

برآورد تحلیلی طیف پرتو گامای گسیلی در روش PGNAA برای کانه بوکسیت معدن جاجرمد

حسین خباززاده^۱، حسین توکلی انبران^{۲*} و احسان ابراهیمی بسابی^۳

۱- دانشجوی دکترا؛ دانشکده فیزیک و مهندسی هسته‌ای دانشگاه صنعتی شاهرود

۲- استاد؛ دانشکده فیزیک و مهندسی هسته‌ای دانشگاه صنعتی شاهرود

۳- دانشیار؛ دانشکده فیزیک و مهندسی هسته‌ای دانشگاه صنعتی شاهرود

دریافت مقاله: ۱۴۰۴/۰۹/۲۳؛ پذیرش مقاله: ۱۴۰۵/۰۱/۱۵

* نویسنده مسئول مکاتبات: Tavakoli-Anbaran@shahroodut.ac.ir & tavakoli.anbaran@gmail.com

چکیده	واژگان کلیدی
روش فعال‌سازی نوترونی گاماهاای گسیلی آنی (PGNAA) در آنالیز کمی و کیفی عنصری نمونه، یک روش سریع، غیر مخرب و بخوبی توسعه یافته‌ای است و در حوزه‌های پژوهشی مربوط به داروسازی، صنعت و معدن بکار برده می‌شود. یکی از مهمترین قسمت‌های این روش، تجزیه و تحلیل طیف پرتوگامای حاصله است. در حال حاضر با ۴ روش: آزمون تجربی مستقیم، شبیه سازی مونت کارلو، شبکه عصبی و برآورد تحلیلی می‌توان این طیف را بدست آورد و یا تجزیه و تحلیل کرد. روش برآورد تحلیلی طیف پرتو گاما که موضوع اصلی این پژوهش است. در واقع شبیه سازی طیف بر اساس اصول و بنیان های فیزیکی برهمکنش نوترون های گرمایی با هسته عناصر موجود در نمونه و اصول و بنیان های فیزیکی برهمکنش فوتون های گامای گسیلی از نمونه فعال سازی شده با ماده درون آشکارساز مورد نظر است. مزایای این شبیه سازی عبارتند از: تعیین دقیق موقعیت قله های عناصر در طیف شامل: قله های اصلی، قله های تک فراری و دو فراری، تعیین همپوشانی قله های کوچک تر توسط قله های بزرگتر و تعیین اجزاء اصلی در شکل طیف حاصل از در هم رفتگی قله چند عنصر با هم. هدف دیگر این پژوهش بدست آوردن آشکارساز مناسبی برای طیف سنجی در آزمون (PGNAA) از کانه بوکسیت معدن جاجرمد بمنظور تعیین درصد (Al_2O_3) و (SiO_2) بوده است. بنابراین طیف تحلیلی حاصل از روش (PGNAA) بر روی نمونه، بوسیله سه آشکارساز (NaI)، (HPGO) و (BGO) بدست آورده و مقایسه شده اند. با بررسی طیف های تحلیلی سه آشکارساز، آشکارساز مناسب برای این کار نوع (NaI) تشخیص داده شده است.	برآورد تحلیلی طیف کانه نمونه بوکسیت اکسید آلومینیوم اکسید سیلیسیم آشکار ساز NaI

۱-مقدمه

روش فعال‌سازی نوترونی با استفاده از طیف گاماهاای گسیلی آنی PGNAA^۱ یک روش مکمل برای روش تاخیری DGNAA^۲ متداول برای ایزوتوپ مرکبی است که بعد از گیراندازی نوترون بوجود آمده است اما یا فعالیت پرتوایی ندارد و یا آنقدر پرتوایی آن ضعیف است که قابل اندازه گیری نیست. همچنین باید دانست که با قطع پرتودهی نوترونی پرتوهای گامای گسیلی آنی نیز قطع می شوند (Tsoulfanidis, 2015)"(روش های گزارش شده تاکنون در مورد بدست آوردن طیف

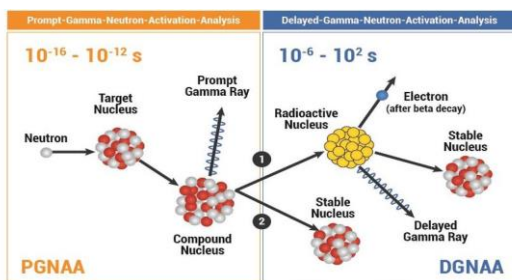
حاصله از PGNAA عبارتند از: الف- آزمون تجربی مستقیم که همان فعال‌سازی نوترونی نمونه و ثبت طیف فوتون های گامای گسیلی توسط تحلیل گر چند کاناله است. ب- شبیه سازی مونت کارلو که عمدتاً با کد MCNPX^۳ انجام می‌شود. روش تجزیه تحلیل گزارش شده تاکنون نیز عبارت است از: روش شبکه عصبی که یک برنامه رایانه ای دارای ساختاری همانند شبکه عصبی مغز انسان است و با یادگیری و کاهش خطا توانایی تجزیه و تحلیل طیف را بدست می‌آورد. در مثالی از آزمون تجربی می‌توان به کار انجام شده بر روی سیمان در مقاله "Safari et al. (2016)" اشاره کرد که آزمون تجربی مستقیم فعال‌سازی نوترونی

^۱ Prompt Gamma Neutron Activation Analysis

^۲ Delay Gamma Neutron Activation Analysis

^۳ Monte carlo N Particle

گاما به بیرون از هسته گسیل می‌شود و هسته به انرژی سطح پایه برمی‌گردد. در روش PGNAA برهمکنش نوترون‌های گرمایی با هسته اهمیت ویژه ای دارد و بصورت $T(n,\gamma)P$ نوشته می‌شود. T هسته هدف و P نشانگر هسته مرکب تولیدی است. این برهمکنش نشاندهنده برخورد نوترون به هسته هدف و تولید هسته مرکب و گامای گسیلی آنی است. به این برهمکنش در روش PGNAA، برهمکنش گیراندازی نوترون گرمایی گفته می‌شود. سطح مقطع گیراندازی نوترون گرمایی σ_T نام دارد که برحسب یکای بارن 10^{-24} cm^2 گزارش می‌شود (Alfassi, 1995).



شکل ۱: مکانیسم گسیل فوتون های آنی و فوتون های تاخیری در روش NAA، (Havenith et al., 2020).

در این پژوهش احتمال بروز واکنش گیراندازی نوترون گرمایی با استفاده از نسبت سطح مقطع گیراندازی نوترونی σ_T به سطح مقطع کل σ_{Tot} بدست آمده است. اطلاعات این پژوهش در مورد سطح مقطع های گیر اندازی و سطح مقطع های کل نوترون های گرمایی عناصر از مراجع: (IAEA, (2007) و "JEFREPORT, (1985)" بدست آمده اند. برهمکنش فوتون گاما با ماده آشکارساز نیز دارای انواعی است که هر نوع آن بر حسب میزان انرژی دارای احتمال معینی می‌باشد. سه برهمکنش اصلی عبارتند از: الف- فوتوالکتریک ب- کامپتون پ- تولید زوج. در طیف سنجی گاما اگر فوتونی همه انرژی خودش را در درون ماده آشکارساز بصورت فوتوالکتریک ذخیره کند نتیجه یک فوتوپیک درطیف خواهد بود که قله اصلی نام دارد و احتمال آن با نسبت τ/μ متناسب است. و اگر انرژی فوتون برابر یا بیشتر از (keV) و در حدی باشد که الکترون مقید نسبت به آن آزاد به نظر برسد برهمکنش کامپتون احتمال بیشتری خواهد داشت و پیوستار کامپتون بوجود می‌آید. در صورتی که انرژی فوتون از مقدار 1.02 MeV فراتر رود احتمال تولید زوج بیشتر شده و بنابراین در طیف گاما شاهد قله های تک فراری و یا دو فراری خواهیم بود که از فرار یک یا دو فوتون حاصل از نابودی برهمکنش پوزیترون با یک الکترون درون آشکارساز بوجود آمده اند احتمال این رخداد با نسبت κ/μ در معادلات اثر می گذارد. این سه برهمکنش هم دارای احتمالات یا سطوح مقاطعی هستند به اسامی τ برای فوتوالکتریک σ برای کامپتون و κ برای تولید زوج (Knoll, 2010). در مجموع دراین مقاله طیف تحلیلی پرتو گامای گسیلی آنی ناشی از فعال سازی با نوترون های گرمایی (PGNAA) با بکار گرفتن الف-اطلاعات پیشین مربوط به درصد عناصر از یک نمونه اندازه گیری شده با روش XRF ب- سطح مقطع های گیراندازی و سطح مقطع های کل نوترون های گرمایی عناصر موجود در نمونه مربوط به انرژی فوتون های گامای آنی گسیلی پ- ضرایب تضعیف μ و سطح مقطع های تولید فوتوپیک τ و سطح مقطع های

گاما های آنی را بر روی نمونه سیمان انجام داده و طیف حاصله را با آشکار ساز یدور سدیم بدست آورده اند. همچنین (Kogo et al, 2009) طیف تجربی حاصل از فعال سازی نوترونی را برای شناسایی کیفی ۲۴ عنصر بکار برده اند. در کار دیگری (Borsaru and Holmes (1981) با استفاده از طیف تجربی در فعال سازی نوترونی نمونه بالک بوکسیت توانسته اند که درصد عناصر آلومینیوم و سیلیس را بدست آورند. در یک پژوهش در مورد فعال سازی نوترونی Helmand Shayan et al. (2022) با در نظر گرفتن توزیع احتمال چگالی کرنل در طیف گاما، اثرات نوفه را در طیف از بین برده و بر اساس تغییر در درصدهای عناصر، شکل طیف را شبیه سازی کرده اند. همچنین (Ghal-Eh et al. (2016) در اجرای روش PGNAA، اطلاعات شبیه سازی به روش مونت کارلو و تجربی را بصورت ورودی به شبکه عصبی قرار داده و توانسته اند نتایج کیفی (شناسایی عناصر بوسیله طیف) را با دقت مناسبی بدست آورند. در کار دیگری از همین نوع (Doostmohammad et al. (2010) طیف گامای ناشی از برهم کنش نوترون های گرمایی و تند را با استفاده از کد MCNP4C شبیه سازی و آن را ورودی برنامه شبکه عصبی قرار داده اند. در تمامی سه روش گفته شده پیشین در اینجا، طیف حاصله ممکن است، دارای پیچیدگی هایی باشد که کار آنالیز کمی و کیفی را دچار مشکل کند. مهمترین آنها پیدا کردن محل دقیق قله و پیدا کردن سطح زیر قله مربوط به عنصر مورد نظردر طیف است که امکان دارد به خاطر همپوشانی با قله های بزرگتر عناصر دیگر دیده نشود و یا اینکه با درهم رفتگی با قله های عناصر دیگر شکل متقارن و خوبی نداشته و قابل تمیز و تفکیک نباشد. در پژوهش صورت گرفته کنونی شبیه سازی طیف گامای گسیلی بگونه ای است که می توان جزئیاتی از طیف را که معمولا در روش های قبلی پنهان می مانند بخوبی مشاهده کرد که عبارتند از: محل دقیق فوتو پیک ها، آشکار شدن جزئیات همپوشانی قله های کوچک تر با قله های بزرگتر، آشکار شدن جزئیات در هم رفتگی قله دو یا چند عنصر، آشکار شدن محل و ارتفاع قله های فوتوپیک تک فراری و دو فراری. برای مثال با درک جزئیات همپوشانی و یا درهم رفتگی قله دو عنصر و با کم کردن تعداد فوتون های معلوم یک عنصر در همپوشانی یا در هم رفتگی شان می توان تعداد فوتون های قله عنصر دیگر را پیدا کرد و درصد آن عنصر نامعلوم را بدین وسیله محاسبه کرد. بصورت خلاصه باید گفت که در روش گفته شده در این پژوهش، بصورت عمده مطلب مستوری درطیف حاصله وجود نخواهد داشت. اما در طیف حاصله از سه روش پیشین امکان اینکه مطالب زیادی از جزئیات پنهان بمانند وجود دارد. بنابراین با کمک گرفتن از روش برآورد تحلیلی طیف می توان طیف حاصل از آزمون تجربی مستقیم یا مونت کارلو را بخوبی تفسیر کرد و نتایج مورد نظر را از آن بدست آورد.

۲-شرح کلی پژوهش:

شکل (۱) نشانگر تفاوت دو روش فعال سازی با گسیل فوتون های گامای آنی PGNAA (چپ) و DGNAA (راست) است. در روش PGNAA فوتون گامای گسیلی از هسته ای صورت می گیرد که واپاشی هسته ای پرتو زا آن را تولید نکرده است. بلکه، در این روش انرژی جنبشی نوترون گرمایی گیر اندازی شده در درون هسته مرکب، بصورت آنی توسط فوتون

ذخیره آن انرژی در آشکارساز برای محاسبه بازده آشکارساز و تولید فوتوپیک در آن انرژی P_{deti} . آنگاه ارتفاع هر قله یا فوتوپیک هر ویژه هسته با رابطه ۱ بر اساس ضرب این شش ضریب در همدیگر بدست می‌آید.

$$\text{Count} = P_{Ni} P_{ni} P_{\gamma ij} P_{Bauxi} P_{Di} P_{deti} \quad (1)$$

رابطه ۱ کلی است و اما جزئیات دو بخشی آن در ادامه شرح داده می‌شود.

۳-۱- بخش اول، محاسبات تعداد فوتون‌های گامای گسیلی از کانه بوکسیت یا N_{fs} :

$$N_{fsi} = N(\text{from sample}) = P_{Ni} \cdot P_{\gamma ij} (\text{Norm}) \cdot P_{Bauxi} \quad (2)$$

محاسبات این بخش براساس رابطه شماره ۲ صورت می‌گیرد.

۳-۱-۱- محاسبات مربوط به تعداد ویژه هسته‌های عنصر در واحد حجم

موجود در نمونه کانه بوکسیت جاجرم یا ضرایب P_{Ni} :

با استفاده از رابطه شماره ۳ تعداد اتم‌های هر ایزوتوپ موجود در نمونه تعیین شده.

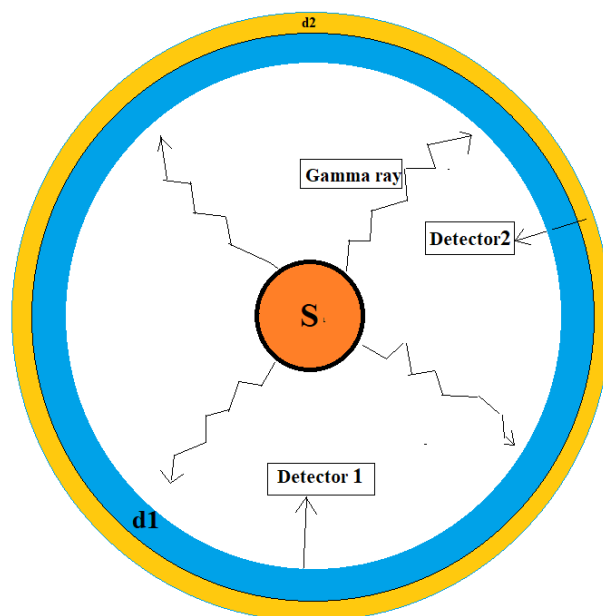
$$P_{Ni} = \frac{\rho_i N_A P_{1i} P_{2i}}{A_i} \quad (3)$$

که در آن ρ_i چگالی عنصر و N_A عدد آووگادرو و P_{1i} درصد آن عنصر در درون کانه بوکسیت می‌باشد و با کمک روش XRF موجود در آزمایشگاه مرکزی کارخانه آلومینای جاجرم بدست آمده است و جدول شماره ۱ نشانگر این درصدها برای بوکسیت با عیار میانگین، کم‌عیار و پرعیار است. تنها اکسیژن بدلیل نداشتن گامای آبی گسیلی در PGNA در این جدول ثبت نشده است و P_{2i} فراوانی ایزوتوپ ویژه هسته در طبیعت از جدول ۲ بخش بر صد و A_i جرم اتمی عنصر است، زیرا در روش فعال‌سازی نوترونی غلظت عناصر بر اساس تعداد هسته‌های عناصر بدست می‌آیند. بعد از محاسبه تعداد اتم‌های تک تک عناصر، تعداد این اتم‌ها را بهنجار می‌کنیم یعنی تعداد هر کدام را بر تعداد کل اتم‌های موجود در نمونه تقسیم می‌کنیم. و به ستون مورد نظر برای داشتن ضریب تعداد هسته‌های عنصر مورد نظر در ترکیب بصورت بهنجار شده می‌رسیم که همان ضرایب P_{Ni} هر فوتوپیک در جدول شماره ۳ و رابطه ۱ و ۲ است.

احتمال تولید زوج K پرتو گاما‌های آبی در سه آشکارساز مورد نظر NaI، BGO و HPGe بدست آمده است.

۳- جزئیات مراحل:

در روش فعال‌سازی نوترونی با گاما‌های آبی رابطه $R = N \cdot I \cdot \sigma_{\gamma}$ وجود دارد که نمایانگر عوامل دخیل در تولید هسته‌های پرتوزایی گامای آبی هستند. و در آن N نشانگر تعداد هسته‌ها در واحد حجم، I تعداد نوترون‌های برخوردی به نمونه در واحد زمان، σ_{γ} سطح مقطع گیراندازی نوترونی و R فعالیت پرتوزایی القایی است (Alfassi, 1995). همچنین در ابتدا فرض بر این است که نمونه بصورت یک کره و در داخل آشکارساز 4π استرادیان قرار دارد. شکل (۲) نشانگر محل استقرار نمونه کروی با نماد S مربوط به کانه بوکسیت، نماد $d1$ آشکارساز کروی با شعاع ۱ متر و ضخامت $d1$ و نماد $d2$ آشکارساز دوم مکمل به ضخامت $d2$ برای روش فرونشانی کامپتون است.



شکل ۲: شکل و نحوه استقرار نمونه و آشکارسازها. رنگ آبی آشکارساز اصلی ۱ و رنگ زرد آشکارساز ۲ مکمل برای روش فرونشانی کامپتون است

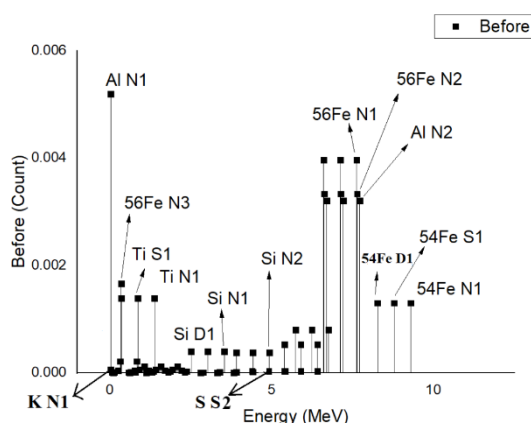
فهرست داده‌های اولیه عبارتند از:

- الف- تعداد ویژه هسته‌های عنصر i ام در واحد حجم نمونه بصورت بهنجار شده P_{Ni} .
- ب- نسبت سطح مقطع واکنش گیراندازی نوترون‌های گرمایی به سطح مقطع کل مربوط به ویژه هسته عنصر i ام در نمونه P_{Ni} .
- پ- احتمال گسیل پرتو گامای با انرژی Z ام از ویژه هسته عنصر i ام $P_{\gamma ij}$.
- ت- محاسبه میزان کاهش تعداد ذرات فوتون‌های گاما بر اساس گذر پرتو گامای گسیلی از لایه کانه بوکسیت که همان ضریب P_{Bauxi} است. ث-
- سطح مقطع تولید زوج از پرتو گامای با انرژی مورد نظر در آشکارساز P_{Di} .
- ج- سطح مقطع واکنش پرتو گامای با انرژی مورد نظر با آشکارساز و

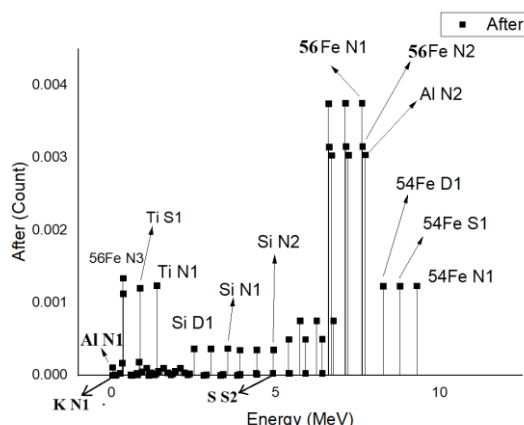
جدول شماره ۱: درصد عناصر سنگ بوکسیت با روش XRF

ایزوتوپ	درصد عیار میانگین	درصد کم عیار	درصد پر عیار
²⁷ Al	۲۳/۳۳۱	۲۰/۸۶	۲۷/۱۳
²⁸ Si	۵/۴۱	۸/۶۸	۳/۴۶
⁵⁴ Fe	۰/۹۱	۰/۸	۰/۸۳
⁵⁶ Fe	۱۴/۳۹	۱۲/۷۲	۱۳/۱۰
⁴⁸ Ti	۲/۰۲	۱/۸۹	۲/۲۴
¹ H	۱/۴۲	۱/۴۴	۱/۳
⁴⁰ Ca	۰/۸۷	۰/۹۱	۰/۶۹
²⁴ Mg	۰/۳۹	۰/۰۷	۰/۲۶
²⁵ Mg	۰/۰۵	۰/۰۱	۰/۰۳
³⁹ K	۰/۳۷	۰/۳۱	۰/۳
³² S	۰/۱۶	۰/۱۸	۰/۱۱

3 g/cm^3 است. ضرایب تضعیف μ مربوط به کانه بوکسیت از مرجع "(xcom)" بدست آمده اند. بنابراین تعداد فوتون های نهایی خروجی از کانه بوکسیت ناشی از هر عنصر N_{fsi} با رابطه ۲ قابل محاسبه می شوند. جدول ۳ نشانگر قسمتی از ستونها در جدول اصلی نرم افزار Excel در محاسبات برای بوکسیت با عیار میانگین است. قابل ذکر می باشد که جدول اصلی با توجه به فراوانی عناصر و در نظر گرفتن فوتوپیک ها و قله های تک فراری و دوفراری ۷۶ سطر دارد. بنابراین می توان نمودار میله ای ارتفاع $N_{fromsample}$ بر حسب انرژی مرکز قله ها را با استفاده از نرم افزار Origin رسم کرد. مثالی از این نمودار قبل از کاهش قله ها و بعد از کاهش قله ها در گذر از میان لایه کانه بوکسیت نمونه با عیار میانگین، در نمودار ۱ و ۲ قابل مشاهده است. همانطوریکه مشاهده می شود کاهش قله فوتون های با انرژی کمتر همانند Al N1 چشمگیرتر است.



نمودار ۱: اندازه قله های فوتون های گسیلی پیش از گذر از لایه سنگ کروی شکل



نمودار ۲: اندازه قله های فوتون های گسیلی پس از گذر از لایه سنگ کروی شکل

۲-۱-۳- محاسبات مربوط به تعیین ضریب $P_{nij}(\text{Norm})$:

این ضریب همان احتمال گسیل ویژه فوتون Z ام از ویژه هسته i ام بصورت بهنجار شده می باشد که با کمک رابطه ۴ بدست می آید.

$$P_{nij} = P_{ni} \cdot P_{yij} \quad (۴)$$

جدول (۲) مربوط به اطلاعات سطح مقطع های گیراندازی نوترون های گرمایی و سطح مقطع های فوتون های گامای گسیلی عناصر موجود در کانه بوکسیت است "(JEFREPORT, 1985)"; "(IAEA, 2007)". در این جدول ستون P_{ni} نشانگر احتمال واکنش گیراندازی نوترون گرمایی در ویژه هسته است و ستون P_{yij} نشانگر احتمال گسیل فوتون های گاما با انرژی نشان داده شده در ستون ۶ است. بنابراین برای رسیدن به مقدار عددی احتمال گسیل فوتون گامای مشخص با آن انرژی در فعال سازی نوترونی باید مقدار عدد P_{ni} آن را در مقدار عددی P_{yij} آن ضرب کرد که به مقدار P_{nij} آن فوتون می رسیم که نشانگر احتمال گسیل آن از هسته است. سپس برای رسیدن به احتمال تعدادی ابتدا P_{nij} های مربوط به یک ویژه هسته را بصورت جداگانه بهنجار می کنیم و سپس مطابق رابطه ۲ ستون بهنجار شده $P_{nij}(\text{Norm})$ حاصله را در ستون بهنجار شده تعداد ویژه هسته ها P_{Ni} ضرب می کنیم. نتیجه حاصله نشانگر تعداد فوتون های گسیلی از ویژه هسته ها می باشد. اما تعداد این فوتون ها در گذر از لایه سنگ بوکسیت بر حسب ضریب رابطه ۵ کاهش خواهند یافت.

۳-۱-۳- محاسبات مربوط به ضریب سوم P_{Baux} در رابطه ۲:

مطابق با رابطه ۵ تعداد فوتون های گامای اولیه گسیلی از ویژه هسته ها

$$P_{Bauxi} = \exp[-3.2\mu_{Bauxi}(E)0.667] \quad (۵)$$

بصورت نمایی کاهش می یابند. عدد 0.667 cm مربوط به طول پیمایش فوتون گاما در درون نمونه کانه بوکسیت کروی با طول قطر میانگین 1 cm می باشد که از رابطه $\frac{4V}{S}$ بدست آمده و Mean chord length نامیده می شود. که در آن V حجم کل و S سطح کل کره کانه نمونه بوکسیت است "(Sjöstrand, 2003)". همچنین چگالی بوکسیت

جدول شماره ۲: اطلاعات مورد نیاز برای محاسبه رابطه ۲

۱. نوع ایزوتوپ و نوع قله گاما	۲. سطح مقطع گیر اندازی نوترون گرمایی بارن σ_T	۳. سطح مقطع کل (بارن) σ_{tot}	(P_{ni}) . نسبت دو سطح مقطع σ_Y/σ_{tot}	۵. فراوانی ایزوتوپ %	۶. انرژی فوتون های گامای گسیلی (MeV)	(P_{ij}) . سطوح مقطع گسیل فوتون گاما (بارن)
²⁷ Al N1	۰/۲۳۱	۱/۵۷۱۴	۰/۱۴۷	۱۰۰	۰/۰۳۰۶	۰/۰۷۹۸
²⁷ Al N2					۷/۷۲	۰/۰۴۹۳
²⁸ Si N1					۳/۵۴	۰/۱۱۹
²⁸ Si N2	۰/۱۷۷	۲/۵۲۹	۰/۰۷	۹۲/۲۳	۴/۹۳	۰/۱۱۲
²⁸ Si N3					۲/۰۹	۰/۰۳۳۱
⁵⁴ Fe N1	۲/۲۵	۵/۶۲۵	۰/۴	۵/۸۴۵	۹/۳	۰/۰۷۴۷
⁵⁶ Fe N1					۷/۶۳	۰/۶۵۳
⁵⁶ Fe N2	۲/۵۹	۱۴/۳۹	۰/۱۸	۹۱/۷۵	۷/۶۵	۰/۵۴۹
⁵⁶ Fe N3					۰/۳۵۲	۰/۲۷۳
⁴⁸ Ti N1					۱/۳۸	۵/۱۸
⁴⁸ Ti N2	۷/۸۸	۱۳/۵۶	۰/۵۸۱	۷۳/۷۲	۶/۷۶	۲/۹۷
⁴⁸ Ti N3					۶/۴۲	۱/۹۶
¹ H N1	۰/۳۳	۲۰/۸۱	۰/۰۱۶	۹۹/۹۹	۲/۲۲	۰/۳۳۳۶
⁴⁰ Ca N1					۱/۹۴	۰/۳۵۲
⁴⁰ Ca N2	۰/۴۱	۳/۲۵	۰/۱۲۶	۹۶/۹۴	۶/۴۲	۰/۱۷۶
⁴⁰ Ca N3					۴/۴۲	۰/۰۷۰۸
²⁴ Mg N1					۳/۹۲	۰/۰۳۲
²⁴ Mg N2	۰/۰۵۴	۳/۴۲	۰/۰۱۵۸	۷۸/۹۹	۰/۵۸۵	۰/۰۳۱۴
²⁴ Mg N3					۲/۸۳	۰/۰۲۴
²⁵ Mg N1					۱/۸۱	۰/۰۱۸
²⁵ Mg N2	۰/۲	۳/۴۰	۰/۰۵۸۸	۱۰	۱/۱۳	۰/۰۰۸۹۱
²⁵ Mg N3					۳/۸۳	۰/۰۰۴۱۸
³⁹ K N1					۰/۰۲۹۸	۱/۳۸
³⁹ K N2	۲/۱	۴/۳۵۷	۰/۴۸۲	۹۳/۲۶	۰/۷۷	۰/۹۰۳
³⁹ K N3					۱/۱۶	۰/۱۶
³² S N1					۰/۸۴۱	۰/۳۴۷
³² S N2	۰/۵۴۸	۱/۵۹	۰/۳۴۵	۹۴/۹۳	۵/۴۲	۰/۳۰۸
³² S N3					۲/۳۸	۰/۲۰۸

جدول شماره ۳: قسمتی از نرم افزار اکسل برای محاسبه رابطه ۲

N _{fromsample}	P _{Baux}	P _{nγ(Norm)}	P _{Ni}	Energy(MeV)	peak
$۸/۵۶ \times ۱۰^{-۷}$	۰/۰۱۶	۰/۰۳۵۹	۰/۰۰۱۵۲	۰/۰۲۹۸	KN1
$۱/۰۹ \times ۱۰^{-۴}$	۰/۰۲۱	۰/۰۱۲	۰/۰۴۳۳	۰/۰۳۰۶	AlN1
$۲/۲۵ \times ۱۰^{-۶}$	۰/۵۷	۰/۰۰۰۷۵	۰/۰۰۵۲۶	۰/۰۷۴	²⁴ MgS2
$۹/۸۷ \times ۱۰^{-۷}$	۰/۶۹	۰/۰۰۲۲	۰/۰۰۰۶۴۶	۰/۱۰۸	²⁵ MgD2
$۴/۵۹ \times ۱۰^{-۶}$	۰/۷۳	۰/۰۰۴۱۶	۰/۰۰۱۵۲	۰/۱۳۷	KD3
$۲/۸۱ \times ۱۰^{-۵}$	۰/۷۸۵	۰/۰۲۲۵	۰/۰۰۱۵۲	۰/۲۵۹	KS2
$۱/۶۸ \times ۱۰^{-۴}$	۰/۸۰۳	۰/۱۱۳	۰/۰۰۱۸۵	۰/۳۳	SS1
$۱/۳۴ \times ۱۰^{-۳}$	۰/۸۰۷	۰/۰۰۴۴	۰/۳۷۷	۰/۳۵۲	⁵⁶ FeN3
$۱/۱۲ \times ۱۰^{-۳}$	۰/۸۰۹	۰/۰۳۹	۰/۰۳۵۴	۰/۳۶	TiD1
$۳/۳۱ \times ۱۰^{-۶}$	۰/۸۴۱	۰/۰۰۰۷۵	۰/۰۰۵۲۶	۰/۵۸۵	²⁴ MgN2

اصلی است و $[1 - \exp(-\mu_p L_r)]$ عبارت است از بازده آشکارساز و L_r طول پیمایش میانگین یا Mean chord Length در آشکارساز کروی 4π استرادیان است " (Sjöstrand, 2003)". اما برای فوتون اصلی با نماد N قله ای که برای آن رخداد تولید زوج بوجود می‌آید، با احتمالی ممکن است که از دو فوتون تولیدی یکی و یا هر دو فوتون از آشکارساز فرار کنند و قله تک یا دو فراری بوجود آید. بنابراین سه رخداد با احتمالی مشخص قابل انجام است.

الف- رخداد تک فراری با احتمال گفته شده در رابطه ۶:

$$p_{Si} = 2 \left[\frac{\tau_k}{\mu_k} (1 - \exp(-\rho \mu_k L_r)) \right] \cdot \exp(-\rho \mu_k L_r) \quad (۶)$$

ب- رخداد دو فراری با احتمال گفته شده در رابطه ۷:

$$p_{Di} = \exp(-2\rho \mu_k L_r) \quad (۷)$$

پ- رخداد جذب دوباره دو فوتون در آشکارساز که این رخداد در قله اصلی N وجود دارد با احتمال گفته شده در رابطه ۸:

$$p_{Dai} = \left[\frac{\tau_k}{\mu_k} (1 - \exp(-\rho \mu_k L_r)) \right]^2 \quad (۸)$$

که در آنها $\mu_k = \mu(0.511 \text{ MeV})$ و $\tau_k = \tau(0.511 \text{ MeV})$

به ترتیب ضریب تضعیف و ضریب تولید فوتوپیک مربوط به فوتون گامای 0.511 MeV هستند "xcom". آنگاه مقدار احتمال رخداد تک فراری

قله‌های فوتوپیک حاصل از ذخیره انرژی فوتون‌ها در ماده آشکارساز سه نوع در نظر گرفته شده‌اند قله فوتوپیک اصلی با نماد N قله فوتوپیک تک فراری با نماد S و قله فوتوپیک دو فراری با نماد D و درگام اول از محاسبه پیوستار کامپتون که معمولاً در محل قله‌های تک فراری و دو فراری قرار می‌گیرد صرف‌نظر می‌شود. فرض کار طیف نگاری در این پژوهش بر اساس ساختار آشکارسازی فرونشانی کامپتون می‌باشد. اصول کار مبتنی بر شکل ۲ و بر این است که لایه اول آشکارسازی 4π استرادیان، یکی از سه آشکار ساز مورد نظر و لایه دوم نیز بصورت 4π استرادیان بر روی لایه اول استقرار یافته باشد. و ثبت تپ‌ها در تحلیلگر چند کاناله MCA بصورت ناهمفرودی انجام شود. در اینصورت، در هنگام ثبت همزمان گاماها ناشی از پراکندگی کامپتون در آشکارساز لایه اول و آشکارساز لایه دوم، خروجی در تحلیل گر چند کاناله MCA نخواهیم داشت و خروجی تنها برای فوتو پیک ها خواهد بود و بنابراین زمینه طیف ناشی از اثر کامپتون و پیوستار کامپتونی به مقدار مناسبی حذف خواهند شد.

۲-۳ - محاسبات ذخیره انرژی فوتون‌های گامای گسیل شده از

نمونه کانه و رسیده به آشکارسازهای NaI ، HPGe و BGO :

در محاسبه ارتفاع قله‌های اصلی با نماد N ضریب احتمال تولید فوتوپیک $P_{\text{det}} = \frac{\tau}{\mu} [1 - \exp(-\mu_p L_r)]$ است. μ ضریب تضعیف، τ سطح مقطع رخداد فوتوالکتریک و نسبت $\frac{\tau}{\mu}$ احتمال تولید فوتوپیک در آن انرژی ویژه قله -

$$G = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left[-\frac{(E-m)^2}{2\sigma^2}\right] \quad (12)$$

در آن m محل قله در طیف است که توزیع نرمال به مرکزیت آن رسم می‌گردد و σ انحراف معیار است که براساس رابطه ۱۳ به FWHM هر آشکارساز وابسته است.

$$FWHM = (2\sqrt{2\ln 2})\sigma \quad (13)$$

همچنین FWHM هر آشکارساز نیز در هر انرژی مربوط به یک قله در طیف را می‌توان با رابطه شماره ۱۴ بدست آورد.
"(Abdi Saraya et al., 2021)"; "(Pelowitz, 2005)".

$$FWHM = a + b\sqrt{E + cE^2} \quad (14)$$

بنابراین می‌توان با رابطه شماره ۱۵ انحراف معیار σ را برای هر انرژی محاسبه و در رابطه توزیع نرمال بکاربرد.

$$\sigma = \frac{FWHM}{2\sqrt{2\ln 2}} = \frac{a + b\sqrt{E + cE^2}}{2.355} \quad (15)$$

در رسم نمودارها با نسبت دادن یک توزیع گوسی به قله‌ها برای آشکارساز NaI با مطالعه مراجع "Abdi Saraya et al. (2022)" و "Hakimabad et al. (2007)" مقادیر ثابت از مرجع "Hakimabad et al. (2007)" برای آشکارساز با طول ۳ اینچ بکار برده شده و عبارتند از:
 $a = -0.00789$ $b = 0.06769$ $c = 0.21159$

و برای آشکارساز هم محور HPGe با طول ۲/۶۵۵ اینچ مقادیر ثابت عبارتند از "Eftekhari et al., 2014":
 $a = 5.87 \times 10^{-4}$ $b = 3.95 \times 10^{-4}$ $c = 7.467$

و برای آشکارساز BGO با مطالعه مراجع "mutowong et al. (2023)" و "Lohrabian et al. (2021)" مقادیر ثابت از مرجع "Lohrabian et al. (2021)" برای آشکارساز با طول ۳ اینچ بکار برده شده عبارتند از:

$$a = 1.56 \times 10^{-3} \quad b = 0.1216 \quad c = 2.455$$

P_S و رخداد دو فراری P_D بدین ترتیب بدست می‌آیند: $P_S = \frac{P_{Si}}{P_{tot}}$ و $P_D = \frac{P_{Di}}{P_{tot}}$ که در آنها

$$P_{tot} = P_{Si} + P_{Di} + P_{Dai}$$

است. بنابراین میزان ارتفاع قله‌های اصلی و تک فراری و دو فراری (photo peak height) بر اساس رابطه ۱ بترتیب زیر محاسبه می‌شود:
الف- ارتفاع قله‌های اصلی با رابطه ۹:

$$Ph_N = N_{fs} \frac{\tau_\gamma}{\mu_\gamma} [1 - \exp(-\rho \mu_\gamma L_r)] \quad (9)$$

ب- ارتفاع قله‌های تک فراری با رابطه ۱۰:

$$Ph_s = N_{fs} \frac{\kappa_\gamma}{\mu_\gamma} P_s \frac{\tau_s}{\mu_s} [1 - \exp(-\rho \mu_s L_r)] \quad (10)$$

پ- ارتفاع قله‌های دو فراری با رابطه ۱۱:

$$Ph_D = N_{fs} \frac{\kappa_\gamma}{\mu_\gamma} P_D \frac{\tau_D}{\mu_D} [1 - \exp(-\rho \mu_D L_r)] \quad (11)$$

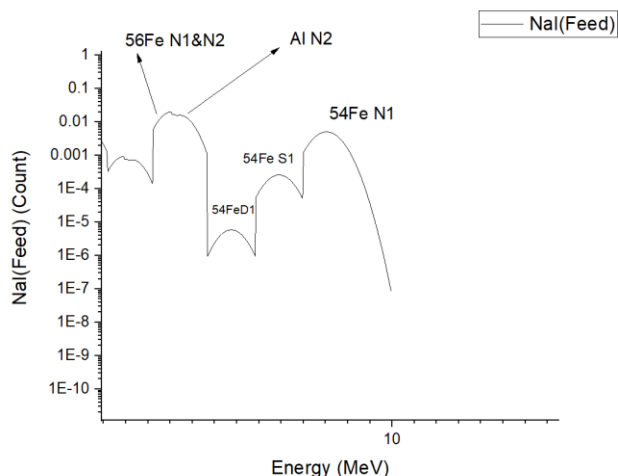
که در آنها N_{fs} مطابق رابطه ۲ به معنای تعداد فوتون‌های گامای گسیلی یک ویژه هسته از سنگ نمونه و اندیس S در μ و τ به معنای تک فراری و اندیس D در آنها به معنای دو فراری و اندیس γ در آنها به معنای فوتون گسیلی اولیه است. در محاسبه ارتفاع قله‌های تک فراری و دو فراری عوامل مهم عبارتند از:

۱- احتمال تولید زوج که با نسبت $\frac{\kappa_\gamma}{\mu_\gamma}$ انرژی فوتون گامای اولیه ورودی به آشکارساز بیان می‌شود.

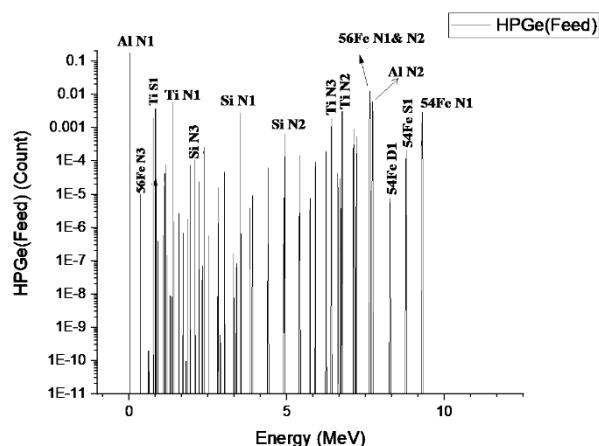
۲- احتمال تولید فوتوپیک فوتون گامای با انرژی،
 $(E_\gamma - 0.511) \text{ MeV}$ در حالت تک فراری با نماد $\frac{\tau_s}{\mu_s}$ و احتمال تولید فوتوپیک فوتون گامای با انرژی،
 $(E_\gamma - 1.022) \text{ MeV}$ در حالت دو فراری با نماد $\frac{\tau_D}{\mu_D}$ همچنین تمام ضرایب μ ، κ و از مرجع "xcom" بدست آمده‌اند.

۳-۳ محاسبات برای رسیدن به شکل طیف طبیعی یا پیچش Folding (رسم منحنی‌های نرمال قله‌ها):

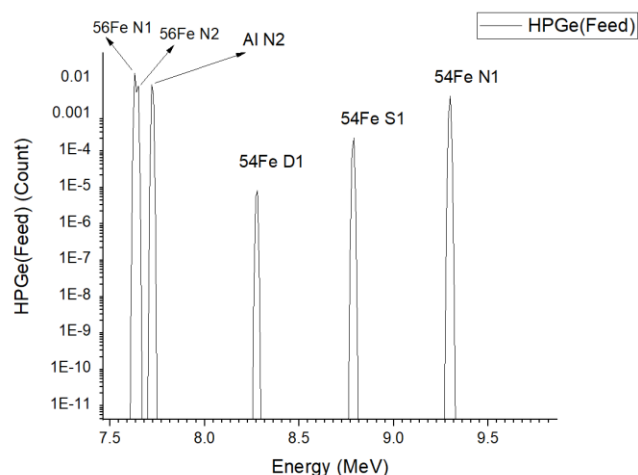
با انجام محاسبات گفته شده برای سه آشکارساز NaI، HPGe و BGO ارتفاع همه قله‌های اصلی N و فرعی، تک فراری S و دو فراری D را بدست آورده و برای تمام عناصر موجود در کانه نمونه بوکسیت با عیار کم، عیار زیاد و عیار میانگین محاسبه و سرانجام طیف ارتفاع قله - انرژی، میله‌ای شکل را با نرم افزار Origin رسم می‌کنیم. آنگاه با نسبت دادن یک توزیع نرمال به هر قله طیف میله‌ای می‌توانیم بسیار به شکل اصلی طیف نزدیک شویم و همپوشانی قله‌ها و یا جدا بودن آنها را ملاحظه کرده و آشکارساز مناسب برای تعیین Al و Si معلوم گردد.
رسم منحنی نرمال بر اساس توزیع نرمال، رابطه شماره ۱۲ است "(Tsoulfanidis, 2015)".



نمودار ۴: شکل طیف تحلیلی برای آشکارساز NaI در ناحیه محدود تر



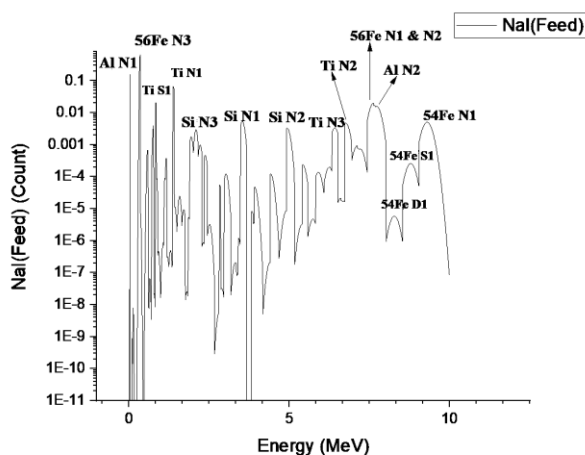
نمودار ۵: شکل طیف تحلیلی برای آشکارساز HPGe



نمودار ۶: شکل طیف تحلیلی برای آشکارساز HPGe در ناحیه محدودتر

۴- برآورد تحلیلی طیف گاما برای بوکسیت‌های نوع عیار میانگین مربوط به آشکارسازهای NaI ، HPGe و BGO :

نمودارهای ۳ تا ۸ طیف‌های تحلیلی نیمه لگاریتمی فوتون‌های گامای آنی گسیلی حاصل از فعال‌سازی نوترونی نمونه کانه بوکسیت با عیار میانگین معدن کارخانه آلومینای جاجرم به ترتیب برای آشکارساز NaI ، HPGe و BGO رانسان می‌دهند. با مقایسه این سه نمودار می‌توان آشکارساز مناسب برای تعیین Al و Si را پیدا کرد که از نظر تفکیک‌پذیری و شکل تقارنی قله‌ها آشکارساز HPGe اولین و آشکارساز NaI دومین است اما از این نظر که ارتفاع قله آشکارساز NaI در حالت میانه است و با توجه به قیمت و عدم محدودیت اندازه بلور آشکارساز NaI می‌تواند گزینه مناسبی برای این کار باشد. زیرا این پژوهش در راستای تعیین درصد‌های Al و Si کانه بوکسیت بر روی نوار نقاله فرآیند تولید کارخانه آلومینای جاجرم انجام شده است. بنابراین اگر بتوان سطح بیشتری از روی نمونه را برای ثبت فوتون‌های گاما پوشش داد دقت کار بالاتر می‌رود و این مورد، نیاز به یک بلور آشکارسازی بزرگی دارد که بلور آشکارساز NaI در این مورد در اندازه‌های بزرگتری نسبت به بلور آشکارساز HPGe در دسترس می‌باشد. بنابراین در پژوهش‌های دیگری که اندازه نمونه کوچک تر است می‌توان آشکارساز HPGe را بعنوان گزینه نخست برگزید.



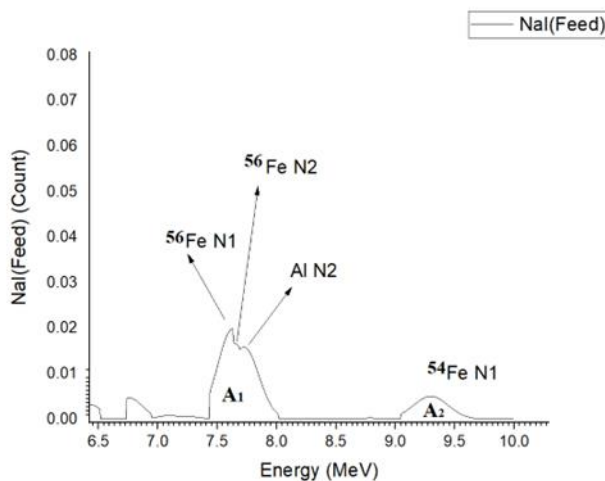
نمودار ۳: شکل طیف تحلیلی برای آشکارساز NaI

در دو آشکارساز دیگر ضروری و در آشکارساز یدور سدیم عملی و در آشکارساز BGO غیر عملی یا بسیار دشوار به نظر می‌رسد.

۶- تشکر و قدردانی:

بدینوسیله از اعضاء محترم هیئت مدیره و کارکنان قسمت تحقیق و توسعه و آزمایشگاه مرکزی کارخانه آلومینای جاجرم به خاطر همکاری، پشتیبانی و همچنین حمایت های مالی و تجهیزاتی تشکر و قدردانی داریم.

۷- پیوست ۱. مثالی از محاسبه درصد Al از طیف گامای گسیلی ثبت شده توسط آشکارساز NaI بصورت غیر مستقیم:



نمودار پ ۱: شکل طیف تحلیلی آشکارساز NaI در ناحیه محدود تر بصورت خطی

نمودار (پ ۱) مربوط به قسمت سمت راست طیف تحلیلی آشکارساز NaI حاصل از پرتوهای گامای ناشی از فعال سازی نوترونی نمونه کانه بوکسیت با عیار میانگین است که برای محاسبه درصد آلومینیوم مورد استفاده قرار می‌گیرد. مراحل کار در این پیوست بترتیب حروف الفبا ارائه می‌شوند:

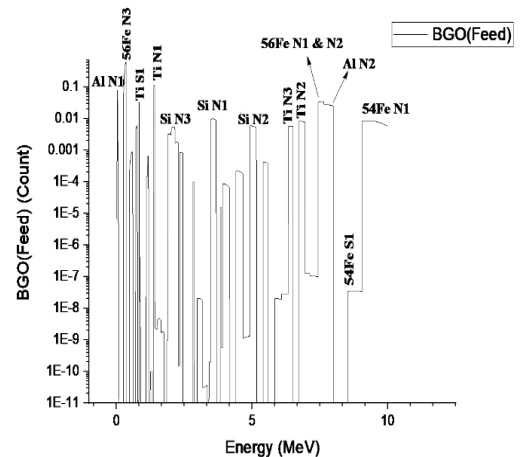
الف- محاسبه سطح زیر قله آمیخته (^{27}Al و $^{56}\text{Fe N1\& N2}$) $A_1 =$ سطح زیر قله ^{54}Fe $A_2 =$

$$A_1 = 0.109 \quad A_2 = 0.03$$

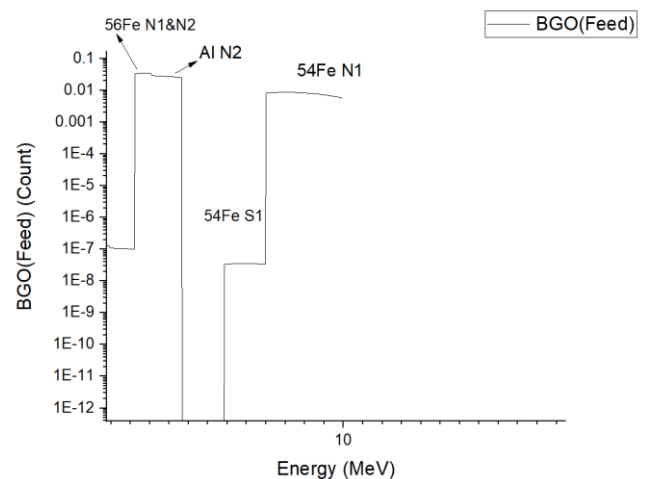
ب- فرض بر این است که درصد ^{54}Fe با استفاده از روش مقایسه با استاندارد برابر 0.91 باشد.

پ- محاسبه مقدار آهن کل در نمونه بوکسیت با استفاده از درصد فراوانی طبیعی ^{54}Fe که برابر 0.05845 است و با استفاده از رابطه پ ۱ .

$$\text{پ ۱} \quad (\%0.05845).(\%\text{Fe}) = \%0.91 \Rightarrow \text{Fe} = \%15.57$$



نمودار ۷: شکل طیف تحلیلی برای آشکارساز BGO



نمودار ۸: شکل طیف تحلیلی برای آشکارساز BGO در ناحیه محدودتر

۵- نتیجه گیری:

با مشاهده و مقایسه نمودارهای تحلیلی طیف میله‌ای با نمودارهای پیچش یافته که به شکل واقعی طیف بسیار شبیه تر هستند، برای مثال با مقایسه نمودار ۲ با نمودار ۳ می‌توان محل دقیق قله‌های فوتوپیک مورد نظر را بدست آورد. همچنین همپوشانی و در هم رفتگی قله‌ها نیز بخوبی آشکار میشوند. برای مثال در قله Al N1 در نمودار ۲ همپوشانی قله K N1 توسط قله Al N1 قابل مشاهده است و باید در ارتفاع قله Al N1 تصحیحی بابت قله پتاسیم انجام شود. همچنین در هم رفتگی قله‌های Al N2 و ^{56}Fe در نمودار ۳ و ۲ را می‌توان در سمت راست طیف مشاهده کرد و با کم کردن تعداد فوتون‌های آهن از طریق ^{54}Fe از این قله درهم رفته می‌شود تعداد فوتون‌های صحیح قله Al N2 را بدست آورد و درصد Al را تعیین کرد (پیوست ۱). البته این کار تقریباً در آشکارساز HPGe بدلیل تفکیک مناسب این دو قله مورد نیاز نیست. اما

ت- محاسبه درصد ^{56}Fe کل در نمونه با استفاده از درصد آهن در قسمت پ ۱ و درصد فراوانی طبیعی آن که برابر 0.91754 است وبا استفاده از رابطه پ ۲.

$$^{56}\text{Fe} = (0.91754) \cdot \%15.57 = \%14.286 \quad \text{پ ۲}$$

ث- محاسبه درصد آهن ^{54}Fe فرضی متناسب با سطح زیر قله آمیخته A_1 وبا استفاده از رابطه پ ۳.

$$^{54}\text{Fe}(A_1) = (\%^{54}\text{Fe}) \cdot \frac{A_1}{A_2} = (\%0.91) \cdot \frac{0.109}{0.03} = \%3.306 \quad \text{پ ۳}$$

ج- محاسبه درصد آهن ^{56}Fe فرضی متناسب با سطح زیر قله آمیخته A_1 با استفاده از نسبت فراوانی طبیعی ^{56}Fe به ^{54}Fe با استفاده از رابطه پ ۴:

$$^{56}\text{Fe}(A_1) = (\%^{54}\text{Fe}) \cdot \frac{\%^{56}\text{Fe}}{\%^{54}\text{Fe}} = \%3.306 \cdot \frac{\%0.91754}{\%0.05845} = \%51.9 \quad \text{پ ۴}$$

چ- محاسبه میزان درصد Al متناسب با زیر سطح آمیخته A_1 با استفاده از رابطه پ ۵:

$$A_1 \equiv [2(\%^{56}\text{Fe}) + \%Al] = [2(\%14.286) + \%Al] = \%51.9 \quad \text{پ ۵} \\ \Rightarrow Al = \%23.328$$

NaI,LYSO, and HPGe detectors in a preclinical mini-CT scanner: Monte Carlo simulation and practical experiment. Radiation Physics and Chemistry. Volume 189 December 2021, 109

Mutuwong.C Bootjomchai.C Chaiphaksa.W yonphan.S Kothan.S Kaewkhao.j ;2023 ResponseFunction and photon interaction of LaBr₃: Ce and BGO scintillation Detectors By monte carlo simulation.Optik ;Volume 289 October 2023, 171161666

N.G. Sjöstrand : 2003 on the average chord length . chalmers university of technology department of reactor physics

Pelowitz, D.B., 2005. MCNP-X TM User's Manual, Version 2.5.0. LA-CP-05e0369. Los Alamos National Laboratory

Shayan.H,Krycki.K,Doemeland.M,Lange-Hengerman.M ;2022 : PGNAAspectral Classification of Metal with Density Estimations: arXiv:2208.13836 8pages Volume 808, 1 February 2016, Pages 123-127

Safari. S.A *, Moussavi Zarandi. S.A., Jafar. A,2016 . Neutron Activation and Layout Optimization Experiments by MCNP Code for the Main Elements of 77-1577-9315-Cement; J. of Nucl Sci. and Tech: 77

Tsoufanidis.N, Landsberger.S 2015 Meauserment Detection of Radiation4th Edition, CRC Press Taylor & Francis Group

مراجع:

Abdi Saraya.A, Zaki Dizajib.H,*, Taheri Balanojia.S.M: 2021 . Comparison of conversion factor methods in spectrometric dosimetry sys-tems based on NaI(Tl) scintillation detectors; Radiation Physics and Engineering 2022; 3(4):35–41

Alfassi. Z B&Chien Chung ,1995 - Prompt Gamma Neutron Activation Analysis. CRC Press, Inc

Borsaru & Holmes 1981 : Alumina in Bulk Bauxite Samples 241-253

Doostmohammad.V,Sardari.D,Motie-Nasrabadi.A : 2010 : Combined application of Monte Carlo method and neural networks to simulate qualitative prompt gamma neutron activation analysis. Journal of Radioanalytical and Nuclear chemistry. 283(2):403-407

Eftekhari Zadeh.E, Fegghi. S. A. H, Bayat. E,2 and. Roshani. G. H 2014; Gaussian Energy Broadening Function of an HPGe Detector inthe Range of 40 keV to 1.46 MeV; Journal of Experimental PhysicsVolume Article ID 623683, 4 pages

Ghal-Eh.N, Ahmadi.P, Doost-Mohammadi.V ; 2016 : A quantitative PGNAAs study for use in aqueous solution measurements using Am–Be neutron source and BGO scintillation detector;Journal of NIMA Volume 808 1 February 2016, Pages 123-127

Hakimabad H M, Panjeh H, Vejdani-Noghreiyani A: (2007) Evaluation the nonlinear response function of a 3*3 in NaI scintillation detector for PGNAAs applications: Applied Radiation and Isotopes 65 918–926

Havenith.A, Kettler.J, Krycki.K, Wangnick.M, Bo Fu, Dürr.M, Coquard.L, Nordhardt.G, Hummel.J, Veltkamp.T, Wegener.S, Köble.T, Schumann.O. Quantum- Non-destructive scanning of waste packages for material characterization: 2020 EPJ Web of Conferences 225, 06013 (2020)

<https://physics.nist.gov/PhysRefData/Xcom/htmlxcom1.html>

IAEA, 2007.Printed by the IAEA in Austria January 2007 STI/PUB/1263 database of prompt gamma rayes from slow neutron capture for elemental analysis

JEFREPORT :1985 NEA Data Bank . able of Simple Integral Neutron Cross-Section Data from JEF-1, ENDF/B-V, ENDL-82,JENDL-2, KEDAK-4, RCN-3.

Knoll. G F, 2010; Radiation detection and measurement. 4Edition, John Wiley & Sons, Inc.

Kogo. B.E, Gajere. E.N, Ogunmola. J.K and Ogbole. J.O ,2009 : Neutron Activation Analysis of Soil Samples from Different Parts of Abuja Metropolis; IDOSI Publications. Middle-East Journal of Scientific Research 4 (4): 254-262, 2009

Lohrabian.V, Kamali-Asl.A,*, Ghadiri Harvani.H Hosseini Aghdam.S.R, Arabi.H, Zaidi.H: 2021; Comparison of the X-ray tube spectrum measurement using BGO,