

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ПАКЕТА ORIGIN ДЛЯ ОБРАБОТКИ И АНАЛИЗА ДАННЫХ В ЛАБОРАТОРНОМ ПРАКТИКУМЕ ПО СПЕКТРОМЕТРИИ

Пасынков К.С., Качан С.М.

Белорусский национальный технический университет, г. Минск

Изучение энергетических спектров ионизирующих излучений позволяет идентифицировать радионуклидные источники и определять их активность. Наиболее наглядным и удобным способом обработки спектров является работа с их графическим представлением и выполнение сопутствующих расчетов с помощью средств автоматизации вычислений. Для этих действий можно использовать различные комбинации инструментов, но удобнее применять специализированное математическое ПО, которое одновременно позволяет проводить как визуализацию, так и численный анализ данных. Одним из примеров такого ПО служит научно-инженерный пакет Origin, разработанный в OriginLabCorporation.

При выполнении лабораторных работ по спектрометрии пакет Origin позволяет визуализировать спектры и проводить их математический анализ, аппроксимировать экспериментальные данные различными функциями, выполнять сопутствующие расчеты в табличной форме и др. Рассмотрим несколько примеров обработки спектров в версии Origin 2018.

Спектр, получаемый в ходе выполнения лабораторных работ, называется аппаратным спектром и представляет собой дискретное распределение по амплитуде электрических импульсов, полученных на выходе спектрометрического тракта, т.е. зависимость числа импульсов от номера канала регистрации спектрометра. Каждый канал регистрации соответствует определенному диапазону напряжения регистрируемого сигнала, а каждое значение напряжения можно сопоставить с энергией, которую передала детектору попавшая в него частица или гамма-квант. Величина переданной энергии, в свою очередь, зависит от конкретного процесса взаимодействия излучения данного типа с веществом детектора, потому аппаратный спектр (даже с вычетом фонового излучения) не является истинным энергетическим спектром излучения источника.

Важным этапом работы со спектрометром является его энергетическая калибровка, т.е. установление связи между номером канала k и зарегистрированной в этом канале энергией излучения E . В современных спектрометрах связь между величиной энергии, переданной частицей или гамма-квантом детектору, и амплитудой электрического сигнала на выходе спектрометра является линейной. Для выполнения энергетической калибровки требуется зарегистрировать аппаратные спектры источников с известными энергиями (т.н. эталонных источников)

и осуществить привязку этих энергий к характерным участкам спектра, отвечающим актам полного поглощения энергии ионизирующей частицы. Так, например, для гамма-излучения такой спектральной особенностью является пик полного поглощения (фотопик).

Вследствие дискретности записи показаний спектрометра и статистического разброса показаний в каждом отдельном канале, обусловленного случайным характером ядерных процессов, искомое положение центра фотопика может не соответствовать точке с максимальным записанным числом импульсов. Для нахождения номера канала, соответствующего пику полного поглощения (и, соответственно, энергии испущенного гамма-кванта), центральную точку пика необходимо определять статистическими методами.

Используя Origin для корректного определения максимума фотопика, нужно выделить необходимый участок спектра и провести аппроксимацию функцией Гаусса. Для этого выделяем область графика нажатием мыши в квадранте между осями, с помощью контекстного меню открываем окно PlotSetup, выделяем строку с графиком и в ней ячейку столбца Range, вызываем дополнительное меню появившейся кнопкой и устанавливаем границы отображения графика по оси абсцисс так, чтобы отображался только пик полного поглощения. Затем выделяем ломаную графика, выбираем Analysis – Fitting – SinglePeakFit – OpenDialog, в пункте Function выбираем Gauss и производим аппроксимацию. Затем можно вернуть полные границы отображения исходного графика. Итоговое изображение представлено на рисунке 1.

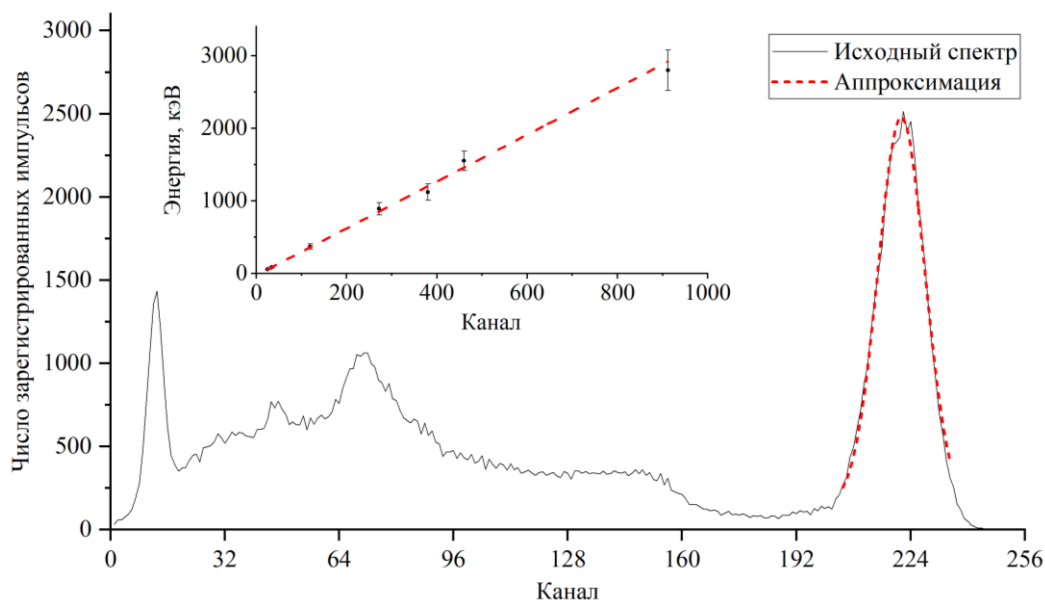


Рисунок 1 – Спектр гамма-излучения Cs-137 с аппроксимацией фотопика функцией Гаусса. На вставке: калибровочная зависимость энергии от канала регистрации

После получения требуемого для энергетической калибровки набора экспериментальных точек $E(k)$ их следует аппроксимировать линейной

функцией с учетом оцененных погрешностей. Для этого визуализируем экспериментальные точки на графике вместе с их погрешностями и в верхнем меню выбираем команды Analysis – Fitting – LinearFit – OpenDialog. На область графика будет добавлена аппроксимирующая прямая, а также таблица с ее параметрами, откуда можно непосредственно извлечь искомые коэффициенты линейной функции и их стандартную ошибку. Полученное изображение представлено на вставке рисунка 1 (таблица параметров скрыта).

В большинстве случаев излучение источника не является моноэнергетическим, и измеренный спектр содержит несколько пиков поглощения. При недостаточном энергетическом разрешении спектрометра пики могут накладываться друг на друга, сливаться. В таком случае для восстановления характеристик отдельных пиков можно использовать многопиковую аппроксимацию, раскладывая спектральный контур на отдельные составляющие (Analysis – PeaksandBaseline – MultiplePeakFit). При открытии диалога нужно установить функцию Гаусса как аппроксимирующую, а затем выделить в поле графика приблизительное местоположение пиков. Результат такой аппроксимации представлен на рисунке 2 (таблица параметров скрыта).

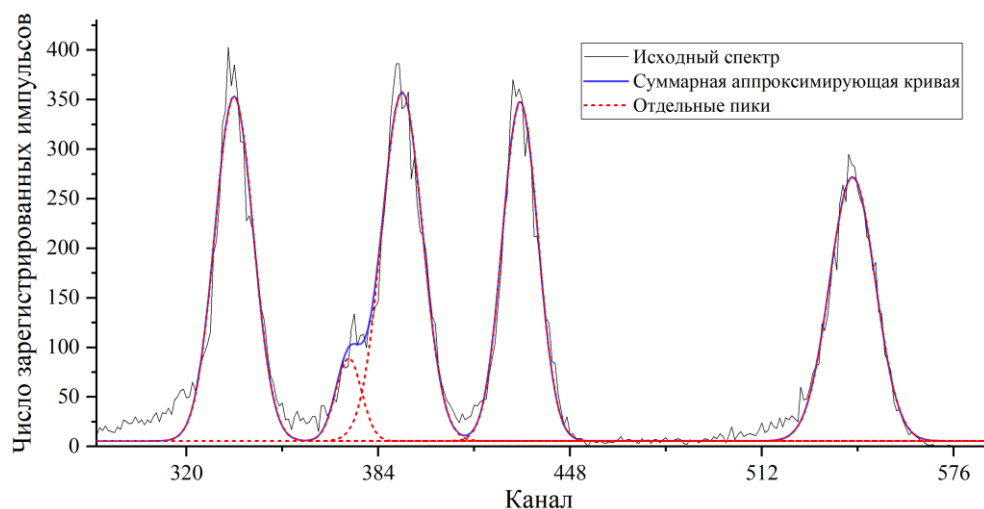


Рисунок 2 – Спектр альфа-излучения Ra-226 и результаты обработки в программе Origin

Таким образом, на примере отдельных этапов визуализации и анализа спектральных данных мы демонстрируем возможности пакета Origin для проведения быстрой, качественной и нетрудоемкой обработки спектрометрической информации.

Рассмотренные примеры используют лишь малую часть возможностей пакета Origin. Безусловно, полное освоение его функционала позволит эффективно и быстро проводить обработку и анализ массивов данных в любом виде научно-технической деятельности.