

УДК 539.172.12

КОМПЬЮТЕРНЫЙ КОД GAMMAPEAKS ДЛЯ ОБРАБОТКИ γ-СПЕКТРОВ

А.Ю. Бережной, С.Н. Утенков

*Национальный Научный центр «Харьковский физико-технический институт»,
ул. Академическая 1, г. Харьков 61108, Украина*

E-mail: goncharov@kipt.kharkov.ua

Поступила в редакцию 26 ноября 2007 г.

Разработана компьютерная программа GAMMAPEAKS (версия 1.0), предназначенная для обработки γ-спектров, полученных в результате экспериментальных исследований ядерных реакций. Для описания формы пика используется функция Гаусса с переменной дисперсией. Предусмотрена энергетическая калибровка спектра. Приведены основные характеристики и принципы работы данной программы.

КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА: ядерные реакции, γ-спектры, компьютерное моделирование, энергетическая калибровка, сечение реакции, радиационная силовая функция.

Одним из главных вопросов γ-спектроскопии является обработка и анализ γ-спектров, полученных в результате экспериментальных исследований ядерных реакций. Развитие и совершенствование полупроводниковых детекторов и анализаторов с большим числом каналов для измерения сложных γ-спектров требует использования современных вычислительных средств для обработки результатов эксперимента.

В настоящее время, как правило, фирмы, выпускающие полупроводниковые детекторы и аппаратуру для спектрометрического анализа комплектуют свою продукцию программами анализа и обработки γ-спектров.

Как было показано в работе [1] при обработке γ-спектров с помощью различных программ (GammaVision, BaltiSpectr, AnGamma и др.), расхождения в определении площадей под некоторыми пиками достигают 25%, что сказывается на точности определения интенсивностей γ-линий, соответствующих данным пикам.

При проведении экспериментов [2], целью которых является определение полных сечений реакции (p,γ) на различных ядрах, необходимо получить точные данные с погрешностью не более 10-15%, и, следовательно, погрешность определения площади под пиком не должна превышать 5%. Целью настоящей работы является создание программы обработки энергетических спектров различных ядерных реакций с помощью аппроксимации пиков гауссовской функцией с переменной дисперсией.

ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Основными задачами обработки γ-спектров, измеренных полупроводниковыми и сцинтилляционными детекторами, являются точное описание формы одиночного пика (ФОП) и обработка перекрывающихся пиков.

Форму пика определяют многие физические процессы, связанные с взаимодействием регистрируемых частиц (γ-квантов) с материалом детектора, а также качество детектора и электронной аппаратуры [3]. В результате форма пика даже в случае монохроматического излучения достаточно сложна и, в общем случае, асимметрична. Попытки аналитического описания ФОП с учетом указанных процессов наталкиваются на существенные трудности. Такие выражения [3,4] громоздки и содержат большое число неизвестных параметров. Поэтому обычным является привлечение эмпирико-феноменологических выражений для аппроксимации ФОП.

В настоящей работе представлена компьютерная программа GAMMAPEAKS (версия 1.0), в которой для описания ФОП используются различные модели. В частности, в данной версии для описания формы пика используются чистый гауссиан, функция Гаусса с переменной дисперсией [5], а также описание при помощи алгоритма, в котором центральная часть пика интерпретируется в виде гауссиана, а правый и левый края – в форме экспонент [6].

Функция Гаусса с переменной дисперсией описывается выражением:

$$f(x) = A_1 \cdot \exp\left\{-\frac{(x - A_2)^2}{\Delta(x)}\right\}. \quad (1)$$

Из проведенного анализа большого числа одиночных пиков, полученных при использовании различных детекторов, было установлено, что зависимость параметра ширины пика $\Delta(x)$ имеет вид гиперболы. Из канонического уравнения гиперболы $\Delta(x)$ можно представить в виде

$$\Delta(x) = A_3 + A_4 \cdot \sqrt{A_5 \cdot (x - A_2 - A_6)^2 + 1}, \quad (2)$$

где A_1 – высота пика; A_2 – положение пика; A_3, A_4 – параметры, определяющие ширину пика; A_5, A_6 – параметры уширения и асимметрии, соответственно.

Выражения для модели, использующей для описания ФОП гауссиан и экспоненты для описания краев пика, были взяты из работы [7].

ОПИСАНИЕ КОМПЬЮТЕРНОГО КОДА GAMMAPEAKS

Программа GAMMAPEAKS написана на языке DELPHI и предназначена для работы под операционной системой WINDOWS в оконном режиме.

Экспериментальные спектры считываются из файла хранения с расширением DAT в формате: номер канала – амплитуда. Разработан пакет программ перекодировки данных из форматов SPR, SPS и других в формат, используемый в программе GAMMAPEAKS.

Программа позволяет просматривать графики спектров на экране в различных режимах вывода числа каналов от 64 до 8192. По оси амплитуд возможно как линейное, так и логарифмическое масштабирование. График спектра можно просматривать в точечном режиме, в режиме линии (рис. 1) и в режиме гистограммы.

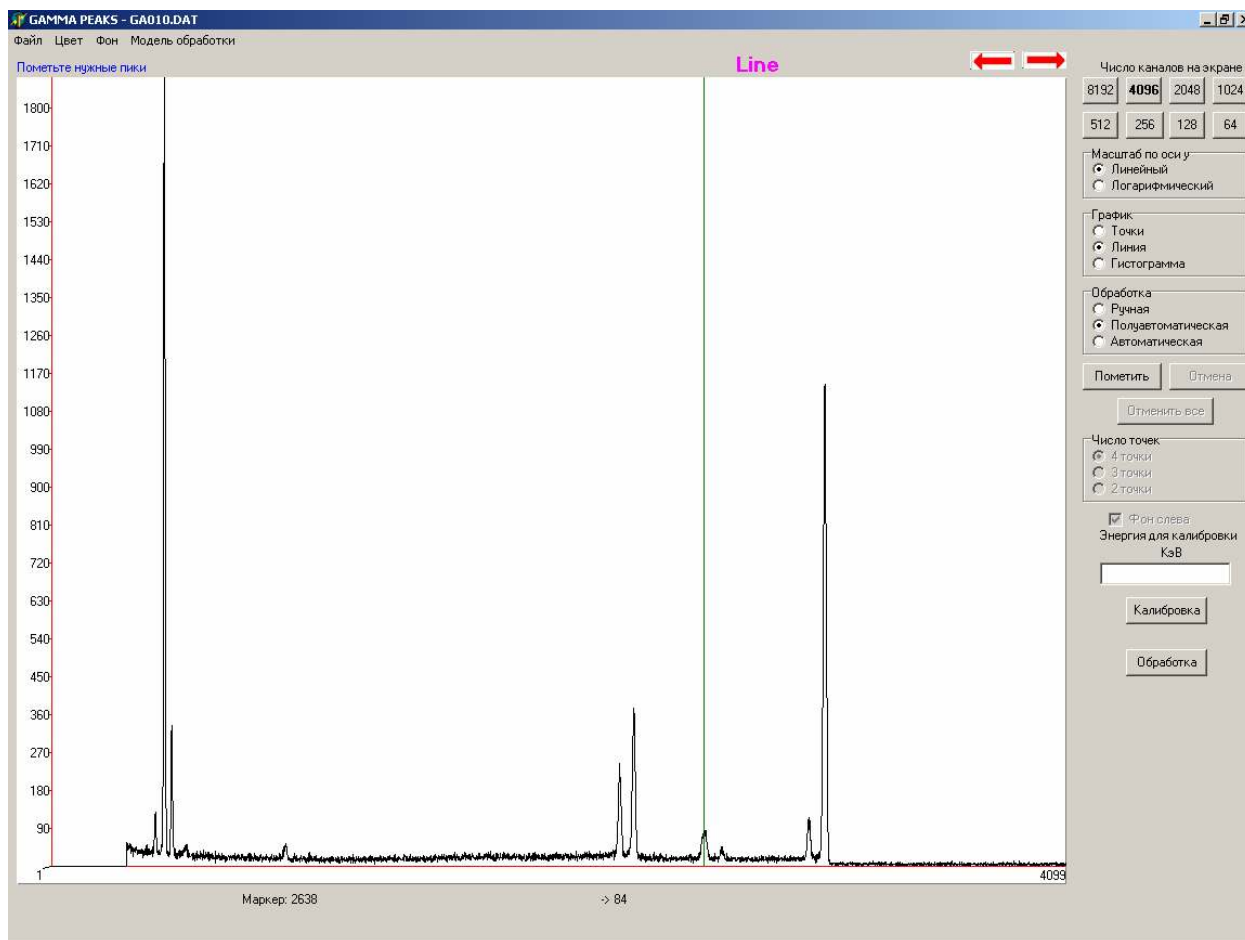


Рис.1. Основное окно программы GAMMAPEAKS (версия 1.0) с загруженным γ -спектром.

В программе предусмотрена энергетическая калибровка спектра, сопоставляющая номеру выбранного канала (местоположение курсора) соответствующую энергию. Изменение калибровки для различных участков спектра можно осуществить в ручном режиме.

В программе реализованы два основных цветовых режима вывода графика спектра на экран: черный график на белом фоне и желтый график на черном фоне. Кроме этого, возможен пользовательский режим, в котором цвет графика, фона, курсора, координатных осей и др. выбираются пользователем из цветовой палитры, разворачиваемой на экране при выборе цвета соответствующего компонента графика (пункт главного меню "Цвет").

В программе предусмотрены три режима обработки γ -спектров: ручной, полуавтоматический и автоматический. В ручном режиме пользователь определяет необходимые для обработки пики и производит разметку пиков самостоятельно. При помощи правой кнопки манипулятора "мышь" или кнопки "Пометить" в правой части главного окна для каждого пика вводятся две точки, соответствующие границам пика, и две

точки, соответствующие границам фона справа и слева от выбранного пика. После ввода этих четырех точек размеченный пик и фон справа и слева от него выделяются разными цветами на графике.

В полуавтоматическом режиме пользователь только помечает выбранные пики при помощи правой кнопки манипулятора "мышь" или кнопки "Пометить" в правой части главного окна, а разметка границ пика и фона справа и слева от пика производится автоматически по алгоритму, заложенному в программе.

В автоматическом режиме разметка всего спектра (выделение пиков и границ фона) производится при нажатии кнопки "Пометить" в правой части главного окна. Поиск пиков в автоматическом режиме включает в себя процедуру сглаживания графика спектра при помощи сплайнирования с использованием линейного фильтра и последующей процедуры анализа изменения знака производной в каждой точке графика.

В случае неправильной разметки спектра пользователь имеет возможность отменить выделение последнего помеченного пика, либо полностью отменить всю разметку спектра (кнопки "Отменить" и "Отменить все" в правой части главного окна).

Вычисление площади под выделенным пиком осуществляется одинаково во всех режимах обработки. Во-первых, суммируя поканально все амплитуды, вычисляется площадь S под выделенным пиком. Фон под пиком определяется, исходя из средних значений разметки фона справа и слева от выбранного пика, и рассчитывается либо в модели прямой линии, либо в модели ступеньки, которые выбираются пользователем в пункте главного меню "Фон". Истинное значение площади под пиком определяется как разность между площадью S и площадью фона. Результаты этих вычислений заносятся в таблицу обработанных пиков.

На рис.2 приведен пример одновременной обработки нескольких пиков экспериментального γ -спектра в полуавтоматическом режиме.

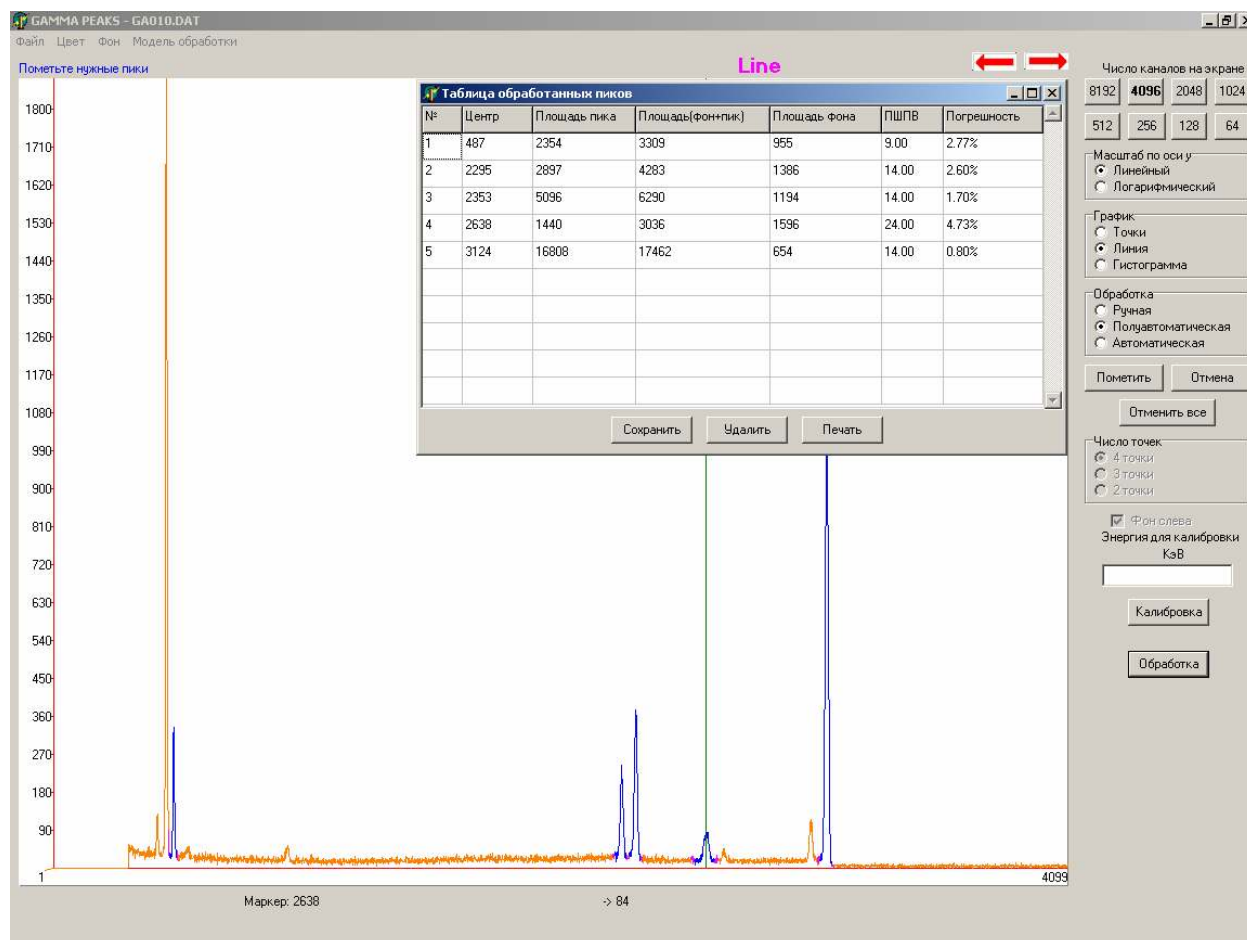


Рис.2. Пример выделения и обработки пиков γ -спектра в программе GAMMAPEAKS (версия 1.0)

В таблице обработанных пиков, которая высвечивается в отдельном окне, отображается следующая информация: порядковый номер пика, номер канала центра пика, истинная площадь пика, площадь под пиком без вычета фона (S), площадь фона, полная ширина пика на полувысоте (ПШПВ) и статистическая погрешность вычисления истинной площади под пиком. Пики в таблице располагаются в порядке возрастания номера канала, соответствующего максимальной амплитуде пика.

В программе предусмотрена возможность сохранять в файле хранения данных таблицу обработанных пиков, а также вывода данной таблицы непосредственно на печатающее устройство. Существует возможность удаления отдельных пиков из таблицы непосредственно в процессе работы программы GAMMAPEAKS (версия 1.0).

Для подробного описания программы GAMMAPEAKS (версия 1.0) планируется добавить пункт главного меню "Помощь", в котором будут описаны все команды и процедуры, используемые в данной программе. Также здесь будут размещаться инструкции пользователям для работы с программой, разметке и обработке спектров и другая информация.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Представленная в данной работе компьютерная программа GAMMAPEAKS (версия 1.0) позволяет проводить обработку экспериментально полученных γ -спектров. Информация о значениях площадей под пиками, соответствующая интенсивностям γ -линий, может быть использована для последующих расчетов сечений реакций, радиационных силовых функций и т.д. Возможность ручной разметки пиков в спектре дает возможность пользователю обрабатывать каждый пик индивидуально. Программа основана на аппроксимации пиков гауссовской функцией с переменной дисперсией.

Авторы благодарят своих коллег Мищенко В.М., Ляшко Ю.В., Туллера Г.И. за полезные обсуждения и критические замечания, высказанные при разработке данного компьютерного кода.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Бережной А.Ю., Мищенко В.М., Утенков С.Н. Компьютерный код GAMMAPEAKS для обработки γ -спектров //Тез. докл. V конф. по физике высоких энергий, ядерной физике и ускорителям. - Харьков. - 2007. - С.88.
2. Бондаренко В.Н. и др. Функция возбуждения астрофизической ядерной реакции $^{64}\text{Zn}(p,\gamma)^{65}\text{Ga}$ //Тез. докл. IV конф. по физике высоких энергий, ядерной физике и ускорителям. - Харьков. - 2006. - С.37-38.
3. Вылов Ц., Осипенко Б.П., Чумин В.Г. Прецизионная спектроскопия излучений радиоактивных нуклидов с помощью полупроводниковых детекторов //ЭЧАЯ.-1978.-Т.9.-Вып.6.-С.1350-1459.
4. Trammel R., Walter F.J. The Effects of Carrier Trapping in Semiconductor Gamma-Ray Spectrometers //Nucl. Instr. and Meth.-1969. - Vol.76. - P.317-321.
5. Купцов Г.Н., Немашкало Б.А. Аналитическое описание формы пиков от полупроводниковых и сцинтилляционных детекторов: Препринт /ХФТИ; 87-31. – Харьков: 1987. – 7 с.
6. Routti J.T., Prussin S.G. //Photopeak Method for the Computer Analysis of Gamma-Ray Spectra from Semiconductor Detectors //Nucl. Instr. and Meth. - 1969. - Vol.72. - P.125-132.
7. Гончаров К.С., Кузьменко В.А., Ремаев В.В. Полуавтоматическая программа обработки γ -спектров «Гамма-1» //ВАНТ.-Сер.: Физика высоких энергий и атомного ядра.-1977.-Вып.1(18).-С.52-56.

COMPUTER CODE GAMMAPEAKS FOR TREATMENT OF γ -SPECTRA

A.Yu. Berezhnoy, S.N. Utenkov

*National Scientific Center "Kharkov Institute of Physics and Technology",
1, Akademicheskaya st., Kharkov 61108, Ukraine.*

The computer program GAMMAPEAKS (version 1.0) intended for treatment of γ -spectra, received as a result of the nuclear reactions experimental researches is developed. The basic characteristics and principles of work of presented program are given. The program bases on the peaks approximation with the Gauss function having the variable dispersion. It provides energy calibration of spectrum. The main characteristics and principles of work present program are given.

KEYWORDS: nuclear reactions, γ -spectra, computer modeling, energy calibration, reaction cross section, radiation power function.