

ЦИФРОВАЯ ВИЗУАЛИЗАЦИЯ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ЭЛЕКТРОННОГО ИЗЛУЧЕНИЯ В ПОЛИЭТИЛЕНЕ SIMULATION OF E-BEAM DISTRIBUTION IN POLYETHYLENE

Татьяна Александровна Максимова **Tatiana Maksimova**

магистрант magistracy student

t.a.maksimova@urfu.ru,

Уральский федеральный университет, Ural Federal University
Екатеринбург, Россия

Олег Владимирович Рябухин **Oleg Riabukhin**

кандидат физико-математических наук, доцент

o.v.ryabuhin@urfu.ru,

Уральский федеральный университет, Candidate of Physical and Mathematical Sciences
Екатеринбург, Россия Ural Federal University

Аннотация. В работе представлены материалы моделирования распространения пучка электронов с энергией 10 МэВ в полиэтилене в компьютерной программе PCLab. Представлены интегральные и дифференциальные характеристики распределения электронов по глубине материала. На основе характеристик получено представление о формировании поглощенной дозы в исследуемом объекте — полиэтиленовой пробирке, подвергающейся радиационной обработке, с целью обеспечения стерильности, в Центре радиационной стерилизации УрФУ.

Ключевые слова: Моделирование; Электронное излучение; Полиэтилен; Ускоритель электронов.

Abstract. The paper presents materials for simulation the propagation of an electron beam with an energy of 10 MeV in polyethylene using the PCLab computer codes. The integral and differential characteristics of the electron's distribution of over the depth of the material are presented. Based on the characteristics, an idea was obtained about the formation and distribution of the absorbed dose in the object under study — a polyethylene test tube subjected to radiation processing in order to ensure sterility at the Center for Radiation Sterilization of UrFU.

Keywords: Simulation; Electron irradiation; Polyethylene; E-beam accelerator.

Введение

Одним из товаров, обрабатываемых в Центре радиационной стерилизации УрФУ, являются полиэтиленовые пробирки для забора крови. Стандартная процедура контроля облучения подразумевает проведение дозиметрических

измерений в контрольной точке упаковки, в которой пробирки прибывают на процедуру радиационной стерилизации (РС). В то же время известно [1], что при облучении полиэтилена в нем формируются дефектные структуры в виде радикалов, приводящих к изменению структурных и

оптических свойств среды. Наличие такой дефектной структуры в принципе позволяет использовать саму обрабатываемую продукцию как контрольные процедуры РС. Измерив изменение оптических свойств с помощью спектрометрии или структурных — с помощью электронного парамагнитного резонанса, мы можем поставить в соответствие изменению свойств значение поглощенной дозы, полученной пробиркой при проведении РС. Данный подход позволит иметь дополнительный контроль стерильности продукции без использования дополнительной дозиметрической системы.

Для понимания и представления формирования объемного распределения дефектной структуры в полиэтиленовых пробирках при облучении электронами и ее визуализации в необходимо промоделировать движение электронов в исследуемой среде, получить интегральные и дифференциальные характеристики распределения излучения при взаимодействии с молекулами полиэтилена. Возможность такой процедуры имеется в программе PCLab (компьютерная лаборатория) [2], в которой заданные параметры ионизирующего излучения и компонентов среды, на которые оно падает, позволяют построить траектории движения частиц, оценить пробеги, потери энергии на ионизацию, тормозные процессы, изменение потоковых величин с глубиной материала. Основным достоинством данного пакета является возможность задания широкого диапазона энергий падающего излучения.

Исходя из того что нами исследуются различными метода-

ми полиэтиленовые пробирки, в качестве материала для моделирования взят полиэтилен с плотностью $0,92 \text{ г/см}^3$. Падающее излучение — электроны с энергией 10 МэВ ускорителя УЭЛР — 10 – 10С. Для качественной оценки процессов, протекающих в толщине материала, будут взяты полученные в результате моделирования расчетные значения потерь энергии электронов при движении в полиэтилене, их распределение по глубине, суммарные энергетические потери энергии в объеме среды на толщинах порядка миллиметров, соответствующих толщинам стенок исследуемых пробирок.

Моделирование взаимодействия ускоренных электронов с полиэтиленом

Для проведения моделирования использовались два режима программы CONST и FLUX. В первом режиме производился расчет основных констант, определяющих взаимодействие электронов со средой и используемых во втором режиме в качестве входных величин.

На рисунке 1 приведен скриншот входных данных о средах, с которыми происходит взаимодействие, и энергетических и геометрических параметрах электронного излучения.

```

model1.fdc - Блокнот
Файл Правка Формат Вид Справка
subs ( polietilene )
2  0.92000D+00 0.62500D-01
0.60000D+01 0.12000D+02 0.85630D+00
0.10000D+01 0.10080D+01 0.14370D+00
subs ( air )
3  0.12900D-02 0.62500D-01
0.70000D+01 0.14000D+02 0.75500D+00
0.80000D+01 0.16000D+02 0.23200D+00
0.18000D+02 0.39948D+02 0.13000D-01
ener
0.50000D-01 0.10000D+02
0.10000D-01 0.50000D-01 0.95000D+01
0.80000D+00 0.10000D+02 0.20440D+01
  
```

Рис. 1. Входные данные о среде и излучении, для которых проводится моделирование

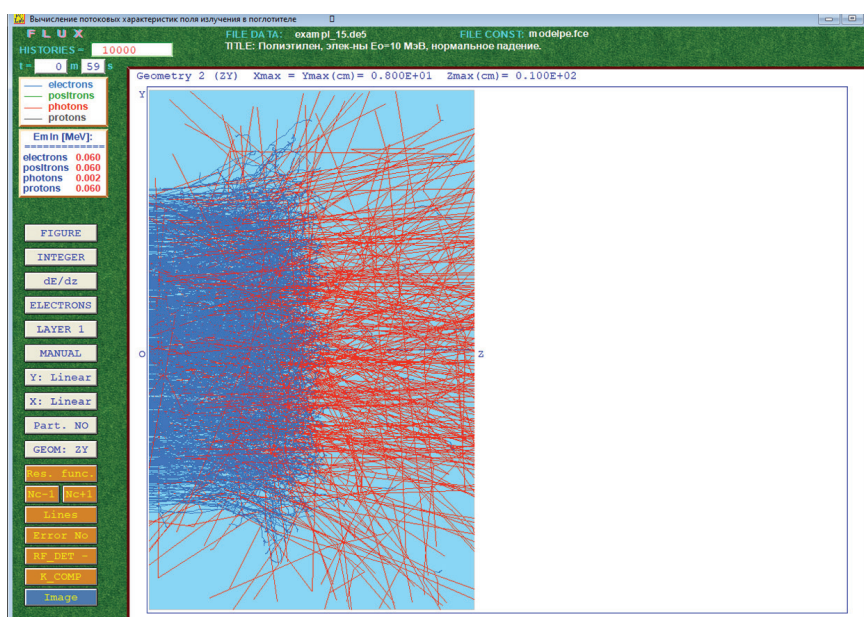


Рис. 2. Визуализация движения электронов (синие траектории) и гамма-излучения (красные траектории) в полиэтилене

Результат визуализации моделирования в режиме FLUX траекторий движения электронов в полиэтилене представлен на рисунке 2 (в проекции на плоскость YZ) при нормальном падении пучка электронов ускорителя с геометрическими размерами пятна контакта 10 см в диаметре.

Наблюдается сложная картина совокупности процессов в объеме полиэтилена, включающих рассеяние электронов, в том числе и многократное (синие траектории) в электронной подсистеме исследуемой среды, приводящих к ее ионизации и формированию характеристического рентгеновского и, в малой степени, тормозного излучений (красные траектории) в результате переходов орбитальных электронов верхних оболочек на вакансии в нижних оболочках и торможения электронов в электромагнитном поле ядер и орбитальных электронов соответственно.

Данные процессы и приводят к первичному образованию алкильных радикалов $-CH_2 - \dot{C}H - CH_2-[3]$ в результате разрыва химической связи и потери атома водорода молекулой полиэтилена. Наличие данных радикалов было зафиксировано нами в спектрах ЭПР облученных пробирок [4].

С учётом выбранного масштаба по оси Z (10 см) видим, что пробег электронов в полиэтиленовой среде составляет порядка 5-6 см, из чего можно сделать вывод, что толщину стенки изучаемых пробирок данное излучение будет преодолевать без особых затруднений, а поглощенная доза будет формироваться за счет потерь энергии электронов на первом миллиметре пути, если рассматривать движение в сплошной среде из полиэтилена.

Потери энергии частиц на начальном этапе пути можно оценить

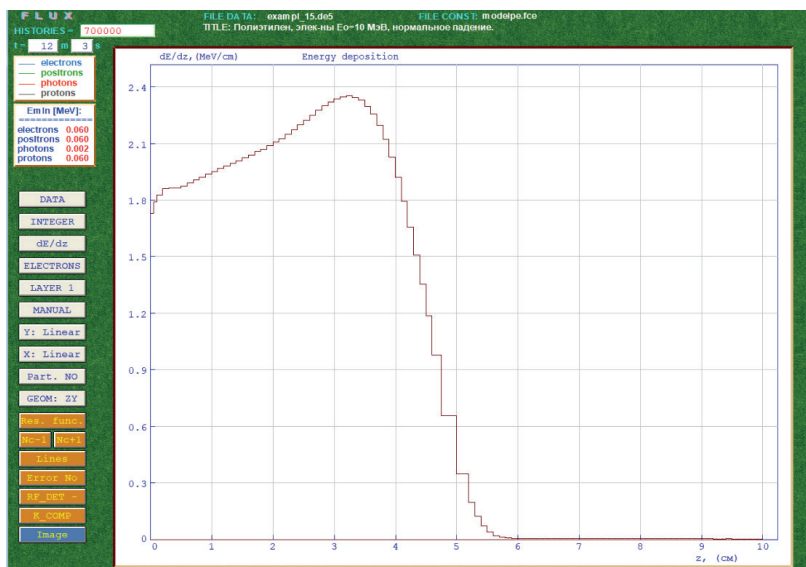


Рис. 3. Потери энергии электронов при движении в полиэтилене

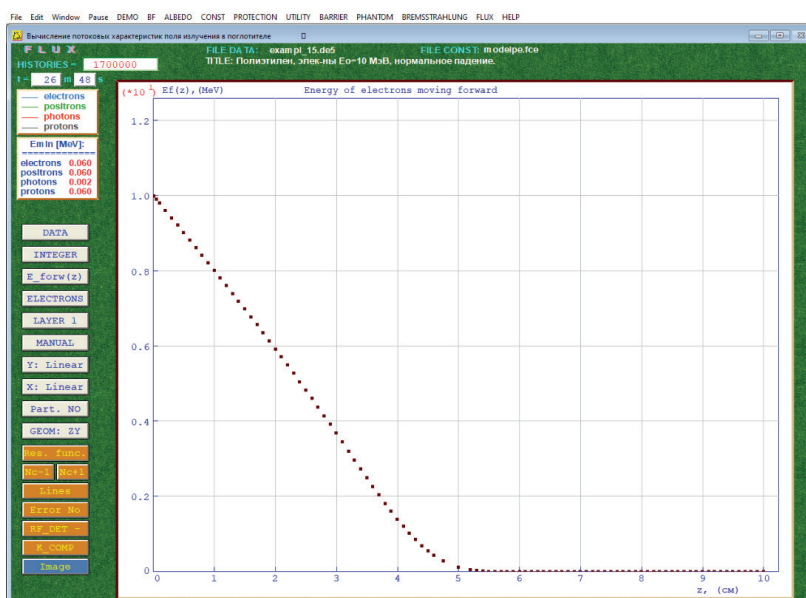


Рис. 4. Распределение электронов по полиэтилену

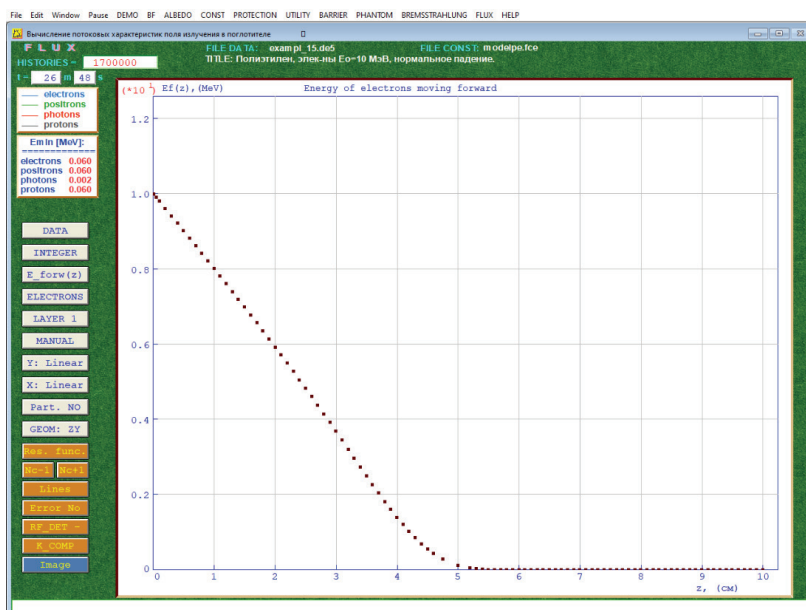


Рис. 5. Изменение энергии электронов в полиэтилене с глубиной

по соответствующему распределению потерь энергии, представленному на рисунке 3.

Видим, что их величина растет от значения порядка 1,6 до примерно 1,9 МэВ/см. Данное значение позволит оценить потери всего флюенса частиц, прошедшего через поперечное сечение пробирки. Большие значения потерь, на задней границе толщи пробирки, как и большее количество электронов (рисунок 4) в этой области, говорит о том, что в толщине стенки будет некоторый градиент поглощенной дозы от поверхности к внутреннему диаметру.

Также на рисунке 5 видим, что энергия электронов, двигающихся в толще стенки, убывает от поверхности к внутреннему диаметру, что очевидно с учетом роста потерь энергии. На рисунках 6, 7 представлена информация об электронах, двигающихся противоположно первоначальному направлению за счет многократного рассеяния. Эти электроны также участвуют в формировании поглощенной дозы, но в гораздо меньшей степени, в сравнении с движущимися в первоначальном направлении.

По интегральному распределению электронов, остановившихся в толще стенки пробирки, представленному на рисунке 8, также можно оценить полную потерю энергии, оставшейся в данном объеме полиэтилена.

Дифференциальная характеристика распределения поглощенной энергии в единице объема, представленная на рисунке 9, показывает некоторый рост в области от поверхности пробирки к границе внутреннего диаметра, хотя, как видно из рисунка, погрешность расчета довольно большая и связана с малым количеством промоделированных ситуаций взаимодействия электронов с компонентами среды.

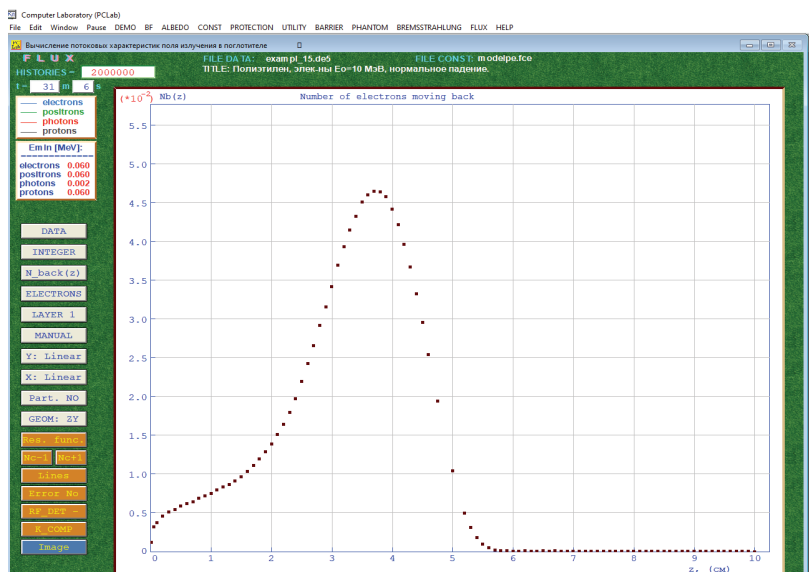


Рис. 6. Электроны, двигающиеся в обратном направлении в полиэтилене

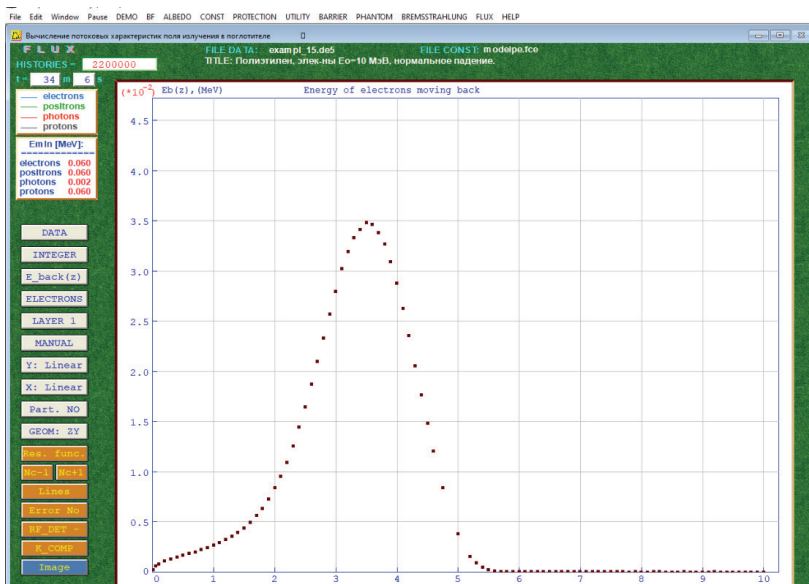


Рис. 7. Энергия электронов, двигающихся в обратном направлении в полиэтилене

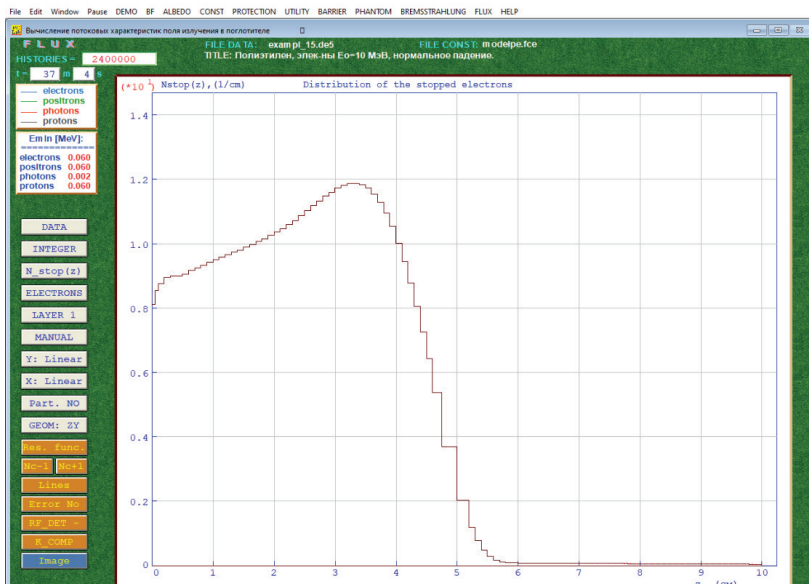


Рис. 8. Количество остановившихся электронов в полиэтилене

Закключение

При проведении моделирования движения электронов с энергией 10 МэВ в полиэтилене нами получены распределения числа и потерь энергии электронов по глубине сплошной среды. С учетом толщины стенки исследуемой пробирки произведены оценки изменения этих величин от поверхности к границе внутреннего диаметра, визуализированы траектории частиц и область полиэтилена, в которой протекают процессы формирования радикалов в результате процессов рассеяния излучения и передачи энергии.

Несмотря на полученные качественные оценки дозовых характеристик, требуется провести моделирование в режиме BARRIER программы PCLab. В этом режиме можно задать реальные геометрические размеры барьера на пути излучения, т.е. исследуемой пробирки,

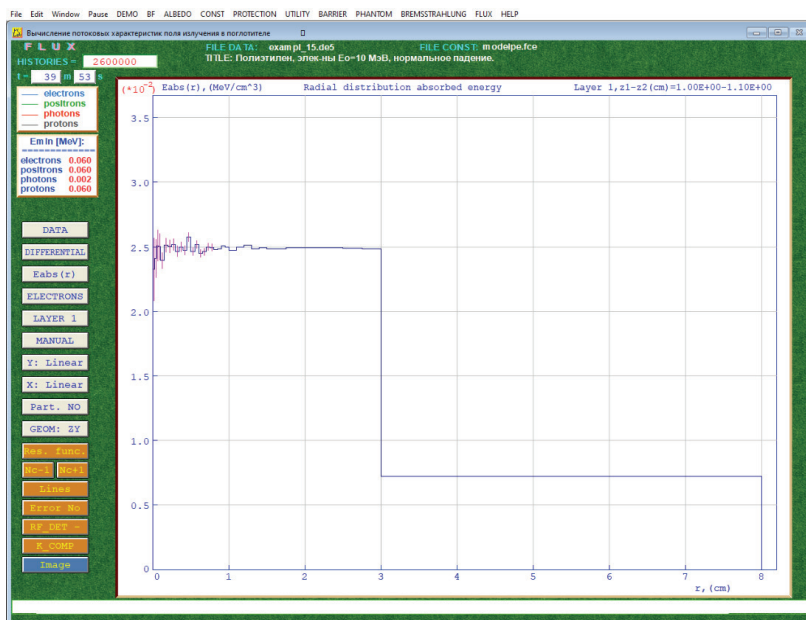


Рис. 9. Распределение поглощенной энергии на единицу объема при движении электронов в полиэтилене

и получить непосредственную картину показанных выше распределений в реальном объекте.

Результаты моделирования анализируются нами на соответствие полученным экспериментальным данным, полученными с помощью оптических и ЭПР — измерений.

Список литературы

1. Радиационная модификация полимеров / Г. Н. Пьянков, А. П. Мелешевич, Е. Г. Ярмишко, А. М. Кабакчи, С. И. Омельченко. Киев: Техника, 1969. 229 с.
2. Беспалов В. И. Компьютерная лаборатория (КЛ PCLab). Описание программы. Руководство по работе с программой (Версия 9.10). Томск: Томск. политехн. ун-т, 2018. 128 с. URL: https://portal.tpu.ru/SHARED/b/BVI/pclab/Tab/PCLAB_instr.pdf.
3. ESR study of free radicals in UHMW-PE fiber irradiated by gamma rays / Yanning Z., Mouhua W., Zhongfeng T., Guozhong W. // Radiation Physics and Chemistry. 2010. Vol. 79. P. 429–433.
4. Максимова Т. А., Рябухин О. В., Иванов Д. В. ЭПР-исследование пробирок для взятия крови на основе полиэтилентерефталата // Физика. Технологии. Инновации. ФТИ-2022: тезисы докладов IX Международной молодежной научной конференции, посвященной 100-летию со дня рождения профессора С. П. Распопина, Екатеринбург, 16–20 мая 2022 г. Екатеринбург: Урал. федерал. ун-т, 2022. С. 88–89. URL: <http://elar.urfu.ru/handle/10995/124972>.