

TẠP CHÍ KHOA HỌC TRƯỜNG ĐẠI HỌC SƯ PHẠM TP HỒ CHÍ MINH

Tập 17, Số 12 (2020): 2219-2228

HO CHI MINH CITY UNIVERSITY OF EDUCATION JOURNAL OF SCIENCE

Vol. 17, No. 12 (2020): 2219-2228

Website: http://journal.hcmue.edu.vn

# Bài báo nghiên cứu XÁC ĐỊNH MẬT ĐỘ AXIT VỚI ĐƯỜNG CHUẨN MẬT ĐỘ ĐƯỢC XÂY DỰNG TỪ DỮ LIỆU MÔ PHỎNG MONTE CARLO

Nguyễn Thu Hằng, Đặng Hoài An, Trương Thành Sang, Trần Thị Mỹ Duyên,

Lê Quang Vương, Nguyễn Thành Đạt, Lâm Duy Nhất, Hoàng Đức Tâm<sup>\*</sup>

Trường Đại học Sư phạm Thành phố Hồ Chí Minh, Việt Nam <sup>\*</sup>Tác giả liên hệ: Hoàng Đức Tâm – Email: tamhd@hcmue.edu.vn Ngày nhận bài: 19-10-2020; ngày nhận bài sửa: 09-11-2020; ngày duyệt đăng: 28-12-2020

# TÓM TẮT

Nghiên cứu trình bày một cách tiếp cận để xác định mật độ của các loại axit phổ biến. Trong cách tiếp cận này, đường chuẩn tuyến tính của tỉ số lnR (R là tỉ số diện tích đỉnh phổ truyền qua của axit và nước) theo mật độ được xây dựng bằng dữ liệu mô phỏng Monte Carlo để xác định mật độ của các loại axit vô cơ và hữu cơ. Nghiên cứu sử dụng đầu dò nhấp nháy NaI(Tl) và nguồn phóng xạ <sup>137</sup>Cs. Kết quả thu được chỉ ra rằng, cách tiếp cận đề xuất trong nghiên cứu là khả thi với độ lệch tương đối của giá trị mật độ đo được so với mật độ chuẩn của các loại axit cung cấp bởi nhà sản xuất là dưới 6,5% cho tất cả các trường hợp khảo sát. Vì vậy, nghiên cứu đã cung cấp một cách tiếp cận khác đơn giản, hiệu quả và thuận tiện để xác định mật độ của axit.

Từ khóa: mật độ axit; MCNP; NaI(Tl); truyền qua

# 1. Giới thiệu

Mật độ là một tham số quan trọng của chất lỏng. Trong công nghiệp dầu khí, thông số này được sử dụng để phân loại dầu thô. Trong lĩnh vực công nghiệp thực phẩm, nó được sử dụng để đánh giá lượng chất hòa tan trong nước. Với các loại axit bao gồm vô cơ và hữu cơ, việc biết chính xác mật độ của nó giúp xác định được nồng độ phần trăm của dung dịch. Một trong những phương pháp được sử dụng phổ biến trước đây để xác định mật độ của các loại chất lỏng là sử dụng các dụng cụ như hydromter (Aguilera, Wright, & Bean, 2008; Cuckow, 1949; Jones, 1995) hay pycnometer (Roy, Sah, & Pradhan, 2010). Hoạt động của các loại dụng cụ này dựa trên nguyên lí Archimedes. Nhìn chung, độ chính xác của các phương pháp này thường không cao do phụ thuộc vào việc đọc độ chia định sẵn trên dụng cụ. Việc thao tác trực tiếp trên những dụng cụ này trong quá trình chuẩn bị mẫu và quá trình đo đạc tiềm ẩn nguy cơ cho người làm thí nghiệm đặc biệt trong trường hợp axit cần đo là loại axit mạnh.

Một cách tiếp cận khác để đo mật độ chất lỏng là sử dụng phương pháp gamma tán xạ

*Cite this article as:* Nguyen Thu Hang, Dang Hoai An, Truong Thanh Sang, Tran Thi My Duyen, Le Quang Vuong, Nguyen Thanh Dat, Lam Duy Nhat, & Hoang Duc Tam (2020). Etermining the density of acid using the calibration curve constructed by Monte Carlo simulation data. *Ho Chi Minh City University of Education Journal of Science*, *17*(12), 2219-2228.

và phương pháp gamma truyền qua được trình bày trong nghiên cứu trước đây (Priyada, Margret, Ramar, & Shivaramu, 2012). Tuy nhiên, đáng lưu ý trong nghiên cứu này đó là phương pháp gamma tán xạ cho kết quả khá tốt với độ lệch tương đối lớn nhất giữa mật độ đo được với mật độ tham khảo là dưới 6% thì ngược lại, phương pháp gamma truyền qua cho kết quả không tốt với độ lệch tương đối trong khoảng từ 4 đến 10%, đặc biệt với hexane, độ lệch tương đối lên đến 21,54%. Một phần nguyên nhân của độ lệch lớn trong trường hợp này, theo chúng tôi là do tác giả sử dụng trực tiếp dữ liệu thực nghiệm trong xây dựng đường chuẩn mật độ. Thật vậy, so với phương pháp gamma tán xạ, độ nhạy của tín hiệu theo mật độ chất lỏng của phương pháp truyền qua là tương đối thấp. Ngoài ra, với việc sử dụng đầu dò bán dẫn cần làm lạnh ở nhiệt độ thấp và dùng nguồn hoạt độ lớn làm cho cách tiếp cận mới sử dụng nguồn hoạt độ thấp và đầu dò có thể hoạt động được tại nhiệt độ phòng để các phép đo có thể dề dàng thực hiện trong điều kiện thực tế.

Trong nghiên cứu này, chúng tôi đề xuất một cách tiếp cận khác sử dụng phương pháp gamma truyền qua. Theo đó, để giảm sự tác động do độ nhạy thấp của phương pháp truyền qua, đường chuẩn của tỉ số cường độ theo mật độ axit được xây dựng bằng mô phỏng Monte Carlo nhằm hạn chế các ảnh hưởng từ các yếu tố môi trường như sự thay đổi nhiệt độ, sự đóng góp của các thành phần tán xạ trong môi trường vào phổ thu nhận được. Tuy nhiên cách tiếp cận này cũng có một vấn đề cần giải quyết đó là sự khác biệt giữa phổ mô phỏng và phổ thực nghiệm. Để có thể sử dụng dữ liệu mô phỏng trong việc xây dựng đường chuẩn, cần thiết phải định nghĩa một đại lượng mới sao cho giá trị của đại lượng này tương ứng với các mật độ khác nhau không có sự khác biệt đáng kể giữa mô phỏng và thực nghiệm. Trong nghiên cứu trước đây (Huynh, Nguyen, & Hoang, 2019), bằng cách định nghĩa tỉ số R là tỉ số giữa cường độ chùm tia đo được với mẫu là chất lỏng và cường độ đo được với mẫu là nước nguyên chất, sự khác biệt giữa mô phỏng và thực nghiệm là không đáng kể khi sử dụng tỉ số này.

# 2. Vật liệu và phương pháp

#### 2.1. Cơ sở lí thuyết

Mối quan hệ giữa cường độ chùm tia truyền qua ống đựng axit khi đến đầu dò  $(I^{Acid})$  và cường độ ban đầu I<sub>0</sub> được xác định theo định luật Beer–Lambert:

$$\mathbf{I}^{\text{Acid}} = \mathbf{I}_0 \exp\left[-\mu_{\rho}^{\text{E}} \rho \mathbf{d}\right] \tag{1}$$

ở đây:  $\mu_{\rho}^{E}$  (cm<sup>2</sup> g<sup>-1</sup>) là hệ số suy giảm khối khi chùm photon năng lượng E truyền qua chất lỏng,  $\rho$  là mật độ của chất lỏng (g cm<sup>-3</sup>) và d là đường kính của ống chất lỏng.

Đặt I<sup>water</sup> là cường độ chùm tia ghi nhận được tại đầu dò trong trường hợp ống chất lỏng chứa nước nguyên chất. Khi đó phương trình (1) được viết lại như sau:

$$\mathbf{R}^{\text{Acid}} = \mathbf{R}_{0}^{\text{Acid}} \exp\left[-\mu_{\rho}^{\text{E}} \rho \mathbf{d}\right]$$
(2)

$$\overset{\circ}{\sigma} \overset{\circ}{day}: R^{Acid} = I^{Acid} / I^{Water} v \overset{\circ}{a} R_{0}^{Acid} = I_{0}^{Acid} / I^{Water}$$

$$L \overset{\circ}{ay} ln hai v \overset{\circ}{e} c \overset{\circ}{u} a phương trình (2):$$

$$ln R^{Acid} = ln R_{0}^{Acid} - \mu_{\rho}^{E} d\rho$$

$$(3)$$

Trong phương trình (3), với một bố trí thí nghiệm xác định, các đại lượng  $\ln R_0^{Acid}$  và d được xem là hằng số. Do vậy, giá trị  $\ln R^{Acid}$  được xem là tuyến tính với mật độ chất lỏng nếu như hệ số suy giảm khối  $\mu_{\rho}^{E}$  tương ứng với năng lượng E là không đổi đối với các chất lỏng. Để có cơ sở cho việc xem xét giá trị hệ số suy giảm khối là hằng số ứng với một mức năng lượng, chúng tôi sử dụng cơ sở dữ liệu NIST (Berger, Hubbell, Seltzer, Chang, Coursey, Sukumar, Zucker, & Olsen, 2010) để xác định hệ số suy giảm khối cho các loại axit khác nhau. Cơ sở dữ liệu NIST cung cấp một công cụ cho phép tính toán nhanh các giá trị của hệ số suy giảm khối bằng cách nhập vào giá trị năng lượng cần tính và công thức hoá học của hợp chất. Kết quả tính toán được trình bày trong Bảng 1.

Loại axit Công thức hóa học		Mật độ (g cm <sup>-3</sup> )	$\frac{\text{He so suy giam khoi}}{(\text{cm}^2 \text{ g}^{-1})}$		
Histidine	$C_6H_9N_3O_2$	0,430	0,08155		
Oleic	$C_{18}H_{34}O_2$	0,781	0,08632		
Montanic	$C_{28}H_{56}O_2$	0,819	0,0872		
Cerotic	$CH_3(CH_2)_{24}COOH$	0,820	0,08714		
Lignoceric	$C_{24}H_{48}O_2$	0,821	0,08707		
Behenic	$C_{22}H_{44}O_2$	0,822	0,087		
Arachidic	$C_{20}H_{40}O_2$	0,824	0,0869		
Palmitic	$C_{16}H_{32}O_2$	0,852	0,08666		
Palmitoleic	$C_{16}H_{30}O_2$	0,894	0,08613		
Stearic	$C_{18}H_{36}O_2$	0,941	0,08679		
Myristic	$C_{14}H_{28}O_2$	0,990	0,08649		
Nước nguyên chất	$H_2O$	1,000	0,08564		
Lauric	$C_{12}H_{24}O_2$	1,007	0,08628		
Acetic	CH <sub>3</sub> COOH	1,045	0,08222		
Acrylic	$C_3H_4O_2$	1,051	0,08136		
Leucine	$C_6H_{13}NO_2$	1,170	0,0847		
Lactic	$C_3H_6O_3$	1,206	0,08222		
Formic	$CH_2O_2$	1,220	0,08045		
Aminobutanoic	$C_4H_9NO_2$	1,230	0,0838		
Methionine	$C_5H_{11}NO_2S$	1,340	0,08274		
Adipic	$C_{6}H_{10}O_{4}$	1,360	0,08235		
Nitric	HNO <sub>3</sub>	1,513	0,07834		
Perchloric	HClO <sub>4</sub>	1,770	0,07681		
Sulfuric	$H_2SO_4$	1,830	0,07866		

Bång	<b>1.</b> Hệ số	suy giảm	khối đối	với năng	lượng	661,657	' keV	' của cá	ic loại	axit
------	-----------------	----------	----------	----------	-------	---------	-------	----------	---------	------

Từ Bảng 1 có thể thấy rằng giá trị của hệ số suy giảm khối ứng với năng lượng 661,657 keV có sự khác biệt không đáng kể đối với các chất có thành phần hóa học khác nhau. Dựa

(4)

trên dữ liệu này, có thể xem hệ số suy giảm khối là không đổi. Do vậy, phương trình (3) được viết lại như sau:

$$\ln R^{ACId} = A + B\rho$$

với A và B là các hằng số. Phương trình (4) là cơ sở để xác định được mật độ của các axit.



# Hình 1. Hệ số suy giảm khối ứng với mức năng lượng 661,657 keV đối với các chất khác nhau 2.2. Mô phỏng Monte Carlo

Trong nghiên cứu này, mô phỏng Monte Carlo được sử dụng để xây dựng đường chuẩn của tỉ số R theo mật độ của các loại axit. Để thực hiện được điều này, chúng tôi sử dụng chương trình MCNP (X-5 Monte Carlo Team, 2005). Đây là một chương trình mô phỏng được sử dụng rộng rãi đặc biệt trong lĩnh vực vật lí hạt nhân. Chương trình MCNP yêu cầu khai báo các thông số hình học của nguồn, đầu dò và đối tượng đo. Trong các nghiên cứu trước đây (Hoang, Nguyen, Le, Huynh, & Tran, 2017; Hoang, Huynh, Tran, & Chau, 2016), chúng tôi đã tiến hành tối ưu các thông số hình học đối với đầu dò NaI(Tl) sử dụng trong nghiên cứu này.

Dữ liệu đầu ra của chương trình MCNP là phổ phân bố độ cao xung. Để phổ thu được có dạng giống với dữ liệu thực nghiệm chúng tôi sử dụng thẻ FT8 với với dạng Gauss của phổ có hàm bề rộng một nữa theo phương trình dưới:

$$FWHM(MeV) = a + b\sqrt{E + cE^2}$$
(5)

với E là năng lượng của photon (MeV); các hệ số a, b, c lần lượt có giá trị bằng – 0,00526 MeV; 0,06096 MeV<sup>1/2</sup>; 0,01401 MeV<sup>-1</sup>. Các giá trị a, b, c thu được bằng cách làm khớp phương trình (5) với dữ liệu FWHM chúng tôi đo được từ thực nghiệm.

Nghiên cứu sử dụng 23 loại axit như được trình bày trong Bảng 1 với mật độ trong khoảng từ 0,4 g cm<sup>-3</sup> đến 2,0 g cm<sup>-3</sup> để mô phỏng và xây dựng đường chuẩn.

#### 2.3. Bố trí thí nghiệm và phương pháp xác định mật độ axit

Nghiên cứu sử dụng đầu dò nhấp nháy NaI(Tl) kích thước 3 inch × 3 inch được cung

cấp bởi hãng Amptek. Đây là loại đầu dò đa kênh với số kênh tối đa là 8192. Trong phép đo phổ chúng tôi đặt ở chế độ đo này để thu nhận chùm tia truyền qua ống chứa axit. Nguồn sử dụng trong nghiên cứu là nguồn <sup>137</sup>Cs có hoạt độ 0,67 μCi. Đây là nguồn phóng xạ được xem là dạng điểm.

Chúng tôi sử dụng 6 loại axit và nước nguyên chất với các thông tin chi tiết được trình bày trong Bảng 2. Các chất này có mật độ được chứng nhận bởi nhà sản xuất và được xem là mật độ chuẩn dùng để đánh giá tính chính xác của việc xác định mật độ axit đo được trong nghiên cứu này. Các axit được chứa trong ống thủy tinh có đường kính trong là 2,68 cm với thành ống có độ dày là 1,85 mm. Ông được đặt tại vị trí sao cho khoảng cách từ tâm ống đến bê mặt nguồn và từ tâm ống tới bề mặt đầu dò là bằng 12,4 cm. Thời gian thực hiện phép đo phổ là 28.800 giây. Toàn bộ bố trí thí nghiệm được trình bày như trong Hình 2.



	Hình 2. Bá	ố trí thí nghiệm	đo mật độ ax	<i>xit</i>
Bång 2.	Thông tin của	các loại axit s	sử dụng trong	thực nghiệm

Loại axit	Công thức hóa học	Mật độ (g cm <sup>-3</sup> )	Nhà cung cấp
Acetic	$C_2H_4O_2$	1,0521	Xilong, Trung Quốc
Formic	$CH_2O_2$	1,201 <sup>2</sup>	Xilong, Trung Quốc
Lactic	$C_3H_6O_3$	1,209 <sup>3</sup>	Xilong, Trung Quốc
Nitric	HNO <sub>3</sub>	1,390	Merck, Đức
Phosphoric	$H_3PO_4$	1,693	VWR Chemicals, Pháp
Sulfuric	$H_2SO_4$	1,839	Merck, Đức
Nước nguyên chất	$H_2O$	1,000	Merck, Đức

Các bước xác định mật độ axit được thực hiện như sau:

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup> Mật độ ứng với nồng độ 99%

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup> Mật độ ứng với nồng độ 88%

<sup>&</sup>lt;sup>3</sup> Mật độ ứng với nồng độ 88%

 Đầu tiên chúng tôi sẽ mô phỏng phổ truyền qua của nhiều loại axit như được trình bày trong Bảng 1. Phổ mô phỏng thu được được phân tích để tính diện tích đỉnh và từ đó tính được tỉ số R<sub>Sim.</sub> và lnR<sub>Sim.</sub>

 Dữ liệu của lnR<sup>Sim.</sup> theo mật độ axit được làm khóp với hàm khóp dạng tuyến tính như trình bày trong phương trình (4).

• Đo phổ thực nghiệm của nước nguyên chất và loại axit cần xác định mật độ để tính toán tỉ số  $R_{Exp.}^{Acid}$  và  $lnR_{Exp.}^{Acid}$ .

Thay giá trị lnR<sup>Acid</sup><sub>Exp.</sub> vào phương trình (6) để tính toán mật độ axit.

$$\rho_{\text{acid}} = \frac{\ln R_{\text{Exp.}}^{\text{Acid}} - A}{B}$$
(6)

Sai số của mật độ axit ( $\sigma_{\rho_{Acid}}$ ) được xác định bằng công thức truyền sai số:

$$\sigma_{\rho_{Acid}} = \sqrt{\frac{\sigma_{R_{Exp.}}^{2}}{B^{2}} + \frac{\sigma_{A}^{2}}{B^{2}} + \frac{\left(R_{Exp.}^{Acid} - A\right)^{2}}{B^{4}}\sigma_{B}^{2}}, \qquad (7)$$

ở đây,  $\sigma_A$  và  $\sigma_B$  tương ứng là sai số của các tham số hàm khớp A và B. Ngoài ra,  $\sigma_{R_{Exp.}^{Acid}}$  được xác định theo phương trình sau:

$$\sigma_{\mathrm{R}_{\mathrm{Exp.}}^{\mathrm{Acid}}} = \sqrt{\frac{1}{\mathrm{N}_{\mathrm{Water}}^{2}}} \sigma_{\mathrm{N}_{\mathrm{Acid}}}^{2} + \frac{\mathrm{N}_{\mathrm{Acid}}^{2}}{\mathrm{N}_{\mathrm{Water}}^{4}} \sigma_{\mathrm{N}_{\mathrm{Water}}}^{2} , \qquad (8)$$

ở đây,  $\sigma_{N_{Acid}} = 2,58\sqrt{N_{Acid}}$  và  $\sigma_{N_{Water}} = 2,58\sqrt{N_{Water}}$ , số 2,58 được sử dụng để đảm bảo độ tin cậy 99%.

#### 3. Kết quả và thảo luận

#### 3.1. Đường chuẩn xác định mật độ xây dựng bằng mô phỏng Monte Carlo

Phổ thực nghiệm và mô phỏng trong phép đo truyền qua của 6 loại axit được trình bày trong Hình 3. Cũng trong hình này, chúng tôi tiến hành so sánh dạng đáp ứng phổ mô phỏng và phổ thực nghiệm. Kết quả thu được cho thấy, có sự phù hợp tốt về dạng đáp ứng phổ ở tất cả các axit đã khảo sát. Kết quả này là cơ sở để chúng tôi sử dụng dữ liệu mô phỏng để xây dựng đường chuẩn của tỉ số lnR theo mật độ axit.



Hình 3. So sánh dạng đáp ứng phổ thực nghiệm và phổ mô phỏng các loại axit

Kết quả tính toán tỉ số R và lnR được trình bày trong Bảng 3. Dữ liệu của lnR theo mật độ được làm khớp với phương trình khớp mô tả trong phương trình (4). Giá trị của các hệ số hàm khớp A và B thu được lần lượt có giá trị bằng (0,20657  $\pm$  0,00383) và (-0,20523  $\pm$  0,00341). Kết quả thu được trình bày như trên Hình 4.

Loại axit	Mật độ (g cm <sup>-3</sup> )	Tỉ số R	Sai số của R	lnR			
Histidine	0,430	1,13280	0,00024	0,1247			
Oleic	0,781	1,04601	0,00023	0,0450			
Montanic	0,819	1,03579	0,00022	0,0352			
Cerotic	0,820	1,03575	0,00022	0,0351			
Lignoceric	0,821	1,03569	0,00022	0,0351			
Behenic	0,822	1,03550	0,00022	0,0349			
Arachidic	0,824	1,03353	0,00022	0,0330			
Palmitic	0,852	1,02963	0,00022	0,0292			
Palmitoleic	0,894	1,02163	0,00022	0,0214			
Steararic	0,941	1,01000	0,00022	0,0099			
Myristic	0,990	1,00016	0,00022	0,0002			
Lauric	1,007	0,99709	0,00022	- 0,0029			
Acetic	1,045	0,99588	0,00022	- 0,0041			
Acrylic	1,051	0,99679	0,00022	- 0,0032			
Leucine	1,170	0,96755	0,00021	- 0,0330			
Lactic	1,206	0,96735	0,00021	- 0,0332			
Formic	1,220	0,96961	0,00021	- 0,0309			
Aminobutanoic	1,230	0,95414	0,00021	- 0,0469			
Methionine	1,340	0,93973	0,00021	- 0,0622			
Adipic	1,360	0,93374	0,00021	- 0,0686			
Nitric	1,513	0,89311	0,00020	- 0,1130			
Perchloric	1,770	0,85031	0,00019	-0,1622			
Sulfuric	1,830	0,84459	0,00019	- 0,1689			

**Bảng 3.** Kết quả tính toán giá trị lnR theo các mật độ khác nhau của các loại axit bằng mô phỏng Monte Carlo

Có thể thấy rằng, có sự tuyến tính tốt giữa lnR và mật độ của các axit với hệ số R<sup>2</sup> xấp xỉ 0,994. Sự tuyến tính tốt này là điều kiện cần để có thể xác định được mật độ của các loại axit với độ chính xác cao.



Hình 4. Sự phụ thuộc tuyển tính của lnR theo mật độ của axit

# 3.2. Mật độ của các loại axit

Sử dụng đường chuẩn thu được, mật độ của 6 loại axit được xác định bằng cách sử dụng phương trình (6). Kết quả tính toán mật độ axit được trình bày như trong Bảng 4. Có thể thấy rằng, độ lệch mật độ đo được và mật độ chuẩn là dưới 6,5%. Kết quả thu được này chứng tỏ rằng cách tiếp cận sử dụng trong nghiên cứu này có khả năng xác định được mật độ của các loại axit với phạm vi mật độ trải rộng trong khoảng từ 0,4 g cm<sup>-3</sup> đến 2,0g cm<sup>-3</sup>. Đây là vùng mật độ đủ rộng để có thể bao phủ số lượng lớn các loại axit cần khảo sát và do vậy cách tiếp cận đề xuất trong nghiên cứu này có tính khả thi. Ngoài ra, phương pháp đo thực hiện trong nghiên cứu này có bố trí thí nghiệm khá đơn giản với nguồn hoạt độ thấp nên có thể áp dụng cho việc xác định mật độ đặc biệt với các loại axit mạnh.

Loại axit	Mật độ chuẩn (g cm <sup>-3</sup> )	R	Sai số của R	lnR	Mật độ đo được (g cm <sup>-3</sup> )	Sai số mật độ (g cm <sup>-3</sup> )	<sup>4</sup> RD (%)
Acetic	1,052	0,991	0,013	- 0,00952	1,053	0,068	0,09
Formic	1,201	0,971	0,014	- 0,029117	1,148	0,069	4,38
Lactic	1,209	0,956	0,014	- 0,045195	1,227	0,067	1,47
Nitric	1,390	0,933	0,013	- 0,069629	1,346	0,066	3,18
Phosphoric	1,693	0,888	0,013	- 0,118289	1,583	0,064	6,50
Sulfuric	1,839	0,860	0,012	- 0,15091	1,742	0,062	5,28

Bảng 4. Kết quả xác định mật độ của một số loại axit

Sai số của phép đo mật độ axit cũng được tính toán. Theo đó, sai số tương đối của phép

 $^4$  RD (%) = |Mật độ đo được – Mật độ chuẩn|/Mật độ chuẩn × 100%

đo trong khoảng từ 3,6% đến 6,5%. Trên thực tế, đầu dò nhấp nháy NaI(Tl) dễ bị ảnh hưởng bởi yếu tố nhiệt độ môi trường, vì vậy sai số tương đối sẽ được cải thiện nếu sử dụng loại đầu dò nhấp nháy ổn định nhiệt. Tuy vậy, với độ lệch lớn nhất giữa mật độ đo được và mật độ chuẩn là 6,5%, phương pháp đo mật độ sử dụng trong nghiên cứu này cho thấy được tính khả thi có thể áp dụng được cho các phép đo mật độ axit trong thực tế.

#### 4. Kết luận

Trong nghiên cứu này, chúng tôi đã sử dụng phương pháp truyền qua để xác định mật độ của các loại axit với đường chuẩn mật độ được xây dựng hoàn toàn bằng dữ liệu mô phỏng Monte Carlo. Kết quả thu được từ nghiên cứu cho thấy, độ lệch lớn nhất giữa mật độ đo được và mật độ chuẩn là dưới 6,5%. Sai số tương đối của các giá trị đo được là dưới 6,5%. Kết quả này khẳng định rằng, cách tiếp cận để đo mật độ axit áp dụng trong nghiên cứu này là hoàn toàn khả thi. Ưu điểm của nghiên cứu thể hiện ở hai điểm: thứ nhất, đường chuẩn mật độ được xây dựng hoàn toàn bằng mô phỏng Monte Carlo sử dụng chương trình MCNP. Việc sử dụng mô phỏng trong xây dựng đường chuẩn giúp tiết kiệm được chi phí và tăng được độ chính xác do loại bỏ được sự ảnh hưởng của các yếu tố môi trường. Ngoài ra, sử dụng mô phỏng Monte Carlo còn giúp dễ dàng xây dựng được đường chuẩn khi thông số thực nghiệm thay đổi, đây là vấn đề mà nếu dùng phép đo thực nghiệm để xây dựng đường chuẩn khó mà thực hiện được. Ưu điểm thứ hai của cách tiếp cận này liên quan đến nguồn phóng xạ. Việc sử dụng nguồn hoạt độ rất thấp với hoạt độ vào khoảng 0,67 µCi, điều này làm cho phép đo trở nên rất an toàn với người làm thí nghiệm nhưng vẫn đảm bảo được độ chính xác của kết quả đo.

- \* Tuyên bố về quyền lợi: Các tác giả xác nhận hoàn toàn không có xung đột về quyền lợi.
- Lời cảm ơn: Nghiên cứu này được tài trợ bởi Bộ Giáo dục và Đào tạo trong đề tài mã số B2020-SPS-01.

#### TÀI LIỆU THAM KHẢO

- Aguilera, J., Wright, J. D., & Bean, V. E. (2008). Hydrometer calibration by hydrostatic weighing with automated liquid surface positioning. *Measurement Science and Technology*, 015104. https://doi.org/10.1088/0957-0233/19/1/015104
- Berger, M. J., Hubbell, J. H., Seltzer, S. M., Chang, J., Coursey, J. S., Sukumar, R., Zucker, D. S., & Olsen, K. (2010). XCOM: Photon Cross Sections Database / NIST. Retrieved from https://www.nist.gov/pml/xcom-photon-cross-sections-database
- Cuckow, F. W. (1949). A new method of high accuracy for the calibration of reference standard hydrometers. *Journal of the Society of Chemical Industry*, 68(2), 44-49. https://doi.org/https://doi.org/10.1002/jctb.5000680203

Jones, F. E. (1995). A new reference method for testing hydrometers. *Measurement*, 16(4), 231–237.

https://doi.org/10.1016/0263-2241(95)00036-4

- Hoang, D. T., Nguyen, T. H. Y., Le, B. T., Huynh, D. C., & Tran, T. T. (2017). Optimization of the Monte Carlo simulation model of NaI(Tl) detector by Geant4 code. *Applied Radiation and Isotopes*, 130. https://doi.org/10.1016/j.apradiso.2017.09.020
- Hoang, D. T., Huynh, D. C., Tran, T. T., & Chau, V. T. (2016). A study of the effect of Al2O3 reflector on response function of NaI(Tl) detector. *Radiation Physics and Chemistry*, 125, 88-93. https://doi.org/10.1016/j.radphyschem.2016.03.020
- Huynh, D. C., Nguyen, T. M. L., & Hoang, D. T. (2019). Semi-empirical method for determining the density of liquids using a NaI(Tl) scintillation detector. *Applied Radiation and Isotopes*, 152(July), 109-114. https://doi.org/10.1016/j.apradiso.2019.07.005
- Priyada, P., Margret, M., Ramar, R., & Shivaramu (2012). Intercomparison of gamma ray scattering and transmission techniques for fluid-fluid and fluid-air interface levels detection and density measurements. *Applied Radiation and Isotopes*, 70(3), 462-469. https://doi.org/10.1016/j.apradiso.2011.10.019
- Roy, M. N., Sah, R. S., & Pradhan, P. (2010). Densities, viscosities, sound speeds, refractive indices, and excess properties of binary mixtures of isoamyl alcohol with some alkoxyethanols. *International Journal of Thermophysics*, 31(2), 316-326. https://doi.org/10.1007/s10765-010-0719-7
- X-5 Monte Carlo Team. (2005). A General Monte Carlo N-Particle Transport Code Version5, Volume II, User guide. Los Alamos national Laboratory, LA–CP–03–0245.

# DETERMINING THE DENSITY OF ACID USING THE CALIBRATION CURVE CONSTRUCTED BY MONTE CARLO SIMULATION DATA

Nguyen Thu Hang, Dang Hoai An, Truong Thanh Sang, Tran Thi My Duyen,

Le Quang Vuong, Nguyen Thanh Dat, Lam Duy Nhat, Hoang Duc Tam<sup>\*</sup>

Faculty of Physics, Ho Chi Minh City University of Education, Vietnam \*Corresponding author: Hoang Duc Tam – Email: tamhd@hcmue.edu.vn Received: October 19, 2020; Revised: November 09, 2020; Accepted: December 28, 2020

#### ABSTRACT

In this study, we present an approach to determine the densities of some common acids. This approach requires to construct the linear calibration curve of the ratio lnR (R is the ratio of the area under a transmitted peak for an acid relative to that for water) versus the density of the liquids based on the Monte Carlo simulation data. This linear calibration curve was then used to determine the densities of acids. The study used the NaI(Tl) scintillation detector and the radioactive source of <sup>137</sup>Cs. The study results indicate that the proposed approach is feasible for determining the densities of acids. The relative deviations between the measured and reference densities are less than 6.5% for the investigated samples. Thus, this study provides a different approach to determine the densities of acids, which is simple, effective, and convenient for determining the density of acids.

Keywords: density of acid; MCNP; NaI(Tl); transmission