

## محاسبه‌ی سطح مقطع و بازده تولید رادیوداروی پراسنودیمیوم- $^{139}\text{Ce}(p,2n)^{139}\text{Pr}$ از طریق واکنش با استفاده از کدهای هسته‌ای GEANT4 و TALYS

فرزاد عیسی‌زاده<sup>۱</sup>، اکبر عبدی سرای<sup>۲\*</sup>

تاریخ دریافت ۱۳۹۹/۰۴/۰۷ تاریخ پذیرش ۱۳۹۹/۰۷/۲۸

### چکیده

**پیش‌زمینه و هدف:** PET یک روش تصویربرداری بسیار مفید و مناسب در پزشکی هسته‌ای می‌باشد. در این روش از پوزیترون‌های با انرژی خاص برای تصویربرداری استفاده می‌شود. عناصر موجود در گروه لانتانیدها برای واپاشی پوزیترون‌های با انرژی مشخص برای استفاده در PET مناسب هستند. پراسنودیمیوم- $^{139}\text{Ce}(p,2n)^{139}\text{Pr}$  با نیمه‌ی عمر ۴/۵ ساعت، یکی از عناصر مفید گروه لانتانیدها است که در PET قابل استفاده می‌باشد. در این مطالعه واکنش  $^{140}\text{Ce}(p,2n)^{139}\text{Pr}$  برای تولید رادیوداروی پراسنودیمیوم- $^{139}\text{Pr}$ ، توسط کد TALYS با چهار مدل متفاوت و همچنین توسط کد مونت‌کارلی GEANT4 شبیه‌سازی شد. هدف از این شبیه‌سازی، محاسبه‌ی سطح مقطع واکنش و بهره‌ی تولید پراسنودیمیوم- $^{139}\text{Pr}$  در هدف سربوم- $^{140}\text{Ce}$  پرتودهی شده با پروتون می‌باشد.

**مواد و روش کار:** مقادیر سطح مقطع و بهره‌ی تولید پراسنودیمیوم- $^{139}\text{Pr}$  از طریق واکنش  $^{140}\text{Ce}(p,2n)^{139}\text{Pr}$  با استفاده از کدهای TALYS و GEANT4 محاسبه و تغییرات برد پرتابه پروتون در هدف سربوم- $^{140}\text{Ce}$  با استفاده از کدهای SRIM و GEANT4 شبیه‌سازی شد. **یافته‌ها:** تغییرات برد پروتون با استفاده از کدهای SRIM و GEANT4 در هدف سربوم- $^{140}\text{Ce}$  به ازای انرژی‌های مختلف پروتون‌های فرودی نشان داده شده است. برد پروتون در سربوم- $^{140}\text{Ce}$  در انرژی ۲۲/۵ MeV به ترتیب ۱۶۱۰ و ۱۶۳۷/۵ میکرومتر محاسبه شد. سپس مقادیر سطح مقطع شبیه‌سازی شده با استفاده از کدهای TALYS و GEANT4 به ازای انرژی‌های مختلف پروتون‌های فرودی با داده‌های تجربی مقایسه شده‌اند. در انرژی ۲۲/۵ MeV، سطح مقطع پراسنودیمیوم- $^{139}\text{Pr}$  در واکنش  $^{140}\text{Ce}(p,2n)^{139}\text{Pr}$  بیشترین مقدار را دارد. مقادیر سطح مقطع به دست آمده در این انرژی با استفاده از این دو کد به ترتیب ۱۱۵۰/۷ و ۱۲۵۰/۴ میلی بارن است. مقدار بهره‌ی تولید در ضخامت ضخیم از هدف سربوم- $^{140}\text{Ce}$  به ازای انرژی‌های مختلف پروتون محاسبه شد. همچنین مقدار بهره‌ی تولید در انرژی ۲۲ MeV با استفاده از این کدها به ترتیب  $1.832 \times 10^{-1}$  و  $1.782 \times 10^{-1} \text{ MBq}\mu\text{A}^{-1}\text{h}^{-1}$  محاسبه شد.

**بحث و نتیجه‌گیری:** مقایسه‌ی نتایج حاصل از شبیه‌سازی برای تولید رادیوداروی پراسنودیمیوم- $^{139}\text{Pr}$  از طریق واکنش  $^{140}\text{Ce}(p,2n)^{139}\text{Pr}$  با استفاده از کد TALYS و روش مونت‌کارلی GEANT4 و SRIM نشان می‌دهد که توافق خوبی با داده‌های تجربی دارند. همچنین می‌توان بدون صرف وقت و هزینه‌ی زیاد و مواد آزمایشگاهی و قبل از تولید رادیودارو، واکنش مورد نظر را با استفاده از این کدها شبیه‌سازی نمود و مقادیر بهره‌ی تولید و بازه مناسب انرژی را برای تولید رادیودارو پیش‌بینی کرد.

**کلیدواژه‌ها:** پراسنودیمیوم- $^{139}\text{Pr}$ ، کد GEANT4، کد TALYS، سطح مقطع، بهره‌ی تولید، شتاب‌دهنده

مجله مطالعات علوم پزشکی، دوره سی و یکم، شماره نهم، ص ۶۸۹-۶۸۰، آذر ۱۳۹۹

آدرس مکاتبه: ارومیه، گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه ارومیه، تلفن: ۰۴۴۳۱۹۴۲۰۴۲

Email: ak.abdi@urmia.ac.ir, aabdisaray75@gmail.com

### مقدمه

میلاادی از ایزوتوپ‌های گسیل‌دهنده‌ی پوزیترون در تصویربرداری پزشکی استفاده شده است. در دهه‌ی ۱۹۶۰ میلادی، انجمن علمی

$^{13}\text{PET}$  یک روش تصویربرداری پزشکی است که از خصوصیت منحصر به فرد واپاشی پوزیترون در شناسایی محل انتشار رادیوایزوتوپ در بدن بیمار استفاده می‌شود. در اوایل دهه‌ی ۱۹۵۰

<sup>۱</sup> دانشجوی کارشناسی ارشد فیزیک هسته‌ای، گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه ارومیه، ارومیه، ایران

<sup>۲</sup> استادیار مهندسی هسته‌ای راکتور، گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه ارومیه، ارومیه، ایران (نویسنده مسئول)

<sup>۳</sup> Positron Emission Tomography

کرده است. چون نیمه‌ی عمر پراسئودیمیموم-۱۳۹ زیاد می‌باشد، این رادیوایزوتوپ برای مطالعه‌ی فرآیندهای متابولیک در زمان‌های جذب بالا، بسیار مورد توجه قرار گرفته است. همچنین همراه شدن  $^{139}\text{Pr}$  با  $^{142g}\text{Pr}$ ، این رادیوایزوتوپ را قادر می‌سازد که در موارد تشخیصی به کار برده شود (۳). تولید رادیودارو  $^{139}\text{Pr}$  از طریق واکنش‌های مختلفی امکان‌پذیر می‌باشد که به دلیل اینکه سریوم-۱۴۰ پایدار است و دارای درصد فراوانی ایزوتوپ بسیار بالا (۸۸/۸ درصد) می‌باشد، این عنصر به‌عنوان هدفی مناسب برای تولید پراسئودیمیموم-۱۳۹ در نظر گرفته شده است، بنابراین واکنش بهینه برای تولید این رادیوایزوتوپ، واکنش  $^{140}\text{Ce}(p,2n)^{139}\text{Pr}$  می‌باشد. در سال ۱۹۶۶ میلادی سطح مقطع واکنش بیان‌شده در بازه‌ی انرژی پروتون  $13/28-14/58 \text{ MeV}$  توسط آقای Furukawa و همکارانش، به‌صورت تجربی اندازه‌گیری شده است (۷). همچنین، در سال ۲۰۰۰ میلادی آقای Zeisler و همکارانش، در بازه‌ی پروتونی  $12/57-32/22 \text{ MeV}$ ، تحقیقاتی بر روی واکنش مدنظر به‌صورت تجربی انجام دادند (۸). در این مطالعه ابتدا سطح مقطع واکنش  $^{140}\text{Ce}(p,2n)^{139}\text{Pr}$  با استفاده از کد TALYS و همچنین با استفاده از روش مونت‌کارلوی GEANT4 محاسبه شد. در کد TALYS از چهار روش متفاوت پتانسیل مدل اپتیکی کروی<sup>۵</sup> (OMPs)، مدل گاز فرمی جابه‌جاشده<sup>۶</sup> (BSFGM)، مدل ترکیبی گیلبرت-کامرون<sup>۷</sup> (CGCM) و مدل ابر شاره تممیم‌یافته<sup>۸</sup> (GSM) برای محاسبه‌ی سطح مقطع استفاده می‌شود. بهره‌ی تولید رادیوایزوتوپ پراسئودیمیموم-۱۳۹ با استفاده از این دو کد نیز محاسبه شد. همچنین نتایج حاصل از شبیه‌سازی با نتایج تجربی، مقایسه شد.

### مواد و روش کار

SRIM<sup>۷</sup> یک کد کامپیوتری بر اساس روش مونت‌کارلو است که می‌توان انواع برهمکنش یون‌ها با مواد مختلف را با آن بررسی و شبیه‌سازی نمود. در سال ۱۹۸۵ این کد برای نخستین بار برای محاسبه‌ی توان توقف و تغییرات برد یون‌ها منتشر شد. این محاسبات از رفتار مکانیک کوانتومی برخوردار یون-اتم پیروی می‌کند (۹ و ۱۰). برای محاسبه‌ی تغییرات برد یون، در فایل ورودی برنامه بازه‌ی انرژی یون و نوع ایزوتوپ و ماده‌ی هدف مشخص می‌شود. با اجرای برنامه،

تحقیقات بهداشت آمریکا (N.I.H)، اولین پروژه‌ی کاربردی را در دانشگاه St. Louis برای پژوهش روی کاربرد عناصر تولیدی در شتاب‌دهنده سیکلوترون با نیمه‌عمر کوتاه ارائه نمود (۱). در این روش همانند روش‌های دیگر نیز اطلاعاتی به‌صورت فیزیولوژیک و مولکولی به دست می‌آید که ناشی از پراکندگی مولکول‌های نشان‌دار شده با عنصر گسیل دهنده‌ی پوزیترون در نواحی بافت تحت بررسی است. پوزیترون‌ها به‌عنوان ذرات باردار با انتقال انرژی جنبشی خود به تومور و بافت ناسالم در بدن، نقش درمانی داشته و همچنین تصویربرداری از بافت تحت درمان را نیز امکان‌پذیر می‌سازند. بنابراین رادیوایزوتوپ‌هایی که گسیل دهنده‌ی پوزیترون هستند در تصویربرداری PET بسیار مفید می‌باشند. در پزشکی هسته‌ای بیشتر رادیوایزوتوپ‌های به‌کاررفته به‌صورت مصنوعی تولید شده‌اند. این رادیوایزوتوپ‌ها به‌وسایله‌ی شتاب‌دهنده سیکلوترون یا راکتور هسته‌ای تولید می‌شوند. شتاب‌دهنده‌های سیکلوترون، سامانه‌های مناسب برای تولید مصنوعی رادیوایزوتوپ‌های گسیل دهنده‌ی پوزیترون برای مقاصد پزشکی و صنعتی با استفاده از ایزوتوپ‌های غیر رادیواکتیو می‌باشند که علاوه بر کاربردهای فراوان، این محصولات دارای کمترین آثار منفی زیست‌محیطی و عدم نیاز به پسمانداری هستند. نوع رادیوایزوتوپ تولیدشده در یک سیکلوترون بستگی به ذره‌ی پرتوده‌ی، انرژی آن و هسته‌های هدف دارد (۱). خواص زیستی لانتانیدها همانند کلسیم، برای مطالعات و کاربردهای تشخیصی بسیار مفید می‌باشد. گروه لانتانیدها در جدول تناوبی، شامل عنصرهای لانتانید با عدد جرمی ۵۷ تا عنصر لوتیم با عدد جرمی ۷۱، می‌باشد (۲). لانتانیدها توانایی متصل شدن به بیومولکول‌های آلبومین سرم انسان<sup>۹</sup> (HSA) را نیز دارند (۳). بیشتر لانتانیدها گسیل دهنده‌ی پوزیترون و مناسب برای تصویربرداری می‌باشند. از طرفی دیگر عناصر گروه لانتانیدها می‌توانند به‌عنوان عوامل ضد باکتری به کار برده شوند (۴).

عناصر این گروه، همچنین برای تشخیص و درمان سرطان نیز استفاده می‌شوند (۵). رادیوایزوتوپ پراسئودیمیموم-۱۳۹ که دارای نیمه‌عمر ۴/۵ ساعت می‌باشد و به دلیل گسیل الکترون‌های اوژه ناشی از گیراندازی الکترون و تابش پوزیترون، برای تصویربرداری PET بسیار مفید است (۶). حضور پراسئودیمیموم-۱۳۹ در گروه لانتانیدها اهمیت این رادیوایزوتوپ را در پزشکی هسته‌ای بیشتر

<sup>5</sup> Composite Gilbert-Cameron Model

<sup>6</sup> Generalized Superfluid Model

<sup>7</sup> Stopping and Range of Ions in Matter

<sup>1</sup> National Institutes of Health

<sup>2</sup> Human Serum Albumin

<sup>3</sup> Spherical Optical Model Potential

<sup>4</sup> Back-Shifted Fermi Gas Model

به کمیت‌های ترمودینامیکی هسته را استخراج نمود. همچنین این کمیت در محاسبه‌ی سطح مقطع واکنش‌های هسته‌ای نقش بسیار مهمی دارد. حالت کلی در این مدل، چگالی کل حالت‌ها برای اسپین مشخص  $J$  و پارامتر مشخص  $\pi$  و تعداد ترازها بر انرژی بر حسب MeV در محدوده‌ی انرژی برانگیختگی  $E_x$ ، از رابطه‌ی (۲) به دست می‌آید:

$$\rho^{tot}(E_x) = \sum_J \sum_{\pi} \rho(E_x, J, \pi) \quad (2)$$

این مدل از چند مدل میکروسکوپی تشکیل شده است که برای هر کدام از این مدل‌ها، رابطه‌ی چگالی حالت‌ها شکل خاص خود را دارد. در این مطالعه از سه روش متفاوت مربوط به مدل چگالی تراز یعنی، مدل گاز فرمی جابه‌جا شده (BSFGM)، مدل دما-ثابت<sup>۲</sup> (CTM) که به مدل ترکیبی گیلبرت-کامرون (CGCM) معروف است و مدل ابرشاره‌ی تعمیم‌یافته (GSM) برای محاسبه‌ی سطح مقطع استفاده شده است. در واقع هر کدام از این مدل‌ها، ویژگی‌های خاص خودشان را دارا می‌باشند.

#### مدل گاز فرمی جابه‌جا شده (BSFGM):

در این مدل، هسته به‌عنوان یک گاز فرمیونی غیر برهمکنش در نظر گرفته شده است. چگالی حالت‌ها برای این مدل از رابطه‌ی (۳) پیروی می‌کند:

$$\rho_F^{tot}(E_x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma}} \times \frac{\sqrt{\pi}}{12} \times \frac{\exp(2\sqrt{aU})}{a^{\frac{1}{4}} \times U^{\frac{5}{4}}} \quad (3)$$

که در این رابطه  $a$  پارامتر چگالی تراز،  $U$  انرژی برانگیختگی مؤثر و  $E_x$  انرژی انطباق داده شده با مقادیر تجربی می‌باشد. مقدار  $U$  از رابطه‌ی (۴) به دست می‌آید (۱۵ و ۱۲).

$$U = E_x - \Delta^{BSFG} \quad (4)$$

در این رابطه،  $\Delta$  پارامتر تغییر انرژی به انرژی جفت شدگی می‌باشد.

#### مدل ترکیبی گیلبرت-کامرون (CGCM):

در یک دمای ثابت که توسط گیلبرت و کامرون تعریف شده است، مقدار چگالی حالت‌ها از رابطه‌ی (۵) به دست می‌آید (۱۲).

$$\rho_{CGC}^{tot}(E_x) = \frac{1}{T} \times \exp\left(\frac{E_x - E_0}{T}\right) \quad (5)$$

در این رابطه،  $T$  دمای هسته،  $E_x$  انرژی برانگیختگی انطباق،  $E_0$  حداقل انرژی برانگیختگی می‌باشند.

#### مدل ابرشاره تعمیم‌یافته (GSM):

در این مدل یک گذار فاز از حالت ابرشارگی در انرژی پایین به ناحیه‌ی انرژی بالا که به‌وسیله‌ی مدل گاز فرمی تعریف می‌شود، اتفاق می‌افتد. مقدار چگالی حالت‌ها از رابطه‌ی (۶) پیروی می‌کند:

در فایل خروجی تغییرات برد یون در ماده‌ی هدف به ازای بازه‌ی انرژی انتخاب‌شده، مشاهده خواهد شد.

کد TALYS1.95 یکی از جدیدترین بسته‌های کد TALYS می‌باشد که در این مطالعه از آن استفاده شده است. کد TALYS برای مطالعه روی انواع واکنش‌های هسته‌ای طراحی شده است. از این کد برای شبیه‌سازی ذرات شامل پروتون، نوترون، فوتون، دوترون، تریتون،  $^3\text{He}$  و آلفا که دارای انرژی بین ۰.۱ keV تا ۲۰۰ MeV می‌باشند و هدف‌هایی با عدد جرمی ۱۲ و بیشتر، استفاده می‌شود (۱۱). در کد TALYS از مدل‌های مختلف میکروسکوپی و پدیده شناختی برای انجام محاسبات استفاده می‌شود (۱۲). می‌توان با استفاده از کد TALYS علاوه بر محاسبه‌ی سطح مقطع در حالت‌های ایزومری (۱۳) و غیر ایزومری هسته‌ی تولیدشده، مقدار بهره تولید، طیف انرژی، پراکندگی زاویه‌ای و ... را به دست آورد (۱۴). در این کد مدل‌های متفاوتی برای بررسی سطح مقطع واکنش‌های هسته‌ای ارائه شده است. در این مطالعه از دو روش پتانسیل مدل اپتیکی کروی و چگالی تراز استفاده شده است. در فایل ورودی این برنامه اطلاعاتی مثل: جنس ذره‌ی پرتاب شده، بازه‌ی انرژی ذره‌ی فرودی، جنس هدف، مدل استفاده شده و ... مورد نیاز است.

#### پتانسیل مدل اپتیکی کروی (OMPs):

یکی از بنیادی‌ترین مدل‌ها برای مطالعه‌ی واکنش‌های هسته‌ای، مدل اپتیکی می‌باشد که به مدل توپ کریستالی ابری نیز معروف است. در این مدل، هسته همانند یک توپ کریستالی در نظر گرفته شده است که وقتی نور به آن می‌تابد، قسمتی از نور جذب شده و قسمتی از آن، از طریق پراکندگی‌های کشسان و غیر کشسان، منعکس و پراکنده می‌شوند (۱۲). در این مدل پراکندگی‌ها به‌صورت پتانسیل مختلط  $U(r)$  با استفاده از رابطه‌ی (۱) تعریف می‌شود (۱۲):

$$U(r) = V(r) + iW(r) \quad (1)$$

که در این رابطه تابع‌های  $V(r)$  و  $W(r)$  طوری انتخاب می‌شوند که وابستگی شعاعی آن‌ها به پتانسیل، به‌صورت مناسب انتخاب شود. تابع  $V(r)$  حقیقی بوده و برای بررسی پراکندگی کشسان و برهمکنش بین ذرات پرتاب شده و هدف می‌باشد، اما  $W(r)$  موهومی بوده و قسمت مربوط به جذب اندرکنش‌ها را پیش‌بینی می‌کند.

#### مدل چگالی تراز<sup>۱</sup> (LDM):

چگالی تراز هسته‌ای کمیته بسیار مهم برای بررسی آماری هسته می‌اشد، به‌طوری‌که می‌توان با استفاده از آن تمام اطلاعات مربوط

<sup>1</sup> Level Density Model

<sup>2</sup> Constant Temperature Model

لیست مورد استفاده و ... را انتخاب کند و هیچ محدودیتی برای تعریف بازه‌ی انرژی چشمه و یا نوع ماده ایجاد نمی‌کند (۱۷). انتخاب مناسب فیزیک لیست مسئله در کد GEANT4 توسط کاربر نکته‌ی بسیار مهمی می‌باشد. این کد فرآیندهایی مثل واپاشی، الکترومغناطیسی، هادرونی، اپتیکی و ... را می‌تواند بررسی کند (۱۸ و ۱۹). چشمه‌ی استفاده شده در این مطالعه باریکه‌ای از پروتون-ها به شکل دایروی به قطر ۳ میلی‌متر می‌باشد که در بازه‌ی انرژی ۳۳-۱۲ MeV به سوی هدف سریوم-۱۴۰ با خلوص ۹۹/۹۹٪ (۴) در یک شتابدهنده‌ی سیکلوترون مطابق شکل (۱) پرتاب می‌شوند. جریان شتابدهنده ۰/۱ میکروآمپر در نظر گرفته شده است. همان‌طور که در شکل (۱) مشاهده می‌شود، قرص سبز رنگ نشان دهنده-ی هدف سریوم-۱۴۰ و خط آبی رنگ نشان دهنده‌ی باریکه‌ی پروتون فرودی می‌باشد.

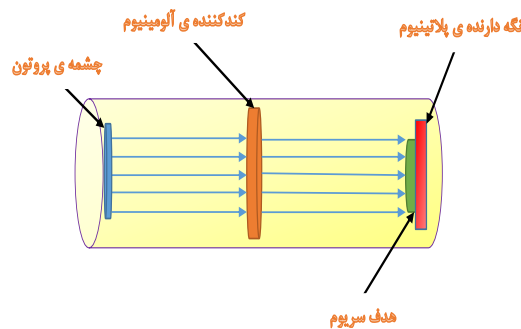
$$\rho_{GS}^{tot}(E_x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma}} \times \frac{e^S}{\sqrt{D}} \quad (6)$$

که در این رابطه S آنتروپی، D دترمینان و  $\sigma$  پارامتر قطع اسپین می‌باشند.

در تمامی مدل‌های میکروسکوپی چگالی تراز، پارامتر a به صورت رابطه (۷) تعریف می‌شود (۱۲ و ۱۵):

$$a(E_x) = a \times \left( 1 + \delta w \times \frac{1 - e^{-\gamma U}}{U} \right) \quad (7)$$

که در این رابطه  $\bar{a}$  مقدار تخمینی پارامتر a،  $\delta w$  تصحیح انرژی پوسته و  $\gamma$  پارامتر تعدیل می‌باشند. همچنین از کد مونت کارلوی GEANT4 برای شبیه‌سازی سطح مقطع واکنش استفاده شده است. به طور کلی، کد GEANT4 در بخش‌های مختلف علمی مثل فیزیک پزشکی، شتابدهنده‌ها، حفاظ نوترونی و ... به طور وسیع کاربرد دارد (۱۶). این کد به کاربر این اجازه را می‌دهد که به صورت دقیق ابعاد و هندسه‌ی هدف و چشمه، بازه انرژی چشمه، فیزیک



شکل (۱): هندسه‌ی هدف سریوم-۱۴۰ و کندکننده‌ی آلومینیومی و باریکه‌ی پروتون‌های فرودی حاصل از شتابدهنده‌ی سیکلوترونی

میکروآمپر بر ساعت (BqμA-1h-1) به دست می‌آید:

$$I = \frac{e \times q \times N_p}{t} \quad (9)$$

که در این رابطه q بار ذره و e بار الکترون،  $N_p$  تعداد کل ذرات پرتاب شده و t مدت زمان پرتودهی بر حسب ثانیه می‌باشد.

### یافته‌ها

#### تغییرات برد پرتابه پروتون در هدف سریوم-۱۴۰:

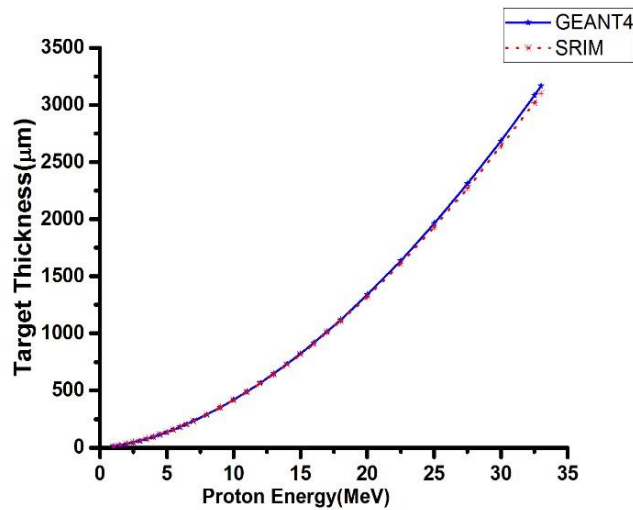
در این مطالعه مقدار برد پروتون‌ها در هدف سریوم-۱۴۰ توسط کدهای SRIM و GEANT4 محاسبه شده است. مقادیر به دست آمده، در شکل (۲) بر حسب انرژی پروتون نشان داده شده است. برای مثال، ضخامت محاسبه شده برای توقف پروتون‌های با انرژی ۲۲/۵ MeV در هدف سریوم-۱۴۰ با استفاده

برای محاسبه‌ی بهره‌ی تولید با استفاده از کد GEANT4 یک قرص کندکننده از جنس آلومینیوم را بین چشمه و هدف قرار می‌دهیم و هدف سریوم-۱۴۰ را به مدت زمان ۲ ساعت توسط پروتون‌های حاصل از شتابدهنده، پرتودهی می‌کنیم. از ویژگی‌های کد GEANT4 می‌توان به محاسبه‌ی تعداد رخدادهایی که منجر به واکنش موردنظر می‌شوند، اشاره نمود. مقدار فعالیت به ازای هر انرژی پروتون فرودی در پایان پرتودهی بر حسب بکرل با استفاده از رابطه‌ی (۸) محاسبه می‌شود (۱۶):

$$SA(E_i) = \frac{\lambda \times N(E_i)}{1 - e^{-\lambda t}} \quad (8)$$

که در این رابطه،  $SA(E_i)$  مقدار فعالیت در پایان پرتودهی بر حسب بکرل،  $\lambda$  ثابت واپاشی رادیوایزوتوپ تولید شده (s-1) و t مدت زمان پرتودهی بر حسب ثانیه می‌باشد. با تقسیم رابطه‌ی (۸) بر مدت زمان پرتودهی بر حسب ساعت و جریان I بر حسب میکرومتر که از رابطه‌ی (۹) به دست می‌آید، مقدار بهره‌ی تولید بر حسب بکرل بر

از کدهای SRIM و GEANT4 به ترتیب ۱۶۱۰ و ۱۶۳۷/۵ میکرومتر می‌باشند.

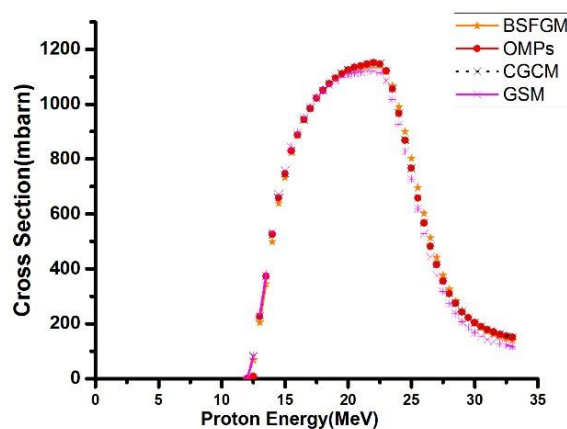


شکل (۲): تغییرات برد پرتابه پروتون در سریوم-۱۴۰ بر حسب انرژی باریکه پروتونی برای تولید پراسنودیمیوم-۱۳۹

همان‌طور که در شکل (۳) مشاهده می‌شود، تولید پراسنودیمیوم-۱۳۹ از انرژی ۱۲/۵ MeV شروع شده و تا انرژی ۲۲ MeV رو به افزایش است، اما پس از آن تولید به تدریج کمتر می‌شود. بنابراین بازه‌ی بهینه‌ی انرژی ۱۲/۵-۲۲ MeV انتخاب می‌شود. بیشترین سطح مقطع محاسبه شده مربوط به انرژی ۲۲ MeV است که برابر ۱۱۵۰/۷۱ میلی بارن می‌باشد.

#### مقادیر سطح مقطع:

سطح مقطع واکنش  $^{140}\text{Ce}(p,2n)^{139}\text{Pr}$  با استفاده از چهار مدل موجود در کد TALYS و همچنین با استفاده از کد مونته‌کارلوی GEANT4 در بازه‌ی انرژی ۱۲-۳۳ MeV محاسبه شده است. در شکل (۳)، سطح مقطع تولید پراسنودیمیوم-۱۳۹ در هدف سریوم-۱۴۰ با استفاده‌ی از مدل‌های OMPs, BSFGM, CGCM و GSM موجود در کد TALYS نشان داده شده است.



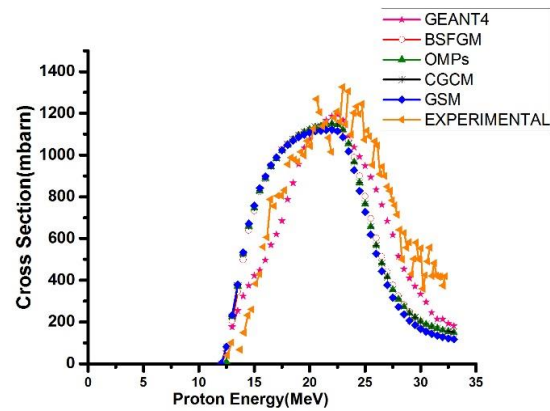
شکل (۳): مقادیر سطح مقطع حاصل از کد TALYS با چهار مدل مختلف برای واکنش  $^{140}\text{Ce}(p,2n)^{139}\text{Pr}$

حاصل از مدل‌های کد TALYS و همچنین مقادیر تجربی که در سال ۲۰۰۰ میلادی توسط آقای Zeisler و همکارانش محاسبه

در شکل (۴)، مقادیر سطح مقطع برای واکنش  $^{140}\text{Ce}(p,2n)^{139}\text{Pr}$  با استفاده از کد GEANT4 با مقادیر

GEANT4 به دست آمده است که مقدار آن برابر  $1350/4$  میلی بارن می‌باشد. این مقدار با مقادیر تجربی و مقادیر حاصل از کد TALYS در توافق بسیار خوبی هستند.

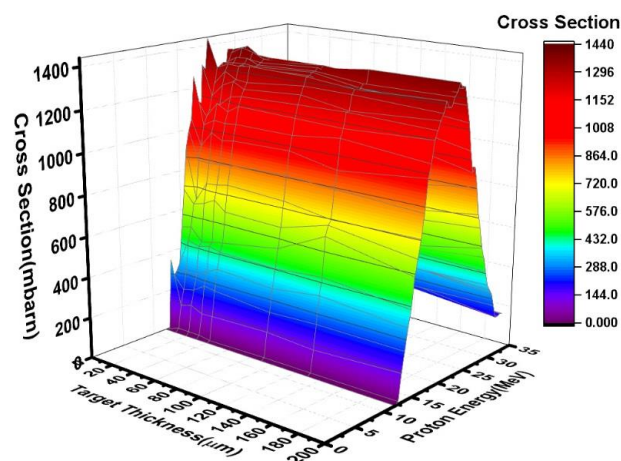
شده (۸)، مقایسه گردید. مطابق این شکل، توافق بسیار خوبی بین مقادیر شبیه‌سازی شده و مقادیر تجربی وجود دارد. در انرژی  $22/5$  MeV، بیشترین مقدار سطح مقطع برای تولید پراسئودیمیوم-۱۳۹ در هدف سریوم-۱۴۰ با استفاده از کد



شکل (۴): مقایسه‌ی نتایج سطح مقطع حاصل از شبیه‌سازی با نتایج تجربی برای واکنش  $140\text{Ce}(p,2n)139\text{Pr}$

می‌باشد ولی به دلیل این‌که، ضخامت یک میکرومتر ضخامت بسیار نازکی است، در این ضخامت مقادیر محاسبه شده‌ی سطح مقطع دقت کمتری دارند. مناسب‌ترین ضخامت که به مقادیر تجربی بسیار نزدیک‌تر است، ضخامت  $40$  میکرومتر می‌باشد.

مقادیر سطح مقطع تولید پراسئودیمیوم-۱۳۹ با استفاده از کد GEANT4 در انرژی‌های مختلف پروتون‌ها و همچنین به ازای ضخامت‌های مختلف از هدف سریوم-۱۴۰ در شکل (۵) نشان داده شده است. در ضخامت  $1$  میکرومتر از هدف سریوم-۱۴۰ مقادیر سطح مقطع نسبت به سایر ضخامت‌ها دارای مقادیر بیشتری



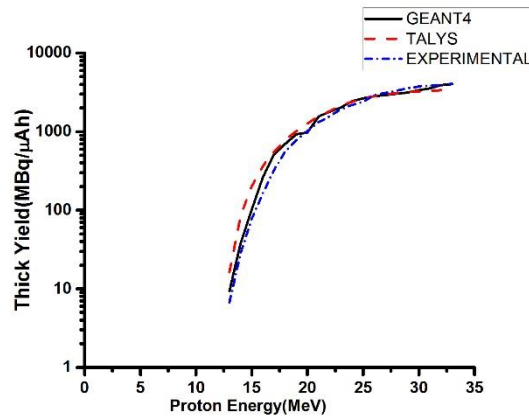
شکل (۵): سطح مقطع تولید پراسئودیمیوم-۱۳۹ حاصل از کد GEANT4 به ازای ضخامت‌های مختلف هدف سریوم-۱۴۰ و در انرژی‌های مختلف پروتون

بهره‌ی تولید محاسبه شده برای واکنش  $140\text{Ce}(p,2n)139\text{Pr}$ ، به ازای انرژی‌های مختلف پروتون‌های ورودی و در هدف ضخیم

مقادیر بهره‌ی تولید:

در انرژی ۲۲ MeV و در هدف ضخیم سریوم-۱۴۰، با استفاده از این کدها به ترتیب، ۱۸۳۲/۱ و ۱۷۸۲/۸۳ MBq $\mu$ A-1h-1 به دست آمده‌اند.

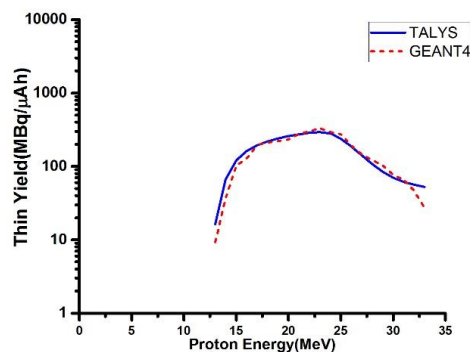
سریوم-۱۴۰ توسط کدهای TALYS و GEANT4، در شکل (۶) نشان داده شده و با مقادیر تجربی به‌دست آمده توسط آقای Zeisler و همکارانش (۸) مقایسه شده‌اند و نشان می‌دهد که توافق بسیار خوبی با یکدیگر دارند. مقدار بهره تولید پراسئودیمیوم-۱۳۹



شکل (۶): مقایسه‌ی مقادیر بهره‌ی تولید پراسئودیمیوم-۱۳۹ در هدف ضخیم سریوم-۱۴۰ حاصل از کدهای TALYS و GEANT4 با مقادیر تجربی در واکنش  $^{140}\text{Ce}(p,2n)^{139}\text{Pr}$

محاسباتی Geant4 با استفاده از روش آماری مونت‌کارلو مسئله را حل می‌نماید و میزان خطا در روش آماری به دلیل استفاده از اعداد تصادفی، بیشتر می‌باشد و همچنین بیشترین بهره تولید رادیوداروی پراسئودیمیوم-۱۳۹ مربوط به انرژی‌های کمتر از ۲۵ MeV می‌باشد که در این انرژی‌ها نتایج حاصل از این دو کد مطابقت لازم را با هم دارند و در انرژی‌های بالاتر از ۲۵ MeV محصول‌های تولید شده از سریوم-۱۴۰، جزو آلودگی ایزوتوپی و غیرایزوتوپی محسوب می‌شود و در واقع جزو بازه‌ی انرژی مطلوب تولید رادیودارو نمی‌باشد.

همچنین در این مطالعه از این دو کد برای محاسبه‌ی بهره‌ی تولید پراسئودیمیوم-۱۳۹ در ضخامت نازک از هدف سریوم-۱۴۰ استفاده شده که در شکل (۷) نشان داده شده است. در ضخامت نازک از هدف سریوم-۱۴۰ و انرژی ۲۲ MeV، مقادیر بهره‌ی تولید پراسئودیمیوم-۱۳۹ با استفاده از کدهای TALYS و GEANT4 به ترتیب ۲۸۵/۷۶ و ۲۹۹/۴۶ MBq $\mu$ A-1h-1 به دست آمد. همان‌طور که در این شکل مشاهده می‌شود با افزایش انرژی از ۳۰ MeV بالاتر، نتایج حاصل از این دو کد محاسباتی با یکدیگر مطابقت کمی دارند و این عدم تطابق به دلیل این است که کد



شکل (۷): نتایج بهره‌ی تولید پراسئودیمیوم-۱۳۹ در هدف نازک سریوم-۱۴۰ با استفاده از کدهای TALYS و GEANT4

## بحث و نتیجه‌گیری

ترتیب ۱۸۲۲/۱ و ۱۷۸۲/۸۳ MBqμA-1A-1 به‌دست آمد و با مقدار تجربی که برابر با ۱۵۶۶ MBqμA-1A-1 اندازه‌گیری شده است، مقایسه گردید. این مقدار با نتیجه حاصل از کد TALYS حدود ۱۴ درصد و با مقدار حاصل از کد GEANT4 ۱۲ درصد اختلاف دارد. برای مقدار بهره‌ی تولید در ضخامت نازک از هدف سریوم-۱۴۰ هیچ مطالعه‌ای در گذشته انجام نشده است و داده‌ی تجربی برای مقایسه با نتایج شبیه‌سازی در دسترس نبود و فقط نتایج حاصل از کدهای شبیه‌سازی TALYS و GEANT4 با یکدیگر مقایسه شد. از مشکلات و محدودیت‌های این مطالعه می‌توان به نتایج دقیق‌تر با افزایش تعداد ذرات در شبیه‌سازی با کد GEANT4 اشاره نمود، ولی مدت زمان اجرای برنامه بیشتر می‌شود که باید از سیستم‌های پردازش سریع استفاده نمود. با مقایسه‌ی نتایج شبیه‌سازی شده و مقادیر تجربی، مشاهده شد که توافق بسیار خوبی بین داده‌های تجربی و مقادیر حاصل از شبیه‌سازی وجود دارد. بنابراین کدهای TALYS، GEANT4 و SRIM ابزارهای مناسبی برای شبیه‌سازی واکنش‌های هسته‌ای با کمترین صرف زمان و هزینه و بدون نیاز به مواد آزمایشگاهی می‌باشند.

در این مطالعه، شرایط هدف و ذره‌ی پرتودهی برای واکنش  $^{140}\text{Ce}(p,2n)^{139}\text{Pr}$  با استفاده از کدهای TALYS و GEANT4 شبیه‌سازی شده‌اند. پس از انتخاب بازه بهینه انرژی ۲۲-۱۲/۵ MeV که دارای سطح مقطع بیشینه و کم‌ترین آلودگی‌های ایزوتوپی و غیرایزوتوپی است، مقادیر بهره تولید در هدف ضخیم سریوم-۱۴۰ محاسبه گردید. بیشترین مقدار سطح مقطع محاسبه شده توسط کدهای TALYS و GEANT4 به ترتیب ۱۱۵۰/۷ و ۱۳۵۰/۴ میلی‌بارن می‌باشند که در مقایسه با مقدار تجربی انجام شده توسط Zeisler و همکارانش (۸) که مقدار آن حدود ۱۳۵۰ میلی‌بارن می‌باشد، توافق بسیار خوبی دارند. مقایسه‌ی داده‌ها نشان می‌دهد که مقدار تجربی با مقدار حاصل از کد TALYS حدود ۱۲ درصد و با مقدار حاصل از کد GEANT4 ۳ درصد اختلاف دارد که این اختلافها بسیار جزئی هستند. مقدار بهره‌ی تولید پراسئودیمیم-۱۳۹ در انرژی ۲۲ MeV نیز از طریق واکنش  $^{140}\text{Ce}(p,2n)^{139}\text{Pr}$  در ضخامت ضخیم هدف سریوم-۱۴۰ توسط کدهای TALYS و GEANT4 محاسبه شد و به

## References:

- Smith B. Nuclear Pharmacy. 1<sup>th</sup> ed. London: Pharmaceutical Press; 2010.
- Fricker SP. The therapeutic application of lanthanides. Chem. Soc. Rev 2006; 6: 524-33.
- Zeisler SK, Becker DW. A new method for PET imaging of tumours: human serum albumin labeled with the long-lived  $^{140}\text{Nd}/^{139}\text{Pr}$  in vivo radionuclide generator. Clin Positron Imaging 1999; 2: 324.
- Kaczmarek MT, Zabiszak M, Nowak M, Jastrzab R. Lanthanides: Schiff base complex, applications in cancer diagnosis, therapy and antibacterial activity. Coord Chem Rev 2018; 370: 42-54.
- Teo RD, Termini J, Gray HB. Lanthanides: Applications in cancer diagnosis and therapy. J Med Chem 2016; 59: 6012-24.
- Steyn GF, Vermeulen C, Noritier FM, Szelecsenyi F, Kovacs Z. Production of no-carrier-added  $^{139}\text{Pr}$  via precursor decay in the proton bombardment of  $^{nat}\text{Pr}$ . Nucl Instrum Methods Phys Res B 2006; 252: 149-59.
- Furukawa M. Excitation functions for proton-induced reactions of  $^{140}\text{Ce}$  and  $^{142}\text{Ce}$  up to  $E_p=15$  MeV. Nucl Phys A 1967; 67: 253-60.
- Zeisler K, Becker DW. A pellet method for the measurement of excitation functions: Cross-section for  $^{140}\text{Ce}(p,2n)^{139}\text{Pr}$  and  $^{140}\text{Ce}(p,3n)^{138m}\text{Pr}$ . Nucl Instrum Methods Phys Res B 2000; 160: 216-20.
- Ziegler JF. SRIM & TRIM [Internet]. [cited 2020 Dec 22]. Available from: <http://www.srim.org/>
- Ziegler J, Andersen H. Helium stopping powers and ranges in All element. New York: Pergamon; 1977.
- Rostampour M, Aboudzadeh MR, Sadeghi M, Hamidi S. Theoretical assessment of production routes for  $^{63}\text{Zn}$  by cyclotron. J Radioanal Nucl Chem 2016; 309: 677-84.
- Koning A, Hilaire S, Goriely S. TALYS1.95 A nuclear reaction program User manual. 1<sup>th</sup> ed. Netherlands: NRG; 2019.
- Kakavand T, Mirzaii M, Eslami M, Karimi A. Nuclear model calculation and targetry recipe for production of  $^{110m}\text{In}$ . Appl Radiat Isot 2015; 104: 60-6.



14. Eslami M, Kakavand T. Simulation of the direct production of  $^{99m}\text{Tc}$  at a small cyclotron. Nucl Instrum Methods Phys Res B 2014; 329: 18-21
15. Sharifian M, Sadeghi M, Alimohamadi M. Calculation of  $^{89}\text{Y}(p,x)^{86,88,89g}\text{Zr}$ ,  $^{86g,87g,88g}\text{Y}$ ,  $^{85g}\text{Sr}$ , and  $^{84}\text{Rb}$  reaction cross sections based on level density. Appl Radiat Isot 2019; 151: 25-9.
16. Rostampour M, Sadeghi M, Aboudzadeh MR, Hamidi S, Hosseini SF. Validation of GEANT4 simulations for  $^{62,63}\text{Zn}$  yield estimation in proton induced reactions of natural copper. Nucl Instrum Methods Phys Res B 2017; 394: 141-4.
17. Pognant F, Penfold S, Asp J, Takhar P, Jackson P. GEANT4 simulation of cyclotron radioisotope production in a solid target, Med Phys 2016; 32: 728-34.
18. Cirrone GAP, Cuttone G, Dirose F, Pandola L, Romano F, Zhang Q. Validation of the Geant4 electromagnetic photon cross-section for elements and compounds. Nucl Instrum Methods Phys Res A 2010; 618: 315-22.
19. User Documentation | geant4.web.cern.ch [Internet]. [cited 2020 Dec 22]. Available from: [https://geant4.web.cern.ch/support/user\\_documentation](https://geant4.web.cern.ch/support/user_documentation)

# CALCULATION OF CROSS SECTION AND PRODUCTION YIELD OF RADIOPHARMACEUTICAL PRASEODYMIUM-139 THROUGH $^{140}\text{Ce}(\text{p}, 2\text{n})^{139}\text{Pr}$ REACTION USING GEANT4 AND TALYS NUCLEAR CODES

Farzad Isazadeh<sup>1</sup>, Akbar Abdi saray<sup>2\*</sup>

Received: 26 June, 2020; Accepted: 18 October, 2020

## Abstract

**Background & Aim:** PET is a very useful and suitable imaging method in nuclear medicine. This method uses positrons with a special energy for imaging. The elements of the lanthanide are suitable for the decay of positrons with a specific energy for use in PET. Praseodymium-139 with a half-life of 4.5 hours is one of the useful elements in the group of lanthanides that can be used in PET. In this study, the  $^{140}\text{Ce}(\text{p}, 2\text{n})^{139}\text{Pr}$  reaction to produce the useful radiopharmaceutical Praseodymium-139 was simulated by the TALYS code with four different models and also by the GEANT4 Monte Carlo code. The purpose of this simulation is to calculate the cross-sectional area of the reaction and the production efficiency of praseodymium-139 in the proton irradiated cerium-140 target.

**Materials & Methods:** The values of cross-section and production yield of Praseodymium-139 have been obtained through  $^{140}\text{Ce}(\text{p}, 2\text{n})^{139}\text{Pr}$  reaction using TALYS and GEANT4 codes and the proton projectile range changes in the cerium-140 target were simulated using SRIM and GEANT4 codes.

**Results:** Proton range changes are shown using the SRIM and GEANT4 codes in the Cerium-140 target for different energies of the entrance protons. The range of protons in cerium-140 at 22 MeV energy was calculated to be 1610 and 1637.5 micrometers, respectively. Then the cross-sectional values simulated using TALYS and GEANT4 codes for different energies of the entrance protons were compared with the experimental data. At the energy of 5.22 MeV, the cross section of Praseodymium-139 has the maximum amount in the reaction  $^{140}\text{Ce}(\text{p}, 2\text{n})^{139}\text{Pr}$ . The thickness of the production thickness was calculated from the target of cerium-140 for different proton energies. The cross-sectional values obtained in this energy using these two codes are 1150.7 and 1350.4 bar, respectively. Also, the amount of product yield in the energy of 22 MeV was calculated using these codes, 1832.1 and 1782.83  $\text{MBq}\mu\text{A}^{-1}\text{h}^{-1}$ , respectively.

**Discussion and conclusion:** Comparison of the simulation results for the product of praseodymium-139 radiopharmaceuticals through the  $^{140}\text{Ce}(\text{p}, 2\text{n})^{139}\text{Pr}$  reaction using the TALYS code and the GEANT4 and SRIM Monte Carlo methods show that they are in good agreement with the experimental data. It is also possible to simulate the desired reaction using these codes without spending a lot of time and money and laboratory materials and before the production of radiopharmaceuticals, and to predict the values of production efficiency and the appropriate range of energy for the production of radiopharmaceuticals.

**Keywords:** Praseodymium-139, GEANT4 code, TALYS code, cross section, production efficiency, accelerator.

**Address:** Department of Physics, Faculty of Science, Urmia University, Urmia, Iran.

**Tel:** +984431942042

**Email:** ak.abdi@urmia.ac.ir, aabdisaray75@gmail.com

SOURCE: STUD MED SCI 2020: 31(9): 689 ISSN: 2717-008X

<sup>1</sup> MSc Student, Department of physics, Faculty of Science, Urmia University, Urmia, Iran

<sup>2</sup> Assistant Professor, Department of physics, Faculty of Science, Urmia University, Urmia, Iran (Corresponding Author)