

بررسی و انتخاب کتابخانه‌های سطح مقطع نوترون در کد MCNPX جهت شبیه‌سازی PGNAA

اسمعیل بیات^{۱*}، حسین آفریده^۱، فریدون عباسی‌دوانی^۲ و زهرا علیپور^۳

^۱پژوهشگاه علوم و فنون، سازمان انرژی اتمی، تهران، ایران.

^۲دانشکده مهندسی انرژی و فیزیک، دانشگاه امیرکبیر، تهران، ایران.

^۳دانشکده مهندسی هسته‌ای، دانشگاه شهید بهشتی، تهران، ایران.

^۴دانشکده فیزیک، دانشگاه زنجان، زنجان، ایران.

*تهران، دانشگاه امیرکبیر، دانشکده مهندسی انرژی و فیزیک، صندوق پستی: ۱۵۸۷۵-۴۴۱۳

پست الکترونیکی: bayat_54@yahoo.com, ebayat@aeoi.org.ir

چکیده

امروزه کاربردهای صنعتی، پزشکی و نظامی آنالیز نوترونی به روش PGNAA کاملاً شناخته شده است. در موارد زیادی مانند طراحی چیدمان نیاز است که با استفاده از کدهای محاسباتی مانند MCNPX، پارامترهای سیستم مانند طیف گامای انتظاری از عناصر حفاظ، نمونه و محیط تعیین گردد تا به‌طور مثال حداقل مقدار عنصر قابل تشخیص (MDC) توسط چیدمان پیش‌بینی شود. کدهای محاسباتی جهت شبیه‌سازی اندرکنش‌ها به کتابخانه‌های سطح مقطع مراجعه می‌کنند. در این تحقیق برای ۱۶ عنصر پرکاربرد، کتابخانه‌های مورد استفاده توسط کد MCNPX-2.6 در دمای ۲۹۳/۶ درجه کلوین، توسط شبیه‌سازی PGNAA با یکدیگر مقایسه شده اند. طیف‌های گامای حاصل از برخی عناصر، علاوه بر اختلاف با داده‌های مراجع معتبر، نشان‌دهنده تفاوت کتابخانه‌ها در شبیه‌سازی یک هندسه واحد می‌باشند. طبق نتایج این تحقیق، تنها توسط کتابخانه‌های مشخصی، مشاهده طیف گامای صحیح برای هر عنصر امکان‌پذیر است.

کلیدواژه‌گان: شبیه‌سازی، کد MCNPX، PGNAA، کتابخانه، سطح مقطع نوترون.

۱. مقدمه

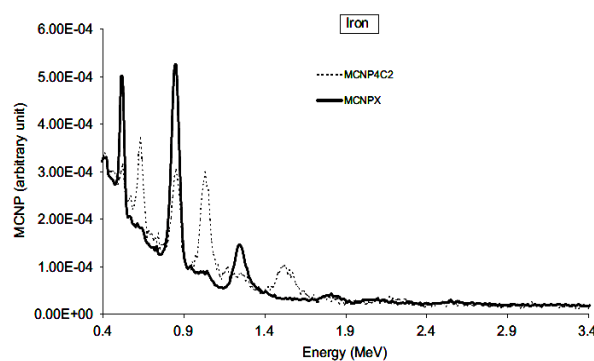
همکاری مراکز تحقیقاتی کشورهای مختلف انجام می‌پذیرد. ارزیابی این داده‌ها نیز به‌طور پیوسته در جریان است و عموماً تنها بخشی از سطح مقطع‌ها بروزرسانی می‌شوند و به‌صورت نسخه‌های جدید ارایه می‌گردند. این کتابخانه‌های سطح مقطع علاوه بر زمان آخرین ارزیابی، در پهن‌شدگی دوپلری ناشی از

کتابخانه‌های سطح مقطع مختلفی برای نوترون در کد محاسباتی MCNPX وجود دارد. تولید این سطح مقطع‌ها به‌طور تئوری توسط مدل‌های هسته‌ای و یا به‌صورت تجربی با

دما، تعداد انرژی نوترون، بیشترین انرژی نوترون، وجود داده‌های تولید فوتون یا ذرات باردار، وجود داده‌های نوترون‌های تأخیری و ... با یکدیگر اختلاف دارند [۱].

به‌طور مکرر دیده شده که کتابخانه جدیدتر دارای نقص‌هایی است که در نسخه قبل وجود نداشته است. همچنین نسخه‌های مختلف کد MCNP نیز نیاز به ارزیابی دارند تا از صحت عملکرد آن اطمینان حاصل شود. به‌عنوان مثال اختلاف طیف PGNAA آهن در MCNP4C و MCNPX در شکل ۱ مشهود است. هر دو نسخه از کتابخانه ENDF/B-VI.0 استفاده نموده‌اند [۲].

پروت و همکاران [۲] مقایسه‌ای بین اندازه‌گیری و شبیه‌سازی PGNAA با برخی داده‌های کتابخانه‌های سطح مقطع ENDF/B-، ENDF/B-VI.8، ENDF/B-VI.0 و JEFF 3.1 و VII.0 برای عناصر C, N, O, Na, Al, Si, Cl, K, Ca, Cr, Fe, Ni, Cu, Zn, Pb در انرژی نوترون ۱۴ MeV انجام داده‌اند. اما به‌طور دقیق، کتابخانه مورد استفاده برای هر عنصر در MCNP را تعیین نکرده‌اند.



شکل (۱): اختلاف تالی F8 در شبیه‌سازی طیف گامای آبی آهن در دو نسخه MCNP4C و MCNPX [۲].

لوشه و همکاران [۳] گاما‌های آبی ناشی از اندرکنش نوترون‌های چشمه ^{252}Cf با ایزوتوپ‌های ژرمانیم را به‌طور

تجربی و شبیه‌سازی بررسی نموده و اختلاف بین این دو را نشان داده‌اند. الئون و همکاران [۴] شبیه‌سازی PGNAA با داده‌های کتابخانه ENDF/B-VII.0 برای عناصر C, O, N, Si, Ca, Fe, Al, در انرژی نوترون ۱۴ MeV را بررسی نموده و اختلاف محاسبه با اندازه‌گیری را برای اکسیژن نشان داده‌اند. پروت و همکاران [۵] برای برخی عناصر مانند C, N, O, Al, Fe, Pb مقایسه‌ای بین آنالیز کمی و کیفی توسط اندازه‌گیری و شبیه‌سازی PGNAA توسط کد MCNPX با کتابخانه سطح مقطع ENDF/B-VII.0 انجام داده و نشان داده‌اند که شبیه‌سازی در برخی موارد علاوه بر ویژگی کیفی از لحاظ مقدار کمی نیز با اندازه‌گیری همخوانی ندارد. بنابراین لازم است برای مواد مختلف مانند حفاظها و آشکارساز موجود در چیدمان آنالیز نوترونی، عناصر محیط اطراف و نمونه تحت آنالیز، کتابخانه‌ها مورد بررسی قرار گیرد و بهترین کتابخانه بر اساس آنالیز نوترونی هر ایزوتوپ و تولید گامای آبی مشخصه آن انتخاب گردد.

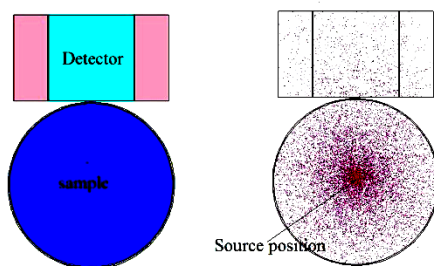
مشخصات کتابخانه‌ها به جز 70c در جدول ضمیمه G-2 راهنمای کد موجود می‌باشد. در این تحقیق کتابخانه‌های مناسب جهت عناصر اصلی یک سیستم آنالیز پرتابل PGNAA مبتنی بر چشمه ^{252}Cf مورد شبیه‌سازی قرار می‌گیرد. سیستم‌های آنالیز پرتابل هندسه ساده‌ای داشته و حفاظ کاربر از آن‌ها حذف شده است [۶].

در هندسه پیش‌فرض PGNAA عناصر B, C, N, F, Na, Al, S, Cl, K, Ca, Mn, Pb, Bi, Si, P, Fe لازم است گاما‌های آبی ایزوتوپ‌های آن‌ها بررسی شوند. عناصر کلر، فلورور، گوگرد، آرسنیک و فسفر، عناصر شاخص جهت تفکیک عوامل شیمیایی جنگی از مهمات انفجاری به عنوان یکی از کاربردهای سیستم‌های پرتابل PGNAA می‌باشند [۷]. دیگر عناصر مانند سدیم، پتاسیم، آهن و ... عناصر اصلی حفاظ، محیط و مواد آشکارساز هستند.

۲. ابزار و روش

مشابه عنصر طبیعی (^{235}U isotop) تعریف گردد. هر چند در برخی موارد برای تمام ایزوتوپ‌های یک عنصر، کتابخانه سطح مقطع وجود ندارد. به منظور شبیه‌سازی PGNAA عناصر ذکر شده از ترکیبات مواد رایج با مشخصات فیزیکی معین مانند خاک، آشکارساز NaI، اسید فسفریک، اسید سولفوریک، اسید فلئوریک، پلی‌اتیلن بوردار، سرب، بیسموت و ... استفاده گردید.

جهت بررسی صحت قله‌های گامای مشاهده شده در طیف PGNAA شبیه‌سازی شده، داده‌های معتبر [۸] و مقالات مبتنی بر اندازه‌گیری به کار گرفته شده‌اند [۹].



شکل (۲): هندسه شبیه‌سازی طیف گامای آبی مواد مختلف در کد MCNPX

۳. نتایج

۱.۳. بور

برای بور طبیعی کتابخانه نوترونی در جدول G2 موجود نیست و بر اساس ایزوتوپ‌های بور چندین کتابخانه در دمای اتاق وجود دارد. همان‌گونه که در شکل ۳ دیده می‌شود، گامای 478 keV حاصل از گیراندازی نوترون توسط ^{10}B برای چهار کتابخانه موجود تفاوتی با یکدیگر ندارند. هر چند در کل طیف، اختلاف زیادی با هم دارند (شکل ۴).

در شکل ۲ هندسه PGNAA شبیه‌سازی شده جهت بررسی کتابخانه‌ها مشاهده می‌شود. ماده مورد بررسی به شکل استوانه‌ای به ارتفاع و قطر برابر ۱۵ سانتی‌متر تعریف شده و چشمه نوترونی ^{252}Cf به صورت نقطه‌ای با طیف شکافت وات^۱ در مرکز آن قرار گرفت [۱]. آشکارساز BGO استوانه‌ای شکل، با قطر و ارتفاع یکسان $7/5 \text{ cm}$ جهت ثبت طیف گامای حاصل از گیراندازی نوترون در یک حفاظ سربی به ضخامت ۲ سانتی‌متر در هندسه قرار داده شد. ثبت طیف گاما توسط تالی F4 در حجم آشکارساز BGO در بازه انرژی صفر تا 8 MeV با بازه بندی ۲۰۰۰ کانال، انجام گرفت. تعداد نوترون ترابرد شده (nps) برابر دو میلیارد در نظر گرفته شد تا میانگین طیف گامای حاصل که به ازای یک نوترون ارائه می‌شود، کمینه خطا را داشته باشد. همچنین جهت صحت مقایسه کتابخانه‌ها، نواحی از طیف گاما، مانند قله‌ها، با خطای محاسباتی کمتر از ۵ درصد مورد استفاده قرار گرفت.

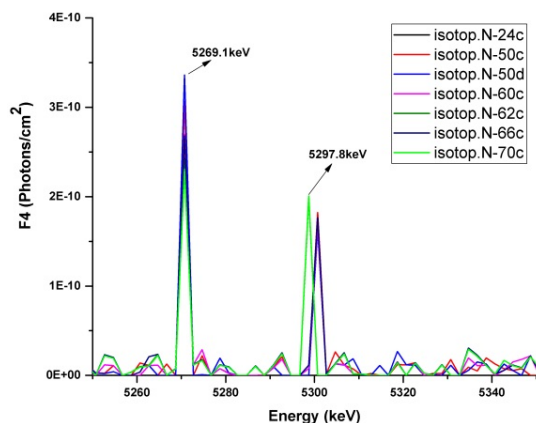
از بین کتابخانه‌های موجود در جدول ضمیمه G-2 راهنمای کد MCNPX 2.6، کتابخانه‌هایی انتخاب گردید که سطح مقاطع نوترونی آن‌ها در دمای استاندارد محیط (۲۹۳/۶ کلوین) بود. عناصر غنی‌سازی شده از لحاظ ایزوتوپی مانند ^{10}B و یا ^6Li تنها در آشکارسازها مورد استفاده بوده و عموماً در چیدمان‌های PGNAA مواد طبیعی استفاده می‌شود.

لذا در مقایسه کتابخانه‌ها برای عناصری که دارای چند ایزوتوپ می‌باشند سعی شده است از حالت طبیعی عناصر (nat) استفاده شود و در صورت عدم وجود کتابخانه برای حالت طبیعی، با ترکیب ایزوتوپ‌ها با توجه به درصد فراوانی،

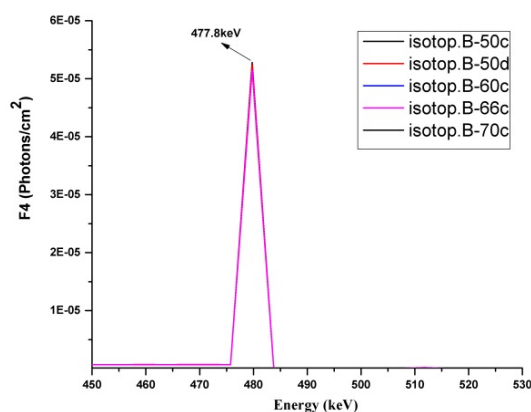
¹ watt

² Natural

³ Isotopic



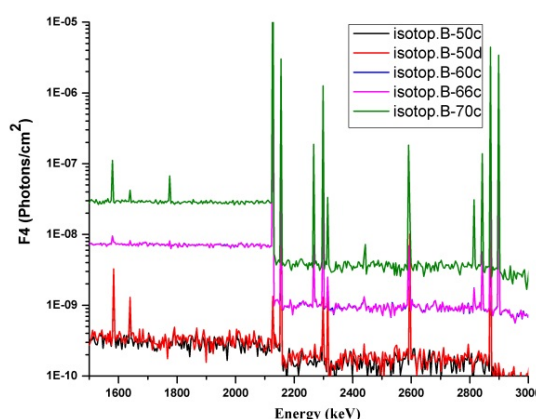
شکل (۵): بخشی از طیف گامای آنی نیتروژن.



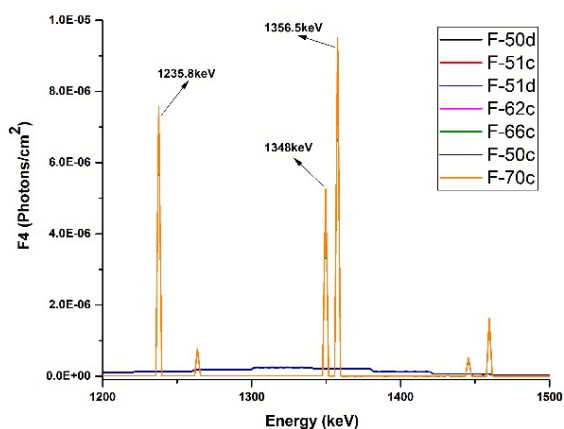
شکل (۳): طیف گیراندازی نوترون در بور.

۳.۳. فلوئور

در شکل ۶ مشاهده می‌شود که چندین گامای آنی مشخصه فلوئور تنها در طیف شبیه‌سازی شده توسط کتابخانه نوترونی 70c و 62c وجود دارد.



شکل (۴): بخشی از طیف‌های گامای آنی هندسه توسط کتابخانه‌های مختلف.



شکل (۶): قله‌های گامای آنی فلور.

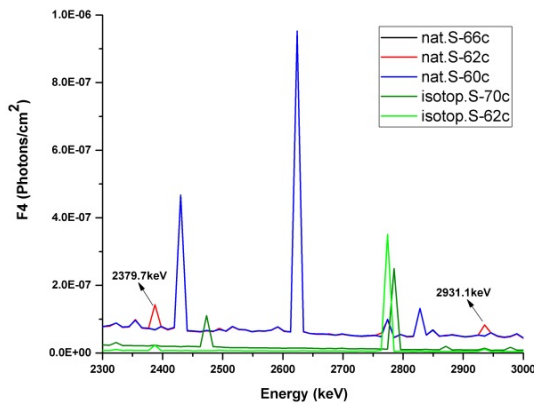
۲.۳. نیتروژن

نیتروژن طبیعی در جدول G2 کتابخانه ندارد و به‌صورت ایزوتوپ‌های ^{14}N و ^{15}N کتابخانه‌ها وجود دارند. به دلیل فراوانی ایزوتوپی کم ^{15}N و عدم وجود آن در برخی کتابخانه‌ها، در شبیه‌سازی نیتروژن، تنها از ^{14}N استفاده گردید. در طیف شبیه‌سازی گامای آنی نیتروژن، شکل ۵، کتابخانه‌ها تقریباً بر هم منطبق هستند. اختلاف جزئی مکان بعضی از گاماها آنی مشخصه نیتروژن مانند ۵۲۹۷/۸ keV و ۶۳۲۲/۴ keV می‌تواند از بازه‌بندی با تفکیک ۴ keV/ch ناشی شده باشد.

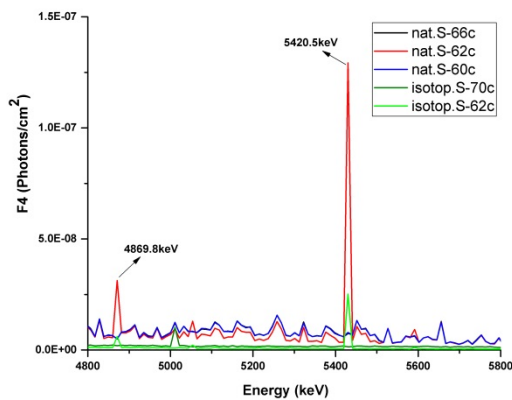
۴.۳. سدیم

گاماها آنی مشخصه سدیم، ۳۵۸۷/۵ keV و ۳۹۸۲ keV، تنها کتابخانه 62c و 70c به‌طور صحیح وجود دارند (شکل ۷).

فقط کتابخانه 70c برای همه ایزوتوپ‌های پایدار گوگرد وجود دارد. مطابق شکل ۹ و شکل ۱۰ به جز گامای آبی با انرژی 62c 841 keV مابقی گاماها آبی گوگرد فقط در کتابخانه 62c مشاهده می‌شود.



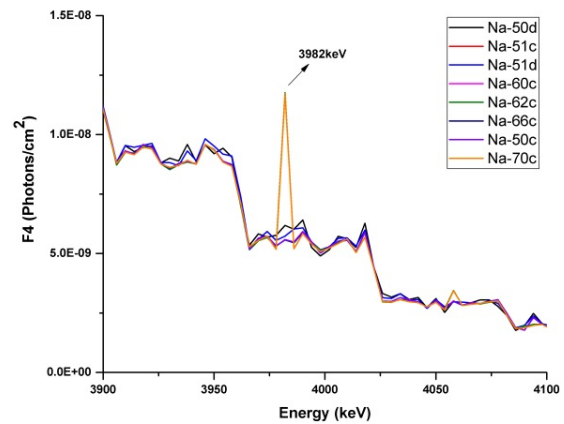
شکل (۹): بخشی از طیف گامای آبی گوگرد.



شکل (۱۰): قله 5420.5keV از طیف گامای آبی گوگرد.

۷.۳. کلر

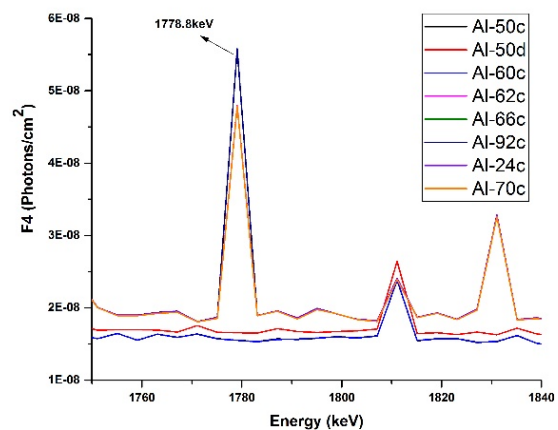
کتابخانه سطح مقطع نوترون برای کلر طبیعی و ایزوتوپ‌های ^{35}Cl و ^{37}Cl وجود دارد. بر اساس طیف به دست آمده توسط کد MCNPX، مطابق شکل ۱۱ و شکل ۱۲، گاماها آبی مشخصه کلر با انرژی 788 keV، 1951 keV، 3061 keV و 6627 keV تنها در طیف مربوط به کتابخانه 62c و 70c وجود دارند.



شکل (۷): بخشی از طیف گامای آبی سدیم.

۵.۳. آلومینیوم

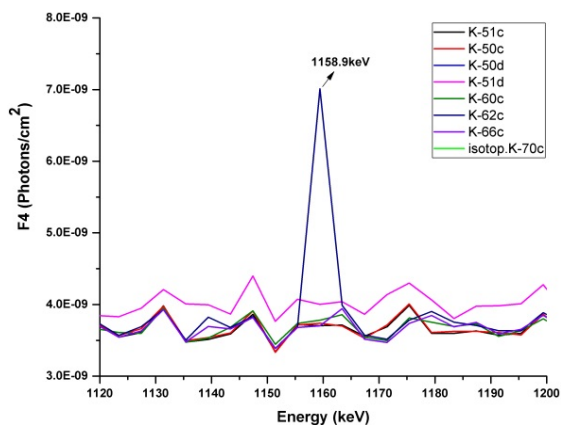
گاماها آبی مشخصه آلومینیوم تقریباً در همه کتابخانه‌ها وجود دارد. اما مطابق شکل ۸، برای گامای تأخیری 1778/8 keV بایستی یکی از کتابخانه‌های 66c، 62c، 70c، 92c و 24c جهت شبیه‌سازی آلومینیوم، انتخاب شود.



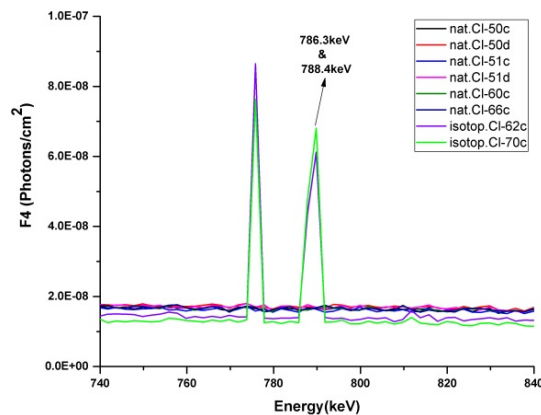
شکل (۸): بخشی از طیف گامای آبی آلومینیوم.

۶.۳. گوگرد

ماده گوگرد در MCNP بر اساس داده‌های کتابخانه سطح مقطع نوترونی، بیش‌تر به صورت طبیعی تعریف می‌شود و در حالت ایزوتوپی، بیش‌تر کتابخانه‌ها صرفاً شامل ^{32}S می‌باشند و



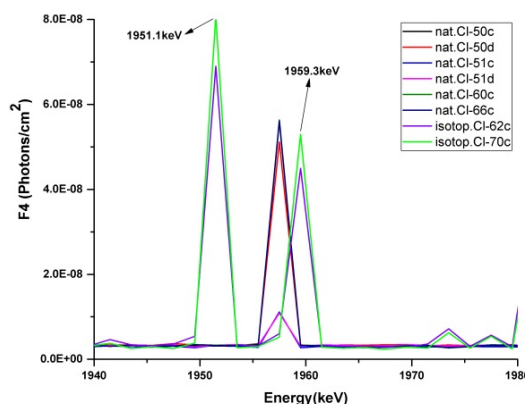
شکل (۱۳): بخشی از طیف گامای آنی پتاسیم.



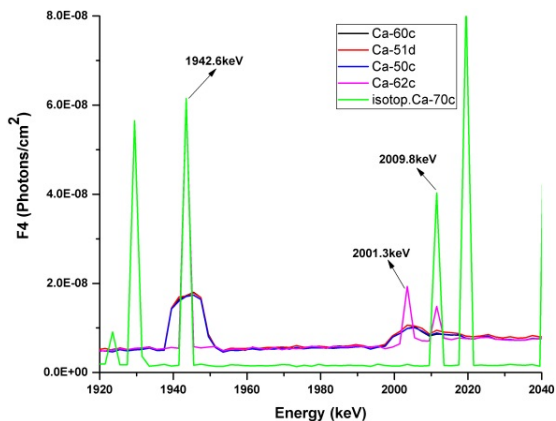
شکل (۱۱): بخشی از طیف گامای آنی کلر.

۹.۳. کلسیم

کتابخانه عنصر کلسیم به صورت طبیعی و نیز ایزوتوپی تنها برای ^{40}Ca وجود دارد. بر اساس مقایسه بین کتابخانه‌های مختلف برای عنصر کلسیم، همه گاما‌های آنی مشخصه کلسیم در طیف گامای حاصل از کتابخانه $^{20000.62}\text{c}$ وجود دارد (شکل ۱۴).



شکل (۱۲): قله گامای آنی $^{1951.1}\text{keV}$ کلر در طیف شبیه‌سازی شده.



شکل (۱۴): بخشی از طیف گامای آنی کلسیم.

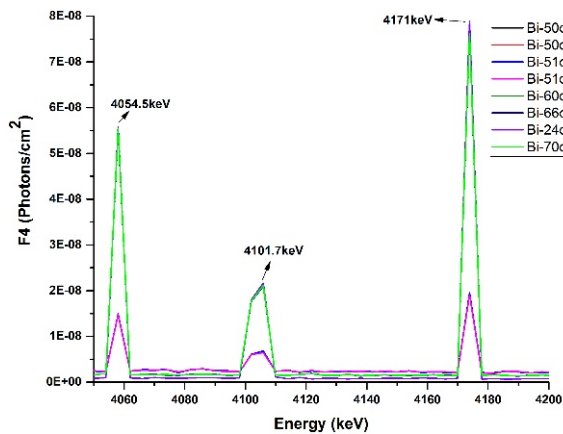
۸.۳. پتاسیم

کتابخانه ^{70}c به صورت ایزوتوپی و دیگر کتابخانه‌ها به صورت طبیعی جهت پتاسیم وجود دارند. با توجه به شکل ۱۳، در طیف گامای شبیه‌سازی شده توسط کتابخانه‌های مختلف، برخی از گاما‌های آنی مشخصه پتاسیم تنها در کتابخانه $^{19000.62}\text{c}$ وجود دارد.

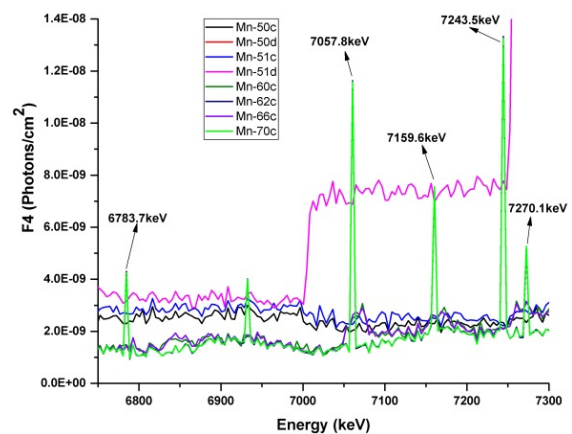
شمارش در طیف کتابخانه ^{70}c یک مرتبه بالاتر از دیگر کتابخانه‌ها قرار گرفته و قله ^{1158}keV در آن مشاهده نمی‌شود.

۱۰.۳. منگنز

با توجه به شکل ۱۵، در طیف گامای شبیه‌سازی شده برای منگنز تنها در کتابخانه ^{62}c و ^{70}c گاما‌های آنی مشخصه منگنز وجود دارد.



شکل (۱۷): بخشی از طیف گامای آبی بیسموت



شکل (۱۵): طیف گامای آبی منگنز.

نتایج شبیه‌سازی‌ها برای کربن، سیلیسیم، فسفر و آهن نشان داد که کتابخانه‌های ارائه شده تقریباً طیف مشابهی تولید می‌کنند.

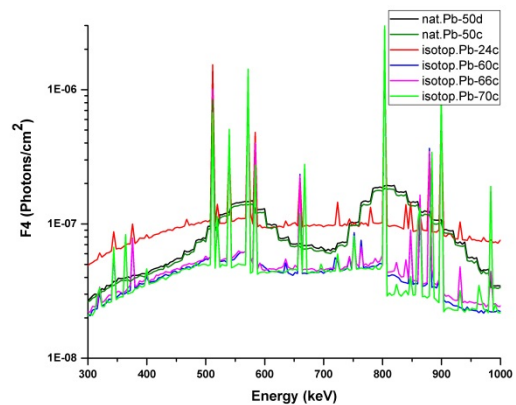
۴. بحث و نتیجه‌گیری

همان‌طور که در طیف‌ها مشاهده گردید، انتخاب کتابخانه بر نتایج خروجی بسیار مؤثر است. کتابخانه 70c به جز عناصر گوگرد، پتاسیم و کلسیم برای دیگر عناصر پاسخ خوبی دارا می‌باشد. برخی کتابخانه‌ها مانند شکل ۳ و شکل ۱۰ هر چند قله‌هایی مشابه دارند ولی ارتفاع قله، یا به عبارتی سطح مقطع تولید گاما در آن‌ها متفاوت است و تعیین صحت آن‌ها نیاز به اندازه‌گیری تجربی دقیق دارد. بنابراین با توجه به نتایج حاصل، در جدول ۱ کتابخانه‌های مناسب جهت شبیه‌سازی PGNAA آورده شده است.

لازم به ذکر است که کتابخانه‌های معرفی شده در جدول ۱ هم‌چنان نقص‌هایی دارند. به‌طور مثال ^{56}Mn حاصل از اندرکنش $^{56}\text{Fe}(n,p)$ و یا $^{55}\text{Mn}(n,\gamma)$ می‌باشد و گاما‌های تاخیری مانند $846\frac{7}{7}\text{ keV}$ و $1810\frac{7}{7}\text{ keV}$ تولید می‌کند. این قله‌های گاما در طیف شبیه‌سازی شده توسط همه کتابخانه‌های آهن دیده می‌شوند، اما در شبیه‌سازی طیف منگنز وجود ندارند. در حالی که این قله‌ها مربوط به منگنز ذکر شده‌اند [۸].

۱۱.۳. سرب

در کتابخانه 70c بر خلاف دیگر کتابخانه‌ها، حالت طبیعی سرب وجود ندارد، بنابراین به‌صورت ترکیب ایزوتوپ‌ها تعریف گردید. مطابق شکل ۱۶، شبیه‌سازی توسط کتابخانه سرب طبیعی (82000.50c, 82000.50d) منجر به طیفی با قله‌های پهن می‌شود که تفاوت زیادی با طیف حاصل از دیگر کتابخانه‌ها دارد.



شکل (۱۶): بخشی از طیف گامای آبی سرب.

۱۲.۳. بیسموت

با توجه به شکل ۱۷، گاما‌های آبی مشخصه بیسموت در همه کتابخانه‌های بیسموت وجود دارد اما ارتفاع قله‌های انرژی برای کتابخانه‌های 24c, 60c, 66c و 70c بیش‌تر است.

بنابراین در شبیه‌سازی PGNAA با کد MCNPX نیاز است که در مورد انتخاب کتابخانه‌ها دقت بیشتری لحاظ شود.

جدول (۱): کتابخانه‌های مناسب جهت شبیه‌سازی PGNAA در K ۲۹۳.

نام کتابخانه مناسب	ایزوتوپ (فرمت MCNP)	عنصر
60c, 66c, 70c	5010, 5011	B
60c, 66c, 70c	6000	C
62c, 70c	7014	N
66c, 62c, 70c	9019	F
62c, 70c	11023	Na
62c, 66c, 70c	13027	Al
24c, 62c, 66c, 70c	14028	Si
	14029	
	14030	
50c, 50d, 51c, 51d 60c	14000	Si
66c, 60c, 70c	15031	P
62c	16000	S
62c, 70c	17035	Cl
	17037	
62c	19000	K
62c	20000	Ca
62c, 70c	25055	Mn
60c, 62c, 66c, 70c	26054	Fe
	26056	
	26057	
	26058	
60c, 66c, 70c	82206	Pb
	82207	
	82208	
60c, 66c, 70c	83209	Bi

۵. مراجع

- [1] MCNPX User's Manual. Version 2.6.0. April (2008) LA-CP-07-1473.
- [2] B. Perot, C. Carasco, S. Bernard, et al. Measurement of 14MeV neutron-induced prompt gamma-ray spectra from 15 elements found in cargo containers. Applied Radiation and Isotopes 66 (2008) 421–434.
- [3] F. Loche, F. Jallu. Creation and Test of MCNP Neutron Libraries for Neutron Capture on Germanium. American Nuclear Society Topical Meeting in Monte Carlo, Tennessee, April (2005) 17–21.
- [4] C. Eleon, B. Perot, C. Carasco, et. al. Experimental and MCNP simulated gamma-ray spectra for the UNCOSS neutron -based explosive detector. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A629 (2011) 220–229.
- [5] B. Perot, W. ElKanawati, C. Carasco, et. al. Quantitative comparison between experimental and simulated gamma-ray spectra induced by 14MeV tagged neutrons. Applied Radiation and Isotopes 70 (2012) 1186–1192.
- [6] E. Bayat, H. Afarideh, F. Abbasi Davani, N. Ghal-Eh. A quality survey on different shielding configurations of gamma ray detector used with a portable PGNAA system. Radiation Physics and Chemistry 120 (2016) 7–11.
- [7] A.J. Caffrey, R.J. Gehrke, R.C. Greenwood, et. al. U.S. Army Experience with the PINS Chemical Assay System. Report. EGG-NRP-11443. September (1994).
- [8] H.D. Choi, et. al. Database of Prompt Gamma Rays from Slow Neutron Capture for Elemental Analysis. Table 7.4, Page 159, IAEA, Vienna, (2006).
- [9] P. Bach, J.L. Ma. Chemical weapons detection by fast neutron activation analysis techniques. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B 79 (1993) 605-610.