



## دوره عمومی آموزش کد MCNP

دکتر یاسر کاسه‌ساز

دانشیار پژوهشگاه علوم و فنون هسته‌ای

[ykasesaz@aeoi.org.ir](mailto:ykasesaz@aeoi.org.ir)



# جلسه سوم

ماده



بخش‌های مختلف هندسه با مواد مختلفی پر شده‌اند یا از مواد مختلفی ساخته شده‌اند

داشتن اطلاعات این مواد برای شبیه‌سازی ضروری است

هرگونه نقص یا کمبود اطلاعات در خصوص مواد روی نتیجه و صحت محاسبات اثر مستقیم دارد

آنچه نیاز است عبارت است از: ترکیبات هر ماده و چگالی

مثلا برای آب می‌دانیم که از H و O با درصد‌های مشخص تشکیل شده است و چگالی آن ۱ گرم بر سانتی‌متر مکعب است

	H <sub>2</sub> O	
	H	O
درصد اتمی	$\frac{2}{3}$	$\frac{1}{3}$
درصد وزنی	$\frac{2}{18}$	$\frac{16}{18}$



هر ماده‌ای ممکن است به صورت یکی از حالت‌های زیر باشد:

ماده خالص تک ایزوتوپی

ماده با فرمول مولکولی مشخص (مثل  $H_2O$ )

مخلوط (مانند بتن، خاک، پوست، خون و ...)

آلیاژ (ترکیبی از چند ماده با درصدهای وزنی مختلف)

محلول (مایع شامل یک ماده که در یک ماده مایع حل شده است)



## هر ایزوتوپ یک عدد درست!

در کد، هر ایزوتوپ با یک درست مشخص می‌شود که این عدد به صورت زیر تعریف می‌شود

$$\begin{matrix} A \\ Z \end{matrix} X$$

این عدد را ZAID می‌نامیم  $1000Z+A$

 ${}^1_1H : 1001$ 
 ${}^{16}_8O : 8016$ 
 ${}^7_3Li : 3006$ 
 ${}^{235}_{92}U : 92235$ 
 ${}^2_1H : 1002$ 
 ${}^{27}_{13}Al : 13027$ 
 ${}^{10}_5B : 5010$ 
 ${}^{238}_{92}U : 92238$



## ماده خالص تک ایزوتوپی

M6 13027 1

عدد یک یعنی ۱۰۰٪ این ماده از ایزوتوپ تعریف شده ساخته شده است

 $^{27}_{13}\text{Al}$ 

مثلا آلومینیوم خالص را در نظر بگیرید

Mn ZAID 1

کارت Mn در بخش دیتا در فایل ورودی نوشته می شود

n عدد دلخواهی است که کاربر به آن ماده نسبت می دهد

M4 5010 -1

علامت منفی، یعنی درصد وزنی و علامت مثبت یعنی درصد اتمی

M7 3006 -1

بعد از تعریف ماده، می توانیم هر سلولی را که بخواهیم با آن پر کنیم

J n d -S1 S2:S3 ....

چگالی ماده

شماره ماده (عدد n در Mn)

99 6 -1.7 -11 12

98 4 -3.2 -21

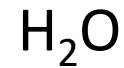
5 6 -1.7 -20

سلول های ۹۹ و ۵ با ماده شماره ۶ با چگالی ۱.۷ و سلول ۹۸ با ماده شماره ۴ با چگالی ۳.۲ گرم بر سانتی متر مکعب پر شده است



## ماده با فرمول مولکولی مشخص

اگر فرمول مولکولی یک ماده را داشته باشیم، با کمی محاسبه درصد وزنی یا درصد اتمی ایزوتوپ‌های تشکیل دهنده آن را بدست می‌آوریم



مثلا برای آب سبک داریم:

	H	O
درصد اتمی	$\frac{2}{3} = 0.6667$	$\frac{1}{3} = 0.3333$
درصد وزنی	$\frac{2}{18} = 0.1111$	$\frac{16}{18} = 0.8889$

تعریف با استفاده از درصدهای اتمی

M4 1001 0.6667 8016 0.3333

M4 1001 2 8016 1

می‌توان به جای درصدهای اتمی، تعداد اتم‌ها را وارد کرد  
(کد خودش نسبت‌ها را محاسبه می‌کند)

تعریف با استفاده از درصدهای وزنی

M4 1001 -0.1111 8016 -0.8889



## در نظر گرفتن غنای ایزوتوپی

منظور از غنای یک ایزوتوپ خاص در یک ماده، نسبت جرم آن ایزوتوپ به جرم عنصر مورد نظر است

$$\omega_i = \frac{\text{جرم ایزوتوپ } i}{\text{جرم کل عنصر}} = \frac{M_i}{M_{\text{elm}}}$$

$$\frac{1}{M_{\text{elm}}} = \sum \frac{\omega_i}{M_i}$$

$$af_i = \omega f_i \frac{M_{\text{elm}}}{M_i}$$

$$wf_i = af_i \frac{M_i}{M_{\text{elm}}}$$

به عنوان مثال UO<sub>2</sub> را با غنای ۲۰ درصد در نظر بگیرید:

$$wf(U-235) = 0.2 \frac{M(U)}{M(\text{UO}_2)}, wf(U-238) = 0.8 \frac{M(U)}{M(\text{UO}_2)}, \frac{1}{M(U)} = \frac{0.2}{M(U-235)} + \frac{0.8}{M(U-238)}$$

$$\frac{1}{M_U} = \frac{0.2}{235.04} + \frac{0.8}{238.05} \Rightarrow M_U = 237.44$$

$$M_{\text{UO}_2} = M_U + 2M_O = 237.44 + 2(16) = 269.44$$

$$wf_{235} = 0.2 \times \frac{237.44}{269.44} = 0.176$$

$$wf_{238} = 0.8 \times \frac{237.44}{269.44} = 0.705$$

$$wf_O = \frac{32}{269.44} = 0.119$$





## ماده با فرمول مولکولی مشخص

به مثال زیر دقت کنید!



	B	C
درصد اتمی	$\frac{4}{5} = 0.8$	$\frac{1}{5} = 0.2$
درصد وزنی	$\frac{44}{56} = 0.7857$	$\frac{12}{56} = 0.2143$

تعریف با استفاده از درصدهای **وزنی**

M5 5011 -0.0.7857 60212 -0.2143

تعریف با استفاده از درصدهای **اتمی**

M5 5011 0.8 6012 0.2

M5 5011 4 6012 1

می توان به جای درصدهای اتمی، تعداد اتمها را وارد کرد  
(کد خودش نسبتها را محاسبه می کند)



## مخلوط (مانند بتن، هوا، پوست، خون و ...)

ترکیبات و درصد وزنی ایزوتوپ‌های موادی که شکل مولکولی مشخصی ندارند را باید از مراجع معتبر پیدا کرد. مثلاً اگر بخواهیم استخوان را شبیه‌سازی کنیم؛ یا هوا، خون و ... را باید اطلاعات آنها را داشته باشیم

در این مرجع مشخصات بیش از ۳۵۰ ماده مختلف  
کاربردی در مسائل هسته‌ای و پرتوی آمده است



Homeland  
Security

Prepared for the U.S. Department of Homeland Security  
U.S. Customs and Border Protection and Domestic Nuclear Detection Office  
under U.S. Department of Energy Contract DE-AC05-76RL01830

PIET-43741-TM-963  
PNNL-15870 Rev. 1

RADIATION PORTAL MONITOR PROJECT

**Compendium of Material  
Composition Data for Radiation  
Transport Modeling**

## آلیاژ

$$\frac{1}{\rho} = \sum \frac{wf_i}{\rho_i}$$

آلیاژ مخلوطی از دو یا چند مختلف با چگالی‌های مشخص است. با معلوم بودن مشخصات مواد تشکیل دهنده یک آلیاژ و انجام کمی محاسبات می‌توان درصد‌های وزنی و اتمی را محاسبه کرد.

$$\text{AlF}_3 (0.7) + \text{Al} (0.3)$$

$$wf(\text{Al}) = 0.7 \frac{M(\text{Al})}{M(\text{AlF}_3)} + 0.3 \frac{M(\text{Al})}{M(\text{Al})} = 0.7 \frac{27}{84} + 0.3 = 0.525$$

$$\text{M77} \quad 13027 \quad -0.525 \quad 9019 \quad -0.475$$

$$wf(\text{F}) = 0.7 \frac{3M(\text{F})}{M(\text{AlF}_3)} = 0.7 \frac{57}{84} = 0.475$$

برای درصد‌های اتمی داریم:

$$\text{تعداد مولکول‌های AlF}_3 \quad n(\text{AlF}_3) = \frac{0.7m}{M(\text{AlF}_3)} N_A = \frac{0.7}{84} m N_A = a$$

$$\text{تعداد کل اتم‌های Al} = a+b$$

$$\text{تعداد اتم‌های Al} \quad n(\text{Al}) = \frac{0.3m}{M(\text{Al})} N_A = \frac{0.3}{27} m N_A = b$$

$$\text{تعداد کل اتم‌های F} = 3a$$

$$\text{تعداد کل اتم‌ها} = 4a+b=c$$

$$af(\text{Al}) = \frac{\frac{0.7}{84} + \frac{0.3}{27}}{3 \frac{0.7}{84} + \frac{0.7}{84} + \frac{0.3}{27}} = 0.4375$$

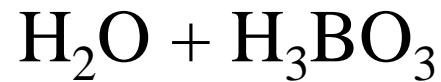
$$af(\text{F}) = \frac{3 \frac{0.7}{84}}{3 \frac{0.7}{84} + \frac{0.7}{84} + \frac{0.3}{27}} = 0.5625$$



## محلول

اگر ماده شامل یک محلول باشد نیز با کمی محاسبات می توان درصد وزنی یا اتمی ایزوتوپ های تشکیل دهنده آن را بدست آورد

مثلا محلولی از آب شامل 500 ppm اسید بوریک را در نظر بگیرید



$$M(\text{H}_3\text{BO}_3)=62, M(\text{H}_2\text{O})=18$$

500 ppm یعنی در هر کیلوگرم ۵۰۰ میلی گرم اسید بوریک وجود دارد

لذا درصد وزنی اسید بوریک در محلول برابر  $0.0005=500\text{E}-6$  است  
و درصد وزنی آب برابر  $۰.۹۹۹۵=۱-۰.۰۰۰۵$  است

$$wf(H) = 0.0005 \frac{3M(H)}{M(\text{H}_3\text{BO}_3)} + 0.9995 \frac{2M(H)}{M(\text{H}_2\text{O})} = 0.0005 \frac{3}{62} + 0.9995 \frac{2}{18} = 0.111080$$

$$wf(O) = 0.0005 \frac{3M(O)}{M(\text{H}_3\text{BO}_3)} + 0.9995 \frac{M(O)}{M(\text{H}_2\text{O})} = 0.0005 \frac{48}{62} + 0.9995 \frac{16}{18} = 0.888832$$

$$wf(B) = 0.0005 \frac{M(B)}{M(\text{H}_3\text{BO}_3)} = 0.0005 \frac{11}{62} = 0.000089$$

M7	1001	-0.111080	8016	-0.888832	5011	-0.000089
----	------	-----------	------	-----------	------	-----------



U3O8

BF3

LiF که در آن غنای Li-6 برابر ۳۰ و Li-7 برابر ۷۰ درصد است

۲ گرم H2SO3 در ۵۰۰ گرم آب

$Y_2O_3$  (35%) +  $Al_2O_3$  (7%) +  $SiO_2$ (58%)



# پایان جلسه سوم

موفق باشید!  
کاسه ساز