

Research Paper

Optimization of Trace Metals' Detection Device Using Monte Carlo Simulation¹

Ehsan Taghizadeh Tousi²

Received:2020.12.21

Revised:2021.02.02

Accepted:2021.04.04

Abstract

In this study, a fluorescence X-ray spectroscopy system was designed by the Solidworks computer code to detect and measure trace metals. Then, the designed device was simulated and developed by the Monte Carlo method in MCNPX software. The most excellent performance of the trace element detection system was respectively found at 3 cm and 30 cm for source-to-sample distance (SSD) and source-to-detector distance (SDD), respectively. According to the results of different runs of the simulation code, the largest intensity of absorbed X-ray by the detector was obtained for the collimator's diameter of 3 mm. In addition, the absence of lead shielding around the surrounding metal walls of the detector, even with the use of a lead collimator at the entrance of the detector window, increases the entrance of background beams to the detector and so, it will cause the reduction of spectroscopic accuracy in detecting trace elements. The least amounts of concentration for detecting arsenic, lead, mercury, zinc, copper, and iron were calculated as 0.17 mg/kg, 0.40, 18.40, 20.00, 146.00, and 266.67 mg/kg, respectively. Due to the concentration and level of pollution of these elements, the rare metal detection device designed for research and educational samples, especially in environmental and agricultural samples, will be extremely practical and useful.

Keywords: *Intensity of X-ray, Minimum Detection Limit, Monte Carlo, Trace Metals.*

¹ - DOI: [10.22051/ijap.2021.34487.1187](https://doi.org/10.22051/ijap.2021.34487.1187)

² - Assistant Professor, Department of Industrial and Mechanical Engineering, Faculty of Engineering, University of Torbat Heydariyeh, Torbat Heydariyeh, Khorasan Razavi, Iran. Email: e.taghizadeh@torbath.ac.ir

فصلنامه علمی فیزیک کاربردی ایران، دانشگاه الزهرا
سال دهم، پیاپی ۲۳، زمستان ۱۳۹۹

مقاله پژوهشی

بهینه‌سازی دستگاه تشخیص فلزات کمیاب با استفاده از شبیه‌سازی مونت کارلو^۱

احسان تقی‌زاده طوسی^۲

تاریخ دریافت: ۱۳۹۹/۱۰/۰۱

تاریخ بازنگری: ۱۳۹۹/۱۱/۱۴

تاریخ پذیرش: ۱۴۰۰/۰۱/۱۵

چکیده

در این پژوهش، ابتدا یک سیستم طیف‌سنجی اشعه ایکس فلورسانس با هدف تشخیص و اندازه‌گیری عناصر کمیاب طراحی شد و سپس به روش مونت کارلو در نرم‌افزار MCNPX، شبیه‌سازی و توسعه داده شد. با توجه به نتایج اجراهای متفاوت کد شبیه‌سازی، بهترین عملکرد سیستم تشخیص عناصر کمیاب در فواصل حدود ۳cm و ۳۰cm، به ترتیب برای فاصله چشمه تا نمونه (SSD) و فاصله چشمه تا آشکارساز (SDD) تعیین شد. به علاوه، مقدار بیشینه شدت پرتوی اشعه ایکس وارد شده به آشکارساز برای موازی‌ساز به قطر ۳ mm حاصل شد. همچنین نتایج شبیه‌سازی نشان می‌دهد که عدم حضور محافظ سربی در اطراف دیواره‌های فلزی خارجی آشکارساز، حتی با وجود استفاده از موازی‌ساز سربی در ورودی پنجره آشکارساز، باعث افزایش ورود پرتوهای زمینه به آشکارساز و در نتیجه کاهش دقت طیف‌سنجی در تشخیص عناصر

^۱ DOI: 10.22051/ijap.2021.34487.1187

^۲ استادیار، گروه مهندسی صنایع و مکانیک، دانشکده فنی و مهندسی، دانشگاه تربیت مدرس، خراسان رضوی، ایران.

Email: e.taghizadeh@torbath.ac.ir

کمیاب خواهد شد. حد کمینه تشخیص غلظت فلزات زرنیخ، سرب، جیوه، روی، مس و آهن به ترتیب 0.17 mg/kg ، 0.40 ، $18/40$ ، $20/00$ ، $146/00$ و $266/67$ محاسبه شد. با توجه به غلظت و حد آلاینده‌گی این عناصر، دستگاه تشخیص فلزات کمیاب طراحی شده برای نمونه‌های تحقیقاتی و آموزشی، به ویژه در نمونه‌های محیط زیستی و کشاورزی، بسیار کاربردی و مفید خواهد بود.

واژگان کلیدی: شدت باریکه اشعه ایکس، حداقل حد تشخیص، فلزات کمیاب، مونت کارلو.

۱. مقدمه

طیف‌سنجی فلورسانس اشعه ایکس (XRF) روشی غیرمخرب و دقیق و سریع است که کاربردهای بسیاری در زمینه‌های علمی و عملی از جمله زمین‌شناسی، کانی‌شناسی، تجزیه و تحلیل مواد، بوم‌شناسی، محیط زیست، باستان‌شناسی، پزشکی و همچنین موارد صنعتی دارد [۱]. استفاده از XRF نسبت به روش‌های تجزیه و تحلیل دیگر مزیت‌های زیادی دارد. اول، بسیار سریع و جامع بوده و نیاز به تکرار آزمایش‌های متعدد ندارد. دوم، راه‌اندازی آن ساده و ارزان است. این سامانه شامل دو قسمت اصلی، چشمه تابش تحریک‌کننده و آشکارساز به عنوان سیستم تشخیص، است. در طراحی دستگاه XRF از برخی مؤلفه‌های دیگر نیز از جمله قسمت‌های الکترونیکی متصل به آشکارساز، برنامه تحلیل داده‌ها و محافظ‌های اطراف منبع و آشکارساز و نمونه استفاده می‌شود.

هدف اصلی استفاده از چشمه در دستگاه XRF، بمباران نمونه و ایجاد اشعه ایکس از نمونه برانگیخته است. منابع تابش در دستگاه XRF به دو دسته اصلی تقسیم می‌شود: ایزوتوپ رادیواکتیو و لوله اشعه ایکس [۲]. استفاده از چشمه پرتوزا، به دلیل کاربرد آسان و هزینه کم، بسیار رایج است. ذرات یا فوتون‌های اولیه ساطع شده از چشمه، می‌توانند نمونه را تحریک کرده و فوتون‌های پرتونگاری ثانویه از اتم‌های تحریک‌شده هدف، ایجاد کنند. طیف اشعه ایکس حاصل از نمونه تحریک‌شده توسط یک آشکارساز مناسب ثبت شده و بر اساس آن عناصر نمونه از نظر کمی و کیفی مشخص خواهند شد. از لحاظ نظری، این روش می‌تواند تقریباً هر عنصر در جدول تناوبی را اندازه‌گیری کند. با این همه، حساسیت و دقت این روش برای تشخیص همه عناصر یکسان نبوده و به عوامل متنوعی به ویژه طیف انرژی چشمه تحریک‌کننده و طراحی و حفاظ‌بندی سیستم بستگی دارد [۳].

انتخاب چشمه مناسب، اولین و مهم‌ترین بخش از طراحی هر سامانه XRF است. تابش ساطع شده از چشمه با انرژی بسیار کم، نمی‌تواند انرژی لازم برای تحریک نمونه و در نتیجه آزادسازی اشعه ایکس مشخصه عنصر مد نظر را فراهم کند. از طرف دیگر، چشمه با تابش بسیار پر انرژی باعث ایجاد پراکندگی‌های کامپتون و همدوسی می‌شود، که در آشکارساز جذب شده و در نتیجه طیف خروجی آشکارساز بسیار پیچیده و کم دقت خواهد شد [۴].

تابش ایکس حاصل از نمونه تحریک شده برای تشخیص عناصر کمیاب در مقایسه با تابش زمینه و اختلال ذاتی محیط، معمولاً بسیار ضعیف است. بنابراین، طراحی مناسب سامانه XRF با کاربری تشخیص عناصر کمیاب، به ویژه طراحی بهینه سپر و تعیین موقعیت مناسب چشمه پرتوزا، نمونه و آشکارساز، در بهبود عملکرد آن و افزایش ظرفیت تحلیلی آن و همچنین ایجاد توانایی تشخیص کم‌ترین غلظت هدف ممکن عناصر در نمونه، نقش بسیار مهم و ضروری دارد.

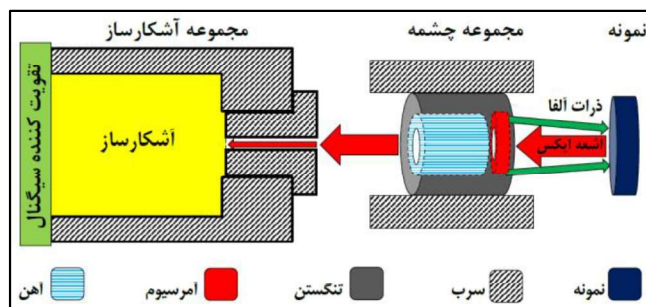
چشمه آمرسیوم (Am^{241}) به طور هم‌زمان ذرات آلفا و فوتون‌های گاما ساطع می‌کند. تابش آلفای چشمه آمرسیوم، با انرژی 5.53 MeV ، فقط برای استفاده در چشمه‌های ترکیبی نوترونی (مانند چشمه آمرسیوم-برلیوم) به کار می‌رود، زیرا ذرات آلفا در فواصل بسیار کوتاهی و ضخامت‌های بسیار کم نیز به راحتی جذب مواد دیگر از جمله هوا می‌شوند. در حالی که فوتون‌های چشمه آمرسیوم با طیف گسسته انرژی کم‌تر از 60 keV ، دارای کاربردهای تشخیصی و پرتونگاری است. لامپ اشعه ایکس در نمونه‌های تجاری دستگاه طیف‌سنج XRF، به عنوان چشمه پرتو در انرژی‌های متنوع کاربرد دارد. از لامپ اشعه ایکس با انرژی کم در تشخیص عناصر کمیاب استفاده می‌شود. برای نمونه، یکی از لامپ‌های تجاری اشعه ایکس در دستگاه‌های طیف‌سنجی تشخیصی XRF، لامپ X-123 است که دارای طیف انرژی کم‌تر از 50 keV است. بنابراین و با توجه به پژوهش‌های گذشته، یک چشمه حلقوی پرتوزای آمرسیوم با نیمه عمر بسیار زیاد (حدود ۴۰۰ سال)، دسترس پذیری، شار و قیمت مناسب، به عنوان چشمه پرتوزای لازم در دستگاه تشخیص عناصر کمیاب در این تحقیق انتخاب شد. با این که چشمه آمرسیوم بیشتر در دسته چشمه‌های آلفا تقسیم‌بندی شده، در دستگاه تشخیص عناصر کمیاب از فوتون‌های گامای آن استفاده خواهد شد، که پس از برخورد با اتم‌های نمونه و تحریک آن‌ها، باعث تولید فوتون‌های ثانویه ایکس از نمونه می‌شوند [۵-۸].

هدف اصلی این تحقیق، طراحی و شبیه‌سازی و بهینه‌سازی دستگاه تشخیص عناصر کمیاب برای مؤسسات آموزشی و پژوهشی است، که با استفاده از الگوبرداری از نمونه‌های اجرا شده [۵-۷] و با توجه به چشمه‌های پرتوزای ارزان و قابل دسترس، انجام شده است. برای این منظور، در

ابتدا قطعات سیستم در نرم‌افزار مهندسی سالی‌دور کر (Solidworks 2016 premium X64) طراحی و مونتاژ شده و پس از آن با استفاده از روش مونت کارلو در نرم‌افزار تخصصی هسته‌ای MCNPX، تحلیل و بررسی شد. همچنین، حداقل مقدار لازم فلزات کمیاب هدف برای تشخیص پذیری محاسبه شد.

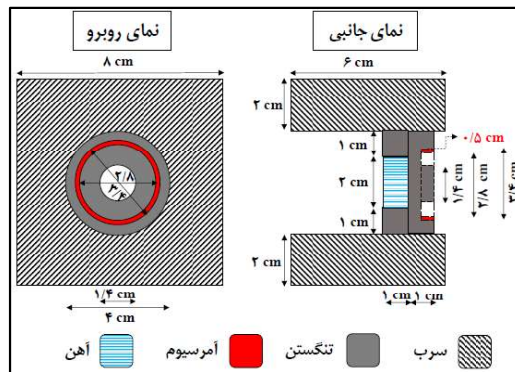
۲. مواد و روش‌ها

جلوگیری از ورود مستقیم پرتوهای ساطع شده از چشمه به آشکارساز، یکی از چالش‌های اصلی برای کاهش خطا و افزایش دقت نتایج طیف‌سنجی است. برای این منظور و بر اساس پژوهش‌های گذشته، چشمه آمرسیوم به شکل حلقوی و در مکانی مابین آشکارساز و نمونه در نظر گرفته شد. با انتخاب حفاظ مناسب بین چشمه و آشکارساز، میزان ورود مستقیم ذرات و فوتون‌های ساطع شده از چشمه به آشکارساز به شدت کاهش یافته، در حالی که پرتوهای گامای ساطع شده از نمونه می‌توانند از حفره وسط چشمه عبور کرده و وارد آشکارساز شوند. شکل ۱ ساختار کلی سیستم تشخیص عناصر کمیاب بر اساس طیف‌سنجی اشعه ایکس مشخصه عنصر را نشان می‌دهد [۷-۱۱].



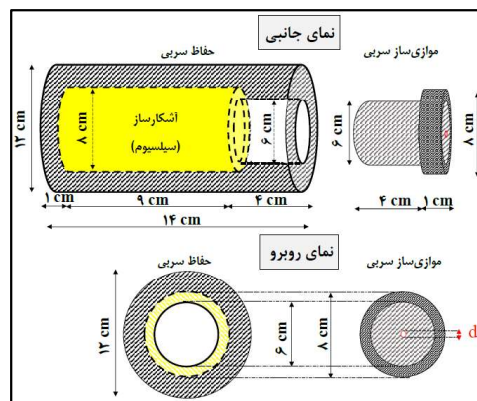
شکل ۱ ساختار کلی سیستم XRF تجربی.

شکل ۲ طراحی و ابعاد مجموعه چشمه آمرسیوم را نشان می‌دهد. برای کاهش خوانش پرتوهای پیش‌زمینه، تمرکز پرتوی ایکس ساطع شده از نمونه و در نتیجه افزایش دقت آشکارساز، از موازی‌ساز در ورودی آشکارساز استفاده می‌شود. آشکارساز گاما از نوع ژرمانیوم-سیلیکن کم‌انرژی (LEGe)، به دلیل دسترس پذیری، دقت و سرعت بالا و همچنین قیمت بسیار مناسب، در طراحی سیستم عناصر کمیاب انتخاب شد. بنابراین، از سرب به عنوان ماده سازنده موازی‌ساز، استفاده شد.



شکل ۲ طرح مجموعه چشمه آمرسیوم و حفاظ‌های آن.

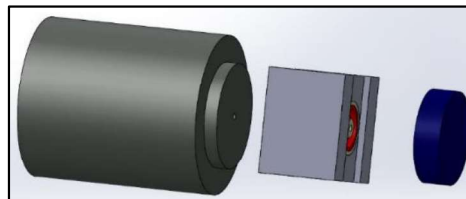
وظیفه اصلی موازی‌ساز، تنظیم و واگراسازی پهنای پرتوی ورودی به آشکارساز است. بنابراین، انتخاب مناسب قطر حفره ورودی موازی‌ساز به عنوان پنجره ورودی آشکارساز بسیار اهمیت دارد. اگر قطر حفره موازی‌ساز بیش از حد بزرگ باشد، باعث ورود پرتوهای زمینه می‌شود. همچنین، پنجره موازی‌ساز در اندازه بیش از حد کوچک باعث کاهش شدت تابش ورودی به آشکارساز خواهد شد. استوانه‌ای توپر از جنس سیلیکن با قطر حدود ۸ cm و ارتفاع تقریباً ۹ cm به عنوان آشکارساز LEGe، طراحی شد. جهت دستیابی به قدرت تفکیک انرژی مناسب برای پرتوهای ایکس مشخصه، ضخامت آشکارساز محدود شده و سعی می‌شود از سطح بزرگ‌تری از آشکارساز استفاده کرد. مطابق با اطلاعات شرکت‌های تولیدکننده، برای تشخیص فوتون‌های کم‌انرژی با آشکارسازی از جنس سیلیکن، ضخامت پنجره خوانش باید در حد چند میلیمتر باشد. بنابراین، یاخته‌ای با ضخامت ۲ میلیمتر در ورودی استوانه آشکارساز برای اندازه‌گیری پرتوهای ورودی، در نظر گرفته شد. شکل ۳ طرح آشکارساز و حفاظ سربی و موازی‌ساز آن را نشان می‌دهد.



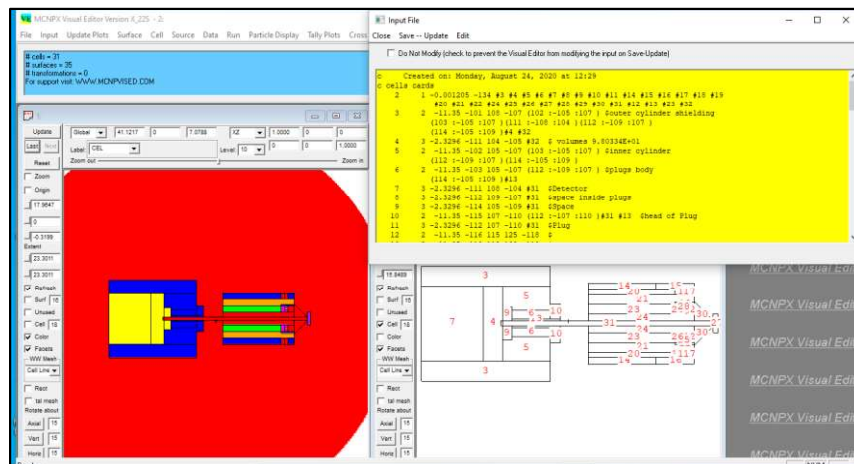
شکل ۳ طرح مجموعه آشکارساز.

۱۰ / بهینه‌سازی دستگاه تشخیص فلزات کمیاب با استفاده از شبیه‌سازی مونت کارلو

طرح و مونتاژ نهایی دستگاه تشخیص عناصر کمیاب شامل سه قسمت اصلی: الف) نمونه، ب) مجموعه چشمه، ج) مجموعه آشکارساز، در شکل ۴ نشان داده شده است. برای تشخیص و ردیابی اشعه ایکس مشخصه عناصر کمیاب نمونه توسط آشکارساز، خروجی نرم‌افزار MCNPX در حالت فوتون (Mode: P) در نظر گرفته شد. برای محاسبه شار انرژی انتقال یافته از فوتون‌های ورودی به آشکارساز، از شمارش گره‌های F2 (متوسط شار عبوری از سطح) و F4 (شار متوسط در یاخته) با واحد $\text{MeV}\cdot\text{cm}^{-2}$ ، در کد شبیه‌سازی استفاده شد. هندسه دستگاه در مختصات متعامد و متشکل از ۳۱ کارت سلولی است که توسط ۳۵ کارت سطحی در نرم‌افزار MCNPX شبیه‌سازی شده است. شکل ۵ هندسه شبیه‌سازی شده مسئله در محیط نرم‌افزار هسته‌ای MCNPX را نشان می‌دهد.



شکل ۴ مونتاژ دستگاه تشخیص عناصر کمیاب، از راست به چپ: نمونه، چشمه، آشکارساز.



شکل ۵ کد شبیه‌سازی تحقیق در محیط نرم‌افزار MCNPX.

آمرسیوم به عنوان یک چشمه گاما دارای طیف انرژی گسسته در محدوده کم‌تر از keV ۵۹/۵۴ است [۱۲]. بر اساس انرژی طیف اشعه ایکس ساطع شده از عناصر کمیاب، دامنه انرژی تشخیص پذیر توسط این آشکارساز در محدوده keV ۰/۱ تا keV ۶۰ در نظر گرفته شد.

آشکارسازهای واقعی شامل غلظت بسیار کمی از ناخالصی ژرمانیوم بوده که درصد وزنی آن تقریباً نزدیک صفر است و در شبیه‌سازی می‌توان از آن صرف‌نظر کرد. در این پژوهش، عناصر آهن، مس، روی، زرنیک، سرب و جیوه به عنوان عناصر کمیاب هدف در نظر گرفته شده که طیف انرژی اشعه ایکس ساطع شده در سری K_{α} این عناصر به ترتیب $6/40$ ، $8/05$ ، $8/67$ و $10/54$ ، $21/18$ و $70/82$ (keV) است [۱۳]. انرژی آزادسازی اشعه ایکس سری K_{α} برای جیوه از بیشینه انرژی گامای ساطع شده از چشمه آمرسیوم بزرگ‌تر بوده و بنابراین برای تشخیص عنصر جیوه از اشعه ایکس مشخصه آن در سری L_{α} با انرژی $9/99$ keV استفاده خواهد شد [۱۴].

جنس نمونه در یاخته شماره ۶، بر اساس عناصر مد نظر در یک نمونه می‌تواند تغییر کند. فاصله مکانی چشمه حلقوی از نمونه (3SSD) و همچنین از آشکارساز (4SDD) به عنوان مجهول دیگر بررسی شد. انرژی فوتون‌های گامای ساطع شده از چشمه آمرسیوم، $13/5$ و $26/4$ و $59/5$ (keV) در نظر گرفته شد [۴]. در کد کامپیوتری MCNPX، ۱۰ آزمون آماری مونت کارلو برای سنجش دقت و صحت نتایج شبیه‌سازی قرار داده شده است. شکل ۶ نتایج این ۱۰ تست آماری را نشان می‌دهد، که بر اساس آن نتایج حاصل از شبیه‌سازی در این تحقیق دارای ضریب اطمینان زیادی است.

results of 10 statistical checks for the estimated answer for the tally fluctuation chart (tfc) bin of tally 4										
tfc bin behavior	--mean-- behavior	-----relative error-----			---variance of the variance---			--figure of merit--		-pdf-slope
		value	decrease	decrease rate	value	decrease	decrease rate	value	behavior	
desired	random	<0.10	yes	1/sqrt(nps)	<0.10	yes	1/nps	constant	random	>3.00
observed	random	0.01	yes	yes	0.00	yes	yes	constant	random	10.00
passed?	yes	yes	yes	yes	yes	yes	yes	yes	yes	yes

شکل ۶ خروجی نرم‌افزار MCNPX برای ۱۰ آزمون آماری تأییدکننده در نتایج شبیه‌سازی مونت کارلو.

یکی از کمیت‌هایی که در دقت و صحت روش طیف‌سنجی تأثیر بسیار مهمی دارد، شدت تابش ورودی به آشکارساز است که به صورت شار سطحی انرژی انتقال یافته به آشکارساز توسط باریکه تابشی در واحد زاویه فضایی تعریف می‌شود. رابطه ۱ شدت تابش را نشان می‌دهد [۱۵]، که در آن I_{Ω} شدت تابش، $d\phi$ شار سطحی انرژی انتقال یافته در واحد زمان [۱۶] و $d\Omega$ زاویه فضایی است،

$$I_{\Omega} = \frac{d\Phi}{d\Omega} \left(\frac{W}{Sr} \right) \quad (1)$$

³ SSD: Source-Sample Distance

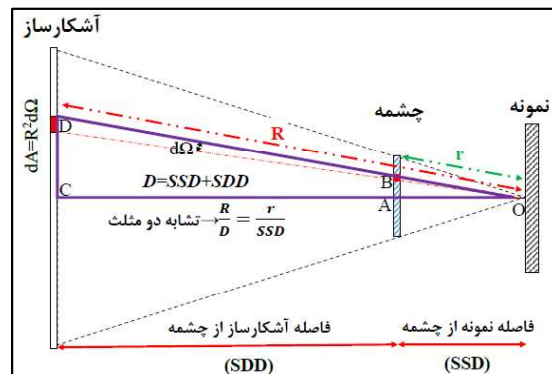
⁴ SDD: Source-Detector Distance

با توجه به تعریف شار سطحی انرژی و همچنین محاسبه مساحت المان سطحی بر سطح آشکارساز، رابطه شدت تابش به صورت رابطه ۲ بازنویسی می‌شود [۱۷]. در این رابطه dA سطحی از آشکارساز است که توسط زاویه فضایی $d\Omega$ محصور شده است. همچنین، E چگالی سطحی تابش ($W.m^{-2}$) بوده که برابر با انرژی انتقال یافته به واحد سطح آشکارساز در واحد زمان است. فاصله سطح مد نظر بر روی آشکارساز تا مرکز نمونه است،

$$I_{\Omega} = \frac{EdA}{d\Omega} \xrightarrow{dA=R^2d\Omega} I_{\Omega} \propto R^2E \quad (2)$$

شکل ۷ نحوه تابش اشعه ایکس از نمونه به آشکارساز را نشان می‌دهد. با توجه به تشابه دو مثلث OAB و OCD، می‌توان رابطه شدت تابش را به صورت رابطه ۳ بازنویسی کرد، که در آن D و SSD به ترتیب فاصله نمونه تا آشکارساز و فاصله نمونه تا چشمه بوده و r وتر مثلث OAB است،

$$\frac{R}{D} = \frac{r}{SSD} \rightarrow R^2 \propto \frac{1}{SSD^2} \Rightarrow I_{\Omega} \propto \frac{E}{SSD^2} \quad (3)$$



شکل ۷ نمودار تجسمی برای ارزیابی شدت پرتو.

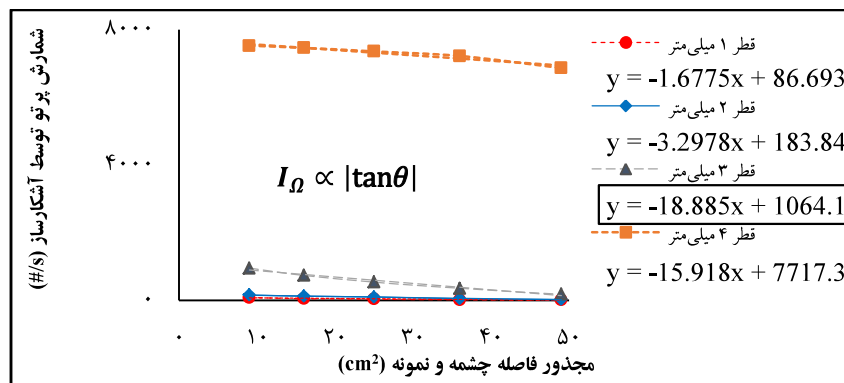
۳. نتایج و بحث

۳-۱ تعیین قطر بهینه پنجره موازی‌ساز

در ابتدا قطر پنجره ورودی موازی‌ساز برابر با ۱ mm انتخاب شده و کد رایانه‌ای آماده‌شده در نرم‌افزار MCNPX برای مقادیر SSD در محدوده ۳ تا ۷ (cm) و به صورت جداگانه، پنج مرتبه اجرا شد. این عمل برای قطرهای ۲ و ۳ و ۴ (mm) پنجره موازی‌ساز تکرار شد. برای تعیین قطر بهینه حفره موازی‌ساز، به جز فاصله نمونه از چشمه (SSD) و قطر موازی‌ساز (d)، تمامی اشکال و ابعاد هندسه در تمامی اجراهای کد نرم‌افزاری MCNPX ثابت در نظر گرفته شد.

منحنی شمارش پرتو توسط آشکارساز (متناسب با چگالی تابش) نسبت به مجذور فاصله نمونه تا چشمه، بر اساس خروجی اجراهای شبیه‌سازی مونت کارلو، در شکل ۸ نشان داده شده است. بر اساس رابطه ۳، شیب این نمودارهای با شدت تابش پرتو ایکس ورودی به آشکارساز رابطه مستقیم دارد. نمودار مربوط به پنجره موازی‌ساز با قطر ۳ mm دارای بیشترین شیب بوده که نشان‌دهنده بیشترین شدت تابش اشعه ایکس نمونه در این قطر است. در نمودارهای مربوط به پنجره موازی‌ساز با قطر کم‌تر از ۳ mm، بیشتر میزان اشعه ایکس خروجی از نمونه قبل از ورود به آشکارساز، جذب موازی‌ساز شده و در نتیجه شدت تابش جذب‌شده در آشکارساز به شدت کاهش می‌یابد.

از طرف دیگر و بر اساس فاصله عرضی نمودارها در شکل ۸، در موازی‌سازهایی با قطر بزرگ‌تر از ۳ mm میزان بیشتری از تابش زمینه از موازی‌ساز عبور کرده و وارد آشکارساز می‌شود. همچنین، شیب نمودار برای $d > 3 \text{ mm}$ کاهش می‌یابد و در نتیجه شدت تابش و همچنین دقت طیف‌سنجی اشعه ایکس کاهش می‌یابد. بنابراین، برای افزایش شدت تابش ورودی به آشکارساز و در نتیجه بهبود دقت تشخیص سیستم طیف‌سنجی برای آشکارسازی با ورودی به قطر ۸ cm، پنجره ورودی موازی‌ساز با قطر ۳ mm پیشنهاد می‌شود.

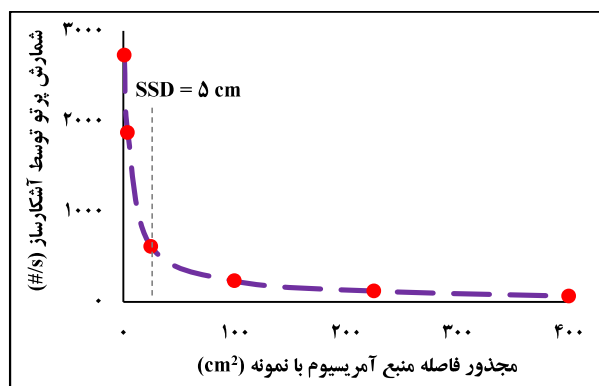


شکل ۸ نمودار شمارش آشکارساز با مجذور فاصله چشمه و نمونه در قطرهای مختلف حفره موازی‌ساز.

۲-۳ تأثیر فاصله چشمه آمرسیوم با نمونه در شدت تابش اشعه ایکس

یکی از مشخصات مهم در طراحی و بهینه‌سازی سیستم تشخیص عناصر کمیاب، تعیین فاصله مناسب چشمه تا نمونه است. برای این منظور تمامی پارامترهای هندسه سیستم، از جمله قطر موازی‌ساز (۳ mm) و فاصله چشمه تا آشکارساز (۱۵ cm)، ثابت در نظر گرفته شد. سپس، برای SSD مقادیر ۱، ۲، ۵، ۱۰، ۱۵ و ۲۰ (cm)، کد شبیه‌سازی به صورت جداگانه اجرا شد.

شکل ۹ نمودار شمارش پرتو در آشکارساز به نسبت مجذور فاصله چشمه تا نمونه را بر اساس نتایج ۶ اجرای کد شبیه‌سازی برای مقادیر مختلف SSD نشان می‌دهد. این نمودار از دو خط تقریباً راست در دو طرف $SSD = 5 \text{ cm}$ تشکیل شده است. بر اساس معادله ۳ و شکل ۸، شدت تابش به عنوان پارامتر اصلی در طیف‌سنجی در مقادیر SSD کمتر از ۵ cm، بسیار بیشتر و تقریباً ثابت (خط راست) است. بنابراین، فاصله بین چشمه و نمونه را می‌توان در محدوده نیم تا پنج سانتی‌متر انتخاب کرد. کمینه این محدوده به دلیل نوع و شکل طراحی حفاظ سربی چشمه است. زیرا برای کاهش پراکندگی باریکه گامای ساطع شده از چشمه در فضای آزمایشگاه، حفاظ سربی چشمه از جلو (در سمت نمونه) حدود ۰/۵ cm و از پشت (در جهت آشکارساز) حدود ۵ cm از لبه چشمه حلقوی بیشتر پیش آمده است. در ادامه این تحقیق، مقدار بهینه $SSD = 3 \text{ cm}$ انتخاب شد.



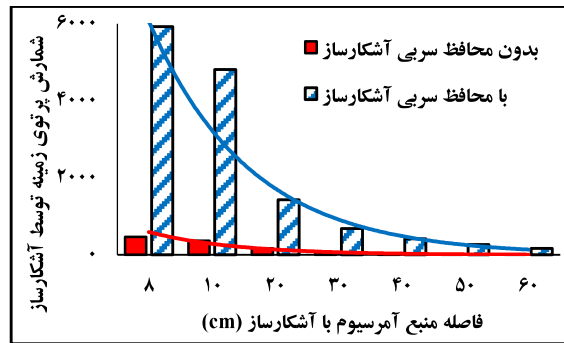
شکل ۹ نمودار شمارش آشکارساز به مجذور فاصله چشمه تا نمونه.

۳-۳ تأثیر حفاظ آشکارساز در شدت تابش اشعه ایکس

برای تعیین اثر حفاظ آشکارساز، نمونه را از جنس هوا در نظر گرفته و در ابتدا جنس سلول حفاظ آشکارساز نیز هوا انتخاب شده و تمامی هندسه سیستم ثابت در نظر گرفته شد. در این حالت کد نرم‌افزار MCNPX برای فاصله چشمه با آشکارساز (SDD) به اندازه ۸، ۱۰، ۲۰، ۳۰، ۴۰، ۵۰ و ۶۰ (cm) اجرا شد. همین عمل برای حفاظ آشکارساز از جنس سرب و برای SDD با اندازه‌های مشابه حالت قبل اجرا شد، که نتایج کد شبیه‌سازی در شکل ۱۰ نشان داده شده است.

حضور حفاظ سربی اطراف دیواره‌های خارجی آشکارساز باعث کاهش بسیار زیاد جذب تابش پس‌زمینه می‌شود. به عبارت بهتر، حتی با حضور موازی‌ساز در پنجره ورودی آشکارساز، استفاده از حفاظ اطراف دیواره‌های فلزی آشکارساز می‌تواند (به دلیل جذب این پرتوها و جلوگیری از پراکندگی ثانویه آن‌ها توسط این دیواره‌ها)، باعث کاهش شدید ورود تابش

پس زمینه به آشکارساز و همچنین کمینگی قله پراکندگی و در نتیجه افزایش دقت نتایج طیف سنجی شود. در شکل ۱۰، برای فاصله SDD بزرگ تر از ۳۰ cm، شیب نمودارها تقریباً صفر است، که جذب کم ترین میزان پرتوی زمینه را نشان می دهد. به همین دلیل، در این تحقیق مقدار بهینه SDD برابر با ۳۰ cm انتخاب شد، تا با کم ترین میزان تابش پیش زمینه به آشکارساز، بیشینه شدت تابش ورودی را داشته باشد.

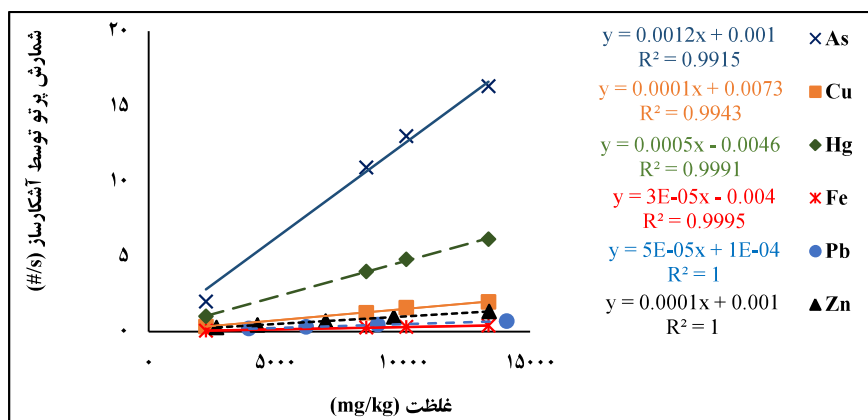


شکل ۱۰ نمودار شمارش پرتوی زمینه توسط آشکارساز به فاصله چشمه با آشکارساز (SDD) در دو حالت حضور و عدم حضور حفاظ آشکارساز.

۴-۳ محاسبه حداقل حد تشخیص غلظت عناصر هدف (MDL)

در هر دستگاه طیف سنجی، حداقل حد تشخیص غلظت برای یک عنصر خاص به صورت دو برابر نسبت عدم قطعیت غلظت عنصر مد نظر (در نمونه ای که حاوی آن عنصر نیست) به شیب نمودار کالیبراسیون آن عنصر تعریف می شود [۱۸]. بر اساس نتایج اجراهای کد شبیه سازی، مقادیر بهینه محاسبه شده برای فاصله چشمه تا آشکارساز، فاصله چشمه تا نمونه و قطر موازی ساز در پنجره ورودی آشکارساز، به ترتیب برابر با ۳۰ cm، ۳ mm و ۳ cm، انتخاب شد. همچنین دیواره های بیرونی آشکارساز نیز با یک حفاظ سربی محافظت شد. سپس کد شبیه سازی برای ۴ غلظت متفاوت از یک عنصر خاص در هندسه نمونه (یاخته شماره ۶) اجرا شد. شکل ۱۱ منحنی های کالیبراسیون عناصر زرنیخ، مس، جیوه، آهن، سرب و روی را بر اساس خروجی ۴ اجرا در غلظت های متفاوت از هر عنصر نشان می دهد.

همچنین، عدم قطعیت، شیب نمودار کالیبراسیون و حداقل میزان غلظت قابل تشخیص این ۶ عنصر در جدول ۱ نشان داده شده است. حداقل میزان تشخیص سه فلز سنگین زرنیخ، سرب و جیوه توسط دستگاه XRF شبیه سازی شده، به ترتیب ۰/۱۷، ۰/۴۰ و ۱۸/۴۰ (mg/kg) تخمین زده شد. این ۳ فلز سنگین برای سیستم های زنده بسیار مضرند.



شکل ۱۱ شیب نمودار کالیبراسیون غلظت زرنیخ، مس، جیوه، آهن، سرب و منگنز با استفاده از نرم‌افزار MCNPX.

جدول ۱ مختصات نمودار کالیبراسیون و حداقل حد تشخیص غلظت زرنیخ، مس، جیوه، آهن، سرب، منگنز.

عنصر	عدم قطعیت (δ) (mg/kg)	شیب نمودار (tan θ)	MDL ^۱ = (2δ/tanθ) (mg/kg)
زرنیخ	۰/۰۰۰۱	۰/۰۰۱۲	۰/۱۷
سرب	۰/۰۰۰۰۱	۰/۰۰۰۰۵	۰/۴۰
جیوه	۰/۰۰۴۶	۰/۰۰۰۵	۱۸/۴۰
روی	۰/۰۰۱	۰/۰۰۰۱	۲۰/۰۰
مس	۰/۰۰۷۳	۰/۰۰۰۱	۱۴۶/۰۰
آهن	۰/۰۰۰۴	۰/۰۰۰۰۳	۲۶۶/۶۷

^۱ کمینه حد تشخیص غلظت

نتایج شبیه‌سازی حد تشخیص عنصر روی را ۲۰ mg/kg تعیین کرد. روی از عناصر ضروری موجودات زنده است. با این حال به میزان بسیار اندکی نیاز است. بنابراین، دستگاه طراحی شده برای تشخیص عناصر زرنیخ، سرب، جیوه و روی در بسیاری از انواع نمونه‌ها، از جمله در علوم زیستی و پزشکی و مهندسی، قادر به تشخیص بوده و کاربرد خواهد داشت. دو فلز مس و آهن نیز به عنوان عناصر ضروری در حیات و محیط زیست دسته‌بندی می‌شود. مس و آهن در محدوده مقادیر درصدی (۱۰۰۰۰ mg/kg) در نمونه‌های محیطی یافت می‌شود. کمینه غلظت قابل تشخیص توسط سیستم XRF شبیه‌سازی شده برای فلزات مس و آهن، به ترتیب (mg/kg) ۱۴۶/۰۰ و ۲۶۶/۶۷ تعیین شده که از حد میزان غلظت و همچنین محدوده آلاینده‌گی این دو عنصر در بسیاری از انواع نمونه‌ها، به ویژه نمونه‌های زیستی کم‌تر است [۱۹].

برای ارزیابی اعتبار نتایج حاصل از شبیه‌سازی مونت کارلو، مقادیر کمینه حد تشخیص غلظت عناصر کمیاب حاصل از شبیه‌سازی با نتایج تجربی مقایسه شد. ال‌دروبی و همکاران با استفاده از سیستمی مشابه، غلظت عناصر جیوه و سرب را در نمونه‌های بیولوژیکی موی سر انسان به صورت تجربی اندازه‌گیری کردند. نتایج آنها با مقادیر شبیه‌سازی شده برای کمینه حد تشخیص غلظت عناصر کمیاب در این تحقیق، مطابقت کامل داشته و نشان می‌دهد که نتایج روش مونت کارلو برای طراحی و بهینه‌سازی سیستم تشخیص عناصر کمیاب معتبر است [۷].

۴. نتیجه‌گیری

ابتدا با استفاده از نرم‌افزار Solidworks مراحل کامل طراحی قطعات و مونتاژ سیستم تشخیص عناصر کمیاب بر اساس ردیابی اشعه ایکس مشخصه عناصر هدف در نمونه، ارائه شده و سپس در کد MCNPX شبیه‌سازی شد. بعد از اطمینان از درستی کد، با استفاده از روش مونت کارلو و با اجرای کد کامپیوتری در شرایط متنوع، مقدار بهینه اندازه قطر موازی‌ساز در ورودی آشکارساز (d) ۳mm، فاصله چشمه از هدف (SSD) کم‌تر از ۵cm و همچنین فاصله چشمه از آشکارساز (SDD) ۳۰cm تعیین شد. همچنین، با رسم نمودار کالیبراسیون برای عناصر هدف حداقل حد غلظت قابل تشخیص با سیستم طراحی شده برای عناصر زرنیخ، سرب، جیوه، روی، مس و آهن به ترتیب ۰/۱۷، ۰/۴۰، ۱۸/۴۰، ۲۰/۰۰، ۱۴۶/۰۰ و ۲۶۶/۶۷ (mg/kg) محاسبه شد. با توجه به غلظت و حد آلاینده‌گی این عناصر، دستگاه تشخیص فلزات کمیاب طراحی شده برای نمونه‌های تحقیقاتی و آموزشی، به ویژه در نمونه‌های محیط زیستی و کشاورزی، بسیار کاربردی و مفید خواهد بود.

۵. تقدیر و تشکر

این تحقیق توسط دانشگاه تربت حیدریه و با کد تحقیقاتی "UTH:۱۳۹۹/۰۶/۱۵۷۹" پشتیبانی مالی شده است. بنابراین، مؤلف این مقاله بر خود لازم می‌داند از همکاری صمیمانه معاونت محترم آموزشی و پژوهشی دانشگاه تربت حیدریه تشکر و قدردانی کند.

منابع

- [1] Tousi E. T., Firoozabadi M. M., and Shiva M., "Determination of the thorium potential in Shah-Kooh area in Iran by NAA and comparison with the results of ICP and XRF techniques", Measurement, **90**, 20-24 (2016).
- [2] Tousi E. T., et al., "Measurement of Percentage Depth Dose and Half Value Layer of the Rhizophora spp. Particleboard Bonded by Eremurus spp. to 60, 80 and 100 kVp Diagnostic X-rays", MAPAN, **33**(3), 321-328 (2018).

- [3] Pushie M. J., et al., "Elemental and chemically specific X-ray fluorescence imaging of biological systems", *Chemical Reviews*, **114**(17), 8499-8541 (2014).
- [4] Beckhoff B., et al., "Handbook of practical X-ray fluorescence analysis". Germany: Springer-Verlag GmbH, Heidelberg, 877 (2007).
- [5] Shakhreet B. Z., et al., "Mass attenuation coefficients of natural Rhizophora spp. wood for X-rays in the 15.77–25.27 keV range", *Radiation Protection Dosimetry*, **135**(1), 47-53 (2009).
- [6] Marashdeh M. W., et al., "Determining the mass attenuation coefficient, effective atomic number, and electron density of raw wood and binderless particleboards of Rhizophora spp. by using Monte Carlo simulation", *Results in Physics*, **5**, 228-234 (2015).
- [7] Aldroobi K. S. A., et al., "Determination of Arsenic and Mercury level in Scalp Hair from a Selected Population in Penang, Malaysia using XRF Technique", *Radiation Physics and Chemistry*, **91**, 9-14 (2013).
- [8] Tousi E. T., et al., "Measurement of mass attenuation coefficients of Eremurus-Rhizophora spp. particleboards for X-ray in the 16.63–25.30 keV energy range", *Radiation Physics and Chemistry*, **103**, 119-125 (2014).
- [9] Abuarra A., et al., "XRF Technique for the Evaluation of Gum Arabic Bonded Rhizophora spp. Particleboards as Tissue Equivalent Material", *International Journal of Applied Physics and Mathematics*, **4**(3), 201-204 (2014).
- [10] Tousi E. T., et al., "Evaluation of the mass attenuation coefficient and Effective Atomic Number of the Eremurus spp. Root in Mammography Energy Range", *IOSR Journal of Applied Physics*, **9**(1), 100-104 (2017).
- [11] Marashdeh M. W., "Effect of the LEGe detector collimators on K-series peaks and Compton scattering in XRF analysis using gamma rays", *Heliyon*, **4**(8), e00724 (2018).
- [12] Terada K., et al., "Measurements of gamma-ray emission probabilities of ²⁴¹Am and ²³⁹Np", *Journal of Nuclear Science and Technology*, **53**(11), 1881-1888 (2016).
- [13] Thompson A. C. and Vaughan D., "X-ray data booklet". Vol. 8, California: Lawrence Berkeley National Laboratory, University of California Berkeley (2001).
- [14] Zschornack G., "X-Ray Emission Lines and Atomic Level Characteristics", in *Handbook of X-Ray Data*, Springer: Heidelberg, Germany. p. 179-609 (2007).
- [15] Franck H. and Franck D., in *Forensic Engineering Fundamentals*, CRC Press: Taylor & Francis Group: Boca Raton, Florida. p. 389 (2013).
- [16] Aarts M. P. J. and Rosemann A. L. P., "Towards a uniform specification of light therapy devices for the treatment of affective disorders and use for non-image forming effects: Radiant flux", *Journal of affective disorders*, **235**, 142-149 (2018).
- [17] Balanis C. A., "Antenna theory: analysis and design", John Wiley & Sons: New Jersey. p. 37 (2016).
- [18] O'Meara J. M., Börjesson J., and Chettle D. R., "Improving the in vivo X-ray fluorescence (XRF) measurement of renal mercury", *Applied Radiation and Isotopes*, **53**(4-5), 639-646 (2000).
- [19] Tousi E. T., "Evaluation of levels of some trace metals in Crocus sativus L. and their transfer trend from soil to saffron by using neutron activation analysis (In Persian)", *Saffron Agronomy and Technology*, **8**(3), 377-397 (2020).