D18-2013-87

S. S. Pavlov, A. Yu. Dmitriev, M. V. Frontasyeva

AUTOMATION OF REACTOR NEUTRON ACTIVATION ANALYSIS Павлов С. С., Дмитриев А. Ю., Фронтасьева М. В. Д18-2013-87 Автоматизация реакторного нейтронного активационного анализа

Сообщается о состоянии дел по созданию программного комплекса, предназначенного для автоматизации НАА на реакторе ИБР-2 ЛНФ ОИЯИ (Дубна). Согласно решениям, принятым на координационном совещании МАГАТЭ в Делфте 27–31 августа 2012 г., отсутствующее в настоящее время устройство смены образцов (sample changer) для НАА будет изготовлено и установлено в соответствии с особенностями радиоаналитического комплекса РЕГАТА на реакторе ИБР-2. Представлены конструкционные детали устройства смены образцов. Программное обеспечение для работы с этим устройством состоит из двух частей. Первая часть представляет собой пользовательский интерфейс, а вторая является программой для управления устройством смены образцов. Вторая часть будет создана после установки этого устройства.

Работа выполнена в Лаборатории нейтронной физики им. И.М.Франка ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна, 2013

Pavlov S. S., Dmitriev A. Yu., Frontasyeva M. V. D18 Automation of Reactor Neutron Activation Analysis

D18-2013-87

The present status of the development of a software package designed for automation of NAA at the IBR-2 reactor of FLNP, JINR, Dubna, is reported. Following decisions adopted at the CRP Meeting in Delft, August 27–31, 2012, the missing tool — a sample changer — will be installed for NAA in compliance with the peculiar features of the radioanalytical laboratory REGATA at the IBR-2 reactor. The details of the design are presented. The software for operation with the sample changer consists of two parts. The first part is a user interface and the second one is a program to control the sample changer. The second part will be developed after installing the tool.

The investigation has been performed at the Frank Laboratory of Neutron Physics, JINR.

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna, 2013

1. INTRODUCTION

At the Joint Institute for Nuclear Research, neutron activation analysis (NAA) is carried out using the installation REGATA at the IBR-2 reactor of the Frank Laboratory of Neutron Physics [1]. The most important tasks in performing NAA are to improve the quality of analysis and the quantity of performed investigations.

In the framework of international programs in the field of life sciences and materials science at the REGATA facility the mass analysis of a large number of samples is performed that requires organization of labeling, storage and recording of analyzed samples, irradiations, measurements and processing of the γ spectra of induced activity, as well as systematization of the results of analysis. Large sets of samples of vegetation, soil, foodstuffs, microorganisms used in bionan-otechnology, and other materials have to be recorded, properly stored, prepared for irradiation, and all phases of the analysis have to be registered.

To a large extent, these tasks are realized while ensuring the fullest possible automation of work. Therefore, the main objective of this project is to increase the level of automation of performed investigations. The initial phase of the development of software for automation of the NAA at the IBR-2 reactor of FLNP is reflected in [2, 3].

Improving the quality and quantity of research will be achieved through:

- automation of data input for analysis;

- use of programmable QC procedures in the analysis;

- rapid statistical analysis of the results and QC/QA procedures;

- automation of measurements of spectra using devices of automatic sample changer;

— automation of the process of calculating the concentrations, storage of the results of analysis and reporting;

— fast check of all phases of analysis and search for any information on NAA from any computer of the Department of NAA & AR.

The purposes mentioned above can be implemented through:

- development of a principally new software using databases of performed investigations;

- development and use of automatic sample changer during measurements of spectra;

- development and manufacture of new pneumatic control electronics for irradiation of samples, replacing the outdated pneumatic components of installation;

 carrying out studies of radiation resistance of new materials for the manufacture of a new type of packaging material and containers for long irradiation exposures;

- development and manufacture of devices for holding containers with samples after long irradiation exposures.

2. PROGRAM PACKAGE

2.1. Block Diagram of the Software. In 2013 development of the software package using the databases has been continued. Block diagram of the software to automate the NAA at the IBR-2 reactor is shown in Fig. 1.

2.2. Database Diagram. The database diagram is presented in Fig. 2. Program modules in solid lines are already developed and used. Those in dashed lines are in progress.

2.3. Main Database Window. Figure 3 shows the main window of the database interface, by means of which one can insert and check information about customers and received samples, used CRM and neutron flux monitors and check their residual amount, as well as data on all steps of the NAA: receiving,

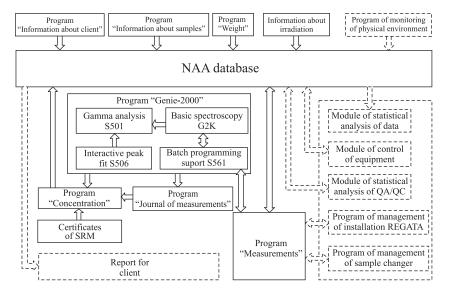
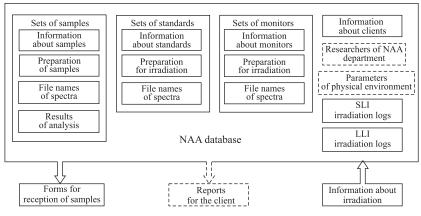


Fig. 1. Block diagram of the software





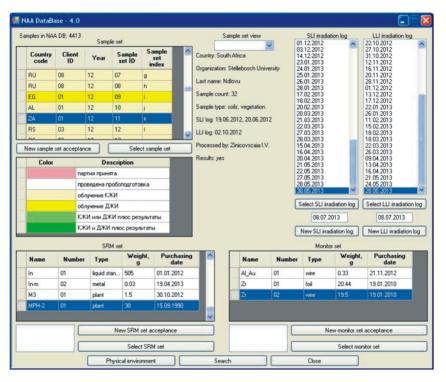


Fig. 3. Main database window

							SLI ina	diation log							Save SLI k	29
Country code	Client ID	Year	Sample set ID	Sample set index	Sample ID	Irradiation date	Start time	Channel	Duration, sec	Detector N [≠]	Spectrum file	Paper log number	Irradiat	ed		
GE	01	13	25	y.	01	30.05.2013	13:23:21	2	180	5	5002215	16	Frontasye	va M.V.		
GE	01	13	25	y	02	30.05.2013	13:23:21	2	190	6	6002215	16	Frontasye	va M.V.		
GE	01	13	25	У	03	30.05.2013	13:23:21	2	180	7	7002215	16	Frontasye	va M.V.		
GE	01	13	25	У	04	30.05.2013	13:41:26	2	180	5	5002216	16	Fronkasye	va M.V.		
GE	01	13	25	У	05	30.05.2013	13:41:26	2	180	6	6002216	16	Frontasye	va M.V.		
GE	01	13	25	У	06	30.05.2013	13:41:26	2	180	7	7002216	16	Frontasye	va M.V.		
GE	01	13	25	У	07	30.05.2013	13:57:20	2	190	7	7002217	16	Frontasye	va M.V.		
8		8	Au	01	01	30.05.2013	14:11:22	2	196	5	5002218	16	Fronkasye	va M.V.		
				Sample se	,				Sampl	e	Sample set vi	ew	Time		Person	
Country	Client	Year	Sample	Sample	_		Country: Sou		01		All sample sets	V	<u>_i_i_</u>			_
code ID			set ID	set			Organization Cape Univer	Western	03		Auto fill in irrad	iation	Fill in time	Filli		
VN	02	13	22	v			name: Petrik.		05		start time		start	inadiate		
ZA	01	12	11	k					06 07		Paper k	NG N= S	pectrum file	Chanr 2	nel Du	Jat
ZA	02	12	21													_
ZA	03	12	34	h							Fill in pa log num		Fill in pectrum file	Fill in charm		ill i rat
ZA	04	12	38	1							Sample's SLI	wicht				
ZA	04	13	26	z					Add sa	mple						
						~			Delete san							
			SRM set						log		SBM	_				
	SRM	SRM		Purchasi	ng		SRM		Irradiatio date 1	n Irradiati date 2	on Irradiation I	radiation date 4	Irradiation date 5	Irradiatio date 6		n I
SRM set	set	set	9	date			numbe					uate 4				T
set		set type plant		date 11.01.201	0		07	0.1077	17.02.201	3		uate 4				
set name 1575a	set	type	9			-		0.1077	17.02.201	-		uate 4				Т
set name 1575a 1577	set number 02	type plant	9 50	11.01.201	0	ŀ	07	-	-	-		uate 4				
set name 1575a 1577	set number 02 01	type plant fau	9 50 10	11.01.201 20.10.201	0	•	07 08	0.0927	17.02.201	3						
set name 1575a 1577 1632b 1632c	set number 02 01	type plant fau col	9 50 10 20	11.01.201 20.10.201 20.10.201	0		07 08	0.0927 I set view	17.02.201	-	Delete last irrad date from lo	iation	iet SRM as n use	not in		
set name 1575a 1577 1632b 1632c	set number 02 01 01 01	type plant fau soil soil	9 50 10 20 50	11.01.201 20.10.201 20.10.201 20.01.201	0		07 08 C	0.0927 I set view	17.02.201	3	Delete last in ad	iation	et SRM as n	not in		
set name 1575a 1577 1632b 1632b 1633b Monitor set	set number 02 01 01 01 01 01 01 01 01 01 01 01 01	type plant fau soil soil b Mon se	9 50 10 20 50 50 50 fonitor set	11.01.201 20.10.201 20.01.201 20.01.201 18.09.201	0		07 08 C SRM AI SRM sets	0.0927 I set view More More S	17.02.201	add SRM	Delete last in ad	iation	et SRM as n	not in		
set name 1575a 1577 1632b 1632b 1633b 1633b	set number 32 31 31 31 31 31 31 31 31 31 31 31 31 31	type plant fau soil soil b Mon type	9 50 10 20 50 50 50 fonitor set itor t t ee	11.01.201 20.10.201 20.01.201 20.01.201 18.09.201	0 1 1 hasing		07 08 C SRM AI SRM sets Monito numbe	0.0927	17.02 201	add SRM	Delete last in ad	iation	et SRM as n	not in		
set name 1575a 1577 1632b 1632c 1633b 1633b 1633b 1633b	set number 02 01 01 01 01 01 01 01 01 01 01 01 01	type plant fau soil soil bit Mon se typ	9 50 10 50 50 50 10 10 50 50 50 50 50 50 50 50 50 50 50 50 50	11.01.201 20.10.201 20.01.201 20.01.201 18.09.201 ght, Purc d	0 0 1 1 hasing ate		07 08 C SRM All SRM sets Monito numbe 03 04	0.0927	17.02.201	add SRM	Delete last in ad	iation	et SRM as n	ot in		
set name 1575a 1577 1632b 1632b 1633b 1633b	set number 02 01 01 01 01 01 01 Monito set numbe 01	type plant fau soil soil b Mon type	9 50 10 20 50 50 50 fonitor set itor t t ee	11.01.201 20.10.201 20.01.201 18.09.201 20.1 .201 18.09.201 21.1 4 19.01	0 1 1 hasing	×	All SRM sets Monito numbe 03 04 05	0.0927 f set view Mor Weight 0.0032 0.0034 0.004	17.02.201 initor 22.11.20 22.11.20 22.11.20	3 Add SRM	Delete last in ad	iation	et SRM as n	ot in		
set name 1575a 1577 1632b 1632b 1632b 1633b 1633b 1633b 1633b	set number 02 01 01 01 01 01 01 01 01	type plant fau soil soil b Mon se typ foil	9 50 10 50 50 50 50 50 50 50 50 50 50 50 50 50	11.01.201 20.10.201 20.01.201 18.09.201 20.1 .201 18.09.201 21.1 4 19.01	0 1 1 hasing late 1.2012	X	All SRM sett Monitor number 03 04 05 05	0.0927	17.02.201	3 Add SRM	Delete last in ad	iation S	et SRM as n			

Fig. 4. Journal of irradiations for determination of short-lived isotopes

sample preparation, irradiation, processing the results and carrying out statistical analysis of the results obtained.

For example, from the journal of irradiations for determination of short-lived isotopes (Fig. 4) one can learn all the necessary parameters for the analysis on irradiations and the names of the spectra for each sample, standard or monitor.

Currently, most of the software has an interface in Russian, so other types of windows are not given in this report.

All the changes and additions will be made and their interfaces will be able to select the language.

2.4. Program "Concentration". Automation of calculation of concentrations of element in the samples based on the results of analysis of the spectra of samples, standards, and monitors is achieved by using the program "Concentration", the main window of which is shown in Fig. 5.

Тересчёт активностей ста	андартов	Групповой стандарт	Концентрация	Очистить форму	Таблица нуклидов	Справи
Тересчёт активностей ста	ндартов					
азовый файл активносте	ей монитора	стандарта: не выбран	7			
Райл активностей монито	ора стандар	га: не выбран				
Райл(ы) активностей стан	ндарта: не в	ыбран				
		Пересчитать и сохр	ранить активности	стандартов		
рупповой стандарт						
Файлы активностей станд	дартных обр	азцов: не выбраны				
	Co	здать сводную таблицу	активностей стан	дартных образцов		
Данные для таблицы про Расчётная погрешност		C Z-scores				
		бразца: C:\GENIE2K\Ci E2K\CONFILES\2709-11				
Файл группового стандар Расс Концентрация	ла: С:\GENI ;читать стан	E2K\CONFILES\2709-11 дарт(ы) на групповой с	6338-LICHEN-336-2	2.grs		
Файл группового стандар Расс Концентрация Файл(ы) активностей исс/	ла: C:\GENII житать стан ледуемого с	E2K\CONFILES\2709-11 дарт(ы) на групповой с бразца: не выбран	6338-LICHEN-336-2	2.grs		
Файл группового стандар Расс Концентрация Файл(ы) активностей иссл Файл группового стандар	лта: C:\GENII житать стан ледуемого о ла: не выбр	Е2K\CONFILES\2709-11 дарт(ы) на групповой с образца: не выбран ан	6338-LICHEN-336-2	2.grs		
Файл группового стандар Расс Концентрация Файл(ы) активностей иссл Файл группового стандар Базовый файл активносте	ла: C:\GENII зчитать стан ледуемого о ла: не выбр ей монитора	E2K\CONFILES\2709-11 дарт(ы) на групповой с кбразца: не выбран ан стандарта: не выбран	6338-LICHEN-336-2	2.grs		
Файл группового стандар Расс Концентрация Файл(ы) активностей иссл Файл группового стандар Базовый файл активносте Файл активностей монитс	ла: C:\GENII житать стан ледуемого о ла: не выбр. ей монитора ора образца	E2K\CONFILES\2709-11 дарт(ы) на групповой с образца: не выбран ан стандарта: не выбран : не выбран	6338-LICHEN-336-2 тандарт и сохрани	2 grs ть таблицу проверки	і стандартов	[10
Файл группового стандар Расс Концентрация Файл(ы) активностей иссл Файл группового стандар Базовый файл активносте Файл активностей монято Отменить выбор	ла: C:\GENI матать стан ледуемого с ла: не выбр ей монитора ора образца Файлов мон	E2K\CONFILES\2709-11 дарт(ы) на групповой с бразца: не выбран ан .стандарта: не выбран с не выбран виторов	6338-LICHEN-336-2 тандарт и сохрани К	2 grs ть таблицу проверки оз Ффициент измене	а стандартов ния потока нейтронов:	1.0
Файл группового стандар Расс Концентрация Файл(ы) активностей иссл Файл группового стандар Базовый файл активносте Файл активностей монято Отменить выбор	ла: C:\GENII житать стан ледуемого о ла: не выбр. ей монитора ора образца	E2K\CONFILES\2709-11 дарт(ы) на групповой с бразца: не выбран ан .стандарта: не выбран с не выбран виторов	6338-LICHEN-336-2 тандарт и сохрани К	2 grs ть таблицу проверки	а стандартов ния потока нейтронов:	1.0
Файл группового стандар Расс Концентрация Файл(ы) активностей иссл Файл группового стандар Базовый файл активносте Файл активностей монято Отменить выбор	ла: C:\GENI матать стан ледуемого с ла: не выбр ей монитора ора образца Файлов мон	Е2K\CONFILES\2709-11 дарт(ы) на групповой с бразца: не выбран ан стандарта: не выбран ан жпоров ЖИ-2	6338-LICHEN-336-2 тандарт и сохрани К	2 grs ть таблицу проверки оз ФФнциент измене истематическая пог	а стандартов ния потока нейтронов:	
Файл группового стандар Расс Концентрация Файл(ы) активностей иссл Файл группового стандар Базовый файл активносте Файл активностей монито Отменить выбор Істочник данных ККИ	та: С:\GENII житать стан ледуемого с та: не выбр ей монитора ора образца Файлов мон КЖИ-1 и К	E2K\CONFILES\2709-11 дарт[ы] на групповой с бразца: не выбран ан истандарта: не выбран энторов жИ-2 Рассингать и	6338-LICHEN-336-2 тандарт и сокрани К С сохранить концент	2 grs ть таблицу проверки оз ФФнциент измене истематическая пог	а стандартов ния потока нейтронов:	
Файл группового стандар Расс Сонцентрация Файл(ы) активностей иссл Файл группового стандар Базовый файл активносте Файл активностей монито Отменить выбор Істочник даннык ККИ	та: С:\GENII житать стан ледуемого с та: не выбр ей монитора ора образца Файлов мон КЖИ-1 и К	E2K\CONFILES\2709-11 дарт[ы] на групповой с бразца: не выбран ан истандарта: не выбран энторов жИ-2 Рассингать и	6338-LICHEN-336-2 тандарт и сокрани К С Сохранить концент	2 grs ть таблицу проверки оз ФФнциент измене истематическая пог	а стандартов ния потока нейтронов:	
Файл группового стандар Расс Концентрация Файл(ы) активностей иссл Файл группового стандар Базовый файл активносте Файл активностей монитс	та: С:\GENII житать стан ледуемого с ота: не выбр ей монитора ора образца Файлов мон (ККИ-1 и К ментов исс.)	E2K\CONFILES\2709-11 дарт[ы] на групповой с бразца: не выбран ан истандарта: не выбран энторов жИ-2 Рассингать и	6338-LICHEN-336-2 тандарт и сохрани К Сохранить концент з выбраны	2 grs ть таблицу проверки оз Ффициент измене истематическая пог грации	а стандартов ния потока нейтронов:	

Fig. 5. Main window of the program "Concentration"

This program allows one:

— to make a correction of activity of isotopes in the samples and standards using the neutron flux monitors;

- to make a group standard using several irradiated CRMs;

— to check the compiled group standard calculating the concentration of elements in each of the standards through the group standard and making the resulting table;

— to calculate the concentration of elements in the samples using the group standard;

— to compile an intermediate table of results and to check the results by creating graphs based on the elemental concentrations obtained from different measurements and concentrations of correlated elements in the samples (Fig. 6);

— to compile the final table and to save it into the database.

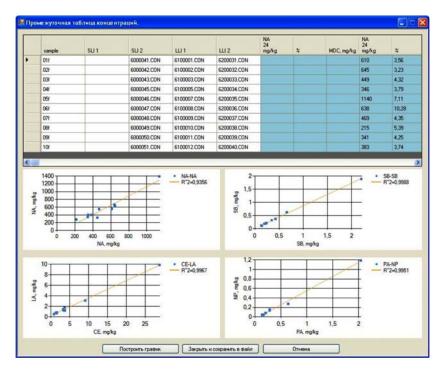


Fig. 6. Intermediate table of results

3. SAMPLE CHANGER

A special device has been developed to automate change of samples on the detectors. The samples to be measured are pre-installed in a rotating disk with 40 cells for containers. Transportation of containers from disk to the detector and back will be carried out using a commercial device produced by company DriveSet M202A (Figs. 7 and 8), which is composed of linear modules for horizontal and vertical transportation in three dimensions and the control electronics, including the control of a rotating disk with samples. The control module allows one to set the sample at any height above the detector and to check the state of the system over all the three dimensions by means of the absolute encoders. The manufacturing of such three modules of linear transportation is in progress.

The purchased package includes libraries for OS Windows, necessary for developing the existing program to control the devices and measurements of spectra.

Discs and stands for the samples are manufactured in the laboratory workshops (drawings are developed and transferred to the workshops). The contract for the purchase of lead shielding is in progress.

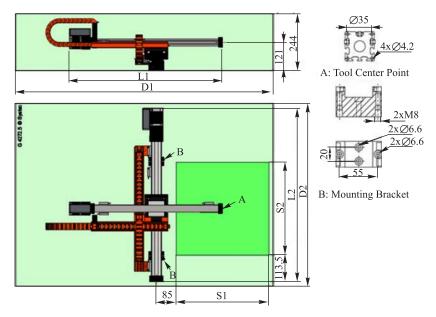


Fig. 7. General view of DriveSet M202A

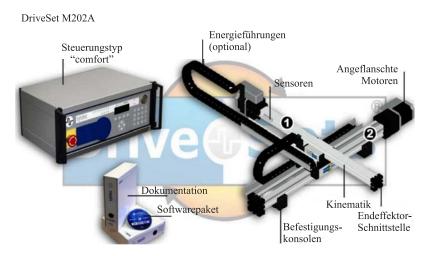


Fig. 8. Module of linear transportation by firm DriveSet

4. PROGRAM TO CONTROL DEVICES AND MEASUREMENT OF SPECTRA

All the necessary data for calculation of the concentrations are taken from the database and from the corresponding files; they are written automatically in the fields of the program and in the spectra. Information on the results of the measurements is automatically stored in the database (Fig. 9).

1эмерення - 3.0.									
никан работы	тип измере				нерений	детекто		вободные файл	
без базы данных	BELL	акжи-2 💿 кж		КЖИ-2, м	ын. 015	01	0	1	.CNF
 ✓ одиночные измер. ○ ДЖ ○ без УСО ○ део 		йное ДЖИ-1 О фон					D	5 5000004	.CNF найти свобод
							0	6 6000004	CNF Hele
циклические измерения		N21	-	ФИО эксперинент.			7 7000004	CNF	
кол-во шиклов	задержка, мяе			Alekseen	ok Yu.V. 🍟	☑ D7		700004	
образцы на детекторах курналы облучений									
27.03.2013	код страны	клиентский номер	год	номер партии	нндекс партин	номер образца	номер	файла	
28.03.2013	MK	02	13	21	u	14	5002156		
16.04.2013	MK	02	13	21	u	15	5002157		
20.04.2013 21.05.2013	MK	02	13	21	u	16	5002158		
22.05.2013	MK	02	13	21	u	17	5002159		
28.05.2013	МК	02	13	21	u	18	5002163		
30.00.2013	and a	1		A.,	r				
		1922	енить	на всех дост	гупных детек				
детектор D1	1	етектор D5			детектор D			детектор D7	
добавить на детект	ap D1	добавить на р	етекто	xp D5	добавит	ь на детект	op D6	добавить	ь на детектор D7
сменять на детекто	pe D1	сменить на де	тектор	e D5	сменить	на детекто	pe D6	сменить	на детекторе D7
образцов		артия М	K-02-13	3-21-u	партия образцов	MK-02-1	3-21-u	партия образцов	MK-02-13-21-u
oópaseu		бразец		14	образец		16	образец	18
Bec, r		iec, r		0,0989	sec, r		0,0934	Bec, r	0,0987
BMCOTA, CH	× 1	ысота, см	ſ	2,5 🖌	высота, см		2,5 💌	высота, см	2.5
дата начала облучения		цата начала облучения	22.0	95.2013	дата начала облучения	22	05.2013	дата начала облучения	22.05.2013
время начала		реня начала облучения	10.4	12:55	еремя начал облучения	na 11:	17:24	время начал облучения	13:04:52
дата окончаныя		ата окончания	22.0	5.2013	дата оконча облучения	22	05.2013	дата окончал облучения	ныя 22.05.2013
время окончаная		юлучения ремя окончания облучения	10.4	3.55	еремя окон облучения	маныя 11:	18:24	время оконч облучения	Harsen 13:05:52
								ourg er son	
				измере	ения				
убразцы на УСО УСО детектора D1		НСО детектора О	5		УСО детект	opa D6		УСО детекто	opa D7
добавнть на 900	01	добавить на	900	D5	добав	ить на УСО	D6	добави	пь на 9C0 D7
удал. образ. Очисти	n» 900	удал. образ.	очнсти	ть 900	удал обра:	з. Оченсти	ть 900	удал. образ	очистить УСО
		№ партия	0	бр. 🐴	№ парт	ия с	бр. 🐴	№ парти	ня обр.
		1			1			1	
		2	-	_	2	-		2	
					3			3	
		3	-	~	3		×	3	~
51	>	3	1	×	3		×		13

Fig. 9. Window of the program to control the devices and measurement of spectra

After installing the sample changers, in the process of their maintenance, it will be necessary to add to the program the codes to control the devices and to check their status.

At present the program is used without devices for automatic changing of samples.

5. TASKS OF THE PROJECT FOR 2014

1. To continue developing the software for the integrated automation of the NAA. To develop a database for atomic absorption spectrometry (AAS). The spectrometer is being set up.

2. To assemble and maintain three sample changers in the radioanalytical laboratory REGATA at the IBR-2 reactor provided with the program to control the devices and measurement of spectra.

3. To replace the outdated pneumatic components of the pneumatic system for irradiation of the samples; to develop new electronics to control the pneumatic system of the REGATA installation.

Acknowledgements. The authors acknowledges grant of the IAEA (Research Contract No. 17363).

Submitted to TECDOC of IAEA Coordination research program F1.20.25/ CRP1888 "Development of an Integrated Approach to Routine Automation of Neutron Activation Analysis".

REFERENCES

- 1. M. V. Frontasyeva. Neutron activation analysis for the Life Sciences. A review. *Physics of Particles and Nuclei*. Vol. 42, No. 2, 2011, pp. 332–378 (in English). http://www.springerlink.com/content/f836723234434m27/
- 2. A. Yu. Dmitriev and S. S. Pavlov. Software for automation of neutron activation analysis at the IBR-2 reactor of FLNP, JINR. Russian Journal *Nuclear Measurement and Information Technology*, No. 4, 2012. pp. 54–66 (in Russian).
- A. Yu. Dmitriev and S. S. Pavlov. Automation of the quantitative determination of elemental content in samples using neutron activation analysis at the IBR-2 reactor of the Frank Laboratory for Neutron Physics, Joint Institute for Nuclear Research. *Physics of Particles and Nuclei, Letters.* No. 1(178), 2013, pp. 58–64.

http://www1.jinr.ru/Pepan_letters/panl_2013_1/07_dmit.pdf (in Russian).

Received on August 14, 2013.

Редактор Е. И. Кравченко

Подписано в печать 19.11.2013. Формат 60 × 90/16. Бумага офсетная. Печать офсетная. Усл. печ. л. 0,75. Уч.-изд. л. 1,04. Тираж 155 экз. Заказ № 58118.

Издательский отдел Объединенного института ядерных исследований 141980, г. Дубна, Московская обл., ул. Жолио-Кюри, 6. E-mail: publish@jinr.ru www.jinr.ru/publish/