

BK 7127842

ISSN 0101-3084



CNEN/SP

ipen Instituto de Pesquisas
Energéticas e Nucleares

**PAGE: UM PROGRAMA PARA ANÁLISE DE ESPECTROS GAMA
EM MICROCOMPUTADORES TIPO IBM-PC**

**Maria Augusta GONÇALVES, Mitiko YAMAURA, Geraldo José Calmon COSTA,
Etsuko Ikeda de CARVALHO, Harko Tamura MATSUDA e Bertha Fioh de ARAÚJO**

IPEN-Pub-333 •

ABRIL/1991

SÃO PAULO

**PAGE: UM PROGRAMA PARA ANÁLISE DE ESPECTROS GAMA EM
MICROCOMPUTADORES TIPO IBM-PC**

**Maria Augusta GONÇALVES, Mitiko YAMAURA, Geraldo José Calmon COSTA,
Etsuko Ikeda de CARVALHO, Harko Tamura MATSUDA e Bertha Floh de ARAÚJO**

DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA QUÍMICA

**CNEN/OP
INSTITUTO DE PESQUISAS ENERGÉTICAS E NUCLEARES
SÃO PAULO - BRASIL**

Série PUBLICAÇÃO IPEN

INIS Categories and Descriptors

B11.00

F51.00

**GAMMA SPECTRA
MULTI-CHANNEL ANALYSERS
COMPUTER CODES
P CODES
MICROCOMPUTERS**

IPEN - Doc - 3922

Aprovado para publicação em 01/03/91.

Nota: A redação, ortografia, conceitos e revisão final são de responsabilidade do(s) autor(es).

PAGE : UM PROGRAMA PARA ANÁLISE DE ESPECTROS GAMA EM
MICROCOMPUTADORES TIPO IBM-PC*

Maria Augusta GONÇALVES, Mitiko YAMAURA, Geraldo José
Calmon COSTA, Etsuko Ikeda de CARVALHO, Harko Tamura
MATSUDA, Bertha Floh de ARAUJO

COMISSÃO NACIONAL DE ENERGIA NUCLEAR - SP
INSTITUTO DE PESQUISAS ENERGÉTICAS E NUCLEARES
Caixa Postal 11049 - Pinheiros
05499 - São Paulo - Brasil

RESUMO

PAGE é um conjunto de programas para a análise de espectros de emissores gama obtidos em detectores de germânio de alta pureza. Foi desenvolvido em linguagem BASIC para uso em microcomputadores tipo IBM-PC acoplados a analisadores multicanal. As principais funções que compõem o software PAGE são as seguintes: localização de picos; identificação do nuclídeo emissor gama; determinação da atividade. A calibração do sistema foi realizada com fontes padrão de rádio nuclídeos. A curva de calibração eficiência x energia foi traçada por um ajuste logarítmico e o programa permite análise de nuclídeos com picos sobrepostos. O PAGE tem programas auxiliares para: construção e listagem da biblioteca de radionuclídeos; aquisição de espectro gama do analisador multicanal; obtenção de espectro gama no visor com determinações de área e FWHM para cada pico do espectro. Este software é para ser aplicado em controle analítico de processo onde o fator tempo de resposta é um parâmetro muito importante. O PAGE gasta aproximadamente 1,5 minutos para analisar um espectro complexo obtido de um analisador multicanal com 4096 canais.

(*) Trabalho apresentado no International Meeting on
Chemical Engineering and Biotechnology, Frankfurt,
Alemanha Federal, junho 1988.

PAGE : A PROGRAM FOR GAMMA SPECTRA ANALYSIS IN
PC MICROCOMPUTERS*

Maria Augusta GONÇALVES, Mitiko YAMAURA, Geraldo José
Caimon COSTA, Etsuko Ikeda de CARVALHO, Harko Tamura
MATSUDA, Bertha Floh de ARAUJO

COMISSÃO NACIONAL DE ENERGIA NUCLEAR - SP
INSTITUTO DE PESQUISAS ENERGÉTICAS E NUCLEARES
Caixa Postal 11049 - Pinheiros
05499 - São Paulo - Brasil

ABSTRACT

PAGE is a software package, written in BASIC language, to perform gamma spectra analysis. It was developed to be used in a high-purity intrinsic germanium detector-multi channel analyser-PC microcomputer system. The analysis program of PAGE package accomplishes functions as follows: peak location; gamma nuclides identification; activity determination. Standard nuclides sources were used to calibrate the system. To perform the efficiency x energy calibration a logarithmic fit was applied. Analysis of nuclides with overlapping peaks is allowed by PAGE program. PAGE has additional auxiliary programs for: building and list of isotopic nuclear data libraries; data acquisition from multichannel analyser; spectrum display with automatic area and FWHM determinations. This software is to be applied in analytical process control where time response is a very important parameter. PAGE takes ca. 1.5 minutes to analyse a complex spectrum from a 4096 channels MCA.

(*) Paper presented at International Meeting on Chemical Engineering and Biotechnology, Frankfurt, Germany Federal Republic, June 1988.

I - INTRODUÇÃO

O decaimento de um isótopo é muitas vezes acompanhado pela emissão de um ou mais raios gama, com energia característica para cada isótopo. Portanto, as medidas das energias dos raios gama emitidos por um dado isótopo servem para identificar o isótopo. Além disso, a taxa de emissão de raios gama de uma amostra permite determinar a atividade dos elementos presentes na amostra (*).

A finalidade do programa é identificar os nuclídeos por meio de suas energias e determinar suas atividades por meio do cálculo da área do pico correspondente.

As principais etapas da programação são a calibração e a análise.

II - DESCRIÇÃO DO PROGRAMA

PAGE é um conjunto de programas para a análise de espectros de emissores gama obtidos em detectores de germânio de alta pureza. Foi desenvolvido em linguagem BASIC para uso em microcomputadores tipo IBM-PC acoplados a analisadores multicanal, ambos de fabricação nacional.

Os principais programas que compõem o "software" PAGE com suas respectivas funções são os seguintes:

- . ANALI - realiza a análise do espectro
- . CALIBRE - efetua as calibrações Energia x Canal, FWHM x Energia e Eficiência x Energia.
- . SIST - permite a visualização do espectro gama no terminal de vídeo, com possibilidade de variação nas escalas horizontal e vertical. Permite ainda o cálculo automático da FWHM (largura na meia-altura), da integral líquida e bruta de um pico para 20 regiões de interesse demarcadas e

da contagem total do espectro.

. MONTABIB e LISTABIB - executam a montagem e a leitura, respectivamente, de bibliotecas contendo os dados nucleares dos radionuclídeos.

O programa PAGE requer um equipamento com 64K de memória RAM para ser executado e leva aproximadamente 1,5 minutos para identificar e determinar as atividades de um espectro complexo de 4096 canais.

II.1 Calibração

O programa de calibração CALIBRE requer a utilização de uma biblioteca com os dados nucleares de radionuclídeos previamente preparada, e um espectro de radionuclídeos- padrão, cujas energias e atividades estejam no intervalo das amostras a serem analisadas.

Para a determinação da curva de calibração de Energia x Nº do Canal, o operador deve introduzir os canais inicial e final e a energia, para cada pico do espectro de calibração.

Conhecendo-se o canal inicial e final para cada pico, o programa determina a equação da reta utilizada para o desconto das contagens do "background" pelo método do trapézio⁽³⁾.

Determina-se o centróide dos picos pela fórmula⁽²⁾:

$$K1 = \frac{\sum_{K=1}^S N * K}{\sum_{K=1}^S N}$$

onde N = contagem líquida no canal (contagem bruta - contagem do "background")

K = nº do canal

I = nº do canal inicial

S = nº do canal final

K1 = nº do canal centróide

Com os centróides calculados e suas respectivas energias, utiliza-se um ajuste pelo método dos mínimos quadrados para a determinação dos coeficientes das retas de calibração (Energia x nº do Canal) e (FWHM x nº do Canal).

Para a calibração em eficiência, o programa solicita ao operador a introdução do nome do espectro de calibração, da biblioteca de radionuclídeos, o tempo de contagem e o "joelho"⁽³⁾ do detector.

O operador pode introduzir os pares (nome do elemento, atividade) via teclado ou a partir de um arquivo previamente preparado.

O programa busca na biblioteca as energias relativas aos elementos introduzidos, determina o centróide CN e calcula a FWHM⁽⁴⁾ correspondente. O intervalo de integração para cálculo da área do pico foi adotado como sendo (CN-L2) a (CN+L2), onde $L2 = 1,55 * FWHM$.

A área é calculada descontando-se o "background" para cada canal.

Quando $CTOTAL/T < 2000$ a área deverá ser corrigida devido ao efeito de "pile-up" no detector⁽³⁾ ($CTOTAL =$ contagem bruta total do espectro e $T =$ tempo de contagem).

A eficiência E_f é então calculada como:

$$E_f = \frac{A}{T.C. * P.D. * A_t} \quad (1)$$

onde **A** = área do pico (contagens)

T.C. = tempo de contagem (s)

P.D. = porcentagem de desintegração (%)

At = atividade (Bq)

O programa armazena os pares (Eficiência, Energia), realiza um ajuste logarítmico e determina os coeficientes A e B da equação:

$$\ln (Ef) = A + B * \ln (Energia)$$

Na tela apresenta-se então uma listagem com as energias dos radionuclídeos usados na calibração, a eficiência real obtida pela equação (1), a eficiência calculada a partir do ajuste logarítmico e os desvios entre as eficiências.

Retirados os "outliners", o programa recalcula automaticamente os coeficientes da equação do ajuste logarítmico.

Os parâmetros que são gravados pelo programa de calibração para uso posterior no programa de análise são os coeficientes angulares e lineares das retas de calibração e o "joelho" do detector.

II.2 Análise

PAGE realiza a análise de uma amostra por meio do programa ANALI. Este requer a preparação prévia da calibração e de uma biblioteca com os dados nucleares dos radionuclídeos (1,5).

O programa ANALI utiliza uma rotina de pesquisa de picos, isto é, ele localiza os picos no espectro e procura na biblioteca os radionuclídeos com a energia correspondente.

Para a localização de picos, o programa percorre todos os canais do espectro e para cada um deles verifica a seguinte condição para a existência de um pico⁽²⁾:

$$C_k > C_{k-2} + S * \sqrt{C_{k-2}} \quad e$$

$$C_k > C_{k+2} + S * \sqrt{C_{k+2}}$$

onde K = nº do canal

C_k = contagens no canal k

C_{k-2} = contagens no canal $k-2$

C_{k+2} = contagens no canal $k+2$

S = sensibilidade introduzida pelo operador

A área de cada pico é calculada pela somatória das contagens nos canais no intervalo $(K - L2)$ a $(K + L2)$, sendo $L2 = 1,55 * FWHM$. A contagem do "background" é descontada para cada canal.

Para a identificação do radionuclídeo, o programa compara a energia de cada pico encontrada no espectro com as energias armazenadas na biblioteca. Aceita-se um pico como pertencente a um dado nuclídeo quando:

$$EG - 0,5 * L2 * R < EN < EG + 0,5 * L2 * R$$

sendo: EG = energia armazenada na biblioteca (keV)

$$L2 = 1,55 * FWHM$$

R = coeficiente angular da reta de calibração energia x nº do canal

EN = energia encontrada no espectro (keV)

Se um pico é identificado com possibilidade de pertencer a mais um nuclídeo da biblioteca, procura-se no espectro outros picos pertencentes a esses nuclídeos, para a identificação. Um nuclídeo só é aceito positivamente quando a energia corresponde à desintegração de maior rendimento estiver presente no espectro.

Determina-se a atividade de um nuclídeo por meio da seguinte equação:

$$At = \frac{A}{E_f * T * P.D.} \quad (2)$$

onde : At = atividade em becqueréis

A = área do pico (contagens)

T = tempo de contagem (s)

P.D. = porcentagem de desintegração (%)

Ef = $\exp [X + R * \ln (EN)]$

R, X = coeficientes angular e linear da reta de calibração de eficiência x energia, respectivamente.

A atividade é calculada para todos os picos do espectro. As atividades dos picos referentes a um mesmo nuclídeo são comparadas e os picos aceitos devem obedecer à seguinte relação:

$$AT_{1,j} = \overline{AT}_1 \pm 0,1 * \overline{AT}_1 \quad (3)$$

onde: \overline{AT}_1 = média aritmética das atividades do nuclídeo 1

$AT_{1,j}$ = atividade do pico j do nuclídeo 1

A porcentagem de incerteza na contagem de um pico é determinada por (3):

$$\% \text{ incerteza} = 100 \times \sqrt{\frac{\text{Contagem da Área Bruta} + \text{Contagens do "Background"}}{\text{Contagens da Área Líquida}}}$$

A atividade do nuclídeo é calculada como a média aritmética das atividades dos picos que obedecerem à relação (3). O mesmo critério se aplica ao cálculo da % incerteza de contagem.

Caso as diferenças entre as atividades calculadas para os vários picos de um mesmo nuclídeo não obedecerem à relação (3), a atividade e a % incerteza do nuclídeo serão consideradas como aquelas do pico de maior porcentagem de desintegração.

A saída do programa fornece o nome dos nuclídeos, as

atividades e as porcentagens de incerteza nas contagens.

III - EQUIPAMENTOS E FONTES-PADRÃO

- detector HpGe (germânio de alta pureza) com volume ativo total de $73,9\text{cm}^3$, com 1,71 keV de resolução para o pico de 1,33 MeV do ^{60}Co , da ORTEC Inc. Co, USA;
- analisador multicanal Mod. 11013 com 4096 canais, acoplado a um microprocessador INTEL 8085, desenvolvido no Instituto de Engenharia Nuclear, no Rio de Janeiro;
- microcomputador XT-2002 MASTER, tipo IBM-PC, com 756 KB de memória RAM, terminal de vídeo, teclado, 2 drives de 5 1/4" dd, Winchester de 10 MB, da Microtec Sistemas Ind. e Com. S/A., Brasil;
- impressora RIMA XT-180 da Sistema Automação Industrial Ltda., Brasil;
- fontes-padrão de emissores gama da New England Nuclear, Inglaterra.

IV - DISCUSSÃO E CONCLUSÕES

Utilizou-se o programa PAGE para analisar um espectro-padrão de nuclídeos com energias no intervalo de 80 a 1800 keV, com 4096 canais.

Os resultados da análise apresentaram um erro médio no cálculo das atividades de 3% e o tempo de análise foi de aproximadamente 1,5 minutos.

Dos testes realizados com este programa, concluiu-se que o modelo adotado para a pesquisa de picos e para o cálculo das áreas apresenta bom desempenho para amostras com atividades no intervalo de 10^{-1} a 10^3 KBq.

Devido à rapidez na resposta, este programa pode ser empregado em controle de processos que envolvam a separação e purificação de gamma-emissores. Presta-se, também, a elaboração de modelos matemáticos e simulação de processos utilizando-se traçadores como indicadores do desempenho de processos.

V - REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- 1 - LEDERER, C.M.; HOLLANDER, J.M.; PERLMAN, I. *Table of Isotopes*. 6 ed. John Wiley & Sons, Inc., USA, 1967, 594 p.
- 2 - LIMA, F.W.; ATALLA, L.T. *A program in BASIC language for analyses of gamma spectra using on line microcomputers*. São Paulo, Instituto de Energia Atômica, nov. 1973. (IEA-Pub-317).
- 3 - OPERATORS Manual for GELIGAM (ORACL): *Analytical Software - Environmental package. Model 6523*. Oak Ridge, Tenn. EG & G ORTEC, Dec. 1977.
- 4 - PRICE, W.J. *Nuclear radiation detection*. New York, USA, McGraw-Hill, 1958. 382p.
- 5 - ZADDACH, G. *Katalog von Ge(Li) - Gamma Spektren*. Kernforschungsanlage Jülich (KFA), 1974. (Jül-914-DE).