

DOI:10.22144/ctu.jsi.2020.094

MÔ PHỎNG HỆ ĐO RAYLEIGH-COMPTON BẰNG PHƯƠNG PHÁP MONTE CARLO

Lê Hoàng Minh^{1*}, Lê Quang Vương^{1,4}, Huỳnh Đình Chương², Huỳnh Thanh Nhẫn³,
Trần Thiện Thanh^{1,2} và Châu Văn Tạo^{1,2}

¹Bộ môn Vật lý Hạt nhân, Trường Đại học Khoa học Tự nhiên – ĐHQG-HCM

²Phòng Thí nghiệm Kỹ thuật Hạt nhân, Trường Đại học Khoa học Tự nhiên – ĐHQG-HCM

³Bộ môn Vật lý Tin học, Trường Đại học Khoa học Tự nhiên – ĐHQG-HCM

⁴Khoa Vật lý, Trường Đại học Sư phạm Thành phố Hồ Chí Minh

*Người chịu trách nhiệm về bài viết: Lê Hoàng Minh (email: lehoangminh987@gmail.com)

Thông tin chung:

Ngày nhận bài: 04/03/2020

Ngày nhận bài sửa: 21/04/2020

Ngày duyệt đăng: 29/06/2020

Title:

Simulation for Rayleigh-Compton measurement system by using Monte Carlo method

Từ khóa:

Mô phỏng Monte Carlo, tán xạ Compton, tán xạ Rayleigh

Keywords:

Compton scattering, Monte Carlo simulation, Rayleigh scattering

ABSTRACT

In this study, the Monte Carlo method is applied for simulating the Rayleigh-Compton measurement system using the Si(Li) detector on MCNP6 software. In which, incident photon's energy is 59.54 keV of ²⁴¹Am source and the scattering angle is determined at 124°. The targets are elements in the range of atomic numbers from 13 to 82. Besides the simulation, the theoretical values of Rayleigh-Compton ratio were calculated basing on NRFF, RFF, MFF models on MATLAB software. The results of the Rayleigh-Compton ratio from the simulation and the theoretical calculation have an average discrepancy of 4%. In conclusion, by utilizing the Rayleigh-Compton measurement system model, the effective atomic number and electron density of compounds can be determined more accurately, conveniently, and quickly.

TÓM TẮT

Trong nghiên cứu này, phương pháp Monte Carlo được áp dụng để mô phỏng cho hệ đo tán xạ Rayleigh-Compton sử dụng đầu dò bán dẫn Si(Li) trên phần mềm MCNP6. Trong đó, tia gamma tới mang năng lượng 59,54 keV được phát ra từ nguồn ²⁴¹Am và góc tán xạ được xác định ở 124°. Các bia tán xạ là các đơn nguyên tố có nguyên tử số Z trải dài từ 13 đến 82. Song song với việc mô phỏng, các giá trị lý thuyết của tỉ số Rayleigh-Compton đã được tính toán dựa vào các mô hình NRFF, RFF, MFF trên phần mềm MATLAB. Các kết quả giá trị tỉ số Rayleigh-Compton từ mô phỏng và tính toán lý thuyết có độ sai biệt trung bình dưới 4%. Như vậy, với mô hình mô phỏng hệ đo tán xạ Rayleigh-Compton như trên, việc xác định nguyên tử số hiệu dụng cũng như mật độ electron cho các hợp chất có thể được thực hiện chính xác, nhanh chóng và thuận tiện hơn.

Trích dẫn: Lê Hoàng Minh, Lê Quang Vương, Huỳnh Đình Chương, Huỳnh Thanh Nhẫn, Trần Thiện Thanh và Châu Văn Tạo, 2020. Mô phỏng hệ đo Rayleigh-Compton bằng phương pháp Monte Carlo. Tạp chí Khoa học Trường Đại học Cần Thơ. 56(Số chuyên đề: Khoa học tự nhiên)(1): 63-71.

1 TỔNG QUAN

Vật lý hạt nhân ngày càng đóng vai trò thiết yếu trong các lĩnh vực quan trọng như công nghiệp, y tế, xây dựng. Các yêu cầu về phát triển tính chất vật liệu ngày càng một tăng cao như các vật liệu phải nhẹ, bền, hoặc có cấu tạo sao cho giống với các mô, tế bào trong cơ thể con người nhất. Một trong những đại lượng đặc trưng cho mỗi vật liệu là nguyên tử số hiệu dụng, nó thể hiện sự tương tác của các bức xạ với vật liệu đó. Việc đánh giá nguyên tử số hiệu dụng (Z_{eff}) có thể được thực hiện thông qua nhiều phương pháp khác nhau như phương pháp gamma truyền qua hay phương pháp gamma tán xạ ngược. Bên cạnh đó tỉ số Rayleigh-Compton (R/C) được xác định là phụ thuộc vào Z_{eff} , do đó thông qua việc xác định tỉ số R/C, chúng ta có thể biết được Z_{eff} của các vật liệu được cấu tạo bởi nhiều nguyên tố khác nhau. Các ứng dụng thực tiễn của tỉ số R/C trong các nghiên cứu trước như: nghiên cứu thành phần trong hợp kim (Gigante *et al.*, 1985), ứng dụng trong kiểm tra không hủy mẫu NDT (Singh *et al.*, 2010), nghiên cứu vật liệu phù hợp để làm hình nộm trong mô phỏng mô sinh học (Lama *et al.*, 2015) hay đánh giá định lượng và định tính các sản phẩm thuốc (Manjunath and Kerur, 2016).

Trong bài báo này, tỉ số R/C của các đơn nguyên tố được khảo sát bằng cách sử dụng phương pháp Monte Carlo trên phần mềm mô phỏng MCNP6 sử dụng năng lượng 59,5 keV của nguồn ^{241}Am tại góc tán xạ 124° . Bên cạnh đó, chương trình tính toán tỉ số R/C được xây dựng trên phần mềm MATLAB (phiên bản 2017b) dựa trên các mô hình lý thuyết phương pháp tham số dạng phi tương đối tính NRFF (Hubbell *et al.*, 1975), tham số dạng sử dụng hàm Hartree-Fock tương đối tính RFF (Hubbell and Overbro, 1979) và tham số dạng sử dụng hàm Hartree-Fock-Slater tương đối tính MFF (Schaupp *et al.*, 1983).

2 CƠ SỞ LÝ THUYẾT

Tán xạ gamma là quá trình tương tác vật lý của bức xạ gamma với vật chất, tán xạ gamma được chia làm hai loại bao gồm tán xạ kết hợp (tán xạ Rayleigh) và tán xạ không kết hợp (tán xạ Compton). Tán xạ Rayleigh xảy ra giữa bức xạ gamma tới và electron liên kết chặt chẽ trong lớp vỏ nguyên tử, có xác suất đáng kể với gamma có năng lượng thấp (dưới 100 keV), góc tán xạ nhỏ và vật liệu mẫu có nguyên tử số Z lớn. Tia gamma sau quá trình tán xạ Rayleigh không bị mất năng lượng $E_{\gamma R} = E_\gamma$. Xác suất xảy ra tán xạ Rayleigh tỉ lệ thuận với bình phương nguyên tử số ($\sim Z^2$), được cho bởi công thức (Singh *et al.*, 2013):

$$\frac{d\sigma_R}{d\Omega} = \frac{r_0^2}{2} (1 - \cos^2 \theta) |F(x, Z)|^2 \quad (1)$$

$$F(x, Z) = \sum_{n=1}^Z \langle \Psi_0 | \exp(i \cdot x \times \vec{r}_n) | \Psi_0 \rangle \quad (2)$$

Trong đó, r_0 là bán kính cổ điển của electron, θ là góc tán xạ, $F(x, Z)$ là tham số dạng nguyên tử, Ψ_0 là hàm sóng ở trạng thái cơ bản, \vec{r}_n là vector bán kính từ hạt nhân đến electron thứ n, x là xung lượng truyền ($1/\text{Å}$), phụ thuộc năng lượng gamma tới E_γ và góc tán xạ (Hubbell *et al.*, 1975):

$$x = \frac{E_\gamma}{hc} \sin \frac{\theta}{2} \quad (3)$$

Tán xạ Compton là quá trình tương tác của gamma với electron tự do trong nguyên tử. Quá trình này có sự giảm năng lượng và làm lệch hướng chuyển động gamma so với hướng ban đầu. Độ giảm năng lượng phụ thuộc vào góc tán xạ và năng lượng gamma tới, năng lượng tia gamma sau tán xạ Compton $E_{\gamma C}$ được xác định (Singh *et al.*, 2013):

$$E_{\gamma C} = \frac{E_\gamma}{1 + \alpha(1 - \cos \theta)} \quad (4)$$

Trong đó, $\alpha = E_\gamma/m_e c^2$ là tỉ số giữa năng lượng gamma tới và khối lượng nghỉ của electron. Xác suất xảy ra tán xạ Compton tỉ lệ với nguyên tử số ($\sim Z$), được xác định bởi công thức (Hubbell *et al.*, 1975):

$$\frac{d\sigma_C}{d\Omega} = \frac{r_0^2}{2} \left[\frac{1}{1 + \alpha(1 - \cos \theta)} \right]^2 \left\{ 1 + \cos^2 \theta + \frac{[\alpha(1 - \cos \theta)]^2}{1 + \alpha(1 - \cos \theta)} \right\} S(x, Z) \quad (5)$$

$$S(x, Z) = \sum_{m=1}^Z \sum_{n=1}^Z \langle \Psi_0 | \exp[i \cdot x \times (\vec{r}_m - \vec{r}_n)] | \Psi_0 \rangle - |F(x, Z)|^2 \quad (6)$$

Với $S(x, Z)$ là hàm tán xạ không kết hợp. Tỉ số tán xạ Rayleigh và tán xạ Compton được xác định bởi công thức (Hubbell *et al.*, 1975):

$$\frac{R}{C} = \frac{\frac{d\sigma_R}{d\Omega}}{\frac{d\sigma_C}{d\Omega}} \sim \frac{|F(x, Z)|^2}{S(x, Z)} \quad (7)$$

Tỉ số R/C có mối liên hệ phụ thuộc vào bậc số nguyên tử Z trong vùng nguyên tố quan tâm và sự phụ thuộc dựa trên tỉ số $|F(x, Z)|^2/S(x, Z)$.

3 ĐỐI TƯỢNG VÀ PHƯƠNG PHÁP NGHIÊN CỨU

3.1 Phương pháp mô phỏng Monte Carlo và phần mềm MCNP6

Phương pháp mô phỏng Monte Carlo là một tập hợp các thuật toán lấy mẫu ngẫu nhiên nhằm mục

đích thu được các kết quả số, thường được ứng dụng rộng rãi trong vật lý thống kê, mô phỏng trong các bài toán hệ nhiều hạt, mô phỏng cấu trúc và tính chất của vật liệu... Phương pháp Monte Carlo mô hình hóa các hiện tượng bằng cách mô phỏng trực tiếp các lý thuyết cần thiết dựa vào yêu cầu của hệ đo.

Monte Carlo N-Particle (viết tắt là MCNP) là phần mềm sử dụng phương pháp Monte Carlo để mô phỏng các quá trình vật lý hạt nhân đối với các hạt sơ cấp như neutron, photon và electron (Werner *et al.*, 2017). Phần mềm có thể giúp cho việc xây dựng cấu trúc hình học phức tạp cũng như mô phỏng các quá trình tương tác của bức xạ với vật chất, quá trình phân rã hạt nhân, tính toán thông lượng neutron hoặc đo phân bố liều được dễ dàng, thuận tiện, nhanh chóng. Phần mềm MCNP được nghiên cứu và phát triển bởi Trung tâm thí nghiệm quốc gia Los Alamos (Hoa Kỳ) từ năm 1963.

Trong bài báo này, chúng tôi sử dụng phần mềm MCNP6 (ra mắt tháng 5/2013) là phiên bản hợp nhất của MCNP và MCNPX (Goorley *et al.*, 2013). Phần

mềm MCNP6 có thể mô tả được 37 loại hạt, các hạt này được phân loại thành các nhóm như: các hạt cơ bản (elementary particle), các hạt tổng hợp (composite particle) hay hadrons, các hạt nhân (nuclei). Dữ liệu tương tác của photon được sử dụng trong thư viện eprdata12 (đây là thư viện dữ liệu mới trong MCNP6), trong đó yêu cầu thêm vào “.12p” trong phần định nghĩa về vật liệu. Các tệp mô phỏng trong bài báo này có sử dụng năng lượng "cut-off" được đặt ở 1eV (Goorley *et al.*, 2016).

3.2 Mô phỏng hệ đo tán xạ Rayleigh-Compton trên MCNP6

Hệ đo tán xạ Rayleigh-Compton được mô hình hóa trên phần mềm MCNP6, sử dụng mô hình đầu dò bán dẫn Si(Li) SL80180 được sản xuất bởi hãng Canberra. Trong đó, các thông số của đầu dò do nhà sản xuất cung cấp đã được tối ưu sao cho đạt được sự phù hợp giữa giá trị hiệu suất tổng của thực nghiệm và mô phỏng (độ sai biệt dưới 4%). Bảng 1 trình bày giá trị các thông số của đầu dò do nhà sản xuất cung cấp và thông số sau quá trình tối ưu (Chuong *et al.*, 2020).

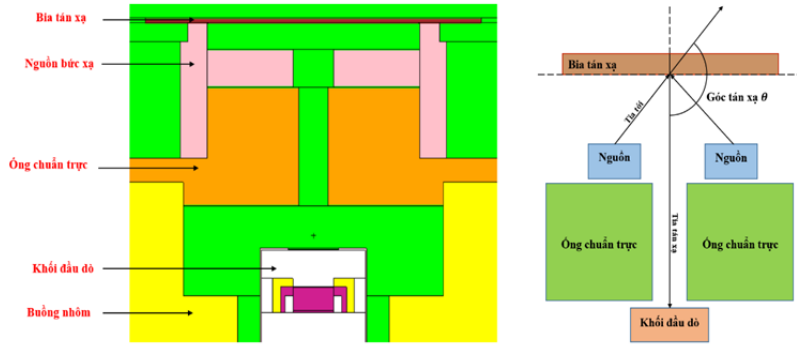
Bảng 1: Thông số do nhà sản xuất cung cấp và thông số tối ưu của đầu dò Si(Li)

Thông số	Giá trị từ nhà sản xuất	Giá trị tối ưu
Đường kính vùng hoạt của tinh thể (mm)	10,5	9,71
Bề dày vùng hoạt của tinh thể (mm)	5,4	4,8
Bán kính trong của rãnh (mm)	11,18	11,18
Bán kính ngoài của rãnh (mm)	15,75	15,75
Chiều sâu của rãnh (mm)	3,56	3,56
Khoảng cách từ đầu dò đến cửa sổ (mm)	6	8,22
Lớp chết phía trước (mm)	0	0,113
Lớp chết phía sau (mm)	0	0,486
Lớp vàng tiếp xúc (mm)	0,0003	0,0003
Bề dày cửa sổ Beri (mm)	0,125	0,125

Từ các thông số tối ưu trong bảng 1, chúng tôi tiến hành các phép mô phỏng tỉ số tán xạ Rayleigh-Compton. Số hạt gieo cho mỗi tệp mô phỏng là 100 tỷ số đếm. Hệ đo tán xạ Rayleigh-Compton bao gồm khối đầu dò Si(Li), buồng nhôm bọc xung quanh đầu dò có vai trò làm giá đỡ đồng thời bảo vệ khối đầu dò bên trong. Ống chuẩn trực làm bằng chì có chiều cao 25 mm và đường kính 7 mm, được thiết kế với hình dạng đặc biệt nhằm cố định hệ đo đồng trục, phù hợp với cấu tạo của buồng nhôm và cấu tạo của nguồn bức xạ. Ống chuẩn trực có vai trò định hướng cho chùm tia gamma tán xạ đi đến đầu dò, đồng thời ngăn cản bức xạ gamma phát ra từ nguồn đi trực tiếp

vào và tương tác với đầu dò gây ra các tín hiệu không mong muốn.

Nguồn bức xạ được mô tả dạng trụ có chiều cao 3 mm và bán kính là 2 mm. Các mẫu bia được đặt bên trên nguồn bức xạ, đầu dò sẽ ghi nhận tín hiệu của các tia tán xạ. Các bia tán xạ được mô phỏng có nguyên tử số Z nằm trong khoảng từ 13 đến 82, mỗi bia có bề dày 3,175 mm. Hình 1 mô tả hệ đo tán xạ Rayleigh-Compton trên phần mềm MCNP6 (hình trái); hướng đi của tia gamma tới và gamma tán xạ (hình phải). Bảng 2 mô tả chi tiết thành phần ô mạng được dùng trong các tệp đầu vào cho hệ mô phỏng tán xạ Rayleigh-Compton.



Hình 1: Mô tả hệ đo tán xạ Rayleigh-Compton

Bảng 2: Thành phần vật liệu trong các ô mạng

Ô mạng	Thành phần vật liệu	Mật độ (g/cm ³)
1	Tinh thể Si(Li)	2,33
2	Lớp chết phía trên	2,33
3	Lớp chết phía dưới	2,33
4	Lớp Si(Li) không hoạt động	2,33
5	Lớp vàng tiếp xúc	19,32
6	Lớp nhôm bọc bên ngoài tinh thể	2,699
7	Lớp vỏ thép không rỉ bao quanh khối đầu dò	7,849
8	Cửa sổ Beri	1,848
9	Lớp không khí tiếp xúc với cửa sổ Beri	0,001205
10 - 13	Lớp chân không bên trong vỏ thép	0
14	Buồng nhôm	2,699
15, 16	Lớp không khí bên trong buồng nhôm	0,001205
17	Ống chuẩn trực (làm bằng chì)	11,35
18	Lớp không khí bên trong ống chuẩn trực	0,001205
19	Lớp không khí bên ngoài ống chuẩn trực	0,001205
20	Khung thép bao quanh nguồn	7,849
21 - 23	Nguồn bức xạ ²⁴¹ Am	1,19
24	Giá đỡ bằng thép chứa nguồn	7,849
25	Lớp không khí giữa ống chuẩn trực và khung thép chứa nguồn	0,001205
26	Bia tán xạ	-
27 - 34	Lớp không khí bao quanh hệ đo	0,001205
35	Vùng không gian bao xung quanh toàn bộ hệ đo	0

3.3 Tính toán lý thuyết trên phần mềm

MATLAB

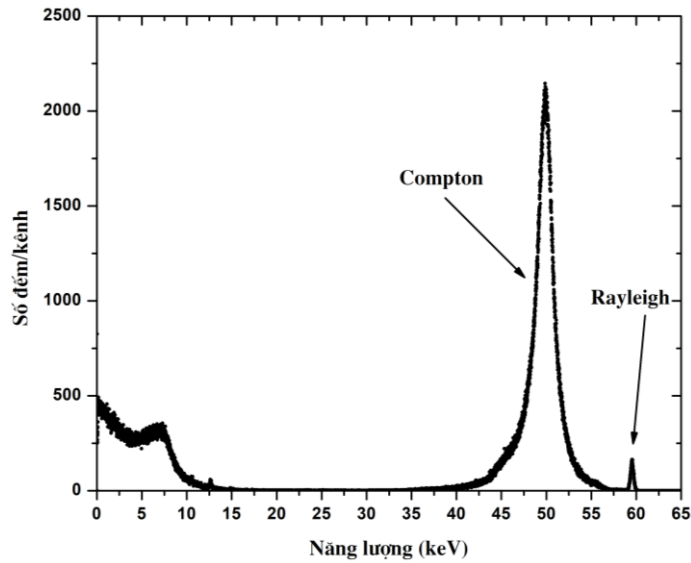
Trong công trình này, giá trị tỉ số Rayleigh-Compton lý thuyết cho các nguyên tố được tính toán dựa trên ba môn hình lý thuyết NRFF, RFF và MFF. Các giá trị $x_i, x_{i+1}, F_i, F_{i+1}, S_i, S_{i+1}$ được lấy từ các tài liệu (Hubbell *et al.*, 1975; Hubbell and Overbro, 1979; Schaupp *et al.*, 1983). Giá trị của $F(x, Z)$ và $S(x, Z)$ được tính toán theo công thức nội suy hàm mũ có dạng như sau:

$$\ln F(x, Z) = \ln F_i + \frac{(\ln x - \ln x_i) \times (\ln F_{i+1} - \ln F_i)}{\ln x_{i+1} - \ln x_i} \quad (8)$$

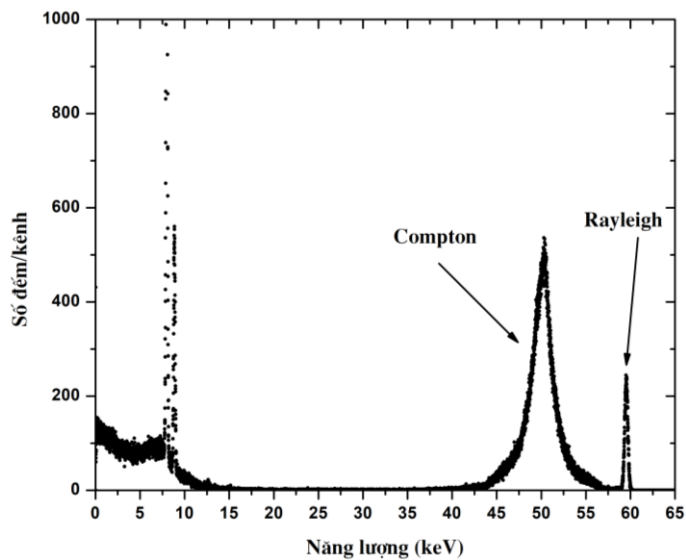
$$\ln S(x, Z) = \ln S_i + \frac{(\ln x - \ln x_i) \times (\ln S_{i+1} - \ln S_i)}{\ln x_{i+1} - \ln x_i} \quad (9)$$

4 KẾT QUẢ VÀ THẢO LUẬN

Phép đo mô phỏng được bố trí sao cho góc tán xạ $\theta = 124^\circ$, để đỉnh tán xạ Rayleigh và đỉnh tán xạ Compton không bị chồng chập lên nhau. Từ công thức (3), với năng lượng $E_\gamma = 59,54$ keV phát ra từ nguồn ²⁴¹Am và $\theta = 124^\circ$ của bố trí hệ đo thì đỉnh tán xạ Compton được xác định ở vị trí năng lượng $E_{\gamma C} = 50,39$ keV, còn đỉnh tán xạ Rayleigh ở vị trí năng lượng là $E_{\gamma R} = 59,54$ keV. Hình 2 và 3 mô tả phổ tán xạ Rayleigh-Compton của nguyên tố nhôm và đồng.



Hình 2: Phổ tán xạ Rayleigh-Compton trên vật liệu nhôm



Hình 3: Phổ tán xạ Rayleigh-Compton trên vật liệu đồng

Phổ tán xạ được lưu lại và hiển thị trên màn hình máy tính thông qua phần mềm Genie 2K. Các phổ ghi nhận sau khi trừ phông nền sẽ được xử lý thông qua phần mềm ROOT, nhằm nâng cao độ chính xác trong việc xác định số đếm của đỉnh tán xạ Rayleigh và đỉnh tán xạ Compton. Công thức xác định tỉ số tán xạ Rayleigh-Compton và sai số tương đối được trình bày như sau (Çatal *et al.*, 2016):

$$R/C = \frac{N_R}{N_C} \times \frac{\epsilon_C}{\epsilon_R} \times \frac{\beta_C}{\beta_R} \times \frac{\gamma_{ac}}{\gamma_{ar}} \quad (10)$$

$$u_{R/C} = \sqrt{(u_{NR})^2 + (u_{NC})^2 + (u_{\epsilon_R})^2 + (u_{\epsilon_C})^2} \quad (11)$$

Trong đó, N_R và N_C lần lượt là diện tích ứng với đỉnh tán xạ Rayleigh và tán xạ Compton. Bảng 3 trình bày diện tích đỉnh tán xạ Rayleigh và diện tích đỉnh tán xạ Compton cho các nguyên tố có $13 \leq Z \leq 82$. Các hiệu suất ghi nhận ϵ_R , ϵ_C lần lượt tương ứng với năng lượng tán xạ Rayleigh và năng lượng tán xạ Compton. Các hệ số β_R , β_C là hệ số hiệu chỉnh sự tự hấp thụ trong mẫu cho tán xạ Rayleigh và tán xạ Compton, được tính toán theo công thức:

$$\beta = \frac{1 - \exp\left\{-\left(\frac{\mu_i}{\cos \theta_1} + \frac{\mu_s}{\cos \theta_2}\right)\rho t\right\}}{\left(\frac{\mu_i}{\cos \theta_1} + \frac{\mu_s}{\cos \theta_2}\right)\rho t} \quad (12)$$

Các hệ số γ_{aR}, γ_{aC} là hệ số hiệu chỉnh sự hấp thụ trong không khí giữa bia tán xạ và đầu dò tương ứng với tán xạ Rayleigh và tán xạ Compton (Çatal *et al.*, 2016):

$$\gamma_a = \frac{1 - \exp\left\{-\left(\frac{\mu_{ai}}{\cos \theta_1} + \frac{\mu_{as}}{\cos \theta_2}\right)\rho_a d\right\}}{\left(\frac{\mu_{ai}}{\cos \theta_1} + \frac{\mu_{as}}{\cos \theta_2}\right)\rho_a d} \quad (13)$$

Với μ_i, μ_s là hệ số hấp thụ khối (cm^2/g) của mẫu ứng với tia tới và tia tán xạ (số liệu được lấy từ XCOM); θ_1, θ_2 là góc giữa tia tới, tia tán xạ so với phương đứng; μ_{ai}, μ_{as} là hệ số hấp thụ khối (cm^2/g) của không khí ứng với tia tới và tia tán xạ; ρ và t là mật độ (g/cm^3) và bề dày của các bia tán xạ nguyên tố (cm); ρ_a và d là mật độ không khí (g/cm^3) và khoảng cách từ mẫu đến đầu dò (cm).

Hiệu suất ghi nhận của đầu dò ứng với đỉnh tán xạ Rayleigh và Compton được xác định bằng mô phỏng. Số hạt mô phỏng cho mỗi tệp đầu vào cho quá trình này là 3 tỷ số đếm. Tiếp theo, tác giả sử dụng phần mềm Colegram để xác định diện tích đỉnh từ đó tính được hiệu suất tương ứng với đỉnh tán xạ Compton ở mức năng lượng 50,39 keV là $\epsilon_C = 3,47 \times 10^{-4}$ và sai số $u_{\epsilon_C} = 0,01\%$, với đỉnh tán xạ Rayleigh ở mức năng lượng 59,54 keV là $\epsilon_R = 2,17 \times 10^{-4}$ và sai số $u_{\epsilon_R} = 0,012\%$.

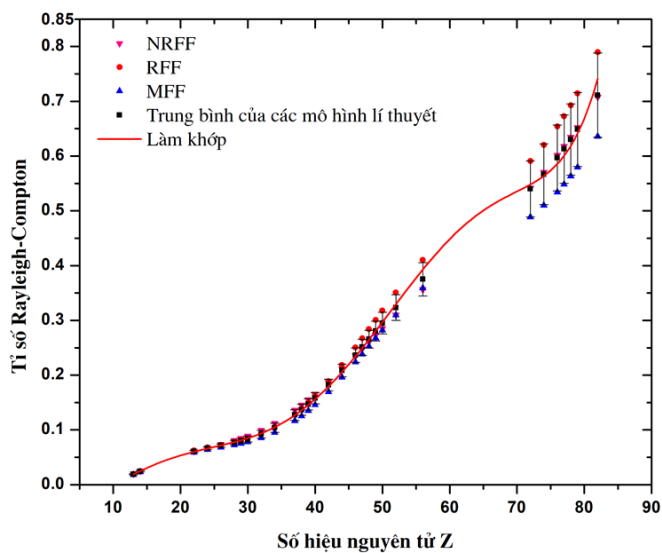
Với cấu hình của hệ đo tán xạ trong tệp mô phỏng, các giá trị góc $\theta_1 = 56^\circ, \theta_2 = 56^\circ$, và khoảng cách từ mẫu đến đầu dò $d = 4,786 \text{ cm}$ được xác định bằng các phép tính hình học sơ cấp, bề dày mỗi bia tán xạ là $t = 0,3175 \text{ cm}$. Tỷ số Rayleigh-Compton mô phỏng và lý thuyết cho các nguyên tố có $13 \leq Z \leq 82$ được trình bày trong bảng 4.

Bảng 3: Diện tích đỉnh tán xạ Rayleigh và Compton của các nguyên tố

Nguyên tố	Nguyên tử số	Diện tích Rayleigh	Diện tích Compton
Nhôm (Al)	13	11104 ± 105	1083128 ± 1041
Silic (Si)	14	12517 ± 112	948783 ± 974
Titan (Ti)	22	27169 ± 165	684798 ± 828
Crom (Cr)	24	25583 ± 160	572812 ± 757
Sắt (Fe)	26	22192 ± 149	448084 ± 669
Niken (Ni)	28	19560 ± 140	349997 ± 592
Đồng (Cu)	29	18544 ± 136	315758 ± 562
Kẽm (Zn)	30	17561 ± 133	283117 ± 532
Gemani (Ge)	32	16154 ± 127	230922 ± 481
Selen (Se)	34	15297 ± 124	188987 ± 435
Rubidi (Rb)	37	13983 ± 118	146198 ± 382
Stronti (Sr)	38	14214 ± 119	132297 ± 364
Ytri (Y)	39	13851 ± 118	120763 ± 348
Ziriconi (Zr)	40	13742 ± 117	110847 ± 333
Molipđen (Mo)	42	13570 ± 116	96540 ± 311
Ruteni (Ru)	44	13548 ± 116	86115 ± 293
Paladi (Pd)	46	13541 ± 116	78404 ± 280
Bạc (Ag)	47	13535 ± 116	74757 ± 273
Cadimi (Cd)	48	13505 ± 116	70024 ± 265
Indi (In)	49	13362 ± 116	66406 ± 258
Thiếc (Sn)	50	13191 ± 115	63986 ± 253
Telu (Te)	52	12710 ± 113	59488 ± 244
Bari (Ba)	56	12146 ± 110	50124 ± 224
Hafini (Hf)	72	41120 ± 203	110611 ± 333
Vonfram (W)	74	40568 ± 201	97925 ± 313
Osimi (Os)	76	39537 ± 199	88535 ± 298
Iridi (Ir)	77	39152 ± 198	83798 ± 289
Plattin (Pt)	78	38769 ± 197	82346 ± 287
Vàng (Au)	79	38392 ± 196	79169 ± 281
Chì (Pb)	82	37376 ± 193	71887 ± 268

Bảng 4: Tỷ số Rayleigh-Compton mô phỏng và lý thuyết cho các nguyên tố

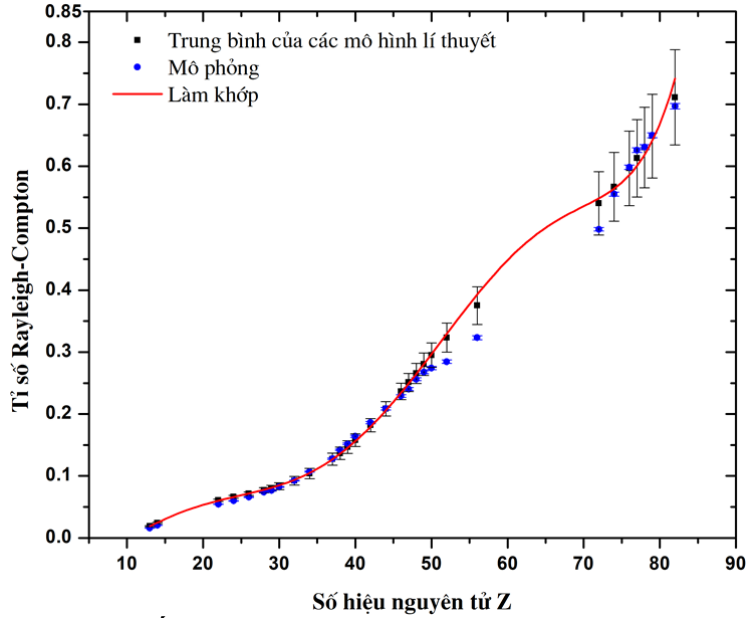
Z	Tỷ số R/C ($\times 10^{-2}$)				Trung bình các lý thuyết	Độ lệch chuẩn
	Mô phỏng	NRFF	RFF	MFF		
13	1,59 ± 0,02	1,99	1,90	1,81	1,90	0,09
14	2,04 ± 0,02	2,51	2,44	2,32	2,42	0,10
22	5,45 ± 0,03	6,10	6,25	5,90	6,08	0,18
24	5,98 ± 0,04	6,72	6,80	6,39	6,64	0,22
26	6,60 ± 0,05	7,35	7,27	6,81	7,14	0,29
28	7,42 ± 0,05	8,05	7,79	7,25	7,70	0,41
29	7,66 ± 0,06	8,44	8,10	7,50	8,01	0,47
30	8,22 ± 0,06	8,85	8,41	7,78	8,35	0,54
32	9,26 ± 0,08	9,91	9,29	8,53	9,24	0,69
34	10,71 ± 0,09	11,17	10,44	9,53	10,38	0,83
37	12,77 ± 0,10	13,58	12,87	11,66	12,70	0,97
38	14,22 ± 0,10	14,52	13,89	12,55	13,65	1,01
39	15,18 ± 0,10	15,50	15,01	13,53	14,68	1,03
40	16,41 ± 0,10	16,54	16,22	14,59	15,78	1,04
42	18,62 ± 0,02	18,75	18,88	16,95	18,19	1,08
44	20,86 ± 0,02	21,11	21,84	19,57	20,84	1,16
46	22,92 ± 0,02	23,54	25,04	22,37	23,65	1,34
47	24,04 ± 0,02	24,79	26,70	23,81	25,10	1,47
48	25,62 ± 0,02	26,03	28,40	25,28	26,57	1,63
49	26,74 ± 0,03	27,28	30,09	26,72	28,03	1,80
50	27,43 ± 0,03	28,53	31,76	28,17	29,49	1,98
52	28,45 ± 0,03	30,99	35,07	30,96	32,34	2,37
56	32,32 ± 0,03	35,63	41,02	35,87	37,51	3,04
72	49,82 ± 0,03	54,14	59,07	48,87	54,03	5,11
74	55,51 ± 0,03	57,01	62,04	50,97	56,68	5,54
76	59,84 ± 0,04	60,12	65,41	53,42	59,65	6,01
77	62,59 ± 0,04	61,76	67,27	54,83	61,29	6,24
78	63,09 ± 0,04	63,45	69,28	56,32	63,02	6,49
79	64,98 ± 0,04	65,20	71,44	57,94	64,86	6,76
82	69,68 ± 0,04	70,79	78,96	63,58	71,11	7,70



Hình 4: Đồ thị mô tả sự phụ thuộc của tỷ số Rayleigh-Compton lý thuyết theo Z

Từ các kết quả trong Bảng 4, tỉ số Rayleigh-Compton mô phỏng và lý thuyết có sự phù hợp tốt ở vùng $Z \leq 50$. Lý thuyết NRFF có độ sai biệt 4% ở $26 \leq Z \leq 82$. Lý thuyết RFF có độ sai biệt 3% ở $26 \leq Z \leq 48$. Lý thuyết MFF có độ sai biệt 1% ở

$22 \leq Z \leq 32$ và $42 \leq Z \leq 74$. Hình 4 là đồ thị mô tả sự phụ thuộc của tỉ số Rayleigh-Compton theo nguyên tử số Z , hàm làm khớp được chọn là đa thức bậc sáu. Hình 5 mô tả sự so sánh giữa giá trị mô phỏng và lý thuyết của tỉ số Rayleigh-Compton.



Hình 5: So sánh tỉ số Rayleigh-Compton mô phỏng và trung bình các lý thuyết

5 KẾT LUẬN

Mục tiêu của nghiên cứu này là khảo sát quy luật phụ thuộc của tỉ số Rayleigh-Compton theo nguyên tử số Z bằng cách sử dụng chương trình mô phỏng MCNP6 để xác định tỉ số Rayleigh-Compton của các nguyên tố có Z từ 13 đến 82. Bên cạnh đó, chương trình tính toán tỉ số Rayleigh-Compton đã được xây dựng bằng ngôn ngữ lập trình MATLAB R2017b và sử dụng để tính tỉ số Rayleigh-Compton theo các mô hình lý thuyết NRFF, RFF, MFF cho các nguyên tố có Z từ 13 đến 82 và khảo sát sự sai biệt giữa các mô hình lý thuyết. Độ sai biệt lớn nhất là 25% của nguyên tố Pb khi so giữa RFF và MFF. Các mô hình tính toán lý thuyết xấp xỉ bằng nhau ở vùng có nguyên tử số $Z < 26$. Các kết quả từ mô phỏng được so sánh với kết quả từ chương trình tính toán lý thuyết, độ sai biệt cao nhất giữa mô phỏng và lý thuyết là 20% của nguyên tố Al, độ sai biệt giảm khi Z lớn (dưới 10%). Các kết quả so sánh tỉ số Rayleigh-Compton của mô phỏng khi so với các mô hình lý thuyết có sự chênh lệch là do việc tính toán lý thuyết được tính ở mức năng lượng và góc tán xạ nhất định, trong khi đó các tia gamma tán xạ có góc tán xạ được tính toán từ mô hình là $124^\circ \pm 5^\circ$. Ngoài ra việc lựa chọn hàm làm khớp phổ tán xạ của vùng Compton cũng làm ảnh hưởng lên việc hiệu

chỉnh tỉ số Rayleigh-Compton từ các kết quả mô phỏng.

LỜI CẢM ƠN

Nghiên cứu này được tài trợ bởi Quỹ Phát triển khoa học và công nghệ Quốc gia (NAFOSTED) trong đề tài mã số 103.04-2017.303.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

- Çatal, N., Ertugrul, M., and Özdemir, Y., 2016. Investigation of coherent to incoherent scattering cross section ratios of some foil metals depending on the temperature. *Journal of Physics: Conference Series*. 707: 012007.
- Chuong, H.D., Linh, N.T.T., Trang, L.T.N., et al., 2020. A simple approach for developing model of Si(Li) detector in Monte Carlo simulation. *Radiation Physics and Chemistry*. 166.
- Duvauchelle, P., Peix, G., and Babot, D., 2000. Rayleigh to Compton ratio computed tomography using synchrotronradiation. *NDT&E International*. 33: 23–31.
- Gigante, G.E., Pedraza, L.J. and Sciuti, S., 1985. Analysis of metal alloys by Rayleigh to Compton ratios and X-ray fluorescence peaks in the 50 to 122 keV energy range. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B*. 12: 229–234.

- Goorley, T., James, M., Booth, T., *et al.*, 2013. Initial MCNP6 Release Overview – MCNP6 version 1.0. LA-UR-22934.
- Goorley, T., James, M., Booth, T., *et al.*, 2016. Features of MCNP6. *Annals of Nuclear Energy*. 87: 772-783.
- Hubbell, J.H., and Overbro, I., 1979. Relativistic atomic form factors and photon coherent scattering cross section. *Journal of Physical and Chemical Reference Data*. 8(1): 69–106.
- Hubbell, J.H., Viegele, W.J., Biggs, E.A., Brown, R.T., Cromer, D.T., and Howerton, R.J., 1975. Atomic form factors, incoherent scattering functions and photon scattering cross sections. *Journal of Physical and Chemical Reference Data*. 4(3): 471–538.
- Lama, L.S.D., Soares, L.H.D., Antoniassi, M., and Poletti, M.E., 2015. Effective atomic numbers for materials of medical interest at low photon energy using the Rayleigh to Compton scattering ratio. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A*. 784: 597–601.
- Manjunath, A. and Kerur, B.R., 2016. Study of Rayleigh to Compton scattering ratio for pharmaceutical ingredients at 8 keV to 32 keV X-ray energy. *Materials Today: Proceedings*. 3:4134–4139.
- Schaupp, D., Schumacher, M., Smend, F., Rullhusen, P., and Hubbell, J.H., 1983. Small-angle Rayleigh scattering of photon at high energies: Tabulations of relativistic HFS modified atom form factors. *Journal of Physical and Chemical Reference Data*. 12(3): 467–512.
- Singh, M.P., Sharma, A., Singh, B., and Sandhu, B.S., 2010. A non-destructive technique for assigning effective atomic number to scientific samples by scattering of 59.54 keV gamma photons. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A*. 619: 63–66.
- Singh, M.P., Sharma, A., Singh, B., and Sandhu, B.S., 2013. An experimental study on cross-section ratio of coherent to incoherent scattering for 145 keV incident gamma photons. *Radiation Measurement*. 59: 30–36.
- Werner, C.J., Bull, J.S., Solomon, C.J., *et al.*, 2017. MCNP User's Manual Code Version 6.2. LA-UR-17-29981.