

На правах рукописи

ТОРКАМАНИ Али

**ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ПАРАЛЛЕЛЬНЫХ
ВЫЧИСЛЕНИЙ И МЕТОДА МОНТЕ-КАРЛО
ДЛЯ ОПТИМИЗАЦИИ ПРОЦЕССА
ПОЛУЧЕНИЯ МЕДИЦИНСКОГО
МОЛИБДЕНА 99 С ПОМОЩЬЮ
ЭЛЕКТРОННОГО УСКОРИТЕЛЯ**

Специальность 05.13.18 —
«Математическое моделирование, численные методы и
комплексы программ»

Автореферат
диссертации на соискание учёной степени
кандидата технических наук

Долгопрудный — 2021

Работа выполнена в федеральном государственном автономном образовательном учреждении высшего образования «Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)».

Научный руководитель: **Бугаев Александр Степанович** - академик РАН, профессор, доктор физико-математических наук

Ведущая организация: ФГБОУ ВО «МИРЭА-Россицкий технологический университет»

Защита состоится 29 декабря 2021 г. в 11 часов на заседании диссертационного совета ФЭФМ.05.13.18.001 на базе ФГАОУ ВО Московский физико-технический институт (национального исследовательского университета) по адресу: 141701, Московская область, г. Долгопрудный, Институтский переулок, д.9.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)»

Работа представлена « ___ » _____ 2021 г. в Аттестационную комиссию Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)» для рассмотрения советом по защите диссертаций на соискание ученой степени кандидата наук в соответствии с п. 3.1 ст. 4 Федерального закона «О науке и государственной научно-технической политике».

Общая характеристика работы

Актуальность темы. Радионуклиды являются незаменимой и очень важной компонентой современной ядерной медицины, получающей все большее распространение при диагностике и терапии разнообразных заболеваний.

Производство $Mo-99/Tc-99m$ в Иране начинает свою историю в 1980 году и за последние три десятилетия было произведено значительное количество тестовых комплектов на основе $Tc-99m$ для однофотонной эмиссионной компьютерной томографии (single photon emission computed tomography - SPECT).

Достижения радиофармацевтической отрасли в Иране в настоящее время находятся на современном международном уровне, что подтверждается поддержкой Национального радиофармацевтического проекта, стартовавшего в 2010 году, МАГАТЭ. Продукция прошла клинические испытания и заняла прочное место на международном рынке.

^{99m}Tc используется более чем в 80% диагностических процедур и как правило его получают из $^{99}Mo/^{99m}Tc$ доставляя далее в специальных контейнерах в специализированные медицинские диагностические центры.

^{99m}Tc может использоваться при диагностике множества заболеваний таких, как злокачественные новообразования, проблемы с костями, сердечные заболевания, заболевания печени и др.

Одним из популярных способов получения медицинского технеция является облучение специальной мишени с тяжелой водой электронным пучком высокой энергии (от 5 Mev до 45 Mev).

При этом форма и размер мишени определяются как характеристиками используемого электронного ускорителя, так и составом используемых материалов.

Оптимизация размеров и геометрии мишени традиционно производится при помощи математического моделирования взаимодействия в материалах мишени электронных пучков высокой энергии, нейтронных пучков и потоков гамма квантов.

Возможность существенно повысить характеристики процесса получения медицинского ^{99m}Tc определяет актуальность данной работы.

Целью данной работы является определение оптимальной формы и размеров мишени, используемой для получения технеция $99m$ путем облуче-

ния молибдена ^{99}Mo электронным пучком высокой энергии формируемым в линейном электронном ускорителе Rodotron при одновременном производстве ^{99}Mo двумя способами - на основе фотонейтронного и нейтронного захвата.

Для достижения поставленной цели необходимо было решить следующие **задачи**:

1. Обзор существующего уровня техники в области производства .
2. Разработка модели взаимодействия электронного пучка высокой энергии, формируемого при взаимодействии пучка нейтронов и гамма квантов.
3. Разработка эскиза вольфрамовой емкости - мишени для тяжелой воды.
4. Оптимизация параметров мишени с учетом требований, предъявляемых геометрией и энергией электронного пучка в используемом линейном электронном ускорителе.
5. Разработка программного комплекса для управления моделированием процессов производства технеция с помощью кластерного вычислителя
6. Исследование эффективности предложенных проектных и технологических решений.

Основные положения, выносимые на защиту:

1. Модель взаимодействия электронного пучка высокой энергии, потока нейтронов и гамма квантов на основе применения метода Монте Карло.
2. Оптимальная форма и размер мишени, используемой для получения медицинского технеция при взаимодействии электронного пучка высокой энергии с мишенью
3. Программный комплекс управления данными для моделирования процесса взаимодействия электронного пучка высокой энергии с мишенью при получении медицинского технеция

Научная новизна:

1. Впервые проведено математическое моделирование взаимодействия электронного пучка высокой энергии, потока нейтронов и гамма квантов на основе применения метода Монте Карло для получения

медицинского технеция с помощью линейного ускорителя электронов

2. Получены параметры для оптимальной формы и размеров сборки - мишени облучаемой электронным пучком .
3. Предложен метод одновременного использования двух производственных каналов, что может привести к увеличению выхода продукции ^{99}Mo : производство через $^{100}\text{Mo}(\gamma, n) \rightarrow ^{99}\text{Mo}$ и $^{98}\text{Mo}(n, \gamma) \rightarrow ^{99}\text{Mo}$.

Практическая значимость работы определяется возможностью использования результатов проведенных исследований для оптимизации параметров установок получения медицинского Mo^{99} .

Достоверность полученных результатов обеспечивается их верификацией на основе экспериментов по получению медицинского ^{99}Mo в линейном электронном ускорителе Rodotron ТТ200.

Результаты находятся в соответствии с результатами, полученными другими авторами.

Апробация работы. Основные результаты работы доложены на World Congress on Medical Physics and Biomedical Engineering May 26-31, 2012, Beijing, China [0], 14th International Congress on Neutron Capture Therapy, Buenos Aires [0], 15th International Congress on Neutron Capture Therapy, Tsukuba Japan [0], The 15th IEEE International Conference on Application of Information and Communication Technologies AICT2021. [0].

Личный вклад. Автор принимал активное участие в работах по разработке математической модели, ее программной реализации, подготовке исходных данных и проведению моделирования.

Основные результаты по теме диссертации изложены в статьях [0].

На разработанный программный комплекс "Программный комплекс для оптимизации геометрической формы и размера мишени при получении медицинского Mo и Tc " получено свидетельство Роспатента о регистрации программы для ЭВМ [0].

Публикации. Основные результаты по теме диссертации изложены в 4 печатных изданиях, 3 из которых изданы в журналах, рекомендованных ВАК, 1 — в тезисах докладов.

Содержание работы

Во Введении обосновывается актуальность исследований, проводимых в рамках данной диссертационной работы, приводится обзор научной литературы по изучаемой проблеме, формулируется цель, ставятся задачи работы, сформулированы научная новизна и практическая значимость представляемой работы.

Первая глава содержит обзор литературы, описывающей применение Mo^{99}/Tc^{99m} в ядерной медицине, существующие технологии получения Mo^{99}/Tc^{99m} и применения методов математического моделирования для оптимизации параметров установок по получению Mo^{99}/Tc^{99m} на базе электронных ускорителей.

Вторая глава посвящена описанию технических особенностей линейного электронного ускорителя Rhodotron ТТ200, влияющих на процесс получения медицинского технеция на основе молибдена Mo^{99} .

Rhodotron - это разновидность мощного и высокоэнергетического ускорителя электронов с одним резонатором, основанный на принципе рециркуляции пучка электронов через единственный коаксиальный резонатор. Пучок проходит несколько раз по разным зонам усиления в средней полости. Каждый раз, когда электрон пересекает полость, его энергия увеличивается на 1 МэВ. Далее пучок отклоняется магнитной системой и отправляется обратно в ускоряющую полость по траекториям, имеющим форму цветка. Таким образом, для получения 10 МэВ требуется десять проходов и девять процедур отклонения.

Родотрон состоит из следующих основных компонентов: электронная пушка, резонатор, отклоняющие магниты, радиочастотная система, система охлаждения, вакуумная система и система доставки пучка. Существует пять промышленных моделей ускорителей Rhodotron (ТТ100, ТТ200, ТТ300, ТТ400, ТТ1000), обеспечивающих формирование электронных пучков мощностью от 35 до 700 кВт при энергии 10 МэВ. Ускорители производятся на предприятии ИВА в Бельгии. Резонансная частота резонатора составляет 215 МГц для Rhodotron ТТ100 и 107,5 МГц для других моделей.

На рисунке 1 показан внешний вид ускорителя Rhodotron ТТ200.



Рис. 1 — Ускоритель Rhodotron TT200.

В Третьей главе приведено описание математической модели процесса взаимодействия электронного пучка высокой энергии, потока нейтронов и гамма - квантов.

Мы использовали подход к моделированию, основанный на методе Монте-Карло, для расчета динамики образования высокоэнергетических нейтронов и фотонов в мишени.

Методы Монте-Карло представляют собой широкий спектр вычислительных алгоритмов, которые опираются на случайную выборку для получения численных результатов.

Основная концепция заключается в использовании случайности для решения задач, которые в принципе могут быть детерминированными. Monte Carlo N-Particle extended (MCNPX) - это универсальная библиотека для расчета переноса излучения на основе метода Монте-Карло, которая применима для всех частиц, участвующих во взаимодействии при всех требуемых энергиях. MCNPX представляет собой новое поколение решений для моделирования уравнений переноса методом Монте-Карло, первые версии которых появились в Лос-Аламосской Национальной Лаборатории более пятидесяти лет назад.

Подход к моделированию уравнений переноса в библиотеке MCNP обладает той особенностью, что вычисления выполняются путем отслеживания каждой отдельной частицы. Результаты моделирования при этом используются для получения статистически значимых результатов для всех остальных частиц.

История поведения взаимодействующих частиц не зависит друг от друга (нелинейными эффектами мы пренебрегаем).

Таким образом, при применении MCNP/MCNPX общее количество взаимодействующих частиц может быть разделено на более мелкие подмножества (каждая небольшая часть вычислений выполняется на отдельном процессоре вычислительного кластера), а затем все результаты обчетов объединяются для получения статистически достоверных результатов. Использование метода Монте-Карло требует значительного вычислительного времени из-за различного взаимодействия с объектами частиц и поведения частиц в окружающей среде.

В нашей работе моделирование выполняется путем параллельной обработки для достижения высокой скорости обработки.

Одной из сильных сторон решения MCNPX является возможность параллельной обработки процессов переноса.

В нашей работе мы используем компьютерный кластер (NSTRI Computer Cluster) для расчета.

В **Четвертой главе** приведено описание результатов моделирования процесса производства ^{99}Mo на основе линейного электронного ускорителя.

Среди материалов, перечисленных в таблице 1, вольфрам и W и тантал Ta являются подходящими по причине их высокой плотности и соответствующих термомеханических свойств, а также низкой стоимости по сравнению с рением Re или ураном U. На рисунке 2 показано сравнение величины выхода между вольфрамом и танталом выход фотонов.

Таблица 1 — Перечень свойств материалов для производства электрон/фотонного конвертора

Элемент	Стабильный изотоп (mass number)	Теплопроводность ($W/m \times K$)	Теплостойкость. at 25°C
$_{73}Ta$	180,181	57.5	6.3
$_{74}W$	182.183.184.186	173.0	4.5
$_{75}Re$	185	48.0	6.2
$_{82}Pb$	204,206,207,208	35.3	28.9
$_{92}U$	238	27.5	13.9

Для дальнейшей работы было важно рассчитать выход фотонов высоких энергий (более 9 МэВ) – Рис.2.

Для достижения максимального эффективного потока фотонов также необходимо было определить оптимальную толщину мишени.

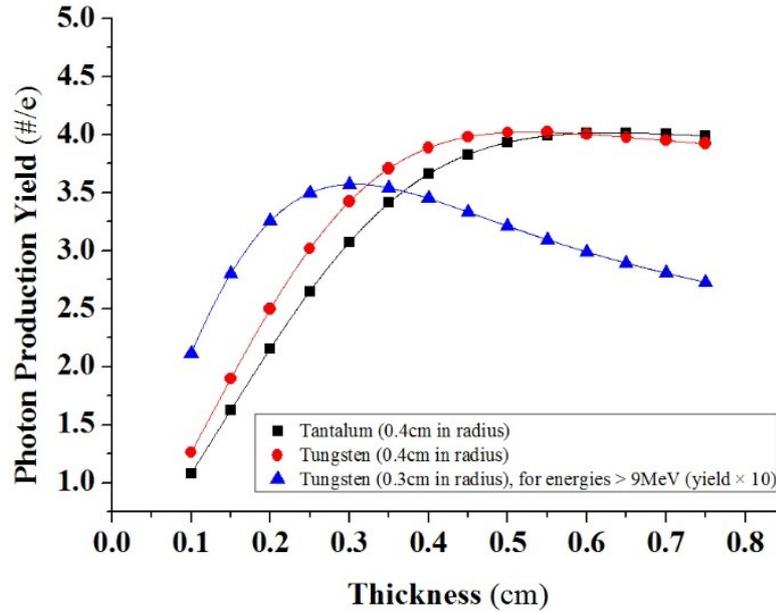


Рис. 2 — Величина выхода фотонов для W и Ta при размере мишени 4 mm, а также для мишени из W при энергии электронов более 9 MeV.

На основе приведенной оценки была спроектирована мишень из вольфрама W радиуса 0,5 см и толщины 0,3 см. Полученные нами результаты для геометрии фотонного конвертера из вольфрама W согласуются с аналогичными данными других исследовательских лабораторий (Таблица 2).

Таблица 2 — Зависимость выхода фотонов от энергии пучка электронов

Энергия электронов T_0 (MeV)	Средний выход фотонов $\gamma_0, (g\ cm^{-2})$
60	16.5
50	15.3
40	13.8
30	12.0
20	9.66
15	8.14
10	6.23
5	3.69
2	1.61

Для того, чтобы оптимизировать толщину вольфрамовой мишени, было проведено моделирование с помощью разработанной программы подготовки данных и библиотеки MCNPX для различных значений толщины от 0,1 до 0,2 см.

Источник электронов рассматривался нами, как точечный источник, находящийся на расстоянии 1 см от вольфрамовой мишени. Размеры вольфрамовой мишени определялись геометрией выходного канала ускорителя Rhodotron с шириной 2 см и длиной 100 см.

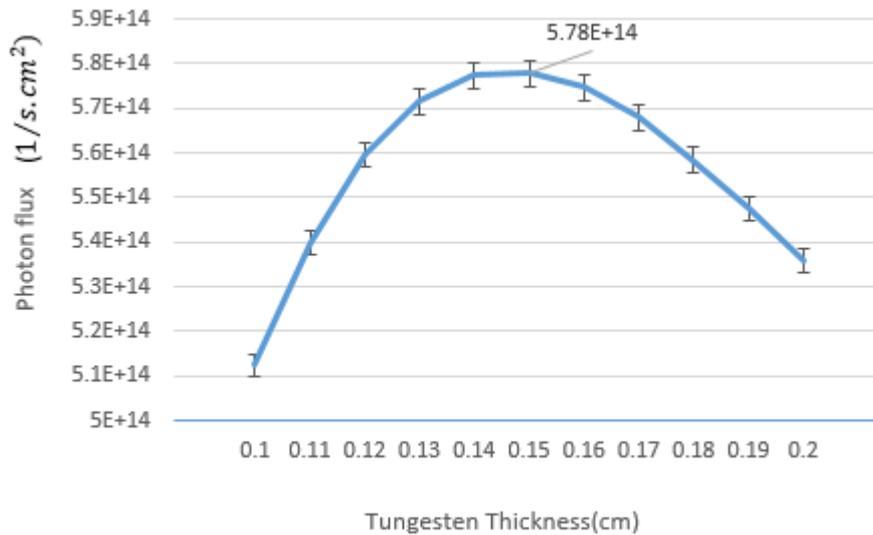


Рис. 3 — Зависимость выхода фотонов от толщины вольфрамовой мишени при энергии пучка 10 Mev.

Результаты моделирования для геометрии, согласованной с выходным каналом Rhodotron, и с оптимальными размерами толщины мишени из вольфрама, будут дают $F_2 = 9,24e^{-3}(1/sm^2)$. В этом случае величина поверхностного потока фотонов для тока Rhodotron 10 мА составляет $5,775e^{14}(1/sm^2)$.

По причинам, уже упомянутым выше, энергия электронного пучка считалась равной 10 МэВ. Конструкция была согласована с геометрией выходного канала пучка ускорителя Rhodotron.

Энергия используемого нами ускорителя недостаточна для производства посредством фотонейтронной реакции на пластинах ^{100}Mo . Но при этом, участвуя в фотонейтронной реакции с тяжелой водой, фотоны порождаемые тормозным (bremsstrahlung) излучением могут производить требуемый поток нейтронов.

Эти нейтроны могут участвовать в реакции захвата нейтронов на ^{98}Mo . На этом этапе методом моделирования было проверено распределение нейтронного потока в резервуаре с тяжелой водой по размерам $40cm \times 40cm \times 50cm$.

Упомянутые размеры были выбраны в соответствии с геометрией Rhodotron.

На глубине 10 см от верха резервуара размещен преобразователь из W размером $48\text{см} \times 3\text{см} \times 0,15\text{см}$. Сам резервуар построен из толстого углеродного слоя (играющего роль отражателя нейтронов), который помещен между двумя тонкими стальными слоями.

Схематический вид этой системы и первичные результаты распределения нейтронов показаны на рис. 4 и 5 соответственно.

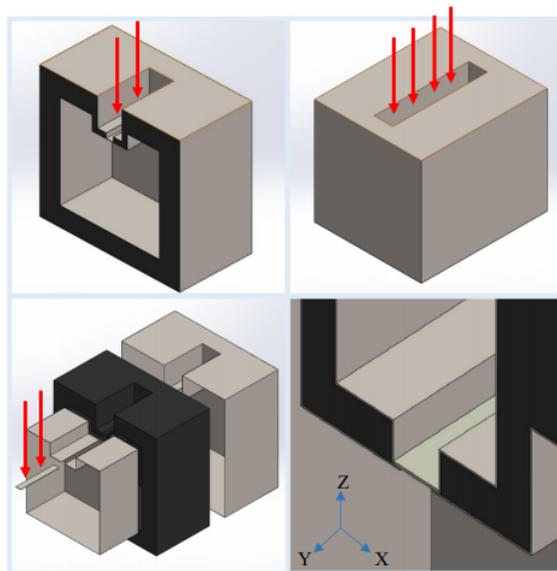


Рис. 4 — Конструкция емкости для тяжелой воды.

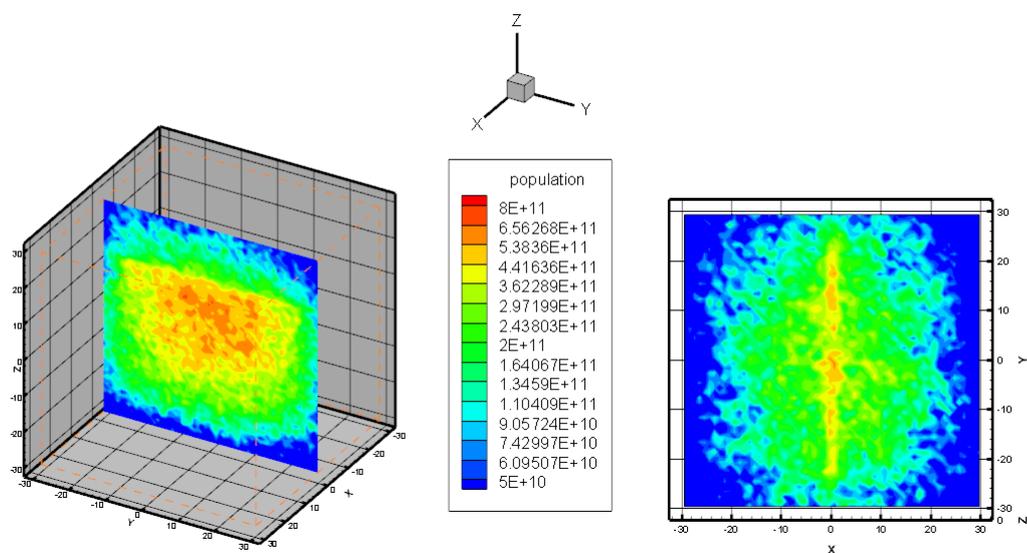


Рис. 5 — 3D и 2D схема распределения нейтронов в емкости для D_2O .

Объемный поток нейтронов в емкости для тяжелой воды составил $\phi_{n1} = 5.556e^{10}(1/s.cm^2)$ с относительной ошибкой $\Delta\phi/\phi = 0.009$

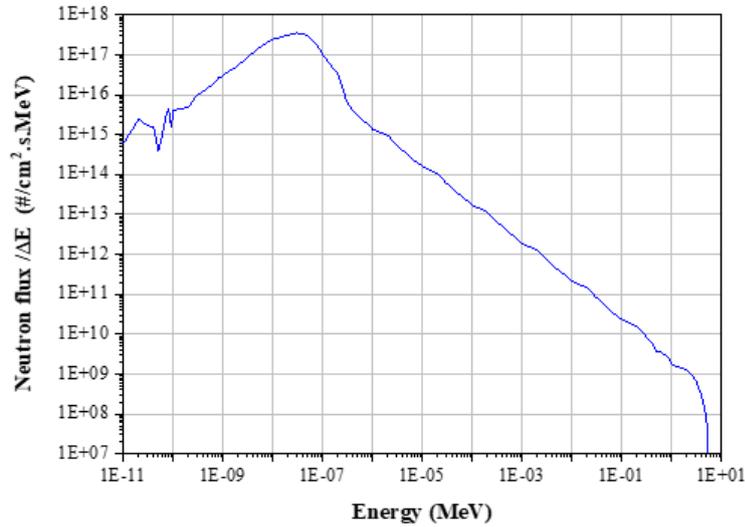


Рис. 6 — Энергетический спектр потока нейтронов в тяжелой воде для толщины графитового слоя 8 см

Поток гамма квантов на вольфрамовой мишени составляет $\phi_{ph} = 1.154e^{15}(1/cm^2s)$ с относительной ошибкой $\Delta\phi/\phi = 0.003$.

Далее мы моделировали задачу взаимодействия в мишени представляющей собой молибденовую пластину, помещенную в емкость с тяжелой водой, состоящей из смеси изотопов молибдена:

а) ^{100}Mo обеспечивающего реакцию $^{100}Mo(\gamma,n) \rightarrow ^{99}Mo$ (фотонейтронная реакция) .

б) ^{98}Mo обеспечивающего реакцию $^{98}Mo(n,\gamma) \rightarrow ^{99}Mo$ (поглощение нейтронов).

с) природный молибден.

В **Пятой главе** приведено описание процесса оптимизации гибридной конструкции мишени для получения $Mo99$ на основе электронного ускорителя.

Приведены результаты моделирования пучков фотонов и нейтронов в резервуаре с тяжелой водой и процесса производства ^{99}Mo с использованием ускорителя электронов Rhodotron ТТ200 на 10 МэВ со средним током пучка 10 мА.

Использован метод Монте-Карло для моделирования производства ^{99}Mo в мишенях ^{98}Mo с помощью $^{98}\text{Mo}(n, \gamma) \rightarrow ^{99}\text{Mo}$ реакции и производства ^{99}Mo в мишенях ^{100}Mo с помощью реакции $^{100}\text{Mo}(\gamma, n) \rightarrow ^{99}\text{Mo}$.

Были использованы полученные выше результаты для моделирования процесса создания соответствующего нейтронного потока для участия в реакции захвата нейтронов через $^{98}\text{Mo}(n, \gamma) \rightarrow ^{99}\text{Mo}$. В этом случае оптимизированный электронно-фотонный преобразователь и пластины ^{98}Mo располагались в емкости с тяжелой водой.

На этом этапе мы проектируем и моделируем преобразователь электронного пучка в фотоны тормозного излучения. Среди материалов, перечисленных в Таблице 1, W и Ta подходят для использования в качестве материала для такого источника гамма квантов по причине их высокой плотности и соответствующих термомеханических свойств, а также низкой стоимости по сравнению с Re или U.

Была рассмотрена мишень из вольфрама (W) и для нее методом моделирования получена оптимизированная геометрия. Далее для достижения максимального эффективного потока фотонов необходимо было определить оптимальную толщину преобразователя.

Чтобы оптимизировать толщину вольфрамовой мишени, было проведено моделирование для различных значений толщины в диапазоне от 0,1 до 0,2 см.

Моделирование на основе условий Rhodotron и с оптимальной толщиной вольфрама (0,15 см) будет $F_2 = 9,24e^{-3}(1/cm^2)$. В этом случае величина поверхностного потока фотонов для тока 10 мА Rhodotron составляет $5,78e^{14}(1/cm^2)$ с относительной погрешностью = 0,001 (рисунок 3).

Исследовано распределение нейтронного потока в резервуаре с тяжелой водой по размерам $40\text{см} \times 40\text{см} \times 50\text{см}$. Упомянутые размеры были выбраны из-за размеров выходного канала Rhodotron, а также из-за наличия достаточного и надежного места для изучения поведения нейтронов. На глубине 10 см от верха резервуара размещен преобразователь W размером $48\text{см} \times 3\text{см} \times 0,15\text{см}$.

Для предложенной конструкции были исследованы различные материалы (графит, бериллий, сталь) в качестве предлагаемых отражателей нейтронов. Согласно результатам, показанным на рисунке 7, бериллий имеет лучшее

отражение. Но из-за проблем доступности, а также экономической эффективности было решено использовать графит. Хотя увеличение толщины графита увеличивает поток отраженных нейтронов, для толщины более 8 см он существенно не увеличится. Моделирование показывает, что кривая потока становится насыщенной. Таким образом, в качестве требуемой была выбрана толщина графитового замедлителя 8 см.

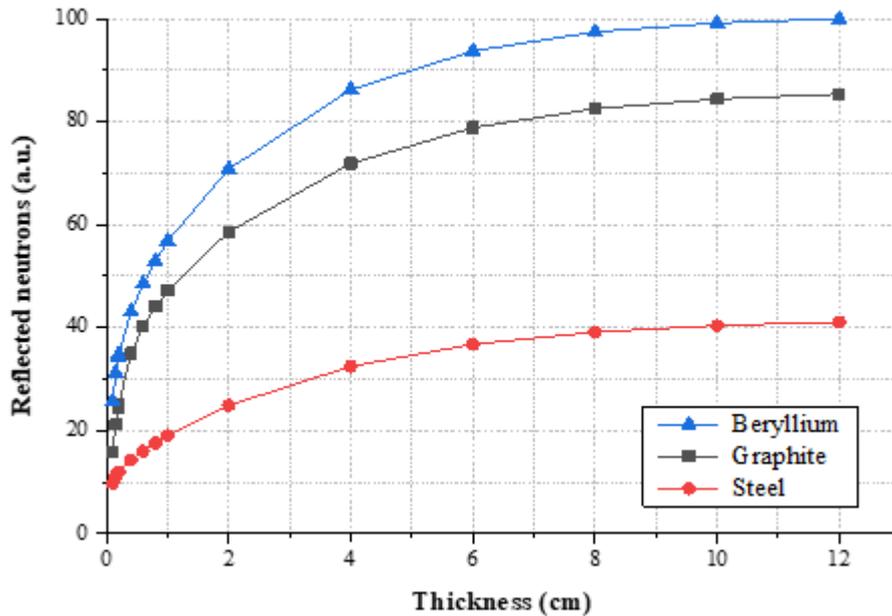


Рис. 7 — Сравнение потока отраженных нейтронов для замедлителя различной толщины из бериллия, графита и стали.

Сам резервуар построен из толстого углеродного слоя (как отражатель нейтронов), который помещен между двумя тонкими стальными слоями. В качестве отражателей были исследованы различные толщины графита. Увеличение толщины графитового слоя в качестве отражателя также увеличивает количество потока фотонов и нейтронов, но незначительно (Таблица 3).

Предполагаемая структура этого резервуара с тяжелой водой и графитового слоя в качестве оболочки отражателя нейтронов разработана в коде MCNPX, как показано на рисунке 4. Средний объемный поток нейтронов и фотонов в резервуаре с тяжелой водой, соответственно, равен $\phi_n = 5,8956e^{10}(1/\cdot cm^2)$ (с относительной погрешностью = 0,09), и $\phi_{ph} = 3.4966e^{13}(1/s \cdot cm^2)$ (с относительной погрешностью = 0,002). Кроме того,

Таблица 3 — Средний поток нейтронов и фотонов в баке с тяжелой водой (для геометрии и параметров Rhodotron ТТ200)

Толщина графита, см	Поток нейтронов ($1/s \cdot cm^2$)	Погрешность	Поток фотонов ($1/s \cdot cm^2$)	Погрешность
2	$4.14E10$	0.0852	$3.41E13$	0.0019
4	$5.17E10$	0.0887	$3.46E13$	0.0019
6	$5.33E10$	0.0865	$3.48E13$	0.0019
8	$5.90E10$	0.0899	$3.50E13$	0.0019
10	$6.02E10$	0.0892	$3.51E13$	0.0019
12	$6.92E10$	0.0864	$3.52E13$	0.0019

был рассчитан средний поток нейтронов в легкой воде (с тем же объемом), который равен $\phi_n = 1.4589e^7(1/s \cdot cm^2)$.

На рисунке 6 показан энергетический спектр нейтронов в резервуаре с тяжелой водой (с 8-сантиметровым слоем графита в качестве отражателя).

Пространственное распределение потока нейтронов в резервуаре с тяжелой водой в направлении электронного пучка показано на рисунке 8.

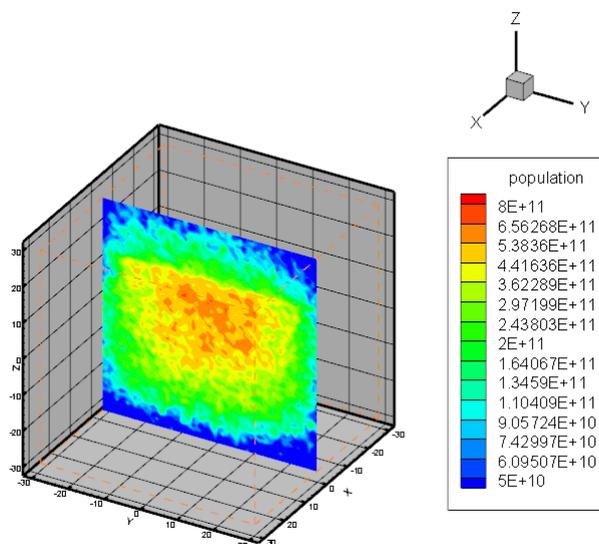


Рис. 8 — Трехмерная схема распределения нейтронов в резервуаре с тяжелой водой (без молибденовой мишени) вдоль вольфрамовой мишени

Мы провели моделирование с разными энергиями электронного луча. Краткие результаты представлены в таблице 4. В этой таблице поток нейтронов и поток фотонов представлены для энергии электронного пучка 10, 15, 20, 25, 30 МэВ. Сравнивая результаты, можно увидеть, что при увеличении

величины энергии электронов создается поток нейтронов большей интенсивности.

Таблица 4 — Поток нейтронов и поток фотонов в резервуаре с тяжелой водой для различных энергий электронного пучка и толщины графита 8 см

Энергия пучка электронов MeV	Поток нейтронов ($1/s \cdot cm^2$)	Погрешность	Поток фотонов ($1/s \cdot cm^2$)	Погрешность
10	$5.90E10$	0.0899	$3.50E13$	0.0019
15	$1.08E11$	0.0645	$4.81E13$	0.0017
20	$1.43E11$	0.0569	$5.31E13$	0.0017
25	$1.89E11$	0.0482	$5.56E13$	0.0018
30	$2.38E11$	0.0454	$5.69E13$	0.0017

Как упоминалось ранее, если нейтроны, генерируемые в тяжелой воде (D_2O), могут участвовать в реакции $^{98}Mo(n, \gamma)^{99}Mo$, то 99 эффективность производства будет увеличена. Учитывая энергетический спектр на нейтронного потока и сечение реакции $^{98}Mo(n, \gamma) \rightarrow ^{99}Mo$ для ^{98}Mo , были вычислены основные параметры производства ^{99}Mo .

Далее были промоделированы разные варианты мишени из ^{98}Mo для подбора максимально эффективной.

В первую очередь, было изучено получение ^{99}Mo посредством реакции $^{98}Mo(n, \gamma)^{99}Mo$ для ^{98}Mo в форме металлических пластин.

Были смоделированы пластины из молибдена-98 заданных размеров (длина 20 см, ширина 9 см) и различной толщины ($\Delta a = 0.1, 0.5, 1.0, 1.5, 2.0, 2.5mm$). В результате этого моделирования (таблица 5) было продемонстрировано, что пластины толщиной 0,1 мм являются оптимальными. При моделировании мы полагали, что мишень из ^{98}Mo включала 11 пластин одинаковой толщины, при этом в каждом расчете толщина менялась для всех этих 11 пластин.

Согласно полученным результатам, удельная активность будет увеличиваться за счет уменьшения толщины. Однако из-за ограничений в конструкции металлических пластин из молибдена (минимально возможных пластин) желательна толщина 0,1 мм.

Средний поток нейтронов и фотонов в баке с тяжелой водой был рассчитан после и до размещения пластин ^{98}Mo . Сравнение результатов расчетов и моделирования показывает, что размещение пластин из ^{98}Mo толщиной 0,1 мм не окажет значительного влияния на средний поток фотонов в резер-

Таблица 5 — Активность пластин ^{98}Mo для различного времени облучения

Толщина (mm)	Общая активность 11 пластин (Ci/cm^3) 24h	Общая активность 11 пластин (Ci/cm^3) 350h	Общий вес 11 пластин (g)	Специфическая активность (mCi/cm^3) 24h
0.1	0.3715	1.6258	202	3.31
0.5	0.2411	1.0553	1011	2.15
1.0	0.2019	0.8838	2023	1.80
1.5	0.1579	0.6401	3035	1.41
2.0	0.1458	0.6380	4047	1.30
2.5	0.1380	0.6040	5058	1.23

вуаре. Пространственное распределение нейтронной заселенности в тяжелой воде показано на рисунке 9.

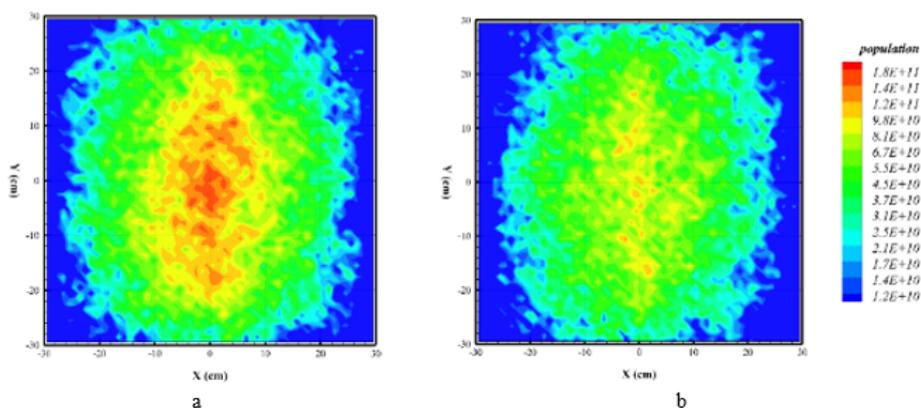


Рис. 9 — 2D-схема распределения нейтронов в резервуаре с тяжелой водой с пластинами ^{98}Mo , а) по высоте равной середине пластин ^{98}Mo , б) по высоте равной позиции вольфрамовому преобразователю.

Для расчета производства ^{99}Mo в пластинах ^{98}Mo , была рассчитана соответствующая скорость реакции в каждой пластине. Все эти симуляции и расчеты основаны на спецификации Rhodotron ТТ200 (энергия = 10 МэВ, средний ток = 10 мА). Значения скорости реакции для 11 пластин металлического ^{98}Mo представлены в таблице 6 (полученные относительные ошибки для этих результатов менее 5 процентов). Следует отметить, что эти 11 пластин расположены перпендикулярно вольфрамовому преобразователю на расстоянии 1 см между пластинами (как показано на рисунке 10).

По скоростям реакции в пластинах ^{98}Mo и току Rhodotron была рассчитана суммарная активность пластин разной толщины.

Таблица 6 — Скорость реакции и активность для 11 пластин из металлического ^{98}Mo (10 мА и 10 МэВ электронный пучок)

Номер пластины	Общая радиоактивность ($1/s \cdot \text{cm}^3$)	Активность после 24 ч облучения 10 мА электронным пучком (Ci/cm^3)
1	$7.97E-8$	$3.00E-2$
2	$9.69E-8$	$3.64E-2$
3	$8.43E-8$	$3.17E-2$
4	$8.01E-8$	$3.01E-2$
5	$1.01E-7$	$3.79E-2$
6	$1.03E-7$	$3.87E-2$
7	$9.13E-8$	$3.43E-2$
8	$7.90E-8$	$2.97E-2$
9	$9.79E-8$	$3.68E-2$
10	$8.54E-8$	$3.21E-2$
11	$9.00E-8$	$3.38E-2$

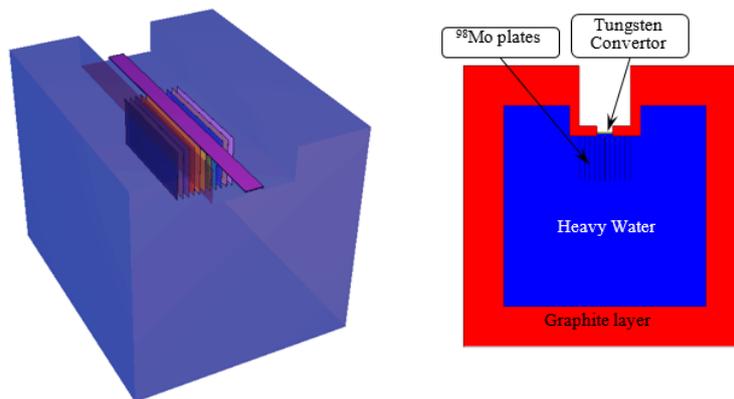


Рис. 10 — Трехмерная и двухмерная схема размещения пластин ^{98}Mo в резервуаре для тяжелой воды.

Результаты сравнивались для различных схем расположения молибденовых пластин. Было проиллюстрировано небольшое снижение общего выхода изотопа в этой новой структуре. В то время, как общая активность основной структуры через 24 часа непрерывного облучения была около 0.37 (Ci/cm^3), альтернативная структура с размещением вдоль конвектора дала выход около 0.32 (Ci/cm^3).

Далее было проведено моделирование для случая использования пластин из природного молибдена.

Получены модельные данные для активности пластин ^{nat}Mo и ^{98}Mo (Результаты приведены в таблице 7).

Таблица 7 — Сравнение генерируемой активности между ^{nat}Mo и чистой формой пластин ^{98}Mo (10 МэВ и 10 мА).

Target type	Activity(Ci) After 20 h	Activity(Ci) After 24 h	Activity(Ci) after 350 h- saturated
^{nat}Mo	0.16	0.19	0.85
^{98}Mo	0.56	0.66	2.93

Следующим шагом стало исследование возможности одновременного использования двух производственных каналов, что может привести к увеличению выхода продукции ^{99}Mo . Исследовано параллельное производство через реакции $^{100}Mo(\gamma, n)^{99}Mo$ и $^{98}Mo(n, \gamma)^{99}Mo$.

Максимальное сечение образования ^{99}Mo в реакции $^{98}Mo(n, \gamma)^{99}Mo$ составляет от 14 до 16 МэВ (рисунок 11). Поскольку увеличение энергии пучка увеличивает скорость производства, но при энергиях более 45 МэВ нежелательные каналы реакции, которые производят нежелательные изотопы, также могут быть увеличены. Учитывая логарифмический спектр тормозного излучения, необходим электронный пучок с энергией от 30 до 45 МэВ.

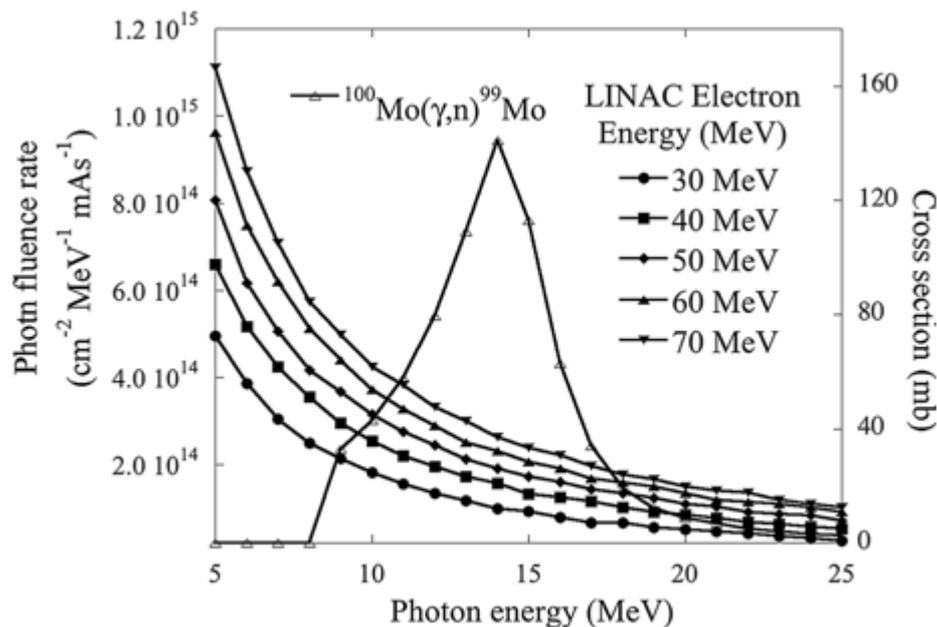


Рис. 11 — Суперпозиция рассчитанного методом Монте-Карло спектра тормозного излучения молибденовой мишени и сечений реакции $^{100}Mo(\gamma, n) \rightarrow ^{99}Mo$.

Итак, для моделирования облучения мишени был выбран электронный пучок 10 МэВ (на основе условий Rhodotron ТТ200, практического ускорителя).

теля в Иране) в качестве исследования объекта, затем был рассмотрен электронный пучок 30 МэВ. При увеличении энергии электронного пучка до 30 МэВ поток нейтронов в резервуаре с тяжелой водой и, как следствие, активность ^{99}Mo будет увеличиваться. Этот рост активности примерно в 3,5 раза больше, чем при рассмотрении электронного пучка 10 МэВ (рисунок 12).

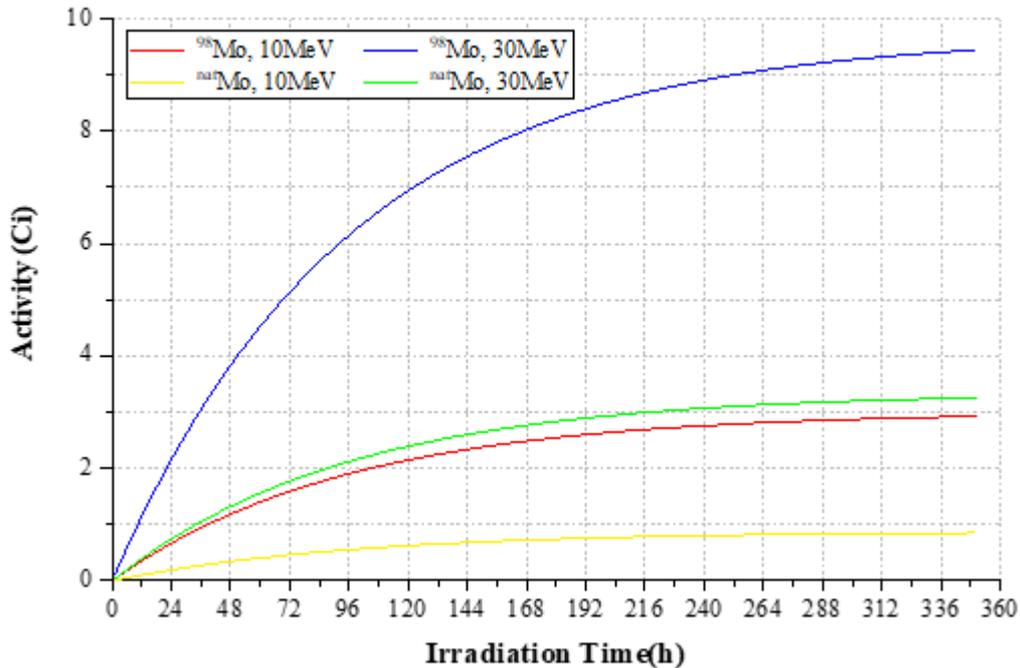


Рис. 12 — Суммарная активность пластин ^{98}Mo и ^{nat}Mo для электронного пучка с током 10 мА и энергией 10 и 30 МэВ (каждая строка содержит совокупную активность 11 одинаковых пластин с толщиной 0,1 мм).

При использовании линейного электронного ускорителя доступны два подхода: двухэтапный подход и одноэтапный подход. При двухэтапном подходе электронный пучок преобразуется в рентгеновское излучение высокой энергии (тормозные фотоны) в мишени с высокой плотностью, такой как W, затем ^{99}Mo производится посредством реакции (γ, n) в цели ^{100}Mo , (Цеханский 2016).

После исследования и выполнения расчетов активности пластин ^{98}Mo для электронного пучка 30 МэВ, цель ^{100}Mo может быть учтена в следующем моделировании. 6 пластин ^{100}Mo будут расположены после преобразователя вольфрама (W) ($10 \times 3\text{cm} \times 0,2\text{cm}$). На рисунке 13 показана предполагае-

мая структура окончательного концептуального проекта, которая включает расположение пластин ^{98}Mo и ^{100}Mo в резервуаре тяжелой воды.

Для этой концептуальной гибридной конструкции, которая включает расположение металлических пластин из ^{100}Mo и ^{98}Mo , показано, что в конце 20-часового непрерывного облучения электронным пучком (30 МэВ, 10 мА) общая активность ^{99}Mo как в ^{98}Mo , так и в ^{100}Mo составит около 97.5 Ci.

После моделирования размеры вольфрамовой мишени - преобразователя фотонов были оптимизированы в соответствии с параметрами Rhodotron TT200 ($48\text{cm} \times 3\text{cm} \times 0.15\text{cm}$).

Все варианты конструкции мишени были сравнены с целью выбора конструкции с более высокой эффективностью. Предложены решения для более эффективного использования фотонов, производимых в системе, например, использование материалов с более низким порогом выхода фотонейтронов.

Если нейтроны, образованные в тяжелой воде (D_2O), можно использовать в соответствии с реакцией $^{98}\text{Mo}(n, \gamma) \rightarrow ^{99}\text{Mo}$, то эффективность производства ^{99}Mo может быть увеличена.

Различные материалы (графит, бериллий, сталь) были исследованы в качестве предлагаемых отражателей нейтронов в конструкции резервуара с тяжелой водой и из-за проблем доступности, а также экономической эффективности графит признан лучшим выбором. В связи с этим, размеры графитового слоя были приняты равными 8 см.

Поток фотонов на поверхности вольфрамовой мишени в резервуаре с тяжелой водой составляет $\phi_{ph} = 1.15e^{15}(1/s \cdot \text{cm}^2)$ с относительной погрешностью = 0.001 и средним объемным потоком нейтронов в тяжелой воде. резервуар для воды равен $\phi_n = 5.90e^{10}(1/s \cdot \text{cm}^2)$ с относительной погрешностью = 0.09 средний объемный поток фотона в баке с тяжелой водой составляет $\phi_{ph} = 3.50e^{13}(1/s \cdot \text{cm}^2)$ с относительной погрешностью = 0.002. Из-за отражения тепловых нейтронов от оптимизированной толщины графита максимальное значение спектра нейтронов находится в тепловой и надтепловой областях. В результате распределение нейтронов в центральной части емкости в направлении столкновения электронов с вольфрамовой мишенью будет максимальным. Сравнивая результаты, можно увидеть, что при увеличении количества энергии электронного пучка создается больший поток нейтронов,

но количество нежелательных каналов реакции, которые производят нежелательные изотопы, может при этом тоже вырасти.

Было смоделировано 11 пластин молибдена-98 с заданными размерами (20 см в длину и 9 см в ширину) и различной толщины. В результате показано, что пластины толщиной 0,1 мм являются оптимальными. Активность для 24-часового облучения электронным пучком толщиной 0,1 мм ^{98}Mo составляет 0,37 (Ci/cm^3), а удельная активность составляет 3,31 (mCi/cm^3).

Активность по результатам 24-часового облучения электронным пучком толщиной 0,1 мм $^{\text{nat}}\text{Mo}$ составляет 0,19 Ci , а удельная активность составляет 0,94 (mCi/cm^3). Что касается изотопного состава природного молибдена, эти различия в активности $^{\text{nat}}\text{Mo}$ и ^{98}Mo были предсказуемы.

В заключение была проверена гипотеза одновременного использования двух производственных каналов, что должно привести к увеличению выхода продукции ^{99}Mo : производство через реакции $^{100}\text{Mo}(\gamma, n)^{99}\text{Mo}$ и $^{98}\text{Mo}(n, \gamma)^{99}\text{Mo}$.

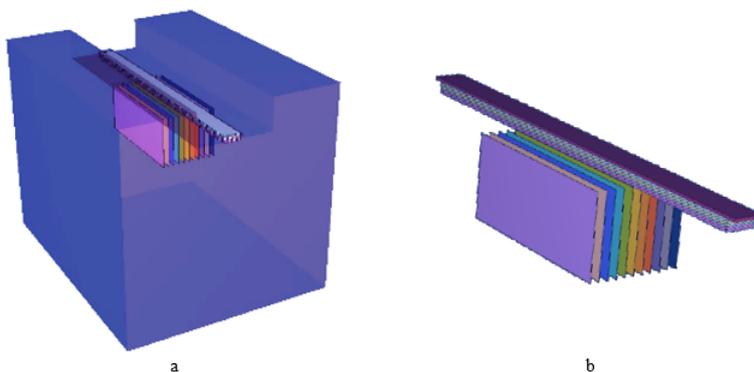


Рис. 13 — Трехмерная схема окончательной концептуальной конструкции, которая включает расположение пластин ^{98}Mo и ^{100}Mo в резервуаре тяжелой воды.

Для этой концептуальной гибридной конструкции, которая включает расположение металлических пластин из ^{100}Mo и ^{98}Mo , ожидается, что в конце 20-часового непрерывного облучения электронным пучком (30 МэВ, 10 мА) общая активность ^{99}Mo как в ^{98}Mo , так и в ^{100}Mo будет около 97,5 Ки.

В **Шестой главе** приведено описание процесса дальнейшей подготовки медицинского ^{99}Mo к использованию, реализованного в рамках гранта МАГАТЭ. Также рассмотрены вопросы связанные с защитой персонала рабо-

тающего с изотопами и приведен пример использования получаемого ^{99}Mo в качестве маркера квантовых точек.

В **Заключении** приведены основные результаты работы, которые заключаются в следующем:

1. Разработана модель взаимодействия электронного пучка высокой энергии, формируемого при взаимодействии пучка нейтронов и гамма квантов с учетом особенностей Rhodotron ТТ200
2. Разработан эскиз вольфрамовой емкости - мишени для тяжелой воды.
3. Проведена оптимизация параметров мишени с учетом требований, предъявляемых геометрией и энергией электронного пучка в используемом линейном электронном ускорителе.
4. Разработан программный комплекс для управления моделированием процессов производства технеция с помощью кластерного вычислителя
5. Показано что нейтроны, образующиеся в тяжелой воде (D_2O), можно использовать в соответствии с реакцией $^{98}\text{Mo}(n, \gamma) \rightarrow ^{99}\text{Mo}$ (нейтронный захват).
6. Предложен метод одновременного использования двух производственных каналов, что может привести к увеличению выхода продукции ^{99}Mo : производство через $^{100}\text{Mo}(\gamma, n) \rightarrow ^{99}\text{Mo}$ и $^{98}\text{Mo}(n, \gamma) \rightarrow ^{99}\text{Mo}$.

Полученные результаты позволяют рекомендовать разработанные подходы к внедрению при построении решений для получения медицинского Mo^{99} на основе линейных электронных ускорителей.

Публикации автора по теме диссертации

1. *Ali Torkamani, Alexander Khelvas, Alexander Bugaev, Farshad Ghasemi* Using Monte Carlo Calculation for Molybdenum-99 Production by Electron Accelerator // Proceedings of the 15th IEEE International Conference on Application of Information and Communication Technologies (AICT2021), Baku, October, 2021

2. *Ali Pazirandeh, Ali Torkamani, Ali Taheri* Design and simulation of neutron source based on an electron linear accelerator for BNCT of skin melanoma *Applied Radiation and Isotopes* 69 (2011)749-755 ISSN 0969-8043, <https://doi.org/10.1016/j.apradiso.2011.01.035>.

3. *Али Торкамани* "Программный комплекс для оптимизации геометрической формы и размера мишени при получении медицинского Мо и Тс" // свидетельство Роспатента о регистрации программы для ЭВМ.

4. *Али Торкамани* "Математическое моделирование процесса получения медицинского Мо путем облучения мишени $Mo98$ с помощью линейного электронного ускорителя" // Труды конференции МФТИ, 2021.

5. *Taheri A., Torkamani A. et al.* (2013) Measurement of Thermal Neutron Flux in Photo-Neutron Source. In: Long M. (eds) World Congress on Medical Physics and Biomedical Engineering May 26-31, 2012, Beijing, China. IFMBE Proceedings, vol 39. Springer, Berlin, Heidelberg. https://doi.org/10.1007/978-3-642-29305-4_464

6. *A.Taheri, A.Torkamani, A.Pazirandeh, S.Goudarzi, N.Khojasteh, A.Arbabi and H.Mehr Alizadeh* First Measurements of Thermal Neutron Flux in the Accelerator Based Photo-Neutron Source // 15th International Congress on Neutron Capture Therapy, Tsukuba Japan, (2012)

7. *Ali Taheri, Ali Torkamani, Ali Pazirandeh* Study the Absorption dosage inside the Photo-Neutron Source Cavac for Neutron Therapy with Boron ^{10}B IMPC, Iran University of Medical Sciences, pp71, (2010)

8. *Ali Pazirandeh, Ali Torkamani, Ali Taheri* Accelerator Based Neutron Source for Boron Neutron Capture Therapy // 14th International Congress on Neutron Capture Therapy, Buenos Aires, July 09, (2010)