Autónoma del Estado de México, por lo tanto conozco y acepto que mi obra esté protegida



bajo una de las Licencia Creative Commons que a continuación se listan, marcando con una "X" del lado izquierdo la que será aplicable a mi obra:

	<i>Licencia</i>	<i>icono</i>
<input checked="" type="checkbox"/>	Reconocimiento (BY): El autor permite copiar, reproducir, distribuir, comunicar públicamente la obra, realizar obras derivadas (traducción, adaptación, etc.) y hacer de ella un uso comercial, siempre y cuando se cite y reconozca al autor original.	
<input type="checkbox"/>	Reconocimiento - Sin obra derivada (BY-ND): El autor permite copiar, reproducir, distribuir, comunicar públicamente la obra, y hacer de ella un uso comercial siempre y cuando se cite y reconozca al autor original. No permite generar obra derivada.	
<input type="checkbox"/>	Reconocimiento - No comercial- Sin obra derivada (BY-NC-ND): El autor permite copiar, reproducir, distribuir, comunicar públicamente la obra, siempre y cuando se cite y reconozca al autor original. No permite generar obra derivada ni utilizarla con finalidades comerciales.	
<input type="checkbox"/>	Reconocimiento - No comercial (BY-NC): El autor permite copiar, reproducir, distribuir, comunicar públicamente la obra, y generar obras derivadas siempre y cuando se cite y reconozca al autor original. No se permite utilizar la obra con fines comerciales.	
<input type="checkbox"/>	Reconocimiento - No comercial - Compartir igual (BY-NC-SA): El autor permite copiar, reproducir, distribuir, comunicar públicamente la obra, y generar obras derivadas siempre y cuando se cite y reconozca al autor original. La distribución de las obras derivadas deberá hacerse bajo una licencia del mismo tipo. No se permite utilizar la obra con fines comerciales.	
<input type="checkbox"/>	Reconocimiento - Compartir igual (BY-SA): El autor permite copiar, reproducir, distribuir, comunicar públicamente la obra, generar obras derivadas y hacer de ellas un uso comercial, siempre y cuando se cite y reconozca al autor original. Se permite la distribución de las obras derivadas, pero única y exclusivamente con una licencia del mismo tipo.	

2. De la Difusión del producto

El nivel de acceso en mi obra definirá la parcialidad o totalidad de acceso a los datos y documento a texto completo para su visibilidad en el Repositorio Institucional, por lo que la aplicable a mi obra, es el señalada del lado izquierdo en esta sección:



Nivel de acceso

- | | |
|-------------------------------------|---|
| <input checked="" type="checkbox"/> | <p>a. Abierto: esta característica permite que los metadatos del depósito puedan ser visualizados en su totalidad, así como el acceso al documento a texto completo depositado para visualización y descarga, el documento es incluido en resultados de búsquedas. Las características de un archivo para publicación en abierto son:</p> <ul style="list-style-type: none">I. Es posible acceder a su contenido de manera libre y universal, sin costo alguno para el lector, a través de cualquier dispositivo que cuente con acceso a Internet;II. El autor o titular de los derechos de propiedad intelectual otorga al usuario el derecho de utilizar, copiar o reproducir el contenido, con la única condición de que se dé el debido crédito de autoría.III. El documento ya cumplió su periodo de exclusividad con alguna editorial o tercera persona y está disponible para su libre publicación. |
| <input type="checkbox"/> | <p>b. Restringido: esta característica se utiliza cuando se desea que el documento no se muestre al público, únicamente podrán visualizarse los metadatos del depósito a petición del depositante o autor, en caso de que algún visitante o usuario desee el acceso al contenido completo del documento se enviará un mensaje al depositante del documento a texto completo solicitando su acceso, el depósito será incluido en los resultados de búsqueda</p> |
| <input type="checkbox"/> | <p>c. Embargado: esta característica permite ocultar el documento por un periodo de tiempo definido por el autor, únicamente podrán visualizarse los metadatos del depósito a petición del depositante o autor, llegada la fecha de finalización de embargo el acceso al documento será modificado a "acceso abierto", mientras el documento se encuentre oculto los metadatos serán visibles y quedará incluido en los resultados de búsqueda.</p> |
| <input type="checkbox"/> | <p>d. Cerrado: en este caso el depósito no será incluido en los resultados de búsquedas, el documento y los metadatos de depósito NO serán visibles para los usuarios.</p> |

Para el caso de nivel de acceso Restringido, Cerrado o Embargo, se deberá contar con un motivo y fecha de término por el nivel de acceso elegido.

Así mismo, conozco y acepto los términos del aviso de privacidad de la UAEMex, mismo que puede ser consultado en http://web.uaemex.mx/avisos/Aviso_Privacidad.pdf; en este mismo acto otorgo mi consentimiento, para que la Universidad Autónoma del Estado de México, haga públicos mis datos personales referentes a nombres, espacio



Universidad Autónoma del Estado de México

UAEM

académico, opiniones y/o conclusiones vertidas en el presente trabajo de investigación (tesis de grado y posgrado, artículos, libros, capítulos y cualquier trabajo académico) derivado de las obligaciones comunes y específicas que se tiene como Sujeto Obligado en materia de Transparencia y en cumplimiento a la Ley de Protección de Datos Personales en Posesión de Sujetos Obligados

En pos a la protección de datos personales de terceros, y en cumplimiento a la Ley de Protección de Datos Personales en Posesión de Sujetos Obligados, estoy de acuerdo para que la tesis de mi autoría no contenga documentos donde se visualicen datos personales sensibles que puedan afectar a terceros; tales documentos como voto aprobatorio, aceptación de tesis, dedicatorias, agradecimientos, mismos que, de no ocultarlos, serán visibles en el Repositorio Institucional de la Universidad autónoma Del Estado de México, haciéndome responsable de los mismos y sin previo permiso de los terceros

Firmo de Conformidad y bajo protesta de decir verdad

Nombre y Firma Benjamín Leal Acevedo 

No. De Cuenta 1330012

NOTA: Ésta carta, toda vez que el autor registre los campos de llenado y las firmas correspondientes, debe digitalizarse y adjuntarse en el depósito del Repositorio Institucional de la Universidad Autónoma del Estado de México; misma que no será visible para consulta.

Conozco y acepto los términos de privacidad de la
Universidad Autónoma del Estado de México
http://web.uaemex.mx/avisos/Aviso_Privacidad.pdf



Toluca, México a 25 de Marzo de 2022

Hoja de datos del autor

Nombre: Benjamín Leal Acevedo

Número de cuenta (en caso de aplicar): 1330012

Grado académico: Doctorado

Programa educativo de procedencia (aplica solo en tesis): Doctorado en Ciencias (Física)

Institución donde labora: Instituto de Ciencias Nucleares UNAM

Domicilio: Francisco Goitia 2418, Bonanza Metepec

Teléfono/Fax: 5524922627

Correo electrónico (preferentemente correo institucional):

benjamin.leal@nucleares.unam.mx

Benjamín Leal Acevedo

Nombre y firma

Nota: para el caso de que sean más de un autor, se deberá imprimir esta última hoja de "datos del autor" en relación al número de autores.

Esta información es recabada con fines administrativos

Conozco y acepto los términos de privacidad de la
Universidad Autónoma del Estado de México
http://web.uaemex.mx/avisos/Aviso_Privacidad.pdf