МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ

Київський національний університет імені Тараса Шевченка

Фізичний факультет

Кафедра ядерної фізики

На правах рукопису

**Вивчення можливості використання нейтронно – активаційного аналізу для пошуку небезпечних речовин на морському дні**

**Галузь знань:** 10 Природничі науки

**Спеціальність:** 104 Фізика та астрономія

**Освітня програма:** Фізика

**Спеціалізація:** Фізика високих енергій

**Кваліфікаційна робота бакалавра:**

студента 4 курсу

Муляр Андрій Васильович

**Науковий керівник:**

доцент

Єрмоленко Руслан Вікторович

Робота заслухана на засіданні кафедри \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ та рекомендована до захисту на ЕК, протокол № \_\_\_\_\_\_ від «\_\_\_\_» \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ 2020 р.

Завідувач кафедри проф. Каденко І.М

Київ – 2020

**ВИТЯГ**

з протоколу № \_\_\_\_\_\_

засідання Екзаменаційної комісії

Визнати, що студент \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ виконав та захистив кваліфікаційну роботу бакалавра з оцінкою \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_.

Голова ЕК \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_

«\_\_\_\_» \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ 2020 р.

**АНОТАЦІЯ**

**Муляр А.В.** «Вивчення можливості використання нейтронно – активаційного аналізу для пошуку небезпечних речовин на морському дні». Кваліфікаційна робота бакалавра за напрямом підготовки 6.040203 – Фізика, спеціалізація «Фізика високих енергій». – Київський національний університет імені Тараса Шевченка, фізичний факультет, кафедра ядерної фізики. – Київ, 2020.

**Науковий керівник:** доцент Єрмоленко Р.В.

В рамках даної роботи було проведено вивчення нейтронно – активаційного аналізу і використання фреймворка Geant4 для моделювання досліджуваної експериментальної моделі. Отримано результуючі спектри моделювання для досліджуваних речовин. Також, в ході роботи було опрацювання результатів з нашої моделі та розгляд ядерних реакцій.

**Ключові слова:** нейтронно – активаційний аналіз, аналіз, НАА, спектроскопія.

**SUMMARY**

**Mulyar A.V.** "Exploring the Possibility of Using Neutron - Activation Analysis to Search for Hazardous Substances on the Seabed". Bachelor's qualification work in the field of preparation 6.040203 - Physics, specialization "High Energy Physics". - Taras Shevchenko National University of Kyiv, Faculty of Physics, Department of Nuclear Physics. - Kyiv, 2020.

**Scientific adviser:** Associate Professor Yermolenko R.V.

In the framework of this work, the study of neutron - activation analysis and the use of the Geant4 framework for modeling the experimental model were conducted. The resulting simulation spectra for the test substances are obtained. Also, in the course of the work was the processing of results from our model and consideration of nuclear reactions.

**Key words:** neutron - activation analysis, analysis, NAA, spectroscopy

ЗМІСТ

[1. Вступ 2](#_Toc41075418)

[2. Теоретична частина 3](#_Toc41075419)

[2.1. Активаційний аналіз (АА) 3](#_Toc41075420)

[2.2. Аналітичні можливості ННА 6](#_Toc41075421)

[3. Практична частина 7](#_Toc41075422)

[3.1. Постановка експерименту 7](#_Toc41075423)

[3.2. Опис геометрії детектуючої установки 8](#_Toc41075424)

[3.3. Валідація моделі 9](#_Toc41075425)

[3.4. Моделювання і аналіз Фосгену (COCl2) 11](#_Toc41075426)

[4. Висновок 13](#_Toc41075427)

[5. Список літератури 14](#_Toc41075428)

# Вступ

За останні роки відбувся чудовий прогрес в науці та промисловості, що дозволяє нам будувати і використовувати більш потужні пристрої. Поки ми мріємо дослідити космос і побувати на інших планетах ми не помічаємо як наші водойми з водою стають все більш забрудненими. У воді знаходяться велика кількість мусора, який ми можемо побачити лише частково. А що знаходиться на глибині наших океанів, все там так чудово як ми думаєм?

Океани займають більшу частину нашої планети і ми зараз не знаємо, що може приховувати від нас глибина, оскілки потрапити в низ майже не можливо. Для дослідження морських глибин стандартні методи є дуже складними через високі тиски і невідомі умови.

Опираючись на дослідження, яке проводилося у Балтійському морі проектом SABAT, цілю якого було пошук небезпечних речовин на морському дні використовуючи нейтронно – активаційний аналіз, я вирішив проаналізувати можливість використання зменшеної моделі для аналогічних цілей. Зменшення і внесення змін в конструктивну будово можливо допоможе покращити дослідження, збільшивши удобство використання і доступ до більших глибин океанів.

# Теоретична частина

## Активаційний аналіз (АА)

АА – метод визначення складу речовини, що базується на активації атомних ядер і дослідженні радіоактивного випромінювання, яке виникає внаслідок зміни нуклонного складу або енергетичного стану ядра. Активаційний аналіз найбільш розповсюджений ядерно – фізичний метод визначення складу речовини. Вперше був запропонований Г. Хевеші (G. Hevesy) і Г. Леві (Levi) (1936 р.). Зразок опромінюють потоком частинок або гамма – квантів (активація). У результаті ядерних реакцій частина ядер перетворюється на радіоактивні чи збуджені ізотопи. Ідентифікація елементів і кількісний аналіз виконується шляхом вимірювання інтенсивності та енергій випромінювань, а також вимірювання періоду напіврозпаду радіоактивних ядер.

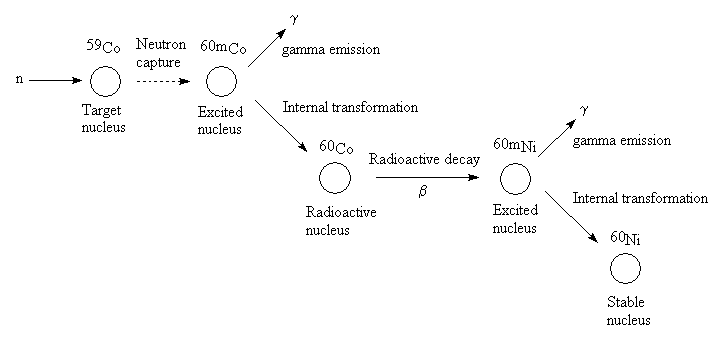
В основі даного методу лежать ядерні процеси, тому його результати не залежать від того, до якої хімічної сполуки входять атоми елементів, що аналізуються. Кількісне визначення складу речовини при активаційному аналізі ґрунтується на тому, що при дотримані певних умов активність радіонуклідів (аналітичного ізотопу), який утворився, пропорційна кількості ядер вихідного нукліда елемента, що аналізується. Більш поширеним є відносний метод вимірювань, при якому активність зразка порівнюється з активністю еталона, що містить відому кількість елемента, що підлягає аналізу, опроміненого в ідентичних із зразком умовах. Активаційний аналіз поділяється за видом активуючого випромінювання на нейтронно – активаційний, гамма-активаційний, активаційний аналіз на заряджений частинах (протонах, нейтронах, альфа – частинок і важких іонах). Найвідоміші перші 2 методи а.а., на заряджений частинах у зв’язку з їхніми малими пробігами в речовині використовують головним чином для аналізу тонких шарів і при вивчені поверхневих явищ, зокрема абсорбції. Широке застосування нейтронно – активаційного аналізу зумовлено його високою чутливістю, пов’язаною з великим перерізом реакції захоплення ядрами теплових нейтронів і наявністю потужний джерел нейтронів (ядерних реакторів, прискорювачів тощо). Чутливість (межа виявлення) більшості елементів при використанні нейтронних потоків ~ 1017 м-2\*с-1 становить 10-5 – 10-10 %. Межа виявлення ~ 10-4 – 10-6 %, яка є достатньою для вирішення багатьох завдань, може бути досягнута при використанні ампульних нейтринних джерел (каліфорнієвого, сурмо – берилієвого). Аналіз легких елементів, що погано активуються тепловими нейтронами (C, N, O), проводиться за допомогою швидких нейтронів, які отримують на прискорювачах і нейтронних генераторах, а також при використанні гамма – випромінювання. Для гамма – активаційного аналізу використовується гальмівне випромінювання високої інтенсивності (1014 – 1015 квант/с). Фотоядерні реакції активують практично всі елементи періодичної системи елементів з межею виявлення ~ 10-4 – 10-7 %. Розрізняють так званий інструментальний активаційний аналіз, який полягає у вимірюванні активності опроміненого зразка (без його руйнування) методами ядерної спектроскопії, і більш точний – активаційний аналіз з використанням хімічний реакцій для відокремлення аналітичних ізотопів від інших ядер, активність яких перешкоджає вимірюванням. Визначається активність за допомогою детекторів частинок. Найкращі результати дають гамма – спектрометри.

Рис.2.1.1: Зразок реакій при нейтронно - активаційному аналізі

Головні переваги активаційного аналізу: можливість визначення малого вмісту елементів у різних об’єктах і проведення масових експрес – аналізів зразка, застосування для визначення домішок у надчистих матеріалах, вмісту мікроелементів у біологічний об’єктах екологічних, фармацевтичних і медичних дослідженнях, а також для контролю технологічний процесів і якості виробленої продукції.

## Аналітичні можливості ННА

Нейтронно – активаційний аналіз може виявити до 74 елементів залежно від експериментальної процедури. Мінімальні межі виявлення від 0,1 до 106 нг г-1 залежно від елемента. Важчі елементи мають більше ядро, тому вони мають велику площу перетину захоплення нейтрона і швидше за все, будуть активовані. Деякі ядра можуть захоплювати нейтрони та залишатися відносно стабільними, не зазнаючи трансмутацій або розпаду протягом багатьох місяців або навіть років. Інші ядра миттєво розпадаються і утворюють лише стабільні ізотопи.

Таблиця 2.2.1: Розрахункові межі виявлення для ННА з використанням гамма - квантів (при опроміненні в реакторі нейтронами 1013 н\*см-2\*с-1

|  |  |
| --- | --- |
| Чутливість (пікограм) | Елементи |
| 1 | Dy, Eu |
| 1 – 10 | In, Lu, Mn |
| 10 – 100 | Au, Ho, Ir, Re, Sm, W |
| 100 – 1000 | Ag, Ar, As, Br, Cl, Co, Cs, Cu, Er, Ga, Hf, I, La, Sb, Sc, Se, Ta, Tb, Th, Tm, U, V, Yb |
| 103 – 104 | Al, Ba, Cd, Ce, Cr, Hg, Kr, Gd, Mo, Na, Nd, Ni, Os, Pd, Rb, Rh, Ru, Sr, Te, Zn, Zr |
| 104 – 105 | Bi, Ca, K, Mg, P, Pt, Si, Sn, Ti, Tl, Xe, Y |
| 105 – 106 | F, Fe, Nb, Ne |
| 107 | Pb, S |

# Практична частина

## Постановка експерименту

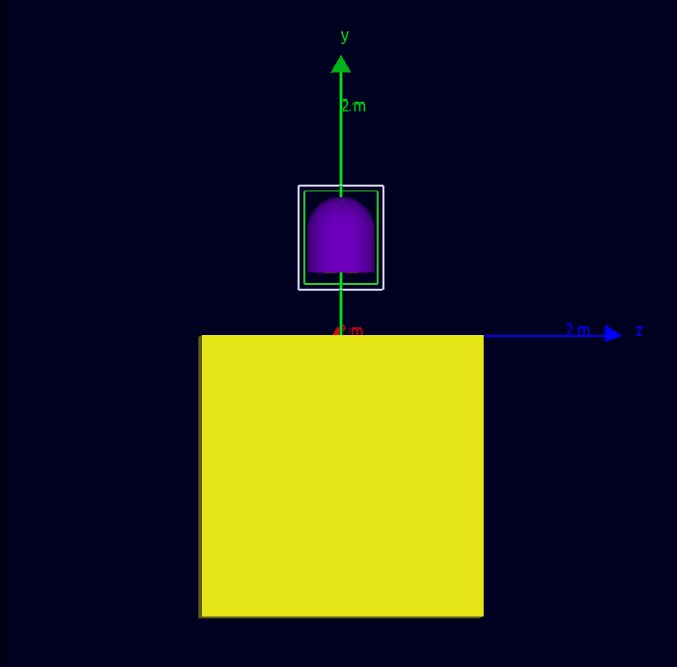
Ознайомившись з геометрією проекта SABAT було вирішено, що для наших цілей потрібно змінити геометрію. Для проведення тестового моделювання була написана програма на Geant4 в якій було описано експериментальний простір із зміненою геометричною моделлю. Весь експериментальний простір розміщений в кубі з ребром 2 м, який показано на Рис.3.1.1. В даному просторі розміщено точкове джерело нейтронів, детектуюча установка і мішень (досліджувана речовина) у формі жовтого кубу з ребром 1 м. Фон набирається без наявності мішені. Відстань детектора до мішені – 32 см, а до джерела нейтронів – 1 м.

Рис.3.1.1: Вигляд експериментальної моделі для моделювання

## Опис геометрії детектуючої установки

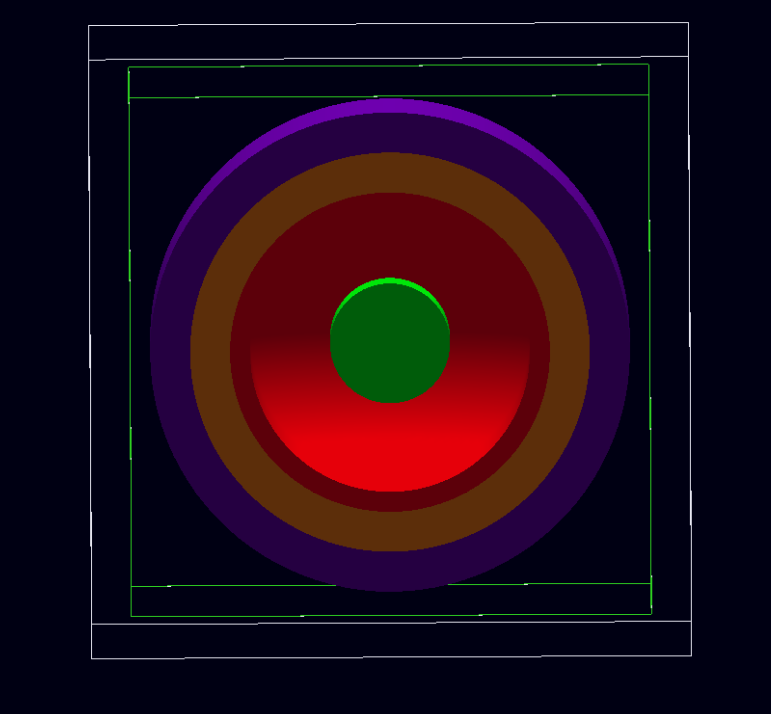
Детектуюча установка складається з чутливого об’му (детектора) і його захисту, які розміщуються в середині алюмінієвого (Al) прямокутника заповненого повітрям з розмірами 30см\*37см\*30см. Захист чутливого об’єму складається з 3 шарів, призначений для зменшення і послаблення впливу нейтронів і інший частинок у детектора. На Рис.3.2.1 зображено конструктивну будову всьої установки. Алюмінієва стінінка призначенна для врахуавння реального впливу від обовязкового зовнішнього захисту з товщиною стін – 2 см. Вся серидна заповнена повітрям, що відповідає зеленому прямокутнику.

Рис.3.2.1: Будова детектуючої установки.

Кожен шар виконує свою роль у захисті:

* Фіолетовий шар – парафін (C31H64) з товщиною – 4 см. Парафін використовуємо для додатково поглиння енергії нейтронів при пружних взаємодія з воднем, оскільки у водню переріз реакції є найбільшим. Окрім парафіну вода також сильно буде термалізувати нейтрони.
* Оранжевий шар – кадмій (Cd) з товщиною – 4 см.
* Червоний шар – свинець (Pb) із товщиною – 3 см.

Всередині захисту розміщено чутливий об’єм – зелений циліндр. Розміри залежать від того, який був використаний детектор при моделювані: сцинтиляційний чи напівпровідниковий. Сцинтиляційний детектор має діаметри – 12 см і висоту – 6 см, а напівпровідниковий відповідно: діаметр – 6 см та висота – 6 см.

## Валідація моделі

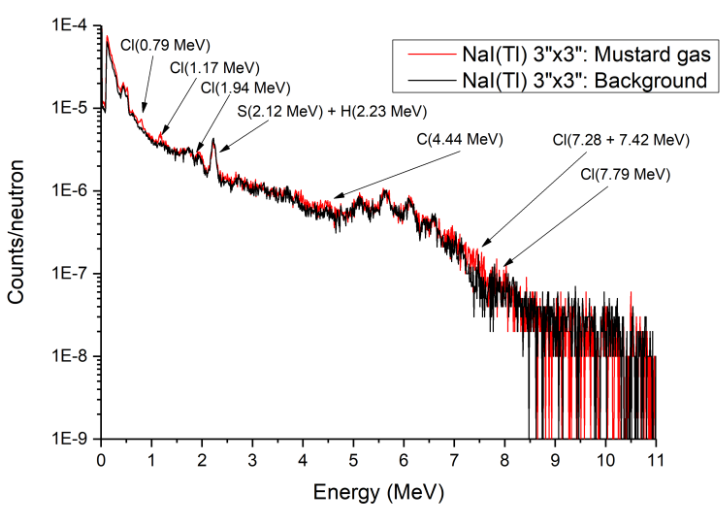
Вважаючи експериментальні результати проекту SABAT достовірними, будемо

Рис.3.3.1: Спектр моделювання експерименту SABAT

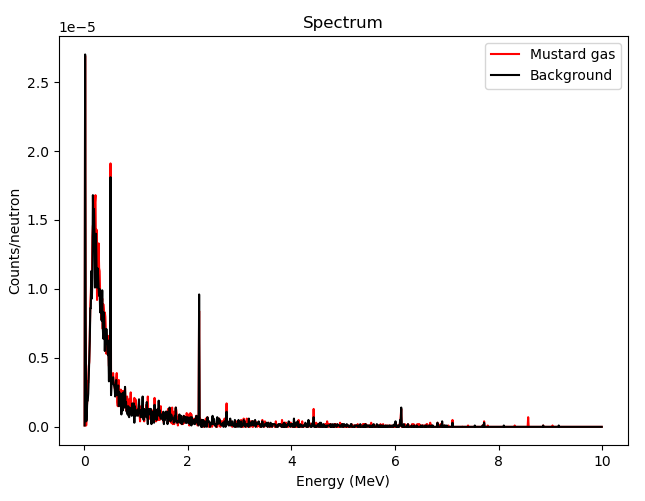
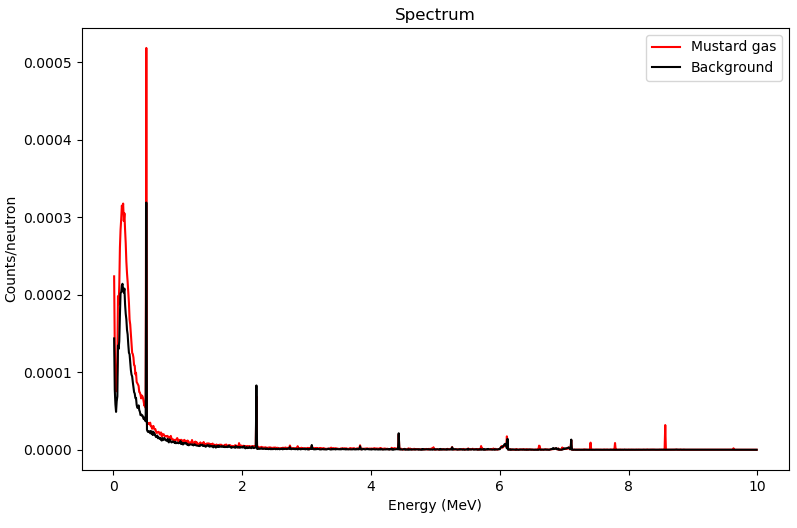


Рис.3.3.3: Спектр моделювання із зміненим положенням джерела нейтронів.

Рис.3.3.2: Спектр моделювання геометрії з пункту - 3.1

звіряти наші результати із зміненою геометрією, щоб підтвердити її достовірність. Моделювання SABAT для Гірчичного газу (C4H8Cl2S) проводилось із використанням програмному забезпечені MCNP і показано на Рис.3.3.1. У ролі детектора було обрано сцинтилятор NaI(Tl). Ми провели наше моделювання використовуючи Geant4 із вказаною геометріє в пункті – 3.1. Постановка експерименту з сцинтилятором, але змінивши його розміри. Результати моделювання показано на Рис.3.3.2 і Рис.3.3.3. Рис.3.3.2 відповідає зміненому розміщенню джерела нейтронів. Аналізуючи отримані нами спетри Рис.3.3.2 і Рис.3.3.3 можна підтвердити, що вони відповідають опису спектру SABAT. Особливо видно по однаковим основним енергетичним пікам.

## Моделювання і аналіз Фосгену (COCl2)

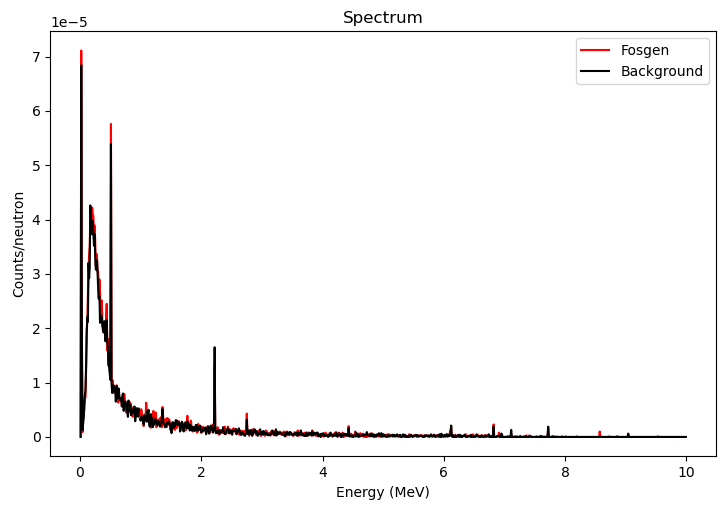
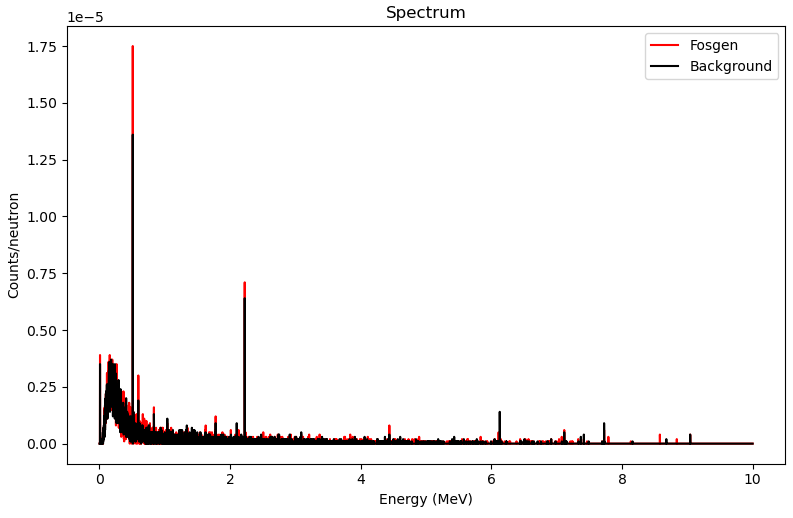
Фосген при нормальних умовах є безбарвним газом, який конденсується в безбарвний речовину при температурах нище 8.2 оС. У холодній воді майже не розчиняється. Моделювання проводилося з геометрією описану в пункті – 3.1. з двома різними детекторами: сцинтилятор – NaI(Tl) і напівпровідниковим – HPGe.

Рис.3.4.1: Спектр з використанням сцинтилятоа NaI(Tl) з 1000 каналів

Рис.3.4.2: Спектр з використанням напівпровідникового детектора HPGe з 8000 каналів

Досліджувана мішень було опромінено потоком нейтронів 107 з енергією 14.1 МеВ. Спектр на Рис.3.4.1 відповідає – NaI(Tl), а Рис.3.4.2 відповідно HPGe.

# Висновок

Моделювання проводилось із використанням програмного забезпечення Geant4 через його гнучкість і чудову запрограмовану початкову базу. Робота орієнтувалась на дослідженнях польського експерименту SABAT, який був взятий за відправну точку. Нейтронно – активаційний аналіз являється чудовим методом для дослідження наявності елементів у речовині. Оскільки нашою цілю було використання ННА для пошуку небезпечний речовин на морському дні, то тут виникаю труднощі. Нейтронно – активаційний аналіз не може нам сказати, що за невідома речовина знаходиться, а лише елементи з яких вона складається. Для можливості визначення речовини потрібно мати певну базу по якій ми зможемо виявити кандидатів по енергетичним пікам, які присутні в спектрах. Також потрібно продовження дослідження геометрії детектуючої установки, оскільки у спектрах є наявність піків, які відповідаю захисту детектора. Не правильно зібраний захист може погіршити результати при аналізі. Задаючись питанням, що краще використовувати у ролі детектора сцинтилятор чи напівпровідник, можна стверджувати, що напівпровідниковий детектор має перевагу і краще продовжити експерименти саме з ними.

# Список літератури

1. <http://archaeometry.missouri.edu/naa_overview.html>
2. <https://web.archive.org/web/20050406230741/http://www.thebritishmuseum.ac.uk/science/text/techniques/sr-tech-naa-t.html>
3. <https://www.webcitation.org/6E0lTFicq?url=http://www.ne.ncsu.edu/nrp/naa.html>
4. Pollard, A. M., Heron, C., 1996, *Archaeological Chemistry*. Cambridge, Royal Society of Chemistry.
5. <https://www.glossary.oilfield.slb.com/en/Terms.aspx?LookIn=term%2520name&filter=neutron+generator>
6. <http://www1.jinr.ru/Pepan/v-42-2/05_fron.pdf>
7. <https://www.ippe.ru/opi/services/361-neutron-activation-analisys>
8. <http://profbeckman.narod.ru/YadFiz.files/L22.pdf>
9. <http://nuclphys.sinp.msu.ru/nuc_techn/activ_analy.htm>
10. <https://acg.missouri.edu/NAA.html>
11. <https://chem21.info/info/18911/>
12. <http://mipt.jinr.ru/ru/lectures>
13. Соболь, И.М Численные методы Монте – Карло / И.М. Соболь. – М.: Наука, 1973, - 312 с.