مجله سنجش و ایمنی پرتو، جلد ۵، شمارهٔ ۱، زمستان ۱۳۹۵

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

اسمعیل بیات[۱و۲*]، حسین آفریده[۱و۲]، فریدون عباسی‌دوانی[۳] و زهرا علیپور[٤]

[۱]پژوهشگاه علوم و فنون، سازمان انرژی اتمی، تهران، ایران.
[۲]دانشکده مهندسی انرژی و فیزیک، دانشگاه امیرکبیر، تهران، ایران.
[۳]دانشکده مهندسی هسته‌ای، دانشگاه شهید بهشتی، تهران، ایران.
[٤]دانشکده فیزیک، دانشگاه زنجان، زنجان، ایران.
*تهران، دانشگاه امیرکبیر، دانشکده مهندسی انرژی و فیزیک، صندوق پستی: ۱۵۸۷۵-٤٤۱۳
پست الکترونیکی: ebayat@aeoi.org.ir, bayat_54@yahoo.com

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 ۱٦ عنصر پرکاربرد، کتابخانه‌های مورد استفاده توسط کد MCNPX-2.6 در دمای ۲۹۳/٦ 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.

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

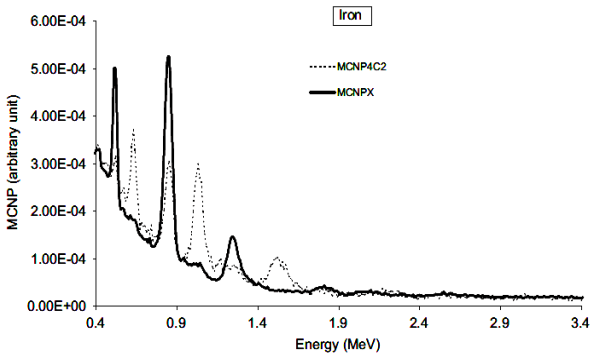
۱. مقدمه

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 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

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-VI.0 ، ENDF/B-VI.8 ، ENDF/B-VII.0 و JEFF 3.1 برای عناصر C, N, O, Na, Al, Si, Cl, K, Ca, Cr, Fe, Ni, Cu, Zn, Pb در انرژی نوترون ۱٤MeV 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 آنی آهن در دو نسخه MCNP4C و MCNPX [۲].

لوشه و همکاران [۳] گاماهای آنی 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 [٤] شبیه‌سازی PGNAA با داده‌های کتابخانه ENDF/B-VII.0 برای عناصر C, O, N, Si, Ca, Fe, Al, در انرژی نوترون ۱٤ MeV را بررسی نموده و اختلاف محاسبه با اندازه‌گیری را برای اکسیژن نشان داده‌اند. پروت و همکاران [٥] 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 آنی 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 [٦].

در هندسه پیش‌فرض PGNAA عناصر B, C, N, F, Na, Al, S, Cl, K, Ca, Mn, Pb, Bi, Si, P, Fe وجود دارند که لازم است گاماهای آنی ایزوتوپ‌های آن‌ها بررسی شوند. عناصر کلر، فلوئور، 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.

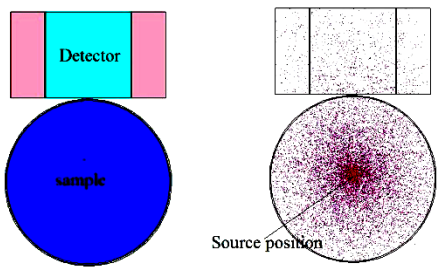
۲. ابزار و روش

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 به‌صورت نقطه‌ای با طیف شکافت وات[1] در مرکز آن قرار گرفت [۱]. آشکارساز BGO استوانه‌ای شکل، با قطر و ارتفاع یکسان ۷/۵ 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 ۸ MeV با بازه‌بندی 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 ^{6}Li 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[2]) استفاده شود و در صورت عدم وجود کتابخانه برای حالت طبیعی، با ترکیب ایزوتوپ‌ها با توجه به درصد فراوانی، مشابه عنصر طبیعی (isotop[3]) 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 فلوئوریک، 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 به‌کار گرفته شده‌اند [۹].



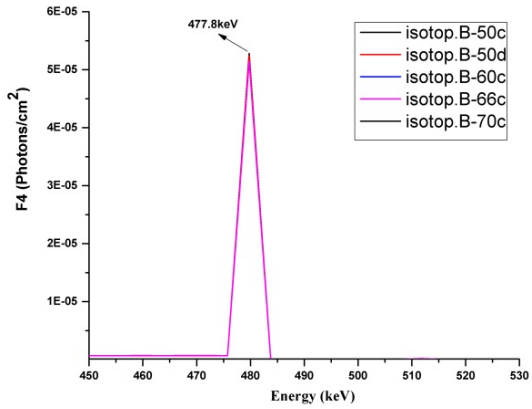
شکل (۲): هندسه شبیه‌سازی طیف گامای آنی مواد مختلف در کد MCNPX.

۳. نتایج

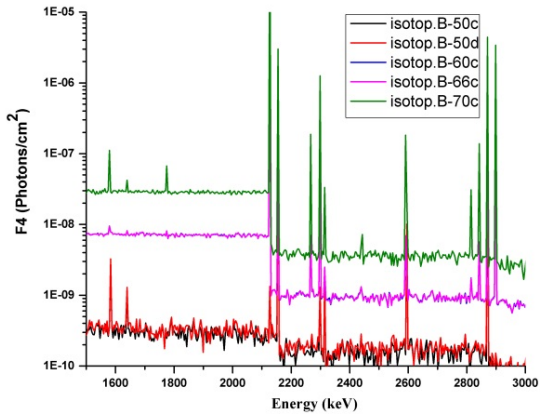
۱.۳. بور

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 ٤٧٨ 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 ٤).

[1] watt
[2] Natural
[3] Isotopic



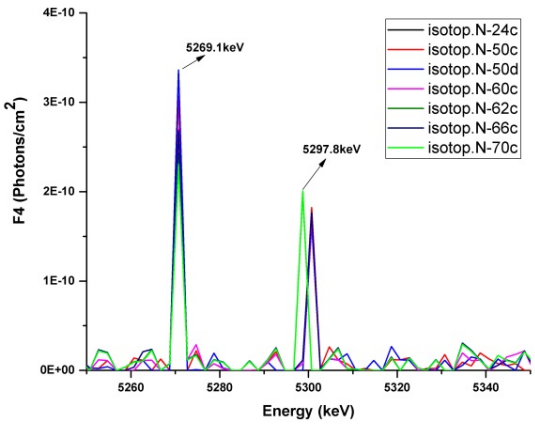
شکل (۳): طیف گیراندازی نوترون در بور.



شکل (٤): بخشی از طیف‌های گامای آنی هندسه توسط کتابخانه‌های مختلف.

۲.۳. نیتروژن

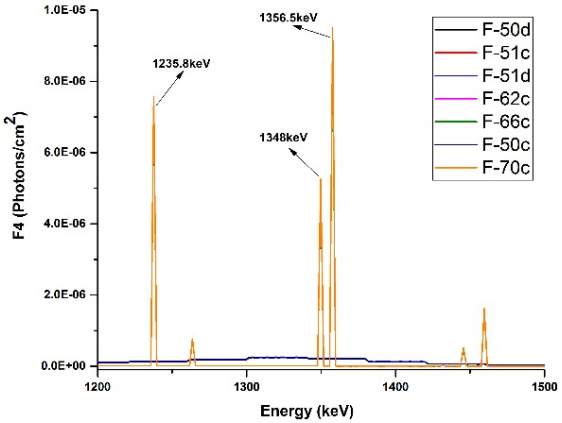
نیتروژن طبیعی در جدول G2 کتابخانه ندارد و به‌صورت ایزوتوپ‌های ^{14}N و ^{15}N کتابخانه‌ها وجود دارند. به دلیل فراوانی ایزوتوپی کم ^{15}N و عدم وجود آن در برخی کتابخانه‌ها، در شبیه‌سازی نیتروژن، تنها از ^{14}N استفاده گردید. در طیف شبیه‌سازی گامای آنی نیتروژن، شکل ۵، کتابخانه‌ها تقریباً بر هم منطبق هستند. اختلاف جزیی مکان بعضی از گاماهای آنی مشخصه نیتروژن مانند ۵۲۹۷/۸ keV و ٦٣٢٢/٤ keV می‌تواند از بازه‌بندی با تفکیک ٤ keV/ch ناشی شده باشد.



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

۳.۳. فلوئور

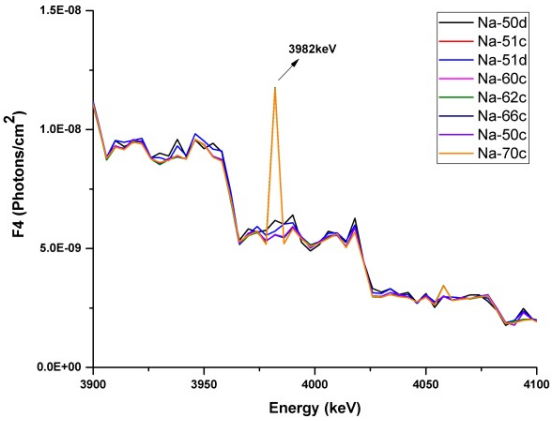
در شکل ٦ مشاهده می‌شود که چندین گامای آنی مشخصه فلوئور تنها در طیف شبیه‌سازی شده توسط کتابخانه نوترونی 70c، 62c و 66c وجود دارد.



شکل (٦): قله های گامای آنی فلوئور.

٤.۳. سدیم

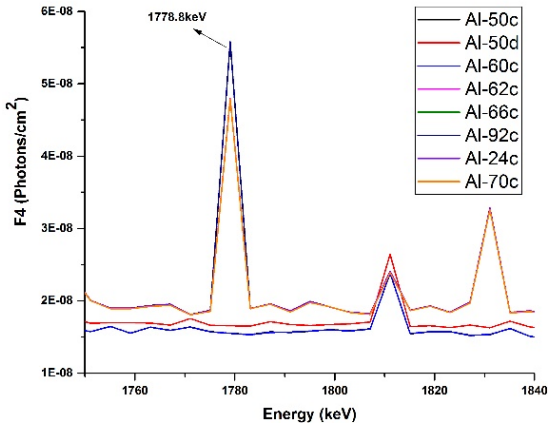
گاماهای آنی مشخصه سدیم، ۳۵۸۷/۵ keV و ۳۹۸۲ keV، تنها کتابخانه 62c و 70c به‌طور صحیح وجود دارند (شکل ۷).



شکل (۷): بخشی از طیف گاما‌ی آنی سدیم.

۵.۳. آلومینیوم

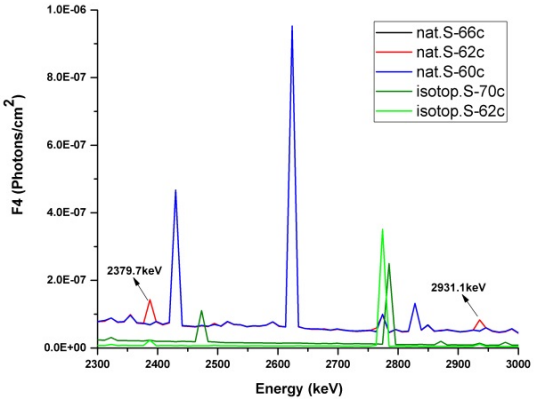
گاماهای آنی مشخصه آلومینیوم تقریباً در همه کتابخانه‌ها وجود دارد. اما مطابق شکل ۸، برای گامای تأخیری ۱۷۷۸/۸ keV بایستی یکی از کتابخانه‌های 70c، 62c، 66c، 92c و 24c جهت شبیه‌سازی آلومینیوم، انتخاب شود.



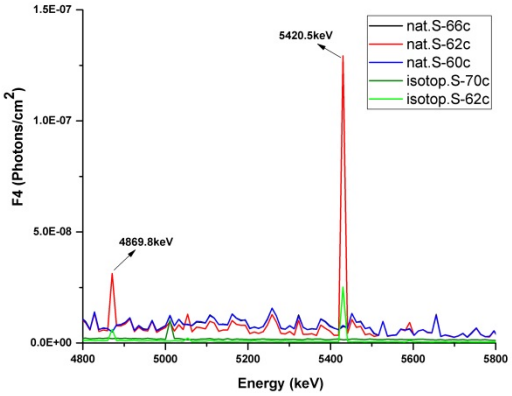
شکل (۸): بخشی از طیف گاما‌ی آنی آلومینیم.

۶.۳. گوگرد

ماده گوگرد در MCNP بر اساس داده‌های کتابخانه سطح مقطع نوترونی، بیش‌تر به‌صورت طبیعی تعریف می‌شود و در حالت ایزوتوپی، بیش‌تر کتابخانه‌ها صرفاً شامل ^{32}S می‌باشند و فقط کتابخانه 70c برای همه ایزوتوپ‌های پایدار گوگرد وجود دارد. مطابق شکل ۹ و شکل ۱۰ به جز گامای آنی با انرژی ۸٤۱ keV مابقی گاماهای آنی گوگرد فقط در کتابخانه 62c مشاهده می‌شود.



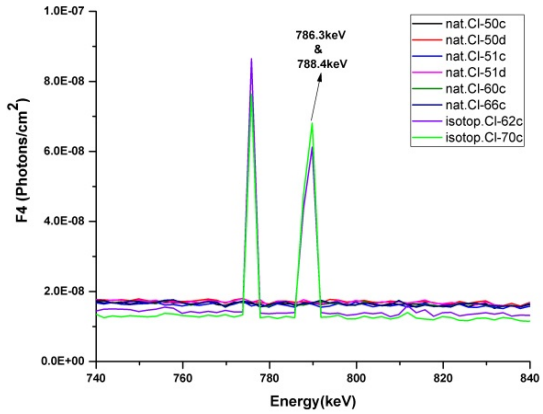
شکل (۹): بخشی از طیف گاما‌ی آنی گوگرد.



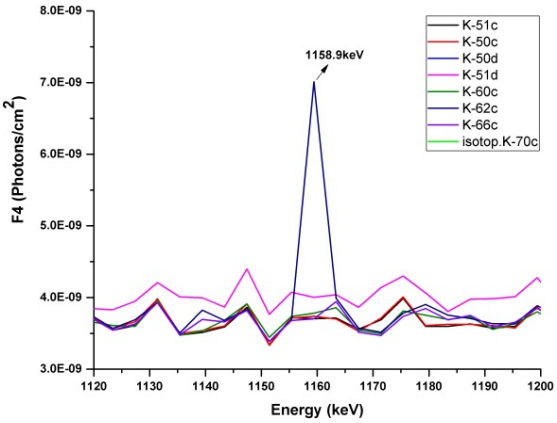
شکل (۱۰): قله ٥٤٢٠keV از طیف گاما‌ی آنی گوگرد.

۷.۳. کلر

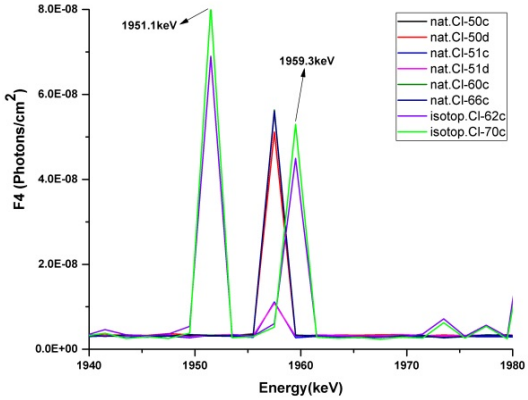
کتابخانه سطح مقطع نوترون برای کلر طبیعی و ایزوتوپ‌های ^{35}Cl و ^{37}Cl وجود دارد. بر اساس طیف به‌دست آمده توسط کد MCNPX، مطابق شکل۱۱ و شکل۱۲، گاماهای آنی مشخصه کلر با انرژی۷۸۸ keV، ۱۹۵۱ keV، ۳۰٦۱ keV و ٦٦۲۷ keV تنها در طیف مربوط به کتابخانه 62c و 70c وجود دارند.



شکل (۱۱): بخشی از طیف گامای آنی کلر.



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



شکل (۱۲): قله گامای آنی ۱۹۵۱/۱ keV کلر در طیف شبیه‌سازی شده.

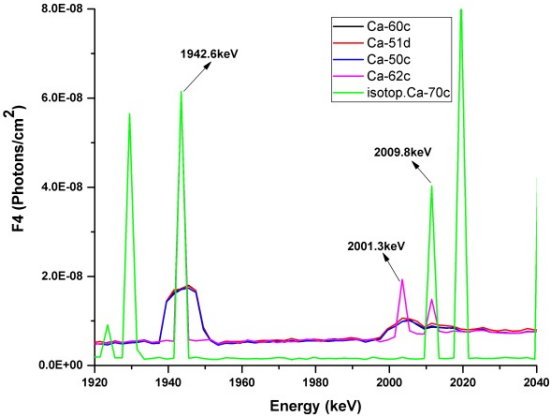
۸.۳. پتاسیم

کتابخانه 70c به‌صورت ایزوتوپی و دیگر کتابخانه‌ها به‌صورت طبیعی جهت پتاسیم وجود دارند. با توجه به شکل۱۳، در طیف گامای شبیه‌سازی شده توسط کتابخانه‌های مختلف، برخی از گاماهای آنی مشخصه پتاسیم تنها در کتابخانه 19000.62c وجود دارد.

شمارش در طیف کتابخانه 70c یک مرتبه بالاتر از دیگر کتابخانه‌ها قرار گرفته و قله ۱۱۵۸ keV در آن مشاهده نمی‌شود.

۹.۳. کلسیم

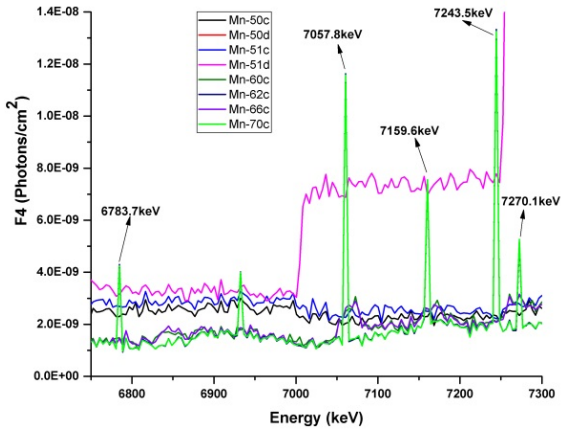
کتابخانه عنصر کلسیم به‌صورت طبیعی و نیز ایزوتوپی تنها برای ^{40}Ca وجود دارد. بر اساس مقایسه بین کتابخانه‌های مختلف برای عنصر کلسیم، همه گاماهای آنی مشخصه کلسیم در طیف گامای حاصل از کتابخانه 20000.62c وجود دارد (شکل ۱٤).



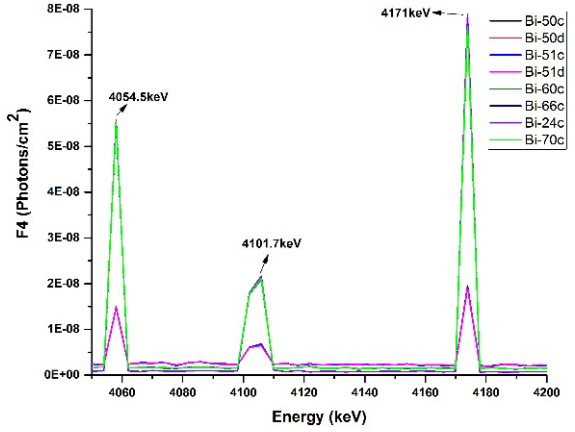
شکل (۱٤): بخشی از طیف گامای آنی کلسیم.

۱۰.۳. منگنز

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



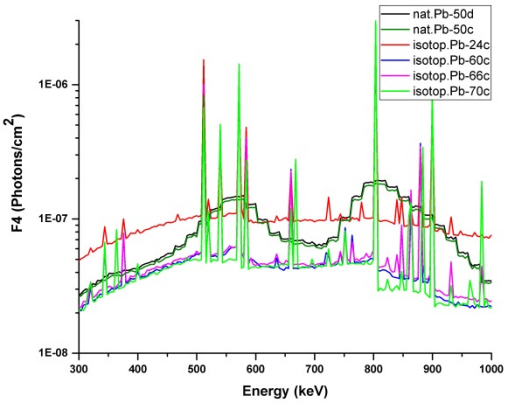
شکل (۱۵): طیف گامای آنی منگنز.



شکل(۱۷): بخشی از طیف گامای آنی بیسموت

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 آنی سرب.

۱۲.۳. بیسموت

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

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

٤. بحث و نتیجه‌گیری

همان‌طورکه 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 $^{56}Fe(n,p)$ و یا $^{55}Mn(n,\gamma)$ می‌باشد و گاماهای تاخیری مانند ۸٤٦/۷ keV و ۱۸۱۰/۷ keV تولید می‌کند. این قله‌های گاما در طیف شبیه‌سازی شده توسط همه کتابخانه‌های آهن دیده می‌شوند، اما در شبیه سازی طیف منگنز وجود ندارند. در حالی که این قله‌ها مربوط به منگنز ذکر شده‌اند [۸].

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.

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

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. Table7.4, 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.