

Capítulo 5 .

Propiedades Estructurales Básicas de los Centelladores Estudiados.

5.1 Características Generales para la entrada del MCNP.

La composición química y la densidad del material son los únicos datos referentes al material centellador que se utilizan para realizar una simulación en el código MCNP; la estructura cristalográfica no se toma en cuenta. Las propiedades de cada uno cristales centelladores caracterizados en este trabajo se muestran en la Tabla 5.1.

Abreviación.	Nombre.	Fórmula.	Densidad (g/cm ³).
BaF	Fluoruro de bario.	BaF ₂	4.8850
BGO	Germanato de bismuto.	Bi ₄ Ge ₃ O ₁₂	7.1300
CaF	Fluoruro de calcio.	CaF ₂	3.1800
CeF	Fluoruro de cerio.	CeF ₃	6.1510
CsF	Fluoruro de cesio.	CsF	4.6520
CsI	Yoduro de cesio.	CsI	4.5290
HfF	Fluoruro de hafnio.	HfF ₄	7.1310
HfO	Óxido de hafnio.	HfO ₂	9.6800
HfO (2)	Óxido de hafnio.	HfO ₂	10.4479
LiCeBO	Borato de litio y cerio.	Li ₃ Ce ₂ (BO ₃) ₃	4.50985
LiGdBO	Borato de litio y gadolinio.	Li ₆ Gd(BO ₃) ₃	3.21064
LiLaBO	Borato de litio y lantano.	Li ₆ La(BO ₃) ₃	3.05371
LiPrBo	Borato de litio y praseodimio.	Li ₃ Pr ₂ (BO ₃) ₃	4.52473
LuBO	Borato de lutecio.	LuBO ₃	6.9000
LuSiO	Oxi-Ortosilicato de lutecio	Lu ₂ SiO ₅	7.4000
NaI	Yoduro de sodio	NaI	3.6750
PbWO	Tungstanato de plomo.	PbWO ₄	8.2800
ThF	Fluoruro de torio	ThF ₄	6.1190
ThO	Óxido de torio.	ThO ₂	9.9870
ZrF	Fluoruro de circonio.	ZrF ₄	4.6090

Tabla 5.1: Características de los materiales centelladores simulados.

A estas características básicas hay que agregar aquellas relacionadas con cada fenómeno descrito en los capítulos anteriores y que vienen cuantificadas en las bibliotecas que usa el MCNP.

5.2 Características Particulares.

- **NaI.**

Fue el primer material centellador usado a gran escala y actualmente es todavía muy utilizado. Presenta una producción de luz muy alta. Este cristal es hidróscopico, es decir, debe de ser conservado al vacío ya que es susceptible a la humedad. Sin embargo, puede ser fabricado en distintas formas y tamaños. Presenta una estructura cristalográfica del grupo 225 que se ilustra en la Figura 5.1. Desgraciadamente tiene un tiempo de decaimiento de 230 ns [18], muy lento para aplicaciones que requieren un conteo rápido.

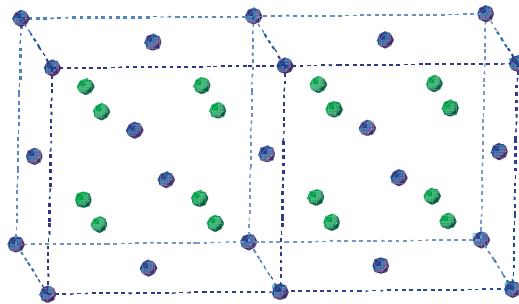


Figura 5.1. Estructura Cristalográfica del Grupo 225. [22]

- **CsF.**

Es hidróscopico y se utiliza principalmente en Tomografía Computarizada (CT). Presenta también una estructura cristalográfica del grupo 225 como el NaI (Ver Figura 5.1).

- **BaF₂.**

Actualmente es el único material con alto número atómico que tiene un tiempo de decaimiento muy pequeño, por lo que lo hace el centellador ideal para aplicaciones que requieren una respuesta rápida de conteo y una eficiencia de detección grande por unidad de volumen. Se sabe que este material tiene dos tiempos de decaimiento, uno en 0.6 ns que emite fotones con longitudes de onda chicas, y otro a 630 ns con emisiones de fotones con longitudes de onda más grande [18]. Muestra estabilidad química, térmica y dureza a la radiación. Sin embargo, su producción de luz es muy baja. Tiene una estructura cristalográfica del grupo 225 (Ver Figura 5.1).

- **CaF₂.**

Es un centellador no hidrocópico e inerte por lo que se ocupa en condiciones ambientales adversas. Es resistente a las fracturas. No es muy utilizado por su largo tiempo de respuesta (900 ns) [18]. Su estructura molecular corresponde a la del grupo 225 (Ver Figura 5.1).

- **ThO₂.**

Posee propiedades ópticas requeridas en un buen detector, en particular debido su alto número atómico. Está compuesto por una estructura cristalográfica del grupo 225 (Ver Figura 5.1).

- **HfO₂ (2).**

Sus principales aplicaciones son en forma de películas delgadas [1]. El óxido de hafnio con densidad mayor presenta una estructura cristalográfica del grupo 225 (Ver Figura 5.1).

- **HfO₂.**

A diferencia del HfO (2), el óxido de hafnio con densidad menor tiene una estructura circonio monoclinica correspondiente al grupo cristalográfico 14, como se muestra en la Figura 5.2.

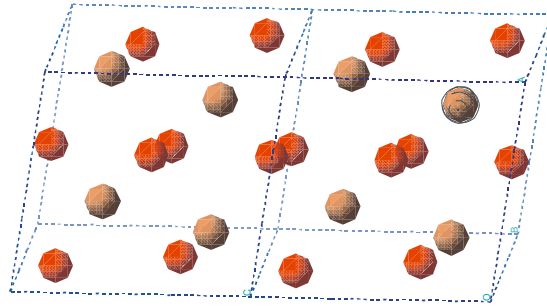


Figura 5.2. Estructura Circonio Monoclinica [23].

- **CsI.**

Se caracteriza por mostrar un coeficiente absorción por unidad de tamaño muy grande. A pesar de ser blando y muy maleable, es resistente a la vibración, golpes y fracturas. Es un material centellador muy utilizado hoy en día, especialmente en aplicaciones espaciales donde es relevante el peso y tamaño del detector, y en distintos proyectos del CERN. Se comercializa en estado puro o dopado con talio o sodio, presentando propiedades muy diferentes en cada caso. Su estructura molecular se denomina Estructura BCC (*Body Center Cubic*) y se ilustra en la Figura 5.3.

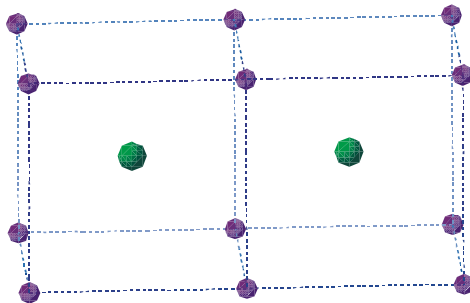


Figura 5.3. Estructura BCC [23].

- **PbWO₄.**

Se caracteriza por tener una producción de luz muy alta, sin embargo, esta varía con respecto a la temperatura. Su fabricación se ve limitada, ya que su temperatura de fusión es muy alta. La Figura 5.4 representa su estructura cristalina que pertenece al grupo cristalográfico 88.

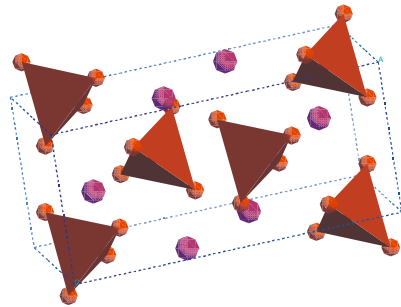


Figura 5.4. Estructura Cristalina del Grupo 88. El plomo se representa de color morado, el oxígeno de color rojo y el volframio se localiza en el centro de la estructura piramidal que forman los oxígenos [23].

- **CeF₃.**

Tiene una producción de luz extremadamente pequeña, equivalente al 5 % del NaI, pero es muy estudiado ya que presenta una gran rapidez de emisión para fotones visibles (27 ns) y ultravioletas (5 ns) [18]. Presenta una estructura tipo vidrio muy complicada que se expone en la Figura 5.5.

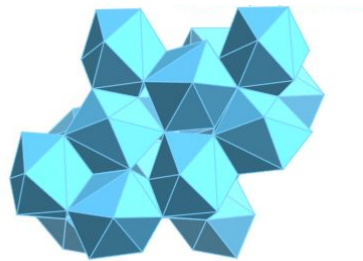


Figura 5.5. Estructura Tipo vidrio del CeF₃ [24].

- **HfF₄.**

El fluoruro de hafnio se fabrica rápidamente y a un bajo costo. Su estructura molecular es muy compleja y de tipo vidrio como en la Figura 5.6.

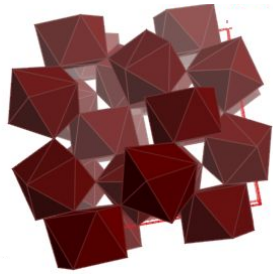


Figura 5.6. Estructura Molecular del HfF₄ [24].

- **ThF₄.**

La estructura molecular del fluoruro de torio también es muy compleja y se ilustra en la Figura 5.7.

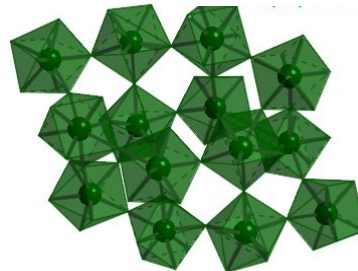


Figura 5.7. Estructura del ThF₄ [24].

- **ZrF₄.**

Su estructura se muestra en la Figura 5.8.

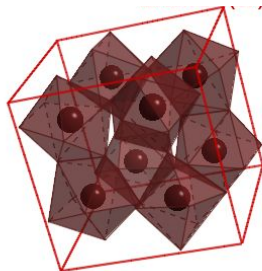


Figura 5.8. Estructura del ZrF₄ [24].

- **Bi₄Ge₃O₁₂ (BGO).**

El Germanato de Bismuto tiene la ventaja de tener alta densidad y un número atómico alto, ideal para detectores de rayos gamma. Se utiliza principalmente en CT, PET y en detectores utilizados en física de altas energías. Su producción de luz es considerablemente baja, siendo de un 10-20 % de la producción de luz del NaI [18]. No requiere de un activador o dopante para producir luminiscencia, una transición óptica del bismuto se encarga de este proceso. Sus propiedades químicas y mecánicas lo hacen manejable y muy duradero, sin embargo, su fabricación es complicada, por lo que es dos o tres veces más caro que el NaI y el tamaño está limitado.

- **LuBO₃.**

Es un material que ha sido poco estudiado en la literatura, pero que se considera prometedor para aplicaciones PET por su gran densidad.

- **Lu₂SiO₅.**

A pesar de que fabricar el LuSiO es altamente costoso, se utiliza porque es uno de los centelladores que presenta mayor producción de luz.

Los materiales propuestos en esta tesis como posibles buenos detectores son el LiCeBO, LiLaBO, LiGdBO y el LiPrBO. Tienen la característica de poseer boro y litio, elementos con un número atómico pequeño, lo que los hace buenos detectores de neutrones; además cuentan con un elemento con un alto número atómico (Ce, La, Gd y Pr) y alta densidad, por lo que su sección eficaz para fotones gamma es grande.

- $\text{Li}_3\text{Ce}_2(\text{BO}_3)_3$.

Su estructura molecular se muestra en la Figura 5.9, donde se puede apreciar su alta densidad.

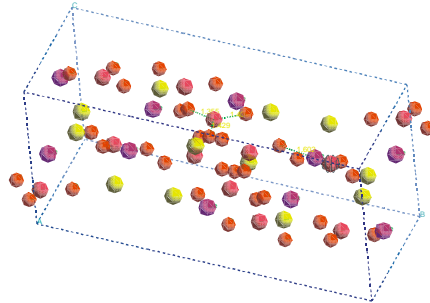


Figura 5.9. Estructura del LiCeBO. Los átomos amarillos son litios, los rojos oxígenos, los rosas son boros y el cerio son de color morado [23].

- $\text{Li}_3\text{Pr}_2(\text{BO}_3)_3$.

Presenta la misma estructura molecular que el LiCeBO representada en la Figura 5.9; en este caso, los átomos de color morado corresponderían al praseodimio.

- $\text{Li}_6\text{Gd}(\text{BO}_3)_3$.

Al igual que los otros centelladores boratos de litio, se observa en la Figura 5.10, que el LiGdBO tiene una alta densidad.

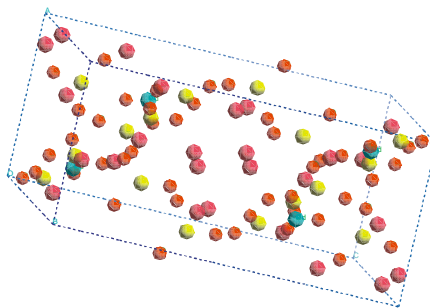


Figura 5.10. Estructura Molecular del LiGdBO. Los átomos de boro se representan de color amarillo, los litios de rosa, los oxígenos de rojo y los gadolinios de color azul [23].

- **$\text{Li}_6\text{La}(\text{BO}_3)_3$.**

Presenta la misma estructura que el LiGdBO representado en la Figura 5.10; pero en este caso los átomos azules representan el lantano.