

УДК 543.53:681.142.4

Применение ЭВМ для обработки спектрометрической информации при инструментальном нейтронно-активационном анализе

ВЫРОПАЕВ В. Я., ЗЛОКАЗОВ В. Б., КУЛЬКИНА Л. П., МАСЛОВ О. Д., ФЕФИЛОВ Б. В.

Расшифровка и обработка спектров γ -излучения является наиболее трудоемкой задачей при активационном анализе сложных многокомпонентных объектов. При получении γ -спектров с помощью Ge (Li)-детекторов больших объемов и с высокой разрешающей способностью для более полной информации целесообразно использовать ЭВМ. Для массового многоэлементного инструментального анализа это единственно возможное решение.

В Лаборатории ядерных реакций разработаны комплекс электронной аппаратуры и программное обеспечение для автоматизации измерения и обработки спектрометрической информации, в том числе сложных γ -спектров, получаемых с помощью полупроводниковых детекторов.

На рис. 1 представлена структурная схема такого измерительно-вычислительного комплекса. Измерительная электронная аппаратура состоит из Ge(Li)-детекторов с различным чувствительным объемом 30–60 см³ и энергетиче-

ским разрешением ~ 2 –3,5 кэВ для линии ⁶⁰Co ($E_\gamma = 1333$ кэВ), зарядо-чувствительного предусилителя, линейного усилителя и амплитудно-цифрового преобразователя на 4096 каналов с частотой квантования 100 МГц. Интегральная нелинейность измерительно-преобразовательного тракта не хуже 0,05%. Долговременная стабильность в нормальных лабораторных условиях составляет не больше $\pm 1,5$ канала для пика в конце энергетической шкалы в течение суток. При необходимости может включаться система стабилизации по реперным пикам или по импульсам стабильного импульсного генератора.

Для интегрального накопления γ -спектров используются многоканальный анализатор АИ-4096 или ЭВМ ТРА-1001, а данные выводятся на перфоратор ПЛ-150. Полученные перфоленты вводятся в ЭВМ «Минск-32» для обработки или распечатываются в виде гистограмм на графопостроителе ДРП-3 при помощи фотосчитывающего устройства FS-1501 и устройства управления УП-7. Комплекс анализаторов АИ-4096 (5 шт.) может передавать накопленные данные непосредственно в ЭВМ «Минск-32» по стандартному каналу ввода — вывода через специально разработанное устройство сопряжения. ЭВМ ТРА-1001 имеет ОЗУ 16К 12-разрядных слов, систему связи с АЦП и осциллографический дисплей с двумя управляемыми маркерами. ЭВМ может быть использована и для окончательной обработки сравнительно простых спектров по программе ЮПИТЕР-16 [1], дающей возможность с помощью дисплея идентифицировать фотошки, определять их площади и разрешение, а также размечать сложные спектры, для окончательной обработки которых используется ЭВМ «Минск-32» [2]. Неотъемлемой частью комплекса обработки является точечный дисплей со световым карандашом, специально разработанный для ЭВМ «Минск-32».

На базе ЭВМ «Минск-32» создан программный комплекс обработки γ -спектров для инструментального активационного анализа. Принцип организации математической обработки γ -спектров как основы для активационного анализа может быть использован и в других экспери-

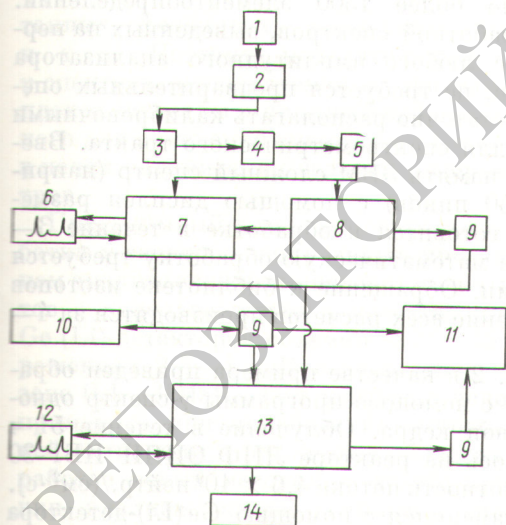


Рис. 1. Структурная схема различных вариантов измерений и обработки γ -спектров активированных проб:

1 — образец; 2 — полупроводниковый детектор; 3 — предусилитель; 4 — усилитель с активным формированием; 5 — аналого-цифровой преобразователь; 6, 12 — дисплей; 7 — ЭВМ ТРА-1001; 8 — АИ-4096; 9 — перфоратор; 10 — телетайп (вывод результатов предварительной обработки); 11 — графопостроитель; 13 — ЭВМ «Минск-32»; 14 — АЦПУ (вывод результатов окончательной обработки)

ментах при работе с γ -спектрами. Основа программного комплекса — спектроориентированная система СПОРС [3], дающая экспериментатору простой и удобный аппарат для взаимодействия с программами обработки спектров.

Зарегистрированный многоканальным амплитудным анализатором γ -спектр представлен как сумма трех компонентов:

$$S(x) = \sum_{n=1}^n A_i p_i(x) + B(x) + \delta(x),$$

где $A_i p_i(x)$ — i -й пик полного поглощения энергии γ -квантов; $B(x)$ — фоновая составляющая (включая края комптоновского рассеяния, пики утечки и другие вклады всевозможных непрерывных распределений энергии в детекторе); $\delta(x)$ — статистическая погрешность (погрешности в разных каналах считаются независимыми).

Обработка γ -спектров — это разложение их на компоненты и статистическая оценка их параметров с помощью метода наименьших квадратов; при этом основной интерес представляют оценки параметров полезных компонентов (площадь, полуширина и положение пиков полного поглощения энергии), а также их погрешности.

В качестве модели пика полного поглощения может быть задана любая кривая, достаточно полно описывающая его форму [4]. Как исходная информация для получения такой кривой используется, например, табличная распечатка (поканально) участка γ -спектра с изолированным фотопиком, полученного с помощью спектрометрического тракта. Эта информация в виде массива чисел вводится в ЭВМ. Гауссова кривая формируется автоматически. Фон моделируется полиномами Чебышева.

В описываемый комплекс входит математическое обеспечение дисплея со спектрометрической ориентацией. Дисплей используется для разметки фотопиков и оптимальных границ участков при математической обработке. Визуально рассматривая спектр с помощью дисплея, можно определить энергию любого фотопика. При наличии дисплея отпадает необходимость введения дополнительной информации для моделирования кривой, описывающей форму фотопика; достаточно в первую очередь разметить пик, выбранный для модели. Чтобы преобразовать результаты математической обработки спектра в физические единицы измерений, в ЭВМ вводятся данные для энергетической калибровки и учета эффективности детектора.

Использование библиотеки изотопов (в пакетном режиме) дает возможность получать расчетные как по относительному (по эталонам), так и по абсолютному (по формуле активации) методу активационного анализа. Расчеты выполняются по всем присутствующим в спектре линиям данного изотопа, что является дополнительным контролем точности анализа. В настоящее время составлена библиотека на 126 изотопов с ориентацией на (n, γ) -реакцию.

Результаты обработки представляются в виде элементного состава пробы (в г/г) с указанием точности определения, причем погрешность оценивается с учетом вклада погрешностей математической обработки и самого метода анализа. Так, в наших экспериментах погрешность определения элементного состава абсолютным и относительным методами составляет 10—12 и 4—6 % соответственно. В программный комплекс входит также математическое обеспечение для изображения γ -спектров с помощью графопостроителя. Максимальные размеры рисунков 800×800 мм, их можно выполнять поканально, в виде гистограмм, в логарифмическом масштабе и т. п.

Программный комплекс опробован на 100 образцах различного происхождения: геологических, биологических, экологических и др. Выполнено более 1500 элементоопределений. Перед обработкой спектров, выведенных на перфоленду с любого амплитудного анализатора импульсов, не требуется предварительных операций; достаточно располагать калибровочными данными для спектрометрического тракта. Введенный в память ЭВМ сложный спектр (например, из 50 пиков) с помощью дисплея размечается и готовится к обработке в течение 3—5 мин. На математическую обработку требуется 15—18 мин. Обращение к библиотеке изотопов и выполнение всех расчетов производится за 4—5 мин.

На рис. 2 в качестве примера приведен обработанный с помощью программы γ -спектр однолетней хвои кедр. Облучение в течение 51 ч проводилось на реакторе ЛНФ ОИЯИ ИБР-30 [5] при плотности потока $4,6 \times 10^9$ нейтр./ $(\text{см}^2 \cdot \text{с})$. Спектр измерялся с помощью Ge(Li)-детектора объемом 30 см^3 с разрешением 3 кэВ по линии ^{137}Cs ($E_\gamma = 0,662 \text{ МэВ}$) и амплитудного анализатора импульсов АИ-4096.

Помимо основных параметров в результате математической обработки экспериментатор располагает дополнительными сведениями о соотношении пик — фон, разрешении на обрабо-

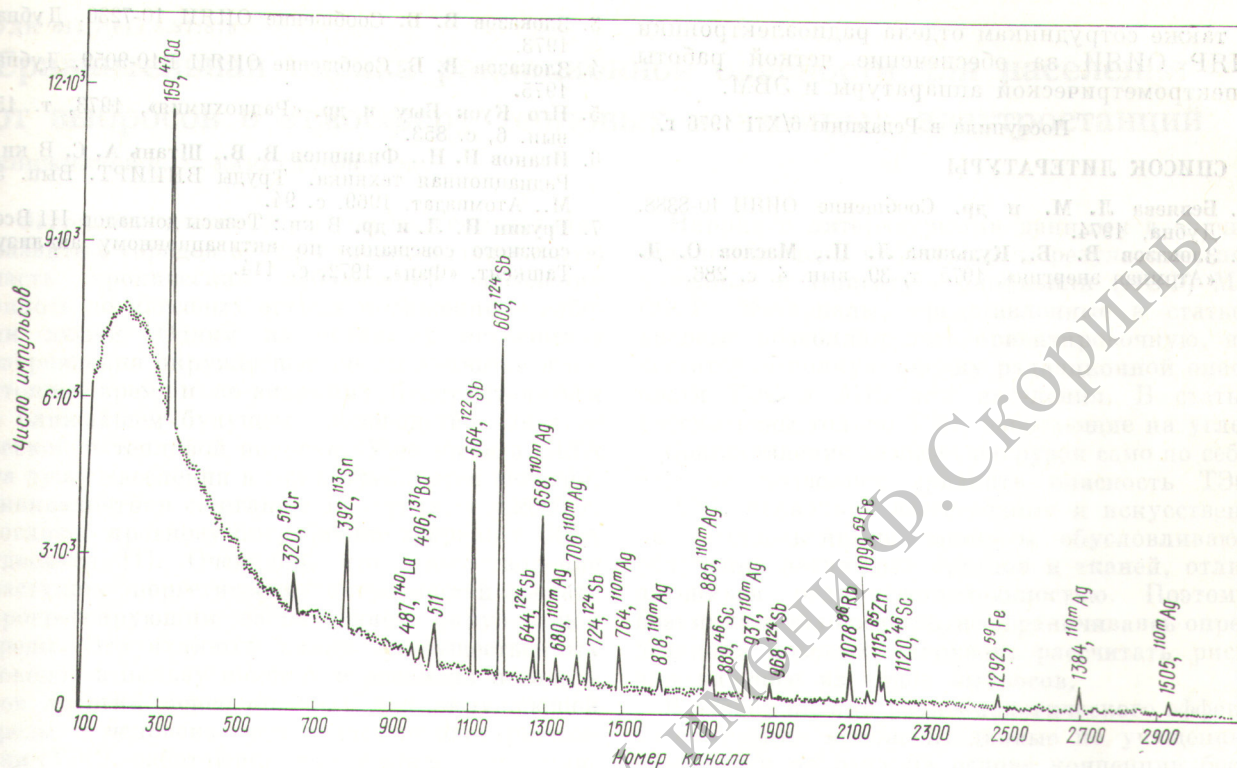


Рис. 2. Гамма-спектр однолетней хвои кедра, измеренный в течение 5 ч после 15 сут «охлаждения»

танных фотопиках, возможных наложениях и т. п. Поэтому математическая обработка γ -спектров, используемая в программном комплексе, может быть полезной при отладке выбранного для измерений спектрометрического тракта в целях оптимизации условий измерения γ -спектров.

Программный комплекс создавался для обработки γ -спектров, полученных при активационном анализе сложных многокомпонентных объектов с использованием в качестве индикаторов Ge (Li)-детекторов объемом $\sim 30-45 \text{ см}^3$ с разрешением 2,5—4 кэВ в энергетическом диапазоне 0,1—3 МэВ. Этот комплекс целесообразно применять при опробовании методов нейтронной активации в различных областях, при разработке новых методик, а также при проведении анализа, когда количество исследуемой пробы существенно ограничено и не допускает повторных облучений.

Для серийных анализов по отработанной аналитической методике, а также при известном качественном составе проб программный комплекс может быть существенно упрощен и специализирован. Могут быть введены поправки для

учета погрешностей спектрометрического тракта в тех случаях, когда экспериментатор не располагает оптимальным измерительным оборудованием. Кроме того, возможна оценка вклада внешнего фона в спектр аппаратурного фона при измерениях в загрязненном помещении.

К разрабатываемым решениям (в рамках созданного комплекса) следует отнести оценку вклада комптоновского рассеяния от изотопов с большим содержанием в пробах, с высоким сечением активации, что представляется наиболее важным при первом (после облучения) измерении. Предполагается обеспечить дополнительный контроль возможных наложений, проверяя соотношения интенсивностей фотопиков каждого обнаруженного в спектре изотопа по данным квантовых выходов, заложенным в библиотеку изотопов, и выбирать с помощью ЭВМ оптимальные временные параметры проведения активационного анализа в зависимости от поставленной перед экспериментатором задачи [6, 7].

Авторы благодарны Г. Н. Флёрову за постановку задачи и постоянный интерес к работе,

а также сотрудникам отдела радиоэлектроники ЛЯР ОИЯИ за обеспечение четкой работы спектрометрической аппаратуры и ЭВМ.

Поступила в Редакцию 6/ХII 1976 г.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Беляева Л. М. и др. Сообщение ОИЯИ 10-8388. Дубна, 1974.
2. Злоказов В. Б., Кулькина Л. П., Маслов О. Д. «Атомная энергия», 1975, т. 39, вып. 4. с. 286.
3. Злоказов В. Б. Сообщение ОИЯИ 10-7230. Дубна, 1973.
4. Злоказов В. Б. Сообщение ОИЯИ Е10-9059. Дубна, 1975.
5. Нго Куок Быу и др. «Радиохимия», 1973, т. 15, вып. 6, с. 853.
6. Иванов И. Н., Филиппов В. В., Штань А. С. В кн.: Радиационная техника. Труды ВНИИРТ. Вып. 3. М., Атомиздат, 1969, с. 94.
7. Грузин П. Л. и др. В кн.: Тезисы докладов III Все-союзного совещания по активационному анализу. Ташкент, «Фан», 1972, с. 114.

РЕПОЗИТОРИЙ ГГУ имени Ф.Скорини