

核物理主题数据: 实验、理论与应用专题

机器学习预测融合反应合成 $^{99-103}\text{Mo}^*$ 的截面\*黄智龙<sup>1)</sup> 李志龙<sup>1)2)</sup> 高泽鹏<sup>3)</sup> 王永佳<sup>1)†</sup> 李庆峰<sup>1)2)‡</sup>

1) (湖州师范学院理学院, 湖州 313000)

2) (中国原子能科学研究院, 北京 102413)

3) (中山大学中法核工程与技术学院, 珠海 519082)

(2025 年 11 月 9 日收到; 2025 年 12 月 8 日收到修改稿)

基于梯度提升决策树 (gradient boosting decision tree, GBDT) 的机器学习算法, 构建了一种用于预测 $^{99-103}\text{Mo}^*$  融合反应截面 (cross section, CS) 的模型, 旨在探索医用同位素 $^{99}\text{Mo}$  的最优合成路径. 模型输入包括反应能量、质子数、质量数及结合能等特征量, 以及基于唯象理论模型计算的相关参数, 输出量为融合反应截面. 研究发现, 在测试集上机器学习预测的 CS 与实验值的平均绝对误差 (mean absolute error, MAE) 为 0.0615, 优于 EBD2 模型预测的 0.1103. 在此基础上, 结合 GEMINI++ 程序计算了 $^{100-103}\text{Mo}^*$  的中子衰变道的存活几率, 进而得到 $^{99}\text{Mo}$  的蒸发剩余截面, 发现 $^4\text{He} + ^{97}\text{Zr}$  在质心能量为 18.51 MeV 时的 2n 退激反应道的蒸发剩余截面为 1199.80 mb, 是合成 $^{99}\text{Mo}$  的最优路径. 该研究验证了基于物理信息的机器学习方法在融合反应截面预测中的可靠性, 可为优化反应体系选择及在重离子加速器上通过融合反应产生医用同位素提供参考. 本文数据集可在 <https://doi.org/10.57760/sciencedb.j00213.00244> 中访问获取.

**关键词:** 医用同位素生产, 重离子融合反应, 融合截面, 机器学习**DOI:** 10.7498/aps.75.20251527**CSTR:** 32037.14.aps.75.20251527

## 1 引言

在核医学领域, 放射性同位素对实现疾病诊断与治疗至关重要<sup>[1,2]</sup>. 诊断方面主要依赖发射 $\gamma$ 光子与正电子的核素, 结合单光子发射计算机断层成像 (single photon emission computed tomography, SPECT) 与正电子发射断层扫描成像 (positron emission tomography, PET) 获取组织结构与功能信息, 实现早期、无创的精准诊断; 治疗方面则越来越多地采用高线性能量转移 (linear energy transfer, LET) 的 $\alpha$ 粒子与适度 LET 的 $\beta$ 粒子在病灶细胞内沉积高剂量能量, 引发 DNA 双链断裂杀伤靶细胞并尽量降低正常组织剂量<sup>[3,4]</sup>. 目前临床与

科研已使用的放射性同位素超过了 200 余种, 但其中绝大多数为人工制备, 生产路径主要包括反应堆途径 (裂变产物分离与中子俘获) 与加速器途径 (诸如 (p, n), (p,  $\alpha$ ), (p, 2n) 以及轻-重离子融合等反应)<sup>[5,6]</sup>. 在核医学诊断领域中高度依赖由 $^{99}\text{Mo}$  衰变获得的 $^{99\text{m}}\text{Tc}$ , 但传统以高浓缩铀 (highly enriched uranium, HEU) 靶研究反应堆裂变制备 $^{99}\text{Mo}$  的模式在放射性废物处置与供应链韧性方面存在突出挑战<sup>[7]</sup>. 为降低对 HEU 的依赖并提升供给弹性, 国际上正在尝试多种替代制备方案, 包括以低浓缩铀 (low enriched uranium, LEU) 替代、光致裂变、回旋加速器直产 $^{99\text{m}}\text{Tc}$  以及 $^{100}\text{Mo}$  等技术路线<sup>[8-14]</sup>. 通过重离子融合反应制备医用同位素具有较高的实验成本和技术复杂性, 因此需要依赖

\* 国家重点基础研究发展计划 (批准号: 2023YFA1606402) 和国家自然科学基金 (批准号: 12335008) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: wangyongjia@zjhu.edu.cn

‡ 通信作者. E-mail: liqf@zjhu.edu.cn

先进的实验平台来提高反应效率,并结合可靠的理论模型来优化实验设计<sup>[15]</sup>.

在实验方面,全球多个国家已建成或正在建设一系列高能重离子实验设施,为研究重离子熔合反应提供了重要的平台.目前,这些已建成并投入运行的设施包括中国兰州的冷却储存环(cooler storage ring, CSR)<sup>[16]</sup>、美国的稀有同位素束设施(facility for rare isotope beams, FRIB)、法国的放射性离子束产生系统(système de production d'Ions radioactifs, SPIRAL2)以及日本的放射性同位素束工厂(radioactive isotope beam factory, RIBF)等.与此同时,一批在建或即将升级的装置,包括中国的高强度重离子加速器装置(high intensity heavy-ion accelerator facility, HIAF)<sup>[17,18]</sup>、韩国的稀有同位素束加速器综合体(rare-isotope beam accelerator complex, RAON)<sup>[19]</sup>、德国的反质子与离子研究设施(facility for antiproton and ion research, FAIR)、俄罗斯的 NICA 等.通过相关实验装置,目前已经测量了超过 1000 多种弹靶组合的激发函数,但仍有大量体系尚未覆盖或已有数据存在较大误差.

为研究重离子熔合反应过程中多种反应机制(如多核子转移、熔合裂变、高激发态复合核的退激发等)对完全熔合过程的影响,已有多种理论模型被相继提出和发展.例如耦合道计算<sup>[20,21]</sup>、时间依赖的 Hartree-Fock(DC-TDHF)理论<sup>[22,23]</sup>、经验耦合道模型(empirical coupled channel, ECC)<sup>[24-30]</sup>、修正的 Siwek-Wilczyński 公式<sup>[31]</sup>以及部分机器学习方法<sup>[32]</sup>.然而,重离子熔合反应本质上是一个复杂的量子多体过程,涉及多核子转移、准裂变等复杂的动力学机制,传统理论模型在处理这些高度非线性的耦合效应时往往面临参数拟合困难或计算量过大的挑战.近年来,已有研究尝试利用机器学习模型对重离子熔合截面进行预测与评估<sup>[33,34]</sup>.然而,这些工作多侧重于构建普适性的唯象公式或仅针对特定的弱束缚核体系,在面向具体医用同位素合成路径的精细化预测时,精度与适用性仍有提升空间.为了在复杂反应机制下实现更高精度的截面预测,梯度提升决策树(GBDT)凭借其在处理结构化数据时的高效性、对异常值的鲁棒性以及良好的可解释性,成为解决此类物理回归问题的理想选择.基于此,本文采用 GBDT 框架下的 LightGBM(light gradient boosting machine)算法.

利用加速器加速质子、氘核或重离子轰击靶核,通过  $(n, \gamma)$ ,  $(p, \alpha)$  或重离子熔合蒸发等核反应生成放射性同位素,是目前生产医用同位素的重要途径之一.本文将探讨利用重离子熔合反应产生医用同位素的可能性.在我们之前的研究中<sup>[35,36]</sup>,基于现有的重离子熔合反应实验数据,结合多个关键物理特征量,构建了一种用于预测熔合截面的机器学习模型.该方法相较于传统理论模型在预测精度上具有明显优势,同时给出的熔合势垒分布与实验提取结果高度一致.对于如  $^{40,48}\text{Ca} + ^{78}\text{Ni}$  等丰中子的反应体系,模型预测的熔合截面也与全微观的密度约束时间依赖 Hartree-Fock(DC-TDHF)模型的计算结果相符<sup>[36]</sup>,进一步表明该机器学习模型具有良好的泛化能力和较强的预言能力.本文基于我们之前的工作,通过筛选数据集,新引入了改进版经验势垒分布方法(EBD2)的计算结果及相关物理量参数作为物理信息特征,构建了一种预测熔合反应合成  $^{99-103}\text{Mo}^*$  的截面的模型,并结合 GEMINI++ 程序寻找通过重离子熔合反应产生  $^{99}\text{Mo}$  的最佳反应途径.本文所称截面指入射核与靶核跨越库仑势垒后被势阱俘获并形成接触体系的几率,轻至中等核区该量近似等同于完全熔合截面,而在重体系中通常称为俘获截面,包含完全熔合与准裂变以及可能的快裂变等通道.本文结构如下:第 2 节介绍机器学习预测模型,第 3 节给出预测结果与性能评估,第 4 节总结和展望.

## 2 机器学习预测模型

在目前的工作中,  $^{99-103}\text{Mo}^*$  熔合反应截面的预测是一项有监督的任务,需要一种机器学习算法(ML),一组具有输入和输出变量的标记数据.此外,还需要一种理论模型来评估模型预测结果的物理合理性与稳定性.本节将简要介绍这些内容.

在重离子熔合反应中,俘获截面描述了入射核与靶核克服库仑势垒并发生初始接触的概率;而熔合截面则进一步表示形成复合核的几率.对于轻核体系,两者通常接近一致.然而,在中重核反应中,多种复杂过程(如准裂变或多核子转移)可能导致俘获与实际熔合之间产生显著差异.精确预测截面对理解反应机制、评估熔合效率及优化实验方案具有重要意义<sup>[37]</sup>.截面的计算受到核形变、表面扩散与核子转移等结构与动力学效应影响,这些耦合

会改变有效势垒的高度、位置与形状<sup>[35]</sup>. 在众多截面计算方法中, 经验势垒分布 (empirical barrier distribution, EBD) 方法可以较好地解释实验数据<sup>[39-41]</sup>, 该方法通过引入势垒分布函数, 将不同局部势垒下的透射几率加权平均, 可得到截面的解析表达式:

$$\sigma_F(E_{c.m.}) = \pi R_B^2 \frac{W}{\sqrt{2}E_{c.m.}} \left[ X \operatorname{erfc}(-X) + \frac{1}{\sqrt{\pi}} \exp(-X^2) \right], \quad X = \frac{E_{c.m.} - V_B}{\sqrt{2}W}, \quad (1)$$

其中,  $R_B$  为平均势垒半径,  $V_B$  为平均势垒高度,  $W$  表示高斯函数标准差,  $E_{c.m.}$  为质心能量. 原始的 EBD 模型在重核体系中能够较好地再现实验数据, 但在轻核体系、 $Q$  值敏感体系以及超重体系中, 其预测精度仍存在明显不足. 局限性主要体现在未能充分考虑轻核表面效应对势垒结构的修正、 $Q$  值对势垒分布宽度的影响, 以及超重体系或深度非弹性散射过程对势垒半径的影响, 进而在不同物理条件下常出现截面高估或再现能力下降的情况. 为改进上述问题, Wang<sup>[42]</sup> 提出了改进版的 EBD2 模型. 该模型在保留原有解析表达形式的基础上, 引入了对势垒高度、势垒半径和分布宽度三项关键输入的系统性修正, 从而显著提升了与各类实验体系的符合度. 本文选取 EBD2 模型的计算结果与机器学习的预测结果进行对比, 评估后者在截面预测中的表现与可靠性.

本文使用的机器学习算法是 LightGBM, 它是微软亚洲研究院提出的一种高效梯度提升决策树 (GBDT) 框架, 属于集成学习中的提升类方法. 在保证预测精度的同时, 具有训练速度快、内存占用低等优势, 尤其适用于大规模、高维稀疏数据的建模任务. LightGBM 引入了基于直方图的树构建方式与叶子优先 (leaf-wise) 生长策略, 加快了分裂点搜索, 并提升了模型拟合能力. 此外, LightGBM 还具备良好的可解释性分析能力, 有助于深入理解模型的预测机制, 已被应用于原子核质量<sup>[43,44]</sup>、融合反应截面<sup>[34,36]</sup>、原子核电荷半径<sup>[45-49]</sup> 以及能级研究<sup>[50-52]</sup>.

本文使用的数据分为三个部分: 训练集、验证集和测试集. 训练集用于调整 LightGBM 中的参数, 通常验证集是训练集的一部分, 用于监控和避免过拟合. 测试集用于评估 LightGBM 对未见数

据的实际预测能力. 整个训练数据由来自 220 个反应体系的 3645 个实验数据点组成, 这些数据收集自参考文献<sup>[35,36]</sup>. 首先, 选择了 6 组反应体系 (共计 127 个实验点) 作为测试集, 这些体系所形成的复合核质量数与  $^{99}\text{Mo}$  相近. 具体体系包括:  $^{12}\text{C} + ^{92}\text{Zr}$ ,  $^{27}\text{Al} + ^{72}\text{Ge}$ ,  $^{27}\text{Al} + ^{73}\text{Ge}$ ,  $^{16}\text{O} + ^{74}\text{Ge}$ ,  $^{35}\text{Al} + ^{54}\text{Cr}$  和  $^{40}\text{Ca} + ^{50}\text{Ti}$ . 随后, 214 组反应体系 (共计 3518 个实验点) 按 4:1 的比例随机划分为训练集与验证集, 用于模型训练与调参过程. 通常, 不同能量范围内的 CS 会表现出数量级的变化, 这种大的数据差异可能影响机器学习算法的预测性能. 因此, 本文选择将 CS 的对数作为 LightGBM 模型的输出变量. 本文所用的输入特征如表 1 所列, 特征分为两类. 第一类为“基础物理特征”, 包括质心能量  $E_{c.m.}$ , 反应  $Q$  值, 弹核、靶核和复合核的  $Z, A$  及三者的结合能  $B$ , 中子数与最近幻数之差  $\nu_n$ , 质子数与最近幻数之差  $\nu_p$ , Casten 因子  $P$ , 同位旋  $I$ , 四极形变参数  $\beta$ , 以及复合核单质子、双质子、单中子、双中子分离能 ( $S_p, S_{2p}, S_n, S_{2n}$ ). 需要说明的是, 虽然核子数与幻数之差 ( $\nu$ ) 和 Casten 因子 ( $P$ ) 均源于壳层结构信息, 但二者在物理机制上具有互补性:  $\nu$  主要表征原子核距球形闭壳的远近, 反映静态的壳修正效应; 而  $P$  则通过价核子对数描述质子-中子相互作用, 重点表征原子核集体形变及组态混合的演化趋势. 同时保留这两个

表 1 机器学习模型特征量  
Table 1. Features for the machine learning model.

特征量	描述
$E_{c.m.}$	质心能量
$Q$	融合 $Q$ 值
$Z_p, Z_t, Z$	弹核、靶核、复合核的质子数
$A_p, A_t, A$	弹核、靶核、复合核的质量数
$B_p, B_t, B$	弹核、靶核、复合核的结合能
$\nu_n^p, \nu_n^t, \nu_n$	弹核、靶核、复合核的中子数与最近幻数之差
$\nu_p^p, \nu_p^t, \nu_p$	弹核、靶核、复合核的质子数与最近幻数之差
$P_p, P_t, P$	弹核、靶核、复合核的 Casten 因子
$I_p, I_t, I$	弹核、靶核、复合核的同位旋
$\beta_p, \beta_t, \beta$	弹核、靶核、复合核的四极形变参数
$S_p, S_{2p}, S_n, S_{2n}$	复合核的单质子、双质子、单中子、双中子分离能
$V_B$	势垒高度
$R_B$	势垒半径
EBD2	EBD2模型计算的CS

特征, 有助于机器学习模型更全面地捕捉结构效应对熔合势垒及截面的复杂影响. 第二类为“物理信息特征”, 即唯象理论模型的计算结果和相关物理量参数, 用以引导机器学习模型挖掘“基础物理特征”与 CS 之间的内在关联, 本文使用物理信息特征包括 EBD2 计算的 CS, 势垒高度  $V_B$  以及势垒半径  $R_B$  [38]. LightGBM 算法的预测能力可以通过机器学习预测的 CS 与实验值的平均绝对误差 (mean absolute error, MAE) 来定量评价:

$$\text{MAE} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N |\log_{10} \sigma_{\text{pred}}^{(i)} - \log_{10} \sigma_{\text{exp}}^{(i)}|. \quad (2)$$

### 3 结果与讨论

本文选取 6 组反应体系作为测试集 (由 127 个数据点组成), 形成的复合核质量数与  $^{99}\text{Mo}$  接近, 用于验证 LightGBM 模型在预测医用同位素  $^{99}\text{Mo}$  熔合截面方面的性能. 图 1 展示了 ML, EBD2 和 Wong 公式预测的 CS 与最新实验数据之间的对比. 可以看到, 在低能区, Wong 公式预测的 CS 与

实验数据较为接近; 然而在低能区, 预测值明显偏低. 这主要是由于在远低于库仑势垒的能量范围内, 抛物线势垒近似不再成立, 该现象已在文献 [36,58] 中进行了讨论. 相比之下, 考虑不同耦合效应的 EBD2 理论模型与包含物理信息的 ML 模型则能更准确地描述熔合激发函数的行为. 使用 ML 和 EBD2 模型在测试集上的 MAE 分别为 0.0615 和 0.1103, 表明机器学习模型在预测精度上显著优于传统理论模型. 造成这种差异的主要原因在于: 在低于库仑势垒的能区内, EBD2 模型未充分考虑核子转移及弱束缚破裂过程对完全熔合的抑制作用 [59]. 例如, 在体系  $^{12}\text{C} + ^{92}\text{Zr}$  中,  $^{12}\text{C}$  可能在到达熔合势垒前发生  $\alpha$  转移形成高激发态的  $^8\text{Be}$ , 随后迅速破裂, 导致实际熔合截面低于理论预测值. 结果表明, 包含物理信息特征的机器学习模型能够自动捕捉这些复杂的耦合效应, 从而在全能区范围内更准确地再现实验趋势, 展现出更强的预测能力与泛化性能.

验证了机器学习模型在重离子熔合反应截面预测中的有效性后, 进一步将其应用于目标产物  $^{99-103}\text{Mo}^*$  的反应体系的初步筛选. 模型筛选得到

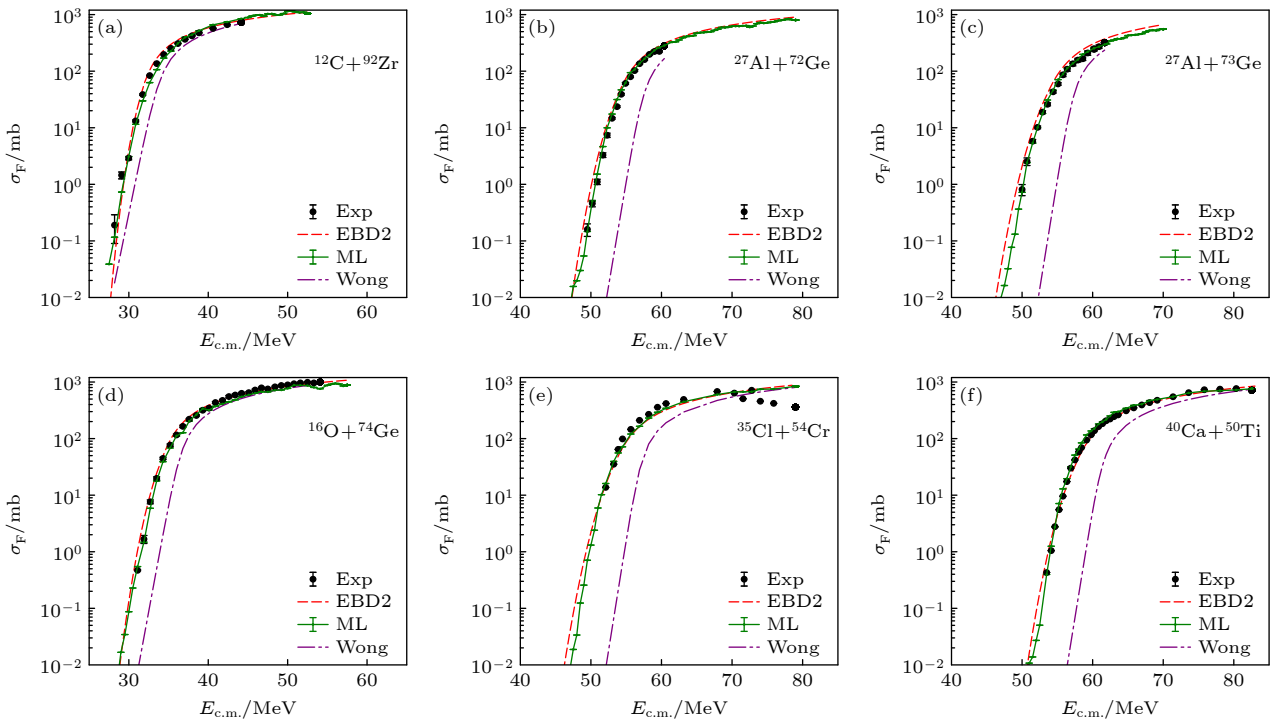


图 1 ML 方法与理论模型 (EBD2, Wong 公式) 对 6 组反应体系熔合截面的预测结果. 图中黑点表示参考文献 [53–57] 中给出的实验数据. 机器学习结果取自 500 次独立训练的平均值, 其误差表示 500 次预测结果的标准差

Fig. 1. Comparison of fusion cross-section predictions for six reaction systems from ML methods and theoretical models (EBD2, Wong formula). The black dots represent experimental data from Refs. [53–57]. The ML results are the average of 500 independent trainings, with error bars indicating the standard deviation of the 500 predictions.

的可能用于合成目标核的弹核与靶核组合分布如图 2 所示. 原则上, 所选用的弹靶核应为自然界中相对稳定的核素, 图中同时给出了对应的半衰期信息, 以供后续反应体系选择.

为寻找医用同位素  $^{99}\text{Mo}$  的最优合成路径, 首先对能够直接生成  $^{99}\text{Mo}$  的候选反应体系进行了研究. 图 3 展示了 EBD2 理论模型与 ML 模型对这些体系的批量预测结果, 其中纵轴为融合截面, 横轴为质心能量  $E_{c.m.}$ . 在两幅图中, 相同色系表示相

同核素的弹靶反应体系, 而颜色深浅的变化则对应合成稀有核素  $^{99}\text{Mo}$  的不同同位素弹靶组合. 图例中标注了各个反应体系中弹核与靶核的质量数范围, 便于对比不同体系下的能量依赖性与模型预测行为. 研究表明, EBD2 模型的预测曲线整体表现出较好的平滑性与系统性, 而 ML 模型在较高的  $E_{c.m.}$  区域出现轻微的非线性波动. 对于这一现象的成因与表现, 本文将在下文中进行详细讨论. 此外可以看到, 在相同反应体系中, 当入射能低于

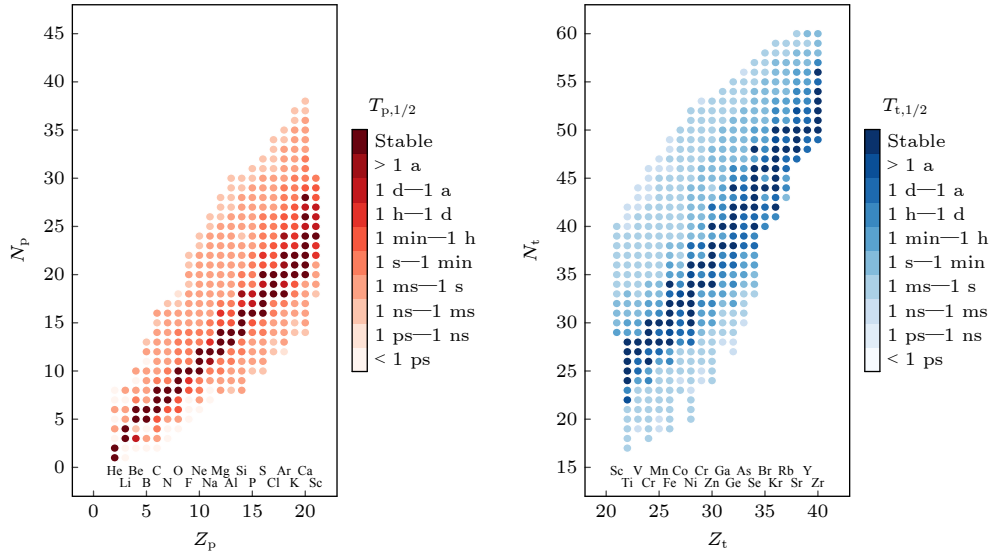


图 2  $^{99-103}\text{Mo}^*$  融合反应可能的反应体系组合的弹核与靶核分布图, 左右两侧分别表示用于合成目标核的弹核 (projectile nuclei) 与靶核 (target nuclei) 在  $Z_p - N_p$  平面上的分布, 圆点的颜色越深表示半衰期越大

Fig. 2. Distribution plot of projectile and target nuclei for possible reaction system combinations in  $^{99-103}\text{Mo}^*$  fusion reactions. The left and right sides respectively show the distributions of projectile nuclei (projectile nuclei) and target nuclei (target nuclei) used to synthesize the target nucleus on the  $Z_p - N_p$  plane, where a deeper dot color indicates a larger half-life.

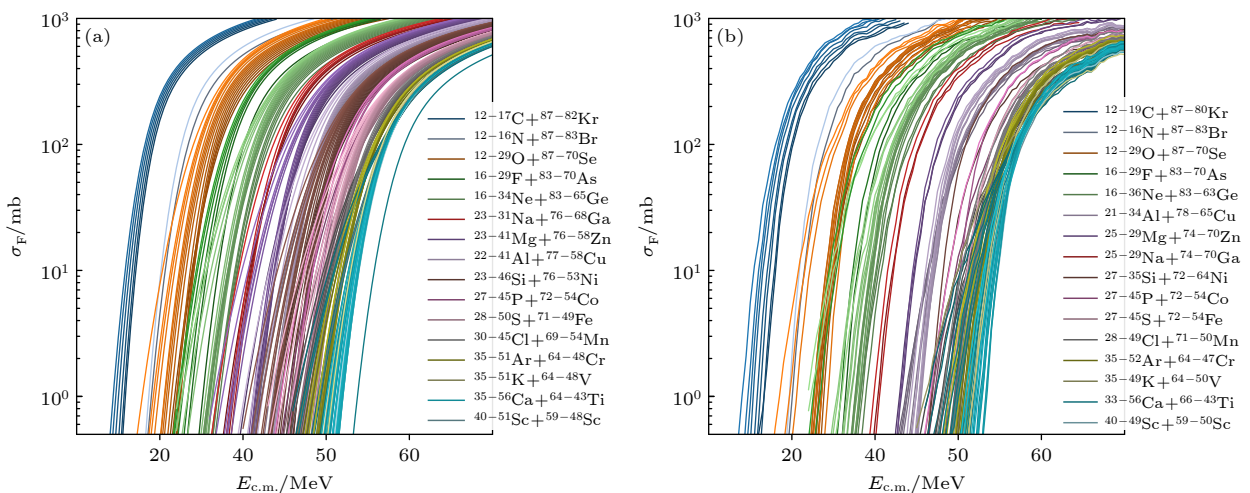


图 3 (a) EBD2 模型计算的各反应体系生成  $^{99}\text{Mo}$  的融合截面; (b) ML 模型预测的对应结果. 图中相同色系表示相同的弹靶反应体系  
Fig. 3. (a) Fusion cross-sections for the production of  $^{99}\text{Mo}$  by various reaction systems, calculated by the EBD2 model; (b) the corresponding results predicted by the ML model. In the figure, the same color scheme represents the same projectile-target reaction system.

熔合势垒时, EBD2 的计算结果普遍高于 ML 模型的预测值, 这与前文讨论的现象保持一致. 总体来看, 两种方法的预测结果表现出一致的趋势: 在同一反应体系中, 随着弹核与靶核质子数乘积  $Z_p Z_t$  的增大, 获得相同熔合截面所需的人射能量也随之升高, 这是因为反应体系需要克服更高的库仑势垒; 而在  $Z_p Z_t$  相同的情况下, 质量数较大的弹-靶组合在相同反应能量下通常能够产生更大的熔合截面. 这一差异可由库仑系数  $\chi$  解释,  $\chi = \frac{Z_p Z_t}{A_p^{1/3} + A_t^{1/3}}$  [26,60]. 势垒高度近似与  $Z_p Z_t / R_B$  成正比, 而势垒半径  $R_B \approx r_0 (A_p^{1/3} + A_t^{1/3})$ . 因此, 在同一体系内  $Z_p Z_t$  越大, 势垒越高、所需能量越大; 在  $Z_p Z_t$  固定时,  $A_p^{1/3} + A_t^{1/3}$  越大则  $R_B$  越大、等效势垒更低, 从而在同一能量下穿透几率更高、截面更大.

熔合反应产生的复合核通常携带较高的激发能  $E^* = E_{c.m.} + Q_{gg}$ ,  $Q_{gg}$  表示基态  $Q$  值. 在中等质量核区复合核的退激发以中子发射为主, 伴随少量的质子、 $\alpha$  粒子发射 [61–64]. 为了得到最终产物  $^{99}\text{Mo}$ , 我们利用机器学习方法继续批量预测  $^{100-103}\text{Mo}^*$  的熔合截面, 并利用 GEMINI++ 程序进行退激模拟. 该程序是一个被广泛应用的统计模型代码, 它基于 Hauser-Feshbach 理论, 通过模拟轻粒子 ( $n, p, \alpha$ ) 蒸发、 $\gamma$  射线发射以及裂变等不同衰变渠道之间的竞争, 来计算复合核的级联退激过程 [65]. 表 2 筛选出了相对长寿命的反应体系, 用于预测熔合截面和蒸发剩余截面, 结果如图 4 所示, 其中表 2 的数据来源于 NRV 网址 [66].

图 4 显示了预测截面、中子蒸发道的存活概率以及蒸发剩余截面随激发能  $E^*$  的变化情况. 从图 4(a) 可以看出,  $^3\text{He} + ^{97}\text{Zr}$  和  $^4\text{He} + ^{96}\text{Zr}$  这两个相似反应体系的截面虽然非常接近, 但其  $Q_{gg}$  值存在显著差异. 由于该差异, 前者 (以及其他若干能形成  $^{100}\text{Mo}$  的反应体系) 具有更高的激发能, 不利于 1n 反应道产物的存活. 因此, 图 4(a'') 中未出现  $^3\text{He} + ^{97}\text{Zr}$  反应体系的贡献. 同样地, 图 4(c) 也可以看到两个相似的反应体系—— $^{14}\text{C} + ^{88}\text{Kr}$  与  $^{13}\text{C} + ^{89}\text{Kr}$ . 尽管它们在熔合阶段表现出相似的趋势, 但在经过 3n 反应道存活计算后, 二者的残余截面差异明显, 这进一步说明了反应  $Q$  值与激发能在决定最终产额中的关键作用.  $^{14}\text{C} + ^{88}\text{Kr}$  比  $^{13}\text{C} + ^{89}\text{Kr}$  拥有在更低激发能的情况下更高的蒸发剩余截面, 所以在 3n 反应道下  $^{14}\text{C} + ^{88}\text{Kr}$  比  $^{13}\text{C} + ^{89}\text{Kr}$  更适用于熔合反应.

表 2 相对稳定反应体系中核素的半衰期、自旋-宇称与衰变类型

Table 2. Half-lives, spin-parity, and decay modes of nuclides in relatively stable reaction systems.

复合核	反应体系	核素	半衰期	自旋和宇称	衰变类型
$^{100}\text{Mo}^*$ (1n)	$^3\text{He} + ^{97}\text{Zr}$	$^3\text{He}$	stable	$1/2^+$	stable
		$^{97}\text{Zr}$	16.75 h	$1/2^+$	$\beta^-$ 100%
	$^4\text{He} + ^{96}\text{Zr}$	$^4\text{He}$	stable	$0^+$	stable
		$^{96}\text{Zr}$	$2.0 \times 10^{19}$ a	$0^+$	$2\beta^-$ 100%
	$^{14}\text{C} + ^{86}\text{Kr}$	$^{14}\text{C}$	$5.7 \times 10^3$ a	$5/2^-$	$\beta^-$ 100%
		$^{86}\text{Kr}$	stable	$0^+$	stable
$^{18}\text{O} + ^{82}\text{Se}$	$^{18}\text{O}$	stable	$0^+$	stable	
	$^{82}\text{Se}$	stable	$0^+$	stable	
$^{101}\text{Mo}^*$ (2n)	$^4\text{He} + ^{97}\text{Zr}$	$^4\text{He}$	stable	$0^+$	stable
		$^{97}\text{Zr}$	16.75 h	$1/2^+$	$\beta^-$ 100%
	$^7\text{Li} + ^{94}\text{Y}$	$^7\text{Li}$	stable	$3/2^-$	stable
		$^{94}\text{Y}$	18.70 min	$2^-$	$\beta^-$ 100%
	$^9\text{Be} + ^{92}\text{Sr}$	$^9\text{Be}$	stable	$3/2^-$	stable
		$^{92}\text{Sr}$	2.61 h	$0^+$	$\beta^-$ 100%
$^{13}\text{C} + ^{88}\text{Kr}$	$^{13}\text{C}$	stable	$1/2^-$	stable	
	$^{88}\text{Kr}$	2.83 h	$0^+$	$\beta^-$ 100%	
$^{18}\text{O} + ^{83}\text{Se}$	$^{18}\text{O}$	stable	$0^+$	stable	
	$^{83}\text{Se}$	22.30 min	$9/2^+$	$\beta^-$ 100%	
$^{102}\text{Mo}^*$ (3n)	$^7\text{Li} + ^{95}\text{Y}$	$^7\text{Li}$	stable	$3/2^-$	stable
		$^{95}\text{Y}$	10.30 min	$1/2^-$	$\beta^-$ 100%
	$^9\text{Be} + ^{93}\text{Sr}$	$^9\text{Be}$	stable	$3/2^-$	stable
		$^{93}\text{Sr}$	7.43 min	$5/2^+$	$\beta^-$ 100%
	$^{14}\text{C} + ^{88}\text{Kr}$	$^{14}\text{C}$	$5.7 \times 10^3$ a	$5/2^-$	$\beta^-$ 100%
		$^{88}\text{Kr}$	2.83 h	$0^+$	$\beta^-$ 100%
$^{13}\text{C} + ^{89}\text{Kr}$	$^{13}\text{C}$	stable	$1/2^-$	stable	
	$^{89}\text{Kr}$	3.15 min	$3/2^+$	$\beta^-$ 100%	
$^{18}\text{O} + ^{84}\text{Se}$	$^{18}\text{O}$	stable	$0^+$	stable	
	$^{84}\text{Se}$	3.26 min	$0^+$	$\beta^-$ 100%	
$^{103}\text{Mo}^*$ (4n)	$^9\text{Be} + ^{94}\text{Sr}$	$^9\text{Be}$	stable	$3/2^-$	stable
		$^{94}\text{Sr}$	1.25 min	$0^+$	$\beta^-$ 100%
	$^{14}\text{C} + ^{89}\text{Kr}$	$^{14}\text{C}$	$5.7 \times 10^3$ a	$5/2^-$	$\beta^-$ 100%
		$^{89}\text{Kr}$	3.15 min	$3/2^+$	$\beta^-$ 100%

在图 4 形成相同复合核  $^{101}\text{Mo}$  的 5 个反应体系中,  $^4\text{He} + ^{97}\text{Zr}$  体系的俘获截面及 2n 蒸发剩余截面显著高于  $^{13}\text{C} + ^{88}\text{Kr}$ ,  $^{18}\text{O} + ^{83}\text{Se}$  等重离子体系. 这一现象主要归因于入口道的弹靶不对称度及其决定的库仑势垒高度. 2n 蒸发通道通常属于低激发能衰变道, 仅在较低的复合核激发能  $E^*$  窗口内具有较高的存活几率.  $^4\text{He} + ^{97}\text{Zr}$  体系具有最大的质量不对称度与最小的电荷乘积  $Z_p Z_t$ , 因而具

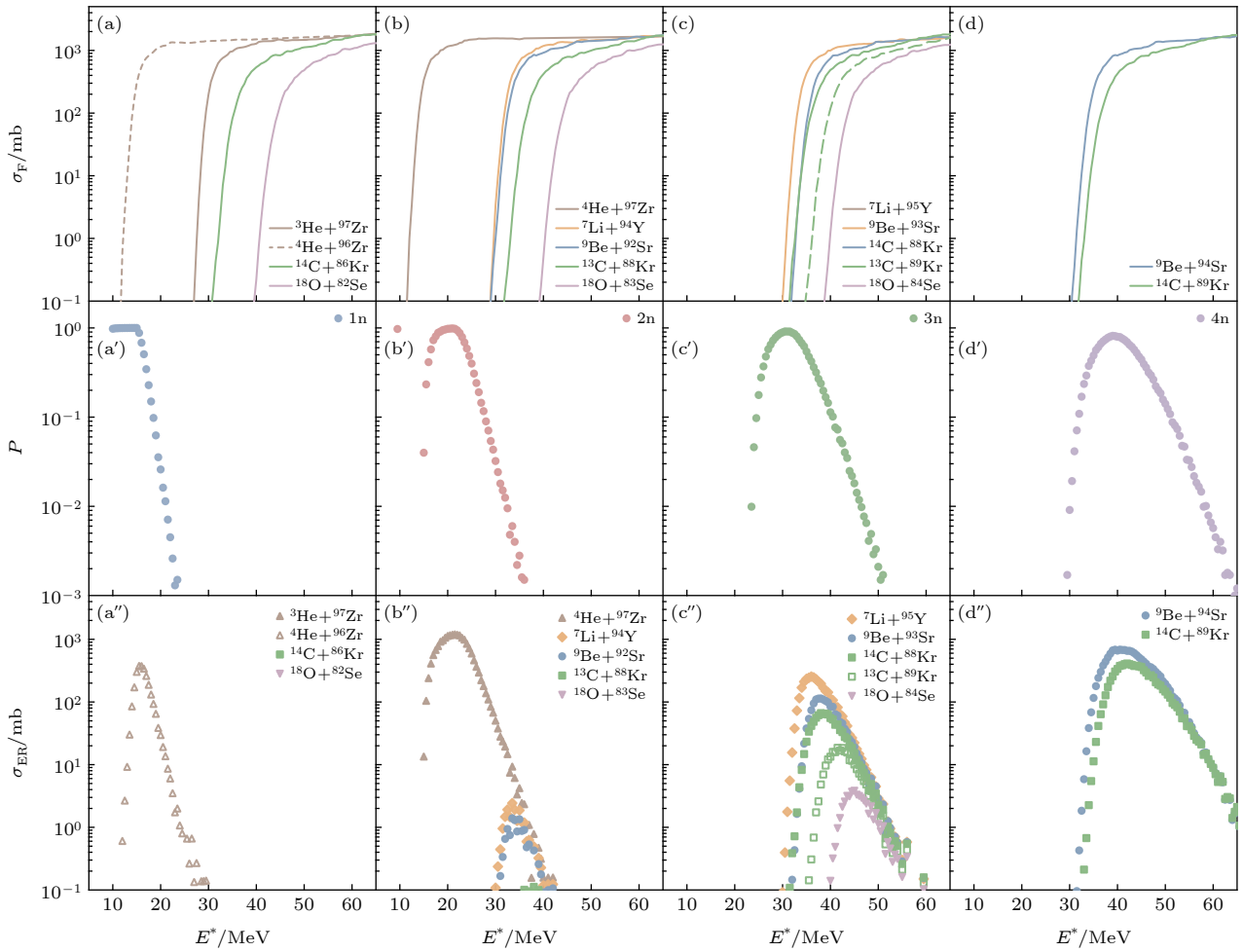


图4 机器学习预测合成 $^{100-103}\text{Mo}^*$ 的蒸发剩余截面。图中的(a), (b), (c), (d)四列分别对应产生 $^{100-103}\text{Mo}^*$ 复合核后, 经过1n, 2n, 3n, 4n(即蒸发1—4个中子)退激反应道的过程。第一行(a)—(d)为机器学习模型预测的初始融合截面( $\sigma_F$ ), 第二行(a')—(d')为GEMINI++程序计算的相应中子蒸发道的存活概率( $P$ ), 第三行(a'')—(d'')则是最终的蒸发剩余截面( $\sigma_{ER} = \sigma_F \times P$ )。所有物理量均作为复合核激发能( $E^*$ )的函数

Fig. 4. Machine learning prediction of evaporation residue cross-sections for the synthesis of  $^{100-103}\text{Mo}^*$ . The four columns (a), (b), (c), and (d) in the figure correspond to the processes of the 1n, 2n, 3n, and 4n (i.e., evaporating 1 to 4 neutrons) de-excitation reaction channels, respectively, after the formation of the  $^{100-103}\text{Mo}^*$  compound nuclei. The first row (a)—(d) shows the initial fusion cross-sections ( $\sigma_F$ ) predicted by the ML model. The second row (a')—(d') shows the corresponding survival probabilities ( $P$ ) of the neutron evaporation channels calculated by the GEMINI++ code. The third row (a'')—(d'') shows the final evaporation residue cross-sections ( $\sigma_{ER} = \sigma_F \times P$ ). All physical quantities are presented as a function of the compound nucleus excitation energy ( $E^*$ ).

有最低的库仑势垒 $V_B$ . 这意味着该体系可以在较低的质心系入射能量 $E_{c.m.}$ 下克服势垒发生熔合, 而此入射能量对应的复合核激发能恰好位于2n道的优势窗口内, 从而获得了最大的2n截面。相比之下, 随着弹核质量增加, 不对称度降低, 体系的库仑势垒显著升高。为了克服势垒发生熔合, 必须提高入射能量, 这导致形成的复合核初始激发能过高, 远超2n道的最佳能量范围, 致使2n通道的存活几率大幅降低。因此, 轻离子的不对称体系更利于在低激发能蒸发道中获得较大的反应截面。此外, 对比图4(a)—(d)中不同反应体系的初始融合

截面 $\sigma_F$ 可以发现, 在相同的复合核激发能 $E^*$ 下, 以 $^7\text{Li}$ ,  $^9\text{Be}$ 为代表的弱束缚弹核体系, 预测的融合截面明显低于紧束缚弹核体系。这一结果与弱束缚核在垒上能区因破裂效应导致熔合抑制的物理预期相符<sup>[67]</sup>, 进一步验证了机器学习模型通过引入结合能与分离能等特征, 成功捕捉到了复杂的反应机制。由于蒸发剩余截面 $\sigma_{ER}$ 由 $\sigma_F$ 和存活几率 $P$ 共同决定,  $\sigma_F$ 的压低直接限制了弱束缚体系最终的产额。这也从物理机制上解释了为何紧束缚的 $^4\text{He} + ^{97}\text{Zr}$ 体系在2n反应道中表现出显著的截面优势。

熔合-蒸发反应受到反应体系 (包括弹靶组合、反应能量、反应  $Q$  值) 以及蒸发过程的共同影响. 综合考虑这些因素后给出了最利于合成  $^{99}\text{Mo}$  的反应体系. 在图 4 1n—4n 全部的中子退激发过程中, 蒸发剩余截面最大的反应组合是图 4(b'') 里面的  $^4\text{He} + ^{97}\text{Zr}$ , 最大截面产生时的激发能  $E^*$  约为 21.5 MeV, 对应的截面值约为 1199 mb. 因此, 我们提出  $^4\text{He} + ^{97}\text{Zr}$  在  $E^* = 21.5$  MeV ( $E_{c.m.} = 18.51$  MeV) 下的反应体系是利用熔合-蒸发反应合成  $^{99}\text{Mo}$  的最优体系. 考虑到  $^{97}\text{Zr}$  的半衰期为 16.75 h, 可能不利于靶的制备, 因此也可以选择  $^4\text{He} + ^{96}\text{Zr}$  通过 1n 道合成, 最大截面产生时的激发能  $E^*$  约为 15.5 MeV, 对应的截面值约为 376 mb.

为进一步分析机器学习模型在较高  $E_{c.m.}$  区域出现轻微非线性波动的原因, 我们选取了  $^{12-17}\text{C} + ^{87-82}\text{Kr}$  等典型反应体系生成  $^{99}\text{Mo}$  的 ML 预测结果进行单独展示, 如图 5 所示. 图中同时标注了每个体系对应的熔合势垒高度  $V_B$ . 由于这些体系的  $V_B$  数值较接近, 在图中绘制了一片代表  $E_{c.m.} \approx 28$  MeV 的阴影区域, 以近似表示势垒位置. 可以观察到, 预测曲线中的振荡主要出现在远离熔合势垒的高能区域. 综合分析表明, 这些振荡现象主要源于以下两个方面: 1) 实验数据主要集中于势垒附近 (即  $E_{c.m.} \approx V_B$ ), 而在远高于势垒的位置 ( $E_{c.m.} \gg V_B$ ) 能量点间隔较大, 样本显著稀疏, 导致模型在该区域学习效果受限, 预测结果容易出现不稳定, 例如图 1 中  $^{35}\text{Al} + ^{54}\text{Cr}$  和  $^{40}\text{Ca} + ^{50}\text{Ti}$  体系在 高能段的实验点分布即明显稀疏; 2) LightGBM 属于基于梯度提升的分段拟合模型, 其结构不易自然逼近连续光滑的函数关系, 在 高能区数据稀疏或误差较大时更易发生局部过拟合, 进而导致预测曲线出现轻微的锯齿状或非线性起伏. 需要指出的是, 尽管上述振荡现象在 高能区确实存在, 但图 3 和图 5 所展示的是基于 500 次独立训练的 ML 模型预测结果的平均值, 其振幅始终处于预测误差范围之内, 对整体的预测趋势与物理解释不构成实质性影响.

如前所述, LightGBM 模型具有良好的可解释性, 这对于物理建模问题具有重要意义 [68]. 为了进一步理解该模型生成预测结果的机制及其学习规律, 本文引入了 SHAP (shapley additive explanations) 方法 [36,45], 这是一种广泛应用于特征归因分析的工具, 能够有效识别对模型输出贡献最大的输入变量. 本文共构建了包含“基础物理特征”和

“物理信息特征”在内的 33 项输入变量. 为了展示模型最为依赖的关键特征, 对所有特征的 SHAP 值进行了统计, 并绘制了其平均值排序结果, 如图 6 所示 (仅显示排名前 12 的特征量). 其中排名靠前的特征对 CS 的预测最为重要, 而排名靠后的特征影响最小. 由图可见, EBD2 模型计算得到的 CS、

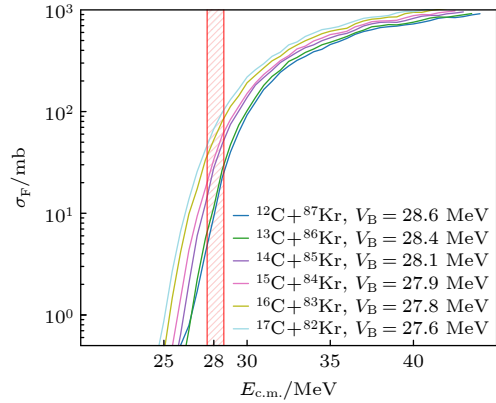


图 5 机器学习模型对  $^{12-17}\text{C} + ^{87-82}\text{Kr}$  反应体系的预测结果. 不同颜色表示不同的反应体系, 红色阴影区域表示  $E_{c.m.} \approx 28$  MeV, 用于近似对应各体系的熔合势垒位置. Fig. 5. Predictions results of the machine learning model for the  $^{12-17}\text{C} + ^{87-82}\text{Kr}$  reaction systems. Different colors represent different reaction systems. The red shaded region at  $E_{c.m.} \approx 28$  MeV indicates the approximate position of the fusion barriers for these systems.

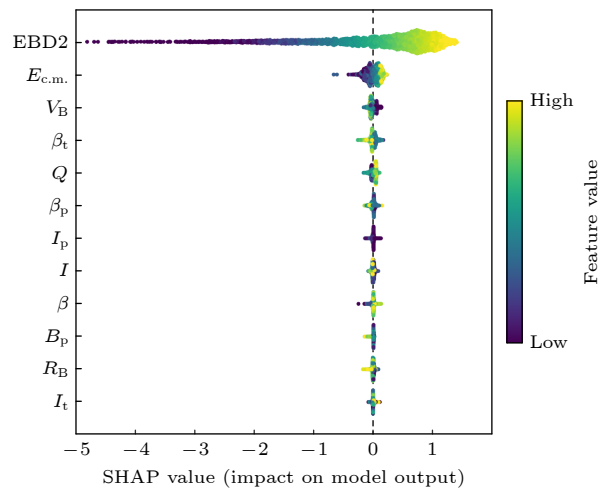


图 6 使用 SHAP 方法获得的输入特征的重要性排序. 每一行代表一个特征,  $x$  轴是 SHAP 值, 表示该特征对特定预测的重要性. 每个点代表一个核素, 颜色表示特征值 (黄色表示高, 紫色表示低).

Fig. 6. Importance ranking for the input features obtained with the SHAP. Each row represents a feature, and the  $x$ -axis is the SHAP value, which shows the importance of a feature for a particular prediction. Each point represents a nucleus, and the color represents the feature value (with yellow being high and purple being low).

质心能量  $E_{c.m.}$  以及平均势垒高度  $V_B$  位列前三, 而平均势垒半径  $R_B$  亦位于前 40% 的重要性排名之内. 这一结果表明, 上述物理量在俘获截面的机器学习建模中发挥了主导作用, 且模型在学习过程中高度依赖这些具有明确物理含义的输入特征. 同时, SHAP 排名中“物理信息特征”整体显著靠前, 也进一步印证了物理信息输入在提升预测准确性与模型泛化能力方面的重要作用, 这一结论与我们此前的研究结果保持一致.

## 4 总结与讨论

本文利用机器学习方法预测通过重离子熔合反应合成医用同位素  $^{99}\text{Mo}$  的可能途径. 机器学习模型的输入量包括基础特征量和包含物理信息的特征量, 输出量为截面. 物理信息特征量包括 EBD2 计算的截面, 势垒高度  $V_B$  以及势垒半径  $R_B$ . 结果表明, 在测试集上 (6 组反应体系共计 127 个数据点, 形成的复合核质量数与  $^{99}\text{Mo}$  接近), ML 模型能够将截面的实验数据预测误差控制在  $10^{0.061} = 1.15$  倍的范围内, 优于改进版的经验势垒分布 (EBD2) 模型得到的  $10^{0.110} = 1.29$ , 验证了 ML 模型的稳定性和可靠性. 在此基础上, 使用 ML 模型和 EBD2 对能够直接生成  $^{99}\text{Mo}$  的候选反应体系进行了预测, 两种方法的预测结果表现出一致的趋势, 得到了不同反应体系合成  $^{99}\text{Mo}$  最优质心能量  $E_{c.m.}$  范围. 考虑到熔合反应过程中形成的复合核通常处于高激发态, 结合 GEMINI++ 程序计算了  $^{100-103}\text{Mo}^*$  的中子衰变道的存活几率, 进而得到  $^{99}\text{Mo}$  的蒸发剩余截面, 发现  $^4\text{He} + ^{97}\text{Zr}$  在质心能量为 18.51 MeV 时的 2n 退激反应道的蒸发剩余截面为 1199.80 mb, 是合成  $^{99}\text{Mo}$  的最优路径. 考虑到  $^{97}\text{Zr}$  的半衰期为 16.75 h, 可能不利于靶的制备, 因此也可以选择  $^4\text{He} + ^{96}\text{Zr}$  通过 1n 道合成, 最大截面产生时的激发能  $E^*$  约为 15.5 MeV, 对应的截面值约为 376.23 mb. 该研究验证了基于物理信息的机器学习方法在熔合反应截面预测中的有效性, 可为优化反应体系选择及在重离子加速器上通过熔合反应产生医用同位素提供参考.

最后, 虽然本文结论表明机器学习模型能够在一定程度上再现弱束缚核 (如  $^7\text{Li}$ ,  $^9\text{Be}$ ) 熔合截面的垒上压低效应, 并据此给出了合理的蒸发剩余截面预测, 但受限于当前弱束缚核熔合反应实验数据

的稀缺性, 模型在这些特定体系垒上能区的预测精度仍受制于训练样本的覆盖度. 未来随着更多相关实验数据的积累, 或在特征量中显式引入破裂通道信息, 有望进一步降低此类体系预测的不确定性. 目前我们的研究筛选出来的最优组合仅考虑了中子退激发的过程, 在未来的工作中, 我们可以考虑伴随着少量的质子、 $\alpha$  粒子发射的退激发过程, 并且可以结合深度神经网络、高斯过程回归等其他的机器学习方法来预测截面值, 从而将模型训练得更完善, 并推广至  $^{131}\text{I}$ ,  $^{177}\text{Lu}$ ,  $^{225}\text{Ac}$  等重要医用核素的熔合反应预测.

## 数据可用性声明

支撑本研究成果的数据集可在科学数据银行 <https://doi.org/10.57760/sciencedb.j00213.00244> 中访问获取.

感谢湖州师范学院 C3S2 计算中心提供的大力支持.

## 参考文献

- [1] Salih S, Alkathheeri A, Alomaim W, Elliyanti A 2022 *Molecules* **27** 5231
- [2] Filippi L, Chiaravallotti A, Schillaci O, Cianni R, Bagni O 2020 *Expert Review of Medical Devices* **17** 331
- [3] Gallamini A, Zwartboed C, Borra A 2014 *Cancers* **6** 1821
- [4] Hsu B, Chen F C, Wu T C, Huang W S, Hou P N, Chen C C, Hung G U 2014 *Eur. J. Nucl. Med. Mol. Imaging* **41** 2294
- [5] Hasan S, Prelas M A 2020 *SN Applied Sciences* **2** 1782
- [6] Stoddard M N, Harb J N, Memmott M J 2019 *Annals of Nuclear Energy* **129** 56
- [7] Wang Y, Chen D, dos Santos Augusto R, Liang J, Qin Z, Liu J, Liu Z 2022 *Molecules* **27** 5294
- [8] Dash A, Knapp Jr F R, Pillai M 2013 *Nucl. Med. Biol.* **40** 167
- [9] Liem P H, Tran H N, Sembiring T M 2015 *Prog. Nucl. Energy* **82** 191
- [10] Le V S 2014 *Sci. Technol. Nuclear Installations* **2014** 345252
- [11] Lee S K, Beyer G J, Lee J S 2016 *Nucl. Eng. Technol.* **48** 613
- [12] Xu W, Li J, Shi L 2024 *Nucl. Eng. Technol.* **56** 3585
- [13] Youker A J, Chemerisov S D, Tkac P, Kalensky M, Heltemes T A, Rotsch D A, Vandegrift G F, Krebs J F, Makarashvili V, Stepinski D C 2017 *J. Nucl. Med.* **58** 514
- [14] Bénard F, Buckley K R, Ruth T J, Zeisler S K, Klug J, Hanemaayer V, Vuckovic M, Hou X, Celler A, Appiah J P, John M S K Valliant, Schaffer P 2014 *J. Nucl. Med.* **55** 1017
- [15] Wang H Y, Qiu Y J, Lin C J, Wu X G, Han Y L, Wu H Y, Feng J, Zheng Y, Yang L, Li C B, Luo T P, Chang C, Sun Q, Zhu D Y, Zhao Y X, Huang D H, Li T X, Zheng M, Zhao Z H, Zhu Y W, Zhao K L, Sun P F, Song J X, Guo M W, Ren S X, Zheng X H 2025 *Acta Phys. Sin.* **74** 132501 (in Chinese) [王涵语, 邱奕嘉, 林承键, 吴晓光, 韩银录, 吴鸿毅, 冯晶, 郑云, 杨磊, 李聪博, 骆天鹏, 常昶, 孙琪, 朱德宇, 赵亦轩, 黄大湖, 李

- 天晓, 郑敏, 赵子豪, 朱意威, 赵坤灵, 孙鹏飞, 宋金兴, 郭明伟, 任四禧, 郑小海 2025 *物理学报* **74** 132501]
- [16] Xia J W, Zhan W L, Wei B W, Yuan Y J, Song M T, Zhang W Z, Yang X D, Yuan P, Gao D Q, Zhao H W, Yang X T, Xiao G Q, Man K T, Dang J R, Cai X H, Wang Y F, Tang J Y, Qiao W M, Rao Y N, He Y, Mao L Z, Zhou Z Z 2002 *Nucl. Instrum. Meth. A* **488** 11
- [17] Yang J C, Xia J W, Xiao G Q, Xu H S, Zhao H W, Zhou X H, Ma X W, He Y, Ma L Z, Gao D Q, Meng J, Xu Z, Mao R S, Zhang W, Wang Y Y, Sun L T, Yuan Y J, Yuan P, Zhan W L, Shi J, Liu J W, Jia X J, Zhou X P, Liu S H, Yin D Y, Chai W P, Wu J X, Song M T, Shen G D, Ma X M, Mao L J, Zhao H, Li Y M, Huang M W, Yin D X, Li J, Wang J C, Sheng L N 2013 *Nucl. Instrum. Meth. B* **317** 263
- [18] Zhou X, Yang J 2022 *AAPPS Bull.* **32** 35
- [19] Hong B 2023 *AAPPS Bulletin* **33** 3
- [20] Hagino K, Rowley N, Kruppa A T 1999 *Comput. Phys. Commun.* **123** 143
- [21] Wen P W, Chulumbaatar O, Gusev A A, Nazmitdinov R G, Nasirov A K, Vimitsky S I, Lin C J, Jia H M 2020 *Phys. Rev. C* **101** 014618
- [22] Simenel C, Umar A S 2018 *Prog. Part. Nucl. Phys.* **103** 19
- [23] Simenel C 2012 *Eur. Phys. J. A* **48** 152
- [24] Wang B, Wen K, Zhao W J, Zhao E G, Zhou S G 2017 *Atom. Data Nucl. Data Tabl.* **114** 281
- [25] Wang B, Wen K, Zhao W, Zhao E, Zhou S 2017 *Chin. Sci. Bull.* **62** 2480
- [26] Wong C Y 1973 *Phys. Rev. Lett.* **31** 766
- [27] Lwin N W, Htike N N, Hagino K 2017 *Phys. Rev. C* **95** 064601
- [28] Vijay, Chahal R P, Gautam M S, Duhan S, Khatri H 2021 *Phys. Rev. C* **103** 024607
- [29] Hill D L, Wheeler J A 1953 *Phys. Rev.* **89** 1102
- [30] Zhu L, Feng Z Q, Li C, Zhang F S 2014 *Phys. Rev. C* **90** 014612
- [31] Chen Y, Yao H, Liu M, Tian J, Wen P, Wang N 2023 *Atom. Data Nucl. Data Tabl.* **154** 101587
- [32] Gao Z, Liu S, Wen P, Liao Z, Yang Y, Su J, Wang Y, Zhu L 2024 *Phys. Rev. C* **109** 024601
- [33] Dell'Aquila D, Gnoffo B, Lombardo I, Porto F, Russo M 2023 *J. Phys. G* **50** 015101
- [34] Cheng K X, He R X, Qiao C Y, Ma C W 2025 *Nucl. Sci. Tech.* **36** 194
- [35] Li Z L, Wang Y J, Li Q F 2025 *Nuclear Techniques* **48** 250132 (in Chinese) [李志龙, 王永佳, 李庆峰 2025 *核技术* **48** 250132]
- [36] Li Z, Gao Z, Liu L, Wang Y, Zhu L, Li Q 2024 *Phys. Rev. C* **109** 024604
- [37] Back B B, Esbensen H, Jiang C L, Rehm K E 2014 *Rev. Mod. Phys.* **86** 317
- [38] Wang N, Chen J, Wang Y, Yao H 2025 *Phys. Rev. C* **111** 024621
- [39] Cap T, Siwek-Wilczynska K, Wilczynski J 2011 *Phys. Rev. C* **83** 054602
- [40] Siwek-Wilczynska K, Wilczynski J 2004 *Phys. Rev. C* **69** 024611
- [41] Lü H, Marchix A, Abe Y, Boilley D 2016 *Comput. Phys. Commun.* **200** 381
- [42] Wang N 2025 *Chin. Phys. C* **49** 124106
- [43] Gao Z P, Wang Y J, Lü H L, Li Q F, Shen C W, Liu L 2021 *Nucl. Sci. Tech.* **32** 109
- [44] Gao Z P, Li Q F 2023 *Nuclear Techniques* **46** 080009 (in Chinese) [高泽鹏, 李庆峰 2023 *核技术* **46** 080009]
- [45] Li Z, Wang Y, Li Q, Lv B f 2025 *Phys. Rev. C* **112** 014312
- [46] Dong X X, An R, Lu J X, Geng L S 2023 *Phys. Lett. B* **838** 137726
- [47] Wu D, Bai C L, Sagawa H, Zhang H Q 2020 *Phys. Rev. C* **102** 054323
- [48] Dong X X, An R, Lu J X, Geng L S 2022 *Phys. Rev. C* **105** 014308
- [49] Su P, He W B, Fang D Q 2023 *Symmetry* **15** 1040
- [50] Lv B, Wang Y, Li Z, Petrache C 2025 *Phys. Rev. C* **111** 064324
- [51] Lv B, Li Z, Wang Y, Petrache C 2024 *Phys. Lett. B* **857** 139013
- [52] Li Z L, Lv B F, Wang Y J, Petrache C M 2026 *Chin. Phys. C* **50** 014107
- [53] Newton J O, Morton C R, Dasgupta M, Leigh J R, Mein J C, Hinde D J, Timmers H, Hagino K 2001 *Phys. Rev. C* **64** 064608
- [54] Aguilera E F, Vega J J, Kolata J J, Morsad A, Tighe R G, Kong X J 1990 *Phys. Rev. C* **41** 910
- [55] Aguilera E F, Kolata J J, Tighe R J 1995 *Phys. Rev. C* **52** 3103
- [56] Szanto E M, Neto R L, Figueira M C S, Szanto de Toledo A, Herman M G, Nicolis N G, Stwertka P M, Cormier T M 1990 *Phys. Rev. C* **41** 2164
- [57] Sonzogni A A, Bierman J D, Kelly M P, Lestone J P, Liang J F, Vandenbosch R 1998 *Phys. Rev. C* **57** 722
- [58] Jiang C L, Back B B, Rehm K E, Hagino K, Montagnoli G, Stefanini A M 2021 *Eur. Phys. J. A* **57** 235
- [59] Luong D H, Dasgupta M, Hinde D J, du Rietz R, Rafiei R, Lin C J, Evers M, Diaz-Torres A 2013 *Phys. Rev. C* **88** 034609
- [60] Jiang C L, Back B B, Esbensen H, Janssens R, Rehm a K 2006 *Physical Review C* **73** 014613
- [61] Werke T A, Mayorov D A, Alfonso M C, Tereshatov E E, Folden C M 2015 *Phys. Rev. C* **92** 054617
- [62] Maiti M 2011 *Phys. Rev. C* **84** 044615
- [63] Palshetkar C S, Santra S, Chatterjee A, Ramachandran K, Thakur S, Pandit S K, Mahata K, Shrivastava A, Parkar V V, Nanal V 2010 *Phys. Rev. C* **82** 044608
- [64] Parkar V V, Palit R, Sharma S K, Naidu B S, Santra S, Joshi P K, Rath P K, Mahata K, Ramachandran K, Trivedi T, Raghav A 2010 *Phys. Rev. C* **82** 054601
- [65] Charity R J 2010 *Phys. Rev. C* **82** 014610
- [66] Zagrebaev V I, Karpov A V, Denikin A S, Samarin V V 2025 <http://nrv.jinr.ru/nrv/>
- [67] Canto L, Gomes P, Donangelo R, Hussein M S 2006 *Phys. Rep.* **424** 1
- [68] Thampi A 2022 *Interpretable AI: Building Explainable Machine Learning Systems* (New York: Simon and Schuster) pp65–88

SPECIAL TOPIC—Thematic data in nuclear physics: Experimental, theoretical and applied research

## Machine-learning predictions of fusion cross sections for synthesizing $^{99-103}\text{Mo}^*$

HUANG Zhilong<sup>1)</sup> LI Zhilong<sup>1)2)</sup> Gao Zepeng<sup>3)</sup>

WANG Yongjia<sup>1)†</sup> LI Qingfeng<sup>1)2)‡</sup>

1) (*School of Science, Huzhou University, Huzhou 313000, China*)

2) (*China Institute of Atomic Energy, Beijing 102413, China*)

3) (*Sino-French Institute of Nuclear Engineering and Technology, Sun Yat-sen University, Zhuhai 519082, China*)

( Received 9 November 2025; revised manuscript received 8 December 2025 )

### Abstract

Based on the Gradient Boosting Decision Tree (GBDT) machine learning algorithm, this study develops a model for predicting the fusion reaction cross-section (CS) of  $^{99-103}\text{Mo}^*$ , aiming to explore the optimal synthesis pathway for the medical isotope  $^{99}\text{Mo}$ . The model inputs include characteristic quantities such as reaction energy, proton number, mass number, and binding energy, as well as relevant parameters calculated based on phenomenological theoretical models, with the output being the fusion reaction cross-section. It is found that the mean absolute error (MAE) between the machine learning-predicted CS and experimental values on the test set is 0.0615, which is superior to the 0.1103 predicted by the EBD2 model. On this basis, combined with the GEMINI++ program, the survival probabilities of the neutron decay channels for  $^{99-103}\text{Mo}^*$  were calculated to derive the evaporation residue cross-section of  $^{99}\text{Mo}$ . It is found that the evaporation residue cross-section of the 2n de-excitation channel for  $^4\text{He} + ^{97}\text{Zr}$  at a center-of-mass energy of 18.51 MeV is 1199.80 mb, making it the optimal pathway for synthesizing  $^{99}\text{Mo}$ . This research validates the reliability of physics-informed machine learning methods in predicting fusion reaction cross-sections and provides a reference for optimizing reaction system selection and producing medical isotopes through fusion reactions in heavy-ion accelerators. The datasets presented in this paper are openly available at <https://doi.org/10.57760/sciencedb.j00213.00244>.

**Keywords:** medical isotope production, heavy-ion fusion reactions, capture cross sections, machine learning

**DOI:** [10.7498/aps.75.20251527](https://doi.org/10.7498/aps.75.20251527)

**CSTR:** [32037.14.aps.75.20251527](https://cstr.cn/32037.14.aps.75.20251527)

\* Project supported by the National Basic Program of China (Grant No. 2023YFA1606402) and the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 12335008).

† Corresponding author. E-mail: [wangyongjia@zjhu.edu.cn](mailto:wangyongjia@zjhu.edu.cn)

‡ Corresponding author. E-mail: [liqf@zjhu.edu.cn](mailto:liqf@zjhu.edu.cn)