

УДК 519.245:543.427.4

Моделирование гибридного рентгеновского спектрометра в среде Geant4А.С. Котляревская

Научный руководитель: к.ф.-м.н. А.О. Павлюк
Национальный исследовательский Томский политехнический университет,
Россия, г. Томск, пр. Ленина, 30, 634050
E-mail: ask157@tpu.ru

Geant4 simulation of hybrid X-ray spectrometerA.S. Kotliarevskaia

Scientific Supervisor: Dr. A.O. Pavliuk
Tomsk Polytechnic University, Russia, Tomsk, Lenin str., 30, 634050
E-mail: ask157@tpu.ru

Abstract. *In the present study, we developed a computational model of hybrid device for determining concentration of actinides in radioactive waste and processing medium. The device uses X-ray fluorescence spectrometry and X-ray densitometry methods. The model is created with Geant4 toolkit and allows getting spectra of model solutions (U, Np, Pu or Am in nitric acid) from two semiconductor detectors (SDD and CZT) in wide range of concentration (from 1 to 300 g/l). Obtained theoretical spectra are aimed to help with estimation of possible sensitivity of the applied methods and with adjusting prototype parameters such as measuring cuvette size and material.*

Key words: *X-ray fluorescence, K-edge densitometry, computational simulation, Geant4*

Введение

В настоящий момент в области обеспечения контроля жидких радиоактивных отходов и технологических растворов, содержащих ядерные материалы и радиоактивные вещества, существует потребность в средствах измерения (СИ), покрывающих широкий диапазон концентраций и обеспечивающих достаточную точность измерения. Гибридные приборы, совмещающие функции рентген-флуоресцентного анализатора (РФА) и рентгеновского плотнoмера, особенно перспективны для решения подобного класса задач.

Применение компьютерного моделирования при проектировании новых СИ позволяет упростить разработку путём выявления возможных технических проблем, связанных с выбором материалов, конструкцией устройства, параметрами эксплуатации и т. д. Geant4 позволяет моделировать процесс переноса ионизирующего излучения в широком диапазоне энергий в различной геометрии при помощи метода Монте-Карло и благодаря своей гибкости зарекомендовал себя как инструмент для решения обширного спектра задач [1].

Настоящее исследование нацелено на создание компьютерной модели гибридного устройства для измерения концентраций смеси актинидов в пробах радиоактивных отходов на основе специализированного программного продукта Geant4 и определение влияния параметров измерительной кюветы на результат измерения пробы.

Экспериментальная часть

В настоящей работе был усовершенствован подход, представленный в работах [2, 3], за счет замены нескольких функциональных частей прибора. В устройстве использована рентгеновская трубка с рабочим напряжением 160 кВ, а также кремниевый дрейфовый детектор для регистрации характеристического рентгеновского излучения (ХРИ) и детектор на основе кристалла из кадмий-цинк-теллура (CdZnTe). Для реализации данного подхода разработана модель с несколькими базовыми объёмами, представленными на рис. 1. Вся измерительная система помещена в стальной корпус.

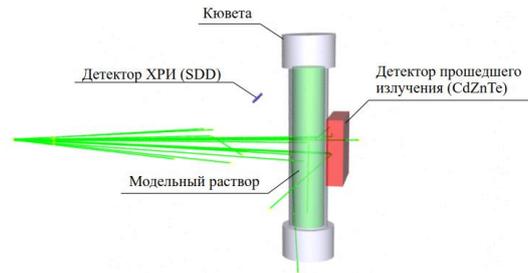


Рис. 1. Геометрия модели измерительного устройства

Спектр излучения рентгеновской трубки $I(E)$ задан при помощи формулы Крамерса [4]:

$$I(E) = \frac{KZ}{(hc)^3} E^2 (E_0 - E),$$

где K – коэффициент пропорциональности; Z – зарядовое число материала мишени; h – постоянная Планка; c – скорость света; E_0 – максимальная энергия излучения.

Основной модуль физической модели взаимодействий частиц представлен библиотекой G4EmLowEPPhysics, которая позволяет ограничиться расчётом электромагнитных взаимодействий [5]. Также в модель введена поправка на статистическую компоненту энергетического разрешения детектора ($FWHM$) в соответствии с формулой [6]:

$$FWHM \approx 2,355\sqrt{F\omega E},$$

где F – фактор Фано; ω – энергия, затрачиваемая на рождение носителя заряда; E – энергия излучения.

Результаты

В результате моделирования получены спектры для растворов нитрата уранила при различной гипотетической концентрации U (рис. 2) и объёме измерительной кюветы (рис. 3).

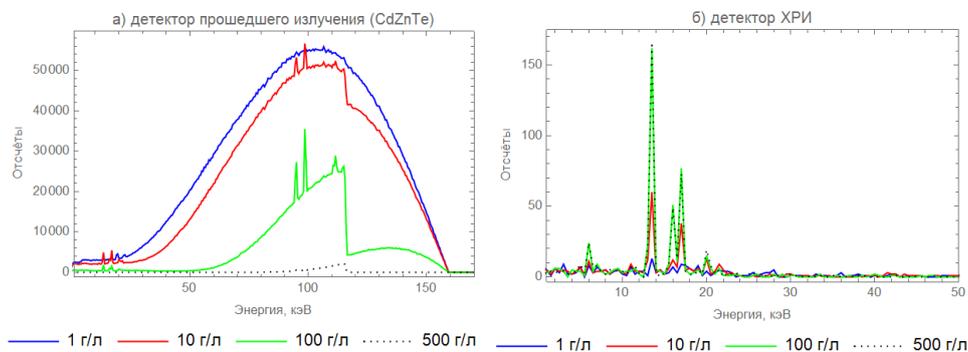


Рис. 2. Спектры для раствора нитрата уранила при различных концентрациях U : а) детектор прошедшего излучения (CdZnTe); б) детектор ХРИ

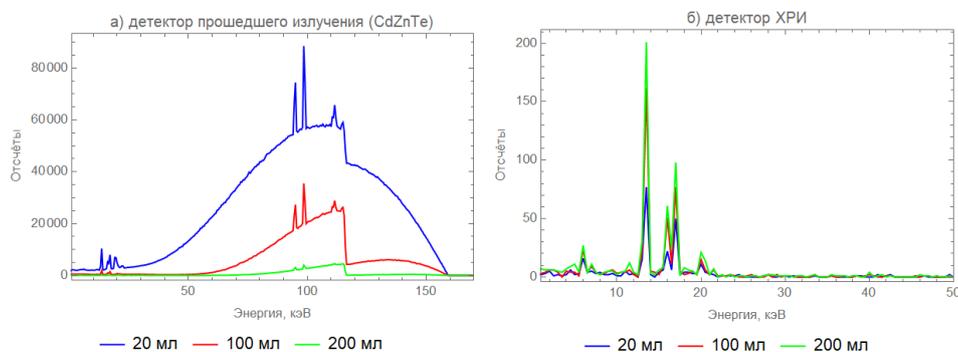


Рис. 3. Спектры для 10% раствора нитрата уранила при различном объёме кюветы: а) детектор прошедшего излучения (CdZnTe); б) детектор ХРИ

Спектр на рис. 2а демонстрирует увеличение контрастности спектра с увеличением концентрации U до 100 г/л, что способствует повышению точности измерений. В свою очередь, спектры на рис. 3б демонстрируют замедление роста интенсивности *L*-линии U (13,6 кэВ) с увеличением концентрации элемента более 100 г/л.

На рис. 3 отчётливо видна зависимость интенсивности спектров от объёма измерительной кюветы (толщины просвечиваемого слоя). Исходя из полученных данных, можно оценить оптимальный объём пробы (100 мл) для получения наиболее точных результатов.

Также проведено сравнение трёх материалов кювет (стали, полистирола и кварцевого стекла) и показано, что наименьшие искажения в получаемые спектры вносит кювета из полистирола. Отмечено, что, в отличие от сцинтилляционного детектора, результаты моделирования которого представлены в работе [3], CdZnTe-детектор является более перспективным, так как позволяет идентифицировать пики *K*- и *L*-линий, а также отчётливо наблюдать поглощение по *K*-краю.

Заключение

Разработанная компьютерная модель гибридного СИ, совмещающего функционал РФА и рентгеновского плотномера, позволяет оценивать ожидаемую чувствительность каждого из применяемых методов, а также осуществлять подбор конструктивных параметров СИ.

Продемонстрировано, что РФА обладает преимуществом в точности результатов измерений в диапазоне более низких концентраций (до 100 г/л), а рентгеновская плотнометрия – в области более высоких (более 100 г/л), что согласуется с данными предыдущих исследований [6]. Определены оптимальный объём пробы (100 мл) и материал кюветы (полистирол) для текущей версии СИ. Представлены преимущества CdZnTe-детектора.

Планируется дальнейшая доработка модели с целью более точного воссоздания функции отклика детектора, а также расширение её функционала (в том числе учёт собственного излучения пробы).

Работа выполнена в рамках программы Приоритет 2030 (проект № Приоритет 2030-НИП/ЭБ-039-375-2023).

Список литературы

1. Agostinelli S. и др. Geant4—a simulation toolkit // Nucl. Inst. and Methods in Phys. Res., A. – 2003. – Т. 506, № 3. – С. 250–303.
2. Белоусов М.П. и др. Установка комплексного определения параметров растворов ОТВС // АНРИ. – 2023. – № 2. – С. 50–66.
3. Котляревская А.С., Павлюк А.О. Моделирование в среде Geant4 спектров рентгенофлуоресцентных и денситометрических измерений. // Известия Томского политехнического университета. Промышленная кибернетика. – 2023. – Т. 1, № 3. – С. 7–13.
4. Kramers H.A. On the theory of X-ray absorption and continuous X-ray spectrum // Phil. Mag. – 1923. – Т. 46, № 275. – С. 836–871.
5. Guide for Physics Lists: Rev 7.0. – Текст: электронный // Geant4: официальный сайт. – 1999-2022. – URL: <https://geant4-userdoc.web.cern.ch/UsersGuides/PhysicsListGuide/html/index.html> (дата обращения: 20.02.2024).
6. PANDA: Пассивный неразрушающий анализ ядерных материалов. Справочник / Под ред. Д. Райлли, Н. Энслина, Х. Смита, С. Крайнер; перевод с английского ВНИИА. – 2007. – 720 с.