

بررسی اثر تنظیمات RangeCut شبیه‌ساز Geant4 در بهینه سازی برآورد محصولات ناشی

از بمباران هدف گالیمی با باریکه پروتونی ۳۰ MeV

حامد نیکو* - علی اکبر مهمان دوست خواجه داد

دانشگاه سیستان و بلوچستان، دانشکده علوم، گروه فیزیک

چکیده:

در این مقاله مقادیر مختلف RangeCut در شبیه‌سازی تولید محصولات ناشی از بمباران هدف Ga با باریکه پروتونی با انرژی ۳۰ MeV توسط شبیه‌ساز Geant4 و تغییراتی که در شکل تابع توزیع انرژی بهنجار پروتون ایجاد می‌کند مورد بررسی قرار می‌گیرد. ملاحظه می‌شود که تغییر در تابع توزیع انرژی پروتون توسط مقادیر مختلف RangeCut می‌تواند در بهینه سازی نتایج شبیه‌سازی این مساله خاص مورد استفاده قرار گیرد.

کلید واژه:

Geant4-RangeCut - شبیه‌سازی - باریکه پروتونی

مقدمه:

در شبیه‌سازی به منظور تخمین محصولات ناشی از بمباران یک هدف با باریکه پروتون با انرژی کمتر از ۱۵۰ مگا الکترون ولت، بدلیل نبود داده‌های سطح مقطع با قالب‌بندی مناسب جهت استفاده در شبیه‌ساز و همچنین دقت پایین مدل‌های فیزیکی در این انرژی‌ها، از روش‌های جایگزین استفاده می‌شود. یکی از این روش‌ها، استفاده همزمان مدل‌های فیزیکی و داده‌های تجربی بصورت سطح مقطع واکنش در شبیه‌سازی است [۱]. یکی از کاربردهای این روش در شبیه‌سازی تولید محصولی نظیر ^{22}Na ، انتخاب هدف مناسب برای بمباران و همچنین امکان‌سنجی تولید این محصول با استفاده از باریکه‌های پروتونی یا دوترونی است [۲].

قدرت بالا و ویژگی‌هایی خاص، شبیه‌ساز MCNPX را گزینه مناسبی برای این منظور معرفی می‌کند [۳]، اما با توجه به محدودیت‌های موجود در کشور و عدم دسترسی قانونی به این شبیه‌ساز، استفاده از شبیه‌ساز Geant4 جایگزین شایسته‌ای است که برخلاف MCNPX، محدودیت‌هایی همچون ممنوعیت فروش، عدم شفافیت در نحوه طراحی کد و غیره را ندارد. علاوه بر این، با توجه به ویژگی‌های زبان برنامه نویسی ++C که در طراحی شبیه‌ساز Geant4 استفاده شده و همچنین، متن باز بودن Geant4 امکان تولید کدهایی با کاربری‌های تخصصی‌تر و رابط کاربری با پیچیدگی کمتر نیز وجود دارد [۴] که این امر، اهمیت تلاش برای تکمیل و تحقیق در مورد کاربری‌های مختلف شبیه‌ساز Geant4 و بررسی تاثیر آن بر خروجی شبیه‌ساز را افزایش می‌دهد. نمونه‌ای از این تلاش‌ها بررسی تنظیمات Geant4، از جمله RangeCut، در بهینه‌سازی نتایج بدست آمده از نرم‌افزارهای مشتق شده از Geant4 می‌باشد [۵]. در این مقاله تاثیر تنظیمات RangeCut در تابع توزیع انرژی پروتون $P(E)$ و متعاقباً در برآورد محصولات ناشی از واکنش‌های $^{nat}Ga(p,x)^{68}Ge$ و $^{nat}Ga(p,x)^{65}Zn$ بررسی می‌شود. هدف گالیمی توسط باریکه پروتون با انرژی ۳۰ مگا الکترون ولت مورد تابش قرار می‌گیرد. این انرژی از این جهت انتخاب شده که اولاً داده‌های تجربی آن قبلاً چاپ شده و ثانیاً امکان انجام و تکرار واکنش با استفاده از شتابدهنده پروتونی داخل کشور وجود دارد. تولید ایزوتوپ پوزیترون دهنده مورد نیاز تحقیقات کشور، از اولویت خاصی برخوردار است. در فرایند شبیه‌سازی، هرگاه انرژی ذرات اولیه به اندازه کافی نباشد تا ذرات ثانویه‌ای تولید کنند که، حداقل فاصله‌ای به اندازه RangeCut را سیر کنند، ذرات ثانویه تولید نمی‌شوند (پایان کاهش گسسته انرژی ذره اولیه) و در هر حال ذرات اولیه تا انرژی صفر دنبال می‌شوند (کاهش پیوسته انرژی ذره) [۶]. معمولاً تنظیمات RangeCut توسط کاربر و با توجه به مساله مورد تحقیق، مقدار دهی می‌شود. مقدار پیش فرض RangeCut در Geant4 برابر ۱ mm است.

روش کار:

در این آزمایش، هدف‌های Ga، پوسته‌های Nb و موازی‌ساز گرافیتی بصورت دیسک‌هایی هم مرکز قرار گرفته‌اند [۷]. قسمت تحتانی هدف به شکل دیسک با ارتفاع ۰/۱۵ cm و شعاع ۱/۲۷ cm، در صفحه $z = -۷/۲۹$ cm به مرکز $x = 0$ و $y = 0$ واقع شده است. شبیه‌سازی مساله توسط شبیه‌ساز MCNPX انجام شده است. تابع توزیع انرژی $P(E)$ در کد MCNPX با استفاده از داده‌های خروجی تالی «f4 و f4/e4» محاسبه شد و با توجه به رابطه (۱) فعالیت محصولات مورد نظر، محاسبه شده است.

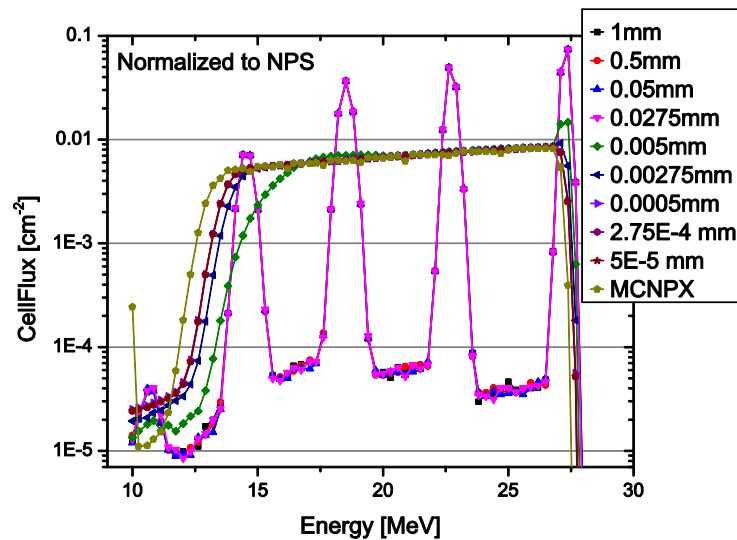


$$A(t) = \int_0^{E_{\max}} P(E)\sigma(E)dE \cdot \frac{dN_p}{dt} \cdot \rho \frac{L}{M} \cdot d \cdot (1 - e^{-\lambda t}) \quad (1)$$

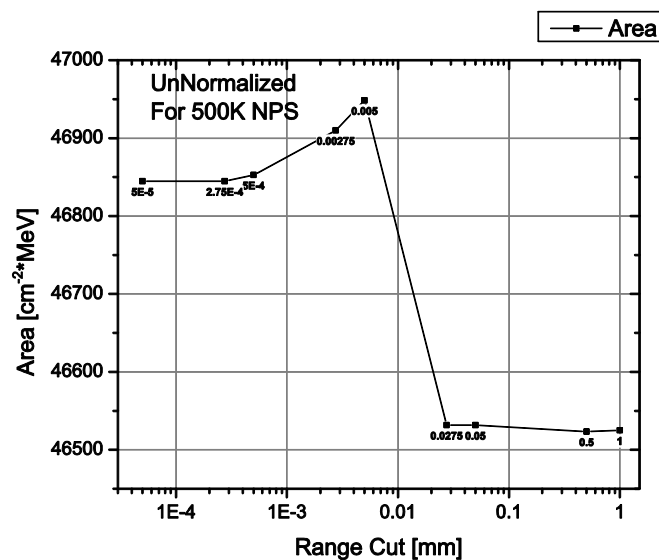
در این رابطه $A(t)$ تعداد هسته محصول، ρ چگالی ماده هدف، d ضخامت استوانه هدف، L ثابت آووگادرو، M جرم مولی ماده هدف، و λ ثابت واپاشی است. تابع محصول $P(E)\sigma(E)$ از نتایج تالی f4 و سطوح مقاطع تجربی محاسبه می‌شود. این رابطه بصورت عددی انتگرال گیری می‌شود. هدف تحقیق حاضر، برآورد محصولات با استفاده از شبیه ساز Geant4 در RangeCut های مختلف است. همچنین کلیه محاسبات MCNPX انجام شده در مرجع [۷] بازتولید شده‌اند. در شبیه‌ساز Geant4 از آشکارساز G4PSCellFlux برای بدست آوردن شارش پروتون درون هدف گالیومی در گستره انرژی، استفاده شده است. مقادیر RangeCut به روش Bisection Search تعقیب شده و مقدار اولیه آن برابر ۱ mm قرار داده شد که مقدار پیش فرض Geant4 است. شبیه‌سازی برهمکنش پروتون و هسته، توسط مدل Bertini اعمال شد و بعلاوه مدل‌های دیگری برای برخورد ناکشسان پروتون نیز بکار رفته‌اند. ذرات اولیه برابر پانصد هزار ذره در نظر گرفته شد است.

نتایج:

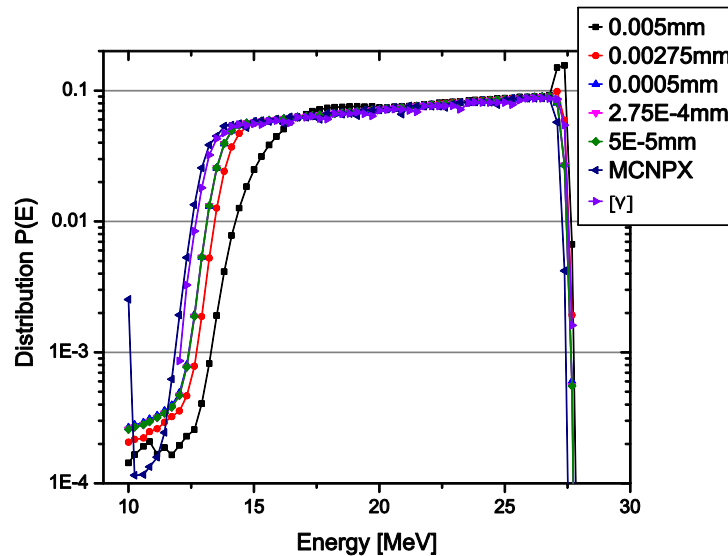
برای RangeCut بین ۱ mm تا ۰/۰۰۰۰۵ mm نمودار توزیع انرژی شار ذرات پروتون در هدف Ga توسط شبیه‌ساز Geant4 انجام شده است. شکل (۱) این نتایج را در قیاس با نتیجه به دست آمده از شبیه ساز MCNPX نشان می‌دهد. در این شکل نتیجه شبیه سازها به تعداد ذرات اولیه، بهنجار شده است. همچنین برای درک بهتر، مساحت زیر نمودارهای شکل (۱) محاسبه و در شکل (۳) نشان داده شده است. در مرجع [۷] نتایج پیشبینی تئوری تابع توزیع پروتون با نتایج تجربی بهره تولید محصولات برای باریکه پروتون ۰/۲ ± ۰/۱۴ mAh حاصل از تخمین شیمیایی مقادیر محصولات درج نشده بود که با توجه به نتایج موجود در مرجع [۷] این مقادیر محاسبه و در **Error! Unknown switch argument.** درج شد. همانطور که از شکل (۱) با کاهش مقادیر RangeCut از ۱ mm تا ۰/۰۲۷۵ mm نمودار برای مقادیر بدون تغییر باقی می‌ماند یعنی ذرات ثانویه‌ای که بتوانند حداقل این فاصله را طی کنند، تولید نمی‌شوند، اما همچنان برهمکنش‌های کشسان و ناکشسان وجود دارند و کاهش پیوسته انرژی ذره نیز ادامه پیدا می‌کند. با کاهش RangeCut تولید ذرات ثانویه افزایش می‌یابد، تا اینکه تولید متوقف می‌شود.



شکل (۲): شارش پروتون درگستره انرژی در هدف Ga به ازای RangeCut هایی از ۰/۰۰۰۰۵ mm تا ۱ mm در شبیه ساز Geant4 رسم شده است. نتیجه شبیه سازی با شبیه ساز MCNPX نیز رسم شده است.



شکل (۳): مساحت زیر نمودارهای (Error! Unknown switch argument.) برای شبیه ساز Geant4، در این شکل نشان داده شده است. ثابت شدن مساحت از یک RangeCut به بعد، بیانگر توقف تولید ذرات ثانویه می باشد.



شکل (۴). مقایسه تابع توزیع انرژی بهنجارپروتون بدست آمده از نتایج Geant4 در RangeCut های مختلف و همچنین نتایج MCNPX و نتایج تجربی مرجع [V].

جدول (۱). مقادیر محاسبه شده و برآورد محصولات با استفاده از شبیه ساز Geant4 در RangeCut های مختلف و مقایسه آن با برآورد شبیه ساز MCNPX و مقایسه هردو شبیه سازی با نتایج تجربی مرجع [V].

مرجع	Geant4						MCNPX	[V]
	RangeCut[mm]	0.005	0.00275	0.0005	0.000275	0.00005		
$\int_{-\infty}^{+\infty} P(E)\sigma(E)dE$ [mb]	$^{nat}\text{Ga}(p,x)^{68}\text{Ge}$	369.2	381	383.7	383.8	383.8	383.8	376.7
	$^{nat}\text{Ga}(p,x)^{65}\text{Zn}$	103.7	103.5	103.2	103.2	103.2	101.1	98.4
Activity(t=1h, 1μA) [μCi]	$^{nat}\text{Ga}(p,x)^{68}\text{Ge}$	29.1	30	30.2	30.3	30.3	30.3	29.7
	$^{nat}\text{Ga}(p,x)^{65}\text{Zn}$	10.3	10.3	10.3	10.3	10.3	10.1	9.8
Yield ^a [mCi]	^{68}Ge	406.9	419.9	422.9	423	423	423.6	415.2
	^{65}Zn	77.5	77.3	77.1	77.1	77.1	75.8	73.5
Radiochemical ^b is % of theory	^{68}Ge	78.9	76.4	75.9	75.9	75.9	75.8	77.3
	^{65}Zn	86.5	86.6	86.9	86.9	86.9	88.4	91.2

^a For 14±0.2mAh Integrated beam

^b Uncertainties for radiochemical assay were 3-5% [V]

بحث و نتیجه گیری:

با بررسی نتایج (Error! Unknown switch argument. مشاهده می‌شود که توزیع انرژی شار پروتون مربوط به فواصل ۱ mm تا ۰/۰۰۲۷۵ mm تفاوت فراوانی با نتایج MCNPX دارد. همانطور که در Error! Unknown switch argument. دیده می‌شود، از RangeCut برابر ۰/۰۰۰۵ mm به بعد روند تغییر این مساحت کند و به تدریج نمودار ثابت می‌شود که به نوعی نشان دهنده عدم تولید ذرات ثانویه اضافی نسبت به RangeCut های بزرگتر و یکسان شدن شکل نمودارهاست. نتایج گزارش شده در Error! Unknown switch argument. با توجه به عدم قطعیت ۳ تا ۵ درصدی موجود در نتایج تجربی مرجع [۷]، تطابق خوبی بین نتایج شبیه سازهای Geant4 و MCNPX نشان می‌دهد. بنابراین با توجه به گستره انرژی و سطح مقطع های بکار رفته، کاهش RangeCut از ۰/۰۰۰۵ mm تغییر چندانی در نتایج ایجاد نمی‌کند. البته نتایج به دست آمده شدیداً تابع هندسه، نوع و ترکیب ماده هدف و سطح مقطع های بکار رفته است.

مراجع:

[۱] Fassbender, M., et al., Proton beam simulation with MCNPX/CINDER'90: Germanium metal activation estimates below 30 MeV relevant to the bulk production of arsenic radioisotopes, Applied Radiation and Isotopes 70, 72-75, 2012.

[۲] نیکو، حامد، شبیه سازی تولید چشمه پوزیترون دهنده Na-22 با استفاده از باریکه پروتون با انرژی کمتر از ۳۰ مگاالکترون ولت توسط شبیه ساز MCNPX، پایان نامه کارشناسی ارشد، دانشگاه سیستان و بلوچستان، آذر ۱۳۹۰.

[۳] <http://mcnpx.lanl.gov>

[۴] <http://geant4.cern.ch>

[۵] Grevillot, L, et al., Optimization of GEANT4 settings for Proton Pencil Beam Scanning simulations using GATE, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B 268, 3295-3305, 2010

[۶] Geant4 Collaboration, Geant4 User's Guide for Application Developers, geant4 9.5.0, 2011

[۷] Fassbender, M., et al., Proton beam simulation with MCNPX: estimates below 30 MeV relevant to the bulk production of ⁶⁸Ge and ⁶⁵Zn, Nuclear Instrument and Methods in Physics Research B 261, 742-746, 2007