

УДК 539.172.12; 539.1.04

МОДЕЛИРОВАНИЕ РЕАКЦИИ $p+^{11}\text{B} \rightarrow 3\alpha$ В СРЕДЕ ПАКЕТА Geant4

А. В. Багуля, В. М. Гришин, И. Н. Завестовская, В. А. Рябов

С целью увеличения поглощенной дозы в пике Брэгга для протонной терапии предлагается использовать реакцию $p+^{11}\text{B} \rightarrow 3\alpha$, реализация которой отсутствует в программном пакете Geant4. В работе предложена упрощенная модель данной реакции, которая позволит проводить ее полномасштабное моделирование. Модель полностью совместима с программным пакетом Geant4 и может быть встроена в него. Обсуждаются предсказания модели и фоновые события от других процессов.

Ключевые слова: протон, бор-11, альфа-частица, пик Брэгга.

Введение. Протонная терапия онкологических заболеваний становится всё более распространённой медицинской технологией [1]. Причина состоит в том, что энерговыделение на треке имеет максимум в конце трека, к которому можно привязать область опухоли. На рис. 1 показана зависимость полного энерговыделения при прохождении пучка протонов с начальной энергией 200 МэВ от глубины трека в воде. Вычисления были проведены в среде программного пакета Geant4 [2–4] (версия 10.2), используя стандартный пакет электромагнитных процессов и ядерный бинарный каскад (binary cascade, BIC). Последний обеспечивает для полного энерговыделения хорошее согласие с экспериментом [5]. Видно, что энерговыделение, поглощенная доза излучения, имеет широкое плато и максимум в конце трека, т. е. пик Брэгга, где плотность дозы в 2–4 раза больше, чем на плато. Для увеличения этого отношения, т. е. для снижения относительной дозы, поглощенной в здоровых тканях на плато, предлагались различные способы, в частности добавки в опухоль наночастиц тяжелых металлов или изотопов, которые испускали бы короткопробежные частицы под действием протонов. В настоящее время большой интерес вызывает реакция с участием изотопа ^{11}B : $p+^{11}\text{B} \rightarrow 3\alpha$ [6]. В настоящей работе предложена упрощенная теоретическая модель этой реакции,

не реализованная до настоящего времени в пакете Geant4, и разработаны программные средства, позволяющие включить её в состав данного пакета.

Для единообразия большинство расчетов в данной работе проведены для энергии первичных протонов 200 МэВ, потому что эта энергия является одной из наиболее часто используемых в радиационной терапии.

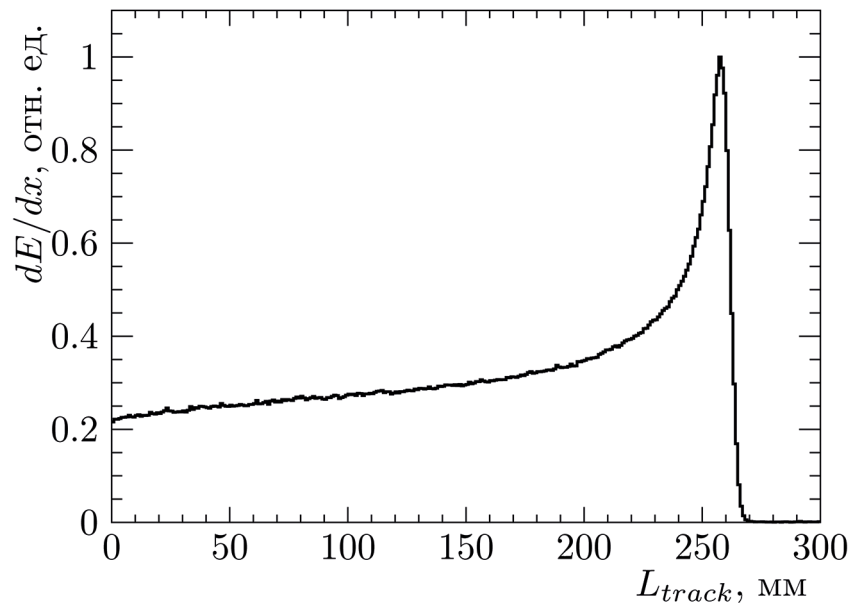


Рис. 1: Зависимость энерговыведения на треке протона с начальной энергией 200 МэВ в воде от глубины трека.

Модель реакции $p+^{11}\text{B} \rightarrow 3\alpha$. Упрощенная модель реакции $p+^{11}\text{B} \rightarrow 3\alpha$ состоит из двух процессов. Предполагается, что в первом протон взаимодействует с остаточным кластером в ядре ^{11}B и образующаяся альфа-частица забирает весь импульс протона. Остающееся возбужденное ядро ^8Be распадается на две альфа-частицы, которые испускаются изотропно в противоположные стороны с равными энергиями. Величина последних определяется общим энергетическим балансом. Таким образом, модель обеспечивает выполнение закона сохранения энергии и импульса, что вполне достаточно для большинства приложений.

Для согласования с пакетом Geant4 новая модель использует принятый в этом пакете объектно-ориентированный интерфейс. Чтобы выполнить моделирование, сначала необходимо обеспечить вычисление интегрального сечения рассматриваемой реакции, которое определяет среднюю длину свободного пробега. На рис. 2 показана зависимость полученного с помощью новой модели интегрального сечения реакции $p+^{11}\text{B} \rightarrow 3\alpha$ от

энергии протона. Сечение имеет острый пик при энергиях протона 0.4–0.6 МэВ. Сплошная линия соответствует вычислениям с помощью новой модели, точки – результатам экспериментов из базы данных по ядерным реакциям EXFOR [6].

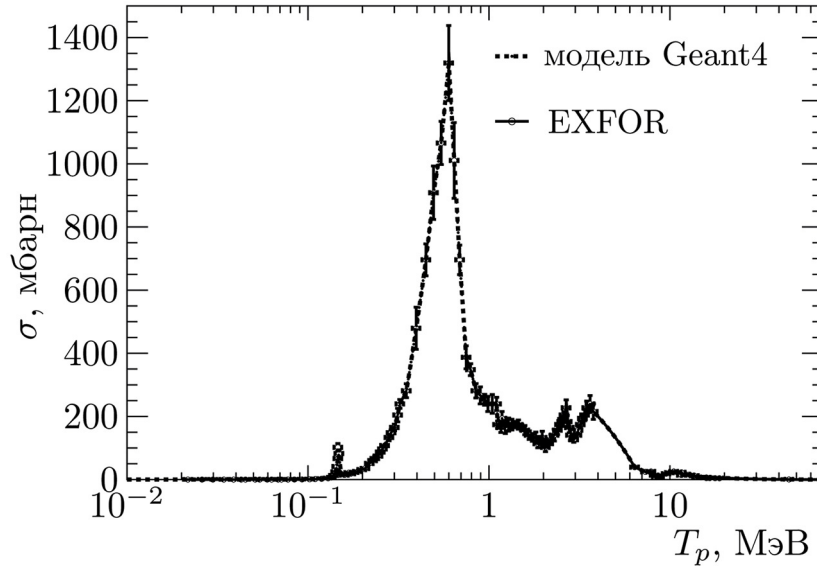


Рис. 2: Зависимость интегрального сечения реакции $p+^{11}\text{B} \rightarrow 3\alpha$ от энергии протона. Сплошная линия – результат вычисления с использованием предложенной модели, точки из базы данных EXFOR [6].

Было выполнено моделирование реакции $p+^{11}\text{B} \rightarrow 3\alpha$ с использованием физического листа QVBS (набора физических моделей), в который была встроена новая модель. Энергетические спектры конечных альфа-частиц реакции для начальной энергии протона 200 МэВ показаны на рис. 3. Гистограмма на этом рисунке, как и на всех последующих, где по оси ординат отложено число α -частиц, нормирована на один первичный протон. Поскольку максимальное сечение реакции приходится на энергии протона меньше 1 МэВ, максимум вблизи 1 МэВ отвечает первой альфа-частице. Вторым максимумом около 6 МэВ отвечает альфа-частицам от распада ^8Be с высвобождением энергии связи 8.7 МэВ.

Фоновые процессы рождения альфа-частиц. При моделировании процесса замедления протонов в водном фантоме был обнаружен заметный фон рождения альфа-частиц от других процессов. На рис. 4 показаны зависимости выхода альфа-частиц от глубины трека протона с начальной энергией 200 МэВ в воде. Показаны вклады от неупругих ядерных взаимодействий начального протона, вторичных нейтронов и распадов возбужденных ядер.

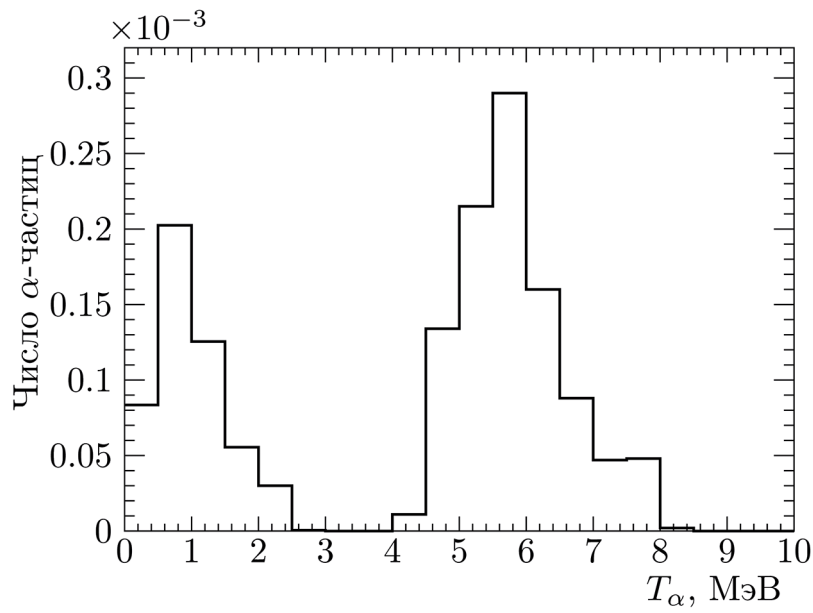


Рис. 3: Энергетические спектры конечных альфа-частиц, полученные при моделировании реакции $p+^{11}B \rightarrow 3\alpha$ с использованием предлагаемой модели.

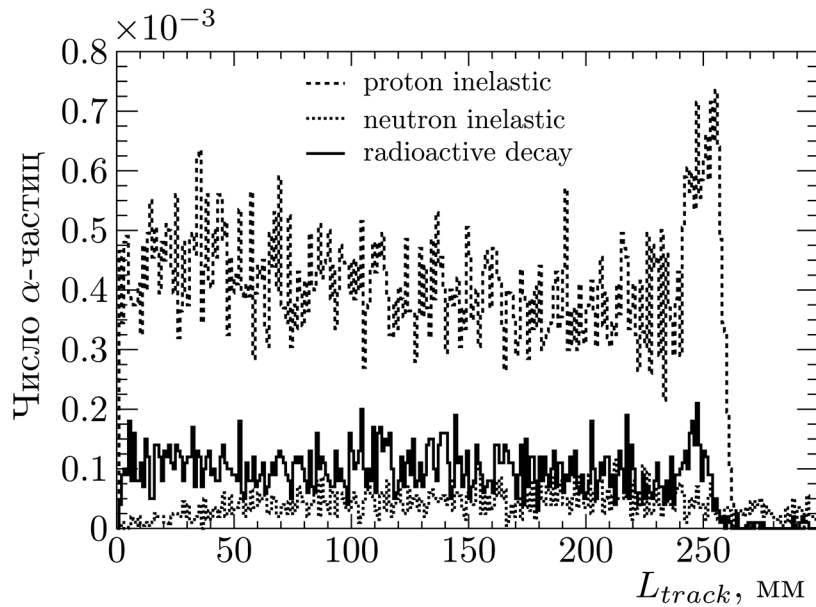


Рис. 4: Зависимости выхода альфа-частиц от глубины трека протона с начальной энергией 200 МэВ в воде. Показаны вклады от неупругих ядерных взаимодействий начального протона, вторичных нейтронов и распадов возбужденных ядер.

В табл. 1 представлены относительные вклады различных процессов (в процентах) в образование альфа-частиц (в абсолютных единицах) для трех каскадных моделей Geant4 (бинарный каскад – BIC, каскад Бертини – BERTINI, каскад, разработанный в университете Льежа – INCLX [2–4]). Видно, что основной вклад 71–76% дают неупругие ядерные процессы с участием первичного протона. Альфа-частицы от радиоактивных распадов составляют примерно 20% от общего числа. Остальные альфа-частицы рождаются в неупругих ядерных взаимодействиях вторичных нейтронов. Они более широко распределены в области вокруг трека первичного протона (рис. 4).

Т а б л и ц а 1

Относительные вклады различных процессов в образование альфа-частиц для трех каскадных моделей Geant4

Физический лист	QBBC	QGSP_BERT_HP	QGSP_INCLX_HP
Неупругое ядерное рассеяние протона	76	71	75
Неупругое ядерное рассеяние нейтрона	7	6	8
Радиоактивный распад	17	23	17
Выход альфа-частиц на 1 протон	0.15	0.1	0.17

На рис. 5 показан энергетический спектр фоновых альфа-частиц от ядерных процессов каскадных моделей Geant4. Его максимум довольно близок к максимуму спектра распадных альфа-частиц предлагаемой модели. Более того, наибольшее число фоновых альфа-частиц рождается как раз в области пика Брэгга. Это связано с характером зависимости интегрального сечения неупругих столкновений протона с ядрами от энергии (рис. 6).

На рис. 6 показана зависимость интегрального сечения неупругих столкновений протона с ядрами углерода от энергии протона. Сплошная линия соответствует модели Барашенкова–Глаубера–Грибова из пакета Geant4, точки – значениям из базы экспериментальных данных [7]. Сечение имеет максимум в области около энергии протона 20 МэВ. Эти энергии как раз отвечают пику Брэгга.

Также изучался выход фоновых альфа-частиц от различных ядерных процессов в пакете Geant4. Энергетические спектры альфа-частиц показаны на рис. 7. В частности,

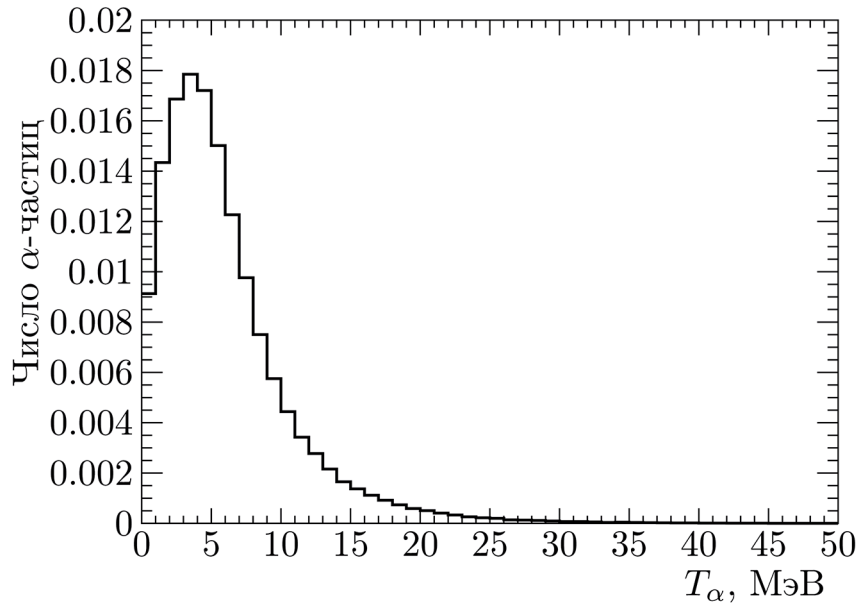


Рис. 5: Энергетический спектр фоновых альфа-частиц от процессов каскадных моделей Geant4.

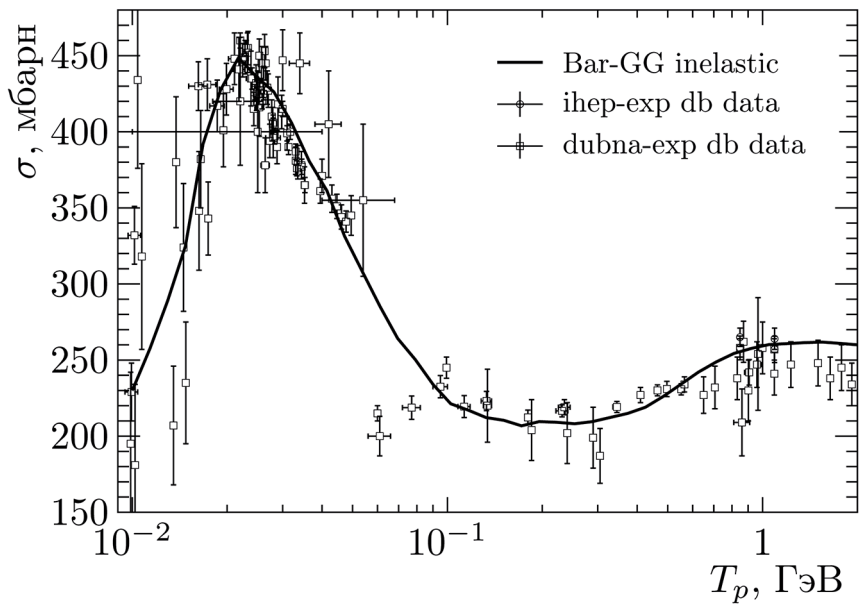


Рис. 6: Зависимость интегрального сечения неупругих столкновений протона с ядрами углерода от энергии протона. Сплошная линия – модель Барашенкова–Глаубера–Грибова из пакета Geant4. Точки – базы экспериментальных данных [7].

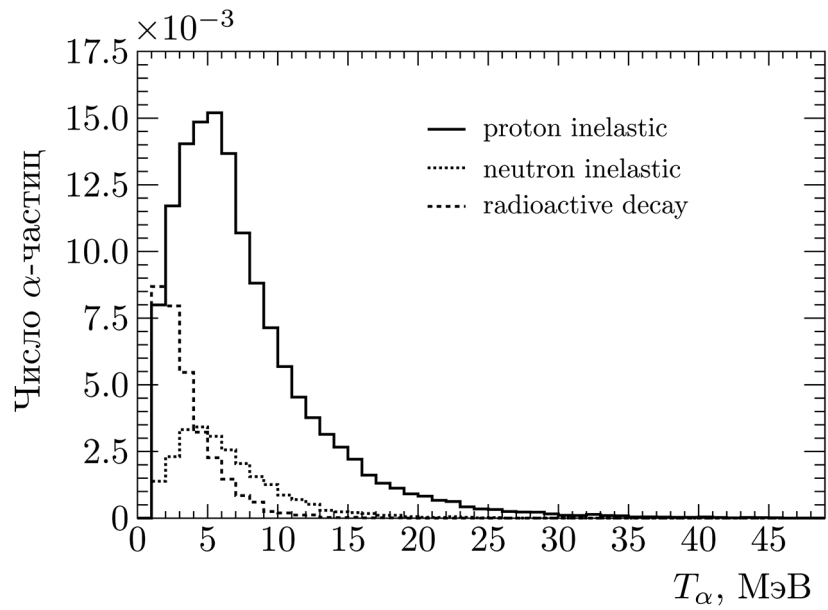


Рис. 7: Энергетические спектры фоновых альфа-частиц от различных ядерных процессов в пакете Geant4.

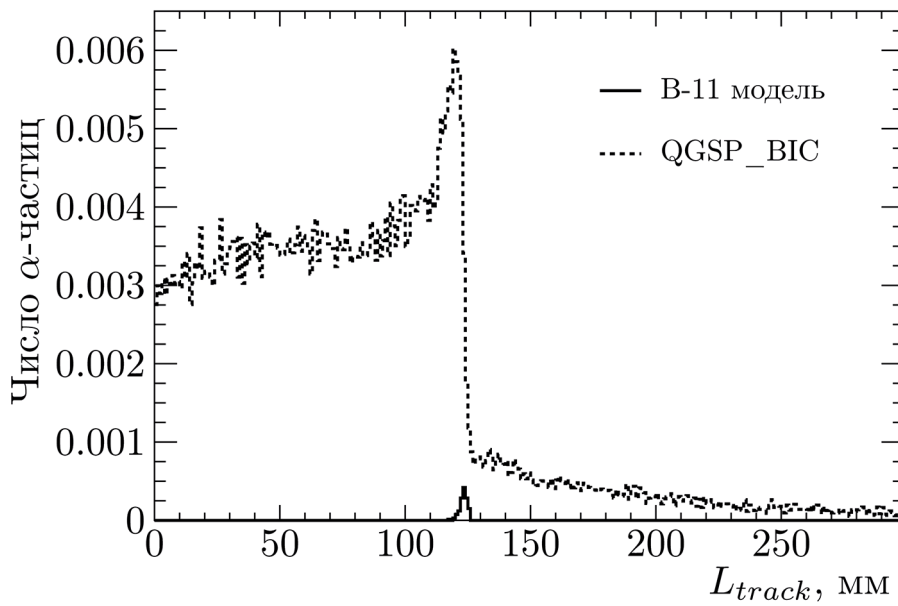


Рис. 8: Зависимости выхода альфа-частиц от протона с начальной энергией 200 МэВ в боре-11.

в этом процессе моделирования в качестве рабочей среды использовался усредненный материал тела человека. Обычно в первом приближении в качестве фантома использу-

ется вода, но в пакете Geant4 реализован и ряд более сложных материалов, доступных для использования. Неупругие ядерные процессы с участием первичного протона и вторичных нейтронов дают спектр с максимумом около 5–6 МэВ. Спектр альфа-частиц от распадов возбужденных ядер мягче и его максимум отвечает области около 2 МэВ.

Для выяснения фоновых условий предложенной реакции было проведено моделирование выхода альфа-частиц в ядерном бинарном каскаде при использовании в качестве материала изотопа бор-11.

На рис. 8 показаны зависимости выхода альфа-частиц от протона с начальной энергией 200 МэВ в боре-11. Выход альфа-частиц из ВИС каскада Geant4 примерно в 30 раз превышает выход предлагаемой модели в её пределах по энергии протона (0.3–1 МэВ).

Заключение. В качестве заключения кратко отметим основные результаты данной работы:

- Разработаны и реализованы в программном пакете Geant4 интегральное сечение и генератор конечного состояния для реакции $p + {}^{11}\text{B} \rightarrow \alpha + {}^8\text{Be}^* \rightarrow 3\alpha + 8.7(9) \text{ МэВ}$, что позволит расширить функциональность программного пакета.

- Моделирование с использованием имеющихся внутриядерных каскадных генераторов Geant4 показывает, что протоны (вторичные нейтроны) создают альфа-частицы испарительного спектра (модель Ферми испарения ядер) и от распадов вторичных нестабильных изотопов биологических материалов (кислород).

- Число альфа-частиц от каскадов по крайней мере на порядок превосходит ожидаемые выходы альфа-частиц от реакции на изотопе В-11.

Несмотря на то, что каскадные модели обеспечивают хорошее описание пика Брэгга в терминах потерь энергии протонов (имеющих в основном электромагнитный характер), выход фоновых альфа-частиц в ядерных каскадных моделях Geant4 выглядит сильно завышенным, примерно на один-два порядка [8], относительно экспериментальных данных. Этот вопрос исследуется в сотрудничестве с экспертами Geant4.

Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки России в рамках Соглашения № 075-15-2021-1347.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] *Ion Beam Therapy, Fundamentals, Technology, Clinical Applications*. Ed. By U. Linz (Springer-Verlag, Berlin Heidelberg, 2012).

- [2] S. Agostinella, J. Allison, K. Amako, et al., Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. A **506**, 250 (2003). DOI: 10.1016/S0168-9002(03)01368-8.
- [3] J. Allison, K. Amako, J. Apostolakis, et al., IEEE Trans. Nucl. Sci. **53**(1), 270 (2006). DOI: 10.1109/TNS.2006.869826.
- [4] J. Allison, K. Amako, J. Apostolakis et al., Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. A **835**, 186 (2016). DOI: 10.1016/j.nima.2016.06.125.
- [5] А. В. Багуля, М. С. Владимиров, В. Н. Иванченко и др., Краткие сообщения по физике ФИАН **36**(5), 3 (2009). DOI: 10.3103/S1068335609050017.
- [6] G. A. P. Cirrone, L. Manti, D. Margarone, et al., Sci. Rep. **8**, 1141 (2018). DOI: 10.1038/s41598-018-19258-5.
- [7] V. Grichine, Eur. Phys. J. C **62**, 399 (2009). DOI: 10.1140/epjc/s10052-009-1033-z.
- [8] V. Ivanchenko, Recent modifications of the de-excitation module, report at Geant4 hadronic group meeting, Nov 16, 2022. <https://indico.cern.ch/event/1219152>.

Поступила в редакцию 22 февраля 2023 г.

После доработки 7 марта 2023 г.

Принята к публикации 9 марта 2023 г.