

UNIVERSIDADE DE SANTIAGO
DE COMPOSTELA



FACULTAD DE FÍSICA
Departamento de Física de Partículas

Simulación Monte-Carlo de alcances de iones en gases

Memoria presentada por:
María Esther Estevez Aguado
como disertación para optar al
Grado de Licenciada en Física
Marzo 2007

UNIVERSIDADE DE SANTIAGO DE COMPOSTELA

Héctor Álvarez Pol, investigador Isidro Parga Pondal del Departamento de Física de Partículas de la Universidade de Santiago de Compostela

CERTIFICA:

Que la memoria titulada “**Simulación Monte-Carlo de alcances de iones en gases**” ha sido realizada por **María Esther Estevez Aguado** en el **Departamento de Física de Partículas de esta Universidad** bajo mi dirección y constituye el trabajo de **Tesina** que presenta para optar al **Grado de Licenciada en Física**.

Santiago de Compostela, Marzo 2007

Fdo: Héctor Álvarez Pol

Sir,

In your otherwise beautiful poem (The Vision of Sin) there is a verse which reads

*“Every moment dies a man,
every moment one is born.”*

Obviously, this cannot be true and I suggest that in the next edition you have it read

*“Every moment dies a man,
every moment $1\frac{1}{16}$ is born.”*

Even this value is slightly in error but should be sufficiently accurate for poetry.

...Charles Babbage (en una carta a Lord Tennyson)

Simulación Monte-Carlo de alcances de iones en gases

María Esther Estevez Aguado

Marzo 2007

Índice General

1. INTRODUCCIÓN.....	11
2. PÉRDIDA DE ENERGÍA EN GASES.....	13
2.1. DESCRIPCIÓN GENERAL.....	13
2.1.1. PODER DE FRENADO.....	13
2.1.2. CORRECCIÓN PARA IONES PESADOS: CARGA EFECTIVA	16
2.1.3. CORRECCIÓN PARA BAJAS ENERGÍAS: CORRECCIÓN DE CAPA.....	16
2.1.4. REGLA DE BRAGG	17
2.1.5. LA CURVA DE BRAGG	18
2.1.6. ALCANCE: DEFINICIONES	18
2.2. GEANT4.....	20
2.2.1. PODER DE FRENADO.....	20
2.2.2. CORRECCIÓN PARA IONES PESADOS: CARGA EFECTIVA	22
2.2.3. CORRECCIÓN PARA BAJAS ENERGÍAS: CORRECCIÓN DE CAPA.....	22
2.2.4. REGLA DE BRAGG	24
2.2.5. ALCANCES.....	25
2.2.6. TAMAÑO DEL PASO EN Geant4.....	25
2.3. SRIM Y TRIM.....	26
2.3.1. REGLA DE BRAGG	27
2.4. ATIMA	27
3. DESCRIPCIÓN DEL CÓDIGO ACTARSIM	29
3.1. DESCRIPCIÓN DEL CÓDIGO	30
3.1.1. DESCRIPCIÓN GEOMÉTRICA	30
3.1.2. PROCESOS FÍSICOS.....	31
3.1.3. GENERACIÓN DE PARTÍCULAS PRIMARIAS.....	32
3.1.4. INTERFAZ DE ANÁLISIS	32
3.2. DESCRIPCIÓN DEL MÉTODO.....	33
3.2.1. PRIMER PASO: EJECUTAR EL PROGRAMA ACTARSIM CON LA MACRO “batchTestRange.mac”	33
3.2.2. SEGUNDO PASO: EJECUTAR DENTRO DE ROOT EL PROGRAMA “analTestRange.C”	35
3.2.3. TERCER PASO (1º COMPARATIVA): EJECUTAR DENTRO DE ROOT EL PROGRAMA “macroReadCin.C”.....	36
3.2.4. TERCER PASO (2º COMPARATIVA): EJECUTAR DENTRO DE ROOT EL PROGRAMA “analBragg.C”	36
4. RESULTADOS.....	41
4.1. COMPARATIVA 1: SRIM.....	41
4.2. COMPARATIVA 2: MAYAITO	52
4.2.1. DETERMINACIÓN DE LOS PUNTOS DE INFLEXIÓN	62
5. CONCLUSIONES.....	69
APÉNDICE: ANALBRAGG.C.....	71
BIBLIOGRAFIA.....	75

1. Introducción

El funcionamiento de cualquier detector de radiación depende de la forma en que la radiación interactúa con el material del propio detector. Por ejemplo, la respuesta de los detectores de partículas cargadas depende del resultado de las interacciones con los electrones del medio.

De forma general, a medida que una partícula penetra en la materia, va perdiendo energía en interacciones sucesivas, principalmente con electrones, produciendo ionizaciones y excitaciones en los átomos. De ese modo, la partícula disminuye su velocidad continuamente en varias interacciones sucesivas hasta que finalmente se detiene. En el caso de darse una ionización, los pares de iones formados pueden ser usados como la base de la respuesta del detector.

No obstante esta visión sencilla se complica cuando se profundiza en los procesos de pérdida de energía, hasta el punto de que las diferentes aproximaciones de cada teoría o modelo hacen que exista casi una parametrización para cada material, rango de energías, partícula incidente, etc. El problema es más evidente a bajas energías, donde todas las teorías fallan, pues se desconocen los detalles de la interacción de los iones con el medio.

Esto no hace más que poner en evidencia que, después de muchos años de estudio, todavía no existe una teoría robusta y consistente que sea capaz de explicar todos los casos. Lo mejor que se puede hacer es seleccionar los parámetros y correcciones de interés correspondientes al tipo de ión, rango de energías o materiales con los que se está trabajando en donde las aproximaciones dan resultados más precisos.

En este trabajo se presentan los resultados de simulaciones Monte-Carlo del alcance de distintos iones en varios gases, en distintas configuraciones de presión y energías de incidencia, comparando diferentes códigos de simulación. El contexto físico en el que se enmarcan estas simulaciones es el estudio de las pérdidas de energía de partículas cargadas pesadas incidiendo en blancos gaseosos gruesos a bajas-medias energías.

Estas simulaciones son importantes de cara al diseño y construcción de ACTAR, un nuevo detector de tipo blanco activo, que utiliza un medio gaseoso actuando a la vez como blanco y como medio detector. Este detector podrá utilizar como blanco diferentes gases a diferentes presiones, que se escogerán en función de las necesidades del experimento a realizar. Se utilizará con haces de iones pesados a energías bajas, medias y relativistas en diferentes tipos de reacciones de interés.

En este trabajo se presta especial atención a las parametrizaciones para bajas energías, que se introducen en la simulación para estudiar los casos que se proponen. Se presentan dos comparativas; en la primera se comparan las simulaciones con resultados obtenidos mediante diferentes códigos, y en la segunda se comparan los resultados obtenidos con simulación y códigos con datos experimentales recientes.

Estas parametrizaciones se verán en el capítulo “*Pérdida de energía en gases*”, donde se hará una descripción genérica del proceso de pérdida de energía en gases para luego especificar el tratamiento que dan los códigos Geant4, SRIM2003 y ATIMA a dicho proceso.

Para la realización de estas simulaciones se desarrolló el código ActarSim, que utiliza las librerías de Geant4. Los detalles de este código junto con el método utilizado para ejecutar las simulaciones se discutirán en el capítulo “*Descripción del código ActarSim*”.

Por último, se presentarán los resultados obtenidos y sus conclusiones en los apartados correspondientes, “*Resultados*” y “*Conclusiones*”.

2. Pérdida de energía en gases

En este capítulo se hace una descripción general de la teoría de la pérdida de energía en un medio, que luego se acotará al cálculo a bajas - medias energías, blancos gaseosos gruesos y partículas cargadas pesadas. Se estudiará también la forma en la que los códigos de simulación Geant4, SRIM/TRIM y ATIMA hacen el cálculo de las pérdidas en este mismo contexto físico. En el próximo capítulo, “*Descripción del código ActarSim*” se verá cómo funciona el código desarrollado para hacer las simulaciones, basado en Geant4.

2.1. Descripción general

2.1.1. PODER DE FRENADO

El poder de frenado lineal S se define como el valor esperado de la tasa de pérdida de energía por unidad de espacio recorrido x por una partícula cargada determinada, de energía cinética E , en un medio absorbente dado de número atómico Z .

La expresión de uso más extendido para el cálculo del poder de frenado fue obtenida por H. Bethe [1] utilizando la aproximación de Born a primer orden, con un enfoque mecanocuántico, y basándose en las suposiciones de que el ión incidente está totalmente libre de electrones, se mueve mucho más rápido que los electrones del blanco, y es mucho más pesado que ellos.

Más tarde, Bloch corrigió sus resultados uniendo los resultados de la aproximación cuántica de Bethe con la aproximación clásica de Bohr, y finalmente Fano [2] extendió estos trabajos a colisiones inelásticas en medios condensados (líquidos y sólidos) para obtener la expresión conocida como la fórmula de Bethe-Bloch o “B-B”, que se escribe como sigue [3]:

$$S = -\frac{dE}{dx}(part, E, Z) = 4\pi r_e^2 m_e c^2 NZ \frac{z^2}{\beta^2} \left[\frac{1}{2} \ln \left(\frac{2m_e c^2 \beta^2 \gamma^2 T_{max}}{I^2} \right) - \beta^2 - \frac{\delta}{2} - \frac{C_e}{Z} \right]$$

$$N = \frac{N_A \rho}{A}$$

En esta expresión, r_e y m_e son el radio clásico del electrón y su masa en reposo, siendo N , ρ , Z y A , parámetros del medio absorbente que representan su densidad atómica y volúmica, y los números atómico y másico del mismo, respectivamente; β y z son la velocidad y el número atómico de la partícula incidente, T_{max} es la máxima energía transferible a un electrón del medio, δ es la corrección de densidad, que para gases es despreciable, por lo cual se ignorará en este trabajo, C_e es una corrección de capa de la que se hablará más adelante, c es la velocidad de la luz y N_A el número de Avogadro. El parámetro I representa el potencial medio de ionización y excitación del medio y se determina de forma experimental o semiempíricamente [4]. Corrige los niveles de energía mecanocuánticos disponibles para la transferencia de energía a los electrones del blanco y las diferencias que hay entre los diferentes estados de fase del blanco. Las unidades de S son MeV/cm o J/m . Para que no haya dependencia con la densidad del medio también se define el “*poder de frenado másico*”, $S = -dE/\rho dx$, en unidades de $MeV cm^2/g$ o $J m^2/kg$.

Se consideran dos contribuciones al poder de frenado, las pérdidas por colisión y las pérdidas por radiación, aunque esta última contribución (también llamada radiación de frenado o “*Bremmstrahlung*”) es más importante para electrones y partículas muy ligeras. En este trabajo se estudian núcleos ligeros y de masa intermedia, de modo que solo se considerarán pérdidas por colisión.

Las pérdidas por colisión tienen dos componentes: las pérdidas por **frenado nuclear**, es decir, la energía cedida a los núcleos positivos del medio, y las pérdidas por **frenado electrónico**, o la energía cedida a los electrones del medio. Para iones ligeros a altas energías, el ión está libre de sus electrones orbitales, la componente electrónica es más importante que la nuclear, y se puede considerar que las partículas interactúan con el blanco solo a través de procesos electromagnéticos, ignorándose las interacciones fuertes. Sin embargo, para energías por debajo de $1 keV$, ambos son del mismo orden, ya que se transfiere también energía a los núcleos por medio de colisiones elásticas no ionizantes de tipo coulombiano que hay que tener en cuenta en la simulación.

El comportamiento de S con la energía de la partícula incidente se puede decir de forma muy general que es suave, y se puede inferir del comportamiento del primer factor. Para una partícula no relativista ($v \ll c$), S se comporta como $1/v^2$, es decir, de forma inversa con la energía. Esto se entiende porque, a energías bajas, la partícula pasará más tiempo en el entorno de interacción de los electrones del medio, y éstos le podrán extraer más energía. A medida que la energía aumenta, este término va perdiendo su influencia, mientras que la dependencia con v en el logaritmo de la fórmula de B-B hace que éste siga aumentando. Para partículas ultrarelativistas, el término v^2/c^2 tiende a 1 y domina el valor del logaritmo. En resumen; de forma general, al aumentar la energía de la partícula, el valor de S irá disminuyendo rápidamente hasta llegar a un mínimo, a partir del cual empezará a crecer, aunque más suavemente.

Además, el poder de frenado depende del número atómico de la partícula y del medio. Con el primero, S aumenta cuadráticamente, así que para partículas con la misma velocidad, la única diferencia será esta. Dado que la masa de la partícula se supuso mucho mayor que la de los electrones del medio, las pérdidas por ionización no dependen de la masa de la partícula: a igual velocidad, si aumentamos la masa, la energía también aumenta, por lo que se compensan, y B-B no se ve afectada. Respecto al material, el producto NZ representa su densidad de electrones, de modo que S aumentará de forma lineal cuanto más denso sea el material y mayor número atómico tenga.

En la Fig. 1 podemos ver la dependencia de S con la energía para muones en cobre [3].

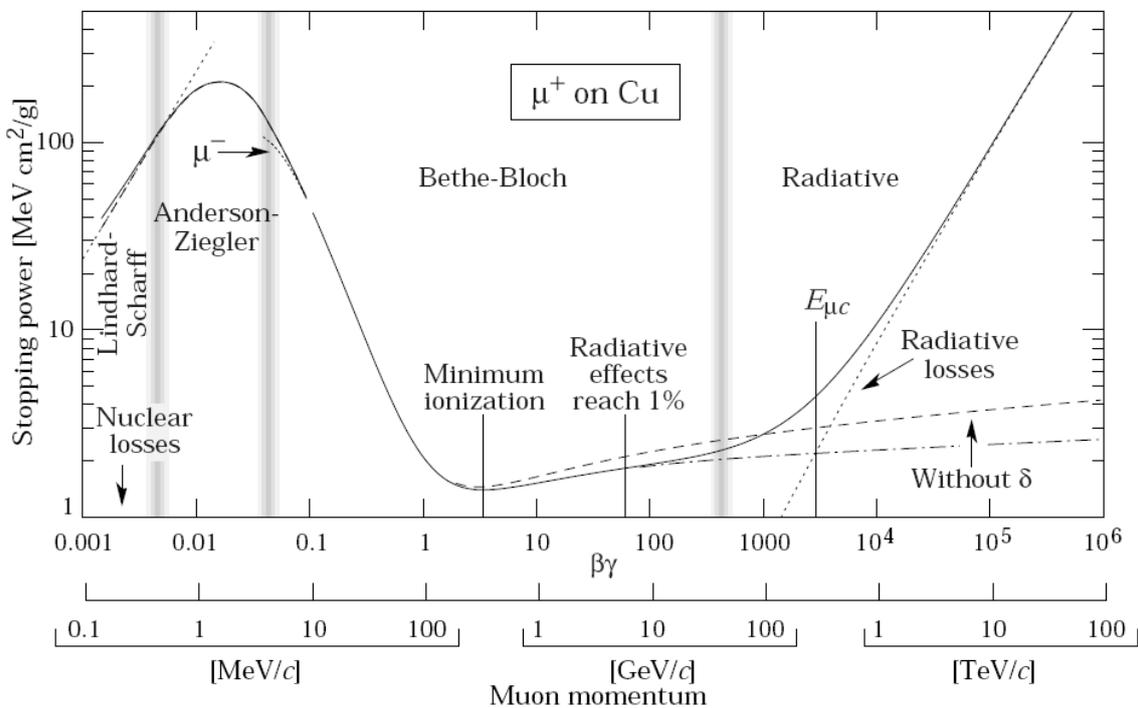


Fig. 1: Poder de frenado ($\langle -dE/\rho dx \rangle$) para muones positivos en cobre en función de $\beta\gamma = p/Mc$ en un rango de nueve órdenes de magnitud en momento (doce en energía). La curva sólida indica el poder de frenado total. Las bandas grises indican los límites entre diferentes aproximaciones o correcciones a la fórmula de B-B discutidas en [3].

Las aproximaciones y suposiciones utilizadas para obtener la fórmula de B-B hacen que su uso no se extienda a todos los escenarios y haya que aplicar correcciones (por ejemplo, para partículas cargadas pesadas la aproximación de Born no es válida). En la Fig. 1 vemos la zona energética de validez de la expresión de B-B y diferentes correcciones en los rangos en los que no es válida. En los siguientes apartados se comentarán dos de estas correcciones, la corrección de capa y la corrección de carga efectiva.

2.1.2. CORRECCIÓN PARA IONES PESADOS: CARGA EFECTIVA

A bajas energías de la partícula incidente, el intercambio de carga entre la partícula y el material absorbente se vuelve importante. Por eso influye el estado de carga del ión en el medio, y lo ligados que estén los electrones a los núcleos. La partícula cargada positivamente tenderá a recoger electrones del medio, lo cual reducirá su carga y su pérdida lineal de energía. Esto se produce a una energía por debajo de los 2 MeV para protones [5]. Al final de su traza, la partícula habrá acumulado z electrones y se volverá un átomo neutro.

En este límite a bajas velocidades de la fórmula de B-B, a veces se define una “carga efectiva” como aquel estado de carga requerido para reducir la B-B de tal modo que se ajuste al experimental, así se tiene en cuenta la neutralización parcial de algunos de los iones o se compensa la polarización parcial de los electrones del blanco. El problema está en encontrar dónde empieza el frenado para una partícula con gran energía y hasta cuándo podemos considerar que la carga de la partícula no está apantallada por los electrones orbitales. Se supone que la fórmula de B-B funciona bien a energías por encima de 1 MeV/u para iones ligeros como el H y He [6].

2.1.3. CORRECCIÓN PARA BAJAS ENERGÍAS: CORRECCIÓN DE CAPA

Al calcular algunas contribuciones a la fórmula de B-B se despreciaron los efectos de las ligaduras atómicas; por eso ésta falla cuando la velocidad de las partículas incidentes deja de ser mucho mayor que la de los electrones del medio, que es una de las suposiciones que se hizo para obtener la fórmula de S .

El factor $1/v^2$ implica que S crece sin límite en proporción a la inversa de la energía a medida que las partículas se ralentizan y se aproximan a velocidad cero. Pero entonces la transferencia de energía es menos efectiva, ya que, a bajas energías (para ligeros, y a todas las energías para pesados), la probabilidad de colisión con los electrones de las capas atómicas internas disminuye. Si la velocidad de la partícula es del orden de la velocidad de los electrones de la capa K, la partícula empieza a recoger electrones. El frenado todavía es mayoritariamente electrónico, pero la velocidad del ión continúa descendiendo. Cuando ésta es comparable a la velocidad de los electrones de valencia, las pérdidas por excitación de los átomos del medio son despreciables frente a la pérdida por colisiones elásticas con los núcleos, y empieza a actuar el poder de frenado nuclear. Es decir, la energía transferida en la interacción llega a no ser suficiente como para excitar o ionizar a los átomos del material a todos los estados posibles, con lo que se está sobreestimando la pérdida de energía.

En ese caso el potencial medio I que se emplea en el cálculo de la fórmula de B-B ya no es correcto. Para resolver el problema cabrían dos alternativas diferentes: calcular un I diferente para cada velocidad de la partícula incidente (lo que no resulta práctico), o simplemente utilizar el valor de los I medidos que existen tabulados [4] y después corregir por el error cometido. Esa corrección es la corrección de capa.

Se introduce entonces a la fórmula de B-B el factor de corrección sustractivo C/Z [22], que tiene el mismo valor para todas las partículas de una cierta velocidad, y cuyo valor es función del medio y de la velocidad de la partícula. A bajas energías su valor es considerable, mientras que a altas energías tiende a cero. El término se calcula teniendo en cuenta detalladamente la interacción de la partícula con cada órbita electrónica en varios elementos. Como la velocidad de la partícula decrece poco a poco, para estudiar las colisiones partícula-electrón se debe hacer una evaluación detallada de la ligadura orbital de cada uno de los electrones del blanco para obtener poderes de frenado precisos. Este término corrige los poderes de frenado para protones con energías entre 1 y 100 MeV en un 6% como máximo (a 10 MeV/u), mientras que a 100 MeV/u la corrección es del 1%. [6].

Una discusión detallada de las correcciones para bajas energías a la fórmula de B-B se ofrece en [7]. Cuando las correcciones se introducen apropiadamente, la precisión de la fórmula de B-B es de un 1% para partículas con velocidades hasta $\beta \approx 0,05$ (energías de 1 MeV para protones).

Para el rango $0,01 < \beta < 0,05$ no hay una teoría satisfactoria, pero para protones, se suele utilizar la fórmula fenomenológica desarrollada por Andersen y Ziegler [8]. En esta región de baja velocidad se produce un efecto de apantallamiento de la carga del ión o partícula cargada que a veces se denomina “*modelo dieléctrico*”.

Para partículas que se mueven con $\beta < 0,01$ (más o menos la velocidad de los electrones de las órbitas más externas), se usa la descripción de Lindhard para el poder de frenado electrónico, el cual sería proporcional a β . Un desarrollo resumido de esta descripción se puede ver en el apéndice de [6] y en [9].

A energías por debajo de 1 eV para protones, la pérdida total de energía está dominada por las pérdidas nucleares no ionizantes (poder de frenado nuclear). En cualquier caso, la corrección de capa no es correcta por debajo de 1 MeV/u [6].

2.1.4. REGLA DE BRAGG

Para calcular las pérdidas de energía en una mezcla o compuesto (como por ejemplo el isobutano), el absorbente se puede considerar como formado por capas delgadas de elementos puros con pesos proporcionales a la densidad electrónica del elemento en el absorbente:

$$\frac{1}{N_c} \left(\frac{dE}{dx} \right)_c = \sum_i W_i \frac{1}{N_i} \left(\frac{dE}{dx} \right)_i$$

donde la suma se toma a todos los elementos del absorbente, N es la densidad atómica, i es el número de elemento, W_i representa la fracción de elemento presente en la mezcla y $(dE/dx)_i$ es la pérdida de energía en el elemento puro i -ésimo en el compuesto c .

2.1.5. LA CURVA DE BRAGG

Se le llama así a la curva obtenida de la representación de la pérdida de energía de partículas cargadas que penetran en un material (Fig. 2). Esta curva es prácticamente plana (ligeramente ascendente) al principio, donde la partícula tiene aún una alta velocidad y está perdiendo energía de forma más o menos constante, y después alcanza un valor máximo, conocido como “*pico de Bragg*” donde el ión está ya muy ralentizado, por lo que empieza a recoger carga y la curva decae. Esta caída puede ser más o menos abrupta, dependiendo del número atómico del ión. Así, las partículas con el número mayor de cargas nucleares empiezan a recoger electrones más temprano en su proceso de desaceleración.

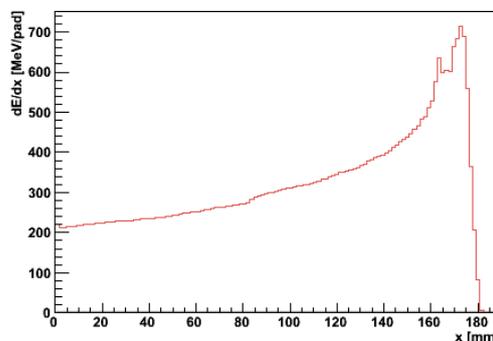


Fig. 2: Representación de la curva de Bragg en un gráfico de pérdida de energía frente a la distancia de penetración para un ión de ^{13}C a 3,01 MeV/u en H_2 a 1800 mbar.

2.1.6. ALCANCE: DEFINICIONES

Las partículas cargadas están caracterizadas por un alcance definido en un material absorbente dado, que representa la distancia más allá de la cual no penetrarán más partículas a una determinada energía. El alcance de partículas cargadas de una cierta energía es una cantidad única para cada material.

De forma general, el alcance \mathcal{R} de una partícula cargada de un cierto tipo y energía en un medio dado es el valor esperado del camino recorrido que sigue hasta que se detiene [10]. Pero la pérdida de energía es un proceso estadístico y el alcance así definido es una cantidad no estadística, es decir, el alcance no es una cantidad que permita caracterizar a cada traza individualmente. Ni las partículas cargadas viajan en línea recta en la materia, ni las partículas monoenergéticas se detienen después de atravesar la misma distancia. Este hecho, y las diferentes aplicaciones del alcance, han hecho necesaria la definición de otros tipos de alcance según diferentes utilidades de éstos.

Por ejemplo, se define el **alcance medio** como el grosor de material que reduce la intensidad de radiación incidente a exactamente la mitad de su valor en ausencia de material, es decir, la distancia a la cual se detienen la mitad de las partículas. Esta es la definición que se suele utilizar en tablas de valores numéricos del alcance [11].

Por otro lado, el **alcance extrapolado**, es aquel que se obtiene de extrapolar a cero la porción lineal del final de la curva de transmisión. La curva de transmisión se obtiene al representar el número de partículas que han sobrevivido después de penetrar un grosor de material absorbente frente al espesor de éste.

El **alcance proyectado** de una partícula cargada de un cierto tipo y energía inicial en un medio dado es el valor esperado de la mayor profundidad de penetración alcanzada por la partícula en su dirección inicial [Figuras 3, 4]. Ésta es también una cantidad no estadística. Además, para partículas con trayectorias muy tortuosas, como los electrones, su valor puede ser muy diferente del valor real del alcance, siendo menor el alcance proyectado [10].

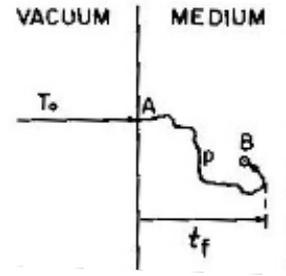


Fig. 3: En esta imagen, t_f representa el alcance proyectado, que también se denota por $\langle t \rangle$.

El **alcance máximo** es el grosor de material más allá del cual no se observa la penetración de más partículas [Fig. 4]. Es decir, es la distancia de máxima profundidad de penetración. Sería el alcance de aquellas partículas que sufren muy poca dispersión a lo largo de su camino.

Por último, se define el **alcance CSDA**, (“*Continuous Slowing-Down Approximation*”) obtenido por aproximación de frenado continuo para una partícula que pierde energía solamente por ionización o excitación atómica [Fig. 4]. Esta aproximación se basa en el hecho de que la energía de la partícula incidente suele ser mucho mayor que la energía de excitación o ionización cedida por colisión, con lo que la pérdida de energía a lo largo del recorrido puede considerarse continua. Este alcance se define como:

$$\mathcal{R}_{CSDA} = \int_{E_0}^0 \left[-\frac{1}{\rho} \frac{dE}{dx} \right]^{-1} dE$$

Si $-dE/\rho dx$ se toma en $MeV \text{ cm}^2/g$ y E en MeV , entonces \mathcal{R}_{CSDA} estaría en g/cm^2 . El problema es hacer la integral, ya que si la partícula frena tendrá que haber pasado por energías muy bajas, que es justo donde falla B-B.

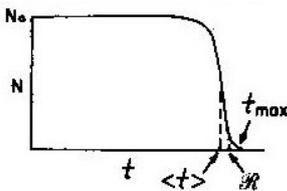


Fig. 4: Se representa la curva de transmisión ignorando reacciones nucleares (número de partículas incidentes N frente a espesor del medio t), y se indican el alcance proyectado $\langle t \rangle$, el alcance CSDA \mathcal{R} , y el alcance máximo, t_{max} . A espesores pequeños, el número de partículas que sobreviven coincide con el inicial N_0 , pero a partir de un cierto espesor esta cifra disminuye. La forma curvada es debida a la dispersión, es decir, se esperan fluctuaciones estadísticas en el alcance.

El alcance de una partícula cargada pesada se puede obtener a partir de los datos para protones sin más que reescalar [10]. En primera aproximación, el poder de frenado en un medio será el mismo para partículas de igual número atómico y velocidad, pero el alcance será proporcional a la masa, ya que las partículas más pesadas tendrán mayor energía cinética que disipar y por lo tanto necesitarán recorrer un espacio mayor. El procedimiento para el cálculo es el siguiente: Se calcula la energía del protón que corresponde a la energía que tiene el ión a la misma velocidad. Esto se hace utilizando la expresión $T_p = Tm_p/m$, y luego se busca en las tablas el $R_{CSDA,p}$ correspondiente a esa T_p . El alcance R_{CSDA} para ese ión sería entonces $R_{CSDA} = (R_{CSDA,p}m)/(z^2 m_p)$.

2.2. Geant4

El código de Geant4 [29] es capaz de simular los procesos dominantes que gobiernan la interacción de partículas e iones con la materia, en el rango de keV a algunos TeV . Es un código Monte-Carlo capaz de simular una configuración experimental al completo con todos los detectores y seguir a las partículas en sus trayectorias dentro de ellos.

Los procesos de pérdida de energía para e^-/e^+ , μ^-/μ^+ , y hadrones son similares, por eso Geant4 usa descripciones generales para todas las partículas cargadas, además de las descripciones de procesos específicos para ciertas partículas.

2.2.1. PODER DE FRENADO

El proceso de ionización de hadrones cargados que inciden en un medio material está descrito en Geant4 por la clase *G4hIonisation* y el de iones por la clase *G4ionIonisation*, que simulan tanto la pérdida de energía continua por ionización como la pérdida de energía discreta, es decir, con producción de electrones delta¹.

El método consiste en fijar una energía umbral T_{cut} (que en Geant4 es, por defecto, mayor o igual que $1 keV$), que da la energía cinética de corte o valor umbral de energía cinética transmitida a una partícula secundaria (en este caso a un electrón delta), para toda partícula cargada incidente en todos los materiales. Por encima de T_{cut} las pérdidas se consideran discretas y se simulan por medio de la producción explícita de las partículas secundarias que se generan, mientras que por debajo de T_{cut} se calculan las pérdidas de energía considerándolas continuas. Las partículas secundarias que se produzcan con energías T por debajo del umbral definido por el usuario no se crean y su energía se deposita localmente.

La tasa media de pérdida de energía de una partícula con energía total E , masa m y número atómico z , con sección eficaz σ de eyección de una partícula secundaria de energía cinética T , en un medio con n_{at} átomos por unidad de volumen, viene dada por:

$$\frac{dE_{soft}(E, T_{cut})}{dx} = n_{at} \int_0^{T_{cut}} \frac{d\sigma(z, E, T)}{dT} T dT$$

¹ En las colisiones duras, el proyectil incide sobre el átomo del medio con un pequeño parámetro de impacto. En este caso lo más probable es que el proyectil interactúe con un solo electrón del átomo que adquiere una alta energía cinética. Este tipo de electrones se llaman “electrones delta”, y depositan la mayor parte de su energía a una cierta distancia de la trayectoria del proyectil.

Si hay varios procesos, se calcula esta cantidad para cada uno de ellos y se suman para obtener la tasa media de pérdida de energía. Para obtener los alcances y las pérdidas de energía continuas, Geant4 calcula estas cantidades y hace una tabla, con la que calcula los alcances para los materiales dados, así como el inverso de estos alcances, de los que se obtienen las funciones $f_T(r)$, que dan la energía cinética de la partícula para un alcance r dado. El intervalo de energía para estas tablas se extiende de 100 eV a 100 TeV en 120 bins.

Para calcular la pérdida **continua** de energía tal que $0 < T < T_{cut} < T_{max}^2$, se calculan las tablas integrando esta expresión con lo que se obtiene la fórmula del poder de frenado restringido dada por:

$$S_e = \left. \frac{dE}{dx} \right|_{T < T_{cut}} = 2\pi r_e^2 m_e c^2 n_{el} \frac{z^2}{\beta^2} \left[\ln \left(\frac{2m_e c^2 \beta^2 \gamma^2 T_{up}}{I^2} \right) - \beta^2 \left(1 + \frac{T_{up}}{T_{max}} \right) - \frac{2C_e}{Z} \right]$$

Los valores de I se toman de [4], y $T_{up} = \min(T_{cut}, T_{max})$. Cuando T_{up} es igual a T_{max} recuperamos la expresión de B-B.

Estas tablas se construyen solo para protones. Como la pérdida de energía por ionización no depende de la masa de la partícula sino de su velocidad, la pérdida de energía para otras partículas cargadas más pesadas que el protón con energía cinética T y masa M será la misma que para el protón a esa misma velocidad. Geant4 calcula la pérdida de energía para partículas cargadas pesadas a partir de las tablas para protones a la energía cinética escalada descrita por la expresión:

$$T_p(\text{escalada}) = \frac{M_p}{M} T$$

En el cálculo de las pérdidas de energía **discretas**, la producción de partículas secundarias con energías $T > T_{cut}$ se muestrean a través de cada proceso concreto de pérdida de energía. En el caso de partículas cargadas pesadas la producción de rayos delta se simula solo por encima de $T_c = \min\{\max\{I, T_{cut}\}, T_{max}\}^3$. Para procesos discretos, se define la sección eficaz total (por átomo) de eyección de un electrón delta con $T > T_c$ como:

$$\sigma(z, E, T_c) = \int_{T_c}^{T_{max}} \frac{d\sigma(z, E, T)}{dT} dT$$

En el caso del electrón, T_{max} viene dada por la expresión:

² T_{max} es la máxima energía cinética transferible a una partícula secundaria libre en una colisión, véase una expresión para electrones en la página siguiente.

³ Notar que cuando $T_c = T_{max}$ la integral de la sección eficaz se hace cero.

$$T_{\max} = \frac{2m_e c^2 (\gamma^2 - 1)}{1 + 2\gamma(m_e / m) + (m_e / m)^2}$$

Así, las pérdidas de energía por producción de secundarios se obtienen a partir de las correspondientes secciones eficaces, donde la expresión de $d\sigma / dT$ utilizada dependerá del spin. A bajas energías, las secciones eficaces totales a una cierta energía de incidencia E se obtienen de las fuentes (ver 2.2.3.) por interpolación:

$$\log|\sigma(E)| = \frac{\log \sigma_1 \log(E_2 / E) + \log \sigma_2 \log(E / E_1)}{\log(E_2 / E_1)}$$

donde E_1 y E_2 son las energías más cercanas por debajo y por encima de E para las cuales se dispone de datos (σ_1 y σ_2).

2.2.2. CORRECCIÓN PARA IONES PESADOS: CARGA EFECTIVA

Para iones o hadrones se suele utilizar la carga efectiva (ver 2.1.2.) para calcular el poder de frenado S_{ei} del ión a partir del poder de frenado para el protón, S_{ep} :

$$S_{ei}(T) = z_{eff}^2 S_{ep}(T_p).$$

Esta z_{eff} debe ser utilizada en todas las expresiones en lugar de z . Para partículas rápidas sus valores coinciden, pero para partículas lentas no sucede lo mismo, dado que un ión lento recogerá electrones del medio al avanzar. La expresión que define a z_{eff} es la siguiente:

$$z_{eff} = \gamma_i z$$

siendo γ_i la carga fraccional efectiva parametrizada para el helio y para iones pesados según [12], que tiene en cuenta el apantallamiento calculando la carga fraccional promedio en función de la velocidad. Antes y después de cada paso, la carga dinámica se recalcula y se guarda en la clase *G4Dynamicparticle*, donde puede ser utilizada no solo para cálculos de pérdida de energía sino también para el muestreo del transporte en presencia de campos electromagnéticos.

2.2.3. CORRECCIÓN PARA BAJAS ENERGÍAS: CORRECCIÓN DE CAPA

A bajas energías se utiliza la clase *G4hLowEnergyIonisation* para calcular pérdidas de energía discretas y continuas por hadrones o iones. La estructura de capas atómica es más importante a bajas energías, de modo que los procesos de baja energía hacen uso directo de los datos de secciones eficaces de la teoría de capas. Geant4

dispone de estos datos para energías desde 250 eV hasta 100 GeV, para elementos de número atómico desde 1 hasta 99. Para estos cálculos se utilizan tanto modelos teóricos como datos evaluados, cuyas fuentes son EPDL97 [33], EEDL [34], EADL [35], el Report 49 de la ICRU (“*International Commission on Radiation Units*”) [7] y algunos libros de J. F. Ziegler sobre el poder de frenado y alcances de iones [8] [12] [16].

Existe una variedad de aproximaciones fenomenológicas para la corrección de capa de la fórmula de B-B (el término C_e/Z del apartado 2.1.3.). Geant4 utiliza una fórmula semiempírica, aplicable a todos los materiales, y debida a Barkas [36]:

- Si $\beta\gamma > 0,13$ ($T_p > 7,9$ MeV) :

$$C_e(I, \beta\gamma) = \frac{a(I)}{(\beta\gamma)^2} + \frac{b(I)}{(\beta\gamma)^4} + \frac{c(I)}{(\beta\gamma)^6}$$

- Si $\beta\gamma \leq 0,13$ ($T_p \leq 7,9$ MeV) :

$$C_e(I, \beta\gamma)|_{\beta\gamma \leq 0,13} = C_e(I, \beta\gamma = 0,13) \frac{\ln(T/T_{2l})}{\ln(7,9MeV/T_{2l})}$$

siendo $T_{2l} = 2$ MeV.

Se define:

$$T_{lim} = 2MeV \times \frac{M}{m_p}$$

Si la energía cinética de la partícula es mayor que T_{lim} , se calcula el poder de frenado a partir de la fórmula de B-B con esta corrección de capa. Si la energía cinética es menor que T_{lim} , se utiliza una fórmula parametrizada simple de la pérdida de energía, utilizada en la clase *G4BraggModel*.

En la zona de energías por debajo de T_{lim} , entramos en velocidades menores que $0,05c$ ($T_p = 1$ MeV) y falla B-B. La región $0,01 < \beta < 0,05$ es donde ocurre el pico de Bragg de ionización, pero no está explicada por teorías precisas. Para velocidades mucho menores ($\beta < 0,01$), el poder de frenado es básicamente nuclear, y el modelo del gas de electrones libres predice que es proporcional a la velocidad, pero éste no es un formalismo exacto.

Geant4 utiliza la siguiente parametrización para el poder de frenado **electrónico** por debajo de T_{lim} (implementada en la clase “*G4Ziegler1977p*”) [7] [8]:

- $S_e = A_0 \sqrt{T_p}$ (se usa el modelo del gas de electrones libres) $T_p < 1 \text{ keV}$,
- $S_e = A_1 E^{1/2}$, $1 \text{ keV} < T_p < 10 \text{ keV}$,
- $S_e = \frac{S_{low} S_{high}}{S_{low} + S_{high}}$, $10 \text{ keV} < T_p < 1 \text{ MeV}$,
 - $\Rightarrow S_{low} = A_2 E^{0.45}$,
 - $\Rightarrow S_{high} = \frac{A_3}{E} \ln \left(1 + \frac{A_4}{E} + A_5 E \right)$,
- $S_e = \frac{A_6}{\beta^2} \left[\ln \frac{A_7 \beta^2}{1 - \beta^2} - \beta^2 - \sum_{i=0}^4 A_{i+8} (\ln E)^i \right]$, $1 \text{ MeV} < T_p < T_2$,
- $S_e = S_e(T_p > T_2) \left(1 + B \frac{T_2}{T_p} \right)$ $T_p > T_2$.

donde $E = T_p / m_p$ [keV/amu], T_2 es un valor arbitrario entre 2 MeV y 100 MeV, B se determina para cada material de modo que haya continuidad en $T_p = T_2$, y los trece parámetros A_i difieren para cada elemento con Z de 1 a 92 [8]. Geant4 ofrece también otras parametrizaciones alternativas [13].

El poder de frenado **nuclear** se simula utilizando una parametrización universal para la energía reducida del ión en el medio de masa M (implementado en la clase “G4Ziegler1977nuclear”):

$$\varepsilon = \frac{32,536TM}{z_{eff} Z(m+M) \sqrt{z_{eff}^{0.23} + Z^{0.23}}}$$

El poder de frenado nuclear universal s_n fue determinado por J. Moliere en el marco del potencial de de Thomas-Fermi [14]. En [7] se tabulan estos resultados, que Geant4 implementa en su código. Para poder utilizar este poder de frenado Geant4 hace una transformación de unidades de la siguiente manera:

$$S_n = s_n \frac{8,462zZm}{(m+M) \sqrt{z^{0.23} + Z^{0.23}}}$$

2.2.4. REGLA DE BRAGG

En el caso de que el medio sea un compuesto o una mezcla, el poder de frenado se calcularía por medio de la regla de Bragg (ver 2.1.4.), pero a baja energía la energía cedida a los electrones de cualquier material depende de la estructura orbital y de excitación detallada del material, y la regla de Bragg falla. En ese caso, lo que hace Geant4 depende de los datos de que disponga. En el caso del C_4H_{10} , único compuesto utilizado en las simulaciones de este trabajo, solo hay datos para una energía de incidencia determinada, de modo que se tiene en cuenta la fórmula química, que se toma como un atributo especial en la descripción de materiales en Geant4, y el cálculo se hace basándose en la regla de Bragg y teniendo en cuenta el factor químico del compuesto.

2.2.5. ALCANCES

Una vez calculadas las tablas de poderes de frenado el alcance se calcula como:

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

donde la integral se resuelve analíticamente para la parte de baja energía y numéricamente por encima de una energía límite, y el resultado está dado en unidades de longitud.

2.2.6. TAMAÑO DEL PASO EN Geant4

Geant4 utiliza métodos Monte-Carlo para generar sucesos y seguir a las partículas a través de geometrías dadas. El rastreo de una partícula en Geant4 a lo largo del dispositivo simulado pasa por dividir su trayectoria en una serie de pasos de un cierto tamaño. En principio, este tamaño se calcula en función de las interacciones muestreadas y sus probabilidades, que están relacionadas con las secciones eficaces de interacción, aunque es posible fijarlo a mano.

Para una partícula de energía E , el recorrido libre medio o longitud de interacción por un proceso determinado es:

$$\lambda = \frac{1}{\sum_i \sigma_i(E)n_i}$$

donde la suma es a todos los elementos que contribuyen a la composición del material, las secciones eficaces σ_i se calculan con las expresiones vistas y n representa la densidad atómica. Para ciertos materiales no se utiliza este método sino el factor químico (ver 2.2.4.).

Todos los procesos físicos asociados con una clase de partícula están relacionados con una longitud de interacción o tiempo de desintegración. Se selecciona el proceso con la longitud de paso más pequeña y se toman las acciones definidas en él. Estas acciones son de tres tipos, lo que pasa aún si la partícula no se está moviendo (por ejemplo desintegración radiactiva), lo que está sucediendo continuamente a lo largo del paso (por ejemplo, la pérdida de energía mientras avanza), y lo que se hace después del paso (por ejemplo producción de partículas secundarias).

La pérdida de energía continua impone un límite al tamaño del paso, ya que las secciones eficaces dependen de la energía de la partícula. Se supone un tamaño de paso lo suficientemente pequeño como para que las secciones eficaces permanezcan aproximadamente constantes durante el paso. Cuanto menor sea el tamaño del paso mayor precisión se obtiene, pero también se requiere mayor tiempo de computación.

Un buen compromiso es no permitir que el alcance de la partícula decrezca más del 20% a lo largo del paso. Como esta condición da longitudes de paso muy pequeñas para partículas con energías por debajo de 0,5 MeV, Geant4 introduce también un límite inferior al tamaño del paso, que puede ser sobrescrito por el usuario.

Después de cada paso, si la deposición de energía es menor que el 5% de la energía cinética de la partícula, se utilizan las tablas de dE/dx calculadas, y si la deposición es mayor, se calcula la pérdida de energía media como:

$$\Delta T = T_o - f_T(r_o - x)$$

donde T_o es la energía cinética, r_o es el alcance al inicio del paso “ x ” y $f_T(r)$ es la inversa de las tablas de alcances calculada por Geant4, que da la energía cinética de la partícula para un valor del alcance r .

2.3. SRIM y TRIM

SRIM [15] (“*the Stopping and Range of Ions in Matter*”) consiste en un conjunto de programas para calcular el poder de frenado y alcance de iones en el material en un rango de energía entre 10 eV y 2 GeV, usando un tratamiento mecanocuántico de las colisiones entre iones y átomos.

TRIM (“*the TRansport of Ions in Matter*”) es el programa más completo que se incluye con este paquete. TRIM acepta como entrada blancos complejos hechos de materiales compuestos de hasta ocho capas, cada una de diferentes materiales. Calcula la distribución final en 3D de los iones y también todos los fenómenos cinemáticos asociados con la pérdida de energía del ión.

El código configura ciertos algoritmos estadísticos que permiten al ión saltar entre colisiones calculadas y después promediar los resultados de la colisión sobre el intervalo considerado. Durante las colisiones, el ión y los átomos del blanco interactúan por colisiones coulombianas apantalladas, que incluyen el intercambio y las interacciones de correlación entre las capas de electrones solapadas. Calcula las pérdidas de energía utilizando tablas que fueron originalmente derivadas en 1984 utilizando los métodos descritos en el libro de uno de sus autores, J. F. Ziegler [16]. Estos valores fueron completamente revisados y mejorados en 1988 y otra vez en 1995. El estado de carga del ión dentro del blanco se describe usando el concepto de carga efectiva, que incluye un estado de carga dependiente de la velocidad y apantallamiento de gran alcance debido al mar de electrones colectivo del blanco. Tanto SRIM como Geant4 toman muchas de las parametrizaciones del libro de Ziegler. El algoritmo se puede encontrar en [17].

2.3.1. REGLA DE BRAGG

En apartados anteriores se vio como el poder de frenado en un compuesto se calcula por medio de la “Regla de Bragg” (ver 2.1.4.).

Para calcular el poder de frenado en compuestos, SRIM utiliza la aproximación “CAB” (“*Core And Bond*”), según la cual los poderes de frenado en compuestos se pueden predecir utilizando la superposición del frenado producido por los “cores” atómicos y el frenado debido a los electrones de ligadura. El frenado del core seguirá la regla de Bragg para los átomos del compuesto (suma ponderada del frenado de cada uno de sus átomos), pero las ligaduras químicas del compuesto contendrán las correcciones, evaluadas según la naturaleza química del compuesto. SRIM solo puede calcular la corrección para siete elementos, H, C, N, O, F, S y Cl, los más comunes en compuestos y los que tienen el efecto de ligadura más grande. Utiliza las correcciones para 100 compuestos obtenidas a partir de 162 experimentos para obtener una precisión del 2% en el pico de la curva de frenado para H y He. En el caso de hidrocarburos gaseosos, como el isobutano, se incluye una corrección por cambio de fase (de sólida a gaseosa) para los átomos de carbono y las correcciones por ligadura van del 3,3% al 8,3%.

2.4. ATIMA

ATIMA [18] fue desarrollado en el GSI (Darmstadt) [31], para calcular las interacciones de iones pesados con la materia para energías cinéticas que van desde 1 *keV* a 500 *GeV* por nucleón.

La expresión de Bethe falla para iones pesados porque falla la primera aproximación de Born. Recientemente, los físicos daneses Lindhard y Sørensen [19] desarrollaron una nueva teoría para el poder de frenado de iones pesados relativistas que considera el efecto del tamaño nuclear. La teoría de Lindhard y Sørensen difiere substancialmente de la fórmula de Bethe para iones con alta *Z*. También tiene en cuenta un análisis del desplazamiento de fase basado en la ecuación de Dirac, y la desviación de la teoría de perturbación cuántica a primer orden de las diferentes expresiones usadas para analizar las primeras interacciones con la materia.

Por otro lado, Ahlen [20,21] presentó un formalismo que tiene en cuenta términos adicionales en la expresión del poder de frenado que se vuelven importantes cuando la carga del proyectil crece. Sus cálculos incluyen la sección eficaz de Mott para la dispersión y para la energía de ligadura del electrón durante esas colisiones, la dispersión de Bloch y la dispersión relativista de Bloch. Ahlen demostró que estos términos se podían describir como series de términos de potencias más altas de la carga del proyectil.

ATIMA se basa en evaluaciones teóricas, calcula las pérdidas de energía siguiendo de cerca la teoría de Lindhard y Sørensen que tiene en cuenta órdenes más altos en la teoría de la perturbación cuántica. También sigue el formalismo de Ahlen, con lo que incluye las correcciones de Dirac, Mott, Bloch y Bloch relativista. El único dato experimental que introduce son los potenciales de ionización medios I . Los proyectiles se tratan como partículas puntuales en una carga media; en concreto:

- Por encima de 30 MeV/u el straggling en la pérdida de energía y el poder de frenado se obtienen de la teoría de Lindhard y Sørensen [19] para iones pesados a energías relativistas. Se aplica también una corrección de capa [22], y se introducen el término de Barkas [23] y el efecto densidad de Fermi [24].
- Por debajo de 10 MeV/u , se usa una versión antigua de SRIM para calcular las pérdidas de energía. Para el straggling energético usa la teoría de Firsov y Hvelplund [25,26].
- En el rango de energías intermedio, se interpola entre los dos.

Para cada cálculo, el código rellena algunas tablas con los valores de pérdida de energía para todas las posibles combinaciones proyectil-blanco. Cuando el usuario quiere calcular un valor particular para la pérdida de energía, ATIMA hace una interpolación con los datos tabulados. Los estados de carga en ATIMA se tratan utilizando la expresión de Pierce y Blann [38].

Se han observado efectos de straggling en el intercambio de carga y una dependencia más detallada con la carga en dE/dx , pero esto no se ha incluido aun en el código.

3. Descripción del código ActarSim

ActarSim es una aplicación cuyo código ha sido y está siendo desarrollado por Hector Alvarez Pol y quien presenta este trabajo, para la simulación del detector ACTAR. Este programa permite el estudio de los iones y gases ligeros que suelen aparecer en las reacciones de interés, tales como protones, alfas, carbonos, etc. pero también de otros iones, ya que realiza una descripción de partículas ligeras cargadas e iones pesados en el gas. En este trabajo se utiliza para simular alcances de iones en gases en dos comparativas.

El programa inicial se desarrolló para comprobar la estructura de datos y herramientas necesarias para una simulación completa de ACTAR. Por falta de espacio no se puede reproducir aquí el código de esta simulación, además, se encuentra bajo actualización continua. Por ejemplo, la versión del programa utilizada para ejecutar las simulaciones de la primera comparativa [27] es diferente de la versión que se encuentra disponible [28] en el momento de presentar este trabajo, utilizada para la segunda comparativa. Sin embargo, en este capítulo se intentará dar una visión general de su funcionamiento.

El código Actarsim está basado en las librerías de Geant4 [29] y ROOT [30]. En concreto:

- ∞ El grupo de librerías del código Geant4 proporciona una herramienta para la simulación del paso de partículas a través de la materia. Sus áreas de aplicación incluyen altas energías, física nuclear y de aceleradores y estudios de ciencias médicas y espaciales. ActarSim utiliza la información recogida por Geant4 acerca de la pérdida de energía de los iones creados en las reacciones de interés en el gas detector.
- ∞ Por otro lado, ROOT vino a sustituir el anterior conjunto de librerías de análisis del CERN agrupadas bajo el nombre de PAW (*Physics Analysis Workstation*), concebidas como un instrumento para el análisis y presentación de datos, por un sistema de librerías más acordes con la informática de nuestros tiempos y con las cantidades de datos generadas en un experimento actual y, sobre todo, con el desarrollo orientado a objetos del lenguaje C++.

En este trabajo se presentan los resultados de dos comparativas. Para la primera comparativa de estas simulaciones se ejecutó la compilación con fecha del 20/12/05 del programa ActarSim con la versión 4.7.1.p01 de Geant4 y la versión 4.00.04 de ROOT. Para la segunda comparativa fue necesario utilizar la versión actual [28] (28/06/06) con ciertas modificaciones para calcular las curvas de Bragg e incluir parametrizaciones a bajas energías. También se cambió la versión de Geant4 por la 4.8.1.p02, y la versión de ROOT por la 5.00.12.

Geant4 es un conjunto de herramientas y librerías, por lo que no contiene un método “main()”⁴, sino que el usuario debe utilizar estas librerías implementando su programa de simulación, en el que se selecciona tanto el modelo de física como las acciones a tomar en cada interacción de las partículas con la materia. Geant4 permite la implementación por el usuario de tres clases (virtuales) básicas para la simulación, la que permite definir la geometría del detector y/o sistema experimental (*G4VUserDetectorConstruction*), la que define los procesos físicos que se simularán (*G4VUserPhysicsList*), y la que rige el comportamiento de la fuente de partículas primarias (*G4VUserPrimaryGeneratorAction*). Estas clases se comentarán en los diferentes apartados de este capítulo.

En el “main()”⁴ de ActarSim se implementan estas clases y se envían a la clase *G4RunManager*, para luego invocar el método “Initialize()” de este objeto. La clase *G4RunManager* es la única del kernel de Geant4 que debe ser instanciada explícitamente en el programa principal, para especificar como se debe construir la geometría del detector, qué procesos físicos se simularán, cómo se deben producir las partículas primarias en cada evento, etc. Finalmente, el método “BeamOn” dispara el bucle de eventos. El argumento de este método es el número de eventos del lanzamiento.

3.1. Descripción del código

3.1.1. DESCRIPCIÓN GEOMÉTRICA

La forma y el tamaño de ACTAR todavía no se han precisado, estando en su etapa inicial las simulaciones para optimizar estos y otros parámetros del diseño. En principio cualquier gas, presión y geometría es posible, aunque la geometría más plausible parece ser la cilíndrica, con campos eléctrico y magnético paralelos al haz, y un tamaño que podría estar alrededor del metro cúbico, según las últimas discusiones de la colaboración ACTAR.

⁴ El main() en el lenguaje C++ es una sentencia que hace referencia al comienzo del programa principal de una simulación.

La geometría del detector se implementa en **ActarSimDetectorConstruction** que es una subclase de *G4VUserDetectorConstruction*, en donde se define por defecto una geometría de paralelepípedo (“box”) que representa la región de deriva, relleno de gas tipo “isoC4H10STP”, es decir, isobutano en condiciones STP⁵. El origen de coordenadas está situado en el centro del paralelepípedo.

Se definen también algunos elementos y a partir de ellos se definen compuestos como el isobutano, metano, propano, agua, etc. Algunos de estos compuestos se definen con sus densidades en condiciones STP y otros a diferentes presiones necesarias para la segunda comparativa. De todos ellos, en este trabajo solo se utilizarán el isobutano y algunos elementos gaseosos.

Todos estos parámetros geométricos se pueden modificar externamente. Una vez compilado el programa, la manera más cómoda de ejecutarlo es a través de una macro, en donde se le pasan todos estos parámetros con los valores deseados. Así es posible estudiar la cinemática de los iones de interés y optimizar las dimensiones. Los parámetros que se pueden ajustar se discutirán en el apartado “*Descripción del método*”.

3.1.2. PROCESOS FÍSICOS

Para la primera comparativa, en la clase **ActarSimPhysicsList**, derivada de la clase *G4VModularPhysicsList*, y en otras clases asociadas, subclases de *G4VPhysicsConstructor*, que definen los modelos físicos para iones, hadrones, muones, etc., se implementan todos los procesos físicos, definiendo las partículas que interactuarán y los procesos asociados a ellas.

Se empieza construyendo todas las partículas que es posible construir en la versión de Geant4 utilizada, con las funciones: `ConstructBosons()`, `ConstructLeptons()`, `ConstructMesons()`, `ConstructBaryons()`, `G4ShortLivedConstructor()` y `G4IonConstructor()`.

Los procesos físicos tomados en cuenta son transporte, procesos electromagnéticos típicos, decaimiento y también procesos a bajas energías para iones y hadrones, todos proporcionados en el paquete de librerías de Geant4. En concreto, los procesos electromagnéticos se tomaron del ejemplo N° 5 de los ejemplos de nivel básico proporcionados por el paquete de Geant4⁶, incluyendo:

- Compton y fotoeléctrico para fotones,
- Producción de pares para fotones y muones,
- Dispersión múltiple e ionización para electrones, muones, taus, deuterios, tritios, alfas y ³He,
- Bremsstrahlung para electrones y muones,
- Aniquilación para positrones,
- Captura en reposo para muones negativos,
- Varios procesos relacionados con física de hadrones a bajas energías.

⁵ Condiciones estándar STP: $T=0\text{ }^{\circ}\text{C}$ [273.15 K] y $P=1\text{ atm}$ [101325 Pa]

⁶ Se pueden encontrar las clases e instancias bajo el directorio: “*\$G4WORKDIR/examples/novice/N05*”

Es decir, en general, se implementa la física standard de Geant4.

Para la segunda comparativa, además de los procesos descritos antes, es necesario incluir parametrizaciones de baja energía. Para ello se han implementado ciertas clases del ejemplo “*Hadrontherapy*” que se encuentra entre los ejemplos avanzados de Geant4⁷. En estas clases se utilizan las librerías de baja energía de Geant4 mencionadas en el capítulo “*Pérdida de energía en gases*”, que incluyen parametrizaciones para hadrones e iones a baja energía.

Entre estas parametrizaciones se puede elegir la que interese aplicar por medio de una macro. La parametrización por defecto es la del Report 49 de la ICRU [7], pero es posible seleccionar otras desarrolladas por Ziegler [8] entre otros. Mediante estas librerías es posible tanto la simulación del poder de frenado electrónico del protón como del poder de frenado nuclear. Algunas incluyen incluso parametrizaciones especiales para el Helio, que no se utilizarán en este trabajo.

Las clases de baja energía utilizadas en este trabajo son las que contienen las parametrizaciones descritas en el capítulo de “*Pérdida de energía en gases*”, es decir, “*G4hLowEnergyZiegler1977p*” para el poder de frenado electrónico del protón y “*G4hLowEnergyZiegler1977Nuclear*” para la simulación del frenado nuclear.

También se ha modificado el programa para introducir los nuevos gases y presiones necesarios en esta comparativa y para que guarde en cada paso la posición inicial y final del mismo con el fin de reconstruir las curvas de Bragg, como se verá en detalle en el capítulo 4.

3.1.3. GENERACIÓN DE PARTÍCULAS PRIMARIAS

Las partículas primarias se crean en **ActarSimPrimaryGeneratorAction**, que deriva de la clase *G4VUserPrimaryGeneratorAction*. Se incluye un generador de eventos desarrollado junto con la Dra. Beatriz Fernandez Dominguez del grupo de Física Nuclear de la Universidad de Liverpool, que incorpora generadores realistas de eventos, y modelos simples de interacción del haz. Los eventos generados y las trazas asociadas se pueden visualizar y almacenar para su posterior uso.

3.1.4. INTERFAZ DE ANÁLISIS

El programa ActarSim contiene una interfaz con ROOT que permite el tratamiento de los datos mediante esta aplicación, así como la realización del análisis de los resultados de las interacciones.

⁷ Se puede encontrar este ejemplo en el directorio raíz de Geant4 bajo: “*\$G4WORKDIR/examples/advanced/hadrontherapy*.”

Como las librerías de ROOT están integradas en el código, podemos utilizar la información de eventos y trazas almacenada al ejecutar la aplicación para declarar histogramas y estructuras tipo árbol⁸, rellenar estos histogramas y ajustarlos a diversas funciones y guardar las estructuras de datos en archivos de ROOT, entre otras cosas.

3.2. Descripción del método

En este trabajo se presenta una comparación de los resultados de ActarSim con los resultados obtenidos con otros códigos como SRIM/TRIM [15] y ATIMA [18] y también con resultados experimentales. En este caso vamos a comparar alcances calculados con ActarSim y comprobaremos que los valores obtenidos son compatibles con los alcances que se obtienen con estos códigos y con los medidos experimentalmente.

Así pues, se hicieron dos comparativas de los resultados de ActarSim, en la primera estos se contrastaron con los obtenidos con SRIM y en la segunda los resultados obtenidos con la simulación se compararon además con datos experimentales de MAYAito⁹ [32] y con las simulaciones realizadas con ATIMA [18]. El método consta de varios pasos:

3.2.1. PRIMER PASO: EJECUTAR EL PROGRAMA ACTARSIM CON LA MACRO “batchTestRange.mac”

Para todas las simulaciones se ejecutó el programa ActarSim utilizando la macro **batchTestRange.mac**, que funciona como un fichero de entrada, en el que se fijan los valores de ciertas variables. En esta macro se hace uso de ciertas instrucciones de Geant4, que se han definido en el código de ActarSim de modo que pudieran ser llamadas dentro de una macro con una cierta sintaxis. Aunque en el código del programa se le dan un valor por defecto, en esta macro es posible acceder a ciertas variables y modificar su valor. A continuación se comentan algunas de las magnitudes que es posible modificar:

⁸ La expresión “estructuras tipo árbol” se refiere a que, al guardar los datos en el archivo de salida de la simulación, la aplicación ROOT hace posible establecer en éste una jerarquía de datos similar a la del almacenamiento de ficheros en un disco, organizado la información en estructuras de directorios y subdirectorios.

⁹ MAYAito es una cámara de gas situada en GANIL (Francia), que funciona en cinemática inversa. Una explicación más detallada se verá en el apartado “Comparativa 2: MAYAito” del capítulo “Resultados”.

☞ *Modelos físicos:*

Es posible elegir entre una serie de modelos electromagnéticos que permiten utilizar una física estándar o de baja energía, así como también se pueden activar modelos hadrónicos, de desintegración, etc. En la primera comparativa se activa la física estándar, mientras que en la segunda comparativa, se usa la física de bajas energías, añadiendo una llamada al tipo de parametrización de bajas energías que se quiere utilizar. Las opciones disponibles para bajas energías son:

- “ion-LowE” Parametrización: ICRU 49 [7] (viene por defecto)
- “ion-LowE-ziegler1977” Parametrización: [8] (la que se usa en este trabajo)
- “ion-LowE-ziegler1985” Parametrización: [12]
- “ion-LowE-ziegler2000” Parametrización: [15]

☞ *Geometría:*

Los primeros comandos de esta macro modifican la geometría fijando los valores de ciertos parámetros geométricos, por ejemplo, el material gaseoso que va a actuar como blanco activo, las dimensiones X, Y, y Z de la caja de gas, etc. También permite definir un valor para las tres componentes del campo magnético (en caso de que lo hubiera) en la unidad que se elija (Teslas por defecto) así como para las tres componentes del campo eléctrico. En la segunda comparativa, al usar una versión diferente del código ha sido necesario cambiar las opciones de la geometría, aunque básicamente los comandos son los mismos, si bien cambia su sintaxis, se añaden otros que tienen relevancia para la nueva versión (por ejemplo, es posible elegir dos posibles geometrías, cilíndrica o cúbica, lo que cambia el modo de introducir las dimensiones, etc.)

☞ *Generación de eventos:*

Se puede controlar la generación de eventos seleccionando uno de los tres tipos de interacciones siguientes (son excluyentes):

- A) Seguir una reacción predefinida a partir de un archivo.
- B) Seguir una reacción calculada por CINE¹⁰. En este caso los valores de las magnitudes cinemáticas que era necesario fijar en un archivo de entrada al utilizar CINE se sustituyen por una serie de instrucciones en la macro, mediante las cuales se fijan estos valores, por ejemplo las propiedades de las partículas iniciales y finales (las mismas que eran necesarias en CINE: el número atómico, la masa atómica y carga y su energía de excitación), el Q de la reacción, la energía de incidencia, y el ángulo theta de la partícula dispersada, al que se le puede dar un valor fijo o aleatorio.
- C) Seguir a una partícula o grupo de partículas definidas en la lista de partículas de Geant4. Este es el modo seleccionado en este trabajo. En el se pueden fijar el tipo de partícula a simular, sus propiedades, energía de incidencia, dirección inicial, etc.

¹⁰ En ActarSim se ha integrado con el resto de las librerías el programa CINE.FOR (cuya autoría se debe al Dr. Wolfgang Mittag) traducido del lenguaje FORTRAN al lenguaje C++. Este programa permite calcular la cinemática relativista en reacciones nucleares a dos cuerpos. La salida de CINE.FOR nos da ángulos y energías de ión incidente e ión dispersado después de la interacción.

Finalmente, el método “beamOn”, seguido del número de eventos que se quieren simular dispara el programa de simulación.

3.2.2. SEGUNDO PASO: EJECUTAR DENTRO DE ROOT EL PROGRAMA “analTestRange.C”

Una vez ejecutada la simulación, se genera un archivo de salida, que guarda la información de eventos y la de trazas. A continuación se debe efectuar el análisis de esos resultados. Utilizamos ROOT para hacer el análisis de alcances sobre cada ión. En la primera comparativa, el programa **analTestRange.C** se ejecuta desde ROOT y hace un análisis preliminar de los datos que vienen de la simulación.

Este programa comienza declarando las variables y funciones que se van a utilizar más adelante, para luego definir algunos histogramas utilizando algunas funciones de las librerías de ROOT, en las que es posible cambiar el rango y el número de bins. Se puede consultar la sintaxis y modo de funcionamiento de estos histogramas en el manual de ROOT [30]. En principio, están definidos con un rango de 0 a 20 metros y con 20000 bins, pero este valor se puede modificar.

El programa abre el archivo, que contiene toda la información y resultados creados durante la simulación, lee los eventos y llama a las rutinas relevantes del código, que generan y calculan las variables con las que se rellenan los histogramas definidos al principio. Esta información se guarda en el propio archivo.

Finalmente, el programa muestra estos histogramas en pantalla, y efectúa un ajuste de cada histograma a una función gaussiana, de donde se obtienen como parámetros la media, que se corresponde con el valor medio del alcance, la anchura o “*sigma*”, que se corresponde con la dispersión en el alcance, y por último, χ^2 , todos ellos con sus errores. Estos parámetros se muestran en cada histograma (también la energía de incidencia) y se escriben después en el archivo de salida **range.dat**, donde se guarda en columnas el valor de la energía, el valor medio del alcance a esa energía con su error y la desviación con su error.

En la segunda comparativa, se utiliza una macro diferente, adaptada a la estructura de la información contenida en la nueva versión del programa. ROOT ofrece la posibilidad de generar automáticamente una macro a partir del archivo de la simulación, por medio de la función “makeClass(“nombre_de_la_macro”)”. Aplicando esta función al árbol de eventos, genera una macro que contiene toda la estructura de datos de la simulación, y un bucle vacío en el que el usuario puede introducir su código.

En los casos en los que el ión es muy pesado, es posible que se generen varios ficheros de simulación¹¹, y la información se guarda repartida entre los mismos, con lo cual el procedimiento se complica. Es preciso crear una “cadena” con la función “TChain(“arbol_de_eventos”)” e ir añadiendo los distintos archivos de la simulación, para luego aplicar la función “makeClass” a esa cadena. De este modo se puede reunir toda la información dispersada en varios archivos y trabajar con ella como si estuviera en uno solo.

3.2.3. TERCER PASO (1º COMPARATIVA): EJECUTAR DENTRO DE ROOT EL PROGRAMA “macroReadCin.C”

En la primera comparativa, este programa ejecutado dentro de ROOT lee el archivo **range.dat** generado en el paso anterior y muestra en un gráfico la energía de incidencia frente al valor medio del alcance para esa energía obtenido a partir de los ajustes a cada histograma del paso anterior. En este gráfico, las barras de error se corresponden con la dispersión del alcance obtenida como parámetro del ajuste a la gaussiana. Además se realiza un ajuste a estos datos que se explicará en el capítulo de resultados.

En la segunda comparativa este paso se omite, puesto que si bien en la primera tenemos para cada ión un espectro de energías de incidencia y sus correspondientes alcances, en la segunda comparativa tenemos solo un punto correspondiente a una energía y su alcance para cada combinación de ión – energía de incidencia – gas – presión, de modo que no es posible dibujar esta grafica.

3.2.4. TERCER PASO (2º COMPARATIVA): EJECUTAR DENTRO DE ROOT EL PROGRAMA “analBragg.C”

A nivel experimental, trabajar con el punto de inflexión de la curva de Bragg es más fácil que hacerlo con el alcance, porque el pico de Bragg es fácil de identificar, sin embargo el alcance, por estar en la parte final de la caída de la curva, se ve afectado por fluctuaciones y por pequeñas diferencias que dependen de donde se haya ubicado el umbral de detección.

En la segunda comparativa, los datos experimentales de los que se dispone para la comparación no son de alcances sino de puntos de inflexión de la curva de Bragg. Es por ello que además de los pasos anteriores es necesario aplicar una macro que, utilizando los datos de las trazas almacenados en el árbol de trazas del archivo de simulación, calcule las curvas de Bragg de cada ión. Este paso no se realiza en la primera comparativa. El código de esta macro se presenta en el Apéndice.

¹¹ ROOT abre automáticamente un fichero nuevo de escritura cuando el primero supera los 2 Gb de tamaño en disco.

El punto de inflexión de una curva es aquel punto que, en una función continua, separa la parte convexa de la cóncava. En ellos la función no es cóncava ni convexa sino que hay cambio de concavidad a convexidad o al revés. Los puntos de inflexión están caracterizados porque la segunda derivada de la curva a la que pertenecen evaluada en ellos es igual a cero y a partir de ahí cambia de signo.

En el caso de un histograma lo que se tiene no es una curva continua sino una serie de valores discretos, con lo que la derivada se hace también de forma discreta:

$$D_i = \frac{B_{i+1} - B_i}{x_{i+1} - x_i}$$

donde D_i es el valor de la derivada discreta de la “curva” de Bragg en el bin x_i y B_i hace referencia al valor de la curva de Bragg en el bin x_i , siendo $x_{i+1} - x_i$ el tamaño del *pad*, que en el caso experimental era de 1,5 mm. Se ha simulado este tamaño de bin para reproducir la geometría que había en las medidas experimentales. Haciendo esto para todos los puntos x_i donde hay datos se construye la segunda derivada discreta de la curva de Bragg. Haciendo lo mismo con la curva obtenida se obtendría la segunda derivada. Habría que buscar el punto donde esta se hace cero y eso daría el punto de inflexión.

Sin embargo, esto no es tan fácil, pues la segunda derivada discreta presenta fluctuaciones en torno al punto de inflexión ya que el tamaño del bin es muy grande, y no ofrece la resolución necesaria. Una mejor aproximación a este cálculo es obtener el pico de Bragg (el máximo de la curva) y el último punto de la caída, y entre estos dos puntos ajustar la “curva” discreta de Bragg a una curva continua de tercer orden. Con los parámetros de este ajuste es posible calcular el punto de inflexión con una expresión obtenida sin más que derivar a mano.

$$f(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2 + a_3x^3, \quad f''(x) = 0 \quad \Rightarrow \quad \boxed{x = -\frac{a_2}{3a_3}}$$

Haciendo esto para los 1000 iones simulados se obtiene una serie de valores que siguen una distribución gaussiana, con mayores frecuencias en torno a un valor medio. Se puede efectuar un ajuste gaussiano a los valores así calculados y obtener el valor medio del punto de inflexión con su dispersión, al igual que se hizo para los alcances. Se dispone pues de un valor para el alcance y su correspondiente punto de inflexión para cada caso, los cuales pueden ser relacionados en un gráfico para estudiar si se puede encontrar alguna relación entre ambos. De este modo, se tiene por un lado un valor (el punto de inflexión) directamente comparable con el dato experimental, y por otro, el alcance calculado con la física de bajas energías que puede ser comparado con TRIM y ATIMA.

El cálculo de la curva de Bragg se hace con respecto a la proyección de la trayectoria sobre la dirección de avance Z. Durante la simulación, Geant4 va guardando en el árbol de trazas (Fig. 5) los valores de posición y pérdida de energía correspondientes a cada paso. La macro recorre los valores de la coordenada de posición z a lo largo de cada traza y suma en cada bin las pérdidas de energía de todas las posiciones que caen en ese bin. De ese modo se obtiene una curva de Bragg discreta.

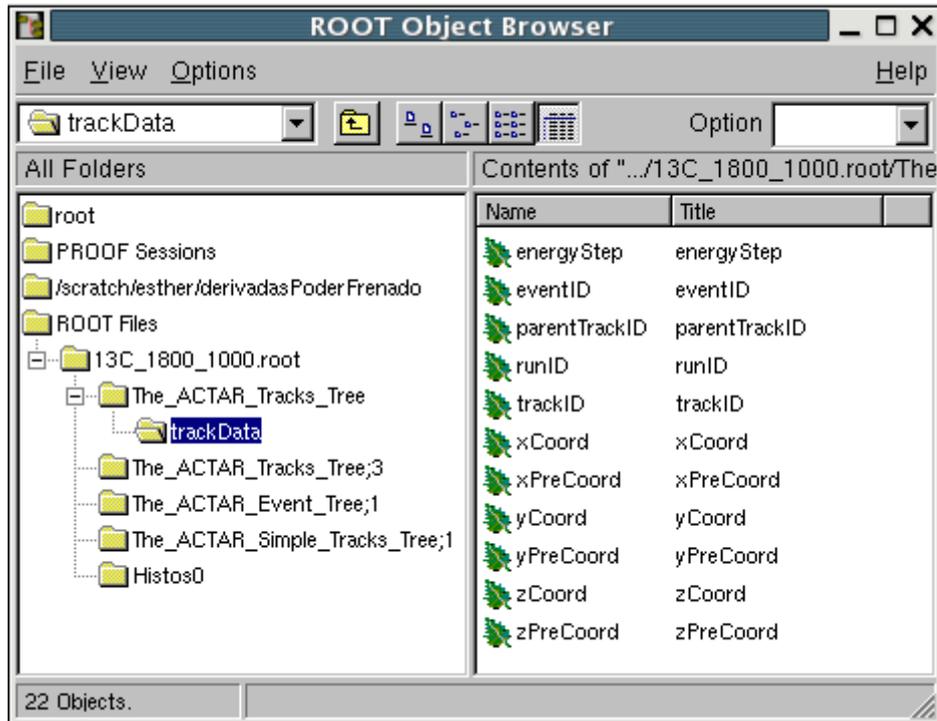


Fig. 5: La figura muestra el explorador de ROOT, que permite navegar por la estructura de directorios del archivo de simulación (en este caso, **13C_1800_1000.root**, correspondiente a la simulación de 1000 iones de ^{13}C en H_2 a 1800 mbar). En esta imagen vemos a la izquierda el árbol de eventos y el de trazas, y a la derecha las variables que se guardan en cada paso en este último: las coordenadas de posición (x , y , z) y la energía depositada (energyStep) entre otras variables que identifican al número de lanzamiento (run), de evento, y de traza padre.

Pero, además, en esta macro se ha tenido el cuidado de corregir la asignación errónea de pérdida de energía en el proceso de lectura de las trazas y relleno de los histogramas. Es posible que, dado un valor de posición z a lo largo de la proyección sobre el eje Z de la traza, el siguiente valor registrado en el árbol de trazas, z_{i+1} , se encuentre en el siguiente bin, el bin $j+1$ (Fig. 6). Entonces la totalidad de la energía depositada a lo largo de la distancia $z_{i+1} - z_i$ se estaría sumando en el bin $j+1$. Sin embargo, según la aproximación de frenado continuo, solo le corresponde una parte; el porcentaje de la energía que se deposita desde el final del bin j hasta la posición z_{i+1} . Del mismo modo, hay un defecto de energía en el bin j , porque no se está sumando el porcentaje de energía perdida entre z_i y el final del bin j . Esto se soluciona calculando estos porcentajes y enviándolos al bin que le corresponde.

También se corrige el caso en el que, de un paso al siguiente, la coordenada Z salte más de un *pad* (más de un bin). Esto se consigue contando el número de pads que hay entre coordenadas y asignando a cada uno el porcentaje de energía que le corresponde, de forma análoga a la Fig. 6, en la que ahora habría además un número entero de bins entre el bin j y el bin $j+1$ a los que se les asigna el mismo porcentaje de pérdida.

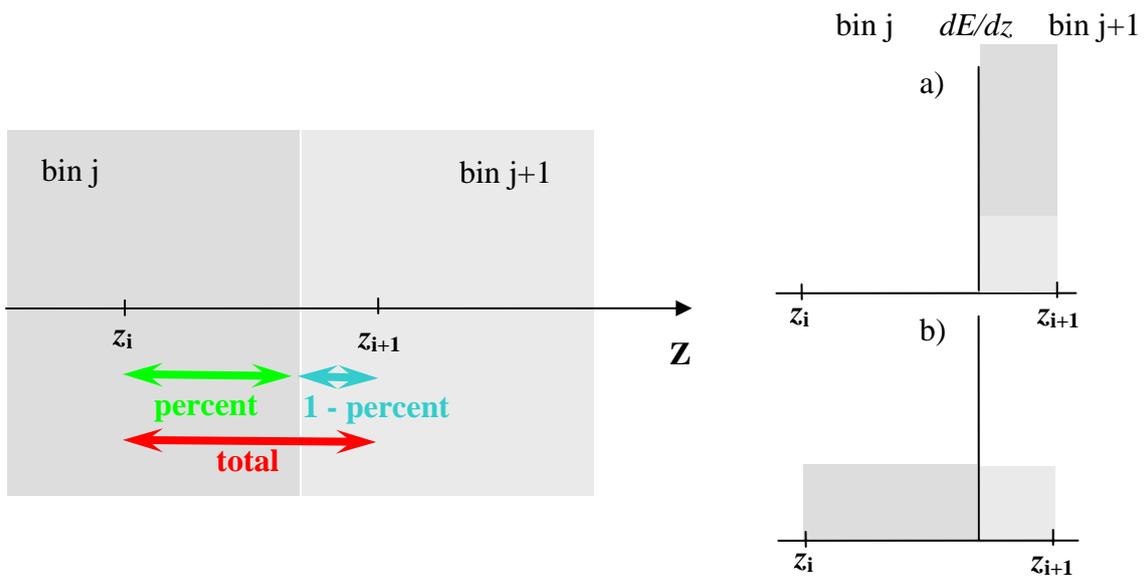


Fig 6: Cuando se cambia de bin hay un porcentaje “percent” de la energía almacenada en la variable “energyStep” (Fig. 5) de la posición z_{i+1} que le corresponde al bin anterior. Si no se tiene en cuenta el reparto adecuado se suma la totalidad de la energía perdida en el bin $j+1$ como se muestra en a). El efecto de esta suma incorrecta sería la aparición de “picos” o pequeñas montañas en la curva de Bragg. En b) tenemos cada porcentaje de la pérdida de energía a lo largo del paso denominado “total” sumado en el bin que le corresponde.

Todas estas aproximaciones serían suficientes si el proceso de escritura de los datos en el archivo de salida fuese ordenado, pero no se puede contar con el hecho de que las posiciones z se escriban de menor a mayor. Geant4 rastrea a las partículas secundarias en el momento en el que se producen, y cuando éstas “mueren” vuelve a la traza primaria, con lo cual se están mezclando posiciones de la traza primaria con posiciones en trazas secundarias. Este hecho también afecta a la curva resultante, produciendo fluctuaciones extrañas a lo largo de la misma. Para evitarlo, se ha modificado ActarSim para definir tres nuevas coordenadas, que guardan la posición inicial del paso (las “PreCoord” en la Fig. 5), y no solo la final como se hacía hasta ahora.

4. Resultados

En este capítulo se comentan los resultados obtenidos con las dos comparativas que se hicieron en este trabajo: en la primera se compararon los resultados de Geant4 con los de SRIM y en la segunda con datos experimentales y otros códigos como ATIMA. Se explicarán las particularidades de las simulaciones, así como también se mostrarán los gráficos obtenidos en estos análisis.

4.1. Comparativa 1: SRIM

Para esta comparativa se realizaron las simulaciones de los siguientes iones: ^1H , ^6He , ^{19}C , ^{27}S y ^{56}Ni . Se lanzaron 20 *runs* para cada ión, uno para cada energía, a energías de 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 20, 30, 40, 50, 60, 70, 80, 90, 100 y 150 *MeV/u*, lanzando 1000 eventos para cada *run* para que la estadística fuese razonable. Las dimensiones de la cámara se fijaron en $1 \times 1 \times 20 \text{ m}^3$. El gas de relleno de la cámara simulado fue el isobutano¹² en condiciones STP, escogido por ser de interés para ACTAR. Los campos eléctrico y magnético se fijaron a cero.

Al final de la simulación de cada ión, se analizó el archivo de salida, obteniendo los histogramas ajustados de los alcances obtenidos para cada energía en cada uno de los 1000 eventos lanzados. Sobre los datos se dibujó la gaussiana obtenida del ajuste a los alcances, cuyos parámetros se escriben en el archivo de salida. Estos datos se presentan en las tablas que vienen a continuación. En el caso del hidrógeno y del helio, a altas energías el ión sale fuera del volumen de gas; esa es la razón de que no haya datos.

¹² En el código utilizado para esta comparativa se define el gas isobutano con valores diferentes de densidad que permiten trabajar con diferentes valores de presión. Se utilizó aquella definición que corresponde a una densidad por defecto de $2,67 \text{ mg/cm}^3$ en condiciones STP y composición C_4H_{10} .

Primero se comentarán los valores obtenidos con Geant4, para luego presentar la comparación entre estos resultados y los obtenidos con TRIM.

El archivo obtenido después de ejecutar el programa contiene información sobre las energías y los alcances de cada ión. En las tablas de la 1 a la 5 se muestran los valores del alcance medio y su dispersión, (es decir, la “*Sigma*” del ajuste gaussiano a la distribución de alcances), ambos en *mm* y con sus errores.

Energía del ión (MeV)	Alcance medio (mm)	Error (mm)	Sigma (mm)	Error (mm)
1	7,522	0,004	0,116	0,003
2	23,59	0,01	0,33	0,01
3	47,08	0,02	0,65	0,02
4	77,89	0,04	1,08	0,04
5	115,68	0,07	1,81	0,08
6	160,00	0,08	2,25	0,08
7	210,83	0,09	2,87	0,07
8	268,1	0,1	3,45	0,07
9	331,3	0,1	4,4	0,1
10	400,4	0,2	5,1	0,1
20	1409,3	0,6	17,2	0,5
30	2946	1	36	1
40	4975	2	56	2
50	7463	3	92	3
60	10379	5	129	6
70	13710	8	184	10
80	17440	9	212	10

Tabla 1: Datos del alcance para el 1H

Energía del ión (MeV)	Alcance medio (mm)	Error (mm)	Sigma (mm)	Error (mm)
6	12,158	0,003	0,085	0,002
12	36,690	0,008	0,231	0,006
18	72,76	0,02	0,43	0,01
24	119,70	0,02	0,69	0,02
30	176,94	0,04	1,08	0,05
36	244,33	0,07	1,62	0,09
42	321,45	0,06	1,78	0,04
48	408,07	0,07	2,15	0,05
54	503,84	0,09	2,79	0,06
60	609,0	0,1	3,22	0,08
120	2133,2	0,4	10,3	0,3
180	4450,1	0,7	21,1	0,6
240	7508	2	41	2
300	11253	2	58	3
360	15652	4	93	5

Tabla 2: Datos del alcance para el 6He

Energía del ión (MeV)	Alcance medio (mm)	Error (mm)	Sigma (mm)	Error (mm)
19	7,920	0,001	0,0369	0,0008
38	19,090	0,002	0,074	0,002
57	34,240	0,004	0,108	0,003
76	52,81	0,01	0,171	0,005
95	74,71	0,01	0,231	0,006
114	99,89	0,01	0,284	0,008
133	128,31	0,01	0,37	0,01
152	159,94	0,01	0,44	0,01
171	194,69	0,02	0,58	0,01
190	232,58	0,02	0,63	0,02
380	772,51	0,08	2,15	0,08
570	1592,1	0,1	4,3	0,1
760	2670,2	0,2	7,1	0,2
950	3989,7	0,4	10,7	0,3
1140	5537,9	0,5	14,5	0,4
1330	7306,0	0,7	19,6	0,7
1520	9282,7	0,9	24,2	0,7
1710	11453	1	29	1

Tabla 3: Datos del alcance para el ^{19}C

Energía del ión (MeV)	Alcance medio (mm)	Error (mm)	Sigma (mm)	Error (mm)
27	3,4699	0,0007	0,0188	0,0006
54	7,199	0,001	0,031	0,001
81	12,099	0,002	0,044	0,002
108	17,624	0,003	0,067	0,004
135	23,764	0,004	0,090	0,005
162	30,494	0,003	0,084	0,003
189	37,824	0,004	0,104	0,003
216	45,723	0,004	0,118	0,004
243	54,186	0,005	0,140	0,005
270	63,151	0,006	0,155	0,007
540	175,55	0,01	0,41	0,01
810	343,25	0,04	0,88	0,04
1080	562,31	0,06	1,44	0,08
1350	829,4	0,1	2,4	0,2
1620	1141,3	0,1	2,37	0,08
1890	1496,7	0,1	3,29	0,09
2160	1893,2	0,1	3,7	0,1
2430	2328,9	0,2	4,8	0,1
2700	2802,0	0,2	5,8	0,2
4050	5685,5	0,5	12,6	0,7

Tabla 4: Datos del alcance para el ^{27}S

Energía del ión (MeV)	Alcance medio (mm)	Error (mm)	Sigma (mm)	Error (mm)
56	4,3790	0,0006	0,0182	0,0006
112	8,297	0,001	0,0262	0,0009
168	13,379	0,001	0,038	0,001
224	18,893	0,002	0,050	0,002
280	24,813	0,002	0,062	0,002
336	31,114	0,003	0,068	0,003
392	37,813	0,004	0,088	0,004
448	44,889	0,005	0,111	0,006
504	52,315	0,006	0,123	0,007
560	59,967	0,005	0,118	0,005
1120	141,184	0,009	0,23	0,01
1680	259,91	0,02	0,44	0,02
2240	413,08	0,03	0,73	0,04
2800	598,32	0,03	0,92	0,03
3360	813,77	0,06	1,41	0,08
3920	1058,49	0,07	1,68	0,08
4480	1330,4	0,1	2,4	0,1
5040	1628,4	0,2	3,4	0,3
5600	1951,9	0,1	3,0	0,1
8400	3914,4	0,5	8,4	0,7

Tabla 5: Datos del alcance para el ^{56}Ni

En estudios anteriores sobre poder de frenado y alcances en sólidos [5], donde era común representar las curvas del alcance frente a energía de incidencia en escala logarítmica, se dedujo, de la forma casi lineal que éstas presentaban, una dependencia de la forma:

$$R = aE^b$$

siendo R el alcance en mm , E la energía de incidencia en MeV y a , b dos parámetros de ajuste. Estos parámetros podrían dar cierta información, en el caso de a , acerca del tipo de partícula que incide sobre el material y en el caso de b , acerca del medio absorbente. Fijando el material, es decir, fijando b , se podría evaluar el valor de a para identificar a la partícula. Siguiendo este método y viendo la tendencia de los datos, se ha realizado un ajuste de los mismos a esta curva, con el objetivo de mostrar cualitativamente como se comportan.

Las tablas anteriores permiten representar el valor medio del alcance en función de la energía y estudiar su dependencia con ésta. En las figuras 8, 9, 10, 11 y 12, se presentan estos gráficos, en el que se ha incluido el ajuste a la curva $R = aE^b$. Se ha tomado la desviación como error del alcance, aunque en los gráficos no se aprecia por ser su valor muy pequeño. Sobre los datos se muestra la curva del ajuste realizado.

Proton Range

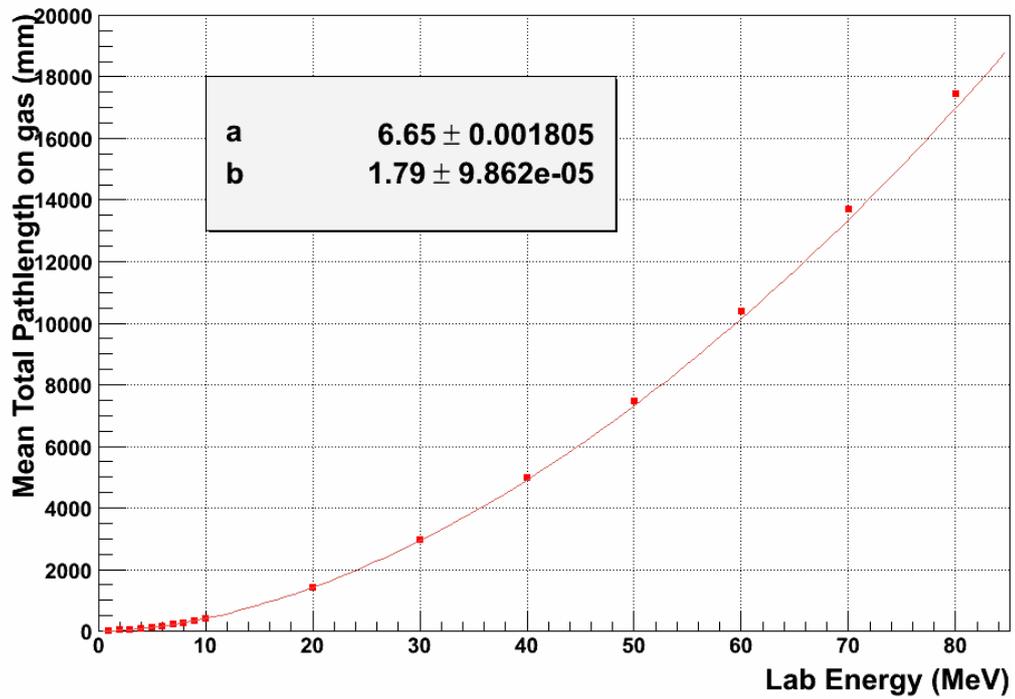


Fig. 8: Alcance en función de la energía para el 1H .

Helium Range

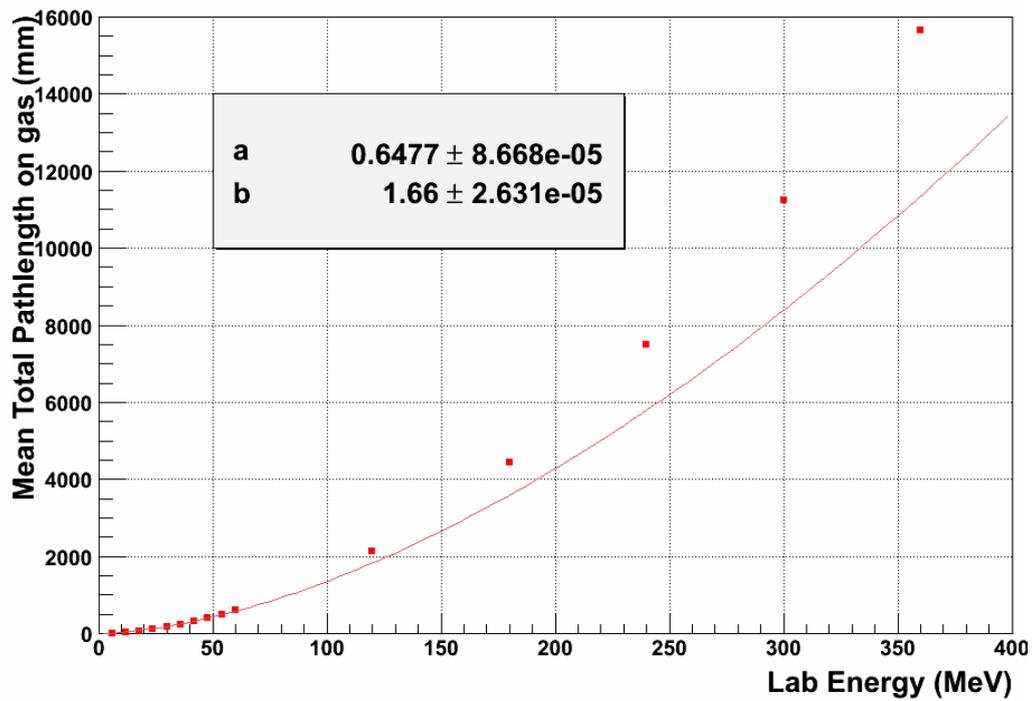


Fig. 9: Alcance en función de la energía para el 6He .

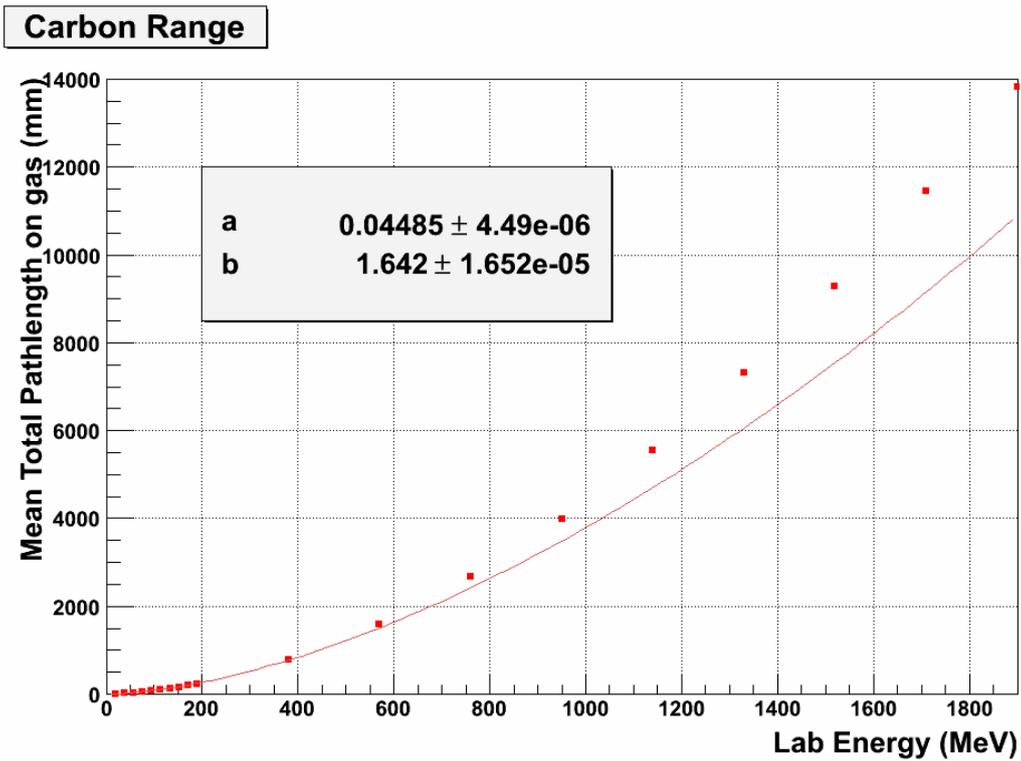


Fig. 10: Alcance en función de la energía para el ^{19}C .

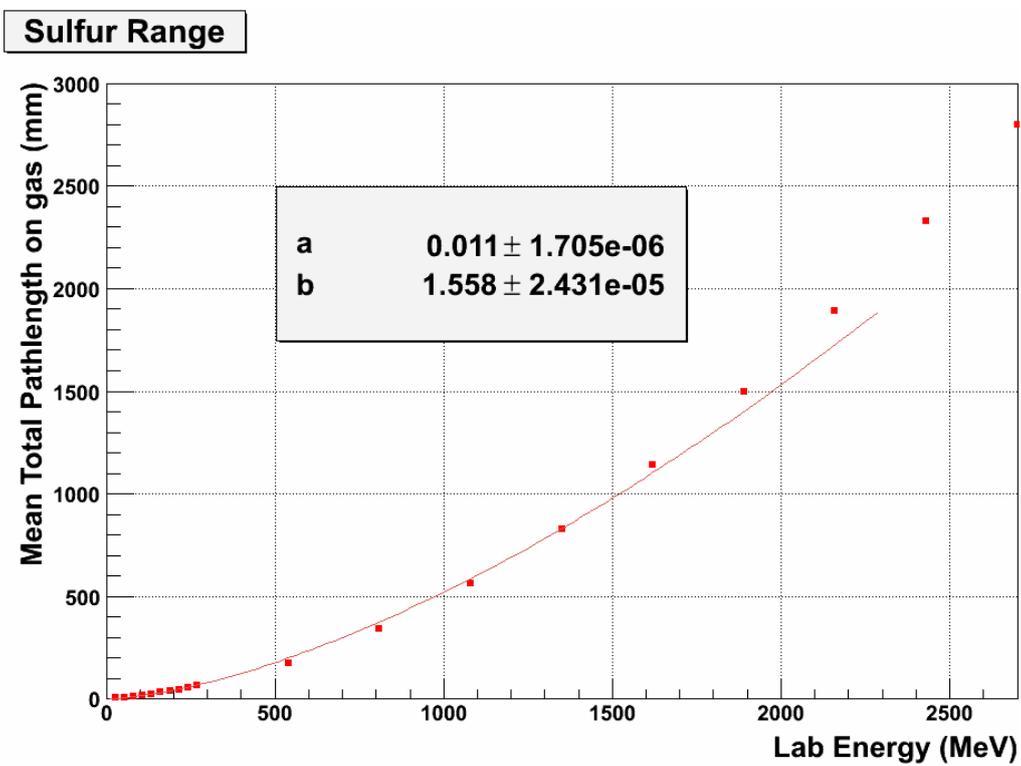


Fig. 11: Alcance en función de la energía para el ^{27}S .

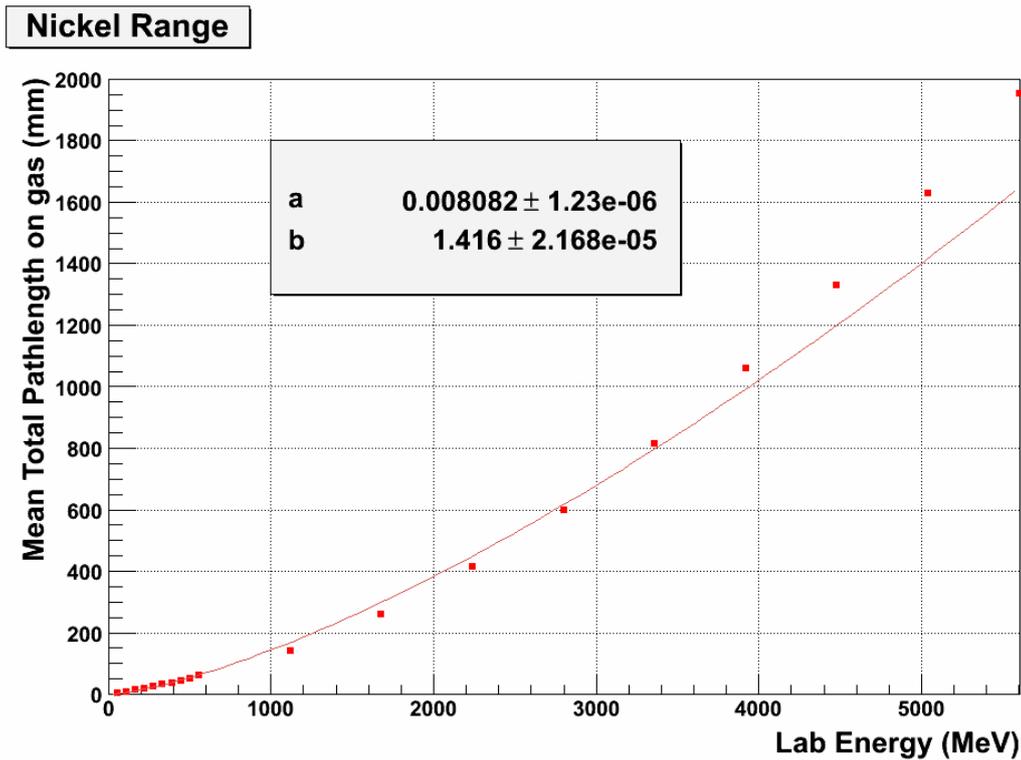


Fig. 12: Alcance en función de la energía para el ^{56}Ni .

En cuanto a estos ajustes, los núcleos ligeros parecen ser los que presentan un mejor ajuste, haciéndose éste peor a medida que la masa del ión aumenta. La tendencia de los datos viene descrita por la aproximación potencial, sobre todo a bajas energías hasta unos 70 MeV/u para elementos intermedios, y en el caso del Níquel hasta 10 MeV/u .

	^1H	^6He	^{19}C	^{27}S	^{56}Ni
a	$6,650 \pm 0,002$	$0,64766 \pm 9 \cdot 10^{-5}$	$0,044847 \pm 4 \cdot 10^{-6}$	$0,010995 \pm 2 \cdot 10^{-6}$	$0,008082 \pm 10^{-6}$
b	$1,7903 \pm 10^{-4}$	$1,64765 \pm 3 \cdot 10^{-5}$	$1,64237 \pm 2 \cdot 10^{-5}$	$1,55829 \pm 2 \cdot 10^{-5}$	$1,41639 \pm 2 \cdot 10^{-5}$

Tabla 6: Valores de los parámetros a y b obtenidos en el ajuste a una curva potencial. Las unidades de a son mm MeV^{-b} , y b no tiene unidades.

Dado que se ha utilizado el mismo medio absorbente en todas las simulaciones (isobutano en condiciones STP) se espera que el valor de b sea más o menos el mismo de un ión a otro. Lo que se observa es que su valor varía ligeramente según el ajuste se va haciendo peor. En cierto modo es lógico que la aproximación *naive* que se ha hecho falle a medida que los iones son más y más pesados. Lo que esto pone de manifiesto es que la interacción de estos iones con la materia a altas energías es más compleja que una simple dependencia potencial, y es posible que haya que añadir algún término (relativista, etc.) que reduzca el valor del alcance obtenido con la expresión potencial utilizada en estos ajustes.

Se presentan ahora los valores del alcance obtenidos con el código SRIM (Tabla 7), para energías de incidencia desde 1 MeV/u hasta 150 MeV/u, como en el caso anterior. Más adelante se presentan los gráficos en los que se superponen los resultados anteriores, obtenidos con ActarSim, sobre los obtenidos con SRIM (Fig. 13, 14, 15, 16 y 17). Los puntos etiquetados como “Geant4” son los mismos de las figuras 7-12, pero ahora se presentan en escala logarítmica para comparar mejor ambas series de datos.

Tabla 7: Datos del alcance para los cinco iones simulados con SRIM

Hidrógeno		Helio		Carbono		Azufre		Niquel	
Energía (MeV)	Alcance (mm)								
1	7,11	6	11,98	20	7,78	27,5	3,74	60	6,18
1,1	8,32	6,5	13,52	22,5	8,84	30	4,02	65	6,49
1,2	9,64	7	15,16	25	9,97	32,5	4,29	70	6,80
1,3	11,05	8	18,68	27,5	11,16	35	4,57	80	7,43
1,4	12,54	9	22,56	30	12,41	37,5	4,86	90	8,08
1,5	14,13	10	26,77	32,5	13,73	40	5,16	100	8,74
1,6	15,8	11	31,32	35	15,11	45	5,77	110	9,41
1,7	17,56	12	36,21	37,5	16,56	50	6,41	120	10,10
1,8	19,39	13	41,42	40	18,07	55	7,08	130	10,80
2	23,31	14	46,96	45	21,29	60	7,78	140	11,52
2,25	28,63	15	52,85	50	24,79	65	8,51	150	12,25
2,5	34,44	16	59,06	55	28,53	70	9,26	160	13,00
2,75	40,71	17	65,58	60	32,52	80	10,85	170	13,76
3	47,43	18	72,39	65	36,75	90	12,54	180	14,54
3,25	54,6	20	86,92	70	41,23	100	14,33	200	16,12
3,5	62,22	22,5	106,72	80	50,88	110	16,21	225	18,17
3,75	70,27	25	128,33	90	61,47	120	18,17	250	20,30
4	78,76	27,5	151,72	100	72,98	130	20,23	275	22,49
4,5	96,99	30	176,87	110	85,41	140	22,37	300	24,77
5	116,92	32,5	203,75	120	98,73	150	24,6	325	27,11
5,5	138,5	35	232,34	130	112,94	160	26,9	350	29,53
6	161,71	37,5	262,62	140	128,04	170	29,29	375	32,02
6,5	186,53	40	294,57	150	144,02	180	31,76	400	34,58
7	212,94	45	363,38	160	160,88	200	36,93	450	39,93
8	270,39	50	438,7	170	178,61	225	43,84	500	45,57
9	334,01	55	520,43	180	197,23	250	51,22	550	51,50
10	403,68	60	608,47	200	237,05	275	59,09	600	57,74
11	479,3	65	702,73	225	291,73	300	67,44	650	64,28
12	560,76	70	803,14	250	351,89	325	76,27	700	71,13
13	648	80	1020	275	417,51	350	85,58	800	85,76
14	740,93	90	1260	300	488,58	375	95,37	900	101,65
15	839,48	100	1530	325	565,07	400	105,65	1000	118,78
16	943,59	110	1820	350	646,94	450	127,66	1100	137,16
17	1050	120	2130	375	734,11	500	151,6	1200	156,75
18	1170	130	2460	400	826,51	550	177,46	1300	177,51
20	1410	140	2820	450	1030	600	205,19	1400	199,40
22,5	1750	150	3200	500	1250	650	234,74	1500	222,36
25	2120	160	3590	550	1480	700	266,03	1600	246,34
27,5	2520	170	4010	600	1740	800	333,34	1700	271,28

30	2950	180	4450	650	2010	900	406,89	1800	297,22
32,5	3420	200	5390	700	2300	1000	486,7	2000	352,24
35	3910	225	6680	800	2930	1100	572,76	2250	426,80
37,5	4430	250	8090	900	3640	1200	665,05	2500	507,69
40	4980	275	9620	1000	4400	1300	763,53	2750	594,74
45	6170	300	11260	1100	5240	1400	868,09	3000	687,81
50	7470	325	13020	1200	6130	1500	978,6	3250	786,77
55	8880	350	14890	1300	7090	1600	1090	3500	891,48
60	10390	375	16870	1400	8110	1700	1220	3750	1000
65	12010	400	18960	1500	9180	1800	1340	4000	1120
70	13730	450	23440	1600	10320	2000	1620	4500	1370
80	17460	500	28330	1700	11510	2250	1990	5000	1630
90	21570	550	33610	1800	12750	2500	2390	5500	1920
100	26040	600	39270	1850	13390	2750	2820	6000	2240
110	30860	650	45290			3000	3290	6500	2570
120	36020	700	51670			3250	3780	7000	2910
130	41500	800	65430			3500	4300	8000	3660
140	47290	900	80480			3750	4850	8400	3980
150	53380					4000	5420		
						4050	5540		

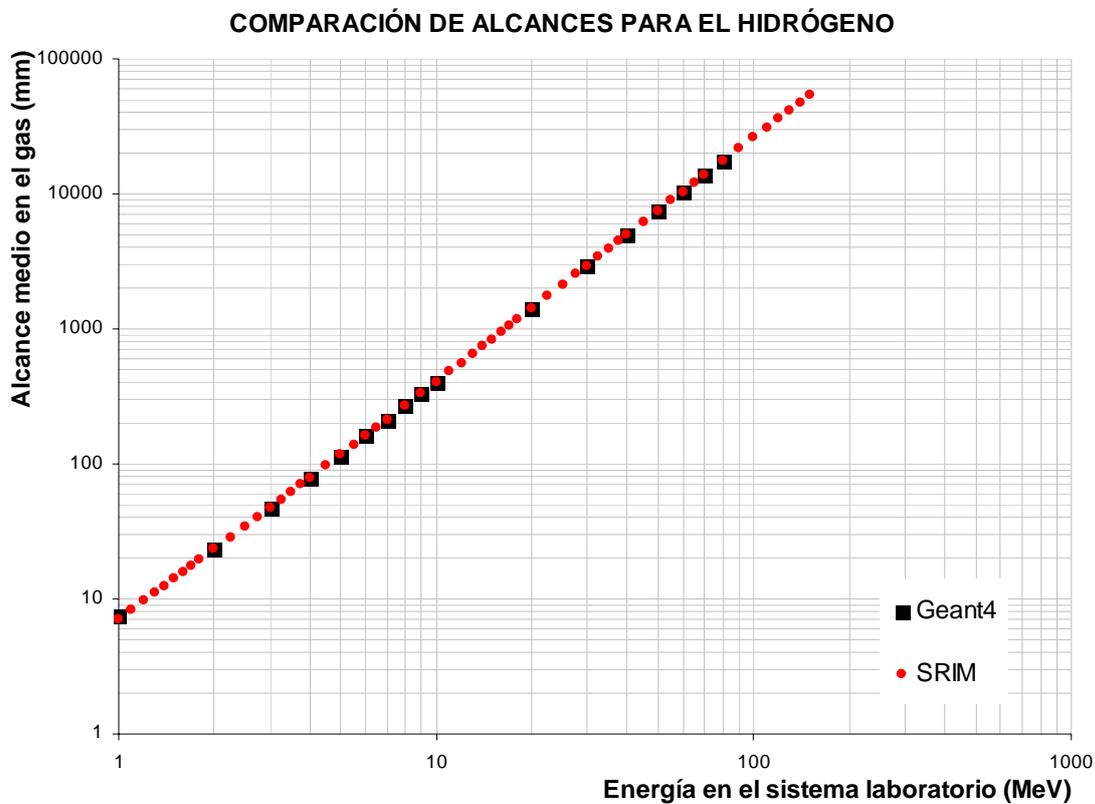


Fig. 13: Comparativa de alcances SRIM – ActarSim para el 1H

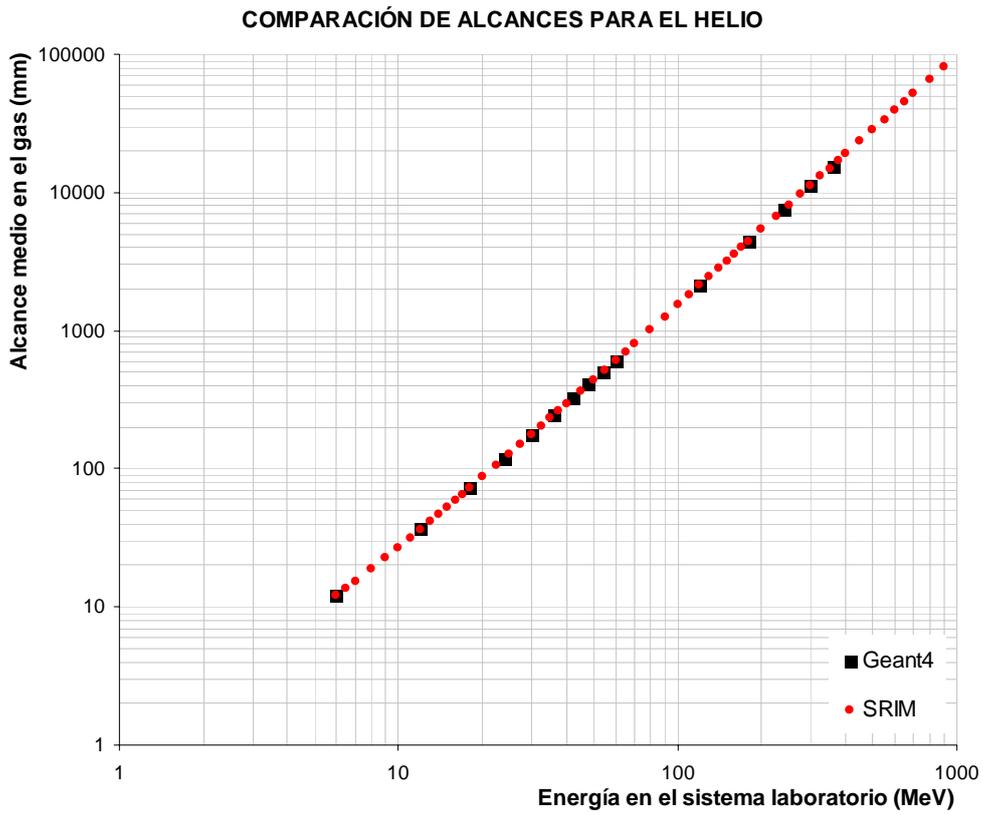


Fig. 14: Comparativa de alcances SRIM – ActarSim para el ${}^6\text{He}$

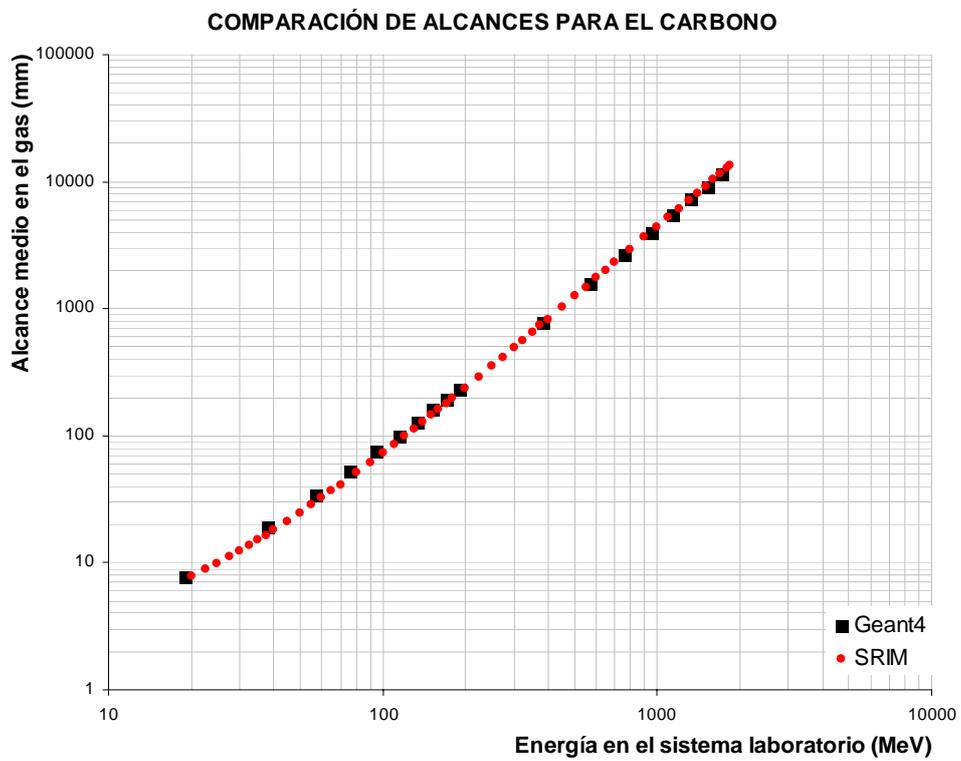


Fig. 15: Comparativa de alcances SRIM – ActarSim para el ${}^{19}\text{C}$

COMPARACIÓN DE ALCANCES PARA EL AZUFRE

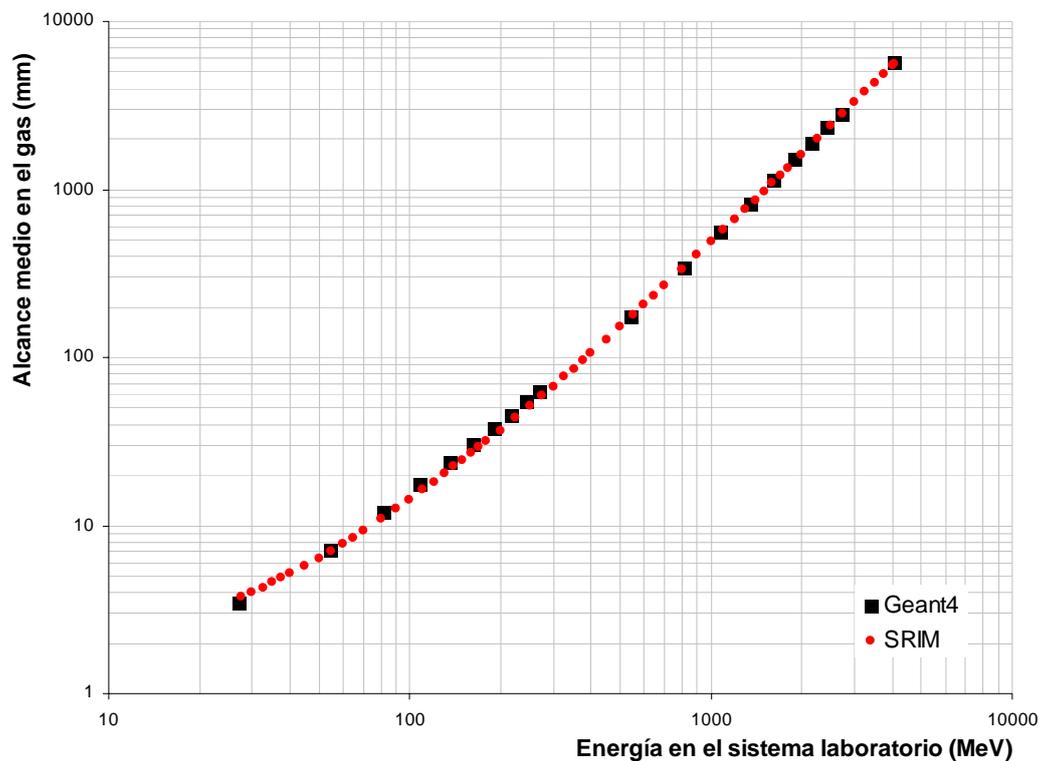


Fig. 16: Comparativa de alcances SRIM – ActarSim para el ^{27}S .

COMPARACIÓN DE ALCANCES PARA EL NÍQUEL

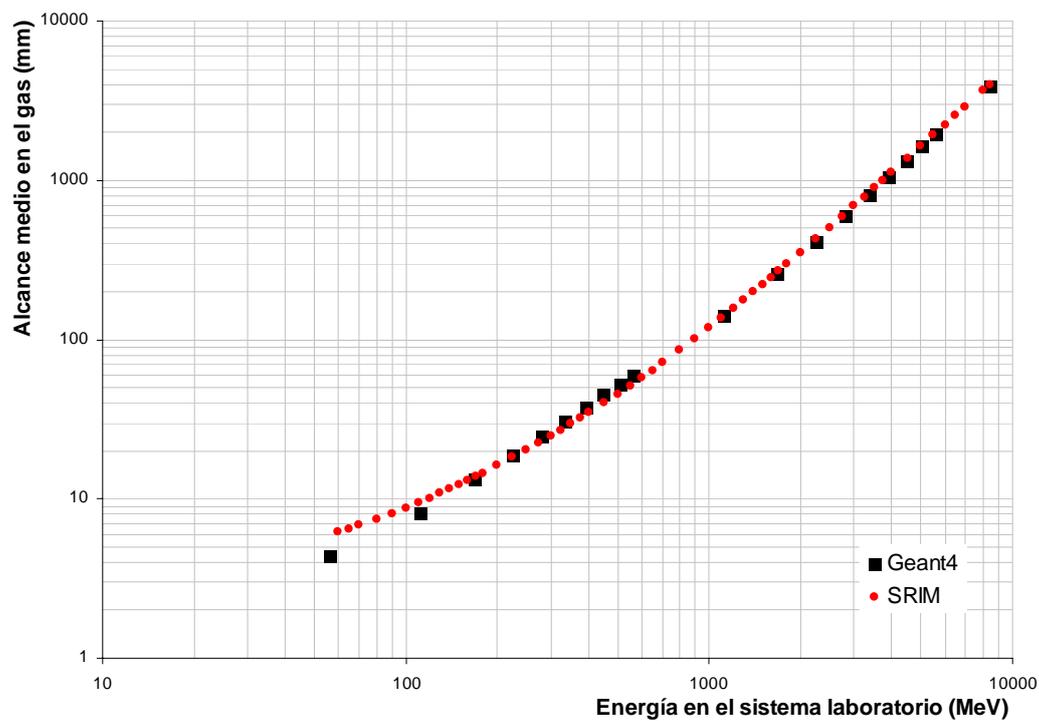


Fig. 17: Comparativa de alcances SRIM – ActarSim para el ^{56}Ni .

Los valores que se obtienen utilizando las librerías de Geant4 son compatibles con los obtenidos con SRIM, como se ve en las figuras de la 13 a la 17. La máxima diferencia se encuentra a bajas energías e iones pesados, donde los valores de ambos difieren en un 20% como máximo, en el caso del Níquel. En el resto de iones se aprecia una diferencia de no más del 10% (en el peor de los casos). Esta diferencia puede deberse a que para las simulaciones se ha utilizado la física estándar de Geant4 (ver 3.1.2.), que no tiene en cuenta las parametrizaciones a bajas energías. En la siguiente sección se utilizarán estas parametrizaciones.

4.2. Comparativa 2: MAYAito

La segunda comparativa se hizo con los últimos resultados experimentales de MAYAito [32]. Estas medidas se tomaron en septiembre de 2005 en GANIL (Francia) y en agosto de este año se han podido ofrecer ya ciertos resultados preliminares a partir del análisis de las mismas, que tomaremos como referencia para comparar con los resultados de ActarSim. Hay que decir que estos datos no son de alcances sino de puntos de inflexión de la curva de Bragg, y que los resultados del análisis de estos datos experimentales se encuentran todavía en una fase muy preliminar, requiriendo que en un futuro se les preste una atención más detallada.

MAYAito también es un blanco activo, mide 30 *cm* de largo. Se le aplica un alto voltaje negativo al cátodo, situado en la cara superior, y positivo a los hilos anódicos de amplificación, situados en la cara opuesta, creando un campo vertical. Hay 5 hilos anódicos en el mismo plano vertical y al mismo potencial, extendidos a todo el ancho de la cámara. Bajo los hilos, el plano de *pads* se mantiene al mismo potencial de éstos, y está dividido en 128 *pads* por columna. Cada *pad* mide 1,5 *mm* de ancho y 15 *mm* de largo, y el área activa del ánodo tiene 200 x 15 *mm*. Las señales se leen a lo largo de ASIC's de Gassiplex conectados en la parte de atrás del ánodo. El plano de la rejilla se coloca encima del ánodo. La cámara se puede rellenar con diferentes gases. El haz entra en el volumen de gas de MAYAito a través de una ventana de Mylar de grosor de 1,5 μm .

En estas medidas se obtuvieron valores experimentales para los alcances y pérdida de energía (dE/dx) de los iones ^{13}C y ^{36}S a diferentes energías de incidencia, para 27 casos correspondientes a diferentes combinaciones de gases y presiones. Los valores de estas presiones fueron elegidos de modo que el haz se detuviera dentro del área activa de MAYAito. De estos 27 casos se han seleccionado 16 para ser simulados en este trabajo, por ser de interés para ACTAR (Tabla 8).

En el caso del carbono las energías de incidencia en el sistema laboratorio fueron 3,01 *MeV/u*, 4,35 *MeV/u*, y 11,06 *MeV/u*, y en el caso del azufre 3,92 y 11,32 *MeV/u*. Las presiones experimentales, los datos de los alcances experimentales, las densidades en condiciones STP de los gases utilizados, y otros valores utilizados en la macro de ejecución, se han tomado de [32]. Al igual que en la comparativa anterior, se lanzaron 1000 eventos para cada *run*,. Sin embargo, se ha utilizado la versión de ActarSim en la que se han incluido parametrizaciones de baja energía [28].

Además de utilizar Geant4, se utilizaron los códigos SRIM, TRIM y ATIMA para calcular los valores de los alcances para estos 16 casos. En el caso de TRIM se simuló una cámara de 1 m³. Para obtener los resultados de TRIM y ActarSim, era necesario introducir como parámetro la densidad del blanco, que fue calculada a la presión experimental (Tabla 8), suponiendo comportamiento de gas ideal¹³, según el cálculo sencillo:

$$P = \frac{nRT}{V} = \frac{m}{P_m} \frac{RT}{V} = \frac{RT}{P_m} \rho = cte\rho \Rightarrow \boxed{P = cte\rho}$$

$$\frac{P_{STP}}{\rho_{STP}} = \frac{P_{MAYAito}}{\rho_{MAYAito}} \Rightarrow \boxed{\rho_{MAYAito} = P_{MAYAito} \frac{\rho_{STP}}{P_{STP}}}$$

siendo P la presión en *mbar*, n el número de moles, R la constante de los gases, T la temperatura, V el volumen, m la masa, P_m el peso molecular y ρ la densidad en *mg/cm³*.

IÓN	ENERGÍA (MeV/u)	GAS	ρ a STP (mg/cm ³)	Pexp (mbar)	ρ a Pexp (mg/cm ³)	ALCANCE EXP. (mm)
¹³ C	3,01	H ₂	0,09	1800	0,2	148,95
		D ₂	0,18	1800	0,3	149,22
				1950	0,3	137,6
	He	0,18	1900	0,3	173,4	
	4,35	Ar	1,78	710	1,2	162,9
				1005	1,8	114,1
		Isobutano	2,59	500	1,3	81,6
11,06	Isobutano	2,59	1880	4,8	105,7	
³⁶ S	3,92	H ₂	0,09	1795	0,2	135,4
		D ₂	0,09	1695	0,3	135,8
				2010	0,4	149,2
		Ar	1,78	600	1,1	110,8
		Isobutano	2,59	220	0,6	100,5
	11,32	Ar	1,78	1700	3,0	163,5
		Isobutano	2,59	710	1,8	150,0
				1300	3,3	78,8

Tabla 8: Detalle de los 16 casos simulados en este trabajo. Todos los datos están tomados de [32]. Se muestran los dos iones elegidos con sus energías de incidencia, los gases utilizados en las medidas, las densidades en condiciones STP y las calculadas a la presión a la que se tomaron las medidas (Pexp), y los valores del alcance medido.

¹³ Dado que las presiones no difieren mucho de 1 atm, las temperaturas no son muy bajas, y los blancos son gases ligeros (el isobutano es un gas de cadena corta), el error cometido con esta aproximación es despreciable.

Para realizar estas simulaciones se ha seguido el procedimiento explicado en el apartado “*Descripción del método*”, con la diferencia de que en lugar de generar 20 histogramas, correspondientes a las 20 energías de incidencia, aquí solo se obtiene un histograma para cada caso particular.

Siguiendo este procedimiento se obtuvieron los histogramas para los valores del alcance calculados en cada combinación gas – presión y se ajustaron a una gaussiana obteniendo el alcance medio y su dispersión. Se hicieron dos grupos de cálculos, utilizando en el primero la física estándar y en el segundo introduciendo las parametrizaciones de baja energía. Solo se mostrarán los histogramas del alcance para este último caso (figuras de la 18 a la 21). La curva que aparece sobre los datos en los histogramas no es más que la gaussiana a la que se han ajustado, y los parámetros de este ajuste aparecen en el recuadro de la derecha, donde el parámetro “*Mean*” se refiere al valor del alcance medio con su error y el parámetro “*Sigma*” se refiere al valor de la dispersión en el alcance también con su error.

En la Tabla 9 se agrupan los iones simulados a las energías mencionadas, así como los gases y las presiones que se utilizaron para realizar cada medida. En las últimas columnas se comparan los valores obtenidos para el alcance: En la columna “ALCANCE EXP. (*mm*)” aparecen los datos experimentales obtenidos en las medidas de MAYAito, en las dos columnas siguientes los resultados de simular estos iones con SRIM y TRIM, en las cuatro siguientes columnas aparecen los resultados de Geant4, mostrando el alcance medio y su dispersión correspondiente, para el caso de física estándar y para el caso en el que se incluyen las parametrizaciones de baja energía, y por último los resultados de ATIMA, en los que no se muestran los resultados para el isobutano, ya que se utilizó la versión web del programa [18], que no permite la introducción de blancos compuestos.

Dado que se están comparando valores de alcance con valores de puntos de inflexión de la curva de Bragg, existe una diferencia notable entre los datos experimentales y los simulados. A primera vista, todos los códigos dan valores del alcance mayores que los experimentales en general, salvo casos contados. También se aprecia que los valores de ATIMA son muy similares a los de ActarSim, aunque un poco por debajo en general, siendo ambos bastante diferentes a los experimentales, a diferencia de los de SRIM/TRIM, que se acercan más al valor real (experimental).

En cuanto a la comparación entre la versión de física estándar y de bajas energías de ActarSim, no parece que haya una gran diferencia entre ambas, aunque el caso a bajas energías se encuentra más cerca del valor experimental, teniendo un valor ligeramente menor que el caso con física estándar.

Si se analizan casos concretos, tanto SRIM como TRIM dan siempre valores menores que los experimentales para el isobutano. Con ActarSim sucede lo mismo para el caso del ^{13}C a $11,06 \text{ MeV/u}$ en isobutano a 1880 mbar y para el ^{27}S a $11,32 \text{ MeV/u}$ en isobutano a 710 mbar , incluso para el argón, en el caso de ^{27}S a $3,92 \text{ MeV/u}$ en argón a 600 mbar y para el ^{27}S a $11,32 \text{ MeV/u}$ en argón a 1700 mbar . Finalmente, no tenemos datos para el isobutano en ATIMA, pero los valores del alcance para el argón están por debajo de los experimentales en todos los casos simulados.

IÓN	ENERGÍA (MeV/u)	GAS	PRESIÓN (mbar)	ALCANCE EXP. (mm)		ALCANCE SRIM (mm)		ALCANCE TRIM (mm)		ALCANCE AS (mm)	DESVIACIÓN (mm)	BAJA ENERGÍA AS (mm)	DESVIACIÓN (mm)	ATIMA
				148,95	152,80	163,83	164,01	165,5	179,6					
¹³ C	3,01	H ₂	1800	148,95	152,80	163,83	164,01	165,5	179,6	0,8	179,5	0,7	178,20	
		D ₂	1800	149,22	160,30	115,74	115,87	116,9	179,8	0,8	179,6	0,7	178,06	
			1950	137,6	148,00	76,42	76,45	86,0	166,1	0,8	177,9	0,7	171,43	
	4,35	Ar	1900	173,4	207,80	115,74	115,87	116,9	203,1	1,1	202,1	0,8	199,32	
			500	81,6	76,42	76,45	86,0	86,0	166,1	0,8	177,9	0,7	171,43	
		Isobutane	1880	105,7	98,24	98,32	98,32	105,0	0,4	105,2	0,4	105,2	0,4	
	³⁶ S	3,92	H ₂	1795	135,4	141,78	141,84	141,84	176,9	0,5	176,5	0,4	170,01	
			D ₂	1695	135,8	149,40	150,71	150,71	187,8	0,5	187,0	0,5	179,90	
				2010	149,2	166,88	166,90	166,90	186,6	0,5	184,7	0,5	179,91	
		11,32	Ar	600	110,8	111,75	111,70	111,70	108,6	0,3	107,9	0,3	107,95	
				220	100,5	97,13	97,14	97,14	108,6	0,3	109,5	0,3	109,5	
			Isobutane	1700	163,5	156,05	155,88	155,88	154,2	0,4	153,7	0,4	146,52	
1300		Isobutane	710	150,0	135,98	135,96	135,96	146,4	0,4	149,9	0,3	149,9	0,3	
			1300	78,8	74,27	74,25	74,25	80,0	0,2	81,8	0,2	81,8	0,2	

Tabla 9: Comparativa entre los valores del alcance obtenidos por diferentes medios: experimentalmente, con SRIM, con TRIM y con ActarSim (o "AS") con la física estándar y con las parametrizaciones de baja energía, y finalmente con ATIMA.

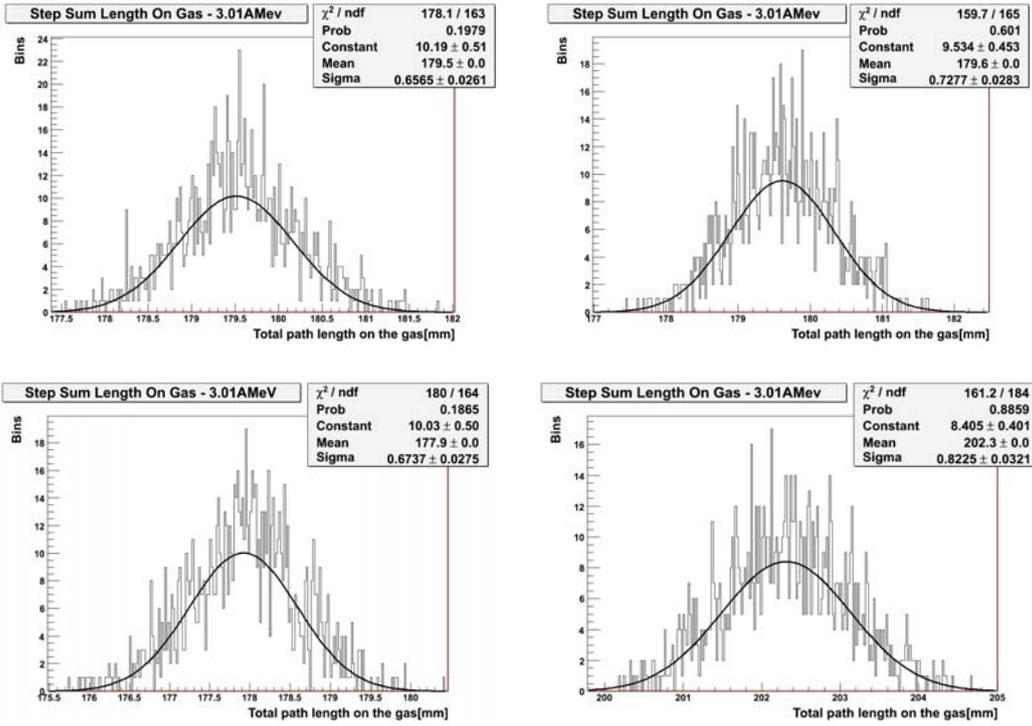


Fig. 18: Histogramas para el ^{13}C a 3,01 MeV/u. De izquierda a derecha y de arriba abajo: H_2 a 1800 mbar, d_2 a 1800 mbar, d_2 a 1950 mbar y He a 1900 mbar.

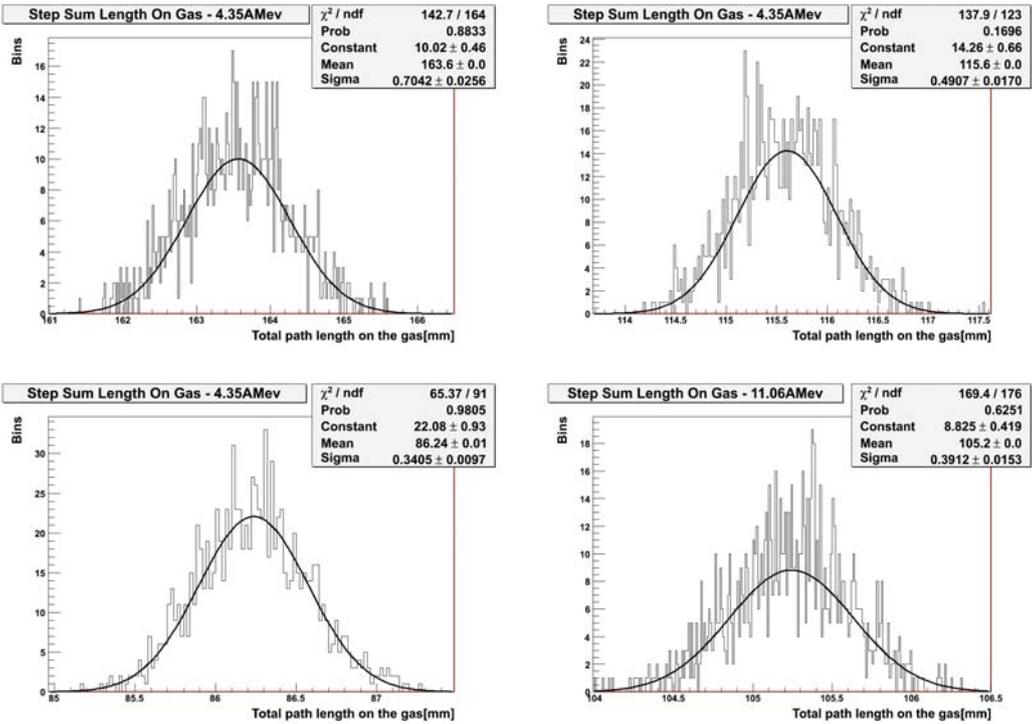


Fig. 19: Histogramas para el ^{13}C a 4,35 y 11,06 MeV/u. De izquierda a derecha y de arriba abajo: Ar a 710 mbar y 4,35 MeV/u, Ar a 1005 mbar y 4,35 MeV/u, isobutano a 500 mbar y 4,35 MeV/u, e isobutano a 1880 mbar y 11,06 MeV/u.

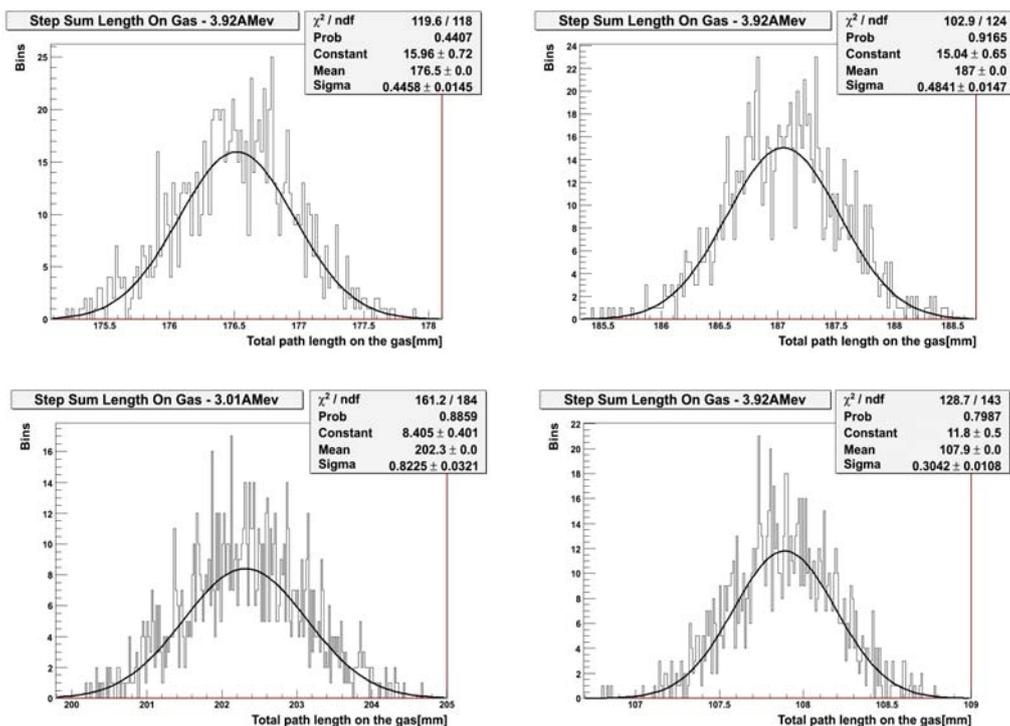


Fig. 20: Histogramas para el ^{36}S a 3,92 MeV/u. De izquierda a derecha y de arriba abajo: H_2 a 1795 mbar, d_2 a 1695 mbar, He a 2010 mbar y Ar a 600 mbar.

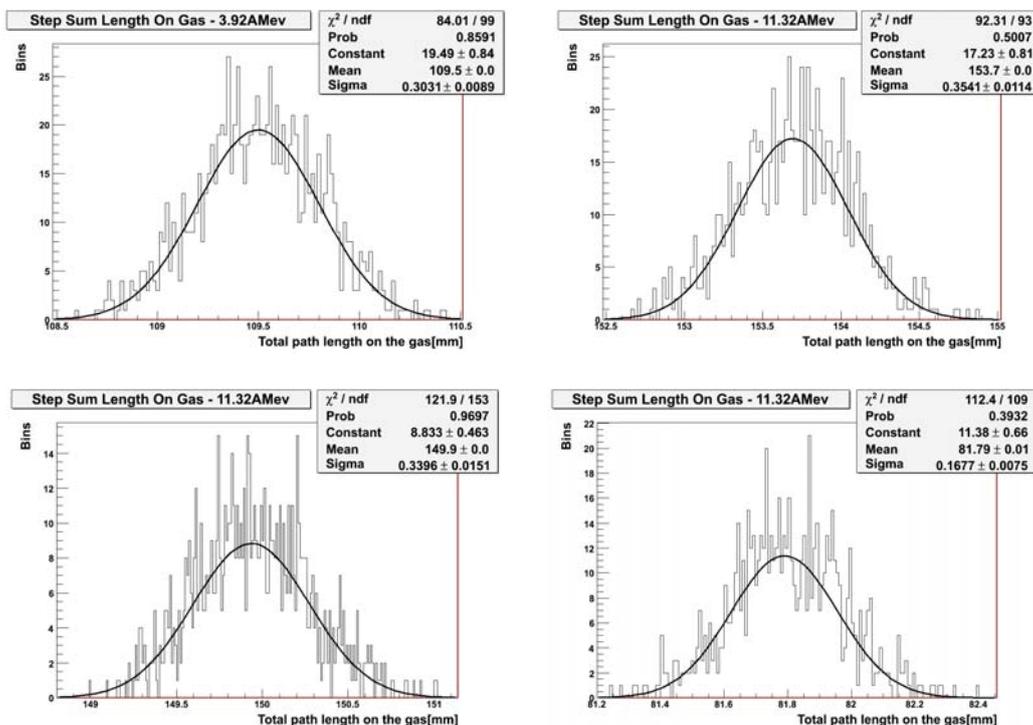


Fig. 21: Histogramas para el ^{36}S a 3,92 y 11,32 MeV/u. De izquierda a derecha y de arriba abajo: isobutano a 220 mbar y 3,92 MeV/u, Ar a 1700 mbar y 11,32 MeV/u, isobutano a 710 mbar y 11,06 MeV/u, e isobutano a 1300 mbar y 11,32 MeV/u.

Para ver estos resultados relacionados entre sí de una forma más clara, se presentan en la Fig. 22 los valores del alcance (experimental, SRIM, TRIM y ActarSim con la física estándar) en función de las 16 diferentes combinaciones de gas y presión simuladas, según la leyenda que se muestra columna “ID” de la Tabla 10.

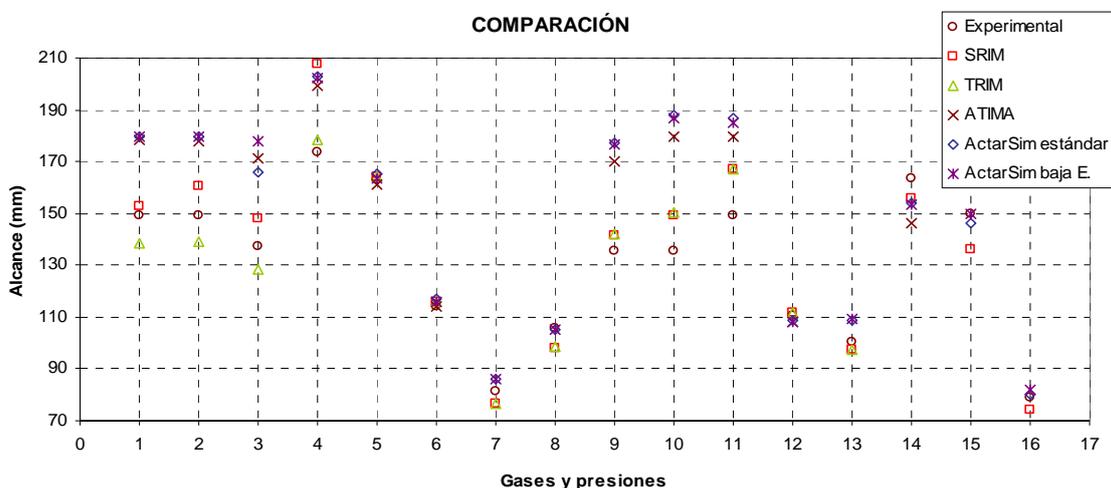


Fig. 22: Comparativa de los valores del alcance obtenidos experimentalmente y con algunos de los códigos utilizados en las simulaciones, frente al número que identifica a cada combinación gas-presión. Estos números identificativos están tomados de la tabla 10.

IÓN	ENERGÍA (MeV/u)	GAS Y PRESIÓN (mbar)	ID	Geant4 ESTÁNDAR DIF. %	Geant4 BAJA E DIF. %	ATIMA DIF. %	ATIMA – Geant4 DIF. %
¹³ C	3,01	H2 a 1800	1	20,6	20,5	20	-0,73
		D2 a 1800	2	20,5	20,4	19	-0,86
		D2 a 1950	3	20,7	29,3	25	-3,77
		He a 1900	4	17,1	16,6	15	-1,40
	4,35	Ar a 710	5	1,6	0,4	-1	-1,55
		Ar a 1005	6	2,4	1,3	-0,3	-1,57
		Iso a 500	7	5,4	5,6		
	11,06	Iso a 1880	8	-0,7	-0,5		
³⁶ S	3,92	H2 a 1795	9	30,7	30,4	26	-3,82
		D2 a 1695	10	38,3	37,7	32	-3,95
		He a 2010	11	25,0	23,8	21	-2,66
		Ar a 600	12	-1,9	-2,6	-3	0,05
		Iso a 220	13	8,1	9,0		
	11,32	Ar a 1700	14	-5,7	-6,0	-10	-4,90
		Iso a 710	15	-2,4	-0,1		
		Iso a 1300	16	1,5	3,8		

Tabla 10: Diferencia en porcentaje entre el alcance medido y el calculado¹⁴ (ActarSim estándar, ActarSim baja energía y ATIMA). La columna “ID” asigna un número a cada caso simulado con el fin de identificarlos en las Fig. 22 y 23. La última columna compara los resultados de ActarSim (para el caso de baja energía) con ATIMA.

IÓN	ENERGÍA (MeV/u)	GAS Y PRESIÓN (mbar)	ID	SRIM DIF. %	TRIM DIF. %	SRIM - Geant4 DIF. %	TRIM - Geant4 DIF. %
¹³ C	3,01	H2 a 1800	1	2,6	-6,9	17,5	29,4
		D2 a 1800	2	7,4	-6,8	12,0	29,2
		D2 a 1950	3	7,6	-6,7	20,2	38,6
		He a 1900	4	19,8	3,0	-2,7	13,1
	4,35	Ar a 710	5	0,6	0,7	-0,1	-0,2
		Ar a 1005	6	1,4	1,6	-0,1	-0,2
		Iso a 500	7	-6,3	-6,3	12,8	12,8
	11,06	Iso a 1880	8	-7,1	-7,0	7,1	7,0
³⁶ S	3,92	H2 a 1795	9	4,7	4,8	24,5	24,4
		D2 a 1695	10	10,0	11,0	25,2	24,1
		He a 2010	11	11,8	11,9	10,7	10,7
		Ar a 600	12	0,9	0,8	-3,4	-3,4
		Iso a 220	13	-3,4	-3,3	12,7	12,7
	11,32	Ar a 1700	14	-4,6	-4,7	-1,5	-1,4
		Iso a 710	15	-9,3	-9,4	10,2	10,3
		Iso a 1300	16	-5,7	-5,8	7,7	10,2

Tabla 11: En esta tabla, similar a la tabla 10, se muestran las diferencias relativas entre SRIM y TRIM y los datos experimentales. En las dos últimas columnas se comparan los resultados de ActarSim (para el caso de baja energía) con ambos códigos.

En la tabla 10 se presentan las diferencias en tanto por cien entre el código ActarSim (que como ya se mencionó, implementa las librerías de Geant4) y los datos experimentales, para los casos en los que se simuló una física estándar y física de bajas energías. Se aprecia una diferencia ligera entre ambas, siendo en ocasiones la diferencia con física estándar superior a la diferencia con física de bajas energías (como en los casos 1, 2, 9, 10 y 11, etc.), mientras que en otros casos la física de bajas energías sobreestima notablemente el alcance experimental (combinación 3). Las diferencias entre ATIMA y los valores experimentales son ligeramente inferiores a las de Geant4, como se ve en la última columna de esta tabla donde se compara Geant4 con este código, aunque siguen teniendo valores demasiado altos.

En la tabla 11 se muestran las diferencias entre los códigos de J. F. Ziegler [15] y los valores experimentales. El acuerdo entre los resultados obtenidos con estos códigos es bastante mejor que el obtenido con Geant4 o con ATIMA, aunque el caso 10 y el 11, que representan al ión pesado en gases ligeros a altas presiones incidiendo a bajas energías, están sobreestimados, y el caso también de bajas energías del carbono incidiendo en otro gas ligero, el helio, tiene una diferencia con los datos experimentales ligeramente mayor que la que se obtiene con cualquiera de las físicas simuladas en Geant4 y con ATIMA. Por eso, al comparar estos códigos con Geant4, (en las dos últimas columnas), la diferencia entre los códigos es mucho mayor que en la comparación con ATIMA, aún utilizando la versión de ActarSim que incluye las librerías de Geant4 para la simulación de la física de bajas energías.

La diferencia¹⁴ en tanto por cien entre los resultados obtenidos con Geant4, (y con otros códigos) y los valores medidos con MAYAito (Tablas 10 y 11) se representan en la Fig. 23 como función de las condiciones gas – presión que se han estudiado en este trabajo, otra vez según la leyenda que se muestra en la columna “ID” de las tablas.

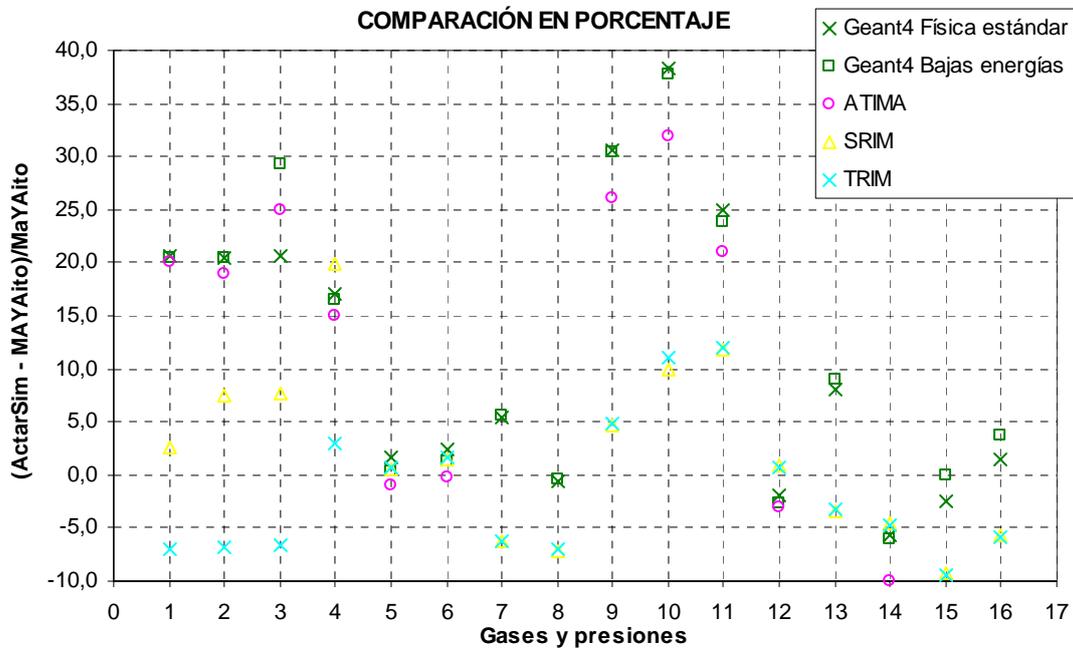


Fig. 23: Diferencias relativas en porcentaje entre el alcance experimental y el calculado con los distintos códigos, como función de las diferentes combinaciones gas – presión, según la leyenda de las Tablas 10 y 11 de donde se sacan los datos.

El factor que más influye en la diferencia entre datos reales y simulados es la forma en la que se ha definido el alcance en los datos experimentales, según el método de “*doble diferenciación*”. Es decir, en el análisis de los datos experimentales, de todas las definiciones posibles de alcance, se ha escogido aquella en la que el alcance se toma como el punto de inflexión de la caída en la parte final de la curva de Bragg, por las razones expuestas en el apartado 3.2.4.

Dicha definición hace que el valor obtenido con éste método difiera de la definición del alcance que utilizan todos los códigos de simulación utilizados, dado que éstos toman como alcance el espacio recorrido hasta que la partícula pierde toda su energía y se detiene. Para partículas cargadas y pesadas como las simuladas, la caída de la curva puede ser más lenta, con lo cual el punto de inflexión está muy separado del punto de corte con el eje (Fig. 24).

¹⁴ Esta diferencia relativa se ha calculado según: $\frac{ActarSim - MAYAito}{MAYAito} \times 100$

Muchos de los valores del alcance obtenidos con ActarSim tienen una diferencia relativa con respecto del alcance medido que está dentro del 10% excepto para los casos en los que se simularon iones a bajas energías o pesados. Por ejemplo, con respecto a la *masa* del ión, los alcances calculados están sobreestimados en alrededor del 20 % para el ión más liviano ^{13}C (ID = 1, 2, 3) y cerca del 40% para el ión pesado ^{36}S (ID = 10). Con respecto a la *energía* de incidencia del ión, al aumentar la energía de incidencia la diferencia entre valor medido y valor calculado se hace menor.

En la figura 24 se muestra una curva de Bragg obtenida a partir de los datos experimentales, tomada de [32]. En ella se representa la pérdida de energía por unidad de espesor másico frente al espesor del detector. Se han marcado con sendas líneas las posiciones en las que se encuentran el alcance experimental (calculado como el punto de inflexión de la curva) y el alcance obtenido con SRIM (calculado como el punto donde la partícula se detiene en el medio). Como se puede apreciar, ambas líneas están separadas por una distancia no despreciable. Lo que también se aprecia es que quizás estas líneas sufran además de un excesivo desplazamiento hacia valores decrecientes del espesor, (el punto de inflexión parece que se encuentre más hacia la derecha de la curva de lo que marca la línea vertical). Esto podría estar introduciendo una diferencia añadida en las comparaciones aquí expuestas.

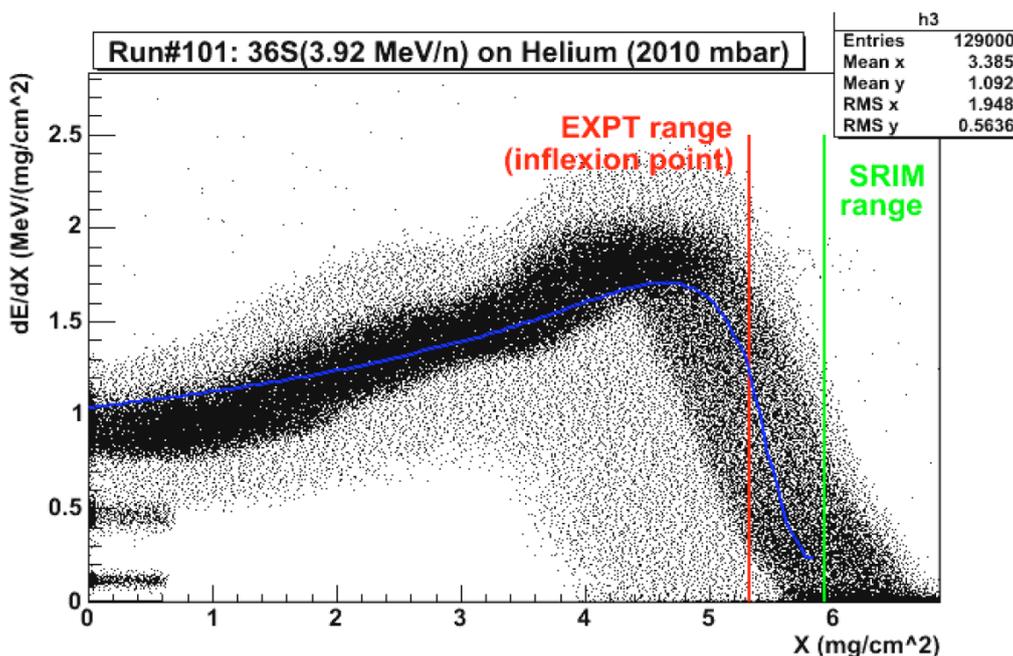


Fig. 24: Diferencias entre el alcance experimental calculado como el punto de inflexión de la curva de Bragg y el alcance definido según la mayoría de los códigos de simulación como por ejemplo SRIM. Si la partícula incidente es muy pesada, como por ejemplo en el caso del azufre (cuya curva de Bragg se muestra en la figura), la caída en la parte final de la curva se produce en un intervalo más largo y la diferencia entre ambos valores puede ser grande. Tomado de [32].

Para evaluar el grado de error que este hecho puede introducir, se hizo otra serie de simulaciones, en las que a partir del fichero de salida de cada simulación, se intentó reproducir la curva de Bragg para calcular a partir de ella el punto de inflexión correspondiente a cada caso de la Tabla 10.

4.2.1. DETERMINACIÓN DE LOS PUNTOS DE INFLEXIÓN

Para obtener los puntos de inflexión de los 16 casos simulados, se ejecutó dentro de ROOT la macro que se muestra en el Apéndice.

Se empieza cargando solo aquellas variables del árbol de trazas que se van a utilizar, y se construyen los histogramas donde se representarán la curva de Bragg y sus derivadas. Se fija el tamaño del *pad* en su valor experimental (1,5 mm), con la intención de reproducir al máximo el método de análisis utilizado en el caso experimental. Entramos en el bucle de llenado de estos histogramas donde se aplican las correcciones explicadas en el apartado 3.2.4, y así se obtienen los gráficos de la Fig. 25.

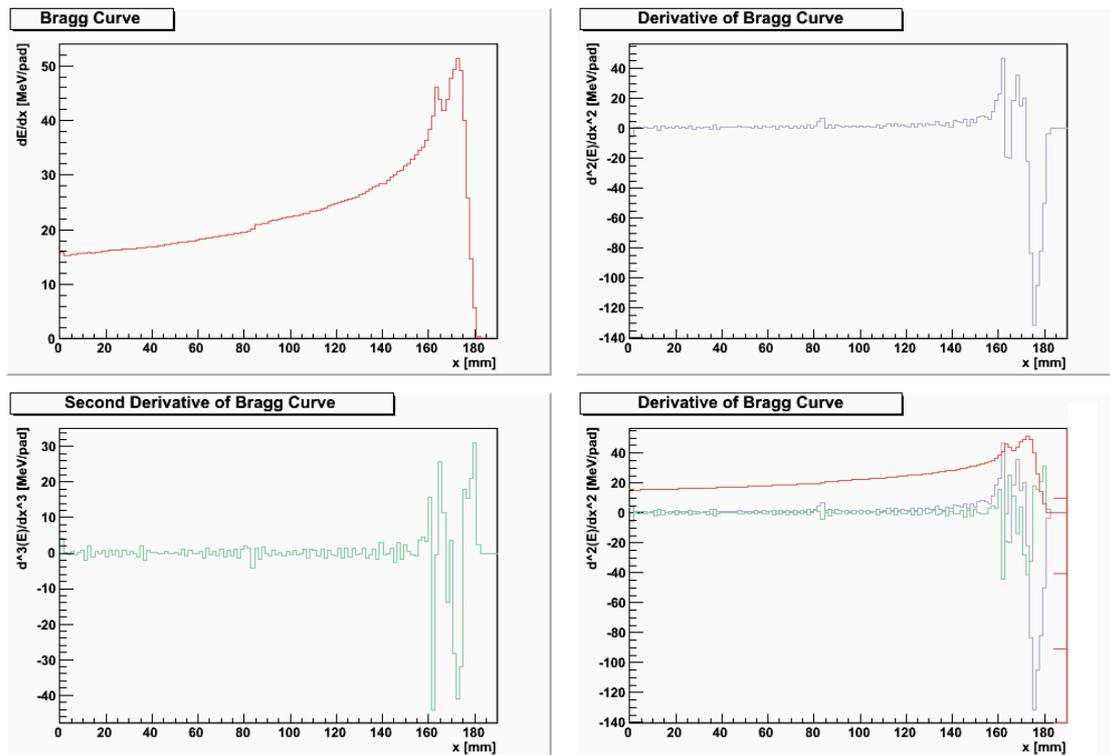


Fig. 25: De izquierda a derecha y de arriba abajo, curva de Bragg, primera derivada, segunda derivada, y superposición de las tres, para el ^{13}C a 3,01 MeV/u en H_2 a 1800 mbar.

En estos gráficos se muestra la suma de la pérdida de energía de los 1000 iones. Para tener la curva de Bragg de cada ión se podría calcular una curva “promedio”, dividiendo el contenido de los bins de la curva de Bragg así calculada entre 1000. Sin embargo, esto no permitiría obtener el valor del punto de inflexión con su dispersión como se hizo para el alcance. Para ello se generan los histogramas de la curva de Bragg para cada uno de los 1000 iones, y se tratan de manera independiente, calculando el punto de inflexión para cada una de ellas, y esperando que éste siga una distribución gaussiana como en el caso del alcance.

Una vez calculadas las curvas de Bragg para cada uno de los 1000 iones, empieza el cálculo del punto de inflexión. Para cada una de las 1000 curvas de Bragg se realizó un ajuste de la última parte (la caída) a un polinomio de orden tres, como se explicó en el apartado 3.2.4. En principio se tomó como rango de ajuste el intervalo entre el máximo de la curva y el punto donde muere, cuidando que al menos contuviera cuatro puntos. También se probó a tomar dos *pads* por encima y dos *pads* por debajo de un punto de inflexión obtenido como el mínimo de la primera derivada. La Fig. 26 muestra que estos procedimientos daban lugar a ajustes erróneos, pues en algunos histogramas el punto de inflexión de las curvas de ajuste estaba más allá del punto de inflexión del histograma, hacia valores de x más pequeños. El resultado más coherente se consigue tomando el intervalo entre el final de la curva y 5 *pads* hacia atrás.

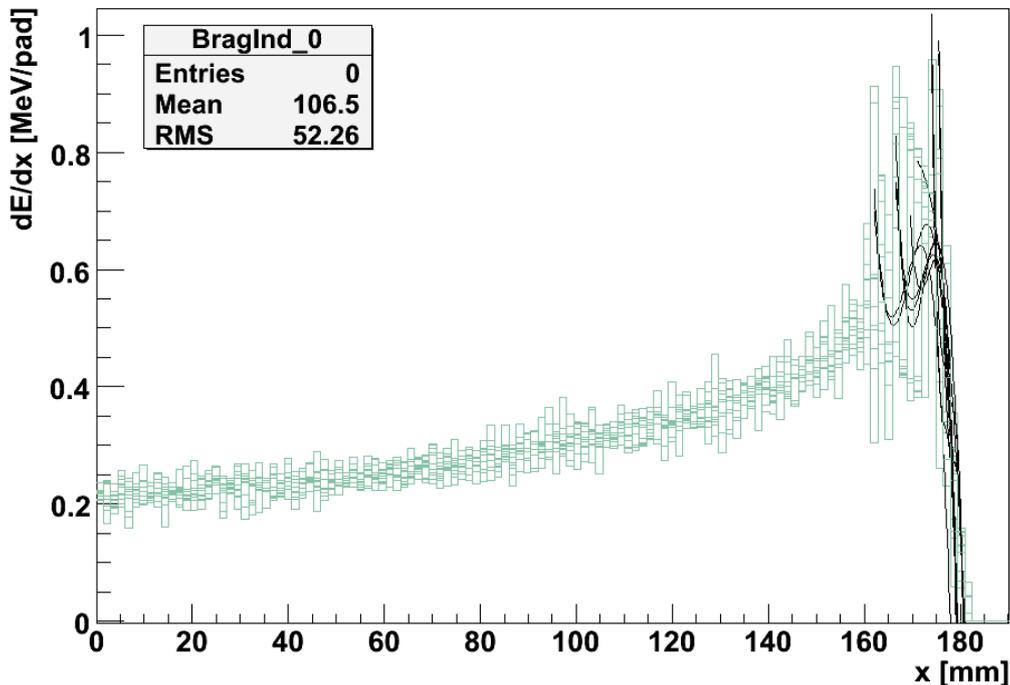


Fig. 26: Se muestra la superposición de 10 de las 1000 curvas de Bragg calculadas para cada ión (se representan las curvas de los iones cuyo identificador es múltiplo de 100 y la del ión 0), para el ^{13}C a 3,01 MeV/u en H_2 a 1800 mbar. Sobre los histogramas se muestran las curvas de ajuste a un polinomio de tercer grado, tomando como rango de ajuste el intervalo entre el máximo del histograma y el último bin.

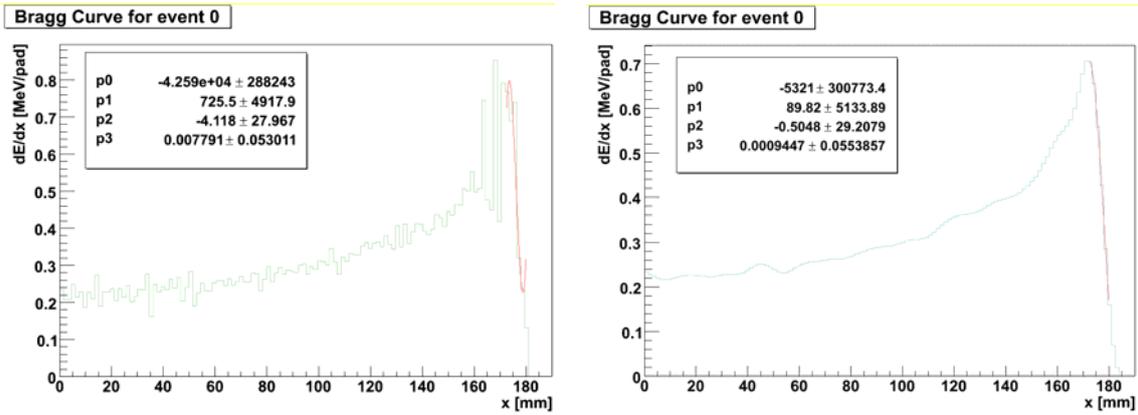
Finalmente, se decidió aplicar una curva de suavizado antes de aplicar el ajuste. La función de suavizado utilizada viene proporcionada por las librerías de ROOT para histogramas, y se basa en el algoritmo 353QH presentado (inicialmente en FORTRAN) por J. Friedman [37], que aplica cálculos de medianas e interpolaciones cuadráticas ente los datos para conseguir este suavizado. Esta función permite introducir el número de veces que se desea repetir el suavizado, en este caso, con 50 veces se consigue un buen resultado de los ajustes como se ve en la Fig. 27.

Se implementó un bucle a los 1000 eventos en el que se tomó la curva de Bragg de cada uno y se le aplicó la función de suavizado seguida del ajuste a un polinomio de tercer orden. Los parámetros de este ajuste se escriben en un fichero de salida, y se utilizan para calcular el punto de inflexión de cada curva con su error. Luego se rellena con ellos un histograma y se comprueba si se ajustan a una distribución gaussiana.

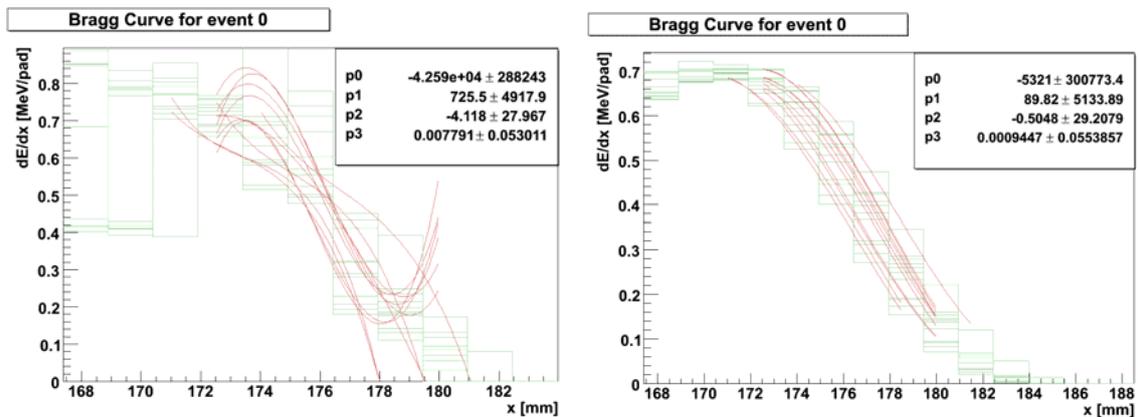
Así, aplicando esta macro a los 16 casos, obtenemos los valores que se muestran en la Tabla 12. Estos valores se obtienen del ajuste gaussiano de los histogramas del punto de inflexión. Estos histogramas se muestran en las Fig. 28 y 29, donde la curva que aparece sobre ellos es el ajuste, y los parámetros de este ajuste aparecen en un recuadro a la derecha. En la tabla 12 se muestran solo los valores de los puntos de inflexión para aquellos casos en los que no hubo problemas con el método propuesto. En general, se espera que el valor del punto de inflexión esté por debajo del valor del alcance, aunque en ciertos casos esto no es así (^{13}C a 4,35 MeV/u en Ar a 1005 mbar y ^{13}C a 4,35 MeV/u en isobutano a 500 mbar).

IÓN	ENERGÍA (MeV/u)	GAS Y PRESIÓN (mbar)	ALCANCE EXP. (mm)	ALCANCE G4 (BAJA E.) (mm)	PTO. DE INFLEXIÓN MEDIO (mm)	ERROR (mm)	SIGMA (mm)	ERROR (mm)
^{13}C	3,01	H2 a 1800	148,95	179,5	177,71	0,03	0,76	0,02
		D2 a 1800	149,22	179,6	179,28	0,03	0,90	0,03
		D2 a 1950	137,6	177,9	177,72	0,03	0,81	0,03
		He a 1900	173,4	202,1	200,47	0,08	1,81	0,06
	4,35	Ar a 710	162,9	163,6	160,85	0,06	1,12	0,04
		Ar a 1005	114,1	115,6	116,83	0,01	0,10	0,01
		Iso a 500	81,6	86,2	86,881	0,001	0,02	0,00
11,06	Iso a 1880	105,7	105,2	96,72	0,02	0,20	0,02	
^{36}S	3,92	H2 a 1795	135,4	176,5	183,14	0,04	1,11	0,03
		D2 a 1695	135,8	187,0				
		He a 2010	149,2	184,7				
		Ar a 600	110,8	107,9				
		Iso a 220	100,5	109,5				
	11,32	Ar a 1700	163,5	153,7	152,28	0,01	0,38	0,01
		Iso a 710	150,0	149,9				
	Iso a 1300	78,8	81,8					

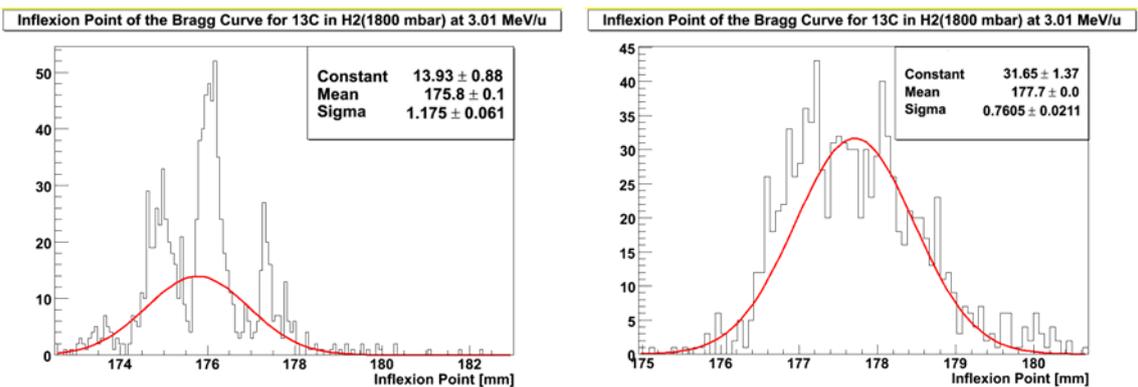
Tabla 12: Se muestran algunos de los valores del punto de inflexión con su error, y la desviación (sigma) de la gaussiana también con su error, para los 16 casos simulados. Además, se comparan con el punto de inflexión experimental y con el resultado del alcance obtenido con ActarSim y las librerías de Geant4 de baja energía.



(a)



(b)



(c)

Fig. 27: En (a) se ve el histograma de la curva de Bragg para el evento 0 del ^{13}C a 3,01 MeV/u en H_2 a 1800 mbar. Antes de suavizar (izquierda) el ajuste de la caída a un polinomio de 3^o orden no es muy bueno, pero al suavizarlo (derecha) el ajuste mejora. En (b) se ve un aumento de la Fig. 26 antes y después de suavizar, y en (c) se muestra el efecto sobre la distribución de puntos de inflexión. A la izquierda se ve la distribución producida por un ajuste efectuado entre el pico de Bragg y el último bin y sin suavizado. Para la distribución de la derecha se han tomado 5 pads y se ha suavizado.

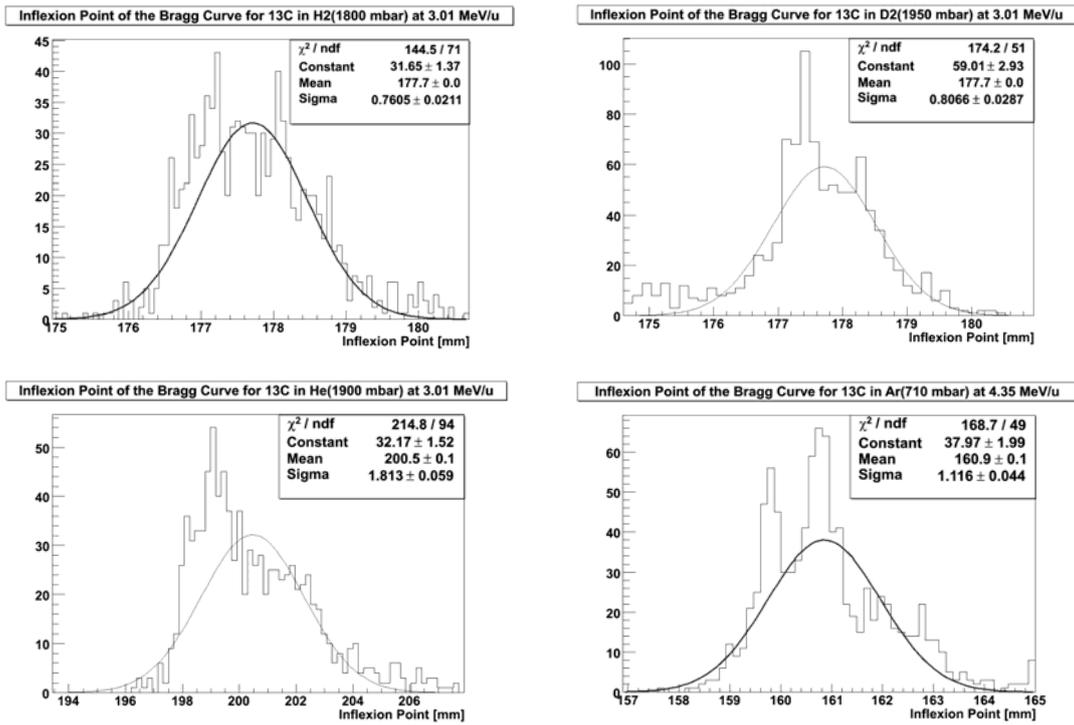


Fig. 28: Puntos de inflexión para el ^{13}C a 3,01 y 4,35 MeV/u. De izquierda a derecha y de arriba abajo: H_2 a 1800 mbar, d_2 a 1950 mbar, He a 1900 mbar y Ar a 710 mbar.

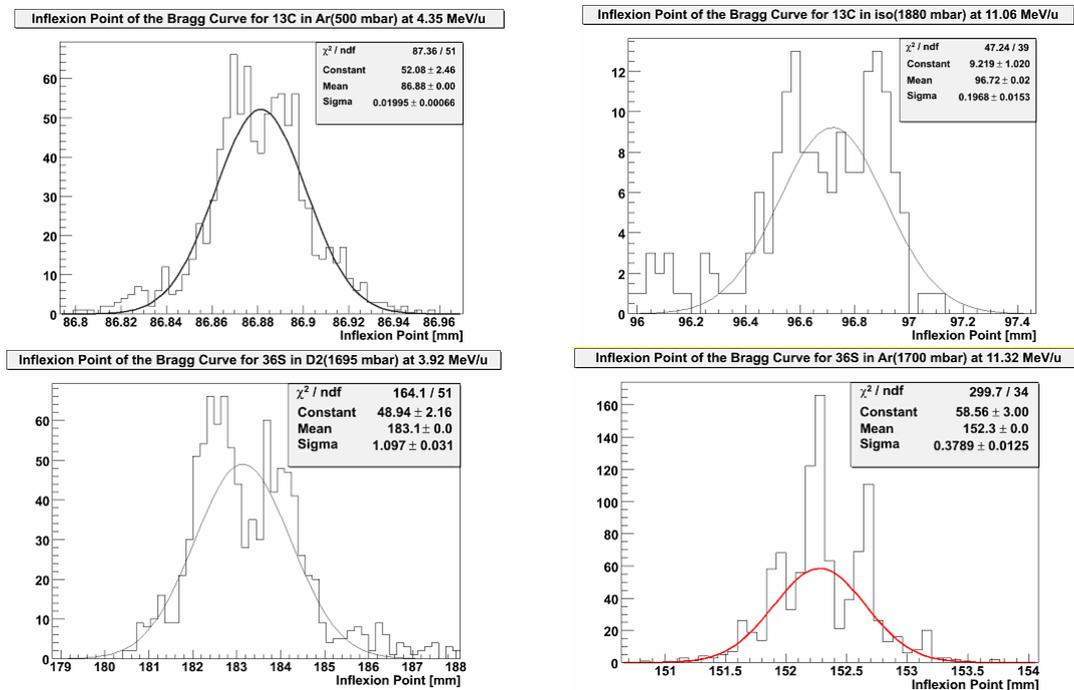


Fig. 29: Puntos de inflexión para el ^{13}C y el ^{36}S . De izquierda a derecha y de arriba abajo: ^{13}C en Ar a 500 mbar y 4,35 MeV/u, y en isobutano a 1880 mbar y 11,06 MeV/u, ^{36}S a 3,92 MeV/u en d_2 a 1695 mbar y en Ar a 1700 mbar y 11,32 MeV/u.

En la siguiente tabla se muestra la diferencia relativa en porcentaje entre los puntos de inflexión obtenidos con ActarSim y los experimentales.

IÓN	ENERGÍA (MeV/u)	GAS Y PRESIÓN (mbar)	ID	ALCANCE EXP. (mm)	PTO. DE INFLEXIÓN MEDIO (mm)	DIF. %
¹³ C	3,01	H2 a 1800	1	148,95	177,71	-19,3
		D2 a 1800	2	149,22	179,28	-20,1
		D2 a 1950	3	137,6	177,72	-29,2
		He a 1900	4	173,4	200,47	-15,6
	4,35	Ar a 710	5	162,9	160,85	1,3
		Ar a 1005	6	114,1	116,83	-2,4
		Iso a 500	7	81,6	86,881	-6,5
11,06	Iso a 1880	8	105,7	96,72	8,5	
³⁶ S	3,92	D2 a 1695	9	135,8	183,14	-34,9
	11,32	Ar a 1700	10	163,5	152,28	6,9

Tabla 13: Diferencia en porcentaje entre los puntos de inflexión medidos y los calculados (ActarSim baja energía). La columna “ID” asigna un número a cada caso simulado con el fin de identificarlos en la Fig. 32.

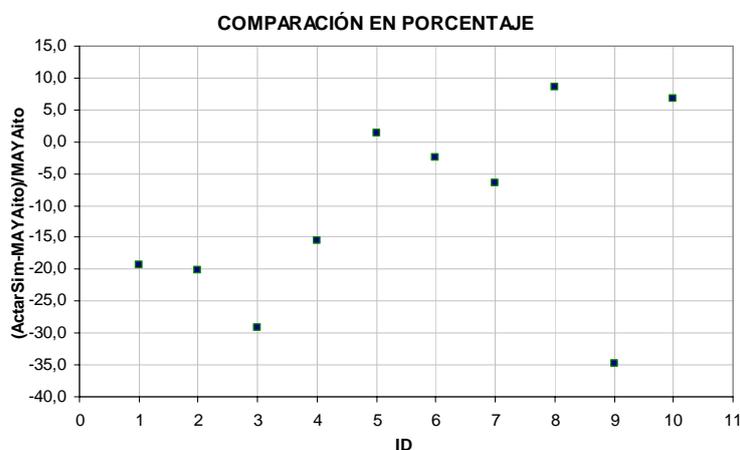


Fig. 32: Diferencias relativas en porcentaje entre los puntos de inflexión medidos y calculados, como función de las diferentes combinaciones gas – presión, según la leyenda de la Tabla 13.

A la vista de estos resultados, parece que para gases ligeros (deuterio), y en la gran mayoría de los casos para bajas energías, la desviación entre la simulación y los datos experimentales es mayor. En el resto de los casos, como se esperaba al calcular puntos de inflexión y no alcances, el valor obtenido con la simulación se acerca más al valor experimental. Sin embargo, todavía sigue habiendo diferencias de más del 20% (por ejemplo, en los casos con ID = 2, 3 y 9), es decir, seguimos sobreestimando el valor experimental.

De cara a un futuro análisis sería interesante disponer de datos para un mismo ión a más energías, y así poder estudiar la dependencia con la energía y con la masa del ión de la diferencia entre puntos de inflexión y alcances. El punto de inflexión es el dato que se puede obtener fácilmente a nivel experimental, y el alcance el que se puede obtener en la simulación. De este modo se podría encontrar algún tipo de relación entre estas dos definiciones de alcance que permitiera obtener el alcance real a partir del punto de inflexión. Pero antes de eso se debe tener la seguridad de que los códigos reproducen las medidas.

En todo caso para hacer un estudio más sistemático y encontrar comportamientos con los distintos gases, energías, presiones o masas de los iones, es necesario disponer de un conjunto de datos más completo con el que poder comparar los resultados de las simulaciones. En relación con esto, se han previsto nuevas medidas de MAYAito, dentro del programa experimental de diseño de ACTAR.

5. Conclusiones

En este trabajo se hizo un estudio del alcance de varios iones en ciertos gases de interés para el detector ACTAR. Para ello se utilizó el código ActarSim, que implementa las librerías de Geant4, cuyos resultados se utilizaron en dos comparativas. En la primera comparativa se han comparado con los resultados obtenidos con SRIM y en la segunda con resultados experimentales y otros códigos como ATIMA.

En la primera comparativa, se han simulado iones a altas energías utilizando el paquete de física electromagnética estándar incluido en las librerías de Geant4. Con esta simulación se ha obtenido el alcance de los iones ^1H , ^6He , ^{19}C , ^{27}S y ^{56}Ni a energías entre 1 y 150 MeV/u . Los alcances de estos iones se distribuyen de forma aproximadamente gaussiana, encontrado que se deben utilizar energías por debajo de 16 MeV para el ^1H , por debajo de 80 MeV para el ^6He y por debajo de 500 MeV para el ^{19}C para detener a estos iones en un volumen de isobutano a STP de, por ejemplo, 1 m^3 . Se han descartado algunos datos a altas energías para algunos iones ligeros, porque a esas energías abandonan el volumen simulado, y el alcance satura.

Se ha observado un buen acuerdo en general entre los resultados de ActarSim y los obtenidos con los otros códigos, como por ejemplo con SRIM, como se aprecia en las Fig.s de la 13 a la 17. Se ha encontrado la máxima diferencia a bajas energías e iones pesados, donde los valores de ambos alcances difieren en un 20 % como máximo, como por ejemplo en el caso del níquel. En el resto de los iones se ha encontrado que la diferencia es de no más de 10 % en el peor caso. Esto puede tener que ver con el hecho de que Geant4 fue desarrollado (en un principio) para trabajar con partículas ligeras a altas energías, y da peores resultados para procesos nucleares de baja energía, aunque últimamente se han incluido parametrizaciones para este tipo de física, como por ejemplo las parametrizaciones de la ICRU y de J. F. Ziegler.

Estas parametrizaciones se utilizan en la segunda comparativa, estudiando un caso real del que se dispone de datos de alcances experimentales (definidos como el punto de inflexión de la curva de Bragg) a bajas energías. Se ha encontrado que en principio no parece haber una gran diferencia entre los resultados obtenidos introduciendo las librerías de baja energía y los obtenidos con la física estándar (Tabla 9).

Se observó que SRIM y TRIM reproducen los valores experimentales con una diferencia muy pequeña, excepto para el isobutano, y el ^{36}S incidiendo en argón a 3,92 MeV/u, donde subestiman el alcance (valores negativos de la tabla 11). Esta pequeña diferencia, en los casos en que resulta positiva ($\text{alcance}_{\text{SRIM}} - \text{alcance}_{\text{exp}}$) podría deberse a que se compararon valores de alcance con valores de puntos de inflexión. Se observa que la máxima diferencia entre estos códigos y los valores experimentales es del 10%, como en el caso del ^{36}S a 3,92 MeV/u incidiendo en deuterio, sin embargo, se encuentra que para el mismo caso, ActarSim difiere casi un 40%. Con ATIMA se han obtenido resultados muy parecidos a los de Geant4, aunque están un poco más cerca de los valores experimentales que los obtenidos con Geant4. La diferencia más grande entre ATIMA y el valor experimental se da para el mismo caso que en Geant4 pero es de un 32%. La diferencia más grande entre ATIMA y Geant4 es también para el azufre, pero incidiendo a 11,32 MeV/u en argón (Tabla 10), donde el resultado de ATIMA tiene un valor un 5% mayor que Geant4.

Se ha implementado un método para calcular el punto de inflexión de una curva de Bragg, dado que los datos experimentales de los que se disponía eran puntos de inflexión y no alcances, según lo que se entiende por alcance (Fig. 24, apartado 2.1.6). Utilizando este método, se han calculado los valores medios de estos puntos de inflexión con su dispersión a partir de curvas de Bragg suavizadas (Tabla 12).

Se ha encontrado que las diferencias entre el punto de inflexión medio calculado a partir de la simulación y el valor del punto de inflexión experimental siguen siendo demasiado grandes, incluso para el mismo caso del azufre incidiendo a 3,92 MeV/u discutido en el párrafo anterior. La diferencia observada entre los alcances y los puntos de inflexión de las curvas de Bragg obtenidos en la simulación es demasiado pequeña para explicar la distancia entre la simulación y los valores experimentales. En cuanto al caso concreto del azufre incidiendo a 3,92 MeV/u, dado que todos los resultados difieren en gran medida, quizás el análisis efectuado sobre el dato experimental para este caso en concreto no sea correcto, hay que recordar que los datos experimentales que se utilizaron en este trabajo son preliminares. También se ha encontrado que las mayores diferencias en porcentaje entre valores simulados y medidos se dan para gases ligeros (o presiones altas) y a bajas energías, sobre todo para el ión pesado.

Apéndice: analBragg.C

```
#define Cl3_1800_1000_analBragg_cxx
#include "Cl3_1800_1000_analBragg.h"
#include <TH2.h>
#include <TStyle.h>
#include <TCanvas.h>

void Cl3_1800_1000_analBragg::Loop(){
// In a ROOT session, you can do:
// Root > .L Cl3_1800_1000_analBragg.C
// Root > Cl3_1800_1000_analBragg t
// Root > t.GetEntry(12); // Fill t data members with entry number 12
// Root > t.Show(); // Show values of entry 12
// Root > t.Show(16); // Read and show values of entry 16
// Root > t.Loop(); // Loop on all entries
//

// This is the loop skeleton where:
// jentry is the global entry number in the chain
// ientry is the entry number in the current Tree
// Note that the argument to GetEntry must be:
// jentry for TChain::GetEntry
// ientry for TTree::GetEntry and TBranch::GetEntry
//
// To read only selected branches, Insert statements like:
// METHOD1:
// fChain->SetBranchStatus("...",0); // disable all branches
// fChain->SetBranchStatus("branchname",1); // activate branchname
// METHOD2: replace line
// fChain->GetEntry(jentry); //read all branches
//by b_branchname->GetEntry(ientry); //read only this branch

gROOT->SetStyle("Default");
gStyle->SetOptStat(0);
gStyle->SetOptFit(1111);

// PREVENTING LACK OF MEMORY
fChain->SetBranchStatus("...",0);
fChain->SetBranchStatus("zCoord",1);
fChain->SetBranchStatus("zPreCoord",1);
fChain->SetBranchStatus("energyStep",1);
fChain->SetBranchStatus("runID",1);
fChain->SetBranchStatus("eventID",1);

if (fChain == 0) return;
Long64_t nentries = fChain->GetEntriesFast();
Long64_t nbytes = 0, nb = 0;

// EDIT ME -- INITIALIZATION VALUES
Double_t pad=1.5; //pad size in mm, to compare with whatever thing Esther wants
Double_t minHistoValue=0.; //always 0
Double_t maxHistoValue=190.; //slightly above the mean range (better an integer multiple of the pad size)
Int_t numberOfIons=1000;
// END OF EDIT ME -- INITIALIZATION VALUES

Int_t numberOfBins=(Int_t)(maxHistoValue/pad);

gROOT->cd();
TH1D* braggCurve =
  new TH1D("braggCurve",
    "Bragg Curve",
    numberOfBins, minHistoValue, maxHistoValue);// in [mm]
braggCurve->SetTitle("x [mm]");
braggCurve->SetYTitle("dE/dx [MeV/pad]");

Char_t name[100];
Char_t title[200];
// char* name = new char[100];
// char* title = new char[200];
TH1D* braggInd;
braggInd = new TH1D*[numberOfIons];
for(Int_t toto=0;toto<numberOfIons;toto++){
  sprintf(name,"%s%i", "BraggInd_",toto);
  sprintf(title,"%s%i", "Bragg Curve for event ",toto);
  braggInd[toto] =
    new TH1D(name,title,
      numberOfBins, minHistoValue, maxHistoValue);// in [mm]
```

```

    braggInd[toto]->SetTitle("x [mm]");
    braggInd[toto]->SetTitle("dE/dx [MeV/pad]");
    //cout << "histo " << toto << " : " << braggInd[toto] << endl;
}

TH1D* derivative =
    new TH1D("derivative",
        "Derivative of Bragg Curve",
        numberofBins, minHistoValue, maxHistoValue); // in [mm]
derivative->SetTitle("x [mm]");
derivative->SetTitle("d^2(E)/dx^2 [MeV/pad]");

TH1D* derivative2 =
    new TH1D("derivative2",
        "Second Derivative of Bragg Curve",
        numberofBins, minHistoValue, maxHistoValue); // in [mm]
derivative2->SetTitle("x [mm]");
derivative2->SetTitle("d^3(E)/dx^3 [MeV/pad]");

TH1D* derivative3 =
    new TH1D("derivative3",
        "Third Derivative of Bragg Curve",
        numberofBins, minHistoValue, maxHistoValue); // in [mm]
derivative3->SetTitle("x [mm]");
derivative3->SetTitle("d^4(E)/dx^4 [MeV/pad]");

Int_t bin=0;
Int_t prevBin=0;
Double_t prev=0.;
Double_t tot=0.;
Double_t percent=0.;
Int_t numberOfPads=0;
Double_t percentPads=0.;

for (Long64_t jentry=0; jentry<nentries;jentry++) {
    Long64_t ientry = LoadTree(jentry);
    if (ientry < 0) break;
    nb = fChain->GetEntry(jentry);   nbytes += nb;

    if(runID == 0) {
        bin = ((Int_t)(zCoord/pad)) + 1; // Specify the bin in wich we are now
        prevBin = ((Int_t)(zPreCoord/pad)) + 1; // Specify the bin corresponding to the previous position

        if (bin = prevBin) {
            braggCurve->AddBinContent(bin, energyStep);
            if(eventID>-1 && eventID<1000) braggInd[eventID]->AddBinContent(bin, energyStep);
            // counterInBins[bin]++; //Number of times that I fall in the same bin
        }

        // CORRECTING FOR WRONG ASSIGNMENT OF ENERGY LOSS
        else {
            // This must be made for all jumps:
            prev = (prevBin*pad) - zPreCoord;
            tot = zCoord - zPreCoord;
            percent = prev/tot;
            braggCurve->AddBinContent(prevBin, energyStep*percent); // Total Histo
            if(eventID>-1 && eventID<1000)
                braggInd[eventID]->AddBinContent(prevBin, energyStep*percent); // Individual events Histo

            // ----- Preventing for jumps of more than one bin(pad)
            numberOfPads = bin - prevBin - 1; // Number of pads in the middle
            if(numberOfPads>0){
                percentPads = pad/tot;
                for (Int_t p=1;p<numberOfPads+1;p++){
                    braggCurve->AddBinContent(prevBin+p, energyStep*percentPads); // Total Histo
                    if(eventID>-1 && eventID<1000)
                        braggInd[eventID]->AddBinContent(prevBin+p, energyStep*percentPads); // Individual events Histo
                }
            }
            // ----- End of preventing
            braggCurve->AddBinContent(bin, energyStep*(1-percent-(numberOfPads*percentPads))); // Total Histo
            if(eventID>-1 && eventID<1000)
                braggInd[eventID]->AddBinContent(bin, energyStep*(1-percent-(numberOfPads*percentPads))); // Individual events Histo
        }
    }
}

// MANUAL CALCULATION OF THE DERIVATIVES OF THE BRAGG CURVE
derivative->SetBinContent(1, (braggCurve->GetBinContent(2) - braggCurve->GetBinContent(1))/pad);
derivative->SetBinContent(2, (braggCurve->GetBinContent(3) - braggCurve->GetBinContent(2))/pad);
derivative2->SetBinContent(1, (derivative->GetBinContent(2) - derivative->GetBinContent(1))/pad);

for(Int_t k=1; k<numberOfBins-3; k++){
    derivative->SetBinContent(k+2, (braggCurve->GetBinContent(k+3) - braggCurve->GetBinContent(k+2))/pad);
    derivative2->SetBinContent(k+1, (derivative->GetBinContent(k+2) - derivative->GetBinContent(k+1))/pad);
    derivative3->SetBinContent(k, (derivative2->GetBinContent(k+1) - derivative2->GetBinContent(k))/pad);
}

// CALCULATION OF THE INFLEXION POINT

// Double_t peakPos=0.; // Position of the Bragg Peak
Double_t maxPos=0.; // Ending position of the range used for the fit
Double_t minPos=0.; // Minim. position of the range used for the fit
Double_t inflexionPoints=0.; // Inflexion points
Double_t inflexionPointsErr=0.; // Inflexion points' errors

// 4 parameters for a 3order polynomial fit, modify depending on the fit parameters
Double_t par[4];
Double_t *parErr;
parErr = new Double_t[4];

for(Int_t j=0; j<4; j++){
    par[j]=0;
    parErr[j]=0;
}

// Write here the name of the output file with the fit parameters
ofstream parFile = new ofstream("l3c_1800_1000_fit.dat"); //Will have numberOfIons lines
if(!parFile){
    cout << "\n *** ERROR OPENING PARAMS FILE: " << " **** << endl;
}

```



```

braggCurve->Draw("same");

//Draw an axis on the righth side
Int_t numberOfDivisions = 6;
TGaxis *axis = new TGaxis(gPad->GetXmax(), gPad->GetYmin(), gPad->GetXmax(), gPad->GetYmax(), braggMin, braggMax, numberOfDivisions,
"+L");
axis->SetLineColor(50);
axis->SetLabelColor(50);
axis->Draw();

// STARTS CANVAS FOR braggInd

TCanvas* braggIndiv = new TCanvas("13C_1800_1000_braggIndiv","Bragg Range Individual",100,100,700,700);
braggIndiv->SetFillColor(10);
braggIndiv->SetBorderSize(2);
braggIndiv->SetFrameFillColor(0);
braggIndiv->Draw();

braggInd[0]->SetLineColor(30);
braggInd[0]->SetLineWidth(1);
braggInd[0]->SetLineStyle(1);
braggInd[0]->Draw();

for(Int_t j=1;j<numberOfIons;j+=100){
  braggInd[j]->SetLineColor(30);
  braggInd[j]->SetLineWidth(1);
  braggInd[j]->SetLineStyle(1);
  braggInd[j]->Draw("same");
}

// STARTS CANVAS FOR INFLEXION POINT

// Write here the name of the output file with the inflexion point
ofstream *parameters = new ofstream("13C_1800_1000_inflexionP.dat");
if(!*parameters){
  cout << "\n *** ERROR OPENING PARAMS FILE: " << " **** << endl;
}

// Fitting the histogram
TF1 *gauss = new TF1("gauss", "gaus");
Double_t param[3];
Double_t *paramErr;
paramErr = new Double_t[3];

TCanvas* inflexionP = new TCanvas("13C_1800_1000_inflexionP","Inflexion Point of the Bragg Curve for 13C in H2(1800 mbar) at 3.01
MeV/u",100,100,700,700);
inflexionP->SetFillColor(10);
inflexionP->SetBorderSize(2);
inflexionP->SetFrameFillColor(0);
inflexionP->Draw();

gauss->SetLineColor(2);
inflexionPoint->Fit("gauss");
gauss->GetParameters(param);
paramErr = gauss->GetParErrors();
*parameters << param[0] << " " << paramErr[0] << " "
<< param[1] << " " << paramErr[1] << " "
<< param[2] << " " << paramErr[2] << endl;

inflexionPoint->SetLineColor(1);
inflexionPoint->SetLineWidth(1);
inflexionPoint->SetLineStyle(1);
inflexionPoint->Draw();
}

```

Bibliografia

- [1] H. Bethe, *Annalen der Physik*, **5**, 325 (1930).
- [2] U. Fano, *Ann. Rev. Nucl. Sci.* **13**, 1-66, (1963).
- [3] PDG (Particle Data Group), *Journal of Physics G*, Volume **33** (2006).
- [4] A. Allisy et al, *Stopping Powers for Electrons and Positrons*, ICRU Report **37** (1984).
- [5] D. J. Skyrme, *Nucl. Instr. Meth.*, **57**, 61-73 (1967).
- [6] J. F. Ziegler, *J. Appl. Phys / Rev. Appl. Phys.*, **85**, 1249-1272 (1999).
- [7] A. Allisy et al, *Stopping Powers and Ranges for Protons and Alpha Particles*, ICRU Report **49** (1993).
- [8] H. H. Andersen and J. F. Ziegler, *The Stopping and Ranges of Ions in Matter*, Vol. **3**, Pergamon press (1977).
- [9] J. Lindhard, *Physical Review*, Vol. **124**, N° 1, 128-130 (1961).
- [10] F. H. Attix, *Introduction to Radiological Physics and Radiation Dosimetry*, John Wiley & Sons (1986).
- [11] G. F. Knoll, *Radiation Detection and Measurement*, 2nd Ed., John Wiley & Sons (1989).
- [12] J. F. Ziegler, J. P. Biersack, U. Littmark, *The Stopping and Ranges of Ions in Solids*, Vol. **1**, Pergamon Press (1985).
- [13] <http://geant4.web.cern.ch/geant4/UserDocumentation/UsersGuides/PhysicsReferenceManual/print/PhysicsReferenceManual180.pdf> (2005).

- [14] G. Moliere, *Theorie der Streuung schneller geladener Teilchen I; Einzelstreuung am abgeschirmten Coulomb-Feld*, Z. f. Naturforsch., A2, 133 (1947).
- [15] <http://www.srim.org/>
- [16] J. F. Ziegler, *The Stopping and Range of Ions in Matter*, Vol. **2-6**, Pergamon Press, (1977-1985).
- [17] J. P. Biersack and L. Hagmark, *Nucl. Instr. and Meth.*, Vol. **174**, 257 (1980)
- [18] <http://www-aix.gsi.de/~weick/ATIMA1.html>
- [19] J. Lindhard and A. H. Sørensen, *Physical Review A*, Vol. **53**, N° 4, 2443-2456 (1996).
- [20] S. P. Ahlen, *Rev. Mod. Phys.*, **52**, 121 (1980).
- [21] S. P. Ahlen, *Phys. Rev. A*, **25**, 1856, (1982).
- [22] W.H. Barkas, M.J. Berger, *NASA Report SP-3013* (1964).
- [23] J.D. Jackson, R.L. McCarthy, *Phys. Rev.* **B6** (1972) 4131.
- [24] R.M. Sternheimer and R.F. Peierls, *Phys. Rev.* **B3** (1971) 3681.
- [25] O.B. Firsov, *Sov. Phys. JETP* **5** (1957) 1192.
- [26] P. Hvelplund, *Dan. Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk.* **38** no.4 (1971).
- [27] <http://fpsalmon.usc.es/r3b/simulationACTAR.shtml>
- [28] <http://fpcongro.usc.es/cgi-bin/viewcvs.cgi/ActarSim/trunk/?root=ActarSim>
- [29] <http://geant4.web.cern.ch/geant4/>
- [30] <http://root.cern.ch/>
- [31] <http://www.gsi.de>
- [32] L. Gaudefroy, G. Mukherjee and F. Rejmund, *Report on the range and stopping power measurements of ions in gases performed at GANIL: A part of R&D for the ACTAR Project*. Grand Accelérateur National d'Ion Lourds (GANIL), Caen & Université de Caen Basse-Normandie (2006).
- [33] D. Cullen, J. H. Hubbell, L. Kissel, *EPDL97: The Evaluated Photon Data Library, '97 version*, UCRL-50400, Vol. 6, Rev. 5.
- [34] S. T. Perkins, D. E. Cullen, S. M. Seltzer, *Tables and Graphs of Electron-Interaction Cross-Sections from 10 eV to 100 GeV Derived from the LLNL Evaluated*

Electron Data Library (EEDL), Z=1-100, UCRL-50400 Vol. 31.

[35] S. T. Perkins, D. E. Cullen, M. H. Chen, J. H. Hubbell, J. Rathkopf, J. Scofield, *Tables and Graphs of Atomic Subshell and Relaxation Data Derived from the LLNL Evaluated Atomic Data Library (EADL), Z=1-100, UCRL-50400 Vol. 30.*

[36] W. H. Barkas, *Technical Report 10292, UCRL, 1962.*

[37] *CERN School of Computing, Noruega, (11-24/08/1974).*

[38] T.E. Pierce, M. Blann, *Phys. Rev.* **173** (1968) 390.