



دانشگاه سبزگان

دانشکده علوم - گروه فیزیک

پایان نامه کارشناسی ارشد

شبیه‌سازی تولید ^{48}V (وانادیم-۴۸) از طریق
واکنش $^{48}\text{Ti}(p,n)^{48}\text{V}$ به روش مونت کارلو

محبوبه محمودی مقدم عراقی

استاتید راهنما

دکتر مهدی صادقی

دکتر طیب کاکاوند

استاد مشاور

دکتر عباس مجدآبادی

چکیده

وانادیم-۴۸ یکی از رادیوایزوتوپ‌های مهمی است که به طور گسترده در پزشکی و صنعت مورد استفاده قرار می‌گیرد. از جمله کاربردهای این رادیوایزوتوپ می‌توان به بکارگیری آن در تصویر برداری پزشکی به روش PET اشاره کرد. نیمه عمر بلند و گاما‌های پر انرژی باعث شده که ^{48}V به عنوان جایگزین مناسب ^{68}Ge در این تصویر برداری انتخاب شود.

واکنش $^{48}\text{V}(\text{p}, \text{xn})^{nat}\text{Ti}$ عمده‌ترین واکنش برای تولید وانادیم-۴۸ می‌باشد. با توجه به اهمیت این واکنش در مانیتورینگ پارامترهای ذرات باردار و نیز نقش ^{48}V تولید شده، در پزشکی، این واکنش تحت شرایط مختلف و در بازه‌های انرژی متفاوت، توسط تعداد زیادی از محققان مورد بررسی قرار گرفته و اکتیویته و بهره تولید وانادیم-۴۸ و سایر رادیونوکلیدهای تولید شده در طی این واکنش به روشهای تجربی تعیین شده است.

در این پروژه برای اولین بار به بررسی تولید رادیونوکلید وانادیم-۴۸ از طریق شبیه‌سازی با استفاده از کد مونت کارلو می‌پردازیم و مقادیر حاصل از این شبیه‌سازی را با مقادیر تئوری محاسبه شده با استفاده از کدهای کامپیوتری TALYS و SRIM و نیز مقادیر تجربی در دسترس مقایسه می‌کنیم. همچنین بهره تولید وانادیم-۴۸ را در هر یک از ایزوتوپ‌های تیتانیوم را با استفاده از کد MCNPX محاسبه کرده و مشخص می‌شود که حداکثر تولید وانادیم-۴۸ در طی واکنش $^{48}\text{V}(\text{p}, \text{n})^{48}\text{Ti}$ روی می‌دهد.

علاوه بر شبیه‌سازی تولید وانادیم-۴۸ به بررسی و شبیه‌سازی تولید دیگر رادیوایزوتوپهای حاصل شده در طی واکنش $^{48}\text{V}(\text{p}, \text{xn})^{nat}\text{Ti}$ پرداخته می‌شود و اکتیویته و بهره تولید شبیه‌سازی شده این ناخالصی‌های رادیواکتیو را با استفاده از کد MCNPX محاسبه و با مقادیر تئوری دیگر مقایسه می‌کنیم. بر اساس این مقایسه توافق بسیار خوبی در بین نتایج حاصل از شبیه‌سازی، مقادیر تئوری و تجربی وجود دارد.

واژه‌های کلیدی: اکتیویته، کد MCNP، شبیه‌سازی، تیتانیوم، وانادیم.

فصل اول: رادیونوکلئیدها و کاربرد آنها در پزشکی

مقدمه	۱
۱-۱ رادیونوکلئیدها در پزشکی	۱
۲-۱ پزشکی هسته‌ای تشخیصی	۲
۱-۲-۱ سیستم تصویر برداری SPECT	۲
۲-۲-۱ سیستم تصویر برداری PET	۳

فصل دوم: کلیات و مفاهیم هسته‌ای

مقدمه	۵
۱-۲ واکنش‌های هسته‌ای	۵
۲-۲ تعریف مقدار Q واکنش هسته‌ای	۶
۳-۲ انرژی آستانه واکنش	۷
۴-۲ سطح مقطع واکنش	۷
۵-۲ تابع برانگیختگی	۹
۱-۵-۲ معرفی اجمالی کد TALYS	۱۰
۶-۲ توان ایستاندگی و برد	۱۱
۱-۶-۲ معرفی اجمالی کد SRIM	۱۲
۷-۲ معادلات اکتیویته و بهره تولید	۱۳
۸-۲ سازوکار واکنش هسته‌ای	۱۶
۱-۸-۲ واکنش هسته مرکب	۱۷
۲-۸-۲ واکنش پیش تعادلی	۱۷
۳-۸-۲ واکنش مستقیم	۱۸

فصل سوم: مروری بر تحقیقات گذشته

مقدمه	۱۹
۱-۳ کاربرد رادیونوکلئیدهای تولیدی واکنش $^{nat}\text{Ti}(p,x)$	۱۹
۲-۳ مروری بر تحقیقات گذشته	۲۱

فصل چهارم: مونت کارلو

۲۷	مقدمه
۲۷	۱-۴ روش مونت کارلو
۲۷	۱-۱-۴ تعریف روش مونت کارلو
۲۸	۲-۱-۴ ایده اصلی روش مونت کارلو
۲۸	۳-۱-۴ همانندسازی (شبیه‌سازی)
۲۸	۴-۱-۴ روش مونت کارلو در ترابرد ذرات هسته‌ای
۲۹	۲-۴ کد MCNP
۳۰	۱-۲-۴ تاریخچه و قسمتی از توانایی‌های کد MCNP
۳۱	۲-۲-۴ کاربردهای کد MCNP
۳۲	۳-۲-۴ واحد در MCNP
۳۲	۳-۴ اساس کار کد MCNP
۳۳	۱-۳-۴ در MCNP چه اتفاقی می‌افتد؟
۳۴	۴-۴ تدوین فایل ورودی
۳۶	۱-۴-۴ معرفی هندسه مسئله
۳۶	۱-۱-۴-۴ تعریف سلول
۳۷	۲-۱-۴-۴ تعریف سطوح
۳۷	۲-۴-۴ تعریف نوع مسئله
۳۸	۳-۴-۴ کاهش خطا
۳۸	۴-۴-۴ تعریف چشمه
۳۹	۵-۴-۴ تعریف مواد
۳۹	۶-۴-۴ تعریف خروجی برنامه
۴۰	۷-۴-۴ دستور قطع برنامه
۴۰	۵-۴ برآورد خطا
۴۱	۶-۴ رسم هندسه و اجرای کد

فصل پنجم: بحث و نتیجه‌گیری

۴۴	مقدمه
۴۴	۱-۵ محاسبه سطح مقطع تولید با استفاده از کد TALYS
۴۷	۲-۵ محاسبه بهره تولید تئوری
۴۷	۱-۲-۵ شرایط اول
۴۸	۲-۲-۵ شرایط دوم
۴۹	۳-۵ محاسبات MCNPX

۵۰ ۱-۳-۵ شبیه‌سازی شرایط اول
۵۴ ۲-۳-۵ شرایط دوم
۵۹ ۴-۵ نتیجه‌گیری و پیشنهاد
۶۱ پیوست
۷۵ فهرست منابع
۷۸ ABSTRACT

فهرست جداول

صفحه	عنوان
۴۷	جدول ۱-۵ پارامترهای تولید وانادیم-۴۸ در طی تابش پروتون بر تیتانیم طبیعی
۴۸	جدول ۲-۵ اکتیویته و بهره تولید رادیونوکلئیدهای تولید شده در طی واکنش $^{nat}\text{Ti}(p,x)^{48}\text{V}$ بر اساس محاسبات دوکد SRIM و TALYS در بازه انرژی ۲۰-۸ MeV
۴۹	جدول ۳-۵ اکتیویته و بهره تولید رادیونوکلئیدهای تولید شده در طی واکنش $^{nat}\text{Ti}(p,x)^{48}\text{V}$ بر اساس محاسبات دو کد SRIM و TALYS در بازه انرژی ۲۰-۵ MeV
۵۳	جدول ۴-۵ مقایسه بین بهره تولید تئوری و تجربی وانادیم-۴۸ با بهره شبیه‌سازی شده با استفاده از سطح مقطع [۱۳]
۵۳	جدول ۵-۵ مقایسه بین بهره تولید تئوری و مقادیر بهره شبیه‌سازی شده با استفاده از کد MCNPX
۵۷	جدول ۶-۵ مقایسه بین بهره تولید تئوری و تجربی وانادیم-۴۸ با بهره شبیه‌سازی شده شرایط دوم با استفاده از کد MCNPX
۵۷	جدول ۷-۵ مقایسه بین بهره تولید تئوری و مقادیر بهره شبیه‌سازی شده شرایط دوم با استفاده از کد MCNPX

صفحه	عنوان
۳	شکل ۱-۱ طرح‌های از مکانیزم تصویربرداری SPECT
۴	شکل ۲-۱ طرح‌های از مکانیزم تصویربرداری PET
۲۰	شکل ۱-۳ نمونه‌ای از استنت در داخل رگ
۳۱	شکل ۱-۴ طرح‌های از تحولات کد MCNP
۵۲	شکل ۱-۵ طرحی از برش طولی تارگت (داخل=سلول تیتانیوم و خارج=سلول آلومینیوم)
۵۲	شکل ۲-۵ طرحی از برش عرضی تارگت (داخل=سلول تیتانیوم و خارج=سلول آلومینیوم)
۵۲	شکل ۳-۵ تصویری از مقطع تیتانیوم که مورد اصابت ۱۰۰۰ ذره پروتونی قرار گرفته است
۵۴	شکل ۴-۵ شار پروتون در سلول تیتانیوم در شرایط اول
۵۴	شکل ۵-۵ شار نوترون در سلول تیتانیوم در شرایط اول
۵۵	شکل ۶-۵ تارگت تیتانیوم-مس
۵۵	شکل ۷-۵ تارگت تیتانیوم-مس
۵۵	شکل ۸-۵ برخورد ۱۰۰۰ ذره پروتونی با سطح تیتانیوم
۵۶	شکل ۹-۵ تارگت تیتانیوم-مس
۵۶	شکل ۱۰-۵ برخورد پروتون‌های خروجی از چشمه به سطح تیتانیوم برای چشمه‌ای در مکان نامناسب
۵۶	شکل ۱۱-۵ برش عرضی تارگت
۵۸	شکل ۱۲-۵ شار پروتون در سلول تیتانیوم در شرایط دوم
۵۸	شکل ۱۳-۵ شار نوترون در سلول تیتانیوم در شرایط دوم

فهرست نمودارها

صفحه	عنوان
۲۲	نمودار ۱-۳ تابع برانگیختگی $[9]^{nat}Ti(p,x)^{48}V$
۲۲	نمودار ۲-۳ بهره تولید رادیونوکلئیدهای ^{47}Sc ، ^{44m}Sc و ^{48}V [۹]
۲۳	نمودار ۳-۳ بهره تولید رادیونوکلئیدهای ^{48}Sc و ^{46g}Sc [۹]
۲۳	نمودار ۴-۳ بهره تولید رادیونوکلئیدهای ^{46g}Sc ، ^{43}Sc [۹]
۲۴	نمودار ۵-۳ تابع برانگیختگی واکنش $[13]^{nat}Ti(p,x)^{48}V$
۲۴	نمودار ۶-۳ بهره تولید رادیونوکلئید ^{48}V [۱۳]
۲۵	نمودار ۷-۳ تابع برانگیختگی واکنش $[18]^{nat}Ti(p,x)^{48}V$
۲۶	نمودار ۸-۳ تابع برانگیختگی واکنش $[19]^{nat}Ti(\alpha,x)^{48}V$
۴۵	نمودار ۱-۵ تابع برانگیختگی تولید وانادیم-۴۸ در ایزوتوپهای تیتانیم طبیعی بر اساس کد TALYS
۴۶	نمودار ۲-۵ تابع برانگیختگی واکنش $^{nat}Ti(p,x)$ بر اساس کد TALYS
۴۶	نمودار ۳-۵ تابع برانگیختگی $^{nat}Ti(p,x)Sc$ بر اساس کد TALYS
۵۳	نمودار ۴-۵ تابع توزیع پروتون در تیتانیم در شرایط اول
۵۸	نمودار ۵-۵ تابع توزیع انرژی پروتون در تیتانیم در شرایط دوم

صفحه	عنوان
پیوست الف	
۶۱.....	MCNPX در شرایط اول بر اساس خروجی
۶۲.....	MCNPX در شرایط دوم بر اساس خروجی
پیوست ب	
۶۳.....	جدول تعریف سطوح در کد MCNP
پیوست پ	
۶۴.....	جدول واپاشی رادیونوکلئیدهای تولید شده در طی تابش پروتون بر تیتانیم
پیوست ت	
۶۶.....	توان ایستاندگی حاصل از کد SRIM
پیوست ث	
۶۷.....	ورودی کد MCNPX در شرایط اول
۶۸.....	ورودی کد MCNPX در شرایط دوم
پیوست ج	
۷۰.....	متن برنامه نوشته شده در محیط MATLAB به منظور محاسبه اکتیویته تئوری
پیوست ح	
۷۲.....	متن برنامه نوشته شده در محیط MATLAB به منظور محاسبه اکتیویته با استفاده از کد MCNPX

مقدمه

امروزه رادیوایزوتوپها نقشی مهم و فزاینده در زندگی بشر بازی می‌کنند و کاربردهای گوناگونی در بسیاری از رشته‌ها و زمینه‌ها دارند. رادیوایزوتوپها بطور گسترده در پزشکی، صنعت، کشاورزی و تحقیقات علمی استفاده شده و کاربردهای جدید آنها دائماً در حال گسترش و توسعه است. در بسیاری از موارد جایگزینی برای رادیوایزوتوپها وجود نداشته و در بیشتر کاربردها نسبت به تکنیک‌ها و روش‌های دیگر موثرتر و ارزانتر هستند. بیش از هشتاد سال از اولین آزمایش پزشکی هسته‌ای با رادیوایزوتوپ طبیعی رادیوم-۲۲۶ در سال ۱۹۲۷ می‌گذرد. اما تنها در چند دهه اخیر است که پزشکی هسته‌ای به عنوان یک تخصص پزشکی شناخته می‌شود. پیشرفت‌های اخیر در زمینه تولید رادیوداروهای شیمیایی از یک سو و گسترش و توسعه تکنیک‌های تصویربرداری از سوی دیگر باعث استفاده روزافزون از این فن‌آوری در تشخیص و درمان بیماری‌ها شده است.

۱-۱ رادیونوکلوئیدها در پزشکی

بیشتر از ۳۰۰۰ هسته شناخته شده در طبیعت وجود دارد. از این میان تنها حدود ۲۷۰ هسته پایدار است و مابقی آنها رادیواکتیو هستند. رادیونوکلوئیدهایی که در پزشکی هسته‌ای بکار می‌روند باید دارای تابش‌های رادیواکتیو مناسب باشند. گئورگ دی هوسی^۱ در سال ۱۹۲۳ میلادی اولین کسی بود که از رادیوایزوتوپها به عنوان ردیاب در تکنیک تصویر برداری استفاده کرد [۱]. در پزشکی هسته‌ای، رادیونوکلوئیدها به ندرت در ساده‌ترین شکل شیمیایی شان مورد استفاده قرار می‌گیرند بلکه با ترکیبات شیمیایی گوناگونی که به واسطه خواص بیوشیمیایی، فیزیولوژی یا متابولیکی مطلوبشان مورد توجه هستند آمیخته می‌شوند.

^۱George de Hevesy

روشهای استفاده از نوکلئیدهای پرتوزا در پزشکی را می‌توان به سه دسته بزرگ تقسیم کرد؛ که بزرگترین آنها بخش روش‌های تشخیصی است. مانند تصویربرداری از اعضای بدن که در آن یک رادیونوکلئید با ترکیب شیمیایی مناسب را به بیمار تجویز می‌کنند و توزیع ماده پرتوزا را به وسیله یک آشکارساز تابش از خارج بدن تعیین می‌شود. در پزشکی هسته‌ای تشخیصی، برای فراهم کردن اطلاعات درباره بدن انسان و عملکرد ارگانهای مشخص، فرایندهای بیولوژیکی در حال پیشرفت و یا وضعیت و چگونگی یک بیماری خاص، از مقدار کم تابش استفاده می‌کند.

یک بخش دیگر از کاربردهای رادیونوکلئیدها، که قسمت کوچکی از کاربردهای پزشکی هسته‌ای است مربوط به کاربرد درمانی نوکلئیدهای پرتوزا می‌باشد. مانند درمان بیماری‌های تیروئید با استفاده از ^{131}I .

در سومین بخش پزشکی هسته‌ای که هر روز بر اهمیت آن افزوده می‌شود، ماده نوکلئید پرتوزا به بیمار تجویز نمی‌شود، بلکه از تکنیک‌های آن برای اندازه‌گیری غلظت هورمون‌ها، پادتن‌ها، داروها و سایر موارد مهم در نمونه خونی یا نمونه بافت استفاده می‌شود [۲] .

۱-۲ پزشکی هسته‌ای تشخیصی

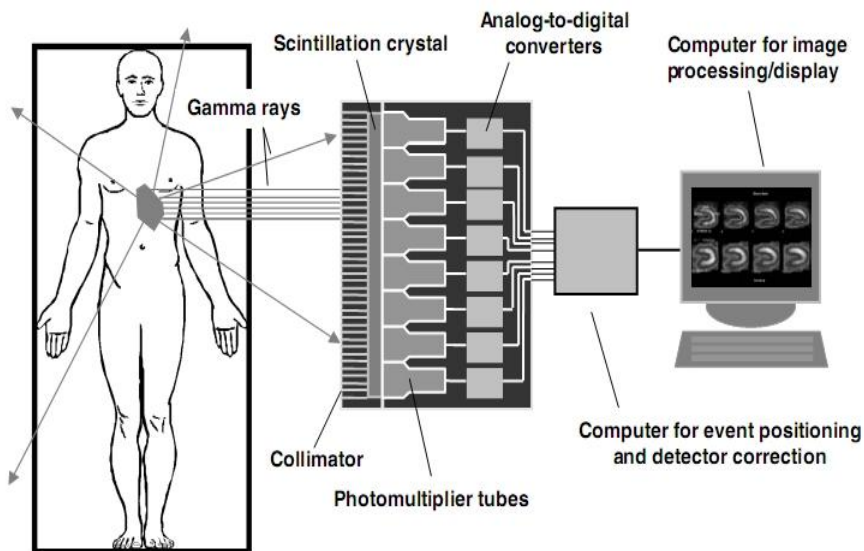
دو تکنیک عمده در پزشکی هسته‌ای تشخیصی وجود دارد که در ادامه به شرح مختصری از هر یک می‌پردازیم:

۱-۲-۱ سیستم تصویربرداری SPECT

در روش تصویربرداری SPECT (توموگرافی گسیلنده تک فوتونی^۱) از رادیوایزوتوپ‌های گسیلنده گاما استفاده می‌شود. با اتصال این رادیونوکلئیدها به ترکیبات خاص (نشاندار کردن) این امکان فراهم می‌شود که رادیونوکلئید پرتوزا در محل بافت مورد بررسی تجمع کند. سپس گامای تابشی رادیوایزوتوپ آشکارسازی و پس از پردازش کامپیوتری به تصویر تبدیل می‌شود. اینگونه رادیونوکلئیدها بایستی دارای گامایی در گستره

^۱Single Photon Emission Computed Tomography (SPECT)

۷۰-۲۵۰ keV باشند. این محدودیت، برای انرژی گاما از آن روست که در انرژی‌های کمتر از ۷۰ ke گاما امکان عبور و فرار از بافت بدن و در نتیجه رسیدن به آشکارساز را ندارد. در انرژی‌های بیشتر از ۲۵۰ keV هم راندمان آشکارساز SPECT به شدت کاهش می‌یابد. شکل ۱-۱ طرحواره‌ای از چگونگی عملکرد سیستم تصویربرداری SPECT را نشان می‌دهد.



شکل ۱-۱ طرحواره‌ای از مکانیزم تصویربرداری SPECT

۲-۲-۱ سیستم تصویربرداری PET

توموگرافی تابش پوزیترون^۱ که تصویربرداری PET نیز نامیده می‌شود، یک روش تصویربرداری در پزشکی هسته‌ای است. تصویر برداری PET دارای دقت، حساسیت و کیفیت بالایی می‌باشد. این روش توسط تریپوگوسین^۲ و همکارانش در دهه ۱۹۷۰ معرفی شد [۴۳] که بطور خاص از خصوصیات واپاشی رادیونوکلئیدهایی که تابش کننده پوزیترون هستند استفاده می‌کند.

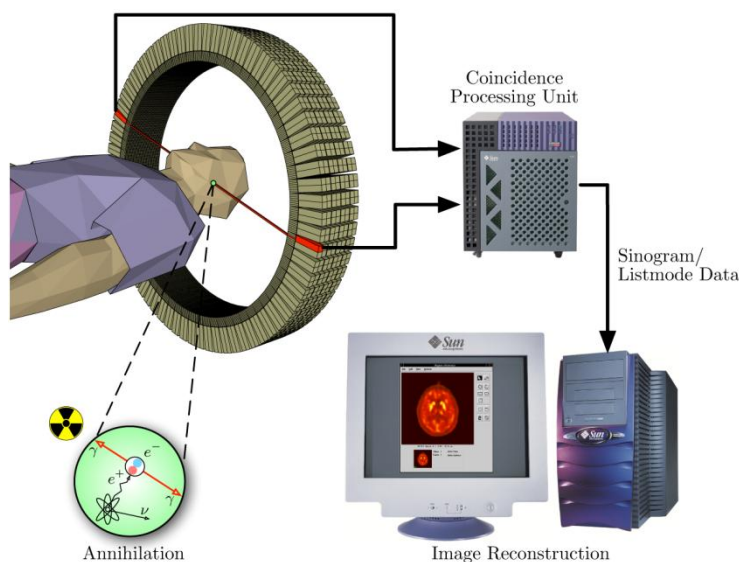
عناصر بیولوژیکی مانند (^{11}C ، ^{13}N ، ^{15}O) و رادیوهالوژن‌هایی مانند (^{18}F ، ^{76}Br ، ^{124}I) و رادیوفلزاتی مانند (Ga ، ^{64}Cu ، ^{66}Ga ، ^{68}Ga) برای گسیل پوزیترون در این نوع تکنیک تصویربرداری با توجه به نیمه عمر و انرژی پرتو

^۱Positron Emission Tomography (PET)

^۲Ter-Pogossian

گسیل دهنده و خصوصیات شیمیایی استفاده می‌شوند [۴۱]. PET می‌تواند اثرات دینامیکی مانند جریان خون را ردیابی، مشخص و ثبت نماید [۵۱]. در PET رادیونوکلئیدهای تابش کننده پوزیترون، پرتو گاما تابش نمی‌کنند بلکه پوزیترون انرژی اش را در اثر برهم‌کنش با محیط اطراف در طی مسافت کوتاهی از محل تولید از دست می‌دهد و از ترکیب با یک الکترون، به طور همزمان دو پرتو گاما با انرژی ۵۱۱ کیلو الکترون‌ولت تولید می‌کند. این دو پرتو گاما در جهت خلاف هم (180°) حرکت می‌کنند.

طرحواره‌ای از مکانیزم تصویر برداری PET در شکل ۱-۲ نشان داده شده است.



شکل ۱-۲ طرحواره‌ای از مکانیزم تصویر برداری PET.

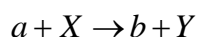
اکثر رادیونوکلئیدهایی که به وسیله سیکلوترون تولید می‌شوند دارای کمبود نوترون بوده و یکی از مدهای متداول در آنها برای رسیدن به پایداری گسیل پوزیترون میباشد. بنابراین روشن است که اکثر رادیونوکلئیدهای بکار رفته در PET محصول واکنش در شتابدهنده‌ها، خصوصاً سیکلوترون می‌باشد.

مقدمه

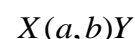
رادیونوکلئیدهای پزشکی هسته‌ای، اغلب بصورت مصنوعی تولید می‌شوند. واضح است که اساس تولید رادیونوکلئیدها، واکنش هسته‌ای است. در این بخش، به بررسی واکنش هسته‌ای و تعاریف لازم برای تولید رادیونوکلئیدها می‌پردازیم.

۱-۲ واکنش‌های هسته‌ای

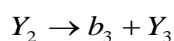
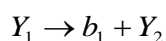
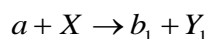
متداولترین نوع واکنش هسته‌ای، فرایندی است که در آن هسته‌ای پایدار به عنوان هدف، در معرض بمباران ذرات پرتابه (ورودی) قرار می‌گیرد و پس از اندرکنش با پرتو ورودی، ذراتی را به عنوان خروجی گسیل می‌کند و هسته‌هایی نیز به عنوان باقیمانده برجای می‌گذارد. بطور کلی یک واکنش هسته‌ای به صورت زیر نشان داده می‌شود:



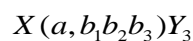
که در آن a ذره پرتابه و X هسته هدف و b ذره خروجی و Y هسته باقیمانده را نشان می‌دهند. برای اختصار می‌توان آن را اینگونه نوشت:



در واکنش‌هایی که بیش از دو ذره محصول داشته باشیم، می‌توان فرایند را به صورت یک رشته واکنش‌های دوتایی سریع در نظر گرفت.



که به اختصار آن را به صورت زیر می‌نویسیم.



پرتابه‌های گوناگونی می‌توانند به عنوان ذره ورودی مورد استفاده قرار گیرند. دامنه انرژی ذرات ورودی نیز می‌تواند بسیار گسترده باشد. از این میان، نوترون، پروتون، دوترون، آلفا و ندرتاً تریتیون و ${}^3\text{He}$ با انرژی‌های تا چند صد MeV؛ متداول‌ترین پرتابه‌هایی هستند، که در تولید رادیونوکلئیدهای پزشکی مورد استفاده قرار می‌گیرند.

نتیجه واکنش‌های هسته‌ای معمولاً تبدیل هسته‌ای پایدار به هسته‌ای رادیواکتیو است که می‌تواند یا بطور مستقیم برای تصویربرداری بکار رود و یا برای تولید رادیوایزوتوپ دیگری (ژنراتور) استفاده می‌شود [۶].

۲-۲ تعریف مقدار Q واکنش هسته‌ای

مقدار Q^۱ واکنش هسته‌ای X(a,b)Y را به صورت اختلاف بین انرژی‌های جنبشی نهایی و اولیه ذرات تعریف می‌کنیم:

$$Q \equiv T_f - T_i = (T_Y + T_b) - (T_X + T_a) \quad (1-2)$$

که در آن Tها انرژی جنبشی ذرات‌اند.

برطبق پایستگی انرژی نسبیتی کل، در این واکنش خواهیم داشت:

$$(m_X c^2 + T_X) + (m_a c^2 + T_a) = (m_Y c^2 + T_Y) + (m_b c^2 + T_b) \quad (2-2)$$

که در آن mها جرم‌های سکون ذرات هستند.

از روابط (۱-۲) و (۲-۲) خواهیم داشت:

$$Q = (m_i - m_f) c^2 = [(m_X + m_a) - (m_Y + m_b)] c^2 \quad (3-2)$$

اگر Q مثبت باشد، واکنش را انرژی‌زا و اگر منفی باشد آنرا انرژی‌گیر می‌خوانیم.

هرگاه واکنش به حالت‌های برانگیخته Y منجر شود، معادله مقدار Q، جرم-انرژی برانگیخته را نیز شامل می‌شود.

$$Q_{ex} = (m_X + m_a - m_Y^* - m_b) c^2 = Q_0 - E_{ex} \quad (4-2)$$

که در آن Q₀ مقدار Q مربوط به حالت پایه Y است و E_{ex} انرژی برانگیختگی بالاتر از حالت پایه است.

^۱Q-Value

مقدار Q برای واکنش‌هایی که دارای ذرات خروجی مرکب هستند بصورت زیر بدست می‌آید.

$$Q' = Q - B_b \quad (5-2)$$

که در آن B_b انرژی بستگی ذره مرکب b می‌باشد.

۲-۳ انرژی آستانه واکنش^۱

در واکنشی که دارای مقدار Q منفی باشد (انرژی‌گیر)، برای انرژی ذره ورودی T_a یک حد پایینی وجود دارد که در کمتر از آن واکنش صورت نمی‌گیرد.

انرژی آستانه واکنش‌های با Q منفی به صورت زیر بدست می‌آید:

$$T_{th} = (-Q) \frac{m_Y + m_b}{m_Y + m_b - m_a} = (-Q) \frac{m_X + m_a}{m_X} \quad (6-2)$$

برای واکنش‌های با Q مثبت (انرژی‌زا) هیچ حد پایینی برای T_a وجود ندارد و حتی برای انرژی‌های بسیار کوچک نیز واکنش انجام خواهد شد.

۲-۴ سطح مقطع واکنش

در تولید رادیوایزوتوپ‌ها معمولا از کمیت سطح مقطع تولید^۲ (سطح مقطع مجموع^۳) استفاده می‌شود که بصورت زیر تعریف می‌شود:

مجموع سطح مقطع‌های همه کانال‌های مختلف واکنش که بر روی یک هسته هدف رخ می‌دهد و منجر به تولید مستقیم^۴ هسته نهایی مفروض می‌شود [۶].

در صورتی که ماده هدف، بطور طبیعی دارای چندین ایزوتوپ مختلف باشد و کانال‌های مختلف در آنها به تولید یک رادیوایزوتوپ نهایی یکسان منجر شود، مسئله پیچیده‌تر می‌شود. در این صورت سطح مقطع تولید انباشته هر ایزوتوپ را با توجه به نسبت فراوانی هر ایزوتوپ با هم جمع می‌کنیم و کمیتی با عنوان

¹ Energy threshold of reaction

² Production cross section

³ Integral cross section

⁴ Direct production

سطح مقطع تولید عنصری^۱ بدست می‌آید. احتمال وقوع یک واکنش معین برای کل هسته‌های هدف برابر است با:

$$\frac{S}{A} = \frac{J}{I} = P \quad (7-2)$$

که در آن A مساحت برگه هدف که در معرض برخورد باریکه ذرات ورودی قرار دارد، S مساحت نسبت داده شده به کل هسته‌های هدف در رابطه با واکنش مورد نظر در همین مساحت A از برگه هدف، I شار ذرات ورودی (تعداد ذرات عبوری از واحد سطح عمود بر بیم در واحد زمان) و J شار ذرات خروجی حاصل از آن واکنش معین می‌باشد.

در واقع این دو نسبت دو بیان مستقل از میزان احتمال وقوع یک واکنش مشخص برای تمام هسته‌های هدف است. اگر ضخامت برگه هدف t و تعداد هسته‌ها در واحد حجم برگه هدف ρ باشد در آن صورت تعداد کل هسته‌ها در برگه هدف برابر است با $N = \rho t A$ با فرض خیلی نازک بودن برگه هدف و عدم همپوشی آنچنانی هسته‌های هدف بریکدیگر، تعداد هسته‌ها در واحد سطح برگه هدف چنین خواهد بود.

$$n = \frac{N}{A} = \frac{\rho t A}{A} = \rho t \quad (8-2)$$

از سوی دیگر از رابطه (7-2) داریم $S = \frac{AJ}{I}$ که در آن S مساحت نسبت داده شده به کل هسته‌های هدف برای واکنشی معین است. می‌توان با تقسیم این مساحت بر کل هسته‌های هدف در سطح A برگه یعنی N ، مساحت هر هسته هدف را برای وقوع یک واکنش معین بدست آورد. این مساحت را سطح مقطع مؤثر هسته هدف برای انجام واکنشی معین می‌نامند و آنرا بطور کلی با حرف (σ) نشان می‌دهند و برابر است با:

$$\sigma = \frac{S}{N} = \frac{AJ}{NI} = \frac{J/I}{N/A} = \frac{J/I}{n} = \frac{J}{nI} \quad (9-2)$$

⁵Elemental production cross section

از رابطه $\sigma = \frac{J}{nI}$ چنین برمی آید که در واقع سطح مقطع σ ، مساحتی فرضی و مجازی است که بر هر هسته هدف در برگه نسبت داده می شود تا نشانی از احتمال وقوع آن واکنش مشخص برای هر هسته هدف در واحد برگه باشد. زیرا n تعداد کل هسته های موجود در واحد سطح برگه است.

۲-۵ تابع برانگیختگی

نمودار سطح مقطع واکنشهای هسته ای بر حسب انرژی در بسیاری از کاربردها مورد توجه قرار می گیرد. این داده ها در بسیاری از زمینه ها از قبیل تولید رادیوایزوتوپ و اساساً برای کاربردهای پزشکی مورد استفاده قرار می گیرند.

برای بررسی سطح مقطع واکنشها یا تعیین احتمال واکنش، معمولاً دو روش وجود دارد:

- ۱- روش محاسباتی: محاسبه سطوح مقطع تولید واکنشهای هسته ای مختلف، در بازه های انرژی گوناگون، برای پرتابه های رایج و هدف های متنوع، با استفاده از مدل های واکنش هسته ای (کدهای کامپیوتری)
- ۲- روش تجربی یا آزمایشی: یک سلسله آزمایشات توسط افراد گوناگون از نقاط مختلف جهان انجام شده و اغلب نتایج این آزمایشات با یکدیگر و نتایج حاصل از کدهای کامپیوتری (روش محاسباتی) مقایسه می گردد

به دلیل اینکه مدل ها و معادلات مربوط به محاسبات واکنش های هسته ای، برای پرتابه ها و هدف های گوناگون در انرژی های مختلف بسیار پیچیده و طولانی است، لذا استفاده از کدهای کامپیوتری برای سهولت، سرعت و دقت در این زمینه، الزامی است. این گونه کدها می توانند برای تولید داده های هسته ای در مواردی که داده های تجربی یا ناقص و کم اعتباراند و یا اساساً وجود ندارد، مورد استفاده قرار گیرند. علاوه بر این موارد، این کدها می توانند برای بررسی ارتباط بین مدل های واکنش هسته ای و داده های تجربی نیز بکار روند.

برنامه های کامپیوتری بسیاری برای انجام محاسبات مربوط به واکنش های هسته ای خاص بر مبنای مدل های گوناگون طراحی شده است. اما برای تولید رادیونوکلئیدها به برنامه کامپیوتری نیاز است، که بتواند یک

شبیه‌سازی یکپارچه، از کانال‌های گوناگون واکنش هسته‌ای در انرژی‌های مختلف، بر پایه مدل‌های هسته‌ای ایجاد کند.

۲-۵-۱ معرفی اجمالی کد TALYS

کد TALYS یک برنامه کامپیوتری است که سطح مقطع را بر اساس مدل‌های مختلف هسته‌ای محاسبه می‌کند. این کد طی همکاری دو مرکز NRG Petten هلند و CEA Bruyères-le-Châtel فرانسه توسط دکتر کونینگ (Koning) و همکاران نوشته شده است [۷].

نسخه TALYS-1.0 که با فرترن ۷۷ نوشته شده است، حدوداً دارای ۴۰۰۰۰ خط برنامه می‌باشد. این کد در محیط سیستم عامل لینوکس استفاده می‌شود. برخی از خصوصیات کد TALYS به اختصار جمع‌آوری شده است، که عبارت است از:

۱- استفاده از ذرات متنوع به عنوان پرتابه مانند: نوترون، پروتون، دوترون، تریتون، ^3He ، آلفا و حتی تابش گاما و بازه انرژی -گسترده $1\text{ keV}-200\text{ MeV}$ برای پرتابه‌ها، در واکنش‌هایی که سطح مقطع کل آن با این کد محاسبه می‌شود.

۲- پوشش نسبتاً کاملی از تمامی هسته‌های موجود به عنوان هدف $12 < A < 339$ و $3 < Z < 110$

۳- محاسبه سطح مقطع‌های کلی و جزئی، طیف انرژی، توزیع زاویه‌ای، طیف دیفرانسیلی دبل و پس‌زنی.

۴- محاسبه توابع برانگیختگی برای هسته‌های باقی‌مانده که شامل سطح مقطع‌های حالت‌های ایزومری می‌باشند.

۵- محاسبه سطح مقطع تولید واکنش‌های فوتونی.

۶- محاسبه سرعت واکنش‌های اخترفیزیک هسته‌ای.

۷- استفاده از مدل‌های مختلف برای فرایندهای هسته مرکب، پیش‌تعادلی، مستقیم و همچنین استفاده از پارامترهای پدیده‌شناختی و میکروسکوپی برای مدل اپتیکی.

۲-۶ توان ایستاندگی^۱ و برد^۲

اگرچه پراکندگی کولنی ذرات باردار توسط هسته‌ها (پراکندگی رادرفورد) فرایندی مهم در فیزیک هسته‌ای است؛ تاثیر آن بر کاهش انرژی ذره باردار، در طی عبور از یک ماده، اندک است. از آنجا که هسته‌ها فقط کسر بسیار کوچکی در حدود 10^{-15} از حجم اتمها را اشغال می‌کنند، احتمال برخورد ذره با الکترون، تقریباً 10^{15} بار بیش از احتمال برخورد با هسته است. بنابراین سازوکار غالب در کاهش انرژی ذرات باردار، پراکندگی کولنی آنها با الکترونهای اتمی ماده است. رابطه نظری بین برد و انرژی را می‌توان از یک محاسبه فرایند برخورد کوانتوم مکانیکی، که برای اولین بار در سال ۱۹۳۰ توسط هانس بته انجام شد، به دست آورد. این محاسبه مقدار افت انرژی در واحد طول را که به توان ایستاندگی یا قدرت توقف معروف است، به صورت زیر به دست می‌دهد:

$$\left(\frac{dE}{dx}\right) = \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\right)^2 \frac{4\pi z^2 N_0 Z \rho}{mc^2 \beta^2 A} \left[\ln\left(\frac{2mc^2 \beta^2}{I}\right) - \ln(1-\beta^2) - \beta^2 \right] \left(\frac{MeV}{cm}\right) \quad (10-2)$$

که در آن $v = \beta c$ سرعت ذره، ze بار الکتریکی ذره، Z, A و ρ به ترتیب عدد اتمی، وزن اتمی، و چگالی ماده مورد گذار، N_0 عدد آووگادرو، و m جرم الکترون است. پارامتر I انرژی برانگیزش متوسط الکترونهای اتمی است که می‌توان آن را با متوسط‌گیری بر روی کلیه فرآیندهای یونش و برانگیختگی محاسبه کرد. معمولاً ساده تر است که دو طرف رابطه (۱۰-۲) به ρ تقسیم کنند. پس طرف راست تنها به ماده بستگی پیدا خواهد کرد، نه به دما یا حالت فیزیکی آن. از طرفی دیگر X در سمت چپ به ρX تبدیل می‌شود (جرم واحد سطح) که معمولاً در اندازه گیری تجربی (با تعیین وزن و سطح)، آسانتر از خود X تعیین می‌شود.

عملاً به کمیت $\frac{1}{\rho} \frac{dE}{dx}$ با واحد $\left[\frac{MeV}{g/cm^2}\right]$ توان ایستاندگی جرمی نیز می‌توان اطلاق کرد.

برد را می‌توان با انتگرال گیری از معادله (۱۰-۲) در گستره انرژی ذره بدست آورد:

$$R = \int_T^0 \left(-\frac{dE}{dx}\right)^{-1} dE \quad (11-2)$$

¹ Stopping power

² Range