

Надежность сечений рождения нейтронов в GEANT4 для приложений моделирования протонной терапии

Г. И. Быхало¹, К. А. Стопани²

¹)МГУ им. М. В. Ломоносова, физический факультет, Москва 119991

²)МГУ им. М. В. Ломоносова, НИИЯФ им. Д. В. Скобельцына, Москва 119991

E-mail: gi.bykhalo@physics.msu.ru

8 ноября 2016 г.

Аннотация

В работе рассматривается надежность сечений выхода нейтронов под действием пучка протонов на входящих в состав биологических тканей изотопах ^{12}C — ^{127}I в пакете Монте-Карло моделирования GEANT4, широко используемом для расчетов доз в протонной пучковой терапии. Ввиду отсутствия экспериментальных данных по выходу нейтронов на большинстве рассматриваемых изотопов полученные в результате моделирования сечения сравниваются с теоретическим расчетом, выполненным с помощью пакета моделирования ядерных реакций TALYS, а рассчитанные с его помощью сечения парциальных реакций сравниваются с доступными результатами экспериментальных измерений. Отмеченные в процессе сравнения расхождения свидетельствуют о значительной неопределенности в расчете доз, обусловленных нейтронами, рождаемыми в реакциях на рассмотренных изотопах.

УДК: 539.16.04

Ключевые слова: метод Монте-Карло, протонная пучковая терапия, ядерные реакции

1 Введение

Преимущества использования пучков тяжелых заряженных частиц для лечения онкологических заболеваний известны достаточно давно. Благодаря наличию у тяжелых заряженных частиц пика Брэгга в функции зависимости удельных потерь энергии от глубины проникновения возможна точная локализация поглощенной дозы в заданном объеме с минимальным поражением соседних здоровых областей. Современный обзор проблематики протонной и ионной пучковой терапии с точки зрения ядерной физики содержится в [1]. Несмотря на принципиальные преимущества данной методики, до сих пор не более 1% процедур лучевой терапии выполняются с ее использованием. Одним из важных факторов, препятствующих развитию данного метода лучевой терапии, является ориентированность существующих систем планирования облучения на использование пучков гамма-квантов. Используемые в них приближенные методы расчета дозовых распределений не применимы для описания сложных процессов с образованием большого количества вторичных частиц, которые протекают под действием пучков тяжелых заряженных частиц с энергиями до нескольких сотен МэВ. В этой связи в настоящее время большое внимание уделяется возможности практического использования метода Монте-Карло (МК) для дозовых расчетов в данной области. Множество работ посвящено вопросам валидации результатов расчетов МК-пакетов, что необходимо для широкого внедрения этого подхода.

В данной работе рассматривается надежность расчета выхода нейтронов в GEANT4, одном из наиболее распространенных пакетов МК-моделирования [2]. Нейтронное излучение представляет собой большую опасность благодаря своему биологическому действию и высокой проникающей способности, в результате чего нейтроны, рождаемые в процессах взаимодействия протонов и ионов высоких энергий с ядрами среды, являются основным источником дозы, выделяемой вне поля облучения. Ряд работ, таких как [3, 4] посвящен уточнению сечений реакций с образованием нейтронов, идущих на отдельных изотопах: на ядрах вольфрама, используемого для изготовления многолепестковых коллиматоров пучка и реакций $^{12}\text{C}(\text{p}, \text{pn})^{11}\text{C}$, $^{16}\text{O}(\text{p}, \text{pn})^{15}\text{O}$, применяемых для контроля дозы методом позитронно-эмиссионной томографии *in vivo*. Настоящая работа посвящена сечениям реакций выхода нейтронов под действием протонного пучка на изотопах, входящих в состав биологических тканей.

2 Расчет сечений выхода нейтронов на изотопах ^{12}C – ^{127}I

Обычный подход к оценке надежности расчетных моделей заключается в сравнении полученных в моделировании данных с результатами экспериментальных измерений. В данном случае прямое сравнение сечений выхода нейтронов $\sigma(p, xn)$ при характерных энергиях протонов лучевой терапии (до нескольких сотен МэВ) с экспериментальными данными на большинстве изотопов не является возможным. В отличие от сечений реакций под действием нейтронов σ_n , прежде всего реакций радиационного захвата и деления, для которых в силу практических, а также исторических причин доступны надежные и полные библиотеки сечений [5], экспериментальные данные по реакциям выхода нейтронов под действием протонов в широком диапазоне энергий для большинства стабильных изотопов практически отсутствуют. Имеющиеся в литературе экспериментальные данные по интегральным сечениям реакций с вылетом нейтронов в основном получены с помощью активационной методики, поэтому в большинстве случаев вместо полного сечения выхода нейтронов доступны интегральные сечения парциальных реакций, т. е. реакций с выходом определенного конечного ядра. В этой ситуации решением может быть сравнение сечений $\sigma(p, xn)$, рассчитанных с помощью GEANT4, с соответствующими сечениями, полученными с использованием надежных теоретических моделей ядерных реакций. При этом рассчитанные с помощью этих моделей сечения отдельных парциальных реакций в свою очередь сравниваются с доступными экспериментальными данными. Данный подход реализован в настоящей работе.

С помощью написанной для GEANT4 программы моделирования эксперимента по облучению тонкой моноизотопной мишени пучком протонов были рассчитаны сечения рождения нейтронов на ядрах мишени $\sigma(p, xn)$. Для этого геометрическая схема моделирования включала в себя мишень из исследуемого вещества с толщиной, равной 0.1 от средней длины пробега протонов с данной энергией в данном веществе, и идеальный детектор, регистрирующий все вылетающие из мишени нейтроны. Отметим, что GEANT4 в принципе позволяет получить таблицы использованных в нем сечений ядерных реакций и без детального моделирования прохождения частиц пучка в мишени, однако использованный в данной работе подход позволяет получить результат с учетом всего цикла МК-моделирования, т. е. учесть и влияние промежуточных процессов, происходящих с

моделируемыми частицами. Важно отметить также, что тонкие мишени являются необходимым требованием при измерении сечений реакций под действием протонов из-за малости величины их пробега при рассматриваемых энергиях. Для каждого из выбранных изотопов рассчитывалось полное сечение рождения нейтрона $\sigma(p, xn)$ под действием протонов с энергиями от порога реакций до 150 МэВ. Расчеты проводились для ядер ^{12}C , ^{14}N , ^{16}O , ^{23}Na , ^{24}Mg , ^{31}P , ^{32}S , ^{35}Cl , ^{39}K , ^{40}Ca , ^{56}Fe , ^{127}I .

Полученные в результате расчета сечения выхода нейтронов сравнивались с результатом соответствующего расчета, выполненного с помощью TALYS, специализированного пакета моделирования ядерных реакций в области энергий до 200 МэВ [6]. Сечение выхода нейтронов рассчитывалось как

$$\sigma(p, xn) = \sum_i x_i \sigma_i,$$

где σ_i — сечение i -го парциального канала реакции, x_i — число нейтронов, вылетающих в данном канале. При расчете сечений парциальных реакций в TALYS учитывается вклад различных механизмов реакции: прямой вылет нуклонов, α , d , t , учтенный с помощью метода связанных каналов, экситонная модель предравновесного механизма реакции, вылет нескольких нуклонов в модели составного ядра, а также деление. Сравнение сечений $\sigma(p, xn)$, полученных с помощью МК-моделирования GEANT4 и сечений TALYS, показано на рис. 1.

В состав GEANT4 включено несколько стандартных пакетов физических моделей, рекомендуемых для проведения расчетов в области радиомедицины: QGSP_BERT_HP, QGSP_BIC_HP, Shielding, QGSP_INCLXX_HP. Вычисления проводились с каждым из этих пакетов, и результаты представлены на графике точками соответствующего цвета. Также, для QGSP_BERT_HP были проведены расчеты с отключенным модулем радиоактивного распада (обозначение “noddecay” на рисунках) и с отключенным пакетом сечений поглощения нейтронов на основе БД ENDF [5] (символ “QGSP_BERT”). Из представленных графиков видно, что имеется значительное (до нескольких раз) расхождение между сечениями $\sigma(p, xn)$ в разных пакетах моделей GEANT4. Точки, соответствующие пакетам QGSP_BERT_HP и Shielding, практически сливаются, поскольку в них используется одна и та же модель интраядерного каскада для описания процесса взаимодействия протона с ядрами. С ними также совпадают точки “noddecay” и QGSP_BERT, что говорит

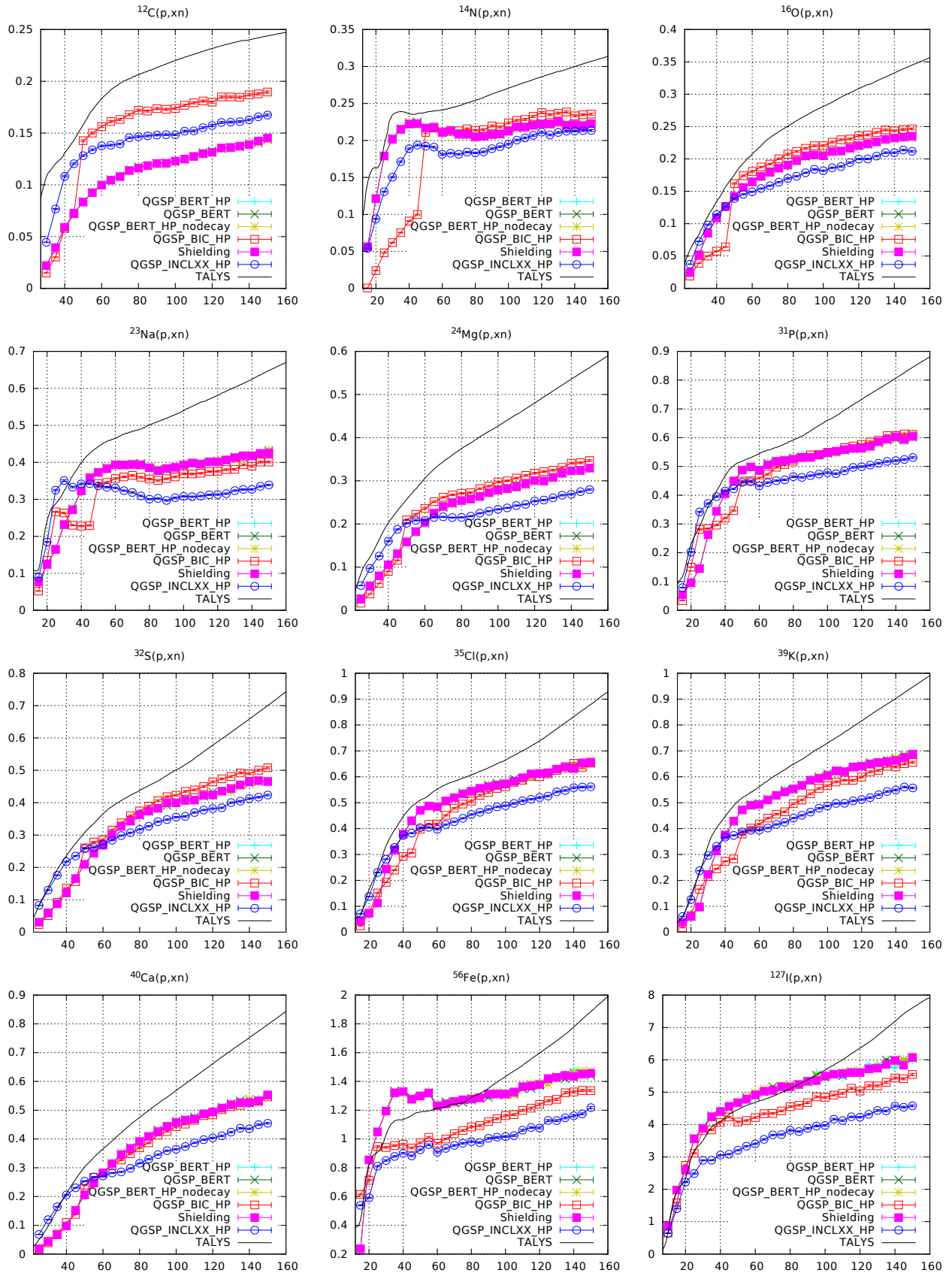


Рис. 1: Сечения выхода нейтронов $\sigma(p, xn)$ на ядрах ^{12}C , ^{14}N , ^{16}O , ^{23}Na , ^{24}Mg , ^{31}P , ^{32}S , ^{35}Cl , ^{39}K , ^{40}Ca , ^{56}Fe , ^{127}I , рассчитанные с помощью TALYS (черная кривая) и GEANT4 (точки с указанием границ статистической ошибки). Энергия протона на оси абсцисс указана в МэВ, сечение выхода нейтронов на оси ординат указано в мб.

об отсутствии влияния модуля радиоактивного распада и библиотеки нейтронных сечений на $\sigma(p, xn)$. Скачок в сечении QGSP_BIC_HP, заметный в области 50 МэВ, связан с внутренним порогом данной модели. В целом, сечения выхода нейтронов, полученные с помощью стандартных пакетов GEANT4 для одних и тех же реакций достаточно заметно отличаются друг от друга, причем наибольшее отличие наблюдается при энергиях до приблизительно 50 МэВ.

Сравнение результатов GEANT4 с сечениями TALYS также обнаруживает значительные расхождения, в первую очередь на легких ядрах ^{12}C и ^{14}N . Практически во всех рассмотренных случаях сечение, рассчитанное с помощью TALYS, превышает результат расчета на GEANT4, в особенности при энергии протона выше 100 МэВ. Наилучшее согласие с расчетом TALYS показывает пакет моделей QGSP_BERT_HP и Shielding.

В соответствии с описанным выше подходом теоретические сечения парциальных реакций с вылетом одного или нескольких нуклонов на рассматриваемых ядрах, рассчитанные с помощью TALYS, сравниваются с экспериментальными данными, доступными в литературе. На рис. 2 и 3 показано сравнение сечений реакций перезарядки (p, n) на ядрах ^{23}Na и ^{56}Fe , полученных с помощью TALYS с результатами экспериментальных измерений [7, 8, 9, 10, 11, 12]. Видно, что результат теоретического расчета согласуется с экспериментальными данными в пределах ошибок измерений. На рис. 4 приведено сравнение результатов теоретического расчета и экспериментально измеренных интегральных сечений парциальных реакций $^{56}\text{Fe}(p, n)^{56}\text{Co}$, $^{56}\text{Fe}(p, 2n)^{55}\text{Co}$, $^{56}\text{Fe}(p, 3p)^{54}\text{Mn}$, $^{56}\text{Fe}(p, 3p2n)^{52g.s.}\text{Mn}$ в области энергий от 7 до 100 МэВ. Можно отметить очень хорошее согласие теоретического расчета с экспериментом для реакций с вылетом небольшого числа нуклонов, которое несколько ухудшается по мере увеличения числа вылетающих частиц. Таким образом, теоретические сечения парциальных реакций с вылетом нейтронов, рассчитанные с помощью TALYS можно считать достаточно надежными для целей оценки сечений выхода нейтронов $\sigma(p, xn)$, и сделанные при сравнении с TALYS выводы также будут справедливыми и при использовании экспериментальных сечений.

Необходимо отметить, что полученные в результате сравнения расхождения свидетельствуют о значительной неопределенности в расчете в GEANT4 нейтронных доз, выделенных вне поля облучения нейтронами, рождающимися на изотопах биологических тканей.

По всей видимости, для обеспечения требуемой достоверности результатов дозиметрических расчетов необходимы экспериментальные измерения выхода нейтронов под действием протонов с энергиями до нескольких сотен МэВ, в первую очередь на легких изотопах ^{12}C , ^{14}N и ^{16}O .

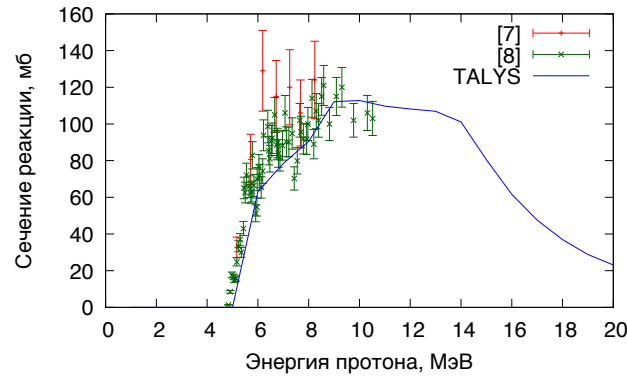


Рис. 2: Сравнение теоретического интегрального сечения реакции $^{23}\text{Na}(p,n)^{23}\text{Mg}$, рассчитанного с помощью TALYS (кривая) с экспериментальными сечениями из работ [7, 8].

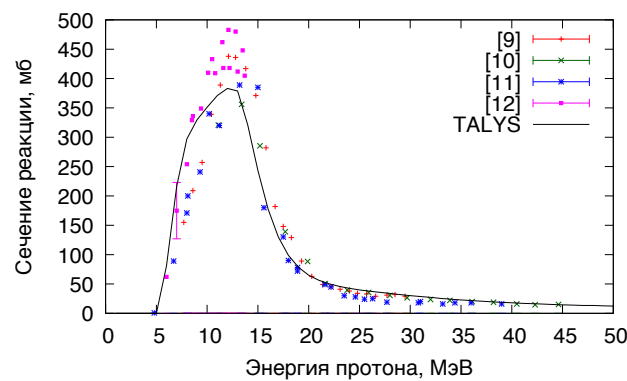


Рис. 3: Сравнение теоретического интегрального сечения реакции $^{56}\text{Fe}(p,n)^{56}\text{Co}$, рассчитанного с помощью TALYS (кривая) с экспериментальными сечениями из работ [9, 10, 11, 12].

3 Заключение

В работе рассматривался вопрос надежности сечений реакций выхода нейтронов под действием пучка протонов при моделировании методом Монте-Карло в пакете GEANT4 в задачах дозиметрических расчетов протонной лучевой терапии. Рассчитывались сечения выхода нейтронов $\sigma(p, xn)$ на ядрах $^{12}\text{C} - ^{127}\text{I}$ путем моделирования эксперимента по рассеянию на тонкой мишени с учетом процессов перерассеяния. Ввиду отсутствия систематизированных экспериментальных данных по выходу нейтронов на изотопах ядер,

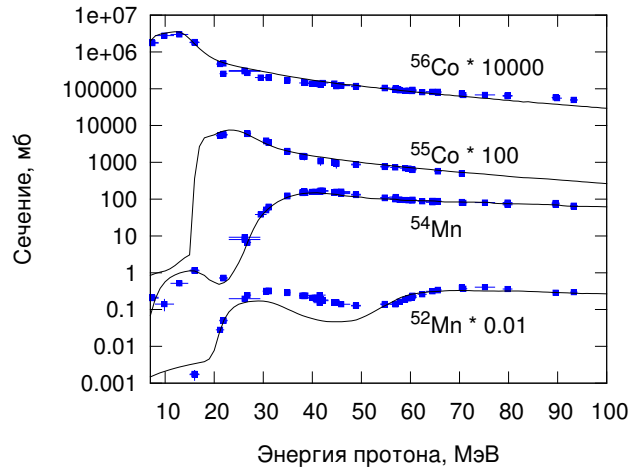


Рис. 4: Сравнение теоретических интегральных сечений парциальных реакций $^{56}\text{Fe}(p,n)^{56}\text{Co}$, $^{56}\text{Fe}(p,2n)^{55}\text{Co}$, $^{56}\text{Fe}(p,3p)^{54}\text{Mn}$, $^{56}\text{Fe}(p,3p2n)^{52g.s.}\text{Mn}$, рассчитанных с помощью TALYS соответствующими экспериментальными данными из работы [13].

входящих в состав биологических тканей, полученные сечения сравнивались с результатом теоретического расчета, выполненного с помощью пакета моделирования ядерных реакций TALYS, а рассчитанные с его помощью сечения парциальных реакций с вылетом одного или нескольких нейтронов сравнивались с доступными экспериментальными данными. Проведенное сравнение позволяет сделать вывод о достаточной точности модельных сечений TALYS для оценки надежности МК-моделирования. Сечения выхода нейтронов, рассчитанные в GEANT4 с применением различных пакетов физических процессов, рекомендованных для радиомедицинских и дозиметрических задач, значительно отличаются между собой и от сечений, полученных с помощью TALYS. На легких ядрах в области энергий до 50 МэВ отличие достигает нескольких раз. Таким образом, имеет место значительная неопределенность моделирования дозы, выделенной в протонной пучковой терапии вне поля облучения нейтронами, рожденными в реакциях на рассмотренных изотопах. Наиболее близкие к расчету TALYS результаты получены при использовании стандартных пакетов физических процессов QGSP_BERT_HP и Shielding.

Список литературы

- [1] M. Durante and H. Paganetti, Rep. Prog. Phys. **79**, 96702 (2016).
- [2] S. Agostinelli *et al.*, Nucl. Instrum. Methods Phys. Res., Sect. A **506**, 250–303 (2003).

- [3] B. Clasić *et al.*, Med. Phys. **37**, 311 (2010).
- [4] Knopf A. C. and Lomax A., Phys. Med. Biol. **58**, R131–60 (2013).
- [5] M. B. Chadwick *et al.*, Nucl. Data Sheets **112**, 2887–2996 (2011).
- [6] A.J. Koning, S. Hilaire and M.C. Duijvestijn, “TALYS-1.0,” in *Proceedings of the International Conference on Nuclear Data for Science and Technology - ND2007, May 22 - 27, 2007, Nice, France, editors O.Bersillon, F.Gunsing, E.Bauge, R.Jacqmin, and S.Leray*, EDP Sciences, 2008, p. 211–214.
- [7] D. W. Kneff *et al.*, Nucl. Phys. A **250**, 285 (1975).
- [8] F. M. Mann *et al.*, Nucl. Phys. A **256**, 163 (1976).
- [9] В. Н. Левковский, АЭ **69**, 99 (1990).
- [10] E. Gadioli *et al.*, Nuovo Cimento A **22**, 547 (1974).
- [11] I. L. Jenkins and A. G. Wain, J. Inorg. Nucl. Chem. **32**, 1419 (1970).
- [12] S. Tanaka and M. Furukawa, J. Phys. Soc. Jpn. **14**, 1269 (1959).
- [13] R. Michel *et al.*, NIM **B 129**, 153 (1997).

Reliability of the neutron yield cross sections obtained using GEANT4 for proton therapy applications

G. I. Bykhalo¹, K. A. Stopani²

¹Lomonosov Moscow State University, Faculty of Physics, Moscow 119991

²Lomonosov Moscow State University, Skobeltsyn Institute of Nuclear Physics, Moscow
119991

E-mail: gi.bykhalo@physics.msu.ru

Abstract Reliability of the proton-induced neutron yield cross sections on the ^{12}C — ^{127}I biological tissue isotopes in the GEANT4 Monte-Carlo simulation package, widely used for dosimetry calculations in proton therapy, is considered. Due to the lack of experimental data on neutron yield on most of the considered isotopes the simulated cross sections are compared to the theoretical calculation performed using the nuclear reaction package TALYS, and the partial reaction cross sections, calculated using TALYS, are in turn compared to the available experimental results. Disagreements noted in the comparison suggest a significant uncertainty in calculation of the neutron doses deposited due to reactions on the considered isotopes.

Keywords: Monte-Carlo simulations, nuclear reactions, proton therapy