

Тумэндэмбэрэл, Б. и Ли Ен Зин.

Б1-10-84-588.

4448/84

Ц 8406

Т-838



ОБЪЕДИНЕННЫЙ ИНСТИТУТ ЯДЕРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ

Б 1-10-84-588

ДЕПОНИРОВАННАЯ ПУБЛИКАЦИЯ

Объединенный институт
ядерных исследований
БИБЛИОТЕКА

Дубна 19 84

АННОТАЦИЯ

В работе описаны программы **ТЕНАА** для количественного нейтронно-активационного анализа с помощью (n, γ) -реакции, **SAMPOZA** для идентификации линий нуклидов, полученных с помощью программ **ACTIV**, **SAMPO-80** и других. Созданы библиотеки нуклидов для этих программ.

Программы написаны на фортране с использованием оверлейной структуры на ЭВМ PDP-11/70 ЛНФ ОИЯИ.

Работа выполнена в Лаборатории нейтронной физики ОИЯИ.

Введение

В настоящее время в ЛНФ для активационного анализа существуют программы АСТIV и SAMPO-80, которые предназначены для автоматической обработки спектров гамма-лучей.

У программы АСТIV есть возможность определить качественный и количественный состав образцов вещества по методу эталон-нов или по формуле активации на основе данных нуклидов оператив-ной библиотеки.

В комплексе программы SAMPO-80 есть отдельная часть, пред-назначенная для идентификации нуклидов.

Авторы стремились решить следующие вопросы:

- 1) Создать программу количественного анализа на основе (n, γ)-реакции с широкими возможностями для пользователей.
- 2) Разработать программу SAMPO3 для идентификации линий нукли-дов, полученных с помощью программ АСТIV, SAMPO-80 и других.
- 3) Создать библиотеку нуклидов для качественного и количествен-ного анализа.

По сравнению с программой АСТIV, созданная программа ТЕНАА для количественного анализа дает дополнительные возможности и позволяет делать следующее:

- использовать дополнительные методы активационного анализа (метод внутреннего стандарта и моностандартный метод),
- определять плотности потоков тепловых и резонансных нейтронов по методу монитора,
- использовать библиотеки нуклидов большего размера,
- применять различные режимы обработки (случай облучения без кадмия и с кадмием, методы обработки и т.п.),
- переводить календарное время в реальное время.

I. ТЕНАА - программа для количественного анализа с помощью (n, γ) -реакции.

I.I. Основные методики и расчеты.

ТЕНАА определяет количественный состав образца с помощью следующих методов активационного анализа: относительного метода, метода внутреннего стандарта, моностандартного метода и расчетного метода. Плотность потока нейтронов определяется с помощью монитора, облученного вместе с образцом, в предположении, что условия облучения одинаковы для образца и монитора.

Площадь пика гамма-линий образующихся изотопов наведенной активности, измеренная $Ge(Li)$ -детектором, выражается формулой:

$$S_{\gamma} = (\mathcal{F}_t \sigma_0 + \mathcal{F}_r \sigma_0) \cdot m \cdot \beta \cdot \alpha = \mathcal{F}_r \sigma_0 (f + \eta) \cdot m \cdot \beta \cdot \alpha \quad (I)$$

где \mathcal{F}_t и \mathcal{F}_r - плотности потоков тепловых и резонансных нейтронов соответственно (нейтрон/(см²·сек)), $f = \mathcal{F}_t / \mathcal{F}_r$, σ_0 - сечение захвата тепловых нейтронов (барн), σ_0 - сечение резонансных нейтронов (барн), $\eta = \sigma_0 / \sigma_0$, m - масса определяемого элемента (грамм), β и α - коэффициенты, зависящие от ядерно-физических свойств элемента, условий облучения и измерения:

$$\beta = \varepsilon \cdot g$$

$$\alpha = 6,02 \cdot 10^{23} \cdot \theta \cdot \mathcal{S} \cdot \mathcal{D} \cdot \mathcal{T} / M$$

где ε - эффективность детектора, g - абсолютный выход гамма-квантов; $6,02 \cdot 10^{23}$ - число Авогадро; θ - природная распространенность нуклида; M - атомный вес элемента; \mathcal{S} , \mathcal{D} и \mathcal{T} - временные факторы насыщения, распада и измерения.

$$\mathcal{S} = 1 - \exp(-\lambda t_1), \mathcal{D} = \exp(-\lambda t_2), \mathcal{T} = (1 - \exp(-\lambda t_3)) / \lambda$$

λ - постоянная распада, t_1 - время облучения, t_2 - время между облучением и измерением (выдержка образца) и t_3 - время измерения.

Плотности потоков определяются с помощью двух мониторов, облученных вместе с образцом. После переобозначения формулы (I) получаем систему линейных уравнений с двумя неизвестными:

$$\begin{aligned} S_1' &= a_1 \cdot F_1 + b_1 F_2 \\ S_1'' &= a_2 F_1 + b_2 F_2 \end{aligned}$$

Введем обозначения

$$\Delta = \begin{vmatrix} a_1 & b_1 \\ a_2 & b_2 \end{vmatrix}, \quad \Delta_1 = \begin{vmatrix} S_1' & b_1 \\ S_1'' & b_2 \end{vmatrix}, \quad \Delta_2 = \begin{vmatrix} a_1 & S_1' \\ a_2 & S_1'' \end{vmatrix}$$

Система имеет следующие решения: $F_1 = \Delta_1 / \Delta$, $F_2 = \Delta_2 / \Delta$, когда определитель системы не равен нулю ($\Delta \neq 0$), а при $\Delta = 0$ выполнение программы прекращается.

Плотности потоков нейтронов через эталон соответственно равны: $F_1' = k_1 \cdot F_1$, $F_2' = k_2 \cdot F_2$, где k_1 , k_2 означают изменения потоков в зависимости от геометрии облучения образца и эталона,

Если образцы облучены с кадмием, то активация данного нуклида обусловлена его резонансным интегралом и расчеты проводятся по формуле (I) при $\lambda = 0$.

1.2. Методы анализа.

Относительный метод.

В программе заложена следующая формула из уравнения (I):

$$m = m' \cdot (S_1 / S_1') \cdot (D_1' F_1' / D_1 F_1) \cdot \alpha \quad (2)$$

Здесь коэффициент α зависит от условий облучения и принимает значения k_2 (с Cd), или $(\lambda \cdot k_1 + \lambda' \cdot k_2) / (\lambda + \lambda')$.

Величины, помеченные штрихом, относятся к эталону. Остальные величины относятся к определяемому элементу.

Методика внутреннего стандарта.

В ряде случаев целесообразно применять метод внутреннего стандарта. Успех применения методики внутреннего стандарта зависит от точности, с которой известны ядерно-физические данные нуклидов элемента-стандарта и определяемого элемента. В настоящее время эти данные (сечение поглощения тепловых нейтронов /3/, резонансные интегралы активации /4/, квантовые выходы излучения /8/) определены с достаточной точностью для большинства химических элементов. Применение методики внутреннего стандарта рассмотрено в работах Дж.Кима, Г.Борна и др. /1,2/.

В описываемой программе внутренним стандартом служит элемент, содержание которого определено относительным методом с помощью внешнего эталона. Для нуклидов $m \neq m'$ содержание элемента определяется по формуле:

$$m = m' \cdot (S'_f / S_f) \cdot (\beta' \alpha' / \beta \alpha) \cdot \varepsilon \quad (3)$$

Для нуклидов $m = m'$ по формуле:

$$m = m' \cdot (S'_f / S_f) \cdot (\beta' D' T' / \beta D T) \cdot \varepsilon \quad (4)$$

Здесь ε коэффициент, зависящий от условий облучения. Он принимает значения λ'_0 / λ_0 ($\leq C_d$), или $(\sigma_0 \cdot (1 + \eta')) / (\sigma_0 (1 + \eta))$ в формуле (3). Этот коэффициент в формуле (4) $\varepsilon = 1$. Величины, помеченные штрихом, относятся к элементу-стандарту.

А.Альян и др. /1/ рекомендуют при использовании методики внутреннего стандарта разделять все определяемые элементы на две группы. Первая группа должна включать элементы, для которых выполняется соотношение $\sigma_0 > \lambda_0$; стандартом здесь может служить элемент этой же группы (например, S_c).

Вторая группа объединяет элементы, для которых выполняется соотношение $\lambda_0 > \sigma_0$; стандартный элемент (например, Au или Co)

также должен входить в эту группу. В программе автоматически разделяются все определяемые элементы на две группы в зависимости от группы элемента-стандарта.

Моностандартный метод.

В этом методе с помощью внешних эталонов определяются все интересующие элементы в исследуемом образце. Содержание элемента выражается аналогично формулам (3) и (4), где величины, помеченные штрихом относятся к моностандартному элементу. Коэффициент α в формуле (3) принимает значения $k_2 \cdot \rho'_0 / \rho_0$, или $(\delta'_0 \cdot (k_1 \cdot f + k_2 \cdot \eta')) / (6_0 \cdot (f + \eta))$, в формуле (4) он принимает значения k_2 , или $(k_1 \cdot f + k_2 \cdot \eta') / (f + \eta)$.

Расчетный метод.

Расчеты проводятся по формуле (I). Когда облучение производится с кадмием, коэффициент f принимает нулевое значение в формуле (I).

Для всех расчетов масс оценивается погрешность масс согласно /9/.

I.3. Структура программы **TENAA**.

Программа включает в себя головную программу и 7 подпрограмм. Головная программа **TENAA** выполняет следующие операции:

- вызывает подпрограмму **INP** для иницирования необходимых файлов ввода-вывода;

- вводит команды на выполнение определенных операций и соответствующие числовые величины;

- вызывает подпрограмму **CAL** для перевода календарного времени, когда присутствуют временные команды среди вводимых команд;

- передает управление в подпрограмму **START**.

Подпрограмма **START** выполняет основные операции и вызывает следующие подпрограммы:

- подпрограмму **LIV** для чтения библиотеки,
- подпрограмму **MAT** для подбора соответствующей энергии гамма-линии,
- подпрограмму **TIMP** для вычисления временных факторов эксперимента,
- подпрограмму **MASS** для вычисления масс элементов методами акти-вационного анализа.

При сборке программы использована оверлейная структура.

I.4. Для работы программы **ТВНАА** необходимы три файла:

- 1) Входной файл - создается пользователем и содержит данные (в бесформатном виде), относящиеся к определенным элементам. Расчет масс можно проводить одновременно для 20 элементов.
- 2) Командный файл - создается пользователем и содержит команды на выполнение определенных операций и соответствующие параметры и данные (в бесформатном виде). С помощью параметров выбираются режимы обработки (случай облучения без кадмия, с кадмием, методы обработки и т.д.) - см. инструкцию программы **ТВНАА.TXT**.

Третий файл содержит библиотеку. В таблице № I приведен пример данных для нескольких нуклидов: символ элемента; период полураспада нуклида /3/; число гамма-линий, энергии и выходы /8/ этих гамма-линий размещаются в следующих строках; изотопная распространенность /3/; атомный вес; сечение захвата тепловых нейтронов с ошибкой /3/; и отношение резонансного интеграла к сечению тепловых нейтронов с ошибкой /4/.

Результатом программной обработки является содержание элементов в грамм/грамм и другая дополнительная информация.

2. САМРОЗА - программа для идентификации нуклидов.

Одной из целей настоящей работы была доработка программы **САМРОЗ** для идентификации гамма-линий нуклидов, полученных с помощью различных программ.

2.1. Созданная библиотека нуклидов для идентификации содержит данные о 511 нуклидах:

- продукты нейтронного захвата,
- продукты деления,
- нейтронно-дефицитные нуклиды,
- естественные радиоактивные нуклиды,
- другие нуклиды.

Данные набраны ручным образом и занимают на диске 4 файла с названиями: **GL.TXT**, **GM.TXT**, **GN.TXT** и **ПУСТАВ.TXT** (данные о нуклидах расположены по файлам в соответствии с их периодами полураспада: в первом файле - до 30 мин., во втором - с 30 мин. до 33 час., в третьем - больше, чем 33 час. Четвертый файл содержит символы и периоды полураспада нуклидов). Файлы объединяются специальным индексом.

С помощью программы **SAMPLIB** можно выбирать информацию из этих 4 файлов для программы идентификации нуклидов. С помощью программы **LIST** имеется также возможность получать листинг библиотеки в удобном формате. В связи с подключением новой библиотеки сделаны изменения в подпрограммах **LIBRAR**, **MATRIX**, **IDENT**, **SAM3**.

2.2. Изменена входная часть программы **SAMPO3** для чтения таблицы результатов программы **ACTIV** и файла, созданного пользователем (в бесформатном виде). Это изменение отражено в подпрограммах **SAM3**, **INPUT2**, **REDA**.

2.3. Идентификации проводятся по следующей схеме:

- а) Выбирается кандидат по совпадению энергии гамма-лучей с библиотечной энергией.
- б) Для отобранного кандидата:
 - нумеруется гамма-линия с уменьшением по интенсивности;
 - ведется поиск других линий, начиная с самой интенсивной линии;

- выдается информация при отсутствии трех самых интенсивных линий в измеренном интервале энергии;
 - проводится тест по энергии;
 - проводится тест по периоду полураспада.
- в) Кандидат проверяется по уровню значимости (нужно исключить кандидата или оставить в рабочей матрице /5,6/). Построенная матрица решается методом наименьших квадратов.

2.4. При сборке программы использована следующая оверлейная структура:

```
.ROOT SAM3-IDENT-*(INPUT2,OV1,OV2)
OV1: .FCTR ORDER-*(LIBRAR,MATRIX-ORDER,INTRF,GLSQ3,DIAG3,CORR)
OV2: .FCTR REBA-CALEND
      .END
```

2.5. Для работы программы **SAMPO3A** необходимы три файла:

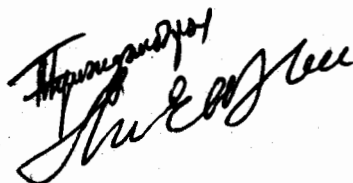
- 1) Входным файлом могут служить выходные файлы программ **ACTIV**, **SAMPO-80** и другие файлы, созданные пользователями на диске для идентификации своих данных.
- 2) Командный файл, содержащий команды для работы программы /5,6/.
- 3) Библиотека нуклидов **LIBR1.TXT**, **SAMLIB.TXT**.

Результат идентификации печатается на бумаге.

Заключение.

В результате этой работы, на основе уже существующих программ для обработки спектров гамма-лучей и разработанных авторами программ, обработка данных для нейтронно-активационного анализа при (n, γ) -реакции (рис. I) стала автоматизированной.

Авторы благодарны Г.Патцой, Р.Хоролжаву и Ш.Гэрбишу за полезные обсуждения.



Литература:

1. A. Alian, H. J. Born, J. I. Kim. *J. Radioanal. Chem.* 1973, v. 15, p. 535.
2. J. I. Kim, H. J. Born. *J. Radioanal. Chem.* 1973, v. 13, p. 427.
3. R. Sher. *Handbook on nuclear activation cross-section*, IAEA, Vienna (1971).
4. R. Van, Der Linden, F DE CORTE, J. Hoste. *Nuclear data in science and technology*, 1973, v. 2, p. 241.
5. M. J. Koskelo, P. A. Aarnio, J. T. Routti. *Comp. Phys. Commun.* 1981, v. 24, p. 11.
6. M. J. Koskelo, P. A. Aarnio, J. T. Routti. *Nucl. Instr. and Meth.* 190 (1981), p. 89.
7. V. B. Zlokazov. *Comp. Phys. Commun.* 1982, v. 28, p. 27.
8. Н. Г. Гусев, П. П. Дмитриев. *Квантовое излучение радиоактивных нуклидов Справочник*, Атомиздат М. 1977.
9. В. Т. Тустановский. *Оценка точности и чувствительности активационного анализа*, Атомиздат М. 1976.

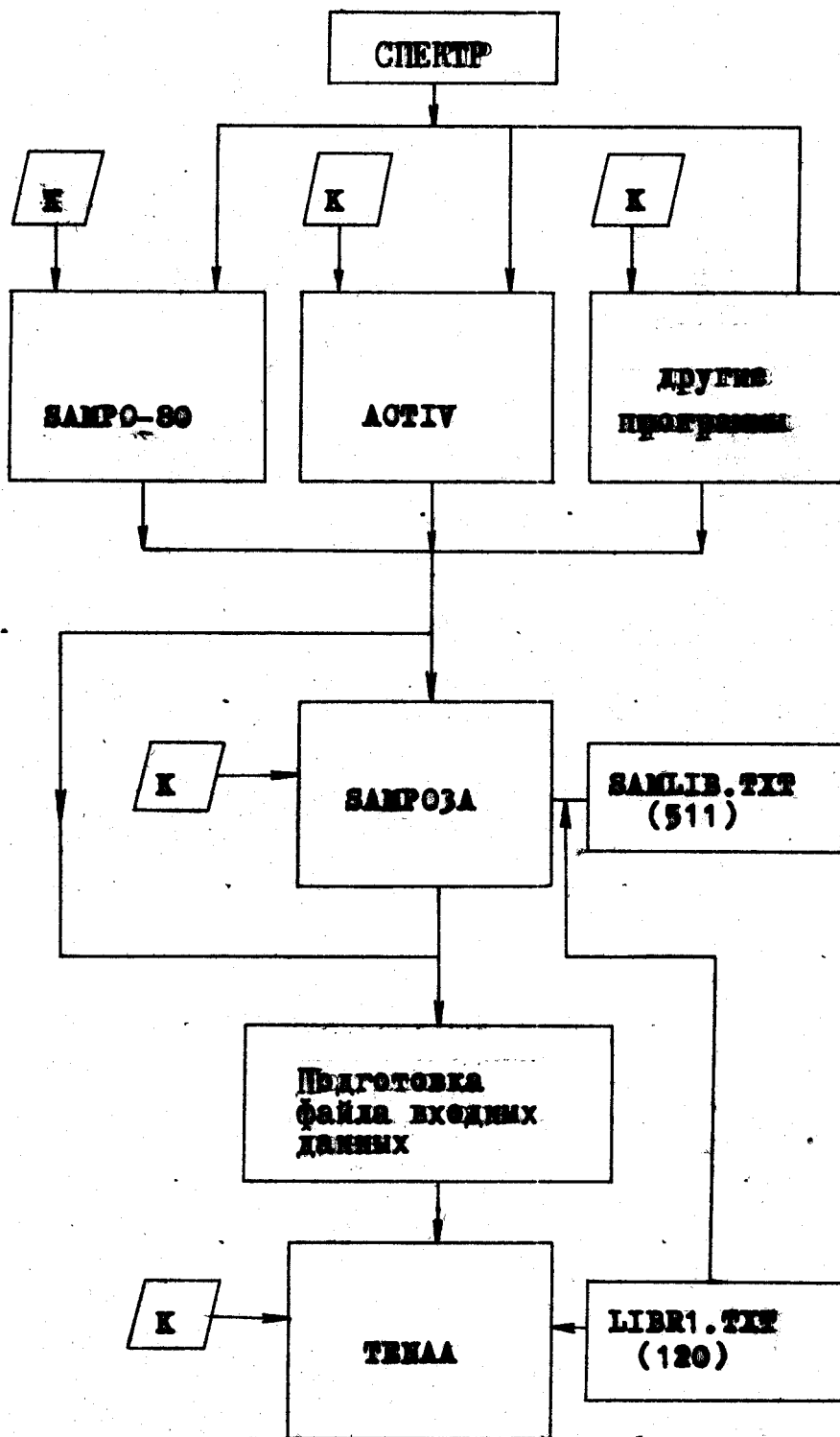


Рис. 1

Подписи к рисункам и таблицам

Рис. I. Блок связи между программами для активационного анализа существующий в ЛНФ. К- Команды для данной программы.

Таблица №I. Пример библиотеки нуклидов для идентификации и количественного расчёта.

