

تعیین سطح مقطع های ماکروسکوپی پراکندگی و جذب نمونه های همگن مجهول

پوران نصراله زاده زواردهی، سید هاشم میری حکیم آباد*، لاله رفعت متولی

دانشگاه فردوسی مشهد، دانشکده علوم پایه، گروه فیزیک

چکیده

برای تعیین سطح مقطع های ماکروسکوپی نمونه های همگن مجهول، می توان از روش های متفاوتی استفاده نمود. در این مقاله روشی ارائه می گردد که در آن بدون نیاز به داشتن اطلاعات قبلی در مورد نمونه و همچنین بدون تخریب نمونه، می توان پارامترهای Σ_s, Σ_a مربوط به نمونه را محاسبه نمود. در این روش با جایگذاری پولک های مسی در چند نقطه خارج نمونه و سپس تابش نوترون به نمونه، آهنگ برهم کنش نوترون در پولک ها تعیین می گردد. برای شبیه سازی سیستم از کد MCNP استفاده شده و روابطی بین آهنگ برهم کنش نوترون در خارج نمونه و Σ_s, Σ_a داخل آن تعیین می گردد و با حل روابط، Σ_s, Σ_a محاسبه می گردد.

کلید واژه: سطح مقطع های ماکروسکوپی نمونه مجهول، پولک های مسی، کد MCNP.

۱- مقدمه

سطح مقطع های موادموننه به جنس آن ها بستگی دارند و یافتن این پارامترها برای بسیاری اهداف، مفید می باشد. برای تعیین سطح مقطع های ماکروسکوپی نمونه های همگن که ترکیب ناشناخته دارند، می توان از روش های متفاوتی استفاده نمود. اما روشی که در این مقاله به کار گرفته می شود، بدون تخریب نمونه و بدون داشتن اطلاعات قبلی از نمونه، به تعیین پارامترهای Σ_s, Σ_a می پردازد [۱]. در این روش چند پولک فلزی در نقاطی در اطراف نمونه جایگذاری می شوند و سپس نمونه تحت تابش نوترون واقع می شود. هنگامی که نمونه به طور همسانگرد تحت تابش نوترون قرار می گیرد، تنها سطح مقطع جذب اهمیت دارد اما وقتی از یک طرف به نمونه نوترون تابیده شود، هم Σ_s و هم Σ_a شار نوترون در داخل نمونه را تحت تاثیر قرار می دهند. شار نوترون فرودی، در اثر عبور از نمونه تغییر نموده و در اطراف نمونه شاری تغییر یافته خواهیم داشت که می توان بدون تخریب نمونه و تنها با تعیین این شار تغییر یافته، پارامترهای داخل نمونه را محاسبه نمود. یعنی باید رابطه ای بین شار خارج نمونه و Σ_s و Σ_a داخل آن تعیین نمود. برای این کار باید شار نوترون را در چند نقطه خارج نمونه های متفاوت تعیین نموده و مقادیر به دست آمده را به توابع مناسبی بر حسب سطح مقطع ها برازش کرد که این توابع همان روابط مورد نیاز جهت محاسبه Σ_s, Σ_a می باشند و با حل این روابط می توان سطح مقطع های ماکروسکوپی مواد نمونه را محاسبه نمود. برای اینکه بتوان از روابط به دست آمده در حالت کلی استفاده نمود، باید آن ها را برای نمونه های معلوم تعیین نمود و پس از اطمینان از درستی روابط، برای نمونه های مجهول به کار برد. برای تعیین شار نوترون در اطراف نمونه محاسبات MCNP [۲] صورت گرفته است.

۲- روش ها و مواد

برای یافتن رابطه‌ای بین شار نوترون اطراف نمونه و پارامترهای آن، باید شار را در چند نقطه خارج نمونه از طریق محاسبات MCNP تعیین نمود. این کار با قرار دادن چند پولک فلزی در اطراف نمونه صورت می‌گیرد. پس از فعالسازی نمونه، آهنگ برهم‌کنش نوترون با پولک‌ها تعیین می‌گردد و سپس رابطه‌ای بین آن و Σ_s, Σ_a برآزش می‌شود. با داشتن چند رابطه (متناسب با تعداد نقاط جایگذاری پولک‌ها) وابسته به Σ_s, Σ_a می‌توان سطح مقطع‌های نمونه مجهول را تعیین نمود.

۲-۱ جنس ظرف و مواد

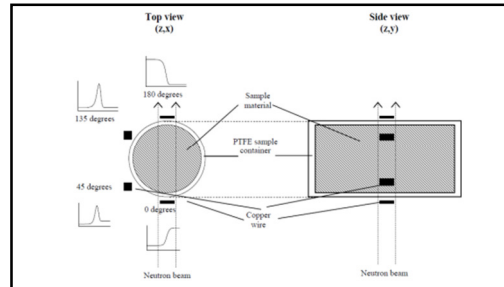
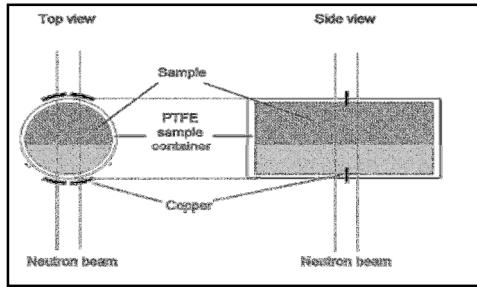
مواد نمونه در ظرف‌های استوانه‌ای از جنس PTFE (Poly Tetra Fluor Ethylene) با طول ۲۰ cm و قطر خارجی ۱۰ cm و ضخامت دیواره ۰/۳۵ cm شبیه‌سازی می‌شوند. ترکیب کلی ظرف‌های PTFE به صورت $(C_2F_4)_n$ می‌باشد. مواد نمونه فرضی دارای سطح مقطع‌های پراکندگی و جذب در محدوده 10^{-6} تا $10^4 \frac{1}{cm}$ می‌باشند که هر ماده نیز دارای نسبت $\frac{\Sigma_s}{\Sigma_t}$ در گستره ۰/۲ تا ۰/۹۸ بوده‌است. با ترکیب‌های متفاوت از دو ایزوتوپ خاص (در اینجا از هیدروژن و بور استفاده شده‌است) و چگالی‌های متفاوتی از این ترکیب، می‌توان گستره تغییرات مورد نظر Σ_s و Σ_t را برای یک نسبت خاص $\frac{\Sigma_s}{\Sigma_t}$ تولید کرد.

۲-۲ تعیین شار نوترون در اطراف نمونه

برای اندازه‌گیری شار نوترون در اطراف نمونه پولک‌های فلزی برای فعالسازی در اطراف نمونه جایگذاری می‌شوند. فلز مناسب باید نیمه‌عمر مناسب داشته و تولید فعالیت زیاد در مدت زمان مناسب صورت گیرد. همچنین تعداد واکنش‌های ناخواسته کمینه بوده و نوع و انرژی تابش گسیلی از هسته پرتوزای تولیدشده مشکلی در شمارش ایجاد نکند [۳]. فلز مس برای این هدف انتخاب شده‌است. پولک‌ها در دو موقعیت متفاوت چهار پولک در دو نقطه و حالت چهار پولک در چهار نقطه شبیه‌سازی شده‌اند.

الف) حالتی که دو پولک استوانه‌ای به طول ۱ cm و شعاع ۰/۰۹ cm در زاویه صفر درجه (زاویه بین خط واصل مرکز پولک تا مرکز نمونه با خط واصل مرکز باریکه نوترونی تا مرکز نمونه) و دو پولک نیز در زاویه ۱۸۰ درجه جایگذاری می‌شوند. حجم پولک‌ها $۰/۰۲۵ cm^3$ می‌باشد و به صورت مماس بر ظرف نمونه قرار گرفته‌اند. هندسه مربوطه در شکل ۱ آورده شده‌است.

ب) حالتی که چهار پولک در چهار نقطه اطراف نمونه جایگذاری می‌شوند. یک پولک مکعبی با طول و عرض ۱ cm و ضخامت ۰/۰۲۵ cm در راستای z، در زاویه صفر درجه و پولکی دیگر نیز با همین ابعاد در زاویه ۱۸۰ درجه قرار می‌گیرند. دو پولک مکعبی نیز با طول و عرض ۰/۱۶ cm و ضخامت ۰/۹۸ cm در زوایای ۴۵ و ۱۳۵ درجه در نظر گرفته شده‌است. حجم مکعب‌ها $۰/۰۲۵ cm^3$ بوده و به صورت مماس بر ظرف نمونه واقع شده‌اند. هندسه مربوط به شبیه‌سازی در این حالت در شکل ۲ آورده شده‌است.



شکل ۱: هندسه شبیه‌سازی سیستم در حالتی که پولک‌ها در دو نقطه اطراف نمونه جایگذاری شده‌اند [۴].

شکل ۲: هندسه شبیه‌سازی سیستم در حالتی که پولک‌ها در چهار موقعیت اطراف نمونه واقع شده‌اند [۱].

۲-۳ چشمه

در این شبیه‌سازی یک چشمه نوترون حرارتی با توزیع ماکسول - بولتزمن تعریف شده و یک باریکه نوترون با قطر ۲٫۵۴ cm به صورت عمودی بر محور تقارن ظرف نمونه وارد می‌شود. از آنجا که ذرات ثانوی در این روش مورد توجه نبوده‌است، تنها نوترون در شبیه‌سازی ترابرد شده (mode n) و حدود 10^6 ذره در هر برنامه MCNP ردگیری شده است.

۳- نتایج

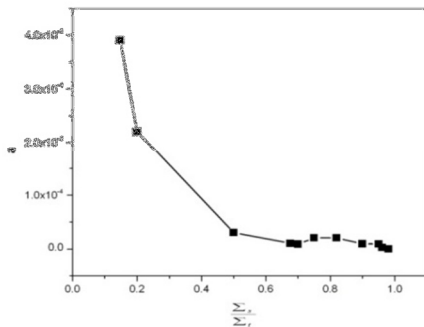
داده‌های محاسباتی برای نمونه‌های مختلف با توابع مناسبی برازش شده و پارامترهای مربوطه تعیین شده است. عمل برازش با استفاده از نرم‌افزار origin صورت گرفته است. نتایج شامل دو بخش جداگانه می‌باشد.

۳-۱ چهار پولک در دو موقعیت

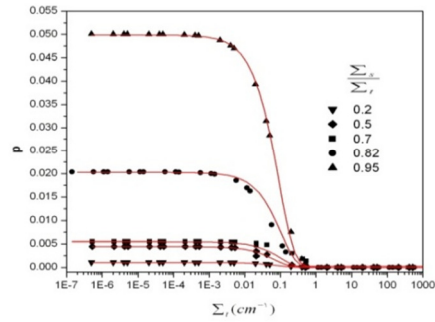
الف) احتمال رسیدن نوترون به پولک‌های واقع در پشت نمونه به Σ_t وابسته است. اگر نمودار مربوطه ترسیم گردد، به صورت شکل ۳ خواهد بود که در ابتدا احتمال تقریباً مقدار ثابتی است اما با افزایش Σ_t ، کاهش می‌یابد. برای هر نسبت $\frac{\Sigma_s}{\Sigma_t}$ یک تابع تضعیف نمایی، به صورت رابطه ۱ برازش می‌شود و بهترین منحنی با کمترین χ^2_r به عنوان رابطه مورد نظر انتخاب می‌گردد. در شکل ۳ منحنی برازش شده برای چند نسبت مختلف آورده شده است.

$$P(\Sigma_s, \Sigma_t) = a + be^{-x\Sigma_t, c} \quad (1)$$

a, b, c مقادیر ثابت می‌باشند. x ضخامت نمونه است و در تمام محاسبات ۱۰cm در نظر گرفته شده است.



شکل ۴: نمودار ضریب a برحسب نسبت $\frac{\Sigma_s}{\Sigma_t}$ در زاویه ۱۸۰ درجه.



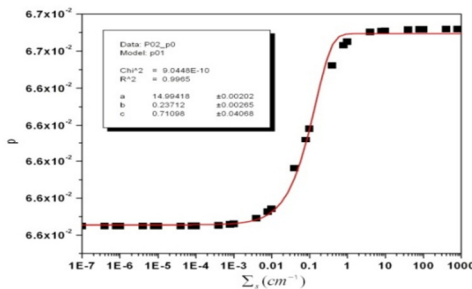
شکل ۳: منحنی برازش شده مربوط به زاویه ۱۸۰ درجه.

عمل برازش برای مقادیر متفاوت $\frac{\Sigma_s}{\Sigma_t}$ در محدوده ۰٫۲ تا ۰٫۹۸ صورت گرفته و در هر مورد مقادیر ثابت تعیین شده و تابعی برای آن‌ها برازش می‌گردد که در حالت کلی به صورت چندجمله‌ای می‌باشند. درجه چندجمله‌ایها نیز جایی تعیین می‌گردد که χ^2 کمینه باشد. در شکل ۴ منحنی برازش شده به مقادیر متفاوت a آورده شده است. برای b و c نیز تابعی به شکل a برازش می‌شود.

ب) احتمال جذب نوترون در پولک در زاویه صفر درجه به Σ_s بستگی دارد. در شکل ۵ مشاهده می‌گردد که در ابتدا احتمال جذب مقدار ثابتی است و با افزایش Σ_s به ازای یک $\frac{\Sigma_s}{\Sigma_t}$ ثابت، افزایش می‌یابد. در اینجا نیز برای هر نسبت $\frac{\Sigma_s}{\Sigma_t}$ یک رابطه برحسب Σ_s و Σ_t به داده‌های محاسباتی برازش می‌شود که شکل آن برای زاویه صفر درجه عکس حالت ۱۸۰ درجه می‌باشد. برای تعیین رابطه‌ای مناسب جهت برازش، دو تابع $p_1(\Sigma_s, \Sigma_t) = (d + f \exp(-gx \Sigma_t))^{-1}$ و $p_2(\Sigma_s, \Sigma_t) = -(d + f \exp(-gx \Sigma_t))$ مورد بررسی واقع شده و p_2 به عنوان تابع مناسب در نظر گرفته شده است:

$$p(\Sigma_s, \Sigma_t) = (d + f \exp(-gx \Sigma_t))^{-1} \quad (2)$$

که d و g و f در اینجا ثابت هستند و در حالت کلی به صورت چندجمله‌ای می‌باشند. نتایج عمل برازش در حالت $\frac{\Sigma_s}{\Sigma_t} = ۰٫۲$ در شکل ۵ آورده شده است.



شکل ۵: منحنی برازش شده به داده‌های مربوط به زاویه صفر درجه.

بنابراین با دراختیار داشتن مقادیر آهنگ برهم‌کنش نوترون در اطراف نمونه و با حل این دستگاه دو معادله (رابطه او ۲) و دو مجهول، می‌توان Σ_s, Σ_a را محاسبه نمود.

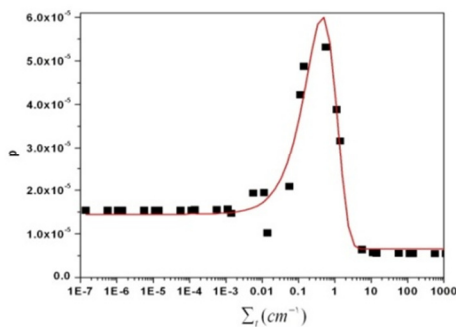
۲-۳ چهار پولک در چهار موقعیت

برای زاویه صفر و ۱۸۰ درجه نمودارها و توابع مانند بخش ۳-۱ می‌باشد و تفاوت در پارامترهای برازش است. الف) پولک واقع در زاویه ۴۵ درجه

در زاویه ۴۵ درجه هر دو سطح مقطع جذب و پراکندگی اهمیت دارند. با توجه به شکل ۶، در ابتدا به ازای افزایش Σ_t و نسبت $\frac{\Sigma_s}{\Sigma_t}$ ثابت، احتمال جذب در پولک افزایش می‌یابد و سپس کاهش می‌یابد. رابطه مربوط به زاویه ۴۵ درجه به صورت زیر است:

$$p(\Sigma_s, \Sigma_t) = s + (r + \Sigma_t)[1 - \exp(-(x\Sigma_t - k)/l)] \exp(-(x\Sigma_t - k)/p) \quad (3)$$

منحنی برازش شده برای نسبت $\frac{\Sigma_s}{\Sigma_t} = 0.17$ در شکل ۶ و ضرایب ثابت نیز در جدول ۱ آورده شده است.



شکل ۶: منحنی برازش شده به داده‌های پولک واقع در زاویه ۴۵ درجه با تابع رابطه ۳ برای نسبت خاص $\frac{\Sigma_s}{\Sigma_t} = 0.17$

ب) پولک واقع در زاویه ۱۳۵ درجه

نمودار احتمال جذب برای زاویه ۱۳۵ درجه مانند زاویه ۴۵ درجه می‌باشد. رابطه‌ی برازش نیز به صورت زیر

$$p(\Sigma_s, \Sigma_t) = m + (n + \Sigma_t)[1 - \exp(-(x\Sigma_t - w)/z)] \exp(-(x\Sigma_t - w)/q) \quad (4)$$

است: ضرایب ثابت مربوط به برازش در حالت $\frac{\Sigma_s}{\Sigma_t} = 0.17$ در جدول ۱ آمده است.

جدول ۱: ضرایب ثابت برازش شده در حالی که چهار پولک در چهار نقطه اطراف نمونه واقع شده‌اند.

s	$5.738 \times 10^{-6} \pm 9.23 \times 10^{-7}$	k	-0.35122 ± 0.05182
r	$-47668638.402 \pm 335955887.04$	l	$-1.6248 \times 10^{11} \pm 1.127 \times 10^{11}$
z	$-27132.260489 \pm 23265.80$	p	49822 ± 0.216
q	1.6223 ± 0.06298	m	$3.868 \times 10^{-6} \pm 3.0091 \times 10^{-7}$
w	-0.2678 ± 0.01538	n	$-2.02566363003 \pm 1747396.13466$

بدین ترتیب چهار رابطه از طریق برازش منحنی به داده‌های محاسباتی به دست می‌آید که می‌توان با حل این چهار معادله، Σ_s, Σ_a را به دست آورد. راه‌کاری که در این مقاله برای حل معادلات، به کار گرفته شده است،

تکنیک کمینه سازی χ^2 در محیط فرترن می باشد. خطای محاسبات نیز کمتر از ۰٫۰۲ می باشد. به خاطر اطمینان از درستی روابط، آن ها را برای مواد معلوم امتحان کرده و با مقادیر درست، مقایسه لازم انجام می شود. مقایسه با نتایج دانشگاه Delft نیز صورت گرفته است. نتایج مربوطه برای نسبت $\frac{\sum_s}{\sum_t} = 0.79$ در جدول ۲ از سمت چپ، به ترتیب مقادیر واقعی، مقادیر محاسبه شده در دانشگاه فردوسی و مربوط به دانشگاه delft آمده است.

جدول ۲: مقایسه مقادیر محاسبه شده \sum_s و \sum_a در دانشگاه های فردوسی و Delft با مقادیر واقعی برای حالت چهار موقعیت .
بست و سیب سبزی

خطای داده ها در روش تعیین سطح مقطع های ماکروسکوپی نمونه در حالتی که چهار پولک در چهار نقطه

true		Derived (ferdowsi)				Derived (Delft)			
Σ_s	Σ_a	Σ_s	error	Σ_a	error	Σ_s	error	Σ_a	error
۰٫۰۰۹	۰٫۰۰۱	۰٫۰۰۹۲	۰٫۰۲	۰٫۰۰۱۳۲	۰٫۳۲	۰٫۰۰۸۶	۰٫۰۴	۰٫۰۰۱۷	۰٫۷
۰٫۰۱۸	۰٫۰۰۲	۰٫۰۱۷۹۴	۰٫۰۰۳	۰٫۰۰۲۱۷	۰٫۸۵	۰٫۰۱۷۴	۰٫۰۳	۰٫۰۰۲۹	۰٫۴۵
۰٫۰۵۴	۰٫۰۰۶	۰٫۰۵۳	۰٫۰۱۸۵۱	۰٫۰۰۶۱	۰٫۱۶	۰٫۰۵۲	۰٫۰۳۷	۰٫۰۰۹	۰٫۵
۰٫۱۸	۰٫۰۲	۰٫۱۷۹	۰٫۰۰۵	۰٫۰۲۱	۰٫۰۵	۰٫۱۷۸	۰٫۰۱	۰٫۰۲۲	۰٫۱
۰٫۵۴	۰٫۰۶	۰٫۵۳۶۴	۰٫۰۰۶	۰٫۰۶۳	۰٫۰۵	۰٫۵۳	۰٫۰۱	۰٫۰۵۸	۰٫۰۵۶
۰٫۹	۰٫۱	۰٫۸۷۵	۰٫۰۲	۰٫۱۰۴۸۷	۰٫۰۴	۰٫۸۵۷۷	۰٫۰۴۷	۰٫۱۰۶	۰٫۰۶
۱٫۸	۰٫۲	۱٫۸۰۱	۰٫۰۰۰۵۵	۰٫۲۰۱۱	۰٫۰۰۵	۲٫۴۱	۰٫۳۳	۰٫۲۰۱	۰٫۰۰۵
۵٫۴	۰٫۶	۵٫۴۰۷	۰٫۰۰۱۲	۰٫۶۰۱	۰٫۰۰۱۶	۷٫۲	۰٫۳۳	۰٫۴۴۶	۰٫۲۵۶

اطراف نمونه واقع شده اند از حالتی که چهار پولک در دو موقعیت قرار می گیرند، کمتر می باشد. زیرا با بیشتر شدن تعداد نقاط، دقت محاسبات بالاتر رفته و پارامترهای نمونه به مقدار واقعی نزدیک تر خواهند بود. روش به کار برده شده جهت تعیین \sum_s ، \sum_a ، در محدوده $0.2 < \frac{\sum_s}{\sum_t} \leq 0.98$ قابل استفاده می باشد. در جدول ۲ مشاهده می گردد که نتایج به دست آمده در دانشگاه فردوسی برای همه مقادیر \sum_s ، \sum_a با خطای از مرتبه ۱ تا ۱۰۰ برابر کوچکتری، محاسبه شده اند.

منابع

- 1-Hellen Degenaar, Towards a methodology for large-sample prompt-gamma neutron-activation analysis, 2004.
- 2-Briesmeister, J. F., Ed. MCNPTM—a general Monte Carlo N-particle transport code: version 4C. Report LA-13709-M (Los Alamos, NM: Los Alamos National Laboratory) (2000).
- 3- Nicholas Soulfanidis, Measurement and detection of radiation, Hemisphere Publishing Corporation, 1983.
- 4- Heleen Degenaar, Menno Blaauw, correction for neutron self-shielding in LS_PGNA, journal of Radioanalytical and nuclear Chemistry, Vol. 257, No.3, 467-470(2003).