



UNIVERSITAT
POLITÈCNICA
DE VALÈNCIA



ESCUELA TÉCNICA
SUPERIOR INGENIEROS
INDUSTRIALES VALENCIA

Curso Académico:

AGRADECIMIENTOS

Primero, agradecer a Rafael Miró y Belén Juste, por brindarme la oportunidad de conocer un campo tan interesante y apoyarme durante la realización del trabajo.

Luego agradecer a toda mi familia que siempre ha estado a mi lado. En especial a mi madre y mi hermano, que me alegran todos los días, y a mi padre, por ser una fuente de motivación y estímulo. Gracias por todos tus consejos.

También, gracias a las personas que me han ayudado a finalizar este trabajo. Gracias Estefanía, por la alegría y el positivismo que siempre te acompaña, y por todos los momentos vividos durante la realización del trabajo y en el grado. Por último, a Carlos, gracias por ser un apoyo constante, alegrándome con tus bromas todos los días.

RESUMEN

La tomografía por emisión de positrones (PET) es una clase de imagen médica que permite la realización de un diagnóstico clínico. Para ello se requieren materiales radiactivos conocidos como radiofármacos, que son introducidos en el paciente y que posteriormente son detectados en una exploración por PET. Las aplicaciones de este diagnóstico son variadas, desde la detección de un cáncer, la evaluación de la eficacia de un plan de tratamiento, la determinación del retorno de un cáncer tras el tratamiento o la determinación de los efectos de un ataque cardíaco... entre otras. Por ello, el estudio de la producción de radionucleidos es de vital importancia.

Los radiofármacos que se utilizan para PET son producidos mediante un ciclotrón, dada su amplia versatilidad en la producción de radionucleidos con altas actividades de una forma reproducible. Para el completo análisis y simulación de las transformaciones que tienen lugar en el interior de un ciclotrón, se crea un modelo 3D completo, en el que se dispone la instalación del bunker y la fuente.

Este trabajo desarrolla un estudio detallado de la evaluación de dos radionucleidos de gran interés en las técnicas de diagnóstico médico (Flúor-18 y Galio-68), obteniendo un modelo genérico de referencia para el estudio de la producción de radionucleidos por el ciclotrón. Además, se realiza un estudio de la eficiencia en la producción de estos radionucleidos, mediante el análisis del sistema, comparando ambos radionucleidos y la dosis recibida en torno al bunker.

El código de transporte de partículas utilizado en las simulaciones de este trabajo ha sido MCNP6 (*Monte Carlo N-Particle Transport Code System*), versión 6, desarrollado en Los Alamos, programa de cálculo más empleado debido a sus resultados semejantes a la realidad.

Adicionalmente, este estudio sirve de referencia para el desarrollo de trabajos posteriores en esta materia, ya que fija las bases de utilización del código descrito y las librerías de datos nucleares a emplear en los cálculos de producción de radionucleidos con ciclotrón.

Palabras Clave: Ciclotrón, PET, Flúor-18, Galio-68, dosis, código de Monte Carlo, producción de radionucleidos, imagen médica, medicina nuclear, eficacia.

RESUM

La tomografia per emissió de positrons (PET) és un tipus d'imatge mèdica que permet la realització d'un diagnòstic mèdic. Per aconseguir això es requereixen materials radioactius coneguts com a radio-fàrmacs o radio-sondes, que són introduïts al pacient i que posteriorment es detecten amb una exploració per PET. Les aplicacions d'aquest diagnòstic són variades a mode d'exemple es podria utilitzar per a la detecció d'un càncer, l'avaluació de l'eficàcia d'un pla de tractament, determinació del retorn d'un càncer etc. Per aquest motiu l'estudi de la producció de radionúclids amb aquesta finalitat és de vital importància, necessitant un estudi que pugui garantir l'eficàcia energètica i productiva d'aquest procés.

Els radio-fàrmacs que s'utilitzen als PET són produïts mitjançant un ciclotró ja que permet una ampla versatilitat en la producció de radionúclids amb altes activitats d'una forma eficaçment reproduïble. Per obtenir un anàlisi complet i simulació de les transformacions que tenen lloc al interior del ciclotró s'ha creat un model 3D complet, al que s'inclou la instal·lació del búnquer i la font.

Aquest treball du a terme un estudi detallat de l'avaluació dels radionúclids de gran interès en les tècniques de diagnòstic mèdic (Fluor-18 i Galio-68), mitjançant la generació d'un model genèric de referència per a l'estudi de la producció de radionúclids amb ciclotró. A més, es realitza un estudi de l'eficiència en la producció d'aquests, mitjançant l'anàlisi del sistema, comparant el dos radionúclids i al dosi rebuda al voltant del búnquer.

El còdec de transport de partícules utilitzat en les simulacions d'aquest treball ha sigut MCNP6 (*Monte Carlo N-Particle Transport Code System*), versió 6, desenvolupat a Los Alamos, programa de càlcul més emprat debut als seus resultats molt semblants a la realitat.

En addició, aquest estudi es pot utilitzar com a referència per al desenvolupament de treballs posteriors en aquesta matèria, ja que fixa les bases d'utilització del còdec descrit y les llibreries de dades nuclears a emprar als càlculs de producció de radionúclids amb ciclotró.

Paraules clau: Ciclotró, PET, Fluor-18, Galio-68, dosi, còdec de Monte Carlo, producció de radionúclids, imatge mèdica, medicina nuclear, eficàcia.

ABSTRACT

The Proton Emission Tomography (PET) is one type of medical image that enables the development of a medical diagnostic. Radiopharmaceutical materials are required and are introduced in the patient and later detected in an exploration carried out by the PET. There is a wide range of applications, for instance cancer detection, treatment plan efficiency evaluations, cancer return after treatment determination or determining the effects of a heart attack. The study of radionuclide production for these purposes is of vital importance.

The radiopharmaceutical materials used for the PET are produced using a cyclotron given its high versatility in radionuclide production with high activity in a repeatable manner. In order to obtain a complete analysis and simulation of the transformations that take place in the cyclotron, a complete 3D model is created with a complete installation of the bunker and the source.

This thesis develops a detailed study of the evolution of two radionuclides of great interest in techniques of medical diagnostic (Fluor-18 and Gallium-68), obtaining as a result a generic model that will be a reference for the study of radionuclide production efficiency by the cyclotron. Furthermore, a study of the efficiency of the production of these radionuclides is conducted, by means of the system, comparing both radionuclides and the received doses around the bunker.

The particle transport code used in the simulations in this thesis has been MCNP6 (*Monte Carlo N-Particle Transport Code System*), version 6, developed at Los Alamos, being this a calculation program most applied due to its results' resemblance to reality.

In addition, this thesis is useful as a reference for the development of later studies of this subject matter because it sets the basics for the use of the described code and the nuclear data libraries that must be used in the radionuclide production calculations with the cyclotron.

Key Words: Cyclotron, PET, Fluor-18, Gallium-68, Monte Carlo code, radionuclide production, medical image, diagnostic, nuclear medicine, efficiency.

DOCUMENTOS CONTENIDOS EN EL TFG

- Memoria
- Presupuesto
- Anexos

ÍNDICE DE LA MEMORIA

ABREVIACIONES.....	2
CAPÍTULO 1. INTRODUCCIÓN.....	4
1.1. OBJETIVOS.....	4
1.2. MOTIVACIÓN.....	4
1.3. JUSTIFICACIÓN.....	5
1.4. ESTRUCTURA.....	5
CAPÍTULO 2. CONCEPTOS BÁSICOS.....	7
2.1. RADIATIVIDAD.....	7
2.2. REACCIONES NUCLEARES.....	8
2.3. INTERACCIÓN DE LA RADIACIÓN ELECTROMAGNÉTICA CON LA MATERIA:.....	10
2.4. SECCIÓN EFICAZ.....	12
2.5. ANTECEDENTES: BREVE HISTORIA DE LA MEDICINA NUCLEAR.....	13
CAPÍTULO 3. TOMOGRAFÍA POR EMISIÓN DE POSITRONES (PET).....	16
3.1. TOMOGRAFÍA POR EMISIÓN DE POSITRONES (PET).....	16
3.2. RADIOFÁRMACOS.....	17
3.3. TIPOLOGÍA.....	18
3.3.1. <i>Generadores</i>	20
3.3.2. <i>Reactores nucleares</i>	20
3.4. RADIOFÁRMACOS SELECCIONADOS.....	21
3.4.1. <i>Flúor-18</i>	21
3.4.2. <i>Galio-68</i>	22
CAPÍTULO 4. CICLOTRÓN.....	23
4.1. ACELERACIÓN DE PARTÍCULAS.....	23
4.2. PRODUCCIÓN DE RADIONUCLEIDOS.....	26
CAPÍTULO 5. MATERIALES Y MODELO.....	27
5.1. MCNP6.....	27
5.2. VISED.....	28
5.3. LIBRERÍAS.....	29
5.4. JANIS.....	31
5.5. MATLAB.....	31
5.6. DESCRIPCIÓN DE LA METODOLOGÍA.....	32
5.7. GEOMETRÍA Y MATERIALES SELECCIONADOS.....	33
5.8. CICLOTRÓN Y FUENTE.....	35
5.9. REACCIONES.....	36
CAPÍTULO 6. SIMULACIÓN CON MCNP6.....	39
6.1. FUNCIONAMIENTO DE MCNP6.....	39
6.2. DEFINICIÓN DE LA GEOMETRÍA.....	40
6.3. MATERIALES.....	43
6.4. FUENTE.....	44
6.5. MÉTODOS DE REDUCCIÓN DE VARIANZA EN MCNP6.....	45

6.6.	TALLY.....	46
6.7.	DOSIMETRÍA.....	49
CAPÍTULO 7. ANÁLISIS DE RESULTADOS		55
7.1.	DISTRIBUCIÓN ENERGÉTICA.....	55
7.2.	EVALUACIÓN DE LA DOSIS.....	62
7.2.1.	<i>Protección radiactiva en la producción de Flúor-18</i>	<i>63</i>
7.2.2.	<i>Protección radiactiva en la producción de Galio-68.....</i>	<i>65</i>
7.2.3.	<i>Comparación entre ambos radionucleidos.....</i>	<i>66</i>
CAPÍTULO 8. CONCLUSIONES		69
8.1.	CONCLUSIONES GENERALES.....	69
8.2.	LÍNEAS FUTURAS	70
BIBLIOGRAFÍA		72

ÍNDICE DEL PRESUPUESTO

PRESUPUESTO.....	77
1. OBJETIVO DEL PRESUPUESTO.....	77
2. PRESUPUESTO DESGLOSADO.	77
2.1.1. <i>Coste personal.....</i>	<i>77</i>
2.1.2. <i>Coste software.</i>	<i>78</i>
2.1.3. <i>Coste hardware.....</i>	<i>79</i>
2.1.4. <i>Otros costes.</i>	<i>79</i>
3. PRESUPUESTO TOTAL.....	79

ÍNDICE DE LOS ANEXOS

INPUT.....	81
1. FLÚOR-18.....	81
2. GALIO-68.....	86
XSDIR.....	92
3. OXÍGENO-18.....	92
4. ZINC-68.....	92

ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 1: Tipos de Radiación. Elaboración propia.....	8
Figura 2: Efecto fotoeléctrico. Elaboración propia.....	10
Figura 3: Efecto de Compton. Elaboración propia.....	11
Figura 4: Producción de pares. Elaboración propia.....	11
Figura 5: Sección eficaz. Elaboración propia.....	12
Figura 6: Sección eficaz de producción del ^{18}F en función de la energía de la partícula incidente. Fuente: TENDL 2017 Nuclear Data Library.....	21
Figura 7: Sección eficaz de producción del ^{68}Ga en función de la energía de la partícula incidente. Fuente: TENDL 2017 Nuclear Data Library.....	22
Figura 8: Aceleración de partículas en un ciclotrón. Elaboración propia.....	23
Figura 9: Relación de proporcionalidad entre velocidad y tiempo. Elaboración propia.....	24
Figura 10: Geometría del recipiente que contiene el blanco. Elaboración propia.....	34
Figura 11: Geometría de la habitación a escala. Elaboración propia.....	35
Figura 12: Ciclotrón del Centro Nacional de Aceleradores (CNA). Obtenido de: CNA - Ciclotrón de IBA.....	35
Figura 13: Haz de protones. Elaboración propia.....	36
Figura 14: Desintegración de los radionucleidos. Elaboración propia.....	36
Figura 15: Secciones eficaces de las reacciones por bombardeo de protones en ^{18}O . Fuente: Nuclear Data Library, JANIS.....	37
Figura 16: Secciones eficaces de las reacciones por bombardeo de protones en ^{68}Ga . Fuente: Nuclear Data Library, JANIS.....	38
Figura 17: Esquema de la simulación de MCNP6. Elaboración propia.....	39
Figura 18: Operadores Boléanos de relación entre superficies. Elaboración propia.....	41
Figura 19: Definición de un cilindro una celda. Elaboración propia.....	42
Figura 20: Geometría del modelo. Elaboración propia.....	43
Figura 21: Fuente cónica. Elaboración propia.....	44
Figura 22: Coeficientes de atenuación para fotones. Obtenido de: NIST base de datos de referencia 2016.....	51
Figura 23: Poderes de frenado para protones. Obtenido de: NIST base de datos de referencia 2016.....	51
Figura 24: Registro de neutrones en el interior de la habitación. Elaboración propia.....	52
Figura 25: Distribución energética de los neutrones en el interior de la habitación para las energías entre 0-5 MeV en la producción de Flúor 18. Elaboración propia.....	53

Figura 26: Distribución energética de los neutrones en el interior de la habitación para las energías entre 5-10 MeV en la producción de Flúor 18. Elaboración propia.	53
Figura 27: Producción relativa de Flúor-18. Elaboración propia.....	57
Figura 28: Producción relativa de Galio-68. Elaboración propia.....	58
Figura 29: Concentración de la solución productora de Galio-68. Elaboración propia.....	59
Figura 30: Concentración de la solución productora de Flúor-18. Elaboración propia.....	60
Figura 31: Comparación unitaria entre la producción de ambos radionucleidos. Elaboración propia.....	60
Figura 32: Comparación unitaria entre la producción de ambos radionucleidos. Elaboración propia.....	61
Figura 33: Distribución de la tasa de dosis efectiva generada en la producción de ¹⁸ F. Elaboración propia.....	63
Figura 34: Fluencia de neutrones en la producción de ¹⁸ F. Elaboración propia.....	64
Figura 35: Distribución de la tasa de dosis efectiva generada en la producción de ⁶⁸ Ga. Elaboración propia.	65
Figura 36: Flujo de neutrones en la producción de ⁶⁸ Ga. Elaboración propia.	66
Figura 37: Tasa de dosis efectiva en mSv/h. Elaboración propia.....	68
Figura 38: Trébol de advertencia para protección radiológica de zonas controladas de acceso restringido.....	68

ÍNDICE DE TABLAS

Tabla 1: Características de los radionucleidos empleados para PET.	19
Tabla 2: Unidades de las magnitudes importantes de MCNP6.	28
Tabla 3: Partes y materiales de la geometría.	33
Tabla 4: Tarjetas de superficies en MCNP6.	40
Tabla 5: Tarjetas a definir en la fuente.	45
Tabla 6: Tipos de <i>Tallies</i> en MCNP6.	47
Tabla 7: Tarjetas de definición del <i>Tally</i> FMESH para MCNP6.	49
Tabla 8: Factores de ponderación de la radiación w_R	50
Tabla 9: Niveles de clasificación de las zonas.	67
Tabla 10: Presupuesto desglosado del coste de personal.	77
Tabla 11: Desglose de las horas realizadas por el autor.	78
Tabla 12: Presupuesto desglosado del coste de software.	78
Tabla 13: Presupuesto desglosado del coste de hardware.	79
Tabla 14: Presupuesto desglosado de otros costes generales realizados.	79
Tabla 15: Presupuesto total.	79

ÍNDICE DE CUADROS

Cuadro 1: Definición de las superficies en MCNP6.....	41
Cuadro 2: Definición de las celdas en MCNP6.....	43
Cuadro 3: Definición de los materiales en MCNP6.....	44
Cuadro 4: Definición de la fuente en MCNP6.....	45
Cuadro 5: Definición de las tarjetas <i>cutoff</i> en MCNP6.....	46
Cuadro 6: Definición de las importancias en MCNP6.....	46
Cuadro 7: Definición del FM4 en MCNP6.....	48
Cuadro 8: Definición del FMESH en MCNP6.....	49
Cuadro 9: Definición del FMESH para protección radiológica en MCNP6.....	50
Cuadro 10: Definición del FMESH para la distribución energética de neutrones.....	52
Cuadro 11: <i>Output</i> del <i>Tally</i> FM4 en MCNP6.....	56

I. MEMORIA

ESTUDIO DE LA PRODUCCIÓN CON
CICLOTRÓN DE RADIONUCLEIDOS
PARA TOMOGRAFÍA POR EMISIÓN DE
POSITRONES (PET).

ABREVIACIONES

ABREVIACIÓN	NOMBRE COMPLETO
CERN	Organización Europea para la Investigación Nuclear
CSEWG	<i>Cross Section Evaluation Group</i>
ENDF	<i>Evaluated Nuclear Data File</i>
IAEA	Organismo Internacional de la Energía Atómica
JANIS	<i>Java-based Nuclear Information Software</i>
LA	Los Alamos
LinAc	Acelerador Lineal
MCNP	<i>Monte Carlo N-Particle Extended</i>
NIST	<i>National Institute of Standards and Technology</i>
OMS	Organización Mundial de la Salud
PET	Tomografía por Emisión de Positrones
SPECT	Tomografía Computarizada por Emisión de un Fotón Único
TC	Tomografía Computarizada
TENDL	<i>TALYS-base Evaluated Nuclear Data Library</i>
TRV	Técnica de Reducción de Varianza
VISED	<i>Visual Editor Consultants</i>
NIST	<i>National Institute of Standards and Technology</i>
OMS	Organización Mundial de la Salud

CAPÍTULO 1. INTRODUCCIÓN

1.1. OBJETIVOS.

La producción de radionucleidos mediante ciclotrón es una de las técnicas más utilizadas en la actualidad, ya que permite reproducir los procesos de producción de manera rápida y sencilla, garantizando la seguridad.

El objetivo principal de este trabajo es elaborar un modelo base que registre el número de reacciones que se dan para la producción de los dos radionucleidos más utilizados en PET: Flúor-18 y Galio-68. Para ello se abordan dos objetivos principales: la elaboración de un modelo básico válido de una instalación con un ciclotrón y la creación de *input* compatible con MCNP6 en el que se puedan realizar diversas simulaciones.

A partir de este objetivo principal, se evaluará la eficiencia del modelo definido en lo referente a la energía de bombardeo de los protones y el desarrollo del proceso de producción de manera eficiente, pero segura, mediante un control de la dosis. Comparando en todos los casos los resultados obtenidos para ambos radionucleidos.

1.2. MOTIVACIÓN.

La motivación principal para llevar a cabo este Trabajo de Fin de Grado ha sido el interés por aprender más en un campo diferente y atractivo. El deseo de descubrir y ampliar los conocimientos sobre la medicina nuclear ha motivado la elección de este trabajo, dadas las altas exigencias de investigación, lectura y preparación previa a las que ha ido ligado su consecución.

La medicina nuclear es un campo reciente con un gran potencial en el tratamiento y diagnóstico de las enfermedades actuales. Se descubrió la existencia de esta ciencia en la asignatura de Tecnología Nuclear, que despertó un creciente interés. También alimentado por las optativas cursadas y por el intercambio académico realizado en la Universidad Técnica Checa de Praga (*Czech Technical University*), en el que se tuvo la oportunidad de visitar una instalación de un ciclotrón de investigación. Todo esto contribuyó a querer aprovechar la oportunidad ofrecida por el Departamento de Ingeniería Química y Nuclear de la Universidad Politécnica de Valencia para participar en el desarrollo de este trabajo y aprender a utilizar MCNP6, el código por excelencia para simular el transporte de partículas.

Además, abordar estudios relacionados con el desarrollo de técnicas de diagnóstico de enfermedades tan presentes como el alzhéimer o el cáncer, es una motivación personal adicional.

1.3. JUSTIFICACIÓN.

La técnica de diagnóstico por PET (Tomografía por Emisión de Positrones) consiste en inyectar al paciente un radiofármaco que contiene una partícula radiactiva que se desintegrará por decaimiento beta positivo, emitiendo dos fotones en direcciones opuestas. Mediante la localización de dos detectores a ambos lados del paciente se obtiene la posición exacta del radionucleido, permitiendo reproducir una imagen de diagnóstico tridimensional. El desarrollo de esta técnica ha aportado mejoras importantes en el campo de la detección de enfermedades en etapas tempranas (estados asintomáticos).

Por este motivo, se trata de una técnica de diagnóstico de elevado interés. No obstante, para poder llevarla a cabo se requiere conocer con exactitud los procesos de producción de los radionucleidos que se desintegrarán. Estos procesos deben ser fácilmente reproducibles, dentro de un periodo de tiempo corto y de manera eficiente, garantizando siempre la mínima dosis durante el proceso de producción y en la inyección al paciente.

El interés en el desarrollo de la producción de radionucleidos por ciclotrón persigue el estudio de una mejora en la eficiencia, para obtener una mayor producción de radionucleidos, junto con una mayor variedad, dada la creciente demanda. Este trabajo pretende elaborar un modelo de referencia para la elaboración de otros estudios posteriores relacionados con la producción de radionucleidos con ciclotrón.

La simulación mediante modelos lo más cercanos posibles a la realidad, fundamental en cualquier aplicación nuclear, para minimizar el coste y la dosis que se puede recibir al llevarlos a cabo de manera experimental. Por ello, el desarrollo de un *input* en MCNP6, como código de referencia para el transporte de partículas, resulta un importante avance, suponiendo un punto de partida en el estudio de la producción de radionucleidos.

Por tanto, mediante este trabajo se desarrolla el conocimiento sobre una técnica que está en auge, al asentar las bases mediante el modelo de simulación de la producción de dos de los radionucleidos más utilizados actualmente: Flúor-18 y Galio-68.

1.4. ESTRUCTURA.

El presente trabajo se divide en 8 capítulos a través de los cuales se explica todo el estudio realizado. En el primer capítulo se introduce el trabajo mediante el planteamiento de los objetivos, la motivación y la justificación del presente.

A continuación, se presenta un capítulo genérico, para explicar los principales conceptos relacionados con el desarrollo del estudio realizado. Junto con una breve descripción de la historia de la medicina nuclear como ciencia desde sus inicios hasta la actualidad, donde se encuentra la técnica de diagnóstico sobre la que se va a abordar el estudio.

Inicialmente, fue necesario realizar una introducción en la materia y una investigación previa para desarrollar el modelo, conocer el fin de la producción de los radionucleidos, y, por tanto, cuáles eran las características que debían poseer. Esta investigación previa se plasma en los capítulos 3 y 4, en los que se explica la tecnología PET y la producción de los radionucleidos empleados mediante el ciclotrón.

En el capítulo 5 se exponen los recursos utilizados para llevar a cabo el trabajo, y una justificación de su elección. Seguido de la metodología empleada y las características del modelo sobre el que se realizará la simulación y se estudiará sus resultados.

Para la simulación en MCNP6, código seleccionado para el modelo, se debe crear un archivo de entrada en el que se describa el modelo y los resultados que se quieren obtener. La elaboración del *input* se explica detenidamente en el capítulo 6. Tras la simulación, en el capítulo 7 se evaluarán los datos, mediante comparación y representación gráfica.

Finalmente, se exponen las conclusiones y las líneas futuras, en el capítulo 8.

CAPÍTULO 2. CONCEPTOS BÁSICOS

Este capítulo tiene como objetivo presentar los principales conceptos que se utilizarán posteriormente para facilitar una mejor comprensión del trabajo.

2.1. RADIATIVIDAD.

La radiactividad es el fenómeno mediante el cual los núcleos inestables intentan alcanzar la estabilidad a través de la desintegración espontánea, emitiendo radiaciones y energía y dando lugar a nuevas especies nucleares. Se conoce como nucleido a una especie nuclear definida por su número atómico Z (número de protones en el núcleo) y su número másico A (número de protones y neutrones en el núcleo). Se diferencia entre dos tipos de nucleidos: los estables y los inestables, conocidos estos últimos como radionucleidos.

La radiactividad fue descubierta en uno de los experimentos de *Röntgen*¹ en 1895, donde se observó que, al aplicar una tensión al tubo de rayos catódicos, se iluminaba un trozo de papel que estaba enfrente de la ventana. Se descubrieron así los Rayos X, radiación electromagnética que proviene de la corteza del núcleo de un átomo. La radiación electromagnética es la propagación de energía a través del espacio, sin necesidad de un canal material. La profundización en el estudio de los Rayos X permitió su aprovechamiento en diversos campos. El más conocido es su empleo para la realización de radiografías, dado que los huesos absorben más rayos x que los tejidos blandos.

Sin embargo, el conocimiento de la existencia de la radiactividad como fenómeno tiene lugar en 1896 gracias a los estudios de *Henry Becquerel*² sobre los materiales fluorescentes. El científico dejó accidentalmente sales de uranio sobre una placa fotográfica que acabó imprimiéndose, descubriendo de este modo que el uranio emitía espontáneamente una radiación misteriosa. Esta propiedad es conocida actualmente como radiactividad, que también poseen otros radionucleidos.

Este fenómeno dio lugar a un gran número de investigaciones posteriores, destacando las realizadas por *Marie Curie*³ y *Pierre Curie*⁴ sobre la radiactividad. Cabe destacar entre éstas las investigaciones realizadas por Marie Curie que permitieron el descubrimiento de los elementos radiactivos Polonio, Radio y Radón.

¹ Wilhelm Conrad Röntgen, ingeniero mecánico y físico alemán de la Universidad de Wurzburg (1845-1923).

² Antoine Henri Becquerel, físico francés y Premio Nobel de Física (1852-1908)

³ Maria Salomea Skłodowska-Curie, científica polaca nacionalizada francesa (1867-1934). Primera persona en obtener dos premios Nobel en dos especialidades —Física y Química— y primera mujer profesora en la Universidad de París.

⁴ Pierre Curie, físico francés (1859-1906). Descubridor de la piezoelectricidad. Premio Nobel de Física junto con Marie Curie y Antoine Henri Becquerel.

Más adelante los estudios de *Ernest Rutherford*⁵ y *Frederick Soddy*⁶ dieron a conocer las tres clases de radiactividad:

- **Radiación alfa (α):** partículas cargadas positivamente formadas por dos protones y dos neutrones. Partículas ionizantes, con una penetración en el medio muy baja, pues una hoja de papel puede frenarlas.
- **Radiación beta (β):** partículas cargadas positiva (positrones: β^+) o negativamente (electrones: β^-). Radiación más penetrante que las partículas alfa, pero con menor poder de ionización.
- **Radiación gamma (γ):** ondas electromagnéticas, es la radiación más penetrante, pues comienza a ser absorbida por una placa de plomo.

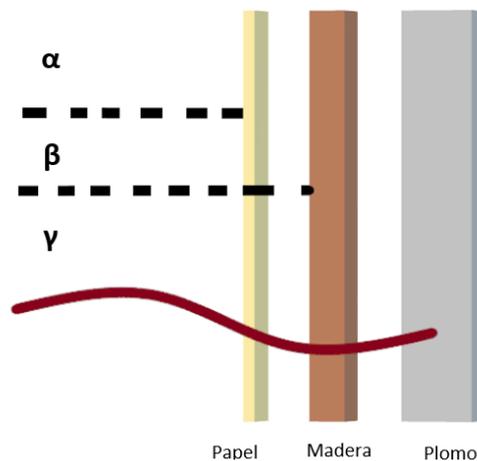


Figura 1: Tipos de Radiación. Elaboración propia.

2.2. REACCIONES NUCLEARES.

Una reacción nuclear es el proceso a través del cual se produce una interacción entre núcleos y partículas subatómicas (protón o neutrón) en la que se realiza una modificación con respecto al estado inicial. La notación habitual para representar una reacción nuclear es:

$$A(a,b)B$$

donde A es el objetivo (blanco), a la partícula incidente, B el producto y b la partícula emitida.

Toda reacción nuclear debe seguir los siguientes principios de conservación:

- Conservación de la carga eléctrica: el número atómico (Z) de los reactivos debe ser igual al de los productos.
- Conservación del número de nucleones: el número másico (A) debe permanecer invariable.
- Conservación de la cantidad de movimiento.
- Conservación de la relación entre masa y energía.

⁵ Ernest Rutherford, físico y químico británico, licenciado en Nueva Zelanda (1871-1937). Premio Nobel de Química.

⁶ Frederick Soddy, físico y químico británico, licenciado en la Universidad de Oxford (1877-1956). Premio Nobel de Química.

Existen diferentes tipos de clasificaciones para las reacciones nucleares. A continuación, se presenta una clasificación según los productos obtenidos:

- **Dispersión elástica:** reacción en la que los productos de la reacción son equivalentes a los reactivos, pues únicamente se produce un intercambio de energía cinética y momento: $X(a,a)X$.
- **Dispersión inelástica:** reacción que tiene lugar cuando el núcleo captura un neutrón y lo reemite, pudiendo ser el mismo neutrón capturado u otro, quedando el núcleo en un estado excitado: $X(a,a)X^*$.
- **Captura radiactiva:** interacción en la que un neutrón es absorbido por el núcleo, formando un isótopo más pesado que el núcleo originario, emitiendo uno o más rayos gamma: $X(a,\gamma)Y$.
- **Emisión de partículas:** reacción producida por el choque de una partícula incidente con el blanco, provocando la emisión de partículas: $X(a,b)Y$.
- **Fotodesintegración:** interacción que se produce entre el átomo blanco y fotones de alta energía, produciéndose la liberación de una partícula y la formación de un nuevo nucleído: $X(\gamma, a)Y$.
- **Fisión:** reacción en la que al incidir una partícula (habitualmente neutrones) sobre un átomo blanco, se produce la división principalmente en dos átomos más ligeros: $X(a,b)Y,Z$.

La probabilidad de que ocurra una reacción nuclear variará en función de dos barreras:

- **Barrera de Coulomb:** repulsión electrostática entre partículas y núcleos cargados positivamente. Una reacción entre una partícula cargada y un núcleo no puede tener lugar si el centro de masas energético de ambas partículas es inferior a la barrera de Coulomb. La producción de radionucleidos con ciclotrones implica que la partícula cargada debe tener una energía superior a la fuerza electrostática de repulsión, que viene determinada por la siguiente expresión:

$$B = \frac{Zze^2}{R} \quad (2.1)$$

siendo B la barrera de la reacción, Z y z el número atómico de ambas especies, e la carga eléctrica y R la separación entre ambas especies (cm).

- **Barrera energética:** representa la energía requerida en función del tipo de reacción exotérmica o endotérmica. Puesto que en toda reacción nuclear la energía debe conservarse, cualquier aumento en la energía cinética debe ir acompañado de una disminución de las masas en reposo.

$$Q(\text{MeV}) = 931,4\Delta M \quad (2.2)$$

$$\Delta M = (m_p + M_T) - (m_q + M_R) \quad (2.3)$$

siendo m_p la masa de la partícula incidente, M_T la masa del objetivo, M_R la masa del producto y m_q la masa de la partícula emitida.

De acuerdo con este principio se diferencian dos tipos de reacciones:

- Si $Q < 0$ la reacción será una reacción endoérgica (endo-energética) y por tanto para que se produzca la reacción será necesario aportar una energía superior a la energía umbral.
- Si $Q > 0$ la reacción será exoérgica (exo-energética) y se producirá una liberación de energía.

2.3. INTERACCIÓN DE LA RADIACIÓN ELECTROMAGNÉTICA CON LA MATERIA:

La interacción de los fotones con la materia deriva en los procesos que se presentan a continuación:

- **Efecto fotoeléctrico (absorción):** reacción de atenuación en la cual un fotón choca con un electrón de un átomo, adquiriendo este último toda la energía del fotón en forma de energía cinética. El electrón que ha absorbido la energía del fotón, que tras esta interacción desaparece, se le conoce como fotoelectrón y es emitido fuera del núcleo, creando un ion positivo con un hueco en una capa profunda. Para alcanzar la estabilización, el átomo emite rayos X.

Esta reacción lleva asociada un intercambio energético y como se vió en el apartado anterior, debe mantenerse constante la energía final con respecto a la inicial. La probabilidad de que ocurra este efecto es mayor a bajas energías.

$$E_f = E_\gamma - E_b \quad (2.4)$$

siendo E_f la energía del fotón incidente, E_γ la energía del fotón y E_b la energía que une el electrón al átomo.

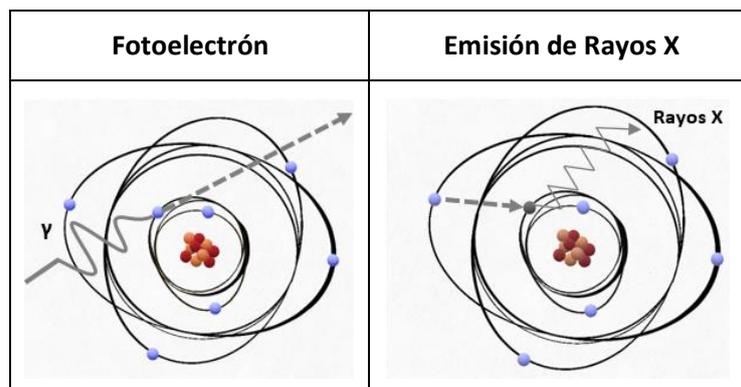


Figura 2: Efecto fotoeléctrico. Elaboración propia.

- **Efecto Compton (Dispersión incoherente):** es la interacción que tiene lugar entre un fotón y un electrón poco ligado al átomo (capas exteriores de la corteza), que tendrá por tanto una energía de ligadura menor que la del fotón ($E_b \ll E_\gamma$). Esta interacción da lugar a una dispersión. El fotón es desviado y atenuado, mientras que el electrón absorbe la energía en forma de energía cinética y es expulsado con una desviación.

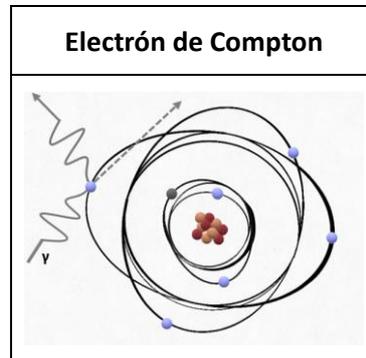


Figura 3: Efecto de Compton. Elaboración propia.

La relación energética entre las partículas es la siguiente:

$$E_f = h\nu = h\nu' + E_e \quad (2.5)$$

donde h es la constante de Plank, ν y ν' la frecuencia de la onda y E_e la energía recibida por el electrón. Este efecto tiene lugar a energías intermedias, del orden de 1 MeV.

- **Efecto de Rayleigh (Dispersión coherente):** es la reacción producida al interaccionar fotones de baja energía con electrones del átomo, aumentando ligeramente la energía de estos últimos, sin alcanzar la energía de separación del átomo. Esta interacción produce una ligera desviación del fotón sin variar su energía.
- **Producción de pares:** interacción producida entre un fotón con una alta energía ($>1,02\text{MeV}$) absorbido por el campo eléctrico de un átomo. Esta interacción tiene como resultado la emisión de un electrón y un positrón, en direcciones opuestas. El positrón continúa su trayectoria hasta que choca con un electrón y se produce la aniquilación de ambos, emitiendo dos fotones de 511 keV. La probabilidad de que se produzca esta reacción aumenta en función de la energía del fotón y de la masa atómica del blanco con el que impacta.

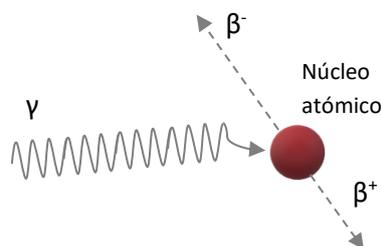


Figura 4: Producción de pares. Elaboración propia.

La distribución energética de la reacción es la siguiente:

$$h\nu = 2m_0c^2 + E_+ + E_- \quad (2.6)$$

siendo E_+ la energía del positrón y E_- la energía del electrón.

2.4. SECCIÓN EFICAZ.

La sección eficaz es un parámetro que representa la probabilidad de que se produzca una reacción nuclear para un radionucleido concreto. Se puede obtener la probabilidad de ocurrencia de una reacción nuclear de un radionucleido y la suma de todas las reacciones posibles es la sección eficaz total. La sección eficaz depende de las siguientes características:

- Energía de la partícula incidente.
- Tipo de reacción.
- Objetivo o blanco sobre el que chocará la partícula incidente.

Para obtener este parámetro se considera, a modo de aproximación, que el blanco (núcleo atómico) y la partícula incidente son equivalentes a esferas. La probabilidad de que se produzca una reacción es por tanto la probabilidad de que choquen dichas esferas. Por ello la sección eficaz se representa a partir de una unidad de superficie.

La unidad de medida de la sección eficaz empleada habitualmente es el barn, que es equivalente a 10^{-24} cm².

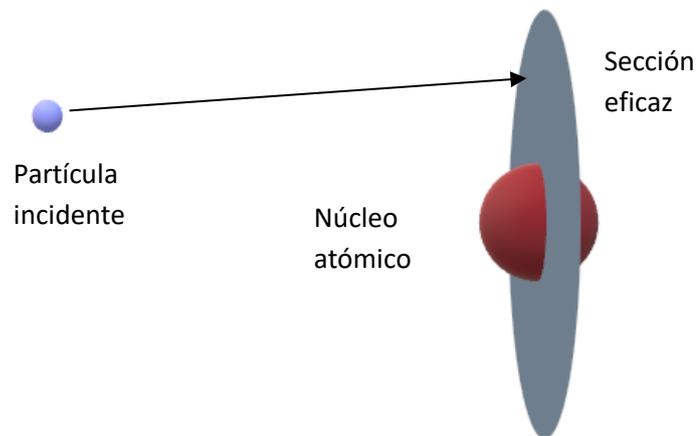


Figura 5: Sección eficaz. Elaboración propia.

La obtención de las secciones eficaces se produce mediante métodos estadísticos, partiendo de datos experimentales. La compilación de las secciones eficaces en relación a la energía, junto con otros datos nucleares, forman las librerías ENDF (*Evaluated Nuclear Data File*). Las librerías ENDF son un referente en la simulación y análisis de cualquier aplicación nuclear. Las librerías ENDF contienen información de secciones eficaces para neutrones, rayos gamma (γ) e interacción de partículas cargadas. En estas librerías las secciones eficaces se representan como una combinación de secciones eficaces tabuladas y parámetros de resonancia, sobre los que se opera para adaptar los datos disponibles y obtener unos más concretos para cada caso.

En el caso de la reacción nuclear de producción de radionucleidos a partir de un blanco, que es la reacción que interesa para la elaboración de estudios sobre la efectividad de los ciclotrones, determina estadísticamente el número de radionucleidos que se formaran en un ciclotrón y los niveles de contaminación producidos por la formación de otros radioisótopos que puede haber en el material objetivo.

2.5. ANTECEDENTES: BREVE HISTORIA DE LA MEDICINA NUCLEAR.

La Medicina Nuclear, según la definición dada por la Organización Mundial de la Salud y el Organismo Internacional de la Energía Atómica, *“es la especialidad que se ocupa del diagnóstico, tratamiento e investigación médica, mediante el uso de radioisótopos como fuentes abiertas”*. El empleo de los radionucleidos para obtener un diagnóstico consiste en detectar su emisión de radiación externamente, mientras que en procesos terapéuticos se aprovecha dicha radiación para atacar y deteriorar los tejidos dañados.

El desarrollo de la Medicina Nuclear comienza a principios del siglo XX, aplicando técnicas terapéuticas para paliar algunas enfermedades como cáncer de piel, de laríngeo... Surge así un interés científico que da paso al inicio de numerosos estudios sobre las posibles aplicaciones de los radionucleidos.

Durante los comienzos de la Medicina Nuclear, los procesos se realizaban sin filtración, es decir, sin eliminar la radiación alfa y beta. Por este motivo, los pacientes recibían altas dosis en tejidos y órganos sanos, pudiendo llegar a dañarlos. Además, las aplicaciones estaban restringidas al uso de aquellos radionucleidos disponibles en la naturaleza, lo que suponía una importante limitación.

A partir de los años 50, la evolución tecnológica llevo asociada el desarrollo de sistemas informáticos más complejos que, junto a una mejora de la instrumentación y los equipos y un mayor control de la dosis, permitió el desarrollo de máquinas más potentes. También se consiguió controlar la producción de radionucleidos de manera artificial, abriendo un campo mayor de aplicaciones en la Medicina Nuclear.

La producción de radionucleidos se basó principalmente en el bombardeo con partículas aceleradas con altas energías a un blanco. A fin de controlar las partículas proyectil y dotarlas de la energía y velocidad suficiente, se desarrollaron los primeros aceleradores de partículas lineales (*LinAc*). Estos equipos conseguían acelerar las partículas mediante un incremento de la tensión creando un campo magnético alterno. Se hacían pasar las partículas por una serie de tubos a los que se había aplicado el campo magnético y se iba invirtiendo la polaridad, provocando reacciones de atracción y repulsión que hacían que las partículas fueran avanzando por los tubos cada vez con mayor tensión y velocidad. Sin embargo, tenían un problema. Para conseguir aceleraciones elevadas era necesario construir estructuras de tubos muy largas. Esto encarecía y dificultaba la construcción, ya que generaba también la necesidad blindar el equipo y obtener una envolvente más grande.

En 1934 el físico *Ernest Lawrence*⁷ desarrolló el primer ciclotrón, un acelerador de partículas circular. El empleo del ciclotrón conseguía producir radionucleidos mediante una estructura más compacta reduciendo costes de construcción, blindaje y envolvente del edificio. El ciclotrón evita problemas asociados a los intensos campos eléctricos producidos en los aceleradores lineales, mediante la aceleración múltiple de iones hasta alcanzar elevadas velocidades, sin empleo de altos voltajes.

Centrando nuestra atención en la Medicina Nuclear para diagnóstico, en 1950 se inventa la Cámara de Centelleo Gamma, primer instrumento que permitía la elaboración de una imagen médica para diagnóstico clínico. Se trata de un equipo fiable y cuyo uso se generalizó a nivel mundial. La imagen generada por esta técnica era planar (bidimensional), lo cual implicaba una pérdida de profundidad, pudiendo confundir resultados al superponerse la información de las zonas de alrededor a la zona de interés.

Más adelante se desarrolló el SPECT (Tomografía Computarizada por Emisión de un Fotón Único). Este equipo genera una imagen tomográfica, es decir, una imagen dividida por secciones, proporcionando profundidad a la información obtenida y mejorando así la calidad del diagnóstico. Este avance se consiguió gracias a la rotación de una cámara gamma alrededor del paciente, permitiendo obtener imágenes tridimensionales que aportan más información y mejor contraste, eliminando las posibles interferencias de la radiación de los órganos y tejidos situados alrededor de la zona de interés.

Ambas técnicas consisten en la inyección en el paciente de moléculas ligadas a un radionucleido, conocidas como radiofármacos, que se distribuyen en el cuerpo y se concentran en la zona de interés. Estas sustancias radiactivas emiten radiación gamma (γ) que atraviesa un tubo fotomultiplicador y se convierte en una señal de voltaje. Dicha señal es analizada, ampliada y digitalizada, para generar los puntos de la imagen.

Sin embargo, el cuerpo humano emite radiación, por todas las partes y en todas las direcciones, que pueden llevar a alterar los resultados de la imagen. Por este motivo, es necesario canalizar dicha radiación. Para ello se utiliza un cristal colimador que reduce la radiación emitida. Sin embargo, esto implica disminuir al mismo tiempo la sensibilidad de detención.

Investigaciones posteriores llevaron al desarrollo del diagnóstico por PET (Tomografía por Emisión Positrónica), técnica de elaboración de una imagen que consiste en situar dos detectores a ambos lados del paciente. Los radiofármacos utilizados sufren una desintegración por emisión de positrones, que cuando se junta con un electrón produce la aniquilación de ambos, emitiendo dos fotones. Estos fotones son detectados por cada uno de los detectores y, en función del tiempo que tardan en alcanzar el detector, se obtiene la posición exacta del radionucleido. La principal ventaja de este instrumento es la obtención de imágenes tridimensionales mucho más sensibles y con una capacidad de detección enorme. En contrapartida, está limitado por la necesidad de realizarlo con radionucleidos emisores de positrones y por la alta complejidad de las máquinas e instrumentos asociados.

El desarrollo de estas técnicas ha aportado mejoras importantes en el campo de la detección de enfermedades, ya que la elaboración de imágenes por PET permite la detección temprana,

⁷ Ernest Orlando Lawrence, físico nuclear estadounidense (1901 - 1958). Premio Nobel de Física.

incluso en estados en los que la enfermedad o trastorno no ha desarrollado efectos notables (estados asintomáticos).

Para mejorar la imagen se combina con Tomografía Computarizada (TC) y otras técnicas a fin de que sea más sencillo identificar la morfología. Sin embargo, la TC se realiza a través de la exposición del paciente a rayos X, con lo cual incrementa considerablemente la dosis recibida.

El interés en el desarrollo de estas técnicas continúa siendo de gran importancia. Las líneas de mejora persiguen incrementar la sensibilidad y localización de los tejidos y órganos dañados y, al mismo tiempo, disminuir los efectos secundarios que puedan aparecer en los órganos sanos.

Las líneas actuales de investigación se centran en obtener imágenes 4D con las que se pueda conocer los movimientos fisiológicos de los órganos para minimizar las secuelas producidas por su aplicación.

CAPÍTULO 3. TOMOGRAFÍA POR EMISIÓN DE POSITRONES (PET)

3.1. TOMOGRAFÍA POR EMISIÓN DE POSITRONES (PET).

La Tomografía por Emisión de Positrones es una técnica no invasiva de exploración a través de la cual se obtiene una imagen tomográfica sobre los procesos fisiológicos que tienen lugar en el cuerpo del paciente. La aplicación de este método de diagnóstico se ha extendido en la Medicina Nuclear; se emplea especialmente en las especialidades de Oncología, Cardiología y Neurología, donde una detección temprana es crucial.

La técnica consiste en inyectar al paciente radiofármacos que se dirigen y concentran en la zona de interés. Los radiofármacos empleados en esta técnica tienen como decaimiento una desintegración beta positiva. Por un defecto de neutrones, el núcleo es inestable y tiende a estabilizarse, emitiendo una partícula β^+ o positrón y optimizando la relación neutrón/protón. El positrón emitido se mueve por el medio perdiendo su energía cinética, hasta que acaba chocando con un electrón, su antipartícula. Esta interacción lleva a la aniquilación de electrón-positrón, emitiendo dos fotones que salen en direcciones opuestas, con un ángulo de 180° y 511 keV de energía. Siguiendo las Leyes de Conservación, todas las reacciones nucleares deben mantener constante la relación energía-masa con respecto al estado inicial y final. Por tanto:

$$E_\gamma = 2 \cdot m_e c^2 \quad (4.1)$$

siendo E_γ la energía de los fotones, m_e la masa del electrón y c la velocidad de la luz. Esta es la energía que se obtiene para cada fotón.

La elaboración de la imagen tomográfica consiste en la detección coincidente de la aniquilación. Se sitúan los detectores en posiciones opuestas y así, cuando los fotones los alcancen, son reconocidos de manera simultánea, manteniendo un tiempo y energía límite. Tras la detección de los fotones, se calcula su origen, que es el punto en el que se ha producido la aniquilación. Esta información es procesada, se realizan las correcciones de atenuación pertinentes y se reconstruye los datos para elaborar la imagen definitiva.

Aun así, esta técnica tiene imperfecciones, ya que de manera aleatoria puede ser que dos fotones generados de manera simultánea en diferentes sitios del cuerpo alcancen los detectores y sean recibidos como resultado de una aniquilación. O, por el contrario, que uno de los fotones procedentes de una aniquilación se disperse en el camino y no llegue al detector, dentro de la línea de respuesta esperada. Estos sucesos reciben el nombre de eventos *random*. La probabilidad de que ocurran estos eventos aumenta a medida que lo hace la radiactividad.

Para mitigarlas, se ha establecido un sistema que mide el tiempo de vuelo, de forma que, asumiendo el origen de los fotones, se calcula el tiempo esperado para que lleguen a los detectores. Así, según donde ocurra la aniquilación, un fotón llegará antes que el otro y se establece una relación proporcional de un tiempo respecto a otro. Sin embargo, esta técnica se encuentra limitada por el desarrollo electrónico.

En cualquier caso y a pesar de lo anterior, el balance es claramente positivo. El desarrollo de este instrumento de diagnóstico ha supuesto un importante avance con respecto a la tecnología SPECT. La sensibilidad de este instrumento es mucho mayor, en torno a 100 veces comparada con la técnica SPECT para la misma dosis, pues ya no es necesario un cristal colimador para filtrar la radiación generada. Además, la resolución de esta tecnología es también mayor gracias a la detección coincidente de los fotones.

3.2. RADIOFÁRMACOS.

La tomografía por emisión positrones es un tipo de estudio *in vivo* (vs. *in vitro*). Es decir, una técnica que consiste en la inyección al paciente de una molécula radiactiva que será la que emitirá radiación permitiendo recoger la información de diagnóstico desde el exterior.

La molécula administrada al paciente recibe el nombre de radiofármaco y consiste en la unión de un medicamento o una molécula orgánica con un radioisótopo emisor de positrones. Estos dos componentes reciben el nombre de:

- Vector selectivo: molécula ligada al radionucleido.
- Vector de información: radionucleido emisor de positrones.

Existen 177 tipos de radiofármacos posibles y su uso depende de donde se quiera evaluar el diagnóstico. Generalmente será el vector selectivo el que defina la ruta metabólica que seguirá el radiofármaco, aunque algunos radionucleidos pueden llegar también a determinarla. Esto significa que, de acuerdo con las propiedades del radiofármaco, éste tendrá tendencia a ir a determinados órganos o tejidos dentro del organismo. La selección de ambos vectores viene principalmente definida por la obtención de la máxima información posible.

Otra característica determinante es el Periodo de Semidesintegración Efectivo (T_e) que relaciona el periodo de desintegración necesario para la consecución del estudio con el menor tiempo posible, de forma que se consiga minimizar la dosis de radiación recibida por el paciente.

El Periodo de Semidesintegración indica el tiempo que tardan en desintegrarse la mitad de los radionucleidos, es decir:

$$T_{1/2} = \frac{\ln 2}{\lambda} \quad (4. 2)$$

donde λ es la constante de semidesintegración del radionucleido.

La selección de los radionucleidos se ve reducida a aquellos que cumplan con esta característica, de modo que se considere dentro del tiempo de desintegración su transporte desde el lugar de producción a la instalación clínica y la realización del estudio (Periodo de Semidesintegración Efectivo).

3.3. TIPOLOGÍA.

Existen dos grandes grupos de radionucleidos: los naturales y los artificiales.

Los primeros radionucleidos empleados fueron los naturales, moléculas inestables que se encuentran presentes en la naturaleza debido a una relación entre neutrones y protones (N/P) lejana a la unidad. Estos radionucleidos generalmente tienen una diferencia grande entre la cantidad de protones y neutrones presentes en su núcleo, provocando una fuerte inestabilidad que originan desintegraciones emisoras de radiación α y β . Se trata de una radiación no deseable, pues es perjudicial para el paciente.

Posteriormente, el desarrollo de la tecnología ha permitido generar radionucleidos de manera artificial mediante técnicas de bombardeo de nucleidos a través de partículas fuertemente energéticas. Estos procesos permiten la selección de los radionucleidos en función de sus características, para que sean los óptimos. En este caso, se desea la obtención de una imagen PET y, por tanto, las características principales que deben tener los radionucleidos para garantizar la máxima calidad del diagnóstico son:

Emisor de positrones puro	Resulta de gran importancia que el radionucleido se desintegre unicamente por desintegración beta positiva, garantizando la detección por la máquina PET. La emisión de otro tipo de radiación o desintegración mediante otro tipo de reacciones no será detectada y recibida para el diagnóstico.
Periodo de semi-desintegración adecuado	Característica vital, ya que debe ser el mínimo necesario para transportarlo desde el lugar de su producción a la instalación clínica en la que se elaborará el estudio.
Aptitud química de fijación con el vector selectivo	La unión entre la molécula y el radionucleido debe realizarse de forma sencilla y para ello ambos deben tener unas características químicas compatibles.
Apto para la introducción en la ruta metabólica	La inyección del radionucleido en el organismo no se realiza en el órgano o tejido de interés, si no que este será transportado por el organismo en lo que se define como ruta metabólica. El paso del radiofármaco por esta ruta no debe alterar ningún proceso y debe tener las características necesarias para alcanzar el órgano o tejido objetivo.
Emisión de positrones de baja energía	La sensibilidad es un factor importante en la elaboración del diagnóstico, pues es la característica principal que define esta técnica. Para alcanzar los valores óptimos es preferible trabajar con bajas energías de emisión de positrones.
Fácil y rápida disponibilidad	La elaboración de estos diagnósticos como herramienta útil requiere que sean sencillos de realizar y se puedan repetir sucesivas veces, de acuerdo con las necesidades de los pacientes. Para ello será necesario que los radionucleidos con los que se realiza el diagnóstico se puedan obtener mediante un proceso sencillo y en un periodo de tiempo corto.
Bajo coste de producción	El coste de producción de los radionucleidos debe ser el mínimo posible, promoviendo su utilización en las instalaciones clínicas.
Decaimiento a un nucleido estable	El radionucleido debe desintegrarse en un nucleido estable, para evitar que el paciente esté expuesto a radiación no necesaria.
Alta pureza del radionucleido	La pureza del radionucleido tiene una importancia elevada, pues los isótopos que se hayan podido generar durante la producción del radionucleido requerido deben ser eliminados. En caso de no ser un radionucleido altamente puro, compartirá las características químicas con los isótopos generados y su separación será costosa en lo referente a tiempo y coste.

Tabla 1: Características de los radionucleidos empleados para PET.

La obtención de los radionucleidos artificiales ofrece pues un amplio abanico de posibilidades. No obstante, la producción artificial está también limitada. Actualmente se pueden diferenciar tres métodos de producción de radionucleidos: generadores, reactores nucleares y ciclotrones. Los ciclotrones se desarrollarán en un capítulo posterior para abordarlo de forma más detallada.

3.3.1. Generadores.

Los generadores son unidades que contienen nucleidos radiactivos, que reciben el nombre de padres radiactivos, con largos periodos de desintegración y cuyo decaimiento lleva a la producción de radionucleidos hijos con periodos de desintegración más cortos. Tras esto, los radionucleidos hijos son separados del radionucleido padre para su utilización como radiofármaco.

Fue el primer método empleado de manera eficiente, ya que permitía la producción de radionucleidos en instalaciones cercanas o en las propias instalaciones clínicas en las que se realizará el diagnóstico, mediante procesos reproducibles. El primer radionucleido que se produjo fue ^{99m}Tc a partir de ^{99}Mo . Aunque se ha estudiado la generación de otros radionucleidos, el más extendido y empleado es éste. En el generador, el radionucleido padre se desintegra en el hijo, que se mantiene *metaestable*⁸ y decaerá emitiendo radiación, con un periodo de desintegración de seis horas. Este radionucleido es empleado para el diagnóstico mediante imágenes SPECT.

El principio de funcionamiento de los generadores es la búsqueda del equilibrio por parte del radionucleido padre, que una vez generado y extraído el radionucleido hijo, comenzará de nuevo el proceso. Esto proceso depende de la actividad del radionucleido original, que es la variable que muestra el número de desintegraciones que realiza por unidad de tiempo y se conoce como la Ley de Desintegración:

$$A_d = \frac{\lambda_d}{\lambda_d - \lambda_p} \times A_{p(0)} \times (e^{-\lambda_p t} - e^{-\lambda_d t}) \quad (4.3)$$

siendo λ_d la constante de semidesintegración del radionucleido hijo, λ_p la constante de semidesintegración del radionucleido padre y t el tiempo.

La actividad del radionucleido padre es por tanto una función que varía con el tiempo, ya que la capacidad de desintegración y producción de radionucleidos hijos se reduce progresivamente de forma exponencial.

3.3.2. Reactores nucleares.

Otra de las posibilidades de producción de radionucleidos para el uso clínico es a través de los reactores nucleares, aprovechando la fisión o el intenso flujo neutrónico que se produce en estos. Los neutrones, al no tener carga eléctrica, son muy eficaces generando radionucleidos, ya que pueden penetrar en el núcleo del átomo sin experimentar las fuerzas de repulsión.

Las principales reacciones que tienen lugar en el interior de los reactores nucleares con el fin de producir radionucleidos son: (n, γ) , (n, p) , (n, α) y $(n, \text{fisión})$.

En el interior de los reactores nucleares se produce una importante cantidad de reacciones. Por tanto, la separación de los radionucleidos de interés de los residuos puede resultar difícil y costosa. Por este motivo, se introduce un material objetivo en el interior del reactor que será irradiado con neutrones en un proceso llamado activación neutrónica. La elección de este

⁸ Sistema en equilibrio aparente que evoluciona a un equilibrio estable en un periodo de tiempo corto.

material blanco es de vital importancia, pues debe tener unas características óptimas como gran pureza, para evitar la aparición de nucleidos parásitos. Además, debe mantenerse estable frente a los efectos térmicos y la acción de la radiación gamma (γ). Algunos de los radionucleidos producidos son ^{51}Cr , empleado para marcar los glóbulos rojos. No obstante, el radionucleido más importante generador en los reactores es ^{99}Mo , que se puede utilizar en los generadores explicados en el apartado anterior.

3.4. RADIOFÁRMACOS SELECCIONADOS.

Los radiofármacos seleccionados para el estudio son ^{18}F y ^{68}Ga . Ambos producen una desintegración beta positiva adecuada, emisora de radiación gamma. A continuación, se explican algunas de sus características principales.

3.4.1. Flúor-18

Flúor-18 (^{18}F) es uno de los radionucleidos utilizados tradicionalmente en las técnicas de diagnóstico por sus favorables características, que permitieron su uso en los inicios de la medicina nuclear para diagnóstico.

Entre ellas, el radio atómico del flúor, de dimensiones muy parecidas al hidrógeno. Esto permite que el radionucleido sustituya al H_2 de las moléculas orgánicas y se generen compuestos marcados muy parecidos a la molécula original y, por tanto, pueda ser introducido fácilmente en la ruta metabólica deseada. Por otro lado, el periodo de semidesintegración es bajo, de 109.77 min según los datos de ENDF/B VIII lo cual permite que la dosis recibida por el paciente sea la mínima posible.

Respecto a la producción de ^{18}F , se obtiene a través del ^{18}O , a través de una reacción (p,n). Para que se produzca esta reacción tiene que incidir un protón contra el núcleo atómico del flúor con la suficiente energía. La probabilidad que se produzca esta reacción se representa a través de la sección eficaz, obtenida a partir de datos experimentales y simulaciones. En la gráfica se puede observar la variación de las probabilidades de producción de ^{18}F en función de la energía.

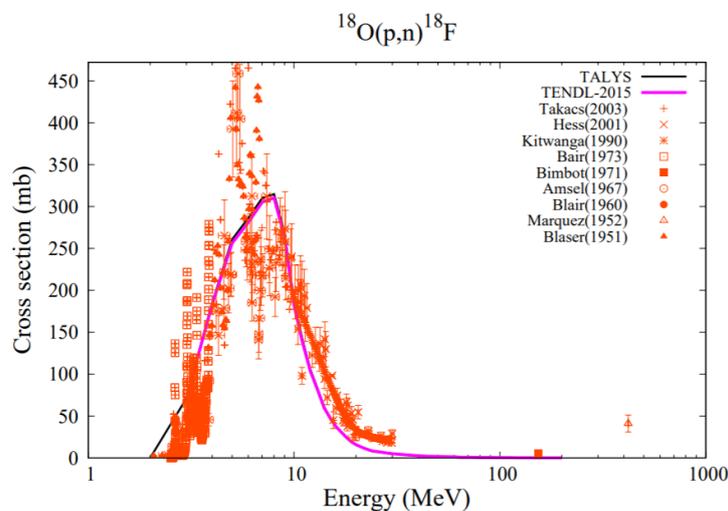


Figura 6: Sección eficaz de producción del ^{18}F en función de la energía de la partícula incidente. Fuente: TENDL 2017 Nuclear Data Library.

3.4.2. Galio-68

El radionucleido Galio-68 (^{68}Ga) se conoce desde hace más de 40 años. No obstante, se comenzó a utilizar en aplicaciones PET a partir del año 2000. El creciente uso de este radionucleido se debe al establecimiento del ciclotrón como medio de producción constante y repetible. El ^{68}Ga se utiliza para diagnóstico de enfermedades como el cáncer de próstata. Una de las características importantes es el bajo periodo de semidesintegración del radionucleido que es de 67.71 min.

El ^{68}Ga se produce a través del ^{68}Zn en una reacción (p,n). Se muestra a continuación una gráfica que recoge los datos de producción del radionucleido, obtenidos a partir de experimentos y simulaciones, en función de la energía con la que impacte la partícula incidente.

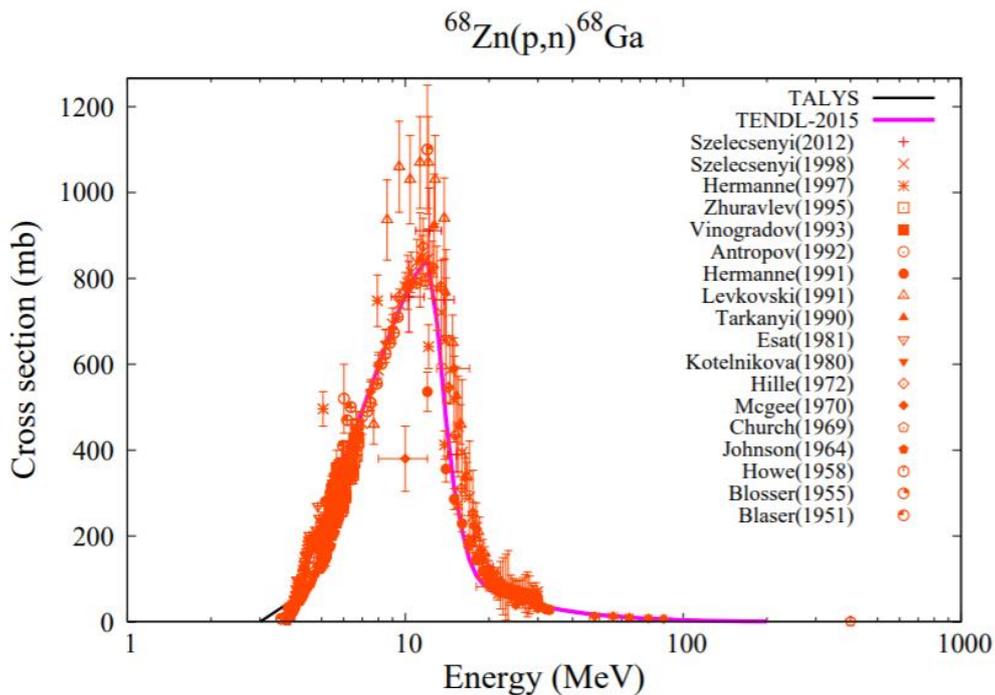


Figura 7: Sección eficaz de producción del ^{68}Ga en función de la energía de la partícula incidente. Fuente: TENDL 2017 Nuclear Data Library.

CAPÍTULO 4. CICLOTRÓN

Un ciclotrón es un acelerador de partículas compacto que usa las ondas electromagnéticas para acelerar las partículas. Un haz de partículas cargadas es llevado al centro de la cámara y una tensión atrae y repele alternativamente las partículas, provocando su aceleración.

4.1. ACELERACIÓN DE PARTÍCULAS.

El ciclotrón está formado por dos placas semicirculares huecas dispuestas con sus bordes diametrales adyacentes, con un campo magnético uniforme entre ambas, normal al plano de las placas y con vacío a su alrededor. A cada semicírculo de placas se le llama D. Para acelerar las partículas se aplica a las placas oscilaciones de alta frecuencia que producen un campo eléctrico oscilante en la región diametral entre ambas. Los iones son acelerados durante un semiciclo por el campo eléctrico hacia el interior de uno de los electrodos (D) recorriendo una trayectoria circular hasta llegar a la zona intermedia donde el campo magnético se ajusta de tal forma que el campo eléctrico invierte su sentido y los iones reciben entonces un segundo aumento de velocidad al pasar al interior de la otra D.

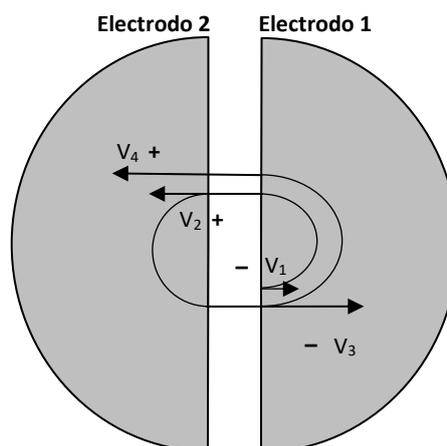


Figura 8: Aceleración de partículas en un ciclotrón. Elaboración propia.

Los radios de las trayectorias realizadas por los iones son proporcionales a las velocidades de los iones, y el tiempo requerido para llevar a cabo un recorrido será constante e independiente de las velocidades. La trayectoria final que realizan los iones tiene forma de espiral y la llevan a cabo en resonancia con el campo magnético hasta alcanzar la periferia del aparato.

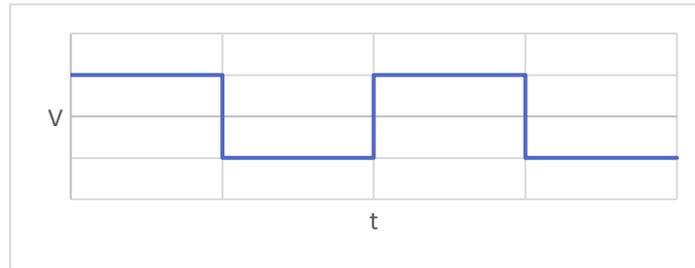


Figura 9: Relación de proporcionalidad entre velocidad y tiempo. Elaboración propia.

Para evidenciar lo dicho se incluye la justificación física. El movimiento circular que realizan las partículas en el ciclotrón se debe al campo magnético uniforme que aplica una Fuerza de Lorentz, definida por la siguiente expresión:

$$F_m = q \cdot v \times B \quad (5.1)$$

donde F_m es la Fuerza de Lorentz, q es la carga de la partícula, v la velocidad y B el campo magnético, con dirección radial y sentido hacia el interior de la semicircunferencia trazada por la partícula.

Como producto de la aceleración de la partícula se producirá una variación de su energía cinética, determinada por la siguiente fórmula:

$$\Delta K = q \cdot \Delta V \quad (5.2)$$

donde ΔV es la diferencia de potencial entre ambas placas.

Aplicando la segunda ley de Newton para un movimiento, que dice que la fuerza es igual a la masa por la aceleración se obtiene que:

$$F_m = \frac{m \cdot v^2}{r} \quad (5.3)$$

Se obtiene así que la fuerza centrípeta que mantiene la partícula en la trayectoria circular es generada por el campo magnético transversal debido a la Fuerza de Lorentz. Combinando ambas expresiones se obtiene:

$$qvB = \frac{mv^2}{r} \quad (5.4)$$

Si despejamos el radio,

$$r = \frac{m \cdot v}{q \cdot B} \quad (5.5)$$

y la frecuencia de rotación ν :

$$\nu = \frac{\omega}{2\pi} = \frac{1}{2\pi} \frac{v}{r} = \frac{qB}{2\pi m} \quad (5.6)$$

donde ω es la velocidad angular.

Por tanto. El periodo que tarda en realizar una semicircunferencia es:

$$P_{\frac{1}{2}} = \frac{\pi \cdot r}{v} = \frac{\pi \cdot m}{q \cdot B} \quad (5.7)$$

Por tanto, se demuestra que la velocidad es independiente del tiempo en aproximaciones no relativistas.

Con el aumento de la velocidad de la partícula, alrededor de la velocidad de la luz, esta aproximación dejará de ser válida y la frecuencia no será constante. Se deberá considerar que el efecto relativista aumentará y habrá que considerarlo cuando la velocidad de la partícula sea próxima o superior a la de la luz. En ese caso, habrá que aplicar unas correcciones para modificar la frecuencia.

La masa relativista se representa mediante la siguiente expresión:

$$m = \frac{m_0}{\gamma} = \frac{m_0}{\sqrt{1 - \beta^2}}, \quad \beta = \frac{v}{c} \quad (5.8)$$

De forma que la frecuencia relativista puede expresarse así:

$$\nu = \frac{qB}{2\pi\gamma m_0} = \frac{\nu_0}{\gamma} \quad (5.9)$$

Para asegurar que las partículas están siempre aceleradas, la fuente de radiofrecuencia debe alternar la polaridad de los electrones siempre que las partículas pasen a través de él. Para cumplir esta condición, la radiofrecuencia debe ser un múltiplo entero de la frecuencia del ciclotrón:

$$\nu_{RF} = h\nu_c, \quad h = 1, 2, 3 \dots \quad (5.10)$$

donde h es el número de armónicos.

4.2. PRODUCCIÓN DE RADIONUCLEIDOS.

La producción de radionucleidos en un ciclotrón se basa en acelerar las partículas proyectiles que van a bombardear un material, de modo que tenga la energía suficiente para provocar la reacción de interés que dé como producto el radionucleido que se quiere obtener.

Entendido el concepto de aceleración de partículas, se fija ahora la atención en el impacto de las partículas con el material. La producción del radionucleido de interés depende de:

- La sección eficaz de la reacción buscada, pues es la probabilidad de que ocurra dicha reacción.
- La energía de la partícula incidente, variable de la que depende la sección eficaz. Como se ha visto anteriormente, para que se produzca una reacción específica, se deben superar las fuerzas de repulsión del núcleo y ello depende de la energía con la que incida la partícula.
- Espesor del blanco, que consiste en la cantidad de radionucleidos por cm^2 , pues cuanta mayor concentración exista, mayor probabilidad habrá de que se produzca la reacción esperada.
- El haz o flujo de las partículas incidentes.

Por tanto, si consideramos que la sección eficaz es independiente de la energía, se obtiene que el índice de producción sería:

$$R = n_T I \sigma \quad (5.11)$$

donde R es el número de nucleidos producidos por segundo, n_T el espesor del blanco (nucleidos/ cm^2), I el flujo de partículas incidentes por segundo y σ la sección eficaz.

Sin embargo, la sección eficaz siempre depende de la energía. Para la obtención de aproximaciones se puede considerar que es independiente, pero será siempre más correcto presentar la sección eficaz en función de la energía. Por tanto, una expresión más exacta del índice de producción de radionucleidos es:

$$R = n_T I \int_{E_S}^{E_0} \frac{\sigma(E)}{dE/dx} dE \quad (5.12)$$

siendo E la energía, x la distancia recorrida por la partícula y $\int_{E_S}^{E_0}$ la integral entre la energía inicial y la final de la partícula incidente a lo largo de su camino.

Por tanto, al introducir la dependencia de la sección eficaz de la energía, se ha introducido la variable distancia recorrida por la partícula, ya que la energía dependerá de este factor, pues irá perdiendo energía en su recorrido. Por este motivo se denomina a dE/dx Poder de Frenado.

CAPÍTULO 5. MATERIALES Y MODELO

Para la simulación de la producción de los radionucleidos de ^{18}F y ^{68}Ga se han empleado diversos programas que se explican a continuación. Además, la simulación está basada en datos experimentales, por lo que ha sido necesario emplear unas librerías específicas de acuerdo con la reacción de producción a estudiar.

En los siguientes apartados se describen estas herramientas utilizadas para el desarrollo del modelo de este trabajo.

Tras esto se explica la metodología empleada en el diseño y estudio del modelo utilizado en el trabajo. Cabe destacar que la selección de los radiofármacos, de las mezclas que los producen, del ciclotrón y de la estructura y materiales que componen el modelo ha sido también parte del análisis y evaluación del estudio, sin partir de definiciones iniciales o elementos seleccionados.

5.1. MCNP6.

El método Monte Carlo es una técnica de resolución de problemas matemáticos no deterministas, mediante variables aleatorias. De hecho, debe su nombre a la ciudad de los casinos, donde el azar es la pieza fundamental.

La utilidad de este método se aplica especialmente a la resolución de problemas con integraciones multidimensionales en las que el resultado final del proceso viene dado en función de diferentes eventos, con probabilidades individuales.

La resolución de la ecuación del transporte de partículas requiere de métodos estocásticos en los que sea considerado el azar y la probabilidad. Para el estudio de estos problemas se empleaba la *Ecuación de Boltzmann* que incluye estas características. No obstante, a partir de cálculos largos y tediosos, en 1944 se desarrolla en Los Álamos un código basado en el método Monte Carlo como solución, que fue inicialmente utilizado para el desarrollo de armas nucleares durante la Segunda Guerra Mundial.

La evolución de este código ha sido progresiva. Comienza con la posibilidad de estudiar el transporte de partículas como neutrones y fotones con geometrías sencillas y se llega a la actualidad, con el código MCNP6 que permite el estudio de transporte de protones, neutrones, fotones y electrones a través de complejas geometrías en 3D. De hecho, la versión MCNP6 proviene de una combinación de las dos versiones anteriores MCNP5 y MCNPX, que estudiaban el transporte de neutrones, electrones y fotones por un lado y protones por otro.

La evolución de este código va ligada al aumento de la memoria y la capacidad de computación de los ordenadores, ya que el método requiere de la creación de un alto volumen de números y variables aleatorias para simular las historias individuales de las partículas. Además, se trata de

una importante solución para la obtención de resultados muy cercanos a la realidad, sin necesidad de realizar experimentos, lo cual resulta más barato y seguro. Por este motivo, el uso del código se encuentra muy extendido y es la herramienta principal en el ámbito nuclear. Algunas de sus aplicaciones son el cálculo de blindajes y dosimetría, protección radiactiva, estudios de criticidad, diseño de reactores, radioterapia... entre otras.

El funcionamiento básico de MCNP consiste en introducir un archivo de entrada conocido como *input*, que tiene definido el modelo que se quiere simular, y partir del cual saldrán los resultados. Hay que destacar que las variables o parámetros que se introduzcan en el *input* deben corresponder con las unidades definidas en MCNP6. A continuación, se presenta las magnitudes que se van a utilizar para este estudio y las correspondientes unidades en las que se deben definir:

Magnitud	Unidades
Longitud	cm
Energía	MeV
Tiempo	segundos
Sección eficaz	Barn
Densidad	g/cm ³

Tabla 2: Unidades de las magnitudes importantes de MCNP6.

Son varios los códigos que emplean el método Monte Carlo para la resolución de la ecuación de transporte, entre ellos destaca PENELOPE, desarrollado en la Universidad de Barcelona o GEANT, del CERN (Organización Europea para la Investigación Nuclear). Sin embargo, se ha escogido MCNP en primer lugar por la amplia experiencia adquirida por el Departamento de Ingeniería Química y Nuclear de la Universidad Politécnica de Valencia en los múltiples proyectos y estudios basados en este código. Por otro lado, es el código que obtiene el resultado más exacto con la realidad y el que mejor funciona para la simulación de protones.

5.2. VISED.

La elaboración de la definición de la geometría para un *input* en MCNP6 no siempre es obvia y puede dar lugar a confusión. Por ello, se ha empleado VISED (Visual Editor Consultants). Se trata de una interfaz cuya aplicación consiste en previsualizar la geometría que se ha definido en un *input*. Esta herramienta permite representar la geometría definida en 2D, diferenciando entre celdas y nombrando cada una de las superficies. Resulta de gran utilidad ya que permite comprobar de manera más visual los datos introducidos en el *input*.

5.3. LIBRERÍAS.

La simulación de MCNP6 se basa en datos experimentales y modelos físicos. Estos datos nucleares se almacenan en librerías que contienen datos sobre secciones eficaces, emisión de partículas, distribuciones energéticas, periodos de semidesintegración, etc. El fichero principal que contiene los datos nucleares se llama *XS*. Para que el código lo encuentre se añade siempre un archivo (*xmdir*) con el directorio del fichero *XS*.

La librería introducida en MCNP6 por defecto recibe el nombre de ENDF (*Evaluated Nuclear Data File*). Su elaboración proviene de un proyecto coordinado por CSEWG (Cross Section Evaluation Group) en coordinación con grupos de trabajo como la Comunidad Internacional de Ciencia Nuclear.

Aunque se trata de una librería muy completa, se ha escogido para este trabajo la librería TENDL (*TALYS-based Evaluated Nuclear Data Library*). Esta librería ha sido desarrollada a través de un conjunto de herramientas, las principales son: TALYS, TEFAL, TASMAN, TARES, TAFIS y TANES, y en su conjunto se reciben el nombre de T6. La primera vez que la librería TENDL fue publicada fue en 2008. La edición escogida es la de 2017, novena edición, que contiene una evaluación de siete tipos de partículas incidentes, para 2800 isótopos y con una energía hasta 200 MeV. La décima edición es de 2019, no publicada en el momento en el que se escogió la librería. Se dispone de la librería a través de la página web donde están publicados todos sus ficheros.

La elección de la librería TENDL se debe a que en lo que a este estudio se refiere, producción de radionucleidos mediante bombardeo de protones, la librería TENDL es mucho más completa. A modo de demostración, se presentan a continuación las secciones eficaces de producción de radionucleidos mediante bombardeo de protones contenidas en cada librería. Los cuadrados verdes indican isótopos de los que sí se tiene la sección eficaz de producción por bombardeo de protones, en cada librería. Es fácil comprobar como la librería TENDL tiene mayor número de datos de radionucleidos que la ENDF.

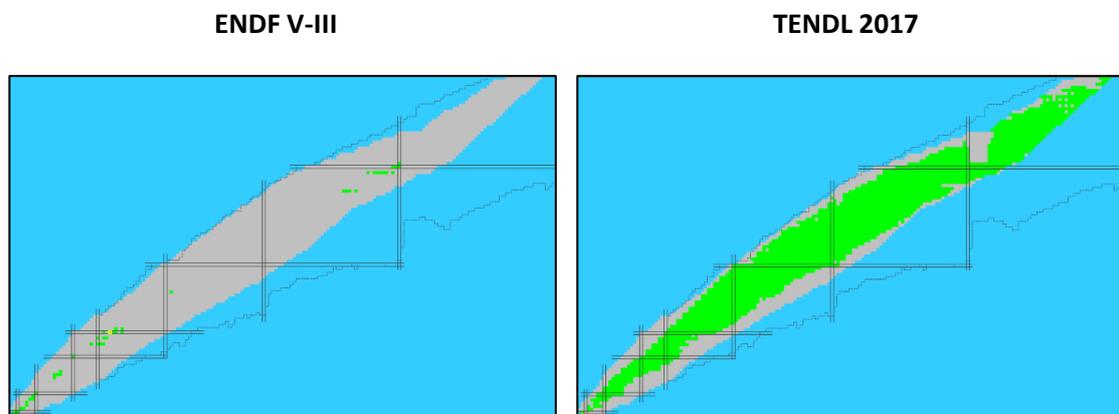


Ilustración 6. 1: Secciones eficaces para bombardeo de protones según librerías. Fuente: JANIS

De hecho, en la librería ENDF no se encuentran las secciones eficaces de producción de los radionucleidos escogidos: ^{18}F y ^{68}Ga . Esto supuso un problema en la realización del trabajo, ya que hubo que buscar una librería adecuada para el estudio, pues en el Departamento se empleaba la librería ENDF para la mayoría de los casos. Por este motivo, inicialmente los errores en la simulación obtenidos al inicio del trabajo no se atribuyeron a la falta de datos de secciones eficaces. Una vez enfocado el problema de la falta de datos nucleares, para su implementación hubo que buscar una librería que realmente contuviera las secciones eficaces que se requerían y confirmar la validez de esa librería, ya que se trata de una librería no validada oficialmente.

La introducción de los archivos con las secciones eficaces de los radionucleidos se realiza a través de un fichero que debe contener el formato aceptado por MCNP6, de forma que pueda leerlo, y modificar el archivo *xmdir*, que es el que contiene el directorio de las secciones eficaces, para que al simular el modelo MCNP6 conozca la ruta y pueda acceder a los datos nucleares en la simulación.

Todo este esfuerzo de búsqueda de fuentes de datos, prueba/error e investigación será de gran utilidad en posteriores trabajos que utilicen este modelo.

Cabe destacar que el creciente interés de la medicina nuclear, y, en consecuencia, de la producción de radionucleidos, ha supuesto un aumento de los documentos y los estudios realizados alrededor de este campo. Estos resultaron de gran ayuda, y se recurrió a ellos para conocer la existencia de la librería empleada. Un amplio conjunto de estudios optaba por la librería TENDL y defendía su uso al comparar los resultados obtenidos mediante simulaciones con los obtenidos experimentalmente. Este hecho tiene una importante trascendencia ya que al tratarse de una librería cuyos datos nucleares no han sido oficialmente validados, la comprobación mediante datos experimentales es de gran interés.

Analizando las referencias realizadas a la librería TENDL, la mayor aplicación es la medicina nuclear. De hecho, según los datos recogidos por los autores de la librería, el empleo de esta fuente para este fin tiene un porcentaje del 27% con respecto al total de aplicaciones como estudios de fusión, fisión y quemado del combustible o desarrollo de datos nucleares e incertidumbres. Es importante remarcar que este porcentaje es remarcable, considerando que el número de estudios sobre medicina nuclear es considerablemente menor que los del resto.

Se destacan los títulos de los siguientes artículos y estudios cuya referencia se encuentra en el apartado de la bibliografía. En ellos se demuestra que la librería TENDL es más adecuada para este tipo de estudios y se contrasta con los resultados obtenidos experimentalmente, a modo de demostración de la validez de estos datos:

- *“Modern Nuclear Data Evaluation with the TALYS Code System.”*
A.J. Koning y D. Rochman. (2012). Nuclear Data Sheets. Volume 113, Issue 12, December 2012, Pages 2841-2934. (<https://doi.org/10.1016/j.nds.2012.11.002>).
- *“Recommended Nuclear Data for the Production of Selected Therapeutic Radionuclides.”*
J.W. Engle, et al. (2019). Nuclear Data Sheets. Volume 155, January 2019, Pages 56-74. (<https://doi.org/10.1016/j.nds.2019.01.003>).
- *“TENDL: Complete Nuclear Data Library for innovative Nuclear Science and Technology.”*
A.J.Koning et al. (2019). Nuclear Data Sheets. Volume 155, January 2019, Pages 1-55 (<https://doi.org/10.1016/j.nds.2019.01.002>).

No obstante, al ser las librerías TENDL no validadas, únicamente se han empleado en lo referente al bombardeo protónico para la obtención de los radionucleidos. Por ello, se ha especificado en el *input* que se empleen para el material definido para Oxígeno-18 y Zinc-68 (*hlib=.00h*). Mientras que el resto de los materiales emplearan las librerías ENDF de referencia para la definición de los parámetros de protones, neutrones, fotones y electrones, respectivamente:

- *hlib=.24h*
- *nlib=.80c*
- *plib=.84p*
- *elib=.03e*

5.4. JANIS.

JANIS (*Java-based Nuclear Information Software*) es un programa gratuito desarrollado por la OECD - Nuclear Energy Agency y la Aquitaine Electronique Informatique. El software se ha creado para facilitar la visualización de los datos nucleares almacenados en las principales librerías. A través de él se puede visualizar y manipular los datos de las librerías de manera gráfica, permitiendo un fácil acceso a los valores numéricos.

5.5. MATLAB.

Los resultados obtenidos de la simulación en MCNP6 son grandes matrices de difícil comprensión inmediata. Por tanto, su representación gráfica es de gran ayuda para analizar los resultados.

Para la visualización de los resultados se ha seleccionado Matlab como software matemático, herramienta conocida y con experiencia en su lenguaje de programación. Sus principales funciones son la manipulación de matrices y la representación de datos y funciones.

La primera versión de Matlab aparece en 1984, desarrollada por *Cleve Moler*⁹. Su mejora y desarrollo continua en la actualidad, siendo una herramienta esencial para millones de ingenieros y científicos en el análisis iterativo y los procesos de diseño.

5.6. DESCRIPCIÓN DE LA METODOLOGÍA.

El presente capítulo desarrolla la metodología empleada para el estudio de la eficiencia en la producción de radionucleidos mediante simulación en MCNP. La producción de los radionucleidos ^{18}F y ^{68}Ga es un proceso importante para la aplicación de las técnicas de diagnósticos existentes en la actualidad, extendidas a nivel mundial. Para la realización del estudio se ha empleado una simulación en MCNP6. La consecución de este estudio requiere la elaboración de una geometría base, la definición del haz de protones con el que se bombardeará el blanco y la selección de los materiales que conforman el modelo, entre otras cosas. Toda esta información se recoge en un archivo de entrada que será el que se ejecutará para obtener los resultados (*input*).

El modelo se corresponde con una geometría simplificada de una instalación con un ciclotrón, llegando al detalle que requiere la simulación mediante el lenguaje de MCNP que se detallará a continuación. La creación de esta geometría se realiza a través de la definición de diferentes superficies en los planos *X*, *Y* y *Z* que forman volúmenes.

La elección de los dos radionucleidos a estudiar se basa en el objetivo de abordar un estudio de producción de radionucleidos tradicional y uno cuya producción y uso es más reciente. El creciente interés de las técnicas de imagen nuclear ha fomentado un aumento del número de estudios sobre posibles radiofármacos a emplear, surgiendo numerosos radionucleidos nuevos. La elección del Flúor-18 y el Galio 68-se fundamenta en el interés que estos tienen tradicionalmente y su gran uso en las técnicas de diagnóstico y, por tanto, se ha podido encontrar información y referencias en múltiples libros y documentos. Además, dado que no se han podido realizar pruebas experimentales para comprobar los resultados, se han conseguido artículos con resultados de experimentos llevados a cabo por otras universidades. Estos resultados se han empleado para comparar los obtenidos y verificar su coherencia. Los principales artículos son los siguientes y su referencia se puede encontrar en el apartado de la bibliografía:

- *Estimate of the radiation source term for ^{18}F production via thick H_2^{18}O targets bombarded with 18 MeV protons.*
J. A. Cruzate (2015). Radiation Physics and Chemistry. Volume 117, December 2015, Pages 54-58. (<https://doi.org/10.1016/j.radphyschem.2015.07.018>).
- *Production of Ga-68 with a General Electric PETtrace cyclotron by liquid target.*
S. Riga et al. (2018). Physica Medica. Volume 55, November 2018, Pages 116-126. (<https://doi.org/10.1016/j.ejmp.2018.10.018>).

⁹ Cleve Barry Moler, matemático estadounidense (1939-). Uno de los autores de LINPACK y EISPACK, inventor de MATLAB y cofundador de MathWorks con Jack Poco

5.7. GEOMETRÍA Y MATERIALES SELECCIONADOS.

La geometría empleada se basa en los datos obtenidos de los artículos mencionados y de instalaciones ya existentes en España. Dado que el estudio a realizar es previo a la instalación de un ciclotrón, ya que consiste en estudiar la eficiencia de la producción de radionucleidos de manera segura, no se poseen la totalidad de los datos y algunas de las partes se han simplificado. Para abordar un estudio más detallado se requerirían conocer todos los datos y estudiar cada una de las partes individualmente antes de unirlos. No obstante, las partes definidas son aquellas que interaccionaran con el haz de protones para producir los radionucleidos y las encargadas de mantener la seguridad de la instalación, evitando la liberación de partículas radiactivas al exterior.

Las partes en las que se clasifica la geometría y sus correspondientes materiales son:

Parte	Material
Muestra o blanco	Agua enriquecida con ^{18}O / Mezcla de Zinc
Recipiente de la muestra	Niobio
Material ventana	Havar
Esfera de vacío y cobertura de aislante	Nitruro de aluminio
Bunker	Hormigón (Cemento Portland)

Tabla 3: Partes y materiales de la geometría.

La muestra es el blanco al que irá dirigido el haz de protones, que es de donde se extraerán los radionucleidos para la elaboración del radiofármaco. De acuerdo con el radionucleido que se desee producir, la mezcla deberá tener unas condiciones que favorezcan su producción y su separación, una vez finalizado el proceso. El estado estándar del blanco es líquido o gaseoso ya que su separación y preparación a posteriori resulta más sencilla. Su empleo es rápido, seguro y de confianza, ya que permiten realizar acciones rápidamente, sin necesidad de manipularlas manualmente, como el intercambio de calor.

Para la producción de Flúor-18 se requiere de una solución de agua enriquecida en más de un 95% de Oxígeno-18 (H_2^{18}O). Mientras que para la producción de Galio-68 se va a emplear una solución de ácido nítrico (HNO_3) en la que se ha disuelto Zinc, formando nitrato de zinc ($\text{Zn}(\text{NO}_3)_2$). La producción de Galio-68 se puede realizar a través de otras disoluciones, no obstante, se ha seleccionado el ácido nítrico porque confiere más estabilidad, pues la presencia de ácido nítrico reduce la presión del blanco durante la irradiación.

Los materiales empleados habitualmente como recipientes del blanco para la producción de radionucleidos son: plata, titanio, niobio o tantalio. De éstos, los más más empleados son el niobio y tantalio, ya que son los más robustos y tienen buenas características de resistencia térmica en las condiciones las que van a ser expuestos. La principal característica de estos materiales es su resistencia a las condiciones que van a ser expuestos. El material seleccionado como recipiente ha sido el Niobio, ya que es el que menor tratamiento posterior requiere, reduciendo las dosis de exposición del personal que trabaja en la instalación.

Es por tanto lógico que en la mayor parte de los artículos consultados se empleara este material como recipiente para la producción de ^{18}F y ^{68}Ga . Además, se ha consultado el material empleado en instalaciones españolas, y el Niobio es material seleccionado con más frecuencia.

La geometría exacta de la fuente varía según el fabricante, para adaptar el recipiente a las exigencias del ciclotrón. Por ello, se ha escogido como geometría un cilindro de Niobio con un diámetro de 3.06 cm y una altura de 2.4 cm. El hueco que queda en su interior será rellenado por la solución con un volumen de 2ml, un diámetro de 2.06 cm y una altura 0.6 cm. Durante la irradiación es importante que el contenido en el interior sea únicamente la solución, para que nada interfiera en las reacciones que tendrán lugar. Por ello, se rellena también la solución con helio, un gas inerte, para garantizar que no hay aire en su interior y evitar reacciones no deseadas.

Hay que remarcar que el volumen escogido ha sido para la producción del radionucleido de Flúor-18, que requiere un menor volumen que una solución para la producción de Galio-68. Esta elección se basa en que se requerían los datos preferentemente para la producción de Flúor, ya que es el radionucleido más empleado. Además, se tienen datos de estudios anteriores realizados en el departamento para la producción de Galio-68. No obstante, debido a las mejoras implementadas al introducir unas librerías más adecuadas y obtener un *input* del que se obtiene directamente el número de reacciones (p,n) que tienen lugar, se ha querido emplear el modelo de Flúor-18 para constatar los resultados obtenidos en el estudio anterior.

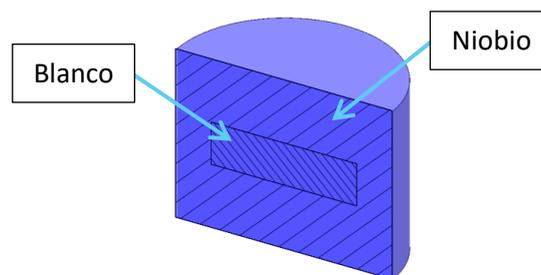


Figura 10: Geometría del recipiente que contiene el blanco. Elaboración propia.

A continuación, se ha definido una esfera de vacío de 30 cm de diámetro que será el lugar en el se coloque el recipiente y donde será bombardeado el blanco. A esta esfera se le ha añadido un conducto cilíndrico por el que escaparán los protones y partículas secundarias generadas hasta el vertedero o cementerio de protones, material con una alta densidad y gran capacidad de absorción de protones. Tanto la esfera como el cilindro están recubiertos por un aislante, aluminio nítrico. Esta superficie está contenida dentro de la habitación en la que se sitúa el ciclotrón, rodeada por muros de hormigón con un espesor de 2 metros. Además, a fin de poder realizar posteriores estudios, se ha diseñado una segunda capa de aire que rodee la superficie de hormigón.

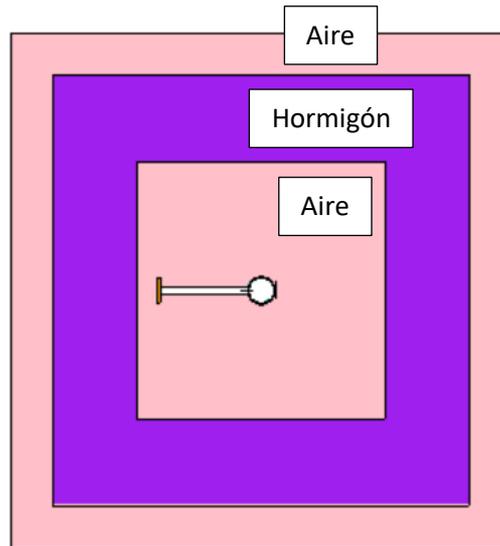


Figura 11: Geometría de la habitación a escala. Elaboración propia.

5.8. CICLOTRÓN Y FUENTE.

Actualmente se pueden encontrar una amplia gama de ciclotrones, siendo el potencial industrial los pequeños ciclotrones médicos que aceleran los protones a una energía inferior a 20 MeV, cuya función principal es la producción de radionucleidos para usos domésticos, comerciales o de investigación.

En el desarrollo de este trabajo se utiliza uno de estos ciclotrones. La localización de este tipo de ciclotrones suele ser en hospitales, universidades o plantas comerciales locales, ya que, dado los cortos periodos de desintegración de los radionucleidos, su uso será siempre local. Centrando la atención en los ciclotrones de España, se ha seleccionado el *Cyclone 18/9* fabricado por Ion Beam Applications (IBA, Bélgica), empleando las características de este ciclotrón para el desarrollo del estudio.



Figura 12: Ciclotrón del Centro Nacional de Aceleradores (CNA). Obtenido de: CNA - Ciclotrón de IBA.

Por tanto, de acuerdo con las características de este ciclotrón, se va a simular una fuente de protones acelerados con una energía de 18 MeV con una intensidad de corriente de 50-80 μA . Se va a dotar a la fuente de una forma cónica, de forma que llegue a la solución como un haz de protones circulares. A modo de demostración, se presenta a continuación un registro del haz de protones que llega al blanco.

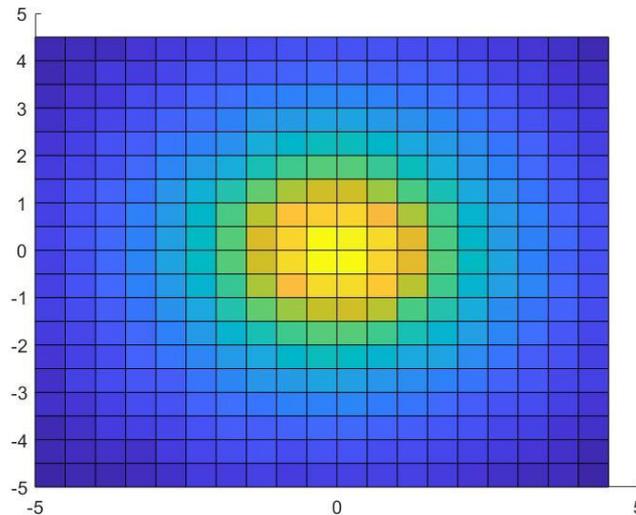


Figura 13: Haz de protones. Elaboración propia.

5.9. REACCIONES.

La producción de los radionucleidos deseados implica una reacción (p,n). No obstante, se van a producir diferentes reacciones en esta solución ya que, además de Oxígeno-18 y Zinc-68 hay otros nucleidos y éstos, además, van a dar lugar a otro tipo de reacciones. Adicionalmente, una vez producidos los radionucleidos Flúor-18 y Galio-68, como son nucleidos radiactivos, pueden desintegrarse y volver a Oxígeno-18 y Zinc-68. Por tanto, para conocer la cantidad de radionucleidos formados, habrá que tener en cuenta el decaimiento de estos radionucleidos.

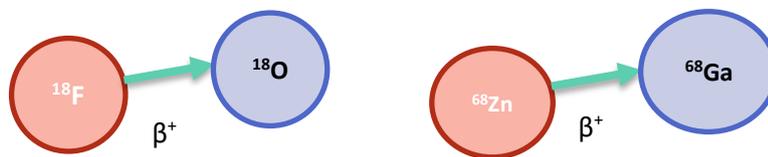


Figura 14: Desintegración de los radionucleidos. Elaboración propia.

El cálculo de la desintegración que producirán estos radionucleidos se realizará en función de la Ley de Desintegración Radiactiva, que es una ley exponencial decreciente. Esta ley se rige por la constante de desintegración, característica de cada radionucleido. Esta constante se obtiene a partir de la vida media de cada radionucleido:

$$T = \frac{\ln(2)}{\lambda} \quad (7.1)$$

siendo λ la probabilidad de desintegración por unidad de tiempo. Por tanto, la probabilidad de que se desintegre un radionucleido se obtiene al multiplicar este valor por el tiempo. Considerando que hay N núcleos, se obtiene la Ley de Desintegración Radiactiva.

$$dN = -N\lambda dt \quad (7.2)$$

Es importante considerar esta reacción. Los datos obtenidos se analizarán teniendo en cuenta esta ley. De este modo, se podrá conocer el número de radionucleidos reales, eliminando aquellos que pueden llegar a desintegrarse durante el proceso de producción.

En referencia a las reacciones que tienen lugar al bombardear Oxígeno y Zinc, resulta trascendente conocer si van a dar lugar a otros isótopos de Flúor y Galio que no sean los requeridos. Para ello, se recurre al programa JANIS que tiene almacenadas las librerías de datos que se van a emplear para representar las reacciones que van a tener lugar. El hecho de estudiar con especial atención la formación de otros isótopos del Flúor y el Galio reside en que estos compartirán propiedades químicas y físicas por lo que su separación, al finalizar el proceso de producción, es más costosa que la de otros elementos.

Se representa a continuación las secciones eficaces de las principales reacciones que tienen lugar durante el bombardeo de protones en una solución que contenga Oxígeno-18.

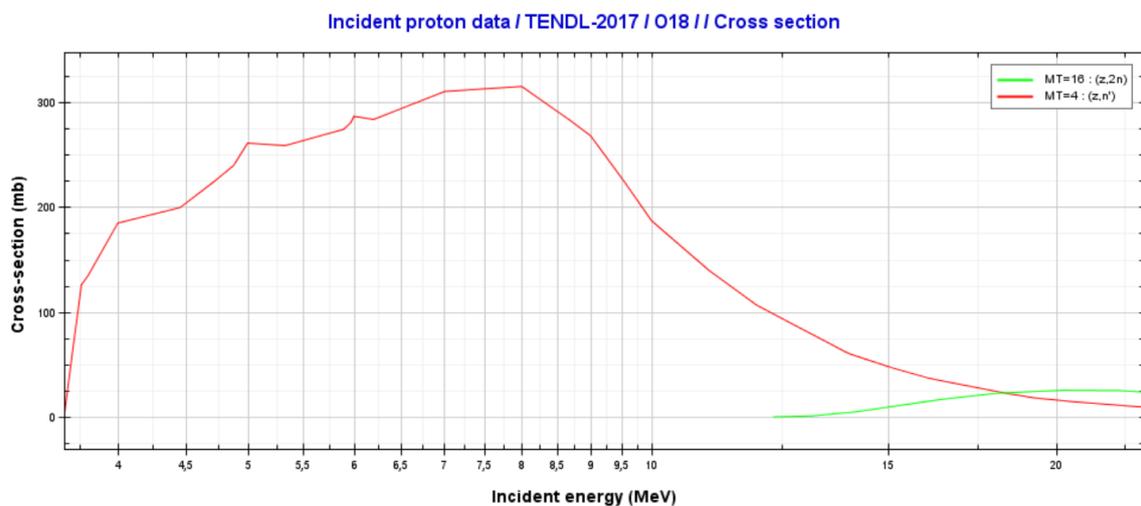


Figura 15: Secciones eficaces de las reacciones por bombardeo de protones en ¹⁸O. Fuente: Nuclear Data Library, JANIS.

Tras analizar las reacciones que tienen lugar, ninguna de ellas genera una importante cantidad de isótopos del Flúor-18. Ese hecho supone una importante ventaja de este radionucleido, la pureza isotópica.

Se repite el proceso de análisis para el bombardeo de protones en una solución de Zinc-68 y se representan las secciones eficaces de reacciones relativas a la producción de Galio-68.

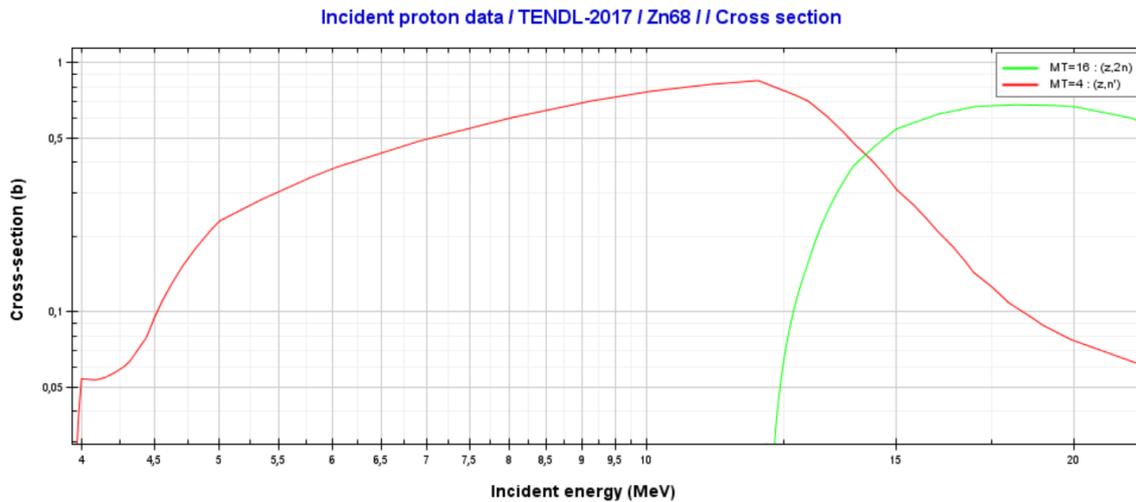


Figura 16: Secciones eficaces de las reacciones por bombardeo de protones en ⁶⁸Ga. Fuente: Nuclear Data Library, JANIS.

En este caso, durante el bombardeo de protones a un blanco con Zinc-68 se produce Galio-68, que es el radionucleido de interés para las aplicaciones médicas. Sin embargo, como se puede ver en la gráfica, hay otra reacción que se produce de manera importante, la MT=16. Esta reacción (p,2n) produce Galio-67, un isótopo del Galio-68, cuya producción debe evitarse en la medida de lo posible, ya que su separación es bastante compleja.

CAPÍTULO 6. SIMULACIÓN CON MCNP6

6.1. FUNCIONAMIENTO DE MCNP6.

En el presente capítulo se analizarán los pasos a realizar para la simulación de MCNP6 una vez se tienen todos los datos previos.

La simulación de MCNP6 funciona a través de un archivo de entrada en el que se especifica la geometría, se describen los materiales y se seleccionan sus correspondientes secciones eficaces, se sitúa y define la fuente radiactiva y se introducen los datos de salida que se quieren obtener. La respuesta al modelo que se simula se obtiene a través de dos archivos de salida principales el *output* y el FMESH.

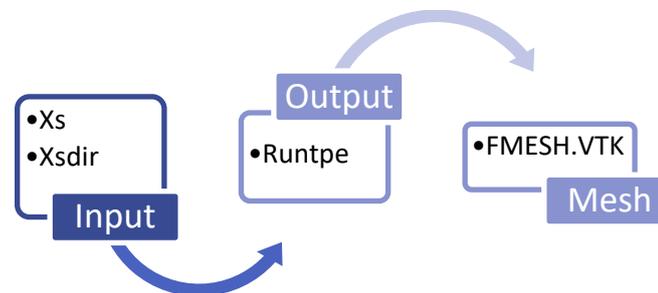


Figura 17: Esquema de la simulación de MCNP6. Elaboración propia.

El coste computacional de algunos modelos es muy elevado, ya que debe recurrir a muchos datos externos almacenados en las librerías (*xmdir*). Por ello generalmente se aplica alguna técnica de reducción de varianza para mejorar la eficiencia de la simulación y reducir en tiempo de computación.

La elaboración del archivo de entrada o *input* en MCNP6 se realiza mediante la definición de tres partes principales:

- Tarjetas de celdas
- Tarjetas de superficies
- Tarjetas de datos (Fuente, *Tallies* y parámetros de control) y Tarjetas de materiales

Estas secciones principales deben introducirse en el *input* en ese orden, dejando un espacio en blanco entre cada una de ellas. Además, ninguna línea debe superar los 80 caracteres, en caso de necesitar más caracteres se introduce un & y se salta a la siguiente línea. Para insertar comentarios se introduce un c en la primera columna, y si se quiere introducir un comentario en una línea se debe escribir el símbolo: \$.

Una vez elaborado el *input* se debe ejecutar el modelo. La ejecución de las diversas pruebas y variaciones del modelo principal para estudiar la eficiencia de todo el proceso ha sido posible

gracias a los sistemas con múltiples procesadores que dispone el grupo de investigación ISIRYM de la Universidad Politécnica de Valencia. Estos sistemas tienen instalado el código MCNP en el cluster Quasar con 5 nodos. Hay que destacar que se emplean protocolos que permiten funcionar varios procesadores en paralelo, permitiendo disminuir el tiempo de cálculo de una simulación. Esto es una importante ventaja, pues para abordar este análisis de la eficiencia han sido necesario llevar a cabo numerosas ejecuciones.

Por tanto, desarrollado el *input*, se ejecutará a través de la siguiente función:

```
nohup mpirun -np 15 mcnp611_100_000_upv.mpi inp=nombre_input out=nombre_output
```

6.2. DEFINICIÓN DE LA GEOMETRÍA.

La elaboración de la geometría del modelo previamente explicado se abordará a través de la definición de una serie de superficies combinadas entre sí para formar la geometría deseada. La enunciación de las superficies en MCNP6 tiene una estructura previamente fijada en la que se deben introducir los parámetros en función de la superficie a definir. Estos parámetros son tanto coeficientes de ecuaciones analíticas como puntos conocidos.

De manera general las superficies que se definan en MCNP6 serán infinitas, a excepción de las esferas y los toros. La estructura que debe tener la tarjeta de las superficies es la siguiente:

$$J \quad a \quad list$$

Siendo J el número de la superficie, a el tipo de superficie y $list$ los coeficientes a asignar a esa superficie.

Dado que en función del tipo de superficie a definir los coeficientes a asignar varían, se ha extraído del manual de MCNP6 una tabla que resume las tarjetas de superficies que se utilizan en el presente estudio y las entradas a especificar para cada una de ellas.

Nemotécnica	Tipo	Descripción	Entradas
P	Plano	General	A B C D
PX		Perpendicular al plano X	D
PY		Perpendicular al plano Y	D
PZ		Perpendicular al plano Z	D
SO	Esfera	Centrado en el origen	R
S		General	x y z R
SX		Centrado en el eje X	x R
SY		Centrado en el eje Y	y R
SZ		Centrado en el eje Z	z R
C/X	Cilindro	Paralelo al eje X	y z R
C/Y		Paralelo al eje Y	x z R
C/Z		Paralelo al eje Z	x y R
CX		En el eje X	R
CY		En el eje Y	R
CZ		En el eje Z	R

Tabla 4: Tarjetas de superficies en MCNP6.

En resumen, para definir un plano, habrá que introducir primero el número de esa superficie, pues necesario que los números de las superficies definidas no coincidan. Tras esto, especificar el tipo de superficie a través de las nemotécnicas. Por último, las entradas a especificar. Se muestra un ejemplo extraído del código, en el que aparecen planos, cilindros y esferas.

c havar	c escape protones
1 PY -1.201	12 CX 7.5
2 PY 1.201	13 PX -27
3 CY 1.531	14 PX -240
c	15 CX 10.5
c niobio	16 PX -30
4 PY -1.2	17 PX -240
5 PY 1.2	c
6 CY 1.53	c Septum
c	18 PX -240
c cilindro solucion	19 PX -250
7 PY -0.3	20 PY 30
8 PY 0.3	21 PY -30
9 CY 1.03	22 PZ 30
c	23 PZ -30
c esfera	c
10 SO 30	c insulador entrada
protones	
11 SO 33	24 PX 33
c	25 PX 36
26 PY 20	
27 PY -20	
28 PZ 20	

Cuadro 1: Definición de las superficies en MCNP6.

Una vez definidas las superficies que exige el modelo, se procede a relacionarlas unas con otras para formar los volúmenes que hay en la geometría. Estas relaciones se deben llevar a cabo en celdas separadas y mediante operadores boléanos como unión o intersección. En caso de unión, únicamente habrá que introducir el número de las superficies, sin necesidad de caracteres especiales. Mientras que, para el caso de querer reproducir una intersección, se tendrán que relacionar dichas superficies mediante dos puntos ":". La jerarquía que se establece entre estas dos operaciones es primero intersecciones y luego uniones. No obstante, el uso del paréntesis puede resultar útil en algunos casos para aclarar algunas operaciones.

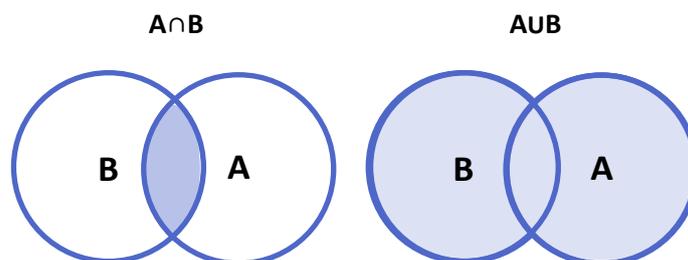


Figura 18: Operadores Boléanos de relación entre superficies. Elaboración propia.

Otra de las operaciones a realizar, para facilitar la tarea de definición de la geometría, es el complemento de otras celdas. De esta forma siempre que se introduzca el símbolo #n quiere decir que se quiere extraer de la celda en cuestión, el volumen definido en la celda n. Se trata de un parámetro útil en muchas ocasiones; no obstante, es conveniente no abusar de él, puesto que puede introducir un importante coste computacional en geometrías complejas.

La asignación de superficies se realiza a través de signos positivos y negativos, indicando el sentido de interés para el volumen que se quiera representar. Será positivo siempre que vaya en la dirección de los ejes principales. Se muestra a continuación un ejemplo de las superficies definidas anteriormente.

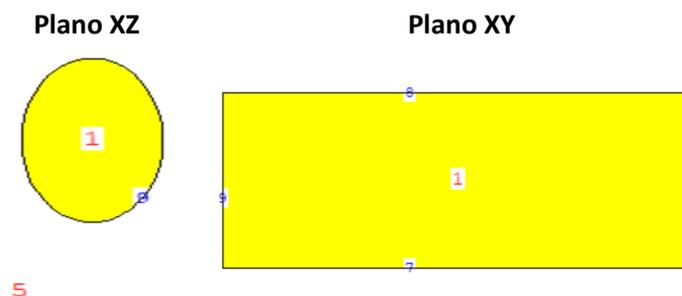


Figura 19: Definición de un cilindro una celda. Elaboración propia.

Este ejemplo consiste en definir un cilindro en la celda 1. Para ello, considerando las direcciones de los ejes XYZ se tiene que la superficie 7 se introducirá con un signo positivo, ya que se quiere coger la zona que está en la dirección del eje Y. Por otro lado, la superficie 8 se escribirá con un signo menos, pues el volumen a registrar va en la dirección contraria al eje Y. En el caso del cilindro, se introducirá su superficie negativa cuando interese el volumen interior y positiva cuando se quiera utilizar el exterior. El resultado final sería que la celda 1 es una intersección entre las superficies 7 -8 -9. Además, siempre habrá que definir el resto del universo, que en este caso viene definido por la celda 5.

Comprendidas las relaciones que se pueden llevar a cabo entre las diferentes superficies definidas, se centra ahora la atención en la estructura que debe tener la tarjeta de una celda para que el código de MCNP6 lo lea correctamente. La forma de la tarjeta de definición de una celda es la siguiente:

$$J \quad m \quad d \quad geom \quad params$$

siendo J el número de la celda que tiene que estar entre los números 1 y 999999, m el número con el que se ha nombrado al material del volumen que se va a definir, d la densidad de la celda, $geom$ el conjunto de superficies y la relación entre ellas y, por último, $params$ que serán el resto de los parámetros que queden por especificar, cuya explicación se realiza más adelante.

Importante incidir en la densidad, cuyas unidades depende de cómo se introduzca el valor. En este caso se representará con un signo negativo delante, lo cual implica que se está introduciendo la densidad másica que es g/cm^3 . En caso contrario, el código lo interpretaría como si se estuviera introduciendo la densidad atómica cuyas unidades son átomos/cm^3 .

Por otro lado, es importante que cada celda sea independiente de las otras y que no existan zonas que coincidan, puesto que los planos son infinitos, en algunas ocasiones esto puede dar lugar a error. Por este motivo, el empleo de la aplicación de visualización resulta de gran ayuda.

Se adjuntan algunas de las celdas definidas en el *input*, a fin de poder observar su estructura con más detenimiento y comprobar las relaciones previamente explicadas. De hecho, el ejemplo mostrado anteriormente corresponde con la celda 1. Además, se añade una imagen de la geometría, que correspondería con las celdas definidas en el extracto anterior.

1 3 -1.1106 -9 7 -8	imp:h=64 imp:n=1 imp:p=1 imp:e=1	\$Cilindro Target liquide
2 1 -8.57 -6 4 -5 #1	imp:h=8 imp:n=1 imp:p=1 imp:e=1	\$Cilindro Ventana Niobium
3 2 -8.3 -3 1 -2 #1 #2	imp:h=2 imp:n=1 imp:p=1 imp:e=1	\$Cilindro Ventana havar
c		
4 0 (-10):(-12 -13 17) #1 #2 #3	imp:h=1 imp:n=1 imp:p=1 imp:e=1	\$Esfera vacio
5 4 -3.1 (-11 10 12):(-15 17 -16) #4 #3 #2 #1 &	imp:h=1 imp:n=1 imp:p=1 imp:e=1	\$Insulator
6 5 -19.3 -18 19 -20 21 -22 23 #1 #2 #3 #4 #5 &	imp:h=1 imp:n=1 imp:p=1 imp:e=1	\$Cemeneterio de partículas
7 4 -3.1 24 -25 -26 27 -28 29 #1 #2 #3 #4 #5 &	imp:h=1 imp:n=1 imp:p=1 imp:e=1	\$Entrada protones

Cuadro 2: Definición de las celdas en MCNP6.



Figura 20: Geometría del modelo. Elaboración propia.

6.3. MATERIALES

La definición de la geometría se finaliza con la definición de los materiales que lo componen. Se añade al final del *input* un conjunto de tarjetas con las características de cada material. Para que el código de MCNP6 pueda leer adecuadamente el material de la tarjeta que los define, debe tener la siguiente estructura:

$$Mm \quad zaid_1 \text{ fraction}_1 \quad zaid_2 \text{ fraction}_2 \dots$$

siendo m el número del material, que será el número a introducir en la celda para definir el material del que está compuesta, $zaid$ es el nombre que se le da a cada uno de los elementos o nucleidos que componen el material y $fraction$ es la cantidad que hay de ese nucleido o elemento, que se puede especificar a partir de la fracción atómica si solo se introduce este valor, o del peso másico en caso de escribir un número negativo. Las concentraciones de cada uno de

los materiales se han extraído de fuentes de datos del NIST y de los artículos mencionados en la bibliografía.

Para definir correctamente el nucleido o elemento a través del *zaid* se debe seguir la siguiente estructura ZZZAAA.abx, siendo ZZZ el número atómico, AAA la masa atómica y abx la referencia de la librería sobre la que se quiere obtener la información para la simulación.

Se ha extraído el material de la solución de agua enriquecida con Oxígeno-18 que será el material bombardeado por protones y partir del cual se formará Flúor-18. A través de este extracto del *input* se puede comprobar la estructura de la tarjeta de los materiales, como se define la tarjeta del material, especificando un número para cada uno de ellos y a continuación, los nucleidos o elementos que lo componen. Destacar las terminaciones de la librería: de manera genérica se han escogido las librerías ENDF que son las utilizadas por defecto. La referencia de estas librerías varía en función de la partícula:

- Protones: .24h
- Neutrones: .80c
- Electrones: .03e
- Fotones: .84p

Pero marcando que la librería escogida para el material ¹⁸O y ⁶⁸Zn es la librería TENDL, cuya referencia es la .00h.

```

c -----
c Agua
c -----
M3 1002 -0.111894 8018 -0.87034388 8016 -0.01776212 &
nlib=.80c hlib=.24h plib=.84p elib=.03e
c -----
c Oxigeno-18
c -----
M831 8018.00h 1
    
```

Cuadro 3: Definición de los materiales en MCNP6.

6.4. FUENTE.

La fuente seleccionada emite protones con una energía de 18 MeV, de acuerdo con las características del ciclotrón seleccionado. La colocación de la fuente se realiza al inicio de la esfera y el haz se propaga en su interior en un medio de vacío.

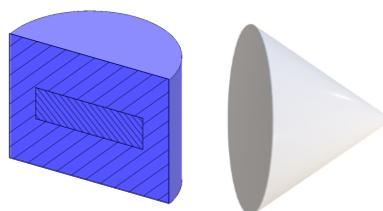


Figura 21: Fuente cónica. Elaboración propia.

Para definir una fuente en MCNP6 se deben definir los siguientes parámetros cuyas tarjetas se detallan. Añadir que existen más tarjetas; no obstante, se han seleccionado las que se exponen a continuación para definir la fuente expuesta.

Variable	Significado
ERG	Energía (MeV)
POS	Punto de referencia de la fuente.
DIR	Dirección del haz.
VEC	Vector de referencia por el que se propagará el haz.
PAR	Tipo de partícula que emite la fuente.
SI	Límites de la fuente.
SP	Probabilidades de la fuente

Tabla 5: Tarjetas a definir en la fuente.

La energía es 18 MeV, energía de aceleración de los protones para el ciclotrón escogido. Su origen es un extremo de la esfera de vacío. Dado que se ha definido el recipiente con el blanco centrado en el origen, el vector sobre el que se propagará es el eje X , y lo hará mediante el vector definido por SI1, que representa los límites de apertura del cono. Se ha obtenido el vector mediante relaciones trigonométricas. Por otro lado, SP1 representa las probabilidades del haz que debe haber en cada región, que se ha considerado cero en la sección que no corresponda con el interior del cono y 1 con el interior del cono. Por último, mediante el par se define el tipo de radiación que emite la fuente. Como se trata de un haz de protones, se introduce la letra H que es la que representa este tipo de partícula.

```

c fuente de protones
c -----
SDEF ERG=18 POS=29 0 0 DIR=d1 VEC=1 0 0 PAR=H
SI1 H -1 0.999996
SP1 D 0 1
    
```

Cuadro 4: Definición de la fuente en MCNP6.

6.5. MÉTODOS DE REDUCCIÓN DE VARIANZA EN MCNP6

La simulación de modelos con datos nucleares puede implicar un amplio coste computacional ya que implica un gran uso de una memoria para almacenar los datos generados y de partida. Por este motivo, se ha desarrollado una serie de tarjetas y técnicas que permiten reducir el coste computacional. El nombre de este método es Técnica de Reducción de Varianza (TRV). Se trata de un método en el que se alteran las probabilidades de las partículas para obtener un mayor número de contribuciones efectivas y reducir así el tiempo de ejecución y el error generado. Mediante este método se consigue centrar la simulación en las historias de las partículas que más interesan. Los métodos empleados en el desarrollo de este trabajo para disminuir el coste computacional son los métodos de corte y los métodos de control de la población.

Los Métodos de Corte son las herramientas básicas para reducir el coste computacional. Consiste en eliminar las partes que no van a afectar al modelo. Existen dos tipos de tarjetas:

- *Energy cutoff*: suprime aquellas partículas que tengan un nivel de energía inferior al marcado.
- *Time cutoff*: deja de registrar las partículas una vez ha pasado un tiempo mayor al marcado en la tarjeta.

Se trata de dos métodos sencillos y fácilmente aplicables, que habitualmente se introducen en prácticamente en todos los *inputs*.

```

c Método de corte
C -----
CUT:H j 0.001
CUT:E j 0.001
CUT:N j 0.001
CUT:P j 0.001
    
```

Cuadro 5: Definición de las tarjetas *cutoff* en MCNP6.

Por otro lado, se tiene el Método de Control de la Población, que multiplica las partículas que se encuentran en el interior de las celdas o rangos energéticos de mayor interés. Esta multiplicación se realiza a través de las importancias, que se introducen al final de la definición de cada celda. De esta forma, según el movimiento de las partículas, cuando vayan a una región de gran interés el número de partículas que pase por ahí aumentará y cuando pasen a continuación por una región de menor interés serán eliminadas.

Para la definición de las importancias se debe especificar el tipo de partícula a la que se le vaya a dar relevancia.

1 3 -1.1106 -9 7 -8	imp:h=256 imp:n=256 imp:p=1 imp:e=1	\$Cilindro Target liquide
2 1 -8.57 -6 4 -5 #1	imp:h=16 imp:n=1 imp:p=1 imp:e=1	\$Cilindro Ventana Niobium
3 2 -8.3 -3 1 -2 #1 #2	imp:h=8 imp:n=1 imp:p=1 imp:e=1	\$Cilindro Ventana havar

Cuadro 6: Definición de las importancias en MCNP6.

6.6. TALLY.

Definidos todos los parámetros que forman el modelo, se continua con aquellas tarjetas mediante las cuales se van a obtener los resultados y analizar el proceso. La forma habitual de extracción de los resultados en MCNP6 es a través de unas tarjetas denominadas *Tallies*. que contabilizan aquello sobre lo que se quiere extraer la información. Se trata de una tarjeta esencial sin la cual no se podría analizar el estudio sobre la producción eficiente de radionucleidos.

El código de MCNP6 ofrece un número limitado de tipos de *Tallies*, pero con la combinación de otras constantes y variables permiten convertir su resultado en una amplia gama de parámetros y resultados de interés.

Cada uno de los *Tallies* definidos en MCNP6 contabiliza una magnitud concreta a través de un espacio. Además, cada uno de ellos puede aplicarse para registrar la variable en función del tipo de partícula o radiación. Se presenta a continuación una tabla resumen con los *Tallies* existentes en MCNP6.

Tally	Descripción	Unidades (Fn)
F1:<pl>	Corriente en una superficie	Partículas
F2:<pl>	Flujo en una superficie	Partículas/cm ²
F4:<pl>	Flujo medio en una celda	Partículas/cm ²
F5:<pl>	Flujo en un punto (Detector puntual)	Partículas/cm ²
F6:<pl>	Energía media depositada en una celda	MeV/g
F7:<pl>	Energía media de fisión depositada en una celda	MeV/g
F8:<pl>	Distribución energética de los pulsos registrados en un detector	Pulsos

Tabla 6: Tipos de *Tallies* en MCNP6.

El *Tally* que se utilizará especialmente en este estudio es el *Tally* F4, ya que mide el flujo de una celda de partículas en una celda, y será, por tanto, el que permita contabilizar el número de reacciones que tienen lugar en el blanco. Pues al introducir al *Tally* F4 la tarjeta FM (Multiplicador del *Tally*) multiplicará el flujo registrado en F4 por la sección eficaz especificada. Por tanto, se tiene que el *Tally* F4 registra el flujo, cuyo cálculo se realiza de la siguiente forma:

$$\phi(\vec{r}, E, t) = vN(\vec{r}, E, t) \quad (8.1)$$

Siendo v la velocidad de desplazamiento de la partícula y $N(\vec{r}, E, t)$ la densidad atómica.

Multiplicando el flujo contabilizado por la sección eficaz, que en el caso de este trabajo será la sección eficaz de producción de los radionucleidos, se obtiene la siguiente expresión, que es la que registrará el número de reacciones por partícula:

$$Q = \int \phi(E)R_m(E)dE \quad (8.2)$$

Siendo Q el número de reacciones que se producirán en el volumen definido, $\phi(E)$ el flujo dependiente de la energía y R_m un operador multiplicativo de respuesta a funciones de las librerías en MCNP6. La función que realizar por este número viene definida por los números de reacciones que pueden tener lugar.

Resulta que para definir este *Tally* habrá que definir tres variables principales, ya que la tarjeta tiene la siguiente forma:

$$FMni \quad (C \quad m \quad R)$$

Donde FM es la tarjeta multiplicadora, n el número de tarjeta, i el *Tally* al que se quiera multiplicar el operador, C una constante definida, m el número del material y R el número de la reacción.

La elección depende de la reacción que se quiera registrar. En el manual hay definidas múltiples reacciones. Para el caso se va a estudiar, la reacción (p,n) está representada por el R=4. Este número se ha obtenido del apéndice G del manual de MCNP6. No obstante, cuando se definen las secciones eficaces mediante Janis, se puede comprobar que la reacción de interés (p,n) viene representada por MT=4. La obtención de este número puede llevar a confusión, ya que en algunas ocasiones el número de la reacción definido por la librería no coincide con el definido para MCNP6, por ello hay que prestar especial atención.

Se destaca el caso de Zinc, donde se desea estudiar también la reacción (p,2n) ya que generará un isótopo del Galio, a fin de minimizar la producción de este isótopo. Se extrae también el número que registre dicha reacción que es R=16. Se puede constatar que también aparecía en las secciones eficaces como MT=16.

Se presenta a continuación la definición de estos dos *Tallies* que registrarán las dos reacciones marcadas y partir de los cuales se evaluará la eficiencia de la producción de los radionucleidos.

c Tally reacciones	
c	-----
F14:H 1	\$ celda 1 protones
FM14 1.538 3037 4	\$ Numero de reaccion (p,n)
F24:H 1	\$ celda 1 protones
FM24 1.538 3037 16	\$ Numero de reaccion (p,2n)

Cuadro 7: Definición del FM4 en MCNP6.

Por otro lado, existe una tarjeta que funciona de manera semejante a los *Tallies* definidos previamente, pero en lugar de dar el resultado para una celda definida previamente, se obtiene los resultados en una malla superpuesta a un volumen definido en la tarjeta. Esta tarjeta se llama FMESH y sus resultados se obtienen en un archivo independiente al *input*, que se llama *meshtal*. Las unidades de sus resultados son por defecto partículas/cm².

Para extraer un FMESH con los resultados que interesan se debe especificar unas tarjetas que fijen el volumen de cual se quiere extraer los datos y como se quieren visualizar. La variación de estas tarjetas junto con el *Tally* FM4 permitirá evaluar todo el proceso de producción de los radionucleidos.

Tarjeta	Significado	Entrada
ORIGIN	Punto más negativo del volumen que se quiere contabilizar.	X Y Z
GEOM	Tipo de geometría del volumen que se quiere evaluar.	CYL (Cilindro) o XYZ (Cartesiana)
IMESH, JMESH, KMESH	Puntos hasta los que llega el volumen a definir.	X, Y, Z
IINTS, JINTS, KINTS	Número de puntos que se quiere que tenga la malla.	N1, N2, N3
OUT	Plano sobre el que se quiere extraer la malla.	IJ,JK, IK
EMESH	Condición para dividir los registros realizados en intervalos energéticos.	0., Emáx.

Tabla 7: Tarjetas de definición del Tally FMESH para MCNP6.

Por ejemplo, para verificar que la energía con la que llegan los protones a la fuente se ha realizado un FMESH que contabilice los protones que llegan a la fuente en función de su energía. Se adjunta el FMESH introducido en el *input* para llevar a cabo este análisis, de forma que se pueda constatar lo explicado anteriormente.

```
c Energía de los protones en la celda 1
FMESH14:h GEOM=xyz ORIGIN= -1 -1 -1 &
IMESH=1 IINTS=10 JMESH=1 JINTS=10 &
KMESH=1 KINTS=10 OUT=JK &
EMESH= 15 16 17 18 19 20
```

Cuadro 8: Definición del FMESH en MCNP6.

6.7. DOSIMETRÍA.

El estudio de la eficiencia del proceso de producción implica conocer también el impacto que el proceso tiene sobre el medio ambiente y los seres humanos. Los materiales radiactivos y las fuentes de radiación generan radiaciones ionizantes que pueden tener efectos adversos en los seres vivos. Por ello, en todo proceso nuclear se debe garantizar la seguridad y minimizar el impacto que pueda tener en el entorno.

Como parte del estudio de la eficiencia del proceso de producción es fundamental estudiar la seguridad. Se realizará mediante un control sobre la dosis. La radiación ionizante que libera cualquier material, proceso o fuente radiactiva, deposita una energía sobre los materiales irradiados que será contabilizada a través de la dosis de radiación. La unidad que se empleará para medir la dosis recibe el nombre de Sievert (Sv). Esta unidad recoge también la medida de los efectos que puede producir la radiación sobre la salud, a niveles bajos (Dosis equivalente, H). Es especialmente útil en la elaboración de estudios dosimétricos, ya que representa el riesgo estocástico que la radiación puede provocar en la salud.

En el proceso que se va a realizar están involucrados diferentes tipos de radiación: protones, neutrones, rayos gamma y electrones. Esta radiación puede formar parte del proceso primario

que se realiza para producir los radionucleidos u originarse de forma secundaria, mediante reacciones desencadenadas por el bombardeo de protones.

Por tanto, se multiplicará la dosis absorbida por unos factores de ponderación adimensionales (w_R) en función de la radiación, para conocer la dosis equivalente que proporciona información sobre el efecto de la radiación.

Tipo de radiación	w_R
Fotones	1
Electrones y muones	1
Neutrones (0-20MeV)	5-20
Protones (>2MeV)	5

Tabla 8: Factores de ponderación de la radiación w_R .

Para conocer la dosis se deberá realizar un registro de partículas mediante un *Tally*, del mismo modo que se realizaba para conocer las reacciones que se estaban produciendo. Concretamente, se va a introducir en el input un FMESH para cada tipo de radiación. Se escoge este *Tally* porque es el más adecuado para obtener una representación en 3D, ya que permite definir los planos en los tres ejes sobre los que se quiere obtener un registro y el nivel de definición. Respecto al tipo de *Tally* se escoge el 4, que recogerá la cantidad de flujo de partículas en el volumen especificado.

En este caso, el volumen a especificar será el volumen de aire que hay en el exterior de las paredes de hormigón del bunker, pues se quiere conocer si la radiación la atraviesa, para analizar la seguridad del proceso. Por tanto, se van a introducir 4 *Tallies*, uno para cada tipo de radiación. Se especifica en el FMESH el punto más negativo y el punto hasta el que se quiere contabilizar en cada eje, mediante ORIGIN y IMESH, JMESH y KMESH. El número de divisiones en las que se quiere representar los resultados se define mediante IINTS, JINTS y KINTS y el plano a través del cual se va a realizar los cortes para representar la matriz se especifica mediante OUT.

```
FMESH44:H GEOM=xyz ORIGIN= -600 -450 -600
IMESH=-500 IINTS=5
JMESH=450 JINTS=9
KMESH=600 KINTS=12
OUT=JK
```

Cuadro 9: Definición del FMESH para protección radiológica en MCNP6.

Definido el volumen sobre el que se va a registrar la dosis, se definen los parámetros necesarios para que los valores de salida del *Tally* representen realmente la dosis. En función de cada tipo de radiación, se emplearán unos coeficientes. Para los fotones se deben obtener del NIST los coeficientes de atenuación. La definición de estos en el *input* se realiza a través de dos variables, DEn4 y DFn4, energía y coeficiente de atenuación para esa energía.

Air, Dry (Near Sea Level)
ASCII format

Energy (MeV)	μ/ρ (cm ² /g)	μ_{en}/ρ (cm ² /g)
1.00000E-03	3.606E+03	3.599E+03
1.50000E-03	1.191E+03	1.188E+03
2.00000E-03	5.279E+02	5.262E+02
3.00000E-03	1.625E+02	1.614E+02
3.20290E-03	1.340E+02	1.330E+02
18 K 3.20290E-03	1.485E+02	1.460E+02
4.00000E-03	7.788E+01	7.636E+01
5.00000E-03	4.027E+01	3.931E+01
6.00000E-03	2.341E+01	2.270E+01
8.00000E-03	9.921E+00	9.446E+00

Figura 22: Coeficientes de atenuación para fotones. Obtenido de: NIST base de datos de referencia 2016.

Para electrones y protones se obtienen los poderes de frenado, también del NIST, especificando el material en el que se propagará la radiación.

Figura 23: Poderes de frenado para protones. Obtenido de: NIST base de datos de referencia 2016.

Para los neutrones es algo más complejo. Primero hay que conocer la energía de los neutrones, antes de estudiar la dosis. Por tanto, se realiza un FMESH4 para conocer la distribución energética de los neutrones. Tras realizar esto fuera de las paredes del bunker, no se han detectado neutrones, así que se realiza también un FMESH4 en el interior de la habitación. La ejecución de este FMESH se realiza para el input con solución para la producción de Flúor-18 y Galio-68.

```

c neutrones
FMESH24:n GEOM=xyz  ORIGIN= -600 -450 -600 &
IMESH=-500 IINTS=5 JMESH=450 JINTS=9 &
KMESH=600 KINTS=12 OUT=JK &
EMESH= 1 5 10 15 20 25
c
FMESH34:n GEOM=xyz  ORIGIN= -300 -100 -600 &
IMESH=-200 IINTS=5 JMESH=100 JINTS=9 &
KMESH=600 KINTS=12 OUT=JK &
EMESH= 5 9 10 15 20 25
    
```

Cuadro 10: Definición del FMESH para la distribución energética de neutrones.

Aunque en el exterior del bunker no se detectan neutrones de ninguna energía, en el interior del bunker sí que aparecen neutrones. Se representa a continuación la suma de todos los neutrones registrados para todas las energías en el plano X que va de -220 a -200, atravesando el tubo de escape de las partículas. A modo de prueba se hizo una simulación en la que la planta del bunker se discretizó en pocos intervalos.

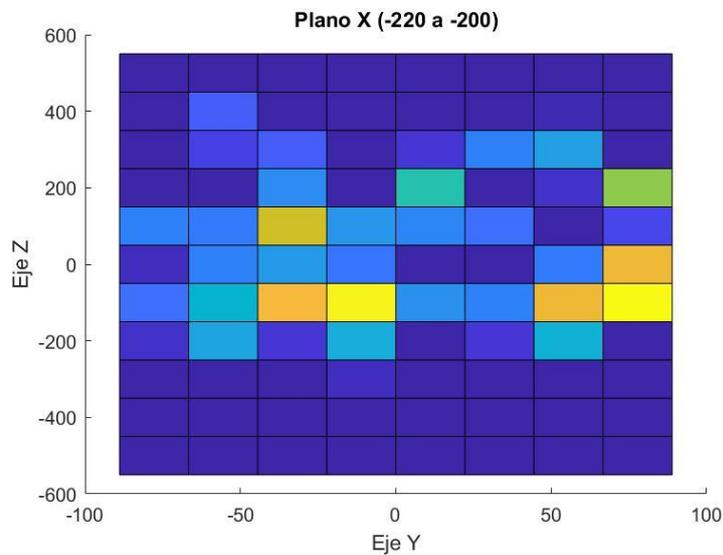


Figura 24: Registro de neutrones en el interior de la habitación. Elaboración propia.

Respecto a los intervalos de energía registrados se obtiene que del intervalo energético 10-25 MeV no se ha obtenido ningún registro de neutrones. Los neutrones emitidos en el interior de la habitación que han escapado del aislante que rodea la esfera y el cilindro, tienen una energía de entre 0-10 MeV. Por este motivo, se escogerán los factores de ponderación para los rangos energéticos de entre 0-5 y 5-10 MeV.

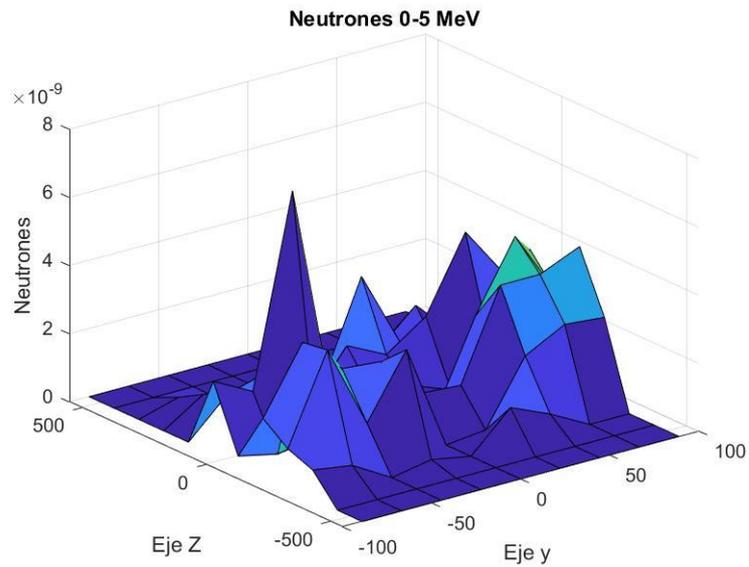


Figura 25: Distribución energética de los neutrones en el interior de la habitación para las energías entre 0-5 MeV en la producción de Flúor 18. Elaboración propia.

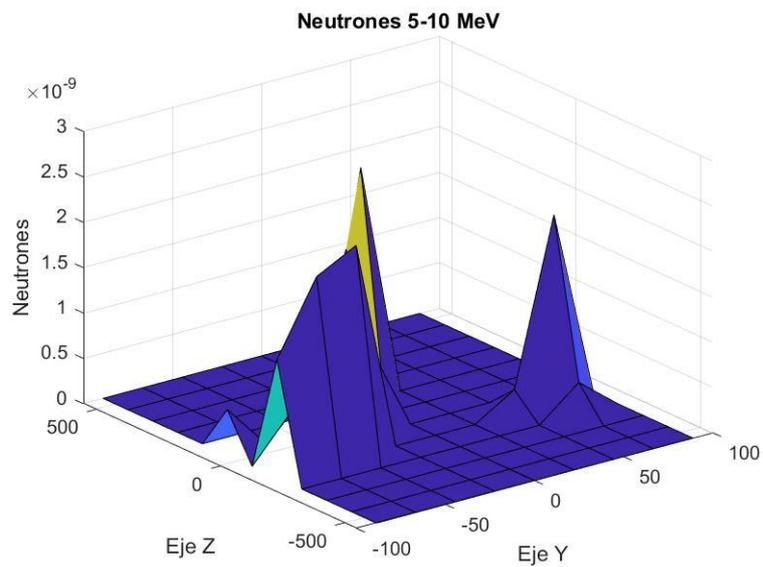


Figura 26: Distribución energética de los neutrones en el interior de la habitación para las energías entre 5-10 MeV en la producción de Flúor 18. Elaboración propia.

La diferencia de este FMESH4 con respecto a los anteriores consiste en la tarjeta EMESH que se ha añadido para que produzca los resultados en función de los intervalos energéticos dados. De esta forma se puede observar entre que rango de energía se pueden encontrar la mayor parte de los neutrones.

De manera general, el *Tally 4*, como se ha visto anteriormente, ofrece el resultado en partículas/cm²s. Por este motivo, para conocer la dosis una vez se introducidos los coeficientes para cada tipo de partícula, habrá que realizar una conversión que se expone a continuación. Inicialmente, a través de los coeficientes se obtienen los valores en las siguientes unidades:

$$\frac{\text{Partículas}}{\text{cm}^2 \cdot \text{s}} \frac{\text{MeV} \cdot \text{cm}^2}{\text{g}} = \frac{\text{MeV}}{\text{g} \cdot \text{s}} \cdot \text{partículas} \quad (8.3)$$

Para obtener el resultado en unidades de dosis se realizará una conversión de unidades:

$$\frac{\text{MeV}}{\text{g} \cdot \text{s}} (\text{part.}) \cdot 1.60218 \cdot 10^{-13} \frac{\text{J}}{\text{MeV}} 1000 \frac{\text{g}}{\text{kg}} = \frac{\text{J}}{\text{kg} \cdot \text{s}} (\text{part.}) = \frac{\text{Gy}}{\text{s}} (\text{part.}) \quad (8.4)$$

Una vez se ha realizado esta conversión, se multiplicarán los resultados por los factores de ponderación en función del tipo de radiación, para convertir los Gy en Sv. De esta forma los datos que se extraigan estarán en valores que puedan ser evaluados directamente.

CAPÍTULO 7. ANÁLISIS DE RESULTADOS

En los siguientes puntos se describe los resultados obtenidos mediante la simulación con MCNP6 descrita en el apartado anterior. Este capítulo consta de dos partes fundamentales:

- Análisis de la energía necesaria para la producción de los radionucleidos.
- Evaluación de la dosis en el exterior del bunker.

7.1. DISTRIBUCIÓN ENERGÉTICA.

El ciclotrón empleado bombardea los protones a una energía de 18 MeV, que es la energía habitual en la que se trabaja. Mediante el siguiente apartado se pretende evaluar que el rango adecuado para obtener el máximo rendimiento se encuentra alrededor de esa energía.

La elección de la energía a la que se va a decidir trabajar debe tener en cuenta siempre la radiación que se puede recibir en el ambiente y los materiales de la instalación, debido a que en algunas ocasiones se deberán manipular. Por este motivo, dentro de unos rendimientos adecuados será siempre más conveniente bombardear los protones con la menor energía posible.

De acuerdo con el modelo teórico planteado en los apartados anteriores, de manera general cuanto mayor sea la corriente y la energía del haz de protones mayor será la producción de los radionucleidos. No obstante, trabajar a altas energías para la producción del Galio-68 implica un progresivo aumento de la producción de Galio-67, con lo cual en lo referente a este radionucleido será conveniente trabajar a la menor energía posible.

Para la evaluación de la distribución energética se han generado 25 *inputs* para cada radionucleido, en los que se ha variado la energía de la fuente, comenzando con una energía de 5 MeV y finalizando con una energía de 30 MeV.

Mediante la simulación en MCNP6 se ha obtenido como resultado el número de cuentas relativas que se producirán para cada una de las soluciones. Este número se extrae del *output*, el archivo de salida. De este modo se ha generado un total de 50 archivos de salida. Se introduce un extracto de uno de los *outputs*. Mediante este *output* se pretende mostrar el *Tally* que está registrando las reacciones producidas y como se recoge su valor.

Además, incidir en el importante coste computacional de la simulación de cada uno de estos archivos. El tiempo de computación indicado en el *output* equivaldría al tiempo, en caso de tener un único procesador. Gracias al empleo del sistema de simulación del departamento en cada simulación han intervenido de 10-15 procesadores, según el número indicado en la función de simulación de MCNP6. Por tanto, el tiempo de simulación de cada *input* es de alrededor de 1 hora.

Obsérvese también que el error tiene un valor pequeño y demuestra que puede considerarse el resultado como válido. El error presentado corresponde con un error menor del 1%, que es considerado válido, pues se aceptan errores hasta el 5%. No obstante, en caso de querer obtener resultados con menores errores únicamente habría que simular para un número de partículas mayor (nps).

```

Tally 14
nps      mean  error  vov  slope  fom
1000000  6.3294E-04 0.0084 0.0002 10.0  165
2000000  6.3162E-04 0.0073 0.0001 10.0  163
3000000  6.3160E-04 0.0065 0.0001 10.0  160
4000000  6.3319E-04 0.0059 0.0001 10.0  160
5000000  6.3471E-04 0.0055 0.0000 10.0  160
6000000  6.3464E-04 0.0052 0.0000 10.0  161
7000000  6.3478E-04 0.0049 0.0000 10.0  161
8000000  6.3383E-04 0.0046 0.0000 10.0  162
9000000  6.3519E-04 0.0039 0.0000 10.0  161
10000000 6.3713E-04 0.0025 0.0000 10.0  162
*****

dump no. 11 on file runtpe  nps = 10000000  coll = 1062651498  ctm = 292.41
nrn = 17874801939

Tally data written to file mctal

40 warning messages so far.

run terminated when 10000000 particle histories were done.

computer time = 479.72 minutes
    
```

Cuadro 11: Output del Tally FM4 en MCNP6.

Por tanto, se extrae el *Tally* de cada uno de los *outputs* y se representa el resultado gráficamente, para poder observar la curva de la producción de los radionucleidos en función de la energía de bombardeo de los protones.

Habitualmente, el resultado obtenido de MCNP6 se debe tratar, pues el resultado es para la simulación de una partícula. En este caso, para conocer el número de átomos que se han producido habría que llevar a cabo una serie de conversiones que dependerían de diferentes variables. En primer lugar, se debe analizar lo que se obtiene del *Tally* que tiene las siguientes unidades:

$$FM4 = \left(\frac{g}{cm^3}\right) \cdot \left(\frac{\#}{cm^2 \cdot s}\right) \cdot (barn) \tag{9.1}$$

Tras esto, se realizaría la conversión para obtener las partículas en función del tiempo y el volumen $\left(\frac{\#}{cm^3 \cdot s}\right)$:

$$FM4 = \left(\frac{g}{cm^3}\right) \cdot \left(\frac{\#}{cm^2 \cdot s}\right) \cdot (barn) \cdot \left(\frac{10^{-24} (cm^2)}{(barn)}\right) \cdot \left(\frac{\%m\acute{a}sico \cdot NA \left(\frac{\#}{mol}\right)}{Mm \left(\frac{g}{mol}\right)}\right) \cdot V(cm^3) = \left(\frac{\#}{s}\right) \tag{9.2}$$

A continuación, habría que multiplicar por el haz de protones que bombardearán el blanco, ya que como se ha comentado, el resultado viene dado para lo que equivaldría el bombardeo de una única partícula. Este valor se obtiene a partir de la corriente del haz y la carga del protón, mediante la siguiente expresión:

$$I = Q/t \tag{9.3}$$

Siendo *I* la intensidad de la corriente, *Q* la carga eléctrica total, que en este caso sería constante, la del protón ($Q = 1.6 \cdot 10^{-19}C$) y $1/t$ las desintegraciones por segundo que se darían.

Por tanto, habría que multiplicar el valor del *Tally* obtenido al realizar la conversión anterior por $1/t$, cuyo valor variará en función de la intensidad con la que se bombardee el haz.

Esta conversión no se ha llevado a cabo, pues la curva que se obtendría para cada radionucleido sería proporcional a la representación de la solución directa del *Tally*. En consecuencia, es adecuado evaluar la distribución energética mediante la solución relativa.

Se representa a continuación la producción de Flúor-18 en función de la energía.

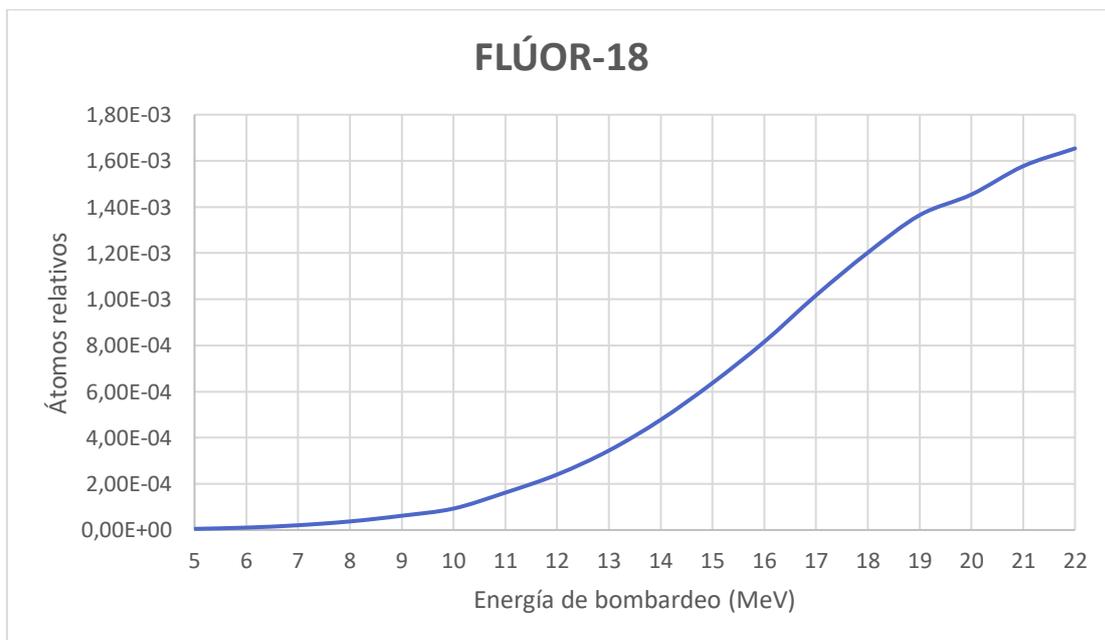


Figura 27: Producción relativa de Flúor-18. Elaboración propia.

Mediante la representación de los átomos relativos producidos en la solución se puede observar claramente como un aumento de la energía de bombardeo produce un aumento en el número

de reacciones producidas. No obstante, a partir de una energía de 20 MeV el aumento no es tan marcado y el proceso de producción no mejorará considerablemente, teniendo en cuenta que el bombardeo a una energía superior implicaría la emisión de una mayor dosis en los materiales de la instalación y en el ambiente.

El proceso de producción de ^{18}F se realiza de manera habitual, según la guía de producción de este radionucleido de la IAEA (*"Cyclotron Produced Radionuclides: Guidance on Facility Design and Production of [^{18}F] Fluorodeoxyglucose (FDG)"*) bajo las siguientes condiciones:

- Haz de protones entre 8-19 MeV
- Flujo de la corriente entre 20-100 μA
- Tiempo de irradiación entre 30 min. y 3 h.

Por tanto, la simulación con una energía de 18 MeV podría decirse que es adecuada, ya que se consigue maximizar la producción del radionucleido de interés a través de una energía mínima, permitiendo reducir al máximo la dosis que pueda ser recibida por los materiales en la instalación.

Analizada la producción de Flúor-18, se procede a representar los átomos relativos de producción de Galio-68.

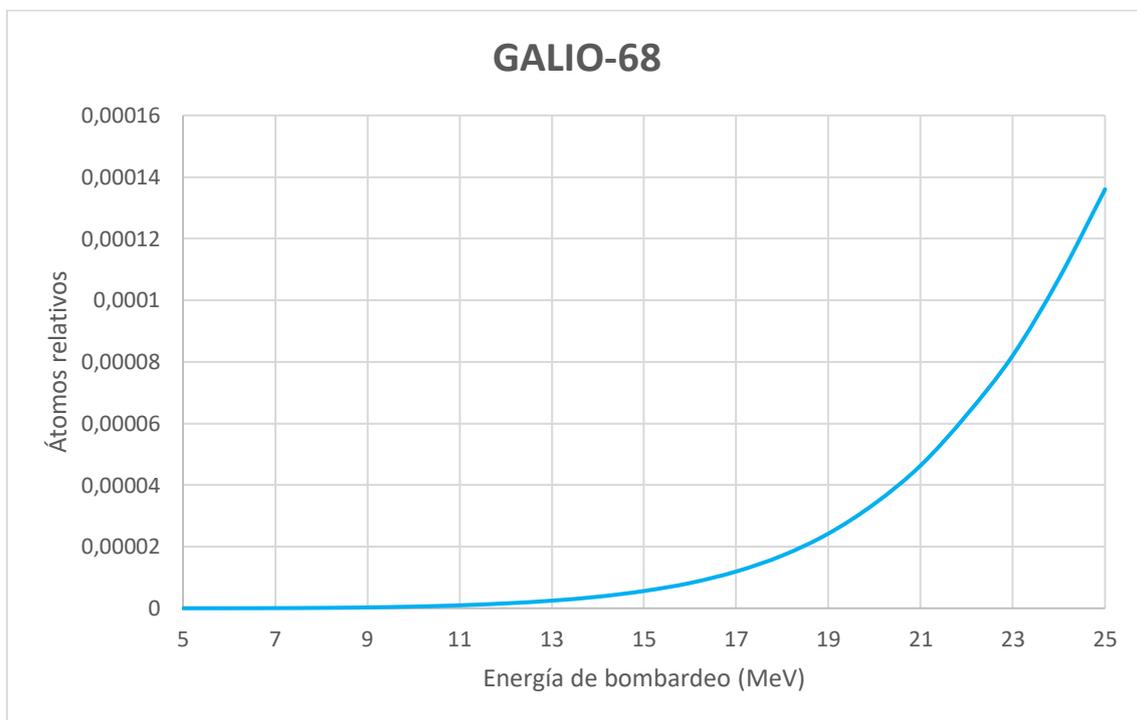


Figura 28: Producción relativa de Galio-68. Elaboración propia.

En este caso, se observa un claro aumento en la producción de Galio-68 a medida que se incrementa la energía de bombardeo del haz de protones. Sin embargo, en este caso, como se vió al analizar las secciones eficaces y las reacciones que tienen lugar al bombardear Zinc-68 con protones, al aumentar la energía de bombardeo de los protones se incrementa también la producción de Galio-67.

Dado el bajo volumen del modelo, no se ha detectado para estos casos la reacción de Galio-67. No obstante, se ha producido un modelo más simple, para comprobar que si se detecta está reacción, con un volumen superior de Zinc-67. La producción de ⁶⁷Ga es muy baja en comparación con la de su isótopo, pero la pureza isotópica es una característica esencial en la producción de los radionucleidos. Por este motivo, en el caso de la producción de Galio habrá que minimizar la producción de Galio-67. La producción de este isótopo, como se puede observar en la representación de las secciones eficaces, aumenta a medida que se incrementa la energía de los protones bombardeados.

En resumen, para el caso del Galio existen dos limitantes a la hora de escoger la energía con la que bombardear:

- Producción de Galio-67
- Dosis generada

Ambos limitantes implican la necesidad de trabajar a energías inferiores a 20 MeV, confirmando así la energía de bombardeo de protones en 18 MeV como adecuada, pues permite trabajar a un rendimiento adecuado para una producción mínima de Galio-67 y una emisión también mínima de dosis.

En estudios más enfocados a reducir la producción de Galio-67 se puede llegar a evaluar la variación del espesor del recipiente a fin de disminuir la energía de impacto de los protones mediante su aumento.

Una vez analizados ambos radionucleidos, se va a comparar la solución relativa de ambos. Antes de analizar los resultados, se fija la atención en la concentración de las soluciones para la producción de ambos radionucleidos.

La solución para la producción de Galio-68 tiene una baja concentración de Zinc-68, productor del radionucleido. Esto se debe a que es una disolución de ácido nítrico en agua, que tiene nitruro de Zinc.

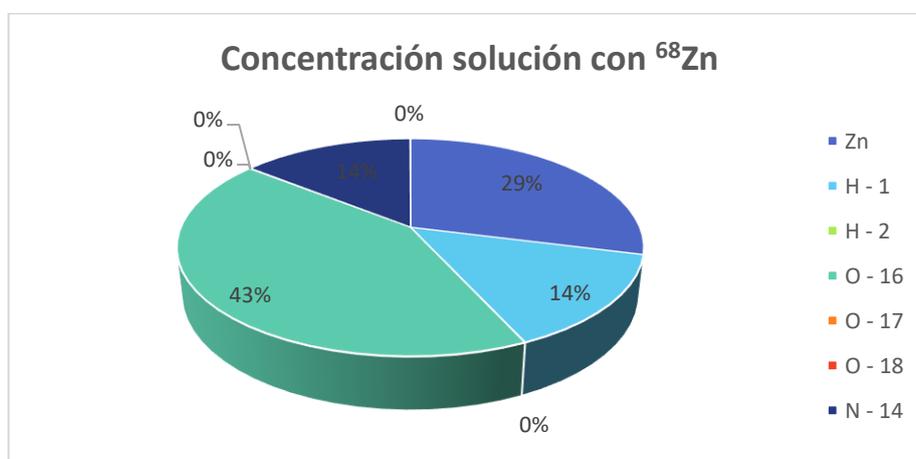


Figura 29: Concentración de la solución productora de Galio-68. Elaboración propia.

Por otro lado, la solución empleada para la producción de Flúor-18 es una solución de agua enriquecido en >95% con Oxígeno-18.



Figura 30: Concentración de la solución productora de Flúor-18. Elaboración propia.

Por este motivo, se contabilizará un mayor número de átomos producidos de Flúor que de Galio para el mismo volumen, pues la concentración inicial de los isótopos productores de ambos radionucleidos es muy diferente, siendo la del Oxígeno mucho mayor que la del Zinc.

Se representan de manera conjunta las curvas de producción de ambos radionucleidos.

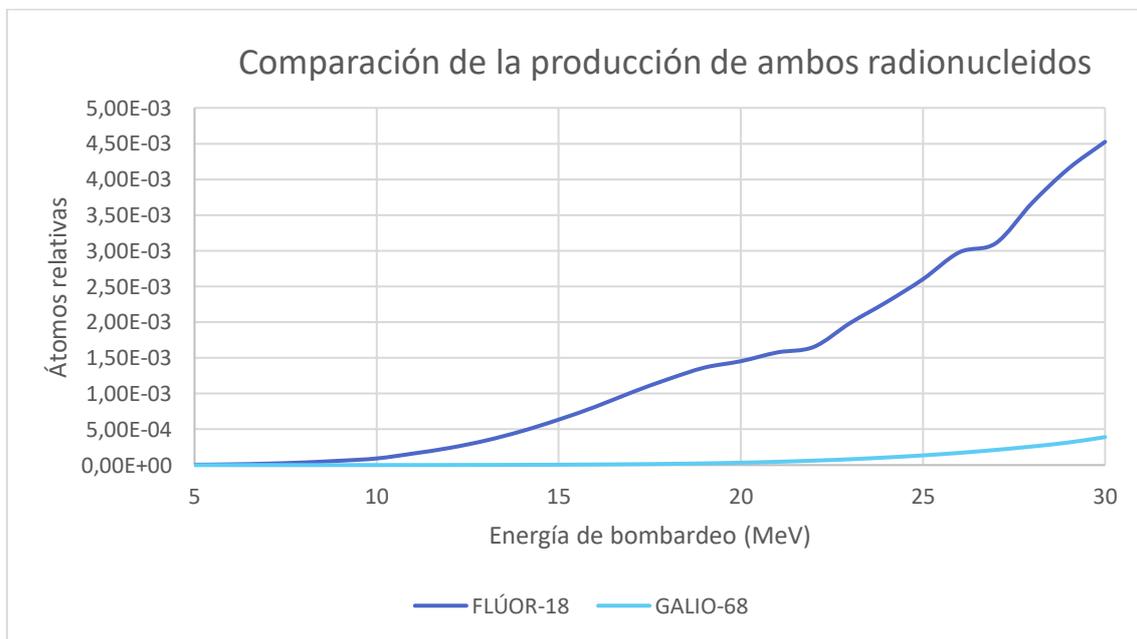


Figura 31: Comparación unitaria entre la producción de ambos radionucleidos. Elaboración propia.

Mediante esta gráfica se puede observar la gran diferencia de producción de ambos radionucleidos, para las mismas condiciones de volumen y energía. Siendo más efectivo la producción de Flúor 18.

Para poder comparar la producción de ambos radionucleidos en función de la energía, sin tener en cuenta las concentraciones de sus átomos originales, se ha representado la curva unitaria de la solución relativa de ambos radionucleidos.

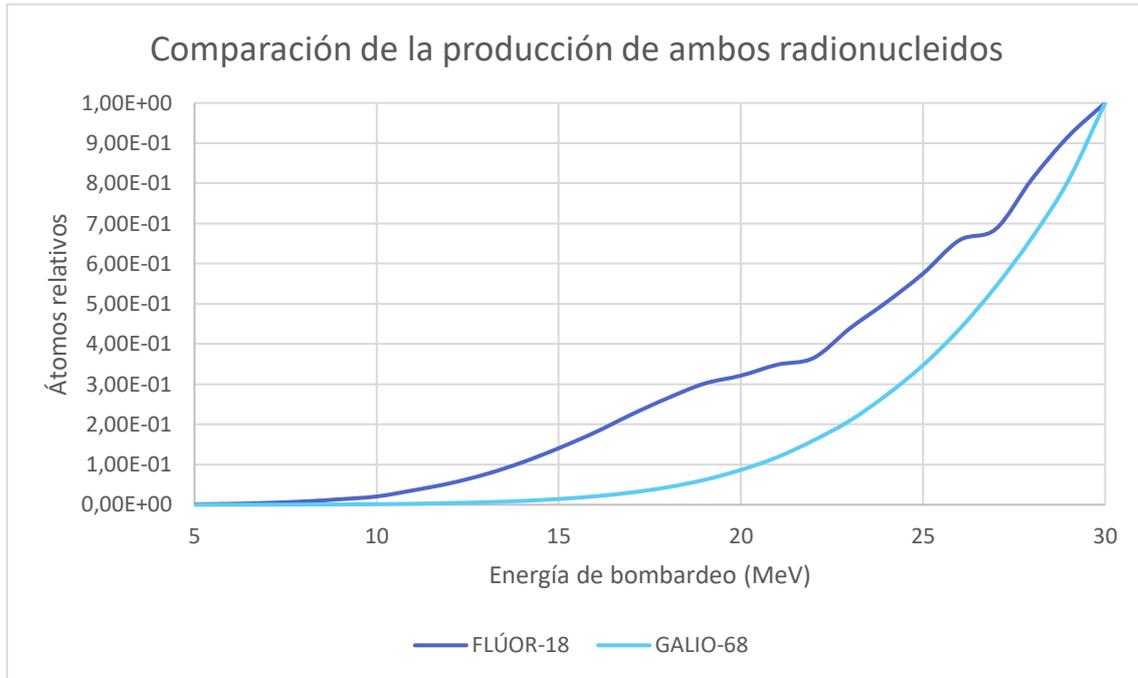


Figura 32: Comparación unitaria entre la producción de ambos radionucleidos. Elaboración propia.

Mediante la representación gráfica, se observa como la producción del Galio en función de la energía crece más exponencialmente que la producción de Flúor. Por lo que, se podría pensar que es más conveniente trabajar a energías elevadas para la producción de este radionucleido. Sin embargo, se debe tener siempre presente la necesidad de garantizar la pureza isotópica. Remarcando en este caso el periodo de semidesintegración del ^{67}Ga que es de 77.8 horas, mientras que el ^{68}Ga es de 67,8 min, notablemente inferior. Por ello, la introducción en el paciente de una concentración de este isótopo puede aumentar la dosis a la que estará expuesto.

Además, se destaca como el incremento de la producción de flúor no aumenta de manera tan exponencial, y se confirma que la producción a una energía de 18 MeV es adecuada, ya que permite mantener una dosis asumible con un buen rendimiento.

7.2. EVALUACIÓN DE LA DOSIS.

La evaluación de la dosis producida por el proceso de producción de los radionucleidos a través de un ciclotrón se ha evaluado mediante una simulación del modelo en el que se ha registrado el número de protones, neutrones, electrones y fotones generados y su distribución. Este registro de radiación y partículas se ha convertido a Gy/s a través de los factores de conversión de lujo a dosis (poderes de frenado para electrones y protones, y coeficientes de atenuación para fotones...) introducidos en el *Tally*.

Por tanto, se extraen los resultados del archivo de salida: *Meshtal*, que es un archivo en el que se recoge el registro especificado en función de la localización geométrica. Su estructura está formada por un conjunto de matrices con los valores de la dosis en cada posición del bunker. Antes de su representación habrá que multiplicar por los factores de ponderación de cada tipo de partícula y radiación para convertirlo a dosis (Sievert) y poder evaluar el modelo en lo referente a protección radiológica.

Para la representación de estos valores se dividirá el siguiente apartado en los cuatro tipos de radiación estudiados: neutrones, protones, electrones y fotones. De esta forma, se obtendrá un resultado aislado de la dosis generada por cada uno. A modo de conclusión, se sumarán los resultados obtenidos para conocer la dosis total generada por el proceso de producción de los radionucleidos.

Se van a representar de nuevo los resultados para una intensidad de corriente máxima (80 μ A) para garantizar que el bunker propuesto funciona de manera adecuada para las condiciones de máxima exigencia. Para ello, se multiplica los resultados por el número de protones del haz, obtenido a partir de la ecuación 9.3.

Otro detalle de gran importancia es que la simulación se ha realizado para un número elevado de partículas, con un alto coste computacional a fin de obtener un error bajo. De este modo, se han obtenido de manera general errores inferiores al 5%.

Hay que comentar antes que las concentraciones de materiales escogidas se han llevado a cabo, para aquellos momentos en los que la producción de esa partícula sea máxima. Es decir, para el caso de los neutrones se ha realizado el registro para el momento en el que la concentración del productor de los radionucleidos es máxima, que es la situación en la que más reacciones (p,n) se darán y por tanto, más neutrones se generarán. Por otro lado, los protones se han simulado para una situación final, en la que ya se ha alcanzado un equilibrio y se ha producido la cantidad máxima del radionucleido. Este valor suele estar alrededor del 95%.

El FMESH recoge el conjunto del modelo incluyendo el volumen de aire definido en el exterior de las paredes de hormigón. La definición de este volumen es de gran importancia, ya que ahora permitirá estudiar si puede llegar a liberarse dosis al exterior del bunker. Por ello, la cantidad de resultados generados en el archivo *Meshtal* es elevada. Con el fin de facilitar la compresión y representar unos valores significativos se ha escogido un rango del eje Y sobre el que representar los resultados en planos XZ. El rango de Y seleccionado ha sido -10 – 0 cm, pues recoge el interior de la esfera en la que se producirán las reacciones y, por tanto, la dosis será mayor.

7.2.1. Protección radiactiva en la producción de Flúor-18

Se comienza el análisis de protección radiológica de una instalación para la producción de Flúor-18 con ciclotrón a través del estudio de la dosis generada por las partículas: protones, neutrones y fotones.

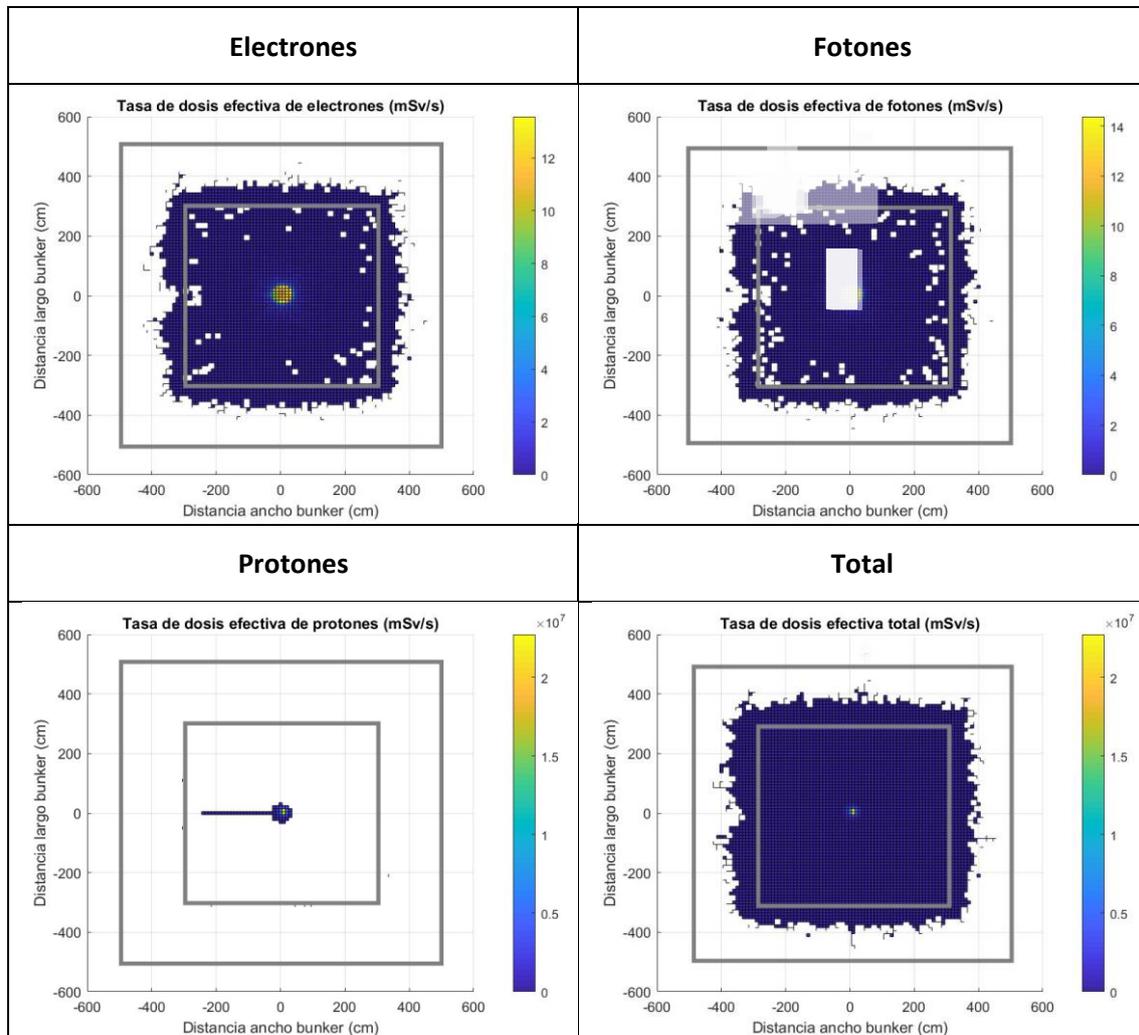


Figura 33: Distribución de la tasa de dosis efectiva generada en la producción de ¹⁸F. Elaboración propia.

Las figuras representadas son un plano XZ de la instalación del ciclotrón, en la que los límites dibujados simbolizan las paredes de hormigón, que tienen un espesor de 2 m. Se puede comprobar como durante el proceso de producción de Flúor-18, no se libera dosis al medio ambiente. Por tanto, la construcción de un bunker de 200 cm es suficiente para aislar una instalación de este tipo.

Especial atención a la dispersión de los protones, ya que es muy diferente al del resto de radiación analizada. Esto se debe a que cuando más pesada es la partícula, menos favorable será su dispersión. Los protones son el tipo de radiación analizada más pesada, por ello no se observa dosis producida por los protones en el exterior de la esfera y el cilindro definidos con aislante en su exterior y conectados con el cementerio de protones. Por tanto, se puede afirmar que de

manera general, los protones bombardeados que no produzcan reacciones o que sean producidos por reacciones secundarias, no escapan del volumen definido.

No obstante, aunque parezca la tasa de dosis muy cercana a cero en el interior del bunker, dada la alta diferencia entre los valores en los extremos con el lugar de bombardeo de protones, se trata de una elevada tasa. Se toma como ejemplo la tasa de dosis de fotones recogida en el punto: (300,350) que tiene un valor de 1.6 mSv/h.

Si se tiene en cuenta que, para personal no expuesto, la dosis máxima permitida anualmente es 1 mSv/año, si se está en el interior del bunker, en un punto alejado de la irradiación, en un tiempo de aproximadamente media hora (37.4min.) se alcanzaría el límite máximo permitido. Se incide que, para este caso se ha considerado únicamente la dosis efectiva producida por los fotones. Por lo que la dosis total sería mucho mayor y superaría el límite máximo permitido en un periodo de tiempo más breve.

Tras esto, se realiza un análisis del flujo neutrónico.

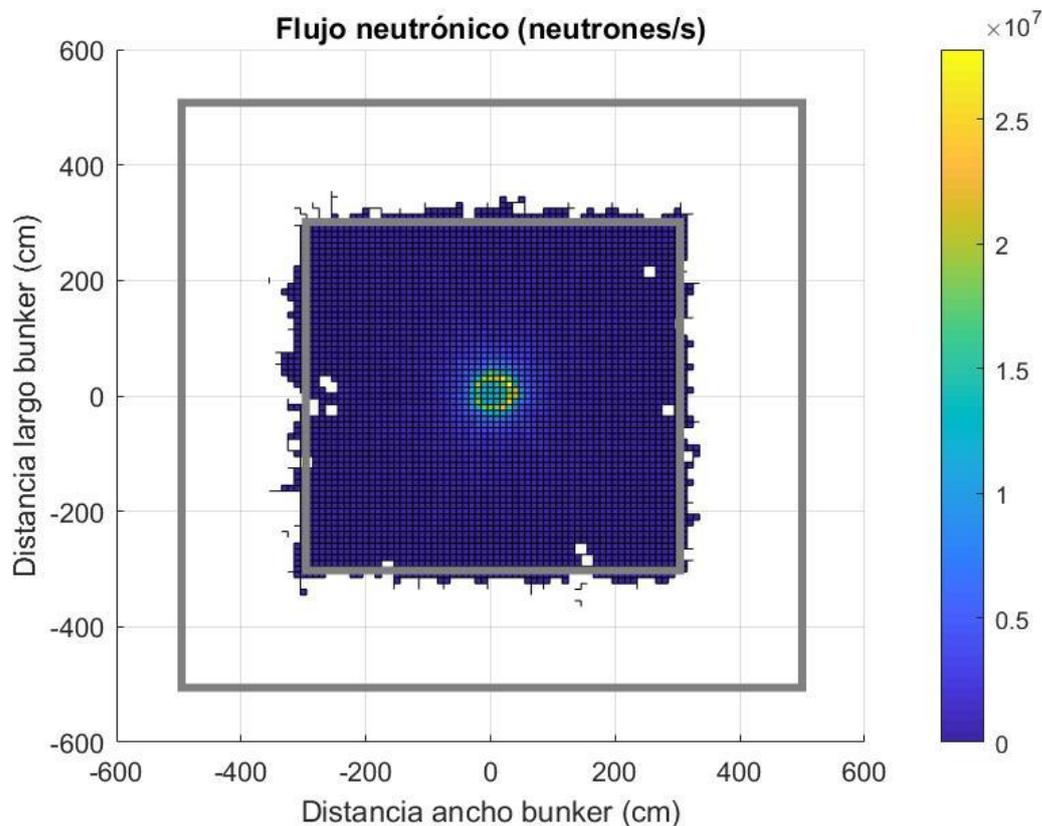


Figura 34: Fluencia de neutrones en la producción de ^{18}F . Elaboración propia.

Se puede observar cómo los neutrones generados en la producción quedan en el interior de las paredes del hormigón y no escapa ninguno.

Por este motivo, se puede afirmar que la construcción de unas paredes de hormigón de 2 metros para la elaboración de un bunker para producción de Flúor-18 son efectivas. Por tanto, permiten la realización del proceso de producción de manera segura.

7.2.2. Protección radiactiva en la producción de Galio-68

Se realiza el mismo proceso de análisis de protección radiológica de la producción de Galio-68.

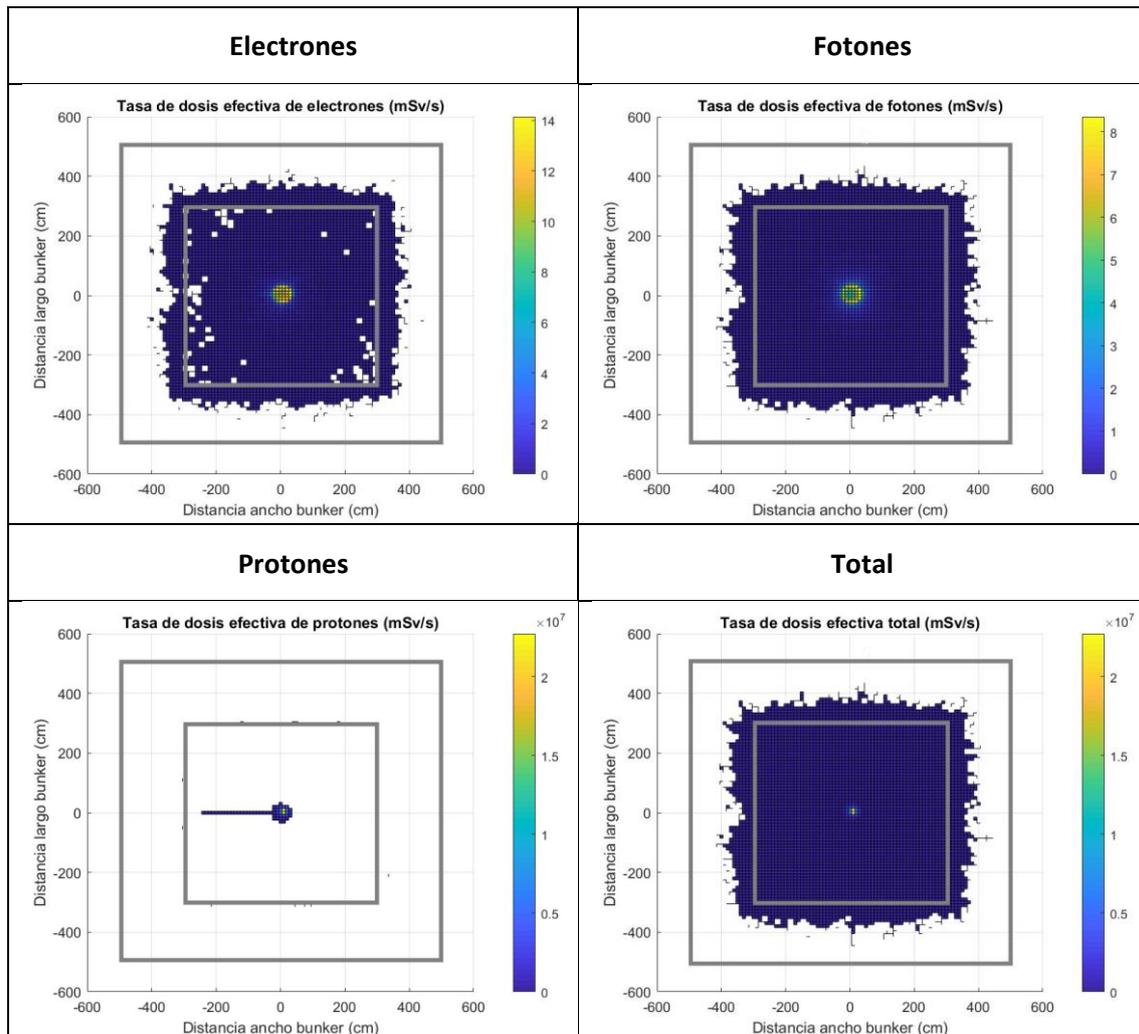


Figura 35: Distribución de la tasa de dosis efectiva generada en la producción de ⁶⁸Ga. Elaboración propia.

Se puede comprobar como la tasa de dosis efectiva resultante del proceso de producción de Galio-68 es semejante a la producción de Flúor-18. Los protones se concentran en el interior de la esfera, donde son bombardeados y el cementerio de protones, situado al externo del conducto que conecta con la esfera, junto con el aislante que rodea esfera y cilindro, impide que se dispersen y escapen al interior del bunker.

Incidir en el elevado valor de la tasa de dosis en el interior del bunker que ha sido frenado.

Se analiza a continuación el flujo neutrónico producido en el proceso de obtención de Galio.

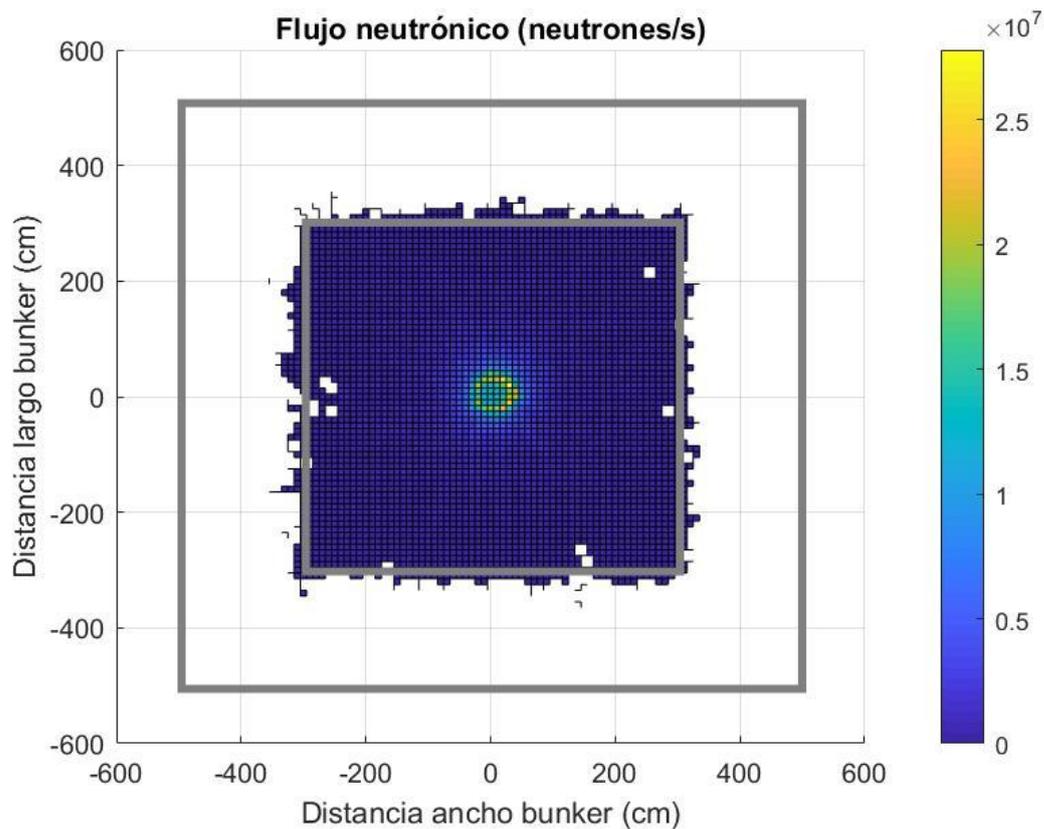


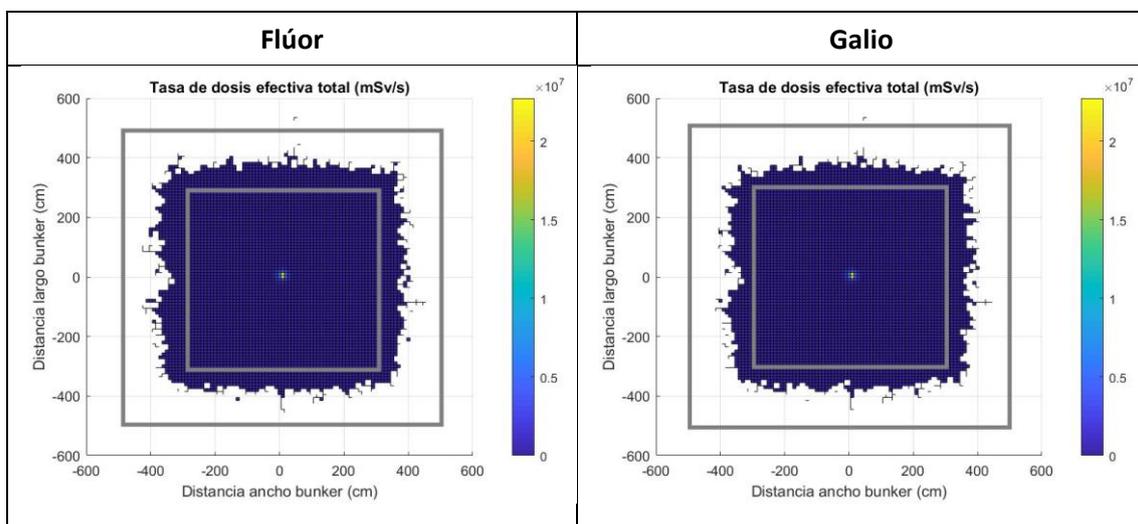
Figura 36: Flujo de neutrones en la producción de ^{68}Ga . Elaboración propia.

El flujo neutrónico queda confinado en el interior del bunker y no atraviesa las paredes de hormigón.

Por tanto, para el proceso de producción del Galio, queda confirmado que el espesor acordado es efectivo y permite operar con seguridad, sin producir la dosis en el exterior de la instalación.

7.2.3. Comparación entre ambos radionucleidos

A continuación, se compara la dosis total producida por ambos radionucleidos.



Se puede observar como la distribución de tasa de dosis efectiva producida en ambos procesos es muy semejante y no presenta grandes variaciones, permitiendo afirmar que la instalación planteada garantiza la consecución del proceso de producción de los radionucleidos con la seguridad adecuada.

No obstante, la elevada tasa de dosis que se produce en el interior de la habitación puede llevar a la activación de los materiales que componen las primeras capas del bunker. Por lo que una vez el ciclotrón ha estado funcionando durante un periodo de tiempo, se deberá evaluar la activación de las paredes y realizar un estudio detallado del daño que puede haber provocado. De hecho, por este motivo se seleccionó el niobio como material para el recipiente de la solución. El niobio tiene unas características óptimas que permiten que, a pesar de la alta dosis que se recibe en el interior de la esfera, el recipiente no se active, reduciendo la necesidad de realizar un tratamiento posterior.

Por último, se estudiará el valor de la tasa de dosis en el interior de la habitación, ya que debido al alto valor obtenido se la instalación del ciclotrón debe estar catalogada dentro de alguno de los niveles de zonas controladas por alta radiación.

A continuación, se expone la división realizada oficialmente en función de los seis tipos de zonas posibles, como deben estar señalizadas y su tasa de dosis efectiva característica:

Zonas	Trébol	Tasa de dosis ($\mu\text{Sv/h}$)
Libre		<0-5
Zona vigilada	Gris azulado	<10
Zona controlada	Verde	<100
Zona controlada de permanencia limitada	Amarillo	<1000
Zona controlada de permanencia reglamentada	Naranja	<10 ⁵
Zona controlada de acceso prohibido	Rojo	<10 ⁵

Tabla 9: Niveles de clasificación de las zonas.

Se presenta a continuación una gráfica en la que se muestra la tasa de dosis efectiva en mSv/h en las zonas cercanas a la esfera en la que se bombardearán los protones, para conocer de qué tipo de zona se trata.

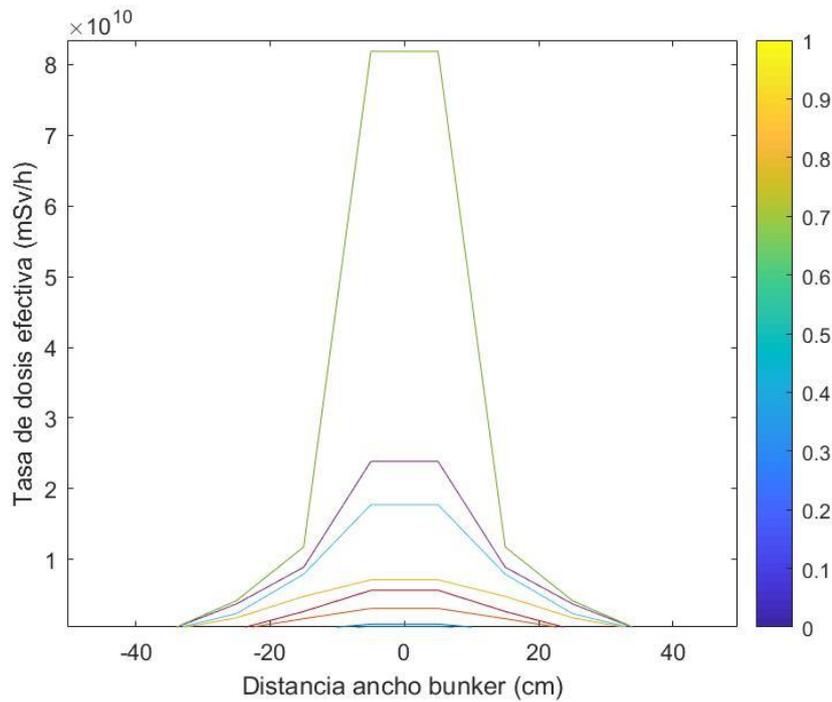


Figura 37: Tasa de dosis efectiva en mSv/h. Elaboración propia.

Se concluye que la tasa de dosis que se puede llegar a recibir en el interior del bunker es muy elevada, y por este motivo, se clasifica la instalación como una zona controlada de acceso prohibido. Por este motivo, la instalación deberá estar debidamente señalizada, a través de una señal luminosa y una advertencia de un trébol rojo, como el que se muestra a continuación.



Figura 38: Trébol de advertencia para protección radiológica de zonas controladas de acceso restringido.

CAPÍTULO 8. CONCLUSIONES

8.1. CONCLUSIONES GENERALES

Finalizado el Trabajo de Fin de Grado, se puede concluir que la elaboración de un modelo mediante el cual cuantificar y evaluar la producción de radionucleidos a través de un ciclotrón con MCNP6 ha resultado exitosa, ya que los resultados de la simulación han sido coherentes con la teoría y semejantes a los planteados en los artículos y guías.

El logro del objetivo principal marcado ha requerido el aprendizaje de los softwares empleados, destacando MCNP6 y la búsqueda e implementación de una librería válida para la simulación (TENDL) en la que apareciesen las secciones eficaces de los radionucleidos de interés. El modelo planteado responde de manera adecuada a las simulaciones, permitiendo variar las características para estudiar cualquier otro modelo y evaluar la producción de otros radionucleidos, siempre que su sección eficaz esté contenida en la librería. Además, la simulación del modelo se ha realiza con errores pequeños, sin largos costes computacionales, con lo que se valida su funcionalidad para evaluar el proceso de producción de radionucleidos.

No obstante, en un primer momento se construyó un modelo con una geometría más compleja, a través de un mallado con métodos finitos, que no ha sido posible implementar. Esto se debe a que la versión utilizada de MCNP6 no acepta la geometría mallada para el bombardeo de protones, dejando un camino abierto para la realización de simulaciones de modelos con geometrías más complejas.

Respecto a la evaluación del proceso de producción de los radionucleidos seleccionados, se ha comprobado que las energías habituales de bombardeo son las más adecuadas, que coinciden con el mejor rendimiento y la mínima dosis. Destacando un mayor rendimiento de producción del Flúor-18 en comparación con el Galio-68. Por tanto, la producción de Flúor-18 a nivel de eficiencia es más favorable ya que permite una producción mucho mayor para las mismas condiciones, a lo que se añade la pureza isotópica del ^{18}F .

Centrando la atención en el estudio de la protección radiológica del modelo, se comprueba que no se emite dosis al exterior del bunker. Por esto motivo se puede afirmar que el diseño del bunker planteado en el trabajo es válido. Sin embargo, la tasa de dosis que habrá en el interior del bunker es muy elevada por lo que se ha clasificado el interior del bunker como una zona controlada de acceso restringido que deberá estar señalizada y vigilada.

La metodología de simulación desarrollada se puede extrapolar para el diseño geométrico de cualquier otro bunker para los ciclotrones disponibles, obteniendo resultados más precisos que los sistemas deterministas que se utilizan actualmente en el diseño de búnkeres.

En definitiva, se ha logrado el objetivo principal planteado que consistía en estudiar la producción de radionucleidos a través de un ciclotrón con la elaboración de un input para la simulación en MCNP6, creando una base para el desarrollo de posteriores estudios alrededor de esta técnica.

8.2. LÍNEAS FUTURAS

El desarrollo de un modelo válido para la simulación de la producción de radionucleidos mediante un ciclotrón con el código de MCNP6 abre un camino en una materia sobre la que aún no se había trabajado, ofreciendo una base esencial y necesaria para la elaboración de posteriores estudios sobre los diferentes radionucleidos utilizados en la medicina nuclear. El estudio y definición de una nueva técnica deja abiertas nuevas líneas de trabajo que se verán mejoradas y complementadas con la propia evolución MCNP6.

Además, se ha realizado un modelo tridimensional que no ha sido posible simular, ya que el código de MCNP6 rechaza las geometrías realizadas con mallas para fuentes de protones. Esta limitación se soluciona en la siguiente versión del código. Por ello, la simulación con una geometría más compleja y cercana a la realidad sería una interesante línea de evolución.

Por otro lado, un estudio interesante a realizar sería la validación de los resultados obtenidos con datos experimentales y la obtención de la actividad de la solución en la que se producen los radionucleidos en función del tiempo. De este modo, se podría confirmar la validez de la librería empleada.

Por último, dada la alta tasa de dosis detectada en el interior de la habitación del bunker, sería útil conocer la activación de las paredes de hormigón.

BIBLIOGRAFÍA

- [1] Ródenas, J. (2003). *Introducción a la Ingeniería de la Contaminación Radiactiva*. Valencia, InterTecnica.
- [2] MCNP (2014). *MCNP6 TM USER's MANUAL Code Version 6.1.1beta*. Los Alamos National Laboratory.
- [3] Shultis, J. K. y Faw, R. E. (2011). *AN MCNP PRIMER*. Dept. of Mechanical and Nuclear Engineering, Manhattan.
- [4] Jabaloyas, E. (2018). *Análisis de las reacciones nucleares que tienen lugar en un ciclotrón para producir radionucleidos de aplicación en un PET*.
- [5] NIST. (2004). *Standard Reference Database 124*. (<https://dx.doi.org/10.18434/T4NC7P>).
- [6] TENDL-2017 *Nuclear Data Library – Proton sub-library*. (https://tendl.web.psi.ch/tendl_2017/proton_html/proton.html).
- [7] M. Fleming, J.C. Sublet, J. Kopecky, D. Rochman y A.J. Koning. (2015). *Probing experimental and systematic trends of the neutron-induced TENDL-2014 nuclear data library*. CCFE report UKAEA-R(15).
- [8] J.Ch. Sublet, A.J. Koning, D. Rochman, M. Fleming y M. Gilbert. (2015). *TENDL-2015: Delivering Both Completeness and Robustness*. Advances in Nuclear Nonproliferation Technology and Policy Conference, Santa Fe, NM, USA.
- [9] D. Rochman, A.J. Koning, J.Ch. Sublet, M. Fleming. (2016) *The TENDL library: hope, reality and future*. International Conference on Nuclear Data for Science and Technology, Bruges, Belgium.
- [10] A.J. Koning y D. Rochman. (2012). *Modern Nuclear Data Evaluation with The TALYS Code System*, Nuclear Data Sheets 113 2841.
- [11] *Java-based Nuclear Information Software (JANIS)*. (<https://www.oecd-nea.org/janis/>)
- [12] Conlin, J. L. (2017). *Listing of Available ACE Data Tables*. (LA-UR-17-20709).
- [13] Abarca, A. y Juste, B. (2015). *Especificación de la fuente en MCNP*. Universitat Politècnica de València.
- [14] Conlin J., Brown F., Kahler A., Lee M., Parsons D., White M. (2012). *Updating the Format of ACE Data Tables*. (LA-UR-12-22033)

- [15] Herman M. y Trkov A. (2010). *Data Formats and Procedures for the Evaluated Nuclear Data Files ENDF/B-VI and ENDF/B-VII*. National Nuclear Data Center.
- [16] Harkness-Brennan, L. (2018). *An Introduction to the Physics of Nuclear Medicine*. University of Liverpool.
- [17] S. Morató, B. Juste, R. Miró, G. Verdú, S. Díez. (2016). *Experimental Validation of Neutron Activation Simulation of a Varian Medical Linear Accelerator*. Instituto de Seguridad Industrial Radiofísica y Medioambiental (ISIRYM), Universitat Politècnica de València.
- [18] Mateusz Adam Synowiecki¹, Lars Rutger Perk y J. Frank W. Nijssen. (2018). *Production of novel diagnostic radionuclides in small medical cyclotrons*. EJNMMI Radiopharmacy and Chemistry.
- [19] Werner, C. J.; Bull, J. S.; Solomon, C. J. Jr.; Brown, F. B.; Mckinney, G. W.; Rising, M. E.; Dixon, D. A.; Martz, R. L.; Hughes, H. G. III; Cox, L. J.; Zukaitis, A. J.; Armstrong, J. C.; Forster III, Robert A.; y Casswell, L. (2018). *MCNP Version 6.2 Release Notes*. Los Alamos National Laboratory. (LA-UR-18-20808).
- [20] Goorley, J.T. (2013). *MCNP6 version 1.0 Known Issues*. Los Alamos National Laboratory. (LA-UR-13-22900).
- [21] Shiomi-Tsuda N., Sakamoto N., Ogawa H., Tanaka M., Goto T. y Nagata Y. (1996). *Stopping Powers of havar for protons from 4.0 to 13.0 MeV*. Nara Women's University, Nara 630, Japón.
- [22] Engle J. W., Ignatyuk A. V, Capote R., Carlson B. V., Hermanne A., Kellett M. A., Kibédi T., Kim G., Kondev F. G., Hussain M., Lebeda O., Luca A., Nagai Y., Naik H., Nichols A. L., Nortier F. M., Suryanarayana S. V., Takács S., Tárkányi F. T., y Verpelli M. (2019). *Recommended Nuclear Data for the Production of Selected Therapeutic Radionuclides. Nuclear Data Sheets 155, 56–74*.
- [23] International Atomic Energy Agency. (2009). *Cyclotron Produced Radionuclides: Physical Characteristics and Production Methods*. TRS-468. October, (468), 279.
- [24] Qaim, S. M., y Ju, F. (2011). *Handbook of Nuclear Chemistry. In Handbook of Nuclear Chemistry*. <https://doi.org/10.1007/978-1-4419-0720-2>
- [25] Miguel Alcaraz Baños. (2010). *Interacción De La Radiación Con La Materia Viva*. 1–10.
- [26] Pelayo, B. D. C. (2013). *Radioterapia externa: lo que el médico general debe saber. Revista Médica Clínica Las Condes, Vol. 24, pp. 705–715*. [https://doi.org/10.1016/s0716-8640\(13\)70210-4](https://doi.org/10.1016/s0716-8640(13)70210-4)
- [27] Barranco García, J. (2009). *Introducción a la física de aceleradores*. High School Teacher at CERN Program (HTS), 1–35.
- [28] Chiappiniello, A. (2014). *Cyclotron production of ¹¹C: experimental assessment of saturation yield and validation with Monte Carlo simulation*. Universidad de Bologna.
- [29] Vallejo, C. (2015). *Técnicas de imagen en medicina nuclear*. 3, 22.

- [30]Koning, A. (2018). *Status of TENDL. WPEC Meeting, May 17-18 2018, NEA, Paris.*
- [31]Rochman, D. (2017). *TENDL - 2017 : better cross sections , better covariances.* Workshop on TALYS/TENDL Developments.
- [32]Rochman, D. (2017). *The TENDL nuclear data library:Standing on the shoulders of giants. ImPACT International Symposium on “New Horizons of Partitioning and Transmutation Technologies with Accelerator System”*, University of Tokyo, Japan.
- [33]IAEA. (2012). *Cyclotron Produced Radionuclides: Guidance on Facility Design and Production of [18F] Fluorodeoxyglucose (FDG).* IAEA Radioisotopes and Radiopharmaceuticals Series, (3), 153.
- [34]S. Riga et al. (2018). *Production of Ga-68 with a General Electric PETtrace cyclotron by liquid target.* Physica Medica. Volume 55, November 2018, Pages 116-126. (<https://doi.org/10.1016/j.ejmp.2018.10.018>).
- [35]J. A. Cruzate (2015). *Estimate of the radiation source term for 18F production via thick H₂¹⁸O targets bombarded with 18 MeV protons.* Radiation Physics and Chemistry. Volume 117, December 2015, Pages 54-58. (<https://doi.org/10.1016/j.radphyschem.2015.07.018>).
- [36]Vichi, S., Zagni, F., Cicoria, G., Infantino, A., Riga, S., Zeller, M., Mostacci, D. (2019). *Activation studies of a PET cyclotron bunker.* Radiation Physics and Chemistry, 161(January), 48–54. <https://doi.org/10.1016/j.radphyschem.2019.04.001>
- [37]Cruzate, J. Á. (2015). Estimate of the radiation source term for 18F production via thick H₂¹⁸O targets bombarded with 18MeV protons. *Radiation Physics and Chemistry*, 117, 54–58. <https://doi.org/10.1016/j.radphyschem.2015.07.018>
- [38]Customs, U. S., Protection, B., Nuclear, D., & Office, D. (2011). *Compendium of Material Composition Data for Radiation Transport Modeling.* Retrieved from www.pnnl.gov/main/publications/external/technical_reports/pnnl-15870rev1.pdf
- [39]Reed, A. (2007). Medical physics calculations with MCNP: a primer. *Boston, MA: Los Alamos National Laboratory, X-3 MCC ...*, 836. Retrieved from <http://cmpwg.ans.org/mcnp/primer.pdf>
- [40]J.W. Engle,A.V., et al. (2019). *Recommended Nuclear Data for the Production of Selected Therapeutic Radionuclides. Nuclear Data Sheets. Volume 155, January 2019, Pages 56-74.* (<https://doi.org/10.1016/j.nds.2019.01.003>).
- [41]A.J.Koning et al. (2019). *TENDL: Complete Nuclear Data Library for innovative Nuclear Science and Technology.* Nuclear Data Sheets. Volume 155, January 2019, Pages 1-55 (<https://doi.org/10.1016/j.nds.2019.01.002>).
- [42]A.J. Koning y D. Rochman. (2012). *Modern Nuclear Data Evaluation with the TALYS Code System.* Nuclear Data Sheets. Volume 113, Issue 12, December 2012, Pages 2841-2934. <https://doi.org/10.1016/j.nds.2012.11.002>

II. PRESUPUESTO

Estudio de la producción con ciclotrón de radionucleidos para Tomografía por Emisión de Positrones (PET).

PRESUPUESTO

1. OBJETIVO DEL PRESUPUESTO.

El anexo II del trabajo cuantifica los costes asociados a la elaboración del Trabajo Fin de Grado a fin de evaluar económicamente los recursos implicados mediante un presupuesto.

El presupuesto va a constar de dos partes fundamentales: el presupuesto desglosado, en el que se explicaran cada uno de los conceptos que han supuesto un coste para el desarrollo del proyecto, y el presupuesto total, en el que se sumarán todos los conceptos y se obtendrá el coste total del trabajo realizado.

2. PRESUPUESTO DESGLOSADO.

A continuación, se desglosarán cada una de las partes implicadas en la consecución del proyecto de estudio de la producción de radionucleidos en un ciclotrón mediante simulación con MCNP6. Al tratarse de un bombardeo con protones, la versión utilizada no es compatible con la elaboración de una estructura mallada, con métodos infinitos, por lo que no han sido necesarios el empleo de programas de diseño y se ha realizado todo a través de MCNP6.

Se han agrupado los costes involucrados en cuatro grupos, de acuerdo con la función que ese recurso ha realizado. Estos grupos son:

- Coste personal
- Coste software
- Coste hardware
- Otros costes

Cada uno de estos subgrupos en los que se ha desglosado tiene un conjunto de conceptos, que han generado un importe, el cual se presentará en el siguiente apartado.

2.1.1. Coste personal.

El coste de personal es el importe que correspondería el trabajo realizado por los recursos humanos que hayan participado durante el proceso de elaboración del trabajo. Se ha cuantificado el importe a partir de una estimación del tiempo empleado en el trabajo.

Coste personal	Tiempo (h.)	Precio (€/h)	Importe (€)
Ingeniero energético (Autor del TFG)	300	40	12,000.00 €
Tutor TFG	40	75	3,000.00 €
Cotutor TFG	40	75	3,000.00 €
Total			18,000.00 €

Tabla 10: Presupuesto desglosado del coste de personal.

Además, se desglosa el número de horas empleadas por la autora en la realización del trabajo, en función de las diferentes tareas llevadas a cabo durante el proceso de elaboración.

Tareas	Tiempo (h.)
Aprendizaje previo	20
Selección de datos para el modelo	45
Búsqueda de la librería	50
Elaboración del <i>input</i>	45
Simulación	40
Análisis de los resultados	45
Redacción de los documentos	55
Total	300

Tabla 11: Desglose de las horas realizadas por el autor.

2.1.2. Coste software.

El trabajo ha consistido en la elaboración de un modelo de simulación para estudiar un proceso de producción de radionucleidos con ciclotrón. Por este motivo, el coste de software agrupa el coste de los materiales empleados para el desarrollo del presente. Dado que se trata de programas previamente instalados, para cuantificar el coste de cada uno de ellos se ha realizado una proporción en función del periodo de tiempo que han sido utilizados para el desarrollo del trabajo.

Además, remarcar que algunas de las licencias de estos programas han supuesto un coste nulo gracias a ser distribuidas gratuitamente por la Universidad Politécnica de Valencia a sus estudiantes (Matlab). Esto junto con el empleo de programas de libre distribución como Janis, ha reducido considerablemente el coste de este trabajo.

Coste Software	Cantidad (Ud.)	Precio unitario (€)	Uso (años)	Importe (€)
Licencia de Office 365	1	123.14 €	0.5	61.57 €
Licencia de Matlab 2017b	1	0.00 €	0.5	0.00 €
Licencia de MCNP6	1	1,000.00 €	0.5	500.00 €
Licencia de Textpad	1	0.00 €	0.5	0.00 €
Licencia de Vised	1	0.00 €	0.5	0.00 €
Licencia de Janis	1	0.00 €	0.5	0.00 €
Total				561.57 €

Tabla 12: Presupuesto desglosado del coste de software.

2.1.3. Coste hardware.

Con relación a los costes de hardware, han sido dos las herramientas empleadas para la elaboración y simulación del trabajo. Por un lado, como herramienta principal sin la cual no habría sido posible la elaboración del trabajo, un ordenador con unas características técnicas adecuadas, definidas en la tabla. Y, por otro lado, el conjunto de procesadores con los que cuenta el departamento de Ingeniería Química y Nuclear, al que se ha tenido acceso para la simulación.

Se desglosan ambos conceptos en función de su coste y el periodo de tiempo empleado en el desarrollo del trabajo.

Coste Hardware	Cantidad (Ud.)	Precio unitario	Uso	Importe (€)
Ordenador (Core i5, 8 GB RAM y 512 GB de disco duro)	1	549 (€/Ud.)	0.5 (años)	274.50 €
Cluster de servidores	21	1 (€/h)	134 (h)	134.00 €
Total				408.50 €

Tabla 13: Presupuesto desglosado del coste de hardware.

2.1.4. Otros costes.

Por último, se han añadido los costes de transporte que han sido necesarios para la elaboración del trabajo. Se han desglosado los costes realizados con vehículo propio y mediante transporte público.

Otros costes	Cantidad	Precio unitario	Importe (€)
Desplazamiento con vehículo propio	1002 (km)	0.19 (€/km)	190.38 €
Desplazamiento con transporte público	30 (viajes)	1.2 (€/viaje)	36.00 €
Total			226.38 €

Tabla 14: Presupuesto desglosado de otros costes generales realizados.

3. PRESUPUESTO TOTAL.

Finalmente, se adjuntan todos los costes agrupado en cada una de las partes en que se han desglosado. De este modo, se obtiene el total del presupuesto al que se le añade un 5% de costes extras y el IVA (21%) sobre la suma del presupuesto total.

Concepto	Importe (€)
Coste de personal	18,000.00 €
Coste de Software	561.57 €
Coste de Hardware	408.50 €
Otros costes	226.38 €
Costes extra	959.82 €
Total	20,156.27 €
21% IVA	4,232.82 €
Presupuesto total	24,389.09 €

Tabla 15: Presupuesto total.

III. ANEXOS

Estudio de la producción con ciclotrón de radionucleidos para Tomografía por Emisión de Positrones (PET).

INPUT

1. FLÚOR-18.

```

c =====
c CELDAS
c =====
c
13 -1.1106 -9 7 -8      imp:h=64 imp:n=1 imp:p=1 imp:e=1  $Cilindro Target liquide
21 -8.57 -6 4 -5 #1    imp:h=8  imp:n=1 imp:p=1 imp:e=1  $Cilindro Ventana Niobium
32 -8.3 -3 1 -2 #1 #2  imp:h=2  imp:n=1 imp:p=1 imp:e=1  $Cilindro Ventana havar
40 (-10):(-12 -13 17) #1 #2 #3 imp:h=1  imp:n=1 imp:p=1 imp:e=1 $Esfera vacio
54 -3.1 (-11 10 12):(-15 17 -16) #4 #3 #2 #1 &
   imp:h=1 imp:n=1 imp:p=1 imp:e=1          $Insulator
65 -19.3 -18 19 -20 21 -22 23 #1 #2 #3 #4 #5 &
   imp:h=1 imp:n=1 imp:p=1 imp:e=1
74 -3.1 24 -25 -26 27 -28 29 #1 #2 #3 #4 #5 &
   imp:h=1 imp:n=1 imp:p=1 imp:e=1
106 -1.222500E-03 100 -101 102 -103 104 -105 #7 #6 #5 #4 #3 #2 #1 & $Aire habitacion
   imp:h=1 imp:n=1 imp:p=1 imp:e=1
c
c
c
117 -2.3 (-100:101:-102:103:-104:105) 106 -107 108 -109 110 -111 & $Bunker
      imp:h=1 imp:n=1 imp:p=1 imp:e=1
c 84 -3.1 -15 17 -16 imp:h=1 imp:n=1 imp:p=1 imp:e=1
1006 -1.222500E-03 (112 -113 114 -115 116 -117) &
      (-106:107:-108:109:-110:111) &          $Aire exterior
      imp:h=1 imp:n=1 imp:p=1 imp:e=1
1010 -112:113:-114:115:-116:117 imp:h=0 imp:n=0 imp:p=0 imp:e=0 $resto del universo

=====
c SUPERFICIES
c
=====
c
c havar
1 PY -1.201
2 PY 1.201
3 CY 1.531
c
c niobio
4 PY -1.2
5 PY 1.2
6 CY 1.53
c
c cilindro solucion
7 PY -0.3
8 PY 0.3
9 CY 1.03
c
c esfera
10 SO 30
11 SO 33
c
c escape protones
12 CX 7.5

```

13 PX -27	100 PY -150
14 PX -240	101 PY 150
15 CX 10.5	102 PX -300
16 PX -30	103 PX 300
17 PX -240	104 PZ -300
c	105 PZ 300
c Septum	c
18 PX -240	c hormigon
19 PX -250	106 PY -350
20 PY 30	107 PY 350
21 PY -30	108 PX -500
22 PZ 30	109 PX 500
23 PZ -30	110 PZ -500
c	111 PZ 500
c insulator entrada protones	c
24 PX 33	c aire fuera
25 PX 36	112 PY -450
26 PY 20	113 PY 450
27 PY -20	114 PX -600
28 PZ 20	115 PX 600
29 PZ -20	116 PZ -600
c	117 PZ 600
c habitacion	

```

c =====
c MATERIALES y FUENTE
c =====
c
c fuente de protones
c -----
SDEF ERG=18 POS=4 0 0 DIR=d1 VEC=1 0 0 PAR=H
SI1 H -1 0.999999996
SP1 D 0 1
c
c Tally reacciones
c -----
c F14:H 1      $ celda 1 protones
c FM14 1.1106 831 4  $ Numero de reaccion 4
c
c Distribucion neutrones
c -----
c FMESH24:N GEOM=xyz  ORIGIN= -3 -3 -3
c   IMESH=3  IINTS=6
c   JMESH=3  JINTS=6
c   KMESH=3  KINTS=6
c   OUT=JK
c
c Distribucion protones fuente energia
c -----
c FMESH14:H GEOM=xyz  ORIGIN= 2 -5 -5
c   IMESH=3  IINTS=1
c   JMESH=5  JINTS=20
c   KMESH=5  KINTS=20
c   OUT=JK
c
c
c

```

c Tallys energia protones

c-----

c F14:H 1

c DE14 17 18 18.5 19

c F64:N 1

c DE64 1 2 3 4 5 6 7 8 9 10

c *F44:H 1 \$ energia en la celda 1

c *F54:H 2 \$ energia en la celda 2

c *F64:H 3 \$ energia en la celda 3

c *F34:H 4 \$ energia en la celda 4

c

c Tallys DOSIS

c-----

c

c protones

FMESH14:h GEOM=xyz ORIGIN= -600 -450 -600 &

IMESH=600 IINTS=120 &

JMESH=450 JINTS=90 &

KMESH=600 KINTS=120 &

OUT=IK

DE14 1.000E-03 1.500E-03 2.000E-03 2.500E-03 3.000E-03 4.000E-03 5.000E-03 &

6.000E-03 7.000E-03 8.000E-03 9.000E-03 1.000E-02 1.250E-02 1.500E-02 &

1.750E-02 2.000E-02 2.250E-02 2.500E-02 2.750E-02 3.000E-02 3.500E-02 &

4.000E-02 4.500E-02 5.000E-02 5.500E-02 6.000E-02 6.500E-02 7.000E-02 &

7.500E-02 8.000E-02 8.500E-02 9.000E-02 9.500E-02 1.000E-01 1.250E-01 &

1.50 0E-01 1.750E-01 2.000E-01 2.250E-01 2.500E-01 2.750E-01 3.000E-01 &

3.500E-01 4.000E-01 4.500E-01 5.000E-01 5.500E-01 6.000E-01 6.500E-01 &

7.000E-01 7.500E-01 8.000E-01 8.500E-01 9.000E-01 9.500E-01 1.000E+00 &

1.250E+00 1.500E+00 1.750E+00 2.000E+00 2.250E+00 2.500E+00 2.750E+00 &

3.000E+00 3.500E+00 4.000E+00 4.500E+00 5.000E+00 5.500E+00 6.000E+00 &

6.500E+00 7.000E+00 7.500E+00 8.000E+00 8.500E+00 9.000E+00 9.500E+00 &

1.000E+01 1.250E+01 1.500E+01 1.750E+01 2.000E+01 2.500E+01 2.750E+01 &

3.000E+01 3.500E+01 4.000E+01 4.500E+01 5.000E+01 5.500E+01 6.000E+01 &

6.500E+01 7.000E+01 7.500E+01 8.000E+01 8.500E+01 9.000E+01 9.500E+01 &

1.000E+02 1.250E+02 1.500E+02 1.750E+02 2.000E+02 2.250E+02 2.500E+02 &

2.750E+02 3.000E+02 3.500E+02 4.000E+02 4.500E+02 5.000E+02 5.500E+02 &

6.000E+02 6.500E+02 7.000E+02 7.500E+02 8.000E+02 8.500E+02 9.000E+02 &

9.500E+02 1.000E+03 1.500E+03 2.000E+03 2.500E+03 3.000E+03 4.000E+03 &

5.000E+03 6.000E+03 7.000E+03 8.000E+03 9.000E+03 1.000E+04

DF14 1.414E+02 1.651E+02 1.855E+02 2.038E+02 2.206E+02 2.507E+02 2.776E+02 &

3.021E+02 3.248E+02 3.460E+02 3.660E+02 3.850E+02 4.224E+02 4.552E+02 &

4.843E+02 5.106E+02 5.343E+02 5.558E+02 5.755E+02 5.934E+02 6.246E+02 &

6.506E+02 6.721E+02 6.897E+02 7.038E+02 7.149E+02 7.233E+02 7.293E+02 &

7.333E+02 7.355E+02 7.360E+02 7.352E+02 7.332E+02 7.301E+02 7.038E+02 &

6.680E+02 6.298E+02 5.928E+02 5.589E+02 5.284E+02 5.011E+02 4.767E+02 &

4.353E+02 4.015E+02 3.736E+02 3.501E+02 3.300E+02 3.123E+02 2.967E+02 &

2.826E+02 2.701E+02 2.589E+02 2.486E+02 2.393E+02 2.308E+02 2.229E+02 &

1.912E+02 1.683E+02 1.509E+02 1.371E+02 1.258E+02 1.165E+02 1.086E+02 &

1.018E+02 9.068E+01 8.197E+01 7.492E+01 6.909E+01 6.417E+01 5.997E+01 &

5.633E+01 5.315E+01 5.033E+01 4.783E+01 4.559E+01 4.357E+01 4.173E+01 &

4.006E+01 3.351E+01 2.894E+01 2.555E+01 2.294E+01 1.915E+01 1.773E+01 &

1.653E+01 1.460E+01 1.312E+01 1.194E+01 1.099E+01 1.019E+01 9.517E+00 &

8.942E+00 8.443E+00 8.006E+00 7.620E+00 7.277E+00 6.970E+00 6.693E+00 &

6.443E+00 5.475E+00 4.816E+00 4.338E+00 3.976E+00 3.691E+00 3.462E+00 &

3.275E+00 3.118E+00 2.871E+00 2.687E+00 2.544E+00 2.431E+00 2.340E+00 &

2.266E+00 2.203E+00 2.151E+00 2.107E+00 2.069E+00 2.037E+00 2.008E+00 &

1.984E+00 1.963E+00 1.850E+00 1.820E+00 1.818E+00 1.828E+00 1.861E+00 &
1.898E+00 1.934E+00 1.967E+00 1.998E+00 2.026E+00 2.052E+00

c

c fotones

FMESH24:p GEOM=xyz ORIGIN= -600 -450 -600 &
IMESH=600 IINTS=120 &
JMESH=450 JINTS=90 &
KMESH=600 KINTS=120 &
OUT=IK

DE24 1.00E-03 1.04E-03 1.07E-03 1.50E-03 2.00E-03 2.47E-03 &
2.64E-03 2.82E-03 3.00E-03 4.00E-03 5.00E-03 6.00E-03 &
8.00E-03 1.00E-02 1.50E-02 2.00E-02 3.00E-02 4.00E-02 &
5.00E-02 6.00E-02 8.00E-02 1.00E-01 1.50E-01 2.00E-01 &
3.00E-01 4.00E-01 5.00E-01 6.00E-01 8.00E-01 1.00E+00 &
1.25E+00 1.50E+00 2.00E+00 3.00E+00 4.00E+00 5.00E+00 &
6.00E+00 8.00E+00 1.00E+01 1.50E+01 2.00E+01
DF24 2.623 2.47154754 2.3275291 1.29015 0.7574 0.5050296 &
0.44798144 0.39400704 0.3534 0.19932 0.12655 0.08676 &
0.047336 0.02935 0.0121545 0.006502 0.0028485 0.00183 &
0.0015425 0.0015402 0.0018864 0.002433 0.0041055 0.005918 &
0.009582 0.013132 0.01652 0.019734 0.025688 0.03108 0.037125 &
0.042585 0.0522 0.06825 0.082 0.09455 0.10638 0.12896 0.1509 &
0.20475 0.2586

c

c electrones

FMESH34:e GEOM=xyz ORIGIN= -600 -450 -600 &
IMESH=600 IINTS=120 &
JMESH=450 JINTS=90 &
KMESH=600 KINTS=120 &
OUT=IK

DE34 1.000E-02 1.250E-02 1.500E-02 1.750E-02 2.000E-02 2.500E-02 &
3.000E-02 3.500E-02 4.000E-02 4.500E-02 5.000E-02 5.500E-02 &
6.000E-02 7.000E-02 8.000E-02 9.000E-02 1.000E-01 1.250E-01 &
1.500E-01 1.750E-01 2.000E-01 2.500E-01 3.000E-01 3.500E-01 &
4.000E-01 4.500E-01 5.000E-01 5.500E-01 6.000E-01 7.000E-01 &
8.000E-01 9.000E-01 1.000E+00 1.250E+00 1.500E+00 1.750E+00 &
2.000E+00 2.500E+00 3.000E+00 3.500E+00 4.000E+00 4.500E+00 &
5.000E+00 5.500E+00 6.000E+00 7.000E+00 8.000E+00 9.000E+00 &
1.000E+01 1.250E+01 1.500E+01 1.750E+01 2.000E+01 2.500E+01 &
3.000E+01 3.500E+01 4.000E+01 4.500E+01 5.000E+01 5.500E+01 &
6.000E+01 7.000E+01 8.000E+01 9.000E+01 1.000E+02 1.250E+02 &
1.500E+02 1.750E+02 2.000E+02 2.500E+02 3.000E+02 3.500E+02 &
4.000E+02 4.500E+02 5.000E+02 5.500E+02 6.000E+02 7.000E+02 &
8.000E+02 9.000E+02 1.000E+03
DF34 1.976E+01 1.663E+01 1.445E+01 1.283E+01 1.158E+01 9.757E+00 &
8.495E+00 7.566E+00 6.852E+00 6.284E+00 5.822E+00 5.438E+00 &
5.114E+00 4.597E+00 4.201E+00 3.889E+00 3.637E+00 3.176E+00 &
2.865E+00 2.642E+00 2.474E+00 2.241E+00 2.089E+00 1.984E+00 &
1.908E+00 1.852E+00 1.809E+00 1.776E+00 1.751E+00 1.715E+00 &
1.694E+00 1.681E+00 1.674E+00 1.671E+00 1.680E+00 1.694E+00 &
1.711E+00 1.747E+00 1.783E+00 1.817E+00 1.850E+00 1.881E+00 &
1.911E+00 1.940E+00 1.967E+00 2.020E+00 2.068E+00 2.115E+00 &
2.159E+00 2.262E+00 2.359E+00 2.450E+00 2.539E+00 2.707E+00 &
2.868E+00 3.020E+00 3.167E+00 3.311E+00 3.452E+00 3.592E+00 &
3.731E+00 4.006E+00 4.279E+00 4.551E+00 4.822E+00 5.498E+00 &
6.173E+00 6.847E+00 7.520E+00 8.868E+00 1.022E+01 1.157E+01 &

```

1.292E+01 1.427E+01 1.562E+01 1.697E+01 1.832E+01 2.102E+01 &
2.372E+01 2.643E+01 2.913E+01
c
c neutrones
FMESH44:n GEOM=xyz  ORIGIN= -600 -450 -600 &
IMESH=600 IINTS=120 JMESH=450 JINTS=90 &
KMESH=600 KINTS=120 OUT=IK &
EMESH= 1 2 3 4 5 6 7 8 9 10 11 12 13 14 15
c
c *****
c MATERIALES
c *****
c
c
c -----
c Niobio
c -----
m1 41000 1
c -----
c Havar
c -----
m2 27059 -0.42 24050 -0.00847275 24052 -0.16338855 24053 -0.01852685 &
24054 -0.00461175 28058 -0.0864489 28060 -0.0333121 28061 -0.0014478 &
28062 -0.00461518 28064 -0.00117602 74180 -0.0000324 &
74182 -0.007155 74183 -0.0038637 74184 -0.0082728 74186 -0.0076761 &
42092 -0.0032648 42094 -0.002035 42095 -0.0035024 &
42096 -0.0036696 42097 -0.002101 42098 -0.0053086 42100 -0.0021186 &
25055 -0.002 26054 -0.01211364 26056 -0.1899018 26057 -0.00438426 &
26058 -0.0006003 nlib=.80c hlib=.24h plib=.84p elib=.03e
c -----
c Agua
c -----
m3 1002 -0.111894 8018 -0.043517194 8016 -0.01776212 9018 -0.826826686 &
nlib=.80c hlib=.24h plib=.84p elib=.03e
c -----
c Oxigeno-18
c -----
m831 8018.00h 1
c -----
c insulator aluminium nitride
c -----
m4 13000 -0.65828 7000 -0.34172 &
nlib=.80c hlib=.24h plib=.84p elib=.03e
c -----
c beam stop tungtem
c -----
m5 74000 1 nlib=.80c hlib=.24h plib=.84p elib=.03e
c -----
c aire
c -----
m6 6000 -0.000125 7000 -0.755267 8000 -0.231781 18000 -0.012827 &
nlib=.80c hlib=.24h plib=.84p elib=.03e
c -----
c hormigon Portland
c -----
m7 1000 -0.010000 6000 -0.001000 8000 -0.529107 11000 -0.016000 &

```

12000 -0.002000 13000 -0.033872 14000 -0.337021 19000 -0.013000 &
20000 -0.044000 26000 -0.014000 &
nlib=.80c hlib=.24h plib=.84p elib=.03e

c

c

c Método de corte

c-----

c CUT:H j 0.001

c CUT:E j 0.001

c CUT:N j 0.001

c CUT:P j 0.001

c

MODE H N P E

MPHYS ON

PRDMP 10000000 -1 1 2 0

nps 100000000

2. GALIO-68.

=====

c CELDAS

=====

c

13 -1.1106 -9 7 -8 imp:h=64 imp:n=1 imp:p=1 imp:e=1 \$Cilindro Target liquide
21 -8.57 -6 4 -5 #1 imp:h=8 imp:n=1 imp:p=1 imp:e=1 \$Cilindro Ventana Niobium
32 -8.3 -3 1 -2 #1 #2 imp:h=2 imp:n=1 imp:p=1 imp:e=1 \$Cilindro Ventana havar
40 (-10):(-12 -13 17) #1 #2 #3 imp:h=1 imp:n=1 imp:p=1 imp:e=1 \$Esfera vacio
54 -3.1 (-11 10 12):(-15 17 -16) #4 #3 #2 #1 &
imp:h=1 imp:n=1 imp:p=1 imp:e=1 \$Insulator
65 -19.3 -18 19 -20 21 -22 23 #1 #2 #3 #4 #5 &
imp:h=1 imp:n=1 imp:p=1 imp:e=1
74 -3.1 24 -25 -26 27 -28 29 #1 #2 #3 #4 #5 &
imp:h=1 imp:n=1 imp:p=1 imp:e=1
106 -1.222500E-03 100 -101 102 -103 104 -105 #7 #6 #5 #4 #3 #2 #1 & \$Aire habitacion
imp:h=1 imp:n=1 imp:p=1 imp:e=1

c

c

117 -2.3 (-100:101:-102:103:-104:105) 106 -107 108 -109 110 -111 & \$Bunker
imp:h=1 imp:n=1 imp:p=1 imp:e=1
c 84 -3.1 -15 17 -16 imp:h=1 imp:n=1 imp:p=1 imp:e=1
1006 -1.222500E-03 (112 -113 114 -115 116 -117) &
(-106:107:-108:109:-110:111) & \$Aire exterior
imp:h=1 imp:n=1 imp:p=1 imp:e=1
1010 -112:113:-114:115:-116:117 imp:h=0 imp:n=0 imp:p=0 imp:e=0 \$resto del universo

c

=====

c SUPERFICIES

c

=====

c

c havar

1 PY -1.201

2 PY 1.201

3 CY 1.531

c

c niobio

4 PY -1.2

5 PY 1.2

6 CY 1.53

c

c cilindro solucion

7 PY -0.3

8 PY 0.3

9 CY 1.03	28 PZ 20
c	29 PZ -20
c esfera	c
10 SO 30	c habitacion
11 SO 33	100 PY -150
c	101 PY 150
c escape protones	102 PX -300
12 CX 7.5	103 PX 300
13 PX -27	104 PZ -300
14 PX -240	105 PZ 300
15 CX 10.5	c
16 PX -30	c hormigon
17 PX -240	106 PY -350
c	107 PY 350
c Septum	108 PX -500
18 PX -240	109 PX 500
19 PX -250	110 PZ -500
20 PY 30	111 PZ 500
21 PY -30	c
22 PZ 30	c aire fuera
23 PZ -30	112 PY -450
c	113 PY 450
c insulator entrada protones	114 PX -600
24 PX 33	115 PX 600
25 PX 36	116 PZ -600
26 PY 20	117 PZ 600
27 PY -20	

c
=====

c MATERIALES y FUENTE

c
=====

c
c fuente de protones

c -----
SDEF ERG=18 POS=4 0 0 DIR=d1 VEC=1 0 0 PAR=H
SI1 H -1 0.999999996
SP1 D 0 1

c
c Tally reacciones

c -----
c F14:H 1 \$ celda 1 protones
c FM14 1.1106 831 4 \$ Numero de reaccion 4

c
c Distribucion neutrones

c -----
c FMESH24:N GEOM=xyz ORIGIN= -3 -3 -3
c IMESH=3 IINTS=6
c JMESH=3 JINTS=6
c KMESH=3 KINTS=6
c OUT=JK

c
c Distribucion protones fuente energia

c -----
c FMESH14:H GEOM=xyz ORIGIN= 2 -5 -5

```

c    IMESH=3  IINTS=1
c    JMESH=5  JINTS=20
c    KMESH=5  KINTS=20
c    OUT=JK
c Tallys energia protones
c -----
c F14:H 1
c DE14 17 18 18.5 19
c F64:N 1
c DE64 1 2 3 4 5 6 7 8 9 10
c *F44:H 1  $ energia en la celda 1
c *F54:H 2  $ energia en la celda 2
c *F64:H 3  $ energia en la celda 3
c *F34:H 4  $ energia en la celda 4
c
c Tallys DOSIS
c -----
c
c protones
FMESH14:h GEOM=xyz  ORIGIN= -600 -450 -600 &
      IMESH=600 IINTS=120                &
      JMESH=450 JINTS=90                  &
      KMESH=600 KINTS=120                &
      OUT=IK
DE14 1.000E-03 1.500E-03 2.000E-03 2.500E-03 3.000E-03 4.000E-03 5.000E-03 &
6.000E-03 7.000E-03 8.000E-03 9.000E-03 1.000E-02 1.250E-02 1.500E-02 &
1.750E-02 2.000E-02 2.250E-02 2.500E-02 2.750E-02 3.000E-02 3.500E-02 &
4.000E-02 4.500E-02 5.000E-02 5.500E-02 6.000E-02 6.500E-02 7.000E-02 &
7.500E-02 8.000E-02 8.500E-02 9.000E-02 9.500E-02 1.000E-01 1.250E-01 &
1.500E-01 1.750E-01 2.000E-01 2.250E-01 2.500E-01 2.750E-01 3.000E-01 &
3.500E-01 4.000E-01 4.500E-01 5.000E-01 5.500E-01 6.000E-01 6.500E-01 &
7.000E-01 7.500E-01 8.000E-01 8.500E-01 9.000E-01 9.500E-01 1.000E+00 &
1.250E+00 1.500E+00 1.750E+00 2.000E+00 2.250E+00 2.500E+00 2.750E+00 &
3.000E+00 3.500E+00 4.000E+00 4.500E+00 5.000E+00 5.500E+00 6.000E+00 &
6.500E+00 7.000E+00 7.500E+00 8.000E+00 8.500E+00 9.000E+00 9.500E+00 &
1.000E+01 1.250E+01 1.500E+01 1.750E+01 2.000E+01 2.500E+01 2.750E+01 &
3.000E+01 3.500E+01 4.000E+01 4.500E+01 5.000E+01 5.500E+01 6.000E+01 &
6.500E+01 7.000E+01 7.500E+01 8.000E+01 8.500E+01 9.000E+01 9.500E+01 &
1.000E+02 1.250E+02 1.500E+02 1.750E+02 2.000E+02 2.250E+02 2.500E+02 &
2.750E+02 3.000E+02 3.500E+02 4.000E+02 4.500E+02 5.000E+02 5.500E+02 &
6.000E+02 6.500E+02 7.000E+02 7.500E+02 8.000E+02 8.500E+02 9.000E+02 &
9.500E+02 1.000E+03 1.500E+03 2.000E+03 2.500E+03 3.000E+03 4.000E+03 &
5.000E+03 6.000E+03 7.000E+03 8.000E+03 9.000E+03 1.000E+04
DF14 1.414E+02 1.651E+02 1.855E+02 2.038E+02 2.206E+02 2.507E+02 2.776E+02 &
3.021E+02 3.248E+02 3.460E+02 3.660E+02 3.850E+02 4.224E+02 4.552E+02 &
4.843E+02 5.106E+02 5.343E+02 5.558E+02 5.755E+02 5.934E+02 6.246E+02 &
6.506E+02 6.721E+02 6.897E+02 7.038E+02 7.149E+02 7.233E+02 7.293E+02 &
7.333E+02 7.355E+02 7.360E+02 7.352E+02 7.332E+02 7.301E+02 7.038E+02 &
6.680E+02 6.298E+02 5.928E+02 5.589E+02 5.284E+02 5.011E+02 4.767E+02 &
4.353E+02 4.015E+02 3.736E+02 3.501E+02 3.300E+02 3.123E+02 2.967E+02 &
2.826E+02 2.701E+02 2.589E+02 2.486E+02 2.393E+02 2.308E+02 2.229E+02 &
1.912E+02 1.683E+02 1.509E+02 1.371E+02 1.258E+02 1.165E+02 1.086E+02 &
1.018E+02 9.068E+01 8.197E+01 7.492E+01 6.909E+01 6.417E+01 5.997E+01 &
5.633E+01 5.315E+01 5.033E+01 4.783E+01 4.559E+01 4.357E+01 4.173E+01 &
4.006E+01 3.351E+01 2.894E+01 2.555E+01 2.294E+01 1.915E+01 1.773E+01 &
1.653E+01 1.460E+01 1.312E+01 1.194E+01 1.099E+01 1.019E+01 9.517E+00 &

```

8.942E+00 8.443E+00 8.006E+00 7.620E+00 7.277E+00 6.970E+00 6.693E+00 &
6.443E+00 5.475E+00 4.816E+00 4.338E+00 3.976E+00 3.691E+00 3.462E+00 &
3.275E+00 3.118E+00 2.871E+00 2.687E+00 2.544E+00 2.431E+00 2.340E+00 &
2.266E+00 2.203E+00 2.151E+00 2.107E+00 2.069E+00 2.037E+00 2.008E+00 &
1.984E+00 1.963E+00 1.850E+00 1.820E+00 1.818E+00 1.828E+00 1.861E+00 &
1.898E+00 1.934E+00 1.967E+00 1.998E+00 2.026E+00 2.052E+00

c

c fotones

FMESH24:p GEOM=xyz ORIGIN= -600 -450 -600 &
IMESH=600 IINTS=120 &
JMESH=450 JINTS=90 &
KMESH=600 KINTS=120 &
OUT=IK

DE24 1.00E-03 1.04E-03 1.07E-03 1.50E-03 2.00E-03 2.47E-03 &
2.64E-03 2.82E-03 3.00E-03 4.00E-03 5.00E-03 6.00E-03 &
8.00E-03 1.00E-02 1.50E-02 2.00E-02 3.00E-02 4.00E-02 &
5.00E-02 6.00E-02 8.00E-02 1.00E-01 1.50E-01 2.00E-01 &
3.00E-01 4.00E-01 5.00E-01 6.00E-01 8.00E-01 1.00E+00 &
1.25E+00 1.50E+00 2.00E+00 3.00E+00 4.00E+00 5.00E+00 &
6.00E+00 8.00E+00 1.00E+01 1.50E+01 2.00E+01
DF24 2.623 2.47154754 2.3275291 1.29015 0.7574 0.5050296 &
0.44798144 0.39400704 0.3534 0.19932 0.12655 0.08676 &
0.047336 0.02935 0.0121545 0.006502 0.0028485 0.00183 &
0.0015425 0.0015402 0.0018864 0.002433 0.0041055 0.005918 &
0.009582 0.013132 0.01652 0.019734 0.025688 0.03108 0.037125 &
0.042585 0.0522 0.06825 0.082 0.09455 0.10638 0.12896 0.1509 &
0.20475 0.2586

c

c electrones

FMESH34:e GEOM=xyz ORIGIN= -600 -450 -600 &
IMESH=600 IINTS=120 &
JMESH=450 JINTS=90 &
KMESH=600 KINTS=120 &
OUT=IK
DE34 1.000E-02 1.250E-02 1.500E-02 1.750E-02 2.000E-02 2.500E-02 &
3.000E-02 3.500E-02 4.000E-02 4.500E-02 5.000E-02 5.500E-02 &
6.000E-02 7.000E-02 8.000E-02 9.000E-02 1.000E-01 1.250E-01 &
1.500E-01 1.750E-01 2.000E-01 2.500E-01 3.000E-01 3.500E-01 &
4.000E-01 4.500E-01 5.000E-01 5.500E-01 6.000E-01 7.000E-01 &
8.000E-01 9.000E-01 1.000E+00 1.250E+00 1.500E+00 1.750E+00 &
2.000E+00 2.500E+00 3.000E+00 3.500E+00 4.000E+00 4.500E+00 &
5.000E+00 5.500E+00 6.000E+00 7.000E+00 8.000E+00 9.000E+00 &
1.000E+01 1.250E+01 1.500E+01 1.750E+01 2.000E+01 2.500E+01 &
3.000E+01 3.500E+01 4.000E+01 4.500E+01 5.000E+01 5.500E+01 &
6.000E+01 7.000E+01 8.000E+01 9.000E+01 1.000E+02 1.250E+02 &
1.500E+02 1.750E+02 2.000E+02 2.500E+02 3.000E+02 3.500E+02 &
4.000E+02 4.500E+02 5.000E+02 5.500E+02 6.000E+02 7.000E+02 &
8.000E+02 9.000E+02 1.000E+03
DF34 1.976E+01 1.663E+01 1.445E+01 1.283E+01 1.158E+01 9.757E+00 &
8.495E+00 7.566E+00 6.852E+00 6.284E+00 5.822E+00 5.438E+00 &
5.114E+00 4.597E+00 4.201E+00 3.889E+00 3.637E+00 3.176E+00 &
2.865E+00 2.642E+00 2.474E+00 2.241E+00 2.089E+00 1.984E+00 &
1.908E+00 1.852E+00 1.809E+00 1.776E+00 1.751E+00 1.715E+00 &
1.694E+00 1.681E+00 1.674E+00 1.671E+00 1.680E+00 1.694E+00 &
1.711E+00 1.747E+00 1.783E+00 1.817E+00 1.850E+00 1.881E+00 &
1.911E+00 1.940E+00 1.967E+00 2.020E+00 2.068E+00 2.115E+00 &

2.159E+00 2.262E+00 2.359E+00 2.450E+00 2.539E+00 2.707E+00 &
2.868E+00 3.020E+00 3.167E+00 3.311E+00 3.452E+00 3.592E+00 &
3.731E+00 4.006E+00 4.279E+00 4.551E+00 4.822E+00 5.498E+00 &
6.173E+00 6.847E+00 7.520E+00 8.868E+00 1.022E+01 1.157E+01 &
1.292E+01 1.427E+01 1.562E+01 1.697E+01 1.832E+01 2.102E+01 &
2.372E+01 2.643E+01 2.913E+01

c

c neutrones

FMESH44:n GEOM=xyz ORIGIN= -600 -450 -600 &
IMESH=600 IINTS=120 JMESH=450 JINTS=90 &
KMESH=600 KINTS=120 OUT=IK

c EMESH= 1 2 3 4 5 6 7 8 9 10 11 12 13 14 15

c

c

*

c MATERIALES

c

*

c

c

c -----

c Niobio

c -----

m1 41000 1

c -----

c Havar

c -----

m2 27059 -0.42 24050 -0.00847275 24052 -0.16338855 24053 -0.01852685 &
24054 -0.00461175 28058 -0.0864489 28060 -0.0333121 28061 -0.0014478 &
28062 -0.00461518 28064 -0.00117602 74180 -0.0000324 &
74182 -0.007155 74183 -0.0038637 74184 -0.0082728 74186 -0.0076761 &
42092 -0.0032648 42094 -0.002035 42095 -0.0035024 &
42096 -0.0036696 42097 -0.002101 42098 -0.0053086 42100 -0.0021186 &
25055 -0.002 26054 -0.01211364 26056 -0.1899018 26057 -0.00438426 &
26058 -0.0006003 nlib=.80c hlib=.24h plib=.84p elib=.03e

c -----

c Mezcla Zinc

c -----

m3 30068 -0.289947691 &
1001 -0.141975747 &
1002 -1.97243E-05 &
8016 -0.425031559 &
8017 -0.000161937 &
8018 -0.000848146 &
7014 -0.141495459 &
7015 -0.000519736

c -----

c Zinc-68

c -----

m3037 30068.00h 1

c -----

c insulator aluminium nitride

c -----

m4 13000 -0.65828 7000 -0.34172 &

nlib=.80c hlib=.24h plib=.84p elib=.03e
c -----
c beam stop tungtem
c -----
m5 74000 1 nlib=.80c hlib=.24h plib=.84p elib=.03e
c -----
c aire
c -----
m6 6000 -0.000125 7000 -0.755267 8000 -0.231781 18000 -0.012827 &
nlib=.80c hlib=.24h plib=.84p elib=.03e
c -----
c hormigon Portland
c -----
m7 1000 -0.010000 6000 -0.001000 8000 -0.529107 11000 -0.016000 &
12000 -0.002000 13000 -0.033872 14000 -0.337021 19000 -0.013000 &
20000 -0.044000 26000 -0.014000 &
nlib=.80c hlib=.24h plib=.84p elib=.03e
c
c
c Método de corte
c -----
c CUT:H j 0.001
c CUT:E j 0.001
c CUT:N j 0.001
c CUT:P j 0.001
c
MODE H N P E
MPHYS ON
PRDMP 10000000 -1 1 2 0
nps 100000000

XSDIR

3. OXÍGENO-18

8018.00h 17.844540 filename route 1 1 164676 0 0 0.000E+00

4. ZINC-68

30068.00h 67.341340 filename route 1 1 151101 0 0 0.000E+00