

České vysoké učení technické v Praze  
Fakulta jaderná a fyzikálně inženýrská

Katedra jaderných reaktorů

Obor: Jaderné inženýrství



Charakterizace únikového spektra neutronů  
z cyklotronu na produkci radiofarmak

Characterization of neutron leakage field  
spectrum of medical cyclotron

DIPLOMOVÁ PRÁCE

Vypracoval: Bc. Marek Zmeškal  
Vedoucí práce: Ing. Michal Košťál, Ph.D.  
Rok: 2021



## **Prohlášení**

Prohlašuji, že jsem diplomovou práci vypracoval samostatně, že jsem řádně citoval všechny použité prameny a literaturu a že práce nebyla využita v rámci jiného vysokoškolského studia či k získání jiného nebo stejného titulu.

V Praze dne .....

.....  
Bc. Marek Zmeškal



## **Poděkování**

Děkuji svému vedoucímu práce Ing. Michalu Košťálovi Ph.D. za vedení mé diplomové práce, trpělivost a cenné rady při jejím sepisování a ochotu ke konzultacím a zodpovězení mých otázek. Stejně tak bych chtěl poděkovat i svému konzultantovi Ing. Evženu Losovi Ph.D. Dále bych chtěl poděkovat svým přátelům, rodině a přítelkyni za podporu při psaní této práce.

Bc. Marek Zmeškal



*Název práce:*

**Charakterizace únikového spektra neutronů z cyklotronu na produkci radiofarmak**

*Autor:* Bc. Marek Zmeškal

*Studijní program:* Aplikace přírodních věd

*Obor:* Jaderné inženýrství

*Druh práce:* Diplomová práce

*Vedoucí práce:* Ing. Michal Košťál, Ph.D.

Centrum výzkumu Řež

*Konzultant:* Ing. Evžen Losa, Ph.D.

KJR FJFI ČVUT v Praze

*Abstrakt:* Radionuklidy používané pro pozitronovou emisní tomografii jsou často vyráběny pomocí kompaktních urychlovačů jako je například IBA Cyclone 18/9. Při jejich výrobě vzniká sekundární pole neutronů, které je třeba pro výpočet stínění a aktivace materiálů vhodně popsat. Možným nástrojem k popisu těchto polí jsou simulace pomocí metody Monte Carlo. V této práci bylo provedeno několik simulací s kódy Geant4 a MCNP6.2 a různými fyzikálními modely, které byly porovnány s naměřenými výsledky pomocí scintilační spektrometrie a aktivačních detektorů a také s výsledky z databáze EXFOR. Byly zjištěny velké nedostatky v popisu nízkoenergetických jaderných reakcí protonů v těchto kódech zejména pro produkci vysokoenergetických neutronů a neutronů vyzařovaných ve zpětných úhlech. Byly navrženy dva možné popisy sekundárních neutronů, které by bylo možné použít pro výpočet radiační situace okolo cyklotronů.

*Klíčová slova:* pozitronová emisní tomografie, IBA Cyclone 18/9, sekundární neutronové pole, Monte Carlo simulace, Geant4

*Title:*

**Characterization of neutron leakage field spectrum of medical cyclotron**

*Author:* Bc. Marek Zmeškal

*Abstract:* Radionuclides used for positron emission tomography are often produced using compact accelerators such as IBA Cyclone 18/9. During their production, a secondary neutron field is created, which must be appropriately described for the calculation of shielding and activation of materials. A possible tool to describe these fields are simulations using the Monte Carlo method. In this work, several simulations were performed with Geant4 and MCNP6.2 codes and various physical models, which were compared with the measured results using scintillation spectrometry and activation detectors, as well as with the results from the EXFOR database. Major deficiencies have been identified in the description of low-energy nuclear proton reactions in these codes, especially for the production of high-energy neutrons and neutrons emitted at back angles. Two possible descriptions of secondary neutrons have been proposed, which could be used to calculate the radiation situation around cyclotrons.

*Key words:* positron emission tomography, IBA Cyclone 18/9, secondary neutron field, Monte Carlo simulation, Geant4





# Obsah

Seznam použitých zkratk	11
Seznam obrázků	13
Seznam tabulek	15
Úvod	17
<b>1 Charakterizace sekundárního neutronového spektra</b>	<b>19</b>
1.1 Bonnerovy sféry . . . . .	19
1.2 Aktivační detektory . . . . .	21
1.3 Scintilační spektrometrie . . . . .	22
1.4 Další metody . . . . .	23
<b>2 Metoda aktivačních detektorů</b>	<b>25</b>
2.1 Výpočet reakční rychlosti . . . . .	25
2.2 Účinnost . . . . .	26
2.2.1 Experimentální určení . . . . .	26
2.2.2 Určení pomocí metody Monte Carlo . . . . .	27
2.2.3 Specializovaný software . . . . .	29
<b>3 Fyzikální modely pro jaderné reakce v MC kódech</b>	<b>31</b>
3.1 Fyzikální modely v Geant4 . . . . .	31
3.2 Hadronické procesy v Geant4 . . . . .	32
3.2.1 Účinné průřezy . . . . .	33
3.2.2 Strunové modely . . . . .	33
3.2.3 Intranukleární kaskády . . . . .	33
3.2.4 Předrovnovážný model . . . . .	36
3.2.5 Deexcitace . . . . .	37
3.2.6 Modely založené na datech . . . . .	39
3.3 Hadronické modely v MCNP6 . . . . .	40
3.3.1 Intranukleární kaskády . . . . .	40
3.3.2 Model CEM . . . . .	40
3.3.3 Předrovnovážný a rovnovážný model . . . . .	41
<b>4 Radiofarmaka a PET IBA Cyclone 18/9</b>	<b>43</b>
4.1 Metoda PET . . . . .	43
4.2 $^{18}\text{F}$ jako zářič pozitronů . . . . .	45
4.3 IBA Cyclone 18/9 . . . . .	45
4.4 Terč XXL a jeho model . . . . .	46
4.5 Provedené experimenty . . . . .	48

<b>5</b>	<b>Charakterizace sekundárního neutronového spektra na povrchu terče</b>	<b>51</b>
5.1	Experimentální metody . . . . .	51
5.1.1	Scintilační spektrometrie . . . . .	51
5.1.2	Aktivační detektory . . . . .	53
5.2	Simulace . . . . .	58
5.2.1	Použité výpočetní kódy . . . . .	58
5.3	Výsledky a jejich porovnání . . . . .	62
5.3.1	Reakční rychlosti ve velkém niklové detektoru . . . . .	62
5.3.2	Ostatní reakční rychlosti . . . . .	64
5.3.3	Spektrální indexy a úhlové rozdělení reakčních rychlostí . . . . .	69
5.3.4	Spektra neutronů . . . . .	73
5.4	Závěry . . . . .	75
<b>6</b>	<b>Porovnání kódů s daty z databáze EXFOR</b>	<b>77</b>
6.1	Popis experimentu a jeho simulace . . . . .	77
6.2	Výsledky a jejich porovnání . . . . .	79
6.2.1	Energetická spektra . . . . .	79
6.2.2	Úhlové rozdělení . . . . .	84
6.3	Celkový výtěžek neutronů . . . . .	87
6.3.1	Vliv dalších reakcí . . . . .	89
6.3.2	Vznik neutronů ve foliích . . . . .	94
6.4	Vylepšení výpočtu . . . . .	95
6.4.1	Simulace . . . . .	95
6.4.2	Výsledky . . . . .	96
	<b>Závěr</b>	<b>99</b>
	<b>Literatura</b>	<b>101</b>

# Seznam použitých zkratk

<b>ADC</b>	Analogově digitální převodník ( <i>Analog-to-Digital Converter</i> )
<b>BERT</b>	Bertiniho kaskáda ( <i>Bertini Cascade</i> )
<b>BIC</b>	Binární kaskáda ( <i>Binary Cascade</i> )
<b>CEM</b>	Kaskádově-excitonový model ( <i>Cascade-Exciton Model</i> )
<b>CERN</b>	Evropská organizace pro jaderný výzkum ( <i>Conseil Européen pour la recherche nucléaire</i> )
<b>CT</b>	Výpočetní tomografie ( <i>Computed Tomography</i> )
<b>EM</b>	Algoritmus maximalizace očekávané (střední) hodnoty ( <i>Expectation-Maximization</i> )
<b>ENDF</b>	Evalúovaná jaderná data ( <i>Evaluated Nuclear Data File</i> )
<b>ENSDF</b>	Evalúovaná data jaderné struktury ( <i>Evaluated Nuclear Structure Data File</i> )
<b>EXFOR</b>	Knihovna experimentálních jaderných dat ( <i>Experimental Nuclear Reaction Data Library</i> )
<b>FDG</b>	Fludeoxyglukóza ( <i>Fluorodeoxyglucose</i> )
<b>FEPE</b>	Účinnost v píku úplného pohlcení ( <i>Full Energy Peak Efficiency</i> )
<b>FPGA</b>	Programovatelné hradlové pole ( <i>Field Programmable Gate Array</i> )
<b>FTF</b>	Fritiofův model ( <i>Fritiof Model</i> )
<b>GEM</b>	Zobecněný vypařovací model ( <i>Generalized Evaporation Model</i> )
<b>HP</b>	Vysoká přesnost ( <i>High Precision</i> )
<b>HPGe</b>	Vysoce čisté germanium ( <i>High Purity Germanium</i> )
<b>IAEA</b>	Mezinárodní agentura pro atomovou energii ( <i>International Atomic Energy Agency</i> )
<b>ISOCS</b>	Čítací systém objektů in-situ ( <i>In Situ Object Counting System</i> )
<b>JINR</b>	Spojený ústav jaderných výzkumů v Dubně ( <i>Joint Institute for Nuclear Research</i> )
<b>LabSOCS</b>	Laboratorní bezdrojový kalibrační software ( <i>Laboratory Sourceless Calibration Software</i> )

**LANL** Národní laboratoř Los Alamos (*Los Alamos National Laboratory*)

**LEND** Jaderná data pro nízké energie (*Low Energy Nuclear Data*)

**LR-0** Lehkovodní výzkumný reaktor nulového výkonu v Centrum Výzkumu Řež

**MC** Monte Carlo

**MCNP** Monte Carlo kód pro výpočet transportu částic (*Monte Carlo N-Particle*)

**MEM** Modifikovaný excitonový model (*Modified Exciton Model*)

**MPM** Mnohastupňový předrovnávací model (*Multistage Pre-equilibrium Model*)

**PDG** Skupina částicových dat (*Particle Data Group*)

**PET** Pozitronová emisní tomografie (*Positron Emission Tomography*)

**PRECO** Model předběžně složeného jádra (*Precompound Model*)

**PVC** Polyvinylchlorid

**QGS** Kvark-gluonový strunový model (*Quark Gluon String model*)

**QMD** Kvantová molekulová dynamika (*Quantum Molecular Dynamics*)

**RAL** Rutherford Appletonova laboratoř (*Rutherford Appleton Laboratory*)

**SPECT** Jednofotonová emisní výpočetní tomografie (*Single-Photon Emission Computed Tomography*)

**TIARA** Urychlovače iontů pro pokročilé radiační aplikace v Takasaki (*Takasaki Ion Accelerators for Advanced Radiation Application*)

**TOF** Metoda doby letu (*Time-of-Flight*)

# Seznam obrázků

2.1	Model detektoru HPGe v MCNP6 . . . . .	28
3.1	Diagram dostupných hadronických modelů v Geant4 . . . . .	32
3.2	Schémata čtyř základních modelů reakcí. . . . .	34
3.3	Porovnání diferenciálních účinných průřezů pro vznik neutronu na cínovém a bismutovém terči. . . . .	38
4.1	Princip pozitronové emisní tomografie. . . . .	44
4.2	IBA Cyclone 18/9 v betonové kobce v ÚJV Řež. . . . .	46
4.3	Detail terčového uskupení. . . . .	47
4.4	Řez detailním modelem terčové sestavy. . . . .	48
5.1	Místo měření stilbenovým scintilačním detektorem v betonové kobce cyklotronu . . . . .	52
5.2	Graf pro vyhodnocení signálu z detektoru. . . . .	53
5.3	Fotografie velkoplošného niklového aktivačního detektoru. . . . .	54
5.4	Mikroskopické účinné průřezy pro reakce použité jako monitory rychlých neutronů . . . . .	55
5.5	Porovnání příspěvku různých reakcí na izotopech v přírodním zastoupení daného prvku. . . . .	55
5.6	Model terče vytvořený v MCNP6 s vyznačenými úhly aktivačních detektorů	56
5.7	Řez zjednodušeným modelem terče v Geant4 a MCNP6.2 . . . . .	59
5.8	Simulace experimentu v Geant4. . . . .	60
5.9	Porovnání poměru reakčních rychlostí ve sloupci aktivačních detektorů. . . .	61
5.10	Citlivost použitých dozimetrických reakcí. . . . .	65
5.11	Podíl reakčních rychlostí v aktivačním detektoru v daném úhlu. . . . .	71
5.12	Podíl reakčních rychlostí v aktivačním detektoru v daném úhlu pro reakční rychlosti vztažené na prostorový úhel zabíraný aktivačním detektorem. . . .	72

5.13	Spektrum neutronů v 1 m přímém směru v porovnání s jednotlivými modelovanými spektry. . . . .	73
5.14	Porovnání experimentálního spektra s vypočtenými neutronovými spektry v aktivačním detektoru A3 . . . . .	74
5.15	Porovnání experimentálního spektra s vypočtenými neutronovými spektry v aktivačním detektoru D3 . . . . .	74
6.1	Schéma experimentu v experimentálním zařízení TIARA. . . . .	78
6.2	Porovnání experimentálních hodnot toku neutronů pro 6 rozdílných úhlů včetně jejich nejistot s výpočtem v různých kódech. . . . .	79 - 84
6.3	Porovnání úhlové distribuce toku neutronů v Geant4 . . . . .	85
6.4	Porovnání úhlové distribuce toku neutronů pro kaskády Bertini a ISABEL s různými vypařovacími modely v MCNP6.2. . . . .	86
6.5	Porovnání úhlové distribuce toku neutronů pro kaskády Bertini a INCL4 s různými vypařovacími modely v MCNP6.2. . . . .	86
6.6	Porovnání úhlové distribuce toku neutronů v MCNP6.2. . . . .	87
6.7	Porovnání mikroskopických účinných průřezů z knihovny TENDL-2019 pro reakce protonů na $^{18}\text{O}$ . . . . .	90
6.8	Porovnání mikroskopických účinných průřezů z knihovny TENDL-2019 pro reakce protonů na $^{18}\text{O}$ - detail na vyšší energii. . . . .	90
6.9	Porovnání mikroskopických účinných průřezů z knihovny TENDL-2019 a mikroskopického účinného průřezu doporučeného IAEA s výpočtem pomocí Geant4 pro reakci $^{18}\text{O}(p,n)^{18}\text{F}$ . . . . .	91
6.9	Porovnání mikroskopických účinných průřezů z knihovny TENDL-2019 s výpočtem pomocí Geant4 pro různé reakce tvorby neutronů . . . . .	92
6.10	Porovnání účinného průřezu pro tvorbu neutronů v Geant4 s účinným průřezem z knihovny TENDL-2019. . . . .	93
6.11	Porovnání inelastického účinného průřezu v Geant4 s inelastickým účinným průřezem z knihovny TENDL-2019. . . . .	93
6.12	Porovnání experimentálních hodnot toku neutronů pro 6 rozdílných úhlů s výpočtem v Geant4 s použitím Bertiniho kaskády simulující protony o energii 20 MeV. . . . .	95
6.13	Porovnání měřeného a simulovaných spekter v 1 m přímém směru od terče. . . . .	98
6.14	Procentuální rozdíl měřeného a simulovaných spekter. . . . .	98

# Seznam tabulek

4.1	Nejčastěji používané emitory pozitronů. . . . .	45
5.1	Vypočtené účinnosti pro pík úplného pohlcení a opravné koeficienty na ko- incidenční sumace pro aktivační detektory o tloušťce 0,1 mm a menší. . . .	57
5.2	Vypočtené účinnosti pro pík úplného pohlcení a opravné koeficienty na ko- incidenční sumace pro aktivační detektory o tloušťce větší než 0,1 mm. . . .	57
5.3	Reakční rychlosti ve velkoplošném niklovém detektoru pro $^{nat}\text{Ni}(n,x)^{58}\text{Co}$ .	62
5.4	Reakční rychlosti ve velkoplošném niklovém detektoru pro $^{nat}\text{Ni}(n,x)^{57}\text{Co}$ .	62
5.5	Porovnání vypočtených a experimentálních reakčních rychlostí ve velkoploš- ném niklovém detektoru pro výpočet pomocí Geant4 s Bertiniho kaskádou. .	63
5.6	Porovnání vypočtených a experimentálních reakčních rychlostí ve velkoploš- ném niklovém detektoru pro výpočet pomocí Geant4 s binárním kaskádou. .	64
5.7	Porovnání vypočtených a experimentálních reakčních rychlostí ve velkoploš- ném niklovém detektoru pro výpočet pomocí MCNP6.2. . . . .	64
5.8	Tabulka průměrné energie odezvy reakční rychlosti. . . . .	65
5.9	Reakční rychlosti v aktivačních detektorech středového pásku a dvou sa- dách aktivačních detektorů u vstupu chladicí vody a v 1 m přímém směru vzdálenosti od terče. . . . .	66
5.10	Porovnání vypočtených a experimentálně určených reakčních rychlostí ve středových páscích pro výpočet pomocí Geant4 s Bertiniho kaskádou. . . . .	66
5.11	Porovnání vypočtených a experimentálně určených reakčních rychlostí ve středových páscích pro výpočet pomocí Geant4 s binární kaskádou. . . . .	67
5.12	Porovnání vypočtených a experimentálně určených reakčních rychlostí ve středových páscích pro výpočet pomocí MCNP6.2. . . . .	68
5.13	Porovnání vypočtených a experimentálně určených reakčních rychlostí pro sady aktivačních detektorů umístěných u vstupu chladicí vody a v 1 m v přímém směru pro výpočty pomocí všech tří popsanych způsobů. . . . .	68
5.14	Relativní nejistoty vypočtených porovnání C/E pro různé reakční rychlosti a různé polohy aktivačních detektorů. . . . .	69
5.15	Spektrální indexy pro vybrané reakce z naměřených hodnot. . . . .	69

5.16	Porovnání vypočtených a experimentálních spektrálních indexů pro výpočet pomocí Geant4 s Bertiniho kaskádou. . . . .	70
5.17	Porovnání vypočtených a experimentálních spektrálních indexů pro výpočet pomocí Geant4 s binární kaskádou. . . . .	70
5.18	Porovnání vypočtených a experimentálních spektrálních indexů pro výpočet pomocí MCNP6.2 . . . . .	70
6.1	Dostupné kombinace fyzikálních modelů v MCNP6.2. . . . .	78
6.2	Porovnání experimentálních a vypočtených hodnot pro úhlovou distribuci neutronů pro výpočty pomocí různých modelů v Geant4. . . . .	85
6.3	Porovnání experimentálních a vypočtených hodnot pro úhlovou distribuci toku neutronů pro výpočty pomocí různých fyzikálních modelů v MCNP6.2. . . . .	86
6.4	Absolutní hodnoty úhlové distribuce neutronů z databáze EXFOR a porovnání experimentálních a vypočtených hodnot pro úhlovou distribuci toku neutronů pro výpočty pomocí různých knihoven dat v MCNP6.2. . . . .	87
6.5	Vypočtené výtěžky neutronů reakcemi protonů v obohacené vodě vztažené na jeden proton v kódech Geant4 a MCNP6.2. . . . .	88
6.6	Absolutní výtěžek neutronů z jednotlivých reakcí a jeho podíl na celkovém počtu neutronů v různých fyzikálních modelech Geant4. . . . .	93
6.7	Výtěžek neutronů ve foliích terče XXL cyklotronu IBA Cyclone 18/9. . . . .	94
6.8	Porovnání vypočtených a experimentálně určených reakčních rychlostí ve středových pásčích pro výpočet v Geant4 s fixním zdrojem neutronů. . . . .	96
6.9	Porovnání vypočtených a experimentálně určených reakčních rychlostí ve středových pásčích pro výpočet v Geant4 s Bertiniho kaskádou simulující protony o energii 20 MeV . . . . .	97
6.10	Porovnání vypočtených a experimentálně určených reakčních rychlostí pro sady aktivačních detektorů umístěných u vstupu chladicí vody a v 1 m v přímém směru pro výpočty pomocí Geant4 s fixním zdrojem neutronů a s Bertiniho kaskádou simulující neutrony o energii 20 MeV. . . . .	97



# Úvod

Pozitronová emisní tomografie je rozšířenou diagnostickou technikou používanou například pro detekci nádorových buněk. Pro její využití je nutné zabezpečit produkci radiofarmak, kterými jsou organické sloučeniny obsahující radionuklid emitující pozitrony. Nejčastěji využívaným zářičem pozitronů je  $^{18}\text{F}$ , který je vyráběn ozařováním obohacené vody protony. K tomuto účelu jsou stále častěji využívány kompaktní medicínské cyklotrony jako je například IBA Cyclone 18/9 využívaný v ÚJV Řež.

Při ozařování terče vzniká sekundární pole neutronů a tato práce je zaměřena na charakterizaci tohoto pole. Jeho znalost je nutná pro správný výpočet a návrh stínění chránící obsluhu cyklotronu a další personál zařízení při provozu. Sekundární pole neutronů dále také přispívá k materiálovým změnám v cyklotronu a k aktivaci jeho komponent a betonových stěn kobky, ve které je cyklotron často umístěn. Znalost spektra neutronů je tak důležitá pro výpočet zdrojového členu aktivity cyklotronu při jeho vyřazování z provozu pro správné zpracování radioaktivních odpadů. V neposlední řadě by bylo možné využít produkci radiofarmak jako levný zdroj neutronů pro další průmyslové, medicínské nebo vědecké aplikace.

Popisem sekundárního neutronového spektra okolo urychlovačů se zabývalo několik prací, v nichž byly použity různé techniky charakterizace toku rychlých neutronů, které při ozařování vznikají. Jejich popisu je věnována první kapitola se zaměřením na metodu Bonnerových sfér, aktivačních detektorů a scintilační spektrometrie. Metodě aktivačních detektorů, je poté blíže věnována i druhá kapitola se zaměřením na výpočet účinnosti detekčního systému využívaného k měření aktivity ozařovaných detektorů.

Další možností charakterizace sekundárního neutronového spektra je výpočet pomocí kódů určených k simulaci transportu částic využívajících metody Monte Carlo. Cílem této práce je vytvořit a popsat věrohodný model ozařovaného terče pomocí něhož by bylo možné určovat hustotu toku neutronů a jejich energetické spektrum v okolí cyklotronu. K popisu produkce neutronů ve výpočetních kódech jsou používány fyzikální modely, které jsou buď teoretické nebo založené na měřených datech. Tyto modely jsou popsány ve třetí kapitole. Poměrně nové je použití těchto modelů pro simulaci reakcí protonů o nízkých energiích menších než 20 MeV, jelikož byly tyto modely zpravidla vyvinuty pro vyšší energie.

Pátá kapitola popisuje praktickou část této práce, kterou je experiment na cyklotronu v ÚJV Řež zaměřený na charakterizaci sekundárního neutronového spektra na povrchu terče. Cyklotron IBA Cyclone 18/9 využitý v tomto experimentu a celý proces výroby radiofarmak je popsán v předchozí čtvrté kapitole. Při experimentu byly porovnávány vypočtené a naměřené reakční rychlosti dozimetrických reakcí s různými energetickými prahy. Kromě toho bylo porovnáno také vypočtené spektrum v přímém směru s experimentálně určeným pomocí stilbenové spektrometrie.

Poslední kapitola je věnována porovnání jednotlivých fyzikálních modelů ve výpočetních kódech Geant4 a MCNP6.2, a to jak energetických spekter tak úhlové distribuce neutronů. Pro srovnání byla použita data z databáze EXFOR. Dále je zde diskutován celkový výtěžek neutronů z různých reakcí protonů v terči. Na závěr jsou prezentovány dvě simulace využívající získaných poznatků sloužící k dosažení výsledků více odpovídajících experimentálnímu měření.

# Kapitola 1

## Charakterizace sekundárního neutronového spektra

Charakterizace sekundárního neutronového spektra okolo urychlovačů je komplexní úkol. Samotná spektrometrie neutronů je poměrně náročný úkon, obzvláště ve velkém rozmezí energií neutronů od tepelných energií do nízkých desítek MeV, jaké je dosahováno na medicínských urychlovačích. Hlavními obtížemi jsou zejména nepřímá detekce neutronů, jelikož neutrony nelze detekovat přímo, ale můžeme detekovat pouze nabitě částice vznikající při různých jaderných reakcích neutronu s jádrem případně indukovanou aktivitu. Druhou komplikací je fakt, že je neutronové pole vždy doprovázeno zářením  $\gamma$  a je třeba provést rozlišení signálu od neutronů a od  $\gamma$  záření. Následuje popis několika různých metod, které lze běžně použít pro charakterizaci spektra sekundárních neutronů. Jedná se zejména o metodu založenou na moderaci neutronů pomocí Bonnerových sfér, metodu aktivačních detektorů a metodu odražených protonů pomocí scintilačních detektorů.

### 1.1 Bonnerovy sféry

Jednou z možností spektrometrie sekundárních neutronů je použití tzv. Bonnerových sfér. Jedná se o koule vyrobené z polyethylenu o různých poloměrech, v jejichž středu je umístěn detektor tepelných neutronů. Tímto detektorem může být aktivní detektor v podobě scintilátoru  ${}^6\text{LiI}(\text{Eu})$  nebo proporcionálního plynového počítáče s náplní  ${}^3\text{He}$ . Pro vyšší toky, u nichž by byla u aktivních detektorů příliš vysoká mrtvá doba, lze použít pasivní detektory ve formě termoluminiscenčního dozimetru nebo aktivačního detektoru například ze zlaté folie [1]. Metoda je založena na tom, že pro různé poloměry polyethylenové koule, dochází k jiné odezvě detektoru uprostřed. Pro menší poloměry dochází k detekci zejména tepelných neutronů původního spektra, pro které má detekční reakce vyšší mikroskopický účinný průřez. Pro větší poloměry dochází k absorpci tepelných neutronů v polyethylen, ale naopak ke zpomalování rychlých neutronů, které jsou tak s větší pravděpodobností detekovány. Pro každý poloměr tak lze sestavit závislost účinnosti detektoru na energii neutronů v měřeném spektru [2].

Rozdělením energetického spektra do  $N$  intervalů a měřením pomocí  $m$  různých Bonnerových sfér je získána soustava  $m$  rovnic o  $N$  neznámých 1.1 [3] .

$$C_j = \sum_{i=1}^N R_{ij} \Phi_i \quad (1.1)$$

$C_j$  je počet impulsů pro  $j$ -tý detektor,  $R_{ij}$  je odezвовá funkce  $j$ -tého detektoru v  $i$ -tém energetickém intervalu a  $\Phi_i$  je tok neutronů v  $i$ -tém energetickém intervalu. Jelikož se zpravidla jedná o nedourčenou soustavu rovnic, kde je počet energetických intervalů vyšší než počet sfér ( $N > m$ ), nemá jednoznačné řešení a pro odhad toho nejlepšího se užívá různých numerických metod. Tomuto procesu se říká dekonvoluce energetického spektra. Pro úspěšnou konvergenci dekonvoluce je vhodné do dekonvolučního kódu zadat očekávané energetické spektrum, čímž však může být výsledné spektrum ovlivněno.

Ve vyhledaných provedených experimentech bylo jako detektorů tepelných neutronů nejčastěji využito pasivních termoluminiscenčních dozimetrů TLD600 ( ${}^6\text{LiF:Mg,Ti}$ ) a TLD700 ( ${}^7\text{LiF:Mg,Ti}$ ) [3][4][5]. U těchto dvou dozimetrů bylo využito vhodné vlastnosti izotopů lithia k diskriminaci signálu od neutronů a  $\gamma$  záření. Jelikož oba detektory obsahují lithium (protonové číslo  $Z=3$ ), mají přibližně stejnou odezvu na záření  $\gamma$ , která ještě může být propojena vzájemným koeficientem pomocí ozařování ve zdrojích  ${}^{60}\text{Co}$  a  ${}^{137}\text{Cs}$  [3] nebo  ${}^{238}\text{U}$  [4]. Odezvu na neutrony má naopak téměř pouze TLD600 obsahující 95,6 % izotopu  ${}^6\text{Li}$  pomocí něhož jsou přes reakci  ${}^6\text{Li}(n,\alpha){}^3\text{H}$  s vysokým účinným průřezem neutrony detekovány. Umístěním vždy páru těchto dvou dozimetrů lze rozdílem mezi jejich odezvami určit příspěvek od tepelných neutronů. Jelikož tyto detektory většinou nahradily v Bonnerových sférách scintilátor  ${}^6\text{LiI}(\text{Eu})$ , bylo nutné provést jejich kalibraci a porovnat jejich odezvu s  ${}^6\text{LiI}(\text{Eu})$  ve známém zdroji neutronů ve formě moderovaných i nedomerovaných radionuklidových zdrojů  ${}^{252}\text{Cf}$  [3] nebo  ${}^{241}\text{Am-Be}$  [4]. V jiných experimentech potom byly jako detektor tepelných neutronů použity heliem-3 plněné proporcionální plynové komory [1][6] a pro vyšší toky zlaté folie [1].

Očekávané energetické spektrum pro dekonvoluci bylo získáváno většinou pomocí Monte Carlo výpočetního kódu pro transport neutronů, u něhož však byly použity různé zdrojové členy. Těmi jsou například monoenergetický izotropní zdroj [3], Maxwellovo spektrum [3][5], vypařovací spektrum [1][3][4], štěpné spektrum [1][6] nebo spektrum vypočítané přímo pomocí transportního kódu [6]. Žádné z těchto spekter však přesně nepopisuje to experimentálně určené.

Nevýhodou těchto měření je fakt, že pro různá neutronová spektra dochází i ke změně odezвовé křivky a pro každé měřené spektrum by se tak měly vytvořit nové odezвовé funkce pomocí měření na známém dobře popsaném spektru, které co nejvíce odpovídá nově měřenému. Tím se tedy komplikuje aplikace této metody na dosud neznámé spektrum neutronů. Pokud je při měření použita vždy pouze jedna sféra, je poté náročnější pro různá měření zajistit stejné podmínky ozařování, aby byly vzájemně porovnatelné. Pokud by bylo použito více sfér s detektory najednou, jsou sice zajištěny stejné ozařovací podmínky, dochází však k ovlivnění spektra sousedními sférami a měření je tak zkresleno. Měření pomocí Bonnerových sfér lze také většinou dosáhnout nižšího energetického rozlišení než pomocí jiných metod [3].

Jiným vhodným využitím Bonnerových sfér, které bylo náhodou zjištěno, je to, že křivka odezvy polyethylenové koule o vhodném průměru přibližně odpovídá závislosti radiačního váhového faktoru pro neutrony na energii. Měření pomocí této sféry lze tedy přímo odečítat dávkový příkon od neutronů v daném místě [2].

## 1.2 Aktivační detektory

Metoda aktivačních detektorů je založena na reakcích neutronů, jejichž produkty jsou nestabilní radioaktivní izotopy. Tyto často vyzařují  $\gamma$  záření, které může být měřeno a pomocí něj může být určena aktivita daného izotopu, která je přímo spjatá s reakční rychlostí vzniku tohoto izotopu.

Reakční rychlost vztahovaná na jeden atom lze pro aktivační detektor ve formě tenké folie určit jako

$$RR = \int_0^{+\infty} \sigma_f(E) \Phi_f(E) dE \quad (1.2)$$

,kde  $\sigma_f(E)$  je mikroskopický účinný průřez pro danou folii a reakci a  $\Phi_f(E)$  je průměrný tok neutronů v celém objemu folie. Pro  $\Phi_f(E)$  lze psát  $\Phi_f(E) = P_f(E)\Phi(E)$ , kde  $\Phi(E)$  je tok neutronů, který by byl v daném místě bez přítomnosti folie a který chceme měřit. V koeficientu  $P_f(E)$  jsou zahrnuty jevy jako je například samostínění. Diskretizací 1.2 pomocí rozdělení toku neutronů do  $N$  energetických grup získáme rovnici

$$RR = \sum_{i=1}^N = a_i \Phi_i \quad (1.3)$$

,kde  $\Phi_i = \int_{E_{i-1}}^{E_i} \Phi(E) dE$  je průměrný tok neutronů v dané grupě s energiemi od  $E_{i-1}$  do  $E_i$ . Průměrný účinný průřez  $a_i$  pro grupu  $i$  potom lze určit pomocí 1.4 [7].

$$a_i = \frac{\int_{E_{i-1}}^{E_i} \sigma_f(E) P_f(E) \Phi(E) dE}{\int_{E_{i-1}}^{E_i} \Phi(E) dE} \quad (1.4)$$

Důležitým aspektem pro tuto metodu je tedy vybrat materiály s vhodnými mikroskopickými účinnými průřezy. Zpravidla je vhodné využívat reakce s vysokým účinným průřezem, u nichž dochází k dostatečné aktivaci, která je potom detekovatelná. Nejčastější jadernou reakcí používanou k produkci radionuklidů je radiační záchyt. Ten má vysoký mikroskopický účinný průřez pro tepelné energie a v oblasti rezonancí, a tak lze jednoduše detekovat tepelné a epitermální neutrony. Využitím prahových reakcí jako například  $(n,n')$ ,  $(n,p)$ ,  $(n,\alpha)$  nebo  $(n,2n)$  lze detekovat i rychlé neutrony.

Změřením reakčních rychlostí pro  $m$  reakcí získáme  $m$  rovnic o  $N$  neznámých. Podle vzájemného vztahu  $m$  a  $N$  můžeme získat několik různých možností, jak lze rovnice řešit. Pokud se  $m = N$  získáváme soustavu rovnic, jejíž matice je čtvercová a lze ji řešit běžnými metodami řešení lineárních rovnic. Soustava má jedinečné řešení, pokud jsou jednotlivé řádky matice lineárně nezávislé, tj. jednotlivé účinné průřezy mají dostatečně odlišný průběh. Pokud  $m > N$  získáme přeurčenou soustavu rovnic, u níž může být určeno pouze přibližné řešení například metodou nejmenších čtverců. Toho je využito v [8], kde je pomocí šesti různých prahových reakcí určováno spektrum ve třech energetických grupách 0,4 – 4 MeV, 4 – 9 MeV a 9 – 16,5 MeV.

Poslední možností je varianta kdy  $m < N$ , tedy když chceme získat informaci o toku neutronů ve více energetických grupách, než máme dostupných reakcí a jim příslušících reakčních rychlostí. Potom získáváme nedourčenou soustavu rovnic podobně jako v případě Bonnerových sfér a správné fyzikální řešení lze získat pouze s využitím počátečního odhadu měřeného spektra a následné dekonvoluce. Toto bylo použito v [9], kde je pomocí šesti reakčních rychlostí určováno energetické spektrum v 60 grupách s využitím dekonvolučního kódu SAND II [10].

Speciální variantou prvních dvou případů může být určení toku neutronů v tepelné, epitermální a rychlé grupě. K určení toku v prvních dvou lze vhodně využít aktivačních detektorů z folie ze zlata [12][13] nebo india [13][14], na nichž probíhá radiační záchyt  $^{197}\text{Au}(n,\gamma)^{198}\text{Au}$  a  $^{115}\text{In}(n,\gamma)^{116m}\text{In}$  s vysokým účinným průřezem pro tepelné neutrony. Jelikož radiační záchyt probíhá i v epitermální oblasti, lze toky v těchto dvou grupách rozlišit pomocí dvojice aktivačních detektorů, z nichž jeden je zabalen do pokrytí z kadmia. Kadmium má vysoký mikroskopický účinný průřez pro energie pod 0,4 eV a tyto neutrony prakticky nepropouští. Rozdílem reakčních rychlostí pro tyto dva aktivační detektory s využitím kadmiového korekčního faktoru potom lze určit reakční rychlosti v jednotlivých energetických grupách. Pro určení reakční rychlosti v rychlé grupě poté lze vhodně využít reakce nepružné rozptylu na indiu  $^{115}\text{In}(n,n')^{115m}\text{In}$  s prahem 0,5 MeV, čímž lze použít stejný aktivační detektor jako pro tepelné neutrony [13][14].

Kromě tvaru a velikosti mikroskopického účinného průřezu jsou dalšími důležitými vlastnostmi pro výběr aktivačních detektorů také poločas rozpadu vzniklého radionuklidu. Ten nesmí být příliš krátký, aby bylo možné přenést detektor z detekovaného místa do měřicí aparatury, ale ani příliš dlouhý, aby byla aktivita měřitelná. Dále jsou to fyzikální vlastnosti detektoru a jeho dostupnost v dostatečné čistotě.

Hlavní nevýhodou aktivačních detektorů je, že poskytují pouze integrální hodnoty v čase a nemohou sloužit jako zdroj informací o proměnlivém neutronovém poli. Jejich výhodou je jejich malý rozměr a v případě vhodně zvolené reakce necitlivost ke  $\gamma$  záření a v neposlední řadě také nízká cena. Dále je možné je použít i v podmínkách, které jsou jinak pro jiné detektory založené na citlivé elektronice nepřijatelné (tepelné, tlakové nebo radiační zatížení) [2].

### 1.3 Scintilační spektrometrie

Další způsobem detekce neutronů včetně možnosti získání energetického spektra je metoda založená na pružném rozptylu neutronů na lehkých jádrech. Nejvyužívanější je pružný rozptyl na vodíku, který má vysoký účinný průřez a navíc při něm neutron může ztratit veškerou svou kinetickou energii. Odražené jádro, které má pro rychlé neutrony dostatečnou energii je poté detekováno jako odražený proton, odtud získala metoda název metoda odražených protonů.

Nejčastějším způsobem využití pružného rozptylu na vodíku jsou organické scintilátory, které všechny vodík přirozeně obsahují. Lze použít všechny typy organických scintilátorů, pevné krystaly, kapalné i plastické. Výhoda plastických a kapalných je jejich relativně levná výroba, která zároveň umožňuje jejich zhotovení v libovolném tvaru a velikosti, což je u krystalů omezeno. Antracen má nejvyšší světelný výkon ze všech organických scintilátorů, stilben je zase využíván pro své výborné diskriminační vlastnosti [2]. Měření pomocí stilbenového scintilátoru je využito v [15].

Velikost scintilátoru určuje jeho účinnost i energetické rozlišení. Větší scintilátory mají vyšší účinnost, jelikož je větší pravděpodobnost, že v nich dojde k rozptylu neutronu. Ovšem s růstem rozměru také roste pravděpodobnost vícenásobného rozptylu a zhoršuje se sběr světelných fotonů, což zhoršuje energetické rozlišení. Měřená odezva detektoru na neutrony je spektrum odražených protonů, které musí být následně převedeno na spektrum neutronů pomocí dekonvolučních kódů.

Energie odraženého jádra závisí na energii nalétávajícího neutronu a úhlu, pod kterým se neutron odrazí. Rozložení energie protonů tedy odpovídá diferenciálnímu účinnému průřezu pro rozptyl. Nejjednodušší variantou je izotropní rozptyl, který lze použít pro rozptyl na vodíku pro neutrony s energií menší než 10 MeV [2]. Teoretický tvar protonového spektra pro monoenergetické neutrony je tedy obdélník od nulové energie po energii těchto neutronů, jehož derivací lze získat původní spektrum neutronů. Toto teoretické spektrum je však ovlivněno mnoha dalšími vlivy. Mezi ně patří nelineární závislost světelného výkonu na energii; předání pouze části energie protonu v objemu scintilátoru; omezené rozlišení detektoru; vícenásobný rozptyl neutronu a rozptyl a další reakce pro vysoké energie neutronu na uhlíku.

Jelikož je obtížné získat monoenergetický zdroj neutronů, musí se detektory kalibrovat pomocí  $\gamma$  záření.  $\Gamma$  záření o dané energii při tom produkuje vyšší světelný výkon než odpovídající energie neutronů a je proto nutné znát tuto závislost. Další komplikací je, že kvůli nízkým protonovým číslům prvků tvořících organické scintilátory téměř neprobíhá fotoefekt a většina  $\gamma$  záření reaguje Comptonovým rozptylem. Energie tedy musí být určována pouze z Comptonovy hrany, jejíž energetické rozlišení je daleko méně přesné než rozlišení píku úplného pohlcení.

Důležitou součástí detekce neutronů je diskriminace pulzů vznikajících působením  $\gamma$  záření a pulzů vznikajících působením neutronů. K tomuto účelu lze u organických scintilátorů využít metody diskriminace podle tvaru pulzu. Na scintilaci se podílí dva jevy, fluorescence, což je okamžité vyzáření světla a fosforescence, což je vyzáření světla s určitým zpožděním. Podíl těchto dvou složek je různý pro různé částice. U rychlých elektronů produkovaných  $\gamma$  zářením převládá fluorescence a pulzy jsou krátké a rychle klesají. U protonů produkovaných neutrony je větší podíl fosforescence a pulzy jsou proto delší a pomaleji klesají. Tohoto efektu je využíváno u vhodných scintilátorů jako např. stilbenu a NE213. Při měření jsou vždy provedeny dva integrály vzniklého pulzu. Pomocí integrálu celého pulzu lze určit energii deponovanou danou částicí. Poměrem integrálu pod sestupnou hranou signálu a celkového integrálu lze určit diskriminační parametr, který slouží k odlišení signálu od protonů a elektronů, čímž je provedena diskriminace neutronů a  $\gamma$  záření [16].

## 1.4 Další metody

Jednou z nejpresnějších metod pro určení energie neutronu je metoda doby letu (*time-of-flight* - TOF). Metoda je založená na přímém vztahu rychlosti neutronu a jeho energie. Pomocí pulzního zdroje primárních nabitých částic lze vytvořit pulzní zdroj neutronů. Ze znalosti času vzniku neutronu, času jeho detekce a dráhy mezi terčem a detektorem potom lze vypočítat energii detekovaného neutronu. Pro detekci neutronů se nejčastěji používá scintilačních detektorů, u kterých je třeba opět nejdříve provést diskriminaci neutronů a  $\gamma$  záření [17]. Bohužel je tato metoda závislá právě na pulzním zdroji neutronů, kterého u medicínských urychlovačů zpravidla nelze dosáhnout.

Pokud je měřenou veličinou pouze dávka od neutronů v okolí urychlovače, která má však přímou vazbu na tok neutronů, lze použít různé druhy neutronových dozimetrů. Pro dávku od tepelných neutronů lze použít dozimetry na principu dvojice termoluminiscenčních detektorů  ${}^6\text{LiF}$  a  ${}^7\text{LiF}$ , jak byly popsány v kapitole 1.1 o využití v Bonnerových sférách [4]. Pro dávku od rychlých neutronů lze potom použít stopový dozimetr CR-39 [18][19].

CR-39 lze však použít i pro měření spektra neutronů, jak je to využito například v [20]. CR-39 je polykarbonát, jenž pro detekci neutronů využívá pružného rozptylu na vodíku

podobně jako scintilační detektory. Odražený proton potom v materiálu zanechává stopu, která je zviditelněna pomocí leptání a následného zvětšení na optickém mikroskopu. Po pořízení fotografie lze podle stupňů šedi určit délku dráhy a podle délky dráhy energii neutronu, který vyrazil proton, který stopu vytvořil. Spočtením četnosti jednotlivých délek drah lze potom získat energetické spektrum.



## Kapitola 2

# Metoda aktivačních detektorů

Jak bylo popsáno v kapitole 1.2, aktivační detektory jsou jednou z možností popisu sekundárního neutronového pole okolo urychlovačů. Bylo zde také naznačeno, jak pomocí znalosti reakčních rychlostí lze určit hustotu toku neutronů. V této kapitole bude popsán způsob změření aktivity vzorku a vypočtení reakční rychlosti s hlavním zaměřením na určení účinnosti detektoru v závislosti na energii, tvaru aktivačního detektoru a geometrii měření.

### 2.1 Výpočet reakční rychlosti

Změna počtu radioaktivních izotopů  $N$  v daném vzorku s celkovým počtem atomů  $N_0$  vystaveném hustotě toku neutronů způsobující reakční rychlost na jeden atom  $RR$  lze popsat diferenciální rovnicí

$$\frac{dN}{dt} = RR \cdot N_0 - \lambda N \quad (2.1)$$

,kde  $\lambda$  je rozpadová konstanta daného radionuklidu. Řešením této rovnice a převedením počtu jader radioaktivního izotopu na jeho aktivitu získáme

$$A = RR \cdot N_0(1 - e^{-\lambda t}) \quad (2.2)$$

Radionuklid dále podléhá radioaktivnímu rozpadu, při čemž v konečném důsledku většinou emituje kvanta  $\gamma$  záření o charakteristické energii pro daný izotop. Toto záření je následně detekováno na detektoru  $\gamma$  záření, pro který se v současné době nejčastěji používá polovodičový detektor vyrobený z velmi čistého germania (*High Purity Germanium-HPGe*).

Při fotoefektu dochází k absorpci celé energie fotonu v detektoru a ten je detekován jako impuls ve fotopíku neboli píku úplného pohlcení. Očekávaný počet pulsů ve fotopíku  $C(E_\gamma)$  o dané energii  $E_\gamma$  lze určit jako

$$C(E_\gamma) = \epsilon_{\text{FEP}} \cdot I_\gamma \int_0^{t_{\text{real}}} A_0 e^{-\lambda t_{\text{cool}}} e^{-\lambda t} dt = \epsilon_{\text{FEP}} \cdot I_\gamma \cdot A_0 e^{-\lambda t_{\text{cool}}} \cdot \frac{1 - e^{-\lambda t_{\text{real}}}}{\lambda} \quad (2.3)$$

,kde  $\epsilon_{\text{FEP}}$  je účinnost detekčního systému pro pík úplného pohlcení pro danou energii a geometrii,  $I_\gamma$  je intenzita dané gama linky na jeden rozpad,  $A_0$  je indukovaná aktivita na konci ozařování,  $t_{\text{cool}}$  je doba mezi koncem ozařování a začátkem měření a  $A_0 e^{-\lambda t_{\text{cool}}}$  je potom tedy aktivita na začátku měření,  $t_{\text{real}}$  je doba měření. Aktivitu na konci ozařování

lze určit pomocí 2.2 jako  $A_0 = RR \cdot N_0(1 - e^{-\lambda t_{\text{irr}}})$ , kde  $t_{\text{irr}}$  je doba ozařování. Počet pulsů ve fotopíku poté určíme jako

$$C(E_\gamma) = S(E_\gamma) \frac{t_{\text{real}}}{t_{\text{live}}} - B \quad (2.4)$$

,kde  $S(E_\gamma)$  je plocha pod píkem v detekovaném spektru kolem hledané energie  $E_\gamma$ . Ta je opravena na mrtvou dobu detektoru vynásobením poměrem  $\frac{t_{\text{real}}}{t_{\text{live}}}$ , kde  $t_{\text{live}}$  je doba měření s opravou na mrtvou dobu. Od  $S(E_\gamma)$  je ještě odečteno pozadí  $B$  v energetickém rozsahu integrálu plochy fotopíku za dobu měření  $t_{\text{real}}$ .

Zkombinováním rovnic 2.2, 2.3 a 2.4 získáme výsledný vzorec pro určení reakční rychlosti daného aktivačního detektoru:

$$RR = \frac{\left( S(E_\gamma) \frac{t_{\text{real}}}{t_{\text{live}}} - B \right) \lambda}{\epsilon_{\text{FEP}} \cdot I_\gamma \cdot N_0 \cdot (1 - e^{-\lambda t_{\text{irr}}}) \cdot e^{-\lambda t_{\text{cool}}} \cdot (1 - e^{-\lambda t_{\text{real}}})} \quad (2.5)$$

Všechny veličiny ve vzorci jsou určeny buď během experimentu nebo vyhledány v literatuře, nejsložitější je potom určení právě účinnosti detekčního systému pro pík úplného pohlcení.

## 2.2 Účinnost

Účinnost  $\epsilon_{\text{FEP}}$  pro pík úplného pohlcení (*Full Energy Peak Efficiency* - FEPE) lze definovat jako

$$\epsilon_{\text{FEP}} = \frac{C(E_\gamma)}{F(E_\gamma)} \quad (2.6)$$

,kde  $C(E_\gamma)$  je počet pulsů ve fotopíku pro energii  $E_\gamma$  a  $F(E_\gamma)$  je celkový počet zdrojem emitovaných fotonů o energii  $E_\gamma$ .  $\epsilon_{\text{FEP}}$  lze napsat jako součin dvou účinností, geometrické účinnosti  $\epsilon_G$  a vlastní účinnosti pro pík úplného pohlcení  $\epsilon_{\text{Ipeak}}$ .

$$\epsilon_{\text{FEP}} = \epsilon_G \cdot \epsilon_{\text{Ipeak}} \quad (2.7)$$

Geometrická účinnost vyjadřuje pravděpodobnost, že záření ze zdroje dorazí do vstupního okna detektoru a pro bodový zdroj ji můžeme určit jako  $\epsilon_G = \frac{\Omega}{4\pi}$ , kde  $\Omega$  je prostorový úhel zabíraný detektorem z pohledu zdroje. Geometrická účinnost tedy závisí pouze na geometrii ve které je měření prováděno.

Vlastní účinnost pro pík úplného pohlcení potom vyjadřuje pravděpodobnost, že foton, který prochází vstupním oknem detektoru, zanechá v aktivním objemu detektoru celou svou energii. Často je vyjadřována pomocí poměru  $r = \frac{\epsilon_{\text{Ipeak}}}{\epsilon_{\text{Itot}}}$ , kde  $\epsilon_{\text{Itot}}$  je absolutní vlastní účinnost vyjadřující pravděpodobnost, že přichází foton zanechá v detektoru alespoň nějaký signál. Je to tedy poměr reakcí jednoho fotonu zakončených fotoefektem ku počtu reakcí, kdy foton se sníženou energií uniká z objemu detektoru. Foton kromě toho může být rozptýlen nebo pohlcen v neaktivní vrstvě detektoru nebo v materiálu okna a elektrody, případně může projít detektorem bez interakce. Vlastní účinnost tak závisí na energii fotonu i na vnitřním uspořádání detektoru.

### 2.2.1 Experimentální určení

Nejčastěji je účinnost detektoru určována experimentálně. Pomocí sady kalibračních zářičů o definovaných aktivitách s  $\gamma$ -linkami o různých energiích je ve vybrané geometrii naměřeno

spektrum a určen počet impulzů pod píkem úplného pohlcení. Pomocí 2.3 a 2.4, kde je nyní známa certifikovaná aktivita  $A_0$  a časem  $t_{cool}$  lze označit čas od certifikace do začátku měření, lze potom určit neznámé  $\epsilon_{FEP}$ . Zanesením těchto bodů do grafu s  $\epsilon_{FEP}$  na ose  $y$  a energií záření  $\gamma$  na ose  $x$  a proložením vhodnou křivkou lze potom určit energetickou závislost účinnosti pro pík úplného pohlcení  $\epsilon_{FEP}(E_\gamma) = f(E_\gamma)$ .

Pro libovolnou energii  $\gamma$ -záření měřeného ve stejné geometrii, jako ve které byla určena funkce  $\epsilon_{FEP}(E_\gamma) = f(E_\gamma)$ , lze potom účinnost vypočítat. Problémem je právě podmínka, že by účinnost měla být určována v identické geometrii jako je probíhající měření. Etalony jsou nejčastěji ve formě malých, téměř bodových, válcových zářičů případně ve formě náplně Marinelliho nádoby. Možné geometrie aktivačních detektorů se tak v podstatě redukuje na tyto dva případy. Pro dodržení geometrie lze použít pouze malé aktivační detektory vyrobené z tenkých folií. Ty jsou umístovány do dostatečné vzdálenosti od detektoru, v níž je možné je připodobnit malým kalibračním zářičům a použít tak účinnost pro ně stanovenou.

Pro dosažení nízké statistické odchylky je třeba naindukovat v aktivačním detektoru dostatečně velkou aktivitu. Indukovaná aktivita je podle 2.2 přímo úměrná reakční rychlosti a počtu jader ve vzorku. Pokud jsou používány pouze malé aktivační folie, lze je použít pouze v dostatečně silných neutronových polích. Pro měření nižších toků neutronů je potom nutné použití větších aktivačních detektorů. V některých případech je potom vhodné použít aktivační detektory speciálních tvarů a velikostí. Pro tyto vzorky poté nastává problém s určením účinnosti detekčního systému. Určitým řešením je aplikace různých korekčních faktorů získaných analytickým výpočtem, jako je geometrický korekční faktor nebo korekční faktor pro samostínění. Tento způsob je však zatížen poměrně velkými obtížně stanovitelnými nejistotami.

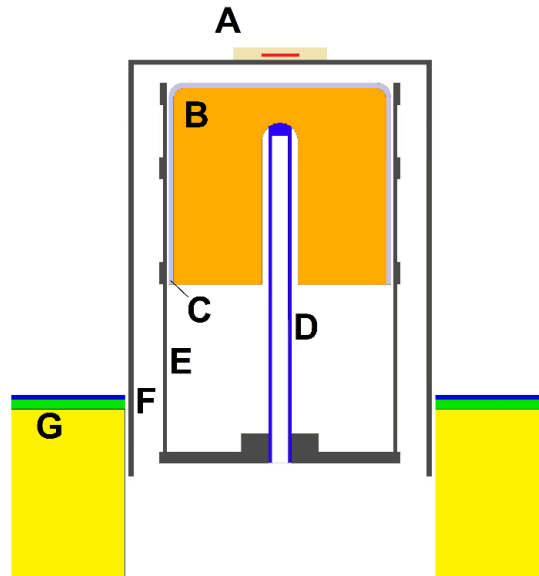
## 2.2.2 Určení pomocí metody Monte Carlo

Pro určení účinnosti lze vhodně použít metody Monte Carlo, které jsou často využívány i v jiných oblastech simulace transportu záření. Tohoto způsobu je využíváno na pracovišti LR-0 vytvořením modelu HPGe detektoru od firmy ORTEC používaného k hodnocení reakčních rychlostí [21].

Pro tento účel musely být nejdříve přesně určeny vnitřní rozměry a složení detektoru, jelikož definované rozměry v produktovém listu od výrobce často nejsou přesné nebo nejsou kompletní [22]. K tomu byl využit radiogram vytvořený prozařováním  $^{137}\text{Cs}$  zdrojem  $\gamma$  záření na vzdálenost 4 m. Dalším důležitým parametrem, který výrazně ovlivňuje účinnost detektoru, je šířka ochuzené neaktivní vrstvy na okraji detektoru mezi krystalem a elektrodou. Tato vrstva se také nazývá jako mrtvá vrstva a může být určena například pomocí měření zeslabení kolimovaného svazku  $\gamma$  záření dopadajícího na čelo detektoru pod různými úhly [23].

S využitím popsanych údajů byl vytvořen přesný model v MC kódu MCNP6 [24]. Kromě samotného detektoru a jeho důležitých částí je v simulaci vytvořeno i stínění kolem celého detektoru vytvořené z vrstvy mědi, pryže a olova sloužící k potlačení záření z přírodního pozadí. Dále je zde modelován samotný zdroj v podobě aktivačního detektoru a případně další přítomné prvky zajišťující požadovanou geometrii. Celý objem aktivačního detektoru je popsán jako izotropní zdroj záření  $\gamma$  o charakteristické energii a detekováním spektra výšky impulzů (*pulse-height spectrum*) v aktivním objemu detektoru lze potom určit účinnost pro pík úplného pohlcení. Na 2.1 lze vidět detail ze simulace detektoru, ve kterém je

měřena účinnost pro malou aktivační folii uzavřenou v plastovém krytu typu EG-3 položeném přímo na detektoru.



Obrázek 2.1: Model detektoru HPGe vytvořený v kódu MCNP6; A - aktivační folie v plastovém krytu, B - aktivní objem detektoru, C - mrtvá vrstva detektoru, D - vnitřní kontaktní kolík, E - držák krystalu, F - pouzdro detektoru, G - stínění (měď, pryž, olovo)

Výsledný model byl validován pomocí porovnání s experimentálně určenou účinností s použitím etalonů bodových zdrojů i ve formě Marinelliho nádoby. Rozdíl mezi experimentem a výpočtem byl určen okolo 2 % pro geometrii s bodovým zdrojem a okolo 1 % pro geometrii s Marinelliho nádobou [21]. Je tedy prokázána možnost dostatečně přesného určení účinnosti a zjištěná neshoda lze použít jako procentuální odchylka určené účinnosti.

Dalším efektem, který ovlivňuje počet impulsů v píku úplného pohlcení, jsou koincidence záření (*coincidence-summing*). Ke koincidenci dochází, pokud jsou v detektoru detekovány najednou dva fotony v menším časovém rozmezí, než je doba nabírání signálu (řádově  $\mu\text{s}$ ) [25]. Při koincidenci může dojít k sumaci koincencí (*summing-in*) nebo koincidenčním ztrátám (*summing-out*). K sumaci dochází, pokud dva různé fotony zanechají v detektoru energii, která je rovna celkové energii jiného fotonu, jehož pík úplného pohlcení je zkoumán. Častěji dochází ke koincidenčním ztrátám, kdy společně s celkovou energií detekovaného fotonu je v detektoru deponovaná alespoň část energie ještě dalšího fotonu. Celková energie je tak posunuta mimo pík úplného pohlcení a dojde ke snížení počtu impulsů v tomto píku.

Jsou rozlišovány pravé a náhodné koincidence. U pravých koincencí pochází oba fotony ze stejného rozpadu, který často probíhá kaskádově přes mezistavy s krátkou dobou života (řádově ps) [25]. K pravým koincencím potom můžou přispět i fotony rentgenového záření vznikající záchytem elektronu nebo vnitřní konverzí. K zohlednění pravých koincencí existuje mnoho různých přístupů. Na pracovišti LR-0 jsou používány opravné koeficienty  $k_{\text{TSCF}}$  získané z [26]. Převrácenou hodnotou opravného koeficientu je potom v 2.4 vynásobena plocha pod píkem úplného pohlcení k získání celkového počtu pulzů ve fotopíku. Koeficient závisí především na rozpadovém schématu daného radionuklidu a účinnosti detektoru - celkové i pro pík úplného pohlcení. Hodnota koeficientu je ve většině případu

nižší než jedna, jelikož pravděpodobněji dochází ke koincidenčním ztrátám. Náhodné koincidence z dvou různých rozpadů jsou naopak často zanedbávány, protože jejich efekt se projeví až při velmi vysokých četnostech, při nichž měření neprobíhá.

### 2.2.3 Specializovaný software

Jelikož vytvoření a validování vlastního matematického modelu detektoru může být poměrně náročné, nabízí firma Mirion Technologies, Inc. svůj kalibrační software LabSOCS<sup>TM</sup> (*Laboratory Sourceless Calibration Software*) [27]. Jak napovídá jeho název, je hlavní předností softwaru možnost účinnostní kalibrace bez nutnosti nákupu a skladování kalibračních etalonů.

Software se skládá ze dvou částí. První je detailní model detektoru, který byl vytvořen v kódu MCNP a pomocí něj byla napočtena energetická a prostorová odezva a závislost účinnosti pro různé zdroje záření. Druhou částí jsou potom matematické šablony, které pokrývají možné tvary a rozměry měřených vzorků. Uživatel vybere používaný detektor a vhodnou šablonu pro měřený vzorek, následně zadá rozměry vzorku, jeho umístění a materiálové složení. Případně je možné zadat další objekty v simulaci, kterými mohou být kolimátory, stínění nebo další absorbující materiály. Celou geometrii si je možné prohlédnout a upravit v 3D grafickém zobrazení. Po provedení výpočtu je výstupem funkce závislosti účinnosti na energii.

V rámci výpočtu účinnosti jsou nově započítávány i koincidence. Dalšími možnostmi softwaru je rychlá citlivostní analýza na variace v rozměrech, poloze i složení vzorků. Součástí výstupu je také stanovení statistické odchylky určení kalibrace. Ta se pohybuje okolo 4–5 % pro energie vyšší než 400 keV a 7–11 % pro energie od 50 do 400 keV. Variantou softwaru určenou pro in-situ měření je potom ISOCS<sup>TM</sup>[28], který funguje na podobných principech.



## Kapitola 3

# Fyzikální modely pro jaderné reakce v MC kódech

Simulace pomocí metody Monte Carlo je hojně využívaná technika ve všech oblastech jaderné i částicové fyziky. Lze ji vhodně využít pro plánování experimentů i vývoj nových jaderných zařízení, jako jsou urychlovače, urychlovačem řízené systémy nebo jaderné reaktory. Je možné ji také použít pro simulaci odezvy detektorů částic. V této práci byly použity dva MC kódy Geant4 [29][30][31] a MCNP6.2 [32][33].

Pro reálný popis průchodu částice prostředím je nutné znát pravděpodobnost reakce této částice v daném prostředí a také typ této reakce, její finální produkty, jejich energii a směr hybnosti, to vše vyjádřené pomocí pravděpodobnostní funkce, aby bylo možné využít metodu Monte Carlo. Typ reakce závisí jednak na prostředí, ale hlavně na typu a energii primární částice, tím vzniká obrovský počet možností, který je třeba v kódu obsáhnout. Pro popis reakcí se používají různé fyzikální modely, které budou pro oba využití MC kódy popsány v následující kapitole.

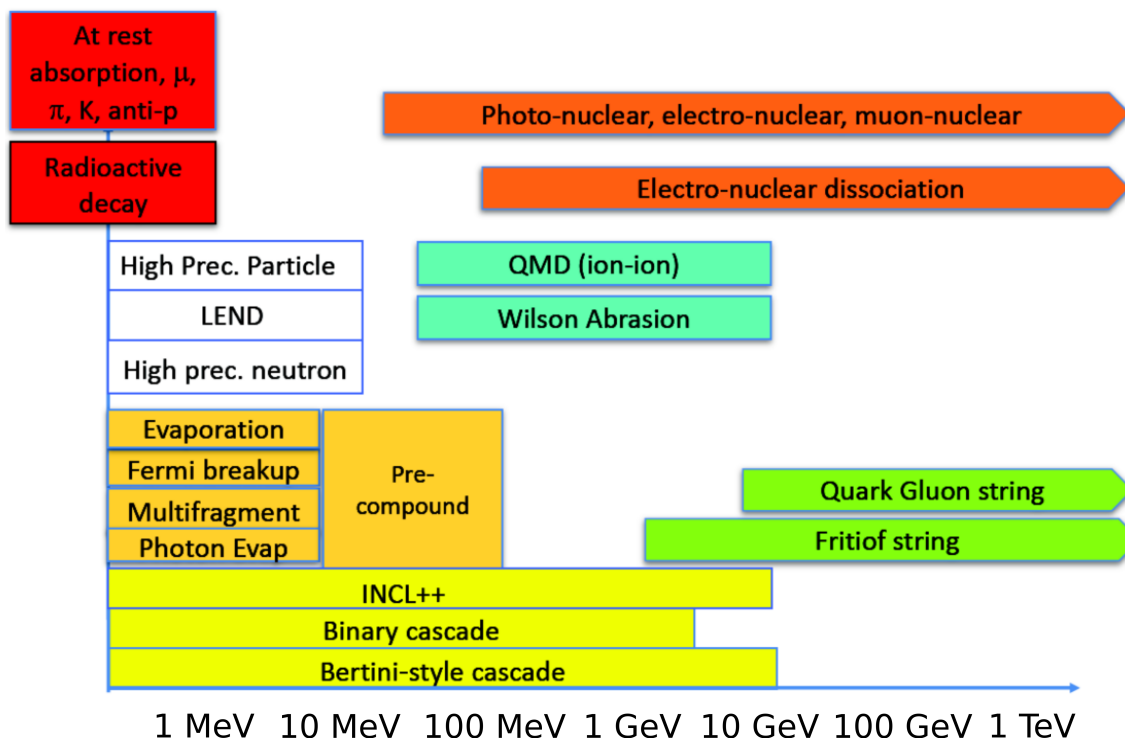
### 3.1 Fyzikální modely v Geant4

V Geant4 můžeme fyzikální modely rozdělit do 3 základních oddílů. Jsou jimi elektromagnetické interakce, hadronické procesy, a foto- a leptonukleární interakce.

Oddíl elektromagnetických interakcí zprostředkovává zejména základní interakce  $\gamma$  fotonů (Comptonův rozptyl, fotoefekt a tvorbu elektronpozitronového páru), ztrátu energie nabitých částic pomocí ionizace a brzděného záření, pružný rozptyl elektronů a dalších nabitých částic s využitím několikanásobných rozptylů, relaxaci atomů a tvorbu a transport rentgenového i optického záření.

Oddíl foto- a leptonukleárních interakcí popisuje interakci fotonů a leptonů s jádry atomů, při čemž se využívá elektromagnetických i hadronických procesů.

Nejdůležitějším oddílem pro simulaci sekundárního záření tvořeného urychlovačem jsou potom hadronické procesy, které jsou definované, jako všechny procesy, jejichž výsledkem může být vznik hadronů. Patří sem tedy elastické i inelastické hadronické srážky, absorpce negativních pionů a kaonů v klidu a radioaktivní rozpad.



Obrázek 3.1: Diagram dostupných hadronických modelů v Geant4 [34]. Červeně jsou označeny procesy pro částice v klidu, absorpce mionů, pionů, kaonů a antiprotonů (*At rest absorption*,  $\mu$ ,  $\pi$ ,  $K$ , *anti-p*) a radioaktivní rozpad (*Radioactive decay*). Oranžově jsou označeny foto- a leptonukleární modely spojující elektromagnetické a hadronické interakce, konkrétně fotonukleární, elektronukleární a mionnukleární (*Photo-nuclear*, *electro-nuclear*, *muon-nuclear*) a elektronukleární disociace (*Electro-nuclear dissociation*). Bíle jsou označeny modely založené na datech pro nízké energie, jsou to data s vysokou přesností pro nabitě částice (*High Prec. Particle*), jaderná data pro nízké energie (*Low Energy Nuclear Data* - LEND) a data s vysokou přesností pro neutrony (*High prec. neutron*). Zelenomodrou barvou jsou označeny modely pro reakce iontů - kvantová molekulová dynamika (*Quantum Molecular Dynamics* - QMD) a Wilsonův abrazní model (*Wilson Abrasion*). Světle zelenou barvou jsou označeny vysokoenergetické strunové modely - kvark-gluonový (*Quark Gluon string*) a Fritiofův (*Fritiof string*). Intranukleární kaskády jsou vyznačeny žlutou barvou, konkrétně jde o kaskádu INCL++, binární kaskádu (*Binary cascade*) a Bertiniho kaskádu (*Bertini-style cascade*). Poslední žlutooranžová barva je vyhrazena modelům pro nízké energie, jde o model předběžně složeného jádra (*Precompound*) a následnou deexcitaci složenou z vypařování (*Evaporation*) Fermiho rozpadu (*Fermi breakup*), multifragmentace (*Multifragment*) a vypařování fotonů (*Photon Evap*).

## 3.2 Hadronické procesy v Geant4

V Geant4 existuje několik modelů pro simulaci hadronických reakcí. Jedná se o teoretické modely i modely založené na knihovných dat. Existují různé modely pro různé částice i energetická rozmezí, ale i pro danou energii má uživatel na výběr z několika modelů. Každá simulace procesu je složena z účinného průřezu, který rozhoduje o tom, kdy a kde k dané reakci dojde a dále modelu, který určuje koncový stav reakce, energii a typ sekundárních částic. Základním schématem pro reakce hadronu s jádrem je počáteční iniciace strunového nebo kaskádového modelu, jenž řídí srážky s jednotlivými nukleony a produ-



kuje vysokoenergetické sekundární částice. Po jeho skončení je jádro ponecháno ve vysoce vzbuzeném stavu. Jeho přechod do rovnovážného stavu je zajištěn modelem předběžně složeného jádra (*precompound model* - PRECO) jenž se taky označuje jako předrovnovážný model (*pre-equilibrium model*). Rovnovážné jádro je potom dále deexcitováno pomocí různých deexcitačních modelů. Podle velikosti jádra a jeho excitační energie může docházet k vypařování (evaporaci), Fermiho rozpadu, multiframegmentaci, štěpení nebo vypařování fotonů. Přehled všech hadronických procesů v závislosti na energii, pro kterou jsou aplikovány je zobrazen na 3.1. Schémata jednotlivých procesů jsou na 3.2.

### 3.2.1 Účinné průřezy

Geant4 poskytuje celkové, inelastické a elastické účinné průřezy pro srážky hadronu, jádra nebo anti jádra s jiným jádrem v celém rozsahu energií. Coulombická část elastického účinného průřezu je implementována pomocí elektromagnetických procesů a tak není součástí hadronických účinných průřezů. Prvním typem účinných průřezů jsou účinné průřezy reakcí na celém jádru, které určují střední volnou dráhu částic v geometrii (celkový účinný průřez) a dále typ reakce (pružný rozptyl nebo volání modelu inelastické srážky). Pro protony a piony o energii menší než 91 GeV jsou vypočítávány pomocí interpolací podle Barashenkova [35][36]. Pro vyšší energie a pro ostatní hadrony a ionty všech energií jsou použity Glauber-Gribovy účinné průřezy [37][38].

Druhým typem jsou účinné průřezy reakcí hadronů s nukleony, které jsou využívány v jednotlivých modelech. Ty jsou popsány pomocí parametrizací, které jsou fitovány na data získána z PDG-2016 [39].

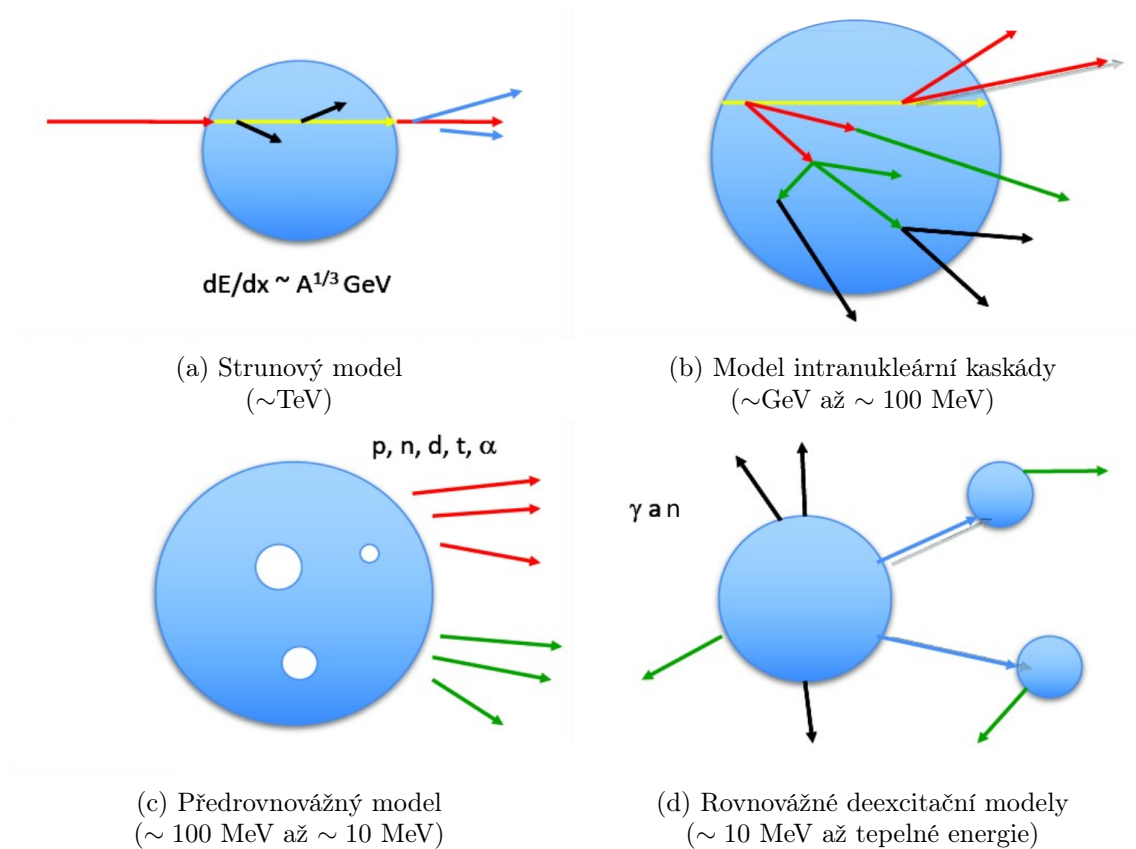
Model pružného rozptylu (energie a úhlová distribuce sekundárních částic) pro nízké energie od 10 do 1200 MeV je založen na diferenciálních datech pro pružný rozptyl na nukleonech převzatých z databáze SAID vytvořené R. A. Arndtem. Pro střední a vyšší energie je využito výpočtu diferenciálního účinného průřezu podle Glaubera [40].

### 3.2.2 Strunové modely

Pro simulace srážek vysokoenergetických částic s jádrem jsou v Geant4 využívány dva strunovo-partonové modely (*parton string model*). Konkrétně se jedná o Fritiofův model (FTF) [41] a kvark-gluonový model (QGS) [42]. Fritiofův model je pro nukleony a další hadrony platný v rozsahu energií 3 GeV až 100 TeV, kvark-gluonový model potom pro energie vyšší než 25 GeV [43]. Oba modely simulují reakci nalétávajícího hadronu s jedním nebo více nukleony a vytvoření několika kvark-gluonových strun a zbytkového excitovaného jádra. Následuje rozpad struny, která se skládá z daného počtu kvarků a má daný čtyř vektor hybnosti, na sekundární hadrony. Excitované jádro je poté předáno do předrovnovážného modelu. Schéma strunového modelu je na 3.2a.

### 3.2.3 Intranukleární kaskády

Pro simulaci reakcí hadronů o středních energiích jsou využívány modely intranukleárních kaskád. Tyto modely jsou založeny na předpokladu, že primární částice reaguje samostatně s jednotlivými nukleony v jádře, které potom získávají vyšší energii a mohou interagovat s dalšími nukleony nebo opustit hranici jádra. Tento předpoklad je přibližně splněn pro energie od 200 MeV do 3 GeV, kdy je vlnová délka primární částice srovnatelná nebo kratší



Obrázek 3.2: Schémata čtyř základních modelů reakcí od nejvyšších po nejnižší energie [34]

než vzdálenost jednotlivých nukleonů v jádře, a to tak může být modelováno jako plyn jednotlivých nukleonů. Pro nižší energie vzrůstá vliv jádra jako celku, model intranukleární kaskády přestává platit a je použit model předběžně složeného jádra. Pro vyšší energie tento model přestává platit, jelikož se začne uplatňovat Lorentzovské zkracování délek. Navíc je při těchto energiích silně dopředně orientované úhlové rozdělení sekundárních částic a prodlužuje se čas, který tyto sekundární částice potřebují, aby se stali kvantově mechanicky odlišitelnými. To snižuje pravděpodobnost vzniku intranukleární kaskády. I přes tyto omezení lze modely intranukleární kaskády upravit tak, aby získali platnost v rozmezí 100 MeV až 10 GeV [43].

Název kaskáda je odvozen z procesu, který se v jádru děje. Primární částice předá část své energie při srážce nukleonu, který potom může reagovat s dalšími nukleony a je tak vytvořena kaskáda, jako je zobrazeno na schématu 3.2b. V Geant4 lze využít tří různých intranukleárních kaskád, jsou to Bertiniho kaskáda [44], Binární kaskáda [45] a kaskáda INCL++ [46][47].

### Bertiniho intranukleární kaskáda

Bertiniho intranukleární kaskáda byla původně přepisem fortranovského INUCL kódu [48], který je založen na Bertiniho kaskádě (Bertiniho přístupu) [49][50], ale byla inspirována i modelem kaskády vyvinutým v Dubně [51]. Původní kód byl přepsán do C++ a postupně byl upravován a vylepšován o prvky, které v původním modelu chyběly jako je například koalescence unikajících částic při kaskádě nebo Coulombova bariéra.

Jádro je modelováno jako 3 až šest koncentrických vrstev o různé konstantní hustotě, které aproximují tvar Woods-Saxonova rozložení hustoty. Jednotlivým nukleonům jsou přiřazeny hybnosti odpovídající degenerovanému Fermiho plynu. Fermiho energie je vypočítána pro každou vrstvu s různou hustotou imitující rozložení hustoty v jádru. Po průchodu částice do jádra je určena její dráha po přímce v závislosti na hustotě této vrstvy a účinného průřezu pro srážku primární částice a volných nukleonů. Celkové účinné průřezy jsou vypočítávány pomocí Letawova vzorce [52][53][54]. Účinné průřezy pro srážky hadronů a volných nukleonů jsou dále efektivně upravovány pro zahrnutí Pauliho blokování a Fermiho pohybu. Pauliho blokování umožňuje vznik sekundárních částic pouze v energetických stavech, které již nejsou obsazené. Úhly sekundárních částic jsou vzorkovány z experimentálně určených diferenciálních účinných průřezů. Během celé kaskády jsou uplatňovány relativistické efekty.

Intranukleární kaskáda je zastavena poté, co všechny částice, které z jádra mohly uniknout, z něj unikly. Kaskáda je následována vlastním zjednodušeným předrovnovážným a deexcitačním modelem, které jsou však podobné obecným modelům v Geant4. V rámci deexcitace může docházet k vypařování lehkých částic, k Fermiho rozpadu pro silně excitovaná lehká jádra anebo ke štěpení, pokud je to pro dané jádro možné. Předrovnovážný stav je řízen Griffinovým excitonovým modelem [55][56] a vypařování je založeno na výpočetním modelu Dostrovského [57][58], který je aplikací statistické teorie emise částic z excitovaných jader po intranukleární kaskádě vyvinuté Weisskopfem [59]. Emitování částic probíhá, dokud je excitační energie vyšší než 0,1 MeV. Vypařování končí emitováním fotonů až do excitační energie  $10^{-15}$  MeV. Takto je tento model platný pro všechny hadrony s dlouhým poločasem rozpadu a  $\gamma$  částice jako primární částice a všechny typy terčových jader pro energie od 0 do 10 GeV [43]. V současné verzi Geant4 10.7 je Bertiniho kaskáda výchozím modelem pro srážky hadronů o středních energiích.

## Binární kaskáda

Binární kaskáda vznikla původně v Geant4 a je kombinací kaskádového modelu a modelu využívajícího kvantovou molekulovou dynamiku hadronových srážek. Jako taková by měla být přesnější na úkor delšího výpočetního času. Stejně jako Bertiniho kaskáda je rozdělena do tří částí - intranukleární kaskády, předrovnovážného rozpadu a deexcitace. Pro předrovnovážný rozpad i deexcitaci jsou používány standardní modely v Geant4, které budou popsány níže. Její název je odvozen od binárních srážek, na kterých je postavena.

Propagace částic v poli jádra je časově závislá a vychází z numerického řešení pohybových rovnic. Jádro je popsáno detailním třírozměrným modelem, jehož hustota se mění podle Woods-Saxonova modelu jádra. Po srážce částice s nukleonem může dojít k vytvoření rezonance, která je dále transportována nebo se rozpadá. Opět jsou aplikovány Pauliho blokování, Coulombova bariéra a relativistické efekty. Částice jsou v jádře propagovány po zakřivených drahách. Kaskáda je ukončena ve stavu, kdy průměrná i maximální energie částic uvnitř jádra jsou pod daným energetickým prahem, který je dán jako 15 MeV respektive 75 MeV.

## Intranukleární kaskáda INCL++

Kaskáda INCL++ je přepisem modelu lutyšské intranukleární kaskády (*Liège Intranuclear Cascade Model*) do objektově orientovaného C++. V současné době je implementovaná verze

INCL4.6. Zájem o tuto kaskádu byl obnoven s rozvojem urychlovačem řízených systémů a spalačnických zdrojů, pro jejichž simulace a projektování se ukázala být vhodným nástrojem.

Jádro je vytvořeno jako shluk jednotlivých protonů a neutronů, které se pohybují ve statickém potenciálu. Proměnlivá hustota nukleonů po poloměru je určena podle Hartree-Fock-Bogoliubových výpočtů [60]. Primární částice je transportována jádrem po přímých drahách, ale stejně jako binární kaskáda je časově závislá. Během transportu dochází k reakci s nukleony, které lavinovým efektem reagují s dalšími a vytváří tak kaskádu. Z jádra potom mohou unikat nukleony, piony i lehké ionty, které jsou tvořené speciálním fázově-prostorovým koalescenčním algoritmem. Pokud dva a více nukleonů dosáhnou povrchu jádra a jsou k sobě dostatečně blízko ve fázovém prostoru, dojde k jejich uvolnění ve formě složeného jádra a nikoliv jako samostatných protonů a neutronů.

Kaskáda končí, pokud v jádře už nezbyly žádné aktivní částice nebo pokud uplynul čas, který je v INCL vypočítáván vlastním unikátním algoritmem pro každé terčové jádro. Na konci kaskády je excitované jádro přiděleno rovnou deexcitačnímu modelu bez předchozího předrovnovážného modelu. K INCL++ v Geant4 může být přidělen standardní deexcitační model nebo model ABLA++ [61][62], který je doporučovaným deexcitačním modelem k této kaskádě [63]. Model INCL byl testován pro simulace reakcí indukovaných nukleony, piony a lehkými ionty až do hmotnostního čísla  $A=18$  na terčových jádrech s hmotnostními čísly od 4 do 250 v blízkosti linie stability a pro energie od 10 MeV/A do 20 GeV/A [43].

ABLA++ je alternativním deexcitačním modelem vedle výchozího modelu v Geant4 a může být přidělena k intranukleární kaskádě INCL++. Jedná se o přepis fortranovského kódu ABLA07 vyvinutého na GSI Alexandrem Keličem a dalšími [61] do C++. Deexcitační model ABLA++ zahrnuje tři možné kanály - vypařování, štěpení a multifragmentaci. Vypařovací model počítá pravděpodobnost emise částic  $\gamma$ , neutronů a lehkých nabitých částic podle Weisskopfova formalismu [64]. Pro realističtější popis deexcitace jsou brány v úvahu separační energie a Coulombova bariéra. Pokud je excitační energie vyšší než energie nutná ke štěpení, je otevřen i tento kanál deexcitace. Jádra s vysokou excitační energií jsou velmi nestabilní a v těchto případech může docházet k rozpadu jádra a multifragmentaci.

### 3.2.4 Předrovnovážný model

Model předběžně složeného jádra (*precompound model*) nebo také předrovnovážný model (*pre-equilibrium model*) je prodloužením hadronických modelů do nižších energií. Je zároveň modelem, který se uplatňuje pro inelastické srážky primárních částic o nízkých energiích a modelem, který slouží jako přechod pro modely vysokých a středních energií popsanych výše k rovnovážným deexcitačním modelům. Vstupními informacemi jsou hmotnostní číslo a náboj zbytkového jádra, jeho čtyřvektor hybnosti, excitační energie a počet excitovaných částic a děr, jejichž součet je rovný počtu excitonů. Tyto údaje jsou určovány během strunového modelu nebo intranukleární kaskády a jsou poté předány modelu předběžně složeného jádra.

Jaderné reakce byly původně simulované pouze jako dvoustupňové. První byla rychlá fáze intranukleární kaskády s malým počtem stupňů volnosti a poté následovala deexcitační fáze s delším časem průběhu a větším počtem stupňů volnosti. Předpokladem je, že v druhé části (deexcitaci) je jádro ve statistické rovnováze a lze na něj použít statistická teorie rozpadu jádra. Proto muselo být během první a druhé fáze dosaženo rovnováhy, během čehož však nebyly vyzářeny žádné částice a v modelovaném spektru chyběl jeho vysokoenergetický konec [65]. Tento model byl doplněn právě modelem předběžně složeného jádra založeným

na excitonech poprvé představen v pracích Griffina a dalších [55] [56]. V Geant4 je tento model použit v úpravě, kterou představili Gudima a další [66].

V tomto modelu je jádro popsáno kvantovým číslem  $n$  představující počet excitonů. To se může měnit o  $+2$  nebo  $-2$  vytvořením nebo zánikem páru excitovaná částice-díra nebo o 0 při rozptylu excitonů. Tyto změny jsou popsány pravděpodobnostmi a podle nich dochází k jednotlivým přechodům do té doby, než se pravděpodobnost vzniku i zániku excitonu vyrovná a jádro tak dosáhne statistické rovnováhy. Pokud se při tomto procesu dostane jádro do stavu s vyšší energií, než je vazebná energie dané částice, může dojít k vyzáření této částice. Emitování částice se tak stává dalším kanálem, pomocí něhož může dojít ke změně počtu excitonů. K výpočtu pravděpodobnosti vyzáření dané částice se používá předpokladu, že tento proces je úměrný mikroskopickému účinnému průřezu pro inverzní reakci, tedy absorpci této částice v jádře, což je podobný princip jako pro výpočet pravděpodobnosti vypařování částice v rovnovážném modelu deexcitace [59].

Pokud má primární částice nízkou energii, která není dostačující k zahájení intranukleární kaskády, redukuje se kaskáda na jednu srážku, při níž dojde k absorpci primární částice. Například absorpcí protonu a jeho reakcí s jedním nukleonem dojde k vytvoření stavu s jednou dírou a dvěma excitovanými částicemi, počet excitonů je tedy  $n = 3$ . Počet excitonů potom dále stoupá, jelikož systém statisticky spěje k vyšší neuspořádanosti, až dosáhne rovnovážného stavu. V současné době je v předrovnovážném modelu možná emise pouze neutronů, protonů, deutronů, tritonů a alfa částice. Jejich emise je předpokládána jako izotropní ve vztažené soustavě spojené s excitovaným jádrem.

### 3.2.5 Deexcitace

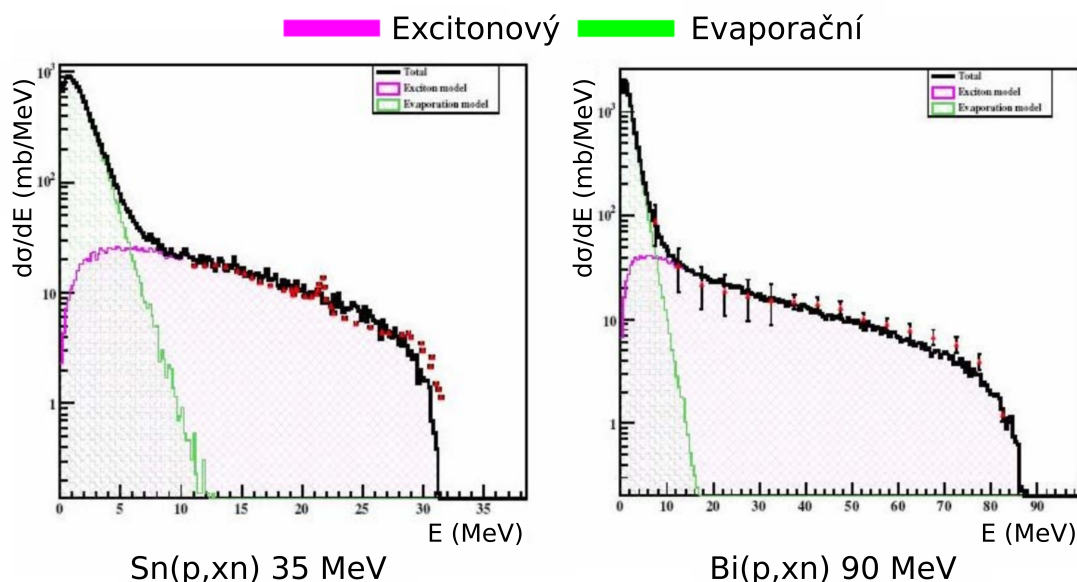
Po ukončení modelu předběžně složeného jádra je zbytkové jádro v rovnovážném stavu s excitační energií, která je sdílená velkým počtem nukleonů. Toto jádro je charakterizováno pouze svojí hmotností, nábojem a množstvím excitační energie bez jakékoliv paměti, jak do tohoto stavu dospělo. Pokud je excitační energie vyšší než separační, může stále dojít k vyzáření nukleonů a lehkých iontů.

Na obrázku 3.3 lze vidět porovnání počtu a energie neutronů vznikajících z excitonového předrovnovážného modelu a deexcitačního vypařovacího (evaporačního) modelu na různých terčovách jádrech převzatého z [67]. Model předběžně složeného jádra pokrývá téměř celý energetický rozsah, ale je v něm tvořeno méně neutronů. Vysokoenergetickou část spektra tvoří výhradně tento model. Vliv vypařování strmě vzrůstá pod energií okolo 15 MeV a tvoří nejpočetnější nízkenergetickou část spektra.

Rovnovážený deexcitační model se v Geant4 skládá z několika podmodulů. Jsou jimi vypařovací model pro vypařování nukleonů a lehkých fragmentů složený z vypařovacího modelu podle Weisskopf-Ewinga [64] pro emitování neutronů a lehkých iontů do částice  $\alpha$  a zobecněný vypařovací model (*Generalized Evaporation Model* - GEM) pro těžší nabitě částice až do  $^{28}\text{Mg}$  [68]. Dále je to model pro vypařování fotonů složený z modelů pro diskrétní a spojitě vyzařování fotonů; model pro štěpení založený na Bohr-Wheelerově modelu [69]; multifragmentace [70] a Fermiho rozpad [70].

### Vypařování (Evaporace)

Emise částic z excitovaného jádra byla úspěšně popsána srovnáním tohoto jevu s vypařováním molekul z kapaliny, odtud tedy název vypařování (evaporace) částic. První statistickou



Obrázek 3.3: Porovnání diferenciálních účinných průřezů pro vznik neutronu na cínovém a bismutovém terči ostřelovaném protony o různé energii. Celkový tok neutronů je rozdělen na část generovanou excitonovým předrovnávacím modelem (fialová) a deexcitačním vypařovacím modelem (zelená). [67]

teorii složeného jádra poté vytvořili Weisskopf a Ewing a tato teorie je používána dodnes. Její úprava pro výpočet v metodách Monte Carlo byla provedena Dostrovským [57]. Tato teorie je založena na úměrnosti pravděpodobnosti přechodu z jednoho stavu do druhého pravděpodobnosti opačného přechodu. Pravděpodobnost vyzáření částice je potom úměrná poměru hustoty stavů jádra po vyzáření částice a před vyzářením částice a mikroskopickému účinnému průřezu pro inverzní reakci, tedy pro absorpci částice za vzniku jádra, na němž probíhá vypařování. Tyto účinné průřezy v závislosti na energii jsou počítány empiricky získaným vzorcem založeným na geometrické interpretaci účinného průřezu podle [57] a [71]. Energie emitované částice je poté určena navzorkováním této pravděpodobnosti, úhlová distribuce je uvažována izotropní.

Původně alternativní GEM model navržený Furihatou [68] byl propojen s původním vypařovacím modelem pro simulaci vypařování těžších částic než  $\alpha$  až do  $^{28}\text{Mg}$  v základních i excitovaných stavech. Oproti výchozímu modelu uvažuje složitější a přesnější popis hustoty stavů a pro výpočet mikroskopických účinných průřezů používá parametry podle [72], jinak funguje na stejném principu popisu pravděpodobnosti emitování částice.

## Štěpení

Pro jádra s nukleonovým číslem vyšším než 65 je bráno v úvahu jako alternativní deexcitační kanál také štěpení. Aby mohlo dojít ke štěpení, musí být excitační energie jádra vyšší než kritická energie pro štěpení, která je vypočítávána podle [73]. Potom je pro výpočet pravděpodobnosti využita Bohr-Wheelerova teorie štěpení [69]. Pomocí dalších modelů je potom vypočítán výsledný stav štěpení, počet a typ štěpných produktů, jejich náboj a kinetická a excitační energie.

## Vypařování fotonů

Jedním ze způsobů vypařování fotonů je model kontinuálního gama přechodu. Při něm je vypočtena pravděpodobnost vypařování fotonu podobně jako pravděpodobnost vypařování částice na základě hustoty stavů a mikroskopického účinného průřezu pro absorpci fotonu vypočítaného podle [74]. Druhým způsobem, kterým také končí celá vypařovací posloupnost, je vyzařování diskretních gama kvant. V tomto okamžiku se už nebere v úvahu emitování jiných částic a vyzařování fotonů probíhá podle tabulovaných ENSDF dat pro různé izotopy z databáze NuDat 2 [75]. Pokud je v těchto datech zahrnuta i vnitřní konverze, je uvažován i tento kanál deexcitace.

## Multifragmentace

Pokud je excitační energie příliš vysoká (vyšší než 3 MeV na jeden nukleon) přestávají platit modely pro vypařovací procesy a dochází k rozpadu celého jádra explozivním způsobem. Pro rozpad těžších jader slouží model statistické multifragmentace [70][76]. Jádro je podrobeno rozpadu, jehož jednotlivé excitované fragmenty se poté nezávisle pohybují ve svých coulombických polích a deexcitují. Pro model multifragmentace jsou nejdříve určeny pravděpodobnosti různých kanálů rozpadu v závislosti na jejich entropii. Pro vybraný kanál s danou entropií je potom určena násobnost jednotlivých fragmentů, jejich nukleonová čísla, náboj a kinetická a excitační energie.

## Fermiho rozpad

U lehkých jader ( $Z < 9$  a  $A < 18$ ) může být i nižší excitační energie srovnatelná s celkovou vazebnou energií nukleonů. Takto excitované jádro opět podléhá úplnému rozpadu, k jehož simulaci je použit model Fermiho rozpadu. Tento statistický model byl poprvé použit Fermim [77] a byl tak po něm pojmenován. Nejdříve jsou určeny všechny možné rozpady, u nichž po aplikování zákona zachování energie, vychází kladná kinetická energie výsledných produktů. Potom je pro jednotlivé stavy vypočtena jejich pravděpodobnost podle [78] a nakonec jsou určeny charakteristiky jednotlivých fragmentů.

### 3.2.6 Modely založené na datech

Kromě těchto teoretických modelů, existují v Geant4 dva modely hadronických interakcí, kde jsou mikroskopické účinné průřezy, informace o finálním stavu a úhlovém a energetickém rozdělení sekundárních částic založeny na tabulovaných datech. Jsou jimi NeutronHP pro neutrony o energii do 20 MeV a ParticleHP pro protony, deuterony, tritony a jádra  $^3\text{He}$  a  $^4\text{He}$  až do 200 MeV.

Modul NeutronHP simuluje interakce neutronů od tepelných energií do energie 20 MeV. Aby měl model podobnou strukturu jako ostatní modely, jsou interakce rozděleny do čtyřech samostatných částí. Jsou jimi radiační záchyt, pružný rozptyl, štěpení a nepružný rozptyl. Data pro tyto reakce jsou v Geant4 uložena ve vlastním formátu G4NDL, který však vychází z formátu ENDF-6. Data jsou uložena v jednotlivých bodech mezi nimiž je uvažována lineární interpolace tak, aby tím nedošlo k větší chybě než několik procent. V současné verzi G4NDL4.6 jsou využívána převážně data z knihovny JEFF-3.3 [79], IAEA však poskytuje data většiny současných verzí evaluovaných knihoven jaderných dat ve formátu G4NDL na svých webových stránkách [80][81][82].

Modul ParticleHP slouží pro simulaci inelastických interakcí lehkých nabitých částic až do energie 200 MeV. Modul používá stejný kód jako NeutronHP pouze s drobnými změnami pro určení primární částice. Data jsou převzata z knihovny ENDF/B-VII.1 [83], pro těch několik izotopů, pro která existují. Pro ostatní jsou převzata z knihovny TENDL-2015 [84][85], která je vypočítána pomocí kódu TALYS. Jelikož pro většinu izotopů nejsou v datech informace o jednotlivých rozpadových kanálech, ale pouze celkový mikroskopický účinný průřez a výtěžky jednotlivých produktů, nejsou splněny zákony zachování energie, protonového a nukleonového čísla v jednotlivých reakcích, ale pouze jejich střední hodnoty.

### 3.3 Hadronické modely v MCNP6

Také v programu MCNP existuje několik různých modelů pro simulaci hadronických procesů nízkých a středních energií. Jsou jimi intranukleární kaskády Bertini [49], ISABEL [86] [87] a INCL4 [46], ke kterým lze připojit jeden ze dvou deexcitačních procesů Dresner [88] nebo ABLA [89]. Společně tak tvoří až šest kombinací. Dalším modelem je pak CEM03.03 [90], který v sobě zahrnuje intranukleární kaskádu, předrovnovážený a deexcitační model. Také je možné použít vzorkování z dostupných knihoven jaderných dat.

#### 3.3.1 Intranukleární kaskády

Model intranukleární kaskády Bertini je postaven na podobných principech jako v Geant4. Jádro je modelováno třemi koncentrickými vrstvami o stejné hustotě. Nukleonům jsou přiřazeny hybnosti degenerovaného Fermiho plynu. Náhodně je určeno místo na hranici jádra, ve kterém do něj vstupuje primární částice, která dále vytváří intranukleární kaskádu. Není zde časová závislost a jednotlivé částice jsou postupně propagovány jádrem, než jejich energie klesne pod danou hranici nebo uniknou z jádra. Poté, co tímto procesem projdou všechny částice, kaskáda končí. Bertiniho model kaskády s deexcitací pomocí modelu podle Dresnera byl u předchozích verzí MCNP výchozím modelem pro reakce nukleonů a pionů.

Model intranukleární kaskády ISABEL byl vyvinut v letech 1978-1981 Yarivem a Fraenkelem. Model vychází z modelu VEGAS vytvořeným Chenem a dalšími [91]. Tento model byl doplněn o reakce indukované lehkými a těžkými ionty. Pokud je použita v MCNP Bertiniho kaskáda, je právě kaskáda ISABEL výchozím modelem pro reakce částic jiných než nukleony a piony. Jádro je modelováno jako 8 až 16 koncentrických vrstev o konstantní hustotě a nukleonům jsou přiřazeny hybnosti degenerovaného Fermiho plynu. Na rozdíl od Bertiniho modelu jsou částice jádrem propagovány v časové posloupnosti, během které je umožněna i změna složení a vlastností jádra. Kaskáda končí, když všechny částice unikly z jádra nebo se jejich energie dostala pod danou hodnotu [92].

Kaskáda INCL4 je také stejná v obou výpočetních kódech. Zde se pouze jedná o její původní formu v kódu FORTRAN a nikoliv její přepis do C++. Hlavními rozdíly oproti Bertiniho modelu je přesnější modelování jádra s proměnnou hustotou a závislost srážek na čase včetně vyjádření konce kaskády pomocí času a nikoliv energetického prahu.

#### 3.3.2 Model CEM

Model CEM (*Cascade-Exciton Model*) byl původně vyvinut na Spojeném ústavu jaderných výzkumů (JINR) v Dubně Gudimou, Mashnikem a Toneevem [66] a byl dále rozvíjen



Mashnikem a jeho spolupracovníky a nyní je používán ve verzi CEM03.03 a jako takový je výchozím modelem pro MCNP6.2. Skládá se ze tří klasických fází, kterými jsou intranukleární kaskáda, předrovnovážný rozpad a rovnovážná deexcitace.

Fáze intranukleární kaskády vychází z modelu intranukleární kaskády DUBNA [51], která sdílí mnoho společných rysů s Bertiniho modelem i modelem INCL4. Jedním z rozdílů je model jádra se sedmi koncentrickými vrstvami o konstantní hustotě. Další odlišností je unikátní způsob rozhodování o ukončení kaskády a přechodu k předrovnovážnému modelu. Děje se tak při překročení daného rozdílu mezi vypočteným lokálním efektivním optickým potenciálem a globálním experimentálně určeným optickým potenciálem.

Po ukončení kaskády je aktivována tzv. fáze spojování, která zprostředkovává emitování vysokoenergetických lehkých iontů do částice  $\alpha$  tím, že spojuje některé uniklé nukleony do těchto částic. Poté už následuje modifikovaný excitonový model předrovnovážného rozpadu (*Modified Exciton Model* - MEM), který je téměř shodný s modelem předběžně složeného jádra v Geant4.

V poslední fázi modelu CEM03 dochází k deexcitaci. Vypařování částic je popisováno modelem GEM [68], který je v Geant4 používán pro vypařování těžších iontů. Štěpení probíhá podle modelu RAL [93] a pro jádra s nukleonovým číslem menším než 13 dochází k Fermiho rozpadu.

### 3.3.3 Předrovnovážný a rovnovážný model

Intranukleární kaskády podle Bertiniho a ISABEL používají vlastní předrovnovážný model, konkrétně mnohastupňový předrovnovážný model (*Multistage Pre-equilibrium Model* - MPM) [94]. Ten pro urychlení simulace uvažuje pouze změnu počtu excitonů  $+2$ , na rozdíl od možností  $\pm 2$  a  $0$  uvažovaných v MEM u CEM03. Kaskáda INCL žádný předrovnovážný model nepoužívá a je přepojena rovnou na deexcitační model.

Rovnovážný deexcitační model Dresner používaný v MCNP je založený na stejných principech jako výchozí vypařovací model v Geant4. Vychází z Weisskopf-Ewingovy statistické teorie zpracované Dostrovskym pro výpočty Monte Carlo, která byla dále rozvíjena Dresnerem. Stejně tak lze použít model ABLA.



## Kapitola 4

# Radiofarmaka a PET IBA Cyclone

18/9

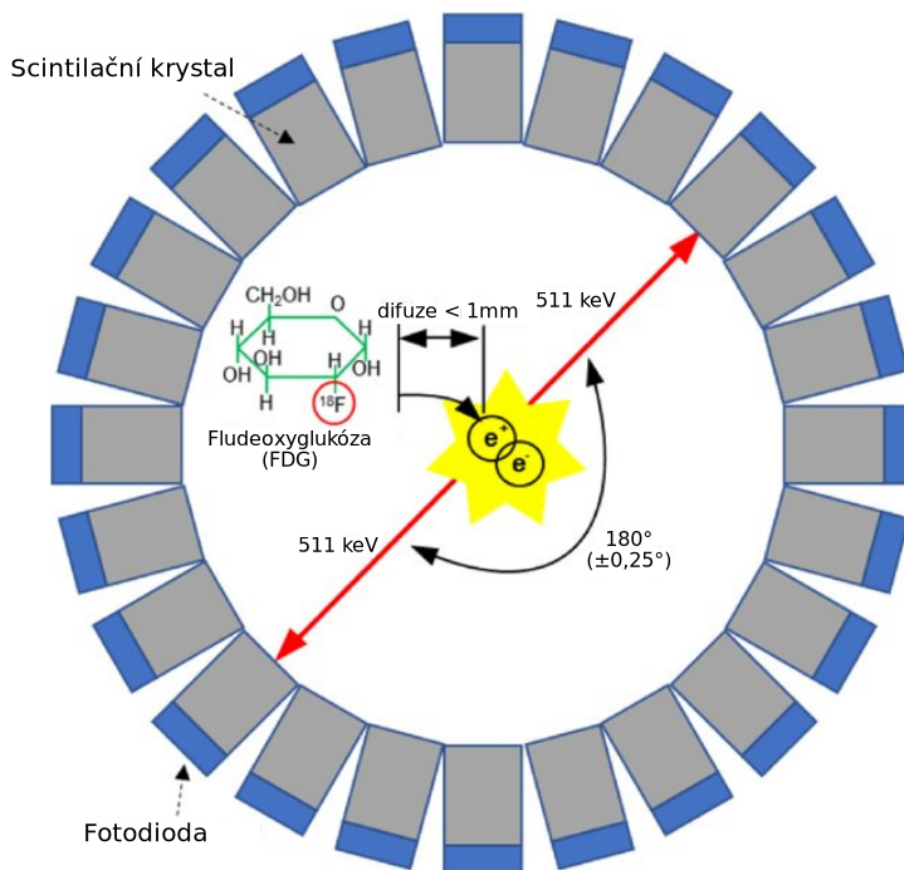
Výroba radiofarmak v urychlovačích započala již ve 30. letech minulého století. Po druhé světové válce byla většina produkce přesunuta do reaktorů. S rozvojem nových druhů radiofarmak a ukončováním životností starých reaktorů dochází opět ke zvýšení výroby v urychlovačích, které jsou často designovány přímo na jejich výrobu. V současné době je v provozu více než 300 kompaktních cyklotronů a jejich počet se stále zvyšuje [95].

Nukleární medicínu lze rozdělit na terapeutickou, kdy jsou radioaktivní izotopy určeny k léčbě pomocí ozařování nádorů, a diagnostickou. Diagnostická nukleární medicína slouží k zobrazování zejména fyziologických procesů. Pacientovi je do těla vpravena látka obsahující radioaktivní izotop, pomocí něž je potom sledován její pohyb, vstřebávání a vylučování. Radioaktivní látka je sledována buď pomocí gama kamery využívané při jednofotonové emisní výpočetní tomografii (*Single-Photon Emission Computed Tomography* - SPECT) nebo pomocí speciální kamery pro pozitronovou emisní tomografii (*Positron Emission Tomography* - PET). Z těchto snímků lze potom získat informace o funkci orgánů a jejich metabolismu.

### 4.1 Metoda PET

Metoda PET je neinvazivní diagnostická technika určená pro sledování funkce orgánů. Od metody SPECT, při které je do těla pacienta vpraven radionuklid emitující jednoduché  $\gamma$  záření, které je přímo detekováno, se liší tím, že je používán radionuklid podléhající  $\beta^+$  rozpadu a detekovány jsou dva anihilační fotony. Ty vznikají anihilací emitovaného pozitronu s elektronem v blízkosti místa vzniku pozitronu. Kvůli zákonům zachování mají oba fotony stejnou energii 511 keV a opačný směr. Díky detektorům umístěným po obvodu kruhu lze potom detekovat oba vzniklé fotony, jak lze vidět na obrázku 4.1, a pomocí výpočtu poté určit místo jejich vzniku. Lze tak získat 3D obraz aktivity daného orgánu s rozlišením cca 4 mm [97]. Metoda PET se nejčastěji využívá pro zobrazování patologických a fyziologických procesů mozku a srdce a zejména pro detekci nádorů a metastáz.

Metoda PET se poté často používá ve spojení se zobrazením pomocí výpočetní tomografie (*Computed Tomography* - CT). Zatímco metoda PET dokáže snímat metabolické procesy, pomocí CT lze velice přesně snímat anatomické struktury. Kombinací obou potom lze získat snímek funkčních procesů s vysokým rozlišením. Dalším zajímavým možným použitím



Obrázek 4.1: Princip pozitronové emisní tomografie - do pacienta je vpraveno radiofarmakum v podobě organické sloučeniny označené radioaktivním nuklidem, ten se rozpadá  $\beta^+$  rozpadem, vzniklý pozitron anihiluje za vzniku dvou elektronů, které jsou detekovány [96].

je spojení chemicky podobných izotopů, nejčastěji stejného prvku, v jednu teranostickou sloučeninu. Metoda je založena na tom, že část se rozpadá  $\beta^+$  rozpadem a umožňuje diagnostiku pomocí PET a část  $\beta^-$  rozpadem. Elektrony z tohoto rozpadu lze potom použít k terapii ozařováním nádorů. Takovou skupinou izotopů je například  $^{43}\text{Sc}$  nebo  $^{44}\text{Sc}$  jako zářič pozitronů a  $^{47}\text{Sc}$  jako zářič elektronů [98].

Aby bylo tedy možné použít metodu PET je nejdříve nutné vyrobit vhodný radionuklid. Nejběžněji užívané radionuklidy jsou shrnuty v tabulce 4.1. Společně s nimi je zobrazen jejich poločas rozpadu, typické reakce použitelné pro jejich výrobu a vhodná energie primární částice, která je v těchto reakcích využívána. Krátký poločas rozpadu zajišťuje nižší dávku pacientovi, omezuje nebo úplně redukuje nutnost vypořádat se s radioaktivním odpadem a umožňuje i více vyšetření během jednoho dne. Naopak jeho nevýhodami je nutnost urychlovače v dostatečné blízkosti diagnostického pracoviště pro převoz radionuklidu a kratší doba pro vytvoření finální sloučeniny.

Tabulka 4.1: Nejčastěji používané emitory pozitronů, jejich poločas rozpadu a typické reakce používané k jejich produkci společně s vhodným energetickým rozmezím [99].

radionuklid	$T_{1/2}$ (min)	reakce	energie (MeV)
$^{11}\text{C}$	20,3	$^{14}\text{N}(\text{p}, \alpha)$	11–17
$^{13}\text{N}$	9,97	$^{16}\text{O}(\text{p}, \alpha)$	19
		$^{13}\text{C}(\text{p}, \text{n})$	11
$^{15}\text{O}$	2,03	$^{15}\text{N}(\text{p}, \text{n})$	11
		$^{14}\text{N}(\text{d}, 2\text{n})$	6
		$^{16}\text{O}(\text{p}, \text{pn})$	>26
$^{18}\text{F}$	110	$^{18}\text{O}(\text{p}, \text{n})$	11–17
		$^{\text{nat}}\text{Ne}(\text{d}, \alpha)$	8–14

## 4.2 $^{18}\text{F}$ jako zářič pozitronů

Fluor-18 je nejčastěji používaným radionuklidem pro metodu PET a celkově jedním z nejvíce používaných radionuklidů v nukleární medicíně. Spojuje v sobě výhody vhodně dlouhého poločasu rozpadu a lze ho produkovat pomocí dobře popsané reakce  $^{18}\text{O}(\text{p},\text{n})^{18}\text{F}$  s dostatečně vysokým výtěžkem. Jedná se o endoenergetickou reakci s energetickým prahem okolo 2,6 MeV. Mikroskopický účinný průřez se pohybuje v rozmezí 100 – 700 mb pro energie od 4 do 16 MeV s lokálním maximem okolo 6 MeV [95].

Terče na výrobu radionuklidů mohou být obecně v plynném, kapalném i pevném skupenství. Nejčastější pro produkci  $^{18}\text{F}$  je kapalně skupenství v podobě  $\text{H}_2\text{O}$  obohacené o  $^{18}\text{O}$ . Jinou možností, která se však využívá spíše pouze pro experimentální účely je využití plynného  $^{18}\text{O}$ .

Po ozáření terče a naindukování dostatečné aktivity je obsah terče přesunut pro další zpracování na finální radiofarmakum. Tím nejvíce používaným v případě fluoru-18 je  $^{18}\text{F}$ -fludeoxyglukóza ( $^{18}\text{F}$ -FDG). Jedná se o látku podobnou D-glukóze, jenž má místo hydroxylové skupiny na jednom uhlíku právě radioaktivní fluor.  $^{18}\text{F}$ -FDG se potom v těle chová podobně jako glukóza a je spotřebovávána buňkami, které vyžadují vysoký přísun energie. Lze tak tedy zobrazovat funkce mozku a srdce a detekovat rychle se množící rakovinové buňky. Jeden mililitr  $^{18}\text{F}$ -FDG obsahuje asi 100 – 1500 MBq  $^{18}\text{F}$ . Pro jedno vyšetření je potřeba asi 350 – 500 MBq [95][98].

## 4.3 IBA Cyclone 18/9

Nejčastěji využívanými urychlovači pro produkci medicínských radionuklidů jsou cyklotrony. Cyklotron používaný v ÚJV Řež pro produkci radiofarmak je IBA Cyclone 18/9. Jedná se o kompaktní medicínský cyklotron o průměru magnetů 2 m, výšce 2,2 m a hmotnosti 24 t. Cyklotron je vyráběný belgickou firmou IBA založenou v roce 1986 specializující se na medicínské urychlovače určené pro výrobu radiofarmak i pro terapii. V roce 2008 bylo instalováno asi 110 těchto cyklotronů [99]. V současné době je stejnou firmou nabízen nástupce tohoto cyklotronu Cyclone KIUBE, který má ještě kompaktnější rozměry [101].

Uprostřed cyklotronu je vestavěný Penningův zdroj iontů, který může produkovat záporné ionty  $\text{H}^-$  nebo  $\text{D}^-$ . Ty jsou dále urychlovány ve vakuové komoře pomocí dvou elektrod s napětím 38 kV. Vakuum je udržováno pomocí olejové difuzní vývěvy na hodnotě asi

$3 \cdot 10^{-6}$  Pa. Pro udržení částice na kruhové dráze je v cyklotronu vytvářeno magnetické pole od 0,35 T do 1,5 T. Extrakce paprsku na terč je provedena pomocí tenké uhlíkové folie, tzv. stripperu. Ten je umístěn na vnějším okruhu vakuové komory v dráze urychlovaných iontů. Průletem folií jsou zápornému iontu odebrány všechny elektrony, ten se tak stane kladným a je vychýlen směrem k terči. Folie jsou zpravidla vyráběny z pyrolytického uhlíku a mají tloušťku asi  $5 \mu\text{m}$ . Při provozu jsou vystaveny teplotám až  $1500^\circ\text{C}$  a jsou tak jednou z nejnáchylnějších součástí cyklotronu, u které je třeba pravidelná údržba a výměna. U cyklotronu IBA Cyclone 18/9 jsou také jedinou možností, jak ovlivnit výsledný paprsek dopadající na terč.

Celý cyklotron je umístěn v betonové kobce o délce 5,85 m a šířce 4 m zajišťující stínění. V přilehlých místnostech se nachází laboratoře pro přípravu radiofarmak včetně horkých komor pro práci s radioaktivními materiály, technické místnosti a místnost pro operátory cyklotronu. Na obrázku 4.2 lze vidět celý cyklotron v betonové kobce.



Obrázek 4.2: IBA Cyclone 18/9 v betonové kobce v ÚJV Řež.

#### 4.4 Terč XXL a jeho model

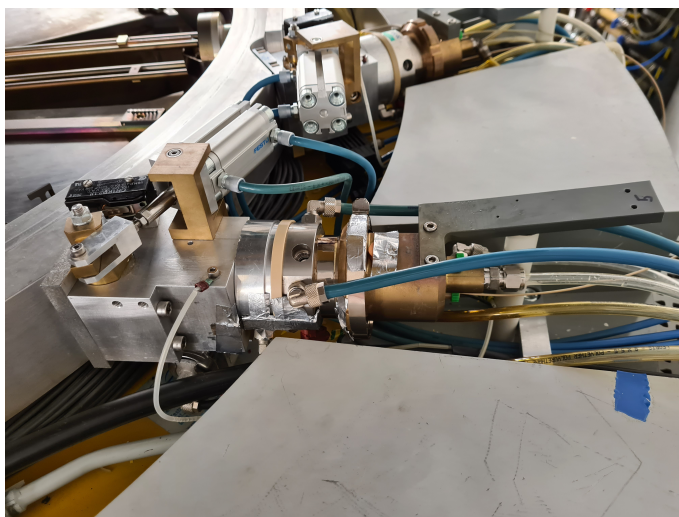
IBA Cyclone 18/9 má celkem 8 možných terčů, při čemž lze využít kontinuálního ozáření na dvou terčích zároveň. Základními parametry každého cyklotronu pro produkci radiofarmak jsou energie a proud paprsku. Částice musí mít dostatečnou energii, aby probíhala zvolená produkční reakce a proud částic musí být dostatečně silný, aby byly získávány praktické výtěžky. Možnými používanými paprsky v cyklotronu IBA Cyclone 18/9 jsou protony o energii 18 MeV a deuterony o energii 9 MeV umožňující využití reakcí  $^{14}\text{N}(p,\alpha)^{11}\text{C}$ ,

$^{18}\text{O}(\text{p},\text{n})^{18}\text{F}$  nebo  $^{\text{nat}}\text{Ne}(\text{d},\alpha)^{18}\text{F}$ . V současné době se v ÚJV Řež vyrábí převážně radiofarmaka obsahující  $^{18}\text{F}$  vyráběné pomocí reakce protonů na  $\text{H}_2^{18}\text{O}$ . K tomu je převážně využívána terčová sestava označována jako model XXL.

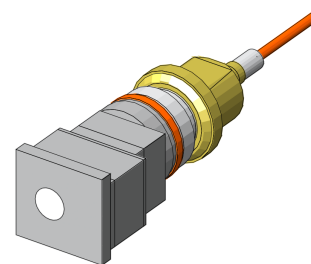
Cyklotron v ÚJV Řež funguje jako záložní výrobní PET centrum pro další dva cyklotrony instalované na Masarykově onkologickém ústavu v Brně a v Nemocnici Na Homolce v Praze. Radiofarmaka jsou produkována podle potřeby  $1 - 2 \times$  denně. Ozařování vždy probíhá pouze na jednom terči a je využíváno proudů  $70 - 80 \mu\text{A}$ . Při jednom ozařování je vyrobeno asi  $100 - 300 \text{ GBq } ^{18}\text{F}$ .

V rámci diplomové práce nebyl modelován celý cyklotron, ale pouze jeho terčové uskupení, jelikož všechny experimenty byly prováděny v těsné blízkosti terče a zároveň má terč největší vliv na podobu neutronového spektra v jeho okolí. Fotografie detailu na terč je na 4.3a. Pomocí dostupných plánů a oměření některých dílů byl vytvořen detailní model celé terčové soustavy. Tu lze rozdělit na tři základní celky. První je hliníková část složená ze třech kvádrů přisedající přímo k cyklotronu obsahující klapku, kterou je možné uzavřít vakuovou komoru, pokud není připojen zbytek terče. Na tuto část lze připojit hliníkový kolimátor, který také obsahuje PVC kroužek zajišťující elektrickou izolaci terče od cyklotronu. Ke kolimátoru je poté šroubovým spojem připojeno mosazné tělo samotného terče obsahující niobovou zkumavku s obohacenou vodou.

Pro uzavření vakuové komory je používána titanová folie o tloušťce  $12,5 \mu\text{m}$ . Voda v terči je poté uzavřena folií vyrobené z havaru o tloušťce  $35 \mu\text{m}$ . Mezi těmito foliemi proudí helium, které slouží jako chlazení, jelikož dopadající protony deponují v materiálu svou energii a vytváří tak tepelný zdroj. Také terčová voda a celý terč je chlazen pomocí proudící vody. Na obrázku 4.4 je zobrazen řez terčem s popisem všech důležitých částí. V rámci zjednodušení byly zanedbány přívod a odvod chladícího helia a odvod chladící vody terče, chladící voda kolimátoru, přívod a odvod terčové vody pomocí tenkých kapilár a další detaily.

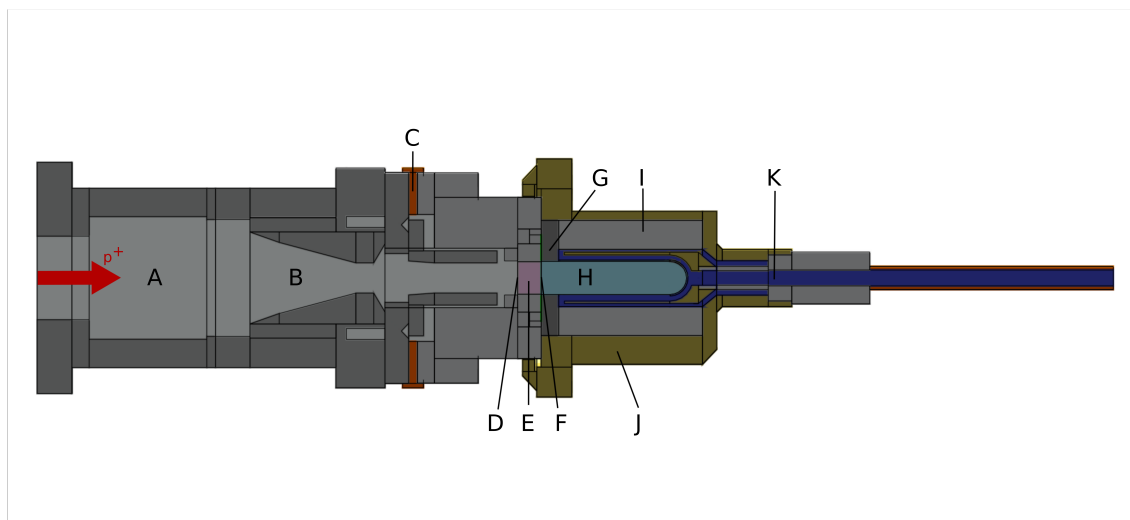


(a) Fotografie



(b) Model

Obrázek 4.3: Detail terčového uskupení.



Obrázek 4.4: Řez detailním modelem terčové sestavy, červená šipka naznačuje směr paprsku protonů; A - vstupní komora s klapkou, B - hliníkový kolimátor; C - izolační kroužek z PVC, D - titanová folie, E - heliové chlazení, F - havarová folie, G - niobová zkumavka, H - voda obohacená o  $^{18}\text{O}$ , I - ocelová část terče, J - mosazná část terče, K - chladicí voda

## 4.5 Provedené experimenty

Do současnosti byly na cyklotronu v ÚJV Řež provedeny dva velké experimenty zaměřené na charakterizaci sekundárního neutronového spektra vznikajícího při výrobě fluoru-18. První bude zběžně popsán v této části, druhý tvoří hlavní výzkumnou část této diplomové práce a společně s dosaženými výsledky bude popsán v následující kapitole.

Experiment [15] je zaměřen na hodnocení metodologie pro charakterizaci sekundárního neutronového spektra okolo cyklotronu. Je zde měřeno neutronové spektrum pomocí stilbenového scintilátoru v přímém směru, které je porovnáváno s výpočtem v MCNP. Výsledky jsou dále porovnávány s rozdílnými spektrálními indexy získanými z ozařovaných aktivačních folií.

Měření stilbenovým detektorem o rozměrech  $10 \times 10$  mm bylo provedeno v rovině terče, 80 cm od jeho konce v přímém směru v rozmezí energií neutronů 0,9 až 14,5 MeV. Jako aktivační folie byly vybrány Ni, Fe, Al, Cu a Ti na nichž byli sledovány dozimetrické reakce  $^{58}\text{Ni}(n,p)$ ,  $^{60}\text{Ni}(n,p)$ ,  $^{58}\text{Ni}(n,x)^{57}\text{Co}$ ,  $^{54}\text{Fe}(n,p)$ ,  $^{48}\text{Ti}(n,p)$ ,  $^{27}\text{Al}(n,\alpha)$   $^{63}\text{Cu}(n,\alpha)$ . Aktivační detektory byly umístěny do stejného místa jako stilbenový detektor, tedy 80 cm od konce cyklotronu v přímém směru, ale také do bližší pozice ve vzdálenosti 7,5 cm. Pro zjištění prostorového rozložení toku, byla jedna sada aktivačních detektorů umístěna také 8,5 cm pod osou terčové soustavy. Naindukovaná aktivita byla měřena na HPGe detektoru jehož účinnost byla určena pomocí výpočtu v MCNP [24]. Kromě porovnávání některých spektrálních indexů, byla provedena i adjustace neutronového spektra z naměřených reakčních rychlostí pomocí kódu STAYSL [102]. Experimentální hodnoty byly poté porovnávány s výpočtem provedeným pomocí MCNP6. Pro simulace reakce protonů byly použity výchozí model CEM03.03 i simulace podle tabulovaných dat s použitím knihoven TENDL-2017 [103] a FENDL-3 [104]. Pro transport neutronů bylo využito knihovny ENDF/B-VII.1 [119] a pro výpočet reakčních rychlostí knihovny IRDFF v.1.05 [106][107].



Diferenciální spektrum naměřené v přímém směru odpovídá svým tvarem vypařovacímu spektru, které je někdy pro zjednodušení používáno. Při porovnání se simulovanými spektry, byly ve všech případech zjištěny velké rozdíly. Jako spektrum, které nejvíce odpovídá tomu experimentálně naměřenému, bylo určeno modelované spektrum pomocí CEM03.03. Všechna spektra vykazují podobný trend nadhodnocování spektra v oblasti 2–6 MeV o 2–3 násobek statistické odchylky a podhodnocování pro energie okolo 10 MeV až o 5 násobek statistické odchylky. Tvar měřeného spektra byl potvrzen výpočtem několika spektrálních indexů z naměřených reakčních rychlostí a dekonvolucí pomocí kódu STAYSL. Dále bylo potvrzeno, že vypočtená spektra pomocí TENDL-2017 a FENDL-3 silně podhodnocují neutronové spektrum pro vysoké energie. Při porovnání vypočtených a měřených reakčních rychlostí bylo dosaženo nejlepších výsledků pro reakce s vyšším prahem u modelu CEM03.03 a pro reakce s nižším energetickým prahem u výpočtu pomocí TENDL-2017.

Při porovnání reakčních rychlostí měřených v přímém směru a pod terčem, tedy v úhlu  $90^\circ$ , bylo pozorováno téměř izotropní rozdělení. Porovnání spektrálních indexů ukazuje i na podobný tvar spektra. Tyto trendy však nekorespondují se simulovanými hodnotami, které vykazují anizotropii a další podhodnocování nejvyšších energií neutronů. Naopak byla nalezena shoda 3 % ve výpočtu reakční rychlosti reakce  $^{18}\text{O}(p,n)^{18}\text{F}$  pomocí TENDL-2017 s experimentálně určenou pomocí měření aktivity obohacené vody v terči. Reakční rychlost byla vypočtena jako  $1,42 \cdot 10^{-3}$  na jeden proton.

Celkově byla prokázána možnost měření vypařovacího spektra neutronů na cyklotronech pomocí stilbenového scintilátoru a vhodnosti použití aktivačních detektorů a vypočtených spektrálních indexů k ověření tvaru spektra. Dále byla ukázána nedokonalost matematických modelů a nepřesnost tabulovaných dat pro simulaci sekundárního neutronového spektra. Právě tyto nedokonalosti a nepřesnosti ukazují na limitace výpočetních charakterizací používaných pro posuzování bezpečného provozu a nutnost dalšího studia problematiky.



## Kapitola 5

# Charakterizace sekundárního neutronového spektra na povrchu terče

V této kapitole bude popsán další experiment, který byl proveden na PET cyklotronu IBA Cyclone 18/9 v ÚJV Řež v roce 2020. Jeho cílem bylo další bližší popsání neutronového spektra unikajícího z terče včetně jeho úhlové rozdělení. Jádrem experimentu bylo využití velkoplošného aktivačního detektoru obklopujícího jednu čtvrtinu terče. Pomocí získaných reakčních rychlostí potom bylo možné určit úhlové rozdělení vznikajících neutronů i přibližnou pozici místa dopadu paprsku na terč. Výpočtem spektrálních indexů potom lze usuzovat i na tvar spektra sekundárních neutronů. Získané výsledky byly porovnány s výpočtem pomocí kódů MCNP6.2 a Geant4 a byly zjištěny poměrně velké rozdíly. Většina provedených měření a simulací byl shrnuta v článku [108].

### 5.1 Experimentální metody

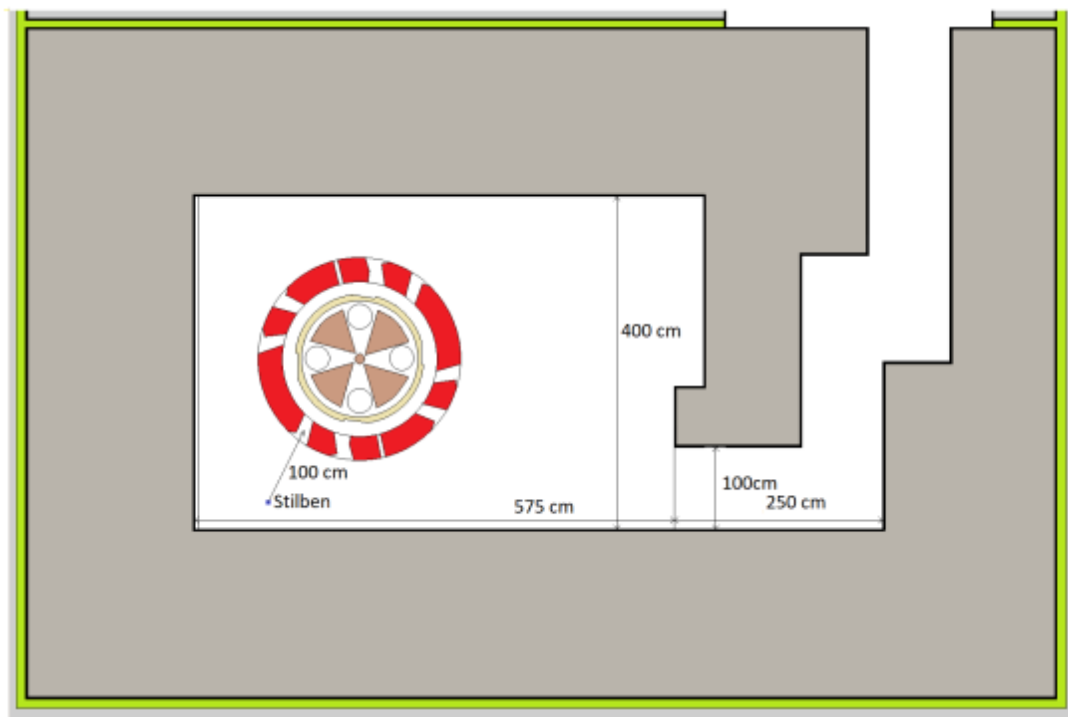
Experiment byl prováděn na cyklotronu pro výrobu radiofarmak IBA Cyclone 18/9 v ÚJV Řež, na kterém v současné době probíhá zejména výroba radionuklidu  $^{18}\text{F}$ . Ten je vyráběn ozařováním obohacené vody o  $^{18}\text{O}$  na 98 % proudem protonů o energii 18 MeV. K výrobě je využíván XXL terč popsáný v kapitole 4.4.

Během ozařování terče bylo spektrum vznikajících neutronů měřeno pomocí stilbenového scintilátoru ve vzdálenosti 1 m v přímém směru. Dále byly měřeny reakční rychlosti pomocí aktivačních detektorů na několika různých místech pro určení prostorového rozložení hustoty toku neutronů. Aby bylo možné usuzovat na energetické spektrum, byla vybrána sada detektorů s vhodně zvolenými prahovými reakcemi.

#### 5.1.1 Scintilační spektrometrie

Neutronové spektrum v rozmezí energií 0,9 až 15 MeV bylo měřeno pomocí stilbenového scintilátoru s malým krystalem o velikosti  $10 \times 10$  mm, který disponuje lepší diskriminací neutronů a  $\gamma$  záření, než větší krystal [109]. Aby bylo dosaženo dostatečně nízké mrtvé doby a také aby nebyl detektor vystaven příliš vysoké intenzitě ionizačního záření, bylo

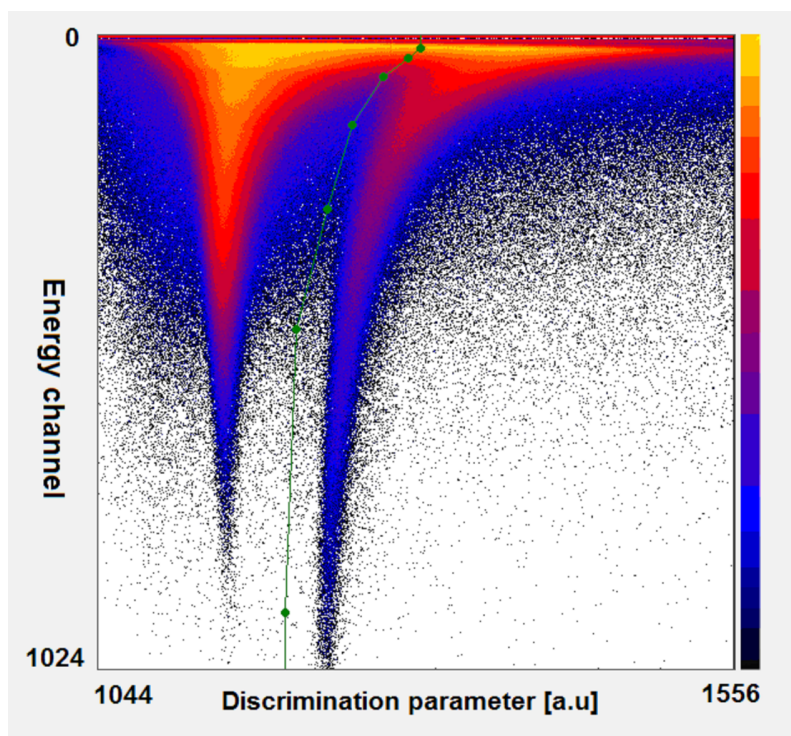
měření prováděné při nízkém proudu protonů  $1 - 2 \mu\text{A}$ . Jelikož jsou v tomto nízkém rozmezí proudů velké nejistoty v jeho měření, nebylo prováděno absolutní měření toku, ale pouze relativní energetické rozložení. Měření bylo prováděno ve vzdálenosti v 1 m přímém směru od začátku vodního terče a tedy primárního místa vzniku neutronů. Místo měření v betonové kobce s labyrintem, v které je cyklotron umístěn, je zaznačeno na obrázku 5.1. Z principu jaderných reakcí v tomto směru vzniká nejvíce neutronů a také neutrony s nejvyšší energií. Zároveň tyto neutrony nejvíce přispívají k aktivaci betonových stěn a jsou důležité z hlediska stínění cyklotronu při provozu.



Obrázek 5.1: Místo měření stilbenovým scintilačním detektorem v betonové kobce cyklotronu

Pro měření a zpracování dat byl využit dvouparametrický spektrometrický systém NGA-01 [110][111][112]. Jedná se o plně digitální systém, který je schopný zpracovat až 500000 impulsů za sekundu. Analogový signál z fotonásobiče je rozdělen na dvě větve, které jsou zesíleny ve vzájemném poměru 1 : 8. Díky tomu lze získat větší dynamický rozsah jednotlivých pulzů a dosáhnout tak lepšího rozlišení malých amplitud vstupního signálu, což vede k lepšímu odlišení šumu od signálu. Signál je dále zpracováván dvěma vysokorychlostními analogově digitálními převodníky (*Analog-to-Digital Converter* - ADC) s rychlostí 500 MS/s a rozlišením 12 bitů. Ty jsou zabudovány do programovatelných hradlových polí (*Field Programmable Gate Array* - FPGA). Tímto je zajištěno zpracování všech impulsů z detektoru bez mrtvé doby digitální části systému. FPGA dále vypočítává dva důležité integrály popsané v kapitole 1.3 sloužící k určení energie a diskriminačního parametru. Získané informace se potom zpravidla zapisují do 3D grafu, kde na ose  $x$  je typicky diskriminační parametr, na ose  $y$  energie a na ose  $z$  potom četnost daných impulsů. Takovýto graf je na obrázku 5.2. Ovládání, nastavování parametrů a vyhodnocení je prováděno vzdáleně pomocí softwaru (*Neutron Gamma Analyst Software*) nainstalovaném na PC. V tomto softwaru je provedena konečná diskriminace fotonů a neutronů výběrem rozhraní na 5.2. Je zde také provedena dekonvoluce protonového spektra, čímž je získáno finální neutronové

spektrum. Pro dekonvoluci je použita metoda maximální věrohodnosti, která pro maximalizaci věrohodnostní funkce používá iterační EM algoritmus (*Expectation–Maximization - EM*) [114]. Energetická kalibrace byla provedena pomocí radionuklidových zdrojů  $\gamma$  záření  $^{60}\text{Co}$  a  $^{137}\text{Cs}$ .



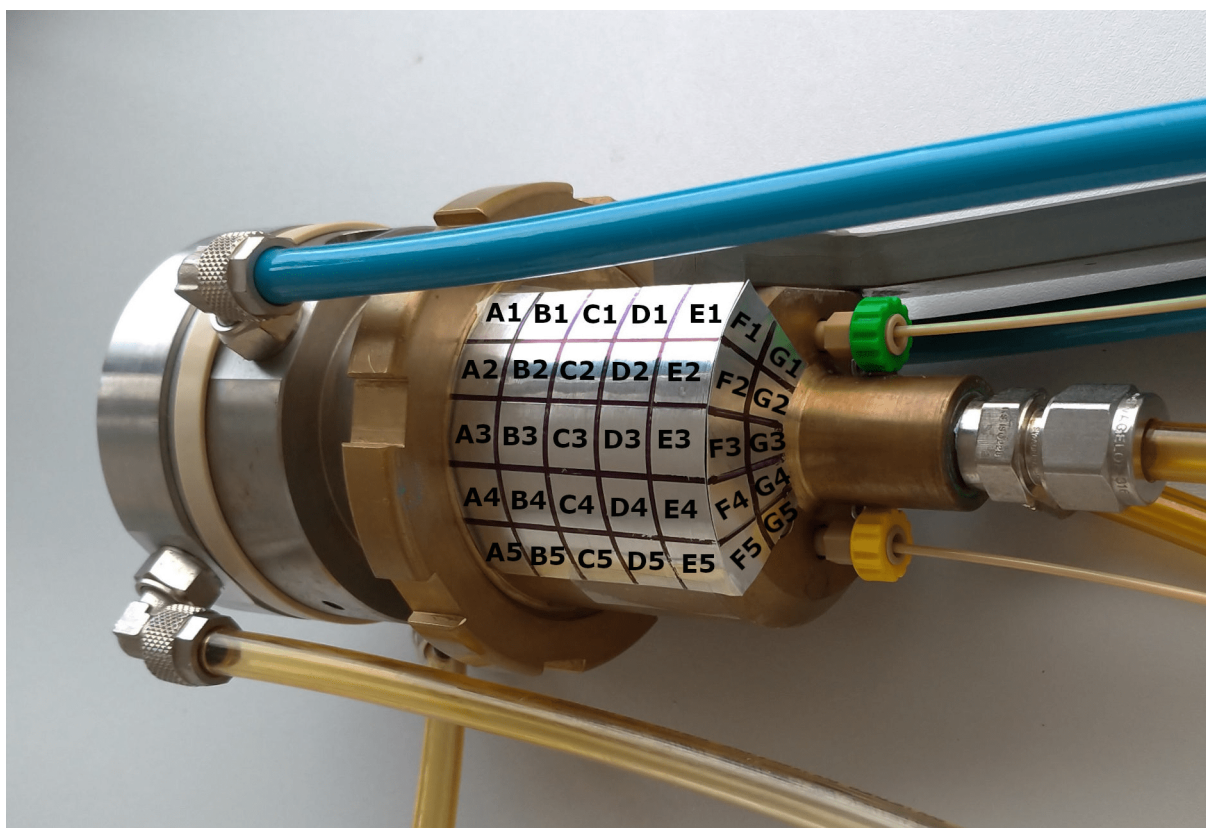
Obrázek 5.2: Graf pro vyhodnocení signálu z detektoru. Na ose  $x$  je diskriminační parametr (*Discrimination parameter*), na ose  $y$  je energetický kanál (*Energy channel*), barva od černé přes modrou a červenou ke žluté zobrazuje počtu impulsů s daným diskriminačním parametrem a v daném energetickém kanálu. Zelená křivka vyznačuje diskriminaci mezi signálem od fotonů (levý pík, menší diskriminační parametr) a neutronů (pravý pík).

### 5.1.2 Aktivační detektory

Pro určení prostorového rozložení hustoty toku neutronů v okolí terče bylo využito aktivačních detektorů, jejichž rozměry lze vhodně přizpůsobit. Všechny aktivační folie byly ozařovány během výroby, při níž je dosahováno proudů  $70 - 80 \mu\text{A}$ . Jelikož je proud po celou dobu měření na titanové folii oddělující vakuum od zbytku terče, je možné využít jeho integrovanou hodnotu pro přepočítání reakčních rychlostí na jeden proton. Po ozařování byly folie odebrány po 1 – 2 dnech a přeneseny na měření.

Pro pokrytí úhlového rozdělení byl vytvořen velkoplošný aktivační detektor pokrývající čtvrtinu válcového terče. Byl vyroben z tenkého niklového plechu o tloušťce 0,1 mm a je zobrazen na 5.3. Detektor byl složen ze dvou částí, čtverce o délce stran 5 cm, který tvořil plášť válce, a čtvrtiny mezikruží o vnitřním poloměru 1,4 cm a vnějším poloměru 3,2 cm, který tvořil podstavu válce. Tyto dvě části byly přilepeny na terč a po konci ozařování byly rozstříhány na menší kusy. Plášť válce byl rozstříhán na 25 aktivačních detektorů ve tvaru čtverce o délce strany 1 cm (pozice A-E). Zbylé mezikruží bylo rozstříháno na

10 aktivačních detektorů o přibližných rozměrech  $0,86 \times 0,9$  cm a  $0,68 \times 0,9$  cm (pozice F a G).

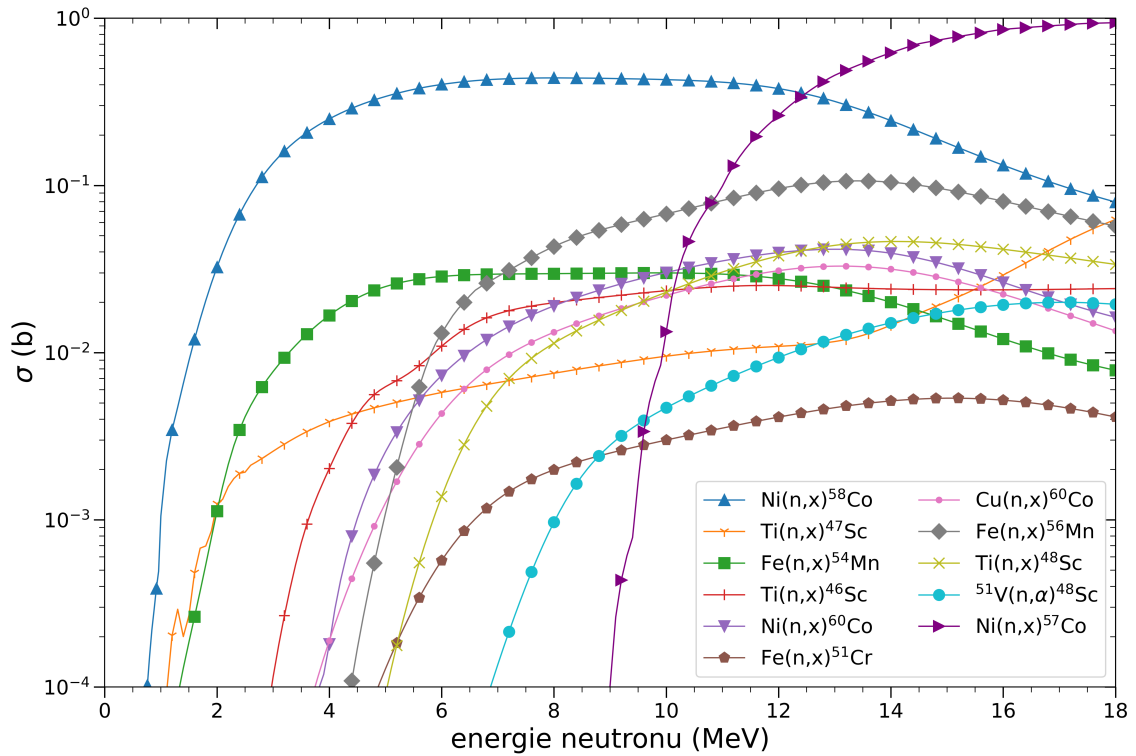


Obrázek 5.3: Fotografie velkoplošného niklového aktivačního detektoru připevněného na terči pro výrobu radiofarmak. Na aktivačním detektoru jsou vyznačeny jednotlivé dílky, na které byl plech následně rozstříhán.

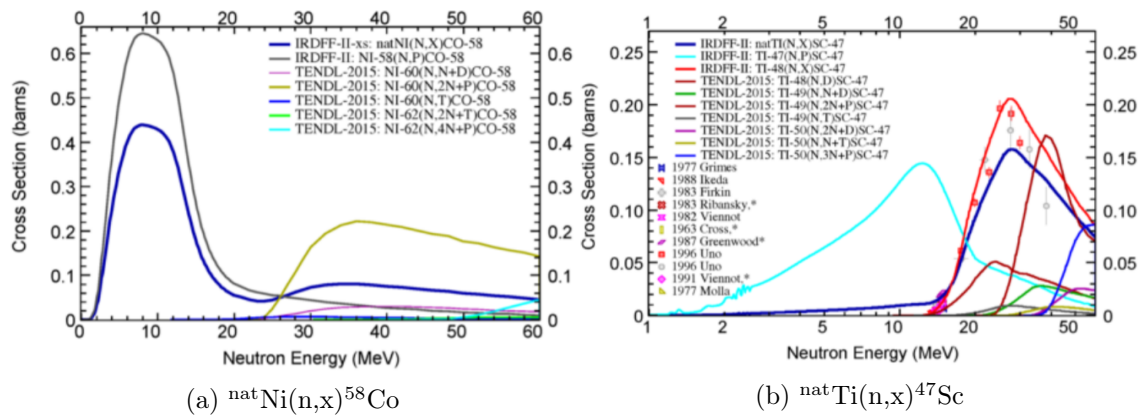
Pro doplnění dalšími reakčními rychlostmi s jinými prahovými energiemi bylo ve středu velkoplošného detektoru (pozice A3 - G3) doplněno několik pásků o délce 6,8 cm a šířce 1 cm z různých materiálů. Tyto pásky byly následně rozstříhány podobně jako velký niklový detektor na pět detektorů  $1 \times 1$  cm v pozicích A-E a  $0,9 \times 1$  cm v pozicích F až G. Konkrétně je se jednalo o niklový a železný pásek o tloušťkách 0,1 mm, pásek z titanu o tloušťce 0,2 mm a vanadu o tloušťce 0,065 mm. Výběrem těchto materiálů bylo umožněné měření reakčních rychlostí mnoha neutronových reakcí s rozdílnými energetickými prahy.

Mikroskopické účinné průřezy pro jednotlivé použité reakce jsou na 5.4. Materiály a reakce na nich měřené byly vybrány tak, aby svou citlivostí vhodně pokrývaly celé měřené spektrum od přibližně 1 MeV do 18 MeV. Všechny aktivační detektory byly vyrobeny z materiálů s přírodním zastoupením jednotlivých izotopů. Proto byly použity celkové produkční mikroskopické účinné průřezy, i když ke vzniku měřeného radionuklidu často dochází dominantně reakcí pouze na jednom izotopu daného materiálu. To je pravda zejména pro nižší energie v oblasti 0 – 10 MeV typické pro reaktorovou dozimetrii. Při vyšších energiích neutronů získávaných pomocí urychlovačů je obecnějším řešením použití právě celkových produkčních účinných průřezů. Toto je demonstrováno na grafech 5.5a a 5.5b převzatých z [115], kde jsou zobrazeny účinné průřezy pro produkci  $^{58}\text{Co}$  na niklu, respektive  $^{47}\text{Sc}$  na titanu. Pro vznik  $^{58}\text{Co}$  je dominantní reakce  $^{58}\text{Ni}(n,p)^{58}\text{Co}$ , pro vyšší energie od přibližně 25 MeV začíná vzrůstat vliv i dalších reakcí. Pro vznik  $^{47}\text{Sc}$  je dominantní reakce

$^{47}\text{Ti}(n,p)^{47}\text{Sc}$ , pro vyšší energie od přibližně 14 MeV začíná silně vzrůstat vliv i reakce  $^{48}\text{Ti}(n,np)^{47}\text{Sc}$ . Pro použití v oblasti do 20 MeV by bylo tedy v prvním případě možné použít pouze účinný průřez dominantní reakce, v druhém případě je již však nutné využít celkový produkční účinný průřez na přírodním titanu.



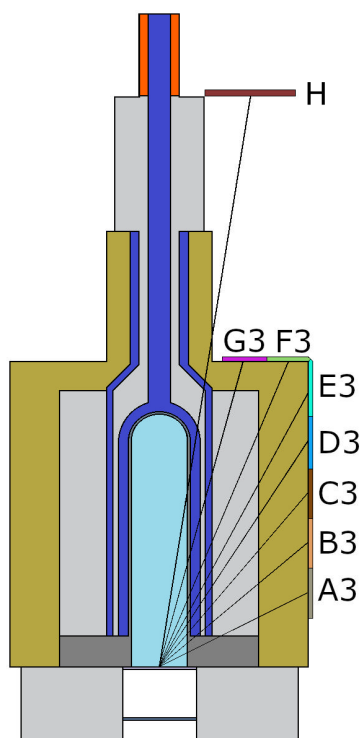
Obrázek 5.4: Mikroskopické účinné průřezy pro jednotlivé reakce použité jako monitory rychlých neutronů pro přírodní složení daného materiálu z knihovny IRDFF-II [115]



Obrázek 5.5: Porovnání příspěvku různých reakcí na izotopech v přírodním zastoupení daného prvku pro tvorbu vybraného radionuklidu. Grafy byly převzaty z [115], na ose  $x$  je energie neutronu v MeV (*Neutron Energy*) a na ose  $y$  je účinný průřez v barnech (*Cross Section*)

Další sada aktivačních detektorů byla umístěna u konce terče v místě, kde je připevněna hadička přívodu chladicí vody (H na 5.6). Zde byly použity aktivační detektory z Ti, Fe, Ni a Cu. Řez terčem s vyznačenými detektory a jejich úhlem vzhledem k paprsku nalétávajících protonů je zobrazen na 5.6. Poslední sada aktivačních detektorů byla umístěna v 1 m

v přímém směru od terče v místě, kde bylo prováděno měření stilbenovým detektorem. Ta byla složena z aktivačních detektorů z Fe, Ni a Cu. Tím byly pokryty úhly od  $0^\circ$  do přibližně  $70^\circ$ . Aktivační detektory v posledních dvou a zejména v posledním případě byly umístěny ve větší vzdálenosti od terče a byly tedy vystaveny menší hustotě toku neutronů. Aby byla naindukována dostatečně velká aktivita, byly použity aktivační detektory větších velikostí, jejich rozměry lze nalézt v tabulce 5.2. Na větší detektory bylo použito železo o tloušťce 3 mm, nikl o tloušťce 1 mm a měď o tloušťce 3 mm.



Obrázek 5.6: Model terče vytvořený v MCNP6 s vyobrazenými jednotlivými aktivačními detektory a jejich úhlem vzhledem k paprsku nalétávajících protonů (A3 -  $62,8^\circ$ ; B3 -  $49,7^\circ$ ; C3 -  $40,2^\circ$ ; D3 -  $33,4^\circ$ ; E3 -  $28,4^\circ$ ; F3 -  $22,8^\circ$ ; G3 -  $15,2^\circ$ ; H -  $9,5^\circ$ )

Všechny aktivační detektory byly přeneseny na měření HPGe detektorem. Aktivita vzorku a následně reakční rychlost byly zjištěny měřením počtu pulzů v píku úplného pohlcení pomocí vzorce 2.5. Do tohoto vzorce byl zahrnut i opravný koeficient na koincidence. Větší folie byly měřeny položeny přímo na detektor, menší folie s tloušťkou 0,1 mm a méně byly měřeny v plastovém pouzdru typu EG-3. Účinnost spektroskopického systému pro různé velikosti folií, různé geometrie a různé energie  $\gamma$  linek byla určena pomocí výpočtu s modelem detektoru v MCNP6 (popsáno v kapitole 2.2.2). Vypočtené účinnosti  $\epsilon_{\text{FEP}}$  společně s vypočteným koeficientem pro koincidence  $k_{\text{TSCF}}$  podle [26] pro jednotlivé aktivační detektory a měřené reakce s příslušnými energiemi jejich  $\gamma$  linek jsou zobrazeny v tabulkách 5.1 a 5.2. Tabulka 5.1 je pro malé aktivační detektory s tloušťkou 0,1 mm a menší, hlavně z velkoplošného niklového detektoru a středových pásek, které byly měřeny v plastovém pouzdru. Tabulka 5.2 je pro větší aktivační detektory s tloušťkou 0,2 mm a větší, zejména z pozic u vstupu chladicí vody a ve vzdálenosti 1 m, které byly měřeny přímo na detektoru.



Tabulka 5.1: Vypočtené účinnosti pro pík úplného pohlcení  $\epsilon_{\text{FEP}}$  a opravné koeficienty na koincidence  $k_{\text{TSCF}}$  pro různé rozměry aktivačních detektorů a různé energie  $E_\gamma$  příslušné  $\gamma$  linky. Detektory o tloušťce 0,1 mm a menší měřené v plastovém pouzdru typu EG-3.

Rozměr detektoru	Reakce	$E_\gamma$ (keV)	$\epsilon_{\text{FEP}}$ (%)	$k_{\text{TSCF}}$
$1 \times 1$ cm	$\text{natNi}(n,x)^{57}\text{Co}$	122, 1	16, 440	1
	$\text{natNi}(n,x)^{58}\text{Co}$	810, 8	4, 539	0, 937
	$\text{natNi}(n,x)^{60}\text{Co}$	1173, 2	3, 364	0, 837
		1332, 5	3, 023	0, 831
$0,9 \times 0,86$ cm	$\text{natNi}(n,x)^{57}\text{Co}$	122, 1	16, 470	1
	$\text{natNi}(n,x)^{58}\text{Co}$	810, 8	4, 550	0, 937
$0,9 \times 0,68$ cm	$\text{natNi}(n,x)^{57}\text{Co}$	122, 1	16, 490	1
	$\text{natNi}(n,x)^{58}\text{Co}$	810, 8	4, 556	0, 937
$1 \times 1$ cm	$\text{natFe}(n,x)^{51}\text{Cr}$	320, 0	10, 260	1
	$\text{natFe}(n,x)^{54}\text{Mn}$	834, 8	4, 427	1
	$\text{natFe}(n,x)^{56}\text{Mn}$	846, 76	4, 374	0, 939
		1810, 7	2, 321	0, 815
$1 \times 1$ cm	$^{51}\text{V}(n,\alpha)^{48}\text{Sc}$	983, 5	3, 880	0, 665
		1037, 5	3, 716	0, 658

Tabulka 5.2: Vypočtené účinnosti pro pík úplného pohlcení  $\epsilon_{\text{FEP}}$  a opravné koeficienty na koincidence  $k_{\text{TSCF}}$  pro různé rozměry aktivačních detektorů a různé energie  $E_\gamma$  příslušné  $\gamma$  linky. Detektory o větší tloušťce než 0,1 mm měřené přímo na detektoru.

Rozměr detektoru	Reakce	$E_\gamma$ (keV)	$\epsilon_{\text{FEP}}$ (%)	$k_{\text{TSCF}}$
$1,6 \times 1,6$ cm	$\text{natNi}(n,x)^{57}\text{Co}$	122, 1	14, 740	1
	$\text{natNi}(n,x)^{58}\text{Co}$	810, 8	4, 602	0, 933
	$\text{natNi}(n,x)^{60}\text{Co}$	1173, 2	3, 427	0, 824
		1332, 5	3, 086	0, 818
$\varnothing 1,8$ cm	$\text{natNi}(n,x)^{57}\text{Co}$	122, 1	14, 870	1
	$\text{natNi}(n,x)^{58}\text{Co}$	810, 8	4, 609	0, 933
	$\text{natNi}(n,x)^{60}\text{Co}$	1173, 2	3, 431	0, 824
		1332, 5	3, 087	0, 818
$\varnothing 1,8$ cm	$\text{natCu}(n,x)^{60}\text{Co}$	1173, 2	3, 431	0, 833
		1332, 5	3, 087	0, 827
$\varnothing 2,5$ cm	$\text{natCu}(n,x)^{60}\text{Co}$	1173, 2	2, 903	0, 833
		1332, 5	2, 629	0, 827
$1 \times 1$ cm	$\text{natFe}(n,x)^{54}\text{Mn}$	834, 8	2, 832	1
159, 4		2, 563	1	
$1 \times 1$ cm	$\text{natTi}(n,x)^{46}\text{Sc}$	889, 3	4, 160	0, 816
	$\text{natTi}(n,x)^{48}\text{Sc}$	983, 5	18, 190	0, 640
		1037, 5	4, 589	0, 633

## 5.2 Simulace

Aby mohly být otestovány dostupné modely pro simulaci transportu a reakcí neutronů a protonů, byl celý experiment simulován v Monte Carlo kódech Geant4 [29][30][31] a MCNP6.2 [32][33]. V obou kódech bylo pro simulaci vznikajících neutronů použito přímých reakcí protonů s terčovým materiálem. Jelikož modely použité pro simulaci jaderných reakcí v obou kódech byly často vyvinuty pro vyšší energie (100 MeV a více), je jejich použití v tomto energetickém rozmezí poměrně nové a nevyzkoušené. Pomocí dostupných metod byla v obou simulačních kódech určena hustota toku neutronů v 640 energetických grupách, která byla poté přepočítána na reakční rychlosti pomocí skalárního součinu s mikroskopickými účinnými průřezy z knihovny IRDFF-II [115].

### 5.2.1 Použité výpočetní kódy

Geant4 (*GEometry ANd Tracking*) je Monte Carlo výpočetní kód pro simulaci transportu částic prostředím. Je napsán v programovacím jazyce C++ a využívá objektově orientovaného programování. Geant4 je volně dostupný z [116] včetně instalační [117] a uživatelské příručky [118]. Pro simulaci experimentu byl využit ve verzi Geant4.10.06.p01.

Geant4 byl původně vyvinut pro plánování experimentů na Velkém hadronovém urychlovači výzkumnou organizací CERN, ale brzy byl rozšířen i do dalších oblastí. V současnosti je využíván v oblastech urychlovačové i jaderné fyziky, ale také v medicínských a vesmírných aplikacích. I přes původní zaměření na fyziku vysokých energií, obsahuje Geant4 nyní fyzikální modely od nulové energie až do oblasti TeV. I přes tyto rozšíření, je stále jeho použití pro nízké a v tomto případě velmi nízké energie spíše ojedinělé.

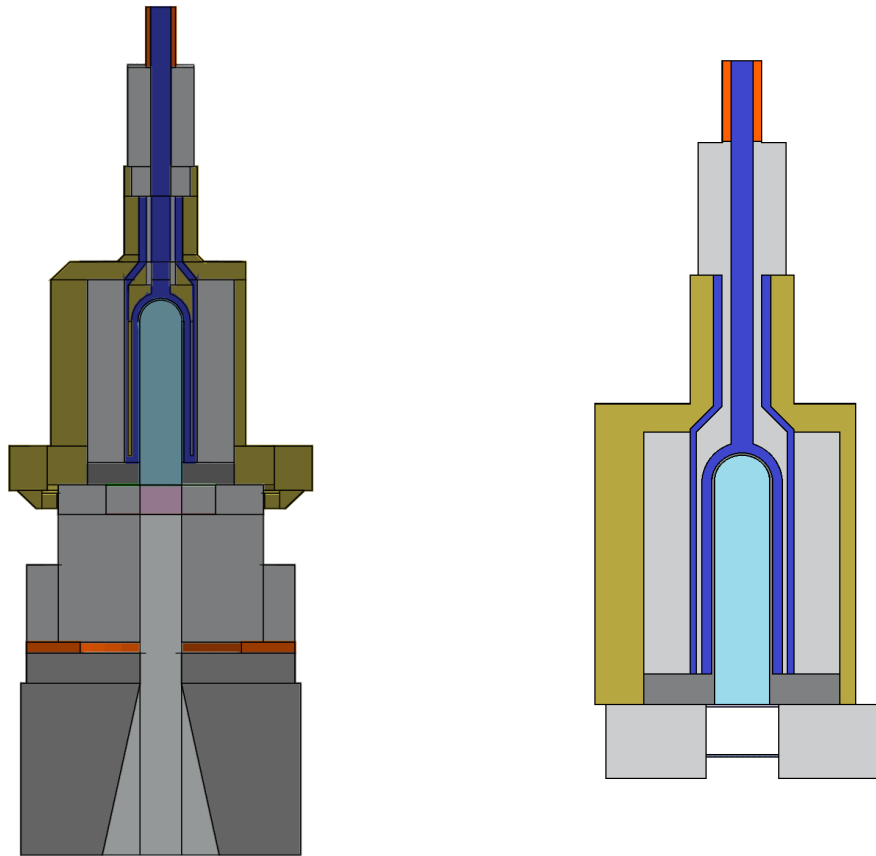
MCNP6.2 (*Monte Carlo N-Particle*) je univerzální kód pro simulaci transportu částic využívající metodu Monte Carlo. Byl vyvinut pro účely reaktorové fyziky v Národní laboratoři Los Alamos (*Los Alamos National Laboratory - LANL*) a původně zahrnoval simulaci pouze neutronů, fotonů a elektronů. V nových verzích byl rozšířen o simulaci i dalších částic a antičástic včetně protonů. Je považován za mezinárodně ověřený výpočetní standard a byl úspěšně aplikován v mnoha oblastech včetně reaktorové i urychlovačové techniky, dozimetrie, radiační ochrany a stínění. V rámci diplomové práce byly připravovány pouze textové vstupy do programu, který byl spuštěn vedoucím práce.

### Geometrie a detektory

Jelikož byly aktivační detektory umístěny pouze okolo mosazné části terče (viz. obrázek 5.3), byl použit zjednodušený model terče oproti modelu popsanému v 4.4. V Geant4 i MCNP6.2 byla detailně modelována mosazná a ocelová část terče včetně niobové zkumavky obsahující terčovou vodu a vodního chlazení. Detailně byly také modelovány obě folie oddělující ozařovanou vodu od vakua urychlovače. V obou kódech byl pouze zjednodušeně simulován hliníkový kolimátor včetně izolačního kroužku z PVC. Řezy oběma modely jsou na obrázku 5.7.

Důležitým modelovaným prvkem je terčová voda. Při ozařování je niobová zkumavka o objemu 5 ml plněna pouze 3,55 ml obohacené vody, což tvoří asi 71 % objemu. Důvodem je, že během ozařování je vysoká energie protonů deponována ve vodě, která tak začíná vřít a zvětšovat svůj objem. Zabírá potom celý objem zkumavky a všechny protony dopadají

na terčová jádra. Proto byl terč simulován, jako by byl plný vody obohacené na 98 %  $^{18}\text{O}$  s poměrně sníženou hustotou.



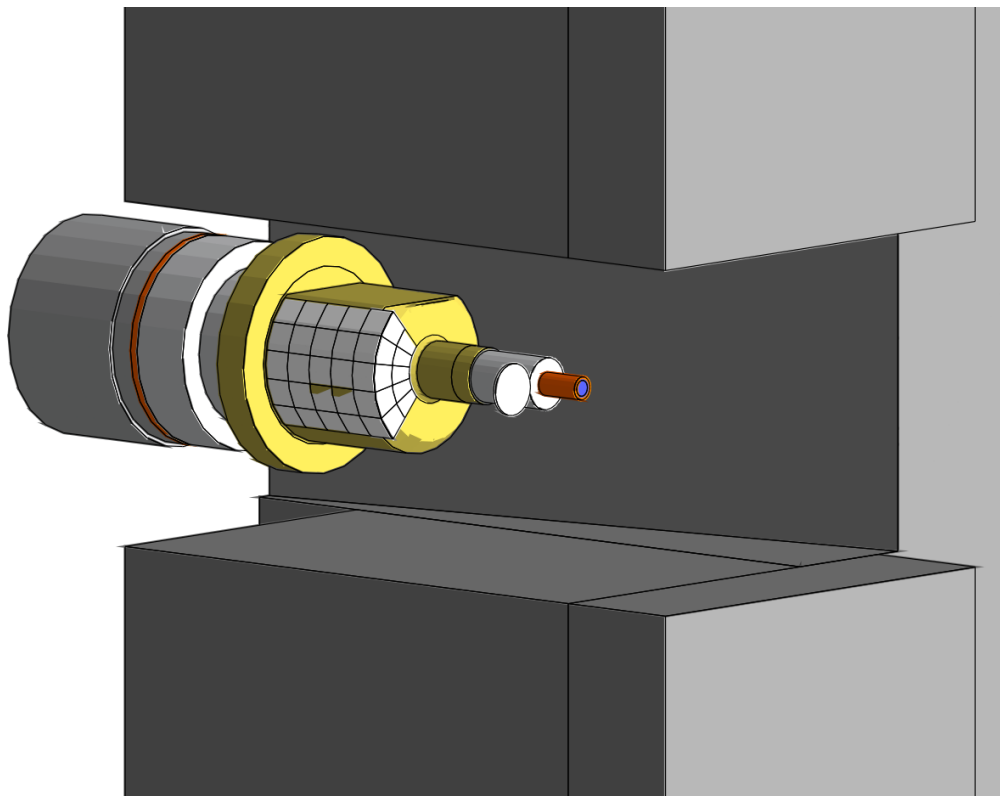
Obrázek 5.7: Řez zjednodušeným modelem terče v Geant4 (vlevo) a MCNP6.2 (vpravo)

Kromě samotného terče bylo v geometrii simulace vytvořeno i zjednodušené ocelové stínění, které obklopuje celý cyklotron a v němž se nachází i samotný terč (viz. fotografie 4.3a). Odražené neutrony ze stínění potom mohou mít vliv na reakční rychlost v jednotlivých aktivačních detektorech. Dále byla simulována i betonová stěna, jelikož jedna sada aktivačních detektorů a také stilbenový scintilátor byly umístěny v její blízkosti (viz. schéma 5.1) a tak dochází k vlivu odražených neutronů. Kvůli nízkému vlivu byly zanedbány další stěny betonové kobky, zbylé části cyklotronu a také hadičky přivádějící a odvádějící chladicí tekutiny.

Hustota toku neutronů byla skórována celkem ve 47 různých detektorech. 25 z nich tvoří plášť válce vytvořený jako 0,1 mm silný niklový plech simulující detektory A-E velkoplošného niklového detektoru (viz. fotografie 4.3a). Další 10 tvoří čtvrtinu podstavy válce rozděleného na dvě mezikruží simulujících detektory F-G. Tok neutronů detekovaný v detektorech A3-G3 byl také použit pro výpočet reakčních rychlostí v tenkých středových páscích, jak byly popsány v 5.1.2. Odtud pochází část nejistot v poloze jednotlivých pásek, které byly ve skutečnosti nalepeny těsně na sobě a každý tak byl od terče v jiné vzdálenosti. Aktivační sada detektorů H u vstupu chladicí vody do terče byla modelována pomocí

tenkého válce o poloměru 9 mm a tloušťce 1 mm, což odpovídá velkému niklovému a měděnému aktivačnímu detektoru, které zde byly umístěny. Tyto detektory a také modelované stínění jsou zobrazeny na 3D pohledu z Geant4 na 5.8. Poslední detektor modelující jak aktivační sadu detektorů, tak krystal stilbenového scintilátoru, byl vytvořen jako válec o poloměru 40 mm a tloušťce 10 mm v 1 m od začátku terče.

Pro detekci neutronů byla v Geant4 využita třída *G4MultiFunctionalDetector* se základním čítačem *G4PSCellFlux*, který skóruje dráhu částic podělenou objemem detektoru. Je tak získána hustota toku neutronů v  $\text{cm}^{-2}$ . V MCNP6.2 bylo využito tally F4, které funguje na stejném principu. V obou kódech byla hustota toku neutronů vypočtena v 640 energetických grupách ve formátu SAND-II.



Obrázek 5.8: Simulace experimentu v Geant4 včetně ocelového stínění okolo terče. Na obrázku jsou také vidět celý velkoplošný detektor rozdělený na jednotlivé části a velký válcový detektor u vstupu chladicí vody.

## Fyzika a paprsek protonů

Fyzikální modely v Geant4 jsou modulární a lze si sestavit vlastní seznam fyzikálních procesů. Kromě této možnosti existuje i několik referenčních fyzikálních seznamů, které již spojují základní fyzikální procesy tak, aby vhodně pokrývaly celý energetický rozsah pro různé aplikace. V rámci experimentu bylo využito referenčních fyzikálních seznamů Shiel- ding, který v sobě zahrnuje Bertiniho intranukleární kaskádu (BERT), a QGSP\_BIC\_HP, který naopak obsahuje binární kaskádu (BIC). Oba jsou doporučeny pro urychlovačovou fyziku, nízkoenergetické dozimetrické aplikace a výpočet stínění. Zároveň jsou oba fyzikální seznamy doporučeny pro výpočet transportu neutronů o energiích menších než 20 MeV,

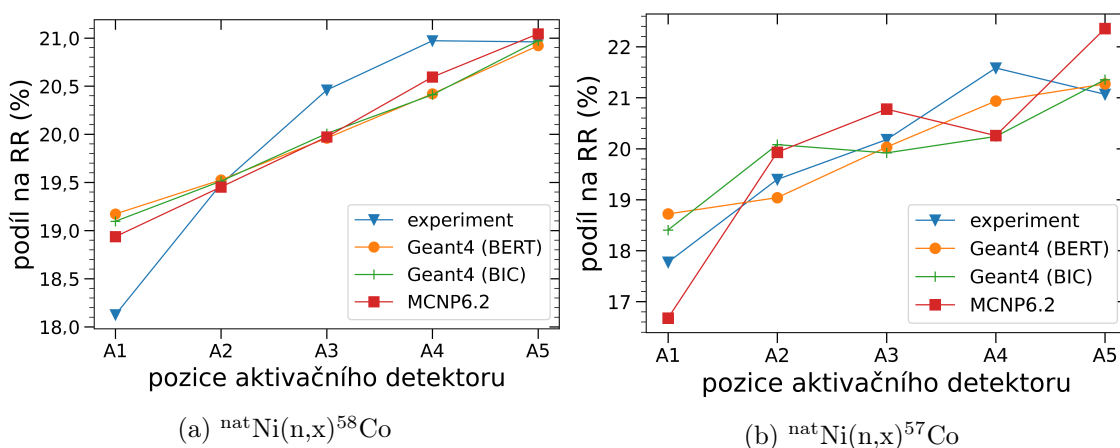
jelikož obsahují modul NeutronHP založený na datech. Pro výpočet nebyla využita výchozí knihovna G4NDL4.6, ale byla nahrazena knihovnou ENDF/B-VII.1 [119], aby bylo dosaženo souladu s výpočtem v MCNP6.2.

V MCNP6.2 probíhá volba fyzikálních modelů pomocí karet LCA, která vybírá intranukleární kaskádu, a LEA, ve které lze zvolit deexcitační model. Na základě předchozích výsledků popsaných v 4.5 byl v MCNP6.2 pro simulace reakcí protonů zvolen výchozí model CEM03.03. Pro popis transportu neutronů bylo využito knihovny jaderných dat ENDF/B-VII.1.

Jelikož na cyklotronu v ÚJV Řež zatím neproběhlo měření paprsku protonů dopadajícího na terč, bylo využito dat z [120], kde byl měřen profil paprsku na stejném cyklotronu IBA Cyclone 18/9. Paprsek byl v Geant4 simulován jako kruhový s gaussovským profilem s odchylkou  $\sigma = 1,94$  mm, jež byla získána jako průměr hodnot pro  $\sigma$  v ose  $x$  a  $y$  publikovaných v [120]. Divergence paprsku 10,5 mrad byla také určena průměrem hodnot z [120]. V MCNP6.2 byl paprsek modelován také jako kruhový s rozložením po poloměru ve tvaru histogramu zpodobňující gaussovské rozložení podobně jako v Geant4. Pro oba kódy byly simulovány monoenergetické protony o energii 18 MeV.

Počáteční bod byl umístěn tak, aby paprsek pronikal přes obě folie a jeho střed byl 1,25 mm pod osou niobové zkumavky s obohacenou vodou. Do dolní části zkumavky je paprsek směřován i ve skutečnosti pomocí uhlíkového stripperu, jelikož se tam před začátkem varu nachází střed terčové vody. Tento vertikální posun je viditelný i v rozložení reakčních rychlostí v aktivačních detektorech nejbližší ke vzniku neutronů, tedy ve sloupci A1-A5 na velkoplošném niklovém detektoru. To je zobrazeno na grafech 5.9a a 5.9b, kde je vidět, jak vzrůstá reakční rychlost od vrchního aktivačního detektoru A1, který je nejdále od zdroje neutronů po nejnižší aktivační detektor A5, který je zdroji neutronů nejbližší. Poměr reakční rychlosti v daném aktivačním detektoru ku reakční rychlosti v celém sloupci je zobrazena pro dvě reakce na přírodním niklu  ${}^{\text{nat}}\text{Ni}(n,x){}^{58}\text{Co}$  a  ${}^{\text{nat}}\text{Ni}(n,x){}^{57}\text{Co}$ .

Jako zdroj neutronů tedy lze uvažovat váleček o poloměru určeném parametry svazku protonů a délkou odpovídající dosahu protonů ve vodě, který byl pomocí Geant4 určen asi jako 3,6 mm. Při výpočtu v Geant4 bylo vždy při jedné události, na které je celý běh simulace rozdělen, simulováno  $10^5$  primárních protonů. Celkem bylo simulováno  $6 \cdot 10^{10}$  primárních částic. Stejný počet byl simulován i v simulaci pomocí MCNP6.2.



Obrázek 5.9: Porovnání poměrů reakčních rychlostí aktivačních detektorů na dané pozici k reakční rychlosti v celém sloupci pro různé výpočetní kódy a fyzikální modely pro dvě různé reakce na přírodní niklu.

## 5.3 Výsledky a jejich porovnání

Aby bylo možné porovnat získané výsledky, bylo třeba je normovat k univerzální veličině. Během ozařování je měřen proud protonů na titanové folii. Jeho integrací v čase a podělením hodnotou elementárního náboje tak lze získat celkový počet protonů dopadajících na terč během ozařování. Změřené reakční rychlosti tak byly poděleny touto hodnotou a byla tak získána hodnota reakční rychlosti na jeden proton. Hustota toku neutronů vypočtená v MCNP6.2 je rovnou vztažena na jednu primární částici a tak byla pouze vynásobena mikroskopickým účinným průřezem dané reakce pro získání reakční rychlosti na jeden proton. V simulaci pomocí Geant4 byl navíc detekován počet protonů vstupujících do titanové folie a touto hodnotou byla vypočtená hustota toku neutronů podělena, poté už byla pronásobena mikroskopickým účinným průřezem jako v případě MCNP6.2.

### 5.3.1 Reakční rychlosti ve velkém niklovém detektoru

Reakční rychlosti naměřené v jednotlivých dílech velkoplošného niklového detektoru jsou v tabulkách 5.3 pro reakci  ${}^{\text{nat}}\text{Ni}(n,x){}^{58}\text{Co}$  a 5.4 pro reakci  ${}^{\text{nat}}\text{Ni}(n,x){}^{57}\text{Co}$ . Jak bylo popsáno v úvodu, reakční rychlosti jsou normovány na jeden proton a pro větší přehlednost byly vynásobeny  $10^{30}$  respektive  $10^{32}$ . Označení jednotlivých detektorů písmeny a čísla je podle fotografie 5.3. Písmena A-G označují sloupce se zmenšující se úhlem (viz 5.6) a čísla 1 – 5 označují řádky od shora dolů. Nejistoty určení reakčních rychlostí jsou 4% pro  ${}^{\text{nat}}\text{Ni}(n,x){}^{58}\text{Co}$  do sloupce D a 4, 1 % pro zbytek, pro reakční rychlosti reakce  ${}^{\text{nat}}\text{Ni}(n,x){}^{57}\text{Co}$  jsou nejistoty nejvýše 7, 5 %, nejvíce se jich však pohybuje v rozmezí 6 – 7 %.

Tabulka 5.3: Naměřené reakční rychlosti ve velkoplošném niklovém detektoru pro reakci  ${}^{\text{nat}}\text{Ni}(n,x){}^{58}\text{Co}$ . Hodnoty jsou uvedeny v  $\text{s}^{-1}$ , vynásobeny  $10^{30}$  a normovány na jeden proton.

${}^{\text{nat}}\text{Ni}(n,x){}^{58}\text{Co} (10^{-30})$	A	B	C	D	E	F	G
1	3,62	2,99	2,23	1,66	1,20	1,21	1,58
2	3,89	3,12	2,33	1,69	1,22	1,19	1,59
3	4,09	3,24	2,44	1,72	1,24	1,15	1,60
4	4,19	3,33	2,42	1,74	1,22	1,17	1,62
5	4,19	3,39	2,49	1,74	1,23	1,16	1,59

Tabulka 5.4: Naměřené reakční rychlosti ve velkoplošném niklovém detektoru pro reakci  ${}^{\text{nat}}\text{Ni}(n,x){}^{57}\text{Co}$ . Hodnoty jsou uvedeny v  $\text{s}^{-1}$ , vynásobeny  $10^{32}$  a normovány na jeden proton.

${}^{\text{nat}}\text{Ni}(n,x){}^{57}\text{Co} (10^{-32})$	A	B	C	D	E	F	G
1	9,58	10,6	9,71	7,69	5,43	5,15	6,52
2	10,5	11,5	10,6	7,66	5,48	5,09	6,62
3	10,9	12,1	11,0	7,86	5,53	4,99	6,34
4	11,6	12,5	11,0	7,94	5,55	4,82	6,49
5	11,4	12,9	11,4	7,85	5,54	5,04	6,19

Ve výsledcích si lze všimnout zvyšující se reakční rychlosti směrem k nižším řádkům, způsobené posunem středu paprsku protonů pod střed niobové zkumavky, jak bylo popsáno v části 5.2.1. To je nejvíce patrné pro nejbližší sloupce A-C, ve sloupci A tento posun

dosahuje až 15%. Vliv tohoto posunu postupně vymizí. Další jev, který lze pozorovat je vývoj reakčních rychlostí v jednotlivých řádcích, kde proti sobě působí dva opačné jevy. S rostoucí vzdáleností od centra vzniku protonů nacházejícího se v oblasti do 3, 5 mm od počátku niobové zkumavky tok neutronů klesá. Se snižujícím se úhlem naopak roste počet vznikajících neutronů. Lze vidět, že vliv vzrůstající vzdálenosti je v průměru silnější a reakční rychlosti klesají se zvyšující se vzdáleností. Úhlové rozdělení reakčních rychlostí bude dále více popsáno na konci této kapitoly.

Pro porovnání vypočtených reakčních rychlostí pomocí výpočetních kódů s experimentálními byl určován procentuální rozdíl vypočtených hodnot oproti experimentálně určeným pomocí vzorce  $\frac{C}{E} - 1$ , kde C zastupuje vypočtené hodnoty a E naměřené hodnoty v experimentu. Tyto rozdíly jsou uvedeny v tabulkách 5.5 pro Geant4 s Bertiniho kaskádou, 5.6 pro Geant4 s binární kaskádou a 5.7 pro MCNP6.2. Reakční rychlosti pro  $^{nat}\text{Ni}(n,x)^{58}\text{Co}$  vypočtené v Geant4 s Bertiniho i binární kaskádou jsou průměrně o 68 % menší než experimentální. Na první pohled tak lze vidět, že neutronový výtěžek reakce v Geant4 je silně podhodnocený. Reakční rychlosti pro reakci  $^{nat}\text{Ni}(n,x)^{57}\text{Co}$  jsou potom v průměru o 86 % podhodnocené pro Bertiniho kaskádu a dokonce o 93% pro binární kaskádu, což naznačuje ještě větší podhodnocování výtěžku neutronů ve vyšších energiích. Pro obě kaskády pro reakci  $^{nat}\text{Ni}(n,x)^{58}\text{Co}$  vzrůstá odchylka směrem k nižším úhlům, výtěžek v dopředných úhlech je tedy více podhodnocený než v úhlech okolo 60°. Pro reakci  $^{nat}\text{Ni}(n,x)^{57}\text{Co}$  pro binární kaskádu odchylky také vzrůstají směrem k nižším úhlům, pro Bertiniho reakci žádný podobný trend vypočítat nelze.

Oproti kódu Geant4, MCNP6.2 poměrně dobře předpovídá reakční rychlosti reakce  $^{nat}\text{Ni}(n,x)^{58}\text{Co}$ . Rozdíl oproti experimentu se pohybuje v rozmezí  $-5,8\%$  až  $3,1\%$  pro dopředné úhly od asi 15° do 33° (sloupce D-G), což jsou rozdíly srovnatelné s odchylkou experimentálně určených hodnot. V oblasti vyšších úhlů (sloupce A-D) jsou reakční rychlosti mírně nadhodnocovány (rozdíl  $0,3\%$  -  $10,4\%$ ). Lze tedy usuzovat, že v oblasti nízkých energií, simulace v MCNP6.2 poměrně dobře simuluje sekundární neutronové spektrum. Jiná situace je naopak pro vyšší energie, na což ukazují velké rozdíly pro reakční rychlost reakce  $^{nat}\text{Ni}(n,x)^{57}\text{Co}$  s vyšším energetickým prahem (asi 9 MeV). Zde se rozdíly oproti experimentu pohybují od  $-89,7\%$  pro úhel 63° po  $-28,6\%$  pro úhel 15°. Je tedy vhodné si všimnout nejen podhodnocení výtěžku vysokoenergetických neutronů, ale také jiné úhlové závislosti.

Tabulka 5.5: Porovnání vypočtených a experimentálních reakčních rychlostí ve velkoplošném niklovém detektoru ve formě  $C/E - 1$  pro výpočet pomocí Geant4 s Bertiniho kaskádou.

$^{nat}\text{Ni}(n,x)^{58}\text{Co}$	A	B	C	D	E	F	G
1	-63,8%	-65,0%	-66,3%	-67,9%	-69,5%	-71,2%	-71,9%
2	-65,7%	-65,9%	-67,0%	-68,3%	-69,0%	-70,7%	-72,0%
3	-66,6%	-66,6%	-68,0%	-68,5%	-69,5%	-69,8%	-72,1%
4	-66,7%	-66,9%	-67,4%	-68,7%	-69,1%	-70,0%	-72,6%
5	-65,9%	-67,1%	-68,0%	-68,2%	-68,9%	-69,6%	-72,2%
$^{nat}\text{Ni}(n,x)^{57}\text{Co}$	A	B	C	D	E	F	G
1	-84,9%	-85,2%	-86,1%	-86,8%	-85,6%	-84,9%	-84,5%
2	-85,9%	-86,2%	-87,1%	-86,6%	-85,4%	-85,6%	-84,3%
3	-85,8%	-86,5%	-87,1%	-86,3%	-85,3%	-84,2%	-83,6%
4	-86,1%	-87,0%	-87,4%	-86,4%	-85,7%	-83,3%	-84,0%
5	-85,5%	-87,2%	-87,4%	-86,1%	-85,4%	-84,3%	-84,0%

Tabulka 5.6: Porovnání vypočtených a experimentálních reakčních rychlostí ve velkoplošném niklovém detektoru ve formě  $C/E-1$  pro výpočet pomocí Geant4 s binárním kaskádou.

$^{nat}\text{Ni}(n,x)^{58}\text{Co}$	A	B	C	D	E	F	G
1	-59,9%	-63,0%	-64,9%	-67,9%	-68,8%	-71,4%	-72,3%
2	-61,9%	-63,6%	-66,0%	-68,0%	-69,3%	-70,9%	-72,5%
3	-62,8%	-64,6%	-67,1%	-68,1%	-69,8%	-69,8%	-72,8%
4	-62,9%	-64,8%	-66,4%	-67,8%	-68,8%	-70,2%	-73,3%
5	-61,9%	-65,0%	-66,9%	-67,7%	-68,7%	-70,0%	-72,5%
$^{nat}\text{Ni}(n,x)^{57}\text{Co}$	A	B	C	D	E	F	G
1	-89,5%	-91,4%	-93,0%	-93,4%	-93,2%	-93,5%	-93,4%
2	-89,5%	-92,2%	-93,4%	-93,8%	-93,5%	-93,4%	-93,2%
3	-90,0%	-92,2%	-93,6%	-93,9%	-93,7%	-92,7%	-93,0%
4	-90,5%	-92,1%	-93,3%	-93,6%	-93,5%	-92,7%	-92,9%
5	-89,8%	-92,6%	-93,8%	-93,0%	-92,7%	-92,9%	-93,2%

Tabulka 5.7: Porovnání vypočtených a experimentálních reakčních rychlostí ve velkoplošném niklovém detektoru ve formě  $C/E - 1$  pro výpočet pomocí MCNP6.2.

$^{nat}\text{Ni}(n,x)^{58}\text{Co}$	A	B	C	D	E	F	G
1	10,4%	7,0%	7,0%	3,1%	-1,3%	-5,8%	-0,3%
2	5,6%	5,6%	3,5%	0,8%	-1,1%	-3,0%	-0,2%
3	3,2%	3,8%	0,3%	1,2%	-0,6%	1,6%	-2,5%
4	3,8%	2,8%	3,4%	0,9%	1,1%	0,6%	-3,4%
5	6,1%	3,1%	2,2%	2,5%	1,4%	1,3%	-0,6%
$^{nat}\text{Ni}(n,x)^{57}\text{Co}$	A	B	C	D	E	F	G
1	-89,7%	-83,1%	-80,5%	-74,3%	-65,8%	-54,7%	-36,4%
2	-88,7%	-85,5%	-79,8%	-71,1%	-65,3%	-52,7%	-34,6%
3	-88,7%	-85,5%	-81,1%	-71,2%	-62,7%	-47,8%	-32,2%
4	-89,7%	-86,3%	-79,8%	-69,9%	-64,3%	-46,1%	-30,8%
5	-88,3%	-85,7%	-79,0%	-72,7%	-63,9%	-52,3%	-28,6%

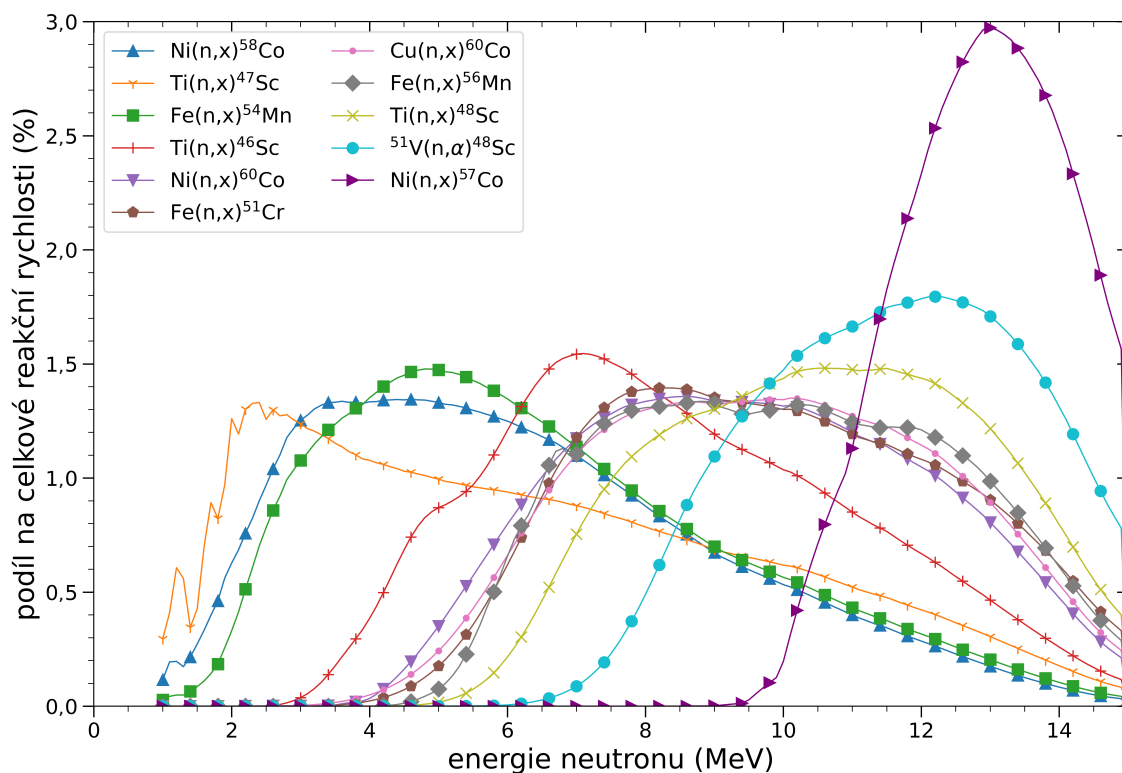
### 5.3.2 Ostatní reakční rychlosti

Aby bylo možné z naměřených reakčních rychlostí lépe usuzovat o spektru neutronů, byly s pomocí neutronové spektra naměřeného stilbenovým scintilátorem vypočteny citlivosti jednotlivých dozimetrických reakcí v tomto spektru. Na grafu 5.10 lze vidět závislost citlivosti reakcí vypočtené jako procentuální podíl příspěvku k celkové reakční rychlosti pro danou energii ku celkové reakční rychlosti. Pod grafem lze nalézt tabulku 5.8 zobrazující průměrné energie odezvy jednotlivých reakčních rychlostí  $E_{50\%}$  určené jako energie neutronu, do které probíhá polovina reakcí přispívajících k reakční rychlosti.

V rámci experimentu byl změřen velký počet reakčních rychlostí pro reakce s různým energetickým prahem vhodně pokrývající spektrum sekundárních neutronů v aktivačních detektorech pokrývajících úhly od  $0^\circ$  do  $60^\circ$ . Tyto naměřené reakční rychlosti jsou shrnuty v tabulce 5.9. Jsou zde uvedeny reakční rychlosti pro všechny středové pásy a jeho části označené A3 až G3 umístěné v horizontální rovině terče, dále pro sadu aktivačních detektorů umístěných u vstupu chladicí vody (H -  $9,5^\circ$ ) a sadu aktivačních detektorů



umístěných v 1 m přímé vzdálenosti od terče (0, 0°). Pro lepší přehlednost jsou jednotlivé reakce seřazené vzestupně podle střední hodnoty energie jejich odezvy.



Obrázek 5.10: Citlivost použitých dozimetrických reakcí jako funkce energie neutronu vypočtené pomocí neutronového spektra naměřeného stilbenovým scintilátorem.

Tabulka 5.8: Tabulka průměrné energie odezvy reakční rychlosti  $E_{50\%}$  pro všechny použité dozimetrické reakce.

reakce	$E_{50\%}$ (MeV)
${}^{\text{nat}}\text{Ni}(n,x){}^{58}\text{Co}$	5,96
${}^{\text{nat}}\text{Ti}(n,x){}^{47}\text{Sc}$	6,05
${}^{\text{nat}}\text{Fe}(n,x){}^{54}\text{Mn}$	6,18
${}^{\text{nat}}\text{Ti}(n,x){}^{46}\text{Sc}$	8,31
${}^{\text{nat}}\text{Ni}(n,x){}^{60}\text{Co}$	9,62
${}^{\text{nat}}\text{Fe}(n,x){}^{51}\text{Cr}$	9,85
${}^{\text{nat}}\text{Cu}(n,x){}^{60}\text{Co}$	9,88
${}^{\text{nat}}\text{Fe}(n,x){}^{56}\text{Mn}$	10,04
${}^{\text{nat}}\text{Ti}(n,x){}^{48}\text{Sc}$	10,73
${}^{51}\text{V}(n,\alpha){}^{48}\text{Sc}$	11,74
${}^{\text{nat}}\text{Ni}(n,x){}^{57}\text{Co}$	13,06

Tabulka 5.9: Reakční rychlosti ( $s^{-1}$ ) vztažené na jeden zdrojový proton naměřené v aktivačních detektorech středového pásku a dvou sadách aktivačních detektorů u vstupu chladicí vody a v 1 m přímém směru vzdálenosti od terče. Reakce jsou seřazeny vzestupně podle střední hodnoty energie odezvy reakční rychlosti.

Reakce	poloha aktivačního detektoru				
	A3 (62, 8°)	B3 (49, 7°)	C3 (40, 2°)	D3 (33, 4°)	E3 (28, 4°)
${}^{\text{nat}}\text{Ni}(\text{n,x})^{58}\text{Co}$	$4,09 \cdot 10^{-30}$	$3,24 \cdot 10^{-30}$	$2,44 \cdot 10^{-30}$	$1,72 \cdot 10^{-30}$	$1,24 \cdot 10^{-30}$
${}^{\text{nat}}\text{Ti}(\text{n,x})^{47}\text{Sc}$	$6,58 \cdot 10^{-32}$	$5,48 \cdot 10^{-32}$	$4,15 \cdot 10^{-32}$	$3,11 \cdot 10^{-32}$	$2,20 \cdot 10^{-32}$
${}^{\text{nat}}\text{Fe}(\text{n,x})^{54}\text{Mn}$	$2,48 \cdot 10^{-31}$	$2,03 \cdot 10^{-31}$	$1,51 \cdot 10^{-31}$	$1,09 \cdot 10^{-31}$	$7,92 \cdot 10^{-32}$
${}^{\text{nat}}\text{Ti}(\text{n,x})^{46}\text{Sc}$	$8,94 \cdot 10^{-32}$	$7,59 \cdot 10^{-32}$	$5,67 \cdot 10^{-32}$	$4,12 \cdot 10^{-32}$	$2,93 \cdot 10^{-32}$
${}^{\text{nat}}\text{Ni}(\text{n,x})^{60}\text{Co}$	$9,71 \cdot 10^{-32}$	$8,25 \cdot 10^{-32}$	$6,46 \cdot 10^{-32}$	$4,75 \cdot 10^{-32}$	$3,38 \cdot 10^{-32}$
${}^{\text{nat}}\text{Fe}(\text{n,x})^{51}\text{Cr}$	$8,81 \cdot 10^{-33}$	$7,47 \cdot 10^{-33}$	$5,82 \cdot 10^{-33}$	$4,13 \cdot 10^{-33}$	$3,06 \cdot 10^{-33}$
${}^{\text{nat}}\text{Fe}(\text{n,x})^{56}\text{Mn}$	$1,89 \cdot 10^{-31}$	$1,65 \cdot 10^{-31}$	$1,27 \cdot 10^{-31}$	$9,14 \cdot 10^{-32}$	$6,25 \cdot 10^{-32}$
${}^{\text{nat}}\text{Ti}(\text{n,x})^{48}\text{Sc}$	$5,75 \cdot 10^{-32}$	$5,12 \cdot 10^{-32}$	$4,01 \cdot 10^{-32}$	$2,98 \cdot 10^{-32}$	$2,12 \cdot 10^{-32}$
${}^{51}\text{V}(\text{n},\alpha)^{48}\text{Sc}$	$1,02 \cdot 10^{-32}$	$9,19 \cdot 10^{-33}$	$7,45 \cdot 10^{-33}$	$5,64 \cdot 10^{-33}$	$4,10 \cdot 10^{-33}$
${}^{\text{nat}}\text{Ni}(\text{n,x})^{57}\text{Co}$	$1,09 \cdot 10^{-31}$	$1,21 \cdot 10^{-31}$	$1,10 \cdot 10^{-31}$	$7,86 \cdot 10^{-32}$	$5,53 \cdot 10^{-32}$
Reakce	poloha aktivačního detektoru				
	F3 (22, 8°)	G3 (15, 2°)	H 9, 5°	0, 0°	
${}^{\text{nat}}\text{Ni}(\text{n,x})^{58}\text{Co}$	$1,15 \cdot 10^{-30}$	$1,60 \cdot 10^{-30}$	$4,61 \cdot 10^{-31}$	$4,51 \cdot 10^{-33}$	
${}^{\text{nat}}\text{Ti}(\text{n,x})^{47}\text{Sc}$	$2,15 \cdot 10^{-32}$	$2,97 \cdot 10^{-32}$	$8,65 \cdot 10^{-33}$		
${}^{\text{nat}}\text{Fe}(\text{n,x})^{54}\text{Mn}$	$7,75 \cdot 10^{-32}$	$1,03 \cdot 10^{-31}$	$3,25 \cdot 10^{-32}$	$3,00 \cdot 10^{-34}$	
${}^{\text{nat}}\text{Ti}(\text{n,x})^{46}\text{Sc}$	$2,93 \cdot 10^{-32}$	$4,10 \cdot 10^{-32}$	$1,33 \cdot 10^{-32}$		
${}^{\text{nat}}\text{Ni}(\text{n,x})^{60}\text{Co}$	$3,79 \cdot 10^{-32}$	$4,51 \cdot 10^{-32}$	$1,32 \cdot 10^{-32}$	$1,27 \cdot 10^{-34}$	
${}^{\text{nat}}\text{Fe}(\text{n,x})^{51}\text{Cr}$	$2,97 \cdot 10^{-33}$	$4,03 \cdot 10^{-33}$	$1,11 \cdot 10^{-33}$		
${}^{\text{nat}}\text{Cu}(\text{n,x})^{60}\text{Co}$			$9,81 \cdot 10^{-33}$	$8,53 \cdot 10^{-35}$	
${}^{\text{nat}}\text{Fe}(\text{n,x})^{56}\text{Mn}$	$6,40 \cdot 10^{-32}$	$8,19 \cdot 10^{-32}$	$2,87 \cdot 10^{-32}$		
${}^{\text{nat}}\text{Ti}(\text{n,x})^{48}\text{Sc}$	$2,07 \cdot 10^{-32}$	$2,83 \cdot 10^{-32}$	$9,53 \cdot 10^{-33}$		
${}^{51}\text{V}(\text{n},\alpha)^{48}\text{Sc}$	$4,04 \cdot 10^{-33}$	$5,44 \cdot 10^{-33}$			
${}^{\text{nat}}\text{Ni}(\text{n,x})^{57}\text{Co}$	$4,99 \cdot 10^{-32}$	$6,34 \cdot 10^{-32}$	$2,29 \cdot 10^{-32}$	$2,30 \cdot 10^{-34}$	

Tabulka 5.10: Porovnání vypočtených a experimentálně určených reakčních rychlostí ve středových páskách na pozici A3-G3 velkoplošného niklového detektoru ve formě C/E-1 pro výpočet pomocí Geant4 s Bertiniho kaskádou.

Geant4 (BERT)	A3	B3	C3	D3	E3	F3	G3
${}^{\text{nat}}\text{Ni}(\text{n,x})^{58}\text{Co}$	-66,6%	-66,6%	-68,0%	-68,5%	-69,5%	-69,8%	-72,1%
${}^{\text{nat}}\text{Ti}(\text{n,x})^{47}\text{Sc}$	-62,4%	-64,0%	-65,5%	-68,0%	-68,2%	-70,0%	-72,3%
${}^{\text{nat}}\text{Fe}(\text{n,x})^{54}\text{Mn}$	-64,1%	-65,1%	-66,2%	-67,5%	-68,8%	-70,7%	-71,7%
${}^{\text{nat}}\text{Ti}(\text{n,x})^{46}\text{Sc}$	-65,4%	-66,2%	-66,6%	-67,5%	-68,0%	-70,3%	-72,3%
${}^{\text{nat}}\text{Ni}(\text{n,x})^{60}\text{Co}$	-72,8%	-72,8%	-73,7%	-74,5%	-74,6%	-78,9%	-76,8%
${}^{\text{nat}}\text{Fe}(\text{n,x})^{51}\text{Cr}$	-71,4%	-71,1%	-71,9%	-71,6%	-72,7%	-73,8%	-74,8%
${}^{\text{nat}}\text{Fe}(\text{n,x})^{56}\text{Mn}$	-71,1%	-71,4%	-71,8%	-71,9%	-70,7%	-73,3%	-72,8%
${}^{\text{nat}}\text{Ti}(\text{n,x})^{48}\text{Sc}$	-73,8%	-74,1%	-74,4%	-75,1%	-74,8%	-75,9%	-77,0%
${}^{51}\text{V}(\text{n},\alpha)^{48}\text{Sc}$	-77,5%	-77,2%	-77,5%	-78,3%	-78,0%	-79,1%	-79,8%
${}^{\text{nat}}\text{Ni}(\text{n,x})^{57}\text{Co}$	-85,8%	-86,5%	-87,1%	-86,3%	-85,3%	-84,2%	-83,6%

Tabulka 5.11: Porovnání vypočtených a experimentálně určených reakčních rychlostí ve středových pásčích na pozici A3-G3 velkoplošného niklového detektoru ve formě  $C/E-1$  pro výpočet pomocí Geant4 s binární kaskádou.

Geant4 (BIC)	A3	B3	C3	D3	E3	F3	G3
${}^{\text{nat}}\text{Ni}(\text{n},\text{x})^{58}\text{Co}$	-62,8%	-64,6%	-67,1%	-68,1%	-69,8%	-69,8%	-72,8%
${}^{\text{nat}}\text{Ti}(\text{n},\text{x})^{47}\text{Sc}$	-58,5%	-62,4%	-65,1%	-68,3%	-69,3%	-70,8%	-73,6%
${}^{\text{nat}}\text{Fe}(\text{n},\text{x})^{54}\text{Mn}$	-60,3%	-63,4%	-65,7%	-67,5%	-69,6%	-71,1%	-72,7%
${}^{\text{nat}}\text{Ti}(\text{n},\text{x})^{46}\text{Sc}$	-68,6%	-71,4%	-72,8%	-74,3%	-75,6%	-76,9%	-79,1%
${}^{\text{nat}}\text{Ni}(\text{n},\text{x})^{60}\text{Co}$	-78,3%	-80,0%	-81,7%	-82,8%	-83,7%	-86,2%	-85,2%
${}^{\text{nat}}\text{Fe}(\text{n},\text{x})^{51}\text{Cr}$	-77,9%	-79,5%	-81,1%	-81,6%	-83,1%	-83,4%	-84,5%
${}^{\text{nat}}\text{Fe}(\text{n},\text{x})^{56}\text{Mn}$	-78,1%	-80,2%	-81,5%	-82,2%	-82,4%	-83,5%	-83,7%
${}^{\text{nat}}\text{Ti}(\text{n},\text{x})^{48}\text{Sc}$	-81,6%	-83,4%	-84,8%	-85,8%	-86,4%	-86,6%	-87,5%
${}^{51}\text{V}(\text{n},\alpha)^{48}\text{Sc}$	-85,7%	-87,0%	-88,4%	-89,3%	-89,9%	-89,9%	-90,5%
${}^{\text{nat}}\text{Ni}(\text{n},\text{x})^{57}\text{Co}$	-90,0%	-92,2%	-93,6%	-93,9%	-93,7%	-92,7%	-93,0%

Porovnání s vypočtenými reakčními rychlostmi je opět prezentováno ve formě procentuálního rozdílu  $C/E-1$ . Tyto hodnoty pro středové pásy jsou zobrazeny v tabulkách 5.10 pro Geant4 a Bertiniho kaskádu, 5.11 pro Geant4 a binární kaskádu a 5.12 pro MCNP6.2. Výsledky pro reakce s různými energetickými prahy mezi reakcemi  ${}^{\text{nat}}\text{Ni}(\text{n},\text{x})^{58}\text{Co}$  a  ${}^{\text{nat}}\text{Ni}(\text{n},\text{x})^{57}\text{Co}$  doplňují a zároveň potvrzují závěry a pozorování popsane v předchozí kapitole.

Výtěžek neutronů v Geant4 je pro obě kaskády silně podhodnocen s tím, že s rostoucí energií procentuální rozdíl oproti experimentálním hodnotám roste, jak lze vidět v jednotlivých sloupcích tabulek 5.10 a 5.11. Menší rozdíl pro nízké energie (první tři reakce) lze pozorovat u binární kaskády, u které však rozdíl také více roste směrem k vyšším energiím a od reakce  ${}^{\text{nat}}\text{Ti}(\text{n},\text{x})^{46}\text{Sc}$  ( $E_{50\%} = 8,31$  MeV) vykazuje horší hodnoty oproti Bertiniho kaskádě. V obou případech lze také pozorovat průměrný nárůst rozdílů směrem k nižším emisním úhlům a nejvyšších hodnot je dosahováno v  $9,5^\circ$  a přímém směru (viz tabulka 5.13), což je opačný trend oproti hodnotám pro MCNP6.2.

V kódu MCNP6.2 je poměrně dobře vypočtena reakční rychlost reakcí s nízkými energetickými prahy (procentuální rozdíl  $-4,7\%$  až  $11,8\%$ ). Do reakce  ${}^{\text{nat}}\text{Fe}(\text{n},\text{x})^{54}\text{Mn}$  ( $E_{50\%} = 6,18$  MeV) dochází dokonce k nadhodnocování reakční rychlosti pro vyšší úhly (pro díly A3-C3) o  $0,3\%$  až  $11,8\%$ . Od reakce  ${}^{\text{nat}}\text{Ti}(\text{n},\text{x})^{46}\text{Sc}$  ( $E_{50\%} = 8,31$  MeV) dochází k podhodnocování reakčních rychlostí ve všech úhlech, které se postupně zvyšuje od průměrných  $-11\%$  přes  $-36\%$  pro reakce s  $E_{50\%} = 9,62 - 10,04$  MeV až po  $-46\%$ ,  $-57\%$  a  $-67\%$  pro tři reakce s nejvyššími energetickými prahy. Stejně jako pro reakci  ${}^{\text{nat}}\text{Ni}(\text{n},\text{x})^{57}\text{Co}$  klesají rozdíly podhodnocených reakcí silně směrem k nižším úhlům a nejmenších rozdílů je dosahováno v dopředných úhlech  $9,5^\circ$  a  $0^\circ$  (viz tabulka 5.13).

Tabulka 5.12: Porovnání vypočtených a experimentálně určených reakčních rychlostí ve středových páscích na pozici A3-G3 velkoplošného niklového detektoru ve formě C/E-1 pro výpočet pomocí MCNP6.2.

MCNP6.2	A3	B3	C3	D3	E3	F3	G3
${}^{\text{nat}}\text{Ni}(\text{n},\text{x})^{58}\text{Co}$	3,2%	3,8%	0,3%	1,2%	-0,6%	1,6%	-2,5%
${}^{\text{nat}}\text{Ti}(\text{n},\text{x})^{47}\text{Sc}$	11,8%	7,4%	4,2%	-0,4%	0,2%	-1,8%	-4,7%
${}^{\text{nat}}\text{Fe}(\text{n},\text{x})^{54}\text{Mn}$	11,0%	8,2%	5,7%	4,7%	1,8%	-1,1%	-0,4%
${}^{\text{nat}}\text{Ti}(\text{n},\text{x})^{46}\text{Sc}$	-13,5%	-14,5%	-12,3%	-11,3%	-8,8%	-9,8%	-9,9%
${}^{\text{nat}}\text{Ni}(\text{n},\text{x})^{60}\text{Co}$	-44,2%	-42,3%	-40,9%	-39,0%	-35,5%	-41,0%	-28,3%
${}^{\text{nat}}\text{Fe}(\text{n},\text{x})^{51}\text{Cr}$	-44,3%	-41,3%	-38,8%	-33,6%	-31,9%	-27,3%	-22,0%
${}^{\text{nat}}\text{Fe}(\text{n},\text{x})^{56}\text{Mn}$	-45,4%	-43,6%	-40,1%	-35,8%	-28,6%	-27,2%	-17,0%
${}^{\text{nat}}\text{Ti}(\text{n},\text{x})^{48}\text{Sc}$	-58,1%	-55,4%	-51,5%	-47,7%	-42,4%	-36,5%	-30,4%
${}^{51}\text{V}(\text{n},\alpha)^{48}\text{Sc}$	-73,6%	-69,0%	-64,0%	-58,3%	-52,3%	-45,2%	-36,6%
${}^{\text{nat}}\text{Ni}(\text{n},\text{x})^{57}\text{Co}$	-88,7%	-85,5%	-81,1%	-71,2%	-62,7%	-47,8%	-32,2%

Tabulka 5.13: Porovnání vypočtených a experimentálně určených reakčních rychlostí pro sady aktivačních detektorů umístěných u vstupu chladicí vody ( $9,5^\circ$ ) a v 1 m v přímém směru ( $0,0^\circ$ ) ve formě C/E-1 pro výpočty pomocí všech tří popsanych způsobů.

	Geant4 (BERT)		Geant4 (BIC)		MCNP6.2	
	$9,5^\circ$	$0,0^\circ$	$9,5^\circ$	$0,0^\circ$	$9,5^\circ$	$0,0^\circ$
${}^{\text{nat}}\text{Ni}(\text{n},\text{x})^{58}\text{Co}$	-70,3%	-73,9%	-70,8%	-74,6%	0,4%	-13,6%
${}^{\text{nat}}\text{Ti}(\text{n},\text{x})^{47}\text{Sc}$	-70,7%		-71,9%		-2,0%	
${}^{\text{nat}}\text{Fe}(\text{n},\text{x})^{54}\text{Mn}$	-72,4%	-74,3%	-73,2%	-75,3%	-6,0%	-14,7%
${}^{\text{nat}}\text{Ti}(\text{n},\text{x})^{46}\text{Sc}$	-73,8%		-80,2%		-15,6%	
${}^{\text{nat}}\text{Ni}(\text{n},\text{x})^{60}\text{Co}$	-75,5%	-77,4%	-84,5%	-85,6%	-23,9%	-33,6%
${}^{\text{nat}}\text{Fe}(\text{n},\text{x})^{51}\text{Cr}$	-71,8%		-82,8%		-11,9%	
${}^{\text{nat}}\text{Cu}(\text{n},\text{x})^{60}\text{Co}$	-76,9%	-76,4%	-85,9%	-85,5%	-28,6%	-31,2%
${}^{\text{nat}}\text{Fe}(\text{n},\text{x})^{56}\text{Mn}$	-76,0%		-85,7%		-25,9%	
${}^{\text{nat}}\text{Ti}(\text{n},\text{x})^{48}\text{Sc}$	-78,7%		-88,7%		-34,3%	
${}^{\text{nat}}\text{Ni}(\text{n},\text{x})^{57}\text{Co}$	-85,2%	-85,9%	-94,2%	-94,6%	-38,1%	-44,0%

Relativní nejistoty pro vypočtené poměry  $C/E$  jsou zobrazeny v tabulce 5.14. Určení experimentální nejistoty sestává z nejistoty určení četnosti impulsů v píku úplného pohlcení, která je však velmi malá, menší než 1 % pro většinu reakcí, 2 % pro měření aktivity radionuklidů  ${}^{51}\text{Cr}$  a  ${}^{57}\text{Co}$  a 3 % pro  ${}^{60}\text{Co}$ . Dalšími nejistotami jsou nejistota v určení účinnosti HPGe detektoru, která se pohybuje okolo 1,8 % a nejistota v měření proudu protonů na cyklotronu do hodnoty 1,5 %. Nejvyšší nejistotou potom je geometrická nejistota polohy jednotlivých aktivačních detektorů, která byla určena jako 3 %. Tato nejistota v sobě zahrnuje jednak možné nepřesné určení polohy a tedy i úhlu detektoru a také položení jednotlivých aktivačních detektorů na sobě, čímž byl každý v trochu jiné vzdálenosti od terče, i když byly použity tenké folie přilepené těsně na sobě. Nejistota vypočtených hodnot se liší podle energetického prahu reakce, s vyšší energií rychle ubývá neutronů a výpočet tak má větší statistickou odchylku. Po provedení skalárního součinu s mikroskopickým účinným průřezem dojde ke snížení celkové nejistoty i přes vyšší odchylky některých energetických binů. Pro reakce s nízkým prahem byla nejistota menší než 0,5 %, která postupně roste až na 1,4 % pro reakci  ${}^{51}\text{V}(\text{n},\alpha)^{48}\text{Sc}$  a 4 – 5 % pro reakci  ${}^{\text{nat}}\text{Ni}(\text{n},\text{x})^{57}\text{Co}$ .

Tabulka 5.14: Relativní nejistoty vypočtených porovnání C/E pro různé reakční rychlosti a různé polohy aktivačních detektorů.

	62, 8°	49, 7°	40, 2°	33, 4°	28, 4°	22, 8°	15, 2°	9, 5°	0, 0°
${}^{\text{nat}}\text{Ni}(\text{n,x})^{58}\text{Co}$	4, 0%	4, 0%	4, 0%	4, 0%	4, 1%	4, 1%	4, 1%	4, 1%	4, 2%
${}^{\text{nat}}\text{Ti}(\text{n,x})^{47}\text{Sc}$	4, 0%	4, 0%	4, 0%	4, 1%	4, 1%	4, 1%	4, 1%	4, 1%	
${}^{\text{nat}}\text{Fe}(\text{n,x})^{54}\text{Mn}$	4, 0%	4, 0%	4, 0%	4, 0%	4, 1%	4, 1%	4, 1%	4, 5%	4, 4%
${}^{\text{nat}}\text{Ti}(\text{n,x})^{46}\text{Sc}$	4, 1%	4, 2%	4, 2%	4, 2%	4, 3%	4, 6%	4, 5%	8, 7%	
${}^{\text{nat}}\text{Ni}(\text{n,x})^{60}\text{Co}$	5, 2%	4, 3%	4, 9%	4, 6%	4, 8%	5, 7%	4, 6%	6, 4%	5, 6%
${}^{\text{nat}}\text{Fe}(\text{n,x})^{51}\text{Cr}$	4, 4%	4, 2%	4, 5%	4, 6%	4, 6%	4, 7%	5, 6%		
${}^{\text{nat}}\text{Cu}(\text{n,x})^{60}\text{Co}$								4, 6%	5, 3%
${}^{\text{nat}}\text{Fe}(\text{n,x})^{56}\text{Mn}$	4, 5%	4, 5%	4, 6%	4, 9%	5, 0%	5, 0%	5, 0%	4, 6%	
${}^{\text{nat}}\text{Ti}(\text{n,x})^{48}\text{Sc}$	4, 2%	4, 2%	4, 3%	4, 5%	4, 6%	4, 4%	4, 5%	4, 3%	
${}^{51}\text{V}(\text{n},\alpha)^{48}\text{Sc}$	4, 5%	4, 4%	4, 7%	4, 7%	4, 9%	4, 6%	4, 8%		
${}^{\text{nat}}\text{Ni}(\text{n,x})^{57}\text{Co}$	6, 5%	6, 3%	6, 3%	6, 5%	7, 3%	6, 1%	5, 7%	5, 0%	7, 9%

### 5.3.3 Spektrální indexy a úhlové rozdělení reakčních rychlostí

Pro porovnání pouze tvaru spektra bez ohledu na celkový tok neutronů lze vhodně využít spektrálních indexů definovaných jako poměr reakčních rychlostí dvou různých reakcí pro stejný nebo různý materiál. Vybrané spektrální indexy jsou uvedené v tabulce 5.15. Ve vývoji spektrálních indexů lze pozorovat posun energetického spektra k vyšším energiím pro nižší úhly, jak lze vidět ze snižujících se spektrálních indexů  ${}^{58}\text{Co}/{}^{57}\text{Co}$  nebo  ${}^{54}\text{Mn}/{}^{48}\text{Sc}$ , což jsou v obou případech poměr reakce s nízkým a vysokým energetickým prahem. Pro nižší úhly je tedy v poměru k vysokoenergetickým neutronům (10 MeV a více) těch nízkoenergetických méně a tak je také poměr reakcí, které jsou dominantní v těchto částech spektra také menší. U opačných poměrů jako  ${}^{56}\text{Mn}/{}^{54}\text{Mn}$  nebo  ${}^{48}\text{Sc}/{}^{47}\text{Sc}$  lze naopak pozorovat opačný trend.

Tabulka 5.15: Spektrální indexy pro vybrané reakce z naměřených hodnot.

	A3	B3	C3	D3	E3	F3	G3
$\text{Ni}(\text{n,x})^{58}\text{Co}/\text{Ni}(\text{n,x})^{57}\text{Co}$	37, 61	26, 65	22, 27	21, 88	22, 38	23, 03	25, 24
$\text{Ni}(\text{n,x})^{58}\text{Co}/\text{Fe}(\text{n,x})^{54}\text{Mn}$	16, 52	15, 98	16, 13	15, 80	15, 62	14, 83	15, 48
$\text{Fe}(\text{n,x})^{56}\text{Mn}/\text{Fe}(\text{n,x})^{54}\text{Mn}$	0, 76	0, 81	0, 84	0, 84	0, 79	0, 83	0, 79
$\text{Fe}(\text{n,x})^{54}\text{Mn}/\text{Ti}(\text{n,x})^{48}\text{Sc}$	4, 30	3, 96	3, 78	3, 65	3, 73	3, 74	3, 66
$\text{Ti}(\text{n,x})^{48}\text{Sc}/\text{Ti}(\text{n,x})^{47}\text{Sc}$	0, 87	0, 93	0, 97	0, 96	0, 96	0, 96	0, 95
$\text{Ti}(\text{n,x})^{46}\text{Sc}/\text{Ti}(\text{n,x})^{47}\text{Sc}$	1, 36	1, 38	1, 37	1, 32	1, 33	1, 36	1, 38

Pro porovnání tvaru spekter modelovaných v jednotlivých kódech byl vypočten procentuální rozdíl jednotlivých spektrálních indexů. Tyto rozdíly jsou uvedeny v tabulkách 5.16 pro Geant4 s Bertiniho kaskádou, 5.17 pro Geant4 s binární kaskádou a 5.18 pro MCNP6.2. Pro všechna tři spektra lze pozorovat velký rozdíl od 43, 8 % až po 812, 8 % pro první spektrální index  ${}^{58}\text{Co}/{}^{57}\text{Co}$ , což naznačuje silné podhodnocování výtěžku neutronů vysokých energií. Nejnižší rozdíly lze pozorovat pro Bertiniho kaskádu v Geant4 s průměrnou hodnotou přibližně 120 %. Přičemž rozdíl se snižujícím se úhlem nejdříve roste ke 140 % pro části B3 a C3 a poté klesá až k 70 % pro G3. Průměrný rozdíl pro zbylá dvě spektra je přibližně stejný a to 350 %, jiný je však jeho průběh. U binární kaskády lze pozorovat podobný průběh jako u Bertiniho kaskády, zatímco u modelu CEM03.03 kódu MCNP6.2

lze opět pozorovat silnou anizotropii, kdy rozdíl klesá od nejvyšších 812,8 % po nejnižší a celkově nejmenší rozdíl 43,8 %.

Tabulka 5.16: Porovnání vypočtených a experimentálních spektrálních indexů ve formě  $C/E - 1$  pro výpočet pomocí Geant4 s Bertiniho kaskádou.

Geant4 (BERT)	A3	B3	C3	D3	E3	F3	G3
$^{58}\text{Co}/^{57}\text{Co}$	134,7%	147,3%	148,4%	129,3%	107,2%	91,0%	69,7%
$^{58}\text{Co}/^{54}\text{Mn}$	-7,1%	-4,2%	-5,2%	-3,2%	-2,0%	3,1%	-1,6%
$^{56}\text{Mn}/^{54}\text{Mn}$	-19,5%	-18,2%	-16,5%	-13,5%	-6,0%	-9,1%	-4,1%
$^{54}\text{Mn}/^{48}\text{Sc}$	37,0%	34,7%	32,0%	30,8%	23,8%	21,9%	23,3%
$^{48}\text{Sc}/^{47}\text{Sc}$	-30,3%	-28,1%	-25,9%	-22,4%	-20,8%	-19,7%	-17,1%
$^{46}\text{Sc}/^{47}\text{Sc}$	-7,9%	-6,2%	-3,2%	1,3%	0,8%	-0,8%	-0,2%

Tabulka 5.17: Porovnání vypočtených a experimentálních spektrálních indexů ve formě  $C/E - 1$  pro výpočet pomocí Geant4 s binární kaskádou.

Geant4 (BIC)	A3	B3	C3	D3	E3	F3	G3
$^{58}\text{Co}/^{57}\text{Co}$	273,6%	352,6%	415,2%	418,9%	380,9%	311,5%	290,9%
$^{58}\text{Co}/^{54}\text{Mn}$	-6,2%	-3,2%	-4,1%	-2,1%	-0,7%	4,4%	-0,3%
$^{56}\text{Mn}/^{54}\text{Mn}$	-45,0%	-45,7%	-46,1%	-45,4%	-41,9%	-43,0%	-40,2%
$^{54}\text{Mn}/^{48}\text{Sc}$	116,3%	120,8%	125,9%	129,9%	123,5%	115,5%	118,9%
$^{48}\text{Sc}/^{47}\text{Sc}$	-55,7%	-55,9%	-56,4%	-55,3%	-55,7%	-54,0%	-52,7%
$^{46}\text{Sc}/^{47}\text{Sc}$	-24,2%	-23,9%	-22,1%	-18,8%	-20,4%	-21,0%	-20,8%

Tabulka 5.18: Porovnání vypočtených a experimentálních spektrálních indexů ve formě  $C/E - 1$  pro výpočet pomocí MCNP6.2

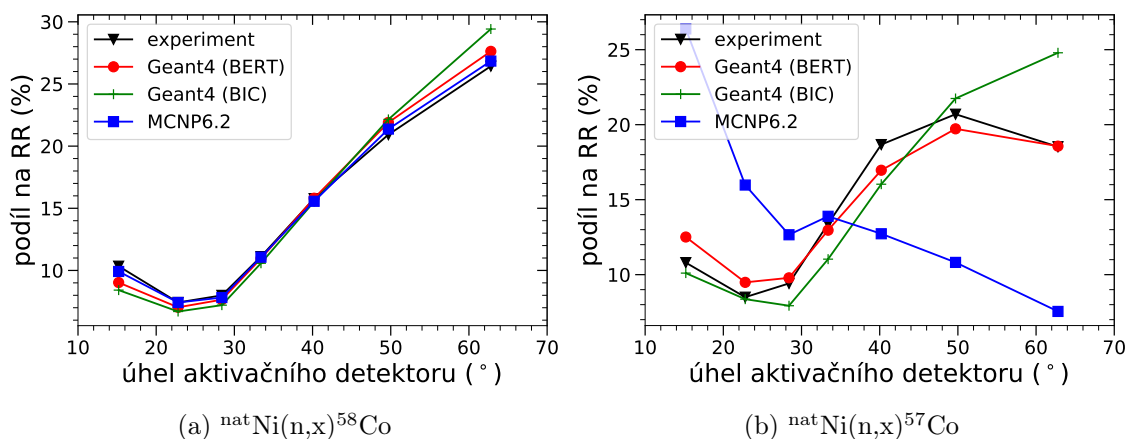
MCNP6.2	A3	B3	C3	D3	E3	F3	G3
$^{58}\text{Co}/^{57}\text{Co}$	812,8%	615,8%	430,1%	251,6%	166,4%	94,8%	43,8%
$^{58}\text{Co}/^{54}\text{Mn}$	-7,0%	-4,1%	-5,1%	-3,3%	-2,4%	2,7%	-2,1%
$^{56}\text{Mn}/^{54}\text{Mn}$	-50,8%	-47,8%	-43,3%	-38,7%	-29,9%	-26,4%	-16,7%
$^{54}\text{Mn}/^{48}\text{Sc}$	164,6%	142,7%	118,1%	100,2%	76,7%	55,7%	43,1%
$^{48}\text{Sc}/^{47}\text{Sc}$	-62,5%	-58,5%	-53,5%	-47,5%	-42,5%	-35,3%	-27,0%
$^{46}\text{Sc}/^{47}\text{Sc}$	-22,6%	-20,4%	-15,8%	-11,0%	-9,0%	-8,2%	-5,4%

Podobné výsledky lze pozorovat i pro podobný poměr  $^{54}\text{Mn}/^{48}\text{Sc}$ . Jelikož má však reakce  $^{\text{nat}}\text{Fe}(n,x)^{54}\text{Mn}$  nižší energetický práh, nejsou tyto rozdíly tak vysoké. Pro Geant4 s Bertiniho kaskádou je rozdíl průměrně 29 %, zatímco pro binární kaskádu 120 % a pro MCNP6.2 100 %. Pro Bertiniho kaskádu a pro MCNP6.2 rozdíl klesá se snižujícím se úhlem, pro binární kaskádu je naopak dosahováno nejlepšího výsledku pro díly A3 a G3. Pro spektrální indexy s reakcí s vyšším prahem v čitateli jako  $^{56}\text{Mn}/^{54}\text{Mn}$  nebo  $^{48}\text{Sc}/^{47}\text{Sc}$  je rozdíl záporný. Pro Bertiniho kaskádu je opět dosahováno nejlepších výsledků s nejmenšími rozdíly a největší rozdíly lze pozorovat u binární kaskády.

Spektrální index  $^{58}\text{Co}/^{54}\text{Mn}$  dává do poměru dvě reakce s podobnou citlivostí, kde reakce  $^{\text{nat}}\text{Ni}(n,x)^{58}\text{Co}$  má pouze o trochu nižší energetický práh. Rozdíly oproti experimentu jsou pro tento spektrální index u všech tří spekter velmi podobné v rozmezí -7 % až 4 % a jsou pravděpodobně více způsobené nejistotami v experimentálním určení spektrálního indexu. Posledním uváděným spektrálním indexem je  $^{46}\text{Sc}/^{47}\text{Sc}$ , který uvádí do poměru reakci s citlivostí na střední energie ( $E_{50\%} = 8,31 \text{ MeV}$ ) a reakci s citlivostí na nízké

energie ( $E_{50\%} = 6,05$  MeV). Výborného výsledku je zde dosaženo s Bertiniho kaskádou, kde je rozdíl v rozmezí  $-7,9\%$  až  $1,3\%$  s průměrnou hodnotou  $-2,3\%$ , lze tedy usuzovat o tom, že tvar spektra v tomto energetickém rozmezí je v Bertiniho kaskádě popisován v souladu s realitou. Pro binární kaskádu dochází k podhodnocování již těchto středních energií a rozdíl oproti experimentálně určenému spektrálnímu indexu je průměrně  $-22\%$ . U MCNP6.2 opět dochází k většímu rozsahu hodnot rozdílu od  $-22,6\%$  pro úhel  $60^\circ$  až po hodnotu srovnatelnou s nejistotami  $-5,4\%$  pro úhel  $15^\circ$ .

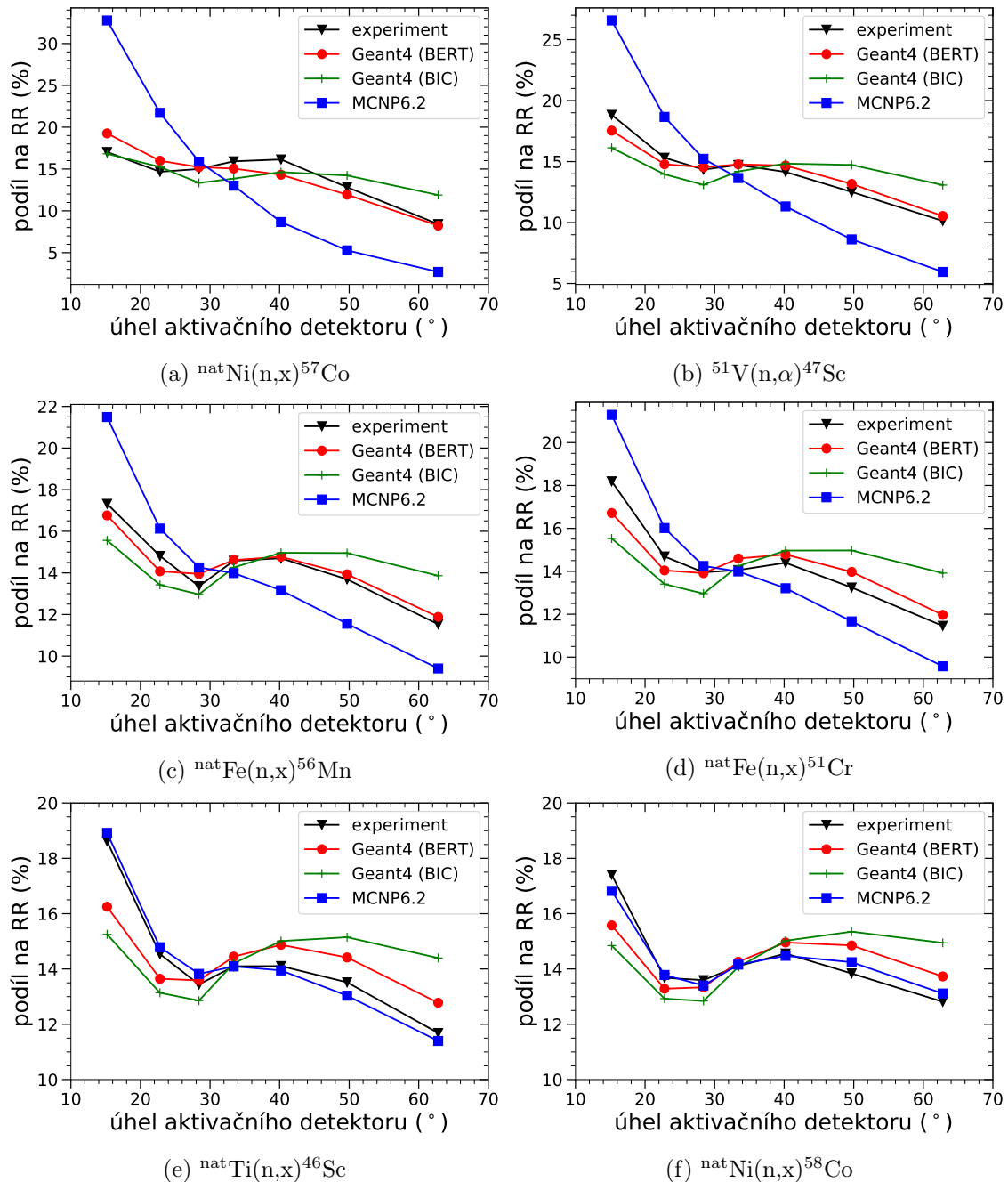
Pro porovnání pouze úhlového rozdělení neutronů bez ohledu na celkový tok neutronů byl vypočten podíl reakčních rychlostí v daném kousku aktivačního detektoru ku reakční rychlosti v celém středovém pásku, která byla určena jako součet reakčních rychlostí v jednotlivých dílcích. Relativní příspěvky k celkové reakční rychlosti jsou pro reakce na niklu zobrazené na grafech 5.11a a 5.11b. Lze vidět, že pro reakci  ${}^{\text{nat}}\text{Ni}(n,x){}^{58}\text{Co}$  mají reakční rychlosti vypočítané v různých kódech stejný průběh. Dále lze pozorovat, že pro hustotu toku neutronů v oblasti citlivosti této reakce má hlavní vliv vzdálenost aktivačního detektoru od zdroje neutronů. Průběh aktivačních rychlostí odpovídá průběhu vzdáleností jednotlivých aktivačních detektorů od zdroje neutronů na počátku terče. Jiná situace nastává pro vývin reakčních rychlostí reakce  ${}^{\text{nat}}\text{Ni}(n,x){}^{57}\text{Co}$ , zde experimentálnímu rozložení nejvíce odpovídá to vypočtené pomocí Geant4 s Bertiniho kaskádou, zatímco průběh vypočtený pomocí MCNP6.2 je téměř opačný. Zde je jasně vidět silná anizotropie vzniku vysokoenergetických neutronů v MCNP6.2, jejichž výtěžek rychle klesá se zvyšujícím se úhlem. I na experimentálním průběhu lze pozorovat oba vlivy, základní tvar odpovídá vzdálenosti aktivačního detektoru od terče, ale relativní reakční rychlost klesá pro úhly  $50^\circ$  a  $60^\circ$ , jelikož se zvyšujícím se úhlem klesá výtěžek neutronů s nejvyššími energiemi.



Obrázek 5.11: Podíl reakčních rychlostí v aktivačním detektoru v daném úhlu k celkové reakční rychlosti celého středového pásku.

Pro vyloučení vlivu vzdálenosti aktivačního detektoru na rozložení reakčních rychlostí v závislosti na úhlu, byly tyto pronásobeny jejich vzdáleností od zdroje umocněnou na druhou, což je hodnota, s níž hustota toku neutronů směrem od zdroje klesá. Podíly reakčních rychlostí v závislosti na úhlu vypočítané stejně jako v předchozím případě pro různé reakce jsou zobrazeny na grafech 5.12. Toto zobrazení je pouze informativní, jelikož nelze plně použít předpoklad zeslabování toku s druhou mocninou vzdálenosti. Aktivační detektory jsou příliš blízko na to, aby mohl být zdroj neutronů považován za bodový a mezi ním a aktivačními detektory je rozptýlující nehomogenní prostředí. I tak lze z výsledných grafů vyčíst alespoň přibližné informace o úhlovém rozložení hustoty toku neutronů při experimentu a v simulacích.

Jak bylo ukázáno výše, spektrum sekundárních neutronů vytvářené modelem CEM03.03 ve výpočetním kódu MCNP6.2 je pro vysoké energie silně anizotropní, jak lze vidět na grafech 5.12a až 5.12d. Se snižující se hodnotou energetického prahu reakce se rozložení reakčních rychlostí předpovídané MCNP6.2 blíží experimentálnímu, které poměrně přesně pro nízkoenergetické reakce  ${}^{\text{nat}}\text{Ti}(n,x){}^{46}\text{Sc}$  a  ${}^{\text{nat}}\text{Ni}(n,x){}^{58}\text{Co}$  předpovídá. U výpočtu pomocí Geant4 s Bertiniho kaskádou je situace obrácená. V tomto kódu jsou věrně předpovídaný rozložení reakčních rychlostí pro reakce s vyšším energetickým prahem a k větším rozdílům dochází pro reakce s prahem nižším.

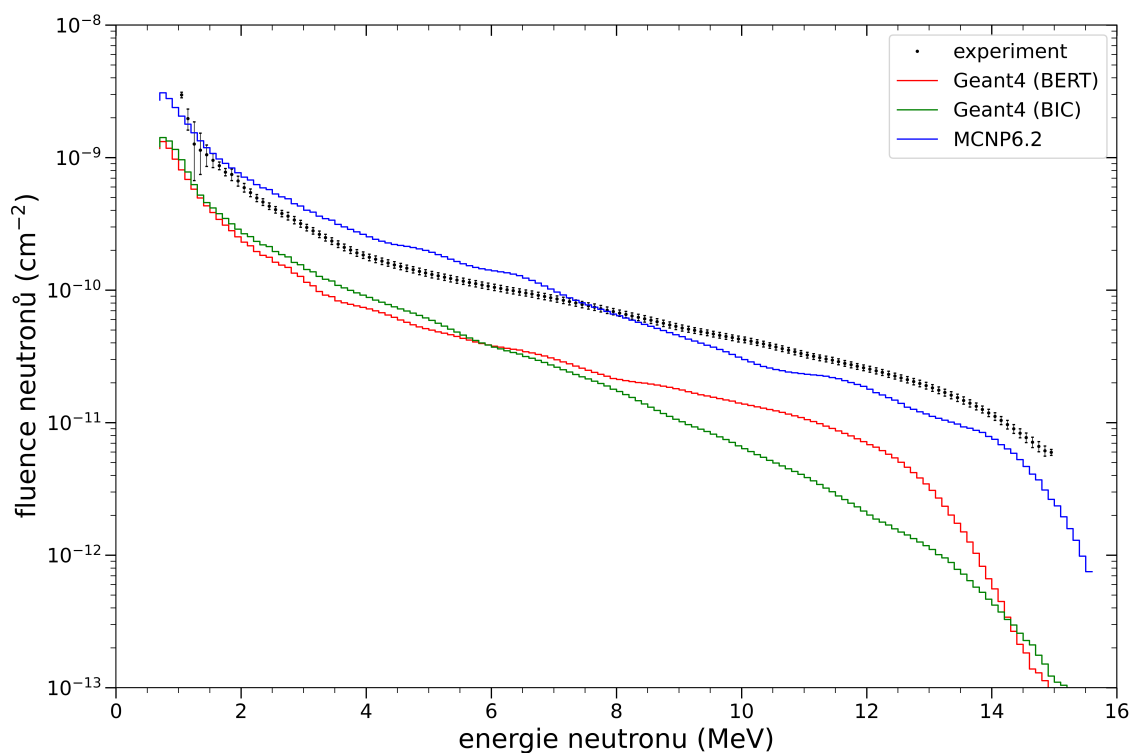


Obrázek 5.12: Podíl reakčních rychlostí v aktivačním detektoru v daném úhlu k celkové reakční rychlosti celého středového pásu pro reakční rychlosti vztahované na prostorový úhel zabíraný aktivačním detektorem.



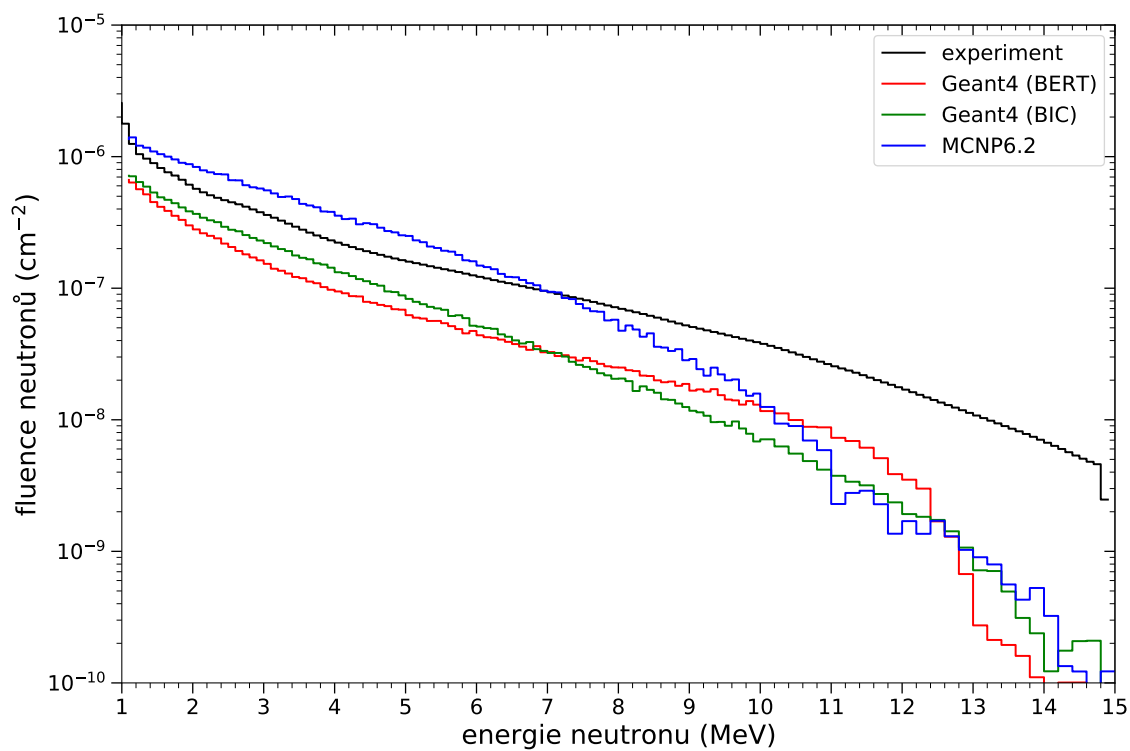
### 5.3.4 Spektra neutronů

Jak bylo napsáno v popisu experimentu, kromě měření aktivačních rychlostí, proběhlo také měření neutronového spektra pomocí stilbenového scintilátoru v 1 m přímého směru od terče. Jelikož nebylo možné toto spektrum normovat přímo na proud protonů, kvůli jeho vysokým nejistotám, bylo spektrum normováno na jeden proton pomocí aktivačních rychlostí naměřených v tomto bodě. Toto měřené spektrum je společně s jeho nejistotami zobrazeno na grafu 5.13. Neutronová spektra vypočítaná v detektoru modelující krystal stilbenu byla po výpočtu gaussovsky rozšířena s rozlišením detektoru a jsou také zobrazena v grafu 5.13. I z tohoto grafu lze vidět podhodnocení spektra výpočetním programem Geant4, také lze u něj pozorovat poměrně rychlý pokles u vysokých energií. Jinak však spektrum vypočtené pomocí Bertiniho kaskády v rozmezí 1 – 12 MeV poměrně dobře simuluje tvar experimentálně naměřeného spektra. Spektrum vypočtené v programu MCNP6.2 nadhodnocuje experimentální spektrum asi do energie 8 MeV a podhodnocuje pro vyšší energie. Tyto výsledky podporují předchozí zjištění na základě porovnání reakčních rychlostí.

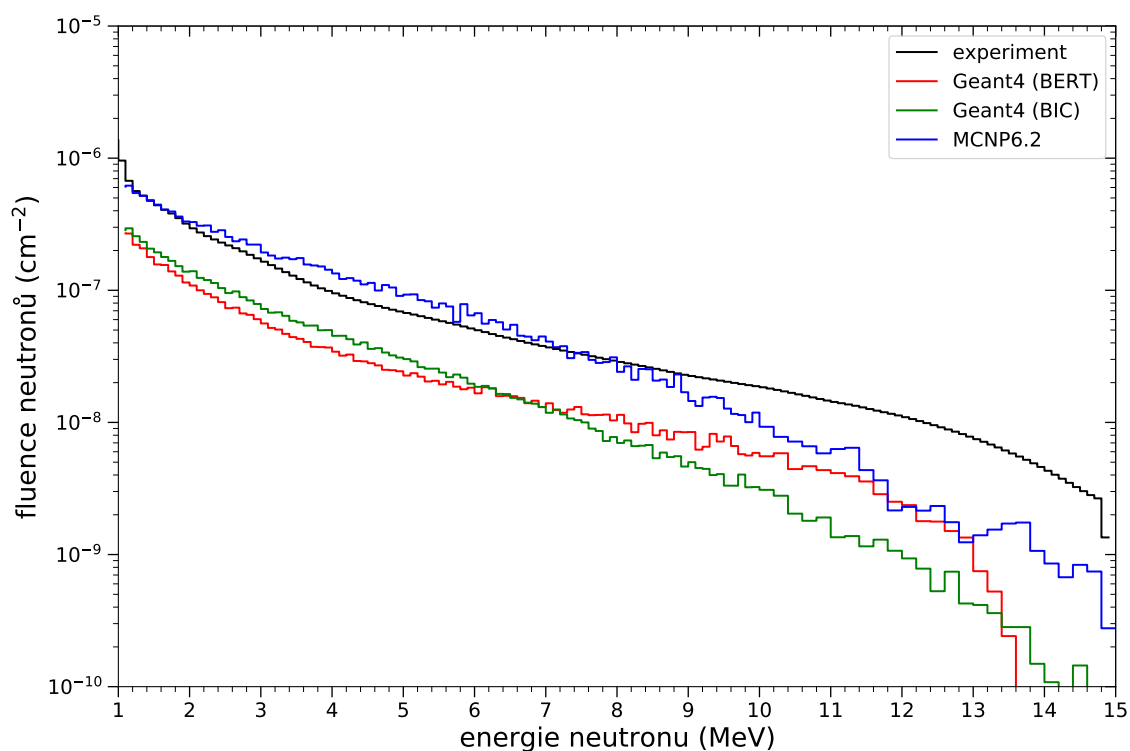


Obrázek 5.13: Spektrum neutronů v 1 m přímém směru měřené stilbenovým scintilátorem normované na jeden proton v porovnání s jednotlivými modelovanými spektry.

Kromě měření spektra stilbenovým detektorem, byla provedena dekonvoluce spektra z naměřených reakčních rychlostí pomocí kódy STAYSL. Jako vstupní spektrum pro tento kód bylo použito naměřené spektrum v 1 m. Porovnání spektra získaného adjustací s vypočtenými spektry pro dva vybrané aktivační detektory A3 a D3 je na grafech 5.14 a 5.15. Lze na nich pozorovat například rychlý úbytek vysokoenergetických neutronů pro větší úhly pro výpočet pomocí MCNP6.2.



Obrázek 5.14: Porovnání experimentálního spektra získaného dekonvolucí naměřených reakčních rychlostí s vypočtenými neutronovými spektry v aktivačním detektoru A3 (62, 8°).



Obrázek 5.15: Porovnání experimentálního spektra získaného dekonvolucí naměřených reakčních rychlostí s vypočtenými neutronovými spektry v aktivačním detektoru D3 (33, 4°).

## 5.4 Závěry

Celkově lze shrnout, že výpočet pomocí Geant4 s Bertiniho kaskádou silně podhodnocuje (o 70 % pro nízké a o 85 % pro vysoké energie) výtěžek neutronů. Naopak poměrně dobře předpovídá prostorové rozložení hustoty toku neutronů, zejména pro vyšší energie. Také tvar spektra sekundárních neutronů je předpovídán v největší shodě s experimentem. Výpočet v MCNP6.2 naproti tomu velmi dobře předpovídá celkovou hustotu toku neutronů v nízkých energiích a s tím související reakční rychlosti reakcí s nízkým energetickým prahem. Pro nízkooenergetické neutrony také dobře předpovídá jejich prostorové rozložení. Nejlepších výsledků je s tímto výpočtem obecně dosahováno v dopředných úhlech. Simulace prostorového rozložení a absolutního toku neutronů vysokých energií je oproti skutečnosti silně anizotropní a podhodnocená.



## Kapitola 6

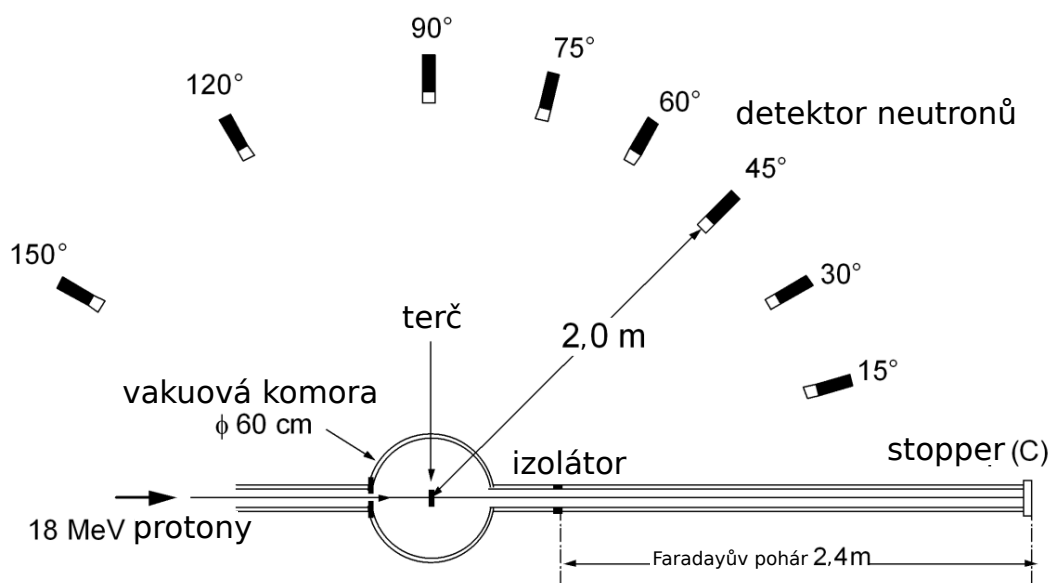
# Porovnání kódů s daty z databáze EXFOR

Pro podrobnější porovnání simulovaných spekter sekundárních neutronů různými fyzikálními modely a kódy byla použita diferenciální data z databáze EXFOR [121] pro reakci protonů o energii 18 MeV na vodním terči obohaceném o  $^{18}\text{O}$ . Experiment, z něhož data pochází, byl proveden na experimentálním zařízení TIARA v Japonsku a je popsán v [17]. Do dnešní doby bylo provedeno několik srovnání naměřených dat s výpočtem a to pomocí kódů MCNPX a PHITS v původním článku [17], různých modelů MCNPX v [122] anebo MCNPX, PHITS i FLUKA v [123]. V této práci byly provedeny výpočty spektra ve všech dostupných fyzikálních modelech kódů Geant4 a MCNP6.2. Dále je v této kapitole diskutován celkový výtěžek neutronů z reakce protonů na obohacené vodě a pomocí získaných informací jsou provedeny dvě nové simulace experimentu z předchozí kapitoly.

### 6.1 Popis experimentu a jeho simulace

Experiment byl proveden na AVF cyklotronu v experimentálním zařízení TIARA. Urychlený paprsek protonů byl veden do vakuové komory o průměru 60 cm, ve které byl umístěn terč. Ten byl vyroben z pouzdra ve tvaru kvádra z nerezové oceli o rozměrech  $2,4\text{ cm} \times 2,4\text{ cm} \times 0,9\text{ cm}$ . Otvor v pouzdru ve tvaru válce o poloměru 1,6 cm a délce 0,6 cm byl naplněn terčovou vodou obohacenou o  $^{18}\text{O}$  na 98 % a uzavřen havarovou folií o tloušťce 10  $\mu\text{m}$ . Tloušťka vodního terče 6 mm byla vybrána tak, aby byla delší než dosah protonů ve vodě, který byl pomocí kódu SRIM [124] vypočítán jako 3,3 mm [17]. Detektory neutronů byly umístěny ve vzdálenosti 2 m od terče v osmi různých úhlech vzhledem k nalétávajícím protonům. Pro měření energie neutronů bylo použito metody TOF, kdy byl paprsek protonů pomocí chopperu dávkován s frekvencí 20,1 MHz a neutrony byly detekovány pomocí scintilačního detektoru NE213 s krystalem o rozměrech 5,08 cm v průměru a 5,08 cm na délku. Schéma experimentu je na obrázku 6.1.

Experiment byl modelován stejně v obou kódech Geant4 a MCNP6.2 podle dostupného popisu. Jelikož je úloha osově symetrická byly detektory neutronů pro získání nižší statistické nejistoty výpočtu modelovány jako tenké kulové pásy o vnitřním poloměru 2 m a šířce 5,08 cm, což odpovídá průměru použitého detektoru NE213. Skórovanou veličinou byla hustota toku neutronů v buňce od 0 do 20 MeV s energetickým binem o šířce 0,1 MeV.



Obrázek 6.1: Schéma experimentu pro měření spektra a úhlového rozložení sekundárních neutronů na AVF cyklotronu v experimentálním zařízení TIARA [17].

Pro simulaci tohoto experimentu byl použit kód Geant4 ve verzi Geant4.10.07. Pro simulaci bylo použito pět různých fyzikálních modelů. Model využívající Bertiniho kaskádu, model s binární kaskádou, model s kaskádou INCL++ s výchozím deexcitačním modelem i s deexcitačním modelem ABLA++ a hadronický model ze seznamu fyzikálních procesů QBBC [125]. Fyzikální seznam QBBC byl vyvinut pro vesmírné aplikace a je doporučován pro vesmírné a medicínské aplikace. Vhodně kombinuje Bertiniho a binární kaskádu, přičemž pro energie pod 1,5 GeV je používána kaskáda binární, pouze využívá jiné účinné průřezy pro stanovení pravděpodobnosti reakce. V Geant4 nebylo využito modelu ParticleHP založeného na datech pro reakce protonů pod 200 MeV, jelikož v něm nejsou dostupná data pro  $^{18}\text{O}$ .

Tabulka 6.1: Dostupné kombinace fyzikálních modelů v MCNP6.2.

Model intranukleární kaskády	Vypařovací model
Bertini	Dresner
	ABLA
ISABEL	Dresner
	ABLA
INCL4	Dresner
	ABLA
CEM03.03	

V kódu MCNP6.2 existuje celkem 7 možností fyzikálních modelů, které shrnuje tabulka 6.1. Jedná se o různé kombinace intranukleární kaskády, kterými jsou intranukleární kaskáda Bertini, ISABEL a INCL4 a vypařovacího modelu, které jsou dva - Dresner a ABLA. Navíc je ještě dostupný výchozí model CEM03.03 spojující vlastní intranukleární kaskádu i vypařovací model. Kromě fyzikálních modelů byly v MCNP6.2 provedeny i dva výpočty s jadernými daty a to z knihoven FENDL3 a TENDL-2017. V obou kódech bylo simulováno celkem  $10^{10}$  primárních protonů o energii 18 MeV v kruhovém paprsku o průměru 1 mm.

## 6.2 Výsledky a jejich porovnání

### 6.2.1 Energetická spektra

Výsledky toku neutronů v experimentu jsou normovány na náboj protonů  $1 \mu\text{C}$  a dále jsou vztaženy na prostorový úhel, který zabíral detektor, a na jednotkovou energii  $1 \text{ MeV}$ . Pro porovnání byla stejně normována také vypočtená spektra. Měřená experimentální spektra pro šest různých úhlů  $15^\circ$ ,  $30^\circ$ ,  $60^\circ$ ,  $90^\circ$ ,  $120^\circ$  a  $150^\circ$  jsou zobrazena na grafech 6.2a až 6.2n v porovnání s jedním ze 14 vypočtených spekter.

Nejistoty experimentálních hodnot se pohybují do 10 % pro energie do 10 MeV a do 20 % pro ostatní hodnoty až na posledních asi 1,5 MeV. Nejistoty pro výpočet v Geant4 jsou do 5 % pro energie do 8 MeV pro úhly  $30^\circ - 90^\circ$  a do 5 MeV pro zbylé úhly. Dále do 10 % pro energie do 10 MeV pro  $15^\circ - 120^\circ$  a do 8,5 MeV pro  $150^\circ$ . Zbylé nejistoty jsou do 20 % až na poslední 1 – 2 MeV. Nejistoty pro výpočet v MCNP6.2 se pohybují do 5 % pro energie do 10 MeV pro úhly  $15^\circ - 60^\circ$ , do 9 MeV pro  $90^\circ$ , do 8 MeV pro  $120^\circ$  a do 7 MeV pro  $150^\circ$ . Pro výpočty s vypařovacím modelem Dresner a daty z knihovny TENDL-2017 jsou tyto energetické hranice asi o 1 MeV níže. Nejistoty do 10 % jsou pro energie do 12 MeV pro dopředné úhly  $15^\circ$  a  $30^\circ$ , do 10,5 MeV pro úhly  $60^\circ$  a  $90^\circ$ , do 9 MeV pro  $120^\circ$  a do 8 MeV pro  $150^\circ$ . Zbylé nejistoty se pohybují do 20 % až na posledních 0,5 – 1,5 MeV.

Porovnání modelovaných a experimentálních spekter prokázalo, že Bertiniho a binární kaskáda v Geant4 podhodnocují výtěžek neutronů všech energií. Tvarem spektra se experimentálnímu více blíží to modelované Bertiniho kaskádou, alespoň pro úhly do  $90^\circ$  a energie do 12 MeV, odkud spektrum oproti experimentálnímu rychle klesá k nule. Model s binární kaskádou prokazuje oproti Bertiniho kaskádě větší výtěžky v nízkých energiích od 2 do 6 MeV. Model s kaskádou INCL++ v Geant4 se vyznačuje vysokými výtěžky v dopředných úhlech  $15^\circ$  a  $30^\circ$ , kde dokonce nadhodnocují experimentální spektrum v rozmezí 3,5 – 12 MeV respektive 5,5 – 10 MeV. I když hustota toku neutronů pro vyšší úhly rychle klesá, kombinace intranukleární kaskády INCL++ s deexcitačním modelem ABLA++ poměrně dobře modeluje tvar spektra pro úhly  $60^\circ - 120^\circ$ .

V deexcitačním modelu ABLA++ dochází oproti výchozímu deexcitačnímu modelu k většímu výtěžku neutronů s nejvyššími energiemi a také k menšímu úbytku těchto neutronů se zvětšujícím se úhlem, což více odpovídá experimentálnímu spektru. Tato vlastnost modelu ABLA je v souladu i s výpočtem v MCNP6.2. Spektrum s hadronickým modelem seznamu QBBC má stejný průběh jako pro binární kaskádu, které oproti experimentálnímu spektru a ostatním modelovaným spektrům rychleji klesá směrem vyšším energiím. Celkově však kvůli použití jiných účinných průřezů dochází k vyšším výtěžkům neutronů.

Všechna modelovaná spektra v MCNP6.2 vykazují podobné rysy, kterými jsou nadhodnocování spektra nízkých energií a naopak podhodnocování spektra v energiích vysokých. Středový bod, ve kterém se střetává modelové a experimentální spektrum se liší v závislosti na modelu a úhlu. Výchozí model pro jaderné reakce CEM03.03 v MCNP6.2 poměrně dobře modeluje spektrum v dopředném úhlu. Pro vyšší úhly však dochází k rychlému poklesu výtěžku neutronů s nejvyššími energiemi a oproti ostatním spektrům zde dochází k zanedbatelnému výtěžku nad 11 až 9,5 MeV v závislosti na úhlu.

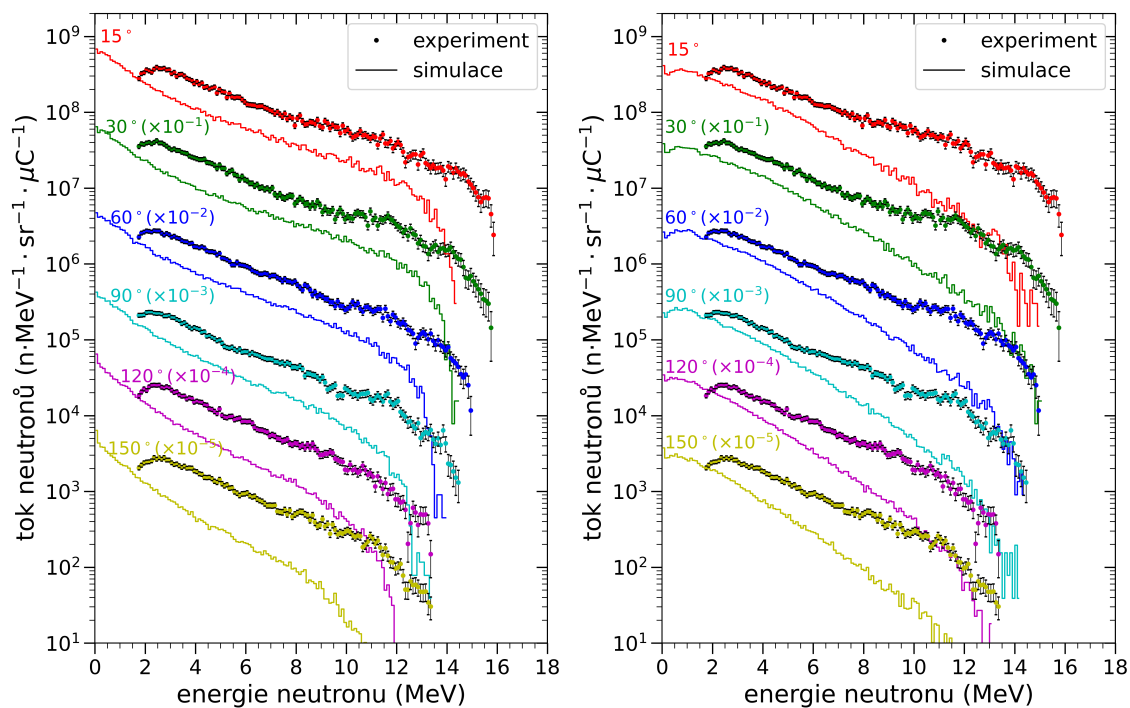
U spekter modelovaných se stejným deexcitačním modelem vypařování lze pozorovat velmi podobný průběh energetického spektra, jelikož právě vypařováním při takto nízkých energiích vzniká nejvíce neutronů. Pro nejnižší energie, asi do 4 MeV, jsou spektra modelovaná až už modelem Dresner nebo ABLA téměř identická. Tato podobnost zároveň roste s rostou-

cím úhlem, jelikož výtěžek modelů intranukleární kaskády je orientován na dopředné úhly. Ze tří spekter modelovaných intranukleárními kaskádami Bertini, ISABEL a INCL4 jsou si dále velmi podobné ty modelované pomocí kaskád Bertini a ISABEL. Tyto kaskády jsou si velmi podobné svým mechanismem a také je v obou zakomponovaný předrovnávací model, který u třetí kaskády INCL4 chybí.

Společným rysem vypařovacího modelu Dresner je rychlý úbytek vysokoenergetických neutronů pro vyšší úhly oproti vypařovacímu modelu ABLA. Zároveň u něj dochází k vysokému výtěžku neutronů o nízkých energiích menších než 2 MeV, který je až dvojnásobný oproti modelu ABLA. Lépe než model ABLA pouze modeluje tvar spektra o středních energiích 4 – 10 MeV pro dopředné úhly 15° a 30°. Poté významně podhodnocuje experimentální spektrum pro vysoké energie od 5,8 MeV pro 60° a už od 3,2 MeV pro vyšší úhly. Modelované spektrum pomocí modelu ABLA nadhodnocuje experimentální pro energie do 14 MeV a 12 MeV pro úhly 15° a 30°, do 10 MeV pro úhly 60° a 90° a do 8 MeV a 6 MeV pro úhly 120° respektive 150°. Pro dopředné úhly vykazuje nejmenší odchylky oproti experimentálnímu spektru spektrum modelované kaskádou INCL4, pro zpětné úhly jsou potom lehce přesnější kaskády Bertini a ISABEL. Intranukleární kaskády ISABEL a zejména INCL4 také oproti ostatním modelům emitují detekovatelné množství neutronů s vyšší energií, než byla v experimentu měřena, alespoň pro úhly přední poloviny.

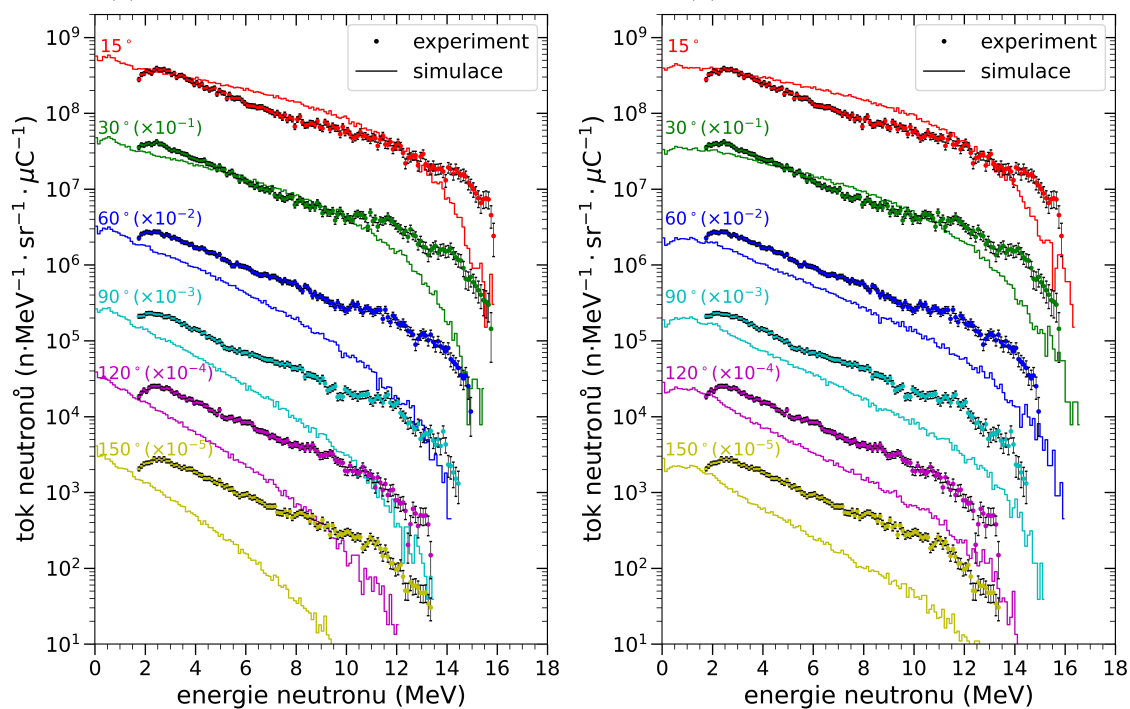
Kromě modelů byla v MCNP6.2 použita také jaderná data a to z knihovny FENDL3 a TENDL-2017. Porovnání vypočtených spekter s těmi experimentálními je na grafech 6.2m a 6.2n. Oproti spektrům vypočtených pomocí modelů nejlépe simulují tvar a mohutnost spektra v nízkých a středních energiích do 8 – 10 MeV pro dopředné úhly 15° až 60°. Pro vyšší úhly je jejich spektrum nejvíce podobné tomu simulovanému s vypařovacím modelem Dresner, a tedy silně podhodnocuje výtěžek neutronů s vyššími energiemi. U spektra vypočteného s pomocí TENDL-2017 dochází k téměř nulové produkci neutronů nad určitou hranicí, čímž se podobá spektru modelovanému pomocí CEM03.03. U obou spekter také dochází k nadhodnocování nízkých energií a podhodnocování energií vysokých, hranice křížení je asi 8 MeV pro dopředné úhly a klesá k 2,5 až 4 MeV pro zpětné úhly. Pro celý energetický rozsah je dosahováno vyšších výtěžků s výpočtem pomocí FENDL3.





(a) Geant4 - Bertiniho kaskáda

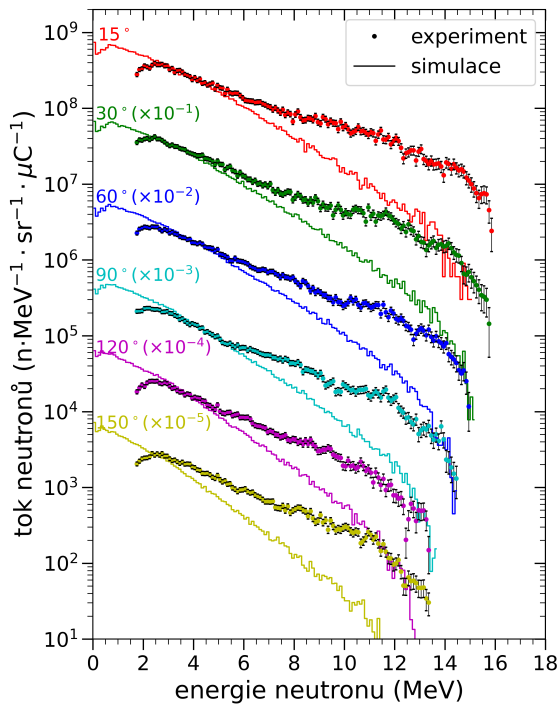
(b) Geant4 - binární kaskáda



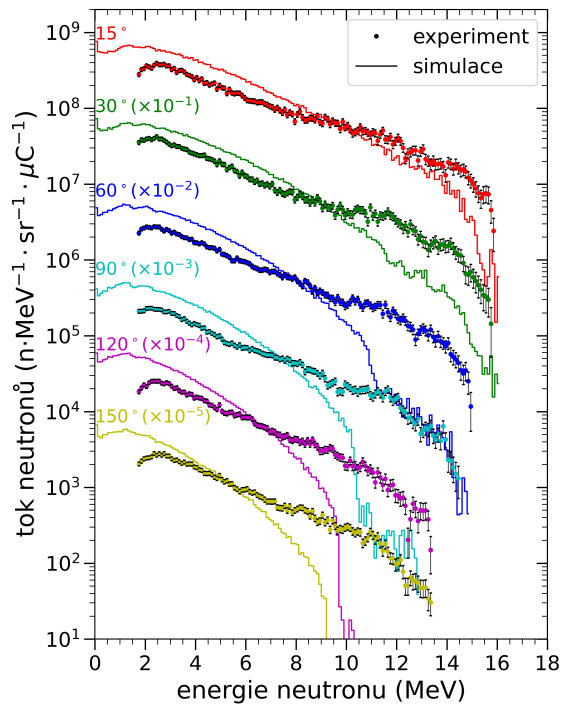
(c) Geant4 - kaskáda INCL++ s výchozím deexcitačním modelem

(d) Geant4 - kaskáda INCL++ s deexcitačním modelem ABLA++

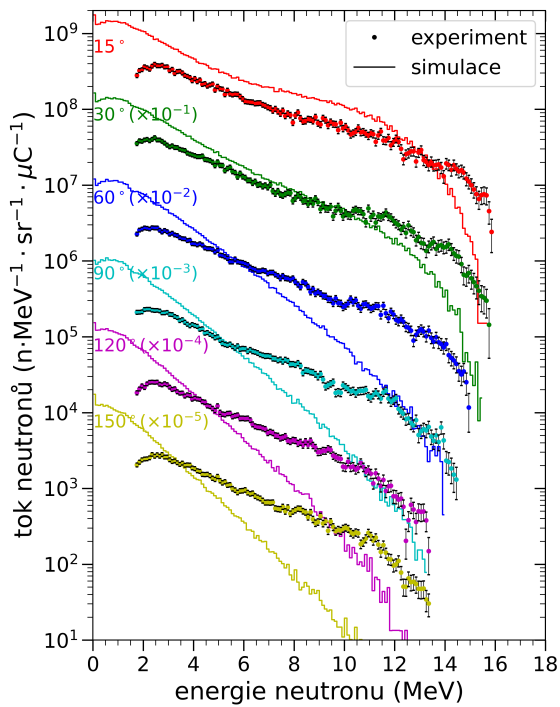
Obrázek 6.2: Porovnání experimentálních hodnot toku neutronů pro 6 rozdílných úhlů včetně jejich nejistot s výpočtem v různých kódech používající různé fyzikální modely nebo knihovny dat.



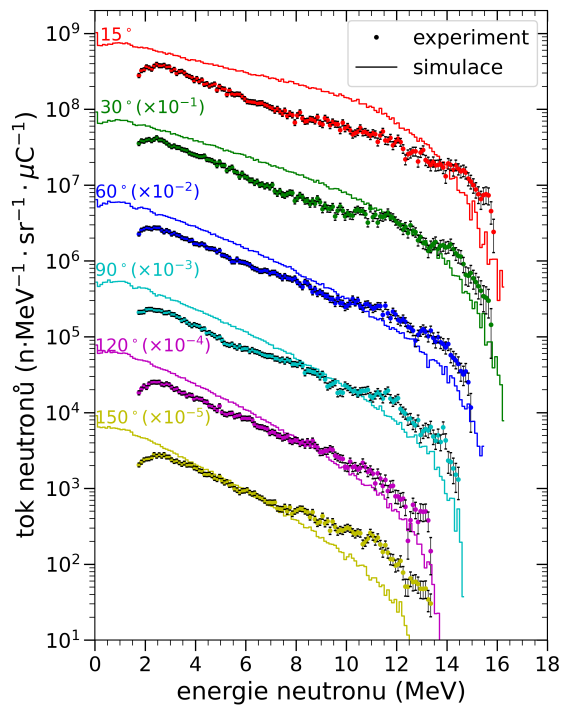
(e) Geant4 - QBBC



(f) MCNP6.2 - CEM03.03

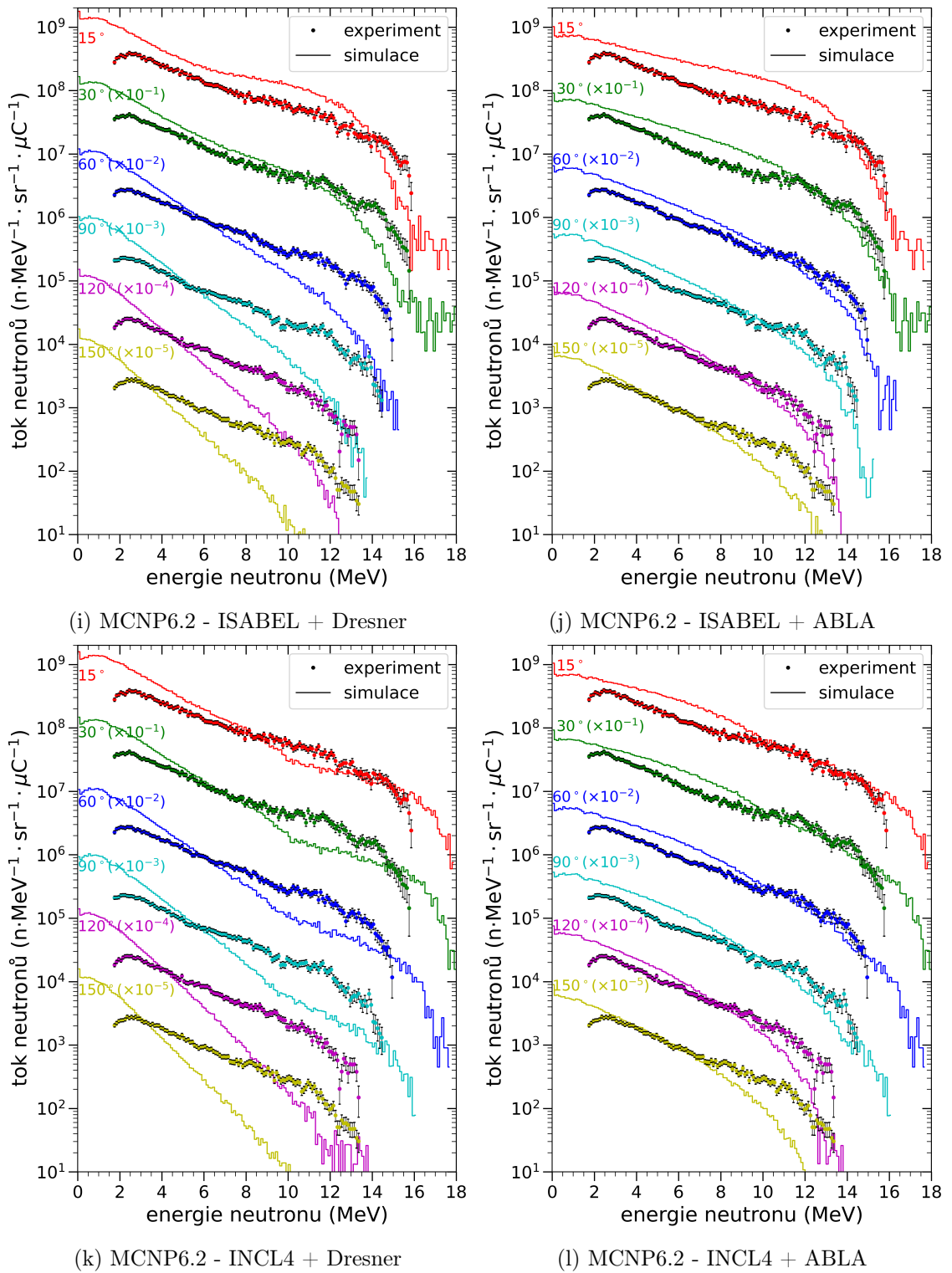


(g) MCNP6.2 - Bertini + Dresner

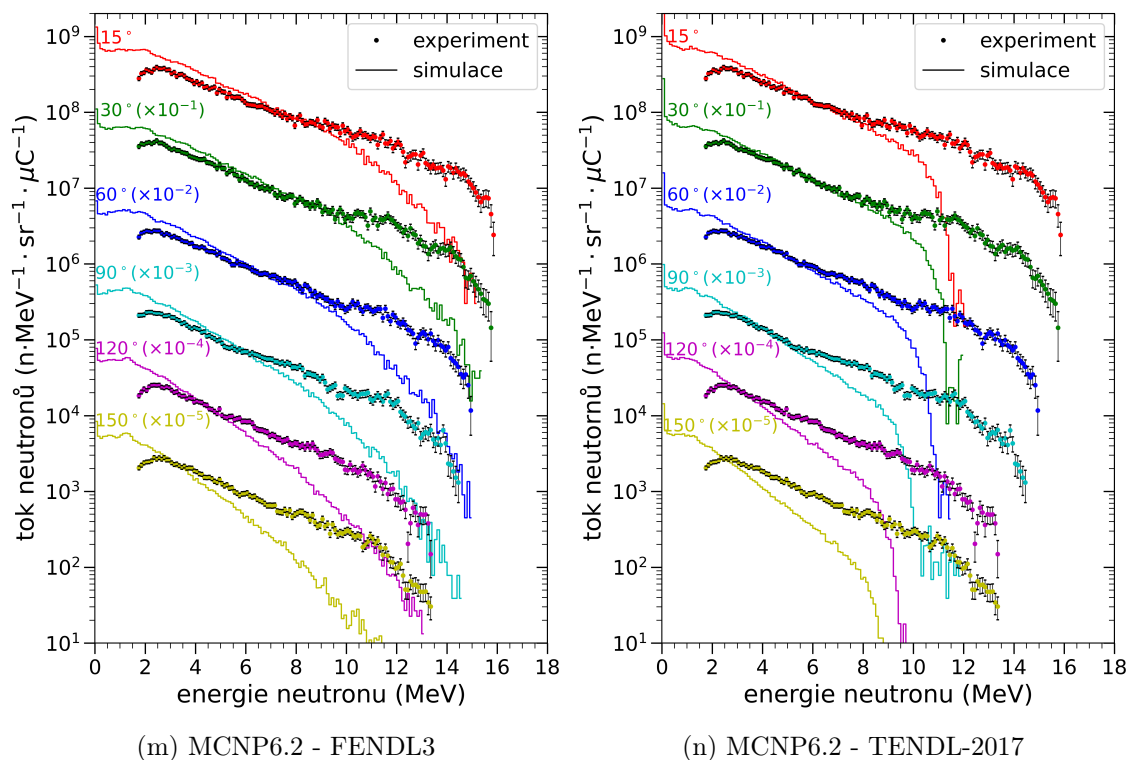


(h) MCNP6.2 - Bertini + ABLA

Obrázek 6.2: Porovnání experimentálních hodnot toku neutronů pro 6 rozdílných úhlů včetně jejich nejistot s výpočtem v různých kódech používající různé fyzikální modely nebo knihovny dat.



Obrázek 6.2: Porovnání experimentálních hodnot toku neutronů pro 6 rozdílných úhlů včetně jejich nejistot s výpočtem v různých kódech používající různé fyzikální modely nebo knihovny dat.



Obrázek 6.2: Porovnání experimentálních hodnot toku neutronů pro 6 rozdílných úhlů včetně jejich nejistot s výpočtem v různých kódech používající různé fyzikální modely nebo knihovny dat.

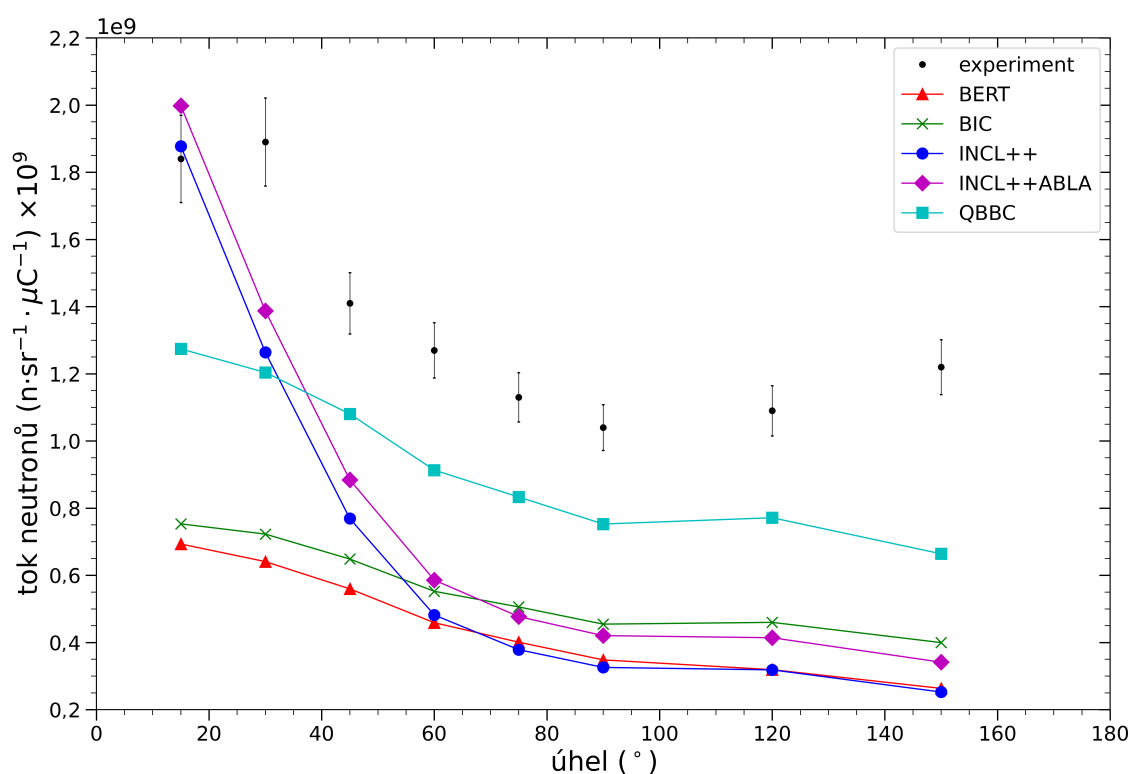
### 6.2.2 Úhlové rozdělení

Kromě spekter byl v experimentu měřen také celkový výtěžek neutronů o energie větší než 2 MeV pro osm různých úhlů v rozmezí  $15^\circ$  až  $150^\circ$ . Data pro toto měření jsou dostupná pro stejné úhly, v kterých probíhalo měření spekter a navíc ještě ve  $45^\circ$  a  $75^\circ$ . Porovnání úhlové distribuce s hodnotami z databáze EXFOR pro Geant4 je zobrazeno na grafu 6.3. Lze vidět, že kromě modelů s intranukleární kaskádou INCL++ jsou výtěžky neutronů pro všechny úhly podhodnocené. Modely s kaskádou INCL++ lehce nadhodnocují výtěžek neutronů v  $15^\circ$ , ale pro další úhly rychle klesají a jsou srovnatelné s modely s Bertiniho (BERT) a binární kaskádou (BIC). V porovnání modelů s Bertiniho a binární kaskádou, tvar úhlového rozdělení neutronů s energií vyšší než 2 MeV lépe modeluje binární kaskáda, u které je úhlové rozdělení méně orientované na dopředné úhly. Porovnání jednotlivých modelů s experimentálními hodnotami ve formě  $C/E-1$  je v tabulce 6.2. Absolutní hodnoty pro experiment jsou v tabulce 6.4.

Na obrázku 6.4 je vidět porovnání úhlové distribuce pro výpočet v MCNP6.2 s fyzikálními modely využívajícími kaskádu Bertini nebo ISABEL a deexcitační model Dresner nebo ABLA. Jak bylo napsáno výše, jsou si výpočty pomocí obou intranukleárních kaskád velmi podobné, což lze vidět i na úhlové distribuci. Pro dopředné úhly je dominantní výtěžek z intranukleární kaskády a ve všech čtyřech modelech je zde získáván podobný výsledek. Pro zpětné úhly je dominantní vliv použitého modelu pro deexcitaci a zde dochází ke shodě pro stejné vypařovací modely. Vypařovací model ABLA poskytuje vyšší výtěžky pro vyšší energie a zpětné úhly, jak již bylo vidět na modelovaných spektrech a tak více odpovídá

Tabulka 6.2: Porovnání experimentálních a vypočtených hodnot ve formě  $C/E - 1$  pro úhlovou distribuci neutronů o energii vyšší než 2 MeV pro výpočty pomocí různých modelů v Geant4.

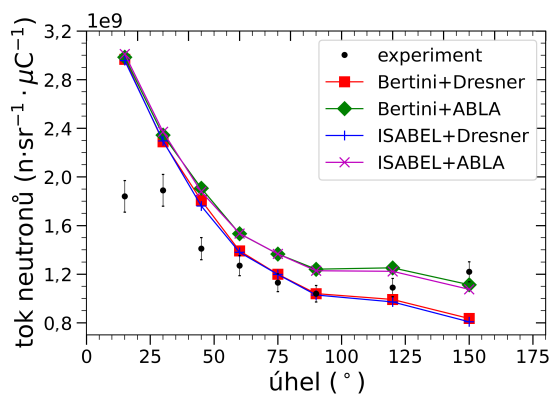
	BERT	BIC	INCL++	INCL++ ABLA	QBBC
15°	-62,3%	-59,1%	2,0%	8,6%	-30,8%
30°	-66,1%	-61,8%	-33,1%	-26,6%	-36,3%
45°	-60,3%	-54,0%	-45,5%	-37,3%	-23,4%
60°	-63,9%	-56,5%	-62,0%	-53,9%	-28,1%
75°	-64,5%	-55,2%	-66,5%	-57,8%	-26,3%
90°	-66,5%	-56,3%	-68,7%	-59,6%	-27,6%
120°	-70,7%	-57,8%	-70,8%	-62,0%	-29,2%
150°	-78,4%	-67,2%	-79,3%	-72,0%	-45,6%



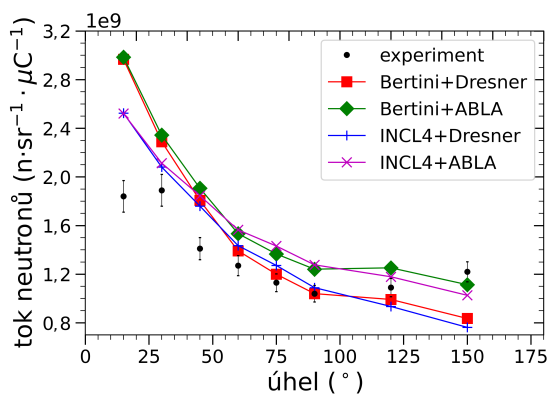
Obrázek 6.3: Porovnání úhlové distribuce toku neutronů o energii vyšší než 2 MeV pro různé modely v Geant4.

experimentu pro zpětné úhly 120° a 150°. Vypařovací model Dresner naopak lépe modeluje tok neutronů o energii vyšší než 2 MeV pro střední úhly od 60° do 90°.

V grafu 6.5 jsou podobně porovnány modely s kaskádou Bertini a INCL4.6. Pro dopředné úhly 15° a 30° se opět více projevuje vliv intranukleární kaskády, kde je blíže experimentálnímu výtěžku ten modelovaný kaskádou INCL4, který je menší, než pro kaskády Bertini a ISABEL a nadhodnocuje tak výtěžek méně. Při úhlu 45° jsou všechny výtěžky v rozmezí 10 %. Dále se projevuje nižší výtěžek vypařovacího modelu Dresner a vyšší výtěžek vypařovacího modelu ABLA.



Obrázek 6.4: Porovnání úhlové distribuce toku neutronů o energii vyšší než 2 MeV pro kaskády Bertini a ISABEL s různými vypařovacími modely v MCNP6.2.

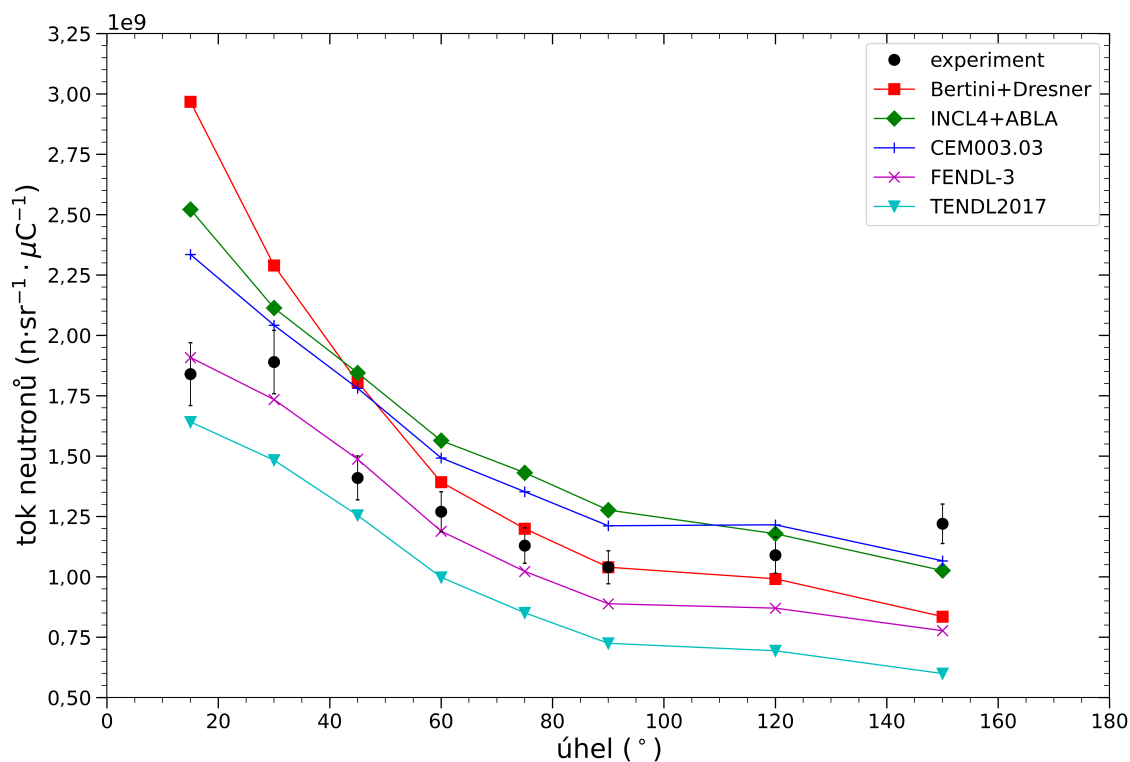


Obrázek 6.5: Porovnání úhlové distribuce toku neutronů o energii vyšší než 2 MeV pro kaskády Bertini a INCL4 s různými vypařovacími modely v MCNP6.2.

V grafu 6.6 jsou potom porovnávány vybrané fyzikální modely a simulace pomocí knihoven dat v kódu MCNP6.2 s experimentálními hodnotami. Hodnoty toku neutronů o energii vyšší než 2 MeV vypočtené pomocí modelu CEM03.03 jsou téměř shodné s hodnotami vypočtenými pomocí modelu s kaskádou INCL4 a vypařovacím modelem ABLA, od kterých se neliší o více než 7,5 % pro všechny úhly. Ve většině případů je navíc tento rozdíl ve směru k experimentálnímu spektru. Úhlová distribuce vypočtená s pomocí knihoven dat FENDL-3 a TENDL-2017 má velmi podobný průběh, při čemž TENDL-2017 je lehce více anizotropní ve prospěch dopředných úhlů. Ve výpočtu s knihovnou FENDL-3 je také dosahováno vyšších výtěžků a ta ze všech modelů nejvíce odpovídá experimentálním hodnotám. Do úhlu 75° se rozdíl pohybuje do 10 %, pro úhel 90° je to přibližně 15 % a pro úhel 120° 20 %. Největšího rozdílu je dosahována pro úhel 150°, kde je výtěžek silně podhodnocen. K podhodnocování toku neutronů pro tento zpětný úhel dochází pro všechny modely i v těch, které jinak tok neutronů nadhodnocují. Zároveň je zvláštní, že tok neutronů pro tento úhel neklesá, ale naopak roste jak je vidět v tabulce 6.4. Porovnání jednotlivých modelů s experimentálními hodnotami ve formě  $C/E - 1$  je v tabulce 6.3, porovnání simulací s pomocí knihoven dat je v 6.4.

Tabulka 6.3: Porovnání experimentálních a vypočtených hodnot ve formě  $C/E - 1$  pro úhlovou distribuci toku neutronů o energii vyšší než 2 MeV pro výpočty pomocí různých fyzikálních modelů v MCNP6.2.

	CEM03.03	Bertini Dresner	Bertini ABLA	ISABEL Dresner	ISABEL ABLA	INCL4 Dresner	INCL4 ABLA
15°	26,9%	61,3%	62,3%	60,7%	63,7%	37,2%	37,0%
30°	8,1%	21,2%	24,0%	21,5%	25,5%	10,1%	11,8%
45°	26,3%	28,2%	35,3%	24,9%	33,2%	24,8%	30,9%
60°	17,5%	9,6%	20,7%	8,6%	20,9%	13,0%	23,2%
75°	19,7%	6,2%	20,9%	6,0%	21,0%	12,6%	26,7%
90°	16,5%	0,0%	19,3%	-1,1%	18,1%	4,7%	22,8%
120°	11,5%	-9,0%	14,9%	-10,8%	12,2%	-14,3%	8,1%
150°	-12,6%	-31,5%	-8,7%	-33,8%	-11,9%	-37,5%	-15,9%



Obrázek 6.6: Porovnání úhlové distribuce toku neutronů o energii vyšší než 2 MeV pro různé modely v MCNP6.2.

Tabulka 6.4: Absolutní hodnoty úhlové distribuce neutronů z databáze EXFOR a porovnání experimentálních a vypočtených hodnot ve formě  $C/E - 1$  pro úhlovou distribuci toku neutronů o energii vyšší než 2 MeV pro výpočty pomocí různých knihoven dat v MCNP6.2.

	experiment ( $n \cdot sr^{-1} \cdot \mu C^{-1}$ )	FENDL-3	TENDL-2017
15°	$1,84 \cdot 10^9$	3,7%	-10,8%
30°	$1,89 \cdot 10^9$	-8,2%	-21,5%
45°	$1,41 \cdot 10^9$	5,5%	-11,0%
60°	$1,27 \cdot 10^9$	-6,4%	-21,4%
75°	$1,13 \cdot 10^9$	-9,5%	-24,7%
90°	$1,04 \cdot 10^9$	-14,6%	-30,3%
120°	$1,09 \cdot 10^9$	-20,1%	-36,3%
150°	$1,22 \cdot 10^9$	-36,3%	-50,9%

### 6.3 Celkový výtěžek neutronů

Pokud dochází v kódu k nadhodnocování nebo podhodnocování spektra, kvůli celkovému vyššímu nebo nižšímu výtěžku neutronů, bylo by lehce možné normovat výsledky simulace koeficientem získaným jako poměr celkového počtu vznikajících neutronů ve skutečném terči ku počtu neutronů vznikajících v terči v simulaci. Pro tento účel je ale třeba znát oba tyto celkové výtěžky neutronů.

Pro výtěžek neutronů při simulaci není těžké tuto hodnotu určit. V Geant4 byl v rámci simulace experimentu na zařízení TIARA přidělen čítač sekundárních neutronů buňce tvořící vodní terč a pro výpočet v MCNP6.2 lze tuto hodnotu určit z výstupního souboru. Hodnoty výtěžku neutronů vztahované na jeden zdrojový proton jsou uvedeny v tabulce 6.5. Výtěžek neutronů v Geant4 se pohybuje okolo  $2 \cdot 10^{-3}$  neutronů na jeden proton, což je asi  $2 - 3 \times$  méně než výtěžek v MCNP6.2. Jedinou výjimkou je vyšší výtěžek v hadronickém modelu fyzikálního seznamu QBBC, který je asi  $3,7 \cdot 10^{-3}$  n/1p, ale i tak je stále nižší než výtěžky v MCNP6.2. Ty se pohybují okolo  $5 \cdot 10^{-3}$  n/1p pro výpočty s vypařovacím modelem ABLA a pomocí modelu CEM03.03. Nejvyšších výtěžků je dosahováno pro výpočet s vypařovacím modelem Dresner, kde velkou část neutronů tvoří velmi vysoký výtěžek pro nízké energie pod 2 MeV. Nejméně neutronů vzniká při výpočtu s použitím knihoven jaderných dat, asi  $4 \cdot 10^{-3}$  n/1p.

Tabulka 6.5: Vypočtené výtěžky neutronů reakcemi protonů v obohacené vodě vztahované na jeden proton v kódech Geant4 a MCNP6.2 s použitím různých fyzikálních modelů.

Geant4				
BERT	BIC	INCL++	INCL++ ABLA	QBBC
$1,932 \cdot 10^{-3}$	$2,019 \cdot 10^{-3}$	$1,981 \cdot 10^{-3}$	$2,034 \cdot 10^{-3}$	$3,612 \cdot 10^{-3}$
MCNP6.2				
CEM03.03	Bertini+Dresner	Bertini+ABLA	ISABEL+Dresner	ISABEL+ABLA
$4,766 \cdot 10^{-3}$	$6,681 \cdot 10^{-3}$	$5,189 \cdot 10^{-3}$	$6,485 \cdot 10^{-3}$	$5,162 \cdot 10^{-3}$
MCNP6.2				
INCL4+Dresner	INCL4+ABLA	FENDL-3	TENDL-2017	
$6,381 \cdot 10^{-3}$	$4,899 \cdot 10^{-3}$	$4,171 \cdot 10^{-3}$	$4,088 \cdot 10^{-3}$	

Mnohem náročnější je ovšem určit celkový počet neutronů vznikajících v terči ve skutečnosti. Neutrony vznikají při produkční reakci vyráběného  $^{18}\text{F}$  a podle některých studií jako například [4] je to dominantní reakce vzniku neutronů, při čemž ostatní reakce mohou být zanedbány. Potom by bylo možné svázat produkci neutronů s produkcí radionuklidu  $^{18}\text{F}$ , protože při vzniku jednoho atomu  $^{18}\text{F}$  vzniká také jeden neutron. Měřením aktivity ozařované terčové vody je možné určit výtěžek reakce a tak i počet vznikajících neutronů. Kromě toho byl v roce 2001 vydán technický dokument Mezinárodní agentury pro atomovou energii [127], ve kterém jsou uvedeny doporučené mikroskopické účinné průřezy a výtěžky reakcí v závislosti na energii pro nejdůležitější reakce sloužící k výrobě medicínských radionuklidů.

Podle [4] byl naměřen výtěžek neutronů  $1,907 \cdot 10^{-3}$  na jeden proton, což přibližně odpovídá výtěžku reakce  $^{18}\text{O}(p,n)^{18}\text{F}$   $1,783 \cdot 10^{-3}$  n/1p podle [127]. Kromě tohoto dokumentu existuje i webová databáze výtěžků a účinných průřezů těchto reakcí [128], která byla aktualizována v roce 2003 s využitím dat z [129] a obsahuje vyšší účinné průřezy i výtěžky. Podle [128] je výtěžek reakce  $2,217 \cdot 10^{-3}$  neutronů na jeden proton o energii 18 MeV. V rámci experimentu [15] zběžně popsáném v 4.5 byla také měřena aktivita vznikajícího  $^{18}\text{F}$ , z čehož byla poté vypočtena reakční rychlost jako  $1,377 \cdot 10^{-3}$  na jeden proton. Tato hodnota je nižší, než výtěžek z [128] a dokonce i z [127]. To může být způsobeno tím, že před terčem musí protony projít přes titanovou a havarovou folii, čímž se jich jednak část absorbuje a jednak ztratí část své energie a na terč dopadají s nižší energií, která má nižší výtěžek. Dalším vlivem je obohacení terčové vody na 98 %. V neposlední řadě mají na nižší výtěžek vliv termodynamické jevy probíhající v terči.



Nejvyšší předpovídaný výtěžek by tak byl  $2,217 \cdot 10^{-3}$  neutronů na jeden proton a nejbližší k této hodnotě by byly výsledky pomocí kódu Geant4. Jak však bylo vidět na předešlých výsledcích, simulace pomocí Geant4 podhodnocuje experimentální výsledky  $2 - 3\times$ . Lze tedy předpokládat, že na vznik neutronů mají vliv i další reakce protonů na  $^{18}\text{O}$ . Toto tvrzení je podporováno také v [130], kde je dále uvedeno, že tyto reakce začínají mít vliv na produkci neutronů od 12 MeV.

Ke stejnému závěru docházejí také v [131], ve kterém je kromě jiného porovnávána vypočtená reakční rychlost různých aktivačních detektorů v kódech MCNP6 [24] a FLUKA [132][133]. Oba kódy podle zde dostupných výsledků produkují spektra s podobným tvarem, přičemž v kódu FLUKA dochází k vyššímu výtěžku neutronů nižších energií. Porovnávány jsou aktivity aktivačních detektorů umístěných nad terčem a je v nich dosahováno rozdílů, které jsou v souladu s výsledky prezentovanými v části 5.3.1. Aktivita  $^{58}\text{Co}$  vznikajícího v niklovém aktivačním detektoru je podhodnocována asi o 17 – 23 %, zatímco aktivita  $^{57}\text{Co}$  je podhodnocována o 82 – 88 %. Ohledně absolutních výtěžků neutronů bylo pro MCNP6 určeno  $4,791 \cdot 10^{-3}$  neutronů na jeden proton, což odpovídá výsledku pro CEM03.03 v 6.5, a pro kód FLUKA  $5,143 \cdot 10^{-3}$  n/1p.

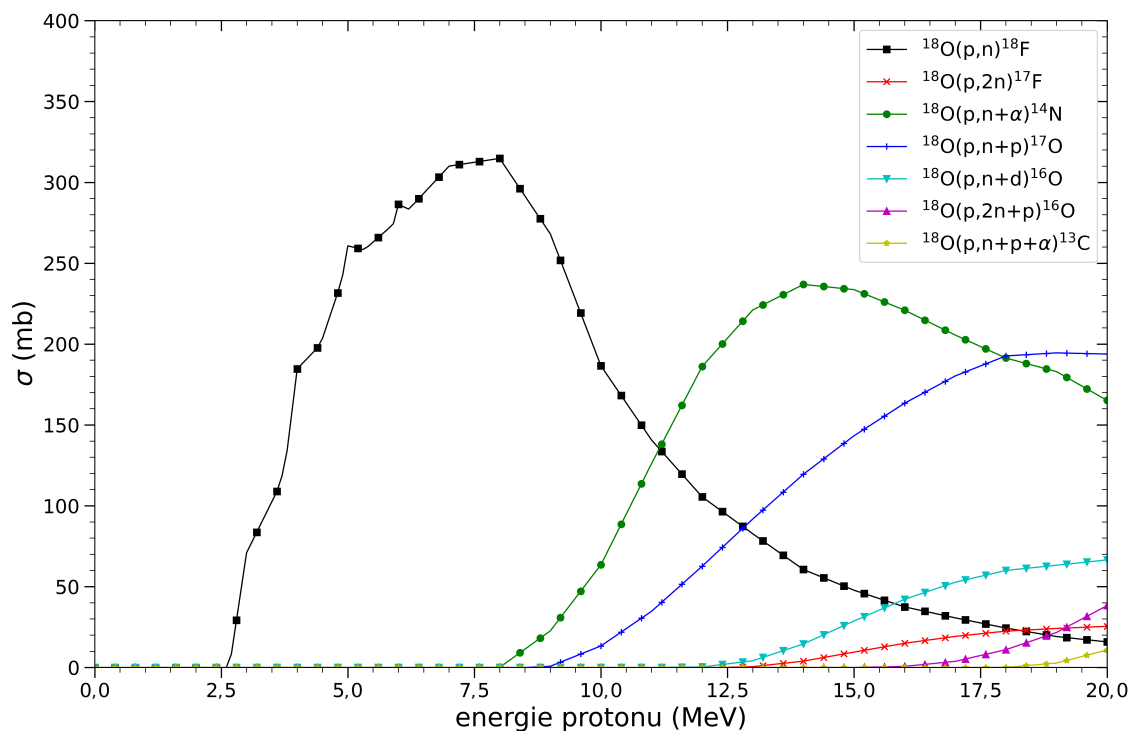
V popisovaném experimentu na zařízení TIARA [17] byl určen absolutní výtěžek neutronů na jeden proton jako  $(2,483 \pm 0,165) \cdot 10^{-3}$  pomocí integrace přes prostorový úhel jednotlivých naměřených úhlových výtěžků. Ty byly ovšem určovány pro neutrony s energií větší než 2 MeV, a tak je toto celkový výtěžek neutronů s energií vyšší než 2 MeV. Pro určení celkového výtěžku neutronů je potom nutno určit procentuální část neutronů, které vznikají s energií vyšší než 2 MeV. Tento poměr se mění jak s výpočetním kódem a použitým fyzikálním modelem tak s úhlem, ve kterém je spektrum detekováno. Pro modely a úhly, pro které probíhala simulace experimentu byl tento poměr vypočten. Průměrné hodnoty pro jednotlivé modely se pohybují od 40 % do 59 %. Průměrně tedy neutrony do 2 MeV tvoří polovinu všech neutronů. Celkový výtěžek neutronů se potom může pohybovat od  $4,200 \cdot 10^{-3}$  n/1p do  $6,231 \cdot 10^{-3}$  n/1p. Průměrná hodnota poté byla vypočtena jako:

$$(5,178 \pm 0,803) \cdot 10^{-3} \text{ n/1p}$$

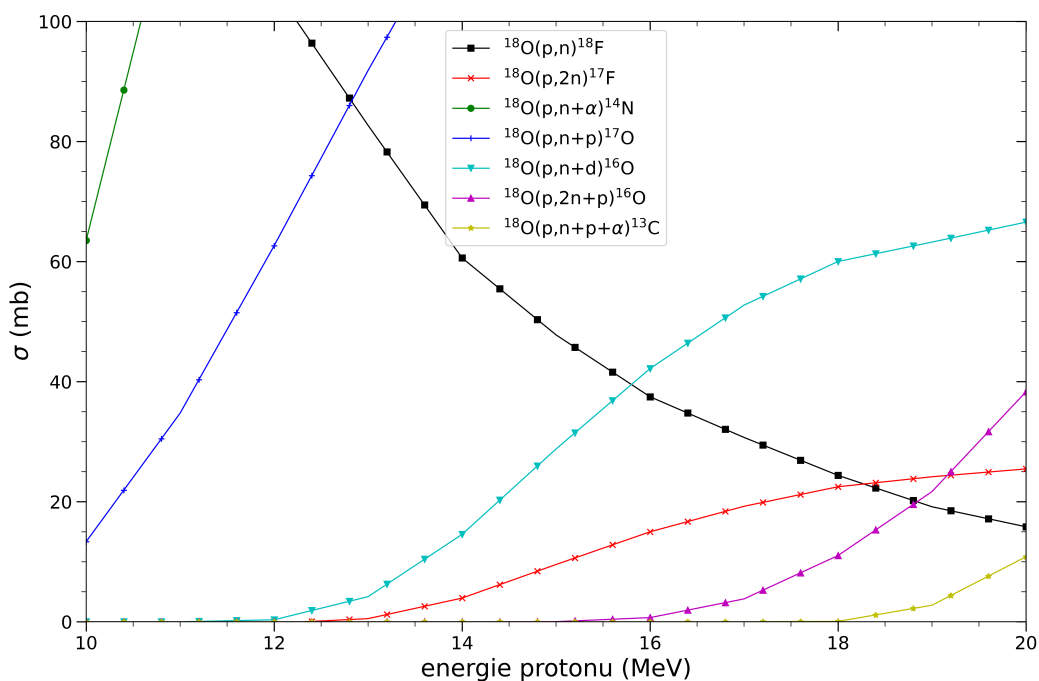
### 6.3.1 Vliv dalších reakcí

Aby mohl být posouzen vliv dalších reakcí, byly porovnány účinné průřezy pro vznik neutronů na terčovém jádru  $^{18}\text{O}$ . Účinné průřezy vybraných reakcí mající vliv na produkci neutronů protony o energii 18 MeV jsou zobrazeny na grafu 6.7. Účinné průřezy pocházejí z knihovny jaderných dat TENDL-2019 [134] vypočtené pomocí kódu TALYS. Lze vidět, že produkční (p,n) reakce pro výroby radiofarmak je dominantní pro nízké energie. Pro vyšší energie se potom ale stávají dominantními reakce (p,n $\alpha$ ) a (p,np), které začnou reakci (p,n) převyšovat v 11,2 MeV respektive 12,9 MeV. Na grafu 6.8 lze potom vidět detail na jaderné reakce s vyšším energetickým prahem a nižším účinným průřezem. Z nich má nejvyšší vliv reakce (n,d) a kvůli dvojnásobnému výtěžku neutronů i reakce (n,2n).

Pro určení vlivu jednotlivých reakcí, které přispívají k tvorbě neutronů v Geant4, byly vypočteny účinné průřezy výše zmíněných reakcí na  $^{18}\text{O}$  pro protony od 0 do 20 MeV pro různé fyzikální modely. Ty byly potom porovnány s účinným průřezem z knihovny TENDL-2019. Na grafu 6.9 lze vidět porovnání mikroskopického účinného průřezu pro produkční reakci  $^{18}\text{O}(p,n)^{18}\text{F}$ . V tomto grafu je navíc ještě doplněn mikroskopický účinný průřez doporučený IAEA z [128], který je kombinací dostupných naměřených dat. V porovnání si lze všimnout, že účinný průřez pro tuto reakci je v Geant4 pro energie nižší

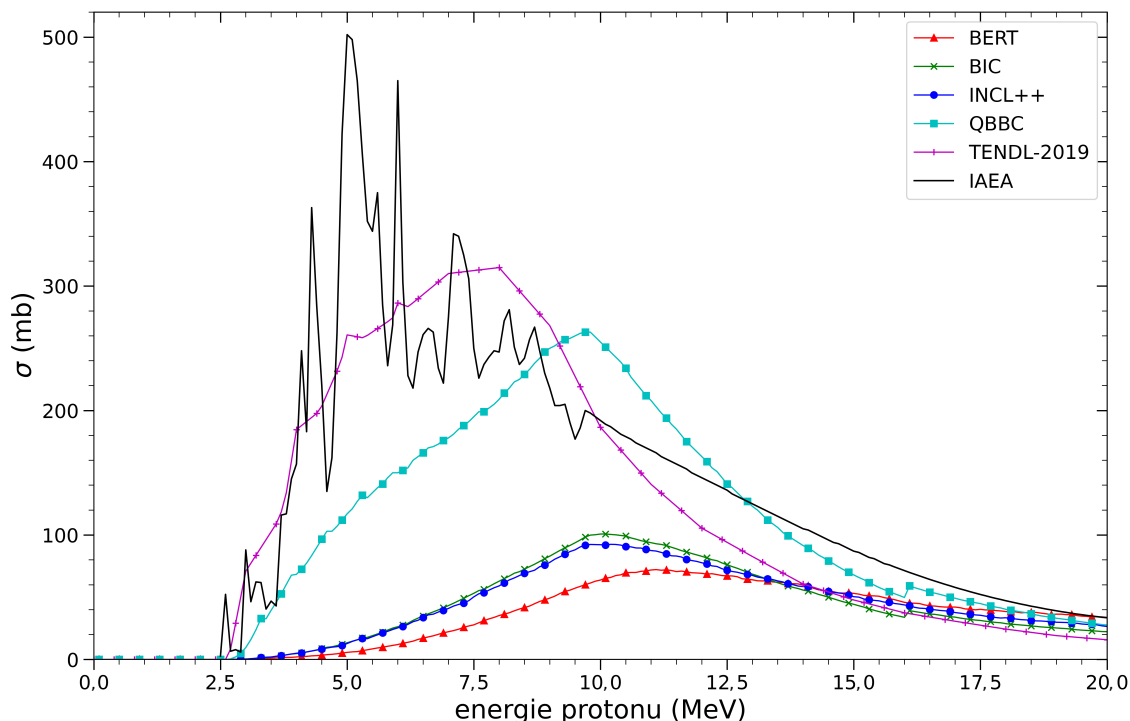


Obrázek 6.7: Porovnání mikroskopických účinných průřezů z knihovny TENDL-2019 pro reakce protonů na  $^{18}\text{O}$ , při nichž vznikají neutrony a mají nižší energetický práh než 18 MeV.



Obrázek 6.8: Porovnání mikroskopických účinných průřezů z knihovny TENDL-2019 pro reakce protonů na  $^{18}\text{O}$ , při nichž vznikají neutrony a mají nižší energetický práh než 18 MeV - detail na vyšší energie a reakce s vyšším energetickým prahem.

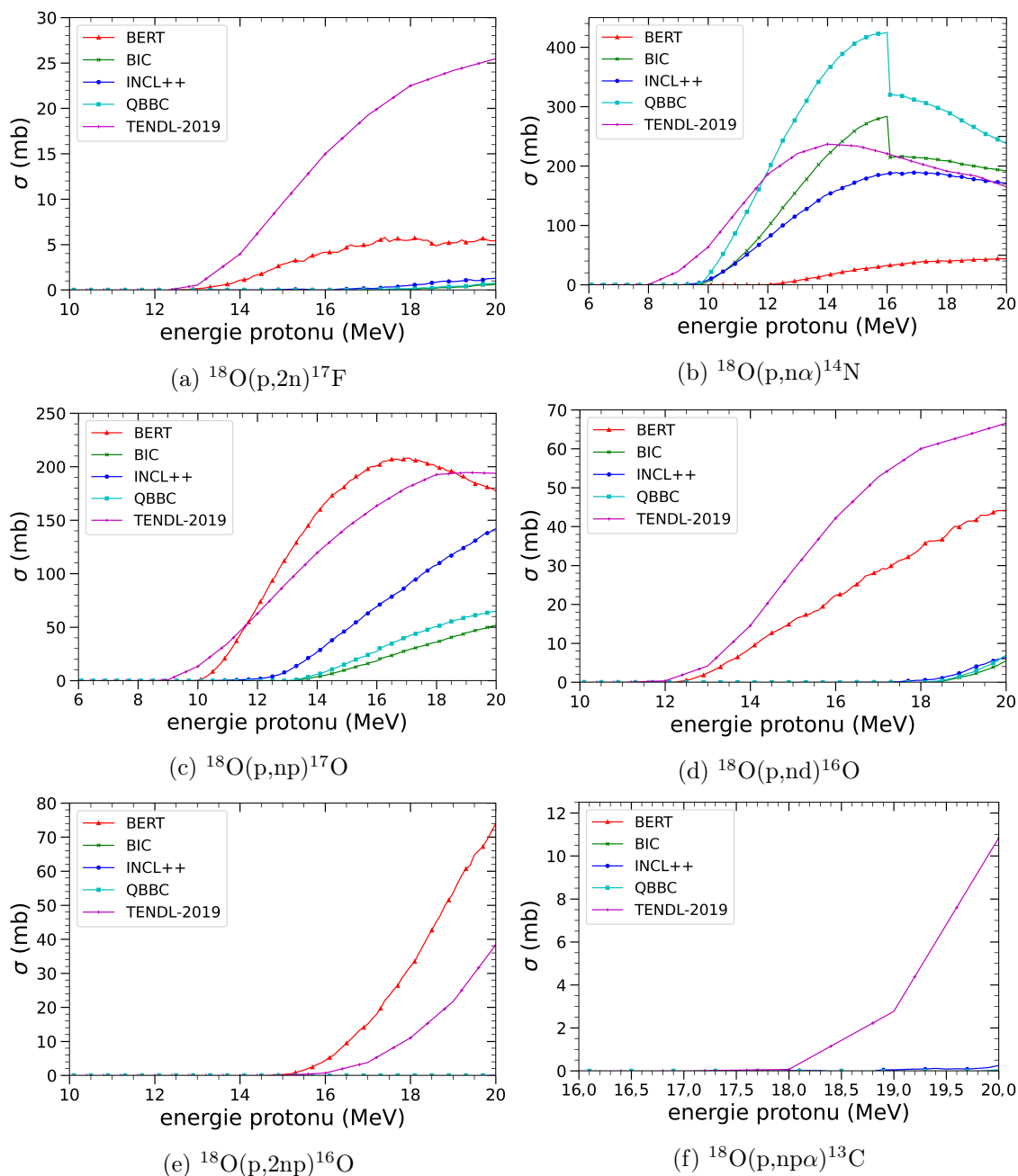
než 14 MeV mnohem nižší a celkově vykazuje jiný průběh. Podobný průběh a hodnoty lze pozorovat pouze u fyzikálního seznamu QBBC, který je však pro energie nižší než 9 MeV také nižší než účinný průřez podle TENDL-2019 a IAEA. Z tohoto porovnání lze vyvodit, že tímto nízkým účinným průřezem vzniká velká část podhodnocení celkového výtěžku neutronů.



Obrázek 6.9: Porovnání mikroskopických účinných průřezů z knihovny TENDL-2019 a mikroskopického účinného průřezu doporučeného IAEA z [128] s výpočtem pomocí Geant4 a různých fyzikálních modelů pro produkční reakci  $^{18}\text{O}(p,n)^{18}\text{F}$

Porovnání dalších reakcí je na grafech 6.9a až 6.9f. Pro většinu z nich jsou vypočtené účinné průřezy v Geant4 nižší než v TENDL-2019, což pravděpodobně dále přispívá k podhodnocování celkového výtěžku neutronů. Lze konstatovat, že všechny reakce, alespoň v menší míře probíhají pro Bertiniho kaskádu, i když opět silně podhodnocuje výtěžek z druhé nejvýznamnější reakce  $(p,n\alpha)$ . Naopak poměrně dobře modeluje reakci  $(p,np)$ , která je zřejmě třetí nejdůležitější a dokonce nadhodnocuje výtěžek z reakce  $(p,2np)$ . Binární kaskáda oproti Bertiniho naopak poměrně věrně modeluje účinný průřez pro reakci  $(p,n\alpha)$ , ale silně podhodnocuje reakci  $(p,np)$ . U účinného průřezu pro reakci  $(p,n\alpha)$  si lze navíc všimnout nespojitosti mezi energií 15 a 16 MeV, kde se nachází hranice pro ukončení intranukleární kaskády a přechod k předrovnovážnému modelu. Účinný průřez modelovaný kaskádou INCL++ se potom pro obě tyto reakce nachází mezi tím modelovaným Bertiniho a binární kaskádou.

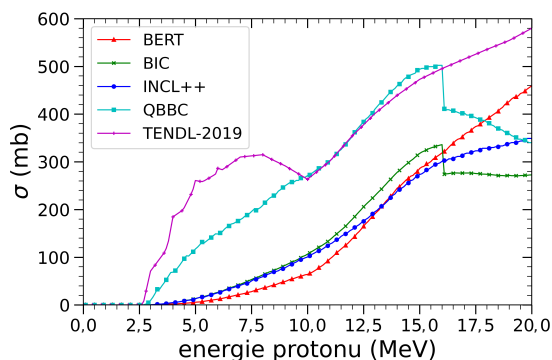
Pro porovnání celkového výtěžku neutronů byl vypočten celkový účinný průřez pro tvorbu neutronů určený jako součet účinných průřezů jednotlivých reakcí se zahrnutím násobného výtěžku některých z nich. Porovnání pro jednotlivé modely a knihovnu TENDL-2019 je na 6.10. Lze vidět, že pro nejvyšší energie je účinný průřez pro tvorbu neutronů u binární kaskády konstantní, zatímco u ostatních modelů roste, u Bertiniho kaskády dokonce poměrně rapidně. To má nespíš za následek menší výtěžek neutronů s nejvyššími ener-



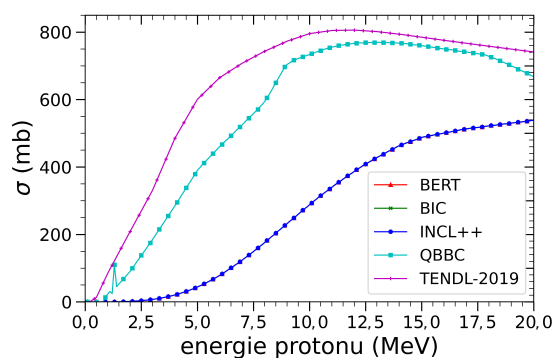
Obrázek 6.9: Porovnání mikroskopických účinných průřezů z knihovny TENDL-2019 s výpočtem pomocí Geant4 a různých fyzikálních modelů pro různé reakce tvorby neutronů reakcí protonu na  $^{18}\text{O}$ .

giemi pro binární kaskádu. Jinak mají mikroskopické účinné průřezy s modely všech tří kaskád podobný průběh a jejich vzájemná velikost odpovídá celkovému výtěžku neutronů v tabulce 6.5.

Na 6.11 lze poté vidět porovnání celkových inelastických účinných průřezů na  $^{18}\text{O}$ , kde lze pozorovat stejný průběh a velikost pro všechny tři modely. Tento účinný průřez pouze určuje střední volnou dráhu v simulaci a pravděpodobnost zahájení inelastické reakce a je pro všechny modely shodný. Fyzikální modely poté určují poměry jednotlivých reakcí a tvorbu sekundárních částic.



Obrázek 6.10: Porovnání účinného průřezu pro tvorbu neutronů pro různé modely v Geant4 pro reakci protonů na  $^{18}\text{O}$  s účinným průřezem z knihovny TENDL-2019.



Obrázek 6.11: Porovnání inelastického účinného průřezu pro různé modely v Geant4 pro reakci protonů na  $^{18}\text{O}$  s inelastickým účinným průřezem z knihovny TENDL-2019.

Tabulka 6.6: Absolutní výtěžek neutronů z jednotlivých reakcí a jeho podíl na celkovém počtu neutronů v různých fyzikálních modelech Geant4 při simulaci protonů o energii 18 MeV dopadajících na vodu obohacenou o  $^{18}\text{O}$  na 100 %.

Reakce	BERT		BIC	
	výtěžek (n/1p)	podíl (%)	výtěžek (n/1p)	podíl (%)
$^{18}\text{O}(p,n)^{18}\text{F}$	$0,563 \cdot 10^{-3}$	27,7	$0,644 \cdot 10^{-3}$	30,4
$^{18}\text{O}(p,2n)^{17}\text{F}$	$0,016 \cdot 10^{-3}$	1,6	0	0,0
$^{18}\text{O}(p,n\alpha)^{14}\text{N}$	$0,242 \cdot 10^{-3}$	11,9	$1,398 \cdot 10^{-3}$	66,0
$^{18}\text{O}(p,np)^{17}\text{O}$	$1,018 \cdot 10^{-3}$	50,1	$0,075 \cdot 10^{-3}$	3,5
$^{18}\text{O}(p,nd)^{16}\text{O}$	$0,098 \cdot 10^{-3}$	4,8	0	0,0
$^{18}\text{O}(p,2np)^{16}\text{O}$	$0,040 \cdot 10^{-3}$	3,9	0	0,0
$^{18}\text{O}(p,np\alpha)^{13}\text{C}$	0	0,0	0	0,0
Reakce	INCL++		QBBC	
	výtěžek (n/1p)	podíl (%)	výtěžek (n/1p)	podíl (%)
$^{18}\text{O}(p,n)^{18}\text{F}$	$0,677 \cdot 10^{-3}$	32,6	$1,493 \cdot 10^{-3}$	39,9
$^{18}\text{O}(p,2n)^{17}\text{F}$	$0,001 \cdot 10^{-3}$	0,1	0	0,0
$^{18}\text{O}(p,n\alpha)^{14}\text{N}$	$1,130 \cdot 10^{-3}$	54,4	$2,129 \cdot 10^{-3}$	56,8
$^{18}\text{O}(p,np)^{17}\text{O}$	$0,270 \cdot 10^{-3}$	13,0	$0,1240 \cdot 10^{-3}$	3,3
$^{18}\text{O}(p,nd)^{16}\text{O}$	0	0,0	0	0,0
$^{18}\text{O}(p,2np)^{16}\text{O}$	0	0,0	0	0,0
$^{18}\text{O}(p,np\alpha)^{13}\text{C}$	0	0,0	0	0,0

Pro určení poměru jednotlivých reakcí na tvorbu neutronů byla vytvořena simulace s jednoduchým terčem z obohacené vody na 100 % ve tvaru válce podobných rozměrů jako vnitřek niobové zkumavky z terče cyklotronu. Tento terč byl ozařován protony o energii 18 MeV a v terči byly detekovány jednotlivé sekundární částice a odražená jádra. Z nich byl potom vypočten počet neutronů vznikajících v jednotlivých reakcích a procentuální poměr této reakce na tvorbu všech neutronů. Výsledky jsou shrnuty v tabulce 6.6.

Ve výsledcích lze vidět, že z reakce pro produkci  $^{18}\text{F}$  vzniká pouze 28 % až 40 % všech neutronů. Zároveň v modelech s Bertiniho a binární kaskádou a kaskádou INCL++ vzniká asi  $3,9\times$ ,  $3,3\times$  respektive  $3,2\times$  méně  $^{18}\text{F}$  než je jeho tabulovaný výtěžek v [128]. Oproti

[128] vzniká v modelu s fyzikálním seznamem QBBC asi  $1,5 \times$  méně  $^{18}\text{F}$ , avšak zajímavým pozorováním je, že tento výtěžek je v souladu s výsledkem z [15].

Jak bylo patrné již z porovnání účinných reakcí, dominantní reakcí pro tvorbu protonů v Bertiniho kaskádě je reakce  $(n,np)$ , u ostatních modelů je potom dominantní reakce  $(n,n\alpha)$ . Zbylá produkce neutronů je u Bertiniho kaskády rozdělena mezi několik reakcí, u ostatních modelů jsou zbylé neutrony produkovány reakcí  $(n,np)$ .

Všechny tyto nesrovnalosti v jednotlivých modelech dále více ukazují na nedokonalost popisu těchto modelů pro nízkoenergetické reakce a jejich nutné vylepšení pro budoucí použití.

### 6.3.2 Vznik neutronů ve foliích

K jaderným reakcím urychlených protonů, při kterých mohou vzniknout neutrony, dochází v oblasti terče nejen v ozařované vodě. Kromě ní dochází k jaderným reakcím také na hliníkovém kolimátoru a ve dvou oddělovacích foliích z titanu a havaru. Pro kvantifikování tohoto vlivu byla provedena simulace v Geant4. Při ní byl detekován počet sekundárních neutronů vznikajících v titanové folii o tloušťce  $12,5 \mu\text{m}$  a následně v havarové folii o tloušťce  $35 \mu\text{m}$ . Složení havarové folie bylo převzato z [135]. Výsledky počtu vznikajících neutronů vztahované na jeden proton pro různé fyzikální modely jsou uvedeny v tabulce 6.7 včetně procentuálního podílu k neutronům vznikajících následně ve vodním terči z obohacené vody.

Vliv neutronů vznikajících ve folii se liší podle použitého modelu a dosahuje skoro až celkových 20 % pro Bertiniho kaskádu. Pro model s fyzikálním seznamem QBBC je tento poměr nižší pod 10 %, což je hlavně způsobeno vyšším výtěžkem neutronů ve vodním terči. Také je zde vidět, že i pro jiné účinné průřezy, které QBBC používá, je dosahováno podobných výtěžků z obou folií jako v ostatních modelech. Je tedy možné se domnívat, že tento výtěžek je konstantní a jeho vysoký vliv na ostatní modely je více způsoben podhodnocením vzniku neutronů v obohacené vodě. Pravděpodobný vliv tohoto jevu je tedy asi 5 – 10 % a je tedy nutné s ním při detailních simulacích počítat. Při současných rozdílech oproti experimentu je však zanedbatelný a je třeba nejdříve zdokonalit popis tvorby neutronů ve vodním terči.

Tabulka 6.7: Absolutní výtěžek neutronů na jeden proton ve foliích terče XXL cyklotronu IBA Cyclone 18/9 pro různé fyzikální modely Geant4 a jejich podíl k produkci neutronů ve vodním terči.

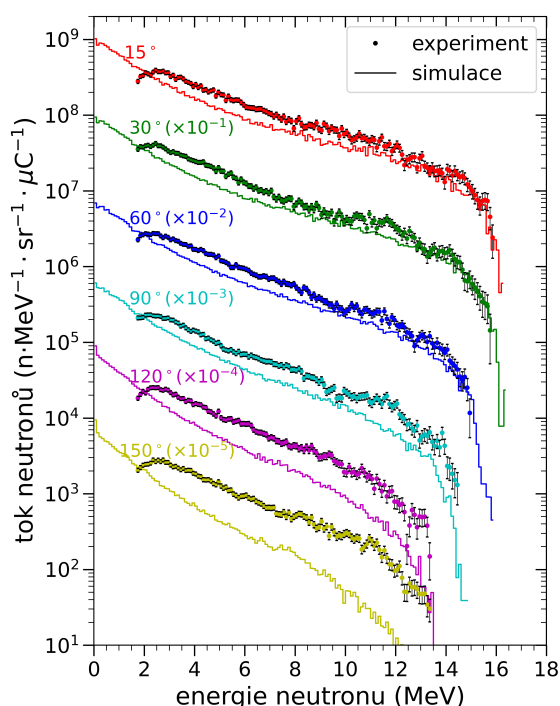
model	výtěžek (n/1p)		podíl (%)		
	titan	havar	titan	havar	celkem
BERT	$4,5 \cdot 10^{-5}$	$2,86 \cdot 10^{-4}$	2,6	16,5	19,1
BIC	$5,1 \cdot 10^{-5}$	$2,52 \cdot 10^{-4}$	2,7	13,6	16,3
INCL++	$4,2 \cdot 10^{-5}$	$2,31 \cdot 10^{-4}$	2,3	12,7	15,1
QBBC	$5,3 \cdot 10^{-5}$	$2,52 \cdot 10^{-4}$	1,6	7,5	9,0

## 6.4 Vylepšení výpočtu

S využitím všech shrnutých poznatků byly provedeny dvě další simulace usilující o věrohodnější popis spektra neutronů a odpovídajících reakčních rychlostí měřených v okolí terče cyklotronu PET Cyclone 18/9.

### 6.4.1 Simulace

Pro tento účel byl vyvinut fixní zdroj neutronů sestavený z dat získaných z databáze EXFOR [17]. Zdroj byl vytvořen pomocí *G4GeneralParticleSource* ve výpočetním programu Geant4. Jelikož v něm nelze použít zároveň úhlové a energetické rozdělení, byl vytvořen jako několik samostatných zdrojů vyzařujících neutrony do daného úhlového rozmezí s danou intenzitou odpovídající hodnotám z databáze EXFOR. Zároveň je v každém úhlovém binu simulováno energetické spektrum, které bylo měřeno v odpovídajícím úhlu. Tento zdroj byl následně zakomponován do modelu experimentu ve výpočetním kódu Geant4 popsáném v 5.2. Zdroj byl vytvořen jako objemový ve tvaru válce o poloměru 0,5 mm a délce 2 mm umístěný na okraj terčové vody 1,25 mm pod osou niobové zkumavky. Byla provedena simulace s  $10^8$  primárními částicemi a pro detekci byly použity stejné čítače jako byly popsány v 5.2. Pro normování výsledků na 1 proton bylo nutné určit vhodnou normovací konstantu. Spektrum z databáze EXFOR je popsané od 1,7 MeV výše, proto byl nejdříve určen poměr integrálu těchto neutronů k výtěžku neutronů nad 2 MeV, který byl určen průměrně jako 1,071. Výsledky poté byly normovány tak, aby na jeden proton připadalo  $2,659 \cdot 10^{-3}$  neutronů, což je součin vypočteného poměru a výtěžku neutronů nad 2 MeV získaného z [17].



Obrázek 6.12: Porovnání experimentálních hodnot toku neutronů pro 6 rozdílných úhlů včetně jejich nejistot s výpočtem v Geant4 s použitím Bertiniho kaskády simulující protony o energii 20 MeV.

Důkladnou analýzou bylo zjištěno, že tvarem spektra velmi dobře hodnotám z databáze EXFOR odpovídá spektrum simulované v kódu Geant4 pomocí Bertiniho kaskády. Toto spektrum je pouze podhodnocené nízkým výtěžkem neutronů a nejvyšší dosahované energie jsou asi o 2 MeV nižší. Proto byl proveden experimentální výpočet v Geant4 s Bertiniho kaskádou a protony o energii 20 MeV místo 18 MeV. Bylo prokázáno, že modelované spektrum tvarem opravdu odpovídá spektru z databáze EXFOR, alespoň pro úhly do 90°, jak lze vidět na 6.12. Proto byla provedena simulace s modelem terče popsaná výše v Geant4 s Bertiniho kaskádou simulující neutrony o energie 20 MeV. Jelikož je výtěžek simulace určený jako  $2,940 \cdot 10^{-3}$  n/1p stále podhodnocený, byly získané výsledky normované na jeden proton dále normovány pomocí konstanty 1,761, která odpovídá poměru výtěžku neutronů vypočteném v 6.3 a výtěžku neutronů této simulace.

## 6.4.2 Výsledky

Porovnání vypočtených reakčních rychlostí ve formě  $C/E - 1$  s experimentálními pro výpočet s fixním zdrojem neutronů pro různé polohy aktivačních detektorů je v tabulkách 6.8 a 6.10. Pro výpočet s Bertiniho kaskádou s protony o energii 20 MeV jsou tyto porovnání v tabulkách 6.9 a 6.10.

Oproti výsledkům v 5.3 je dosahováno mnohem nižších rozdílů, které se až na dvě hodnoty pohybují do 30 %. Pro model s fixním zdrojem neutronů lze pozorovat podhodnocování reakčních rychlostí pro energie s nízkým energetickým prahem, což je způsobeno tím, že modelované spektrum je simulováno až od energie 1,7 MeV. Pro oba výpočty je nejlepších výsledků dosahováno pro střední energie, kde se většina rozdílů pohybuje do 10 %. Pro oba výpočty vzrůstá také rozdíl směrem k dopředným úhlům a tak lze usuzovat, že je výtěžek ve skutečnosti více orientován dopředným směrem. Jak lze vidět na 6.13 je v modelu s fixním zdrojem nadhodnocováno spektrum pro nejvyšší energie, což se projevuje i poměrně velkými rozdíly v reakčních rychlostech pro reakci  ${}^{\text{nat}}\text{Ni}(n,x){}^{57}\text{Co}$ .

Tabulka 6.8: Porovnání vypočtených a experimentálně určených reakčních rychlostí ve středových páscích na pozici A3-G3 velkoplošného niklového detektoru ve formě  $C/E - 1$  pro výpočet v Geant4 s fixním zdrojem neutronů z dat z databáze EXFOR.

Zdroj neutronů	A3	B3	C3	D3	E3	F3	G3
${}^{\text{nat}}\text{Ni}(n,x){}^{58}\text{Co}$	-8,3%	-12,1%	-16,8%	-10,3%	-16,2%	-16,5%	-24,3%
${}^{\text{nat}}\text{Ti}(n,x){}^{47}\text{Sc}$	5,3%	-3,6%	-6,7%	-5,2%	-9,7%	-13,8%	-21,3%
${}^{\text{nat}}\text{Fe}(n,x){}^{54}\text{Mn}$	0,5%	-6,7%	-10,8%	-5,7%	-13,0%	-17,5%	-21,7%
${}^{\text{nat}}\text{Ti}(n,x){}^{46}\text{Sc}$	9,1%	-1,5%	-3,3%	2,5%	-3,0%	-7,4%	-15,0%
${}^{\text{nat}}\text{Ni}(n,x){}^{60}\text{Co}$	-4,9%	-13,6%	-16,3%	-11,6%	-16,5%	-28,0%	-22,1%
${}^{\text{nat}}\text{Fe}(n,x){}^{51}\text{Cr}$	3,6%	-5,5%	-6,6%	2,5%	-6,8%	-6,8%	-11,4%
${}^{\text{nat}}\text{Fe}(n,x){}^{56}\text{Mn}$	5,4%	-6,4%	-6,6%	1,0%	-0,6%	-5,7%	-5,1%
${}^{\text{nat}}\text{Ti}(n,x){}^{48}\text{Sc}$	6,2%	-7,0%	-5,7%	-0,6%	-6,0%	-5,9%	-11,4%
${}^{51}\text{V}(n,\alpha){}^{48}\text{Sc}$	13,2%	-1,3%	3,3%	8,1%	0,0%	0,3%	-4,3%
${}^{\text{nat}}\text{Ni}(n,x){}^{57}\text{Co}$	42,5%	2,5%	7,1%	19,6%	15,2%	26,2%	28,0%



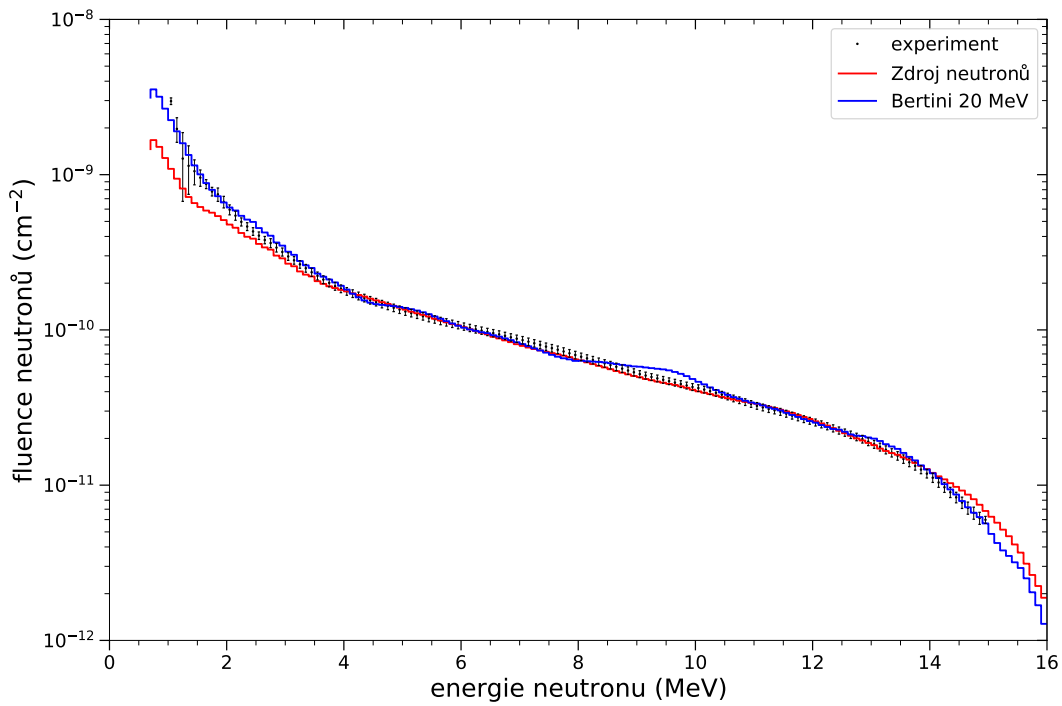
Tabulka 6.9: Porovnání vypočtených a experimentálně určených reakčních rychlostí ve středových páscích na pozici A3-G3 velkoplošného niklového detektoru ve formě C/E-1 pro výpočet v Geant4 s Bertiniho kaskádou simulující protony o energii 20 MeV

Bertini 20 MeV	A3	B3	C3	D3	E3	F3	G3
${}^{\text{nat}}\text{Ni}(n,x)^{58}\text{Co}$	-6,5%	-5,2%	-9,3%	-10,7%	-15,2%	-12,1%	-20,4%
${}^{\text{nat}}\text{Ti}(n,x)^{47}\text{Sc}$	9,2%	6,5%	2,7%	-4,5%	-7,1%	-8,2%	-16,0%
${}^{\text{nat}}\text{Fe}(n,x)^{54}\text{Mn}$	1,0%	-0,4%	-3,7%	-7,2%	-12,8%	-14,1%	-18,5%
${}^{\text{nat}}\text{Ti}(n,x)^{46}\text{Sc}$	6,5%	5,4%	4,4%	0,6%	-1,8%	-4,3%	-12,6%
${}^{\text{nat}}\text{Ni}(n,x)^{60}\text{Co}$	-7,9%	-6,1%	-9,7%	-13,4%	-14,5%	-25,5%	-19,3%
${}^{\text{nat}}\text{Fe}(n,x)^{51}\text{Cr}$	-0,1%	3,0%	0,4%	0,1%	-4,6%	-3,9%	-8,4%
${}^{\text{nat}}\text{Fe}(n,x)^{56}\text{Mn}$	1,8%	2,2%	0,7%	-1,0%	2,2%	-2,4%	-1,6%
${}^{\text{nat}}\text{Ti}(n,x)^{48}\text{Sc}$	1,4%	2,5%	0,5%	-3,6%	-3,7%	-3,4%	-7,8%
${}^{51}\text{V}(n,\alpha)^{48}\text{Sc}$	5,6%	10,4%	7,1%	2,5%	1,6%	1,0%	-0,1%
${}^{\text{nat}}\text{Ni}(n,x)^{57}\text{Co}$	24,6%	14,2%	4,1%	7,0%	15,2%	24,7%	35,8%

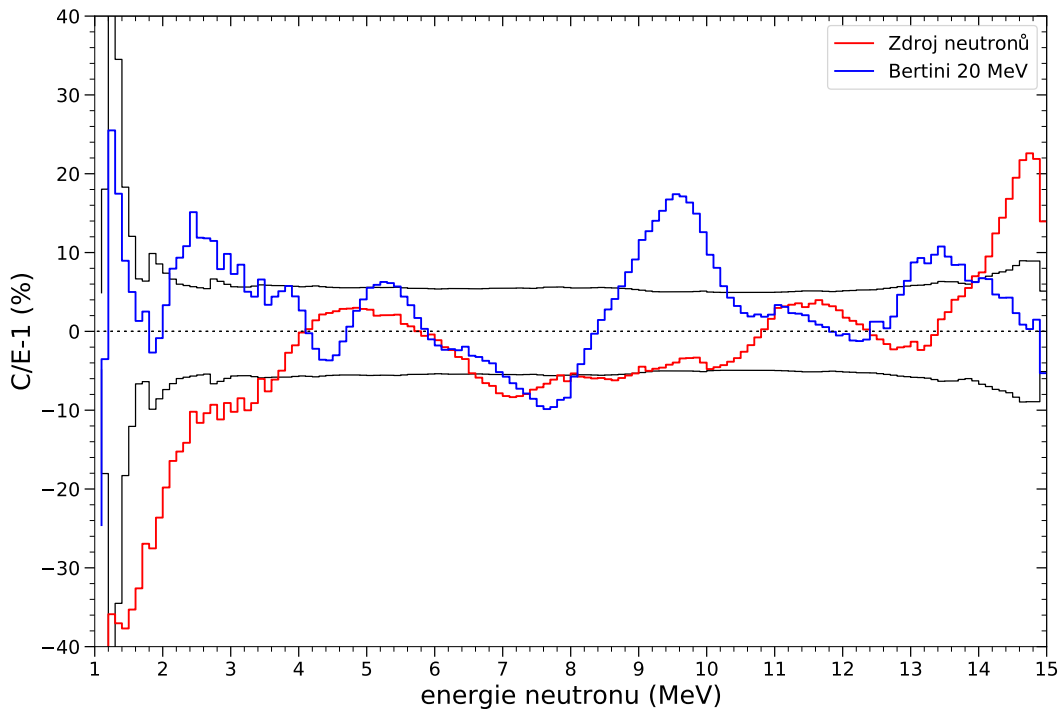
Tabulka 6.10: Porovnání vypočtených a experimentálně určených reakčních rychlostí pro sady aktivačních detektorů umístěných u vstupu chladící vody ( $9,5^\circ$ ) a v 1 m v přímém směru ( $0,0^\circ$ ) ve formě C/E-1 pro výpočty pomocí Geant4 s fixním zdrojem neutronů a s Bertiniho kaskádou simulující neutrony o energii 20 MeV.

	Zdroj neutronů		Bertini 20 MeV	
	$9,5^\circ$	$0,0^\circ$	$9,5^\circ$	$0,0^\circ$
${}^{\text{nat}}\text{Ni}(n,x)^{58}\text{Co}$	-20,8%	-29,2%	-15,3%	-24,5%
${}^{\text{nat}}\text{Ti}(n,x)^{47}\text{Sc}$	-18,0%		-11,0%	
${}^{\text{nat}}\text{Fe}(n,x)^{54}\text{Mn}$	-24,9%	-29,0%	-20,7%	-25,1%
${}^{\text{nat}}\text{Ti}(n,x)^{46}\text{Sc}$	-20,4%		-17,5%	
${}^{\text{nat}}\text{Ni}(n,x)^{60}\text{Co}$	-18,8%	-25,1%	-15,8%	-21,9%
${}^{\text{nat}}\text{Fe}(n,x)^{51}\text{Cr}$	-1,9%		1,7%	
${}^{\text{nat}}\text{Cu}(n,x)^{60}\text{Co}$	-21,5%	-20,1%	-18,6%	-16,8%
${}^{\text{nat}}\text{Fe}(n,x)^{56}\text{Mn}$	-17,2%		-14,0%	
${}^{\text{nat}}\text{Ti}(n,x)^{48}\text{Sc}$	-19,3%		-16,3%	
${}^{\text{nat}}\text{Ni}(n,x)^{57}\text{Co}$	10,1%	-3,8%	14,4%	-6,9%

Kromě aktivačních rychlostí bylo porovnáno také spektrum modelované v 1 m přímém směru od začátku terče se spektrem měřeným stilbenovým scintilátorem. Toto porovnání je v grafu 6.13 a v grafu 6.14 je potom zobrazen rozdíl měřeného a simulovaného spektra v závislosti na energii neutronu. Spektrum vypočtené s fixním zdrojem neutronů podhodnocuje experimentální pro nízké energie do 4 MeV, jelikož je popsáno až od energie 1,7 MeV a také s nižšími výtěžky pro nižší energie. Následně velmi dobře modeluje experimentální spektrum s rozdíly menšími nebo pouze lehce vyššími, než jsou nejistoty měření. Modelované spektrum poté nadhodnocuje výtěžek pro vysoké energie vyšší než 14 MeV. Druhé spektrum získané pomocí simulace s Bertiniho kaskádou oproti fixnímu zdroji neutronů velmi dobře simuluje spektrum pro nejnižší i nejvyšší energie, kde dochází k rozdílu menšímu než experimentální nejistota. Pro střední hodnoty energie je rozdíl srovnatelný s experimentální nejistotou, až na část mezi 9 – 10 MeV, kde je rozdíl vyšší než 10 %.



Obrázek 6.13: Porovnání měřeného a simulovaných spekter pomocí Geant4 s fixním zdrojem neutronů a s Bertiniho kaskádou a protony o energii 20 MeV v 1 m přímém směru od terče.



Obrázek 6.14: Procentuální rozdíl měřeného a simulovaných spekter pomocí Geant4 s fixním zdrojem neutronů a s Bertiniho kaskádou a protony o energii 20 MeV v 1 m přímém směru od terče ve formě  $C/E - 1$ . Černou čarou je symetricky vyznačena procentuální nejistota měřeného spektra.

# Závěr

V rámci diplomové práce byla provedena rešerše provedených experimentů zabývajících se charakterizací sekundárního neutronového pole okolo medicínských urychlovačů a jednotlivých experimentálních technik použitých k této charakterizaci. Dále proběhlo seznámení s postupem vyhodnocování reakčních rychlostí a účinnostní kalibrace pomocí matematického modelu HPGe detektoru na pracovišti LR-0. Poté byl zpracován popis urychlovače IBA Cyclone 18/9 a postupu výroby radiofarmak pro diagnostickou metodu PET. Ve výpočetním kódu Geant4 byl vytvořen podrobný model terčové soustavy používané pro produkci  $^{18}\text{F}$ .

Hlavní částí práce je potom vyhodnocení experimentu zaměřeného na charakterizaci sekundárního neutronového spektra na povrchu XXL terče pomocí srovnání vypočtených a naměřených reakčních rychlostí. V tomto experimentu bylo zjištěno silné podhodnocování výtěžku neutronů všech energií výpočetním kódem Geant4 a podhodnocování výtěžku vysokých energií kódem MCNP6.2. Výpočetní kód MCNP6.2 potom poměrně dobře předpovídá reakční rychlosti reakcí s nízkým energetickým prahem, zejména v dopředných směrech. Co se týče úhlového rozdělení neutronů, tak experimentu pro vysoké energie odpovídá Geant4 a pro nižší energie MCNP6.2. Porovnáním spektrálních indexů bylo zjištěno, že nejlépe tvar spektra modeluje simulace s fyzikálním modelem s Bertiniho kaskádou v Geant4.

Oproti původnímu plánu byla provedena rešerše jednotlivých fyzikálních modelů používaných pro simulaci jaderných reakcí v MC výpočetních kódech Geant4 a MCNP6.2. Tyto modely byly poté použity pro simulaci studované reakce protonů na obohacené vodě o  $^{18}\text{O}$  a porovnány s diferenciálními daty z databáze EXFOR. Zde se projevila jednak jejich různorodost, ale zároveň i to, že žádný z dostupných modelů nesimuluje vhodně spektrum neutronů v celém rozsahu energií a úhlů. Všechna spektra však přibližně odpovídají vypařovacímu tvaru spektra. Kromě toho byla provedena rešerše popisu celkového výtěžku neutronů, kde bylo dosaženo závěru, že na celkový výtěžek neutronů mají nezanedbatelný vliv i další reakce než pouze produkční  $^{18}\text{O}(p,n)^{18}\text{F}$ .

Výsledky a závěry z této práce by měly být v budoucnu použity pro vytvoření matematického modelu popisujícího radiační situaci okolo cyklotronu ověřující dostatečnost stínění při zvyšování výkonu nebo instalaci nového cyklotronu. Pro účel výpočtu radiační dávky by měly být dostatečné modely popisující spektrum neutronů pouze přibližně, což bude ještě ověřeno. Zároveň dobíhají a jsou v plánu další experimenty zaměřené na charakterizaci sekundárního neutronového pole na cyklotronu IBA Cyclone 18/9 zejména pro zpětné úhly, které zatím nebyly plně pokryty. Kromě toho by mělo proběhnout měření neutronových spekter z reakce protonů o energii 18 MeV na obohacené vodě v různých úhlech ve zjednodušeném terči.



# Literatura

- [1] FERNANDEZ, F., K. AMGAROU, C. DOMINGO, M. J. GARCIA, G. QUINCO-CES, J. M. MARTI-CLIMENT, R. MENDEZ a R. BARQUERO. Neutron spectrometry in a PET cyclotron with a Bonner sphere system. *Radiation Protection Dosimetry* [online]. 2007, **126**(1-4), 371-375 [cit. 2021-03-30]. ISSN 0144-8420. Dostupné z: doi:10.1093/rpd/ncm077
- [2] KNOLL, Glenn F. *Radiation detection and measurement*. 4th ed. Hoboken: Wiley, c2010. ISBN 978-0-470-13148-0.
- [3] VEGA-CARRILLO, Héctor René. Neutron energy spectra inside a PET cyclotron vault room. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment* [online]. 2001, **463**(1-2), 375-386 [cit. 2021-03-30]. ISSN 01689002. Dostupné z: doi:10.1016/S0168-9002(01)00234-0
- [4] MÉNDEZ, R, M P IÑIGUEZ, J M MARTÍ-CLIMENT, I PEÑUELAS, H R VEGA-CARRILLO a R BARQUERO. Study of the neutron field in the vicinity of an unshielded PET cyclotron. *Physics in Medicine and Biology* [online]. 2005, **50**(21), 5141-5152 [cit. 2021-03-30]. ISSN 0031-9155. Dostupné z: doi:10.1088/0031-9155/50/21/013
- [5] GUIMARÃES, A.M., M.A.S. LACERDA, J.A.L. SANTOS, P.G.M. MALETTA, S.L.M. RODRIGUES, R.S. ANDRADE, E.C. VILELA a T.A. DA SILVA. Use of a TLD-based multisphere spectrometry system to measure the neutron spectra around a not-self-shielded PET cyclotron: Preliminary results. *Applied Radiation and Isotopes* [online]. 2012, **71**, 92-95 [cit. 2021-03-30]. ISSN 09698043. Dostupné z: doi:10.1016/j.apradiso.2012.05.014
- [6] LAGARES, J.I., J.E. Guerrero ARAQUE, R. MÉNDEZ-VILLAFANE, et al. Neutron spectra around a tandem linear accelerator in the generation of <sup>18</sup>F with a bonner sphere spectrometer. *Applied Radiation and Isotopes* [online]. 2016, **114**, 154-158 [cit. 2021-03-30]. ISSN 09698043. Dostupné z: doi:10.1016/j.apradiso.2016.05.023
- [7] NIGG, David W., Charles A. WEMPLE, Ruedi RISLER, John K. HARTWELL, Yale D. HARKER a George E. LARAMORE. Modification of the University of Washington Neutron Radiotherapy Facility for optimization of neutron capture enhanced fast-neutron therapy. *Medical Physics* [online]. 2000, **27**(2), 359-367 [cit. 2021-03-28]. ISSN 00942405. Dostupné z: doi:10.1118/1.598839

- [8] JEFFRIES, Brad D., Christopher ALGIERE, Jake A. GALLAGHER, Tyler H. NICHOLS, Joshua R. SO, Charles W. LITTLEFIELD, Michael QUINN a John D. BROCKMAN. Characterization of the neutron flux during production of  $^{18}\text{F}$  at a medical cyclotron and evaluation of the incidental neutron spectrum for neutron damage studies. *Applied Radiation and Isotopes* [online]. 2019, **154** [cit. 2021-03-28]. ISSN 09698043. Dostupné z: doi:10.1016/j.apradiso.2019.108892
- [9] ALLONI, D. a M. PRATA. Characterisation of the secondary neutron field generated by a compact PET cyclotron with MCNP6 and experimental measurements. *Applied Radiation and Isotopes* [online]. 2017, **128**, 204-209 [cit. 2021-03-28]. ISSN 09698043. Dostupné z: doi:10.1016/j.apradiso.2017.07.031
- [10] MCELROY, W. N., S. BERG a T. CROCKETT. *A COMPUTER-AUTOMATED ITERATIVE METHOD FOR NEUTRON FLUX SPECTRA DETERMINATION BY FOIL ACTIVATION: A Study of the Iterative Method*. New Mexico, 1967.
- [11] FUJIBUCHI, Toshioh, Genki HORITSUGI, Ichiro YAMAGUCHI, et al. Comparison of neutron fluxes in an 18-MeV unshielded cyclotron room and a 16.5-MeV self-shielded cyclotron room. *Radiological Physics and Technology* [online]. 2012, **5**(2), 156-165 [cit. 2021-03-28]. ISSN 1865-0333. Dostupné z: doi:10.1007/s12194-012-0149-2
- [12] FUJIBUCHI, Toshioh, Genki HORITSUGI, Ichiro YAMAGUCHI, et al. Comparison of neutron fluxes in an 18-MeV unshielded cyclotron room and a 16.5-MeV self-shielded cyclotron room. *Radiological Physics and Technology* [online]. 2012, **5**(2), 156-165 [cit. 2021-03-28]. ISSN 1865-0333. Dostupné z: doi:10.1007/s12194-012-0149-2
- [13] BENAVENTE-CASTILLO, J.A., M.A.S. LACERDA, A.V. FERREIRA, H.M. DALLE a T.A. DA SILVA. Assessment of the neutron radiation field with activation foils and intermittent irradiations around a PETtrace biomedical cyclotron. *Applied Radiation and Isotopes* [online]. 2019, **153** [cit. 2021-03-28]. ISSN 09698043. Dostupné z: doi:10.1016/j.apradiso.2019.108823
- [14] LIN, Jye-Bin, Jui-Ping LEE, Ding-Bang LIN, Wen-Kang CHEN, Wen-Shan LIU a Chien-Yi CHEN. Evaluation of stray neutron distribution in medical cyclotron vault room by neutron activation analysis approach. *Journal of Radioanalytical and Nuclear Chemistry* [online]. 2009, **280**(3), 481-487 [cit. 2021-03-28]. ISSN 0236-5731. Dostupné z: doi:10.1007/s10967-009-7461-2
- [15] KOŠTÁL, Michal, Evžen LOSA, Martin SCHULC, et al. The methodology of characterization of neutron leakage field from PET production cyclotron for experimental purposes. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment* [online]. 2019, **942** [cit. 2021-03-28]. ISSN 01689002. Dostupné z: doi:10.1016/j.nima.2019.162374
- [16] KOŠTÁL, Michal, Jaroslav ŠOLTÉS, Ladislav VIERERBL, Zdeněk MATĚJ, František CVACHOVEC, Vojtěch RYPAR a Evžen LOSA. Measurement of neutron spectra in a silicon filtered neutron beam using stilbene detectors at the LVR-15 research reactor. *Applied Radiation and Isotopes* [online]. 2017, **128**, 41-48 [cit. 2021-03-28]. ISSN 09698043. Dostupné z: doi:10.1016/j.apradiso.2017.06.026
- [17] HAGIWARA, M., T. SANAMI, K. MASUMOTO, et al. Spectrum Measurement of Neutrons and Gamma-Rays from Thick  $\text{H}^{182}\text{O}$  Target Bombarded with 18 MeV Protons. *Journal of the Korean Physical Society* [online]. 2011, **59**(2(3)), 2035-2038 [cit. 2021-03-28]. ISSN 0374-4884. Dostupné z: doi:10.3938/jkps.59.2035

- [18] GALLERANI, R., G. CICORIA, E. FANTUZZI, M. MARENGO a D. MOSTACCI. Neutron production in the operation of a 16.5MeV PETrace cyclotron. *Progress in Nuclear Energy* [online]. 2008, **50**(8), 939-943 [cit. 2021-03-28]. ISSN 01491970. Dostupné z: doi:10.1016/j.pnucene.2008.02.006
- [19] INFANTINO, Angelo, Gianfranco CICORIA, Giulia LUCCONI, Davide PANCALDI, Sara VICHI, Federico ZAGNI, Domiziano MOSTACCI a Mario MARENGO. Assessment of the neutron dose field around a biomedical cyclotron: FLUKA simulation and experimental measurements. *Physica Medica* [online]. 2016, **32**(12), 1602-1608 [cit. 2021-5-11]. ISSN 11201797. Dostupné z: doi:10.1016/j.ejmp.2016.11.115
- [20] TRIPATHY, S.P., S. PAUL, G.S. SAHOO, V. SUMAN, C. SUNIL, D.S. JOSHI a T. BANDYOPADHYAY. Measurement of fast neutron spectra from the interaction of 20MeV protons with thick Be and C targets using CR-39 detector. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms* [online]. 2014, **318**, 237-240 [cit. 2021-03-28]. ISSN 0168583X. Dostupné z: doi:10.1016/j.nimb.2013.09.023
- [21] KOŠTÁL, Michal, Martin SCHULC, Vojtěch RYPAR, Evžen LOSA, Nicola BURIANOVÁ, Jan ŠIMON, Martin MAREČEK a Jan UHLÍŘ. Validation of zirconium isotopes (n,g) and (n,2n) cross sections in a comprehensive LR-0 reactor operative parameters set. *Applied Radiation and Isotopes* [online]. 2017, **128**, 92-100 [cit. 2021-03-30]. ISSN 09698043. Dostupné z: doi:10.1016/j.apradiso.2017.06.023
- [22] KOLESKA, Michal, Ladislav VIERERBL a Milan MAREK. Development of the MCNPX model for the portable HPGe detector. *Radiation Physics and Chemistry* [online]. 2014, **104**, 351-354 [cit. 2021-03-30]. ISSN 0969806X. Dostupné z: doi:10.1016/j.radphyschem.2014.03.035
- [23] DRYAK, Pavel a Petr KOVAR. Experimental and MC determination of HPGe detector efficiency in the 40—2754keV energy range for measuring point source geometry with the source-to-detector distance of 25cm. *Applied Radiation and Isotopes* [online]. 2006, **64**(10-11), 1346-1349 [cit. 2021-03-30]. ISSN 09698043. Dostupné z: doi:10.1016/j.apradiso.2006.02.083
- [24] GOORLEY, T., M. JAMES, T. BOOTH, et al. Initial MCNP6 Release Overview. *Nuclear Technology* [online]. 2017, **180**(3), 298-315 [cit. 2021-03-30]. ISSN 0029-5450. Dostupné z: doi:10.13182/NT11-135
- [25] TRUE COINCIDENCE SUMMING. *MIRION Technologies* [online]. Mirion Technologies, 2021 [cit. 2021-03-30]. Dostupné z: <https://www.mirion.com/learning-center/lab-experiments/true-coincidence-summing>
- [26] TOMARCHIO, E. a S. RIZZO. Coincidence-summing correction equations in gamma-ray spectrometry with p-type HPGe detectors. *Radiation Physics and Chemistry* [online]. 2011, **80**(3), 318-323 [cit. 2021-03-30]. ISSN 0969806X. Dostupné z: doi:10.1016/j.radphyschem.2010.09.014
- [27] MIRION Technologies, Inc. *LabSOCS Calibration Software: C40167 - 04/13* [online]. Mirion Technologies, 2017 [cit. 2021-03-30]. Dostupné z: [https://mirion.s3.amazonaws.com/cms4\\_mirion/files/pdf/spec-sheets/c40167\\_labsocs\\_super\\_spec\\_2.pdf?1557864010](https://mirion.s3.amazonaws.com/cms4_mirion/files/pdf/spec-sheets/c40167_labsocs_super_spec_2.pdf?1557864010)

- [28] MIRION Technologies, Inc. *Model S573 ISOCs Calibration Software : C40166 – 04/2013* [online]. Mirion Technologies, 2017 [cit. 2021-03-30]. Dostupné z: [https://mirion.s3.amazonaws.com/cms4\\_mirion/files/pdf/spec-sheets/c40166s573-isocs-calibration-software.pdf?1562764105](https://mirion.s3.amazonaws.com/cms4_mirion/files/pdf/spec-sheets/c40166s573-isocs-calibration-software.pdf?1562764105)
- [29] AGOSTINELLI, S., J. ALLISON, K. AMAKO, et al. Geant4-a simulation toolkit. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment* [online]. 2003, **506**(3), 250-303 [cit. 2021-04-15]. ISSN 01689002. Dostupné z: doi:10.1016/S0168-9002(03)01368-8
- [30] ALLISON, J., K. AMAKO, J. APOSTOLAKIS, et al. Geant4 developments and applications. *IEEE Transactions on Nuclear Science* [online]. 2006, **53**(1), 270-278 [cit. 2021-04-15]. ISSN 0018-9499. Dostupné z: doi:10.1109/TNS.2006.869826
- [31] ALLISON, J., K. AMAKO, J. APOSTOLAKIS, et al. Recent developments in Geant4. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment* [online]. 2016, **835**, 186-225 [cit. 2021-04-15]. ISSN 01689002. Dostupné z: doi:10.1016/j.nima.2016.06.125
- [32] WERNER, C.J., J.S. BULL, C.J SOLOMON, et al. *MCNP Version 6.2 Release Notes: LA-UR-18-20808* [online]. Los Alamos: Los Alamos National Laboratory, 2018 [cit. 2021-04-21]. Dostupné z: [https://laws.lanl.gov/vhosts/mcnp.lanl.gov/pdf\\_files/la-ur-18-20808.pdf](https://laws.lanl.gov/vhosts/mcnp.lanl.gov/pdf_files/la-ur-18-20808.pdf)
- [33] WERNER, C. J., ed. *MCNP Users Manual - Code Version 6.2* [online]. Los Alamos: Los Alamos National Laboratory, 2017 [cit. 2021-04-21]. Dostupné z: [https://laws.lanl.gov/vhosts/mcnp.lanl.gov/pdf\\_files/la-ur-17-29981.pdf](https://laws.lanl.gov/vhosts/mcnp.lanl.gov/pdf_files/la-ur-17-29981.pdf)
- [34] RIBON, Alberto. *Hadronic Physics* [online]. Ženeva, 2019 [cit. 2021-04-19]. Dostupné z: <https://indico.cern.ch/event/789510/contributions/3279378/attachments/1818438/2973078/HadronicPhysics.pdf>
- [35] BARASHENKOV, V. S. a V. D. TONEEV. *High Energy interactions of particles and nuclei with nuclei*. 1972.
- [36] BARASHENKOV, B. C. a S. MASHNIK. Barashenkov Compilation of cross sections for nucleon induced reactions at energies above a few MeV. *NEA - Nuclear Energy Agency* [online]. OECD, 2020 [cit. 2021-04-20]. Dostupné z: <https://www.oecd-nea.org/dbdata/bara.html>
- [37] GRICHINE, V. M. A simplified Glauber model for hadron—nucleus cross sections. *The European Physical Journal C* [online]. 2009, **62**(2), 399-404 [cit. 2021-04-20]. ISSN 1434-6044. Dostupné z: doi:10.1140/epjc/s10052-009-1033-z
- [38] GRICHINE, V.M. A simple model for integral hadron—nucleus and nucleus—nucleus cross-sections. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms* [online]. 2009, **267**(14), 2460-2462 [cit. 2021-04-20]. ISSN 0168583X. Dostupné z: doi:10.1016/j.nimb.2009.05.020
- [39] OLIVE, K.A. Review of Particle Physics. *Chinese Physics C* [online]. 2016, **40**(10) [cit. 2021-04-20]. ISSN 1674-1137. Dostupné z: doi:10.1088/1674-1137/40/10/100001
- [40] GLAUBER, R. J. Theory of High Energy Hadron-Nucleus Collisions. DEVONS, Samuel, ed. *High-Energy Physics and Nuclear Structure* [online]. Boston, MA: Springer US, 1995, 1970, s. 207-264 [cit. 2021-04-20]. ISBN 978-1-4684-1829-3. Dostupné z: doi:10.1007/978-1-4684-1827-9\_43



- [41] ANDERSSON, B., G. GUSTAFSON a B. NILSSON-ALMQVIST. A model for low-pT hadronic reactions with generalizations to hadron-nucleus and nucleus-nucleus collisions. *Nuclear Physics B* [online]. 1987, **281**(1-2), 289-309 [cit. 2021-04-20]. ISSN 05503213. Dostupné z: doi:10.1016/0550-3213(87)90257-4
- [42] FOLGER, G. a J. P. WELLISCH. String Parton Models in Geant4. In: *Computing in High Energy and Nuclear Physics 2003 Conference Proceedings* [online]. La Jolla, 2003 [cit. 2021-04-20]. Dostupné z: <https://arxiv.org/pdf/nucl-th/0306007.pdf>
- [43] GEANT4. *Physics Reference Manual* [online]. 10.6. Geant4 Collaboration, 2020 [cit. 2021-04-20]. Dostupné z: <https://geant4-userdoc.web.cern.ch/UsersGuides/PhysicsReferenceManual/BackupVersions/V10.6c/fo/PhysicsReferenceManual.pdf>
- [44] HEIKKINEN, Aatos, Nikita STEPANOV a Johannes Peter WELLISCH. Bertini intra-nuclear cascade implementation in Geant4. In: *Computing in High Energy and Nuclear Physics 2003 Conference Proceedings* [online]. La Jolla: CHEP, 2003 [cit. 2021-04-20]. Dostupné z: <https://arxiv.org/pdf/nucl-th/0306008.pdf>
- [45] FOLGER, G., V. N. IVANCHENKO a J. P. WELLISCH. The Binary Cascade. *The European Physical Journal A* [online]. 2004, **21**(3), 407-417 [cit. 2021-04-20]. ISSN 1434-6001. Dostupné z: doi:10.1140/epja/i2003-10219-7
- [46] BOUDARD, A., J. CUGNON, J.-C. DAVID, S. LERAY a D. MANCUSI. New potentialities of the Liège intranuclear cascade model for reactions induced by nucleons and light charged particles. *Physical Review C* [online]. 2013, **87**(1) [cit. 2021-04-20]. ISSN 0556-2813. Dostupné z: doi:10.1103/PhysRevC.87.014606
- [47] MANCUSI, Davide, Alain BOUDARD, Joseph CUGNON, Jean-Christophe DAVID, Pekka KAITANIEMI a Sylvie LERAY. Extension of the Liège intranuclear-cascade model to reactions induced by light nuclei. *Physical Review C* [online]. 2014, **90**(5) [cit. 2021-04-20]. ISSN 0556-2813. Dostupné z: doi:10.1103/PhysRevC.90.054602
- [48] LOBOV, G. A., N. V. STEPANOV, A. A. SIBIRTSEV a Yu. V. TREBUKHOVSKII. *Statistical Simulation of Hadron and Light-Nuclei Interactions with Nuclei. Intranuclear Cascade Model*. Moskva: ITEP, 1983.
- [49] BERTINI, Hugo W. Low-Energy Intranuclear Cascade Calculation. *Physical Review* [online]. 1963, **131**(4), 1801-1821 [cit. 2021-04-20]. ISSN 0031-899X. Dostupné z: doi:10.1103/PhysRev.131.1801
- [50] BERTINI, Hugo W. a Miriam P. GUTHRIE. News item results from medium-energy intranuclear-cascade calculation. *Nuclear Physics A* [online]. 1971, **169**(3), 670-672 [cit. 2021-04-20]. ISSN 03759474. Dostupné z: doi:10.1016/0375-9474(71)90710-X
- [51] BARASHENKOV, V.S. a V.D. TONEEV. *Interaction of High Energy Particles and Nuclei with Atomic Nuclei*. Moskva, 1972.
- [52] LETAW, J. R., R. SILBERBERG a C. H. TSAO. Proton-nucleus total inelastic cross sections - an empirical formula for E greater than 10 MeV. *The Astrophysical Journal Supplement Series* [online]. 1983, **51** [cit. 2021-04-20]. ISSN 0067-0049. Dostupné z: doi:10.1086/190849

- [53] LETAW, John R., Rein SILBERBERG a C. H. TSAO. Comparison of distributed reacceleration and leaky-box models of cosmic-ray abundances ( $Z = 3-28$ ). *The Astrophysical Journal* [online]. 1993, **414** [cit. 2021-04-20]. ISSN 0004-637X. Dostupné z: doi:10.1086/173106
- [54] PEARLSTEIN, S. Medium-energy nuclear data libraries - A case study, neutron- and proton-induced reactions in Fe-56. *The Astrophysical Journal* [online]. 1989, **346** [cit. 2021-04-20]. ISSN 0004-637X. Dostupné z: doi:10.1086/168089
- [55] GRIFFIN, J. J. Statistical Model of Intermediate Structure. *Physical Review Letters* [online]. 1966, **17**(9), 478-481 [cit. 2021-04-20]. ISSN 0031-9007. Dostupné z: doi:10.1103/PhysRevLett.17.478
- [56] GRIFFIN, J.J. Energy dependence of average direct reaction cross sections and partial nuclear level densities. *Physics Letters B* [online]. 1967, **24**(1), 5-7 [cit. 2021-04-21]. ISSN 03702693. Dostupné z: doi:10.1016/0370-2693(67)90319-X
- [57] DOSTROVSKY, I., Z. FRAENKEL a G. FRIEDLANDER. Monte Carlo Calculations of Nuclear Evaporation Processes. III. Applications to Low-Energy Reactions. *Physical Review* [online]. 1959, **116**(3), 683-702 [cit. 2021-04-20]. ISSN 0031-899X. Dostupné z: doi:10.1103/PhysRev.116.683
- [58] DOSTROVSKY, I., Z. FRAENKEL a P. RABINOWITZ. Monte Carlo Calculations of Nuclear Evaporation Processes. V. Emission of Particles Heavier Than He 4. *Physical Review* [online]. 1960, **118**(3), 791-793 [cit. 2021-04-20]. ISSN 0031-899X. Dostupné z: doi:10.1103/PhysRev.118.791
- [59] WEISSKOPF, V. Statistics and Nuclear Reactions. *Physical Review* [online]. 1937, **52**(4), 295-303 [cit. 2021-04-20]. ISSN 0031-899X. Dostupné z: doi:10.1103/PhysRev.52.295
- [60] RODRÍGUEZ-SÁNCHEZ, Jose Luis, Jean-Christophe DAVID, Davide MANCUSI, Alain BOUDARD, Joseph CUGNON a Sylvie LERAY. Improvement of one-nucleon removal and total reaction cross sections in the Liège intranuclear-cascade model using Hartree-Fock-Bogoliubov calculations. *Physical Review C* [online]. 2017, **96**(5) [cit. 2021-04-20]. ISSN 2469-9985. Dostupné z: doi:10.1103/PhysRevC.96.054602
- [61] KELIC, A., M. V. RICCIARDI a K.-H. SCHMIDT. ABLA07 - Towards a Complete Description of the Decay Channels of a Nuclear System from Spontaneous Fission to Multifragmentation. In: FILGES, D., S. LERAY, Y. YARIV, A. MENGONI, A. STANCULESCU a G. MANK. *Joint ICTP-IAEA Advanced Workshop on Model Codes for Spallation Reactions: INDC(NDS)-0530* [online]. Vídeň: IAEA, 2008, 4-8 February 2008, s. 181-221 [cit. 2021-04-20]. Dostupné z: <https://arxiv.org/ftp/arxiv/papers/0906/0906.4193.pdf>
- [62] RODRÍGUEZ-SÁNCHEZ, J.L., A. KELIC-HEIL, J. BENLLIURE, J.-C. DAVID a S. LERAY. Implementation of the deexcitation model ABLA07 in GEANT4. In: *GSI Scientific Report 2016* [online]. GSI, 2016 [cit. 2021-04-20]. Dostupné z: [https://www.researchgate.net/publication/319260639\\_Implementation\\_of\\_the\\_deexcitation\\_model\\_ABLA07\\_in\\_GEANT4](https://www.researchgate.net/publication/319260639_Implementation_of_the_deexcitation_model_ABLA07_in_GEANT4)
- [63] LERAY, S., J. C. DAVID, M. KHANDAKER, et al. Results from the IAEA Benchmark of Spallation Models. *Journal of the Korean Physical Society* [online]. 2011, **59**(2(3)), 791-796 [cit. 2021-04-20]. ISSN 0374-4884. Dostupné z: doi:10.3938/jkps.59.791

- [64] WEISSKOPF, V. F. a D. H. EWING. On the Yield of Nuclear Reactions with Heavy Elements. *Physical Review* [online]. 1940, **57**(6), 472-485 [cit. 2021-04-20]. ISSN 0031-899X. Dostupné z: doi:10.1103/PhysRev.57.472
- [65] GUDIMA, K. K., G. A. OSOKOV a V. D. TONEEV. Model for pre-equilibrium decay of excited nuclei. *Yadernaya Fizika* [online]. 1975, **21**(2), 260-272 [cit. 2021-04-20]. Dostupné z: [https://www.researchgate.net/publication/236543087\\_Model\\_of\\_preequilibrium\\_decay\\_of\\_excited\\_nuclei](https://www.researchgate.net/publication/236543087_Model_of_preequilibrium_decay_of_excited_nuclei)
- [66] GUDIMA, K.K., S.G. MASHNIK a V.D. TONEEV. Cascade-exciton model of nuclear reactions. *Nuclear Physics A* [online]. 1983, **401**(2), 329-361 [cit. 2021-04-20]. ISSN 03759474. Dostupné z: doi:10.1016/0375-9474(83)90532-8
- [67] KOI, Tatsumi, Dennis H. WRIGHT, Gunter FOLGER, et al. Validation of Hadronic Models in Geant4. In: *AIP Conference Proceedings* [online]. AIP, 2007, 2007, s. 21-30 [cit. 2021-04-21]. ISSN 0094243X. Dostupné z: doi:10.1063/1.2720454
- [68] FURIHATA, S. Statistical analysis of light fragment production from medium energy proton-induced reactions. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms* [online]. 2000, **171**(3), 251-258 [cit. 2021-04-21]. ISSN 0168583X. Dostupné z: doi:10.1016/S0168-583X(00)00332-3
- [69] BOHR, Niels a John Archibald WHEELER. The Mechanism of Nuclear Fission. *Physical Review* [online]. 1939, **56**(5), 426-450 [cit. 2021-04-20]. ISSN 0031-899X. Dostupné z: doi:10.1103/PhysRev.56.426
- [70] BONDORF, J.P., A.S. BOTVINA, A.S. ILJINOV, I.N. MISHUSTIN a K. SNEPPEN. Statistical multifragmentation of nuclei. *Physics Reports* [online]. 1995, **257**(3), 133-221 [cit. 2021-04-21]. ISSN 03701573. Dostupné z: doi:10.1016/0370-1573(94)00097-M
- [71] SHAPIRO, Mathew M. Cross Sections for the Formation of the Compound Nucleus by Charged Particles. *Physical Review* [online]. 1953, **90**(2), 171-182 [cit. 2021-04-21]. ISSN 0031-899X. Dostupné z: doi:10.1103/PhysRev.90.171
- [72] MATSUSE, T., A. ARIMA a S. M. LEE. Critical distance in fusion reactions. *Physical Review C* [online]. 1982, **26**(5), 2338-2341 [cit. 2021-04-21]. ISSN 0556-2813. Dostupné z: doi:10.1103/PhysRevC.26.2338
- [73] BARASHENKOV, V.S., A.S. ILJINOV, V.D. TONEEV a F.G. GEREGHI. Fission and decay of excited nuclei. *Nuclear Physics A* [online]. 1973, **206**(1), 131-144 [cit. 2021-04-21]. ISSN 03759474. Dostupné z: doi:10.1016/0375-9474(73)90611-8
- [74] ILJINOV, A.S., M.V. MEBEL, N. BIANCHI, et al. Phenomenological statistical analysis of level densities, decay widths and lifetimes of excited nuclei. *Nuclear Physics A* [online]. 1992, **543**(3), 517-557 [cit. 2021-04-21]. ISSN 03759474. Dostupné z: doi:10.1016/0375-9474(92)90278-R
- [75] Evaluated nuclear structure data file (ensdf) - a computer file of evaluated experimental nuclear structure data maintained by the national nuclear data center. *National Nuclear Data Center* [online]. Brookhaven National Laboratory, 2021 [cit. 2021-04-21]. Dostupné z: <https://www.nndc.bnl.gov/nudat2/>

- [76] BOTVINA, A.S., A.S. ILJINOV, I.N. MISHUSTIN, J.P. BONDORF, R. DONANGELO a K. SNEPPEN. Statistical simulation of the break-up of highly excited nuclei. *Nuclear Physics A* [online]. 1987, **475**(4), 663-686 [cit. 2021-04-21]. ISSN 03759474. Dostupné z: doi:10.1016/0375-9474(87)90232-6
- [77] FERMI, E. High Energy Nuclear Events. *Progress of Theoretical Physics* [online]. 1950, **5**(4), 570-583 [cit. 2021-04-21]. ISSN 0033-068X. Dostupné z: doi:10.1143/ptp/5.4.570
- [78] BARAŠENKOV, V. S., B. M. BARBAŠEV a E. G. BUBELEV. Statistical theory of particle multiple production in high energy nucleon collisions. *Il Nuovo Cimento* [online]. 1958, **7**(S1), 117-128 [cit. 2021-04-21]. ISSN 0029-6341. Dostupné z: doi:10.1007/BF02725091
- [79] PLOMPEN, A. J. M., O. CABELLOS, C. DE SAINT JEAN, et al. The joint evaluated fission and fusion nuclear data library, JEFF-3.3. *The European Physical Journal A* [online]. 2020, **56**(7) [cit. 2021-04-21]. ISSN 1434-6001. Dostupné z: doi:10.1140/epja/s10050-020-00141-9
- [80] MENDOZA, Emilio, Daniel CANO-OTT, Tatsumi KOI a Carlos GUERRERO. New Standard Evaluated Neutron Cross Section Libraries for the GEANT4 Code and First Verification. *IEEE Transactions on Nuclear Science* [online]. 2014, **61**(4), 2357-2364 [cit. 2021-04-21]. ISSN 0018-9499. Dostupné z: doi:10.1109/TNS.2014.2335538
- [81] MENDOZA, Emilio, Daniel CANO-OTT, Carlos GUERRERO a Roberto CAPOTE. *New Evaluated Neutron Cross Section Libraries for the Geant4 Code: INDC(NDS)-0612* [online]. Vídeň: IAEA, 2012 [cit. 2021-04-21]. Dostupné z: <https://www-nds.iaea.org/publications/indc/indc-nds-0612.pdf>
- [82] MENDOZA, Emilio a Daniel CANO-OTT. *Update of the Evaluated Neutron Cross Section Libraries for the Geant4 Code: INDC(NDS)-0758* [online]. Vídeň: IAEA, 2018 [cit. 2021-04-21]. Dostupné z: <https://www-nds.iaea.org/publications/indc/indc-nds-0758.pdf>
- [83] CHADWICK, M.B., M. HERMAN, P. OBLOŽINSKÝ, et al. ENDF/B-VII.1 Nuclear Data for Science and Technology: Cross Sections, Covariances, Fission Product Yields and Decay Data. *Nuclear Data Sheets* [online]. 2011, **112**(12), 2887-2996 [cit. 2021-04-21]. ISSN 00903752. Dostupné z: doi:10.1016/j.nds.2011.11.002
- [84] KONING, A. J., D. ROCHMAN, J. KOPECKY, et al. *TENDL-2015: TALYS-based evaluated nuclear data library* [online]. 2015 [cit. 2021-04-21]. Dostupné z: [https://tendl.web.psi.ch/tendl\\_2015/tendl2015.html](https://tendl.web.psi.ch/tendl_2015/tendl2015.html)
- [85] KONING, A.J. a D. ROCHMAN. Modern Nuclear Data Evaluation with the TALYS Code System. *Nuclear Data Sheets* [online]. 2012, **113**(12), 2841-2934 [cit. 2021-04-21]. ISSN 00903752. Dostupné z: doi:10.1016/j.nds.2012.11.002
- [86] YARIV, Y. a Z. FRAENKEL. Intranuclear cascade calculation of high-energy heavy-ion interactions. *Physical Review C* [online]. 1979, **20**(6), 2227-2243 [cit. 2021-04-21]. ISSN 0556-2813. Dostupné z: doi:10.1103/PhysRevC.20.2227
- [87] YARIV, Y. a Z. FRAENKEL. Intranuclear cascade calculation of high energy heavy ion collisions: Effect of interactions between cascade particles. *Physical Review C* [online]. 1981, **24**(2), 488-494 [cit. 2021-04-21]. ISSN 0556-2813. Dostupné z: doi:10.1103/PhysRevC.24.488

- [88] DRESNER, L. *EVAP—A FORTRAN PROGRAM FOR CALCULATING THE EVAPORATION OF VARIOUS PARTICLES FROM EXCITED COMPOUND NUCLEI: ORNL-TM-196* [online]. Oak Ridge: Oak Ridge National Laboratory, 1962 [cit. 2021-04-21]. Dostupné z: doi:10.2172/4638868
- [89] GAIMARD, J.-J. a K.-H. SCHMIDT. A reexamination of the abrasion-ablation model for the description of the nuclear fragmentation reaction. *Nuclear Physics A* [online]. 1991, **531**(3-4), 709-745 [cit. 2021-04-21]. ISSN 03759474. Dostupné z: doi:10.1016/0375-9474(91)90748-U
- [90] MASHNIK, Stepan G. a Arnold J. SIERK. *CEM03.03 User Manual: LA-UR-12-01364* [online]. Los Alamos: Los Alamos National Laboratory, 2012 [cit. 2021-04-21]. Dostupné z: [https://laws.lanl.gov/vhosts/mcnp.lanl.gov/pdf\\_files/la-ur-12-01364.pdf](https://laws.lanl.gov/vhosts/mcnp.lanl.gov/pdf_files/la-ur-12-01364.pdf)
- [91] CHEN, K., Z. FRAENKEL, G. FRIEDLANDER, J. R. GROVER, J. M. MILLER a Y. SHIMAMOTO. VEGAS: A Monte Carlo Simulation of Intranuclear Cascades. *Physical Review* [online]. 1968, **166**(4), 949-967 [cit. 2021-04-21]. ISSN 0031-899X. Dostupné z: doi:10.1103/PhysRev.166.949
- [92] FILGES, Detlef a Frank GOLDENBAUM. *Handbook of Spallation Research* [online]. Wiley, 2009 [cit. 2021-04-21]. ISBN 9783527407149. Dostupné z: doi:10.1002/9783527628865
- [93] ATCHISON, F. Spallation and Fission in Heavy Metal Nuclei under Medium Energy Proton Bombardment. In: *Targets for Neutron Beam Spallation Sources: Jül-Conf-34*. Jülich: Kernforschungsanlage Jülich, 1980.
- [94] PRAEL, Richard E. a Michael BOZOIAN. *Adaptation of the Multistage Pre-equilibrium Model for the Monte Carlo Method: LA-UR-88-3238* [online]. Los Alamos: Los Alamos National Laboratory, 1988 [cit. 2021-04-21]. Dostupné z: [https://laws.lanl.gov/vhosts/mcnp.lanl.gov/pdf\\_files/la-ur-88-3238.pdf](https://laws.lanl.gov/vhosts/mcnp.lanl.gov/pdf_files/la-ur-88-3238.pdf)
- [95] BRACCINI, Saverio. Compact Medical Cyclotrons and their use for Radioisotope Production and Multi-disciplinary Research. *International Conference on Cyclotrons and Their Applications* [online]. Geneva, Switzerland: JACoW, 2017, **21**. [cit. 2021-04-04]. Dostupné z: doi:10.18429/JACoW-Cyclotrons2016-TUD01
- [96] JIANG, CHALICH a DEEN. Sensors for Positron Emission Tomography Applications. *Sensors* [online]. 2019, **19**(22) [cit. 2021-04-09]. ISSN 1424-8220. Dostupné z: doi:10.3390/s19225019
- [97] LEVIN, Craig S a Edward J HOFFMAN. Calculation of positron range and its effect on the fundamental limit of positron emission tomography system spatial resolution. *Physics in Medicine and Biology* [online]. 1999, **44**(3), 781-799 [cit. 2021-04-04]. ISSN 0031-9155. Dostupné z: doi:10.1088/0031-9155/44/3/019
- [98] CARZANIGA, Tommaso Stefano a Saverio BRACCINI. Cross-section measurement of  $^{44}\text{Sc}$ ,  $^{47}\text{Sc}$ ,  $^{48}\text{Sc}$  and  $^{47}\text{Ca}$  for an optimized  $^{47}\text{Sc}$  production with an 18-MeV medical PET cyclotron. *Applied Radiation and Isotopes* [online]. 2019, **143**, 18-23 [cit. 2021-04-04]. ISSN 09698043. Dostupné z: doi:10.1016/j.apradiso.2018.10.015
- [99] IAEA. *Cyclotron Produced Radionuclides: Principles and Practice* [online]. Vienna: International Atomic Energy Agency, 2008 [cit. 2021-04-04]. ISBN 978—92—0—100208—2. Dostupné z: [https://www-pub.iaea.org/MTCD/publications/PDF/trs465\\_web.pdf](https://www-pub.iaea.org/MTCD/publications/PDF/trs465_web.pdf)

- [100] IAEA. *Cyclotron Produced Radionuclides: Physical Characteristics and Production Methods* [online]. Vienna: International Atomic Energy Agency, 2009 [cit. 2021-04-04]. ISBN 978—92—0—106908—5. Dostupné z: [https://www-pub.iaea.org/mtcd/publications/pdf/trs468\\_web.pdf](https://www-pub.iaea.org/mtcd/publications/pdf/trs468_web.pdf)
- [101] IBA *Radiopharma Solutions* [online]. 2021 [cit. 2021-04-06]. Dostupné z: <https://www.iba-radiopharmasolutions.com/>
- [102] GREENWOOD, L. R. a C. D. JOHNSON. *User Guide for the STAYSL PNNL Suite of Software Tools* [online]. PNNL-22253. Richland: Pacific North West National Laboratory, 2013 [cit. 2021-04-07]. Dostupné z: [https://www.pnnl.gov/main/publications/external/technical\\_reports/pnnl-22253.pdf](https://www.pnnl.gov/main/publications/external/technical_reports/pnnl-22253.pdf)
- [103] KONING, A.J. a D. ROCHMAN. Modern Nuclear Data Evaluation with the TALYS Code System. *Nuclear Data Sheets* [online]. 2012, **113**(12), 2841-2934 [cit. 2021-04-08]. ISSN 00903752. Dostupné z: doi:10.1016/j.nds.2012.11.002
- [104] FOREST, R. A., R. CAPOTE, N. OTSUKA, T. KAWANO, A. J. KONING, S. KUNIEDA, J-Ch. SUBLET a Y. WATANABE. *FENDL-3 Library — Summary documentation* [online]. INDC(NDS)-0628. Vienna: International Atomic Energy Agency, 2012 [cit. 2021-04-08]. Dostupné z: <https://www-nds.iaea.org/publications/indc/indc-nds-0628.pdf>
- [105] CHADWICK, M.B., M. HERMAN, P. OBLOŽINSKÝ, et al. ENDF/B-VII.1 Nuclear Data for Science and Technology: Cross Sections, Covariances, Fission Product Yields and Decay Data. *Nuclear Data Sheets* [online]. 2011, **112**(12), 2887-2996 [cit. 2021-04-08]. ISSN 00903752. Dostupné z: doi:10.1016/j.nds.2011.11.002
- [106] CAPOTE, Roberto, Konstantin I. ZOLOTAREV, Vladimir G. PRONYAEV a Andrej TRKOV. Updating and Extending the IRDF-2002 Dosimetry Library. *Journal of ASTM International* [online]. 2012, **9**(4) [cit. 2021-04-08]. ISSN 1546962X. Dostupné z: doi:10.1520/JAI104119
- [107] ZSOLNAY, E. M., R. CAPOTE, H. J. NOLTHENIUS a A. TRKOV. *Summary Description of the New International Reactor Dosimetry and Fusion File (IRDF release 1.0)* [online]. INDC(NDS)-0616. Vienna: International Atomic Energy Agency, 2012 [cit. 2021-04-08]. Dostupné z: <https://www-nds.iaea.org/publications/indc/indc-nds-0616-1.pdf>
- [108] KOŠŤÁL, Michal, Martin SCHULC, Evžen LOSA, et al. Characterization of the neutron flux on the surface of a liquid water target intended for <sup>18</sup>F production. *Radiation Physics and Chemistry* [online]. 2021 [cit. 2021-04-12]. ISSN 0969806X. Dostupné z: doi:10.1016/j.radphyschem.2021.109475
- [109] KOŠŤÁL, Michal, Zdeněk MATĚJ, Filip MRAVEC, et al. Testing of Scintillation Detectors in Quasi-Monoenergetic Neutron Spectra in a Silicon Filtered Neutron Beam at the LVR-15 Research Reactor. *Journal of Nuclear Engineering and Radiation Science* [online]. 2019, **5**(3) [cit. 2021-04-13]. ISSN 2332-8983. Dostupné z: doi:10.1115/1.4043197
- [110] MATĚJ, Zdeněk. *Digitalization of spectrometric system for mixed field of radiation*. Saarbrücken: LAP Lambert Academic Publishing, [2014]. ISBN 978-3-659-59970-5.
- [111] VEŠKRNA, Martin, Zdeněk MATĚJ, Filip MRAVEC, Václav PŘENOSIL, František CVACHOVEC a Michal KOŠŤÁL. Digitalized two parametric system for gamma/neutron spectrometry. In: *18th Topical Meeting of the Radiation Protection and Shielding*

- Division (RPSD 2014)*. Knoxville, USA: American Nuclear Society, 2014, s. 1-4. ISBN 978-0-89448-714-9.
- [112] NGA-01: NEUTRON GAMMA ANALYSER. *VF NUCLEAR* [online]. VF, 2017 [cit. 2021-04-12]. Dostupné z: <https://www.vfnuclear.com/en/products/neutron-gamma-analyser-nga-01>
- [113] MARTINEZ-SERRANO, J. Javier a Antonio DIEZ DE LOS RIOS. Predicting Induced Activity in the Havar Foils of the 18F Production Targets of a PET Cyclotron and Derived Radiological Risk. *Health Physics* [online]. 2014, **107**(2), 103-110 [cit. 2021-04-12]. ISSN 0017-9078. Dostupné z: doi:10.1097/HP.0000000000000064
- [114] CVACHOVEC, Jiří a František CVACHOVEC. Maximum Likelihood Estimation of a Neutron Spectrum and Associated Uncertainties. *Advances in Military Technology* [online]. Brno: Univerzita obrany, 2008, (3) [cit. 2021-04-13]. ISSN 1802-2308. Dostupné z: [https://www.researchgate.net/publication/267992287\\_Maximum\\_Likelihood\\_Estimation\\_of\\_a\\_Neutron\\_Spectrum\\_and\\_Associated\\_Uncertainties](https://www.researchgate.net/publication/267992287_Maximum_Likelihood_Estimation_of_a_Neutron_Spectrum_and_Associated_Uncertainties)
- [115] TRKOV, A., P.J. GRIFFIN, S.P. SIMAKOV, et al. IRDFF-II: A New Neutron Metrology Library. *Nuclear Data Sheets* [online]. 2020, **163**, 1-108 [cit. 2021-04-16]. ISSN 00903752. Dostupné z: doi:10.1016/j.nds.2019.12.001
- [116] *GEANT4: A SIMULATION TOOLKIT* [online]. 2020 [cit. 2021-4-26]. Dostupné z: <https://geant4.web.cern.ch/>
- [117] GEANT4. *Geant4 Installation Guide Documentation* [online]. 10.7. Geant4 Collaboration, 2020 [cit. 2021-4-20]. Dostupné z: <https://geant4-userdoc.web.cern.ch/UsersGuides/InstallationGuide/fo/Geant4InstallationGuide.pdf>
- [118] GEANT4. *Book For Application Developers* [online]. 10.7. Geant4 Collaboration, 2020 [cit. 2021-4-20]. Dostupné z: <https://geant4-userdoc.web.cern.ch/UsersGuides/PhysicsReferenceManual/BackupVersions/V10.6c/fo/PhysicsReferenceManual.pdf>
- [119] CHADWICK, M.B., M. HERMAN, P. OBLOŽINSKÝ, et al. ENDF/B-VII.1 Nuclear Data for Science and Technology: Cross Sections, Covariances, Fission Product Yields and Decay Data. *Nuclear Data Sheets* [online]. 2011, **112**(12), 2887-2996 [cit. 2021-4-28]. ISSN 00903752. Dostupné z: doi:10.1016/j.nds.2011.11.002
- [120] TAMBURELLA, C. a T.J. GILES. Beam diagnostics for an 18MeV medical cyclotron. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms* [online]. 2008, **266**(19-20), 4678-4681 [cit. 2021-4-28]. ISSN 0168583X. Dostupné z: doi:10.1016/j.nimb.2008.05.115
- [121] OTUKA, N., E. DUPONT, V. SEMKOVA, et al. Towards a More Complete and Accurate Experimental Nuclear Reaction Data Library (EXFOR): International Collaboration Between Nuclear Reaction Data Centres (NRDC). *Nuclear Data Sheets* [online]. 2014, **120**, 272-276 [cit. 2021-5-17]. ISSN 00903752. Dostupné z: doi:10.1016/j.nds.2014.07.065
- [122] CRUZATE, Juan Ángel. Estimate of the radiation source term for 18 F production via thick H 2 18 O targets bombarded with 18 MeV protons. *Radiation Physics and Chemistry* [online]. 2015, **117**, 54-58 [cit. 2021-5-7]. ISSN 0969806X. Dostupné z: doi:10.1016/j.radphyschem.2015.07.018

- [123] BAKHTIARI, Mahdi, Leila MOKHTARI ORANJ, Nam-Suk JUNG, Arim LEE a Hee-Seock LEE. Estimation of neutron production yields from H218O as the 18F-production target bombarded by 18-MeV protons. *Radiation Physics and Chemistry* [online]. 2020, **177** [cit. 2021-5-7]. ISSN 0969806X. Dostupné z: doi:10.1016/j.radphyschem.2020.109120
- [124] ZIEGLER, James F., M.D. ZIEGLER a J.P. BIRSACK. SRIM — The stopping and range of ions in matter (2010). *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms* [online]. 2010, **268**(11-12), 1818-1823 [cit. 2021-5-16]. ISSN 0168583X. Dostupné z: doi:10.1016/j.nimb.2010.02.091
- [125] IVANTCHENKO, Anton V., Vladimir N. IVANCHENKO, Jose-Manuel Quesada MOLINA a Sebastien L. INCERTI. Geant4 hadronic physics for space radiation environment. *International Journal of Radiation Biology* [online]. 2011, **88**(1-2), 171-175 [cit. 2021-5-7]. ISSN 0955-3002. Dostupné z: doi:10.3109/09553002.2011.610865
- [126] AMIN, T., A. INFANTINO, R. BARLOW a C. HOEHR. Validating production of PET radionuclides in solid and liquid targets: Comparing Geant4 predictions with FLUKA and measurements. *Applied Radiation and Isotopes* [online]. 2018, **133**, 61-67 [cit. 2021-5-10]. ISSN 09698043. Dostupné z: doi:10.1016/j.apradiso.2017.12.009
- [127] IAEA. *Charged particle cross-section database for medical radioisotope production: diagnostic radioisotopes and monitor reactions: IAEA-TECDOC-1211* [online]. Vienna: International Atomic Energy Agency, 2001 [cit. 2021-5-11]. ISBN 1011—4289. Dostupné z: [https://www-pub.iaea.org/MTCD/Publications/PDF/te\\_1211\\_prn.pdf](https://www-pub.iaea.org/MTCD/Publications/PDF/te_1211_prn.pdf)
- [128] *Charged-particle cross section database for medical radioisotope production and beam monitor reactions* [online]. International Atomic Energy Agency, 2003 [cit. 2021-5-11]. Dostupné z: <https://www-nds.iaea.org/medical/>
- [129] HESS, E., S. TAKÁCS, B. SCHOLTEN, F. TÁRKÁNYI, Heinz H. COENEN a Syed M. QAIM. Excitation function of the 18O(p,n)18F nuclear reaction from threshold up to 30 MeV. *Radiochimica Acta* [online]. 2001, **89**(6) [cit. 2021-5-11]. ISSN 2193-3405. Dostupné z: doi:10.1524/ract.2001.89.6.357
- [130] CARROLL, L. R. Estimating the radiation source term for PET isotope targets. *9th Int. Workshop on Target and Target Chemistry* [online]. 2002 [cit. 2021-5-11]. Dostupné z: [http://www.carroll-ramsey.com/docs/bibliography\\_and\\_selected\\_articles/2002%20Target%20reaction%20Source%20Term.pdf](http://www.carroll-ramsey.com/docs/bibliography_and_selected_articles/2002%20Target%20reaction%20Source%20Term.pdf)
- [131] KONHEISER, J, S E MÜLLER, A MAGIN, B NAUMANN a A FERRARI. Source term calculation and validation for 18 F-production with a cyclotron for medical applications at HZDR. *Journal of Radiological Protection* [online]. 2019, **39**(3), 906-919 [cit. 2021-5-11]. ISSN 0952-4746. Dostupné z: doi:10.1088/1361-6498/ab2ae8
- [132] *FLUKA: A Multi-Particle Transport Code: SLAC-R-773* [online]. Ženeva: CERN, 2005 [cit. 2021-5-11]. Dostupné z: <https://www.slac.stanford.edu/pubs/slacreports/reports16/slac-r-773.pdf>
- [133] BÖHLEN, T.T., F. CERUTTI, M.P.W. CHIN, et al. The FLUKA Code: Developments and Challenges for High Energy and Medical Applications. *Nuclear Data Sheets* [online]. 2014, **120**, 211-214 [cit. 2021-5-11]. ISSN 00903752. Dostupné z: doi:10.1016/j.nds.2014.07.049



- [134] KONING, A.J., D. ROCHMAN, J.-Ch. SUBLET, N. DZYSIUK, M. FLEMING a S. VAN DER MARCK. TENDL: Complete Nuclear Data Library for Innovative Nuclear Science and Technology. *Nuclear Data Sheets* [online]. 2019, **155**, 1-55 [cit. 2021-5-12]. ISSN 00903752. Dostupné z: doi:10.1016/j.nds.2019.01.002
- [135] MARTINEZ-SERRANO, J. Javier a Antonio DIEZ DE LOS RIOS. Predicting Induced Activity in the Havar Foils of the <sup>18</sup>F Production Targets of a PET Cyclotron and Derived Radiological Risk. *Health Physics* [online]. 2014, **107**(2), 103-110 [cit. 2021-5-16]. ISSN 0017-9078. Dostupné z: doi:10.1097/HP.0000000000000064