

BƯỚC ĐẦU MÔ HÌNH HÓA HỆ PHỔ KẾ GAMMA DÙNG DETECTOR BÁN DẪN SIÊU TINH KHIẾT SỬ DỤNG CHƯƠNG TRÌNH MCNP

Ngô Quang Huy⁽¹⁾, Đỗ Quang Bình⁽¹⁾, Võ Xuân Ân⁽²⁾

(1) Trung tâm Hạt nhân Tp. Hồ Chí Minh

(2) Trường Đại học Công nghiệp Tp. Hồ Chí Minh

(Bài nhận ngày 14 tháng 07 năm 2005, hoàn chỉnh sửa chữa ngày 20 tháng 08 năm 2005)

TÓM TẮT: Công trình này trình bày các kết quả thu được từ các nghiên cứu mô hình hoá hệ phổ kế gamma dùng detector bán dẫn siêu tinh khiết GC1518 của hãng Canberra Industries Inc. bằng tính toán mô phỏng Monte Carlo sử dụng chương trình MCNP. Bộ số liệu đầu vào về kích thước hình học và cấu trúc vật liệu của các thành phần hệ phổ kế được xây dựng trên cơ sở thực tế và thông tin của nhà sản xuất. Kết quả tính toán phổ gamma được so sánh với số liệu thực nghiệm đối với các nguồn phóng xạ chuẩn ^{137}Cs và ^{60}Co . Sự phù hợp giữa tính toán và thực nghiệm đã nhận được đối với hai vị trí đặt nguồn phóng xạ trong buồng chì của hệ phổ kế. Điều này cho thấy bộ số liệu đầu vào cho chương trình MCNP4C là chính xác và đủ độ tin cậy để sử dụng trong các tính toán sau này.

1. Mở đầu

Phương pháp Monte Carlo đã được áp dụng rộng rãi trong việc mô phỏng các cấu hình phức tạp nhằm giải các bài toán tương tác trong vật lý hạt nhân [1,2,3,4]. Việc tính toán ở đây dựa trên xác suất xảy ra các quá trình tương tác của các hạt và bức xạ với vật chất. Phương pháp mô phỏng Monte Carlo được ứng dụng để tính các phổ gamma của các phổ kế dùng detector nhấp nháy và detector bán dẫn [5,6,7,8]. Riêng với phổ kế gamma dùng detector bán dẫn, một số chương trình máy tính theo phương pháp Monte Carlo được sử dụng phổ biến là MCNP [9,10], CYLTRAN [11], DTEFF [12], GEANT [13], GESPECOR [14], . . . Vấn đề quan trọng khi ứng dụng chương trình Monte Carlo là bộ số liệu đầu vào về kích thước hình học cũng như cấu trúc vật liệu phải được mô tả càng đúng như thực tế càng tốt. Sự đúng đắn này được kiểm tra bằng cách so sánh các phổ gamma tính toán và phổ gamma thực nghiệm của một số nguồn phóng xạ chuẩn. Công trình này sử dụng chương trình MCNP phiên bản MCNP4C để mô phỏng hệ phổ kế gamma dùng detector bán dẫn siêu tinh khiết HPGe GC1518 của hãng Canberra Industries, Inc., đặt tại Trung tâm Hạt nhân TP Hồ Chí Minh. Các thành phần chính của hệ phổ kế là buồng chì, detector GC1518 và nguồn phóng xạ. Bộ số liệu về buồng chì được xác định trên thực tế bằng cách đo đạc còn bộ số liệu của detector dựa trên dữ liệu của nhà sản xuất cung cấp. Việc kiểm chứng bộ số liệu này được thực hiện bằng cách so sánh các phổ gamma tính toán và thực nghiệm đối với hai nguồn chuẩn ^{137}Cs và ^{60}Co đặt tại hai vị trí khác nhau trong buồng chì.

2. Chương trình MCNP4C

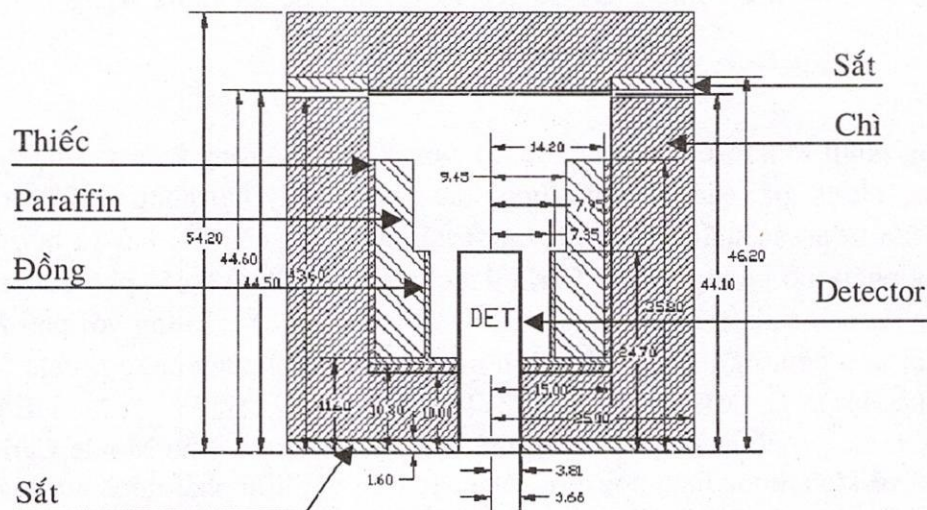
Chương trình MCNP (Monte Carlo N-Particle) được xây dựng từ những năm 1970 và phiên bản MCNP4C ra đời năm 2000 [9,10]. Chương trình MCNP là chương trình đa mục đích, ứng dụng phương pháp Monte Carlo để mô phỏng quá trình vận chuyển của các hạt neutron, photon và electron riêng biệt hoặc kết hợp neutron/photon, neutron/photon/electron, photon/electron và electron/photon trong môi trường vật chất.

và electron là 10^{-3} MeV – 10^3 MeV. Thư viện số liệu hạt nhân và tiết diện tương tác phụ thuộc liên tục vào năng lượng của bức xạ neutron, photon và electron với vật chất cho chương trình được chuẩn bị từ các dữ liệu ENDF, ENDL và AGLT [9].

Khi sử dụng chương trình MCNP để mô phỏng phổ kế gamma ta chỉ quan tâm đến quá trình tương tác của gamma với vật chất, tức là dùng Mode P. Khi đó chương trình MCNP sẽ tính hiệu ứng quang điện, tán xạ Compton, hiệu ứng tạo cặp electron-positron và các quá trình thứ cấp. Khi bức xạ gamma ban đầu rơi vào vùng nhạy của detector bán dẫn thì năng lượng của tất cả các hạt sơ cấp hay thứ cấp sinh ra từ bức xạ gamma đó sẽ được giữ lại và các số liệu này được lấy ra trên thẻ truy xuất kết quả phân bố theo năng lượng tally F8. Năng lượng tổng cộng này tỉ lệ với biên độ tín hiệu ra của detector.

3. Cấu trúc của buồng chì và detector GC1518

Hệ phổ kế gamma của Trung tâm Hạt nhân TP Hồ Chí Minh gồm detector bán dẫn siêu tinh khiết germanium (HPGe) GC1518, tiền khuếch đại, khuếch đại phổ, khối phân tích biên độ đa kênh, nguồn nuôi thế thấp một chiều và nguồn nuôi cao thế cho detector. Detector GC1518 được đặt trong buồng chì để giảm phòng gamma từ môi trường. Cấu trúc của buồng chì được trình bày trên hình 1.

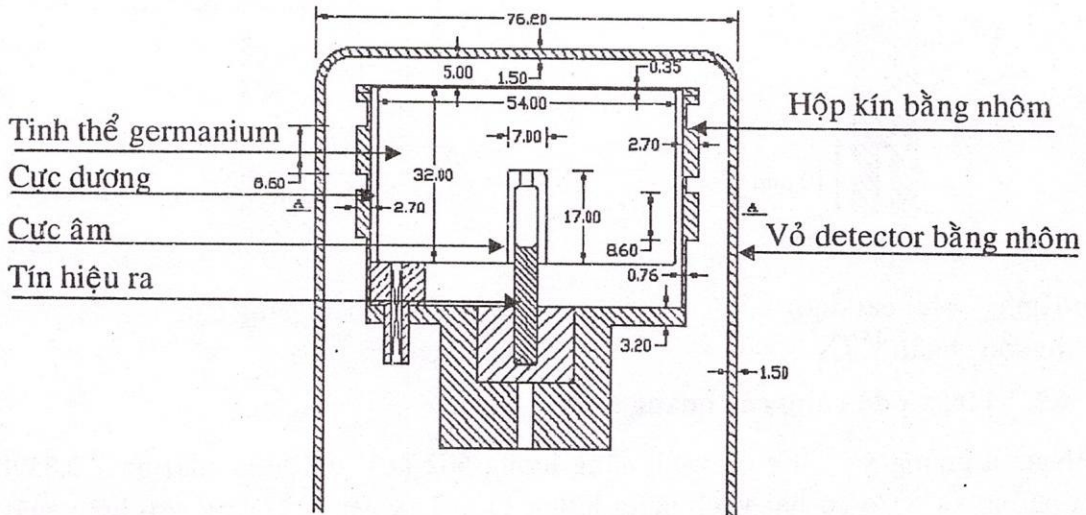


Hình 1. Mặt cắt dọc của buồng chì, kích thước được tính bằng cm.

Trên hình 1 detector GC1518 là một ống hình trụ bán kính 3,81 cm với chiều cao nằm bên trong buồng chì là 8,40 cm. Buồng chì có dạng hình trụ vành khuyết với bán kính ngoài 25 cm, cao 50 cm, bán kính trong 15 cm, cao 30 cm. Bề dày chì ở các mặt trên, mặt dưới và mặt xung quanh hình trụ bằng 10 cm. Ở mặt dưới của nắp buồng chì có một lớp thiếc dày 0,3 cm và một lớp đồng dày 0,1 cm. Mặt trên của đáy buồng chì có lót một lớp đồng dày 0,8 cm. Mặt trong của thành buồng chì có một lớp thiếc dày 0,8 cm, một lớp paraffin dày 6,25 cm nửa dưới và 4,75 cm nửa trên, và một lớp đồng dày 0,6 cm kể từ bên ngoài vào.

Sơ đồ cấu trúc của detector GC1518 được trình bày trên hình 2. Đây là detector germanium siêu tinh khiết có dạng hình trụ đồng trục. Detector có các thông số danh định như sau: hiệu suất tương đối 15% so với detector nhấp nháy NaI(Tl) kích thước 3 inch x 3 inch, độ phân giải năng lượng 1,8 keV tại vạch năng lượng 1332 keV của đồng vị ^{60}Co và tỉ số đỉnh/Compton bằng 45:1 tại đỉnh 1332 keV của đồng vị ^{60}Co . Các thông số hình học và

vật liệu của detector do nhà sản xuất cung cấp. Phần chính của detector là tinh thể germanium có đường kính ngoài 54 mm, chiều cao 32 mm, ở giữa có một hốc hình trụ đường kính 7 mm và chiều cao 17 mm. Tín hiệu lấy ra từ một cái lõi đặt ở hốc trong tinh thể germanium. Mặt trên và mặt bên tinh thể có một lớp lithium khuếch tán ngoài cùng với bề dày tương đương 0,35 mm Ge, được gọi là lớp chết lithium. Đó là lớp n^+ làm điện cực dương nối với nguồn điện dương. Mặt trong hốc của tinh thể có một lớp boron được cấy ion với bề dày tương đương 3.10^{-3} mm Ge, gọi là lớp chết boron. Đây là lớp p^+ làm điện cực âm nối với nguồn điện âm. Độ dày của các lớp chết lithium và boron được đo khi kiểm tra xuất xưởng detector vào năm 1996. Các độ dày này có thể thay đổi theo thời gian và tăng lên đáng kể nếu detector để ở nhiệt độ cao một thời gian dài. Trên mặt tinh thể có phủ hai lớp vật liệu, bao gồm lớp trên làm bằng kapton với bề dày 0,1 mm và lớp dưới làm bằng mylar được kim loại hóa với bề dày $8,5.10^{-3}$ mm.



Hình 2. Mặt cắt dọc của detector HPGe GC1518, kích thước được tính bằng mm.

Tinh thể germanium được đặt trong một hộp kín bằng nhôm với các kích thước như trên hình 2, trong đó các điện cực cách điện với nhau bằng teflon và có một khoảng chân không ở dưới tinh thể. Toàn bộ hộp kín này được đặt vào trong vỏ bằng nhôm có đường kính 76,2 mm và dày 1,5 mm. Khoảng cách giữa mặt trên tinh thể germanium với mặt trên của vỏ nhôm là 5 mm.

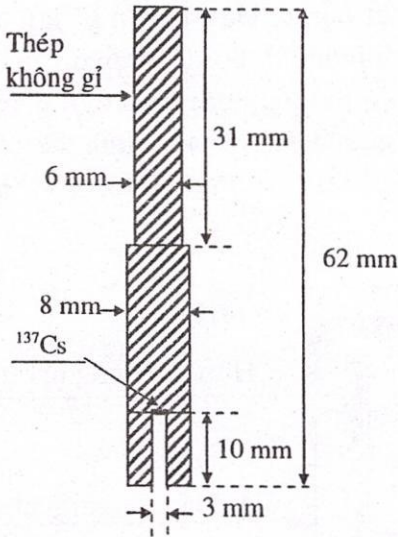
4. Tính toán và thực nghiệm

Trong các tính toán được trình bày dưới đây, chúng tôi sử dụng chương trình MCNP phiên bản MCNP4C để tính phổ gamma của hai nguồn phóng xạ chuẩn ^{137}Cs và ^{60}Co đặt trong buồng chì. Nguồn ^{137}Cs phát bức xạ gamma với năng lượng 662 keV nên khi gamma tương tác với vật chất có hai hiệu ứng xảy ra là hiệu ứng quang điện và tán xạ Compton. Các tia gamma của nguồn ^{60}Co có hai mức năng lượng là 1173 keV và 1332 keV nên ngoài hiệu ứng quang điện và tán xạ Compton còn xảy ra quá trình tạo cặp electron-positron. Các kết quả tính toán được so sánh với các số liệu thực nghiệm về vị trí và độ rộng các quang đỉnh và về dạng toàn phổ gamma.

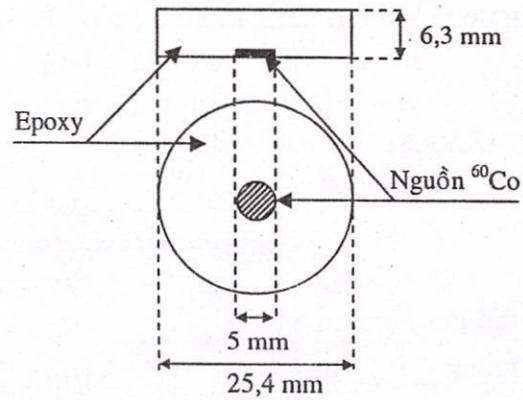
4.1. Cấu trúc của các nguồn phóng xạ ^{137}Cs và ^{60}Co

Nguồn ^{137}Cs có dạng đĩa tròn với đường kính 2 mm đặt trong một ống thép không gỉ dài 62 mm, có collimator dài 10 mm, đường kính collimator 2 mm (hình 3). Nguồn ^{60}Co có dạng đĩa tròn với đường kính 5 mm được chế tạo bằng cách cho bay hơi muối kim loại

cobalt và đong lại trên một giá đỡ làm bằng nhựa epoxy, được trình bày trong hình 4. Hai nguồn này được chọn vì chúng có cấu trúc khác nhau. Nguồn ^{60}Co là một nguồn đơn giản, bức xạ gamma từ nguồn không bị tán xạ đáng kể trong vật liệu nguồn. Trong lúc đó, nguồn ^{137}Cs nằm trong lõi thép không gỉ nên hiệu ứng tán xạ của gamma trong vật liệu nguồn là đáng kể. Đặc điểm này của nguồn ^{137}Cs được sử dụng để khảo sát hiệu ứng tán xạ gamma.



Hình 3. Mặt cắt đứng của nguồn chuẩn ^{137}Cs .



Hình 4. Mặt cắt ngang của nguồn chuẩn ^{60}Co .

4.2. Vị trí và độ rộng các quang đỉnh

Nguồn phóng xạ ^{137}Cs có vạch năng lượng 662 keV với hiệu suất phát 0,8520 còn nguồn phóng xạ ^{60}Co có hai vạch năng lượng 1173 keV và 1332 keV với hiệu suất phát 0,9986 và 0,9998 tương ứng. Trên phổ gamma thực nghiệm các vạch năng lượng này giãn rộng thành các đỉnh có dạng Gauss, được gọi là các quang đỉnh. Độ rộng các quang đỉnh được xác định bởi ba hiệu ứng là sự giãn rộng thống kê số lượng các hạt mang điện, hiệu suất tập hợp diện tích và đóng góp của các nhiễu điện tử [15]. Trong chương trình MCNP4C không mô phỏng các hiệu ứng này mà sử dụng một thuật toán làm phù hợp về độ rộng đỉnh giữa tính toán Monte Carlo với thực nghiệm. Đó là thủ tục lấy mẫu ngẫu nhiên theo dạng hàm Gauss:

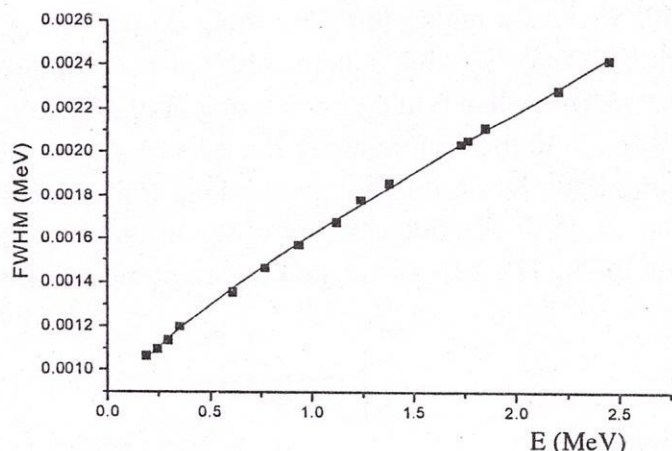
$$P(E) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-(E-E_0)^2/2\sigma^2} \quad (1)$$

trong đó E là năng lượng gamma, E_0 là năng lượng gamma tại đỉnh của phổ, σ là độ lệch chuẩn. Khi xem xét đỉnh gamma, thay cho độ lệch chuẩn σ người ta thường dùng độ rộng ở nửa chiều cao $\text{FWHM} = 2\sqrt{2\ln 2} \sigma$. Giá trị của độ rộng ở nửa chiều cao FWHM là giá trị bán thực nghiệm, được xác định theo công thức sau đây [9]:

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

Trong đó a, b, c là các hằng số được xác định bằng phương pháp khớp bình phương tối thiểu hàm số (2) với số liệu thực nghiệm đối với một số đỉnh năng lượng của các nguồn phóng xạ chuẩn. Từ phổ gamma thực nghiệm của nguồn phóng xạ ^{226}Ra đã xác định được sự phụ thuộc của FWHM vào E như trình bày trên hình 5. Phương pháp làm khớp bình phương tối thiểu cho các giá trị a, b, c như sau:

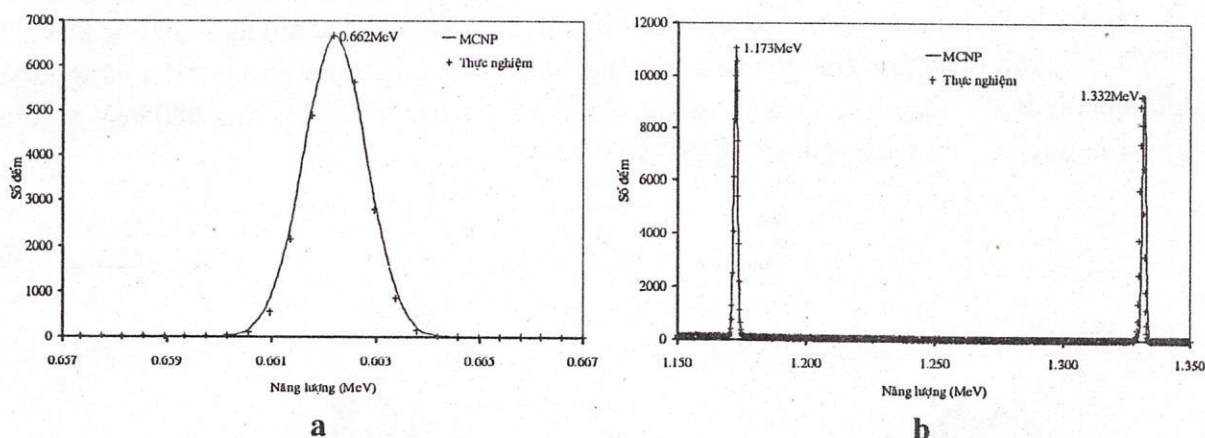
$$a = 0,00071 \pm 0,00003; b = 0,00075 \pm 0,00005; c = 0,46493 \pm 0,09143 \quad (3)$$



Hình 5. Sự phụ thuộc của độ rộng đỉnh ở nửa chiều cao FWHM vào năng lượng gamma E.

■ Thực nghiệm ————— Tính toán theo hàm (2).

Trên hình 6 trình bày các quang đỉnh tính toán theo chương trình MCNP4C và thực nghiệm của nguồn ^{137}Cs (662 keV) và nguồn ^{60}Co (1173 keV và 1332 keV). Các nguồn phóng xạ được đặt trên trục qua tâm detector ở độ cao 10 cm đến mặt trên detector. Tính toán Monte Carlo được thực hiện với các thông số của hệ đo nêu trong các hình 1, 2, 3, 4 và các công thức (1), (2), (3). Từ hình 6 thấy rằng vị trí và độ rộng các quang đỉnh tính toán và thực nghiệm khá trùng nhau.



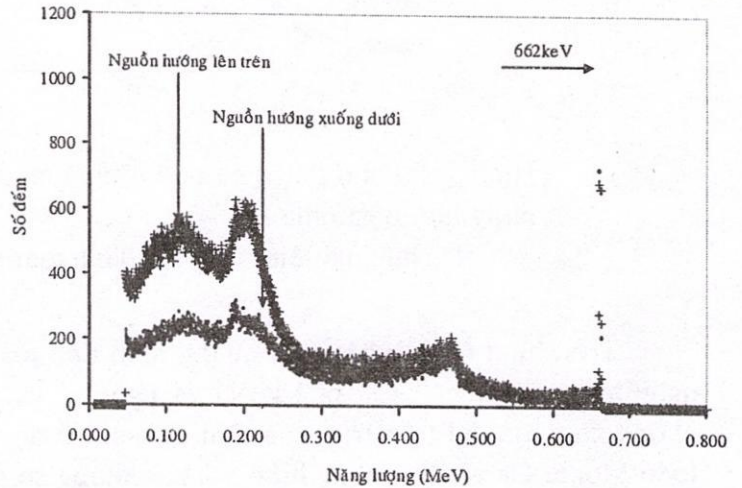
Hình 6. So sánh kết quả tính toán theo chương trình MCNP4C (đường liền) và thực nghiệm (dấu +) về vị trí và độ rộng các quang đỉnh của nguồn ^{137}Cs (hình a) và ^{60}Co (hình b).

4.3. Các phổ gamma

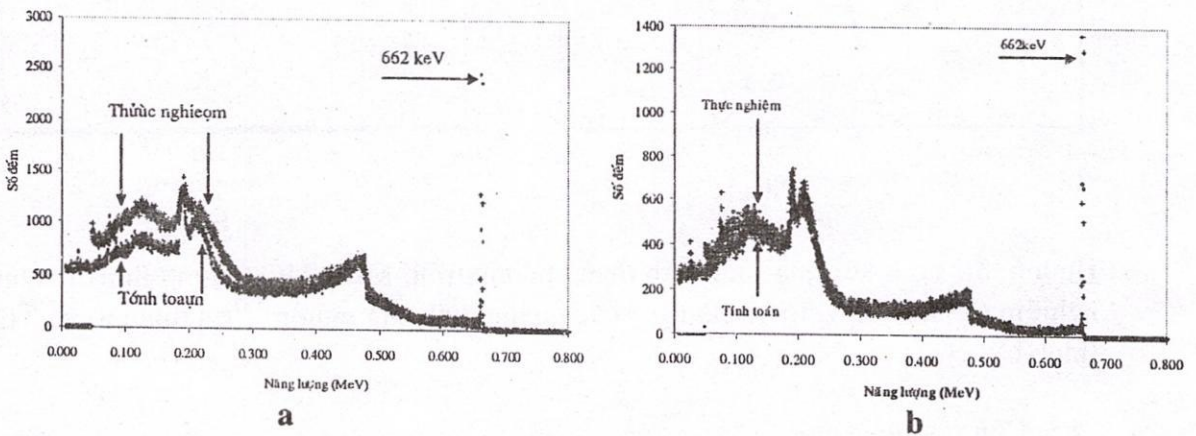
Để so sánh kết quả tính toán với thực nghiệm về phổ gamma, trong công trình này các nguồn phóng xạ được đặt ở độ cao 5 cm và 10 cm so với mặt detector và trên trục thẳng đứng qua tâm detector. Riêng với nguồn ^{137}Cs , do có cấu trúc vỏ thép không gỉ nên đặt nó theo hai tư thế hướng nguồn xuống dưới và hướng nguồn lên trên nhằm tính đến hiệu ứng tán xạ gamma trong thép không gỉ.

Hình 7 trình bày các phổ gamma thực nghiệm đối với nguồn ^{137}Cs đặt theo hai tư thế nguồn hướng xuống dưới và nguồn hướng lên trên, trong đó hai phổ gamma được chuẩn theo độ cao quang đỉnh 662 keV. Từ hình 7 thấy rằng hai phổ trùng nhau ở miền năng lượng từ 300 keV trở lên và khác nhau ở miền năng lượng dưới 300 keV. Trong miền năng lượng này phổ gamma ứng với tư thế nguồn hướng lên trên có giá trị cao hơn phổ ứng với tư thế nguồn hướng xuống dưới. Đó là do khi nguồn hướng lên trên các photon tán xạ từ nguồn qua vỏ thép không gì để đi đến detector nhiều hơn trường hợp nguồn hướng xuống dưới. Ngoài ra khi nguồn hướng lên trên, số tia gamma tán xạ ngược từ nắp buồng chì đến detector cũng tăng lên.

Hình 7. Các phổ gamma thực nghiệm của nguồn ^{137}Cs đặt hướng xuống dưới và hướng lên trên, cách detector 10 cm.



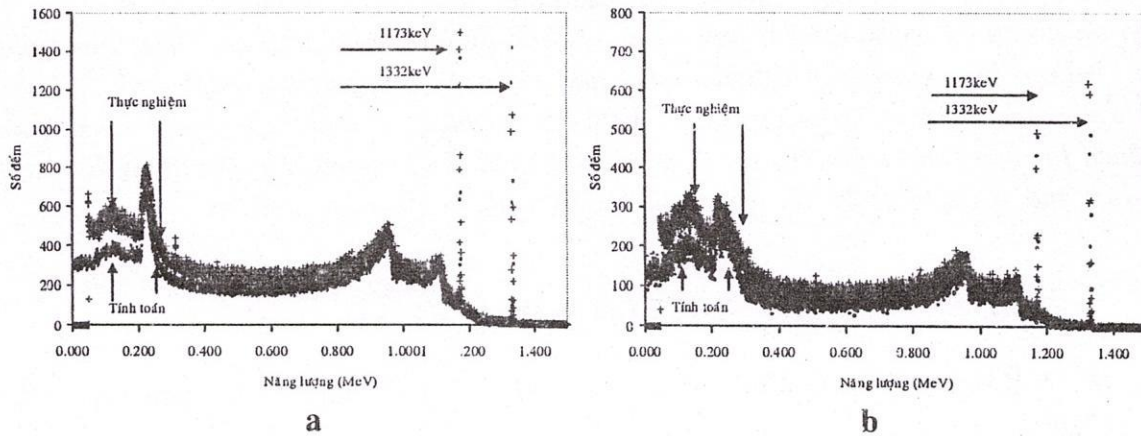
Hình 8 trình bày các phổ gamma thực nghiệm và tính toán của nguồn ^{137}Cs đặt cách detector 10 cm đối với hai tư thế nguồn hướng xuống dưới (hình 8a) và nguồn hướng lên trên (hình 8b). Trên mỗi hình, các phổ được chuẩn theo độ cao các quang đỉnh 662 keV. Từ hình 8 thấy rằng các phổ tính toán và thực nghiệm gần trùng nhau, trong miền năng lượng dưới quang đỉnh 662 keV xuất hiện mép Compton với năng lượng khoảng 480 keV và đỉnh tán xạ ngược với năng lượng khoảng 200 keV.



Hình 8. Các phổ gamma thực nghiệm và tính toán của nguồn ^{137}Cs đặt cách detector 10 cm. Hình a: Nguồn hướng xuống dưới; hình b: Nguồn hướng lên trên .

Hình 9 trình bày các phổ gamma thực nghiệm và tính toán của nguồn ^{60}Co đặt cách detector 5 cm (hình 9a) và 10 cm (hình 9b). Các phổ được chuẩn theo độ cao các quang đỉnh 1332 keV. Từ hình 9 cũng thấy rằng, các phổ gamma tính toán gần trùng với thực nghiệm. Trên các phổ gamma này, trong miền năng lượng dưới quang đỉnh 1173 keV xuất

hiện hai mép Compton với năng lượng khoảng 960 keV và 1110 keV, và đỉnh tán xạ ngược với năng lượng khoảng 220 keV.



Hình 9. Các phổ gamma thực nghiệm và tính toán của nguồn ^{60}Co đặt cách detector 5 cm (hình a) và 10 cm (hình b) theo trục qua tâm detector.

5. Kết luận

Trong công trình này chương trình MCNP4C đã được sử dụng để mô phỏng hệ phổ kế gamma dùng detector HPGe GC1518 tại Trung tâm Hạt nhân TP Hồ Chí Minh. Từ các nghiên cứu này đã xây dựng được bộ số liệu đầu vào về kích thước hình học và cấu trúc vật liệu của buồng chì và detector cũng như cấu trúc các nguồn phóng xạ hướng tới mô hình hoá chính xác hệ phổ kế. So sánh các phổ gamma tính toán và thực nghiệm của các nguồn khác nhau, được đo tại các vị trí khác nhau, ở các tư thế khác nhau có thể nhận thấy rằng các phổ tính toán bằng MCNP4C phù hợp khá tốt với phổ thực nghiệm. Các quang đỉnh của các phổ tính toán và thực nghiệm đối với cả nguồn Cs^{137} và Co^{60} trùng khớp với nhau khi số liệu về sự phụ thuộc của độ rộng nửa chiều cao cực đại FWHM theo năng lượng đối với hệ phổ kế được xác định chính xác. Vẫn còn sự chưa phù hợp hoàn toàn giữa tính toán và thực nghiệm đối với phần phổ gamma ở vùng năng lượng dưới 300 keV. Vấn đề này sẽ tiếp tục được nghiên cứu chi tiết sau này.

Cảm ơn: Các tác giả bày tỏ sự cảm ơn chân thành đến CN Nguyễn Văn Mai, CN Trần Văn Luyến, Th.S Thái Mỹ Phê và các đồng nghiệp trong Phòng An toàn Bức xạ và Môi trường thuộc Trung tâm Hạt nhân TP Hồ Chí Minh đã tạo điều kiện thuận lợi trong việc đo đạc trên hệ phổ kế gamma và các ý kiến thảo luận bổ ích.

TOWARDS A MODELING OF A HIGH PURITY GERMANIUM DETECTOR GAMMA SPECTROMETER USING MCNP CODE

Ngo Quang Huy⁽¹⁾, Do Quang Binh⁽¹⁾, Vo Xuan An⁽²⁾

(1) Center for Nuclear Techniques Ho Chi Minh City

(2) Ho Chi Minh City University of Industry

ABSTRACT: *The MCNP code was used for simulation of the GC1518 HPGe gamma spectrometer at the Center for Nuclear Techniques Ho Chi Minh City. The input data of geometrical dimensions and material compositions of gamma spectrometer were set up based on practical measurement and data supplied by the manufacturer. These input data were checked by comparison of calculated and experimental gamma spectra of ^{137}Cs and ^{60}Co reference sources. The agreement between calculation and experiment results was obtained for two source portions inside the lead shield. This shows that the input data were accurate and acceptable for the use of the MCNP code in other calculations.*

TÀI LIỆU THAM KHẢO

1. M. H. Kalos and P. A. Whitlick. *Monte Carlo Methods*. John Wiley and Sons, USA, 1986.
2. N. Metropolis and S. Ulam. *The Monte Carlo Method*. J. Amer. Stat. Assoc., 1949.
3. J. Spamer and E. M. Gelbard. *Monte Carlo Principles and Neutron Transport*. Addison-Wesley, Massachusetts, 1969.
4. L. L. Carter and E. D. Cashell. *Particle Transport Simulation with the Monte Carlo Methods*. ERDA Critical Review Series. TID-26607, 1975.
5. I.O.B. Ewa, D. Bodizs, Sz. Czifrus, Zs. Molnar. *Monte Carlo determination of full energy peak efficiency for a HPGe detector*. Applied Radiation and Isotopes, 55, 103-108, 2001.
6. J.C. Hardy, V.E. Jacob, M. Sanchez-Vega, R.T. Effinger, P. Lipnik, V.E. Mayes, D.K. Willis, R.G. Helmer. *Precise efficiency calibration of an HPGe detector: source measurements and Monte Carlo calculations with sub-percent precision*. Applied Radiation and Isotopes, 56, 65-69, 2002.
7. M. Jurado Vargas, A. Fernandez Timon, N. Cornejo Diaz and D. Perez Sanchez. *Monte Carlo simulation of the self-absorption corrections for natural samples in gamma ray spectrometry*. Applied Radiation and Isotopes, 57, 202-898, 2002.
8. M. Garcia-Talavera, H. Neder, M.J. Daza, B. Quintana. *Towards a proper modeling of detector and source characteristics in Monte Carlo simulations*. Applied Radiation and Isotopes, 52, 777-783, 2000.
9. J.F. Briesmeister. *MCNP-A general Monte-Carlo N-Particle Transport Code, Version 4C*. Los Alamos, LA-13709-M, 2000.
10. J. S. Hendricks, K.J. Adams, T.E. Booth, J.F. Briesmeister, L.L. Carter, L.J. Cox, J.A. Favorite, R.A. Forster, G.W. McKinney, R.E. Prael. *Present and future capacities of MCNP*. Applied Radiation and Isotopes, 53, 857-861, 2000.
11. R.G. Helmer, N. Nica, J.C. Hardy, V.E. Iacob. *Precise efficiency calibration of an HPGe detector up to 3.5 MeV with measurements and Monte-Carlo calculations*. Applied Radiation and Isotopes, 60, 173-177, 2004.

12. M. Jurado Vargas, N. Cornejo Diaz and D. Perez Sanchez. *Efficiency transfer in the calibration of a coaxial p-type HPGe detector using the Monte Carlo method*. Applied Radiation and Isotopes, 58, 707-712, 2003.
13. S. Hurtado, M. Garcia-Leon, R. Garcia-Tenorio. *Monte Carlo simulation of the response of a germanium detector for low-level spectrometry measurements using GEANT4*. Applied Radiation and Isotopes, 61, 139-143, 2004.
14. O. Sima and D. Arnold. *Transfer of the efficiency calibration of Germanium gamma-ray detectors using the GESPECOR software*. Applied Radiation and Isotopes, 56, 71-75, 2002.
15. Glenn F. Knoll. *Radiation detection and measurement*. John Wiley & Sons, Second edition, 1989.