

PERFILES DE DOSIS EN VAPOR DE AGUA

G.H. OLIVERA* y R.D. RIVAROLA.

Grupo de Colisiones Atómicas, Instituto de Física Rosario (CONICET-UNR), Av. Pellegrini 250, (2000) Rosario, Argentina.

e-mail: olivera@unrctu.edu.ar / colision@ifir.edu.ar

P.D. FAINSTEIN

Laboratoire de Chimie -Physique, Matière et Rayonnement, Université Pierre et Marie Curie, 11 Rue Pierre et Marie Curie, 75231 Paris, Francia.

Introducción

El conocimiento de la distribución espacial de energía resulta útil para comprender la respuesta biológica a las radiaciones ionizantes. Diferentes aproximaciones han sido desarrolladas, por ejemplo estudios detallados de estructura de trazas en el caso de iones pesados pueden ser realizados con el uso del método Monte Carlo. Algunos de estos cálculos [1-3] obtienen distribuciones radiales de dosis y pueden ser comparados con mediciones experimentales.

Los perfiles de dosis se utilizan para obtener secciones eficaces de inactivación de enzimas [4-6], y en modelos de detección de iones pesados en sistemas físicos y biológicos [7].

Desarrollaremos perfiles de dosis utilizando DDCS de ionización dentro del modelo CDW-EIS para el impacto de iones, y una simple aproximación para la deposición de energía por parte de los electrones. Analizaremos las limitaciones de nuestro método y la contribución de cada orbital molecular al perfil de dosis. La descripción de los resultados experimentales es buena dentro del rango de validez de la teoría. Obtenemos comportamientos muy diferentes para grandes radios respecto de otras teorías, y

desviaciones de la simple dependencia $\frac{1}{r^2}$ (siendo r la distancia radial a la traza del ion) debidas a las contribuciones de electrones de altas energías pertenecientes al orbital molecular 1s del oxígeno. Mostramos también que fórmulas bien establecidas para obtener radios de penumbra son inadecuadas para energías por nucleón del ion (energía específica) intermedias y bajas. Esto es de particular interés en el cálculo de secciones eficaces de inactivación en función del parámetro de impacto [5].

Teoría

Nuestro programa tiene en cuenta electrones eyectados a diferentes energías, para ángulos entre 0° y $\pm 180^\circ$ respecto de la traza del ion. Las DDCS se obtienen en la aproximación CDW-EIS [8]. El blanco tiene N moléculas por cm^3 y suponemos que hay equilibrio electrónico. Supondremos además que los electrones eyectados viajan en línea recta y que en el punto de interés, la energía se deposita a la tasa del poder de frenamiento correspondiente a la energía del electrón en este sitio. Es muy simple mostrar que el perfil de dosis dentro de esta aproximación es:

$$D(r) = \int_{E_{\min}}^{\infty} \int_{\arcsen\left(\frac{r}{R}\right)}^{\pi - \arcsen\left(\frac{r}{R}\right)} N \frac{1}{r} \frac{dE}{dr} \sigma(\theta, E) d\theta dE \quad (1)$$

donde $\sigma(\theta, E)$ es la DDCS de ionización, r es la distancia normal desde la traza del ion al punto de interés, θ y E son el ángulo polar y la energía del electrón eyectado, R es el rango de los electrones eyectados y $\frac{dE}{dr}$ es el poder de frenamiento de electrones en vapor de agua obtenido de la referencia [9]. El rango del electrón es obtenido dentro de la aproximación de frenado continuo (CSDA) a partir del poder de frenamiento, obteniendo una relación numérica entre el rango y la energía. En nuestro caso la energía mínima considerada es 10 eV, que es del orden del mínimo potencial de ionización del agua (12.6 eV).

Resultados y Discusiones

En la figura 1 presentamos los perfiles de dosis obtenidos a partir de nuestros cálculos en vapor de agua, los cuales fueron convertidos a una

* Autor a quien debe enviarse la correspondencia

densidad másica de $1 \frac{g}{cm^3}$, junto con los resultados de Katz [10] y Monte Carlo de Olko et al [2]. Es bien conocido que pueden existir efectos de fase, no obstante, generalmente se realizan los cálculos en vapor de agua y se los corrige por densidad para tener la misma cantidad de blancos por unidad de volumen que para el agua líquida. Excepto para el caso de partículas alfa con una energía de 1 MeV, donde las contribuciones del canal de captura pueden ser importantes, los perfiles de dosis corresponden a iones desnudos para la situación de equilibrio. La mediciones son de Wingate y Baum [11].

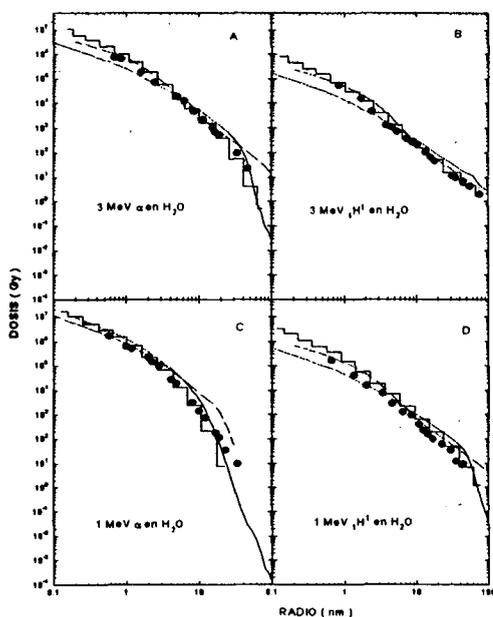


Fig. 1: Perfiles de dosis en vapor de agua alrededor de la traza de un ion en función del radio. Teoría: (—), DW; (---), Katz [10]; (escalón), Monte Carlo [2]. Experimentos: (●), de ref. [11]

Se pueden observar algunos hechos en común. Nuestros resultados subestiman los cálculos Monte Carlo, los de Katz y las mediciones para pequeños radios, y tienen un buen acuerdo con Monte Carlo y la mediciones para radios intermedios y grandes. En el caso de energías específicas menores que 1 MeV/amu nuestros cálculos tienen el mismo comportamiento que las mediciones y Monte Carlo (los cuales se realizan

con DDCS experimentales) y se apartan de los de Katz.

Es instructivo saber por qué un modelo tan simple para el transporte de los electrones puede describir la región de radios intermedios y grandes, se aparta de otros modelos simples para grandes radios y describe inadecuadamente los radios pequeños.

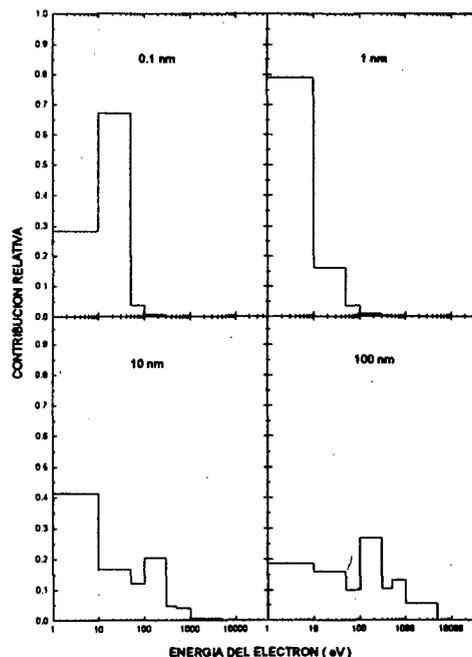


Fig. 2: Contribución relativa a la dosis en vapor de agua de los electrones en función de la energía de arribo, para diferentes radios desde la traza del ion. $^1H^1$ de 1MeV.

Para analizar nuestros cálculos, obtuvimos para los perfiles de dosis de las figuras 1 las contribuciones relativas a la dosis, de los electrones con diferentes energías de llegada al punto de interés para radios fijos. En las figuras 2 y 3 podemos observar que a pequeños radios la contribución principal se debe a electrones que arriban a dicha región con baja energía, pero cuando el radio crece la contribución de electrones más energéticos se hace importante. Además, cuando la energía específica crece, y a grandes radios, la contribución proviene fundamentalmente de electrones de alta energía, indicando que esta clase de modelos es adecuado para altas energías específicas del proyectil. Esto

podría explicar el por qué esta simple aproximación CSDA para el transporte de electrones puede dar resultados relativamente buenos para radios intermedios y altos. Pero debe ser tomada en cuenta la observación de Berger [12] que una pérdida de energía gradual es aceptable para energías aproximadamente igual o mayores a 1 keV. Sin embargo, nuestro modelo da resultados aceptables para radios intermedios y grandes si la energía específica del proyectil es suficientemente alta.

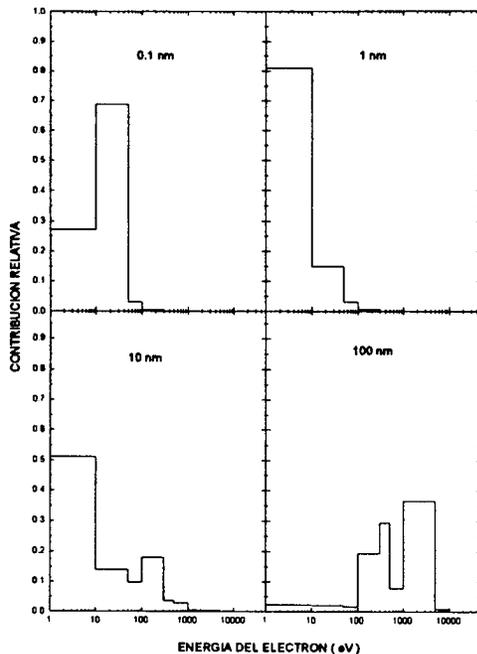


Fig. 3: Idem fig. 2 para $^1H^1$ de 3 MeV.

Mostraremos que la ionización de los electrones 1s del oxígeno, podría tener un papel importante en el estudio de las probabilidades de inactivación en función del parámetro de impacto del proyectil.

En nuestro modelo obtuvimos la contribución de cada orbital molecular a los perfiles de dosis (figura 4). Podemos observar que para radios grandes la principal contribución a la dosis proviene de electrones 1s del oxígeno producidos por ionización simple.

En las figuras 5 comparamos nuestros resultados con los de Katz [10], Kiefer y Straaten [13], Chatterjee y Magge [14], Magee y Chatterjee

[15] y Fain et al [16]. Para radios pequeños los comportamientos de todas las teorías es muy diferente.

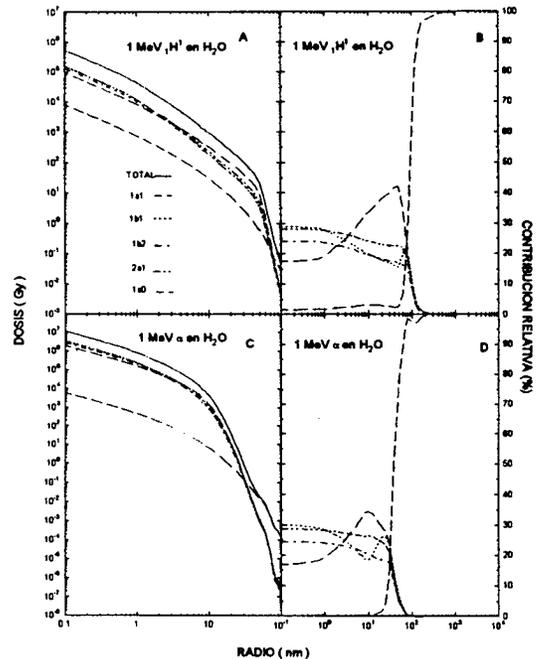


Fig 4: A y C) Contribución de cada orbital molecular a los perfiles de dosis en función del radio. B y D) Contribución relativa de cada orbital molecular a los perfiles de dosis en función del radio.

Se debe prestar especial atención a la zona de grandes radios. Es comúnmente aceptado que los perfiles de dosis decrecen proporcionalmente a $\frac{1}{r^2}$. Esto es verificado por todos los cálculos y

mediciones en una cierta zona del perfil de dosis. Pero de nuestros resultados podemos ver que esto es cierto solamente cuando la contribución principal es de los electrones externos de la molécula de agua. Esta desviación es más notoria para energías específicas bajas, ya que entonces aparece en radios menores, a pesar de estar siempre presente.

Comparando nuestros resultados con los otros modelos simples podemos apreciar dos tipos de discrepancias.

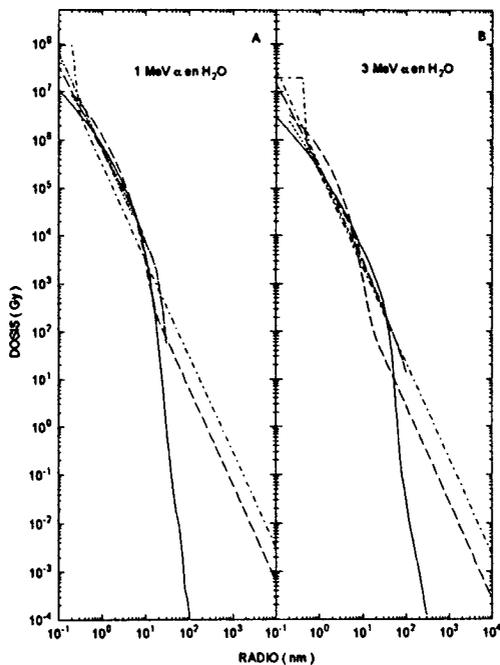


Fig 5: Perfiles de dosis en vapor de agua alrededor de la traza de un ion en función del radio. Teoría: (—), DW; (---), Katz [10]; (- · - · -), Chatterjee y Magge [14,15]; (- · · · - · -), Kiefer y Straaten [13]; (- - -), Fain et al [16].

Por un lado los resultados de Katz y Kiefer y Straaten obtienen dosis hasta un cierto radio máximo. Este radio se encuentra cuando el electrón está libre, pero es bien conocido que cuando un electrón está ligado, la energía que le puede entregar el ion es mayor. Kiefer y Straaten [13] utilizando un modelo similar al nuestro, pero basado en dinámica clásica y relaciones rango-energía, obtienen radios de penumbra los cuales para bajas energías específicas, son menores que las experimentales. Kraft y Krämer [17] atribuyen este efecto al uso de un tratamiento relativista del problema, para el cual se producen más electrones en la dirección hacia adelante, pero debido a que no consideran la dispersión múltiple en el blanco, los electrones más energéticos no son dispersados en dirección normal a la trayectoria. Sin embargo, según nuestros resultados, es claro que este efecto de debe a la no inclusión de los electrones 1s del oxígeno. En el caso de proyectiles con energía específica alta, el acuerdo con los resultados

experimentales es bueno, ya que la principal contribución es debida a los electrones externos de la molécula de agua para los radios estudiados, que se encuentran casi libres comparados con los 1s del oxígeno. El concepto de radio de penumbra aparece en este contexto como ambiguo, y sólo podemos hablar de umbrales de detección (los cuales dependen del experimento), o radios donde la dosis decrece drásticamente. Por otro lado, los modelos que extienden la dependencia $\frac{1}{r^2}$ a radios más grandes [14-16], se desvían de nuestros resultados.

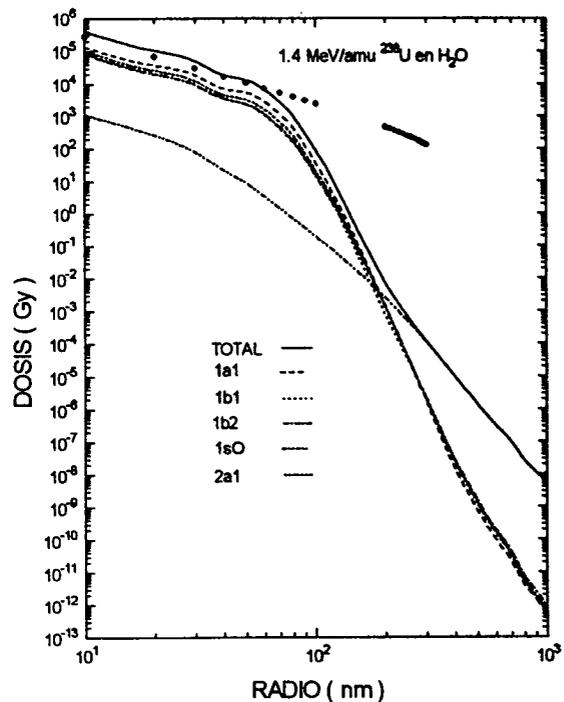


Fig. 6: Contribuciones al perfil de dosis de ^{238}U en vapor de agua. Teoría: (líneas), DW referencias en la figura; (●), Katz [10]

Finalmente en la figura 6 presentamos los perfiles de dosis de 1.4 MeV/amu ^{238}U en vapor de agua. Es claro que el perfil teórico sólo puede dar una descripción cualitativa del proceso. Weisbrod et al miden la probabilidad de inactivación en función del parámetro de impacto del ion y la calculan dentro del marco de la teoría de Katz. Experimentalmente obtienen inactivación hasta 600 nm, mientras el modelo

teórico predice dosis hasta 290 nm. En nuestro modelo es posible apreciar que podemos calcular dosis para radios aún mayores que 600 nm, observando además que la dosis en esta región se desvía del comportamiento $\frac{1}{r^2}$ proviniendo de la contribución de electrones 1s del oxígeno. En la figura aparecen también resultados de la teoría de Katz, los cuales sobrestiman nuestros cálculos para los radios grandes. Debe recordarse además que los cálculos de Katz presentan un factor de escala Z_p^2 , mientras que nuestros resultados satisfacen esta escala sólo en energía de impacto alta.

Conclusión

Usando DDCS en la aproximación CDW-EIS y un modelo simple para el transporte de los electrones pudimos obtener perfiles de dosis. Los resultados están en buen acuerdo con los experimentos y con cálculos Monte Carlo en la región de validez de la teoría. Mostramos desviaciones con la dependencia $\frac{1}{r^2}$ debido a la contribución de los electrones 1s del oxígeno. De nuestro trabajo queda claro que el radio de penumbra es un concepto ambiguo, y que simples relaciones para obtener estos radios deben ser revisadas. Esto es de principal interés para energías específicas intermedias y bajas, ya que las secciones eficaces en esta región son mayores que a grandes energías específicas, y la contribución a la dosis de los electrones de capa interna puede ser importante y medible. El buen acuerdo obtenido para altas velocidades de impacto por modelos que no tengan en cuenta electrones de capa interna, es debido a que la contribución principal, que proviene de los electrones de capas externas, se extiende a mayores radios. Además mostramos que la contribución de los electrones de capa interna puede ser de fundamental interés en el estudio de las probabilidades de inactivación en función del parámetro de impacto para proyectiles de energía específica baja e intermedia.

Referencias

1.- P.M.Zaider, D.J. Brenner y W.E. Wilson W.E; Radiation Research 95(1983), 231.

- 2.- P. Olko, J. Booz, H.G. Paretzke y W.E Wilson; Atomic and Molecular data for Radiotherapy, IAEA-TECDOC-506 (1989), 105.
- 3.- M. Krämer y G. Kraft; Radiation Environ. Biophys. 33 (1994), 91.
- 4.- J.J. Butts y R. Katz; Radiation Research 30 (1967), 855.
- 5.- U. Weisbrod, H. Bücken, G. Horneck y G. Kraft; Radiation Research 139 (1992), 250.
- 6.- X. Liu, M. Li y K.N. Yu; Phys. in Med. and Biol. 39 (1994), 1757.
- 7.- M.P.R. Waligorski; A model of heavy ion detection in physical and biological physics, Raport 1396/PL Krakow (1988).
- 8.- G.H. Olivera, A.E. Martínez, P.D. Fainstein y R.D. Rivarola; Rad. Res. 144 (1995), 271.
- 9.- W. Akande; Rad. Prot. Dos. 42 (1992), 91.
- 10.- R. Katz; Quantitative models in radiation biology, J. Kiefer Ed., Springer Verlag (1988), 57.
- 11.- C.L. Wingate y J.W. Baum; Radiation Research 95 (1976), 231.
- 12.- M. Berger; Nuclear and Atomic Data for Raditherapy and Related Radiobiology, IAEA (1988), 323.
- 13.- J. Kiefer y H. Straaten; Phys. in Med. and Biol. 31 (1986), 1201.
- 14.- A. Chatterjee y J.L. Magee; Lawrence Berkeley Lab. Rep. LBL-11220 (1980), 53.
- 15.- J.L. Magee y A. Chatterjee; Journal of Phys. Chem. 84 (1980), 3529.
- 16.- J. Fain, M. Monnin y M. Montret; Radiation Research 57 (1974), 379.
- 17.- G. Kraft y M. Krämer; Advances in Rad. Biology 17 (1993), 1.