



ГОСУДАРСТВЕННЫЙ НАУЧНЫЙ ЦЕНТР РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

ИНСТИТУТ ФИЗИКИ ВЫСОКИХ ЭНЕРГИЙ

ИФВЭ 99-61
ОРИ

С.Д.Агриненко¹, А.Г.Алексеев³, И.А.Бурлака¹, Н.А.Карпов²,

МЕТОД АНАЛИЗА КРИВОЙ ТЕРМОВЫСВЕЧИВАНИЯ ДЛЯ ЛИНЕЙНОГО НАГРЕВА

¹ НПО "РАДОН", Сергиев-Посад, Россия

² МГУ, Москва, Россия

³ E-mail:alexeev@m10.ihep.su

Аннотация

Агриненко С.Д. и др. Метод анализа кривой термовысвечивания для линейного нагрева: Препринт ИФВЭ 99–61. – Протвино, 1999. – 12 с., 5 рис., 4 табл., библиогр.: 9.

Предлагаются приближенные способы решения уравнений для первого и n -го порядков кинетики термостимулированной люминесценции (ТСЛ) при линейном нагреве. Разработано специализированное программное обеспечение (СПО) DECONVOLUTION с применением полученных аналитических выражений, представлен алгоритм выполнения вычислений. Проведен анализ работы предлагаемого метода в сравнении с традиционным подходом. Показано, что параметры пиков, полученные с использованием предлагаемой модели, хорошо согласуются с приведенными в литературе.

Abstract

Agrinenko S.D. et al. Glow Curve Analysis Method for Linear Heating: IHEP Preprint 99–61. – Protvino, 1999. – p. 12, figs. 5, tables 4, refs.: 9.

New analytical approximations to solve equations for the first and general-order kinetics for linear heating are given. A specialized software DECONVOLUTION for the glow curves analysis with analytical expressions obtained has been developed and the algorithm for realization of evaluations is presented. The analysis of the offered method in a comparison with the traditional approach was conducted. Peaks parameters obtained with the model offered are shown to be in a good agreement with the literature ones.

Введение

Термически активируемые процессы, включая термолюминесценцию, часто встречаются в прикладной химии и физике. Во всех случаях рассматривают процесс изменения измеряемой величины с ростом температуры во времени и, как результат, получают кривую отклика как функцию температуры или времени. Термически стимулированная люминесценция является типичным примером таких процессов, в результате которых получают кривые термовысвечивания (КТВ) кристаллофосфоров при их нагреве. Форма КТВ зависит от целого ряда параметров, в частности от режима нагрева кристаллофосфора. Чаще всего на практике применяется линейный нагрев.

Существует множество методов и реализованных на их основе компьютерных программ, используемых для анализа КТВ. Примером сравнения разных подходов и программ может служить международное сличение компьютерных программ анализа КТВ, состоявшееся в Испании (Мадрид) в 1993 г. [1]. Данное сличение, в частности, показало, что широко используемый метод разложения КТВ с помощью описания кривых гауссианом, а также методы простого масштабирования нормализованных пиков дают наибольшую погрешность. Также показано, что применительно к TLD-100 хорошо работает модель первого порядка кинетики Randall-Wilkins [2, 3]. Сделан вывод, что лучшие результаты получаются с использованием более точных аналитических выражений, чем приближенных.

Цель настоящей работы — представление еще одного приближенного метода расчета кинетики термолюминесценции. Метод достаточно прост для реализации его в любой программной среде и дает при этом вполне удовлетворительную точность расчета.

1. Линейный и гиперболический нагрев

Известно, что любой элементарный пик КТВ однозначно задается тремя параметрами: энергией активации E электронно-дырочного центра захвата (ЭДЦЗ), частотным фактором S и начальной концентрацией локализованных носителей заряда n_0 . Элементарный пик КТВ для первого $p = 1$ и произвольного порядка кинетики в общем случае можно описать выражениями [4]

$$I(t) = m_0 S \exp(-E/kT) \exp\left[-S \int_0^t e^{(-E/kT')} dt'\right], \quad (1)$$

$$I(t) = m_0 S \exp(-E/kT) \exp\left\{1 + (p-1)S \int_0^t e^{-E/kT'} dt'\right\}^{-p/(p-1)}, \quad (2)$$

где $m_0 = n_0 \alpha$; n_0 — начальная концентрация носителей заряда в ЭДЦЗ; α — коэффициент рекомбинации; k — постоянная Больцмана; T — температура; t — время.

Приведенные выражения не имеют аналитического решения при линейном нагреве из-за невозможности представить интеграл

$$\int_0^t e^{-\frac{E}{kT'}} dt' \quad (3)$$

в элементарных функциях.

Для теоретического расчета пика различными авторами предлагается более или менее удачная замена интеграла (3) приближением [2, 3, 4]. Чаще всего интегральное выражения (3) аппроксимируют сходящимся рядом [2, 4]. Такая замена приводит к значительному усложнению расчетов, увеличению необходимого времени и погрешности. В то же время интеграл (3) легко решается для гиперболического закона нагрева [4]. Рассмотрим в сравнении линейный и гиперболический законы нагрева. Линейный нагрев описывается известным уравнением

$$T = T_0 + \beta \cdot t, \quad (4)$$

где T_0 — начальная температура в заданной системе координат; β — скорость нагрева; t — время.

Гиперболический температурный профиль описывается известным уравнением

$$\frac{1}{T} = \frac{1}{T'_0} - bt, \quad (5)$$

где b — постоянная, характеризующая скорость нагрева.

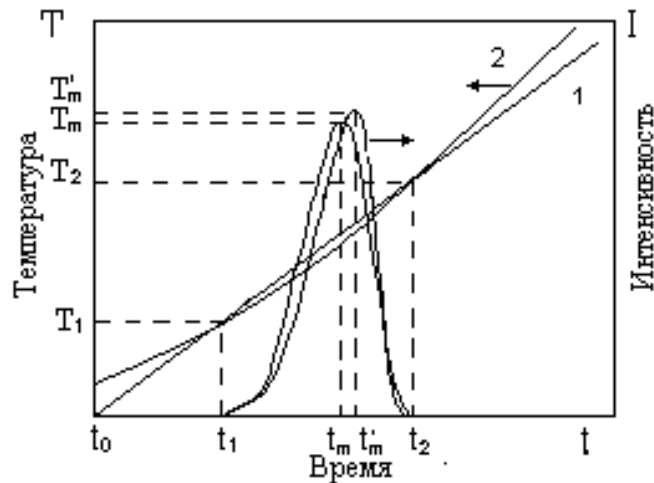


Рис. 1. Температурные профили для линейного (1) и гиперболического нагрева (2).

На рис. 1 в координатах $T(t)$ схематически показаны линейный и гиперболический законы нагрева. Там же, на рис. 1, показаны элементарные пики термовысвечивания в координатах интенсивности высвечивания I от времени t для двух законов нагрева.

Процесс нагрева фосфора начинается в момент времени $t_0 = 0$ (см. рис. 1), этой точке соответствует начальная температура T_0 (температура окружающей среды). Но каждому пику, ответственному за определенный тип ЭДЦЗ, соответствуют момент времени начала «разгорания» пика t_1 и время опустошения рассматриваемых ловушек t_2 .

Таким образом, весь процесс высвечивания рассматриваемых ЭДЦЗ протекает в интервале времени $(t_2 - t_1)$. Очевидно, что в реальном масштабе времени указанный промежуток занимает лишь часть всего времени измерения. Поскольку для моделирования пика нас интересует лишь промежуток времени высвечивания пика, т.е. $(t_2 - t_1)$, то можно задаться масштабом времени, который ограничен только этим временным интервалом.

Таким образом, в рассматриваемом временном масштабе для любой прямой, характеризующей линейный нагрев (1), можно найти такой гиперболический закон нагрева (2), что температуры T_1 и T_2 для линейного и гиперболического законов нагрева практически совпадут. В общем случае температуры максимумов пиков T_m и T'_m не совпадают, однако в предложенном нами масштабе этим можно пренебречь.

Для любой T на гиперболическом температурном профиле справедливо соотношение

$$\frac{(\frac{1}{T_m} - \frac{1}{T})}{(-b)} = (t_m - t), \quad (6)$$

где t_m — время на момент максимума пика.

Соответственно, для линейного закона нагрева для любой T справедливо следующее соотношение:

$$\frac{(T_m - T)}{\beta} = (t_m - t). \quad (7)$$

Основываясь на допущении, что форма пика несущественно меняется в рассматриваемом интервале температур для двух рассматриваемых законов нагрева, можно приравнять левые части уравнений (6), (7). В результате получим

$$\frac{(\frac{1}{T_m} - \frac{1}{T})}{(-b)} \cong \frac{(T_m - T)}{\beta}, \quad (8)$$

откуда имеем

$$b = \frac{\beta}{T_m T}. \quad (9)$$

Уравнение (9) устанавливает взаимосвязь коэффициентов β и b и указывает на то, что заданный интервал на линии нагрева $(T_m - T)$ можно рассматривать как элемент гиперболического закона, что можно видеть, подставив выражение (9) в (6).

Предположим $\Delta T = (T_2 - T_1) < T_i$, здесь T_i — любое значение абсолютной температуры в области высвечивания КТВ, начиная с начальной температуры T_o , что в общем случае всегда выполняется. Следовательно, величина b в выражении (9) слабо зависит от температуры T и в основном определяется скоростью нагрева β . Поэтому вполне можно допустить, что в уравнении (9) параметр T можно принять за постоянную величину в области температур $T_1 < T < T_2$. Обозначим её как T^* , тогда выражение (9) можно представить в виде

$$b = \frac{\beta}{T_m T^*}. \quad (10)$$

Как известно, максимум кривой, описываемой уравнениями (1) и (2), определяется из условия $dI/dt = 0$ или, что удобнее, $d \ln I / dy = 0$. Тогда из уравнения (1) с учетом (5) получим

$$\frac{d \ln I(t)}{dt} = \frac{Eb}{k} - S e^{-E/kT_m} = 0,$$

или

$$\frac{bE}{k} = S e^{-E/kT_m}, \quad p = 1. \quad (11)$$

Как показано в [3], выражение (11) в общем случае верно для любого физически реализуемого, монотонно возрастающего закона нагрева $T(t)$. Тогда, подставив уравнение (10) в (11), имеем

$$\frac{\beta \cdot E}{T_m T^* k} = S e^{-E/kT_m}. \quad (12)$$

В общем случае $\beta = (dT/dt)_{T_m} = \beta_m$, т.е. равно производной по времени функции нагрева $T(t)$ в точке максимума [3].

Принимая во внимание уравнение (10), интеграл (3) для гиперболического нагрева можно выразить в аналитическом виде:

$$\begin{aligned} \int_0^t e^{(-E/kT')} dt' &= \left(\frac{kT_m T^*}{E\beta} \right) \left(e^{-E/kT} - e^{-E/kT^*} \right) = \left(\frac{kT_m T^*}{E\beta} \right) e^{-E/kT_m} e^{E\beta(t-t_m)/kT_m T^*} - \\ &- \left(\frac{kT_m T^*}{E\beta} \right) e^{-E/kT^*} = \left(\frac{kT_m T^*}{E\beta} \right) e^{-E/kT_m} e^{ET/kT_m T^*} e^{-ET_m/kT_m T^*} - \left(\frac{kT_m T^*}{E\beta} \right) e^{-E/kT^*} = \\ &= \frac{1}{S} e^{ET/kT_m T^*} e^{-E/kT^*} - \left(\frac{kT_m T^*}{E\beta} \right) e^{-E/kT^*} \end{aligned} \quad (13)$$

С учетом того, что $\frac{1}{S} e^{ET/kT_m T^*} e^{-ET_m/kT_m T^*} \gg \left(\frac{kT_m T^*}{E\beta} \right) e^{-E/kT^*}$, выражение (13) можно упростить:

$$\int_0^t e^{(-E/kT')} dt' = \frac{1}{S} e^{ET/kT_m T^*} e^{-ET_m/kT_m T^*} = \frac{1}{S} e^{E(T-T_m)/kT_m T^*}. \quad (14)$$

В работе [1] приводятся выражения для I_m при $p = 1$ и $p = n$ соответственно:

$$I_m = \frac{m_0 b E}{k}, \quad (15)$$

$$I_m = \frac{m_0 b E p^{-p/(p-1)}}{k}. \quad (16)$$

Тогда, подставляя полученное решение (14) в выражения (1) и (2), с учетом соотношений (6), (9), (12), (15), (16), получаем кинетические уравнения, описывающие кинетику высвечивания для 1-го и n -го порядков соответственно:

$$\begin{aligned} I &= \frac{m_0 b E}{k} \exp \left[\frac{E}{kT_m T^*} (T - T_m) \right] \exp \left\{ 1 - e^{\left[\frac{E}{kT_m T^*} (T - T_m) \right]} \right\} = \\ &= I_m \exp \left[\frac{E}{kT_m T^*} (T - T_m) \right] \exp \left\{ 1 - e^{\left[\frac{E}{kT_m T^*} (T - T_m) \right]} \right\}, \end{aligned} \quad (17)$$

$$\begin{aligned} I &= \frac{m_0 b E}{kn} \exp \left[\frac{E}{kT_m T^*} (T - T_m) \right] \exp \left\{ 1 + (p-1) e^{\left[\frac{E}{kT_m T^*} (T - T_m) \right]} \right\}^{-p/(p-1)} = \\ &= I_m \exp \left[\frac{E}{kT_m T^*} (T - T_m) \right] \exp \left\{ \frac{1 + (p-1) e^{\left[\frac{E}{kT_m T^*} (T - T_m) \right]}}{p} \right\}^{-p/(p-1)}. \end{aligned} \quad (18)$$

Теперь примем в выражениях (17), (18), что T^* есть переменная величина T . В результате имеем

$$I = I_m \exp\left[\frac{E}{kT_m T}(T - T_m)\right] \exp\left\{1 - e^{\left[\frac{E}{kT_m T}(T - T_m)\right]}\right\}, \quad (19)$$

для $p=1$ и

$$I = I_m \exp\left[\frac{E}{kT_m T}(T - T_m)\right] \exp\left\{\frac{1 + (p-1)e^{\left[\frac{E}{kT_m T}(T - T_m)\right]}}{p}\right\}^{-p/(p-1)} \quad (20)$$

для произвольного порядка кинетики соответственно.

2. Решение уравнений кинетики термовысвечивания путем замены интеграла бесконечным сходящимся рядом

Для оценки предложенного нами способа аппроксимации КТВ был также использован известный метод решения уравнений (1) и (2) путем представления интеграла (3) бесконечным сходящимся рядом [2, 4]:

$$\int_0^t e^{(-E/kT')} dt' = \frac{kT^2}{\beta E} \exp\left(-\frac{E}{kT}\right) G(T), \quad (21)$$

где

$$G(T) = \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \frac{(n+1)!(kT)^n}{E}. \quad (22)$$

В этом случае справедливы следующие соотношения, связывающие T_m [4] с параметрами ЭДЦЗ для $p=1$ и $p=n$ соответственно

$$I_m = m_0 \left(\frac{\beta \cdot E}{kT_m^2}\right) e^{-G(T_m)}, \quad (23)$$

$$\frac{\beta \cdot E}{kT_m^2} = S \exp\left(-\frac{E}{kT_m}\right), \quad (24)$$

$$I_m = m_0 \left(\frac{\beta E}{kT_m^2}\right) \frac{\{1 - G(T_m)[(n-1)/n]\}^{n/(n-1)}}{n - G(T_m)(n-1)}, \quad (25)$$

$$\frac{\beta E}{kT_m^2} = S \exp\left(-\frac{E}{kT_m}\right) \left\{n - G(T_m)[n-1]\right\}. \quad (26)$$

Подставляя уравнения (21)–(24) в (1), получаем уравнение, удобное для выполнения аналитических расчетов для $p=1$:

$$I = I_m \exp(G(T_m)) \exp\left[\frac{E}{k} \left(\frac{1}{T_m} - \frac{1}{T}\right)\right] \exp\left\{-\frac{T^2}{T_m^2} \exp\left[\frac{E}{k} \left(\frac{1}{T_m} - \frac{1}{T}\right)\right] G(T)\right\}. \quad (27)$$

Соответственно, подставляя уравнения (21), (22), (25), (26) в (2), получаем выражение для $p=n$:

$$I = I_m \frac{\exp\left[\frac{E}{k} \left(\frac{1}{T_m} - \frac{1}{T}\right)\right]}{\left[1 - G(T_m)^{(n-1)/n}\right]^{n/(n-1)}} \left\{1 + \frac{(n-1) \frac{T^2}{T_m^2} \exp\left[\frac{E}{k} \left(\frac{1}{T_m} - \frac{1}{T}\right)\right] G(T)}{n - G(T_m)(n-1)}\right\}^{-n/(n-1)}. \quad (28)$$

3. Алгоритмы расчета отдельного пика

КТВ большинства кристаллофосфоров представляют собой суперпозицию ряда пиков, соответствующих различным ЭДЦЗ. Очевидно, что для более точного анализа КТВ необходимо иметь предварительные сведения о порядке кинетики p , числе пиков в рассматриваемой температурной области, а также о их примерном расположении на оси температур. Последнее особенно важно в случае значительного наложения пиков. Важным моментом анализа КТВ является также последовательность расчета пиков. Анализ лучше начинать с наиболее ярко выраженного пика, с той его части, которая не перекрыта смежными пиками, или же перекрыта в меньшей степени.

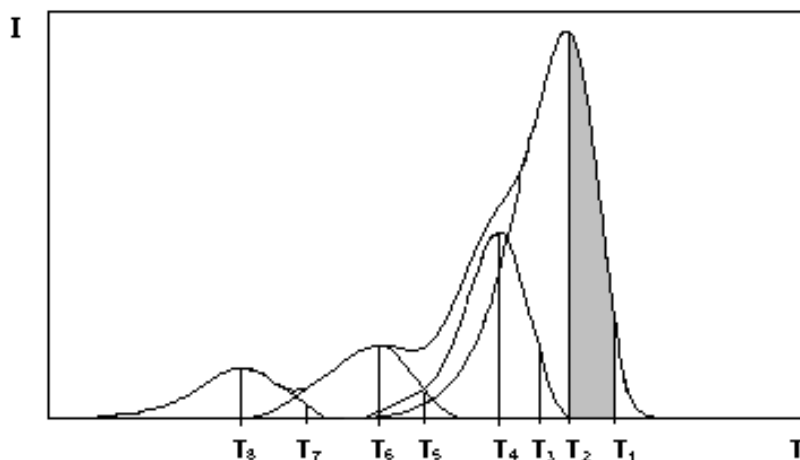


Рис. 2. Пример анализа КТВ с разложением на составляющие пики (пояснения в тексте).

На рис. 2 показан пример последовательности расчета пиков КТВ детектора ДТГ-4 на основе кристаллофосфора LiF:Mg, Ti.

В данном случае анализ начинали с правой части основного 4-го пика (см. заштрихованную область на рис. 2). Для этого выделяли область экспериментального пика, явно не перекрывающуюся другими пиками, которую использовали как область сравнения. На рис. 2 область сравнения 4-го пика ($T_1 - T_2$) заштрихована.

При записи пиков в память считывающего устройства весь температурный диапазон разбит на отдельные каналы и запись идет поканально.

В качестве критерия соответствия использовали минимизацию так называемого фактора FOM, впервые введенного Balian [7, 8]

$$FOM = \sum_{i=0}^{i=N} \frac{|Y_i - Y'_i|}{Y'_i}, \quad (29)$$

Y_i — экспериментальная интенсивность в i -м канале; $Y'_i(t)$ — расчетная интенсивность в i -м канале; N — число каналов считывающего устройства в области сравнения. FOM-фактор позволяет сравнить соответствие формы теоретически рассчитанной КТВ и экспериментальной. Расчет первого пика продолжали до тех пор, пока FOM-фактор области сравнения превышал 0.005, после чего расчет пика заканчивался. Рассчитанный пик программа вычитала из исходной КТВ поканально и далее продолжала расчет оставшейся

части КТВ. Таким образом, далее программно или в особо сложных случаях вручную выбиралась область сравнения следующего пика ($T_3 \div T_4$). На рис. 2 для примера, показана последовательность выбора областей сравнения и расчета пиков.

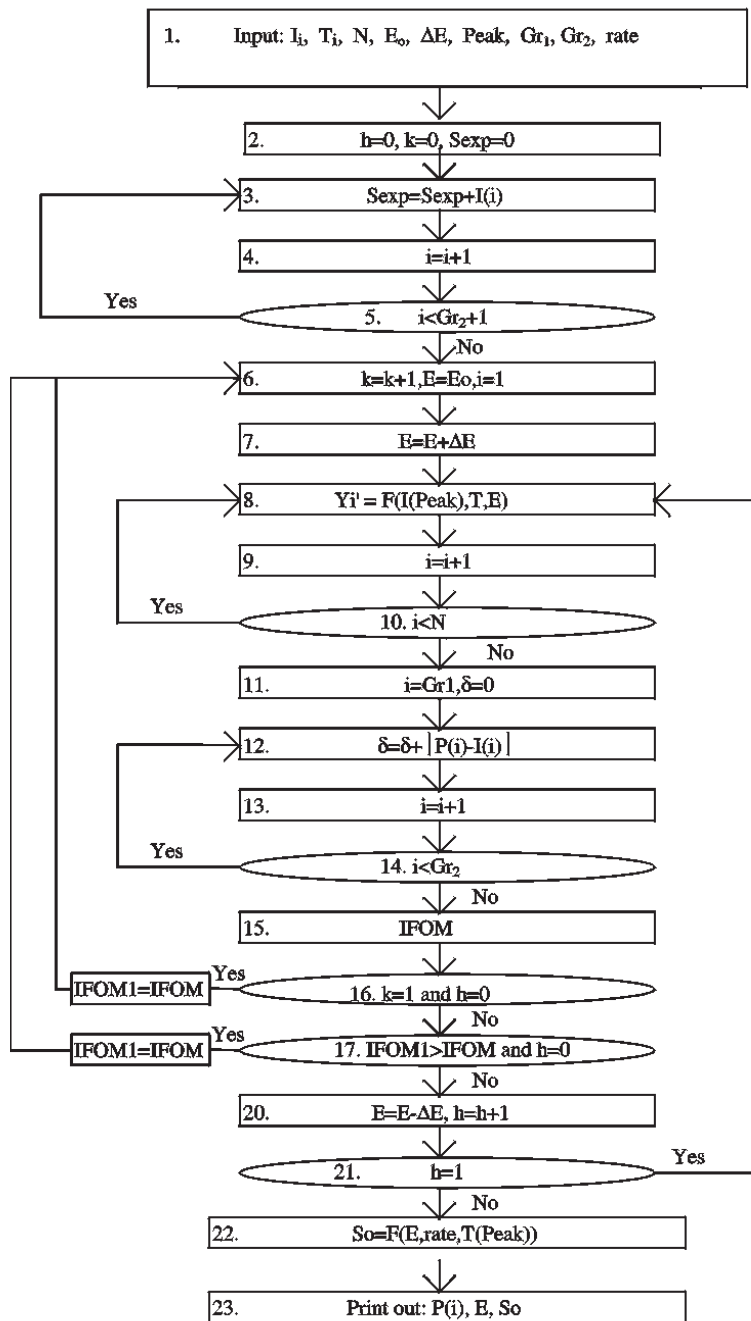


Рис. 3. Алгоритм расчета отдельного пика.

На рис. 3 приведен алгоритм расчета отдельного пика и его основных параметров. В качестве параметров расчета задавали: N — число каналов; T_i — температура в i -канале; I_i — интенсивность в i -канале; Gr_1 — правая граница области сравнения (T_1);

Gr_2 — левая граница области сравнения (T_2); Rate — скорость нагрева; E_o — начальное приближение энергии активации; ΔE — шаг приближения энергии активации; Peak — номер канала, соответствующий максимуму пика.

В первом блоке {1} вводятся исходные данные: массивы I_i и T_i , число каналов N , начальное приближение по энергии E_o , канал пика Peak, границы области сравнения Gr_1 , Gr_2 , шаг приближения по энергии ΔE , скорость нагрева Rate. В блоке {2} производится инициализация переключателей k , h и площади области сравнения S_{exp} . В блоках {3}, {4}, {5} рассчитывается светосумма области сравнения пика S_{exp} в интервале температур Gr_1 , Gr_2 .

В блоке {6} выбирается начальное приближение энергии активации E , и переключателю k присваивается следующее целочисленное значение. В блоке {7} параметр E увеличивается на величину шага приближения по энергии ΔE . В блоках {8}, {9}, {10} рассчитываются теоретические интенсивности Y'_i по всей шкале температур, соответствующие полученной энергией активации E , по любому из выше приведенных выражений (19), (20), (27), (28) в зависимости от установленного порядка кинетики p .

В блоках {11}, {12}, {13}, {14}, {15} рассчитывается FOM-фактор для области сравнения (от Gr_1 до Gr_2) по соотношению (29). В блоке {16} проверяются значения переключателей направления расчета при $k = 1$ и $h = 0$, и, если достигнута необходимая точность по FOM-фактору, расчет передается в блок {18}. Если не достигнута, то в блоке {18} происходят присваивание переменной IFOM1 значения IFOM, затем возврат в блок {6}.

В блоке {7} производится пошаговое приращение переменной E на ΔE , и расчет повторяется до блока {17} (если $k > 1$). В блоке {17} проверяются условия IFOM < IFOM1 и $h = 0$, при их истинности расчет передается в блок {19}, где параметру IFOM1 присваивается новое значение IFOM, и расчет передается в блок {6}. Выход из цикла осуществляется, когда в блоке сравнения {17} будет выполнено условие “Ложь”. В блоке {20} происходит возврат к предыдущему значению энергии E , и второй переключатель h увеличивается на 1. Из блока {21} при $h = 1$ расчет передается в блок {8}, где рассчитываются окончательные значения интенсивностей Y_i по N -каналам. В блоке {22} рассчитывается площадь S_0 . В блоке {23} производится вывод рассчитанных параметров Y_i , E , S_0 . Далее аналогичным образом производится расчет других пиков КТВ.

На основании представленного алгоритма было разработано СПО DECONVOLUTION с применением кода VisualBasic-5 под Microsoft Windows 98. DECONVOLUTION позволяет работать с файлами в формате Excel, а также с файлами специализированного программного обеспечения установки ДВГ-01Т в бинарном формате. В настоящее время ведутся работы по разработке программного обеспечения для работы с файлами КТВ, полученными при нелинейном нагреве, в частности с файлами, полученными на установке RE-1 DOSACUS фирмы RADOS.

4. Результаты и их обсуждение

В рамках данной работы с помощью СПО DECONVOLUTION была проведена обработка 100 КТВ детекторов ДТГ-4 (LiF:Mg, Ti), полученных при помощи ДВГ-01Т. Скорость нагрева при измерениях была выбрана минимальной, реализуемой на считывателе ДВГ-01Т — 2°/сек, с целью достижения наиболее равномерного прогрева в ходе измерения, что очень важно для последующего математического анализа КТВ. В идеальном случае при минимальной скорости нагрева детектор должен быть очень тонким для устранения всяких искажений КТВ вследствие неравномерности прогрева.

Детекторы были облучены разными дозами: 1 мГр, 10 мГр, 0.1, 1.0 Гр в поле источника $^{90}\text{Sr} - ^{90}\text{Y}$. В табл. 1 приведены средние значения рассчитанных по уравнениям (19), (26) и (27) параметров E , S , а также их коэффициенты вариации (КВ), полученные на основании расчетов.

Таблица 1. Результаты анализа КТВ 100 детекторов ДТГ-4 с помощью СПО (расчет 1 — по уравнению (19), расчет 2 — по уравнению (27)).

Расчет	2 пик (106°C)		3 пик (144°C)		4 пик (175°C)		5 пик (205°C)	
	1	2	1	2	1	2	1	2
E_{cp} , эВ	1.31	1.34	1.47	1.41	1.61	1.66	2.03	2.01
КВ (E), %	7	6	4.51	4.39	4.00	4.11	4.47	4.21
S_{cp} , 1/с	1.1E15	2.5E15	3.6E13	1.3E14	1.3E17	3.1E17	3.8E20	1.1E21
КВ (S), %	147	147	107	106	246	246	365	363

Из таблицы можно видеть хорошее совпадение абсолютных значений E и S , рассчитанных по уравнениям (19) и (27), при этом погрешности расчетов по обоим способам близки. Следует отметить, что при расчетах уравнения (27) мы использовали 13 членов полинома (22), дальнейшее увеличение количества членов не дает значимого увеличения точности и практически не влияет на результаты расчета. Использование меньшего количества членов приближения приводит к большим ошибкам по сравнению с расчетом по уравнению (19), однако большое количество членов полинома сильно усложнило расчет и привело к значительному увеличению времени расчета. Так, время расчета одной КТВ по уравнению (19) составило 3 секунды, а по уравнению (27) — 36 секунд с применением IBM INTEL PENTIUM 233. Таким образом, время расчета одной КТВ по выражению (19) оказалось больше, чем по уравнению (27), в 12 раз. Такой выигрыш во времени расчета 1 обусловлен отсутствием необходимости вычисления интеграла (5).

ГОМ-фактор для всей КТВ в обоих вариантах расчета был соизмерим и составил в среднем 3,71% для расчета 1 и 3,68% для расчета 2.

На рис. 4 приведен пример анализа типичной КТВ детектора ДТГ-4 (LiF:Mg, Ti).

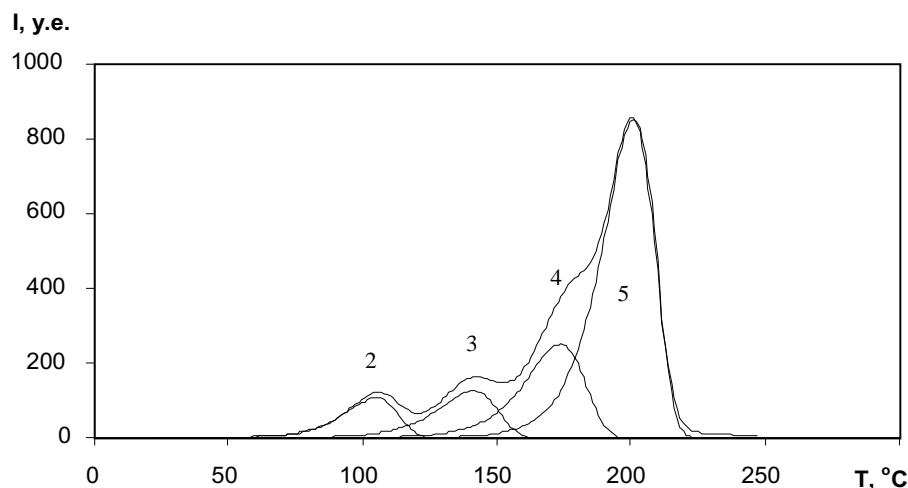


Рис. 4. КТВ детектора ДТГ-4, разложенная на составляющие пики.

Для того чтобы убедиться, что предложенный метод расчета адекватно воспроизводит исходные параметры отдельных пиков, был проведен анализ модельной КТВ, рассчитанной при помощи МАНТСАД-7. Анализ был проведен также при помощи двух описанных методов расчета.

На рис. 5 представлена модельная кривая, образованная четырьмя элементарными пиками термовысвечивания 1-го порядка. Исходные данные модельной кривой и результаты анализа приведены в табл. 2. Там же показаны результаты 20 последовательных расчетов модельной КТВ методами 1 и 2. Из рис. 5. и табл. 2 видно, что оба метода с достаточной точностью позволяют описать процесс термолюминесценции. Величина FOM-фактора в расчетах не превышала 3,2%.

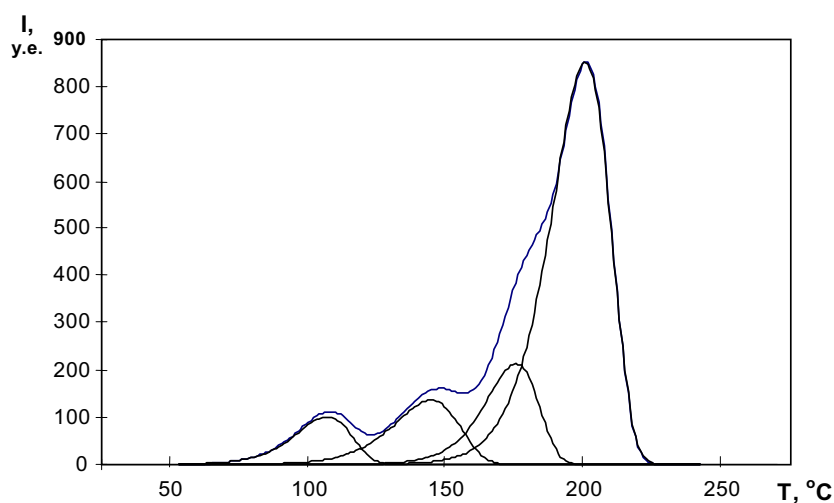


Рис. 5. Пример разложения модельной КТВ на составляющие элементарные пики.

Тем не менее очевидно, что расчет, проведенный по уравнению (19), дает более точные результаты с меньшими КВ. Из табл. 2 видно, что точность расчета неперекрывающихся более выраженных пиков (пики 1, 2, 4) выше, чем сильно перекрытого 3-го пика.

Таблица 2. Исходные и расчетные параметры модельной КТВ.

№ пика	E, эВ	КВ (E) %	S, c ⁻¹	КВ (S), %	мо, у.е.	КВ (мо), %
Модель						
1	1,01	-	5,2*10 ¹³	-	1400	-
2	1,04	-	3,9*10 ¹²	-	2270	-
3	1,57	-	9,4*10 ¹⁷	-	3000	-
4	1,63	-	3,5*10 ¹⁷	-	12000	-
Расчет 1						
1	1,01	2,15	7,2*10 ¹⁴	200	1216	2,12
2	1,09	1,35	9,7*10 ¹²	37	2119	3,24
3	1,70	2,85	3,4*10 ²⁰	134	2536	2,13
4	1,62	0,72	1,9*10 ¹⁷	29	12164	0,73
Расчет 2						
1	1,06	2,26	3,1*10 ¹⁴	258	1194	0,75
2	1,05	1,48	3,3*10 ¹²	32	2006	2,33
3	1,72	1,84	7,4*10 ¹⁹	182	2204	8,16
4	1,59	0,92	7,2*10 ¹⁶	35	12140	2,23

На основе результатов обработки экспериментальных кривых, полученных с детекторов ДТГ-4 (LiF:Mg, Ti, НИИГХ г.Иркутск) было показано, что предложенный способ расчета позволяет найти параметры отдельных пиков составляющих КТВ. Результаты расчета хорошо согласуются с литературными данными (см. табл. 3, 4), хотя строгая аналогия в данном случае вряд ли оправдана.

Таблица 3. Энергии активации детекторов ДТГ-4, TLD-100.

Тип детектора	Е, 2 пик, эВ	Т пика, °C	Е, 3 пик, эВ	Т пика, °C	Е, 4 пик, эВ	Т пика, °C	Е, 5 пик, эВ	Т пика, °C
ДТГ-4	1,31±0,07	106	1,47±0,06	144	1,61±0,06	176	2,03±0,09	205
TLD-100*	1,30	108	1,44	145	1,62	180	2,01	205
TLD-100**					1,541	170	1,616	210
TLD-100***	1,34±0,11	107	1,41±0,11	150	1,58±0,05	192	2,10±0,0	207
							5	

*Данные [4], **данные [2], ***усредненные данные по результатам [1].

Таблица 4. Предэкспоненциальный множитель детекторов ДТГ-4, TLD-100.

Тип детектора	S ₀ , 2 пик, эВ	KB, %	S ₀ , 3 пик, эВ	KB, %	S ₀ , 5 пик, эВ	KB, %	S ₀ , 5 пик, эВ	KB, %
ДТГ-4	4,10E16	147	1,49E16	107	2,09E17	247	6,07E20	365
TLD-100*	1,77E16		1,6E16		1,18E17		1,71E20	
TLD-100**					4E15		1E22	
TLD-100***	1,58E17	153	1,59E16	135	4,43E16	100	8,16E20	78

*Данные [4], **данные [2], ***усредненные данные по результатам [1].

Следует, однако, помнить, что численный расчет не дает достаточной информации, чтобы установить точное число пиков на КТВ. Поэтому достоверную информацию об истинном количестве пиков следует получать с помощью специальных физических исследований, подобных методам изотермического распада, фракционного высвечивания или разных скоростей нагрева [2, 9].

5. Выводы

Рассмотренный метод относится к приближенным методам решения кинетического уравнения термолюминесценции, тем не менее он позволяет получить в аналитическом виде решение, которое, как показали расчеты, достаточно точно описывает процесс высвечивания кристаллофосфора произвольного порядка кинетики. Полученное в аналитическом виде решение кинетического уравнения термолюминесценции позволяет значительно упростить расчет и сократить временные затраты на его реализацию.

На основе полученных выражений реализовано СПО DECONVOLUTION в среде VisualBasic-5. СПО DECONVOLUTION позволяет обрабатывать КТВ, полученные при линейном нагреве ТЛ-детекторов в формате Excel или СПО ДВГ-01Т. Программа прошла опытную эксплуатацию в лаборатории индивидуального дозиметрического контроля МосНПО "Радон" и в лаборатории дозиметрии химического факультета МГУ.

Метод может быть использован при работе с любыми ТЛД-системами, реализующими линейный нагрев детектора. В рамках данной работы метод с успехом был использован для обработки КТВ, полученных при помощи ТЛД-считывателей ДВГ-01Т (Санкт-Петербург) и Harshow-4000 (США).

Список литературы

- [1] Bos A.J., Gomez Ros T.M., Deldago A. An Intercomparison of Glow Curve Analysis Computer Programs: II. Measured Glow Curves. Radiat.Prot.Dosim. V.51, № 4, pp. 257-264 (1994).
- [2] Horowitz Y.S. Thermoluminescence and Thermoluminescent Dosimetry. (CRC Press, Boca Raton, Florida), v.1 (1984).
- [3] Chen R. On the Computation of the Generalized Integral in Glow Curve Theory. // J. Comput. Phys. № 6, p.314 (1970).
- [4] Hoogenboom J.E., de Vries W., Dielhof J.B. and Bos A.J. Computerized analysis of glow curves from thermally activated processes. // J. Appl.Phys. V.64(6), № 15 September, pp.3193-3200 (1988).
- [5] Horowitz Y.S. and Moscovitch M. Computerized glow curve deconvolution applied to high dose (10^2 - 10^5 Gy) TL dosimetry. // Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A243, North-Holland. Amsterdam pp. 207-214 (1986).
- [6] Horowitz Y.S. PH.D. Thermoluminescence and thermoluminescent dosimetry. V.1, CRC Press, INC. Boca Raton, Florida pp. 81-84 (1984).
- [7] Balian H.G., Eddy N.W. Figure of Merit (FOM) Improved Criterion over the Normalized Chi-squared Test for Assessing Goodness-Of-Fit of Gamma-ray Spectral Peaks. // Nucl. Instrum. Methods, № 145, pp. 389-395 (1977).
- [8] Pernicka F. and Linh H.Q. Use of Universal functional optimisation for TL glow curve analysis. Rad. Prot. Dosim. V.66, № 1-4, pp.437-440 (1996).
- [9] Антонов-Романовский В.В. Кинетика фотолюминесценции кристаллофосфоров. – М.: Наука, 1966.

Рукопись поступила 29 декабря 1999 г.

С.Д.Агриненко, А.Г.Алексеев, С.Д.Бурлака, Н.А.Карпов.
Метод анализа кривой термовысвечивания для линейного нагрева.

Оригинал-макет подготовлен с помощью системы \LaTeX .
Редактор Н.В.Ежела. Технический редактор Н.В.Орлова.

Подписано к печати 23.12.99. Формат $60 \times 84/8$. Офсетная печать.
Печ.л. 1,5. Уч.-изд.л. 1,2. Тираж 130. Заказ 20. Индекс 3649.
ЛР №020498 17.04.97.

ГНЦ РФ Институт физики высоких энергий
142284, Протвино Московской обл.

Индекс 3649