

Оптимизация параметров мишени, облучаемой тормозными фотонами

С. С. Бельшев,* А. В. Дружинина†

Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова,
физический факультет, кафедра общей ядерной физики
Россия, 119991, Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 2.
(Статья поступила 08.04.2018; Подписана в печать 16.04.2018)

Работа посвящена решению задачи оптимизации параметров мишени, облучаемой тормозными фотонами. В ходе работы была разработана программа, моделирующая облучение мишени тормозными фотонами с использованием пакета GEANT4. Программа моделирует прохождение частиц через вещество и методом МСМС подбирает оптимальные геометрические параметры мишени для облучения. Были рассчитаны оптимальные геометрические параметры галлиевой мишени с целью наработки радионуклида ^{69m}Zn .

PACS: 02.70.Uy 25.20.-x

УДК: 539.172.3

Ключевые слова: фотоядерные реакции, метод Монте–Карло, планирование эксперимента, наработка радионуклидов

ВВЕДЕНИЕ

При облучении вещества потоком γ -квантов с энергиями выше 10 МэВ происходят фотоядерные реакции с вылетом одного или нескольких нуклонов. Целью экспериментов с фотоядерными реакциями может быть изучение свойств и структуры ядра или наработка радионуклидов для их дальнейшего использования, например, в медицине.

В качестве источника гамма квантов для облучения исследуемых веществ обычно используется тормозное гамма-излучение, которое генерируется при облучении тормозной мишени пучком электронов. Выбор энергии пучка фотонов, материала и параметров мишени при проведении экспериментов проводится в соответствии с конкретными целями исследований и типом фотоядерных реакций, происходящих в материале мишени под действием фотонов. Важнейшим этапом подготовки эксперимента является его математическое моделирование, которое используется для планирования эксперимента, обработки его результатов и оптимизации параметров мишени. Прямое математическое моделирование экспериментов такого вида с детальным описанием геометрии и физических свойств проводится с применением методов Монте–Карло на основе различных видов оцененных ядерных данных.

1. ОПТИМИЗАЦИЯ ПАРАМЕТРОВ ЭКСПЕРИМЕНТА

В НИИЯФ МГУ совместно с кафедрой радиохимии химического факультета МГУ проводится серия экспериментов по изучению методов наработки и выделения перспективного медицинского радионуклида ^{69m}Zn образующегося в реакции $^{71}\text{Ga}(\gamma, pn)^{69m}\text{Zn}$. В

ходе работы была решена задача подбора оптимальных условий облучения для наработки ^{69m}Zn .

Для моделирования эксперимента использована система библиотек прямого компьютерного моделирования процессов прохождения элементарных частиц через вещество на основе методов Монте–Карло — GEANT4 (GEometry ANd Tracking) [1], разработанная в CERN. Выбор GEANT4 обусловлен тем, что это наиболее современный и совершенный из доступных пакетов библиотек. Он обладает развитыми средствами моделирования электромагнитных процессов при взаимодействии электронов и γ -квантов с веществом. Для описания тормозного излучения GEANT4 использует данные Зельцера и Бергера [2], в основе которых лежат таблицы для суммарного сечения тормозного спектра электронных взаимодействий в зависимости от энергии тормозного γ -кванта, кинетической энергии иницилирующего электрона и заряда ядра.

Рассматривалось два метода оптимизации параметров: градиентный спуск и МСМС (Монте–Карло с цепями Маркова). Так как нам не известен аналитический градиент функции, а также значения целевой функции имеют дополнительную погрешность в точке, то метод градиентного спуска для решения этой задачи не применим. Таким образом, оптимизация параметров эксперимента реализована с использованием метода МСМС.

Для подбора параметров эксперимента использован алгоритм Метрополиса–Гастингса, который был впервые опубликован 1953 г. Н. Метрополисом [3], а в 1970 г. обобщен К. Гастингсом [4]. Алгоритм позволяет вычислить выборку по заданной функции распределения плотности вероятности $f(x)$, при этом вычисление обратной функции или знание нормировки плотности не требуется. Для вычисления пробных значений вектора параметров x используется вспомогательное распределение Q , выборка значений из которого генерируется просто.

Последовательность вычислений в основном цикле алгоритма состоит из следующих шагов:

*E-mail: belyshev@depni.sinp.msu.ru

†E-mail: alexdruzhinina@gmail.com

- Выбрать значение x_{i+1} из x_i , используя распределение Q
- Вычислить $f_{i+1}(x_{i+1})$
- Вычислить $\alpha = \frac{f_{i+1}}{f_i} \frac{Q(x_i \rightarrow x_{i+1})}{Q(x_{i+1} \rightarrow x_i)}$, где $Q(x_i \rightarrow x_{i+1})$ это плотность вероятности перехода из точки x_i в x_{i+1}
- Сгенерировать случайное число q , равномерно распределённое от 0 до 1 и если $q < \alpha$, то принять значение x_{i+1} , иначе принять значение x_i

2. ВЫБОР ЭНЕРГИИ ЭЛЕКТРОННОГО ПУЧКА

Результатом эксперимента на тормозном пучке фотонов является выход фотоядерной реакции $Y(E_e)$ равный интегралу от произведения сечения реакции на плотность распределения числа фотонов $\phi(E_\gamma, E_e)$:

$$Y(E_e) = \int_{E_{thr}}^{E_e} \phi(E_\gamma, E_e) \sigma(E_\gamma) dE_\gamma,$$

где E_e — кинетическая энергия электронов, падающих на тормозную мишень, E_γ — энергия тормозных γ -квантов, испущенных из тормозной мишени, E_{thr} — порог исследуемой фотоядерной реакции.

Выбор энергии электронов для облучения определяется зависимостью сечений интересующей реакции и сечения образования тормозных фотонов от энергии электронного пучка, а также целевым критерием, по которому производится оптимизация. В качестве такого критерия наиболее естественно выбрать отношение числа образующихся ядер к затраченной на это энергии пучка, т.е. отношение выхода реакции к энергии электрона $Y(E_e)/E_e$.

На рис.1 представлена зависимость сечений образования тормозных фотонов с энергиями 40, 50 и 60 МэВ, полученных с помощью данных Зельцера и Бергера [3]. На том же графике (в другом масштабе) представлена зависимость сечения реакции с образованием ^{69m}Zn в результате реакции $^{71}\text{Ga}(\gamma, pn)^{69m}\text{Zn}$ от энергии фотонов. Сечение рассчитано с помощью программы TALYS [5]. Из графика трудно сделать однозначный вывод о том, как ведёт себя интересующее отношение.

Для выяснения зависимости критерия $Y(E_e)/E_e$ от энергии электронов был проведён расчёт для различных значений энергии электронного пучка и двумя свободными параметрами: радиусом исследуемой мишени и толщиной тормозной мишени, подбираемых алгоритмом МСМС. Масса облучаемой мишени в данном расчёте была зафиксирована. На рис. 2 представлена эта зависимость. Как видно из графика, значение $Y(E_e)/E_e$ плавно растёт с увеличением энергии электронов.

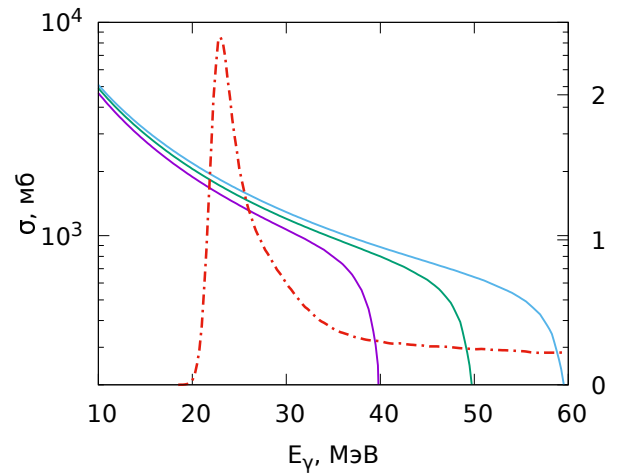


Рис. 1: Зависимость сечений образования тормозных фотонов (сплошные кривые, левая шкала) в сравнении с сечением ядерной реакции $^{71}\text{Ga}(\gamma, pn)^{69m}\text{Zn}$ (штрихпунктир, правая шкала)

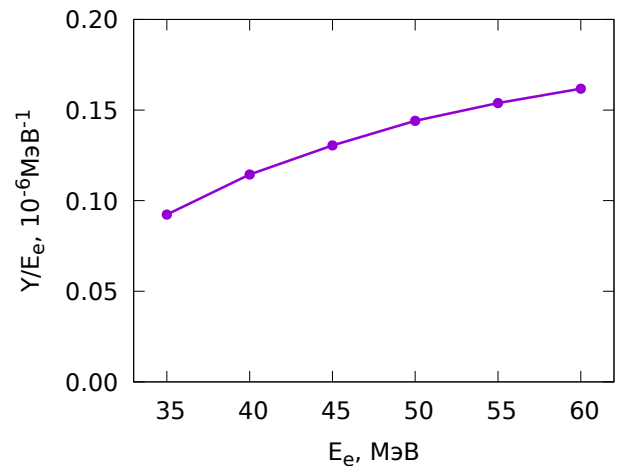


Рис. 2: Оптимальное отношение $Y(E_e)/E_e$ в зависимости от энергии пучка электронов

3. ВЫБОР МАТЕРИАЛА ТОРМОЗНОЙ МИШЕНИ

Сечение образования тормозных фотонов также зависит от заряда ядер тормозной мишени. Вычисления показали, что оптимальный выход для Z тормозной мишени в диапазоне от 74 до 82 отличается незначительно. Поэтому в дальнейших расчетах в качестве материала тормозной мишени использовался вольфрам с $Z = 74$, как наиболее практичный.

4. ВЫБОР МАССЫ ИССЛЕДУЕМОЙ МИШЕНИ

Выход реакции будет зависеть от размеров мишени, и ясно, что чем больше мишень, тем больше будет происходить в ней реакций. Однако как будет зависеть удельная (на единицу массы) активность облучённой мишени от её массы не очевидно. Был проведён соответствующий расчёт для различных масс мишени и на рис. 3 представлен график полученной зависимости. Как видно из графика, с увеличением массы выход реакции растёт очень медленно, а удельный на единицу массы выход монотонно и быстро падает.

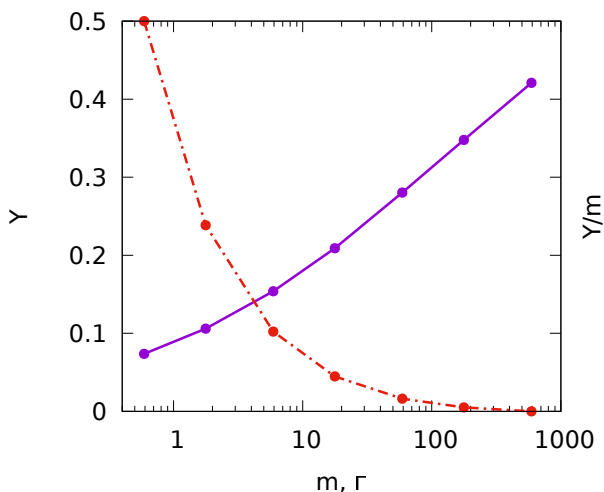


Рис. 3: Оптимальный выход ^{69m}Zn (сплошная кривая) и удельный на единицу массы (пунктир) в зависимости от массы облучаемой мишени

5. РАСЧЁТ ДЛЯ УСЛОВИЙ РЕАЛЬНОГО ЭКСПЕРИМЕНТА

В эксперименте, проводимом в НИИЯФ МГУ используется ускоритель RTM-55 с фиксированной энергией ускоренных электронов $E_e = 55.6$ МэВ, поэтому расчет оптимальных параметров проводился для этой энергии с учетом формы пучка электронов в попереч-

ном сечении с использованием тормозной мишени из вольфрама.

Масса галлиевой мишени выбирается исходя из условий процесса радиохимического выделения изотопа ^{69m}Zn из объема мишени и является фиксированной. Таким образом, оптимальные условия эксперимента можно определить подбором всего двух свободных параметров: толщины тормозной мишени, а также радиуса облучаемой мишени в форме цилиндра, объем которого задан.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

На рис. 4 представлена рассчитанная зависимость выхода реакции (цветовая шкала) от толщины тормозной мишени и радиуса облучаемой галлиевой мишени природного изотопного состава, объемом 1 см^3 .

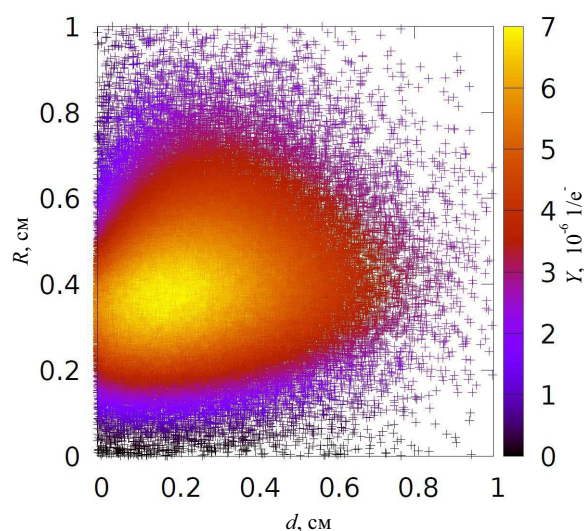


Рис. 4: Зависимость выхода реакции от толщины тормозной мишени и радиуса облучаемой мишени объемом 1 см^3

Оптимальный выход реакции составил $6.8 \cdot 10^{-6}$ ядер на один электрон при толщине тормозной мишени 0.18 см и радиусе облучаемой галлиевой мишени 0.38 см, что соответствует нарабатываемой активности ^{69m}Zn 2.15 МБк на $1\text{ мкА}\cdot\text{ч}$ прошедшего заряда пучка.

- [1] *Geant4 Collaboration* Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. A. 2003. **506**, N 3. P. 250.
 [2] *Seltzer S.M., Berger M.J.* Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B. 1985. **12**. P. 95.
 [3] *Metropolis N., Rosenbluth A. W., Rosenbluth M. N., Teller A. H., & Teller E.* J. Chem. Phys. 1953. **21**. P. 1087.

- [4] *Hastings W.K.* Biometrika. 1970. **57**, N 1. P. 97.
 [5] *Koning A.J., Hilaire S., Duijvestijn M.C.* Proceedings of the International Conference on Nuclear Data for Science and Technology. April, 22–27, 2007 / edited by Bersillon O. et al. EDP Sciences (Nice, France, 2008). P. 211.

Optimization of parameters of target irradiated by bremsstrahlung photons

S. S. Belyshev^a, A. A. Druzhinina^b

Faculty of Physics, M.V.Lomonosov Moscow State University, Moscow 119991, Russia
E-mail: ^abelyshev@depni.sinp.msu.ru, ^balexdruzhinina@gmail.com

The work is devoted to solving the problem of optimization of parameters of the target irradiated by bremsstrahlung photons. In the course of the work, a program, which simulates irradiation of the target with bremsstrahlung photons, was developed using the GEANT4 package. The program simulates the passage of the particles through a substance and selects the optimal geometric parameters of the target for irradiation using the MCMC method. As a result, optimal geometric parameters were calculated for irradiation of the gallium target with the purpose of production of the radionuclide ^{69m}Zn.

PACS: 02.70.Uu 25.20.-x

Keywords: photonuclear reactions, Monte Carlo method, experiment planning, radionuclide production.

Received 08 April 2018.

Сведения об авторах

1. Бельшев Сергей Сергеевич — ассистент; тел.: (495) 939-25-58, e-mail: belyshev@depni.sinp.msu.ru.
2. Дружинина Александра Владимировна — студентка; тел.: (495) 939-25-58, e-mail: alexdruzhinina@gmail.com.