

1 Вступ

З розвитком технологій та промисловості, забрудненням навколишнього середовища, ростом популяції населення, все частіше починає підніматися питання загрози вичерпання природних ресурсів. Особливо гостро це торкається невідновлюваних природних ресурсів. З кожним роком вичерпаних родовищ стає все більше. Так, наприклад, по оцінкам "Римського клубу"[Літ. ??]: запасів алюмінієвих руд вистачить на 55 років, міді - 49 років, заліза - 173 роки, свинцю - 64 роки, хрому - 154 роки. Це змушує шукати нові родовища.

З іншого боку 3/4 поверхні планети вкриті океанами, а по різних даних досліджено від 5% до 7% дна. Океанічне дно має плоский або горбистий рельєф та в основному від 3,5 - 6 кілометрів в глибину, але зустрічаються глибоководні жолоби до 11 кілометрів в глибину, їх найбільше в Тихому океані.

За рахунок досить складних умов і високого тиску, стандартні методи аналізу мінеральних порід за допомогою габаритного обладнання є дуже складними, а в деяких місцях такий етап пошуку родовищ, як буріння опорних та параметричних свердловин, є неможливим.

На основі проекту SABAT(Stoichiometry Analysis By Activation Techniques)[Літ. ??] - за мету в якому було поставлено пошук небезпечних речовин на дні Балтійського моря з використання нейтронно-активаційного аналізу для неінвазивного дослідження об'єкту. Я допустив можливість використання даного методу дослідження для отримання більш розгорнутої інформації про океанічне дно.

2 Теоретична частина

2.1 Фізична модель *QGSP_BERT*

QGSP_BERT - ця фізична модель входить в перелік стандартних фізичних моделей розрахункового пакету Geant4 і базується на каскадній моделі Бертіні. Для валідації даної моделі необхідне виконання наступних умов $\frac{\lambda_B}{\nu} \ll \tau_c \ll \Delta t$, λ_B - хвиля де-Бройля для налітаючої частинки, ν - швидкість налітаючої частинки, Δt - час між зіткненнями. Модель, що реалізована в програмному пакеті Geant4, була протестована на частинках з енергіями від 100 MeV до 3 GeV.

В конструкторі даної фізичної моделі ініціалізуються наступні класи фізики:

- G4EmStandardPhysics
- G4EmExtraPhysics
- G4DecayPhysics
- G4HadronElasticPhysics
- *HadronPhysicsQGSP_BERT*
- G4StoppingPhysics
- G4IonPhysics

Кожен з класів наслідується від базового класу фізичної G4PhysicsConstructor. Подібна архітектура дозволяє не дублювати код та додавати лише необхідні процеси для моделювання.

QGSP_BERT_HP - це фізична модель базується на даній та має майже той самий перелік інкапсульованих класів, за виключенням наступних двох:

- *G4HadronElasticPhysicsHP*
- *HadronPhysicsQGSP_BERT_HP*

Ця фізична модель була створена для більш точного врахування процесів гальмування нейтронів в речовині, від енергій $E_n = 20$ MeV до $E_n = 0.0025$ eV (теплових). Ця фізична модель була провалідована на експерименті TARC[Літ. ??]

Тобто дані класи: *QGSP_BERT* і *QGSP_BERT_HP* представляють собою інтерфейси з інкапсуляцією в них базової фізики.

2.2 Мультипоточність Geant4

Geant4 - написаний на об'єктно-орієнтованій мові програмування C++, яка дає можливість використовувати мультипоточну архітектуру і отримувати більшу продуктивність коду. Але потрібно зважати, що продуктивність лінійно збільшується лише в тому випадку, коли під задачу виділяється фізичне чи віртуальне ядро.

При використанні мультипоточної архітектури обов'язково необхідно дбати про синхронізацію потоків для безпечного виконання коду. Geant4 - використовує *G4MTRunManager*. Даний клас наслідується від базового *G4RunManager*, але включає в себе реалізацію пулу потоків. Це дає змогу контролювати кожен з об'єктів, що створюється в рамках пулу та валідувати їх.

Так, як при моделюванні, потрібно щоб кожен запуск відбувався з однаковими параметрами та за тієї ж самої геометрії. Необхідно щоб

класи інтерфейсу, які відповідають за створення даних об'єктів, були доступні для всіх об'єктів з пулу.

2.3 Джерела нейтронів

Нейтронний генератор - це одне з джерел нейтронів. В основі лежить $D(D, n)He^3$, та $D(T, n)He^4$, в реакції з тритієм утворюються нейтрони більш високих енергій, близько 14.1 MeV. Ядра D розганяються різницею потенціалів 100-300 кВ і спрямовуються на мішень з тритія чи дейтерія. Максимальний енергетичний вихід реакції на тритії 17.6 MeV. В основі ізотопних джерел нейтронів лежить (α, n) - реакція. Як правило, джерело собою представляє запаяну капсулу циліндричної форми та діє по схожому принципу, як і генератор. Як джерело альфа частинок поміщується ізомери Pu, Am, Cm за мішень Be, Li. Такі джерела нейтронів в більшості своїй випромінюють нейтрони 2.8 MeV

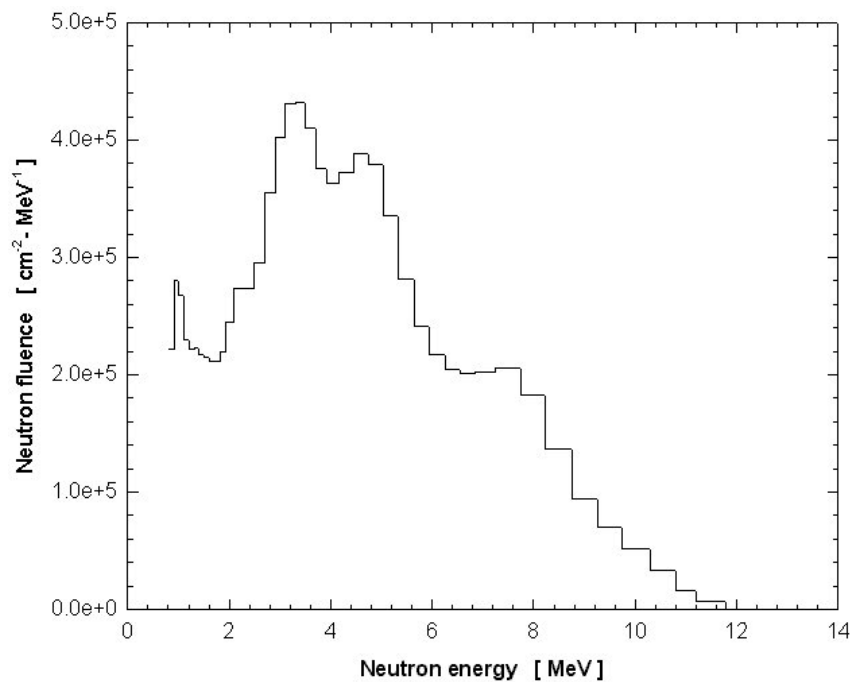


Рис. 2.1: Спектр нейтронів ізотопічного джерела з Pu та Be - мішенню

3 Постановка задачі

Метою даної роботи було створення моделі, яка б дала можливість отримати інформацію про елементи, що входять до складу океанічного дна.

3.1 Геометрії моделювання

Змодельована геометрія схожа на ту, яка використовувалась у проєкті SABAT [Літ. ??]Рис. 3.1, але з наступними відмінностями: по-перше, не моделювався корпус самої субмарини, так як він не ніс жодного корисного навантаження при проведенні розрахунків; по-друге, детектор та джерело були розташовані на більшій відстані та поміняні місцями; по-третє, на даному етапі було вирішено відмовитись від моделювання морського дна, так як це дуже суттєво знижувало ефективність виконання коду. Також було приділено більшу увагу моделюванню захисту детектора.

Геометрія, яка використовувалась для набору спектрів, зображена на Рис. 3.2, довжина ребра куба середовища 1 м., довжина ребра бічної поверхні мішені (Рис. 3.2 - 3) 40 см., від мішені до чутливого об'єму детектора 30 см., від чутливого об'єму до джерела 30 см., (відстані задані не враховуючи зовнішній захист) матеріал середовища був взятий з запропонованої бази матеріалів Geant4 - "G4_WATER". Джерело нейтронів поміщене в направляючий об'єм (Рис. 3.2 - 1), який виготовлений з тонкого шару свинцю. Чутливий об'єм детектора поміщений у захист зі свинцю, бору та алюмінію, направляючі об'єми заповнені повітрям (G4_AIR). Для спрощення моделювання точкове джерело нейтронів було розміщене всередині направляючого коаксіального об'єму (Рис. 3.2, 1 - червоного

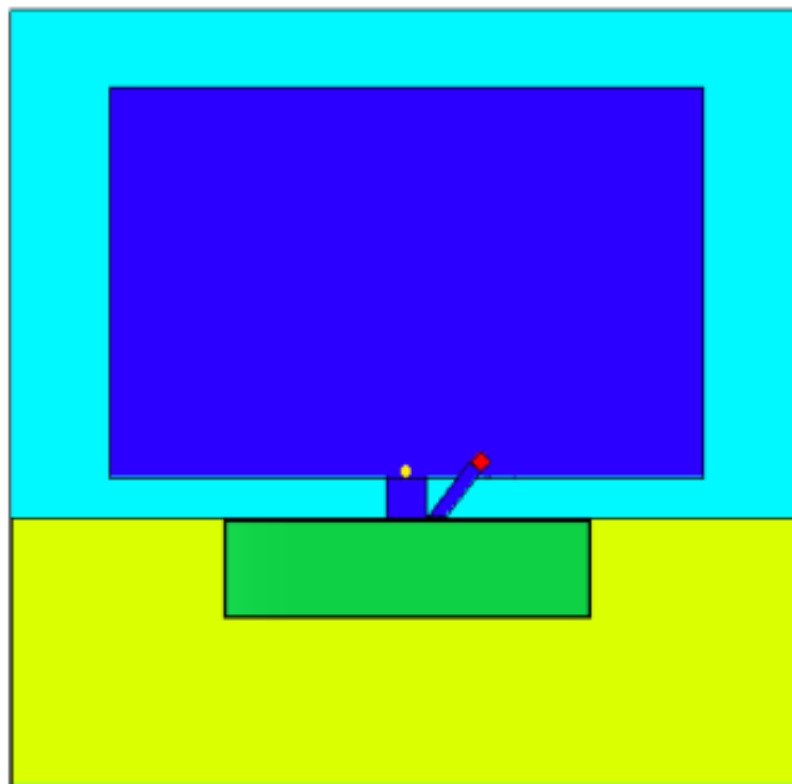


Рис. 3.1: Геометрія проекту SABAT

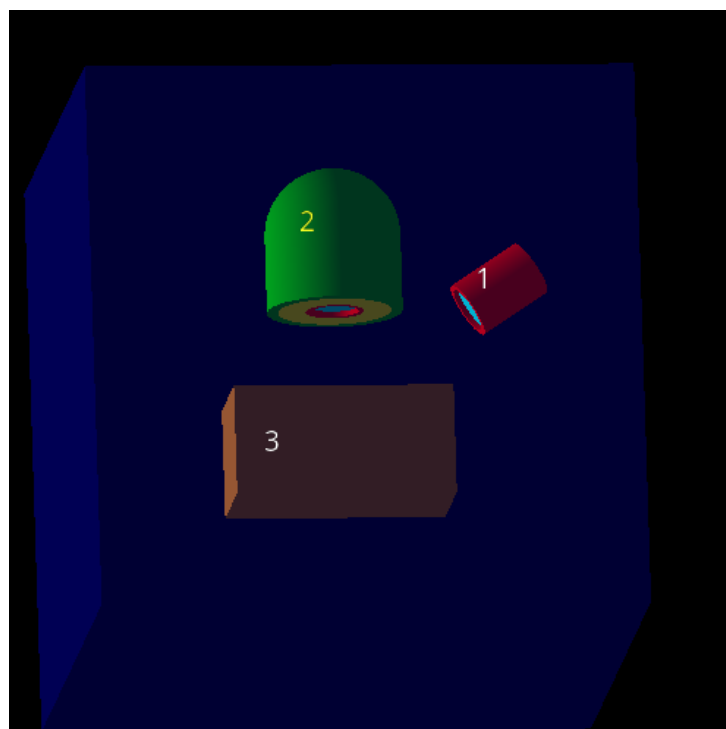


Рис. 3.2: Геометрія моделі, 1 - джерело і його направляючий об'єм, 2 - захист детектора та детектор, 3 - мішень

кольору) під кутом, для того, щоб більша кількість нейтронів потрапляла в поверхню, яка безпосередньо знаходиться під чутливим об'ємом детектора.

3.2 Чутливий об'єм детектора та захист

Для моделювання чутливого об'єму був обраний надчистий германій, з діаметром 60.6 міліметрів, та довжиною 56.7 міліметрів. Рис. 3.3.

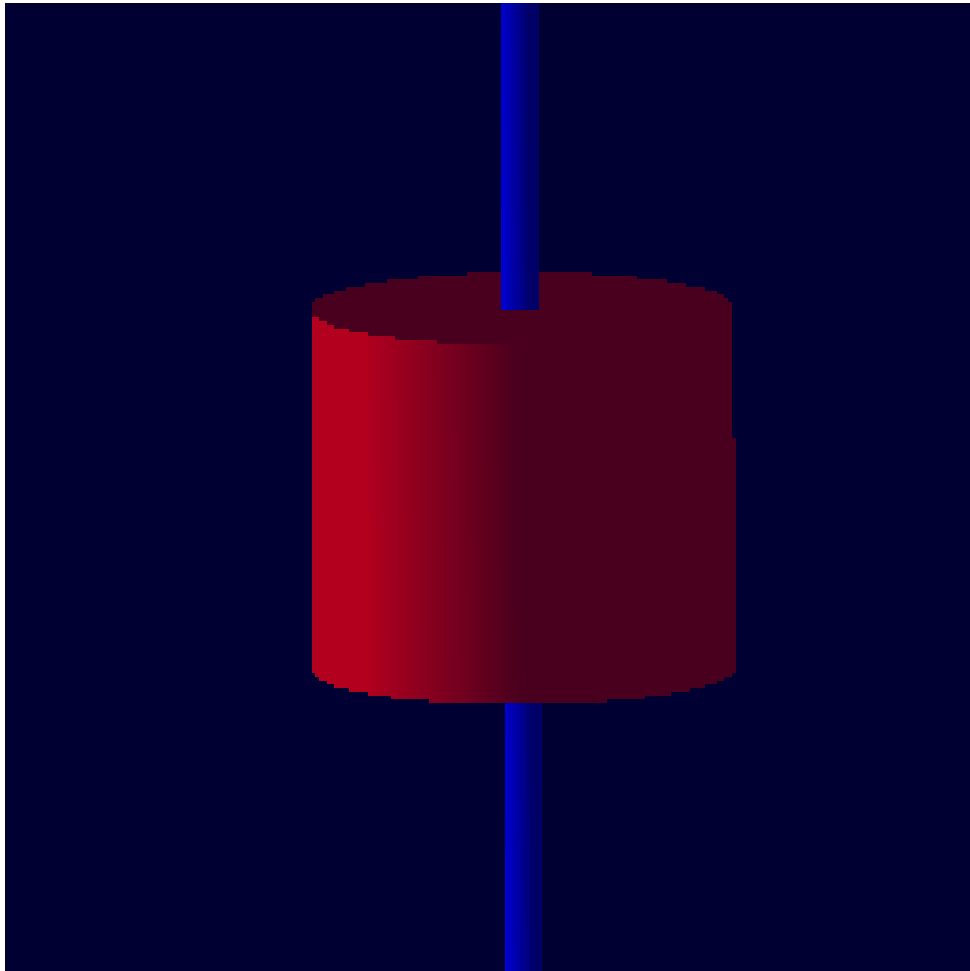


Рис. 3.3: Форма чутливого об'єму

За основу для моделювання було взято розміри детектора N21879A виробника від ORTEC AMETEK, параметри розмірів були взяті від офіційного дистриб'ютора.

Детектор буде розміщений поряд з джерелом нейтронів енергій 14.1

MeV. Тому детектор був розміщений у трьох шаровий захист Рис. 3.4. В

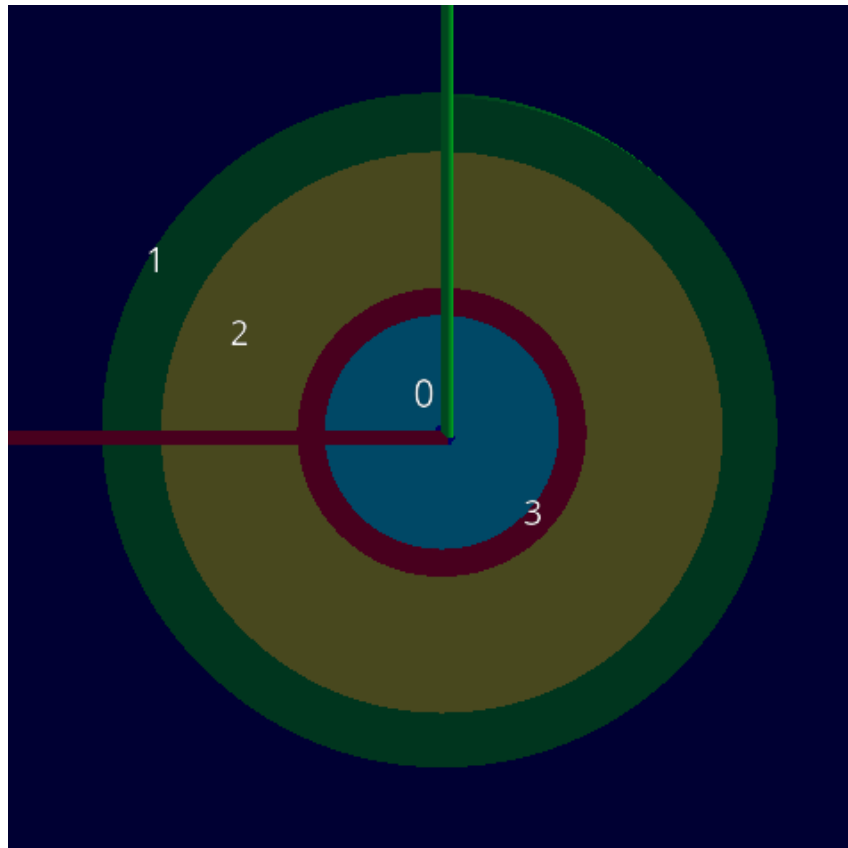


Рис. 3.4: Захист детектора: Al - 1 (зелений) товщина 2 см., В - 2 (жовтий) товщина 5 см., Pb - 3 (червоний) товщина 1 см. 0 (Блакитний) шар повітря

захисті використовується Бор для поглинання теплових нейтронів, так як вся детекторна система буде знаходитися під водою, то нейтрони від джерела будуть втрачати енергію при пружному розсіюванні на водню.

Для поглинання теплових нейтронів перед чутливим об'ємом детектора був обраний ^{10}B .

$^{10}\text{B}(n, \alpha\gamma)\text{Li}_3^7$, Переріз захоплення нейтрона ^{10}B $\sigma = 3380$ барн. $E_\gamma = 480$ кеВ, реакція з вильотом γ - кванту відбувається з ймовірністю 0.94.

Для зовнішнього корпусу захисту чутливого об'єму використовувався ^{26}Al - товщиною 1 см на Рис. 3.4 - зображений зеленим кольором

3.3 Досліджувані речовини

В рамках данного моделювання були розглянуті матеріали зазначені в Таб. 3.1.

Табл. 3.1: Елементи та ізотопи які входять до їх складу

Назва	Хімічна склад	Ізотопний склад
Гірчичний газ	$C_4H_8Cl_2S$	C^{12} , H^1 , Cl^{35} , S^{32}
Ютенбогардтит	Ag_3AuS_2	Ag^{108} , Au^{197} , S^{32}
Халькопірит	$CuFeS_2$	Cu^{64} , Fe^{56} , S^{32}
Збіднений уран	U	99.27% U^{238} , 0.7% U^{235} , 0.005% U^{234}

Найбільш інтенсивні піки для кожного з елементів, розглянуті в Табл. 3.2, використовувались елементи з бази доступної в Geant4

Табл. 3.2: Таблиця енергій найбільш інтенсивних піків

Елемент	Енергія, MeV
Cl	0.79, 1.17, 1.94, 2.12, 6.12, 7.79, 8.58
H	2.23
C	4.44
Fe	7.64, 9.30
S	2.96, 4.73
U	1.26
Ag	0.74, 6.26
Au	0.67, 1.087, 2.24, 1.37

3.4 Опис програмної моделі

Моєю метою було написати максимально зручний код для набору спектрів за різних умов та на різних мішенях, тому були створені абстрактні

класи для створення геометричних об'єктів. Для зручності створення матеріалів були створенні структури. Та для пришвидшення роботи всі можливі константи були ініціалізовані на етапі компіляції. Для полегшення контролю над пам'яттю використовувалися розумні вказівники C++ 14 стандарту. Архітектура коду моделювання зображена на Рис. 3.5.

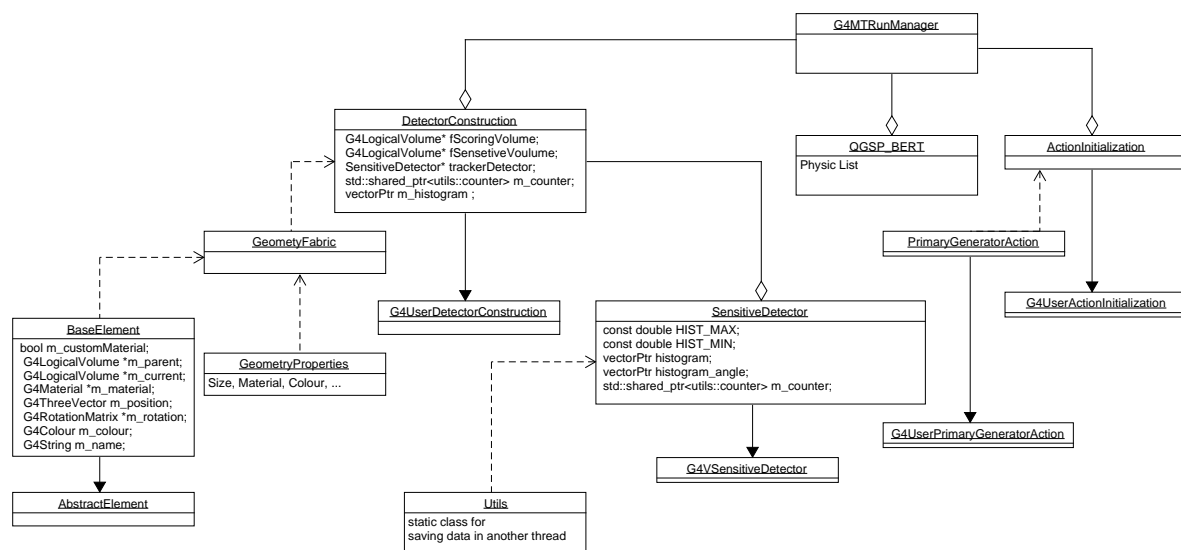


Рис. 3.5: Діаграма класів коду моделі

Проаналізувавши різницю між двома фізичними моделями *QGSP_BERT_H* та *QGSP_BERT*, для проведення моделювання, була обрана *QGSP_BERT* - так, як на даному етапі вона виявилась більш підходящою через вищу продуктивність.

4 Аналіз результатів

4.1 Опис обробки спектру

В результаті моделювання набирались апаратні спектри. Встановлена роздільна здатність на апаратному спектрі дорівнювала 16384 біни. Далі, для наближення спектру до реального, було проведено його згладжування за наступною формулою: $\Delta E = 2.36\sqrt{F\frac{w}{E}}w$, ΔE - енергія на один бін, F - Фано фактор, w - енергія на утворення пари. Потім спектр нормувався на кількість нейтронів з джерела, так як для спрощення побудови джерела в моделі використовувалась спрощена геометрія, а генерація нейтронів відбувалася майже строго у заданому напрямку і джерело нейтронів вважалось ізотропним, то загальна кількість частинок розраховувалась наступною формулою: $4\pi n = N$, де N — це загальна кількість частинок. В моїй роботі для згладжування спектру були взяті наступні параметри Табл. 4.1

Табл. 4.1: Таблиця значень для уширення піків

Параметр	Значення	Розмірність
F	0.13	-
w	3.62	eV

Фон Рис. 4.1 набирался за тій самої геометрії, що й на Рис. 3.2, але за відсутності мішені (З - коричневий паралелепіпед). У фоні були проаналізовані наступні три піки: Н з $E_\gamma = 2.23\text{MeV}$, два піки які були отримані за рахунок захоплення теплових нейтронів Ge з $E_\gamma = 0.505\text{MeV}$, $E_\gamma = 1.42\text{MeV}$. Це означає, що за даної геометрії частина нейтронів від джерела, проходячи через захист, потрапляє в чутливий об'єм детектора та призводить до його руйнації. Дані піки відповідають пікам

HPGe Background

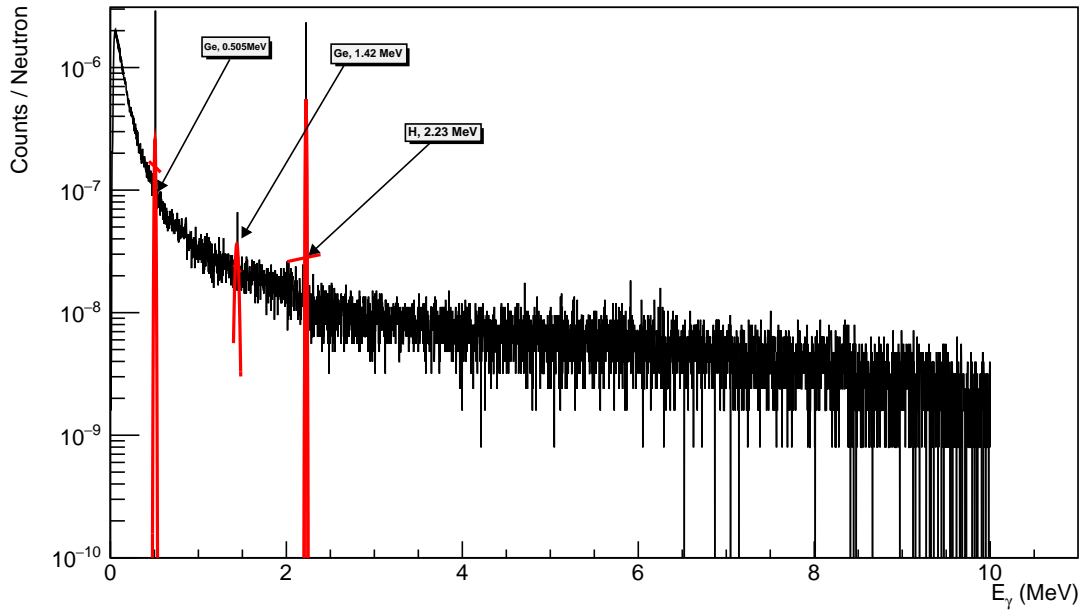


Рис. 4.1: Фон

$^{72}\text{Ge}(n, \gamma)\text{Ge}^{73}$ - реакції з нейтронами енергій близькими до теплових - $E_n = 0.025\text{eV}$. ^{72}Ge - основний ізоотоп Ge, і саме він використовується в основі чутливого об'єму.

Табл. 4.2: Фонові піки

E_γ , MeV	ΔE , MeV	$I = I_\gamma / I_b$	ΔI
0.505	0.008	12	3
1.420	0.004	20	4
2.230	0.003	22	4

4.2 Валідація моделі

Для підтвердження можливості проведення наборів на моїй моделі, був набраний спектор для Гірчичного газу ($\text{C}_4\text{H}_8\text{Cl}_2\text{S}$) Рис 4.2, та порівняний з отриманим спектром в проекті SABAT [Літ. ??]. Цей спектр набирался для валідації моделі, тому до уваги бралися лише ті піки, які були вказані в проекті SABAT[Літ. ??] Табл. 4.3.

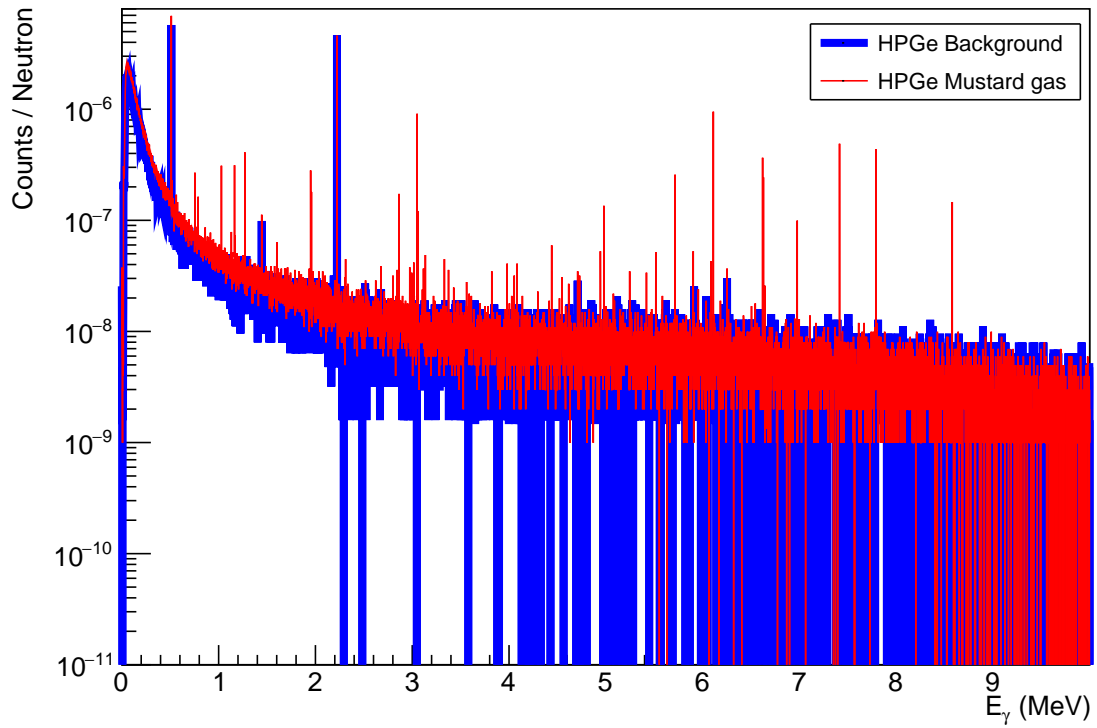


Рис. 4.2: Червоним - представлений спектр для Гірничного газу. Синім - фону

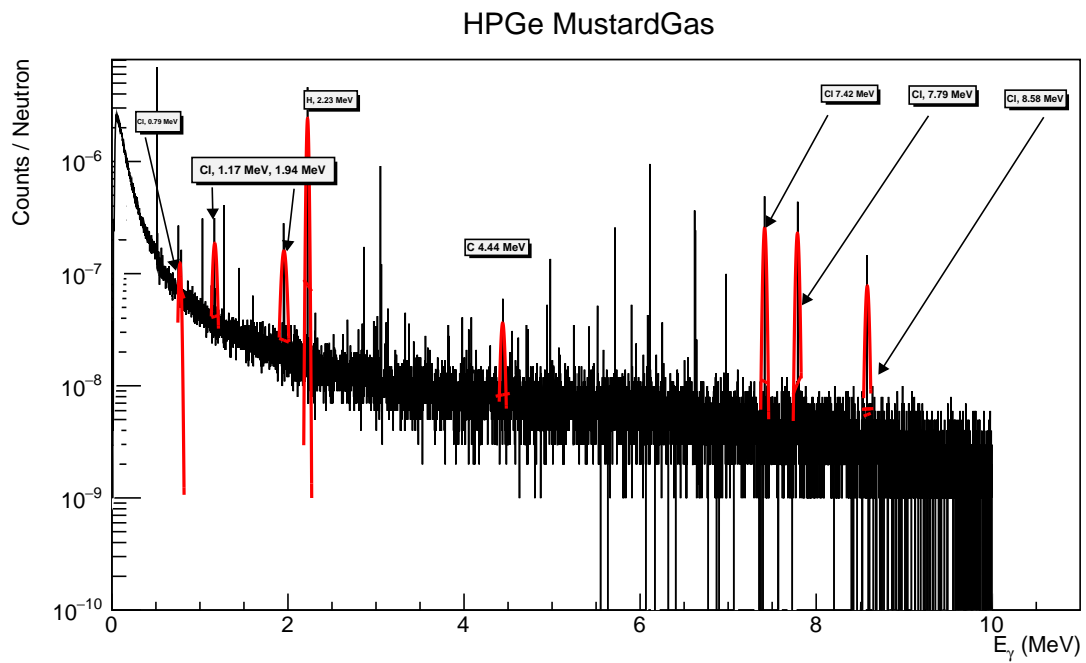


Рис. 4.3: Ініціалізація піків, Cl, H, C - в спектрі гірничного газу

Табл. 4.3: Піки гірничного газу - $C_4H_8Cl_2S$

E_γ , MeV	ΔE , MeV	$I = I_\gamma/I_b$	ΔI	Елемент
0.79	0.008	12	3	Cl
1.165	0.004	20	4	Cl
1.95	0.003	22	4	Cl
4.44	0.003	22	4	C
7.41	0.003	23	4	Cl
7.78	0.003	23	4	Cl
8.58	0.003	22	4	Cl

4.3 Дослідження (n, γ) реакцій, Au та Cu

$^{197}\text{Au}(n, \gamma)\text{Au}^{198}$ - реакція захоплення нейтрона, переріз захоплення нейтронів в залежності від енергії зображено на Рис. 4.4.

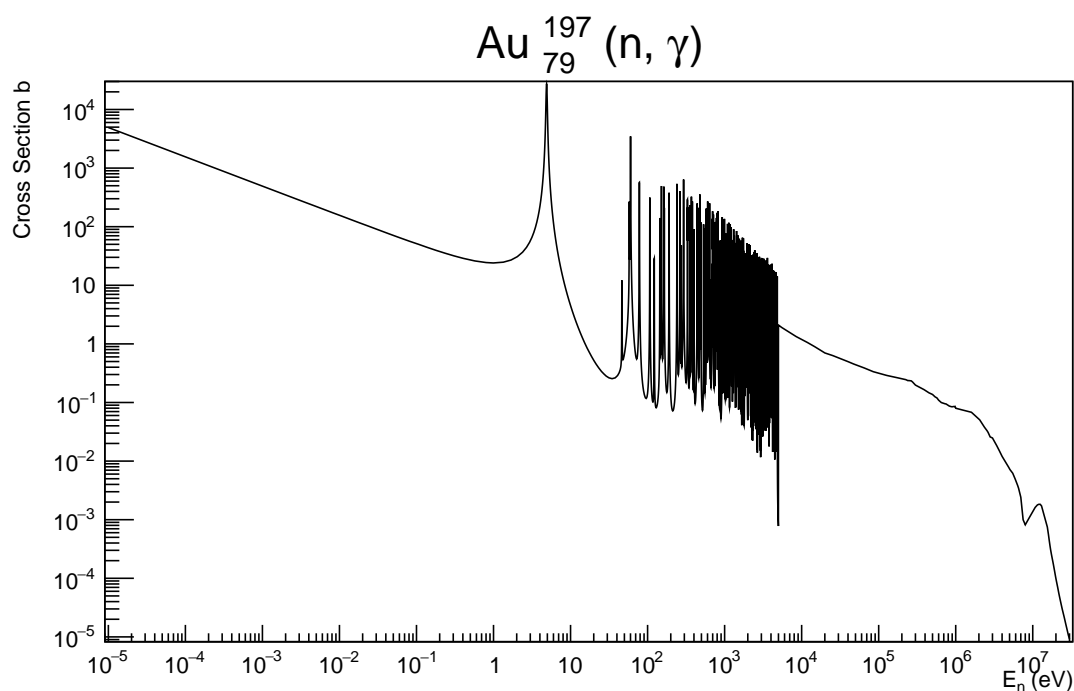


Рис. 4.4: Залежність захоплення нейтрона від енергії нейтронів в реакції $^{197}\text{Au}(n, \gamma)\text{Au}^{198}$

^{198}Au - ізоотп, має 2 - рівні, в результаті розпаду з яких випромінюються гамма кванти, $T_{1/2} = 2.6$ днів. На Рис. ?? зображено перехід з

збудженого $J\pi$ 12- на J/π 2- з якого, у даного ізотопу відбувається β^- розпад до стабільного $^{198}_{80}\text{Hg}$.

^{198}Hg - має два збуджені рівні $J\pi$ 2+ - перехід в основний стан відбувається з випромінення γ -кванту $E_\gamma = 1087\text{keV}$, каскадний перехід є основним способом переходу на стабільний рівень ^{198}Hg , відбувається з випромінення двох γ -квантів $E_\gamma = 675\text{keV}$ та $E_\gamma = 411\text{keV}$.

На Рис. 4.4 - гарно видно, що є резонансна область поглинання, яка розтягується до енергій нейтронів декілька кеВ.

Табл. 4.4: E_γ , для нейтронів з енергіями поблизу резонансної області для ^{197}Au

E_n , eV	E_γ , кеВ	ΔE_γ , кеВ	$I_\gamma/100n$	ΔI
4.9	6252.6	0.7	40.0	1.6
4.9	6457.8	0.7	20.4	0.5
4.9	5710.7	0.7	10.1	0.7
60	6061.3	0.9	16.2	1.5
60	5710.7	0.7	16.0	1.5
78	4958	1.0	10.5	0.6
107	5808.2	0.9	17.3	1.0

В реакції $^{64}\text{Cu}(n, \gamma)\text{Cu}^{65}$ переріз захоплення теплового нейтрона $\sigma = 2.1 \times 10^3 \pm 1.9 \times 10^3$ барн. ^{65}Cu - стабільний елемент, $^{65}\text{Cu}(n, \gamma)\text{Cu}^{66}$. Для даного ізотопу спостерігається існування резонансної області в діапазоні десятків кеВ Рис. 4.5. ^{66}Cu - не стабільний ізотоп, якому притаманний β^- розпад в $^{66}_{30}\text{Zn}$, $T_{1/2} = 5.12$ хвилин. ^{66}Zn - стабільний ізотоп з основним рівнем $J\pi$ 0+. β^- - розпад ^{66}Cu в основному відбувається у стабільний стан, але є ймовірність розпаду на $J\pi$ 1+ рівень, з подальшим випромінювання γ - кванту з енергією $E_\gamma = 1039\text{keV}$. Рис. ??

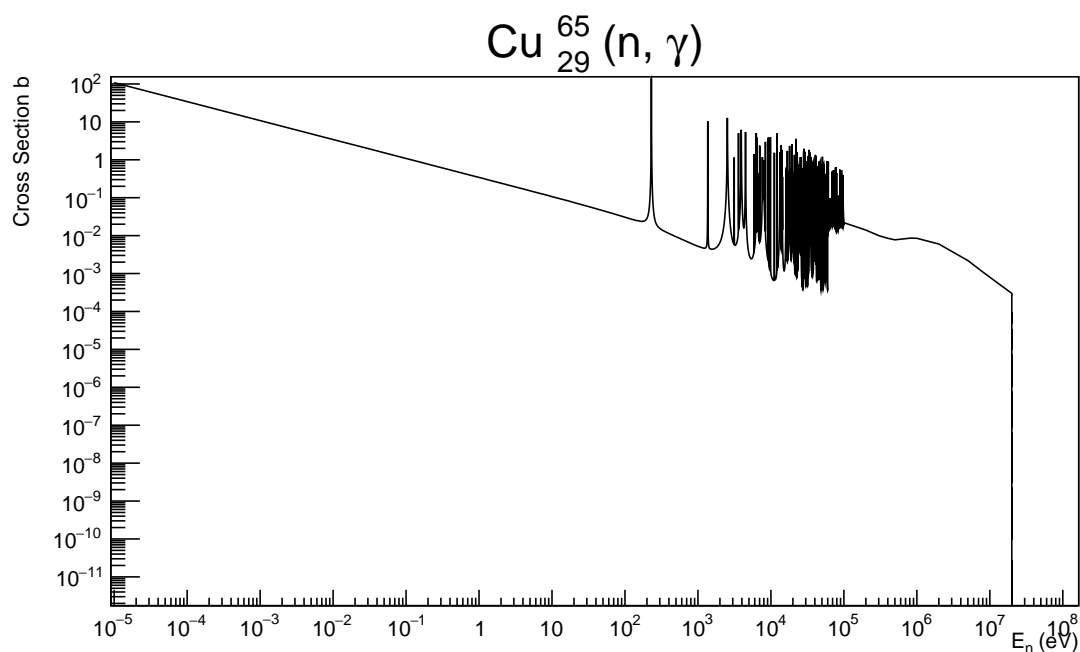


Рис. 4.5: Залежність захоплення нейтрона від енергії нейтронів в реакції $^{65}\text{Cu}(n, \gamma)^{66}\text{Cu}$

4.4 Аналіз спектрів Ag_3AuS_2

Виконано аналіз можливості детектування ютенбогартита Ag_3AuS_2 - Родовища з даними мінералами були знайдені на Камчатці, поблизу узбережжя. Даний мінерал відноситься до рідкісних золотоносних руд, зустрічається в природі у твердому стані. Був знайдений на Камчатських родовищах. Рис. 4.6 Даний спектр і фон були набрані при опроміненні нейтронами з джерела максимальної енергії 14.1 MeV. Для порівняння було проведено опромінення за допомогою нейтронів енергією 8.5 MeV. Рис. ??.

Для того щоб проаналізувати можливість використання ізотопних джерел був набраний спектор за енергій нейтронів 2.8 MeV Рис. ??

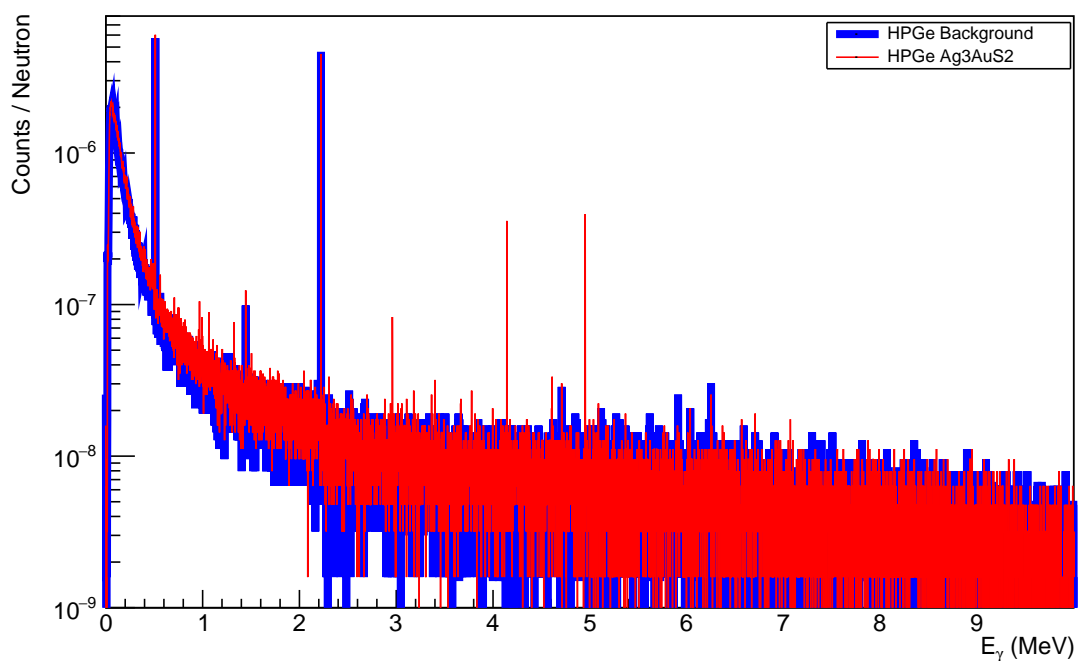


Рис. 4.6: Червоним - представлений спектр для Ag_3AuS_2 . Синім - фону

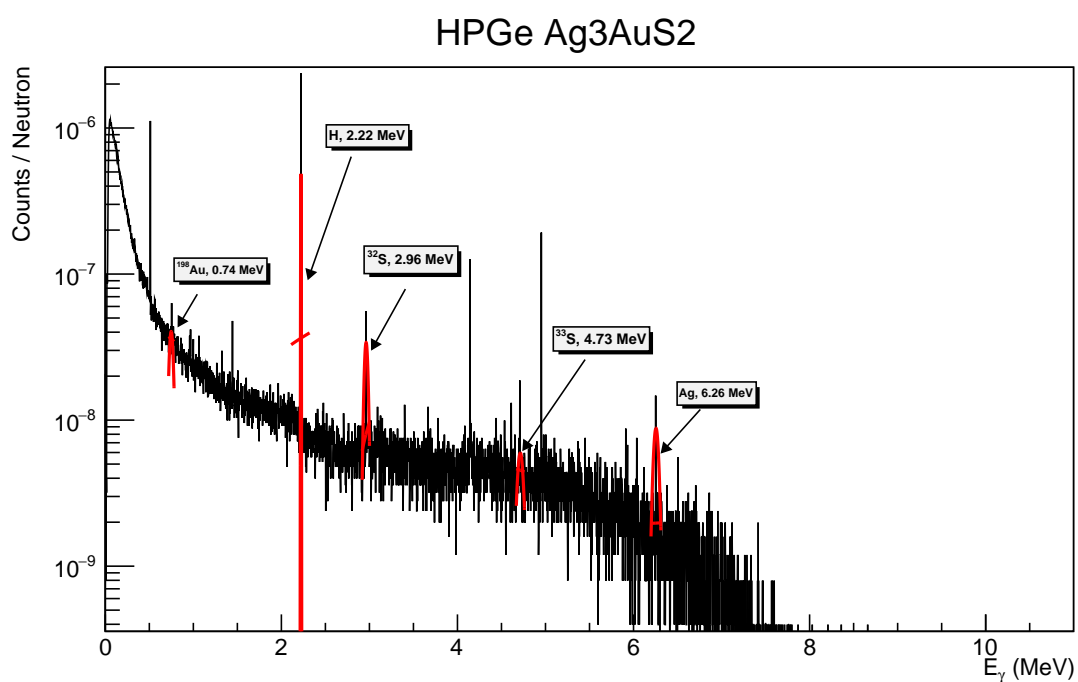


Рис. 4.7: Спектр Ag_3AuS_2 , $E_n = 8.5 MeV$ - енергія нейтронів з джерела

4.5 Аналіз спектрів $CuFeS_2$

Даний мінерал являється основною складовою мідної руди, спектр для нього представлений на Рис. 4.8.

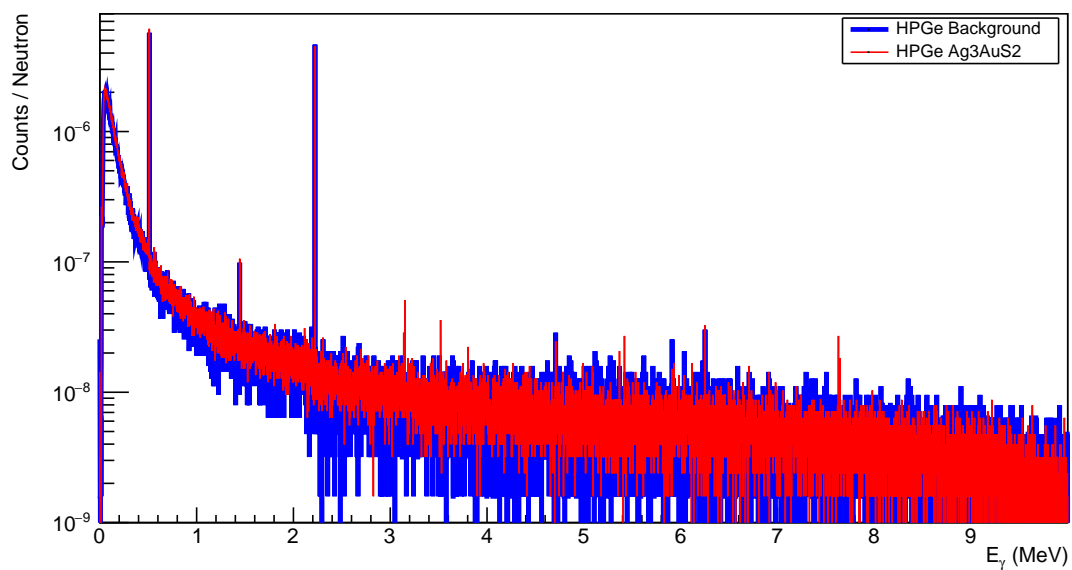


Рис. 4.8: Червоним - представлений спектр для $CuFeS_2$. Синім - фону

4.6 Аналіз спектру U^{238}

Було обрано збіднений уран з наступним ізотопним складом: 99.27%— ^{238}U , 0.72%— ^{235}U , 0.005%— ^{234}U . У ході набору було отримано наступний спектр Рис. 4.9.

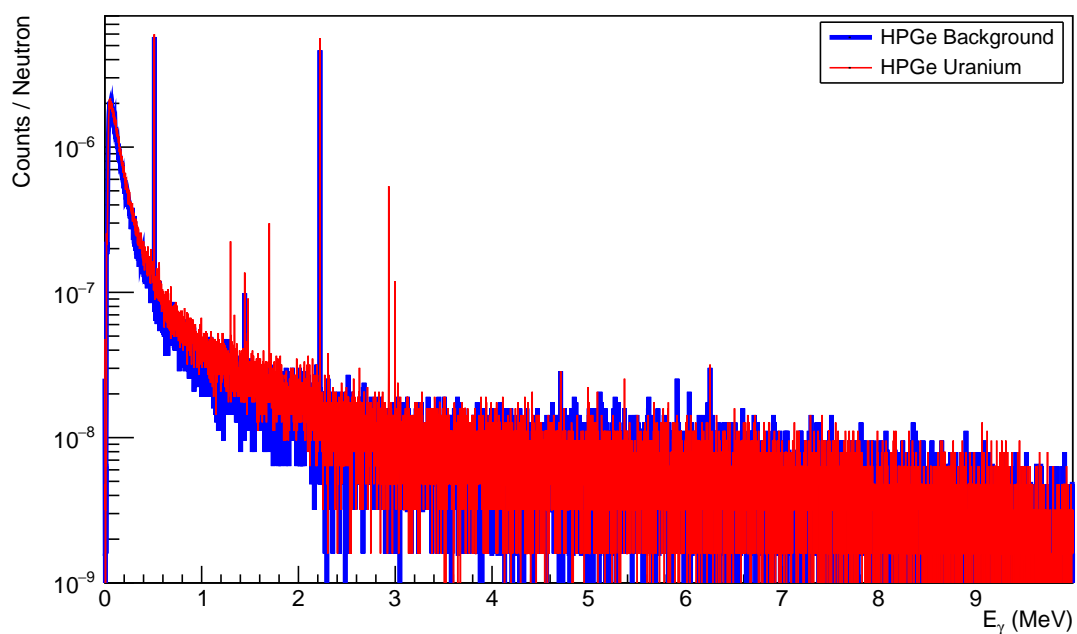


Рис. 4.9: Червоним - представлений спектр для ^{238}U . Синім - фону

4.7 Оцінка чутливості

Для всіх представлених спектрів з енергіями нейтронів 14.1 MeV, було проведено моделювання для 314 мільйонів частинок. Розрахунок проводиться за наступною формулою $4\pi n = N$, де $n = 25 \times 10^6$ частинок. Об'єм, в який була поміщена досліджувана речовина, дорівнює 16 дм³.

$I_H = 93.4 \pm 9.3$ - відношення площі піку водню до фону.

Табл. 4.5: Відношення піків елементів мінералу до піку водню, розрахунок інтенсивності на один грам речовини

Ізотоп	E_γ , MeV	ΔE_γ , MeV	$I = I_\gamma/I_b$	ΔI	I/I_H	$I/m \times 10^{-12} \text{ г}^{-1} \text{ н}^{-1}$
^{198}Au	0.749	0.008	10.6	2.6	0.113	4.49
^{32}S	2.96	0.01	43.04	4.48	0.46	8.72
^{33}S	4.734	0.013	1.46	0.13	0.015	2.9
^{107}Ag	6.257	0.017	22.37	1.83	0.24	3.02

5 Висновки

Метою даної роботи було створення моделі для детектування елементів, що входять до складу корисних копалин на дні океану та її валідація.

Для роботи було обрано ряд матеріалів, що входять до складу металічних руд.

Для кожного з даних матеріалів були набрані та проаналізовані спектри, та встановленні значення інтенсивності відносно фону.

Модель була успішно завалідована.

Проведення набору спетрів для нейтронів різних енергій дало можливість виявити та зареєструвати недоліки даної моделі та геометрії.

На даному етапі було проведено перевірку використання даної моделі для обмеженої кількості речовин.

Встановлена відстань від джерела нейтронів до досліджуваної речовини може варіюватися і бути більшою за 30 см. при енергіях нейтронів 14.1 MeV.