

CARACTERIZACIÓN DE LA REACCIÓN DE CAPTURA NEUTRÓNICA POR ^{14}N USANDO GEANT4

Hollman. A. Huertas^{1*}, Edwin. Munevar², J. Alfonso Leyva³.

¹Universidad Distrital Francisco José de Caldas. Facultad de Ciencias y Educación, Licenciatura en Física. Grupo de investigación FISINFOR. Bogotá, Colombia.

²Universidad Distrital Francisco José de Caldas. Facultad de Ciencias y Educación, Licenciatura en Física. Grupo de investigación FISINFOR. Bogotá, Colombia.

³Pontificia Universidad Javeriana. Departamento de Física. Bogotá, Colombia.

Received May 2021; accepted November 2021

Abstract

Tissue is primarily composed of elements such as hydrogen, carbon, oxygen, and nitrogen. Nitrogen has the largest neutron capture cross section among these elements. In a nitrogen neutron capture reaction (NNCR), an energetic proton is emitted, which quickly loses its energy along its track. It is expected that such released energy will be deposited within the tissue under consideration. Therefore, even though nitrogen only makes up approximately 3% of tissue by mass, its effect is significant and cannot be ignored. In this work, the neutron capture reaction by ^{14}N is simulated using the GEANT4 toolkit to characterize the reaction in terms of kinematical quantities. In future work, we will be able to study the effects associated with the final state of the NNCR that might take place in tissue.

Keywords: neutron capture, characterization, Geant4.

Resumen

El tejido se compone principalmente de elementos como hidrógeno, carbono, oxígeno y nitrógeno. Entre ellos, el nitrógeno tiene la sección transversal de captura de neutrones más alta. En una reacción de captura de neutrones por nitrógeno (NNCR), se emite un protón energético que pierde rápidamente su energía a lo largo de su trayectoria, y existe una alta probabilidad de que dicha energía liberada se deposite dentro del tejido en consideración. Por lo tanto, aunque el porcentaje de nitrógeno (en masa) es del orden del 3% en un tejido típico, su efecto es significativo y no puede ignorarse. En este trabajo se simula la reacción de captura de neutrones por ^{14}N utilizando el toolkit GEANT4 con el objetivo de caracterizar la reacción en términos de cantidades cinemáticas y así, en un trabajo futuro, poder estudiar los efectos asociados con el estado final de NNCR que podría tener lugar en el tejido.

Palabras clave: captura neutrónica, caracterización, Geant4.

I. INTRODUCCIÓN

Desde el descubrimiento del neutrón realizado por James Chadwick en 1932 (Chadwick, 1932), se han llevado a cabo diversos estudios para caracterizar sus propiedades físicas en términos de distribuciones angulares, distribuciones de energía, secciones eficaces y dosis absorbidas, entre otras (Barschall y col., 2000). Algunos de estos estudios se han enfocado en los efectos de la interacción de neutrones con tejido, buscando tratamientos alternativos y menos invasivos para enfermedades como el glioblastoma multiforme

^{1*}Hollman. A. Huertas: hahuertasa@udistrital.edu.co

o GBM¹. Uno de estos es el tratamiento con neutrones llamado terapia por captura neutrónica (NCT, por sus siglas en inglés) (Kreimann, 2002; Medina y col., 2018) que consiste en la introducción de un marcador o absorbente de neutrones (⁷Li, ¹⁰B o ¹⁵⁷Gd) en el tumor para luego bombardearlo con un haz de neutrones térmicos o epitérmicos. La reacción nuclear resultante libera -en una región delimitada al tamaño celular- energía y dosis suficiente para causar daño a las células tumorales con un efecto mínimo sobre las células sanas.

Estudios completos de dosimetría a nivel de NCT presentan un alto nivel de complejidad ya que al campo correspondiente de radiación contribuyen dos componentes principales: (a) la componente asociada con el estado final de la reacción de captura neutrónica por parte del marcador y (b) la componente debida a fotones y partículas cargadas pesadas producidas como parte de la captura neutrónica asociada con el tejido circundante sano (ver Figura 1), que rodea al tumor, en particular, con los elementos ¹H, ¹²C, ¹⁴N y ¹⁶O, los cuales dan cuenta de alrededor del 99,2 % del contenido atómico en el cuerpo humano (Swanepoel, 2010; Young y Foster Jr, 1972). De estos cuatro elementos, el nitrógeno presenta, a energías térmicas, la sección eficaz de captura neutrónica más alta con un valor de 1.83 barns (Gledenov y col., 1993). Además, a pesar de que el porcentaje de átomos de nitrógeno es de 2,7% del total de tejido, considerablemente bajo comparado con el hidrógeno o el oxígeno con un 10,5% y 60,2%, respectivamente, el estado final de la reacción de captura neutrónica por nitrógeno es el responsable de la mayor contribución a la dosis depositada en el tejido por parte de la componente (b) del campo de radiación de NCT.

Por lo anterior y dado el papel fundamental que desempeña el nitrógeno para determinar la dosis total absorbida en una reacción de captura neutrónica, en el presente trabajo se lleva a cabo la simulación computacional de la captura neutrónica por nitrógeno en el rango de energías térmicas. Lo anterior con el fin de establecer un primer escenario de caracterización cinemática en términos de distribución de energía cinética, distribución de momento y distribución angular que permita continuar en un trabajo a futuro con la caracterización a nivel de dosis depositada propia del estado final de dicha reacción.

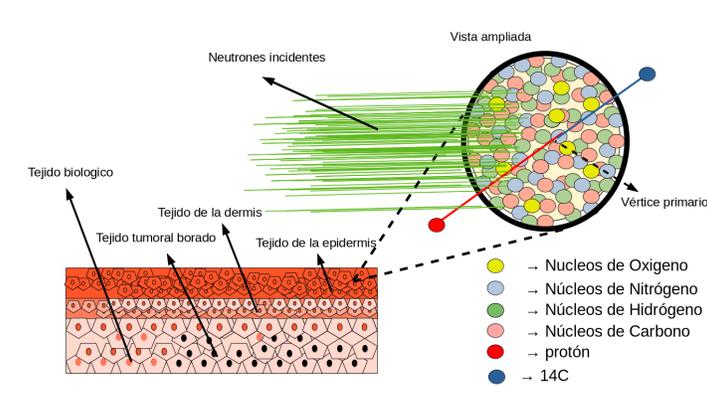


Figura 1: Representación de la captura neutrónica por nitrógeno y otros elementos presentes en células biológicas.
Fuente: Autores.

II. MATERIALES Y MÉTODOS

Geant4 es un conjunto de herramientas computacionales enfocado en el estudio de interacciones de las partículas con la materia. El desarrollo de esta herramienta se debe a la necesidad de las ciencias experimentales de diseñar detectores más eficientes que permitan dar una interpretación más cercana a

¹ El GBM es un tipo de tumor que presenta mayor resistencia a tratamientos convencionales actuales.

resultados experimentales. Su lenguaje de programación en C++ orientado a objetos y su carácter de fuente abierta, brinda la posibilidad de realizar modificaciones en el software. Además, la disponibilidad de una gran variedad de listas o librerías asociadas con diferentes procesos físicos, así como una amplia validación, la hace una herramienta confiable para el desarrollo de simulaciones relacionadas con la interacción radiación-materia. La versión de Geant4 usada en este trabajo corresponde a la versión 10.6.

Geometría de la simulación

La simulación implementa una geometría formada por un volumen principal (World volume) compuesto de material “vacío” y un volumen blanco semi-infinito hecho de ^{14}N enriquecido al 100% y situado con su cara lateral izquierda en el centro del origen de coordenadas del volumen principal (ver Figura 2). El espesor del volumen blanco (500 m) se estableció con el fin de aumentar la probabilidad de captura neutrónica en cada evento. Dicho valor se justifica a partir de determinar evento por evento la posición del vértice primario de la reacción de captura. La Figura 3 muestra cómo se distribuye dicha posición para neutrones incidentes con energía de 0,025 eV dentro del blanco de ^{14}N .

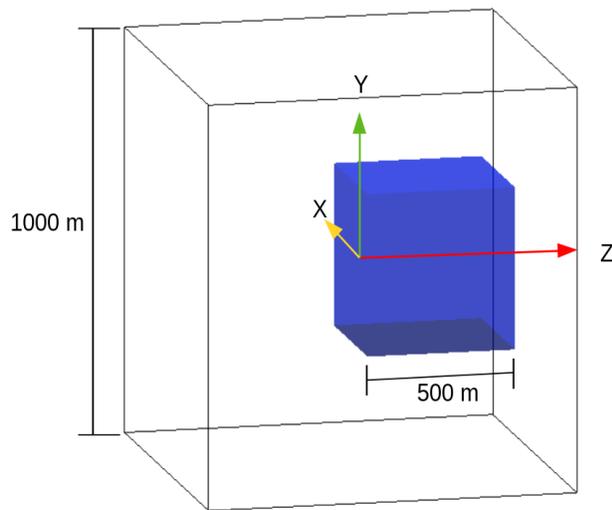


Figura 2: Dimensiones de la geometría implementada en la simulación. El volumen blanco está representado por un cubo de 500 m de espesor enriquecido al 100 % de ^{14}N .

Fuente: autores

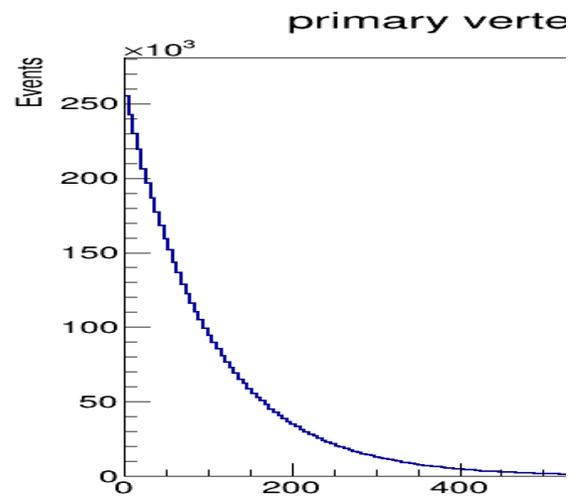


Figura 3: Distribución del vértice primario de captura neutrónica por nitrógeno para una fuente neutrones incidentes con energía de 0,025 eV. Los neutrones en su mayoría son capturados antes de recorrer 500 m.

Fuente: autores

Fuente de neutrones y listas de física

La fuente está compuesta por un haz monoenergético unidireccional de neutrones térmicos con dirección a lo largo del eje z. La física de la simulación se establece en las librerías G4HadronPhysicsQGSP_BIC_HP especializada en interacciones de neutrones a baja energía y G4EmStandardPhysics especializada en las interacciones electromagnéticas (Collaboration y col., 2016a, 2016b).

Reacciones producidas en la interacción $n + {}^{14}\text{N}$

En Geant4 la interacción entre neutrones térmicos y ${}^{14}\text{N}$ conlleva a dos posibles reacciones (ver Tabla 1). La primera reacción corresponde a un proceso de interacción elástica asociada con la emisión de partículas gamma y ${}^{15}\text{N}$ con una tasa de producción cercana al 4% y un valor Q de 10,833 MeV; la segunda reacción corresponde a la captura neutrónica cuyo estado final produce iones de ${}^{14}\text{C}$ y protones con un porcentaje de ocurrencia cercano al 96% y un valor Q de 0,626 MeV. Estos valores coinciden con los reportados en la literatura (Podgoršak y col., 2006).

Tabla 1: Porcentaje de ocurrencia de las reacciones producidas en $n + {}^{14}\text{N}$.

Energía del neutrón	0,025 eV
${}^{14}\text{N}(n,\gamma){}^{15}\text{N}$	3,95 %
${}^{14}\text{N}(n,p){}^{14}\text{C}$	95,97 %

III. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

En esta sección se presentan los resultados de la simulación que caracteriza la reacción ${}^{14}\text{N}(n,p){}^{14}\text{C}$; en la simulación se generaron cinco millones de eventos. Para llevar a cabo el análisis de la interacción se utiliza la clase `G4UsersteppingAction()`, desde aquí se hace un rastreo de las partículas en cada paso de su trayectoria y la identificación de las partículas que puedan generarse; seguido a esto se hace un registro de las partículas secundarias. Haciendo uso de estos elementos se genera una lista de datos como nombre de partícula, energía inicial, momento, vértice primario, ángulos polar y azimutal en un archivo generado con información de evento por evento.

Distribución de energía cinética para el ${}^{14}\text{C}$ y el protón

La Figura 4 muestra la distribución de energía cinética asociada con el estado final de la reacción ${}^{14}\text{N}(n,p){}^{14}\text{C}$ usando neutrones de energía igual a 0,025 eV. Los valores medios de energía cinética para ${}^{14}\text{C}$ y protón son de 0,04205 MeV y 0,58443 MeV, respectivamente. Se observa diferencias significativas entre la energía del ${}^{14}\text{C}$ y el protón, mostrando que este último es el mayor responsable en la deposición de energía en el tejido.

Estudios adicionales usando diferentes grupos de energía (0,220, 0,415, 0,610, 0,805 y 1,0 eV) muestran que la energía cinética media asociada con los productos del estado final de la captura neutrónica es independiente de la energía del haz de neutrones incidentes (ver Tabla 2).

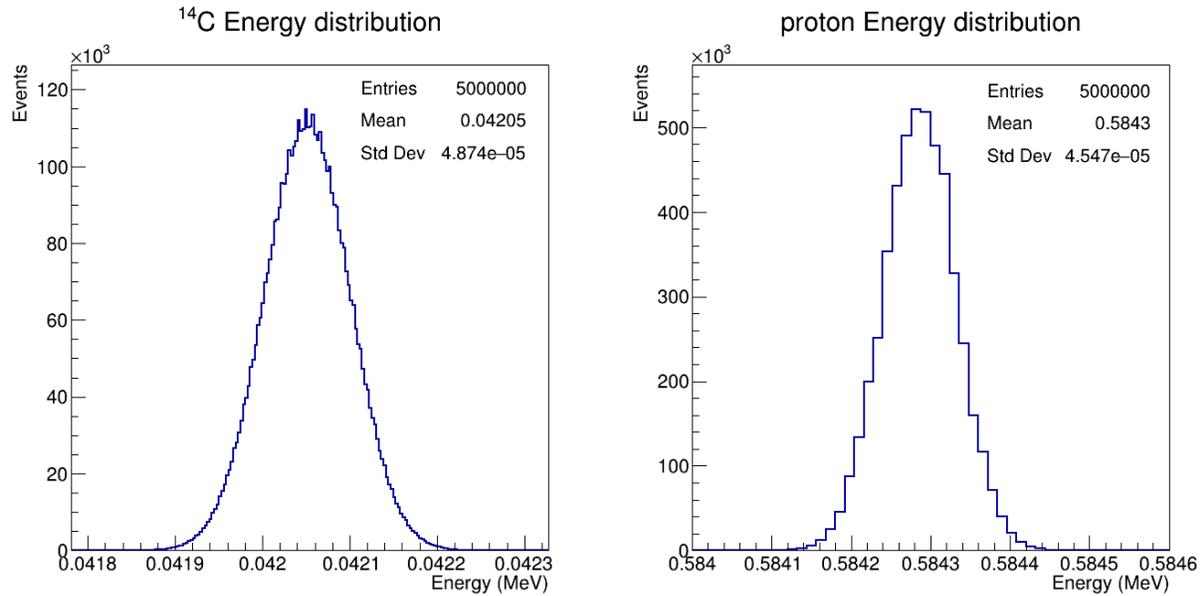


Figura 4: Distribución de energía cinética para el ^{14}C (izquierda) y el protón (derecha) para neutrones incidentes con energía de 0,025 eV. El ancho de cada distribución revela el carácter monoenergético con que el ^{14}C y el protón son emitidos.

Fuente: autores.

Tabla 2: Energía cinética media para la reacción $^{14}\text{N}(n,p)^{14}\text{C}$ usando diferentes grupos de energía. La energía cinética en cada caso no muestra variación significativa al aumentar la energía del haz.

Energía neutrón (eV)	0,025	0,22	0,415	0,61	0,805	1,0
Energía protón (MeV)	0,5842860	0,5842860	0,5842870	0,5842870	0,5842870	0,5842870
Energía ^{14}C (MeV)	0,0420516	0,0420516	0,0420516	0,0420517	0,0420517	0,0420517

Distribución de momento del ^{14}C y el protón

La Figura 5 muestra la distribución de momento para ^{14}C y protón. El valor medio es el mismo en ambos casos por lo cual la diferencia entre momentos es consistente con cero.

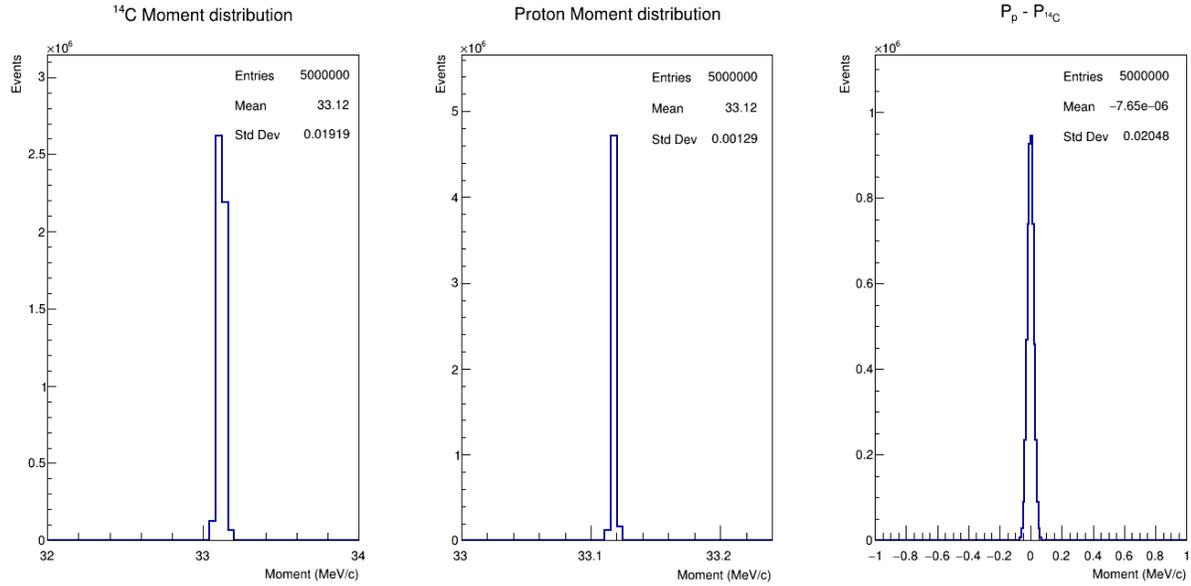


Figura 5: Distribución de momento para ^{14}C (izquierda) y protón (centro) para un haz de neutrones incidentes de 0,025 eV. A la derecha se encuentra la diferencia de momentos entre protón y ^{14}C , la cual se distribuye alrededor de cero.

Distribución angular del ^{14}C y el protón

La correlación angular entre el ^{14}C y el protón se muestra en la Figura 6 a partir de la diferencia entre los ángulos polares y los ángulos azimutales respectivos para una energía de 0,025 eV del haz primario. Ambas distribuciones tienen un valor medio centrado en 180° lo cual revela la emisión “back to back” de los productos del estado final en el sistema de laboratorio. Conocer esta distribución angular es de ayuda para establecer el modelo del volumen blanco a implementar.

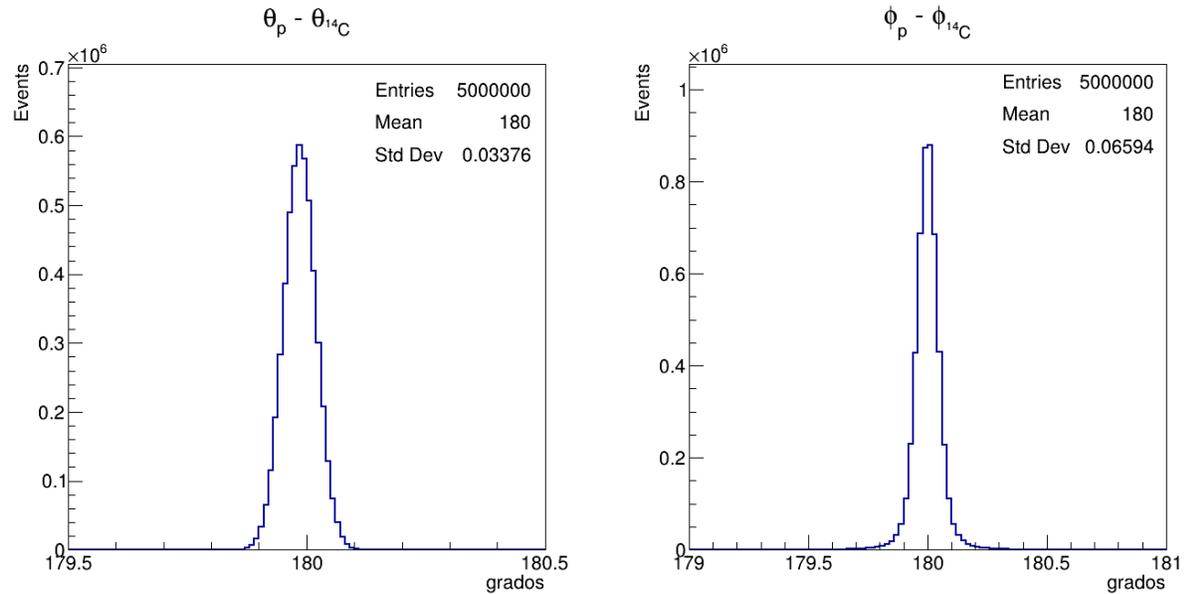


Figura 6: Diferencia en valor absoluto del ángulo polar (izquierda) y el ángulo azimutal (derecha) para el protón y el ^{14}C en el sistema de laboratorio usando neutrones incidentes con energía de 0,025 eV en la reacción $^{14}\text{N}(n,p)^{14}\text{C}$.

IV. CONCLUSIONES

Se llevó a cabo la simulación de la reacción de captura neutrónica por ^{14}N usando la herramienta computacional Geant4. Esta herramienta permite simular el estado final de la captura neutrónica, que incluye ^{14}C y protones. Las dimensiones implementadas en el presente trabajo contribuyen en la correcta caracterización de la reacción, esto se debe a la alta cantidad de capturas que se obtienen. Para implementar la captura neutrónica por nitrógeno en un modelo real es necesario simular la emisión de una cantidad considerablemente alta de neutrones para obtener resultados similares a los expuestos en este trabajo.

Las distribuciones de momento y las distribuciones angulares para el ^{14}C y el protón evidencian claramente que los productos de la captura son emitidos en el sistema de laboratorio con la misma magnitud de momento, pero en dirección opuesta. Esto corrobora lo esperado a partir de un cálculo de la cinemática de la reacción.

Con base en los resultados obtenidos en la simulación, se puede resaltar que Geant4 constituye una herramienta computacional válida para evaluar la simulación de la reacción nuclear que tiene lugar en la captura neutrónica por nitrógeno a energías térmicas.

V. REFERENCIAS

- Barschall, H., Chadwick, M., Jones, D., Meulders, J., Schuhmacher, H. & Young, P. (2000). Report 63. Journal of the ICRU, (2).
- Chadwick, J. (1932). The existence of neutron. Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character, 136 (830), 692-708.
- Collaboration, G. y col. (2016b). Physics reference manual. Version: geant4, 10.4 (0).
- Collaboration, G. y col. (2016a). Guide for physics lists release. Version: geant4, 10.4 (0).
- Gledenov, Y. M., Salatski, V. I., & Sedyshev, P. V. (1993). The $^{14}\text{N}(n,p)^{14}\text{C}$ reaction cross section for thermal neutrons. *Zeitschrift für Physik a Hadrons and Nuclei*, 346, 307-308.
- Kreimann, E. L. (2002). *Estudios de terapia por captura neutrónica en boro (BNCT) en un modelo experimental de cáncer oral* (Doctoral dissertation, Universidad de Buenos Aires. Facultad de Ciencias Exactas y Naturales).
- Medina, R. S., Téllez, D. A., Munévar, E., & Leyva, J. A. (2018). Caracterización de la reacción nuclear de la terapia de captura neutrónica por Boro (BNCT) por medio de Geant4. *Revista Investigaciones y Aplicaciones Nucleares*, (2), 43-54.
- Podgoršak, E. B. y col. (2006). Radiation physics for medical physicists (Vol. 1). Springer.
- Swanepoel, M. W. (2010). The role of the $^{14}\text{N}(n,p)^{14}\text{C}$ reaction in neutron irradiation of soft tissues. *Radiation measurements*, 45(10), 1458-1461.
- Young, P. & Foster Jr, D. (1972). Evaluation of the neutron and gamma-ray production cross sections for nitrogen. (inf. téc.). Los Alamos Scientific Lab., N. Mex.