

Proposition de stage – Année 2020-2021

Niveau du stage : M2

Durée du stage : 4 mois

Ouverture éventuelle vers un sujet de thèse : Oui/Non

Type de financement envisagé :

Responsable du stage : Yves Pison

Téléphone : 04 72 43 10 57

Email : y.pison@ipnl.in2p3.fr

Adresse : IP2i Lyon – Bureau 416

Domaine Scientifique de la Doua – Bât. Paul Dirac

4 rue Enrico Fermi – 69622 Villeurbanne Cedex - France

Equipe d'encadrement : groupe ACE

Thématique : Modélisation atomistique de nanoparticules pour la médecine nucléaire

Intitulé du stage : Simulation de l'irradiation de nanoparticules de Mo en suspension dans de l'eau

Description du travail demandé :

Le technétium 99 métastable (^{99m}Tc) est le radio-isotope le plus utilisé en médecine nucléaire. Il est extrait du ^{99}Mo , lui-même produit par irradiation d'une cible très enrichie d' ^{235}U dans des réacteurs à haut flux neutronique. Les deux tiers de la production mondiale sont assurés par seulement deux réacteurs. Cela explique que la recherche actuelle soit focalisée sur de nouveaux modes de fabrication du ^{99}Mo .

L'objectif de ce travail est de soutenir et d'orienter les efforts expérimentaux pour produire du ^{99}Mo à haute activité spécifique grâce à l'irradiation de nanoparticules par des accélérateurs. Les expériences menées par le JRC (service scientifique de la commission européenne) en Belgique (Geel) sont basées sur l'irradiation de suspensions de nanoparticules (NPs) de Mo pour induire les réactions $^{100}\text{Mo}(n, 2n)^{99}\text{Mo}$ ou $^{100}\text{Mo}(\gamma, n)^{99}\text{Mo}$. Au cours de la réaction nucléaire, les atomes de recul (^{99}Mo) ont des énergies d'environ 100 keV ou 20 keV respectivement, suffisamment pour être éjectés de la NP dans le liquide environnant.

En utilisant des suspensions de nanoparticules comme cibles, il est possible d'ajuster l'énergie incidente et la taille des nanoparticules afin de permettre au radio-isotope s'échappant de la surface du nanomatériau d'être collecté directement dans le liquide, évitant ainsi le processus de séparation chimique. Des simulations de dynamique moléculaire (MD) ont été réalisées dans le cadre du stage Post-Doctoral de Clémentine Panetier dans le groupe ACE afin de répondre à cette problématique. Le potentiel de paires Ackland & Thetford a été sélectionné car il simulait le mieux les cascades de collisions se produisant pour des énergies de PKA variant de 5 keV à 150 keV. Des NPs polyédriques de Mo ont été construites par la méthode de Wulff (stage M1 de T. Roubille) avec des tailles variant de 5 nm à 20 nm. Ces NPs ont ensuite modélisées dans le vide puis irradiées selon différentes géométries afin d'évaluer le nombre total d'atomes éjectés de la NP par rapport à l'éjection du ^{99}Mo (PKA initial). La figure 1 présente un exemple d'irradiation dans lequel une partie de la surface de la NP a été pulvérisée.



Figure 1 :
Nanoparticule de Mo irradié par un PKA
de 100 keV.

*La surface présente un cratère lié à la pulvérisation
de la surface et à l'éjection des atomes dans le vide*

Le travail de stage proposé consiste à passer à la phase 2 du projet en ajoutant de l'eau autour de la NP afin d'estimer si les atomes pulvérisés seront retenus à la surface de la NP ou bien, au contraire, éjectés en plus grand nombre.

Pour cela, le candidat devra prendre en main le code LAMMPS afin d'effectuer des calculs de DM sur des serveurs de l'IP2i. La première étape consiste à utiliser des potentiels de Lennard Jones déjà existant pour modéliser les interactions Mo-Mo, Mo-O et Mo-H. Les molécules d'eau seront testées selon les modèles SPC, TIP4P, TIP3P déjà implémenté dans LAMMPS. Le candidat devra modéliser des NPs cubiques en contact avec un cube d'eau liquide et irradier les NP avec des PKA de 20 keV et de 100 keV. Si le temps le permet, la phase 2 consistera à revenir vers des potentiels plus réalistes permettant d'aller vers un modèle tenant compte de la géométrie « réelle » de la NP.

Internship offer – Year 2020-2021

Internship level: M2

Duration: 4 months

Possible PhD follow up: Yes/~~No~~

Proposed PhD funding type:

Supervisor: Yves Pison

Phone: +33(0)4 72 43 10 57

Email: y.pison@ipnl.in2p3.fr

Address: IP2I Lyon – Bureau 416

Domaine Scientifique de la Doua – Bât. Paul Dirac

4 rue Enrico Fermi – 69622 Villeurbanne Cedex - France

Mentoring team: ACE group

Research field: Atomistic modelling of nanoparticles for nuclear medicine

Internship title: Simulation of the irradiation of Mo nanoparticles diluted in water

Work description:

Metastable technetium-99 (^{99m}Tc) is the most widely used radioisotope in nuclear medicine. It is extracted from ^{99}Mo , itself produced by irradiation of a highly enriched target of ^{235}U in high neutron flux reactors. Two-thirds of world production is provided by just two reactors. This explains why current research is focused on new ways of elaborating ^{99}Mo .

The objective of this work is to support the experimental efforts to produce ^{99}Mo with high specific activity thanks to the irradiation of nanoparticles by accelerators. The experiments carried out by the JRC (scientific service of the European Commission) in Belgium (Geel) are based on the irradiation of suspensions of Mo nanoparticles (NPs) to induce reactions $^{100}\text{Mo}(n, 2n)^{99}\text{Mo}$ or $^{100}\text{Mo}(\gamma, n)^{99}\text{Mo}$. During the nuclear reaction, the recoil atoms (^{99}Mo) have energies of about 100 keV or 20 keV respectively, enough to be ejected from the NP into the surrounding liquid.

By using suspensions of nanoparticles as targets, it is possible to adjust the incident energy and the size of the nanoparticles in order to allow the radioisotope escaping from the NP surface to be collected directly in the liquid, thus avoiding the chemical separation process. Molecular dynamics (MD) simulations were carried out as part of Clémentine Panetier's Post-Doctoral internship in the ACE group in order to answer to this problem. The Ackland & Thetford pair potential was selected because it best simulated the collision cascades occurring for PKA energies ranging from 5 keV to 150 keV. Polyhedral Mo NPs were constructed by the Wulff method (M1 internship of T. Roubille) with sizes varying from 5 nm to 20 nm. These NPs were then modelled in vacuum and then irradiated according to different geometries in order to assess the total number of atoms ejected from the NP compared to the ejection of ^{99}Mo (initial PKA). Figure 1 shows an example of irradiation in which part of the NP surface has been sputtered.

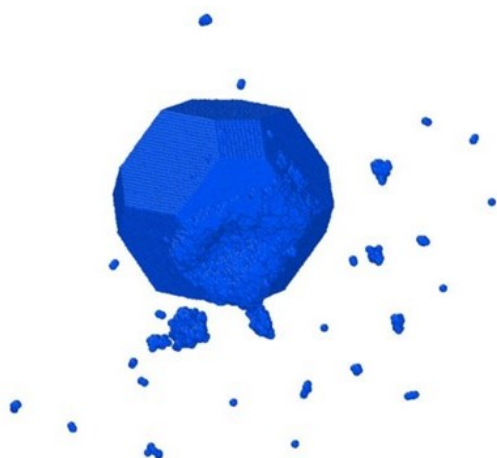


Figure 1:

Mo nanoparticle irradiated by a PKA with a 100 keV energy.

The surface displays a crater induced by the sputtering process with a lot of atoms outside of the NP.

The proposed internship work consists of moving to phase 2 of the project by adding water around the NP in order to estimate whether the sputtered atoms will be retained on the surface of the NP or, on the contrary, ejected with a larger number.

For this, the candidate will have to use the LAMMPS code in order to perform MD calculations on IP2i servers. The first step is to use already existing Lennard Jones potentials to model the Mo-Mo, Mo-O and Mo-H interactions. The water molecules will be tested according to the SPC, TIP4P, TIP3P models already implemented in LAMMPS. The candidate will have to model cubic NPs in contact with a cube of liquid water and irradiate the NP with 100 keV or 20 keV PKAs. If time permits, phase 2 will consist of returning to more realistic potentials allowing taking into account the "real" geometry of the NP.