

Оптимальная настройка дискриминатора регистрирующего тракта спектрометра в ГР-эксперименте

С. В. СИНИЦЫН

Рассмотрен выбор оптимальной настройки дискриминатора регистрирующего тракта спектрометра в гамма-резонансном-эксперименте в геометрии прохождения. Установлено, что ширина «окна» дискриминатора должна составлять полторы ширины регистрируемого пика резонансного γ -излучения на половине его высоты. При этом положение середины «окна» дискриминатора должно соответствовать положению максимума регистрируемого пика резонансного γ -излучения.

The choice of optimal tuning of discriminator of spectrometer registering circuit in Mössbauer experiment in sample beam geometry is considered. It is determined that the width of discriminator «window» ought to be one and a half width of peak resonance gamma-radiation on half of its height. In that case the middle of «window» ought to correspond to the place of maximum of registered peak of resonance gamma-radiation.

В [1] была рассмотрена задача выбора оптимальной, толщины исследуемого образца с целью уменьшения статистической погрешности измерения в гамма-резонансном (ГР)-эксперименте в геометрии пропускания. Статистическую погрешность измерения можно уменьшить также другим способом, а именно, выбором оптимальной настройки дискриминатора регистрирующего тракта спектрометра. Задача выбора оптимальной настройки дискриминатора регистрирующего тракта спектрометра в ГР-эксперименте в геометрии пропускания не рассматривалась до сих пор в литературе. Решение данной задачи не имеет аналогов в физическом эксперименте, что обусловлено особенностями ГР-эксперимента в геометрии пропускания. Эти особенности заключаются в следующем. Во-первых, необходимо регистрировать γ -излучение, прошедшее исследуемый образец, который по своей природе представляет совокупность резонансного и нерезонансного фильтров γ -излучения. Параметры [1] исследуемого образца как резонансного, так и нерезонансного фильтров могут изменяться от эксперимента к эксперименту. Более того, достаточно часто на практике эти параметры и вовсе не известны. Во-вторых, в ГР-эксперименте настройку дискриминатора спектрометра проводят в «амплитудном» режиме, а спектр регистрируют во «временном» режиме работы спектрометра. Данное обстоятельство обуславливает сложную связь между величинами, измеряемыми в ГР-эксперименте, с одной стороны, интенсивностью регистрируемого γ -излучения и его энергетическим составом, с другой стороны. Следует отметить также, что часто на практике исследуемый образец имеет произвольную толщину. Поэтому рассмотрим задачу выбора оптимальной настройки дискриминатора регистрирующего тракта спектрометра, когда в ГР-эксперименте в геометрии пропускания исследуется образец неизвестного химического состава и произвольной толщины d .

В [1] указывалось, что проведение измерений в ГР-эксперименте в геометрии пропускания упрощается, если исключить из регистрируемого потока γ -квантов характеристическое рентгеновское излучение мессбауэровского источника. Поэтому будем считать далее, что присутствием характеристического рентгеновского излучения мессбауэровского источника можно пренебречь в регистрируемом потоке γ -квантов.

Известно, что при проведении ГР-эксперимента решаются следующие две основные задачи для исследуемого вещества: определение мессбауэровских параметров (изомерного сдвига, константы квадрупольного взаимодействия, эффективного магнитного поля на ядре) или идентификация фазового состава по положению моноклини на спектре;

определение вероятности эффекта Мессбауэра f' или концентрации с искомой фазы через измерение интенсивности спектра.

Согласно [2] решение последней задачи основано на измерении либо амплитуды A , либо площади S моноклини на ГР-спектре:

$$A = N_{\infty} - N_0, \quad (1)$$

$$S = \frac{4}{n_0} \sum_{i=1}^{n_s} (N_{\infty} - N_i), \quad (2)$$

где N_0 — число импульсов в резонансе; N_{∞} — фон, определяемый в результате обработки информации из n_f каналов спектра; N_i — число импульсов в i -ом канале спектра; n_s — число каналов в спектре; n_0 — выраженная в каналах спектра ширина резонансного энергетического уровня ядра мессбауэровского изотопа, используемого в ГР-эксперименте при отсутствии внешних магнитных и электрических полей.

С другой стороны, учитывая [1, 2], имеем

$$A = \alpha \beta [1 - I_0(\sigma_r d/2) \exp(-\sigma_r d/2)] \exp(-\mu_r d) \sqrt{tpI_S}; \quad (3)$$

$$S = \alpha \beta \pi \sigma_r d [I_0(\sigma_r d/2) + I_1(\sigma_r d/2)] \exp(-\mu_r d) \sqrt{tpI_S}; \quad (4)$$

$$N_{\infty} = [(1-\alpha) \exp(-\mu_{nr} d) + \alpha \exp(-\mu_r d) \sqrt{tpI_S}], \quad (5)$$

где α — доля резонансных γ -квантов в общем потоке регистрируемого γ -излучения мессбауэровского источника в отсутствие исследуемого образца; β — доля резонансных γ -квантов, испущенных без отдачи, в общем потоке резонансного γ -излучения мессбауэровского источника; μ_r и σ_r — коэффициенты соответственно нерезонансного и резонансного ослабления резонансных γ -квантов; μ_{nr} — коэффициент ослабления нерезонансных γ -квантов; t — время измерения спектра исследуемого образца; I_S — суммарная интенсивность γ -излучения, регистрируемая в «окне» дискриминатора при «амплитудном» режиме работы спектрометра и отсутствие исследуемого образца; p — коэффициент, связывающий I_S со скоростью счета γ -квантов в любом канале спектрометра при «временном» режиме его работы и отсутствие исследуемого образца; I_0 и I_1 — функции Бесселя соответственно нулевого и первого порядков.

Согласно [3] для γ -излучения энергии от 10 до 200 кэВ, что соответствует энергии γ -квантов, испускаемых мессбауэровскими источниками, коэффициент μ_r на два-три порядка превышает μ_{nr} . Кроме того, на практике выполняются соотношения $n_s \gg 1$ и $n_f \gg 1$. Тогда из (1), (3), (5) следует, что при определении f' или c , основанном на измерении A , относительная статистическая погрешность измерения имеет вид

$$\Delta_a = \frac{2\sqrt{1-\alpha+\alpha \exp(-\mu_r d)} \sqrt{1-A/N_{\infty}}}{\sqrt{tpI_S} \alpha \beta \pi \sigma_r d [I_0(\sigma_r d/2) + I_1(\sigma_r d/2)] \exp[-(\mu_r + \sigma_r/2)d]}. \quad (6)$$

Аналогично из (2), (3), (5) следует, что при определении f' или s , основанном на измерении S , относительная статистическая погрешность измерения

$$\Delta_s = \frac{2\sqrt{1-\alpha+\alpha\exp(-\mu_r d)} \sqrt{n_s}}{\sqrt{I_p I_S \pi \alpha \beta \sigma_r d I_0 (\sigma_r d/2) \exp[-(\mu_r + \sigma_r/2)d]}} \quad (7)$$

Чтобы определить мессбауэровские параметры или провести идентификацию фазового состава вещества, требуется установить положение монолиний на экспериментальном ГР-спектре. С этой целью необходимо выполнить математическую обработку последнего с помощью ЭВМ. В общем случае математическая обработка совокупности монолиний заданной формы. Точность этого приближения будет зависеть не только от используемой для математической обработки вычислительной программы, но и от Δ_A — относительной статистической погрешности измерения A . Из (1), (3), (5) имеем выражение для Δ_A , которое представляет собой соотношение «сигнал—шум»:

$$\Delta_A = \frac{\sqrt{1-\alpha+\alpha\exp(-\mu_r d)} \sqrt{1-A/N_\infty}}{\sqrt{I_p I_S \pi \alpha \beta \sigma_r d I_0 (\sigma_r d/2) \exp[-(\mu_r + \sigma_r/2)d]}} \quad (8)$$

По определению можно записать

$$\alpha = I_r / I_S, \quad (9)$$

причем, учитывая (5), имеем

$$I_r = \int_{E_1}^{E_2} \left(\frac{dI_r}{dE} \right) dE; \quad I_S = \int_{E_1}^{E_2} \left(\frac{dI_r}{dE} \right) dE + \int_{E_1}^{E_2} \left(\frac{dI_{nr}}{dE} \right) dE, \quad (10)$$

где dI_r/dE и dI_{nr}/dE — функции, описывающие регистрируемые спектры энергетических потерь соответственно резонансного и нерезонансного γ -излучений в результате их взаимодействия с детектором при отсутствии исследуемого образца.

Положение и ширина «окна» дискриминатора регистрирующего тракта спектрометра определяются положением нижней E_1 и верхней E_2 границ регистрации спектра энергетических потерь. Из (6)—(10) следует, что погрешности Δ_a , Δ_s , Δ_A представляют собой функции от E_1 и E_2 . Определим условия выбора оптимальных значений E_1 и E_2 , при которых Δ_a , Δ_s , Δ_A минимальны. Минимизируя (6)—(8) по E_1 и E_2 с учетом (9), (10), получаем следующее относительно простое условие нахождения E_1 и E_2 :

$$\left(\frac{dI_r}{dE} \right) / \left(\frac{dI_S}{dE} \right)_{E=E_1} = \left(\frac{dI_r}{dE} \right) / \left(\frac{dI_S}{dE} \right)_{E=E_2} = \alpha F(\alpha), \quad (11)$$

$$F(\alpha) = [2 - \alpha + \alpha \exp(-\mu_r d_{эф})]^{-1},$$

где $d_{эф}$ — некоторая эффективная толщина исследуемого образца, причем для случаев идентификации фазового состава, определения мессбауэровских параметров, получения f' и s через измерение A расчет дает

$$d_{эф} = d - \mu_r^{-1} \ln [1 - \beta [1 - I_0(\sigma_r d/2) \exp(-\sigma_r d/2)]],$$

а для случая определений f' и s через измерение S имеем

$$d_{эф} = d.$$

На спектре энергетических потерь регистрируемого γ -излучения пик полного поглощения γ -квантов диапазона энергий рентгеновского излучения имеет гауссову форму [4]. На рис. 1 представлен фрагмент спектра энергетических потерь резонансного γ -излучения энергии 14,4 кэВ мессбауэровского изотопа ^{57}Co , содержащий пик полного поглощения. Видно, что пик полного поглощения резонансного γ -излучения хорошо описывается гауссовой линией. Для простоты дальнейшего анализа будем полагать, что в области пика полного поглощения резонансного γ -излучения фон не меняется, т. е. функция dI_{nr}/dE постоянна. В связи с изложенным выше, рассмотрим решение уравнения (11), когда dI_r/dE представляет собой линию гауссовой формы, отношение амплитуды которой к фону равно η , и ширина данной линии на половине ее высоты ω_i . Тогда, согласно (11), положение середины «окна» дискриминатора должно соответствовать положению максимума регистрируемого пика резонансного γ -излучения на спектре энергетических потерь последнего. Ширина ω_i «окна» дискриминатора спектрометра, при которой достигается минимум относитель-

dI_r/dE , отн. сд.

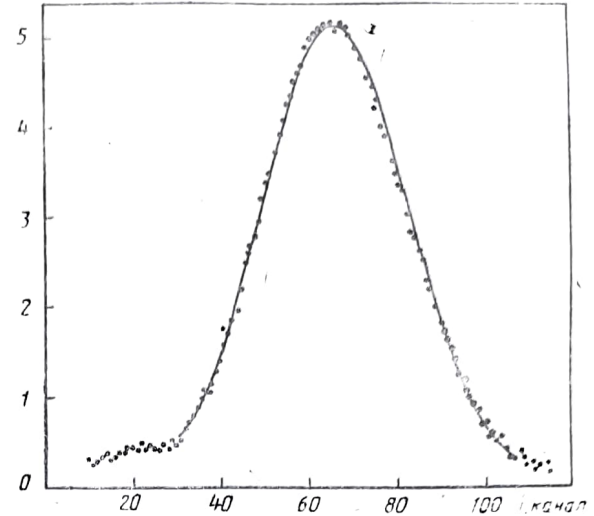


Рис. 1. Фрагмент спектра энергетических потерь резонансного γ -излучения мессбауэровского изотопа ^{57}Co при взаимодействии его со сцинтилляционным кристаллом $\text{NaI}(\text{Tl})$ толщиной около 100 мкм

ной статистической погрешности измерения в ГР-эксперименте, является корнем уравнения

$$2x = [\exp(x^2) - \eta \exp(-\mu_r d_{эф})] \int_0^x dy \exp(-y^2); \quad (12)$$

$$x = \omega_i \sqrt{\ln 2} / \omega_l.$$

Из (12) следует, что ω_i зависит не только от соотношения «сигнал—шум», но и от параметра $\mu_r d_{эф}$, который в общем случае определяется характеристиками исследуемого образца μ_r , σ_r , d и используемого мессбауэровского источника β . На рис. 2 показана зависимость ω_i от η для различных значений $\mu_r d_{эф}$. При отклонении значения ω от ω_i величина $\Delta_{a(s, A)}$ возрастает, как это показано для $\mu_r d_{эф} = 2$ (рис. 3). Условие $\mu_r d_{эф} = 2$ соответствует, в частности, случаю проведения ГР-эксперимента, когда концентрация анализируемого вещества мала в исследуемом образце [1]. Согласно рис. 3, при отклонении ω от ω_i в меньшую сторону величина $\Delta_{a(s, A)}$ возрастает больше, чем при отклонении ω от ω_i в большую сторону. Кроме того, при отклонении ω от ω_i рост $\Delta_{a(s, A)}$ уменьшается с увеличением η . В результате отклонения ω от

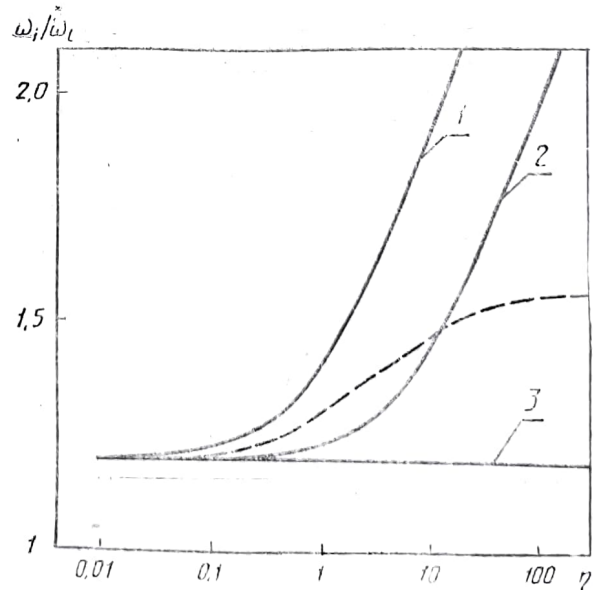


Рис. 2. Зависимости ω_i/ω_l (—) и ω_0/ω_l (---) от η для $\mu_r d_{эф} = 0; 2$ и ∞ (соответственно кривые 1, 2, 3)

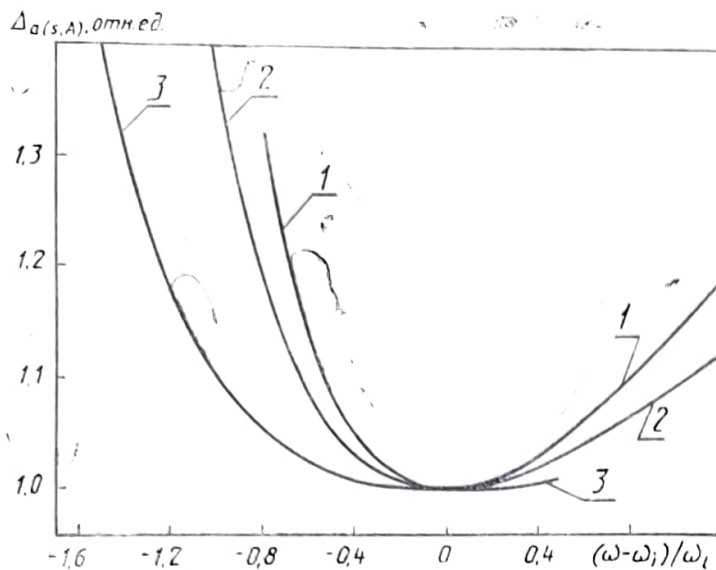


Рис. 3. Относительная зависимость $\Delta_{a(s, A)}$ от $(\omega - \omega_i)/\omega_i$ для $\mu_r d_{эф} = 2$ при $\eta = 1; 10; 100$ (соответственно кривые 1, 2 и 3)

ω_i возрастание $\Delta_{a(s, A)}$ становится большим с увеличением $\mu_r d_{эф}$ (рис. 4).

Как указывалось выше, достаточно часто в ГР-эксперименте характеристики исследуемого образца неизвестны. Например, при фазовом анализе значение σ_r может быть установлено только после определения концентрации искомой фазы. Поэтому рассчитать заранее ω_i не представляется возможным. В связи с этим возникает проблема выбора такого значения ω , при котором максимально возможная погрешность измерения A , f' и c была бы минимальна. Данное значение ω является оптимальным ω_0 . Согласно расчету, при оптимальной ширине «окна» дискриминатора относительное увеличение $\Delta_{a(s, A)}$ в результате отклонения ω от ω_i должно быть одинаково для двух крайних случаев: $d_{эф} = 0$ и ∞ (см. рис. 4). На рис. 2 приведены результаты расчета зависимости ω_0 от η . Согласно выполненному расчету, отношение ω_0/ω_i изменяется всего лишь от 1,4 до 1,6 в диапазоне значений η от 4 до 1000. Обычно в ГР-эксперименте при применении для регистрации резонансного γ -излучения сцинтилляционного, полупроводникового или газоразрядного детекторов значение η лежит именно в этом диапазоне. Как показывают расчеты и рис. 4, при $\omega = \omega_0$ и $\eta \leq 1000$ величина $\Delta_{a(s, A)}$ может превышать свое минимальное значение не

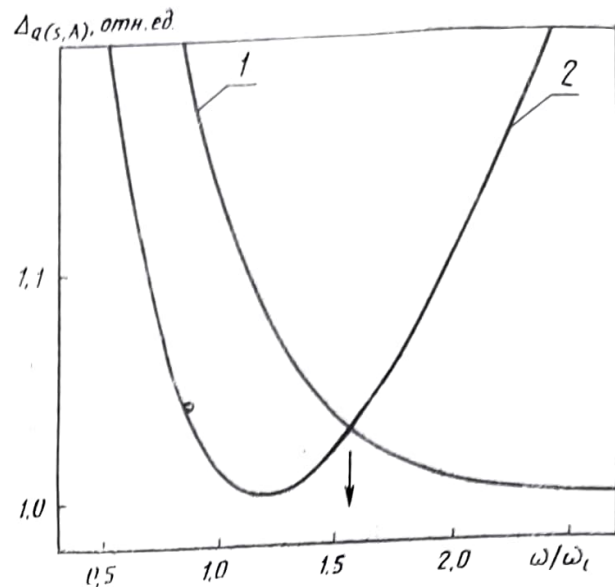


Рис. 4. Относительная зависимость $\Delta_{a(s, A)}$ от ω/ω_i при $\eta = 100$ для $\mu_r d_{эф} = 0$ и ∞ (соответственно кривые 1 и 2). Стрелкой указано значение ω_0/ω_i при $\eta = 100$

более, чем в 1,04 раза. Это не принципиально. Следовательно, не имеет смысла в каждом ГР-эксперименте устанавливать ширину «окна» дискриминатора равную ω_i . Достаточно в процессе эксплуатации мессбауэровского источника один раз установить ширину «окна», равной ω_0 .

Таким образом, можно сформулировать общее правило: в ГР-эксперименте в геометрии пропускания ширина «окна» дискриминатора регистрирующего тракта спектрометра должна составлять полторы ширины регистрируемого пика резонансного γ -излучения на половине его высоты. При этом положение середины «окна» дискриминатора должно соответствовать положению максимума регистрируемого пика резонансного γ -излучения.

ЛИТЕРАТУРА

1. Сеницын С. В. // ПТЭ. — 1992. — № 3. — С. 79.
2. Быков Г. А., Фам Зуи Хиен // ЖЭТФ. — 1962. — Т. 43. — Вып. 3(9). — С. 909.
3. Немец О. Ф., Гофман Ю. В. Справочник по ядерной физике. — Киев: Наукова думка, 1975.
4. Heydorn K., Lada W. // Analytical Chemistry. — 1972. — V. 44. — N 14. — P. 12313.