

A PGNAA Facility Design for Chlorine Determination in Water Using the MCNPX

M. Mostajaboddavati¹

R. Saldideh Azarki²

Received: 2011.11.26

Accepted: 2012.04.22

Abstract

The Monte Carlo (MCNPX) code has been used to the design a PGNAA facility for water chlorine content determination. The facility uses ^{241}Am - ^9Be neutron source. Its configuration was optimized to yield maximum prompt gamma ray of chlorine in detectors, so minimize the relative statistical error. Then the calibration curve of measured count rate of 6110 keV gamma rays against the amount of Cl were obtained. The result permits PGNAA to be a valuable diagnostic tool for chlorine contamination of water.

Keywords: PGNAA, Chlorine determination, MCNP.

1. Mojtaba Mostajaboddavati: Assistant Professor, Department of Physics - University of Isfahan; mmostajab@yahoo.com

2. Rouhollah Saldideh Azarki: Master of Science, Department of Physics - University of Isfahan; saldideh@yahoo.com

مجله فیزیک کاربردی دانشگاه الزهراء (س)

شماره ۲، بهار و تابستان ۱۳۹۱

طراحی دستگاه PGNAA برای سنجش کلر آب با استفاده از کد MCNPX

مجتبی مستجاب الدعواتی^۱
روح الله سالدیده آزارکی^۲

تاریخ دریافت: ۱۳۹۰/۹/۵

تاریخ تصویب: ۱۳۹۱/۲/۲

چکیده

مجموعه‌ای از شبیه‌سازی‌های MCNPX انجام شد تا یک دستگاه PGNAA که از چشمه نوترونی ^{241}Am - ^4Be استفاده می‌کند، برای سنجش کلر آب طراحی شود. پیکربندی دستگاه طوری بهینه شد تا بیشترین شار گامای آنی کلر ($6/11 \text{ MeV}$) به آشکارسازها برسد و در نتیجه خطا کمینه شود. با رسم منحنی درجه‌بندی نشان می‌دهیم که آهنگ شمارش نسبت به غلظت کلر به طور خطی افزایش می‌یابد. نتایج نشان می‌دهد که روش PGNAA قادر است

^۱ استادیار گروه فیزیک دانشگاه اصفهان، mmostajab@yahoo.com

^۲ کارشناس ارشد فیزیک دانشگاه اصفهان، r.saldideh@yahoo.com

کلر را با دقت بسیار زیاد و در مدت زمان نسبتاً کم در نمونه‌های حجیم آب تعیین کند.

واژه‌های کلیدی: روش PGNAA، کلر سنجی،

مونت کارلو، شبیه‌سازی MCNP

۱. مقدمه

کلرزنی یکی از ابتدایی‌ترین و قدیمی‌ترین روش‌ها برای غیرفعال کردن میکروارگانیزم‌های عامل بیماری در آب آشامیدنی و رودخانه‌های آلوده است؛ اما وجود کلر زیاد از حد در آب باعث ایجاد اثرات سوء از جمله بوی بد آب و تغییر طعم آن و حتی باعث ایجاد ترکیبات سرطان‌زا مانند کلروفرم می‌شود. در نتیجه در هر مرحله از فرآیند تصفیه آب به‌ویژه در انتهای فرآیند یعنی قبل از ورود آب به سیستم لوله‌کشی و شاه‌لوله‌های آب، باید میزان کلر اندازه‌گیری شود تا هم از سالم بودن آب از لحاظ میکروبی اطمینان حاصل شود و هم اثرات سوء کلر به حداقل برسد [1].

روش‌های زیادی برای سنجش کلر آب وجود دارد. یکی از این روش‌ها، روش واکافت گامای آنی ناشی از فعال‌سازی نوترونی یا ^{60}Co است. از ویژگی‌های بارز این روش می‌توان به دقت و درعین حال سرعت بالا، آنالین بودن و عدم نیاز به نمونه‌برداری اشاره کرد. در روش PGNAA نمونه با استفاده از نوترون‌ها بمباران می‌شود. پس از جذب نوترون توسط هسته، ایزوتوپی با عدد جرمی یک واحد بیشتر در حالت برانگیخته ایجاد می‌شود. هسته برانگیخته در زمان 10^{-14} ثانیه یک پرتو گامای آنی که مشخصه هسته است، گسیل می‌کند. در نتیجه با آشکارسازی پرتوهای گاما آنی گسیل شده از نمونه و تعیین انرژی و شدت آن می‌توان به ترتیب به نوع عنصر و غلظت آن پی برد [2-4].

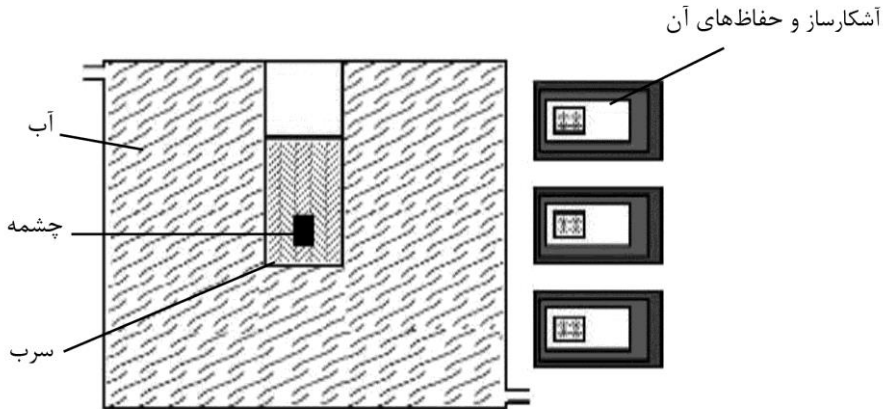
در این مقاله یک سیستم PGNAA با چشمه $^{241}\text{Am-Be}$ با استفاده از کد MCNPX طراحی شد. در سیستم PGNAA باید تناسب خوبی بین پاسخ دستگاه و غلظت عنصر

¹ Prompt Gamma Neutron Activation Analysis

مورد شناسایی وجود داشته باشد. این تناسب را پارامترهای سیستم از قبیل پیکربندی (جنس و ضخامت مواد کندکننده، بازتابنده و جاذب نوترون و مواد جاذب پرتو گاما)، چشمه نوترونی، آشکارسازها و بعضی ویژگی‌های نمونه مورد بررسی مانند ضخامت نمونه تعیین می‌کنند [5]. پارامترهای پیکربندی دستگاه طوری بهینه شدند تا حساسیت دستگاه نسبت به تغییرات کلر در آب بیشینه شود. حساسیت زیاد یعنی تغییر کم در کلر موجود در آب، تغییر زیادی در شار گامای آبی آشکار شده توسط آشکارسازها ایجاد شود؛ و این یعنی دقت بیشتر. پس از بهینه‌سازی این پارامترها، دستگاه برای کلر کالیبره شد و منحنی درجه‌بندی برای مقادیر مختلف کلر اضافه‌شده به آب خالص به دست آمد. در این پروژه شبیه‌سازی‌های لازم با استفاده از کد MCNPX انجام گرفته است؛ که یکی از جامع‌ترین کدها برای حل مسائل مربوط به واکنش‌های (n, γ) است.

۲. شبیه‌سازی مونت کارلو

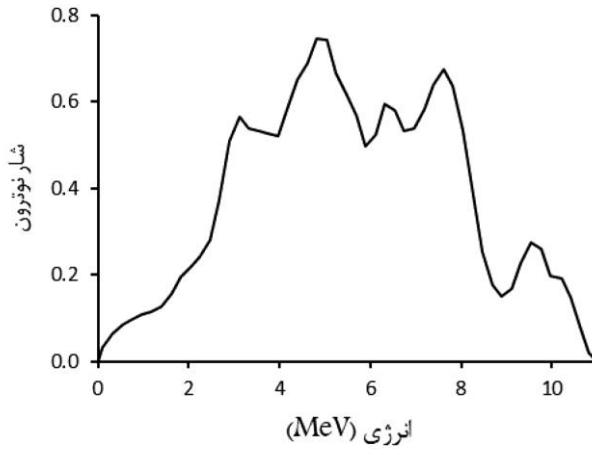
هدف از بهینه‌سازی پیکربندی دستگاه به دست آوردن بهترین طیف گامای آبی است. برای این کار باید شار نوترون حرارتی در محل نمونه بیشینه و زمینه گامای غیرضروری و مزاحم کمینه شود. در این طراحی سعی شده تا هندسه‌ای انتخاب شود که از شار نوترون چشمه بیش‌ترین استفاده را برده و نوترون کمتری از دست برود. به همین دلیل هندسه به صورت متقارن و استوانه‌های هم مرکز در نظر گرفته شد. هندسه‌ی نهایی دستگاه در شکل ۱ نشان داده شده است.



شکل ۱: نمای کلی هندسه دستگاه PGNAA

در این طراحی از چشمه $^{241}\text{Am}-^9\text{Be}$ استفاده شد. امرسیوم ^{241}Am آلفایی با انرژی 5.486 MeV گسیل می‌دارد. این آلفا با بریلیوم برخورد کرده و تحت واکنش $^9\text{Be}(\alpha, n)^{12}\text{C}$ طیف نوترون با آهنگ $2.2 \times 10^6\text{ n/s}$ تولید می‌کند. طیف نوترون خروجی از چشمه که از ISO^۱ استخراج شده است در شکل ۲ نشان داده شده است [6]. در اینجا، چشمه‌ای با فعالیت 5 mCi که توسط کپسولی از استیل احاطه شده است، طراحی شد. Am-Be علاوه بر نوترون، گامای 4.44 MeV نیز گسیل می‌کند که این گاما پس از برخورد با کپسول استیلی، طیف فوتون تولید می‌کند. به علاوه برخورد نوترون با کپسول نیز گامای آبی ایجاد می‌کند [7]. این گاما در داخل آشکارساز انباشته می‌شود، تپ‌های همزمان ایجاد می‌کند و در نتیجه طیف در ناحیه‌ی مورد نظر را مختل می‌کند [8]. همه‌ی این محدودیت‌ها ما را مجبور ساخت تا این گاماها را کاهش دهیم بدون اینکه نگران کاهش شار نوترون باشیم. برای این کار، استوانه‌ای از سرب حول چشمه قرار داده شد. سپس به ازای ضخامت‌های مختلف سرب، گامای چشمه در آشکارسازهای NaI(Tl) با استفاده از تالی ارتفاع پالس (F8) به دست آمد.

¹ International Organization for Standardization



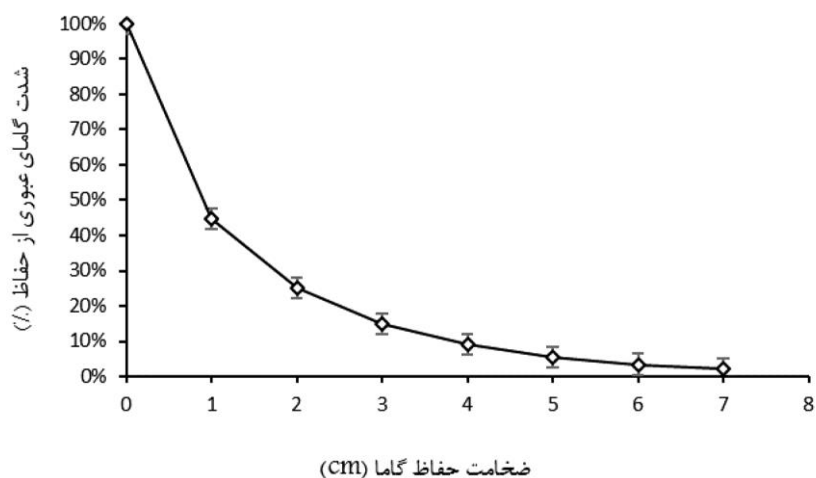
شکل ۲: بیناب استاندارد نوترون چشمه $^{241}\text{Am}-^9\text{Be}$

سطح مقطع گیراندازی نوترون در انرژی‌های پایین (ناحیه حرارتی) بالاست. از این رو سعی می‌کنیم در محل قرارگیری نمونه شار نوترون‌های حرارتی را به حداکثر برسانیم. مواد هیدروژن دار مانند آب، پلی‌اتیلن و پارافین بهترین مواد برای حرارتی کردن نوترون هستند. در نتیجه، در این دستگاه آب دو نقش مختلف دارد: هم کندکننده نوترون است و هم نمونه. برای دریافت بیش‌ترین گامای آبی، یک مقدار بهینه برای حجم آب وجود دارد. برای به‌دست آوردن این حجم، شعاع بشکه آب از ۱۰ cm تا ۵۵ cm در گام‌های ۵ سانتی‌متری تغییر داده شد و شار گامای آبی کلر توسط تالی F8 به‌دست آمد.

در شبیه‌سازی‌ها از آشکارسازهای NaI(Tl) برای آشکارسازی گاما استفاده شد. دو مجموعه سه‌تایی از آشکارسازهای NaI(Tl) عمود برهم در نظر گرفته شد. هر مجموعه شامل سه آشکارساز است که این آشکارسازها با فاصله‌ی اندکی بر روی هم قرار گرفته‌اند. برای جلوگیری از رسیدن پرتوهای گامای مزاحم و نوترون‌ها به آشکارسازها، آشکارسازها با ورقه‌های سربی و کادمیومی پوشانده شده است.

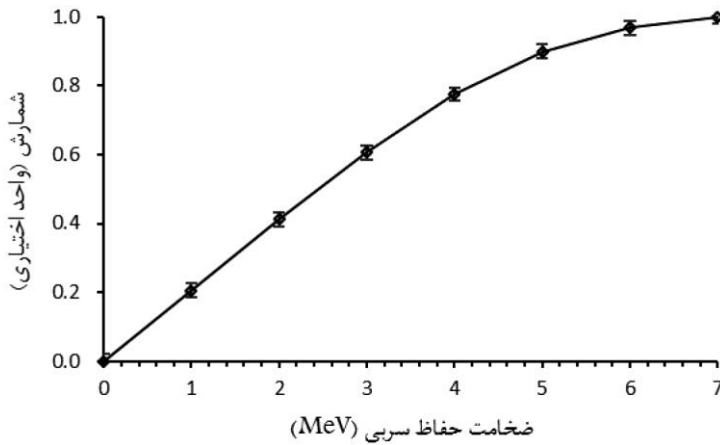
۳. نتیجه گیری و بحث

حفاظی از سرب جلوی چشمه قرار داده شد تا پرتوهای گامای چشمه را جذب نموده و شدت این پرتوها را در محل نمونه و آشکارسازها کاهش دهد. شکل ۳ شدت کل گامای عبوری از ضخامت‌های مختلف سرب را نشان می‌دهد. مشاهده می‌شود که شار گاما با افزایش حفاظ گاما کاهش می‌یابد. طبق این شکل، حفاظ با ضخامت ۴ cm گامای چشمه را تا ۹۰ درصد کاهش می‌دهد.



شکل ۳: درصد شدت گامای عبوری از سرب به ازای ضخامت‌های مختلف حفاظ

شار نوترون پس از عبور از حفاظ سربی تغییر می‌کند که در شکل ۴ نشان داده شده است. طبق این شکل شار نوترون با افزایش ضخامت حفاظ سربی افزایش می‌یابد. در جدول ۱ سطح مقطع واکنش‌های (n, Xn) برای سرب طبیعی آمده است. با توجه به سطح مقطع‌ها می‌توان گفت که این افزایش ناشی از برهمکنش (n, Xn) در حفاظ سربی است که در آن X می‌تواند ۲ و ۳ بسته به انرژی نوترون باشد [8]. این حقیقت، کاهش شار نوترون در عبور از حفاظ را که به علت واکنش‌های (n, γ) در سرب روی می‌دهد جبران می‌کند و همچنین ایده‌ی استفاده از حفاظ گاما حول چشمه را تقویت می‌بخشد.



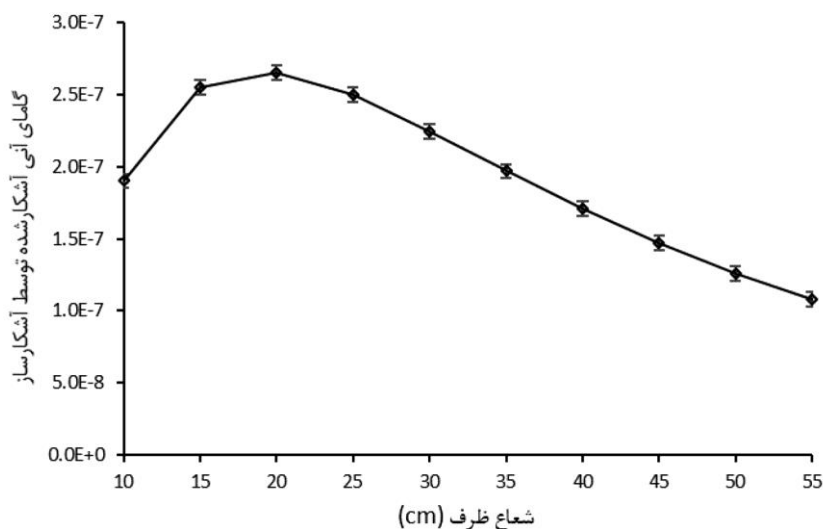
شکل ۴: شار کل نوترون به ازای ضخامت‌های مختلف حفاظ گاما. شار نوترون در عبور از حفاظ گاما افزایش می‌یابد.

جدول ۱: سطح مقطع برهمکنش‌های (n,Xn) برای سرب طبیعی [8].

سطح مقطع (Barn)	انرژی نوترون (MeV)
(n, 2n)	
4.35E-03	6.31
5.85E-02	7.08
2.94E-01	7.90
7.46E-01	8.90
1.74E+00	10
0.00E+00	20
(n, 3n)	
2.60E-01	10
0.00E+00	20

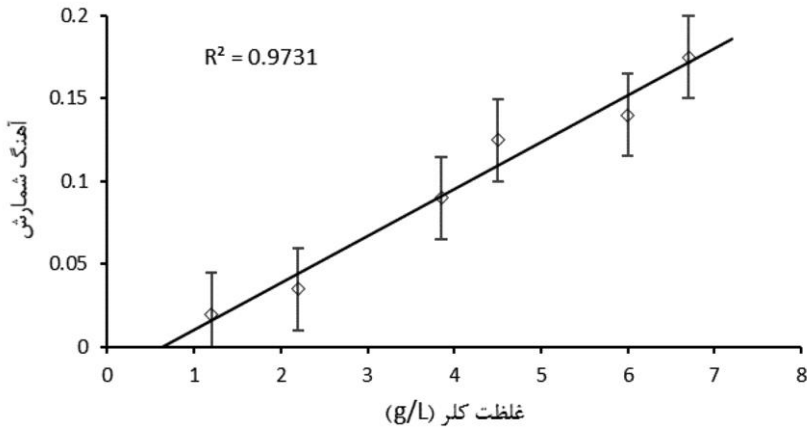
کل مجموعه چشمه و سرب در درون بشکه‌ای از آب قرار گرفت. شار گامای آبی کلر به ازای مقادیر مختلف شعاع ظرف به دست آمد که در شکل ۵ نشان داده شده است. مشاهده می‌شود که گامای آبی به دست آمده با افزایش شعاع ظرف ابتدا افزایش می‌یابد. به ازای

۲۰ cm شعاع آب، به بیشینه مقدار خود می‌رسد و بعد از آن کاهش می‌یابد. افزایش شار گامای آبی به دو علت است: افزایش شار نوترون‌های حرارتی به علت افزایش کندکننده و افزایش نمونه. کاهش شار گاما نیز به دو علت رخ می‌دهد: افزایش خود جذب نوترون توسط آب و مخصوصاً هیدروژن آن و افزایش خود جذب پرتوهای گاما.



شکل ۵: شار گامای آبی کلر به ازای مقادیر مختلف شعاع ظرف

در انتها اثر غلظت کلر بر آهنگ شمارش گامای آبی آن بررسی شد. شکل ۶ تغییرات آهنگ شمارش گامای آبی ۶/۱۱ MeV ناشی از واکنش $^{36}\text{Cl}(n,\gamma)^{35}\text{Cl}$ را به ازای مقادیر مختلف غلظت کلر نشان می‌دهد. مطابق شکل ۶ آهنگ شمارش تقریباً به طور خطی با افزایش غلظت کلر افزایش می‌یابد. ضریب همبستگی خطی ۰/۹۷۳۱ است که همبستگی خوبی را بین شمارش گامای آبی ۶/۱۱ MeV و غلظت کلر نشان می‌دهد. برای غلظت‌های کمتر از ۱,۲ g/L باید زمان شمارش را افزایش داد؛ زیرا دقت کاهش می‌یابد.



شکل ۶: رابطه آهنک شمارش گامای ۶/۱۱ MeV با غلظت کلر در آب

۴. نتیجه گیری

یک دستگاه PGNAA برای اندازه گیری کلر آب با استفاده از کد MCNPX طراحی شد. پارامترهای هندسی دستگاه بهینه شدند. در محاسبات از گامای آنی ۶/۱۱ MeV کلر استفاده شد. با بررسی منحنی درجه بندی آهنک شمارش نسبت به غلظت کلر به این نتیجه رسیدیم آهنک شمارش گامای ۶/۱۱ MeV با افزایش غلظت کلر در آب به طور خطی افزایش می یابد. کلر را می توان در نمونه های حجم آب با دقت بسیار زیاد و در زمان نسبتاً کم با استفاده از روش PGNAA تعیین کرد. روش PGNAA روش قدرتمندی در شناسایی مواد است بنابراین پیشنهاد می شود که امکان استفاده از این روش برای شناسایی سایر آلودگی های موجود در آب، مورد مطالعه قرار گیرد.

۵. منابع

[1] S. K. Garg; Environmental Engineering Vol. I, Khanna Publishers, New Delhi (1986).

[2] H. J. Im and K. Song; Appl. Spectros. Rev. 44, No. 4 (2009) 317-334.

- [3] R. Khelifi, A. Amokrane, and P. Bode; Nucl. Instrum. and Methods in Phys. Res. B **262**, No. 2 (2007) 329-332.
- [4] R. Khelifi, P. Bode, and A. Amokrane; The 3rd International Conference Current Problems in Nuclear Physics and Atomic Energy, Kyiv, Ukraine (2010).
- [5] C. Oliveira, J. Salgado, and F. Leitao; Appl. Radiat. Isot. **49**, No. 8 (1998) 923-930.
- [6] ISO-8529-1; International Organization for Standardization, 56 CH-1211, Genève (2001).
- [7] J. C. Vitorelli, A. X. Silva, V. R. Crispim, E. S. da Fonseca, and W. W. Pereira; Appl. Radiat. Isot. **62** (2005) 619-622.
- [8] R. Izadi Najafabadi, S. H. Miri Hakim Abad, and H. Panjeh; Asian J. Exp. Sci. **21**, (2007) 249-258.