Open Access Full Text Article

Xác định hệ số trùng phùng tổng bằng phương pháp Monte Carlo sử dụng chương trình MCNP–CP và PENNUC

Lê Hoàng Minh^{1,2,*}, Phan Nguyễn Hoàng Long^{1,2}, Trần Thiện Thanh^{1,2}, Châu Văn Tạo^{1,2}



Use your smartphone to scan this QR code and download this article

TÓM TẮT

Trong phép phân tích phổ gamma, thông tin định lượng về thành phần các nguyên tố có trong mẫu đo thực nghiệm có thể thu được từ đường chuẩn hiệu suất, hoạt độ phóng xạ và cường độ phát gamma của đồng vị phóng xạ. Hiệu suất ghi nhận của đầu dò thường bị ảnh hưởng bởi hiệu ứng trùng phùng tổng. Hiệu chỉnh hệ số trùng phùng tổng có thể được thực hiện thông qua các phần mềm dựa trên phương pháp chuyển hiệu suất hoặc mô phỏng Monte Carlo. Trong nghiên cứu này, hai chương trình mô phỏng dựa trên phương pháp Monte Carlo gồm MCNP–CP và PENNUC, được sử dụng để tính toán hệ số trùng phùng tổng đối với bốn đồng vị 22 Na, 60 Co, 133 Ba và 134 Cs. Cấu hình tính toán được sử dụng từ bài toán chuẩn với hai loại đầu dò gồm loại n và loại p, cùng với các cấu hình nguồn là nguồn dạng điểm, mẫu nước, mẫu đất và mẫu giấy lọc đã được sử dụng. Mục đích của nghiên cứu là kiểm tra đáp ứng phổ và so sánh các giá trị của hệ số trùng phùng tổng được tính toán từ hai chương trình có sự phù hợp tốt với độ sai khác dưới 2%. Các giá trị về hệ số trùng phùng tổng CSF được tính toán từ hai chương trình mô phỏng qua phép kiểm T-test với hệ số tương quan là r_{xy} = 0,995.

Từ khoá: hệ số trùng phùng tổng, mô phỏng Monte Carlo, MCNP–CP, PENNUC

¹Bộ môn Vật lý Hạt nhân, Khoa Vật lý-Vật lý kỹ thuật, Trường Đại học Khoa học Tự Nhiên, TP. Hồ Chí Minh, Việt Nam

²Đại học Quốc gia TP. Hồ Chí Minh, Việt Nam

Liên hệ

Lê Hoàng Minh, Bộ môn Vật lý Hạt nhân, Khoa Vật lý-Vật lý kỹ thuật, Trường Đại học Khoa học Tự Nhiên, TP. Hồ Chí Minh, Việt Nam

Đại học Quốc gia TP. Hồ Chí Minh, Việt Nam

Email: hoangminh@hcmus.edu.vn

Lịch sử

• Ngày nhận: 25-5-2021

• Ngày chấp nhận: 08-3-2022

• Ngày đăng: 19-5-2022

DOI: 10.32508/stdjns.v6i2.1078

Check for updates

Bản quyền

© ĐHQG Tp.HCM. Đây là bài báo công bố mở được phát hành theo các điều khoản của the Creative Commons Attribution 4.0 International license.



MỞ ĐẦU

Phép đo phổ gamma sử dụng đầu dò bán dẫn germaniumum siêu tinh khiết (HPGe) là một phương pháp được sử dụng rộng rãi, đóng vai trò quan trọng trong các phép phân tích nguyên tố, kiểm tra không phá hủy, xác định hoạt độ phóng xạ... Đối với các phép đo mẫu có hoạt độ thấp, nguồn phóng xạ được đặt gần với đầu dò HPGe nhằm tăng hiệu suất ghi nhận. Tuy nhiên, trong trường hợp này, độ chính xác của phép đo bị ảnh hưởng bởi hiệu ứng trùng phùng tổng. Hiệu ứng trùng phùng tổng xảy ra khi hai hoặc nhiều tia gamma phát ra từ nguồn phóng xạ trong cùng một khoảng thời gian nhỏ hơn thời gian phân giải của đầu dò. Hiệu ứng trùng phùng tổng gây ra sự xuất hiện của đỉnh năng lượng với năng lượng bằng tổng các năng lượng thành phần trong phổ ghi nhận^{1,2}.

Trường hợp hai gamma thành phần để lại toàn bộ năng lượng trong đầu dò, số đếm của đỉnh năng lượng tổng sẽ tăng lên, hiệu ứng này được gọi là trùng phùng cộng thêm (summing-in). Và ngược lại, nếu một trong hai hoặc cả hai gamma thành phần chỉ để lại một phần năng lượng, số đếm của hai đỉnh thành phần bị giảm xuống, trường hợp này gọi là trùng phùng mất đi (summing-out). Hiệu ứng trùng phùng tổng phụ thuộc vào các yếu tố như khoảng cách và góc khối từ nguồn phát và đầu dò, sơ đồ phân rã của đồng vị phóng xạ³. Như vậy, để xác định đúng hiệu suất đỉnh đối với các mức năng lượng khác nhau, cần phải hiệu chỉnh hệ số trùng phùng tổng (Coincidence Summing Factor). Việc hiệu chỉnh có thể được thực hiện thông qua các phần mềm tính toán, dựa trên phương pháp chuyển hiệu suất như: EFFTRAN⁴, ETNA⁵. Phương pháp chuyển hiệu suất được đưa ra lần đầu bởi Moens và cộng sự⁶ và được bổ sung bởi Vidmar⁴.

Ngoài ra, việc hiệu chỉnh còn được thực hiện thông qua các chương trình mô phỏng dựa trên phương pháp Monte Carlo đã được phát triển như: GESPECOR⁷, EGS4⁸, GEANT4⁹, MCNP¹⁰ và PENELOPE¹¹. 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, 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.

Nhược điểm của phương pháp chuyển hiệu suất khi so với phương pháp mô phỏng Monte Carlo là phương pháp đã không xét các sự kiện tán xạ từ vật liệu xung quanh và giả thiết về tỉ số đỉnh/tổng không hoàn toàn

Trích dẫn bài báo này: Minh L H, Long P N H, Thanh T T, Tạo C V. Xác định hệ số trùng phùng tổng bằng phương pháp Monte Carlo sử dụng chương trình MCNP–CP và PENNUC. Sci. Tech. Dev. J. - Nat. Sci.; 6(2):1970-1978.

chính xác. Nếu GEANT4 đòi hỏi người sử dụng phải chuẩn bị các thành phẩn phức tạp như Detector Construction, Physics List, Primary Generator Action thì chương trình GESPECOR chỉ áp dụng chủ yếu cho đầu dò HPGe. Chương trình MCNP (với gói mở rộng MCNP–CP) có những ưu điểm như việc chuẩn bị tệp đầu vào cũng như cách thức thực hành đơn giản, được nhiều người sử dụng, cho thấy mức độ tin cậy cao, còn chương trình PENELOPE (với gói mở rộng PEN-NUC) sử dụng dữ liệu về các đồng vị phóng xạ từ ¹², với các gói lệnh của chương trình được thường xuyên cập nhật để nâng cao tính chính xác trong việc mô phỏng.

Trong nghiên cứu trước, Lépy và cộng sự¹³ đã sử dung năm chương trình EGS, GESPECOR, GEANT4, MCNP và PENELOPE nhằm mô phỏng hiệu suất đỉnh và hiệu suất tổng của các cấu hình giả định. Ngoài ra, các tệp đầu vào của các chương trình đã được sử dụng để làm chuẩn, hướng dẫn cho người sử dụng mới. Mục tiêu của nghiên cứu này là xác định hệ số hiệu chỉnh trùng phùng tổng của các đồng vi phóng xa bằng chương trình mô phỏng PENNUC, với các cấu hình nguồn và đầu dò khác nhau đã được sử dụng trong công bố nêu trên, sau đó các kết quả từ chương trình PENNUC được so sánh với kết quả mô phỏng bởi chương trình MCNP-CP (được xem như chương trình chuẩn). Nội dung của nghiên cứu là kiểm tra đáp ứng phổ mô phỏng và và so sánh giá trị hệ số hiệu chỉnh trùng phùng tổng giữa hai chương trình mô phỏng, từ đó kết luận về tính phù hợp của hai chương trình mô phỏng trong phạm vi khảo sát thông qua phép kiểm định thống kê T-test.

PHƯƠNG PHÁP NGHIÊN CỨU

Mô tả cấu hình mô phỏng

Trong nghiên cứu này, các đồng vị phát bức xạ gamma được sử dụng trong mô phỏng lần lượt là ²²Na, ⁶⁰Co, ¹³³Ba và ¹³⁴Cs. Các đồng vị này thường được sử dụng trong các nghiên cứu trước về hệ số trùng phùng tổng, với thông tin về năng lượng của mỗi đồng vị được lấy từ thư viện dữ liệu Laraweb ¹² và trình bày trong Bảng 1. Các giá trị hiệu chỉnh CSF thường được ứng dụng trong phép phân tích các mẫu môi trường như mẫu nước, mẫu đất và mẫu đầu lọc. Do đó, nghiên cứu tập trung vào ba nguồn thể tích dạng trụ chứa các mẫu trên cùng với một nguồn điểm. Tất cả các nguồn thể tích đều là nguồn trần, không có lớp bao bọc xung quanh. Thông tin của các nguồn phát được được trình bày trong Bảng 2¹³. Khoảng cách của mỗi nguồn phát đến cửa số của đầu dò là 1 mm.

Ở Bảng 1, sự không đồng nhất về xác suất phát ở một số mức năng lượng của các đồng vị giữa hai chương trình là do ở chương trình MCNP-CP các xác suất phát được đưa vào bên trong chương trình, người sử dụng chỉ khai báo đồng vị sử dụng, còn đối với PEN-NUC các giá trị xác suất phát được đưa bởi tệp tin riêng trong đầu vào, các giá trị này được cập nhật trên hệ thống Laraweb¹².

Hai loại đầu dò HPGe là đồng trục điện cực thuận (loại p - đầu dò A) và đồng trục điện cực ngược (loại n - đầu dò B), được sử dụng để ghi nhận tín hiệu phát ra từ nguồn. Tinh thể germaniumum của đầu dò có dạng hình trụ, kích thước 60 x 60 mm, ở giữa có một hốc hình trụ đường kính 10 mm x 40 mm chiều sâu, hiệu suất tương đối (danh định) xấp xỉ 20%¹³. Bên ngoài tinh thể germanium được bao bọc bởi một lớp nhôm dày 1 mm, với chiều cao và đường kính là 80 x 80 mm. Khoảng cách từ tinh thể đến cửa sổ beri là 5 mm.

Đặc điểm khác nhau giữa hai đầu dò là ở đầu dò A có lớp chết dày 1 mm ở bề mặt và hai bên của tinh thể germanium. Bên ngoài đầu dò và nguồn phát là một lớp chỉ dày 50 mm, với chiều cao và đường kính là 400 x 400 mm. Hình 1 và Hình 2 mô tả cấu trúc hình học của đầu dò A với nguồn là mẫu đất thông qua giao diện của MCNP và Gview2D của PENNUC.





Các đồng vị phóng xạ được mô phỏng sử dụng hai hình học nguồn gồm nguồn điểm và ba nguồn trụ, trong đó thành phần mẫu là nước, đất và giấy lọc, sử dụng đầu dò HPGe loại đồng trụ điện cực thuận (A) và đồng trục điện cực ngược (B), tổng cộng 8 cấu hình. Mỗi cấu hình được mô phỏng với 10 triệu sự kiện, năng lượng cắt ngưỡng là 1 keV đối với các hạt photon và electron cho cả hai chương trình MCNP–CP và PENNUC. Phân bố năng lượng được quan sát từ 0 -3000 keV, chia đều thành 1000 kênh.

| Đồng vị | Năng lượng (keV) | Xác suất phát MCNP-CP (%) | Xác suất phát PENNUC (%) |
|-------------------|------------------|---------------------------|--------------------------|
| ²² Na | 511,0 | 181 | 180,7 |
| | 1274,0 | 99,944 | 99,94 |
| ⁶⁰ Co | 1173,0 | 99,85 | 99,85 |
| | 1332,0 | 99,9826 | 99,9826 |
| ¹³³ Ba | 30,9 | 70,38 | 62,4 |
| | 35,0 | 12,61 | 18,24 |
| | 53,1 | 2,199 | 2,14 |
| | 79,6 | 2,62 | 2,63 |
| | 81,0 | 34,06 | 33,31 |
| | 160,6 | 0,645 | 0,638 |
| | 223,2 | 0,45 | 0,45 |
| | 276,4 | 7,164 | 7,13 |
| | 302,8 | 18,33 | 18,31 |
| | 356,0 | 62,05 | 62,05 |
| | 383,8 | 8,94 | 8,94 |
| ¹³⁴ Cs | 32,1 | 0,4451 | 0,438 |
| | 36,6 | 0,08051 | 0,1289 |
| | 475,3 | 1,486 | 1,479 |
| | 563,2 | 8,35 | 8,342 |
| | 569,3 | 15,38 | 15,368 |
| | 604,7 | 97,62 | 97,63 |
| | 795,8 | 85,53 | 85,47 |
| | 801,9 | 8,69 | 8,694 |
| | 1038,6 | 0,988 | 0,9909 |
| | 1167,9 | 1,789 | 1,791 |
| | 1365,2 | 3,014 | 3,019 |

Bảng 1: Thông tin đồng vị phóng xạ

Bảng 2: Thông tin cấu hình các loại nguồn phát

| Loại nguồn | Kí hiệu | Đường kính (mm) | Bề dày (mm) | Vật liệu | Mật độ (g/cm ³) |
|-------------|---------|-----------------|-------------|--------------------|-----------------------------|
| Nguồn điểm | Р | - | - | - | - |
| Mẫu nước | W | 90 | 40 | H ₂ O | 1,0 |
| Mẫu đất | S | 60 | 20 | SiO ₂ | 1,4 |
| Mẫu đầu lọc | F | 80 | 3 | $C_{6}H_{10}O_{5}$ | 0,3 |

Giới thiệu các chương trình mô phỏng Chương trình MCNP–CP

MCNP-CP là một gói chương trình mở rộng cho MCNP4c, được phát triển bởi Andrey Berlizov¹⁴. Phiên bản mới nhất của chương trình là MCNP-CP 3.2. Chương trình hiện được được sử dung để mô phỏng các quá trình tương tác có xét đến các đặc trưng của chuỗi phân rã của từng đồng vị như sự trùng phùng ngẫu nhiên, trùng phùng tổng. Người sử dụng có thể kích hoạt hoặc loại bỏ hiệu ứng trùng phùng tổng thông qua thẻ CPS, khai báo đồng vị phóng xạ thông qua thẻ ZAM. Dữ liệu đầu ra của MCNP-CP mang các thông tin của đồng vị sử dụng trong mô phỏng, các hiệu suất ghi nhận $\mathcal{E}(E)$ tương ứng với kênh năng lượng và sai số tương đối của hiệu suất u_{ε} (E). Trong đó, u_{ε} (E) được tính thông qua tỉ số giữa số sự kiện ghi nhận ứng với mỗi kênh năng lượng N(E) và tổng số sự kiện mô phỏng Nsim:

$$\varepsilon(E) = \frac{N(E)}{N_{sim}} \tag{1}$$

Chương trình PENNUC

Chương trình PENNUC là gói chương trình con mở rộng, liên kết trực tiếp với các chương trình con của PENELOPE 2014. Chương trình PENNUC có thể mô phỏng quá trình phân rã của 219 đồng vị phóng xạ ¹⁵. Thông tin về sơ đồ phân rã của đồng vị được trích từ thư viện NUCLEIDE. Dữ liệu đầu ra của PENNUC bao gồm các tệp con. Mỗi tệp con mang thông tin khác nhau như thông tin của đồng vị sử dụng trong mô phỏng, thông tin các vật liệu được sử dụng trong khai báo đầu vào, các giá trị của hàm mật độ xác suất p(E) tương ứng với kênh năng lượng và sai số tương đối $u_p(E)$. Hiệu suất ghi nhận được xác định thông qua tích số giữa giá trị mật độ xác suất với độ rộng của một kênh năng lượng ΔE^{16} :

$$\boldsymbol{\varepsilon}(E) = p(E) \times \triangle E \tag{2}$$

Tính toán hệ số trùng phùng tổng CSF

Hệ số trùng phùng tổng CSF được xác định thông qua tỉ số của hiệu suất đỉnh năng lượng (FEPE) ứng với trường hợp không hiệu chỉnh trùng phùng "Without – $\varepsilon_{Wo}(E)$ " và có hiệu chỉnh trùng phùng "With – $\varepsilon_W(E)$ "¹⁷:

$$CSF = \frac{\varepsilon_{wo}(E)}{\varepsilon_{w}(E)}$$
(3)

(4)

Với sai số tương đối của hệ số CSF được tính như công thức sau:

$$u_{CSF} = \sqrt{\left(u_{\varepsilon_{wo}}\right)^2 + \left(u_{\varepsilon_w}\right)^2}$$

Độ sai khác của các giá trị CSF giữa hai chương trình được tính toán theo công thức:

$$RD = \frac{CSF_{MCNP-CP} - CSF_{PENNUC}}{CSF_{PENNUC}} \times 100\%$$
(5)

Các yếu tố có thể gây ảnh hưởng lên kết quả mô phỏng như: xác suất phát của các mức năng lượng của các đồng vị, số sự kiện mô phỏng ban đầu, số lượng kênh phân chia tương ứng với vùng năng lượng ¹³. Ngoài ra, sai số thống kê của việc mô phỏng cũng gây ảnh hưởng đến giá trị CSF.

KẾT QUẢ VÀ THẢO LUẬN

Hình 3 biểu diễn phổ phân bố số đếm theo năng lượng của ⁶⁰Co sử dụng đầu dò loại A với hình học dạng trụ với thành phần mẫu là đất. Kết quả mô phỏng cho thấy sự xuất hiện của đỉnh 2505 keV (1173 keV + 1332 keV) khi có hiệu chỉnh trùng phùng.



Hình 3: Phổ mô phỏng của nguồn ⁶⁰Co sử dụng đầu dò loại A cho hình học mẫu đất

Dữ liệu từ các tệp đầu ra của các chương trình mô phỏng được xử lý trên chương trình Microsoft Excel để thuận tiện cho các tính toán. Hệ số trùng phùng tổng và sai số tương đối của các cấu hình đầu dò và nguồn được tính toán theo công thức (3) và (4), cho chương trình mô phỏng MCNP–CP (Bảng 3) và PEN-NUC (Bảng 4).

Từ các giá trị trong Bảng 2 và Bảng 3, độ sai khác của các giá trị CSF giữa hai chương trình được tính toán theo công thức (5) và được trình bày trong Bảng 5:

Các kết quả từ Bảng 5 cho thấy rằng đối với các mức năng lượng lớn hơn 250 keV có xác suất phát lớn 7%, các giá trị CSF của hai chương trình có độ sai khác dưới 1% trong hầu hết các cấu hình, ngoại trừ cấu hình nguồn điểm của ²²Na tại mức năng lượng 1274 keV (độ sai khác là 2,7% và 3,5% cho đầu dò A và B) và cấu hình nguồn điểm của ¹³³Ba tại mức năng lượng 53,1 keV (độ sai khác là 6,1% và 8,7% cho đầu dò A

Tạp chí Phát triển Khoa học và Công nghệ – Khoa học Tự nhiên, 6(2):1970-1978

| Bang 3: He | e so trung p | nung tong | cua cac uo | ng vị mo pr | long bang i | VICINP-CP | | | |
|-------------------|------------------------|-----------|------------|-------------|-------------|-----------|-------|-------|-------|
| Đồng vị | Năng lượng (keV) | АР | AW | AS | AF | BP | BW | BS | BF |
| ²² Na | 511,0 | 1,219 | 1,081 | 1,120 | 1,132 | 1,254 | 1,092 | 1,133 | 1,153 |
| | 1274,0 | 1,176 | 1,186 | 1,310 | 1,294 | 1,202 | 1,227 | 1,355 | 1,354 |
| ⁶⁰ Co | 1173,0 | 1,219 | 1,085 | 1,126 | 1,136 | 1,252 | 1,086 | 1,129 | 1,150 |
| | 1332,0 | 1,230 | 1,087 | 1,126 | 1,145 | 1,259 | 1,092 | 1,140 | 1,154 |
| ¹³³ Ba | 30,9 | 1,066 | 1,060 | 1,027 | 1,053 | 1,832 | 1,279 | 1,413 | 1,468 |
| | 35,0 | 1,094 | 1,014 | 1,078 | 1,059 | 1,812 | 1,266 | 1,378 | 1,450 |
| | 53,1 | 1,195 | 1,045 | 1,086 | 1,085 | 1,710 | 1,204 | 1,309 | 1,393 |
| | 79,6 | 1,162 | 1,053 | 1,108 | 1,109 | 1,356 | 1,130 | 1,190 | 1,231 |
| | 81,0 | 1,309 | 1,121 | 1,173 | 1,193 | 1,774 | 1,249 | 1,310 | 1,441 |
| | 160,6 | 1,052 | 1,012 | 1,024 | 1,033 | 1,076 | 1,062 | 1,058 | 1,053 |
| | 223,2 | 1,041 | 1,004 | 1,017 | 1,028 | 1,122 | 1,017 | 1,025 | 1,055 |
| | 276,4 | 1,131 | 1,062 | 1,073 | 1,080 | 2,016 | 1,273 | 1,312 | 1,545 |
| | 302,8 | 1,067 | 1,030 | 1,038 | 1,039 | 1,833 | 1,222 | 1,250 | 1,447 |
| | 356,0 | 1,051 | 1,022 | 1,030 | 1,033 | 1,573 | 1,173 | 1,186 | 1,326 |
| | 383,8 | 0,873 | 0,963 | 0,932 | 0,920 | 1,033 | 0,939 | 0,944 | 1,001 |
| ¹³⁴ Cs | 32,1 | 1,344 | 1,114 | 1,170 | 1,215 | 1,419 | 1,138 | 1,227 | 1,258 |
| | 36,6 | 1,372 | 1,126 | 1,220 | 1,214 | 1,410 | 1,148 | 1,217 | 1,244 |
| | 475,3 | 1,355 | 1,112 | 1,199 | 1,212 | 1,418 | 1,154 | 1,224 | 1,260 |
| | 563,2 | 1,519 | 1,169 | 1,255 | 1,298 | 1,609 | 1,195 | 1,294 | 1,342 |
| | 569,3 | 1,565 | 1,201 | 1,285 | 1,324 | 1,649 | 1,201 | 1,325 | 1,356 |
| | 604,7 | 1,327 | 1,116 | 1,176 | 1,191 | 1,370 | 1,138 | 1,202 | 1,220 |
| | 795,8 | 1,328 | 1,124 | 1,186 | 1,196 | 1,381 | 1,138 | 1,205 | 1,225 |
| | 801,9 | 1,444 | 1,156 | 1,224 | 1,268 | 1,513 | 1,164 | 1,257 | 1,306 |
| | 1038,6 | 0,795 | 0,883 | 0,854 | 0,816 | 0,798 | 0,915 | 0,834 | 0,812 |
| | 1167,9 | 0,682 | 0,897 | 0,821 | 0,767 | 0,646 | 0,886 | 0,806 | 0,768 |
| | 1365,2 | 0,677 | 0,864 | 0,814 | 0,748 | 0,623 | 0,813 | 0,774 | 0,724 |

Bảng 3: Hê số trùng phùng tổng của các đồng vi mô phỏng bằng MCNP-CP

(Sai số tương đối của các giá trị CSF thấp hơn 1%)

và B). Nguyên nhân chính gây ra sự khác biệt đối với các trường hợp trên là do sai khác giữa hiệu suất trong trường hợp có hiệu chỉnh $\varepsilon_{Wo}(E)$ và không hiệu chỉnh trùng phùng $\varepsilon_{Wo}(E)$, dẫn đến sự sai khác của hệ số CSF giữa hai chương trình. Đối với các trường hợp còn lại, sự sai khác gây ra bởi nguyên nhân xác suất phát của mức năng lượng thấp hoặc có sự chêch lệch giá trị xác suất phát giữa hai chương trình.

Sử dụng phép kiểm định T-test nhằm đánh giá sự tương quan tuyến tính giữa hai giá trị hệ số trùng

phùng bằng PENNUC và MCNP-CP:

$$t = \frac{r_{XY}}{\sqrt{\left(1 - r_{XY}^2\right) / (n - 2)}}$$
(6)

Trong đó, hệ số tương quan Pearson's r_{XY} được tính bởi hàm CORREL(Mảng dữ liệu X, Mảng dữ liệu Y) trong chương trình Microsoft Excel, với mảng dữ liệu X và Y lần lượt là dữ liệu CSF của PENNUC và MCNP-CP, giá trị thu được của hệ số tương quan là r_{xy} = 0,995. Số cặp dữ liệu n = 208, từ công thức

Tạp chí Phát triển Khoa học và Công nghệ – Khoa học Tự nhiên, 6(2):1970-1978

| Dang 4. ne | so trung phi | ing tong t | cua cac uon | à vi mo bu | ong bang P | LININOC | | | |
|-------------------|------------------------|------------|-------------|------------|------------|---------|-------|-------|-------|
| Đồng vị | Năng lượng (keV) | AP | AW | AS | AF | ВР | BW | BS | BF |
| ²² Na | 511,0 | 1,224 | 1,085 | 1,119 | 1,140 | 1,250 | 1,099 | 1,134 | 1,157 |
| | 1274,0 | 1,208 | 1,200 | 1,308 | 1,311 | 1,245 | 1,220 | 1,346 | 1,356 |
| ⁶⁰ Co | 1173,0 | 1,213 | 1,074 | 1,116 | 1,131 | 1,246 | 1,084 | 1,130 | 1,153 |
| | 1332,0 | 1,226 | 1,082 | 1,120 | 1,131 | 1,252 | 1,095 | 1,131 | 1,152 |
| ¹³³ Ba | 30,9 | 1,071 | 1,048 | 1,059 | 1,088 | 1,823 | 1,279 | 1,411 | 1,468 |
| | 35,0 | 1,095 | 1,018 | 1,043 | 1,041 | 1,795 | 1,275 | 1,374 | 1,455 |
| | 53,1 | 1,126 | 1,043 | 1,104 | 1,126 | 1,573 | 1,178 | 1,276 | 1,357 |
| | 79,6 | 1,177 | 1,084 | 1,120 | 1,095 | 1,352 | 1,139 | 1,183 | 1,206 |
| | 81,0 | 1,314 | 1,131 | 1,180 | 1,193 | 1,719 | 1,238 | 1,299 | 1,411 |
| | 160,6 | 1,071 | 1,006 | 1,025 | 1,029 | 1,042 | 1,031 | 1,044 | 1,012 |
| | 223,2 | 1,020 | 1,001 | 1,003 | 1,000 | 1,114 | 0,991 | 0,993 | 1,034 |
| | 276,4 | 1,127 | 1,047 | 1,081 | 1,068 | 1,972 | 1,273 | 1,308 | 1,517 |
| | 302,8 | 1,067 | 1,027 | 1,030 | 1,041 | 1,795 | 1,219 | 1,237 | 1,437 |
| | 356,0 | 1,051 | 1,019 | 1,028 | 1,034 | 1,532 | 1,163 | 1,177 | 1,308 |
| | 383,8 | 0,871 | 0,966 | 0,927 | 0,923 | 0,998 | 0,955 | 0,934 | 0,992 |
| ¹³⁴ Cs | 32,1 | 1,367 | 1,128 | 1,187 | 1,228 | 1,442 | 1,154 | 1,188 | 1,234 |
| | 36,6 | 1,363 | 1,061 | 1,174 | 1,196 | 1,421 | 1,103 | 1,198 | 1,229 |
| | 475,3 | 1,350 | 1,088 | 1,192 | 1,194 | 1,429 | 1,135 | 1,178 | 1,241 |
| | 563,2 | 1,524 | 1,170 | 1,253 | 1,304 | 1,636 | 1,185 | 1,289 | 1,345 |
| | 569,3 | 1,553 | 1,178 | 1,260 | 1,308 | 1,635 | 1,222 | 1,302 | 1,359 |
| | 604,7 | 1,321 | 1,114 | 1,171 | 1,192 | 1,367 | 1,133 | 1,192 | 1,219 |
| | 795,8 | 1,328 | 1,114 | 1,171 | 1,192 | 1,370 | 1,130 | 1,198 | 1,217 |
| | 801,9 | 1,453 | 1,150 | 1,227 | 1,249 | 1,518 | 1,166 | 1,274 | 1,291 |
| | 1038,6 | 0,824 | 0,928 | 0,895 | 0,849 | 0,824 | 0,926 | 0,869 | 0,835 |
| | 1167,9 | 0,659 | 0,838 | 0,839 | 0,761 | 0,642 | 0,837 | 0,792 | 0,747 |
| | 1365,2 | 0,659 | 0,871 | 0,793 | 0,751 | 0,636 | 0,831 | 0,772 | 0,717 |

Bảng 4: Hệ số trùng phùng tổng của các đồng vị mô phỏng bằng PENNUC

(Sai số tương đối của các giá trị CSF thấp hơn 1%)

(6), ta tính được giá trị t = 142,6. Với mức ý nghĩa α = 5%, ngưỡng quyết định được tính bởi t_{*n*-2, α /2} = TINV(α ,n-2) = 1,97. Như vậy, t > t_{*n*-2, α /2}, hệ số trùng phùng từ PENNUC và MCNP-CP có tương quan tuyến tính với nhau với mức ý nghĩa 5%. Hình 4 mô tả sự tương quan tuyến tính giữa hệ số CSF của PENNUC và MCNP-CP.

KẾT LUẬN

Mục tiêu của nghiên cứu này là tính toán các giá trị của hệ số trùng phùng tổng CSF, dựa trên hai chương trình mô phỏng sử dụng phương pháp Monte Carlo là MCNP–CP và PENNUC. Trong đó hai cấu hình đầu dò HPGe đã được xem xét, cùng với bốn loại nguồn thường được sử dụng. Kết quả cho thấy rằng đáp ứng phổ phân bố số đếm theo năng lượng giữa hai chương trình mô phỏng có sự phù hợp tốt và độ sai khác của các giá trị CSF giữa hai chương trình không quá 2%.

Tạp chí Phát triển Khoa học và Công nghệ – Khoa học Tự nhiên, 6(2):1970-1978

| Dally 5. Độ | Sang 5. Do sai kilac cua CSF giua MCNF-CF va FLINIOC | | | | | | | | | |
|-------------------|--|------|------|------|------|------|------|------|------|--|
| Đồng vị | Năng lượng (keV) | АР | AW | AS | AF | BP | BW | BS | BF | |
| ²² Na | 511,0 | -0,5 | -0,3 | 0,1 | -0,7 | 0,3 | -0,6 | 0,0 | -0,3 | |
| | 1274,0 | -2,7 | -1,1 | 0,2 | -1,3 | -3,5 | 0,6 | 0,7 | -0,2 | |
| ⁶⁰ Co | 1173,0 | 0,4 | 1,0 | 0,9 | 0,4 | 0,5 | 0,2 | -0,1 | -0,3 | |
| | 1332,0 | 0,3 | 0,5 | 0,5 | 1,2 | 0,6 | -0,2 | 0,8 | 0,2 | |
| ¹³³ Ba | 30,9 | -0,5 | 1,2 | -3,1 | -3,2 | 0,4 | 0,0 | 0,1 | 0,0 | |
| | 35,0 | -0,1 | -0,4 | 3,3 | 1,7 | 1,0 | -0,7 | 0,3 | -0,4 | |
| | 53,1 | 6,1 | 0,2 | -1,6 | -3,7 | 8,7 | 2,2 | 2,6 | 2,7 | |
| | 79,6 | -1,2 | -2,8 | -1,1 | 1,3 | 0,3 | -0,8 | 0,5 | 2,0 | |
| | 81,0 | -0,4 | -0,9 | -0,6 | -0,1 | 3,2 | 0,9 | 0,9 | 2,2 | |
| | 160,6 | -1,7 | 0,6 | -0,1 | 0,5 | 3,3 | 3,0 | 1,4 | 4,0 | |
| | 223,2 | 2,0 | 0,3 | 1,4 | 2,8 | 0,7 | 2,6 | 3,2 | 2,1 | |
| | 276,4 | 0,4 | 1,5 | -0,7 | 1,1 | 2,2 | 0,0 | 0,3 | 1,8 | |
| | 302,8 | 0,0 | 0,3 | 0,7 | -0,2 | 2,1 | 0,3 | 1,0 | 0,7 | |
| | 356,0 | 0,0 | 0,3 | 0,2 | -0,1 | 2,7 | 0,9 | 0,8 | 1,4 | |
| | 383,8 | 0,3 | -0,4 | 0,5 | -0,3 | 3,5 | -1,7 | 1,1 | 0,8 | |
| ¹³⁴ Cs | 32,1 | -1,7 | -1,2 | -1,4 | -1,0 | -1,6 | -1,4 | 3,3 | 1,9 | |
| | 36,6 | 0,7 | 6,1 | 3,9 | 1,5 | -0,8 | 4,1 | 1,6 | 1,2 | |
| | 475,3 | 0,4 | 2,2 | 0,6 | 1,5 | -0,8 | 1,7 | 3,8 | 1,5 | |
| | 563,2 | -0,3 | -0,1 | 0,1 | -0,5 | -1,7 | 0,9 | 0,4 | -0,2 | |
| | 569,3 | 0,8 | 1,9 | 2,0 | 1,2 | 0,8 | -1,8 | 1,8 | -0,2 | |
| | 604,7 | 0,5 | 0,2 | 0,4 | -0,1 | 0,3 | 0,4 | 0,8 | 0,1 | |
| | 795,8 | 0,0 | 0,9 | 1,3 | 0,3 | 0,8 | 0,7 | 0,6 | 0,6 | |
| | 801,9 | -0,6 | 0,5 | -0,3 | 1,5 | -0,3 | -0,2 | -1,3 | 1,2 | |
| | 1038,6 | -3,5 | -4,8 | -4,6 | -3,9 | -3,2 | -1,2 | -4,1 | -2,7 | |
| | 1167,9 | 3,5 | 7,0 | -2,1 | 0,8 | 0,6 | 5,9 | 1,7 | 2,9 | |
| | 1365,2 | 2,8 | -0,8 | 2,5 | -0,4 | -2,1 | -2,3 | 0,3 | 0,9 | |

Bảng 5: Độ sai khác của CSF giữa MCNP–CP và PENNUC

Dựa vào kết quả của phép kiểm định T-test, trong phạm vi khảo sát, giá trị CSF mô phỏng từ hai chương trình có tương quan tuyến tính với mức ý nghĩa 5%, từ đó cho thấy hai chương trình MCNP–CP và PEN-NUC có sự phù hợp tốt và có thể được ứng dụng trong tính toán hệ số CSF cho hầu hết các đồng vị bị trùng phùng.

DANH MỤC CÁC TỪ VIẾT TẮT

CSF: Coincidence Summing Factor **EFFTRAN:** Efficiency Transfer **ETNA:** Efficiency Transfer for Nuclide Activity measurements

GESPECOR: Germaniumum Spectra Correction EGS4: Electron Gamma Shower (version 4) GEANT4: Geometry And Tracking (version 4) MCNP: Monte Carlo N-Particle PENELOPE: Penetration and Energy Loss of Positrons and Electrons

XUNG ĐỘT LỢI ÍCH

Nhóm tác giả cam kết không mâu thuẫn quyền lợi và nghĩa vụ của các thành viên.



Hình 4: Đồ thị mô tả tương quan dữ liệu giữa hệ số trùng phùng mô phỏng bằng PENNUC và MCNP–CP

ĐÓNG GÓP CỦA CÁC TÁC GIẢ

Lê Hoàng Minh, Phan Nguyễn Hoàng Long thực hiện mô phỏng và thống kê số liệu.

Trần Thiện Thanh lên ý tưởng nghiên cứu, phân tích số liệu, viết bài báo.

Châu Văn Tạo chỉnh sửa bản thảo bài báo.

LỜI CẢM ƠN

Nghiên cứu được tài trợ bởi Đại học Quốc gia Thành phố Hồ Chí Minh (ĐHQG-HCM) trong khuôn khổ Đề tài mã số VL2021-18-01.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

- Debertin K, Schötzig U. Coincidence summing corrections in Ge(Li)-spectrometry at low source-to-detector distances. Nucl Instruments Methods. 1979;158(C);Available from: https://doi. org/10.1016/S0029-554X(79)94845-6.
- Rizzo S, Tomarchio E. Numerical expressions for the computation of coincidence-summing correction factors in γ-ray spectrometry with HPGe detectors. Vol. 68, Applied Radiation and lsotopes. 2010. p. 555-60;PMID: 19892555. Available from: https://doi.org/10.1016/j.apradiso.2009.10.024.
- Semkow TM, Mehmood G, Parekh PP, Virgil M. Coincidence summing in gamma-ray spectroscopy. J Nuclear Instruments Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors Associated Equipment; 1990. p. 437-44;Available from: https://doi.org/10.1016/0168-9002(90) 90561-J.
- Vidmar T. EFFTRAN A Monte Carlo efficiency transfer code for gamma-ray spectrometry. Nucl Instruments Methods Phys Res Sect A Accel Spectrometers, Detect Assoc

Equip. 2005;550(3);Available from: https://doi.org/10.1016/j. nima.2005.05.055.

- Lépy MC, Ferreux L, Pierre S. Coincidence summing corrections applied to volume sources. Appl Radiat lsot. 2012;70(9);PMID: 22410298. Available from: https://doi.org/10.1016/j.apradiso.2012.02.057.
- Moens L, De Donder J, Xi-lei L, De Corte F, De Wispelaere A, Simonits A, et al. Calculation of the absolute peak efficiency of gamma-ray detectors for different counting geometries. Nucl Instruments Methods. 1981;187(2-3);Available from: https:// doi.org/10.1016/0029-554X(81)90374-8.
- Arnold D, Sima O. Calculation of coincidence summing corrections for X-ray peaks and for sum peaks with X-ray contributions. Appl Radiat Isot. 2006;64(10-11);PMID: 16678431. Available from: https://doi.org/10.1016/j.apradiso.2006.02.051.
- Celik N, Altin D, Cevik U. Building-up a code for the purpose of TRUE coincidence summing correction in gamma-ray spectrometry with EGS4. Radiat Phys Chem. 2015;115;Available from: https://doi.org/10.1016/j.radphyschem.2015.07.002.
- Giubrone G, Ortiz J, Gallardo S, Martorell S, Bas MC. Calculation of Coincidence Summing Correction Factors for an HPGe detector using GEANT4. J Environ Radioact. 2016;158-159;PMID: 27085040. Available from: https://doi.org/10.1016/j.jenvrad. 2016.04.008.
- Werner CJ, Armstrong J, Brown FB, Bull JS, Casswell L, Cox LJ, et al. MCNP User's Manual Code Version 6.2. Los Alamos Natl Lab. 2017;.
- García-Toraño E, Peyres V, Bé MM, Dulieu C, Lépy MC, Salvat F. Simulation of decay processes and radiation transport times in radioactivity measurements. Nucl Instruments Methods Phys Res Sect B Beam Interact with Mater Atoms. 2017;396;Available from: https://doi.org/10.1016/j.nimb.2017.02.002.
- Laraweb [Internet]. [cited 2021 May 16]; Available from: http: //www.nucleide.org/Laraweb/index.php.
- Lépy MC, Thiam C, Anagnostakis M, Galea R, Gurau D, Hurtado S, et al. A benchmark for Monte Carlo simulation in gamma-ray spectrometry. Vol. 154, Applied Radiation and Isotopes. 2019;PMID: 31476556. Available from: https://doi.org/ 10.1016/j.apradiso.2019.108850.
- Berlizov AN. MCNP-CP: A correlated particle radiation source extension of a general purpose Monte Carlo N-particle transport code. In: ACS Symposium Series. 2007;Available from: https://doi.org/10.1021/bk-2007-0945.ch013.
- García-Toraño E, Peyres V, Salvat F. PENNUC: Monte Carlo simulation of the decay of radionuclides. Comput Phys Commun. 2019;245;Available from: https://doi.org/10.1016/j.cpc. 2019.08.002.
- Thanh TT, Trang HTK, Chuong HD, Nguyen VH, Tran LB, Tam HD, et al. A prototype of radioactive waste drum monitor by non-destructive assays using gamma spectrometry. Appl Radiat Isot. 2016;109;PMID: 26717796. Available from: https: //doi.org/10.1016/j.apradiso.2015.11.037.
- Thanh TT, Vuong LQ, Ho PL, Chuong HD, Nguyen VH, Tao C Van. Validation of an advanced analytical procedure applied to the measurement of environmental radioactivity. J Environ Radioact. 2018;184-185;PMID: 29407639. Available from: https://doi.org/10.1016/j.jenvrad.2017.12.020.

Open Access Full Text Article

Determination of the coincidence summing factor by Monte Carlo method using MCNP-CP and PENNUC codes

Le Hoang Minh^{1,2,*}, Phan Nguyen Hoang Long^{1,2}, Tran Thien Thanh^{1,2}, Chau Van Tao^{1,2}



Use your smartphone to scan this QR code and download this article

ABSTRACT

In gamma spectrometry, the quantitative information about the composition of elements present in the experimental samples can be obtained from the efficiency calibration curve, the radioactivity, and the gamma emission intensity of the radioactive. The efficiency of the detector is often affected by the coincidence summing effect. The correction of the coincidence summing factors can be done through the software based on the efficiency transfer method or Monte Carlo simulation. In this study, two Monte Carlo simulation software, MCNP–CP and PENNUC, were applied to calculate the coincidence summing factors of four radioactive ²²Na, ⁶⁰Co, ¹³³Ba, and ¹³⁴Cs by the simulation method. The calculated models from the benchmark with two types of detectors of n-type and p-type, using different source geometries such as point source, water, soil, and filter samples, were used. This study aimed to validate the spectral response as well as to compare the coincidence summing factors between MCNP–CP and PENNUC. The results showed that the coincidence summing factors calculated by two simulation software gave a good agreement with an average relative deviation of less than 2%. The coincidence summing factors calculated by two simulation programs were verified by the statistical T-test with a linear correlation value of r_{xy} = 0.995.

Key words: coincidence summing factor, Monte Carlo simulation, MCNP-CP, PENNUC

¹Department of Nuclear Physics, Faculty of Physics and Engineering Physics, University of Science, Ho Chi Minh City, Vietnam

²Vietnam National University Ho Chi Minh City, Vietnam

Correspondence

Le Hoang Minh, Department of Nuclear Physics, Faculty of Physics and Engineering Physics, University of Science, Ho Chi Minh City, Vietnam

Vietnam National University Ho Chi Minh City, Vietnam

Email: hoangminh@hcmus.edu.vn

History

- Received: 25-5-2021
- Accepted: 08-3-2022
- Published: 19-5-2022

DOI: 10.32508/stdjns.v6i2.1078



Copyright

© VNUHCM Press. This is an openaccess article distributed under the terms of the Creative Commons Attribution 4.0 International license.



Cite this article : Minh L H, Long P N H, Thanh T T, Tao C V. **Determination of the coincidence summing factor by Monte Carlo method using MCNP–CP and PENNUC codes**. *Sci. Tech. Dev. J. - Nat. Sci.*; 6(2):1970-1978.