

# OPTIMIZACIÓN DE UNA INSTALACIÓN PARA EL ANÁLISIS POR ACTIVACIÓN NEUTRÓNICA.

RICARDO FRANKLIN MERGAREJO.

RESUMEN. Se presenta un método de detección del Flúor por medio del análisis por activación neutrónica. Este método supone una exactitud en la determinación de cualquier elemento muy alta (del orden de ppm); pero teniendo la particularidad de que con Oxígeno y Flúor después de ciertas reacciones nucleares se obtienen el mismo producto de reacción (*hijo*). Esto implica serios inconvenientes ya que se produce una interferencia entre la activación del Oxígeno y del Flúor falseando la lectura. Para salvar esta problemática y aprovechar las bondades de este método se conoce que el Oxígeno se activa para neutrones con energías superiores a los 10.5 MeV, mientras que el Flúor para energías de los neutrones incidentes superior a los 1.5 MeV.

Nos planteamos como *hipótesis* que es posible reducir la interferencia del Oxígeno utilizando un moderador a fin de afectar la estadística del conteo lo menos posible.

El *objetivo* del presente trabajo es diseñar y optimizar una instalación para medir concentraciones de Flúor en presencia de Oxígeno utilizando neutrones de 14 MeV proveniente de un generador de neutrones del tipo NG-12-1.

Para cumplir con nuestro objetivo partiendo de la hipótesis haremos la simulación experimental utilizando métodos matemáticos de probada eficiencia en el transporte de neutrones como el método de Monte Carlo (específicamente el código MCNP-4C).

Los resultados de nuestras simulaciones apuntan a la validez de nuestra hipótesis.

## 1. ANTECEDENTES.

**1.1. Aplicaciones del Flúor.** El Flúor es un elemento muy importante para el organismo humano, considerado indispensable por su efecto en el esmalte dental, confiriéndole una máxima resistencia frente a las caries. Debido a la fluoración del agua potable, el uso de pastas dentales con fluoruro y a un mayor uso de este elemento en la cadena alimenticia, la frecuencia de las caries han disminuido. Además, en la etapa de desarrollo y crecimiento, este nutriente junto al calcio y otros minerales, contribuyen a formar y estabilizar la estructura sólida de los huesos.

El Flúor que no es depositado en los tejidos duros, es eliminado por el riñón a través de la orina después que ha pasado por el organismo. Cabe resaltar que el Flúor ingerido normalmente debe sobrepasar los niveles de absorción ósea, por lo que si no existe una ingesta suficiente, éste se moviliza ocasionando una desmineralización de estas estructuras. Esta es la razón por la que el adulto también necesita una ingesta mínima diaria de dicho elemento.

Hoy en día con el desarrollo de agentes anti-absorbentes como los tratamientos con vitaminas D y hormonas o los **biophosphonates** ofrecen una nueva panorámica para el desarrollo de la terapia de sales de Flúor para combatir la osteoporosis. El Flúor ha atraído la atención como agente terapéutico para la osteoporosis debido a su efectividad en la estimulación de células madres **osteoblasts**. Sin embargo el Flúor solo parece ser útil en la etapa inicial de la enfermedad, sobre todo si el paciente tiene la **trabecular bone** intacto. Los mayores beneficios de esta terapia es la efectividad a abajas dosis de este elemento en combinación con Calcio y vitamina D. [1]

En el proceso de obtención del aluminio éste se produce por medio de electrólisis de Alumina disuelta en Creolita a una temperatura de 960 grados Celcius; sólo que esta Creolita es obtenida por medio de la neutralización del Ácido Fluorídrico (HF) [2].

Otras aplicaciones del Flúor podemos observarlas en la producción de Uranio (específicamente el Hexafluoruro de Uranio), en más de 100 productos químicos que utilizan este elemento como son los bien conocidos plásticos resistentes a altas temperaturas (Teflón); en los sistemas de refrigeración como el Clorofluorocarbono. También este elemento ha sido estudiado como propulsor en los cohetes debido a su excepcionalmente alto valor específico de impulso. Luego la determinación de éste supone una gran importancia debido a sus aplicaciones en la vida cotidiana.

Se han hecho estudios en los cuales la inhalación de óxidos de flúor a un nivel superior de 500 ppb pueden provocar en las personas edemas crónicos pulmonares [3]. Vale decir que se han establecido límites para la expsición permisible en la industria a este elemento los cuales no deben exceder de 0.05 ppm ó 0.1 mg/m<sup>3</sup> en el aire durante un tiempo de 8 horas. En el caso de trabajadores de minería el límite anterior no debe excederse durante todo el tiempo de trabajo [4].

**1.2. Determinación de Flúor.** Existen distintos métodos que se aplican en la medición del Flúor como, por ejemplo, el método colorimétrico, que consiste en la reacción del Flúor presente en la muestra, previamente acidificada con Nitrato de Torio, para formar un complejo

biophosphonates

osteoblast.

Osteoblasto: Célula productora de tejido óseo, contenida en las lagunas microscópicas óseas llamadas también osteoplastos.

Trabecular bone

Trabécula ósea: Prolóngaciones entrecruzadas de sustancia ósea que limitan las cavidades medulares de sustancia esponjosa

que se colorea con el indicador rojo de Alizarina; luego, la determinación se realiza por comparación del color obtenido en la muestra frente a un estándar de Flúor de concentración conocida. Esta técnica semi-cuantitativa requiere que la cantidad adicionada de Nitrato de Torio sea exactamente la misma tanto en la muestra como en el estándar y que la comparación del color se realice en el punto final de la reacción. Cuando se aplica este método en alimentos, estos deben ser llevados previamente a cenizas con alguna sal fundente, tratadas con Ácido Perclórico y luego destiladas.

Otras formas para determinar Flúor son: el método por cromatografía líquida de alto rendimiento (HPLC) con detección ultravioleta, el método indirecto por espectrometría de emisión de plasma con espectrometría de masas (ICP-MS) y el método por ión selectivo. Los dos primeros, determinan el flúor como anión, es decir fluoruro, a nivel de trazas y en simultáneo con otros aniones o cationes. En tanto, el método por ión selectivo, se basa en la medida del potencial de una solución que contiene iones fluoruro, cuando se sumerge dentro de ella un electrodo específico para fluoruro y uno de referencia, creándose una corriente eléctrica entre la muestra y la solución interna del electrodo de ión selectivo, cuyo potencial será la medida de la concentración de fluoruro. [5] y por último tenemos el método por Activación neutrónica.

**1.3. Método de activación neutrónica.** Pretendemos en este trabajo llamar la atención sobre el análisis por activación neutrónica. Este supone una exactitud en la determinación de cualquier elemento muy alta.

Es importante mencionar que las existen tres reacciones posibles del Flúor ante los neutrones rápidos que podrán ser  $^{19}\text{F}(n, \alpha) ^{16}\text{N}$ ;  $^{19}\text{F}(n, 2n) ^{18}\text{F}$  y  $^{19}\text{F}(n, p) ^{19}\text{O}$ . Por mucho la reacción  $(n, \alpha)$  es la más sensible; teniendo la particularidad de que con el Oxígeno mediante la reacción  $(n, p)$  se obtiene el mismo producto de reacción [6] . Esto implica serios inconvenientes ya que se produce una interferencia entre la activación del Oxígeno y del Flúor falseando la lectura.

Para salvar esta problemática y aprovechar las bondades de este método se conoce que el Oxígeno se activa con neutrones de energías superiores a los 10.5 MeV, mientras que el Flúor para energías de los neutrones incidentes superior a los 1.5 MeV.

Como *hipótesis* nos planteamos que es posible reducir la interferencia del Oxígeno utilizando un moderador que optimice el error producido por la estadística del conteo y el error producto de la interferencia.

El *objetivo* del presente informe es diseñar y optimizar una instalación para medir concentraciones de Flúor en presencia de Oxígeno utilizando neutrones de 14 MeV.

Para cumplir con nuestro objetivo se realizó la simulación experimental utilizando métodos matemáticos de probada eficiencia en el transporte de neutrones que en nuestro caso será la utilización del método de Monte Carlo (específicamente el código MCNP-4C).

## 2. MATERIALES Y MÉTODOS.

En el caso de la disolución estudiada la sal (Hexafluorosilicato de Amonio) representa el 18.5% de masa de la muestra, por lo que habrá mayor cantidad de núcleos de Oxígeno que de Flúor.

Se estudiaron como moderadores el Agua ligera ( $H_2O$ ), el Carbono (C) y el Plomo (Pb), los cuales tienen diferentes propiedades ante los neutrones. Véase la tabla 1 a fin de ilustrar estas propiedades.

Sustancia	Densidad	$\xi$	$1 - \bar{\mu}$
$H_2O$ [7]	1.0	0.9480	0.676
C	3.51	0.1580	0.944
Pb	11.34	0.0095	0.997

CUADRO 1. Propiedades de las sustancias moderadoras

**2.1. Agua ligera.** Se estudió el flujo de neutrones en el moderador con el fin de obtener el espectro de este en diferentes zonas. La geometría (ver figura 1) que se tomó se presenta a continuación:

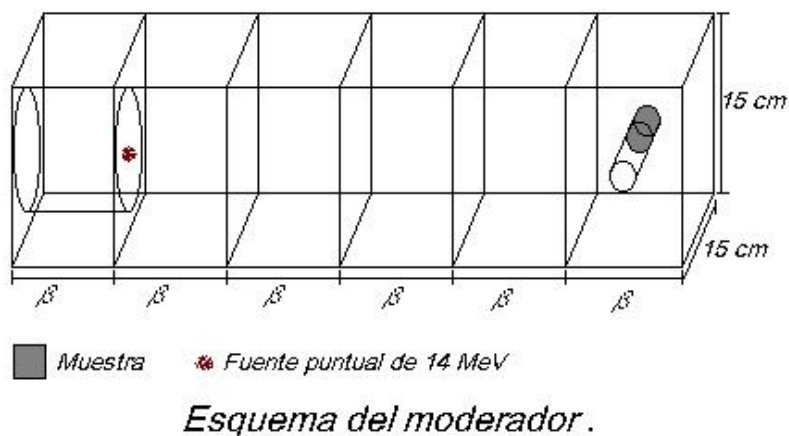


FIGURA 1. Geometría de irradiación

Esta geometría se dividió por celdas de espesor  $\beta$  el cual era variable para buscar una distancia óptima entre la fuente y la muestra.

Para cada una de las placas del moderador se determinó el espectro de los neutrones a fin de conocer como se iban comportando estas partículas a su paso por la sustancia:

Para la simulación se tomó la misma geometría y sólo se modificó la distancia  $\beta$  ya que el agua es más absorbedora de neutrones además de que un neutrón puede perder cerca del 94.8% de su energía en una colisión.

Nótese como es la variación del flujo en la muestra como se muestra en la Figura 2:

Véase en la figura 2 como hay un flujo muy grande de neutrones de 14 MeV (por encima de cualquier energía), lo que representa una fuente de errores considerable producto de la interferencia entre la activación de Oxígeno y la del Flúor, que como se conoce la velocidad de reacción es  $R = \sum_{\text{Actv}} \phi(E) = N_{\text{Elmto}} \sigma_{\text{Actv}} \phi(E)$  y esta velocidad depende de tres factores (sección de activación, cantidad de núcleos por  $\text{cm}^3$  y flujo de neutrones). En la gráfica 3 el flujo promedio de neutrones con energías inferiores a los 10.5 MeV y el flujo promedio de neutrones con energías

superiores a los 10.5 MeV están muy cercanos uno del otro por lo que la interferencia será muy alta.

A continuación se muestra una tabla en la cual se muestran los valores de los flujos promedios de la Figura 3. Se definió la magnitud *Índice espectral* ( $\delta$ ) como

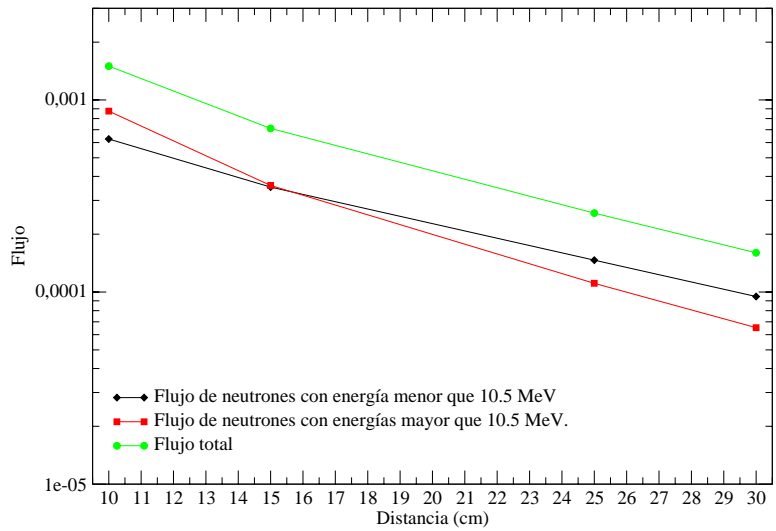
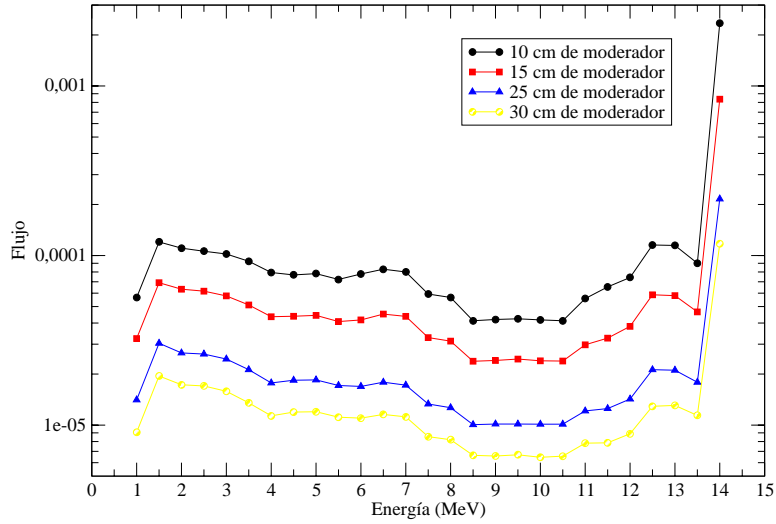


FIGURA 3. Flujo promedio en la muestra.

$$(2.1) \quad \delta = \frac{\int_{1,5}^{10,5} \phi(E) dE}{\int_{1,5}^{14} \phi(E) dE}$$

Distancia	$\phi_{<10,5}$	$\phi_{>10,5}$	$\phi_{total}$	$\delta$
10	$6,26156 \cdot 10^{-4}$	$8,74611 \cdot 10^{-4}$	$1,500767 \cdot 10^{-3}$	0,41722
15	$3,51998 \cdot 10^{-4}$	$3,58756 \cdot 10^{-4}$	$7,01754 \cdot 10^{-4}$	0,49525
25	$1,466096 \cdot 10^{-4}$	$1,11049 \cdot 10^{-4}$	$2,576586 \cdot 10^{-4}$	0,5690
30	$9,47649 \cdot 10^{-5}$	$6,52543 \cdot 10^{-5}$	$1,600192 \cdot 10^{-4}$	0,59221

CUADRO 2. Resultados del Agua ligera.

**2.2. Grafito.** El grafito es un moderador de propiedades nucleares diferentes al agua ligera lo cual se muestra en la tabla 1. Por eso el comportamiento de los neutrones a su paso va a diferir considerablemente del agua ligera.

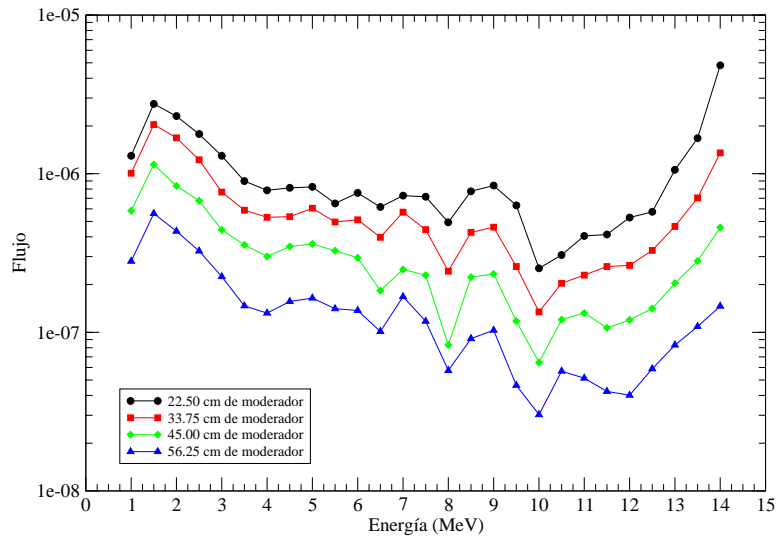


FIGURA 4. Espectro en la muestra.

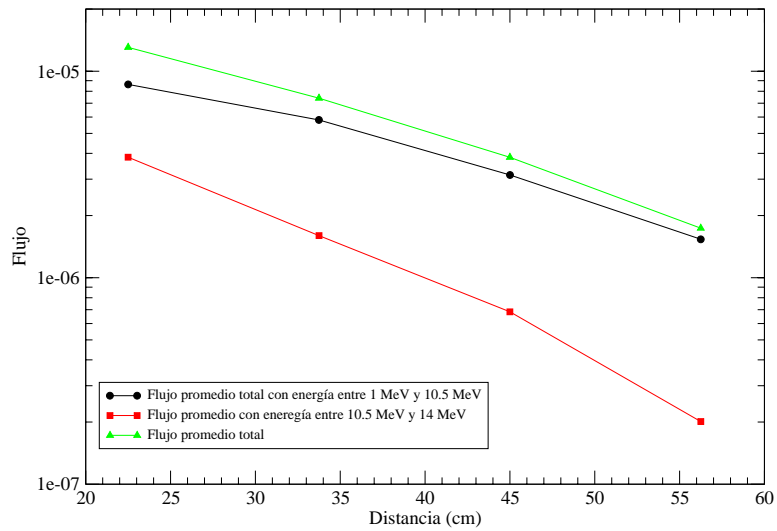


FIGURA 5. Flujo promedio en la muestra.



En la tabla 3 mostramos los valores de la del flujo promedio<sup>1</sup> para neutrones con energías comprendidas entre 1.5 MeV-10.5 MeV, 10.5 MeV-14 MeV, 1.5 MeV-14 MeV y su índice espectral.

Distancia	$\phi_{<10,5}$	$\phi_{>10,5}$	$\phi_{total}$	$\delta$
20	$8.63059 \cdot 10^{-6}$	$3.83219 \cdot 10^{-6}$	$1.3053 \cdot 10^{-5}$	0.6612
30	$5.80544 \cdot 10^{-6}$	$1.59927 \cdot 10^{-6}$	$7.40471 \cdot 10^{-6}$	0.7840
40	$3.145782 \cdot 10^{-6}$	$6.83583 \cdot 10^{-7}$	$3.829365 \cdot 10^{-6}$	0.8215
50	$1.536033 \cdot 10^{-6}$	$2.01151 \cdot 10^{-7}$	$1.737184 \cdot 10^{-6}$	0.8842

CUADRO 3. Resultados del Grafito.

Nótese en la Figura 4 y en la Figura 5 (que es el flujo promedio) que en este caso la distancia óptima será de 45 cm. El número de conteos de neutrones de energías menores que 10 MeV es superior a  $10^{-6}$  neutrones/cm<sup>2</sup> · seg, mientras que esto deja de cumplirse para energías mayores de 10 MeV. La relación entre neutrones con energías menores a los 10 MeV con respecto a los que tienen energías por encima de esta es máximo. Por otra parte la estadística de conteos<sup>2</sup> en esa distancia es la mejor.

**2.3. Plomo.** Para el estudio del Plomo se tomó para el estado natural de este elemento la composición isotópica siguiente:

Isótopo	%
206	24.80
207	22.80
208	52.40

CUADRO 4. Composición isotópica del Plomo.

En la muestra se estudio el flujo en función de la energía (Figura 6) como también el comportamiento del flujo promedio en función de la distancia (Figura 7).

<sup>1</sup>flujo promedio:  $\bar{\phi}(\vec{r}) = \int_{E_1}^{E_2} \phi(\vec{r}; E) dE$

<sup>2</sup>El flujo está normalizado a 1 neutrón/cm<sup>2</sup> · seg

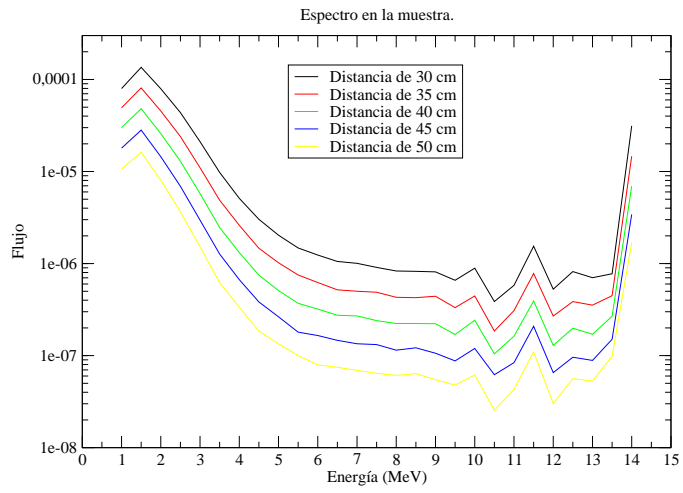


FIGURA 6. Flujo en función de la energía

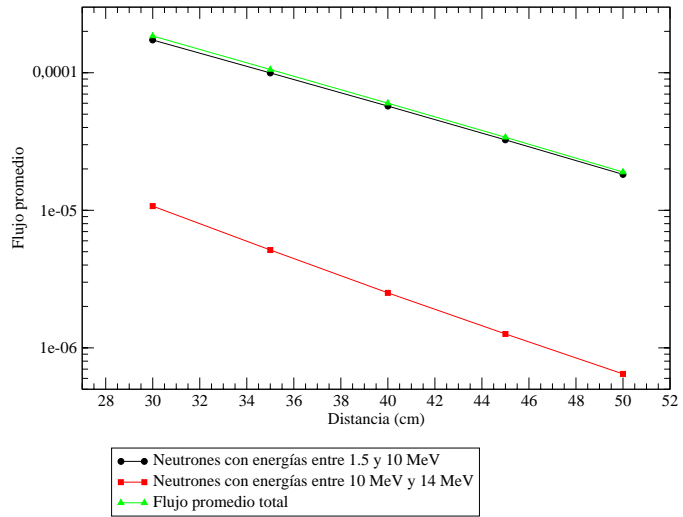


FIGURA 7. Flujo en función de la distancia

Ilustraremos estos resultados en la tabla 5 para que se vea sus valores exactos.

Distancia	$\phi_{<10}$	$\phi_{>10}$	$\phi_{\text{total}}$	$\delta$
30	$1.73023 \cdot 10^{-4}$	$1.07253 \cdot 10^{-5}$	$1.85013 \cdot 10^{-4}$	0.93519
35	$9.97750 \cdot 10^{-5}$	$5.14571 \cdot 10^{-6}$	$1.05558 \cdot 10^{-4}$	0.94521
40	$5.72295 \cdot 10^{-5}$	$2.51136 \cdot 10^{-6}$	$6.00637 \cdot 10^{-5}$	0.95281
45	$3.25252 \cdot 10^{-5}$	$1.26226 \cdot 10^{-6}$	$3.39502 \cdot 10^{-5}$	0.95803
50	$1.82446 \cdot 10^{-5}$	$6.46277 \cdot 10^{-7}$	$1.89768 \cdot 10^{-5}$	0.96141

CUADRO 5. Resultados del Plomo.

#### REFERENCIAS

- [1] Schulz W. Fluoride treatment of osteoporosis. *Wien Med Wochenschr*, 150:42–52, 2000.
- [2] [www.altech.pechiney.com/ Gardanne/ WebGardanne.nsf/ vwUrl/ MondeAlumine-Utilisations-Aluminium-Aluminiumproduction\\_VI](http://www.altech.pechiney.com/Gardanne/WebGardanne.nsf/vwUrl/MondeAlumine-Utilisations-Aluminium-Aluminiumproduction_VI).
- [3] American Conference of Governmental Industrial Hygienists (ACGIH). *The Threshold Limit Values (TLVs) and Biological Exposure Indices (BEIs)*. Cincinnati, OH, 1996.
- [4] U.S. Government Printing Office, Supt. of Documents, Washington, DC 20402. *Code of Federal Regulations.*, 1994.
- [5] Patricia Aguilar R. Validación del método potenciométrico por ión selectivo para la determinación de flúor en sal, agua y orina. Technical report, Instituto Nacional de Salud, 2001.
- [6] S. M.Ñargolwalla and E. P. Przybylowski. *Activation analysis with neutron generator*. John Wiley & Sons.
- [7] Ganey I. J. *Física y cálculo del reactor*. Editorial Pueblo y Educación, Calle 3<sup>ra</sup> A No. 4605 entre 46 y 60. Playa. Ciudad Habana.Cuba, 1988.

INTEC. QUINTA DE LOS MOLINOS. SALVADOR ALLENDE Y LUACES. PLAZA. CIUDAD HABANA.

*E-mail address:* franklin@info.isctn.edu.cu