



Bài báo nghiên cứu

NGHIÊN CỨU XỬ LÝ PHỔ NHIỆT PHÁT QUANG (TL) BẰNG PHẦN MỀM PYTHON

Nguyễn Duy Sang^{1}, Lê Ngọc Hoa²*

¹*Trường Thực hành Sư phạm, Đại học Cần Thơ, Việt Nam*

²*Trường Đại học Cần Thơ, Việt Nam*

**Tác giả liên hệ: Nguyễn Duy Sang – Email: ndsang@ctu.edu.vn*

Ngày nhận bài: 08-10-2021; ngày nhận bài sửa: 13-12-2021; ngày duyệt đăng: 20-12-2021

TÓM TẮT

Phổ nhiệt phát quang (TL) là những đường cong phức tạp không tuân theo những phân bố thông thường mà theo mô hình bậc một, hai, tổng quát, một bẫy một tâm tái hợp hoặc mô hình trộn. Bài báo này đưa ra phương pháp sử dụng phần mềm Python để mô phỏng và làm khớp đường cong thực nghiệm của phổ TL theo các mô hình khác nhau. Phương pháp mô phỏng phổ TL dựa vào thông số bẫy hoặc thông số đỉnh phổ theo các phương trình động học. Việc xử lý và phân tích phổ TL tìm ra được các thông số đặc trưng của phổ TL của vật liệu như năng lượng bẫy, tần số thoát và thời gian sống ở bẫy. Kết quả cho thấy, phổ TL được mô phỏng và làm khớp phù hợp nhất với mô hình bậc tổng quát. Hệ số khớp phổ nhỏ cho thấy phổ TL mô phỏng và thực nghiệm là tương đồng nhau.

Từ khóa: năng lượng bẫy; tần số thoát; thời gian sống; nhiệt phát quang; Python

1. Giới thiệu

Hiện tượng nhiệt phát quang (TL) là hiện tượng phát ra ánh sáng từ các chất cách điện hoặc chất bán dẫn khi chúng được nung nóng. Xác định được lượng TL phát ra ta có thể xác định được liều bức xạ ion hóa đã chiếu lên mẫu. Phổ TL thu được từ thiết bị đọc nhiệt phát quang (TL Reader) dựa trên sự phát sáng của các khoáng chất được tách ra khỏi thực phẩm, gia vị khi bị kích thích nhiệt (Nguyen, 2013). Việc khảo sát tổng quan và ứng dụng phương pháp TL trong thực phẩm chiếu xạ với mẫu là bột ớt đã được nghiên cứu (Nguyen, 2015). Nhằm xác định các thành phần, cấu trúc của vật liệu đã có một số nghiên cứu liên quan đến các thông số động học của bẫy TL của phổ TL (Peng, Dong, & Han, 2016; Nguyen, 2017; Nguyen, Tran, Nguyen & Nguyen, 2017, 2018). Một số nghiên cứu khác liên quan đến hiệu ứng fading của phổ TL (sự suy giảm tín hiệu TL theo thời gian) có sử dụng máy học và phần mềm Python (Amit & Datz, 2018; Kröninger, Mentzel, Theinert, & Walbersloh, 2019; Theinert et al., 2018). Ngoài ra, gần đây, nhiều công trình khác đã nghiên cứu phân tích và

Cite this article as: Nguyen Duy Sang, & Le Ngọc Hoa (2021). A study on thermoluminescence (TL) spectra using Python software. *Ho Chi Minh City University of Education Journal of Science*, 18(12), 2221-2235.

xử lý phổ TL của nhiều loại vật liệu khác nhau (Aşlar, Şahiner, Polymeris, & Meriç, 2021; Bassinet & Le Bris, 2020; Peng, Kitis, Sadek, Karsu Asal, & Li, 2021).

Phổ TL thu được là dạng phổ gồm những đường cong tuân theo mô hình động học bậc nhất, bậc hai, bậc tổng quát, một bẫy một tâm tái hợp hoặc mô hình trộn. Phổ TL có thể là một đỉnh đơn hoặc là sự chồng chập của nhiều đỉnh phức tạp. Phần mềm Python được dùng để xử lý, phân tích và mô phỏng TL theo các mô hình khác nhau. Mẫu thực nghiệm trong nghiên cứu được tham khảo từ dự án GLOCANIN (Bos, Piters, Ros, & Delgado, 1993, 1994). Việc xử lý và mô phỏng phổ TL sẽ ước lượng được giá trị của các thông số động học của phổ TL như năng lượng bẫy, tần số thoát ở bẫy TL. Các kết quả phân tích, xử lý và mô phỏng được đánh giá qua hệ số làm khớp phổ FOM. Việc mô phỏng phổ TL đóng vai trò quan trọng trong phân tích vật liệu đặc biệt là trong nghiên cứu xác định liều chiếu, định tuổi của vật liệu, hiệu ứng fading. Là ngôn ngữ hướng đối tượng cao cấp, Python được dùng kết hợp với các phương pháp máy học và khoa học dữ liệu được xem là một giải pháp nổi bật và vô cùng mới mẻ cho nghiên cứu phổ TL.

2. Vật liệu và phương pháp

2.1. Phần mềm Python

Python là ngôn ngữ lập trình có cấu trúc dữ liệu cao cấp và mạnh mẽ được tạo ra bởi Guido Van Rossum (Severance, 2015). Nó được thể hiện ở các câu lệnh rất đơn giản, hoàn toàn miễn phí và là mã nguồn mở. Python là một ngôn ngữ di động, có thể dễ dàng di chuyển từ nền tảng này sang các nền tảng khác, có thể chạy chương trình của Python ở mọi nền tảng mà không sợ có bất kỳ những thay đổi nào ảnh hưởng. Python là ngôn ngữ phiên dịch cao cấp: khi chạy chương trình Python trên bất cứ hệ điều hành hay mạng Internet nào. Python có thể hoàn toàn tự động dịch và chạy theo đúng chương trình dữ liệu của máy tính đó. Để cài đặt Python vào trang web: <https://www.python.org/downloads/> tải về phiên bản phù hợp với hệ điều hành đang sử dụng và cài đặt.

Python phục vụ cho khoa học và tính toán triển khai các thuật toán máy học (Machine Learning) thực hiện các phép tính toán toán học phức tạp. Nó Python cung cấp cho người dùng rất nhiều thư viện cho khoa học và số liệu như Numpy, Pandas, Scipy (Murray-Wallace et al., 2002), Scikit-learning.

2.2. Mô hình động học TL

Đường cong TL là loại đường cong bao gồm nhiều đỉnh phổ khác nhau. Phương trình động học mô tả các đường cong tuân theo mô hình bậc nhất, bậc hai hoặc bậc tổng quát (Pagonis, Kitis, & Furetta, 2006):

$$dn/dt = (-n_s \exp(-E/kT))/\beta \quad (1)$$

$$dn/dt = (-n^2 s \exp(-E/kT))/(N \beta) \quad (2)$$

$$dn/dt = (-n^b s \exp(-E/kT))/(N \beta) \quad (3)$$

Trong đó: n là xác suất bắt các electron, dn/dt là tốc độ thay đổi xác suất bắt các electron, s là tần số thoát, E là năng lượng bẫy, T là nhiệt độ tuyệt đối, k là hằng số Boltzmann, N là tổng xác suất bẫy của tinh thể, b là bậc động học, và β là tốc độ gia nhiệt.

Phương trình gần đúng của mô hình một bẫy một tâm tái hợp (OTOR) (Pagonis et al., 2006) như sau:

$$dn/dt = (-A_h n^2 s \exp(-E/kT)) / [nA_h + (N - n) A_n] \beta \quad (4)$$

Trong đó: A_h là xác suất khi electron tái hợp với lỗ trống ở tâm tái hợp, A_n là xác suất khi electron tái bẫy ở bẫy.

Phương trình gần đúng của mô hình trộn (MOK) (G. Kitis & Gomez-Ros, 2000) như sau:

$$dn/dt = (-s n (n + c) \exp(-E/kT)) / ((N + c) \beta) \quad (5)$$

Trong đó $\alpha = n / (n + c)$ và c là hằng số, $c = (n(1 - \alpha)) / \alpha$

$$dn/dt = (-n^2 s \exp(-E/kT)) / [N + n((1 - \alpha) / \alpha)] \beta \alpha \quad (6)$$

Để mô phỏng một đỉnh TL trong Python cần cung cấp các thông số ban đầu liên quan đến bẫy electron, dữ liệu được nhập vào Python là nhiệt độ và cường độ TL tương ứng. Ngoài ra, đối với phổ TL gồm nhiều đỉnh phổ, cần khai báo cho Python số đỉnh cần tách.

Đỉnh phổ TL được làm khớp theo mô hình bậc nhất phù hợp đối với trường hợp xác suất tái hợp (A_m) lớn hơn xác suất tái bẫy (A_n) trong suốt quá trình phơi chiếu. Ba thông số đặc trưng cho phổ TL theo mô hình bậc nhất là: I_m , E , và T_m . Phương trình làm khớp phổ TL thực nghiệm theo mô hình bậc nhất (G. Kitis, Gomez-Ros, & Tuyn, 1998) có dạng:

$$I(T) = I_m \exp[1 + E/kT (T - T_m) / T_m - T^2 / (T_m^2) \exp(E/kT (T - T_m) / T_m) (1 - 2kT/E) - (2kT_m) / E] \quad (7)$$

Đỉnh phổ TL được làm khớp theo mô hình bậc hai phù hợp đối với trường hợp xác suất tái bẫy không nhỏ hơn xác suất tái hợp trong suốt quá trình phơi chiếu. Ba thông số đặc trưng cho phổ TL theo mô hình bậc hai cũng giống như bậc nhất là: I_m , E , và T_m . Phương trình làm khớp phổ TL thực nghiệm theo mô hình bậc hai (G. Kitis et al., 1998) có dạng:

$$I(T) = 4I_m \exp(E/kT (T - T_m) / T_m) [T^2 / (T_m^2) (1 - 2kT/E) \exp(E/kT (T - T_m) / T_m) + 1 + (2kT_m) / E]^{-2} \quad (8)$$

Đỉnh phổ TL được làm khớp theo mô hình bậc tổng quát được cho là phù hợp đối với trường hợp không xảy ra ở bậc nhất và bậc hai, bậc động học nằm trong khoảng giữa 1 và 2. Bốn thông số đặc trưng cho phổ TL theo mô hình bậc tổng quát là: I_m , E , T_m và b . Phương trình làm khớp phổ TL thực nghiệm theo mô hình bậc tổng quát (Kitis et al., 1998) có dạng:

$$I(T) = I_m b^{(b/(b-1))} \exp(E/kT (T - T_m) / T_m) [(b-1)(1 - 2kT/E) T^2 / (T_m^2) \exp(E/kT (T - T_m) / T_m) + 1 + (2kT_m (b-1)) / E]^{-b/(b-1)} \quad (9)$$

Đỉnh phổ TL được làm khớp theo mô hình OTOR cũng được cho là phù hợp khi có sử dụng hàm Lambert W (George Kitis & Pagonis, 2017; Kitis & Vlachos, 2013; Sadek et al., 2015) và hàm Wright Omega (Chopra, Singh, & Lochab, 2013; Singh & Gartia, 2015). Bốn

thông số đặc trưng cho phổ TL theo mô hình OTOR là: I_m , E , T_m , và tỉ số tái hợp và tái bẫy $R = A_n/A_m$. Phương trình làm khớp phổ TL thực nghiệm theo mô hình OTOR có dạng:

$$I(T) = I_m \exp(-E/kT (T_m - T)/T_m) (\omega(Z_m) + [\omega(Z_m)]^2)/(\omega(Z) + [\omega(Z)]^2) \quad (10)$$

Trong đó:

$$Z_m = R/(1 - R) - \log((1 - R)/R) + E \exp(E/(kT_m)) / (kT_m^2 (1 - 1.05R^{1.26})) F(T_m, E) \quad (11)$$

và

$$Z = R/(1 - R) - \log((1 - R)/R) + E \exp(E/(kT_m)) / (kT_m^2 (1 - 1.05R^{1.26})) F(T, E) \quad (12)$$

Đỉnh phổ TL được làm khớp theo mô hình trộn MOK cũng được cho là phù hợp với thông số trộn $\alpha = n_0/(n_0 + M)$ trong đó n_0 là xác suất ban đầu lấp đầy bẫy năng lượng và M là xác suất bẫy khi ngừng cung cấp nhiệt (Sunta, Ayta, Chubaci, & Watanabe, 2002). Bốn thông số đặc trưng cho phổ TL theo mô hình MOK là: I_m , E , T_m , và α . Phương trình làm khớp phổ TL thực nghiệm theo mô hình MOK (G. Kitis & Gomez-Ros, 2000) có dạng:

$$I(T) = (I_m [\exp((1 - (2kT_m)/E)/R_m) - \alpha]^2 \exp(E/kT (T - T_m)/T_m) \exp[T^2/(T_m^2 R_m) \exp(E/kT (T - T_m)/T_m) (1 - 2kT/E)]) / (\exp((1 - (2kT_m)/E)/R_m) [\exp[T^2/(T_m^2 R_m) \exp(E/kT (T - T_m)/T_m) (1 - 2kT/E)] - \alpha]^2) \quad (13)$$

Trong đó: $(A_m + \alpha)/(A_m - \alpha)$ và $A_m = \exp((A_m - \alpha)/(A_m + \alpha) (1 - (2kT_m)/E))$

2.3. Phân tích và xử lý số liệu phổ TL thực nghiệm

Phổ TL thực nghiệm là những đường cong gồm nhiều đỉnh TL chồng chập. Số liệu trong nghiên cứu này được tham khảo từ dự án GLOCANIN (Bos et al., 1993, 1994). Số liệu của dự án GLOCANIN được sử dụng rất phổ biến trong phân tích và tách đỉnh phổ TL (Puchalska & Bilski, 2006; Sadek et al., 2015). Tuy nhiên, thông số tần số thoát khi phân tích làm khớp và tách đỉnh phổ vẫn chưa được đề cập đến. Số liệu của hai đường cong Rg1, Rg2 của dự án GLOCANIN được sử dụng để tính tần số thoát cho riêng mỗi đỉnh. Dữ liệu của phổ Rg1, Rg2 dạng thô là hai cột là nhiệt độ tuyệt đối (K) và số đếm TL. Phổ TL ban đầu này là có sự phụ thuộc của nhiệt độ tuyệt đối (K) và số đếm TL. Dữ liệu thực nghiệm này sau đó được làm khớp theo các mô hình động học phù hợp. Kết quả của quá trình làm khớp sẽ tính được thông số động học của bẫy TL từ đó tìm ra các đặc trưng của phổ TL. Qua đó, kết quả của việc làm khớp phổ được dùng để mô phỏng phổ TL thực nghiệm. Bằng cách hiệu chỉnh các thông số phổ TL ban đầu phổ TL được mô phỏng sẽ có dạng gần giống với phổ thực nghiệm. Các số liệu thô của phổ Rg1 của dự án GLOCANIN được đưa lên công khai trên Github theo địa chỉ: <https://github.com/sangduynguyen/tgcd/blob/main/Rg1.csv>.

Giá trị tần số thoát được cho bởi các phương trình FOK, SOK, GOK (Kitis et al., 1998) lần lượt là:

$$s = \beta E / (kT_m)^2 \exp(E / (kT_m)) \quad (14)$$

$$s = \beta E / (kT_m)^2 \cdot 1 / (1 + 2kT_m \sqrt{E}) \exp(E / (kT_m)) \quad (15)$$

$$s = (\beta E / (kT_m)^2) \exp(E / (kT_m)) [1 + (b - 1) (2kT_m) / E]^{-1} \quad (16)$$

Trong đó: b là bậc động học.

Giá trị tần số thoát được cho bởi phương trình MOK (Kitis & Gomez-Ros, 2000) là:

$$s = (\beta E / (kT_m)^2) \exp(E / (kT_m)) (\alpha R_m) / ((1 - \alpha)) \quad (17)$$

Trong đó: R_m (G. Kitis & Gomez-Ros, 2000) cho bởi:

$$R_m = (2.6 - 0.9203\alpha + 0.324\alpha^{3.338}) / (2.6 - 2.9203\alpha + 0.324\alpha^{3.338})$$

α là thông số đặc trưng cho đỉnh.

Giá trị tần số thoát được cho bởi phương trình OTOR là:

$$s = (\beta E / (kT_m)^2) \exp(E / (kT_m)) [((1 + W[\exp(Z_m)])^2) / (1 + 2W[\exp(Z_m)])] (1 - R) \quad (18)$$

Để đánh giá kết quả làm khớp sai khác giữa mô phỏng và thực nghiệm dùng hệ số FOM như sau:

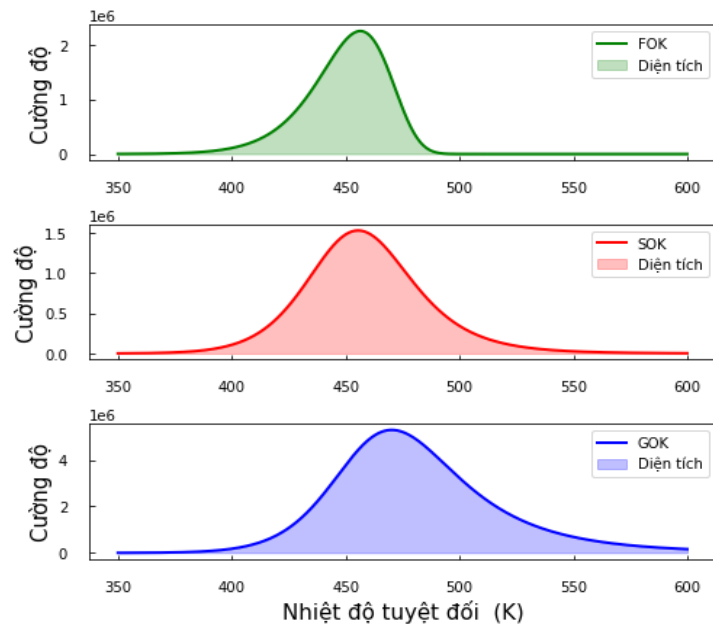
$$FOM = (\sum_p ||y_{exp} - y_{fit}||) / (\sum_p y_{fit}) \quad (19)$$

Trong đó: y_{exp} và y_{fit} là giá trị của số liệu thực nghiệm và giá trị làm khớp.

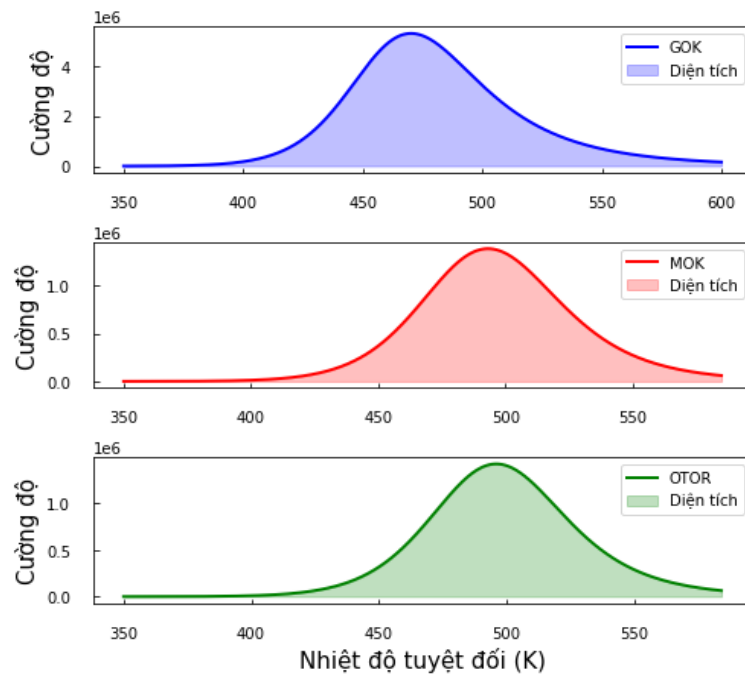
3. Kết quả và thảo luận

3.1. Kết quả mô phỏng phổ TL dựa vào các thông số bẫy

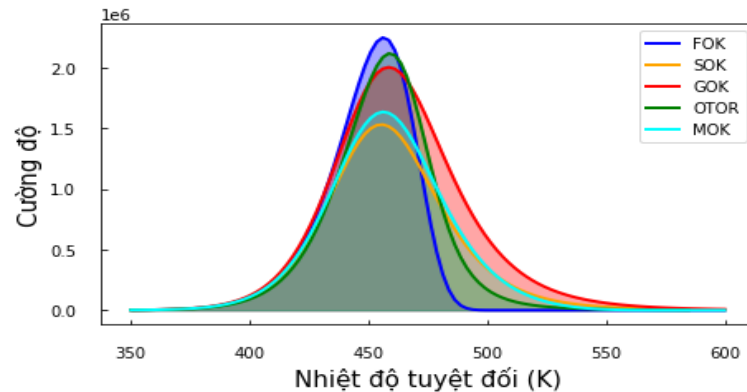
Các đường cong TL được mô phỏng dựa theo thông số bẫy theo các mô hình: FOK, SOK, GOK, MOK và OTTOR tương ứng với các hàm của các công thức (1), (2), (3), (4) và (5) đã được nêu ra. Phổ TL thực nghiệm của bột ót đã chiếu xạ với các liều xạ khác nhau được trình bày trong nghiên cứu (Nguyen, 2017) cho thấy đỉnh nằm ở nhiệt độ tuyệt đối 473 (K), cường độ TL thay đổi theo thời gian và mức liều xạ. Tiến hành mô phỏng đỉnh phổ TL ở nhiệt độ tuyệt đối 473 (K) với các thông số bẫy ban đầu. Bằng cách hiệu chỉnh các giá trị thông số bẫy sao cho phổ TL thỏa mãn mô hình động học TL và có đỉnh TL phù hợp với thực nghiệm. Kết quả cho thấy với các thông số ban đầu được cho trước: $n_0 = 10^8$, $N = 10^{10}$, $E = 1.1$ (eV), $\beta = 1$ (K/s), $s = 8.10^{14}$ (s^{-1}) và bậc động học: $b = 1.61$, $R = 0.008$ hoặc $\alpha = 0.99$. Phổ TL được ước lượng đỉnh ở nhiệt độ tuyệt đối $T_m = 473$ (K) cho kết quả mô phỏng này phù hợp với thực nghiệm. Trong Hình 1, phổ TL được mô phỏng theo mô hình FOK, SOK và GOK. Trong Hình 2, phổ TL được mô phỏng theo mô hình GOK, MOK và OTOR. Trong Hình 3, phổ TL được mô phỏng theo các mô hình FOK, SOK, GOK, MOK và OTOR. Khi so sánh kết quả mô phỏng phổ TL theo đỉnh TL thực nghiệm, kết quả cho thấy mô hình GOK là phù hợp nhất.



Hình 1. Mô phỏng phổ TL từ thông số bẫy theo mô hình FOK, SOK và GOK



Hình 2. Mô phỏng phổ TL từ thông số bẫy theo mô hình GOK, MOK và OTOR



Hình 3. Mô phỏng phổ TL theo mô hình FOK, SOK, GOK, MOK và OTOR

Việc khai báo hàm làm khớp phổ TL theo mô hình bậc nhất trong Python để mô phỏng là:

```
kbz = 8.617385e-5
c,n,ff,hr = 1.1, 0.01e10, 8e14, 1.0
def FOK(x):
    return n*ff*np.exp(-c/kbz/x)*np.exp(-ff*kbz*x**2/(hr*c)*np.exp(-c/kbz/x)*(1-2*kbz/c))
```

Việc đánh giá kết quả mô phỏng dựa trên hệ số FOM. Kết quả mô phỏng cho giá trị FOM nhỏ tức việc mô phỏng phổ TL theo các mô hình tương đồng với thực nghiệm. Trong đó, khi mô phỏng mô hình GOK cho thấy phổ TL được làm khớp tốt nhất.

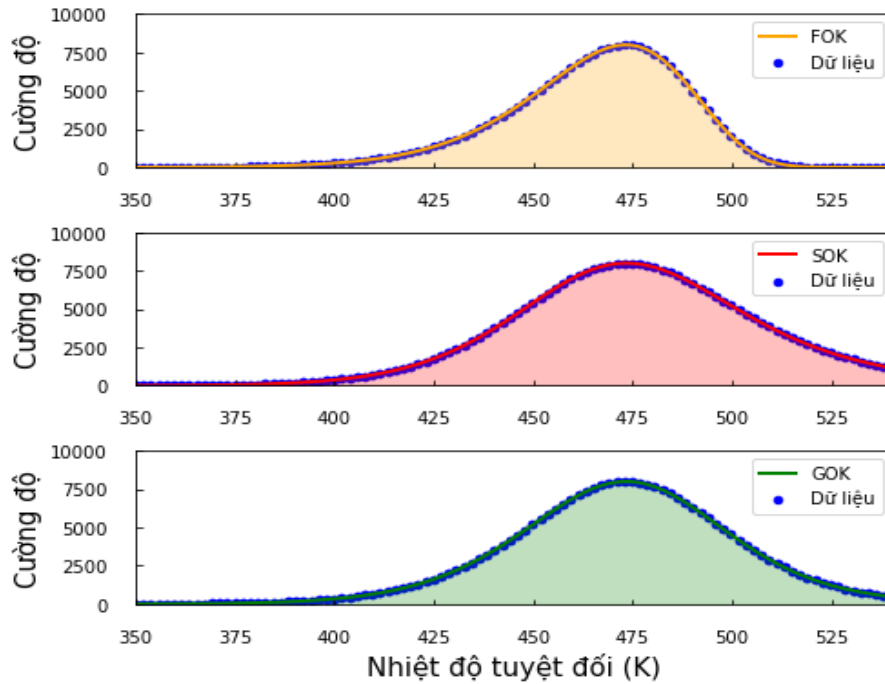
3.2. Kết quả mô phỏng phổ TL dựa vào các thông số đỉnh phổ

Các đường cong TL được mô phỏng dựa theo thông số đỉnh phổ theo các mô hình: FOK, SOK, GOK, MOK và OTTOR tương ứng với các hàm của các công thức (7), (8), (9), (10) và (11) đã được nêu ra. Để mô phỏng phổ TL, bên cạnh dựa vào các thông số bẫy phổ TL còn dựa vào các thông số đỉnh phổ TL. Phổ TL thực nghiệm của bột ốt đã chiếu xạ với các liều xạ khác nhau được trình bày trong nghiên cứu (Nguyen, 2017) cho thấy đỉnh nằm ở nhiệt độ tuyệt đối 473 (K), cường độ TL thay đổi theo thời gian và mức liều xạ. Bằng cách hiệu chỉnh các giá trị thông số đỉnh phổ TL thỏa mãn mô hình động học TL và có đỉnh TL phù hợp với thực nghiệm. Các thông số đỉnh TL ban đầu được cho là: $I_m = 8000$, $E = 0.95$ (eV), $T_m = 473$ (K) và bậc động học: $b = 1.61$, $R = 0.2$ hoặc $\alpha = 0.0001$ khi đó phổ TL được làm khớp phù hợp với thực nghiệm.

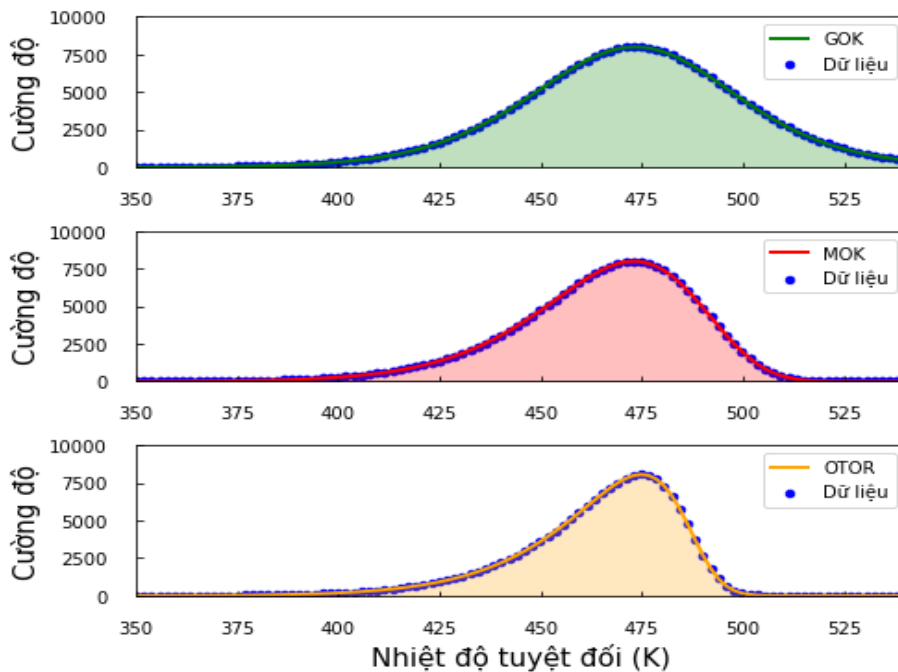
Việc khai báo hàm làm khớp phổ TL theo mô hình bậc nhất trong Python để mô phỏng là:

```
def FOK(x, a, b, c):
    kbz = 8.617385e-5
    return a*np.exp(1.0+c/kbz/x*((x-b)/b)-((x/b)**2)*np.exp(c/kbz/x*((x-b)/b))*(1.0-2.0*kbz*x/c)-2.0*kbz*b/c) # Im=a, Tm=b, E=c
x = np.linspace(start=0, stop=600, num=50)
y = FOK(x, 8000, 473, 0.95)
```

Trong Hình 4, các đường cong TL được mô phỏng dựa vào các thông số đỉnh phổ TL theo các mô hình FOK, SOK và GOK. Ở Hình 5, các đường cong TL được mô phỏng dựa vào các thông số đỉnh phổ TL theo các mô hình GOK, MOK và OTOR. Với các mô hình khác nhau, hệ số FOM đều nhỏ cho thấy việc mô phỏng là phù hợp.

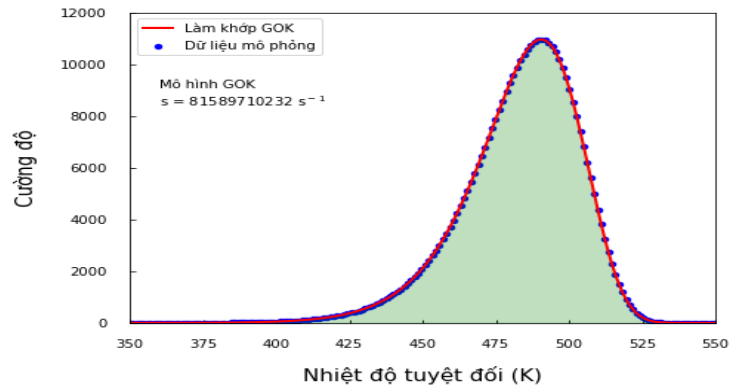


Hình 4. Mô phỏng phổ TL từ thông số đỉnh theo mô hình FOK, SOK và GOK



Hình 5. Mô phỏng phổ TL từ thông số đỉnh theo các mô hình GOK, MOK và OTOR

Xem xét trường hợp cụ thể khi mô phỏng phổ TL theo mô hình GOK với thông số đỉnh $I_m = 10968$, $E = 1.18$ (eV), $T_m = 490$ (K) và $b = 1.0001$. Kết quả mô phỏng cho giá trị tần số thoát: $s = 8.1 \cdot 10^{10}$ (s^{-1}). Việc mô phỏng và tính toán tần số thoát của đường cong TL theo mô hình GOK được cho bởi Hình 6.



Hình 6. Mô phỏng một đỉnh phổ TL cụ thể theo mô hình GOK

Hệ số FOM nhỏ chứng tỏ việc mô phỏng phổ TL trong trường hợp này là phù hợp, phổ mô phỏng tương đồng với thực nghiệm.

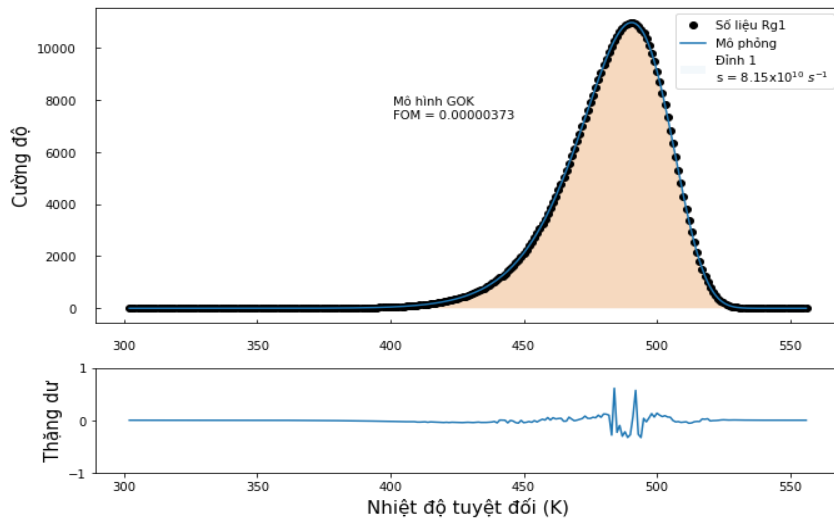
3.3. Kết quả tính tần số thoát của các đường cong thực nghiệm

Phổ TL thực nghiệm cho biết các thông số đỉnh và cường độ. Dựa vào việc làm khớp theo mô hình động học, thông số tần số thoát sẽ được tính toán. Để đơn giản, khi tính tần số thoát tỉ số giữa n_0/N được cho bằng 0.01, tốc độ gia nhiệt được cho bằng 1 K/s. Kết quả tính toán tần số thoát dựa vào quá trình làm khớp phổ TL theo các mô hình khác nhau được cho bởi Bảng 1.

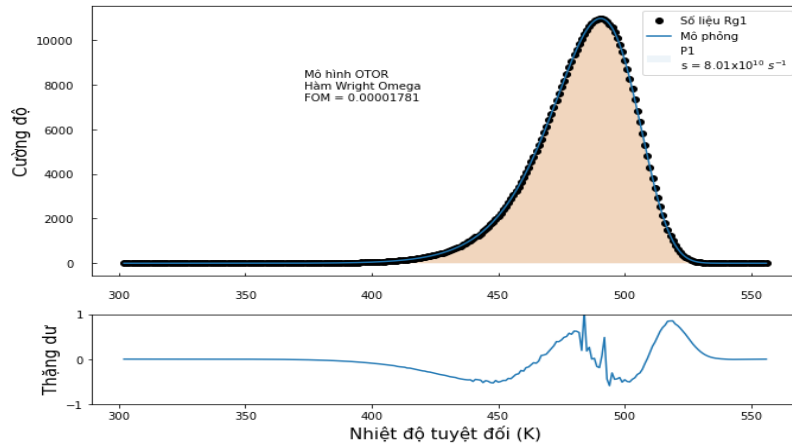
Bảng 1. Kết quả tính tần số thoát của phổ Rg1 và Rg2 theo các mô hình khác nhau

TL	Đỉnh	GOK		OTOR		MOK	
		s (s^{-1})	FOM	s (s^{-1})	FOM	s (s^{-1})	FOM
Rg1	1	8.15×10^{10}	$3.7e-6$	8.01×10^{10}	$1.7e-5$	8.16×10^{10}	$7.1e-4$
	1	5.36×10^{15}		1.31×10^{15}		2.86×10^{15}	$2.6e-3$
Rg2	2	2.05×10^{15}	$4.2e-4$	1.2×10^{15}	$1.1e-3$	2.90×10^{15}	
	3	2.51×10^{15}		1.84×10^{15}		1.59×10^{15}	
	4	4.91×10^{15}		3.90×10^{15}		5.84×10^{15}	

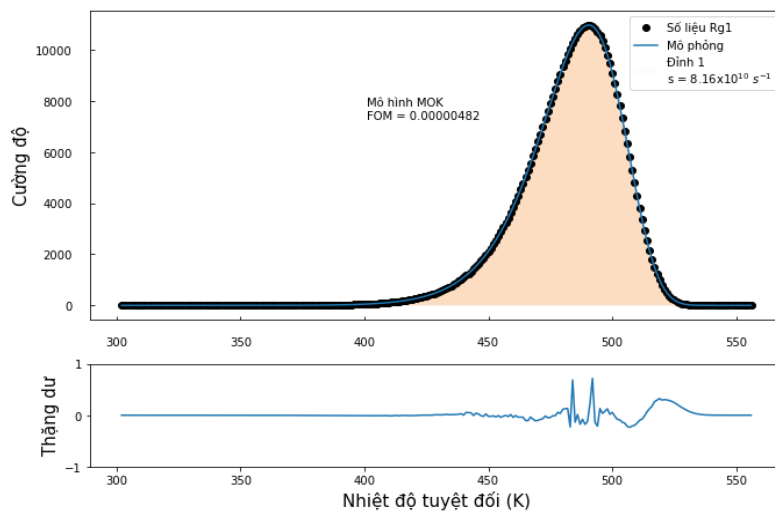
Với đường cong Rg1 (Bos et al., 1993, 1994), phổ TL có dạng đỉnh đơn nên được làm khớp với một đỉnh. Khi làm khớp phổ TL, cường độ của phổ TL cực đại ở 10968 và nhiệt độ tuyệt đối khoảng 490 K. Giá trị tần số thoát tương ứng của Rg1 tương ứng với từng mô hình lần lượt là 8.15×10^{10} (GOK), 8.01×10^{10} (OTOR) and $8.16 \times 10^{10} s^{-1}$ (MOK). Giá trị FOM có độ lớn lần lượt là 0.01 (GOK and OTOR) và 0.03 (MOK). Các kết quả làm khớp và tính toán được cho bởi Hình 7, Hình 8, Hình 9.



Hình 7. Mô phỏng phổ TL của mẫu Rg1 theo các mô hình GOK



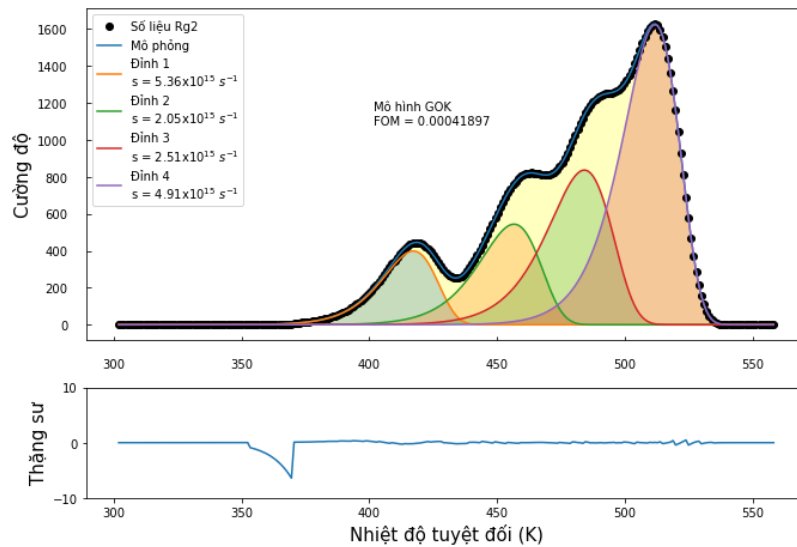
Hình 8. Mô phỏng phổ TL của mẫu Rg1 theo các mô hình OTOR



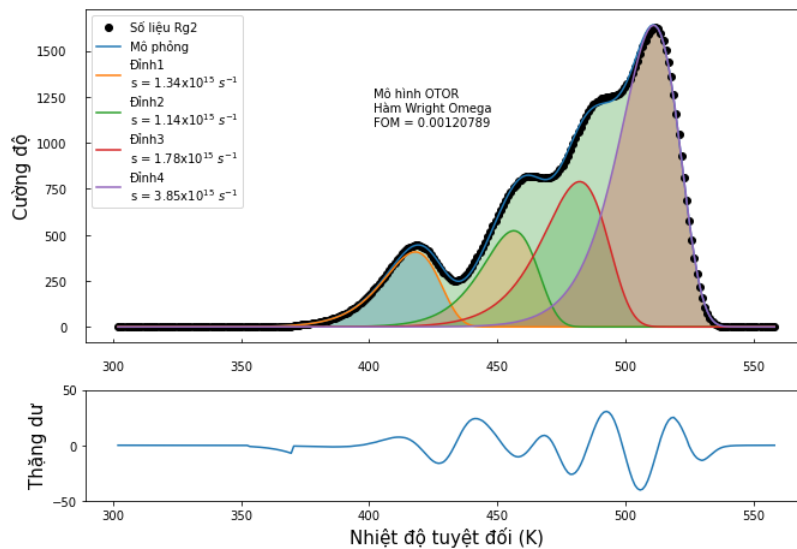
Hình 9. Mô phỏng phổ TL của mẫu Rg1 theo các mô hình MOK

Kết quả cho thấy, với phổ TL của mẫu Rg1, các giá trị FOM nhỏ, phổ TL được mô phỏng tương đồng với thực nghiệm. Các giá trị tần số thoát với những mô hình khác nhau không khác nhau. Vì vậy việc ước lượng giá trị tần số thoát của phổ Rg1 trong trường hợp này có thể xem như phù hợp.

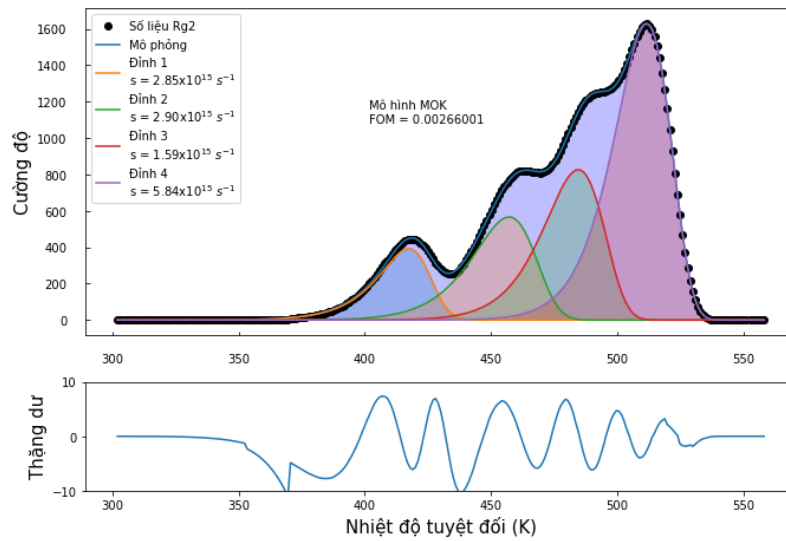
Tiếp đến, phổ Rg2 của dự án GLOCANIN (Bos et al., 1993, 1994) được làm khớp theo các mô hình và tính thông số tần số thoát. Phổ Rg2 là đường cong với bốn đỉnh chính vì vậy phổ được làm khớp với bốn đỉnh. Kết quả làm khớp và tính toán tần số thoát được cho bởi Hình 10, Hình 11, Hình 12.



Hình 10. Mô phỏng phổ TL của mẫu Rg2 theo các mô hình GOK



Hình 11. Mô phỏng phổ TL của mẫu Rg2 theo các mô hình OTOR



Hình 12. Mô phỏng phổ TL của mẫu Rg2 theo các mô hình MOK

Bốn đỉnh chính của phổ Rg2 được chọn có cường độ và nhiệt độ tuyệt đối lần lượt là $I_m = 398, 543, 835, 1623$; $T_m = 417, 456, 484, 511$ (K). Kết quả tính toán tần số thoát của phổ Rg2 của bốn đỉnh theo các mô hình khác nhau lần lượt là $5,36 \times 10^{15}, 2,05 \times 10^{15}, 2,51 \times 10^{15}, 4,91 \times 10^{15} \text{ s}^{-1}$ (GOK), $1,31 \times 10^{15}, 1,2 \times 10^{15}, 1,84 \times 10^{15}, 3,90 \times 10^{15} \text{ s}^{-1}$ (OTOR) and $2,86 \times 10^{15}, 2,9 \times 10^{15}, 1,59 \times 10^{15}, 5,84 \times 10^{15} \text{ s}^{-1}$ (MOK). Tần số thoát theo của mỗi đỉnh trong các mô hình là khác nhau. Hệ số FOM của mỗi mô hình đều rất nhỏ cho thấy việc làm khớp và tính toán là phù hợp.

Tóm lại, với đường cong TL thực nghiệm dạng đỉnh đơn, việc làm khớp và tính toán thông số tần số thoát là phù hợp. Các giá trị tần số thoát của phổ TL ở mỗi mô hình khi làm khớp dạng đỉnh đơn là tương đồng nhau. Với đường cong TL thực nghiệm có dạng phức tạp bao gồm nhiều đỉnh phổ, việc làm khớp và tính toán thông số tần số thoát sẽ có sự chênh lệch nhỏ ở mỗi đỉnh TL và ở mỗi mô hình động học. Nguyên nhân của sự chênh lệch này nằm ở cách chọn lựa vị trí đỉnh, mô hình động học khác nhau. Để đánh giá mô hình nào phù hợp nhất khi làm khớp phổ TL, khi đó cần căn cứ vào hệ số FOM, hệ số FOM của mô hình nào nhỏ nhất sẽ được chọn.

4. Kết luận

Dựa trên các mô hình khác nhau, phổ TL thực nghiệm được xử lý làm khớp bằng phần mềm Python là phù hợp. Phổ TL khi được xử lý với Python cho kết quả rất nhanh, các hàm và các thuật toán tách đỉnh tương đối đơn giản. Hệ số làm khớp phổ FOM ở mỗi mô hình đều nhỏ. Giá trị tần số thoát được tính toán chi tiết ở mỗi mô hình và khá tương đồng nhau. Việc tính toán giá trị tần số thoát ở đây có ý nghĩa quan trọng trong việc xác định sự tồn tại của đỉnh phổ TL theo thời gian làm cơ sở ứng dụng trong các lĩnh vực đo liều, dò thực phẩm chiếu xạ, xác định liều xạ.

❖ **Tuyên bố về quyền lợi:** Các tác giả xác nhận hoàn toàn không có xung đột về quyền lợi.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

- Amit, G., & Datz, H. (2018). Automatic detection of anomalous thermoluminescent dosimeter glow curves using machine learning. *Radiation Measurements*, 117, 80-85. <https://doi.org/10.1016/j.radmeas.2018.07.014>
- Aşlar, E., Şahiner, E., Polymeris, G. S., & Meriç, N. (2021). Thermally and optically stimulated luminescence properties of BeO dosimeter with double TL peak in the main dosimetric region. *Applied Radiation and Isotopes*, 170, 109635. <https://doi.org/10.1016/j.apradiso.2021.109635>
- Bassinot, C., & Le Bris, W. (2020). TL investigation of glasses from mobile phone screen protectors for radiation accident dosimetry. *Radiation Measurements*, 136, 106384. <https://doi.org/10.1016/j.radmeas.2020.106384>
- Bos, A. J. J., Pijpers, T. M., Ros, J. M. G., & Delgado, A. (1993). An intercomparison of glow curve analysis computer programs: I. Synthetic Glow Curves. *Radiat Prot Dosim*, 47(1), 473-477. <http://doi.org/10.1093/oxfordjournals.rpd.a081789>
- Bos, A. J. J., Pijpers, T. M., Ros, J. M. G., & Delgado, A. (1994). An intercomparison of glow curve analysis computer programs: II. Measured Glow Curves. *Radiat Prot Dosim*, 51(1), 257-264. <http://doi.org/10.1093/oxfordjournals.rpd.a082143>
- Chopra, V., Singh, L., & Lochab, S. P. (2013). Thermoluminescence characteristics of gamma irradiated Li₂B₄O₇:Cu nanophosphor. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, 717, 63-68. <http://dx.doi.org/10.1016/j.nima.2013.03.015>
- Kitis, G., & Gomez-Ros, J. M. (2000). Thermoluminescence glow-curve deconvolution functions for mixed order of kinetics and continuous trap distribution. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, 440(1), 224-231. [http://dx.doi.org/10.1016/S0168-9002\(99\)00876-1](http://dx.doi.org/10.1016/S0168-9002(99)00876-1)
- Kitis, G., Gomez-Ros, J. M., & Tuyn, J. W. N. (1998). Thermoluminescence glow-curve deconvolution functions for first, second and general orders of kinetics. *J Phys D: Appl Phys*, 31(19), 2636.
- Kitis, G., & Pagonis, V. (2017). New expressions for half life, peak maximum temperature, activation energy and kinetic order of a thermoluminescence glow peak based on the Lambert W function. *Radiation Measurements*, 97, 28-34. doi:10.1016/j.radmeas.2016.12.013
- Kitis, G., & Vlachos, N. D. (2013). General semi-analytical expressions for TL, OSL and other luminescence stimulation modes derived from the OTOR model using the Lambert W-function. *Rad Meas*, 48, 47-54. <http://dx.doi.org/10.1016/j.radmeas.2012.09.006>
- Kröniger, K., Mentzel, F., Theinert, R., & Walbersloh, J. (2019). A machine learning approach to glow curve analysis. *Radiation Measurements*, 125, 34-39. <https://doi.org/10.1016/j.radmeas.2019.02.015>

- Murray-Wallace, C. V., Jones, B. G., Nghi, T., Price, D. M., Vinh, V. V., Tinh N. T., & Nanson, G. C. (2002). Thermoluminescence ages for a reworked coastal barrier, southeastern Vietnam: a preliminary report. *Journal of Asian Earth Sciences*, 20(5), 535-548. [http://dx.doi.org/10.1016/S1367-9120\(01\)00040-2](http://dx.doi.org/10.1016/S1367-9120(01)00040-2)
- Nguyen, D. S. (2013). Nghiên cứu ứng dụng hiện tượng nhiệt huỳnh quang trong việc xác định sản phẩm chiếu xạ ở Việt Nam [Research on the application of thermoluminescence phenomenon in determining irradiated products in Vietnam]. *Can Tho University Journal of Science*, 29, 105-110.
- Nguyen, D. S. (2015). Đo phổ nhiệt huỳnh quang của bột ớt với các liều chiếu xạ khác nhau [Measuring fluorescent thermal-spectrum of chili powder by different dose of irradiation]. *Ho Chi Minh City University of Education Journal of Science*, 9(75).
- Nguyen D. S. (2017). Study of the effect of gamma-irradiation on the activation energy value from the thermoluminescence glow curve. *Journal of Taibah University for Science*, 11(6), 1221-1221. doi:10.1016/j.jtusci.2016.10.006
- Nguyen, D. S., Tran, V. H., Nguyen, V. H., Tran, & Nguyen Q. H. (2017). Using the computerized glow curve deconvolution method and the R package tgc to determination of thermoluminescence kinetic parameters of chilli powder samples by GOK model and OTOR one. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, 394, 113-120. <https://doi.org/10.1016/j.nimb.2017.01.012>
- Nguyen, D. S., Tran, V. H., Nguyen, V. H., Tran, & Nguyen, Q. H. (2018). Determine dose-saturation level from thermoluminescence curves by the GOK and OTOR models. *Journal of Taibah University for Science*, 12(6), 846-851. doi:10.1080/16583655.2018.1526660
- Pagonis, V., Kitis, G., & Furetta, C. (2006). *Numerical and Practical Exercises in Thermoluminescence*. Springer, United States of America.
- Peng, J., Dong, Z., & Han, F. (2016). tgc: An R package for analyzing thermoluminescence glow curves. *SoftwareX*, 5, 112-120. <https://doi.org/10.1016/j.softx.2016.06.001>
- Peng, J., Kitis, G., Sadek, A. M., Karsu Asal, E. C., & Li, Z. (2021). Thermoluminescence glow-curve deconvolution using analytical expressions: A unified presentation. *Applied Radiation and Isotopes*, 168, 109440. <https://doi.org/10.1016/j.apradiso.2020.109440>
- Puchalska, M., & Bilski, P. (2006). GlowFit – a new tool for thermoluminescence glow-curve deconvolution. *Rad Meas*, 41(6), 659-664. <http://dx.doi.org/10.1016/j.radmeas.2006.03.008>
- Sadek, A. M., Eissa, H. M., Basha, A. M., Carinou, E., Askounis, P., & Kitis, G. (2015). The deconvolution of thermoluminescence glow-curves using general expressions derived from the one trap-one recombination (OTOR) level model. *Appl Radiat Isot.*, 95, 214-221. <http://dx.doi.org/10.1016/j.apradiso.2014.10.030>
- Severance, C. (2015). Guido van Rossum: The Early Years of Python. *Computer*, 48, 7-9. doi:10.1109/MC.2015.45
- Singh, L. L., & Gartia, R. K. (2015). Derivation of a simplified OSL OTOR equation using Wright Omega function and its application. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, 346, 45-52. <http://dx.doi.org/10.1016/j.nimb.2015.01.038>

- Sunta, C. M., Ayta, W. E. F., Chubaci, J. F. D., & Watanabe, S. (2002). General order and mixed order fits of thermoluminescence glow curves—a comparison. *Radiation Measurements*, 35(1), 47-57. [http://dx.doi.org/10.1016/S1350-4487\(01\)00257-8](http://dx.doi.org/10.1016/S1350-4487(01)00257-8)
- Theinert, R., Kröniger, K., Lütfring, A., Mender, S., Mentzel, F., & Walbersloh, J. (2018). Fading time and irradiation dose estimation from thermoluminescent dosimeters using glow curve deconvolution. *Radiation Measurements*, 108, 20-25. <https://doi.org/10.1016/j.radmeas.2017.11.002>

**A STUDY ON THERMOLUMINESCENCE (TL) SPECTRA
USING PYTHON SOFTWARE**

Nguyen Duy Sang^{1*}, *Le Ngoc Hoa*²

¹High school Teacher Practice – Can Tho University, Vietnam

²Can Tho University, Vietnam

*Corresponding author: Nguyen Duy Sang – Email: ndsang@ctu.edu.vn

Received: October 08, 2021; Revised: December 13, 2021; Accepted: December 20, 2021

ABSTRACT

Thermoluminescence (TL) spectra are complex curves that do not follow normal distributions but follow a general, first-, second-order, one-center recombination trap or mixing model. This paper presents a method to use Python software to simulate and fit the experimental curve of the TL spectrum based on different models. The TL spectral simulation method is based on the trap parameter or the spectral peak parameter according to the kinetic equations. The processing and analysis of the TL spectrum show the characteristic parameters of the TL spectrum of the material such as the activation energy, frequency factor, and trap lifetime. The results show that the simulated and matched TL spectrum fits the general order model. The small spectral matching coefficient shows that the simulated and experimental TL spectra are similar.

Keywords: activation energy; frequency factor; lifetime; thermoluminescence; Python