

Tính toán tiết diện Compton của nhôm, sắt, đồng, thép C45 và thép CT3 trong vùng năng lượng 250 keV–2600 keV

• Nguyễn Thảo Ngân

• Trần Thiện Thanh

• Châu Văn Tạo

Trường Đại học Khoa học Tự nhiên, ĐHQG-HCM

• Lê Quang Vương

• Nguyễn Thị Bình

• Hoàng Đức Tâm

Trường Đại học Sư phạm TpHCM

(Bài nhận ngày 17 tháng 11 năm 2014, nhận đăng ngày 18 tháng 06 năm 2015)

TÓM TẮT

Trong công trình này, tiết diện tán xạ Compton đối với một số vật liệu như nhôm, sắt, đồng, thép C45 và CT3 đã được tính toán bằng chương trình Mathematica và Fortran 95 cho vùng năng lượng từ 250 keV đến 2600 keV. Bên cạnh đó, chương trình MCNP5 và thực nghiệm đã sử dụng kỹ thuật

Từ khóa: Tiết diện Compton, MCNP5, gamma truyền qua.

gamma truyền qua để xác định hệ số suy giảm tuyến tính từ đó tính toán tiết diện Compton. Độ sai biệt lớn nhất 6 % cho thấy chương trình tính toán phù hợp tốt với cơ sở dữ liệu NIST, chương trình MCNP5 và thực nghiệm.

GIỚI THIỆU

Phương pháp gamma tán xạ được ứng dụng nhiều trong các lĩnh vực kiểm tra không phá hủy (NDT – Non-destructive testing) như xác định độ ăn mòn vật liệu [5], đo độ dày của phim hữu cơ phủ trên tấm thép [2], kiểm tra khuyết tật trên cấu trúc đa lớp [4], đo mật độ của chất lỏng [6],... Các ứng dụng này cho thấy được tầm quan trọng cũng như tính phổ biến của phương pháp gamma tán xạ. Ưu điểm của phương pháp này là nguồn gamma và thiết bị ghi đo không cần tiếp xúc trực tiếp với đối tượng cần đo, nguồn phát gamma và đầu dò có thể đặt cùng một phía so với vật mẫu. Do đó, khi cần đo trực tiếp các vật mẫu đặt trong một môi trường khắc nghiệt (nhiệt độ cao, áp suất lớn,...) hoặc khi điều kiện đo chi cho phép hệ đo tiếp cận từ một phía (thành lò chịu nhiệt, ống trụ,...) thì hệ đo tán xạ gamma là giải pháp hữu

hiệu. Tiết diện tán xạ Compton trở nên lớn hơn tiết diện hiệu ứng quang điện và tiết diện hiệu ứng tạo cặp trong vùng năng lượng từ 250 keV đến 3000 keV. Do đó, tính toán tiết diện tán xạ Compton hỗ trợ tốt cho các nghiên cứu tương tác của gamma với mẫu sinh học [7].

Trong công trình này, một chương trình tính toán được phát triển để tính tiết diện tán xạ Compton dựa trên công thức Klein – Nishina [1] đối với vật liệu dạng đơn chất (nhôm, sắt, đồng) và hỗn hợp (thép CT3, thép C45). Kết quả tính toán được so sánh với thực nghiệm và mô phỏng bằng chương trình MCNP5. Độ sai biệt 6 % giữa chương trình phát triển với thực nghiệm, mô phỏng và cơ sở dữ liệu NIST [11]. Điều này cho thấy, chương trình tính toán của chúng tôi là đáng

tin cậy và có thể áp dụng tính toán tiết diện
PHƯƠNG PHÁP NGHIÊN CỨU

Cơ sở lý thuyết

Tiết diện vi phân của tán xạ Compton được tính toán bằng công thức Klein – Nishina [1]:

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\text{Compt}} = r_e^2 \frac{1 + \cos^2\theta}{2[1 + \varepsilon(1 - \cos\theta)]^2} \left\{ 1 + \frac{\varepsilon^2(1 - \cos\theta)^2}{(1 + \cos^2\theta)[1 + \varepsilon(1 - \cos\theta)]} \right\} \quad (1)$$

Khi lượng tử gamma tới mang năng lượng E (keV) tương tác với electron, tiết diện toàn phần tán xạ Compton được tính bằng công thức:

$$\sigma_{\text{Compt}} = \frac{\alpha^2 \pi}{m^2} \left(\frac{\hbar c}{10^4 e}\right)^2 \left[\frac{2\varepsilon^3 + 18\varepsilon^2 + 16\varepsilon + 4}{\varepsilon^2(1 + 2\varepsilon)^2} + \left(\frac{\varepsilon^2 - 2\varepsilon - 2}{\varepsilon^3}\right) \ln(1 + 2\varepsilon) \right] \quad (2)$$

Với $r_e = e^2 / (4\pi\varepsilon_0 m \hbar c)$, $\varepsilon = E / mc^2$,
 $\alpha = e^2 / 4\pi\varepsilon_0 \hbar c$, đơn vị tính của σ_{Compt} là (cm²).

Công thức gần đúng để tính tiết diện tán xạ Compton cho toàn bộ Z electron của nguyên tử [3]:

$$\sigma_{\text{Ctot}} = Z\sigma_{\text{Compt}} \quad (3)$$

Đối với vật liệu đơn chất, tiết diện tán xạ Compton được xác định thông qua hệ số hấp thụ khối Compton:

$$\sigma_{\text{Ctot}} = \frac{M}{N_{\text{Av}}} \left(\frac{\mu_{\text{Ctot}}}{\rho} \right) \quad (4)$$

Trong đó, M (mol/g) là khối lượng nguyên tử, N_{Av} là hằng số Avogadro.

Compton cho các vật liệu khác.

Hệ số hấp thụ khối Compton của vật liệu hỗn hợp gồm n nguyên tố:

$$\frac{\mu_{\text{Ctot}}}{\rho} = \sum_{i=1}^n \left[\frac{(\mu_{\text{C}})_i}{\rho_i} \omega_i \right] \quad (5)$$

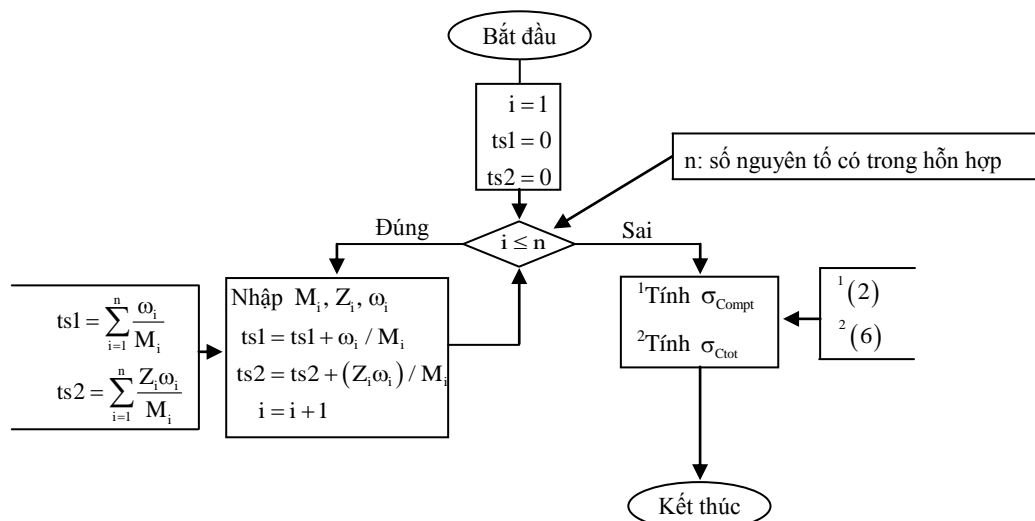
Công thức tính tiết diện tán xạ Compton đối với vật liệu dạng hỗn hợp:

$$\sigma_{\text{Ctot}} = \frac{\frac{\mu_{\text{Ctot}}}{\rho}}{N_{\text{Av}} \sum_{i=1}^n \frac{\omega_i}{M_i}} = \frac{\left(\sum_{i=1}^n \frac{Z_i}{M_i} \omega_i \right)}{\sum_{i=1}^n \frac{\omega_i}{M_i}} \sigma_{\text{Compt}} \quad (6)$$

Trong đó, ω_i là phần trăm khối lượng của nguyên tố thứ i và σ_{Ctot} có đơn vị (cm²)

Chương trình tính toán

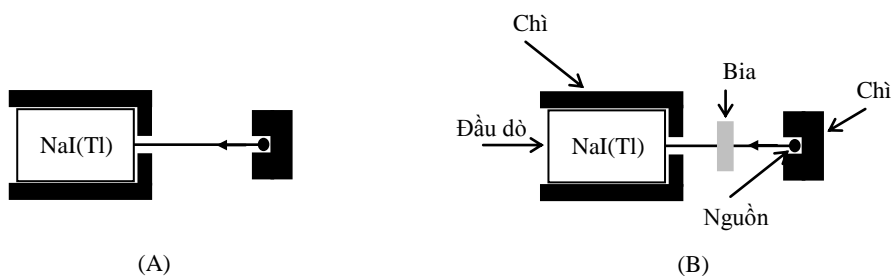
Hình 1 thể hiện giải thuật tính tiết diện tán xạ Compton bằng Fortran 95. Trong đó, số khối M, số bậc nguyên tử Z, khối lượng riêng ρ của các nguyên tố được lấy theo NIST. Khối lượng electron lấy theo đơn vị năng lượng, nghĩa là $m = 510,99891(\text{keV})$.



Hình 1. Lưu đồ chương trình tính tiết diện tán xạ Compton.

Thành phần nguyên tố của thép C45 và thép CT3 được lấy theo tiêu chuẩn [10].

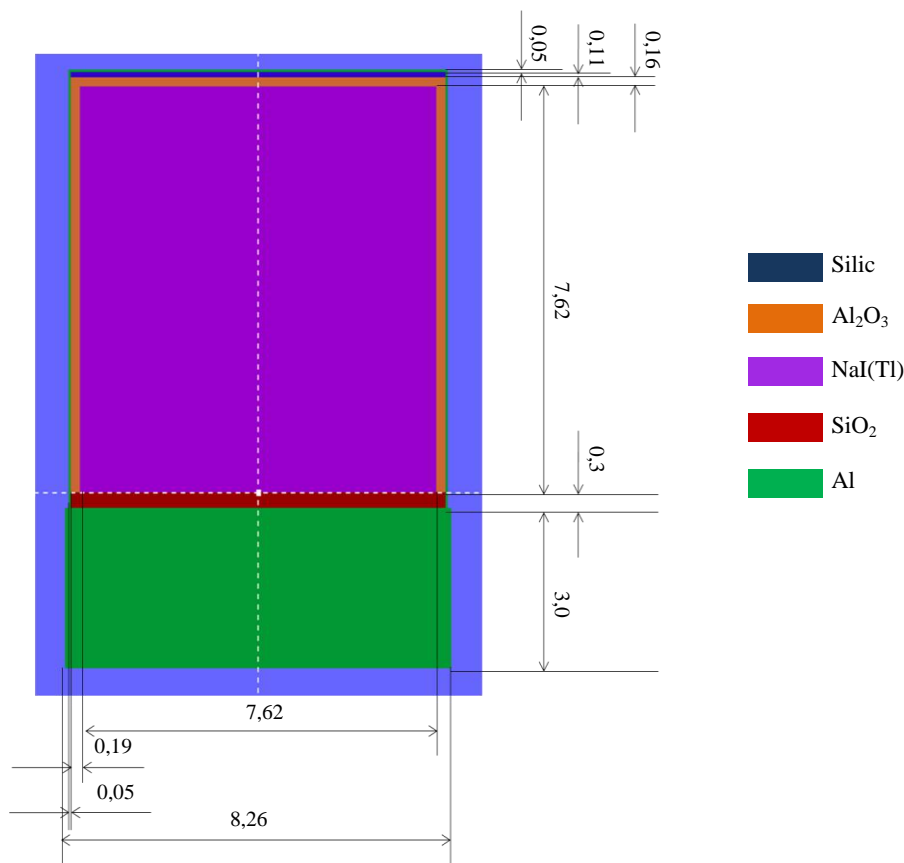
Mô phỏng và thực nghiệm



Hình 2. Hệ thực nghiệm đo gamma truyền qua.

Hệ thực nghiệm đo gamma truyền qua được thiết kế như Hình 2, sử dụng các nguồn điểm ¹³⁷Cs(661,7 keV), ⁶⁰Co(1173,2 keV và 1332,5 keV), ²²⁶Ra(1764,5 keV). Đầu dò NaI(Tl) 802–3×3 (Canberra Inc.) với kích thước tinh

thể 7,62×7,62 cm, độ phân giải 7,5 % và có cấu trúc được mô phỏng như Hình 3. Các thông số đầu dò NaI(Tl): cửa sổ nhôm dày 0,05 (cm), mật độ 147 (mg/cm²), lớp phản xạ nhôm oxit dày 0,16 (cm), mật độ 88 (mg/cm²).



Hình 3. Cấu trúc đầu dò NaI(Tl) mô phỏng bằng MCNP5.

Hệ đo gamma truyền qua được thiết kế để xác định hệ số suy giảm tuyến tính của vật liệu. Đối với hệ thực nghiệm đo gamma truyền qua, cần tiến hành đo phòng (số đếm đến từ môi trường) trước khi lắp nguồn và bia vào hệ đo. Sau khi trừ phòng, lấy diện tích đỉnh của phổ đo không bia (Hình 2A) có được giá trị $N_0(E)$, lấy diện tích đỉnh của phổ đo có bia (Hình 2B) được giá trị $N(E)$. Đối với hệ mô phỏng gamma truyền qua, giá trị $N_0(E)$ và $N(E)$ được tính toán thông qua hiệu suất ghi nhận của đầu dò và số sự kiện khai báo ban đầu:

$$N_0(E) = \eta \xi_1 \quad (7)$$

$$N(E) = \eta \xi_2 \quad (8)$$

Trong đó, ξ_1 và ξ_2 là hiệu suất ghi nhận của đầu dò đối với hệ đo không bia và có bia, $\eta = 10^8$ sự kiện.

Công thức (9) và (10) được sử dụng để xác định hệ số suy giảm tuyến tính và sai số tương đối [9]:

$$\mu(E) = \frac{1}{x} \ln \left[\frac{N_0(E)}{N(E)} \right] \quad (9)$$

$$\frac{u^2(\mu)}{\mu^2} = \frac{u^2(x)}{x^2} + \frac{1}{\ln^2 \left[\frac{N_0(E)}{N(E)} \right]} \left[\frac{u^2(N_0(E))}{N_0^2(E)} + \frac{u^2(N(E))}{N^2(E)} \right] \quad (10)$$

Ở đây, $\mu(E) (\text{cm}^{-1})$ là hệ số suy giảm tuyến tính của vật liệu ứng với năng lượng E ; $x(\text{cm})$ là bề dày bia vật liệu; $u(\mu)$ là sai số của $\mu(E)$; $u(x) = 0,01 (\text{cm})$ là sai số của thước đo; $u(N_0(E))$ là sai số của $N_0(E)$; $u(N(E))$ là sai số của $N(E)$.

Khi chia $\mu(E)$ cho khối lượng riêng ρ được hệ số hấp thụ khối toàn phần ($\mu(E)/\rho$), thế vào công thức (11) để tìm hệ số hấp thụ khối

Compton (μ_{Cot} / ρ) của vật liệu. Trong đó, giá trị của hệ số hấp thụ khối quang điện ($\mu_{\text{photo}} / \rho$) và hệ số hấp thụ khối tạo cặp (μ_{pair} / ρ) được lấy từ cơ sở dữ liệu NIST [11].

$$\frac{\mu_{\text{Cot}}}{\rho} = \frac{\mu(E)}{\rho} - \frac{\mu_{\text{photo}}}{\rho} - \frac{\mu_{\text{pair}}}{\rho} \quad (11)$$

Cuối cùng, thế kết quả vào công thức (4) để tìm tiết diện tán xạ Compton của bia vật liệu đơn chất (nhôm, sắt, đồng,...) và công thức (6) để tìm tiết diện tán xạ Compton của bia vật liệu hỗn hợp nhiều nguyên tố (thép C45, thép CT3,...).

KẾT QUẢ VÀ THẢO LUẬN

Tiết diện tán xạ Compton từ hệ thực nghiệm và hệ mô phỏng MCNP5 đo gamma truyền qua

Bảng 1 và Bảng 2 thể hiện kết quả tìm hệ số suy giảm tuyến tính và tiết diện tán xạ Compton đối với nhôm từ hệ đo thực nghiệm và hệ đo mô phỏng. Trong đó, hệ số suy giảm tuyến tính được xác định bằng công thức (9), tiết diện tán xạ Compton đối với vật liệu đơn chất (nhôm, sắt, đồng,...) được xác định thông qua công thức (4) và (11), đối với vật liệu dạng hỗn hợp (thép CT3, thép C45,...) thì tiết diện tán xạ Compton được xác định bằng công thức (6) và (11).

Bảng 1. Hệ số suy giảm tuyến tính và tiết diện tán xạ Compton đối với nhôm từ hệ đo thực nghiệm.

E (keV)	$N_0(E)$	N(E)	μ (cm^{-1})	σ_C^{TN} (barn)
661,7	726310(852)	587957(767)	0,2013(25)	3,34(4)
1173,2	161529(402)	137498(371)	0,1534(38)	2,55(6)
1332,5	149892(387)	128963(359)	0,1432(39)	2,37(6)
1764,5	199326(446)	174819(418)	0,1249(33)	2,06(5)

Với $3,33(4) = 3,33 \pm 0,04$ và $1\text{barn} = 10^{-24} \text{cm}^2$

Bảng 2. Hệ số suy giảm tuyến tính và tiết diện tán xạ Compton đối với nhôm từ hệ đo mô phỏng.

E (keV)	$N_0(E)$	N(E)	μ (cm^{-1})	σ_C^{MCNP5} (barn)
661,7	433150(658)	349077(591)	0,2055(22)	3,41(4)
1173,2	500626(708)	425523(652)	0,1548(20)	2,57(3)
1332,5	467737(684)	402649(635)	0,1427(21)	2,38(3)
1764,5	391613(626)	342640(585)	0,1272(22)	2,05(4)

So sánh các kết quả

Tiết diện tán xạ Compton của vật liệu đơn chất

Chúng tôi tính toán tiết diện tán xạ Compton của lượng tử gamma tương tác với bia nhôm, sắt,

đồng. Độ sai biệt lớn nhất 0,49 % (Bảng 3) cho thấy chương trình tính toán là phù hợp với cơ sở dữ liệu NIST.

Bảng 3. Kết quả tìm tiết diện tán xạ Compton đối với nhôm, sắt, đồng.

Vật liệu	E (keV)	σ_C^{NIST} (barn)	σ_C^{Math} (barn)	σ_C^{FT95} (barn)	σ_C^{MCNP5} (barn)	σ_C^{TN} (barn)	Sai biệt $\sigma_C^{Math} / \sigma_C^{NIST}$ (%)	Sai biệt $\sigma_C^{FT95} / \sigma_C^{NIST}$ (%)	Sai biệt $\sigma_C^{MCNP5} / \sigma_C^{NIST}$ (%)	Sai biệt $\sigma_C^{TN} / \sigma_C^{NIST}$ (%)
NHÔM	661,7	3,33	3,33	3,33	3,41(4)	3,34(4)	0,00	0,00	2,40	0,30
	1173,2	2,54	2,54	2,54	2,57(3)	2,55(6)	0,00	0,00	1,18	0,39
	1332,5	2,38	2,37	2,38	2,37(3)	2,37(6)	0,22	0,00	0,42	0,42
	1764,5	2,05	2,04	2,04	2,09(4)	2,06(5)	0,49	0,49	1,95	0,49
SẮT	661,7	6,64	6,66	6,66	6,80(3)	6,66(7)	0,30	0,30	2,41	0,30
	1173,2	5,08	5,07	5,08	5,17(3)	5,07(7)	0,20	0,00	1,77	0,20
	1332,5	4,75	4,75	4,75	4,82(3)	4,74(7)	0,00	0,00	1,47	0,21
	1764,5	4,09	4,08	4,09	4,19(3)	4,07(6)	0,24	0,00	2,44	0,49
ĐỒNG	661,7	7,40	7,43	7,43	7,56(3)	7,39(7)	0,40	0,40	2,16	0,14
	1173,2	5,66	5,66	5,66	5,77(2)	5,64(6)	0,05	0,02	1,96	0,34
	1332,5	5,30	5,30	5,30	5,39(2)	5,29(6)	0,08	0,03	1,67	0,22
	1764,5	4,56	4,55	4,55	4,67(3)	4,56(5)	0,19	0,28	2,35	0,06

Với $3,41(4) = (3,41 \pm 0,04)$

Hình 4A thể hiện kết quả tìm tiết diện tán xạ Compton của nhôm ở 27 mức năng lượng trong vùng năng lượng từ 250 keV đến 2600 keV, độ sai biệt lớn nhất giữa lý thuyết và cơ sở dữ liệu NIST là 0,70 %. Đối với bia sắt và đồng, tiết diện tán xạ Compton giữa tính toán lý thuyết và NIST có sai biệt lớn nhất 1,84 %.

Tiết diện tán xạ Compton của vật liệu hỗn hợp nhiều nguyên tố

Ở các mức năng lượng thực nghiệm, tiết diện tán xạ Compton của thép C45 (và thép CT3) có độ sai biệt cao nhất 0,31 % (và 0,30 %) giữa tính toán lý thuyết và cơ sở dữ liệu NIST. Kết quả được trình bày trong Bảng 4.

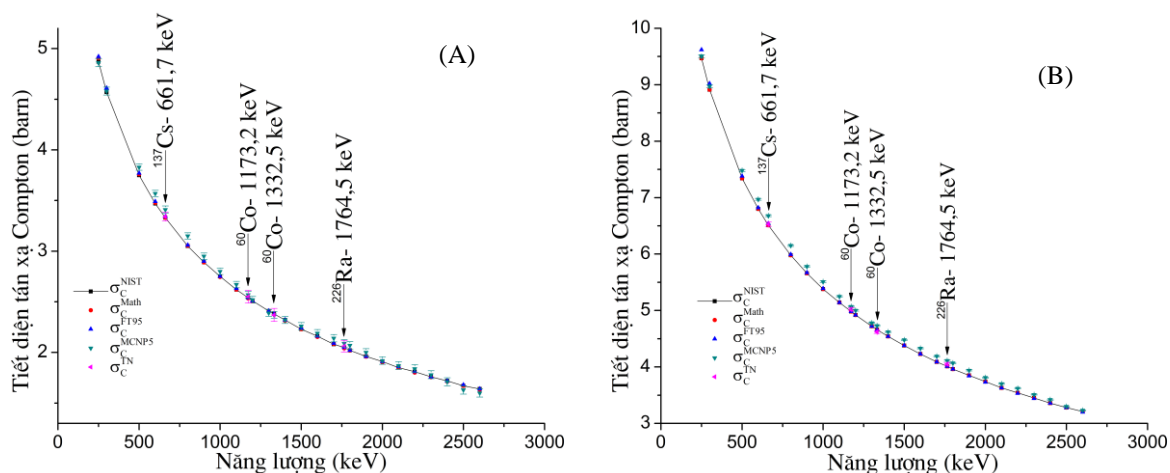
Bảng 4. Kết quả tìm tiết diện tán xạ Compton của thép C45 và thép CT3.

Vật liệu	E (keV)	σ_C^{NIST} (barn)	σ_C^{Math} (barn)	σ_C^{FT95} (barn)	σ_C^{MCNP5} (barn)	σ_C^{TN} (barn)	Sai biệt $\sigma_C^{Math} / \sigma_C^{NIST}$ (%)	Sai biệt $\sigma_C^{FT95} / \sigma_C^{NIST}$ (%)	Sai biệt $\sigma_C^{MCNP5} / \sigma_C^{NIST}$ (%)	Sai biệt $\sigma_C^{TN} / \sigma_C^{NIST}$ (%)
C45	661,7	6,51	6,54	6,53	6,68(3)	6,53(7)	0,30	0,31	2,61	0,31
	1173,2	4,98	4,98	4,98	5,07(3)	5,02(7)	0,00	0,00	1,81	0,80
	1332,5	4,66	4,66	4,66	4,73(3)	4,62(6)	0,00	0,00	1,50	0,86
	1764,5	4,01	4,01	4,01	4,11(3)	4,05(6)	0,00	0,00	2,49	1,00
CT3	661,7	6,59	6,61	6,61	6,74(3)	6,52(7)	0,30	0,30	2,28	1,06
	1173,2	5,03	5,03	5,03	5,12(3)	5,35(7)	0,00	0,00	1,79	6,36
	1332,5	4,71	4,71	4,71	4,78(3)	4,74(7)	0,00	0,00	1,49	0,64
	1764,5	4,05	4,05	4,05	4,15(3)	3,98(6)	0,00	0,00	2,47	1,73

Với $6,68(3) = 6,68 \pm 0,03$

Trong vùng năng lượng từ 250 keV đến 2600 keV (Hình 4B), tiết diện tán xạ Compton của

thép C45 tính toán lý thuyết có độ sai biệt lớn nhất 1,64 % so với cơ sở dữ liệu NIST



Hình 4. Tiết diện tán xạ Compton của lượng tử gamma tương tác với bia nhôm (A) và thép C45 (B)

KẾT LUẬN

Trong công trình này, chương trình tính toán tiết diện tán xạ Compton được viết bằng Fortran 95 và Mathematica đối với vật liệu đơn chất (nhôm, sắt, đồng) và vật liệu hỗn hợp (thép CT3 và thép C45). Ngoài ra, hệ đo gamma truyền qua bằng thực nghiệm và mô phỏng MCNP5 cũng được thiết kế để xác định hệ số suy giảm tuyến tính, từ đó tìm tiết diện tán xạ Compton. Tiết diện

tán xạ Compton từ tính toán lý thuyết so với cơ sở dữ liệu NIST có độ sai biệt lớn nhất 1,84 % đối với bia dạng đơn chất (1,63 % đối với bia dạng hỗn hợp) chứng tỏ chương trình tính toán chúng tôi xây dựng là đáng tin cậy.

LỜI CẢM ƠN: Nghiên cứu được tài trợ bởi Đại học Quốc gia Thành phố Hồ Chí Minh trong khuôn khổ Đề tài mã số B2015-18-03.

Calculation of Compton cross section of aluminum, iron, copper, C45 and CT3 steels in the range of 250 keV–2600 keV

• Nguyen Thao Ngan

• Tran Thien Thanh

• Chau Van Tao

University of Science, VNU-HCM

• Le Quang Vuong

• Nguyen Thi Binh

• Hoang Duc Tam

University of Pedagogy HCMC

ABSTRACT

In this work, the Compton cross section of some materials such as aluminum, iron, copper, C45 steels and CT3 steels was calculated by Mathematica and Fortran 95 codes. Besides, the MCNP5 code and experiment using the gamma transmission

technique to determine linear attenuation coefficients, were used to calculate the Compton cross section. The maximum deviation of about 6 % showed that our codes was good agreement with NIST data, MCNP code and experiment.

Keywords: Compton cross section, MCNP5, gamma transmission.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

- [1]. Hirayama, Lecture Note on Photon Interactions and Cross Sections, *High Energy Accelerator Research Organization*, Japan (2000).
- [2]. J.Y. Kim, Y.S. Choi, Y.J. Park, K. Song, S.H. Jung, E.M.A. Hussein, Thickness measurement of organic films using Compton scattering of characteristic X-rays, *Appl. Radiat. Isot.*, 69, 1241-1245 (2011).
- [3]. F. Mandl, G. Shaw, *Quantum Field Theory* 2nd Edition, The University of Manchester, Manchester, UK, 129- 160 (2010).
- [4]. S.K. Mullin, E.M.A. Hussein, A Compton-scatter spectrometry technique for flaw detection, *Nucl. Inst. Meth.A*, 353, 663-667 (1994).
- [5]. P. Priyada, M. Margret, R. Ramar, Shivaramu, M. Menaka, L. Thilagam, Intercomparison of gamma scattering, gammatography, and radiography techniques for mild steel nonuniform corrosion detection, *Rev. Sci. Instrum.*, 82, 035115 (2011).
- [6]. P. Priyada, M. Margret, R. Ramar, Shivaramu, Intercomparison of gamma ray scattering and transmission techniques for fluid–fluid and fluid–air interface levels detection and density measurements, *Appl. Radiat. Isot.*, 70, 462 – 469 (2012).
- [7]. D.V. Rao, S.M. Seltzer, P.M. Bergstrom, Compton scattering cross-sections for individual subshells for a few elements of biological interest in the energy region 5 keV

- 10 MeV, *Radiation Physics and Chemistry*, 70, 479 – 489 (2004).
- [8]. I.L.M. Silva, R.T. Lopes, E.F.O. De Jesus, Tube defects inspection technique by using Compton gamma-rays backscattering, *Nucl. Inst. Meth.A*, 422, 957 – 963 (1999).
- [9]. T.T. Thanh, L. Ferreux, M.C. Lépy, C.V. Tao, Determination activity of radionuclides in marine sediment by gamma spectrometer with anti cosmic shielding, *J Environ Radioactiv*, 101(9), 780 – 783 (2010).
- [10]. Tiêu chuẩn Việt Nam TCVN 1766-75 <http://www.tcvn.gov.vn/>
- [11]. NIST (2013) XCOM: photon cross sections database. USA. <http://www.nist.gov/pml/data/xcom/index.cfm>.