

محاسبه ضریب خودحفاظتی نوترون و تاثیر آن در تخمین مقدار ماده نمونه در تحلیل به روش فعالسازی نوترونی برای نمونه‌های بزرگ

نصراله‌زاده زواردهی، پوران؛ میری حکیم آباد، سید هاشم؛ رفعت متولی، لاله

گروه فیزیک دانشگاه فردوسی مشهد

چکیده

LS-PGNAA (Large Sample Prompt Gamma Neutron Activation Analysis) روشی غیر مخرب برای تعیین کسرهای جرمی نمونه‌های بزرگ با ترکیب همگن ناشناخته می‌باشد و زمانی که نمونه بزرگ باشد، اثراتی مانند خودحفاظتی نوترون و تضعیف گاما در تخمین مقدار ماده، خطا ایجاد خواهند کرد و برای تعیین مقدار دقیق نمونه، باید تصحیحاتی اعمال گردد. در این مقاله ضریب خودحفاظتی نوترون محاسبه و تاثیر آن در تصحیح قله تمام انرژی مربوط به طیف گاماها برای آنی گسیل شده از ماده نمونه بررسی می‌شود. برای تحقق این موضوع، یک شبیه‌سازی با استفاده از کد *MCNP* صورت گرفته است. نمونه‌ها در ظرف‌های *PTFE (poly tetra fluor ethylene)* جایگذاری شدند. تاثیر سه پارامتر مختلف: نوع ماده، ابعاد نمونه و چگالی آن، روی ضریب خودحفاظتی نوترون بررسی شده و نیز نشان داده شده است که سطح زیر قله تمام انرژی با چگالی اتمی نمونه‌ای خاص رابطه خطی داشته و پارامترهای خط مربوطه تعیین شده است. همچنین نشان داده شده است که با اعمال ضریب خودحفاظتی نوترون، پارامترهای خط برازش شده با خطای کمتری به دست می‌آیند.

کلید واژه: *LS-PGNAA* (تحلیل نمونه‌های بزرگ به روش فعالسازی نوترونی با گاماها‌های آنی)، خودحفاظتی نوترون، ضریب تصحیح، کد *MCNP*

Calculation of neutron self-shielding factor and its effect on estimating amount of sample matter in LS-PGNAA

Nasrolahzadeh zevardehi, Pooran; Miri Hakimabad, Seyed Hashem; Rafat Motavalli, Laleh

Department of Physics, Ferdowsi university of mashhad

Abstract

LS-PGNAA (Large Sample Prompt Gamma Neutron Activation Analysis) is a noninvasive method for determination element fractions of large samples with an unknown homogeneous matrix composition. and when the sample is large, effects such as neutron self-shielding and gamma attenuation cause error in estimating amount of matter.

For determination of amount of matter exactly, corrections should be considered, so correction factors for these effects are expressed. In this paper neutron self-shielding correction factor is calculated and its effect on correction of full energy peak in prompt gamma spectrum is investigated.

For calculating this factor a simulation was carried out using *MCNP* code. samples put in cylindrical *PTFE (poly tetra fluor ethylene)* container. Effects of three different parameters: type of matter, dimension of sample and density of that, investigated on neutron self-shielding. also it has showed the area of full energy peak has linear relation with atom density of special sample and parameters of that line determined. Also it showed that by using self-shielding factor, parameters of fitted line obtain with less error.

Keywords: *LS-PGNAA*, neutron self-shielding, correction factor, *MCNP* code

PACS 28

مقدمه

روش که در دانشگاه delft توسعه یافته است، یکی از دقیق‌ترین روش‌های موجود بوده و بدون تخریب و دست‌اندازی در نمونه، به تحلیل آن می‌پردازد. به گفته محققان دانشگاه delft، خطای این روش توسعه یافته کمتر از ۱۰ درصد می‌باشد [۱]. اما مشکلی که در تحلیل نمونه‌هایی با ابعاد بزرگ موجود است، مساله خودحفاظتی

یک روش برای تعیین کسرهای جرمی عناصر موجود در نمونه‌های بزرگ که ترکیب همگن دارند، روش *LS-PGNAA* می‌باشد [۱].
که یک روش منطقی و مکمل برای روش‌های موجود است. این

$$M: \text{جرم مولی } \left(\frac{kg}{mol}\right)$$

$$\phi: \text{شار نوترون } (m^{-2}s^{-1})$$

$$I_\gamma: \text{شدت نسبی گاما}$$

$$\varepsilon: \text{بازده مطلق آشکارسازی قله تمام انرژی}$$

$$N_{av}: \text{عدد آووگادرو } \left(\frac{1}{mol}\right)$$

$$\sigma_a: \text{سطح مقطع میکروسکوپی جذب}$$

$$\theta: \text{فراوانی ایزوتوپی}$$

$$\lambda: \text{ثابت واپاشی } (s^{-1})$$

$$t_i: \text{زمان تابش } (s)$$

$$f: \text{ضریب تصحیح برای خودحفاظی نوترون}$$

روش کار

ضریب خودحفاظی نوترون که با f نشان داده می‌شود از رابطه زیر به دست می‌آید [۳]:

$$f = \frac{RV}{\sigma_a N \phi V} = \frac{RV}{\sigma_a N n v V} \quad (2)$$

$$f: \text{فاکتور تصحیح برای خودحفاظی نوترون}$$

$$V: \text{حجم نمونه } (m^3)$$

$$R: \text{آهنگ برهم‌کنش در واحد حجم نمونه } (m^{-3})$$

$$\sigma_a: \text{سطح مقطع میکروسکوپی جذب [۴]}$$

$$N: \text{چگالی اتمی } (m^{-3})$$

$$\phi: \text{شار نوترون } (m^{-2}s^{-1})$$

$$n: \text{چگالی نوترون } (m^{-3})$$

$$v: \text{سرعت نوترون } \left(\frac{m}{s}\right)$$

صورت کسر، آهنگ برهم‌کنش محاسبه شده از طریق تجربه یا شبیه‌سازی می‌باشد و مخرج کسر نیز آهنگ برهم‌کنش از رابطه تئوری و با استفاده از شار نوترون فرودی است. واضح است که آهنگ برهم‌کنش نوترون در حالت واقعی (تجربه یا شبیه‌سازی) کوچکتر از حالت تئوری است زیرا نوترون در سر راه خود، دچار خودحفاظی می‌شود. ضریب خودحفاظی عددی بین صفر و یک می‌باشد و انتظار می‌رود برای نمونه‌ای که جاذب خوبی برای نوترون است، کسر کوچک‌تر و نزدیک به صفر باشد. برای محاسبه

نوترون و تضعیف گاما می‌باشد که به دلیل تضعیف شار نوترون و پرتوهای گاما در ابعاد نمونه به وجود می‌آید و جهت تعیین مقدار دقیق نمونه، مشکل مذکور باید برطرف گردد. در این مقاله روی ضریب خودحفاظی نوترون بحث می‌گردد. مساله خودحفاظی - نوترون طی یک ضریب، جهت تصحیح مقدار نمونه برطرف می‌شود. لذا روش LS-PGNAA بدون در نظر گرفتن چنین ضریب تصحیحی فاقد ارزش خواهد بود. زیرا در شناسایی یک نمونه مجهول، علاوه بر نوع عناصر موجود در آن، مقدار دقیق عناصر نیز حائز اهمیت فراوان می‌باشد.

در روش LS-PGNAA زمانی که حجم نمونه‌ها بزرگ باشد، مساله خودحفاظی نوترون به وجود خواهد آمد. هسته‌هایی که در عمق بیشتری از نمونه قرار گرفته‌اند در مقابل نوترون‌های فرودی، توسط هسته‌هایی که در سطح قرار دارند، استتار می‌شوند. به دلیل اندرکنش‌های متفاوت در سر راه نوترون، از تعداد نوترون‌های موجود در شار فرودی کاسته می‌شود و به‌طور مثال شار در فاصله x از نمونه همان شار فرودی نمی‌باشد. اما در محاسبات متفاوت جهت تعیین کسر جرمی عنصر، شار فرودی نوترون جایگذاری می‌شود و از آنجا که برای کل نمونه بزرگ تحت بررسی، نمی‌توان همان شار فرودی را قرار داد و باید یک شار میانگین (تصحیح شده) برای نمونه در نظر گرفت، لذا نیاز به ورود ضریب تصحیحی برای خودحفاظی نوترون احساس می‌شود. در نمونه‌های کوچک این تصحیح می‌تواند نادیده گرفته شود و شار برای کل نمونه همان شار فرودی در نظر گرفته شود، اما در نمونه‌های بزرگ باید تصحیحات لازم صورت گیرد.

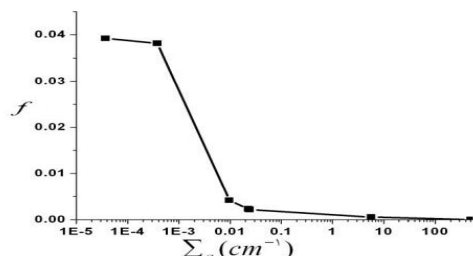
مقدار عنصر موجود در نمونه از رابطه زیر به دست می‌آید که به مساحت خالص قله تمام انرژی بستگی دارد [۲]:

$$m = \frac{S M}{N_{av} t_c \theta I_\gamma \varepsilon \phi \sigma (1 - e^{-\lambda t_i})} \quad (1)$$

m : مقدار یک عنصر در نمونه (kg)

S : مساحت خالص قله تمام انرژی

برحسب سطح مقطع ماکروسکوپی جذب در شکل ۲ آورده شده است.



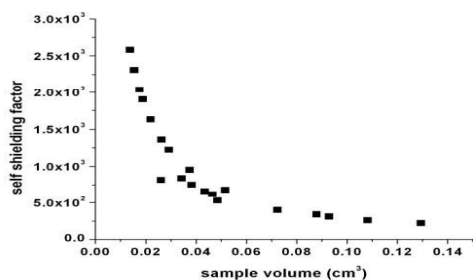
شکل ۲: نمودار ضریب خودحفاظتی نوترون بر حسب سطح مقطع جذب

مشاهده می‌شود که با افزایش سطح مقطع جذب، ضریب خودحفاظتی نوترون کاهش می‌یابد و هرچقدر نمونه جاذب بهتری باشد، فاکتور خودحفاظتی کوچکتر خواهد بود، یعنی شار نوترون فرودی دچار خودجذبی بیشتری گشته و مقدار نمونه را کمتر از حالت واقعی به دست خواهد داد.

ب) ابعاد نمونه

در این حالت از نمونه‌ای مشخص و ثابت (پارافین) در محاسبات متفاوت بهره گرفته شده و تنها ابعاد نمونه متغیر فرض شده است.

نتایج محاسبات همان‌طور که در شکل ۳ آمده است، نشان می‌دهد



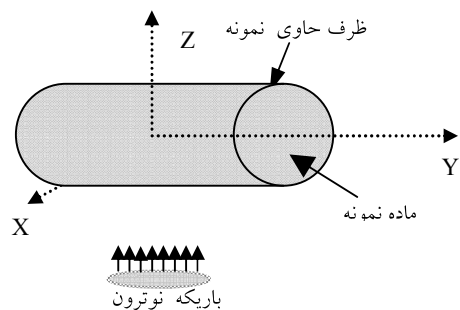
شکل ۳: نمودار ضریب خودحفاظتی نوترون بر حسب حجم نمونه

که هر چقدر حجم نمونه بزرگتر باشد، ضریب خودحفاظتی نوترون کوچکتر خواهد بود. در واقع شار نوترون فرودی به دلیل ابعاد بزرگ نمونه بیشتر تضعیف می‌گردد.

ج) تراکم نمونه

ضریب خودحفاظتی نوترون برای نمونه پارافین، در حالتی که تراکم نمونه در یک حجم ثابت، متغیر فرض شده، محاسبه گردیده است. همان‌طور که در نمودار شکل ۴ مشاهده می‌شود، با افزایش چگالی

ضریب خودحفاظتی، با استفاده از کد MCNP [۵]، آهنگ برهمکنش نوترون در یک نمونه با شکل هندسی و ترکیب معین، به دست می‌آید، آن‌گاه از رابطه فوق برای تعیین f استفاده می‌شود. در بررسی صورت گرفته مواد نمونه در ظرف‌های (poly) PTFE که به صورت استوانه‌هایی با قطر خارجی ۱۰ cm و ارتفاع خارجی ۲۰ cm و ضخامت دیواره ۰٫۳۵ cm بودند، قرار دارند. یک باریکه نوترون حرارتی با توزیع ماکسول - بولتزمن با قطر ۲٫۵۴ cm نیز به صورت عمود بر محور استوانه در راستای محور Z بر آن می‌تابد. هندسه مربوط به شبیه‌سازی در شکل ۱ آورده شده است.



شکل ۱: هندسه مربوط به شبیه‌سازی سیستم

سه پارامتر متفاوت که می‌توانند ضریب خودحفاظتی نوترون را

تحت تأثیر قرار دهند عبارتند از:

- نوع نمونه (ترکیب و عناصر تشکیل دهنده)

- ابعاد نمونه

- تراکم نمونه (چگالی)

بنابراین ضریب تصحیح خودحفاظتی نوترون، برای ابعاد هندسی و ترکیب‌های متفاوت، مورد تحقیق واقع شده و نتایج تحلیل شده است.

نتایج

الف) نوع نمونه

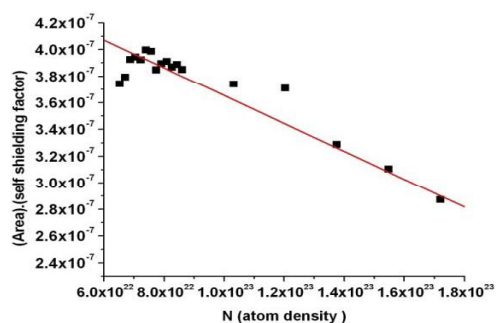
موادی که ضریب خودحفاظتی برای آن‌ها محاسبه شده است، عبارتند از: کربن، بور، بریلیوم، پارافین، آب، آب سنگین و پارافین + پنج درصد اسید بوریک. نمودار ضریب خودحفاظتی نوترون محاسبه شده برای مواد مذکور،

حال با استفاده از ضریب f سطح زیر قله را تصحیح نموده و آن‌را مجدداً برحسب چگالی رسم نموده و پارامترهای خط برازش شده به داده‌ها را به‌دست می‌آوریم. نمودار مربوطه در شکل ۶ آمده‌است و پارامترها نیز با χ_r^2 بهتری به‌صورت زیر تغییر نموده‌اند:

$$A = 4.69578 \times 10^{-7} \quad \text{Error} = 6.83169 \times 10^{-9}$$

$$B = -1.04295 \times 10^{-23} \quad \text{Error} = 6.09802 \times 10^{-23}$$

$$\chi_r^2 = 1.1778 \times 10^{-8}$$



شکل ۶: نمودار سطح زیر قله بر حسب چگالی با اعمال ضریب خودحفاظی

بنابراین در مورد یک نمونه خاص با استفاده از یک رابطه خطی برای هر عنصر، می‌توان تعداد اتم‌های مربوطه به آن را به‌دست آورد.

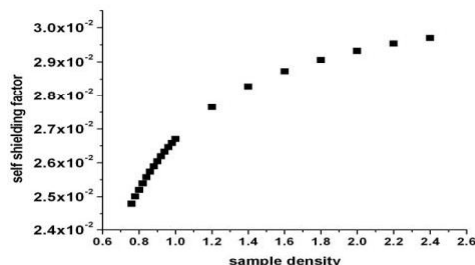
بحث و نتیجه‌گیری

پارامترهای بررسی شده در این مقاله در شمارش گاماهاى آنی گسیل‌شده از واحد حجم نمونه در روش LS-PGNAA و در تعیین مقدار نمونه مورد نظر، تاثیر گذار می‌باشند. تعداد گاماهاى آنی (مشخصه) ساطع شده از نمونه که در برهم‌کنش $(n-\gamma)$ همان آهنگ برهم‌کنش نوترون می‌باشد با ضریب خودحفاظی نوترون تصحیح می‌شود. لذا اعتبار روش LS-PGNAA به ضرایب تصحیح مربوطه بستگی خواهد داشت.

مراجع

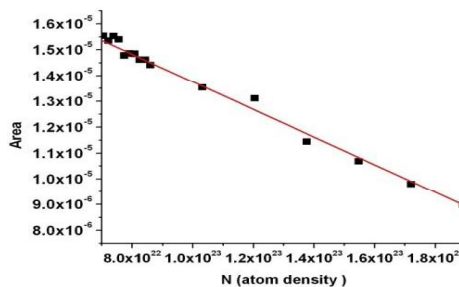
[1] M. Blaauw, I. H. Degenaar, J. J. M. de Goeij Journal of Radioanalytical and Nuclear Chemistry, Vol. 271, NO. 3 (2007) 765-770
 [2] Measurement and detection of radiation, Nicholas Soulfanidis, Hemisphere Publishing Corporation, 1983.
 [3] Heleen Degenaar, Menno Blaauw, Nuclear Instruments and Methods in Physics B 207 (2003) 131-135.
 [4] Table of nuclides, (<http://atom.kaeri.re.kr>) (2000).
 [5] Briesmeister, J. F., Ed. MCNP—a general Monte Carlo N-particle transport code: version 4C. Report LA-13709-M (Los Alamos, NM: Los Alamos National Laboratory) (2000).

نمونه‌ای خاص، ضریب خودحفاظی نوترون افزایش می‌یابد.



شکل ۷: نمودار ضریب خودحفاظی نوترون بر حسب چگالی نمونه

پس از محاسبه ضریب خودحفاظی نوترون، می‌توان طیف گاماهاى آنی را تصحیح نمود. باید رابطه‌ای خطی بین سطح زیر قله تمام انرژی و چگالی (تعداد اتم‌ها) نمونه به‌دست آورد، زیرا سطح زیر قله با مقدار نمونه رابطه مستقیم دارد یعنی با استفاده از مساحت هر قله می‌توان تعداد اتم‌های عنصر مورد نظر را مشخص نمود. بنابراین مجدداً سیستم را با وجود آشکارسازی در راستای محور Z شبیه‌سازی نموده و طیف گاما را برای نمونه پارافین درحالت چگالی متغیر به‌دست می‌آوریم. با ترسیم نمودار سطح زیر قله بر حسب چگالی اتمی، رابطه‌ای خطی می‌توان برای آن برازش نمود. نمودار مربوطه در شکل ۵ آورده شده‌است.



شکل ۵: نمودار تغییرات سطح زیر قله تمام انرژی بر حسب چگالی اتمی

پارامترهای مربوط به خط برازش شده با معادله $Y = AX + B$ به صورت زیر می‌باشند:

$$A = 1/91.097 \times 10^{-5} \quad \text{Error} = 1/44277 \times 10^{-7}$$

$$B = -5/3539 \times 10^{-29} \quad \text{Error} = 1/28783 \times 10^{-30}$$

$$\chi_r^2 = 2/48738 \times 10^{-7}$$