

THIẾT KẾ NGUYÊN TẮC HỆ THỐNG CHÙM POSITRON CHẬM BẰNG CHƯƠNG TRÌNH MÔ PHỎNG SIMION

CAO THANH LONG¹, BÙI XUÂN HUY²

¹Trung tâm Hạt nhân Thành phố Hồ Chí Minh, 217 Nguyễn Trãi, Phường Nguyễn Cư Trinh,
Quận 1, Thành phố Hồ Chí Minh

²Đại học Sư Phạm Thành phố Hồ Chí Minh, 280 An Dương Vương, Phường 4,
Quận 5, Thành phố Hồ Chí Minh

¹ctlong26051993@gmail.com, ²xuanhuy_vl@yahoo.com

Tóm tắt: Hệ thống chùm positron chậm là một thiết bị quan trọng trong nghiên cứu vật lý và kỹ thuật positron, đặc biệt được ứng dụng trong nghiên cứu vật liệu. Báo cáo của chúng tôi trình bày các kết quả nghiên cứu và áp dụng chương trình mô phỏng quỹ đạo hạt mang điện Simion để xây dựng các mô hình thiết kế khả thi cho hệ thống. Một số tính toán mô phỏng thử nghiệm quỹ đạo chuyển động của chùm hạt positron đã được tiến hành nhằm mục đích so sánh giữa các mô hình. Từ đó, một mô hình thiết kế nguyên tắc đã được đề xuất để làm cơ sở cho việc xây dựng hệ thống chùm positron chậm thực tế có thể được thực hiện trong tương lai ở Việt Nam.

Từ khóa: Hệ thống chùm positron chậm, chương trình mô phỏng, Simion, thiết kế nguyên tắc

I. MỞ ĐẦU

Phương pháp phổ kế huỷ cặp positron (**Positron Annihilation Spectroscopy – PAS**) đóng vai trò quan trọng trong việc nghiên cứu các dạng sai hỏng vật liệu, cấu trúc nano cũng như trạng thái kim loại, tạp chất bên trong vật liệu [1]. Do các nguồn positron đồng vị truyền thống được sử dụng trong phương pháp PAS có đặc trưng phát positron với phổ phân bố năng lượng liên tục, phương pháp này không cung cấp được những thông tin chi tiết về các sai hỏng bề mặt vật liệu nằm ở các độ sâu khác nhau [2]. Để khắc phục nhược điểm trên, các hệ thống chùm positron chậm đã được chế tạo và đưa vào hoạt động tại một số Viện nghiên cứu, phòng thí nghiệm và các trường Đại học lớn ở các nước phát triển nhằm mục đích tạo ra các chùm positron đơn năng có năng lượng thấp để thay thế cho nguồn phát đồng vị truyền thống. Các hệ thống này mặc dù có các thiết kế khác nhau nhưng vẫn tuân theo một nguyên lý thiết kế chung. Một tỉ lệ các positron có năng lượng cao phát ra từ nguồn phát được làm chậm để trở thành các positron chậm có năng lượng thấp (vài eV) và tương đối đơn năng. Các positron chậm sau đó được gia tốc nhẹ nhờ bộ phận tiền gia tốc và được dẫn qua một bộ phận lọc năng lượng để tách các hạt positron có năng lượng cao ra khỏi chùm tia. Chùm positron chậm tương đối đơn năng sau khi được lọc ra khỏi chùm tia ban đầu tiếp tục được dẫn qua một bộ phận gia tốc để được gia tốc đến một mức năng lượng cần thiết và được dẫn đến buồng chứa mẫu để bắn phá bề mặt của vật liệu cần khảo sát.

Trung tâm Hạt nhân Thành phố Hồ Chí Minh (Trung tâm) đã bước đầu áp dụng các phương pháp PAS bao gồm phương pháp đo thời gian sống positron và giãn nở Doppler để nghiên cứu một số tính chất vật liệu kim loại, ống nano carbon, zeolite và đã có được một số kết quả nhất định [3-6]. Tuy nhiên nguồn phát positron chủ yếu được sử dụng là nguồn ²²Na có phổ năng lượng rộng, gây hạn chế rất lớn đối với các nghiên cứu tính chất bề mặt vật liệu. Do đó, nhu cầu xây dựng một hệ thống phát chùm positron chậm trong tương lai tại Trung tâm để phục vụ cho các nghiên cứu và ứng dụng chuyên sâu là rất cần thiết. Để đảm bảo tính khả thi cho việc xây dựng hệ thống, công việc tiên quyết cần làm ở giai đoạn đầu là tìm hiểu và sử dụng các chương trình mô phỏng quỹ đạo hạt để phục vụ cho việc thiết kế nguyên tắc cho hệ thống. Trong số các chương trình mô phỏng tiêu biểu, chương trình Simion với nhiều tính năng tốt đã và đang được sử dụng rộng rãi với ứng dụng chính là mô phỏng các trường điện từ và tính toán quỹ đạo của hạt mang điện trong điện từ trường. Chương trình Simion đã được sử dụng cho việc nghiên cứu xây dựng các hệ thống chùm positron chậm tại một số

phòng thí nghiệm trên thế giới như Viện nghiên cứu Rossendorf (Đức), Phòng Thí nghiệm quốc gia Lawrence Livermore (Hoa Kỳ), trường Đại học Bath (Anh) và tại các nước khác như Israel, Trung Quốc [7-10]... Bên cạnh đó, một số tính toán mô phỏng thử nghiệm dựa trên thiết kế tham khảo của hệ thống SPONSOR thuộc Viện nghiên cứu Rossendorf bằng chương trình Simion đã được nhóm nghiên cứu tại Trung tâm thực hiện [11] và sự phù hợp giữa kết quả mô phỏng với các kết quả tính toán, đo đạc thực nghiệm của hệ thống SPONSOR đã chứng tỏ chương trình Simion là một công cụ tính toán thích hợp, có thể được sử dụng cho việc thiết kế nguyên tắc hệ thống chùm positron chậm.

Báo cáo trình bày các kết quả nghiên cứu áp dụng chương trình mô phỏng Simion để xây dựng các mô hình thiết kế khả thi của hệ thống chùm positron chậm dựa trên nguyên lý thiết kế của một số hệ thống tiêu biểu đã được đưa vào hoạt động trên thế giới và từ đó đưa ra một mô hình thiết kế nguyên tắc khả thi làm cơ sở cho việc thiết kế chi tiết kỹ thuật, chế tạo, xây dựng cho hệ thống chùm positron chậm có thể được thực hiện trong tương lai tại Trung tâm.

II. NỘI DUNG

II. 1. Tổng quan về chương trình mô phỏng Simion

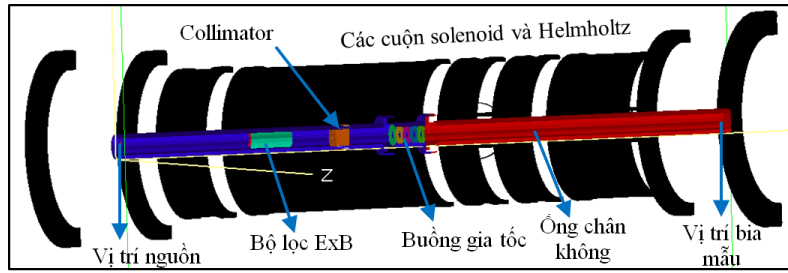
Simion là một chương trình mô phỏng chuyên dụng được sử dụng để mô hình hoá, mô phỏng các trường tĩnh điện và từ trường đồng thời tính toán quỹ đạo chuyển động của hạt mang điện trong điện từ trường [12]. Một cách tổng quan, chương trình Simion giải quyết hai bài toán chính bằng phương pháp số bao gồm tính toán các trường tĩnh điện, từ trường và bài toán xác định quỹ đạo chuyển động của hạt mang điện trong điện từ trường đã được tính toán. Phương pháp sai phân hữu hạn (Finite differential method) được tối ưu hoá bằng kỹ thuật lặp over-relaxation được chương trình sử dụng để giải quyết bài toán tìm nghiệm phương trình đạo hàm riêng từng phần, cụ thể là phương trình Laplace (hoặc phương trình Poisson) nhằm xác định giá trị thế tại mỗi điểm trong không gian của trường. Đối với bài toán xác định quỹ đạo chuyển động của hạt mang điện, chương trình sử dụng phương pháp tích phân số Runge-Kutta bậc bốn để dự đoán vận tốc và vị trí của hạt mang điện dựa vào các thông số phát hạt ban đầu được xác định bởi người dùng và dựa trên trường thế đã được tính toán, qua đó xác định quỹ đạo của hạt trong trường tĩnh điện và từ trường đã được xác định trước đó. Một trong những tính năng cực kỳ hữu ích của chương trình Simion là việc có thể sử dụng ngôn ngữ lập trình ngay bên trong chương trình, trong đó trình biên dịch ngôn ngữ Lua (Lua 5.1) đã được nhúng trực tiếp bên trong chương trình Simion từ phiên bản 8.0 trở đi. Việc sử dụng ngôn ngữ Lua giúp mở rộng khả năng mô phỏng của chương trình một cách linh hoạt và hiệu quả.

II. 2. Phương pháp nghiên cứu

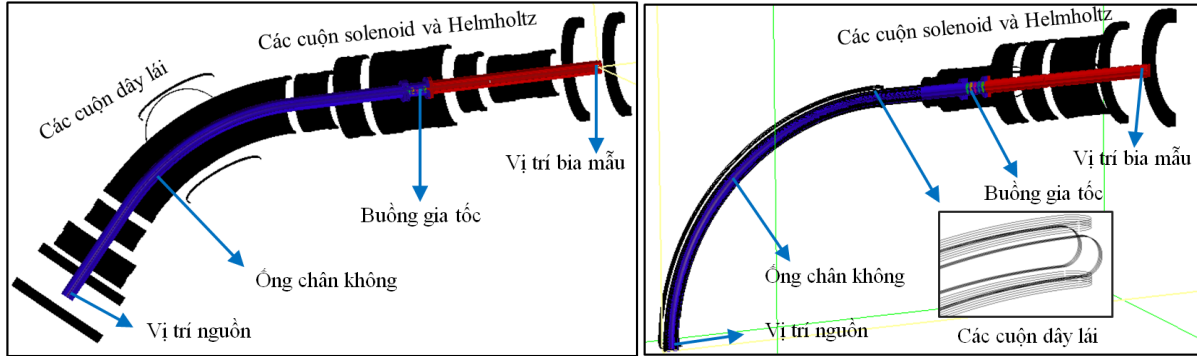
Dựa trên thông tin có thể tiếp cận được từ các thiết kế hệ thống chùm positron chậm mà nhóm nghiên cứu đã tham khảo, một số mô hình thiết kế hệ thống đã được xây dựng bằng chương trình mô phỏng Simion. Vì sự hạn chế về khả năng ứng dụng của chương trình, các mô hình thiết kế này chỉ dùng để mô phỏng nguyên lý hoạt động của một hệ thống chùm positron chậm một cách đơn giản chứ chưa phải là các thiết kế chi tiết kỹ thuật. Các mô hình mô phỏng được chia làm hai loại sau:

- Mô hình mô phỏng thiết kế theo dạng thẳng, sử dụng phương pháp lọc chùm positron chậm bằng bộ lọc điện từ trường ExB (hình 1).

- Mô hình mô phỏng thiết kế theo dạng cong, sử dụng phương pháp lọc chùm positron chậm bằng đoạn ống cong kết hợp với từ trường và được chia làm hai mô hình riêng lẻ bao gồm mô hình sử dụng đoạn ống cong với góc cong 50^0 dựa trên thiết kế của hệ thống SPONSOR [13, 14] và mô hình dùng đoạn ống cong với góc cong 90^0 dựa trên thiết kế của hệ thống của trường Đại học Halle [15] (hình 2).



Hình 1. Mô hình hệ thống thiết kế theo dạng thẳng



Hình 2. Mô hình hệ thống thiết kế theo dạng cong với góc cong 50^0 (trái) và góc cong 90^0 (phải)

Sau khi xây dựng thành công các mô hình mô phỏng trên, nhóm nghiên cứu đã tiến hành một số tính toán thử nghiệm mô phỏng quỹ đạo chuyển động của chùm hạt positron nhằm mục đích so sánh giữa các mô hình dựa trên việc khảo sát chất lượng của chùm hạt positron thu được tại bia mẫu cho cả ba mô hình thiết kế. Chùm hạt positron được mô phỏng với các thông số đầu vào giống nhau cho các mô hình cho mỗi trường hợp khảo sát. Các trường hợp khảo sát đã được thực hiện bao gồm:

- Khảo sát tính toán quỹ đạo bay của chùm hạt positron đơn năng. Khảo sát này được thực hiện nhằm đánh giá độ hội tụ và độ đơn năng của chùm hạt positron thu được tại bia mẫu của các mô hình.

- Khảo sát tính toán quỹ đạo bay của chùm hạt positron đơn năng trong trường hợp một cuộn solenoid bị lệch khỏi vị trí tối ưu ban đầu. Khảo sát này được thực hiện với mục đích đánh giá độ nhạy của chất lượng chùm hạt positron thu được tại bia mẫu khi phát sinh tình huống lắp đặt sai vị trí của một cuộn dây solenoid, dẫn đến sai lệch từ trường tối ưu dọc theo trục của các mô hình.

Nhóm nghiên cứu đã đánh giá, so sánh các kết quả tính toán mô phỏng và đưa ra lựa chọn thiết kế được xem là tối ưu nhất trong số các mô hình. Mô hình tối ưu này được đề xuất làm mô hình thiết kế nguyên tắc cho hệ thống chùm positron chậm có thể được xây dựng trong tương lai. Bản thông số thiết kế cuối cùng của mô hình sẽ bao gồm các thông số về dạng hình học của hệ thống, thông số thiết kế của các cuộn dây điện tạo từ trường và thông số về điện của mô hình tối ưu được lựa chọn.

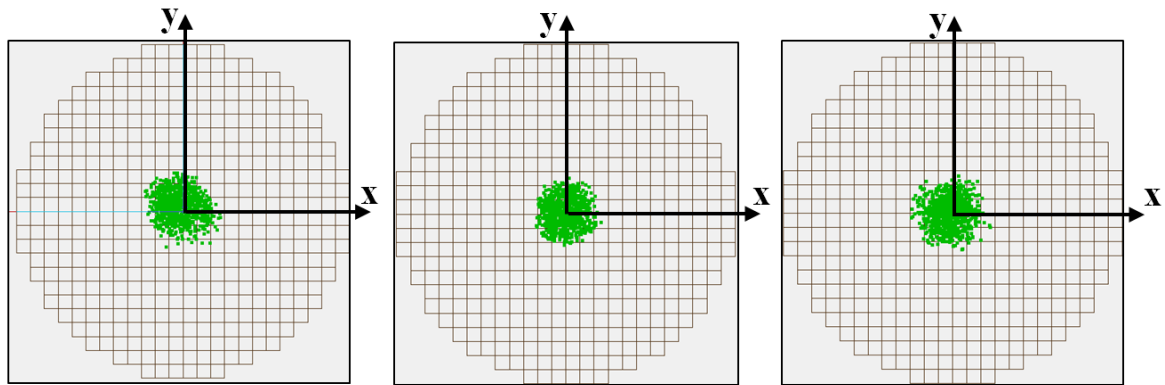
II. 3. Kết quả và bàn luận

Trường hợp 1: Khảo sát mô phỏng với chùm hạt positron đơn năng

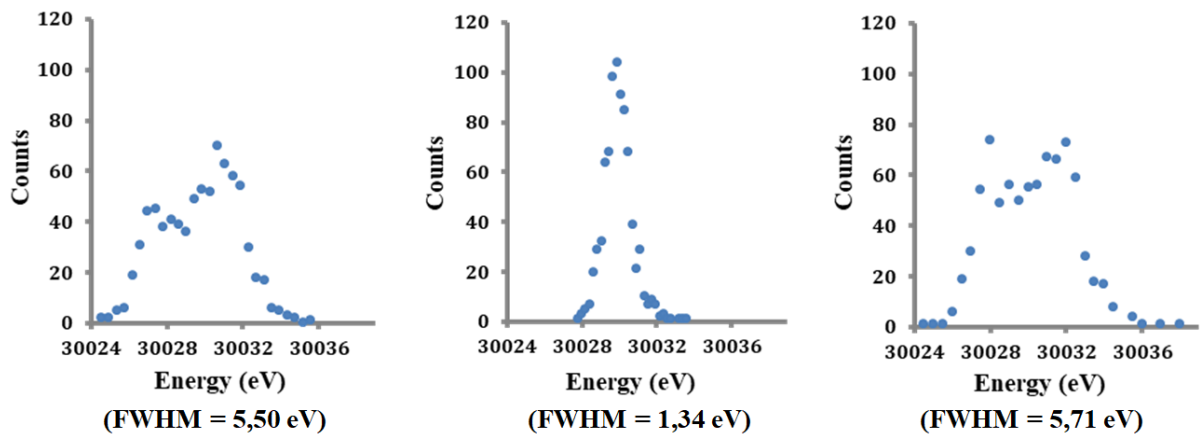
Chương trình Simion được sử dụng để mô phỏng quỹ đạo bay của chùm hạt bao gồm 1000 hạt positron đơn năng, có động năng ban đầu 3 eV phát đẳng hướng từ cửa sổ nguồn giả định cho từng mô hình thiết kế. Giá trị cao thế được cung cấp cho bộ phận tiền gia tốc và bộ phận gia tốc cho cả ba mô hình một cách tương ứng là 27 V và 30 kV. Các kết quả thống kê của chùm hạt positron thu được tại bia mẫu cho mỗi mô hình được trình bày trên bảng 1. Các kết quả biểu diễn phân bố chùm hạt và phân bố năng lượng của chùm hạt tại bia mẫu cho mỗi mô hình được mô tả trên hình 3 và hình 4 dưới đây.

Bảng 1. Kết quả thống kê tại bia mẫu trong trường hợp khảo sát với chùm hạt positron đơn năng

	Mô hình dạng thẳng	Mô hình dạng cong với góc cong 50^0	Mô hình dạng cong với góc cong 90^0
Tổng số positron phát ra từ nguồn	1000	1000	1000
Tổng số positron đến được bia mẫu	789	807	795
Tỉ lệ positron đến được bia mẫu	78,9%	80,7%	79,5%
Bán kính tiết diện chùm positron tại bia mẫu	2,75 mm	2,39 mm	2,79 mm



Hình 3. Phân bố của chùm hạt tại bề mặt bia mẫu cho mô hình thiết kế theo dạng thẳng (trái), thiết kế theo dạng cong với góc cong 50^0 (giữa) và góc cong 90^0 (phải) cho trường hợp khảo sát chùm hạt positron đơn năng



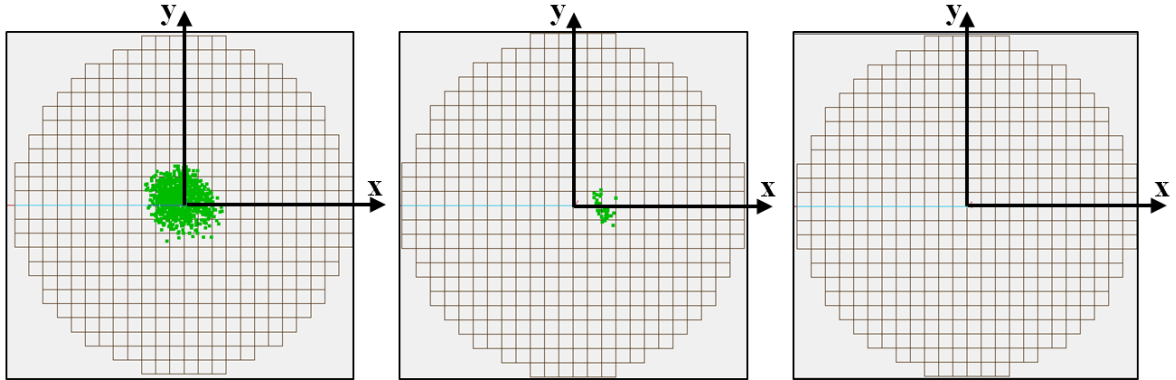
Hình 4. Phân bố năng lượng của chùm hạt tại bề mặt bia mẫu cho mô hình thiết kế theo dạng thẳng (trái), thiết kế theo dạng cong với góc cong 50^0 (giữa) và góc cong 90^0 (phải) cho trường hợp khảo sát chùm hạt positron đơn năng

Từ các kết quả khảo sát cho trường hợp 1, có thể thấy được chùm hạt positron thu được trong trường hợp sử dụng mô hình với góc cong 50^0 có bán kính tiết diện chùm hạt phân bố trên bề mặt bia mẫu là nhỏ nhất, do đó có độ hội tụ tốt hơn so với hai mô hình còn lại. Ngoài ra, phổ phân bố năng lượng của chùm hạt positron thu được cho cả ba mô hình thiết kế có đỉnh phổ nằm xung quanh mức năng lượng 30030 eV. Kết quả này phù hợp với đỉnh năng lượng đã được dự đoán sẽ thu được khi khảo sát chùm hạt positron đơn năng 3 eV được tiên gia tốc với điện áp 27 V và được gia tốc với cao thế 30 kV. Bên cạnh đó, kết quả đánh giá phổ phân bố năng lượng còn cho thấy độ rộng bán cực đại của phổ đối với mô hình thiết kế với

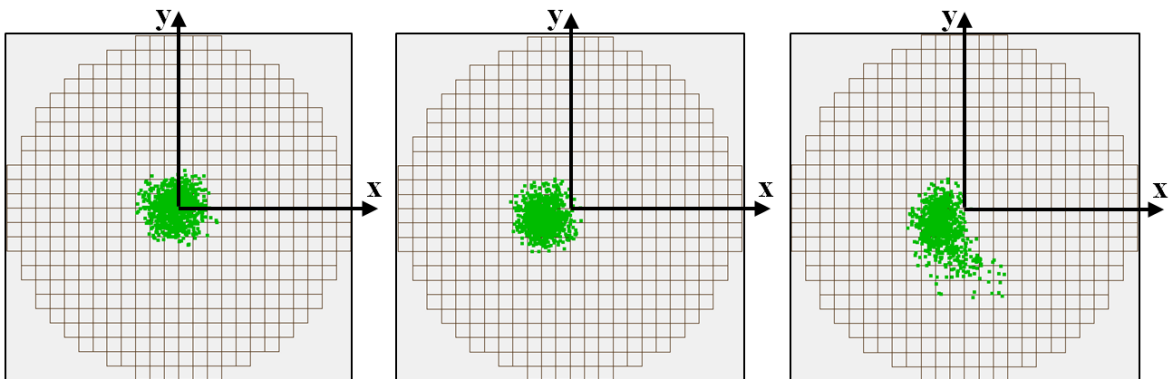
góc cong 50° (FWHM = 1,34 eV) là nhỏ hơn so với kết quả tính toán cho mô hình thiết kế theo dạng thẳng (FWHM = 5,50 eV) và mô hình thiết kế với góc cong 90° (FWHM = 5,71 eV). Kết quả này cho thấy chùm hạt positron thu được tại bia mẫu đối với mô hình thiết kế với góc cong 50° là tương đối đơn năng hơn so với hai mô hình còn lại.

Trường hợp 2: Khảo sát mô phỏng với chùm hạt positron đơn năng trong trường hợp một cuộn solenoid bị lệch khỏi vị trí tối ưu ban đầu

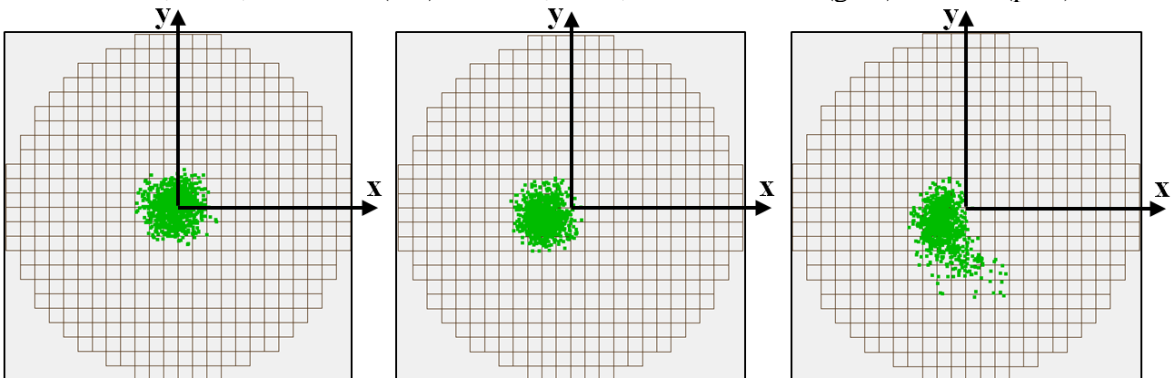
Quỹ đạo bay của chùm hạt đơn năng được mô phỏng với các thông số đầu giống trường hợp 1 đã được khảo sát trong trường hợp cuộn solenoid bao quanh bộ phận gia tốc của mỗi mô hình thiết kế được giả định bị lệch khỏi vị trí tối ưu ban đầu với các độ lệch 1 cm và 2 cm. Các kết quả so sánh phân bố của chùm hạt positron thu được tại bia mẫu cho các mô hình thiết kế được mô tả tương ứng trên các hình 5, 6 và 7 dưới đây.



Hình 5. Phân bố của chùm hạt tại bề mặt bia mẫu cho mô hình thiết kế theo dạng thẳng khi không làm lệch cuộn solenoid (trái) và làm lệch cuộn solenoid 1 cm (giữa) và 2 cm (phải)



Hình 6. Phân bố của chùm hạt tại bề mặt bia mẫu cho mô hình thiết kế theo dạng cong 50° khi không làm lệch cuộn solenoid (trái) và làm lệch cuộn solenoid 1 cm (giữa) và 2 cm (phải)



Hình 7. Phân bố của chùm hạt tại bề mặt bia mẫu cho mô hình thiết kế theo dạng cong 90° khi không làm lệch cuộn solenoid (trái) và làm lệch cuộn solenoid 1 cm (giữa) và 2 cm (phải)

Từ các kết quả khảo sát cho trường hợp 2, có thể thấy được với mô hình thiết kế theo dạng thẳng sử dụng bộ lọc ExB, độ lệch của cuộn solenoid bao quanh bộ phận gia tốc ảnh hưởng rất nhiều đến tỉ lệ các hạt positron đến được bia mẫu. Với trường hợp cuộn solenoid bị lệch 1 cm, sự sai lệch của từ trường làm cho các positron chậm sau khi ra khỏi bộ lọc ExB gần như bị chặn hoàn toàn bởi khối collimator và làm cho số hạt đến được bia mẫu rất ít. Trong trường hợp cuộn solenoid bị lệch 2 cm, thậm chí không có hạt positron nào đến được bia mẫu. Đối với hai mô hình thiết kế theo dạng cong, kết quả so sánh cho thấy chùm hạt positron thu được tại bia mẫu với mô hình thiết kế theo dạng cong với góc cong 90^0 bị sai lệch nhiều hơn so với việc sử dụng mô hình với góc cong 50^0 , thậm chí chùm hạt positron thu được còn bị thay đổi hình dạng trong trường hợp cuộn solenoid giả định bị lệch 2 cm như mô tả trên hình 7. Các kết quả so sánh trên cho thấy chất lượng của chùm hạt positron thu được với mô hình thiết kế theo dạng cong với góc cong 50^0 sẽ ít nhạy với sai số gây ra bởi của sự lệch vị trí cuộn solenoid so với việc sử dụng hai mô hình còn lại.

III. KẾT LUẬN

Thông qua việc thực hiện nghiên cứu này, nhóm nghiên cứu đã nắm được nguyên lý chung cũng như các thành phần chính của một hệ thống chùm positron chậm; đồng thời sử dụng chương trình mô phỏng Simion để xây dựng thành công các mô hình thiết kế khả thi cho một hệ thống chùm positron chậm. Từ việc xem xét tính khả thi của các mô hình thiết kế và đánh giá các kết quả tính toán mô phỏng thử nghiệm dẫn đến kết luận rằng mô hình thiết kế theo dạng cong với góc cong 50^0 tối ưu hơn so với hai mô hình còn lại. Đây sẽ là mô hình được đề xuất làm thiết kế nguyên tắc và làm cơ sở cho việc thiết kế chi tiết kỹ thuật các thành phần thiết yếu của hệ thống chùm positron chậm có thể được xây dựng trong tương lai. Với mô hình thiết kế nguyên tắc đã được lựa chọn, các thông số của mô hình có thể được thay đổi và hoàn thiện một cách linh động qua đó có thể tối ưu hóa hơn nữa các thông số kỹ thuật một cách khả thi và hợp lý nhất trước khi tiến tới việc thiết kế, xây dựng hệ thống thực tế.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

- [1] P K Pujari, K Sudarshan and D Dutta (Ed.), “11th International Workshop on Positron and Positronium Chemistry (PPC-11)”, *Journal of Physics: Conference Series*, Volume 618, Conference 1, 2015.
- [2] P.G. Coleman (Ed.), “Positron Beams and their applications”, *World Scientific*, Singapore, 2000.
- [3] L. A. Tuyen, Zs Kajcsos, K Lázár, T D Tap, D D Khiem, P T Phuc: “Positron annihilation characteristics in multi-wall carbon nanotubes with different average diameters”, *Journal of Physics: Conference Series (IOP)*, 2013.
- [4] A. T. Luu, Zs. Kajcsos, N. D. Thanh, T. Q. Dung, M. V. Nhon, K. Lázár, K. Havancsák, G. Huhn, Z. E. Horváth, T. D. Tap, L. T. Son, and P. T. Phuc “Multi-Wall carbon nanotubes investigated by positron annihilation techniques and microscopies for further production handling” *Phys. Status Solidi C* 6, No. 11, 2578–2581, 2009
- [5] Nguyen Duc Thanh, Tran Quoc Dung, Luu Anh Tuyen and Khuong Thanh Tuan, “Semi-empirical formula for large pore- size estimation from o-Ps annihilation lifetime” *Int. J. Nuclear Energy Science and Technology*, Vol. 4, No. 2 (2008).
- [6] T. Q. Dung, K. Lázár, K. Havancsák, Zs. Kajcsos “o-Ps lifetimes in iron containing micro- and mesoporous media”, *Materials Science Forum*, Vol. 733, pp 197-202, 2013.
- [7] F. A. Selim, A.W. Hunt, J.A. Golovchenko, R. H. Howell, R. Haakenaasen, K.G. Lynn, “Improved source and transport of monoenergetic MeV positrons”, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B* 171 (2000), 182-188, 2000.

- [8] S. May-Tal Beck, D. Cohen, E. Cohen, A. Kelleher, O. Hen, J. Dumas, E. Piassetzky, N. Pilip, G. Ron, I. Sabo-Napadensky, R Weiss-Babai, “Design of the Slow POSitron facility (SPOT) in Israel”, *13th International Workshop on Slow Positron Beam Techniques and Applications*, 2014.
- [9] C. K. Cheung, P. S. Naik, C. D. Beling, S. Fung, H. M. Weng, “Performance of a slow positron beam using a hybrid lens design”, *Department of Physics, University of Hong Kong, Pokfulam Road, Hong Kong, PR China*, 2006.
- [10] Xu Hong-Xia, Liu Jian-Dang, Gao Chuan-Bo, Weng Hui-Min, Ye Bang-Jiao, “SIMION simulation of a slow pulsed positron beam”, *Department of Modern Physics, University of Science and Technology of China, Hefei 230026, China*, 2012.
- [11] Cao Thanh Long, Nguyen Trung Hieu, Tran Quoc Dung, Huynh Dong Phuong, “Some initial results of simulating a positron beam system by using SIMION”, *Nuclear Science and Technology*, Vol.7, No. 3, 17-24, 2017.
- [12] David J. Manura, David A. Dahl, “SIMION Version 8.0/8.1 User Manual”, *Document Revision 5, Scientific Instrument Services Inc.*, 2011.
- [13] Wolfgang Anwanda, Gerhard Brauer, Maik Butterling, Hans-Rainer Kissener, Andreas Wagner, “Design and Construction of a Slow Positron Beam for Solid and Surface Investigations”, *Defect and Diffusion Forum*, Vol. 331, 2012.
- [14] Wolfgang Anwanda, Gerhard Brauer, Hans-Rainer Kissener, “Magnetically guided slow positron beam for defect studies”, *Positron Group of TU Dresden at Research Centre Rossendorf, Dresden, Germany*, 1994.
- [15] R. Krause-Rehberg, “Simple design for a continuous magnetically guided positron beam – and – News from the EPOS project”, *Institute of Physics, Martin Luther University Halle-Wittenberg, Germany*, 2010.

CONCEPTUAL DESIGN OF A SLOW POSITRON BEAM SYSTEM USING SIMION SIMULATION PROGRAM

Abstract: The slow positron beam system is an important device in the study of positron physics and techniques, especially in materials research. Our report presents the obtained results in studying and applying a charged particles trajectory simulation program – Simion to build feasible design models for the system. Some positron beam trajectory calculation tests have been performed for comparison between the models. From that, a conceptual design model has been proposed as a basis for building a real slow positron beam system in the future in Vietnam.

Keywords: *Slow positron beam system, simulation program, Simion, conceptual design*