



UNIVERSITAT
POLITÈCNICA
DE VALÈNCIA



ESCUELA TÉCNICA
SUPERIOR INGENIEROS
INDUSTRIALES VALENCIA

Curso Académico:

Agradecimientos

A mi familiar

A mi tutor

A mis compañeros de grado

Resumen

El objetivo principal de este proyecto es analizar la influencia de una serie de parámetros en la activación neutrónica de un material irradiado. Dichas propiedades son, entre otras, la potencia del flujo neutrónico incidente, el tiempo de irradiación que sufre el material, el tiempo de enfriamiento, la densidad del material irradiado y la vida media del núcleo activado.

Para la realización de este análisis, se utilizan diversos conocimientos de Física Nuclear, Protección Radiológica y Matemáticas que han sido adquiridos durante el transcurso del Grado en Ingeniería de la Energía.

Como herramienta principal en la realización del trabajo, se emplea el código MCNP, basado en el método de Monte Carlo. Mediante este código se lleva a cabo la simulación de la activación de un material en un reactor. Se utiliza un reactor nuclear, porque es el método más potente y, por tanto, el que mayores actividades generará.

A continuación, se determina qué potencia, flujo neutrónico y tiempos de irradiación y enfriamiento son necesarios para obtener unos valores de actividad exentos, tal como los establece la legislación. Serán tan bajos que la dosis producida por el material activado se encuentre por debajo de los límites.

Una utilidad de este estudio es el marcado con isótopos radiactivos de sustancias para analizar un proceso. Es necesario que la actividad de los radioisótopos del marcado sea exenta para que pueda ser un residuo convencional y la dosis potencialmente recibida por los trabajadores del proceso estén muy por debajo de los límites.

Palabras clave: Activación neutrónica, reactor nuclear, actividad, dosis, método de Monte Carlo, radioisótopos, trazadores.

Documentos contenidos en el Trabajo Final de Grado:

- Memoria
- Anexos
- Presupuesto

Índice de contenido

1.- INTRODUCCIÓN	9
1.1.- ANTECEDENTES	9
1.2.- JUSTIFICACIÓN	9
1.3.- MOTIVACIÓN	10
1.4.- OBJETIVOS	10
1.5.- ESTRUCTURA DEL TRABAJO	11
2.- CONCEPTOS BÁSICOS	12
2.1.- RADIATIVIDAD	12
2.1.1.- DEFINICIÓN	12
2.1.2.- LEY DE DESINTEGRACIÓN RADIATIVA	13
2.1.3.- DESINTEGRACIÓN ALFA, BETA Y GAMMA	15
2.2.- INTERACCIÓN RADIACIÓN-MATERIA	15
2.2.1.- TIPOS DE COLISIÓN	15
2.2.2.- SECCIONES EFICACES	16
2.2.3.- INTERACCIÓN DE LOS NEUTRONES CON LA MATERIA	17
2.3.- ACTIVACIÓN NEUTRÓNICA	18
2.3.1.- ECUACIONES Y PARÁMETROS	18
2.3.2.- APLICACIONES DE LA ACTIVACIÓN NEUTRÓNICA	19
2.4.- REACTOR	20
2.4.1.- COMPONENTES	21
2.4.2.- TIPOS DE REACTOR	21
2.5.- MARCADO CON RADIOISÓTOPOS	22
2.5.1.- PRINCIPIOS GENERALES	22
2.5.2.- APLICACIONES	23
2.6.- DOSIS	23
2.6.1.- DOSIMETRÍA	23
2.6.2.- DOSIS ABSORBIDA	24
2.6.3.- DOSIS EQUIVALENTE	24

2.6.4.- DOSIS EFECTIVA	25
2.6.5.- DOSIMETRÍA DE FOTONES	26
2.6.6.- LIMITACIÓN DE DOSIS: JUSTIFICACIÓN Y VALORES	26
3.- MÉTODO DE MONTE CARLO	28
3.1.- INTRODUCCIÓN	28
3.2.- CÓDIGO MCNP5	30
3.3.- APLICACIÓN DE MCNP AL PROYECTO	32
4.- CÁLCULO DE LA ACTIVIDAD: ESTUDIO DE PARTÍCULAS PARA MARCADO CON RADIOISÓTOPOS	33
1.1.- PRESENTACIÓN DEL CASO	33
4.2.- ENTRADA DE DATOS: INPUT	36
4.3.- EXTRACCIÓN DE DATOS: OUTPUT	40
5.- RESULTADOS Y DISCUSIÓN	43
5.1.- OBTENCIÓN DE RESULTADOS Y PARÁMETROS A ESTUDIAR	43
5.1.1.- OBTENCIÓN DE LA ACTIVIDAD ABSOLUTA	43
5.1.2.- VARIACIÓN DE LA ACTIVIDAD EN FUNCIÓN DEL TIEMPO DE IRRADIACIÓN	45
5.1.3.- VARIACIÓN DE LA ACTIVIDAD EN FUNCIÓN DEL TIEMPO DE ENFRIAMIENTO	46
5.1.4.- VARIACIÓN DE LA ACTIVIDAD EN FUNCIÓN DE LA POTENCIA DEL REACTOR	47
5.1.5.- VARIACIÓN DE LA ACTIVIDAD EN FUNCIÓN DEL VOLUMEN IRRADIADO	48
5.2.- ENSAYOS PROPUESTOS CON VALORES DE ACTIVIDAD EXENTOS	49
6.- CONCLUSIONES	60
7.- BIBLIOGRAFÍA	62

Lista de ilustraciones

ILUSTRACIÓN 1: PENETRABILIDAD DE LOS DISTINTOS TIPOS DE RADIACIÓN	13
ILUSTRACIÓN 2: ACTIVIDAD DE LA MUESTRA EN FUNCIÓN DEL TIEMPO A PARTIR DE LA ECUACIÓN 6	14
ILUSTRACIÓN 3: COLISIÓN INELÁSTICA: EXCITACIÓN E IONIZACIÓN	16
ILUSTRACIÓN 4: EJEMPLO DE SECCIÓN EFICAZ PARA FE-54 Y REACCIÓN (N,GAMMA) EN FUNCIÓN DE LA ENERGÍA ^[14]	17
ILUSTRACIÓN 5: ESQUEMA DE ACTIVACIÓN NEUTRÓNICA	19
ILUSTRACIÓN 6: REACCIÓN DE FISIÓN EN CADENA MANTENIDA	20
ILUSTRACIÓN 7: LOS ALAMOS NATIONAL LABORATORY[23]	28
ILUSTRACIÓN 8: REPRESENTACIÓN DEL ERROR EN EL MÉTODO DE MONTE CARLO EN FUNCIÓN DEL NÚMERO DE REPETICIONES	29
ILUSTRACIÓN 9: HISTORIA DE UN NEUTRÓN ^[28]	31
ILUSTRACIÓN 10: SECCIÓN EFICAZ DE LA REACCIÓN NA-23 (N,Γ) NA-24	34
ILUSTRACIÓN 11: SECCIÓN EFICAZ DE LA REACCIÓN MO-98 (N,Γ) MO-99	35
ILUSTRACIÓN 12: SECCIÓN EFICAZ DE LA REACCIÓN SB-123 (N,Γ) SB-124	36
ILUSTRACIÓN 13: VARIACIÓN DE LA ACTIVIDAD SEGÚN EL TIEMPO DE IRRADIACIÓN	45
ILUSTRACIÓN 14: DE LA ACTIVIDAD SEGÚN EL TIEMPO DE ENFRIAMIENTO	46
ILUSTRACIÓN 15: VARIACIÓN DE LA ACTIVIDAD SEGÚN LA POTENCIA DEL REACTOR	47
ILUSTRACIÓN 16: VARIACIÓN DE LA ACTIVIDAD SEGÚN EL VOLUMEN DE LA MUESTRA IRRADIADA	48
ILUSTRACIÓN 17: CASO DE EXENCIÓN 1	50
ILUSTRACIÓN 18: CASO DE EXENCIÓN 2	51
ILUSTRACIÓN 19: SODIO, POTENCIA 50W, VOLUMEN 0,1 CM3 CON Y SIN TIEMPO DE ENFRIAMIENTO DE 5 HORAS	52
ILUSTRACIÓN 20: CASO DE EXENCIÓN 3	52
ILUSTRACIÓN 21: SODIO, POTENCIA 1KW, VOLUMEN 0,1 CM3 CON Y SIN TIEMPO DE ENFRIAMIENTO DE 20 HORAS	53
ILUSTRACIÓN 22: CASO DE EXENCIÓN 4	54
ILUSTRACIÓN 23: CASO DE EXENCIÓN 5	55
ILUSTRACIÓN 24: CASO DE EXENCIÓN 6	56
ILUSTRACIÓN 25: CASO DE EXENCIÓN 7	57
ILUSTRACIÓN 26: CASO DE EXENCIÓN 8	58
ILUSTRACIÓN 27: CASO DE EXENCIÓN 9	59

Lista de tablas

- Memoria

TABLA 1: TIPOS DE REACTORES DE POTENCIA	22
TABLA 2: FACTORES DE PONDERACIÓN DE LA RADIACIÓN ^[20]	25
TABLA 3: FACTORES DE PONDERACIÓN TISULAR ^[20]	25
TABLA 4: LÍMITES ANUALES DE DOSIS ^[10]	27
TABLA 5: CARACTERÍSTICAS DEL SODIO	34
TABLA 6: CARACTERÍSTICAS DEL MOLIBDENO	35
TABLA 7: CARACTERÍSTICAS DEL ANTIMONIO	35
TABLA 8: RESULTADOS DEL OUTPUT PARA EL SODIO	40
TABLA 9: RESULTADOS DEL OUTPUT DE MOLIBDENO	41
TABLA 10: RESULTADOS DEL OUTPUT DEL ANTIMONIO	41
TABLA 11: VALORES DE EXENCIÓN	49

- Presupuesto

TABLA I: RELACIÓN DE UNIDADES	71
TABLA II: COSTE ASOCIADO CON UNIDAD 1.....	71
TABLA III: COSTE ASOCIADO CON UNIDAD 2.....	72
TABLA IV: COSTE ASOCIADO CON UNIDAD 3	72
TABLA V: COSTE ASOCIADO CON UNIDAD 4	72
TABLA VI: RESULTADO PARCIAL DEL PRESUPUESTO	73
TABLA VII: COSTE SIN IMPUESTOS.....	73
TABLA VIII: COSTE DE PRESUPUESTO TOTAL.....	73

MEMORIA

1.- INTRODUCCIÓN

1.1.- ANTECEDENTES

El análisis por activación neutrónica (AAN o NAA en sus siglas inglesas) fue descubierto en 1936 por Hevesy y Levi^[1]. Estos encontraron que las muestras que contenían ciertas tierras raras eran altamente radiactivas tras ser expuestas a una fuente de neutrones. A partir de este descubrimiento, se reconoció rápidamente la posibilidad del empleo de reacciones nucleares en las muestras, seguidas de unas mediciones de la radioactividad inducida, para facilitar la identificación cualitativa y cuantitativa de los elementos presentes en dichas muestras.

Una de las aplicaciones más extendidas del análisis por activación neutrónica se encuentra en el campo de la arqueología. Esta aplicación comenzó a mediados de la década de 1950^[1], cuando científicos en el “Brookhaven National Laboratory” (Sayre y Dodson 1957) reconocieron el potencial del AAN para relacionar artefactos con el origen de sus materiales mediante el análisis de su composición. El interés en esta técnica continuó expandiéndose durante las décadas de los 60, 70 y 80.

De forma paralela al descubrimiento del análisis por activación neutrónica, el uso del marcado con radioisótopos también ha sido ampliamente estudiado por la ciencia moderna. En 1936^[2], John Lawrence (considerado como el padre de la medicina nuclear) y Ernest Lawrence utilizaron por primera vez un radioisótopo en el tratamiento de una enfermedad.

En 1937, Joseph Hamilton fue el primero en usar estos radioisótopos trazadores (en concreto, sodio radiactivo) para estudiar el sistema cardiovascular humano. Durante estas investigaciones se generó Iodo-131 como consecuencia del bombardeo de teluro con deuterio el cuál ha sido muy utilizado en el tratamiento del cáncer de tiroides^[3].

Una vez mencionados los antecedentes generales de la activación neutrónica y el marcado radioisotópico, se da paso a los antecedentes directos a este trabajo realizados por distintos investigadores de la Universidad Politécnica de Valencia, entre ellos, el tutor de este trabajo^{[4][5][6]}.

1.2.- JUSTIFICACIÓN

La activación neutrónica y el uso de radioisótopos trazadores son técnicas que, si bien resultan desconocidas para el gran público, son de gran utilidad y ampliamente usadas en ámbitos muy diversos^[7]. Sin embargo, su correcto uso requiere de medidas de seguridad y estudios previos para asegurar que no producen un impacto negativo en materiales o personas.

Así, el objetivo principal de este trabajo reside en la búsqueda de los parámetros que intervienen en el proceso de irradiación (por ejemplo, el tiempo de irradiación, potencia del reactor o tiempo de enfriamiento) de la muestra para que sea posible asegurar que su

actividad es lo suficientemente reducida como para estar por debajo de los límites de actividades exentas marcados por el Consejo de Seguridad Nuclear^[8].

Una vez se obtiene un valor de actividad exento en la muestra irradiada que se pretende utilizar en alguna de sus muchas aplicaciones, se puede considerar que su transporte, tratamiento o uso resulta seguro. De esta forma, se llega a la justificación de la necesidad de este trabajo: establecer, mediante una simulación, las condiciones para afirmar que el manejo del material irradiado resulta seguro para las personas y materiales que estarán en contacto con el material radiactivo o próximo al mismo. Además, una actividad exenta en la muestra permite que el trabajo a realizar pueda ser desarrollado en un área no controlada.

1.3.- MOTIVACIÓN

Asignaturas como Tecnología Nuclear o Protección Radiológica, cursadas durante el cuarto curso del Grado en Ingeniería de la Energía (GIE), han despertado en el alumno un interés por el campo de la Ingeniería Nuclear. Este interés ha desembocado en una búsqueda de un trabajo adecuado dentro de esta rama de la ingeniería.

Otro de los motivos detrás de la elección de este trabajo era la adquisición de nuevas capacidades en cuanto al uso de software y nuevos conocimientos que profundizaran más en los campos estudiados en la carrera. Con ello, el alumno pretendía buscar un trabajo que ampliara más su formación académica en lugar de tan sólo utilizar aquellas herramientas y conocimientos ya empleados. Este objetivo se logra mediante el uso del código MCNP basado en el método de Monte Carlo y el estudio de la activación neutrónica, ambos desconocidos para el alumno antes de la realización del trabajo.

Además, la búsqueda (previa a la decisión de la realización de un trabajo en este ámbito) de los diversos usos que puede tener la activación neutrónica o el marcado isotópico también ha ampliado el interés del alumno en la realización de este trabajo.

1.4.- OBJETIVOS

Los objetivos que se han establecido para este proyecto son los siguientes:

- Analizar, con carácter general, la influencia de una serie de parámetros en la activación neutrónica de un material irradiado.
- Desarrollo de un modelo MCNP para simular la actividad del material irradiado.
- Determinar qué parámetros y qué valores causan que la muestra disminuya su actividad, en particular hasta valores exentos.

1.5.- ESTRUCTURA DEL TRABAJO

Además del presente capítulo introductorio, la memoria de este trabajo se divide en una serie de capítulos que se detallan a continuación:

- En el capítulo 2 se explican los diversos conceptos físicos necesarios para la realización y comprensión del resto del trabajo. Entre otras, se muestran ideas tales como la interacción radiación-materia, la activación neutrónica o el marcado isotópico.
- El capítulo 3 sirve como introducción al método de Monte Carlo y al código MCNP5 que emplea dicho método. Esta herramienta es muy importante para la realización del presente proyecto y, por tanto, su introducción se desarrolla en un capítulo propio.
- En el capítulo 4 se procede a presentar completamente el caso práctico a resolver, el análisis que se ha realizado del mismo y la metodología empleada para el correcto hallazgo de resultados.
- Complementando al anterior capítulo, el capítulo 5 sirve como exposición y debate de los resultados obtenidos a través de la labor mostrada anteriormente.
- El último capítulo se reserva para las conclusiones, es decir, para el análisis del cumplimiento de los objetivos marcados en la introducción y, por tanto, del éxito del trabajo en su conjunto.
- A continuación se listan las referencias bibliográficas en orden de aparición que se han ido citando durante toda la extensión de la presente memoria.
- Por último, se incluyen una serie de anexos con material adicional de interés para la lectura y comprensión de esta memoria.

Adicionalmente a la memoria del trabajo, se presenta otro documento que está dedicado al presupuesto para la realización del trabajo.

2.- CONCEPTOS BÁSICOS

Se ha usado este segundo capítulo con el objetivo de definir y explicar unos conocimientos teóricos sobre los que fundamentar el trabajo expuesto en esta memoria. Estos conceptos comienzan dentro de un ámbito de la física más general hasta adentrarse en ideas más avanzadas dentro de la física nuclear.

Algunos de estos conocimientos son: la radiactividad, las desintegraciones, la actividad de una muestra, la interacción entre la radiación y la materia, el reactor nuclear, las secciones eficaces, la activación neutrónica o la dosimetría.

2.1.- RADIATIVIDAD

2.1.1.- DEFINICIÓN

Antes de poder exponer el concepto de radiactividad, es necesario realizar dos definiciones previas que ayudarán a la comprensión del mismo:

- Nucleido es aquella especie nuclear caracterizada por su número másico (A) y su número atómico (Z), según expone la RAE^[9]. Se representa como X_Z^A .
- Los nucleidos que no sufren transformaciones nucleares en ausencia de acciones externas se denominan nucleidos estables. Por su parte, aquellos que sí experimentan dichas transformaciones se conocen como nucleidos inestables, radiactivos o radionucleidos.

Así, la radiactividad es la propiedad que presentan los radionucleidos, nucleidos inestables, de buscar la estabilidad. Para ello, se transforman en otras especies nucleares, emitiendo radiaciones^[10]. La radiactividad fue descubierta en 1896 por Henri Becquerel mientras estudiaba las propiedades de los Rayos X, descubiertos el año anterior. Becquerel descubrió que el uranio emitía radiación sin una fuente externa de energía y, por tanto, descubrió la radiactividad. Sin embargo, el término radiactividad no fue acuñado por él, sino por Marie y Pierre Curie^[11].

La radiactividad natural y la artificial tan sólo se diferencian por el origen de la inestabilidad del nucleido, ya que las radiaciones emitidas son similares sea cuál sea dicho origen. Las radiaciones que emiten los nucleidos inestables se han catalogado en tres tipos:

- Radiación α (alfa). Formada por un núcleo de helio, es decir, dos protones y dos neutrones.
- Radiación β (beta). Formada por electrones o positrones.
- Radiación γ (gamma). Radiación electromagnética.

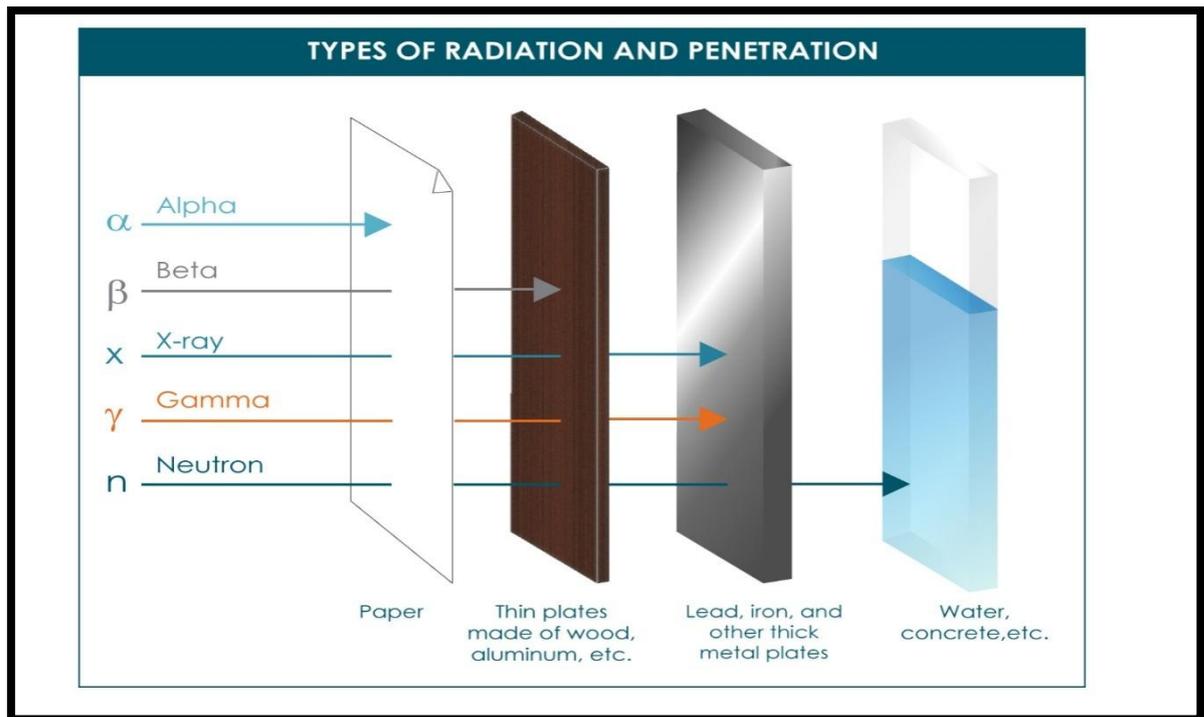


Ilustración 1: Penetrabilidad de los distintos tipos de radiación

2.1.2.- LEY DE DESINTEGRACIÓN RADIATIVA

Una vez definida la radiactividad y presentados los distintos tipos de radiación que pueden emanar de un radionucleido, se procede a presentar la ley de desintegración radiactiva y los diferentes conceptos que la componen. Dicha ley resume eficientemente el comportamiento de un elemento radiactivo y su proceso de desintegración en otras partículas, radiactivas o no.

Sin embargo, de nuevo antes de llegar a la mencionada ley, se procede a definir los diferentes elementos que la componen y que resultan de uso común en el estudio nuclear:

- **Actividad.** Se denomina actividad (A) absoluta de una muestra de material radiactivo al número de desintegraciones que tienen lugar por unidad de tiempo^[10]. La unidad de actividad en el sistema internacional es el Becquerel (Bq), aunque también se emplea el Curio (Ci) con la equivalencia $1 \text{ Ci} = 3,7 \cdot 10^{10} \text{ Bq}$. También resulta posible expresar la actividad por unidad de masa o volumen, es decir, la actividad específica de una muestra.

La actividad viene dada por la ecuación 1 y representa la desaparición (signo negativo) de núcleos (N) durante un tiempo (t). Adicionalmente, la actividad también puede expresarse como en la ecuación 2:

$$A = -\frac{dN}{dt} \quad [1]$$

$$A = \lambda \cdot N \quad [2]$$

- Constante de desintegración radiactiva (λ). Es una constante de proporcionalidad entre la actividad de una muestra y el número de núcleos presentes en la misma, cómo se puede extraer de la ecuación 2^[10].
- Periodo de semidesintegración ($T_{1/2}$). Representa el intervalo de tiempo necesario para que la actividad se reduzca a la mitad. Este periodo tiene unidades de tiempo y se define con la ecuación 3:

$$T_{1/2} = \frac{\ln 2}{\lambda} \quad [3]$$

- Vida media (τ). Es la inversa de la constante de semidesintegración.

Desde la ecuación 1 y 2 se puede hallar la ley de desintegración radiactiva, expuesta en la ecuación 4. En ella, se puede ver representado que el diferencial de núcleos en función del tiempo es el resultado de la multiplicación con de la constante de desintegración radiactiva por el número de núcleos inicial, con un signo negativo debido a que los núcleos van desintegrándose con el tiempo.

$$\frac{dN}{dt} = -\lambda \cdot N \quad [4]$$

Integrando dicha ley, se halla la ecuación 5. A su vez, multiplicando la ecuación 5 por la constante de desintegración se obtiene la ecuación 6, dónde se puede representar la actividad de la muestra en función del tiempo, la constante de desintegración radiactiva y la actividad inicial. Además, dicha ecuación 6 puede ser representada de forma gráfica, cómo se expone en la Ilustración a continuación:

$$N(t) = N_0 \cdot e^{-\lambda \cdot t} \quad [5]$$

$$A(t) = A_0 \cdot e^{-\lambda \cdot t} \quad [6]$$

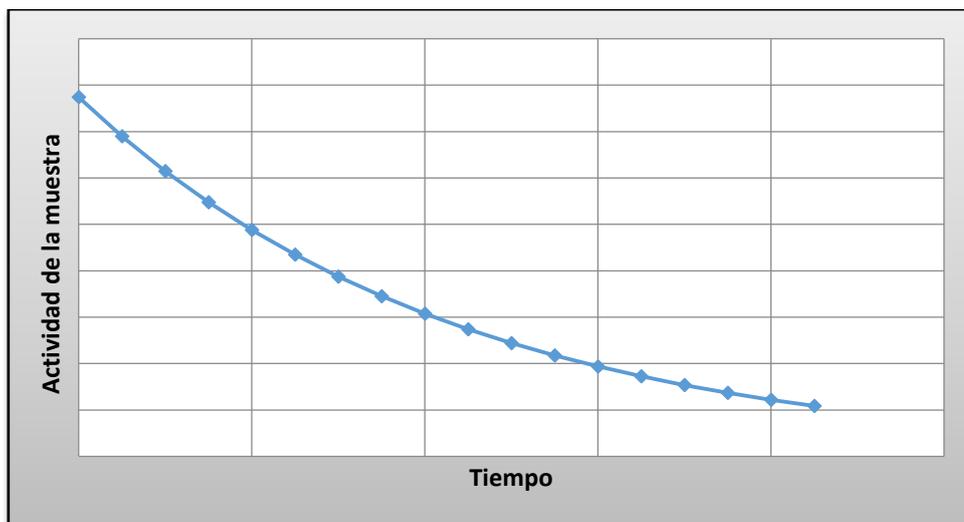
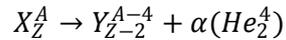


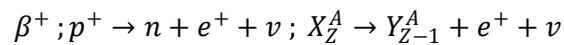
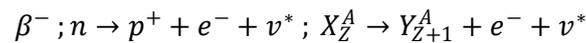
Ilustración 2: Actividad de la muestra en función del tiempo a partir de la ecuación 6

2.1.3.- DESINTEGRACIÓN ALFA, BETA Y GAMMA

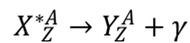
La desintegración α fue el primer tipo de proceso radiactivo estudiado. El espectro α es discreto y todos los emisores alfa son nucleidos pesados. El proceso de desintegración sigue la siguiente expresión, siendo X el nucleido emisor e Y el nucleido hijo:



La desintegración beta tiene lugar a causa de la inestabilidad debida al exceso o defecto en el número de neutrones respecto al que tienen los nucleidos estables del mismo número másico^[10]. Su espectro es continuo y existen dos tipos de desintegraciones β : beta positiva (defecto de neutrones) y beta negativa (exceso de neutrones), según las expresiones siguientes:



La desintegración gamma se produce cuando un núcleo excitado pasa a un nivel de menor energía, emitiendo un fotón gamma^[12]. El espectro energético de la radiación γ es discreto y su expresión es:



2.2.- INTERACCIÓN RADIACIÓN-MATERIA

Una característica muy importante de la radiación es su capacidad de interactuar con los átomos de la materia. En dicha interacción, la radiación deposita parcial o totalmente su energía, causando una variedad de efectos en la materia que recibe la colisión. La comprensión de estos fenómenos permitirá prevenir y minimizar los efectos de las radiaciones, así como potenciar los efectos que puedan ser usados en una aplicación determinada^[10].

Los efectos producidos dependen de una gran variedad de factores. Entre ellos, se encuentran el tipo de radiación incidente, la energía de dicha radiación o el material con el que interacciona. Ampliando con respecto al tipo de radiación incidente, ésta se suele catalogar en tres grupos:

- Partículas cargadas, es decir, partículas α , β^+ , β^- , protones, deuterones y productos de fisión
- Fotones, es decir, rayos X y radiación γ .
- Neutrones, que carecen de carga eléctrica.

2.2.1.- TIPOS DE COLISIÓN

Existen tres tipos fundamentales de interacción o colisión entre la radiación y la materia, los cuales se describen a continuación^[10]:

- Colisión elástica. En este tipo de interacción, la partícula incidente resulta desviada de su trayectoria a causa de los átomos del blanco contra el que colisiona y cede una cantidad de energía cinética que es absorbida por los átomos con los que ha interactuado. Así pues, no se produce alteración atómica ni nuclear.
- Colisión inelástica. En esta ocasión, el choque modifica los átomos blancos. Se producen excitaciones (paso de electrones a niveles energéticos menos ligados) o ionizaciones (expulsión de un electrón del átomo).

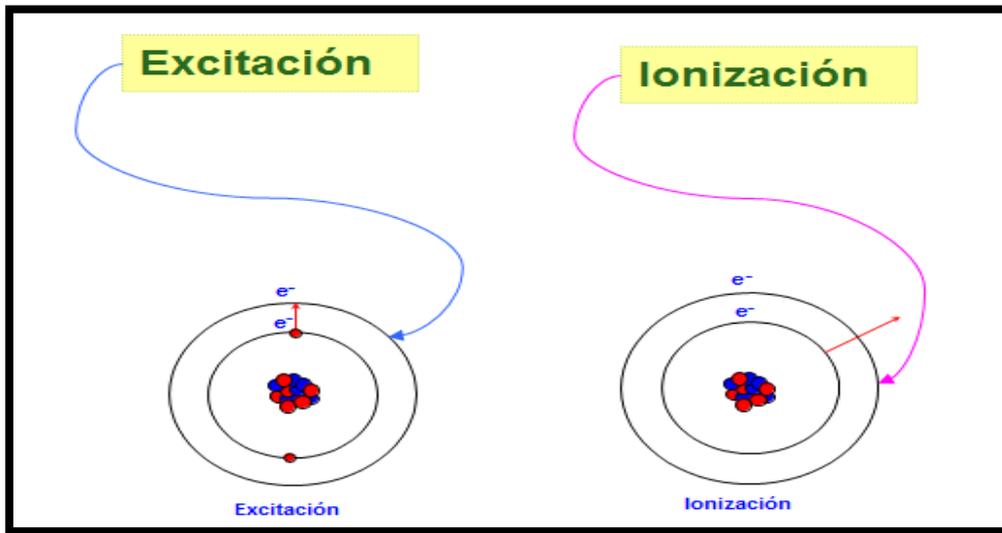


Ilustración 3: Colisión inelástica: Excitación e ionización

- Colisión radiativa. En esta interacción, la partícula cargada se frena o desvía al interactuar con los átomos blancos del medio y se emite radiación electromagnética. La colisión radiativa es el fundamento físico de la producción de Rayos X y de la radiación de frenado.

2.2.2.- SECCIONES EFICACES

La probabilidad de que una partícula interactúe con un núcleo para dar una reacción concreta depende del tipo de núcleo blanco y de la energía de la partícula incidente. Así, dicha probabilidad se conoce como sección eficaz microscópica (σ) del núcleo para una reacción determinada^[13]. La sección eficaz microscópica depende de la energía de la partícula que incide y se expresa en unidades de superficie, concretamente con el barn en el sistema internacional ($1 \text{ barn} = 10^{-24} \text{ cm}^2$).

Otra forma de comprender el concepto de sección eficaz es equiparando este valor al área efectiva que el núcleo tiene con respecto a la partícula incidente para una reacción. Cuánta mayor sea esta área efectiva, mayores son las posibilidades de interacción.

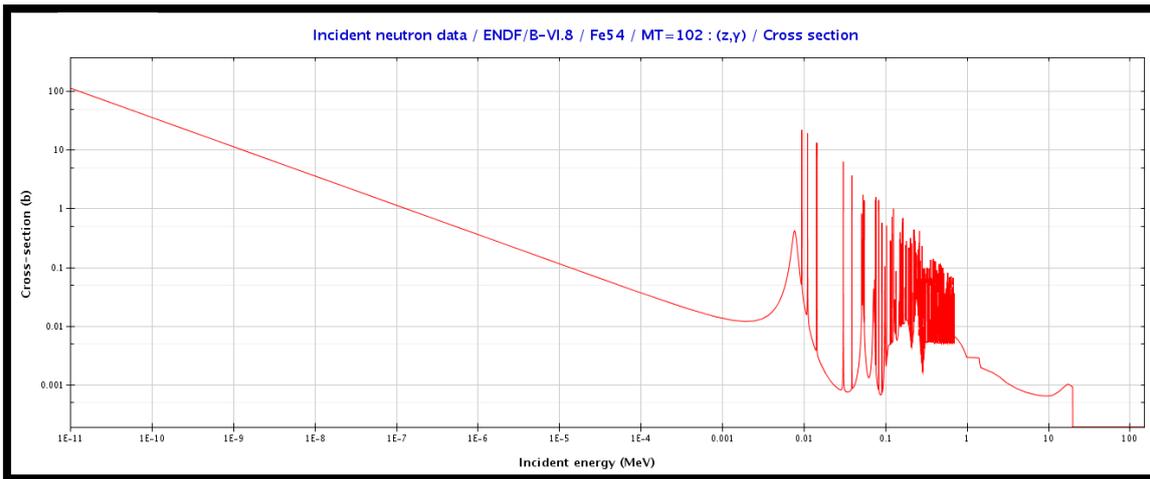


Ilustración 4: Ejemplo de sección eficaz para Fe-54 y reacción (n,γ) en función de la energía^[14]

Además de la sección eficaz microscópica, también existe la sección eficaz macroscópica (Σ). Éste concepto se obtiene al multiplicar σ por la densidad atómica del material blanco (N , en átomos/cm³) cómo se expresa en la ecuación 7. La sección eficaz macroscópica representa la probabilidad de que ocurra una reacción por unidad de longitud recorrido por la partícula incidente y se expresa en dimensiones L⁻¹, es decir, cm⁻¹.

$$\Sigma = N \cdot \sigma \quad [7]$$

2.2.3.- INTERACCIÓN DE LOS NEUTRONES CON LA MATERIA

Para el presente trabajo resulta de especial interés introducir la interacción de los neutrones con la materia. Dado que los neutrones no poseen carga eléctrica, no producen ionización ni otros fenómenos como la radiación de frenado.

El parámetro que gobierna esta interacción es la llamada sección eficaz, que ha sido introducida en el apartado 2.2.2 y es un parámetro distinto para cada tipo de reacción neutrónica posible. Estas reacciones son las siguientes^[10]:

- Dispersión elástica, con la forma $X(n,n)X$. Puede tener lugar a cualquier energía del neutrón incidente. Sólo hay intercambio de energía entre el neutrón incidente y el núcleo colisionado.
- Dispersión inelástica, con la forma $X(n,n)X^*$. El neutrón incidente es capturado para ser seguidamente re-emitido con una energía cinética menor. Mientras, el núcleo ha sido excitado durante el proceso y volverá a su estado fundamental emitiendo radiación γ .
- Captura radiativa, con la forma $X^A(n,\gamma)X^{A+1}$. Mediante esta reacción se explica que ciertos materiales absorbentes de neutrones sean emisores de radiación γ .
- Reacciones (n,p) y (n, α). También conocidas como reacciones de transmutación. El neutrón incidente debe aportar la energía suficiente para vencer la energía de enlace de la partícula.
- Fisión. El núcleo pesado absorbe un neutrón y se escinde en dos fragmentos, además de varias partículas, radiación y una gran liberación de energía.

Las secciones eficaces microscópicas se dividen en dos grandes grupos según la naturaleza de la reacción producida: sección eficaz de dispersión o *scattering* (σ_s) y sección eficaz de absorción (σ_a). A su vez, la sección eficaz de dispersión se divide en la sección eficaz de dispersión elástica (σ_{se}) y la sección eficaz de dispersión inelástica (σ_{si}); mientras que la sección eficaz de absorción se divide en la sección eficaz de fisión (σ_f), la sección eficaz de captura (σ_c) y otras reacciones^[13].

Así, la sección eficaz microscópica total resulta ser la suma de las secciones eficaces para cada reacción, como se observa en la ecuación 8:

$$\sigma_{total} = \sigma_s + \sigma_a = \sigma_{se} + \sigma_{si} + \sigma_f + \sigma_c + \dots \quad [8]$$

2.3.- ACTIVACIÓN NEUTRÓNICA

La activación neutrónica es una reacción en la cual un núcleo estable se convierte en uno radiactivo tras la interacción con un neutrón incidente, normalmente por absorción.

2.3.1.- ECUACIONES Y PARÁMETROS

Para llegar a la eventual ecuación que describe el fenómeno de la activación^[6], es necesario primero estimar una tasa de interacciones Q (reacciones/cm³ · s) para cada reacción, definido como:

$$Q = C \int \Phi(E) \cdot \sigma(E) \cdot dE \quad [9]$$

Siendo $\Phi(E)$ el flujo neutrónico (neutrones/cm² · s), $\sigma(E)$ la sección eficaz microscópica en barn y C un factor de normalización (átomos/barn · cm) que se extrae desde la ecuación 10:

$$C = \frac{\rho \cdot N_A \cdot 10^{-24} \cdot \varepsilon}{M} \quad [10]$$

donde ρ representa la densidad (g/cm³), N_A es el número de Avogadro, 10^{-24} es la equivalencia entre barn y centímetros cuadrados, ε representa la proporción del isótopo en el material y M es el peso molecular de dicho isótopo. Por otra parte, para cada isótopo j generado, se puede realizar el balance que se muestra en el ecuación 11. Integrandolo, se consigue la ecuación 12:

$$\frac{dN_j}{dt} = Q_j - (\lambda_j \cdot N_j) \quad [11] \quad N_j(t) = \frac{Q_j}{\lambda_j} * (1 - \exp(-\lambda_j \cdot t_i)) \quad [12]$$

Donde λ es la constante de desintegración radiactiva, N es la concentración del isótopo j en núcleos/cm³, y t_i representa el tiempo de irradiación al que ha sido sometido el material. Si además se introduce un tiempo de refrigeración en el proceso, es decir, el tiempo que pasa

desde que el material ha dejado de ser irradiado hasta el instante de la medición, la ecuación resultante es:

$$N_j(t) = \frac{Q_j}{\lambda_j} * (1 - \exp(-\lambda_j \cdot t_i)) \cdot \exp(-\lambda_j \cdot t_e) \quad [13]$$

Por último, multiplicando por λ_j , se obtiene la expresión para el cálculo de la actividad de un material activado (ecuación 14). Esta ecuación no obtiene la actividad, sino la actividad volumétrica (Bq/cm³). Así pues, el valor obtenido en la ecuación 14 será multiplicado por el volumen de la muestra activada si se pretende hallar el valor de actividad.

$$A_j(t) = Q_j * (1 - \exp(-\lambda_j \cdot t_i)) \cdot \exp(-\lambda_j \cdot t_e) \quad [14]$$

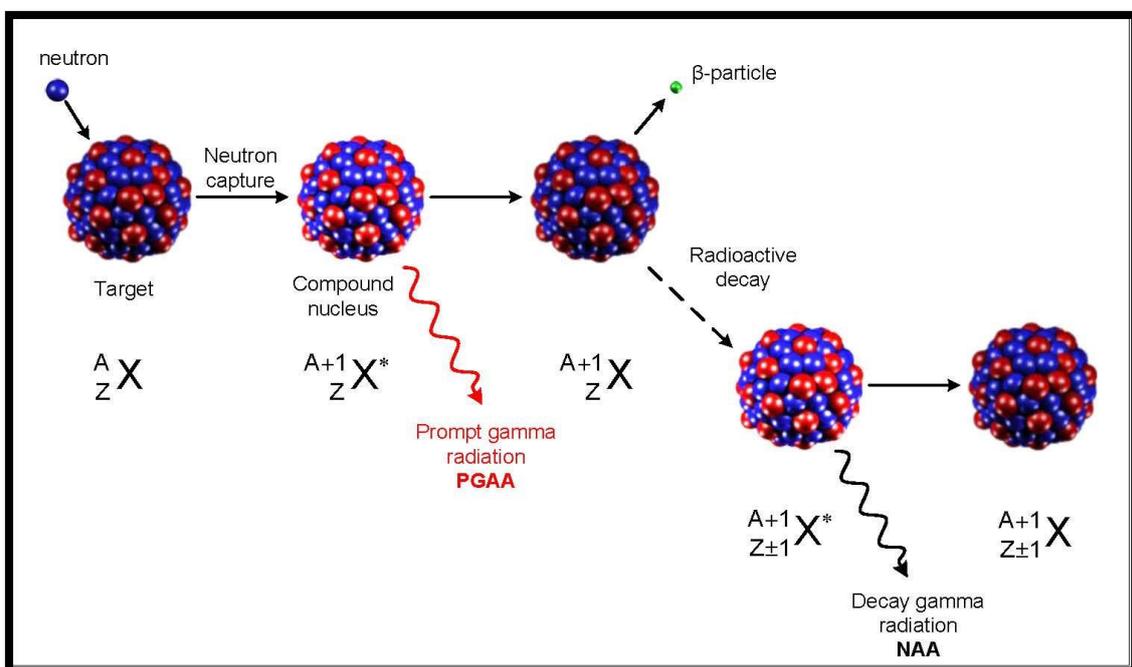


Ilustración 5: Esquema de activación neutrónica

2.3.2.- APLICACIONES DE LA ACTIVACIÓN NEUTRÓNICA

Las aplicaciones del análisis por activación neutrónica son numerosas, si bien destacan especialmente las aplicaciones médicas e industriales. A continuación se citan algunos de los posibles usos de la técnica de activación neutrónica^{[7][15]}:

- **Arqueología:** Uso de la activación neutrónica para la clasificación de una muestra arqueológica y para tratar de identificar un origen.
- **Geología:** Análisis de muestras de rocas y su composición.
- **Ciencias del suelo:** Uso de trazadores para conocer las corrientes subterráneas, procesos de fertilización o composición del suelo, entre otros.
- **Análisis ambiental:** Trazadores para estudiar el recorrido de desperdicios (filtraciones en el suelo, llegada al mar, contaminación de los alrededores, etc.)

- **Industria:** Detección de impurezas o dopados en la industria de los semiconductores, producción de compuestos químicos, desinfección de residuos, estudio de flujos mediante trazadores radiactivos.
- **Medicina:** Uso de radioisótopos trazadores para el desarrollo de medicinas (dónde afecta dicho fármaco), radiodiagnóstico, estudio de diversos cánceres como el de tiroides o piel, estudios de metabolismo.

2.4.- REACTOR

Se define un reactor nuclear como una instalación capaz de iniciar, mantener y controlar las reacciones de fisión en cadena que tienen lugar en el núcleo del reactor^[16], compuesto por el combustible, el refrigerante, los elementos de control, los materiales estructurales y el moderador en el caso de los reactores nucleares térmicos.

Para mantener la reacción de fisión en cadena, es necesario mantener un delicado balance neutrónico entre los neutrones que se generan mediante las reacciones de fisión y los neutrones que escapan del reactor o se pierden a través de las reacciones de captura. Es decir, en el reactor nuclear se deben compensar las pérdidas de neutrones (absorciones y fugas) con la producción de neutrones por fisión^[10]. El resultado de este balance se plasma en la condición de criticidad, condición que se cumple cuando la población neutrónica no varía con el tiempo. Así, si un reactor es supercrítico significa que produce más neutrones de los que pierde causando un descontrol en la reacción de fisión en cadena, mientras que un reactor subcrítico perdería más neutrones de los que produce, deteniendo así la reacción en cadena.

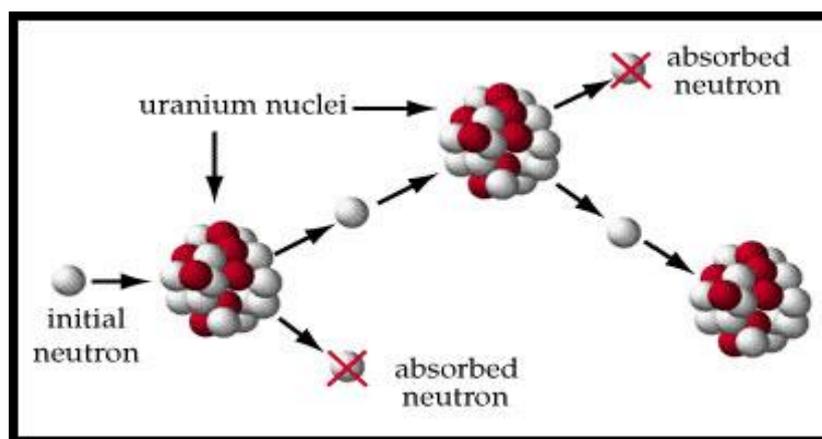


Ilustración 6: Reacción de fisión en cadena mantenida

Debido a que los reactores son uno de los métodos más empleados en la activación neutrónica de una muestra, se ha decidido dedicar este apartado a los reactores nucleares. Además, también son la fuente de activación que mayores actividades puede generar pero aún así se pueden conseguir niveles de actividad exentos.

2.4.1.- COMPONENTES

Un reactor nuclear está compuesto por los siguientes elementos funcionando conjuntamente en busca del balance neutrónico preciso:

- Estructura. Son todos aquellos elementos constructivos que conforman el propio reactor nuclear, como la vasija del reactor, válvulas, tubos, intercambiadores, etc. Estos elementos suelen estar hechos de acero u otras aleaciones que son capaces de soportar las temperaturas que se producen dentro del reactor y con las condiciones mecánicas que se precisan.
- Combustible nuclear. Es un elemento clave en el funcionamiento del reactor ya que es el material que contiene núcleos fisiles (en los cuales ocurre la fisión). El combustible más utilizado es el óxido de uranio, siendo este uranio enriquecido hasta el 3% de U-235^[17]. También existen reactores que usan otros tipos de combustible nuclear menos comunes, como el uranio natural o los óxidos mixtos.
- Refrigerante. La misión del refrigerante consiste en extraer el calor generado en la fisión para evitar que éste se acumule en el combustible^[10]. Con este fin, se utilizan materiales líquidos o gaseosos como: agua (más común), agua pesada, CO₂ o helio, entre otros.
- Moderador. Se encuentra presente en los reactores térmicos. Su propósito es conseguir que los neutrones liberados en las reacciones de fisión colisionen con dicho material moderador y así reduzcan su energía hasta valores óptimos para que se produzca la fisión deseada. Los materiales más usados para ello son el agua, el agua pesada y el grafito.
- Elementos de control. Estos elementos sirven para controlar, con la variación necesaria en cada caso, la reacción de fisión en cadena que se está produciendo y mantener así la condición de criticidad en el reactor nuclear. El elemento más representativo de este grupo son las barras de control constituidas, por ejemplo, por una aleación de boro.
- Blindaje. Su función es la de conseguir que cualquier radiación producida en el proceso no llegue hasta zonas no protegidas, ya sea en forma de radiación γ , neutrón o productos de fisión. Aunque se pueden usar muchos materiales diferentes, el más común es el hormigón

2.4.2.- TIPOS DE REACTOR

Existen multitud de clasificaciones posibles para los reactores nucleares: en función de la energía de neutrones, del tipo de refrigerante primario, del moderador empleado, etc. Sin embargo, para este apartado se ha decidido clasificarlos según su finalidad ya que se ha considerado que es la forma de abarcar el mayor rango posible de distintos reactores. Con ello, se clasifican en los siguientes seis tipos^{[10][18]}:

- Reactores de investigación. Como su propio nombre indica, son una herramienta de investigación aplicada.

- Reactores de enseñanza. Su finalidad es la formación de personal para la operación de reactores nucleares comerciales. Se encuentran en desuso ya que se han sustituido por simuladores.
- Reactores de irradiación. Tipo de reactor idóneo para realizar la activación neutrónica que se plantea en este trabajo ya que su función principal es la producción de radioisótopos.
- Reactores de desarrollo. Se trata de reactores “prototipo” cuya función es ofrecer datos sobre la física e ingeniería de un proyecto y tipo de reactor. Puede ser un reactor experimental (para pruebas de todo tipo) o una réplica a escala del reactor que se desea construir.
- Reactores de potencia. Se resumen los reactores de potencia de operación comercial en la siguiente tabla:

Tabla 1: Tipos de reactores de potencia

	Combustible	Moderador	Refrigerante	Otros
Magnox	Uranio natural	Grafito	CO2	Diseño de UK. Reactor antiguo, en desuso.
AGR	Uranio enriquecido	Grafito	CO2	Diseño en UK. Aún algunos en uso.
PWR	Uranio enriquecido	Agua ligera	Agua ligera	Diseño en USA. Muy usado.
BWR	Uranio enriquecido	Agua ligera	Agua ligera	Diseño en USA. Muy usado.
CANDU	Uranio natural	Agua pesada	Agua pesada	Diseño en Canadá. Recarga de combustible se hace en funcionamiento.
RBMK	Uranio enriquecido	Grafito	Agua ligera	Diseño en URSS.

- Reactores de producción de material fisil. Principalmente para la obtención de plutonio.

2.5.- MARCADO CON RADIOISÓTOPOS

2.5.1.- PRINCIPIOS GENERALES

Esta técnica se conoce con diversos nombres, como marcado con radioisótopos, radioisótopos trazadores o simplemente trazadores. El fundamento de esta técnica es la introducción de una sustancia en un sistema, alterando éste lo menos posible, con el objeto de medir alguna de sus propiedades aprovechando la facilidad de detección de la sustancia introducida^[15]. La sustancia introducida puede ser sólida, soluble, colorante o radiactiva, siendo ésta última la que se aplica en el ámbito en que se desarrolla este proyecto.

Además de la facilidad para ser detectados, los trazadores radiactivos tienen la ventaja de que desaparecen del medio por desintegración transcurridos varios períodos. Por el contrario, cabe destacar que los radioisótopos empleados suelen tener una disponibilidad limitada, además de cara.

El marcado con radioisótopos es una técnica muy ligada a la activación neutrónica debido a que la activación neutrónica es uno de los métodos con los que se puede obtener los radioisótopos que serán utilizados como trazadores. La relación de ambas técnicas con el presente trabajo será explorada con mayor profundidad en apartados posteriores en esta memoria.

2.5.2.- APLICACIONES

El trazador ideal^[15] no debe interaccionar con el medio, ni separarse del medio fluido, debe ser estable química y biológicamente, no debe alterar las propiedades fisicoquímicas del medio ni debe contaminar permanentemente el medio. Adicionalmente, es conveniente que este trazador sea de fácil manejo, fácil obtención, detectable a bajas cantidades, de elevada solubilidad, etc.

Por la gran cantidad de requisitos, resulta muy importante hacer una buena elección del radioisótopo a utilizar y cada uno de ellos será útil para unas aplicaciones muy concretas, algunas de las cuáles son:

- Medida de caudales de fluidos. Es una de las aplicaciones más extendidas
- Medida de velocidades en un fluido.
- Medida de tiempos de residencia.
- Medida de tiempos de mezcla.
- Medidas en hidrología subterránea.
- Medida de desgaste de piezas sujetas a frotamiento.
- Estudio de difusión en componentes de aleación.
- Búsqueda de fugas de gases en tuberías.
- Y un largo etcétera, ya que son muchas y muy diversas las aplicaciones industriales en las que se puede emplear el marcado con radioisótopos.

2.6.- DOSIS

2.6.1.- DOSIMETRÍA

La dosimetría es el estudio de las dosis absorbidas por un material o persona a causa de las radiaciones^[10]. La dosimetría nace paralelamente al comienzo de los descubrimientos y aplicaciones de las radiaciones, ya que su objetivo principal es caracterizar cuantitativamente la radiación y sus efectos, mediante la definición de magnitudes y unidades que sirvan de apoyo a dicho objetivo.

Una de los primeros estudios en este campo fue la cuantificación de las ionizaciones producidas por fotones en el aire. Más tarde, el uso de otros tipos de radiaciones tuvo como consecuencia la ampliación de la dosimetría y sus medidas para adaptarse a las nuevas técnicas y seguir mejorando la protección de las personas ante las radiaciones.

La dosimetría es un campo que requiere constante estudio en busca de un mejor entendimiento de los efectos que producen las radiaciones en el ser humano y su entorno, una mejor protección ante estos efectos y un tratamiento más adecuado si, desgraciadamente, la protección no fuera suficiente para evitar la exposición.

2.6.2.- DOSIS ABSORBIDA

La dosis absorbida es una magnitud que caracteriza la energía absorbida por un material cualquiera a causa de cualquier tipo de radiación. La dosis absorbida mide la energía media depositada por la radiación en la unidad de masa del medio considerado y en un punto determinado del mismo^[10], expresado según la ecuación 15:

$$D = \frac{d\varepsilon}{dm} \quad [15]$$

$$\dot{D} = \frac{dD}{dt} \quad [16]$$

La unidad de dosis absorbida en el Sistema Internacional es el Gray (Gy), con las equivalencias siguientes: 1 Gy = 1 J/kg = 100 rad.

La dosis absorbida también puede ser expresada como tasas de dosis absorbida (ecuación 16). La tasa de dosis absorbida se puede definir como la variación de la dosis absorbida en la unidad de tiempo, expresándose en unidades de Gy/s.

2.6.3.- DOSIS EQUIVALENTE

A igualdad de dosis absorbida, el daño biológico producido por la radiación difiere según el tipo de radiación incidente. A consecuencia de este hecho, se introdujo una nueva magnitud en la dosimetría: la dosis equivalente (H_T), es decir, la dosis absorbida en el tejido T ponderada en función del tipo y la calidad de la radiación R ^[19]. Se expresa con la ecuación 17 y, en el caso de que haya diferentes tipos de radiación siendo estudiados en la misma medición, se aplica la ecuación 18:

$$H_T = W_R \cdot D_{T,R} \quad [17]$$

$$H_T = \sum_R W_R \cdot D_{T,R} \quad [18]$$

$$\dot{H} = \frac{dH}{dt} \quad [19]$$

La unidad de dosis equivalente en el Sistema Internacional es el Sievert (Sv) que es la dosis equivalente correspondiente a una dosis absorbida de 1 Gy. De la misma forma que en el apartado 2.6.2., la dosis también puede aparecer expuesta en forma de tasa de dosis equivalente, como se ve en la ecuación 19.

Tabla 2: Factores de ponderación de la radiación^[20]

Tipo de radiación e intervalo de energía	Factor de ponderación (W_R)	
Fotones, todas las energías	1	
Electrones y muones, todas las energías	1	
Neutrones	Energía < 10 keV	5
	10 keV a 100 keV	10
	100 keV a 2 MeV	20
	2 MeV a 20 MeV	10
	> 20 MeV	5
Protones, salvo los de retroceso, de energía >2 MeV	5	
Partículas alfa, fragmentos de fisión, núcleos pesados	20	

2.6.4.- DOSIS EFECTIVA

Además de las anteriores, una nueva magnitud fue añadida para tener en cuenta la irradiación no uniforme del cuerpo y las diferentes susceptibilidades de los diversos órganos y tejidos. Esta magnitud es la dosis efectiva y su unidad es el Sievert (Sv), igual que en la dosis equilibrada. Se expresa mediante la ecuación 20, siendo ésta una ampliación de la ecuación 18:

$$E = \sum_T W_T \cdot H_T = \sum_T W_T \sum_R W_R \cdot D_{T,R} \quad [20]$$

Donde W_T es el factor de ponderación tisular del tejido u órgano T.

Tabla 3: Factores de ponderación tisular^[20]

Tejido u órgano	W_T
Gónadas	0,20
Médula ósea (roja)	0,12
Colon	0,12
Pulmón	0,12
Estómago	0,12
Vejiga	0,05
Mama	0,05
Hígado	0,05
Esófago	0,05
Tiroides	0,05
Piel	0,01
Superficie de los huesos	0,01
Resto del organismo	0,05

2.6.5.- DOSIMETRÍA DE FOTONES

El cálculo dosimétrico es conveniente para acompañar a los estudios de activación neutrónica debido a las reacciones que tienen lugar en dicha activación son del tipo $X + n \rightarrow Y + \gamma$, es decir, un neutrón colisiona con un núcleo blanco que lo absorbe, liberando en el proceso radiación gamma.

La ecuación 21 proporciona la tasa de dosis producida por una fuente puntual de un material radiactivo en función de, entre otros parámetros, la actividad:

$$\dot{D}_{\gamma i} = k_0 \cdot \left(\frac{\mu_a}{\rho}\right)_i \cdot \frac{A \vartheta_i E_i}{4\pi r^2} \quad [21]$$

donde:

- k_0 representa una constante proveniente del cambio de unidades necesario para cuadrar el resto de parámetros de la ecuación.
- μ_a/ρ es el coeficiente másico de absorción de energía.
- A es la actividad de la fuente.
- E_i es la energía del fotón que emite la fuente.
- ϑ_i es la probabilidad de que la fuente emita un fotón de la energía E_i .
- r es la distancia a la fuente.

Es decir, para una fuente gamma puntual, la tasa de dosis es proporcional a la actividad de la fuente e inversamente proporcional al cuadrado de la distancia^[10]. Para facilitar los cálculos, se define la constante energética de radiación gamma para la tasa de dosis absorbida, es decir, k_D (ecuación 22) y se añade a la expresión de la tasa de dosis absorbida para obtener finalmente la ecuación 23.

$$k_D = \frac{1}{4 \cdot \pi} k_0 \cdot \sum_i \left(\frac{\mu_a}{\rho}\right)_i \cdot \vartheta_i E_i \quad [22] \quad \dot{D} = k_D \cdot \frac{A}{r^2} \quad [23]$$

2.6.6.- LIMITACIÓN DE DOSIS: JUSTIFICACIÓN Y VALORES

De acuerdo con los principios y objetivos que emanan de la Protección Radiológica, es necesario tener la mejor protección posible ante las radiaciones ionizantes. En concreto, la ICRP (International Commission on Radiological Protection) ha introducido tres principios fundamentales en los que se basa cualquier estudio de Protección Radiológica: Justificación, Optimización y Limitación^[21]:

- Justificación. La justificación para el uso de las radiaciones ionizantes debe hacerse mediante un análisis coste-beneficio amplio, ya que éstas no deben ser usadas si no se obtiene un beneficio neto positivo, según criterios sociales, tecnológicos, económicos, ambientales o sanitarios. Cabe destacar la dificultad y subjetividad implícitas en la realización del análisis coste-beneficio debido a la naturaleza intangible de varios aspectos, siendo el más importante de ellos la salud de las personas.

- **Optimización.** La exposición a las radiaciones ionizantes debe mantenerse tan baja como sea posible. Este principio se encuentra resumido en lo que se conoce como “Criterio ALARA” (As Low As Reasonably Achievable). Por tanto, se debe mejorar la protección contra las radiaciones siempre que el coste de dichas medidas sea menor que el beneficio para la salud que generan.
- **Limitación.** Para asegurar la protección adecuada de las personas, se fijan unos límites de actividad o dosis que nunca deben ser rebasados. Una tabla completa de las actividades límites (por debajo de ese valor se considera actividades exentas, esto es, se considera que no son peligrosas) por isótopo se puede encontrar en la instrucción IS/05, de 26 de febrero de 2003, del Consejo de Seguridad Nuclear^[8].

Por lo que respecta a los límites de dosis, estos límites se clasifican según el tipo de persona expuesta a las radiaciones y han sido resumidos en la siguiente tabla:

Tabla 4: Límites anuales de dosis^[10]

Órgano	Tipo de dosis	Trabajadores (mSv)	Jóvenes (16-18 años) (mSv)	Público (mSv)
Todo el cuerpo	Efectiva	50	1	1
Cristalino	Equivalente	150	50	15
Piel	Equivalente	500	150	50
Manos, antebrazos, pies y tobillos	Equivalente	500	150	---
Feto (durante embarazo)	Equivalente	1	---	---

3.- MÉTODO DE MONTE CARLO

3.1.- INTRODUCCIÓN

Los métodos o experimentos de Monte Carlo abarcan una gran colección de diversos métodos de simulación por repetición, los cuáles son diseñados para aproximar la solución a problemas según unas probabilidades dadas^[22].

La idea principal es la mejora en la aproximación a un resultado a partir de cálculos probabilísticos, teniendo en cuenta las mencionadas probabilidades de un caso dado, mediante numerosas repeticiones para así obtener un valor numérico válido que permita reducir la aleatoriedad e incertidumbre. Los métodos de Monte Carlo se emplean ante problemas físicos y matemáticos cuando su resolución por otros métodos es muy costosa o no es posible.

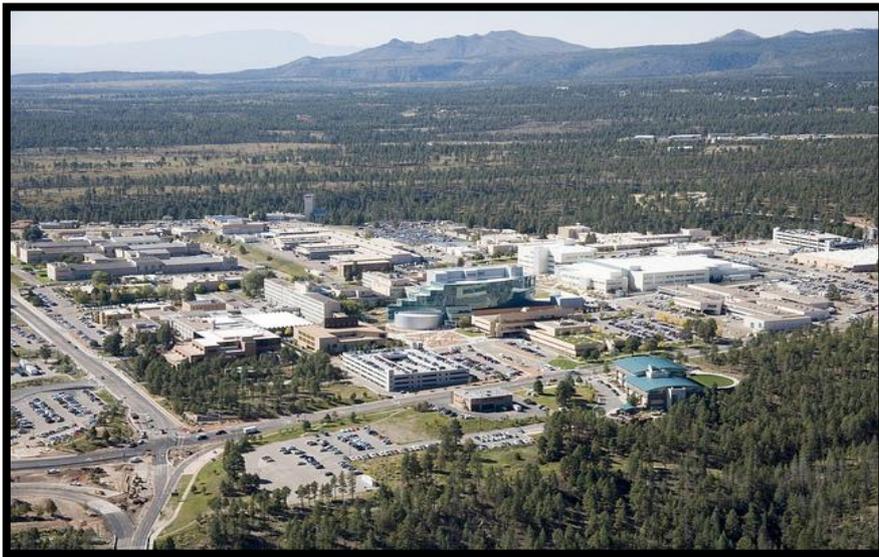


Ilustración 7: Los Alamos National Laboratory[23]

Así, el método de Monte Carlo es procedimiento probabilístico que se basa en la generación de números aleatorios dentro de un conjunto determinado de valores, cada uno de los cuáles tiene asociada una probabilidad. Mediante la repetición de cálculos y la obtención de un gran número de valores se puede hallar un resultado satisfactorio que son imposibles (o muy costosos) de realizar mediante métodos analíticos o numéricos.

Existen diversos métodos que se emplean para la generación de números aleatorios, como la fórmula de congruencia o el método del centro de los cuadrados^[24], pero su explicación no tiene cabida dentro del objetivo de este trabajo.

Por su parte, resulta importante mencionar el error asociado al método de Monte Carlo. Éste se representa con la siguiente ecuación, donde N es la cantidad de números aleatorios generados:

$$e = \frac{1}{\sqrt{N}} \quad [24]$$

Adicionalmente, este error se puede mostrar de forma gráfica. De esa forma, se observa claramente que el error desciende conforme aumenta N, es decir, cuántas más repeticiones se realicen dentro del método de Monte Carlo menor es el error producido.

Sin embargo, la capacidad y tiempo de computación, incluso en los potentes ordenadores actuales, son unos problemas muy presentes a la hora de la aplicación del método de Monte Carlo. Por ello, en la gran mayoría de los casos se acepta un determinado error con el fin de no alargar excesivamente el tiempo de cálculo.

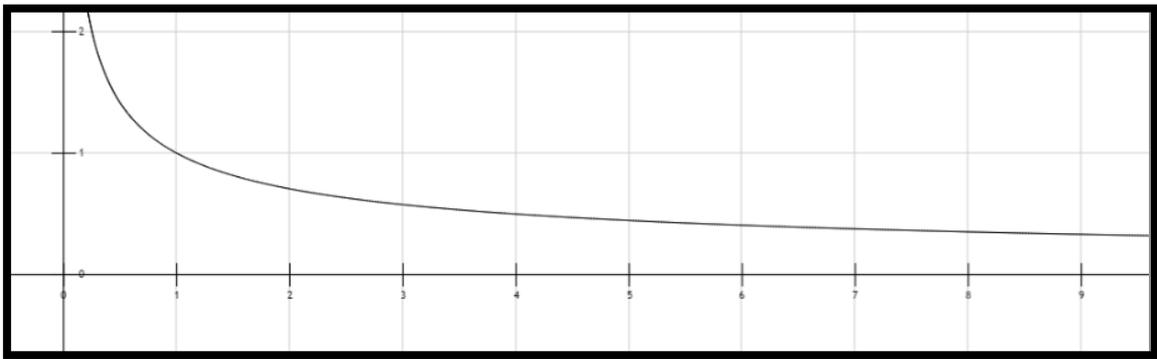


Ilustración 8: Representación del error en el método de Monte Carlo en función del número de repeticiones

La historia de la creación del método de Monte Carlo transcurre en “Los Alamos National Laboratory” (LANL) durante la Segunda Guerra Mundial. Tras la aparición del ENIAC (el primer ordenador electrónico), Stanislaw Ulam comenzó a trabajar en las técnicas estadísticas que llegarían a conocerse como el método de Monte Carlo^[25]. El nombre del método, Monte Carlo, es atribuido a Ulam y se trata de una referencia a los conocidos casinos monegascos.

En 1947, Johann Von Neumann, viendo las grandes posibilidades del método, se interesó por realizar muestreos estadísticos con las técnicas computacionales recientemente desarrolladas. Esta idea parecía especialmente aplicable para entender el comportamiento de reacciones neutrónicas en cadena en reactores de fisión. Así, esta sería la primera simulación con un método de Monte Carlo en una máquina computacional^[26].

3.2.- CÓDIGO MCNP5

Durante la década de los 50 y siguiendo el trabajo de Ulam, von Neumann, Fermi, Metropolis y otros, una serie de códigos de Monte Carlo para el transporte de partículas comenzaron a ser desarrollados desde LANL. Más tarde, en 1973, los códigos de transporte de neutrones y los códigos de transporte de fotones se unieron en uno^[26].

La versión MCNP5 de este código ha sido utilizada en el proceso de análisis del presente trabajo. El código sigue siendo desarrollado, actualizado y mantenido en LANL y se ha convertido en el código reconocido internacionalmente para el análisis de transporte de neutrones y rayos gamma mediante el uso del método de Monte Carlo^[27].

MCNP es un código de interés general que se puede aplicar a técnicas y campos muy diversos, dependiente del tiempo, con una geometría generalizada y que utiliza un espectro energético continuo. Puede ser usado en diversos tipos de transporte: sólo neutrones, sólo fotones, sólo electrones, combinación de transporte de neutrones y fotones donde éstos últimos son producidos por interacciones neutrónicas u otras combinaciones de neutrones, electrones y fotones^[28].

Para su uso básico, el usuario crea un archivo de entrada o *input* que será procesado por MCNP. El archivo contiene información sobre el problema o caso a tratar en áreas como:

- Especificación de la geometría general del entorno de experimento, de la geometría del material irradiado y de la fuente.
Estos parámetros se definen en el input mediante la definición de celdas y superficies. Mediante la definición de la celda, se describe el espacio a analizar, con una forma concreta y de qué material se compone dicho espacio. Estas celdas están limitadas por las superficies.
- Descripción de materiales, su composición exacta y selección de las bibliotecas de secciones eficaces a emplear.
- Localización y características de la fuente de neutrones, fotones o electrones, según el caso a estudiar.
- Tipo de respuestas o cuentas deseadas según la naturaleza del resultado que se busque. Esto se conoce como “tally”.
- Multitud de opciones adicionales para mejorar la eficiencia del cálculo deseado o modificar las condiciones concretas de la simulación.

Una vez procesada toda la información contenida en el archivo de entrada, MCNP realizará el número de simulaciones pertinente y devolverá un archivo de salida o *output* donde se encontrarán los resultados que el usuario deseaba hallar^[28].

Pero, ¿cómo funciona cada repetición de las millones que puede contener una simulación exitosa? En el transporte de partículas, Monte Carlo consiste en el seguimiento de cada partícula desde la fuente durante su “vida” hasta su “muerte” por diferentes circunstancias (escape de la zona de problema, absorción, desintegración, etc.).

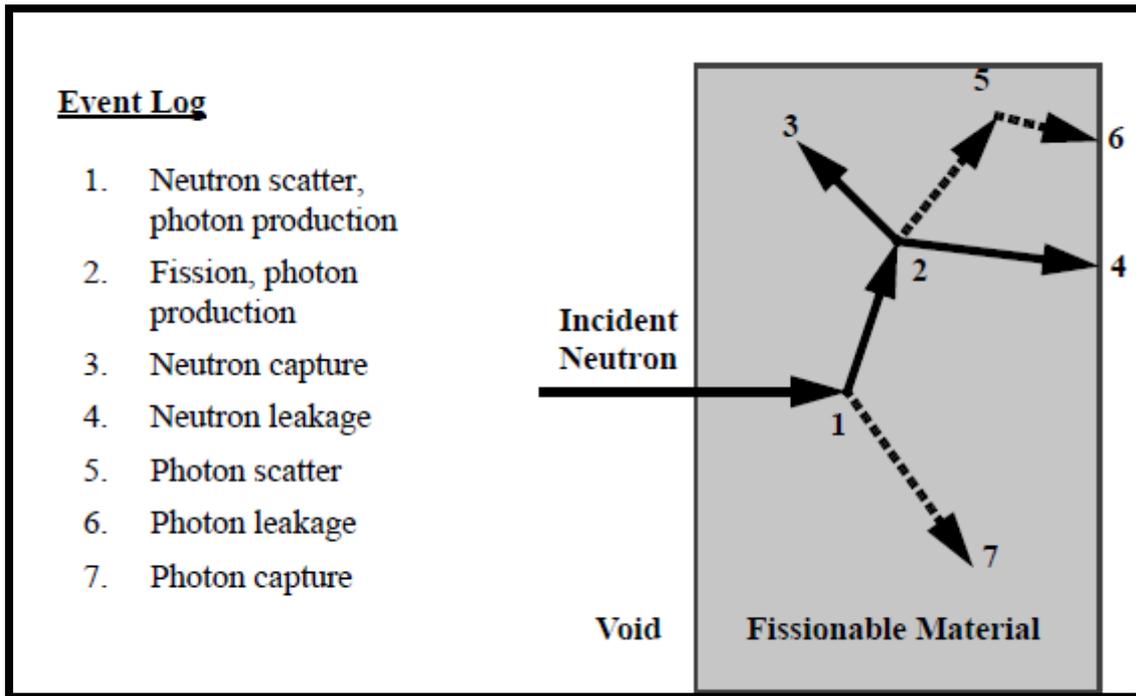


Ilustración 9: Historia de un neutrón^[28]

En la ilustración 9 se representa la “historia” o camino aleatorio que toma un neutrón que incide sobre un material fisionable. Basándose en la física concreta del problema y las probabilidades de interacción (datos de transporte, como el material, secciones eficaces, temperatura, etc.) que gobiernan el proceso, se selecciona un número aleatoriamente entre 0 y 1 para determinar si hay interacción, de qué tipo es y dónde se produce.

En el ejemplo presentado en la ilustración 9, el neutrón colisiona en el evento 1. Dicho neutrón es dispersado en la dirección mostrada, la cuál ha sido seleccionada aleatoriamente mediante las probabilidades que se extraen de datos de distribución por dispersión. Además, un fotón se produce en esta colisión que será posteriormente analizado en el evento 7.

De forma análoga, siguiendo la leyenda de la Ilustración, se puede observar cómo se completa la historia del neutrón incidente a través de 7 eventos analizados completamente. Realizando este proceso numerosas veces (desde decenas de miles hasta centenas de millones, con el error relativo disminuyendo con el aumento de repeticiones), se obtienen y recogen todas las historias de cada neutrón incidente. Estos resultados son recopilados y tratados para conformar un resultado general que sigue un estudio estadístico de forma que resulta muy semejante a la realidad^[28].

MCNP usa bibliotecas de datos atómicos y nucleares, siendo las fuentes primarias las procedentes del sistema ENDF^[29] (Evaluated Nuclear Data File), ACTI^[30] (Advanced Computational Technology Initiative), ENDL^[31] (Evaluated Nuclear Data Library). Así, MCNP incluye más de 836 tablas de interacción neutrónica para, aproximadamente, 100 elementos e isótopos diferentes. Debe ser destacado que existen diversas tablas de datos para un único isótopo debido a que una tabla puede ser consecuencia de otros estudios anteriores, por estar realizado en un régimen de temperaturas diferentes o por diferentes tolerancias en el análisis.

3.3.- APLICACIÓN DE MCNP AL PROYECTO

Mediante el uso del código MCNP5 va a ser posible simular un espacio geométrico similar a un reactor nuclear de pequeño tamaño, aunque de una forma básica. En su interior, se procederá a simular una fuente neutrónica que rodeará al material que se pretende irradiar.

Este proceso será repetido en varias ocasiones para simular la activación de los diversos elementos que se verán sometidos a activación neutrónica con el objetivo de obtener los materiales que servirán como radioisótopos trazadores.

Es muy importante destacar que los resultados obtenidos en MCNP son por partícula emitida por parte de la fuente simulada. Así, será necesario multiplicar los resultados obtenidos por el número real de partículas consideradas para obtener un resultado adecuado. Este procedimiento será visto con mayor profundidad en el próximo capítulo.

4.- CÁLCULO DE LA ACTIVIDAD: ESTUDIO DE PARTÍCULAS PARA MARCADO CON RADIOISÓTOPOS

Una vez introducidos los conceptos clave que se requieren para una correcta comprensión del trabajo, presentado el método de Monte Carlo y el código MCNP5 con el que dicho método es aplicado; es momento de plantear el presente trabajo, que tiene por título: “Cálculo del tiempo de irradiación en un reactor nuclear de investigación para limitar la actividad de materiales irradiados: Aplicación a la obtención de radioisótopos para utilizarlos como marcadores en un proceso industrial”.

1.1.- PRESENTACIÓN DEL CASO

Como ya se ha mencionado en el apartado 2.5.2., el marcado con radioisótopos como trazadores cuenta con numerosas aplicaciones industriales de diversa naturaleza.

Así, esta memoria no trata sobre el marcado con radioisótopos ni ninguna de sus aplicaciones, sino sobre el proceso de activación neutrónica que se realiza para obtener los radioisótopos deseados. Se realizará una simulación de dicha activación neutrónica para tres elementos diferentes, cada uno con sus características propias.

Sin embargo, el objetivo principal del trabajo no es la simple simulación de que la activación neutrónica es posible, sino que es garantizar la seguridad de las personas y/o materiales que se encuentran en contacto o cercanos al material activado durante su aplicación industrial como radioisótopos trazadores.

Este objetivo se pretende conseguir mediante el análisis de los parámetros que influyen en la actividad y cómo dicha actividad varía cuando alguno de dichos parámetros son modificados. Los mencionados parámetros serán clave en el cálculo de la actividad que presenta la muestra activada y serán presentados en posteriores apartados.

El trabajo resulta del análisis de varios trabajos relacionados con la activación neutrónica, el uso del marcado con radioisótopos, la posibilidad de realizar estas aplicaciones en condiciones seguras y, en tal caso, cuáles son los parámetros a variar en busca de la máxima seguridad. Un estudio previo, de origen belga, destaca sobre el resto^[32]. En él, se presenta la activación neutrónica de cuatro elementos para ser usados como radioisótopos trazadores diluidos en aceite de motor y así evaluar la posibilidad de uso de este método en la realización de pruebas en un sistema de post-tratamiento de gases de escape en un motor.

Como se ha mencionado, el objetivo del trabajo es la garantía de la seguridad a personas y/o materiales mediante la limitación de los valores de actividad en la muestra simulada. Para asignar un valor concreto y riguroso a la mencionada limitación se han usado los valores de exención para cada radionucleido publicados por el Consejo de Seguridad Nuclear^[8].

Un valor por debajo del límite de exención para un radioisótopo indica que su manejo, traslado y uso es seguro sin ser obligatorio recurrir a medidas para la protección contra la radiación. Así, obtener un valor exento es importante por motivos de seguridad y, además, económicos.

Se ha decidido centrar este estudio en tres elementos: sodio (Na), molibdeno (Mo) y antimonio (Sb). El motivo de la elección de estos elementos se justifica con el hecho de que son elementos que son utilizados como radioisótopos trazadores en ciertas aplicaciones^[32]. A continuación, se presenta cada uno de los elementos con sus características más relevantes para el presente trabajo:

- **Sodio:** Debido a que, en su estado natural, el sodio se compone al 100% de isótopos de Na-23, la única reacción posible de activación por captura radiativa (reacción más probable con neutrones térmicos) es Na-23 (n,γ) Na-24. El significado de esta reacción es que un neutrón incide sobre un núcleo de Na-23, es absorbido y dicho núcleo pasa a ser Na-24, emitiendo radiación γ en el proceso.

Tabla 5: Características del Sodio

SODIO ^{[33][34]}	
Símbolo químico	Na
Densidad	0.968 g/cm ³
Abundancia isotópica natural	100% Na-23
Reacción de activación	Na-23 (n,γ) Na-24
Periodo de semidesintegración	Na-24 -> 14,997 horas



Ilustración 10: Sección eficaz de la reacción Na-23 (n,γ) Na-24

- **Molibdeno:** En el caso del molibdeno, en su estado natural se encuentra compuesto de siete isótopos distintos. Aunque existen diversas reacciones posibles de activación neutrónica, tras descartar los radioisótopos resultantes con periodos de semidesintegración reducidos y las reacciones menos probables, se ha centrado el estudio en la reacción Mo-98 (n,γ) Mo-99.

Tabla 6: Características del molibdeno

MOLIBDENO ^{[35][36][37][38][39][40][41][42]}	
Símbolo químico	Mo
Densidad	10,28 g/cm ³
Abundancia isotópica natural	14,53% Mo-92
	9,15% Mo-94
	15,84% Mo-95
	16,67% Mo-96
	9,6% Mo-97
	24,39% Mo-98
	9,82% Mo-100
Reacción de activación	Mo-98 (n,γ) Mo-99
Periodo de semidesintegración	Mo-99 -> 65,976 horas

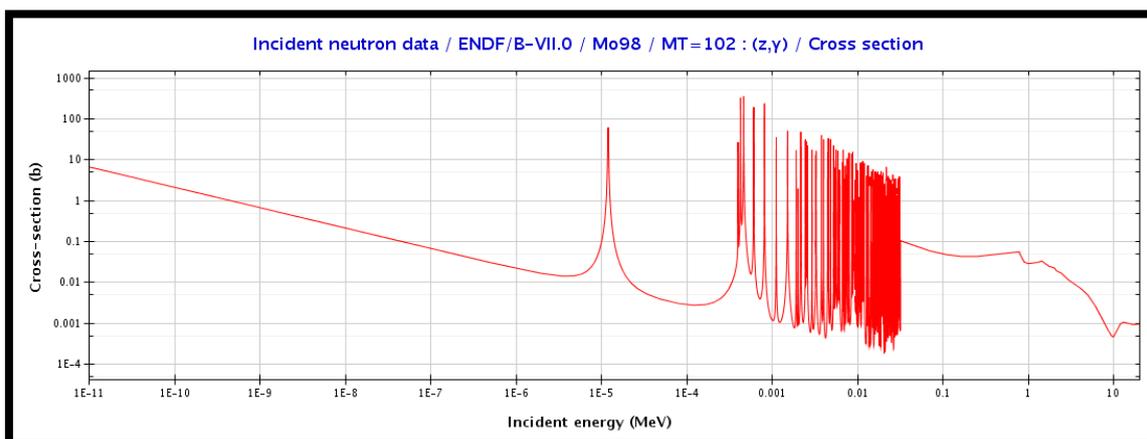


Ilustración 11: Sección eficaz de la reacción Mo-98 (n,γ) Mo-99

- **Antimonio:** En su estado natural, el antimonio se encuentra compuesto de dos isótopos: Sb-121 y Sb-123. Con similitudes entre las dos posibles reacciones de activación, para el propósito de este trabajo se ha decidido analizar la reacción Sb-123 (n,γ) Sb-124 por dar un radioisótopo con un mayor periodo de semidesintegración.

Tabla 7: Características del antimonio

ANTIMONIO ^{[43][44][45]}	
Símbolo químico	Sb
Densidad	6,697 g/cm ³
Abundancia isotópica natural	57,21% Sb-121
	42,79% Sb-123
Reacción de activación	Sb-123 (n,γ) Sb-124
Periodo de semidesintegración	Sb-124 -> 60,2 días

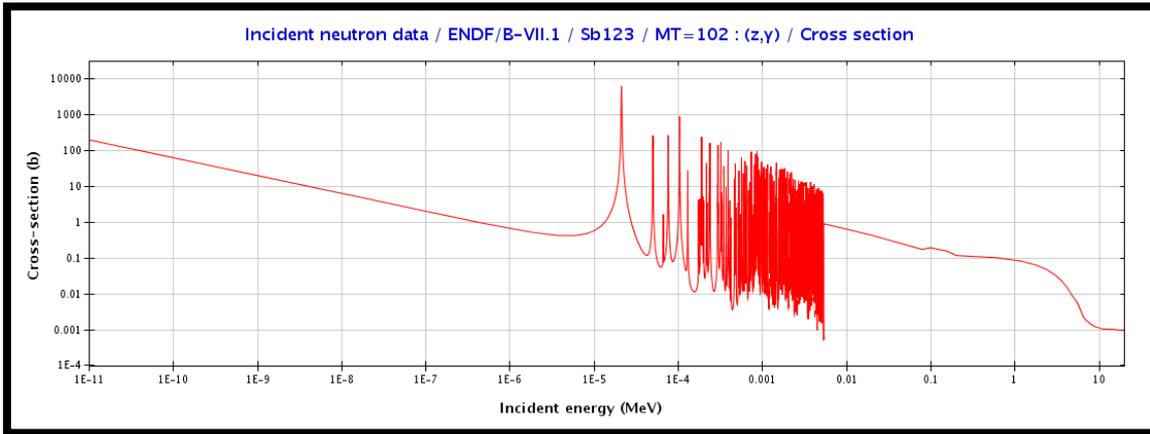


Ilustración 12: Sección eficaz de la reacción Sb-123 (n,γ) Sb-124

Así, ya han sido introducidas las reacciones que se van a estudiar y los radioisótopos resultantes de dichas reacciones que serían empleados en alguna de las aplicaciones del marcado con radioisótopos.

Se ha considerado que la activación neutrónica en esta simulación sería realizada en un reactor de investigación, aunque también se podría realizar con otro tipo de fuentes de neutrones, como por ejemplo una fuente Americio-Berilio. Esta opción ha sido descartada en beneficio del reactor nuclear por ser éste capaz de generar actividades mayores y, por tanto, con condiciones más exigentes para cumplir los límites de exención deseados. Otro posible beneficio de los reactores de investigación es la amplia variedad de los mismos que existen y que trabajan a potencias muy diferentes.

Una consideración importante que debe destacarse tiene relación con el material, por su forma, composición y tamaño. Se ha elegido una forma de la muestra cilíndrica porque es la que mejor se ajusta al canal de irradiación simulado (también de forma cilíndrica) y con un volumen de 1 cm³ para cada muestra, lo cual implica diferentes masas para cada material según su densidad.

Por último, se ha considerado que cada cilindro corresponde al elemento en su estado natural, es decir, con los diferentes isótopos presentes en lugar de considerar un material dónde sólo aparezca el isótopo que interviene en la reacción de estudio.

Una vez expuesto el caso que ocupa esta memoria, el objetivo de su estudio y las condiciones del mismo, se pasa en los siguientes dos apartados a una descripción de los datos de entrada al código MCNP5 y los resultados que se extraen del mismo.

4.2.- ENTRADA DE DATOS: INPUT

En este apartado se va a proceder a realizar una explicación sobre los archivos de entrada o *inputs* que han sido utilizados para realizar la simulación de la activación neutrónica mediante el código MCNP5^[27]. Se van a mostrar, a modo de ejemplo, las líneas pertenecientes al input

del sodio, indicando dónde haya cambios en los valores para los otros dos elementos. Los tres inputs completos se añaden en un anexo a esta memoria.

El archivo comienza con la declaración de las celdas de las que se compone el modelo. Nótese que todo lo que acompaña al símbolo \$ en MCNP5 sirve como anotación y no es interpretado por el programa:

C Cell Cards

1 1 -0.968 -1 2 -3 imp:n=1 \$Celda de cilindro de sodio, densidad negativa por ser en g/cm3

2 2 -0.00129 -4 5 -6 #1 imp:n=1 \$Celda de irradiación, densidad negativa por g/cm3

3 3 -1.235 -7 8 -9 #1 #2 imp:n=1 \$Núcleo

4 0 7:-8:9 #1 #2 #3 imp:n=0 \$Espacio exterior con vacío

- El primer número en cada línea representa el número de celda asignado al volumen que se define tras él.
- El segundo número se utiliza para asociar un material concreto (serán definidos más tarde) a cada una de las celdas existentes en el modelo. Se puede observar que la celda 4 tiene el valor del material 0 asociado a ella, esto significa que se considera vacía la celda 4.
- El tercer número corresponde a la densidad del material que se encuentra en dicha celda. Si el número es positivo, se trata de una densidad atómica con unidades átomos/barn-cm. Si es negativo, se trata de una densidad másica en unidades g/cm³. La celda 4 no posee valor alguno al encontrarse vacía.
- Los siguientes números que suceden a la densidad corresponden a las superficies (serán definidas a continuación) que limitan el volumen de la celda en cuestión. El valor positivo o negativo indica la dirección respecto a los ejes en que se encuentra el interior de la celda respecto a la superficie definida (ejemplo, la superficie 1 es un cilindro infinito, por lo tanto un valor negativo indica que la celda se encuentra dentro de dicho cilindro).
Cuando hay un número precedido por el símbolo #, significa que dicho número corresponde al de una celda que queda excluida de formar parte de la celda que se está definiendo en esa línea.
En la definición de celdas, cuando hay un espacio entre los números de superficies, indica intersección de los espacios definidos por las mismas. Cuando se escriben dos puntos entre dichos números, indica unión de los espacios definidos por las superficies.
- El último valor a tener en cuenta viene definido por imp:n. Un valor de 1 significa que la importancia relativa de neutrones y, por tanto, del análisis en esa celda es total. Un valor 0 significa que esta celda no tiene importancia para el cálculo neutrónico que se desarrollará.

Las siguientes líneas se corresponden con la declaración de las diversas superficies que forman las celdas:

C Surface Cards

```
1 cz 0.7
2 pz -0.325
3 pz 0.325
4 cz 1.2
5 pz -12.5
6 pz 12.5
7 cx 12.5
8 px -13.75
9 px 13.75
```

- El primer valor de cada línea corresponde a la numeración asignada a cada superficie descrita a continuación.
- La segunda entrada en estas declaraciones de superficies corresponde al tipo de superficie que se define. “cz” corresponde a un cilindro infinito centrado en el eje z y el número que le acompaña es el radio de dicho cilindro en centímetros. “pz” se trata de un plano normal al eje z situado a la distancia en centímetros hasta el origen de coordenadas. “px” y “cx” siguen el mismo razonamiento.

Las superficies 1, 2 y 3 marcan los límites de la celda 1, es decir, de la muestra a irradiar. Estas superficies tienen el mismo valor para cada input, debido a que se ha introducido una muestra de cada elemento con un volumen fijado y masa diferente, debido a las diferentes densidades de cada material. Las superficies 4, 5 y 6 delimitan el canal de irradiación donde se introduce la muestra. De la misma forma, las superficies 7, 8 y 9 marcan los límites del reactor.

El siguiente paso en la elaboración del archivo de entrada para MCNP5 es la definición de los materiales presentes en la simulación:

C Data Cards

C Materiales

```
m1 11023 1 $Sodio 23, abundancia natural 100%
m2 7014 -0.79 8016 -0.21 $Aire simplificado (79% N, 21% O)
m3 1001 -0.13447 1002 -0.00002 $Polietileno
    6000 -0.80131 $Carbono
    8016 -0.0445 $Oxigeno del oxido de uranio
    92238 -0.0157351 92235 -0.00388476 $Uranio enriquecido
```

- De nuevo, la primera línea corresponde con el valor predicho de una “m” que se asigna cada material que será definido
- El siguiente valor de cinco cifras define un isótopo que se encuentra en el material. Las dos primeras cifras se corresponden con el número atómico del elemento y las tres siguientes con la masa atómica concreta (ejemplo, en el caso de 92238 se refiere al uranio 238 ya que el número atómico 92 corresponde al uranio y 238 indica qué isótopo del uranio se especifica).

En el caso de que el número atómico se acompañe de tres ceros, como en 6000, indica que ese elemento se encuentra en su estado natural.

- El valor que prosigue a la declaración del isótopo es la fracción en tanto por uno que ocupa dentro del material. Si el valor es positivo, se habla de fracción atómica. Si es negativo, de fracción másica.
- Mientras que el material 1 es diferente en cada uno de los archivos de entrada, los materiales 2 y 3 no sufren variación alguna entre las distintas simulaciones.

Por último, en las siguientes líneas se expone la parte final del input que incluye la declaración de la fuente de neutrones, el tally utilizado y el número de repeticiones que realizará el código MCNP5:

```
C Datos generales
MODE N $Define el uso de neutrones
NPS 20000000 $Numero de partículas a lanzar en el problema
C Definición de fuente
SDEF POS=0 0 0 AXS=1 0 0 CEL=3 RAD=d1 EXT=d2 ERG=0.0253E-06 $Definición fuente
SI1 0.0 12.5 $Distancia radial de celda fuente
SI2 -13.75 13.75 $Distancia al exterior de la celda fuente, altura
C Tallies
F4:n 1 $Tally tipo 4, con neutrones y contabilizando lo que pasa en celda 1
FM4 0.025345 1 102 $Factor de normalización, Na-23 y (n,gamma)
```

- La primera línea dentro de la sección de datos generales define el uso de neutrones como partícula incidente.
- La línea que sigue indica el número de repeticiones o “historias” que va a realizar el programa. Se decidió por el valor 20 millones ya que, a pesar del elevado tiempo de cálculo (algo menos de 3 horas por input), proporciona unos resultados con un error relativo pequeño.
- El siguiente apartado es la definición de la fuente de neutrones. Se indica su posición con POS(0 0 0, eje de coordenadas), AXS indica el vector dirección principal, CEL permite definir que la fuente se encuentra dentro de la celda 3 y ERG se corresponde con el valor de energía que se otorga a los neutrones.
- Las líneas SI1 y SI2 hacen referencia a las variables RAD y EXT, respectivamente. Limitan las dimensiones dentro de las cuáles se produce una generación de neutrones.
- La penúltima línea define el tally, es decir, el tipo de respuesta o cuenta que se desea obtener. En este caso se trata de un tipo 4 con neutrones (letra “n”) y centrado en lo que sucede en la celda 1 (muestra). El tally F4 calcula la fluencia media a través de la celda indicada.
- La línea final define el multiplicador FM4 del tally F4, que calcula la tasa de interacciones en reacciones/cm³-s para la reacción y material que se indican. El primer valor corresponde al factor de normalización C que expresa la densidad atómica del isótopo que es irradiado y se obtiene siguiendo la ecuación 1. El valor que sigue a C se refiere al número de material irradiado en el que tendrá lugar la reacción que se define mediante el último valor de la línea. La reacción (n, γ) se indica con el valor 102 en MCNP5.

$$C = \frac{\text{Densidad} \cdot \text{Num. Avogadro} \cdot \text{Conversión barn a cm}^2 \cdot \text{Abundancia isotópica}}{\text{Peso molecular}} \quad [25]$$

$$C_{Na-23} = \frac{0,968 \cdot (6,022 \cdot 10^{23}) \cdot (1 \cdot 10^{-24}) \cdot 1}{23} = 0,025345$$

$$C_{Mo-98} = \frac{10,28 \cdot (6,022 \cdot 10^{23}) \cdot (1 \cdot 10^{-24}) \cdot 0,2429}{98} = 0,015344$$

$$C_{Sb-123} = \frac{6,697 \cdot (6,022 \cdot 10^{23}) \cdot (1 \cdot 10^{-24}) \cdot 0,4279}{123} = 0,014030$$

4.3.- EXTRACCIÓN DE DATOS: OUTPUT

La ejecución del programa MCNP con el archivo de entrada descrito generará un archivo de salida u *output* con el resultado de los cálculos que han sido solicitados. El output generado por el programa es un archivo de texto de grandes dimensiones. Sin embargo, el resultado deseado es sencillo de localizar debido a que se encuentra localizado en una tabla al final de dicho documento. En las siguientes tablas, se exponen los resultados de las tres simulaciones realizadas:

Tabla 8: Resultados del output para el sodio

Sodio - Tally 4					
nps	mean	error	vov	slope	fom
1024000	3,0116E-05	0.0094	0.0004	5.8	1012
2048000	3,0229E-05	0.0067	0.0002	10.0	1007
3072000	3,0333E-05	0.0054	0.0001	10.0	1010
4096000	3,0420E-05	0.0047	0.0001	10.0	1013
5120000	3,0441E-05	0.0042	0.0001	10.0	1013
6144000	3,0395E-05	0.0038	0.0001	10.0	1012
7168000	3,0426E-05	0.0036	0.0001	10.0	1010
8192000	3,0467E-05	0.0033	0.0000	10.0	1008
9216000	3,0434E-05	0.0031	0.0000	6.5	1008
10240000	3,0454E-05	0.0030	0.0000	7.7	1008
11264000	3,0509E-05	0.0028	0.0000	8.6	1008
12288000	3,0508E-05	0.0027	0.0000	9.8	1007
13312000	3,0532E-05	0.0026	0.0000	10.0	1008
14336000	3,0556E-05	0.0025	0.0000	10.0	1008
15360000	3,0524E-05	0.0024	0.0000	10.0	1006
16384000	3,0534E-05	0.0024	0.0000	10.0	1005
17408000	3,0534E-05	0.0023	0.0000	10.0	1005
18432000	3,0529E-05	0.0022	0.0000	10.0	1005
19456000	3,0519E-05	0.0022	0.0000	8.4	1005
20000000	3,0504E-05	0.0021	0.0000	9.4	1004

Tabla 9: Resultados del output de molibdeno

Molibdeno - Tally 4					
nps	mean	error	vov	slope	fom
1024000	9,3563E-05	0.0207	0.0496	3.0	204
2048000	9,4245E-05	0.0147	0.0315	3.0	204
3072000	9,5454E-05	0.0131	0.0359	3.1	172
4096000	9,5816E-05	0.0107	0.0248	3.0	192
5120000	9,5335E-05	0.0093	0.0184	3.1	203
6144000	9,5064E-05	0.0083	0.0141	3.4	211
7168000	9,5285E-05	0.0076	0.0109	3.5	217
8192000	9,5334E-05	0.0070	0.0088	3.1	221
9216000	9,5128E-05	0.0066	0.0073	3.5	224
10240000	9,5057E-05	0.0062	0.0061	3.7	228
11264000	9,5201E-05	0.0059	0.0052	3.5	230
12288000	9,5290E-05	0.0056	0.0045	3.8	230
13312000	9,5208E-05	0.0054	0.0040	4.0	233
14336000	9,5243E-05	0.0052	0.0037	3.8	231
15360000	9,5124E-05	0.0050	0.0033	3.9	233
16384000	9,4979E-05	0.0048	0.0030	3.9	236
17408000	9,4849E-05	0.0047	0.0027	4.0	237
18432000	9,4829E-05	0.0045	0.0025	3.7	238
19456000	9,4745E-05	0.0044	0.0023	3.7	240
20000000	9,4755E-05	0.0043	0.0022	3.5	240

Tabla 10: Resultados del output del antimonio

Antimonio – Tally 4					
nps	mean	error	vov	slope	fom
1024000	1,7791E-04	0.0226	0.0268	2.5	177
2048000	1,7682E-04	0.0152	0.0133	2.7	195
3072000	1,7846E-04	0.0140	0.0708	3.0	152
4096000	1,7926E-04	0.0120	0.0465	2.7	157
5120000	1,7887E-04	0.0107	0.0338	2.6	156
6144000	1,7826E-04	0.0096	0.0263	2.9	163
7168000	1,7860E-04	0.0091	0.0270	2.9	155
8192000	1,7845E-04	0.0086	0.0234	2.8	152
9216000	1,7750E-04	0.0079	0.0206	2.8	158
10240000	1,7698E-04	0.0074	0.0182	2.8	163
11264000	1,7695E-04	0.0070	0.0159	3.0	165
12288000	1,7719E-04	0.0067	0.0138	3.0	168
13312000	1,7763E-04	0.0065	0.0127	3.0	161
14336000	1,7738E-04	0.0063	0.0116	3.0	163
15360000	1,7730E-04	0.0061	0.0105	3.0	161
16384000	1,7698E-04	0.0059	0.0097	2.8	162

17408000	1,7697E-04	0.0057	0.0088	3.0	160
18432000	1,7685E-04	0.0056	0.0083	3.0	161
19456000	1,7692E-04	0.0055	0.0080	3.0	157
20000000	1,7681E-04	0.0054	0.0077	2.9	159

Concretamente, los datos a utilizar se encuentran en las tres primeras columnas de la última línea, ya que las anteriores líneas son resultados parciales. En el input se había indicado un NPS (o número de “historias”) de 20 millones.

La segunda columna, nombrada “mean”, representa el valor de las reacciones de tipo (n,γ) producidas por neutrón emitido en la fuente y por unidad de volumen. La tercera columna “error” corresponde al error relativo asociado con el valor de la columna anterior. Se puede apreciar que, con el aumento de “nps” se reduce sensiblemente dicho error relativo hasta alcanzar valores suficientemente bajos.

Así, este es el motivo de que se haya simulado con un valor NPS de 20 millones a pesar del elevado tiempo de computación que conlleva (222 minutos para el input del molibdeno, 217 minutos para el input del antimonio y 215 minutos para el input del sodio).

5.- RESULTADOS Y DISCUSIÓN

En este capítulo, centrado en la obtención de resultados y su análisis, se ha utilizado el programa Microsoft Excel, parte del paquete Microsoft Office, como herramienta principal de trabajo.

5.1.- OBTENCIÓN DE RESULTADOS Y PARÁMETROS A ESTUDIAR

5.1.1.- OBTENCIÓN DE LA ACTIVIDAD ABSOLUTA

El objetivo de este apartado es la obtención de valor de actividad (Bq) de la muestra irradiada y la determinación de los parámetros que pueden disminuir dicha actividad para que sea exenta.

Para ello, mediante el uso de la tasa de reacciones Q que se obtiene del output generado por MCNP5, se plantea un balance de masa (ecuación 26) para cada radionucleido X generado en la reacción.

$$\frac{dX}{dt} = Q - \lambda \cdot X \quad [26]$$

donde:

- X es la concentración en núcleos/cm³.
- Q es la tasa de reacciones por unidad de volumen (reacciones/s·cm³)
- λ la constante de desintegración en unidades de tiempo⁻¹. Esta constante se obtiene a partir de $T_{1/2}$, el periodo de semidesintegración del radionucleido (ecuación 27).

$$\lambda = \frac{\ln 2}{T_{1/2}} \quad [27]$$

En dicho balance, el número de radioisótopos X en un tiempo determinado (dX/dt) se determina como los radioisótopos generados en la reacción (Q) a los cuáles se resta los radioisótopos X que se han desintegrado ($\lambda \cdot X$).

Al integrar la ecuación 1 se obtiene la concentración existente del radionucleido X (ecuación 28). A continuación, se añade el concepto de tiempo de enfriamiento (tiempo desde que terminó la irradiación hasta que se produce la medida) a través de la ecuación 29.

Multiplicando la ecuación 29 por la constante λ se obtiene la actividad volumétrica presente en la muestra (ecuación 30).

$$X(t) = \left(\frac{Q}{\lambda}\right) \cdot (1 - \exp(-\lambda \cdot t_i)) \quad [28]$$

$$X(t) = \left(\frac{Q}{\lambda}\right) \cdot (1 - \exp(-\lambda \cdot t_i)) \cdot \exp(-\lambda \cdot t_e) \quad [29]$$

$$A_v = Q \cdot (1 - \exp(-\lambda \cdot t_i)) \cdot \exp(-\lambda \cdot t_e) \quad [30]$$

donde:

- A_v es la actividad volumétrica de la muestra expresada con unidades Bq/n·cm³.
- Q es la tasa de reacciones obtenida mediante el uso de MCNP. Sus unidades son reacciones/n·cm³.
- λ es la constante de desintegración en unidades de tiempo⁻¹.
- $T_{1/2}$ es el periodo de semidesintegración del radionucleido en unidades de tiempo.
- t_i es el tiempo de irradiación.
- t_e es el tiempo de enfriamiento (tiempo desde que terminó la irradiación hasta que se produce la medida).

Los resultados de MCNP son siempre por partícula emitida en la fuente. Por ello, se define la población neutrónica instantánea “ n ” (ecuación 31) con el objetivo de obtener un valor de actividad que no se encuentre por neutrón emitido en la fuente.

$$n \left(\frac{n}{s}\right) = \bar{P} \cdot c \cdot v \quad [31]$$

$$c \left(\frac{\text{fisión}}{W \cdot s}\right) = \frac{1}{E_{RECUP}} = \frac{1}{200 \text{ MeV} \cdot (1,6 \cdot 10^{-13} \frac{J}{\text{MeV}})} = 3,125 \cdot 10^{10} \quad [32]$$

donde:

- c es la inversa de la energía recuperable por fisión
- \bar{P} es la potencia media del reactor en vatios.
- E_{RECUP} es la energía recuperable por fisión producida.
- v es el número medio de neutrones emitidos por fisión. Se considera un valor de 2,45.
- n es la población neutrónica instantánea.

La actividad se obtiene multiplicando la actividad volumétrica, el volumen de la muestra y la población neutrónica instantánea (ecuación 33).

$$A = A_v \cdot n \cdot Volumen \quad [33]$$

Descartando los parámetros constantes empleados en esta sucesión de ecuaciones, se obtienen cuatro parámetros variables que serán modificados en los sucesivos apartados para estudiar su influencia en el valor de la actividad total que muestra el material.

Los cuatro parámetros son el tiempo de irradiación (su influencia se observa a partir de la ecuación 28), el tiempo de enfriamiento (desde la ecuación 29), la potencia media del reactor (influye en la población neutrónica instantánea como se observa en la ecuación 31) y el volumen de la muestra (ecuación 33).

5.1.2.- VARIACIÓN DE LA ACTIVIDAD EN FUNCIÓN DEL TIEMPO DE IRRADIACIÓN

Se procede a observar como varía la actividad de una muestra con el tiempo de irradiación. Para ello, se fijan los otros tres valores para variar sólo el tiempo de irradiación con la finalidad de que se pueda apreciar su importancia. Los valores escogidos son los siguientes:

- Tiempo de irradiación: Entre 0 y 300 horas.
- Tiempo de enfriamiento: 0 horas.
- Potencia del reactor: 1000 vatios.
- Volumen de las muestras: 1 cm³.

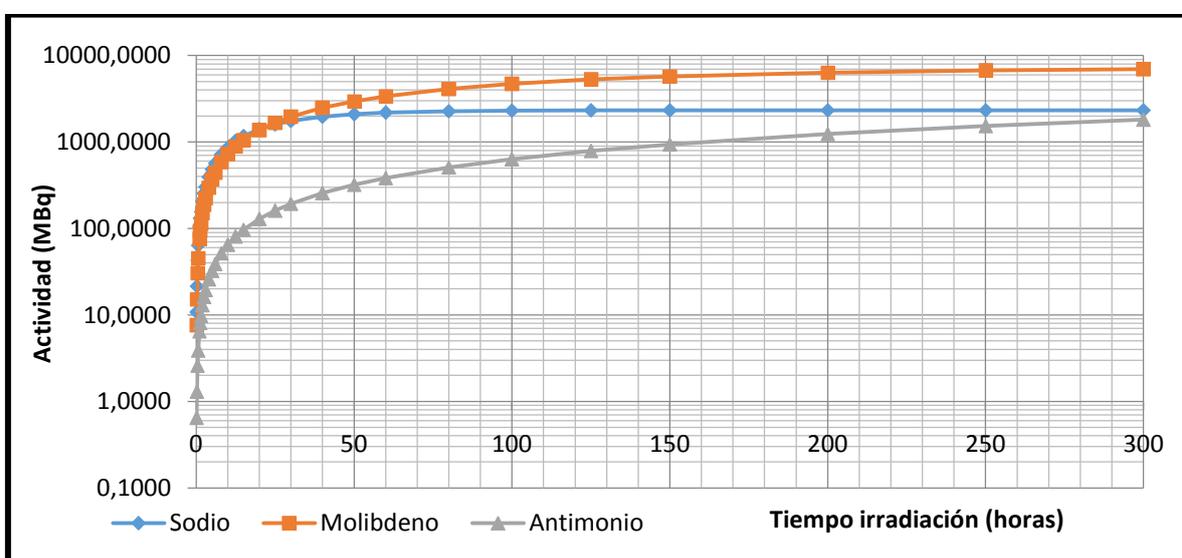


Ilustración 13: Variación de la actividad según el tiempo de irradiación

Se puede observar que el sodio es activado rápidamente y alcanza el equilibrio a las 50 horas. Esto se debe a que su periodo de semidesintegración es de tan sólo 14,997 horas, con lo que llegadas a esas 50 horas una gran parte del Na-24 generado en la reacción Na-23 (n, γ) Na-24 se ha desintegrado. Asimismo, la rápida escalada de la actividad absoluta (en 48 horas ya ha superado los 2000 MBq) también tiene relación con su periodo de semidesintegración, ya que éste causa una constante de semidesintegración (ecuación 27) grande y la aparición de la constante en la exponencial (ecuación 30) conlleva un significativo aumento de la actividad.

En el caso opuesto se encuentra el antimonio. Su periodo de semidesintegración de 60,2 días causa que el aumento de la actividad se extienda más en el tiempo y que requiera un número de horas superior al expuesto en la gráfica superior para alcanzar el equilibrio.

Por lo que respecta al molibdeno, con un periodo de semidesintegración de 65,976 horas, se muestra como un “caso medio” entre el sodio y el antimonio. Su activación también resulta rápida pero la menor constante de desintegración respecto a la del sodio hace que, en las 300 horas mostradas, se encuentre cerca de alcanzar el equilibrio.

Debe notarse que el molibdeno llega a unos valores de actividad superiores al sodio debido a la diferencia de densidad entre ambos elementos, que propicia que haya mayor masa y más átomos de Mo-98 a activar que de Na-23.

De la variación de la actividad en función del tiempo de irradiación puede concluirse que el sodio debe ser irradiado durante menos tiempo que el molibdeno para mantenerse dentro de los valores de exención propios de cada radioisótopo. De forma similar, se extrae que el tiempo de irradiación máximo para no sobrepasar el límite de exención del molibdeno será menor que en el caso del antimonio pero mayor que para el sodio.

5.1.3.- VARIACIÓN DE LA ACTIVIDAD EN FUNCIÓN DEL TIEMPO DE ENFRIAMIENTO

De forma similar al anterior apartado, se va a estudiar la influencia que posee la variación del tiempo de enfriamiento en los valores de actividad que presentan las muestras. Los valores que han sido utilizados son:

- Tiempo de irradiación: 24 horas.
- Tiempo de enfriamiento: Entre 0 y 300 horas.
- Potencia del reactor: 1000 vatios.
- Volumen de las muestras: 1 cm³.

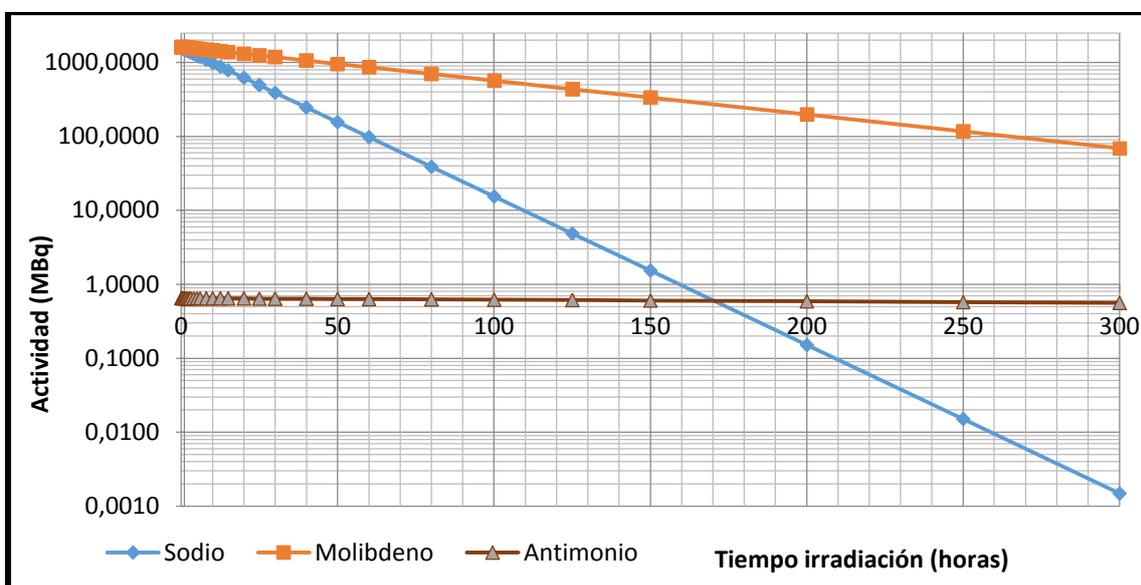


Ilustración 14: de la actividad según el tiempo de enfriamiento

De nuevo, el isótopo que sufre un cambio mayor es el sodio. Su corto periodo de semidesintegración causa que un tiempo de enfriamiento pronunciado reduzca su actividad drásticamente. Por lo que respecta al molibdeno, si bien se produce una reducción de la actividad absoluta que presenta la muestra, esta reducción no es pronunciada.

En el caso del antimonio, debido a su largo periodo de semidesintegración, el tiempo de enfriamiento se muestra como un parámetro muy poco efectivo ya que apenas consigue reducir la actividad de la muestra durante las 300 horas planteadas.

La conclusión de la observación del efecto en la actividad por la variación del tiempo de enfriamiento es que, salvo para el caso del Na-24, dicho tiempo se muestra poco eficiente. Por tanto, a la hora de buscar que las muestras se mantengan dentro de los valores de actividad exentos, resulta recomendable ajustar el tiempo de irradiación en lugar del tiempo de enfriamiento.

5.1.4.- VARIACIÓN DE LA ACTIVIDAD EN FUNCIÓN DE LA POTENCIA DEL REACTOR

En este apartado se va a estudiar la variación de la actividad absoluta de los tres materiales planteados con diferentes valores de potencia de reactor. Debido a la gran cantidad de reactores de investigación que existe en el mundo y la enorme variación de potencia entre ellos (desde una potencia de 0,5 W en los reactores más pequeños hasta reactores de investigación de varios megavatios), hace que éste sea un parámetro muy abierto a cambios. Como norma general, los reactores de investigación pequeños son más adecuados para conseguir la irradiación de un material con actividad exenta.

Los valores utilizados en el estudio son:

- Tiempo de irradiación: 12 horas.
- Tiempo de enfriamiento: 12 horas.
- Potencia del reactor: Entre 0 y 60 vatios.
- Volumen de las muestras: 1 cm³.

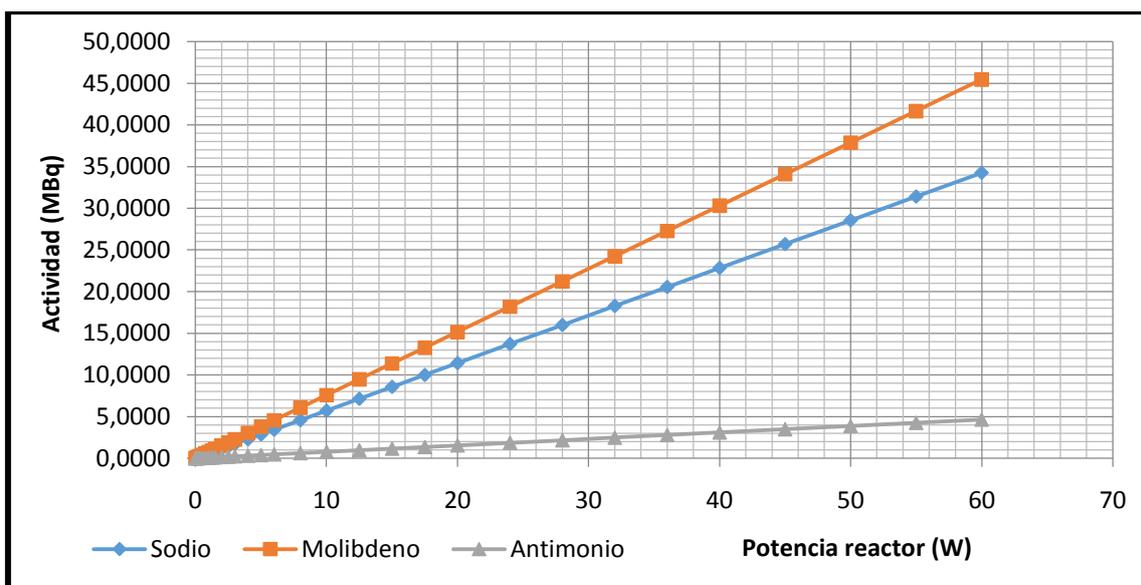


Ilustración 15: Variación de la actividad según la potencia del reactor

Como se desprende de las ecuaciones 6 y 8, la relación entre la potencia media del reactor y la actividad de las muestras irradiadas en dicho reactor es lineal para los tres elementos.

De la gráfica se desprende que un aumento en la potencia media del reactor que se usa para la irradiación causa un ascenso en el valor de la actividad absoluta. Es por ello que se reitera la conclusión, esta vez apoyada en la simulación, que indica que los reactores de investigación con potencias bajas resultan más adecuados para la irradiación de materiales hasta niveles de actividad exentos.

Sin embargo, con un sentido más práctico, el número de reactores de investigación es limitado y más si se tiene en cuenta que deben estar cerca del lugar dónde los radioisótopos van a ser usados con el objetivo de reducir los costes de transporte. Esto hace que, en la práctica, éste sería el primer valor a considerar antes de fijar los tiempos de irradiación o enfriamiento.

5.1.5.- VARIACIÓN DE LA ACTIVIDAD EN FUNCIÓN DEL VOLUMEN IRRADIADO

El último de los parámetros que se van a estudiar en el apartado 5.1 es el volumen de la muestra a irradiar. Debido a que el uso del producto activado se realiza en forma de partículas de tamaño muy reducido (orden de microgramos o incluso nanogramos), los volúmenes considerados son en todos los casos bajos. Los valores que se han usado son:

- Tiempo de irradiación: 12 horas.
- Tiempo de enfriamiento: 12 horas.
- Potencia del reactor: 1 kV.
- Volumen de las muestras: Entre 0 y 6 cm³.

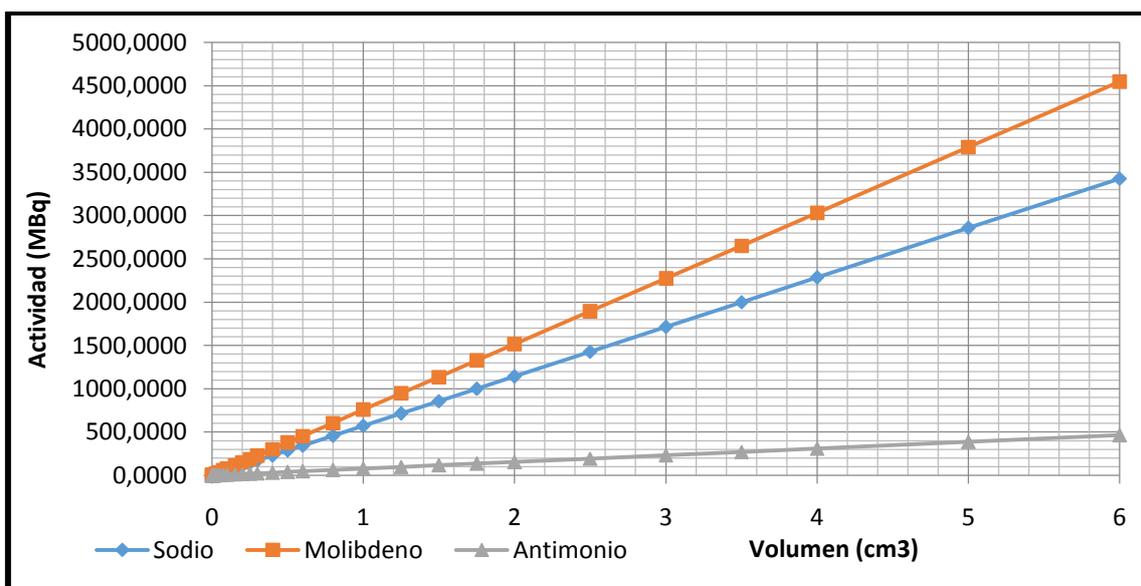


Ilustración 16: Variación de la actividad según el volumen de la muestra irradiada

De forma análoga al apartado 5.1.4, la variación de la actividad absoluta en función del volumen de la muestra irradiada es de forma lineal. Así, un leve aumento del volumen de la pieza significa un nada despreciable aumento en el valor de la actividad absoluta.

La conclusión que se desprende es que, con el objetivo de limitar la actividad presente por debajo del límite de exención marcado, el volumen de la muestra es conveniente que sea reducido para los tres elementos en estudio. Además, esto concuerda con la afirmación posterior en la que se exponía que el volumen a irradiar debe ser pequeño porque el uso del material irradiado se produce en forma de microgramos o nanogramos.

5.2.- ENSAYOS PROPUESTOS CON VALORES DE ACTIVIDAD EXENTOS

Una vez se ha identificado y estudiado los parámetros más influyentes que intervienen en el valor final de actividad absoluta presente en las muestras, se procede a exponer diversos ejemplos de la activación neutrónica de cada material.

De acuerdo con el objetivo general del trabajo, los casos que se van a mostrar en este apartado tienen una cosa en común: su actividad se encuentra dentro de los límites exentos que marca el Consejo de Seguridad Nuclear. Dichos valores son^[8]:

Tabla 11: Valores de exención

Elemento	Límite de exención (Bq)	Límite de exención (MBq)
Na-24	$1 \cdot 10^5$ Bq	0,1 MBq
Mo-99	$1 \cdot 10^6$ Bq	1 MBq
Sb-124	$1 \cdot 10^6$ Bq	1 MBq

El límite de exención del radioisótopo Na-24 es un orden de magnitud menor que el de los otros dos isótopos. Este hecho, unido a lo observado durante el apartado 5.1, va a causar que los parámetros sean más restrictivos para el caso del sodio.

La estructuración de los casos se ha realizado de la siguiente forma: para cada isótopo se fijan tres potencias distintas: baja (1W), media (50W) y alta (1kW). Cómo ha sido indicado en el apartado 5.1.4, desde un punto de vista práctico la potencia es el valor que más puede cambiar y, por ello, se le da prioridad en estos ensayos.

Para cada una de las potencias expuestas, se realizarán dos ensayos con dos volúmenes distintos de $0,1 \text{ cm}^3$ y $0,001 \text{ cm}^3$. Esto se corresponde con la distinción de la cantidad de material irradiado necesaria para una aplicación dada.

Para cada volumen, se realiza un ensayo con el tiempo de irradiación necesario para que se mantenga en un valor exento. Para el caso del Mo-99 y el Sb-124, el objetivo es establecer un tiempo de irradiación que permita que el tiempo de enfriamiento no sea necesario debido a su

ineficiencia (apartado 5.1.3). En el caso del sodio, sí se va a hacer uso de un pequeño tiempo de enfriamiento para evitar que el tiempo de irradiación sea demasiado reducido como consecuencia de su menor límite de exención.

- Sodio y potencia baja: Con una baja potencia de 1 W y la opción de volumen mayor, el material requiere una irradiación de 12 horas para superar el valor del límite exento. Así, se sugiere un caso con los siguientes valores: **Potencia de 1W, volumen de 0,1 cm³ y tiempo de irradiación de 10 horas** (en lugar de las 12 horas para dejar cierto margen respecto al límite).

En cuanto a la segunda opción de volumen, se observa en los cálculos realizados que el valor de actividad absoluta nunca llega a alcanzar el valor límite de 100000 Bq. Por tanto, se concluye un caso con los valores: **Potencia de 1W, volumen de 0,001 cm³ y tiempo de irradiación menor de 15 horas**. Estas 15 horas corresponden al tiempo de semidesintegración y una irradiación que se prolongue más allá corre el riesgo de ver cómo su actividad disminuye.

Debido a la baja potencia y, por tanto, a los bajos valores de actividad obtenidos, se ha considerado que en estas condiciones la introducción de un tiempo de enfriamiento resultaba innecesaria.

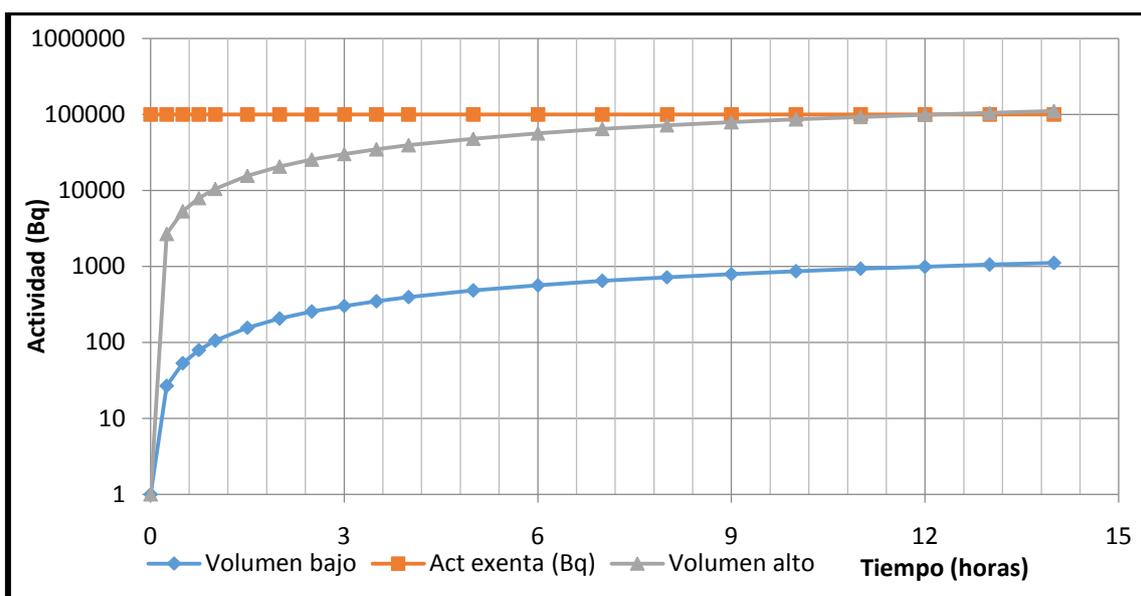


Ilustración 17: Caso de exención 1

- Sodio y potencia media: Debido al aumento en la potencia, se observa que los tiempos de irradiación necesarios disminuyen. Para el caso del volumen alto, la irradiación máxima que se puede realizar antes de que el material muestre una actividad no exenta es de apenas 11 minutos. Se considera que es un tiempo bajo aunque realizable. Se propone un caso con los siguientes valores: **Potencia de 50W, volumen de 0,1 cm³ y un tiempo de irradiación de 10 minutos**.

Por lo que respecta al material con un volumen menor, alcanza un valor de actividad exenta a las 42 horas de irradiación. Se sugieren los siguientes valores: **Potencia de 50W, volumen de 0,001 cm³ y un tiempo de irradiación menor de 15 horas**. De

nuevo, como a las 42 horas de irradiación han transcurrido casi tres periodos de semidesintegración, resulta mejor limitar la irradiación a un solo periodo.

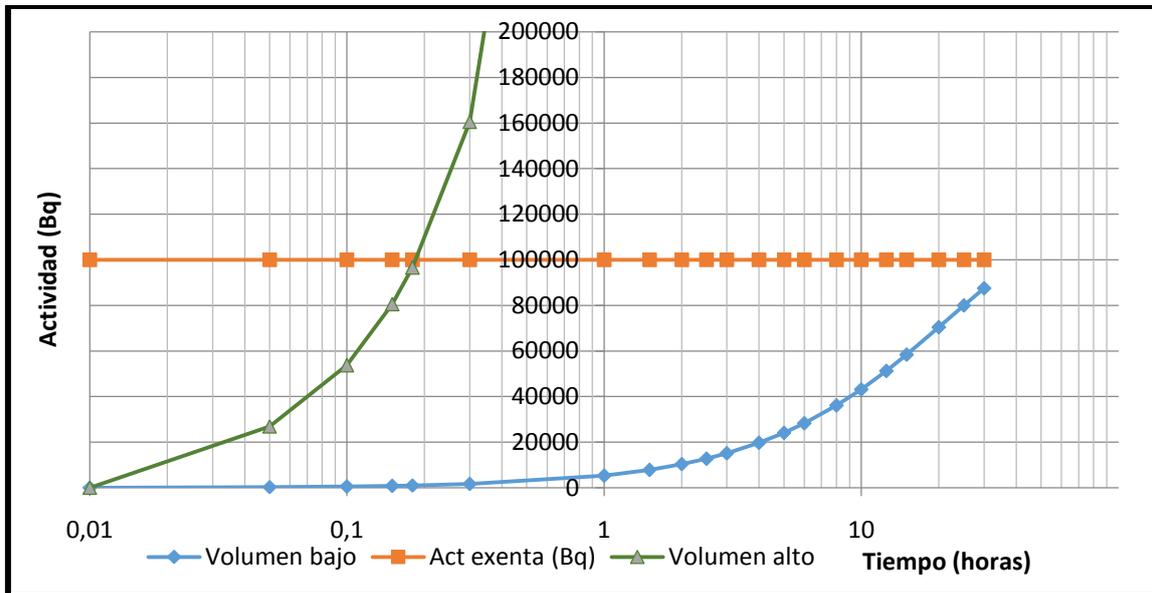


Ilustración 18: Caso de exención 2

Debido al reducido tiempo de irradiación requerido con el volumen de 0,1 cm³, se ha aplicado un tiempo de enfriamiento de 5 horas a cada uno de los tiempos de irradiación para observar el cambio producido y tratar de aumentar los escasos 10 minutos de irradiación propuestos.

El resultado con esta nueva consideración ofrece un resultado con un leve incremento en el valor del tiempo de irradiación: en lugar de sobrepasar el límite de exención en 11 minutos, un tiempo de enfriamiento de 5 horas permite prolongar la irradiación hasta 14 minutos.

Debido a la escasa diferencia entre ambos resultados, a la propuesta para las condiciones de **potencia de 50W, volumen de 0,1 cm³ y un tiempo de irradiación de 10 minutos** no se añade el tiempo de enfriamiento simulado.

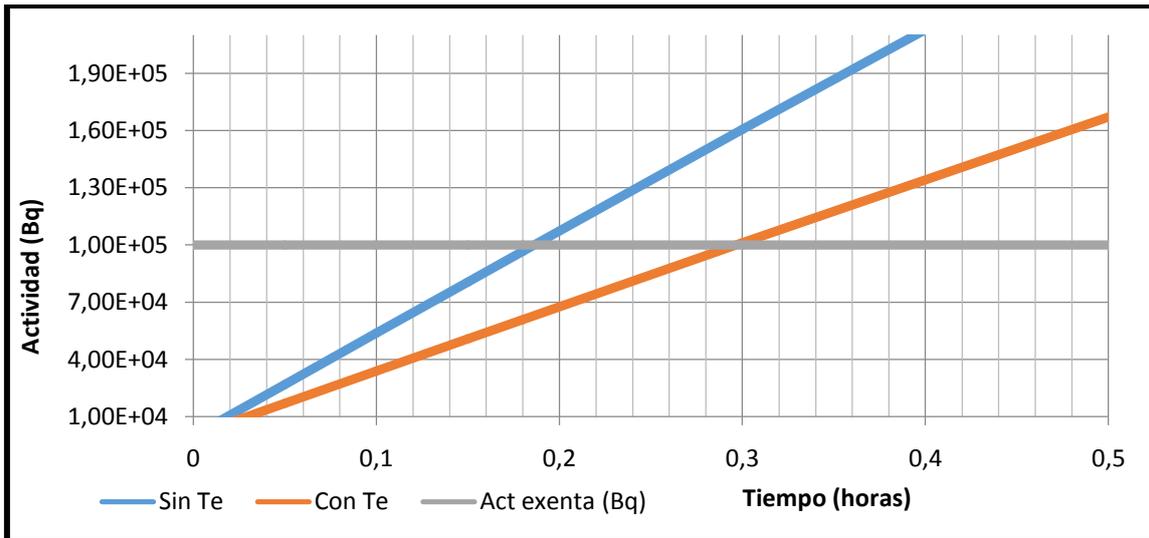


Ilustración 19: Sodio, potencia 50W, volumen 0,1 cm³ con y sin tiempo de enfriamiento de 5 horas

- **Sodio y potencia alta:** Para este caso, debido a la alta potencia además de la elevada constante de desintegración, los tiempos de irradiación son muy reducidos para el caso del volumen pequeño, que llega al límite de exención tras 57 minutos de irradiación. Es por ello que se propone el caso con los valores: **Potencia 1 kW, volumen 0,001 cm³ y tiempo de irradiación de 50 minutos.**

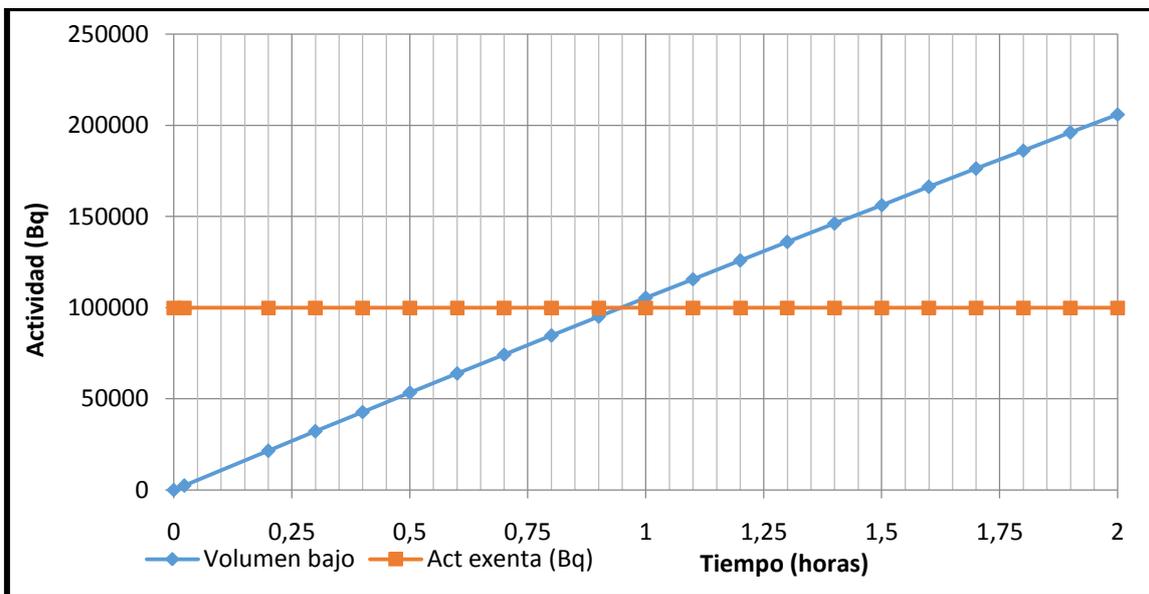


Ilustración 20: Caso de exención 3

Sin embargo, para el volumen de 0,1 cm³ esta potencia resulta impracticable ya que, en menos de un minuto de irradiación, el material ya sobrepasa el límite de exención. De forma similar al caso anterior, se añade un tiempo de enfriamiento para aumentar el tiempo de irradiación y conseguir una actividad exenta. En esta ocasión, debido a la gran potencia media del reactor, se escoge un tiempo de enfriamiento elevado de 20 horas.

En la siguiente gráfica se puede apreciar que, en efecto, se produce un aumento en el tiempo de irradiación hasta más allá de un minuto. Los valores de los parámetros serían: **Potencia 1 kW, volumen 0,1 cm³, tiempo de irradiación de 1 minuto y tiempo de enfriamiento de 20 horas**. Sin embargo, este tiempo resulta poco práctico para una irradiación en un reactor y no parece recomendable:

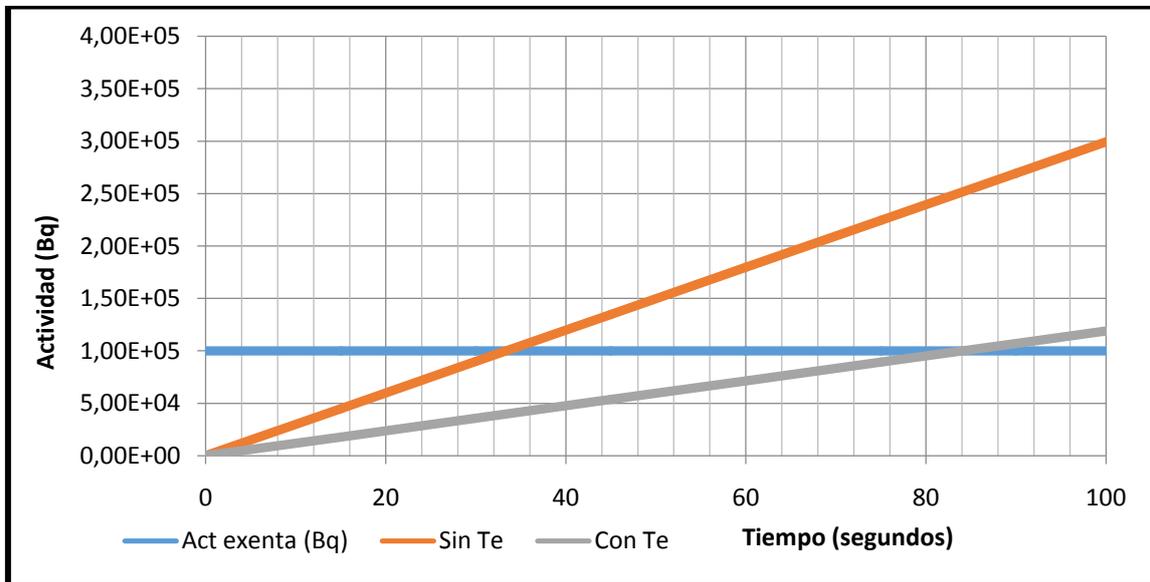


Ilustración 21: Sodio, potencia 1kW, volumen 0,1 cm³ con y sin tiempo de enfriamiento de 20 horas

- **Molibdeno y potencia baja:** Debido al mayor periodo de semidesintegración y menor constante de semidesintegración del molibdeno con respecto al sodio, se observa que con ninguno de los dos volúmenes diferentes se alcanza un valor de actividad no exenta. Así, se plantea el siguiente escenario: **Potencia de 1W, volumen de 0,1 cm³ y tiempo de irradiación menor de 65 horas y Potencia de 1W, volumen de 0,001 cm³ y tiempo de irradiación menor de 65 horas.**

El valor de 65 horas se ha escogido debido a que es un periodo de semidesintegración del radioisótopo Mo-99 y se considera que, sobrepasado este valor, la cantidad de Mo-99 que se desintegra resulta en una pérdida de masa considerable. Por ello, se propone una irradiación menor a un periodo de semidesintegración.

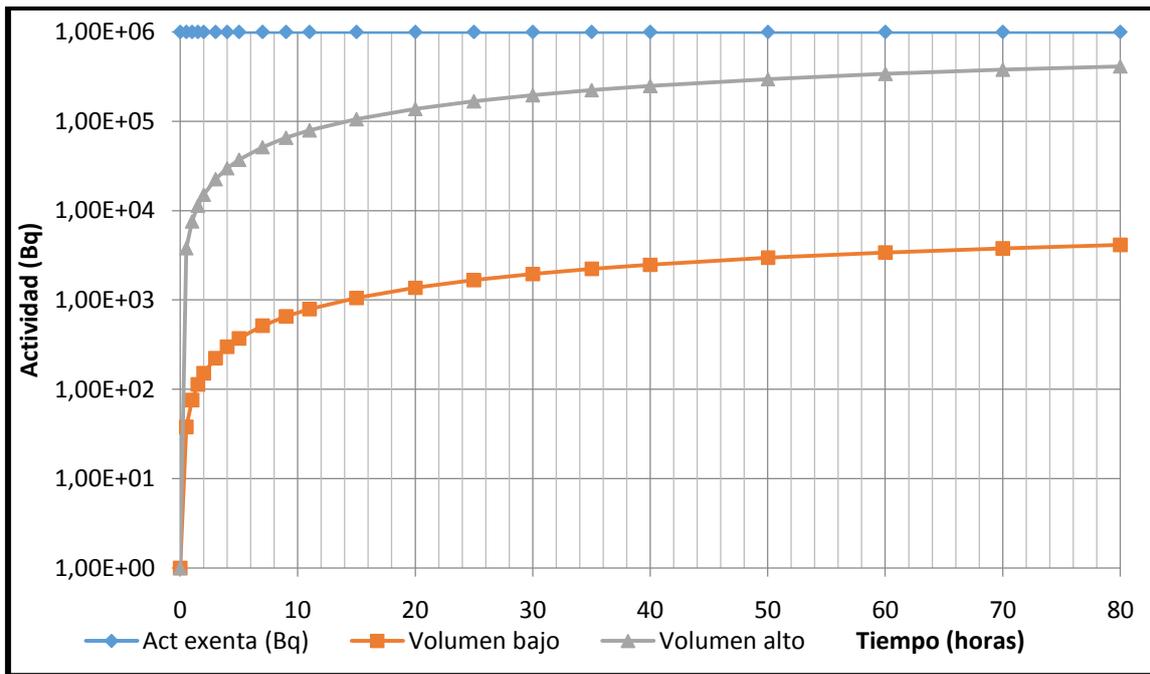


Ilustración 22: Caso de exención 4

- Molibdeno y potencia media:** Con el aumento en la potencia a 50W, se observa que esta vez el tiempo de irradiación sí debe ser limitado en el caso del volumen alto para no sobrepasar el límite de actividad establecido. Dicho límite se alcanza tras 160 minutos de irradiación. Así, se proponen los siguientes valores para el supuesto: **Potencia de 50W, volumen de 0,1 cm³ y tiempo de irradiación de 2,5 horas.**

En cuanto a la segunda opción que completa esta hipótesis, se observa que, de nuevo, necesita una potencia mayor para alcanzar el límite de exención para el Mo-99. Así, se sugiere un caso con los siguientes términos: **Potencia de 50W, volumen de 0,001 cm³ y tiempo de irradiación menor de 65 horas.**

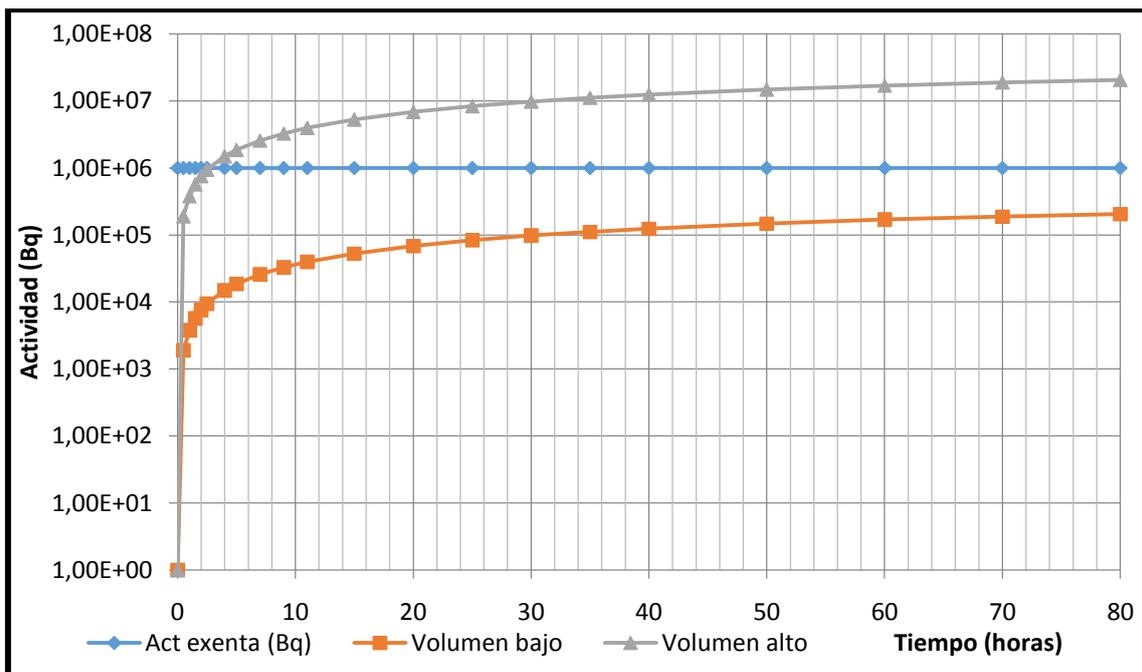


Ilustración 23: Caso de exención 5

- Molibdeno y potencia alta:** Para la opción de volumen alto, se observa que el tiempo de irradiación resulta mínimo. Según los datos obtenidos en los cálculos realizados en Excel, el valor límite de 1MBq se supera en menos de 8 minutos tras el comienzo de la irradiación. Se trata pues de un tiempo muy corto que, si bien realizable, puede resultar problemático en su irradiación en un reactor real. A pesar de ello, se sugieren los siguientes valores: **Potencia de 1kW, volumen de 0,1 cm³ y tiempo de irradiación de 6 minutos.**

Por lo que respecta al caso con un volumen inferior, el material alcanza el límite de exención a las 14 horas de irradiación, hecho que no había sucedido para este volumen a otras potencias. Se propone estas cifras para el caso: **Potencia de 1kW, volumen de 0,001 cm³ y tiempo de irradiación de 13 horas** (dado que con 14 horas se obtiene un valor de actividad no exento, se ha escogido dejar una hora como margen de seguridad para asegurar que se consigue el valor de actividad exento deseado).

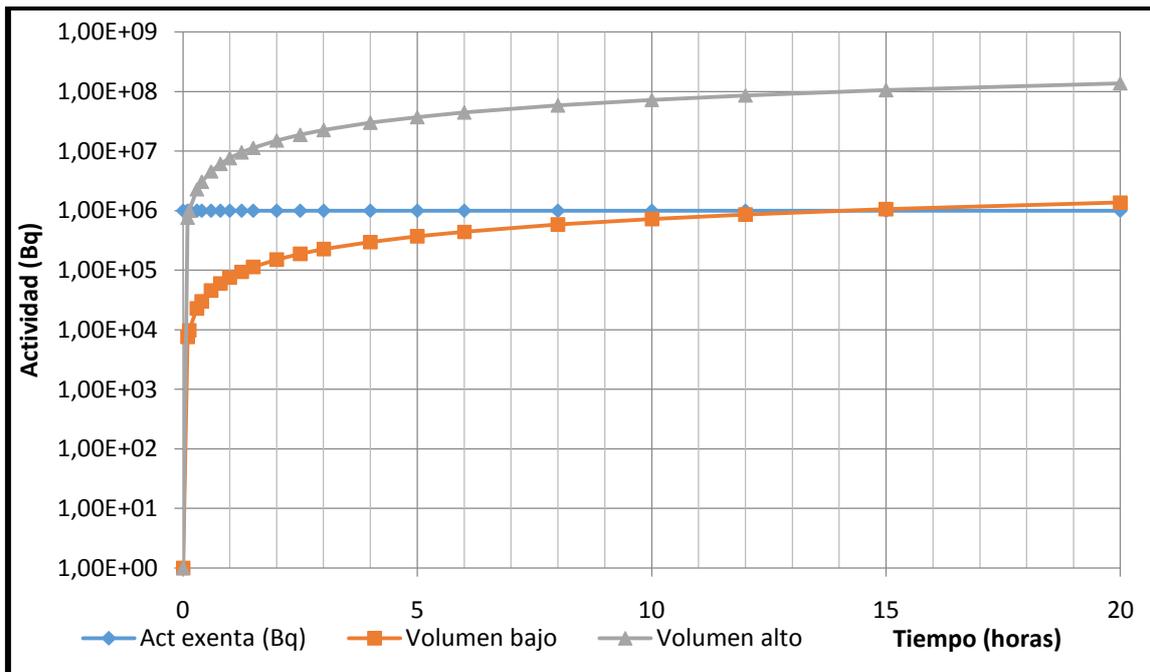


Ilustración 24: Caso de exención 6

- Antimonio y potencia baja: Como consecuencia del elevado periodo de semidesintegración que posee el radioisótopo Sb-124 (1444,8 horas) y la baja potencia del reactor simulado, se comprueba que ninguno de los dos materiales probados sobrepasa el valor de exención. Así, para el volumen alto, se plantea el caso con los siguientes valores: **Potencia de 1W, volumen de 0,1 cm³ y tiempo de irradiación menor de 150 horas.**

Sin embargo, para el caso del volumen de 0,001 cm³ no se presenta caso alguno. Se considera que la simulación no resulta práctica debido a que requiere un tiempo de irradiación enorme para producir niveles de actividad bajos (en una irradiación de 200 horas, el nivel de actividad resultante se encuentra tres órdenes de magnitud por debajo del límite de exención para el Sb-124), con lo que se descarta su aplicación a favor de otros supuestos con un reactor de mayor potencia media o un volumen de muestra superior.

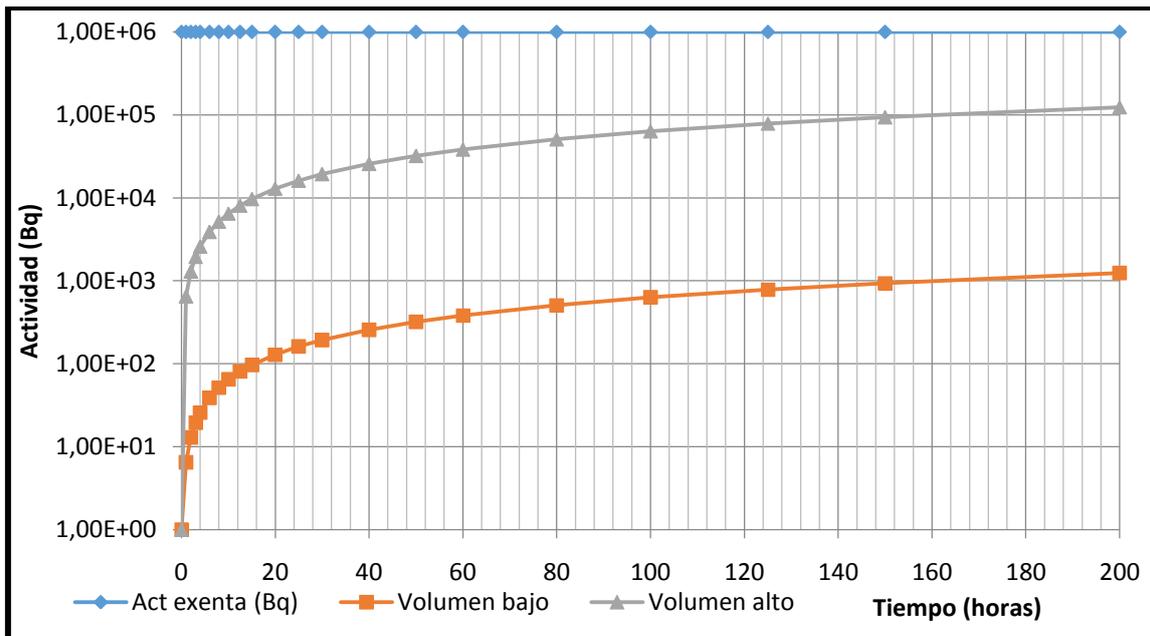


Ilustración 25: Caso de exención 7

- Antimonio y potencia media: En esta ocasión sí resultan viables ambas opciones. En la primera, el material requiere una irradiación de 31 horas para superar el límite existente en 1MBq. A pesar de ser un valor de tiempo elevado, aún se encuentra muy alejado del periodo de semidesintegración por lo que se considera válido. Así, se proponen los siguientes valores para el caso: **Potencia de 50W, volumen de 0,1 cm³ y tiempo de irradiación de 25 horas.**

Para la otra opción, vuelve a suceder que el material no sobrepasa los valores de actividad no exentos. Sin embargo, al contrario que en la simulación anterior, el valor de actividad alcanzado sí se considera suficiente para ser tomado en cuenta. Se sugieren estas cifras para el caso: **Potencia de 50W, volumen de 0,001 cm³ y tiempo de irradiación menor de 150 horas.**

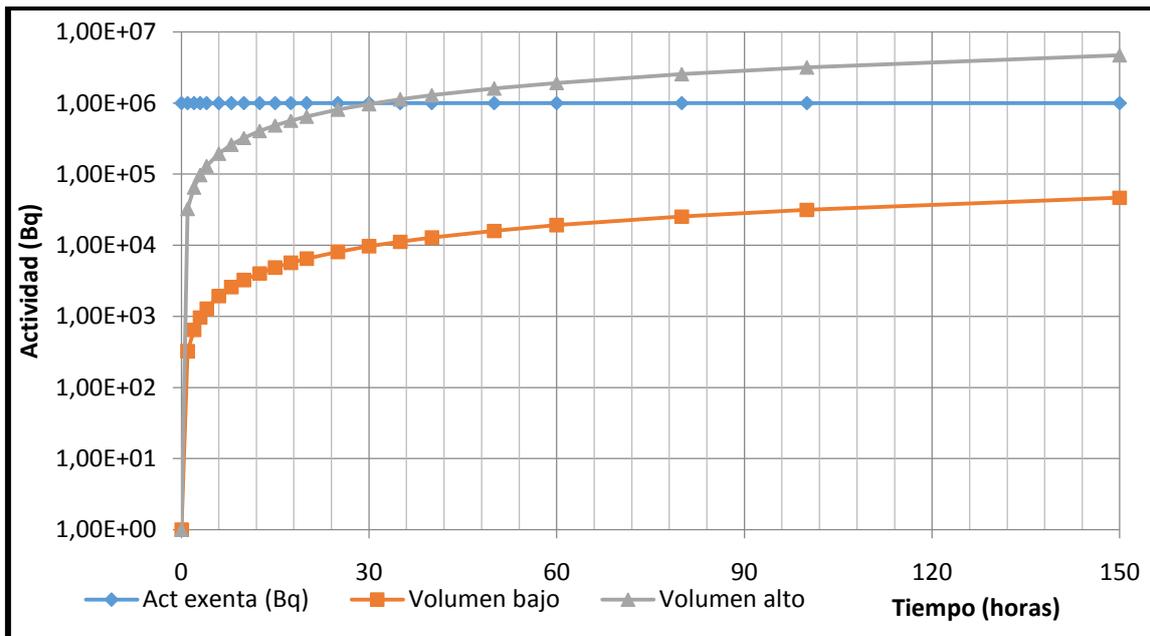


Ilustración 26: Caso de exención 8

- Antimonio y potencia alta: Debido al aumento de potencia respecto al anterior caso, se observa que la opción de volumen alto llega rápidamente a un valor de actividad no exento. Esto sucede con poco más de 90 minutos de irradiación. Se plantea un caso con los siguientes valores: **Potencia 1kW, volumen de 0,1 cm³ y tiempo de irradiación de 80 minutos.**

Por su parte, al contrario que en las dos simulaciones anteriores con el Sb-124, la opción de volumen inferior sí es capaz de superar el valor de exención fijado, aunque se produce con un tiempo de irradiación muy elevado de 150 horas. Sin embargo, el crecimiento desde las 120 horas hasta las 150 es escaso, por lo que se puede otorgar ese margen para conseguir una irradiación menos exigente temporalmente. Así, se propone el siguiente caso: **Potencia 1kW, volumen de 0,001 cm³ y tiempo de irradiación de 120 horas.**

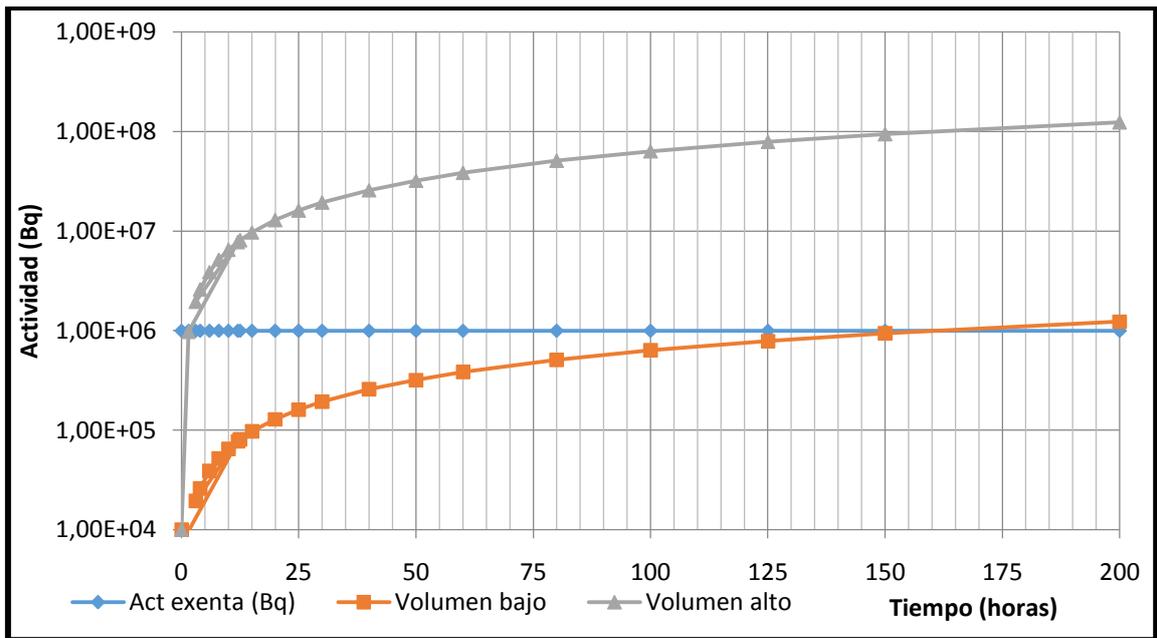


Ilustración 27: Caso de exención 9

6.- CONCLUSIONES

En el presente trabajo se ha desarrollado un modelo MCNP que se utiliza para simular las siguientes reacciones: Na-23 (n, γ) Na-24, Mo-98 (n, γ) Mo-99 y Sb-123 (n, γ) Sb-124. El objetivo de realizar dichas simulaciones es el análisis de la influencia de una serie de parámetros en la actividad resultante de la activación neutrónica de muestras de Na, Mo y Sb. Una vez identificados y analizados dichos parámetros, se han expuesto diversos ejemplos que producirán niveles de actividad exentos, que permiten el manejo de los radioisótopos fuera de zona controlada, lo que facilita su aplicación en uno de los diversos campos dónde se emplea la técnica del marcado con radioisótopos.

La variación del tiempo de irradiación produce cambios acentuados en los valores de actividad que se pueden obtener para los tres radioisótopos. Si bien se puede considerar que durante el proceso de activación neutrónica es una variable con grandes posibilidades de ajuste, en la práctica no resulta adecuado considerar tiempos de irradiación menores de una hora, asumiendo que dicha irradiación se produce en un reactor de investigación. Esta es una consideración importante a la hora de llevar los ejemplos propuestos en este trabajo u otros más allá del desarrollo teórico.

Por lo que respecta al tiempo de enfriamiento se observa que es, quizás, la variable de menor importancia de las cuatro estudiadas ya que sólo da lugar a un descenso considerable de la actividad para Na-24. Para los radioisótopos considerados de molibdeno y antimonio, requiere un número de horas muy elevado para que sea apreciable el efecto de una variación de este tiempo. Sin embargo, de nuevo abogando por el aspecto práctico, el tiempo de enfriamiento siempre debe formar parte del análisis de activación neutrónica debido al transporte del material irradiado desde su origen hasta el lugar dónde tendrá lugar su aplicación o a posibles tiempos de espera antes o después de dicho transporte.

La potencia media del reactor utilizado para la irradiación es un parámetro muy importante en la actividad resultante, ya que ésta aumenta de forma lineal con el incremento de la potencia. Así, la potencia media del reactor es un factor de importancia en la limitación de la actividad a valores por debajo del límite de exención. Sin embargo, es un valor que puede variar significativamente debido a las características del reactor que se utilice para la activación neutrónica del material y la gran diferencia de potencias de operación que existen entre los reactores, incluso los de investigación. Por tanto, en la práctica, en función de dónde se realiza la irradiación, el valor de la potencia es uno de los primeros parámetros en ser fijado.

El último de los parámetros analizados ha sido el volumen de la muestra. De forma similar con la potencia, de las ecuaciones presentadas durante la obtención de la actividad se desprende que su relación con la actividad es lineal. Aunque durante el análisis se han considerado valores pequeños, del orden de centímetros cúbicos, los valores de volumen empleados en las diferentes aplicaciones de los radioisótopos son incluso menores. De esta forma, se puede concluir que bien en el lugar de irradiación o bien en el lugar de aplicación, el volumen de la muestra irradiada será reducido hasta la cantidad de partículas de las que se vaya a hacer uso.

Para el sodio, se deben adoptar valores altos de potencia, volumen o tiempo de irradiación mientras que el tiempo de enfriamiento debe ser lo más bajo posible. Esto es debido al bajo

valor del periodo de semidesintegración. Por el contrario, debido a los valores de dicho periodo que son más altos para Mo-99 y Sb-124, el tiempo de enfriamiento carece de importancia y se debe disminuir alguno de los otros parámetros, o todos ellos, para obtener una actividad exenta. Teniendo en cuenta que el marcado se hace con nanopartículas, la dilución de la muestra irradiada puede bastar para alcanzar el objetivo deseado, es decir, una masa y por tanto volumen muy pequeños que causen un valor de actividad por debajo del límite de exención.

Finalmente, se puede afirmar que la activación neutrónica para obtener los radioisótopos Na-24, Mo-99 y Sb-124 con actividades que no superan el límite de exención es posible en los tres casos con el correcto ajuste en los parámetros analizados.

7.- BIBLIOGRAFÍA

- [1] Dr. Michael D. Glascock, Senior Research Scientist. University of Missouri Research Reactor. http://archaeometry.missouri.edu/naa_overview.html
- [2] Kahn, Jeffery (1996). From Radioisotopes to Medical Imaging, History of Nuclear Medicine Written at Berkeley, Berkeley Lab. <http://www2.lbl.gov/Science-Articles/Archive/nuclear-med-history.html>
- [3] Luque Ramírez, Manuel (2012). Manual CTO de Medicina y Cirugía. Endocrinología, metabolismo y nutrición. CTO Editorial, p. 41. ISBN 978-84-15062-11-0
- [4] Ródenas, J., Gallardo, S., Abarca, A., Juan, V., 2010d. Estimation of the activity generated by neutron activation in control rods of a BWR. Appl. Radiat. Isot. 68(4–5), 905–908.
- [5] Ródenas, J., Abarca, A., Gallardo, S., Analysis of dose rates received around the storage pool for irradiated control rods in a BWR Nuclear Power Plant. In: Proceedings of the Sixth CHERNE Workshop, Coimbra, June 2010e.
- [6] J.Ródenas, et al., Nucl. Instr. And Meth. A (2009), doi:10.1016/j.nima.2009.10.084
- [7] University of Missouri Research Reactor, Archaeometry Laboratory http://archaeometry.missouri.edu/naa_applications.html
- [8] INSTRUCCIÓN IS/05, de 26 de febrero de 2003, del Consejo de Seguridad Nuclear, por la que se definen los valores de exención para nucleidos según se establece en las tablas A y B del anexo I del Real Decreto 1836/1999. <https://www.boe.es/boe/dias/2003/04/10/pdfs/A14221-14229.pdf>
- [9] Nucleido, definición de la RAE. <http://dle.rae.es/?id=QhKS4op>
- [10] Ródenas, J. (2003). Introducción a la ingeniería de la contaminación radiactiva. ISBN 84-933316-4-3
- [11] Berkeley Lab (2000). The Discovery of Radioactivity. <http://www.lbl.gov/abc/wallchart/chapters/03/4.html>
- [12] Berkeley Lab (2003). A Guide to the Nuclear Science Wall Chart <http://www.lbl.gov/abc/wallchart/teachersguide/pdf/Chap03.pdf>
- [13] <https://energy.gov/sites/prod/files/2013/06/f2/h1019v1.pdf>
- [14] JANIS (Java-based nuclear information software) – NEA (Nuclear Energy Agency) <http://www.oecd-nea.org/janisweb/renderer/2647>
- [15] Ortega, X., Jorba, J. (1996). Radiaciones ionizantes: Utilización y riesgos – Volumen II. ISBN 978-84-8301-168-3
- [16] Foro Nuclear (2004). Manual de Tecnología Nuclear, apartado 2.2.1. http://www.foronuclear.org/images/stories/recursos/publicaciones/2010/manual_tecnologia_periodistas.pdf
- [17] CSN, Consejo de Seguridad Nuclear. El combustible nuclear y su ciclo <https://www.csn.es/enriquecimiento>

- [18] Nuclear Reactor Types (2008). The IET The (Institution of Engineering and Technology) www.theiet.org/factfiles/energy/nuc-reac-page.cfm?type=pdf
- [19] Reglamento sobre Protección Sanitaria contra las Radiaciones Ionizantes <https://www.boe.es/boe/dias/2001/07/26/pdfs/A27284-27393.pdf>
- [20] Reglamento sobre Protección Sanitaria contra las Radiaciones Ionizantes – Anexo II <https://www.boe.es/boe/dias/2001/07/26/pdfs/A27284-27393.pdf>
- [21] ICRP Publication 103. The 2007 Recommendations of the International Commission on Radiological Protection. [http://www.icrp.org/docs/ICRP_Publication_103-Annals_of_the_ICRP_37\(2-4\)-Free_extract.pdf](http://www.icrp.org/docs/ICRP_Publication_103-Annals_of_the_ICRP_37(2-4)-Free_extract.pdf)
- [22] Azmy, Y., Sartori, E., (). Nuclear Computational Science: A Century in Review. ISBN
- [23] Los Alamos National Laboratory. <http://www.lanl.gov/about/facts-figures/location.php>
- [24] Hull, T. E., Dobell, A. R. Random Number Generators. SIAM Review, Vol. 4, No. 3. http://chagall.med.cornell.edu/BioinfoCourse/PDFs/Lecture4/random_number_generator.pdf
- [25] Metropolis, N. (1987). Los Alamos Science Special Issue. <http://library.lanl.gov/cgi-bin/getfile?00326866.pdf>
- [26] Eckhardt, R. (1987). Los Alamos Science Special Issue. http://www.sciencemadness.org/lanl1_a/lib-www/pubs/00326867.pdf
- [27] Shultis, J. K., Faw, R. E. (2004). An MCNP Primer. ISBN
- [28] X-5 Monte Carlo Team (2003). MCNP – A General N-Particle Transport Code, Version 5, Volume I: Overview and Theory.
- [29] Rose, P. F. (1991). ENDF-201, ENDF/B-VI Summary Documentation. BNL-NCS-17541, Brookhaven National Laboratory.
- [30] Frankle, S. C., Reedy, R. C., Young, P. G. (2002). ACTI An MCNP Data Library for Prompt Gamma-ray Spectroscopy.
- [31] Howerton, R. J., et al (1975). The LLL Evaluated Nuclear Data Library (ENDL): Evaluation Techniques, Reaction Index, and Descriptions of Individual Reactions.
- [32] N. Manderlier, F. Tondeur, J. Guillaume, I. Gerardy, "Mesures sur banc moteur avec différents additifs activés", IRISIB, 2003. Comunicación privada al tutor de este trabajo.
- [33] Datos del Na-23 <http://www.oecd-nea.org/janisweb/renderer/1316>
- [34] Datos del Na-24 <http://www.oecd-nea.org/janisweb/renderer/1317>
- [35] Datos del Mo-92 <http://www.oecd-nea.org/janisweb/renderer/1319>
- [36] Datos del Mo-94 <http://www.oecd-nea.org/janisweb/renderer/1320>
- [37] Datos del Mo-95 <http://www.oecd-nea.org/janisweb/renderer/1321>
- [38] Datos del Mo-96 <http://www.oecd-nea.org/janisweb/renderer/1322>
- [39] Datos del Mo-97 <http://www.oecd-nea.org/janisweb/renderer/1323>

- [40] Datos del Mo-98 <http://www.oecd-nea.org/janisweb/renderer/1324>
- [41] Datos del Mo-99 <http://www.oecd-nea.org/janisweb/renderer/1326>
- [42] Datos del Mo-100 <http://www.oecd-nea.org/janisweb/renderer/1325>
- [43] Datos del Sb-121 <http://www.oecd-nea.org/janisweb/renderer/1332>
- [44] Datos del Sb-123 <http://www.oecd-nea.org/janisweb/renderer/1333>
- [45] Datos del Sb-124 <http://www.oecd-nea.org/janisweb/renderer/1334>

ANEXO 1: INPUT PARA NA-24

Input de trabajo para la activación de Na-23, Salva Aledó

C Cell Cards

1 1 -0.968 -1 2 -3 imp:n=1 \$Celda de cilindro de sodio, densidad negativa por ser en g/cm3

2 2 -0.00129 -4 5 -6 #1 imp:n=1 \$Celda de irradiación, densidad negativa por g/cm3

3 3 -1.235 -7 8 -9 #1 #2 imp:n=1 \$Núcleo

4 0 7:-8:9 #1 #2 #3 imp:n=0 \$Espacio exterior con vacío

C Surface Cards

c Barra a irradiar

1 cz 0.7

2 pz -0.325

3 pz 0.325

c Canal de irradiación

4 cz 1.2

5 pz -12.5

6 pz 12.5

c Núcleo

7 cx 12.5

8 px -13.75

9 px 13.75

C Data Cards

C Materiales

C

m1 11023 1 \$Sodio 23, abundancia natural 100%

c

m2 7014 -0.79 8016 -0.21 \$Aire simplificado (79% N, 21% O)

m3 1001 -0.13447 1002 -0.00002 \$Polietileno

6000 -0.80131 \$Carbono

8016 -0.0445 \$Oxígeno del óxido de uranio

92238 -0.0157351 92235 -0.00388476 \$Uranio enriquecido

C

C Datos generales

C

MODE N \$Añadido, define el uso de neutrones

NPS 20000000 \$Numero de partículas a lanzar en el problema

C

C Definición de fuente

C

SDEF POS=0 0 0 AXS=1 0 0 CEL=3 RAD=d1 EXT=d2 ERG=0.0253E-06 \$Definición fuente celda 3

C

SI1 0.0 12.5 \$Distancia radial de celda fuente

SI2 -13.75 13.75 \$Distancia al exterior de la celda fuente, altura

C

C Tallies

C

F4:n 1 \$Tally tipo 4, con neutrones y contabilizando lo que pasa en celda 1

FM4 0.025345 1 102 \$Factor de normalización, Na-23 y (n,gamma)

ANEXO 2: INPUT PARA MO-99

Input de trabajo para la activación de Mo-98, Salva Aledó

C Cell Cards

1 1 -10.28 -1 2 -3 imp:n=1 \$Celda de cilindro de molibdeno, densidad negativa por ser en g/cm³

2 2 -0.00129 -4 5 -6 #1 imp:n=1 \$Celda de irradiación, densidad negativa por g/cm³

3 3 -1.235 -7 8 -9 #1 #2 imp:n=1 \$Núcleo

4 0 7:-8:9 #1 #2 #3 imp:n=0 \$Espacio exterior con vacío

C Surface Cards

c Barra a irradiar

1 cz 0.7

2 pz -0.325

3 pz 0.325

c Canal de irradiación

4 cz 1.2

5 pz -12.5

6 pz 12.5

c Núcleo

7 cx 12.5

8 px -13.75

9 px 13.75

C Data Cards

C

C Materiales

C

m1 42000 1 \$Molibdeno natural

c

m2 7014 -0.79 8016 -0.21 \$Aire simplificado (79% N, 21% O)

c

m3 1001 -0.13447 1002 -0.00002 \$Polietileno

6000 -0.80131 \$Carbono

```

8016 -0.0445 $Oxigeno del oxido de uranio
92238 -0.0157351 92235 -0.00388476 $Uranio enriquecido
C
C Datos generales
C
MODE N $Añadido, define el uso de neutrones
NPS 20000000 $Numero de partículas a lanzar en el problema
C
C Definición de fuente
C
SDEF POS=0 0 0 AXS=1 0 0 CEL=3 RAD=d1 EXT=d2 ERG=0.0253E-06 $Definición fuente celda 3
C
SI1 0.0 12.5 $Distancia radial de celda fuente
SI2 -13.75 13.75 $Distancia al exterior de la celda fuente, altura
C
C Tallies
C
F4:n 1 $Tally tipo 4, con neutrones y contabilizando lo que pasa en celda 1
FM4 0.015344 1 102 $Factor de normalización, Mo-98 y (n,gamma)

```

ANEXO 3: INPUT PARA SB-124

Input de trabajo para la activación de Sb-123, Salva Aledó

C Cell Cards

1 1 -6.697 -1 2 -3 imp:n=1 \$Celda de cilindro de antimonio, densidad negativa por ser en g/cm³

2 2 -0.00129 -4 5 -6 #1 imp:n=1 \$Celda de irradiación, densidad negativa por g/cm³

3 3 -1.235 -7 8 -9 #1 #2 imp:n=1 \$Núcleo

4 0 7:-8:9 #1 #2 #3 imp:n=0 \$Espacio exterior con vacío

C Surface Cards

c Barra a irradiar

1 cz 0.7

2 pz -0.325

3 pz 0.325

c Canal de irradiación

4 cz 1.2

5 pz -12.5

6 pz 12.5

c Núcleo

7 cx 12.5

8 px -13.75

9 px 13.75

C Data Cards

C

C Materiales

C

m1 51000 1 \$Antimonio natural

c

m2 7014 -0.79 8016 -0.21 \$Aire simplificado (79% N, 21% O)

m3 1001 -0.13447 1002 -0.00002 \$Polietileno

6000 -0.80131 \$Carbono

8016 -0.0445 \$Oxígeno del óxido de uranio

92238 -0.0157351 92235 -0.00388476 \$Uranio enriquecido

C

C Datos generales

C

MODE N \$Añadido, define el uso de neutrones

NPS 20000000 \$Numero de partículas a lanzar en el problema

C

C Definición de fuente

C

SDEF POS=0 0 0 AXS=1 0 0 CEL=3 RAD=d1 EXT=d2 ERG=0.0253E-06 \$Definición fuente celda 3

C

SI1 0.0 12.5 \$Distancia radial de celda fuente

SI2 -13.75 13.75 \$Distancia al exterior de la celda fuente, altura

C

C Tallies

C

F4:n 1 \$Tally tipo 4, con neutrones y contabilizando lo que pasa en celda 1

FM4 0.014030 1 102 \$Factor de normalización, Sb-123 y (n,gamma)

PRESUPUESTO

El Presupuesto es el segundo de los tres documentos que componen el presente Trabajo Final de Grado titulado “Cálculo del tiempo de irradiación en un reactor nuclear de investigación para limitar la actividad de materiales irradiados: Aplicación a la obtención de radioisótopos para utilizarlos como marcadores en un proceso industrial.”

En este Presupuesto va a ser dividido en unidades temáticas correspondientes con las distintas fases del desarrollo del trabajo, como se expone en la siguiente tabla:

Tabla XII: Relación de unidades

UNIDAD	
1	Aprendizaje de herramientas y conceptos iniciales
2	Desarrollo de los modelos en MCNP
3	Tratamiento de los resultados y redacción del trabajo
4	Herramientas y material empleados

Dentro de la primera unidad, se va a realizar la estimación de las horas empleadas en el aprendizaje del nuevo software informático (MCNP), el repaso en herramientas ya conocidas (Microsoft Office) y el aprendizaje de los conceptos previos necesarios para la realización del trabajo.

Tabla XIII: Coste asociado con Unidad 1

	Horas totales	€/hora	Coste (€)
Aprendizaje del código MCNP5	40	20	800
Mejoras en manejo de Office	5	20	100
Conceptos previos	25	20	500
Total	70		1400

La Unidad 2 refleja la relación de recursos que han sido invertidos en el desarrollo de los tres inputs para MCNP, su ejecución y la extracción de resultados a través del archivo output generado por el programa.

Tabla XIV: Coste asociado con Unidad 2

	Horas totales	€/hora	Coste (€)
Desarrollo de los inputs	50	20	1000
Ejecución de modelos	25	20	500
Extracción de resultados	5	20	100
Total	80		1600

La Unidad 3 está compuesta de las tareas de tratamiento de datos, búsqueda bibliográfica, redacción, revisión e impresión de los documentos que componen este trabajo.

Tabla XV: Coste asociado con Unidad 3

	Horas totales	€/hora	Coste (€)
Tratamiento de datos	30	20	600
Búsqueda bibliográfica	10	20	200
Redacción de documentos	90	20	1800
Revisión de documentos	15	20	300
Impresión y encuadernación	5	20	100
Total	150		3000

La última unidad se compone de las herramientas informáticas y los materiales que han sido empleados en alguna de las tareas descritas en las tres unidades anteriores.

Tabla XVI: Coste asociado con Unidad 4

	Cantidad	% de amortización	€/unidad	Coste (€)
Ordenador personal	1	10	600	60
Licencia de software MCNP	1	10	2000	200
Licencia de software Office	1	10	80	8
Libreta de anotaciones	1		2	2
Bolígrafos	2		1	2
Folios y fotocopias	200		0,1	20
Encuadernación	1		3	3
Total				295

Así, sumando el coste asociado a las cuatro unidades descritas en la tabla I además del coste de las horas de trabajo del tutor de este trabajo:

Tabla XVII: Resultado parcial del Presupuesto

	Horas totales	€/hora	Coste (€)
Unidad 1			1400
Unidad 2			1600
Unidad 3			3000
Unidad 4			295
Tareas del tutor	50	30	1500
Total			7795

Una vez obtenido este resultado parcial, se procede a calcular el resultado definitivo de este Presupuesto añadiendo los gastos generales, el beneficio industrial y el impuesto sobre el valor añadido:

Tabla XVIII: Coste sin impuestos

	Coste (€)
Resultado parcial	7795
Gastos generales (12%)	935,4
Beneficio industrial (6%)	467,7
Presupuesto sin impuestos	9198,1

Tabla XIX: Coste de Presupuesto Total

	Coste (€)
Presupuesto sin impuestos	9198,1
IVA (21%)	1931,6
Presupuesto total	11129,7

El Presupuesto Total asciende a un coste de: ONCE MIL CIENTO VEINTINUEVE EUROS CON SETENTA CÉNTIMOS.

