

## محاسبه بهره تولید زیرکونیوم-۸۹ با استفاده از روش مونت کارلو کد mcnpX

شریفیان، مژگان<sup>(۱)</sup> - صادقی، مهدی<sup>(۲)</sup> - بهروز، علیرضاپور<sup>(۲)</sup>

<sup>۱</sup> دانشگاه پیام نور تهران، دانشکده علوم، گروه فیزیک ص. پ. ۱۹۳۹۵-۳۶۹۷، تهران، ایران.

<sup>۲</sup> سازمان انرژی اتمی، پژوهشگاه علوم و فنون هسته‌ای، پژوهشگاه کاربرد پرتوها

### چکیده:

رادیونوکلئید زیرکونیوم-۸۹، بعنوان یکی از رادیونوکلئیدهایی مورد توجه است که می‌تواند جهت تصویربرداری توسط پوزیترون نشری (PET) بکارگرفته شود. در این تحقیق تابع برانگیختگی برای تولید زیرکونیوم از طریق واکنش  $^{89}\text{Y}(p,n)^{89}\text{Zr}$ ، با استفاده از کدهای *TALYS-1.8*، *ALICE/ASH* و *EMPIRE-3.2.2* محاسبه شده است. پس از مشخص شدن انرژی بهینه، ضخامت هدف توسط کد *SRIM-2013* محاسبه شد. بهره تولید برای واکنش فوق با استفاده از کد مونت کارلو *MCNPX* شبیه سازی شد. نتایج بدست آمده در توافق بسیار خوبی با داده های تجربی بودند.

**کلمات کلیدی:** زیرکونیوم-۸۹، PET، تابع برانگیختگی، بهره تولید، کد مونت کارلو *MCNPX*

### مقدمه:

زیرکونیوم-۸۹ ( $T_{1/2} = 78.41 \text{ h}$ ,  $I_{EC} = 76.6\%$ ,  $I_{\beta^+} = 22.3\%$ ,  $E_{\max}(\beta^+) = 897 \text{ keV}$ ,  $E_{\text{ave}}(\beta^+) = 397 \text{ keV}$ ) دارای نیمه عمر نسبتاً طولانی است و ۲۳٪ واپاشی آن به صورت نشر پوزیترون و ۷۷٪ آن از طریق گیراندازی الکترون است. نهایت انرژی پوزیترون حدود ۰/۹ MeV است که سبب می شود این عنصر یک کاندید برای PET محسوب گردد. فراوانی زیاد گاما در انرژی ۹۰۹ KeV سبب افزایش دز جذبی می شود. این عنصر همچنین کاندیدی برای یافتن تومورها از طریق نشاندارسازی پادتن های تک دودمانی محسوب می شود [۱-۲].

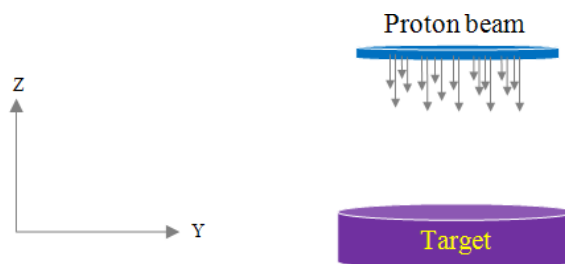
روش های مختلفی برای تولید زیرکونیوم-۸۹ مانند  $^{89}\text{Y}(p,n)^{89}\text{Zr}$ ،  $^{89}\text{Y}(d,2n)^{89}\text{Zr}$ ،  $^{nat}\text{Sr}(\alpha,xn)^{89}\text{Zr}$ ،  $^{89}\text{Zr}(n,2n)^{90}\text{Zr}$  و  $^{nat}\text{Zr}(p,pxn)^{89}\text{Zr}$  وجود دارد [۱۱-۲]. در این تحقیق، واکنش  $^{89}\text{Y}(p,n)^{89}\text{Zr}$  برای دست یافتن به بهترین شرایط تولید، مورد بررسی قرار گرفت. طبق محاسبات انجام شده برای تعیین بازه انرژی مناسب، جهت حداکثر بازده مطلوب و نبودن ناخالصی های اکتیو در این بازه انرژی توسط سیکلوترون های با انرژی پایین، واکنش فوق ایده آل می باشد [۳].

به منظور آماده سازی هدف برای انرژی های ورودی، ضخامت هدف ایتیریم-۸۹ توسط کد SRIM-2013 [۱۲] محاسبه شد. سطح مقطع واکنش  $^{89}\text{Y}(p,n)^{89}\text{Zr}$ ، توسط کدهای محاسباتی TALYS-1.8 [۱۳]، ALICE/ASH [۱۴] و EMPIRE-3.2.2 [۱۵]، محاسبه شد. بهره تولید زیرکونیوم-۸۹ توسط کد مونت کارلوی MCNPX محاسبه شده و با نتایج تجربی مقایسه گردید.

### روش کار :

واکنش های متعددی برای تولید زیرکونیوم - ۸۹ وجود دارد، که در این تحقیق واکنش  $^{89}\text{Y}(p,n)^{89}\text{Zr}$  مورد بررسی قرار گرفته است. همان طور که میدانیم پارامترهای واکنش هسته‌ای نظیر انرژی باریکه پروتونی و ضخامت هدف باید طوری در نظر گرفته شوند تا میزان ناخالصی ها به حداقل برسد. برای این منظور با بررسی نمودار سطح مقطع و تابع برانگیختگی می توان حوزه ای از انرژی را که در آن مقدار واکنش های مزاحم در کمترین حد و واکنش مطلوب در بیشترین بازدهی باشد، تعیین کرد. تابع برانگیختگی را می توان با استفاده از روش های تجربی، همچین شبیه سازی های کامپیوتری مانند کد تالیس، آلیس و امپایر بدست آورد. پس از تعیین انرژی به منظور آماده سازی هدف، توان ایستاندگی، همچنین برد ذرات با انرژی های مختلف توسط کد کامپیوتری SRIM قابل محاسبه خواهد بود.

در این تحقیق هدف ایتیریمی بصورت پودری درون استوانه آلومینیومی به شعاع ۵ mm در نظر گرفته شده است. ضخامت هدف ۱ mm، با توجه به بهترین گستره انرژی پروتون فرودی [۳]، (۱۵-۴ MeV)، توسط کد SRIM محاسبه شد. باریکه پروتون ورودی را دیسک کروی با شعاع ۵ mm و بصورت توزیع گوسی ( $\sigma_x=2/52$  و  $\sigma_y=1/68$ ) که بطور عمود در راستای Z بر سطح هدف می تابد، در نظر گرفته شد. شکل (۱)



شکل (۱) هندسه هدف طراحی شده برای ورودی کد MCNPX

شار پروتون ها توسط تالی f4 درون حجم هدف با استفاده از کد MCNPX-2.6 بدست آمده سپس نرمالیزه شده است. برای محاسبه اکتیویته محصول با استفاده از کد MCNPX از فرمول انتگرالی زیر استفاده شده است:

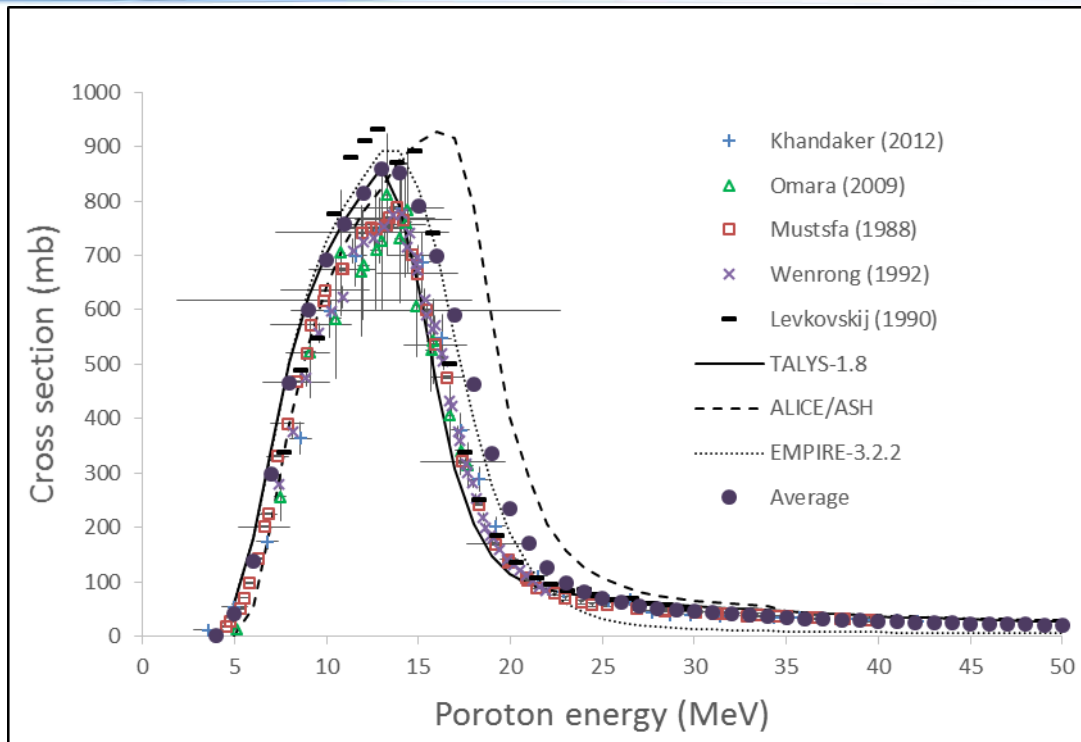
$$A(t) = \int_0^{E_{max}} P(E) \sigma(E) dE \frac{dN_p}{dt} d\rho \frac{L}{M} (1 - e^{-\lambda t}) \quad (1)$$

که در آن  $A(t)$  اکتیویته محصول،  $\rho$  چگالی ماده هدف،  $d$  ضخامت هدف، عدد آووگادرو،  $M$  جرم مولی ماده هدف،  $\lambda$  ثابت واپاشی محصول،  $t$  مدت زمان بمباران هدف،  $\frac{dN_p}{dt}$  جریان بیم پروتون،  $\sigma(E)$  سطح مقطع واکنش بر حسب انرژی و  $P(E)$ ، تابع توزیع نرمالیزه شده پروتون بر حسب انرژی می‌باشد که از طریق تالی  $f4/e4$ ، که متوسط شار ذره در حجم را محاسبه می‌کند بدست می‌آید.

### نتایج :

#### بررسی سطح مقطع واکنش $^{89}\text{Y}(p,n)^{89}\text{Zr}$

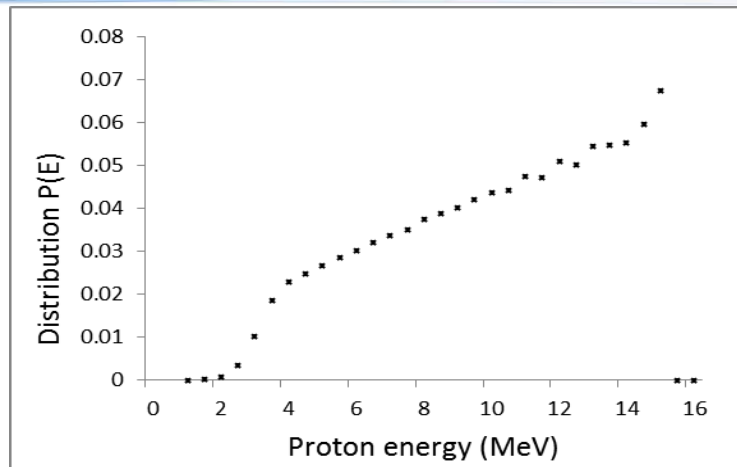
سطح مقطع واکنش  $^{89}\text{Y}(p,n)^{89}\text{Zr}$  با استفاده از کدهای TALYS-1.8، ALICE/ASH و EMPIRE-3.2.2 محاسبه شده و نتایج این محاسبات در شکل (۲) نشان داده شده است. همانطور که در این شکل مشاهده می‌شود تا انرژی ۱۳ MeV، سطح مقطع تولید زیرکونیوم-۸۹ توسط هر سه کد مقادیر یکسان با اختلاف نسبتاً کمی را پیش بینی می‌کنند ولی در انرژی‌های بالاتر، این اختلاف بیشتر می‌شود. بیشترین مقدار سطح مقطع محاسبه شده در انرژی ۱۳ مگا الکترون ولت، توسط کد TALYS-1.8، ۸۶۱ میلی‌بارن و توسط کد EMPIRE-3.2.2، ۸۹۳ میلی‌بارن بدست آمده و این در حالی است که کد ALICE/ASH بیشترین مقدار سطح مقطع را ۹۱۶ میلی‌بارن در انرژی ۱۶ مگا الکترون ولت، پیش بینی می‌کند. میانگین حاصل از سطح مقطع محاسبه شده توسط هر سه کد و داده‌های مربوط به نتایج تجربی حاصل که توسط Omara [۴]، Khandaker [۵]، Wenrong [۶]، Levkovskij [۷] و Mustafa [۸] بدست آمده نیز در شکل (۲) آورده شده است. مقایسه بین داده‌های تجربی و مقادیر حاصل از کدهای محاسباتی مختلف نشان می‌دهد کدهای TALYS-1.8 و EMPIRE-3.2.2 در انرژی‌های بالاتر نسبت به کد ALICE/ASH توافق بیشتری با نتایج آزمایشگاهی دارند.



شکل (۲) تابع برانگیختگی برای واکنش  $^{89}\text{Y}(p,n)^{89}\text{Zr}$

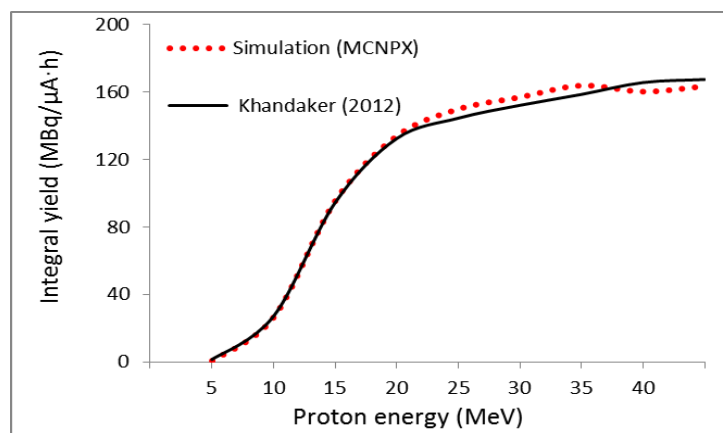
### محاسبه بهره واکنش $^{89}\text{Y}(p,n)^{89}\text{Zr}$

بهره تولید زیرکونیوم-۸۹ از طریق واکنش  $^{89}\text{Y}(p,n)^{89}\text{Zr}$ ، توسط کد MCNPX-2.6، شبیه سازی شد. برای تخمین زدن اکتیویته زیرکونیوم-۸۹، ابتدا هدف ایتیمی در انرژی بهینه ۱۵ MeV (انرژی که در آن ماکزیمم تولید با کمترین ناخالصی های ایزوتوپی می باشد)، برای مدت یک ساعت، تحت جریان یک میکروآمپر قرار گرفت. تابع توزیع پروتون از طریق تالی f4/e4 که در کل بازه انرژی نرمالیزه شده، در شکل (۳) نشان داده شده است. به منظور کاهش خطا، برنامه برای  $10^7$  ذره اجرا گردید و خطای کمتر از دو درصد بدست آمد.



شکل (۳) تابع توزیع انرژی نرمالیزه شده برای پروتون های فرودی در هدف ایتیریم-۸۹

داده های مربوط به سطح مقطع که از میانگین کدهای TALYS-1.8 ، ALICE/ASH و EMPIRE-3.2.2 ، بدست آمده برای محاسبه تابع  $P(E)\sigma(E)$  ، استفاده شده است. در نهایت بهره تولید زیرکونیوم-۸۹ با استفاده از انتگرال عددی به روش سیمسون با استفاده از برنامه نویسی MATLAB محاسبه گردید. (معادله ۱). همچنین بهره تولید واکنش فوق برای سایر انرژی های پروتون فرودی ۵-۴۲ MeV ، تا رسیدن به انرژی آستانه واکنش ( $E_{th}=3.66$  MeV)، محاسبه گردید. منحنی مربوط به نتایج حاصل از این محاسبات در شکل (۴) نشان داده شده است. نتایج جدیدترین داده های تجربی که توسط Khandaker [۵] بدست آمده، با مقادیر مربوط به شبیه سازی توسط کد MCNPX-2.6، در شکل (۴) از توافق خوبی برخوردار می باشد. همانطور که در شکل ۴ می بینیم ، تا انرژی ۱۵ مگا الکترون ولت نتایج بدست آمده از شبیه سازی با کد MCNPX با داده های تجربی منطبق بوده و برای انرژی های بالاتر نیز، با کمی اختلاف به هم نزدیک می باشد.



شکل (۴) مقایسه بهره زیرکونیوم-۸۹ توسط کد MCNPX و نتایج تجربی

### بحث و نتیجه گیری :

در سالهای اخیر زیرکونیوم-۸۹، بعنوان رادیونوکلئید ایده آل مورد استفاده در PET، مورد توجه بسیاری از محققان قرار گرفته است. در این تحقیق واکنش  $^{89}\text{Y}(p,n)^{89}\text{Zr}$  بعنوان بهترین واکنش مورد استفاده در سیکلوترونهای کوچک مورد بررسی قرار گرفت. از آنجا که بهره تولید، یکی از مهمترین فاکتورها برای تولید رادیوداروهاست، از کد مونت کارلوی MCNPX برای تخمین این کمیت کمک گرفته شد. نتایج حاصل از شبیه سازی با مقادیر تجربی در توافق بسیار خوبی بودند. بنابراین این کد می تواند برای تخمین بهره تولید رادیونوکلئیدها با دقت نسبتاً بالایی بکار برده شود.

### مراجع :

1. A. L. Wooten, E. Madrid, G. D. Schweitzer, L. A. Lawrence, E. Mebrahtu, B. C. Lewis, S. E. Lapi, Appl. Sci. **3**: 593-613 (2013).
2. M. Sadeghi, T. Kakavand, M. Taghilo.. Int. J. Mod. Phys. E **20**: 1775 (2011).
3. M. Sadeghi, T. Kakavand, M. Taghilo, Kerntechnik **75**: 298 (2010).
4. H. M. Omara, K. F. Hassan, S. A. Kandi, F. E. Hegazy, Z. A. Saleh, Radiochimica Acta **97**: 467 (2009).
5. M. U. Khandaker, K. Kim, M. W. Lee a, K. S. Kim, G. Kim, N. Otuka, Inst. Meth. Phys. Res. B. **271**: 72 (2012).
6. Z. Wenrong, S. Qingbiao, L. Hanlin, Y. Weixiang. Chinese J. Nucl. Phys. (Beijing) **6**: 80-86 (1992)
7. V.N.Levkovsky, V.F.Reutov, K.V.Botvin. Jour: Atomnaya Energiya, (Russia) **69**: 180 (1990).
8. M.G. Mustafa, H.I. West, H. O'Brien, R.G. Lanier, M. Benhamou, T. Tamura,. Phys.Rev. C **38**:1624-1637 (1988).
9. J. Zweit, S. Downey, H. L. Sharma, Production of no-carrier-added zirconium-89 for positron emission tomography. Appl. Radiat. Isot. **42**: 199 (1991).
10. S. A. Kandil, I. Spahn, B. Scholten, Z. A. Saleh, S. M. M. Saad, H. H. Coenen, S. M. Qaim, Radiat. Isot. **65**: 561 (2007).
11. M. S. Uddin, M. U. Khandaker, K. S. Kim, Y. S. Lee, M. W. Lee, G. N. Kim, Inst. Meth. Phys. Res. B. **266**: 13 (2008).
12. JF. Ziegler Interactions of ions with matter. (2013) <http://www.srim.org/>. Accessed 19 Nov 2015.
13. AJ. Koning, S. Hilaire, S. Goriely, TALYS-1.8: a nuclear reaction program. User manual,

NRG, Netherlands. <http://www.talys.eu/download-talys> (2013). Accessed 19 Nov 2015.

14. C. H. M. Broeders, A. Yu. Konobeyev, Yu. A. Korovin, V. P. Lunev, M. Blann ALICE/ASH-Pre-compound and evaporation model code system for calculation of excitation functions, energy and angular distributions of emitted particles in nuclear reactions at intermediate energies, FZK-7183 (2006).[http:// bibliothek.fzk.de/zb/berichte/FZKA7183.pdf](http://bibliothek.fzk.de/zb/berichte/FZKA7183.pdf)S.

15. Monte Carlo Team. MCNP5/MCNPX-exe Package, Monte Carlo N-Particle extended, Los Alamos National Laboratory report. (2008), <https://mcnpx.lanl.gov/> (with Proper License to the author C. Tenreiro).