

Caracterización de la reacción nuclear de la terapia de captura neutrónica por Boro (BNCT) por medio de Geant4

Characterization of the nuclear reaction of neutron capture therapy by Boron (BNCT) via Geant4

Robinson Steven Medina¹, Diego Alexander Téllez², Edwin Munévar¹ y Jose Alfonso Leyva²

Recibido: 3 de julio de 2018

Aceptado: 7 de diciembre de 2018

Publicado en línea: 17 de diciembre de 2018

Doi: 10.32685/2590-7468/invapnuclear.2.2018.58

Citación: R. S. Medina, D. A. Téllez, E. Munévar y J. A. Leyva, “Caracterización de la reacción nuclear de la terapia de captura neutrónica por boro (BNCT) por medio de Geant4”, *Revista de Investigaciones y Aplicaciones Nucleares* n.º 2, pp. 43-54, 2018.

RESUMEN

El propósito principal en este trabajo es determinar evento por evento el conteo, la distribución de energía, la distribución de momento y la distribución angular de las partículas producidas en la reacción nuclear principal que tiene lugar en la terapia de captura neutrónica por boro (BNCT) [$^{10}\text{B} (n, \alpha)^7\text{Li}$]. Además de una breve revisión histórica, se presentan los resultados obtenidos de la simulación computacional con Geant4 de la reacción nuclear que tiene lugar en la BNCT.

ABSTRACT

The aim in this work is to determine event by event the counting, the distribution of energy, the distribution of momentum, and the angular distribution of the particles produced in the main nuclear reaction that takes place in neutron capture therapy by boron (BNCT) [$^{10}\text{B} (n, \alpha)^7\text{Li}$]. In addition to a brief historical review, the results obtained from the computational simulation with Geant4 of the nuclear reaction that takes place in the BNCT are presented.

Palabras clave: Captura neutrónica, neutrones epitérmicos, Geant4.

Key words: Neutron capture, epithermal neutrons, Geant4.

¹ Proyecto curricular de licenciatura en Física, Universidad Distrital Francisco José de Caldas

² Departamento de Física, Pontificia Universidad Javeriana, Colombia
Email de correspondencia: leyvaa@javeriana.edu.co

1. INTRODUCCIÓN

Después de que Chadwick descubriera el neutrón, en 1932 [1], se iniciaron diversas investigaciones en el ámbito nuclear. Una cantidad considerable de estas investigaciones se enfocó en la denominada *captura neutrónica*, reacción de tipo binario descrita por Taylor y Goldhaber en 1935 [2]. En 1936, Locher especificó los efectos biológicos de la reacción nuclear de captura neutrónica [3], y sugirió su uso potencial como terapia contra el cáncer, procedimiento que recibió el nombre de *neutron capture therapy* (NCT). La NCT combina la introducción de pequeñas cantidades de un absorbente de neutrones (^{10}B , ^{157}Gd , ^7Li) que se almacenan a nivel celular, para posteriormente ser bombardeados con neutrones epitérmicos (neutrones lentos), los que desencadenan una reacción que libera energía de ionización en las regiones de mayor interés, brindando así una forma selectiva

de causar daño a las células tumorales y, al mismo tiempo, minimizando los efectos letales al tejido sano circundante [4].

Cuando la NCT se realiza por medio de boro (^{10}B), se le denomina *boron neutron capture therapy* (BNCT). La reacción nuclear principal (véase la figura 1) consiste en la liberación de rayos gamma, partículas α (^4He) e iones de litio (^7Li) dentro del tejido celular con una energía de 0,478 MeV, 1,47 MeV y 0,84 MeV, respectivamente. Este canal de decaimiento se da en aproximadamente el 94% de los casos; en el porcentaje restante solo se producen partículas α (^4He) e iones de litio (^7Li) sin producción de rayos gamma. Para lograr un alto grado de eficiencia en la BNCT se requiere que la concentración de boro sea del orden de 10^9 átomos por célula; esto indica que se debe tener una concentración de aproximadamente 35 μg de boro por cada gramo de tejido tumoral, mientras que para el tejido sano la concentración no debe superar los 5 μg por gramo [5].

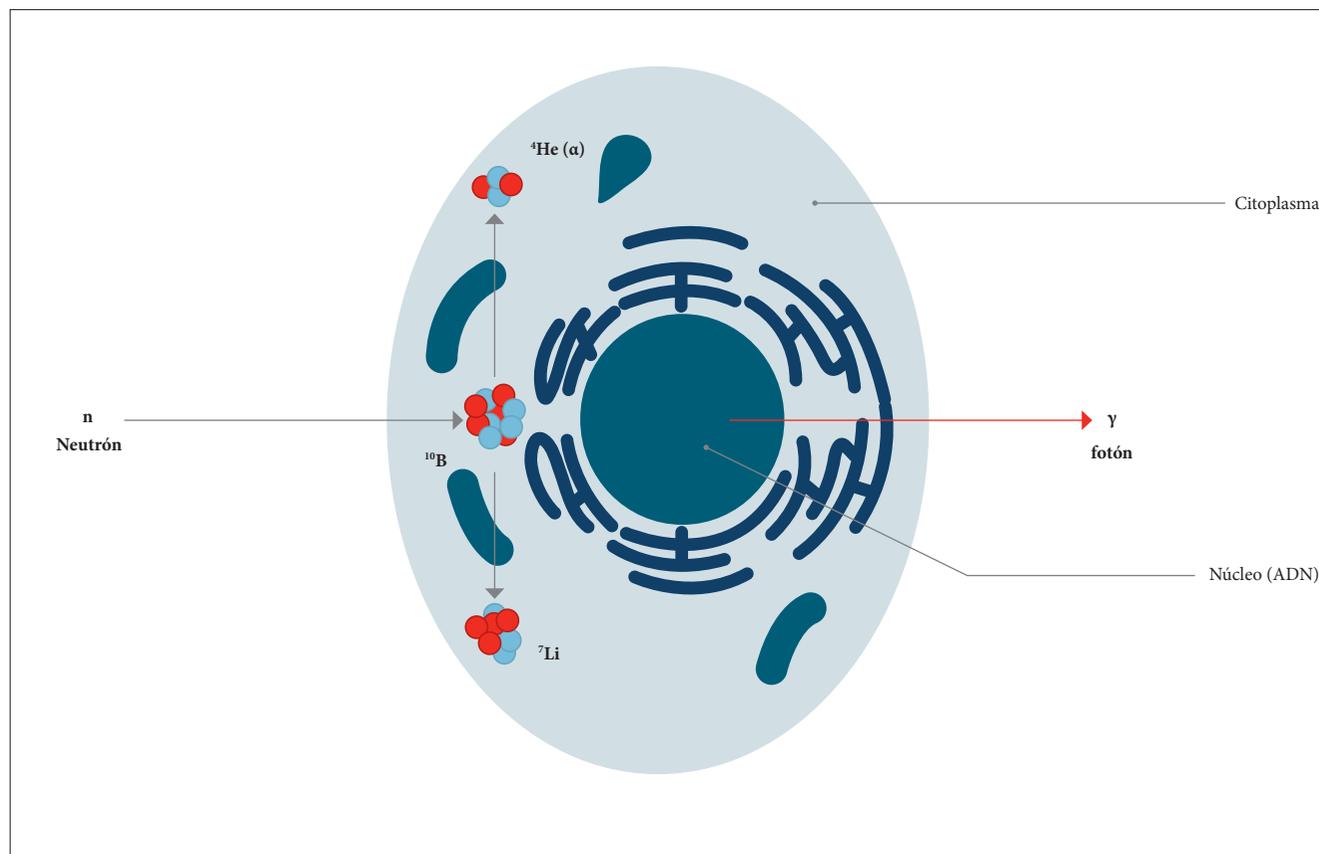


Figura 1. Representación de BNCT en el interior de la célula

Reacción que se produce en el canal de decaimiento más probable (~94%) del BNCT.

Figura realizada por los autores de este documento con base en la representación de BNCT en la célula de [3].

La razón principal que condujo al desarrollo de la BNCT es tratar tumores cerebrales malignos, como los glioblastomas multiformes (GBM), considerados una de las formas más agresivas de cáncer, de los cuales raramente se puede eliminar quirúrgicamente todo el tejido canceroso [6]. Este tipo de tumores se caracteriza por su agresiva proliferación y extensa invasión del tejido normal antes de que se presente cualquier síntoma. El tratamiento de los GBM con BNCT presenta ventajas tanto de tipo físico como biológico. Debido a que el tratamiento se lleva a cabo a partir de partículas con alta transferencia lineal de energía (LET, por sus siglas en inglés) como α y ${}^7\text{Li}$, la tasa de esterilización o destrucción de tumores es más alta si se la compara con la de otras técnicas, como la radioterapia por rayos X. Por otro lado, la BNCT permite administrar de manera selectiva dosis localizadas a células tumorales (con muy alta concentración de ${}^{10}\text{B}$) dispersas en tejido normal, al tiempo que minimiza la toxicidad en el tejido normal. Adicionalmente, el proceso de destrucción de células mediante la BNCT es poco sensible a la presión de oxígeno, lo que la convierte en un procedimiento ventajoso para tratar tumores con hipoxia extensa, tales como los GBM. El éxito de la BNCT como tratamiento para dicha clase de tumores depende, sin embargo, de tres factores: una adecuada concentración de ${}^{10}\text{B}$ en las células tumorales, captación diferencial de boro en células tumorales y en células normales, y suficiente fluencia de neutrones térmicos en la región del tumor [7].

Un efecto importante que se debe tener en cuenta en este tipo de tratamiento es la deposición de energía en las células debido a las partículas α y ${}^7\text{Li}$ creadas en la reacción. En un trabajo preliminar, titulado “Computational approach to the interaction of ${}^7\text{Li}$ coming from neutron capture on biological cells via Geant4”, presentado en Laspna & Wonp-Nurt 2017, estudiamos la interacción de las partículas de ${}^7\text{Li}$ procedentes de la BNCT con el tejido celular [8]. En ese estudio en particular, se utilizó para la simulación un volumen principal de geometría cúbica con 10 micrómetros de lado, un maniquí o *phantom* de 500 nanómetros, hecho de agua y una porción de tejido cerebral centrada en el maniquí, compuesta principalmente de hidrógeno, oxígeno y carbono, y cuyo objetivo era simular una porción de célula simple. Como complemento al trabajo anterior, y continuando con el uso del conjunto de herramientas de simulación Geant4 [9], en este trabajo se

busca estudiar directamente la reacción nuclear de captura neutrónica (${}^{10}\text{B} + n_{\text{th}}$), con el fin de determinar evento por evento las cantidades físicas relevantes de la reacción (por ejemplo, la energía y el momento de los iones que se producen en el estado final y su distribución angular). Debido a que los modelos nucleares fallan al tratar de predecir con razonable precisión las secciones eficaces de neutrones, todas las cantidades físicas relevantes para modelar adecuadamente reacciones nucleares en simulaciones de Monte Carlo necesitan ser implementadas en forma de base de datos. En el caso de reacciones inducidas por neutrones, estas bases de datos, conocidas como *librerías evaluadas* (ENDF, por sus siglas en inglés) contienen valores referenciados para diferentes cantidades que dependen de la combinación de diversos datos nucleares, usualmente completados con predicciones teóricas y validados, cuando es posible, con resultados experimentales existentes. La cantidad de información disponible varía de isótopo en isótopo, y en algunos casos puede ser incompleta o simplemente no existir [10]. Este trabajo, por tanto, tiene como objetivo verificar los datos implementados en Geant4 de captura neutrónica en boro a muy bajas energías del neutrón incidente; a diferencia de los trabajos estándar en los cuales la validación de Geant4 con datos publicados se hace en términos de la dosis total depositada en el medio [11], en este trabajo se hace la validación de manera directa, estudiando en el vértice primario o de interacción la distribución de energía, la distribución de momento y la distribución angular de las partículas que se producen en la BNCT.

2. ANTECEDENTES DE LA TERAPIA POR CAPTURA NEUTRÓNICA MEDIANTE BORO

Los experimentos de BNCT comenzaron en 1938 con el trabajo de Kruger [12], en el que se estudiaron tres tumores diferentes en ratones: un sarcoma, un carcinoma y un linfoma. El estudio consistía en la extracción del tejido afectado, su respectiva irradiación con neutrones y finalmente su reimplantación. Posteriormente se observaban los tejidos tratados y, en particular, el eventual crecimiento de un nuevo brote tumoral. Diversas muestras de estos tumores se inyectaron con ácido bórico H_3BO_3 . Al implantar las muestras e irradiarlas se encontró que las dosis de neutrones lentos sobre los tumores que contenían ácido bórico eran menores

que las dosis de rayos X que se requerían para prevenir que el tumor creciera nuevamente [5], [13].

Desde febrero de 1951 hasta enero de 1953 se llevaron a cabo experimentos de BNCT en el laboratorio nacional de Brookhaven. Se trataron diez pacientes, de los cuales ocho se habían sometido previamente a radioterapia convencional. En esta primera etapa de tratamiento se usaron neutrones térmicos y tetraborato de sodio (bórax) como portador del ^{10}B . Antes de la irradiación se suministró vía intravenosa 20 g de bórax disuelto en una solución acuosa [14]. No se observaron efectos secundarios graves posteriores a la irradiación, y como resultado se obtuvo una mediana de supervivencia de 97 días. A un segundo grupo de nueve pacientes con tumores cerebrales altamente malignos (glioblastomas multiformes [GBM]) se les suministró pentaborato de sodio con una mayor concentración de boro y se irradió con un mayor flujo de neutrones. En esta segunda prueba se observaron efectos secundarios graves en los pacientes, como radiodermatitis en el cuero cabelludo y ulceraciones profundas. La mediana de supervivencia en esta segunda práctica clínica fue de 147 días [13]. Debido a los resultados negativos y desalentadores que se obtuvieron en las investigaciones clínicas, en 1961 se suspendieron en Estados Unidos las prácticas con BNCT.

A partir de 1968 se pusieron en funcionamiento las aplicaciones clínicas de la BNCT en Japón [5], [14]. Se introdujo un nuevo compuesto, denominado BSH, que fue sintetizado por Soloway [15]. El tratamiento se hizo por medio de radioterapia intraoperatoria y comprendía la extirpación quirúrgica, previa a la irradiación, de la mayor parte del tumor, lo que facilitó la exposición a la radiación y la protección del cráneo y cuero cabelludo. Se reportaron resultados exitosos en un reducido grupo de pacientes que padecían GBM de grados III y IV [13], [16].

Alrededor de 1987 comenzó una nueva era de las aplicaciones clínicas, con la aparición de un nuevo fármaco denominado P-boronofenilalanina (BPA) y un haz de neutrones térmicos. La aplicación más relevante fue el tratamiento de un melanoma que permitió la aplicación del procedimiento en un tumor situado fuera del sistema nervioso central [17].

Esto muestra la importancia de llevar a cabo estudios de la reacción de BNCT en todos los niveles y desde diferentes puntos de vista, en particular, a partir de simulaciones de Monte Carlo, en las que aún existen algunas limitaciones para realizar un modelamiento preciso de reacciones nucleares.

3. SIMULACIÓN VÍA GEANT4

3.1. Consideraciones generales sobre Geant4

Geant4 es un conjunto de herramientas que permiten simular la interacción de la radiación con la materia [18]. Su estructura, basada en programación orientada a objetos (POO) e implementada en el lenguaje de programación C++, así como su carácter de fuente abierta, le brindan al usuario la posibilidad de hacerle modificaciones o extensiones al software, según sea necesario. Además, su amplio uso y validación hacen de esta una herramienta computacional confiable para llevar a cabo simulaciones en el régimen de la física nuclear. En este trabajo se utilizó la versión 10.2 de Geant4.

3.2. Características y parámetros de la simulación

3.2.1. Geometría

La geometría de la simulación consiste en un volumen principal (*world volume*) hecho de vacío con dimensiones en (x, y, z) de (2,5, 2,5 y 2,5) cm, y un blanco o placa de boro con su cara lateral izquierda ubicada en el origen (0, 0, 0) del volumen principal (véase la figura 2). El blanco, en este caso, consiste en un medio “semi-infinito” homogéneo enriquecido en ^{10}B con dimensiones de 1 cm \times 1 cm \times 1 cm. Este tamaño se establece para asegurar que ocurra interacción en todos los eventos.

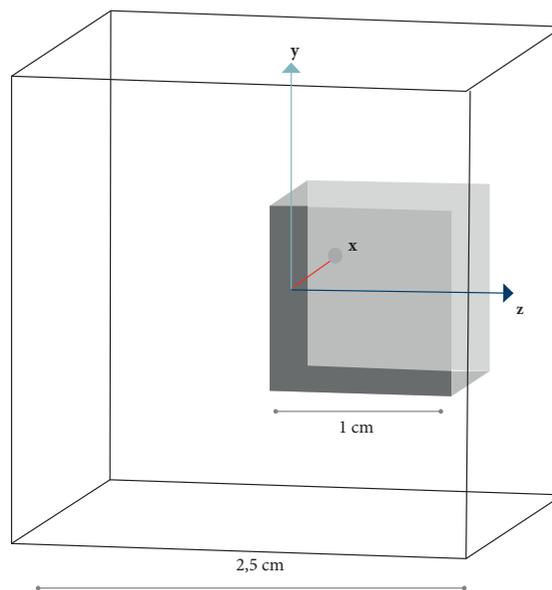


Figura 2. Dimensiones de la geometría usada en la simulación

El volumen principal corresponde a una caja de 2,5 cm de lado. El blanco está representado por una caja de 1 cm de lado enriquecido en ^{10}B . El eje x apunta entrando al papel.

Fuente: autores

3.2.2. Evento primario y lista de física

La fuente está compuesta por un haz cilíndrico monoenergético y unidireccional de neutrones epitérmicos que incide a lo largo del eje z (figura 3). Se utilizaron tres grupos de energía diferentes para el haz: 0,025 eV, 0,25 eV y 2,5 eV, los cuales abar-

can parte del espectro de neutrones epitérmicos. La física de la simulación se establece mediante las librerías G4HadronPhysicsQGSP_BIC_HP y G4EmStandardPhysics, que controlan los procesos relacionados con la interacción de neutrones lentos y las interacciones electromagnéticas, respectivamente.

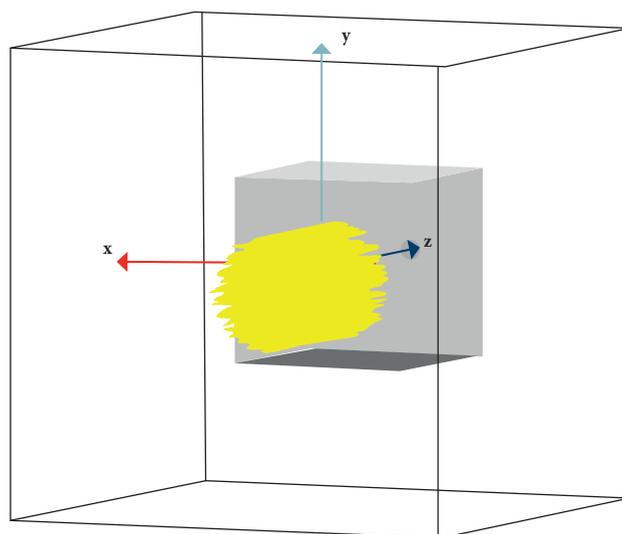


Figura 3. Visualización del haz incidente en la simulación

Se usa un haz cilíndrico monoenergético y unidireccional como fuente de neutrones que inciden sobre el blanco desde la izquierda a lo largo del eje z . La figura mostrada corresponde a una simulación con solo mil neutrones incidentes.

Fuente: autores

3.2.3. Reacciones producidas con neutrones que inciden sobre boro

En Geant4, la interacción de neutrones epitérmicos con ^{10}B conduce principalmente a cuatro posibles reacciones nucleares. La tabla 1 muestra dichas reacciones junto con el porcentaje de producción y el Q de cada una. La primera reacción corresponde a un proceso elástico con una tasa de producción de 0,054 a 0,559%, según la energía del neutrón incidente; en la segunda reacción, la captura

neutrónica lleva a la formación de $^{11}\text{B}^*$, que termina decayendo en ^{11}B con la emisión de rayos gamma. Esta reacción se presenta en promedio en un 0,012%. Las otras dos reacciones, las más predominantes, representan las reacciones de captura neutrónica de interés en la BNCT. Para efectos de estudiar estas dos reacciones de BNCT en Geant4 es necesario seleccionar, evento por evento, cada una de ellas a partir del número e identidad de las partículas presentes en cada estado final.

Tabla1. Principales reacciones nucleares producidas en la reacción $n + ^{10}\text{B}$

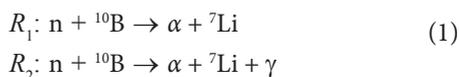
Reacciones	Porcentaje (0,025 eV)	Q (0,025 eV)	Porcentaje (0,25 eV)	Q (0,25 eV)	Porcentaje (2,5 eV)	Q (2,5 eV)
$n + ^{10}\text{B} \rightarrow n + ^{10}\text{B}$	0,054%	0,0382 eV	0,180%	0,0377 eV	0,559%	0,0382 eV
$n + ^{10}\text{B} \rightarrow \gamma + ^{11}\text{B}$	0,012%	11,4540 MeV	0,014%	11,4540 MeV	0,011%	11,4540 MeV
$n + ^{10}\text{B} \rightarrow \alpha + ^7\text{Li}$	6,305%	2,7901 MeV	6,302%	2,7901 MeV	6,262%	2,7901 MeV
$n + ^{10}\text{B} \rightarrow \alpha + ^7\text{Li} + \gamma$	93,628%	2,7900 MeV	93,503%	2,7900 MeV	93,166%	2,7900 MeV

El porcentaje de producción y el Q de cada reacción son calculados a partir de la simulación en Geant4 para el caso de neutrones incidentes con energías de 0,025, 0,25 y 2,5 eV.

Fuente: autores

4. RESULTADOS DE LA SIMULACIÓN

Esta sección contiene los resultados de la simulación correspondiente a las reacciones R_1 y R_2 , que caracterizan la captura neutrónica de interés en la BNCT:



Por cada grupo de energía (0,025, 0,25 y 2,5 eV) se generaron alrededor de cinco millones de eventos.

4.1. Selección de las reacciones de la BNCT

Para seleccionar las reacciones R_1 y R_2 se utiliza la clase `G4U-sersteppingAction`. Desde allí, en el vértice primario donde se produce la reacción (“`track->GetCurrentStepNumber() == 1`”), se escogen únicamente eventos con dos partículas secundarias (“`track->GetTrackID() > 1`”) cargadas que deben corresponder a α y a ${}^7\text{Li}$ y, dependiendo del caso, sin gammas (R_1), o con uno o más gammas (R_2). La figura 4 muestra el conteo de eventos en el caso de la reacción R_1 y de la reacción R_2 con una energía del haz de neutrones de 0,025 eV. De los cinco millones de eventos generados, 4 979 405 corresponden a eventos de BNCT, de los cuales 313 599 contienen un α y un ${}^7\text{Li}$ sin presencia de gammas, y 4 665 806 contienen un α , un ${}^7\text{Li}$ y uno o más gammas.

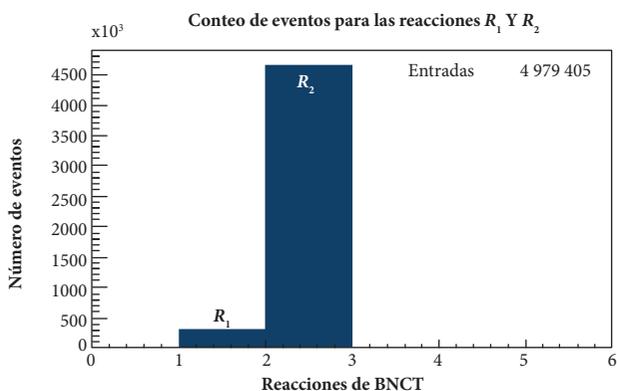


Figura 4. Conteo de eventos en las reacciones R_1 ($n + {}^{10}\text{B} \rightarrow \alpha + {}^7\text{Li}$) y R_2 ($n + {}^{10}\text{B} \rightarrow \gamma + \alpha + {}^7\text{Li}$), en el caso de neutrones incidentes con energía de 0,025 eV. Del total de eventos, 313 599 corresponden a la reacción R_1 y 4 665 806 a R_2 .

Fuente: autores

La tabla 2 muestra los resultados obtenidos en los *branching ratios* asociados con los tres grupos de energía. La razón entre los *branching ratios* R_1/R_2 permanece aproximadamente constante en los dos grupos de energía más bajos, y parece aumentar ligeramente en 2,5 eV. Aunque se necesita un mayor número de valores de energía para sacar conclusiones definitivas respecto a la dependencia R_1/R_2 con la energía del neutrón, y aún no existen datos experimentales que puedan validar estos resultados en el rango de bajas energías, se debe mencionar que existen estudios experimentales con rangos de energía del orden de los MeV en los que la razón R_1/R_2 aumenta con la energía del neutrón [19]. Esto puede servir para efectos de validar los códigos de Geant4 en el rango de energía de los MeV.

Tabla 2. Valores obtenidos en la simulación en los branching ratios de los dos canales de reacción R_1 ($n + {}^{10}\text{B} \rightarrow \alpha + {}^7\text{Li}$) y R_2 ($n + {}^{10}\text{B} \rightarrow \gamma + \alpha + {}^7\text{Li}$) en la BNCT

Energía del neutrón (eV)	$n + {}^{10}\text{B} \rightarrow \alpha + {}^7\text{Li}$	$n + {}^{10}\text{B} \rightarrow \gamma + \alpha + {}^7\text{Li}$
0,025	6,30%	93,70%
0,25	6,30%	93,70%
2,5	6,31%	93,69%

Fuente: autores

4.2. Distribución de energía de las reacciones de la BNCT

La figura 5 muestra la distribución de energía de los productos finales (α y ${}^7\text{Li}$) de la reacción nuclear $R_1: n + {}^{10}\text{B} \rightarrow \alpha + {}^7\text{Li}$. Tanto en α como en ${}^7\text{Li}$ se realizó un ajuste gaussiano sobre las correspondientes distribuciones. Los valores medios de energía en α y ${}^7\text{Li}$ obtenidos son 1777 y 1,014 MeV, respectivamente. Estos valores coinciden con los reportados en la literatura [20]. El ancho de estas distribuciones es de 0,00018 MeV, lo cual evidencia el carácter monoenergético (discreto) de los alfas y litios emitidos en la reacción.

La distribución de energía de los productos finales (α , ${}^7\text{Li}$ y γ) de la reacción $n + {}^{10}\text{B} \rightarrow \alpha + {}^7\text{Li}^* \rightarrow \alpha + {}^7\text{Li} + \gamma$ son presentados en la figura 6. Los valores medios de energía obtenidos son 1,472 MeV para α , 0,840 MeV para ${}^7\text{Li}$ y 0,477 MeV para γ . Estos valores coinciden satisfactoriamente con los valores reportados en la literatura [20]. El ancho asociado con las distribuciones revela su carácter discreto.

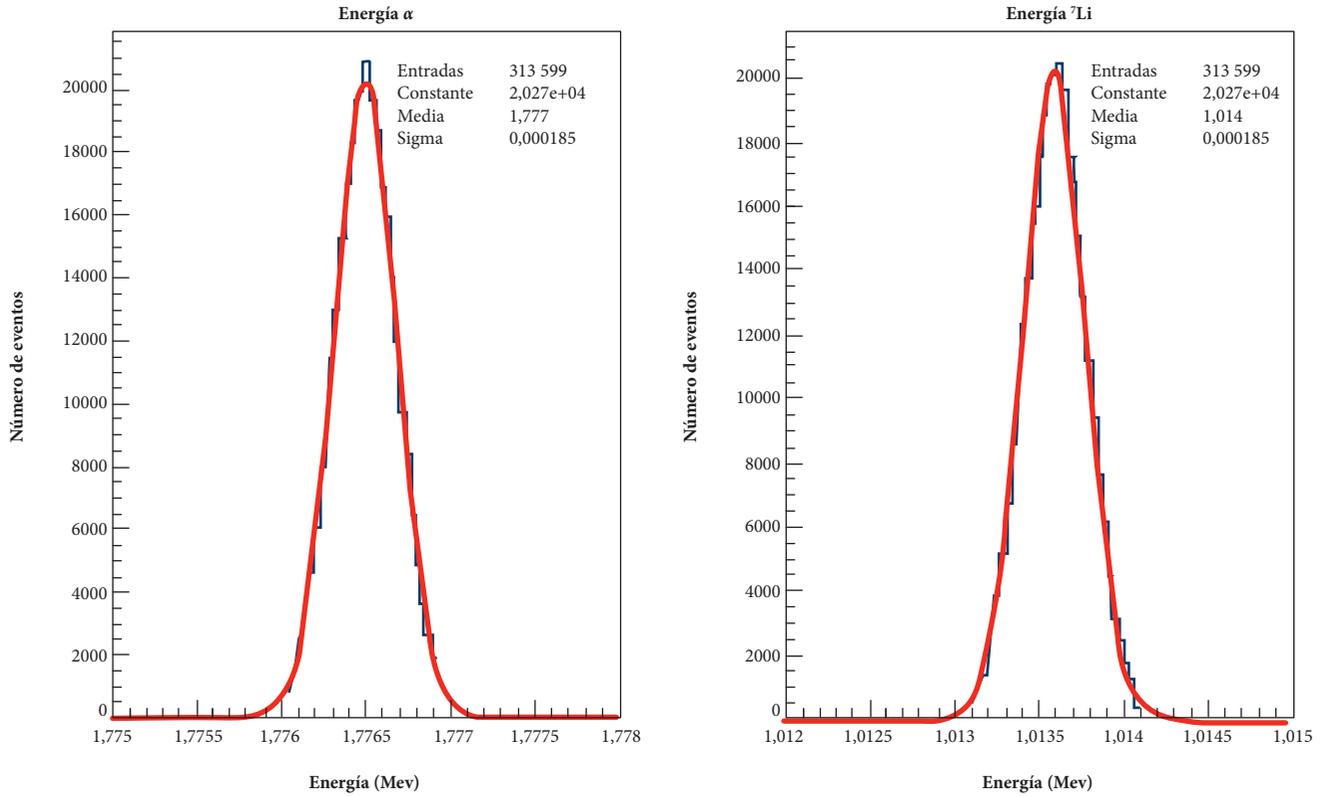


Figura 5. Distribución de energía y de momento en α (izquierda) y ${}^7\text{Li}$ (derecha), en casos de neutrones incidentes con energía de 0,025 eV en la reacción R_1 ($n + {}^{10}\text{B} \rightarrow \alpha + {}^7\text{Li}$).

Fuente: autores

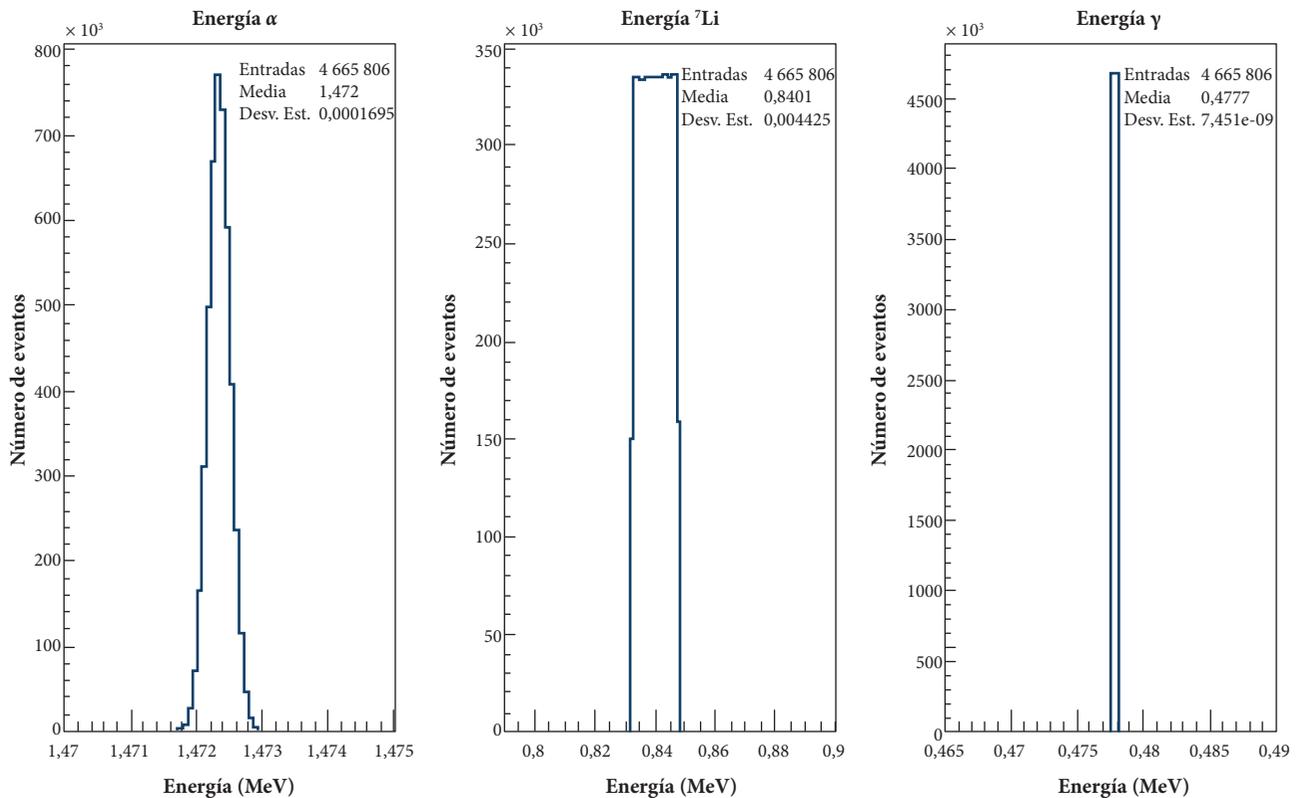


Figura 6. Distribución de energía y de momento en α (izquierda), ${}^7\text{Li}$ (centro) y γ (derecha) en casos de neutrones incidentes con energía de 0,025 eV en la reacción R_2 ($n + {}^{10}\text{B} \rightarrow \alpha + {}^7\text{Li} + \gamma$).

Fuente: autores

Los resultados de las distribuciones de energía usando los otros dos grupos de energía son consistentes con aquellos obtenidos con 0,025 eV.

4.3. Distribución de momento de las reacciones de la BNCT

En la figura 7 se observa la distribución de momento de los productos finales (α y ${}^7\text{Li}$) de la reacción nuclear $R_1: n + {}^{10}\text{B}$

$\rightarrow \alpha + {}^7\text{Li}$. La distribución en ambas partículas es discreta y tiene el mismo valor medio (la diferencia es cero), lo cual indica que las partículas se producen en el sistema de laboratorio con un momento de igual magnitud, resultado que coincide con lo que se obtiene de un cálculo correspondiente a partir de la cinemática de la reacción.

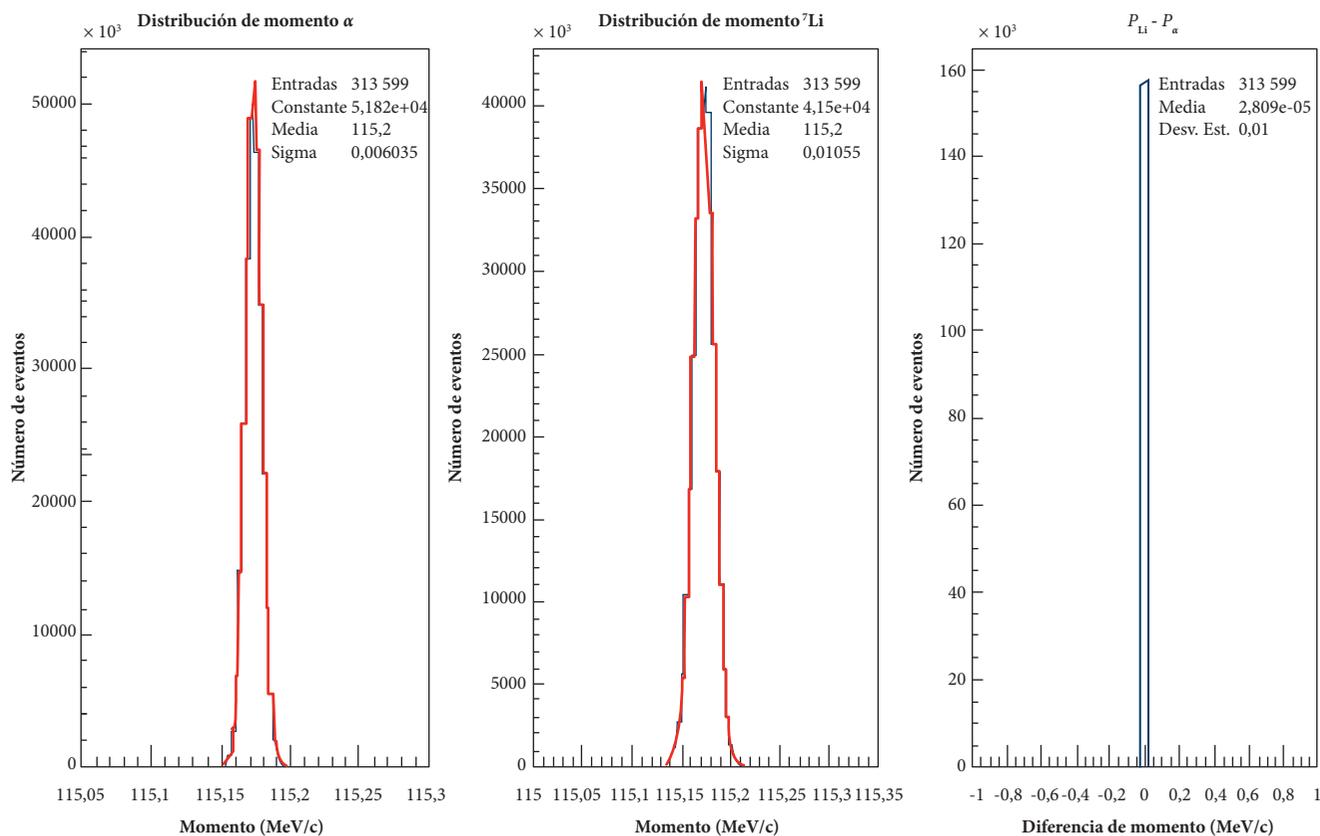


Figura 7. Distribución de momento en α (izquierda) y ${}^7\text{Li}$ (centro) en casos de neutrones incidentes con energía de 0,025 eV en la reacción $R_1 (n + {}^{10}\text{B} \rightarrow \alpha + {}^7\text{Li})$. El histograma de la derecha representa la diferencia de momento entre α y ${}^7\text{Li}$, que se distribuye alrededor de cero.

Fuente: autores

Los resultados de la distribución de momento asociados con los productos finales (α , y ${}^7\text{Li}$) de la reacción $n + {}^{10}\text{B} \rightarrow \alpha + {}^7\text{Li}^* \rightarrow \alpha + {}^7\text{Li} + \gamma$ son mostrados en la figura 8. Aunque se obtienen valores medios muy parecidos en α y ${}^7\text{Li}$, se debe notar, sin embargo, que el ancho de la distribución de momento en ${}^7\text{Li}$ es mucho mayor que en α . Esto se puede deber al hecho de que tanto ${}^7\text{Li}$ como γ vienen del decaimiento de

${}^7\text{Li}^*$; por tanto, la colinealidad (emisión *back to back*) se da entre α y ${}^7\text{Li}^*$, y no entre α y ${}^7\text{Li}$. Con el fin de reconstruir el ${}^7\text{Li}^*$ se utiliza la técnica de masa invariante usando la información de sus productos de decaimiento ${}^7\text{Li}$ y γ . La figura 9 muestra la masa invariante de ${}^7\text{Li}^*$, que es ligeramente mayor que la de ${}^7\text{Li}$.

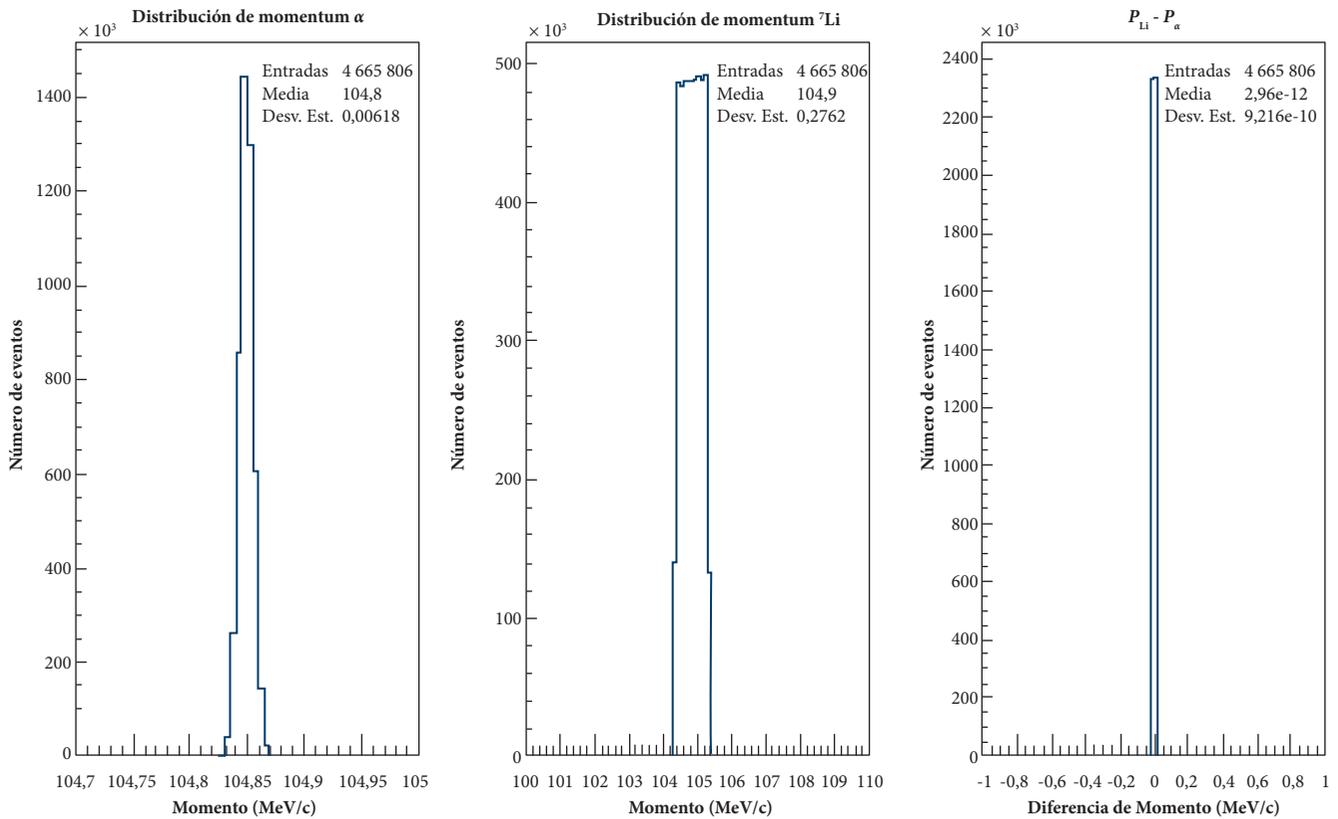


Figura 8. Distribución de momento en α (izquierda) y ${}^7\text{Li}$ (centro) en casos de neutrones incidentes con energía de 0,025 eV en la reacción R_2 ($n + {}^{10}\text{B} \rightarrow \alpha + {}^7\text{Li} + \gamma$). El histograma de la derecha representa la diferencia de momento entre α y ${}^7\text{Li}$, que se distribuye alrededor de cero.

Fuente: autores

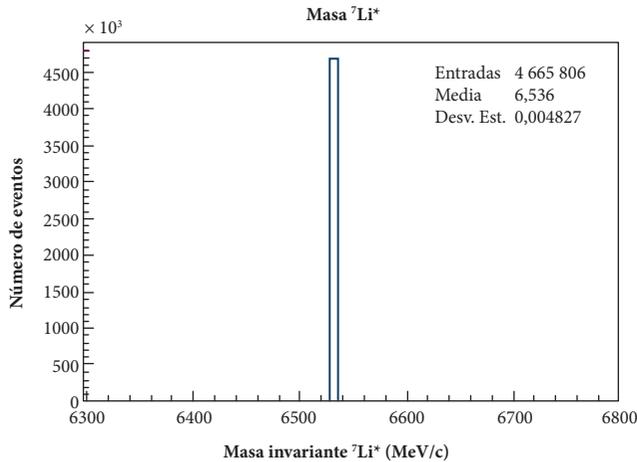


Figura 9. Masa invariante del sistema (${}^7\text{Li}$, γ), que corresponde a la masa de ${}^7\text{Li}^*$ en MeV/c². Se usaron neutrones incidentes con energía de 0,025 eV.

Fuente: autores

Los resultados de las distribuciones de momento usando los dos grupos de energía restantes son consistentes con aquellos obtenidos con 0,025 eV.

4.4. Distribución angular de los canales de decaimiento de la BNCT

Las reacciones representativas en la BNCT (R_1 y R_2) son cinemáticamente sencillas de describir, debido a su carácter de reacción nuclear dos a dos. La literatura predice que los estados finales en ambas reacciones (α y ${}^7\text{Li}$ en R_1 y $\alpha + {}^7\text{Li}^*$ en R_2) deben estar correlacionados angularmente de forma tal que en el sistema de laboratorio son emitidos *back to back*. Conocer y validar la distribución angular de las partículas del estado final es, por tanto, importante para efectos del diseño del modelo de blanco o *target* que se vaya a usar en la BNCT. En la figura 10 se presenta la distribución polar y azimutal en α y ${}^7\text{Li}$ provenientes de la reacción R_1 . Como se puede observar, se presenta un valor medio en el ángulo polar alrededor de 90° en ambas partículas, y la distribución en el ángulo azimutal es uniforme, lo cual refleja que no existe dependencia azimutal en la reacción.

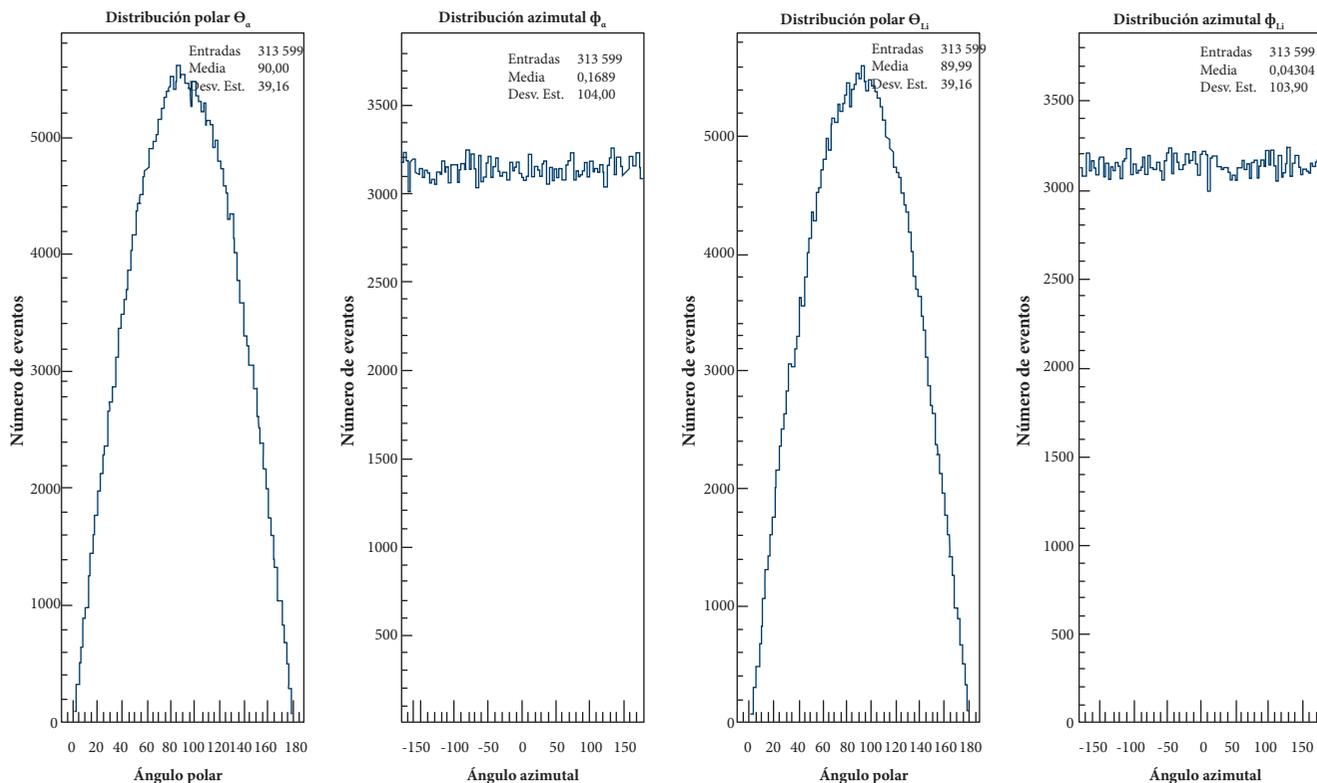


Figura 10. Distribución del ángulo polar y azimutal en α (izquierda) y ${}^7\text{Li}$ (derecha) usando neutrones incidentes con energía de 0,025 eV en la reacción $R_1 (n + {}^{10}\text{B} \rightarrow \alpha + {}^7\text{Li})$. Se observa independencia azimutal en la reacción.
Fuente: autores

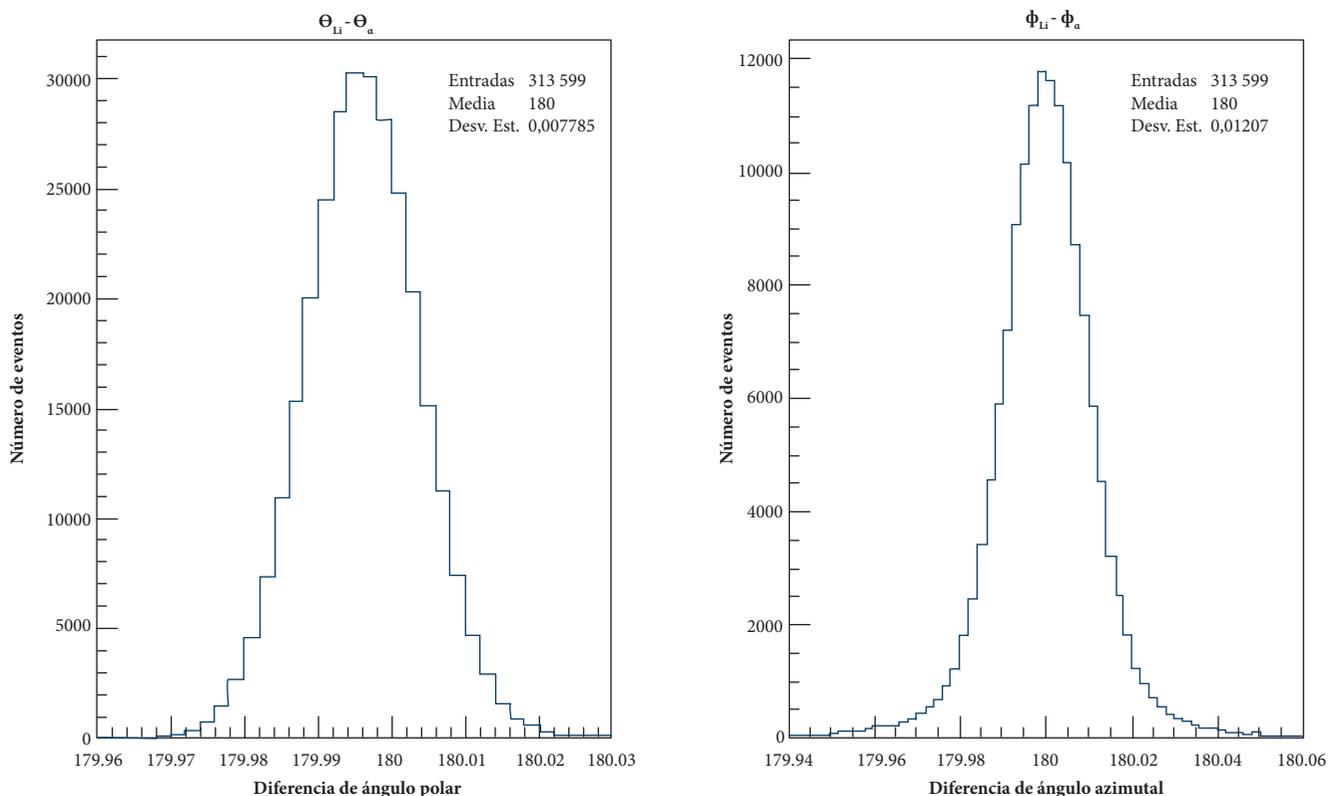


Figura 11. Diferencia en valor absoluto del ángulo polar (izquierda) y el ángulo azimutal (derecha) en α y ${}^7\text{Li}$ en el sistema de laboratorio usando neutrones incidentes con energía de 0,025 eV en la reacción $R_1 (n + {}^{10}\text{B} \rightarrow \alpha + {}^7\text{Li})$.
Fuente: autores

Las distribuciones de la diferencia en valor absoluto del ángulo polar y del ángulo azimutal en α y ${}^7\text{Li}$ son presentadas en la figura 11. El valor medio en cada caso equivale a 180° , con un ancho muy pequeño. Esto evidencia claramente la forma en que las partículas son emitidas en el sistema de laboratorio: de manera opuesta o *back to back*.

De igual manera, la distribución angular asociada con la reacción R_2 se estudia determinando la distribución angular de ${}^7\text{Li}^*$ en el sistema de laboratorio a partir de la técnica de

masa invariante. De forma similar a lo que sucede en la reacción R_1 , la diferencia en valor absoluto del ángulo polar y del ángulo azimutal en α y ${}^7\text{Li}^*$ (figura 12) revela la tendencia de estas partículas a ser emitidas *back to back* en el sistema de laboratorio. El valor medio en cada distribución corresponde a 180° , con un ancho que no supera los $0,5^\circ$. Este tipo de caracterización permite entender mejor la física que opera tras la reacción de BNCT.

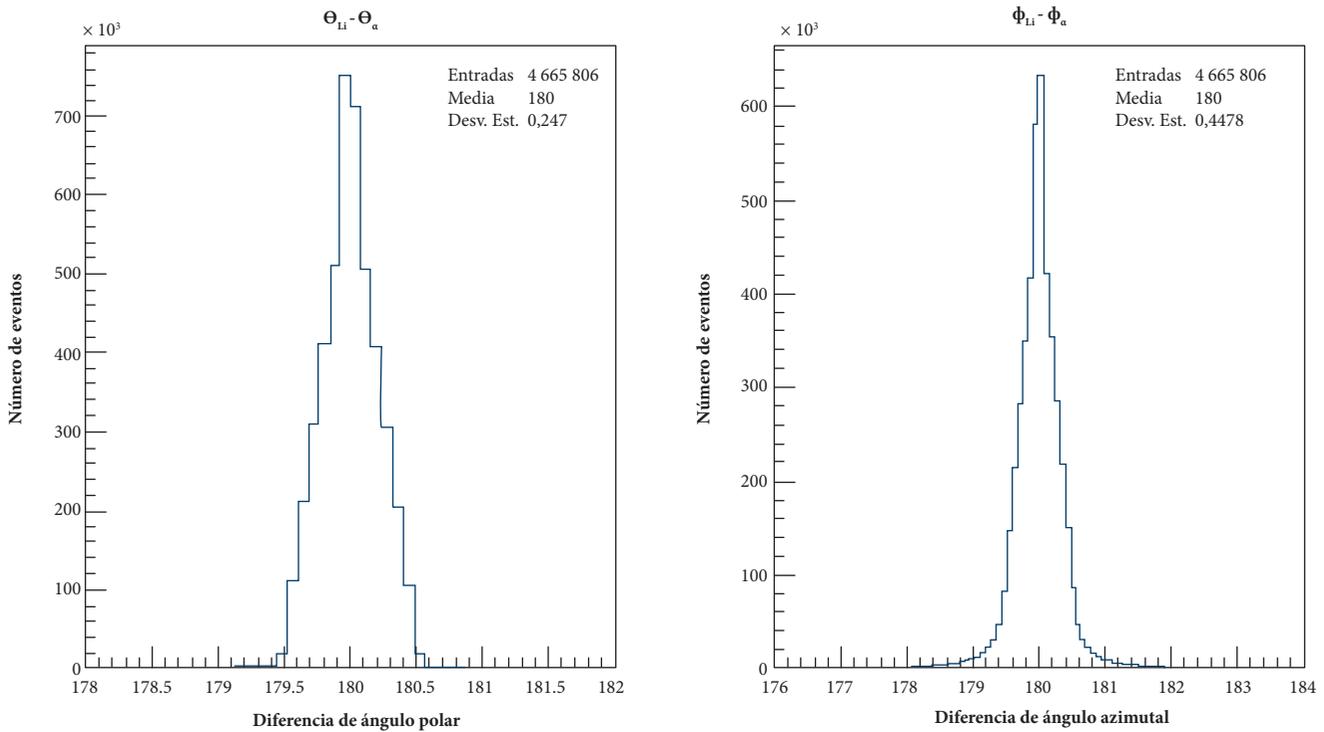


Figura 12. Diferencia en valor absoluto del ángulo polar (izquierda) y el ángulo azimutal (derecha) en α y ${}^7\text{Li}^*$ en el sistema de laboratorio usando neutrones incidentes con energía de 0,025 eV en la reacción R_2 ($n + {}^{10}\text{B} \rightarrow \alpha + {}^7\text{Li} + \gamma$).

Fuente: autores

Los resultados de las distribuciones angulares asociadas con 0,25 eV y 2,5 eV muestran valores muy similares a los obtenidos con el grupo de energía de 0,025 eV.

5. CONCLUSIONES

Se realizó una simulación computacional de la reacción $10\text{B} + n_{\text{th}}$ con la ayuda de las suites Geant4 y Root C++ para determinar el conteo, la distribución de energía, la distribución de momento y la distribución angular de las partículas presentes en el estado final de las reacciones propias de la BNCT: $n + {}^{10}\text{B} \rightarrow \alpha + {}^7\text{Li}$ y $n + {}^{10}\text{B} \rightarrow \alpha + {}^7\text{Li} + \gamma$.

Los *branching ratios* obtenidos concuerdan de manera satisfactoria con los valores reportados en la literatura [5, 20]. De igual forma, las energías de los iones emitidos (α y ${}^7\text{Li}$) y de los γ son reproducidos con buena precisión al compararlos con los datos mencionados en la literatura [5, 20]. Las distribuciones de momento y las distribuciones angulares dejan ver claramente que tanto α y ${}^7\text{Li}$ en la reacción R_1 , como $\alpha + {}^7\text{Li}^*$ en la reacción R_2 , son emitidos en el sistema de laboratorio con la misma magnitud de momento, pero en dirección opuesta. Esto corrobora lo esperado a partir de un cálculo de la cinemática de la reacción. Dados los resultados obtenidos en la simulación, se puede resaltar que Geant4 y

Root C++ representan herramientas válidas para evaluar la simulación de la reacción nuclear principal que tiene lugar en la terapia de captura neutrónica por boro (BNCT) en un sistema biológico.

Referencias

- [1] J. Chadwick, F. R. S., "The Existence of a Neutron", *Proc. R. Soc. Lond. A.*, vol. 136, n.º 830, jun., 1932, pp. 692-708.
- [2] H. J. Taylor y M. Goldhaber, "Detection of Nuclear Disintegration in a Photographic Emulsion", *Nature*, vol. 136, n.º 3409, mar., 1935, p. 341.
- [3] L. Gordon, "Biological Effects and Therapeutic Possibilities of Neutrons", *Am. J. Roentgenol. Radium Ther.*, vol. 36, 1936, pp. 1-13.
- [4] K. Hanaoka, T. Watabe, S. Naka *et al.*, "FBPA PET in Boron Neutron Capture Therapy for Cancer: Prediction of ^{10}B Concentration in the Tumor and Normal Tissue in a Rat Xenograft Model", *EJNMMI Research*, vol. 4, n.º 4, 2014, pp. 1-8.
- [5] N. S. Hosmane, J. A. Maguire, C. Salt, *et al.*, "Boron and Gadolinium Neutron Capture Therapy for Cancer Treatment", en L. E. Feinendegen, comp., *World Scientific*, EE. UU.: Treatment United States Department of Energy Office of Science, 2012.
- [6] L. Kankaanranta, T. Seppälä, H. Koivunoro *et al.*, "Boron Neutron Capture Therapy in the Treatment of Locally Recurred Head-and-Neck Cancer: Final Analysis of a Phase I/II Trial". *Int. J. Radiat. Oncol. Biol. Phys.*, vol. 82, 2012, pp. 67-75.
- [7] L. Moghaddasi y E. Bezak, "Development of an Integrated Monte Carlo Model for Glioblastoma Multiforme Treated with Boron Neutron Capture Therapy", *Scientific Reports*, vol. 7, n.º 1, 2017, p. 7069.
- [8] D. A. Téllez, R. S. Medina, E. Munévar y J. A. Leyva, "Computational Approach to the Interaction of ^7Li Coming from Neutron Capture on Biological Cells Via Geant4", en *Lasnpa & Wonp-Nurt 2017*, Program and abstracts, 2017, p. 126.
- [9] S. Agostinelli, J. Allison, K. Amako, *et al.*, "Geant4: A Simulation Toolkit, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, vol. 506, n.º 3, 2003, pp. 250-303.
- [10] Geant4 Collaboration, *Geant4 User's Guide for Application Developers*, version 10.4, 2017.
- [11] L. Moghaddasi y E. Bezak, "Geant4 Beam Model for Boron Neutron Capture Therapy: Investigation of Neutron Dose Components", *Australasian Physical & Engineering Sciences in Medicine*, vol. 41, 2018, pp. 129-141.
- [12] P. G. Kruger. "Some Biological Effects of Nuclear Disintegration Products on Neoplastic Tissue", *Proceedings of the National Academy of Sciences*, vol. 26, n.º 3, 1940, pp. 181-192.
- [13] W. A. Sauerwein, A. Witting, R. Moss y Y. Nakagawa, *Neutron Capture Therapy*. Berlín: Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2012.
- [14] W. H. Sweet, "Early History of Development of Boron Neutron Capture Therapy of Tumors", *Neuro-Oncology*, vol. 33, n.º 1, may, 1997, pp. 19-26.
- [15] A. H. Soloway, H. Hatanaka y M. A. Davis, "Penetration of Brain and Brain Tumor. vii. Tumor-Binding Sulfhydryl Boron Compounds". *Journal of Medicinal Chemistry*, vol. 10, n.º 4, jul, 1967, pp. 714-717.
- [16] O. K. Harling, F. J. Wheeler, J. A. Bernard *et al.*, "Neutron Beam Design: Development, and Performance for Neutron Capture Therapy", en *Basic Life Sciences*, vol. 54, Nueva York: Springer US, 1990.
- [17] Y. Mishima, *Cancer, Neutron Capture Therapy*, Nueva York: Springer US, 1996.
- [18] J. Allison, K. Amako, J. Apostolakis, *et al.*, "Recent Developments in Geant4". *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, vol. 835, 2016, pp. 186-225.
- [19] R. Bevilacqua, F. J. Hamsch, M. Vidali *et al.*, " ^{10}B (n, α) ^7Li and ^{10}B (n, $\alpha_1\gamma$) ^7Li Cross Section Data up to 3 MeV Incident Neutron Energy", EPJ Web of Conferences 146, p. 11010, 2017.
- [20] A. Karaoglu, P. Arce, D. Obradors *et al.*, "Calculation by Gamos/Geant4 Simulation of Cellular Energy Distributions from Alpha and Lithium-7 Particles Created by BNCT", *Appl Radiat Isot*, vol. 132, 2018, pp. 206-211.