

## بررسی شرایط مناسب تولید رادیوایزوتوپ اسکاندیم-۴۳ در سیکلوترون $MeV$ ۳۰ از طریق شبیه‌سازی مونت کارلو

سارا طالبی<sup>۱</sup> و علیرضا آزادبر<sup>۱\*</sup>

<sup>۱</sup> گروه مهندسی پرتوپزشکی، واحد لاهیجان، دانشگاه آزاد اسلامی، لاهیجان، ایران.

\*گیلان، لاهیجان، دانشگاه آزاد اسلامی واحد لاهیجان، دانشکده فنی مهندسی، گروه مهندسی پرتوپزشکی، صندوق پستی ۱۶۱۱۶.

پست الکترونیکی: al.azadbar@iau.ac.ir

### چکیده

اسکاندیم- $^{43}\text{Sc}$  رادیوایزوتوپی پوزیترون‌زا است که با گسیل فوتون نابودی  $KeV$  ۵۱۱ ( $176\%$ ) و پرتو گامای  $KeV$  ۳۷۲/۷۶ ( $23\%$ )، قابلیت استفاده در تصویربرداری PET را دارد. در این مطالعه، بهره‌تئوری تولید  $^{43}\text{Sc}$  و ناخالصی‌های همراه آن در واکنش‌های  $^{43}\text{Ca}(\alpha, p)$ ،  $^{43}\text{K}(\alpha, n)$ ،  $^{43}\text{Ca}(p, n)$ ،  $^{43}\text{Ca}(d, n)$  و  $^{43}\text{Ti}(p, a)$  برای تولید این رادیوایزوتوپ در سیکلوترون  $MeV$  ۳۰ کرج، با شبیه‌سازی توابع برانگیختگی این واکنش‌ها در کدهای مونت کارلو TALYS-۱/۹۶ و EMPIRE-۳-۲-۲، و توان ایستاندگی جرمی در کد مونت کارلو SRIM-۲۰۱۳ در بازه انرژی ۰ تا  $MeV$  ۳۰ و انتگرال‌گیری عددی از فرمول بهره تولید در MATLAB محاسبه شده و با نتایج تجربی مقایسه شد.  $^{43}\text{Sc}$  ناخالصی رادیوایزوتوپی است که در واکنش‌های  $^{43}\text{Ca}(p, n)$  و  $^{43}\text{K}(\alpha, n)$  تولید می‌شود و حذف آن از محصول نهایی عملاً غیرممکن است؛ در واکنش  $^{46}\text{Ti}(p, a)$  تولید می‌شود و با تعیین بازه انرژی، قابل حذف است؛ و در واکنش‌های  $^{43}\text{Ca}(p, n)$ ،  $^{43}\text{Ca}(d, n)$  و  $^{43}\text{Ca}(\alpha, p)$  تولید نمی‌شود. نتایج نشان می‌دهد که برای تولید  $^{43}\text{Sc}$  خالص با بالاترین بهره تولید،  $^{43}\text{Ca}(p, n)$  بهترین واکنش برای سیکلوترون کرج است؛ اما برای تولید محصولی خالص با بهره مناسب و کمترین هزینه ممکن، واکنش  $^{43}\text{Ca}(\alpha, p)$  انتخاب بهتری است.

**کلیدواژگان:** اسکاندیم-۴۳، سیکلوترون کرج، شبیه‌سازی مونت کارلو، تابع برانگیختگی، بهره تولید.

### ۱. مقدمه

$^{43}\text{Sc}$  رادیوایزوتوپی با نیمه‌عمر فیزیکی ۳/۸۹۱ ساعت است که در ۸۸/۱٪ از موارد با گسیل پوزیترون و در ۱۲٪ از موارد با گیراندازی الکترون، به ایزوتوپ پایدار  $^{43}\text{Ca}$  واپاشی می‌کند.

پوزیترون‌های  $^{43}\text{Sc}$  دو طیف پیوسته با حداکثر انرژی  $KeV$  ۱۱۹۸/۸ ( $70/9\%$ ) و  $KeV$  ۸۲۶ ( $17/2\%$ ) دارند که متوسط انرژی آن‌ها به ترتیب  $KeV$  ۵۰۸/۱ و  $KeV$  ۳۴۴/۴۶

توموگرافی گسیل پوزیترون (PET) یکی از روش‌های تصویربرداری پزشکی است که با استفاده از آن می‌توان بیماری‌های مختلفی را با دقت بالا تشخیص داد. در این روش تصویربرداری عمدتاً از رادیوداروهای حاوی  $^{18}\text{F}$  استفاده می‌شود؛ اما رادیوایزوتوپ‌های پوزیترون‌زای دیگری همچون  $^{11}\text{C}$ ،  $^{13}\text{N}$ ،  $^{15}\text{O}$ ،  $^{124}\text{I}$ ،  $^{68}\text{Ga}$ ،  $^{61}\text{Cu}$  و  $^{43}\text{Sc}$  ... نیز وجود دارند که می‌توان از آن‌ها برای اهداف خاص استفاده کرد [۱].

تولید رادیوایزوتوپ  $^{43}\text{Sc}$  از طریق واکنش های  $^{40}\text{Ca}(\alpha, p)$  و  $^{41}\text{K}(\alpha, n)$  توسط اسکلینارز<sup>۱</sup> و همکاران در سال ۲۰۱۶ با پرتودهی هدف‌هایی از جنس  $^{nat}\text{Ca}$ ،  $^{nat}\text{CaCO}_3$  و  $^{nat}\text{KCl}$  با ذرات آلفا تا انرژی ۳۰ MeV بررسی شد. این مطالعه نشان داد که سطح مقطع و بهره تولید  $^{43}\text{Sc}$  در واکنش  $^{40}\text{Ca}(\alpha, p)$ ، ۲ تا ۴ مرتبه بیشتر از واکنش  $^{41}\text{K}(\alpha, n)$  است. علاوه بر این، بهره تولید  $^{43}\text{Sc}$  از هدف  $^{nat}\text{Ca}$  نیز تقریباً ۲ مرتبه بیشتر از هدف  $^{nat}\text{CaCO}_3$  است [۱۰]. اوگر<sup>۲</sup> و همکاران در سال ۲۰۱۷ سطح مقطع تولید  $^{43}\text{Sc}$  تحت واکنش های  $^{43}\text{Ca}(p, n)$ ،  $^{44}\text{Ca}(p, n)$  و  $^{46}\text{Ti}(p, a)$  در سیکلوترون پزشکی ۱۸ MeV را بررسی کردند. هدف‌ها،  $^{43}\text{CaCO}_3$  (۵۷٪)،  $^{44}\text{CaCO}_3$  (۹۷٪) و  $^{46}\text{TiO}_2$  (۹۷٪) بودند. بیشترین سطح مقطع به ترتیب برای واکنش های  $^{43}\text{Ca}(p, n)$ ،  $^{44}\text{Ca}(p, n)$  و  $^{46}\text{Ti}(p, a)$  بود. بر اساس مطالعه آن‌ها، واکنش  $^{43}\text{Ca}(p, n)$  بهره تولید تجربی  $^{43}\text{Sc}$  بالاتر و فرایند جداسازی شیمیایی راحت‌تری دارد؛ اما واکنش  $^{46}\text{Ti}(p, a)$  بهره تولید تجربی پایین و فرایند جداسازی شیمیایی پیچیده‌ای دارد [۲]. امکان تولید  $^{43}\text{Sc}$  از واکنش  $^{42}\text{Ca}(d, n)$  توسط کارزانیکا<sup>۳</sup> و همکاران در سال ۲۰۱۹ با پرتودهی لایه‌ای چند میکرومتری از  $^{42}\text{CaCO}_3$  غنی‌شده توسط دوترون‌های شتاب‌یافته در یک شتاب‌دهنده تاندوم ۷/۵ MeV بررسی شد. نتایج این آزمایش نشان داد که در انرژی ۷/۵ MeV و برای هدفی به ضخامت ۱۵۰  $\mu\text{m}$ ، بهره اشباع ۰/۵ GBq/ $\mu\text{A}$  برای  $^{43}\text{Sc}$  به دست می‌آید؛ پس با نصب یک چشمه دوترون بر روی سیکلوترون‌های پزشکی ۲۰ MeV، واکنش  $^{42}\text{Ca}(d, n)$  می‌تواند واکنش مناسبی برای تولید بالینی  $^{43}\text{Sc}$  باشد [۱۱]. طریق آن توسط میولن و هاسلر<sup>۴</sup> در سال ۲۰۱۹ با پرتودهی

است. فوتون‌های تابش شده از آن، گامای ۳۷۲/۷۶ KeV (۲۳٪) و تابش نابودی ۵۱۱ KeV (۱۷۶٪) هستند [۲، ۳].

$^{43}\text{Sc}$  هم‌خانواده رادیوایزوتوپ‌های مهم  $^{44}\text{Sc}$  و  $^{45}\text{Sc}$  است.  $^{43}\text{Sc}$  با نیمه‌عمر ۳/۹۲۷ ساعت، در ۹۳/۳۴٪ از موارد پوزیترونی با حداکثر انرژی ۱۴۷۴/۲۵ KeV و در ۹۹/۹٪ از موارد گامایی با انرژی ۱۱۵۷ KeV تابش می‌کند که در تصویربرداری PET قابل‌استفاده است [۲، ۳].  $^{45}\text{Sc}$  نیمه‌عمری برابر با ۸۰/۳۸ ساعت دارد و با تابش الکترون با انرژی متوسط تقریباً ۱۶۴ KeV (۱۰۰٪) و پرتو گاما با انرژی ۱۵۹/۳۸ KeV (۶۷/۳٪)، گزینه مناسبی برای پرتودرمانی هدفمند است [۴].

رادیوایزوتوپ  $^{43}\text{Sc}$  از آن‌جاکه رفتار شیمیایی مشابهی با  $^{44}\text{Sc}$  دارد، به‌عنوان جایگزینی برای  $^{67}\text{Ga}$  در تصویربرداری PET قابل‌استفاده است [۵] و امکان تشخیص بیمارهای استخوان در تصاویر PET را فراهم می‌کند [۶، ۷]. ویژگی شیمیایی و رفتار درون تنی  $^{44}\text{Sc}$  مشابه رادیونوکلیدهای  $^{90}\text{Y}$  و  $^{177}\text{Lu}$  است که در درمان سرطان مورد استفاده قرار می‌گیرند؛ بنابراین از آن می‌توان به‌عنوان دزیمتر قبل از درمان با این رادیونوکلیدها نیز استفاده کرد [۸، ۹].  $^{43}\text{Sc}$  به‌واسطه انرژی پایین‌تر پوزیترون‌ها و گاما‌های گسیلی، تصاویر PET باکیفیت‌تری نسبت به  $^{44}\text{Sc}$  به دست می‌دهد. جفت رادیوایزوتوپی  $^{43}\text{Sc}$  -  $^{45}\text{Sc}$  به‌عنوان جفت تشخیصی-درمانی هم برای تصویربرداری PET و هم برای پرتودرمانی هدفمند، قابل‌استفاده است. علاوه بر این موارد، نیمه‌عمر طولانی  $^{43}\text{Sc}$  امکان تولید آن در یک مرکز تولید رادیوایزوتوپ و انتقال آن به بیمارستان‌های مختلف را فراهم می‌کند [۲، ۳].

چندین واکنش برای تولید  $^{43}\text{Sc}$  وجود دارد که شامل پرتودهی اهدافی از جنس کلسیم، پتاسیم و تیتانیم خالص یا طبیعی با پرتوهای آلفا، دوترون و پروتون می‌شوند و همگی در شتاب‌دهنده‌های ذرات سنگین امکان‌پذیر است.

<sup>1</sup> Szkliniarz

<sup>2</sup> Auger

<sup>3</sup> Carzaniga

<sup>4</sup> Meulen and Hasler

هدف‌های  $^{44}\text{CaO}$  غنی‌شده توسط باریکه‌ای از پروتون با شدت جریان  $40 \mu\text{A}$  تا  $50 \mu\text{A}$  و انرژی‌های مختلف تا  $5 \text{ MeV}$  به مدت  $90$  دقیقه، بررسی شد. محصول نهایی این آزمایش ترکیبی از  $^{43}\text{Sc}$  و  $^{44}\text{Sc}$  با نسبت‌های مختلف بود و بیشترین اکتیویته ترکیبی به‌دست‌آمده از آن، بالاتر از  $4 \text{ GBq}$  است. از این واکنش،  $^{43}\text{Sc}$  با خلوص بالای  $70\%$  در انرژی‌های بالاتر از  $20 \text{ MeV}$  قابل‌تولید است [۱۲]. بکر<sup>۱</sup> و همکاران در سال  $2023$  تولید رادیوایزوتوپ  $^{43}\text{Sc}$  از طریق بمباران هدف‌های غنی‌شده  $^{40}\text{CaO}$ ،  $^{42}\text{CaO}$  و  $^{44}\text{CaO}$  با بیمی از پروتون و دوترون تحت واکنش‌های  $^{40}\text{Ca}(p,n)$ ،  $^{42}\text{Ca}(d,n)$  و  $^{44}\text{Ca}(p,2n)$  را بررسی کردند. هدف‌ها، لایه‌ای به جرم تقریباً  $60 \text{ mg}$  بودند که توسط باریکه‌ای از پروتون با انرژی  $13/6 \text{ MeV}$  و یا دوترون  $5/8 \text{ MeV}$  با شدت جریان  $20 \mu\text{A}$  پرتودهی می‌شدند. بهره تولید تجربی  $^{43}\text{Sc}$  در واکنش  $^{43}\text{Ca}(p,n)$  بیشتر از واکنش  $^{42}\text{Ca}(d,n)$  بود و در واکنش  $^{44}\text{Ca}(p,2n)$ ، هیچ اکتیویته‌ای از  $^{43}\text{Sc}$  به دست نیامد [۱۳].

بررسی تجربی شرایط بهینه تولید یک رادیوایزوتوپ علاوه بر زمان‌بر و هزینه‌بر بودن، پرتوگیری غیرضروری پرسنل را نیز به همراه دارد. از این رو بهتر است قبل از تولید تجربی یک رادیوایزوتوپ؛ شرایط بهینه تولید آن با استفاده از کدهای شبیه‌سازی برآورد شود تا محصولی با بالاترین بهره تولید و کمترین ناخالصی رادیوایزوتوپی تولید شود. ALICE، TALYS، EMPIRE، MCNP و SRIM کدهای مونت‌کارلویی هستند که با دقت و صحت مناسب می‌توانند واکنش‌های هسته‌ای را شبیه‌سازی کنند [۱۴]. تاکنون مطالعه نظری و تجربی تولید رادیوایزوتوپ  $^{43}\text{Sc}$  در سیکلوترون کرج انجام شده است و نتایج آن منتشر شده است [۱۵]؛ اما مطالعه‌ای برای تولید  $^{43}\text{Sc}$  بر اساس امکانات کشور انجام نشده است. از این رو در این مطالعه واکنش‌های هسته‌ای  $^{40}\text{Ca}(\alpha,p)$ ،

## ۲. روش کار

برای انجام این مطالعه، ابتدا واکنش‌های هسته‌ای  $^{40}\text{Ca}(\alpha,p)$ ،  $^{41}\text{K}(\alpha,2n)$ ،  $^{42}\text{Ca}(d,n)$ ،  $^{43}\text{Ca}(p,n)$  و  $^{44}\text{Ca}(p,2n)$  با استفاده از کدهای TALYS، EMPIRE و SRIM مورد بررسی قرار می‌گیرند تا شرایط بهینه تولید رادیوایزوتوپ  $^{43}\text{Sc}$  در سیکلوترون کرج شناسایی شود.

۲. روش کار  
برای انجام این مطالعه، ابتدا واکنش‌های هسته‌ای  $^{40}\text{Ca}(\alpha,p)$ ،  $^{41}\text{K}(\alpha,2n)$ ،  $^{42}\text{Ca}(d,n)$ ،  $^{43}\text{Ca}(p,n)$  و  $^{44}\text{Ca}(p,2n)$  در بازه انرژی  $0$  تا  $30 \text{ MeV}$  برای پروتون و آلفا و بازه انرژی  $0$  تا  $15 \text{ MeV}$  برای دوترون (مطابق با انرژی سیکلوترون کرج) با استفاده از کدهای EMPIRE و TALYS شبیه‌سازی شده، سطح مقطع تولید هر یک از رادیوایزوتوپ‌های اسکاندیم متناظر با هر انرژی برای یک از این واکنش‌ها استخراج شده و تابع برانگیختگی آن‌ها برای هر یک از این واکنش‌ها رسم می‌شود. این داده‌ها با نتایج مطالعات تجربی مقایسه می‌شود تا اختلاف‌های آن‌ها مشخص شود. سپس داده‌های توان ایستاندگی جرمی و برد ذرات پرتابه در هدف‌های تعیین شده این واکنش‌ها در این بازه‌های انرژی توسط کد مونت‌کارلو SRIM، شبیه‌سازی و استخراج می‌شود.

با استفاده از نرم‌افزار MATLAB و انتگرال‌گیری از فرمول بهره تولید که در معادله ۱ آمده است، بهره تولید رادیوایزوتوپ  $^{43}\text{Sc}$  و  $^{44}\text{Sc}$  (در صورت تولید) برای این ۶ واکنش در بازه انرژی تولید آن‌ها محاسبه و نمودارهای آن‌ها رسم می‌شود. در ادامه نتایج به‌دست‌آمده از این شبیه‌سازی‌ها با نتایج کارهای تجربی استخراج شده از مقالات علمی و سایت EXFOR مقایسه می‌شود و مناسب‌ترین واکنش و بهترین بازه انرژی بیم فرودی برای آن واکنش، بر این اساس که بیشترین مقدار از رادیوایزوتوپ  $^{43}\text{Sc}$  و کمترین مقدار از رادیوایزوتوپ مزاحم  $^{44}\text{Sc}$  تولید شود، تعیین می‌شود.

بررسی تجربی شرایط بهینه تولید یک رادیوایزوتوپ علاوه بر زمان‌بر و هزینه‌بر بودن، پرتوگیری غیرضروری پرسنل را نیز به همراه دارد. از این رو بهتر است قبل از تولید تجربی یک رادیوایزوتوپ؛ شرایط بهینه تولید آن با استفاده از کدهای شبیه‌سازی برآورد شود تا محصولی با بالاترین بهره تولید و کمترین ناخالصی رادیوایزوتوپی تولید شود. ALICE، TALYS، EMPIRE، MCNP و SRIM کدهای مونت‌کارلویی هستند که با دقت و صحت مناسب می‌توانند واکنش‌های هسته‌ای را شبیه‌سازی کنند [۱۴]. تاکنون مطالعه نظری و تجربی تولید رادیوایزوتوپ  $^{43}\text{Sc}$  در سیکلوترون کرج انجام شده است و نتایج آن منتشر شده است [۱۵]؛ اما مطالعه‌ای برای تولید  $^{43}\text{Sc}$  بر اساس امکانات کشور انجام نشده است. از این رو در این مطالعه واکنش‌های هسته‌ای  $^{40}\text{Ca}(\alpha,p)$ ،

<sup>1</sup> Becker

واکنش‌های هسته‌ای و ارزیابی داده‌های هسته‌ای طراحی شده است. در این کد می‌توان پرتابه‌هایی از جمله فوتون، نوکلئون‌ها،  $d$ ،  ${}^3\text{He}^+$ ،  $\alpha$  و انواع یون‌ها در محدوده انرژی اندکی بالاتر از ناحیه تشدید برای  $n$  تا چند صد  $\text{MeV}$  برای یون‌های سنگین انتخاب کرد. در این مطالعه برای انجام محاسبات از نسخه EMPIRE-۳-۲-۲۷۲ استفاده شده است [۱۸].

### ۳.۲. کد مونت کارلو SRIM

SRIM یک کد شبیه‌سازی برای بررسی نفوذ یون‌ها در ماده است که در سال ۱۹۸۵ توسط زیگلر<sup>۳</sup> و همکارانش نوشته شده است. این کد با حل معادله توان ایستاندگی با استفاده از رفتار کوانتومی برخورد یون-اتم، می‌تواند ایستاندگی جرمی هدف و برد ذرات پرتابه در بازه انرژی انتخابی را محاسبه کند. محدوده انرژی ذرات در این کد بین  $10\text{ eV}$  تا  $2\text{ GeV}$  بر واحد جرم اتمی ( $\text{amu}$ ) است. محاسبات انجام شده توسط این کد، دقت قابل قبولی دارد و می‌توان با اطمینان از آن در برآورد ضخامت هدف در تولید رادیوایزوتوپ‌ها استفاده کرد. در این مطالعه برای انجام محاسبات از نسخه SRIM-۲۰۱۳ استفاده شده است [۱۹].

### ۳. نتایج و بحث

تابع برانگیختگی واکنش‌های هسته‌ای  ${}^4\text{Ca}(\alpha, p)$ ،  ${}^4\text{K}(\alpha, 2n)$ ،  ${}^{42}\text{Ca}(d, n)$ ،  ${}^{43}\text{Ca}(p, n)$ ،  ${}^{44}\text{Ca}(p, 2n)$  و  ${}^{46}\text{Ti}(p, a)$  به دست آمده از کدهای مونت کارلو TALYS و EMPIRE و مقایسه آن‌ها با نتایج تجربی در شکل‌های ۱ تا ۶ نشان داده شده است. در واکنش‌های  ${}^4\text{Ca}(\alpha, p)$ ،  ${}^{42}\text{Ca}(d, n)$  و  ${}^{43}\text{Ca}(p, n)$  علاوه بر  ${}^{43}\text{Sc}$ ، رادیوایزوتوپ  ${}^{43}\text{Sc}$  نیز مشاهده می‌شود که نیمه عمر آن  $681$  میلی‌ثانیه است و در انرژی‌های بالاتر و سطح مقطع

$$Y = 3/76 \frac{H \times I}{M} (1 - e^{-\lambda t}) \int_{E_E}^{E_I} \frac{\sigma(E)}{S_p(E)} dE \quad (1)$$

که در آن  $Y$  بهره تولید رادیوایزوتوپ ( $\text{MBq}/\mu\text{Ah}$ )؛  $I$  شدت جریان بیم فرودی ( $\mu\text{A}$ )؛  $H$  درصد فراوانی ماده هدف؛  $M$  جرم مولی ماده هدف ( $\text{gr/mol}$ )؛  $\lambda$  ثابت واپاشی محصول ( $\text{h}^{-1}$ )؛  $t$  مدت زمان بمباران هدف ( $\text{h}$ )؛  $\sigma(E)$  تابع برانگیختگی ماده هدف ( $\text{mbarn}$ )؛  $S_p(E)$  توان ایستاندگی جرمی هدف ( $\text{MeV.cm}^2/\text{mgr}$ )؛  $E_I$  و  $E_E$  ( $\text{MeV}$ ) به ترتیب انرژی ابتدایی و انتهای ذره فرودی در حین عبور از لایه هدف است [۱۶].

### ۱.۲. کد مونت کارلو TALYS

این کد می‌تواند سطح مقطع واکنش‌های هسته‌ای با پرتابه‌های فوتون،  $n$ ،  $p$ ،  $d$ ،  ${}^3\text{He}^+$  و  $\alpha$  در محدوده انرژی  $0.01\text{ MeV}$  تا  $200\text{ MeV}$  را بر اساس مدل‌های هسته‌ای همچون مدل اپتیکی، مدل گاز فرمی، مدل گاز فرمی پس رانده، مدل گیلبرت و کامرون، مدل ابر شار تعمیم‌یافته و مدل‌های آماری میکروسکوپی، محاسبه کند. این کد در طی همکاری دو مرکز تحقیقاتی توسط کونینگ<sup>۱</sup> و همکارانش با زبان فرترن نوشته شده و برای سیستم عامل لینوکس و یونیکس طراحی شده است. محاسبات انجام شده در این مطالعه با استفاده از نسخه ۱/۹۶ (۲۰۲۱) این کد انجام می‌شود [۱۷].

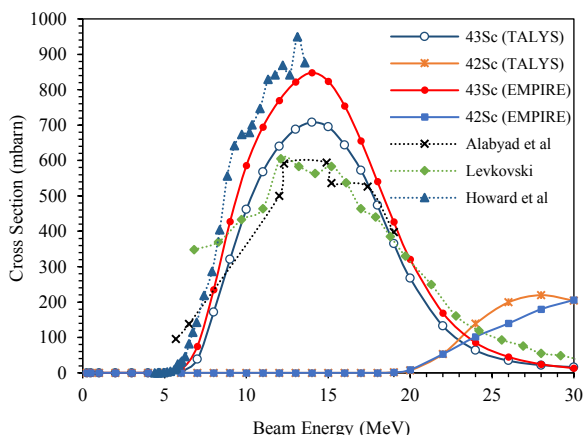
### ۲.۲. کد مونت کارلو EMPIRE

این کد یک سیستم پیمانه‌ای شامل مدل‌های هسته‌ای از جمله مدل اپتیکی، واکنش مستقیم، مدل هسته مرکب، مونت کارلو هیبریدی، مدل اکسیتون، دستور چندمرحله‌ای ORION+TRISTAN، کانال‌های جفت شده و DWBA، ترکیب چندمرحله‌ای NVWY و نسخه کامل مدل هاوزر-فشیباخ است که توسط هرمان<sup>۲</sup> و همکارانش برای بررسی

<sup>۱</sup> Koning

<sup>۲</sup> Herman

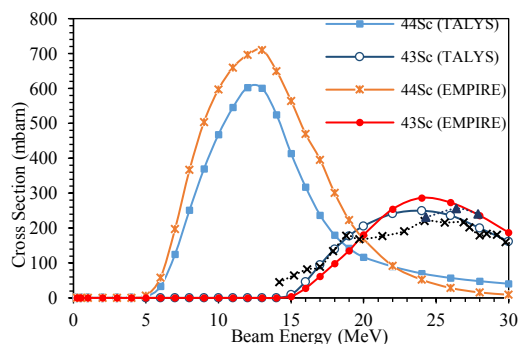
<sup>۳</sup> Ziegler



شکل (۱): تابع برانگیختگی شبیه‌سازی شده رادیوایزوتوپ‌های

اسکاندیم در واکنش  $^{44}\text{Ca}(\alpha, p)$  و مقایسه نتایج  $^{43}\text{Sc}$  با نتایج تجربی.

در واکنش  $^{41}\text{K}(\alpha, n)$  تابع برانگیختگی حاصل از کدهای TALYS و EMPIRE برای  $^{43}\text{Sc}$  و  $^{44}\text{Sc}$  با هم مشابه و تقریباً گوسی شکل هستند. انرژی آستانه تولید  $^{43}\text{Sc}$  و  $^{44}\text{Sc}$  در هر دو کد به ترتیب برابر با ۱۵ MeV و ۵ MeV است و قله انرژی هر دو آن‌ها برای  $^{43}\text{Sc}$  در ۲۴ MeV و برای  $^{44}\text{Sc}$  در ۱۳ MeV قرار دارد. نتایج کد EMPIRE برای هر دو رادیوایزوتوپ بیشتر از نتایج TALYS است. علاوه بر این، نتایج تجربی آزمایش لوکوفسکی (۱۹۹۱) [۲۰] و ماتسو و سوگیهارا<sup>۴</sup> (۱۹۶۱) [۲۲] با وجود نوسانات بسیار، در محدوده نتایج شبیه‌سازی هستند و اختلاف کمی با هم دارند. نتیجه آزمایش لوکوفسکی در تعدادی از انرژی‌ها، مشابه نتایج کد TALYS است.



شکل (۲): تابع برانگیختگی شبیه‌سازی شده رادیوایزوتوپ‌های

اسکاندیم در واکنش  $^{41}\text{K}(\alpha, n)$  و مقایسه نتایج  $^{43}\text{Sc}$  با نتایج تجربی.

کمتری نسبت به  $^{43}\text{Sc}$  تولید می‌شود؛ از این رو اکتیویته تولید شده آن در طی فرآیندهای جداسازی شیمیایی اسکاندیم از سایر عناصر، واپاشی کرده و محصولش  $^{42}\text{Ca}$  قابل جداسازی است. اما در واکنش‌های  $^{41}\text{K}(\alpha, n)$  و  $^{44}\text{Ca}(p, n)$ ؛ رادیوایزوتوپ  $^{44}\text{Sc}$  با نیمه‌عمر ۳/۹۲۷ ساعت مشاهده می‌شود که در انرژی‌های پایین‌تر و سطح مقطع بیشتری نسبت به  $^{43}\text{Sc}$  تولید می‌شود؛ بنابراین اکتیویته تولیدی آن را به هیچ روشی نمی‌توان از محصول نهایی حذف کرد. در واکنش  $^{46}\text{Ti}(p, a)$  علاوه بر  $^{43}\text{Sc}$ ، رادیوایزوتوپ‌های  $^{42}\text{Sc}$  و  $^{44}\text{Sc}$  نیز مشاهده می‌شوند که هر دو در انرژی‌های بالاتری نسبت به  $^{43}\text{Sc}$  تولید می‌شود؛ بنابراین با انتخاب بازه انرژی مناسب، می‌توان از تولید هر دو آن‌ها جلوگیری کرد.

در واکنش  $^{44}\text{Ca}(\alpha, p)$  تابع برانگیختگی حاصل از کدهای TALYS و EMPIRE برای  $^{43}\text{Sc}$  با هم مشابه و گوسی شکل هستند. انرژی آستانه تولید  $^{43}\text{Sc}$  در هر دو کد برابر با ۶ MeV است و قله انرژی هر دو آن‌ها در ۱۴ MeV قرار دارد؛ اما اختلافی در حدود ۱۴۰ mbarn دارند که مقدار قابل توجهی است. برای  $^{44}\text{Sc}$  نیز نتایج تقریباً مشابه هستند. علاوه بر این، نتایج آزمایش‌های تجربی الیباد<sup>۱</sup> و همکارانش (۲۰۱۸) [۳] و لوکوفسکی<sup>۲</sup> (۱۹۹۱) [۲۰] با نتایج شبیه‌سازی کد TALYS؛ و نتیجه آزمایش هوارد<sup>۳</sup> و همکارانش (۱۹۷۴) [۲۱] با نتایج شبیه‌سازی کد EMPIRE مشابه هستند. دلیل اختلاف نتایج مطالعه هوارد و همکارانش با دو مطالعه تجربی دیگر می‌تواند ناشی از نوع هدف استفاده شده باشد؛ به‌نحوی که در این مطالعه از هدف  $^{44}\text{CaF}_2$ ؛ اما در مطالعه الیباد و همکارانش و لوکوفسکی از هدف  $^{44}\text{CaO}$  استفاده شده است. لازم به ذکر است که غنای  $^{44}\text{Ca}$  استفاده شده در این ۳ مطالعه بالاتر از ۹۸٪ عنوان شده است.

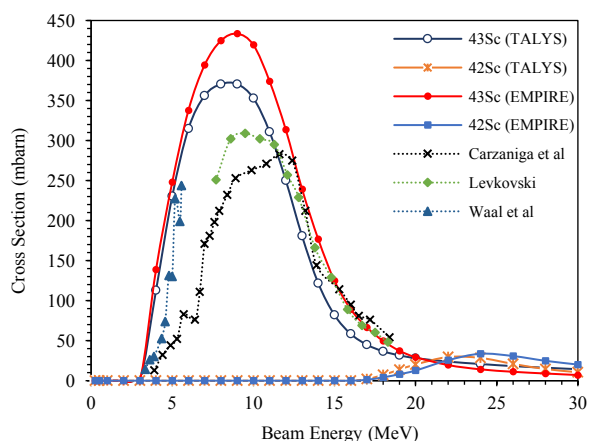
<sup>1</sup> Alabyad

<sup>2</sup> Levkovski

<sup>3</sup> Howard

<sup>4</sup> Matsuo and Sugihara

است و قله هر دو آن‌ها در انرژی ۹ MeV قرار دارد؛ اما اختلاف آن‌ها برابر با ۶۳ mbarn است. سطح مقطع تولید  $^{43}\text{Sc}$  در کد EMPIRE تقریباً در تمام بازه انرژی بیشتر از کد TALYS است. نتایج آزمایش تجربی وال و همکارانش (۱۹۷۱) [۲۴] که با هدف کلسیم فلورید (غنی شده) انجام شده، تقریباً با نتایج شبیه‌سازی همخوانی دارد. داده‌های حاصل از مطالعه کارزانیگا و همکارانش (۲۰۱۷) [۲] تا انرژی ۱۱ MeV هیچ همخوانی با نتایج شبیه‌سازی ندارد که آن هم می‌تواند ناشی از هدف  $\text{CaCO}_3$  با غنای ۵۷/۹٪ باشد؛ اما از این انرژی به بعد، با نتایج حاصل از کد EMPIRE تقریباً برابر است. نتایج آزمایش تجربی لوکوفسکی (۱۹۹۱) [۲۰] نیز تا انرژی ۱۱ MeV هیچ همخوانی با نتایج شبیه‌سازی ندارد؛ اما از این انرژی به بعد، تقریباً با نتایج حاصل از شبیه‌سازی در توافق است. لوکوفسکی در این آزمایش از هدف غنی شده  $\text{CaO}$  استفاده کرده است. این داده‌ها نشان‌دهنده آن است که نتایج تجربی فارغ از نوع هدف و غنای آن، در انرژی‌های بالا با هم و با نتایج شبیه‌سازی در توافق است.

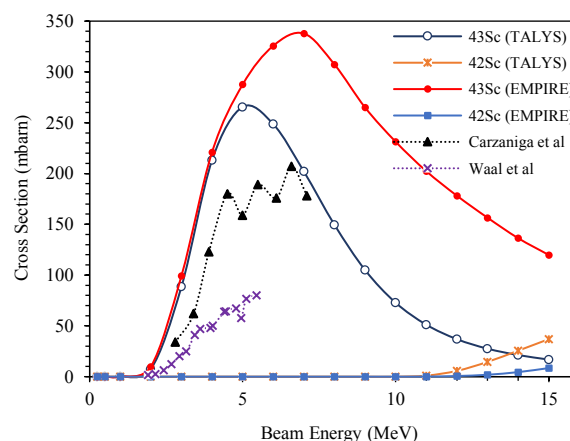


شکل (۴): تابع برانگیختگی شبیه‌سازی شده رادیوایزوتوپ‌های

اسکاندیم در واکنش  $^{43}\text{Ca}(p,n)$  و مقایسه نتایج  $^{43}\text{Sc}$  با نتایج تجربی.

در واکنش  $^{44}\text{Ca}(p,2n)$  انرژی آستانه تولید  $^{43}\text{Sc}$  در هر دو کد تقریباً برابر با ۱۴/۵ MeV است و از این انرژی تا

در واکنش  $^{42}\text{Ca}(d,n)$ ، انرژی آستانه تولید  $^{43}\text{Sc}$  در کدهای TALYS و EMPIRE تقریباً برابر با ۱/۵ MeV است. سطح مقطع تولید  $^{43}\text{Sc}$  در هر دو کد تا انرژی ۴ MeV با هم برابر هستند؛ اما از این انرژی به بعد، کد EMPIRE سطح مقطع‌های بزرگ‌تری را تولید می‌کند. نتایج هر دو کد گوسی هستند؛ اما قله آن‌ها در یک انرژی قرار ندارد. قله TALYS و EMPIRE به ترتیب در انرژی‌های ۵ MeV و ۷ MeV قرار دارند و اختلاف سطح مقطع آن‌ها برابر با ۷۲/۳ mbarn است. مقایسه بین نتایج تجربی و شبیه‌سازی نشان می‌دهد که داده‌های حاصل از کار کارزانیگا و همکارانش (۲۰۱۹) [۱۱] تا حدودی با نتایج کد TALYS شباهت دارد؛ اما کمتر از آن و پرنوسان است که می‌تواند ناشی از جنس هدف (پودر  $^{42}\text{CaCO}_3$ ) و غنای آن (۸۰/۸۰٪) باشد. نتایج وال<sup>۱</sup> و همکارانش (۱۹۷۱) [۲۳] هیچ شباهتی به نتایج شبیه‌سازی و نتایج کار کارزانیگا و همکارانش ندارد و خیلی کمتر از آن‌ها است. در این مطالعه از ترکیب کلسیم کلرید غنی شده استفاده شده است؛ اما غنای  $^{42}\text{Ca}$  آن معلوم نیست.



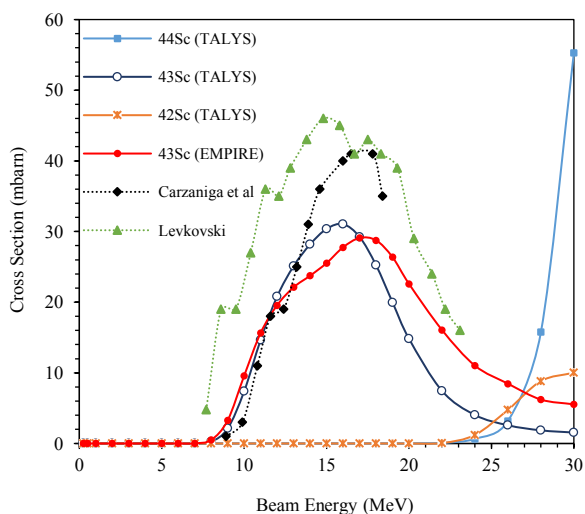
شکل (۳): تابع برانگیختگی شبیه‌سازی شده رادیوایزوتوپ‌های

اسکاندیم در واکنش  $^{42}\text{Ca}(d,n)$  و مقایسه نتایج  $^{43}\text{Sc}$  با نتایج تجربی.

در واکنش  $^{43}\text{Ca}(p,n)$  تابع برانگیختگی تولید  $^{43}\text{Sc}$  در کدهای TALYS و EMPIRE با هم مشابه و شکلی گوسی دارند. انرژی آستانه تولید  $^{43}\text{Sc}$  در هر دو کد برابر با ۳ MeV

<sup>۱</sup> Waal

آن‌ها به ترتیب در انرژی‌های ۱۶ MeV و ۱۷ MeV قرار دارند. کد EMPIRE به دلیل محدودیت، در این واکنش فقط تابع برانگیختگی  $^{43}\text{Sc}$  را تولید می‌کند. در این واکنش،  $^{43}\text{Sc}$  و  $^{44}\text{Sc}$  نیز تولید می‌شوند که انرژی آستانه آن‌ها تقریباً در ۲۴ MeV است؛ پس با انتخاب بازه انرژی ۸ MeV تا ۲۴ MeV، تا حد زیادی می‌توان از تولید این دو رادیوایزوتوپ جلوگیری کرد. سطح مقطع‌های تجربی حاصل از مطالعه کارزانیگا و همکارانش (۲۰۱۷) [۲] با وجود استفاده از هدف  $\text{TiO}_2$  با غنای ۹۷٪، هیچ همخوانی با نتایج شبیه‌سازی ندارد و بیشتر از آن‌ها هستند. باین‌حال نتایج آزمایش لوکوفسکی (۱۹۹۱) [۲۰] تا انرژی ۱۳ MeV تقریباً با نتایج شبیه‌سازی همخوانی دارد؛ اما از این انرژی به بعد، از نتایج حاصل از شبیه‌سازی بیشتر است. لوکوفسکی نیز در آزمایش خود از هدف  $\text{TiO}_2$  با غنای بیش از ۹۵٪ استفاده کرده است. برخلاف سایر واکنش‌ها، در این واکنش داده‌های تجربی بیشتر از نتایج شبیه‌سازی است.

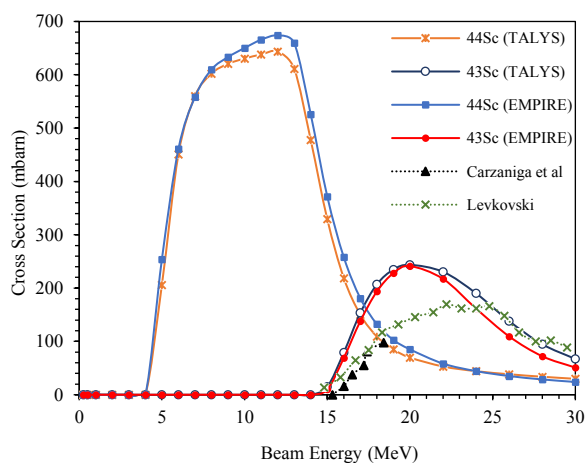


شکل (۶): تابع برانگیختگی شبیه‌سازی شده رادیوایزوتوپ‌های

اسکاندیم در واکنش  $^{46}\text{Ti}(p,\alpha)$  و مقایسه نتایج  $^{43}\text{Sc}$  با نتایج تجربی.

ضخامت لازم و توان ایستاندگی جرمی هدف برای واکنش‌های  $^{43}\text{Ca}(p,n)$ ،  $^{42}\text{Ca}(d,n)$ ،  $^{41}\text{K}(\alpha,n)$ ،  $^{40}\text{Ca}(\alpha,p)$  و  $^{44}\text{Ca}(p,n)$  و  $^{46}\text{Ti}(p,\alpha)$  در بازه انرژی ۰ تا ۳۰ MeV توسط کد مونت کارلو SRIM شبیه‌سازی شد. بهره‌توری تولید این

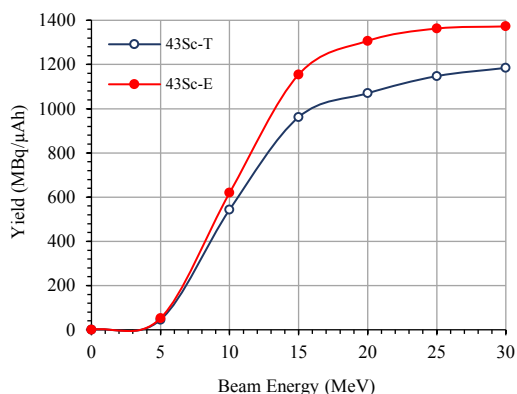
۲۰ MeV، سطح مقطع تولید  $^{43}\text{Sc}$  در هر دو کد تقریباً با هم برابر هستند؛ اما از ۲۰ MeV تا ۳۰ MeV، سطح مقطع کد TALYS بیشتر از کد EMPIRE است و بیشترین اختلاف آن‌ها به ۳۰ mbarn می‌رسد. نتایج هر دو کد تقریباً گوسی هستند و قله آن‌ها در انرژی‌های ۲۰ MeV قرار دارد. تابع برانگیختگی تولید  $^{44}\text{Sc}$  در کدهای TALYS و EMPIRE نیز تقریباً با هم مشابه هستند. انرژی آستانه تولید  $^{44}\text{Sc}$  تقریباً در ۴ MeV است و قله آن در هر دو کد در ۱۲ MeV قرار دارد. داده‌های تجربی حاصل از مطالعه کارزانیگا و همکارانش (۲۰۱۷) [۲] با وجود استفاده از هدف  $\text{CaCO}_3$  با غنای ۹۵٪، هیچ همخوانی با نتایج شبیه‌سازی ندارد و سطح مقطع آزمایش آن‌ها خیلی کمتر از نتایج شبیه‌سازی است. نتایج آزمایش تجربی لوکوفسکی (۱۹۹۱) [۲۰] نیز تا انرژی ۲۵ MeV هیچ همخوانی با نتایج شبیه‌سازی ندارد و از نتایج شبیه‌سازی کمتر است؛ اما از این انرژی به بعد، تقریباً با نتایج حاصل از شبیه‌سازی در توافق است.



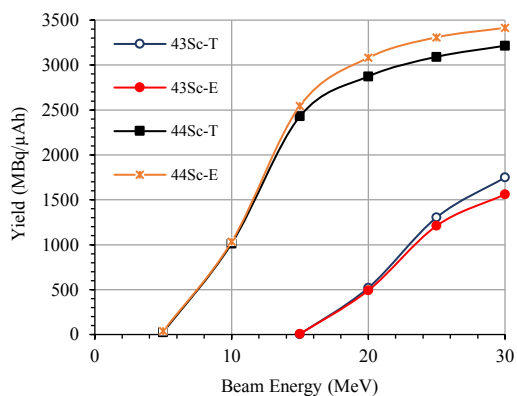
شکل (۵): تابع برانگیختگی شبیه‌سازی شده رادیوایزوتوپ‌های

اسکاندیم در واکنش  $^{44}\text{Ca}(p,n)$  و مقایسه نتایج  $^{43}\text{Sc}$  با نتایج تجربی.

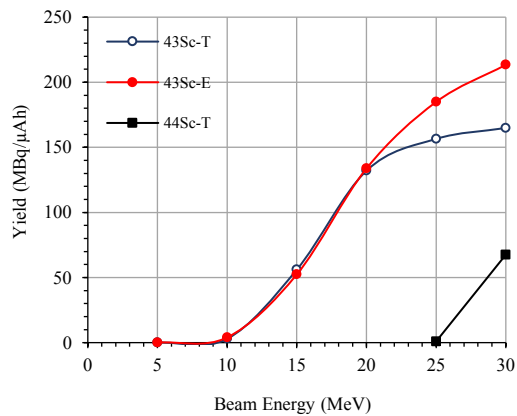
در واکنش  $^{46}\text{Ti}(p,\alpha)$  انرژی آستانه تولید  $^{43}\text{Sc}$  در هر دو کد تقریباً برابر با ۸ MeV است و فقط از این انرژی تا ۱۲ MeV، سطح مقطع تولید  $^{43}\text{Sc}$  در هر دو کد تقریباً با هم هستند. نتایج کد EMPIRE و TALYS تقریباً گوسی هستند و قله



شکل (۱۰): تغییرات بهره تنوری تولید  $^{43}\text{Sc}$  در واکنش  $^{43}\text{Ca}(p,n)$ .



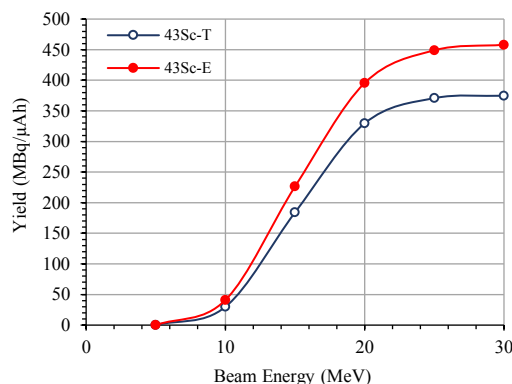
شکل (۱۱): تغییرات بهره تنوری تولید  $^{43}\text{Sc}$  و  $^{44}\text{Sc}$  در واکنش  $^{44}\text{Ca}(p,n)$ .



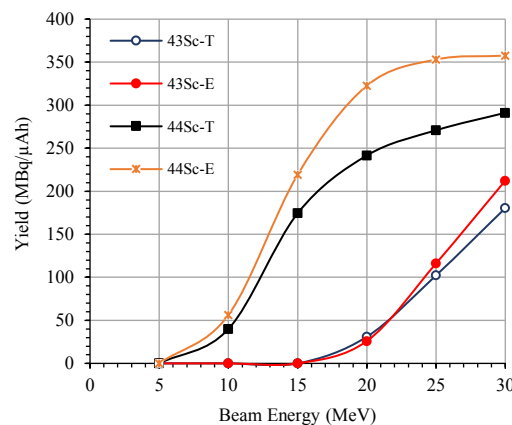
شکل (۱۲): تغییرات بهره تنوری تولید  $^{43}\text{Sc}$  و  $^{44}\text{Sc}$  در واکنش  $^{44}\text{Ti}(p,\alpha)$ .

در واکنش‌های  $^{43}\text{Ca}(p,n)$ ،  $^{43}\text{Ca}(d,n)$  و  $^{43}\text{Ca}(a,p)$  معمولاً  $^{43}\text{Sc}$  نیز تولید می‌شود. نیمه‌عمر  $^{43}\text{Sc}$  و  $^{43}\text{Sc}$  به ترتیب برابر با ۳/۸۹۱ ساعت و ۶۸۱ میلی‌ثانیه است. علاوه بر این،  $^{43}\text{Sc}$  سطح مقطع تولید پایین‌تر و انرژی آستانه تولید بالاتری نسبت به  $^{43}\text{Sc}$  دارد؛ پس به راحتی در حین جداسازی شیمیایی واپاشی کرده و از بین می‌رود. بنابراین اگر در این واکنش از

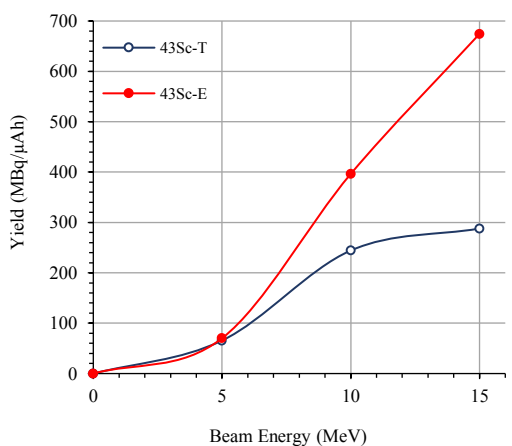
واکنش‌ها با استفاده از نتایج شبیه‌سازی از معادله ۱ محاسبه شده که در شکل‌های ۷ تا ۱۲ و جدول ۱ قابل مشاهده است.



شکل (۷): تغییرات بهره تنوری تولید  $^{43}\text{Sc}$  در واکنش  $^{44}\text{Ca}(a,p)$ .



شکل (۸): تغییرات بهره تنوری تولید  $^{43}\text{Sc}$  و  $^{44}\text{Sc}$  در واکنش  $^{44}\text{K}(a,n)$ .



شکل (۹): تغییرات بهره تنوری تولید  $^{43}\text{Sc}$  در واکنش  $^{43}\text{Ca}(d,n)$ .



کدهای EMPIRE و TALYS برابر با  $184/91 \text{ MBq}/\mu\text{Ah}$  و  $156/5 \text{ MBq}/\mu\text{Ah}$  است که از نتایج واکنش‌های  $^{43}\text{Ca}(p,n)$ ،  $^{43}\text{Ca}(d,n)$  و  $^{43}\text{Ca}(a,p)$  کمتر است. در واکنش‌های  $^{41}\text{K}(\alpha,2n)$  و  $^{44}\text{Ca}(p,2n)$  همراه با  $^{43}\text{Sc}$  معمولاً رادیوایزوتوپ  $^{44}\text{Sc}$  تولید می‌شود که سطح مقطع بیشتر و انرژی آستانه تولید کمتری نسبت به  $^{43}\text{Sc}$  دارد؛ بنابراین تحت هیچ شرایطی امکان حذف  $^{44}\text{Sc}$  در این دو واکنش وجود ندارد و محصول نهایی بسته به انرژی باریکه فرودی، حاوی درصدهایی مختلفی از  $^{43}\text{Sc}$  و  $^{44}\text{Sc}$  است. در این بین، واکنش  $^{44}\text{Ca}(p,2n)$  بیشترین بهره تئوری تولید  $^{43}\text{Sc}$  و  $^{44}\text{Sc}$  را دارد.

هدفی عنصری با غنای نزدیک ۱۰۰٪ استفاده شود؛ محصول  $^{43}\text{Sc}$  نهایی خالی از ناخالصی‌های رادیوایزوتویی است. بهره تئوری تولید  $^{43}\text{Sc}$  در واکنش  $^{43}\text{Ca}(p,n)$  با  $1372/26 \text{ MBq}/\mu\text{Ah}$  و  $1184/73 \text{ MBq}/\mu\text{Ah}$  به ترتیب برای کدهای EMPIRE و TALYS، بیشتر از ۲ واکنش دیگر است. در واکنش  $^{46}\text{Ti}(p,a)$  معمولاً رادیوایزوتوپ‌های  $^{43}\text{Sc}$  و  $^{44}\text{Sc}$  نیز تولید می‌شوند که انرژی آستانه تولید هر دوی آنها در  $24 \text{ MeV}$  است، در حالی که انرژی آستانه تولید  $^{43}\text{Sc}$  در  $8 \text{ MeV}$  قرار دارد؛ پس با انتخاب بازه انرژی  $8 \text{ MeV}$  تا  $24 \text{ MeV}$  می‌توان از تولید آنها جلوگیری کرد. بهره تئوری تولید  $^{43}\text{Sc}$  در واکنش  $^{46}\text{Ti}(p,a)$  در انرژی  $24 \text{ MeV}$  برای

جدول (۱): حداکثر بهره تئوری تولید  $^{43}\text{Sc}$  و  $^{44}\text{Sc}$  با استفاده از هدف‌های عنصری خالص.

بهره تولید TALYS (MBq/μAh)		بهره تولید EMPIRE (MBq/μAh)		ضخامت هدف (mm)	حداکثر انرژی انتخابی (MeV)	واکنش
$^{43}\text{Sc}$	$^{44}\text{Sc}$	$^{43}\text{Sc}$	$^{44}\text{Sc}$			
۰	۳۷۴/۷۷	۰	۴۵۸/۰۲	۰/۶۷۶	۳۰	$^{40}\text{Ca}(\alpha,p)$
۲۹۱/۱۸	۱۸۰/۴۳	۳۵۷/۵۶	۲۱۲/۳۲	۱/۲۸	۳۰	$^{41}\text{K}(\alpha,2n)$
۰	۲۸۷/۹۲	۰	۶۷۴/۳۹	۱/۴۲	۱۵	$^{42}\text{Ca}(d,n)$
۰	۱۱۸۴/۷۳	۰	۱۳۷۲/۲۶	۸/۱۶	۳۰	$^{43}\text{Ca}(p,n)$
۳۲۱۴/۷۴	۱۷۴۸/۶۴	۳۴۱۴/۳۸	۱۵۶۰/۵۵	۸/۳۵	۳۰	$^{44}\text{Ca}(p,2n)$
۰	۱۵۶/۵۰	۰	۱۸۴/۹۱	۱/۹۳	۲۴	$^{46}\text{Ti}(p,a)$

اندازه‌گیری است. در واکنش  $^{46}\text{Ti}(p,a)$  سطح مقطع تجربی واکنش از نتایج شبیه‌سازی بیشتر است و به این دلیل، بهره تجربی تولید  $^{43}\text{Sc}$  بیشتر از بهره تئوری محاسبه شده در این مطالعه است. این اتفاق می‌تواند ناشی از دقت پایین کدهای شبیه‌سازی در برآورد مدل این واکنش هسته‌ای باشد.

در جدول ۲ بهره تجربی هر یک از این واکنش‌ها و نتایج شبیه‌سازی در انرژی موردنظر، ارائه شده است. به‌طور کلی در واکنش‌های هسته‌ای  $^{40}\text{Ca}(\alpha,p)$ ،  $^{41}\text{K}(\alpha,2n)$ ،  $^{42}\text{Ca}(d,n)$ ،  $^{43}\text{Ca}(p,n)$  و  $^{44}\text{Ca}(p,2n)$  سطح مقطع آزمایش‌های تجربی کمتر از نتایج شبیه‌سازی هستند و به طبع آن، بهره تجربی به‌دست‌آمده نیز باید کمتر از بهره تئوری باشد که به‌وضوح قابل مشاهده است؛ با این حال، اختلاف نتایج تجربی با تئوری بیش از حد انتظار است که می‌تواند ناشی از استفاده از ترکیب به‌جای هدف عنصری، غنای پایین هدف‌ها و یا دقت پایین

جدول (۲): مقایسه بهره تنوری تولید  $^{43}\text{Sc}$  با هدف‌های عنصری خالص با نتایج تجربی.

بهره شبیه‌سازی (MBq/μAh)			بهره تجربی (MBq/μAh)	انرژی (MeV)	هدف	واکنش
TALYS	EMPIRE	انرژی				
۳۲۹	۳۹۵	۲۰	[۱۰] ۲۴۰	۲۹	(۹۹/۹۹) Ca	$^{40}\text{Ca}(\alpha, p)$
			[۱۰] ۱۹۰	۲۰		
			[۱۰] ۸۸	۲۰	(۹۹/۹۹) CaCO <sub>۳</sub>	
۳۷۴/۶۰	۴۵۷/۵	۲۹	[۱۰] ۱۱۰	۲۹	(۹۶/۹۴) CaCO <sub>۳</sub>	
			[۱۰] ۸۴	۲۰		
۱۶۸/۱۰	۱۹۵/۹۰	۲۹	(۱۰) ۶۰	۲۹	(۹۵/۷۴) KCl	
۱۱۳/۹۰	۱۲۷/۹۰	۶	[۱۳] ۳۰/۳۴	۵/۸	(۹۳/۷۶) CaO	$^{44}\text{Ca}(d, n)$
			[۱۱] ۶۸	۶	(۸۰/۷۸) CaO	
۱۵۸	۱۹۶	۷	[۵] ۴۵	۶/۸	(۹۵/۹) CaCO <sub>۳</sub>	
۹۲۳/۸۴	۱۰۹۳/۰۶	۱۴	[۱۳] ۲۲۹	۱۳/۶	(۸۳/۹) CaO	$^{43}\text{Ca}(p, n)$
			[۲۵] ۴۱۰	۱۷/۵	(۷۹۰) CaCO <sub>۳</sub>	
۱۰۳۶/۷۰	۱۲۶۵/۴۰	۱۸	[۲] ۲۴۷	۱۸	(۷۵۸) CaCO <sub>۳</sub>	
۲۱۵	۱۹۵	۱۸	[۱۲] ۶/۲۵	۱۸	(۷۹۷) CaCO <sub>۳</sub>	$^{44}\text{Ca}(p, \gamma n)$
۵۶	۵۲/۴۰	۱۵	[۲۶] ۱/۰۷	۱۵/۱	(۷۹۷) Ti	$^{46}\text{Ti}(p, a)$
			[۲] ۱۵۰	۱۸	(۷۹۷) Ti	
۱۰۷	۱۰۱	۱۸	[۲] ۸۰	۱۸	(۷۹۷) TiO <sub>۲</sub>	

جدول (۳): قیمت حدودی هر میلی‌گرم از هدف‌های استفاده شده در این مطالعه [۲۷].

عنصر	ایزوتوپ	ترکیب	خلوص (%)	قیمت (یورو)
Ca	۴۰	Ca	۹۹/۹۹	۱/۹۰
		CaCO <sub>۳</sub>	۹۹/۹۹	۰/۷۰
		CaF <sub>۲</sub>	۹۹/۹۷	۰/۷۱
	۴۲	Ca	۹۳/۷۱	۶۸/۵۰
		CaCO <sub>۳</sub>	۹۴/۴۹	۵۹/۷۵
		CaCO <sub>۳</sub>	۸۳/۹۳	۴۰۲/۲۵
۴۴	Ca	۹۸/۷۸	۲۸/۲۰	
	CaCO <sub>۳</sub>	۹۸/۸۹	۲۴/۷۵	
K	۴۱	KCl	۹۹/۱۷	۱۴۵/۵۰
Ti	۴۶	Ti	۸۶/۱۰	۱۷/۸۵
		TiO <sub>۲</sub>	۹۶/۸۴	۱۸/۹۸

#### ۴. نتیجه‌گیری

طریق شبیه‌سازی توسط کدهای مونت‌کارلو TALYS،

EMPIRE و SRIM بررسی شد. برای این کار ابتدا توابع

برانگیختگی واکنش‌های هسته‌ای  $^{40}\text{Ca}(\alpha, p)$ ،  $^{41}\text{K}(\alpha, \gamma n)$ ،

در این مطالعه شرایط بهینه تولید رادیوایزوتوپ  $^{43}\text{Sc}$  با

پرتودهی هدف‌های غنی شده در یک سیکلوترون ۳۰ MeV از

آستانه تولید  $^{43}\text{Sc}$  است؛ پس با انتخاب بازه انرژی مناسب می‌توان از تولید آن‌ها جلوگیری کرد؛ اما در سایر واکنش‌ها، رادیوایزوتوپ  $^{44}\text{Sc}$  نیز تولید می‌شود که نیمه‌عمر بالاتر و انرژی آستانه تولید پایین‌تری نسبت به  $^{43}\text{Sc}$  دارد، پس حذف آن از محصول نهایی عملاً غیرممکن است.

بنابراین اگر هدف، تولید  $^{43}\text{Sc}$  خالص باشد و جنبه‌های اقتصادی نیز مدنظر نباشد، واکنش  $^{43}\text{Ca}(p,n)^{43}\text{Sc}$  در انرژی ۳۰ MeV برای سیکلوترون کرج، بالاترین بهره تولید را دارد؛ اما اگر تولید  $^{43}\text{Sc}$  بدون ناخالصی با بهره مناسب و کمترین هزینه ممکن هدف کار باشد، واکنش  $^{40}\text{Ca}(a,p)^{43}\text{Sc}$  بهترین انتخاب است؛ چون قیمت هدف‌های غنی شده  $^{40}\text{Ca}$  خیلی پایین‌تر از هدف‌های  $^{42}\text{Ca}$  و  $^{43}\text{Ca}$  است (جدول ۳). علاوه بر این، اگر وجود ناخالصی  $^{44}\text{Sc}$  در محصول نهایی اهمیتی نداشته باشد، واکنش  $^{43}\text{Sc}(p,\gamma)^{43}\text{Sc}$  در عین مقرون‌به‌صرفه بودن، بیشترین بهره تولید  $^{43}\text{Sc}$  و  $^{44}\text{Sc}$  را در این انرژی به دست می‌دهد.

$^{43}\text{Ca}(d,n)^{43}\text{Sc}$ ،  $^{43}\text{Ca}(p,n)^{43}\text{Sc}$  و  $^{46}\text{Ti}(p,a)^{43}\text{Sc}$  توسط کدهای TALYS و EMPIRE در بازه انرژی ۰ تا ۳۰ MeV برای رادیوایزوتوپ‌های اسکاندیم محاسبه شد. سپس توان ایستاندگی جرمی و برد ذرات پرتابه در این بازه انرژی در هدف‌های تعیین شده توسط کد SRIM محاسبه شد. بهره تولید  $^{43}\text{Sc}$  و ناخالصی‌های همراه آن در واکنش‌های ذکر شده با استفاده از داده‌های به‌دست‌آمده از این کدها و با انتگرال‌گیری عددی از فرمول بهره تولید در محیط MATLAB، محاسبه شد و در نهایت با نتایج حاصل از کارهای تجربی مقایسه شد.

نتایج این مطالعه نشان می‌دهد که علاوه بر  $^{43}\text{Sc}$ ، در واکنش‌های  $^{43}\text{Ca}(p,n)^{43}\text{Sc}$ ،  $^{43}\text{Ca}(d,n)^{43}\text{Sc}$  و  $^{40}\text{Ca}(a,p)^{43}\text{Sc}$  رادیوایزوتوپ  $^{43}\text{Sc}$  با نیمه‌عمر ۶۸۱ میلی‌ثانیه نیز تولید می‌شود که به راحتی در حین جداسازی شیمیایی واپاشی می‌کند؛ در واکنش  $^{46}\text{Ti}(p,a)^{43}\text{Sc}$  رادیوایزوتوپ‌های  $^{43}\text{Sc}$  و  $^{44}\text{Sc}$  نیز تولید می‌شوند که انرژی آستانه تولید هر دوی آن‌ها بیشتر از انرژی

## ۵. مراجع

1. A. R. Jalilian. *Principles of Positron Emission Tomography Radiopharmaceuticals*. Nuclear Science & Technology Research Institute, Tehran, Iran, 2012. [Persian]
2. T. S. Carzaniga, M. Auger, S. Braccini, M. Bunka, A. Ereditato, K. P. Nesteruk, P. Scampoli, A. Türler, N. P. Van Der Meulen. Measurement of  $^{43}\text{Sc}$  and  $^{44}\text{Sc}$  production cross-section with an 18 MeV medical PET cyclotron. *Appl. Radiat. Isot.* 129 (2017) 96-102.
3. M. Alabyad, G. Y. Mohamed, H. E. Hassan, S. Takács, F. Ditrói. Experimental measurements and theoretical calculations for proton, deuteron and  $\alpha$ -particle induced nuclear reactions on calcium: special relevance to the production of  $^{43,44}\text{Sc}$ . *J. Radioanalytical Nucl. Chem.* 316 (2018) 119-128.
4. L. Deilami-Nezhad, L. Moghaddam-Banaem, M. Sadeghi, M. Asgari. Production and purification of Scandium-47: A potential radioisotope for cancer theranostics. *Appl. Radiat. Isot.* 118 (2016) 124-130.
5. F. Roesch. Scandium-44: benefits of a long-lived PET radionuclide available from the  $^{44}\text{Ti}/^{44}\text{Sc}$  generator system. *Cur. Radiopharmaceuticals* 5 (3) (2012) 187-201.
6. A. Singh, R. Baum, I. Klette, N. P. Van Der Meulen, C. Müller, A. Türler, R. Schibli. Scandium-44 DOTATOC PET/CT: First in-human molecular imaging of neuroendocrine tumors and possible perspectives for Theranostics. *J. Nucl. Med.* 56 (3) (2015) 267.
7. C. Alliot, R. Kerdjoudj, N. Michel, F. Haddad, S. Huclier-Markai. Cyclotron production of high purity  $^{44m,44}\text{Sc}$  with deuterons from  $^{44}\text{CaCO}_3$  targets. *Nucl. Med. Bio.* 42 (6) (2015) 524-529.
8. N. P. Van Der Meulen, M. Bunka, K. A. Domnanich, C. Müller, S. Haller, C. Vermeulen, A. Türler, R. Schibli. Cyclotron production of  $^{44}\text{Sc}$ :

- from bench to bedside. *Nucl. Med. Bio.* 42 (9) (2015) 745-751.
9. C. Müller, M. Bunka, J. Reber, C. Fischer, K. Zhernosekov, A. Türler, R. Schibli. Promises of cyclotron-produced  $^{44}\text{Sc}$  as a diagnostic match for trivalent  $\beta^-$ -emitters: in vitro and in vivo study of a  $^{44}\text{Sc}$ -DOTA-folate conjugate. *J. Nucl. Med.* 54 (12) (2013) 2168-2174.
  10. K. Szkliniarz, M. Sitarz, R. Walczak, J. Jastrzębski, A. Bilewicz, J. Choiński, A. Jakubowski, A. Majkowska, A. Stolarz, A. Trzcińska, W. Zipper. Production of medical Sc radioisotopes with an alpha particle beam. *Appl. Radiat. Isot.* 118 (2016) 182-189.
  11. T. S. Carzaniga, N. P. Van Der Meulen, R. Hasler, C. Kottler, P. Peier, A. Türler, E. Vermeulen, C. Vockenhuber, S. Braccini. Measurement of the  $^{43}\text{Sc}$  production cross-section with a deuteron beam. *Appl. Radiat. Isot.* 145 (2019) 205-208.
  12. N. P. Van Der Meulen, R. Hasler. The possibility of producing  $^{43}\text{Sc}$  from  $^{44}\text{Ca}$  via the (p, 2n) nuclear reaction. *Nucl. Med. Bio.* 72 (2019) 9.
  13. K. V. Becker, E. Aluicio-Sarduy, T. Bradshaw, S. A. Hurley, A. P. Olson, K. E. Barrett, J. Batterton, P. A. Ellison, T. E. Barnhart, A. Pirasteh, J. W. Engle. Cyclotron production of  $^{43}\text{Sc}$  and  $^{44\text{g}}\text{Sc}$  from enriched  $^{42}\text{CaO}$ ,  $^{43}\text{CaO}$ , and  $^{44}\text{CaO}$  targets. *Front. Chem.* 11 (2023) 1167783.
  14. M. Jeldani, A. R. Azadbar. Calculation of the production yield of theranostic  $^{67}\text{Cu}$  radioisotope via the  $^{68}\text{Zn}(p,2p)^{67}\text{Cu}$ ,  $^{70}\text{Zn}(p,\alpha)^{67}\text{Cu}$ ,  $^{70}\text{Zn}(d,x)^{67}\text{Cu}$  and  $^{64}\text{Ni}(\alpha,p)^{67}\text{Cu}$  reactions. *J. Nucl. Sci., Eng. Tech.* 45 (4) (2024) 179-189. [Persian]
  15. A. Jafari, M. R. Aboudzadeh, M. Sharifian, M. Sadeghi, A. Rahiminezhad, B. Alirezapour, S. Rajabifar. A Theoretical and Experimental study of the Theranostic Radionuclide Scandium-47 in Karaj Cyclotron. *J. Nucl. Sci., Eng. Tech.* 96 (3) (2021) 113-121. [Persian]
  16. F. F. Knapp, A. Dash. *Radiopharmaceuticals for Therapy*. Springer, New Delhi, India, 2016.
  17. A. Koning, S. Hilaire, S. Goriely. *TALYS-1.96/2.0 Simulation of Nuclear Reactions*. IAEA, Vienna, Austria, 2021.
  18. M. Herman, R. Capote, M. Sin, A. Trkov, B. V. Carlson, P. Obložinsky, C. M. Mattoon, H. Wienkey, S. Hoblit, Y. S. Cho, G. P. A. Nobre, V. A. Plujko, V. Zerkin. *EMPIRE-3.2 Malta: Modular System for Nuclear Reaction Calculations and NNuclear Data Evaluation*. IAEA, Vienna, Austria, 2013.
  19. J. F. Ziegler, M. D. Ziegler, J. P. Biersack. SRIM- The Stopping and Range of Ions in Matter. *Nucl. Instrum. Meth. B* 268 (11-12) (2010) 1818-1823.
  20. V. N. Levkovski. Cross sections of medium mass nuclide activation (A= 40-100) by medium energy protons and alpha-particles (E= 10-50 MeV). *Inter-Vesi, Moscow* (1991).
  21. A. J. Howard, H. B. Jensen, M. Rios, W. A. Fowler, B. A. Zimmerman. Measurement and theoretical analysis of some reaction rates of interest in silicon burning. *Astrophysical J.* 188 (1974) 131-140.
  22. T. Matsuo, T. T. Sugihara. Evidence for low-momentum-transfer process in  $^{41}\text{K}(\alpha,n)^{44\text{m,g}}\text{Sc}$  reactions from range measurements of products. *Canadian J. Chem.* 39 (3) (1961) 697-705.
  23. T. J. De Waal, M. Peisach, R. Pretorius. Activation cross sections for deuteron-induced reactions on calcium isotopes up to 5.5 MeV. *Radiochimica Acta* 15 (3) (1971) 123-127.
  24. T. J. De Waal, M. Peisach, R. Pretorius. Activation cross sections for proton-induced reactions on calcium isotopes up to 5.6 MeV. *J. Inorganic Nucl. Chem.* 33 (9) (1971) 2783-2789.
  25. M. Sitarz, K. Szkliniarz, J. Jastrzębski, J. Choiński, A. Guertin, F. Haddad, A. Jakubowski, K. Kapinos, M. Kisieliński, A. Majkowska, E. Nigrón. Production of Sc medical radioisotopes with proton and deuteron beams. *Appl. Radiat. Isot.* 142 (2018) 104-112.
  26. K. A. Domnanich, R. Eichler, C. Müller, S. Jordi, V. Yakusheva, S. Braccini, M. Behe, R. Schibli, A. Türler, N. P. Van Der Meulen. Production and separation of  $^{43}\text{Sc}$  for radiopharmaceutical purposes. *EJNMMI Radiopharmacy Chem.* 2 (2017) 1-7.
  27. Prices of stable isotopes. Available at: <https://institut-seltene-erden.de/unser-service-2/metall-preise/preise-fuer-stabile-isotope>. ccessed July 20, 2024.