

O QUE É CÉSIO-137?

Kenneth E. Collins, Isabel Cristina S.F. Jardim e Carol H. Collins

Instituto de Química — Universidade Estadual de Campinas — C. Postal 6154 — 13081 — Campinas (SP)

Recebido em 14/1/88

ABSTRACT

WHAT IS CESIUM-137?

Cesium-137 is a fission-product radionuclide which decays with the emission of beta particles, electrons and gamma rays. It is used normally as a sealed gamma ray source, for industrial and therapeutic irradiations. This paper reviews the physical and chemical properties of cesium-137 and some of its compounds and relates these properties to the behavior of this radionuclide in the human body and in the environment.

RESUMO

O QUE É CÉSIO-137?

O césio-137 é um radionuclídeo produzido através da fissão de urânio que se desintegra emitindo partículas betas, elétrons e raios gama. Ele é usado, normalmente encapsulado, como fonte de raios gama na indústria e nas irradiações terapêuticas. Este artigo pretende revisar as propriedades físicas e químicas do césio-137 e de alguns de seus compostos e relacioná-las com o comportamento deste radionuclídeo no corpo humano e no ambiente.

Césio-137 é, neste momento, um dos radionuclídeos mais discutidos no mundo, devido a dois acidentes envolvendo-o. O primeiro ocorreu na usina nuclear de Tchernobil, na Rússia, onde o espalhamento do césio-137 atingiu vários países europeus. O segundo ocorreu em Goiânia, onde os danos, apesar de terem ficado restritos a uma pequena parte do território brasileiro, teve repercussão mundial. Neste último acidente, uma fonte radioativa utilizada para fins radioterapêuticos foi destruída no pátio de um ferro velho, liberando várias gramas de uma substância fluorescente e higroscópica, identificada posteriormente como sendo cloreto de césio-137 ($^{137}\text{CsCl}$). O contato físico com esta substância resultou na morte de quatro pessoas e sérios danos biológicos em várias outras. A sua dispersão no ambiente, embora dito limitada, não foi totalmente definida e, por isso, preocupou, e continua preocupando, milhares de pessoas, residentes em Goiânia e os demais brasileiros. Uma grande parte desta ansiedade relaciona-se di-

retamente com uma deficiência de conhecimentos, por parte do público em geral, das propriedades físicas e químicas desta substância.

Este artigo tem com objetivo sanar a falta de informações, que impera no momento, através de um relato sobre a produção, as propriedades físicas e químicas, o transporte e a distribuição ambiental, os perigos e as aplicações do radionuclídeo^{*1} césio-137.

Propriedades Físicas do Césio-137

O césio é o elemento com número atômico 55, indicando a presença de 55 prótons em seu núcleo, bem como 55 elétrons nas camadas de elétrons fora do núcleo do átomo. Na natureza há só um nuclídeo^{*1} do césio, o $^{133}_{55}\text{Cs}$, com 78 nêutrons e 55 prótons no seu núcleo, dando uma massa atômica de 132,9054 u.m.a.¹. Além deste nuclídeo estável, são conhecidos mais 34 isótopos^{*2}, todos instáveis ou radioativos², que sofrem desintegrações nucleares por emissão de partículas betas (positivas ou negativas) com meias-vidas^{*3} que variam de menos de um segundo até vários anos. Entre estes isótopos radioativos, o de meia-vida mais longa é o césio-137, com 30,17 anos, sendo que o mesmo é uma espécie nuclearmente definida, que possui 55 prótons e 82 nêutrons e uma massa atômica de cerca de 137 u.m.a.

A desintegração nuclear (também chamada de decaimento radioativo) do césio-137 ocorre através de dois caminhos, ambos resultando no estado fundamental do elemento bário (número atômico 56) com massa de 136,9058 u.m.a.¹. A Fig. 1 ilustra este processo. A maioria das desintegrações (94,6%) dá-se com a emissão de partículas beta (β_1^-), formando o estado excitado do bário-137. O restante (5,4%) ocorre por emissão das partículas β_2^- e produz, diretamente, o estado fundamental do bário-137¹.

*1 Nuclídeo descreve o átomo cujo núcleo contém um número definido de prótons e nêutrons. Em certos casos, como o césio, só tem um nuclídeo estável, enquanto em outros existem vários nuclídeos estáveis; os instáveis (radioativos) são chamados radionuclídeos.

*2 Isótopos são nuclídeos do mesmo elemento com massas atômicas diferentes.

*3 Meia-vida é o tempo necessário para que metade dos núcleos de um radionuclídeo sofram desintegrações.

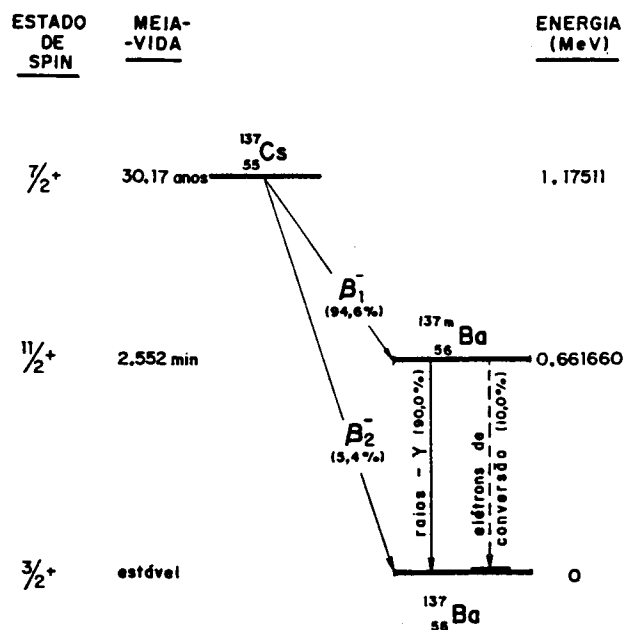


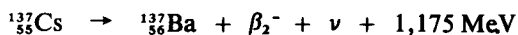
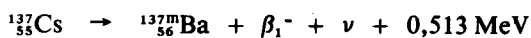
Figura 1. Esquema da desintegração do céσιο-137.

O estado excitado do bário-137m em uma meia-vida de 2,552 minutos. Uma vez que esta meia-vida é relativamente longa, em comparação com as de outros estados excitados típicos e, sendo que a sua desintegração resulta em outro estado do mesmo núcleo, este estado excitado é denominado um *isômero* metaestável do bário-137 e a transição simples entre o estado excitado e o fundamental é chamada uma *transição isomérica*.

Esta transição isomérica do estado metaestável ao estado fundamental do bário-137 ocorre por emissão de um raio gama de energia 0,661660 MeV em 90% das ocorrências e pelo processo de conversão de elétrons em 10%. Neste último processo, a energia de excitação do núcleo de bário-137m é transferida para um dos vários elétrons das camadas de elétrons fora do núcleo do átomo, causando sua expulsão com energia cinética alta (cerca de 0,6 MeV), bem como a emissão de elétrons Auger ou de raios-X, também das camadas de elétrons (Apêndice I).

O raio gama resultante da desintegração do céσιο-137 é uma radiação muito penetrante, em comparação com suas outras radiações, fato este que afeta muito os efeitos da radiação no corpo humano, como será exposto em uma próxima seção.

As duas reações de desintegração beta podem ser escritas como:



Aqui, os β^- representam as partículas betas que são simplesmente elétrons (spin 1/2) saindo do núcleo e os ν os antineutrinos, que são partículas fundamentais de carga zero, spin 1/2 e massa desprezível. Nos dois casos, a energia de transição (0,513 ou 1,175 MeV, respectiva-

mente) manifestam-se como energia cinética das partículas resultantes (o núcleo, o β_1 e o ν) e é distribuída entre eles de acordo com as leis da estatística do processo, obedecendo a conservação de energia cinética, da quantidade de movimento e do momento angular do spin. Como resultado, as *energias* das partículas betas variam entre um mínimo de zero (quando o ν tem energia cinéti-

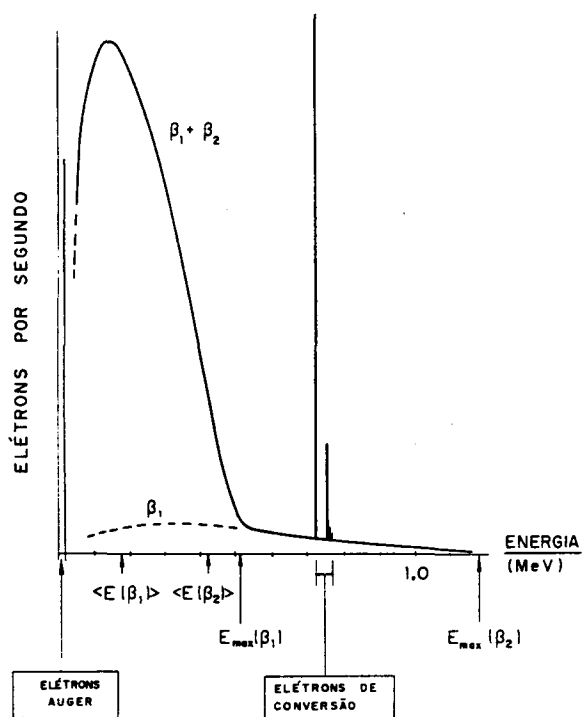


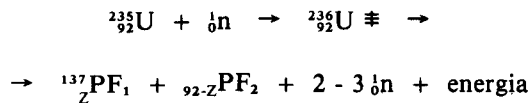
Figura 2. Distribuição típica da energia das partículas β emitidas em um processo de desintegração radioativa.

ca quase igual à energia de transição) e um máximo que é essencialmente igual à energia de transição (quando a energia cinética do ν é zero). A distribuição típica destas energias começa perto de zero (para a energia de zero), aumenta para um máximo a aproximadamente um terço da energia total da transição e cai para zero após a energia máxima (energia da transição). No caso da desintegração do céσιο-137, a energia média das partículas β_1^- é cerca de 0,174 MeV enquanto que a do β_2^- é de 0,427 MeV³, como ilustrada na Fig. 2. Informações adicionais se encontram no Apêndice I.

Produção do Céσιο-137

O céσιο-137 e vários outros radioisótopos do céσιο são produzidos, com alto rendimento, pela fissão nuclear⁴⁴ espontânea ou induzida de vários radionuclídeos pesados tais como o urânio-233, o urânio-235 ou o plutônio-239. Para que ocorra a fissão nuclear, é necessário que a barreira de energia potencial seja vencida. Na região do urânio e do plutônio, esta energia potencial é de aproximadamente 5,5 MeV⁴, tornando a fissão espontânea pouco provável. Entretanto é possível aproveitar a energia de ligação de um nêutron (cerca de 7,6 MeV⁴) para que o núcleo de um destes elementos obtenha ener-

gia de excitação suficiente para provocar a fissão induzida. A reação nuclear para produção do céσιο-137 pode ser representada pela equação:



onde ${}^{235}_{92}\text{U}^*$ é o núcleo excitado antes da fissão, PF_1 e PF_2 são os dois produtos iniciais de fissão e Z e $92-Z$ são os números atômicos destes produtos.

Os números atômicos dos produtos de fissão podem ter diversos valores. No caso dos produtos de massa 137 (Fig. 3), quando Z é maior que 55, o produto pode ser estável (${}^{137}_{56}\text{Ba}$) ou radioativo, que decai por emissão de β^- ou por captura de elétrons, ao nuclídeo estável. Quando Z é menor que 55, os radionuclídeos formados têm meias-vidas relativamente curtas e decaem, em algumas etapas, emitindo partículas β^- , até produzirem o céσιο-137. Quando Z é 55, o céσιο-137 é produzido diretamente.

O rendimento total de produção do céσιο-137, a partir da fissão induzida do urânio-233, urânio-235 ou plutônio-239 é, respectivamente, 6,8%, 6,2% e 6,7%². Isto significa que 6,2% das fissões totais de urânio-235 produzem o céσιο-137, quer diretamente, quer através de uma cadeia de desintegrações β^- . Entretanto, esta quantidade encontra-se misturada com vários contaminantes e é necessário uma série de etapas químicas para a obtenção do céσιο-137 puro⁵. Por exemplo, o processo pode ini-

ciar com uma barra de combustível irradiada, contendo urânio⁵ (tanto o isótopo 235 como o 238) e todos os produtos de fissão. A barra é estocada por alguns meses para que todos os radionuclídeos de meia-vida curta decaiam e é, então, seccionada para que o urânio (parte interna, recoberta com ligas especiais de zircônio) se dissolva em ácido nítrico 8M. A solução resultante contém urânio na forma UO_2^{2+} , o plutônio-239 e os produtos de fissão. O zircônio da cápsula permanece como resíduo sólido. A seguir, reduz-se a concentração ácida para 1-2 M e faz-se o tratamento com nitrito de sódio ou outro agente redutor para que ocorra redução, obtendo o urânio e o plutônio nos seus estados de oxidação IV, os quais são extraídos da solução aquosa por meio de uma solução de fosfato de tributila em querosene. Os demais produtos de fissão ficam retidos na solução aquosa, que é aquecida para que ocorra a evaporação do ácido nítrico e, a seguir, é saturada com alúmen ($\text{NH}_4\text{Al}(\text{SO}_4)_2$) a 90°C e então resfriada. Com resfriamento, cerca de 99% do céσιο-137, na forma de ${}^{137}\text{Cs}^+$, cocrystalizam-se com o $\text{NH}_4\text{Al}(\text{SO}_4)_2$. O sólido é recristalizado várias vezes até obter ${}^{137}\text{CsAl}(\text{SO}_4)_2$ na sua forma pura.

Para a preparação de fontes radioterapêuticas de céσιο-137, o ${}^{137}\text{CsAl}(\text{SO}_4)_2$ (densidade 1,97 g/cm³) é convertido a ${}^{137}\text{CsCl}$ (densidade 3,99 g/cm³), dissolvendo o alúmen em HCl 1M e precipitando ${}^{137}\text{Cs}_2\text{PtCl}_6$ com Na_2PtCl_6 . O ${}^{137}\text{Cs}_2\text{PtCl}_6$ é então convertido a ${}^{137}\text{CsCl}$, com recuperação de platina, na forma metálica, por redução com hidrazina (NH_2NH_2)⁵.

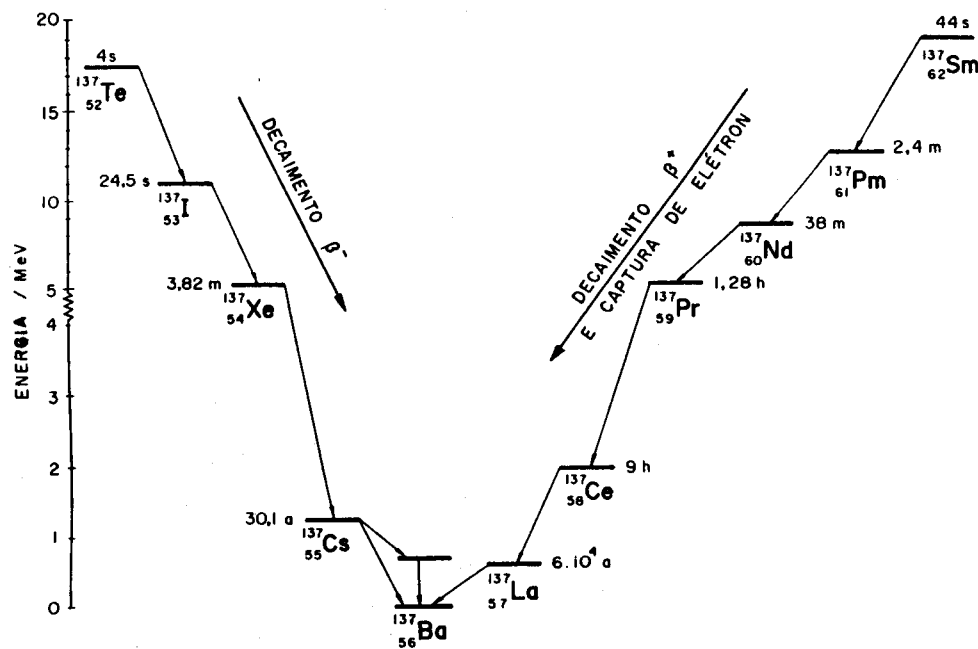


Figura 3. Cadeia de desintegração dos produtos de fissão ${}^{137}_Z\text{PF}$.

⁴⁴ Fissão Nuclear é a divisão de um núcleo em dois ou mais fragmentos com emissão de fótons γ e de nêutrons. Este processo está quase sempre associado aos elementos pesados.

⁴⁵ Em barra de combustível nova, o conteúdo de urânio-235 é de 3-4%, enquanto que o urânio-238 é de 97-96%. Após irradiação, o conteúdo de urânio-235 é reduzido a 1-2%.

O céσιο-137 puro, livre de carregador (isto é, sem outros isótopos de céσιο) apresenta uma atividade específica (razão da sua radioatividade em relação a sua massa) de $3,22 \times 10^{12}$ Bq/g (87,0 Ci/g) (Ap. II). Sendo assim, o $^{137}\text{CsCl}$ mostra uma atividade específica de $(3,22 \times 10^{12} \times 137)/(137 + 35,45) = 2,56 \times 10^{12}$ Bq/g (69,1 Ci/g). Uma fonte de radioterapia contendo $4,44 \times 10^{13}$ Bq (1200 Ci) de céσιο-137 na forma de cloreto de céσιο tem cerca de 17 gramas de $^{137}\text{CsCl}$.

Propriedades Químicas do Céσιο e de seus Compostos

Os átomos de céσιο têm um raio de 0,265 nm com apenas um elétron ($6s^1$) na sua última camada de elétrons. Sendo que este elétron é facilmente removido, com energia de ionização de 375,6 kJ/mol, a maioria dos compostos apresenta o céσιο na sua forma iônica, Cs^+ . Por outro lado, no estado gasoso, a molécula Cs_2 se forma, porém com energia de dissociação baixa (43,6 kJ/mol), enquanto que a forma metálica (não ionizada) do céσιο tem baixos pontos de fusão (28,40°C) e ebulição (699,3°C)⁶. Contribuições covalentes das ligações também existem nos óxidos, tais como CsO_2 , Cs_{11}O_3 e Cs_{21}O_3 , e nos complexos com β -dicetonas e em outros agentes quelantes fortes⁷. Além destes exemplos, são poucas as evidências do caráter covalente; a grande maioria da química do céσιο é a química do íon Cs^+ , com caráter predominantemente eletrostático.

Os sais de Cs^+ com a maioria dos ânions, tais como F^- , Cl^- , Br^- , I^- , NO_3^- , ClO_4^- , CO_3^{2-} , CrO_4^{2-} , OH^- , MnO_4^- , SO_4^{2-} , etc., têm densidades na faixa de 3-4 g/cm³ e solubilidades em água ao redor de centenas de gramas por litro, devido ao seu raio iônico grande (0,184 nm), que resulta em energia reticular baixa⁶. Após dissolução, o íon hidratado apresenta um raio de 0,228 nm com ligações fortes com as moléculas de água na esfera de hidratação. Assim sendo, a dissolução dos sais de céσιο é energeticamente tão favorável que solubilidades grandes são comuns.

Uma vez dissolvidos, os íons de céσιο tendem a ficar na forma monodispersa, sem espécies hidrolíticas oligoméricas ou sem a formação de complexos ou colóides⁸, mesmo na faixa de pH entre 4 a 10; onde a maioria dos cátions mostram reações de complexação e hidrólise, formando partículas coloidais⁹. Por outro lado, pares iônicos de Cs^+ com tenoiltrifluoroacetona (TTA) são usados para extrair Cs^+ de soluções aquosas com solventes apolares⁶.

O comportamento do íon hidratado de céσιο, frente a resina trocadora catiônica é típica de um íon altamente polarizável. Consistente com o raio de hidratação e a polarizabilidade, o Cs^+ , entre os íons dos metais alcalinos, é o que apresenta a maior afinidade (seletividade) para estas resinas, segundo a ordem $\text{Cs}^+ > \text{Rb}^+ > \text{K}^+ > \text{Na}^+ > \text{Li}^+$.¹⁰ A retenção do Cs^+ nas resinas é similar a do Mg^{2+} ou Ca^{2+} , porém menor que a do Sr^{2+} , Ba^{2+} , Co^{2+} e dos íons com carga 3+. A seletividade em relação a troca catiônica depende da presença (ou ausência) de ligantes e do tipo de trocador. Por exemplo, a ordem de afi-

nidade pode ser invertida, Cs^+ sendo o menos retido dos íons alcalinos, com certos vidros e zeolites⁹; com solo argiloso, a ordem "normal" prevalece¹¹.

Em concentrações típicas, o comportamento do Cs^+ é altamente previsível. A sua retenção é devido a atração eletrostática para sítios carregados negativamente e íons negativos (até a formação de pares iônicos). Entretanto, em concentrações baixíssimas, o Cs^+ pode ser adsorvido sobre outras superfícies, tais como vidro, polietileno e politetrafluoroetileno, bem como aderir às partículas de solo suspensas em rios, lagos ou até oceanos.

Propriedades Físicas e Químicas do Cloreto de Céσιο

Cristais de cloreto de céσιο são higroscópicos, sendo assim absorvem água do ar para formar, em sua superfície, uma camada aquosa saturada com cloreto de céσιο. Devido a isto, pequenos cristais do sólido aderem nas várias superfícies, como, por exemplo, na pele de pessoas que, porventura, fiquem em contato direto com o sólido.

Os haletos de céσιο, também, são cintiladores¹² ou seja, quando expostos a radiação gama ou a outra radiação ionizante, absorvem energia e emitem fótons energéticos visíveis, parecendo luminescentes.

Os cristais de $^{137}\text{CsCl}$ podem ser excitados pelas próprias desintegrações que emitem partículas beta e raios gama. Como resultado, o $^{137}\text{CsCl}$ emite uma luminescência azul intensa, como a observada por várias pessoas que tiveram contato com os cristais liberados em Goiânia.

Comportamento do Céσιο-137 no Ambiente

Existem muitos estudos sobre as interações e o transporte de materiais radioativos na atmosfera, água e terra, que apresentam informações sobre as formas químicas e as distribuições dos radionuclídeos, tal como do céσιο-137, bem como os mecanismos físicos e químicos que determinam os seus movimentos^{4,9,13-15}.

Vários anos atrás, o céσιο-137 entrou na atmosfera através dos testes de armas nucleares realizados ao ar livre. Outro caminho, mais recente, foi a explosão química e as chamas que ocorreram na usina nuclear de Tchernobil. Em ambos, as altíssimas temperaturas volatilizaram grandes quantidades dos materiais, incluindo os radioativos. Logo após, iniciou-se a formação de partículas, primeiro com os materiais menos voláteis. Desde que a concentração inicial dos materiais era alta e localizada, estas partículas cresceram rapidamente até chegarem a um tamanho tal que provocou a sua deposição sob a forma de uma chuva radioativa ("fall-out") a poucos quilômetros da sua origem¹⁴. Os materiais mais voláteis, incluindo o céσιο-137, se condensaram depois de uma queda significativa de temperatura. A concentração global dos materiais ficou reduzida por dispersão e, como resultado, as partículas eventualmente for-

mas eram de menor tamanho e diâmetro ($\leq 1\mu\text{m}$), com pouca probabilidade de deposição rápida na ausência de um agente carregador, como a chuva. Sendo assim, as quantidades de céσιο-137, e outros radionuclídeos voláteis, que penetraram acima da troposfera até a estratosfera, como resultado destas explosões, poderão ser distribuídas mundialmente pelos ventos e correntes, entrando na biosfera lentamente através de difusão e deposição na terra, por meio da chuva^{4,14}.

Desde que o intercâmbio troposférico entre os hemisférios norte e sul é moroso¹⁴, pouco céσιο-137 oriundo do acidente de Tchernobil chegará ao Brasil. O céσιο-137 encontrado, em pouquíssimas quantidades, em terra brasileira, resultou dos testes nucleares atmosféricos realizados em ambos os hemisférios desde 1950.

Vindo com a chuva, o céσιο-137 entra nas águas naturais (rios, lagos e oceanos) e nos solos, onde as quantidades são pequenas e difíceis de serem quantificadas. Por outro lado, liberações acidentais ou intencionais de estoques de soluções oriundas de reprocessamento poderiam introduzir quantidades maiores em áreas mais restritas¹³⁻¹⁷.

A forma química predominante em água é o íon hidratado, $^{137}\text{Cs}(\text{H}_2\text{O})_n^+$. Assim, esta espécie permanece em solução até a sua sedimentação, principalmente através de mecanismo de troca catiônica, no solo e nos sedimentos ao redor dos cursos das águas ou sobre partículas suspensas nas águas.

No caso da liberação intencional de $^{137}\text{Cs}^+$ em um rio de alta correnteza, foi verificado que 80% da radioatividade continuou na água e apenas 20% sedimentou nas partículas, após mais de 200 km de percurso do rio¹⁶. No mesmo evento, quase todo o $^{89,90}\text{Sr}^{2+}$ e o $^{60}\text{Co}^{2+}$ ficaram dissolvidos ou suspensos na forma coloidal até a mesma distância¹⁶.

Em lagos, com pouco movimento das águas, o $^{137}\text{Cs}^+$ fica em solução por períodos mais longos, desde que a concentração das partículas sólidas na água seja pequena, e lentamente se deposita no fundo e nas margens. As meias-vidas de permanência de $^{137}\text{Cs}^+$ nos lagos canadenses são de algumas semanas¹⁶.

O céσιο-137 ainda não penetrou nas partes mais profundas dos oceanos. Isto acontece devido ao fato que são poucas as correntes verticais nos oceanos, uma vez que praticamente não existe intercâmbio entre as várias camadas oceânicas. Também existem poucas partículas que atuam como carregadores, fazendo com que a difusão de radionuclídeos se dê, principalmente, em movimentos horizontais, ao invés de verticais¹⁶.

Vários estudos já mostraram que a migração do céσιο-137 no solo é lenta^{4,11,13-17}. O íon positivo é fortemente adsorvido, aparentemente pelo mecanismo de troca catiônica, por vários tipos de solos. Por exemplo, em solo argiloso, a seletividade para o íon Cs^+ é quase tão alta quanto a dos íons dipositivos e pelo menos 250 vezes maior que a dos íons K^+ , Na^+ e Li^+ .⁹ Sendo assim, somente íons de carga 2+ ou 3+ são capazes de eluir eficientemente o Cs^+ . Mas, no solo, as concentrações destes íons são baixas, uma vez que eles também são

fortemente retidos pelos inúmeros sítios ativos presentes na maioria dos solos.

Com dois exemplos, pode-se indicar a extensão da migração de céσιο-137. Nos Laboratórios Hanford, estado de Washington, EUA, uma quantidade considerável (400.000 litros) de solução aquosa contendo uma mistura de produtos de fissão, resultantes do reprocessamento de combustíveis nucleares, vazou de alguns tanques de estocagem, penetrando no solo argiloso ao seu redor. Os testes de controle de migração destes radionuclídeos indicaram que a maioria do céσιο-137 só migrou 2 a 3 metros, apesar das grandes quantidades de outros eletrólitos que entraram no solo junto com o céσιο-137. Nenhuma radioatividade foi encontrada a mais de 30 metros, por mais de 20 anos¹⁷. Cálculos baseados em medidas do laboratório mostraram que céσιο-137 penetrará somente 40 cm no solo argiloso após 700 anos⁴.

Por outro lado, estudos da distribuição dos produtos de fissão e seus produtos secundários (produtos estáveis após as cadeias de desintegração dos núcleos radioativos), que resultaram do "reator natural" que funcionou durante um período de aproximadamente um milhão de anos, no depósito de urânio de Oklo, no país africano de Gabon, indicaram que quase todos os produtos de carga 3+ são encontrados hoje, após dois bilhões de anos, a poucos metros do depósito¹⁸⁻²⁰. Por outro lado, nenhum traço de bário-137 (produto estável da desintegração do céσιο-137, veja Fig. 1) foi encontrado perto do "reator", indicando que o céσιο-137, ou o bário-137, sofreram considerável lixiviação desde a sua formação¹⁹.

Experimentos simulados sobre a migração do céσιο-137, feitos em coluna cromatográfica ou utilizando cromatografia planar, sugerem que a velocidade de migração nas condições típicas de movimento dos lençóis freáticos são de poucos centímetros por ano⁴. Algumas considerações físico-químicas sobre este comportamento são expostas no Apêndice III.

Considerando o céσιο-137 liberado em Goiânia, pode-se prever que a penetração do material em contato com a terra fica restrita a cerca de poucos centímetros da superfície do solo. Portanto, bastaria a remoção de uma camada de 10 a 20 cm do solo para eliminar a presença do céσιο-137. Em Goiânia, esta suposição foi confirmada por medidas feitas depois da remoção da camada superficial do solo das áreas contaminadas.

Supondo que uma porção do céσιο-137, que penetrou no solo, não tenha sido detectada e conseqüentemente não foi removida do solo, a possibilidade de migração natural e contaminação posterior por contato, por assimilação em alimentos ou por ter infiltrado em uma fonte de água potável são ínfimas e assim mesmo não atingem distâncias superiores a poucos metros do lugar inicial de contaminação, após várias décadas. Se uma pequena quantidade do céσιο-137 ficou absorvida sobre poeira ou outra partícula pequena que, com uma chuva forte, foi arrastada para os córregos, contaminando assim as águas superficiais, a sua diluição com a água não radioativa da chuva tornam desprezíveis os riscos reais

de contaminação. Portanto, pode-se concluir que, se as devidas precauções foram tomadas para descontaminação das áreas atingidas pelo césio-137 em Goiânia, o seu perigo para a população não mais existe.

Césio-137 e o Corpo Humano

A desintegração do césio-137 pode afetar o corpo humano através de vários caminhos. Os raios gama, com energia de 0,662 MeV, emitidos como consequência da desintegração (Fig. 1) interagem com os componentes do corpo, produzindo excitação e ionização das suas moléculas. Quando a exposição do corpo é "uniforme", isto é, quando todo o corpo está sendo exposto, a dose absorvida é sempre maior no lado perto da fonte que no outro lado, uma vez que a deposição de energia é regida pelo decréscimo na intensidade dos raios gama durante o seu percurso pelo corpo. Assim sendo, apenas aproximadamente metade dos raios gama sairão do outro lado do corpo (Apêndice II).

A quantidade dos raios gama que penetram no corpo depende da quantidade da radioatividade da fonte e da espessura da blindagem ao redor da mesma. Fontes bem blindados não oferecem perigo, sendo que quase todos os raios gama são atenuados pela blindagem (Ap. II). A exposição, por exemplo, no tratamento de tecidos cancerosos, é controlada e direcionada a uma parte específica do corpo pelo sistema de colimadores.

As partículas beta, os elétrons atômicos e os raios-X emitidos como consequência da desintegração do césio-137 (Ap. I) são facilmente absorvidos pela blindagem ou pelo ar entre a fonte colocada a uma distância de 2-3 metros ou mais. Por outro lado, em contato direto com a pele, as partículas beta efetuam excitação e ionização em regiões localizadas, a uma profundidade de 2 a 3mm da superfície da pele. A dose de radiação absorvida pode ser centenas de vezes maior, nesta camada superficial, que a dose relacionada aos raios gama que penetram no corpo e depositam a sua energia em caminhos bem maiores. O resultado de uma alta dose localizada freqüentemente é a destruição dos tecidos da região onde houve contato, aparentemente similar a causada por queimaduras.

Nos casos em que o material contendo césio-137 é ingerido, por exemplo, em comidas ou bebidas, o césio-137, na forma iônica, fica distribuído quase uniformemente nos fluidos que se encontram dentro do corpo inteiro³, semelhante a distribuição dos íons de sódio ou potássio. Na ausência de tratamento médico, a meia-vida biológica de césio-137, isto é, o tempo necessário para que metade do césio-137 seja eliminado do corpo por meios biológicos, é de cerca de 70 dias²¹.

As desintegrações que ocorrem quando o césio-137 está dentro do corpo produzem uma dose de radiação, distribuída quase uniformemente e composta de excitações e ionizações resultantes das interações com as partículas betas, elétrons atômicos, raios- γ e raios-X.

Se o césio-137 entrou no corpo pela inalação de pó

não solúvel, a sua distribuição é restrita aos pulmões e a dose absorvida será relativamente alta nas camadas superficiais dos pulmões, de maneira análoga a que ocorre quando uma fonte de césio-137 fica em contato direto com a pele externa.

A gravidade da exposição do corpo humano às radiações do césio-137 depende da energia absorvida por unidade de massa e da(s) parte(s) do corpo diretamente afetada(s). Sendo assim, as primeiras questões que devem ser consideradas são: qual foi a dose absorvida pelo corpo (total) e quais foram os órgãos que receberam doses mais elevadas? Estes dados permitem uma avaliação preliminar da condição em que a pessoa se encontra e também possibilita programar o tratamento médico que a mesma será submetida, caso haja necessidade.

Aplicações do Césio-137

Há cerca de quatro décadas, desde quando quantidades significativas de césio-137 tornaram disponíveis, o mesmo está sendo utilizado em várias aplicações em pesquisa, em indústria e em medicina. Estas aplicações, tais como fonte de raios gama de energia moderada, se devem principalmente às propriedades físicas favoráveis deste radionuclídeo, que possui uma meia-vida razoavelmente longa, bem como às suas propriedades químicas de ser um radioisótopo de metal alcalino, cujos íons monovalentes não formam complexos ou colóides.

O césio-137, bem como o cobalto-60, são muito usados, individualmente, como fontes de raios gama para a inativação, por radiação, do câncer em ser humano, esterilização em escala industrial, preservação de certos alimentos e para permitir a conversão de borra de esgoto em fertilizante e/ou ração de gado. Nestas aplicações, o césio-137, freqüentemente presente a nível de milhares de curies, se encontra em várias formas químicas, tais como $^{137}\text{CsCl}$, $^{137}\text{Cs}_2\text{SO}_4$ ou na forma de cerâmico, e é usado sempre encapsulado, isto é, selado dentro de um tubo de aço inoxidável ou de outro material não sujeito a corrosão. As vantagens de se usar o césio-137 nestas fontes estão relacionadas com a sua disponibilidade como produto de reprocessamento de combustível de usinas nucleares, onde se produz até 10^{10} curies anuais; com a sua meia-vida de 30 anos, que permite o uso da fonte sem a necessidade de reposição por períodos de tempo cerca de seis vezes maiores que quando se utiliza o cobalto-60, que tem meia-vida de 5,27 anos, e com a energia de seu raio gama de 0,662 MeV, que requer menor blindagem de proteção, comparada com a do cobalto-60, que emite dois raios gama muito mais energéticos, 1,17 e 1,33 MeV. Por outro lado, as energias mais altas dos raios gama do cobalto-60 têm certas vantagens em poder de penetração, especialmente para fins de esterilização e preservação de alimentos.

Fontes seladas contendo menos de um curie ($3,7 \times 10^{10}$ Bq) de césio-137 também têm aplicações industriais, como, por exemplo, indicadoras da densidade de fluidos ou da altura de líquidos em latas. Fontes menos poten-

tes, a níveis de 1 μCi ($3,7 \times 10^4$ Bq) a 1 mCi ($3,7 \times 10^7$ Bq) são usadas para a calibração de detectores e monitores de radiação e para a descarga de eletricidade estática em muitos aparelhos.

Como traçador, o césio-137 é usado principalmente em estudos de transporte de partículas no ar ou em águas naturais, que podem levar anos para completar, dando vantagem a sua meia-vida de 30 anos, bem como a sua forma química simples. Por exemplo, a partir de estudos do movimento das águas nos oceanos, utilizando $^{137}\text{Cs}^+$, foi estabelecido que o movimento da água nas correntes oceânicas é essencialmente restrito as camadas horizontais e que levaria milhões de anos para partículas nas camadas superiores chegarem as camadas mais profundas¹⁶.

Através destas aplicações, pode-se notar que, se o césio-137 for utilizado adequadamente, ele é muito útil ao homem e lhe proporciona muitos benefícios.

APÊNDICE I

O núcleo do césio-137 sofre desintegração pela emissão de partículas betas (β_1 ou β_2). A esta são adicionadas as radiações oriundas da desintegração do bário-137m (Fig. 1). Mais especificamente, 94,6% das desintegrações do césio-137 resultam em emissões β_1 com energia média de 0,175 MeV, enquanto 5,4% produzem emissões β_2 com energia média de 0,427 MeV³. As desintegrações do bário-137m resultam em raios gama de 0,661660 MeV (90,0%) ou emissão de elétrons atômicos (10,0%), bem como raios-X. Sendo que a fração de (0,946) (0,900) = 0,851 das desintegrações produzem um raio gama de 0,661660 MeV, a energia média disponível neste caminho é (0,851) (0,662) = 0,564 MeV. Na produção do β_1 , a energia é (0,946) (0,175) = 0,166 MeV e do β_2 , (0,054) (0,427) = 0,023 MeV. Os elétrons de conversão e os associados com o processo Auger e com a emissão de raios-X, devido a emissão de elétrons atômicos, contribuem com (0,946) (0,10) (0,662) = 0,063 MeV. A energia total é de 0,816 MeV, das quais 69% originam os raios gama e 31% as partículas beta, os elétrons atômicos e os raios-X.

O espectro total de elétrons saindo de uma fonte de césio-137 consiste nas distribuições largas das partículas β_1 e β_2 , e também nos elétrons atômicos, resultantes do processo de conversão de elétrons. Cada um dos elétrons atômicos tem um único valor de energia.

A Tabela 1 mostra os dados sobre os grupos das energias únicas (coletadas em "bins" para simplificar a apresentação) para os elétrons de conversão e os elétrons Auger (resultantes do processo Auger que geram a formação de buracos no átomo)¹. Estes grupos de elétrons contribuem com "picos" estreitos, na distribuição de energia, posicionados acima do pico largo, que repre-

senta a distribuição das energias das partículas β_1 ou β_2 , que saem do núcleo¹⁶. A Fig. 2 indica a forma qualitativa da distribuição das energias dos vários elétrons observados na desintegração do césio-137.

TABELA 1

Energias e os Números Relativos dos Elétrons Emitidos na Desintegração do Césio-137¹

Tipo de Elétron	Energia (e_{bin} , keV)	Número de Elétrons por 100 Desintegrações
Auger	5	3,84
	6	2,63
	25	0,262
	26	0,173
	27	0,283
	30	0,0556
	31	0,152
	32	0,0323
	35	0,0145
	36	0,00768
Conversão	624	7,91
	256	1,44
	660	0,241
	661	0,139
	662	0,00423

A Tabela 2 apresenta os dados sobre os números relativos dos vários fótons (raios- γ e -X) emitidos quando o césio-137 sofre desintegração.

TABELA 2

Energias e os Números Relativos dos Fótons Emitidos na Desintegração de Césio-137¹

Tipo de Fóton	Modo de Produção do Fóton	Energia (keV)	Número de Fótons por 100 Desintegrações
Raios-X	Ba L $_{\rho}$	3,954	0,0144
	Ba L $_{\eta}$	4,331	0,00647
	Ba L $_{\alpha}$	4,465	0,405
	Ba L $_{\beta}$	4,944	0,375
	Ba L $_{\gamma}$	5,620	0,0497
	Ba K $_{\alpha 2}$	31,817	2,05
	Ba K $_{\alpha 1}$	32,194	3,77
	Ba K $_{\beta 1}$	36,357	1,04
	Ba K $_{\beta 2}$	37,450	0,264
	Raios- γ	γ M4	661,660

APÊNDICE II

A quantidade de césio-137, independente da forma, é

¹⁶ Mais informações sobre os cálculos com "bins" encontram-se disponíveis na referência¹ e sobre decaimento beta, utilizando césio-137 como exemplo, na referência⁴.

convenientemente indicada pela sua *radioatividade*, isto é, pela sua velocidade de desintegração. Este valor é obtido através da Lei de Decaimento:

$$dN/dt = \lambda N \quad (1)$$

onde N é o número de núcleos radioativos e λ a constante de desintegração. Para céσιο-137:

$$\lambda = \ln 2/t_{1/2} = 7,32 \times 10^{-10} \text{ s}^{-1} \quad (2)$$

Assim, uma grama de céσιο-137 (1/137 mol ou $4,40 \times 10^{21}$ átomos) apresenta uma radioatividade de ($7,32 \times 10^{-10}$) ($4,40 \times 10^{21}$) = $3,22 \times 10^{12}$ desintegrações por segundo (dps) ou $3,22 \times 10^{12}$ Bq⁷.

Quando uma substância é exposta às radiações ionizantes emitidas por uma fonte, estas radiações interagem com os constituintes da substância, depositando nelas uma fração de suas energias, medida como *dose absorvida*⁸ (energia por unidade de massa). A dose absorvida varia, dependendo do tipo de radiação, da sua energia, da disposição geométrica da fonte e do tempo de exposição.

A *intensidade* da radiação depende inversamente da distância da fonte:

$$I_x = I_{\text{ref}} (d_{\text{ref}}/d_x)^2 \quad (3)$$

onde d_x indica a distância da fonte ao objeto em questão e d_{ref} a distância onde foi medida a intensidade da dose absorvida de referência, I_{ref} .

A um metro de uma fonte contendo uma grama de céσιο-137⁹ a dose absorvida por uma substância com densidade de 1 g/ml (água, tecido humano, etc.) é $2,9 \text{ J kg}^{-1}$ por hora de exposição^{4,22}. Pela equação 3 pode calcular as doses absorvidas de $290 \text{ J kg}^{-1} \text{ h}^{-1}$ a 10cm; $2,9 \times 10^4 \text{ J kg}^{-1} \text{ h}^{-1}$ a 1cm e $0,029 \text{ J kg}^{-1} \text{ h}^{-1}$ a 10m da fonte. Estes valores indicam que um contato íntimo com ¹³⁷CsCl pode resultar em danos sérios nas partes em contato direto (por ex., as mãos) e que doses menores podem ser recebidas por outras partes do mesmo corpo.

Outro fator importante é a presença, ou não, de blindagem. Qualquer material colocado entre a fonte e a

substância que está sendo irradiada reduz a intensidade de radiação segundo a equação 4:

$$I_x = I_0 e^{-\mu_x \cdot x} = I_0 e^{-\ln 2 (x/x_{1/2})} \quad (4)$$

onde x é a espessura da blindagem, μ_x o coeficiente de absorção e $x_{1/2}$ a espessura, que diminui a intensidade inicial, I_0 , por um fator de 2. Para os raios gama de 0,662 MeV do céσιο-137, os valores de $x_{1/2}$ são 8,7; 4,0 e 0,62cm para água, concreto e chumbo, respectivamente²³. Assim, 100cm de cada material decresce a intensidade dos raios gama do céσιο-137 por fatores de 3000, $3,4 \times 10^7$ e $3,6 \times 10^{48}$, respectivamente. Uma blindagem de 10cm de chumbo, similar a usada em fontes para radioterapia, reduz a intensidade por um fator de 7×10^4 .

A velocidade de absorção da dose a um metro de uma fonte de 1200 Ci, blindada com 10cm de chumbo é $5,6 \times 10^{-7} \text{ J kg}^{-1} \text{ h}^{-1}$. Aumentando a espessura da blindagem até 15cm diminui para $2 \times 10^{-9} \text{ J kg}^{-1} \text{ h}^{-1}$, cerca de 1% do nível de radiação naturalmente absorvida por qualquer pessoa. Aumentando a distância da fonte também diminui ainda mais a velocidade da dose absorvida.

A blindagem necessária para eliminar os efeitos das partículas beta é bem menor. Partículas beta não conseguem atravessar as camadas de metal usadas para encapsular fontes radioterapêuticas. Livre, sem blindagem de proteção, as profundidades de penetração máxima das partículas β_1 e β_2 do céσιο-137 (Fig. 1) em água ou tecido humano são 1,8 e 4mm, respectivamente²³, com a maior parte das suas energias sendo depositadas na primeira camada de 1mm.

Como já indicado, as partículas beta produzem danos localizados na região do contato. Para os raios gama, os efeitos podem ser localizados, como é o caso do tratamento terapêutico dos órgãos cancerosos, ou generalizados, como acontece quando se tem uma exposição uniforme do corpo. Neste caso, uma dose absorvida menor que 1 J kg^{-1} normalmente não produz sintomas na maioria das pessoas²⁴. Uma dose absorvida de 2 J kg^{-1} , administrada em períodos de tempo curto, produz sintomas de náuseas e vômitos, bem como gera uma pequena queda do número de leucócitos no sangue. Doses de 4 J kg^{-1} resultam em 50% de probabilidade de morte, enquanto que doses de 6 J kg^{-1} em todo o corpo são quase sempre letais².

APÊNDICE III

Como uma aproximação, à migração do céσιο-137 no solo é similar ao seu comportamento dentro de uma coluna contendo uma resina de troca catiônica. O movimento dos íons ¹³⁷Cs⁺ está diretamente relacionado com as concentrações de outras espécies catiônicas e ocorre na direção do fluxo de eluente (fase móvel líquida). Como ocorre em todas as modalidades de cromatografia, o íon ¹³⁷Cs⁺, quando presente na fase móvel, apresenta uma velocidade de movimento igual a da fase móvel, enquanto que quando adsorvido na fase estacionária, não

⁷ O bequerel é a unidade do Sistema Internacional de Unidades e é igual a 1 desintegração por segundo. Outra unidade de radioatividade é o Curie, definido como sendo igual a $3,7 \times 10^{10}$ Bq. Uma grama de céσιο-137 puro corresponde a 87,0 Ci.

⁸ Outro termo encontrado em estudos de química e biologia das radiações é a *kerma*, usado nos casos de radiação por raios- γ ou raios-X e cujo cálculo é idêntico ao da dose absorvida.

⁹ Uma grama de céσιο-137 puro, com $3,22 \times 10^{12}$ Bq, é uma quantidade muitas vezes maior que a quantidade normalmente usada em pesquisas de laboratório (10^3 a 10^6 Bq por experimento). Entretanto, é da mesma ordem de grandeza da quantidade diretamente tocada pelas pessoas mais afetadas pela irradiação do céσιο-137 em Goiânia.

tem movimento algum. Este movimento pode ser representado pelo coeficiente de distribuição, K_D :

$$K_D = C_S/C_M = n_S V_M/V_S M_M = \beta(t_R - t_M)/t_M \quad (5)$$

onde n_S é o número de íons do césio-137 na fase estacionária, n_M o número de íons de césio-137 na fase móvel, C_S e C_M as concentrações do césio-137 nas fases estacionária e móvel, respectivamente, V_S e V_M os respectivos volumes, β a razão das fases (V_M/V_S), t_R o tempo de retenção do césio-137 e t_M o tempo de retenção da fase móvel (ou o tempo em que um componente não retido passa pela coluna). Quanto maior o valor de K_D , mais soluto será retido e maior será o tempo necessário para o soluto percorrer uma dada distância. Valores de K_D entre 160 e 750 são encontrados para solos diferentes⁴.

Uma outra descrição, igualmente pertinente, é a de considerar o movimento de $^{137}\text{Cs}^+$ no solo similar ao seu movimento em cromatografia planar. Neste caso, a definição fundamental é a do fator de retenção, RF, definido como:

$$RF = v_W/v_T \quad (6)$$

onde v_W e v_T são as respectivas velocidades médias de movimento no solo da fase móvel (água) e do radionuclídeo de interesse. A velocidade do radionuclídeo, v_T , depende do tempo que a espécie tem movimento livre, dissolvido na fase móvel, e do tempo que ele é retido pelo solo:

$$v_T = v_W t_M/(t_M + t_P) \quad (7)$$

onde t_M é o tempo no qual o radionuclídeo está em movimento, t_P é o tempo no qual o radionuclídeo se encontra em repouso e $t_M + t_P$ representa o tempo total da experiência. Rearranjado:

$$RF = 1 + (t_P/t_M) \quad (8)$$

Quanto $t_P \gg t_M$, o valor de t_P torna-se proporcional à área superficial do solo que, por sua vez, é proporcional a sua massa:

$$t_P = k_S V \delta (1-\epsilon) \quad (9)$$

onde V é o volume total do solo, δ a sua densidade, $(1-\epsilon)$ a fração de volume do solo que é composto de partículas sólidas e k_S é um coeficiente de proporcionalidade. Analogamente:

$$t_M = k_M V \epsilon \quad (10)$$

onde ϵ representa a porosidade do solo, isto é, a fração não sólida. Fazendo estas substituições, obtém-se:

$$RF = 1 + [k_S V \delta (1-\epsilon)/k_M V \epsilon] = 1 + k_D \delta (1-\epsilon)/\epsilon \quad (11)$$

O coeficiente k_D indica a afinidade do radionuclídeo para a superfície do solo e as suas unidades são em m^3/kg quando δ é dado em kg/m^3 .

Apesar de existirem muitos tipos diferentes de solos, os valores de δ e ϵ não variam muito, sendo tipicamente cerca de $1500 \text{ kg}/\text{m}^3$ e $0,5$, respectivamente⁴. O valor de k_D depende do radionuclídeo em estudo; para $^{137}\text{Cs}^+$, $^{60}\text{Co}^{2+}$, $^{90}\text{Sr}^{2+}$ e $^{239}\text{Pu}(\text{IV})$ os valores de k_D são $0,3$; $0,04$; $0,02$ e 1 , respectivamente⁴. Para $^{137}\text{Cs}^+$, então, $RF = 451$.

O valor de v_W pode ser determinado diretamente ou estimado a partir da relação:

$$v_W = k_P i/\epsilon \quad (12)$$

onde i é o gradiente hidráulico e k_P o coeficiente de permeabilidade do solo. Em casos típicos, as grandezas de k_P , i e ϵ são 10^{-5} m/s ; $0,05$ e $0,5$, respectivamente⁴, correspondendo a uma velocidade de movimento da água de 10^{-6} m/s ($8,6 \text{ cm}$ por dia).

Substituindo estes valores na equação 6 e rearranjando:

$$v_{^{137}\text{Cs}} = v_W/RF = 10^{-6} \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}/451 = 2,2 \times 10^{-9} \text{ m/s} \quad (13)$$

onde $2,2 \times 10^{-9} \text{ m/s}$ corresponde a 7 cm por ano de movimento no solo.

Este valor calculado é bem semelhante aos valores determinados experimentalmente em três solos diferentes: tufo, basalto e calcário^{1,15}. Sendo que o valor v_W é bem menor em solo argiloso, devido as suas partículas densas e finas, o $v_{^{137}\text{Cs}}$ neste tipo de solo será menor. Para a argila bentonita, um valor típico determinado para $v_{^{137}\text{Cs}}$ é $0,1 \text{ cm}$ por ano⁴.

Com estas velocidades de movimento do césio-137, é difícil ocorrer contaminação de lençóis freáticos a mais de 50 m da fonte de radiação antes da desintegração completa do césio-137 (600 anos). Deve-se lembrar porém, que outros radionuclídeos que têm meias-vidas ainda mais longas e coeficientes de afinidade (k_D) menores, devido principalmente as suas tendências em formar complexos com outras espécies presentes, são mais móveis, causando portanto maiores riscos de contaminação.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Browne, E.; Firestone, R.B.; "Table of Radioactive Isotopes", Shirley, V.S., ed.; John Wiley & Sons; New York (1986).

- ² Walter, F.W.; Miller, D.G.; Feiner, F.; "Chart of the Nuclides", 13th ed.; General Electric Co.; San Jose (1984).
- ³ Dillman, L.T.; Vonder Lage, F.C.; "Radionuclide Decay Schemes and Nuclear Parameters for Use in Radiation-Dose Estimation", NM/MIRD Pamphlet n.º 10, Society of Nuclear Medicine; New York (1975).
- ⁴ Choppin, G.R.; Rydberg, J.; "Nuclear Chemistry", Pergamon Press; Oxford (1980).
- ⁵ Nesmeyanov, An. N.; "Radiochemistry", traduzido por Beknazarov, A.; Mir Publishers; Moscow (1974).
- ⁶ Cotton, F.A.; Wilkinson, G.; "Advanced Inorganic Chemistry", 4th ed., John Wiley & Sons; New York (1980).
- ⁷ Layton, A.J.; Nyholm, R.S.; Banerjee, A.K.; Fenton, D.E.; Lestas, C.N.; Truter, M.R.; *J. Chem. Soc. A* (1970) 1894.
- ⁸ Benês, P.; Majer, V.; "Trace Chemistry of Aqueous Solutions", Elsevier Scientific Publishing Co., Amsterdam (1980).
- ⁹ Stumm, W.; Morgan, J.J.; "Aquatic Chemistry", 2th, John Wiley & Sons; New York (1981).
- ¹⁰ Massart, D.L.; "Cation Exchange Techniques in Radiochemistry", Publ. NAS-NS 3113, National Academy of Sciences-National Research Council; Washington, D.C. (1971).
- ¹¹ Gast; R.G.; *Soil Sci. Soc. Am. Proc.* (1969) 33, 37.
- ¹² Birks, J.B.; "The Theory and Practice of Scintillation Counting", Pergamon Press; New York (1964).
- ¹³ Endo, L.S.; "Avaliação de Parâmetros de Retenção dos Produtos de Fissão no Solo", Tese de Mestrado, Instituto de Energia Atômica, São Paulo, 1978.
- ¹⁴ Glasstone, S.; Dolan, P.J.; "The Effects of Nuclear Weapons", 3th ed., U.S. Departments of Defense and Energy; Washington, D.C. (1977).
- ¹⁵ Cohen, B.L.; *Rev. Mod. Phys.* (1977) 49, 1.
- ¹⁶ "Radioactivity in the Canadian Aquatic Environment", Publ. NRCC 19250, National Research Council of Canada; Ottawa (1983).
- ¹⁷ "Nuclear Power and the Environment", American Nuclear Society; Hinsdale, (1976).
- ¹⁸ Maurette, M.; *Ann. Rev. Nucl. Sci.* (1976) 26, 319.
- ¹⁹ Weinberg, A.; *Nature*, (1977) 266 206.
- ²⁰ Vasconcellas, M.B.A.; Lima, F.W.; *Spectrum, J. Bras. Ci.* (1982) 2(7), 31.
- ²¹ International Commission on Radiological Protection. *Hlth. Phys.* (1960) 3, 1.
- ²² Andrews, H.L.; "Radiation Biophysics", 2nd d., Prentice-Hall; Englewood Cliffs (1974).
- ²³ Seelmann-Eggebert, W.; Pfenning, G.; Münzel, H.; Klewe-Nebenius, H.; "Nuclidkarte", 5th ed., Gersbach und Sohn Verlag; München (1981).
- ²⁴ Ketchum, L.E.; *J. Nucl. Med.* (1987) 28, 413.

ARTIGO

CORRELAÇÕES EMPÍRICAS DE DESLOCAMENTOS QUÍMICOS. PRÓTONS α -METILÊNICOS DE COMPOSTOS CARBONÍLICOS

Marcos A. P. Martins*, Helio G. Bonacorso e Miguel S.B. Caro

Departamento de Química — Universidade Federal de Santa Maria, 97.119 — Santa Maria (RS)

Recebido em 21/10/87

ABSTRACT

α -Methylene proton chemical shifts of carbonyl compounds have been studied using multiple linear regression analysis, and additive chemical parameters have been determined. Using a data set of 78 chemical shifts, involving 22 different substituents, a standard error of estimate of 0.08 ppm, and a coefficient of multiple correlation (R^2) of 0.991, were found for protons spread between 1.8 and 5.0 ppm.

RESUMO

Os deslocamentos químicos de prótons α -metilênicos de compostos carbonílicos foram estudados usando análises de correlação múltipla, também foram determinadas constantes de aditividade de deslocamento químico de substituintes. Usando dados de 78 deslocamentos químicos, envolvendo 22 diferentes substituintes, foi observado, para prótons em uma faixa de deslocamentos de 1,8 a 5,0 ppm, um erro padrão de estimativa de 0,08 ppm e um coeficiente de correlação múltipla (R^2) de 0,991.

* Autor a que se deve dirigir a correspondência