

ĐẠI HỌC QUỐC GIA TP. HCM  
TRƯỜNG ĐẠI HỌC KHOA HỌC TỰ NHIÊN

HUỲNH TRÚC PHƯƠNG

CÁC PHƯƠNG PHÁP PHÂN TÍCH  
HẠT NHÂN NGUYÊN TỬ

## MỤC LỤC

Trang

### Chương 1: Các nguyên tắc cơ bản của phép phân tích huỳnh quang tia X

1.1. Tổng quan về phương pháp phân tích huỳnh quang tia X.....	1
1.2. Tương tác của tia X với vật chất.....	2
1.2.1. Hệ số suy giảm.....	2
1.2.2. Quá trình tán xạ .....	5
1.2.3. Quá trình hấp thụ .....	8
1.3. Cường độ huỳnh quang thứ cấp.....	12
1.3.1. Biểu thức tổng quát.....	12
1.3.2. Trường hợp mẫu dày vô hạn.....	16
1.3.3. Trường hợp mẫu mỏng .....	16
Bài tập chương 1 .....	17

### Chương 2: Các phương pháp phân tích huỳnh quang tia X

2.1. Phương pháp phân tích định tính.....	19
2.1.1. Các vạch K.....	19
2.1.2. Các vạch L .....	20
2.1.3. Các vạch M.....	21
2.2. Các phương pháp phân tích định lượng.....	21
2.2.1. Phương pháp chuẩn ngoại tuyến tính .....	21
2.2.2. Phương pháp phân tích với mẫu mỏng .....	23
2.2.3. Phương pháp chuẩn nội .....	25
2.2.4. Phương pháp chuẩn độ nhạy .....	25
2.2.5. Phương pháp hàm kích thích .....	26
2.2.6. Phương pháp tỉ số cường độ đỉnh .....	27
Bài tập chương 2 .....	28

### Chương 3: Hiệu ứng matrix và các phương pháp hiệu chỉnh

3.1. Các hiệu ứng hấp thụ và tăng cường .....	31
3.1.1. Hiệu ứng hấp thụ sơ cấp .....	31
3.1.2. Hiệu ứng hấp thụ thứ cấp.....	32
3.1.3. Hiệu ứng tăng cường .....	32
3.2. Các biểu thức cơ bản.....	33
3.2.1. Huỳnh quang cấp 1 .....	33
3.2.2. Huỳnh quang cấp 2 .....	33
3.2.3. Huỳnh quang cấp 3 .....	34
3.3. Các hệ số cơ bản .....	35
3.3.1. Hệ số alpha- phương trình Lachance và Traill .....	35
3.3.2. Mẫu hai thành phần – tăng cường và hấp thụ.....	36
3.3.3. Mẫu ba thành phần – hiệu ứng nguyên tố thứ ba.....	37
3.4. Các phương pháp hiệu chỉnh hiệu ứng matrix.....	40
3.4.1. Phương pháp định cở .....	40
3.4.2. Phương pháp tham số cơ bản.....	41

3.4.3. Phương pháp hệ số cơ bản .....	42
3.4.4. Phương pháp hàm delta .....	44
Bài tập chương 3 .....	47

#### **Chương 4: Đại cương về phân tích kích hoạt neutron**

4.1. Các tính chất cơ bản của phép phân tích kích hoạt neutron.....	49
4.1.1. Phân tích kích hoạt.....	49
4.1.2. Tính chất của phép phân tích kích hoạt neutron .....	50
4.1.3. Phương pháp tích hợp cho việc phân tích vết.....	50
4.2. Phổ neutron trong lò phản ứng hạt nhân.....	50
4.2.1. Phổ neutron theo phân bố Maxwell-Boltzmann .....	50
4.2.2. Phổ neutron theo phân bố $1/E$ .....	51
4.2.3. Phổ neutron phân hạch.....	52
4.3. Tiết diện phản ứng với neutron.....	52
4.3.1. Định nghĩa .....	52
4.3.2. Tiết diện neutron nhiệt và trên nhiệt.....	53
4.3.3. Tiết diện tích phân cộng hưởng .....	53
4.3.4. Tiết diện phản ứng với neutron nhanh.....	55
4.4. Tốc độ phản ứng với neutron.....	57
4.4.1. Tốc độ phản ứng với neutron nhiệt.....	57
4.4.2. Tốc độ phản ứng của hạt nhân khi chiếu xạ trong lò phản ứng .....	57
4.5. Một vài ứng dụng của phản ứng hạt nhân với neutron .....	58
4.5.1. Tỉ số cadmi ( $R_{Cd}$ ) và tỉ số thông lượng neutron nhiệt/cộng hưởng.....	58
4.5.2. Xác định thông lượng neutron nhiệt.....	59
4.5.3. Xác định thông lượng neutron trung bình và nhanh .....	60
Bài tập chương 4 .....	61

#### **Chương 5: Phương trình cơ bản trong phép phân tích kích hoạt neutron .....** 62

5.1. Định luật phân rã phóng xạ.....	62
5.1.1. Trường hợp đơn giản .....	62
5.1.2. Trường hợp tổng quát .....	62
5.2. Sự lớn dần của hạt nhân con bức xạ .....	63
5.2.1. Hai phân rã liên tiếp.....	63
5.2.2. Nhiều phân rã liên tiếp .....	64
5.2.3. Phân rã nhánh .....	64
5.3. Sự biến đổi hạt nhân theo thông lượng neutron.....	65
5.3.1. Lời giải bằng phương trình Leibnitz.....	65
5.3.2. Lời giải bằng phương trình Bateman.....	66
5.4. Sự lớn dần của hạt nhân con khi chiếu xạ neutron .....	67
5.4.1. Lời giải bằng phương trình Leibnitz.....	67
5.4.2. Lời giải bằng phương trình Bateman.....	67
5.5. Phương trình cơ bản trong phân tích kích hoạt neutron .....	68
Bài tập chương 5 .....	71

---

## **Chương 6: Các phương pháp phân tích kích hoạt neutron**

6.1. Phương pháp chuẩn hóa tuyệt đối.....	73
6.2. Phương pháp chuẩn hóa tương đối.....	73
6.3. Phương pháp chuẩn hóa đơn nguyên tố.....	73
6.4. Phương pháp chuẩn hóa $k_0$ .....	74
6.5. Các phương pháp xác định thông số lò phản ứng.....	76
6.5.1. Xác định hệ số $\alpha$ .....	76
6.5.2. Xác định hệ số $f$ .....	79
6.5.3. Xác định chỉ số $r(\alpha)\sqrt{T_n / T_0}$ và nhiệt độ neutron $T_n$ .....	80
Bài tập chương 6 .....	82

## **Chương 7: Chuẩn bị mẫu phân tích và mẫu chuẩn**

7.1. Chuẩn bị mẫu cho phân tích XRF.....	85
7.1.1. Mẫu lỏng.....	85
7.1.2. Mẫu rắn .....	86
7.1.3. Mẫu sinh học.....	89
7.1.4. Mẫu sol khí và bụi .....	89
7.2. Chuẩn bị mẫu phân tích và mẫu chuẩn trong phân tích NAA.....	90
7.2.1. Chuẩn bị mẫu phân tích .....	90
7.2.2. Chuẩn bị mẫu chuẩn .....	91
7.2.3. Lựa chọn vật liệu gói mẫu .....	94
Bài tập chương 7 .....	95

## **Chương 8: Phương tiện chiếu xạ và thiết bị ghi bức xạ**

8.1. Các nguồn dùng trong phân tích kích hoạt neutron.....	96
8.1.1. Nguồn neutron đồng vị .....	96
8.1.2. Mát phát neutron.....	99
8.1.3. Lò phản ứng hạt nhân .....	103
8.2. Các nguồn dùng cho phân tích huỳnh quang tia X.....	104
8.2.1. Máy phát tia X .....	104
8.2.2. Nguồn đồng vị phóng xạ.....	106
8.3. Hệ phò kẽ tia X và tia gamma .....	107
8.3.1. Tính chất cơ bản .....	107
8.3.2. Detector.....	108
8.3.3. Hệ điện tử tuyển tính .....	110
Bài tập chương 8 .....	114

## **Chương 9: Xử lý phổ và đánh giá phương pháp**

9.1. Số đếm .....	115
9.1.1. Đo cường độ bằng cách đếm số xung.....	115
9.1.2. Số đếm ở kênh định .....	115
9.1.3. Diện tích định phổ .....	115
9.2. Kỹ thuật làm tròn phổ .....	115

9.2.1. Làm tròn phô ở vùng phông .....	116
9.2.2. Làm tròn phô ở vùng đỉnh .....	116
9.3. Kỹ thuật làm khớp phô .....	117
9.3.1. Xử lý phông .....	117
9.3.2. Xử lý đỉnh .....	119
9.4. Đánh giá phương pháp phân tích.....	123
9.4.1. Đánh giá tính lặp lại của phương pháp .....	123
9.4.2. Đánh giá độ nhạy của phương pháp .....	125
Bài tập chương 9 .....	126

## **Chương 10: Các vấn đề sai số trong phân tích**

10.1. Sai số hệ thống.....	128
10.1.1. Độ phô cập đồng vị dị thường .....	128
10.1.2. Sai số do sự khác nhau thông lượng trong mẫu và chuẩn .....	128
10.1.3. Các định nghĩa .....	129
10.1.4. Tính toán theo Hogdahl .....	130
10.2. Các phản ứng nhiễu .....	132
10.2.1. Các phản ứng nhiễu sơ cấp .....	132
10.2.2. Các phản ứng nhiễu thứ cấp .....	133
10.2.3. Phản ứng nhiễu bậc hai .....	134
10.3. Sai số thống kê.....	135
10.3.1. Giá trị tốt nhất cho một chuỗi quan sát.....	135
10.3.2. Độ lệch chuẩn .....	136
10.3.3. Giới hạn độ tin cậy .....	136
10.3.4. Tiêu chuẩn Chauvenet .....	137
10.3.5. Truyền sai số .....	138
10.3.6. Phân tích sai số .....	138
Bài tập chương 10 .....	140

Tài liệu tham khảo .....	141
--------------------------	-----

## **PHỤ LỤC**

Phụ lục 1: Các vạch năng lượng tia X .....	142
Phụ lục 2: Bảng số liệu hạt nhân dùng trong INAA .....	145

## Chương 1

# CÁC NGUYÊN TẮC CƠ BẢN CỦA PHÉP PHÂN TÍCH HUỲNH QUANG TIA X

### 1.1. TỔNG QUAN VỀ PHƯƠNG PHÁP PHÂN TÍCH HUỲNH QUANG TIA X

Năm 1895, Wilhelm Roentgen khám phá ra tia X, lãnh vực ứng dụng đầu tiên của tia X là Y học. Nhưng mãi đến năm 1910, Barkla phát hiện phổ phát xạ tia X đặc trưng và ba năm sau (1913), H. G. J. Moseley đã thiết lập hệ thức liên quan giữa tần số của bức xạ tia X với bậc số nguyên tử của nguyên tố phát ra nó, đó là cơ sở cho phương pháp phân tích huỳnh quang tia X ngày nay. Năm 1966 detector tia X bán dẫn đầu tiên ra đời ở phòng thí nghiệm Lawrence Berkeley đánh dấu sự phát triển phổ kẽ huỳnh quang tia X. Sau đó sự phát triển của ngành điện tử hạt nhân, đặc biệt là việc chế tạo và hoàn thiện các loại detector bán dẫn như Ge, Si(Li) đã cho phép xây dựng được các phổ kẽ có hiệu suất ghi cao, tốc độ phân tích nhanh và thuận tiện trong nhiều yêu cầu sử dụng, nên phương pháp phân tích huỳnh quang tia X có vai trò ngày càng quan trọng trong phân tích nguyên tố.

Tia X là bức xạ điện từ có bước sóng trong khoảng  $10^{-5} \rightarrow 100 \text{ \AA}$ , được tạo ra do sự hấp thụ năng lượng cao hay bởi sự dịch chuyển điện tử từ quỹ đạo cao sang quỹ đạo thấp trong nguyên tử. Tương ứng với hai nguyên nhân đó, ta có hai loại bức xạ tia X: bức xạ hầm và bức xạ đặc trưng. Trong phương pháp phân tích phổ huỳnh quang tia X, chúng ta quan tâm đến bức xạ đặc trưng vì nó giúp ta phân tích định tính và định lượng nguyên tố phát ra nó.

Muốn một nguyên tố phát bức xạ huỳnh quang tia X đặc trưng, thì ta phải dùng một nguồn kích thích. Nguồn kích thích này có thể là máy gia tốc hạt tích điện, hoặc máy phát tia X, hoặc một nguồn đồng vị phát tia gamma năng lượng thấp, tia X.

Đến nay tính ưu việt của phương pháp phân tích huỳnh quang tia X đã được khẳng định như sau:

- Không phá mẫu.
- Có thể phân tích nhanh với độ chính xác cao.
- Có thể phân tích cùng lúc nhiều nguyên tố (từ Z = 9 đến giới hạn phát hiện định lượng có thể đạt đến ppm).
- Sai số phân tích có thể đạt tới cực nhỏ ~ 0,1%.
- Đối tượng phân tích đa dạng: rắn, lỏng và khí.
- Có thể thiết lập hệ thống phân tích tự động để kiểm tra sản phẩm trên dây chuyền sản xuất.

Do những ưu điểm cơ bản nói trên, phương pháp phân tích huỳnh quang tia X có phạm vi ứng dụng ngày càng rộng rãi. Ở nước ta trong mười năm gần đây, phương pháp phân tích vi lượng bằng bức xạ huỳnh quang tia X đã được áp dụng trong một số lĩnh vực sau:

- Trong ngành luyện kim: xác định thành phần nguyên tố trong hợp kim.
- Quặng mỏ: điều tra khoáng sản.
- Phân tích nguyên liệu cho gốm, sứ, xi măng, thủy tinh và các hóa phẩm.
- Xác định bề dày lớp mạ.
- Định tuổi của kim loại quý như Au, Ag, Pt,...
- Nhận diện đá quý.
- Xác định hàm lượng K, Ca, F, P, ... trong phân bón.

- Trong kỹ nghệ phim ảnh: xác định hàm lượng Ag.
- Phân tích môi sinh: xác định hàm lượng Pb, Hg, Sb, Cu trong môi trường không khí.
- Trong kỹ nghệ dầu thô và cao su: xác định hàm lượng Cu, Ni, S.
- Xử lý gỗ: xác định hàm lượng Cr, Cu, As.
- Kỹ nghệ giấy: xác định hàm lượng Ti.

Trong phương pháp phân tích huỳnh quang tia X, để đạt được độ nhạy và năng suất phân giải cao, người ta đang quan tâm nhiều đến việc cải tiến kỹ thuật phân tích, như tự động hóa quá trình thay mẫu trong buồng chiếu; gắn hệ phân tích với máy tính để xử lý ngay kết quả thực nghiệm, làm tròn phô bằng tính toán, thí dụ như bằng phương pháp bình phương tối thiểu tuyến tính hoặc phi tuyến như dùng phần mềm AXIL (Analysis of X-ray spectra by Iterative Least squares fitting).

Bên cạnh đó, vẫn đề đang được quan tâm là sự khắc phục ánh hưởng của các hiệu ứng ánh hưởng lên kết quả phân tích, ví dụ như hiệu ứng giao thoa của các nguyên tố trong mẫu nhiều thành phần. Do đó cần phải hiệu chỉnh cường độ vạch phổ đặc trưng nguyên tố phân tích đối với cả hiệu ứng hấp thụ lẫn hiệu ứng tăng cường bức xạ do các nguyên tố khác trong cùng mẫu phân tích phát ra.

Để hiệu chỉnh ánh hưởng của hiệu ứng matrix người ta thường dùng các phương pháp hồi quy nhiều lần để tính toán các hệ số nhiều.

## 1.2. TƯƠNG TÁC CỦA TIA X VỚI VẬT CHẤT

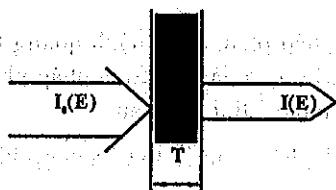
Khi tia X tương tác với electron của các nguyên tử nó sẽ bị hấp thụ hoặc tán xạ. Sự hấp thụ bức xạ sẽ xảy ra bởi những tương tác riêng hoặc bởi nhiều tương tác tổng quát hơn. Các tương tác riêng có vai trò quan trọng trong quá trình kích thích mẫu. Các tương tác tổng quát có ảnh hưởng quan trọng vào cường độ bức xạ tia X từ mẫu. Tán xạ tia X dẫn đến xuất hiện nền phông trong phổ quan sát. Sự hiểu biết về tương tác của tia X với lớp vỏ nguyên tử là cơ sở cho việc phân tích biến đổi xung của phổ.

### 1.2.1. Hệ số suy giảm

Xét một chùm tia X đơn sắc, chuẩn trực có cường độ  $I_0(E)$ , khi đi qua một lớp vật chất có bề dày  $T$  (cm), mật độ nguyên tử môi trường  $\rho$  ( $\text{g}/\text{cm}^3$ ), một vài photon sẽ tương tác với hệ nguyên tử môi trường vật chất. Các tương tác xảy ra có thể là hiệu ứng quang điện, tán xạ không kết hợp, tán xạ kết hợp, và nhiễu xạ. Chùm tia X truyền qua vật chất mà không tương tác với vật chất có cường độ  $I(E)$  tuân theo định luật suy giảm:

$$I(E) = I_0(E) \exp[-\mu(E)T] \quad (1.1)$$

trong đó,  $\mu(E)$  được gọi là hệ số suy giảm tuyến tính, có đơn vị  $\text{cm}^{-1}$ .



Hình 1.1: Sự suy giảm cường độ của chùm tia X khi xuyên qua vật chất

Thông thường người ta dùng khái niệm hệ số suy giảm khối  $\mu(E) = \mu(E)/\rho$  (có đơn vị  $\text{cm}^2/\text{g}$ ) chỉ sự suy giảm cường độ trên đơn vị khối lượng trên đơn vị diện tích. Trong trường hợp này phương trình (1.1) trở thành:

$$I(E) = I_0(E) \exp[-\mu(E)\rho T] \quad (1.2)$$

Hệ số suy giảm khói của một hợp chất sẽ bằng tổng các hệ số suy giảm khói thành phần:

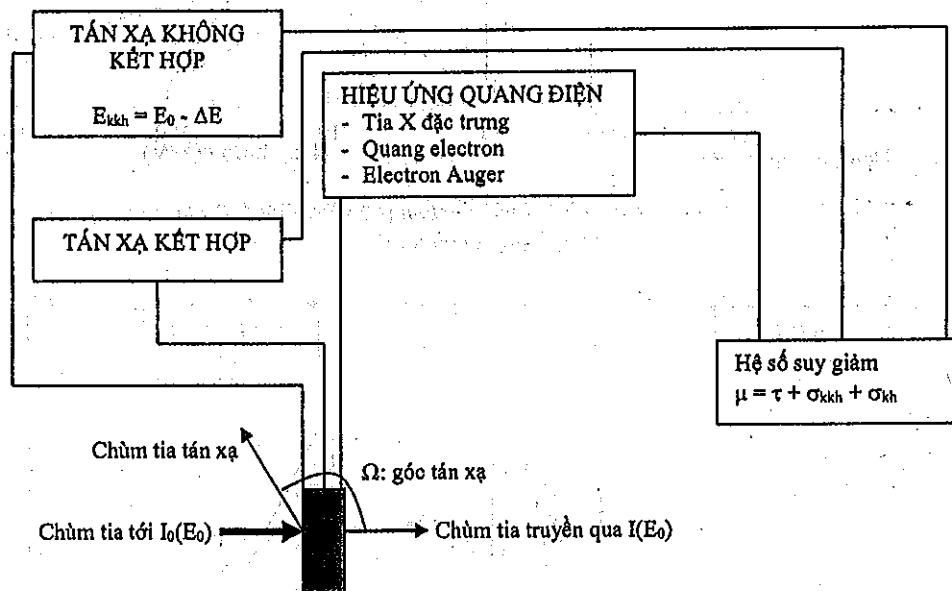
$$\mu = \sum w_i \mu_i \quad (1.3)$$

với  $w_i$  là hàm lượng (%) của nguyên tố i ( $\sum w_i = 1$ ).

Do tương tác với lớp vỏ electron của nguyên tử, nên hệ số suy giảm khói tăng theo bậc số nguyên tử Z của nguyên tố vật liệu bia. Hệ số suy giảm khói còn là đặc trưng của một chất ưng với một giá trị nào đó của năng lượng bắn tia X tới. Đối với một nguyên tố cho trước, hệ số suy giảm khói thay đổi theo bước sóng tia X tới:

$$\mu = KZ^4 \lambda^3 \quad (1.4)$$

trong đó,  $\lambda$  là bước sóng của tia X tới, tính theo đơn vị cm; K là hệ số thay đổi theo mỗi giới hạn hấp thụ của nguyên tố bia.



Hình 1.2: Sơ đồ tương tác của tia X với vật chất

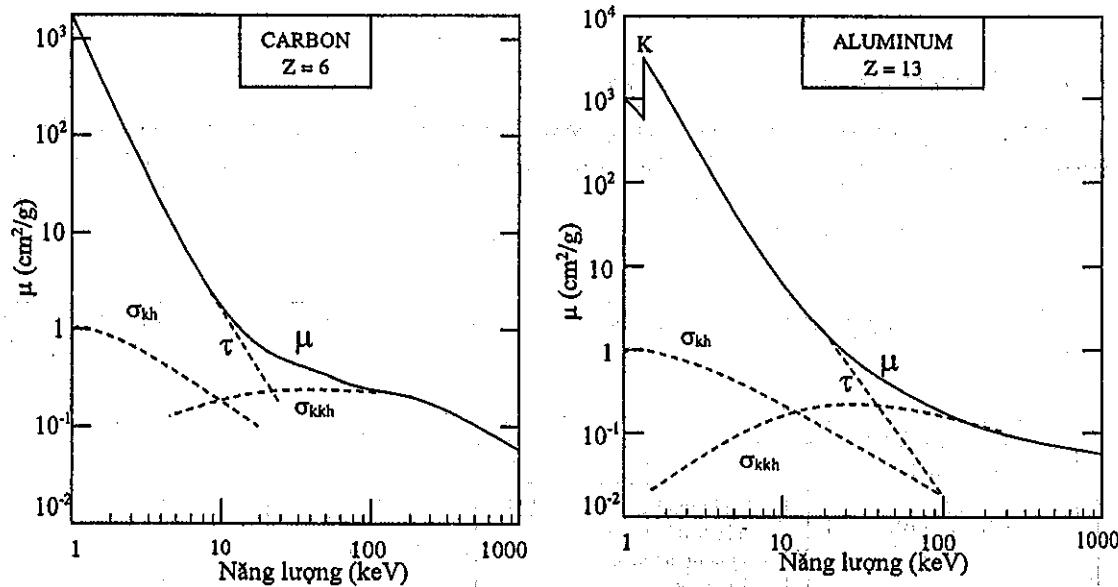
Vì vậy khi một chùm tia X đi qua mẫu, cường độ chùm tia sẽ bị suy giảm. Có nhiều loại tương tác khác biệt nhau của tia X với hệ nguyên tử của môi trường vật chất. Các tương tác này là các quá trình tán xạ kết hợp, không kết hợp và quá trình hấp thụ quang điện. Do đó, hệ số suy giảm là tổng các hệ số tán xạ và hấp thụ xảy ra khi tia X đi qua mẫu:

$$\mu(E) = \tau(E) + \sigma_{kh}(E) + \sigma_{khh}(E) \quad (1.5)$$

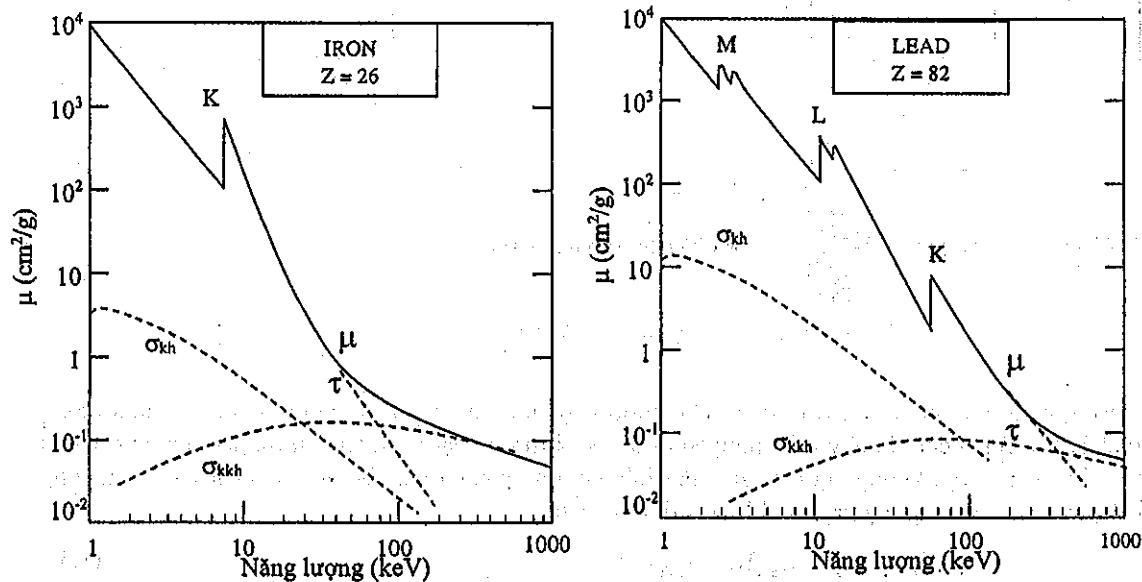
trong đó,  $\tau(E)$  là hệ số hấp thụ quang điện,  $\sigma_{kh}(E)$  là tổng hệ số tán xạ khói kết hợp, và  $\sigma_{khh}(E)$  là tổng hệ số tán xạ khói không kết hợp. Cả  $\sigma_{kh}(E)$  và  $\sigma_{khh}(E)$  đều được tính với tất cả các góc tán xạ có thể có.

Một cách tổng quát, ta có thể mô tả các quá trình xảy ra khi chùm tia X có năng lượng  $E_0$  cường độ  $I_0(E_0)$  đập vào vật chất được mô tả như hình 1.2 ở trên.

Hình 1.3 sau đây cho thấy với bậc số nguyên từ Z cho trước, hệ số suy giảm khối giảm theo sự gia tăng năng lượng của photon tới.



*Hình 1.3a: Hệ số suy giảm khối đối với Cacbon (C) và Nhôm (Al) như là hàm năng lượng photon tới*



*Hình 1.3b: Hệ số suy giảm khối đối với Sắt (Fe) và Chì (Pb) như là hàm năng lượng photon tới*

### 1.2.2. Quá trình tán xạ

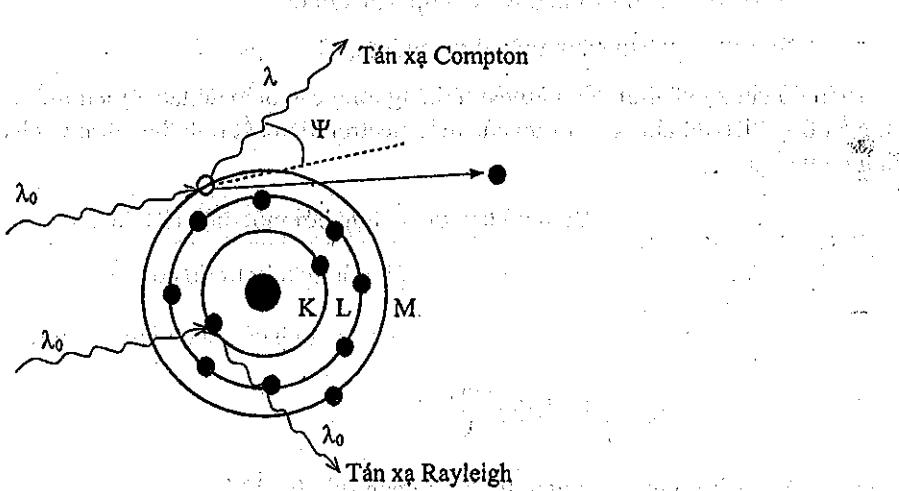
Khi tia X đập vào đám mây electron của vỏ nguyên tử của nguyên tố bia, nó sẽ tương tác với electron và bị tán xạ như trong hình 1.4.

Tán xạ tia X trong mẫu, chủ yếu gây ra ở tầng ngoài của vỏ nguyên tử và là nguồn gốc chính của phồng trong phô tia X sự tán xạ có thể là đàn hồi, ở đây photon tán xạ có cùng năng lượng với photon tới, và gọi là tán xạ kết hợp, hay còn gọi là tán xạ Rayleigh. Đường đi của tia X bị lệch, vì vậy có sự đóng góp biếu kiến vào hệ số suy giảm khối. Nếu sự va chạm là không đàn tính thì tia X bị mất năng lượng để một electron thoát ra và tán xạ tia X được gọi là không kết hợp hay tán xạ Compton. Đường đi của tia X bị lệch và năng lượng giảm.

Hai nhận xét quan trọng liên quan đến tán xạ đối với phô kẽ tia X là:

1) Mặc dù số tán xạ tổng cộng tăng theo bậc số nguyên tử  $Z$ , nhưng đối với mẫu có bậc số nguyên tử  $Z$  cao thì phần lớn các bức xạ tán xạ bị hấp thụ ngay trong mẫu, nên tán xạ quan sát được từ mẫu sẽ ít. Còn đối với mẫu có bậc số nguyên tử  $Z$  thấp thì tán xạ quan sát được từ mẫu lại nhiều hơn do sự hấp thụ bởi mẫu là nhỏ.

2) Đối với nguyên tố nhẹ thì tán xạ Compton xảy ra với xác suất lớn, do đó tỉ số cường độ tán xạ Compton và Rayleigh tăng khi bậc số nguyên tử  $Z$  của mẫu giảm.



Hình 1.4: Tán xạ Rayleigh và Compton của tia X

#### 1.2.2.1. Tương tác của tia X với electron tự do

Tương tác của tia X với electron tự do, chủ yếu là quá trình tán xạ. Gọi  $\Psi$  là góc tán xạ,  $I_e$  là cường độ tán xạ trên một đơn vị góc khối trong một đơn vị thời gian gây ra bởi sự tương tác của chùm tia X không phân cực lên một electron tự do. Theo định luật Thompson, ta có:

$$I_e = 7,9 \cdot 10^{-26} \frac{1 + \cos^2 \Psi}{2} I_0 \quad (1.6)$$

Trong tán xạ Compton, photon tia X tới chỉ truyền một phần năng lượng của mình cho một electron liên kết yếu và phần năng lượng còn lại xuất hiện như là một tia X thứ cấp. Tán xạ Compton xảy ra khi năng lượng của photon tới vào khoảng  $m c^2$ , nghĩa là đủ lớn để xem các electron liên kết yếu như là tự do. Compton là người đầu tiên chứng minh rằng tia X tán xạ lên electron tự do có độ dịch chuyển bước sóng theo biểu thức sau:

$$\Delta\lambda = \lambda - \lambda_0 = \frac{h}{m_0 c} (1 - \cos \Psi) \quad (1.7)$$

trong đó,  $\lambda$  là bước sóng bức xạ tán xạ Compton,  $\lambda_0$  là bước sóng tia X tới,  $h$  là hằng số Planck,  $m_0$  là khối lượng nghỉ của electron,  $c$  là vận tốc bức xạ điện tử và  $\Psi$  là góc giữa tia tới và tia tán xạ.

Từ phương trình (1.7), ta có:  $\Delta\lambda = 0,0243(1 - \cos \Psi)$ . Ở đây  $\Delta\lambda$  tính bằng đơn vị Angstrom ( $\text{\AA}$ ).

Năng lượng bức xạ sau tán xạ Compton cho bởi phương trình:

$$E = \frac{E_0}{1 + \frac{E_0}{m_0 c^2} (1 - \cos \Psi)} \quad (1.8)$$

với  $m_0 c^2 = 511 \text{ keV}$ , là năng lượng nghỉ của electron.

### 1.2.2.2 Tương tác của tia X với electron liên kết

Cơ lượng tử cũng như thực nghiệm đã chứng minh rằng: trong vùng năng lượng của tia X xấp xỉ 10 keV tán xạ của tia X lên các electron liên kết tuân theo các nguyên tắc tổng quát sau:

- Cả tán xạ kết hợp và không kết hợp đều xảy ra.
- Tán xạ toàn phần cũng tuân theo định luật Thompson (1.6).

Biên độ tán xạ kết hợp lên nguyên tử bằng tổng các biên độ tán xạ lên mỗi electron trong nguyên tử. Nếu  $f_e$  là biên độ tán xạ kết hợp của một electron liên kết tính theo đơn vị electron (eu) thì  $f_e$  được định nghĩa như sau:

*bản* *kết* *tán* *xạ* *kết* *hợp*  $f_e = \frac{\text{Biên độ tán xạ kết hợp bởi một điện tử liên kết}}{\text{Biên độ tán xạ bởi một điện tử tự do cỗ điện}}$

Nếu đám mây electron riêng lẻ được giả sử có dạng hình cầu bán kính  $r$ , chúng ta có:

$$f_e = \int_0^\infty 4\pi r^2 \rho(r) \frac{\sin kr}{kr} dr \quad (1.9)$$

Ở đây,  $\rho(r)$  là mật độ phân bố điện tử,  $k = (4\pi \sin \theta)/\lambda$ ,  $\theta = \Psi/2$ .

Biên độ tán xạ đối với nguyên tử Z electron là

$$f = \sum_{n=1}^Z (f_e)_n = \sum_{n=1}^Z \int_0^\infty 4\pi r^2 \rho_n(r) \frac{\sin kr}{kr} dr \quad (1.10)$$

Vì vậy, với một nguyên tử bất kỳ,  $f$  là một hàm của  $(\sin \theta)/\lambda$ , và khi  $(\sin \theta)/\lambda \rightarrow 0$ , thì:  $f \rightarrow \sum_{n=1}^Z \int_0^\infty 4\pi r^2 \rho_n(r) dr \rightarrow Z$  (vì  $\sum_{n=1}^Z \int_0^\infty 4\pi r^2 \rho_n(r) dr = 1$ : xác suất tìm thấy electron trong nguyên tử). Lưu ý rằng  $(\sin \theta)/\lambda \rightarrow 0$ , khi  $\theta/\lambda \rightarrow 0$  (góc tán xạ nhỏ), hoặc khi  $\lambda$  rất lớn (năng lượng thấp).

### 1.2.2.3. Tán xạ không kết hợp lên các nguyên tử

Đối với bức xạ tán xạ không kết hợp thì không có giao thoa giữa các sóng tán xạ, và tổng cường độ tán xạ lên các electron trong đám mây electron quanh nhân được tính bởi:

$$I_{kh} = \sum_{n=1}^Z [1 - (f_e)^2]_n = \left[ Z - \sum_{n=1}^Z (f_e)_n^2 \right] I_e \quad (1.11)$$

Thí dụ với Li ( $Z = 3$ ), Al ( $Z = 13$ ), Cu ( $Z = 29$ ), sự phụ thuộc cường độ tán xạ kết hợp và không kết hợp vào  $(\sin\theta)/\lambda$  được mô tả trên các đồ thị ở hình 1.5 cho thấy: đối với Li thì ảnh hưởng của tán xạ rất lớn. Còn đối với Al và Cu thì ảnh hưởng không đáng kể khi  $\sin(\theta)$  không quá bé. Vì vậy, phân tích nguyên tố nhẹ bằng phương pháp huỳnh quang tia X là không tốt.

Từ các đồ thị trên hình 1.5 cho ta các nhận xét sau:

- Đối với các nguyên tố có bậc số nguyên tử  $Z$  càng lớn thì ảnh hưởng của tán xạ không kết hợp càng nhỏ.

- Nếu chọn góc tán xạ lớn, ta có thể bỏ qua ảnh hưởng của tán xạ kết hợp.

- Nếu photon X tới có năng lượng lớn hơn năng lượng liên kết của electron quỹ đạo rất nhiều thì tán xạ không kết hợp sẽ chiếm ưu thế. Khi năng lượng photon X tới xấp xỉ năng lượng liên kết thì tán xạ kết hợp chiếm ưu thế.

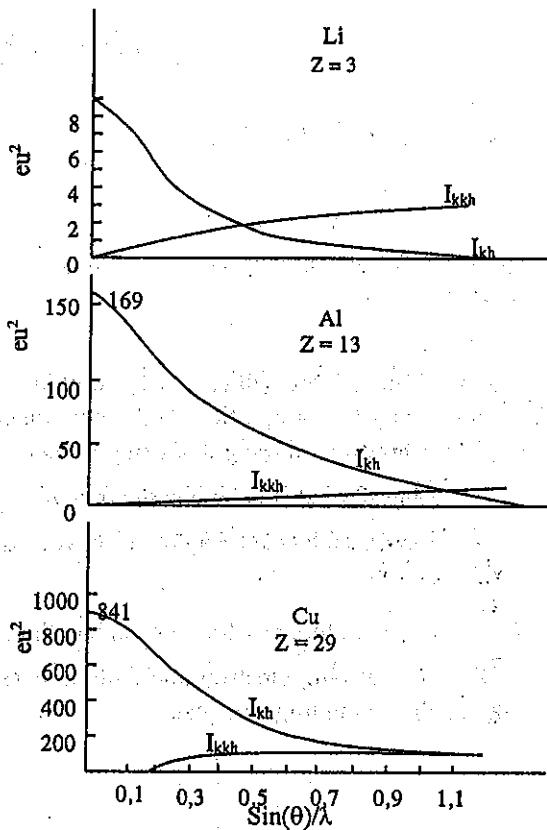
#### 1.2.2.4. Tán xạ trên hệ nguyên tử liên kết

Khi tán xạ xảy ra trên một hệ nguyên tử liên kết, các bức xạ tán xạ kết hợp (năng lượng không đổi) sẽ lệch pha nhau, hình thành các cực đại tương ứng với sự giao thoa giữa các sóng, tán xạ kết hợp. Hiệu ứng này đạt được trong một khối chất kết tinh, mà trong đó gần như các tán xạ kết hợp tập hợp thành các đỉnh.

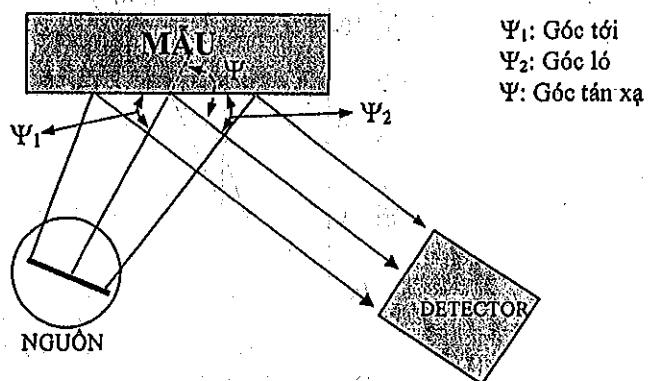
#### 1.2.2.5. Năng lượng của bức xạ tán xạ không kết hợp

Phương trình (1.7) ở trên là biểu thức liên hệ giữa các bước sóng bức xạ tán xạ kết hợp ( $\lambda_0$ ) và không kết hợp ( $\lambda_{kh}$ ) và góc tán xạ  $\Psi$ . Hình 1.6 cho thấy góc tán xạ  $\Psi$  và mối liên hệ của nó với góc tới trung bình  $\Psi_1$  của chùm sơ cấp, và góc ló  $\Psi_2$  trong một hệ phô kẽ tia X.

Trong các phô kẽ tia X ta có thể bố trí để  $\Psi$  xấp xỉ  $90^\circ$ , khi đó từ phương trình (1.7) ta tính được độ dịch chuyển  $\Delta\lambda$  của bước sóng Compton vào khoảng  $0,0243\text{\AA}$ . Từ phương trình (1.8) ta chỉ ra được rằng độ dịch chuyển năng lượng của photon X tán xạ Compton phụ thuộc vào cả góc tán xạ  $\Psi$  và năng lượng  $E_0$  của photon tới.



Hình 1.5: Sự phụ thuộc cường độ tán xạ kết hợp và không kết hợp vào  $\sin(\theta)/\lambda$  của Li( $Z = 3$ ), Al( $Z = 13$ ) và Cu( $Z = 29$ )



Hình 1.6: Tia tới và tia ló trong phô kẽ tia X

$$\Delta E = E - E_{\text{kh}} = E_0 \times \left( 1 - \frac{1}{1 + \frac{E_0}{511} \times (1 - \cos \Psi)} \right)$$

$$= \frac{E_0^2 (1 - \cos \Psi)}{511 + E_0 \times (1 - \cos \Psi)}$$
(1.12)

Ở đây,  $E_0$  tính bằng đơn vị keV.

### 1.2.3. Quá trình hấp thụ

Tia X tương tác với electron của nguyên tử sẽ bị hấp thụ hoặc tán xạ. Sự liên hệ giữa quá trình hấp thụ với bậc số nguyên tử là một yếu tố quan trọng trong quá trình chọn điều kiện hoạt động tối ưu của hệ phô kẽ tia X.

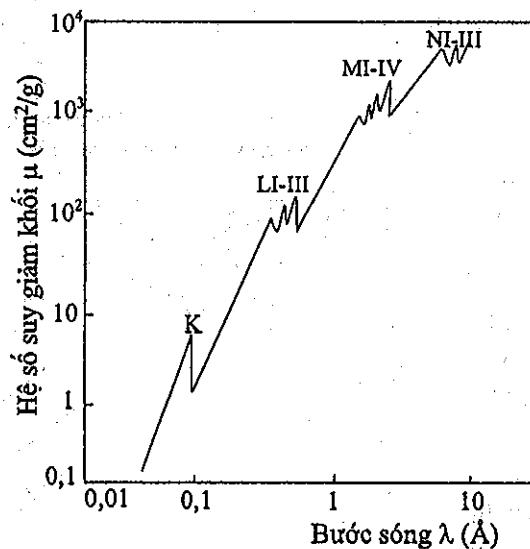
#### 1.2.3.1. Cạnh hấp thụ

Trong hình 1.7 dưới đây, ta thấy có những điểm bất liên tục được gọi là cạnh hấp thụ (giới hạn hấp thụ). Năng lượng cực tiểu có thể phát quang một electron từ một quỹ đạo trong nguyên tử của nguyên tố cho trước, được gọi là năng lượng cạnh hấp thụ. Một nguyên tố có nhiều cạnh hấp thụ:

- Tầng K có một cạnh hấp thụ ứng với năng lượng cạnh hấp thụ là  $K_{ht}$ .
- Tầng L có ba cạnh hấp thụ, ứng với  $L_{ht}$ ,  $L_{Iht}$ ,  $L_{IIht}$
- v.v....

Cùng một nguyên tố, năng lượng cạnh hấp thụ tuân theo  $K_{ht} > L_{ht} > L_{Iht} > L_{IIht} \dots$

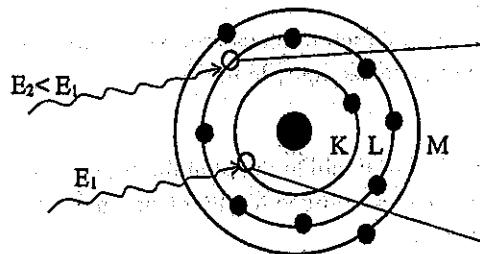
Đối với một tầng electron xác định, nguyên tố có bậc số nguyên tử Z càng lớn thì năng lượng cạnh hấp thụ tương ứng càng cao.



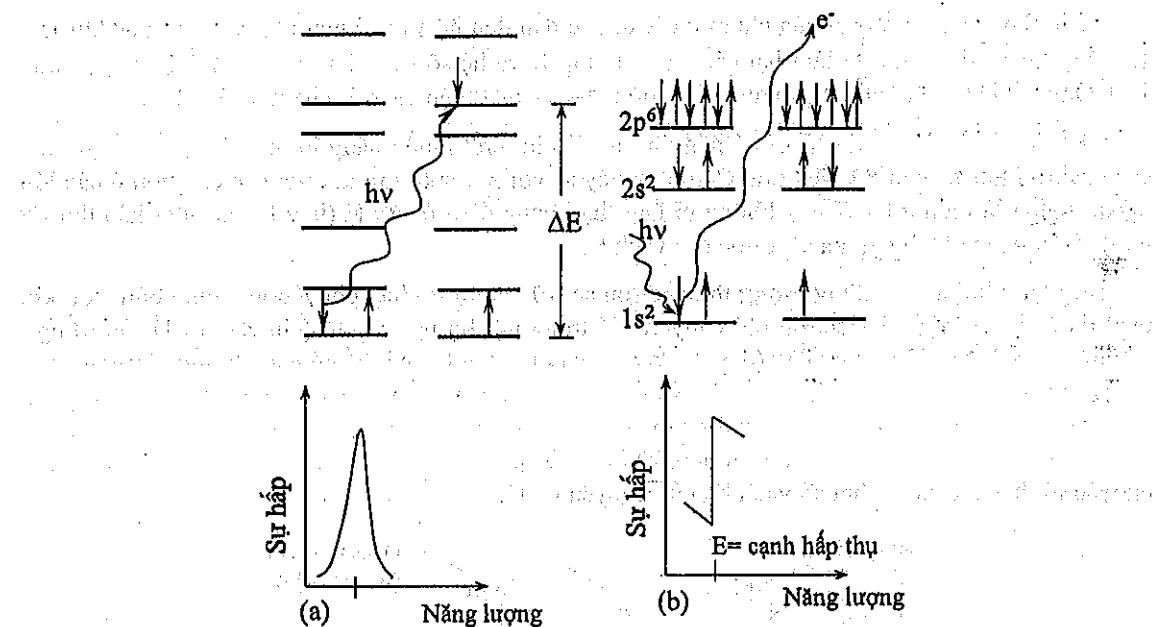
Hình 1.7: Đường cong biểu diễn hệ số suy giảm khối của nguyên tố urani theo bước sóng

Hình vẽ 1.8 biểu diễn các tầng electron của nguyên tử. Các tầng K, L, M có các số lượng tử chính tương ứng là  $n = 1, 2, 3$ . Số lượng tử chính càng nhỏ thì năng lượng cần thiết để giải phóng một electron từ tầng đó càng cao. Trong hình 1.9, năng lượng tối thiểu của tia X tới giải phóng

electron tầng K lớn hơn năng lượng để giải phóng electron tầng L, nghĩa là năng lượng cạnh hấp thụ của tầng K lớn hơn tầng L.



**Hình 1.8:** Minh họa sự phát quang electron tầng K bởi photon với năng lượng cao hơn, và phát quang electron tầng L bởi photon với năng lượng thấp hơn



**Hình 1.9:** Sự kích thích các mức năng lượng điện tử  
 (a) Dịch chuyển giữa hai mức năng lượng  
 (b) Sự phát quang electron bởi photon X

Quá trình quang điện dẫn đến trạng thái electron không bền và phát xạ tia X đặc trưng được minh họa trong hình 1.9.

Hình 1.9(a) biều diễn sự hấp thụ theo năng lượng đối với photon có năng lượng thấp hơn vùng năng lượng tia X. Trong trường hợp này, năng lượng photon được dùng để dịch chuyển electron từ quỹ đạo thấp lên quỹ đạo cao hơn và do đó tạo nên sự dịch chuyển từ trạng thái lượng tử bền đến trạng thái lượng tử không bền. Sự khác biệt về năng lượng (giữa trạng thái bền và không bền) được xác định bởi nguyên tố làm bia. Chỉ những photon có năng lượng rất gần với năng lượng khác biệt này sẽ bị hấp thụ bởi mẫu. Hình 1.9(b) là trường hợp bức xạ nằm trong vùng năng lượng tia X. Electron nằm ở quỹ đạo thấp với mức năng lượng biết trước, được giải phóng từ trạng thái bền tới

miền liên tục (trạng thái kích thích cao nhất) khi rời khỏi nguyên tử. Bất kỳ một năng lượng dư thừa nào của tia X đều biến đổi thành động năng của electron được giải phóng. Vì vậy, khi năng lượng tia X đủ để phát quang electron thay vì có định hấp thụ như trong hình 1.9(a), ta có cảnh hấp thụ như trong hình 1.9(b). Việc chọn lựa năng lượng để kích thích các nguyên tố trong mẫu sẽ được xem xét dựa vào các giá trị năng lượng cảnh hấp thụ của các nguyên tố đó.

### 1.2.3.2. Nguyên lý cảnh hấp thụ

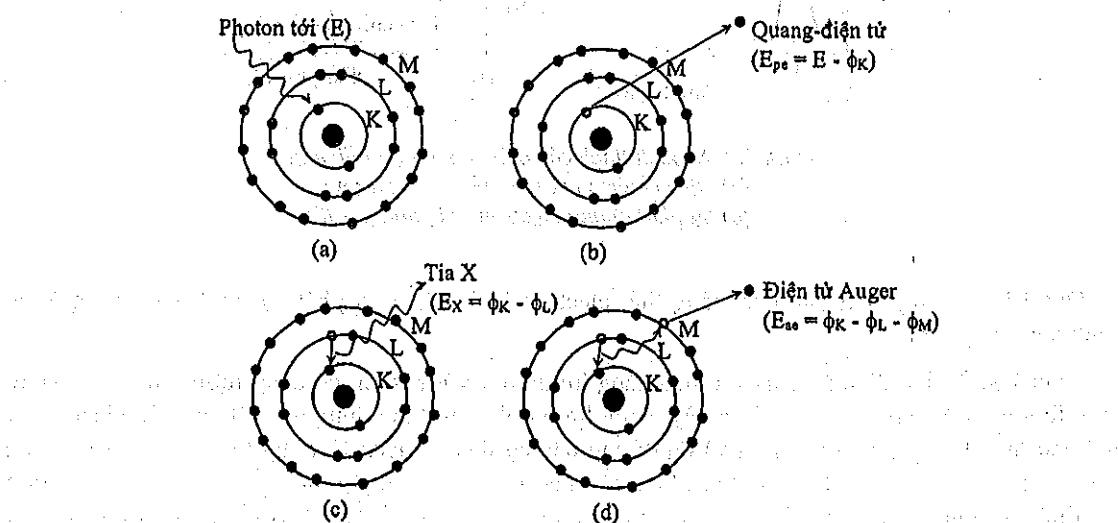
Xét một chùm tia X đơn sắc, có năng lượng  $E$ , chiếu lên mẫu đa nguyên tố. Tùy theo năng lượng của tia X tới và năng lượng cảnh hấp thụ của các nguyên tố chứa trong mẫu, trên phò ghi nhận được có hoặc không xuất hiện đỉnh đặc trưng:

\* Đối với các nguyên tố có năng lượng cảnh hấp thụ  $\phi_K > E$ , chùm tia X tới không đủ năng lượng để làm bật những electron lớp K của nguyên tố đó. Trên phò không có các vạch K của nó. Nếu  $E$  lớn hơn  $\phi_{L1}$  hoặc lớn hơn  $\phi_{L2}, \phi_{L3}$  thì trên phò ta có thể quan sát thấy các vạch L tương ứng của nguyên tố này.

\* Khi tăng năng lượng  $E$  của chùm tia X tới, sẽ dẫn đến hệ số suy giảm khói giảm, đến khi  $E = \phi_K$ , năng lượng tia X tới đủ làm bật các electron lớp K và hệ số suy giảm khói tăng đột ngột, (hình 1.7). Đây là hiện tượng hấp thụ quang điện, trên phò sẽ xuất hiện vạch K của nguyên tố này.

\* Khi  $E \gg \phi_K$  chùm tia X tới có năng lượng lớn hơn rất nhiều năng lượng cần thiết để làm bật các electron lớp K. Khi đó hiệu ứng Compton xảy ra với xác suất lớn đối với các electron ở các lớp ngoài, nghĩa là những tia X này không bị hấp thụ quang điện ở lớp K (hay là xác suất hấp thụ rất nhỏ). Trên phò ta không quan sát được các vạch K.

Tóm lại, khi hấp thụ năng lượng thì electron sẽ trở nên tự do hay chuyển lên vùng dẫn, còn khi phát tia X đặc trưng thì electron chỉ chuyển dời trong nội bộ nguyên tử (chuyển tới lớp lõi trống). Không có vạch nào trong một dãy (dãy K, dãy L<sub>1</sub>, dãy L<sub>2</sub>, dãy L<sub>3</sub>) có thể có năng lượng lớn hơn năng lượng cảnh hấp thụ ứng với dãy đó. Như vậy khi tia X sơ cấp dùng để kích thích có năng lượng lớn hơn năng lượng cảnh hấp thụ ứng với dãy nào đó của nguyên tố phân tích, thì tất cả các vạch đặc trưng trong dãy đó đều xuất hiện trên phò. Thí dụ trên phò ghi nhận được, nếu có vạch K<sub>β</sub> của một nguyên tố thì chắc chắn phải có vạch K<sub>α</sub> của nguyên tố đó.



Hình 1.10: Hiện tượng tương tác quang điện

### 1.2.3.3. Hiệu ứng quang điện

Một trong những quá trình dẫn đến sự hấp thụ tia X khi chúng xuyên qua vật chất là hiệu ứng quang điện. Quá trình này đóng góp chủ yếu vào sự hấp thụ tia X, và là mô hình kích thích các nguyên tử trong mẫu phát phò tia X đặc trưng. (a) Trước khi tương tác, một photon năng lượng E đập vào nguyên tử. (b) Một electron tầng K hấp thụ toàn bộ năng lượng của photon và thoát ra ngoài. (c) và (d) Lỗ trống ở tầng K được lấp đầy bởi một electron từ tầng L chuyển về, kèm theo việc phóng thích: hoặc (c), tia X đặc trưng; hoặc (d), giải phóng electron Auger.

Khi chùm tia X đập vào một electron liên kết trong hệ nguyên tử môi trường, nếu năng lượng E của chùm tia X lớn hơn năng lượng liên kết  $\phi$  của electron ở tầng, trong ứng thì hiệu ứng quang điện sẽ xảy ra: tia X biến mất, năng lượng của nó được trao toàn bộ cho electron liên kết. Electron này (được gọi là quang - điện tử) bức ra khỏi hệ nguyên tử với năng lượng  $E - \phi$ .

Trên hình 1.10(a) tia X đập vào một electron ở tầng K, quang - điện tử này thoát ra ngoài để lại lỗ trống ở tầng K, như trong hình 1.10(b), do đó nguyên tử ở trạng thái kích thích. Các electron từ các tầng ngoài, nơi có năng lượng liên kết thấp hơn (tầng L, M,...), sẽ dịch chuyển tới để lấp lỗ trống, và một tia X đặc trưng xuất hiện với năng lượng bằng hiệu năng lượng liên kết giữa hai tầng như trong hình 1.10(c).

Xác suất xảy ra hiệu ứng quang điện ở một tầng nào đó của vỏ nguyên tử, gọi là tiết điện, xảy ra hiệu ứng quang điện hay còn gọi là hệ số hấp thụ quang điện. Phương trình thực nghiệm diễn tả mối phụ thuộc giữa hệ số hấp thụ quang điện  $\tau_k$  của lớp K với bậc số nguyên tử Z và năng lượng E như sau:

$$\tau_k = 1,09 \times 10^{-6} \times Z^5 \times \left(\frac{13,61}{E}\right)^2 \text{ (cm}^2/\text{nguyên tử)} \quad (1.14)$$

Hiệu ứng quang điện hầu như không xảy ra đối với các electron có năng lượng liên kết yếu, nhất là các electron có năng lượng liên kết nhỏ hơn rất nhiều so với năng lượng của tia X tới. Vì vậy việc phân tích huỳnh quang tia X sẽ gặp khó khăn đối với các nguyên tố nhẹ. Nói chung, hiệu ứng thường xảy ra tại các lớp electron trong cùng (liên kết bền vững), đó là các lớp K, L.

### 1.2.3.4. Hiệu ứng Auger

Hiệu ứng quang điện xảy ra thường kèm theo hiệu ứng Auger hay gọi là sự biến hoán trong (hấp thụ quang điện nội tại). Trong trường hợp này, tia X đặc trưng vừa phát ra bị hấp thụ ngay bởi một electron ở tầng phía ngoài hơn trong cùng một nguyên tử, như trong hình 1.10 (d). Khi đó không có tia X đặc trưng được phóng thích mà là một electron Auger. Hiệu ứng này làm giảm cường độ của vạch phổ và thường xảy ra đối với những nguyên tố nhẹ.

#### i) Hệ số biến hoán trong

Gọi  $N_e$  là số electron Auger,  $N_x$  là số tia X phóng thích cùng thời gian từ trong cùng một mẫu. Hệ số biến hoán trong toàn phần là:

$$\alpha = \frac{N_e}{N_x} = \alpha_K + \alpha_L + \alpha_M + \dots \quad (1.15)$$

với,  $\alpha_K$  là hệ số biến hoán trong đối với các electron tầng K,  $\alpha_L$  là hệ số biến hoán trong đối với các electron tầng L, ...

Các electron sau khi bật ra đã để lại các lỗ trống ở lớp vỏ nguyên tử. Do đó kèm theo hiện tượng biến hoán trong luôn luôn có sự phát xạ của các tia X đặc trưng hoặc các electron Auger.

#### ii) Hiệu suất huỳnh quang

Khi electron được giải phóng từ nguyên tử do quá trình quang điện, có hai khả năng xảy ra: hoặc phát xạ tia X hoặc phát electron Auger. Hai quá trình này cạnh tranh nhau. Hiệu suất huỳnh quang  $\omega_K$  của lớp K, là dãy tỉ số giữa tổng số photon  $\sum n_i$  của tất cả các vạch trong dãy K phát ra với số lõi trống  $N_K$  của lớp K được tạo ra trong cùng thời gian ấy.

$$\omega_K = \frac{\sum n_i}{N_K} = \frac{1}{N_K} (n_{K\alpha 1} + n_{K\alpha 2} + n_{K\beta}) \quad (1.16)$$

Thường hiệu suất huỳnh quang khác nhau đối với các nguyên tố khác nhau và trong cùng một nguyên tố thì hiệu suất huỳnh quang cũng khác nhau đối với các lớp khác nhau, Eugene P. Berlin đã đưa ra công thức bán thực nghiệm:

$$\omega_i = \frac{Z^4}{A_i + Z^4} \quad (1.17)$$

trong đó,  $A_i = 1,08 \cdot 10^6$  đối với lớp K và  $A_i = 10^8$  đối với lớp L.

Một cách tổng quát, hiệu suất huỳnh quang  $\omega$  đối với một lớp cho trước được xác định theo công thức bán thực nghiệm:

$$\left( \frac{\omega}{1-\omega} \right)^{\frac{1}{4}} = a + bZ + cZ^2 \quad (1.18)$$

với a, b, c là những hằng số cho trong bảng 1.1.

Bảng 1.1: Các hệ số tương ứng với các lớp vỏ nguyên tử

Hệ số	K	L	M
a	-0,03795	-0,11107	-0,00036
b	0,03426	0,01368	0,00386
c	-0,1163x10 <sup>-5</sup>	0,2177x10 <sup>-6</sup>	0,201101x10 <sup>-6</sup>

### 1.3. CƯỜNG ĐỘ HUỲNH QUANG THÚ CẤP

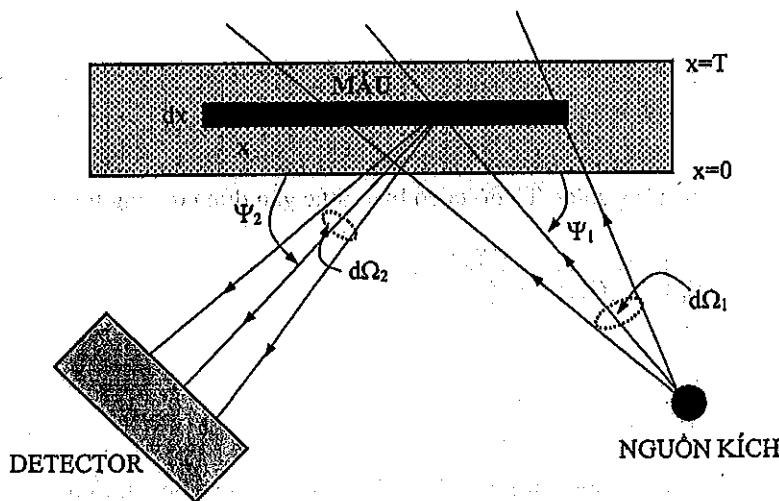
#### 1.3.1. Biểu thức tổng quát

Để thiết lập mối quan hệ giữa hàm lượng của nguyên tố có trong mẫu với cường độ tia X đặc trưng phát ra từ mẫu, ta xét một chùm tia X có năng lượng trong khoảng  $E_0$  đến  $E_0 + dE_0$  phát ra từ máy phát tia X hoặc một nguồn đồng vị (để đơn giản ta xem như nguồn điểm) trong một góc khối  $d\Omega_1$  đặt lên bề mặt của mẫu có bề dày T dưới một góc  $\Psi_1$  (hình 1.11). Số photon tới bề mặt của mẫu trong một đơn vị thời gian sẽ là  $I_0(E_0)dE_0d\Omega_1$ .

Để di tích vi cáp có bề dày dx ở độ sâu x (nơi xảy ra tương tác quang điện) chùm tia X sơ cấp phải truyền qua một đoạn đường  $x / \sin \Psi_1$ . Khi đó cường độ tia X sơ cấp tới lớp dx này sẽ là:

$$I_1 = I_0(E_0)dE_0d\Omega_1 \exp\left(-\mu(E_0)\rho \frac{x}{\sin \Psi_1}\right) \quad (1.19)$$

Ở đây,  $\mu(E_0)$  là hệ số suy giảm khối tổng cộng ( $\text{cm}^2/\text{g}$ ) ở năng lượng  $E_0$ , đối với mẫu có mật độ nguyên tử  $\rho$ .



Hình 1.11: Bố trí hình học phép đo cường độ huỳnh quang thứ cấp

Khi xuyêng qua bìa dày vi phân này, tia X di chuyển một đoạn  $dx/\sin \Psi_1$ . Do đó, số tia X gây nên tương tác quang điện trong quá trình này (tính trên một đơn vị thời gian) là:

$$I_2 = I_1 \tau(E_0) \rho \frac{dx}{\sin \Psi_1} \quad (1.20)$$

Ở đây,  $\tau(E_0)$  là hệ số hấp thụ khối quang điện tổng cộng, có đơn vị  $\text{cm}^2/\text{g}$  và được tính theo công thức:

$$\tau(E_0) = \sum_m w_m \tau_m(E_0) \quad (1.21)$$

trong đó,  $w_m$  là hàm lượng của nguyên tố thứ m,  $\tau_m(E_0)$  là hệ số hấp thụ khối quang điện tổng cộng của nguyên tố thứ m.

Vậy với nguyên tố thứ i, số tia X gây nên tương tác quang điện sẽ là

$$I_3 = w_i \frac{\tau_i(E_0)}{\tau(E_0)} I_2 = I_1 w_i \tau_i(E_0) \rho \frac{dx}{\sin \Psi_1} \quad (1.22)$$

Trong phương trình (1.22), số hạng  $\tau_i(E_0)$  là do sự ion hóa của các tầng trong vỏ nguyên tử ở năng lượng liên kết electron nhỏ hơn năng lượng  $E_0$  của photon kích thích. Ví dụ ta chỉ xét tầng K, khi đó ta có:

$$\begin{aligned} I_4 &= [\tau_{ki}(E_0) / \tau_i(E_0)] I_3 \\ &= I_1 w_i \tau_{ki}(E_0) \rho \frac{dx}{\sin \Psi_1} \end{aligned} \quad (1.23)$$

với,  $\tau_{ki}$  là hệ số hấp thụ khối quang điện của nguyên tố thứ i, ứng với tầng K xác định. Tỉ số thay đổi đột ngột ở cạnh hấp thụ được xác định:

$$r_k = \frac{\tau_+(\phi_k)}{\tau_-(\phi_k)} \quad (1.24)$$

với,  $\tau_+(\phi_k)$  và  $\tau_-(\phi_k)$  là giá trị cao nhất và thấp nhất của hệ số hấp thụ khói quang điện tại năng lượng cạnh hấp thụ  $\phi_k$  (sự bất liên tục tại cạnh K).

Đối với năng lượng gần năng lượng cạnh hấp thụ, thì các đoạn đồ thị của  $\tau_i(E)$  về hai phía  $E < \phi_k$  và  $E > \phi_k$  gần như song song. Từ đó ta có biểu thức gần đúng ở năng lượng  $E_0$  như sau:

$$\frac{\tau_i(E_0)}{\tau_i(E_0) - \tau_{ki}(E_0)} \approx \frac{\tau_+(\phi_k)}{\tau_-(\phi_k)} = r_k \quad (1.25)$$

Hay,

$$\tau_{ki}(E_0) \approx \tau_i(E_0) \frac{r_k - 1}{r_k} \quad (1.26)$$

Phương trình (1.23) cho biết cường độ ion hóa ở tầng K của nguyên tố thứ i. Sau ion hóa, các lỗ trống ở tầng K được lấp đầy bởi các electron chuyển dịch từ các tầng có năng lượng liên kết thấp hơn. Trong một số dịch chuyển này các electron Auger được phóng thích. Hiện tượng phóng thích electron Auger không đóng góp vào việc phát tia X thứ cấp, nên ta phải loại bỏ, nghĩa là chỉ tính đến sự phát huỳnh quang. Với hiệu suất phát huỳnh quang từ tầng K của nguyên tố thứ i là  $\omega_{ki}$ , cường độ tia X phát từ tầng K của nguyên tố thứ i là

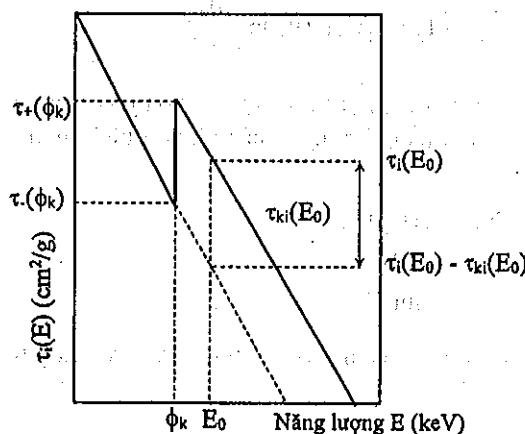
$$I_5 = \omega_{ki} I_4 \quad (1.27)$$

Một cách tổng quát, chì một vạch trong chuỗi K là được đo. Năng lượng của vạch này được xác định là  $E_1$ . Nếu vạch này chiếm tỉ lệ f trong tổng số các vạch trong chuỗi K, thì cường độ tia X phát ra ứng với vạch này là

$$I_6 = f \cdot I_5 \quad (1.28)$$

Để tính đằng hướng của chùm ra,  $I_6$  là tính cho toàn bộ góc khói  $\Omega$ . Vậy số tia X thứ cấp hướng tới detector theo góc khói  $d\Omega_2$  là

$$I_7 = I_6 \cdot \left( \frac{d\Omega_2}{4\pi} \right) \quad (1.29)$$



Hình 1.13: Mô hình suy diễn giá trị của  $\tau_{ki}(E_0)$

Sau khi phát ra từ nguyên tố thứ i trong mẫu, tia X đặc trưng có thể bị hấp thụ trên quãng đường  $x / \sin \Psi_2$  trong mẫu. Vì vậy khi ló ra khỏi mẫu, cường độ tia X đặc trưng sẽ là

$$I_s = I_i \cdot \exp\left(-\mu(E_i) \rho \frac{x}{\sin \Psi_2}\right) \quad (1.30)$$

Ở đây,  $\mu(E_i)$  là hệ số suy giảm khói tổng cộng khi tia X đặc trưng với năng lượng  $E_i$  truyền trong mẫu. Nếu hiệu suất ghi của detector đối với năng lượng  $E_i$  là  $\eta(E_i)$  thì cường độ tia X ghi nhận được trong detector sẽ là

$$I dx dE_0 = \eta(E_i) I_s \quad (1.31)$$

Trong thực tế, nguồn kích thích không là nguồn điểm. Như vậy cường độ của vạch i phát ra từ dây K do các nguyên tố i thuộc lớp vi phân  $dx$  của mẫu, kích thích bởi một đơn vị diện tích  $ds$  của nguồn kích là:

$$dI = I ds dx dE_0 =$$

$$\frac{\eta(E_i)}{4\pi \sin \Psi_1} I_0 \tau_{ki} \omega_{ki} f w_i \rho \exp\left(-\rho x \left[\frac{\mu(E_0)}{\sin \Psi_1} + \frac{\mu(E_i)}{\sin \Psi_2}\right]\right) dx d\Omega_1 d\Omega_2 \quad (1.32)$$

Trên đây ta mới khảo sát quá trình quang điện xảy ra trong phần tử thể tích vi phân có bề dày  $dx$  (trong khoảng  $x$  đến  $x + dx$ ), đối với phần năng lượng kích thích trong khoảng  $E$  đến  $E + dE$ . Vậy để tính cường độ của một vạch phổ đặc trưng cho nguyên tố trong mẫu thì phải lấy tích phân phương trình (1.32), trên toàn diện tích hiệu dụng của nguồn kích thích, trên các góc đặc giới hạn, và trên bề dày mẫu, trong khoảng năng lượng từ năng lượng cạnh hấp thụ  $\phi_k$  đến năng lượng cực đại  $E_{max}$  trong phổ kích thích. Trong quá trình thực hiện tích phân, ta xem  $\Psi_1, \Psi_2$  như không đổi; điều này có thể đạt được nếu khoảng cách từ nguồn đến mẫu và từ mẫu đến detector rất lớn so với bề dày mẫu, ta có:

$$I_i(E_i) = \iiint ds d\Omega_1 d\Omega_2 \int_{E_0=\phi_k}^{E_{max}} \int_0^T I dx dE_0$$

$$I_i(E_i) = G_0 w_i \int_{E_0=\phi_k}^{E_{max}} Q_{if}(E_0) \frac{1 - \exp\left(-\rho T \left[\frac{\mu(E_0)}{\sin \Psi_1} + \frac{\mu(E_i)}{\sin \Psi_2}\right]\right)}{\frac{\mu(E_0)}{\sin \Psi_1} + \frac{\mu(E_i)}{\sin \Psi_2}} I_0(E_0) dE_0 \quad (1.33)$$

$$\text{Ở đây: } Q_{if} = \frac{\eta(E_i)}{4\pi} \tau_{ki} \omega_{ki} f \approx \frac{\eta(E_i)}{4\pi} \frac{r_k - 1}{r_k} \tau_i \omega_{ki} f \quad (1.34)$$

$$G_0 = \iiint ds d\Omega_1 d\Omega_2 \frac{1}{\sin \Psi_1} \quad (1.35)$$

$G_0$  chỉ phụ thuộc vào bô trí hình học của nguồn kích thích.

Trong trường hợp nguồn kích là đơn năng, ta có:

$$I_i(E_i) = Q_{if} G_0 I_0 w_i \frac{1 - \exp\left(\rho T \left[ \frac{\mu(E_0)}{\sinh \Psi_1} + \frac{\mu(E_i)}{\sin \Psi_2} \right] \right)}{\frac{\mu(E_0)}{\sinh \Psi_1} + \frac{\mu(E_i)}{\sin \Psi_2}} \quad (1.36)$$

### 1.3.2. Trường hợp mẫu dày vô hạn

Đối với mẫu dày vô hạn (hấp thụ 99% khi chiếu tia X vào), thì ta có thể bỏ các số hạng hàm mũ trong các phương trình (1.33) và (1.36). Như vậy đối với mẫu dày vô hạn, cường độ huỳnh quang thứ cấp là:

- Trường hợp nguồn kích đa năng:

$$I_i(E_i) = G_0 w_i \int_{E_0=\phi_k}^{E_{max}} \frac{Q_{if}(E_0) I_0(E_0)}{\frac{\mu(E_0)}{\sinh \Psi_1} + \frac{\mu(E_i)}{\sin \Psi_2}} dE_0 \quad (1.37)$$

- Trường hợp nguồn kích đơn năng:

$$I_i(E_i) = Q_{if} G_0 I_0 \frac{w_i}{\frac{\mu(E_0)}{\sinh \Psi_1} + \frac{\mu(E_i)}{\sin \Psi_2}} \quad (1.38)$$

### 1.3.3. Trường hợp mẫu mỏng

Đối với mẫu mỏng (các lớp sơn, mạ, màu, phim ...), ta có

$$\exp\left[-\rho T \left( \frac{\mu(E_0)}{\sinh \Psi_1} + \frac{\mu(E_i)}{\sin \Psi_2} \right)\right] \approx 1 - \left[ -\rho T \left( \frac{\mu(E_0)}{\sinh \Psi_1} + \frac{\mu(E_i)}{\sin \Psi_2} \right) \right]$$

Do đó cường độ tia X huỳnh quang thứ cấp đối với mẫu mỏng là

- Trường hợp nguồn kích đa năng:

$$I_i(E_i) = G_0 w_i \rho T \int_{E_0=\phi_k}^{E_{max}} Q_{if}(E_0) I_0(E_0) dE_0 \quad (1.39)$$

- Trường hợp nguồn kích đơn năng:

$$I_i(E_i) = Q_{if} G_0 I_0 w_i \rho T \quad (1.40)$$

## BÀI TẬP CHƯƠNG 1

- 1.1. Có  $5 \cdot 10^6$  tia gamma, mỗi tia mang năng lượng 600 keV, tới lớp Pb dày 2 cm. Hỏi có bao nhiêu tia gamma truyền qua được lớp Pb? Biết mật độ của Pb là  $11,35 \text{ g/cm}^3$  và hệ số suy giảm khối tại năng lượng này là  $0,125 \text{ cm}^2/\text{g}$ .
- 1.2. Xác định bề dày của lớp Pb để giảm cường độ chùm tia gamma năng lượng 600 keV đi 1000 lần. Biết mật độ của Pb là  $11,35 \text{ g/cm}^3$  và hệ số suy giảm khối tại năng lượng này là  $0,125 \text{ cm}^2/\text{g}$ .
- 1.3. Xác định bề dày của lớp Pb để giảm cường độ chùm tia X năng lượng 30 keV đi 1000 lần. Biết mật độ của Pb là  $11,35 \text{ g/cm}^3$  và hệ số suy giảm khối tại năng lượng này là  $29,7 \text{ cm}^2/\text{g}$ .
- 1.4. Giả sử bạn muốn dùng tấm Al để che chắn chùm tia X như bài 1.3. Xác định bề dày của lớp Al để giảm cường độ chùm tia X năng lượng 30 keV đi 1000 lần. Biết mật độ của Al là  $2,7 \text{ g/cm}^3$  và hệ số suy giảm khối tại năng lượng này là  $1,12 \text{ cm}^2/\text{g}$ .
- 1.5. Xác định hệ số suy giảm tuyến tính của Cu. Biết rằng bề dày một nửa của Cu là 1 mm (Bề dày ứng với cường độ tia X giảm  $1/2$  so với cường độ ban đầu của nó). Từ đó xác định hệ số suy giảm khối của Cu? Biết  $\rho_{\text{Cu}} = 8930 \text{ Kg/m}^3$ .
- 1.6. Bề dày một nửa của Al là 3,2 mm. Xác định hệ số suy giảm tuyến tính của nhôm.
- 1.7. Một chùm tia X sau khi qua một lớp nước tinh khiết dày 10 cm giảm còn  $1/3$  so với cường độ ban đầu của nó. Biết thành phần hydrô chiếm 80% trong nước và mật độ khối của nước là  $1 \text{ kg/dm}^3$ . Hệ số suy giảm khối của Oxy gấp 4 lần hệ số suy giảm khối của hydrô. Xác định hệ số suy giảm khối của H và O.
- 1.8. Xác định hệ số suy giảm khối của  $\text{Fe}_2\text{O}_3$ , biết hệ số  $\mu_{\text{Fe}} = 35,1 \text{ cm}^2/\text{g}$  và  $\mu_{\text{O}} = 0,95 \text{ cm}^2/\text{g}$ .
- 1.9. Một photon có bước sóng 6000 nm va chạm với một electron đứng yên. Sau tán xạ, photon có độ thay đổi bước sóng đúng bằng một bước sóng Compton. Tính: (a) góc photon sau tán xạ, (b) độ thay đổi năng lượng photon sau tán xạ.
- 1.10. Một photon có bước sóng 6000 nm tán xạ lên electron đứng yên. Electron bị giật lùi với năng lượng 60 keV. Tính năng lượng photon sau tán xạ và góc tán xạ của photon đó.
- 1.11. Một photon có tần số  $v_0$  tán xạ lên một electron đứng yên và di chuyển theo hướng hợp với hướng tới một góc  $60^\circ$ . Nếu tần số photon sau tán xạ bằng  $1/2$  tần số photon tới, hãy tính tần số photon tới.
- 1.12. Chứng minh rằng nếu năng lượng của chùm tia X tới nhỏ hơn nhiều so với năng lượng nghỉ của electron thì tán xạ Compton không thể xảy ra.
- 1.13. Mẫu Ag được kích thích bằng vạch  $K_\alpha$  của W ( $E-K_\alpha = 59,1 \text{ keV}$ ). Các quang electron trên lớp vỏ M bị kích thích trực tiếp bay ra có động năng 58,6 keV. Thêm vào đó, electron trên lớp vỏ M của Ag cũng bị kích thích bởi tia X vạch  $K_\alpha$  của Ag ( $E-K_\alpha = 22,1 \text{ keV}$ ) qua quá trình Auger. Tính động năng của các electron Auger này.
- 1.14. Tính hiệu suất huỳnh quang lớp vỏ K và L của Cu, Zr và U.
- 1.15. Hiệu suất huỳnh quang lớp vỏ K của một nguyên tố X đo được là 0,8418. Hỏi X là nguyên tố nào?
- 1.16. a) Xác định hiệu suất huỳnh quang lớp K của Cu.  
b) Tính tỉ số giữa hiệu suất huỳnh quang lớp L và K của Zn.

- 1.17. Ba cạnh hấp thụ vạch L ( $L_I$ ,  $L_{II}$  và  $L_{III}$ ) của Cu là 1096,1; 951,0; và 931,1 eV, cạnh hấp thụ vạch K là 8,9789 keV. Tính bước sóng các vạch  $Cu-K_{\alpha 1}$  và  $Cu-K_{\alpha 2}$ .
- 1.18. Trong nguyên tử Ag ( $Z = 47$ ), năng lượng tia X vạch  $K_{\alpha} = 21,990$  keV và  $K_{\beta} = 25,145$  keV. Năng lượng liên kết của electron trên lớp K là  $E_K = 25,514$  keV. Tính: (a) năng lượng vạch  $L_{\alpha}$ , (b) năng lượng liên kết của electron trên lớp L.
- 1.19. Tính năng lượng photon tia X nếu bước sóng của nó là: a) 1 nm; b) 0,1 nm.
- 1.20. Có bao nhiêu vạch tia X được phép trong phép dịch chuyển  $K_{\alpha}$ ,  $K_{\beta}$  và  $L_{\alpha}$  trong Sn ( $Z = 50$ )? Vẽ sơ đồ mức năng lượng cho thấy các vạch được phép dịch chuyển tia X trong lớp vỏ nguyên tử Sn (Chỉ đến mức  $n = 3$ ).

## Chương 2

# CÁC PHƯƠNG PHÁP PHÂN TÍCH HUỲNH QUANG TIA X

### 2.1. PHƯƠNG PHÁP PHÂN TÍCH ĐỊNH TÍNH

Khi nguyên tử nhận một năng lượng từ bên ngoài, thì sẽ có electron nào đó của nguyên tử có thể nhận được năng lượng này, nếu năng lượng nhận được lớn hơn năng lượng liên kết của electron trong nguyên tử thì nó bị bức khói nguyên tử và ở lớp vỏ nguyên tử hình thành một lỗ trống. Nguyên tử bây giờ ở trạng thái kích thích, trạng thái này không bền, ngay sau đó các electron ở các tầng ngoài nhảy về lớp lỗ trống mới và lại xảy ra những dịch chuyển tiếp theo của các electron từ các tầng ngoài.

Sự dịch chuyển electron từ các tầng ngoài về lớp lỗ trống tuân theo qui tắc lựa chọn trong cơ học lượng tử:

$$\Delta n > 0$$

$$\Delta l = \pm 1$$

$$\Delta j = \pm 1; 0$$

với,  $n$  là số lượng tử chính,  $l$  là số lượng tử quỹ đạo, và  $j = |\ell \pm 1/2|$  là số lượng tử toàn phần.

Mỗi lần có sự dịch chuyển của electron từ tầng ngoài (năng lượng kích thích cao hơn) về tầng thấp thì có một năng lượng được giải phóng. Nếu năng lượng đó phát ra dưới dạng photon thì hiện tượng này được gọi là hiện tượng huỳnh quang. Bức xạ phát ra được gọi là bức xạ huỳnh quang tia X đặc trưng. Những thông tin định tính từ phổ tia X là năng lượng của tia X đặc trưng phát ra từ mẫu xuất hiện trên phổ. Cơ sở cho sự phân tích định tính là phổ đặc trưng huỳnh quang tia X cho tất cả các nguyên tố đều có dạng giống nhau, nhưng bước sóng ở các vạch đặc trưng cho mỗi nguyên tố phụ thuộc vào bậc số nguyên tử  $Z$  theo định luật Moseley:

$$\sqrt{\frac{1}{\lambda}} = K(Z - \sigma) \quad (2.1)$$

trong đó,  $K$  và  $\sigma$  là hằng số tương ứng với từng dãy vạch phổ.

#### 2.1.1. Các vạch K

Một khi lỗ trống được tạo thành trong lớp K bởi hiệu ứng quang điện, các electron từ các tầng L, M,... vận chuyển về lớp lỗ trống ở tầng K và kèm theo sự phát xạ các tia X đặc trưng dãy K:  $K_{\alpha 1}$ ,  $K_{\alpha 2}$ ,  $K_{\beta}$ .

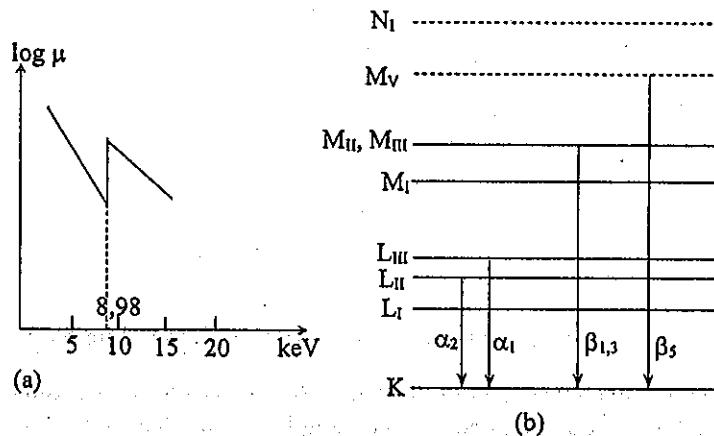
Quá trình kích thích và phát quang electron tầng K của Cu được biểu diễn trên hình 2.1. Hình 2.1(a) biểu diễn hệ số hấp thụ của Cu theo năng lượng tia X từ 0 tới 20 keV, trong đó 8,98 keV là năng lượng cạnh hấp thụ  $\phi_K$  của Cu. Hình 2.1(b) biểu thị các mức năng lượng electron của Cu. Tia X có năng lượng lớn hơn 8,98 keV kích nguyên tử Cu phát quang electron tầng K.

Hình 2.1(b) biểu thị sự chuyển mức vạch K của Cu. Nghiên cứu bảng số liệu (bảng 2.1), ta thấy có sự tương quan giữa cường độ tương đối của các vạch K. Vạch  $K_{\alpha 1}$  sinh ra do sự chuyển mức từ  $L_{II}(2p_{3/2}) \rightarrow K(s_{1/2})$  và vạch  $K_{\alpha 2}$  sinh ra do sự chuyển mức từ  $L_{II}(2p_{1/2}) \rightarrow K(1s_{1/2})$ . Quỹ đạo  $L_{II}(2p_{3/2})$  chứa bốn electron, quỹ đạo  $L_{II}(2p_{1/2})$  chứa hai electron. Vì vậy, tỉ số cường độ quan sát là 2 : 1 đối với vạch  $K_{\alpha 1}$  và  $K_{\alpha 2}$  là kết quả của xác suất thống kê của sự chuyển mức. Mặc dù hai vạch

này sinh ra từ sự chuyển mức khác nhau nhưng năng lượng của chúng rất gần nhau đến nỗi khó phân biệt được. Thông thường năng lượng trung bình của những vạch này được cho bởi phương trình:

$$E_{K\alpha} = \frac{2E_{K\alpha 1} + E_{K\alpha 2}}{3} \quad (2.2)$$

Vạch  $K\beta$  xuất hiện ở năng lượng cao hơn vạch  $K\alpha$ , do sự dịch chuyển electron từ tầng M về lớp lõi trống ở tầng K. Cường độ tương đối của vạch  $K\alpha$  và  $K\beta$  là một hàm phức tạp do sự khác nhau giữa những mức năng lượng của các tầng L và M. Tuy nhiên thực nghiệm cho thấy cường độ vạch phổ  $K\beta$  của các nguyên tố có bậc số nguyên tử Z từ 24 đến 30 thì xấp xỉ bằng 10% tới 13% cường độ tổng cộng của  $K\alpha$  và  $K\beta$ .



Hình 2.1: Các mức năng lượng electron  
a) Năng lượng cạnh hấp thụ của Cu  
b) Các vạch tia X đặc trưng phát ra

Bảng 2.1: Các mức dịch chuyển và cường độ tương đối của Cu

Vạch	Dịch chuyển	Cường độ tương đối	E(keV)
K <sub>α1</sub>	L <sub>III</sub> → K (2p <sub>3/2</sub> → 1s <sub>1/2</sub> )	63	8,047
K <sub>α2</sub>	L <sub>II</sub> → K (2p <sub>1/2</sub> → 1s <sub>1/2</sub> )	32	8,027
K <sub>β1</sub>	M <sub>III</sub> → K (3p <sub>3/2</sub> → 1s <sub>1/2</sub> )	5	8,903
K <sub>β3</sub>	M <sub>II</sub> → K (3p <sub>1/2</sub> → 1s <sub>1/2</sub> )		8,973
K <sub>β5</sub>	M <sub>V</sub> → K (3d <sub>5/2</sub> → 1s <sub>1/2</sub> )	< 1 (cảm)	8,970

### 2.1.2. Các vạch L

Các tia X vạch L phát ra khi có sự dịch chuyển electron từ tầng M, N về lớp đầy lõi trống trên tầng L. Vạch L<sub>α</sub> ứng với sự dịch chuyển từ tầng M về L và vạch L<sub>β</sub> ứng với sự dịch chuyển từ tầng N về L.

Khi năng lượng của photon tới không lớn hơn năng lượng cạnh hấp thụ  $\phi_K$  của nguyên tố cần phân tích, thì trên phổ ghi nhận được sẽ không có các vạch K đặc trưng. Trong trường hợp này ta quan sát các vạch L, M. Do có ba số lượng tử mômen góc đối với electron tầng L ứng với các quỹ đạo 2s<sub>1/2</sub>, 2p<sub>1/2</sub>, 2p<sub>3/2</sub> nên có ba cạnh hấp thụ là L<sub>I</sub>, L<sub>II</sub>, L<sub>III</sub>. Để kích thích tất cả ba dãy vạch L, năng lượng photon tới phải có giá trị lớn hơn  $\phi_L$ . Nếu dùng nguồn đồng vị để kích, bằng nguồn đồng vị

phát tia X cho thấy năng lượng được dùng lớn nhất khoảng 22 keV (nguồn Cd<sup>109</sup>), thì vạch L có giá trị đối với nguyên tố có bậc số nguyên tử Z lớn hơn 45 (Rh).

### 2.1.3. Các vạch M

Các tia X vạch M phát ra khi có sự dịch chuyển electron từ tầng N, O về lớp dày lỗ trống trên tầng M. Vạch M<sub>i</sub> ứng với sự dịch chuyển từ tầng N về M và vạch M<sub>j</sub> ứng với sự dịch chuyển từ tầng O về M.

Vạch M ít sử dụng trong phổ tia X. Không quan sát thấy đối với nguyên tố có bậc số nguyên tử Z < 57. Trong thực tế chỉ dùng cho ba nguyên tố Th, U, Pa. Chúng được dùng trong trường hợp để tránh sự giao thoa với vạch L của những nguyên tố khác trong mẫu.

## 2.2. CÁC PHƯƠNG PHÁP PHÂN TÍCH ĐỊNH LƯỢNG

### 2.2.1. Phương pháp chuẩn ngoại tuyến tính

Từ các phương trình (1.38), ta có:

- *Đối với mẫu phân tích:*

$$I_i(E_i) = K \frac{w_i}{\frac{\mu(E_0)}{\sin \Psi_1} + \frac{\mu(E_i)}{\sin \Psi_2}} \quad (2.3)$$

- *Đối với mẫu chuẩn:*

$$I_i^*(E_i) = K \frac{w_i^*}{\frac{\mu^*(E_0)}{\sin \Psi_1} + \frac{\mu^*(E_i)}{\sin \Psi_2}} \quad (2.4)$$

Ở đây:

$$\mu(E) = w_i \mu_i(E) + (1 - w_i) \mu_n(E)$$

$$\mu^*(E) = w_i^* \mu_i^*(E) + (1 - w_i^*) \mu_n^*(E) \quad (2.5)$$

với,  $\mu_i(E_0)$  và  $\mu_i(E_i)$  là hệ số suy giảm khối của nguyên tố i cần xác định tương ứng với bức xạ sơ cấp và thứ cấp.

$\mu(E_0)$  và  $\mu(E_i)$  là hệ số suy giảm khối của mẫu (có n nguyên tố i, j, k, ..l, ...) tương ứng với bức xạ sơ cấp và bức xạ thứ cấp.

Ta lập tỉ lệ (2.3) và (2.4):

$$\frac{I_i(E_i)}{I_i^*(E_i)} = \frac{w_i}{w_i^*} \frac{\frac{\mu^*(E_0)}{\sin \Psi_1} + \frac{\mu^*(E_i)}{\sin \Psi_2}}{\frac{\mu(E_0)}{\sin \Psi_1} + \frac{\mu(E_i)}{\sin \Psi_2}} \quad (2.6)$$

Nếu mẫu phân tích và mẫu chuẩn có thành phần hóa học như nhau và hàm lượng của nguyên tố cần xác định trong mẫu thay đổi nhỏ, thì ta có thể xem hệ số suy giảm khối  $\mu$  không đổi, nghĩa là  $\mu \approx \mu^*$ . Khi đó từ phương trình (2.6) ta có phương trình gần đúng:

$$w_i = \frac{I_i}{I_i^*} w_i^* \quad (2.7)$$

Đây là trường hợp đơn giản nhất, ta chỉ dùng một mẫu chuẩn. Tuy nhiên, nếu hàm lượng của nguyên tố cần xác định thay đổi trong một khoảng giới hạn lớn, thì phương trình (2.7) không áp dụng được. Trường hợp này ta phải dùng nhiều mẫu so sánh (thay thế mẫu chuẩn) và lập đồ thị  $I = f(w)$ . Thường thường đồ thị này có dạng tuyến tính:

$$w = aI + b \quad (2.8)$$

Đối với mỗi miền của đồ thị ta có thể dùng phương pháp bình phương tối thiểu để tính các giá trị  $a$  và  $b$ . Để chính xác, đôi khi đường chuẩn phải là một đa thức bậc hai hay lớn hơn. Tuy nhiên, kết quả phân tích còn chịu ảnh hưởng của các yếu tố bên ngoài và cường độ nguồn kích thích luôn thay đổi theo thời gian dẫn đến hiện tượng trôi phô và đường chuẩn đã lập trước đây không còn dùng được, chính vì vậy việc xác định đường chuẩn phải làm hàng ngày, hàng tuần. Để tránh tình trạng này người ta dùng tỉ số cường độ tương đối  $I/I_c$ . Trong đó  $I_c$  là cường độ của vạch tán xạ kết hợp hoặc vạch tán xạ không kết hợp. Phương trình (2.8) trở thành:

$$w = a \frac{I}{I_c} + b \quad (2.9)$$

Ở phương trình này, người ta pha chế các mẫu so sánh gần giống mẫu phân tích. Các mẫu này có hàm lượng nguyên tố cần xác định đã biết. Do đó đo cường độ bức xạ đặc trưng phát ra từ chúng, người ta xây dựng đường cong biểu diễn mối quan hệ giữa cường độ và hàm lượng. Với đường chuẩn này, khi biết cường độ ta có thể tính được hàm lượng nguyên tố cần phân tích.

Trong trường hợp vật liệu có thành phần hóa học đa dạng, nghĩa là  $\mu \neq \mu^*$ , ta có:

$$\frac{I_i(E_i)}{I_i^*(E_i)} = \frac{w_i}{w_i^*} \frac{\mu^*(E_i)}{\mu(E_i)} \quad (2.10)$$

Khi đó để xác định hàm lượng nguyên tố  $w_i$  trong mẫu ta chỉ cần biết hệ số suy giảm khối đối với tia X đặc trưng phát ra từ mẫu. Điều này được tìm thấy từ thực nghiệm bằng cách xây dựng đường cong hấp thụ biểu diễn mối liên hệ phụ thuộc của hệ số suy giảm khối vào năng lượng. Phương pháp thực nghiệm như sau:

- Đo cường độ  $I_0(E)$  khi chưa có mẫu và cường độ  $I(E)$  khi có mẫu.
- Từ phương trình (1.2) cho phép ta tính hệ số suy giảm khối  $\mu(E)$

$$\mu(E) = \frac{1}{\rho T} \ln \left( \frac{I_0(E)}{I(E)} \right) = \frac{S}{P} \ln \left( \frac{I_0(E)}{I(E)} \right) \quad (2.11)$$

Nhu vậy sử dụng các nguồn chuẩn tia X, thí dụ các nguồn chuẩn  $Fe^{55}$ ,  $Zn^{65}$ ,  $Cd^{109}$  và  $Am^{241}$  mà năng lượng các bức xạ được sử dụng trong bảng 2.2.

Bảng 2.2: Các nguồn kích thích huỳnh quang tia X

Nguồn	$Fe^{55}$	$Zn^{65}$	$Am^{241}$	$Am^{241}$	$Cd^{109}$
$E(keV)$	5,898 (Mn-K $\alpha$ )	8,047 (Cu-K $\alpha$ )	13,945 (Np-L $\alpha$ )	17,740 (Np-L $\beta$ )	22,162 (Ag-K $\alpha$ )

Từ bảng trên cho phép ta xây dựng được đường cong suy giảm khối  $\mu = \mu(E)$ . Khi đó với giá trị  $E_i$  ta suy ra được các giá trị tương ứng  $\mu(E_i)$  và  $\mu^*(E_i)$ . Từ phương trình (2.10) ta có biểu thức xác định được hàm lượng  $w_i$

$$w_i = \frac{I_i(E_i)}{I^*(E_i)} \frac{\mu(E_i)}{\mu^*(E_i)} w_i^* \quad (2.12)$$

Nếu trong vật liệu phân tích có chứa nguyên tố k, mà năng lượng cạnh hấp thụ  $\phi_k$  của nó nằm giữa năng lượng cạnh hấp thụ  $\phi_i$  và năng lượng  $E_i$  của tia X đặc trưng nguyên tố i cần phân tích:  $E_i < \phi_k < \phi_i$ , thì sự thay đổi hàm lượng của nguyên tố k sẽ dẫn đến sai số hệ thống trong kết quả phân tích. Trong trường hợp này ta phải tính toán ảnh hưởng của nguyên tố k lên cường độ tia X đặc trưng của nguyên tố i cần phân tích. Khi đó hàm lượng của nguyên tố i được tính theo phương trình sau:

$$w_i = \frac{I(E_i)\mu(E_i)w_i^*}{I^*(E_i)\mu^*(E_i)F(m)} \quad (2.13)$$

Ở đây,  $F(m)$  là hàm của m, với  $m = \mu(E_i)/\mu(E_k)$ .

$$F(m) = \alpha \frac{\mu(E_i)}{\mu(E_k)} \quad (2.14)$$

$\alpha$  là hệ số không đổi cho từng điều kiện phân tích đã chọn.

Giá trị  $F(m)$  xác định theo đồ thị mà được xây dựng bằng cách sử dụng nhóm mẫu so sánh với hàm lượng của nguyên tố i đã biết và thay đổi trong một khoảng giới hạn quanh giá trị  $w_i$  của mẫu phân tích, sao cho giá trị hệ số suy giảm khỏi  $\mu(E_i)$  đổi với toàn bộ nhóm mẫu so sánh được giữ nguyên không đổi. Khi đó từ phương trình (2.13), ta có:

$$F(m) = \frac{I^*(E_i)}{I^*(E_i)} \frac{w_i^*}{w_i} \quad (2.15)$$

Trong đó,  $I^*(E_i)$  và  $I^*(E_i)$  là cường độ tia X đặc trưng phát ra từ nguyên tố i trong một mẫu so sánh cố định a và trong một mẫu j  $\neq a$  thuộc nhóm mẫu so sánh. Với mẫu j ta có một giá trị  $F_j(m)$  tương ứng với một giá trị  $m = \frac{\mu(E_i)}{\mu(E_k)}$ . Các hệ số  $\mu(E_j)$  và  $\mu(E_k)$  được xác định theo phương trình (2.11).

Như vậy, do cường độ các vạch đặc trưng của các nguyên tố i và nguyên tố k trong mẫu phân tích và trong các mẫu so sánh ta xác định được các hệ số làm yếu khói, xây dựng được hàm  $F_j(m)$ . Từ đó ta tính được giá trị  $F(m)$  của mẫu phân tích. Dùng phương trình (2.12) ta tính được  $w_i$ .

### 2.2.2. Phương pháp phân tích với mẫu mỏng

Nếu bề dày mẫu phân tích  $T \rightarrow 0$  thì từ phương trình (1.40), ta có thể viết:

$$I_i(E_i) = K w_i \rho T \quad (2.16)$$

Phương trình trên cho thấy cường độ huỳnh quang phát ra từ mẫu mỏng không phụ thuộc thành phần hóa học của mẫu, nghĩa là không có sự hiện diện của các hệ số hấp thụ hay hệ số tăng cường. Do đó với mẫu mỏng ta loại được ảnh hưởng của hiệu ứng matrix. Để xác định như thế nào là mẫu mỏng ta có biểu thức sau:

$$\text{Sai số phân tích (\%)} = [1 - (1 - \alpha \rho T) \exp(\alpha \rho T)] 100\% \quad (2.17)$$

trong đó,

$$\alpha = \frac{\mu(E_0)}{\sin \Psi_1} + \frac{\mu(E_i)}{\sin \Psi_2} \quad (2.18)$$

Thí dụ: với  $\alpha = 100 \div 500 \text{ cm}^2/\text{g}$

$$\rho = 2 \div 5 \text{ g/cm}^3$$

$$T = 1 \div 10 \mu\text{m}$$

thì sai số phân tích mẫu mỏng được tính trong bảng 2.3.

Bảng 2.3: Sai số phân tích với mẫu mỏng

$\alpha \times \rho \times T$	Sai số (%) phương pháp mảng mỏng
0,010	0,005
0,100	0,535
0,135	1,000
0,200	2,290
0,500	17,600
0,750	47,100
1,000	100,000

Nếu đặt  $\rho T = \rho_s$  (mật độ bề mặt của mẫu), thì ta có tiêu chuẩn về độ mỏng còn được qui định theo độ chính xác như sau:

\* Đối với sự gần đúng 1%:

$$\rho_s \leq \frac{0,022}{\alpha_i w_i + \alpha_n (1 - w_i)} \quad (2.19)$$

\* Đối với sự gần đúng 10%:

$$\rho_s \leq \frac{0,195}{\alpha_i w_i + \alpha_n (1 - w_i)} \quad (2.20)$$

trong đó:  $\alpha_i = \frac{\mu_i(E_0)}{\sin \Psi_1} + \frac{\mu_i(E_i)}{\sin \Psi_2}$  (2.21)

$$\alpha_n = \frac{\mu_n(E_0)}{\sin \Psi_1} + \frac{\mu_n(E_i)}{\sin \Psi_2} \quad (2.22)$$

Sau khi xác định  $\rho_s$  theo các phương trình trên, đo cường độ phô, hàm lượng được tính theo phương trình:

$$w_i = \frac{I_i}{K \rho_s} \quad (2.23)$$

Ở đây K là hệ số không đổi, có thể xác định bằng thực nghiệm bởi một mẫu có hàm lượng biết trước.

Căn cứ phương trình (2.23) ta thấy rằng nếu  $\rho_s$  không đổi thì hàm lượng  $w_i$  tỉ lệ tuyến tính với cường độ  $I_i$ . Vậy nếu chuẩn bị các mẫu so sánh và mẫu phân tích có cùng khối lượng P và diện tích bề mặt S, thì để xác định hàm lượng  $w_i$  ta xây dựng đồ thị phân tích  $I_i = f(w_i)$  với bộ mẫu so sánh có hàm lượng nguyên tố phân tích đã biết.

Độ chính xác của phương pháp mẫu mỏng tùy thuộc vào độ đồng đều của các nguyên tố trên bề mặt mẫu, độ chính xác của phép đo và sự thực hiện điều kiện về "độ mỏng". Đôi khi để đạt đến "độ

mỏng" của lớp mẫu, người ta pha loãng bằng chất hấp thụ kém. Trong trường hợp này bề dày của lớp mẫu có thể đạt đến 1+2 mm mà vẫn thỏa mãn điều kiện "mỏng" của mẫu.

Phương pháp phân tích mẫu mỏng giảm thiểu được ảnh hưởng hiệu ứng matrix, tuy nhiên khuyết điểm của nó là sự phức tạp ở giai đoạn chuẩn bị mẫu "mỏng" và nhất là độ nhạy rất thấp.

### 2.2.3. Phương pháp chuẩn nội

Đưa vào mẫu phân tích một lượng nguyên tố B nào đó có bậc số nguyên tử khác bậc số nguyên tử của nguyên tố A cần phân tích một đơn vị (nhiều lăm là hai đơn vị). Nguyên tố này có hàm lượng đã biết trước, được gọi là nguyên tố chuẩn nội hay nguyên tố so sánh. Ta sẽ so sánh cường độ bức xạ đặc trưng của hai nguyên tố này. Ta có biểu thức liên hệ sau:

$$w_A = \Phi w_B \frac{I_A}{I_B} \quad (2.24)$$

với,  $w_B$  là hàm lượng nguyên tố so sánh trong mẫu,  $\Phi$  là hệ số cường độ, được xác định bằng thực nghiệm như sau:

- Dùng mẫu so sánh có hàm lượng nguyên tố A và nguyên tố B xác định, ta có:

$$\Phi = \frac{I_B}{I_A} \frac{w_A}{w_B} \quad (2.25)$$

Phương trình (2.24) và (2.25) được sử dụng tính  $w_A$  khi hàm lượng nguyên tố A ở các mẫu cần phân tích thay đổi trong một khoảng giới hạn không lớn. Trong trường hợp ngược lại thì phải tạo bộ mẫu so sánh có hàm lượng của các nguyên tố A và B xác định, trong đó hàm lượng của nguyên tố B như nhau trong các mẫu so sánh. Lập đồ thị phân tích:  $\frac{I_A}{I_B} = f(w_A / w_B)$ . Độ nghiêng của đường phân tích đặc trưng cho hệ số cường độ  $\Phi$ .

### 2.2.4. Phương pháp chuẩn độ nhạy

Từ phương trình (1.36) ta có:

$$I_i(E_i) = S w_i \frac{1 - \exp(-\alpha \rho T)}{\alpha} \quad (2.26)$$

với,  $S = Q_{lf} G_0 I_0$ : độ nhạy của hệ thống thiết bị phân tích đối với vạch phân tích,  $\alpha$  là khả năng hấp thụ của mẫu đối với bức xạ sơ cấp và thứ cấp,

$$\alpha = \frac{\mu_s(E_0)}{\sin \Psi_1} + \frac{\mu_s(E_i)}{\sin \Psi_2}$$

Sau khi đo cường độ  $I_i$ , từ phương trình (2.26) ta tính được hàm lượng của nguyên tố phân tích là:

$$w_i = \frac{I_i \alpha}{S(1 - \exp(-\alpha \rho T))} \quad (2.27)$$

Từ biểu thức  $S = Q_{lf} G_0 I_0$  ta thấy rằng  $S$  phụ thuộc vào nguyên tố cần phân tích, bố trí hình học và nguồn kích thích, mà không phụ thuộc vào dạng thức và thành phần cấu tạo nên mẫu. Vì vậy có thể dùng các mẫu chuẩn dày vô hạn có chứa nguyên tố phân tích i để tính  $S_i$ .

Đối với mẫu dày vô hạn, ta có:

$$I_i = Q_{if} G_0 I_0 \frac{w_i}{\alpha} = S \frac{w_i}{\alpha} \quad (2.28)$$

Như vậy về mặt thực nghiệm ta tiến hành các phép đo như sau:

- Chuẩn bị mẫu phân tích dưới dạng mẫu trung bình.
- Tạo một mẫu chuẩn dày vô hạn, có chứa nguyên tố cần phân tích với các thành phần đã biết, dùng để đo độ nhạy và làm chuẩn hấp thụ.
- Đo cường độ  $I_i^*(E_i)$  của vạch đặc trưng nguyên tố phân tích  $i$  phát ra từ mẫu chuẩn dày vô hạn. Khi đó độ nhạy  $S_i$  được xác định bởi hệ thức:

$$S_i = \frac{I_i^*(E_i) \alpha}{w_i} \quad (2.29)$$

Trong đó, để tính  $\alpha$  ta phải xác định các hệ số hấp thụ khói  $\mu_s(E_0), \mu_s(E_i)$  bằng cách tra bảng hoặc xác định bằng thực nghiệm theo công thức (2.11).

Để xác định  $\alpha\rho T$  ta đặt mẫu phân tích vào giữa mẫu chuẩn hấp thụ và detector, rồi đo cường độ  $I_2$ :

$$I_2(E_i) = I_i^*(E_i) \exp[-\alpha\rho T] + I(E_i)$$

Do đó giá trị  $\alpha\rho T$  được xác định bởi phương trình sau

$$\alpha\rho T = \ln\left(\frac{I_1}{I_2 - I}\right) \quad (2.30)$$

Trong đó  $I$  là cường độ vạch đặc trưng phát ra từ mẫu phân tích. Tất cả các phép đo đều được thực hiện trong cùng điều kiện hình học.

Với các giá trị  $S_i$  và  $\alpha\rho T$  tính được bằng thực nghiệm, thay vào phương trình (2.27) ta tính được hàm lượng  $w_i$  của nguyên tố  $i$  trong mẫu phân tích.

### 2.2.5. Phương pháp hàm kích thích

Từ phương trình tính cường độ bức xạ huỳnh quang thứ cấp (1.36) đổi với nguồn kích đơn năng:

$$I_i(E_i) = Q_{if} G_0 I_0 w_i \frac{1 - \exp\left(-\rho T \left[ \frac{\mu(E_0)}{\sin \Psi_1} + \frac{\mu(E_i)}{\sin \Psi_2} \right] \right)}{\frac{\mu(E_0)}{\sin \Psi_1} + \frac{\mu(E_i)}{\sin \Psi_2}}$$

Trong đó:  $Q_{if} = \frac{\eta(E_i)}{4\pi} \tau_{ki} \omega_{ki} f$

Do  $\tau_{ki}$  là hệ số hấp thụ khói quang điện của bức xạ đặc trưng nguyên tố  $i$ , nên nó là một hàm của  $Z_i$ . Do đó ta có thể đặt:

$$Q_{if} G_0 I_0 = F(Z_i) \quad (2.31)$$

Vì vậy,  $F(Z_i)$  được gọi là hàm kích thích.

Vậy phương trình (1.36) có thể viết lại như sau:

$$I_i(E_i) = F(Z_i)w_i \frac{1 - \exp\left[-\rho T \left\{\frac{\mu(E_0)}{\sin \Psi_1} + \frac{\mu(E_i)}{\sin \Psi_2}\right\}\right]}{\frac{\mu(E_0)}{\sin \Psi_1} + \frac{\mu(E_i)}{\sin \Psi_2}} \quad (2.32)$$

Thí nghiệm được bố trí sao cho các góc  $\Psi_1, \Psi_2$  gần bằng  $90^\circ$ . Khi đó ta có:

$$I_i(E_i) = F(Z_i)w_i \frac{1 - \exp[-\rho T(\mu(E_0) + \mu(E_i))]}{\mu(E_0) + \mu(E_i)} \quad (2.33)$$

Đối với mẫu mỏng, ta có:

$$I_i(E_i) = F(Z_i)w_i\rho T \quad (2.34)$$

Sử dụng các mẫu chuẩn mỏng đơn nguyên tố tương ứng với các giá trị  $Z$  khác nhau bao quanh giá trị  $Z_i$  của nguyên tố cần phân tích, bằng thực nghiệm ta đo các cường độ  $I$  của bức xạ đặc trưng các nguyên tố đó theo năng lượng vạch  $K, L, M, \dots$  trong các mẫu mỏng nói trên. Với các giá trị  $\rho, T$  đã biết của các mẫu mỏng ta tính được các giá trị  $F(Z)$  tương ứng từ phương trình:

$$F(Z) = \frac{I}{\rho T w} \quad (2.35)$$

Dùng phương pháp bình thường tối thiểu để thiết lập hàm kích thích  $F(Z)$  ứng với vạch  $K, L, M, \dots$  Do đó, với giá trị  $Z_i$  của nguyên tố cần phân tích ta có được giá trị  $F(Z_i)$  tương ứng. Đối với mẫu phân tích (mẫu mỏng), ta đo cường độ  $I_i$ , còn giá trị  $\rho T$  tính từ biểu thức:  $\rho T = \frac{P}{S}$

Thay các giá trị đã đo được vào phương trình (2.34), ta có:

$$w_i = \frac{I_i(E_i)}{F(Z_i) \frac{P}{S}} \quad (2.36)$$

Trường hợp không tạo được mẫu mỏng thì ta phải xác định các hệ số hấp thụ khối  $\mu(E_0), \mu(E_i)$  bằng cách tra bảng hoặc xác định bằng thực nghiệm theo công thức (2.11). Thay các giá trị có được vào phương trình (2.33) ta tính được  $w_i$ .

## 2.2.6. Phương pháp dung tisố cường độ định

Giả sử mẫu có  $n$  thành phần ( $i, j, k, l, \dots$ ) sao cho  $\sum_i^n C_i = 1$ , lập tisố hàm lượng nguyên tố tương ứng ta có hệ thống phương trình tuyến tính sau:

$$\begin{aligned} 1 + \frac{C_j}{C_i} + \frac{C_k}{C_i} + \frac{C_l}{C_i} + \dots &= \sum_{m=i,j,k,l}^n \frac{C_m}{C_i} = \frac{1}{C_i} \\ \frac{C_i}{C_j} + 1 + \frac{C_k}{C_j} + \frac{C_l}{C_j} + \dots &= \sum_{m=l,j,k,l}^n \frac{C_m}{C_j} = \frac{1}{C_j} \\ \frac{C_i}{C_k} + \frac{C_j}{C_k} + 1 + \frac{C_l}{C_k} + \dots &= \sum_{m=l,j,k,l}^n \frac{C_m}{C_k} = \frac{1}{C_k} \\ \dots \dots \dots \end{aligned} \quad (2.37)$$

Xây dựng đường chuẩn tỉ số cường độ đỉnh năng lượng huỳnh quang theo tỉ số hàm lượng nguyên tố tương ứng theo biểu thức sau:

$$\frac{I_i}{I_j} = a_n \left( \frac{C_i}{C_j} \right)^n + a_{n-1} \left( \frac{C_i}{C_j} \right)^{n-1} + \dots + a_0 \quad (2.38)$$

Như vậy với mẫu có ba thành phần ta có sáu đường chuẩn tương ứng. Để xác định hàm lượng mẫu phân tích, ta đo cường độ đỉnh huỳnh quang tương ứng sau đó thay vào các phương trình đường chuẩn để ngoại suy các tỉ số hàm lượng; sau đó thay các giá trị này vào hệ phương trình trên và dùng phương pháp lặp để tính hàm lượng.

## BÀI TẬP CHƯƠNG 2

- 2.1. Đối với tia X vạch  $K_{\alpha}$ , định luật Moseley được biểu diễn dưới dạng  $E = b(Z - a)^2$ . Năng lượng vạch  $K_{\alpha}$  của Zn ( $Z = 30$ ) và Sn ( $Z = 50$ ) là 8,627 keV và 25,157 keV. Tính các hằng số  $a$ ,  $b$  và từ đó suy ra xác định năng lượng vạch  $K_{\alpha}$  của Zr ( $Z = 40$ ).
- 2.2. Biết năng lượng vạch  $K_{\alpha}$  của các nguyên tố Ca, Cr, Cu lần lượt là 3,69 keV; 5,41 keV; 8,05 keV. Dùng định luật Moseley hãy xác định năn g lượng vạch  $K_{\alpha}$  của Ti ( $Z = 22$ ) và Ni ( $Z = 28$ ).
- 2.3. Để xác định thành phần các nguyên tố trong mẫu bằng phương pháp XRF, trước tiên ta phải chuẩn năng lượng cho hệ máy phân tích. Trong đó, ta dùng 3 nguồn chuẩn sau thời gian đo ta thu được kết quả sau:

Nguồn chuẩn	Năng lượng(keV)	Vị trí kênh
Fe-55	5,9	123
Zn-65	8,05	230
Cd-109	22,1	842

- a) Dùng phương pháp bình phương tối thiểu tuyến tính hãy xác định phương trình đường chuẩn năng lượng cho hệ máy.
- b) Mẫu được đo trên hệ máy này và thấy xuất hiện 5 đỉnh ứng với vị trí các kênh: 174; 198; 363; 639 và 760. Hãy cho biết các nguyên tố trong mẫu.
- 2.4. Một nhân viên an ninh đưa cho bạn một mẫu bột trắng và nhờ bạn xác định xem trong mẫu có thành phần nguyên tố nào. Khi dùng XRF để xác định bạn thấy trên nền phổ xuất hiện 2 đỉnh năng lượng vạch  $K_{\alpha}$  tại kênh 187 và 353. Bạn hãy cho biết trong mẫu có nguyên tố nào? Biết đường chuẩn năng lượng của máy phân tích ở thời điểm đo là:  $E = -0,4 + 0,031 \cdot K$  (keV). K: vị trí kênh.

- 2.5. Vẽ đồ thị Moseley đối với tia X vạch  $K_{\beta}$  của các nguyên tố cho ở bảng sau:

Nguyên tố	Vạch $K_{\beta}$ (keV)	Nguyên tố	Vạch $K_{\beta}$ (keV)	Nguyên tố	Vạch $K_{\beta}$ (keV)
Ne	0,858	Mn	6,51	Zr	17,7
P	2,14	Zn	9,57	Rh	22,8
Ca	4,02	Br	13,3	Sn	28,4

Xác định hệ số góc và điểm giao với trục Z.

- 2.6. Vẽ đồ thị Moseley đối với tia X vạch  $L_{\alpha}$  của các nguyên tố cho ở bảng sau:

Nguyên tố	Vạch $K_{\beta}$ (keV)	Nguyên tố	Vạch $K_{\beta}$ (keV)	Nguyên tố	Vạch $K_{\beta}$ (keV)
Mn	0,721	Zr	2,06	Cs	4,65
Zn	1,11	Rh	2,89	Nd	5,72
Br	1,60	Sn	3,71		

Xác định hệ số góc và điểm giao với trục Z.

2.7. Bước sóng tia X phát ra từ vạch  $L_{\alpha}$  của một nguyên tố X là 0,14299 nm. Bước sóng tia X phát ra từ vạch  $L_{\alpha}$  của nguyên tố Ir ( $Z = 77$ ) là 0,13485 nm. Biết hệ số màn chấn  $\sigma = 7,4$ . Xác định bậc số nguyên tử của nguyên tố X.

2.8. Xác định hàm lượng Cu trong mẫu giấy bằng phương pháp XRF với các số liệu cho ở bảng:

Hàm lượng mẫu chuẩn (%)	Diện tích đỉnh $K_{\alpha}$ -Cu
5	5290
10	8345
25	19120
30	25789

Xác định hàm lượng Cu trong mẫu. Biết rằng diện tích đỉnh  $K_{\alpha}$ -Cu trong mẫu đo được là 7125.

2.9. Xác định hàm lượng Cr và Mn trong mẫu cá người ta dùng bộ mẫu chuẩn có thành phần hóa học khác với mẫu cá, biết hàm lượng của Cr và Mn trong mẫu chuẩn là 5 mg/g và 15 mg/g. Diện tích của mẫu và chuẩn đo được là:

Vạch năng lượng	Mẫu phân tích	Mẫu chuẩn
$K_{\alpha}$ -Cr	18000	18600
$K_{\alpha}$ -Mn	15000	14600

Để xác định hệ số suy giảm tia X ta dùng 3 nguồn chuẩn: Fe-55; Zn-65 và Cd-109. Kết quả đo cho ở bảng:

a) Đối với mẫu phân tích:

Nguồn	Năng lượng (keV)	Cường độ (chưa có mẫu)	Cường độ (có mẫu)
Fe-55	5,898	15400	12500
Zn-65	8,040	16500	11680
Cd-109	22,162	18000	9500

b) Đối với mẫu chuẩn:

Nguồn	Năng lượng (keV)	Cường độ (chưa có mẫu)	Cường độ (có mẫu)
Fe-55	5,898	15400	11967
Zn-65	8,040	16500	11500
Cd-109	22,162	18000	9576

Biết: S/P = 1.

2.10. Xác định hàm lượng Cu bằng phương pháp chuẩn nội. Ta thêm vào mẫu một lượng Zn = 2 mg/g. Khi đo cường độ mẫu ta thu diện tích là 23500 ( $K_{\alpha}$ -Cu) và 25680 ( $K_{\alpha}$ -Zn). Để xác định hệ số tia X ta dùng các mẫu chuẩn và thu kết quả như sau:

Mẫu chuẩn	Hàm lượng (mg/g)	Cường độ
	2	15000

Cu	5	20000
	10	35000
Zn	3	30000

2.11. Một mẫu bụi có chứa Zn được đem phân tích hàm lượng bằng XRF, ta tiến hành làm thực nghiệm như sau:

- Mang chiếu mẫu (dạng trung bình) trong 30 phút thu được cường độ tại đỉnh là 15790 số đếm.
  - Dùng mẫu chuẩn (dày vô hạn) có hàm lượng 2 mg/g chiếu cùng thời gian và thu được 17600 số đếm.
  - Nếu ta để mẫu phân tích vào giữa mẫu chuẩn và detector thì thu được 16500 số đếm.
- Xác định độ nhạy của hệ phân tích.
  - Xác định hàm lượng của Zn trong mẫu.

Biết hệ số  $\alpha = 0,396$

2.12. Một mẫu chứa Ni và Cu và ta cần xác định hàm lượng bằng XRF. Ta dùng một bộ mẫu chuẩn Cr, V, Zn, Sn có hàm lượng như nhau là 2 mg/g. Kết quả thực nghiệm cho ở bảng sau:

Nguyên tố	Cường độ
V	200
Cr	250
Zn	600
Sn	800
Cu	760
Ni	810

Xác định hàm lượng Ni và Cu trong mẫu.

Biết tỉ số S/P = 1 cho tất cả các mẫu và chuẩn.

### Chương 3

## HIỆU ỨNG MATRIX VÀ CÁC PHƯƠNG PHÁP HIỆU CHỈNH

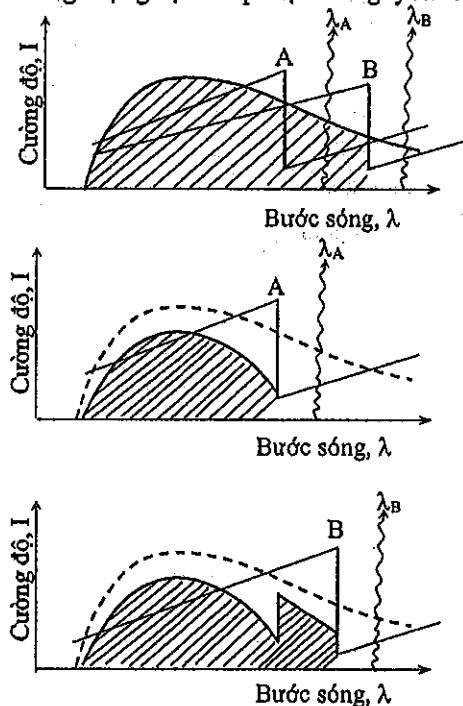
Trong nhiều loại mẫu thích hợp cho việc phân tích bằng phương pháp huỳnh quang tia X như mẫu hợp kim, khoáng quặng,... là những vật liệu nhiều thành phần. Vì vậy khi phân tích một nguyên tố chứa trong mẫu, người ta phải quan tâm đến những hiệu ứng xuất hiện do sự có mặt của các nguyên tố khác. Các hiệu ứng đó dẫn đến sự hấp thụ hay tăng cường bức xạ đặc trưng nguyên tố phân tích và ta gọi đó là hiệu ứng matrix. Vì vậy hiệu ứng matrix làm ảnh hưởng đến độ chính xác của phương pháp phân tích huỳnh quang tia X. Có hai loại hiệu ứng matrix chính: sự hấp thụ bức xạ huỳnh quang của nguyên tố muốn đo bởi các nguyên tố nặng trong mẫu (hiệu ứng hấp thụ) và sự gia tăng bức xạ huỳnh quang của nguyên tố này do bức xạ huỳnh quang có năng lượng cao hơn từ những nguyên tố khác chứa trong mẫu phân tích (hiệu ứng tăng cường).

### 3.1. CÁC HIỆU ỨNG HẤP THỤ VÀ TĂNG CƯỜNG

Các nguyên tố matrix không chỉ hấp thụ các bức xạ đặc trưng phát ra từ nguyên tố phân tích khi năng lượng cạnh hấp thụ của nó nhỏ hơn năng lượng bức xạ đặc trưng (hấp thụ thứ cấp) mà các nguyên tố matrix cũng hấp thụ cả phổ kích thích sơ cấp (hấp thụ sơ cấp). Điều này làm cho việc phân tích định hình lượng thêm khó khăn.

#### 3.1.1. Hiệu ứng hấp thụ sơ cấp

Hiệu ứng hấp thụ sơ cấp được miêu tả trong hình 3.1. Trong hiệu ứng này một phần nhỏ của phổ năng lượng kích thích sơ cấp là khả dụng kích thích một vài nguyên tố trong mẫu. Nếu năng lượng kích thích quá lớn so với năng lượng cạnh hấp thụ của nguyên tố thì hiệu suất kích thích không đáng kể.



Hình 3.1: Phổ sơ cấp có thể dùng kích thích các nguyên tố A và B (phần diện tích gạch chéo biểu thị phần bồ photon có thể dùng để kích thích)

Trong hình 3.1 nguyên tố A và B đều chịu sự kích thích của một miền nhỏ trong vùng liên tục của phổ năng lượng kích thích (phổ hấp). Các bước sóng tương ứng với các cạnh hấp thụ của A và B khác nhau, nên tùy vào các cạnh hấp thụ ứng với hai nguyên tố A và B mà dãy phổ năng lượng kích thích sơ cấp khả dụng hơn đối với một trong hai nguyên tố đó. Như vậy đối với một nguyên tố cho trước, hiệu suất kích thích của bức xạ sơ cấp không chỉ phụ thuộc vào cạnh hấp thụ của nguyên tố phân tích mà còn phụ thuộc vào các cạnh hấp thụ của các nguyên tố matrix. Điều đó có nghĩa là tồn tại một hiệu ứng do các nguyên tố matrix ảnh hưởng đến sự kích thích sơ cấp của một nguyên tố cho trước. Hiệu ứng này được gọi là hiệu ứng hấp thụ sơ cấp.

### 3.1.2. Hiệu ứng hấp thụ thứ cấp

Khi tia X huỳnh quang đặc trưng nguyên tố phân tích có năng lượng lớn hơn năng lượng hấp thụ của một vài nguyên tố matrix, một phần năng lượng bị hấp thụ bởi các nguyên tố matrix này nên cường độ bức xạ đặc trưng bị giảm. Hiệu ứng này gọi là hiệu ứng hấp thụ thứ cấp. Trong các phương trình diễn tả mối quan hệ giữa cường độ và hàm lượng ở chương 2, số hạng  $\mu(E_i)/\sin\Psi_2$  là độ hấp thụ khối toàn phần thứ cấp đối với một tia X riêng biệt có năng lượng  $E_i$  phát ra từ nguyên tố phân tích i.

Từ phương trình (2.3), ta có:

$$\frac{\mu(E_i)}{\sin\Psi_2} = \sum_j w_j \left( \frac{\mu_j(E_i)}{\sin\Psi_2} \right) \quad (3.1)$$

với,  $w_j$  là hàm lượng của nguyên tố j (j biểu diễn tất cả các loại nguyên tố chứa trong mẫu).

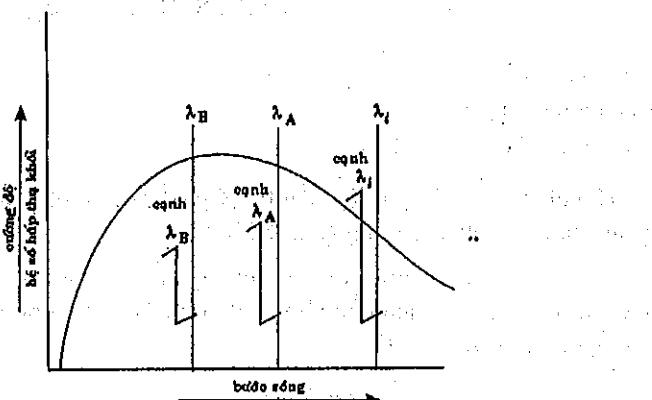
Độ hấp thụ khối toàn phần cho cả hai số hạng hấp thụ sơ cấp và thứ cấp là

$$\alpha_T(E_i) = \sum_j w_j \left( \frac{\mu_j(E_0)}{\sin\Psi_1} + \frac{\mu_j(E_i)}{\sin\Psi_2} \right) \quad (3.2)$$

Trong phương trình trên,  $\mu(E_0)$  biểu diễn độ hấp thụ của nguyên tố j đối với tia X sơ cấp có năng lượng  $E_0$ .

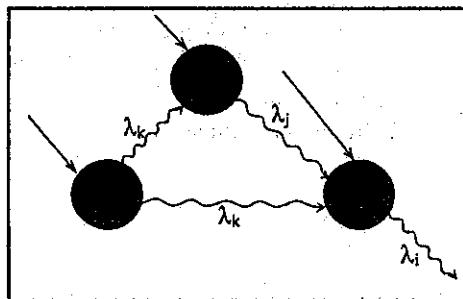
### 3.1.3. Hiệu ứng tăng cường

Quá trình căn bản dẫn đến hiệu ứng matrix là tia X đặc trưng phát ra từ các nguyên tố j nào đó, có năng lượng lớn hơn cạnh hấp thụ của nguyên tố i trong cùng mẫu, thì sẽ góp phần kích thích nguyên tố i phát quang. Do đó cường độ tia X đặc trưng đo được của nguyên tố i sẽ tăng theo hàm lượng của nguyên tố j (ta nói nguyên tố j tăng cường nguyên tố i). Ngược lại cường độ tia X đặc trưng nguyên tố j sẽ giảm khi hàm lượng nguyên tố i tăng. Hình 3.2 cho thấy rằng không chỉ vùng liên tục của phổ kích thích sơ cấp mà cả tia X phát ra từ các nguyên tố A và B đều có khả năng kích thích nguyên tố i phát huỳnh quang.



Hình 3.2: Các hiệu ứng hấp thụ giữa các nguyên tố

Một quá trình phức tạp hơn, đó là trường hợp nguyên tố j lại được một nguyên tố k (nguyên tố thứ ba) kích thích và nguyên tố k này cũng kích thích nguyên tố i phát quang. Quá trình này gọi là hiệu ứng nguyên tố thứ ba.



Hình 3.3: Sự tăng cường và hiệu ứng nguyên tố thứ ba

### 3.2. CÁC BIỂU THỨC CƠ BẢN

#### 3.2.1. Huỳnh quang cấp một

Huỳnh quang cấp một là một phần tia X phát ra từ nguyên tố do sự kích thích của nguồn sơ cấp. Từ phương trình (1.38) ta có biểu thức cường độ huỳnh quang cấp một đối với trường hợp kích thích bởi nguồn đơn năng:

$$A_i(E_i) = \frac{Q_{lf} G_0 I_0}{\sin \Psi_1} \frac{w_i}{\mu(E_0) + \frac{\sin \Psi_1}{\sin \Psi_2} \mu(E_i)} \quad (3.3)$$

trong đó, i là nguyên tố huỳnh quang,  $w_i$  là hàm lượng của nguyên tố i.

Đặt  $K_i = Q_{lf} G_0 I_0 / \sin \Psi_1$ ;  $S = \frac{\sin \Psi_1}{\sin \Psi_2}$ . Vậy,

$$A_i = K_i \frac{w_i}{\mu(E_0) + S\mu(E_i)} = K_i \frac{w_i}{\mu_{(hd)}} \quad (3.4)$$

với  $\mu_{(hd)} = \mu(E_0) + S\mu_i(E_i)$  là hệ số suy giảm khối hiệu dụng của mẫu cho cả bức xạ tới  $E_0$  và bức xạ huỳnh quang  $E_i$ .

#### 3.2.2. Huỳnh quang cấp hai

Huỳnh quang cấp hai là phần tia X phát ra từ một nguyên tố do sự kích thích của bức xạ huỳnh quang cấp một phát ra từ nguyên tố khác.

Guilliam và Heal tìm ra huỳnh quang cấp hai hay còn gọi là huỳnh quang tăng cường, nghĩa là nguyên tố i bị kích thích bằng bức xạ có lọc lựa của một vài nguyên tố j. Do đó phần cường độ tăng cường cho một vạch  $E_i$  là

$$B_{ij} = a_{ij} w_j A_i \quad (3.5)$$

với,

$$a_{ij} = \frac{1}{2} \varepsilon_j \frac{\mu_i(E_0)}{\mu_j(E_0)} \mu_i(E_j) L \quad (3.6)$$

trong đó:  $\mu_i(E_j)$  là hệ số hấp thụ khói của nguyên tố i đối với bức xạ năng lượng  $E_j$ ,  $\mu_i(E_0)$ ,  $\mu_j(E_0)$  là hệ số hấp thụ khói của các nguyên tố i, j đối với bức xạ có năng lượng  $E_0$ .

$$L = \frac{\ln\left(1 + \frac{\mu(E_0)}{\sin \Psi_1}\right)}{\frac{\mu(E_0)}{\sin \Psi_1}} + \frac{\ln\left(1 + \frac{\mu(E_1)}{\sin \Psi_2}\right)}{\frac{\mu(E_1)}{\sin \Psi_2}} \quad (3.7)$$

Trong (3.6),  $\varepsilon_j$  là hệ số kích thích của nguyên tố i đối với một vạch phô đã cho trước.

Ví dụ:  $\varepsilon_j$  đối với vạch  $K_\alpha$  là

$$\varepsilon_j = \frac{r_k - 1}{r_k} \omega_k f_{k\alpha} \quad (3.8)$$

và  $\frac{r_k - 1}{r_k}$  là xác suất kích thích nguyên tố j phát quang electron tầng K;  $\omega_k$  là hiệu suất huỳnh quang tầng K khi bức xạ kích thích có năng lượng  $E_j$ ;  $f_{k\alpha}$  xác suất bức xạ vạch  $K_\alpha$  (so với các vạch K khác).

Nếu cường độ vạch đặc trưng nguyên tố i được tăng cường bởi nhiều vạch (bức xạ đặc trưng) của một nguyên tố j thì  $S_{ij}$  được thay bằng một tổng  $S_{ij}^T$  tương ứng. Trường hợp nhiều nguyên tố j ( $\neq i$ ), thì ta có:

$$B_i = \sum_{j \neq i} B_{ij}^T \quad (3.9)$$

Cuối cùng cường độ tổng cộng của nguyên tố i là

$$I_i = A_i + B_i \quad (3.10)$$

Trường hợp nguồn kích đa năng, ta có:

- Cường độ huỳnh quang cấp một là

$$A_i = \frac{d\Omega}{4\pi} S \varepsilon_i w_i \int_{E_0=\phi_K}^{E_{max}} \frac{\mu_i(E_0) I(E_0) dE_0}{\mu(E_0) + S \mu(E_i)} \quad (3.11)$$

- Cường độ huỳnh quang cấp hai là

$$B_{ji} = \frac{1}{2} \frac{d\Omega}{4\pi} S \varepsilon_i w_i \int_{E_0=\phi_K}^{E_{max}} \frac{\mu_i(E_0) I(E_0) dE_0}{\mu(E_0) + S \mu(E_i)} \varepsilon_j w_j \quad (3.12)$$

### 3.2.3. Huỳnh quang cấp ba

Huỳnh quang cấp ba là phần tia X phát ra từ nguyên tố phân tích do sự kích thích của bức xạ huỳnh quang cấp hai phát ra từ một nguyên tố matrix. Còn hiệu ứng nguyên tố thứ ba xảy ra khi có sự kích thích chéo như nói ở trên, nghĩa là khi yếu tố thứ ba k vừa kích thích nguyên tố j phát huỳnh quang cấp hai vừa kích thích nguyên tố phân tích i phát quang.

Trong thực tế huỳnh quang cấp ba không đáng kể, nên ta không lập biểu thức cho trường hợp này. Như vậy với các công thức trên cho phép ta tính được cường độ huỳnh quang trong trường hợp phải tính đến hiệu ứng matrix.

### 3.3. CÁC HỆ SỐ CƠ BẢN

#### 3.3.1 Hệ số alpha – Phương trình Lanchance và Traill

Beattie và Brissey đã đưa ra các phương trình đối với mẫu ba thành phần như sau:

$$\begin{aligned} w_i &= R_i(w_i + K_{ij}w_j + K_{ik}w_k) \\ w_j &= R_j(w_j + K_{jk}w_k + K_{ji}w_i) \\ w_k &= R_k(w_k + K_{ki}w_i + K_{kj}w_j) \\ w_i + w_j + w_k &= 1 \end{aligned} \quad (3.13)$$

trong đó,  $R_i, R_j, R_k$  là các tỷ số cường độ đo được từ mẫu phân tích trên cường độ đo được từ mẫu tinh khiết tương ứng;  $K_{ij}, K_{jk}, K_{ki}$  là các hệ số hiệu chỉnh.

Với giả thiết nguồn kích thích đơn nồng  $E_0$ , Beattie và Brissey đã đưa ra các hệ số  $K$  cho trường hợp chỉ đơn thuần hiệu ứng hấp thụ như sau:

$$K_{ij} = \frac{\mu_j(E_0) + S\mu_j(E_i)}{\mu_i(E_0) + S\mu_i(E_i)} \quad (3.14)$$

Các hệ số này cũng có thể xác định bằng thực nghiệm bằng cách dùng bộ mẫu so sánh.

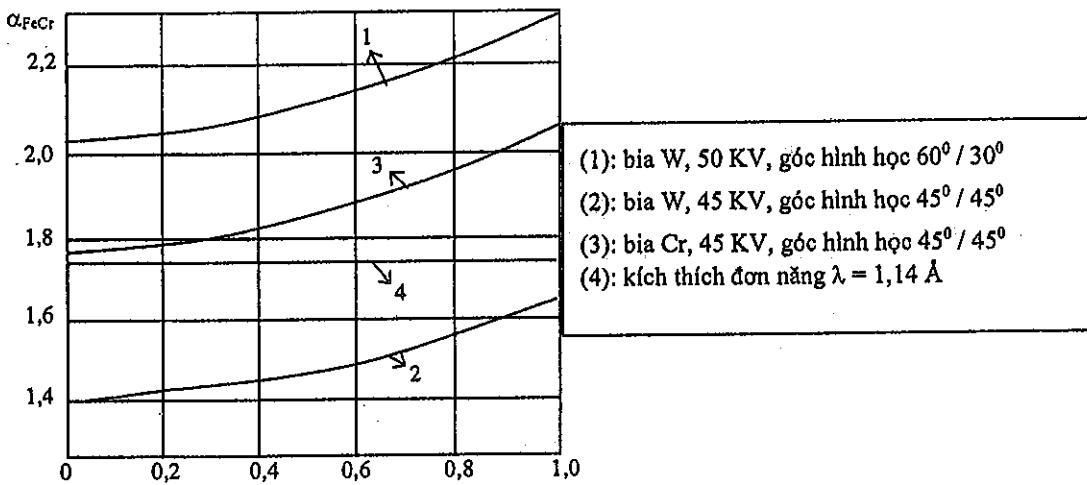
Trên cơ sở tổng quát hơn, Lanchance và Traill đã đưa ra hệ phương trình sau:

$$\begin{aligned} w_i &= R_i(1 + \alpha_{ij}w_j + \alpha_{ik}w_k) \\ w_j &= R_j(1 + \alpha_{jk}w_k + \alpha_{ji}w_i) \\ w_k &= R_k(1 + \alpha_{ki}w_i + \alpha_{kj}w_j) \end{aligned} \quad (3.15)$$

So sánh (3.13) và (3.15), ta có:

$$\begin{aligned} \alpha_{ij} &= K_{ij} - 1; \alpha_{jk} = K_{jk} - 1; \alpha_{ki} = K_{ki} - 1 \\ \text{Do đó: } \alpha_{ij} &= \frac{\mu_j(E_0) + S\mu_j(E_i)}{\mu_i(E_0) + S\mu_i(E_i)} - 1 \end{aligned} \quad (3.16)$$

Trong biểu thức (3.16),  $E_0$  là năng lượng bức xạ tới, nếu bức xạ đa nồng thì  $E_0$  là giá trị hiệu dụng. Rõ ràng đối với sự kích thích đơn sắc hệ số  $\alpha_{ij}$  là hằng số. Trong hình 3.4, khảo sát hệ Fe-Cr, nguyên tố phân tích Fe chỉ chịu sự hấp thụ bởi nguyên tố Cr, đồ thị (4) cho thấy với trường hợp kích thích đơn nồng hệ số  $\alpha_{FeCr}$  là hằng số.



Hình 3.4: Trường hợp chỉ có hấp thụ (hệ Fe-Cr)

### 3.3.2. Mẫu hai thành phần – Hấp thụ và tăng cường

Trong phương trình Lachance và Traill, các hệ số  $\alpha_{ij}$  tính theo biểu thức (3.16) chỉ đúng cho trường hợp đơn thuần hiệu ứng hấp thụ. Thực ra các hệ số  $\alpha_{ij}$  cũng biểu thị sự tăng cường, và khi đó hệ số  $\alpha_{ij}$  không tính theo biểu thức (3.16) ở trên nữa. Nếu hấp thụ chiếm ưu thế thì  $\alpha_{ij} > 0$ , ngược lại nếu tăng cường chiếm ưu thế thì  $\alpha_{ij} < 0$ , cũng có trường hợp  $\alpha_{ij} = 0$ .

Xét trường hợp đơn giản: kích thích bằng nguồn đơn năng. Từ các phương trình (3.4), (3.5) và (3.10) ta có:

$$I_i = \alpha_0 w_i (1 + a_{ij} w_j) \quad (3.17)$$

với,

$$\alpha_0 = \frac{K_i}{\mu(E_0) + S\mu(E_i)} \quad (3.18)$$

Hệ số  $\alpha_{ij}$  được tính một cách định lượng như sau:

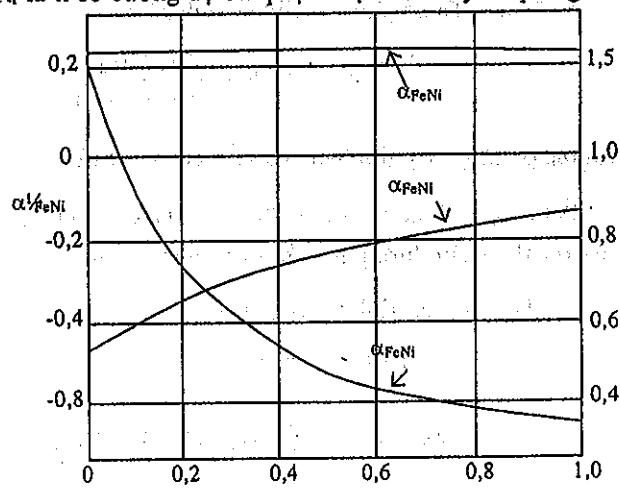
Gọi  $R'_i$  là tỉ số cường độ toàn phần,  $R_i$  là tỉ số cường độ chỉ phụ thuộc vào huỳnh quang sơ cấp, ta có:

$$R'_i = R_i (1 + a_{ij} w_j) \quad (3.19)$$

Đối với mẫu hai thành phần, phương trình Lachance -Traill như sau:

$$w_i = R'_i (1 + \alpha_{ij} w_j) \quad (3.20)$$

Trong đó hệ số  $\alpha_{ij}$  ứng với trường hợp chỉ xét đơn thuần hấp thụ. Nếu xét cả hấp thụ lẫn tăng cường thì cường độ  $R_i$  được thay bởi  $R'_i$ , và hệ số  $\alpha_{ij}$  được thay bởi hệ số  $\alpha'_{ij}$  ứng với trường hợp có xét tới sự tăng cường. Khi đó ta có:

Hình 3.5: Sơ biến thiên của hệ số  $\alpha'_{ij}$  trong trường hợp có tăng cường. Kích thích đơn năng  $\lambda = 1,02 \text{ \AA}$ ; góc hình học  $45^\circ / 45^\circ$

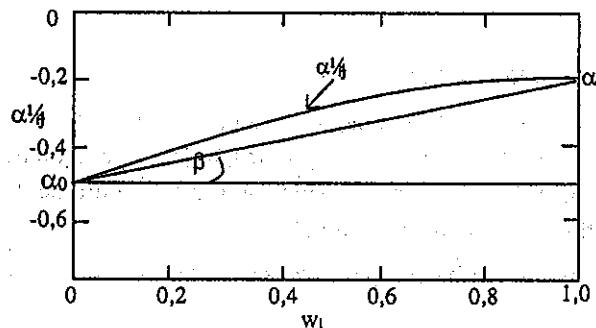
$$w_i = R_i(1 + \alpha_{ij}^i w_j) \quad (3.21)$$

Từ (3.19), (3.20) và (3.21), ta có:

$$\begin{aligned} R_i(1 + a_{ij}^i w_j)(1 + \alpha_{ij}^i w_j) &= R_i(1 + \alpha_{ij}^i w_j) \\ \text{Suy ra: } \alpha_{ij}^i w_j &= \frac{1 + \alpha_{ij}^i w_j}{1 + a_{ij}^i w_j} - 1 = \frac{(\alpha_{ij}^i - a_{ij}^i)w_j}{1 + a_{ij}^i w_j} \\ \alpha_{ij}^i &= \frac{\alpha_{ij}^i - a_{ij}^i}{1 + a_{ij}^i w_j} \end{aligned} \quad (3.22)$$

Hình 3.5 cho thấy một ví dụ điển hình đối với hệ Fe-Ni. Những biến thiên tương tự cũng được tìm thấy trong các hệ Cr-Fe, Mn-Co, Co-Cu và Ni-Zn.

Một cách tổng quát, sự biến thiên của hệ số  $\alpha_{ij}^i$  của hàm lượng được biểu diễn trong đồ thị trên hình 3.6 như sau:



Hình 3.6: Sự biến thiên của hệ số  $\alpha_{ij}^i$  theo hàm lượng  $w_i$  trong trường hợp tăng cường

Từ đồ thị trên ta có:

$$\alpha_{ij}^i = \alpha_0 + w_i \tan \beta = \alpha_0 + w_i (\alpha_1 - \alpha_0)$$

Đo dạng đồ thị là đường cong nên để chính xác hơn ta đưa vào hệ số điều chỉnh  $\eta$  cho hệ hợp phần bậc hai. Ta có phương trình chính xác:

$$\alpha_{ij}^i = \alpha_0 + \frac{w_i(\alpha_1 - \alpha_0)}{w_i + \eta(1 - w_i)} \quad (3.23)$$

với  $\alpha_0, \alpha_1$  là giá trị giới hạn của  $\alpha_{ij}^i$  tại  $w_i = 0$  và  $w_i = 1$ .

Phương trình này cùng ba tham số  $\alpha_0, \alpha_1, \eta$  cho phép biểu diễn tất cả các đường cong biến thiên của  $\alpha_{ij}^i$  theo hàm lượng  $w_i$  với độ chính xác cao.

Từ phương trình (3.22), ta có:

$$\begin{aligned} \alpha_{ij}^i (1 + a_{ij}^i w_j) &= \alpha_{ij}^i - a_{ij}^i \\ \alpha_{ij}^i &= \alpha_{ij}^i - a_{ij}^i (1 + \alpha_{ij}^i w_j) = \alpha_{ij}^i - a_{ij}^i \frac{w_j}{R_i} \end{aligned} \quad (3.24)$$

### 3.3.3. Mẫu ba thành phần – Hiệu ứng nguyên tố thứ ba

Khi có ít nhất ba nguyên tố cùng tồn tại trong một hợp phần và chúng ít nhiều làm mất hiệu quả các hệ số Lachance – Traill bậc hai đã tính ở phương trình (3.16). Chúng ta xem xét bản chất của hiệu ứng nguyên tố thứ ba và ước tính ảnh hưởng của chúng.

Hiệu ứng này khác hẳn huỳnh quang cấp ba. Huỳnh quang cấp ba được xem như bức xạ huỳnh quang thêm vào. Ví dụ trong hệ Cr-Fe-Ni, huỳnh quang cấp ba (Cr) là gia lượng liên quan đến sự kích thích do huỳnh quang cấp hai (Fe), huỳnh quang cấp hai (Fe) là được gia tăng bởi huỳnh quang cấp một (Ni). Còn hiệu ứng nguyên tố thứ ba lại khác, nó còn được gọi là hiệu ứng huỳnh quang bắt chéo, bắt nguồn từ sự biến đổi hấp thụ trong mẫu và sự tác động trở lại của chúng trong hiệu suất tăng cường. Do huỳnh quang cấp ba không đáng kể nên trong quá trình khảo sát hiệu ứng nguyên tố thứ ba ta chỉ xét tới huỳnh quang cấp hai.

Xét trường hợp nguồn kích đơn năng, nguyên tố phân tích là  $w_i$ .

$$\text{- Đối với trường hợp hai thành phần: } w_i + w_j = 1 \quad (3.25)$$

$\text{- Đối với trường hợp ba thành phần:}$

$$w_i + w_j^T + w_k^T = 1 \quad (3.26)$$

- $w_i$  là hàm lượng nguyên tố phân tích trong mẫu hai thành phần cũng như trong mẫu ba thành phần.
- $w_j$  và  $w_j^T$  là hàm lượng của nguyên tố  $j$  trong mẫu hai thành phần và trong mẫu ba thành phần.
- $w_k^T$  là hàm lượng của nguyên tố  $k$  trong mẫu ba thành phần.
- $j$  là nguyên tố tăng cường cho  $i$ , còn  $k$  là nguyên tố thứ ba.

Từ phương trình (3.24) ta có hệ số  $\alpha_{ij}^*$  đối với mẫu hai thành phần (ký hiệu H) và đối với mẫu ba thành phần (ký hiệu B) là:

$$(\alpha_{ij}^*)_H = \alpha_{ij} - (a_{ij})_H \left( \frac{w_i}{R_i} \right)_H \quad (3.27)$$

$$(\alpha_{ij}^*)_B = \alpha_{ij} - (a_{ij})_B \left( \frac{w_i}{R_i} \right)_B \quad (3.28)$$

Trong đó  $\alpha_{ij}$  cho bởi biểu thức (3.16) còn  $(a_{ij})_H$  và  $(a_{ij})_B$  được lấy từ biểu thức (3.6) cho mẫu hai thành phần và mẫu ba thành phần như sau:

$$(a_{ij})_H = \frac{1}{2} \epsilon_j \frac{\mu_j(E_0)}{\mu_i(E_0)} \mu_i(E_j)(L)_H \quad (3.29)$$

$$(a_{ij})_B = \frac{1}{2} \epsilon_j \frac{\mu_j(E_0)}{\mu_i(E_0)} \mu_i(E_j)(L)_B \quad (3.30)$$

với  $L$  lấy từ biểu thức (3.7).

Ta có thể khảo sát hiệu ứng nguyên tố thứ ba bằng cách khác như sau:

Trước hết ta chưa xét đến hiệu ứng nguyên tố thứ ba, nghĩa là trong mẫu ba thành phần, các nguyên tố  $j$  và  $k$  không ảnh hưởng lên nhau.

Đối với mẫu hai thành phần  $H_{ij}$  ( $w_i + w_j = 1$ ), ta có:

$$w_i = R_{ij}'(1 + \alpha_{ij}' w_j) \quad (3.31)$$

Đối với mẫu hai thành phần  $H_{ik}$  ( $w_i + w_k = 1$ ), ta có:

$$w_i = R_{ik}'(1 + \alpha_{ik}' w_k) \quad (3.32)$$

Đối với mẫu ba thành phần  $B_{ijk}$  ( $w_i + w_j^B + w_k^B = 1$ ), ta có:

$$w_i = R_{ijk}'(1 + \alpha_{ij}' w_j^B + \alpha_{ik}' w_k^B) \quad (3.33)$$

$$\begin{aligned} &= R_{ijk}' \left( 1 + \frac{\frac{w_i}{R_{ij}'} - 1}{\frac{w_j}{R_{ij}'} w_j^B} + \frac{\frac{w_i}{R_{ik}'} - 1}{\frac{w_k}{R_{ik}'} w_k^B} \right) \\ &= R_{ijk}' \left( 1 + \frac{\frac{w_i w_j^B}{R_{ij}'} - \frac{w_j^B}{w_j}}{\frac{w_j}{R_{ij}'} w_j^B} + \frac{\frac{w_i w_k^B}{R_{ik}'} - \frac{w_k^B}{w_k}}{\frac{w_k}{R_{ik}'} w_k^B} \right) \\ &= R_{ijk}' \left( 1 + \frac{\frac{w_i w_j^B}{R_{ij}'(1-w_i)} + \frac{w_i w_k^B}{R_{ik}'(1-w_i)}}{\frac{w_j^B + w_k^B}{1-w_i}} \right) \end{aligned}$$

Lưu ý:  $w_j = 1 - w_i$  (đối với mẫu hai thành phần i và j)

$w_k = 1 - w_i$  (đối với mẫu hai thành phần i và k)

$w_j^B + w_k^B = 1 - w_i$  (đối với mẫu ba thành phần i, j và k)

Do đó:  $w_i = R_{ijk}' \frac{w_j^B}{R_{ij}'(w_j^B + w_k^B)} + \frac{w_k^B}{R_{ik}'(w_j^B + w_k^B)}$

Vậy:  $\frac{w_j^B + w_k^B}{R_{ijk}'} = \frac{w_j^B}{R_{ij}'} + \frac{w_k^B}{R_{ik}'} \quad (3.34)$

Như trên đã nói ở phương trình (3.33) ứng với trường hợp bỏ qua hiệu ứng nguyên tố thứ ba. Vì vậy khi xét đến hiệu ứng nguyên tố thứ ba thì cường độ tỉ đối  $R_{ijk}'$  phải hiệu chỉnh, nghĩa là thay  $R_{ijk}'$  do được bởi  $R_{ijk}^b$ :

$$R_{ijk}' \rightarrow R_{ijk}^b = \frac{\frac{w_j^B + w_k^B}{w_j^B + w_k^B}}{\frac{w_j^B}{R_{ij}'} + \frac{w_k^B}{R_{ik}'}}$$

Khi đó phương trình (3.34) trở thành:

$$w_i = \frac{R_{ijk}^b}{1 + \xi_i} (1 + \alpha_{ij}' w_j^B + \alpha_{ik}' w_k^B) \quad (3.35)$$

ở đây,  $\xi$  là hệ số dùng để hiệu chỉnh khi dùng các hệ số cấp hai. Đây là biểu thức tổng quát cho một hợp phần bất kỳ.

### 3.4. CÁC PHƯƠNG PHÁP HIỆU CHỈNH HIỆU ỨNG MATRIX

Độ chính xác của phương pháp phân tích huỳnh quang tia X có thể bị ảnh hưởng do sự hiện diện của những nguyên tố khác trong mẫu. Những hiệu ứng này nói chung được xem như hiệu ứng matrix đã nói ở trên.

Một vài kỹ thuật để khắc phục hiệu ứng matrix mà ta đã đề cập trong các phương pháp phân tích định lượng có thể tóm tắt như sau:

- Sử dụng phương pháp tính dựa trên các đồ thị lấy từ hai hay nhiều phép đo riêng trên cùng một mẫu.

- Những kỹ thuật khác dựa trên các phương pháp chuẩn bị mẫu đặc biệt có sự pha loãng kết hợp với acid boric hoặc pha thêm những chất nội.

### 3.4.1. Phương pháp định cỡ

Giả sử mẫu phân tích gồm các nguyên tố a, b, c, d, ..., p, ..., m với nồng độ trong ứng là  $w_a, w_b, w_c, w_d, \dots, w_j, \dots, w_m$ . Các nguyên tố của mẫu có ảnh hưởng đến cường độ dãy phổ phân tích. Vì vậy nếu hàm lượng của chúng thay đổi một cách tùy tiện từ mẫu này sang mẫu khác thì khi phân tích ta cần phải tính toán mối quan hệ (ảnh hưởng) của các nguyên tố.

Lập tì số  $N_p = \frac{I_p^{(pure)}}{I_j}$ , ở đây  $I_p^{(pure)}$  và  $I_j$  là cường độ vạch đặc trưng nguyên tố j đo từ mẫu tinh khiết và đo từ mẫu đa nguyên tố.

Với  $N_p \geq 1$ , ta có hệ phương trình:

$$-(N_p - 1)w_j + \sum_{p \neq j} q_j^p w_p = 0, \text{ khi } \sum_j w_j = 1 \quad (3.36)$$

Ở đây  $q_j^p$  là đại lượng không đổi.

Chi tiết phương trình này có dạng:

$$\left. \begin{aligned} -(N_a - 1)w_a + q_a^p w_b + q_a^c w_c + \dots + q_a^m w_m &= 0 \\ q_b^a w_a - (N_b - 1)w_b + q_b^c w_c + \dots + q_b^m w_m &= 0 \\ \dots & \\ q_b^a w_a + q_m^b w_b + q_m^c w_c \dots - (N_m - 1)w_m &= 0 \\ w_a + w_b + w_c + w_d + \dots + w_p + \dots + w_m &= 1 \end{aligned} \right\} \quad (3.37)$$

Phương trình cuối nhận được một cách dễ dàng từ biểu thức cường độ huỳnh quang phát ra khi kích thích bởi bức xạ đơn sắc. Khi đó  $\mu(E_0)$  và  $\mu(E_i)$  trong mẫu số ở phương trình (1.36) trình bày dưới dạng

$$\mu(E) = w_a \mu_a(E) + w_b \mu_b(E) + w_c \mu_c(E) + \dots + w_m \mu_m(E) \quad (3.38)$$

Giải hệ phương trình (3.37) ta có thể xác định hàm lượng  $w_j$ , các tham số  $q_j^p$  có thể tính bằng lý thuyết bởi công thức sau:

$$q_j^p = \frac{\frac{\mu_p(E_0)}{\sin \Psi_1} + \frac{\mu_p(E_i)}{\sin \Psi_2}}{\frac{\mu_j(E_0)}{\sin \Psi_1} + \frac{\mu_j(E_i)}{\sin \Psi_2}} \quad (3.39)$$

Ở đây,  $\mu_p(E_0)$ ,  $\mu_j(E_0)$  là các hệ số suy giảm khối đối với bức xạ sơ cấp  $E_0$ ; ứng với nguyên tố p và nguyên tố j.

$\mu_p(E_i)$ ,  $\mu_j(E_i)$  là các hệ số suy giảm khối đối với bức xạ thứ cấp  $E_i$ ; ứng với nguyên tố p và nguyên tố j.

Tuy nhiên những hệ số  $q_j^p$  xác định bằng thực nghiệm thì tốt hơn bởi vì các phương trình (3.37) và (3.39) nhận được từ giả thiết bức xạ kích thích là đơn sắc, trong thực tế nó có thể là bức xạ hâm hay là đa năng.

Như vậy với phương pháp này, trước tiên ta xác định bằng thực nghiệm các hệ số  $q_j^p$ , sau đó giải hệ phương trình (3.37) ta có kết quả hàm lượng  $w_i$  muốn tìm.

### 3.4.2. Phương pháp tham số cơ bản

Cường độ tia X đặc trưng của nguyên tố phân tích i kích thích bởi nguồn đơn năng với tham số hình học của hệ phổ kể biết trước được tính bởi phương trình (1.36) đã thiết lập ở chương 1:

$$I_i(E_i) = Q_{if} G_0 I_0 w_i \frac{1 - \exp\left(-\rho T \left[ \frac{\mu(E_0)}{\sin \Psi_1} + \frac{\mu(E_i)}{\sin \Psi_2} \right] \right)}{\frac{\mu(E_0)}{\sin \Psi_1} + \frac{\mu(E_i)}{\sin \Psi_2}}$$

Phương trình trên về nguyên tắc không dùng mẫu chuẩn. Trong đó các hệ số hình học dụng cụ và hiệu suất ghi của detector như là hàm của năng lượng. Để định chuẩn thiết bị người ta thường sử dụng một mẫu chuẩn đơn nguyên tố.

Từ phương trình trên ta nhận thấy rằng để xác định hàm lượng  $w_i$ , ngoài giá trị  $I_i$  đo được, giá trị  $I_0$  của cường độ nguồn kích, giá trị  $\rho T$  của khối lượng trên một đơn vị diện tích ta phải xác định các tham số cơ bản sau:

- o Hệ số hấp thụ khối của mẫu:  $\mu_p(E_i)$ ,  $\mu_j(E_i)$  xác định bởi công thức (2.11).
- o Hệ số  $Q_{if}$  và  $G_0$  được xác định từ mẫu đơn nguyên tố.
- o Góc  $\Psi_1$  và  $\Psi_2$  xác định bằng phương pháp Monte Carlo.

Phương pháp này chỉ sử dụng một mẫu chuẩn đơn nguyên tố và các thông số vật lý được xác định trước đối với một hệ đo cố định, cho kết quả với độ chính xác không cao nên chỉ là phương pháp phân tích bán định lượng. Ngoài ra phương pháp tham số cơ bản sử dụng nhiều thông số vật lý tra cứu từ các bảng số liệu vật lý hạt nhân, phải tính toán nhiều nên ít được sử dụng.

### 3.4.3. Phương pháp hệ số cơ bản

Để tính cường độ bức xạ huỳnh quang tổng cộng của nguyên tố i trong mẫu nhiều thành phần (i, j, k, ...) được kích thích bởi nguồn đơn năng có cường độ  $I_0$ , ta có phương trình cơ bản của Sherman như sau:

$$I_0 = q E_k w_i \frac{\mu_i(E_0)}{\mu(E_0) + A \mu(E_i)} I_0 \left[ 1 + \sum_j w_j \delta_{ij} \right] \quad (3.40)$$

Trong đó,

$$q = \frac{\sin \Psi_i}{\sin \Psi_2} \times \frac{d\Omega}{4\pi}$$

$$E_k = \frac{r_i - 1}{r_i} \omega_i f_i : \text{hệ số kích thích.}$$

$w_i$ : hàm lượng nguyên tố phân tích i trong mẫu.

$\mu_i(E_0)$ : hệ số hấp thụ khói của nguyên tố i ứng với năng lượng nguồn kích  $E_0$ .

$\mu(E_0), \mu(E_i)$ : hệ số hấp thụ khói của mẫu ứng với năng lượng nguồn kích  $E_0$  và năng lực bức xạ huỳnh quang đặc trưng  $E_i$

$$A = \frac{\sin \Psi_1}{\sin \Psi_2} : \text{hệ số hình học.}$$

$I_0$ : cường độ nguồn kích thích.

$\delta_{ij}$ : hệ số hấp thụ - tăng cường giữa các nguyên tố i và j.

$$\text{Đặt } \mu^* = \mu(E_0) + A\mu(E_i)$$

$$\mu_j^* = \mu_j(E_0) + A\mu_j(E_i)$$

Ta có

$$\mu^* = \mu_j^* \left[ 1 + \sum_j w_j \frac{\mu_j^*}{\mu_i^* - 1} \right] = \sum_j w_j \mu_j^*$$

$$\text{Đặt } \beta_{ij} = \frac{\mu_j^*}{\mu_i^*} - 1$$

$$\Rightarrow \mu^* = \mu_i^* \left[ 1 + \sum_j w_j \beta_{ij} \right] = \sum_j w_j \mu_j^*$$

Phương trình (3.40) trở thành

$$I_i = q E_k w_i \frac{\mu_i(E_0)}{\mu_i^* \left( 1 + \sum_j w_j \beta_{ij} \right)} I_0 \left[ 1 + \sum_j w_j \delta_{ij} \right] \quad (3.41)$$

$$\text{Đặt } R_i = \frac{I_i}{I_i^{(p)}}$$

$I_i^{(p)}$ : cường độ vạch phổ đặc trưng nguyên tố i trong mẫu đơn chất tinh khiết.

Đối với mẫu tinh khiết,

$$w_i = 1 \text{ và } \delta_{ij} = 0; \beta_{ij} = 0$$

Từ phương trình (3.40), ta có

$$I_i^{(p)} = q E_k \frac{\mu_i(E_0)}{\mu_i^*} I_0 \quad (3.42)$$

Lập tỷ số hai phương trình (3.41) và (3.42), ta có

$$R_i = \frac{I_i}{I_i^{(p)}} = \frac{w_i}{1 + \sum_j w_j \beta_{ij}} \left[ 1 + \sum_j w_j \delta_{ij} \right]$$

Hay  $w_i = R_i \frac{1 + \sum_j w_j \beta_{ij}}{1 + \sum_j w_j \delta_{ij}}$  (3.43)

Để xác định hàm lượng  $w_i$ , ta dùng mô hình Lachance-Trail:

Từ phương trình (3.43), ta đặt

$$\begin{aligned} x &= \sum_j w_j \beta_{ij} \\ y &= \sum_j w_j \delta_{ij} \\ \Rightarrow w_i &= R_i \frac{1+x}{1+y} \end{aligned} \quad (3.44)$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow \frac{w_i}{R_i} &= \frac{1+x}{1+y} = 1 - 1 + \frac{1+x}{1+y} = 1 + \frac{x-y}{1+y} \\ &= 1 + \frac{\sum_j w_j \beta_{ij} - \sum_j w_j \delta_{ij}}{1 + \sum_j w_j \delta_{ij}} \\ \frac{w_i}{R_i} &= 1 + \frac{\sum_j w_j (\beta_{ij} - \delta_{ij})}{1 + \sum_j w_j \delta_{ij}} \end{aligned} \quad (3.45)$$

Đặt  $\alpha_{ij} = \frac{\beta_{ij} - \delta_{ij}}{1 + \sum_j w_j \delta_{ij}}$

$$\Rightarrow \frac{w_i}{R_i} = 1 + \sum_j w_j \alpha_{ij} \quad (3.46)$$

$\alpha_{ij}$  gọi là hệ số hiệu chỉnh matrix và được tính từ công thức bán thực nghiệm của Tertian như sau:

$$\alpha_{ij} = \alpha_0 + \frac{w_i(\alpha_1 - \alpha_2)}{w_i + \eta(1 - w_i)}$$

với:

$\alpha_0$ : giá trị của  $\alpha_{ij}$  trong trường hợp  $w_i = 0$

$\alpha_1$ : giá trị của  $\alpha_{ij}$  trong trường hợp  $w_i = 1$

$\eta$ : hằng số phụ thuộc vào hệ hai thành phần của mẫu và thường lấy giá trị

$$\eta = \frac{\alpha_0 + \alpha_1}{2}$$

Hàm lượng các nguyên tố được tính theo thuật toán của Lachance – Trail như sau:

Từ phương trình (3.46), ta có:

$$w_i = R_i (1 + \sum_j w_j \alpha_{ij}) \quad (3.47)$$

*Bước 1:* Cho giá trị đầu tiên của các  $w_i$  là  $R_i$  vào phương trình (3.47) với các giá trị  $R_i$  và  $\alpha_{ij}$  biết trước ta tính được các giá trị  $w_i^{(0)}$ .

*Bước 2:* Thay các giá trị  $w_i^{(0)}$  vào phương trình (3.47) tương ứng với  $w_i$  ta tính được các giá trị mới  $w_i^{(1)}$ .

*Bước 3:* Tiếp tục thay thế các giá trị  $w_i^{(1)}$  vào phương trình (3.47) tương ứng với  $w_i$  ta tính được các giá trị mới  $w_i^{(2)}$ .

.....

cho đến khi điều kiện hội tụ  $\sum_i w_i = 1$  được thỏa mãn ta dừng lại với các giá trị  $w_i, w_j, w_k, \dots$  muôn tìm.

#### 3.4.4. Phương pháp hàm delta

Sự thay đổi hàm lượng của các thành phần mẫu dẫn đến sự không tuyến tính của đường chuẩn cường độ. Mỗi liên hệ giữa cường độ  $I$  và hàm lượng  $w$  được viết như sau:

$$I_A = a_{1A}w_A + a_{0A} + \sum_{i \neq A} b_{i1}w_i + \sum_{i \neq A} b_{ii}w_i^2 + \sum_{i,j \neq A} b_{ij}w_iw_j \quad (3.48)$$

Nếu các số liệu giả sử đã được trừ phông, thì các hệ số  $a_0$  có thể bỏ đi.

Với mẫu tinh khiết:  $w_{A(\text{pure})} = 1, I_{A(\text{pure})} = a_{1A}$

Từ phương trình trên ta có:

$$\text{Vậy: } w = w_A = \frac{1}{I_{A(\text{pure})}} \left( I_A - \sum_{i \neq A} b_{i1}w_i - \sum_{i \neq A} b_{ii}w_i^2 - \sum_{i,j \neq A} b_{ij}w_iw_j \right) \quad (3.49)$$

Đặt:

$$R_A = I_A / I_{A(\text{pure})}$$

$$\alpha_i = -b_{i1} / I_{A(\text{pure})}$$

$$\alpha_{ii} = -b_{ii} / I_{A(\text{pure})}$$

$$\alpha_{ij} = -b_{ij} / I_{A(\text{pure})}$$

Ta có hệ thức xác định hàm lượng của nguyên tố A trong mẫu (đã hiệu chỉnh hiệu ứng matrix) là:

$$w_A = R_A \left( 1 + \sum_{i \neq A} \alpha_i w_i + \sum_{i \neq A} \alpha_{ii} w_i^2 + \sum_{i,j \neq A} \alpha_{ij} w_i w_j \right) \quad (3.50)$$

Nếu trong mẫu phân tích chỉ có hai nguyên tố A và B gây nên hiệu ứng hấp thụ/tăng cường (hiệu ứng matrix). Thì phương trình (3.50) có dạng đơn giản:

$$w_A = R_A \left( 1 + \alpha_B w_B + \alpha_{BB} w_B^2 \right) \quad (3.51)$$

Viết lại phương trình (3.51) đối với nguyên tố B ta có

$$w_B = R_B \left( 1 + \alpha_A w_A + \alpha_{AA} w_A^2 \right) \quad (3.52)$$

Để tính các hệ số  $\alpha_i, \alpha_{ij}$  ta vẽ đồ thị biểu diễn phương trình

$$\frac{\frac{w_i}{R_i} - 1}{w_j} = \alpha_j + \alpha_{jj} w_j$$

- Hệ số  $\alpha_j$  là tung độ điểm cắt của đường biểu diễn với trục tung.

- Hệ số  $\alpha_{jj}$  là độ dốc của đường thẳng.

Sau khi đã tính được các hệ số  $\alpha$ , ta thay vào các phương trình (3.51), (3.52).

Từ các phương trình này ta xác định được hàm lượng của các nguyên tố A và B.

\* *Hệ số delta:*

Để tăng độ chính xác của kết của phân tích, ta tạo một mẫu chuẩn (\*) có hàm lượng của các nguyên tố A và i rất gần với mẫu phân tích.

Thành phần của mẫu được tính từ mẫu chuẩn (\*) theo hệ thức sau

$$w_i = w_i^* + \Delta w_i \quad (3.53)$$

Từ phương trình (3.50), ta có thể viết

$$w_A^* = R_A^* \left( 1 + \sum_{i \in A} \alpha_i w_i^* + \sum_{i \in A} \alpha_{ii} w_i^{*2} + \sum_{i,j \in A} \alpha_{ij} w_i^* w_j^* \right) \quad (3.54)$$

Lập tì số  $\frac{w_A^*}{w_A}$  ta có

$$w_A = w_A^* \times \frac{I_A}{I_A^*} \times \left( 1 + \frac{\sum \alpha_i \Delta w_i + 2 \sum \alpha_{ij} w_i^* \Delta w_j}{1 + \sum \alpha_i w_i^* + \sum \alpha_{ii} w_i^{*2}} \right) \quad (3.55)$$

Trong phương trình trên vì  $\Delta w_i$ ,  $\Delta w_j$  nhỏ nên các số hạng chứa  $(\Delta w_i)^2$ ,  $\Delta w_i \Delta w_j$  đã được bỏ đi. Trong trường hợp hiệu ứng nguyên tố thứ ba không đáng kể các số hạng chứa hệ số  $\alpha_{jj}$  có thể bỏ qua.

Còn số hạng  $w_A^*(I_A / I_A^*)$  chính là “hàm lượng biểu kiến” của nguyên tố A (tính toán từ phổ ghi nhận được)

$$w_A^{(bk)} = w_A^* \times \frac{I_A}{I_A^*} \quad (3.56)$$

Do đó:

$$w_A = w_A^{(bk)} (1 + \sum \delta_i \Delta w_i) \quad (3.57)$$

với

$$\delta_A = \frac{\alpha_B + 2\alpha_{BB} w_B^*}{1 + \sum_{i \in A} \alpha_i w_i^* + \sum_{i \in A} \alpha_{ii} w_i^{*2}} \quad (3.58)$$

- Dùng phương trình (3.53) để tính  $\Delta w_i$ . Trước hết phương trình này áp dụng với hàm lượng  $w^{(bk)}$  thay cho hàm lượng  $w_i$ .

- Dùng phương trình (3.57) để tính hàm lượng với giá trị  $\Delta w_i$  vừa tính được ở bước trên.

- Lặp lại các bước trên nhiều lần đến khi giá trị  $w$  bắt đầu ổn định.

Trong mỗi lần lặp, luôn luôn sử dụng cùng một giá trị  $w^{(bk)}$ .

### BÀI TẬP CHƯƠNG 3

- 3.1. Xác định hệ số hiệu chỉnh cho việc hấp thụ giữa Fe-Cr và Cr-Fe trong mẫu hai thành phần. Biết rằng góc hình học đo tại vị trí  $60^\circ/30^\circ$  và phương trình đường chuẩn hệ số hấp thụ tuyến tính có dạng:

$$\mu(E) = 0,023 + 0,102 * E ; E: \text{keV}$$

Nguồn kích dùng cho thí nghiệm là Zn-65 (8,047keV).

- 3.2. Với các hệ số hiệu chỉnh ở bài 3.1, hãy xác định hàm lượng của Fe, Cr trong mẫu. Biết số liệu thực nghiệm cho ở bảng

Nguyên tố		Cường độ đỉnh
	Mẫu	12600
Fe	Chuẩn	15280
	Mẫu	7189
Cr	Chuẩn	9182

- 3.3. Xác định hàm lượng của Fe trong hợp kim Fe-Ni nếu biết  $\alpha_0 = -0,450$ ,  $\alpha_1 = -0,115$  và  $\alpha_{Fe-Ni} = -0,268$ .

- 3.4. Hàm lượng Fe trong hợp kim Fe-Mo lần lượt là 0 ; 0,2; 0,4; 0,6; 0,8 ; 1,0.

a) Xác định hệ số hiệu chỉnh hấp thụ tăng cường  $\alpha_{Fe-Mo}$  tương ứng với các hàm lượng trên.

b) Từ các hệ số hiệu chỉnh này, hãy biểu diễn bằng đồ thị mối liên hệ giữa  $\alpha_{Fe-Ni}$  và w.

c) Xác định đường cong tốt nhất cho mối liên hệ này.

Biết :  $\alpha_0 = 0,756$ ,  $\alpha_1 = 1,555$

- 3.5. Cho trước các số liệu thực nghiệm như bảng dưới đây:

Các điều kiện phân tích				
Mẫu: Fe-Ni	Nguyên tố phân tích i = Fe	Nguyên tố matrix j = Ni		
Bức xạ kích thích: $\lambda_k = 0,71 \text{ \AA}$ (vạch Mo-K $\alpha$ )				
Hình học chiếu và đo: $\Psi_1 = \Psi_2 = 45^\circ$				
Số liệu thực nghiệm				
Mẫu	Hàm lượng		Cường độ phân tích (cps)	
	w <sub>i</sub> (Fe)	w <sub>j</sub> (Ni)	Fe-K $\alpha$	Ni-K $\alpha$
Fe tinh khiết	1,0	0	626,2	0
Ni tinh khiết	0	1,0	0	952,9
SPLE-1	Chưa biết	Chưa biết	209,9	438,4
Hệ số hấp thụ khói ( $\text{cm}^2/\text{g}$ )				
	$\lambda_k = 0,71 \text{ \AA}$	$\lambda_j = 1,659 \text{ \AA}$	$\lambda_i = 1,937 \text{ \AA}$	

$\mu_i(\lambda)$	37,74	379,62	71,43	
$\mu_j(\lambda)$	45,81	58,94	89,98	
Hệ số bước nhảy mép hấp thụ K đối với Ni: 0,873				
Hiệu suất huỳnh quang đối với lớp K của Ni: 0,42				

- a) Tính cường độ tương đối  $R_{Fe}$  và  $R_{Ni}$
- b) Tính hệ số ảnh hưởng do hiệu ứng hấp thụ  $\beta_{FeNi}$  và  $\beta_{NiFe}$
- c) Tính hệ số ảnh hưởng do hiệu ứng tăng cường  $\delta_{FeNi}$  và  $\delta_{NiFe}$
- d) Tính hàm lượng nguyên tố Fe và Ni trong mẫu SPLE-1

3.6. Dùng thuật toán LaChance – Trail hãy xác định hệ số ảnh hưởng  $\alpha_{FeNi}$  và  $\alpha_{NiFe}$  đối với hợp kim hai thành phần Fe-Ni theo bảng số liệu cho ở bảng sau:

Mẫu Fe-Ni	Hàm lượng, w		Cường độ tương đối, R	
	Fe	Ni	Fe	Ni
971	0,0462	0,9516	0,0789	0,8782
972	0,0659	0,9322	0,1104	0,8321
974	0,1018	0,8964	0,1621	0,7595
983	0,2263	0,7711	0,3172	0,5483
986	0,3067	0,6931	0,4007	0,4515
987	0,3431	0,6552	0,4373	0,4073
1159	0,5100	0,4820	0,5907	0,2553
126B	0,6315	0,3599	0,6958	0,1720
809B	0,9514	0,0329	0,9659	0,0125

3.7. Dùng thuật toán LaChance – Trail hãy xác định hệ số ảnh hưởng  $\alpha_{FeCr}$  và  $\alpha_{CrFe}$  đối với hợp kim hai thành phần Fe-Cr theo bảng số liệu cho ở bảng sau:

Mẫu Fe-Cr	Hàm lượng, w		Cường độ tương đối, R	
	Cr	Fe	Cr	Fe
4061	0,0353	0,9627	0,0617	0,8970
4062	0,0608	0,9372	0,1004	0,8270
4065	0,1214	0,8766	0,1817	0,6974
4173	0,1900	0,8080	0,2587	0,5739
4181	0,2503	0,7477	0,3326	0,4748
4183	0,3194	0,6786	0,4023	0,4048
4184	0,3658	0,6322	0,4476	0,3579

## Chương 4

### ĐẠI CƯƠNG VỀ PHÂN TÍCH KÍCH HOẠT NEUTRON

#### 4.1. CÁC TÍNH CHẤT CƠ BẢN CỦA PHÉP PHÂN TÍCH KÍCH HOẠT NEUTRON

##### 4.1.1. Phân tích kích hoạt

Năm 1936, kỹ thuật phân tích kích hoạt ra đời và được Von Hevesy & Levi lần đầu tiên áp dụng, cho đến nay phân tích kích hoạt là một phương pháp phân tích hàm lượng các nguyên tố trong mẫu chính xác nhất và tiện lợi nhất so với các phép phân tích khác. Từ 1938 đến 1940, người ta phân tích kích hoạt bằng các hạt mang điện như proton (p), alpha ( $\alpha$ ), deuteron (d),... Với sự phát triển của lò phản ứng hạt nhân đã cho phép tạo ra neutron có thông lượng lên đến  $10^{12}$ - $10^{15}$  n.cm $^{-2}$ .s $^{-1}$  thì khi đó phân tích kích hoạt bằng neutron được xem như là một kỹ thuật phân tích thông dụng nhất với độ tin cậy rất cao so với các phương pháp phân tích khác.

Phân tích kích hoạt là phương pháp phân tích nguyên tố hiện đại, sử dụng kỹ thuật hạt nhân dựa trên các nguyên tắc sau:

- Dùng một chùm hạt bắn vào mẫu cần phân tích. Các nguyên tố chứa trong mẫu cần phân tích cũng như các đồng vị của nguyên tố đó được biến đổi qua các phản ứng hạt nhân để tạo thành các đồng vị phóng xạ. Những đồng vị phóng xạ này có thể phân biệt được dựa trên các tính chất bức xạ khác nhau của chúng như: loại bức xạ phóng ra, năng lượng bức xạ, thời gian bán rã. Từ sự khác nhau này, ta **định tính** được các nguyên tố hiện diện trong mẫu. Ngoài ra, độ phóng xạ của các đồng vị sinh ra do phản ứng hạt nhân dưới những điều kiện không đổi tỉ lệ với hàm lượng nguyên tố chứa trong mẫu, dựa vào tính chất này ta **định lượng** các nguyên tố đó.

- Độ phóng xạ do kích hoạt không chỉ phụ thuộc vào lượng nguyên tố chứa trong mẫu mà còn phụ thuộc vào thông lượng chùm hạt chiếu, tiệt diện kích hoạt của nhân bia, thời gian chiếu và đặc trưng phân rã của đồng vị phóng xạ tạo thành.

Để kích hoạt, ta có thể dùng neutron, photon hay các hạt mang điện từ các lò phản ứng hay máy gia tốc: neutron, proton, deuteron, He $^3$ , He $^4$ ,... Trong đó, kích hoạt bằng neutron đóng vai trò đặc biệt bởi vì neutron có các tính chất đặc trưng sau:

- Neutron trung hòa điện nên có khả năng đi sâu vào hạt nhân nguyên tử.
- Dễ dàng xuyên vào mọi vật chất.
- Không làm thay đổi thành phần hóa học của nguyên tố được chiếu và đặc biệt là không hủy mẫu.

Trong phân tích kích hoạt, cần lưu ý đến một số vấn đề sau: chiếu xạ mẫu và chuẩn dưới cùng điều kiện, ghi nhận số đếm cả hai mẫu và chuẩn dưới cùng điều kiện, tỉ lệ số đếm của mẫu phân tích và mẫu chuẩn phải tỉ lệ với khối lượng của chúng. Để có hiệu quả, người phân tích được hiểu biết về hóa học và có kiến thức vững về hóa hạt nhân, về việc đo, về thiết bị đo và về nguồn chiếu xạ. Khi phân tích, mẫu có thể thay đổi từ vị trí này đến vị trí khác trong lò phản ứng cho nên thông lượng có thể thay đổi, dẫn đến việc ảnh hưởng phản ứng hạt nhân và ảnh hưởng đến kết quả đo. Việc đo bức xạ cũng phức tạp và gặp nhiều khó khăn như: sự hấp thu bức xạ, sự không ổn định của thiết bị, tính không tuyến tính trong detector. Nói chung, kết quả thu được trong phân tích kích hoạt bằng neutron có tính chất thống kê. Tuy vậy, tính phức tạp trong phân tích và giá thành cao cho việc chiếu xạ và thiết bị đo cũng không thể ngăn cản được tốc độ phát triển nhanh của phân tích kích hoạt neutron.

#### 4.1.2. Tính chất của phân tích kích hoạt bằng neutron

Trong phân tích kích hoạt bằng neutron, điều kiện đầu tiên là nguyên tố quan tâm qua các phản ứng hạt nhân, cho ra các đồng vị phóng xạ, cho nên xác suất phản ứng (tiết diện bắt neutron), độ phổ cập đồng vị của hạt nhân bia và chu kỳ phân rã của đồng vị phóng xạ phải đủ lớn để ghi nhận được bức xạ. Loại và năng lượng của bức xạ này cũng cần quan tâm.

Kỹ thuật phân tích kích hoạt bằng neutron có thể đạt đến mức ppb ( $1 \text{ ppb} = 10^{-9} \text{ g/g}$ ) khi chiếu xạ trong lò phản ứng với thông lượng neutron lớn. Đối với những phản ứng neutron nhanh phải lựa chọn một vị trí chiếu xạ trong lò phản ứng với một thông lượng thích hợp. Trong hầu hết các trường hợp, sự nhiễm xạ có thể trải khắp bề mặt phản ứng. Vì vậy, mẫu cần phải làm sạch trước khi phân tích. Mặc dù một số phân tích có thể được tiến hành bằng một thiết bị nào đó nhưng trong phân tích vết, việc chuẩn bị hóa học đôi khi trở nên quan trọng và không được phép bỏ qua.

#### 4.1.3. Phương pháp thích hợp cho phân tích vết

Vấn đề đặt ra ở đây là độ nhạy trong phép phân tích. Do đó, một số thiết bị cần phải có độ nhạy cao. Trong quá trình phân tích thì sự nhiễm bẩn cần phải được tránh hay giữ cho mức nhiễu này càng ít càng tốt để có thể thu được kết quả mong muốn. Phân tích mẫu chứa những tạp chất trên mức  $\text{ppm}$  ( $1 \text{ ppm} = 1 \mu\text{g/g}$ ) thì không thích hợp cho phân tích vết. Trong phân tích vết, kết quả thu được không luôn đúng đối với kỹ thuật này, điều đó là do sự phân bố không đồng đều của các nguyên tố trong matrix. Tính chính xác trong phân tích vết phụ thuộc hoàn toàn vào mẫu chuẩn. Vì vậy, trong phân tích phải tính đến những kỹ thuật như tạo mẫu chuẩn hay so sánh với một phương pháp độc lập khác. Hàm lượng mẫu cũng cần được cấu thành một hệ số xác định cho việc lựa chọn một kỹ thuật phân tích. Cho nên, những mẫu lớn đồng tính thì thích hợp hơn.

### 4.2. PHÔ NEUTRON TRONG LÒ PHẢN ỨNG HẠT NHÂN

Các neutron trong lò phản ứng được hình thành qua phản ứng phân hạch hạt nhân là những neutron nhanh hay neutron phân hạch. Do sự va chạm với môi trường chất làm chậm nên cuối cùng chúng sẽ bị nhiệt hóa.

Trên hình 4.1 cho thấy phô thông lượng neutron của lò phản ứng phân hạch hạt nhân với ba thành phần chủ yếu: (i) phô Maxwell-Boltzmann; (ii) phô “ $1/E$ ”; và (iii) phô phân hạch.

**4.2.1. Phô neutron theo phân bố Maxwell-Boltzmann (vùng neutron nhiệt):** là vùng neutron có năng lượng từ 0 đến  $0,5 \text{ eV}$ . Neutron phân hạch sau khi được làm chậm trong lò phản ứng sẽ mất dần năng lượng và trở về trạng thái cân bằng nhiệt với môi trường, nên gọi là neutron nhiệt. Các neutron nhiệt chuyển động trong trạng thái cân bằng nhiệt với các phân tử môi trường. Quá trình giảm năng lượng của neutron đến vùng nhiệt gọi là nhiệt hóa. Phô neutron nhiệt khi đó phân bố theo sự phân bố Maxwell-Boltzmann:

$$dn = \frac{2\pi n_0}{(\pi k T_n)^{3/2}} e^{-\frac{E}{k T_n}} E^{1/2} dE \quad (4.1)$$

trong đó,  $dn$  là số neutron với năng lượng trong khoảng từ  $E$  đến  $E + dE$ ,  $n_0$  là số neutron tổng cộng trong hệ,  $k$  là hằng số Boltzmann, và  $T_n$  là nhiệt độ neutron (hay nhiệt độ môi trường).

Từ công thức (4.1) ta có thể viết lại theo sự phân bố thông lượng neutron tại nhiệt độ neutron  $T_n$  như sau

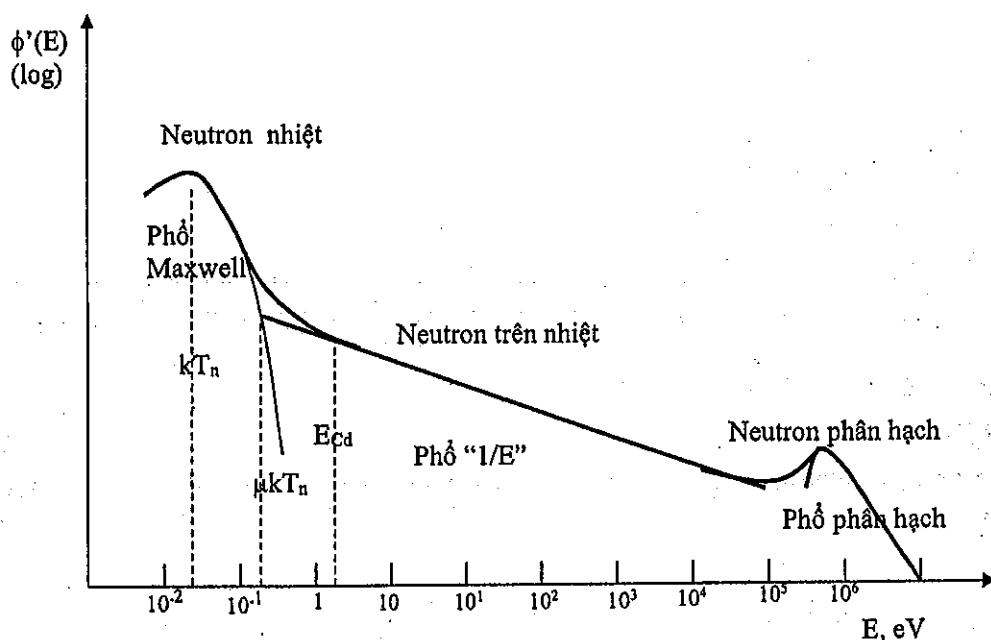
$$\phi_m(E) = \phi_m \frac{E}{(k T_n)^2} e^{-E/(k T_n)} \quad (4.2)$$

với  $k$  là hằng số Boltzmann và  $\phi_m$  là thông lượng neutron toàn phần tuân theo phân bố Maxwell. Khi đó, hàm phân bố thông lượng theo vận tốc neutron tương ứng là

$$\phi'_m(v) = n'_m(v) \cdot v \quad (4.3)$$

với  $n'_m(v)$  – mật độ neutron trong phân bố Maxwell cho mỗi khoảng đơn vị vận tốc. Tại nhiệt độ phòng  $T_0 = 293,6\text{K}$  ( $= 20,4^\circ\text{C}$ ) năng lượng tương ứng là  $E_0 = kT_0 = 0,0253\text{ eV}$ , vận tốc tương ứng  $v_0 = 2200\text{ m.s}^{-1}$ .

Như vậy, năng lượng của neutron sẽ phụ thuộc vào nhiệt độ môi trường và trong vùng năng lượng này tiết diện tương tác của neutron tuân theo luật  $1/v$ .



Hình 4.1: Sơ đồ phổ thông lượng neutron của một lò phản ứng phân hạch hạt nhân

**4.2.2. Phổ neutron phân bố theo  $1/E$  (vùng neutron trên nhiệt):** là vùng neutron đang trong quá trình chậm dần và có năng lượng trong khoảng  $0,5\text{ eV} < E < 0,5\text{ MeV}$ . Vùng này gọi là vùng trung gian hay vùng cộng hưởng. Một cách lí tưởng, sự phân bố neutron trên nhiệt tỉ lệ nghịch với năng lượng neutron,  $E$ :

$$\text{W hy } \quad \phi_e(E) = \frac{\phi_e}{E} \quad (4.4)$$

với  $\phi_e(E)$  là thông lượng neutron trên nhiệt trong toàn miền năng lượng. Do cấu trúc môi trường vật chất trong lò phản ứng, neutron sẽ bị hấp thụ làm cho phổ neutron trên nhiệt bị lệch khỏi quy luật  $1/E$ . Trên thực tế thì ta có thể biểu diễn theo công thức gần đúng:

$$\phi_e(E) = \frac{\phi_e}{E^{1+\alpha}} (\text{eV})^\alpha \quad \Rightarrow \quad W hy \quad \phi_e(E) \quad (4.5)$$

hubo obus

hubo obus → 1 đố n̄ n̄ l̄y  
↓  
l̄y = s̄n̄ l̄ēs ph̄

$$\Phi \Sigma$$

với  $\alpha$  là hằng số đặc trưng cho độ lệch khỏi phổ lí tưởng trong vùng neutron trên nhiệt và nó độc lập với năng lượng (và  $\phi_f$  lúc này là thông lượng neutron trên nhiệt thực sự cho mỗi khoảng đơn vị  $\left(-\frac{E^{-\alpha}}{\alpha}\right)(1\text{eV})^\alpha$ ).

$E > 0,5$   
 $n (\text{MeV})$

**4.2.3. Phổ neutron phân hạch (vùng neutron nhanh):** là vùng neutron sinh ra trong phân hạch và có năng lượng  $E > 0,5 \text{ MeV}$ . Một vài công thức bán thực nghiệm cho việc biểu diễn phổ phân hạch thường được dùng là:

- *Phổ phân hạch của Watt:*

$$\phi'_f(E) = 0,484 \phi_f e^{-E} \sinh \sqrt{2E} \quad (4.6)$$

- *Phổ phân hạch của Cranberg:*

$$\phi'_f(E) = 0,453 \phi_f e^{-E/0,965} \sinh \sqrt{2,29E} \quad (4.7)$$

- *Phổ phân hạch của Grundl và Usner:*

$$\phi'_f(E) = 0,77 \phi_f \sqrt{E} e^{-0,776E} \quad (4.8)$$

Trong các công thức trên,  $E$  – năng lượng neutron ( $\text{MeV}$ );  $\phi'(E)$  – thông lượng neutron phân hạch cho mỗi khoảng đơn vị năng lượng tại năng lượng  $E$ ;  $\phi_f(E)$  – thông lượng neutron phân hạch toàn phần.

### 4.3. TIẾT DIỆN PHẢN ỨNG VỚI NEUTRON

#### 4.3.1. Định nghĩa

Nếu một bia với  $N$  hạt nhân trong mỗi  $\text{cm}^3$ , mỗi hạt có một vùng hiệu dụng  $\sigma$  và có bán kính  $R_A$  thì

$$\sigma = \pi R_A^2 \quad (4.9)$$

được bắn vào với một chùm neutron thông lượng  $\phi$  ( $\text{n cm}^{-2} \text{s}^{-1}$ ). Tốc độ va chạm sẽ cho bởi:

$$R_{\text{col}} = \phi \cdot \sigma \cdot N \quad (4.10)$$

(Giả thiết rằng bia rất mỏng để cho số neutron va chạm hết số nguyên tử trong bia).

Số va chạm tần số với thông lượng neutron  $\phi$  và số nhân bia  $N$  trong mỗi  $\text{cm}^3$ . Hằng số tần số được xem như là tiết diện của nhân. Tiết diện va chạm được xác định như sau:

$$\sigma_{\text{col}}(\text{cm}^2) = \frac{R_{\text{col}}(\text{cm}^{-3} \cdot \text{s}^{-1})}{\phi(\text{n.cm}^{-2}) N(\text{cm}^{-3})} \quad (4.11)$$

Đơn vị của  $\sigma$  là  $\text{cm}^2$  hay barn ( $1\text{barn} = 10^{-24} \text{ cm}^2$ )

$$1 \text{ mb} = 10^{-3} \text{ b}, 1 \mu\text{b} = 10^{-6} \text{ b}$$

Trong va chạm của neutron với nhân bia thì có thể xảy ra tán xạ đàn hồi ( $n, n$ ) hay không đàn hồi ( $n, n'$ ), phát photon hay các hạt mang điện ( $n, \gamma$ ), ( $n, p$ ), ( $n, \alpha$ ),... Nếu bề rộng mức riêng phản đối với mỗi quá trình xảy ra là  $\Gamma_\gamma, \Gamma_p, \Gamma_\alpha, \Gamma_n, \dots$  thì xác suất để xảy ra phản ứng với hạt phóng xạ  $x$  ( $x = \gamma, p, n, \alpha, \dots$ ) là  $\Gamma_x/\Gamma$

với  $\Gamma = \Gamma_\gamma + \Gamma_p + \Gamma_\alpha + \Gamma_n \quad (4.12)$

được gọi là *bề rộng mức toàn phản*.

Khi đó tiết diện phản ứng

$$\sigma(n, x) = \sigma_0 \Gamma_x / \Gamma \quad (4.13a)$$

trong đó,  $\sigma_0$  được gọi là xác suất hình thành hạt nhân hợp phần:

$$\sigma_0 = \pi \lambda^2 \frac{\Gamma_n \Gamma}{(E - E_r)^2 + \Gamma^2 / 4} \quad (4.13b)$$

Trong (4.13b),  $\lambda$  là bước sóng rút gọn,  $E_r$  năng lượng cộng hưởng.

#### 4.3.2. Tiết diện neutron nhiệt và trên nhiệt

Neutron nhiệt có năng lượng 0,0253 eV ( $v_0 = 2200$  m/s). Neutron trên nhiệt có năng lượng từ 0,1 eV đến 1 eV, trong vùng này, tiết diện phản ứng  $\sigma$  tỉ lệ với  $E^{-1/2}$  hay  $v^{-1}$ . Neutron nhiệt hay trên nhiệt chủ yếu cho phản ứng  $(n, \gamma)$ .

##### a - Tiết diện phản ứng

- Là tiết diện mà sau quá trình phản ứng, neutron không được tái phát xạ, nghĩa là chỉ có ở phản ứng  $(n, \gamma)$ ,  $(n, p)$ ,  $(n, \alpha)$ . Tốc độ phản ứng ở thông lượng neutron nhiệt có thể tính từ tiết diện  $\sigma_0$  ở vận tốc  $v_0$  với điều kiện  $\sigma(v) \sim 1/v$ .

- Tiết diện hấp thụ  $\sigma_a$  là tiết diện phản ứng của những hạt nhân mà có khả năng hấp thụ neutron. Đối với mục đích phân tích kích hoạt, tiết diện hấp thụ là quan trọng nhất để tính toán hiệu ứng tự chế chấn neutron.

##### b - Tiết diện tán xạ

Tiết diện tán xạ thường là hằng số đối với neutron có năng lượng nằm trong vùng nhiệt, điều đó quan trọng đối với các hạt nhân nhẹ. Trong vật lý, có vài loại tán xạ với các tiết diện tương ứng: tiết diện tán xạ kết hợp (coherent) ( $\sigma_{coh}$ ), tiết diện tán xạ nguyên tử tự do  $\sigma_a$ , tiết diện tán xạ trung bình  $\sigma_s$  và tiết diện tán xạ vi phân ( $d\sigma / d\Omega$ ).

##### c - Tiết diện toàn phần

Tiết diện toàn phần là tổng của tiết diện hấp thụ và tiết diện tán xạ trung bình. Được định nghĩa theo công thức:

$$\sigma_t = \sigma_a + \sigma_s \quad (4.14)$$

##### d - Tiết diện vĩ mô $\Sigma$

Tất cả các tiết diện được định nghĩa ở trên được gọi là tiết diện vi mô, còn tiết diện vĩ mô được tính cho toàn bộ số hạt nhân nguyên tử trong bia, định nghĩa như sau:

$$\Sigma = \sigma N = \sigma \frac{\rho N_A}{A} \quad (4.15)$$

với  $\rho$  là mật độ hạt nhân ( $\text{g.cm}^{-3}$ );  $A$  là khối lượng nguyên tử;  $N_A$  là số Avogadro;  $N$  là số nguyên tử trong mỗi  $\text{cm}^3$ . Tiết diện vĩ mô  $\Sigma$  có thứ nguyên là [ $\text{cm}^{-1}$ ],  $\sigma$  tính bằng  $\text{cm}^2$ .

Một cách tổng quát, nếu trong mẫu có n hạt nhân khác nhau thì tiết diện vĩ mô được tính bởi:

$$\Sigma = \sum_{i=1}^n \sigma_i N_i \quad (4.16)$$

Ví dụ, đối với  $\text{H}_2\text{O}$  thì  $\Sigma_{\text{H}_2\text{O}} = \sigma_{\text{H}} N_{\text{H}} + \sigma_{\text{O}} N_{\text{O}} = \rho_{\text{H}_2\text{O}} \frac{N_A}{M_{\text{H}_2\text{O}}} (2\sigma_{\text{H}} + \sigma_{\text{O}})$

(tên Cd bao bao  
chỗ chia neutron trao nhau  
(đo neutron như vào))

#### 4.3.3. Tiết diện tích phân cộng hưởng

Trong vùng năng lượng  $1 \text{ eV} < E_n < 1 \text{ MeV}$ , tiết diện neutron không tuân theo luật  $1/v$  mà có những chỗ cộng hưởng riêng biệt. Tiết diện toàn phần  $\sigma_t$  thay đổi nhanh theo năng lượng neutron và khác nhau ứng với các hạt nhân khác nhau. Giá trị  $\sigma_t$  không thể dự đoán được cho một nguyên tố cho trước. Các cộng hưởng chủ yếu do việc bắt neutron ( $n, \gamma$ ). Do đó, trong vùng năng lượng này, ta có thể cho rằng  $\Gamma_\gamma > \Gamma_n > \Gamma_p$  và  $\Gamma_\alpha$ , bởi vì  $\Gamma_p$  và  $\Gamma_\alpha$  rất nhỏ ứng với vùng năng lượng này. Do đó, các neutron có năng lượng trung bình không đủ năng lượng kích thích hạt nhân để cho phép proton và alpha xuyên qua rào Coulomb quanh nhân.

Rõ ràng tốc độ phản ứng trong vùng năng lượng neutron cộng hưởng có thể tính được nếu như phân bố năng lượng neutron và tiết diện  $\sigma(E)$  biết trước. Trong vùng năng lượng này tiết diện neutron không tuân theo luật  $1/v$  mà có những chỗ cộng hưởng, tiết diện cho một loại phản ứng được xác định :

$$I_{0x} = \int_{E_{Cd}}^{2\text{MeV}} \sigma_x(E) \frac{dE}{E} \approx \int_{E_{Cd}}^{\infty} \sigma_x(E) \frac{dE}{E} \quad (4.17)$$

Chỉ số  $x$  cho biết loại phản ứng hạt nhân (hấp thụ, tán xạ,...) và  $I_{0x}$  được gọi là **tiết diện tích phân cộng hưởng trên Cadmium**.  $E_{Cd}$  là năng lượng ngưỡng khi bia được bọc bởi tấm cadmium.

Tích phân cộng hưởng bao gồm sự phân bố cộng hưởng và phần đuôi của đỉnh cộng hưởng tuân theo luật  $1/v$ . Do đó, trong trường hợp có một đỉnh cộng hưởng đơn trên đường cong  $\sigma(E)$  thì tiết diện trong vùng cộng hưởng có thể chia là hai phần:

- Một phần do sự phân bố bởi đỉnh cộng hưởng  $\sigma_r(E)$ , được cho bởi công thức Breit-Wigner.
- Một phần do sự phân bố bởi luật  $1/v$ ,  $\sigma_{1/v}(E)$ . Do đó, khi không có cộng hưởng thì tiết diện tuân theo sự biến đổi  $1/v$ .

Vậy, ta có thể viết lại (4.17) như sau:

$$I_0 = \int_{E_{Cd}}^{\infty} \sigma(E) \frac{dE}{E} = \int_{E_{Cd}}^{\infty} \sigma_{1/v}(E) \frac{dE}{E} + \int_{E_{Cd}}^{\infty} \sigma_r(E) \frac{dE}{E} \quad (4.18)$$

Hay ta có thể viết gọn lại:  $I_0 = I_{1/v} + I'$

$$(4.19)$$

$$I_{1/v} = \int_{E_{Cd}}^{\infty} \sigma_{1/v}(E) \frac{dE}{E} \quad (4.20)$$

Tùy theo bề dày của hộp Cd bao bọc vật liệu bia mà năng lượng  $E_{Cd}$  có giá trị khác nhau. Nếu bề dày hộp Cd  $< 1 \text{ mm}$  thì  $E_{Cd} = 0,5 \text{ eV} \rightarrow I_{1/v} = 0,45\sigma_0$ ; Nếu bề dày lá Cd = 1 mm thì  $E_{Cd} = 0,55 \text{ eV} \rightarrow I_{1/v} = 0,429\sigma_0$ ; Nếu bề dày lá Cd  $> 1 \text{ mm}$  thì  $E_{Cd} = 0,68 \text{ eV} \rightarrow I_{1/v} = 0,38\sigma_0$ .

$$\left. \begin{array}{l} E_0 = 0,258 \text{ eV} \\ \sigma_0 = 0,258 \text{ cm}^{-2} \end{array} \right\}$$

$$I' = \int_{E_{Cd}}^{\infty} \sigma_r(E) \frac{dE}{E} = 4,1 \cdot 10^6 \cdot g \cdot \frac{\Gamma_n \Gamma_\gamma}{E_r^2 \Gamma} \quad (4.21)$$

trong đó,  $g = (2J+1)/[2(2I+1)]$  là trọng số phụ thuộc vào spin hạt nhân bia I và spin hạt nhân hợp phần J. Trị số của  $I_0$  đối với một hạt nhân được cho trước và sau khi chuẩn hóa ngưỡng cadmium bằng 0,5 eV. Các giá trị  $I_0$ ,  $I'$  và  $I_{1/v}$  của vài hạt nhân cho ở bảng 4.1.

Trên thực tế phổ neutron trên nhiệt tuân theo  $1/E^{1+\alpha}$ , vì vậy tiết diện tích phân cộng hưởng được viết lại như sau:

Tiết diện  
để phản ứng

$$I_0'(\alpha) = I_0 \cdot \frac{(1eV)^\alpha}{E_r^\alpha} \quad (1)$$

neutron khôn  
g

$$\frac{v_0}{v} = \frac{\sqrt{\frac{2E_0}{m}}}{\sqrt{\frac{2E}{m}}} = \sqrt{\frac{E_0}{E}}$$

$$(2) I_0' = I_0 - I_{1/v}$$

Lỗi

55

$$(3) I_0'(\alpha) = I_0^{(\alpha)} - I_{1/v}^{(\alpha)}$$

$$I_0(\alpha) = \int_{E_{Cd}}^{\infty} \sigma(E) \frac{dE}{E^{1+\alpha}} = \frac{I_0 - 0,429\sigma_0}{E_r^\alpha} + \frac{0,429\sigma_0}{(2\alpha+1)E_{Cd}^\alpha} \quad (4.22)$$

trong đó,  $\bar{E}_r$  (eV) là năng lượng cộng hưởng hiệu dụng.

Bảng 4.1: Các thông số cộng hưởng của vài hạt nhân

Hạt nhân	T <sub>1/n</sub>	E <sub>r</sub> (eV)	I' (barn)	I <sub>1/v</sub> (barn)		I <sub>0</sub> (barn) = I' + I <sub>1/v</sub>		$\sigma_0$ (barn)
				a	b	a	b	
<sup>115</sup> In	54,2 phút	1,457	$2000 \pm 300$	60	68	$2060 \pm 300$	$2068 \pm 300$	$166 \pm 2$
<sup>197</sup> Au	250 ngày	4,906	$1505 \pm 20$	$38 \pm 0,2$	$44 \pm 0,2$	$1543 \pm 20$	$1551 \pm 20$	$98,8 \pm 0,3$
<sup>59</sup> Co	5,26 năm	133	$50 \pm 12$	15	17	$65 \pm 12$	$67 \pm 12$	$37,2 \pm 1,5$
<sup>63</sup> Cu	12,8 giờ	580	$2,4 \pm 0,5$	1,7	2	$4,1 \pm 0,5$	$4,4 \pm 0,5$	$4,51 \pm 0,23$

a: ngưỡng cadmium 0,68 eV ứng với hộp Cd dày > 1 mm

b: ngưỡng cadmium 0,52 eV ứng với hộp Cd dày < 1 mm

#### 4.3.4. Tiết diện phản ứng với neutron nhanh ( $E > 1$ MeV)

Trong trường hợp này ta chủ yếu khảo sát đối với neutron có năng lượng 14 MeV. Trong vùng năng lượng này, các neutron được tạo ra từ máy phát neutron dựa theo phản ứng  $T(d, n)\alpha$ .

**4.3.4.1. Tiết diện toàn phần  $\sigma_t$  với neutron 14 MeV:**  $\sigma_t$  có thể tính được dễ dàng cho các nguyên tố cho trước, còn các neutron nhiệt và trung nhiệt thì không tính được trong vùng năng lượng này. Tiết diện toàn phần được định nghĩa:

$$\sigma_t = 2\pi R_A^2 \quad (4.23)$$

với  $R_A$  là bán kính hạt nhân,  $R_A \approx 1,5 \times 10^{-13} A^{1/3}$  (cm).

Điều này có nghĩa là  $\sigma_t^{1/2}$  tỉ lệ với  $A^{1/3}$  và tất cả các nguyên tố theo tính toán thì  $\sigma_t$  có giá trị từ 1,5 barn đến 6 barn ứng với năng lượng neutron 14 MeV.

**4.3.4.2. Tiết diện phản ứng ( $n, \gamma$ ):** Tại năng lượng neutron 14 MeV, xác suất xảy ra phản ứng ( $n, \gamma$ ) nhỏ. Hình 1.2 cho ta thấy rằng tiết diện phản ứng này giảm rất nhanh khi năng lượng neutron tăng. Do đó, tại năng lượng 14 MeV, tiết diện phản ứng này xác định được bằng cách ngoại suy tuyến tính hàm  $\text{Log}(\sigma_t)$  theo  $\text{Log}(E)$ .

**4.3.4.3. Tiết diện  $\sigma(n, 2n)$ :** Tại neutron 14 MeV, các phản ứng khác có thể tính được tiết diện, đặc biệt là phản ứng ( $n, 2n$ ). Trong hầu hết trường hợp, ta thấy rằng phản ứng ( $n, 2n$ ) có tiết diện gần bằng 1/2 tiết diện toàn phần, tức là:

$$\sigma(n, 2n) = 1/2\sigma_t \approx \pi R_A^2 \quad (4.24)$$

Rõ ràng, tiết diện phản ứng ( $n, 2n$ ) phụ thuộc vào số neutron dư trong nhân bia. Neutron thứ hai có thể rời khỏi hạt nhân dễ dàng hơn nếu như neutron dư lớn hơn. Phép đo neutron dư người ta thường chọn  $(N-Z)/A$ .

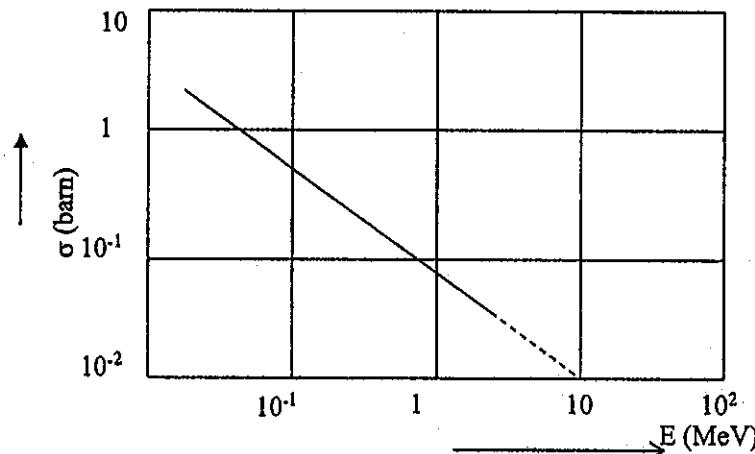
Theo mối quan hệ bán thực nghiệm giữa  $\sigma(n, 2n)$  và  $(N-Z)/A$  được cho bởi:

- Với  $(N-Z)/A \geq 0,07$

$$\text{Log } \sigma(n, 2n)_{14\text{MeV}} = 2,473 + 3,48 \frac{N-Z}{A} \text{ (mb).} \quad (4.25)$$

- Với  $(N-Z)/A < 0,07$

$$\log \sigma(n, 2n)_{14\text{MeV}} = -0,341 + 42 \frac{N-Z}{A} (\text{mb}) \quad (4.26)$$



Hình 4.2 : Tiết diện  $(n, \gamma)$  của Au tại năng lượng neutron cao

#### 4.3.4.4. Các phản ứng $\sigma(n, p)$ , $\sigma(n, \alpha)$

Các phản ứng  $\sigma(n, p)$   $\sigma(n, \alpha)$  cũng là phản ứng ngưỡng. Trong vùng năng lượng 14 MeV, tiết diện phản ứng  $\sigma(n, p)$  và  $\sigma(n, \alpha)$  thường được tính theo tỉ số đối với  $\sigma_{n,e}$  và được cho bởi:

$$\frac{\sigma(n, p)_{\max}}{\sigma_{n,e}} = k \exp(-25,2 \frac{N-Z}{A}) \quad (4.27)$$

với nhân lẻ-chẵn  $k_{(o-e)} = 0,25$  và nhân chẵn – chẵn  $k_{(e-e)} = 0,47$ .

$$\text{Tiết diện không đòn hồi: } \sigma_{n,e} = \sigma(n, 2n) + \sigma(n, p) + \sigma(n, \alpha) + \dots \quad (4.28)$$

- Tại neutron 14 MeV thì

$$\sigma_{n,e}(14 \text{ MeV}) = \pi(0,12 A^{1/3} + 0,21)^2 \text{ barn}$$

và tiết diện phản ứng  $\sigma(n, p)$  cho bởi:

$$\frac{\sigma(n, p)(14 \text{ MeV})}{\sigma_{n,e}} = k \exp(-31,1 \frac{N-Z}{A}) \quad (4.29)$$

với nhân lẻ-chẵn  $k_{(o-e)} = 0,5$  và nhân chẵn – chẵn  $k_{(e-e)} = 0,83$ .

#### Yí dụ:

Giá trị thực nghiệm của  $\sigma(n, p)(14 \text{ MeV}) = 13 \text{ mb}$ .

Giá trị tính:  $A = 109$ ,  $Z = 47$ ,  $N = 62$

$$\sigma_{n,e} = 1,93 \text{ b}, \sigma(n, p)(14 \text{ MeV}) = 13,34 \text{ mb}.$$

- Tương tự, đối với phản ứng  $(n, \alpha)$ :

~~Để tính số phản ứng neutron trên nh 100~~ =  $\int_{E_{Cd}}^{\infty} \phi(E) \sigma(E) dE$

→ h<sub>e</sub> sẽ xem là opera  $E_{Cd}$

Quy tắc + logarit

57

$$R = \Phi_{th} \sigma_0 + \Phi_e I_0$$

$$\frac{\sigma(n, \alpha)_{max}}{\sigma_{n,e}} = k \cdot \exp\left(-37,7 \frac{N-Z}{A}\right)$$

$$(4.30) = \sigma_0 V_0 \int_0^{V_{Cd}} n(v) dv +$$

với nhân lè-chă̄n  $k_{(e-e)} = 0,55$  và nhân chă̄n-chă̄n  $k_{(e-e)} = 0,92$

$$\frac{\sigma(n, \alpha)(14 \text{ MeV})}{\sigma_{n,e}} = k \cdot \exp\left(-37,8 \frac{N-Z}{A}\right)$$

$$(4.31) \Phi_e \int_{E_{Cd}}^{\infty} \frac{\sigma(E)}{E^{1/2}} dE$$

với nhân lè-chă̄n  $k_{(e-e)} = 0,5$  và nhân chă̄n-chă̄n  $k_{(e-e)} = 0,83$

#### 4.4. TỐC ĐỘ PHẢN ỨNG VỚI NEUTRON

##### 4.4.1. Tốc độ phản ứng với neutron nhiệt (luật 1/v)

Tốc độ phản ứng R cho mỗi nhân nguyên tử có thể tính được nếu như thông lượng neutron  $\phi(E)$  và tiết diện  $\sigma(E)$  đã biết trước, tốc độ phản ứng khi đó là:

$$dR = \sigma(E) \phi(E) dE \quad (4.32)$$

Do  $\phi = v \cdot n$  ( $n$  là mật độ neutron), nên ta có thể biểu diễn tốc độ phản ứng theo vận tốc neutron

$$dR = \sigma(v) v n(v) dv \quad (4.33)$$

Lấy tích phân phương trình (4.32), ta được tốc độ phản ứng toàn phần

$$R = \int_0^{\infty} \sigma(v) v n(v) dv \quad (4.34)$$

với  $n(v)dv$  là mật độ neutron có vận tốc giữa  $v$  và  $v+dv$ .

$$\text{Khi } \sigma \sim 1/v \text{ thì } \sigma(v) = \frac{\sigma_0 V_0}{v} \quad (4.35)$$

với  $\sigma_0$  là tiết diện phản ứng của neutron ở vận tốc  $v_0 = 2200 \text{ ms}^{-1}$ .

Vậy, tốc độ phản ứng của neutron nhiệt với nhân bia được tính bởi

$$R = \sigma_0 V_0 \int_0^{\infty} n(v) dv = n v_0 \sigma_0 = \phi_{th} \sigma_0 \quad (4.36)$$

với  $n = \int_0^{\infty} n(v) dv$  được gọi là mật độ neutron nhiệt,  $\phi_{th}$  gọi là thông lượng neutron nhiệt.

##### 4.4.2. Tốc độ phản ứng của hạt nhân khi chiếu xạ trong lò phản ứng

Khi chiếu xạ nhân bia trong lò phản ứng, tốc độ phản ứng của mỗi hạt nhân nguyên tử được cho bởi:

$$\begin{aligned} R &= \int_0^{\infty} n(v) v \sigma(v) dv = \int_0^{v_1} n(v) v \sigma(v) dv + \int_{v_1}^{\infty} n(v) v \sigma(v) dv \\ &= \sigma_0 V_0 \int_0^{v_1} n(v) dv + \phi_e \int_{E_{Cd}}^{\infty} \frac{\sigma(E)}{E^{1/2}} dE \\ &= \sigma_0 v_0 n_{th} + \phi_e I_0 \end{aligned} \quad (4.37)$$

Hay,

$$R = \phi_{th} \sigma_0 + \phi_e I_0$$

$\downarrow$

$\rightarrow$

$$\frac{dN}{dt} \rightarrow N$$

Hạt nhân phay xác

?) Cao bao độ đt  $\phi$  & cadmium và vay  
thuỷ ngân. Dùng bia lè ghi dày Al - 0,1% Au  
HDP  $\rightarrow$  Vết hoát nêu trên  $Au^{197}(n, \gamma) Au^{198}$

58



Trên thực tế, phô neutron trong vùng trên nhiệt có thể lệch khỏi giá trị ban đầu của nó, khi đó tiết diện tích phân cộng hưởng phải thay đổi và phụ thuộc vào vị trí chiếu xạ trong lò phản ứng. Tốc độ phản ứng lúc này được tính theo công thức:

$$R = \phi_{th} \sigma_0 + \phi_e I_0(\alpha) \quad (4.38)$$

trong đó,  $\alpha$  là một hằng số phụ thuộc vị trí chiếu xạ trong lò phản ứng và được gọi là *hệ số lệch phô neutron trên nhiệt*.

Nếu thay  $\sigma_0$  bằng tiết diện hiệu dụng  $\sigma_{eff}$ , thì khi đó tốc độ phản ứng của hạt nhân bia trong lò phản ứng hạt nhân là

$$R = \phi_{th} \sigma_{eff} \quad (4.39)$$

với,  $\sigma_{eff} = \sigma_0 + \frac{\phi_e}{\phi_{th}} I_0(\alpha)$  (4.40)

Từ phương trình (4.39) ta có thể tính được tốc độ phản ứng đổi với một hạt nhân bia bất kỳ nếu như thông số phô neutron ( $\alpha$ ,  $\phi_{th}$  và  $\phi_e/\phi_{th}$ ) tại vị trí chiếu xạ cho trước. Tuy nhiên, trong thực nghiệm ta thường dễ dàng đo tỉ số thông lượng neutron nhiệt/trên nhiệt và tỉ số tiết diện neutron trên nhiệt/neutron nhiệt. Vì vậy, ta đặt:

$$f = \frac{\phi_{th}}{\phi_e} = \frac{\text{thông lượng neutron}}{\text{thông lượng neutron trên nhiệt}} \quad (4.41)$$

$$Q_0 = \frac{I_0}{\sigma_0} \quad \text{hay} \quad Q_0(\alpha) = \frac{I_0(\alpha)}{\sigma_0} \quad (4.42)$$

$$Q_0(\alpha) = \frac{I_0(\alpha)}{\sigma_0} = \frac{Q_0 - 0,429}{E_r^\alpha} + \frac{0,429}{(2\alpha + 1) E_{Cd}^\alpha} \quad (4.43)$$

Hệ số  $f$  trong (4.41) được gọi là *tỉ số thông lượng neutron nhiệt/thông lượng neutron trên nhiệt*. Hệ số  $Q_0$  trong (4.42) được gọi là *tỉ số tiết diện tích phân cộng hưởng/tiết diện neutron tại vận tốc 2200 m/s*.

Khi đó, tốc độ phản ứng của hạt nhân bia từ (4.39) được tính lại như sau:

$$R = \sigma_0 \phi_e (f + Q_0(\alpha)) \quad \leftarrow R = \phi_{th} + \phi_e J_0(\alpha) \quad (4.44)$$

Nếu gọi  $N_0$  là số hạt nhân bia thì tốc độ phản ứng tương ứng là:

$$R' (s^{-1}) = N_0 R = N_0 \sigma_0 \phi_e (f + Q_0(\alpha)) \quad (4.45)$$

## 4.5. MỘT VÀI ỨNG DỤNG CỦA PHẢN ỨNG HẠT NHÂN VỚI NEUTRON

### 4.5.1. Tỉ số cadmium ( $R_{Cd}$ ) và tỉ số thông lượng neutron nhiệt/trên nhiệt ( $f$ )

Như ta biết, cadmium (Cd) có tiết diện hấp thụ rất cao đối với neutron có năng lượng 0,4 → 0,5 eV. Ngưỡng hiệu dụng của Cd phụ thuộc vào bề dày của lớp Cd và phụ thuộc vào dạng hình học của nó.

Nếu chiếu mẫu có bao phủ lớp Cd dày 0,7 mm đến 1 mm thì các neutron nhiệt hoàn toàn bị hấp thụ, vì thế mà phản ứng ( $n, \gamma$ ) chỉ có thể xảy ra với neutron có năng lượng trên ngưỡng Cd (epi-cadmium). Nếu không có chắn lớp Cd thì phản ứng xảy ra cho cả neutron nhiệt và neutron cộng hưởng.

$$R = G_e \phi_e [G_{th} f + G_e Q_0(\alpha)]$$

$$G \leq 1$$

X5. Kỹ thuật  
(ngân điện)

$\downarrow$   
hỗn hợp chì  
neutron

như sau  
như  
nêu trên  
trên  
như

F, họ số truyền qua lớp col

$$F_{cd} = 1 \quad (F_{cd, Au} = 0,991)$$

59

$$\text{bọc col: } R_{cd} = G_e F_{cd} e^{-\frac{t}{T}}$$

Tỉ số cadmium được định nghĩa như sau: tỉ số cadmium ( $R_{cd}$ ) là tỉ số giữa tốc độ phản ứng của một hạt nhân khi chưa bọc tấm Cd và tốc độ phản ứng của hạt nhân đó khi có bọc tấm Cd. Từ định nghĩa này ta có biểu thức:

$$\text{để Cad và } R_{cd} = \frac{\phi_{th}\sigma_0 + \phi_e I_0(\alpha)}{F_{cd}\phi_e I_0(\alpha)} \Rightarrow \frac{\text{không bọc col}}{\text{bọc col}} \quad (4.46)$$

$$\text{Hay: } R_{cd} F_{cd} - 1 = \frac{\phi_{th}\sigma_0}{\phi_e I_0(\alpha)} = \frac{f}{Q_0(\alpha)} \quad (4.47)$$

trong đó,  $F_{cd}$  là hệ số truyền qua Cd, phụ thuộc vào hạt nhân bia.

Rõ ràng, ta thấy phép đo tỉ số  $R_{cd}$  phụ thuộc vào độ nhạy của nhân bia đối với neutron nhiệt và trên nhiệt. Do đó, phương trình (4.47) chưa tính trực tiếp được tỉ số thông lượng neutron nhiệt/trên nhiệt trừ khi độ nhạy của nhân bia biết trước.

Thông thường, với một nguyên tố xác định thì giá trị  $R_{cd}$  được đo hoàn toàn bằng thực nghiệm, do đó ta có thể tính được tỉ số  $f = \phi_{th}/\phi_e$ .

Các công thức bán thực nghiệm cho việc xác định  $R_{cd}$  của một nguyên tố bất kỳ khi biết được  $R_{cd}$  của một nguyên tố cho trước (ví dụ như vàng, Au hay cobalt, Co)

$$R_{cd,x} F_{cd,x} = 1 + (R_{cd,Au} F_{cd,Au} - 1) \frac{I_{0,Au}(\alpha)\sigma_{0,x}}{I_{0,x}(\alpha)\sigma_{0,Au}} \quad (4.48)$$

$$R_{cd,x} F_{cd,x} = 1 + (R_{cd,Co} F_{cd,Co} - 1) \frac{I_{0,Co}(\alpha)\sigma_{0,x}}{I_{0,x}(\alpha)\sigma_{0,Co}} \quad (4.49)$$

Các giá trị  $\sigma_0$  và  $I_0$  được lấy từ các bảng số liệu hạt nhân.

#### 4.5.2. Xác định thông lượng neutron nhiệt

Thông lượng neutron nhiệt được xác định bằng phép đo tuyệt đối độ phóng xạ nếu như ta biết chính xác tần số điện kích hoạt của nguyên tố đó.

Theo Hogdahl, tốc độ phản ứng đối với mẫu chiếu trần cho bởi:

$$R = R_{th} + R_e = \phi_{th}\sigma_0 + \phi_e I_0(\alpha) \quad (4.50)$$

Khi đó, tốc độ phân rã D trong thời gian chiếu xạ t<sub>i</sub> và sau thời gian chờ t<sub>d</sub> là

$$D = N_0 \cdot R [1 - \exp(-\lambda t_i)] \exp(-\lambda t_d) \quad (4.51)$$

$$\text{Hay: } D = N_0 \cdot \phi_{th} \sigma_{eff} [1 - \exp(-\lambda t_i)] \exp(-\lambda t_d) \quad (4.52)$$

với  $N_0$  là số hạt nhân bia.

Nếu bia (với  $F_{cd} = 1$ ) được bọc bởi lớp Cd thì phản ứng chỉ xảy ra với neutron trên nhiệt, khi đó:

$$R_e = \phi_e I_0(\alpha) \quad (4.53)$$

Do đó, tốc độ phân rã ứng với trường hợp này là

$$D_e = N_0 \cdot \phi_e I_0(\alpha) [1 - \exp(-\lambda t_i)] \exp(-\lambda t_d) \quad (4.54)$$

Từ các biểu thức trên, tốc độ phân rã chỉ do phản ứng với neutron nhiệt cho bởi

$$D_{th} = D - D_e = N_0 \cdot \phi_{th} \sigma_0 [1 - \exp(-\lambda t_i)] \exp(-\lambda t_d) \quad (4.55)$$

Đo

để số cadmium  $R_{cd}$  =

float số liệu Asr (ke<sup>0</sup> bao)

float số liệu Asr, col (bco)

$$\text{hỗn độ} = \frac{N_p / t_m}{W.S.D.C} \quad (\text{hỗn độ} \text{~và~ hỗn độ} \text{~liệu}) \quad \text{page 69}$$

Bằng việc đo tốc độ phân rã  $D$  và  $D_0$  (có và không có bọc Cd) thì ta sẽ tính được thông lượng neutron nhiệt  $\phi_{th}$  khi  $\sigma_0, N, \lambda, t_i$  và  $t_d$  là biết trước.

Ta lưu ý rằng, các phép đo này sẽ cho ra các kết quả khác nhau, bởi vì nó phụ thuộc vào bề dày của lớp Cadmium bao quanh mẫu đo.

#### 4.5.3. Xác định thông lượng neutron trung bình và nhanh

Với neutron nhanh hầu như xảy ra ở các phản ứng ( $n, p$ ), đôi khi cũng có  $(n, \alpha)$ ,  $(n, 2n)$ ,..

Tốc độ phản ứng trong trường hợp này là

$$R = \bar{\phi} \cdot \bar{\sigma} \quad (4.56)$$

Sau thời gian chiếu  $t_i$  và thời gian chờ  $t_d$ , tốc độ phân rã là

$$D_f = N_0 \bar{\phi} \bar{\sigma} [1 - \exp(-\lambda t_i)] \exp(-\lambda t_d) \quad (4.57)$$

Như vậy, khi đo được  $D_f$  thì ta có thể tính được  $\bar{\phi}$  nếu biết trước  $\bar{\sigma}$ .

Nếu lò phản ứng ổn định, nghĩa là tỉ số thông lượng nhanh/nhiệt không đổi thì ta có thể đưa ra một hệ số  $k$  và nó được xác định bởi

$$k = \frac{\bar{\phi}}{\phi_{reactor}} \approx \frac{\bar{\phi}}{\phi_{th}} \quad (4.58)$$

Khi đó, tốc độ phản ứng là

$$R = \bar{\phi} \bar{\sigma} = k \cdot \phi_{th} \bar{\sigma} \quad (4.59)$$

Các giá trị  $\bar{\sigma}$  biết trước,  $k$  tính được nếu hoạt độ đo được chính xác. Từ giá trị  $k$  và thay vào (4.59) ta xác định được thông lượng neutron nhiệt  $\phi_{th}$ .

- B1 : nhu cầu b1 b2 (W)
- B2 : nhu cầu đang thử quen (tm)
- B3 : A
- B4 : thực hành #1
- B5 : tq +m
- B6 : thực hành đt Page 69

## BÀI TẬP CHƯƠNG 4

- 4.1. Tính tiết diện hiệu dụng lò phản ứng  $\sigma_{\text{eff}}$  đối với hạt nhân  $\text{In}^{115}$ ,  $\text{Au}^{197}$ ,  $\text{Co}^{59}$ ,  $\text{Cu}^{63}$ . Biết rằng lò phản ứng có thông lượng nhiệt  $\phi_h = 1,5 \cdot 10^{12} \text{ n.cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$  và thông lượng trên nhiệt  $\phi_e = 2 \cdot 10^{11} \text{ n.cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$ . Biết:  $\sigma_0(\text{In}^{115}) = 166 \text{ b}$ ;  $\sigma_0(\text{Au}^{197}) = 98,8 \text{ b}$ ;  $\sigma_0(\text{Co}^{59}) = 37,2 \text{ b}$ ;  $\sigma_0(\text{Cu}^{63}) = 4,51 \text{ b}$   
 $I_0(\text{In}^{115}) = 2060 \text{ b}$ ;  $I_0(\text{Au}^{197}) = 1543 \text{ b}$ ;  $I_0(\text{Co}^{59}) = 65 \text{ b}$ ;  $I_0(\text{Cu}^{63}) = 4,1 \text{ b}$
- 4.2. Thực nghiệm với lò phản ứng tại kênh số 1 có thông lượng nhiệt  $\phi_h = 5 \cdot 10^{13} \text{ n.cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$ , trên nhiệt  $\phi_e = 5 \cdot 10^{12} \text{ n.cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$  người ta dùng miếng vàng (Au) để đo tiết diện hiệu dụng và đã xác định được  $\sigma_{\text{eff1}} = 253,1 \text{ b}$ . Còn khi thực nghiệm tại kênh số 2 có thông lượng nhiệt  $1,5 \cdot 10^{11} \text{ n.cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$  và trên nhiệt  $3 \cdot 10^{10} \text{ n.cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$  người ta xác định được  $\sigma_{\text{eff2}} = 407,4 \text{ b}$ . Tính tiết diện tích phân công hưởng  $I_0$  và tiết diện neutron nhiệt  $\sigma_0$  của Au. Bỏ qua độ lệch phö neutron trên nhiệt cho cả hai kênh.
- 4.3. Tính tiết diện phản ứng  $\sigma(n, 2n)$  của  $\text{O}^{17}$ ,  $\text{Mn}^{55}$ ,  $\text{V}^{51}$  với neutron 14 MeV.
- 4.4. Tính tiết diện phản ứng  $\sigma(n, p)$ ,  $\sigma(n, \alpha)$  với neutron 14 MeV của các hạt nhân  $\text{F}^{19}$ ,  $\text{Ca}^{41}$  và  $\text{Cu}^{63}$ .
- 4.5. Tính tì số cadmi  $R_{\text{Cd}}$  đối với Au với nguồn neutron có  $\phi_e = 5 \cdot 10^6 \text{ n.cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$ ,  $\phi_h = 6 \cdot 10^7 \text{ n.cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$  trong hai trường hợp: a)  $\alpha = 0$ ; b)  $\alpha = 0,02$ . Bỏ qua hệ số tự che chắn neutron nhiệt và trên nhiệt.
- 4.6. Để xác định thông lượng neutron nhiệt  $\phi_h$  và trên nhiệt  $\phi_e$  người ta dùng lá mỏng Au<sup>197</sup> và Co<sup>59</sup> có hàm lượng biết trước đem chiếu xạ tại cùng vị trí trong lò phản ứng. Tốc độ phản ứng của mỗi hạt nhân Au thu được là  $2,5 \cdot 10^{-7}$  hạt/s, tốc độ phản ứng của mỗi hạt nhân Co thu được là  $1,5 \cdot 10^{-8}$  hạt/s. Tính thông lượng neutron nhiệt và trên nhiệt tại vị trí trên trong hai trường hợp: a)  $\alpha = 0$ ; b)  $\alpha = -0,05$ . Bỏ qua hệ số tự che chắn neutron nhiệt và trên nhiệt của Au và Co.  
Biết:  $\sigma_0(\text{Au}^{197}) = 98,8 \text{ b}$ ;  $\sigma_0(\text{Co}^{59}) = 37,2 \text{ b}$   
 $I_0(\text{Au}^{197}) = 1543 \text{ b}$ ;  $I_0(\text{Co}^{59}) = 65 \text{ b}$
- 4.7. Tính tốc độ phản ứng của Au<sup>197</sup> khi chiếu mẫu tại vị trí trong lò phản ứng có  $\phi_h = 2 \cdot 10^{12} \text{ n.cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$ ,  $\phi_e = 5 \cdot 10^{10} \text{ n.cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$  và  $\alpha = -0,025$  trong các trường hợp sau:
- a) Mẫu có dạng dây hợp kim Al-0,1%Au, khối lượng  $w = 50 \text{ mg}$ . Bỏ qua các hệ số tự che chắn neutron nhiệt và trên nhiệt.
  - b) Mẫu có dạng tấm, dày  $t = 1 \text{ mm}$ , khối lượng  $w = 50 \text{ mg}$ , độ tinh khiết 99,9%. Hệ số tự che chắn neutron nhiệt phụ thuộc bề dày như sau:  $G_h = 1 - 0,75 * \ln(22,9 \cdot t)$ ,  $t$  đơn vị cm. Hệ số tự che chắn neutron trên nhiệt phụ thuộc bề dày như sau:  $G_e = 1 - 0,55 * \ln(30,3 \cdot t)$ ,  $t$  đơn vị cm.
  - c) Tính tì số Cd của Au. Suy ra tì số Cd của Cu.

## Chương 5

# PHƯƠNG TRÌNH CƠ BẢN TRONG PHÉP PHÂN TÍCH KÍCH HOẠT NEUTRON

### 5.1. ĐỊNH LUẬT PHÂN RÃ PHÓNG XẠ

#### 5.1.1. Trường hợp đơn giản

Xét một hạt nhân phân rã thành một hạt nhân bền:

$$(1) \xrightarrow{\lambda} (2) (\text{bền}) \quad (5.1)$$

Trường hợp này có thể xem như là phản ứng đơn hạt nhân. Tốc độ phân rã (số phân rã mỗi giây, D) tương ứng là

$$dN/dt = -\lambda N = D \quad (5.2)$$

với  $\lambda$  là hằng số phân rã, có thứ nguyên tỉ lệ nghịch với thời gian [ $s^{-1}$ ].

Tích phân (5.2) ta được :

$$N(t) = N_0 \exp(-\lambda t) \quad (5.3)$$

Ở đây,  $N(t)$  là số hạt nhân (1) còn lại tại thời điểm  $t$ ,  $N_0$  là số hạt nhân (1) ở thời điểm  $t = 0$ .

Từ (5.2) và (5.3), tốc độ phân rã tại thời điểm  $t$

$$D(t) = D_0 \exp(-\lambda t) \quad (5.4)$$

với  $D_0 = \lambda N_0$  là tốc độ phân rã tại thời điểm ban đầu ( $t = 0$ ).

Khi đó hoạt độ phóng xạ của mẫu đo được tại thời điểm  $t$  là

$$A(t) = \varepsilon_p D = \varepsilon_p \lambda N \quad (5.5)$$

$$\text{và} \quad A(t) = A_0 \exp(-\lambda t) \quad (5.6)$$

Hệ số  $\varepsilon_p$  được gọi là hệ số dò bức xạ (hiệu suất ghi của detector) và nó phụ thuộc vào bản chất của thiết bị ghi và dạng hình học của mẫu - detector.

Đặc trưng “tốc độ phân rã của một hạt nhân phân rã bức xạ” có thể được biểu diễn theo một hàm của chu kỳ bán rã  $T_{1/2}$ , nghĩa là thời gian cần thiết cho một số hạt nhân nguyên tử ban đầu “giảm” còn một nửa giá trị của nó. Như vậy, tại thời điểm  $t = T_{1/2}$  thì  $N = N_0/2$  và  $\ln(1/2) = -\lambda T_{1/2}$ .

$$\text{Hay } T_{1/2} = 0,693/\lambda \quad (5.7)$$

Chu kỳ bán rã  $T_{1/2}$  có thể xác định được từ đồ thị bằng việc vẽ hoạt độ A theo thời gian t trên giấy semilog cho ra một đường thẳng với hệ số góc là  $-\lambda$ .

#### 5.1.2. Trường hợp tổng quát

Nếu trong mẫu có nhiều hạt nhân phóng xạ thì độ phóng xạ toàn phần đo được là tổng của các độ phóng xạ của mỗi hạt nhân trong mẫu

$$A = A_1 + A_2 + \dots = \varepsilon_{p1} N_1 \lambda_1 + \varepsilon_{p2} \lambda_2 N_2 + \dots \quad (5.8)$$

Các hệ số  $\varepsilon_{p1}, \varepsilon_{p2}, \dots$  có thể khác nhau, phụ thuộc vào bản chất và năng lượng của bức xạ khác nhau.

Trong trường hợp này độ phóng xạ A khi được vẽ trên giấy semilog theo thời gian t sẽ cho ra một đường cong.

Trong trường hợp mẫu có 2 hạt nhân phóng xạ, ta có

$$A(t) = A_1(t) + A_2(t) = A_{01} \exp(-\lambda_1 t) + A_{02} \exp(-\lambda_2 t) \quad (5.9)$$

Giả sử rằng hạt nhân (1) phân rã nhanh hơn hạt nhân (2), nghĩa là  $\lambda_1 > \lambda_2$ , sau thời gian đủ lớn phương trình (5.9) trở thành

$$A(t) \approx A_{02} \exp(-\lambda_2 t) \quad (5.10)$$

Sau một thời gian đo đủ lâu, ta ngoại suy đường cong này trên giấy semilog  $t \rightarrow 0$ , trừ giá trị  $A_2(t)$  vài lần từ độ phóng xạ toàn phần  $A$ . Từ đó, có thể tính  $A_1$  theo  $t$  (nghĩa là  $A_{01} \exp(-\lambda_1 t)$ ). Đường phân rã phức tạp này được phân tích thành hai thành phần của nó, từ hai thành phần này, chu kỳ bán rã  $T_{1/2}$  có thể xác định được.

Thông thường kỹ thuật làm khớp bình phương tối thiểu phải được đề cập đến. Số liệu của một đường phân rã bức xạ bao gồm m lần đo tốc độ đếm  $A_i$  của một mẫu tại thời điểm  $t_i$ . Nếu n loại hạt nhân độc lập hiện diện trong mẫu thì khi đó:

$$A_i = \sum_{j=1}^{j=n} A_{0j} \exp(-\lambda_j t_i) + z_i \quad (5.11)$$

với  $A_{0j} \exp(-\lambda_j t_j)$  biểu diễn sự phân bố của thành phần thứ j trong bức xạ toàn phần tại thời điểm  $t_j$ . Phần còn lại  $z_i$  có mặt do sự biến thiên thống kê và sai số thực nghiệm. Từ n hệ số  $A_{0j}$  có thể lập thành phương trình tuyến tính và được giải bằng phương pháp bình phương tối thiểu.

Điều kiện cho lời giải là

$$\sum_{i=1}^{i=m} W_i z_i^2 = \min \quad (5.12)$$

với  $W_i = \frac{1}{\sigma_i^2}$  (5.13)

## 5.2. SỰ LỚN DÀN CỦA NHỮNG HẠT NHÂN CON BỨC XẠ

### 5.2.1. Hai phân rã liên tiếp

Xét trường hợp đơn giản của một hạt nhân (1) phân rã thành hạt nhân (2), hạt nhân (2) tiếp tục phân rã thành hạt nhân bền (3) :

$$(1) \xrightarrow{\lambda_1} (2) \xrightarrow{\lambda_2} (3) \quad (\text{bền}) \quad (5.14)$$

Sự phân rã (1) và (2) được biểu diễn theo phương trình vi phân

$$\frac{dN_1}{dt} = -\lambda_1 N_1 \quad (5.15)$$

Suy ra:

$$N_1 = N_{01} \exp(-\lambda_1 t) \quad (5.16)$$

$$\frac{dN_2}{dt} = \lambda_1 N_1 - \lambda_2 N_2 \quad (5.17)$$

Từ (5.16) và (5.17), ta có:

$$\frac{dN_2}{dt} + \lambda_2 N_2 = \lambda_1 N_{01} \exp(-\lambda_1 t) \quad (5.18)$$

Đây là phương trình vi phân tuyến tính bậc nhất. Dạng tổng quát của phương trình này cho bởi phương trình Leibnitz:

$$dy / dx + py = Q \quad (5.19)$$

Nghiệm tổng quát có dạng

$$y = \exp(-\int pdx) \int Q \exp(\int pdx)dx + C \exp(-\int pdx) \quad (5.20)$$

Vậy áp dụng cho (5.18), ta có nghiệm tổng quát

$$N_2(t) = \frac{\lambda_1}{\lambda_2 - \lambda_1} N_{01} [\exp(-\lambda_1 t) - \exp(-\lambda_2 t)] + N_{02} \exp(-\lambda_2 t) \quad (5.21)$$

Biểu thức thứ hai ở về phải của (5.21) cho biết sự phân bố tại thời điểm mà những hạt nhân con có mặt lúc đầu. Giá trị tại  $t = 0$  thì  $N_{02} = 0$ .

Phương trình (5.21) trở nên

$$N_2(t) = \frac{\lambda_1}{\lambda_2 - \lambda_1} N_{01} [\exp(-\lambda_1 t) - \exp(-\lambda_2 t)] \quad (5.22)$$

### 5.2.2. Nhiều phân rã liên tiếp

Xét chuỗi phân rã

$$(1) \xrightarrow{\lambda_1} (2) \xrightarrow{\lambda_2} \dots (n) \xrightarrow{\lambda_n} \quad (5.23)$$

Tốc độ phân rã của hạt nhân được biểu diễn bằng phương trình vi phân

$$dN_1 / dt = -\lambda_1 N_1 \quad (5.24)$$

$$dN_2 / dt = \lambda_1 N_1 - \lambda_2 N_2 \quad (5.25)$$

$$dN_3 / dt = \lambda_2 N_2 - \lambda_3 N_3, \dots \quad (5.26)$$

với  $N_1(t)$  và  $N_2(t)$  được cho bởi phương trình (5.3) và (5.21). Phương pháp thay thế phương trình vi phân thứ i vào phương trình vi phân thứ  $(i+1)$  khá phức tạp.... H. Bateman đã đưa ra lời giải cho một chuỗi gồm n số phân rã và giả sử rằng tại  $t = 0$  chỉ có một mình nhân "cha" hiện diện, nghĩa là  $N_{02} = N_{03} = \dots = 0$ . Lời giải phương trình này được thu được như sau:

$$N_n(t) = \lambda_1 \lambda_2 \lambda_3 \dots \lambda_{n-1} N_{01} \sum_{i=1}^{i=n} C_i \exp(-\lambda_i t) \quad (5.27)$$

với  $C_i = \prod_{j=1}^{j=i} \frac{1}{\lambda_j - \lambda_i} \quad (i \neq j)$  (5.28)

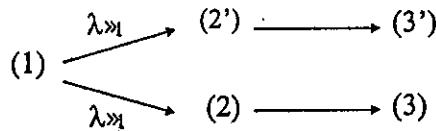
Ví dụ: Trong chuỗi  $(1) \rightarrow (2) \rightarrow (3)$  (bên)

$$C_1 = \frac{1}{\lambda_2 - \lambda_1}; \quad C_2 = \frac{1}{\lambda_1 - \lambda_2} \quad (5.29)$$

$$N_2(t) = \lambda_1 N_{01} \left[ \frac{\exp(-\lambda_1 t)}{\lambda_2 - \lambda_1} + \frac{\exp(-\lambda_2 t)}{\lambda_1 - \lambda_2} \right] = \frac{\lambda_1}{\lambda_2 - \lambda_1} N_{01} [\exp(-\lambda_1 t) - \exp(-\lambda_2 t)] \quad (5.30)$$

### 5.2.3. Phân rã phân nhánh

Xét một hạt nhân phóng xạ (1), phân rã bằng hai cách khác nhau hình thành hạt nhân (2) và (2'). Ta có sơ đồ phân rã sau



trong đó,  $\lambda_1$  và  $\lambda'_1$  là hằng số phân rã của hạt nhân (1) hình thành (2) và (2') tương ứng; (2) thì được hình thành tại tốc độ  $\lambda_1 N_1$ ; (2') tại  $\lambda'_1 N_1$ ; (1) phân rã tại  $(\lambda_1 + \lambda'_1)N_1$ .

Từ đó phương trình Bateman, ta viết lại:

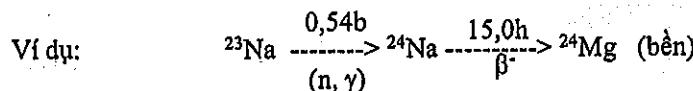
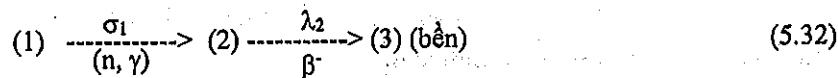
$$N_n(t) = \lambda_1 \cdot \lambda_2 \cdots \lambda_{n-1} N_{01} \sum_{i=1}^{i=n} C_i \exp(-\lambda_i t) \quad (5.31)$$

Nghĩa là  $\lambda$  trước khi lấy tổng phải được thay thế bằng hằng số phân rã một phần ( $\lambda^*$ ):  $\lambda^*$  là hằng số phân rã đối với sự biến đổi của thành phần chuỗi thứ i đến chuỗi thứ i+1.

Trong chuỗi (1)  $\rightarrow$  (2')  $\rightarrow$  (3') thì  $\lambda^*_1$  bằng  $\lambda'_1$ ; nhưng  $\lambda_1$  ở phương trình (5.31) bằng  $(\lambda_1 + \lambda'_1)$ .

### 5.3. SỰ BIẾN ĐỔI HẠT NHÂN THEO THÔNG LƯỢNG

Xét trường hợp sự biến đổi theo thông lượng neutron  $\phi$  được biểu thị bằng sơ đồ:



Theo sơ đồ (5.32), hạt nhân bền (1) được kích hoạt bằng sự bắt neutron (tiết diện  $\sigma_1$ ) và hình thành hạt nhân (2), và nó phân rã thành hạt nhân bền (3).

#### 5.3.1. Lời giải bằng phương trình Leibnitz

Trong quá trình chiếu xạ, sự lớn dần của hạt nhân (2) tỉ lệ với tiết diện kích hoạt  $\sigma_1$ , thông lượng neutron  $\phi$  và với số nguyên tử  $N_1$ . Giả sử  $N_1$  không đổi trong khi chiếu xạ, nghĩa là việc cháy mảnh được bỏ qua ( $N_1 \approx N_{01}$ ). Mặt khác, hạt nhân phóng xạ (2) phân rã trong khi chiếu xạ ở tốc độ  $\lambda_2 N_2$ . Kết quả, theo phương trình vi phân có thể tính được:

$$\frac{dN_2}{dt_i} = \phi \sigma_1 N_{01} - \lambda_2 N_2 \quad (5.33)$$

Phương trình này là dạng tổng quát của phương trình (5.20), với:  $x = t_i$  (thời gian chiếu),  $p(x) = \lambda_2 =$  hằng số,  $Q(x) = \phi \sigma_1 N_{01} =$  hằng số và  $y = N_2$

Nghiệm của (5.33) được cho bởi:

$$N_2(t_i) = \exp(-\lambda_2 t_i) \int_0^{t_i} \phi \sigma_1 N_{01} \exp(-\lambda_2 t_i) dt_i + C \exp(-\lambda_2 t_i) \quad (5.34)$$

$$N_2(t_i) = \frac{\phi \sigma_1 N_{01}}{\lambda_2} \exp(-\lambda_2 t_i) [\exp(-\lambda_2 t_i) - 1] + C \exp(-\lambda_2 t_i) \quad (5.35)$$

$$N_2(t_i) = \frac{\phi \sigma_1 N_{01}}{\lambda_2} [1 - \exp(-\lambda_2 t_i)] + C \exp(-\lambda_2 t_i) \quad (5.36)$$

Tại  $t_i = 0$  thì  $N_{02} = 0 + C$ , suy ra  $C = N_{02}$ .

Vậy nghiệm thu được là

$$N_2(t_i) = \frac{\phi\sigma_1 N_{01}}{\lambda_2} [1 - \exp(-\lambda_2 t_i)] + N_{02} \exp(-\lambda_2 t_i) \quad (5.37)$$

Nếu tại  $t_i = 0$ ,  $N_{02} = 0$  thì (5.37) được viết lại:

$$N_2(t_i) = \frac{\phi\sigma_1 N_{01}}{\lambda_2} [1 - \exp(-\lambda_2 t_i)] \quad (5.38)$$

Tốc độ phân rã của hạt nhân (2) theo thời gian chiếu xạ cho bởi:

$$D_2(t_i) = \lambda_2 N_2(t_i) = \phi\sigma_1 N_{01} [1 - \exp(-\lambda_2 t_i)] \quad (5.39)$$

Hệ số  $[1 - \exp(-\lambda_2 t_i)]$  được gọi là hệ số bão hòa S.

- o Khi  $t_i \gg (T_{1/2})_2$ :  $\exp(-\lambda_2 t_i) \rightarrow 0$  và  $S \rightarrow 1$ .
- o Khi  $t_i \ll (T_{1/2})_2$ :  $\exp(-\lambda_2 t_i) \approx 1 - \lambda_2 t_i$  và  $S = \lambda_2 t_i$  nghĩa là độ phóng xạ tăng tỉ lệ với  $t_i$ .

Tốc độ phân rã sau thời gian chiếu xạ  $t_i$  và thời gian đợi  $t_d$  có thể tính được:

$$D_2(t_i, t_d) = D_2(t_i) \cdot \exp(-\lambda_2 t_d) = \phi\sigma_1 N_{01} [1 - \exp(-\lambda_2 t_i)] \exp(-\lambda_2 t_d) \quad (5.40)$$

### 5.3.2. Lời giải bằng phương trình Bateman

Bài toán nêu trên cũng có thể giải được bằng phương trình Bateman. Theo cách này, ta đặt một hằng số mới gọi là "hằng số biến mất". Kí hiệu:

$$\Lambda = \lambda + \phi\sigma_1 \quad (5.41)$$

Hằng số biến mất trong (5.41) được hiểu là, khi mẫu đang chiếu neutron thì  $\Lambda = \sigma_1 \phi$  và khi mẫu ngưng chiếu thì  $\Lambda = \lambda$ .

Cũng tương tự như trường hợp một chuỗi phân rã, nghiệm của phương trình Bateman được viết lại là :

$$N_n(t_i) = \Lambda_1^* \Lambda_2^* \dots \Lambda_{n-1}^* N_{01} \sum_{j=1}^n C_j \exp(-\Lambda_j t_i) \quad (5.42)$$

$$C_j = \prod_{k=1}^{k=n} \frac{1}{\Lambda_k - \Lambda_j} \quad k \neq j \quad (5.43)$$

Áp dụng phương pháp này cho trường hợp đơn giản trong chuỗi  $^{23}\text{Na} \rightarrow ^{24}\text{Mg}$  ta tìm được

$$\Lambda_1 = \Lambda^* = \phi\sigma_1 \quad ; \quad \Lambda_2 = \lambda_2 \quad (5.44)$$

$$\text{Vậy} \quad C_1 = \frac{1}{\Lambda_2 - \Lambda_1} = \frac{1}{\lambda_2 - \phi\sigma_1} \quad (5.45)$$

$$C_2 = \frac{1}{\Lambda_1 - \Lambda_2} = \frac{1}{\phi\sigma_1 - \lambda_2} \quad (5.46)$$

$$\text{Suy ra} \quad N_2(t_i) = \Lambda_1^* N_{01} [C_1 \exp(-\Lambda_1 t_i) + C_2 \exp(-\Lambda_2 t_i)] \quad (5.47)$$

Hay

$$N_2(t_i) = \frac{\phi\sigma_1 N_{01}}{\lambda_2 - \phi\sigma_1} [\exp(-\phi\sigma_1 t_i) - \exp(-\lambda_2 t_i)] \quad (5.48)$$

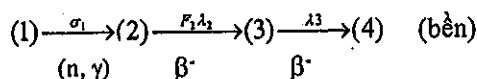
Nếu  $\phi, \sigma_1$  không quá lớn,  $t_i$  không dài quá và  $\lambda_2 \gg \phi\sigma_1$  thì ta thu được :

$$N_2(t_i) = \frac{\phi\sigma_1 N_{01}}{\lambda_2} [1 - \exp(-\lambda_2 t_i)] \quad (5.49)$$

Nghiệm này giống với (5.38) và từ đây ta tính tốc độ phân rã như ở (5.40).

#### 5.4. SỰ LỚN DÀN CỦA HẠT NHÂN CON KHI CHIẾU XẠ NEUTRON

Một trường hợp khác của sự biến đổi hạt nhân theo thông lượng neutron cũng là trường hợp thường áp dụng cho thực tế, bằng cách xét chuỗi phân rã sau:



với  $F_2$  là xác suất hạt nhân (2) phân rã thành hạt nhân (3).

Theo chuỗi phân rã trên, để xác định hạt nhân (1), ta đo độ phóng xạ của hạt nhân (3) thay vì phải xác định hoạt độ hạt nhân (2). Để tính toán, người ta dùng 2 cách:

- Bằng cách biểu diễn tốc độ phân rã của hạt nhân bằng phương trình vi phân có dạng tổng quát (5.27).

- Bằng việc áp dụng phương trình Bateman-Rubinson

##### 5.4.1. Lời giải bằng phương trình Leibnitz

Sự lớn dần của hạt nhân (3) theo thời gian chiếu  $t_i$  được biểu diễn bằng phương trình vi phân

$$\frac{dN_3}{dt_i} = F_2 \lambda_2 N_2 - \lambda_3 N_3 \quad (5.50)$$

Với  $N_2(t_i)$  cho bởi (5.49). Thay (5.49) vào (5.50), ta được

$$\frac{dN_3}{dt_i} = F_2 \phi\sigma_1 N_{01} [1 - \exp(-\lambda_2 t_i)] - \lambda_3 N_3 \quad (5.51)$$

Đây là dạng tổng quát của (5.20), với  $x = t_i$ ,  $y = N_3$ ,  $P(x) = \lambda_3$ ,  $Q(x) = F_2 \phi\sigma_1 N_{01} [1 - \exp(-\lambda_2 t_i)]$

Giải (5.51) ta được

$$N_3(t_i) = \frac{F_2 \phi\sigma_1 N_{01}}{\lambda_3(\lambda_3 - \lambda_2)} \{ \lambda_3 [1 - \exp(-\lambda_2 t_i)] - \lambda_2 [1 - \exp(-\lambda_3 t_i)] \} \quad (5.52)$$

Nếu  $\lambda_2 \gg \lambda_3$  và  $\exp(-\lambda_2 t_i) \rightarrow 0$ , thời gian chờ đủ dài thì tốc độ phân rã của hạt nhân phóng xạ (3) theo thời gian chiếu là:

$$D_3(t_i, t_d) = \phi\sigma_1 N_{01} [1 - \exp(-\lambda_3 t_i)] \exp(-\lambda_3 t_d) \quad (5.53)$$

##### 5.4.2. Lời giải bằng phương trình Bateman

Cũng tương tự như lời giải ở (5.41) và (5.42):

$$\Lambda_1 = \Lambda_1^* = \phi\sigma_1$$

$$\Lambda_2 = \lambda_2 \text{ (hạt nhân (2) không bị kích hoạt)}$$

$$\Lambda_2^* = F_2 \lambda_2$$

$$\Lambda_3 = \lambda_3 \text{ (hạt nhân (3) không bị kích hoạt)}$$

Do đó

$$\begin{aligned} C_1 &= \frac{1}{(\lambda_2 - \phi\sigma_1)(\lambda_3 - \phi\sigma_1)} \approx \frac{1}{\lambda_2\lambda_3} \\ C_2 &= \frac{1}{(\phi\sigma_1 - \lambda_2)(\lambda_3 - \lambda_2)} \approx \frac{1}{\lambda_2(\lambda_2 - \lambda_3)} \\ C_3 &= \frac{1}{(\phi\sigma_1 - \lambda_3)(\lambda_2 - \lambda_3)} \approx \frac{1}{\lambda_3(\lambda_3 - \lambda_2)} \end{aligned}$$

Ở đây ta giả sử rằng việc cháy mẫu bỏ qua. Như vậy, nếu  $N_{02} = N_{03} = 0$  thì

$$N_3(t_i) = \frac{F_2\phi\sigma N_{01}}{\lambda_3(\lambda_2 - \lambda_3)} \{ \lambda_2 [\exp(-\phi\sigma_1 t_i) - \exp(\lambda_3 t_i)] + \lambda_3 [\exp(-\lambda_2 t_i) - \exp(-\phi\sigma_1 t_i)] \} \quad (5.54)$$

Thường  $\exp(-\phi\sigma_1 t_i) \approx 1$  (bỏ qua việc cháy mẫu)

Để tính  $N_3$  tại thời điểm  $t$  sau khi kết thúc chiếu xạ, ta phải dùng phương trình tổng quát (5.20), với  $N_2(t_i)$  và  $N_3(t_i)$  đã biết. Sau thời gian chờ  $t_d$  thì:

$$N_3(t_i, t_d) = \frac{F_2\phi\sigma_1 N_{01}}{\lambda_3(\lambda_3 - \lambda_2)} \{ \lambda_3 [1 - \exp(-\lambda_2 t_i)] \exp(-\lambda_2 t_d) - \lambda_2 [1 - \exp(-\lambda_3 t_i)] \exp(-\lambda_3 t_d) \} \quad (5.55)$$

Nếu  $\lambda_2 \gg \lambda_3$  và  $\exp(-\lambda_2 t_i) \rightarrow 0$ , thời gian chờ đủ dài thì:

$$N_3(t_i, t_d) = \frac{F_2\phi\sigma_1 N_{01}}{\lambda_3} \{ [1 - \exp(-\lambda_3 t_i)] \exp(-\lambda_3 t_d) \} \quad (5.56)$$

$$\text{Hay } D_3(t_b, t) = \lambda_3 N_3(t_i, t_d) = \phi\sigma_1 N_{01} [1 - \exp(-\lambda_3 t_i)] \exp(-\lambda_3 t_d) \quad (5.57)$$

Như vậy, từ biểu thức trên ta thấy rằng việc xác định hàm lượng của nguyên tố ban đầu sẽ phụ thuộc vào đồng vị phóng xạ cuối cùng trong một chuỗi phân rã mà không phụ thuộc vào các sản phẩm nhán trung gian.

## 5.5. PHƯƠNG TRÌNH CƠ BẢN TRONG PHÂN TÍCH KÍCH HOẠT NEUTRON

Phản ứng phổ biến nhất trong NAA là phản ứng  $(n, \gamma)$ , nhưng cũng có những phản ứng quan trọng khác như  $(n, p)$ ,  $(n, \alpha)$ ,  $(n, n')$  và  $(n, 2n)$ . Ngoài ra có vài hạt nhân có khả năng phân hạch khi bắt neutron nhiệt, ví dụ  $^{235}\text{U}$ , thì xảy ra phản ứng phân hạch hạt nhân  $(n, f)$  tạo ra sản phẩm phân hạch và những neutron nhanh.

Nếu phản ứng hạt nhân xảy ra với neutron thì hoạt độ phóng xạ của đồng vị quan tâm phụ thuộc vào thông lượng neutron và tiết diện phản ứng.

Chiếu vào mẫu có  $N_0$  hạt nhân bằng chùm neutron có thông lượng  $\phi$  ( $\text{n.cm}^{-2}\text{s}^{-1}$ ), mỗi nhân bia có tiết diện phản ứng  $\sigma$  ( $\text{cm}^2$ ), thì tốc độ phản ứng cho mỗi hạt nhân bia được xác định bởi:

$$R = \int_0^\infty \sigma(E) \phi(E) dE \quad (5.58)$$

trong đó,  $\sigma(E)$  là tiết diện hấp thụ neutron tại năng lượng  $E$ , ( $\text{cm}^2$ ) và  $\phi(E)$  là thông lượng neutron trên mỗi khoảng năng lượng, ( $\text{n.cm}^{-2}\text{s}^{-1}.eV^{-1}$ )

Độ phân rã của mẫu phóng xạ ở thời điểm  $t$  được tính

$$\frac{dN}{dt} = RN_0 - \lambda N \quad (5.59)$$

Tốc độ phân rã của hạt nhân con ở thời điểm ngưng chiếu xạ có dạng:

$$D(t_i) = \lambda N(t_i) = \phi\sigma N_0 [1 - \exp(-\lambda t_i)] \quad (5.60)$$

Tốc độ phân rã sau thời gian chiếu  $t_i$  và thời gian chờ  $t_d$  là

$$D(t_i, t_d) = D(t_i) \exp(-\lambda t_d) = \phi\sigma N_0 [1 - \exp(-\lambda t_i)] \exp(-\lambda t_d) \quad (5.61)$$

Hay

$$D(t_i, t_d) = \frac{\phi\sigma \cdot W \cdot \theta \cdot N_A}{M} [1 - \exp(-\lambda t_i)] \exp(-\lambda t_d) \quad (5.62)$$

Với detector có hiệu suất ghi  $\epsilon_p$  tại định năng lượng  $E_\gamma$  có xác suất phát tia gamma  $I_\gamma$ , diện tích định thu được trong thời gian đo  $t_m$ :

$$N_p / t_m = \frac{\phi\sigma \cdot W \cdot \theta \cdot N_A \cdot \epsilon_p \cdot I_\gamma}{M} [1 - \exp(-\lambda t_i)] \exp(-\lambda t_d) [1 - \exp(-\lambda t_m)] / (\lambda t_m) \quad (5.63)$$

Ở đây, ta chỉ quan tâm đến phản ứng  $(n, \gamma)$  khi chiếu mẫu trong vùng neutron nhiệt trong lò phản ứng nên:

$$\phi\sigma = G_{th} \phi_{th} \sigma_0 + G_e \phi_e I_0(\alpha) \quad (5.64)$$

Vậy,

$$N_p / t_m = \frac{W \cdot \theta \cdot N_A}{M} \epsilon_p I_\gamma [G_{th} \phi_{th} \sigma_0 + G_e \phi_e I_0(\alpha)] S.D.C \quad (5.65)$$

Khi đó, hoạt độ riêng của hạt nhân quan tâm đo được là

$$A_{sp} = \frac{N_p / t_m}{W.SDC} \quad (5.66)$$

với:

$N_p / t_m$ : tốc độ xung đo được của định tia gamma quan tâm đã được hiệu chỉnh thời gian chết và các hiệu ứng ngẫu nhiên cũng như trùng phùng thực.

$N_p$ : số đếm trong định năng lượng toàn phản;

$t_m$ : thời gian đo;

$t_i$ : thời gian chiếu;

$t_d$ : thời gian rã;

$N_A$ : hằng số Avogadro;

$W$ : khối lượng nguyên tố được chiếu xạ (g);

$\theta$ : độ phổ biến tự nhiên của đồng vị bia;

$M$ : khối lượng nguyên tử của nguyên tố bia;

$G_{th}$ : hệ số hiệu chỉnh tự che chắn neutron nhiệt;

$G_e$ : hệ số hiệu chỉnh tự che chắn neutron trên nhiệt;

$S = 1 - \exp(-\lambda t_i)$ : hệ số hiệu chỉnh thời gian chiếu;

$D = \exp(-\lambda t_d)$ : hệ số hiệu chỉnh thời gian phân rã;

$C = [1 - \exp(-\lambda t_m)]/(\lambda t_m)$ : hệ số hiệu chỉnh thời gian đo;

$I_\gamma$ : xác suất phát tia gamma của năng lượng  $E_\gamma$  được đo;

$\varepsilon_p$ : hiệu suất ghi tại đỉnh năng lượng  $E_\gamma$ ;

Theo quy ước Hogdahl, phương trình (5.65) cho phép ta tính khối lượng (g) của nguyên tố như sau:

$$W = \frac{N_p / t_m}{S.D.C} \cdot \frac{M}{N_A \cdot \theta I_\gamma} \cdot \frac{1}{\varepsilon_p} \cdot \frac{1}{G_{th} \cdot \phi_{th} \cdot \sigma_0 + G_e \cdot \phi_e \cdot I_0(\alpha)} \quad (5.67)$$

Các thông số trong phương trình (5.67) được giải thích như trong phương trình (5.65).

Hay hàm lượng của nguyên tố trong mẫu được xác định như sau

$$\rho(g/g) = \frac{N_p / t_m}{w.S.D.C} \cdot \frac{M}{N_A \cdot \theta I_\gamma \cdot \sigma_0} \cdot \frac{1}{\varepsilon_p} \cdot \frac{1}{\phi_e G_{th} f + G_e Q_0(\alpha)} \quad (5.68)$$

w: khối lượng mẫu (g).

Như vậy, để xác định hàm lượng của mẫu vật ta phải biết các thông số vị trí chiếu xạ của lò phản ứng (hoặc nguồn neutron đồng vị) như thông lượng neutron nhiệt và trên nhiệt, biết hệ số lệch phô neutron trên nhiệt. Đối với thiết bị ghi bức xạ ta phải xác định đường cong hiệu suất theo năng lượng của detector.

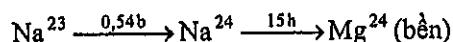
Phương trình (5.68) được gọi là phương trình cơ bản trong phép phân tích kích hoạt neutron.

## BÀI TẬP CHƯƠNG 5

5.1. Một mẫu đồng (Cu) có khối lượng 1 g được chiếu trong lò phản ứng tại vị trí có thông lượng neutron nhiệt  $4 \cdot 10^{12} \text{ n.cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$  trong 2 giờ. Tính:

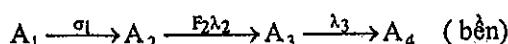
- hoạt độ của mỗi đồng vị Cu lúc bắt đầu ngưng chiếu.
- hoạt độ của mỗi đồng vị Cu sau 1 giờ di chuyển khỏi lò.

5.2. Chiếu vào mẫu chứa 2 mg Na bằng nguồn neutron nhiệt có thông lượng  $\phi_{th} = 1,5 \cdot 10^{12} \text{ n.cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$ , phản ứng xảy ra theo sơ đồ



- Tính số hạt nhân  $\text{Na}^{24}$  tại thời điểm chiếu  $t_i = T_{1/2}/2$
- Tính tốc độ phân rã của  $\text{Na}^{24}$  tại thời điểm  $t_d = 3T_{1/2}$  khi chiếu trong 3 giờ.

5.3. Xét sơ đồ phản ứng



Tính số hạt nhân  $A_3$  tại thời điểm phân rã  $t_d = 10T_{1/2}$  khi chiếu trong khoảng thời gian  $t_i = 1/10 T_{1/2}$  bằng nguồn neutron có thông lượng  $\phi$ .

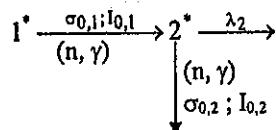
5.4. Một mẫu có hai đồng vị B và C được kích hoạt neutron trong một lò phản ứng. Sau thời gian kích hoạt, hoạt độ của mẫu được đo theo thời gian như sau:

Thời gian (giờ)	0,1	0,5	1,0	1,5	2,0	2,5	3,0	4	5	7	10	12
Hoạt độ (cpm)	270	210	170	130	110	90	80	65	55	44	34	22

Hãy xác định chu kỳ bán rã và hoạt độ ban đầu của B và C.

5.5. Mẫu có dạng dây nhỏ bằng hợp kim Al-0,1%Au, khối lượng dây  $w = 50 \text{ mg}$  được chiếu trong thời gian 15 phút tại vị trí trong lò phản ứng có tần số  $R_{Cd,Au} = 3,44$ ,  $\phi_s = 5 \cdot 10^{10} \text{ n.cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$  và  $\alpha = -0,025$ . Sau thời gian chờ 2 giờ, mẫu được đo trên hệ phô kẽ gamma với detector HPGe trong thời gian 30 phút. Hãy ước tính tốc độ đếm mà hệ phô kẽ có thể ghi nhận được trong quá trình phân rã phóng xạ của mẫu. Biết hiệu suất của detector tại vị trí đo là:  $\log(\varepsilon_p) = -5,29 + 7,28 \cdot \log(E_\gamma) - 2,28 \cdot (\log(E_\gamma))^2$ .

5.6. Xét sơ đồ phản ứng như sau:



Trong đó, dấu “\*” kí hiệu cho hiệu ứng cháy mẫu (burn-up).

- Chứng minh rằng hoạt độ riêng của hạt nhân 2 đo được là

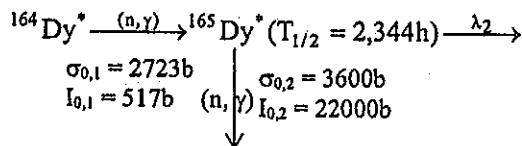
$$A_{sp,2} = \frac{N_{p,2} / t_m}{S_2 D_2 C_2 W F_{burn}}$$

với  $F_{burn} = \frac{\lambda_2 e^{-(\phi \sigma_1) t_i} [1 - e^{[(\phi \sigma_1) - (\phi \sigma_2) - \lambda_2] t_i}]}{[(\phi \sigma_2) + \lambda_2 - \phi \sigma_1] [1 - e^{-\lambda_2 t_i}]}$  là hệ số hiệu chỉnh cho hiệu ứng cháy mẫu

$$(φσ) = G_{th} φ_{th} σ_0 + G_e φ_e I_0(α)$$

- b) Tính hệ số  $F_{burn}$  khi bỏ qua hiệu ứng cháy mêt của hạt nhân 1 và hệ số  $F_{burn}$  khi bỏ qua hiệu ứng cháy mêt của hạt nhân 2.

**5.7. Xét sở đồ phản ứng:**

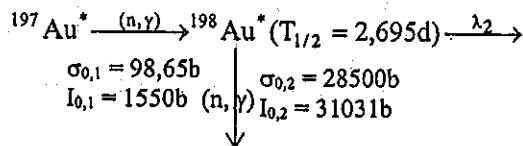


- a) Bằng cách áp dụng bài 5.6, hãy tính hệ số  $F_{burn}$  của phản ứng. Tính hệ số  $F_{burn}$  khi bỏ qua hiệu ứng cháy mêt của hạt nhân  ${}^{164}\text{Dy}$  và hệ số  $F_{burn}$  khi bỏ qua hiệu ứng cháy mêt của hạt nhân  ${}^{165}\text{Dy}$ .

Biết rằng mẫu được chiếu trong 7 giờ trong lò phản ứng tại vị trí có  $φ_{th} = 1,6 \cdot 10^{12} \text{ n.cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$ ,  $φ_e = 6,8 \cdot 10^{10} \text{ n.cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$ ,  $α = 0,015$  và  $G_{th} = G_e = 1$ .

- b) Tính lại câu a) khi mẫu chiếu trong 10 giờ trong lò phản ứng tại vị trí có  $φ_{th} = 3,6 \cdot 10^{13} \text{ n.cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$ ,  $φ_e = 1,8 \cdot 10^{12} \text{ n.cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$ ,  $α = 0$  và  $G_{th} = G_e = 1$ .
- c) Tính lại câu a) khi mẫu chiếu trong 14 ngày trong lò phản ứng tại vị trí có  $φ_{th} = 10^{14} \text{ n.cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$ ,  $φ_e = 10^{13} \text{ n.cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$ ,  $α = 0$  và  $G_{th} = G_e = 1$ .

**5.8. Xét sở đồ phản ứng:**



- a) Bằng cách áp dụng bài 5.6, hãy tính hệ số  $F_{burn}$  của phản ứng. Tính hệ số  $F_{burn}$  khi bỏ qua hiệu ứng cháy mêt của hạt nhân  ${}^{197}\text{Au}$  và hệ số  $F_{burn}$  khi bỏ qua hiệu ứng cháy mêt của hạt nhân  ${}^{198}\text{Au}$ .

Biết rằng mẫu được chiếu trong 7 giờ trong lò phản ứng tại vị trí có  $φ_{th} = 1,6 \cdot 10^{12} \text{ n.cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$ ,  $φ_e = 6,8 \cdot 10^{10} \text{ n.cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$ ,  $α = 0,015$  và  $G_{th} = G_e = 1$ .

- b) Tính lại câu a) khi mẫu chiếu trong 10 giờ trong lò phản ứng tại vị trí có  $φ_{th} = 3,6 \cdot 10^{13} \text{ n.cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$ ,  $φ_e = 1,8 \cdot 10^{12} \text{ n.cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$ ,  $α = 0$  và  $G_{th} = G_e = 1$ .
- c) Tính lại câu a) khi mẫu chiếu trong 14 ngày trong lò phản ứng tại vị trí có  $φ_{th} = 10^{14} \text{ n.cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$ ,  $φ_e = 10^{13} \text{ n.cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$ ,  $α = 0$  và  $G_{th} = G_e = 1$ .

## Chương 6

# CÁC PHƯƠNG PHÁP CHUẨN HÓA TRONG PHÉP PHÂN TÍCH KÍCH HOẠT NEUTRON

### 6.1. PHƯƠNG PHÁP CHUẨN HÓA TUYỆT ĐỐI

Hàm lượng nguyên tố  $\rho(\mu\text{g/g})$  có thể thu được bằng việc chiếu kèm mẫu với một monitor chuẩn (\*), lập tì số về theo về của phương trình (5.68) đối với mẫu và đối với monitor chuẩn (\*), sắp xếp lại ta được:

$$\rho(\mu\text{g/g}) = \frac{\frac{N_p / t_m}{w.S.D.C}}{\frac{A_{sp}}{M^* \theta \sigma_0 I_\gamma}} \cdot \frac{M^* \theta \sigma_0 I_\gamma^*}{M^* \theta \sigma_0 I_\gamma} \cdot \frac{G_{th} f + G_e Q_0(\alpha)}{G_{th} f + G_e Q_0(\alpha)} \cdot \frac{\varepsilon_p^*}{\varepsilon_p} \cdot 10^6 \quad (6.1)$$

Phương pháp này đòi hỏi phải sử dụng một loạt số liệu hạt nhân và số liệu thực nghiệm. Do đó kết quả phân tích sẽ bị ảnh hưởng bởi nhiều nguồn sai số. Do đó phương pháp này ít được sử dụng trong thực tế.

### 6.2. PHƯƠNG PHÁP CHUẨN HÓA TƯƠNG ĐỐI

Phương pháp chuẩn hóa tương đối bao gồm việc chiếu mẫu kèm theo một mẫu chuẩn với hàm lượng của nguyên tố quan tâm đã được biết trước. Khi đó, công thức xác định hàm lượng bằng phương pháp tương đối được viết như sau:

$$\rho(\mu\text{g/g}) = \frac{\frac{N_p / t_m}{w.S.D.C}}{\left( \frac{N_p / t_m}{w.S.D.C} \right)} \cdot 10^6 \quad (6.2)$$

Cần chú ý là mẫu và chuẩn trong phương pháp này phải đồng nhất về thành phần hóa học, dạng hình học mẫu, cấu hình đo, phải được hiệu chỉnh hiệu ứng tự che chắn neutron khi chiếu và hiệu chỉnh hiệu ứng suy giảm tia gamma trong mẫu khi đo.

Phương pháp này tránh được nhiều loại sai số, đơn giản trong thực nghiệm. Vì vậy đây là phương pháp phân tích chính xác nhất, kết quả phân tích có độ tin cậy cao nhất. Tuy nhiên, phương pháp này không phù hợp để phân tích đa nguyên tố bởi vì việc tạo ra một mẫu chuẩn có thành phần hóa học giống với mẫu phân tích là rất khó, ví dụ như mẫu dầu, mẫu bụi khí, v.v...

### 6.3. PHƯƠNG PHÁP CHUẨN HÓA ĐƠN NGUYÊN TỐ

Để cho phép phân tích chính xác hơn và có thể phân tích được đa nguyên tố thì người ta đưa ra một phương pháp chuẩn đơn nguyên tố. Phương pháp chuẩn đơn nguyên tố làm cho phân tích đa nguyên tố bằng kỹ thuật INAA trở nên khả thi hơn.

Phương pháp này dựa trên việc gộp các thông số hạt nhân, điều kiện chiếu và đo trong phương trình (6.1) vào một hệ số  $k$ , và khi đó hàm lượng nguyên tố được xác định như sau:

$$\rho(\mu\text{g/g}) = \frac{\frac{N_p / t_m}{w.S.D.C}}{\left( \frac{N_p / t_m}{w.S.D.C} \right)} \cdot \frac{1}{k} \cdot 10^6 \quad (6.3)$$

Hệ số k của nguyên tố được chọn làm chuẩn đối với từng nguyên tố quan tâm và được xác định bằng thực nghiệm. Khi phân tích, chỉ cần chiếu kèm mẫu với một nguyên tố chuẩn đã chọn (nên gọi là phương pháp chuẩn đơn) và dùng các hệ số k để tính ra hàm lượng các nguyên tố quan tâm theo công thức (6.3).

$$k = \frac{M^* \theta_a I_\gamma}{M \theta_a^* I_\gamma^*} \cdot \frac{G_{th} f + G_e Q_0(\alpha)}{G_{th}^* f + G_e^* Q_0^*(\alpha)} \cdot \frac{\epsilon_p}{\epsilon_p^*} \quad (6.4)$$

Do hệ số k phụ thuộc vào các thông số của nguồn neutron và hệ đo nên nhược điểm của phương pháp này là không có tính linh hoạt khi thay đổi điều kiện chiếu hoặc hệ đo bức xạ.

#### 6.4. PHƯƠNG PHÁP CHUẨN HÓA K<sub>0</sub>

Để làm cho phương pháp chuẩn đơn có thể áp dụng linh hoạt hơn khi thay đổi điều kiện chiếu hoặc hệ đo và để làm cho phương pháp tuyệt đối chính xác hơn, A.Simonits đã đề nghị sử dụng các hệ số k<sub>0</sub> được xác định bằng thực nghiệm giống như các hệ số k trong phương pháp chuẩn đơn, được tính từ các số liệu hạt nhân và đặc lập với phổ neutron và detector ghi bức xạ.

Phương pháp chuẩn hóa k<sub>0</sub> là phương pháp so sánh đơn được chuẩn hóa cho phép phân tích kích hoạt neutron dụng cụ (INAA). Tốc độ tạo thành các hạt nhân phóng xạ từ các nguyên tử bền liên quan đến tỷ số hoạt độ của monitor làm chuẩn (thường dùng Au) thông qua hằng số k<sub>0</sub>. Hằng số k<sub>0</sub> được định nghĩa như sau:

$$k_{0,Au}(a) = \frac{M_{Au} \theta_a I_\gamma^a \sigma_{0,a}}{M_a \theta_{Au} I_\gamma^{Au} \sigma_{0,Au}} \quad (6.5)$$

Hằng số này đại diện cho tỷ số tương đối giữa nguyên tố phân tích và monitor, hoặc đúng hơn là một phần của tỷ số đặc lập với điều kiện chiếu và đo, đóng vai trò thiết yếu trong việc tính hàm lượng các nguyên tố trong phương pháp k<sub>0</sub> – INAA. Các hằng số k<sub>0</sub> được đo một cách trực tiếp trong các viện chuyên ngành như: Viện khoa học Hạt nhân ở Gent, viện KFKI ở Budapest và Riso ở Đan Mạch.

Biết được hằng số k<sub>0</sub>, khi điều kiện chiếu xạ và detector đã biết, mỗi mẫu cần được chiếu cùng lúc với một chuẩn so sánh duy nhất, thường dùng Au thông qua phản ứng  $^{197}\text{Au}(n, \gamma)^{198}\text{Au}$ , mà không cần mẫu so sánh (hay mẫu chuẩn), do đó có thể ngăn chặn các sai số trong việc chuẩn bị mẫu chuẩn. Trong phép truyền sai số, sai số của các hằng số k<sub>0</sub> có ảnh hưởng đến tất cả các kết quả thu được, tuy nhiên, các sai số này rất nhỏ. Thông thường mức cho phép sai số của hằng số k<sub>0</sub> là dưới 3,5%.

Mẫu và monitor Au có thể có hình dạng và các đặc điểm hấp thụ neutron và tia gamma khác nhau. Quá trình hiệu chỉnh những khác biệt cũng được xem là một phần không thể thiếu của phương pháp k<sub>0</sub>.

Ngoài ra còn có những trường hợp phức tạp như nhân phóng xạ tạo thành từ các phản ứng kích hoạt không phải nhân phóng xạ phát tia gamma. Tuy nhiên, trong giáo trình này tác giả không đề cập đến hằng số k<sub>0</sub> trong các phản ứng phức tạp có liên quan đến hạt nhân mẹ – con.

Theo quy ước Hogdahl, hằng số k<sub>0</sub> của các đồng vị được xác định bằng thực nghiệm dựa vào phương trình:

$$k_{0,Au}(a) = \frac{\left(\frac{N_p/t_m}{W.S.D.C}\right)_a}{\left(\frac{N_p/t_m}{W.S.D.C}\right)_{Au}} \cdot \frac{1}{\rho(a)} \cdot \frac{f + Q_{0,Au}(\alpha)}{f + Q_{0,a}(\alpha)} \cdot \frac{\epsilon_{p,Au}}{\epsilon_{p,a}} \cdot 10^6 \quad (6.6)$$

với  $k_0$  được xác định bằng thực nghiệm với độ chính xác cao ( $\sim 1\%$ ), chất so sánh tối ưu là vàng (Au) dùng phản ứng  $Au^{197}(n, \gamma)Au^{198}$  với các số liệu hạt nhân:

$$\sigma_0 = 98,65 \pm 0,9 \text{ barn.}$$

$$Q_0 = 15,71 \pm 0,28.$$

$$I_0 = 1550 \pm 28 \text{ barn.}$$

$\rho(a)$  là hàm lượng nguyên tố  $a$  có đơn vị là  $\mu\text{g/g}$ ;

Khi đó công thức tính hàm lượng của nguyên tố quan tâm  $a$  trở thành:

$$\rho_a(\mu\text{g/g}) = \frac{\left(\frac{N_p/t_m}{W.S.D.C}\right)_a}{\left(\frac{N_p/t_m}{W.S.D.C}\right)_{Au}} \cdot \frac{1}{k_{0,Au}(a)} \cdot \frac{G_{th,Au}f + G_{e,Au}Q_{0,Au}(\alpha)}{G_{th,a}f + G_{e,a}Q_{0,a}(\alpha)} \cdot \frac{\epsilon_{p,Au}}{\epsilon_{p,a}} \cdot 10^6 \quad (6.7)$$

Phương trình (6.7) được gọi là phương trình cơ bản trong phương pháp chuẩn hóa  $k_0$ -INAA.  
Phương trình này được chia 4 phần:

- Tỉ số đầu ở về phải (6.7) phụ thuộc thời gian chiếu, chờ, đo.
- Tỉ số thứ hai ở về phải (6.7) là hằng số  $k_0$  của các đồng vị.
- Tỉ số thứ ba ở về phải (6.7) phụ thuộc vị trí chiếu xạ trong lò phản ứng.
- Tỉ số thứ tư ở về phải (6.7) phụ thuộc thiết bị đo (detector).

Ta phải lưu ý rằng tất cả thông số liên quan vị trí chiếu xạ ( $\phi_{th}$ ,  $f$  và  $\alpha$ ) không thay đổi trong quá trình chiếu mẫu, và giá trị diện tích đỉnh năng lượng toàn phần  $N_p$  phải được hiệu chỉnh hiệu ứng trùng phùng thực.

Tuy nhiên cũng có vài phản ứng hạt nhân [ $^{151}\text{Eu}(n, \gamma)^{152m}\text{Eu}$ ,  $^{151}\text{Eu}(n, \gamma)^{152}\text{Eu}$ ,  $^{176}\text{Lu}(n, \gamma)^{177}\text{Lu}$  và  $^{168}\text{Yb}(n, \gamma)^{169}\text{Yb}$ ] có tiết diện không tuân theo luật  $1/v$ . Khi đó tỉ số  $\frac{G_{th,Au}f + G_{e,Au}Q_{0,Au}(\alpha)}{G_{th,a}f + G_{e,a}Q_{0,a}(\alpha)}$  trong (6.7) được thay bằng một dạng tương tự theo đề nghị của Westcott và dẫn tới:

$$\rho_a(\mu\text{g/g}) = \frac{\left(\frac{N_p/t_m}{W.S.D.C}\right)_a}{\left(\frac{N_p/t_m}{W.S.D.C}\right)_{Au}} \cdot \frac{1}{k_{0,Au}(a)} \cdot \frac{G_{th,Au}g_{Au}(T_n) + G_{e,Au}r(\alpha)\sqrt{T_n/T_0}s_{0,Au}(\alpha)}{G_{th,a}g_a(T_n) + G_{e,a}r(\alpha)\sqrt{T_n/T_0}s_{0,a}(\alpha)} \cdot \frac{\epsilon_{p,Au}}{\epsilon_{p,a}} \cdot 10^6 \quad (6.8)$$

với  $g(T_n)$  là hệ số Wetscott phụ thuộc vào nhiệt độ neutron  $T_n$ ,  $r(\alpha)\sqrt{T_n/T_0}$  là chỉ số phô neutron hiệu chỉnh cho phô neutron nhiệt,  $T_0 = 293,6^\circ\text{K}$  và  $s_0(\alpha)$  là một phép đo của tiết diện neutron trên nhiệt đối với tiết nhiệt neutron nhiệt.

Đối với hạt nhân có tiết diện tuân không theo luật  $1/v$  thì

$$s_0 = \frac{2}{\sqrt{\pi}} Q_0 - 0,484 \quad (6.9)$$

và  $s_0(\alpha) = s_0(\bar{E}_r)^{-\alpha} \quad (6.10)$

## 6.5. PHƯƠNG PHÁP XÁC ĐỊNH CÁC THÔNG SỐ PHỔ NEUTRON

### 6.5.1. Thực nghiệm xác định hệ số lệch phổ neutron trên nhiệt $\alpha$

Sự phân bố thông lượng neutron trên nhiệt  $1/E$  chỉ có thể đúng trong trường hợp phổ lý tưởng, tuy nhiên trong thực tế thì chúng không tuân theo  $1/E$ . Khi đó phổ thông lượng neutron có thể biểu diễn dưới dạng  $\phi'(E) = (1eV)^\alpha \phi_e / E^{1+\alpha}$ , với  $\phi_e$  là thông lượng neutron trên nhiệt trên toàn miền năng lượng và  $\alpha$  là một hằng số âm (phổ cứng) hay dương (phổ mềm). Trong hình 6.1 ta thấy phổ neutron trên nhiệt  $\phi' \sim 1/E^{1+\alpha}$ . Trong thực tế thông số  $\alpha$  vẫn không đổi cho mỗi vị trí chiếu xạ trừ khi có sự thay đổi cấu hình, vật liệu làm chậm neutron trong lò phản ứng.

Có ba phương pháp thực nghiệm xác định hệ số  $\alpha$ :

- Phương pháp bọc cadmi cho đa lá dò.
- Phương pháp tì số cadmi cho đa lá dò.
- Phương pháp ba lá dò chiếu trần.

Sau đây ta lần lượt trình bày ba phương pháp thực nghiệm này.

#### a) Phương pháp bọc cadmi cho đa lá dò

Phương pháp này chủ yếu thích hợp cho việc xác định  $\alpha$  trong kích hoạt neutron trên nhiệt. Theo phương pháp này, một bộ các monitor được chiếu đồng thời dưới sự bọc một lớp cadmi và được đo trên một detector HPGe với đường cong hiệu suất được biết khá chính xác. Nếu tất cả monitor có giá trị  $\sigma(v) \propto 1/v$  lên tới  $\sim 1,5$ eV, thì hệ số  $\alpha$  có thể thu được từ hệ số góc  $(-\alpha)$  của đường thẳng khi ta vẽ:

$$\log \frac{(\bar{E}_{r,i})^{-\alpha} (A_{sp,i})_{Cd}}{k_{0,Au}(i) \cdot \epsilon_{p,i} \cdot F_{Cd,i} \cdot Q_{0,i}(\alpha) \cdot G_{e,i}} \text{ theo } \log \bar{E}_{r,i} \quad (6.11)$$

với  $i$  là kí hiệu cho các đồng vị  $1, 2, \dots, N$ ;  $F_{Cd,i}$  là hệ số hiệu chỉnh cho sự truyền qua Cd của các neutron trên nhiệt.

Về trái của phương trình (6.11) là một hàm theo  $\alpha$ , như vậy một phép tính lặp sẽ được áp dụng, nghĩa là bằng việc vẽ phương trình (6.11) với  $\alpha = 0$ , ta thu được đường thẳng có hệ số góc  $\alpha_1$ , thay  $\alpha = \alpha_1$ , ta thu được đường thẳng với hệ số góc  $\alpha_2$ , cứ tiếp tục như thế lặp đến khi ta thấy  $\alpha = \alpha_{n-1} = \alpha_n$ .

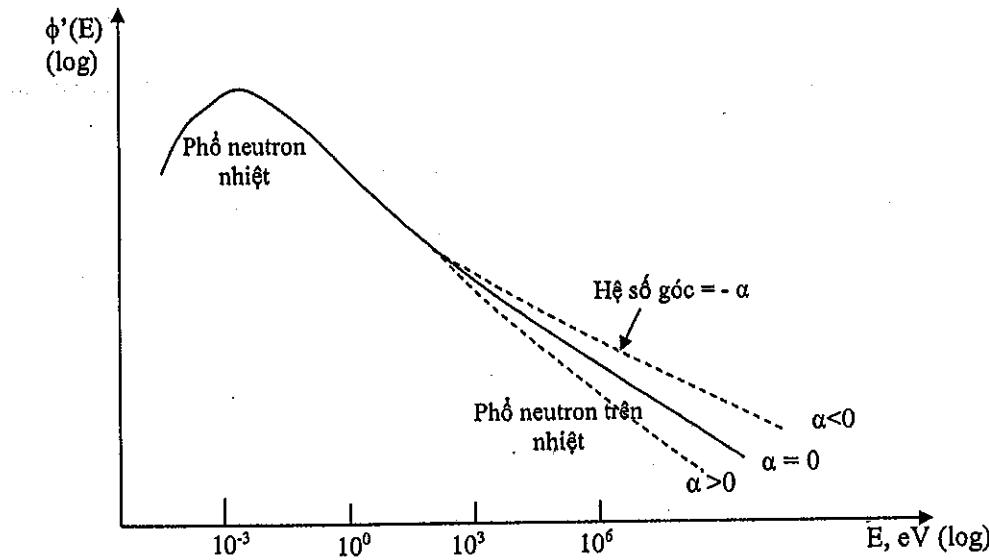
Hoặc bằng phép tính toán, hệ số  $\alpha$  có thể nhận được cùng giá trị từ phương trình:

$$\alpha + \frac{\sum_{i=1}^N \left( \log \bar{E}_{r,i} - \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \log \bar{E}_{r,i} \right) \left( \log T_i - \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \log T_i \right)}{\sum_{i=1}^N \left( \log \bar{E}_{r,i} - \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \log \bar{E}_{r,i} \right)^2} = 0 \quad (6.12)$$

với

$$T_i = \frac{(\bar{E}_{r,i})^{-\alpha} (A_{sp,i})_{Cd}}{k_{0,Au}(i) \cdot \epsilon_{p,i} \cdot F_{Cd,i} \cdot R_{Cd,i} \cdot Q_{0,i}(\alpha) \cdot G_{e,i}} \quad (6.13)$$

Nếu số monitor nhỏ nhất là 2 ( $N = 2$ ) thì dẫn tới phương pháp “bọc cadmi cho lưỡng lá dò”.



Hình 6.1: Phổ neutron trên nhiệt  $\phi' e \sim 1/E^{1+\alpha}$ .

Khi chọn lựa các monitor ta cần chọn số monitor càng lớn càng tốt và các giá trị  $\bar{E}_{r,i}$  của các monitor khác biệt càng lớn càng tốt. Tuy nhiên, trong thực tế tốt nhất là lựa chọn một số monitor thích hợp với số liệu hạt nhân được biết chính xác, và giá trị  $\bar{E}$ , phân bố từ thấp đến cao. Sự lựa chọn này có thể kiểm tra sự tuyến tính trong phương trình (6.11), và chứng minh rằng  $\alpha$  là một hằng số khắp cả vùng năng lượng neutron trên nhiệt trong lò phản ứng. Trong thực nghiệm xác định hệ số  $\alpha$  ta thường dùng các monitor  $^{197}\text{Au}$ - $^{238}\text{U}$ - $^{98}\text{Mo}$ - $^{64}\text{Zn}$  có bọc lớp cadmi. Nếu ta dùng các monitor  $^{197}\text{Au}$ - $^{96}\text{Zr}$ - $^{94}\text{Zr}$  làm monitor có bọc cadmi thì ta gọi là phương pháp “bọc cadmi cho ba lá dò”.

### b) Phương pháp tỉ số cadmi cho đa lá dò

De Corte, Simonits và Moenit đã phát triển một kỹ thuật cho việc xác định hệ số  $\alpha$ , đó là phương pháp “tỉ số Cd cho nhiều monitor”. Theo phương pháp này, một bộ các monitor kích hoạt cộng hưởng  $i = 1, \dots, N$ , mỗi monitor được đặc trưng bằng một năng lượng cộng hưởng hiệu dụng,  $\bar{E}_{r,i}$ , được chiếu với việc có bọc và không bọc lớp cadmi. Với mỗi monitor, tỉ số cadmi,  $R_{Cd,i}$ , được cho bởi:

$$R_{Cd,i} = 1 + \frac{\phi_{th,i} \cdot \sigma_{0,i}}{\phi_e I_{0,i}(\alpha)} = \frac{A_{sp,i}}{A_{sp,Cd}^{epiCd}} \quad (6.14)$$

với  $A_{sp,i}$  và  $A_{sp,Cd}^{epiCd}$  là hoạt độ riêng của monitor  $i$ , tương ứng cho việc chiếu xạ trần và có bọc Cd. Nếu tất cả monitor có giá trị  $\sigma(v) \propto 1/v$  lên tới  $\sim 1,5\text{eV}$ , thì hệ số  $\alpha$  có thể thu được từ hệ số góc của đường thẳng khi ta vẽ:

$$\log \frac{\bar{E}_{r,i}^{-\alpha}}{(F_{Cd,i} R_{Cd,i} - 1) Q_{0,i}(\alpha) G_{e,i} / G_{th,i}} \text{ theo } \log \bar{E}_{r,i} \quad (6.15)$$

với  $F_{Cd,i}$  là hệ số hiệu chỉnh cho sự truyền qua Cd của các neutron trên nhiệt.

Cũng tương tự như phương pháp bọc cadmi cho đa lá dò, vé trái của phương trình (6.15) là một hàm theo  $\alpha$ , như vậy một phép tính lặp sẽ được áp dụng, nghĩa là bằng việc vẽ phương trình (6.15) với  $\alpha = 0$  nó cho kết quả của phép gần đúng bậc nhất  $\alpha = \alpha_1$ , cứ tiếp tục như thế lặp đến kết quả thích hợp cuối cùng.

Hoặc bằng phép tính toán, hệ số  $\alpha$  có thể giải được từ phương trình:

$$\alpha + \frac{\sum_i^N \left( \log \bar{E}_{r,i} - \frac{\sum_i^N \log \bar{E}_{r,i}}{N} \right) \log \frac{\bar{E}_{r,i}^{-\alpha}}{(F_{Cd,i} R_{Cd,i} - 1) Q_{0,i}(\alpha) G_{e,i} / G_{th,i}} - \frac{\sum_i^N \log \frac{\bar{E}_{r,i}^{-\alpha}}{(F_{Cd,i} R_{Cd,i} - 1) Q_{0,i}(\alpha) G_{e,i} / G_{th,i}}}{N}}{\sum_i^N \left( \log \bar{E}_{r,i} - \frac{\sum_i^N \log \bar{E}_{r,i}}{N} \right)^2} = 0 \quad (6.16)$$

Trong thực nghiệm xác định hệ số  $\alpha$  ta thường dùng các monitor được cho trong bảng 6.1 như sau:

**Bảng 6.1** Các monitor kích hoạt và các dữ liệu hạt nhân [65] được dùng trong phương pháp “tỉ số Cd cho đa lá dò” cho việc xác định hệ số  $\alpha$ .  $F_{Cd} = 1$ , ngoại trừ Au

Phản ứng kích hoạt	$\bar{E}_r$ , eV	$Q_0$	$T_{1/2}$
$^{197}\text{Au}(n, \gamma)^{198}\text{Au}$	$5,65 \pm 0,40$	$15,71 \pm 0,28$ ( $F_{Cd} = 0,991$ )	2,695 ngày
$^{232}\text{Th}(n, \gamma)^{233}\text{Th}/^{233}\text{Pa}$	$54,4 \pm 0,5$	$11,53 \pm 0,42$	22,3 phút 27 ngày
$^{59}\text{Co}(n, \gamma)^{60}\text{Co}$	$136 \pm 7$	$1,993 \pm 0,054$	5,271 năm
$^{98}\text{Mo}(n, \gamma)^{99}\text{Mo}/^{99m}\text{Tc}$	$241 \pm 48$	$53,1 \pm 3,3$	66,02 giờ 6,02 giờ
$^{68}\text{Zn}(n, \gamma)^{69m}\text{Zn}$	$590 \pm 59$	$3,19 \pm 0,045$	13,76 giờ
$^{64}\text{Zn}(n, \gamma)^{65}\text{Zn}$	$2560 \pm 256$	$1,908 \pm 0,093$	244 ngày
$^{94}\text{Zr}(n, \gamma)^{95}\text{Zr}$	$6260 \pm 250$	$5,05 \pm 0,10$	64,03 ngày

### c) Phương pháp đa lá dò chiếu trần

Phương pháp này chủ yếu thích hợp cho việc xác định hệ số  $\alpha$  trong phản ứng kích hoạt neutron lò phản ứng. Theo phương pháp này, một bộ gồm N monitor cùng với một monitor “tham khảo” được chiếu không cần bọc lớp cadmi và hoạt độ của các monitor được đo với detector Ge đã biết đường cong hiệu suất chính xác. Nếu tất cả các monitor có tiết diện neutron  $\sigma(v) \propto 1/v$  lên tới  $\sim 1,5\text{eV}$ , thì hệ số  $\alpha$  có thể thu được từ hệ số góc của đường thẳng khi ta vẽ:

$$\log \left\{ (\bar{E}_{r,i})^{-\alpha} A_i \right\} \quad \text{theo} \quad \log \bar{E}_{r,i} \quad (6.17)$$

$$\text{với} \quad A_i = \frac{A_{sp,i} / k_{0,Au}(i) \epsilon_{p,i} - A_{sp,ref} / k_{0,Au}(\text{ref}) \epsilon_{p,ref}}{Q_{0,i}(\alpha) G_{e,i} / G_{th,i} - Q_{0,ref}(\alpha) G_{e,ref} / G_{th,ref}} \quad (6.18)$$

trong đó, kí hiệu “ref” tương ứng ứng với monitor “tham khảo”.

Cũng tương tự như phương pháp “bọc cadmi cho đa lá dò” và “tỉ số cadmi cho đa lá dò”, hệ số  $\alpha$  được xác định theo phương trình:

$$\alpha + \frac{\sum_i^N \left( \log \bar{E}_{r,i} - \frac{\sum_i^N \log \bar{E}_{r,i}}{N} \right) \left[ \log (\bar{E}_{r,i})^{-\alpha} A_i \right] - \frac{\sum_i^N \log (\bar{E}_{r,i})^{-\alpha} A_i}{N}}{\sum_i^N \left( \log \bar{E}_{r,i} - \frac{\sum_i^N \log \bar{E}_{r,i}}{N} \right)^2} = 0 \quad (6.19)$$

Lưu ý rằng phương trình (6.19) không tính cho monitor “ref” trong dãy i và nếu như số monitor nhỏ nhất là 3 ( $N = 2$  cộng với một monitor “ref”) thì sẽ dẫn đến phương pháp “ba lá dò chiếu trần”. Khi đó,  $\alpha$  được tính từ phương trình:

$$(a - b) Q_{0,1}(\alpha) G_{e,1} / G_{th,1} - a Q_{0,2}(\alpha) G_{e,2} / G_{th,2} + b Q_{0,3}(\alpha) G_{e,3} / G_{th,3} = 0 \quad (6.20)$$

với

$$\begin{aligned} a &= \left[ 1 - \frac{A_{sp,2}}{A_{sp,1}} \cdot \frac{k_{0,Au}(1)}{k_{0,Au}(2)} \cdot \frac{\epsilon_{p,1}}{\epsilon_{p,2}} \right]^{-1} \\ b &= \left[ 1 - \frac{A_{sp,3}}{A_{sp,1}} \cdot \frac{k_{0,Au}(1)}{k_{0,Au}(3)} \cdot \frac{\epsilon_{p,1}}{\epsilon_{p,3}} \right]^{-1} \end{aligned} \quad (6.21)$$

Để xác định chính xác hệ số  $\alpha$  ta cần đo các monitor tại khoảng cách lớn so với detector (khoảng cách tham khảo) để tránh hiệu ứng trùng phùng thực. Thực tế việc chọn lựa monitor như thế nào là tối ưu thì chưa có trường hợp nào đề cập đến, nhưng ta thấy rằng kết quả tốt nhất trong phương pháp “ba lá dò chiếu trần” cho trường hợp xác định hệ số  $\alpha$  tại vị trí chiếu xạ có tỉ số thông lượng neutron  $f$  cao là các monitor được chọn sao cho một monitor có giá trị  $Q_0$  thấp và hai monitor có giá trị  $Q_0$  cao. Cụ thể là  $Q_{0,1} < Q_{0,2} < Q_{0,3}$  và  $E_{r,2} < E_{r,1} < E_{r,3}$  và các monitor được chọn tốt nhất cho trường hợp này là  $^{197}\text{Au}$ - $^{96}\text{Zr}$ - $^{94}\text{Zr}$ . Gần đây Blauuw và cộng sự đã tìm thấy ba monitor Au-Mn-Br cũng thích hợp dùng cho việc xác định hệ số  $\alpha$  tại vị trí chiếu xạ.

### 6.5.2 Thực nghiệm xác định hệ số $f$ (qui ước Hogdahl)

#### a) Phương pháp tỉ số cadmi

Tỉ số thông lượng nhiệt/trên nhiệt,  $f = \phi_{th} / \phi_e$ , thu được bằng cách dùng các thực nghiệm cho việc xác định  $\alpha$ . Thật vậy,  $f$  có thể xác định được từ phép đo tỉ số Cd đối với một monitor như sau:

$$f = (F_{Cd,r} R_{Cd,r} - 1) Q_0(\alpha) G_{e,r} / G_{th,r} \quad (6.22)$$

Trong đó,  $r$  là một monitor có giá trị  $Q_0$  và  $\bar{E}_r$  được biết khá chính xác khi chiếu có bọc và không bọc lớp Cd.

#### b) Phương pháp ba lá dò chiếu trần

Từ việc xác định hệ số  $\alpha$  theo phương pháp “ba lá dò chiếu trần”, ta có thể rút ra biểu thức xác định tỉ số thông lượng neutron như sau:

$$f = \frac{G_{e,1} \frac{k_{0,e}(1)}{k_{0,e}(2)} \cdot \frac{\epsilon_{p,1}}{\epsilon_{p,2}} Q_{0,1}(\alpha) - G_{e,2} \frac{A_{sp,1}}{A_{sp,2}} \cdot Q_{0,2}(\alpha)}{G_{th,2} \frac{A_{sp,1}}{A_{sp,2}} - G_{th,1} \frac{k_{0,e}(1)}{k_{0,e}(2)} \cdot \frac{\epsilon_{p,1}}{\epsilon_{p,2}}} \quad (6.23)$$

Ta thấy rằng, monitor thích hợp cho trường hợp này là Zr (theo phản ứng  $^{94}\text{Zr}(n, \gamma)^{95}\text{Zr}$  và  $^{96}\text{Zr}(n, \gamma)^{97}\text{Zr}$ ).

### 6.5.3 Xác định chỉ số thay đổi phô neutron $r(\alpha)\sqrt{T_n/T_0}$ và nhiệt độ neutron $T_n$

#### a) Xác định chỉ số thay đổi phô neutron $r(\alpha)\sqrt{T_n/T_0}$

Chỉ số thay đổi phô  $r(\alpha)\sqrt{T_n/T_0}$  là một phép đo tỉ số mật độ neutron trên nhiệt độ với mật độ neutron toàn phần. Theo chủ thích Westcott và theo qui ước của Ryves thì chỉ số thay đổi phô có thể tính từ phương trình như sau:

$$r(\alpha)\sqrt{T_n/T_0} = \frac{G_{th}g(T_n)}{R_{cd}F_{cd} \left[ \frac{(1\text{eV})^\alpha g(T_n)/2,2931}{(1+2\alpha)(0,55)^\alpha} - \frac{2}{\sqrt{\pi}} W'(\alpha) + s_0(\alpha)G_t \right] - s_0(\alpha)G_t} \quad (6.24)$$

Các monitor thích hợp là  $^{55}\text{Mn}$ ,  $^{59}\text{Co}$  và  $^{197}\text{Au}$ . Trong phương trình (6.24),  $W'(\alpha)$  là hàm gần đúng của hệ số  $\alpha$  được cho bởi:

$$W'(\alpha) \approx W' \cdot \bar{E}^{-\alpha} \quad (6.25)$$

với  $W'$  – số hạng hiệu chỉnh cho tiết diện không theo luật  $1/v$  nằm giữa  $\mu kT_n$  và  $E_{cd}$ . Đối với tiết diện tuân theo luật  $1/v$  thì  $W' = 0$ . Đối với tiết diện không theo luật  $1/v$  thì nó có thể được xem như hằng số cho dù giá trị chính xác của nó phụ thuộc vào loại lò phản ứng và vị trí chiếu xạ; tuy nhiên, sai số có thể bỏ qua khi so với  $W'$  (ví dụ, đối với Au, xem bảng 6.2).

Sau này E. M. Gryntakis và J. I. Kim đưa ra phương pháp xác định xác định chỉ số thay đổi phô neutron trên nhiệt  $r(\alpha)\sqrt{T_n/T_0}$  mà không cần bọc lớp cadmi. Cơ sở của phương pháp này là dùng hai monitor: một monitor nhạy với neutron nhiệt và một monitor nhạy với neutron trên nhiệt. Sau khi chiếu xạ đồng thời hai monitor này, chỉ số thay đổi phô neutron trên nhiệt tại vị trí chiếu xạ được tính như sau:

$$r(\alpha)\sqrt{T_n/T_0} = \frac{g_1(T_n)\sigma_{01} - g_2(T_n)\sigma_{02}R}{s_{02}\sigma_{02}R - s_{01}\sigma_{01}} \quad (6.26)$$

với  $R$  là phép đo tỉ số hoạt độ riêng của hai monitor 1 và 2.

Jae Choon Yang đã đề nghị dùng hai monitor là Mn và Au, Mn là monitor nhạy với neutron nhiệt và Au là monitor nhạy với neutron trên nhiệt. Hai monitor này được chiếu tại hai vị trí khác nhau, trong đó có một vị trí nhiệt hóa neutron tốt. Khi đó chỉ số thay đổi phô neutron trên nhiệt được tính theo công thức:

$$r(\alpha)\sqrt{T_n/T_0} = \frac{R \cdot g_{Mn}(T_1)g_{Au}(T_2) - g_{Au}(T_1)g_{Mn}(T_2)}{s_0(Au)g_{Mn}(T_2) - R \cdot g_{Au}(T_2)s_0(Mn)} \quad (6.27)$$

Monitor Au không tuân theo chính xác luật  $1/v$  trong vùng neutron nhiệt, nhưng lệch nhẹ trong vùng này và có thể hiệu chỉnh bằng hệ số  $g_{Au}$ . Hệ số  $g_{Mn}$  rất gần với 1 và ở đây ta giả sử  $g_{Mn} = 1$ . Để

thu được chỉ số thay đổi phô neutron trên nhiệt trong phương trình (6.27) thì các giá trị  $s_0(\text{Au})$ ,  $s_0(\text{Mn})$ ,  $g_{\text{Au}}(T_1)$  và  $g_{\text{Au}}(T_2)$  cần phải biết. Theo phân tích số liệu từ các thí nghiệm chiếu xạ, các giá trị sau đây có thể được dùng theo Westcott:  $g_{\text{Au}}(T_1) = g_{\text{Au}}(T_2) = 1,0053$ ,  $s_0(\text{Au}) = 17,3$  và  $s_0(\text{Mn}) = 0,666$ .

### b) Thực nghiệm xác định nhiệt độ neutron $T_n$

Để tính hệ số Westcott  $g(T_n)$  thì ta cần xác định nhiệt độ neutron  $T_n$ . Nhiệt độ này được xác định bằng việc chiếu kèm một monitor Lutetium và một monitor  $1/v$  (Au chẳng hạn). Mục tiêu là đo  $[g(T_n)]_{\text{Lu}}$  cho kênh chiếu xạ và từ các bảng cho trước  $[g(T_n)]_{\text{Lu}}$  theo  $T_n$  ta thu được nhiệt độ neutron  $T_n$ . Giá trị của  $[g(T_n)]_{\text{Lu}}$  đã được tính từ :

$$g_{\text{Lu}}(T_n) = \left[ \frac{A_{\text{sp,Lu}} / G_{\text{th,Lu}}}{k_{0,\text{Au}}(\text{Lu}) \epsilon_{p,\text{Lu}}} / \frac{A_{\text{sp},1/v}}{k_{0,\text{Au}}(1/v) \epsilon_{p,1/v}} \right] \\ \times [G_{\text{th},1/v} \cdot g_{1/v}(T_n) + G_{r,1/v} \cdot r(\alpha) \sqrt{T_n/T_0} \cdot s_{0,1/v}(\alpha)] \\ - G_{r,\text{Lu}} \cdot r(\alpha) \sqrt{T_n/T_0} \cdot s_{0,\text{Lu}}(\alpha) / G_{\text{th,Lu}} \quad (6.28)$$

Monitor được chọn là Au. Số liệu hạt nhân cho thấy ở bảng 6.3.

Bảng 6.2: Số liệu hạt nhân dùng để tính chỉ số thay đổi phô  $r(\alpha) \sqrt{T_n/T_0}$

Phản ứng kích hoạt	$\bar{E}_r, \text{eV}$	$s_0$	$W'$	$F_{\text{Cd}}$	$g(T_n)$
$^{197}\text{Au}(n, \gamma)^{198}\text{Au}$	$5,65 \pm 0,40$	17,24	0,055	0,991	1
$^{59}\text{Co}(n, \gamma)^{60}\text{Co}$	$136 \pm 7$	1,765	0	1	1

Bảng 6.3 : Số liệu hạt nhân dùng để tính nhiệt độ neutron  $T_n$

Phản ứng kích hoạt	$E_\gamma, \text{keV}$	$T_{1/2}$	$k_{0,\text{Au}}$	$s_0$	$\bar{E}_r, \text{eV}$
$^{176}\text{Lu}(n, \gamma)^{177}\text{Lu}$	112,9	6,71 ngày	$4,16 \cdot 10^{-2}$	1,67	0,158
	208,4		$7,14 \cdot 10^{-2}$		
$^{197}\text{Au}(n, \gamma)^{198}\text{Au}$	411,8	2,695 ngày	1	17,24	$5,65 \pm 0,40$

## BÀI TẬP CHƯƠNG 6

- 6.1. Để phân tích hàm lượng Cd trong mẫu gạo bằng kỹ thuật KH neutron, ta đem 100 mg (đã hóa bột và cho vào túi chuyên dụng) kèm 100 mg mẫu gạo chuẩn SRM-1527 (hàm lượng Cd là 15 ppm) chiếu trong lò phản ứng trong thời gian 30 phút. Sau thời gian chờ 1 giờ, mẫu được đo trên hệ phô kẽ gamma HPGe trong thời gian 2 giờ. Ngay sau khi đo mẫu, chuẩn được đo trong thời gian 2 giờ. Sau thời gian đo mẫu và chuẩn, diện tích đỉnh 527,9 keV của Cd<sup>115</sup> thu được lần lượt là 12500 số đếm và 15230 số đếm. Hãy xác định hàm lượng Cd trong mẫu gạo trên.
- 6.2. Để phân tích hàm lượng Cd trong mẫu gạo bằng kỹ thuật KH neutron, ta đem 100 mg (đã hóa bột và cho vào túi chuyên dụng) chiếu trong lò phản ứng trong thời gian 30 phút. Sau thời gian chờ 1 giờ, mẫu được đo trên hệ phô kẽ gamma HPGe trong thời gian 2 giờ. Sau thời gian đo mẫu, diện tích đỉnh 527,9 keV của Cd<sup>115</sup> thu được lần lượt là 12500 số đếm. Hãy xác định hàm lượng Cd trong mẫu gạo trên.

Biết hoạt độ riêng của Au<sup>198</sup> là  $2.10^6 \text{ Bq/g}$  và hằng số chuẩn đơn  $k_{Cd,Au} = 121.2$ .

- 6.3. Để phân tích hàm lượng Cd trong mẫu gạo bằng kỹ thuật KH neutron, ta đem 100 mg (đã hóa bột và cho vào túi chuyên dụng) kèm monitor Al-0,1%Au khối lượng 0,017 mg chiếu trong lò phản ứng tại vị trí có  $f = 120$  và  $\alpha = 0,012$  trong thời gian 30 phút. Sau thời gian chờ 1 giờ, mẫu và monitor được đo đồng thời trên hệ phô kẽ gamma HPGe trong thời gian 2 giờ. Sau thời gian đo, diện tích đỉnh 411,8 keV của Au<sup>198</sup> và 527,9 keV của Cd<sup>115</sup> thu được lần lượt là 175000 số đếm và 2300 số đếm. Hãy xác định hàm lượng Cd trong mẫu gạo trên.

Biết rằng hiệu suất của detector tại vị trí đo là:  $\log(\epsilon_p) = -5,29 + 7,28 * \log(E_\gamma) - 2,28 * (\log(E_\gamma))^2$

Bỏ qua các hệ số tự che chắn neutron nhiệt và trên nhiệt.

- 6.4. Để phân tích nồng độ Mn trong vỏ lon đóng hộp, người ta lấy 1 g mẫu đem đi chiếu xạ neutron nhiệt trong 1 giờ. Sau khoảng thời gian 3 giờ kể từ lúc ngưng chiếu ta đem mẫu đi đo với detector Ge trong 2 giờ. Tại đỉnh năng lượng 846,8 keV ta thu được diện tích 15000 số đếm. Tiếp theo đó ta dùng một mẫu chuẩn đã biết hàm lượng của Mn là 8 mg/g để làm thực nghiệm với những điều kiện hoàn toàn giống như mẫu phân tích ta thu được diện tích tại đỉnh 846,8 keV là 13500 số đếm.

a) Hãy cho biết người ta dùng đồng vị nào của Mn để phân tích? Viết phương trình phản ứng và cho biết đầy đủ các thông số hạt nhân của chúng.

b) Tính hàm lượng Mn trong mẫu.

- 6.5. Để đánh giá nồng độ của họ Lanthanide (La, Ce, Nd, Sm, Eu) trong mẫu mồi trường do nhà máy than thái ra, mẫu được đem đến lò phản ứng để phân tích bằng phương pháp chuẩn hóa k<sub>0</sub>. Đem 200 mg mẫu có kèm theo 0,2 mg Au tinh khiết chiếu xạ neutron tại kênh chiếu có thông lượng neutron nhiệt =  $3,6 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-2}\text{s}^{-1}$  và trên nhiệt =  $2 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-2}\text{s}^{-1}$ , độ lệch phô  $\alpha = 0,048$  trong thời gian 5 giờ. Sau thời gian phân rã 2 tuần, ta bắt đầu đo trong 2 giờ và thu được diện tích đỉnh là: 12500 ( $\text{La}^{140}$  – 328,8 keV); 67800 ( $\text{Ce}^{141}$  – 145,4 keV); 7500 ( $\text{Nd}^{147}$  – 91,1 keV); 12110 ( $\text{Sm}^{153}$  – 103,2 keV); 5150 ( $\text{Eu}^{152}$  – 121,8 keV) và 23700 ( $\text{Au}^{198}$  – 411,8 keV)

a) Từ bảng số liệu hạt nhân cho trước hãy tính hệ số  $k_0(\text{Au})$  và  $k_0$  so với Au của các nguyên tố trong mẫu.

b) Tính nồng độ của các nguyên tố trong mẫu.

Biết rằng: Bỏ qua hệ số tự che chắn neutron nhiệt và trên nhiệt.

Đường cong hiệu suất ghi của detector có dạng:  $\log \varepsilon_p = -2,6889 + 5,4963 \cdot \log(E_\gamma) - 1,56(\log E_\gamma)^2$ .

- 6.6. Một mẫu bột có chứa 3 nguyên tố X, Y và Z. Lấy 100 mg mẫu này (dạng bột) cùng với 50 mg mẫu chuẩn (cũng có chứa 3 nguyên tố X, Y và Z) đem chiếu tại kênh neutron nhiệt trong thời gian 15 phút để xảy ra phản ứng ( $n, \gamma$ ). Sau khi kết thúc chiếu xạ, mẫu ngay lập tức được đo tại vị trí cách bề mặt detector HPGe 5 cm trong 1 giờ. Sau khi thu được diện tích các đỉnh năng lượng của X, Y và Z ta bỏ mẫu phân tích ra và đặt mẫu chuẩn cùng vị trí đo với mẫu phân tích và cũng đo trong 1 giờ. Diện tích các đỉnh năng lượng của X, Y và Z trong mẫu chuẩn cũng thu được. Kết quả thí nghiệm được cho trong bảng dưới đây:

Nguyên tố	Năng lượng, $E_\gamma$ (keV)	Diện tích đỉnh (số đếm)	
		Mẫu phân tích	Mẫu chuẩn
X	846,8	12500	10100
Y	438,6	23145	19212
Z	1524,7	5324	4745

Biết rằng hàm lượng của nguyên tố X, Y và Z trong mẫu chuẩn lần lượt là: 1,6%, 11% và 0,8%.

- a) Hãy cho biết tên của 3 nguyên tố X, Y và Z?  
b) Xác định hàm lượng của 3 nguyên tố X, Y và Z trong mẫu bột?

- 6.7. Để đo tì số tiết diện tích phân công hưởng(tiết diện neutron nhiệt có vận tốc 2200 m/s,  $Q_{0,Mn}$  của hạt nhân Mn<sup>55</sup> bằng phương pháp tì số cadmi, trong thực nghiệm ta dùng mẫu bột MnO kèm theo dây hợp kim nhỏ Al-0,1%Au và chiếu tại vị trí trong lò phản ứng có hệ số lệch phô neutron trên nhiệt  $\alpha = 0,025$ . Kết quả thực nghiệm, tì số cadmi của Mn và Au thu được là  $R_{Cd,Mn} = 29,1$  và  $R_{Cd,Au} = 2,8$ . Hãy xác định  $Q_{0,Mn}$ ? Bỏ qua các hệ số tự chế chấn neutron nhiệt và trên nhiệt.

- 6.8. Để đánh giá hàm lượng kim loại nặng trong cá ở kênh Nhiêu Lộc người ta bắt khoảng 10 con cá X, mỗi con cân nặng khoảng 800 gam. Cá được đem về phòng thí nghiệm, lấy thịt, bỏ xương. Thịt cá được sấy khô, hóa thành bột, 10 con cá ta thu được 10 mẫu và mỗi mẫu lấy khối lượng  $w = 100$  mg. Lấy ngẫu nhiên một mẫu (kèm theo dây nhỏ Al-0,1%Au) đem đi kích hoạt neutron tại kênh 7-1 của lò phản ứng hạt nhân Đà Lạt (có tì số cadmi  $R_{Cd,Au} = 2,8$  và hệ số  $\alpha = 0,02$ ) trong thời gian  $t_i = 5$  phút. Sau thời gian chiếu, mẫu được đợi rã trong thời gian 2 giờ và sau đó mẫu được đo trên hệ phô kế gamma HPGe trong thời gian  $t_m = 2$  giờ. Kết quả trên phô tia gamma ta thu được diện tích tại các đỉnh năng lượng tương ứng như sau: 1542 (438,6 keV), 17500 (846,8 keV), 800 (527,9 keV).

- a) Hãy xác định các kim loại trong mẫu các trên.  
b) Hãy phân tích hàm lượng của 01 trong các kim loại trên có trong mẫu cá.

Biết rằng:

- Hoạt độ riêng của Au<sup>197</sup> chiếu kèm là  $A_{sp,Au} = 3 \cdot 10^9$  Bq/g
- Đường cong hiệu suất tại vị trí đo:  
$$\log(\varepsilon_p) = -4,3 + 7,4 \cdot \log(E_\gamma) - 2,3 \cdot (\log(E_\gamma))^2$$
- Bỏ qua các phản ứng nhiễu và các hệ số tự chế chấn neutron nhiệt và trên nhiệt.

- 6.9. Phép đo thực nghiệm tì số Cd của 3 monitor tại 4 vị trí trong một lò phản ứng nghiên cứu HANARO (Hàn Quốc) được cho ở bảng sau:

Monitor	Tí số Cd, $R_{Cd}$			
	Vị trí # 1	Vị trí # 2	Vị trí # 3	Vị trí # 4

$^{197}\text{Au}(n, \gamma)^{198}\text{Au}$	83,03	88,38	76,31	79,96
$^{96}\text{Zr}(n, \gamma)^{97}\text{Zr}/^{97m}\text{Nb}$	11,04	11,03	10,99	10,60
$^{94}\text{Zr}(n, \gamma)^{95}\text{Zr}$	533	588	496	550

Bằng phương pháp tia số cadmi, hãy xác định độ lệch phô neutron trên nhiệt  $\alpha$  và tia số  $f$  đối với 4 vị trí của lò phản ứng trên. Bỏ qua hệ số tự che chắn neutron nhiệt và trên nhiệt.

- 6.10. Một dây Zr có khối lượng 2 mg chiếu xạ tại vị trí neutron nhiệt trong 2 giờ. Sau khi kết thúc chiếu xạ, Zr đợi phân rã trong 1 giờ và sau đó đo trong 2 giờ với detector HPGe tại vị trí có đường cong hiệu suất:  $\log(\epsilon_p) = -0,0789 * \log(E_\gamma)^4 + 1,2615 * \log(E_\gamma)^3 - 6,8259 * \log(E_\gamma)^2 + 14,496 * \log(E_\gamma) - 12,666$ . Diện tích các đỉnh năng lượng: Zr<sup>95</sup> (724,2 keV) 1235; Zr<sup>97</sup> (254,2 keV) 3282.

Hãy xác định tia số  $f$ . Bỏ qua hệ số tự che chắn neutron nhiệt và trên nhiệt.

- 6.11. Hãy phân tích hàm lượng nguyên tố Mn trong mẫu xi măng bằng phương pháp chuẩn hóa ko-NAA. Biết rằng, đem 100 mg mẫu được chiếu trên lò phản ứng tại vị trí có hệ số  $\alpha = 0,075$  và tia số cadmi  $R_{\text{Cd},\text{Au}} = 5$ , trong khoảng thời gian 5 phút. Sau khoảng thời gian chờ 10 giờ, mẫu được đo trên detector HPGe (đường cong hiệu suất tại vị trí đo:  $\epsilon_p = -1,65784 + 2,19003 * \text{Log}(E) - 0,87857 * [\text{Log}(E)]^2 + 0,1125978 * [\text{Log}(E)]^3$ ) trong khoảng thời gian 30 phút. Kết quả ta thu được diện tích: 15600 số đếm tại đỉnh năng lượng 846,8 keV. Hoạt độ riêng của Au chiếu kèm là:  $2 \cdot 10^8$  phân rã/giây/gam. Bỏ qua tất cả các hiệu ứng tự che chắn neutron nhiệt và trên nhiệt.

- 6.12. Hãy phân tích hàm lượng nguyên tố K trong mẫu xi măng bằng phương pháp chuẩn hóa ko-NAA. Biết rằng mẫu có khối lượng 100 mg được chiếu trên nguồn neutron đồng vị Am-Be (có hệ số  $f = 80$ , hệ số  $\alpha = -0,074$ ), trong khoảng thời gian từ 9h20, 06/04/2011 đến 9h30, 08/04/2011. Sau khoảng thời gian chờ 10s, mẫu được đo trên detector HPGe đường cong hiệu suất tại vị trí đo:  $\epsilon_p = -1,65784 + 2,19003 * \text{Log}(E) - 0,87857 * \text{Log}(E)^2 + 0,1125978 * \text{Log}(E)^3$  trong khoảng thời gian 7200s. Kết quả ta thu được diện tích: 5600 số đếm tại đỉnh năng lượng 312,7 keV. Hoạt độ riêng của Au là:  $206 \cdot 10^6$  phân rã/giây/gam.

## Chương 7

# CHUẨN BỊ MẪU PHÂN TÍCH VÀ MẪU CHUẨN

### **7.1. CHUẨN BỊ MẪU CHO PHÉP PHÂN TÍCH HUỲNH QUANG TIA X**

#### **7.1.1. Mẫu lỏng**

##### **7.1.1.1. Phân tích trực tiếp mẫu lỏng và dung dịch**

Trong nhiều trường hợp, mẫu lỏng có thể dùng để phân tích trực tiếp được. Tuy nhiên, có nhiều vấn đề khó khăn để phân tích khi trong mẫu xuất hiện nhiều bọt khí. Các bọt khí này có thể gây ra nhiều vấn đề như sự lắp đầy không đầy đủ, hoặc sự giãn nở của màng mỏng bao bọc hộp chứa mẫu. Trong trường hợp này sự giãn nở bọt khí làm thay đổi khoảng cách từ nguồn kích đèn mẫu gây ra sai số số đếm. Mẫu lỏng đòi hỏi phải chứa trong hộp làm bằng thép không rỉ, polyethylene hoặc polytetrafluorethylen (PTFE hoặc Teflon). Các hộp mẫu này có cửa sổ mỏng (3-6μm) làm bằng vật liệu có Z thấp như Mylar hoặc Kapton. Một số cửa sổ chứa vài lỗ nhỏ để cho phép khí thoát ra khỏi hộp mẫu, như vậy có thể loại bỏ được vấn đề bọt khí trong mẫu. Có một số hệ phốt kẽ tia X mà ống phát tia X đặt phía dưới hộp mẫu. Với dạng hình học này đòi hỏi cửa sổ hộp mẫu phải đặt dưới đáy. Vật liệu cửa sổ hấp thụ bức xạ thứ cấp, đặc biệt là vật liệu làm từ các nguyên tố có Z thấp, và cũng tạo ra bức xạ phóng trong phốt quan sát. Mẫu lỏng thường được phân tích tại áp suất khí quyển trong buồng mẫu nên không khí cũng hấp thụ bức xạ phát ra từ các nguyên tố Z thấp. Kết quả là việc phân tích hàm lượng thấp (cỡ ppm) của các nguyên tố Z thấp (ví dụ như Bo) là không thể thực hiện được. Mẫu lỏng có thuận lợi là làm cực tiêu các hiệu ứng matrix và dễ dàng pha thêm chuẩn nội vào mẫu. Tuy nhiên, trái ngược với các mẫu chuẩn được chuẩn bị bằng việc nấu chảy hoặc hóa viên, thi mẫu chuẩn dạng lỏng hư hỏng theo thời gian do các hiệu ứng hấp thụ hoặc kết tủa. Trong một số nghiên cứu gần đây, người ta cho mẫu lỏng chảy liên tục qua buồng mẫu nhằm xác định các thành phần nguyên tố trong dầu khí và các sản phẩm từ dầu khí.

Mặc dù việc phân tích mẫu lỏng và dung dịch khá phổ biến nhưng nó gặp nhiều khó khăn hơn so với việc phân tích các mẫu rắn và sai số thường lớn hơn nhiều so với mẫu rắn.

##### **7.1.1.2. Biến mẫu lỏng thành mẫu già rắn**

Hầu hết các mẫu rắn phân tích dễ dàng hơn mẫu lỏng. Cho nên đối với việc phân tích mẫu lỏng ta thường biến mẫu lỏng thành mẫu già rắn bằng việc đưa chất phụ gia vào để tăng độ nhớt của chất lỏng, hoặc bằng việc đông lạnh mẫu lỏng. Các dung dịch kiềm có thể chuyển thành trạng thái già rắn bằng việc bổ sung một hỗn hợp amylopectine và ethylene glycol. Khi eicosane thêm vào dầu thì nó tạo ra một mẫu rắn đồng nhất ở nhiệt độ phòng.

Chất gelatine (hoặc agar) khi thêm vào dung dịch sẽ tạo ra mẫu già rắn có kích thước và hình dạng thích hợp đối với việc sử dụng các loại phốt kẽ khác nhau. Ví dụ như ta thêm 10% (khối lượng) gelatine hoặc 3% (khối lượng) agar (thạch trắng) dưới dạng bột vào dung dịch và đợi một thời gian ngắn, sau đó dung dịch được nung nhiệt từ 60°C đến 80°C trong vài phút để thu được một dung dịch đông nhất. Dung dịch này cho vào cu-vết bằng Teflon và đợi đến khi nó cứng lại. Khi mẫu cho vào buồng mẫu của hệ phốt kẽ thì cu-vết chứa mẫu phải lộn ngược xuống mặt phẳng tron nhẵn bao bọc bởi màng mỏng Teflon. Kết quả của việc tiếp xúc bề mặt ky nước là một mẫu sên sệt có tính đàn hồi được hình thành với bề mặt bóng loáng rất thích hợp cho phân tích XRF. Như vậy một mẫu có thể thu được dung dịch lỏng có độ pH từ 1 đến 10, cũng như các dung dịch chứa dung môi có nước (chẳng hạn như ethanol, methanol hoặc aceton). Các mẫu gelatine có khuynh hướng tan chảy khi chiếu chùm tia X có cường độ lớn. Người phân tích phải làm thực nghiệm để tìm các điều kiện làm việc tốt nhất để tránh việc tan chảy hoặc phá hủy mẫu do chùm tia X. Chúng ta cần đưa vào mẫu cờ

0,25% (khối lượng) quinhydrone, điều này gây ra sự oxi hóa các nguyên tử getaline và làm cho sự liên kết của các phân tử với nhau, như vậy việc hình thành một polymer có tính ổn định nhiệt cao hơn. Quinhydrone là một vật liệu có Z thấp và nó không hấp thụ nhiều nhưng làm tăng độ nhớt của chất lỏng. Khi kiểm tra bằng kính hiển vi người ta thấy rằng việc hình thành bọt khí không xảy ra tại thời gian rời từ 10s đến 100s, cường độ dòng 20 mA và điện áp 20-40 kV.

#### 7.1.1.3. Biến mẫu lỏng thành mẫu thủy tinh

Khi chỉ có một thể tích nhỏ dung dịch nước thì chúng ta cần dùng phương pháp xa-ca-rô-za (đường mía) để tạo ra một mẫu thủy tinh polymer. Phương pháp này được thực hiện như sau: cho 1g xa-ca-rô-za vào 2-3cm<sup>3</sup> dung dịch có độ pH = 2-9. Sau đó hỗn hợp được nung nóng ở nhiệt độ 130-150°C trong 3-5 phút. Caramen hình thành khi nước bay hơi. Mẫu có dạng thíc hợp được hình thành bằng việc làm lạnh caramen trên bề mặt Teflon trơn nhẵn, hoặc trên một màng mỏng bên trong khung Teflon. Khối lượng thu được chỉ khoảng 1/2 hoặc 1/3 kích thước dung dịch ban đầu. Phương pháp này tạo ra một mẫu có hàm lượng cao hơn dung dịch ban đầu.

#### 7.1.1.4. Biến mẫu lỏng thành mẫu film mỏng

Khi các film mỏng đủ tiêu chuẩn của một lớp "mỏng" thì việc hấp thụ bức xạ sơ cấp và thứ cấp có thể bỏ qua được. Trong trường hợp này các thành phần hóa học (hiệu ứng matrix) của film và bề dày của nó không ảnh hưởng đến cường độ vạch phân tích và mối liên hệ tuyến tính giữa cường độ vạch phân tích và hàm lượng nguyên tố có thể thu được. Rõ ràng, trong mẫu film mỏng, bề dày film có thể giảm từ vài micro mét xuống đến vài nano mét. Tuy nhiên, không phải tất cả các mẫu tương ứng với tiêu chuẩn của một lớp mỏng mà ta thường làm dưới các điều kiện của một lớp "không suy giảm" khi bề dày mẫu cố định. Các film này chứa một khối lượng nhỏ của vật liệu, cho nên chỉ có những nguyên tố có hàm lượng cao mới tạo ra tín hiệu đủ để phân tích.

Một trong những phương pháp phân tích film mỏng là hòa tan carboxymethyl cellulose (CMC) vào dung dịch mẫu phân tích; sau đó rót dung dịch vào một vòng plastic trên chất nền polyethylene; rồi sau đó sấy khô nó. Film CMC có thể lấy ra khỏi chất nền cùng với vòng plastic để thu được một mẫu.

### 7.1.2. Mẫu rắn

#### 7.1.2.1. Mẫu kim loại

XRF là một kỹ thuật được dùng rộng rãi trong phân tích các sản phẩm kim loại. Trong phân tích kim loại cần một phương pháp đơn giản, nhanh,... cho nên việc chuẩn bị mẫu cũng cần phải nhanh, đơn giản và có thể tái sử dụng. Phương pháp chuẩn bị mẫu phổ biến nhất là cắt, nghiền, và nấu chảy. Phân tích kim loại bằng XRF cho phép xác định thành phần trên một lớp mẫu mỏng. Cho nên bề mặt phải đại diện cho một mẫu lớn. Phương pháp chính cho việc chuẩn bị bề mặt mẫu mỏng là bằng giã công cơ khí (cán mòn, tiện mòn, mài mòn), cũng như bằng việc đánh bóng,... Việc chuẩn bị mẫu cần phải hết sức cẩn thận nhằm tránh nhiễm bẩn bề mặt trong quá trình chuẩn bị mẫu. Đặc biệt đối với các kim loại mềm như nhôm, các hạt từ dụng cụ nghiên có thể xâm nhập vào bề mặt mẫu trong quá trình chuẩn bị mẫu. Việc lựa chọn một chất mài mòn là khó khăn, đặc biệt khi nguyên tố quan tâm là silic (Si), nhôm (Al) hoạt sắt (Fe). Ví dụ như, SiC và Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> là chất mài mòn rất hiệu quả, nhưng cả hai đều chứa các nguyên tố quan tâm trong công nghiệp kim loại. Như vậy, trong trường hợp này ta thường sử dụng phương pháp đánh bóng điện phân hoặc axit. Sau mỗi bước đánh bóng hoặc mài mòn bề mặt thì phải đảm bảo bề mặt phải được giữ sạch. Như vậy, tất cả các vết của chất bôi trơn, chất lỏng dùng để cắt, hoặc dầu vân tay phải được làm sạch bằng rượu isopropyl (C<sub>3</sub>H<sub>7</sub>). Thỉnh thoảng bề mặt của một số kim loại bị ảnh hưởng do sự ăn mòn theo thời gian. Cho nên, cách tốt nhất cho kết quả phân tích chính xác là phân tích mẫu ngay sau khi chuẩn bị.

Khi bề mặt mẫu gồ ghề và các phương pháp thông thường như mài mòn, đánh bóng không hiệu quả thì các mẫu có thể được chuẩn bị bằng cách tiện mẫu rồi nén thành viên ở áp suất cao

(~100MPa). Khi phương pháp này được thực hiện một cách thuận thực thì mẫu được nén để tạo ra một bề mặt đủ phẳng cho việc phân tích. Việc lựa chọn kỹ thuật chuẩn bị bề mặt mẫu thích hợp nhất phụ thuộc vào hợp kim hoặc nhóm hợp kim. Ví dụ như hợp kim cứng rất khó cho việc cắt và mài mòn, thì có thể nghiên và hóa viên trước khi phân tích. Mặt khác, nếu mẫu là hỗn hợp của các hợp kim mềm, dễ đát móng, nhiều pha thì sự nhiễm bẩn từ các thành phần mềm hơn, như chì và nhôm, làm cho việc chuẩn bị mẫu hết sức khó khăn. Các nguyên tố mềm này sẽ tập trung trên bề mặt. Đây là lí do tại sao cường độ huỳnh quang của các kim loại mềm này thường quá cao, trong khi đó với các kim loại cứng, kim loại có Z thấp thì cường độ huỳnh quang quá thấp. Trong các trường hợp này, khi bề mặt mẫu không chứa nguyên tố đại diện cho mẫu lớn thì cần mài mòn bằng điện phân hoặc axít. Đối với vật liệu cõi thì phương pháp ăn mòn axít quá nguy hiểm do nhiều thành phần bị hòa tan trong quá trình axít bề mặt. Đối với hợp kim đồng thiếc thì để nghiên dùng chất phản ứng axít là dung dịch alcoholic ferric chloride (120 ml C<sub>2</sub>H<sub>5</sub>OH, 30 ml HCl và 10 g FeCl<sub>3</sub>), ngược lại đối với hợp kim đồng thau thì dùng dung dịch ammonium persulfate (100ml H<sub>2</sub>O và 10g (NH<sub>4</sub>)<sub>2</sub>S<sub>2</sub>O<sub>8</sub>).

Một kỹ thuật mới là làm tan chảy mẫu, theo nguyên tắc việc tan chảy chỉ phù hợp cho các vật liệu có điểm nóng chảy không quá cao nhằm đồng nhất hóa mẫu và thu được một mẫu có hình dạng mong muôn với một bề mặt phẳng. Một mẫu được chuẩn bị như kỹ thuật này thường dùng để phân tích hợp kim đồng, đồng điện phân và các kim loại khác. Hợp kim sắt được nghiên nhỏ đến kích thước hạt cỡ 2mm với máy nghiên bằng thép sau khi giã nát trước bằng một máy nghiên khác. Các hạt nhuyễn này được trộn với một phần sắt (15g hợp kim Fe-Mo + 25g Fe tinh khiết) và hỗn hợp này được đun chảy trong một lò cảm ứng từ. Sau đây kim loại nóng chảy được khuấy và đúc khuôn trước khi phân tích. Các mẫu chuẩn cũng dễ dàng làm theo cách này. Việc xác định crôm (Cr) trong hợp kim Mo-Fe và Nb-Fe đôi khi cũng cần làm tan chảy mẫu vì các hợp kim này có độ đồng nhất không cao, dẫn đến việc phân tích XRF không chính xác.

Một số kim loại và hợp kim rất khó nóng chảy thì ta có thể chuyển thành dung dịch bằng cách dùng nước cường toan (aqua-regia), là loại dung dịch gồm một phần hàm lượng HNO<sub>3</sub> + ba phần hàm lượng HCl, nung nhiệt lên đến 60°C. Nước cường toan dùng để hòa tan một số kim loại (ví dụ như Pd, Pt, Sn, Ge), và một số hợp kim như thép, Mo-, Rh-, Ir-, Ru-, và một số hợp kim khác ở nhiệt độ cao. Khả năng của dung môi này để hòa tan kim loại là do sự hình thành nhóm phức của Cl cũng như do hiệu ứng chất xúc tác của Cl<sub>2</sub> và NOCl. Dung dịch trở thành chất ăn mòn nếu như mẫu được ngâm trong thời gian 10-20 phút trước khi nung nhiệt. Quặng sắt và quặng vanadium có thể hòa tan được bằng nước cường toan. Cũng tương tự như vậy nó đúng cho các sulfide (chẳng hạn như quặng pyrite và đồng sulfide), mặc dù có một số sulfur bị mất mát. Đôi khi HNO<sub>3</sub> và HCl được trộn theo tỉ lệ 3:1 tốt hơn là theo tỉ lệ 1:3 như nêu trên. Chất ăn mòn khác là HNO<sub>3</sub>/HF. Hiệu ứng nhóm phức của ion F được sử dụng trong dung dịch này, với sự liên kết này một số kim loại (ví dụ như Si, Nb, Ta, Zr, Hf, W, Ti) và các hợp kim (ví dụ như Nb-Sn, Al-Cr, Cu-Si, Ca-Si) có thể hòa tan được. Tuy nhiên có một số nguyên tố bị mất trong quá trình tiêu hóa, đặc biệt là các nguyên tố Se, Hg và Sn vì chúng dễ bay hơi khi trộn chung với axít. Dĩ nhiên phương pháp mà dẫn đến mất mát các nguyên tố trong quá trình chuẩn bị mẫu thì không nên dùng, trừ khi các nguyên tố bị mất không quan tâm trong phân tích.

### 7.1.2.2. Mẫu bột

Một kỹ thuật thường dùng cho việc chuẩn bị mẫu đối với các mẫu thuộc địa chất, sinh học và công nghiệp là chuẩn bị mẫu dưới dạng bột và nén thành viên. Mẫu bột được chuẩn bị khi mẫu gốc quá không đồng nhất hoặc quá giòn để phân tích trực tiếp. Phân tích mẫu bột bằng XRF đòi hỏi các hạt phải có kích thước đồng đều, dù nhỏ để tránh các vấn đề hiệu ứng kích thước hạt. Cường độ vạch của nguyên tố phân tích phụ thuộc vào mật độ mẫu bột, vì vậy cần nén ở áp suất không đổi. Phương pháp là nát, tán nhuyễn, và nghiên thường được dùng trong chuẩn bị mẫu bột.

Đôi khi chất phụ gia cũng được dùng để cung cấp một môi trường nghiên tốt hơn đối với mẫu bột. Nhìn chung, chất phụ gia thêm vào cỡ 2-10% (hàm lượng) cho việc nghiên và trộn. Mẫu bột

phải khớp với buồng mẫu của hệ phò kẽ tia X, tốt nhất là dạng đĩa tròn phẳng. Trong một vài trường hợp, mẫu bột mềm (chưa nén) có thể đặt trong hộp mẫu có cửa sổ mỏng và sau đó đưa vào buồng mẫu của hệ phò kẽ.

Mẫu bột cũng có thể gói trong các khuông hoặc trai đều trên vật liệu film mỏng (được gọi là kỹ thuật hóa bùn). Kỹ thuật hóa bùn thích hợp với vật liệu không hòa tan với nước. Bùn được chuẩn bị với vài miligam bột và vài mililit nước. Dung dịch bùn được hình thành và sau đó được lọc qua bộ lọc Nuclepore. Mục tiêu là để tạo ra một mẫu dày đồng đều. Đối với mẫu lớn thì việc xử lý phức tạp hơn. Thách thức đầu tiên là lấy ra một phần sao cho đại diện cho toàn mẫu lớn. Điều này không phải là nhiệm vụ dễ dàng và cần phải hết sức cẩn thận. Thách thức thứ hai là việc tán mẫu thành bột sao cho tạo ra các hạt có kích thước đồng nhất và không làm nhiễm bẩn mẫu. Các mẫu cũng cần phải có sự phân bố các nguyên tố đồng đều khắp bên trong mẫu dùng phân tích.

### 1) Nghiền mẫu

Mục tiêu chính của quá trình chuẩn bị mẫu từ khối mẫu lớn là nghiền mẫu thành bột có kích thước hạt đồng đều. Trong phép phân tích XRF thông thường thì kích thước hạt nhỏ hơn  $60\mu\text{m}$  là chấp nhận được. Có nhiều phương pháp cho việc nghiền mẫu. Đối với mẫu thông thường ta có thể nghiền mẫu bằng tay bằng cách dùng cối và chày, trong khi đó đối với mẫu cần mịn hơn ( $1-10\mu\text{m}$ ) và kích thước hạt được kiểm soát thì cần các thiết bị hiện đại hơn. Công ty SPEX tạo ra máy nghiên với kích thước hạt đồng nhất. Máy nghiên này chỉ có thể được dùng khi ta có vài gram vật liệu mẫu. Khi khối lượng mẫu cực kỳ nhỏ thì việc nghiên bằng tay là cách lựa chọn tốt nhất cho dù nó thô sơ và mất nhiều thời gian để tạo ra các hạt có sự phân bố với kích thước đồng nhất. Đối với các vật liệu khó xử lý bằng cách nghiên như đá và quặng thì để nghiên được dễ hơn ta nên đưa vào mẫu một ít chất xúc tác như stearate sodium. Người ta thấy rằng việc dùng cối và chày để nghiên mẫu có thể giảm kích thước hạt đến khoảng  $40\mu\text{m}$ . Tuy nhiên, sự phân bố kích thước hạt trong mẫu phải được kiểm soát nếu không thì việc hấp thụ thứ cấp có thể xảy ra trong các hạt có kích thước khác nhau. Đối với mẫu than, mẫu được chuẩn bị dưới dạng bột ( $5\text{g}$  mẫu được nghiên với  $1\text{g}$  axít boric và  $100\text{mg}$  stearate sodium). Thời gian nghiên khoảng 6 phút sẽ tạo ra hạt có kích thước khoảng  $50\mu\text{m}$ . Nếu phân tích nhiều mẫu thì thời gian nghiên mỗi mẫu như nhau nhằm đảm bảo kết quả phân tích có tính lặp lại. Đối với vật liệu nguy hiểm hoặc chịu sự biến đổi trong quá trình giảm kích thước của nó thì việc nghiên thường được thực hiện với việc pha ethyl hoặc rượu isopropyl vào mẫu và dùng cối – chày để nghiên.

Máy nghiên cơ học cũng có thể dùng được dưới điều kiện khô và âm. Mẫu nghiên mà chứa hỗn hợp các nguyên tố có tính chất vật lý khác nhau có thể dẫn đến việc nghiên khác nhau ứng với các pha khác nhau. Kinh nghiệm cho thấy rằng tất cả các dụng cụ nghiên đều chứa nhiễm bẩn cho nên cần cẩn thận chọn dụng cụ nghiên nhằm tránh chứa nguyên tố quan trọng trong phép phân tích. Ví dụ như đá mài nào sẽ rơi ra một ít  $\text{SiO}_2$ , Mg và Ca nên gây nhiễm bẩn khi phân tích nguyên tố Si, Mg và Ca trong mẫu. Điều này không quan trọng lắm trong các mẫu địa chất nhưng rất quan trọng đối với mẫu sinh học.

### 2) Tạo thành viên

Việc viền hóa mẫu bột là cần thiết nhằm giảm các ảnh hưởng bên mặt. Nhìn chung các hạt bột mẫu thường phân bố đều và có đường kính nhỏ hơn  $50\mu\text{m}$  cho nên mẫu cần nén thành một đĩa (dạng viên) ở áp suất  $600-800\text{MPa}$  ( $6-8\text{ tấn}/\text{cm}^2$ ). Nếu các tính chất tự liên kết của bột mẫu là tốt thì chỉ cần nén ở áp suất  $100-400\text{MPa}$  ( $1-4\text{ tấn}/\text{cm}^2$ ). Việc nén viên một mẫu ở áp suất cao trong một khuông hoặc trực tiếp trong cốc đựng mẫu thường dẫn đến viên mẫu bị nứt gãy kèm theo áp suất rò rỉ ra khỏi khuông. Áp suất nên giải phóng chậm chạp và luôn cùng tốc độ để tạo ra số liệu có thể lặp lại được.

Đôi khi ta cần thêm vào mẫu một ít chất kết dính trước khi hóa viên mẫu để hình thành các viên mẫu bền vững. Chất kết dính thường là thành phần vật liệu có Z thấp hoặc là chất hữu cơ. Như đá

nói ở trên, các loại vật liệu này có thể tạo ra sự tán xạ tia X và như vậy làm tăng số đếm phông. Hiệu ứng này trở nên quan trọng trong việc xác định hàm lượng các nguyên tố vét có Z thấp. Cho nên ta cần cẩn thận trong việc lựa chọn chất kết dính. Chất kết dính phải không chứa tạp chất và có hệ số hấp thụ thấp đối với các vạch phân tích. Chất kết dính thường dùng nhiều nhất là tinh bột, cellulose, lucite, polivinyl, urea, boric acid, graphit, v.v.,... Chất kết dính thuộc dạng lỏng như rượu ethyl hoặc este diethyl có thể trộn với mẫu bằng tay, ngược lại chất kết dính dạng bột được trộn với mẫu bằng máy để thu được một hỗn hợp đồng nhất.

### 7.1.3. Mẫu sinh học

Mẫu sinh học dạng rắn thường có sự phân bố nguyên tố không đều. Cho nên việc sấy khô, hóa bột, trộn đều và kiểm tra độ đồng đều là cần thiết trước khi phân tích. Việc chuẩn bị mẫu cho phân tích XRF đối với mẫu rau, củ, quả tương đối đơn giản và nhanh. Lấy một mẫu đại diện (khoảng 5g), sấy khô ở 85°C, tán thành bột, nén thành viên sao cho không bị nham nhán. Thường có thể phân tích được 10-20 nguyên tố trong một mẫu.

Hầu hết các mô con người và động vật rất mềm và như vậy trước tiên nó phải được làm ổn định và bền trước khi cắt. Mẫu mô có thể đông lạnh ở nhiệt độ nitơ lỏng rồi sau đó nghiên thành bột. Một lượng nhỏ mẫu bột này có thể được giữ cố định trên một màng mỏng có 1% dung dịch polystyrene trong benzen và sau đó đo mẫu. Các mô hữu cơ được đông lạnh có thể được cắt bằng một thiết bị vi phẫu, còn nếu như các lát cắt không quá mỏng thì chúng có thể sấy khô bằng cách chiếu đèn. Để định lượng, ta thêm chuẩn nội trước khi phân tích và xác định khối lượng sấy khô sau khi phân tích.

Các ứng dụng quan tâm trong y khoa tăng từ năm này qua năm khác. Phân tích cơ thể sống, đặc biệt đối với chì (Pb), là một nhiệm vụ quan trọng đối với XRF. Việc xác định trực tiếp Pb trong xương giúp ta biết được dấu hiệu của sự tích lũy đang xảy ra, ngược lại việc nghiên cứu Pb trong máu chỉ phản ánh sự phơi nhiễm gần đây. Ngoài Pb còn có các kim loại khác cũng được nghiên cứu bằng XRF như As, Cd, Hg và U. Việc khảo sát cơ thể sống kỹ hơn thường đề cập đến hàm lượng nhiều nguyên tố trong các cơ quan khác nhau, chủ yếu là thận, gan, và phổi. Tuy nhiên độ nhạy và giới hạn phát hiện trong các ứng dụng phân tích cơ thể sống vẫn còn khá hạn chế.

Các ứng dụng khác của phân tích XRF là phân tích hàm lượng nguyên tố trong tóc, răng, móng tay-chân, huyết thanh, ma túy, v.v.,... Mẫu máu có thể hút bằng pi-pet cỡ 100 $\mu$ L và bơm lên giấy lọc. Mẫu huyết thanh thi xử lí cũng tương tự như mẫu máu nhưng thay vì giấy lọc ta nên dùng lá polypropylene. Để tránh sự mất mát thành phần dễ bay hơi thi mẫu nước tiểu và mẫu máu cần làm không trong một tủ lạnh ở nhiệt độ 2-4°C. Giới hạn phát hiện đối với Ca là 1,2 ng/L trong nước tiểu và đối với Sr là 50 $\mu$ g/L trong máu nếu ta xử lí mẫu theo cách này.

### 7.1.4. Mẫu sol khí và bụi

XRF thường được ứng dụng vào việc phân tích nguyên tố vét trong nghiên cứu môi trường. Trong không khí các nguyên tố vét thường tập trung ở hàm lượng 50-500ng/m<sup>3</sup>. Bằng việc hút một lượng lớn không khí qua một bộ lọc thì ta có thể phân tích hàm lượng nguyên tố dễ dàng. Các bộ lọc được tái thích hợp với vật chất không khí riêng biệt được đưa trực tiếp vào hệ XRF. Diện tích bề mặt của bộ lọc dùng cho phân tích XRF chỉ cần khoảng vài cm<sup>2</sup> và ta phải chọn vật liệu làm bộ lọc sao cho phù hợp nhất. Các bộ lọc làm bằng Teflon và Polycarbonate (Nuclepore) là lý tưởng nhất do chúng có độ tinh khiết cao. Bộ lọc bằng cellulose Whatman-41 được dùng rộng rãi vì có giá thành thấp nhưng chúng lại khá dày (khoảng 9mg/cm<sup>2</sup>, trong khi đối với Nuclepore là 1,1mg/cm<sup>2</sup>) dẫn đến việc tia X bị tán xạ nhiều hơn và giới hạn phát hiện cao hơn. Chúng cũng hấp thụ một phần vật chất riêng biệt vào sâu trong bộ lọc làm cho việc hiệu chỉnh sự hấp thụ tia X trở nên phức tạp hơn. Các bộ lọc bằng thủy tinh nên tránh dùng trong bất kỳ trường hợp nào do chúng có độ nồng bẩn các chất vô cơ cao. Gần đây người ta thường sử dụng bộ lọc bằng thạch anh tinh khiết cao. Trước khi lựa chọn một vật liệu làm bộ lọc cho một phép phân tích nào đó thì ta phải kiểm tra phòng của bộ lọc.

Đối với phép phân tích sol khí, một vài hệ số ánh hưởng đến cường độ huỳnh quang tia X phải được xem xét: sự suy giảm tia X bên trong sol khí chỉ quan trọng đối với hạt có kích thước lớn hơn vài micromét. Một phép hiệu chỉnh bao gồm sự hiểu biết về sự phân bố kích thước hạt, lựa chọn thời gian làm mẫu thích hợp và lựa chọn vật liệu làm bộ lọc. Ví dụ, nếu bộ lọc mỏng (như Nucleopore hoặc Millipore) được lựa chọn dùng thu mẫu thì các hiệu ứng hấp thụ trong chính bộ lọc là nhỏ và có thể bỏ qua đối với tia X có năng lượng lớn hơn 3 keV. Tuy nhiên, đối với nguyên tố nhẹ như Si, P, S và Cl thì hiệu ứng hấp thụ cần phải được hiệu chỉnh bằng cách dùng một phương pháp hiệu chỉnh thích hợp.

## 7.2. CHUẨN BỊ MẪU PHÂN TÍCH VÀ MẪU CHUẨN TRONG PHÂN TÍCH NAA

Chuẩn bị mẫu phân tích và mẫu chuẩn là giai đoạn quan trọng nhất trong phép phân tích NAA. Nếu có thể thì người phân tích nên thực hiện các quá trình xử lý mẫu dưới cùng điều kiện có kiểm soát, hoặc ít ra người phân tích phải nhận biết chi tiết về lịch sử của mẫu phân tích nhằm tẩy các tạp chất ra khỏi mẫu trước và sau khi kích hoạt neutron. Tùy theo khả năng, các yêu cầu về độ nhạy, kích thước hộp chứa mẫu, hoạt độ của matrix, tiết diện vĩ mô,... thì khối lượng mẫu thường dùng là cực đại. Nếu thành phần tạp chất trong mẫu được biết chính xác thì ta có thể tính được kích thước mẫu đối với điều kiện chiếu cho trước (thông lượng, thời gian chiếu,...).

Trong mọi trường hợp của phép phân tích NAA, việc chuẩn bị mẫu chuẩn không quá khó như các phép phân tích khác, chẳng hạn như phép phân tích phổ phát xạ, phân tích XRF,... do matrix và hiệu ứng nguyên tố thứ ba không quan trọng trong trường hợp này. Tuy nhiên, hiệu ứng tự che chắn neutron có thể xảy ra mạnh, cho nên ta cần phải tính toán hoặc ít ra là phải giữ cho hiệu ứng này bằng nhau trong mẫu phân tích và mẫu chuẩn. Ngoài ra, hiệu ứng hấp thụ bức xạ phát ra trong mẫu cần phải đề cập tới, nếu không sẽ dẫn tới sai số hệ thống. Thời gian chiếu mẫu trong một thông lượng neutron cho trước thời được chọn bằng việc xem xét đến hệ số bảo hòa đối với hạt nhân quan tâm,  $[1 - \exp(\lambda t)]$ .

### 7.2.1. Chuẩn vị mẫu phân tích

#### 7.2.1.1. Mẫu rắn

Mẫu rắn có thể gói trong lá nhôm và đặt vào bình bằng nhôm chuẩn cho việc chiếu xạ. Mẫu rắn có thể quá lớn không thể chiếu trực tiếp được mà cần phải rút gọn nó bằng cách nghiên, cắt, khoan,... trước khi gói. Các dụng cụ bằng thép cũng dùng để cắt, nghiên mẫu chứa vài nguyên tố mà có thể làm nhiễu lên mẫu phân tích. Vì thế, sau khi kích hoạt neutron, mẫu cần phải làm sạch bằng axit (hoặc dung môi) trước khi đo.

Việc làm sạch mẫu bằng axit trước và sau khi kích hoạt không phải lúc nào cũng loại bỏ được nhiều, đặc biệt là khi chúng có tính dương điện hơn matrix. Trong quá trình axit mẫu, các nguyên tố như Au và Cu đến từ chính bản thân mẫu hoặc từ nhiễm bẩn trên bề mặt mẫu, vẫn còn dư trên mẫu. Hiện tượng này cũng xảy ra đối với Sn và Zn. Việc làm sạch bằng axit vài lần trong các dung dịch tinh khiết có thể giải quyết được vấn đề này. Đôi khi các mẫu rắn thường bị tan chảy trong quá trình kích hoạt tại vị trí có thông lượng neutron cao ( $cở 10^{14} \text{ n.cm}^{-2}.\text{s}^{-1}$ ), ví dụ như cadmium. Vì vậy việc tẩy bẩn sau khi kích hoạt là không có ý nghĩa.

#### 7.2.1.2. Mẫu bột

Bột mẫu được chứa trong một hộp chuyên dụng rồi đưa trực tiếp vào vị trí chiếu trong lò phản ứng. Nếu mẫu bột được chuẩn bị từ mẫu rắn thì nó chắc chắn bị nhiễm bẩn nhiều hay ít tùy vào dạng mẫu và dụng cụ làm mẫu. Mặt khác, các chất hóa học được tạo ra dưới dạng bột bằng kết tủa, kết tinh hay thăng hoa. Nhiễm bẩn do bụi phòng thí nghiệm có thể tránh được bằng việc hàn kín hộp mẫu ngay lập tức sau khi chuẩn bị.

Mẫu bột cần nén thành viên chứa trong một hộp thích hợp để ta thu được một hình học chiếu (hoặc đo) có thể lặp lại nhiều lần. Các hiệu ứng kết hợp về mật độ và hình học có thể chú ý tới, chẳng hạn khi xác định oxy lần thứ hai và thứ ba trong nhiều mẫu thì hàm lượng cao hơn lần thứ nhất, không phụ thuộc thời gian giữa các phép xác định oxy. Hiệu ứng này gây ra do va chạm đột ngột của hộp mẫu với các đường ống dẫn mẫu bằng bơm áp lực, vì thế vật liệu bột mẫu tại đáy hộp chứa mẫu kết chặt hơn ở phần đầu hộp. Việc chứa mẫu bột trong hộp mà không nén chặt hoặc mẫu không lấp đầy hộp thì kết quả phân tích cũng không chính xác khi so sánh với phép đo mẫu chuẩn trong cùng điều kiện.

#### 7.2.1.3. Mẫu lỏng

Mẫu lỏng thường được chứa trong ống bằng thạch anh hoặc polythene. Mẫu lỏng có độ đồng nhất cao hơn mẫu rắn và mẫu bột. Tuy nhiên, ta nên chú ý rằng các thành phần nguyên tố trong nước biển phụ thuộc vào độ sâu, thời gian trong năm, gần đất liền hay gần sông lớn. Ngay cả khi ta rất cẩn thận nhằm tránh nhiễm bẩn trong quá trình thu thập mẫu thì các nguyên tố vết vẫn bị mất do kết tủa hoặc hấp thụ bởi sinh vật phù du trong nước biển, đặc biệt là mẫu không được phân tích sớm ngay sau khi thu thập.

Các mẫu sinh học, chẳng hạn như máu, nước tiểu,... cũng thay đổi thành phần nguyên tố vết theo thời gian, điều kiện bệnh lý, thức ăn, ma túy.

Vấn đề quan trọng thứ hai là khả năng mất mát các nguyên tố vết do sự hấp thụ trên thành hộp chứa và nhiễm bẩn do sự phân ly các nguyên tố vết từ thành hộp chứa. Nhiều hạt nhân từ thành hộp chứa có thể tránh được nếu như ta đông lạnh mẫu trong quá trình chiếu xạ. Trước khi đo, mẫu được làm tan chảy trong một thời gian ngắn. Điều này làm di chuyển một lớp băng mỏng có chứa tạp chất từ thành hộp chứa.

Kỹ thuật đông lạnh cũng có thể áp dụng được cho mẫu sinh học. Việc đông lạnh mẫu trong suốt quá trình kích hoạt cũng có những thuận lợi như áp suất trong hộp chứa gây ra do phân ly từ nước giảm đáng kể, mất mát hoạt độ do bay hơi cũng như hấp thụ hoạt độ trên thành hộp chứa không đáng kể.

#### 7.2.1.4. Mẫu keo (gel)

Mẫu sinh học thường có dạng keo, vì thế cần phải cắt trước khi chiếu. Để tránh nhiễm bẩn trong quá trình cắt mẫu ta phải dùng dao bằng thạch anh hoặc perspex. Nếu như không thể kích hoạt trực tiếp được (lò phản ứng nhiệt độ cao) thì mẫu cần phải sấy khô hoặc tro hóa.

#### 7.2.1.5. Mẫu sol khí

Các bộ lọc cellulose acetate loại EA 1 µm có thể được dùng để thu các hạt sol khí bằng việc len chặt vào bên trong. Khi lấy mẫu, ta nên chỉ ra: độ cao của bộ lọc cách mặt đất bao xa, tốc độ gió, loại bơm hút mẫu, vị trí lấy mẫu (khoảng cách đến bờ biển, khoảng cách đến đường phố, mật độ lưu thông xe cộ,...). Nhiễm bẩn mẫu bởi các hạt không mong đợi (ví dụ như hạt tuyết) có thể tránh được bằng việc phủ lên đầu mờ của bộ lọc một màng plastic và hướng đầu mờ hướng thẳng đứng xuống trong quá trình thu thập mẫu.

Sol khí được thu thập bằng khí cầu (hoặc máy bay). Độ ẩm ảnh hưởng lên cả kích thước hạt và khả năng kết bám. Để cực tiêu độ nhiễm bẩn từ mặt đất thì bộ phận thu mẫu nên phủ plastic đến vài giây trước khi hạ cánh và lần nữa phủ plastic sau khi đáp xuống mặt đất. Ta nên chỉ ra độ cao và tốc độ máy bay trong quá trình lấy mẫu.

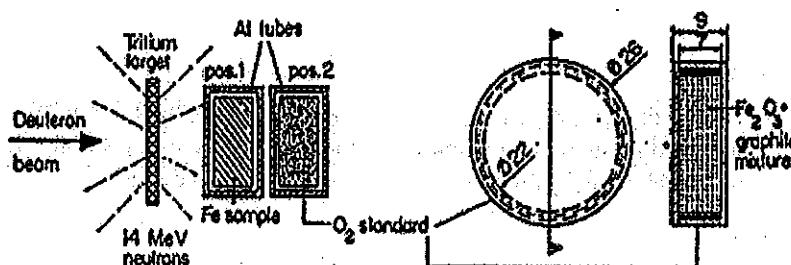
#### 7.2.2. Chuẩn bị mẫu chuẩn

##### 7.2.2.1. Hoạt độ riêng của mẫu chuẩn

Một mẫu chuẩn tốt phải đáp ứng được yêu cầu là sau khi chiếu xạ hoạt độ riêng của mẫu chuẩn phải bằng hoạt độ riêng của nguyên tố cần xác định trong một matrix cho trước. Để thỏa mãn đòi hỏi này thì hoạt độ mẫu chuẩn và mẫu phân tích được đo trong cùng các điều kiện thực nghiệm. Tuy nhiên, trong suốt quá trình kích hoạt mẫu chuẩn phải nhận thông lượng neutron như mẫu phân tích. Đòi hỏi này có thể đáp ứng được đối với kích hoạt neutron lò phản ứng, trừ trường hợp kích hoạt bằng máy phát neutron.

Để minh họa cho các vấn đề ở trên, ta xét trường hợp phân tích ôxy trong thép bằng kích hoạt máy phát neutron 14 MeV, dùng mẫu chuẩn có hàm lượng ôxy biết trước. Mẫu có dạng đĩa, bề dày 9 mm, đường kính 26 mm; mẫu được chứa trong ống nhôm tiết diện hình chữ nhật có kích thước (9,5 mm x 26,5 mm). Mẫu chuẩn có khối lượng 4,92 g gồm hỗn hợp 26,62%  $\text{Fe}_2\text{O}_3$  + 73,38% graphit, nghĩa là có 394 mg ôxy. Mẫu chuẩn được nén trong hộp thép có cùng kích thước ngoài với mẫu phân tích. Giá trị phóng của hộp và graphit là 4 mg ôxy. Đường kính trong của hộp là  $22,00 \pm 0,02$  mm và bề dày bên ngoài là  $7,00 \pm 0,02$  mm (hình 7.1). Mẫu chuẩn được chiếu đồng thời với mẫu phân tích, trong một ống nhôm đặt phía sau ống chứa mẫu phân tích. Lúc này, xảy ra một số vấn đề sau:

- Do gradient thông lượng giảm lân cận bia nén liều neutron trung bình ở vị trí 2 nhỏ hơn ba lần vị trí 1.
- Mẫu chuẩn (vị trí 2) bị chắn bởi mẫu phân tích (sự mất neutron do hấp thụ và tán xạ).
- Hấp thụ neutron trong mẫu và chuẩn không bằng nhau.
- Do phân bố ôxy trong mẫu (đường kính 26 mm, dày 9 mm) và chuẩn (đường kính 22 mm, dày 7 mm) là khác nhau nên tốc độ đếm riêng của  $^{16}\text{N}$  không bằng nhau, ngay cả mẫu và chuẩn được chiếu cùng vị trí và bỏ qua sự hấp thụ neutron và tia gamma.
- Mẫu và chuẩn được đo cùng hệ đo nhưng tại hai vị trí khác nhau nên hiệu suất ghi cần điều chỉnh.



Hình 7.1: Sơ đồ chiếu mẫu và chuẩn bằng máy phát neutron 14 MeV

Các vấn đề ở trên được giải quyết như sau:

- Chuẩn bị hai mẫu chuẩn giống nhau, chứa trong hai hộp có kích thước như sau. Chiếu một mẫu chuẩn ở vị trí 1, hoạt độ riêng của  $^{16}\text{N}$  đo được ngay sau khi kết thúc chiếu là

$$R_{st}(1) = F_{st} \epsilon_1 \sigma \bar{\phi}_1 w_{st} \theta N_A S / A \quad (7.1)$$

Trong đó,  $\sigma = \sigma_{14\text{MeV}}$  là tiết diện của phản ứng  $^{16}\text{O}(\text{n}, \text{p})^{16}\text{N}$ ;  $w_{st}$  là hàm lượng ôxy trong mẫu chuẩn (394 mg);  $\theta$  là độ phô cung tự nhiên của  $^{16}\text{O}$ ;  $N_A$  là hằng số Avogadro;  $S = 1 - \exp(-\lambda t_i)$  là hệ số hiệu chỉnh thời gian chiếu;  $A$  là khối lượng nguyên tử của ôxy;  $\bar{\phi}_1$  là thông lượng neutron trung bình trong hộp tại vị trí 1;  $\epsilon_1$  là hiệu suất ghi của hệ đo 1 đối với tia gamma 6 MeV;  $F_{st}$  là hệ số truyền qua đối với neutron 14 MeV và tia gamma 6 MeV trong mẫu chuẩn.

Chiếu đồng thời mẫu chuẩn còn lại ở vị trí 2, , hoạt độ riêng của  $^{16}\text{N}$  đo được ngay sau khi kết thúc chiếu là

$$R_{st}(2) = F_{st} \varepsilon_2 \sigma \bar{\phi}_2 w_{st} \theta N_A S \exp(-\Sigma_{st} d) / A \quad (7.2)$$

Trong đó,  $\exp(-\Sigma_{st} d)$  mô tả cho hiệu ứng màn chắn của mẫu chuẩn ở vị trí 1.

Từ phương trình (7.1) và (7.2) ta có:

$$\frac{R_{st}(1)}{R_{st}(2)} = k = \frac{\varepsilon_1 \bar{\phi}_1}{\varepsilon_2 \bar{\phi}_2 \exp(-\Sigma_{st} d)}$$

Hay  $\frac{\varepsilon_1 \bar{\phi}_1}{\varepsilon_2 \bar{\phi}_2} = k \exp(-\Sigma_{st} d)$  (7.3)

2. Trong trường hợp mẫu phân tích, mẫu thép được chiếu ở vị trí 1 và mẫu chuẩn ở vị trí 2. Khi đó, hoạt độ  $^{16}\text{N}$  đo được:

- Đối với mẫu thép:

$$R_{Fe}(1) = F_{Fe} \varepsilon_1 \sigma \bar{\phi}_{1(Fe)} w_x \theta N_A S / A \quad (7.4)$$

Trong đó,  $\bar{\phi}_{1(Fe)}$  là thông lượng trung bình trong mẫu tại vị trí 1.

- Đối với mẫu chuẩn:

$$R_{st}(2) = F_{st} \varepsilon_2 \sigma \bar{\phi}_2 w_{st} \theta N_A S \exp(-\Sigma_{st} d) / A \quad (7.5)$$

Từ (7.4) và (7.5) ta có:

$$\frac{R_{Fe}(1)}{R_{st}(2)} = \frac{w_x \varepsilon_1 \bar{\phi}_{1(Fe)} F_{Fe}}{w_{st} \varepsilon_2 \bar{\phi}_2 \exp(-\Sigma_{st} d) F_{st}} = \frac{w_x F_{Fe} \bar{\phi}_{1(Fe)} \varepsilon_1 \bar{\phi}_1}{w_{st} F_{st} \bar{\phi}_1 \varepsilon_2 \bar{\phi}_2 \exp(-\Sigma_{st} d)} \quad (7.6)$$

Từ (7.3) và (7.6) hàm lượng ôxy được xác định như sau:

$$w_x = \frac{w_{st}}{k} \frac{R_{Fe}(1) \exp(-\Sigma_{st} d)}{R_{st}(2) \exp(-\Sigma_{st} d)} \frac{F_{st}}{F_{Fe}} \frac{\bar{\phi}_1}{\bar{\phi}_{1(Fe)}} \quad (7.7)$$

Với k để cập đến gradient thông lượng và hiệu suất ghi ( $k \sim 3$ );  $\exp(-\Sigma_{Fe} d)/\exp(-\Sigma_{st} d)$  là sự khác biệt giữa hiệu ứng màn chắn trong mẫu thép hoặc mẫu chuẩn ( $0,949 \pm 0,006$ );  $F_{st}/F_{Fe}$  là hệ số truyền qua đối với mẫu chuẩn và mẫu thép ( $1,065 \pm 0,005$ );  $\bar{\phi}_1/\bar{\phi}_{1(Fe)}$  là thông lượng trung bình (tại vị trí 1) trong hộp chuẩn và mẫu ( $1,042 \pm 0,005$ ).

Việc xác định bằng thực nghiệm ba hệ số hiệu chỉnh ở trên dựa vào máy phát neutron 14-MeV với bia tritium có đường kính 16 mm, nếu mẫu và chuẩn đặt cách bia lần lượt là 9 mm và 22 mm. Như vậy hệ số hiệu chỉnh toàn phần là  $1,053 (\pm 1\%)$  cộng với 4,5 mg ôxy từ phông. Mặt khác, dù mẫu chuẩn chứa 394 mg ôxy nhưng ta có thể thu được khối lượng biếu kiến như sau:

$$\frac{(394 \times 1,053) + 4,5}{k} \text{ hoặc } \frac{419,2}{k} \text{ (mg)}$$

#### 7.2.2.2. Chuẩn thứ cấp

Các vấn đề mô tả ở trên cũng có thể xảy ra đối với kích hoạt lò phản ứng. Việc tính toán sai số hệ thống, do gradient thông lượng, sự khác nhau về hấp thụ neutron nhiệt hoặc trên nhiệt sẽ trình bày trong chương 9.

Một số hoạt độ nhiễu tạo ra từ các matrix trong mẫu phân tích. Trong trường hợp này, để hiệu chỉnh thì mẫu nên được chiếu cùng với mẫu chuẩn sơ và thứ cấp. Một ví dụ thực tế về phản ứng nhiễu xảy ra khi phân tích photpho (P) trong mẫu sinh học.

Phản ứng quan tâm:  $^{31}\text{P}(\text{n}, \gamma)^{32}\text{P}$ ;  $T_{1/2} = 14,2$  ngày; phát  $\beta^+$  năng lượng 1,707 MeV

Phản ứng nhiễu:  $^{32}\text{S}(\text{n}, \text{p})^{32}\text{P}$ ;  $^{35}\text{Cl}(\text{n}, \alpha)^{32}\text{P}$

Phương pháp để hiệu chỉnh cho phản ứng nhiễu này được mô tả bởi Koch và Roesmer. Phương pháp này đòi hỏi ta phải biết hàm lượng của S và Cl trong mẫu phân tích; điều này có thể thực hiện được bằng việc xác định hoạt độ  $^{38}\text{Cl}$  (từ phản ứng  $^{37}\text{Cl}(\text{n}, \gamma)$ ) trong mẫu và trong chuẩn Cl thứ cấp và xác định hoạt độ  $^{35}\text{S}$  (từ phản ứng  $^{34}\text{S}(\text{n}, \gamma)$ ) trong mẫu và trong chuẩn S thứ cấp. Sau khi xác định sản phẩm  $^{32}\text{P}$  trong mẫu chuẩn thứ cấp Cl và S thì cho phép ta tính được hoạt độ  $^{32}\text{P}$  do S và Cl trong mẫu. Nếu hoạt độ  $^{32}\text{P}$  được trừ cho tổng hoạt độ  $^{32}\text{P}$  trong mẫu thì hoạt độ  $^{32}\text{P}$  từ phản ứng  $^{31}\text{P}(\text{n}, \gamma)^{32}\text{P}$  sẽ thu được; bằng việc so sánh hoạt độ  $^{32}\text{P}$  trong mẫu chuẩn P sơ cấp thì hàm lượng P trong mẫu phân tích sẽ xác định được.

### 7.2.3. Lựa chọn vật liệu khi gói mẫu

Các mẫu được nghiên cứu bằng phân tích kích hoạt neutron cần được hoàn thành trước khi rời, nếu không xử lí gì cả càng tốt nhằm tránh sự nhiễu bắn. Để rời, các mẫu đôi khi cần gói lại nhiều lớp. Vật liệu gói thường làm bằng các vật liệu nhân tạo như polystyrol, thạch anh tinh khiết hay nhôm nguyên chất. Tuy nhiên, nếu gói mẫu bằng nhôm cần chú ý đến trường hợp nhôm phản ứng với neutron nhanh tạo đồng vị  $^{24}\text{Na}$  phát tia gamma năng lượng 1368 keV. Trong trường hợp này cần tránh dùng nhôm. Vì các vật liệu nhân tạo (chất dẻo) dưới tác dụng của neutron trở nên dòn cho nên chúng chỉ được dùng để gói khi thời gian chiếu ngắn. Các ampull dùng chứa mẫu lỏng chỉ nên làm đầy 1/3 thể tích của nó vì phải tinh đến sự phân ly do chiếu xạ.

**BÀI TẬP CHƯƠNG 7**

- 7.1. Để pha mẫu so sánh cho việc phân tích huỳnh quang tia X, trong phòng thí nghiệm có các hợp chất  $\text{CaF}$ ,  $\text{Cr}_2\text{O}_3$ ,  $\text{CuSO}_4$  và graphit dùng làm chất nền. Xác định khối lượng các hợp chất trên để mẫu so sánh có hàm lượng Ca: 10%; Cr: 5%; Cu: 5%. Biết khối lượng toàn phần của một mẫu là 20 g.
- 7.2. Một hộp chứa mẫu dạng trụ có bán kính 2,5 cm, chiều cao 50 mm được chứa đầy 25 g mẫu. Tính mật độ mẫu trong hộp?
- 7.3. Tính hàm lượng của Zn trong 12 g mẫu. Biết trong mẫu có 3,2 g  $\text{ZnSO}_4$ .
- 7.4. Để phân tích Cr trong mẫu bằng phương pháp XRF ta phải dùng chất nào sau đây làm chất nền: Graphit nguyên chất,  $\text{CaF}$ ,  $\text{NaF}$ , đất. Vì sao?
- 7.5. Thực hiện 5 lần cân mẫu ta thu được kết quả mỗi lần: 1,02g; 1,32g; 0,89g; 1,02g; 1,12g. Hãy tính kết quả cuối cùng.

## Chương 8

# PHƯƠNG TIỆN CHIỀU XẠ VÀ THIẾT BỊ GHI BỨC XẠ

### 8.1. CÁC NGUỒN DÙNG TRONG PHÂN TÍCH KÍCH HOẠT NEUTRON

Neutron được dùng rộng rãi và có ý nghĩa trong phân tích kích hoạt (PTKH), trước nhất, là do những tính chất đặc biệt của chúng:

- Do neutron trung hòa điện nên khi bắn phá vật chất, nó không bị hạt nhân đẩy ra, cho nên có thể đi sâu vào và làm biến đổi nhân nguyên tử.

- Ngoài ra, neutron xâm nhập sâu vào dễ dàng nhiều loại vật chất (ngược với hạt tích điện). Phản ứng hạt nhân dẫn đến kích hoạt phóng xạ không giới hạn ở gần lớp bề mặt và lớp mầu đối diện với dòng hạt. Do đó người ta có thể thực hiện phép rọi bức xạ ở các bình kín, điều này có lợi là loại trừ được sự nguy hiểm nhiễm xạ như khi kích hoạt các vật liệu dạng bột và việc thực hiện cũng dễ dàng hơn khi ta rọi các chất dễ bay hơi.

- Một ưu điểm nữa là kích hoạt bằng neutron không làm cho vật liệu mầu nóng lên ở nhiệt độ cao.

Những nguồn neutron dùng cho PTKH gồm: lò phản ứng hạt nhân, máy phát neutron và các nguồn đồng vị phóng xạ, đó là những nguồn quan trọng nhất.

#### 8.1.1. Nguồn neutron đồng vị

Trong phân tích kích hoạt nguồn neutron có vai trò rất quan trọng. Tùy theo yêu cầu và phương pháp phân tích, người ta dùng các nguồn khác nhau. Đặc trưng quan trọng nhất cho nguồn neutron là thông lượng và năng lượng neutron do nguồn phát ra.

Nguồn neutron đồng vị nhỏ, chật, dễ vận chuyển. Sự nguy hiểm đến sức khỏe được hạn chế và ít tồn kém. Trong những quốc gia đang phát triển, trong các trường Đại học, nguồn này thích hợp hơn để sử dụng trong các thí nghiệm và huấn luyện cho các sinh viên trong ngành hạt nhân. Nguồn này cũng là cách đơn giản và kinh tế để dùng phân tích kích hoạt trong công nghiệp. Trong những năm đầu phát triển phân tích kích hoạt bằng neutron, nguồn đồng vị được chế ra từ đồng vị phóng xạ tự nhiên, chẳng hạn như  $^{210}\text{Po}$  - Be và  $^{226}\text{Ra}$  - Be. Tuy nhiên, những nguồn này không thuận tiện lắm, vì chúng có thông lượng nhỏ cỡ  $10^4 \text{ n.cm}^{-2}\text{s}^{-1}$  đến  $10^7 \text{ n.cm}^{-2}\text{s}^{-1}$  cho nên chỉ giới hạn trong việc xác định vài nguyên tố có độ phô cập tự nhiên lớn, tiết diện neutron nhiệt cao và chỉ thích hợp với các hạt nhân có chu kỳ bán hủy ngắn. Các nguồn này cũng không thể "đóng mở" khi không dùng. Những nguồn neutron này bao gồm các hạt nhân phóng xạ  $\gamma$  và  $\alpha$  được trộn với nguyên liệu dùng làm bia (như Be).

##### (a) Nguồn photoneutron ( $\gamma$ , n)

Một vài đồng vị phóng xạ phát ra bức xạ  $\gamma$  và  $\gamma$  tương tác với Be hay D để tạo ra neutron. Năng lượng ngưỡng của Be là 1,67 MeV và của D là 2,33 MeV. Neutron được bức ra bởi phản ứng  $^9\text{Be}(\gamma, n)^8\text{Be}$  hay  $^2\text{D}(\gamma, n)^1\text{H}$ . Đối với những bia khác thì phản ứng  $(\gamma, n)$  có năng lượng ngưỡng trên 6 MeV và năng lượng neutron phát ra ( $E_n$ ) từ một tia  $\gamma$  đơn năng ( $E_\gamma$ ) tương tác với Be hay D với năng lượng liên kết với neutron là Q được cho bởi công thức:

$$E_n = \frac{A-1}{A} E_\gamma - Q - \frac{E_\gamma^2}{1862(A-1)} + \delta \cos \theta \quad (8.1)$$

với  $\delta$  là hệ số hiệu chỉnh và  $\theta$  là góc giữa photon tới và neutron phát ra. Những nguồn này thường được tạo ra bằng việc phát  $\gamma$  xung quanh một lớp Be dày. Vài nguồn photoneutron và hiệu suất phát neutron được cho ở bảng 8.1. Những đồng vị phóng xạ phát  $\gamma$  khác như  $^{56}\text{Mn}$ ,  $^{72}\text{Ga}$  cũng có thể được dùng nhưng thời gian sử dụng không lâu.

Bảng 8.1: Đặc trưng của vài nguồn photoneutron

Hạt nhân	$T_{1/2}$	$E_\gamma$ (MeV)	Phản ứng với	$E_n$ (MeV)	Hiệu suất (n.s <sup>-1</sup> )
$^{24}\text{Na}$	15 giờ	2,75	Be	0,2	$1,4 \cdot 10^5$
			D <sub>2</sub> O	0,8	$2,9 \cdot 10^5$
$^{88}\text{Y}$	108 ngày	1,8 và 2,8	Be	0,16	$1,0 \cdot 10^5$
			D <sub>2</sub> O	0,3	$3,0 \cdot 10^3$
$^{124}\text{Sb}$	60,4 ngày	1,7	Be	0,02	$1,9 \cdot 10^5$
$^{140}\text{La}$	40,2 giờ	2,5	Be	0,6	$2,0 \cdot 10^3$
			D <sub>2</sub> O	0,15	$7,4 \cdot 10^3$

### (b) Nguồn alpha-neutron ( $\alpha$ , n)

Phản ứng hạt nhân ( $\alpha$ , n) đã được dùng đầu tiên cho việc khám phá và tạo ra neutron từ nguồn phóng xạ tự nhiên  $^{210}\text{Po}$  (138 ngày) phát ra hạt  $\alpha$  có năng lượng 5,3 MeV



Ở đây Be được trộn với Po, vì thế mà nó được chiếu trực tiếp với hạt  $\alpha$ . Nguồn này có cường độ bức xạ  $\gamma$  bé hơn so với nguồn ( $\gamma$ , n). Thay vì Be, những nguyên tố nhẹ khác như B, Li, và F cũng có thể được dùng làm bia. Hạt nhân  $^{18}\text{O}$  là nguyên liệu bia thích hợp bởi vì tiết diện của nó thuận lợi cho phản ứng  $^{18}\text{O}(\alpha, n)^{21}\text{Ne}$ . Bảng 8.2 chỉ ra rằng hiệu suất Be cho ra cao nhất ứng với mỗi hạt  $\alpha$  so với những bia khác dưới cùng điều kiện. Điều này được minh họa ở bảng 8.4. Năng lượng neutron được tạo ra phụ thuộc vào góc tán xạ và sự truyền rã ngoài, ví dụ, trong nguồn Po-Be là 11 MeV → 6 MeV. Nguồn  $^{226}\text{Ra}$ -Be có lợi về chu kỳ  $T_{1/2}$  dài nhưng nó lại có bức xạ gamma mạnh phát ra từ  $^{226}\text{Ra}$ . Nguồn Rn-Be cũng được ứng dụng nhưng chỉ giới hạn vì có  $T_{1/2}$  ngắn (4 ngày). Trong những năm gần đây, những nguyên tố siêu uranium như  $^{239}\text{Pu}$ ,  $^{241}\text{Am}$  hay  $^{242}\text{Cm}$  đang trở nên dùng rộng rãi. Những nguồn này được tạo ra dưới dạng kim loại bột với Be.

Khi so sánh bảng 8.1 và bảng 8.3, ta thấy rằng hiệu suất neutron của nguồn alpha-neutron lớn hơn nguồn gamma - neutron.

### (c) Nguồn phân hạch tự phát

Nhiều nguyên tố siêu uranium qua quá trình phân rã  $\alpha$  cũng có thể phân rã bằng việc phân hạch tự phát phóng ra vài neutron. Mặc dù có vài hạt nhân thông dụng như  $^{242}\text{Pu}$ ,  $^{238}\text{U}$ ,  $^{244}\text{Cm}$ ,..., nhưng với hạt nhân  $^{252}\text{Cf}$  được dùng rộng rãi hơn. Chu kỳ bán hủy của nó là 2,73 năm nhưng chỉ 3,2% phân rã bằng phân hạch tự phát, trung bình phóng ra 3,7 neutron trong mỗi phân hạch.



Đặc trưng của nguồn  $^{252}\text{Cf}$  cho ở bảng 8.4. Mỗi mg nguồn Cf cho ra  $\sim 10^9 \text{n.s}^{-1} \text{mg}^{-1}$ . Đây là nguồn được dùng thích hợp nhất để dùng làm nguồn neutron cho phân tích kích hoạt tại nơi mà lò phản ứng không đáp ứng được.

Bảng 8.2: So sánh hiệu suất neutron của nhiều loại bia của nguồn ( $\alpha, n$ )

Bia	Phản ứng	Q(MeV)	Hiệu suất n mỗi	
			$10^6$ hạt $\alpha$	
B(Tự nhiên)	$^{10}\text{B}(\alpha, n)$	1,07	13 đổi với $^{241}\text{Am}$	
	$^{11}\text{B}(\alpha, n)$	0,16		
F	$^{19}\text{F}(\alpha, n)$	-1,93	4,1 "	$^{241}\text{Am}$
$^{13}\text{C}$	$^{13}\text{C}(\alpha, n)$	2,2	11 "	$^{241}\text{Pu}$
Li(Tự nhiên)	$^7\text{Li}(\alpha, n)$	-2,79	1 "	$^{210}\text{Po}$
Be	$^9\text{Be}(\alpha, n)$	5,71	70 "	$^{241}\text{Am}$

Bảng 8.3: Đặc trưng của vài nguồn ( $\alpha, n$ )

Hạt nhân	T $1/2$	E $\alpha$ (MeV)	Bia	E $n$ (MeV)	Hiệu suất ( $\text{ns}^{-1} \text{Cl}^{-1}$ )	Hiệu suất ( $\text{n.s}^{-1} \text{g}^{-1}$ )	Liều $\gamma$ (r/h)
$^{210}\text{Po}$	138 ngày	5,3	Be	4,3	$2,5.10^6$	$1,1.10^{10}$	
			B		$5.10^5$		
			F		$1,5.10^5$		
$^{226}\text{Ra}$	1620 năm	4,5	Be	3,6	$1,1.10^7$	$1,5.10^7$	600
$^{227}\text{Ac}$	22 năm	4,9	Be	4	$1,5.10^7$	$1,7.10^9$	80
$^{228}\text{Th}$	19 năm	6,4	Be	4	$2.10^7$	$2,3.10^{10}$	300
$^{238}\text{Pu}$	89 năm	5,5	Be	4	$2,8.10^6$	$4,5.10^7$	0,08
$^{239}\text{Pu}$	24360 năm	5,1	Be	4,5	$1,6.10^6$	$1,2.10^5$	
$^{241}\text{Am}$	432 năm	5,4	Be	4	$2,2.10^6$	$6,5.10^5$	10
			B		$5.10^5$		
			F		$1,5.10^5$		
$^{242}\text{Cm}$	163 ngày	6,1	Be	4	$4.10^4$	$10^{10}$	0,06
$^{244}\text{Cm}$	18,1 năm	5,8	Be	4	$3.10^6$	$2,5.10^8$	0,04

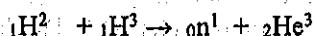
**Bảng 8.4:** Vài tính chất hạt nhân của nguồn  $^{252}\text{Cf}$ 

Tính chất		Giá trị
1. Kiểu phân rã:	Phát $\alpha$	96,8 %
	Phân hạch tự phát	3,2%
2. Chu kỳ bán rã:	Phân rã $\alpha$	$2,731 \pm 0,007$ năm
	Phân hạch tự phát	$85,5 \pm 0,5$ năm
	Hiệu dụng	$2,646 \pm 0,004$ năm
3. Tốc độ phát neutron		$2,34 \cdot 10^{12} \text{ n.s}^{-1} \text{ g}^{-1}$
4. Phát neutron/ phân hạch tự phát		3,76
5. Năng lượng neutron trung bình		2,348 MeV
6. Năng lượng trung bình		6,117 MeV
7. Tốc độ phát gamma		$1,3 \cdot 10^{13} \text{ } \gamma \cdot \text{s}^{-1} \cdot \text{g}^{-1}$
8. Tốc độ liều ở 1 mét trong không khí: neutron : gamma		$2,2 \cdot 10^3 \text{ rem.h}^{-1} \cdot \text{g}^{-1}$
		$1,6 \cdot 10^2 \text{ rad. h}^{-1} \cdot \text{g}^{-1}$
9. Phát nhiệt :phân rã $\alpha$ : phân hạch		18,8 w.g $^{-1}$
		19,7 w.g $^{-1}$
10. Thể tích nguồn		<1 cm $^3 \cdot \text{g}^{-1}$

### 8.1.2. Máy phát neutron

Bắt đầu từ những năm 1960, sự phát triển về PTKH ứng dụng các máy phát neutron dựa trên nguyên tắc các máy gia tốc thẳng (nhỏ, ít tốn kém so với lò phản ứng) trong phòng thí nghiệm và trong công nghiệp ngày càng tăng. Phần lớn các máy phát neutron làm việc theo nguyên tắc sau:

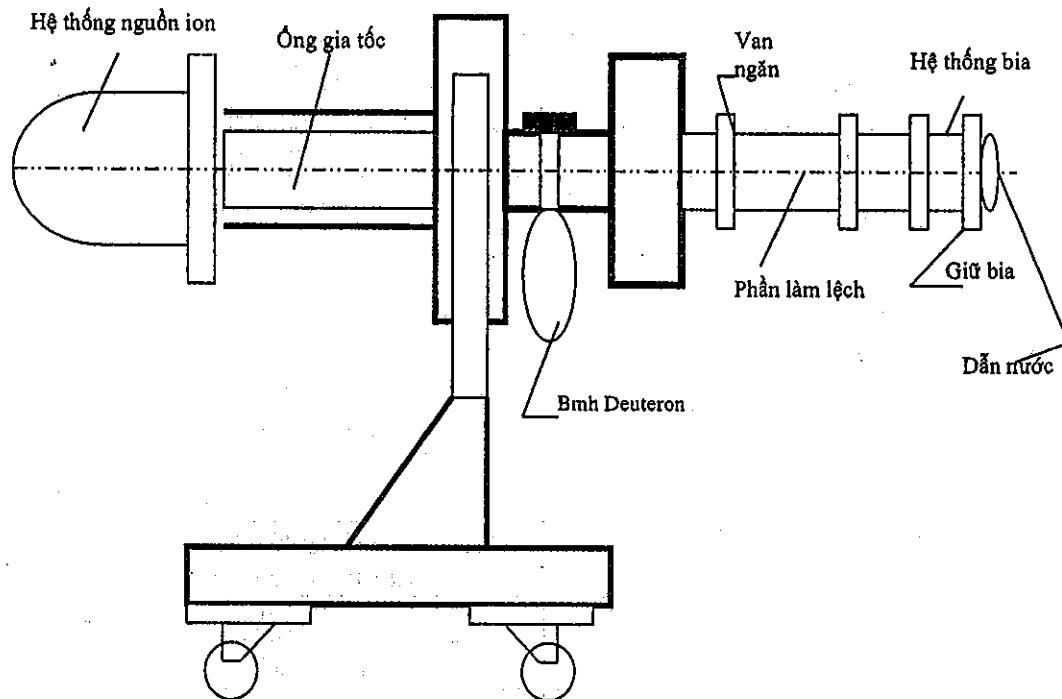
Bằng một phương pháp thích hợp (phần lớn là phương pháp dao động tần số cao) người ta làm cho deuterium bị ion hóa. Những ion này lại được gia tốc trong một máy gia tốc nhiều cấp (thông thường là mạch Cockroft Walton) đến động năng khoảng 100 keV  $\rightarrow$  150 keV, sau đó đập vào bia chất rắn. Bia phần lớn được làm bằng một miếng titan (thực ra là một miếng đồng phủ titan hoặc zircon) có hấp thụ tritium. Như vậy phản ứng hạt nhân sau đây sẽ xảy ra:



và xuất hiện các neutron đơn năng với năng lượng 14,7 MeV (và 15,09 MeV).

Sản lượng riêng của neutron đối với phản ứng D-T và đối với bia T-Ti có mật độ  $2,5 \text{ mg/cm}^2$  là vào khoảng  $4 \cdot 10^7 \text{ n.s}^{-1} \mu\text{A}^{-1}$  (hiện nay các bia được sử dụng có sản lượng neutron cao hơn khoảng 2-3 lần). Về nguyên tắc thì bia có thể dùng các nguyên tố từ nước nặng  $\text{D}_2\text{O}$  đến beryllium (Be); tuy nhiên, năng lượng của deuteron bắn phá phải tăng lên rất nhanh (đến cỡ MeV) cùng với số thứ tự của nguyên tố tăng nếu cần đạt đến sản lượng neutron theo ý muốn.

Sơ đồ nguyên tắc làm việc của một máy phát neutron được phát họa ở hình 8.1.



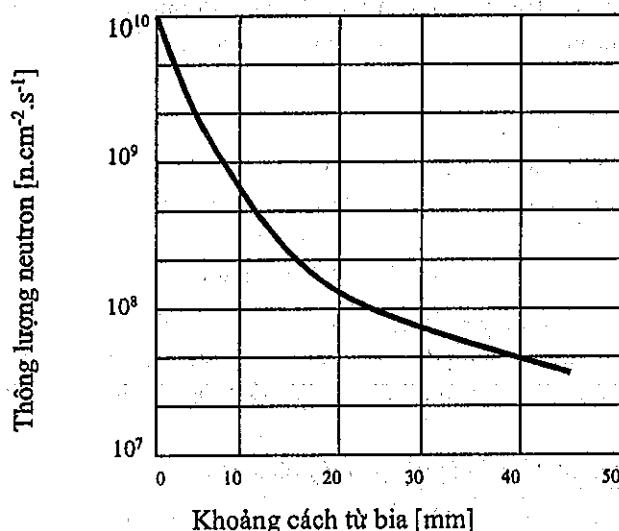
**Hình 8.1: Hệ thống máy phát neutron 14 MeV**

Hệ thống gia tốc luôn được tạo chân không đến vào khoảng  $10^{-5}$  torr bằng bom ion (với các máy hiện đại) hoặc bom khuếch tán (máy phát cũ). Độ chân không như vậy là cần thiết để giảm nhòe đèn mức tối thiểu sự va chạm giữa các deuteron và các phân tử khí. Với máy phát lớn, sản lượng neutron khoảng  $10^{11} \rightarrow 10^{12} \text{ n.s}^{-1}$  (góc không gian  $4\pi$ ), như vậy tương ứng với thông lượng neutron nhanh ngay gần sát bia vào khoảng  $10^9 \rightarrow 10^{10} \text{ cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$ .

Sản lượng neutron có thể điều chỉnh được tùy theo yêu cầu của từng công việc phân tích (qua việc điều chỉnh thích hợp các bộ phận chức năng của máy phát). Chỉ khi yêu cầu có độ nhạy hoàn toàn cao mới dùng đến sản lượng neutron cao, điều này đặc biệt đối với tuổi thọ của bia tritium. Bên cạnh những tính chất thuận lợi cho mục đích phân tích như neutron đơn năng có năng lượng cao và dòng neutron có thể điều chỉnh được..., máy phát neutron có những tính chất khác làm hạn chế việc sử dụng nó trong phân tích ứng dụng vào công nghiệp.

1. Thông lượng neutron dao động theo thời gian, điều này đòi hỏi mẫu chuẩn phải được rời đồng thời với mẫu đo khi thời gian rời lâu.
2. Thông lượng neutron phụ thuộc rất mạnh vào vị trí và giảm rất nhanh theo khoảng cách so với bia (hình 8.2), do đó, đòi hỏi giữ không đổi thường xuyên về hình học rời đối với những phép đo lặp lại nhiều lần.
3. Thời gian sống của bia tritium bị hạn chế do 3 hiệu ứng sau:
  - a) Áp suất phân ly tăng nhanh khi nhiệt độ cao của vật liệu hấp thụ hydro và các đồng vị của nó. Với bia zircon thì nhiệt độ này  $120^\circ\text{C}$  và với bia titan là  $200^\circ\text{C}$ . Khi bị deuteron bắn phá, bia bị

nóng lên cục bộ và tritium trở nên tự do. Việc dẫn nhiệt là một biện pháp quan trọng nhằm kéo dài đời sống của bia tritium. Người ta thực hiện việc dẫn nhiệt bằng cách làm lạnh phía sau lưng bia với dòng chất lỏng chảy vòng quanh, bằng cách dùng các bia quay và bằng cách sản xuất các tẩm lõi của bia bằng các vật liệu có khả năng chịu nhiệt cao. Người ta dùng đất hiếm để làm lõi bia có khả năng chịu nhiệt cao. Loại bia này có khả năng chịu nhiệt đến 500°C mà không bị mất mát tritium vì áp suất phân ly của hydrid đất hiếm nhỏ hơn hydrid titan hoặc hydrid zircon nhiều cấp độ lớn.



Hình 8.2: Sự giảm của thông lượng theo khoảng cách so với bia

b) Hiệu ứng hóa loãng: xảy ra khi bia tritium bị deuteron bắn phá. Lúc đó các nguyên tử tritium của bia bị các deuteron chiếm chỗ (làm loãng mật độ).

c) Hiệu ứng phun xạ: xảy ra khi các deuteron bay đến bia làm bật các nguyên tử vật liệu mang tritium ra ngoài. Hiệu ứng này có thể ngăn ngừa được bằng cách dùng một lớp nhôm bảo vệ có khối lượng bề mặt vào khoảng  $0,05 \text{ mg/cm}^2$  bao quanh bia. Tuy nhiên, do sự hấp thụ và hâm các deuteron của nhôm nên các bia này chỉ được sử dụng khi tốc độ trên 200 KV.

- Ngoài phản ứng ( $t, d$ ), neutron cũng có thể được sinh ra qua phản ứng:  $\text{H}_1^2 + \text{H}_1^2 \rightarrow n_0^1 + \text{He}_2^3$  với năng lượng 2,6 MeV. Sản lượng neutron như trên gần hai cấp độ lớn (so với phản ứng ( $T, D$ )). Do tiết diện kích hoạt nhỏ nên phản ứng này ít được sử dụng cho phân tích kích hoạt.

- Nhằm khắc phục lại khó khăn là phải liên tục tạo chân không trong máy phát bằng bom chân không cao, người ta đã làm máy phát neutron với những ống đã được đóng kín. Trong ống đó chứa hơi nguồn ion, hệ thống gia tốc và hệ thống bia cũng ở luôn trong đó. (Phản ứng dùng nguồn ion Penning). Hệ thống bia làm bằng tấm Titan được gọi bằng những bia tự nó. Với những máy phát như vậy thì cả deuteron, cả các nguyên tử tritium đều bắn phá bia, chúng có cùng thành phần trong hơi nguồn ion. Sản lượng neutron tăng dần lên cùng với thời gian làm việc của máy qua việc tritium ngày càng làm giàu thêm cho bia. Ngược với máy phát được bom liên tục, loại máy phát này (ống máy phát) có thời gian hoạt động không phải bị hạn chế do áp suất tăng lên trong toàn bộ hệ thống. Nói chung thời gian sống vào khoảng 400 giờ. Tuy nhiên, sản lượng neutron so với loại máy phát

được bom liên tục khi dòng tổng cộng như nhau sẽ thấp hơn từ hai đèn bốn lần do đồng thời tồn tại hai phản ứng ( $D - D$ ) và ( $T - T$ ).

- Để tăng thông lượng neutron, thời gian gần đây người ta làm ra những máy phát công suất cao, gọi là ống máy phát. Loại này có sản lượng neutron đến  $5.10^{12} \text{ n.s}^{-1}$  (Đức) từ đó thông lượng neutron vào khoảng  $6.10^{10} \text{ n.s}^{-1}\text{cm}^{-2}$ , dùng để rời các mẫu có thể tích đến  $25 \text{ cm}^3$ . Thời gian sống của ống máy phát đến nhiều trăm giờ. Cũng đã xuất hiện những máy phát công suất cao với sản lượng Neutron đến  $5.10^{13} \text{ n.s}^{-1}$  (và  $\phi \cong 5.10^{11} \text{ n.s}^{-1}\text{cm}^{-2}$ ), tức là tương đương với một lò phản ứng cỡ trung bình về phuong diện thông lượng neutron. Với thông lượng neutron cao như vậy đã tạo nhiều thuận lợi trong phân tích kích hoạt, như:

- Nâng cao khả năng phát hiện vết nguyên tử.
- Sử dụng được các phản ứng hạt nhân mới cho phân tích nhằm khắc phục các phản ứng nhiễu so sáp, ví dụ có thể xác định được Si qua phản ứng:  $^{29}\text{Si}(n, p)^{29}\text{Al}$  với  $T_{1/2} = 6,6$  phút, trong khi cho đến nay phải sử dụng phản ứng  $^{27}\text{Al}(n, p)^{28}\text{Al}$  có thể gặp phản ứng nhiễu:



Bảng 8.5 cho ta thấy một số máy phát neutron có trên thế giới cũng như các thông số kỹ thuật của chúng. Máy phát neutron thường dùng để xác định các nguyên tố có tiết diện hấp thụ cao trong vùng năng lượng neutron nhanh, các nguyên tố được phân tích theo kích hoạt neutron loại này cho ở bảng 8.6.

**Bảng 8.5:** Vài thông số liệu kỹ thuật về các máy phát neutron

Mã hiệu	Nước sản xuất	Thế giới tốc cực đại (KV)	Dòng ion cực đại (mA)	Cường độ (n.s <sup>-1</sup> )	Thông lượng (n cm <sup>-2</sup> s <sup>-1</sup> )
9990	Tex USA	300	8	$1.10^{12}$	$8.10^8$
9900	Texas USA	150		$2.5.10^{11}$	$8.10^8$
111	Technical USA	200		$2.10^{11}$	$1.25.10^9$
S	Sames, Pháp	600	1,0	$1.10^{12}$	
J	Sames, Pháp	150	2,5	$1.10^{11}$	
Magnum	Sames, Anh	250		$1.10^{12}$	$10^9$
NGH	Sames, Anh	150		$6.10^{10}$	$10^9$
N6-160	Sames, Nga	150	0,3	$1.10^9$	
N61-5	Sames, Nga	140		$6.10^8$	
NA-2	Hungary	120	1,0	$5.10^{10}$	
NA-3	Hungary	120	1,0	$3.10^{10}$	
111,590/10	Philips	125	0,1	$1.10^8$	

**Bảng 8.6:** Một số nguyên tố xác định bởi neutron nhanh

Nguyên tố	Phản ứng	Chu kỳ $T_{1/2}$
Magnesium (Mg)	$Mg^{26}(n, \alpha)Ne^{23}$	37,6 giây
Aluminum (Al)	$Al^{27}(n, p)Mg^{27}$	9,5 phút
Silicon (Si)	$Si^{28}(n, p)Al^{28}$	2,3 phút
Titanium (Ti)	$Ti^{46}(n, p)Sc^{46m}$	18,7 giây
Iron (Fe)	$Fe^{56}(n, p)Mn^{56}$	2,58 giờ
Zirconium (Zr)	$Zr^{90}(n, 2n)Zr^{89m}$	4,2 phút
Nickel (Ni)	$Ni^{60}(n, p)Co^{60m}$	10,5 phút

### 8.1.3. Lò phản ứng hạt nhân

Các lò phản ứng có khả năng kích hoạt mạnh nhất, tùy theo cách cấu tạo mà chúng có thể cung cấp các thông lượng neutron không đổi. Phần lớn lò phản ứng cho thông lượng neutron từ  $10^{11} \rightarrow 10^{12} n.cm^{-2}.s^{-1}$ . Lò phản ứng lớn cho thông lượng  $10^{15} n.cm^{-2}.s^{-1}$ .

Phần trung tâm của lò phản ứng gọi là vùng phân chia hay vùng hoạt, chứa vật liệu hạt nhân, chất hầm và chất làm chậm cùng với phương tiện làm mát. Vật liệu hạt nhân chủ yếu là  $U^{235}$ ,  $U^{233}$  và  $Pu^{239}$ . Trung bình mỗi sự vỡ hạt nhân có 2,5 neutron nhanh tự do, các neutron này được hâm thành neutron nhiệt và tiếp tục gây ra các phân chia khác. Ngoài neutron nhiệt, trên nhiệt và neutron nhanh cũng được dùng trong phân tích kích hoạt.

Lò phản ứng hạt nhân thực nghiệm hoạt động trong vùng năng lượng nhiệt lớn ( $100 KW \rightarrow 10 MW$ ) với thông lượng neutron nhiệt khoảng  $10^{12} - 10^{14} n.cm^{-2}.s^{-1}$  là nguồn neutron hiệu quả nhất cho phân tích kích hoạt do tiết diện hấp thụ neutron cao trong vùng nhiệt đối với đa số các nguyên tố nên có độ nhạy phép phân tích cao.

Từ 1942 lò phản ứng đầu tiên được xây dựng theo cơ chế uranium-graphit ở Đại học Chicago, tiếp theo đó lò phản ứng đã được xây dựng ở nhiều nơi khác nhau với những mô hình khác nhau: chất làm chậm, thành phần nhiên liệu và chất phản xạ,... Sự phân loại lò phản ứng dựa vào các tính chất sau:

- **Loại nhiên liệu:** nhiên liệu đơn giản nhất là Uranium tự nhiên ( $6.10^{-3\%} U^{234}$ ,  $0,71\% U^{235}$  và  $99,28\% U^{238}$ ). Để tăng hàm lượng của nguyên liệu cho việc phân hạch hạt nhân, uranium phải được làm giàu lên từ vài % đến 95%  $U^{235}$ , khi đó kích thước lò sẽ được rút gọn.
- **Loại chất làm chậm và tải nhiệt:** như ta biết, tiêu chuẩn của một lò phản ứng là nhanh hay nhiệt phụ thuộc vào tỉ lệ nhiên liệu/chất làm chậm. Chất làm chậm phải được làm sao cho việc mất mát năng lượng lớn khi có sự va chạm với neutron và có tiết diện bắt nhỏ để ta thu được hiệu suất neutron tối ưu. Những chất làm chậm có thể là nước ( $H_2O$ ), nước nặng ( $D_2O$ ) và graphit hay berium ( $Be$ ).
- **Năng lượng neutron:** hầu hết các loại lò phản ứng đều dùng neutron nhiệt cho việc phân hạch hạt nhân.
- **Cấu trúc hình học:** có hai loại cấu trúc lò: Lò có sự trộn nhiên liệu và chất làm chậm đồng đều được gọi là lò phản ứng đồng chất, ngược lại ta gọi là lò phản ứng không đồng chất.
- **Mục đích của lò phản ứng:** lò phản ứng được xây dựng với mục đích nghiên cứu hay thực nghiệm.

**Bảng 8.7: Thông lượng neutron của một số lò phản ứng hạt nhân**

Tên lò phản ứng	Nước	Vật liệu cháy	Chất làm chậm	Thông lượng (n.cm <sup>-2</sup> s <sup>-1</sup> )
BEPO	Anh	Uran tự nhiên	Graphit	$2.10^{12}$
DiDO	Anh	Uran làm giàu	D <sub>2</sub> O	$1.10^{14}$
BNL	USA	Uran tự nhiên	Graphit	$5.10^{12}$
LTR	USA	Uran làm giàu	H <sub>2</sub> O	$4.10^{13}$
NTR	USA	Uran làm giàu	H <sub>2</sub> O	$5.10^{14}$
NRX	Canada	Uran làm giàu	D <sub>2</sub> O	$6.8.10^{12}$
WWRS-M	Đức	Uran làm giàu	H <sub>2</sub> O	$1.5.10^{13}$
FRM	Đức		H <sub>2</sub> O	$6.10^{13}$

Để chiếu xạ trong lò phản ứng, mẫu phải được di chuyển ra vào vị trí chiếu xạ bằng remote điều khiển. Các vật liệu dùng để gói mẫu phải thích hợp cho việc chiếu xạ và vận chuyển, nhất là tránh được sự nhiễm xạ từ chúng. Việc chọn lựa vật liệu gói mẫu phù hợp sẽ phụ thuộc vào loại mẫu, khoảng thời gian chiếu xạ, thông lượng lò phản ứng và nhiệt độ trong lò.

Phổ neutron trong lò phản ứng hạt nhân đã trình bày chi tiết ở chương 4. Bảng 8.7 cho ta thấy thông lượng của một số loại lò phản ứng trên thế giới.

## 8.2. CÁC NGUỒN DÙNG CHO PHÂN TÍCH HUỲNH QUANG TIA X

Trong phổ kế huỳnh quang tia X, tia X đặc trưng phát ra từ mẫu phân tích do nguồn kích thích chùm electron năng lượng cao, bằng hạt tích điện, gia tốc hay bằng chính tia X sơ cấp hoặc tia gamma phát ra từ nguồn đồng vị. Việc sử dụng chùm electron có năng lượng cao đòi hỏi trong môi trường chân không cao, điều này không cần thiết cho việc phân tích mẫu thông thường, hơn nữa sự xuyênh thấu của chùm electron thấp nên việc kích thích mẫu chỉ xảy ra trên bề mặt mẫu. Ngoài ra cả hai loại kích thích bằng electron và hạt tích điện có khả năng gây ra sự dẫn điện đối với mẫu không dẫn điện. Hai kỹ thuật kích thích này được áp dụng cho những đối tượng đặc biệt và thường không có giá trị thực tế trong lãnh vực phân tích định lượng bằng phương pháp huỳnh quang tia X.

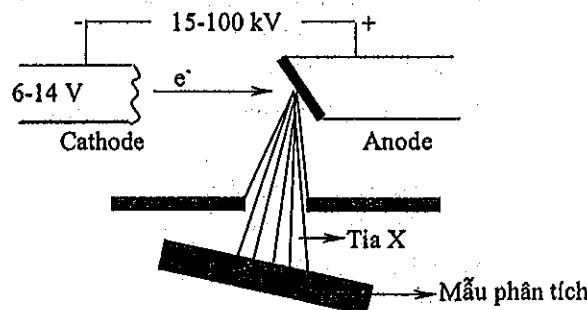
Trong thường nguồn kích thích được sử dụng trong phổ kế huỳnh quang là:

- Photon phát ra từ nguồn đồng vị như Am-241, Co-57.
- Tia X sơ cấp phát ra từ nguồn đồng vị như Fe-55, Cd-109.
- Tia X với năng lượng khác nhau được tạo ra từ ống phát tia X.

### 8.2.1. Máy phát tia X

Máy phát tia X sử dụng trong phương pháp huỳnh quang tia X thường cấu tạo như hình 8.3 dưới đây:

Dây tim (cathode) được nhiệt hóa bằng điện thế thấp 6 → 14 Volt. Một điện thế được áp vào giữa dây tim và bia, thường làm bằng nguyễn tố tinh khiết (anode) để gia tốc electron tới anode. Sự giảm tốc của electron trong quá trình tương tác với các electron

**Hình 8.3: Tia X sinh ra từ ống phát**

quỹ đạo của nguyên tố bia và quá trình quang điện xảy ra tạo nên phổ liên tục và bức xạ X đặc trưng từ nguyên tố bia. Vì ống phát được trong chân không nên tia X sản sinh phải đi qua cửa sổ, thường làm bằng beryllium. Ống phát tia X dùng trong phân tích huỳnh quang tia X thường hoạt động ở điện thế  $\sim 1 \rightarrow 3$  KV nên được làm nguội bằng nước. Sự thay đổi bia (vật liệu Anode) cung cấp tia X phát ra có năng lượng thay đổi phù hợp cho sự lựa chọn kích thích các nguyên tố trong mẫu đa dạng hơn và phong phú hơn.

Ngoài ra khi sử dụng ống phát tia X, có thể dùng bia trung gian để tạo nguồn bức xạ kích thích đơn năng.

Bảng 8.8: Năng lượng đặc trưng cho các anode

Nguyên tố bia (Anode)	Vạch năng lượng (keV)
Ag	22,162 K <sub>α</sub>
	2,980 L <sub>α</sub>
Au	8,490 L <sub>α</sub>
Cr	5,410 K <sub>α</sub>
Cu	8,047 K <sub>α</sub>
Mo	17,441 K <sub>α</sub>
Rh	20,166 K <sub>α</sub>

Phổ liên tục từ ống phát tia X có những đặc tính sau:

- Bước sóng tối hạn  $\lambda_0$  cho bởi Duane – Hurt không phụ thuộc vật liệu bia:

$$\lambda_0(\text{\AA}) = \frac{12,369}{V} \quad (8.5)$$

với V (KV) là điện thế của ống phát tia X.

- Cường độ tổng cộng của phổ liên tục tăng theo dòng điện i, điện thế áp đặt V và bậc số nguyên tử Z của bia, Ulrey đã tìm ra mối quan hệ sau:

$$I = KiZV^2 [\text{w.m}^{-2}] \quad (8.6)$$

trong đó, K là hằng số ti lệ ( $K = 1,4 \times 10^{-9}$ ), i là cường độ dòng điện [A], Z là bậc số nguyên tử của nguyên tố bia và V là điện thế áp đặt [V].

- Hàm phân bố liên tục theo bước sóng diễn tả theo photon hay số đếm được nghiên cứu bởi Kulenkampff và Kramers có dạng:

$$N(\lambda) = KZ \left( \frac{1}{\lambda^2} \right) \left[ \frac{\lambda}{\lambda_0} - 1 \right]^q \quad (8.7)$$

Nếu hiệu chỉnh hấp thụ, ta có công thức của Tertian và Broll:

$$N(\lambda) = \left( \frac{1}{\lambda^2} \right) \left[ \frac{\lambda}{\lambda_0} - 1 \right]^q \exp(-Q\mu_{A,\lambda}^n) \exp(-\mu_{Be,\lambda} \rho_{Be,d}) \quad (8.8)$$

trong đó,

- Số hạng  $\exp(-Q\mu^n_{A,\lambda})$  hiệu chỉnh cho hệ số hấp thụ của bia,

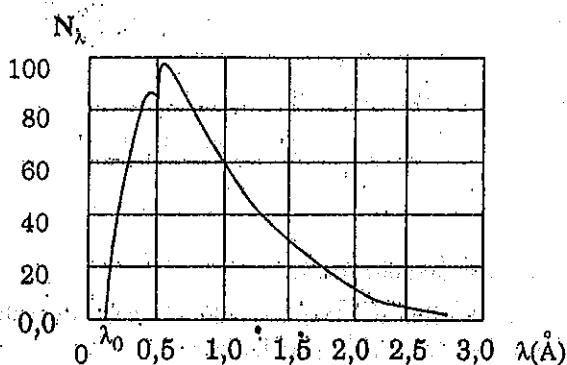
- Số hạng  $\exp(-\mu_{B_0,\lambda} \rho_{B_0,d})$  hiệu chỉnh hấp thụ của số beryllium của ống phát.

Để xác định các tham số của phô liên tục sử dụng cho ống phát có anode xác định cùng với thế và dòng biết trước, ta đo phô thực nghiệm  $N'(\lambda)$  và dùng phương pháp làm khớp phô bằng cách dùng thuật toán của Newton – Raphson để tìm trị cực tiểu của hàm số:

$$F(q, n, Q) = \sum [N'(\lambda) - N(\lambda)] \quad (8.9)$$

Bảng 8.9: Các tham số phô liên tục với anode Rh và Cr

Điện thế (KV)	Anode Rh (n = 0,8)		Anode Cr (n = 0,7)	
	q	Q	q	Q
10	0,890	0,0020	0,758	0,0030
20	0,904	0,0024	0,878	0,0077
30	0,933	0,0030	1,211	0,0122
40	1,043	0,0064	1,081	0,0109
50	1,112	0,0092	1,143	0,0165
55	1,174	0,0107	1,265	0,0261



Hình 8.4: Phân bố cường độ phô máy phát tia X với bia Rh, điện thế 50 KV

### 8.2.2. Nguồn đồng vị phóng xạ

Các nguồn phóng xạ thường được dùng để kích thích trong phô kế huỳnh quang tia X được liệt kê trong bảng 8.10.

Các nguồn phóng xạ phát tia X hoặc gamma là những bức xạ đơn năng nên rất thuận lợi cho việc phân tích định lượng nguyên tố theo năng lượng kích thích chọn lọc để đạt được độ nhạy mong muốn.

Ngoài ra nguồn đồng vị có kích thước nhỏ, cường độ thấp nên thuận lợi để xây dựng hệ thống phân tích trên phạm vi nhỏ trong phòng thí nghiệm cũng như ứng dụng trong thực tiễn và bảo đảm an toàn bức xạ cho môi trường cùng nhân viên làm việc.

Các nguồn phóng xạ phát tia theo các hình thức phân rã khác nhau như phân rã bắt electron, phân rã α, γ, β. Dưới đây là sơ đồ phân rã của nguồn <sup>241</sup>Am.

Bảng 8.10: Nguồn đồng vị và các thông số của nó dùng làm nguồn kích

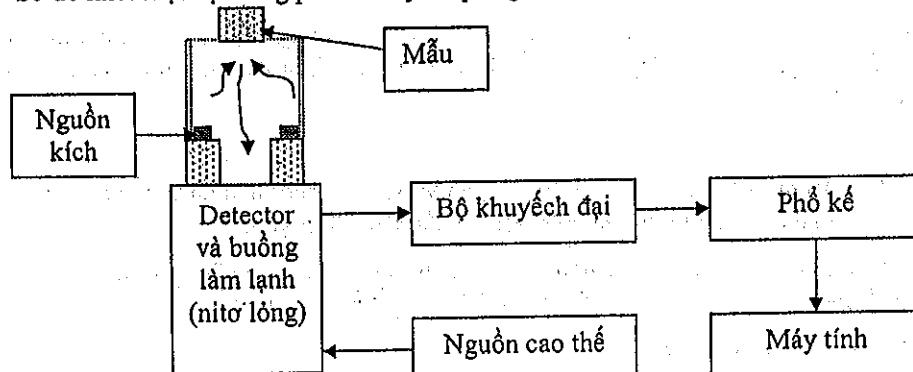
Tên nguồn	Chu kỳ bán hủy (năm)	Năng lượng (keV)	Nguyên tố nhạy cao	Cường độ (Ci)
$^{3}\text{H/Zr}$	12,3	Phổ liên tục 3 – 10 keV	Ca(K), C(K) Mn(K), Fe(K)	4,5
$^{55}\text{Fe}$	2,7	Mn(K): 5,9 và 6,4	Ca(K), V(K) Ti(K), K(K)	0,050
$^{57}\text{Co}$	0,74	Fe(K): 6,4 và 7,05 Gamma: 122	Ti(K), V(K) W(K)	0,020
$^{109}\text{Cd}$	1,3	Ag(K): 22,162	Fe(K), Cu(K) W(L), Mo(K) Au(L), Zr(K)	0,030
$^{153}\text{Gd}$	0,65	Eu(K): 42 Gamma: 100	W(K)	0,005
$^{241}\text{Am}$	460	Np(L): 11-12 Gamma: 59,6	Mo(K), Ag(K) Cd(K), Sn(K)	0,05

### 8.3. HỆ PHÔ KẾ TIA X VÀ TIA GAMMA

#### 8.3.1. Tính chất cơ bản

Huỳnh quang tia X và tia gamma là bức tranh mô tả các đỉnh phô của các nguyên tố theo năng lượng đặc trưng của từng loại vạch bức xạ mà nguyên tố phát ra do bị kích thích bởi nguồn gamma hay các loại bức xạ khác như tia X, neutron v.v... Để ghi nhận phô bức xạ phát ra từ mẫu, ta dùng detector ghi bức xạ có năng lượng thấp (như Si(Li), Ge(Li)) nếu ta phân tích huỳnh quang tia X hoặc dùng detector ghi bức xạ có năng lượng cao hơn (như HPGe, NaI(Tl)) nếu ta phân tích kích hoạt neutron, hệ điện tử tuyển tính gồm cao thế, khuyếch đại phô kế, máy phân tích biên độ đa kênh và máy tính cá nhân để biểu thị cũng như tính toán kết quả.

Sơ đồ khối một hệ thống phô kế huỳnh quang tia X như sau:



Hình 8.5: Sơ đồ khối một hệ phân tích huỳnh quang tia X

Hệ phô kẽ đo tia gamma cũng tương tự như sơ đồ trên hình 8.5 nhưng đơn giản hơn là không cần nguồn kích thích như trong huỳnh quang tia X.

### 8.3.2. Detector (đầu dò ghi bức xạ)

Detector sử dụng trong hệ phô kẽ huỳnh quang tia X có năng lượng từ 1 keV đến 100 keV, phô kẽ tia gamma có năng lượng từ 40 keV đến vài MeV, chúng có thể là loại detector chứa khí, nhấp nháy, bán dẫn. Trong các loại detector kẽ trên thì detector bán dẫn có độ phân giải ~120 eV đến ~2 keV đối với nguồn Fe-55 với năng lượng 5,898 keV và Co-60 với năng lượng 1332 keV như Si(Li) hay HPGe là thích hợp nhất để ghi phô huỳnh quang tia X và phô tia gamma.

#### 8.3.2.1. Chất bán dẫn

Vật chất phân loại theo tính dẫn điện gồm kim loại, chất bán dẫn và điện môi.

- Kim loại là chất dẫn điện tốt vì có mật độ electron tự do lớn nên điện trở suất nhỏ ( $\sim 10^{-6} - \sim 10^{-4}$ ).
- Điện môi là chất cách điện vì có mật độ electron tự do nhỏ nên điện trở suất lớn ( $\sim 10^{10} - 10^{15}$   $\Omega \cdot \text{cm}^{-1}$ ), độ dẫn điện phụ thuộc mạnh vào nhiệt độ, vào lượng tạp chất có trong chất bán dẫn và vào điện tử trung.

Theo lý thuyết vùng năng lượng, chất bán dẫn được chia thành vùng hóa trị và vùng dẫn, giữa hai vùng này là vùng cấm. Độ rộng của vùng cấm  $\Delta\epsilon$  là một trong những đặc trưng quan trọng nhất của chất bán dẫn, cho phép xác định công nghệ chế tạo, khoảng nhiệt làm việc ổn định của dụng cụ bán dẫn (hình 8.6).

Trong chất bán dẫn có hai phần tử tài điện: electron (n) trong vùng dẫn và lỗ trống (p) trong vùng hóa trị.

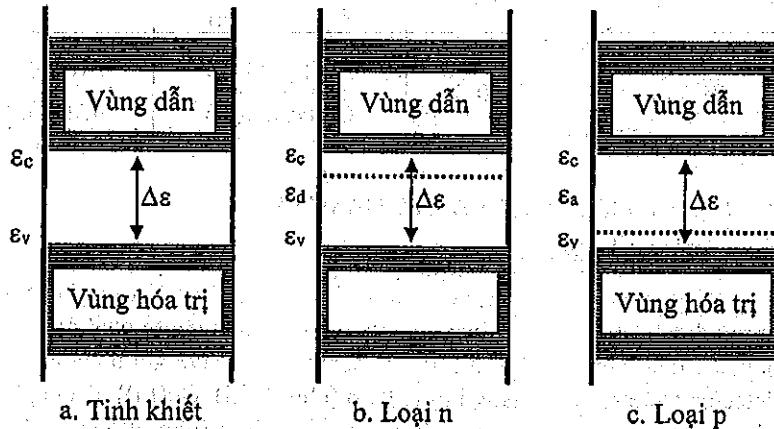
Cũng theo lý thuyết vùng năng lượng, tạp chất tạo ra các mức năng lượng trung gian nằm trong vùng cấm, cho phép các phần tử tài điện dễ dàng chuyển từ vùng hóa trị qua miền trung gian vào vùng dẫn.

Tạp chất có hai loại:

- Donor: (As, P) tạo ra các mức năng lượng gần vùng dẫn, chất bán dẫn có tạp chất donor có electron tham gia vào dẫn điện nhiều hơn, nên gọi là chất bán dẫn loại n.
- Acceptor: (In, B) tạo ra các mức năng lượng gần vùng hóa trị, chất bán dẫn với tạp chất acceptor có lỗ trống tham gia vào dẫn điện nhiều hơn nên gọi là bán dẫn loại p.

#### 8.3.2.2. Detector bán dẫn Ge hay Si(Li)

Khi hạt mang điện đi qua môi trường bán dẫn sẽ tạo ra các cặp phần tử tài điện là electron và lỗ trống. Dưới tác động của điện trường do điện thế nuôi tạo, các phần tử tài điện tạo thành sẽ dịch chuyển về các điện cực, hình thành tín hiệu ra.



Hình 8.6: Cấu trúc vùng năng lượng của chất bán dẫn

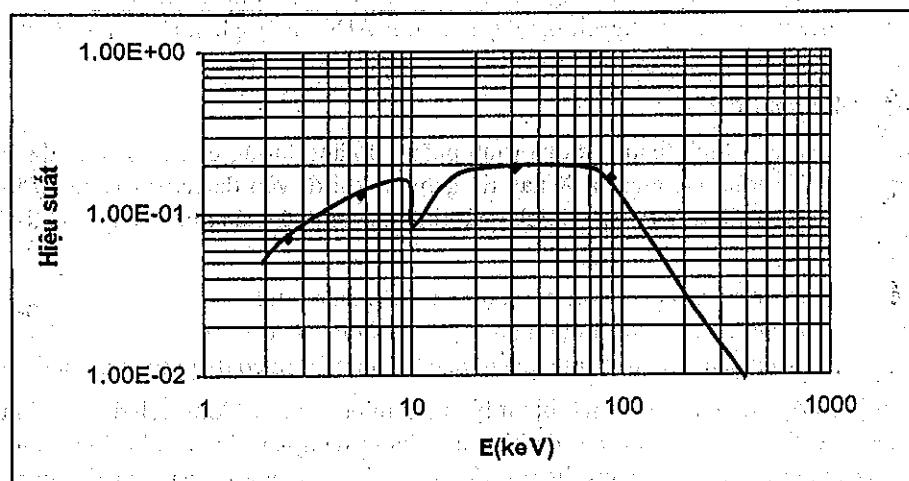
Vật chất được chọn làm môi trường phải có năng lượng tạo cặp nhỏ, không có sự tái hợp và chiếm các phần tử tải điện. Do vậy, chất bán dẫn siêu tinh khiết (nồng độ tạp chất  $< 10^{-8}$ ) như Ge hay Si có các đặc tính thích hợp nhất để chế tạo detector bán dẫn.

Độ rộng vùng cảm của Ge và Si nhỏ nên năng lượng tạo một cặp electron – lỗ trống nhỏ  $\omega(\text{Ge}) = 2,96 \text{ eV}$  và  $\omega(\text{Si}) = 3,66 \text{ eV}$ . Kết quả là với cùng một năng lượng song detector bán dẫn sẽ cho số phần tử tải điện lớn hơn nhiều so với các loại detector khác và khả năng phân giải năng lượng cao.

Ngoài ra tính chất phụ thuộc nhiệt độ của chất bán dẫn và để tránh các electron sinh ra do sự phát nhiệt, detector bán dẫn thường được làm lạnh ở nhiệt độ nitơ lỏng (-196°C) khi sử dụng. Về mặt này detector Si có độ ổn định nhiệt độ tốt hơn detector Ge vì có độ rộng vùng cảm lớn hơn.

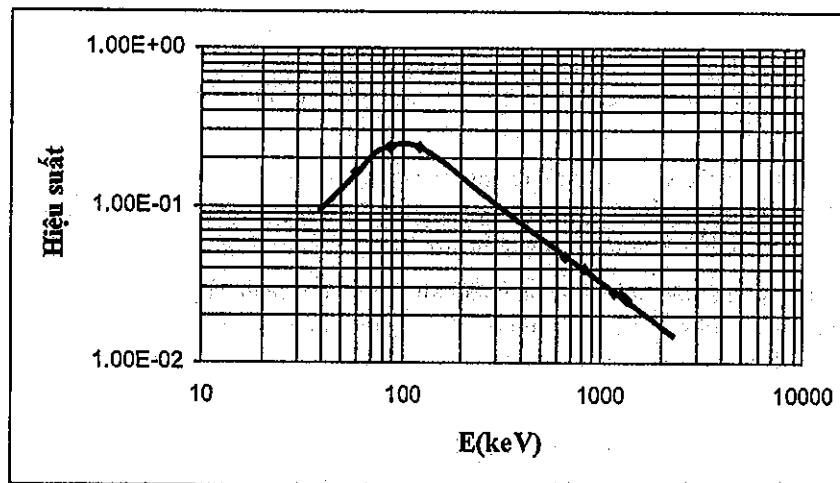
### 8.3.2.3. Hiệu suất ghi

Đối với detector bán dẫn như HPGe hay Si(Li) thì hiệu suất tuyệt đối từ 9% đến 22%. Để nâng cao hiệu suất ghi các nhà sản xuất thường nghiên cứu vật liệu thật mỏng và bền để chế tạo cửa sổ detector có khả năng hấp thụ tia X có năng lượng thấp nhất, những vật liệu này thường là beryllium hoặc polymer. Ngoài ra tùy loại detector mà trên đường cong hiệu suất, xuất hiện các cạnh hấp thụ vạch K ở năng lượng 1,838 KeV đối với detector Si(Li) hay 11,103 KeV đối với detector LEGe, kết quả là xuất hiện các điểm không liên tục trên đường cong hiệu suất.



Hình 8.7: Đường cong hiệu suất của detector LEGe theo năng lượng tia X

Hiệu suất ghi tuyệt đối của detector thường được xác định bằng thực nghiệm với bộ nguồn chuẩn điểm có năng lượng trải rộng từ ~2 keV đến ~60 keV như  $^{51}\text{Cr}$ ,  $^{54}\text{Mn}$ ,  $^{57}\text{Co}$ ,  $^{65}\text{Zn}$ ,  $^{85}\text{Sr}$ ,  $^{113}\text{Sm}$  và  $^{241}\text{Am}$  có cường độ cỡ 0,1 – 2  $\mu\text{Ci}$ . Đường cong hiệu suất tuyệt đối của detector LEGe và HPGe thường được minh họa bởi nhà sản xuất, có thể xem như một trong các đặc trưng chính của các loại detector. Tuy nhiên sau thời gian sử dụng khoảng vài năm, thì hiệu suất ghi của detector sẽ thay đổi và cần thiết làm thực nghiệm kết hợp với phương pháp toán học để xây dựng lại đường cong hiệu suất cho chính xác. Đường cong hiệu suất đặc trưng cho hai loại detector này đường minh họa trên hình 8.7 và 8.8



Hình 8.8: Đường cong hiệu suất của detector HPGe theo năng lượng tia gamma

### 8.3.3. Hệ điện tử tuyến tính

Một hệ điện tử cho phô kẽ huỳnh quang tia X và tia gamma thường gồm các phần sau: tiền khuyếch đại, cao thế nuôi detector khuyếch đại, bộ biến đổi ADC, máy phân tích biên độ đa kênh, máy vi tính.

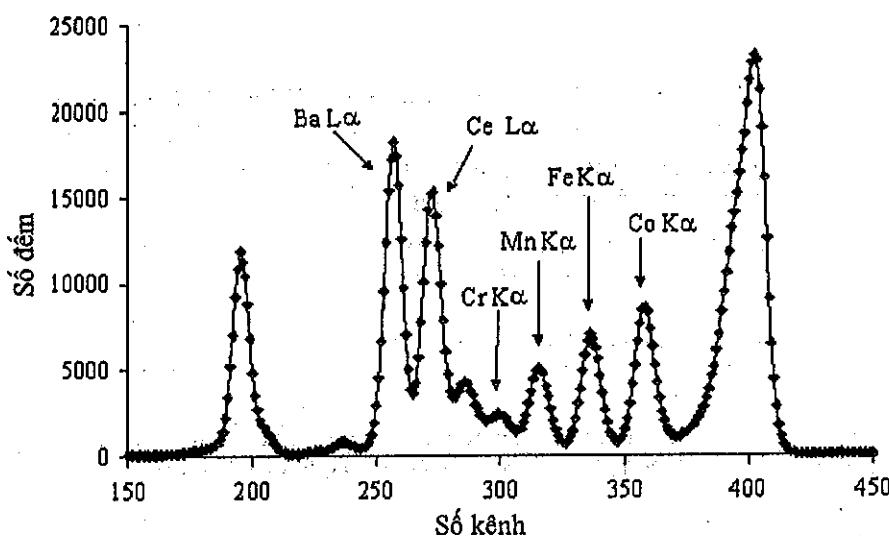
#### 8.3.3.1. Hệ phân tích biên độ xung

Phô tia X hay tia gamma hình thành từ quá trình phân bố năng lượng của tia X hay tia gamma khi đi vào detector. Mỗi tương tác của tia X hay tia gamma khi đi vào detector gây ra sự ion hóa quang điện và tạo nên các phần tử tải điện. Chính quá trình này tạo nên các đỉnh trong phô tia X hay tia gamma đặc trưng.

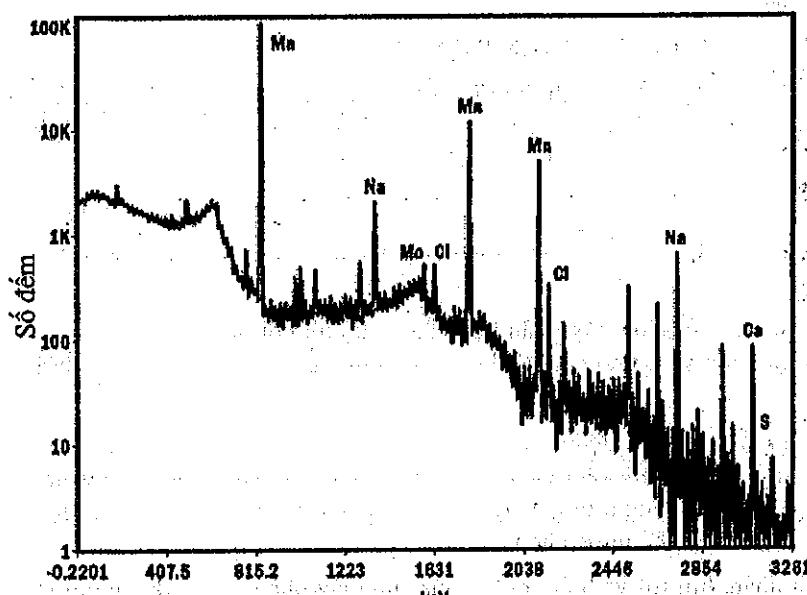
Khi tia X hay tia gamma đi vào detector, nó được biến đổi thành điện tích, liên kết với transistor trường (FET) vào đầu ra của tiền khuyếch đại hình thành tín hiệu ra tỉ lệ với năng lượng tia X hay tia gamma. Đôi với tiền khuyếch đại xung loại quang học thì tín hiệu ra có dạng tín hiệu bước nhảy.

Lối ra của khuyếch đại được nối với thiết bị xử lý xung, thiết bị này sẽ khuyếch đại và định dạng tín hiệu thành dạng có thể chấp nhận được để biến đổi thành dạng số nhờ vào bộ biến đổi ADC. Trong quá trình này việc định chuẩn năng lượng đối với phô tia X hay tia gamma là cần thiết và quan trọng nó liên quan đến quá trình phân tích cũng như định lượng.

Dạng xung được thực hiện bởi bộ xử lý xung để cải thiện tỉ số tín hiệu/tiếng ồn và tối ưu độ phân giải. Việc điều chỉnh khuyếch đại có thể tối ưu thời gian hình thành xung tương ứng với cường độ tia X hay tia gamma ghi nhận được. Thời gian đó càng lâu thì độ chính xác của kết quả và độ phân giải năng lượng càng tốt. Vì vậy nếu mẫu đo có số điểm thấp thì thời gian hình thành xung phải đặt tương đối lớn để có độ phân giải năng lượng tốt hơn (ví dụ: detector Si(Li) hay LEGe thì hằng số hình thành xung  $\sim 12 \mu\text{s}$ , detector HPGe thì hằng số hình thành xung  $\sim 6 \mu\text{s}$ ).



Hình 8.9: Phổ huỳnh quang tia X được kích bởi nguồn Cd-109



Hình 8.10: Phổ gamma ghi nhận bởi detector HPGe sau khi mẫu  
được kích hoạt neutron

Thông thường trong phổ kế huỳnh quang tia X hay tia gamma, đồng hồ của hệ thống thường dùng làm đồng hồ thời gian để thu nhận phổ. Ngay đến cả hệ điện tử nhanh, việc sử lý xung cần lượng thời gian xác định. Ở tốc độ đếm cao thời gian này có ý nghĩa: Khi một xung được ghi nhận và quá trình xử lý ban đầu thực hiện thì đồng hồ dừng cho tới khi hệ thống sẵn sàng xử lý một xung

mới khác. Thời gian đồng hồ tắt gọi là thời gian chết, thời gian đồng hồ mở gọi là thời gian sống. Tổng cộng hai loại thời gian trên là thời gian thực.

Việc xử lý xung tạo thành bởi photon phải được hoàn thiện trước khi một xung khác xuất hiện. Bộ phận điện tử gọi là “thiết bị tràn xung” sẽ nhốt xung mà nó nhận quá sớm. Khi hoạt động, bộ phận điện tử trên có nhiệm vụ ngăn cản xung mới vào bộ xử lý trước khi xung cũ được xử lý xong. Nếu xung chưa được xử lý xong mà bộ phận điện tử để nhốt xung không hoạt động thì hiện tượng tràn phô xảy ra, kết quả có những đỉnh phô giả xuất hiện với năng lượng bằng tổng của năng lượng photon thứ nhất và thứ hai đi vào detector, hiện tượng này thường gọi là *đỉnh tổng*.

Trên hình 8.9 và 8.10 ta thấy phô điện hình của phép phân tích huỳnh quang tia X và phép phân tích kích hoạt neutron. Phô được ghi nhận bởi detector LEGe và HPGe và được xử lí qua máy phân tích đa kênh MCA, cuối cùng trên màn hình máy tính ta thấy các đỉnh năng lượng tia X và tia gamma đặc trưng của nguyên tố hiện diện trong mẫu phân tích.

### 8.3.3.2. Hệ thống số liệu

Trong phô kế huỳnh quang tia X hay tia gamma, hệ thống xử lý số liệu thường là bộ biến đổi tín hiệu tương tự ra tín hiệu số (ADC) sẽ biến đổi tín hiệu từ tiền khuyếch đại thành địa chỉ trong bộ nhớ máy tính.

Biên độ của những địa chỉ này tỉ lệ với chiều cao tín hiệu và nội dung của địa chỉ tăng dần. Nói cách khác, đại chỉ được xác định bởi sự chuẩn năng lượng nghĩa là đồng nhất với năng lượng của photon và số đếm là nội dung của địa chỉ đó. Quá trình biến đổi trên thực hiện nhờ vào “bộ nhớ truy xuất trực tiếp” DMA.

### 8.3.3.3. Máy phân tích biến độ nhiều kênh (MCA)

Máy phân tích biến độ nhiều kênh thường kết hợp với các thiết bị điện tử khác như: detector khi bức xạ hạt nhân, nguồn cao thế nuôi detector, tiền khuyếch đại, khuyếch đại phô, bộ biến đổi tương tự thành số (ADC), thiết bị xử lý, lưu trữ và hiển thị kết quả.

Detector sử dụng cho mục đích phân tích nhiều kênh là loại tuyển tính có độ phân giải cao.

**Biến đổi tương tự thành số:** thực hiện biến đổi biến độ xung thành mã số, kết quả biến đổi được ghi vào thanh ghi.

Để xử lý và lưu trữ số liệu, máy phân tích cần có bộ nhớ được chia thành các ô nhớ. Mỗi ô nhớ tương ứng với một kênh và ô nhớ cần có dung lượng đủ để chứa thông tin sau thời gian đo phô cần thiết.

Khi phân tích một xung có biến độ A, ADC sẽ cho kết quả là một số n, số n này được sử dụng để xác định địa chỉ ô nhớ. Xung kết thúc phân tích của ADC sẽ khởi động chu trình số liệu, chu trình này bắt đầu bằng việc đọc dung lượng đang có của ô nhớ được gọi, sau đó thực hiện thuật toán +1 và ghi dung lượng mới vào ô nhớ được chọn.

Hệ thống thu nhận, lưu trữ và hiển thị kết quả cho máy phân tích đa kênh thường kết hợp với xử lý kết quả. Các xử lý thông thường đối với phô theo năng lượng là trừ phông, xác định vị trí năng lượng đỉnh phô, tính độ phân giải theo năng lượng, tính diện tích đỉnh phô. Vì vậy phần thiết bị này thường được xây dựng trên cơ sở bộ vi xử lý, thiết bị cần có bàn phím nhỏ để điều khiển bộ vi xử lý hoạt động theo các chương trình định sẵn trong bộ nhớ cố định như MCA hiệu Canberr 35, 40.

Các máy phân tích có thể xây dựng trên cơ sở ghép nối với máy tính cá nhân. Cấu hình ghép nối có thể trực tiếp từ ADC hoặc từ bộ nhớ của máy phân tích nhiều kênh qua bộ giao diện với máy tính.

Trong trường hợp ghép trực tiếp ADC với máy tính. ADC được chế tạo như một board điện tử chuyên dụng gắn trên slot ISA của máy tính và điều khiển bằng phần mềm chuyên dụng như

Accuspec chạy trên môi trường DOS hoặc Gennie-2000 chạy trên môi trường Windows của hãng Canberra (Mỹ).

Chu trình đọc kết quả từ ADC vào máy tính có thể kéo dài thời gian chết của thiết bị. Tuy nhiên, ngày nay máy tính với bộ vi xử lý có tốc độ nhanh cỡ 1 – 2 GHz thì chu trình trao đổi thông tin rút ngắn đáng kể.

Việc sử dụng bộ nhớ ngoài có thể giải phóng máy tính khỏi quá trình đo để có thể thực hiện các công việc khác trên máy tính đồng thời với việc thu nhận phô.

Việc ghép nối máy phân tích đa kênh với máy tính cho phép sử dụng các phần mềm chuyên dụng để phục vụ cho việc xử lý phô cũng như phép phân tích định lượng.

## BÀI TẬP CHƯƠNG 8

- 8.1. Tính bước sóng ngắn nhất của tia X phát ra từ bia nếu ống phát hoạt động ở điện áp 10 kV.
- 8.2. Tính công suất cung cấp cho ống phát tia X khi ống phát hoạt động ở điện áp 50 kV và cường độ dòng điện 100 mA.
- 8.3. Trong một ống phát tia X, cường độ dòng đến bia là 1,5 mA và điện áp hoạt động là 10000 V. Tính công suất của ống phát. Có bao nhiêu electron chạm vào bia mỗi giây?
- 8.4. Tính vận tốc electron được gia tốc qua hiệu điện thế 10000 V khi nó đạt tới bia của ống.
- 8.5. Electron được gia tốc qua hiệu điện thế 18 kV. (a) Tính vận tốc của electron nhanh nhất chạm tới bia. (b) Tính bước sóng ngắn nhất của tia X phát ra từ bia.
- 8.6. Một ống tia X hoạt động ở điện áp 10 kV và cường độ dòng điện 15 mA. (a) Tính số electron chạm vào bia mỗi giây. (b) Tính công suất hoạt động của ống. (c) Tính tần số tia X phát ra có năng lượng lớn nhất.
- 8.7. Trong phòng thí nghiệm có 3 nguồn kích: Fe-55 (5,9 keV); Zn-65 (8,05 keV) và Am-241 (59,5 keV). Để phân tích Cr, Cu và Au thi anh (chỉ) lựa chọn nguồn nào cho tốt nhất? Vì sao?
- 8.8. Một ống phát tia X hoạt động tại cao thế 80 kV và cường độ dòng 50 mA. Khi tia X phát ra qua ống nó có diện tích  $10 \text{ mm}^2$ . Hiệu suất của ống là 1%. Xác định cường độ tia X khi đó?
- 8.9. Giả sử cường độ đã cho ở bài 8.8 đo được cách anode 0,01 m. Hỏi cường độ cách ống phát tia X 1,5 m bằng bao nhiêu?
- 8.10. Đặt một tấm nhôm dày 5 mm vào giữa ống phát và detector (cách nhau 1,5m). Hãy xác định cường độ của chùm tia X?
- 8.11. Một ống phát tia X hoạt động với cao thế 100 kV và cường độ dòng 40 mA
- Tính công suất của máy?
  - Có bao nhiêu electron đến anode mỗi giây?
  - Có bao nhiêu photon phát ra mỗi giây? Hiệu suất của ống là 1%.
  - Năng lượng cực đại của photon? Bước sóng?
- 8.12. Hãy cho biết ưu - khuyết điểm đối với từng loại nguồn neutron. Dựa vào phổ neutron của các nguồn neutron hãy chỉ ra nguồn nào phân tích có tính lọc lựa nhất.
- 8.13. Sau khi được gia tốc trong cyclotron, hạt deuteron bắn vào hạt nhân của đồng vị  $\text{Li}^7$  để tạo ra neutron. Hãy xác định:
- Bán kính của deuteron, biết  $r_0 = 1,3 \cdot 10^{-15} \text{ m}$ .
  - Năng lượng liên kết của  $\text{Li}^7$ .
  - Năng lượng tỏa ra trong phản ứng.
  - Tần số của hiệu điện thế xoay chiều đặt vào hai nửa của cyclotron, cho biết cảm ứng từ  $B = 1,26 \text{ T}$ .
- 8.14. Tính năng lượng neutron bay ra khi dùng photon có năng lượng 1,78MeV bắn vào hạt nhân  $\text{Be}^9$  đứng yên. Biết rằng neutron bay ra tạo với photon tới một góc  $60^\circ$  và hệ số hiệu chỉnh góc bằng 0,92.

## Chương 9

### XỬ LÝ PHÔ VÀ ĐÁNH GIÁ PHƯƠNG PHÁP

Trong phân tích huỳnh quang tia X và phân tích kích hoạt neutron, việc xử lý và đánh giá phô đóng một vai trò quan trọng. Dù bằng một phương pháp tối ưu nào đi nữa mà việc xử lý phô không tốt cũng kéo theo kết quả thu được là không chính xác, sai số gấp phải rất lớn. Trong việc xử lý và đánh giá phô, có hai vấn đề cần quan tâm là phông và các đỉnh của bức xạ ghi nhận được.

#### 9.1. SỐ ĐÉM

##### 9.1.1. Đo cường độ bằng cách đếm số xung

Những thông tin định tính từ phô tia X (tia gamma) là năng lượng của tia X (tia gamma) phát ra từ mẫu biểu thị bởi đỉnh phô. Thông tin định lượng là cường độ vạch phô tia X (tia gamma) đặc trưng. Cường độ này thường được diễn tả theo số đếm, ghi nhận được trên phô kê trong đơn vị thời gian. Nếu lặp lại nhiều lần phép đo thì số xung  $N_t$  đếm được trong mỗi lần với một khoảng thời gian t như nhau sẽ không hoàn toàn như nhau, dù ngay cả khi cường độ chùm tia bức xạ thật ổn định. Như vậy, sự bức xạ tia X (tia gamma) là một quá trình ngẫu nhiên. Biến cố này tuân theo phân bố Poisson với độ lệch chuẩn  $\sigma$  của số đếm là:

$$\sigma = \sqrt{N_t} \quad (9.1)$$

trong đó,  $N_t$  là số đếm trong khoảng thời gian  $t$ .

Độ lệch chuẩn tương đối cho bởi phương trình:

$$\frac{\sigma}{N_t} = \frac{1}{\sqrt{N_t}} = \frac{100}{\sqrt{N_t}} (\%) \quad (9.2)$$

Căn cứ phương trình (9.2) ta thấy rằng: để độ chính xác cần thiết của phép đo, là 1% thì phải chọn thời gian  $t$  sao cho số đếm vào khoảng 10000.

Hệ phô kê tối tân có hệ điện tử ổn định để với các lần đo khác nhau cho kết quả độ lệch chuẩn rất nhỏ, gần giá trị lý thuyết. Lưu ý rằng trong mọi trường hợp xê dịch mẫu hay thay mẫu đều dẫn đến gia tăng độ lệch chuẩn.

##### 9.1.2. Số đếm ở kênh đỉnh

Phương pháp đơn giản nhất để rút ra cường độ là đọc từ máy phân tích đa kênh số đếm hiện diện ở trong kênh đỉnh của vạch đặc trưng tương ứng với năng lượng tia X (tia gamma).

##### 9.1.3. Diện tích đỉnh phô

Để tăng độ nhạy (số đếm trên một đơn vị hàm lượng) người ta lấy tổng số đếm của các kênh nằm giữa hai vị trí giới hạn của đỉnh thay vì chỉ lấy số đếm tại một kênh ở ngay đỉnh. Tổng này thường được gọi là diện tích đỉnh. Hệ thống máy phân tích đa kênh đều có phần mềm để tính giá trị này. Đa số các phần mềm đều được tự động tính phông và cho số liệu diện tích đỉnh đã trừ phông.

#### 9.2. KỸ THUẬT LÀM TRON PHÔ

Mục đích làm tron phô là giảm thăng giáng thống kê trong phô ghi nhận được trước khi phân tích định lượng, nhất là đối với các đỉnh yếu gần giới hạn phát hiện.

### 9.2.1. Làm tròn phô ở vùng phông

Đây là miền phô bằng phẳng, nghĩa là trọng hàm đối với các kênh tiếp cận nhau là giống nhau. Điều đó có nghĩa là giá trị đã làm tròn  $y'(x)$  đối với số đếm trong kênh  $x$ , nhận được từ các kênh lân cận như sau

$$y'(x) = \frac{1}{2n+1} \sum_{i=-n}^{+n} y(x+i) \quad (9.3)$$

Ở đây việc làm tròn phô thực hiện trên  $2n+1$  kênh liên tiếp. Nếu các giá trị của  $y(x+i)$  xấp xỉ nhau trên  $2n+1$  kênh này, thì dễ dàng thấy rằng độ lệch chuẩn  $\sigma$  trong số liệu làm tròn được tính theo độ lệch chuẩn  $\sigma$  của số liệu gốc như sau

$$\sigma' = \frac{\sigma}{\sqrt{2n+1}} \quad (9.4)$$

Từ biểu thức trên ta thấy  $\sigma'$  luôn luôn nhỏ hơn  $\sigma$ , do đó kỹ thuật làm tròn phô có thể làm giảm thăng giáng thống kê trong nền phông và dễ dàng nhận thấy được các đỉnh phô bị lẩn trong nền phông gốc.

### 9.2.2. Làm tròn phô ở vùng đỉnh

Nhược điểm của trọng hàm hiện rõ khi làm tròn ở vùng đỉnh. Trong trường hợp này các số đếm kỳ vọng sẽ biến đổi nhanh theo  $x$ . Các số đếm trong các kênh lân cận kênh  $x$  sẽ biểu diễn không hoàn hảo số đếm kỳ vọng trong kênh  $x$ . Gọi  $h(i)$  là giá trị trọng hàm tại kênh  $i$ , ta có

$$y'(x) = \sum_{i=-n}^{+n} h(i)y(x+i) \quad (9.5)$$

Ở đây,  $h(i)$  là hàm xác suất nên phải chuẩn hóa:

$$\sum_{i=-n}^{+n} h(i) = 1 \quad (9.6)$$

và  $h(i)$  tuân theo phân bố nhị thức.

Đối với trường hợp khảo sát, hàm tối ưu có dạng

$$h(i) = \varphi(x - x_0) \quad (9.7)$$

Ở đây,  $\varphi(x - x_0)$  là hàm mô tả dạng đỉnh kỳ vọng, tâm ở kênh  $x_0$ . Nói cách khác, trọng hàm tối ưu có dạng như một đỉnh. Hàm Gauss biểu diễn hoàn hảo dạng đỉnh, nghĩa là

$$f(x) = \frac{A}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{(x - \bar{x})^2}{2\sigma^2}\right) \quad (9.8)$$

Ở đây,  $A$  là diện tích đỉnh,  $\bar{x}$  là tâm đỉnh và  $\sigma$  là độ lệch chuẩn.

Bề rộng toàn phần ở chiều cao phân nửa (FWHM) hay gọi là độ phân giải của đỉnh cho bởi:

$$\Gamma = 2\sqrt{2 \ln 2} \sigma = 2,35\sigma \quad (9.9)$$

Vì phương trình (9.8) là liên tục, nên hàm mô tả dạng phô quan sát được có dạng

$$\varphi(x) = \int_{-\frac{1}{2}}^{\frac{1}{2}} f(x) dx \quad (9.10)$$

Việc làm tròn định phô bằng dạng Gauss cho kết quả phù hợp nhất.

### 9.3. KỸ THUẬT LÀM KHỚP PHÔ

Trong hầu hết các mẫu phân tích bằng phô kể huỳnh quang tia X (tia gamma) đều có hiện tượng phủ lèn nhau giữa vạch đặc trưng của nguyên tố phân tích với các vạch phô của những nguyên tố khác trong mẫu. Khi có trường hợp này, kỹ thuật làm khớp phô với chương trình máy tính được áp dụng để lấy ra số liệu định lượng cho mỗi nguyên tố trong mẫu. Phẩm chất của kỹ thuật làm khớp phô được thông báo bởi hệ số  $\chi^2$  (chi - bình - phương). Hệ số này bằng không đối với việc làm khớp phô lý tưởng.

Định của phô huỳnh quang tia X (tia gamma) được diễn tả bởi ba tham số: cường độ (I), vị trí (E), và độ rộng (R). Vị trí của định được xác định bởi năng lượng tia X (tia gamma) đặc trưng tương ứng. Độ rộng của định được xác định bởi độ phân giải năng lượng. Cường độ của định được xác định bởi hàm lượng của nguyên tố cần phân tích, thành phần chất nền của mẫu và các tham số dụng cụ. Định phô có dạng phân bố Gauss.

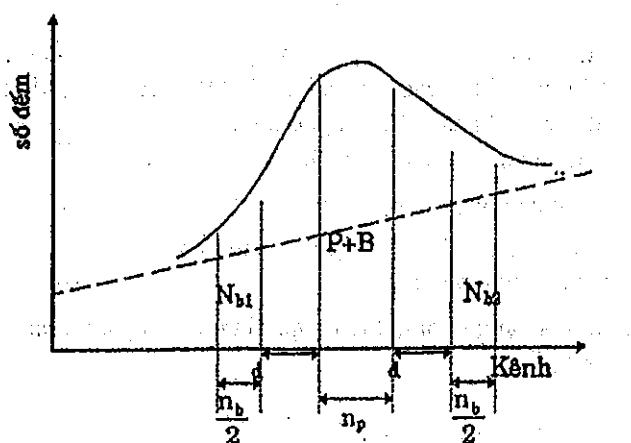
#### 9.3.1. Xử lý phông

Phô huỳnh quang tia X (tia gamma) luôn luôn chứa phông. Phông rất khó loại trừ, vì có sự đóng góp của quá trình tán xạ tia X (tia gamma) từ mẫu. Đa số phông là do tán xạ của phô liên tục (phô bức xạ hâm) và các bức xạ đặc trưng của phô nguồn. Có nhiều phương pháp loại trừ phông:

(1) Về nguyên tắc, phông có thể tính từ tham số cơ bản của tán xạ; tuy nhiên điều này đòi hỏi phải biết chính xác thành phần của mẫu.

(2) Dùng phô trắng không chứa nguyên tố quan tâm nhưng có chất nền giống như mẫu phân tích để trừ phông. Thường điều này khó thực hiện vì dạng phô phông thay đổi theo điều kiện kích thích và thành phần của mẫu.

(3) Phương pháp nội suy tuyến tính. Trong phương pháp này ta dùng diện tích các phần phông hai bên định quan tâm để nội suy phông ở vùng định theo quy tắc hình thang như sau:



Hình 9.1: Minh họa phương pháp nội suy phông tuyến tính

Gọi  $n_p$  là số kênh ở vùng định quan tâm (đối xứng quanh tâm định),  $N_t$  là diện tích trong  $n_p$  kênh này. Ta có

$$N_t = P + B \quad (9.11)$$

trong đó,  $P$  là diện tích của phần định,  $B$  là diện tích của phần phông.

Để tính B ta chọn hai vùng phông ở hai phía của đỉnh như trong hình 9.1, mỗi vùng có ( $n_b/2$ ) kênh tính từ đỉnh về hai phía chân đỉnh, với diện tích tương ứng là  $N_{b1}$  và  $N_{b2}$ . Diện tích phần phông được xác định như sau

$$B = \frac{n_p}{n_b} (N_{b1} + N_{b2}) \quad (9.12)$$

Vậy diện tích phần đỉnh là

$$P = N_t - B = N_t - \frac{n_p}{n_b} (N_{b1} + N_{b2}) \quad (9.13)$$

Sai số thống kê kỳ vọng của B là

$$\sigma_B = \frac{n_p}{n_b} (N_{b1} + N_{b2})^{\frac{1}{2}} \quad (9.14)$$

Sai số thống kê kỳ vọng của P là

$$\sigma_P = \sqrt{N_t + \left(\frac{n_p}{n_b}\right)^2 (N_{b1} + N_{b2})} = \sqrt{P + B \left(1 + \frac{n_p}{n_b}\right)} \quad (9.15)$$

Do đó sai số tương ứng của P là

$$\frac{\sigma_P}{P} = \sqrt{\frac{P + B \left(1 + \frac{n_p}{n_b}\right)}{P}} = \frac{1}{\sqrt{P}} \sqrt{1 + \frac{B}{P} \left(1 + \frac{n_p}{n_b}\right)} \quad (9.16)$$

Sai số thống kê có thể được cực tiểu bằng cách chọn  $n_b >> n_p$ , ở đó tồn tại các vùng phông thích hợp.

Nếu  $P \gg B$ , thì sai số do phông đóng góp là không đáng kể và số kênh vùng đỉnh nên chọn là  $n_p \approx 2\Gamma$  ( $\Gamma$  là bệ rộng ở phân nửa chiều cao cực đại, FWHM). Ngược lại, khi số đếm ở kênh đỉnh gần giới hạn phát hiện của detector thì sai số thống kê do phông là chủ yếu và ta nên chọn  $n_p \approx 1,17\Gamma$ . Chú ý rằng  $n_p \gg \Gamma$  sẽ làm độ nhạy của hệ đo kém đi.

(4) Trường hợp đỉnh nằm gần đuôi Compton hay gần đỉnh nguồn:

Trong trường hợp này đường phông không thể xem là tuyến tính. Người ta dùng phương pháp bình phương tối thiểu để làm khớp phông.

Giả sử  $g(x)$  là hàm mô tả dạng phông thích hợp. Phương pháp bình phương tối thiểu đòi hỏi cực tiểu giá trị "chi-bình-phương"

$$\chi^2 = \sum_i \frac{1}{\sigma_i^2} (y_i - g(x_i))^2 = \sum_i \frac{(y_i - g(x_i))^2}{y_i} \quad (9.17)$$

$$\text{Thí dụ } g(x) \text{ có dạng: } g(x) = \sum_{j=0}^n a_j f_j(x) \quad (9.18)$$

thì  $\chi^2$  đạt giá trị cực tiểu khi

$$\frac{\partial \chi^2}{\partial a_j} = 0, j = 1, 2, 3, \dots, n \quad (9.19)$$

Căn cứ điều kiện cực tiêu này ta tính được các hệ số  $a_j$ , nghĩa là ta có được hàm mô tả dạng phông xác định. Từ đó có thể loại trừ sự đóng góp của phông trong vùng định  $N$ .

Việc lựa chọn hàm  $g(x)$  quyết định việc mô tả đúng hay không đúng dạng phông thực tế. Thường thường ta lựa chọn dạng phông như sau:

- Dạng tuyến tính: được dùng khi vùng khảo sát rộng cỡ vài keV. Đây là dạng đơn giản nhất và nhanh nhất.

- Dạng hàm mũ: nếu vùng phổ cần làm khớp rộng ( $> 5\text{keV}$ ), dạng phông thực tế dốc nên dạng tuyến tính không thích hợp ta chọn dạng hàm mũ.

- Dạng bức xạ hâm: dạng phông này thường dùng đối với phổ PIXE (Particle Induced X-ray Emission), nhưng về nguyên tắc được dùng bất cứ khi nào mà phông chủ yếu là do bức xạ phát ra từ nguồn kích đóng góp, thí dụ mẫu được kích thích trực tiếp bởi ống phát tia X.

Ưu điểm của kỹ thuật làm khớp bằng phương pháp bình phương tối thiểu là biểu thị giá trị có thể có nhiều nhất đối với phông, với điều kiện:

- (1) Hàm tổng quát mô tả đúng dạng phông thực tế.

- (2) Số liệu được phân bố quanh giá trị kỳ vọng theo dạng phân bố chuẩn “bình thường” hay dạng Gauss.

Điều kiện thứ hai có hiệu lực khi  $y_i > 10$ , bởi vì phân bố Poisson mô tả tính thống kê của số đếm và tiến tới phân bố chuẩn “bình thường” khi số đếm lớn. Để kiểm tra việc hai điều kiện nêu trên có được thỏa mãn hay không, ta so sánh  $\chi^2$  có được với giá trị kỳ vọng của nó. Các giá trị cao hoặc thấp không bình thường chứng tỏ một trong hai điều kiện nêu trên không được thỏa, thường là do việc lựa chọn hàm  $g(x)$  không đúng. Thông thường có thể làm khớp phông với đa thức bậc nhất hoặc bậc hai, đôi khi bậc ba nếu cần thiết. Không dùng các bậc cao hơn.

### 9.3.2. Xử lý đỉnh

Nếu một đỉnh nằm riêng lẻ, việc tính số đếm trong một đỉnh không có gì khó khăn và được tiến hành như đã nói ở trên. Tuy nhiên nếu hai đỉnh chập vào nhau thì việc xử lý sẽ phức tạp hơn. Việc đầu tiên phải làm là nhận ra đỉnh chập, một trong các cách để nhận ra đỉnh chập là độ rộng phân nửa của đỉnh chập lớn hơn nhiều độ phân giải của hệ máy. Sau đây là một số phương pháp khác xử lý đỉnh chập:

#### a) Phương pháp bóc vỏ.

Nếu hai đỉnh chập vào nhau, ta cần phải kết hợp nhiều việc như xử lý phông, xử lý các đỉnh đơn không bị chập, tra các bảng về tỉ lệ cường độ của các đỉnh trong dãy phổ đặc trưng một nguyên tố. Từ đó mới tính được diện tích trung thực của đỉnh tham gia trong một đỉnh chập.

Thí dụ đỉnh chập tạo bởi một đỉnh đặc trưng của nguyên tố A và một đỉnh đặc trưng của nguyên tố B. Gọi  $k$  là hệ số tỉ lệ cường độ của hai đỉnh phổ đặc trưng nguyên tố A, trong đó có một đỉnh tham gia đỉnh chập, ta có

$$k = \frac{N_{1A}}{N_{1B}} \quad (9.20)$$

trong đó,  $N_{1A}$  là diện tích (đã trừ phông) của đỉnh đơn ứng với nguyên tố A,  $N_{2A}$  là diện tích (đã trừ phông) của đỉnh thứ hai ứng với nguyên tố A, tham gia vào đỉnh chập.

Vậy diện tích  $N_B$  ứng với nguyên tố B, tham gia vào đỉnh chập là

$$N_B = N - N_{2A} = N - \frac{N_{1A}}{k} \quad (9.21)$$

với,  $N$  là diện tích đỉnh chập (đã trừ phông).

Hệ số  $k$  có thể xác định bằng thực nghiệm như sau: đo mẫu chỉ chứa một nguyên tố phân tích (nguyên tố A) có khả năng tạo đỉnh chập. Khi đó

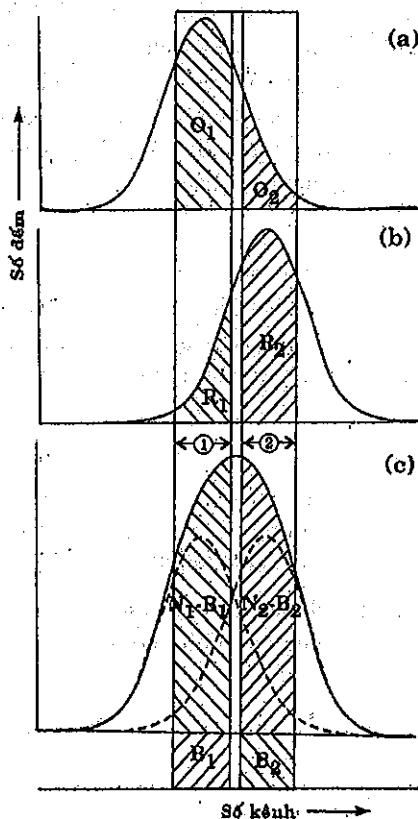
$$k = \frac{N'_{1A}}{N'_{2A}} \quad (9.22)$$

với,  $N'_{1A}$ ,  $N'_{2A}$  là diện tích các đỉnh tương ứng trong phô của mẫu tinh khiết này.

Lần lượt thực hiện cho mọi miền phô để xử lý các đỉnh chập còn lại. Về nguyên tắc, phương pháp này áp dụng được cho mọi phô chập. Nhưng nhược điểm là thực hiện lâu và đòi hỏi phô kẽ có độ ô định cao.

#### b) Phương pháp xác định trước các tham số đỉnh thành phần

Trong phương pháp này, để tách đỉnh chập ta phải ghi phô của từng nguyên tố tham gia vào phô chập, gọi là phô tham khảo. Phô tham khảo được tích lũy với thời gian đủ để sai số thống kê của các tham số thành phần đo được là không đáng kể.



Hình 9.2: Minh họa phương pháp tính trước các tham số thành phần

Hình 9.2 minh họa phương pháp này, thí dụ đỉnh chập được tạo thành từ một đỉnh của nguyên tố Q và một cửa đỉnh của nguyên tố R.

Trong phô tham khảo thức nhất (hình 9.2a),  $Q_1$  và  $Q_2$  là các phần diện tích đã trừ phông của đỉnh Q ở trong vùng 1 và vùng 2.

Trong phô tham khảo thức hai (hình 9.2b),  $R_1$  và  $R_2$  là các phần diện tích đã trừ phông của đỉnh R ở trong vùng 1 và vùng 2.

Các tham số thành phần được định nghĩa như sau

$$q = \frac{Q_2}{Q_1} \quad r = \frac{R_1}{R_2} \quad (9.23)$$

Trong phô chập (hình 9.2c), các phần diện tích  $N_1$  và  $N_2$  của đỉnh chập ở trong vùng 1 và 2 được xác định như sau

$$\begin{aligned} N_1 &= Q_1 + B_1 + rR_2 = R_1 + B_1 + Q_2 / q \\ N_2 &= R_2 + B_2 + qQ_1 = Q_2 + B_2 + R_1 / r \end{aligned} \quad (9.24)$$

Giải hệ phương trình trên, ta có:

$$\begin{aligned} Q_1 &= \frac{N_1 - B_1 - r(N_2 - B_2)}{1 - qr} \\ Q_2 &= \frac{N_2 - B_2 - \frac{1}{r}(N_1 - B_1)}{1 - \frac{1}{qr}} \\ R_2 &= \frac{N_2 - B_2 - q(N_1 - B_1)}{1 - qr} \end{aligned} \quad (9.26)$$

Như vậy đỉnh chập có thể được tách riêng bằng cách dùng các phô tham khảo để xác định trước các tham số thành phần  $q$  và  $r$ . Sau đó trong phô phân tích ta phân diện tích đỉnh chập thành hai phần  $N_1$  và  $N_2$ . Xác định các diện tích  $N_1$ ,  $N_2$  và các thành phần phông tương ứng  $B_1$ ,  $B_2$ . Từ các phương trình (9.25) và (9.26) ta tính được các diện tích  $Q_1$ ,  $Q_2$ ,  $R_1$ ,  $R_2$ .

Sai số thống kê trong diện tích  $Q_1$ ,  $Q_2$ ,  $R_1$ ,  $R_2$  được tính như sau

$$\begin{aligned} \sigma_{Q_1} &= \sqrt{\frac{N_1 + \sigma_{B_1}^2 + (N_2 + \sigma_{B_2}^2)}{1 - qr}} \\ \sigma_{Q_2} &= \sqrt{\frac{N_2 + \sigma_{B_2}^2 + \frac{1}{r^2}(N_1 + \sigma_{B_1}^2)}{1 - \frac{1}{qr}}} \\ \sigma_{R_1} &= \sqrt{\frac{N_1 + \sigma_{B_1}^2 + \frac{1}{q^2}(N_2 + \sigma_{B_2}^2)}{1 - \frac{1}{qr}}} \end{aligned} \quad (9.27)$$

$$\sigma_{R_2} = \sqrt{\frac{N_2 + \sigma_{B_2}^2 + q^2(N_1 + \sigma_{B_1}^2)}{1 - qr}} \quad (9.28)$$

Trong đó sai số của  $q$  và  $r$  được xem là không đáng kể. Đóng góp do phông sẽ tùy vào phương pháp ước lượng phông, nhưng nói chung sẽ rơi vào giữa giới hạn sau

$$\sigma < \sigma_{B_1}^2 < B_1 \text{ và } \sigma < \sigma_{B_2}^2 < B_2$$

Xét trường hợp  $R_2 \gg Q_1$ , nghĩa là định  $R$  lớn hơn định  $Q$  rất nhiều. Để đơn giản ta giả sử rằng  $\sigma_{B_1} = \sigma_{B_2} = 0$ , sai số để đánh giá định  $Q$  là

$$\sigma_{Q_1} = \frac{\sqrt{(Q_1 + rQ_2 + B_1) + r^2(R_2 - qQ_1 + B_2)}}{1 - qr} \quad (9.29)$$

Bởi vì  $q$  và  $r$  đều nhỏ hơn 1,  $B_1 \approx B_2$ ,  $Q_1 \gg R_2$ , các biểu thức trên có dạng đơn giản sau

$$\sigma_{Q_1} \approx \frac{\sqrt{Q_1 + rQ_2 + B_1}}{1 - qr} \quad (9.30)$$

Từ phương trình (9.30) ta thấy rằng định mạnh đóng góp đáng kể vào sai số thống kê trong việc xác định diện tích định yếu. Thực vậy nếu  $rR_2$  lớn so với  $Q_1 + B_1$ , sai số thống kê trong định yếu hầu như do bởi định mạnh. Đây là giới hạn chủ yếu trong phép đo định yếu với sự hiện diện của định nhiễu có cường độ lớn và là cơ sở của tất cả các phương pháp tách định nhiễu.

### c) *Làm khớp phổ bằng phương pháp bình phương tối thiểu*

Khi dạng định được mô tả chính xác, kỹ thuật khớp phổ bằng phương pháp bình phương tối thiểu cung cấp phép đo chính xác cường độ định thành phần đối với các định chập.

#### *Làm khớp phổ bằng phương pháp bình phương tối thiểu tuyến tính:*

Xét vùng phổ có chứa phông và n định chập, sử dụng hàm làm khớp phổ có dạng:

$$g(x) = f_0(x) + \sum_{j=0}^n F_j(x) \quad (9.31)$$

Trong đó  $f_0(x)$  là hàm mô tả dạng phông,  $F_j(x)$  là hàm mô tả dạng định thứ  $j$ .

Để đơn giản ta giả sử định phổ có dạng Gauss, nghĩa là

$$F_j(x) = \frac{A_j}{\sigma_j \sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{(x - \bar{x}_j)^2}{2\sigma_j^2}\right) \quad (9.32)$$

Với diện tích định là  $A_j$ , tâm định ở  $\bar{x}_j$ , bề rộng toàn phần ở chiều cao phân nửa là

$$\Gamma_j = 2\sqrt{2 \ln 2} \sigma_j k \quad (9.33)$$

Ở đây,  $k$  là kích thước kênh (số electron-volt trong một kênh), nghĩa là  $k = dE/dx$ ,  $\Gamma_j$  có đơn vị là electron-volt, và  $\sigma_j$  có đơn vị là "kênh". Nếu mỗi định chập được xác định thì tâm chính xác của nó có thể tra từ bảng năng lượng đặc trưng.

Dạng điển hình của hàm phông là dạng tuyến tính bậc hai, nghĩa là

$$f_0(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 \quad (9.34)$$

Từ đó hàm dùng để làm khớp phổ có dạng

$$g(x) = \sum_k a_k f_k(x) \quad (9.35)$$

Ở đây,  $f_k(x)$  là hàm đã xác định trước và  $a_k$  là các tham số được xác định từ việc tối ưu hóa bài toán làm khớp phô, nghĩa là:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \chi^2}{\partial a_0} &= 0; & \frac{\partial \chi^2}{\partial a_1} &= 0; & \frac{\partial \chi^2}{\partial a_2} &= 0 \\ \frac{\partial \chi^2}{\partial A_j} &= 0, & j &= 1, 2, 3, \dots, n \end{aligned} \quad (9.36)$$

Giải hệ phương trình này ta tìm được các giá trị  $a_0, a_1, a_2$  và  $A_1, A_2, \dots, A_n$  và do đó hàm  $g(x)$  được xác định.

Để kiểm định xem việc làm khớp phô có tốt không, người ta tính  $\chi^2$  từ công thức (9.17), với hàm  $g(x)$  đã chọn. Giá trị bắt thường của  $\chi^2$  sẽ cho thấy hàm  $g(x)$  được lựa chọn để làm khớp là không thích hợp, hoặc dữ liệu không tuân theo quy luật phân phối chuẩn.

*Làm khớp phô bằng phương pháp bình phương tối thiểu phi tuyến:*

Trong trường hợp ta không biết vị trí  $\bar{x}_j$  của đỉnh chập, thì trong hệ phương trình (9.37) ta cần bổ sung thêm các phương trình của tham số  $\bar{x}_j$ .

$$\frac{\partial \chi^2}{\partial \bar{x}_j} = 0 \quad j = 1, 2, 3, \dots, n \quad (9.37)$$

Vì  $\bar{x}_j$  nằm trong trong hàm mũ, phương trình (9.32) là phi tuyến, do đó phải giải chúng bằng phương pháp lặp. Đôi khi  $\sigma_j$  chưa biết và được coi như tham số độc lập thì bài toán làm khớp phô trở nên phức tạp hơn.

## 9.4. ĐÁNH GIÁ PHƯƠNG PHÁP PHÂN TÍCH

### 9.4.1. Đánh giá tính lặp lại của phương pháp

Tính lặp lại đặc trưng bởi độ phân tán kết quả so với giá trị trung bình  $\bar{x}$ , nó được xác định bởi nhiều sai số ngẫu nhiên gây ra từ những nguyên nhân không kiểm tra được. Tính lặp lại của kết quả phân tích đặc trưng bởi phương sai có chọn lọc  $s^2$  hay độ lệch chuẩn  $s$ .

- Xác định  $s^2$  bằng cách phân tích một mẫu nhiều lần:

$$s^2 = \frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2}{n-1} \quad (9.38)$$

trong đó,  $x_i$  là hàm lượng nguyên tố đo được trong mẫu lần thứ  $i$ ,  $\bar{x}$  là trị trung bình của  $n$  lần đo, ( $n-1$ ) là số bậc tự do đối với đặc trưng thống kê đã cho.

- Để nhận được thông tin đầy đủ hơn, tiến hành phân tích một nhóm trong mẫu (gồm  $m$  mẫu), mỗi mẫu được đo nhiều lần.

$$s^2 = \frac{\sum_{j=1}^m \sum_{i=1}^n (x_{ji} - \bar{x}_j)^2}{\sum_{j=1}^m n_j - m} \quad (9.39)$$

trong đó,  $x_{ji}$  là giá trị hàm lượng đo lần thứ i trong mẫu thứ j,  $\bar{x}_j$  là trị trung bình của hàm lượng trong mẫu thứ j,  $n_j$  là số lần đo liên tiếp của tất cả các mẫu là giống nhau, thì phương trình (9.39) trở thành:

$$s^2 = \frac{\sum_{j=1}^m \sum_{i=1}^{n_j} (x_{ji} - \bar{x}_j)^2}{m(n-1)} \quad (9.40)$$

Thực ra  $s^2$  này chỉ dùng để đánh giá hàm lượng giới hạn nguyên tố cần đo trong mẫu (vì các mẫu được lấy từ một mẫu chung,  $s^2$  của chúng là đồng nhất).

- Nếu trị trung bình của hàm lượng thay đổi ít hơn năm lần thì đối với phương pháp phân tích huỳnh quang tia X, các phương sai  $s_1^2, s_2^2, s_3^2, \dots, s_m^2$ , có thể xem là đồng nhất.

- Ngược lại là không đồng nhất, khi đó để đánh giá tính lặp lại của kết quả phân tích, mẫu có thể được phân chia thành những nhóm riêng đặc trưng bởi giới hạn thấp hơn của hàm lượng nguyên tố cần đo, và đối với từng nhóm ta tính  $s^2$  riêng.

- Để có thể tin cậy động lặp lại của phương pháp, số lần đo cần phải tăng lên.

Để kiểm định tính chính xác thống kê của một phương pháp nào đó, người ta dùng phép kiểm định U hoặc phép kiểm định T. Đo n lần (trong các điều kiện giống hệt nhau) một mẫu đối chứng mà ta biết trước chính xác giá trị  $\mu$  của hàm lượng nguyên tố cần phân tích. Bằng phương pháp đã chọn ta xác định các giá trị hàm lượng w tương ứng với n lần đo này. So sánh giá trị trung bình w với giá trị chính xác  $\mu$  trên quan điểm thống kê, nghĩa là kiểm định các kết quả cho bởi phương pháp đã chọn đạt độ tin cậy là bao nhiêu.

Hàm thống kê có dạng:

$$T = \frac{w - \mu}{\frac{s}{\sqrt{n}}} \quad (9.41)$$

trong đó, s là độ lệch chuẩn từ mẫu, ( $s^2$  là phương sai từ mẫu).

Tùy theo số lần lặp lại phép đo mà ta chọn phép kiểm định U hay phép kiểm định T để xác định độ tin cậy của phương pháp:

a) Nếu số lần lặp lại  $n > 30$ , thống kê tương ứng là

$$U = \frac{(w - \mu)}{\frac{s}{\sqrt{n}}} \sim N(\mu, \sigma^2) \quad (9.42)$$

ở đây, N là hàm phân phối chuẩn “bình thường” (normal), hay phân phối Gauss.

Phép kiểm định trường hợp này gọi là phép kiểm U.

b) Nếu số lần lặp lại  $n < 30$ , thống kê tương ứng là

$$T = \frac{(w - \mu)}{\frac{s}{\sqrt{n}}} \sim St(n-1) \quad (9.43)$$

trong đó, St là hàm phân phối Student.

Phép kiểm định trường hợp này gọi là phép kiểm T.

Sau đó đưa vào bảng giá trị của phân phối Gauss (đối với trường hợp dùng phép kiểm U) hay bảng giá trị của phân phối Student (đối với trường hợp dùng phép kiểm T) để xác định ngưỡng  $C_\alpha$  tương ứng với giá trị  $\alpha$  chọn theo yêu cầu kiểm định ( $\alpha = 0,05; 0,01; 0,001$ ). So sánh giá trị của T với  $C_\alpha$ , nếu  $T < C_\alpha$  thì ta có thể kết luận phương pháp đã chọn có độ tin cậy là  $(1 - \alpha)$ .

#### 9.4.2. Đánh giá độ nhạy của phương pháp

Để đánh giá độ nhạy của phương pháp, ta dùng ba khái niệm.

##### a) Hệ số nhạy

Hệ số nhạy D đặc trưng số đo tín hiệu phân tích  $\Delta I$  (trong phân tích huỳnh quang cường độ vạch phô là tín hiệu) trên đơn vị hàm lượng  $\Delta w$ :

$$D = \frac{\Delta I}{\Delta w} \quad (9.44)$$

Hệ số nhạy D xác định dạng đồ thị phân tích.

##### b) Giới hạn xác định

Giới hạn xác định ký hiệu  $w_{xd}$  là giá trị hàm lượng cực tiểu trong mẫu mà ta có thể xác định theo phương pháp đã làm, với độ lặp lại cho trước. Để xây dựng đường cong giới hạn xác định, ta sử dụng một nhóm mẫu có hàm lượng nguyên tố A khác nhau:  $w_1, w_2, w_3, \dots, w_j, \dots, w_n$ . Mỗi mẫu được phân tích độc lập nhau n lần, tính độ lệch chuẩn  $S_j$  đặc trưng độ lặp lại của giá trị hàm lượng. Vẽ đồ thị mà trục tung là  $S_j$  và trục hoành là hàm lượng  $w_j$  của nguyên tố A.

##### c) Giới hạn phát hiện

Giới hạn phát hiện  $w_{ph}$  là hàm lượng cực tiểu của nguyên tố mà ta có thể phát hiện nó trong mẫu bằng phương pháp quan sát với độ tin cậy cho trước

$$w_{ph} = \frac{K\sigma_s}{D_{(w \rightarrow 0)}} \quad (9.45)$$

trong đó,  $\sigma_s$  là độ lệch chuẩn, đặc trưng tính lặp lại của phép đo tín hiệu từ mẫu,  $D_{(w \rightarrow 0)}$  là hệ số nhạy của giá trị hàm lượng gần giá trị  $w_{ph}$ .

Nếu đồ thị phân tích đi qua gốc tọa độ thì

$$w_{ph} = \frac{K\sigma_s}{I_0} w_0 \quad (9.46)$$

với,  $I_0$  là cường độ vạch phân tích của mẫu đối chiếu có hàm lượng  $w_0$ .

### BÀI TẬP CHƯƠNG 9

9.1. Diện tích một đinh phô huỳnh quang đo được là 12500 số đếm. Tính sai số tương đối và tuyệt đối?

9.2. Sự phân bố số đếm trong vùng phông của một máy phân tích đa kênh cho ở bảng:

Kênh	10	11	12	13	14	15
Số đếm	25	32	12	45	23	26

Hãy làm tròn số đếm trong vùng phông này. Biết số kênh làm tròn là 3.

9.3. Chứng minh rằng diện tích phần phông trong một đinh phô cho bởi:

$$B = \frac{n_p}{n_b} (N_{b1} + N_{b2})$$

(Các kí hiệu xem phần giáo trình)

9.4. Trên nền phô huỳnh quang tia X của một mẫu chứa hai nguyên tố V và Cr ta thấy có sự chồng chập giữa vạch  $K\beta$  của V với vạch  $K\alpha$  của Cr. Để xác định thành phần riêng lẻ của hai vạch này ta dùng mẫu chỉ chứa Cr và kết quả thu được số đếm của vạch  $K\alpha$  = 12000 và số đếm của vạch  $K\beta$  = 5280. Xác định số đếm vạch  $K\beta$  của V và vạch  $K\alpha$  của Cr trong mẫu trên. Biết số đếm tổng tại đinh chập này là 18650 và tất cả phép đo đã trừ phông.

9.5. Xác định thời gian kích mẫu để ta nhận được sai số thống kê là 1%. Biết rằng mỗi giây máy ghi 10 số đếm.

9.6. Trong việc khảo sát độ nhạy và giới hạn phát hiện của hệ phân tích XRF của các nguyên tố Cu, Ni, Co và Fe trong dầu động cơ, ta tiến hành đo đặc 5 mẫu đã biết hàm lượng các nguyên tố, thời gian đo 10 giây cho mỗi mẫu. Kết quả thu được ở các bảng dưới đây:

Cường độ vạch  $K\alpha$ -Cu trong dầu động cơ

Hàm lượng Cu (%)	Đinh $I_{K\alpha}$ -Cu (c/s)	Phông $I_{K\alpha}$ -Cu (c/s)	Đinh thực $I_{K\alpha}$ -Cu (c/s)
1	1660	110	1490
2	2680	150	2530
3	5000	220	4780
4	7800	300	7500
5	12300	420	11180

Cường độ vạch  $K\alpha$ -Ni trong dầu động cơ

Hàm lượng Ni (%)	Đinh $I_{K\alpha}$ -Ni (c/s)	Phông $I_{K\alpha}$ -Ni (c/s)	Đinh thực $I_{K\alpha}$ -Ni (c/s)
1	1500	100	1400
2	2500	140	2360
3	4600	190	4410
4	6900	240	6660
5	10500	320	10180

*Cường độ vạch K<sub>α</sub>-Co trong dầu động cơ*

Hàm lượng Co (%)	Định I <sub>K<sub>α</sub></sub> -Co (c/s)	Phông I <sub>K<sub>α</sub></sub> -Co (c/s)	Định thực I <sub>K<sub>α</sub></sub> -Co (c/s)
1	1400	90	1310
2	2300	130	2170
3	4100	180	3910
4	6300	220	6080
5	9200	300	8900

*Cường độ vạch K<sub>α</sub>-Fe trong dầu động cơ*

Hàm lượng Fe (%)	Định I <sub>K<sub>α</sub></sub> -Fe (c/s)	Phông I <sub>K<sub>α</sub></sub> -Fe (c/s)	Định thực I <sub>K<sub>α</sub></sub> -Fe (c/s)
1	1310	80	1230
2	2000	110	1890
3	3600	150	3450
4	5600	200	5400
5	8200	270	7930

- a) Xác định độ nhạy trung bình của các nguyên tố Cu, Ni, Co và Fe trong dầu
- b) Vẽ đồ thị và tìm mối liên hệ giữa độ nhạy và bậc số nguyên tử Z
- c) Xác định giới hạn phát hiện của các nguyên tố Cu, Ni, Co và Fe trong dầu
- d) Vẽ đồ thị và tìm mối liên hệ giữa giới hạn phát hiện và bậc số nguyên tử Z

## Chương 10

# CÁC VẤN ĐỀ SAI SỐ TRONG PHÂN TÍCH

### 10.1. SAI SỐ HỆ THỐNG

Trong phép phân tích kích hoạt dùng phương pháp chuẩn hóa tương đối đôi khi ta phạm phải sai số do sự khác nhau về tính chất hạt nhân giữa mẫu phân tích và mẫu chuẩn. Sau đây ta sẽ tìm hiểu về các loại sai số này.

#### 10.1.1. Độ phô cập đồng vị dị thường

Thode xác định được rằng, độ phô cập đồng vị của boron (B) trong các mẫu có nguồn gốc khác nhau sẽ chênh lệch vào cỡ 3-4%. Điều này xem như một yếu tố quan trọng khi dùng nguyên tố boron làm chuẩn để xác định tiết diện bắt neutron.

Thode cũng thực hiện các phép đo sunfua từ các mẫu khác nhau (pyrite, sunfat tự nhiên,...) và cũng cho thấy sự khác nhau cỡ 4% theo tỉ lệ  $^{32}\text{S}/^{33}\text{S}$  và 8% trong  $^{32}\text{S}/^{34}\text{S}$ .

Sautin đã tìm thấy rằng độ phô cập đồng vị  $^{152}\text{Gd}$  trong chuẩn gadolinium khác với  $^{152}\text{Gd}$  trong chuẩn didymium, sự khác nhau này rất quan trọng nếu chúng ta phân tích kích hoạt dựa vào  $^{152}\text{Gd}$  có độ phô cập tự nhiên là 0,2%. Qua khảo sát người ta thấy rằng, nếu phân tích Gd trong mẫu dựa vào đồng vị  $^{152}\text{Gd}$  thì sẽ sai số vào cỡ 50% so với phép phân tích dựa vào đồng vị  $^{159}\text{Gd}$ .

#### 10.1.2. Sai số do thông lượng khác nhau trong mẫu và chuẩn

Nguồn sai số này chủ yếu là do chuẩn và mẫu không nhận được cùng thông lượng neutron, nghĩa là  $\phi(S) \neq \phi(X)$ . Sự biến đổi thông lượng neutron phụ thuộc các các yếu tố sau:

- Sự biến đổi thông lượng neutron theo thời gian. Để tránh sự khác nhau này, chuẩn và mẫu phải được chiếu đồng thời để cho việc chuẩn hóa tất cả phép chiếu xạ có thông lượng như nhau trong cả mẫu và chuẩn. Dĩ nhiên sự biến đổi theo thời gian đối với nguồn đồng vị có đời sống dài, đặc biệt là lò phản ứng sẽ không ảnh hưởng đến sự khác biệt về thông lượng giữa mẫu và chuẩn.
- Một điều quan trọng khác là sự biến đổi thông lượng theo vị trí chiếu xạ. Để tránh sự khác biệt này, chuẩn và mẫu phải được chiếu đồng thời trong cùng một vị trí chiếu. Trong lò phản ứng với tâm lò lớn, thông lượng neutron thay đổi nhỏ theo khoảng cách (cỡ 0,5%/cm), điều đó đảm bảo rằng thông lượng đến mẫu và chuẩn như nhau (sai số < 2%). Tuy nhiên, càng gần chất phản xạ (tỉ lệ cadmium cao nhất) thông lượng có thể thay đổi 2-3%/cm. Vì thế, mẫu và chuẩn cần được đặt càng gần càng tốt.
- Một hệ số khác có thể gây ra sự thay đổi thông lượng bên trong vị trí chiếu xạ là sự suy giảm neutron do các nguyên liệu gói mẫu khác nhau. Để tránh sự khác nhau này, dĩ nhiên ta chọn vật liệu gói mẫu và chuẩn phải giống nhau.
- Sự suy giảm thông lượng neutron trong mẫu hay chuẩn có kích thước lớn, hoạt độ bên trong kém hơn bên ngoài. Rõ ràng hoạt độ riêng sẽ giảm nếu kích thước mẫu tăng.

Một vài hiệu ứng gây ra  $\phi(S) \neq \phi(X)$  được minh họa ở hình 10.1.

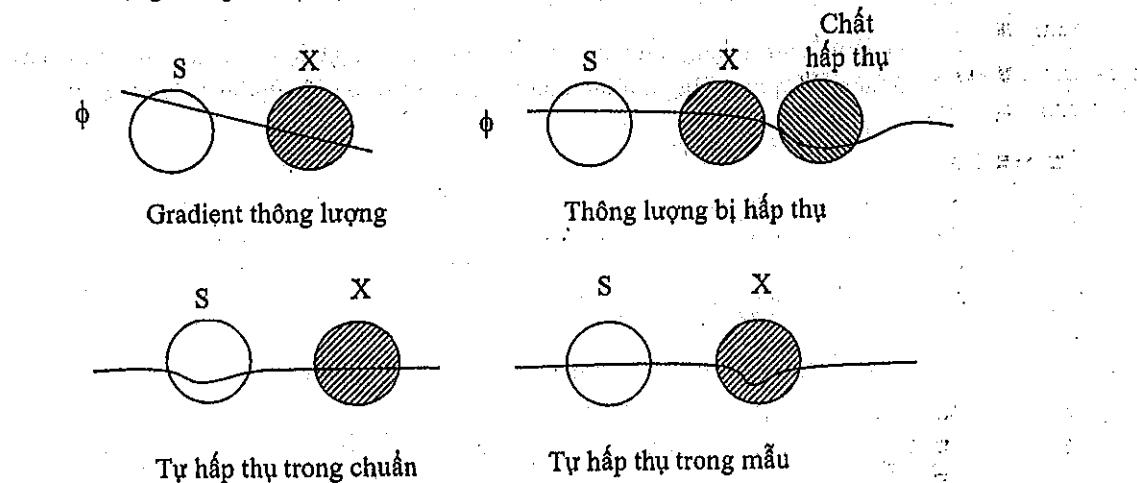
### 10.1.3. Các định nghĩa

Nhiều khi việc nhằm lẩn liên quan tới sự tự hấp thụ, sự suy giảm thông lượng và nhiễu loạn thông lượng, và ta có thể thấy sự khác nhau giữa các khái niệm này. Khi chất hấp thụ được đặt trong một môi trường khuếch tán thì thông lượng neutron sẽ bị *xáo trộn bên trong và bên ngoài mẫu*. Ở lân cận chất hấp thụ gradient thông lượng giảm về hướng mẫu. Hiệu ứng này được gọi là *sự suy giảm thông lượng* và do các neutron bị hấp thụ trong môi trường nên không thể tán xạ trở lại mẫu, vì thế nó duy trì thông lượng neutron không đổi.

Sự suy giảm thông lượng neutron trong mẫu khi neutron bị thay đổi do sự hấp thụ của chính các hạt nhân trong mẫu, được gọi là *sự tự hấp thụ*. Tổng hai hiệu ứng: suy giảm thông lượng và tự hấp thụ được gọi là *sự xáo trộn thông lượng*.

Nếu thông lượng không bị xáo trộn được biểu diễn bằng  $\phi$ , thì thông lượng trung bình khắp bề mặt mẫu bằng  $\phi_{sf}$  và thông lượng trung bình bên trong mẫu bằng  $\phi_{av}$ , ba hệ số này có thể được định nghĩa như sau:

- Hệ số suy giảm neutron là tỉ số giữa thông lượng tại bề mặt mẫu với thông lượng toàn phần đến mẫu:  $\phi_{sf}/\phi$
- Hệ số tự hấp thụ là tỉ số giữa thông lượng trung bình bên trong mẫu với thông lượng tại bề mặt mẫu:  $\phi_{av}/\phi_{sf}$
- Hệ số xáo trộn thông lượng là tỉ số giữa thông lượng trung bình bên trong mẫu với thông lượng toàn phần:  $\phi_{av}/\phi$



Hình 10.1: Sự khác nhau về thông lượng neutron trong mẫu và chuẩn

Thực tế, trong phân tích kích hoạt, hệ số tự hấp thụ toàn phần  $G$  là cần xác định, vì nó cho phép ước lượng được hiệu ứng hấp thụ. Để tính toán ba hệ số ở trên là quá khó khăn, sau đây có vài phương pháp tính toán gần đúng để hiệu chỉnh việc che chắn neutron. Trong hầu hết các trường hợp chúng chỉ đúng nếu hấp thụ cộng hưởng có thể bỏ qua, nghĩa là nhân quan tâm có tỉ số cadmium cao tại vị trí chiếu xạ.

Nguyên tố được xác định thường có nồng độ thấp, hiệu ứng tự che chắn neutron có thể bỏ qua được mặc dù nguyên tố phân tích có tiết diện hấp thụ neutron rất cao. Cho nên việc tự che chắn chỉ có khả năng xảy ra đối với các matrix trong mẫu hay khi các matrix này tự nó có tiết diện hấp thụ

cao, trong trường hợp này, việc hấp thụ neutron sẽ ảnh hưởng hoạt động đối với các nguyên tố vết trong mẫu.

Các vấn đề tính toán hệ số tự che chắn neutron được mô tả chi tiết hơn dưới đây.

#### 10.1.4. Tính toán theo Hogdahl (kích hoạt lò phản ứng)

##### a) Tính toán hệ số tự che chắn neutron toàn phần

Khi hạt nhân được chiếu trong lò phản ứng, cả hai phản ứng nhiệt và trên nhiệt đều xảy ra. Khi đó tốc độ phản ứng của nhân là (giả sử phổ neutron trên nhiệt tuân theo  $1/E$ )

$$R = R_{th} + R_e = \bar{\phi}_{th} \sigma_0 + \bar{\phi}_e I_0 = \bar{\phi}_{th} \sigma_{eff} \quad (10.1)$$

Các thông số trong (10.1) đã được chỉ ra trong chương 4.

Tốc độ phản rã ở thời điểm cuối của việc chiếu xạ cho bởi:

$$D = \frac{W \cdot \theta N_A}{M} \sigma_{eff} \bar{\phi}_{th} [1 - \exp(-\lambda t_i)] \quad (10.2)$$

Ở đây giả sử rằng không có hiệu ứng tự hấp thụ neutron.

Nếu neutron bị hấp thụ do vật chất, các phương trình trên phải sửa lại. Tốc độ phản ứng bên trong mẫu chiếu xạ:

$$R' = R'_{th} + R'_e \quad (10.3)$$

với  $R'_{th} = \bar{n}_a v_0 \sigma_0$  ( $\bar{n}_a$  mật độ neutron nhiệt trung bình trong mẫu).

Điều này khó khăn để viết dưới dạng tổng quát của  $R'_e$  theo hàm mật độ neutron trong mẫu. Tuy nhiên có thể viết dưới dạng tích phân cộng hưởng hiệu dụng  $I^{eff}$  và được xác định bởi  $R'_e = \bar{\phi}_e I^{eff}$ .

Do đó:  $R' = \bar{\phi}_{th} \sigma_0 + \bar{\phi}_e I^{eff} = \bar{\phi}_{th} \sigma_{reactor}^{eff}$  (10.4)

với:  $\sigma_{reactor}^{eff} = \sigma_0 + \frac{\bar{\phi}_e}{\bar{\phi}_{th}} I^{eff}$  (10.5)

Như vậy:  $D' = \frac{W}{A} \theta N_A \sigma_{reactor}^{eff} \bar{\phi}_{th} [1 - \exp(-\lambda t_i)]$  (10.6)

Lập tỉ số  $D'/D$ , hệ số tự che chắn neutron toàn phần  $G$  có thể xác định được:

$$G = \frac{\sigma_{reactor}^{eff} \bar{\phi}_{th}}{\sigma_{eff} \bar{\phi}_{th}} = G_{th} \frac{R_{th}}{R} + G_e \frac{R_e}{R} = \left(1 - \frac{1}{R_{Cd}}\right) G_{th} + \frac{1}{R_{Cd}} G_e \quad (10.7)$$

với,  $R_{Cd}$ : Tỉ số Cd đối với hạt nhân quan tâm,

$G_{th}$ : Hệ số tự che chắn neutron nhiệt, xác định bởi  $\bar{n}_{th} / n_{th}$  ( $= R'_{th}/R_{th}$ )

$G_e$ : Hệ số tự che chắn neutron trên nhiệt, được xác định bởi  $I^{eff}/I_0$

Lưu ý rằng, từ phương trình (10.7) cho thấy việc đóng góp sự hấp thụ neutron trên nhiệt đến hấp thụ toàn phần phụ thuộc vào mức độ nhiệt hóa của neutron, nghĩa là phụ thuộc vào tỉ số cadmi của hạt nhân quan tâm.

**b) Tự che chắn neutron nhiệt**

Tự che chắn neutron nhiệt có thể tính chính xác bằng cách dùng phương trình của Zweifel, với điều kiện  $\frac{\bar{\sigma}_s}{\sigma_t} < 0,1$ . Mỗi liên hệ tương tự cũng được lập ra do các tác giả khác. Việc tính toán  $G_{th}$  sẽ được diễn ra như sau:

- Đối với mẫu dạng tấm (lá):  $G_{th} = 1 - \frac{Z}{2} \left( 0,923 + \ln \frac{1}{Z} \right)$  (10.8)

với,  $Z = t/l$  ( $t$  là bề dày của tấm (cm)).

- Đối với mẫu dạng hình cầu:  $G_{th} = 1 - \frac{8}{9} Z$  (10.9)

với,  $Z = 2r/l$  ( $r$  = bán kính (cm)).

- Đối với mẫu dạng hình trụ:  $G_{th} = 1 - \frac{4}{3} Z$  (10.10)

với,  $Z = r/l$

Ở các phương trình trên  $l$  là quãng đường hấp thụ tự do trung bình trong mẫu

$$\ell^{-1} = \sum N_i \sigma(\bar{v})_i \quad (10.11)$$

với  $N_i$  là mật độ của hạt nhân thứ  $i$  (nguyên tử/cm<sup>3</sup>);  $\sigma(\bar{v})_i$  là tiết diện hấp thụ trung bình của hạt nhân  $i$ .

$$\sigma(\bar{v})_i = \sigma_{vi} \frac{\sqrt{\pi}}{2} \left( \frac{293,6}{T} \right)^{1/2} \quad (10.12)$$

T: Nhiệt độ tuyệt đối (°K)

Trong trường hợp có một hạt nhân hấp thụ, phương trình (10.11) viết lại:

$$\ell^{-1} = N \sigma(\bar{v}) \quad (10.13)$$

và tiết diện hấp thụ trung bình trở thành:

$$\sigma(\bar{v}) = \sigma_0 \frac{\sqrt{\pi}}{2} \left( \frac{293,6}{T} \right)^{1/2} \quad (10.14)$$

$\sigma_0$ : Tiết diện hấp thụ trung bình của hạt nhân và  $N$  là mật độ hạt nhân của mẫu.

**c) Tự che chắn neutron cộng hưởng**

Để tính  $G_e = I^{eff}/I_0$ , thì cả hai tích phân cộng hưởng xác định  $I_0$  và tích phân cộng hưởng hiệu dụng  $I^{eff}$  phải được biết đối với nhân quan tâm, hoặc ít ra thì phải biết tỉ số  $I^{eff}/I_0$ .

Trong trường hợp các hạt nhân hấp thụ chính, vận dụng lý thuyết vận chuyển của neutron,  $G_e$  có thể tính được. Tuy nhiên, các phép tính gần đúng này lại khó khăn và dẫn tới kết quả không phù hợp. Chernoik và Vernon đưa ra phép đơn giản cho cộng hưởng Breit – Wigner  $I_0$  không có hiệu chỉnh cho hiệu ứng Doppler. Phương trình này gọi là phép gần đúng “cộng hưởng hẹp” (NR), phương trình thứ hai là phép gần đúng “chất hấp thụ nặng vô hạn” (NRIA).

$$\text{NR: } G_e = \frac{I_i^{\text{eff}}}{I_{0,i}} = \left( 1 + \frac{\beta}{\varepsilon + 1} - \frac{\beta \Gamma_n}{(\varepsilon + 1)^2 \Gamma} \right)^{-1/2} \quad (10.15)$$

$$\text{NRIA: } G_e = \frac{I_i^{\text{eff}}}{I_i} = \left( 1 + \frac{\beta \Gamma_\gamma}{\varepsilon \Gamma} \right)^{-1/2} \quad (10.16)$$

$$\beta = \frac{\sigma_r(E_r)}{\sigma_p}; \quad \varepsilon = \rho \frac{S}{4N\sigma_p W} \quad (10.17)$$

với,  $\Gamma_\gamma$  và  $\Gamma_n$  là bê rông riêng phần của gamma và phát neutron và  $\Gamma = \Gamma_\gamma + \Gamma_n$ ;  $\rho$ , S và W là mật độ, diện tích mặt và khối lượng của bia; N là số hạt nhân hấp thụ mỗi  $\text{cm}^3$ ;  $\sigma_r(E_r)$  là tiết diện toàn phần ở cộng hưởng cực đại và  $\sigma_p$  là tiết diện tản xạ thê ( $= 4\pi R_A^2$ ,  $R_A$  = bán kính hạt nhân).

Có sử dụng giá trị gần đúng NRIA hay NR hay không phụ thuộc vào tích số  $\Gamma[\sigma_r(E_r)/\sigma_p]^{1/2}$  lớn hơn hay nhỏ hơn sự mất mát năng lượng cực đại trong va chạm của neutron có năng lượng  $E_r$  (năng lượng cộng hưởng) với hạt nhân số khối A.

$$\Delta E_{\max} = E \left[ 1 - \left( \frac{A-1}{A+1} \right)^2 \right] \quad (10.18)$$

Nếu  $\Gamma[\sigma_r(E_r)/\sigma_p]^{1/2} \geq \Delta E_{\max}$  thì ta sử dụng phép gần đúng NR, ngược lại sử dụng phép gần đúng NRIA.

## 10.2. CÁC PHẢN ỨNG NHIỀU

### 6.2.1. Các phản ứng nhiễu sơ cấp

#### 6.2.1.1. Phản ứng (n, p) và (n, $\alpha$ )

Phản ứng (n, p) của hạt nhân Z + 1 hay phản ứng (n,  $\alpha$ ) của hạt nhân Z + 2 có thể cho ra sản phẩm như phản ứng (n,  $\gamma$ ) của hạt nhân Z, rõ ràng sự hiện diện của hạt nhân Z + 1 hay Z + 2 trong mẫu phân tích sẽ gây ra nhiễu khi xác định hạt nhân Z. Nhiễu sẽ đóng góp vào kết quả phân tích nhiều hay ít phụ thuộc vào nồng độ tương đối của các hạt nhân bia trong mẫu, phụ thuộc vào thông lượng neutron nhanh/nhiệt và phụ thuộc vào tỉ số tiết diện phản ứng của chúng. Rất may là tiết diện của phản ứng (n, p) hay (n,  $\alpha$ ) rất nhỏ so với tiết diện của phản ứng (n,  $\gamma$ ). Vì thế, các phản ứng này thường gây nhiễu chỉ với các đại lượng vĩ mô của các hạt nhân gây nhiễu hiện diện trong mẫu (nghĩa là, hạt nhân nhiễu là matrix, hay hạt nhân cần xác định có nồng độ cực thấp và hạt nhân nhiễu có thành phần lớn). Dĩ nhiên, nhiễu này sẽ kém quan trọng hay có thể bỏ qua khi ta chiếu xạ với phô neutron nhiệt tốt.

Tầm quan trọng của phản ứng nhiễu sơ cấp có thể ước lượng được nếu tỉ lệ thông lượng neutron nhiệt/nhanh ở vị trí chiếu xạ và các giá trị  $\sigma_0(n, \gamma)$  và  $\sigma(n, p)$ ... của các nguyên tố quan tâm được biết trước.

Điều này được minh họa qua việc xác định Cu trong Zn từ phép đo hoạt độ  $^{64}\text{Cu}$ , tại vị trí chiếu xạ có:  $\phi_{th} = 4 \cdot 10^{11}$  và  $\bar{\phi} = 2,17 \cdot 10^{10} \text{n.cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$

Phản ứng quan tâm  $^{63}\text{Cu}(n, \gamma)^{64}\text{Cu}$ ,  $\theta = 0,691$ ,

$$\sigma_0(n, \gamma) = 4,3 \text{b}, \quad \phi_{th} = 4 \cdot 10^{11} \text{n.cm}^{-2} \text{s}^{-1}, \quad A = 63,54.$$

Phản ứng nhiễu:  $^{64}\text{Zn}(n, p)^{64}\text{Cu}$ ,  $\theta' = 0,489$

$$\bar{\sigma}(n, p) = 93 \text{ mb}, \bar{\phi} = 2,17 \cdot 10^{10} \text{ n.cm}^{-2}\text{s}^{-1}, A' = 65,17$$

Tỉ lệ hoạt độ của đồng  $^{64}\text{Cu}$  được tạo ra ứng với 1g kẽm tự nhiên và 1g đồng tự nhiên cho bởi:

$$\frac{D(\text{Zn})}{D(\text{Cu})} = \frac{A \cdot \theta \cdot \bar{\phi} \cdot \bar{\sigma}(n, p)}{A' \cdot \theta \cdot \phi_{th} \cdot \sigma(n, \gamma)} = 8,1 \cdot 10^{-4} \quad (10.19)$$

Điều này có nghĩa là thành phần Cu có hàm lượng 810 ppm sẽ phát hiện được trong kẽm (Zn). Nellish đo được thành phần nhiều 700 ppm sau khi chiếu ở trung tâm lò BEPO.

### 10.2.1.2. Phản ứng ( $n, f$ )

Một phản ứng gây nhiễu khác trong kích hoạt neutron nhiệt là sự hiện diện của nguyên liệu có khả năng phân hạch. Ngay cả với hàm lượng nhỏ của nhân (ví dụ  $^{235}\text{U}$ ) hiện diện trong mẫu thì nó có thể gây ra các sai số có nghĩa và thường không tránh khỏi khi xác định nhiều nguyên tố trong các vùng nhất định của bảng tuần hoàn. Dams đã tìm thấy một chuỗi nhiễu từ vết Uranium khi xác định molybdenum và tellurium có nồng độ rất thấp trong dung dịch  $\text{ZnSO}_4$ . Với thành phần uranium cho trước trong mẫu, nhiễu phụ thuộc vào hiệu suất phân hạch đối với đồng vị phóng xạ quan tâm và phụ thuộc vào tiết diện kích hoạt và độ phô cập đồng vị của nhân bền tương ứng. Trường hợp rất bất lợi là xác định Mo, Te và Ce chẳng hạn.

Nhiễu có thể ước lượng được theo cách như sau:

Giả sử rằng 1 g uranium tự nhiên có mặt trong mẫu, độ phóng xạ của đồng vị i cho trước từ sự phân hạch có thể tính từ:

$$A_i(n, f) = y_i \sigma(n, f) \phi_{th} N_A S_i / A_u \quad (10.20)$$

với,  $\sigma(n, f)$  là tiết diện phân hạch của uranium tự nhiên ( $= 4,18 \text{ b}$ );  $A_u$  là khối lượng nguyên tử của uranium ( $= 238,03$ );  $N_A$  là hằng số Avogadro;  $S_i = 1 - \exp(-\lambda_i t)$ ;  $y_i$  là hiệu suất phân hạch toàn phần của đồng vị i.

Với 1g nguyên tố x, ta tính:

$$A_i(n, \gamma) = \sigma(n, \gamma) \theta \phi_{th} N_A S_i / A_x \quad (10.21)$$

Tí số  $A_i(n, f)/A_i(n, \gamma)$  cho ra giá trị nhiễu:

$$\text{Nhiễu (\%)} = \frac{A_i(n, f)}{A_i(n, \gamma)} = \frac{4,18 y_i A_x}{238,03 \theta \sigma(n, \gamma)} \quad (10.22)$$

Từ các số liệu trên ta thấy rằng phép phân tích vết cho các nguyên tố đất hiếm nhẹ (hiệu suất phân hạch cực đại) trong khoáng sản bằng phân tích kích hoạt neutron sẽ không thực hiện được nếu Uranium hiện diện trong cùng khoáng nồng độ. Với nhóm các nguyên tố nặng (hiệu suất phân hạch thấp hơn) sự bất lợi này sẽ kém hơn.

Thực tế, tầm quan trọng của nhiễu này đối với một đồng vị cho trước có thể ước lượng được bằng việc xác định thành phần uranium trong mẫu từ hoạt độ  $^{239}\text{Nb}$  và khi đó xác định được độ phóng xạ của nhân phóng xạ quan tâm. Nếu nhiễu quá cao, tốt hơn hết là tách uranium từ mẫu trước đó để kích hoạt.

### 10.2.2. Các phản ứng thứ cấp

Phản ứng thứ cấp do các tia  $\gamma$  hay các hạt mang điện từ các phản ứng ( $n, \gamma$ ) hay ( $n, p$ ) và ( $n, \alpha$ ). Các phản ứng này hiếm khi có ý nghĩa trong việc chiếu xạ lò phản ứng, bởi vì các photon và các hạt tích điện (tạo ra bởi các neutron lò phản ứng) có hoặc là năng lượng quá thấp hoặc là cường độ quá thấp để có ý nghĩa. Ceypers mô tả sự hình thành  $^{13}\text{N}$  trong polytylen bằng chiếu xạ neutron 14 MeV.

Do neutron 14 MeV va chạm với nguyên tử hydro trong mẫu, các proton năng lượng cao hình thành và nó tương tác với carbon cho ra phản ứng  $^{13}\text{C}(\text{p}, \text{n})^{13}\text{N}$  ( $Q = 2,26 \text{ MeV}; T_{1/2} = 10 \text{ phút}$ ). Có cùng phản ứng cho việc xác định nitơ trong hydrocacbon bằng phản ứng  $^{14}\text{N}(\text{n}, 2\text{n})^{13}\text{N}$  với nồng độ lớn hơn 0,1%.

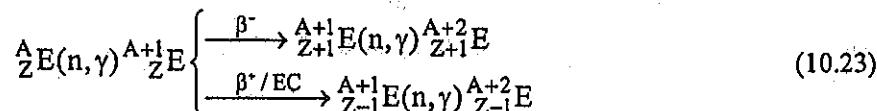
Lý thuyết dự đoán rằng hàm lượng  $^{13}\text{N}$  được tăng cường và có lẽ dễ dàng mở rộng đến trường hợp oxy cũng hiện diện trong mẫu khi  $^{13}\text{N}$  được tạo ra bởi phản ứng  $^{16}\text{O}(\text{p}, \alpha)^{13}\text{N}$ . Theo lý thuyết cho rằng sản phẩm  $^{13}\text{N}$  phụ thuộc vào thông lượng proton và phụ thuộc vào nồng độ carbon và oxy. Sản phẩm  $^{13}\text{N}$  cũng giới hạn cho việc xác định đồng trong dầu nhớt, từ  $^{62}\text{Cu}$  có cùng chu kỳ bán hủy với  $^{13}\text{N}$  và từ cả hai hạt nhân phóng xạ cùng phát positron.

### 10.2.3. Các phản ứng bậc 2

Hai loại phản ứng bậc 2 xảy ra là:

- Phản ứng làm tăng cường sản phẩm của sản phẩm kích hoạt.
- Phản ứng làm giảm "nồng độ" của nó.

Các phản ứng của loại thứ nhất thường xảy ra khi thành phần chính của mẫu hay matrix của nó và vết nguyên tố có số nguyên tử gần nhau. Trong trường hợp này, sản phẩm kích hoạt của nguyên tố chính có thể phân rã thành đồng vị bền của nguyên tố vết. Ta xét sơ đồ phản ứng:



Số hạt nhân nhiễu được tính (theo sơ đồ trên):

$$N_4(t_i) = \frac{6,023 \cdot 10^{23} \theta_1}{A_1} \phi^2 \sigma_1 \sigma_3 F_2 A_2 \sum_{i=1}^4 C_i \exp(-\Lambda_i t_i) \quad (10.24)$$

với,  $\theta_1$  là độ phô cập của đồng vị (1) trong nguyên tử  $Z$ ;  $\theta_3$  là độ phô cập của đồng vị (3) trong nguyên tử ( $Z \pm 1$ );  $A_1, A_3$  là khối lượng nguyên tử của nguyên tố (1), (3),  $\phi$  là thông lượng neutron lò phản ứng và  $\sigma_1, \sigma_3$  là tiết diện kích hoạt của (1) và (3).

Số hạt nhân bức xạ  $N'4$  được hình thành khi kích hoạt trực tiếp 1  $\mu\text{g}$  nguyên tố ( $Z + 1$ ) hay ( $Z - 1$ ) có thể tính được từ phương trình:

$$N_4(t_i) = \frac{6,023 \cdot 10^{17} \theta_3 \sigma_3 \phi}{\Lambda_4 A_3} [1 - \exp(-\Lambda_4 t_i)] \quad (10.25)$$

Do đó, nồng độ (bằng ppm) của nguyên tố ( $Z \pm 1$ ) được hình thành từ nguyên tố  $Z$  do phản ứng bậc 2 được tính từ tỉ số  $N_4/N'4$ :

$$\text{ppm}(Z \pm 1) = \frac{A_3}{A_1} \frac{\theta_1}{\theta_3} \frac{\phi \sigma_1 F_2 \Lambda_2 \Lambda_4 \sum_{i=1}^4 C_i \exp(-\Lambda_i t_i)}{1 - \exp(-\Lambda_4 t_i)} \cdot 10^6 \quad (10.26)$$

Từ các phương trình này ta thấy rằng (trong phép gần đúng bậc 1) nhiễu ti lệ với thông lượng và với  $\sigma_1$ .

Từ phép tính toán, thấy rằng kết quả cuối cùng độc lập rõ ràng với  $\sigma_3$ , nhưng tỉ lệ với  $\sigma_1$ , vì thế kích hoạt cộng hưởng của hạt nhân (1) phải kể tới.

Có 40 trường hợp nhiễu bậc 2. Ricci và Dyer đã tính nhiễu cho 23 trường hợp theo thời gian chiếu. Các phương trình trên khó để giải bằng tay và thường dẫn tới mất ý nghĩa trong tổng hàm mũ  $C_1 \exp(-\lambda_2 t_i)$ . Để tính toán các phép tính này cần phải có máy tính với bộ nhớ cực lớn. Các công thức đơn giản hơn được bắt nguồn theo cách sau:

- Số hạt nhân hình thành sau mỗi giây sau khi chiếu với thời gian  $t_i$  cho bởi:

$$N_2 = \frac{N_1^0 \theta \sigma_1}{\lambda_2} [1 - \exp(-\lambda_2 t_i)] \quad (\Lambda_2 \approx \lambda_2) \quad (10.27)$$

Số phân rã của nhân (2) mỗi giây cho bởi  $\lambda_2 N_2 = N_1^0 \theta \sigma_1 [1 - \exp(-\lambda_2 t_i)]$ . Điều này cũng cho số nhân (3) (bền) được hình thành mỗi giây (giả sử  $F_2 = 1$ ).

Số nguyên tử toàn phần (3) được hình thành sau thời gian chiếu  $t_i$  được tính:

$$N_3(t_i) = \int_0^{t_i} N_3 dt_i = N_1^0 \theta \sigma_1 \left[ t_i - \frac{1 - \exp(-\lambda_2 t_i)}{\lambda_2} \right] \quad (10.28)$$

Nếu  $N_3(t_i)$  mô tả bằng ppm ( $Z \pm 1$ ) trong matrix ( $N_1^0 = \theta_1 N^0$ ), phương trình này có thể viết lại:

$$\text{ppm}(Z \pm 1)(t_i) = \theta_1 \phi \sigma_1 \cdot 10^6 \left[ t_i - \frac{1 - \exp(-\lambda_2 t_i)}{\lambda_2} \right] \quad (10.29)$$

➤ Nếu  $T_{1/2}(2) \gg t_i$ ,  $1 - \exp(-\lambda_2 t_i) \approx \lambda_2 t_i - \frac{\lambda_2^2 t_i^2}{2} + \dots$

Do đó:

$$\text{ppm}(Z \pm 1)(t_i) \approx 0,5 \cdot 10^6 \theta_1 \phi \sigma_1 \lambda_2 t_i^2 \quad (\text{dạng parabol}) \quad (10.30)$$

➤ Nếu  $T_{1/2}(2) \ll t_i$  thì  $1 - \exp(-\lambda_2 t_i) \approx 1$

Do đó:

$$\text{ppm}(Z \pm 1)(t_i) \approx \theta_1 \phi \sigma_1 \cdot 10^6 \frac{\lambda_2 t_i - 1}{\lambda_2} \approx 10^6 \theta_1 \phi \sigma_1 t_i \quad (\text{dạng đường thẳng}) \quad (10.31)$$

Đĩ nhiên, các công thức đơn giản này chỉ cho ra kết quả gần đúng, nhưng chúng tránh được làm việc với máy tính có bộ nhớ lớn.

### 10.3. SAI SỐ THỐNG KÊ

#### 10.3.1. Giá trị tốt nhất cho một chuỗi quan sát

Với  $n$  lần quan sát  $x_1, x_2, \dots, x_n$  được thực nghiệm dưới cùng điều kiện và có độ tin cậy bằng nhau, thì "trung bình số học" là giá trị biểu diễn tốt nhất

$$\bar{x} = \frac{\sum_{i=1}^n x_i}{n} \quad (10.32)$$

Nếu dữ liệu quan sát được không có độ tin cậy bằng nhau thì ta đưa vào một trọng số thống kê  $W$ . Giá trị tốt nhất cho chuỗi quan sát này là "trung bình có trọng số", thỉnh thoảng được gọi là "trung bình tổng":

$$\bar{x} = \frac{\sum_{i=1}^n w_i x_i}{\sum_{i=1}^n w_i} \quad (10.33)$$

với  $w_i = A / \sigma^2_i$  và  $A$  là hằng số (thường  $A \approx 1$ ).

### 10.3.2. Độ lệch chuẩn

Trong chuỗi quan sát, độ phân tán toàn phần có thể quá hẹp đến nỗi mà chỉ có một vài giá trị đo là nằm trong khoảng cho phép, do đó cần phải đo nhiều lần để thu được một tập hợp đủ lớn. Độ tin cậy được biểu diễn dưới dạng hàm “sai số có thể có”, “độ lệch chuẩn”,... Khả năng lặp lại của một phương pháp phân tích trong một khoảng tập hợp cho trước được biểu diễn bằng độ lệch chuẩn  $\sigma(x)$ . Điều này có thể thu được từ khái niệm thống kê của phép biến thiên:

$$v = \frac{\sum_{i=1}^n (\bar{x} - x_i)^2}{n-1} \quad (10.34)$$

Với  $n-1$  chỉ ra bậc tự do của chuỗi quan sát. Phương trình (10.34) đòi hỏi tất cả chuỗi quan sát  $x_i$  được thực hiện dưới cùng điều kiện và tất cả có độ tin cậy bằng nhau. Độ lệch chuẩn của một chuỗi quan sát cho bởi căn bậc 2 của phép biến thiên:

$$\sigma(x) = \sqrt{v} = \sqrt{\frac{\sum(\bar{x} - x_i)^2}{n-1}} \quad (10.35)$$

Nếu có  $n$  lần phân tích thì kết quả sẽ tốt hơn. Độ lệch chuẩn ảnh hưởng đến dãy kết quả,  $\sigma(\bar{x})$ , có thể được tính như sau:

$$\sigma(\bar{x}) = \sqrt{\frac{\sum(\bar{x} - x_i)^2}{n(n-1)}} = \frac{\sigma(x)}{\sqrt{n}} \quad (10.36)$$

với:  $\sigma(\bar{x})$  là một ước tính cho độ lệch chuẩn của giá trị trung bình  $x$ .

Nếu độ chính xác  $\sigma(x)$  cần thiết cho kết quả  $x$ , số lần phân tích  $n$  có thể tính từ phương trình (10.36), nếu  $\sigma(\bar{x})$  đã biết, đơn thuần là tăng số lần thực nghiệm, không có thay đổi điều kiện thực nghiệm sẽ giảm ảnh hưởng của sai số ngẫu nhiên và làm tốt thêm độ chính xác.

Sai số trong quá trình đo cũng có thể được biểu diễn theo % độ lệch chuẩn, được định nghĩa:

$$\sigma(%) = 100 \cdot \sigma(x) / \bar{x} \quad (10.37)$$

với  $\bar{x}$  cho bởi (10.33) và  $\sigma(x)$  cho bởi (10.35).

### 10.3.3. Giới hạn độ tin cậy

Trung bình số học cho một số lần quan sát vô hạn thường không thể đạt được, thường người ta chỉ có thể tính xác suất mà giá trị này chứa trong giới hạn ( $\bar{x} \pm \Delta x$ ). Số gia  $\Delta x$  có thể chọn nhỏ tùy ý. Thường người ta biểu diễn  $\Delta x$  theo hàm của độ lệch chuẩn, ví dụ  $\pm \Delta x = \pm t\sigma$ , với  $t$  phụ thuộc vào mức xác suất và số bậc tự do. Đối với phân bố chuẩn, kết quả  $x_i$  sẽ thu được trong khoảng  $x \pm \sigma(x)$  với một xác suất  $p = 0,683$  hay 68,3%. Từ đây, khoảng  $x_i \pm \sigma(x_i)$  sẽ chứa trung bình số học của một số lần quan sát vô hạn với xác suất 68%.

Rõ ràng, bậc của độ tin cậy tăng lên, khi “khoảng tin cậy tăng” (bảng 10.1). Đối với việc phân tích vết, xác suất 0,68 thì chấp nhận được. Trong trường hợp khác, ví dụ, phân tích thành phần nhỏ, giới hạn độ tin cậy là  $\pm 2\sigma$  ( $p \approx 95\%$ ). Khoảng  $\pm 3\sigma$  tương ứng sai số ngẫu nhiên cực đại của giá trị đo ( $p = 99,7\%$ ).

**Bảng 10.1:** Mức xác suất tương ứng loại sai số

Hàng số u	P	P'	Sai số
0,6745	0,500	0,500	“sai số có thể có”
1,000	0,683	0,317	“độ lệch chuẩn $\sigma$ ”
1,177	0,761	0,239	
1,645	0,900	0,100	“sai số 90% hay sai số tin cậy”
1,960	0,950	0,050	“sai số 95%”
2,576	0,990	0,010	“sai số 99%”
2,807	0,995	0,005	
3,000	0,9973	0,0027	$3\sigma$
3,291	0,999	0,001	
4,000	0,99994	0,00006	$4\sigma$

P = Xác suất sai số của phép phân tích  $< u, \sigma$

P' = Xác suất sai số của phép phân tích  $> u, \sigma$  ( $P' = 1 - P$ ).

#### 10.3.4. Tiêu chuẩn Chauvenet

Trong suốt quá trình đếm, những tín hiệu bên ngoài có thể xuất hiện, chẳng hạn như tiếng ồn máy khuếch đại, tiếng ồn mạch điện tử, .... Những sai số loại khác là: thiết bị đọc sai, đếm sai mẫu, đo mẫu ở vị trí đếm sai, ...

Ở bảng 10.2 giá trị giới hạn của độ lệch từ một quan sát như là một hàm của số lần thực nghiệm. Khi giá trị giới hạn này vượt mức cho phép thì phép đo tương ứng có thể loại bỏ.

**Bảng 10.2:** Giá trị giới hạn của độ lệch chuẩn

Số thực nghiệm	2	4	6	8	10	20	30	40
Giá trị giới hạn	1,15	1,55	1,73	1,88	1,98	2,25	2,40	2,50

Ví dụ: Xác định oxygen trong thép bằng 4 phòng thí nghiệm (lab) khác nhau.

	$x_i$	$(x_i - \bar{x})$	$(x_i - \bar{x})^2$	
Lab.1	911	-18	324	
	908	-21	411	
Lab.2	947	+18	324	$\sigma(x) = \sqrt{\frac{\sum (x_i - \bar{x})^2}{n-1}} = 30$
	938	+9	81	
Lab.3	992	+63	3969	
	944	+15	225	

	919	-10	100
Lab.4	903	-26	676
	899	-30	900
$\bar{x} = \frac{929}{9}$			

Giá trị giới hạn của sai số đối với 9 thực nghiệm:  $\pm 1,93 \sigma(x) = \pm 58 \text{ ppm}$ . Giá trị này vượt quá giá trị trước tiên của Lab.3 (992 - 929) = 63. Từ đây, phép đo này có thể được loại bỏ. Khi đó, giá trị trung bình mới trở thành: 992 ppm;  $\sigma(x) = \pm 19 \text{ ppm}$ ; hệ số giới hạn của sai số đối với 8 thực nghiệm còn lại;  $\pm 1,88 \sigma(x) = \pm 36 \text{ ppm}$ . Tất cả kết quả còn lại rơi vào  $992 \pm 36 \text{ ppm}$ .

#### 10.3.5. Sự truyền sai số

Đôi khi vài kết quả hay phép đo  $x_1, x_2, \dots$  đã có sai số tương ứng của chúng, cho nên độ lệch chuẩn  $\sigma(x_1), \sigma(x_2), \dots$  phải được viết với đại lượng mới  $X = f(x_1, x_2, \dots)$ .

Ở bảng 10.3 cho thấy vài loại truyền sai số trong vài hàm phổ biến. Sau việc tính toán độ lệch chuẩn của X, giới hạn tin cậy của đại lượng này có thể được xác định như  $\pm t \sigma(x)$ .

Các hàm ở bảng 10.3 hợp lệ nếu mỗi  $\sigma(x_i)/x_i$  vừa đủ nhỏ ( $\leq 20\%$ ) và nếu giá trị của  $x_i$  có tính thống kê độc lập.

Bảng 10.3: Sự truyền sai số trong vài hàm thông dụng

Hàm	Độ lệch chuẩn
$X = x_1 \pm x_2$	$\sigma^2(X) = \sigma^2(x_1) + \sigma^2(x_2)$
$X = (x_1 x_2 / x_3)$	$\sigma^2(X) / X^2 = \sigma^2(x_1) / x_1^2 + \sigma^2(x_2) / x_2^2 + \sigma^2(x_3) / x_3^2$
$X = ax_1 + b$	$\sigma^2(X) = a^2 \sigma^2(x_1)$
$X = x_1'$	$\sigma^2(X) / X^2 \cong r^2 \sigma^2(x_1) / x_1^2$
$X = e^{cx_1}$	$\sigma^2(X) \cong c^2 \sigma^2(x_1)$
$X = \ln(cx_1)$	$\sigma^2(X) \cong \sigma^2(x_1) / x_1^2$
$X = \ln(x_1 + x_2)$	$\sigma^2(X) \cong [\sigma^2(x_1) + \sigma^2(x_2)] / (x_1 + x_2)^2$
$X = \ln(x_1 / x_2)$	$\sigma^2(X) \cong \sigma^2(x_1) / x_1^2 + \sigma^2(x_2) / x_2^2$

#### 10.3.6. Phân tích sai số

Giả sử quy trình phân tích bao gồm làm mẫu, chiết mẫu, xử lý hóa và đo đếm là các biến độc lập, thì phương sai toàn phần  $\sigma^2(T)$  là :

$$\begin{aligned} \sigma^2\% (T) &= \sigma^2\% (\text{mẫu}) + \sigma^2\% (\text{chiết xạ}) + \sigma^2\% (\text{hóa học}) + \sigma^2\% (\text{đếm}) \\ &= \sigma^2\% (\text{mẫu}) + \sigma^2\% (\text{phân tích}) \end{aligned} \quad (10.38)$$

Trong đó :  $\sigma^2\% (\text{phân tích}) = \sigma^2\% (\text{chiết xạ}) + \sigma^2\% (\text{hóa học}) + \sigma^2\% (\text{đếm})$

Thực tế khi dùng phương pháp so sánh, sự biến đổi của chuẩn cũng sẽ ảnh hưởng lên kết quả của phép phân tích. Đổi với chuẩn  $\sigma_c^2\% (T) = \sigma^2\% (\text{chiết xạ}) + \sigma^2\% (\text{đếm})$ ; còn  $\sigma^2\% (\text{hóa học}) = 0$ ;  $\sigma^2\% (\text{mẫu}) = 0$ .

Như vậy, thấy rằng  $\sigma^2\% (T)$  của mẫu phân tích bao giờ cũng lớn hơn  $\sigma^2\% (T)$  mẫu chuẩn.

### 10.3.6.1. $\sigma^2\%$ (mẫu)

Độ lệch chuẩn % của mẫu được xác định bởi khối lượng mẫu và bởi sự phân bố thuần nhất của nguyên tố cần xác định. Khối lượng mẫu càng lớn càng có lợi về độ nhạy và thống kê số đếm. Tuy nhiên, điều này làm tăng độ phóng xạ của matrix do kích hoạt và hiệu ứng tự chế chấn.

Đối với khối lượng mẫu 1 mg, độ chính xác tốt hơn 0,5 % từ 0,1 - 1 mg, sai số cỡ 1%.

Nếu dùng kỹ thuật phân tích không phá vỡ mẫu thì  $\sigma^2\%$  (hóa) = 0 và nếu độ phóng xạ cao và ổn định, các điều kiện hình học khi chiếu xạ và đếm không thay đổi thì  $\sigma^2\%$  (đếm) rất bé và  $\sigma^2\%$  (chiếu xạ) cũng bé.

$$\text{Như vậy: } \sigma^2\% (T) = \sigma^2\% (\text{mẫu}) \quad (10.39)$$

### 10.3.6.2. $\sigma^2\%$ (chiếu xạ)

Độ lệch chuẩn chiếu xạ là do sự biến thiên thông lượng neutron và do việc đo thời gian chiếu xạ chính xác khi đồng vị phóng xạ sinh ra có bán sinh ngắn. Đồng thời, vẫn đề gradien thông lượng neutron rất quan trọng trong các lò phản ứng, cũng như trong máy phát neutron. Sự thay đổi nhỏ về vị trí chiếu xạ của mẫu sẽ dẫn đến thay đổi thông lượng neutron trên mẫu. Thực tế:  $\sigma^2\%$  (chiếu xạ)  $\approx \pm 2\%$

### 10.3.6.3. $\sigma\%$ (hóa học)

Chỉ tồn tại trong quá trình phân tích có xử lý hóa học (hòa tan mẫu, điện phân, kết tủa). Mặc dù  $\sigma\%$  (hóa học) có phụ thuộc vào cách thức tiến hành nhưng trong tiêu chuẩn  $\sigma\%$  (hóa học):  $\sigma^2 \approx \pm 2\%$ .

### 10.3.6.4. $\sigma\%$ (đếm)

Gồm các yếu tố sau:

- Điều kiện hình học
- Sai số do mạch điện từ phía sau (xử lí và khuếch đại tín hiệu)
- Hiệu suất ghi của đầu dò → hiệu chỉnh thời gian chết
- Thống kê đếm

Nếu tất cả các tham số kể trên là không đáng kể, thì  $\sigma\%$  (đếm) chủ yếu là do thống kê đếm thông thường.

$$\sigma\% = \sqrt{N} \quad (10.40)$$

### 10.3.6.5. Các nguyên nhân khác

Khi dùng các mạch đếm góp hay máy phân tích đa kênh có kèm theo máy in hoặc máy xuyên phiếu hoặc băng từ để ghi tín hiệu ra thì chú ý là có thể có sai số do các bộ phận này.

## BÀI TẬP CHƯƠNG 10

- 10.1. Tính hệ số tự che chấn neutron toàn phần của một tấm Au dày 1 mm. Biết rằng quãng đường tự do trung bình của neutron trong tấm Au là  $1 \mu\text{m}$ , hệ số tự che chấn neutron trên nhiệt,  $G_e = 0,58$ ,  $R_{\text{Cd},\text{Au}} = 29$ .
- 10.2. Một dây vàng tinh khiết đường kính 1 mm, dài 1 cm, khối lượng 1 mg. Tính hệ số tự che chấn neutron trên nhiệt tại năng lượng 5,65 eV. Biết rằng số liệu về các thông số cộng hưởng đối với  $^{197}\text{Au}$  là  $\Gamma = 300 \text{ meV}$ ;  $\Gamma_n = 200 \text{ meV}$ ;  $\Gamma_\gamma = 100 \text{ meV}$ ;  $J = 2$ ;  $I = 3/2$ .
- 10.3. Tính hàm lượng nhiễu Mn do Fe tạo ra khi phân tích hàm lượng Mn trong Fe bằng việc kích hoạt neutron tại vị trí có thông lượng neutron nhiệt  $\phi_h = 3 \cdot 10^{12} \text{ n.cm}^{-2}.\text{s}^{-1}$  và thông lượng neutron nhanh  $\phi_f = 2 \cdot 10^{11} \text{ n.cm}^{-2}.\text{s}^{-1}$ .
- 10.4. Tính độ nhiễu trong 1 g uranium phân hạch của các hạt nhân:

$\text{Ce}^{141}$  ( $y = 0,06$ ;  $\theta = 0,88$ ;  $\sigma(n, \gamma) = 0,31 \text{ b}$ )

$\text{Ce}^{143}$  ( $y = 0,057$ ;  $\theta = 0,11$ ;  $\sigma(n, \gamma) = 1 \text{ b}$ )

$\text{Nb}^{147}$  ( $y = 0,027$ ;  $\theta = 0,17$ ;  $\sigma(n, \gamma) = 2 \text{ b}$ )

$\text{Mo}^{99}$  ( $y = 0,061$ ;  $\theta = 0,24$ ;  $\sigma(n, \gamma) = 0,5 \text{ b}$ )

- 10.5. Tính nồng độ nhiễu của P trong Si ( $\text{P}^{32}$ ) và Ir trong Os ( $\text{Ir}^{191}$ ) khi chiếu trong lò phản ứng có thông lượng neutron nhiệt  $\phi_h = 10^{12} \text{ n.cm}^{-2}.\text{s}^{-1}$  và  $\phi_e/\phi_h = 1/10$  tại thời điểm  $t_i = 10^3 \text{ s}$ ;  $10^4 \text{ s}$ ; và  $10^5 \text{ s}$ .

### TÀI LIỆU THAM KHẢO

1. Arthur H. Compton, Samuel K. Allison, X-ray in theory and experiment, D. Van Nostrand, Princeton, N.J., 1935.
2. Donald E. Leyden, Fundamental of X-ray spectrometry as applied to Energy-dispersive techniques, Tractor X-ray, USA, 1984.
3. Eugene P. Bertin, Introduction to X-ray Spectrometry Analysis, Plenum Press, New York, 1978.
4. Eugene P. Bertin, Principles and Practice of X-ray Spectrometric Analysis, 2<sup>nd</sup> ed., Plenum Press, New York, 1975.
5. F. Claisse and M. Quintin, Generalization of the Lachance – Traill method for the correction of the matrix – effect in X-ray fluorescence, Canad. Spectrosc., 12, 1967, 129.
6. George L. Clark, Applied X-rays, McGraw-Hill, York, 1927.
7. Ron Jenkins, R. W. Gould, Dale Gedcke, Quantitative X-ray Spectrometry, Marcel Dekker, Inc., USA, 1981.
8. Ron Jenkins, An Introduction to X-ray Spectrometry, Heyden, London, 1974, 132.
9. S. D. Rasberry and K. F. J., calibration for interelement effect in X-ray fluorescence analysis, Anal. Chem., 46, 1974, 81.
10. D. De Soete-R, Gijbels-Jhoste, Neutron activation Analysis, John Wiley & Sons Inc., 1972.
11. M. Blaauw, *The Holistic Analysis of Gamma-ray Spectra in Instrumental Neutron Activation Analysis*, TU Delft, Nederlands, 1993
12. C. Gilmore, J.D. Hemingway, Practical Gamma-ray Spectrometry, John Wiley & Sons, NY, 1996
13. F. De Corte, The K<sub>0</sub>-Standardization Method: A Move To The Optimization Of Neutron Activation Analysis, PhD Thesis, GENT, 1987

**Phần mềm hay công cụ hỗ trợ thực hành**

1. AXIL, GENIE-2000, K<sub>0</sub>-IAEA, HYPERMET 5.0.
2. X ray and gamma ray spectroscopy.

**PHỤC LỰC 1**  
**Các vạch năng lượng tia X**

Z	Nguyên tố	K $\alpha$ 1	K $\alpha$ 2	K $\beta$ 1	L $\alpha$ 1	L $\alpha$ 2	L $\beta$ 1
3	Li	0.0543					
4	Be	0.1085					
5	B	0.1833					
6	C	0.277					
7	N	0.3924					
8	O	0.5249					
9	F	0.6768					
10	Ne	0.8486	0.8486				
11	Na	1.04098	1.04098	1.0711			
12	Mg	1.25360	1.25360	1.3022			
13	Al	1.48670	1.48627	1.55745			
14	Si	1.73998	1.73938	1.83594			
15	P	2.0137	2.0127	2.1391			
16	S	2.30784	2.30664	2.46404			
17	Cl	2.62239	2.62078	2.8156			
18	Ar	2.95770	2.95563	3.1905			
19	K	3.3138	3.3111	3.5896			
20	Ca	3.69168	3.68809	4.0127	0.3413	0.3413	0.3449
21	Sc	4.0906	4.0861	4.4605	0.3954	0.3954	0.3996
22	Ti	4.51084	4.50486	4.93181	0.4522	0.4522	0.4584
23	V	4.95220	4.94464	5.42729	0.5113	0.5113	0.5192
24	Cr	5.41472	5.405509	5.94671	0.5728	0.5728	0.5828
25	Mn	5.89875	5.88765	6.49045	0.6374	0.6374	0.6488
26	Fe	6.40384	6.39084	7.05798	0.7050	0.7050	0.7185
27	Co	6.93032	6.91530	7.64943	0.7762	0.7762	0.7914
28	Ni	7.47815	7.46089	8.26466	0.8515	0.8515	0.8688
29	Cu	8.04778	8.02783	8.90529	0.9297	0.9297	0.9498
30	Zn	8.63886	8.61578	9.5720	1.0117	1.0117	1.0347
31	Ga	9.25174	9.22482	10.2642	1.09792	1.09792	1.1248
32	Ge	9.88642	9.85532	10.9821	1.18800	1.18800	1.2185
33	As	10.54372	10.50799	11.7262	1.2820	1.2820	1.3170
34	Se	11.2224	11.1814	12.4959	1.37910	1.37910	1.41923
35	Br	11.9242	11.8776	13.2914	1.48043	1.48043	1.52590
36	Kr	12.649	12.598	14.112	1.5860	1.5860	1.6366
37	Rb	13.3953	13.3358	14.9613	1.69413	1.69256	1.75217
38	Sr	14.1650	14.0979	15.8357	1.80656	1.80474	1.87172
39	Y	14.9584	14.8829	16.7378	1.92256	1.92047	1.99584

**PHỤC LỰC 1(tiếp theo)**  
**Các vạch năng lượng tia X**

Z.	Nguyên tố	Ka1	Ka2	Kb1	La1	La2	Lb1
40	Zr	15.7751	15.6909	17.6678	2.04236	2.0399	2.1244
41	Nb	16.6151	16.5210	18.6225	2.16589	2.1630	2.2574
42	Mo	17.47934	17.3743	19.6083	2.29316	2.28985	2.39481
43	Tc	18.3671	18.2508	20.619	2.4240	-	2.5368
44	Ru	19.2792	19.1504	21.6568	2.55855	2.55431	2.68323
45	Rh	20.2161	20.0737	22.7236	2.69674	2.69205	2.83441
46	Pd	21.1771	21.0201	23.8187	2.83861	2.83325	2.99022
47	Ag	22.16292	21.9903	24.9424	2.98431	2.97821	3.15094
48	Cd	23.1736	22.9841	26.0955	3.13373	3.12691	3.31657
49	In	24.2097	24.0020	27.2759	3.28694	3.27929	3.48721
50	Sn	25.2713	25.0440	28.4860	3.44398	3.43542	3.66280
51	Sb	26.3591	26.1108	29.7256	3.60472	3.59532	3.84357
52	Te	27.4723	27.2017	30.9957	3.76933	3.7588	4.02958
53	I	28.6120	28.3172	32.2947	3.93765	3.92604	4.22072
54	Xe	29.779	29.458	33.624	4.1099	-	-
55	Cs	30.9728	30.6251	34.9869	4.2865	4.2722	4.6198
56	Ba	32.1936	31.8171	36.3782	4.46626	4.45090	4.82753
57	La	33.4418	33.0341	37.8010	4.65097	4.63423	5.0421
58	Ce	34.7197	34.2789	39.2573	4.8402	4.8230	5.2622
59	Pr	36.0263	35.5502	40.7482	5.0337	5.0135	5.4889
60	Nd	37.3610	36.8474	42.2713	5.2304	5.2077	5.7216
61	Pm	38.7247	38.1712	43.826	5.4325	5.4078	5.961
62	Sm	40.1181	39.5224	45.413	5.6361	5.6090	6.2051
63	Eu	41.5422	40.9019	47.0379	5.8457	5.8166	6.4564
64	Gd	42.9962	42.3089	48.697	6.0572	6.0250	6.7132
65	Tb	44.4816	43.7441	50.382	6.2728	6.2380	6.978
66	Dy	45.9984	45.2078	52.119	6.4952	6.4577	7.2477
67	Ho	47.5467	46.6997	53.877	6.7198	6.6795	7.5253
68	Er	49.1277	48.2211	55.681	6.9487	6.9050	7.8109
69	Tm	50.7416	49.7726	57.517	7.1799	7.1331	8.101
70	Yb	52.3889	51.3540	59.37	7.4156	7.3673	8.4018
71	Lu	54.0698	52.9650	61.283	7.6555	7.6049	8.7090
72	Hf	55.7902	54.6114	63.234	7.8990	7.8446	9.0227
73	Ta	57.532	56.277	65.223	8.1461	8.0879	9.3431
74	W	59.31824	57.9817	67.2443	8.3976	8.3352	9.67235
75	Re	61.1403	59.7179	69.310	8.6525	8.5862	10.0100
76	Os	63.0005	61.4867	71.413	8.9117	8.8410	10.3553

**PHỤC LỰC 1(tiếp theo)**  
**Các vạch năng lượng tia X**

Z.	Nguyên tố	Ka1	Ka2	Kb1	La1	La2	Lb1
77	Ir	64.8956	63.2867	73.5608	9.1751	9.0995	10.7083
78	Pt	66.832	65.112	75.748	9.4423	9.3618	11.0707
79	Au	68.8037	66.9895	77.984	9.7133	9.6280	11.4423
80	Hg	70.819	68.895	80.253	9.9888	9.8976	11.8226
81	Tl	72.8715	70.8319	82.576	10.2685	10.1728	12.2133
82	Pb	74.9694	72.8042	84.936	10.5515	10.4495	12.6137
83	Bi	77.1079	74.8148	87.343	10.8388	10.73091	13.0235
84	Po	79.290	76.862	89.80	11.1308	11.0158	13.447
85	At	81.52	78.95	92.30	11.4268	11.3048	13.876
86	Rn	83.78	81.07	94.87	11.7270	11.5979	14.316
87	Fr	86.10	83.23	97.47	12.0313	11.8950	14.770
88	Ra	88.47	85.43	100.13	12.3397	12.1962	15.2358
89	Ac	90.884	87.67	102.85	12.6520	12.5008	15.713
90	Th	93.350	89.953	105.609	12.9687	12.8096	16.2022
91	Pa	95.868	92.287	108.427	13.2907	13.1222	16.702
92	U	98.439	94.665	111.300	13.6147	13.4388	17.2200
93	Np	-	-	-	13.9441	13.7597	17.7502
94	Pu	-	-	-	14.2786	14.0842	18.2937
95	Am	-	-	-	14.6172	14.4119	18.8520

## PHỤ LỤC 2

Bảng số liệu hạt nhân dùng trong phân tích kích hoạt neutron

Đồng vị bia	Đồng vị hình thành	$Q_0$	$\bar{E}_r$ (eV)	$T_{1/2}$ (giờ)	$E_\gamma$ (keV)	$k_0, \text{Au}$
F-19	F-20	2.2	44700	0.0031	1633.6	9.98E-04
Na-23	Na-24	0.59	3380	14.96	1368.6	4.68E-02
Mg-26	Mg-27	0.64	257000	0.1577	843.8	2.53E-04
Al-27	Al-28	0.71	11800	0.037357	1778.9	1.75E-02
Si-30	Si-31	1.11	2280	2.622	1266.2	1.45E-07
Cl-37	Cl-38	0.69	13700	0.620667	1642.7	1.97E-03
Cl-37	Cl-38	0.69	13700	0.620667	2167.4	2.66E-03
Ar-40	Ar-41	0.63	31000	1.822	1293.6	3.32E-02
K-41	K-42	0.87	2960	12.36	312.7	1.59E-05
K-41	K-42	0.87	2960	12.36	1524.7	9.46E-04
Ca-48	Ca-49	0.45	1330000	0.1453	3084.4	1.01E-04
Sc-45	Sc-46	0.43	5130	2011.92	889.3	1.22E+00
Sc-45	Sc-46	0.43	5130	2011.92	1120.5	1.22E+00
Ti-50	Ti-51	0.67	63200	0.096	320.1	3.74E-04
Ti-50	Ti-51	0.67	63200	0.096	928.6	2.65E-05
V-51	V-52	0.55	7230	0.0625	1434.1	1.96E-01
Cr-50	Cr-51	0.53	7530	664.8	320.1	2.62E-03
Mn-55	Mn-56	1.053	468	2.579	846.8	4.96E-01
Mn-55	Mn-56	1.053	468	2.579	1810.7	1.35E-01
Fe-58	Fe-59	0.975	637	1068	142.7	1.33E-06
Fe-58	Fe-59	0.975	637	1068	192.3	3.78E-06
Fe-58	Fe-59	0.975	637	1068	334.8	3.82E-07
Fe-58	Fe-59	0.975	637	1068	1099.3	7.77E-05
Fe-58	Fe-59	0.975	637	1068	1291.6	5.93E-05
Co-59	Co-60m	2	136	0.1745	58.6	1.51E-02
Co-60	Co-60m	2	136	0.1745	1332.5	1.75E-03
Ni-64	Ni-65	0.67	14200	2.517	366.3	2.51E-05
Ni-64	Ni-65	0.67	14200	2.517	1115.5	8.14E-05
Ni-64	Ni-65	0.67	14200	2.517	1481.8	1.27E-04
Cu-63	Cu-64	1.14	1040	12.7	511	3.70E-02
Cu-63	Cu-64	1.14	1040	12.7	1345.8	4.98E-04

## PHỤ LỤC 2(tiếp theo)

Bảng số liệu hạt nhân dùng trong phân tích kích hoạt neutron

Đồng vị bia	Đồng vị hình thành	$Q_0$	$\bar{E}_r$ (eV)	$t_{1/2}$ (giờ)	$E_\gamma$ (keV)	$k_0, \text{Au}$
Cu-65	Cu-66	1.06	766	0.085333	1039.2	1.86E-03
Zn-64	Zn-65	1.908	2560	5863.2	1115.5	5.72E-03
Zn-68	Zn-69m	3.19	590	13.76	438.6	3.98E-04
Zn-70	Zn-71	7.9	17	0.040833	121.5	1.09E-07
Zn-70	Zn-71	7.9	17	0.040833	511.6	1.55E-06
Ga-71	Ga-72	6.69	154	14.1	630	1.49E-02
Ga-71	Ga-72	6.69	154	14.1	834	5.23E-02
Ga-71	Ga-72	6.69	154	14.1	894.2	5.46E-03
Ga-71	Ga-72	6.69	154	14.1	1050.7	3.83E-03
Ga-71	Ga-72	6.69	154	14.1	2201.7	1.48E-02
Ge-74	Ge-75	1.57	3540	1.379667	198.6	6.15E-05
Ge-74	Ge-75	1.57	3540	1.379667	468.8	1.20E-05
Ge-74	Ge-75	1.57	3540	1.379667	617.7	4.69E-06
Ge-76	Ge-77	12.9	583	11.3	211	3.90E-05
Ge-76	Ge-77	12.9	583	11.3	215.5	3.55E-05
Ge-76	Ge-77	12.9	583	11.3	264.4	6.88E-05
Ge-76	Ge-77	12.9	583	11.3	367.4	1.94E-05
Ge-76	Ge-77	12.9	583	11.3	416.3	3.06E-05
Ge-76	Ge-77	12.9	583	11.3	558	2.28E-05
Ge-76	Ge-77	12.9	583	11.3	631.8	1.04E-05
Ge-76	Ge-77	12.9	583	11.3	714.4	1.14E-05
Ge-76	Ge-77	12.9	583	11.3	1085.2	8.35E-06
As-75	As-76	13.6	106	26.24	559.1	4.83E-02
As-75	As-76	13.6	106	26.24	563.2	1.40E-03
As-75	As-76	13.6	106	26.24	657.1	6.61E-03
As-75	As-76	13.6	106	26.24	1212.9	1.52E-03
As-75	As-76	13.6	106	26.24	1216.1	3.73E-03
Se-74	Se-75	10.8	29.4	2875.2	121.1	1.94E-03
Se-74	Se-75	10.8	29.4	2875.2	136	6.76E-03
Se-74	Se-75	10.8	29.4	2875.2	264.7	7.11E-03

## PHỤ LỤC 2 (tiếp theo)

Bảng số liệu hạt nhân dùng trong phân tích kích hoạt neutron

Đồng vị bia	Đồng vị hình thành	$Q_0$	$\bar{E}_r$ (eV)	$t_{1/2}$ (giờ)	$E_\gamma$ (keV)	$k_0, \text{Au}$
Se-74	Se-75	10.8	29.4	2875.2	279.5	3.00E-03
Se-74	Se-75	10.8	29.4	2875.2	400.7	1.43E-03
Br-79	Br-80	12.1	69.3	0.294667	616.3	6.92E-03
Br-79	Br-80	12.1	69.3	0.294667	666.3	1.22E-03
Br-81	Br-82	19.3	152	35.3	554.3	2.38E-02
Br-81	Br-82	19.3	152	35.3	619.1	1.45E-02
Br-81	Br-82	19.3	152	35.3	698.4	9.38E-03
Br-81	Br-82	19.3	152	35.3	776.5	2.76E-02
Br-81	Br-82	19.3	152	35.3	827.8	7.99E-03
Br-81	Br-82	19.3	152	35.3	1044	9.14E-03
Br-81	Br-82	19.3	152	35.3	1317.5	8.91E-03
Br-81	Br-82	19.3	152	35.3	1474.9	5.42E-03
Rb-85	Rb-86	14.8	838	447.12	1077	7.65E-04
Rb-87	Rb-88	23.3	364	0.296333	898	1.01E-01
Rb-87	Rb-88	23.3	364	0.296333	1836	1.57E-04
Rb-87	Rb-88	23.3	364	0.296333	2677.9	1.47E-05
Sr-84	Sr-85m	14.5	469	1.127167	231.9	6.92E-05
Sr-84	Sr-85	13.2	469	1556.16	514	9.15E-05
Sr-86	Sr-87m	4.11	795	2.803	388.5	1.49E-03
Y-89	Y-90m	5.93	4300	3.19	202.5	2.36E-05
Y-90	Y-90m	5.93	4300	3.19	479.5	2.23E-05
Zr-94	Zr-95	5.31	6260	1536.48	724.2	8.90E-05
Zr-94	Zr-95	5.31	6260	1536.48	756.7	1.10E-05
Zr-96	Zr-97	251.6	338	16.74	254.2	1.82E-07
Zr-96	Zr-97	251.6	338	16.74	355.4	2.92E-07
Zr-96	Zr-97	251.6	338	16.74	507.6	6.79E-07
Zr-96	Zr-97	251.6	338	16.74	602.4	1.90E-07
Zr-96	Zr-97	251.6	338	16.74	703.8	1.36E-07
Zr-96	Zr-97	251.6	338	16.74	1148	3.41E-07
Nb-93	Nb-94m	7.35	574	0.104333	871	9.70E-03

## PHỤ LỤC 2 (tiếp theo)

Bảng số liệu hạt nhân dùng trong phân tích kích hoạt neutron

Đồng vị bia	Đồng vị hình thành	$Q_0$	$\bar{E}_r$ (eV)	$t_{1/2}$ (giờ)	$E_\gamma$ (keV)	$k_0, \text{Au}$
Mo-98	Mo-99	53.1	241	65.94	181.1	4.15E-05
Mo-98	Mo-99	53.1	241	65.94	366.4	8.36E-06
Mo-98	Mo-99	53.1	241	65.94	739.5	8.46E-05
Mo-98	Mo-99	53.1	241	65.94	777.9	2.97E-05
Mo-98	Mo-99	53.1	241	65.94	140.5	5.27E-04
Mo-100	Mo-101	18.8	672	0.2435	80.9	1.80E-05
Mo-100	Mo-101	18.8	672	0.2435	191.9	7.25E-05
Mo-100	Mo-101	18.8	672	0.2435	195.9	1.11E-05
Mo-100	Mo-101	18.8	672	0.2435	408.7	5.85E-06
Mo-100	Mo-101	18.8	672	0.2435	499.7	5.63E-06
Mo-100	Mo-101	18.8	672	0.2435	695.6	2.79E-05
Mo-100	Mo-101	18.8	672	0.2435	713	1.37E-05
Mo-100	Mo-101	18.8	672	0.2435	877.4	1.53E-05
Mo-100	Mo-101	18.8	672	0.2435	1011.1	3.75E-06
Mo-100	Mo-101	18.8	672	0.2435	1012.5	5.80E-05
Mo-100	Mo-101	18.8	672	0.2435	1161	1.82E-05
Mo-100	Mo-101	18.8	672	0.2435	1304	1.30E-05
Mo-100	Mo-101	18.8	672	0.2435	1532.5	2.73E-05
Ru-96	Ru-97	26.5	776	69.6	215.7	2.25E-04
Ru-102	Ru-103	3.63	181	944.4	497.1	6.89E-03
Ru-102	Ru-103	3.63	181	944.4	610.3	4.30E-04
Ru-104	Ru-105	12.8	495	4.44	262.8	1.31E-04
Ru-104	Ru-105	12.8	495	4.44	469.4	3.26E-04
Ru-104	Ru-105	12.8	495	4.44	676.4	2.95E-04
Ru-104	Ru-105	12.8	495	4.44	724.3	8.87E-04
Rh-103	Rh-104	6.75	1.45	0.01175	555.8	6.92E-02
Pd-108	Pd-109m	25	39.7	0.078167	188.9	4.94E-04
Pd-108	Pd-109	26.6	39.7	13.46	311.4	1.48E-04
Pd-108	Pd-109	26.6	39.7	13.46	647.3	1.13E-05
Pd-110	Pd-111m	11.9	950	5.5	172.2	1.07E-05

## PHỤ LỤC 2 (tiếp theo)

Bảng số liệu hạt nhân dùng trong phân tích kích hoạt neutron

Đồng vị bia	Đồng vị hình thành	$Q_0$	$\bar{E}_r$ (eV)	$t_{1/2}$ (giờ)	$E_\gamma$ (keV)	$k_0, \text{Au}$
Ag-107	Ag-108	2.9	38.5	0.0395	434	1.59E-03
Ag-107	Ag-108	2.9	38.5	0.0395	618.9	9.33E-04
Ag-107	Ag-108	2.9	38.5	0.0395	633	6.01E-03
Ag-109	Ag-110m	16.7	6.08	5995.2	446.8	1.36E-03
Ag-109	Ag-110m	16.7	6.08	5995.2	620.4	1.02E-03
Ag-109	Ag-110m	16.7	6.08	5995.2	657.8	3.50E-02
Ag-109	Ag-110m	16.7	6.08	5995.2	677.6	3.93E-03
Ag-109	Ag-110m	16.7	6.08	5995.2	687	2.43E-03
Ag-109	Ag-110m	16.7	6.08	5995.2	706.7	6.03E-03
Ag-109	Ag-110m	16.7	6.08	5995.2	744.3	1.69E-03
Ag-109	Ag-110m	16.7	6.08	5995.2	763.9	8.27E-03
Ag-109	Ag-110m	16.7	6.08	5995.2	818	2.69E-03
Ag-109	Ag-110m	16.7	6.08	5995.2	884.7	2.69E-02
Ag-109	Ag-110m	16.7	6.08	5995.2	937.5	1.27E-02
Ag-109	Ag-110m	16.7	6.08	5995.2	1384.3	9.12E-03
Ag-109	Ag-110m	16.7	6.08	5995.2	1475.8	1.50E-03
Ag-109	Ag-110m	16.7	6.08	5995.2	1505	4.84E-03
Ag-109	Ag-110m	16.7	6.08	5995.2	1562.3	4.35E-04
Cd-114	Cd-115	32.4	207	53.46	527.9	4.77E-04
Cd-114	In-115m	32.4	207	4.486	336.2	7.73E-04
In-113	In-114m	24.2	6.41	1188.24	190.3	1.06E-03
In-113	In-114m	24.2	6.41	1188.24	558.4	2.86E-04
In-113	In-114m	24.2	6.41	1188.24	725.2	2.90E-04
In-115	In-116m	16.8	1.56	0.906833	138.3	1.01E-01
In-115	In-116m	16.8	1.56	0.906833	416.9	7.54E-01
In-115	In-116m	16.8	1.56	0.906833	818.7	3.36E-01
In-115	In-116m	16.8	1.56	0.906833	1097.3	1.60E+00
In-115	In-116m	16.8	1.56	0.906833	1293.5	2.29E+00
In-115	In-116m	16.8	1.56	0.906833	1507.4	2.69E-01
In-115	In-116m	16.8	1.56	0.906833	2112.1	4.18E-01

## PHỤ LỤC 2 (tiếp theo)

Bảng số liệu hạt nhân dùng trong phân tích kích hoạt neutron

Đồng vị bia	Đồng vị hình thành	$Q_0$	$\bar{E}_r$ (eV)	$t_{1/2}$ (giờ)	$E_\gamma$ (keV)	$k_0, \text{Au}$
Sn-112	Sn-113	48,4	107	2762.4	255.1	1.95E-06
Sn-116	Sn-117m	56.3	128	326.4	156	3.23E-07
Sn-116	Sn-117m	56.3	128	326.4	158.6	1.36E-05
Sn-122	Sn-123m	5.4	424	0.667667	160.3	1.02E-04
Sn-124	Sn-125m	60,1	74,2	0.158667	331.9	1.18E-04
Sn-124	Sn-125m	17.2	74.2	231.36	332.1	5.73E-08
Sn-124	Sn-125m	17.2	74.2	231.36	822.5	2.10E-07
Sn-124	Sn-125m	17.2	74.2	231.36	1067.1	4.64E-07
Sb-121	Sb-122	33	13.1	65.376	564.2	4.38E-02
Sb-121	Sb-122	33	13.1	65.376	692.7	2.38E-03
Sb-123	Sb-124	28.8	28.2	1444.8	602.7	2.96E-02
Sb-123	Sb-124	28.8	28.2	1444.8	645.9	2.21E-03
Sb-123	Sb-124	28.8	28.2	1444.8	722.8	3.19E-03
Sb-123	Sb-124	28.8	28.2	1444.8	1691	1.41E-02
Sb-123	Sb-124	28.8	28.2	1444.8	2090.9	1.58E-03
I-127	I-128	24.8	57.6	0.4165	442.9	1.12E-02
I-127	I-128	24.8	57.6	0.4165	526.6	1.07E-03
Cs-133	Cs-134m	11.8	9.27	2.903	127.5	5.48E-03
Ba-130	Ba-131	24.8	69.9	276	123.8	3.90E-05
Ba-130	Ba-131	24.8	69.9	276	133.6	3.24E-06
Ba-130	Ba-131	24.8	69.9	276	216.1	2.75E-05
Ba-130	Ba-131	24.8	69.9	276	373.2	1.92E-05
Ba-130	Ba-131	24.8	69.9	276	486.5	3.44E-06
Ba-130	Ba-131	24.8	69.9	276	496.3	6.48E-05
Ba-130	Ba-131	24.8	69.9	276	620.1	2.34E-06
Ba-132	Ba-133m	5.6	143	38.9	275.9	2.27E-06
Ba-138	Ba-139	0.88	15700	1.384333	165.9	1.05E-03
La-139	La-140	1.24	76	40.272	328.8	2.87E-02
La-139	La-140	1.24	76	40.272	487	6.37E-02
La-139	La-140	1.24	76	40.272	815.8	3.32E-02

## PHỤ LỤC 2 (tiếp theo)

Bảng số liệu hạt nhân dùng trong phân tích kích hoạt neutron

Đồng vị bia	Đồng vị hình thành	$Q_0$	$\bar{E}_r$ (eV)	$t_{1/2}$ (giờ)	$E_\gamma$ (keV)	$k_0, \text{Au}$
La-139	La-140	1.24	76	40.272	1596.2	1.34E-01
Ce-140	Ce-141	0.83	7200	780.24	145.4	3.66E-03
Ce-142	Ce-143	1.2	1540	33.1	231.6	3.37E-05
Ce-142	Ce-143	1.2	1540	33.1	293.3	6.89E-04
Ce-142	Ce-143	1.2	1540	33.1	350.6	5.14E-05
Ce-142	Ce-143	1.2	1540	33.1	664.6	9.18E-05
Ce-142	Ce-143	1.2	1540	33.1	721.9	8.78E-05
Pr-141	Pr-142	1.51	296	19.12	1575.6	6.12E-03
Nd-146	Nd-147	2	874	263.52	91.1	1.02E-03
Nd-146	Nd-147	2	874	263.52	120.5	1.28E-05
Nd-146	Nd-147	2	874	263.52	275.4	2.86E-05
Nd-146	Nd-147	2	874	263.52	319.4	6.78E-05
Nd-146	Nd-147	2	874	263.52	398.2	2.90E-05
Nd-146	Nd-147	2	874	263.52	439.9	4.22E-05
Nd-146	Nd-147	2	874	263.52	531	4.56E-04
Nd-146	Nd-147	2	874	263.52	685.9	2.68E-05
Nd-148	Nd-149	5.08	236	1.728	97	3.32E-05
Nd-148	Nd-149	5.08	236	1.728	114.3	4.05E-04
Nd-148	Nd-149	5.08	236	1.728	198	2.98E-05
Nd-148	Nd-149	5.08	236	1.728	208.1	5.71E-05
Nd-148	Nd-149	5.08	236	1.728	211.3	5.26E-04
Nd-148	Nd-149	5.08	236	1.728	240.2	7.72E-05
Nd-148	Nd-149	5.08	236	1.728	267.7	1.16E-04
Nd-148	Nd-149	5.08	236	1.728	270.2	2.12E-04
Nd-148	Nd-149	5.08	236	1.728	326.6	9.10E-05
Nd-148	Nd-149	5.08	236	1.728	347.8	2.96E-05
Nd-148	Nd-149	5.08	236	1.728	540.5	1.35E-04
Nd-148	Nd-149	5.08	236	1.728	654.8	1.66E-04
Nd-148	Pm-149	5.08	236	53.08	286	6.10E-05
Nd-150	Nd-151	12.3	173	0.207333	255.7	1.31E-04

## PHỤ LỤC 2 (tiếp theo)

Bảng số liệu hạt nhân dùng trong phân tích kích hoạt neutron

Đồng vị bia	Đồng vị hình thành	$Q_0$	$\bar{E}_r$ (eV)	$T_{1/2}$ (giờ)	$E_\gamma$ (keV)	$k_0, \text{Au}$
Nd-150	Nd-151	12.3	173	0.207333	1180.9	1.09E-04
Nd-150	Pm-151	12.3	173	28.4	340.1	1.73E-04
Sm-152	Sm-153	14.4	8.53	46.5	69.7	3.52E-02
Sm-152	Sm-153	14.4	8.53	46.5	103.2	2.31E-01
Sm-154	Sm-155	4.3	142	0.371667	141.4	4.83E-04
Sm-154	Sm-155	4.3	142	0.371667	245.7	9.05E-04
Eu-151	Eu-152m	1.492406	0.448	9.312	121.8	1.48E+00
Eu-152	Eu-152m	1.492406	0.448	9.312	344.2	4.98E-01
Eu-153	Eu-152m	1.492406	0.448	9.312	841.6	3.02E+00
Eu-154	Eu-152m	1.492406	0.448	9.312	963.3	2.49E+00
Gd-152	Gd-153	0.77	16.7	5769.6	97.4	5.86E-03
Gd-152	Gd-153	0.77	16.7	5769.6	103.2	4.21E-03
Gd-158	Gd-159	29.9	48.2	18.56	363.5	8.49E-04
Gd-160	Gd-161	3.83	480	0.061	102.3	7.88E-04
Gd-160	Gd-161	3.83	480	0.061	165.2	1.07E-04
Gd-160	Gd-161	3.83	480	0.061	283.6	2.84E-04
Gd-160	Gd-161	3.83	480	0.061	314.9	1.03E-03
Gd-160	Gd-161	3.83	480	0.061	360.9	2.72E-03
Gd-160	Gd-161	3.83	480	0.061	480.1	1.04E-04
Tb-159	Tb-160	17.9	18.1	1735.2	86.8	4.20E-02
Tb-159	Tb-160	17.9	18.1	1735.2	197	1.62E-02
Tb-159	Tb-160	17.9	18.1	1735.2	215.6	1.27E-02
Tb-159	Tb-160	17.9	18.1	1735.2	298.6	8.25E-02
Tb-159	Tb-160	17.9	18.1	1735.2	879.4	9.42E-02
Tb-159	Tb-160	17.9	18.1	1735.2	962.3	1.08E-01
Tb-159	Tb-160	17.9	18.1	1735.2	966.2	7.84E-02
Tb-159	Tb-160	17.9	18.1	1735.2	1178	4.71E-02
Tb-159	Tb-160	17.9	18.1	1735.2	1199.9	7.53E-03
Tb-159	Tb-160	17.9	18.1	1735.2	1271.9	2.35E-02
Tb-159	Tb-160	17.9	18.1	1735.2	1312.1	8.98E-03

## PHỤ LỤC 2 (tiếp theo)

Bảng số liệu hạt nhân dùng trong phân tích kích hoạt neutron

Đồng vị bia	Đồng vị hình thành	$Q_0$	$\bar{E}_r$ (eV)	$T_{1/2}$ (giờ)	$E_\gamma$ (keV)	$k_{0,Au}$
Dy-164	Dy-165	0.19	224	2.334	94.7	3.57E-01
Dy-164	Dy-165	0.19	224	2.334	279.8	4.88E-02
Dy-164	Dy-165	0.19	224	2.334	361.7	8.36E-02
Dy-164	Dy-165	0.19	224	2.334	633.4	5.62E-02
Dy-164	Dy-165	0.19	224	2.334	715.3	5.23E-02
Ho-165	Ho-166	10.9	12.3	26.83	80.6	4.94E-02
Ho-165	Ho-166	10.9	12.3	26.83	1379.4	6.95E-03
Ho-165	Ho-166	10.9	12.3	26.83	1581.9	1.40E-03
Ho-165	Ho-166	10.9	12.3	26.83	1662.5	8.75E-04
Er-170	Er-171	4.42	129	7.516	111.6	3.41E-03
Er-170	Er-171	4.42	129	7.516	116.7	3.81E-04
Er-170	Er-171	4.42	129	7.516	124	1.52E-03
Er-170	Er-171	4.42	129	7.516	237.1	5.23E-05
Er-170	Er-171	4.42	129	7.516	295.9	4.79E-03
Er-170	Er-171	4.42	129	7.516	308.3	1.04E-02
Tm-169	Tm-170	13.7	4.8	3086.4	84.3	3.26E-02
Yb-168	Yb-169	4.833482	0.61	768.72	63.1	2.04E-02
Yb-168	Yb-169	4.833482	0.61	768.72	109.8	7.79E-03
Yb-168	Yb-169	4.833482	0.61	768.72	130.5	5.17E-03
Yb-168	Yb-169	4.833482	0.61	768.72	177.2	1.04E-02
Yb-168	Yb-169	4.833482	0.61	768.72	198	1.64E-02
Yb-168	Yb-169	4.833482	0.61	768.72	307.7	4.34E-03
Yb-174	Yb-175	0.46	602	100.44	113.8	9.42E-03
Yb-174	Yb-175	0.46	602	100.44	137.7	5.69E-04
Yb-174	Yb-175	0.46	602	100.44	144.9	1.59E-03
Yb-174	Yb-175	0.46	602	100.44	282.5	1.46E-02
Yb-174	Yb-175	0.46	602	100.44	396.3	3.12E-02
Yb-176	Yb-177	2.5	412	1.911	122.7	1.64E-04
Yb-176	Yb-177	2.5	412	1.911	139.3	6.48E-05
Yb-176	Yb-177	2.5	412	1.911	150.6	8.94E-04

## PHỤ LỤC 2 (tiếp theo)

Bảng số liệu hạt nhân dùng trong phân tích kích hoạt neutron

Đồng vị bia	Đồng vị hình thành	$Q_0$	$\bar{E}_r$ (eV)	$T_{1/2}$ (giờ)	$E_\gamma$ (keV)	$k_{0,Au}$
Yb-176	Yb-177	2.5	412	1.911	898.9	3.12E-05
Yb-176	Yb-177	2.5	412	1.911	914.8	4.87E-05
Yb-176	Yb-177	2.5	412	1.911	1028.1	2.94E-05
Yb-176	Yb-177	2.5	412	1.911	1080.2	2.68E-04
Yb-176	Yb-177	2.5	412	1.911	1119.7	2.74E-05
Yb-176	Yb-177	2.5	412	1.911	1149.8	2.96E-05
Yb-176	Yb-177	2.5	412	1.911	1241.2	1.62E-04
Lu-175	Lu-176m	34.8	16.1	3.635	88.4	1.73E-02
Lu-176	Lu-177	1.908933	0.158	161.52	112.9	4.15E-02
Lu-176	Lu-177	1.908933	0.158	161.52	208.4	7.14E-02
Hf-174	Hf-175	0.78	29.6	1680	343.4	9.06E-03
Hf-178	Hf-179m	16.6	7.9	0.005186	214.3	1.77E-01
Hf-179	Hf-180m	14.4	16.2	5.5	93.3	1.24E-04
Hf-180	Hf-180m	14.4	16.2	5.5	215.4	5.91E-04
Hf-181	Hf-180m	14.4	16.2	5.5	332.3	6.74E-04
Hf-182	Hf-180m	14.4	16.2	5.5	443.2	5.88E-04
Hf-183	Hf-180m	14.4	16.2	5.5	500.7	1.02E-04
Hf-180	Hf-181	2.52	115	1017.36	133	2.37E-02
Hf-180	Hf-181	2.52	115	1017.36	136.3	3.65E-03
Hf-180	Hf-181	2.52	115	1017.36	345.9	7.93E-03
Hf-180	Hf-181	2.52	115	1017.36	482.2	4.56E-02
Ta-181	Ta-182	33.3	10.4	2745.6	67.8	9.08E-02
Ta-181	Ta-182	33.3	10.4	2745.6	100.1	3.18E-02
Ta-181	Ta-182	33.3	10.4	2745.6	152.4	1.62E-02
Ta-181	Ta-182	33.3	10.4	2745.6	222.1	1.78E-02
Ta-181	Ta-182	33.3	10.4	2745.6	1121.3	8.27E-02
Ta-181	Ta-182	33.3	10.4	2745.6	1189.1	3.88E-02
Ta-181	Ta-182	33.3	10.4	2745.6	1221.4	6.45E-02
Ta-181	Ta-182	33.3	10.4	2745.6	1231	2.72E-02
W-186	W-187	13.7	20.5	23.72	134.2	1.13E-02
W-186	W-187	13.7	20.5	23.72	479.6	2.97E-02

## PHỤ LỤC 2 (tiếp theo)

Bảng số liệu hạt nhân dùng trong phân tích kích hoạt neutron

Đồng vị bia	Đồng vị hình thành	$Q_0$	$\bar{E}_r$ (eV)	$T_{1/2}$ (giờ)	$E_\gamma$ (keV)	$k_{0,Au}$
W-186	W-187	13.7	20.5	23.72	551.5	6.91E-03
W-186	W-187	13.7	20.5	23.72	618.3	8.65E-03
W-186	W-187	13.7	20.5	23.72	772.9	5.61E-03
Re-185	Re-186	15.4	3.4	89.232	122.6	2.79E-03
Re-185	Re-186	15.4	3.4	89.232	137.2	4.33E-02
Re-187	Re-188m	4.57	41.1	0.31	92.4	7.77E-04
Re-187	Re-188m	4.57	41.1	0.31	106	1.50E-03
Re-187	Re-188	4.34	41.1	17.01	155	7.77E-02
Re-187	Re-188	4.34	41.1	17.01	478	5.29E-03
Re-187	Re-188	4.34	41.1	17.01	633	6.83E-03
Re-187	Re-188	4.34	41.1	17.01	635	8.08E-04
Re-187	Re-188	4.34	41.1	17.01	829.5	2.17E-03
Re-187	Re-188	4.34	41.1	17.01	931.3	2.85E-03
Os-192	Os-193	2.34	89.7	30.11	138.9	5.35E-04
Os-192	Os-193	2.34	89.7	30.11	142.1	9.49E-06
Os-192	Os-193	2.34	89.7	30.11	251.6	3.04E-05
Os-192	Os-193	2.34	89.7	30.11	280.4	1.79E-04
Os-192	Os-193	2.34	89.7	30.11	298.8	2.83E-05
Os-192	Os-193	2.34	89.7	30.11	321.6	1.78E-04
Os-192	Os-193	2.34	89.7	30.11	361.8	3.81E-05
Os-192	Os-193	2.34	89.7	30.11	387.5	1.73E-04
Os-192	Os-193	2.34	89.7	30.11	460.5	5.55E-04
Ir-193	Ir-194	12	2.21	19.28	293.5	2.03E-02
Ir-193	Ir-194	12	2.21	19.28	328.4	1.03E-01
Ir-193	Ir-194	12	2.21	19.28	645.1	9.38E-03
Ir-193	Ir-194	12	2.21	19.28	938.7	4.76E-03
Au-197	Au-198	15.7	5.65	64.68	411.8	1.00E+00
Hg-196	Hg-197m	0.49	93.5	23.8	134	4.99E-04
Hg-202	Hg-203	0.88	1960	1118.64	279.2	1.10E-02
Th-232	Pa-233	11.5	54.4	647.28	300.1	4.37E-03
Th-232	Pa-233	11.5	54.4	647.28	311.9	2.52E-02

## PHỤ LỤC 2 (tiếp theo)

Bảng số liệu hạt nhân dùng trong phân tích kích hoạt neutron

Đồng vị bàu	Đồng vị hình thành	$Q_0$	$E_n$ (eV)	$T_{1/2}$ (giờ)	$E_\gamma$ (keV)	$k_{0,Au}$
Th-232	Pa-233	11.5	54.4	647.28	340.5	2.95E-03
Th-232	Pa-233	11.5	54.4	647.28	375.4	4.49E-04
Th-232	Pa-233	11.5	54.4	647.28	398.5	9.26E-04
Th-232	Pa-233	11.5	54.4	647.28	415.8	1.16E-03
U-238	Np-239	103.4	16.9	56.568	106.1	6.52E-03
U-238	Np-239	103.4	16.9	56.568	209.8	7.80E-04
U-238	Np-239	103.4	16.9	56.568	226.4	2.76E-03
U-238	Np-239	103.4	16.9	56.568	277.6	3.40E-03
U-238	Np-239	103.4	16.9	56.568	285.8	1.83E-04
U-238	Np-239	103.4	16.9	56.568	315.9	3.68E-04
U-238	Np-239	103.4	16.9	56.568	334.2	4.81E-04

January 22, 2014

### Gamma Ray Energy Peaks & Intensities Arranged by Increasing Energy

Energy1 (keV)	Intensity %	Half-Life Isotope	Unit	Energy2 (keV)	Intensity %	Energy3 (keV)	Intensity %	Energy4 (keV)	Intensity %	Energy5 (keV)	Intensity %	Energy6 (keV)	Intensity %	Energy7 (keV)
6.24	1.03%	W-181	d	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---
8.15	15.06%	Hf-181	d	56.28	9.022%	57.535	15.64%	64.948	1.764%	65.222	3.408%	133.021	43.35%	136.26
9.44	46.722%	Pt-191	d	9.56	100%	65.122	2.51%	66.831	4.26%	91.11	12.152%	---	---	---
9.56	100%	Pt-191	d	9.44	46.722%	65.122	2.51%	66.831	4.26%	91.11	12.152%	---	---	---
9.71	58.4%	Au-198	d	50.5	22%	66.991	24.1%	68.806	40.722%	97.21	69.5%	180.31	49.5%	204.10
12.30	7.15%	Th-232	y	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---
12.33	1.53%	Ba-133m	h	275.92	17.8%	---	---	---	---	---	---	---	---	---
13.00	7.3%	U-238	y	1879	32.8%	2512.75	65.12%	---	---	---	---	---	---	---
13.85	1.22%	Ba-140	d	29.96	14.1%	162.66	6.22%	304.85	4.29%	423.72	3.15%	437.58	1.929%	537.26
14.41	9.16%	Co-57	d	122.06	85.6%	136.47	10.68%	---	---	---	---	---	---	---
23.87	16.1%	Sn-119m	d	25.27	14.3%	65.66	0.02%	---	---	---	---	---	---	---
24.002	10.74%	Cd-115	h	24.21	19.8%	27.238	1.78%	27.276	3.44%	260.896	1.944%	336.241	45.99%	492.351
24.21	19.8%	Cd-115	h	24.002	10.74%	27.238	1.78%	27.276	3.44%	260.896	1.944%	336.241	45.99%	492.351
25.27	14.3%	Sn-119m	d	23.87	16.1%	65.66	0.02%	---	---	---	---	---	---	---
25.65	23.2%	Tb-161	d	48.92	17%	57.20	1.79%	74.57	10.2%	---	---	---	---	---
26.34	2.4%	Am-241	y	59.54	35.9%	---	---	---	---	---	---	---	---	---
27.238	1.78%	Cd-115	h	24.002	10.74%	24.21	19.8%	27.276	3.44%	260.896	1.944%	336.241	45.99%	492.351
27.276	3.44%	Cd-115	h	24.002	10.74%	24.21	19.8%	27.238	1.78%	260.896	1.944%	336.241	45.99%	492.351
28.24	1.13%	Dy-166	h	82.47	14%	---	---	---	---	---	---	---	---	---
29.37	2.5%	Th-233	m	86.48	2.7%	459.22	1.4%	94.66	0.8%	---	---	---	---	---
29.96	14.1%	Ba-140	d	13.85	1.22%	162.66	6.22%	304.85	4.29%	423.72	3.15%	437.58	1.929%	537.26
30.90	2.28%	Pt-195m	d	98.85	11.4%	129.70	2.83%	---	---	---	---	---	---	---
31.817	1.99%	Cs-137	y	32.194	3.641%	661.657	85.102%	---	---	---	---	---	---	---
32.194	3.641%	Cs-137	y	31.817	1.99%	661.657	85.102%	---	---	---	---	---	---	---
35.49	6.68%	I-125	d	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---
35.49	4.29%	Sb-125	y	176.31	6.823%	380.45	1.516%	427.88	30%	463.37	10.493%	600.60	17.86%	606.72

37.05	39.1%	Br-80m 4.420	h	48.79	0.317%	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---
40.58	1.05%	Mo-99 65.976	h	140.51	89.43%	181.06	5.99%	366.42	1.191%	739.50	12.13%	777.92	4.26%	---	---	---
43.50	4.14%	U-239 23.450	m	74.66	49.2%	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---
45.30	1.326%	Eu-155 4.753	y	60.01	1.13%	86.55	30.7%	105.31	21.2%	---	---	---	---	---	---	---
46.48	5.8%	Ta-183 5.100	d	52.60	5.8%	99.08	6.7%	107.93	11%	161.35	8.9%	162.32	4.88%	244.26	---	---
48.92	17%	Tb-161 6.890	d	25.65	23.2%	57.20	1.79%	74.57	10.2%	---	---	---	---	---	---	---
49.72	15%	Te-132 3.204	d	111.76	1.74%	116.30	1.96%	228.16	88%	---	---	---	---	---	---	---
50.50	22%	Au-198 2.695	d	9.71	58.4%	66.991	24.1%	68.806	40.722%	97.21	69.5%	180.31	49.5%	204.10	---	---
51.42	48%	Rh-104m 4.340	m	97.10	2.99%	77.50	2.08%	555.80	0.13%	---	---	---	---	---	---	---
52.60	5.8%	Ta-183 5.100	d	46.48	5.8%	99.08	6.7%	107.93	11%	161.35	8.9%	162.32	4.88%	244.26	8	8
53.16	2.199%	Ba-133 10.551	y	79.61	2.62%	81.00	34.06%	276.40	7.164%	302.85	18.33%	356.02	62.05%	383.85	8	8
56.28	9.022%	Hf-181 42.390	d	8.15	15.06%	57.535	15.64%	64.948	1.764%	65.222	3.408%	133.021	43.35%	136.26	8	8
57.20	1.79%	Tb-161 6.890	d	25.65	23.2%	48.92	17%	74.57	10.2%	---	---	---	---	---	---	---
57.36	11.7%	Ce-143 33.039	h	231.55	2.05%	293.27	42.8%	350.62	3.23%	490.37	2.161%	664.57	5.69%	721.93	8	8
57.535	15.64%	Hf-181 42.390	d	8.15	15.06%	56.28	9.022%	64.948	1.764%	65.22	3.408%	133.021	43.35%	136.26	8	8
57.549	48.43%	Hf-180m 5.520	h	332.307	94.4%	443.181	85.34%	215.251	81.66%	93.33	16.99%	500.714	12.84%	---	---	---
58.0	2.22%	Dy-159 144.400	d	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---
58.0	2.15%	Gd-159 18.560	h	363.60	11.4%	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---
58.0	0.039%	Ir-192m 1.450	m	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---
58.60	2%	Co-60m 10.470	m	1332.50	0.24%	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---
59.54	35.9%	Am-241 432.600	y	26.34	2.4%	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---
59.69	2.69%	Er-172 49.300	h	68.11	3.29%	127.81	2.13%	202.72	1.03%	383.5	2.35%	407.34	42.1%	446.020	2	2
60.01	1.13%	Eu-155 4.753	y	45.30	1.326%	86.55	30.7%	105.31	21.2%	---	---	---	---	---	---	---
61.25	12%	Sm-145 340.000	d	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---
61.40	44.34%	Sb-122m 4.191	m	76.08	18.4%	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---
61.46	1.29%	Np-239 2.356	d	106.13	27.2%	209.75	3.42%	228.18	10.76%	277.6	14.38%	315.88	1.6%	334.310	2	2
63.12	44.2%	Yb-169 32.018	d	93.62	2.61%	109.78	17.47%	118.19	1.86%	130.52	11.31%	177.21	22.16%	197.960	2	2
63.58	21.6%	Re-188m 18.600	m	105.87	10.8%	92.46	5.2%	156.01	0.62%	---	---	---	---	---	---	---
64.948	1.764%	Hf-181 42.390	d	8.15	15.06%	56.28	9.022%	57.535	15.64%	65.222	3.408%	133.021	43.35%	136.260	8	8
65.122	2.51%	Pt-191 2.830	d	9.44	46.722%	9.56	100%	66.831	4.26%	91.11	12.152%	---	---	---	---	---

65.222	3.408%	Hf-181	42.390	d	8.15	15.06%	56.28	9.02%	57.535	15.64%	64.948	1.764%	133.021	43.35%	136.260
65.66	0.02%	Sn-119m	293.100	d	23.87	16.1%	25.27	14.3%	---	---	---	---	---	---	---
66.05	1.112%	Se-75	119.790	d	96.73	3.42%	121.12	17.2%	136.0	58.3%	198.61	1.48%	264.66	58.9%	279.540
66.831	4.26%	Pt-191	2.830	d	9.44	46.722%	9.56	100%	65.122	2.51%	91.11	12.152%	---	---	---
66.88	4.79%	Cs-136	13.040	d	86.36	5.18%	153.25	5.75%	176.60	10%	273.65	11.1%	340.55	42.2%	818.510
66.991	24.1%	Au-198	2.695	d	9.71	58.4%	50.50	22%	68.806	40.72%	97.21	69.5%	180.31	49.5%	204.100
67.75	41.2%	Ta-182	114.740	d	100.11	2.65%	152.43	6.93%	222.11	7.49%	229.32	3.63%	1121.30	34.9%	1189.050
68.11	3.29%	Er-172	49.300	h	59.69	2.69%	127.81	2.13%	202.72	1.03%	383.5	2.35%	407.34	42.1%	446.020
68.806	40.722%	Au-198	2.695	d	9.71	58.4%	50.50	22%	66.991	24.1%	97.21	69.5%	180.31	49.5%	204.100
69.67	2.419%	Gd-153	240.400	d	97.43	29%	103.18	21.11%	---	---	---	---	---	---	---
69.67	4.85%	Sm-153	46.284	h	103.18	30%	---	---	---	---	---	---	---	---	---
72.0	11.14%	W-187	23.900	h	685.77	27.3%	479.53	21.8%	134.24	8.85%	618.36	6.28%	551.53	5.08%	772.890
73.04	3.2%	Os-193	30.110	h	138.94	4.27%	280.46	1.24%	321.60	1.28%	387.52	1.26%	460.55	3.95%	557.430
74.57	10.2%	Tb-161	6.890	d	25.65	23.2%	48.92	17%	57.20	1.79%	---	---	---	---	---
74.66	49.2%	U-239	23.470	m	43.50	4.14%	---	---	---	---	---	---	---	---	---
75.35	1.39%	Pa-233	26.975	d	86.81	1.97%	300.34	6.62%	312.17	38.6%	340.81	4.47%	398.62	1.39%	415.760
76.08	18.4%	Sb-122m	4.191	m	61.40	44.34%	---	---	---	---	---	---	---	---	---
77.16	1.5%	Pt-199	30.800	m	542.99	15.0%	493.77	5.59%	317.06	4.95%	185.77	3.32%	191.71	2.34%	246.46
77.35	18.7%	Hg-197	64.140	h	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---
77.35	17%	Pt-197	19.890	h	191.44	3.7%	268.78	0.231%	---	---	---	---	---	---	---
77.50	2.08%	Rh-104m	4.340	m	51.40	48.0%	97.10	2.99%	555.80	0.13%	---	---	---	---	---
78.74	6.50%	Tm-172	63.600	h	181.53	2.75%	912.13	1.42%	1093.66	6%	1387.09	5.6%	1465.93	4.5%	1470.42
79.61	2.62%	Ba-133	10.551	y	53.16	2.199%	81.00	34.06%	276.40	7.164%	302.85	18.33%	---	---	---
80.57	12.33%	Ho-166m	1200.000	y	184.41	72.6%	280.46	29.77%	410.94	11.41%	529.8	9.69%	711.68	55.32%	752.29
80.57	6.71%	Ho-166	26.824	h	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---
81.00	34.06%	Ba-133	10.551	y	53.16	2.199%	79.61	2.62%	276.40	7.164%	302.85	18.33%	356.02	62.05%	383.85
82.47	14%	Dy-166	81.600	h	28.24	1.13%	---	---	---	---	---	---	---	---	---
86.36	5.18%	Cs-136	13.040	d	66.88	4.79%	153.25	5.75%	176.60	10%	273.65	11.1%	340.55	42.2%	818.51
86.48	2.7%	Th-233	22.300	m	29.37	2.50%	459.22	1.4%	94.66	0.8%	669.9	0.68%	---	---	---
86.55	30.7%	Eu-155	4.753	y	45.30	1.326%	60.01	1.13%	105.31	21.2%	---	---	---	---	---
86.79	13.15%	Tb-160	72.300	d	197.04	5.18%	215.65	4.02%	298.58	26.13%	879.38	30.1%	962.32	9.81%	966.17
86.81	1.97%	Pa-233	26.975	d	75.35	1.39%	300.34	6.62%	312.17	38.6%	340.81	4.47%	398.62	1.39%	415.76

88.04	3.61%	Cd-109	461.400	d	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	
88.04	3.6%	Pd-109	13.700	h	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	
89.36	2.4%	Hf-175	70.000	d	343.40	84%	433.00	1.436%	---	---	---	---	---	---	---	---	---	
91.10	28%	Nd-147	10.980	d	319.41	1.95%	439.90	1.2%	531.02	13.1%	---	---	---	---	---	---	---	
91.11	12.152%	Pt-191	2.830	d	9.44	46.722%	9.56	100%	65.122	2.51%	66.831	4.26%	---	---	---	---	---	
91.27	7%	Cu-67	61.830	h	93.31	16.1%	184.58	48.7%	---	---	---	---	---	---	---	---	---	
92.46	5.2%	Re-	188m	18.600	m	63.58	21.6%	105.87	10.8%	156.01	0.62%	---	---	---	---	---	---	
93.31	16.1%	Cu-67	61.830	h	91.27	7%	184.58	48.7%	---	---	---	---	---	---	---	---	---	
93.33	16.99%	Hf-	180m	5.520	h	332.307	94.4%	443.181	85.34%	215.251	81.66%	57.549	48.43%	500.714	12.84%	---	---	
93.62	2.61%	Yb-169	32.018	d	63.12	44.2%	109.78	17.47%	118.19	1.86%	130.52	11.31%	177.21	22.16%	197.96	1	1	
94.66	0.8%	Th-233	22.300	m	86.48	2.7%	29.37	2.5%	459.22	1.4%	669.9	0.68%	---	---	---	---	---	
94.70	3.58%	Dy-165	2.334	h	361.68	0.84%	633.42	0.568%	715.33	0.535%	279.76	0.498%	---	---	---	---	---	
95.73	9.62%	Se-79m	3.920	m	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	
96.73	3.42%	Se-75	119.790	d	66.05	1.112%	121.12	17.2%	136.0	58.30%	198.61	1.48%	264.66	58.9%	279.54	1	1	
97.10	2.99%	Rh-	104m	4.340	m	51.40	48%	77.50	2.08%	555.8	0.13%	---	---	---	---	---	---	
97.21	69.5%	Au-198	2.695	d	9.71	58.4%	50.50	22%	66.991	24.1%	68.806	40.722%	180.31	49.5%	204.10	1	1	
97.43	29%	Gd-153	240.400	d	69.67	2.419%	103.18	21.11%	---	---	---	---	---	---	---	---	---	
98.85	11.4%	Pt-	195m	4.010	d	30.90	2.28%	129.70	2.83%	---	---	---	---	---	---	---	---	
99.08	6.7%	Ta-183	5.100	d	46.48	5.8%	52.60	5.8%	107.93	11%	161.35	8.9%	162.32	4.88%	244.26	1	1	
100.02	2.54%	Pm-151	28.400	h	104.84	3.51%	167.75	8.3%	177.16	3.82%	240.09	3.82%	275.21	6.8%	340.08	2	2	
100.11	2.65%	Ta-182	114.740	d	67.75	41.2%	152.43	6.93%	222.11	7.49%	229.32	3.63%	1121.30	34.9%	1189.05	1	1	
102.06	10.37%	Te-	131m	33.250	h	240.93	9.91%	334.27	12.49%	773.67	49.9%	782.49	10.16%	793.75	18.1%	852.21	2	2
102.31	13.9%	Gd-161	3.660	m	360.94	60.1%	314.92	22.7%	283.55	5.95%	56.29	3.77%	480.12	2.68%	165.21	2	2	
103.01	13%	Se-81m	57.280	m	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---		
103.18	30%	Sm-153	46.284	h	69.67	4.85%	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---		
103.18	21.11%	Gd-153	240.400	d	69.67	2.419%	97.43	29%	---	---	---	---	---	---	---	---		
104.33	74.6%	Sm-155	22.300	m	245.77	3.7%	141.44	1.98%	---	---	---	---	---	---	---	---		
104.84	3.51%	Pm-151	28.400	h	100.02	2.54%	167.75	8.3%	177.16	3.82%	240.09	3.82%	275.21	6.8%	340.08	2	2	
105.31	21.2%	Eu-155	4.753	y	45.30	1.326%	60.01	1.13%	86.55	30.7%	---	---	---	---	---	---	---	
105.87	10.8%	Re-	188m	18.600	m	63.58	21.6%	92.46	5.2%	156.01	0.62%	---	---	---	---	---	---	
106.13	27.2%	Np-239	2.356	d	61.46	1.29%	209.75	3.42%	228.18	10.76%	277.6	14.38%	315.88	1.6%	334.31	2	2	







190.29	15.56%	In-114m	71.900	s	558.46	3.24%	725.30	3.24%	---	---	---	---	---	---	---	---	---
191.44	3.7%	Pt-197	19.890	h	77.35	17%	268.78	0.231%	---	---	---	---	---	---	---	---	---
191.71	2.34%	Pt-199	30.800	m	542.99	15%	493.77	5.59%	317.06	4.95%	185.77	3.32%	---	---	---	---	---
191.92	18%	Mo-101	14.610	m	590.10	20.31%	1012.47	13%	505.92	11.62%	695.56	6.66%	246.46	2.23%	714.58	1	1
192.35	3.08%	Fe-59	44.495	d	142.65	1.02%	1099.25	56.5%	1291.60	43.2%	---	---	---	---	---	---	---
196.30	25.98%	Kr-88	2.840	h	2392.11	34.6%	2195.84	13.18%	834.83	12.98%	1529.77	10.93%	2029.84	4.53%	2035.41	1	1
197.04	5.18%	Tb-160	72.300	d	86.79	13.15%	215.65	4.02%	298.58	26.13%	879.38	30.1%	962.32	9.81%	966.17	2	2
197.10	95.9%	O-19	26.910	s	1356.80	50.4%	1444.20	2.64%	109.90	2.54%	---	---	---	---	---	---	---
197.96	35.8%	Yb-169	32.018	d	63.12	44.2%	93.62	2.61%	109.78	17.47%	118.19	1.869%	130.52	11.31%	177.21	2	2
198.61	1.48%	Se-75	119.790	d	66.05	1.112%	96.73	3.42%	121.12	17.2%	136.00	58.3%	264.66	58.9%	279.54	2	2
202.11	1.08%	U-235	7.040E+08	y	109.16	1.54%	143.76	10.96%	185.71	57.2%	163.36	5.08%	205.31	5.01%	---	---	---
202.51	97.3%	Y-90m	3.190	h	479.17	90.74%	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---
202.72	1.03%	Er-172	49.300	h	59.69	2.69%	68.11	3.29%	127.81	2.13%	383.50	2.35%	407.34	42.1%	446.02	1	1
203.75	2.2%	Hg-205	5.200	m	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	
204.10	39.5%	Au-198	2.695	d	9.71	58.4%	50.50	22%	66.991	24.1%	68.806	40.722%	97.21	69.5%	180.31	2	2
205.31	5.01%	U-235	7.040E+08	y	109.16	1.54%	185.71	57.2%	143.76	10.96%	163.36	5.08%	202.11	1.08%	---	---	---
205.80	3.3%	Ir-192	73.829	d	295.96	28.67%	308.46	30%	316.51	82.81%	468.07	47.83%	484.58	3.184%	588.58	2	2
208.21	8.732%	Au-199	3.139	d	158.38	40%	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---
208.37	57.7%	Lu-177m	160.440	d	112.95	20.4%	128.50	15.5%	153.28	16.9%	228.48	37%	327.68	18.1%	378.50	2	2
208.37	11%	Lu-177	6.647	d	112.95	6.4%	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---
209.75	3.42%	Np-239	2.356	d	61.46	1.29%	106.13	27.2%	228.18	10.76%	277.60	14.38%	315.88	1.6%	334.31	1	1
211.03	30.8%	Ge-77	11.300	h	264.44	54%	215.51	28.6%	416.33	21.8%	558.02	16.1%	367.40	14.0%	714.35	1	1
211.31	25.9%	Nd-149	1.728	h	114.31	19.2%	270.17	10.7%	654.83	8%	423.55	7.4%	540.51	6.58%	267.69	1	1
214.89	77.3%	Au-198	2.695	d	9.71	58.4%	50.50	22%	66.991	24.1%	68.806	40.722%	97.21	69.50%	180.31	2	2
215.251	81.66%	Hf-180m	5.520	h	332.31	94.4%	443.181	85.34%	57.549	48.43%	93.33	16.99%	500.714	12.84%	---	---	---
215.51	28.6%	Ge-77	11.300	h	264.44	54%	211.03	30.8%	416.33	21.8%	558.02	16.1%	367.40	14.0%	714.35	1	1
215.51	21.4%	Ge-77m	52.900	s	159.70	10.33%	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	
215.65	4.018%	Tb-160	72.300	d	86.79	13.15%	197.04	5.18%	298.58	26.13%	879.38	30.1%	962.32	9.81%	966.17	2	2
215.72	86%	Ru-97	2.830	d	324.48	10.79%	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	
216.08	19.66%	Ba-131	11.500	d	123.81	28.97%	133.61	2.12%	239.63	2.41%	249.43	2.813%	373.25	14.04%	486.52	2	2
221.48	2.26%	Br-82	35.282	h	554.35	70.8%	619.11	43.4%	698.37	28.49%	776.52	83.5%	827.83	24.03%	1044.00	2	2
222.11	7.49%	Ta-182	114.740	d	67.75	41.2%	100.11	2.65%	152.43	6.93%	229.32	3.63%	1121.30	34.9%	1189.05	1	1



135m																
270.17	10.7%	Nd-149	1.728	h	211.31	25.9%	114.31	19.2%	654.83	8%	423.55	7.4%	540.51	6.58%	267.69	
273.65	11.1%	Cs-136	13.040	d	66.88	4.79%	86.36	5.18%	153.25	5.75%	176.60	10%	340.55	42.2%	818.51	
275.21	6.8%	Pm-151	28.400	h	100.02	2.54%	104.84	3.51%	167.75	8.3%	177.16	3.82%	240.09	3.82%	340.08	
275.92	17.8%	Ba-133m	38.930	h	12.33	1.53%	---	---	---	---	---	---	---	---	---	
275.99	0.7%	Se-81	18.450	m	290.03	0.55%	---	---	---	---	---	---	---	---	---	
276.40	7.164%	Ba-133	10.551	y	53.16	2.199%	79.61	2.62%	81.00	34.06%	302.85	18.33%	356.02	62.05%	383.85	
277.60	14.38%	Np-239	2.356	d	61.46	1.29%	106.13	27.2%	209.75	3.42%	228.18	10.76%	315.88	1.60%	334.31	
279.01	6%	Hg-197m	23.800	h	133.99	33%	---	---	---	---	---	---	---	---	---	
279.01	2.4%	Pt-197m	95.410	m	346.50	11.1%	53.10	1.09%	---	---	---	---	---	---	---	
279.20	81%	Hg-203	46.594	d	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	
279.54	24.99%	Se-75	119.790	d	66.05	1.112%	96.73	3.42%	121.12	17.2%	136.00	58.3%	198.61	1.48%	264.66	
279.76	0.498%	Dy-165	2.330	h	94.70	3.58%	361.68	0.84%	633.42	0.568%	715.33	0.535%	279.76	0.5%	---	
280.46	1.24%	Os-193	30.110	h	73.04	3.2%	138.94	4.27%	321.60	1.28%	387.52	1.26%	460.55	3.95%	557.43	
280.46	29.77%	Ho-166m	1200.000	y	80.57	12.33%	184.41	72.6%	410.94	11.41%	529.80	9.69%	711.68	55.32%	752.29	
282.52	3.01%	Yb-175	4.185	d	113.81	1.88%	396.33	6.4%	---	---	---	---	---	---	---	
283.55	5.95%	Gd-161	3.660	m	360.94	60.1%	314.92	22.7%	102.31	13.9%	56.29	3.77%	480.12	2.68%	165.21	
285.95	3.1%	Pm-149	53.080	h	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	
290.03	0.55%	Se-81	18.450	m	275.99	0.7%	---	---	---	---	---	---	---	---	---	
293.27	42.8%	Ce-143	33.039	h	57.36	11.7%	231.55	2.05%	350.62	3.23%	490.37	2.161%	664.57	5.69%	721.93	
293.54	2.52%	Ir-194	19.280	h	328.46	13.1%	645.16	1.18%	---	---	---	---	---	---	---	
295.90	28.9%	Er-171	7.520	h	308.31	64.4%	111.62	20.5%	124.02	9.1%	116.66	2.3%	---	---	---	
295.96	28.67%	Ir-192	73.829	d	205.80	3.3%	308.46	30%	316.51	82.81%	468.07	47.83%	484.58	3.184%	588.58	
298.58	26.13%	Tb-160	72.300	d	86.79	13.15%	197.04	5.18%	215.65	4.018%	879.38	30.1%	962.32	9.81%	966.17	
300.34	6.62%	Pa-233	26.975	d	75.35	1.39%	86.81	1.97%	312.17	38.6%	340.81	4.47%	398.62	1.39%	415.76	
302.85	18.33%	Ba-133	10.551	y	53.16	2.199%	79.61	2.62%	81.00	34.06%	276.40	7.164%	356.02	62.05%	383.85	
303.92	1.316%	Se-75	119.790	d	66.05	1.112%	96.73	3.42%	121.12	17.2%	136.00	58.3%	198.61	1.48%	264.66	
304.85	4.29%	Ba-140	12.753	d	13.85	1.22%	29.96	14.1%	162.66	6.22%	423.72	3.15%	437.58	1.93%	537.26	
304.87	14%	Kr-85m	4.480	h	151.16	75%	---	---	---	---	---	---	---	---	---	
306.25	5.1%	Rh-105	35.360	h	319.14	19%	---	---	---	---	---	---	---	---	---	
306.86	89%	Tc-101	14.220	m	545.12	5.96%	127.23	2.63%	184.10	1.6%	---	---	---	---	---	
307.74	10.05%	Yb-169	32.018	d	63.12	44.2%	93.62	2.61%	109.78	17.47%	118.19	1.869%	130.52	11.31%	177.21	

308.31	64.4%	Er-171	7.520	h	295.90	28.9%	111.62	20.5%	124.02	9.1%	116.66	2.3%	---	---	---	---	
308.46	30%	Ir-192	73.829	d	205.80	3.3%	295.96	28.67%	316.51	82.81%	468.07	47.83%	484.58	3.184%	588.58	z	
312.17	38.6%	Pa-233	26.975	d	75.35	1.39%	86.81	1.97%	300.34	6.62%	340.81	4.47%	398.62	1.39%	415.76	1	
314.92	22.7%	Gd-161	3.660	m	360.94	60.1%	102.31	13.9%	283.55	5.95%	56.29	3.77%	480.12	2.68%	165.21	1	
315.88	1.6%	Np-239	2.356	d	61.46	1.29%	106.13	27.2%	209.75	3.42%	228.18	10.76%	277.60	14.38%	334.31	1	
316.44	11.1%	Ru-105	4.440	h	724.21	47%	469.37	17.5%	676.36	15.7%	262.83	6.57%	129.78	5.68%	393.36	z	
316.51	82.81%	Ir-192	73.829	d	205.80	3.3%	295.96	28.67%	308.46	30%	468.07	47.83%	484.58	3.184%	588.58	z	
317.06	4.95%	Pt-199	30.800	m	542.99	15%	493.77	5.59%	185.77	3.32%	191.71	2.34%	246.46	2.23%	714.58	1	
319.14	19%	Rh-105	35.360	h	306.25	5.1%	---	---	---	---	---	---	---	---	---		
319.41	1.95%	Nd-147	10.980	d	91.10	28%	439.90	1.2%	531.02	13.1%	---	---	---	---	---	---	
320.08	10%	Cr-51	27.703	d	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---		
320.08	93%	Ti-51	5.760	m	928.60	6.9%	608.60	1.18%	---	---	---	---	---	---	---		
321.60	1.28%	Os-193	30.110	h	73.04	3.2%	138.94	4.27%	280.46	1.24%	387.52	1.26%	460.55	3.95%	557.43	1	
324.48	10.79%	Ru-97	2.830	d	215.72	86%	---	---	---	---	---	---	---	---	---		
327.68	18.1%	Lu-	160.440	d	112.95	20.4%	128.50	15.5%	153.28	16.9%	208.37	57.7%	228.48	37.0%	378.50	z	
328.46	13.1%	Ir-194	19.280	h	293.54	2.52%	645.16	1.18%	---	---	---	---	---	---	---		
328.76	20.3%	La-140	1.679	d	432.49	2.9%	487.02	45.5%	751.64	4.33%	815.77	23.28%	867.85	5.50%	925.19	c	
332.10	1.41%	Sn-125	9.640	d	469.85	1.48%	800.28	1.07%	822.48	4.28%	915.55	4.13%	1067.10	10%	1087.70	1	
332.10	97.2%	Sn-	9.520	m	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---		
332.307	94.4%	Hf-	180m	5.520	h	443.181	85.34%	215.251	81.66%	57.549	48.43%	93.33	16.99%	500.714	12.84%	---	
332.98	22.9%	Au-196	6.167	d	355.68	87%	426.00	7%	---	---	---	---	---	---	---		
333.82	18.4%	Au-198	2.695	d	9.71	58.4%	50.50	22%	66.991	24.1%	68.806	40.722%	97.21	69.5%	180.31	z	
334.27	12.49%	Te-	131m	33.250	h	102.06	10.37%	240.93	9.91%	773.67	49.9%	782.49	10.16%	793.75	18.1%	852.21	z
334.31	2.07%	Np-239	2.356	d	61.46	1.29%	106.13	27.2%	209.75	3.42%	228.18	10.76%	277.60	14.38%	315.88	1	
336.24	45.83%	In-	115m	4.486	h	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---		
336.241	45.99%	Cd-115	53.460	h	24.002	10.74%	24.21	19.8%	27.238	1.78%	27.276	3.44%	260.896	1.944%	492.351	z	
340.08	23%	Pm-151	28.400	h	100.02	2.54%	104.84	3.51%	167.75	8.3%	177.16	3.82%	240.09	3.82%	275.21	e	
340.55	42.2%	Cs-136	13.040	d	66.88	4.79%	86.36	5.18%	153.25	5.75%	176.60	10%	273.65	11.1%	818.51	1	
340.81	4.47%	Pa-233	26.975	d	75.35	1.39%	86.81	1.97%	300.34	6.62%	312.17	38.60%	398.62	1.39%	415.76	1	
343.40	84%	Hf-175	70.000	d	89.36	2.4%	433.00	1.436%	---	---	---	---	---	---	---		
344.28	26.5%	Eu-152	13.528	y	121.78	28.58%	244.70	7.583%	778.90	12.942%	867.38	4.245%	964.08	14.605%	1085.87	1	
344.28	2.38%	Eu-	9.312	h	841.57	14.2%	963.39	11.67%	121.78	7%	---	---	---	---	---		

152m																	
345.93	15.12%	Hf-181	42.390	d	8.15	15.06%	56.28	9.022%	57.535	15.64%	64.948	1.764%	65.222	3.408%	133.021		
346.50	11.1%	Pt-	197m	95.410	m	279.01	2.4%	53.10	1.09%	---	---	---	---	---	---	---	
350.62	3.23%	Ce-143	33.039	h	57.36	11.7%	231.55	2.05%	293.27	42.8%	490.37	2.161%	664.57	5.69%	721.93		
353.99	11.2%	Ta-183	5.100	d	46.48	5.80%	52.60	5.8%	99.08	6.7%	107.93	11%	161.35	8.9%	162.32		
355.68	87%	Au-196	6.167	d	332.98	22.9%	426.00	7%	---	---	---	---	---	---	---		
356.02	62.05%	Ba-133	10.551	y	53.16	2.199%	79.61	2.62%	81.00	34.06%	276.40	7.164%	302.85	18.33%	383.85		
356.69	70%	Se-83	22.300	m	510.17	43%	224.80	32.7%	718.10	15%	799.07	14.8%	836.52	13%	2290.30		
360.94	60.1%	Gd-161	3.660	m	314.92	22.7%	102.31	13.9%	283.55	5.95%	56.29	3.77%	480.12	2.68%	165.21		
361.10	89%	Os-	190m	9.900	m	502.50	98.6%	616.10	98.6%	186.70	74.2%	---	---	---	---	---	
361.68	0.84%	Dy-165	2.330	h	94.70	3.58%	633.42	0.568%	715.33	0.535%	279.76	0.498%	---	---	---	---	
363.60	11.4%	Gd-159	18.560	h	58.00	2.15%	---	---	---	---	---	---	---	---	---		
366.27	4.75%	Ni-65	2.517	h	1481.84	23.5%	1115.52	15.1%	---	---	---	---	---	---	---		
366.42	1.191%	Mo-99	65.976	h	40.58	1.05%	140.51	89.43%	181.06	5.99%	739.50	12.13%	777.92	4.26%	---		
367.40	14%	Ge-77	11.300	h	264.44	54%	211.03	30.8%	215.51	28.6%	416.33	21.8%	558.02	16.1%	714.35		
373.25	14.04%	Ba-131	11.500	d	123.81	28.97%	133.61	2.12%	216.08	19.66%	239.63	2.41%	249.43	2.813%	486.52		
374.10	13.8%	Hg-	199m	42.600	m	158.38	52%	---	---	---	---	---	---	---	---		
378.50	29.7%	Lu-	177m	160.440	d	112.95	20.4%	128.50	15.5%	153.28	16.9%	208.37	57.7%	228.48	37%	327.68	
380.45	1.516%	Sb-125	2.759	y	35.49	4.29%	176.31	6.823%	427.88	30%	463.37	10.493%	600.60	17.86%	606.72		
383.50	2.35%	Er-172	49.300	h	59.69	2.69%	68.11	3.29%	127.81	2.13%	202.72	1.03%	407.34	42.1%	446.02		
383.85	8.94%	Ba-133	10.551	y	53.16	2.2%	79.61	2.62%	81.00	34.06%	276.40	7.164%	302.85	18.33%	356.02		
386.28	93%	Zn-	71m	3.960	h	487.38	62%	620.18	57%	511.56	28.4%	596.14	27.9%	964.64	4.3%	---	
387.52	1.26%	Os-193	30.110	h	73.04	3.2%	138.94	4.27%	280.46	1.24%	321.60	1.28%	460.55	3.95%	557.43		
388.53	81.9%	Sr-87m	2.803	h	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---		
391.69	64%	Sn-113	115.090	d	255.05	1.82%	---	---	---	---	---	---	---	---	---		
396.33	6.4%	Yb-175	4.185	d	113.81	1.88%	282.52	3.01%	---	---	---	---	---	---	---		
398.62	1.39%	Pa-233	26.975	d	75.35	1.39%	86.81	1.97%	300.34	6.62%	312.17	38.6%	340.81	4.47%	415.76		
400.66	11.47%	Se-75	119.790	d	66.05	1.112%	96.73	3.42%	121.12	17.2%	136.00	58.3%	198.61	1.48%	264.66		
402.59	49.6%	Kr-87	76.310	m	2554.80	9.2%	845.43	7.34%	2558.10	3.92%	2011.88	2.88%	---	---	---		
407.34	42.1%	Er-172	49.300	h	59.69	2.69%	68.11	3.29%	127.81	2.13%	202.72	1.03%	383.50	2.35%	446.02		
410.94	11.41%	Ho-	166m	1200.000	y	80.57	12.33%	184.41	72.6%	280.46	29.77%	529.80	9.69%	711.68	55.32%	752.29	

413.66	17.4%	Lu-177m	160.440	d	112.95	20.4%	128.50	15.5%	153.28	16.9%	208.37	57.7%	228.48	37%	327.68
415.76	1.745%	Pa-233	26.975	d	75.35	1.39%	86.81	1.97%	300.34	6.62%	312.17	38.6%	340.81	4.47%	398.62
416.33	21.8%	Ge-77	11.300	h	264.44	54%	211.03	30.8%	215.51	28.6%	558.02	16.1%	367.40	14%	714.35
416.86	27.7%	In-116m	54.290	m	1293.56	84.4%	1097.33	56.2%	2112.31	15.5%	818.72	11.5%	1507.67	10%	138.33
418.54	21.3%	Lu-177m	160.440	d	112.95	20.4%	128.50	15.5%	153.28	16.9%	208.37	57.7%	228.48	37%	327.68
423.72	3.15%	Ba-140	12.753	d	13.85	1.22%	29.96	14.1%	162.66	6.22%	304.85	4.29%	437.58	1.929%	537.26
426.00	7%	Au-196	6.167	d	355.68	87%	332.98	22.9%	---	---	---	---	---	---	---
427.88	30%	Sb-125	2.759	y	35.49	4.29%	176.31	6.82%	380.45	1.516%	463.37	10.493%	600.60	17.86%	606.72
432.49	2.9%	La-140	1.679	d	328.76	20.3%	487.02	45.5%	751.64	4.33%	815.77	23.28%	867.85	5.5%	925.19
433.00	1.436%	Hf-175	70.000	d	89.36	2.4%	343.40	84%	---	---	---	---	---	---	---
433.94	0.5%	Ag-108	2.370	m	632.97	1.76%	618.84	0.261%	---	---	---	---	---	---	---
434.56	20.3%	Xe-138	14.080	m	258.41	31.5%	1768.26	16.7%	2015.82	12.25%	396.51	6.3%	153.86	5.95%	2004.75
436.59	0.265%	Ce-137	9.000	h	447.15	1.8%	10.60	0.8%	---	---	---	---	---	---	---
437.58	1.929%	Ba-140	12.753	d	13.85	1.22%	29.96	14.1%	162.66	6.22%	304.85	4.29%	423.72	3.15%	537.26
438.63	94.77%	Zn-69m	13.760	h	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	
439.90	1.2%	Nd-147	10.980	d	91.10	28%	319.41	1.95%	531.02	13.1%	---	---	---	---	---
439.99	33%	Ne-23	37.240	s	1635.96	0.99%	---	---	---	---	---	---	---	---	---
442.90	17%	I-128	24.990	m	526.56	1.58%	969.46	0.404%	---	---	---	---	---	---	---
443.181	85.34%	Hf-180m	5.520	h	332.31	94.4%	215.251	81.66%	57.549	48.43%	93.33	16.99%	500.714	12.84%	---
443.80	3.27%	Ru-103	39.247	d	497.08	90.9%	610.33	5.75%	---	---	---	---	---	---	---
445.68	4%	Pm-151	28.400	h	100.02	2.54%	104.84	3.51%	167.75	8.3%	177.16	3.82%	240.09	3.82%	275.21
446.02	2.96%	Er-172	49.300	h	59.69	2.69%	68.11	3.29%	127.81	2.13%	202.72	1.03%	383.50	2.35%	407.34
447.15	1.8%	Ce-137	9.000	h	436.59	0.265%	10.60	0.8%	---	---	---	---	---	---	---
452.32	18.18%	Te-131	25.000	m	149.72	69%	1146.96	4.95%	492.66	4.826%	602.04	4.187%	---	---	---
455.49	31%	Xe-137	3.818	m	848.95	0.62%	---	---	---	---	---	---	---	---	---
459.22	1.4%	Th-233	22.300	m	86.48	2.7%	29.37	2.5%	94.66	0.8%	669.90	0.68%	---	---	---
459.60	7.7%	Te-129	69.600	m	27.81	16.3%	487.39	1.42%	---	---	---	---	---	---	---
460.55	3.95%	Os-193	30.110	h	73.04	3.2%	138.94	4.27%	280.46	1.24%	321.60	1.28%	387.52	1.26%	557.43
462.80	30.7%	Cs-138	33.410	m	1435.79	76.3%	1009.78	29.8%	2218.00	15.2%	547.00	10.76%	2639.59	7.63%	871.80
463.37	10.493%	Sb-125	2.759	y	35.49	4.29%	176.31	6.823%	380.45	1.516%	427.88	30%	600.60	17.86%	606.72
468.07	47.83%	Ir-192	73.829	d	205.80	3.3%	295.96	28.67%	316.51	82.81%	308.46	30%	484.58	3.18%	588.58
469.37	17.5%	Ru-105	4.440	h	724.21	47%	316.44	11.1%	676.36	15.7%	262.83	6.57%	129.78	5.68%	393.36

469.85	1.48%	Sn-125	9.640	d	332.10	1.41%	800.28	1.07%	822.48	4.28%	915.55	4.13%	1067.10	10%	1087.70
470.47	1.41%	Te-121	19.170	d	507.59	17.7%	573.14	80.3%	---	---	---	---	---	---	---
475.37	1.486%	Cs-134	2.065	y	563.25	8.35%	569.33	15.38%	604.72	97.62%	795.86	85.53%	801.95	8.69%	1167.97
475.44	1.04%	Er-172	49.300	h	59.69	2.69%	68.11	3.29%	127.81	2.13%	202.72	1.03%	383.50	2.35%	407.34
477.60	10.52%	Be-7	53.240	d	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	
479.17	90.74%	Y-90m	3.190	h	202.51	97.3%	---	---	---	---	---	---	---	---	
479.53	21.8%	W-187	23.900	h	685.77	27.3%	72.00	11.14%	134.24	8.85%	618.36	6.28%	551.53	5.08%	772.89
482.18	80.5%	Hf-181	42.390	d	8.15	15.06%	56.28	9.022%	57.535	15.64%	64.95	1.76%	65.22	3.41%	133.021
484.58	3.184%	Ir-192	73.829	d	205.80	3.3%	295.96	28.67%	316.51	82.81%	308.46	30%	468.07	47.83%	588.58
486.52	2.087%	Ba-131	11.500	d	123.81	28.97%	133.61	2.12%	216.08	19.66%	239.63	2.41%	249.43	2.813%	373.25
487.02	45.5%	La-140	1.679	d	328.76	20.3%	432.49	2.9%	751.64	4.33%	815.77	23.28%	867.85	5.50%	925.19
487.38	62%	Zn-71m	3.940	h	386.28	93%	620.18	57%	511.56	28.4%	596.14	27.9%	964.64	4.3%	---
487.39	1.42%	Te-129	69.600	m	27.81	16.3%	459.60	7.7%	---	---	---	---	---	---	---
489.23	6.2%	Ca-47	4.536	d	807.86	6.2%	1297.09	71%	---	---	---	---	---	---	---
490.37	2.161%	Ce-143	33.039	h	57.36	11.7%	231.55	2.05%	293.27	42.8%	350.62	3.23%	664.57	5.69%	721.93
492.351	8.032%	Cd-115	53.460	h	24.00	10.74%	24.21	19.8%	27.238	1.78%	27.28	3.44%	260.90	1.944%	336.241
493.77	5.59%	Pt-199	30.800	m	542.99	15%	317.06	4.95%	185.77	3.32%	191.71	2.34%	246.46	2.23%	714.58
496.33	47%	Ba-131	11.500	d	123.81	28.97%	133.61	2.12%	216.08	19.66%	239.63	2.41%	249.43	2.813%	373.25
497.08	90.9%	Ru-103	39.247	d	443.80	3.27%	610.33	5.75%	---	---	---	---	---	---	---
498.38	25%	Sb-124m	93.000	s	645.85	25%	602.73	25%	---	---	---	---	---	---	---
502.50	98.6%	Os-190m	9.900	m	361.10	89%	616.10	98.6%	186.70	74.2%	---	---	---	---	---
505.92	11.62%	Mo-101	14.600	m	590.10	20.31%	191.92	18%	1012.47	13%	695.56	6.66%	2032.10	6.59%	1532.49
507.59	17.7%	Te-121	19.170	d	470.47	1.41%	573.14	80.3%	---	---	---	---	---	---	---
510.17	43%	Se-83	22.300	m	356.69	70%	224.80	32.7%	718.10	15%	799.07	14.8%	836.52	13%	2290.30
511.00	Positron Annihilation energy from several isotopes [e.g. Cu-64, Br-80, Rh-104, Ag-108, Cd-107, Xe-125, Ba-131, Ce-137, Eu-152m, I-138 (production outside detector.)]														
511.56	28.4%	Zn-71m	3.940	h	386.28	93%	487.38	62%	620.18	57%	596.14	27.9%	964.64	4.3%	---
514.01	96%	Sr-85	64.850	d	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	
522.65	16%	I-132	2.295	h	667.72	99%	772.60	75.6%	954.55	17.6%	630.19	13.3%	1398.57	7.01%	---
526.56	1.58%	I-128	24.990	m	442.90	17%	969.46	0.404%	---	---	---	---	---	---	---
526.56	13.514%	I-135	6.570	h	1260.41	28.9%	1131.51	22.74%	1678.03	9.62%	1457.60	8.73%	1038.76	8.01%	1
526.56	80.5%	Xe-135m	15.290	m	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	
527.901	27.56%	Cd-115	53.460	h	24.002	10.74%	24.21	19.8%	27.238	1.78%	27.276	3.44%	260.896	1.944%	3

529.80	9.69%	Ho-166m	1200.000	y	80.57	12.33%	184.41	72.6%	280.46	29.77%	410.94	11.41%	711.68	55.32%	-
529.87	87%	I-133	20.800	h	875.33	4.51%	1298.22	2.35%	---	---	---	---	---	---	-
531.02	13.1%	Nd-147	10.980	d	91.10	28%	319.41	1.95%	439.90	1.2%	---	---	---	---	-
537.26	24.39%	Ba-140	12.753	d	13.85	1.22%	29.96	14.1%	162.66	6.22%	304.85	4.29%	423.72	3.15%	-
542.99	15%	Pt-199	30.800	m	493.77	5.59%	317.06	4.95%	185.77	3.32%	191.71	2.34%	246.46	2.23%	-
545.12	5.96%	Tc-101	14.200	m	306.86	89%	127.23	2.63%	184.10	1.6%	---	---	---	---	-
546.56	7.2%	I-135	6.570	h	1260.41	28.9%	1131.51	22.74%	526.56	13.51%	1678.03	9.62%	1457.60	8.73%	-
547.00	10.76%	Cs-138	33.410	m	1435.79	76.3%	462.80	30.7%	1009.78	29.8%	2218.00	15.2%	2639.59	7.63%	-
551.53	5.08%	W-187	23.900	h	685.77	27.3%	479.53	21.8%	72.00	11.14%	134.24	8.85%	618.36	6.28%	-
554.35	70.8%	Br-82	35.282	h	221.48	2.26%	619.11	43.4%	698.37	28.49%	776.52	83.5%	827.83	24.03%	-
555.80	0.13%	Rb-104m	4.340	m	51.40	48%	97.10	2.99%	77.50	2.08%	---	---	---	---	-
556.07	98%	Rb-86m	1.017	m	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	-
557.43	1.3%	Os-193	30.110	h	73.04	3.2%	138.94	4.27%	280.46	1.24%	321.60	1.28%	387.52	1.26%	-
558.02	16.1%	Ge-77	11.300	h	264.44	54%	211.03	30.8%	215.51	28.6%	416.33	21.8%	367.40	14%	-
558.46	3.24%	In-114m	71.900	s	190.29	15.56%	725.30	3.24%	---	---	---	---	---	---	-
559.10	45%	As-76	1.094	d	563.18	1.20%	657.04	6.2%	1212.94	1.44%	1216.10	3.42%	1228.60	1.21%	-
563.18	1.2%	As-76	1.094	d	559.10	45%	657.04	6.2%	1212.94	1.44%	1216.10	3.42%	1228.60	1.21%	-
563.25	8.35%	Cs-134	2.065	y	475.37	1.486%	569.33	15.38%	604.72	97.62%	795.86	85.53%	801.95	8.69%	-
564.12	71%	Sb-122	2.724	d	692.79	3.85%	---	---	---	---	---	---	---	---	-
569.33	15.38%	Cs-134	2.065	y	475.37	1.486%	563.25	8.35%	604.72	97.62%	795.86	85.53%	801.95	8.69%	-
573.14	80.3%	Te-121	19.170	d	470.47	1.41%	507.59	17.7%	---	---	---	---	---	---	-
588.58	4.515%	Ir-192	73.829	d	205.80	3.3%	295.96	28.67%	316.51	82.81%	308.46	30%	468.07	47.83%	-
590.10	20.31%	Mo-101	14.600	m	191.92	18%	1012.47	13%	505.92	11.62%	695.56	6.66%	2032.10	6.59%	-
591.76	4.99%	Eu-154	8.601	y	123.07	40.79%	247.93	6.95%	723.30	20.22%	756.76	4.57%	873.19	12.27%	-
592.07	1.318%	Os-185	93.600	d	646.12	78%	717.42	3.94%	874.81	6.29%	880.52	5.17%	---	---	-
595.85	59%	As-74	17.770	d	634.78	15.4%	---	---	---	---	---	---	---	---	-
596.14	27.9%	Zn-71m	3.940	h	386.28	93%	487.38	62%	620.18	57%	511.56	28.4%	964.64	4.30%	-
600.60	17.86%	Sb-125	2.759	y	35.49	4.29%	176.31	6.823%	380.45	1.516%	463.37	10.49%	427.88	30%	-
600.912	5.82%	Ga-72	14.100	h	834.13	95.45%	2201.59	26.87%	629.967	26.13%	2507.718	13.33%	894.33	10.136%	-
602.73	98.26%	Sb-124	60.200	d	645.85	7.456%	713.78	2.287%	722.79	10.81%	968.20	1.892%	1045.13	1.841%	-
602.73	25%	Sb-124m	93.000	s	645.85	25%	498.38	25%	---	---	---	---	---	---	-
604.41	8.23%	Ir-192	73.829	d	205.80	3.30%	295.96	28.67%	316.51	82.81%	308.46	30%	468.07	47.83%	-
604.72	97.62%	Cs-134	2.065	y	475.37	1.486%	563.25	8.35%	569.33	15.38%	795.86	85.53%	801.95	8.69%	-
606.72	5.026%	Sb-125	2.759	y	35.49	4.29%	380.45	1.516%	176.31	6.823%	463.37	10.493%	427.88	30%	-
610.06	44.2%	Er-172	49.300	h	59.69	2.69%	68.11	3.29%	127.81	2.13%	202.72	1.03%	383.50	2.35%	-

610.33	5.75%	Ru-103	39.247	d	443.80	3.27%	497.08	90.9%	---	---	---	---	---	---	---	---	---
612.47	5.309%	Ir-192	73.829	d	205.80	3.3%	295.96	28.67%	316.51	82.81%	308.46	30%	468.07	47.83%	4	4	4
616.10	98.6%	Os-190m	9.900	m	502.50	98.6%	361.10	89%	186.7	74.2%	---	---	---	---	---	---	4
616.60	7%	Br-80	17.680	m	666.14	1.08%	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	4
618.36	6.28%	W-187	23.900	h	685.77	27.3%	479.53	21.8%	72.0	11.14%	134.24	8.85%	551.53	5.08%	4	4	4
618.84	0.261%	Ag-108	2.370	m	632.97	1.76%	433.94	0.5%	---	---	---	---	---	---	---	---	4
619.11	43.4%	Br-82	35.282	h	221.48	2.26%	554.35	70.8%	698.37	28.49%	776.52	83.5%	827.83	24.03%	4	4	4
620.11	1.437%	Ba-131	11.500	d	123.81	28.97%	133.61	2.12%	216.08	19.66%	239.63	2.41%	249.43	2.813%	4	4	4
620.18	57%	Zn-71m	3.940	h	386.28	93%	487.38	62%	511.56	28.4%	596.14	27.9%	964.64	4.3%	4	4	4
629.967	26.13%	Ga-72	14.100	h	834.13	95.45%	2201.586	26.87%	2507.718	13.33%	894.327	10.14%	2491.026	7.73%	4	4	4
630.19	13.3%	I-132	2.295	h	667.72	99%	772.60	75.6%	954.55	17.6%	522.65	16%	1398.57	7.01%	4	4	4
631.82	6.95%	Ge-77	11.300	h	264.44	54%	211.03	30.80%	215.51	28.6%	416.33	21.8%	558.02	16.10%	4	4	4
632.97	1.76%	Ag-108	2.370	m	433.94	0.5%	618.84	0.261%	---	---	---	---	---	---	---	---	4
633.42	0.568%	Dy-165	2.330	h	94.70	3.58%	361.68	0.84%	715.33	0.535%	279.76	0.498%	---	---	---	---	4
634.78	15.4%	As-74	17.770	d	595.85	59%	---	---	---	---	---	---	---	---	---	4	
635.95	11.31%	Sb-125	2.759	y	35.49	4.29%	176.31	6.823%	380.45	1.516%	463.37	10.493%	427.88	30%	4	4	4
645.85	7.456%	Sb-124	60.200	d	602.73	98.26%	713.78	2.287%	722.79	10.81%	968.20	1.892%	1045.13	1.841%	4	4	4
645.85	25%	Sb-124m	93.000	s	498.38	25%	602.73	25%	---	---	---	---	---	---	---	4	
646.12	78%	Os-185	93.600	d	592.07	1.318%	717.42	3.94%	874.81	6.29%	880.52	5.17%	---	---	---	---	4
657.04	6.2%	As-76	1.094	d	559.10	45%	563.18	1.2%	1212.94	1.44%	1216.10	3.42%	1228.60	1.21%	4	4	4
657.76	94%	Ag-110m	249.760	d	677.62	10.28%	706.68	16.33%	763.94	22.14%	818.03	7.29%	884.68	72.2%	4	4	4
657.76	4.5%	Ag-110	24.600	s	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	4	
657.92	98.2%	Nb-97	72.100	m	1024.53	1%	---	---	---	---	---	---	---	---	---	4	
661.64	89.9%	Ba-137m	2.552	m	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	4	
661.657	85.102%	Cs-137	30.080	y	31.817	1.99%	32.194	3.641%	---	---	---	---	---	---	---	4	
664.57	5.69%	Ce-143	33.039	h	57.36	11.7%	231.55	2.05%	293.27	42.8%	350.62	3.23%	490.37	2.161%	4	4	4
666.14	1.08%	Br-80	17.680	m	616.60	7%	---	---	---	---	---	---	---	---	---	4	
667.72	99%	I-132	2.295	h	772.60	75.6%	954.55	17.6%	522.65	16%	630.19	13.3%	1398.57	7.01%	4	4	4
669.90	0.68%	Th-233	22.300	m	86.48	2.7%	29.37	2.5%	459.22	1.4%	94.66	0.8%	---	---	---	---	4
671.45	1.795%	Sb-125	2.759	y	35.49	4.29%	176.31	6.823%	380.45	1.516%	463.37	10.49%	427.88	30%	4	4	4
676.36	15.7%	Ru-105	4.440	h	724.21	47%	469.37	17.5%	316.44	11.1%	262.83	6.57%	129.78	5.68%	4	4	4
677.62	10.28%	Ag-110m	249.760	d	657.76	94%	706.68	16.33%	763.94	22.14%	818.03	7.29%	884.68	72.2%	4	4	4
685.77	27.3%	W-187	23.900	h	479.53	21.8%	72.00	11.14%	134.24	8.85%	618.36	6.28%	551.53	5.08%	4	4	4
692.79	3.85%	Sb-122	2.724	d	564.12	71%	---	---	---	---	---	---	---	---	---	4	
695.56	6.66%	Mo-101	14.600	m	590.10	20.31%	191.92	18%	1012.47	13%	505.92	11.62%	2032.10	6.59%	4	4	4

698.37	28.49%	Br-82	35.282	h	221.48	2.26%	554.35	70.8%	619.11	43.4%	776.52	83.5%	827.83	24.03%
706.68	16.33%	Ag-110m	249.760	d	657.76	94%	677.62	10.28%	763.94	22.14%	818.03	7.29%	884.68	72.2%
711.68	55.32%	Ho-166m	1200.000	y	80.57	12.33%	184.41	72.6%	280.46	29.77%	410.94	11.41%	529.80	9.69%
713.78	2.287%	Sb-124	60.200	d	602.73	98.26%	645.85	7.46%	722.79	10.81%	968.20	1.892%	1045.13	1.841%
714.35	7.17%	Ge-77	11.300	h	264.44	54%	211.03	30.8%	215.51	28.6%	416.33	21.8%	558.02	16.10%
715.33	0.535%	Dy-165	2.330	h	94.70	3.58%	361.68	0.84%	633.42	0.568%	279.76	0.498%	---	---
717.42	3.94%	Os-185	93.600	d	592.07	1.318%	646.12	78%	874.81	6.29%	880.52	5.17%	---	---
717.72	4.05%	Pm-151	28.400	h	100.02	2.54%	104.84	3.51%	167.75	8.3%	177.16	3.82%	240.09	3.82%
718.10	15%	Se-83	22.300	m	356.69	70%	510.17	43%	224.80	32.7%	799.07	14.8%	836.52	13%
721.93	5.39%	Ce-143	33.039	h	57.36	11.7%	231.55	2.05%	293.27	42.8%	350.62	3.23%	490.37	2.161%
722.79	10.81%	Sb-124	60.200	d	602.73	98.26%	645.85	7.456%	713.78	2.287%	968.20	1.892%	1045.13	1.841%
723.30	20.22%	Eu-154	8.601	y	123.07	40.79%	247.93	6.95%	591.76	4.99%	756.76	4.57%	873.19	12.27%
724.20	44.17%	Zr-95	64.032	d	756.73	54%	---	---	---	---	---	---	---	---
724.21	47%	Ru-105	4.440	h	469.37	17.5%	676.36	15.7%	316.44	11.1%	262.83	6.57%	129.78	5.68%
725.30	3.24%	In-114m	71.900	s	190.29	15.56%	558.46	3.24%	---	---	---	---	---	---
739.50	12.13%	Mo-99	65.976	h	40.58	1.05%	140.51	89.43%	181.06	5.99%	366.42	1.191%	777.92	4.26%
743.36	93%	Zr-97	16.910	h	507.64	5.03%	1147.97	2.61%	355.40	2.09%	---	---	---	---
751.64	4.33%	La-140	1.679	d	328.76	20.3%	432.49	2.9%	487.02	45.5%	815.77	23.28%	867.85	5.5%
752.29	12.29%	Ho-166m	1200.000	y	80.57	12.33%	184.41	72.6%	280.46	29.77%	410.94	11.41%	529.80	9.69%
756.73	54%	Zr-95	64.032	d	724.20	44.17%	---	---	---	---	---	---	---	---
756.76	4.57%	Eu-154	8.601	y	123.07	40.79%	247.93	6.95%	591.76	4.99%	723.30	20.22%	873.19	12.27%
763.94	22.14%	Ag-110m	249.760	d	657.76	94%	677.62	10.28%	706.68	16.33%	818.03	7.29%	884.68	72.2%
765.79	100%	Nb-95	34.991	d	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---
772.60	75.60%	I-132	2.295	h	667.72	99%	954.55	17.6%	522.65	16%	630.19	13.3%	1398.57	7.01%
772.89	4.12%	W-187	23.900	h	685.77	27.3%	479.53	21.8%	72.00	11.14%	134.24	8.85%	618.36	6.28%
773.67	49.9%	Te-131m	33.250	h	102.06	10.37%	240.93	9.91%	334.27	12.49%	782.49	10.16%	793.75	18.1%
776.52	83.5%	Br-82	35.282	h	221.48	2.26%	554.35	70.8%	619.11	43.4%	698.37	28.49%	827.83	24.03%
776.52	0.26%	Br-82m	6.13	m	45.95	0.24%	---	---	---	---	---	---	---	---
777.92	4.26%	Mo-99	65.976	h	40.58	1.05%	140.51	89.43%	181.06	5.99%	366.42	1.191%	739.50	12.13%
778.90	12.942%	Eu-152	13.528	y	121.78	28.58%	244.70	7.583%	344.28	26.5%	867.38	4.245%	964.08	14.61%
782.49	10.16%	Te-131m	33.25	h	102.06	10.37%	240.93	9.91%	334.27	12.49%	773.67	49.9%	793.75	18.1%
793.75	18.1%	Te-131m	33.25	h	102.06	10.37%	240.93	9.91%	334.27	12.49%	773.67	49.9%	782.49	10.16%
795.86	85.53%	Cs-134	2.065	y	475.37	1.486%	563.25	8.35%	569.33	15.38%	604.72	97.62%	801.95	8.69%
799.07	14.8%	Se-83	22.30	m	356.69	70%	510.17	43%	224.80	32.7%	718.10	15%	836.52	13%
800.28	1.07%	Sn-125	9.64	d	332.10	1.41%	469.85	1.48%	822.48	4.28%	915.55	4.13%	1067.10	10%

801.95	8.69%	Cs-134	2.065	y	475.37	1.486%	563.25	8.35%	569.33	15.38%	604.72	97.62%	795.86	85.53%
807.86	6.2%	Ca-47	4.536	d	489.23	6.2%	1297.09	71%	---	---	---	---	---	---
810.28	58.08%	Ho-166m	1200	y	80.57	12.33%	184.41	72.6%	280.46	29.77%	410.94	11.41%	529.80	9.69%
810.78	99%	Co-58	70.86	d	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---
815.77	23.28%	La-140	1.679	d	328.76	20.3%	432.49	2.9%	487.02	45.5%	751.64	4.33%	867.85	5.5%
818.03	7.29%	Ag-110m	249.76	d	657.76	94%	677.62	10.28%	706.68	16.33%	763.94	22.14%	884.68	72.2%
818.51	100%	Cs-136	13.04	d	66.88	4.79%	86.36	5.18%	153.25	5.75%	176.60	10%	273.65	11.1%
818.72	11.5%	In-116m	54.15	m	1293.56	84.4%	1097.33	56.2%	416.86	27.7%	2112.31	15.5%	1507.67	10%
822.48	4.28%	Sn-125	9.64	d	332.10	1.41%	469.85	1.48%	800.28	1.07%	915.55	4.13%	1067.10	10%
827.83	24.03%	Br-82	35.282	h	221.48	2.26%	554.35	70.8%	619.11	43.4%	698.37	28.49%	776.52	83.5%
830.58	9.82%	Ho-166m	1200	y	80.57	12.33%	184.41	72.6%	280.46	29.77%	410.94	11.41%	529.80	9.69%
833.54	0.22%	Cu-66	5.12	m	1039.23	9%	---	---	---	---	---	---	---	---
834.13	95.45%	Ga-72	14.10	h	2201.586	26.87%	629.967	26.13%	2507.718	13.33%	894.327	10.136%	2491.026	7.73%
834.83	12.98%	Kr-88	2.84	h	2392.11	34.6%	196.30	25.98%	2195.84	13.18%	1529.77	10.93%	2029.84	4.53%
834.85	99.976%	Mn-54	312.12	d	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---
836.52	13%	Se-83	22.30	m	356.69	70%	510.17	43%	224.80	32.7%	718.10	15%	799.07	14.8%
836.80	6.73%	I-135	6.57	h	1260.41	28.9%	1131.51	22.74%	526.56	13.514%	1678.03	9.62%	1457.60	8.73%
841.57	14.2%	Eu-152m	9.312	h	963.39	11.67%	121.78	7%	344.28	2.38%	---	---	---	---
843.74	71.8%	Mg-27	9.458	m	1014.42	28%	---	---	---	---	---	---	---	---
845.43	7.34%	Kr-87	76.31	m	402.59	49.6%	2554.80	9.2%	2558.10	3.92%	2011.88	2.88%	---	---
846.77	100%	Co-56	77.236	d	1037.84	13.99%	1238.28	67.6%	1360.21	4.33%	1771.35	15.69%	2015.18	3.08%
846.77	98.9%	Mn-56	2.579	h	1810.77	27.2%	2113.12	14.3%	2522.88	0.99%	---	---	---	---
847.03	95.4%	I-134	52.50	m	884.09	64.9%	1072.55	14.9%	595.36	11.1%	621.79	10.6%	1136.16	9.1%
852.21	27%	Te-131m	33.25	h	102.06	10.37%	240.93	9.91%	334.27	12.49%	773.67	49.9%	782.49	10.16%
866.85	8.2%	Se-83	22.30	m	356.69	70%	510.17	43%	224.80	32.7%	718.10	15%	799.07	14.8%
867.38	4.245%	Eu-152	13.528	y	121.78	28.58%	244.70	7.583%	344.28	26.5%	778.90	12.942%	964.08	14.61%
867.85	5.5%	La-140	1.679	d	328.76	20.3%	432.49	2.9%	487.02	45.5%	751.64	4.33%	815.77	23.28%
871.09	0.5%	Nb-94m	6.263	m	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---
873.19	12.27%	Eu-154	8.601	y	123.07	40.79%	247.93	6.95%	591.76	4.99%	723.30	20.22%	756.76	4.57%
874.81	6.29%	Os-185	93.60	d	592.07	1.318%	646.12	78%	717.42	3.94%	880.52	5.17%	---	---
879.38	30.1%	Tb-160	72.30	d	86.79	13.15%	197.04	5.18%	215.65	4.018%	298.58	26.13%	962.32	9.81%
880.46	1.031%	Ce-143	33.039	h	57.36	11.7%	231.55	2.05%	293.27	42.8%	350.62	3.23%	490.37	2.161%
880.52	5.17%	Os-185	93.60	d	592.07	1.318%	646.12	78%	717.42	3.94%	874.81	6.29%	---	---
884.09	64.9%	I-134	52.50	m	847.03	95.4%	1072.55	14.9%	595.36	11.1%	621.79	10.6%	1136.16	9.10%
884.68	72.2%	Ag-110m	249.76	d	657.76	94%	677.62	10.28%	706.68	16.33%	763.94	22.14%	818.03	7.29%

889.28	99.84%	Sc-46	83.79	d	1120.54	99.987%	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	
894.327	10.136%	Ga-72	14.10	h	834.13	95.45%	2201.586	26.87%	629.967	26.13%	2507.718	13.33%	2491.026	7.73%	2491.026	7.73%	2491.026	7.73%
898.04	93.7%	Y-88	106.626	d	1836.06	99.2%	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	
898.04	14.04%	Rb-88	17.78	m	1836.06	21.4%	2677.89	1.96%	---	---	---	---	---	---	---	---	---	
912.13	1.42%	Tm-172	63.60	h	78.74	6.5%	181.53	2.75%	1093.66	6%	1387.09	5.6%	1465.93	4.5%	1465.93	4.5%	1465.93	4.5%
915.55	4.13%	Sn-125	9.64	d	332.10	1.41%	469.85	1.48%	800.28	1.07%	822.48	4.28%	1067.10	10%	1067.10	10%	1067.10	10%
925.19	6.9%	La-140	1.679	d	328.76	20.3%	432.49	2.9%	487.02	45.5%	751.64	4.33%	815.77	23.28%	815.77	23.28%	815.77	23.28%
928.60	6.9%	Ti-51	5.76	m	320.08	93%	608.60	1.18%	---	---	---	---	---	---	---	---	---	
933.80	2%	Cd-115m	44.56	d	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	
937.49	34.13%	Ag-110m	249.76	d	657.76	94%	677.62	10.28%	706.68	16.33%	763.94	22.14%	818.03	7.29%	818.03	7.29%	818.03	7.29%
954.55	17.6%	I-132	2.295	h	667.72	99%	772.60	75.6%	522.65	16%	630.19	13.3%	1398.57	7.01%	1398.57	7.01%	1398.57	7.01%
962.32	9.81%	Tb-160	72.30	d	86.79	13.15%	197.04	5.18%	215.65	4.018%	298.58	26.13%	879.38	30.1%	879.38	30.1%	879.38	30.1%
963.39	11.67%	Eu-152m	9.312	h	841.57	14.2%	121.78	7%	344.28	2.38%	---	---	---	---	---	---	---	
964.08	14.605%	Eu-152	13.528	y	121.78	28.58%	244.70	7.58%	344.28	26.5%	778.90	12.942%	867.38	4.245%	867.38	4.245%	867.38	4.245%
966.17	25.1%	Tb-160	72.30	d	86.79	13.15%	197.04	5.18%	215.65	4.018%	298.58	26.13%	879.38	30.1%	879.38	30.1%	879.38	30.1%
968.20	1.892%	Sb-124	60.20	d	602.73	98.26%	645.85	7.456%	713.78	2.287%	722.79	10.81%	1045.13	1.841%	1045.13	1.841%	1045.13	1.841%
983.52	100.1%	Sc-48	43.67	h	175.36	7.48%	1037.60	97.6%	1212.88	2.38%	1312.10	100.1%	---	---	---	---	---	---
996.26	10.6%	Eu-154	8.601	y	123.07	40.79%	247.93	6.95%	591.76	4.99%	723.30	20.22%	756.76	4.57%	756.76	4.57%	756.76	4.57%
1004.72	18.01%	Eu-154	8.601	y	123.07	40.79%	247.93	6.95%	591.76	4.99%	723.30	20.22%	756.76	4.57%	756.76	4.57%	756.76	4.57%
1009.78	29.8%	Cs-138	33.41	m	1435.79	76.3%	462.80	30.7%	2218.00	15.2%	547.00	10.76%	2639.59	7.63%	2639.59	7.63%	2639.59	7.63%
1012.47	13%	Mo-101	14.60	m	590.10	20.31%	191.92	18%	505.92	11.62%	695.56	6.66%	2032.10	6.59%	2032.10	6.59%	2032.10	6.59%
1014.42	28%	Mg-27	9.46	m	843.74	71.80%	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	
1037.60	97.6%	Sc-48	43.67	h	175.36	7.48%	983.52	100.1%	1212.88	2.38%	1312.10	100.1%	---	---	---	---	---	---
1037.84	13.99%	Co-56	77.236	d	846.77	100%	1238.28	67.6%	1360.21	4.33%	1771.35	15.69%	2015.18	3.08%	2015.18	3.08%	2015.18	3.08%
1038.76	8.01%	I-135	6.57	h	1260.41	28.90%	1131.51	22.74%	526.56	13.514%	1678.03	9.62%	1457.60	8.73%	1457.60	8.73%	1457.60	8.73%
1039.23	9%	Cu-66	5.12	m	833.54	0.22%	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	
1044.00	27.23%	Br-82	35.282	h	221.48	2.26%	554.35	70.8%	619.11	43.4%	698.37	28.49%	776.52	83.5%	776.52	83.5%	776.52	83.5%
1045.13	1.841%	Sb-124	60.20	d	602.73	98.26%	645.85	7.456%	713.78	2.287%	722.79	10.81%	968.20	1.892%	968.20	1.892%	968.20	1.892%
1048.07	80%	Cs-136	13.04	d	66.88	4.79%	86.36	5.18%	153.25	5.75%	176.60	10%	273.65	11.1%	273.65	11.1%	273.65	11.1%
1050.794	6.991%	Ga-72	14.10	h	834.13	95.45%	2201.586	26.87%	629.967	26.13%	2507.718	13.33%	894.33	10.136%	894.33	10.136%	894.33	10.136%
1067.10	10%	Sn-125	9.64	d	332.10	1.41%	469.85	1.48%	800.28	1.07%	822.48	4.28%	915.55	4.13%	915.55	4.13%	915.55	4.13%
1076.64	9%	Rb-86	18.642	d	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	---	
1080.21	5.6%	Yb-177	1.911	h	150.39	20.3%	1241.20	3.47%	121.62	3.42%	138.61	1.34%	---	---	---	---	---	---
1080.21	5.6%	Yb-177	1.911	h	150.39	20.3%	1241.20	3.47%	121.62	3.42%	138.61	1.34%	---	---	---	---	---	---
1085.87	10.207%	Eu-152	13.528	y	121.78	28.58%	244.70	7.583%	344.28	26.5%	778.90	12.94%	867.38	4.245%	867.38	4.245%	867.38	4.245%

1087.70	1.19%	Sn-125	9.64	d	332.10	1.41%	469.85	1.48%	800.28	1.07%	822.48	4.28%	915.55	4.13%
1089.15	4.59%	Sn-125	9.64	d	332.10	1.41%	469.85	1.48%	800.28	1.07%	822.48	4.28%	915.55	4.13%
1093.66	6%	Tm-172	63.60	h	78.74	6.5%	181.53	2.75%	912.13	1.42%	1387.09	5.6%	1465.93	4.5%
1097.33	56.2%	In-116m	54.15	m	1293.56	84.4%	416.86	27.7%	2112.31	15.5%	818.72	11.5%	1507.67	10%
1099.25	56.5%	Fe-59	44.495	d	142.65	1.02%	192.35	3.08%	1291.60	43.2%	---	---	---	---
1112.07	13.644%	Eu-152	13.528	y	121.78	28.58%	244.70	7.583%	344.28	26.5%	778.90	12.942%	867.38	4.245%
1115.52	15.1%	Ni-65	2.52	h	1481.84	23.5%	366.27	4.75%	---	---	---	---	---	-
1115.55	50.6%	Zn-65	243.930	d	---	---	---	---	---	---	---	---	---	-
1120.54	99.987%	Sc-46	83.79	d	889.28	99.84%	---	---	---	---	---	---	---	-
1121.30	34.9%	Ta-182	114.74	d	67.75	41.2%	100.11	2.65%	152.43	6.93%	222.11	7.49%	229.32	3.63%
1125.46	14.9%	Te-131m	33.25	h	102.06	10.37%	240.93	9.91%	334.27	12.49%	773.67	49.9%	782.49	10.16%
1131.51	22.74%	I-135	6.57	h	1260.41	28.9%	526.56	13.514%	1678.03	9.62%	1457.60	8.73%	1038.76	8.01%
1146.96	4.95%	Te-131	25.00	m	149.72	69%	452.32	18.18%	492.66	4.826%	602.04	4.187%	---	-
1167.97	1.789%	Cs-134	2.065	y	475.37	1.486%	563.25	8.35%	569.33	15.38%	604.72	97.62%	795.86	85.53%
1173.24	99.974%	Co-60	1925.28	d	1332.50	99.986%	---	---	---	---	---	---	---	-
1177.96	14.87%	Tb-160	72.30	d	86.79	13.15%	197.04	5.18%	215.65	4.018%	298.58	26.13%	879.38	30.1%
1180.89	13.3%	Nd-151	12.44	m	116.80	39%	255.68	14.80%	138.89	7.05%	175.07	6.33%	736.23	5.92%
1189.05	16.23%	Ta-182	114.74	d	67.75	41.2%	100.11	2.65%	152.43	6.93%	222.11	7.49%	229.32	3.63%
1206.60	12.74%	Te-131m	33.25	h	102.06	10.37%	240.93	9.91%	334.27	12.49%	773.67	49.9%	782.49	10.16%
1212.88	2.38%	Sc-48	43.67	h	175.36	7.48%	983.52	100.1%	1037.60	97.6%	1312.10	100.1%	---	-
1212.94	1.44%	As-76	1.094	d	559.10	45%	563.18	1.2%	657.04	6.2%	1216.10	3.42%	1228.60	1.21%
1221.41	26.98%	Ta-182	114.74	d	67.75	41.2%	100.11	2.65%	152.43	6.93%	222.11	7.49%	229.32	3.63%
1228.60	1.21%	As-76	1.094	d	559.10	45%	563.18	1.2%	657.04	6.2%	1216.10	3.42%	1212.94	1.44%
1231.02	11.44%	Ta-182	114.74	d	67.75	41.2%	100.11	2.65%	152.43	6.93%	222.11	7.49%	229.32	3.63%
1235.36	20%	Cs-136	13.04	d	66.88	4.79%	86.36	5.18%	153.25	5.75%	176.60	10%	273.65	11.1%
1238.28	67.60%	Co-56	77.236	d	846.77	100%	1037.84	13.99%	1360.21	4.33%	1771.35	15.69%	2015.18	3.08%
1241.20	3.47%	Yb-177	1.911	h	150.39	20.3%	1080.21	5.6%	121.62	3.42%	138.61	1.34%	---	-
1260.41	28.9%	I-135	6.57	h	1131.51	22.74%	526.56	13.514%	1678.03	9.62%	1457.60	8.73%	1038.76	8.01%
1266.12	0.07%	Si-31	157.30	m	---	---	---	---	---	---	---	---	---	-
1271.88	7.444%	Tb-160	72.30	d	86.79	13.15%	197.04	5.18%	215.65	4.018%	298.58	26.13%	879.38	30.1%
1273.37	90.6%	Al-29	6.56	m	2425.91	5.7%	2028.12	3.7%	---	---	---	---	---	-
1274.44	35.19%	Eu-154	8.601	y	123.07	40.79%	247.93	6.95%	591.76	4.99%	723.30	20.22%	756.76	4.57%
1274.53	99.944%	Na-22	2.603	y	---	---	---	---	---	---	---	---	---	-
1291.60	43.2%	Fe-59	44.495	d	142.65	1.02%	192.35	3.08%	1099.25	56.5%	---	---	---	-
1293.56	84.4%	In-116m	54.15	m	1097.33	56.2%	416.86	27.7%	2112.31	15.5%	818.72	11.5%	1507.67	10%







## (K) Neutron Activation Properties of Isotopes Useful for Neutron Activation Analysis

January 22, 2014

By: Barry Diacon, McMaster University  
Jeffrey Johnston, McMaster University

### Elements

Z	Symbol	Element	Isotopes in Nature	Half-Life	Unit	Abundance in Nature (%)	Thermal Nuetron Absortion Cross Section (barn)	Potential Product(s)	Half-Life of Product	Unit
8	O	Oxygen	O-18	Stable	---	0.205%	0.00016	O-19	26.88	s
9	F	Fluorine	F-19	Stable	---	100%	0.009582	F-20	11.07	s
11	Na	Sodium	Na-23	Stable	---	100%	0.528	Na-24	14.997	h
12	Mg	Magnesium	Mg-26	Stable	---	11.01%	0.03831	Mg-27	9.458	m
13	Al	Aluminium	Al-27	Stable	---	100%	0.2335	Al-28	2.2414	m
14	Si	Silicon	Si-30	Stable	---	3.092%	0.107	Si-31	157.3	m
15	P	Phosphorus	P-31	Stable	---	100%	0.1991	P-32	14.262	d
16	S	Sulfur	S-34	Stable	---	4.25%	0.2236	S-35	87.37	d
			S-36	Stable	---	0.01%	0.1504	S-37	5.05	m
17	Cl	Chlorine	Cl-37	Stable	---	24.24%	0.4332	Cl-38	37.24	m
18	Ar	Argon	Ar-40	Stable	---	99.6035%	0.6601	Ar-41	109.61	m
19	K	Potassium	K-41	Stable	---	6.7302%	1.459	K-42	12.321	h
20	Ca	Calcium	Ca-46	Stable	---	0.004%	0.7402	Ca-47	4.536	d
			Ca-48	6.0000E+18	y	0.187%	1.093	Ca-49	8.718	m
21	Sc	Scandium	Sc-45	Stable	---	100%	27.16	Sc-46	83.79	d
			"	"	---	"	9.6	Sc-46m	18.75	s
22	Ti	Titanium	Ti-50	Stable	---	5.18%	0.1783	Ti-51	5.76	m
23	V	Vanadium	V-51	Stable	---	99.75%	4.90	V-52	3.743	m
24	Cr	Chromium	Cr-50	1.8000E+17	y	4.345%	15.92	Cr-51	27.7025	d
25	Mn	Manganese	Mn-55	Stable	---	100%	13.41	Mn-56	2.5789	h
26	Fe	Iron	Fe-58	Stable	---	0.282%	1.149	Fe-59	44.495	d

27	Co	Cobalt	Co-59	Stable	---	100%	37.17	Co-60	5.27	y
			"	"	---	"	20.0	Co-60m	10.467	m
28	Ni	Nickel	Ni-64	Stable	---	0.926%	1.518	Ni-65	2.5175	h
29	Cu	Copper	Cu-63	Stable	---	69.15%	4.47	Cu-64	12.701	h
			Cu-65	Stable	---	30.85%	2.148	Cu-66	5.12	m
30	Zn	Zinc	Zn-64	Stable	---	48.6%	0.93	Zn-65	243.93	d
			Zn-68	Stable	---	18.8%	0.0699	Zn-69m	13.76	h
			Zn-70	5.0000E+14	y	0.6%	0.0082	Zn-71m	3.96	h
31	Ga	Gallium	Ga-69	Stable	---	60.108%	1.73	Ga-70	21.14	m
			Ga-71	Stable	---	39.892%	4.731	Ga-72	14.1	h
32	Ge	Germanium	Ge-74	Stable	---	36.50%	0.383	Ge-75	82.78	m
			"	"	---	"	0.143	Ge-75m	47.7	s
			Ge-76	Stable	---	7.80%	0.050	Ge-77	11.3	h
			"	"	---	"	0.092	Ge-77m	52.9	s
33	As	Arsenic	As-75	Stable	---	100%	4.501	As-76	1.0942	d
34	Se	Selenium	Se-74	Stable	---	0.89%	51.81	Se-75	119.77	d
			Se-76	Stable	---	9.36%	21.0	Se-77m	17.4	s
			Se-78	Stable	---	23.78%	0.33	Se-79m	3.92	m
			Se-80	Stable	---	49.61%	0.6102	Se-81	18.45	m
			"	"	---	"	0.080	Se-81m	57.28	m
			Se-82	1.0800E+20	y	8.73%	0.04442	Se-83	22.3	m
			"	"	y	"	0.0058	Se-83m	70.1	s
35	Br	Bromine	Br-79	Stable	---	50.690%	9.85	Br-80	17.68	m
			"	"	---	"	2.04	Br-80m	4.4205	h
			Br-81	Stable	---	49.31%	2.58	Br-82	35.282	h
			"	"	---	"	2.43	Br-82m	6.13	m
36	Kr	Krypton	Kr-84	Stable	---	56.96%	0.90	Kr-85m	4.48	h
			Kr-86	Stable	---	17.3%	0.0008782	Kr-87	76.3	m
37	Rb	Rubidium	Rb-85	Stable	---	72.165%	0.4935	Rb-86	18.642	d
			"	"	---	"	0.050	Rb-86m	1.017	m
			Rb-87	4.8100E+07	y	27.835%	0.12	Rb-88	17.773	m
38	Sr	Strontium	Sr-84	Stable	---	0.56%	0.8221	Sr-85	64.85	d
			"	"	---	"	0.61	Sr-85m	67.63	m
			Sr-86	Stable	---	9.86%	0.770	Sr-87m	2.815	h

39	Y	Yttrium	Sr-88	Stable	---	82.58%	0.008688	Sr-89	50.53	d	
40	Zr	Zirconium	Y-89	Stable	---	100%	0.006	Y-90m	3.19	h	
			Zr-94	Stable	---	17.38%	0.695	Zr-95	64.032	d	
			Zr-96	3.8000E+19 y		2.80%	0.02285	Zr-97	16.749	h	
41	Nb	Niobium	Nb-93	Stable	---	100%	0.863	Nb-94m	6.26	m	
42	Mo	Molybdenum	Mo-92	Stable	---	14.84%	0.0060	Mo-93m	6.85	h	
			Mo-98	Stable	---	24.13%	0.13	Mo-99	65.976	h	
			Mo-100	1.0000E+19 y		9.63%	0.199	Mo-101	14.61	m	
44	Ru	Ruthenium	Ru-96	Stable	---	5.54%	0.2901	Ru-97	2.83	d	
			Ru-102	Stable	---	31.55%	1.27	Ru-103	39.247	d	
			Ru-104	Stable	---	18.62%	0.4716	Ru-105	4.44	h	
45	Rh	Rhodium	Rh-103	Stable	---	100%	134	Rh-104	42.3	s	
			"	"	---	"	11	Rh-104m	4.34	m	
46	Pd	Palladium	Pd-102	Stable	---	1.02%	4.8	Pd-103	16.991	d	
			Pd-106	Stable	---	27.33%	0.013	Pd-107m	21.3	s	
			Pd-108	Stable	---	26.46%	8.481	Pd-109	13.7012	h	
			"	"	---	"	0.20	Pd-109m	4.696	m	
			Pd-110	Stable	---	11.72%	0.36	Pd-111	23.4	m	
			"	"	---	"	0.012	Pd-111m	5.5	h	
47	Ag	Silver	Ag-107	Stable	---	51.839%	37.6	Ag-108	2.382	m	
			Ag-109	Stable	---	48.161%	91.12	Ag-110	24.6	s	
			"	"	---	"	3.9	Ag-110m	249.76	d	
48	Cd	Cadmium	Cd-106	Stable	---	1.25%	1.004	Cd-107	6.5	h	
			Cd-108	Stable	---	0.89%	0.7974	Cd-109	461.4	d	
			Cd-110	Stable	---	12.49%	0.10	Cd-111m	48.5	m	
			Cd-114	2.1000E+18 y		28.73%	0.336	Cd-115	53.46	h	
			"	"	y	"	0.036	Cd-115m	44.56	d	
			Cd-116	Stable	---	7.49%	0.050	Cd-117	2.49	h	
			"	"	---	"	0.027	Cd-117m	3.36	h	
49	In	Indium	In-113	Stable	---	4.29%	8.2	In-114m	49.51	d	
			In-115	4.4100E+14 y		95.71%	70	In-116m	54.29	m	
50	Sn	Tin	Sn-112	1.3000E+21 y		0.97%	0.541	Sn-113	115.09	d	
			"	"	y	"	0.35	Sn-113m	21.4	m	
			Sn-116	Stable	---	14.54%	0.0060	Sn-117m	13.76	d	

51	Sb	Antimony	Sn-118	Stable	---	24.22%	0.08	Sn-119m	293.1	d
			Sn-122	Stable	---	4.63%	0.18	Sn-123	129.2	d
			"	"	---	"	0.146	Sn-123m	40.06	m
			Sn-124	1.2000E+21	y	5.79%	0.0042	Sn-125	9.64	d
			"	"	y	"	0.1160	Sn-125m	9.52	m
	Te	Tellurium	Sb-121	Stable	---	57.21%	5.773	Sb-122	2.7238	d
			"	"	---	"	0.055	Sb-122m	4.191	m
			Sb-123	Stable	---	42.79%	3.875	Sb-124	60.2	d
			"	"	---	"	0.0350	Sb-124m	93.0	s
			Te-120	Stable	---	0.09%	2.00	Te-121	19.17	d
52	Te	Tellurium	"	"	---	"	0.34	Te-121m	164.20	d
			Te-122	Stable	---	2.55%	2.80	Te-123m	119.2	d
			Te-124	Stable	---	4.74%	0.040	Te-125m	57.4	d
			Te-126	Stable	---	18.84%	0.90	Te-127	9.35	h
			"	"	---	"	0.1350	Te-127m	106.1	d
			Te-128	2.4100E+24	y	31.74%	0.20	Te-129	69.6	m
			"	"	y	"	0.015	Te-129m	33.6	d
			Te-130	3.0000E+24	y	34.08%	0.2700	Te-131	25.0	m
			"	"	y	"	0.0200	Te-131m	33.25	h
			I-127	Stable	---	100%	6.146	I-128	24.99	m
53	I	Iodine	Xe-124	1.6000E+14	y	0.10%	106	Xe-125	16.90	h
			Xe-128	Stable	---	1.91%	0.36	Xe-129m	8.88	d
			Xe-130	Stable	---	4.071%	0.42	Xe-131m	11.84	d
			Xe-132	Stable	---	26.9086%	0.4506	Xe-133	5.2475	d
			"	"	---	"	0.025	Xe-133m	2.198	s
			Xe-134	5.8000E+22	y	10.436%	0.2649	Xe-135	9.14	h
			"	"	y	"	0.003	Xe-135m	15.29	m
			Xe-136	2.4000E+21	y	8.8573%	0.16	Xe-137	3.818	m
			Cs-133	Stable	---	100%	29.0	Cs-134	2.0652	y
			"	"	---	"	2.74	Cs-134m	2.912	h
56	Ba	Barium	Ba-130	Stable	---	0.106%	8.68	Ba-131	11.5	d
			"	"	---	"	2.5	Ba-131m	14.6	m
			Ba-132	3.0000E+21	y	0.101%	6.532	Ba-133	10.551	y
			"	"	y	"	0.6	Ba-133m	38.93	h

			Ba-134	Stable	---	2.417%	0.158	Ba-135m	28.700	h
			Ba-136	Stable	---	7.854%	0.10	Ba-137m	2.522	m
			Ba-138	Stable	---	71.698%	0.4035	Ba-139	83.06	m
57	La	Lanthanum	La-139	Stable	---	99.9119%	9.041	La-140	1.6786	d
58	Ce	Cerium	Ce-136	7.0000E+13	y	0.185%	6.30	Ce-137	9	h
			"	"	y	"	0.95	Ce-137m	34.4	h
			Ce-138	9.0000E+13	y	0.251%	1.037	Ce-139	137.641	d
			Ce-140	Stable	---	88.485%	0.5775	Ce-141	32.508	d
			Ce-142	5.0000E+16	y	11.114%	0.965	Ce-143	33.039	h
60	Nd	Neodymium	Nd-146	Stable	---	17.189%	1.489	Nd-147	10.98	d
			Nd-148	Stable	---	5.756%	2.584	Nd-149	1.728	h
			Nd-150	1.9000E+18	y	5.64%	1.02	Nd-151	12.44	m
62	Sm	Samarium	Sm-144	Stable	---	3.07%	0.70	Sm-145	340	d
			Sm-152	Stable	---	26.75%	206	Sm-153	46.284	h
			Sm-154	Stable	---	22.75%	8.325	Sm-155	22.3	m
63	Eu	Europium	Eu-151	1.7000E+18	y	47.81%	5900	Eu-152	13.528	y
			"	"	y	"	3300	Eu-152m	9.3116	h
			Eu-153	Stable	---	52.19%	380	Eu-154	8.601	y
64	Gd	Gadolinium	Gd-152	1.0800E+14	y	0.20%	1100	Gd-153	240.4	d
			Gd-158	Stable	---	24.84%	2.202	Gd-159	18.479	h
			Gd-160	Stable	---	21.86%	1.410	Gd-161	3.66	m
65	Tb	Terbium	Tb-159	Stable	---	100%	23.35	Tb-160	72.3	d
66	Dy	Dysprosium	Dy-156	Stable	---	0.056%	33	Dy-157	8.14	h
			Dy-158	Stable	---	0.095%	70	Dy-159	144.4	d
			Dy-164	Stable	---	28.26%	900	Dy-165	2.334	h
			"	"	---	"	1800	Dy-165m	1.257	m
67	Ho	Holmium	Ho-165	Stable	---	100%	62	Ho-166	26.824	h
			"	"	---	"	3.5	Ho-166m	1200	y
68	Er	Erbium	Er-170	Stable	---	14.91%	8.853	Er-171	7.516	h
			Yb-174	Stable	---	31.80%	128	Yb-175	4.185	d
			Yb-176	Stable	---	12.70%	2.85	Yb-177	1.911	h
71	Lu	Lutetium	Lu-175	Stable	---	97.401%	16.7	Lu-176m	3.664	h
			Lu-176	3.7600E+10	y	2.599%	2097	Lu-177	6.647	d
			"	"	y	"	7	Lu-177m	160.44	d

72	Hf	Hafnium	Hf-174	2.0000E+15	y	0.162%	561.7	Hf-175	70	d
			Hf-176	Stable	---	5.26%	38	Hf-177m2	51.4	m
			Hf-178	Stable	---	27.297%	53	Hf-179m	18.67	s
			Hf-179	Stable	---	13.629%	0.43	Hf-180m	5.47	h
			Hf-180	Stable	---	35.10%	13.01	Hf-181	42.39	d
73	Ta	Tantalum	Ta-181	Stable	---	99.98799%	21.13	Ta-182	114.74	d
			"	"	---	"	0.0103	Ta-182m	283	ms
74	W	Tungsten	W-180	6.6000E+17	y	0.12%	10.1	W-181	121.2	d
			W-184	3.0000E+17	y	30.64%	1.75	W-185	75.1000	d
			W-186	Stable	---	28.43%	38.70	W-187	23.9	h
75	Re	Rhenium	Re-185	Stable	---	37.4%	112.1	Re-186	3.7186	d
			Re-187	4.3300E+10	y	62.6%	76.7	Re-188	17.003	h
76	Os	Osmium	Os-184	5.6000E+13	y	0.02%	3613	Os-185	93.6	d
			Os-189	Stable	---	16.10%	0.00026	Os-190m	9.9	m
			Os-190	Stable	---	26.4%	3.9	Os-191	15.4	d
			"	"	---	"	9.1	Os-191m	13.1	h
			Os-192	Stable	---	41.0%	2.0	Os-193	30.11	h
77	Ir	Iridium	Ir-191	Stable	---	37.3%	400	Ir-192m1	1.45	m
78	Pt	Platinum	Pt-190	6.5000E+11	y	0.013%	800	Pt-191	2.83	d
			Pt-192	Stable	---	0.782%	2.2	Pt-193m	4.33	d
			Pt-196	Stable	---	25.21%	0.050	Pt-197m	95.41	m
			Pt-198	Stable	---	7.36%	3.66	Pt-199	30.8	m
79	Au	Gold	Au-197	Stable	---	100%	98.7	Au-198	2.6948	d
80	Hg	Mercury	Hg-196	Stable	---	0.15%	3078	Hg-197	64.14	h
			"	"	---	"	120	Hg-197m	23.8	h
			Hg-198	Stable	---	9.97%	0.018	Hg-199m	42.67	m
			Hg-202	Stable	---	29.86%	4.955	Hg-203	46.594	d
			Hg-204	Stable	---	6.87%	0.4315	Hg-205	5.14	m
90	Th	Thorium	Th-232	1.4000E+10	y	100%	7.337	Th-233	21.83	m
92	U	Uranium	U-238	4.4680E+09	y	99.274%	2.683	U-239	23.45	m

Abbreviations used for the "Units" columns: y = years; d = days; h = hours; m = minutes; s = seconds; ms = milliseconds

Information sources accessed for above table: