

ANEXO I - EDITAL IEN-CNEN nº 009/2024 – BOLSA BCI (DA)

**PROJETO DE PESQUISA E DESENVOLVIMENTO
TECNOLÓGICO A SER DESENVOLVIDO NA DIRAD/IEN**

IDENTIFICAÇÃO

Supervisor: Julio Cezar Suita

Título do Trabalho: Análises de viabilidade e prospecções de experimentos nos cíclotrons Cyclone 18 e Cyclone 30 no IPEN-CNEN/SP e caracterização de materiais radioativos provenientes do descomissionamento do CV-28 no IEN-CNEN/RJ utilizando os programas FLUKA e SIMNRA.

Área de interesse da CNEN (item I do Edital): Pesquisa e desenvolvimento de técnicas nucleares aplicadas à saúde, indústria e preservação do meio ambiente.

I – INTRODUÇÃO

O IEN (Instituto de Engenharia Nuclear) possui um acelerador do tipo cíclotron, modelo CV-28 fabricado pela *The Cyclotron Co.* [1], que foi montado e instalado em 1974, e utilizando na produção de radiofármacos por décadas, além de auxiliar em diversas frentes de pesquisas. Porém, por conta de um colapso em suas condições de operação, foi decidido que o descomissionamento do CV-28 se faz necessário do ponto de vista da segurança radiológica para o próprio instituto e para as entidades mantenedora e controladora. Por conta disso, duas linhas de pesquisa se abrem: parceria com o IPEN e o uso de seus cíclotrons Cyclone 18 [2] e Cyclone 30 [2] para atender as demandas por feixes de prótons da DIRAD, e pesquisas associadas ao processo de descomissionamento do CV-28.

Quanto a primeira linha, é importante salientar as capacidades dos cíclotrons Cyclone 18 e Cyclone 30, nas Tabelas 1 e 2, respectivamente:

Cíclotron Cyclone 18	
Parâmetro	Valor
Íon Acelerado	H-
Íon Extraído	H+
Energia Mínima	18MeV
Energia Máxima	18MeV
Corrente Garantida	100µA

Tabela 1: Características do Cíclotron Cyclone 30 do IPEN-CNEN/SP

Cíclotron Cyclone 30	
Parâmetro	Valor
Íon Acelerado	H-
Íon Extraído	H+
Energia Mínima	15MeV
Energia Máxima	30MeV
Corrente Garantida	350µA

Tabela 2: Características do Cíclotron Cyclone 30 do IPEN-CNEN/SP

Com estas características, é possível realizar uma variedade de experimentos utilizando ativações por feixe de prótons, similares às possíveis no CV-28, o que torna esta parceria extremamente importante para a continuação das linhas de pesquisas e conhecimentos que por outro motivo seriam perdidos com o descomissionamento do CV-28.

Para isto, algo que pode realizar enormes ganhos em eficiência e segurança é a utilização de programas de simulação e análise prévios para cada experimento a ser realizado em tais acelerados. Assim, é possível prever, com um nível de precisão razoável, quais parâmetros são adequados a cada experimento, como energia para o Cyclone 30 e nível de ativação (tempo de irradiação e corrente). No IPEN, algo similar já é feito para parte de seus experimentos e um programa utilizado é o FLUKA [3], que será discutido mais à frente.

Sobre o CV-28 e seu descomissionamento, a Figura 1 [1] contém o desenho esquemático do sistema em torno do acelerador e suas linhas. Os finais das linhas de irradiação podem ainda ser utilizados de algumas formas, como uma linha de pesquisa com irradiação utilizando de fontes de alfas, porém a caverna onde o cíclotron se encontra deverá ser descomissionada por conta da alta quantidade de materiais ativados por consequência da utilização do cíclotron por um período tão extenso. Atualmente, a utilização da câmara onde o cíclotron se encontra para armazenar outros materiais ativados, tanto do cíclotron e suas linhas de feixe quanto de materiais de outros lugares, está sendo considerada por conta da impropriedade em retirar o cíclotron de sua blindagem atual e proteções disponíveis neste ambiente.

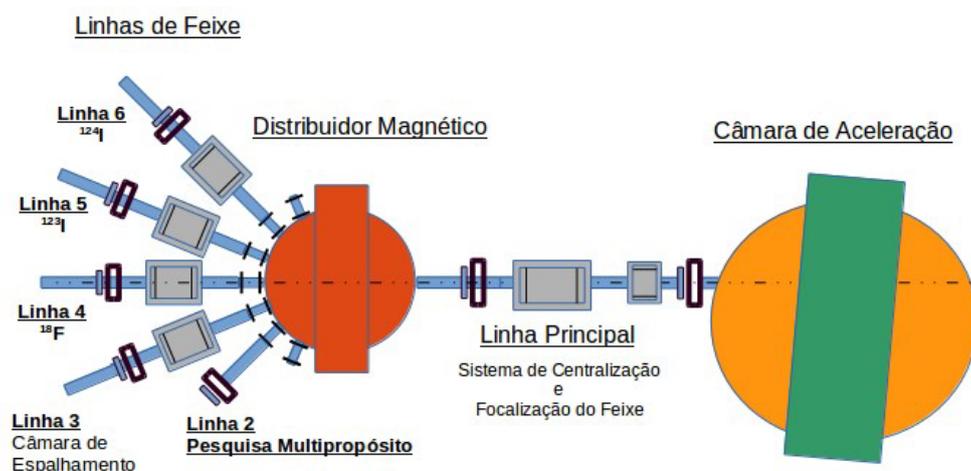


Figura 1 Desenho esquemático do Cíclotron CV-28 do IEN-CNEN/RJ.

Qualquer que seja a modalidade de descomissionamento, uma das principais atividades a serem realizadas é o levantamento e a caracterização dos materiais ativados presentes no ambiente. No quesito caracterização é importante obter a composição química/isotópica dos materiais, já que como mencionado, alguns desses materiais foram expostos a prótons, alfas e principalmente nêutrons por décadas, com um uso intenso no auge da produção de radiofármacos.

Visando agilidade e segurança, uma das ferramentas que pode auxiliar neste processo é o programa SIMNRA [4], este capaz de prover resultados analíticos de experimentos de RBS [5], ERDA [6], NRA [7] e PIGE [8] com alta precisão, confrontando estes resultados com os obtidos por detectores presentes no IEN-CNEN/RJ é possível analisar o conteúdo isotópico dos materiais provenientes do descomissionamento.

Fundamentos Teóricos:

Entre os conceitos, ferramentas e técnicas que serão utilizados durante o projeto, se encontram os seguintes tipos de experimentos:

- **RBS** (*Rutherford Backscattering Spectroscopy*) utilização de feixes de partículas carregadas (prótons e alfas, por exemplo) para se obter dados sobre as concentrações de determinados elementos e a profundidade dos mesmos em um dado material analisado;
- **ERDA** (*Elastic Recoil Detection Analysis*) analisa concentrações de materiais leves, especialmente hidrogênio e hélio, utilizando de um feixe incidente de partículas carregadas, normalmente alfas ou partículas pesadas, sobre um material e a detecção dos núcleos leves expelidos. Tem como principal uso a detecção de formações de bolhas em um determinado material;
- **Ativação/Produção de Isótopos** Esta não é exatamente uma técnica específica, mas foi um dos principais usos do Cíclotron CV-28, o bombardeamento de um determinado material para se obter outro material, normalmente um isótopo de alto interesse, como ^{124}I e ^{64}Cu para a área de saúde e ^{127}Xe e ^{57}Co para a indústria. O funcionamento tem como base as reações que podem ocorrer, como $X(p,n)Y$, quando um determinado material é bombardeado por um feixe de partículas, que no caso dos cíclotrons em questão consiste basicamente de prótons com diferentes energias, permitindo a produção de uma variedade de isótopos.

Já sobre as ferramentas, podemos destacar duas:

- **FLUKA/FLAIR** são dois programas que agem em conjunto, sendo o FLUKA o motor e o FLAIR a interface de usuário. Este conjunto trabalha com simulações utilizando do Método de Monte Carlo para realizar estimativas de transporte que compreendem a análise das interações de até 100 diferentes partículas incidentes em praticamente qualquer tipo de material, as consequentes reações dessas interações e também os produtos, possuindo diversas formas de apresentar resultados, sendo as de maior interesse a capacidade de estimar quais isótopos são produzidos durante um experimento de Ativação, como descrito acima, e como determinadas partículas atravessam/deixam o material alvo após as interações, como necessário para experimentos RBS/PIGE;
- **SIMNRA** por sua vez, é capaz de estimar analiticamente (não se trata de um programa de simulação Monte Carlo) resultados de experimentos como ERDA, RBS, PIXE e PIGE através da inserção de parâmetros iniciais como: composição do material irradiado, tipo de partícula irradiada, intensidade do feixe e tipo de detector utilizado. Apesar de não ser o intuito a estimativa dos experimentos listados acima, o programa pode ser utilizado facilmente para analisar a composição isotópica de um determinado material analisado através dos parâmetros iniciais, logo ele se faz muito útil na caracterização dos materiais ativados durante a operação do CV-28 e que devem ser armazenados após o descomissionamento do mesmo.

2 –OBJETIVOS

Os dois principais objetivos deste projeto são: auxiliar e realizar experimentos em parceria com o IPEN utilizando de seus cíclotrons para atender e dar continuidade às competências acumuladas no IEN com o uso de aceleradores e; contribuir na caracterização dos materiais ativos presentes no cíclotron CV-28 e seu entorno, com vistas a estabelecer as alternativas mais seguras e viáveis para o seu descomissionamento.

3 – JUSTIFICATIVA

A descontinuidade do funcionamento do CV-28 deixou um vazio, onde os pesquisadores da DIRAD possuem o conhecimento e a capacidade de realizar pesquisas importantes para a área, mas não contam no momento com um ciclotron para tal, a interrupção do funcionamento do acelerador do IEN interrompeu a realização de pesquisas nas áreas de produção de radioisótopos de interesse para a área de saúde, indústria e preservação do meio-ambiente, inclusive com o comprometimento de dissertação de mestrado que estavam em desenvolvimento. A alternativa imediata para a continuação desses trabalhos é buscar a realização dessas irradiações usando os aceleradores do IPEN. Entretanto, os ciclotrons do IPEN já possuem sua demanda corriqueira. Logo a otimização de qualquer experimento realizado através desta parceria acarreta uma maior facilidade e agilidade no emprego das capacidades dos pesquisadores dos dois institutos. Ainda sobre o CV-28, o seu descomissionamento certamente será um processo longo e devido ao extenso período de utilização do mesmo, há uma gama de materiais com níveis elevados de atividade e certos isótopos mais difíceis de prever, logo, o uso de ferramentas que agilizem o processo de identificação e quantificação das atividades radioativas presentes tornará o descomissionamento acelerador e seu periféricos, mais ágil e seguro do ponto de vista radiológico. Outro ponto relevante que se pretende desenvolver com o presente plano de trabalho, está relacionado ao acervo de dados de irradiações realizadas com o CV-28, especialmente em seus últimos vinte anos de vida útil. É objetivo dessa proposta também realizar simulações com o programa FLUKA de algumas dessas irradiações, com o propósito de se validar o uso dessa ferramenta no IEN e construir uma memória consistente do legado deixado pelo CV-28 em seus quase cinquenta anos de importantes serviços prestados à CNEN e a nossa sociedade.

Esses objetivos, que estão divididos em três frentes de trabalho distintas, requerem um prazo de realização de pelo menos três anos para a sua execução, com atividades intercaladas entre essas ações, conforme detalhamento constante no cronograma apresentado na sequência.

IV – METODOLOGIA

Com relação a utilização dos Ciclotrons presentes no IPEN, um ganho imediato seria a retomada da produção de alguns isótopos de interesse para os pesquisadores presentes na DIRAD e no IEN. Com a parada das atividades do CV-28 algumas linhas de pesquisas ficaram em suspenso devido a falta dos isótopos necessários, como radiotraçadores, marcadores e fontes de calibração. Logo, a retomada da obtenção de isótopos para estes pesquisadores e seus respectivos experimentos seria um grande ganho imediato.

Nesta tarefa, pode-se utilizar os programas computacionais FLUKA e FLAIR para realizar a definição dos parâmetros iniciais de cada experimento, como: alvo a ser irradiado, se sua composição pode ser natural ou se será necessário realizar a aquisição de alvos enriquecidos; carga integrada de irradiação; energia de irradiação, visando o pico da seção de choque desejada e evitar a produção de isótopos indesejados e; tempo de decaimento até a utilização do material resultante.

De forma simplificada, o fluxo de trabalho envolvendo experimentos partindo do IEN para o IPEN pode ser descrito conforme o fluxograma da figura 1.

É importante ressaltar que haverá uma conversa constante entre o pesquisador que propor o experimento e o bolsista que traz as estimativas através da simulação com o programa FLUKA. É através dessa interação que é possível otimizar os experimentos e os ganhos em termos de resultados, agilidade de realização dos experimentos e resultados mais precisos para cada aplicação, como e desenvolvimento de novos radiotraçadores com atividades adequadas para os propósitos requeridos, por exemplo.

Já em relação a caracterização do material pertinente ao descomissionamento, boa parte das atividades será realizada experimentalmente, em medições utilizando detectores do tipo HPGe presentes nas instalações da DIRAD. Porém, no caso de alguns materiais, equipamentos e partes, onde algum isótopo não seja totalmente identificado durante as medições, ou haja alguma dúvida em relação a segurança da realização das medições, é possível utilizar das ferramentas SIMNRA e FLUKA/FLAIR para predizer quais isótopos estão presentes e até uma estimativa da atividade atual dos mesmos.

No caso do SIMNRA, é possível identificar as condições iniciais de um determinado experimento através do espectro produzido através de um detector do tipo HPGe, por exemplo. Utilizando da superposição do espectro experimental e o analítico produzido pelo SIMNRA e ajustando os parâmetros iniciais de experimento dentro do SIMNRA até que a superposição fique perfeita obtemos os parâmetros iniciais para o experimento, neste sentido a composição do material inicial e a carga integrada são os dois fatores de interesse e daí a partir deles é possível aferir determinadas linhas de emissão que não ficam tão claras no espectro experimental.

Sobre o programa FLUKA, caso seja possível determinar com precisão o material inicial, é relativamente simples produzir o resultado final através de uma estimativa da carga integrada e das energias envolvidas, logo, é possível determinar quais isótopos estão atualmente presentes na amostra.

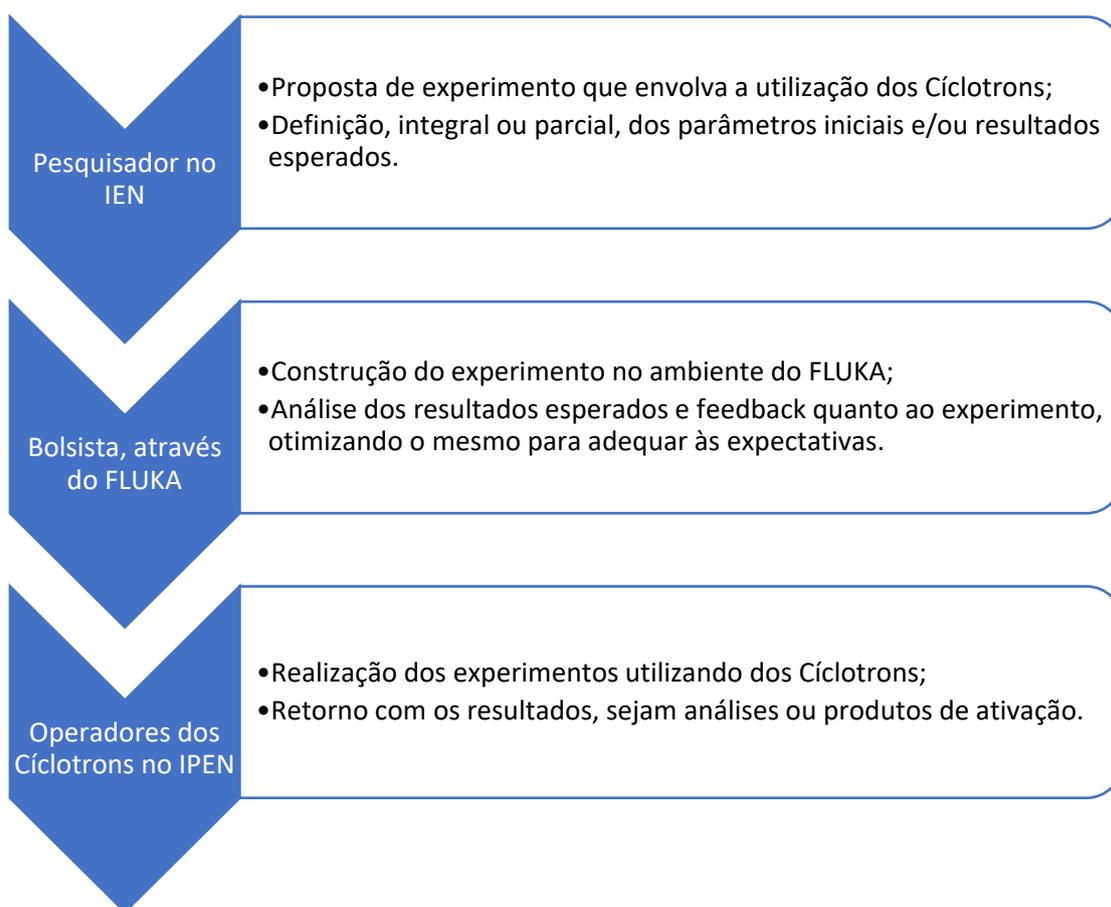


Figura 1 – Planejamento das experiências desenvolvidas com o IPEN.

4 – PLANO DE TRABALHO

Atividade 1: Acompanhar e desenvolver a rotina de caracterização das peças ativadas do CV-28 e suas linhas de feixe, bem como participar da organização e planejamento dos trabalhos de prospecção e caracterização.

Atividade 2: Desenvolver metodologia por meio de programas de Monte Carlo (SIMNRA) para a definição da geometria de contagem com detector HPGe, com vista a determinação de suas atividades radioativas.

Atividade 3: Estabelecer e realizar rotinas de simulação para a realização de contagens das peças ativadas de acordo com as necessidades do programa de descomissionamento do CV-28, em fase de elaboração;

Atividade 4: Implantação do Programa FLUKA em plataforma de computação com capacidade e velocidade compatíveis com as demandas de até centenas de milhões de eventos.

Atividade 5: Validação dos resultados das simulações feitas com o Programa FLUKA usando os resultados de irradiações realizadas com o cíclotron CV-28 nos últimos três anos.

Atividade 6: Realização de simulação para irradiações a serem feitas com o uso do cíclotron C18 do IPEN e realização de contagens com detector HPGe dos espectros de raios gama dos alvos irradiados.

Atividade 7: Construção de um banco de simulações das irradiações realizadas com o CV-28 nos últimos 20 anos, bem como fazer sua catalogação por tipo de partícula, alvo e energia.

Atividade 8: Elaboração de Relatórios.

5 - RESULTADOS ESPERADOS

5.1. Inventário de peças ativadas do CV-28, suas linhas de feixes, sistemas de alvos e estruturas das casamatas.

5.2. Metodologia de determinação de parâmetros para a realização de irradiações nos cíclotrons do IPEN instalada e operacional com o uso do programa FLUKA no novo computador de alto desempenho em instalação no IEN.

5.3. Acervo de dados e resultados das irradiações com o Cíclotron CV-28 do IEN levantado com dados de feixes com prótons, partículas alfas e dêuterons.

5.4. Organização de arquivo com acervo de dados gerados com o cíclotron CV-28 do IEN.

6 - CRONOGRAMA DE ATIVIDADES

O cronograma é apresentado em trimestres e refere-se às atividades descritas no item 4. (Proposta)

Atividades	Ano 1				Ano 2				Ano 3			
	1	2	3	4	1	2	3	4	1	2	3	4
Atividade 1	X											
Atividade 2	X	X	X									
Atividade 3		X	X	X								
Atividade 4			X	X	X							
Atividade 5				X	X	X						
Atividade 6					X	X	X	X	X	X	X	
Atividade 7									X	X	X	X
Atividade 8				X				X				X

7 – REFERÊNCIAS

- [1] Furlanetto, J. A. D., et al. "Operation and maintenance of CV-28 cyclotron." (1983).
- [2] Oliveira, Henrique Barcellos de. Modelos analíticos para o desenvolvimento de alvos metálicos de alta performance irradiados nos ciclotrons Cyclone 30 e Cyclone 18 do IPEN-CNEN/SP. Diss. Universidade de São Paulo, 2009.
- [3] Battistoni, Giuseppe, et al. "Overview of the FLUKA code." *Annals of Nuclear Energy* 82 (2015): 10-18.
- [4] Mayer, M. "Improved physics in SIMNRA 7." *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms* 332 (2014): 176-180.
- [5] Perrière, Jaques. "Rutherford backscattering spectrometry." *Vacuum* 37.5-6 (1987): 429-432.
- [6] Bik, WM Arnold, and F. H. P. M. Habraken. "Elastic recoil detection." *Reports on Progress in Physics* 56.7 (1993): 859.
- [7] Mayer, Matej. "SIMNRA, a simulation program for the analysis of NRA, RBS and ERDA." AIP conference proceedings. Vol. 475. No. 1. American Institute of Physics, 1999.
- [8] Mayer, M. "An expert-assisted system for improving the quality of IBA simulations by SIMNRA." *Journal of Physics: Conference Series*. Vol. 2326. No. 1. IOP Publishing, 2022.
- [9] Boson, Jonas, Göran Ågren, and Lennart Johansson. "A detailed investigation of HPGe detector response for improved Monte Carlo efficiency calculations." *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment* 587.2-3 (2008): 304-314.