

MÔ PHỎNG CÁC QUÁ TRÌNH TƯƠNG TÁC CỦA TIA GAMMA VỚI DETECTOR NHẤP NHÁY BẰNG PHƯƠNG PHÁP MONTE CARLO

Châu Văn Tạo, Nguyễn Anh Kiệt, Đặng Văn Liệt

Khoa Vật lý, Trường Đại học Khoa học Tự nhiên – ĐHQG-HCM

(Bài nhận ngày 04 tháng 3 năm 2004, hoàn chỉnh sửa chữa ngày 07 tháng 5 năm 2004)

TÓM TẮT: Trong bài báo này, chúng tôi đã sử dụng phương pháp Monte Carlo để mô phỏng quá trình tương tác của bức xạ gamma với vật chất, thông qua 3 hiệu ứng chính là hiệu ứng quang điện, tán xạ Compton, hiệu ứng tạo cặp. Dựa trên các hiệu ứng chủ yếu này, một phần mềm mô phỏng phổ gamma của một số nguồn phóng xạ thông dụng như Co^{60} , Cs^{137} , Tc^{99} , I^{131} , Ir^{192} đã được xây dựng theo hướng lập trình hướng đối tượng bằng ngôn ngữ C^{++} .

1. Mở đầu

Việc khảo sát các quá trình tương tác của bức xạ gamma với vật chất và xây dựng chương trình mô phỏng đã được nhiều tác giả trên thế giới cũng như trong nước thực hiện. Trong bài báo này, chúng tôi thực hiện xây dựng phần mềm mô phỏng hoạt động của đầu dò nhấp nháy $\text{NaI}(\phi=3\text{cm}, h=3\text{cm})$ bằng phương pháp Monte Carlo theo hướng lập trình hướng đối tượng với ngôn ngữ C^{++} thông qua các tương tác chính là hiệu ứng quang điện, tán xạ Compton, hiệu ứng tạo cặp để ghi nhận phổ của các nguồn phóng xạ khác nhau. Phần mềm được xây dựng theo hướng mở để dễ dàng cải tiến về sau.

2. Lý thuyết cơ sở

Trong bài báo chúng tôi sử dụng phương pháp Monte Carlo cho việc tạo các bức xạ ngẫu nhiên và các quá trình tương tác được tính thông qua tiết diện của chúng [6]. Ngoài ra việc mô phỏng cho từng quá trình tương tác cụ thể theo lý thuyết cũng được áp dụng. Phương pháp Monte Carlo được sử dụng để lựa chọn biến cố theo xác suất và tạo số ngẫu nhiên theo phân bố thống kê [1],[5]. Quá trình tương tác giữa bức xạ gamma với vật chất được thể hiện qua 3 loại tương tác chính là: hiệu ứng quang điện, tán xạ Compton, hiệu ứng tạo cặp [4].

2.1. Hiệu ứng quang điện

Tiết diện của hiệu ứng quang điện cho mỗi nguyên tử ϕ_{photo} , được tính theo công thức:

$$\phi_{\text{photo}} = 4\alpha^4 \sqrt{2Z^5} \phi_0 (m_e c^2 / h\nu)^{3/2} \quad (1.1)$$

Với $\phi_0 = 8\pi r_e^2 / 3 = 6,651 \cdot 10^{-25} \text{cm}^2$ và $\alpha = 1/137$, Z bậc số nguyên tử của vật liệu, $h\nu$ năng lượng của tia gamma.

2.2. Tán xạ Compton

Tiết diện tương tác của quá trình tán xạ Compton σ_c được tính theo công thức:

$$\sigma_c = 2\pi r_e^2 \left\{ \frac{1+\gamma}{\gamma^2} \left[\frac{2(1+\gamma)}{1+2\gamma} - \frac{1}{\gamma} \ln(1+2\gamma) \right] + \frac{1}{2\gamma} \ln(1+2\gamma) - \frac{1+3\gamma}{(1+2\gamma)^2} \right\} \quad (1.2)$$

Ở đây r_e là bán kính electron cổ điển và $\gamma = h\nu/m_e c^2$. Trong tán xạ Compton, ta lưu ý đến phân bố động năng T của electron sau tán xạ và tán xạ thứ cấp. Công thức Klein Nishima cho phép tính năng lượng tia gamma thứ cấp $h\nu'$ bay ra dưới góc θ so với phương tới của bức xạ $h\nu$:

$$h\nu' = \frac{h\nu}{1 + \gamma(1 - \cos\theta)} \quad (1.3)$$

$$T = h\nu - h\nu' = h\nu \frac{\gamma(1 - \cos\theta)}{1 + \gamma(1 - \cos\theta)} \quad (1.4)$$

2.3. Hiệu ứng tạo cặp

Tiết diện của hiệu ứng tạo cặp được tính theo công thức sau:

* Trường hợp $m_e c^2 < hv < 137 m_e c^2 Z^{-1/3}$

$$\tau_{\text{pair}} = 4Z^2 \alpha r_e^2 \left[\frac{7}{9} \left(\ln \frac{2hv}{m_e c^2} - f(Z) \right) - \frac{109}{54} \right] \quad (1.5)$$

* Trường hợp $hv > 137 m_e c^2 Z^{-1/3}$

$$\tau_{\text{pair}} = 4Z^2 \alpha r_e^2 \left\{ \frac{7}{9} \left[\ln(183Z^{1/3}) - f(Z) \right] - \frac{1}{54} \right\} \quad (1.6)$$

Để hiệu ứng tạo cặp xảy ra, thì tia gamma tới phải có năng lượng trên 1,022MeV. Có ba khả năng có thể xảy ra:

- Cả 2 photon đều bị hấp thụ. Bức xạ gamma đóng góp hoàn toàn năng lượng vào đỉnh năng lượng toàn phần hv.
- Chỉ có một photon bị hấp thụ, còn một photon thoát ra ngoài nên năng lượng ghi nhận là $hv - 0.511 \text{ MeV}$ (đỉnh thoát cặp thứ nhất).
- Nếu cả 2 photon thoát ra ngoài thì năng lượng ghi nhận được là $hv - 1.022 \text{ MeV}$ (đỉnh thoát cặp thứ hai). Tuy nhiên xác suất này rất thấp.

Khi kích thước chất nhấp nháy lớn thì khả năng thoát photon (cũng như tia gamma thứ cấp) giảm đi rất nhiều. Cho nên trong phổ thực nghiệm ta hầu như không phân biệt được đỉnh thoát cặp trên bức xạ nền. Trên phổ năng lượng các đỉnh không phải là một vạch mà thường có dạng phân bố (Gauss). Nguồn gốc của sự phân bố này là do máy đo trong quá trình ghi nhận có độ bất định năng lượng nhất định. Trong chương trình mô phỏng, sự lệch đi này được thay thế bằng sự phân bố năng lượng ngay tại nguồn phát chứ không phải phát sinh trong quá trình ghi nhận. Khả năng xảy ra tán xạ thứ cấp có thể giải bằng hình học không gian lần phương pháp xác suất. Ở đây, để giảm độ phức tạp của bài toán, phương pháp mô phỏng theo xác suất (Monte Carlo) được áp dụng [1]. Phương pháp được đưa ra dựa trên ý tưởng tìm ra xác suất để bức xạ gamma thứ cấp thoát ra ngoài dựa vào quỹ đạo bay trung bình. Do bức xạ gamma chỉ có thể thoát ra ngoài, khi nó xuất phát cách biên ít hơn quỹ đạo bay của nó. Ta sẽ đưa vào công thức dựa trên xác suất để hạt rơi vào vị trí bất kỳ trong đầu dò. Ngoài ra khi tính đến tán xạ nhiều lần trong khối tinh thể khả năng mất bức xạ sẽ cao hơn. Xác suất mất bức xạ từ khối tinh thể σ_{lost} được cho trong (1.7), với R_c là bán kính tinh thể. R_{avr} là quỹ đạo bay trung bình và N số lần tán xạ.

$$\sigma_{\text{lost}} = \frac{1 - \left(\frac{R_c - R_{\text{avr}}}{R_c} \right)^{3N}}{2} \quad (1.7)$$

3. Xây dựng mô hình

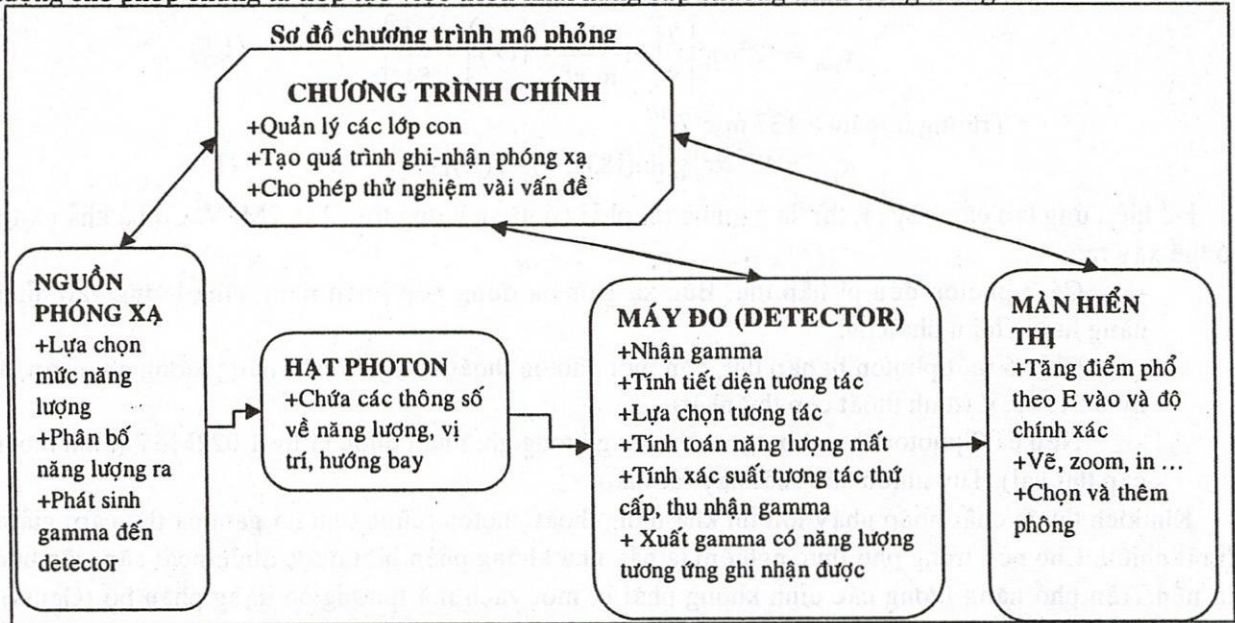
3.1. Cơ sở xây dựng mô hình

Nguồn phóng xạ phát ra các tia gamma có năng lượng và xác suất đặc trưng cho đồng vị phóng xạ. Bức xạ gamma sau đó sẽ được xử lý để năng lượng có dạng phân bố (Gauss, Lorentz...). Mô hình máy đo sẽ thực hiện việc mô phỏng các loại tương tác với đầu dò. Sau nhiều lần tương tác, mô hình máy đo sẽ trả ra kết quả sau cùng chính là năng lượng ghi nhận được của máy đo và chương trình cho thể hiện kết quả ghi nhận tín hiệu. Tương tác được tính đến của bức xạ gamma với vật chất là hiệu ứng quang điện, tán xạ Compton, hiệu ứng tạo cặp thông qua tiết diện tương ứng của chúng. Nếu là tán xạ Compton, ta xét điều kiện tán xạ thứ cấp bao gồm 2 điều kiện: năng lượng gamma thứ cấp phải đủ lớn; hạt gamma chưa thoát ra ngoài qua mặt bên. Năng lượng mà máy đo ghi lại sẽ bằng tổng năng lượng mất đi của các lần tương tác. Trong mô hình của mình, chúng tôi đã đưa thông nền vào và bỏ qua tương tác tia gamma với vật liệu bao quanh đầu dò. Năng lượng được detector ghi nhận với độ phân giải xác định (cửa sổ năng lượng).

3.2. Chương trình mô phỏng.

Do phương pháp Monte Carlo không đòi hỏi các tính toán quá phức tạp nên có thể sử dụng ngôn ngữ C++ để mô phỏng các quá trình vật lý mà không cần sử dụng các phần mềm tính toán mạnh như

Matlab, Mathematica [2],[3]. Bên cạnh đó, việc chọn ngôn ngữ C++ với hướng lập trình hướng đối tượng cho phép chúng ta tiếp tục việc triển khai nâng cấp chương trình trong tương lai.



Hình 1 : Sơ đồ chương trình mô phỏng theo hướng đối tượng

4. Mô phỏng phổ gamma của một số nguồn phóng xạ

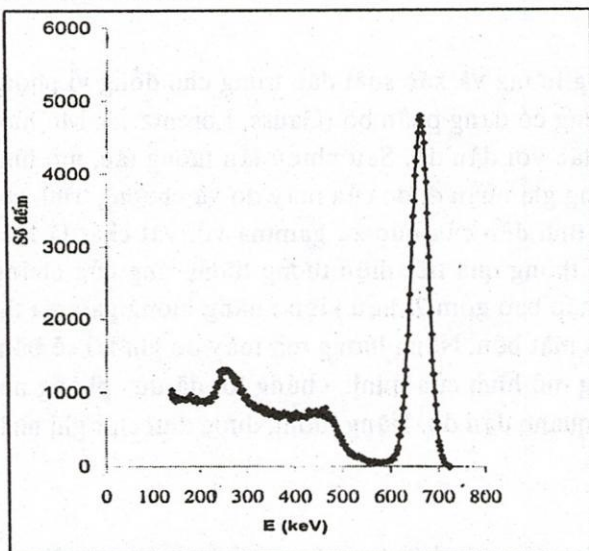
Sau khi xây dựng chương trình, chúng tôi tiến hành chạy mô phỏng quá trình tương tác của tia gamma từ một số nguồn phóng xạ thông dụng và thu được các kết quả sau:

4.1 Phổ gamma của nguồn phóng xạ Cs¹³⁷.

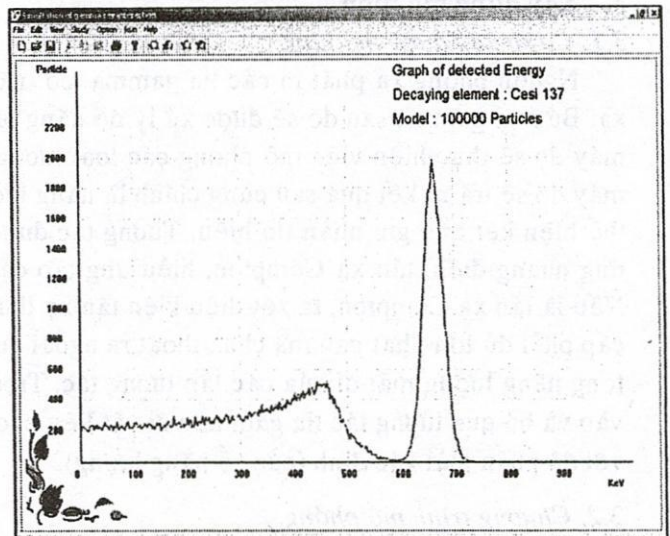
Đồng vị Cs¹³⁷ là nguồn đơn năng, phát bức xạ gamma có năng lượng 662 KeV, năng lượng của bức xạ gamma này không tới ngưỡng xảy ra tạo cặp, nên là nguồn phóng xạ thông dụng nhất dùng để khảo sát sự tương tác của bức xạ gamma với vật chất. Phổ gamma của đồng vị Cs¹³⁷ thu được từ thực nghiệm (hình .2) và từ mô phỏng (hình.3). Các số liệu so sánh được đưa ra trong bảng 1.

Bảng 1: Số liệu lý thuyết, thực nghiệm và 2 lần chạy mô phỏng của nguồn Cs¹³⁷.

	Lý Thuyết	Thực nghiệm	Mô phỏng 1	Mô phỏng 2
Đỉnh toàn phần (KeV)	662	662	660	661
Cạnh Compton (KeV)	478	476	456	457



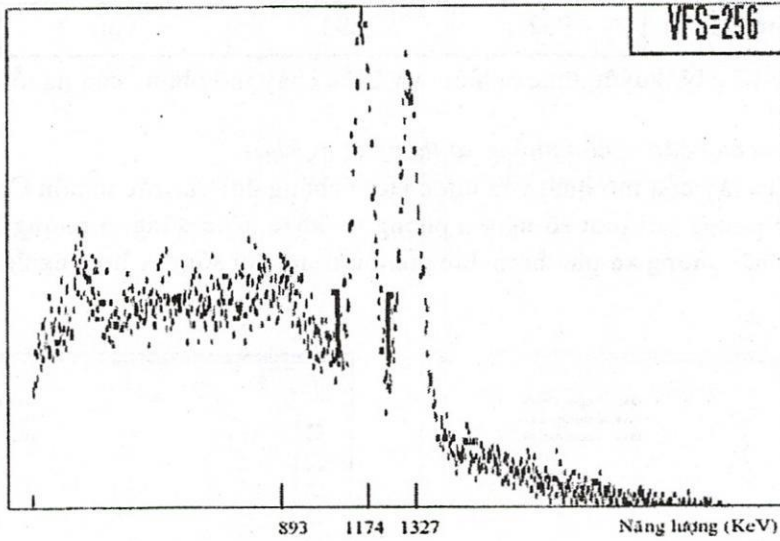
Hình 2 : Phổ thực nghiệm của Cs¹³⁷ (100.000 hạt)



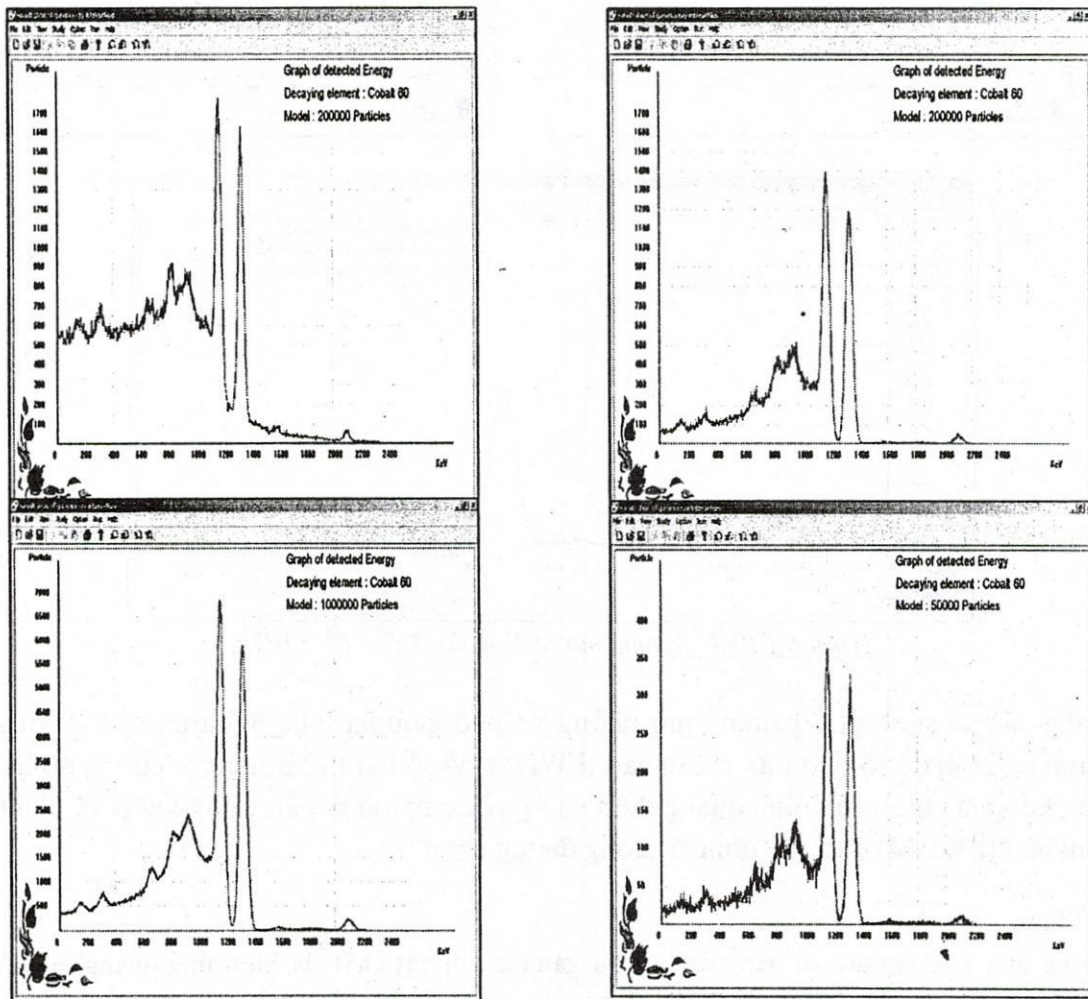
Hình 3.: Phổ năng lượng của Cs¹³⁷ thu từ chương trình, mô hình 100.000 hạt.

4.2 Phổ gamma của nguồn phóng xạ Co^{60} .

Đồng vị Co^{60} tuy không phải là nguồn đơn năng nhưng là đồng vị phóng xạ phát ra tia gamma có năng lượng trên 1,022 MeV nên có thể khảo sát tương tác của tia gamma với vật chất đầy đủ hơn bao gồm cả ba hiệu ứng. Các Phổ Co^{60} thu được từ thực nghiệm (hình .4) và từ quá trình mô phỏng (hình.5), và các số liệu so sánh được đưa ra trong bảng.2



Hình 4 : Phổ gamma thực nghiệm của nguồn Co^{60} 150.000 hạt



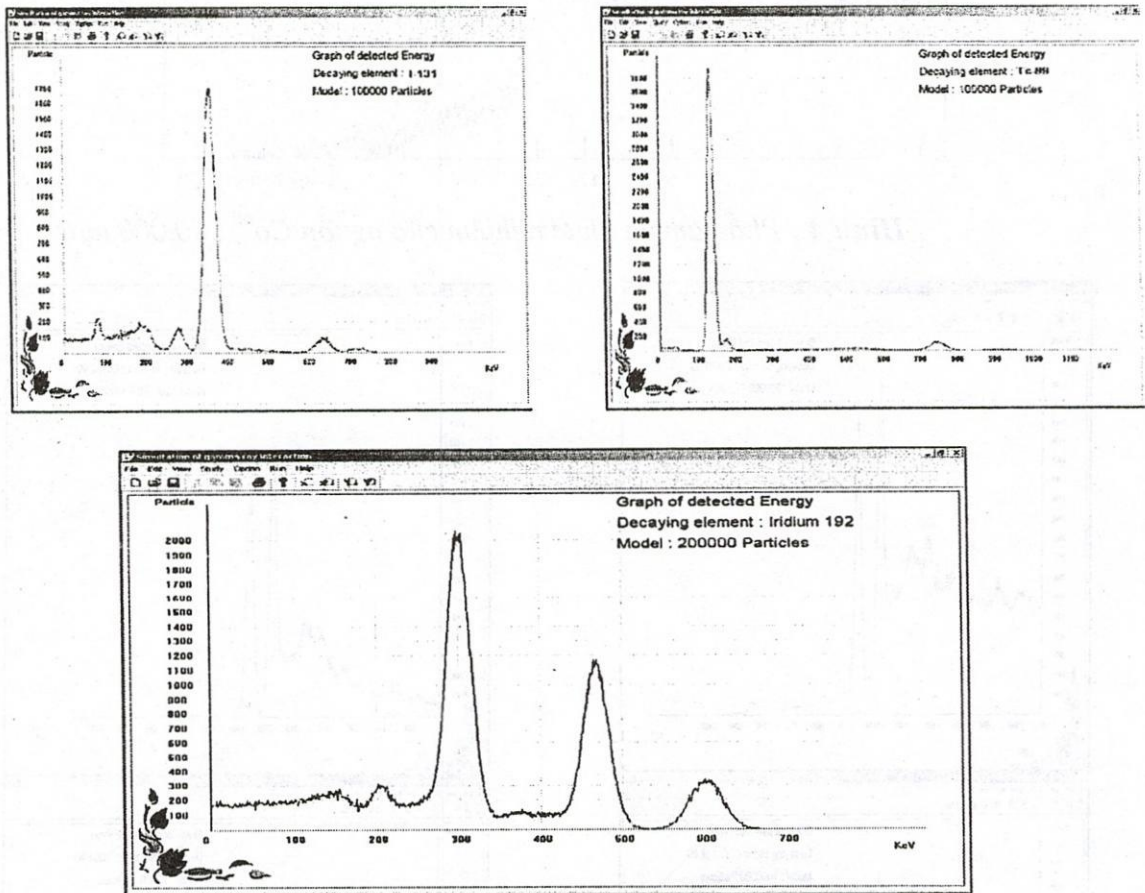
Hình 5 : Phổ mô phỏng gamma của đồng vị Co^{60} với cường độ gamma khác nhau.

	Lý thuyết	Thực nghiệm	Mô phỏng 1	Mô phỏng 2
Vạch 1 (KeV)	1172	1174	1168	1170
Vạch 2 (KeV)	1333	1327	1332	1332
Vạch 3 (KeV)	2105	-	2104	2109
Cạnh Compton (KeV)	962	893	936	942

Bảng .2 : Số liệu lý thuyết, thực nghiệm và 2 lần chạy mô phỏng của nguồn Co^{60} .

4.3. Một số phổ gamma của các nguồn phóng xạ thông dụng khác

Căn cứ trên độ tin cậy của mô hình vừa được kiểm chứng đối với các nguồn Cs^{137} , Co^{60} . Chúng tôi thực hiện việc mô phỏng với một số nguồn phóng xạ khác. Các đồng vị phóng xạ được sử dụng trong mô hình là các chất phóng xạ phổ biến dùng nhiều trong đời sống, y học, nghiên cứu ... gồm có Tc^{99} , I^{131} , Ir^{192} .



Hình 6 : Phổ gamma mô phỏng của Tc^{99} , I^{131} , Ir^{192} .

Trong các so sánh phổ gamma mô phỏng và phổ gamma thực nghiệm, chúng tôi không tiến hành so sánh độ rộng ở nửa chiều cao (FWHM) vì số hạt thử trùng với cường độ hạt thực nghiệm, kết quả chiều cao đỉnh quang điện và vị trí Compton là gần trùng khớp và như thế có thể xem như (FWHM) của các đỉnh là tương đương nhau.

5. Kết luận

Thông qua 3 tương tác cơ bản của bức xạ gamma với vật chất là hiệu ứng quang điện, tán xạ Compton và hiệu ứng tạo cặp. Chúng tôi đã xây dựng một phần mềm để mô phỏng phổ gamma của các nguồn bức xạ. Mô hình xây dựng đã mô phỏng phổ gamma của một số nguồn bức xạ thông dụng

Cs¹³⁷, Co⁶⁰ và cho kết quả là phổ gamma thu được từ mô phỏng phù hợp phổ gamma thu được từ thực nghiệm với cùng số hạt. Mô hình xây dựng cũng cho phép mô phỏng phổ của các nguồn bức xạ gamma khác, nếu chúng ta biết được sơ đồ phân rã của chúng. Phần mềm được thiết kế theo hướng lập trình hướng đối tượng cho phép dễ dàng triển khai tiếp tục về sau cho các hiệu ứng phụ khác như tính đến các nhiễu tạo ra bởi đầu dò ... để phổ gamma được mô phỏng từ mô hình là phù hợp hơn với phổ gamma thu được từ thực nghiệm ở những vùng năng lượng thấp.

SIMULATING THE INTERACTION OF GAMMA RADIATION WITH SCINTILLATOR DETECTOR BY MONTE-CARLO METHOD

Chau Van Tao, Nguyen Anh Kiet, Dang Van Liet

Faculty of physics – University of Natural Sciences – VNU-HCM

ABSTRACT: *In this paper, we used Monte-Carlo method for simulating the interactions of gamma radiation with matter, which composed of the three main types such as photoeffect, Compton effect and pair formation effect. The software is designed based on C++ language for simulating gamma spectroscopy of some useful radioactivity sources such as Co⁶⁰, Cs¹³⁷, Tc⁹⁹, I¹³¹, Ir¹⁹².*

TÀI LIỆU THAM KHẢO

- [1] K. Binder, *Topics in Applied Physics – The Monte Carlo Method in Condensed Matter Physics*, Springer-Verlag, 1991.
- [2] Vũ Ngọc Tước, *Mô phỏng và mô hình hoá bằng máy tính*, Nhà xuất bản Giáo Dục, 2001.
- [3] Rubin H. Landau và Manuel J. Páez, *Computational Physics – Problem solving with computers*, John Wiley & Son, 1997.
- [4] Kenneth Krane, *Introductory Nuclear Physics*, John Wiley, 1988.
- [5] George Casella, *Introduction to Monte Carlo Staticcal Methods*, University of Florida, 1999.