

VILNIAUS UNIVERSITETAS
FIZIKOS FAKULTETAS
BENDROSIOS FIZIKOS IR SPEKTROKOPIJOS KATEDRA

Antanas Bukartas

**RADIONUKLIDŲ DETEKTAVIMO EFEKTYVUMO VERTINIMAS MODELIOJANT
JONIZUOJANČIOSIOS SPINDULIUOTĖS SAVEIKOS SU MEDŽIAGA PROCESUS PAKETU
GEANT4**

Magistrantūros studijų baigiamasis darbas

Aplinkos ir cheminės fizikos studijų programa

Studentas	Antanas Bukartas
Darbo vadovas	dr. Artūras Plukis
Recenzentas	dr. Alytis Gruodis
Katedros vedėjas	prof. dr. (HP) Valdas Šablinskas

Vilnius 2016

Turinys

Įvadas	2
1 Teorija	5
1.1 Radioaktyvių branduolių skilimas	5
1.1.1 Alfa skilimas	5
1.1.2 Beta skilimas	5
1.1.3 Branduolių elektromagnetinio spinduliavimo teorija.....	6
1.2 Jonizuojančiosios spinduliuotės detektoriai	10
1.2.1 Gryno germanio puslaidininkiniai detektoriai	10
1.2.2 Organiniai scintiliatoriai	14
1.2.3 Fotodaugintuvai	17
1.3 Sutapčių svarba šaltinių aktyvumo vertinimui	18
1.3.1 Sutapčių svarba puslaidininkiniams detektoriams	19
1.3.2 Trigubų-dvigubų sutapčių santykio metodas	19
1.4 HPGe detektoriaus modeliavimas <i>Geant4</i> bibliotekų paketu	21
2 Tyrimo metodika	22
2.1 Modeliai aprašyti <i>Geant4</i> bibliotekomis	22
2.1.1 HPGe detektoriaus modelis.....	22
2.1.2 TDCR sistemos modelis	27
2.1.3 Plono polietilnaftalato scintiliacinio detektoriaus modelis.....	31
2.2 Modeliuoti ir eksperimentiškai matuoti bandiniai.....	32
2.3 Eksperimentai	33
3 Rezultatai ir jų aptarimas	34
3.1 Gama detektoriaus efektyvumo vertinimas <i>Geant4</i> modeliavimo paketu	34
3.1.1 Co-60 taškinio kalibracinio šaltinio modeliavimas	34
3.1.2 Ilgaamžių nuklidų aktyvumo nustatymas	36
3.1.3 Trumpaamžių nuklidų aktyvumo nustatymas.....	39
3.2 TDCR sistemos efektyvumo vertinimas <i>Geant4</i> modeliavimo paketu	39
3.2.1 H-3 skaičiavimo efektyvumo vertinimas.....	39
3.2.2 C-14 ir Tc-99 skaičiavimo efektyvumo vertinimas	41
3.2.3 Eksperimento ir modelio palyginimas	41
3.3 PEN scintiliatoriaus efektyvumo vertinimas.....	43
3.4 Apibendrinimas	44
Išvados	47
Literatūros sąrašas	48
Santrauka	51

Įvadas

Radioaktyvių nuklidų naudojimas yra labai paplitęs įvairiose srityse: nuo energetikos, mokslo, medicinos iki pramonės ir teismo ekspertizės. Bet kurioje srityje dažnai tenka identifikuoti bandinyje esančius radionuklidus ar nustatinėti nežinomo mėginio aktyvumą. Kadangi radionuklidų yra labai įvairių, pasižyminčių skirtingomis sąvybėmis (alfa, beta ar gama spinduliai [1]), yra sukurti efektyviausi šių radionuklidų tipų analizės metodai [2, 3]. Gama spinduoliams — gama spektroskopija puslaidininkiniais detektoriais [4], alfa spinduoliams — scintiliaciniai detektoriai, o beta nuklidams sukurtas specialus trigubų-dvigubų sutapčių santykio metodas [5].

Net ir pačių efektyviausių metodų tikslumas gali būti netenkinantis. Taip gali nutikti nustatinėjant tūrinių bandinių aktyvumą, trumpaampžių radionuklidų aktyvumą arba pasireiškiant tokiems fizikiniams procesams kaip sutaptys [6, 7], kurie daro įtaką matavimo tikslumui. Tokiu atveju labai naudinga pasinaudoti nepriklausomu metodu — modeliavimu, kuriuo būtų galima įvertinti fizikinių procesų, geometrinių parametrų bei detektoriaus medžiagų įtaką rezultatams [8–10].

Naudojant gama spektroskopijos metodus galima vertinti aplinkos užterštumą radionuklidais, vykdyti medicininio personalo apšvitos stebėseną, atlikti medžiagų tyrimus ir t.t. Tačiau tam tikrose situacijose esamas gama spektrometrijos tikslumas netenkina. Norint didinti branduolinės spektrometrijos tikslumą, reikia vertinti detektoriaus efektyvumą [11]. Paprastai tai atliekama eksperimentiškai išmatuojant žinomo efektyvumo ir sudėties jonizuojančios spinduliuotės šaltinį. Trumpaamžiams nuklidams ir tūriniams bandiniams sunku, o kartais praktiškai neįmanoma, vien tik eksperimentiniais matavimais nustatyti detektoriaus efektyvumą. Jį galima vertinti ir kitu metodu — modeliuojant [12].

Trigubų-dvigubų sutapčių santykio metodas — standartizuotas, pasaulyje plačiai naudojamas metrologijoje, pamatinių beta minus ar elektrono pagavos būdų skylančių radionuklidų aktyvumo vertinimo metodas [13]. Metodo esmė — sutapčių panaudojimas mėginio aktyvumo vertinimo netikslumui mažinti. Papildant Fizinių ir Technologijos Mokslų Centro, Metrologijos skyriaus eksperimentinius tyrimus [14] galima gauti vertingų žinių norint geriau suprasti ir įvertinti galimas matavimo paklaidas.

Brangių detektavimo sistemų, tokių kaip trigubų-dvigubų sutapčių santykio sistema ar puslaidininkinis gama spektrometras, alternatyva gali būti organiniai scintiliaciniai detektoriai. Šie detektoriai yra pigūs ir universalūs — jie gali būti pritaikyti tiek alfa, tiek beta ar gama spinduliuotei detektuoti. Tačiau tokie detektoriai pasižymi kiek prastesne skiriamąja geba. Tirta polietilnaftalato plėvelė, pasižyminti puikiais scintiliacinėmis sąvybėmis bei dideliu atsparumu aplinkos poveikiui [2].

Kaip nepriklausomas vertinimo metodas pasirinktas Monte-Karlo metodu veikiantis *Geant4* programinis paketas [15], modeliujantis darbe tiriamų nuklidų skilimo produktų sąveiką su detektoriumi medžiaga.

Darbo tikslas

Naudojantis *Geant4* programiniu paketu sukurti ir eksperimentiškai patikrinti jonizuojančiosios spinduliuotės detektorių modelius, kuriais būtų galima nustatyti alfa, beta ir gama, baigtinių matmenų,

šaltinių aktyvumą.

Uždaviniai

1. Sukurti ir eksperimentiškai patikrinti puslaidininkinio, gryno germanio kristalo, gama detektoriaus modelį, kuriuo būtų galima nustatyti kaskadiniu būdu skylančių tūrinių šaltinių aktyvumą.
2. Įgyvendinti organinio scintiliatoriaus pagrindu veikiančią trigubų-dvigubų sutapčių sistemos modelį, kuriuo būtų galima didinti pamatinių β^- radionuklidų aktyvumo nustatymo tikslumą.
3. Sukurti jonizuojančiosios spinduliuotės detektoriaus, pagaminto plono organinio scintiliatoriaus pagrindu, modelį, skirtą eksperimentinių tyrimų planavimui ir rezultatų analizei.

Padėka

Dėkoju darbo vadovui dr. Artūriui Plukiui už kantrybę, suteiktas žinias ir puikų vadovavimą mokslinio darbo metu, Fizinių ir Technologijos Mokslų Centriui už suteiktą galimybę naudotis moksline aparatūra. Dr. Arūnui Gudeliui už naudingas diskusijas gilinant žinias apie TDCR sistemos veikimo principus, bei TDCR bandinių paruošimą, Linai Gaigalaitei ir Eugenijui Garankinui už eksperimentinius rezultatus, bei dr. Alyčiui Gruodžiui už vertingus patarimus rengiant šį mokslinį darbą.

1 Teorija

1.1 Radioaktyvių branduolių skilimas

Skildami radioaktyvūs branduoliai pereina iš nestabilios būsenos į stabilią. Šio, tikimybinio proceso metu išspinduliuojama jonizuojančioji spinduliuotė (alfa, beta dalelės arba gama kvantai). Plačiau apie kiekvieną skilimo rūšį bus aptarta skyreliuose apačioje.

1.1.1 Alfa skilimas

Sunkūs branduoliai dažniausiai skyla spontaninės alfa dalelės (arba ${}^4\text{He}$ branduolio) emisijos metu. Skilimo tikimybę lemia tuneliavimo efektas aprašytas daugumoje branduolinės fizikos vadovėlių [1–3], skilimo pusperiodžiui vyraujant nuo kelių dienų iki daugelio tūkstančių metų. Skilimo procesas gali būti užrašytas:



čia X — skylantis nuklidas, Y — dukterinis nuklidas.

Nuklido skilimo metu yra išspinduliuojama viena arba kelios monoenergetinės alfa dalelės. Kiekvienam konkrečiam skilimui tarp motininio ir dukterinio nuklido (tarp pagrindinių būsenų) yra fiksuotas energijų skirtumas, kuris charakterizuoja skilimą [2].

1.1.2 Beta skilimas

Vienas iš dažniausiai pasitaikančių greitųjų elektronų šaltinių yra radionuklidas skylantis β^- būdu. Skilimą galima užrašyti:



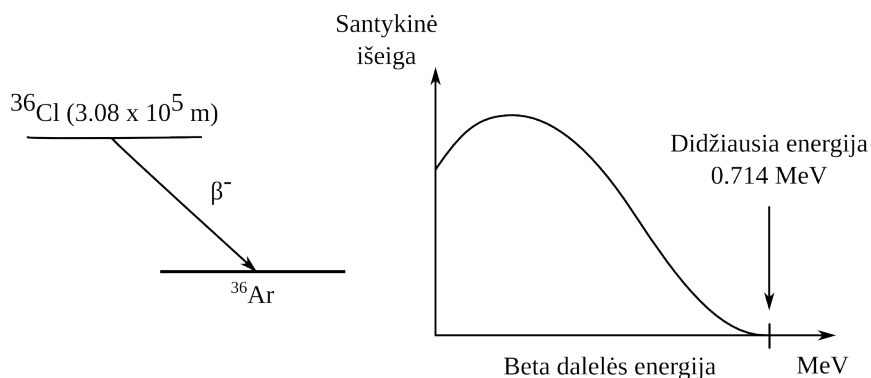
čia X ir Y yra pradinis ir galutinis nuklidas, o $\bar{\nu}$ — antineutrinas. Kadangi neutrinai su medžiaga praktiškai nesąveikauja, o branduolio Y atitransformacijos energija yra žemesnė negu jonizacijos slenkstis (paprastais metodais ji negali būti užfiksuota), pagrindinė β^- skilimo metu sukuriama spinduliuotė yra greitieji elektronai [2].

Kadangi dauguma nuklidų sukurtų neutronams bombarduojant stabilias medžiagas yra beta-aktyvūs, didelę beta radionuklidų dalį galima gauti reaktoriaus sraute. Taip pasigamina labai įvairaus pusamžio nuklidai, pusamžio vertėms svyruojant nuo tūkstančių metų iki kiek pasirinktinės minimalios vertės, kurios reikia konkrečiam radionuklido pritaikymui. Dauguma beta skilimų baigiasi dukterinio nuklido sužadintoje būsenoje su sekančia relaksacija išspinduliuojant gama kvantą, todėl dauguma beta radionuklidų yra ir gama spinduliuotės šaltiniai [2]. Tačiau yra ir gryni beta spinduliuotės šaltiniai, kurie skyla tiesiogiai į dukterinio nuklido pagrindinę būseną (1 lentelė).

Kiekvienas β^- skilimas gali būti charakterizuojamas tam tikra didžiausia skilimo energija. Kadangi branduolio atitransformacijos energija praktiškai nulinė, beveik visą energiją pasiskirsto išspinduliuojamas elektronas ir „nematomas“ antineutrinas. To pasekmė — kiekvieno skilimo metu išspinduliuojamas skirtingos energijos elektronas, energijai kintant nuo 0 iki maksimalios vertės [2]. Tipinis β^- skilimo

1 lentelė. Kai kurie grynieji β^- nuklidai.

Nuklidas	Pusamžis	Maksimali dalelės energija (MeV)
^3H	12.26 m	0.018
^{14}C	5730 m	0.156
^{35}S	87,9 d	0.167
^{45}Ca	165 d	0.252
^{63}Ni	92 m	0.067
^{99}Tc	$2.12 \cdot 10^5$ m	0.292
^{204}Tl	3.81 m	0.766



1 pav. ^{36}Cl skilimo schema ir beta dalelės energijos pasiskirstymas. Adaptuota pagal [2].

metu išspinduliuoto elektrono spektras pateiktas 1 paveikslėlyje.

Didžiausia energijos vertė tam tikram skilimui dažniausiai pateikiama darant prielaidą, kad skilimas vyksta tarp pagrindinių motininio ir dukterinio nuklido būsenų. Jei skilimas vyksta tarp pagrindinės ir sužadintos būsenos (motininio ar dukterinio nuklido), maksimali beta dalelių energijos vertė bus pastumta atsižvelgiant į skirtumą tarp sužadinimo energijų. Kadangi kai kuriose skilimo schemose gali egzistuoti skilimai tarp kelių sužadintų lygmenų, beta dalelės spektras gali susidaryti iš kelių komponentų su skirtingomis maksimalios energijos vertėmis [2].

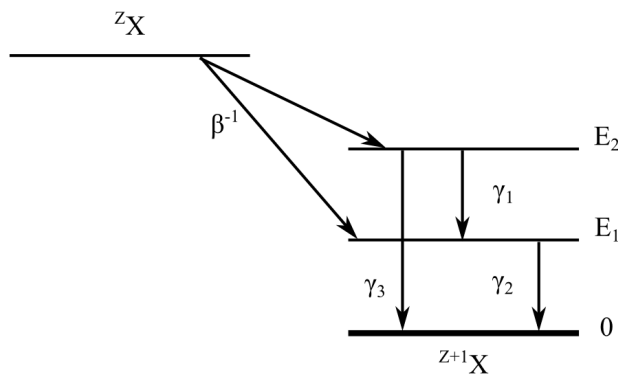
1.1.3 Branduolių elektromagnetinio spinduliavimo teorija

Gama (γ) spinduliuotė — sužadinto atomo branduolio relaksacijos metu išspinduliuotos elektromagnetinės bangos, kurių bangos ilgis daug mažesnis už atstumą tarp atomų kietame kūne [3]. Daugeliu atvejų skildamas radioaktyvus nuklidas pereina į sužadintosios būsenos dukterinį nuklidą, išspinduliuodamas alfa, beta dalelę arba elektrono pagavos metu. Vienas iš dukterinio nuklido, esančio sužadintoje būsenoje, relaksacijos į pagrindinį energetinį lygmenį būdų yra kaskadinės gama spinduliuotės emisijos metu. Nuklidui relaksuojant kaskadiniu būdu, branduolys išspinduliuoja keletą gama kvantų iš eilės. Tipinė sužadintųjų būsenų gyvavimo trukmė yra pikosekundžių eilės, todėl yra didelė tikimybė, kad kaskadiniu būdu išspinduliuoti gama kvantai, dėl mikrosekundžių eilės detektoriaus laikinės skyros, bus užfiksuoti vienu laiko momentu. Kadangi detektorius fiksuoja suminę gama kvanto

energiją atiduotą detektoriumi laiko momentu, dėl gama kvantų sutapčių užfiksuotų kvantų skaičius pilnos energijos smailėje gali būti didesnis, jei sutapties energija atitinka smailės energiją, arba mažesnis, jei energijos neatitinka.

2 paveikslėlyje pavaizduota kaskadiniu būdu skylančio nuklido energetinių lygmenų schema. Sužadintas dukterinis nuklidas esantis E_2 energetiniame lygmenyje relaksuoja į pagrindinį išspinduliuodamas $E_2 - E_1$ energijos kvantą γ_1 , ir E_1 energijos kvantą γ_2 .

Kitas įmanomas relaksacijos būdas yra tiesioginis išspinduliuojant $E_2 - E_0$ energijos gama kvantą γ_3 . Jeigu abu kaskadinio skilimo metu išspinduliuoti kvantai yra užfiksuojami detektoriuje, tai dėl sutapčių $E_2 - E_0$ energijos kvantų bus užfiksuota santykinai daugiau, o $E_2 - E_1$ ir E_1 energijos kvantų bus užfiksuota atitinkamai mažiau.



2 pav. Tipinė ${}^Z\text{X}$ radioaktyvaus branduolio β^- skilimo energetinių lygmenų schema. Adaptuota pagal [3].

Dėl impulso momento tvermės dėsniu branduolio impulso momentas (sukinys) ir išspinduliuoto gama kvanto impulso momento vektorinė suma susijusi su pradiniu branduolio sukiniu sąryšiu [3]:

$$\mathbf{L}_{J_a} = \mathbf{L}_{J_b} + \mathbf{I} \quad (3)$$

čia J_a pradinės branduolio būsenos pilnutinio impulso momento kvantinis skaičius, J_b galutinės branduolio būsenos pilnutinio impulso momento kvantinis skaičius, \mathbf{L}_{J_a} ir \mathbf{L}_{J_b} pradinės ir galutinės branduolio būsenos pilnutinio impulso momento vektoriai, o \mathbf{I} yra išspinduliuoto gama kvanto impulso momento vektorius. Galima išreikšti išspinduliuoto gama kvanto impulso momento vektorių lygybe:

$$\mathbf{I} = \mathbf{L}_{J_a} - \mathbf{L}_{J_b} \quad (4)$$

Kadangi pradinė ir galutinė branduolio būsenos yra kvantuotos impulso momento J vertės (J_a ir J_b), tai išspinduliuoto gama kvanto impulso momentas taip pat turi būti kvantuotas. Pagal kvantinės mechanikos impulso momentų sudėties taisyklę [3]:

$$|J_a - J_b| \leq l \leq |J_a + J_b| \quad (\text{išskyrus } l = 0) \quad (5)$$

o kvanto impulso momento projekcijos kvantinis skaičius:

$$m = m_{J_a} - m_{J_b} \quad (6)$$

Iš to išplaukia, kad branduoliui išspinduliuojant elektromagnetinės spinduliuotės kvantą, branduolio impulso momentas būna orientuotas tam tikra kryptimi išspinduliuoto kvanto impulso momento vektoriaus krypties atžvilgiu.

Visą branduolio elektromagnetinę spinduliuotę galima apibrėžti indeksu L , kai 2^L yra multipolinės spinduliuotės eilė ($L = 1$ dipolinė, $L = 2$ kvadrupolinė, $L = 3$ heksapolinė, ir t.t.) Kadangi elektromagnetinės multipolinės spinduliuotės lyginumas [1]:

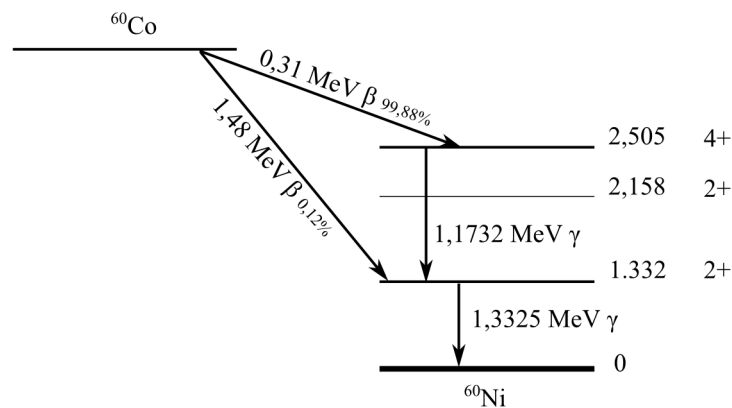
$$\begin{aligned} \pi(ML) &= (-1)^{L+1} \text{ magnetiniams šuoliams,} \\ \pi(EL) &= (-1)^L \text{ elektriniams šuoliams,} \end{aligned} \quad (7)$$

tai galima nustatyti, ar konkretus šuolis bus magnetinis ar elektrinis. Jeigu šuolio metu lyginumas nepasikeičia ($\Delta\pi = ne$), tada spinduliuotės laukas turi būti lyginis, o jeigu lyginumas pasikeičia ($\Delta\pi = taip$), spinduliuotės laukas turi būti nelyginis. Iš 7 lygties matome, kad šuolis, kurio metu lyginumas nepasikeičia, bus sudarytas iš lyginių elektrinių ir nelyginių magnetinių multipolių, o šuolis, kurio metu lyginumas pasikeičia, bus sudarytas iš lyginių magnetinių ir nelyginių elektrinių multipolių. Iš čia gauname impulso momento ir lyginumo atrankos taisykles:

$$\begin{aligned} |J_a - J_b| \leq l \leq |J_a + J_b| & \quad (\text{išskyrus } l = 0) \\ \Delta\pi = ne & \quad \text{lyginė elektrinė, nelyginė magnetinė} \\ \Delta\pi = taip & \quad \text{lyginė magnetinė, nelyginė elektrinė} \end{aligned} \quad (8)$$

Multipolinės spinduliuotės tikimybė sparčiai mažėja didėjant l . Šuoliai, kurių metu branduolio impulso momentas pasikeičia daugiau negu vienetu yra vadinami draudžiamaisias, tačiau skirtingai nei atomo fizikoje, kadangi branduolys yra izoliuotas nuo aplinkos ir negali relaksuoti kitais būdais, tai draudžiamieji šuoliai branduolyje vistiek vyksta, tiesiog draustinių šuolių tikimybė eilėmis mažesnė negu leistinų šuolių, ir jie vyksta labai retai.

Branduoliai, kurių relaksacija gali vykti per daugiau nei vieną energetinį lygmenį iš sužadintos būsenos į pagrindinę gali pereiti spinduliuodami tam tikros energijos gama kvantus paeiliui. Toks relaksacijos būdas vadinamas kaskadiniu spinduliuavimu. Kadangi bet kokia fizikinė sistema stengiasi kuo greičiau pereiti į mažiausią energetinį lygmenį, taip ir sužadintas branduolys relaksuoja greičiausiai energiją nusinešančiu būdu. 2 paveikslėlyje pateiktoje branduolio β^- skilimo schemoje matomas pats greičiausias branduolio relaksacijos kelias iš E_2 energetinio lygmenio — išspinduliuoti E_2 energijos kvantą γ_3 ir pereiti tiesiogiai į pagrindinę būseną. Tačiau ne visada toks šuolis yra labiausiai tikėtinas. Branduolio spinduliuojamųjų šuolių tikimybė priklauso nuo to šuolio draustinumo. Kuo



3 pav. Co-60 skilimo diagrama. Pavaizduoti β^- skilimo procesai su šuolių tikimybėmis. Nurodyti Ni-60 energetinių lygmenų schema su lygmenų energijomis ir pilnu branduolio sukiniu. Adaptuota pagal [3].

šulio tikimybė mažesnė tuo draustinumas didesnis.

Taigi, kai tiesioginio branduolio relaksacijos šulio tikimybė yra daug mažesnė, negu šulio į žemesnį energetinį lygmenį E_1 , sužadintas branduolys relaksuoja per tarpinį energetinį lygmenį, t.y. kaskadinės relaksacijos metu. Ni-60 (Co-60 skilimo dukterinis nuklidai) vienas iš nuklidų relaksuojančių kaskadiniu būdu. 3 paveikslėlyje pateikta Co-60 skilimo diagrama. Kadangi Ni-60 turi tris sužadintosios būsenos lygmenis — iš viso galimi šeši šuoliai. Atidžiai panagrinėjus skilimo diagramą, galima pastebėti, kad visi šuoliai yra draustini, tačiau dažniausiai relaksacija vyksta kaskadomis išspinduliuojant 1,1732 MeV ir 1,3325 MeV energijos gama kvantus. Taip yra, nes aukštesnės multipolinės spinduliuotės šuoliai yra labiau draustini (pvz. iš 4+ į 0), todėl jų tikimybė yra mažesnė.

Branduoliui relaksuojant kaskadiniu būdu per tarpinį energetinį lygmenį dėl pikosekundžių eilės sužadinto branduolio energetinių būsenų gyvavimų trukmės gali pasireikšti branduolio pilnutinio impulso momento orientacijos įtaka sekančiam kaskadinio spinduliavimo kvantui [1]. Branduolio impulso momentas, išspinduliuavus pirmą kaskadinį kvantą, tam tikrą laiką lieka orientuotoje būsenoje. Jei branduolio impulso momentui būnant orientuotoje būsenoje yra išspinduliuojamas sekantis kaskadinis kvantas, yra stebimas antro kvanto kampinis pasiskirstymas pirmo kvanto krypties (branduolio impulso momento orientacijos) atžvilgiu. Kvantų kampinio pasiskirstymo koreliacijos koeficientas — tai antrinio kvanto su anizotropiniu (įtakotu branduolio orientacijos) kampiniu pasiskirstymu santykis su pirminiu izotropiškai išspinduliuotu kvantu, kurio atžvilgiu yra orientuotas antrinio kvanto kampinis pasiskirstymas.

$$W(\theta) = \frac{A(\theta)}{I(\theta)} \quad (9)$$

Šis koreliacijos koeficientas gali būti išreiškiamas Ležandro polinomų suma [7]:

$$W(\theta) = 1 + A_{22}P_2(\cos \theta) + A_{44}P_4(\cos \theta) \quad (10)$$

čia $W(\theta)$ — koreliacijos funkcija, A_{22}, A_{44} — koreliacijos koeficientai multipoliniam šuoliui, $P_n(x)$ — n -tos eilės Ležandro polinomas. Ležandro polinomų suma gali būti išreikšta kosinuso funkcijų suma. Kadangi kvadrupolinės spinduliuotės koeficientai yra žinomi ($A_{22} = 0,102$, $A_{44} = 0,0091$), koreliacijos funkciją galima išreikšti taip [11]:

$$W(\theta) = 1 + \frac{1}{8} \cos^2 \theta + \frac{1}{24} \cos^4 \theta \quad (11)$$

1.2 Jonizuojančiosios spinduliuotės detektoriai

Šiame skyriuje bus aprašyti fizikiniai procesai, vykstantys gryno germanio puslaidininkiniuose detektoriuose (HPGe) ir organiniuose scintiliatoriuose. Taip pat aprašyti ir fotodaugintuvo veikimo principai, nes jie reikalingi scintiliatoriaus išspinduliuotų fotonų pavertimui elektriniais impulsais.

1.2.1 Gryno germanio puslaidininkiniai detektoriai

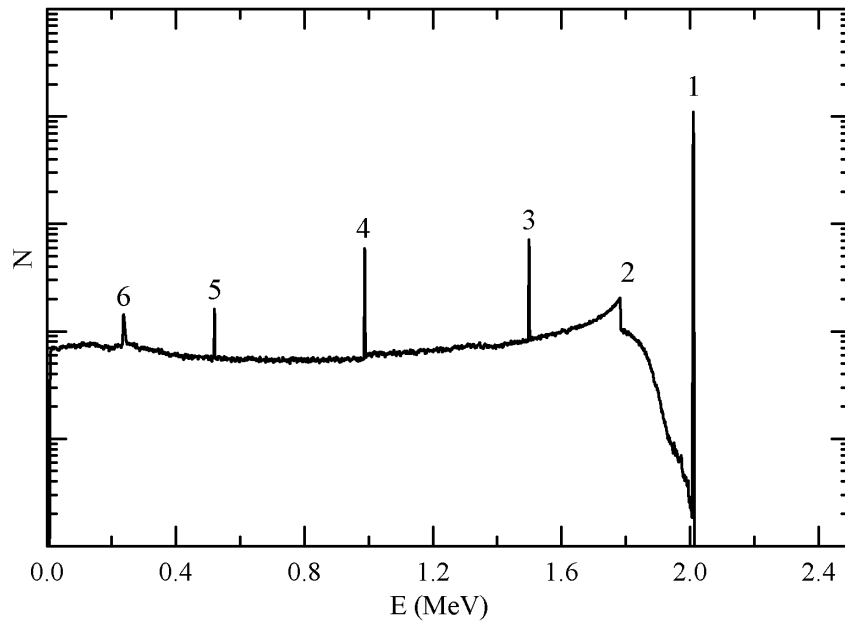
Gryno germanio detektoriai (HPGe) yra jonizuojančiosios spinduliuotės detektoriai, kuriuose sukurtos krūvininkų poros yra surenkamos tiesiogiai. Gama spinduliuotės energijų srityje šių detektorių energinė skyra yra ženkliai geresnė negu scintiliacinių detektorių, todėl puslaidininkiniais detektoriais galima fiksuoti daug detalesnį gama spektrą [16]. Puslaidininkiniai detektoriai dažniausiai gaminami dviejų geometrijų: plokšti ir koaksialiniai.

Pagrindiniai jonizuojančiosios spinduliuotės sąveikos su medžiaga fizikiniai procesai fiksuojami detektoriuje yra fotoelektrinė kvantų sugertis, Komptono sklaida ir porų kūrimas. Visi šie procesai gama spinduliuotės kvantui sąveikaujant su detektoriaus ir aplinkos medžiaga yra svarbūs, nes tiesiogiai įtakoja sukurtų elektronų ir skylių krūvininkų porų skaičių, kurios yra surenkamos detektoriaus kontaktuose dėl sudaryto elektrinio lauko. Nuo surinktų krūvininkų skaičius priklauso fiksuojama perduota suminė energija detektoriumi, todėl visi minėti procesai turi specifinius požymius fiksuojamuose gama spektruose. Pagrindiniai bet kokį detektorių nusakantys parametrai yra efektyvumas ir energinė skyra.

Fotoelektrinės kvantų sugerties metu gama kvantas sąveikauja su surištu elektronu. Kvantas, visą savo energiją perduodamas elektronui, jį išlaisvina su energija E_e ir pagal judesio kiekio tvermės dėsnį branduoliui suteikia atitranskoms energiją. Tačiau ši energija yra keliomis eilėmis mažesnė, todėl 12 lygtyje neįskaitoma.

$$E_e = E_\gamma - E_b \quad (12)$$

čia E_e — elektrono energija, E_γ — gama kvanto energija, E_b — ryšio energija. Elektrono vietoje su-



4 pav. Tipinis 2 MeV energijos gama spinduliuotės šaltinio spektras. Spektre matoma pilnos sugerties fotosmailė (1), Komptono sklaidos kraštas (2), viengubo (3) ir dvigubo (4) pabėgimo smailės, anihiliacijos smailė (5) ir atbulinės sklaidos smailė (6). Adaptuota pagal [4].

kuriama skylė, kuriai relaksuojant atomas išspinduliuoja būdingosios rentgeno spinduliuotės kvantus arba Ožė elektronus. Jeigu fotoelektrinė kvantų sugertis vyksta medžiagoje, tai išspinduliuotos dalelės sąveikaudamos su aplinkiniais atomais visą kvanto energiją perduoda supančiai medžiagai.

Komptono sklaida — neelastinė gama kvantų sklaida surištaisias elektronais. Vykstant Komptono sklaidai, E energijos gama kvantas neelastiškai sąveikauja su medžiagos elektronu, sąveikos metu pakeisdamas judėjimo kryptį ir dalį savo energijos perduodamas elektronui. Išsklaidyto kvanto energija:

$$E' = E[1 + \alpha(1 + \cos\theta)] \quad (13)$$

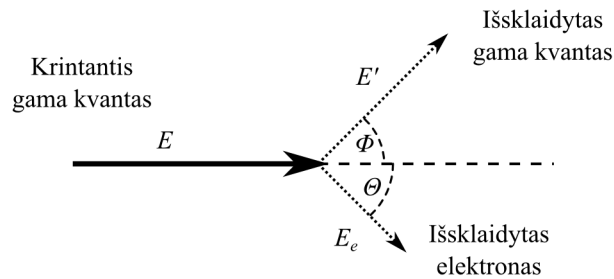
čia θ — sklaidos kampas, $\alpha = \frac{E}{m_0c^2}$. Išsklaidyto elektrono energija:

$$E_e = E \cdot \left\{ 1 - \frac{1}{[1 + \alpha(1 - \cos\theta)]} \right\} \quad (14)$$

Kampai θ ir ϕ susieti sąryšiu:

$$\tan \Phi = \frac{1}{[1 + \alpha \cdot \tan(\theta/2)]} \quad (15)$$

Kai gama kvanto energija viršija kelis MeV, porų kūrimas tampa dominuojančiu fizikiniu procesu. Branduolio kuriamame Kulono lauke kvanto energija paverčiama į pozitrono ir elektrono porą. Norint kad vyktų šis sąveikos procesas, gama kvanto energija turi būti dvigubai didesnė negu elektrono rimties masė (1022 keV). Perteklinė energija:



5 pav. Komptono sklaidos schema. Adaptuota pagal [3]

$$E_p = E_\gamma - 2 \cdot m_0 c^2 \quad (16)$$

virsta kinetine pozitrono ir elektrono energija.

Fotoelektrinės kvantų sugerties tikimybė tiesiogiai priklauso nuo atominio skaičiaus Z^5 , ir atvirkščiai nuo $E_\gamma^{3,5}$, Komptono efekto tikimybė mažėja didėjant kvantų energijai, o porų kūrimas pradeda dominuoti kelių MeV energijų srityje [1, 3].

Visi anksčiau paminėti fizikiniai procesai pasireiškia gama spektruose. Kurie procesai bus dominuojantys, priklausys nuo šaltinio spinduliuojamų kvantų energijos. Fotoelektrinės kvantų sugerties rezultatas yra pilnos kvanto energijos sugerties fotosmailė (Full Energy Peak — FEP). Šios smailės yra didžiausias informacijos šaltinis gama spektruose, tačiau dėl vykstančių fizikinių procesų visumos spektre taip pat atsiranda ir Komptono kontinuumo spektras, kai kvantas sąveikauja su detektoriumi Komptono sklaidos būdu atiduodamas tik dalį savo energijos. Dėl porų kūrimo atsiranda viengubo, dvigubo pabėgimo bei anihiliacijos smailės ties 0,511 MeV, 1,22 MeV ir 0,511 MeV energijomis.

Kadangi gama spinduliuotės sąveikos su medžiaga tikimybės yra mažos palyginti su alfa ar beta spinduliuote, tai gama detektorių efektyvumas būna daug mažesnis negu 100 %. Todėl norint įvertinti į detektorių pataikiusių kvantų skaičių pagal užfiksuotų impulsų skaičių reikia žinoti detektoriaus efektyvumą:

$$\epsilon_{abs} = \frac{\text{užfiksuotų impulsų skaičius}}{\text{šaltinio išspinduliuotų kvantų skaičius}} \quad (17)$$

tačiau šis parametras priklauso ne tik nuo pačio detektoriaus, bet ir nuo skaičiavimo geometrijos (pagrindė nuo šaltinio atstumo iki detektoriaus). Todėl dažnai naudojamas kitas parametras — savitasis efektyvumas:

$$\epsilon_{int} = \frac{\text{detektoriaus užfiksuotų impulsų skaičius}}{\text{į detektorių pataikiusių kvantų skaičius}} \quad (18)$$

šis parametras nebeįskaito detektoriumi tenkančio erdvinio kampo šaltinio atžvilgiu. Savitasis detektoriaus efektyvumas priklauso tik nuo detektoriaus medžiagos parametrų ir detektoriaus storio. Efektyvus detektoriaus storis priklauso nuo krentančių kvantų krypties — į plokščios geometrijos detektorių

statmenai kristalui krentantis kvantas turės daug mažesnę atstumą detektoriaus medžiagoje atiduoti energijai nei išilgai kristalo krentantis kvantas. Naudojant žinomo efektyvumo detektorius, galima įvertinti šaltinio aktyvumą [2]:

$$S = N \frac{4\pi}{\epsilon_{ip} \Omega} \quad (19)$$

čia S — šaltinio išspinduliuotų kvantų skaičius, N — užfiksuotų impulsų skaičius, ϵ_{ip} — savasis detektoriaus smailės efektyvumas, Ω — erdvinis detektoriaus kampas.

Detektoriaus užfiksuoti FEP gama kvantai spektre matomi smailių pavidalu. Šių smailių plotį nusako detektoriaus energinė skyra. Kuo spektre užfiksuota smailė siauresnė, tuo geriau galima išskirti greta esančias smailes, tuo aukštesnė (geresnė) detektoriaus energinė skyra. Puslaidininkinio detektoriaus energinę skyrą pagrįsde apibrėžia šie parametrai:

1. Krūvininkų porų sukūrimo statistika
2. Konkretaus detektoriaus parametrai (kaip gerai detektoriuje surenkami sukurti krūvininkai)
3. Triukšmas elektronikoje

Pagrindinis parametras, apibūdinantis porų sukūrimo statistiką, yra puslaidininkinio detektoriaus draustinės juostos plotis. Vienakristalio germanio draustinės juostos plotis $e = 0,69$ eV ties 77 K temperatūra, tačiau norint sukurti elektrono-skyklės krūvininkų porą reikia $e = 2,69$ eV energijos Ge kristale ir $e = 3,7$ eV Si kristale [4]. Papildoma energija išsklaidoma kaip kristalo gardelės fononai. Kadangi gama kvanto, kurio energija E_γ , vidutinis sukurtų krūvininkų skaičius: $N = E_\gamma/e$, kvantų energijos pasidalinimas su skirtingomis sužadavimo modomis nėra visiškai stochastinis. Tai sukuria krūvininkų porų skaičiaus nuokrypius nuo tikrosios vertės. Būtent dėl šios priežasties monoenerginė kvantų pilnos sugerties smailė išplinta [4]. Detektoriaus užfiksuoto spektro FEP smailės pilnas plotis pusėje aukščio (FWHM) W_T gali būti apskaičiuojamas:

$$W_T^2 = W_D^2 + W_X^2 + W_E^2, \quad (20)$$

čia W vertės dešinėje lygties pusėje apibūdina smailės plotį dėl konkrečių procesų įtakos: W_D — smailės plotis tik dėl krūvininkų pernešimo statistikos, W_X — dėl krūvininkų surinkimo statistikos ir W_E — dėl elektroninio triukšmo. Pirmasis iš šių faktorių — W_D apibūdina detektoriuje sukurtamų krūvininkų skaičiaus fliktuacijas

$$W_D^2 = (2,35)^2 F \cdot \varepsilon \cdot E_\gamma, \quad (21)$$

čia F — Fano faktorius konkrečiam detektoriumi, ε — energija reikalinga sukurti vienai elektrono-skyklės porai, E_γ — gama spektrinės smailės energija. Šis faktorius vertinamas kiekvienam detektoriumi

atskirai. Taip pat, dėl nepilno krūvininkų surinkimo ar triukšmo elektronikoje galimi FEP smailės formos nukrypimai nuo idealios normalinio skirstinio formos. Prastai surenkant ar krūvininkams rekombinuojant kristale, FEP smailėje atsiranda žemų energijų uodega, į kurią reikia atsižvelgti vertinant spektrus.

1.2.2 Organiniai scintiliatoriai

Fluorescencija organiniuose scintiliatoriuose yra įmanoma dėl šuolių tarp molekulės energijos lygmenų, kuri gali būti stebima tam tikroms molekulėms nepriklausomai nuo jų fizinio būvio. Pavyzdžiui, antracenas pasižymi fluorescencinėmis sąvybėmis tiek kietame polikristaliniame, dujiniame ar skystame būvyje tirpale. Toks elgesys būdingas tik organiniams scintiliatoriams, priešingai kristaliniams (pvz. NaI), kuriems būtina kristalinė struktūra.

Dauguma praktikoje naudojamų organinių scintiliatorių pasižymi organinių molekulių struktūros simetrija, kuri leidžia susiformuoti π – elektronų struktūrai. Tokios π – elektroninės struktūros molekulės energetinių lygmenų diagrama pavaizduota 6 paveikslėlyje.

Energija gali būti sugerta sužadinant elektroną į bet kurią energetinį lygmenį. Singuletinės būsenos (sukinys — 0) pažymėtos S_0, S_1, S_2, \dots . Panašus rinkinys tripletinių (sukinys — 1) būsenų pavaizduota T_1, T_2, T_3, \dots . Tarpas tarp tokių organinių scintiliatorių molekulių lygmenų S_0 ir S_1 dažniausiai būna apie 3–4 eV, o tarp aukštesnių lygmenų šis tarpas būna šiek tiek mažesnis. Kiekvienas iš tokių elektroninių lygmenų yra išsiskaidęs į dar daugiau smulkesnių vibracinių lygmenų. Tipinis tarpas tarp energetinių lygmenų apie 0.15 eV. Šios būsenos dažniausiai būna nurodomos prie pagrindinio energetinio lygmens skaičiaus pridėdant dar vieną indeksą, pvz. S_{00} — žemiausias vibracinis energetinis lygmuo. Kadangi tarpai tarp vibracinių lygmenų yra didesni nei vidutinė terminė energija (0.025 eV), beveik visos molekulės kambario temperatūroje būna S_{00} būsenoje [2].

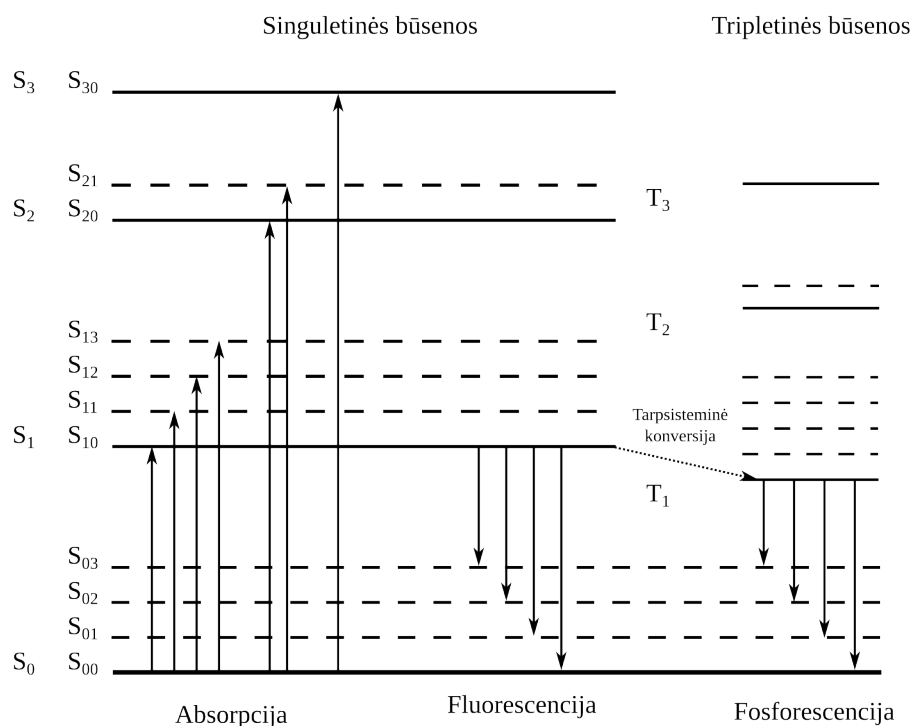
Organinio scintiliatoriaus atveju krintančios dalelės kinetinės energijos sugerties procesai

Aukštesniosios elektroninės būsenos labai greitai (ps eilės) relaksuoja į S_1 lygmenį nespinduliniu vidinės konversijos būdu. Taip pat, bet kokia būsena, su pertekline vibracine energija relaksuoja į pagrindinę vibracinę būseną. Taigi, kinetinės absorbcijos proceso pasekmė — tam tikras skaičius molekulių, kurios yra sužadintoje S_{10} būsenoje. Pagrindinė scintiliacijos proceso metu išspinduliuota šviesa yra spinduliuotė, gaunama vyksmo, molekulėms relaksuojant iš S_{10} būsenos į bet kurią pagrindinio elektroninio lygmens vibracinę būseną S_{1n} , metu. Jei tarsime, kad τ — fluorescencijos iš S_{10} lygmens laikas, greitosios fluorescencijos intensyvumas laiko momentu t

$$I = I_0 \cdot e^{-\frac{t}{\tau}} \quad (22)$$

Daugeliui organinių scintiliatorių, šis laikas τ yra kelių nanosekundžių eilės, todėl greitosios scintiliacijos komponentė yra gana greita.

Pirmosios sužadintosios tripletinės būsenos T_1 gyvavimo laikas yra charakteringai daug ilgesnis



6 pav. Organinės molekulės su π – elektronine struktūra Jablonskio diagrama. Adaptuota pagal [2].

nei singuletinės S_1 būsenos. Tarpvietinio šuolio metu tam tikras skaičius singuletinių sužadintų būsenų gali virsti į tripletines. T_1 lygmens gyvavimo trukmė gali siekti 10^{-3} s, todėl išspinduliuoti fotonai tripletinės būsenos relaksacijos metu yra uždelstoji spinduliuotė — fosforescencija. Kadangi T_1 yra žemesnės energijos lygmuo nei S_1 , fosforescencijos spektras yra mažesnės energijos nei fluorescencijos. Tačiau T_1 būseną šiluminiu būdu gali būti sužadinama atgal į S_1 būseną, ir relaksuoti fluorescencijos spektrui būdingų energijų kvantais, tačiau daug vėliau dėl tripletinės būsenos gyvavimo trukmės. Tokia spinduliuotė — uždelstoji fluorescencija. 6 paveikslėlyje taip pat galima pamatyti, kodėl organiniai scintiliatoriai yra skaidrūs fluorescencijos spinduliuotei. Aiškiai matosi, kad daugumos fluorescencijos fotonų energija yra mažesnė nei reikalinga sužadinimui (išskyrus $S_{10} - S_{00}$ lygmenis). Todėl emisijos ir absorpcijos spektrų persiklojimas yra minimalus [2].

Bet kokio scintiliatoriaus scintiliacijos išėiga gali būti apibūdinama kaip dalis krintančiosios dalelės energijos, kuri buvo konvertuota į fotonus. Natūralu, kad geriausi detektoriai yra su didžiausia scintiliacijos išėigos verte, tačiau molekulei perduota energija gali relaksuoti ir kitokiais metodais. Vienas iš jų — energija tiesiog virsta šiluma. Visi tokie nespinduliniai relaksacijos procesai gali būti bendrai apibūdinti kaip scintiliacijos gesintojai arba malšintojai (*quenching*). Organinių scintiliatorių gamyboje labai svarbu priemaišų pašalinimas, nes priemaišos (tokios kaip ištirpęs deguonis) gali sumažinti šviesos išėigą sukurdamas naujų scintiliacijos gesinimo mechanizmų.

Tik maža dalis krintančiosios dalelės kinetinės energijos yra paverčiama fotonais. Dauguma energijos būna išsklaidoma nespinduliniais mechanizmais, pavyzdžiui gardelės vibracijomis ar šiluma. Kokia dalis energijos bus paversta į šviesą priklauso tiek nuo dalelės tipo, tiek nuo jos energijos. Kai

kuriais atvejais scintiliacijos išeiga nepriklauso nuo dalelės energijos — fotonų skaičius tiesiogiai priklauso nuo dalelės energijos.

Organinių scintiliatorių atsakas gali būti apibūdinamas sąryšiu tarp dL/dx (fluorescencijos energija išspinduliuota per nueitą kelią dx) ir dE/dx (specifiniai elektringosios dalelės energijos nuostoliai). Dažnai naudojamas sąryšis, pasiūlytas Birks [13], yra paremtas prielaida, kad didelis jonizacijos tankis visame dalelės kelyje sąlygoja scintiliacijos malšinimą dėl pažeistų molekulių, taip sumažindamas scintiliacijos išeigą. Jeigu padaroma prielaida, kad pažeistų molekulių tankis dalelės kelyje yra tiesiai proporcingas jonizacijos tankiui, galima užrašyti tankį per $B(dE/dx)$, kur B - proporcingumo konstanta. Daroma prielaida, kad tam tikra dalis jonizuotų molekulių padidins scintiliacijos gesinimą. Kita prielaida, kad nesant gesinimo, šviesos išeiga yra proporcinga energijos nuostoliams:

$$\frac{dL}{dx} = S \frac{dE}{dx} \quad (23)$$

čia S — normali scintiliacijos išeiga. Įskaitant scintiliacijos gesinimą:

$$\frac{dL}{dx} = \frac{S \frac{dE}{dx}}{1 + kB \frac{dE}{dx}} \quad (24)$$

čia kB Birk's parametras. Ši lygtis dažnai vadinama Birks'o formule. Parametras kB dažnai varijuojamas norint geriau aproksimuoti konkretaus scintiliatoriaus eksperimentinius duomenis.

Scintiliatorių sužadinus greitai elektronu (arba gama kvantu), dE/dx yra pakankamai mažas didelėms E vertėms, tada galima užrašyti

$$\left. \frac{dL}{dE} \right|_e = S \frac{dE}{dx} \quad (25)$$

arba šviesos išeiga energijos praradimo vienetui yra konstanta

$$\left. \frac{dL}{dE} \right|_e = S \quad (26)$$

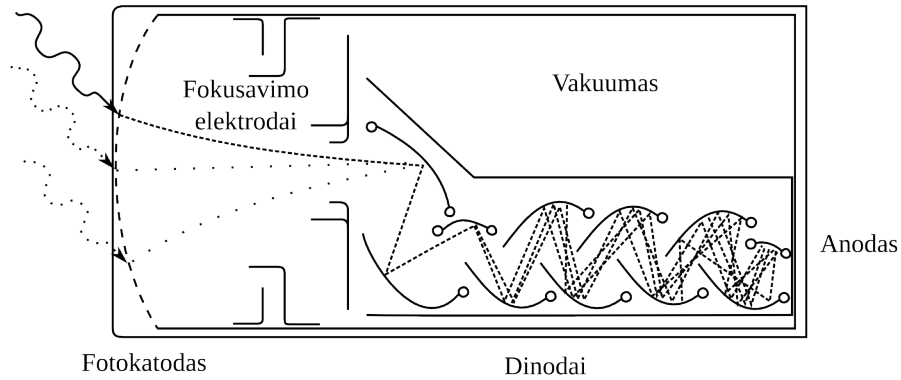
Tokiame režime šviesos išeiga

$$L = \int_0^E \frac{dL}{dE} dE = SE \quad (27)$$

yra tiesinė krentančiosios dalelės funkcija. Kita vertus, alfa dalelėms dE/dx yra labai didelis, todėl prasideda įsotinimas ir Birks'o formulė tampa

$$\left. \frac{dL}{dx} \right|_\alpha = \frac{S}{kB} \quad (28)$$

Tinkama kB vertė gali būti surasta apskaičiuojant santykį



7 pav. Fotodaugintuvo schema. Adaptuota pagal [2].

$$kB = \frac{dL}{dE} \bigg|_e \bigg/ \frac{dL}{dx} \bigg|_\alpha \quad (29)$$

Scintiliatorių alfa-beta parametras apibūdina organinio scintiliatoriaus šviesos išeigos skirtumą elektronams ir sunkesniems krūvininkams. Scintiliacinės spinduliuotės išeiga elektronams visada bus didesnė, nei tokios pačios energijos kitokio krūvininko, todėl šis santykis visada būna mažesnis už 1. Šis santykis priklauso nuo energijų srities, kurioje yra skaičiuojamas, bet dažniausiai pasitaikanti vertė ~ 0.1 .

1.2.3 Fotodaugintuvai

Fotodaugintuvas — prietaisas paverčiantis šviesos impulsus į elektrinius. Toks detektorius dažniausiai gali detektuoti ne daugiau nei kelis šimtus fotonų nepridedant žymaus triukšmo. Fotodaugintuvų yra labai įvairių, su skirtingais pritaikymais, pradedant skirtingu spektriniu jautriu ultravioletinei, regimosios srities ar artimosios–infraraudonųjų srities spinduliuotei. Vienas iš fotodaugintuvų pritaikymo būdų — skaičiuoti scintiliatoriaus išspinduliuotus fotonus.

Supaprastinta fotodaugintuvo schema pateikta 7 paveikslėlyje. Fotodaugintuvas dažniausiai būna patalpintas stikliniame apvalkale, saugančiame vakuumą esantį viduje, leidžiantį mažos energijos elektronus įgreitinti elektriniais laukais. Fotodaugintuvą sudaro dvi pagrindinės dalys — fotokatodas ir elektronų daugintuvas. Fotodaugintuvas verčia kritusius šviesos kvantus mažos energijos elektronais didžiausiu įmanomu naudingumo koeficientu. Kadangi išmuštų elektronų skaičius siekia vos kelis šimtus, šie mažos energijos elektroni yra negali suformuoti patogiai fiksuojamo elektrinio impulso. Tam už fotokatodo yra elektronų daugintuvas. Jo geometrija parinkta taip, kad elektronų būtų prarandama kuo mažiau, taip priartinant šį daugintuvą prie idealaus stiprintuvo. Tipinio scintiliacijos pulso metu fotodaugintuvo anodą pasiekia apie $10^7 - 10^{10}$ elektronų. Tokio elektronų skaičiaus pakanka patogiam ir patikimam scintiliacijos pulso fiksavimui. Dauguma fotodaugintuvų krūvio stiprinimą atlieka labai tiesiškai, sukuriant elektrinį impulsą proporcingą iš fotokatodo išmuštų elektronų

skaičiui [2].

Pirmas žingsnis elektrinio impulso link — elektrono išmušimas iš fotokatodo. Šį procesą galima išskaidyti į tris etapus: fotoelektrono išmušimas iš fotomedžiagos fotono sugerties metu; elektrono migracija iki fotokatodo paviršiaus; fotoelektrono ištrūkimas iš fotokatodo paviršiaus. Energija, kuri gali būti perduota elektronui — kvanto energija $h\nu$. Mėlynai šviesai, būdingai daugeliui scintiliatorių, kvanto energija yra apie 3 eV. Antrame etape dalis šios energijos gali būti perduodama aplinkiniams elektronams. Galiausiai, trečiame etape elektronas turi turėti pakankamai energijos, kad galėtų pabėgti iš potencialinio barjero, kuris egzistuoja tarp bet kurios medžiagos ir vakuumo. Šis potencialinis barjeras metalams dažnai būna didesnis nei 3 ar 4 eV, tačiau specialiai paruoštų puslaidininkių gali siekti 1.5 – 2 eV.

Netgi jei neskaitytume jokių energijos nuostolių, norint, kad elektronai pabėgtų iš fotokatodo, reikia, kad fotonų energija viršytų minėtą barjerą. Tačiau realybėje taip nėra. Norint kad kuo daugiau fotoelektronų būtų ištrūktų iš medžiagos, reikia maksimaliai sumažinti fotoelektrono energijos nuostolius medžiagoje, padidinant efektyvų medžiagos gylį iš kurio gali pabėgti fotoelektronai. Energijos nuostoliai metaluose yra labai dideli, todėl efektyvus medžiagos gylis tėra keli nanometrai. Specialių puslaidininkių efektyvus medžiagos gylis gali siekti kelias dešimtis nanometrų, tačiau toks medžiagos storis yra pusiau skaidrus net ir matomai šviesai. Todėl didžioji dalis fotokatode sugertos šviesos taip ir nebūna užregistruota [2].

Paviršinis potencialinis barjeras taip pat daro įtaką ir kitam labai svarbiam fotodaugintuvų parametru — termoelektriniam triukšmui. Normaliomis sąlygomis laidumo juostoje esantys elektronai visada turi tam tikrą šiluminę kinetinę energiją, kurios vidutinė vertė kambario temperatūroje apie 0.025 eV. Dėl atsitiktinio energijų pasiskirstymo gali nutikti taip, kad elektronas įgis didesnę energiją, nei potencialinis barjeras. Jei toks elektronas yra pakankamai arti paviršiaus, jis gali pabėgti iš medžiagos ir patekti į daugintuvą, taip užfiksuojant terminį fotodaugintuvo triukšmą. Metaliniuose fotokatoduose tokių elektronų spinduliavimo sparta yra gana maža ($\sim 100 \frac{s}{m^2}$) dėl santykinai didelio potencialinio barjero. Puslaidininkiuose šis barjeras daug mažesnis, todėl ir šiluminių elektronų spinduliavimo sparta gali siekti net $10^6 - 10^8 \frac{s}{m^2}$. Taigi didelis puslaidininkinių fotokatodų fotojautrumas didinamas termioninio triukšmo sąskaita.

Fotodaugintuvo jautrumas gali būti įvertintas įvairiais būdais. Didžiausią įtaką šiam dydžiui daro fotokatodo kvantinis našumas QE :

$$QE = \frac{\text{emituotų fotoelektronų skaičius}}{\text{kritusių fotonų skaičius}} \quad (30)$$

Idealaus fotokatodo kvantinis našumas būtų 100 %, tačiau dėl anksčiau aptartų priežasčių realios kvantinio našumo vertės siekia tik 20 – 30 % [2].

1.3 Sutapčių svarba šaltinių aktyvumo vertinimui

Sutaptis — įvykis kai vienu detektoriaus laiko skyros momentu daugiau negu viena dalelė detektoriumi perduoda dalį savo energijos. Tokie įvykiai apsunkina gautų rezultatų vertinimą, nes reikia

atsižvelgti į šio proceso įneštas paklaidas. Tačiau ne visada sutaptys yra nepageidaujamas dalykas. Trigubų-dvigubų sutapčių santykio (Triple to Double Coincidence Ratio, TDCR) metodo esmė — sutapčių panaudojimas nuklido aktyvumo nustatymo tikslinimui. Toliau šiame skyriuje plačiau apie sutaptis HPGe detektoriuose ir TDCR sistemoje.

1.3.1 Sutapčių svarba puslaidininkiniams detektoriams

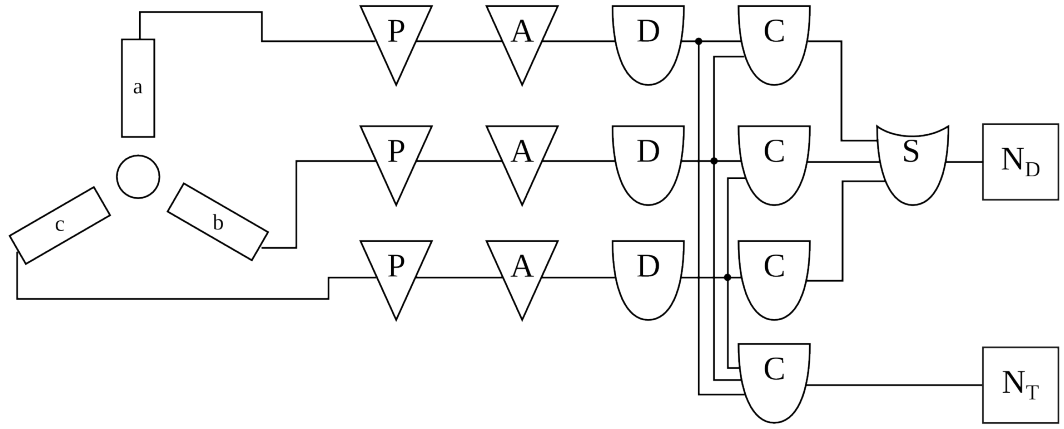
Gama spindulio spektrometrinė analizė naudojant HPGe detektorių artimoje geometrijoje, gali būti paveikta paklaidų, atsirandančių dėl sutapčių [6]. Šios paklaidos atsiranda, kai du ar daugiau kvantų yra sugeriami vieno gama spektrometrinės sistemos laikinės skyros metu. Jos gali būti labai svarbios norint įvertinti detektoriaus efektyvumą arba nustatyti bandinio aktyvumą. Minėtas efektas pasireiškia, kai krentantys kvantai atiduoda visą savo energiją detektoriumi (summing-in). Kita vertus, gali būti ir taip, kad su detektoriumi sąveikauja daugiau negu vienas kvantas, tačiau visą energiją perduoda bent vienas (summing-out) [6]. Taip pat sutaptys gali vykti ne tik tarp gama kvantų, bet ir gama-rentgeno spinduliuotės kvantų, nes abiejų spinduliuotės rūšių fizikiniai procesai tie patys — elektroninė pagava ir vidinė konversija. Sutapties įvykio tikimybė tiesiogiai priklauso nuo skylančio radionuklido skilimo schemos, tačiau visiškai nepriklauso nuo šaltinio aktyvumo. Nuokrypis dėl sutapčių didėja, mažėjant atstumui nuo šaltinio iki detektoriaus, ir priklauso nuo savitojo detektoriaus aktyvumo [6]. Kadangi nuklido skilimo procesas ir jo skilimo proceso progresavimas nuklido skilimo schema yra stochastinis reiškinys, žinant fizikinių procesų tikimybes galima apskaičiuoti smailės ploto pataisos faktorių sutapčių procesų paklaidoms eliminuoti, tačiau skaičiavimai teisingi tik kalibraciniams taškiniams šaltiniams [6]. O norint teisingai įvertinti matuojamo tūrinio šaltinio aktyvumą, kartais šaltinį reikia patraukti tolyn nuo detektoriaus, taip didinant spektro rinkimo laiką, arba naudoti pusempirius skaičiavimus, vertinant sutapčių pataisos koeficientus [17].

1.3.2 Trigubų-dvigubų sutapčių santykio metodas

TDCR metodas - vienas iš pagrindinių metodų, naudojamų gryno β - arba elektrono pagavos spindulio aktyvumo nustatymui. Šis metodas remiasi scintiliacijos fotonų pasiskirstymo ir jų detektavimo tikimybių trijų fotodaugintuvų detektoriumi fizikiniu ir statistiniu modeliu. Taip pat, metodas atsižvelgia į scintiliatoriaus atsako netiesiškumus dėl jonizacijos slopinimo efekto [8, 9, 13].

Šiam metodui reikalinga speciali sistema, sudaryta iš trijų fotodaugintuvų, sujungtų sutapčių valdymo įrenginiu. Naudojimui parengtos sistemos nėra parduodamos, tačiau atskiros sistemos dalys gali būti įsigytos iš tiekėjų. Tokių matavimo sistemų paklausa pasaulyje tik didėja. Šiuo metu šį metodą pasaulyje naudoja kelios dešimtys metrologinių laboratorijų [5, 14]. TDCR metodas yra patvirtintas jonizuojančiosios spinduliuotės patariamojo komiteto tarptautiniame matavimo vienetų ir svorių biure (BIPM) kaip alternatyviu metodu CIEMAT/NIST skystųjų scintiliatorių tarptautinje atskaitinėje sistemoje gryniems β spinduliams [5].

Šio įrenginio supaprastinta loginė schema pateikta 8 paveiksle. TDCR sistemą sudaro skysto scintiliatoriaus ir nuklido tirpalas patalpintas į trijų fotodaugintuvų kamerą. Fotodaugintuvus maitina reguliuojamos įtampos šaltiniai. Fotodaugintuvai sujungti į sutapčių įrenginį MAC3 [18]. Šis įrenginys — TDCR sistemos šerdis. Į šį įrenginį atkeliavę impulsai iš fotodaugintuvų yra praleidžiami per



8 pav. Supaprastinta loginė trijų fotodaugintuvų (a,b,c) TDCR sistemos diagrama. P — priešstiprintuvis, A — stiprintuvas, D — diskriminatorius, C — loginis IR elementas, S — loginis ARBA elementas, N — skaitiklis. Adaptuota pagal [18].

dvigubų ir trigubų sutapčių logines grandines. Išėjime įrenginys pateikia kiekvieno detektoriaus impulsų skaičių atskirai (A,B,C), porų logines sandaugas (AB, AC, BC), dvigubų sutapčių loginę sumą (AB+AC+BC), trigubas sutaptis (ABC) bei detektoriaus *dead time*.

Dvigubų ir trigubų sutapčių skaičiavimo efektyvumus galima gauti iš

$$\varphi(\lambda) = \int_0^{E_{max}} S(E)P(E, \lambda)dE \quad (31)$$

čia $S(E)$ — normalizuotas scintiliatoriaus spektras, $P(E, \lambda)$ — tikimybė, kad į fotodaugintuvą pataikęs fotonas bus užregistruotas, E_{max} — maksimali elektronų energija, λ — laisvasis parametras [13]. Jeigu fotodaugintuvai panašūs, galima užrašyti trigubų ir dvigubų sutapčių skaičiavimo efektyvumo santykį

$$\frac{\phi_T}{\phi_D} = \left[\int_0^{E_{max}} S(E)(1 - e^{-E \cdot Q(E)/3\lambda})^3 dE \right] \times \left[\int_0^{E_{max}} S(E) \left[3(1 - e^{-E \cdot Q(E)/3\lambda})^2 - 2(1 - e^{-E \cdot Q(E)/3\lambda})^3 \right] dE \right]^{-1} \quad (32)$$

čia $Q(E)$ — jonizacijos gesinimo funkcija [13].

Dideliam skilimų skaičiui trigubų-dvigubų sutapčių skaičiavimo greitis T/D konverguoja link skaičiavimo efektyvumų santykio φ_T/φ_D . Taigi kairė 32 lygties pusė yra eksperimentinis rezultatas, o lygtis gali būti išspręsta žinant scintiliatoriaus spektrą $S(E)$ ir spėjant kB vertę. Sprendimas duoda λ parametro vertę, leidžiančią apskaičiuoti kiekvieno sutapčių įvykio skaičiavimo efektyvumą [13].

Taip pat, galima užrašyti TDCR skaičių — trigubų ir dvigubų sutapčių skaičiavimo spartų santykį

$$N_{TDCR} = \frac{N_T}{N_D} \quad (33)$$

Šis santykis visada bus intervale $0 \leq N_{TDCR} \leq 1$, nes trigubų sutapčių skaičiavimo efektyvumas visada mažesnis už dvigubų sutapčių skaičiavimo efektyvumą. Kai skaičiavimo efektyvumai artėja prie vieneto

$$\varphi \rightarrow 1, \quad (34)$$

dvigubų ir trigubų sutapčių skaičiavimo sparta artėja prie šaltinio skilimo spartos

$$N_T \rightarrow N_0, \quad N_D \rightarrow N_0 \quad (35)$$

o N_{TDCR} artėja link vieneto. Ekstrapoliuojant TDCR skaičių iki $N_{TDCR} = 1$, gali būti apskaičiuotos skilimo spartos vertės N_0 su skaičiavimo efektyvumu $\varphi = 1$.

1.4 HPGe detektoriaus modeliavimas *Geant4* bibliotekų paketu

Geant4 (angl. Geometry And Tracking) yra CERN išleistas, Monte-Karlo metodu veikiantis, modeliavimo bibliotekų paketas, veikiantis tiek Windows, tiek Unix pagrindu parašytose platformose [15]. Šis paketas skirtas modeliuoti dalelių sąveikai su medžiaga. Pagrindinės šio modeliavimo paketo pritaikymo sritys — branduolinė fizika, medicininiai bei kosmoso tyrimai. Šis paketas turi pilną įrankių komplektą, skirtą detaliam fizikinių modelių aprašymui: modeliuojamos geometrijos pasirinkimas, dalelių sekimo galimybė, detektoriaus atsako modeliavimas, fizikinių procesų modeliavimas, įvykių (dalelių sąveikų) peržiūra, dalelių trajektorijų valdymas, proceso vizualizacija ir vartotojo sąsaja [19].

Geant4 programų paketas jau kuris laikas naudojamas įvairių tipų puslaidininkinių gryo germanio detektorių modeliavimui [12]. Analoginiai Monte Karlo efektyvumo nustatymo metodai grindžiami pilnos sugerties foto smailės efektyvumo nustatymu modeliuojant visus fizikinius procesus vykstančius gama kvanto kelyje. Fiksuojama kiekvieno kvanto įvykių istorija: išspinduliavimas šaltinyje, sąveika su detektoriumi ir aplinkinėmis medžiagomis, antrinių dalelių kūrimas ir pernaša, kvanto sekimas, kol jis išlekia iš modeliuojamos geometrijos arba būna sugertas praradęs visą savo energiją. Kadangi nereikia jokių aproksimacijų, geometrija gali būti bet kokia [12]. Pagrindinis trūkumas — reikia suskaičiuoti didelį skaičių kvantų sąveikų istorijų ($> 10^5$ — 10^6 pirminių kvantų) norint pasiekti mažesnę nei 1 % statistinę paklaidą. Tačiau yra galimybė įgyvendinti modelio konvergavimo spartinimo metodus, siekiant paspartinti skaičiavimą [7]. Tam gali būti naudojamas spinduliuotės svorinimas (angl. *weighing*), kai modeliuojamiems kvantams priskiriami svoriniai koeficientai pagal kryptį arba pagal medžiagą [20]. Tada, mažesnės svarbos kvantų yra modeliuojama mažiau, didinant tikslumą norimoje srityje, modeliuojamų įvykių skaičių tuo vienodą, tačiau vėliau rezultatus pataisant, atsižvelgiant į svorinius koeficientus.

Dažnai atliekant gama spektrometrijos matavimus dėl gama kvantų sutapčių analitiškai nustatyti detektoriaus efektyvumą labai sudėtinga, tačiau Monte Karlo metodai leidžia šią problemą išspręsti daug paprasčiau. [10]. Kadangi dažnas nuklidas skyla išspinduliuojant keletą kaskadinių gama kvantų, branduolio poliarizacijos įtaka kaskadinių kvantų kampinei koreliacijai, dėl branduolio sukinių ir spinduliavimo multipoliškumo, tampa svarbiu fizikiniu procesu vertinant efektyvumą. Norint teisingai modeliuoti gama kvantų, sutaptis reikia atsižvelgti į minėtus procesus, tačiau tik nedaug Monte Karlo modeliavimo paketų į juos atsižvelgia [7].

2 Tyrimo metodika

Šio darbo tikslas — naudojantis *Geant4* bibliotekų paketu sukurti HPGe detektoriaus, TDCR sistemos ir plono organinio PEN scintiliatoriaus modelius. Toliau šiame skyriuje bus detaliam nagrinėjami įgyvendinti modeliai, jų parametrai ir aptarta metodika, kuria naudojantis bus atlikta rezultatų analizė.

2.1 Modeliai aprašyti *Geant4* bibliotekomis

Kadangi *Geant4* modeliavimo bibliotekų paketas yra labai sudėtingas, daugialypis produktas, rašomas bendradarbiaujant daugeliui mokslininkų iš įvairių šalių, neretai pakete pasitaiko klaidų. Periodiškai išleidžiama nauja, nemokama, laisvai prieinama *Geant4* bibliotekų versija, kurią galima parsisiųsti sukompiliuotą arba parsisiuntus išeities kodus susikompiliuoti pačiam. Šis darbas atliktas naudojantis naujausia *Geant4* 10.2.1 bibliotekų versija, kompiliuota Ubuntu 14.04 aplinkoje. Naujausioje *Geant4* versijoje buvo peržiūrėta ir perrašyta dauguma radioaktyviojo skilimo bibliotekų fragmentų, atsakingų už radioaktyviojo skilimo fizikinius procesus [21]. .

2.1.1 HPGe detektoriaus modelis

Darbe [22] radioaktyviojo skilimo fizikiniai procesai buvo įgyvendinti nesinaudojant minėtomis radioaktyviojo skilimo bibliotekomis, aprašant visus fizikinius vyksmus pačioje programoje. T.y. aprašant skylandžio nuklido lygmenų diagramą, kiekvienam nuklidui iš lentelių parenkant koreliacijos koeficientus, modeliuojant skylantį nuklidą paeiliui, pagal lygmenų diagramą ir kvantų kampinę priklausomybę vienu programos modeliavimo žingsniu (*Event*). Taip suderinus modelį, galima fiksuoti sutapčių smailes, kai vieno detektoriaus laiko skyros momentu į detektorius pataiko du ar daugiau gama kvantų.

Visos programos parašytos naudojantis *Geant4* bibliotekų paketu vykdomos labai aiškia tvarka. Kiekvienoje programoje, pagrindiniame *main* metode, yra deklaruojamas vykdymo valdytojas *Run-Manager*. Šis valdytojas yra atsakingas už visų programos valdymo metu vykstančių procesų įgyvendinimą. Toliau reikia naudojantis sukurtu vykdymo valdytoju užregistruoti privalomus programos inicializacijos objektus, kuriuose nurodyta detektoriaus geometrija (*DetectorConstruction*), inicializacijos veiksmai (*ActionInitialization*), bei modelyje norimų modeliuoti dalelių ir fizikinių procesų aprašas (*PhysicsList*). Taip pat privaloma užregistruoti pirmą, inicializacijoje nedalyvaujantį, objektą, atsakingą už dalelių sukūrimą modelyje (*PrimaryGenerator*). Tada inicializuojamas programos branduolys ir vykdomos nurodytos modeliavimo komandos. Visos programos užsibaigia vykdymo valdytojo pašalinimu. Taip pat *Geant4* vartotojas gali užregistruoti ir kitokius, neprivalomus objektus, kurie gali stebėti visą programos vykdymą (*UserRunAction*), vieną programos modeliavimo žingsnį (*UserEventAction*), vienos dalelės žingsnį (*UserSteppingAction*), vieną dalelės trajektorijos žingsnį (*UserTrackingAction*). Pasinaudojant pagalbiniais objektais, galima aprašyti labai sudėtingas programas, kuriose modeliuojama daugybė skirtingų detektorių ir dalelių vienu metu.

Gryno germanio detektoriaus modelio programa buvo parašyta naudojantis radioaktyviojo skilimo ir standartinių elektromagnetinių fizikinių procesų bibliotekomis. Šios bibliotekos buvo įsiūtos į programos kodą *PhysicsList.cc* faile, kurį galima sukurti esant poreikiui apibūdinti konkrečius fiziki-

nius procesus ir konkrečias dominiančias daleles, kurias paketas naudos programos vykdymo eigoje. Radioaktyviojo skilimo bibliotekų aprašymui buvo pasinaudota pavyzdžiu *RDecay01*, kuriame aprašomas pasirenkamo nuklido skilimo grandinės modeliavimas ir informacijos apie skilimą išvedimas. Standartinių elektromagnetinių procesų aprašymui — *TestEm18*. Šame pavyzdyje aprašomi procesai, reikalingi modeliuoti dalelių nuostoliams medžiagoje. Parengtas *PhysicsList.cc* failas pagrindiniame programos kode, *main* metode, prijungtas vietoje standartinių modulinių fizikinių procesų bibliotekų, prjungiamų pagal nutylėjimą. Tik naujausioje *Geant4* paketo versijoje [21], *RadioactiveDecay* radioaktyviojo skilimo bibliotekose buvo įtraukta kvantų kampinės koreliacijos įtaka radioaktyviojo skilimo procesui. T.y. naujose bibliotekose jau egzistuoja antrinio kvanto erdvinė kampinė priklausomybė nuo pirmojo krypties dėl kvanto sukinių susietumo su branduolio sukiniu. Kadangi šie fizikiniai procesai buvo išnagrinėti ir aprašyti sename modelyje [22], šiame darbe gauti rezultatai bus palyginti su seno modelio rezultatais [22].

Sukurtas modelis valdomas šešiais pagrindiniais parametrais — šaltinio tipas (taškinis — ne, tūrinis — taip), šaltinio medžiaga, cilindrinio šaltinio aukštis ir spindulys (jei šaltinis tūrinis), modeliuojamų įvykių skaičius bei modeliuojamas radionuklidas. Pirmų keturių parametrų valdymo mechanizmas iš programos komandinės eilutės įgyvendintas naudojant *G4GenericMessenger* klasę. Aprašytos komandos, į kurias kreipiantis galima keisti programos parametrus (šiuo atveju šaltinio geometriją). Kadangi visas radioaktyviojo proceso modeliavimas remiasi relaksavimo bibliotekomis, programai reikia nurodyti modeliuojamą branduolį — modeliuojamo nuklido atominį skaičių ir protonų skaičių branduolyje. Paleidus programą, kartojama visa aprašyta veiksmų seka nurodytą skaičių kartų (modeliuojamų įvykių skaičius). Visus šiuos parametrus programai galima perduoti paleidimo momentu nurodant makro failą. Naudojant tokius failus, galima automatizuoti programą surašant komandų seką, kurią programa įvykdo nuosekliai, be vartotojo įsikišimo.

Programos *PrimaryGenerator* klasės, atsakingos už pirminių dalelių generavimą, kode aprašyti du modeliavimo atvejai. Jei programai nurodyta, kad šaltinis yra taškinis, modeliuojamas nustatytas radionuklidas pasirinktu atstumu nuo detektoriaus ant detektoriaus kristalo simetrijos ašies. Jei nurodyta priešingai — programa atsitiktinėje vietoje sugeneruoja joną cilindro viduje nuskaičiusi cilindro matmenis. Naudojamas atsitiktinių vyksmų variklis — *G4UniformRand*, kuris pateikia tolydinę atsitiktinę vertę nuo 0 iki 1. Kad šaltinis būtų homogeniškas, buvo generuojamos radionuklido branduolio x , y , ir z koordinatės nepriklausomai. Paviršiuje, statmename detektoriumi, tikrinama ar kvanto koordinatės tenkina apskritimo lygtį:

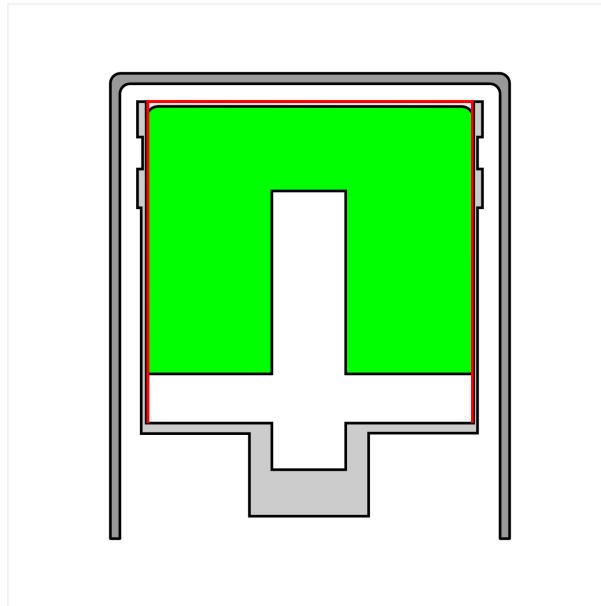
$$x^2 + y^2 = r_{cil}^2. \quad (36)$$

Jei netenkina koordinatės perskaičiuojamos iš naujo:

$$\begin{cases} x = G4UniformRand \cdot 2 \cdot r_{cil} - r_{cil} \\ y = G4UniformRand \cdot 2 \cdot r_{cil} - r_{cil} \end{cases} \quad (37)$$

Pagal gamintojo dokumentacijoje pateiktas specifikacijas buvo sumodeliuotas koaksialinis Can-

berra GC2520 gama spinduliuotės spektrometro detektorius su ekranuojančiu gaubtu. Nustatytas atitinkamo storio neįtrauktas spinduliuotei detektoriaus išorinis sluoksnis, aprašytas aliuminio langelis. Virš detektoriaus apsauginio gaubtelio modeliuojamas taškinis arba tūrinis gama spinduliuotės šaltinis. Atstumas nuo detektoriaus iki šaltinio h atidedamas nuo apsauginio detektoriaus gaubtelio krašto (10 pav.).

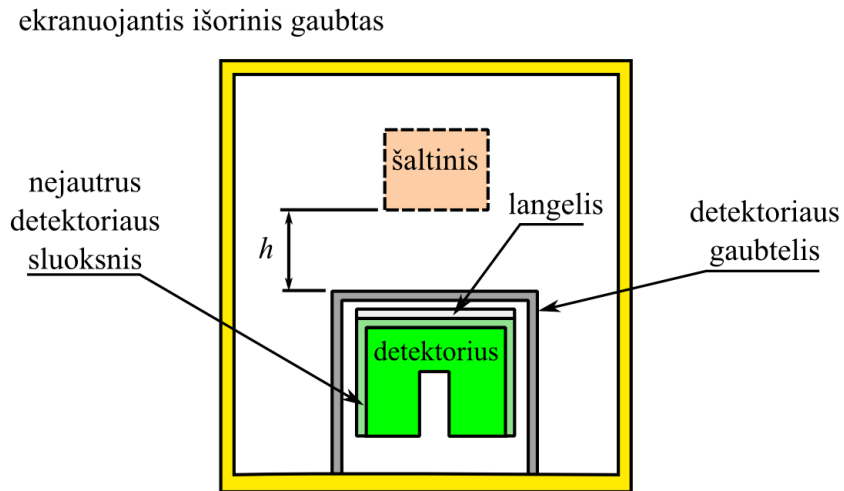


9 pav. Detektoriaus Canberra GC2520 vidinės konstrukcijos schema pagal gamintojo pateiktas specifikacijas.

2 lentelė. Detektoriaus fiziniai parametrai pagal gamintojo specifikaciją.

Detalės pavadinimas	Medžiaga	Ilgis / storis
Kristalo diametras		60,5 mm
Kristalo ilgis		36,5 mm
Kristalo skylės diametras	Germanis	9 mm
Kristalo skylės ilgis		20 mm
Išorinis elektrodas		0,5 mm
Vidinis elektrodas		0,3 μm
Izoliatorius	Plastikas	Viršuje — 1mm, šone — 0,5 mm
Langelis		0,5 mm
Kriostato langelis	Aliuminis	1,5 mm
Apsauginis gaubtas		1,5 mm
Kristalo laikiklis		—

Modelio geometrijoje naudojami medžiagų aprašymai imami iš NIST (National Institute of Standards and Technology) medžiagų bibliotekos, kuri būna įtraukta į *Geant4* paketą. Naudotos tankių vertės pateiktos 3 lentelėje.



10 pav. Sumodeliuoto detektoriaus geometrija.

3 lentelė. Detektoriaus geometrijoje naudotų medžiagų identifikatoriai *Geant4* programų pakete ir naudotos tankio vertės, esančios *Geant4-NIST* medžiagų duomenų bazėje.

Medžiaga	Identifikatorius	Tankis ($\frac{\text{g}}{\text{cm}^3}$)
Aliuminis	G4_Al	2,699
Germanis	G4_Ge	5,323
Geležis	G4_Fe	7,874
Švinas	G4_Pb	11,35

Norint modelyje rinkti reikiamus duomenis apie vykstančius fizikinius procesus, galima įgyvendinti du duomenų rinkimo būdus. Vienas iš būdų yra naudoti tiesioginės vartotojo sąsajos su vykstančiais procesais funkcijas (*G4UserTrackingAction*, *G4UserSteppingAction*, ir t.t.). Naudojant šias funkcijas galima prieiti prie beveik visų modelio parametrų. Toks duomenų rinkimo metodas yra gana paprastas, tiesmukas ir aiškus — pavyzdžiui galima gana nesudėtingai išsivesti į ekraną dominančių parametrų vertes ar su jomis atlikti reikalingus veiksmus. Kitas metodas — priskirti *G4VSensitiveDetector* būseną dominančiam loginiam geometrijos elementui. Tada *Geant4* paketas loginį geometrinį elementą traktuoja kaip jautrų detektorių. Įvykus dalelės sąveikai su medžiaga į sąveikos parametrų saugyklą *Hit* fiksuojamos pasirinktų dalelių nustatytų parametrų vertės (šiuo atveju gama kvanto suminė atiduota energija detektoriumi modeliujamo žingsnio momentu). Programai atlikus modeliavimo žingsnį visi individualių sąveikų parametrai gali būti prieinami saugykloje *HitsCollection*. Po kiekvieno modeliavimo žingsnio reikalingi parametrai gali būti užsaugojami ROOT histogramoje.

Kadangi paketas modeliuoja vieną radioaktyviojo skilimo grandinę viename programos žingsnyje *Event*, galima nustatyti suminę atiduotą energiją detektoriumi per vieną modeliavimo žingsnį. Minėtos tiesioginės vartotojo sąsajos funkcijos modeliavimo žingsnį *Event* išdalina į *Step* (vienos dalelės kelias per gyvavimo trukmę), o *Step* į *Track* (vienos dalelės kelias tarp sąveikų su medžiaga). Norint modelyje

įgyvendinti germanio kristalui perduotos kvanto energijos fiksavimą tiesioginėmis vartotojo sąsajos funkcijomis su modelio parametrais, reikia sukurti savo funkcijas. Šioms funkcijoms vienu metu turi būti prieniami *Step* ir *Event* metodai. Naudojant jautraus detektoriaus (*G4VSensitiveDetector*) režimą funkcijų kūrimo galima išvengti — tuo pasirūpina *G4VSensitiveDetector* klasė. Būtent dėl tokios duomenų rinkimo metodikos sumodeliuotuose gama spektruose galima stebėti dvigubo ir aukštesnio multiplietiškumo sutaptis, kai detektorius užfiksuoja daugiau du ar daugiau kvantų vienu metu laiko momentu.

Eksperimentinių gama spektrų smailės dėl teorijoje aptartų priežasčių yra išplitę. Kadangi *Geant4* programinis paketas yra skirtas modeliuoti betkokių dalelių sąveikai su medžiaga, juo naudojantis taip pat galima sumodeliuoti ir puslaidininkinį germanio detektorių, su visa jame vykstančia elektronų ir skylių sukūrimo, rekombinavimo ir surinkimo fizika [23]. Tačiau atkreipus dėmesį į gama kvanto sąveikos su medžiaga tikimybę ir palyginus su elektrono ir skylės sąveikos su medžiaga tikimybe, galima suprasti, kad krūvininkų surinkimo fizika puslaidininkiniame detektoriuje užimtų didžiausią modeliavimo laiko dalį. Kadangi krūvininkų surinkimo procesų įtaka spektrui yra žinoma, galima daug mažesniais kompiuteriniais resursais įvertinti spektro išplitimą. Tam reikia naudoti sąsūką — skaičiuojant dviejų funkcijų f ir g (signalo ir atsako) persiklojimo integralą:

$$(f \otimes g)(t) = \int_0^t f(\tau)g(t - \tau)d\tau \quad (38)$$

Atliekant sąsūkos operaciją signalas — spektras, o atsakas — aparatūrinis spektro išplitimas (Gauso funkcija, plotu normuota į vienetą)

$$f(x) = \frac{1}{\sigma \sqrt{2\pi}} e^{\frac{1}{2} \cdot \left(\frac{x-x_c}{\sigma}\right)^2} \quad (39)$$

Norint nustatyti šaltinio aktyvumą naudojantis sumodeliuotais spektrais, būtina sukalibruoti eksperimentinį ir modeliuojamą detektorius. Tai atliekama palyginus rezultatus, kai spektrų duomenys yra sunormuoti vienai dalelei — t.y. gaunamas vidutinis spektras, kurį atneša viena dalelė. Eksperimentiniu atveju vienai dalelei tenkantį impulsų skaičių galima skaičiuoti kiekvienam kanalui:

$$N_{exp}(x) = \frac{N}{A \cdot t}, \quad (40)$$

čia N — x kanale užfiksuotų impulsų skaičius, A — šaltinio aktyvumas (Bq), t — eksperimentinio spektro surinkimo laikas. Kadangi modeliuojamas pasirinktas įvykių skaičius — N_{skil} (nuklido skilimų skaičius modelyje), tai modelyje tokį vienos dalelės spektrą galima apskaičiuoti tiesiog

$$N_{mod}(x) = N/N_{skil}. \quad (41)$$

Jei įvertinus skilimų skaičių eksperimentinis ir sumodeliuotas spektras atitinka:

$$\frac{N_{mod}(x)}{N_{eksp}(x)} = 1, \quad (42)$$

Tačiau tam reikėtų modeliuoti daugybę sudėtingų procesų, kurie turi įtakos galutiniam spektrui — foninė spinduliuotė, spektro linijų išplitimas, krūvininkų praradimas, elektroniniai triukšmai ir t.t. Kadangi šie procesai mažiausią įtaką daro intensyviausioms spektro vietoms — nuklido pagrindinėms smailėms, spektro smailių santykis skaičiuojamas tik tarp smailių plotų.

Eksperimentinė spektro smailės išplinta dėl daugybės atsitiktinių procesų — smailė tampa normalinio skirstinio pavidalo. Plintant spektro smailei jos suminis plotas nesikeičia — todėl lyginami būtent spektro smailių plotai. Tačiau dėl sumodeliuoto ir faktinio detektoriaus geometrijos skirtumų smailių plotai gali neatitikti. Todėl reikia atlikti detektoriaus kalibraciją — surasti modeliavimo parametrus, kurie leistų smailių plotų santykį įmanomai priartinti prie vieneto. Tiriamoje detektoriaus geometrijoje didžiausią įtaką spektrui turi detektoriaus kristalo aukštis, bei kristalo atstumas iki detektoriaus. Buvo pasirinkta keisti šaltinio atstumą iki detektoriaus.

Pasirinkus vieną eksperimentinį aukštį h_{eksp} , jame išmatuojamas žinomo aktyvumo radionuklido spektras. Apskaičiuojami radionuklido eksperimentinio spektro smailių plotai. Modeliuojama tokia pati geometrija ir toks pats radioaktyvusis izotopas, tačiau pasirenkant skirtingus aukščius $h_{mod} = h_1, h_2, h_3, h_4, \dots$. Apskaičiuojami ir palyginami smailių plotai, esant skirtingoms h_{mod} vertėms. Surandama vertė, kuriai esant smailių plotų santykis — 1. Esant tai h_{mod} vertei — detektoriai sukalibruoti. Naudojantis sukalibruotu detektoriumi galima nustatyti šaltinio aktyvumą:

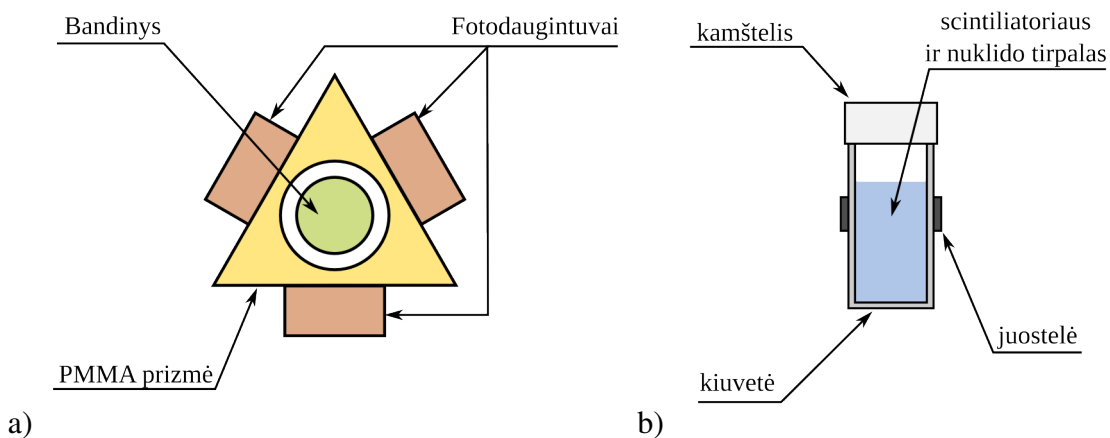
$$A = \frac{N_{eksp} \cdot N_{Gtot}}{t \cdot N_{Geant}}, \quad (43)$$

čia N_{eksp} — eksperimentinio spektro smailės integralas, N_{Gtot} — suminis modeliuotų skilimų skaičius, t — eksperimentinio spektro matavimo laikas, N_{Geant} — sumodeliuoto spektro smailės integralas.

Kad iškiltų kuo mažiau nepatogumų atliekant duomenų analizę, buvo pasirinktas modeliuojamas HPGe detektoriaus energijos intervalas ir kanalų skaičius atitinkantis eksperimentinius spektrus (kanalų skaičius — 8191, energijos intervalas — 3.79 MeV). Kadangi *Geant4* pakete visa standartinė duomenų analizės biblioteka parašyta ROOT [24] pagrindu, visi modeliavimo metu detektoriuje užfiksuoti spektrai yra talpinami į ROOT failuose esančias histogramas. Naudojantis parašytu programiniu kodu reikiami rezultatai buvo eksportuojami ASCII formatu ir apdorojami duomenų analizės programa R.

2.1.2 TDCR sistemos modelis

Sukurtą trigubų-dvigubų sutapčių santykio sistemą sudaro dvi dalys. Pirma dalis, įgyvendinta



11 pav. a) Įgyvendinto TDCR modelio schema b) kiuvetės modelio geometrija.

Geant4, atsakinga už branduolių radioaktyviojo skilimo, scintiliatoriaus sužadavimo ir relaksacijos bei optinių fotonų pernešimo fizikinius procesus. Antra dalis — įgyvendinta naudojantis statistinę duomenų analizės programą R. Šioje dalyje buvo apdorojami rezultatai, gauti modeliavimo metu.

TDCR sistemos skaičiavimo kamerą sudaro trys pagrindinės dalys: Skysto scintiliatoriaus bandinys, plastiko prizmė, ir prie prizmės prijungti fotodaugintuvai. Kadangi modeliuojamos aparatūros [14] tikslūs techniniai duomenys nėra prieinami, teko parinkti tokias geometrinių ir fizikinių sistemos parametrų vertes, kurios atitiktų tikėtinas vertes ir maksimaliai priartintų modeliavimo rezultatus prie eksperimentinių. Išmatavus scintiliacijos kameros dydį nustatyta tikėtiniausias lygiakraštės prizmės atstumų nuo prizmės centro iki sienos verčių intervalas — [3 cm; 3.8 cm]. Šiai vertei esant — 3.5 cm modelis labiausiai atitinka eksperimentą.

Prizmės centre — skylė į kurią iš apačios įstumiamas bandinys. Atstumas tarp bandinio sienelės ir prizmės taip pat nėra žinomas. Spėjama, kad atstumas yra ~ 3 mm. Prie šios prizmės iš šonų prijungti trys fotodaugintuvai. Kadangi fotodaugintuvuose vykstančių fizikinių procesų įtaka rezultatams yra žinoma, jų fizikiniai veikimo procesai nebuvo modeliuojami, sumažinant ir taip didelę modeliavimo trukmę.

Kiuvetė buvo sukonstruota iš keturių dalių: kiuvetės polivinyl cholrido apvalkalo (pačio kiuvetės), kamštelio, nelaidaus fotonams, pasirinkto tūrio scintiliatoriaus ir radionuklido mišinio bei reguliuojamo pločio fotonams nelaidžios juostelės. Scintiliatorius buvo aprašytas kaip dviejų medžiagų (vandens ir pačio scintiliatoriaus) mišinys. Kadangi *Geant4* paketas neturi išsamaus ir plataus scintiliatorinių medžiagų aprašymo, pagal gamintojo (*Perkin Elmer*) pateiktą *ULTIMA Gold LLT* [25] scintiliatoriaus cheminę sudėtį (4 lentelė) buvo sukurta scintiliatoriaus medžiaga. Modelio geometrinė schema

4 lentelė. Scintiliatoriaus ULTIMA Gold LLT cheminė sudėtis

ULTIMA Gold LLT (6013377) molekuliniai svoriai					
C (%)	H(%)	N(%)	O(%)	P(%)	Vidutinis molekulinis
76.4	9.7	0.05	13.85	0.01	293.28

pavaizduota 11 paveiksle.

Kadangi šiuo modeliu tiriama trijų nuklidų (^3H , ^{14}C , ^{99}Tc) šaltiniai, reikėjo įgyvendinti radioaktyviojo šaltinio modeliavimą. Šaltinis modeliuojamas nuskaitant scintiliatoriaus geometrinius parametrus (plotį ir aukštį, kuris gali būti reguliuojamas) ir pagal scintiliatoriaus dydį atsitiktinai generuojant radioaktyvų branduolį scintiliatoriaus tūryje (metodika tokia pati, kaip aprašyta HPGe detektoriaus modelyje). Panaudojus *G4RadioactiveDecay* biblioteką buvo įgyvendinti ^{14}C ir ^{99}Tc šaltiniai, tačiau *Geant4* pakete radioaktyvusis tritis yra aprašytas kaip stabilus izotopas. Norint tritį padaryti nestabiliu, reikia programos *PhysicsLists.cc* faile aprašyti tričio dalelei išjungti standartinės *G4Decay* bibliotekos panaudojimą ir vietoj jos tričio dalelei (tritonui) rankiniu būdu prjungti *G4RadioactiveDecay*.

Taip pat, norint modeliuoti scintiliacijos fizikinius procesus, *PhysicsLists.cc* faile reikia aprašyti optinius fotonus ir priregistruoti visus vykstančius fizikinius vyksmus, reikalingus optinių fotonų modeliavimui. Kadangi tai yra labai sudėtingas procesas reikalaujantis tiek gero optinių procesų, tiek labai gilaus *Geant4* paketo išmanymo, buvo panaudotas pavyzdys „donoras“ — *OpNovice* iš kurio ir buvo pasiskolinta būtent ši programos dalis. Šis pavyzdys — kartu su *Geant4* paketu pateikiama viena iš daugelio demonstracinių programų, skirta demonstruoti *Geant4* bibliotekų paketo pagrindines optinių fotonų modeliavimo galimybes.

Prijungus optinių procesų modeliavimą, fizikiniams medžiagų aprašymams reikia priskirti optinius parametrus. *Geant4* paketui privalu nurodyti vienintelę optinę medžiagos vertę — lūžio rodiklį. Kitaip medžiaga bus 100 % optinių fotonų sugėriklis, nemodeliuojant jokių optinių procesų — nei vykstančių pačioje medžiagoje, nei medžiagų ribose. Šis paketo elgesys buvo panaudotas modeliuojant fotonų sugėriklius: stūmoklį, įstumiantį kiuvetę į scintiliatoriaus kamerą, fotonams nelaidžią juostelę, užklijuotą ant kiuvetės, ir kiuvetės kamštelį. Visoms kitoms medžiagoms nurodyti optiniai parametrai pateikti 5 lentelėje.

Norint *Geant4* sumodeliuoti scintiliatorinį detektorių, reikia nurodyti scintiliatoriaus parametrus: emisijos spektrus, lūžio rodiklį, sugerties ilgį, scintiliacijos išeią, scintiliatoriaus energinę skyrą, greitąją konstantą, lėtąją konstantą, greitosios ir lėtosios spinduliuotės išeių santykį. Nurodyti modeliuojami scintiliatoriaus spektrai — vienetinio santykinio intensyvumo visame spinduliuotės spektre (620 – 300 nm). Medžiagoms nustatyti optiniai parametrai (lūžio rodiklis, sugerties ilgis) visam spinduliuotės spektrui (5 lentelė) turi šią vieną vertę.

Duomenų rinkimui modelyje buvo naudojami fotodaugintuvai. Tai tiesiog geometriniai cilindrai atitinkantys fotodaugintuvo fotokatodo geometriją, į kuriuos patekus optiniams fotonams jie betkoku atveju yra sunaikinami. Kiekvienam patekusiam fotonui į fotodaugintuvą paleidžiamas *G4UniformRand* atsitiktinis variklis ir jei variklio sugeneruota vertė yra mažesnė už nustatytą kvantinį fotodaugintuvo

5 lentelė. Medžiagų optiniai parametrai.

Medžiaga	Sugerties ilgis (m)	Lūžio rodiklis
Polivinilo chloridas	1	1.4
Polimetilmetakrilatas	1200	1.489
Pyrex stiklas	1000	1.4
Oras	—	1
Scintiliatorius	200	1.35

6 lentelė. Modeliuojamo scintiliatoriaus optiniai parametrai

Scintiliatoriaus parametras	parametro vertė
Lūžio rodiklis	1.35
Sugerties ilgis (m)	200
Scintiliacijos išeiga ($\frac{\text{fotonų}}{\text{keV}}$)	1-12
Energinė skyra	2
Greitoji laiko konstanta (ns)	90
Lėtoji laiko konstanta (ns)	174
Santykinė greitosios ir lėtosios spinduliuotės išeiga	0.8

fotokatodo našumą, optinis fotonas yra registruojamas. TDCR sistemoje esantys fotodaugintuvai — Burle 8850. Pagal gamintojo pateiktas specifikacijas nustatyta maksimali fotokatodo kvantinio našumo vertė — 25 %. Kiekvieno detektoriaus užfiksuotas kvantų skaičius yra išvedamas į nustatyto pavadinimo rezultatų bylą. Taip pat, byloje pateikiamas ir per tą patį modeliavimo žingsnį sukurtų optinių fotonų suminis skaičius, bei, radioaktyvaus branduolio išspinduliuoto, elektrono medžiagai perduotos energijos vertė.

Programa parašyta taip, kad iš *Geant4* valdymo sąsajos būtų galima keisti scintiliatoriaus scintiliacijos išeigą, fotonus sugeriančios juostelės plotį, fotodaugintuvo jautraus paviršiaus spindulį, bandinio užpildą bei duomenų failo pavadinimą (valdymo sąsaja įgyvendinta remiantis HPGc modelyje aprašyta metodika). Taip galima neperkompilijuojant programos atlikti daug įvairių skaičiavimų.

Modeliavimo rezultatuose pirmi trys skaičiai eilutėje — skirtinguose fotodaugintuvuose užfiksuotų kvantų skaičius. Dvigubas ir trigubas sutaptis galima išrinkti naudojant MAC3 [18] įgyvendintą loginę schemą (8 paveikslėlis). Tačiau taip reikia tikrinti ar kiekviena eilutė tenkina loginę sąlygą:

$$T = A \wedge B \wedge C \quad (44)$$

čia, \wedge — loginė sandauga, A — pirmame detektoriuje užfiksuotų fotonų skaičius, B — antrame, C —

7 lentelė. Naudotos parametrų vertės modeliavime

Scintiliacijos išeiga ($\frac{\text{fotonai}}{\text{keV}}$)	1-12
Bandinio užpilda tirpalu (%)	20-100
Juostelės storis (mm)	0-40

trečiame. Dvigubos sutaptys tenkina sąlygą:

$$D = (A \wedge B) \vee (A \wedge C) \vee (B \wedge C) \quad (45)$$

čia, \vee — loginė suma. Šias sąlygas reikia tikrinti šimtams tūkstančių eilučių. Norint įgyvendinti MAC3 įrenginyje esantį diskriminatorių, leidžiantį pasirinkti minimalią vertę (minimalų fotonų kiekį, kuris duoda sutaptis), reikia tuos pačius veiksmus tiems patiems duomenims atlikti dar keliasdešimt kartų. Tokiu atveju lygtys tampa

$$\begin{aligned} T &= A \wedge B \wedge C, \\ D &= (A \wedge B) \vee (A \wedge C) \vee (B \wedge C), \\ \text{kai } A, B, C &\geq N_d. \end{aligned} \quad (46)$$

čia N_d — MAC3 įrenginyje nustatyta diskriminatoriaus vertė. Tokių skaičiavimų trukmė eksponentiškai priklauso nuo modelių įvykių skaičiaus. Duomenų analizės trukmei pasiekus kelias valandas, buvo nuspręsta metodą patobulinti. Pastebėta, kad visų trijų detektorių užfiksuotų fotonų skaičius viename modeliavimo žingsnyje (i, j, k) išrikiavus didėjimo tvarka ($i \leq j \leq k$) mažiausias skaičius atitinka maksimalų trigubų sutapčių diskriminatoriaus skaičių, o vidurinis skaičius — maksimalų dvigubų sutapčių diskriminatoriaus skaičių. Tai skaičiavimus leido pagreitinti iki kelių tūkstančių kartų.

Norint įvertinti detektoriaus skaičiavimo efektyvumą, reikia įvertinti detektuotų dalelių skaičių. Dalelė laikoma detektuota, jei buvo užfiksuoti trigubų ir dvigubų sutapčių įvykiai. Tada galima apskaičiuoti trigubų ir dvigubų sutapčių įvykių sumas N_T ir N_D per modelių įvykių skaičių n_{max} . Galima užrašyti

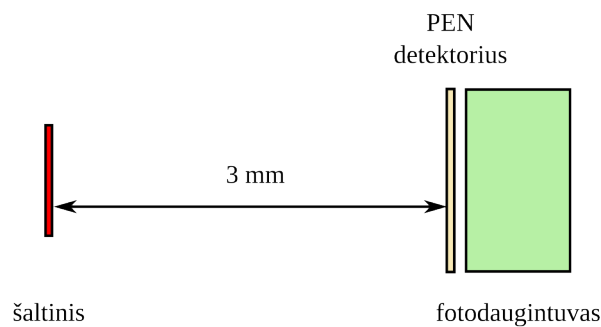
$$\begin{aligned} N_T &= \sum_{i=0}^{n_{max}} T, \text{ kai } T \geq N_d \\ N_D &= \sum_{i=0}^{n_{max}} D, \text{ kai } D \geq N_d \end{aligned} \quad (47)$$

čia, N_d — diskriminatoriaus vertė. Jei n_{max} — pakankamai didelis, tada detektoriaus skaičiavimo efektyvumai triguboms ir dviguboms sutaptims

$$\varphi_T = \frac{N_T}{n_{max}}, \quad \varphi_D = \frac{N_D}{n_{max}}. \quad (48)$$

2.1.3 Plono polietilnaftalato scintiliacinio detektoriaus modelis

Šiam detektoriumi modeliui buvo pritaikytas TDCR sistemai sukurtas modelis. Modelyje buvo pakeista modelio geometrija ir medžiagų parametrai. Scintiliatorius — polietilnaftalato (PEN) plėvelė, kurios storis $d = 125 \mu\text{m}$. Plėvelės matmenys: $1 \times 1 \text{ cm}$. Scintiliatoriaus cheminė sudėtis pakeista į polietilnaftalato. Fotodaugintuvas pastatytas iškart už plėvelės. Kadangi fotodaugintuvo kvantinis našumas nėra žinomas, todėl nustatyta realistinė kvantinio našumo vertė $\sim 25 \%$. Šaltiniai baigtiųjų matmenų — ^{14}C ir ^{238}Pu . Abu šaltiniai — plono disko pavidalo. Modeliuojamų šaltinių storis $l_s = 15 \mu\text{m}$. Plutonio šaltinis beveik taškinis — $d_s = 1 \text{ mm}$ diametro. Anglies — $d_s = 1 \text{ cm}$. Abiejų šaltinių atstumas iki PEN plėvelės $h = 3 \text{ mm}$. Optiniai fotonai detektuojami tokiu pačiu būdu, kaip ir TDCR modelyje — lyginiant atsitiktinę vertę su kvantiniu našumu. Į bylą išvedama modeliavimo



12 pav. PEN modelio geometrija.

žingsnio metu fotodaugintuve užfiksuotų fotonų skaičius, modeliavimo žingsnio metu sukurtų optinių fotonų skaičius, modeliavimo žingsnio metu pasirinktos dalelės energijos nuostoliai PEN plėvelėje. Duomenys analizuojami ir apdorojami statistinės analizės programa R.

2.2 Modeliuoti ir eksperimentiškai matuoti bandiniai

Gama spektrometru eksperimentiškai išmatuoti ir sumodeliuoti penki šaltiniai:

1. Sc-48 cilindro formos tūrinis nežinomo aktyvumo šaltinis.
2. Mn-56 cilindro formos tūrinis nežinomo aktyvumo šaltinis.
3. Co-60 taškinis kalibracinis žinomo aktyvumo šaltinis
4. TATENA pateiktas laboratorijos palyginamiesiems matavimams, tūrinis, mažo aktyvumo šaltinis su septyniais nuklidais
5. Eu-152 taškinis kalibracinis žinomo aktyvumo šaltinis

8 lentelė. Šaltinių parametrų lentelė.

Šaltinis	Modeliuotas nuklidas	Geometrija	Spindulys (r , cm)	Aukštis (h cm)	Aktyvumas kBq
Neutronais aktyvuotas titanas	Sc-48	Tūrinis	1	0.3	Nežinomas
Neutronais aktyvuotas MnSO ₄	Mn-56	Tūrinis	0.65	0.4	Nežinomas
Co-60	Co-60	Taškinis	—	—	4.7
Radionuklidų mišinys	Cs-134	Tūrinis	3.2	10	6.4
Eu-152	Eu-152	Taškinis	—	—	12.4

TDCR sistema matuoti keturi šaltiniai:

1. 20 ml (100 % užpilda) ^3H radioaktyvaus tirpalo (79.3 mg) ir *ULTIMA Gold LLT* scintiliatoriaus mišinys
2. 16 ml (80 % užpilda) ^3H radioaktyvaus tirpalo (79.9 mg) ir *ULTIMA Gold LLT* scintiliatoriaus mišinys
3. 16 ml (80 % užpilda) ^{14}C radioaktyvaus tirpalo (22.1 mg) ir *ULTIMA Gold LLT* scintiliatoriaus mišinys
4. 16 ml (80 % užpilda) ^{99}Tc radioaktyvaus tirpalo (103.3 mg) ir *ULTIMA Gold LLT* scintiliatoriaus mišinys

2.3 Eksperimentai

Eksperimentai buvo atliekami trimis įrenginiais esančiais fizikos institute: HPGe gama spektrometru, TDCR sistema [14] bei savadarbiu scintiliaciniu detektoriumi [26],

Eksperimentiniai Gama spektrai buvo matuoti koaksialiniu HPGe gama spektrometru su kriostatu 7500SL, priešstiprintuviu 2002CSL, p tipo detektoriumi Canberra GC2520 ir Genie2000 duomenų rinkimo ir analizės stotimi. Eksperimentinių spektrų analizė buvo atliekama detektoriaus darbo stotyje. Pagal gamintojo pateiktas specifikacijas santykinis detektoriaus efektyvumas – 25 %. Smailės puslplotis ties 122 keV – 0,9 keV, ties 1,33 MeV – 0,9 keV. Smailės ir Komptono santykis – 50:1. Gamintojo dokumentacijoje pateikta geometrija 9 paveikslėlyje ir geometriniai parametrai pateikti 2 lentelėje.

3 Rezultatai ir jų aptarimas

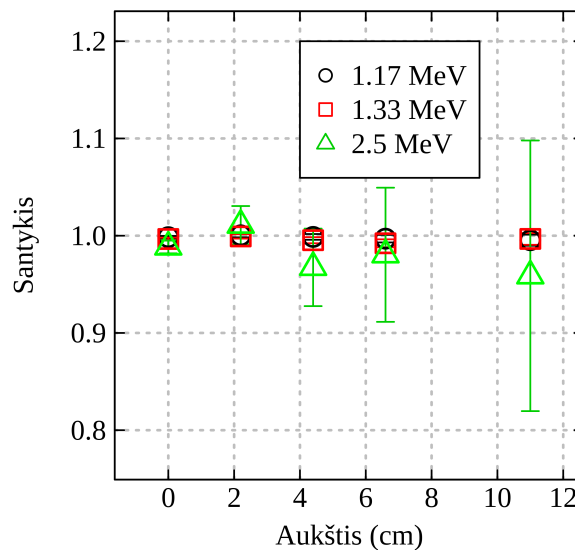
Šiame skyriuje bus pateikti ir aptarti darbo metu gauti rezultatai. Šis skyrius padalintas į tris dalis: švaraus germanio puslaidininkinio gama spinduliuotės detektoriaus efektyvumo vertinimą, TDCR metodo efektyvumo vertinimą bei plono scintiliacinio PEN detektoriaus efektyvumo vertinimą *Geant4* bibliotekų paketu

3.1 Gama detektoriaus efektyvumo vertinimas *Geant4* modeliavimo paketu

Šiame skyrelyje bus aptarti gryno germanio puslaidininkinio gama spinduliuotės detektoriaus modeliavimo rezultatai. Palyginti senos programos modeliavimo rezultatai [22] su gautais rezultatais. Atlikta detektorių kalibracija naudojant taškinį kalibracinį Co-60 šaltinį. Kalibracija patikrinta žinomo aktyvumo taškiniu Eu-152 šaltiniu bei TATENA laboratorijų palyginamųjų matavimų šaltiniu. Naudojantis sukalibruotais detektoriais įvertintas trumpaamžių, nežinomo aktyvumo, šaltinių aktyvumas. Sumodeliuoti spektrai atidėti grafikuose kartu su eksperimentiškai išmatuotais. Apskaičiuotos aktyvumo vertės pateiktos grafikuose, taip pat skaitine išraiška. Galutinė aktyvumų lentelė pateikta skyriaus pabaigoje.

3.1.1 Co-60 taškinio kalibracinio šaltinio modeliavimas

Buvo atlikta Co-60 spektrų smailių plotų santykių priklausomybės nuo šaltinio atstumo iki detektoriaus analizė. Modelyje naudota ta pati modeliuojama detektoriaus geometrija, vienodas skilimų skaičius bei skylantis nuklidas kaip ir ankstesniame darbe aprašytame modelyje [22]. Gauti rezultatai palyginti su ankstesniame darbe gautais rezultatais [22].



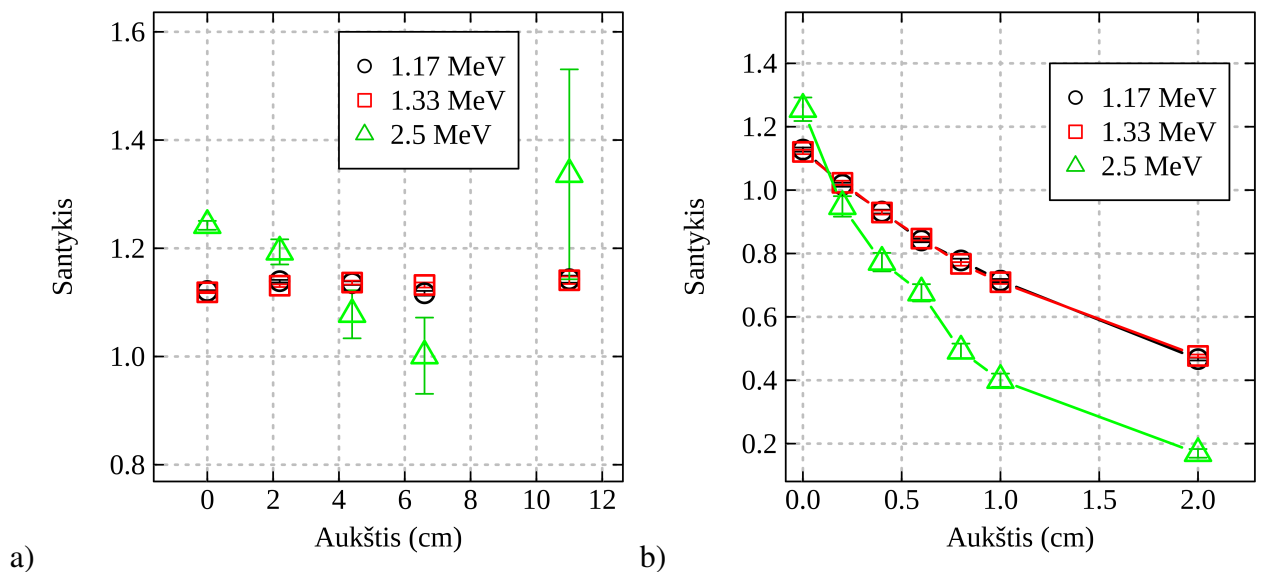
13 pav. Co-60 spektrų, modeliuotų sena programa [22], ir nauja programa, smailių plotų santykių palyginimas. Juodi rutuliukai — 1.17 MeV linija, raudoni kvadratėliai — 1.33 MeV linija, žali trikampėliai — sutapčių 2.5 MeV linija.

Nustatyta, kad pagrindinių ir sutapčių smailių santykių vertės, paklaidų ribose atitinka (13 pav.).

Pagrindinių smailių santykio nuokrypis nuo vieneto nesiekia vieno procento. Sutapčių smailės santykio vertės paklaidų ribose atitinka pagrindinių smailių santykių vertes.

Galima teigti, kad praeitame darbe [22] sukurtas radioaktyvių nuklidų skilimo modelis ir modeliavimo rezultatai buvo teisingi.

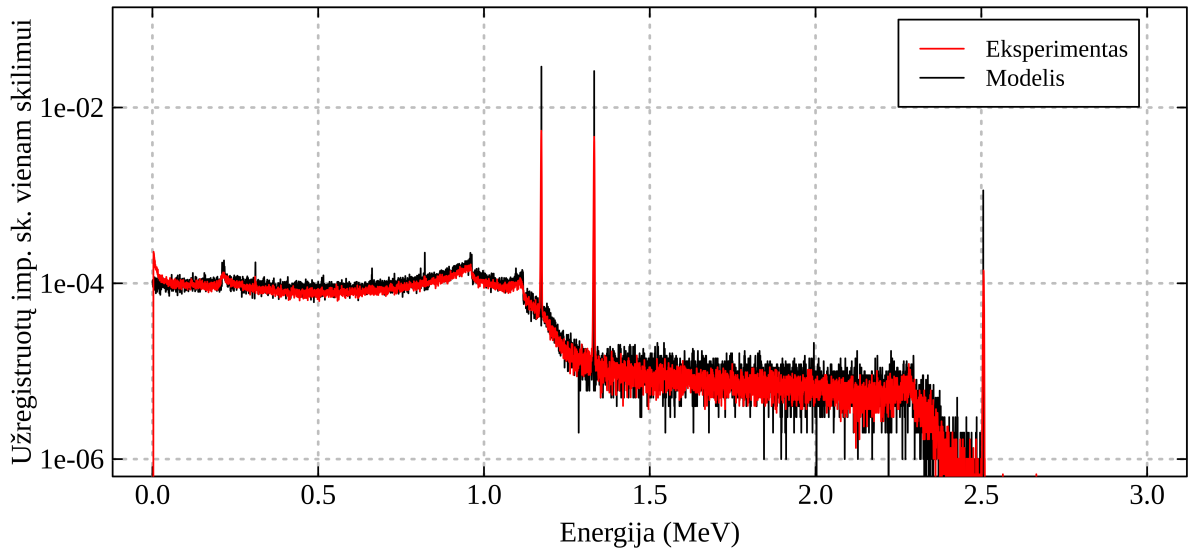
Atlikus skaičiavimus ir palyginus sukurto modelio rezultatus su ankstesniame darbe gautais rezultatais [22] gautas visiškas atitikimas, todėl santykis tarp sumodeliuoto ir eksperimentinio spektro smailių plotų (14 pav.) atitinka ankstesniame darbe gautus rezultatus [22]. Turint omenyje tai, kad tai yra trečias bandymas sumodeliuoti konkretų gama detektorių pagal gamintojo pateiktas specifikacijas, o rezultatų tendencija yra labai panaši (ankstesniame darbe ir *Geant4*, ir MCNP paketais gautuose spektruose fiksuojama vidutiniškai apie 20% daugiau gama kvantų [22]), galima daryti išvadą, kad gamintojo pateikta detektoriaus geometrijos specifikacija neatitinka realios detektoriaus geometrijos. Kadangi sumodeliavus detektorių pagal gamintojo dokumentacijoje pateiktas specifikacijas atitikimo negauta, buvo atliktas detektorių kalibravimas: sumodeliuoti Co-60 spektrai keičiant atstumą iki detektoriaus kas 2 mm, bei skaičiuojami eksperimentinio ir sumodeliuotų spektrų smailių plotų santykiai, lyginant eksperimentinio spektro smailių plotus prie $h_{eksp} = 0$ mm, o sumodeliuotų spektrų prie $h_{mod} = 0, 2, 4, 6, 8, 10, 20$ mm atstumų nuo šaltinio iki detektoriaus (14 pav.).



14 pav. Smailių plotų santykių priklausomybė nuo aukščio. Juodi rutuliukai — 1.17 MeV linija, raudoni kvadratai — 1.33 MeV linija, žali trikampėliai — sutapčių 2.5 MeV linija. Grafike a) atidėta eksperimentinio ir modeliuoto spektrų smailių plotų santykių priklausomybė nuo aukščio, b) kalibracinė kreivė — eksperimentinio ir modeliuoto spektrų smailių plotų santykio priklausomybė fiksuojant vieną eksperimentinių matavimų aukštį.

Nustatyta, kad atstumui h_{mod} esant 2 mm, santykis tarp eksperimentinio ir sumodeliuoto spektrų smailių plotų paklaidų ribose atitinka vieną (14 pav.). Tai reiškia, kad arba detektoriaus neįtrauktas sluoksnis yra didesnis [22], arba pats detektorius yra 2 mm žemiau. Atlikus kalibraciją bei sunormavus

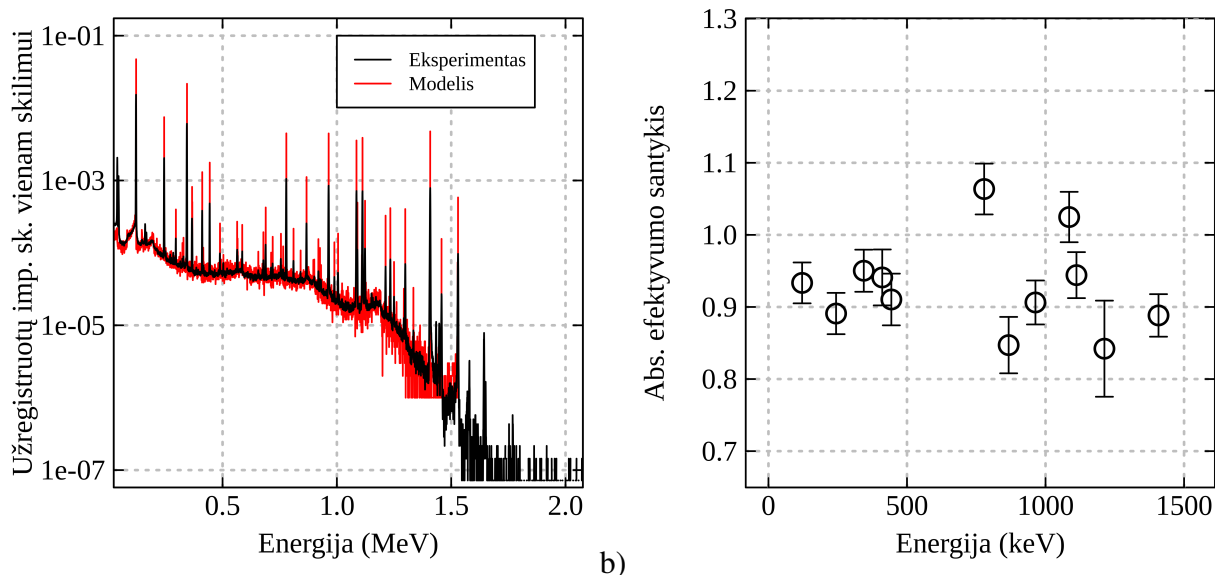
spektrus vienam skilimui atidėtas spektras (15 pav.). Šiame darbe nei *Geant4* paketu nei konvoliucijos operacijos pagalba spektro linijų išplitimas nemodeliuojamas, nes išplitimas įtakos smailės integralui neturi. Kadangi išplitimas nemodeliuojamas, sumodeliuoto spektro kraštai yra labai aiškūs ir išreikšti. Aiškiai matome, kad visos spektrų dalys puikiai atitinka — tiek smailių pozicija ir išėiga (iš smailių plotų santykių palyginimo), tiek komptono spektro kraštų pozicija ir išėiga. Galima teigti, kad eksperimentinis detektorius ir modelis sukalibruoti esant $h = 2$ mm pataisai.



15 pav. ^{60}Co spektrai normuoti vienai dalelei: sumodeliuotas (juodai) ir eksperimentiškai išmatuotas (raudonai).

3.1.2 Ilgaamžių nuklidų aktyvumo nustatymas

Buvo atliktas detektoriaus kalibracijos patikrinimas nustatant žinomo aktyvumo Eu-152 taškinio kalibracinio šaltinio aktyvumą. Šaltinio sertifikate pateikiamas atskaitinis aktyvumas 1989 lapkričio 1 d. $A_a = 48,2 \pm 1,5$ kBq. Perskaičiavus aktyvumą matavimo dienai: $A_f = 12,5 \pm 1,5$ kBq. Iš sumodeliuoto spektro išrinkti visų linijų integralai, o eksperimentinis spektras buvo išanalizuotas Genie2000 darbo stoties spektro smailių analizavimo įrankiu (*PeakAnalysisReport*). Gautų spektrų (16 pav.) smailių plotų vertės panaudotos skaičiuojant Eu-152 aktyvumą. 16 grafike atidėtos iš smailių plotų santykio nustatytos absoliutaus efektyvumo santykio vertės. Modeliavimo metodu nustatyta aktyvumo vertė $A_m = 12 \pm 0.8$ kBq. Toks rezultatas patvirtina atliktos detektoriaus kalibracijos tikslumą.



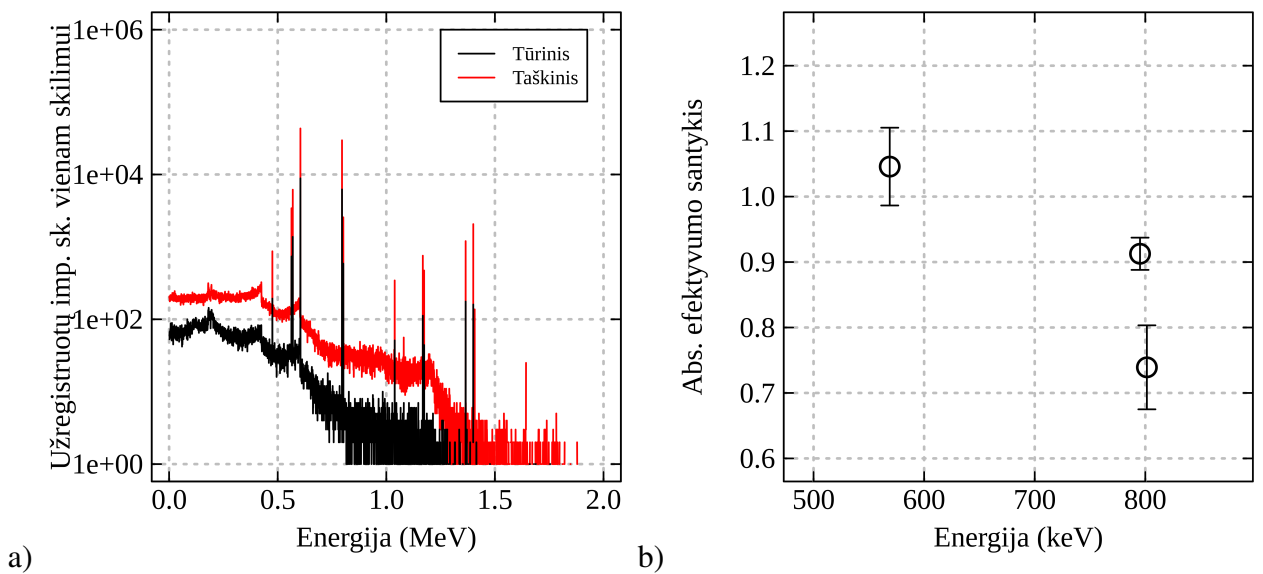
16 pav. a) sumodeliuotas (raudonai) ir išmatuotas (juodai) Eu-152 spektrai b) Eu-152 taškinio šaltinio absoliutinės santykinės aktyvumo vertės.

Kadangi darbo tikslas — tūrinių šaltinių aktyvumo vertinimas, kalibracija buvo dar kartą patikrinta naudojant žinomo aktyvumo tūrinį šaltinį. Šaltinis — TATENOS pateiktas mažo aktyvumo 10 cm aukščio ir 6.4 cm diametro cilindrinis vandens rezervuaras su Sr-90, Cs-134, Cs-137, Ra-226, U-234, U-238 ir Am-241 radionuklų mišiniu ir žinomu šių radionuklidų masiniu aktyvumu (9 lent.). Kadangi bandinys gana didelio tūrio (0.32 l), išspinduliuotų gama kvantų sąveika su pačiu bandiniu daro reikšmingą įtaką detektorių pasiekiančių dalelių skaičiui. Tai galima aiškiai matyti 17 paveiksle, kairėje, kuriame viename grafike atidėti to paties radionuklido (šiuo atveju Cs-134) tūrinio ir taškinio šaltinio spektrai. Grafike matomas aiškus viso spektro intensyvumo sumažėjimas dėl kvantų sugerties pačiame bandinyje, bei atitinkamų spektro segmentų iškraipymai. Atkartojus eksperimentinę geometriją, buvo sumodeliuotas tūrinio Cs-134 šaltinio spektras. Įvertinus Cs-134 nuklido skilimą šaltinyje buvo perskaičiuotas šaltinio aktyvumas matavimo dienai: $A_{Cs} = 6.48 \pm 0.04 \text{ kBq}$. Aktyvumo vertinimui buvo naudojamos tik trys didžiausios išeigos spektro smailės: 568, 796 ir 502 keV. Modeliavimo metodu nustatyta aktyvumo vertė: $A_{Cs,mod} = 5.5 \pm 1.0 \text{ kBq}$. Apskaičiavus šaltinio aktyvumo absoliutinį efektyvumą gautos vertės pateiktos 17 paveiksle, dešinėje. Kadangi tiriamame bandinyje buvo daugiau nei vienas radionuklidas, eksperimentiškai išmatuotame spektre matome daugiau spektrinių linijų (18 pav.). Sutampa tik spektrinės linijos priklausančios Cs-134, nes tūriniame šaltinyje modeliuotas buvo tik pastarasis nuklidas.

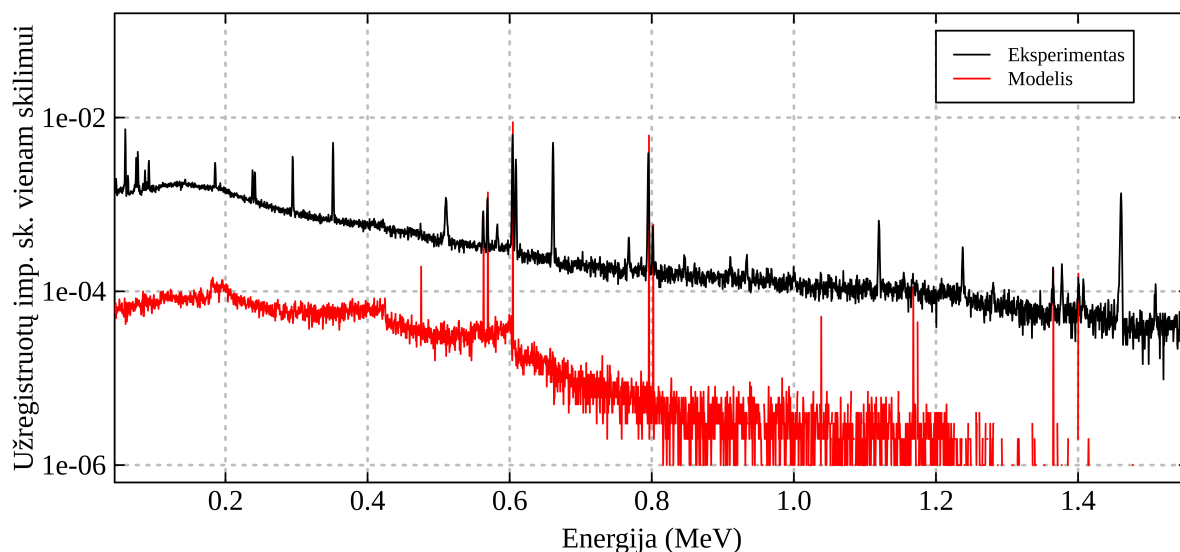
Atlikus du kalibracijos patikrinimus — vieną su taškiniu, kitą su tūriniu šaltiniu, galima drąsiai teigti, kad *Geant4* paketo elektromagnetinių ir radioaktyvaus skilimo procesų modeliavimo tikslumas yra pakankamas tūrinių šaltinių aktyvumo vertinimui 20 ribose.

9 lentelė. TATENA tūrinio bandinio sudėtyje esantys radionuklidai ir jų masiniai aktyvumai.

Izotopas	Aktyvumas, Bq/kg	Neapibrėžtis
Sr-90	24.5	0.2
Cs-134	26.3	0.2
Cs-137	19.6	0.1
Ra-226	17.9	0.1
U-234	2.69	0.02
U-238	2.79	0.02
Am-241	20	0.1



17 pav. a) Taškinio ir modeliutų parametų tūrinio Cs-134 šaltinių palyginimas. Raudonai grafike atidėta taškinio šaltinio spektras, juodai — tūrinio. b) Cs-134 tūrinio šaltinio absoliutinės santykinės aktyvumo vertės.



18 pav. Tūrinio TATENA šaltinio eksperimentiškai išmatuotas spektras (juoda) ir sumodeliuoto Cs-134 tūrinio šaltinio spektras (raudonai).

3.1.3 Trumpaamžių nuklidų aktyvumo nustatymas

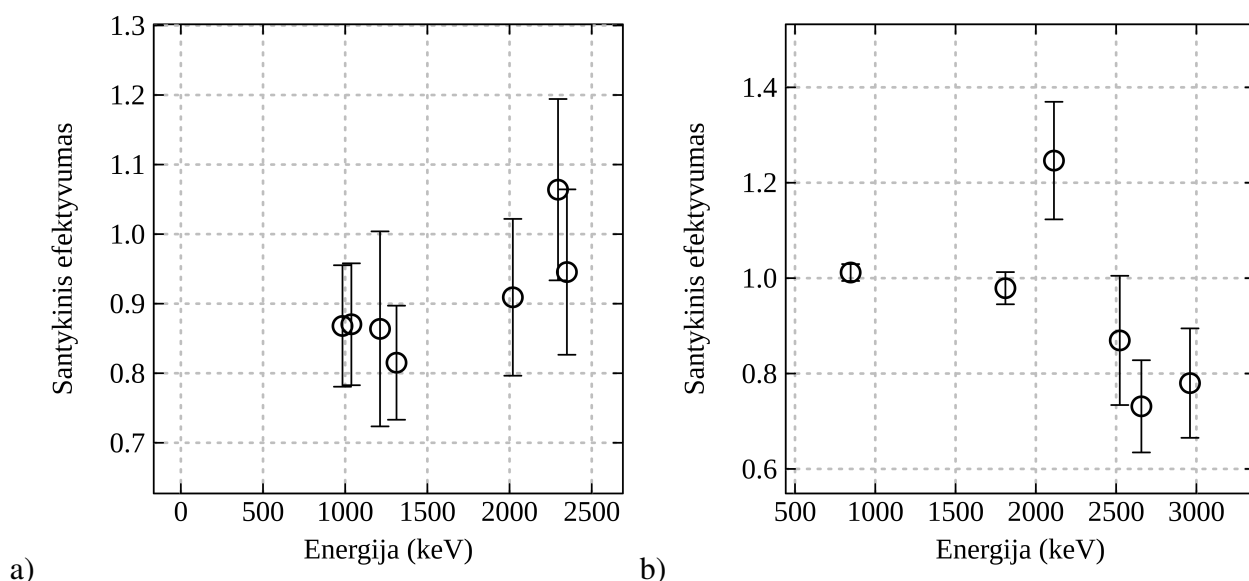
Patvirtinus, kad detektorius sukalibruotas tinkamai, buvo apskaičiuoti ir nežinomų bandinių aktyvumai. Tam pasirinkti du cilindriniai Mn-56 ir Sc-48 šaltiniai (neutronų šulinyje aktyvuotas MnSO_4 ir titanas). Mn-56 cilindrinio šaltinio spindulys $r = 0.65$ cm, aukštis $h = 0.4$ cm, o Sc-45 — $r = 1$ cm, $h = 0.3$ cm. Sumodeliavus bandinių spektrus, atlikta aktyvumo analizė. Nustatytos aktyvumų vertės $A_{Sc} = 5.5 \pm 1.0$ Bq ir $A_{Mn} = 300 \pm 70$ Bq. Apskaičiavus šaltinių santykinus efektyvumus gautos vertės pateiktos 19 paveikslo grafikuose. Kadangi, Sc-45 eksperimentinis spektras matuotas tos pačios eilės laiko tarpą ($\sim 10^5$ s) kaip ir TATENA palyginamųjų matavimų šaltinis, o Sc-48 spektrinių linijų suminiai integralai — taip pat labai panašaus dydžio, galime teigti, kad bandinys maždaug tos pačios eilės aktyvumo, kaip ir Cs-134 aktyvumas ($A_{Cs} = 6.48 \pm 0.04$ Bq) TATENA bandinyje. Tai patvirtina matavimų rezultatą — $A_{Sc} = 5.5 \pm 1.0$ Bq. Kadangi analizės rezultatai gana pastovūs, galima teigti, kad parašyta programa gali modeliuoti tūrinių šaltinių radioaktyviojo skilimo procesus absoliučiu 20 % tikslumu. Tai leidžia pakankamu tikslumu įvertinti žinomos sudėties, nežinomo aktyvumo tūrinių bandinių aktyvumą.

3.2 TDCR sistemos efektyvumo vertinimas *Geant4* modeliavimo paketu

Šiame skyrelyje bus aptarti TDCR sistemos modeliavimo rezultatai. Trims nuklidams buvo tiriamos teorinės dvigubų ir trigubų sutapčių skaičiavimo efektyvumo priklausomybės nuo įvairių parametų — scintiliatoriaus išėigos, kiuvetės užpildos, fotonų sugeriančios juostelės pločio. Taip pat tiriama TDCR skaičiaus priklausomybė nuo pasirinktos diskriminatoriaus vertės. Gautos priklausomybės atvaizduotos grafikuose, gauti rezultatai lyginami su eksperimentiniais.

3.2.1 H-3 skaičiavimo efektyvumo vertinimas

Naudojantis *Geant4* aprašytu TDCR modeliu, buvo sumodeliuotas skysto scintiliatoriaus *Ultima*



19 pav. a) ^{48}Sc ir b) ^{56}Mn tūrinių šaltinių aktyvumų vertinimo analizės rezultatai.

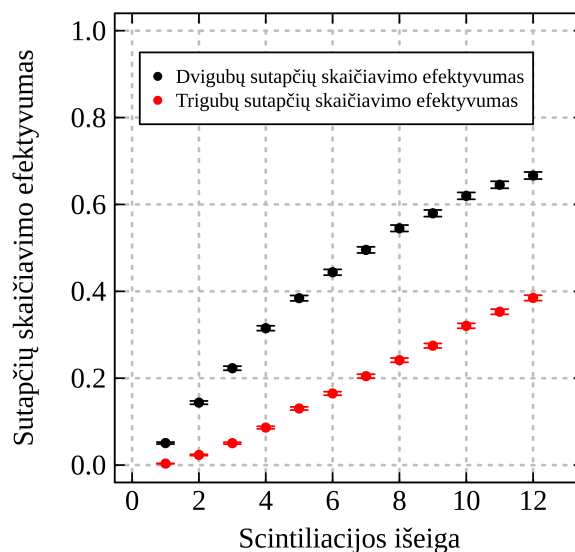
10 lentelė. Išmatuotų, TDCR skaičiaus, dvigubų φ_D ir trigubų φ_T sutapčių skaičiavimo efektyvumų, verčių ^3H nuklido bandiniui palyginimas su nustatytais modeliavimo būdu, scintiliacijos išėigai esant $6.5 \frac{\text{fotonų}}{\text{keV}}$.

	TDCR	φ_D	φ_T
Eksperimentas	0.394	0.449	0.177
Modelis	0.370	0.443	0.164

Gold LLT (Perkin Elmer) detektorius su scintiliatoriaus tūryje atsitiktinai pasiskirsčiusiais radioaktyviais tričio branduoliais. Modeliuojama keičiant geometrinių ir fizikinių parametrų vertes, darančias įtaką skaičiavimo efektyvumui (7 lentelė). Modeliuojant scintiliacinio detektoriaus atsaką prie įvairių scintiliacijos išėigų (7 lentelė) buvo gautos dvigubų ir trigubų sutapčių skaičiavimo efektyvumo priklausomybės nuo scintiliacijos išėigos vertės (20 pav.). Naudojantis eksperimentiniais rezultatais buvo nustatyta *Ultima Gold LLT* scintiliatoriaus scintiliacijos išėiga atitinkanti eksperimentinę skaičiavimo efektyvumo vertę tričiui - 6.5 fotonai keV.

Tolesni rezultatai gauti modeliuojant naudojantis šia scintiliatoriaus išėigos verte. Keičiant juostelės storį ir taip keičiant scintiliacijos gesinimo parametą buvo nustatyta dvigubų ir trigubų sutapčių skaičiavimo efektyvumo priklausomybė nuo juostelės storio (21 paveikslėlis). Aiškiai matosi, kad net ir mažiausio pasirinkto storio juostelė (3 mm) skaičiavimo efektyvumą sumažina 15 %.

Keičiant kiuvetės užpildą radioaktyviu scintiliatoriaus tirpalu (7 lentelė) buvo gautos dvigubų ir trigubų sutapčių skaičiavimo efektyvumo priklausomybės nuo kiuvetės užpildos (21 paveikslėlis). Užpildos vertėms 60 – 100 % modeliavimo rezultatai skiriasi 5 %. Eksperimentas taip pat demonstruoja panašias tendencijas. Buvo išmatuoti sutapčių skaičiavimo efektyvumai kiuvetės užpildai esant 80 ir



20 pav. Tričio dvigubų ir trigubų sutapčių skaičiavimo efektyvumo priklausomybė nuo a) scintiliatoriaus išeigos b) TDCR skaičiaus

11 lentelė. Eksperimentiniai rezultatai esant skirtingoms kiuvetės užpildoms.

Užpilda (%)	TDCR	φ_D	φ_T
80	0.3948	0.4492	0.177
100	0.398	0.453	0.180

100 %. Dvigubų ir trigubų sutapčių skaičiavimo efektyvumai, bei TDCR skaičiai pateikti 11 lentelėje. Galima daryti išvadą, kad norint efektyviai skaičiuoti nebūtina pripildyti visos kiuvetės radioaktyviu scintiliatoriaus tirpalu taupant brangias medžiagas.

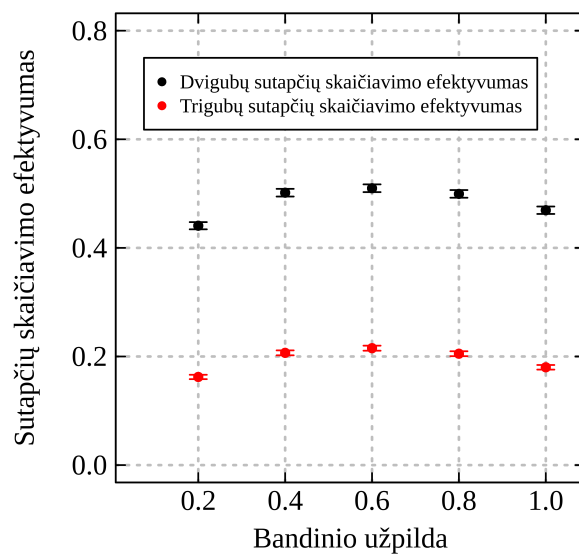
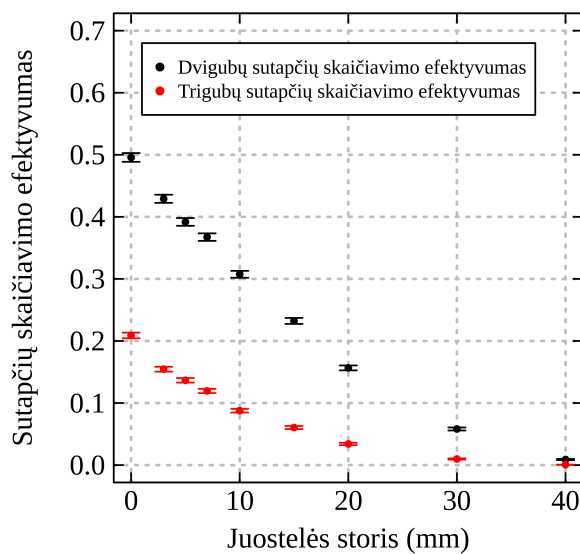
3.2.2 C-14 ir Tc-99 skaičiavimo efektyvumo vertinimas

Taip pat buvo sumodeliuoti ir C-14, Tc-99 radioaktyvūs scintiliatoriaus tirpalai. Naudojant tas pačias scintiliacijos išeigos vertes (7 lentelė) buvo nustatytos dvigubų ir trigubų sutapčių skaičiavimo efektyvumo priklausomybės nuo scintiliatoriaus scintiliacijos išeigos. Modeliavimo rezultatai pateikti 22 paveikslėlyje.

Dvigubų ir trigubų sutapčių skaičiavimo efektyvumas C-14 nuklidui prie išeigos vertės, kai tričio sumodeliuotas skaičiavimo efektyvumas atitinka išmatuotą eksperimentiškai, taip pat atitinka eksperimentinę TDCR, dvigubų sutapčių bei trigubų sutapčių skaičiavimo efektyvumo vertes. Tc-99 trigubų sutapčių skaičiavimo efektyvumas yra 7 % mažesnis. Dėl to taip pat mažesnė ir TDCR vertė. Taip gali būti dėl netikslios modelio geometrijos ar neteisingai parinktų optinių parametru.

3.2.3 Eksperimento ir modelio palyginimas

Kadangi eksperimento rezultatai labai jautrūs triukšmams, TDCR sistemoje galima nustatyti diskriminatoriaus vertę, iki kurios impulsai nebus skaičiuojami. Diskriminatoriaus modulio atitinkmuo buvo įgyvendintas ir modelyje. Gautos dvigubų ir trigubų sutapčių skaičiavimo efektyvumo vertės

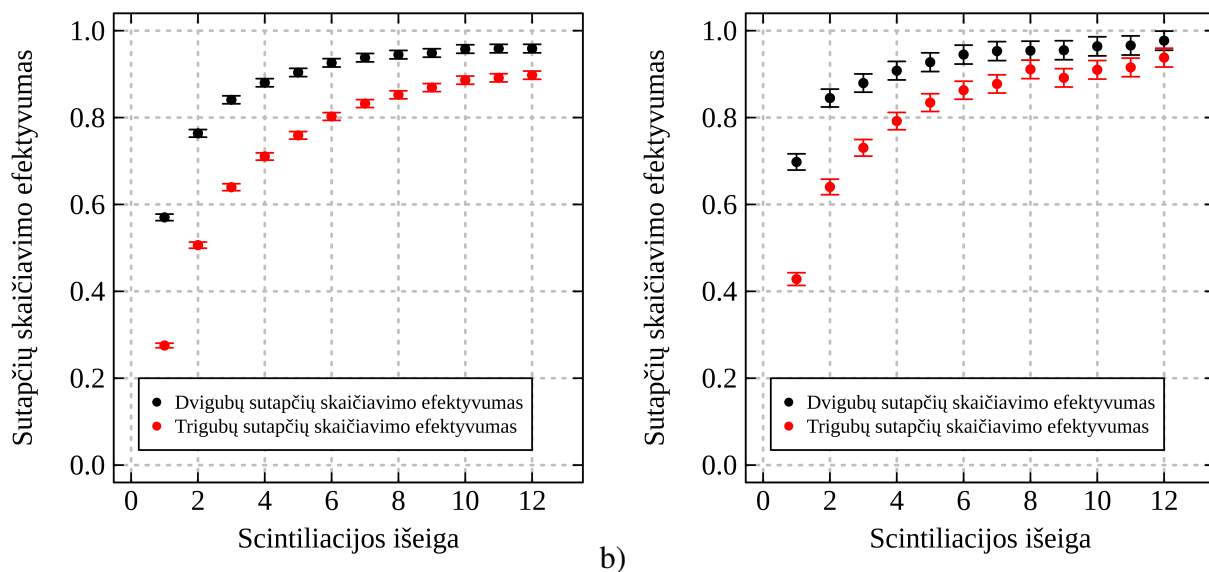


a)

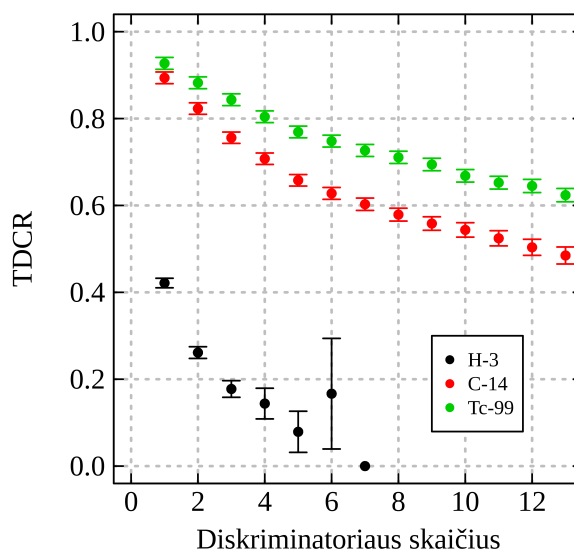
b)

21 pav. Tričio dvigubų ir trigubų sutapčių skaičiavimo efektyvumo priklausomybė nuo a) juostelės storio b) kiuvetės užpildos

nuklidams, ir jų priklausomybė nuo pasirinktos diskriminatoriaus vertės. Gauti rezultatai pateikti 23 paveiksle. Rezultatai atidėti kaip trigubų ir dvigubų sutapčių skaičiavimų efektyvumų santykio priklausomybė nuo diskriminatoriaus vertės. Iš rezultatų matyti, kad mažų energijų beta nuklidai, tokie kaip tritis, neturi didelio tikslinimo „biudžeto“ — jų ir taip mažos skaičiavimo efektyvumų vertės labai greitai pasiekia nulį. Tačiau didesnės energijos beta nuklidams, kaip C-14 ar Tc-99 tikslinimas įmanomas gana plačiame intervale. Kadangi eksperimentinė sistema suderinta vienam fotoelektronui, dvigubų ir trigubų sutapčių skaičiavimo efektyvumo vertės lyginame prie diskriminatoriaus vertės $n_d = 1$. Gautų verčių palyginimas pateiktas 13 lentelėje.



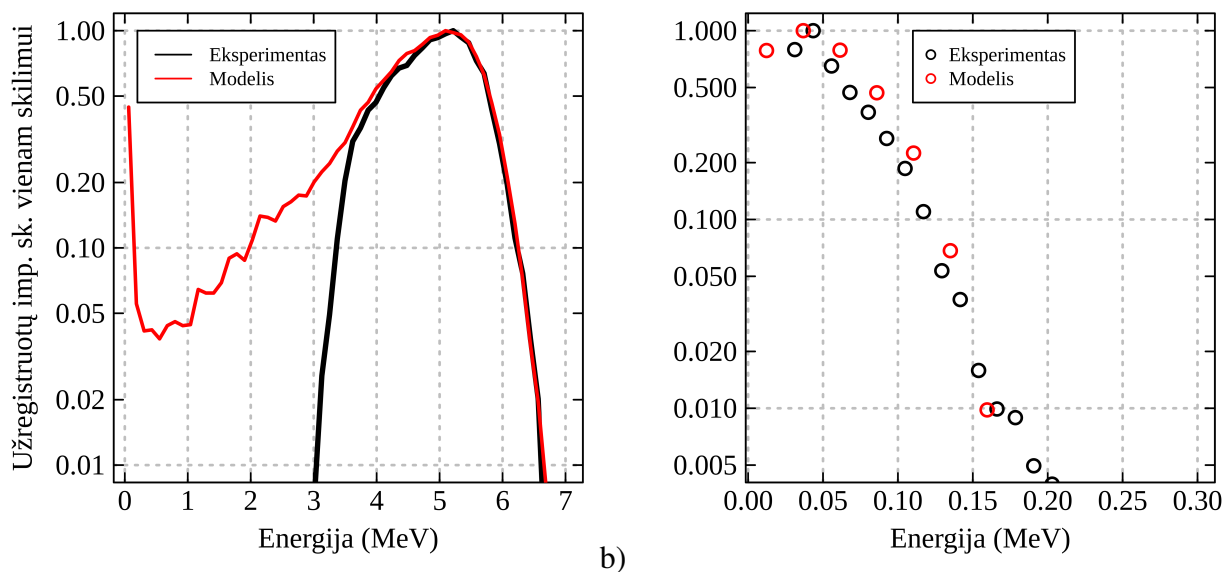
22 pav. a) ^{14}C ir b) ^{99}Tc dvigubų ir trigubų sutapčių skaičiavimo efektyvumo priklausomybė nuo scintiliatoriaus išeigos



23 pav. Nuklidų TDCR skaičių priklausomybė nuo diskriminatoriaus vertės.

3.3 PEN scintiliatoriaus efektyvumo vertinimas

TDCR sistemos modeliavimui sukurtą modelį pritaikius plono organinio scintiliatoriaus efektyvumo modeliavimui, buvo sumodeliuoti alfa (Pu-238) ir beta (C-14) tūriniai šaltiniai, kurių išspinduliuotos dalelės buvo detektuojamos plonu polietilnaftalato (PEN) detektoriumi. Modeliavimo būdu nustatytos detektoriaus scintiliacijos išeigos vertės alfa dalelėms ir elektronams, kai sumodeliuoti spektrai atitinka eksperimentinius spektrus. Alfa dalelėms nustatyta scintiliacijos išeiga $Y_\alpha = 0.175 \frac{\text{fotonų}}{\text{keV}}$, elektronams — $Y_e = 1.15 \frac{\text{fotonų}}{\text{keV}}$. Eksperimentiniai ir sumodeliuoti spektrai pateikti 24 paveiksle. Matomas



24 pav. a) Alfa dalelės spektrai gauti eksperimentiškai (atidėta juoda spalva) ir modeliuojant (raudona), b) beta dalelės spektrai gauti eksperimentiškai (juoda) ir modeliuojant (raudona).

puikus alfa spektrų atitikimas, iki ribos, ties kuria buvo nustatyta slenkstinė eksperimentinio spektro rinkimo vertė (~ 3 MeV). Matomas eksperimentinio beta spektro nuokrypis nuo teorinio. Taip gali būti dėl savadarbės detektoriaus elektronikos sukeltų triukšmų.

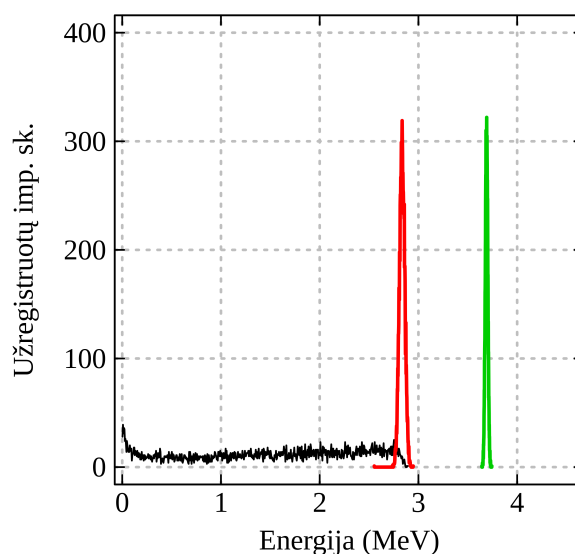
Kadangi tos pačios energijos alfa dalelių lėkio atstumas medžiagoje yra daug kartų mažesnis nei elektronų, modeliuojant alfa dalelių detektorius yra ypatingai svarbus alfa dalelių energijos nuostolių medžiagoje modeliavimo tikslumas net ir esant mažiems atstumams nuo šaltinio iki detektoriaus. Mažinant atstumą tarp šaltinio ir detektoriaus, galima sumažinti dalelės nuostolius ore, tačiau energijos nuostolių pačiame šaltinyje išvengti neįmanoma dėl baigtinių realaus šaltinio matmenų. Sumodeliuoti 4 MeV alfa dalelių tūrinio arba taškinio šaltinio, esančio 1 cm ir 3 mm atstumu nuo detektoriaus, energijos nuostoliai scintiliaciniame detektoriuje. Gauti spektrai pavaizduoti 25 paveiksle. Galima labai aiškiai atskirti padidėjusius alfa dalelės nuostolius ore esant 1 cm atstumui iki detektoriaus. Tūrinio šaltinio atveju — alfa dalelių spektras tampa panašus į realų.

Iš gautų rezultatų matome, kad *Geant4* modeliavimo paketas gali pakankamai tiksliai modeliuoti jonizuojančiosios spinduliuotės detektorius pagamintus plonų organinių scintiliatorių pagrindu.

3.4 Apibendrinimas

Šiame darbe buvo naudojama *Geant4* modeliavimo bibliotekų paketu sukurtas modelis, kuriuo būtų galima pakankamu tikslumu įvertinti nežinomo tūrinio alfa, beta arba gama šaltinio aktyvumą.

Pasinaudojus atnaujinta radioaktyviojo skilimo fizikinių procesų modeliavimo biblioteka buvo atlikta atnaujintos bibliotekos ir senos programos [22] modeliavimo rezultatų palyginimas. Lygintos spektrų smailių plotų santykio vertės prie skirtingų šaltinio atstumų iki detektoriaus. Sukalibruotas eksperimentinis ir programoje aprašytas puslaidininkinis švaraus germanio detektorius, naudojantis žinomo aktyvumo kalibraciniu Co-60 šaltiniu. Kalibracija patikrinta naudojantis žinomo aktyvumo



25 pav. Sumodeliuoti 4 MeV energijos alfa dalelių šaltinio energijos nuostolių PEN detektoriuje spektrai. Žalia spalva — taškinis šaltinis 3 mm atstumu, raudona spalva — taškinis šaltinis 1 cm atstumu, juoda spalva — tūrinis 15 μm storio šaltinis 1 cm atstumu nuo detektoriaus.

taškiniu kalibraciniu Eu-152 ir palyginamųjų matavimų tūriniu Cs-134 šaltiniais. Patvirtinus kalibraciją buvo atlikti nežinomų tūrinių Mn-56 ir Sc-48 šaltinių matavimai.

12 lentelė. Nustatytos šaltinių aktyvumo vertės ir jų palyginimas.

Šaltinis	Modeliuotas nuklidas	Aktyvumas (Bq)	Nustatytas aktyvumas (Bq)
Aktyvuotas Titanas	Sc-48	—	5.5 ± 1
Aktyvuotas MnSO ₄	Mn-56	—	300 ± 50
Radionuklidų mišinys	Cs-134	6.48 ± 0.04	5.5 ± 1.0
Eu-152	Eu-152	12.4 ± 1.5	12.0 ± 0.8

Atlikus rezultatų analizę, nustatyta, kad ankstesnis modelis atitinka dabartinį modelį, kuris remiasi atnaujinta radioaktyviojo skilimo procesų biblioteka. Remiantis ankstesnio darbo [22] rezultatais, palyginus kalibracinio Co-60 šaltinio eksperimentinius rezultatus su sumodeliuotais, galima teigti, kad faktinė detektoriaus geometrija neatitinka gamintojo dokumentacijoje pateiktos. Nustatyta aukščio pataisa detektoriuje — $h = 2$ mm. Tikrinant modeliavimo tikslumą buvo apskaičiuoti Eu-152 ir Cs-134 nuklidų aktyvumai šaltiniuose. Aktyvumo vertės atitinkamai $A_{Eu} = 12.0 \pm 0.8$ kBq, $A_{Cs} = 5.5 \pm 1.0$ Bq paklaidų ribose atitinkančios faktines nuklidų aktyvumo vertes — $A_{Eu,f} = 12,5 \pm 1,5$ kBq ir $A_{Cs,f} = 6.4 \pm 0.04$ Bq. Naudojantis sukalibruotu ir patikrintu detektoriumi, atlikti nežinomo aktyvumo tūrinių Sc-48 ir Mn-56 bandinių aktyvumo tyrimai. Visų aktyvumų palyginimas pateiktas 12 lentelėje.

Igyvendinus TDCR sistemos modelį, buvo sumodeliuotas skysto scintiliatoriaus *Ultima Gold LLT* (*Perkin Elmer*) detektorius su scintiliatoriaus tūryje atsitiktinai pasisikrščiusiais radioaktyviais branduoliais. Buvo sumodeliuotos dvigubų ir trigubų sutapčių skaičiavimo efektyvumo priklausomybės

nuo scintiliatoriaus scintiliacijos išseigos ^3H , ^{14}C ir ^{99}Tc nuklidams. Pasinaudojus ^3H eksperimentiniais duomenimis, šis scintiliacinis detektorius buvo sukalibruotas ties scintiliatoriaus scintiliacijos išseiga $6.5 \frac{\text{fotonų}}{\text{keV}}$. Taip pat, tričiui buvo atlikti juostelės pločio ir bandinio užpildos įtakos dvigubų ir trigubų sutapčių skaičiavimo efektyvumui tyrimai. Nustatyta, kad TDCR modeliavimo ir eksperimentiniai rezultatai esant buteliuko užpildoms 60 – 100 % skiriasi tik 5 %. Todėl galima turėti beveik tokį pat skaičiavimo efektyvumą sutaupant kas penktą arba kas trečią matavimą. Taip pat buvo atlikta TDCR skaičiaus priklausomybės nuo diskriminatoriaus analizė ^3H , ^{14}C ir ^{99}Tc nuklidams. Palyginus su eksperimentu, matome, kad modelis ^{14}C nuklidui puikiai ($< 3\%$) atitinka eksperimentinius rezultatus, o ^3H ir ^{99}Tc nustatytas 5 % nuokrypis nuo eksperimentinių verčių.

13 lentelė. Eksperimentiškai išmatuotos ir modeliuojant gautos TDCR skaičiaus, dvigubų ir trigubų sutapčių skaičiavimo efektyvumų vertės nuklidams.

	H-3		C-14		Tc-99	
	Eksp.	Mod.	Eksp.	Mod.	Eksp.	Mod.
TDCR	0,39	0,37	0,89	0,87	0,96	0,91
φ_D	0,44	0,45	0,91	0,92	0,96	0,95
φ_T	0,17	0,16	0,81	0,80	0,92	0,86

Palyginus eksperimentinius ir sumodeliuotus PEN detektoriaus spektrus, galima teigti, kad *Geant4* bibliotekų paketu galima pakankamai tiksliai modeliuoti plonus organinius scintiliatorius.

Išvados

1. Panaudojant sukurtą modelį, *Geant4* bibliotekų paketu įvertintas taškinių šaltinių aktyvumo matavimo efektyvumas — 10% paklaidos ribose. Nuokrypis tarp sumodeliuotos ir eksperimentinių verčių yra nulemtas neteisingai gamintojo nurodyto atstumo nuo kristalo iki detektoriaus apsauginio gaubto.
2. Remiantis sukurtu modeliu, galima apskaičiuoti nežinomų tūrinių šaltinių aktyvumą 10% paklaidos ribose. Kadangi atliktų eksperimentų matavimo paklaidos yra mažesnės nei modeliavimo, suminės paklaidos dydį lemia modeliavimo rezultatai.
3. Palyginus TDCR vertes ^3H , ^{14}C ir ^{99}Tc nuklidams, gautas modeliuojant su eksperimentinėmis, nustatyta, kad modelis ^{14}C nuklidui puikiai ($< 3\%$) atitinka eksperimentinius rezultatus, o ^3H ir ^{99}Tc nustatytas 5% skirtumas nuo eksperimentinių verčių.
4. Kadangi TDCR modeliavimo ir eksperimentiniai rezultatai kiuvetės užpildoms esant 80–100% skiriasi tik 5%, galima daryti išvadą, kad norint pasiekti pakankamą skaičiavimo efektyvumą nebūtina užpildyti visos kiuvetės.
5. Palyginus PEN detektoriaus eksperimentinius ir modeliavimo rezultatus, galima teigti, kad *Geant4* bibliotekų paketu galima pakankamai tiksliai modeliuoti jonizuojančiosios spinduliuotės detektorius plonų organinių scintiliatorių pagrindu.

Literatūros sąrašas

- [1] K. S. Krane. *Introductory Nuclear Physics*. John Wiley & Sons, 1988.
- [2] Glenn F. Knoll. *Radiation Detection and Measurement*. John Wiley & Sons, 2010.
- [3] A. Poškus. *Atomo fizika ir branduolio fizikos eksperimentiniai metodai*. Vilniaus universitetas, 2012.
- [4] K. Debertin and R. Helmer. *Gamma and X-Ray spectrometry with semiconductor detectors*. ELSEVIER SCIENCE B.V., 1988.
- [5] Broda R. A review of the triple-to-double coincidence ratio (TDCR) method for standardizing radionuclides. *Applied Radiation and Isotopes*, (58):585–594, 2003.
- [6] Tomarchio E. and Rizzo S. Coincidence-summing correction equations in gamma-ray spectroscopy with p-type HPGe detectors. *Radiation Physics and Chemistry*, (80):318–323, 2011.
- [7] E. Williams and J. Tickner. Efficient Monte Carlo simulation of coincidence effects in radioisotope decays including γ - γ angular correlations. *Computer Physics Communications*, 9(183):1869–1876, September 2012.
- [8] Bobin C., Thiam C., Bouchard J., and Jaubert F. Application of a stochastic TDCR model based on Geant4 for Cherenkov primary measurements. *Applied Radiation and Isotopes*, 68:2366–2371, 2010.
- [9] Thiam C., Bobin C., Chauvenet B., and Bouchard A. Application of TDCR-Geant4 modeling to standardization of ^{63}Ni . *Applied Radiation and Isotopes*, 70:2195–2199, 2012.
- [10] S. Debabneh, E. Al-Nemri, and J. Sharaf. Application of Geant4 in routine close geometry gamma spectroscopy for environmental samples. *Journal of Environmental Radioactivity*, (134):27–34, 2014.
- [11] T. Vidmar, M. Korun, and A. Likar. Close-geometry efficiency calibration in gamma-ray spectroscopy using radio-nuclides with a two-step cascade decay. *Nuclear Instruments & Methods in Physics Research*, A(508):404–413, 2003.
- [12] S. and García-León M. Hurtado. GEANT4 code for simulation of a germanium gamma-ray detector and its application to efficiency calibration. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research*, A(518):764–774, 2004.
- [13] Broda R., Cassette P., and Karsten K. Radionuclide metrology using liquid scintillation counting. *Metrologia*, (44):S36–S52, 2007.

- [14] Gudelis A., Vinčiūnas A., Butkus P., and Pranaitis M. Measurements of some radionuclides using a new TDCR system and an ultra low-level conventional LSC counter in CPST, Lithuania. *Applied Radiation and Isotopes*, (70):2204–2208, 2012.
- [15] A. Agostinelli, J. Allison, and K. Amako. Geant4 - a simulation toolkit. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, 506(3):250–303, liepa 2003.
- [16] S. Hastings and L. Marcia. *Gamma-Ray detectors*. United States Nuclear Regulatory Commission, 1991.
- [17] Ngo Quang Huy and Do Quang Binh. A semi-empirical approach to analyze the activities of cylindrical radioactive samples using gamma energies from 185 to 1764 keV. *Applied Radiation and Isotopes*, (94):82–88, 2014.
- [18] Bouchard J. and Cassette P. MAC3: an electronic module for the processing of pulses delivered by a three photomultiplier. *Applied Radiation and Isotopes*, 52:669–672, 2000.
- [19] A. Bukartas. Geant4 programų paketo panaudojimas PIXE spektrometrijoje kiekybinės analizės tikslumui didinti. Branduolinės energetikos fizikos bakalauro studijų programos baigiamasis darbas. Vad. dr. Artūras Plukis, birželis 2014.
- [20] Shakeel ur Rehman. *Study of Gamma Ray Detector Efficiencies and Integral Parameters using Stochastic Simulations and Analytical Techniques*. PhD thesis, Pakistan Institute of Engineering and Applied Sciences, Lapkritis 2010.
- [21] Detwiler J. Angular Correlations in Gamma De-excitation <<http://indico.cern.ch/event/372884/contributions/1792361/attachments/742166/1018118/G4NuclearPolarizationCERN.pdf>> [Žiūrėta 2016.05.20]. 2015.
- [22] A. Bukartas. Monte Karlo metodų palyginimas modeliuojant gama detektoriaus efektyvumą. Magistrantūros studijų mokslo tiriamasis darbas, 2015.
- [23] Brandt Daniel. New Developments in Geant4 <http://geant4.slac.stanford.edu/MSFC2012/G4_NewDevelopments_DBrandt.pdf>. [Žiūrėta 2016.01.20].
- [24] R. Brun and F. Rademakers. Root, an object oriented data analysis framework. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, 389(1-2):81–86, balandis 1997.
- [25] LSC Cocktails — Elemental Composition <http://www.perkinelmer.com/lab-solutions/resources/docs/APP_LSCCocktailsElementalComposition.pdf> [Žiūrėta 2016.05.20].

[26] Garankin Jevgenij. Scintiliacinių savybių, svarbių jonizuojančiosios spinduliuotės registravimui, tyrimas aromatinuose polimeruose, kursinis darbas. 2015.

EVALUATION OF RADIONUCLIDE DETECTION EFFICIENCY USING GEANT4 PACKAGE
FOR SIMULATION OF IONISING RADIATION INTERACTION WITH MATTER

Summary

The purpose of this work was to create a alpha, beta and gamma radiation detector model using *Geant4* 10.2.1 version libraries capable of indirect evaluation of volumetric source activity. Two types of detectors were modeled: HPGe and scintillation detectors.

HPGe detector was modeled according to manufacturer's specifications. Theoretical ^{60}Co results were compared with experimental data. It was concluded, that the geometry of the experimental setup differs from the specifications in the documentation. The model was calibrated for a ratio of peak area integrals of unity at a point source distance of $h = 2$ mm from the detector. The validity of this calibration has been confirmed by the comparative measurements of known activity point source of ^{152}Eu and volume source of ^{134}Cs . Measured activities were in good agreement within extended uncertainties with the actual activities of the sources. Seeing that the demonstrated results differ from the actual values of activity by less than 10%, it is considered, that using the created HPGe model one can estimate absolute activity of a cylindrical geometry volumetric source well within a 10% limits. Also activity of volumetric sources of short-lived nuclides ^{48}Sc and ^{56}Mn without known activities were measured. In the analysis was shown, that estimated values agree with other available methods of activity estimation.

TDCR system model was created using estimated geometrical parameters. The model was used to calculate double and triple coincidence counting efficiencies as dependancies of scintillation yield, scintillation quenching parameter and vial filling percentage for ^3H , ^{14}C and ^{99}Tc nuclides. Scintillation yield of experimental *ULTIMA Gold LLT* scintillator was estimated from tritium coincidences counting efficiencies comparison with experimental results. It was concluded, that using a scintillation yield value of $6.5 \frac{\text{photons}}{\text{keV}}$ TDCR value for carbon differed from experimental only by 3 %. For other nuclides this value was slightly higher — yielding 5 % difference. Also, according to experimental and theoretical results, one could obtain relatively high coincidences counting efficiencies in a wide range of vial filling percentages.

Thin-film polyethyl naphthalate scintillation detector model was also created. Experimental spectra of ^{14}C and ^{238}Pu thin volumetric sources were compared with theoretical results. By changing the scintillation yield and resolution values, modelled spectra was fitted to experimental results. Obtained yield values for alpha particles $0.175 \frac{\text{photons}}{\text{keV}}$ and for electrons $1.7 \frac{\text{photons}}{\text{keV}}$. Obtained alpha-to-beta ratio ~ 0.1 , is very characteristic for organic scintillators.

Bukartas, Antanas. *Radionuklidų detektavimo efektyvumo vertinimas, modeliuojant jonizuojančios spinduliuotės sąveikos su medžiaga procesus paketu GEANT4*, Aplinkos ir Cheminės fizikos Magistrantūros studijų baigiamasis darbas. Vad. Artūras Plukis. Vilnius: Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, 2016, 52 p.

Šio darbo tikslas buvo sukurti ir eksperimentiškai patikrinti modelį, kuriuo būtų galima nustatyti alfa, beta ir gama baigtinių matmenų šaltinių aktyvumą naudojantis *Geant4* modeliavimo bibliotekų paketu. Buvo įgyvendinti trys jonizuojančiosios spinduliuotės detektorių modeliai — puslaidininkinio gryno germanio kristalo (HPGe) detektoriaus, trigubų-dvigubų sutapčių (TDCR) sistemos ir polietilnaftalato plono organinio scintiliatorinio detektoriaus. HPGe detektoriaus modelis buvo sukalibruotas. Kalibraciją patikrinus nustatytos nežinomų tūrinių bandinių aktyvumo vertės. TDCR sistema sukalibruota tiriant dvigubų ir trigubų sutapčių skaičiavimo efektyvumą priklausomybes nuo scintiliacijos išeigos ^3H , ^{14}C ir ^{99}Tc nuklidams. Kalibracija palyginta su eksperimentiniais rezultatais. Plono organinio scintiliatoriaus detektoriaus modelis sukalibruotas modeliavimo metodu. Nustatyta tipinė organinio scintiliatoriaus alfa–beta išeigų santykio vertė.