



KHẢO SÁT ĐẶC TRƯNG PHỔ GAMMA ĐỂ ĐÁNH GIÁ TÍNH CHÍNH XÁC CỦA MÔ HÌNH MÔ PHỎNG MONTE CARLO ĐỐI VỚI ĐẦU DÒ NHẬP NHÁY NaI(Tl)

Hoàng Đức Tâm^{*}, Nguyễn Thị Hải Yến¹, Nguyễn Thị Mỹ Lệ²

¹ Khoa Vật lý – Trường Đại học Sư phạm TP Hồ Chí Minh

² Trường Đại học Khoa học Tự nhiên – ĐHQG TP HCM

Ngày Tòa soạn nhận được bài: 27-02-2017; ngày phân biện đánh giá: 07-3-2017; ngày chấp nhận đăng: 24-3-2017

TÓM TẮT

Nghiên cứu này được thực hiện nhằm mục đích đánh giá sự phù hợp của mô hình mô phỏng Monte Carlo dùng trong chương trình MCNP với thực nghiệm. Để tăng độ tin cậy của mô hình mô phỏng, bên cạnh các đặc trưng như dạng đáp ứng của phổ và hiệu suất đỉnh hấp thụ năng lượng toàn phần đã khảo sát trong nghiên cứu trước đây, chúng tôi tiếp tục đánh giá các đặc trưng phổ khác bao gồm độ phân giải năng lượng ($R(E)$) và tỉ số đỉnh trên Compton (R_{PC}). Kết quả cho thấy, đối với độ phân giải năng lượng có sự phù hợp rất tốt giữa mô phỏng và thực nghiệm với độ lệch tương đối không vượt quá 3,59% trong khi đó giá trị này đối với tỉ số đỉnh trên Compton là 5,58%. Kết quả này khẳng định tính tin cậy của mô hình mô phỏng mà chúng tôi đã đưa ra.

Từ khóa: độ phân giải năng lượng, tỉ số đỉnh trên Compton, đầu dò NaI(Tl).

ABSTRACT

Validating the Monte Carlo simulation model using MCNP code by evaluating the features of spectrum obtained by NaI(Tl) scintillation detector

This research was performed to evaluate the agreement of Monte Carlo simulation model using MCNP code of NaI(Tl) detector with experiment. In attempt to increase the reliability of the simulation model, the features of spectrum such as energy resolution ($R(E)$) and peak to Compton ratio (R_{PC}) were evaluated. The results showed that the deviations between experimental and simulated values does not exceed 3.59% for $R(E)$ and 7.42% for R_{PC} . These results strongly confirm the reliability of this simulation model that we proposed.

Keywords: energy resolution, peak to Compton ratio, NaI(Tl) detector.

1. Giới thiệu

Hiện nay, phương pháp mô phỏng Monte Carlo được sử dụng nhiều trong lĩnh vực vật lý hạt nhân là do những ưu việt mà phương pháp này mang lại. Trong nhiều trường hợp, các thí nghiệm vật lý cần phải được tiến hành bằng mô phỏng trước nhằm định hướng cho thực nghiệm giúp tiết kiệm chi phí đồng thời tăng độ tin cậy cho kết quả nghiên cứu.

^{*} Email: hoangductam@hcmup.edu.vn

Hiện nay, một trong những chương trình mô phỏng rất phổ biến sử dụng phương pháp Monte Carlo là chương trình MCNP (Monte Carlo N-Particle). Đây là chương trình được phát triển bởi phòng thí nghiệm Los Alamos [1] và được rất nhiều nhóm nghiên cứu sử dụng [2, 3, 4, 5] cho thấy độ tin cậy của chương trình. Tuy nhiên, để có thể sử dụng kết quả mô phỏng nhằm định hướng cũng như làm tăng độ tin cậy của kết quả thực nghiệm, yêu cầu các thông số kỹ thuật đầu vào của hệ đo khi đưa vào chương trình mô phỏng cần phải đảm bảo độ chính xác cao. Đây là một yêu cầu không dễ thực hiện do không phải lúc nào chúng ta cũng có đầy đủ các thông số kỹ thuật của hệ thống đầu dò hoặc các thông số kỹ thuật này có thể thay đổi theo thời gian [6].

Hiện nay cách phổ biến nhất để khai báo các thông số kỹ thuật đầu dò cho đầu vào của chương trình mô phỏng MCNP là sử dụng các thông số được cung cấp bởi nhà sản xuất. Tuy nhiên, như đã đề cập ở trên, một số thông số kỹ thuật của đầu dò biến đổi theo thời gian như độ dày lớp chết [6] của đầu dò HPGe (High Purity Germanium), do vậy việc sử dụng các thông số được cung cấp bởi nhà sản xuất trước đó là không còn chính xác. Trong nghiên cứu trước đây [7], chúng tôi cũng đã chỉ ra rằng việc khai báo không chính xác độ dày của lớp phản xạ Al_2O_3 bao quanh đầu dò nhấp nháy NaI(Tl) ảnh hưởng rất lớn đến hiệu suất đỉnh hấp thụ năng lượng toàn phần. Do vậy, việc đánh giá tính phù hợp của các thông số này là rất quan trọng trong việc làm tăng độ tin cậy của các kết quả mô phỏng khi so sánh với thực nghiệm.

Để đánh giá tính phù hợp của các thông số kỹ thuật cho đầu vào của chương trình mô phỏng, cần thiết phải khảo sát dạng đáp ứng của phổ thu được bằng mô phỏng so với thực nghiệm dựa trên ba đặc trưng phổ đó là hiệu suất đỉnh hấp thụ năng lượng toàn phần, tỉ số đỉnh trên Compton (R_{PC}) và độ phân giải đỉnh năng lượng $R(E)$. Sự phù hợp của các đặc trưng này giữa mô phỏng và thực nghiệm sẽ khẳng định tính phù hợp của các thông số kỹ thuật của đầu dò khi đưa vào chương trình mô phỏng.

Trong nghiên cứu này, chúng tôi tiếp tục khảo sát các đặc trưng phổ về tỉ số đỉnh trên Compton R_{PC} và độ phân giải năng lượng của đỉnh hấp thụ toàn phần $R(E)$. Kết quả này cùng với khảo sát trước đây về hiệu suất đỉnh năng lượng toàn phần [7] sẽ khẳng định được tính chính xác của mô hình mô phỏng Monte Carlo mà chúng tôi đưa ra đồng thời sẽ cung cấp thông tin về tính cần thiết trong việc đánh giá tính phù hợp của các thông số kỹ thuật đầu dò trong mô hình mô phỏng Monte Carlo trước khi áp dụng vào các nghiên cứu cụ thể.

2. Cơ sở lý thuyết

2.1. Tỉ số đỉnh trên Compton (R_{PC})

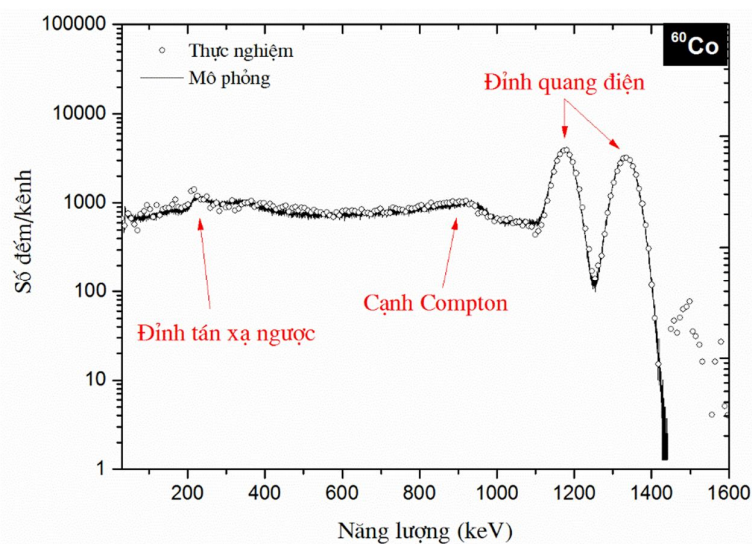
Thông thường để so sánh sự phù hợp của phổ mô phỏng và phổ thực nghiệm, dạng

đáp ứng của phổ trong tất cả các kênh được so sánh; tuy nhiên, đánh giá này chỉ là đánh giá bước đầu và mang tính định tính. Những đánh giá mang tính định lượng về sự phù hợp của phổ mô phỏng và thực nghiệm như đã đề cập ở trên bao gồm hiệu suất đỉnh hấp thụ năng lượng toàn phần, tỉ số đỉnh trên Compton và độ phân giải năng lượng của đỉnh. Các thông số mang tính định lượng này còn có thể đánh giá được “chất lượng” của đầu dò khi lựa chọn cho một nghiên cứu cụ thể nào đó.

Tỉ số đỉnh trên Compton là tỉ số giữa số đếm tại kênh đỉnh quang điện và số đếm tại vùng đặc trưng nền Compton tương ứng với đỉnh năng lượng đó. Vùng Compton được chọn là vùng phẳng trong nền Compton liên tục ngay bên dưới cạnh Compton. Tỉ số đỉnh trên Compton được tính theo công thức:

$$R_{PC} = \frac{C_p}{\frac{1}{m-n+1} \sum_m^n C_i} \quad (1)$$

trong đó C_p là số đếm tại vị trí đỉnh cao nhất của đỉnh hấp thụ năng lượng toàn phần, C_i là số đếm tương ứng tại kênh i , m và n lần lượt là kênh đầu và kênh cuối tương ứng với vùng đặc trưng Compton của phổ.



Hình 1. So sánh phổ thực nghiệm và mô phỏng đối với nguồn ^{60}Co khi đo bằng đầu dò nhấp nháy NaI(Tl)

2.2. Độ phân giải đỉnh hấp thụ toàn phần $R(E)$

Để đánh giá độ phân giải của các loại đầu dò, thông thường người ta sử dụng độ phân giải đỉnh hấp thụ năng lượng toàn phần $R(E)$. Trong thực tế, đại lượng này được tính bằng tỉ số của bề rộng tại nửa độ cao đỉnh (FWHM) với năng lượng của đỉnh đó. Cụ thể:

$$R(E) = \frac{\text{FWHM}(\text{keV})}{E_0} \quad (2)$$

FWHM phụ thuộc vào loại đầu dò và năng lượng của chùm tia gamma mà đầu dò ghi nhận. Thông thường biểu thức toán học của hàm bề rộng một nửa có dạng sau [8, 9, 10]:

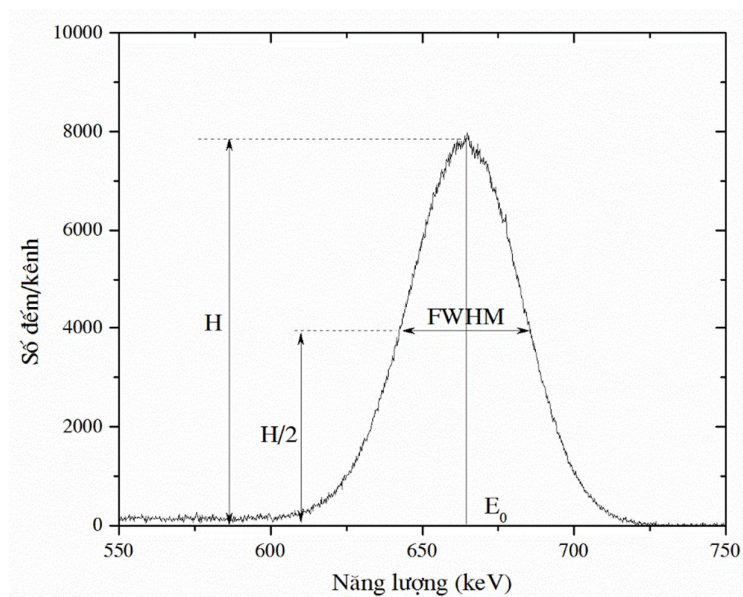
$$\text{FWHM} = a + b\sqrt{E} + cE^2 \quad (3)$$

với a, b, c là các tham số thu được từ việc làm khớp với dữ liệu thực nghiệm.

Trong thực nghiệm, độ phân giải năng lượng được xác định theo biểu thức sau [11]:

$$\text{FWHM} = 2\sqrt{2\ln(2)}\sigma \quad (4)$$

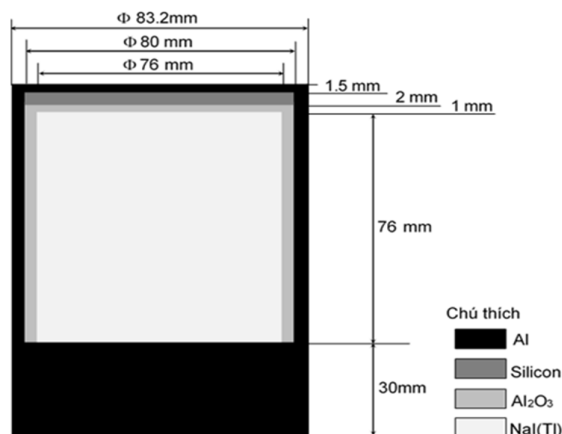
với σ là độ lệch chuẩn.



Hình 2. Đỉnh hấp thụ năng lượng toàn phần đo được trong thực nghiệm sử dụng đầu dò NaI(Tl) với nguồn ^{137}Cs

3. Phương pháp Monte Carlo

Trong nghiên cứu này, chúng tôi sử dụng chương trình MCNP5 để mô hình hóa toàn bộ quá trình đo đạc thực nghiệm. Trong nghiên cứu trước đây [7], bằng cách khảo sát dạng đáp ứng phổ và hiệu suất đỉnh năng lượng toàn phần, chúng tôi đã đề xuất mô hình mô phỏng với các thông số kỹ thuật được trình bày như trong Hình 3.



Hình 3. Các thông số kỹ thuật của đầu dò nhấp nháy NaI(Tl) dùng trong mô phỏng Monte Carlo sử dụng chương trình MCNP5 [7]

Phổ thu nhận được từ chương trình MCNP là phổ phân bố độ cao xung (Tally F8). Để phổ có dạng giống như như nghiệm, cần phải sử dụng thẻ FT8 trong khai báo input của chương trình MCNP với hàm bề rộng một nửa như trong phương trình (3)

với $a = -0,0137257 \text{ MeV}$; $b = 0,0739501 \text{ MeV}^{1/2}$ và $c = -0,152982 \text{ MeV}^{-1}$ [7].

Phổ mô phỏng thu được từ chương trình MCNP5 được phân tích để tính toán các đại lượng như độ phân giải năng lượng $R(E)$ và tỉ số đỉnh trên Compton (R_{PC}). Các kết quả tính toán này được so sánh với các kết quả tương ứng thu được từ phân tích phổ thực nghiệm nhằm khẳng định độ tin cậy của mô hình mô phỏng Monte Carlo sử dụng cho các nghiên cứu sau này có sử dụng chương trình MCNP và loại đầu dò đã khảo sát. Để đảm bảo tính thống kê, số lịch sử hạt được sử dụng trong mô phỏng là 1×10^6 hạt. Tất cả các phổ thu được bao gồm cả thực nghiệm và mô phỏng đều được xử lý bằng chương trình phân tích phổ gamma chuyên dụng Colegram [12].

4. Bố trí thực nghiệm

Loại đầu dò được sử dụng trong nghiên cứu này là đầu dò nhấp nháy NaI(Tl) với tinh thể có dạng hình trụ đặc có đường kính 76 mm và chiều dài 76 mm do hãng Amptek (Mỹ) sản xuất. Loại đầu dò này hoạt động được ở nhiệt độ phòng và việc kết nối nó với máy tính khá đơn giản thông qua cổng USB nên được sử dụng khá phổ biến trong các ứng dụng nhất là lĩnh vực công nghiệp như đo độ dày vật liệu [13], đo độ dày thành ống [14].

Nguồn sử dụng trong nghiên cứu này là bộ nguồn chuẩn điểm do hãng Eckert & Ziegler cung cấp. Hoạt độ của các nguồn tại thời điểm đo như được trình bày trong Bảng 1. Tất cả các nguồn này đều có sai số tương đối của hoạt độ là 3%. Nguồn được đặt trên trục đối xứng của đầu dò và cách 20 cm tính từ bề mặt đầu dò. Thời gian ghi nhận phổ là $1,8 \times 10^4$ s.

Bảng 1. Thông tin các nguồn phóng xạ [7]

Nguồn	Chu kỳ bán rã	Năng lượng (keV)	Hiệu suất phát (%)	Hoạt độ (Bq)
²² Na	2,6029 (8) năm	511	180,7 (2)	37333
		1274,537 (7)	99,94 (13)	--
¹³⁷ Cs	30,05 (8) năm	661,657 (3)	84,99 (20)	38258
⁵⁴ Mn	312,13 (3) ngày	834,838 (5)	99,9746 (11)	38110
⁶⁵ Zn	244,01 (9) ngày	511	2,842 (13)	37555
		1115,539 (2)	50,22 (11)	--
⁶⁰ Co	5,2711 (8) năm	1173,228 (3)	99,85 (3)	37407
		1332,492 (4)	99,9826 (6)	--
¹⁵² Eu	13,522 (16) năm	121,7817 (3)	28,41 (13)	--
		244,6974 (8)	7,55 (4)	--
		344,2785 (12)	26,59 (12)	--
		778,9045 (24)	12,97 (6)	--
		964,079 (18)	14,50 (6)	--
		1085,837 (10)	10,13 (6)	--
		1112,076 (3)	13,41 (6)	--
		1408,013 (3)	20,85 (8)	--

5. Kết quả

Kết quả tính toán độ phân giải năng lượng từ phổ mô phỏng và phổ thực nghiệm được trình bày trong Bảng 2. Trong bảng này, chúng ta có thể thấy được sự phù hợp giữa độ phân giải năng lượng thu được từ thực nghiệm và mô phỏng. Độ lệch tương đối ở hầu hết các năng lượng đã khảo sát đều dưới 2,2%. Riêng độ phân giải của đỉnh 244,6974 keV của ¹⁵²Eu là cao hơn so với các đỉnh còn lại tuy nhiên cũng chỉ xấp xỉ ở 3,6%. Điều này có thể giải thích là do ¹⁵²Eu là nguồn đa năng với nhiều mức năng lượng nên việc xử lý phổ mô phỏng tương đối phức tạp và gây ra sai số lớn.

Bảng 2. So sánh độ phân giải năng lượng của các đỉnh thực nghiệm và mô phỏng

Đồng vị	Năng lượng (keV)	R(E) (%)		Độ lệch tương đối $RD = \frac{a-b}{a} 100\%$
		Thực nghiệm (a)	MCNP5 (b)	
¹⁵² Eu	121,7817	9,79	9,70	0,94
¹⁵² Eu	244,6974	8,67	8,98	-3,59

¹⁵² Eu	344,2785	8,43	8,30	1,49
²² Na	511	7,29	7,37	-1,14
¹³⁷ Cs	661,657	6,44	6,54	-1,60
⁵⁴ Mn	834,838	5,90	5,92	-0,23
⁶⁵ Zn	1115,539	5,14	5,14	-0,15
⁶⁰ Co	1173,228	4,98	4,92	1,13
²² Na	1274,537	4,81	4,84	-0,60
⁶⁰ Co	1332,492	4,78	4,67	2,14

Việc so sánh độ phân giải năng lượng với các đỉnh năng lượng trải dài và phân bố đều từ 121 keV đến 1332 keV với độ lệch tương đối của giá trị $R(E)$ giữa phổ thực nghiệm và mô phỏng là nhỏ ở hầu hết các năng lượng đã khảo sát đã làm tăng độ tin cậy mô hình mô phỏng đầu dò nhấp nháy NaI(Tl) như trình bày trong Hình 3 mà chúng tôi đã đề xuất trong nghiên cứu trước đây [7].

Bảng 3. Tỉ số đỉnh trên Compton của một số đỉnh hấp thụ năng lượng toàn phần khi đo bằng đầu dò NaI(Tl)

Đồng vị	Năng lượng (keV)	Tỉ số đỉnh trên Compton (R_{PC})		Độ lệch tương đối $RD = \frac{a-b}{a} 100\%$
		Thực nghiệm (a)	MCNP5 (b)	
¹³⁷ Cs	661,657	9,71	9,83	-1,21
⁵⁴ Mn	834,838	8,66	8,56	1,14
⁶⁰ Co	1173,228	3,78	3,87	-2,61
⁶⁰ Co	1332,492	3,24	3,42	-5,58

Kết quả tính toán tỉ số R_{PC} được trình bày trong Bảng 3. Trong bảng này có thể thấy được sự phù hợp rất tốt của R_{PC} thực nghiệm và mô phỏng đối với các đỉnh năng lượng của nguồn ¹³⁷Cs và ⁵⁴Mn (độ lệch dưới 1,3%). Trong khi đó với đỉnh năng lượng của ⁶⁰Co, giá trị R_{PC} có lớn hơn nhưng cũng đều nhỏ hơn 5,6%. Điều này có thể giải thích như sau: Dựa vào sơ đồ các mức năng lượng phát ra từ nguồn ¹³⁷Cs, có thể xem đây là nguồn đơn năng, việc xử lí đỉnh phổ này tương đối đơn giản. Do vậy, việc tính toán R_{PC} là khá chính xác giữa thực nghiệm và mô phỏng. Điều này cũng hoàn toàn đúng cho đỉnh 834,838 keV của ⁵⁴Mn. Trong khi đó với nguồn ⁶⁰Co, có sự phát nổi tăng các photon năng lượng 1332,492 keV và 1173,228 keV nên phổ ghi nhận được là có hai đỉnh. Mặt khác đối với đầu dò nhấp nháy NaI(Tl) có độ phân giải kém hơn rất nhiều so với đầu dò HPGe nên hai đỉnh phổ này

nằm rất gần nhau dẫn đến việc xử lý phổ phức tạp hơn, kết quả là tỉ số R_{PC} sẽ kém chính xác hơn.

6. Kết luận

Kết quả tính toán độ phân giải năng lượng $R(E)$ và tỉ số đỉnh trên Compton R_{PC} cho thấy sự phù hợp tốt giữa mô phỏng và thực nghiệm. Kết quả này một lần nữa khẳng định rằng mô hình mô phỏng Monte Carlo với các thông số đầu dò mà chúng tôi đưa ra trong nghiên cứu trước đây là hoàn toàn phù hợp để sử dụng trong tập tin đầu vào của chương trình MCNP. Từ kết quả nghiên cứu này chúng tôi có thể khẳng định rằng, việc đánh giá các đặc trưng phổ như dạng đáp ứng của phổ, hiệu suất đỉnh hấp thụ năng lượng toàn phần, độ phân giải năng lượng và tỉ số đỉnh trên Compton giữa phổ mô phỏng và thực nghiệm là rất cần thiết trong việc làm tăng độ tin cậy của mô hình mô phỏng Monte Carlo. Qua đó, có thể sử dụng kết quả mô phỏng để định hướng thực nghiệm cũng như làm tăng độ tin cậy của các kết quả nghiên cứu.

Lời cảm ơn: Nghiên cứu này được tài trợ bởi Trường Đại học Sư phạm Tp.Hồ Chí Minh qua đề tài với mã số CS2016.19.12 và trong khuôn khổ đề tài cấp Bộ “Phát triển kỹ thuật gamma tán xạ ngược để đo khối lượng riêng chất lỏng bằng đầu dò nhấp nháy NaI(Tl)”.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

- [1] X-5 Monte Carlo Team (2003). MCNP – A General Monte Carlo N-Particle Transport Code, Version 5, Volume I: Overview and Theory, LA-UR-03-1987. Los Alamos National Laboratory.
- [2] Abolhasan, K., Faezeh, R., “An approach to design a ^{90}Sr radioisotope thermoelectric generator using analytical and Monte Carlo methods with ANSYS, COMSOL, and MCNP,” *Applied Radiation and Isotopes* **119**, pp.51 – pp.59, 2017,.
- [3] Albarhoum, M., “Calculation of the effect of boron as impurity on the reactivity of the Miniature Neutron Source Reactors using the MCNP code,” *Progress in Nuclear Energy* **81**, pp.91 – pp.97, 2015.
- [4] Doddy, K., “Critical mass calculations using MCNP: An academic exercise”, *Annals of Nuclear Energy* **75**, pp.228 – pp.231, 2015.
- [5] Yavara, A.R., Khalafi, H., Kasesaz, Y., Sarmani, S., Yahaya, R., Wood, A.K., Khoo, K.S., “Verification of MCNP simulation of neutron flux parameters at TRIGA MK II reactor of Malaysia”, *Applied Radiation and Isotopes* **70**, pp.2488 - pp.2493, 2012.
- [6] Ngo Quang Huy, “The influence of dead layer thickness increase on efficiency decrease for a coaxial HPGe p-type detector,” *Nuclear Instruments and Methods in Physics* **621**, pp.390 – pp.394, 2010.

- [7] Hoang Duc Tam, Huynh Dinh Chuong, Tran Thien Thanh, Chau Van Tao, "A study of the effect of Al₂O₃ reflector on response function of NaI(Tl) detector," *Radiation Physics and Chemistry* 125, pp.88 – pp.93, 2016.
- [8] Amgarou, K., Domingo, C., Bouassoule, T., Fernández, F., "Monte Carlo simulation of the NaI(Tl) detector response to measure gold activated foils," *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B* 267, pp.2944-pp.2951, 2009.
- [9] Baccouche, S., Al-Azmi, D., Karunakara, N., Trabelsi, A., "Application of the Monte Carlo method for the efficiency calibration of CsI and NaI detectors for gamma-ray measurements from terrestrial samples", *Applied Radiation and Isotopes* 70, 227–232, 2012.
- [10] Kovaltchouk, V., Machrafi, R., "Monte Carlo simulations of response functions for gas filled and scintillator detectors with MCNPX code," *Annals of Nuclear Energy* 38, pp.788 – pp.793, 2011.
- [11] Casanovas, R., Morant, J.J., Salvadó, M., "Energy and resolution calibration of NaI(Tl) and LaBr₃(Ce) scintillators and validation of an EGS5 Monte Carlo user code for efficiency calculations", *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A* 675, pp.78 – pp.83, 2012.
- [12] Lépy, M.C., "Presentation of the COLEGRAM software," *Note technique Laboratoire National Henri Becquerel/04/26*, 2004.
- [13] Hoang Duc Tam, Huynh Dinh Chuong, Tran Thien Thanh, Vo Hoang Nguyen, Hoang Thi Kieu Trang, Chau Van Tao, "Advanced gamma spectrum processing technique applied to the analysis of scattering spectra for determining material thickness," *Journal of Radioanalytical and Nuclear Chemistry* 303, pp.693 – pp.699, 2015.
- [14] Vo Hoang Nguyen, Hoang Duc Tam, Le Bao Tran, Tran Thien Thanh, Hua Tuyet Le, Le Dinh Minh Quan, Huynh Dinh Chuong, Tran Nguyen Thuy Ngan, Chau Van Tao, "A semi-empirical method for measuring thickness of pipe-wall using gamma scattering technique," *Journal of Radioanalytical and Nuclear Chemistry* 308, pp.1011 – pp.1016, 2016.