

THIẾT KẾ CẤU HÌNH ĐO HỆ PHÂN TÍCH THAN BẰNG KỸ THUẬT PGNAA TRÊN PHẦN MỀM MÔ PHỎNG MOCA

NGUYỄN THANH TÙY, KHUÔNG THANH TUẤN, VŨ TRUNG TÂN

Viện Khoa học và Kỹ thuật Hạt nhân

Thành phần và hàm lượng các nguyên tố trong than là thông số có ý nghĩa quan trọng trong phân tích, điều tra, khai khoáng. Có nhiều phương pháp phân tích khác nhau để xác định hàm lượng các nguyên tố như phân tích huỳnh quang tia X (XRF), khối phổ kế hấp thụ nguyên tử (AAS), phân tích kích hoạt neutron - gamma tức thời (PGNAA)... trong đó PGNAA cho đáp ứng nhanh và hiệu quả. Nhóm nghiên cứu đã sử dụng chương trình mô phỏng MOCA dựa trên mã nguồn MCNP để thiết kế một cấu hình PGNAA off-belt dùng nguồn neutron Cf-252 và đầu dò BGO cho đối tượng than. Sự phù hợp giữa các kết quả xác định thành phần trên mẫu than thu được so với kết quả phân tích hóa cho thấy khả năng chế tạo và ứng dụng hệ thiết bị PGNAA off-belt công nghiệp phục vụ công tác phân tích hiện trường.

Từ khóa: PGNAA, MOCA, thiết kế

CONFIGURATION DESIGNING OF PGNAA OFF-BELT COAL ASH ANALYZER BASED ON MOCA SIMULATION SOFTWARE

Summary

Elemental composition of coal material is one of important parameters in the analysis, investigation and mining. There are many different methods that can be used for elemental composition analysis such as XRF, AAS, PGNAA... In these methods, PGNAA is found to be a quick and useful technique. In this work, the MOCA simulation software based on MCNP code was used to design a configuration off-belt PGNAA using Cf-252 neutron source and the BGO detector for coal. The results are in good agreement with those obtained by chemical analysis, showing the ability to manufacture PGNAA off-belt commercially.

I. Giới thiệu chung về kỹ thuật phân tích PGNAA và chương trình mô phỏng MOCA

1. Kỹ thuật phân tích PGNAA

PGNAA là kỹ thuật phân tích bằng phương pháp kích hoạt neutron-gamma tức thời, cho phép phân tích nhanh, kết quả khá chính xác, không phải gia công mẫu, quá trình phân tích không bị ảnh hưởng của điều kiện môi trường, và phân tích được hầu hết các nguyên tố trong bảng tuần hoàn... Nguyên lý cơ bản của PGNAA là khi chiếu neutron chậm (nhiệt và trên nhiệt) vào mẫu đo, xảy ra các phản ứng bắt (n, γ) hoặc tán xạ (n, n') neutron, tạo thành các hạt nhân ở trạng thái kích thích và phát tia gamma tức thời ($10^{-13} \div 10^{-15}$ giây) để trở về trạng thái cơ bản. Cường độ tia gamma phụ thuộc vào năng

lượng của neutron, thành phần và hàm lượng các nguyên tố có trong mẫu. Khi thông lượng của nguồn neutron không đổi (trường hợp dùng nguồn đồng vị hoặc với các thông số về dòng, điện áp xác định khi dùng máy phát neutron), cường độ tia gamma chỉ còn phụ thuộc vào hàm lượng của các nguyên tố và đặc trưng cho các nguyên tố có trong mẫu bị chiếu [1-4].

Căn cứ vào năng lượng bức xạ gamma đặc trưng ta có thể nhận diện được các nguyên tố cấu thành độ tro của than, việc xác định hàm lượng các nguyên tố trong mẫu phân tích dựa vào cường độ hay diện tích đỉnh phổ gamma. Dùng kỹ thuật PGNAA phân tích than (phân tích nguyên tố, độ tro...) để đánh giá chất lượng than của các vỉa than và đồng than trong lĩnh vực thăm dò, khai thác và chế biến than.

2. Chương trình mô phỏng MOCA

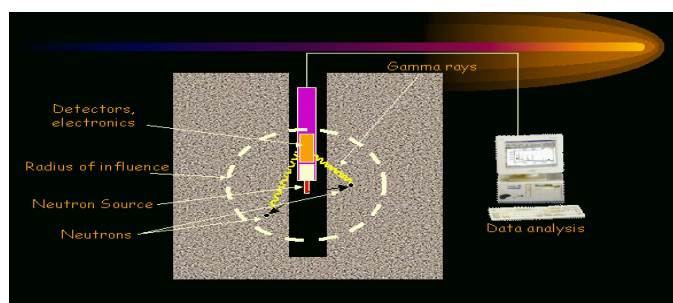
MOCA là bộ chương trình mô phỏng quá trình tương tác của neutron với vật chất sử dụng phương pháp Monte - Carlo, được viết để chạy trên PC dựa trên mã nguồn MCNP.

MCNP (Monte - Carlo N-Particle), MOCA là phần mềm ứng dụng phương pháp Monte - Carlo mô phỏng các quá trình vật lý mang tính thống kê, sử dụng các thư viện số liệu hạt nhân của các quá trình tính toán, gieo số ngẫu nhiên tuân theo các quy luật phân bố, ghi lại sự kiện lịch sử của một hạt phát ra từ nguồn đến hết thời gian sống của nó. Chương trình MCNP, MOCA chủ yếu mô tả các quá trình vật lý hạt nhân của neutron và photon dựa trên các phương trình toán học.

MOCA có khả năng mô phỏng các quá trình vận chuyển và tương tác của neutron với các nguyên tố khác nhau, ứng với các năng lượng neutron khác nhau, sử dụng bộ dữ liệu chuẩn về các tham số vật lý như: tiết diện phản ứng theo năng lượng, suất phát gamma, số liệu chi tiết về các loại nguồn neutron và gamma... trang bị sẵn trong chương trình dưới dạng bộ thư viện chuẩn. Bộ thư viện này cũng có thể cập nhật, thêm mới hoặc sửa đổi khi cần thiết [5, 6].

II. Thiết kế hệ đo bằng chương trình mô phỏng

1. Cấu hình đo cơ bản của kỹ thuật phân tích PGNA



Hình 1: vùng xảy ra tương tác prompt gamma quanh đầu thu hạt nhân

Từ hình 1 ta thấy, hệ đo sử dụng kỹ thuật PGNA có ảnh hưởng liên quan đến vị trí đặt nguồn, mẫu đo xung quanh nguồn và đầu đo thu tín hiệu.

Vị trí đặt nguồn (khi đo) phải đặt cố định ở một vị trí trong thùng chứa mẫu phân tích. Trong phép đo phân tích dùng kỹ thuật PGNA thì loại nguồn đồng vị phát neutron phổ biến được dùng là nguồn Cf-252 với suất lượng cỡ 10^6 n/giây đến 10^7 n/giây; Đầu dò hạt nhân sử dụng thường là loại BGO để có thể ghi nhận được các bức xạ gamma

có năng lượng cao từ vài trăm keV đến 10 MeV, vì bức xạ gamma sinh ra từ phản ứng bắt neutron nhiệt (n, γ) phần lớn có năng lượng cao trên vài MeV. Khi mô phỏng, sử dụng 2 loại đầu dò BGO để thí nghiệm: kích thước 2"x2" và 3"x3"; loại BGO 3"x3" có hiệu suất ghi tốt hơn nhưng giá thành lại cao hơn.

Mẫu đo được bố trí xung quanh nguồn, kích thước mẫu đo phải đảm bảo đủ vùng bão hòa neutron - gamma, nguồn neutron có suất lượng càng lớn thì kích thước mẫu đo càng lớn.

2. Các thông số để thiết kế cấu hình đo PGNA bằng chương trình mô phỏng MOCA

Các thông số đầu vào được nạp vào chương trình mô phỏng MOCA là:

- Nguồn phát neutron Cf-252 với suất lượng 10^6 n/giây và 10^7 n/giây, đầu dò BGO kích thước 2"x2" hoặc 3"x3", mẫu than phân tích là loại than có khối lượng riêng từ 0,89 g/cm³ đến 3 g/cm³.

- Vỏ hình trụ của thiết bị: mô phỏng với polyetylen. Khối điện tử chức năng gắn bên trong thiết bị.

- Các giá đỡ giá nguồn bằng polyetylen.

- Tấm ngăn cách tia gamma trực tiếp làm bằng chì.

- Vị trí, kích thước, thành phần hóa học và mật độ khối của vật liệu mẫu cần đo (ở đây là các mẫu than có độ tro khác nhau).

Trong tính toán mô phỏng các yếu tố chính được xét đến là:

- Mô phỏng để lựa chọn việc sử dụng các nguồn neutron khác nhau, đó là nguồn Cf-252 suất lượng 10^6 n/giây và nguồn Am - Be suất lượng 10^7 n/giây.

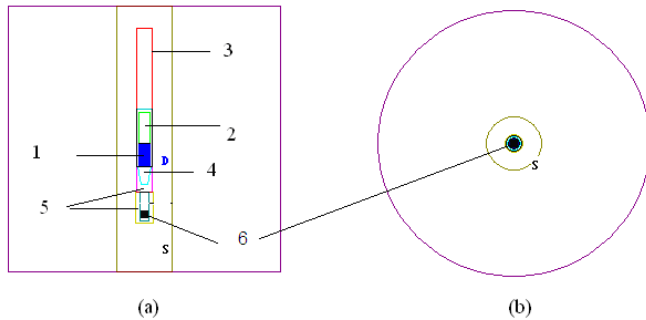
- Mô phỏng chiều dày bão hòa của mẫu than cần phân tích đối với 2 loại nguồn neutron trên.

- Sự thay đổi của phổ gamma tức thời thu được khi thay đổi thành phần hóa của các mẫu than.

Chức năng chính của chương trình là mô phỏng quá trình vận chuyển và tương tác của neutron trong mẫu than, nhằm đoán nhận trước các thông số cần thiết đặc trưng về phổ gamma tức thời thu nhận được từ phản ứng của neutron với các nguyên tố có mặt trong than đóng vai trò quyết định đến độ tro của than. Thông qua kết quả của quá trình mô phỏng này, ta cũng có thể đoán nhận được khả năng phân tích của hệ khi đưa vào các thông số ràng buộc cho trước như: suất lượng của nguồn neutron, loại nguồn neutron, ảnh hưởng của cấu hình thiết bị đến khả năng và độ chính xác của phép phân tích.

Các nguyên tố Ca, Fe, Si, Al, Ti trong mẫu than có tiết diện bắt neutron nhiệt lớn, vì vậy các neutron phát ra từ nguồn đồng vị cần được nhiệt hóa để tăng cường độ bức xạ gamma tức thời phát ra từ phản ứng (n, γ) . Nguồn neutron thường được bao quanh bởi khối polyetylen nhằm làm tăng thông lượng neutron nhiệt đi vào mẫu.

Hình 2 là cấu hình của hệ phân tích độ tro của than sử dụng kỹ thuật PGNAA tức thời.



Hình 2: cấu hình hệ phân tích độ tro sử dụng phương pháp PGNAA

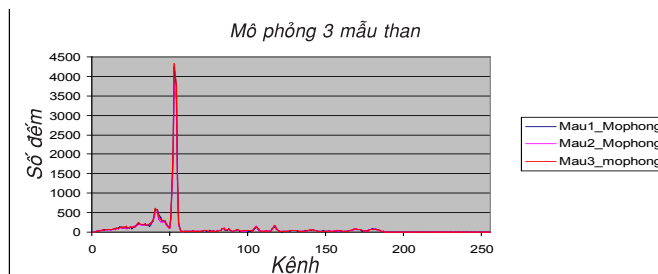
Chú thích: (a) mặt cắt đứng; (b) tiết diện; 1 - đầu dò BGO; 2 - khối điện tử chức năng; 3 - vỏ bằng polyetylen; 4 - cốc chì để chắn tia gamma trực tiếp từ nguồn; 5 - ổ đỡ bằng polyetylen; 6 - nguồn neutron

Một số mẫu than đã được phân tích mô phỏng được liệt kê trong bảng 1.

Bảng 1: hàm lượng (%) các oxit có trong tro than giả định để phân tích mô phỏng

Mẫu than phân tích	Đơn vị	Mẫu than		
Độ tro thô	%	Mẫu số 1	Mẫu số 2	Mẫu số 3
Hàm lượng oxit trong tro than				
SiO ₂	%	52,43	53,16	52,55
Al ₂ O ₃	%	20,02	19,71	20,15
Fe ₂ O ₃	%	19,41	14,86	14,53
TiO ₂	%	0,49	0,52	0,65
K ₂ O	%	4,05	3,66	3,44
Na ₂ O	%	0,68	0,53	0,49
CaO	%	1,12	1,61	2,95
MgO	%	1,06	2,13	2,24
P ₂ O ₅	%	0,30	0,42	0,34
SO ₃	%	2,07	1,71	1,21

Từ hàm lượng các nguyên tố trong tro than như ở bảng trên, qua chương trình MOCA thu được phổ bức xạ gamma tức thời (hình 3).



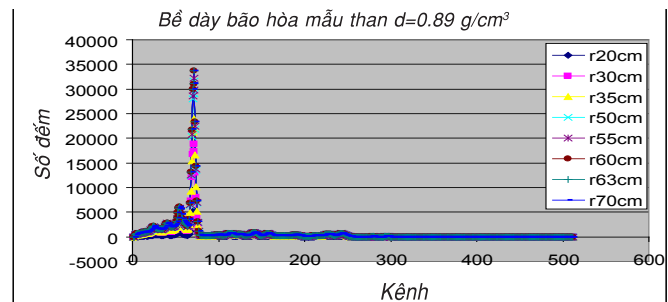
Hình 3: phổ thu được qua mô phỏng của 3 mẫu than

Kết quả mô phỏng: thu được hình dạng phổ với năng lượng các tia gamma đặc trưng của các nguyên tố xuất hiện ở các kênh xác định.

Trong kỹ thuật PGNAA sử dụng chủ yếu là neutron nhiệt nên phải làm chậm neutron nhanh phát ra từ nguồn. Đây là yếu tố rất quan trọng ảnh hưởng trực tiếp đến hiệu suất của phép phân tích. Nếu neutron nhanh phát ra từ nguồn được nhiệt hóa tối đa thì hiệu suất sinh bức xạ gamma lớn, do đó độ nhạy kết quả phân tích sẽ cao. Trong chương trình mô phỏng đã sử dụng lớp polyetylen để nhiệt hóa neutron. Kết quả tính toán cho thấy, bề dày tối ưu của lớp polyetylen là 10 cm.

Neutron đi ra khỏi bề mặt thùng chứa mẫu có xác suất đáng kể, vì vậy cần có một loại vỏ thùng có khả năng phản xạ neutron được bao quanh bề mặt thùng chứa mẫu, hiện tượng phản xạ ngược sẽ làm tăng thông lượng neutron đi vào mẫu. Ngoài ra, vành phản xạ này còn có tác dụng che chắn, ngăn neutron ra môi trường đảm bảo an toàn bức xạ cho người làm việc và giảm khối lượng mẫu than phân tích.

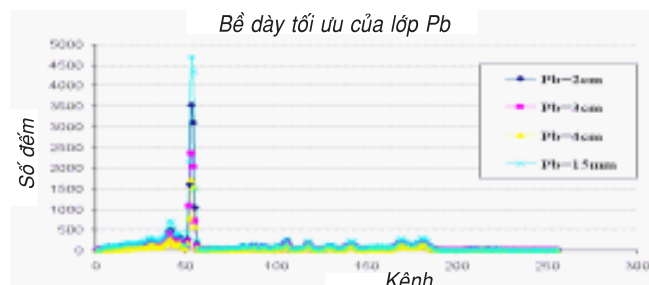
Thông qua chương trình mô phỏng MOCA đã xác định được bề dày bảo hòa gamma của thùng chứa mẫu, kết quả được biểu diễn trên hình 4.



Hình 4: kết quả mô phỏng xác định bề dày bảo hòa

Đối với mẫu than có khối lượng riêng 0,85 g/cm³, mô phỏng MOCA thu được bán kính bảo hòa là R = 60 cm.

Ngoài ra bề dày của lớp Pb có tác dụng chắn các neutron (gamma) trực tiếp từ nguồn tới đầu dò trong cấu hình cũng được tính toán trong quá trình mô phỏng để tìm được cấu hình tối ưu (hình 5).

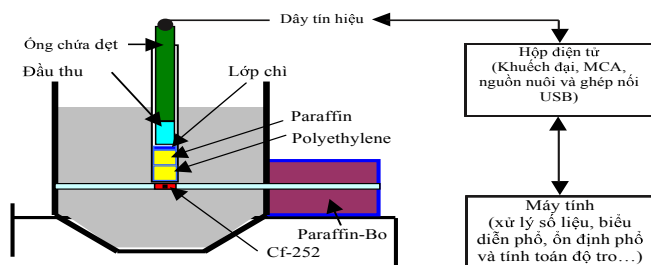


Hình 5: bề dày lớp Pb chắn neutron (gamma) đi thẳng từ nguồn tới đầu dò

Qua mô phỏng cho thấy, bề dày tối ưu của lớp chì che chắn neutron (gamma) đi trực tiếp từ nguồn đến đầu dò là 15 mm.

3. Thiết kế cấu hình đo PGNAA bằng chương trình MOCA

Từ các thông số tính được bằng chương trình mô phỏng cấu hình thử nghiệm hệ PGNAA off-belt được thiết kế như trên hình 6, hệ đo này sử dụng đầu dò BGO 2"x2", và nguồn Cf-252 (2×10^6 n/giây).



Hình 6: cấu hình hệ phân tích độ tro than bằng phương pháp PGNAA

III. Hệ đo thực nghiệm

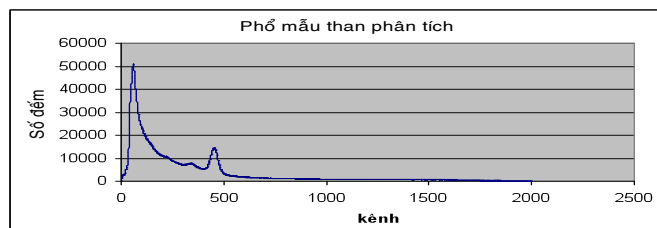
Dựa trên cấu hình tính toán thiết kế, hệ PGNAA off-belt thực nghiệm được xây dựng như trên hình 7.



Hình 7: phần cơ của hệ thiết bị đo gồm hộp chứa nguồn và thùng đo mẫu

Qua mô phỏng MOCA, với việc đưa ra các mẫu than có khối lượng riêng khác nhau sẽ thu được kích thước bồn hòa khác nhau. Thực nghiệm với 3 loại than: $0,85 \text{ g/cm}^3$, $1,5 \text{ g/cm}^3$ và 3 g/cm^3 thu được 3 kích thước về bán kính bồn hòa là 60 cm, 47 cm và 35 cm. Tuy nhiên, than ở vùng Quảng Ninh có giá trị trong khoảng từ $1,5-2 \text{ g/cm}^3$, cho nên khi chế tạo thùng đo cho hệ thiết bị, chúng tôi đã chọn bán kính thùng đo là 50 cm. Kết quả mô phỏng cũng đã xác định được tổng bề dày lớp polyetylen và bề dày lớp chì che chắn bức xạ từ nguồn đến đầu thu BGO là 15 cm. Thực nghiệm cũng đã chọn được lớp polyetylen là 10 cm và lớp chì dày 1,2 cm.

Qua mô phỏng MOCA còn cho ta thấy được sự tối ưu về cấu hình của hệ đo. Sự tối ưu hóa về cấu hình trong mô phỏng cũng rất phù hợp với kết quả thực nghiệm.



Hình 8: phổ thu được từ thực nghiệm

Hình dạng phổ thu được qua mô phỏng và phổ thu được từ thực nghiệm có sự tương quan tuyến tính cho thấy kết quả phân tích thực nghiệm đáng tin cậy.

Qua việc mô phỏng và quá trình thực nghiệm cho 2 kết quả có sự tương quan tốt, từ đó cho thấy mức độ tin cậy của thiết bị phân tích prompt - gamma đã được nghiên cứu chế tạo.

Cấu hình mô phỏng đã được đưa vào triển khai trong thực tế cho kết quả tốt, vấn đề an toàn bức xạ cũng được kiểm tra đạt yêu cầu, phù hợp với các kết quả cho ra từ cấu hình mô phỏng bằng chương trình MOCA.

IV. Kết luận

Chương trình mô phỏng cho phép mô tả hầu hết các hiệu ứng của quá trình vận chuyển neutron và bức xạ gamma. Qua quá trình mô phỏng MOCA, với các kết quả có độ tin cậy cao có thể đưa ra được những phương án về những thông số thiết kế kỹ thuật tối ưu. Mặc dù các kết quả đạt được rất đáng tin cậy nhưng để chế tạo thành thiết bị công nghiệp cần phải có sự nghiên cứu, khảo sát nhiều hơn về các đặc trưng vật lý của hệ đo, thiết kế phần cứng và phần mềm cho thiết bị.

Tài liệu tham khảo

- [1] Báo cáo tổng kết đề tài "Nghiên cứu xây dựng hệ thiết bị phân tích độ tro sử dụng kỹ thuật PGNAA với nguồn phát neutron", mã số: ĐT.03/09.NLNT, 2009-2011, Bộ KH&CN.
- [2] R. Proctor, S. Yusuf, J. Miller, C. Scott, "Detectors for on-line prompt gamma neutron activation analysis", Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A 422 (1999) 933-937.
- [3] M. Borsaru, M. Biggs, W. Nichols, F. Bos, "The application of prompt-gamma neutron activation analysis to borehole logging for coal", Applied Radiation and Isotopes, 54 (2001) 335-343.
- [4] M. Nezamzadeh, Sh. Alavi, M. Lamehi-rachti, N. Rahimian, M. Ghiassi-Nejad, "Comparison between $(n-\gamma)$, $(\gamma-\gamma)$ and natural γ -ray activity techniques for ash measurement of coal samples", Applied Radiation and Isotopes, 50 (1999) 685-691.
- [5] M. Sohrabpour, M. Shahriari, V. Zarifian, K.K. Moghadam, "Borehole prompt gamma neutron activation and comparison with Monte Carlo simulation using MCNP code: Borehole PGNAA experiment comparison with MCNP Original Research", Applied Radiation and Isotopes, 50 (1999) 805-810.
- [6] MCNP - A General Monte Carlo N-Particle Transport Code, Version 5. Los Alamos National Laboratory, 2003.