



SỬ DỤNG KỸ THUẬT GAMMA TÁN XẠ NGƯỢC ĐỂ XÁC ĐỊNH MẬT ĐỘ CHẤT LỎNG BẰNG PHƯƠNG PHÁP MONTE CARLO

Nguyễn Thị Mỹ Lệ¹, Hồ Thị Tuyết Ngân², Hoàng Đức Tâm^{2*}

¹Trường Đại học Khoa học Tự nhiên - ĐHQG TP HCM

²Khoa Vật lý - Trường Đại học Sư phạm TP Hồ Chí Minh

Ngày Tòa soạn nhận được bài: 20-4-2017; ngày phân biên đánh giá: 09-6-2017; ngày chấp nhận đăng: 19-6-2017

TÓM TẮT

Trong nghiên cứu này, chúng tôi sử dụng phương pháp Monte Carlo để đánh giá khả năng sử dụng đầu dò nhấp nháy NaI(Tl) trong việc xác định mật độ chất lỏng bằng kỹ thuật gamma tán xạ ngược. Kết quả nghiên cứu cho thấy sự phụ thuộc tuyến tính rất tốt của cường độ chùm tia tán xạ một lần vào mật độ của chất lỏng. Bên cạnh đó, nghiên cứu cũng chỉ ra rằng có thể mở rộng đường kính ống chuẩn trực đầu dò nhằm rút ngắn thời gian đo. Để tăng độ tin cậy của kết quả nghiên cứu, mật độ của benzene và n-hexane cũng đã được tính toán và so sánh với giá trị chuẩn của NIST với độ lệch tương đối dưới 5%.

Từ khóa: gamma tán xạ ngược, mật độ chất lỏng, MCNP5, NaI(Tl).

ABSTRACT

Using the gamma backscattering technique to determine the density of liquid by Monte Carlo method

In this work, we used the Monte Carlo method to evaluate the ability of using the NaI(Tl) detector in determining the density of liquid by gamma backscattering technique. The results showed the strongly dependence of single scattering intensity on density of liquid. In addition, our work also showed that it is possible to expand the diameter of detector collimator with the aim of reducing the acquisition time. In order to increase the reliability of the obtained results, the density of benzene and n-hexane were calculated and compared with the standard values of NIST which the maximum deviation is under 5%.

Keywords: gamma backscattering, liquid density, MCNP5, NaI(Tl).

1. Giới thiệu

Lĩnh vực ứng dụng hạt nhân trong công nghiệp, kỹ thuật gamma tán xạ ngược được sử dụng khá phổ biến do những ưu điểm mà kỹ thuật này mang lại như chỉ cần tiếp cận đối tượng đo từ một phía, có thể thực hiện phép đo khi hệ thống đang hoạt động trong một số trường hợp. Bên cạnh đó, trong nghiên cứu khảo sát tính ăn mòn của vật liệu [1], Priyada và cộng sự đã chỉ ra rằng kỹ thuật gamma tán xạ ngược có độ chính xác tương đương với các kỹ thuật gamma truyền qua và kỹ thuật chụp ảnh tia X.

* Email: hoangductam@hcmup.edu.vn

Một số nhóm nghiên cứu khác cũng đã ứng dụng thành công kỹ thuật gamma tán xạ ngược để dò tìm mức chất lỏng [2], xác định bề dày vật liệu [3]. Trong nghiên cứu [2], Priyada và cộng sự đã sử dụng kỹ thuật gamma tán xạ để xác định mật độ chất lỏng bằng đầu dò HPGe. Đây là loại đầu dò có độ phân giải cao nhưng hiệu suất thấp khi so sánh với đầu dò nhấp nháy NaI(Tl). Kết quả của nghiên cứu này đã chỉ ra rằng có thể sử dụng kỹ thuật gamma tán xạ ngược để xác định mật độ của chất lỏng.

Tuy nhiên có thể thấy rằng, trong nghiên cứu của Priyada [2], việc sử dụng đầu dò HPGe và ống chuẩn trực đầu dò có kích thước nhỏ (7 mm) sẽ dẫn đến một số hạn chế. Thứ nhất, đầu dò bán dẫn HPGe cần làm lạnh khi hoạt động (-196°C) do vậy rất khó mang thiết bị này ra hiện trường để đo và thêm vào đó là chi phí cao. Thứ hai, việc sử dụng ống chuẩn trực đầu dò có đường kính nhỏ như trên sẽ dẫn đến việc sử dụng nguồn phóng xạ có hoạt độ lớn. Do vậy, trong nghiên cứu này, chúng tôi sẽ khắc phục hai vấn đề trên bằng cách sử dụng đầu dò nhấp nháy NaI(Tl) và sử dụng các loại ống chuẩn trực đầu dò có đường kính lớn hơn (3,0 cm và 9,5 cm). Hai loại ống chuẩn đầu dò với đường kính như trên được sử dụng do đây là các loại mà chúng tôi hiện có trong phòng thí nghiệm.

Để làm cơ sở cho việc đo thực nghiệm, trong giai đoạn đầu của nghiên cứu này, chúng tôi sẽ tiến hành mô phỏng toàn bộ quá trình đo đạc bằng phương pháp Monte Carlo sử dụng chương trình MCNP5. Việc mô phỏng thành công sẽ làm cơ sở để giúp chúng tôi thực hiện giai đoạn tiếp theo của nghiên cứu.

2. Cơ sở lý thuyết

Chùm photon phát ra từ nguồn sau khi tán xạ trên khối chất lỏng có năng lượng được xác định theo biểu thức:

$$E = \frac{E_0}{1 + (E_0 / m_0 c^2)(1 - \cos \theta)} \quad (1)$$

trong đó:

- $m_0 c^2 = 0,511 \text{ MeV}$ là năng lượng nghỉ của electron,
- θ là góc tán xạ.

Quá trình tán xạ của chùm photon trải qua ba giai đoạn: Đầu tiên chùm photon đi đến khối chất lỏng và bị suy giảm cường độ, sau đó chúng bị tán xạ trong khối chất lỏng và cuối cùng ra đi ra khỏi khối chất lỏng và được đầu dò ghi nhận có cường độ được xác định bởi biểu thức [1]:

$$I(P) = I_0 \exp \left[- \left(\frac{\mu(E_0)}{\rho} \right) \rho x \right] \frac{d\sigma(E_0, \Omega)}{d\Omega} S(E_0, \theta, Z) d\Omega \rho N \frac{Z}{A} V \exp \left[- \left(\frac{\mu(E)}{\rho} \right) \rho x' \right] \quad (2)$$

trong đó:

- ρ là mật độ của chất lỏng (kgm^{-3})
- $\mu(E_0)/\rho$, $\mu(E)/\rho$ ($\text{cm}^2 \text{ g}^{-1}$) là hệ số suy giảm khối tương ứng với năng lượng E_0 và

E được xác định bằng chương trình XCOM [4],

- $d\sigma(E_0, \Omega)/d\Omega$ là tiết diện tán xạ vi phân được tính theo công thức Klein – Nishina,
- $S(E_0, \theta, Z)$ là hàm tán xạ không kết hợp.

$$\text{Đặt } \kappa = I_0 \frac{d\sigma(E_0, \Omega)}{d\Omega} S(E_0, \theta, Z) d\Omega N \frac{Z}{A} V \quad (3)$$

Biểu thức (2) được viết lại như sau [1]:

$$I(P) = \kappa \rho \exp \left[- \left(\frac{\mu(E_0)}{\rho} \right) \rho x \right] \exp \left[- \left(\frac{\mu(E)}{\rho} \right) \rho x' \right] \quad (4)$$

với κ là hằng số phụ thuộc vào việc bố trí thí nghiệm.

Biểu thức (4) biểu diễn mối liên hệ giữa mật độ chất lỏng và cường độ tán xạ. Trong nghiên cứu [5], Luo và cộng sự đã đưa ra biểu thức dạng tường minh mô tả sự phụ thuộc của cường độ chùm tia tán xạ theo mật độ chất lỏng theo biểu thức bên dưới:

$$I(\rho) = k\rho + C \quad (5)$$

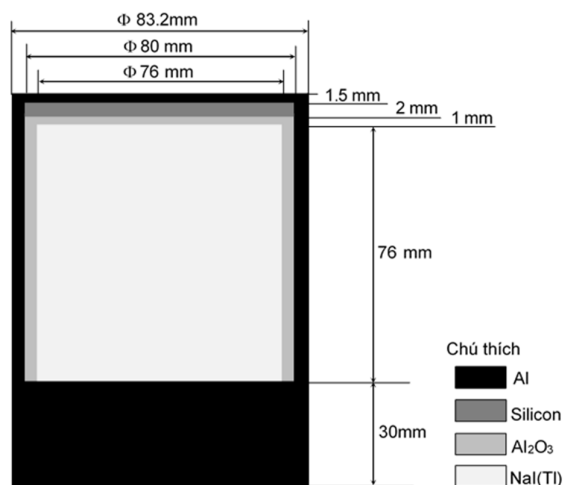
với k và C là các hằng số.

3. Mô phỏng Monte Carlo

Phương pháp Monte Carlo được sử dụng để khảo sát sự phụ thuộc của cường độ chùm tia tán xạ một lần theo mật độ chất lỏng bằng chương trình MCNP5 [6]. Đây là chương trình mô phỏng được phát triển bởi phòng thí nghiệm Los Alamos và được sử dụng nhiều trong lĩnh vực vật lý hạt nhân. Mặc dù là một chương trình mô phỏng rất mạnh, tuy nhiên tính chính xác của kết quả mô phỏng lại phụ thuộc nhiều vào các thông số kỹ thuật của đầu dò trong khai báo tập tin đầu vào. Các thông số này thông thường được cung cấp bởi nhà sản xuất, tuy nhiên tính chính xác của nó cần phải được kiểm tra và đặc biệt một số thông số có thể thay đổi theo thời gian.

Trong các nghiên cứu gần đây [7, 8], chúng tôi đã khảo sát và hiệu chỉnh các thông số kỹ thuật sao cho phù hợp thu được phù hợp với thực nghiệm không chỉ về dạng đáp ứng phổ và hiệu suất đỉnh [7] mà còn phù hợp cả về các đặc trưng phổ như tỉ số đỉnh trên Compton (R_{PC}) và độ phân giải năng lượng ($R(E)$). Việc chính xác hóa các thông số này đối với đầu dò nhấp nháy NaI(Tl) làm cơ sở để chúng tôi sử dụng phương pháp Monte Carlo cho nghiên cứu này.

Thông số kỹ thuật của đầu dò nhấp nháy NaI(Tl) được mô tả như trong Hình 1. Mật độ của nhôm, Silicon, nhôm ô-xít (Al_2O_3) và tinh thể NaI(Tl) được khai báo trong tập tin đầu vào từ dữ liệu của NIST [4]. Nguồn phóng xạ sử dụng trong mô phỏng là nguồn ^{137}Cs . Đầu dò NaI(Tl) được bố trí để ghi nhận chùm photon tán xạ ở góc 120° .

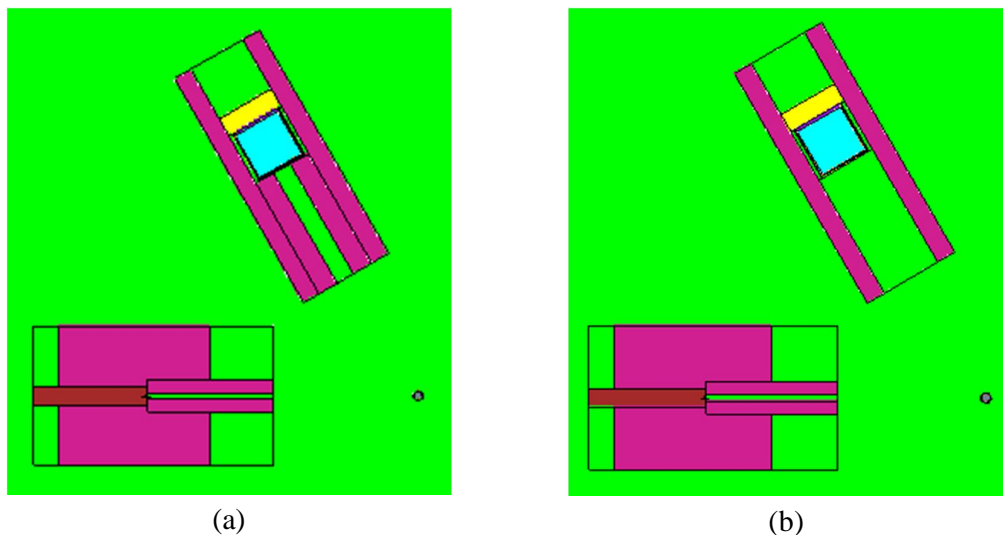


Hình 1. Các thông số kỹ thuật của đầu dò NaI(Tl) dùng trong mô phỏng [6]

Để phổ mô phỏng có dạng giống với phổ thực nghiệm, hàm bề rộng một nửa được sử dụng trong chương trình mô phỏng MCNP5 có dạng như sau:

$$\text{FWHM(MeV)} = a + b\sqrt{c + cE^2} \quad (6)$$

với E là năng lượng photon tán xạ (MeV); các hệ số a, b, c lần lượt có giá trị bằng $-0,0137257 \text{ MeV}$, $0,0739501 \text{ MeV}^{1/2}$, $-0,152982 \text{ MeV}^{-1}$ [3].



Hình 2. Mô hình mô phỏng sử dụng trong chương trình MCNP5 cho nguồn ^{137}Cs với a) đường kính ống chuẩn trực đầu dò 3,0cm và b) đường kính ống chuẩn trực đầu dò 9,5cm

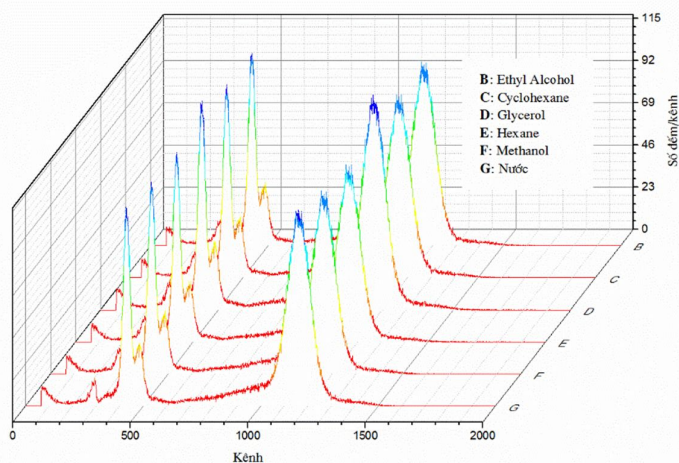
Các chất lỏng được sử dụng trong mô phỏng là: nước, methanol, ethanol, hexane, glycerol, cyclohexane, benzene và n-hexane. Đầu tiên, chúng tôi khảo sát sự phụ thuộc tuyến tính giữa cường độ tán xạ một lần và mật độ chuẩn của 7 loại chất lỏng như: nước,

methanol, ethanol, hexane, glycerol, cyclohexane theo biểu thức (5) đã được trình bày. Dựa trên cơ sở đó, chúng tôi xác định mật độ của hai loại dung dịch còn lại là benzene và n-hexane bằng cách thay cường độ tán xạ một lần tương ứng vào trong hàm vừa được xây dựng.

Để đánh giá về khả năng mở rộng ống chuẩn trực đầu dò nhằm rút ngắn thời gian đo khi tiến hành trong thực tế, chúng tôi thực hiện mô phỏng với hai trường hợp đường kính ống chuẩn trực đầu dò 3,0cm và 9,5cm. Chi tiết của mô hình mô phỏng được biểu diễn trong Hình 2.

4. Kết quả và thảo luận

Phổ tán xạ thu được từ mô phỏng của các chất lỏng được biểu diễn như trong Hình 3. Các phổ tán xạ này được chúng tôi phân tích bằng kỹ thuật xử lý phổ tán xạ cải tiến [3].



Hình 3. Phổ tán xạ của chùm photon năng lượng 662 keV trên các chất lỏng

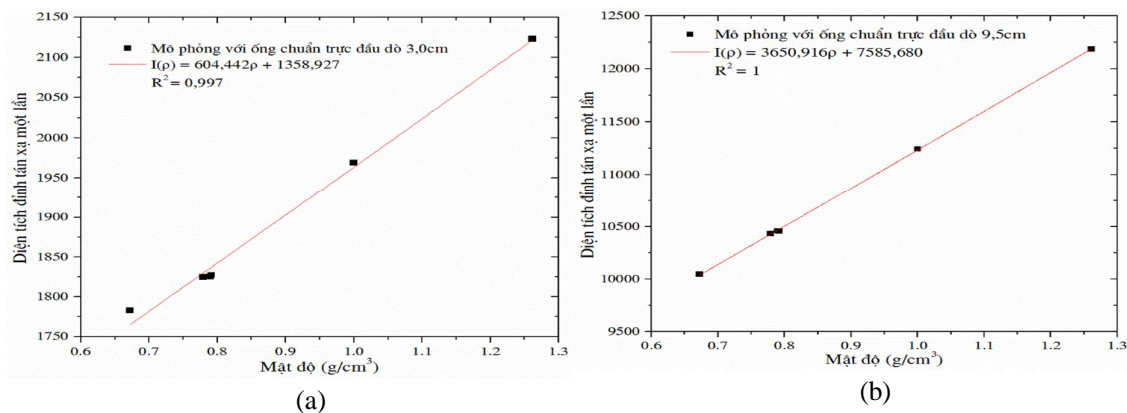
Tại góc tán xạ 120° , năng lượng photon tán xạ được xác định từ lý thuyết theo biểu thức (1) vào khoảng 224,9 keV. Bảng 1 biểu diễn giá trị năng lượng photon tán xạ một lần và FWHM của đỉnh tán xạ một lần trong cả hai trường hợp ống chuẩn trực đầu dò 3,0cm và 9,5cm.

Từ Bảng 1 có thể thấy được sự phù hợp rất tốt giữa năng lượng photon tán xạ một lần từ lý thuyết và mô phỏng với độ sai biệt chỉ vào khoảng 0,6 – 0,7% trong cả hai trường hợp ống chuẩn trực đầu dò đã khảo sát. Tuy nhiên, bề rộng một nửa đỉnh tán xạ (FWHM) tăng khi đường kính ống chuẩn trực đầu dò tăng lên. Nguyên nhân của điều này là do khi tăng đường kính trong của ống chuẩn trực đầu dò thì thành phần đóng góp của tán xạ nhiều lần tăng lên dẫn đến sự giãn nở phổ nhiều hơn.

Bảng 1. Năng lượng photon tán xạ và FWHM (keV) của đỉnh tán xạ đơn từ lý thuyết và mô phỏng

Dung dịch	Mật độ chuẩn [4] (kg/m ³)	Năng lượng photon tán xạ (keV)			FWHM (keV)		
		Lí thuyết	MCNP5	RD (%)	Lí thuyết	MCNP5	RD (%)
Ống chuẩn trực đầu dò có đường kính 3,0cm							
Nước	1000,0	224,9	223,4	0,7	20,7	21,1	1,8
Methanol	791,4	224,9	223,3	0,7	20,7	21,0	1,7
Ethanol	789,3	224,9	223,3	0,7	20,7	21,1	1,7
Hexane	672,0	224,9	223,3	0,7	20,7	21,1	1,9
Glyxerol	1261,3	224,9	223,4	0,7	20,7	20,8	0,5
Cyclohexane	779,0	224,9	223,3	0,7	20,7	21,1	1,7
Ống chuẩn trực đầu dò có đường kính 9,5cm							
Nước	1000,0	224,9	223,5	0,6	20,7	22,7	8,9
Methanol	791,4	224,9	223,5	0,6	20,7	22,8	9,0
Ethanol	789,3	224,9	223,5	0,6	20,7	23,0	9,9
Hexane	672,0	224,9	223,5	0,6	20,7	22,8	9,2
Glyxerol	1261,3	224,9	223,5	0,6	20,7	22,6	8,5
Cyclohexane	779,0	224,9	223,5	0,6	20,7	22,8	9,1

Sự phụ thuộc giữa cường độ của đỉnh tán xạ một lần vào mật độ của 6 loại chất lỏng (Nước, methanol, ethanol, hexane, glycerol, cyclohexane) được biểu diễn trong Hình 4. Đồ thị cho thấy được sự phụ thuộc tuyến tính rất tốt của cường độ đỉnh tán xạ một lần vào mật độ của chất lỏng trong cả hai trường hợp kích thước ống chuẩn trực đầu dò đã khảo sát. Các dữ liệu này làm khớp bằng chương trình Origin 8.5.1 với hệ số $R^2 = 0,997$ và $R^2 \approx 1$.



Hình 4. Đồ thị biểu diễn sự phụ thuộc tuyến tính giữa cường độ đỉnh tán xạ một lần vào mật độ với a) đường kính ống chuẩn trực đầu dò: 3,0cm và b) đường kính ống chuẩn trực đầu dò: 9,5cm.

Để đánh giá lại sự phụ tuyến tính của cường độ tán xạ một lần vào mật độ chất lỏng đã thu được ở trên, chúng tôi sử dụng hai chất lỏng là benzene và n-hexane và tính toán lại mật độ dựa vào cường độ tán xạ một lần từ phổ mô phỏng thu được của chúng. Kết quả tính toán được trình bày trong Bảng 2. Có thể thấy rằng, mật độ của benzene và n-hexane được xác định với độ sai biệt so với mật độ chuẩn [4] không vượt quá 7,0% đối với ống chuẩn trực đầu dò 3,0 cm và 5,0% với ống chuẩn trực đầu dò 9,5 cm.

Bảng 2. Giá trị mật độ dung dịch của benzene và n-hexane

Dung dịch	Mật độ chuẩn [4] (kg/m ³)	3,0cm		9,5cm	
		Mô phỏng	RD (%)	Mô phỏng	RD (%)
Benzene	878,65	817,05	7,0	878,65	4,9
n-hexane	660,3	632,81	4,2	660,30	0,3

Điều đáng chú ý ở đây là kết quả mật độ chất lỏng thu được đối với ống chuẩn trực đầu dò đường kính 9,5 cm lại tốt hơn so với ống chuẩn trực đầu dò đường kính 3,0 cm. Chúng tôi cho rằng điều này liên quan đến hai vấn đề đó là tính thống kê trong việc ghi nhận số photon tán xạ và sự phù hợp của kỹ thuật phân tích phổ cải tiến trong phân tích phổ tán xạ trên chất lỏng. Đối với vấn đề thứ nhất: Việc sử dụng ống chuẩn trực đầu dò có đường kính lớn dẫn đến xác suất ghi nhận của photon tán xạ một lần sẽ lớn hơn, điều này làm giảm sai số gây ra do các thăng giáng thống kê trong ghi nhận số đếm. Vấn đề thứ hai liên quan đến kỹ thuật phân tích phổ. Trong nghiên cứu trước đây [3], kỹ thuật này đã kiểm chứng độ tin cậy trong phân tích phổ tán xạ trên vật liệu thép. Tất nhiên, việc áp dụng đối với chất lỏng cần phải được kiểm chứng thêm để tăng độ tin cậy nhưng bước đầu chúng tôi cho rằng việc áp dụng kỹ thuật phân tích phổ trong [3] đối với phổ tán xạ trên chất lỏng là phù hợp.

5. Kết luận

Trong nghiên cứu này, chúng tôi đã sử dụng kỹ thuật gamma tán xạ ngược để xác định mật độ của chất lỏng. Kết quả nghiên cứu cho thấy sự phụ thuộc tuyến tính rất tốt của cường độ tán xạ một lần vào mật độ chất lỏng với hệ số R^2 lần lượt bằng 0,997 và 1 đối với hai ống chuẩn trực đầu dò đã khảo sát là 3,0 cm và 9,5 cm. Độ tin cậy của kết quả thu được cũng được chúng tôi đánh giá lại bằng cách so sánh mật độ tính toán từ mô phỏng của benzene và n-hexane với mật độ chuẩn được lấy từ NIST. Kết quả tính toán cho thấy độ lệch tương đối lớn nhất của kết quả tính toán của chúng tôi so với giá trị chuẩn của NIST là 7,0% đối với ống chuẩn trực có đường kính 3,0cm và 4,9% đối với ống chuẩn trực 9,5 cm. Với những kết quả thu được này, bước đầu chúng tôi nhận định rằng, có thể sử dụng đầu dò nhấp nháy NaI(Tl) thay cho đầu dò HPGe trong việc xác định mật độ dung dịch. Bên cạnh đó việc mở rộng ống chuẩn trực đầu dò để rút ngắn thời gian đo trong thực nghiệm là hoàn toàn khả thi. Kết quả này sẽ làm cơ sở cho việc bố trí hệ đo thực nghiệm trong thời gian sắp tới.

Lời cảm ơn: Nghiên cứu này được thực hiện với kinh phí được cấp từ đề tài cấp Bộ với mã số B2017-SPS-15.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

1. P. Priyada, M. Margret, R. Ramar, Shivaramu, M. Menaka, L. Thilagam, B. Venkataraman, B. Raj, “Intercomparison of gamma scattering, gammatography, and radiography techniques for mild steel nonuniform corrosion detection,” *Review of Scientific Instruments* **82**, pp. 035115 (1 – 8), 2011.
2. P. Priyada, M. Magret, R. Ramar, Shivaramu, “Intercomparison of gamma ray scattering and transmission techniques for fluid–fluid and fluid–air interface levels detection and density measurements,” *Applied Radiation and Isotopes* **70**, pp.462 – 469, 2012.
3. H.D. Tam, H.D. Chuong, T.T. Thanh, V.H. Nguyen, H.T.K. Trang, C.V. 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 – 699, 2015.
4. M.J. Berger, J.H. Hubbell, S.M. Seltzer, J. Chang, J.S. Coursey, R. Sukumar, D.S. Zucker, K. Olsen, *XCOM version 3.1, NIST Standard Reference Database 8*, 1999 (XGAM).
5. G. Luo, G. Xiao, “Analysis of the factors that affect photon counts in Compton scattering,” *Applied Radiation and Isotopes* **95**, pp.208 – 213, 2015.
6. X-5 Monte Carlo Team. MCNP – A General Monte Carlo N-Particle Transport Code, Version 5, Volume I: Overview and Theory, LA-UR-03-1987. Los Alamos National Laboratory, 2003.
7. H.D. Tam, H.D. Chuong, T.T. Thanh, C.V. Tao, “A study of the effect of Al₂O₃ reflector on response function of NaI(Tl) detector,” *Radiation Physics and Chemistry* **125**, pp.88- 93, 2016.
8. Hoàng Đức Tâm, Nguyễn Thị Hải Yến, Nguyễn Thị Mỹ Lệ, “Khảo sát đặc trưng phổ gamma để đánh giá tính chính xác của mô hình mô phỏng Monte Carlo đối với đầu dò nhấp nháy NaI(Tl),” *Tạp chí Khoa học - Trường Đại học Sư phạm TPHCM* **14** (3), tr.95 – 103, 2017.