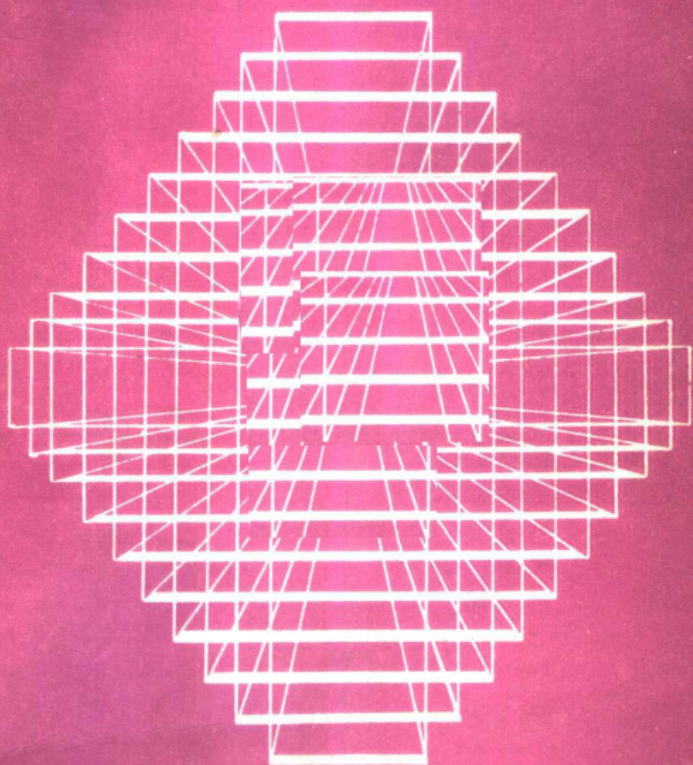


庞巨丰 著 陕西科学技术出版社



能谱数据分析



封面设计：惠红彦

ISBN 7-5369-0681-1/TL·1

定价：11.60元

Y 能 谱 数 据 分 析

庞 巨 丰 编 著

陕 西 科 学 技 术 出 版 社

γ 能谱数据分析

庞巨丰 编著

陕西科学技术出版社出版发行

(西安北大街131号)

012基地印刷厂排版 西安永新印刷厂印刷

350×1168毫米 32开本 25.75印张 2插页 568千字

1990年3月第1版 1990年3月第1次印刷

印数: 1—2,000

ISBN 7-5369-0681-1/TL·1

定 价: 11.60元

前 言

γ 能谱分析技术,是快速、可靠、非破坏性地确定待测样品中各种具有 γ 辐射的放射性核素的性质及其强度的重要手段,是一种比较直观的仪器分析技术。二十几年来,它在核物理研究、原子能各种应用领域、核防护、环境放射性研究等方面都发挥了巨大的作用。这种分析技术主要包括 γ 能谱的测量技术以及数据的收集和分析技术。前者主要是样品的制备和测量方法,后者即为数据的获取和分析方法。

自从1948年Hofstadter开始使用NaI(Tl)晶体探测 γ 射线,1950年以Wilkinson的模拟—数字转换方法为基础的多道分析器出现以后,由探测器和多道分析器的组合,构成了 γ 能谱数据的获取系统。随着探测技术的不断发展,于六十年代初,又出现了高分辨率的Ge(Li)探测器,这就要求多道分析器增加道数和提高工作速度。这样,由Ge(Li)探测器和高道数多道分析器构成的数据获取系统,使数据量大大增加;此外,由于放射性测量技术的多样化,一个实验所得到的数据量就相当庞大,使得用以往“硬件”型多道幅度分析器来获取数据成为有限的了。于是从六十年代开始,使用电子计算机作为 γ 射线能谱的数据获取装置。计算机具有优良的数据处理能力,能够把获取到的大量信息减化为少量必要的信息。特别是,随着电子计算机技术的发展,比较便宜的小型电子计算机不断进步。它既具有“硬件”型多道幅度分析器的特长,也具有计算机“软件”的主要功能,既是数据获取装置又是数据处理设备,越来越显示出它的生命力。

所谓数据处理，就是要从放射性试样的测量数据中，确定放射性物质的含量。对于 γ 能谱分析来说，从 γ 能谱测量系统获取的数据中，经过一定的数据处理和分析方法，求出待测试样的定性、定量结果。如果试样的成分已知，就是要求出其中各成分的放射性量。对于未知组成的试样，数据分析包括定性分析和定量分析两步。第一步，利用各种核素的半衰期和特征 γ 射线能量的不同，以及辐射多种能量 γ 射线的核素， γ 射线相对强度比的差异，在相同的测量条件下，在不同时刻测量同一个样品的 γ 能谱。必要时，还可以利用各种核素特征 α 射线能量的区别，同时测量低能的 α 射线谱。从预先备有的核素特征中，细致筛选出可能的核素，确定被测试样所含有的成分。第二步，在定性分析的基础上，根据 γ 能谱的特征、复杂程度、标准源谱的具备情况以及数据处理手段等条件，选择恰当的解析方法，或者几种方法结合使用，对 γ 能谱进行定量解析。

γ 能谱的定量解析方法，从国外来看，于五十年代末期开始经历这样一个发展过程：峰面积法——逐次差引法（剥谱法）——逆矩阵法（解联立方程组）——逐道最小二乘法——峰面积法。对于NaI(Tl) γ 谱，在电子计算机没有得到广泛应用以前，人们对于 γ 能谱数据的分析，只能手工计算，或者借助于台式电动计算机处理。这样，就不可能进行复杂的数学分析，只能进行各道计数累加的简单峰面积法。然而，由于NaI(Tl)探测器的分辨率有限，较为复杂的混合放射性核素的 γ 能谱，简单的峰面积法就无能为力，促使人们进一步发展更加精确而较复杂的解析方法。随着电子计算机技术的发展和运用，为人们用更复杂的数学分析作 γ 谱更精确的定量解析提供有利

条件。因此，至今仍被广泛应用的逐道最小二乘法就应运而生了，而且在精确地解析 NaI(Tl) γ 谱的发展中，不断地补充和完善起来。Ge(Li)探测器的出现，使得 γ 能谱探测技术发生了革命性的变化。由于 Ge(Li)探测器具有很高的分辨率，即使混合核素较为复杂的 γ 能谱，大部分的 γ 射线谱峰均能孤寡分开。这样，又使得 γ 能谱的定量解析变得简明，峰面积法又重现了新的生命力。累加计数的峰面积法，固然在许多场合仍然十分有用。但是，电子计算机的数据处理能力，使得峰面积法又有新的发展，出现了更加确切反映峰的特征、复杂分析函数拟合的峰面积法。这种函数拟合法能更准确地求得真正面积。目前，NaI(Tl)探测器和 Ge(Li)探测器，由于它们各具优点，根据不同的探测对象择而使用，因而均有广泛应用。与之相适应的解谱方法——逐道最小二乘法和峰面积法，亦同时占有其应得的地位。我国从事 γ 能谱分析技术的科技工作者，在逆矩阵法的基础上，提出了最小二乘——逆矩阵法。为解决难以分辨而谱形又十分接近的放射性混合样品（如 ^{144}Ce 和 $^{144}\text{Ce}-^{144}\text{Pr}$ 混合）的 γ 能谱的定量解析问题，又提出了复合道区最小二乘法，取得了很好的效果。

从目前的发展情况来看，数据的处理手段主要是两个方面：一方面是应用小型电子计算机作 γ 射线能谱数据的获取，同时，利用电子计算机“软件”的功能作数据的输入、处理和输出，即“在线”运行。并用直观的图形显示法将结果显示出来，可以一边观察呈现在显像管上的图形结果，一边通过计算机的控制机构或者用光笔通过显像管向计算机传达新的运算指令，实现人和机器的直接“对话”。另一方面是应用大型的通用电子计算机作复杂的 γ 能谱数据处理，即将多道分析器测得

的 γ 能谱数据,通过磁盘、磁带或穿孔纸带送到计算机进行处理,即“离线”运行,对混合放射性核素的 γ 能谱作定性定量的解析工作,从而给出试样中所含的各种放射性核素的性质和活度。

本书的目的是着重于 γ 能谱的数据分析,其它方面的介绍均是围绕数据分析的需要进行的。包括如何获得更有利于作数据分析的 γ 能谱数据。全书共分七章:第一章 γ 能谱数据分析的数学基础。主要介绍在 γ 能谱定量分析中所用到的主要数学问题,常用的主要的计算方法;第二章 γ 能谱的数据获取方法。主要介绍以“硬件”型多道分析器为基础的数据获取系统;第三章 γ 能谱仪的刻度。这是 γ 能谱定性、定量解析的基础,是决定解析结果可靠性的重要环节;第四章无电子计算机时 γ 谱的定量解析方法。其中有些方法仅适用于NaI(Tl) γ 谱,有些方法对NaI(Tl)和Ge(Li) γ 谱峰均适用;第五章应用电子计算机定量解析NaI(Tl) γ 谱;第六章应用电子计算机定量解析Ge(Li) γ 谱;第七章反康普顿 γ 谱仪在低活度样品分析中的应用。四、五、六章是 γ 能谱数据分析的主体,除了介绍国内外的一些方法以外,着重于作者多年来的一些研究成果和体会。

本书第一章承蒙西安交通大学游兆永教授审阅。大部分书稿和图表承蒙李彤云、郑桂芳、李彤霞、朱晓夷等同志协助誊抄和绘制,在此一并表示衷心地感谢!

由于编著者水平有限,加之时间仓促,缺点错误之处在所难免,希望读者提出批评意见。

目 录

前 言

第一章 γ 能谱数据分析的数学基础..... (1)

第一节 线代数方程组及求解方法..... (1)

一、用主元素消去法解线代数方程组..... (2)

二、由逆矩阵法解线代数方程组..... (6)

三、用迭代法解线代数方程组..... (12)

第二节 非线性方程组及求解方法..... (14)

一、用阻尼牛顿迭代法解非线性方程组..... (14)

二、用 $n+1$ 点残量法解非线性方程组..... (19)

第三节 最小二乘法与曲线拟合..... (24)

一、线代数方程组方程个数远大于未知数的

最小二乘法处理..... (24)

二、直线最小二乘法拟合..... (31)

三、用 n 次多项式作最小二乘法拟合求出数

据光滑和数值微分公式..... (34)

四、非线性最小二乘法..... (43)

第四节 函数变换..... (44)

一、函数的残式变换..... (45)

二、离散函数褶积的滑动变换..... (49)

三、快速傅立叶变换..... (53)

第五节 蒙特卡罗方法..... (68)

一、蒙特卡罗法的基本思想..... (69)

二、随机变数抽样值的电子计算机模拟..... (72)

三、蒙特卡罗法的误差及其基本特点..... (77)

四、蒙特卡罗法在 γ 能谱分析中的应用	(83)
第二章 γ能谱数据的获取方法	(91)
第一节 γ 射线与物质相互作用	(91)
一、光电效应	(93)
二、康普顿散射	(95)
三、电子对生成	(100)
四、 γ 射线的吸收	(101)
第二节 测量装置概述	(107)
一、NaI(Tl)闪烁探测器	(107)
二、Ge(Li)半导体探测器	(115)
三、普通多道 γ 能谱仪结构	(122)
四、高灵敏度反康普顿 γ 能谱仪	(121)
五、联机(电子计算机)反康普顿 γ 谱仪	(130)
第三节 NaI(Tl)闪烁谱仪的能谱响应及其实验谱的数据特征	(135)
一、NaI(Tl)探测器的能谱响应	(135)
二、NaI(Tl)闪烁谱仪 γ 实验谱的数据特征	(141)
第四节 Ge(Li)探测器的能谱响应及其实验谱的数据特征	(152)
一、Ge(Li)探测器的能谱响应	(153)
二、Ge(Li)谱仪 γ 实验谱的数据特征	(163)
第五节 获得最佳 γ 实验谱数据的条件	(171)
一、提高全能峰探测效率的方法	(171)
二、抑制非全能峰的贡献	(173)
第三章 γ能谱仪的刻度	(193)
第一节 γ 谱仪的主要指标	(193)
第二节 NaI(Tl) γ 能谱仪的刻度方法	(205)

一、能量刻度.....	206
二、分辨率~能量关系曲线的测定.....	(211)
三、效率刻度.....	(212)
(一) NaI(Tl) 探测器探测效率的实验测定.....	(212)
(二) NaI(Tl) 探测器全能峰效率的蒙特卡罗计算.....	(231)
(三) 理论计算和实验测量相结合确定 NaI(Tl) 探 测器的效率.....	(241)
第三节 Ge(Li) γ 能谱仪的刻度方法.....	(245)
一、Ge(Li) γ 谱仪的能量刻度.....	(245)
二、Ge(Li) 谱仪 γ 峰形状因子的刻度.....	(270)
三、Ge(Li) 谱仪的效率刻度.....	(274)
(一) 惯用的 $\epsilon_p(E_p)$ 的实验确定方法.....	(274)
(二) 用标准点源确定大体积样品的 γ 射线峰效率.....	(318)
(三) 不用符合加和修正的小源距效率刻度方法.....	(327)
(四) 用韧致辐射作 80~500KeV 能区的效率刻度方法.....	(334)
(五) 理论计算与简单实验结合确定峰面积效率的方法.....	(338)
第四章 无电子计算机时 γ 谱的定量解析方法.....	(350)
第一节 γ 谱解析方法发展过程的概述.....	(350)
第二节 NaI(Tl) γ 谱的逐次差引法.....	(352)
一、逐道能谱逐次差引法.....	(353)
二、道区数字剔除差引法.....	(356)
三、半衰期差别很大的同位素混合谱差引迭代解析法.....	(360)
第三节 累加计数的峰面积法.....	(365)
一、总峰面积法(TPA法).....	(365)
二、科沃尔(Covell)峰面积法.....	(367)
三、瓦森(Wasson)峰面积法.....	(368)
四、斯托林斯基(Sterlinski)峰面积法.....	(371)
五、瓦森-斯托林斯基(Wasson—Sterlinski)峰面	

积法	(375)
六、奎特纳 (Quittner) 峰面积法	(380)
七、 $W-S-Q$ 峰面积法和 $Q-S$ 峰面积法	(388)
八、各种累加计数峰面积法的比较	(390)
第四节 用高斯曲线拟合 γ 射线谱峰台式计算机算法	(402)
第五章 应用电子计算机定量解析 $\text{NaI(Tl)} \gamma$ 谱	(416)
第一节 能谱逐次差引法	(416)
第二节 逆矩阵法及最小二乘—逆矩阵法	(423)
一、逆矩阵法	(423)
二、最小二乘—逆矩阵法	(446)
第三节 逐道最小二乘法及复合道区最小二乘法	(463)
一、逐道最小二乘法	(463)
二、复合道区最小二乘法	(480)
第四节 函数拟合峰面积法	(506)
一、先扣除基底, 后对“净”峰作拟合的峰面积法	(507)
二、峰形函数加基线函数同时拟合的峰面积法	(533)
第六章 应用电子计算机定量解析 $\text{Ge(Li)} \gamma$ 谱	(541)
第一节 γ 谱数据的光滑	(542)
一、重心法	(542)
二、多项式最小二乘拟合法	(544)
三、傅立叶变换法	(553)
四、离散函数褶积滑动变换法	(562)
五、峰面积确定中谱光滑的效应	(567)
第二节 峰位置和峰区的确定	(576)
一、IF 函数找峰法	(577)
二、高斯乘积函数找峰法	(578)

三、一、二、三阶微商找峰法.....	(588)
四、协方差法找峰.....	(590)
五、对称零面积变换法找峰.....	(598)
第三节 γ 谱峰分析方法	(608)
一、平均累加计数峰面积法.....	(608)
二、单峰曲线拟合分析方法.....	(624)
三、重叠峰分析方法.....	(651)
第四节 极弱峰分析方法	(660)
一、 χ^2 最小拟合法存在的问题.....	(661)
二、改进的 χ^2 最小拟合法.....	(665)
三、最大似然法.....	(673)
第五节 γ 峰拟合优度的判据	(678)
一、 χ_R^2 判据的困难.....	(678)
二、品质因数、改型和分析的改型品质因数FOM、 IFOM 和 AIFOM判据.....	(681)
三、误差相关因子 δ 判据.....	(688)
第六节 Ge(Li) γ 谱的自动分析.....	(695)
一、基底扣除方式.....	(696)
二、本底峰的扣除.....	(703)
三、核素成分未知的样品的定量分析.....	(706)
四、指定核素的定量分析.....	(716)

第七章 反康普顿 γ 谱仪在低活度样品分析中

的应用

第一节 反康普顿 γ 谱仪最佳状态的调试	(722)
一、NaI(Tl)反康普顿 γ 谱仪最佳状态的调试.....	(722)
二、Ge(Li)反康普顿 γ 谱仪最佳状态的调试.....	(732)
第二节 γ 谱仪的灵敏度	(749)

一、最小可探测活度的概念.....	(750)
二、NaI(Tl) γ 谱仪最小可探测活度.....	(759)
三、Ge(Li) γ 谱仪最小可探测活度.....	(764)
四、Ge(Li)反康普顿 γ 谱仪的灵敏度.....	(767)
第三节 环境样品分析中谱仪的选择	(770)
一、NaI(Tl)和Ge(Li) γ 谱仪之间的选择.....	(770)
二、相对效率不同的Ge(Li)探测器的选择	(772)
三、样品几何形状的选择.....	(778)
第四节 环境样品的 γ 谱分析	(783)
一、大体积样品与自吸收效应无关的活度测量方法.....	(784)
二、用Ge(Li)反康普顿 γ 谱仪分析环境样品.....	(789)

第一章 遥感谱数据分析的数学基础

在 γ 能谱的定量解析工作中,在谱仪效率的理论计算以及实验刻度的数据处理中,都常常遇到许多数学问题,而且在各个环节所涉及到的数学问题,具有相同的类型。因此,选择主要的部分在本章中统一叙述。

第一节 线代数方程组及求解方程

在 γ 能谱的解析中, 许多问题最终都要归结到解线代数方程组的问题, 因而我们首先考虑这一最基础的数学问题。所给出的解法只是其中一部分主要的, 或是作者曾经用过的方法。

方程组:

$$\begin{cases} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \dots + a_{1n}x_n = b_1 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \dots + a_{2n}x_n = b_2 \\ \dots\dots\dots \\ a_{n1}x_1 + a_{n2}x_2 + \dots + a_{nn}x_n = b_n \end{cases} \quad (1 \cdot 1 \cdot 1)$$

称为 n 个未知数 $x_1, x_2, \dots, x_n$ 的线代数方程组。其中 a_{ij} ($i, j = 1, 2, \dots, n$) 为第 i 个方程中 x_j 的系数; b_i ($i = 1, 2, \dots, n$) 为第 i 个方程的常数项。方程组 (1.1.1) 也可以写成矩阵的形式:

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{pmatrix}$$

或

$$\begin{matrix} A & \cdot & X & = & B \\ (n \times n) & & (n \times 1) & & (n \times 1) \end{matrix} \quad (1.1.2)$$

其中 A 为 $(n \times n)$ 阶系数矩阵; X 为待求解的未知数组成的 n 行 1 列向量; B 为 n 行 1 列常数向量。只要方程组 (1.1.1) 的系数行列式 $|A| \neq 0$, 那么方程组 (1.1.1) 就存在唯一的解。

一、用主元素消去法解线代数方程组

为了便于说明这种解法的思想, 通过具体例子来讨论。

一般消元法解线代数方程组, 就是把系数矩阵化为三角形矩阵的方程组来求解。如:

$$\begin{cases} 5x_1 + 2x_2 + 3x_3 + 2x_4 = -1 & \textcircled{1} \\ 2x_1 + 4x_2 + x_3 - 2x_4 = 5 & \textcircled{2} \\ x_1 - 3x_2 + 4x_3 + 3x_4 = 4 & \textcircled{3} \\ 3x_1 + 2x_2 + 2x_3 + 8x_4 = -6 & \textcircled{4} \end{cases}$$

逐个消去未知数, 最后得:

$$\begin{cases} 5x_1 + 2x_2 + 3x_3 + 2x_4 = -1 & \textcircled{5} \\ 16x_2 - x_3 - 14x_4 = 27 & \textcircled{6} \\ 17x_3 - 2x_4 = 53 & \textcircled{7} \\ 512x_4 = -512 & \textcircled{8} \end{cases}$$

为三角形系数矩阵的方程组。由⑧解得 x_4 后逐步往前代即可得各未知数的解。

总之, 对于一个线代数方程组, 我们先保留其中一个方程 (叫做保留方程), 利用它来消去其余各方程中某个未知量 (叫做消去元), 得到比原方程组少一个方程、少一个未知量

的新方程组。对于新方程组，用同样方法，得到又少一个方程、又少一个未知量的新方程组。这样继续下去，最后得到只含一个未知量的一个方程。把历次的保留方程集中起来，就成为系数矩阵是三角形矩阵的方程组。这样，就把一般的线代数方程组转化成特殊的容易求解的方程组。

上面的演算实际上只是对方程的系数及常数项进行计算，与未知量 x_1, x_2, x_3, x_4 无关。因此，为了简便，我们可以利用表格演算。

系 数				常数项	检查和	消去过程的说明
x_1	x_2	x_3	x_4			
• 5	2	3	2	-1	11	①
2	4	1	-2	5	10	②
1	-3	4	3	4	9	③
3	2	2	8	-6	9	④
• 16	-1	-14		27	28	⑤ = 5 × ② - 2 × ①
-17	17	13		21	34	⑥ = 5 × ③ - ①
4	1	34		-27	12	⑦ = 5 × ④ - 3 × ①
• 17	-2			53	68	⑧ = { 16 × ⑥ + 17 × ⑤ } + 15
1	30			-27	4	⑨ = { 4 × ⑦ - ⑤ } + 5
• 512				-512	0	⑩ = 17 × ⑨ - ⑧
		1		-1		⑪ = ⑩ + 512
	1			3		⑫ : 以⑪代入⑧
1				1		⑬ : ⑪, ⑫代入⑤
1				-2		⑭ : 以⑪, ⑫, ⑬代入①

• 为保留方程

上面所介绍的消去法，在实际求解时，采用的计算工具是台式计算器或电子计算机，它们只能对一定位数的数进行运