

**МОСКОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ  
имени М.В. ЛОМОНОСОВА**

---

**НАУЧНО-ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ИНСТИТУТ  
ЯДЕРНОЙ ФИЗИКИ имени Д.В. СКОБЕЛЬЦЫНА**

Б.С. Ишханов, С.Ю. Трощев

**МОДЕЛИРОВАНИЕ ГАММА-АКТИВАЦИОННЫХ ЭКСПЕРИМЕНТОВ**

Препринт НИИЯФ МГУ № 2012-3/881

Москва, 2012 г.

**Б.С. Ишханов, С.Ю. Трощев**

**e-mail: [sergey.troschiev@googlemail.com](mailto:sergey.troschiev@googlemail.com)**

## **МОДЕЛИРОВАНИЕ ГАММА-АКТИВАЦИОННЫХ ЭКСПЕРИМЕНТОВ**

Препринт НИИЯФ МГУ № 2012-3/881

### **Аннотация**

В работе описывается разработанный программный комплекс для моделирования эксперимента по исследованию фотонуклонных реакций методом измерения остаточной активности. Подробно описывается расчет: сечений и выходов фотонуклонных реакций, количества ядер-продуктов фотонуклонных реакций и продуктов их распада, спектра гамма-квантов, образующихся в облученном образце, и спектра, измеряемого детектором. Приводится сравнение результатов моделирования с результатами реальных экспериментов.

**B.S. Ishkhanov, S.Y. Troschiev**

## **SIMULATION OF THE GAMMA-ACTIVATION EXPERIMENTS**

Preprint MSU SINP N 2012-3/881

### **Abstract**

The paper describes a software package designed to simulate an experiment to study photonucleon reactions by measuring the residual activity. The calculations of the cross sections and yields of photonucleon reactions, the number of product nuclei photonucleon reactions and their decay products, the spectrum of gamma rays produced in the irradiated sample, and the spectrum measured by the detector are describes in detail. A comparison of simulation results with the results of real experiments is given.

© Б.С. Ишханов, С.Ю. Трощев

© НИИЯФ МГУ, год, <http://www.sinp.msu.ru>

## Оглавление

Оглавление.....	3
1 Введение.....	3
2 Моделирование гамма-активационного эксперимента.....	5
2.1 Моделирование генерации тормозного спектра.....	6
2.2 Моделирование сечений фотонуклонных реакций.....	7
2.2.1 TALYS.....	7
2.2.2 Комбинированная модель.....	9
2.3 Моделирование накопления и распада изотопов.....	12
2.3.1 Факторы, влияющие на изменение количества ядер различных изотопов в ходе эксперимента.....	12
2.3.2 Системы уравнений, описывающие динамику изменения количества ядер изотопов в образце во время облучения и после его окончания.....	14
2.4 Модель детектора гамма-квантов.....	17
3 Работа с программным комплексом.....	22
4 Моделирование реальных экспериментов.....	27
4.1 Спектр изотопа кобальта $^{60}\text{Co}$ .....	27
4.2 Спектр изотопа европия $^{152}\text{Eu}$ .....	29
4.3 Облучение изотопа золота $^{197}\text{Au}$ .....	35
4.4 Облучение изотопа иода $^{127}\text{I}$ .....	38
4.5 Анализ результатов.....	40
5 Заключение.....	41
Литература.....	41

## 1 Введение

В НИИЯФ МГУ проводятся эксперименты по исследованию фотонуклонных реакций в области ДГР с помощью гамма-активационной методики. Схема эксперимента показана на рис. 1. Пучок электронов из разрезного микротрона RTM-70 [1] с энергией  $E^{\max}$  попадает на тормозную мишень, в которой генерируется тормозное гамма-излучение. Сразу за тормозной мишенью располагается образец исследуемого вещества.

Под действием тормозных гамма-квантов в ядрах образца возбуждается ДГР, который затем распадается с испусканием одного или нескольких нуклонов. В результате распада ДГР и вылета нуклонов в образце образуются химические элементы и изотопы, которых

изначально в нем не было. В частности, в результате некоторых реакций образуются радиоактивные изотопы.

Чаще всегда в ходе облучения в образце образуются бета-радиоактивные изотопы. При распаде таких ядер дочернее ядро с различной вероятностью может образовываться как в основном, так и в различных возбужденных состояниях. Возбуждение снимается посредством переходов между возбужденными состояниями с испусканием гамма-квантов. Спектры гамма-квантов, рождающихся при бета-распадах ядер, уникальны для каждого изотопа и хорошо исследованы [2]. Пример образования и распада ядра радиоактивного изотопа  $^{197}\text{Hg}$  с испусканием гамма-квантов с энергиями 77, 191 и 268 кэВ в результате фотонуклонной реакции  $^{198}\text{Hg} + \gamma \rightarrow ^{197}\text{Hg} + n$  (более краткий вариант записи –  $^{198}\text{Hg}(\gamma, n)^{197}\text{Hg}$ ) приведен на рис. 2.

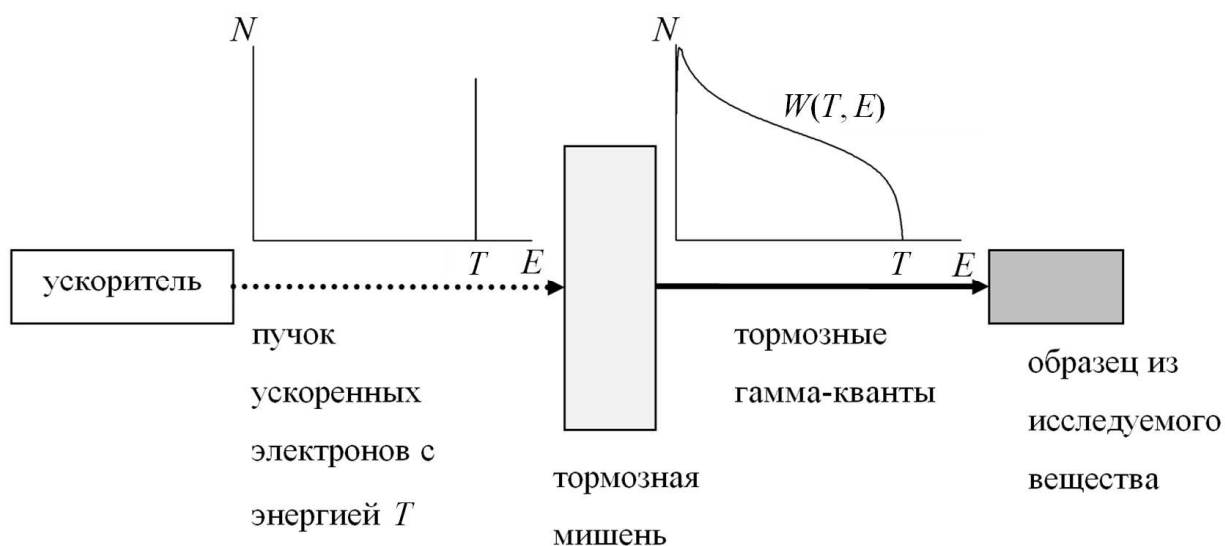


Рис. 1. Схема эксперимента на пучке тормозных гамма-квантов. На рисунке изображены спектры электронов на выходе из ускорителя и тормозных гамма-квантов.

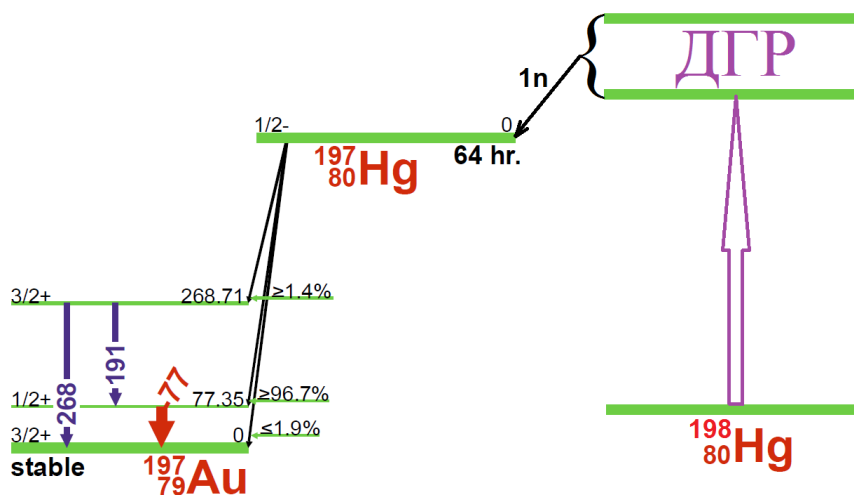


Рис. 2. Образование и распад радиоактивного изотопа  $^{197}\text{Hg}$  в реакции  $^{198}\text{Hg}(\gamma, n)^{197}\text{Hg}$ .

После облучения спектр гамма-квантов наведенной активности образца измеряется детектором из сверхчистого германия. В измеренном спектре наблюдаются максимумы, образующиеся при регистрации гамма-квантов наведенной активности. Идентификация максимумов проводится по их энергии и по скорости их уменьшения в спектрах остаточной активности. Пример измеренного спектра с указанием максимумов, соответствующих распаду образовавшегося в ходе фотонуклонной реакции  $^{198}\text{Hg} + \gamma \rightarrow ^{197}\text{Hg} + n$  изотопа  $^{197}\text{Hg}$ , приведен на рис. 3.

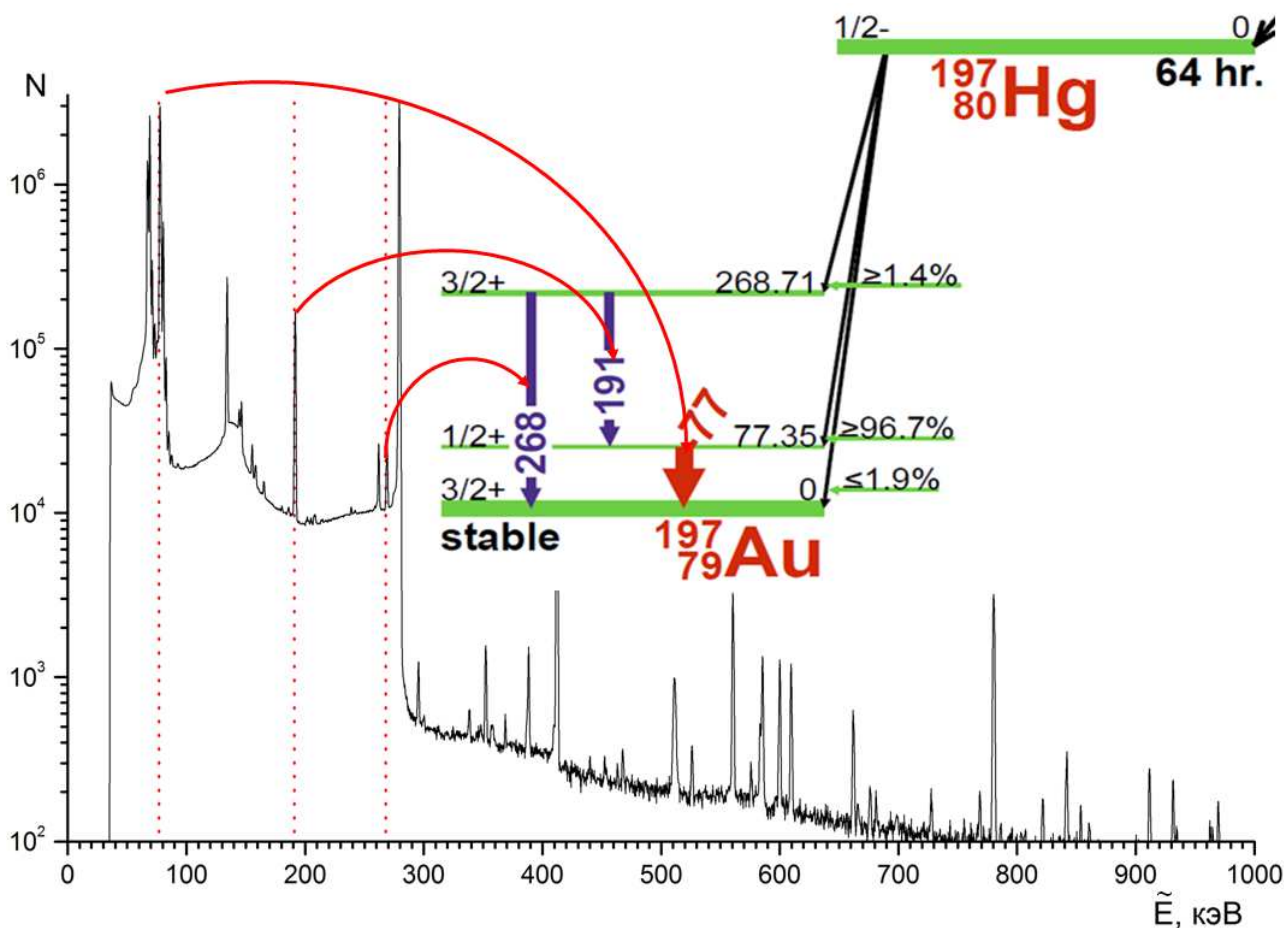


Рис. 3. Измеренный спектр остаточной активности образца естественной смеси Hg. Вертикальными пунктирными линиями обозначены максимумы в спектре, соответствующие бета-распаду радиоактивного изотопа  $^{197}\text{Hg}$ , образовавшегося в реакции  $^{198}\text{Hg}(\gamma, n)^{197}\text{Hg}$ .

Для более эффективного планирования эксперимента и анализа имеющихся результатов был создан программный комплекс, моделирующий гамма-активационный эксперимент.

## 2 Моделирование гамма-активационного эксперимента

Моделирование гамма-активационного эксперимента проводится последовательно в несколько шагов, соответствующих различным этапам эксперимента.

В начале моделирования задается исходный изотопный состав образца  $\{N_i\}$  ( $i=1..n_{init}$ , где  $n_{init}$  – количество стабильных изотопов в составе образца), где  $N_i$  – количество ядер изотопа  $i$  в образце.

В качестве материала образца можно задать химический элемент, например, ртуть Hg. В таком случае в качестве изотопного состава образца используется естественная смесь изотопов указанного элемента. В расчетах используется содержание отдельных изотопов в естественной смеси, автоматически получаемое из базы данных [3] при помощи интерфейса [2].

Можно также задать конкретный изотоп, например,  $^{198}\text{Hg}$ . В таком случае образец в начале расчета будет содержать только один изотоп.

Для расчета образования и распада ядер-продуктов фотонуклонных реакций в образце необходимо знать выходы фотонуклонных реакций на исходных изотопах, в результате которых образуются эти продукты. Выход реакции на изотопе  $i$  с образованием изотопа  $f$   $Y_i^f(T)$ , связан с тормозным спектром  $W(T, E)$  и сечением соответствующей реакции  $\sigma_i^f(E)$  соотношением

$$Y_i^f(T) = G_i \int_0^T \sigma_i^f(E) W(T, E) dE. \quad (1)$$

Здесь  $G_i$  – нормировочный множитель, учитывающий форму облучаемого образца, интенсивность потока гамма-квантов и содержание изотопа  $i$  в исследуемом образце. Удельный выход реакции  $y_i^f(T)$  связан с выходом  $Y_i^f(T)$  выражением  $y_i^f(T) = Y_i^f(T)/N_i$ .

## **2.1 Моделирование генерации тормозного спектра**

Для расчета выходов фотонуклонных реакций  $Y_i^f(T)$  при помощи пакета библиотек GEANT4 [4] была создана база данных спектров тормозных фотонов, падающих на образец во время облучения. База содержит тормозные спектры  $W(T, E)$  для пучков фотонов, рождаемых в вольфрамовой тормозной мишени толщиной 2.5 мм электронами с энергиями  $T$  от 8 до 70 МэВ с шагом 1 МэВ. Разрешение по энергии фотонов  $E$  составляет 10 кэВ.

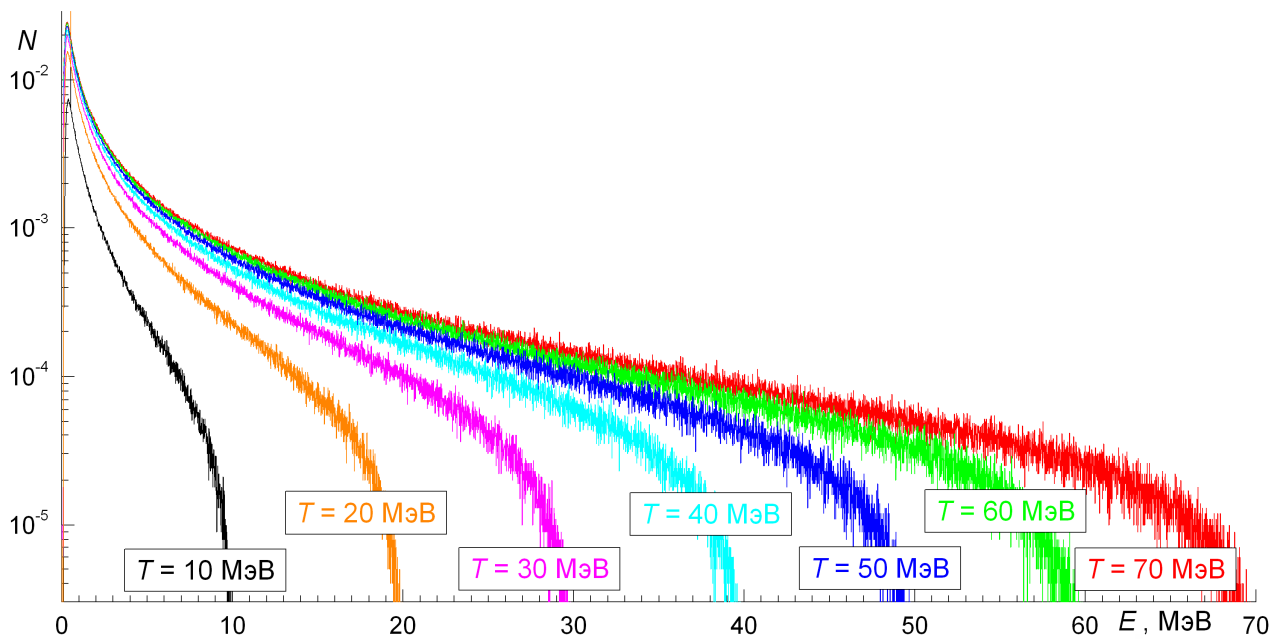


Рис. 4. Тормозные спектры  $W(T, E)$  при различных значениях  $T$  от 10 до 70 МэВ.

## 2.2 Моделирование сечений фотонуклонных реакций

На сегодня разработаны модели ДГР, описывающие не только процесс формирования резонанса, но и перераспределение энергии поглощенного гамма-кванта между нуклонами и последующий распад резонанса с испусканием одного или нескольких нуклонов. Ниже приведен обзор двух таких моделей, каждая из которых имеет свои сильные и слабые стороны.

### 2.2.1 TALYS

Программа TALYS [5, 6] была создана для моделирования взаимодействия различных элементарных частиц с атомными ядрами. В программе TALYS сечение фотопоглощения в области ДГР описывается как сумма кривых Лоренца, соответствующих различным каналам возбуждения атомного ядра:

$$\sigma_{GDR}(E) = \sum_i \sigma_i \frac{(E\Gamma_i)^2}{(E^2 - E_i^2)^2 + E^2\Gamma_i^2} \quad (2)$$

где  $\sigma_i$  – величина компоненты сечения в максимуме,  $E_i$  – положение максимума,  $\Gamma_i$  – ширина максимума. Суммирование в (2) ведется по компонентам, которые формируют ДГР. Для тяжелых ядер учитывается форма атомного ядра. В сферических ядрах формируется одно коллективное когерентное состояние. В деформированных эллипсоидальных ядрах

формируется две компоненты резонанса, соответствующие колебаниям ядерной материи вдоль большой и малой осей ядерного эллипсоида.

В программе TALYS используется обширная экспериментальная база данных [7], включающая в себя параметры ДГР  $\sigma_{E1}$ ,  $E_{E1}$ ,  $\Gamma_{E1}$ . Для ядер, параметры ДГР которых отсутствуют в базе данных, они рассчитываются на основе теоретических моделей аппроксимации ДГР:

$$\sigma_{E1} = 1.2 \frac{12NZ}{A\pi\Gamma_{E1}} \text{ мб}, E_{E1} = 31.2A^{-1/3} + 20.6A^{-1/6} \text{ МэВ}, \Gamma_{E1} = 0.026E_{E1}^{1.91} \text{ МэВ}. \quad (3)$$

Кроме дипольных  $E1$  колебаний учитываются также возбуждения более высокой мультипольности, в частности, изоскалярные квадрупольные  $E2$  возбуждения, следующие по интенсивности после ДГР. Параметры изоскалярного электрического квадрупольного резонанса для всех ядер рассчитываются как

$$\sigma_{E2} = \frac{0.00014Z^2E_{E2}}{A^{1/3}\Gamma_{E2}} \text{ мб}, E_{E2} = 63A^{-1/3} \text{ МэВ}, \Gamma_{E2} = 6.11 - 0.012A \text{ МэВ}. \quad (4)$$

В программе TALYS не учитываются изовекторные квадрупольные возбуждения [8]. Расчет вкладов электрических и магнитных колебаний более высокой мультипольности описан в [9].

В области энергии за гигантским резонансом  $E > 25$  МэВ полное сечение фотопоглощения  $\sigma_{abs}(E)$  рассчитывается как сумма высокоэнергетической части ДГР  $\sigma_{GDR}(E)$  и квазидейтронного механизма  $\sigma_{QD}(E)$ :

$$\sigma_{abs}(E) = \sigma_{GDR}(E) + \sigma_{QD}(E). \quad (5)$$

Квазидейтронный механизм проявляется в области энергии, в которой фотон эффективно взаимодействует с коррелированной протон-нейтронной парой в ядре. Расчет квазидейтронной компоненты  $\sigma_{QD}(E)$  основан на аппроксимации [10]:

$$\sigma_{QD}(E) = L \frac{NZ}{A} \sigma_d(E) f(E)$$

$$\sigma_d(E) = 61.2 \frac{(E - 2.224)^{3/2}}{E^3}$$

$$\text{Для } E < 20 \text{ МэВ} \quad f(E) = e^{-73.3/E} \quad (6)$$

$$\text{Для } 20 < E < 140 \text{ МэВ} \quad f(E) = 3.3714 \cdot 10^{-2} - 9.8343 \cdot 10^{-3} E + 4.1222 \cdot 10^{-2} E^2 - 3.4762 \cdot 10^{-6} E^3 + 9.3537 \cdot 10^{-2} E^4$$

$$\text{Для } E > 140 \text{ МэВ} \quad f(E) = e^{-24.2348/E}$$

Здесь  $L$  – так называемый параметр Левинджера, равный 6.5.



В результате поглощения гамма-кванта атомное ядро переходит в возбужденное состояние. Предравновесные процессы в возбужденном ядре рассчитываются в рамках двухкомпонентной экситонной модели [11]. В этой модели возбуждение ядра описывается протонными  $n_\pi = p_\pi + h_\pi$  и нейтронными  $n_\nu = p_\nu + h_\nu$  экситонами. В программе TALYS установлено ограничение на количество экситонов: считается, что, когда оно достигает шести, ядро переходит в равновесную стадию – в этом случае используется модель составного ядра. Эмиссионная скорость распада рассчитывается при помощи соотношений, полученных Клайном и Бланом [12] с использованием принципа детального равновесия, адаптированного в [13] для двухкомпонентной экситонной модели.

Таким образом для расчета сечений в программе TALYS нужно задать единственный параметром, описывающий возбуждение ядра в используемой модели ДГР – энергию поглощенного гамма-кванта  $E$ , которая перераспределяется между нуклонами ядра и на каждом этапе диссипации энергии рассчитывается испускание протона или нейтрона. Конкуренция между вылетом протона и нейтрона определяется энергией частицы и числом открытых каналов распада. Возбуждение состояний с различными значениями изоспина  $T_< = T_0 = |N - Z|/2$  и  $T_> = T_0 + 1$ , где  $T_0$  – изоспин основного состояния ядра, и особенности распада этих состояний с испусканием протонов и нейтронов в программе TALYS не рассматриваются.

В программе TALYS анализируются все происходящие в ядре реакции и переходы между состояниями, что позволяет определять не только полные сечения фотонуклонных реакций, но и сечения реакций с образованием конкретных состояний, в частности, изомерных.

### **2.2.2 Комбинированная модель**

Комбинированная модель была создана в НИИЯФ МГУ специально для описания фотоядерных реакций на средних и тяжелых ядрах ( $A > 50$ ) от нуклонного порога до  $E = 140$  МэВ [14, 15, 16].

Электрические дипольные колебания возникают как отклик нуклонной системы на действие переменного электрического поля, которое приводит к возникновению в ядре индуцированного дипольного момента (вибрационного дипольного поля). Вибрационное поле может генерировать кванты возбуждений, характеризуемые изоспином  $T = 1$  и проекцией изоспина  $T_z = 0, \pm 1$ . Моды  $T_z = \pm 1$  отвечают зарядово-обменным колебаниям нуклонной системы, при которых один нейтрон превращается в протон или наоборот.

Колебания с  $T_z = 0$  соответствуют обычному фотопоглощению. Состояние  $|\Phi_0\rangle$ , отвечающее фотопоглощению, содержит компоненты с изоспинами  $T_< \equiv T_0$  и  $T_> \equiv T_0 + 1$ , где  $T_0$  – изоспин основного состояния ядра:

$$|\Phi_0\rangle = g_0(T_0)|\Phi_0(T_0T_0)\rangle + g_0(T_0 + 1)|\Phi_0(T_0 + 1T_0)\rangle, \quad (7)$$

где  $|\Phi_0(T_0T_0)\rangle$  и  $|\Phi_0(T_0 + 1T_0)\rangle$  – нормированные волновые функции, описывающие  $T_<$ - и  $T_>$ -пики, на которые расщепляется сечение фотопоглощения.  $g_0(T_0)$  и  $g_0(T_0 + 1)$  определяют вероятности возбуждения двух изоспиновых ветвей резонанса и связаны друг с другом соотношением

$$g_0^2(T_0) + g_0^2(T_0 + 1) = 1. \quad (8)$$

Сечение фотопоглощения имеет три компоненты, связанные с формой ядра, так как имеются три независимых направления для пространственных колебаний. В сферических ядрах различные направления колебаний энергетически вырождены. В деформированных ядрах это вырождение снимается. В КМ рассматриваются кроме сферических аксиально-симметричные ядра, для которых следует различать колебания вдоль оси симметрии ядра 3 и перпендикулярно к ней (вдоль осей 1 и 2).

Параметрами полумикроскопической модели фотопоглощения являются одночастичные энергии  $\varepsilon_\alpha$  состояний  $|\alpha\rangle$  и константы диполь-дипольных сил, отвечающие колебаниям вдоль и перпендикулярно оси ядра. Для расчета одночастичных состояний используется потенциал Нильссона [17]. Единственным свободным параметром модели является параметр деформации  $\delta$ , связанный с параметром квадрупольной деформации ядра  $\beta_2$ , который обычно может быть оценен из экспериментальных данных об электрических статических квадрупольных моментах [18] либо вычислен теоретически [19].

Таким образом, в комбинированной модели сечение фотопоглощения на средних и тяжелых ядрах аппроксимируется суммой четырех лоренцевых кривых, отвечающим дипольным возбуждениям ядер с изоспином  $T_< = T_0 = |N - Z|/2$  и  $T_> = T_0 + 1$  с нейтрон-протонными колебаниями вдоль и перпендикулярно оси симметрии ядра:

$$\sigma_{GDR}(E) = \sum_T \sum_s \sigma_{T,s} \frac{(E \Gamma_{T,s})^2}{(E^2 - E_{T,s}^2)^2 + E^2 \Gamma_{T,s}^2}, \quad (9)$$

то есть, в отличие от программы TALYS, наряду с расщеплением ДГР, обусловленным деформацией ядра, учитывается величина изоспинового расщепления ДГР.

Параметры кривых Лоренца: положение максимума  $E_{T,s}$ , величина сечения в максимуме  $\sigma_{T,s}$  и ширина резонанса  $\Gamma_{T,s}$  определяются в рамках полумикроскопической модели ДГР так, чтобы интегральное сечение ДГР удовлетворяло дипольному правилу сумм:

$$\int_0^{\infty} \sigma_{GDR}(E) dE = (1 + \alpha) 60 \frac{NZ}{A} \text{ [МэВ мбн]}, \quad (10)$$

где  $\alpha$  – безразмерный параметр, учитывающий влияние обменных токов на силу дипольных переходов.

Для расчета квазидейтронной компоненты фотопоглощения в комбинированной модели, как и в программе TALYS, используется аппроксимация [10].

Предравновесные процессы рассчитываются в рамках однокомпонентной экситонной модели. В модели предполагается, что после поглощения гамма-кванта образуется входное состояние с  $m = 2$  для дипольного  $1p1h$ -возбуждения или с  $m = 4$  для квазидейтронного  $2p2h$ -возбуждения экситонами. Это первичное возбуждение распадается либо вследствие эмиссии возбужденного нуклона (переход  $m \rightarrow m - 1$ ), либо, что более вероятно, вследствие перехода  $m \rightarrow m + 2$  к более сложной частично-дырочной конфигурации, вызванного остаточным двухчастичным взаимодействием. Затем процесс повторяется. Образовавшееся  $m = m + 2$  или  $m = m - 1$  экситонное состояние либо испускает нуклон в непрерывный спектр ( $m = 1$ ), либо совершает внутриядерный переход  $m \rightarrow m + 2$  и т.д. В результате внутриядерных ( $m \rightarrow m + 2$ )-переходов энергия возбуждения составной системы распределяется по все большему и большему числу экситонов. Вместе с тем возможны и обратные переходы  $m \rightarrow m - 2$ , обусловленные аннигиляцией одной из частично-дырочных пар вследствие передачи ее энергии какой-нибудь частице или дырке. Эти переходы играют малую роль, пока общее количество частиц и дырок в системе невелико. Однако с увеличением их числа вероятность таких переходов постепенно возрастет и, в конце концов, становится равной вероятности прямых переходов. В этот момент система достигает состояния теплового равновесия либо в исходном, либо в одном из остаточных ядер, после чего начинается сравнительно длительный процесс испарения нуклонов, который описывается в рамках испарительной модели. Предравновесная эмиссия нуклонов сходит на нет задолго до установления равновесия (еще на первых стадиях реакции), поэтому в комбинированной модели обратными переходами пренебрегают.

Вследствие эмиссии нуклонов экситонные состояния образуются в различных ядрах. Для нахождения плотностей вероятности образования ядра в возбужденном состоянии  $U$

после вылета  $dp$  протонов и  $dn$  нейтронов используются ферми-газовыми плотности конечных состояний [15].

Развитие предравновесного каскада завершается образованием равновесного состояния либо в исходном, либо в одном из остаточных ядер. Процессы в ядре, достигшем теплового равновесия, рассчитываются в рамках испарительной модели.

## **2.3 Моделирование накопления и распада изотопов**

Как во время облучения образца пучком гамма-квантов, так и после облучения в образце происходят распады радиоактивных изотопов. Скорости и моды распадов абсолютного большинства радиоактивных изотопов известны с высокой точностью. Зная моды их распадов и начальный состав образца, можно составить список всех изотопов, образующихся в гамма-активационном эксперименте. Зная выходы многочастичных фотоядерных реакций и периоды полураспада образующихся изотопов, можно определить количество ядер любого из образующихся изотопов в любой момент времени, а также количество его распадов за любой промежуток времени.

### **2.3.1 Факторы, влияющие на изменение количества ядер различных изотопов в ходе эксперимента**

В ходе гамма-активационного эксперимента количество ядер  $N_i$  любого изотопа  $i$  в образце может меняться за счет четырех процессов.

Если рассматриваемый изотоп  $i$  нестабилен, то изменение количества ядер данного изотопа  $N_i$  за малый промежуток времени  $dt$ , обусловленное его распадом, равняется

$$\left( \frac{dN_i}{dt} \right)_{\text{распад}}^- = -\lambda_i N_i, \quad (11)$$

где  $\lambda_i$  - постоянная распада данного изотопа, которая может быть выражена через период полураспада  $T_{1/2}$  как  $\lambda_i = \frac{\ln 2}{T_{1/2}}$ .

Если в эксперименте образуется радиоактивный изотоп  $i$ , распадающийся на изотоп  $j$ , то количество ядер  $N_j$  увеличивается за счет таких распадов. Изменение количества ядер изотопа  $j$  за счет таких распадов выражается как

$$\left( \frac{dN_j}{dt} \right)_{\text{распад}}^+ = \sum_i \lambda_i^j N_i, \quad (12)$$

где  $N_i$  – число ядер изотопа  $i$ , а  $\lambda_i^j = \lambda_i W_i^j$  – постоянная его распада ( $W_i^j \in [0,1]$  – вероятность распада изотопа  $i$  на изотоп  $j$ .  $\lambda_i = \sum_j \lambda_i^j$ ). Суммирование ведется по всем изотопам  $i$ .

Если на изотопе  $i$  могут проходить фотонуклонные реакции, то при каждой такой реакции ядро изотопа  $i$  будет превращаться в ядро другого изотопа  $j$ . Такой процесс проходит лишь во время облучения образца пучком тормозных гамма-квантов. Изменение количества ядер изотопа  $i$  в результате каждой из таких реакций выражается как

$$\left( \frac{dN_i}{dt} \right)_{\text{gamma},j}^- = -y_i^j N_i, \quad (13)$$

где  $y_i^j$  – выход фотонуклонной реакции на изотопе  $i$  с образованием изотопа  $j$ . Полное изменение числа ядер изотопа  $i$  за счет всех фотонуклонных реакций на нем

$$\left( \frac{dN_i}{dt} \right)_{\text{gamma}}^- = -\sum_j y_i^j N_i. \quad (14)$$

Суммирование ведется по всем  $j$ .

Количество ядер изотопа  $j$  может увеличиваться за счет фотонуклонных реакций, в результате которых из ядер изотопов  $i$  получают ядра данного изотопа  $j$ . Изменение количества ядер изотопа  $j$  в результате каждой из таких реакций

$$\left( \frac{dN_j}{dt} \right)_{\text{gamma},i}^+ = y_i^j N_i. \quad (15)$$

Полное изменение числа ядер изотопа  $j$  за счет всех многочастичных фотоядерных реакций, приводящих к образованию ядер изотопа  $j$ ,

$$\left( \frac{dN_j}{dt} \right)_{\text{gamma}}^+ = \sum_i y_i^j N_i. \quad (16)$$

Учитывая четыре описанных процесса, получим выражение для полного изменения количества ядер изотопа  $i$  за малый промежуток времени облучения:

$$\begin{aligned} \frac{dN_i}{dt} = & \left( \frac{dN_i}{dt} \right)_{\text{распад}}^- + \left( \frac{dN_i}{dt} \right)_{\text{распад}}^+ + \left( \frac{dN_i}{dt} \right)_{\text{gamma},i}^- + \left( \frac{dN_i}{dt} \right)_{\text{gamma}}^+ = \\ & -\sum_j \lambda_i^j N_i + \sum_j \lambda_j^i N_j - \sum_j y_i^j N_i + \sum_j y_j^i N_j \end{aligned} \quad (17)$$

### 2.3.2 Системы уравнений, описывающие динамику изменения количества ядер изотопов в образце во время облучения и после его окончания

Все перечисленные выше факторы учитываются в системе дифференциальных уравнений с постоянными коэффициентами для количества ядер каждого из изотопов:

$$\frac{dN_i}{dt} = \sum_j \nu_j^i N_j, \quad (18)$$

где коэффициенты  $\nu_j^i$  определяются на основе постоянных распада  $\lambda_i^j$  участвующих в эксперименте изотопов и выходов многочастичных фотоядерных реакций  $y_i^j$ .

$$\text{При } i \neq j: \nu_j^i = \sum_j \lambda_j^i + \sum_j y_j^i.$$

(19)

$$\text{При } i = j: \nu_j^i = \nu_i^i = -\sum_j \lambda_i^j - \sum_j y_i^j.$$

Во время облучения образца гамма-квантами и во время последующего измерения спектра коэффициенты  $\nu_j^i$  различны, т.к. после окончания облучения фотонуклонные реакции в образце прекращаются. Это приводит к необходимости построения и решения двух независимых систем дифференциальных уравнений с постоянными коэффициентами. Начальные условия для той из них, которая описывает динамику изменения количества ядер во время облучения, определяются из начального состава образца. В качестве начальных условий второй системы уравнений используются количества ядер, полученные в результате решения первой системы уравнений.

Для построения и последующего решения систем уравнений необходимо, во-первых, построить список всех изотопов, участвующих в конкретном гамма-активационном эксперименте, и, во-вторых, определить коэффициенты системы, исходя из выходов фотонуклонных реакций и данных о распадах радиоактивных изотопов.

Построение списка изотопов происходит согласно блок-схеме, приведенной на рис. 5. В результате действия программы изначально пустой список заполняется изотопами, входящими в состав образца в начале эксперимента. Здесь и в дальнейшем при добавлении каждого изотопа программа автоматически считывает из базы данных [2] период полураспада изотопа и моды его распада.



Рис. 5. Схема построения списка изотопов.

Затем программа считывает из базы данных тормозной спектр  $W(T, E)$  для заданной энергии электронов  $T$  и сечения фотонуклонных реакций  $\sigma_i^f(E)$ , пороги которых  $B_i^f$  не превышают энергию пучка  $T$ , и рассчитывает выходы  $Y_i^f(T) = G_i \int_0^T \sigma_i^f(E) W(T, E) dE$  на всех изотопах, входящих в состав образца. На основе рассчитанных выходов в список изотопов добавляются все изотопы-продукты фотонуклонных реакций.

Затем на основе постоянных распада всех занесенных в список изотопов проверяется возможность образования новых изотопов из уже присутствующих в списке. В случае если таковые обнаруживаются, они добавляются в список и проверка осуществляется заново. Цикл продолжается до тех пор, пока все цепочки распадов не закончатся стабильными изотопами. После этого список изотопов считается построенным.

Исходя из полученного списка изотопов, строятся две системы линейных дифференциальных уравнений (18), описывающие изменение количества ядер всех изотопов, участвующих в эксперименте во время облучения образца и после окончания облучения.

Первая система уравнений решается методом Рунге [20] на временном интервале от 0 до  $t_1$ . Полученные значения  $N_i$  используются в качестве граничных условий при  $t = t_2$  для решения второй системы уравнений.

Количество распадов данного изотопа  $M_i$  за промежуток времени от  $t_1$  до  $t_2$  находится по формуле

$$M_i = \int_{t_1}^{t_2} \lambda_i N_i(t) dt, \quad (20)$$

где  $N_i(t)$  - зависимость количества ядер изотопа  $N_i$  от времени, полученная в результате решения систем дифференциальных уравнений.

Спектр гамма-квантов, образующихся в образце при распаде  $M_i$  ядер изотопа  $i$ , описывается как сумма:

$$w_i(E_\gamma) = M_i \sum_k \delta(E_\gamma - E_i^k) I_i^k, \quad (21)$$

где  $E_i^k$  - энергия гамма-линии, образующейся при распаде изотопа  $i$ ,  $I_i^k$  - ее интенсивность в процентах, а  $k$  - номер линии в базе данных. Программа автоматически получает величины  $E_i^k$  и  $I_i^k$  из базы данных [21].

Общий спектр всех фотонов, образующихся в образце за заданный интервал времени от  $t_1$  до  $t_2$ , описывается выражением:



$$w(E_\gamma) = \sum_i \sum_k \left( \int_{t_1}^{t_2} \lambda_i N_i(t) dt \right) \delta(E_\gamma - E_i^k) I_i^k. \quad (22)$$

## 2.4 Модель детектора гамма-квантов

Одним из основных элементов в методике активационного анализа является детектор Canberra GC3019, с помощью которого измеряется остаточная активность продуктов фотонуклонных реакций. При измерении спектра в ходе эксперимента по гамма-активационной методике обычно регистрируются гамма-кванты с энергиями  $E_\gamma$  от 100 кэВ до 3 МэВ. При регистрации гамма-квантов с такими энергиями в кристалле НрGe-детектора происходят следующие процессы:

- фотоэффект,
- комптоновское рассеяние,
- рождение электрон-позитронных пар (если  $E_\gamma$  выше порога рождения электрон-позитронной пары, равного 1.022 МэВ).

Во всех этих процессах энергия гамма-кванта или часть его энергии передается заряженной частице (электрону или позитрону), энергия которой измеряется в детекторе за счет вызываемой ею ионизации.

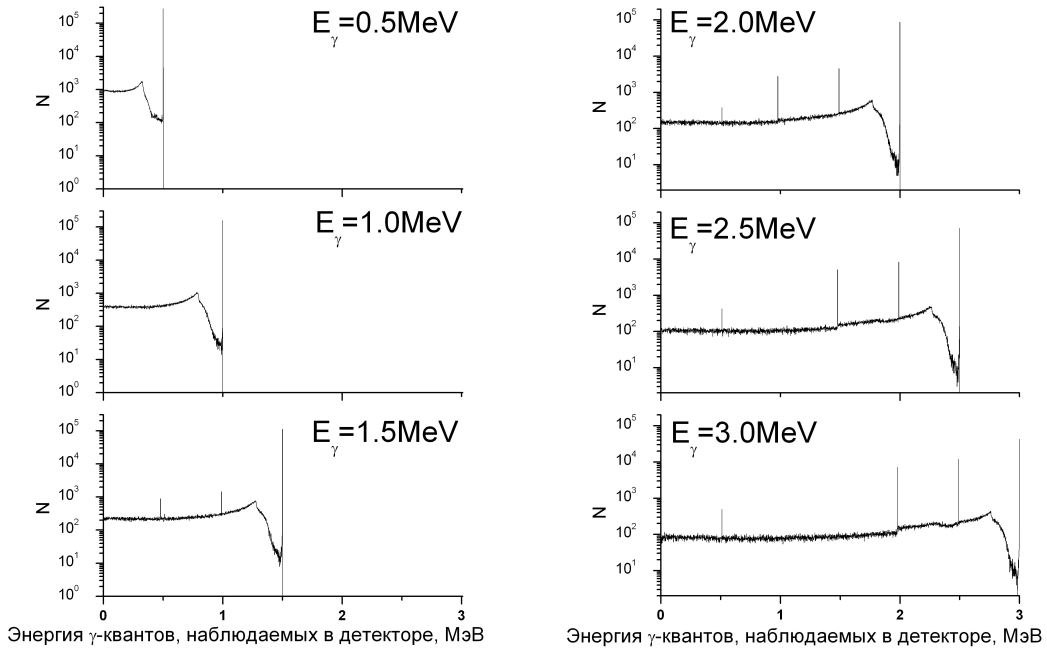
Рассмотрим более подробно все три процесса взаимодействия гамма-квантов с веществом детектора [22], влияющие на эффективность регистрации детектором гамма-квантов, формирующих спектр зарегистрированных гамма-квантов.

- 1) Фотоэффект – выбивание электрона атомной оболочки. Энергия выбитого электрона равна  $E_\gamma - E_{связи}$ . При выбивании электрона из внутренних оболочек атома энергия связи  $E_{связи}^{внутр}$  может достигать десятков кэВ. Однако при этом образуется вакантное место на оболочке, с которой был выбит электрон, и электроны с более слабо связанных оболочек занимают вакантное место, испуская при этом рентгеновские фотоны с энергиями, равными разности энергий атомных оболочек. Эти фотоны вызывают фотоэффект в соседних ядрах, выбивая электроны с более высоких атомных оболочек. Энергия связи внешних электронов с ядром  $E_{связи}^{внешн}$  составляет десятки эВ, тогда как энергия гамма-кванта  $E_\gamma$  в эксперименте, как правило, превышает 100 кэВ. Функция отклика детектора, обусловленная фотоэффектом, имеет вид максимума на энергии  $E_\gamma - E_{связи}^{внешн} \approx E_\gamma$ . Этот максимум называется пиком полного поглощения или фотопиком.

- 2) Эффект Комптона – рассеяние гамма-кванта на электроне вещества детектора. При эффекте Комптона гамма-квант передает электрону только часть своей энергии. Рассеянный фотон может участвовать в других процессах в веществе, а может покинуть объем детектора. За счет данного процесса в функции отклика детектора образуется комптоновская подложка – плато в области энергий от 0 до  $E_\gamma$ .
- 3) Рождение электрон-позитронных пар. В результате торможения в веществе детектора рожденный электрон полностью теряет энергию в детекторе. Позитрон также тормозится, теряя энергию на ионизацию, и практически с нулевой энергией аннигилирует с электроном вещества. В результате аннигиляции образуется два гамма-кванта с энергиями по 0.511 МэВ. Затем возможно три варианта развития событий:
  - а) Оба аннигиляционных гамма-кванта поглощаются в веществе детектора. Образующийся при этом максимум в спектре совпадает по энергии с фотопиком.
  - б) Один аннигиляционный гамма-квант поглощается в детекторе, а второй вылетает за пределы детектора. При этом образуется максимум при энергии  $E_\gamma - 0.511$  МэВ, называемый пиком одиночного вылета.
  - б) Оба аннигиляционных гамма-кванта вылетают из детектора. В результате в наблюдаемом спектре образуется максимум при энергии  $E_\gamma - 1.022$  МэВ, называемый пиком двойного вылета.

Для моделирования процесса регистрации гамма-квантов с энергиями  $E_\gamma$  до 3 МэВ HpGe-детектором Canberra GC3019 были проведены численные эксперименты, основанные на модели [23, 24]. Во всех расчетах направления вылета гамма-квантов из источника были равномерно распределены по телесному углу  $4\pi$ . Вся система находилась в воздушной среде. Спектры гамма-квантов, зарегистрированных HpGe-детектором, рассчитывались с помощью пакета библиотек для C++ GEANT4 [4]. При расчете учитывались все описанные выше физические процессы.

Расчет проводился для ряда энергий фотонов  $E_\gamma^i$  от 30 кэВ до 3 МэВ с переменным шагом (при 30 кэВ шаг составлял 2 кэВ, при 3 МэВ шаг составлял 100 кэВ). Все полученные спектры  $D(\tilde{E}, E_\gamma^i)$  были объединены в массив  $\{D(\tilde{E}, E_\gamma^i)\}$ , где  $\tilde{E}$  – энергия в спектре, измеренном детектором. Результаты расчета измеренных детектором спектров для нескольких энергий монохроматических потоков гамма-квантов, падающих на детектор ( $E_\gamma = 0.5; 1.0; 1.5; 2.0; 2.5; 3.0$  МэВ), показаны на рис. 6.



**Рис. 6. Отклик детектора при регистрации гамма-квантов с энергией 0.5 – 3 МэВ. В расчете источник гамма-квантов находился на расстоянии 5 мм от детектора.**

Из рис. 6 видно, что при энергии фотонов 0.5 МэВ и 1.0 МэВ наблюдаемый спектр состоит из пика полного поглощения и комптоновской подложки. При энергиях 1.5 МэВ и выше кроме пика полного поглощения и комптоновской подложки наблюдаются пик одиночного и пик двойного вылета, а также пик на энергии 511 кэВ, обусловленный рождением электрон-позитронных пар вне детектора с последующей аннигиляцией позитрона в воздухе и в корпусе детектора.

Все спектры в массиве  $\{D(\tilde{E}, E_\gamma^i)\}$  были разделены на пять частей:

- максимум полного поглощения  $\{D_{full}(\tilde{E}, E_\gamma^i)\}$ ,
- максимум одиночного вылета  $\{D_{single}(\tilde{E}, E_\gamma^i)\}$ ,
- максимум двойного вылета  $\{D_{double}(\tilde{E}, E_\gamma^i)\}$ ,
- комптоновская подложка  $\{D_{compt}(\tilde{E}, E_\gamma^i)\}$ ,
- максимум при 511 кэВ  $\{D_{511}(\tilde{E}, E_\gamma^i)\}$ :

$$D(\tilde{E}, E_\gamma^i) = D_{full}(\tilde{E}, E_\gamma^i) + D_{single}(\tilde{E}, E_\gamma^i) + D_{double}(\tilde{E}, E_\gamma^i) + D_{compt}(\tilde{E}, E_\gamma^i) + D_{511}(\tilde{E}, E_\gamma^i). \quad (23)$$

Все перечисленные выше компоненты  $D(\tilde{E}, E_\gamma^i)$  определены в конечном множестве точек  $\{E_\gamma^i\}$ . Для моделирования работы детектора необходимо получить функцию

$$D(\tilde{E}, E_\gamma) = D_{full}(\tilde{E}, E_\gamma) + D_{single}(\tilde{E}, E_\gamma) + D_{double}(\tilde{E}, E_\gamma) + D_{compt}(\tilde{E}, E_\gamma) + D_{511}(\tilde{E}, E_\gamma), \quad (24)$$

определенную для любого значения  $E_\gamma$  от 30 кэВ до 3 МэВ.

Функция комптоновской подложки  $D_{compt}(\tilde{E}, E_\gamma)$  определяется на основе двух соседних функций  $D_{compt}(\tilde{E}, E_\gamma^k)$  и  $D_{compt}(\tilde{E}, E_\gamma^{k+1})$ , где  $E_\gamma^k < E_\gamma < E_\gamma^{k+1}$ , путем смещения первой из них в область более высоких энергий на величину  $E_\gamma - E_\gamma^k$ , а второй – в область более низких энергий на величину  $E_\gamma^{k+1} - E_\gamma$ , и умножения их на весовые коэффициенты  $\frac{E_\gamma - E_\gamma^k}{E_\gamma^{k+1} - E_\gamma}$

и  $\frac{E_\gamma^{k+1} - E_\gamma}{E_\gamma^{k+1} - E_\gamma^k}$  соответственно:

$$D_{compt}(\tilde{E}, E_\gamma) = \frac{E_\gamma - E_\gamma^k}{E_\gamma^{k+1} - E_\gamma^k} D_{compt}(\tilde{E} - (E_\gamma - E_\gamma^k), E_\gamma^k) + \frac{E_\gamma^{k+1} - E_\gamma}{E_\gamma^{k+1} - E_\gamma^k} D_{compt}(\tilde{E} - (E_\gamma - E_\gamma^{k+1}), E_\gamma^{k+1}) \quad (25)$$

Из-за того, что GEANT4 не учитывает особенности работы полупроводниковой электроники, функции максимумов полного поглощения и одиночного и двойного вылета представляют собой дельта-функции с коэффициентами, называемыми эффективностью по максимуму полного поглощения  $\varepsilon_{full}(E_\gamma)$ , максимуму одиночного вылета  $\varepsilon_{single}(E_\gamma)$ , максимуму двойного вылета  $\varepsilon_{double}(E_\gamma)$  и максимуму 511 кэВ  $\varepsilon_{511}(E_\gamma)$ :

$$\begin{aligned} D_{full}(\tilde{E}, E_\gamma) &= \varepsilon_{full}(E_\gamma) \delta(E_\gamma - \tilde{E}) \\ D_{single}(\tilde{E}, E_\gamma) &= \varepsilon_{single}(E_\gamma) \delta(E_\gamma - \tilde{E} - 511 \text{кэВ}) \\ D_{double}(\tilde{E}, E_\gamma) &= \varepsilon_{double}(E_\gamma) \delta(E_\gamma - \tilde{E} - 1022 \text{кэВ}) \\ D_{511}(\tilde{E}, E_\gamma) &= \varepsilon_{511}(E_\gamma) \delta(\tilde{E} - 511 \text{кэВ}) \end{aligned} \quad (26)$$

Эффективности  $\varepsilon_{full}(E_\gamma)$ ,  $\varepsilon_{single}(E_\gamma)$ ,  $\varepsilon_{double}(E_\gamma)$ ,  $\varepsilon_{511}(E_\gamma)$  при энергиях  $E_\gamma^i$  определяются на основе расчета GEANT4. Для всех других  $E_\gamma$  от 30 кэВ до 3 МэВ эффективности рассчитываются на основе линейной интерполяции между соседними точками. На рис. 7 изображены рассчитанные зависимости эффективностей  $\varepsilon_{full}(E_\gamma)$ ,  $\varepsilon_{single}(E_\gamma)$ ,  $\varepsilon_{double}(E_\gamma)$ ,  $\varepsilon_{511}(E_\gamma)$  от их энергии фотонов  $E_\gamma$ .

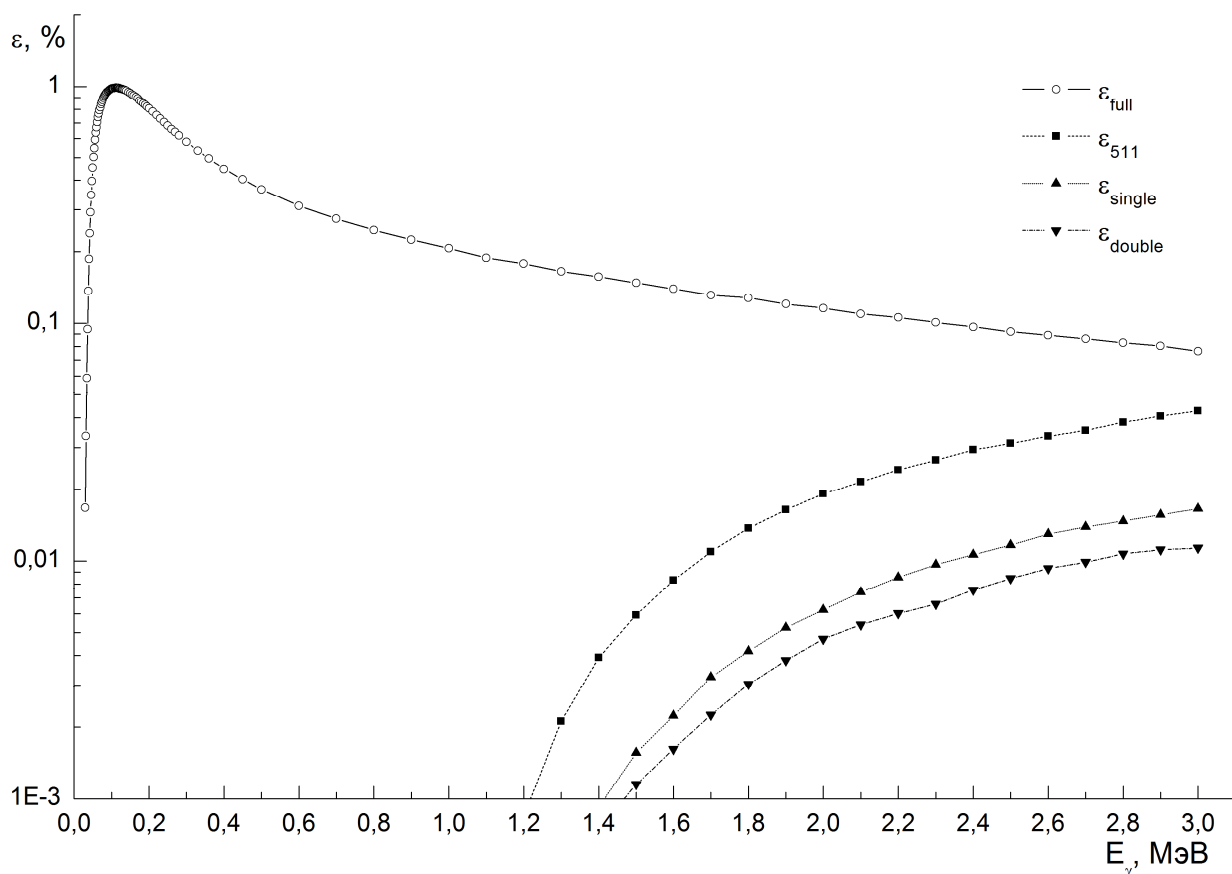


Рис. 7. Зависимость эффективности регистрации детектором гамма-квантов от их энергии: точки – расчет GEANT4, ломаные линии – линейная интерполяция.

В реальном эксперименте максимумы в спектре имеют вид не дельта-функций, а

функций Гаусса  $g(\tilde{E}, E_\gamma, \sigma(E_\gamma)) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-\left(\frac{\tilde{E}-E_\gamma}{2\sigma(E_\gamma)}\right)^2}$ , где дисперсия  $\sigma(E_\gamma)$  зависит от энергии фотонов  $E_\gamma$ . Вид зависимости  $\sigma(E_\gamma)$  был определен на основе совместного анализа результатов более ранних экспериментов:

$$\sigma(E_\gamma) = 1.33\sqrt{8\ln 2} (0.92222 + 9 \cdot 10^{-4} E_\gamma - 1.5 \cdot 10^{-7} E_\gamma^2 + 1.5 \cdot 10^{-11} E_\gamma^3 - 4.7 \cdot 10^{-17} E_\gamma^4). \quad (27)$$

В дальнейшем для краткости будем обозначать  $g(\tilde{E}, E_\gamma, \sigma(E_\gamma)) = g(\tilde{E}, E_\gamma)$ .

Тогда отклик детектора на фотон с энергией  $E_\gamma$  будет иметь вид:

$$D(\tilde{E}, E_\gamma) = D_{compt}(\tilde{E}, E_\gamma) + \varepsilon_{full}(E_\gamma)g(\tilde{E}, E_\gamma) + \varepsilon_{single}(E_\gamma)g(\tilde{E}, E_\gamma - 511) + \varepsilon_{double}(E_\gamma)g(\tilde{E}, E_\gamma - 1022) + \varepsilon_{511}(E_\gamma)g(\tilde{E}, 511). \quad (28)$$

В результате измеренный детектором спектр гамма-квантов из облученной мишени будет иметь вид:

$$\omega(\tilde{E}) = \int_{E_\gamma} w(E_\gamma) D(\tilde{E}, E_\gamma) dE_\gamma = \int_{E_\gamma} \sum_i \sum_k \left( \int_{t_1}^{t_2} \lambda_i N_i(t) dt \right) \delta(\tilde{E} - E_i^k) I_i^k D(\tilde{E}, E_\gamma) dE_\gamma. \quad (29)$$

### 3 Работа с программным комплексом

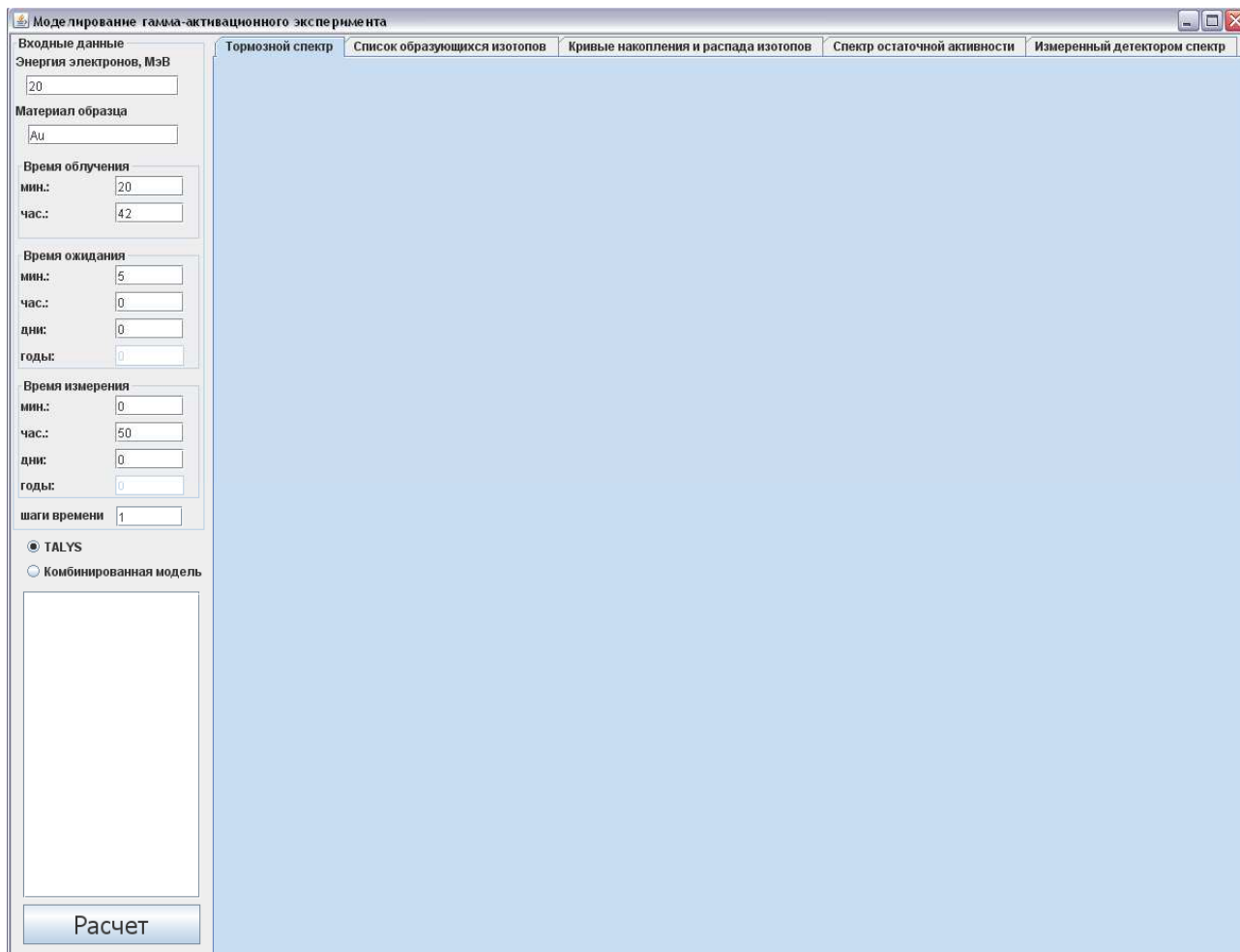


Рис. 8. Пример ввода данных в интерфейс программного комплекса.

На рис. 8 изображен интерфейс программного комплекса. В левой части расположен блок ввода параметров эксперимента. В верхнем поле вводится энергия электронного пучка. Во втором поле вводится исходный состав образца. Здесь можно указывать конкретный изотоп, например, « $^{198}\text{Hg}$ », а можно указать элемент, например, « $\text{Hg}$ », тогда программа в качестве исходных изотопов будет использовать естественную смесь изотопов выбранного элемента.

В блоке «Время облучения» указывается время облучения в минутах и часах. В блоке «Время ожидания» указывается время между концом облучения и началом измерения спектров остаточной активности. В блоке «Время измерения» указывается время измерения

спектров остаточной активности. Если какое-либо поле в этих блоках оставлено пустым, считается, что в нем указан ноль.

Блок «шаги времени» позволяет разбить все время измерения спектра на отдельные интервалы, число которых равно указанному значению, для каждого из которых отдельно рассчитывается спектр. Полученные таким образом спектры строятся на одном рисунке, что позволяет проследить динамику изменения с течением времени. По умолчанию в этой графе стоит 1, то есть рассчитывается только один спектр.

Поля «TALYS» и «комбинированная модель» позволяют выбрать модель, описывающую фотонуклонные реакции, использовать для расчета выходов этих реакций.

После того, как все поля заполнены и нажата кнопка «Расчет», программа начинает расчет, время которого в зависимости от вычислительной мощности компьютера и сложности задачи может варьироваться от нескольких секунд до десятков минут. После расчета в правой части рабочей области программы показываются несколько вкладок.

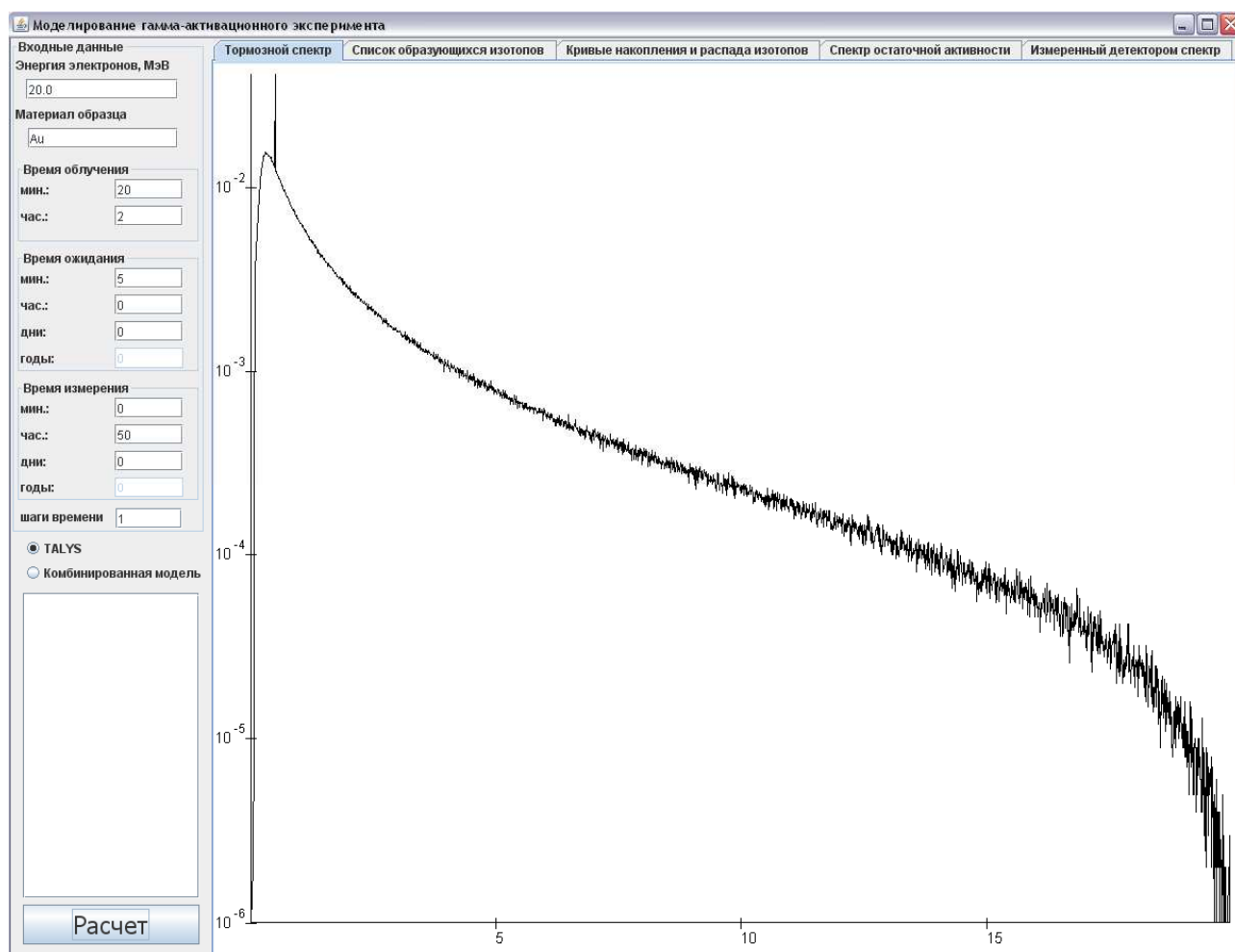


Рис. 9. Вкладка «Тормозной спектр».

На первой из них – «Тормозной спектр» – изображен спектр тормозных фотонов, взятый из базы данных и использованный в расчете (рис. 9). По оси X отложена энергия фотонов в МэВ, по оси Y – число фотонов тормозного спектра с данной энергией. Ширина энергетического интервала суммирования фотонов тормозного спектра составляет 10 кэВ.

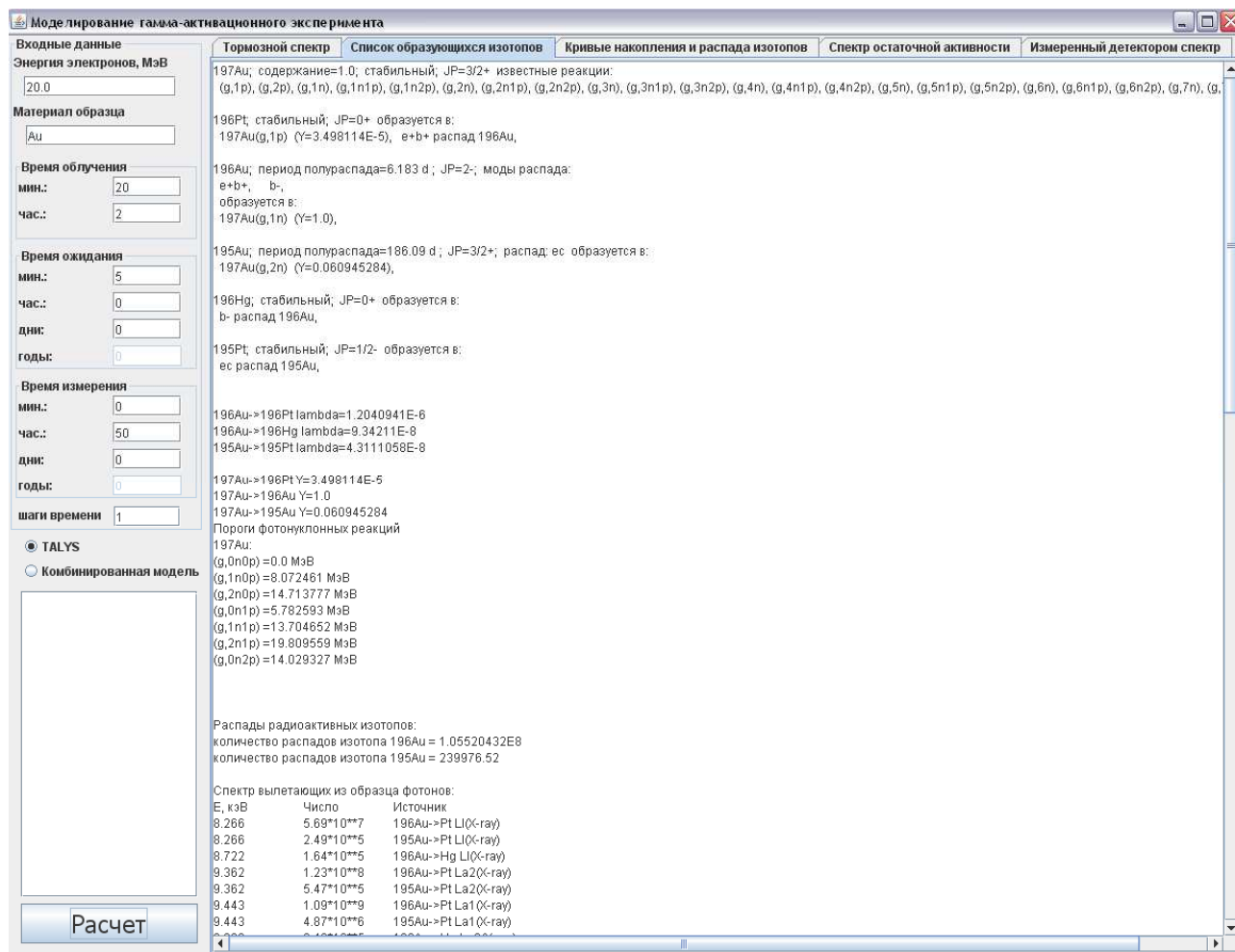
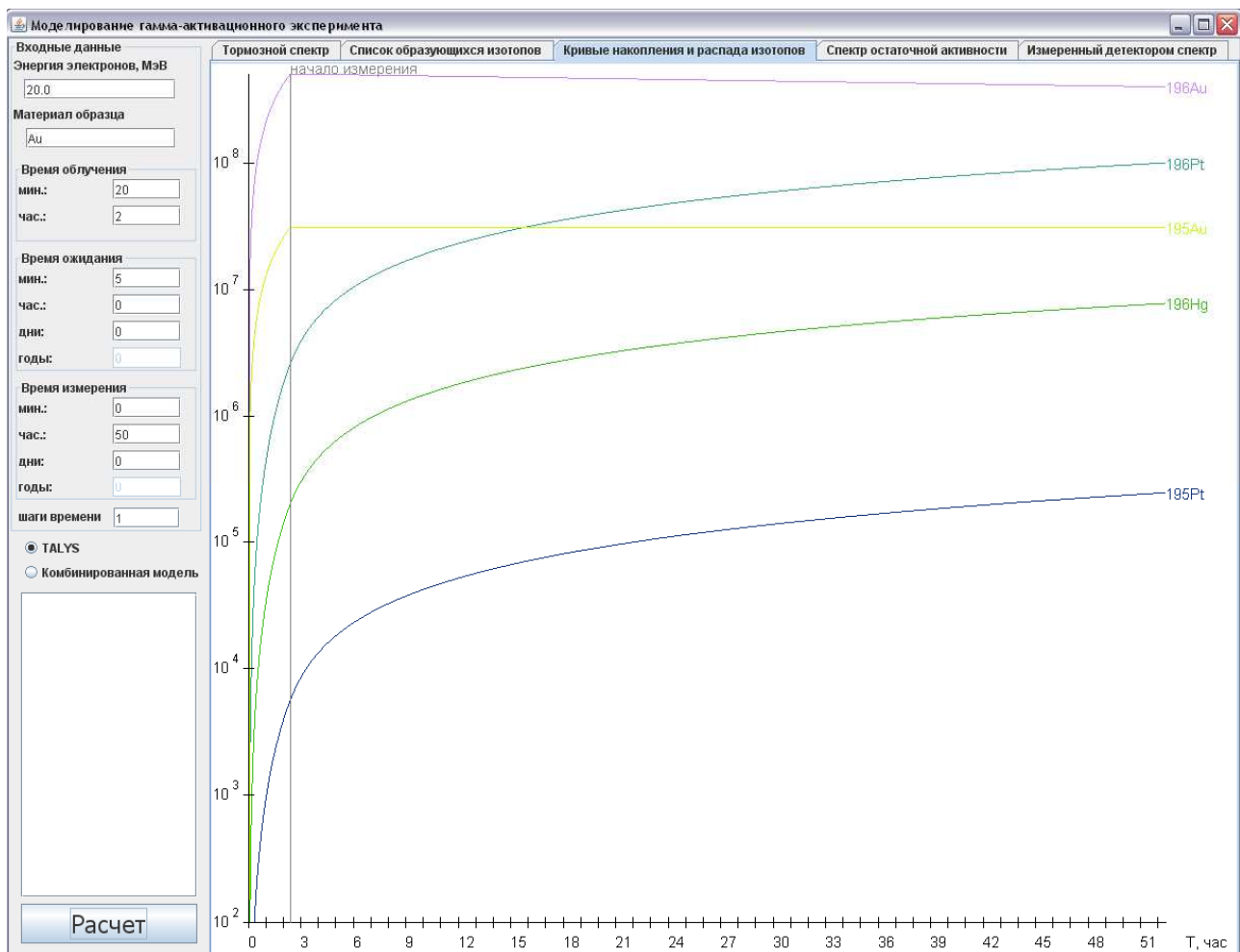


Рис. 10. Вкладка «Список образующихся изотопов».

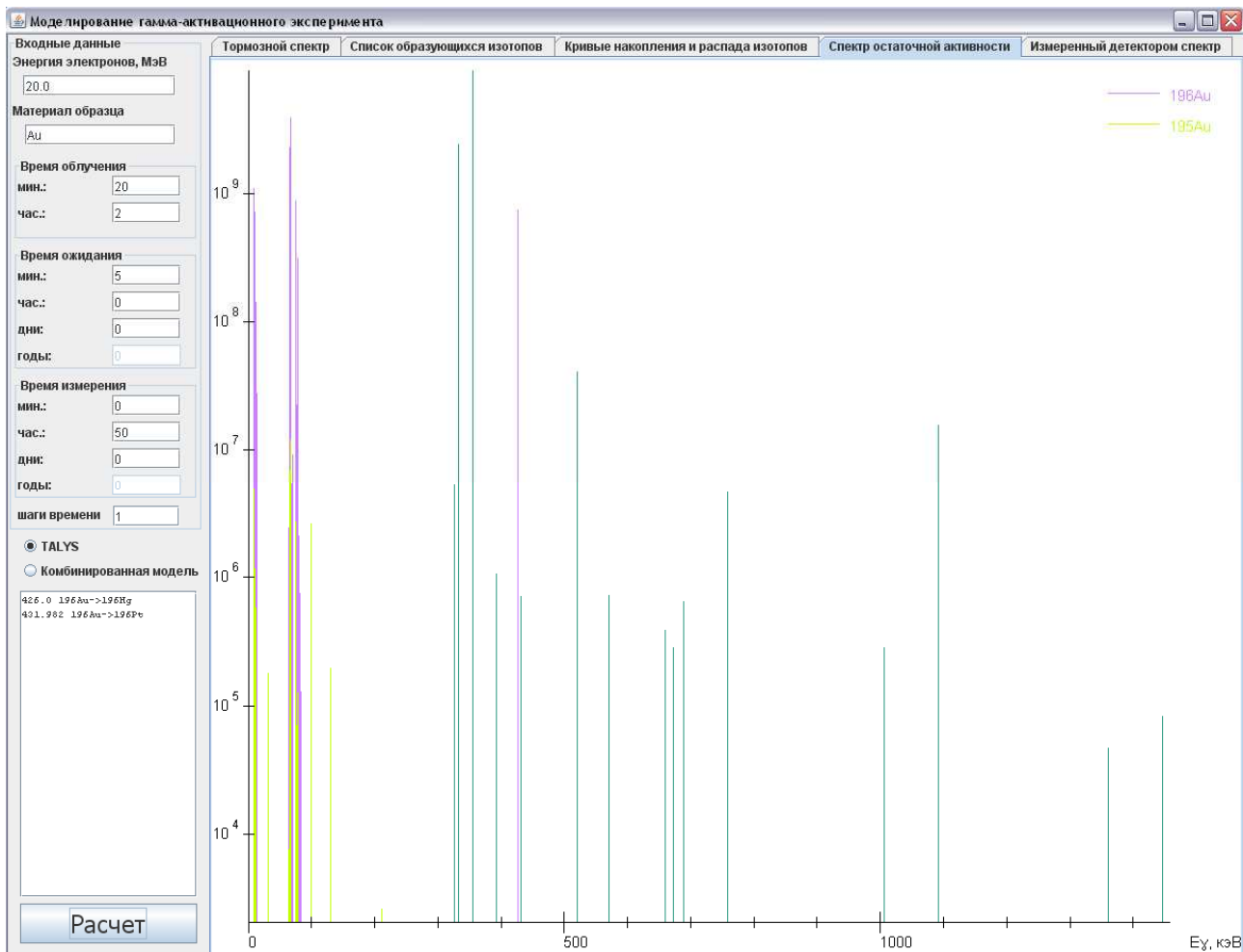
На второй вкладка «Список образующихся изотопов» приводится полный список фотонуклонных реакций в образце с их порогами и изотопами, образующихся в результате этих реакций, а также радиоактивных распадов ядер в образце (рис. 10). Указаны периоды полураспада образующихся изотопов и их моды распада. В конце вкладки приведен список всех фотонов, испускаемых всеми изотопами, образующимися в эксперименте, и указано, в каких реакциях образуются фотоны данной энергии. Интенсивности гамма-линий соответствуют числу фотонов, образовавшихся в облученном образце за время измерения спектра.





**Рис. 11. Вкладка «Кривые накопления и распада изотопов».**

На третьей вкладке «Кривые накопления и распада изотопов» изображены количества ядер всех участвующих в эксперименте изотопов в зависимости от времени измерения (рис. 11). По оси X отложено время в часах от начала облучения образца, по оси Y – количество ядер данного изотопа в зависимости от времени.



**Рис. 12. Вкладка «Спектр остаточной активности».**

На четвертой вкладке – «Спектр остаточной активности» в графическом виде изображен список энергий фотонов из вкладки «Список образующихся изотопов», то есть изображен спектр фотонов, образующихся в образце,  $w(E_\gamma)$  за время измерения (рис. 12). По оси  $X$  отложена энергия фотонов в кэВ, по оси  $Y$  – количество фотонов.

При наведении указателя мыши на максимум на этой вкладке в текстовом поле в нижнем левом углу окна отображается энергия максимума и канал распада изотопа, в результате которого образуется максимум в гамма-спектре наведенной в мишени активности.

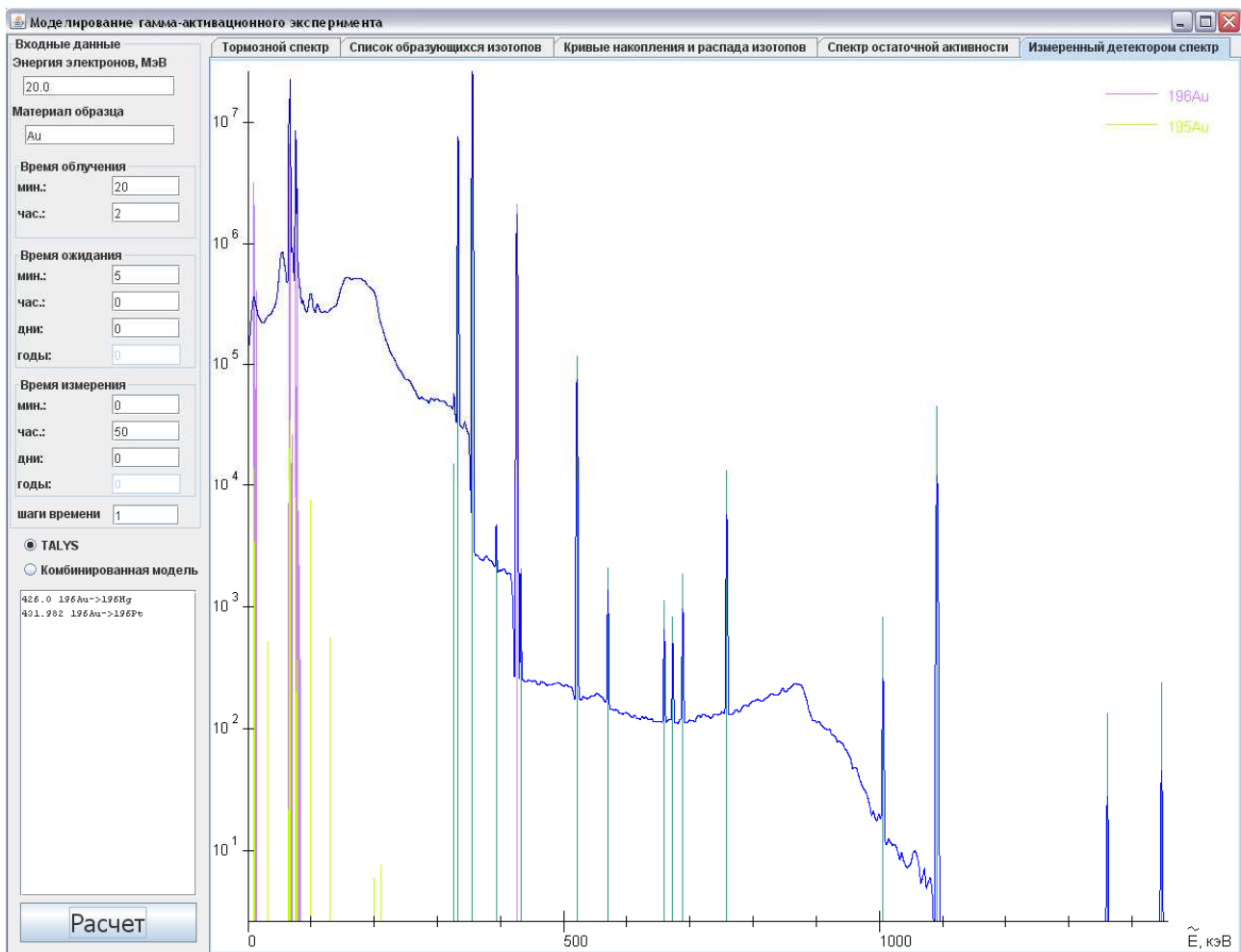


Рис. 13. Вкладка «Измеренный детектором спектр».

На пятой вкладке – «Измеренный детектором спектр» – изображен спектр  $\omega(\tilde{E})$  (рис. 13). По оси X отложена энергия в кэВ, по оси Y – количество отсчетов детектора. Также, как и на вкладке «Все гамма-линии» при наведении курсора мыши на максимум отображается его энергия, интенсивность и указывается природа образования линии гамма-спектра.

## 4 Моделирование реальных экспериментов

Для проверки работы программы и демонстрации ее возможностей было проведено моделирование нескольких реальных экспериментов, выполненных гамма-активационной методикой. Результаты моделирования и их сравнение с результатами экспериментов приведены ниже.

### 4.1 Спектр изотопа кобальта $^{60}\text{Co}$

Первым смоделированным экспериментом стало измерение спектра активности изотопа кобальта  $^{60}\text{Co}$ . Это радиоактивный изотоп с периодом полураспада 5.27 лет (1925.28 дней), поэтому образец не облучался. Он интересен тем, что имеет всего две гамма-

линии высокой интенсивности (1173 и 1332 кэВ), поэтому хорошо подходит для проверки точности моделирования комптоновской подложки. Схема распада  $^{60}\text{Co}$  изображена на рис. 14.

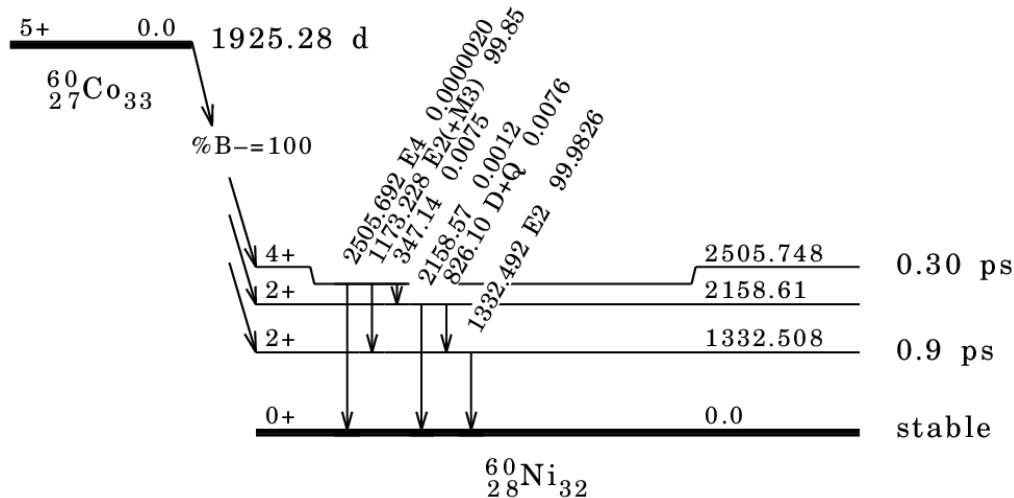


Рис. 14. Схема распада изотопа  $^{60}\text{Co}$ .

Были проведены эксперименты по измерению спектра активности  $^{60}\text{Co}$  при различных расстояниях между образцом  $^{60}\text{Co}$  и детектором: от 4 мм до 14 см. Результаты измерений вплотную (4 мм) и на расстоянии 14 см на рис. 15 сравниваются с результатом моделирования. Для удобства визуального сравнения все спектры нормированы так, чтобы площадь максимума при 1173 кэВ была одинакова во всех спектрах.

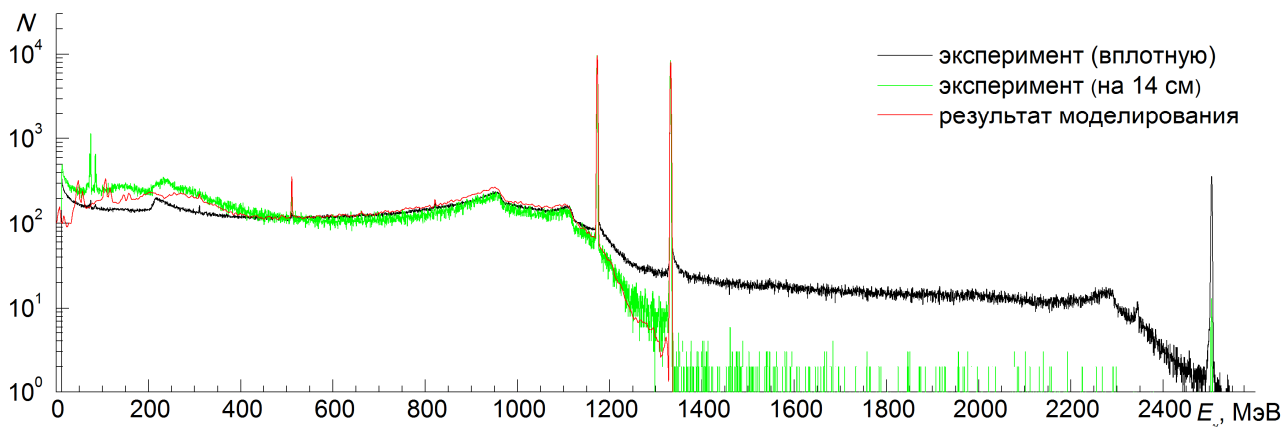


Рис. 15. Спектры источника  $^{60}\text{Co}$ . Спектры нормированы так, чтобы площадь максимума при 1173 кэВ была одинакова. Черная кривая – спектр, измеренный при расположении образца вплотную к детектору. Зеленая кривая – спектр, измеренный при расстоянии между образцом и детектором 14 см. Красная кривая – результат моделирования.

В первую очередь, обратим внимание на то, что экспериментально измеренные спектры сильно отличаются друг от друга в области энергии выше 1332 кэВ: при измерении вплотную в спектре в области энергии от 1332 кэВ до 2505 кэВ наблюдается комптоновская подложка, а при энергии 2505 максимум, приблизительно в 10 раз более высокие, чем при

измерении на расстоянии 14 см. Этот эффект связан с тем, что при распаде из ядра  $^{60}\text{Co}$  практически одновременно (с разницей порядка 1 пс) вылетают два гамма-кванта: с энергией 1173 и 1332 кэВ (см. рис. 14). Если эти два гамма-кванта попадают в детектор, то сигнал на выходе детектора с большой вероятностью будет соответствовать суммарной энергии этих гамма-квантов, то есть 2505 кэВ, или образовывать комптоновскую подложку в области до 2505 кэВ, что и наблюдается в спектре, измеренном при расположении источника вплотную к детектору.

При увеличении расстояния между источником и детектором сильно уменьшается вероятность одновременного попадания обоих гамма-квантов, испущенных распадающимся ядром, в образец. Поэтому максимум при 2505 кэВ и комптоновская подложка от него ослабляются.

Спектр, полученный в результате моделирования эксперимента при помощи созданного программного комплекса, хорошо воспроизводит спектр, измеренный при расстоянии между образцом и детектором 14 см, в области до 1332 кэВ: соотношение площадей максимумов практически не отличается, форма комптоновской подложки воспроизводится хорошо.

#### 4.2 Спектр изотопа европия $^{152}\text{Eu}$

Для дополнительной проверки точности моделирования работы германиевого детектора, в первую очередь, эффективности регистрации максимума, соответствующего полному поглощению энергии гамма-кванта в детекторе, было проведено моделирование эксперимента по измерению спектра изотопа  $^{152}\text{Eu}$ . Это естественный радиоактивный изотоп с периодом полураспада 13.5 лет, поэтому образец не облучался.  $^{152}\text{Eu}$  имеет два канала распада: бета-минус и захват электрона. Схема распада  $^{152}\text{Eu}$  изображена на рис. 16–19.

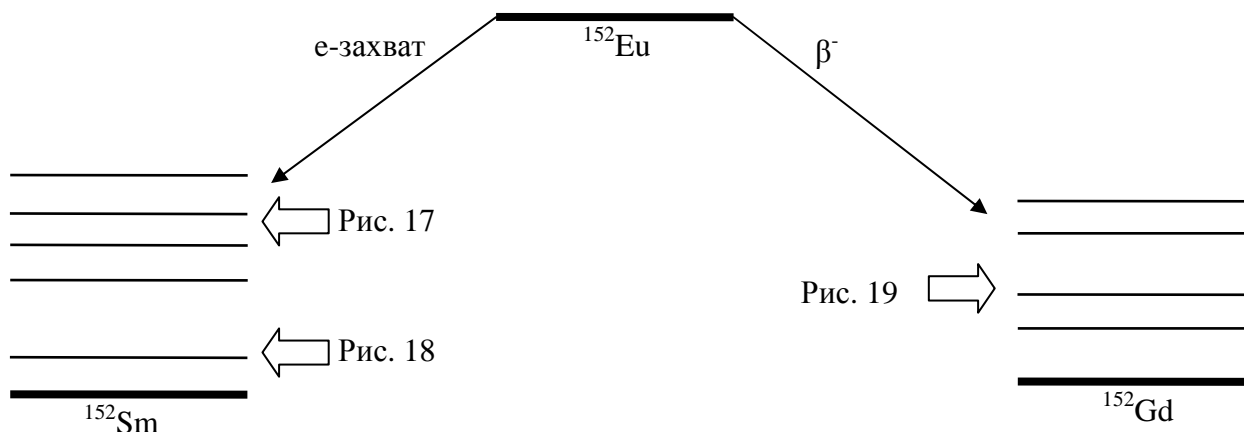


Рис. 16. Схема распада  $^{152}\text{Eu}$  (общая).

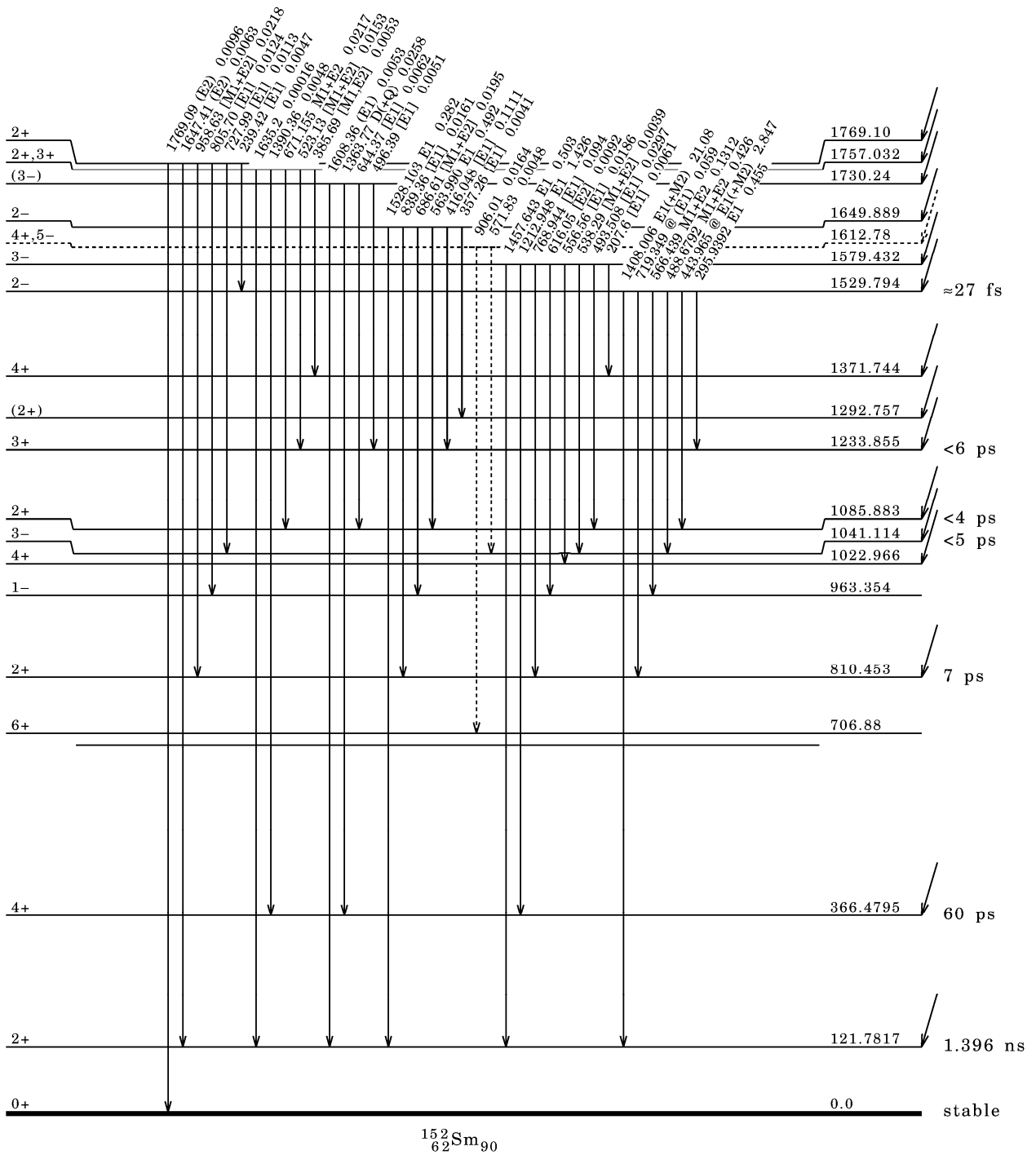


Рис. 17. Схема распада  $^{152}\text{Eu}$  (часть 1 – распад состояний в  $^{152}\text{Sm}$  с энергией более 1500 кэВ).

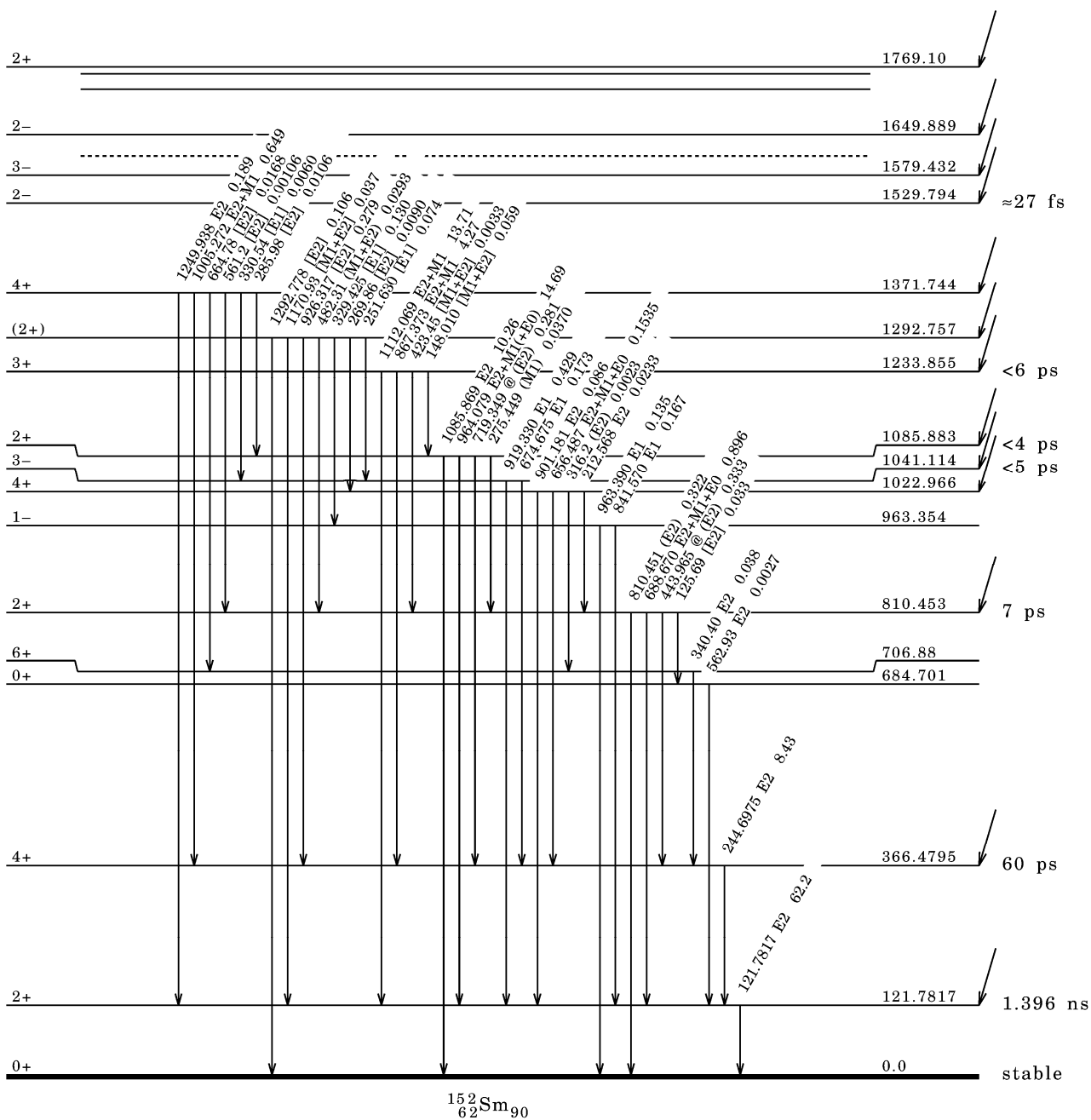


Рис. 18. Схема распада  $^{152}\text{Eu}$  (часть 2 – распад состояний в  $^{152}\text{Sm}$  с энергией менее 1500 кэВ).

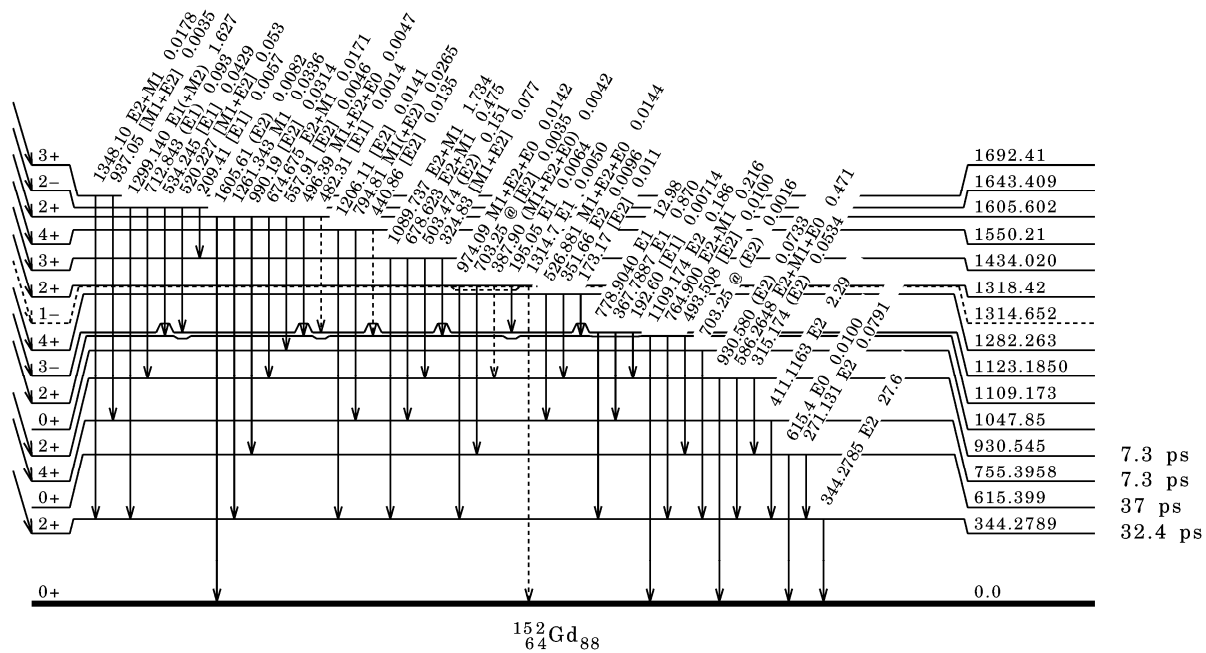


Рис. 19. Схема распада  $^{152}\text{Eu}$  (часть 3 – распад состояний в  $^{152}\text{Gd}$ ).

В связи с большим временем жизни и большим количеством гамма-линий изотоп  $^{152}\text{Eu}$  часто используют для калибровки и настройки детекторов. Он же использовался и при калибровке детектора Canberra GC3019. Измеренные при этом спектры изображены на рис. 20.

Экспериментальные измерения спектров также проводились при различном положении источника относительно детектора. На рис. 20 изображены спектры для двух случаев: образец расположен вплотную к детектору и образец удален на расстояние 14 см от детектора вдоль его оси. Для удобства визуального сравнения все спектры нормированы так, чтобы площадь максимума при 344 кэВ была одинакова во всех спектрах.



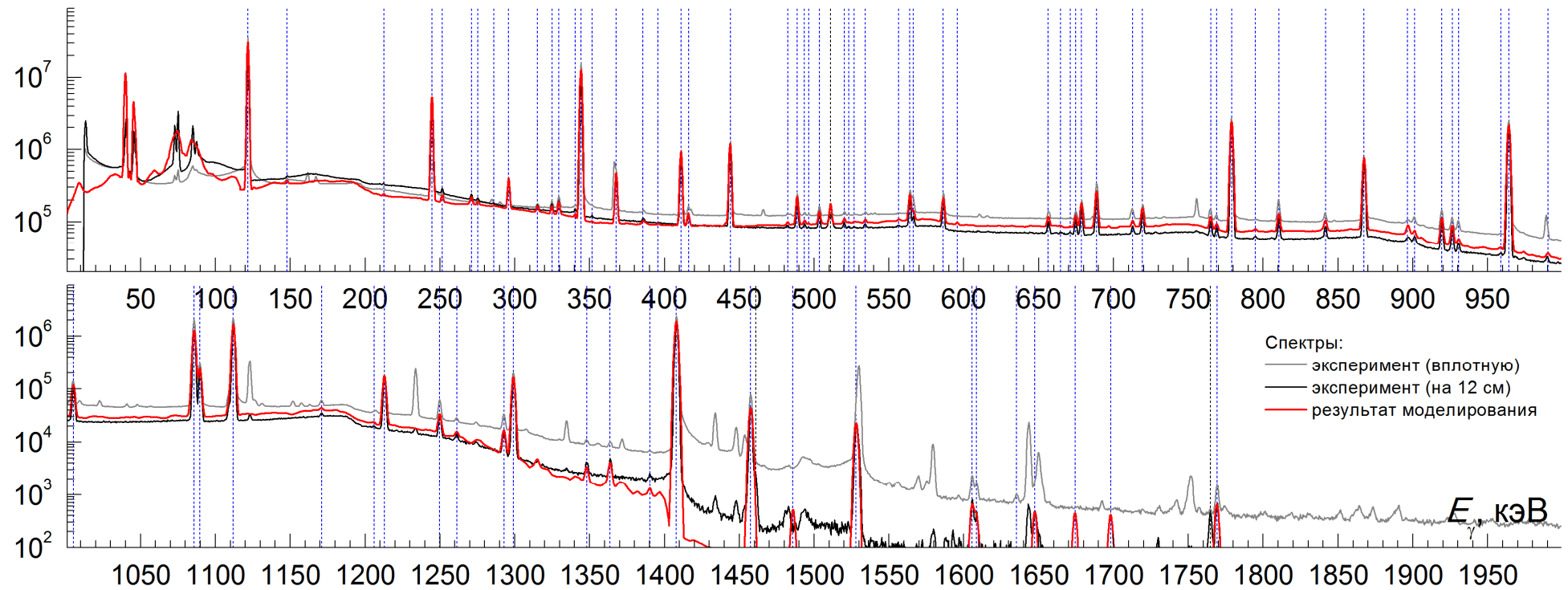


Рис. 20. Спектры источника  $^{152}\text{Eu}$ . Спектры нормированы так, чтобы площадь максимума при 344 кэВ была одинакова. Серая кривая – спектр, измеренный при расположении образца вплотную к детектору. Черная кривая – спектр, измеренный при расстоянии между образцом и детектором 14 см. Красная кривая – результат моделирования. Синие вертикальные пунктирные линии – энергии наиболее интенсивных гамма-линий, соответствующих распаду  $^{152}\text{Eu}$ , черные – фон и линия 511 кэВ.

Несмотря на то, что во всех измерениях параметры детектора и источника  $^{152}\text{Eu}$  оставались постоянными, приведенные результаты измерений сильно отличаются друг от друга. Это вызвано тем, что, чем ближе к детектору расположен образец, тем большее количество гамма-квантов попадает в детектор. Это приводит к нескольким последствиям:

- 1) При уменьшении расстояния между образцом и детектором увеличивается количество срабатываний детектора и уменьшается его живое время, то есть время, когда он может регистрировать попадающие в его рабочий объем частицы. Этот эффект может незначительно исказить результаты эксперимента
- 2) При увеличении расстояния между образцом и детектором из-за значительного снижения количества гамма-квантов, попадающих в детектор, ухудшается соотношение сигнал-шум в измеряемом спектре, и некоторые наиболее слабые гамма-линии перестают наблюдаться.
- 3) При уменьшении расстояния между образцом и детектором увеличивается вероятность того, что при каскадном испускании гамма-квантов из дочернего ядра (а также при испускании рентгеновских гамма-квантов), образовавшегося при бета-распаде ядра радиоактивного изотопа, несколько гамма-квантов попадут в детектор одновременно, то есть за время меньшее, чем временное разрешение детектора. При этом в спектре будет наблюдаться сигнал, соответствующий сумме энергий всех попавших в него частиц. Это приводит к тому, что в спектре появляются новые максимумы, а площадь основных максимумов, соответствующих гамма-линиям изотопов, перераспределяется: уменьшается или увеличивается.

Таким образом, наиболее чистый эксперимент должен проводиться с измерением спектра остаточной активности при максимально возможно удалении образца от детектора, что уменьшает вероятность сложения гамма-квантов, попадающих в детектор. Однако в ряде экспериментов из-за сравнительно невысокой величины наведенной активности для надежного наблюдения максимумов необходимо правильно подбирать расстояние между образцом и детектором, чтобы добиваться оптимального соотношения сигнал-шум при минимальном искажении спектра.

Указанные эффекты хорошо видны на рис. 20: серая и черная кривые, соответствующие измерению вплотную и на расстоянии 14 см соответственно, достаточно сильно отличаются.

Во-первых, в черной кривой наблюдается большая величина шума, особенно при высоких энергиях.

Во-вторых, в серой кривой наблюдается ряд максимумов, энергии которых не соответствуют энергии каких-либо гамма-квантов, образующихся при распаде изотопа  $^{152}\text{Eu}$ . В табл. 1 приводится список всех таких максимумов и указывается, сложение энергий каких гамма-квантов приводит к образованию каждого максимума.

Результат моделирования спектра (красная кривая на рис. 20) хорошо согласуется с экспериментальными данными, полученными при измерении спектра на расстоянии 14 см. Расчет воспроизводит все максимумы в спектре кроме дополнительных, вызванных сложением энергии гамма-квантов в детекторе.

В основной рабочей области по энергии, где находится большая часть максимумов, комптоновская подложка воспроизводится с точностью около 50%, чего, как правило, бывает достаточно, чтобы определить, возможно ли будет выделить максимум из подложки. В области за последним интенсивным максимумом  $E > 1410$  кэВ рассчитанная комптоновская подложка резко идет на спад. В экспериментально измеренных спектрах в этой области доминирует фон, что необходимо учитывать при планировании эксперимента.

Табл. 1. Сложение энергий гамма-квантов бета-распада изотопа  $^{152}\text{Eu}$  в детекторе.

Линия в спектре $E$ , кэВ	Природа совпадений		Линия в спектре $E$ , кэВ	Природа совпадений		Линия в спектре $E$ , кэВ	Природа совпадений	
	$E_1$ , кэВ	$E_2$ , кэВ		$E_1$ , кэВ	$E_2$ , кэВ		$E_1$ , кэВ	$E_2$ , кэВ
162	122	40 (X-ray)	1023	778	245	1434	344	1090
167	122	45 (X-ray)	1041	122	919	1448	1408	40 (X-ray)
755	344	411	1048	122	926	1453	1408	45 (X-ray)
285	245	40 (X-ray)	1123	344	779	1530	122	1408
290	245	45 (X-ray)	1126	1086	40 (X-ray)	1569	1299	270
367	122	245	1131	1086	45 (X-ray)	1575	1086	489
418	122	296	1152	1112	40 (X-ray)	1579	122	1457
610	122	488	1157	1112	45 (X-ray)	1643	344	1299
615	122	493	1164	245	919	1650	122	1528
755	344	411	1234	122	1112	1692	344	1348
989	122	867	1335	122	1213	1751	1086	665
1009	344	665	1370	867	503			

#### 4.3 Облучение изотопа золота $^{197}\text{Au}$

Образец  $^{197}\text{Au}$  облучался 3 часа 20 минут при энергии электронов 29.1 МэВ. Измерение спектров остаточной активности началось через 5 минут после окончания облучения и продолжалось 7 дней. За это время было измерено 359 спектров. Время измерения одного спектра варьировалось от 1 до 30 минут. Затем после 20-дневного перерыва было проведено второе измерение спектров остаточной активности того же образца в течение 43 дней (2078 спектров).

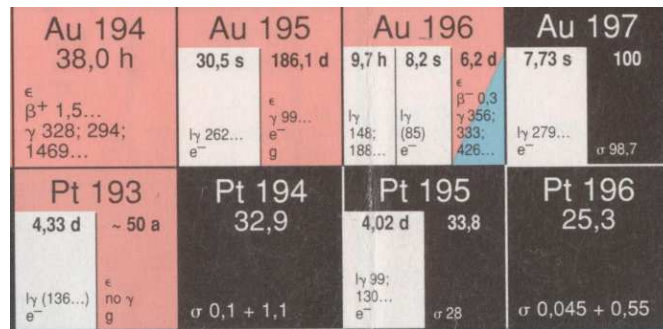


Рис. 21. Изотоп  $^{197}\text{Au}$  и продукты фотонуклонных реакций на N-Z диаграмме.

На рис. 21 изображен фрагмент N-Z-диаграммы атомных ядер, на котором показаны продукты фотонуклонных реакций на изотопе  $^{197}\text{Au}$ . В эксперименте наблюдались реакции  $^{197}\text{Au}(\gamma, n)^{196}\text{Au}$ ,  $^{197}\text{Au}(\gamma, n)^{196\text{m}2}\text{Au}$ ,  $^{197}\text{Au}(\gamma, 2n)^{195}\text{Au}$  и  $^{197}\text{Au}(\gamma, 3n)^{194}\text{Au}$ .

На рис. 22 изображен спектр остаточной активности образца золота, измеренный в течение 5 дней. Измерение началось через 5 минут после окончания облучения.

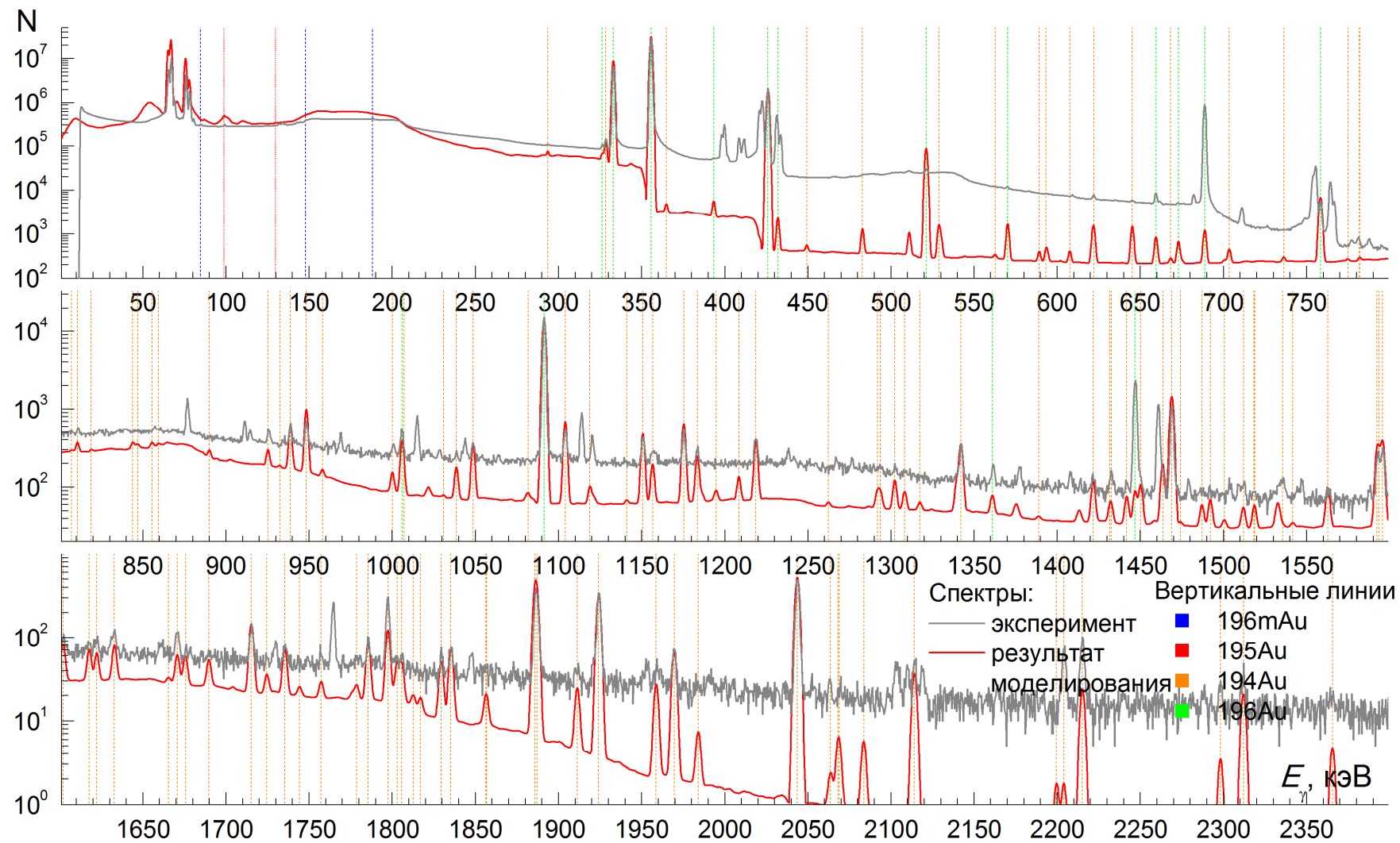


Рис. 22. Спектры остаточной активности образца  $^{197}\text{Au}$ , измеренные в течение 5 дней сразу после окончания облучения. Измерение началось через 5 минут после окончания облучения. Черная кривая – эксперимент, оранжевая кривая – моделирование. Вертикальные линии – наиболее интенсивные гамма-линии продуктов фотонуклонных реакций на  $^{197}\text{Au}$ : зеленая –  $^{196}\text{Au}$ , синяя –  $^{196\text{m}}\text{Au}$ , красная –  $^{195}\text{Au}$ , серая –  $^{194}\text{Au}$ .

#### 4.4 Облучение изотопа йода $^{127}\text{I}$

Образец  $^{127}\text{I}$  облучался 3 часа при энергии электронов 67.7 МэВ. Измерение спектров остаточной активности началось через 2 минуты после окончания облучения и продолжалось 13 дней. За это время было измерено 318 спектров. Время измерения одного спектра варьировалось от 30 до 60 минут.

<b>Xe 119</b> 5,8 m ε β <sup>+</sup> γ 232; 100; 462...	<b>Xe 120</b> 40 m ε; β <sup>+</sup> γ 25; 73; 178; 176; 763... g	<b>Xe 121</b> 38,8 m β <sup>+</sup> 2,8... γ 253; 133; 445...	<b>Xe 122</b> 20,1 h ε γ 350; 149; 417...	<b>Xe 123</b> 2,08 h ε β <sup>+</sup> 1,5... γ 149; 178; 330...	<b>Xe 124</b> 0,10 σ 28 + 137	<b>Xe 125</b> 57 s 16,9 h ε; β <sup>+</sup> ... γ 188; 243; 55... σ <sub>n,α</sub> ~ 0,03 h <sub>γ</sub> 112; 140	<b>Xe 126</b> 0,09 σ 0,45 + 3,0	<b>Xe 127</b> 70 s 36,4 d ε γ 203; 172; 375...	<b>Xe 128</b> 1,91 σ 0,48 + < 73
<b>I 118</b> 8,5 m β <sup>+</sup> - 4,9... γ 605; 600; 614... h <sub>γ</sub> 104 ?	<b>I 119</b> 19 m β <sup>+</sup> 2,4... γ 258... g	<b>I 120</b> 53 m 1,35 h ε β <sup>+</sup> 3,8... γ 560; 601; 614...	<b>I 121</b> 2,12 h ε β <sup>+</sup> 1,1... γ 212... g	<b>I 122</b> 3,6 m β <sup>+</sup> 3,1... γ 564...	<b>I 123</b> 13,2 h ε no β <sup>+</sup> γ 159... g	<b>I 124</b> 4,15 d β <sup>+</sup> 2,1... γ 603; 1691; 723...	<b>I 125</b> 59,41 d ε γ 35; e <sup>-</sup> g σ 900	<b>I 126</b> 13,11 d ε; β <sup>-</sup> 0,9; 1,3... β <sup>+</sup> 1,1... γ 389; 666... σ ~ 10000	<b>I 127</b> 100 σ 6,15
<b>Te 117</b> 1,1 h ε β <sup>+</sup> 1,8... γ 720; 1716; 2300...	<b>Te 118</b> 6,0 d ε no γ g	<b>Te 119</b> 4,7 d 16 h ε γ 154; 1213; 271...	<b>Te 120</b> 0,096 σ 0,25 + 2,0	<b>Te 121</b> 154 d 16,8 d h <sub>γ</sub> 212... e <sup>-</sup> ... ε β <sup>+</sup> ... γ 1102... γ 573; 508...	<b>Te 122</b> 2,603 σ 1,1 + 2,3	<b>Te 123</b> 0,908 119,7 d 1,24 · 10 <sup>13</sup> a h <sub>γ</sub> 159... e <sup>-</sup>	<b>Te 124</b> 4,816 σ 0,05 + 7	<b>Te 125</b> 57,4 d 7,139 e <sup>-</sup> σ 1,6	<b>Te 126</b> 18,95 σ 0,12 + 0,8
<b>Sb 116</b> 60 m 16 m ε β <sup>+</sup> 1,1 γ 1294; 973; 543...	<b>Sb 117</b> 2,8 h ε β <sup>+</sup> 0,6 γ 159... g	<b>Sb 118</b> 5,0 h 3,5 m ε β <sup>+</sup> ... γ 1230; 254; 1051...	<b>Sb 119</b> 38,5 h ε γ 24 e <sup>-</sup> g	<b>Sb 120</b> 5,76 d 15,9 m ε no β <sup>+</sup> ... γ 1171; 1023; 197; 90... β <sup>+</sup> 1,7... γ 1171...	<b>Sb 121</b> 57,36 σ 0,4 + 5,5	<b>Sb 122</b> 4,2 m 2,70 d β <sup>-</sup> 1,4; 2,0... h <sub>γ</sub> 61; 76... e <sup>-</sup>	<b>Sb 123</b> 42,64 σ 0,02 + 0,04 + 4,0	<b>Sb 124</b> 20 m 1,6 m 60,3 d h <sub>γ</sub> (11) e <sup>-</sup> β <sup>-</sup> 0,6; 2,3... β <sup>-</sup> 1,2 γ 603; 1691... h <sub>γ</sub> (25) e <sup>-</sup> 646... σ 17	<b>Sb 125</b> 2,77 a β <sup>-</sup> 0,3; 0,6... γ 428; 601; 636; 463... g; m

Рис. 23. Изотоп  $^{127}\text{I}$  и продукты фотонуклонных реакций на N-Z диаграмме.

На рис. 23 изображен фрагмент N-Z-диаграммы атомных ядер, на котором показаны продукты фотонуклонных реакций на изотопе  $^{127}\text{I}$ . В эксперименте наблюдались реакции  $^{127}\text{I}(\gamma, n)^{126}\text{I}$ ,  $^{127}\text{I}(\gamma, 3n)^{124}\text{I}$ ,  $^{127}\text{I}(\gamma, 4n)^{123}\text{I}$ ,  $^{127}\text{I}(\gamma, 5n)^{122}\text{I}$ ,  $^{127}\text{I}(\gamma, 6n)^{121}\text{I}$ ,  $^{127}\text{I}(\gamma, 5n1p)^{121}\text{Te}$ .

На рис. 24 изображены спектры остаточной активности образца йода, измеренные в течение 30 минут сразу после облучения и в течение 4 дней через один день после облучения.

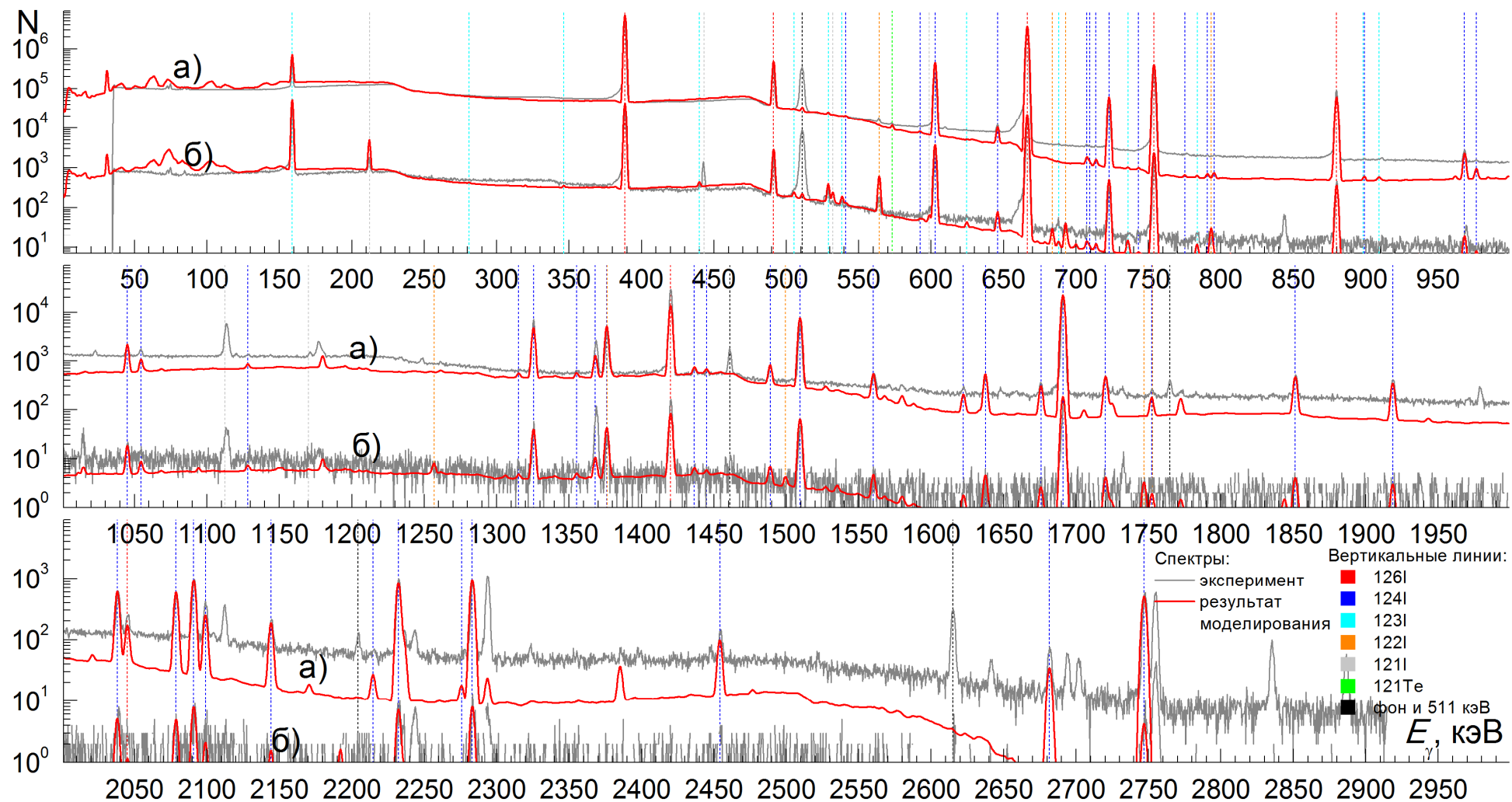


Рис. 24. Спектры остаточной активности образца  $^{127}\text{I}$ : а) – измеренные в течение 4 дней через один день после облучения, б) – измеренные в течение 30 минут сразу после облучения. Серая кривая – эксперимент, красная кривая – моделирование. Вертикальные пунктирные линии – наиболее интенсивные гамма-линии продуктов фотонуклонных реакций на  $^{127}\text{I}$  и фон (черные линии).

## 4.5 Анализ результатов

При моделировании экспериментов на изотопах  $^{197}\text{Au}$  и  $^{127}\text{I}$  наблюдаются те же эффекты, связанные со сложением пиков и регистрацией фона, что и при моделировании измерения гамма-спектров радиоактивных источников  $^{60}\text{Co}$  и  $^{152}\text{Eu}$ :

- 1) Из-за сложения энергии гамма-квантов в детекторе в измеренных спектрах появляются дополнительные максимумы, не воспроизводимые при моделировании. Например, максимумы 2122 и 2835 кэВ в спектре остаточной активности образца  $^{127}\text{I}$  образуются при сложении гамма-квантов с энергией 603 кэВ и 1509 и 2232 кэВ соответственно (бета-распад  $^{142}\text{I}$ ), а максимум при энергии 1114 кэВ в спектре остаточной активности образца  $^{197}\text{Au}$  образуется при сложении гамма-квантов с энергиями 356 и 758 кэВ (бета-распад  $^{196}\text{Au}$ ).
- 2) В области высокой энергии ( $> 1.5$  МэВ) значительную роль в измеренных спектрах играет фон, который не учитывается при моделировании.
- 3) Некоторые максимумы в измеренных спектрах остаточной активности имеют площадь в несколько раз меньшую, чем в рассчитанных. Например, в спектре  $^{197}\text{Au}$  максимум при энергии 521 кэВ имеет приблизительно в 10 раз меньшую площадь, чем в рассчитанном. Этот эффект связан с тем, что при распаде  $^{196}\text{Au}$  вылет гамма-кванта с энергией 521 кэВ с большой вероятностью сопровождается вылетом гамма-кванта с энергией 355 кэВ. Если оба этих гамма-кванта попадают в детектор, на выходе получается импульс, соответствующий их суммарной энергии, равной 876 кэВ. Этот максимум, действительно, наблюдается в измеренном спектре. Его образование приводит к ослаблению максимумов 521 и 355 кэВ.
- 4) Некоторые максимумы в измеренных спектрах остаточной активности имеют площадь в несколько раз или на несколько порядков большую, чем в рассчитанных. Например, в измеренном спектре остаточной активности образца  $^{197}\text{Au}$  максимум при энергии 689 кэВ имеет приблизительно в 1000 раз большую площадь, чем в рассчитанном. Этот эффект также связан с особенностью распада изотопа  $^{196}\text{Au}$ . Дело в том, что с большой вероятностью состояние 689 кэВ в дочернем ядре  $^{196}\text{Pt}$  распадается за счет двух последовательных переходов с энергиями 333 и 356 кэВ. При одновременном попадании двух гамма-квантов с этими энергиями в детектор, на выходе получается сигнал, соответствующий линии 689 кэВ. Прямой переход с энергией 689 кэВ также возможен, но имеет чрезвычайно низкую вероятность (0.006%), поэтому в рассчитанном теоретически спектре он практически не



выделяется из подложки. Однако за счет высокой интенсивности линий 333 и 356 кэВ в реальном эксперименте линия 689 кэВ хорошо видна.

- 5) Такие максимумы, обусловленные одновременным попаданием нескольких гамма-квантов в детектор, имеют свою комптоновскую подложку. Например, в измеренном спектре остаточной активности образца  $^{197}\text{Au}$  в области 350 – 690 кэВ комптоновская подложка обусловлена в первую очередь максимумом при энергии 689 кэВ.

## 5 Заключение

Был создан уникальный программный комплекс, позволяющий моделировать эксперименты по исследованию фотонуклонных реакций методом наведенной активности. Сравнение результатов расчета при помощи созданного комплекса и результатов реальных экспериментов показывает достаточно высокую точность моделирования. Основной источник расхождений результатов – одновременное попадание в детектор нескольких гамма-квантов, рождающихся при распаде одного ядра, приводящее к сложению их энергии и образованию нового максимума в спектре.

В первую очередь созданный комплекс полезен для планирования будущих экспериментов. Анализ результатов моделирования при различных параметрах облучения образца и измерения спектров позволяет подобрать оптимальные условия эксперимента и заранее определить исследовательский потенциал эксперимента.

Сравнение рассчитанных и измеренных экспериментально спектров позволяют более детально проанализировать результаты эксперимента, в частности, понять природу некоторых линий в спектрах.

Большая часть данных, используемых в расчете, автоматически скачивается из баз данных в интернете, за счет чего, во-первых, сам программный комплекс может работать на любом компьютере с подключением к интернету, и, во-вторых, в расчетах всегда используются самые последние данные.

## Литература

1. Shvedunov V. I., Ermakov A. N., Gribov I. V. // Nucl. Instrum. Methods in Phys. Research A 550, P. 39 (2005).
2. LUNDS homepage <http://ie.lbl.gov/toi/>
3. Nuclear wallet cards. National Nuclear Data Center (<http://www.nndc.bnl.gov/>)
4. Agostinelli S., Allison J., Amako K. et al. // Nuclear Instruments and Methods A 506. P. 250 (2003).

5. <http://www.talys.eu/>
6. Koning A. J., Hilaire S., Duijvestijn M. C. in “Proceedings of the International Conference on Nuclear Data for Science and Technology, April 22-27, 2007”, EDP Sciences, Nice, France, 2008, ed. By O.Bersillon, F.Gunsing, E.Bauge et al., P. 211.
7. Корецкы J., Maslov V. M., Reffo G. et al // Nucl. Data Sheets 110, P. 3107 (2009).
8. Ишханов Б.С., Юдин Н.П., Эрамжян Р.А. // ЭЧАЯ 31, С. 313 (2000).
9. TALYS USER MANUAL <http://www.talys.eu/fileadmin/talys/user/docs/talys1.2.pdf>
10. Chadwick M. B., Obloinský P., Hodgson P. E., Reffo G. // Phys. Rev. C. 44, P. 814 (1991).
11. Koning A. J., Duijvestijn M. C. // Nucl. Phys. A744, P. 15 (2003).
12. Cline C. K., Blann M. // Nucl. Phys. A172, P. 225 (1971).
13. Dobeš J., Běták E. // Zeit. Phys. A 310, P. 329 (1983).
14. Ишханов Б. С., Орлин В. Н. // ЭЧАЯ 38, С. 460 (2007).
15. Ишханов Б. С., Орлин В. Н. // ЯФ 71, С. 517 (2008).
16. Ишханов Б. С., Орлин В. Н. // ЯФ 74. С. 21 (2011).
17. Нильссон С., Деформация атомных ядер (ИИЛ, Москва, 1958), С. 232.
18. Stone N., Table of New Nuclear Moments, Preprint 1997 (a revision of the Table of Nuclear Moments by P. Raghavan (Atom. Data Nucl. Tables 42, 189 (1989))); URL=<http://www.nndc.bnl.gov/nndc/stonemoments>
19. Ишханов Б. С., Орлин В. Н. // ЯФ 68, С. 1407 (2005).
20. Л.Э. Эльсгольц, Дифференциальные уравнения и вариационное исчисление, Москва, 2002.
21. <http://nucleardata.nuclear.lu.se/nucleardata/toi/index.asp>
22. Ишханов Б. С., Капитонов И. М., Юдин Н. П.. Частицы и атомные ядра. Москва, 2005.
23. Кузнецов А. А., Курилик А. С.. Калибровка эффективности HPGe детектора по экспериментальным измерениям и моделированию GEANT4. 59 международное совещание по ядерной спектроскопии и структуре атомного ядра «ЯДРО 2009», Чебоксары, тезисы докладов, С. 314.
24. С. Ю. Трощев, в сб.: Труды X межвузовской научной школы молодых специалистов “Концентрированные потоки энергии в космической технике, электронике, экологии и медицине”, Москва, 2009, под ред. Б. С. Ишханова и Л. С. Новикова (КДУ, Москва, 2009), с. 174.

**Б.С. Ишханов, С.Ю. Трощев**

**МОДЕЛИРОВАНИЕ ГАММА-АКТИВАЦИОННЫХ ЭКСПЕРИМЕНТОВ**

Препринт НИИЯФ МГУ № 2012-3/881

Работа поступила в ОНТИ 09.08.2012