

**AD4HEL - Activation Detectors for High Energy
Lasers: využití kvazi-offline metod pro detekci
laserem generovaných neutronů**

TJ02000321-V3

Software analyzující laserem generované neutronové spektrum v
celém energetickém rozsahu - manuál

Leden 2021

Obsah

Úvod	4
1 Popis programu	5
2 Menu Main	7
2.0.1 Jména vstupních souborů	8
2.0.2 Informace o pících ve spektrech	8
3 Menu Spectra	10
4 Menu Libraries	14
4.1 Attenuation (samoabsorpce)	15
4.2 Background (odečet pozadí)	16
4.3 Efficiency (účinnost detektoru)	16
4.4 Nonlinearity (nelinearita detektoru)	17
4.5 Beam Fluctuation (kolísání intenzity svazku částic)	17
4.6 Coincidences (pravé kaskádní koincidence)	18
4.7 Gamma Intensity (all) (Databáze gama linek)	18
4.8 Gamma Intensity (ref) (aktivita referenčních zářičů)	19
5 Výpočet produkční a reakční rychlosti	20
6 Propojení se SAND-II	22
6.1 Editor vstupu do SAND-II	22
6.2 Grafické zobrazení výstupu	24
7 Doplnkové funkce	26
7.1 Píková účinnost detektoru	26
7.2 Nelinearita detektoru	27
7.3 Koincidence	28
8 Zpožděné neutrony	29
Závěr	32

Seznam obrázků

1	Úvodní okno programu	5
2	Uživatelská nabídka - sekce Main	7
3	Sekce Main - Uploaded Information	7
4	Sekce Main - Open selection	8
5	Uživatelská nabídka - sekce Spectra	10
6	Okno pro zadání parametrů ozařování	10
7	Okno pro vložení informací o hmotnostech, tloušťce a materiálu vzorků	11

8	<i>Okno pro vložení koeficientů pro korekci na nebodovost vzorku</i>	11
9	<i>Okno pro vložení informací o kalibračních energiích.</i>	11
10	<i>Okno pro konfiguraci vstupu vyhodnocovacího softwaru Deimos.</i>	12
11	<i>Okno pro volbu požadovaných korekcí</i>	13
12	<i>Uživatelská nabídka - sekce Libraries</i>	14
13	<i>Formát knihovny pro výpočet korekce na samoabsorpci</i>	15
14	<i>Formát knihovny pro odečet pozadí</i>	16
15	<i>Formát knihovny pro korekci na účinnost detektoru</i>	16
16	<i>Formát knihovny pro výpočet korekce na nelinearitu detektoru</i>	17
17	<i>Formát knihovny pro výpočet korekce na nelinearitu svazku</i>	18
18	<i>Formát knihovny pro výpočet korekce na koincidence</i>	18
19	<i>Formát knihovny energií γ linek</i>	19
20	<i>Formát knihovny s aktivitou referenčních zářičů</i>	19
21	<i>Uživatelská nabídka - sekce PR/RR</i>	20
22	<i>Levá část okna pro výpočet reakční rychlosti</i>	20
23	<i>Pravá část okna pro výpočet reakční rychlosti</i>	21
24	<i>Uživatelská nabídka - sekce SAND-II</i>	22
25	<i>Okno pro kontrolu výstupních dat</i>	22
26	<i>Editor pro přípravu vstupního souboru do SAND-II</i>	23
27	<i>Vstupní soubor pro SAND-II s doplněnými hodnotami pro volbu Tabular</i>	24
28	<i>Okno s nápovědou pro vytvoření vstupu pro SAND-II.</i>	24
29	<i>Okno pro vytvoření grafu z výstupu SAND-II</i>	25
30	<i>Uživatelská nabídka - sekce Detector</i>	26
31	<i>Okno pro výpočet píkovej účinnosti detektoru</i>	26
32	<i>Okno pro výpočet nelinearity detektoru</i>	27
33	<i>Okno pro výpočet korekcí na koincidence</i>	28
34	<i>Menu pro vykreslení dat z měření zpožděných neutronů.</i>	29
35	<i>Okno pro nahrání naměřených dat.</i>	29
36	<i>Ukázka souboru obsahujícího naměřená data.</i>	30
37	<i>Okno pro vykreslení dat z měření a jejich prokladu.</i>	31

Seznam tabulek

Úvod

Tento dokument obsahuje popis ovládání programu pro analýzu laserem generovaného neutronového spektra. V jednotlivých podkapitolách jsou popsány jednotlivé součásti programu s ohledem na jejich ovládání, práci s knihovnamy včetně jejich modifikací.

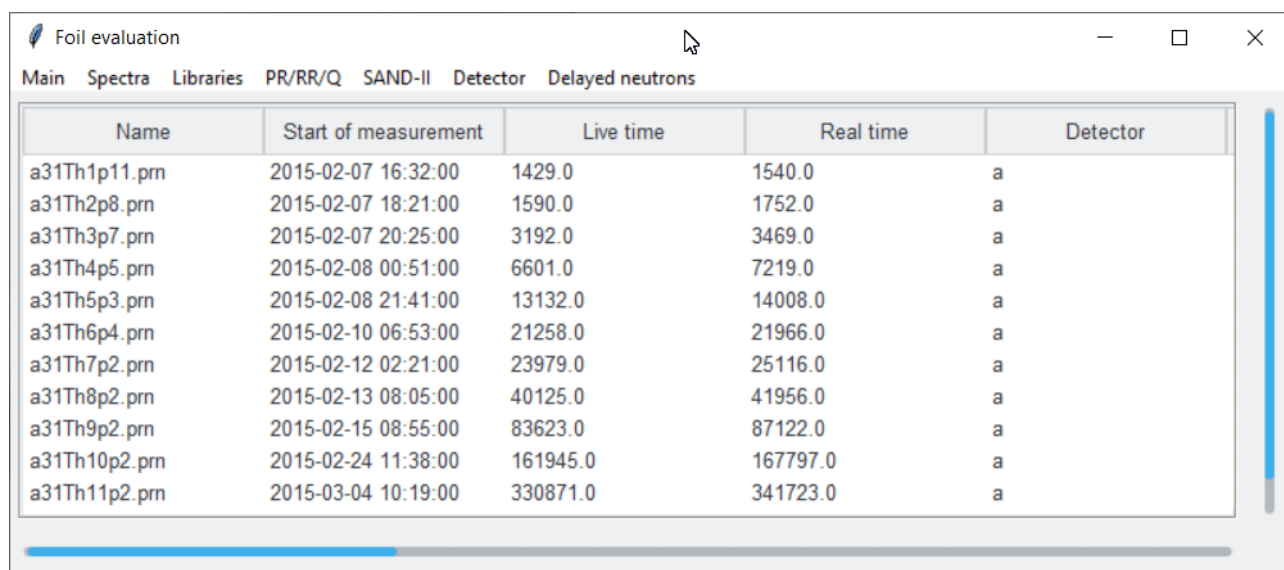
Struktura návodu se snaží sledovat postup při kterém uživatel zpracovává data ze skutečného experimentu, včetně přípravy potřebných knihoven.

1 Popis programu

Po spuštění programu se uživateli otevře základní okno s celkem sedmi nabídkami v horní liště. Jednotlivá menu budou podrobněji popsána v dalších kapitolách. Výčet nabídek je následující:

- *Main* - načtení/změna pracovní složky, zobrazení obsahu souboru spektra, export spektra, restart nebo ukončení programu.
- *Spectra* - umožňuje zadávat informace o experimentu, parametrech vzorků a vyhodnocování, volba spektrometrických korekcí.
- *Libraries* - volba souborů knihoven.
- *PR/RR* - otevře okno pro výpočet produkční nebo reakční rychlosti.
- *SAND-II* - otevře okno pro export výsledků do programu SAND-II včetně nastavení dekonvoluce, import výstupu ze SAND-II a jeho vizualizace.
- *Detector* - umožňuje zpracovat spektra pro přípravu knihoven efektivity, nelinearity nebo koincidencí.
- *Delayed neutrons* - slouží ke zpracování záznamu detekce zpožděných neutronů.

Kromě základní nabídky má v tomto okně uživatel k dispozici informace o nahraných spektrech, viz obr. 1



The screenshot shows a window titled 'Foil evaluation' with a menu bar containing 'Main', 'Spectra', 'Libraries', 'PR/RR/Q', 'SAND-II', 'Detector', and 'Delayed neutrons'. Below the menu bar is a table with the following data:

Name	Start of measurement	Live time	Real time	Detector
a31Th1p11.prn	2015-02-07 16:32:00	1429.0	1540.0	a
a31Th2p8.prn	2015-02-07 18:21:00	1590.0	1752.0	a
a31Th3p7.prn	2015-02-07 20:25:00	3192.0	3469.0	a
a31Th4p5.prn	2015-02-08 00:51:00	6601.0	7219.0	a
a31Th5p3.prn	2015-02-08 21:41:00	13132.0	14008.0	a
a31Th6p4.prn	2015-02-10 06:53:00	21258.0	21966.0	a
a31Th7p2.prn	2015-02-12 02:21:00	23979.0	25116.0	a
a31Th8p2.prn	2015-02-13 08:05:00	40125.0	41956.0	a
a31Th9p2.prn	2015-02-15 08:55:00	83623.0	87122.0	a
a31Th10p2.prn	2015-02-24 11:38:00	161945.0	167797.0	a
a31Th11p2.prn	2015-03-04 10:19:00	330871.0	341723.0	a

Obrázek 1: Úvodní okno programu

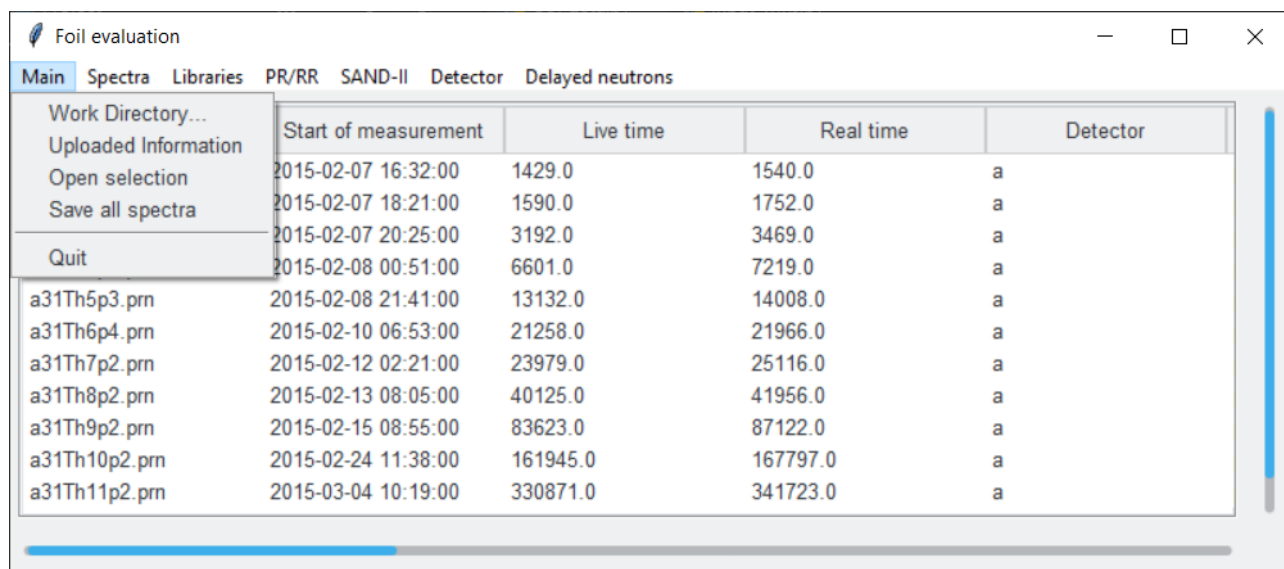
Pro každé spektrum jsou zobrazeny následující informace:

- *Name* - název souboru,
- *Start of measurement* - datum a čas začátku měření,
- *Live time* - čistý čas měření t_{live} (s),
- *Real time* - celkový čas měření t_{real} (s),
- *Detector* - označení detektoru,
- *Position* - označení pozice, ve které se vzorek nacházel v průběhu měření,
- *Sample name* - název měřeného vzorku,
- *Measurement number* - číslo měření,
- *Weight* - hmotnost vzorku (g),
- *Molar mass* - molární hmotnost (u),

- *Cal en_1* - kalibrační energie z programu Deimos32 (keV) - nižší hodnota,
- *Cal en_2* - kalibrační energie z programu Deimos32 (keV) - vyšší hodnota,
- *Delayed time* - čas mezi koncem ozařování a začátkem měření (s),
- *Element* - prvek (nebo seznam prvků) tvořící materiál vzorku,
- *Fraction by weight* - hmotnostní zlomek (-),
- *Density* - hustota materiálu (g/cm^3),
- *Thickness* - tloušťka vzorku (mm),
- *Non-point* - korekce na nebodovost vzorku.

2 Menu Main

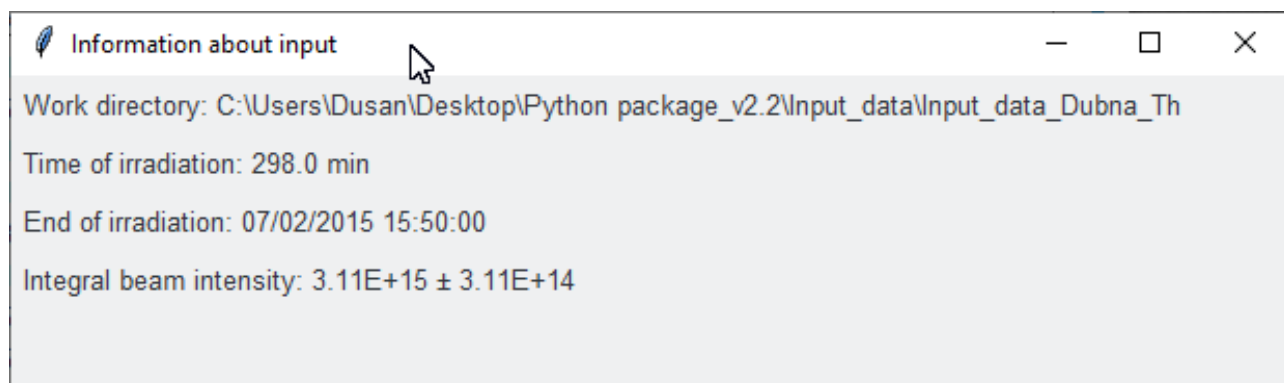
Hlavní sekce **Main** v menu (obr. 2) slouží k základní práci se spektry. Výběrem možnosti **Work Directory** uživatel načte složku s **.prn** soubory spekter z programu Deimos32¹. Ve zvolené složce se mohou nacházet jak soubory pro výpočet reakčních rychlostí, tak soubory pro stanovení korekce na píkovou účinnost a nelinearitu detektoru.



Obrázek 2: Uživatelská nabídka - sekce Main

Pokud není výše uvedené pojmenování dodrženo, tak nedojde ke korektnímu načtení souborů do programu. Označení detektoru a měřící pozice je důležité z hlediska gama spektrometrických korekcí. Číslo měření a jméno souboru pak slouží při vyhodnocování výsledků.

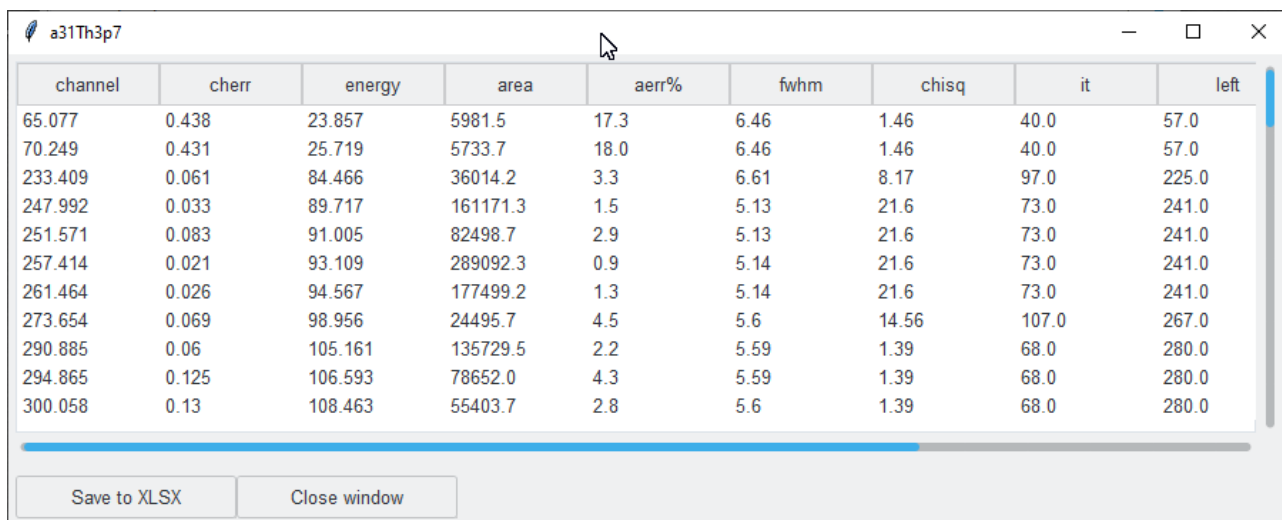
Nabídka **Uploaded Information** zobrazí okno s informacemi o umístění pracovní složky, délce ozařování, konci ozařování a parametrech ozařování (integrál svazku a jeho nejistota), viz Obr. 3



Obrázek 3: Sekce Main - Uploaded Information

Úvodní okno obsahuje pouze obecné informace o celých spektrech. Pomocí dvojkliku levého tlačítka myši na vybrané spektrum a nebo výběrem možnosti **Open selection** v hlavní nabídce lze otevřít jednotlivá spektra a prohlížet jejich obsah včetně již provedených korekcí, viz Obr. 4. Z tohoto okna lze taktéž uložit obsah spektra do **.xlsx** souboru.

¹Program Deimos byl vyvinut na ÚJF AVČR [1]



channel	cherr	energy	area	aerr%	fwhm	chisq	it	left
65.077	0.438	23.857	5981.5	17.3	6.46	1.46	40.0	57.0
70.249	0.431	25.719	5733.7	18.0	6.46	1.46	40.0	57.0
233.409	0.061	84.466	36014.2	3.3	6.61	8.17	97.0	225.0
247.992	0.033	89.717	161171.3	1.5	5.13	21.6	73.0	241.0
251.571	0.083	91.005	82498.7	2.9	5.13	21.6	73.0	241.0
257.414	0.021	93.109	289092.3	0.9	5.14	21.6	73.0	241.0
261.464	0.026	94.567	177499.2	1.3	5.14	21.6	73.0	241.0
273.654	0.069	98.956	24495.7	4.5	5.6	14.56	107.0	267.0
290.885	0.06	105.161	135729.5	2.2	5.59	1.39	68.0	280.0
294.865	0.125	106.593	78652.0	4.3	5.59	1.39	68.0	280.0
300.058	0.13	108.463	55403.7	2.8	5.6	1.39	68.0	280.0

Obrázek 4: Sekce Main - Open selection

Další nabídkou je **Save all spectra**, jež slouží k uložení všech načtených spekter do .xlsx souboru, resp. souborů. Všechny informace z hlavního okna jsou uloženy do souboru spectra_parameters.xlsx a obsah spekter je pak uložen do spectra_data.xlsx, kde každé spektrum je na vlastním listu se stejným názvem, jako měl původní soubor. Export je proveden do složky **Output** ve stejném adresáři jako je tento program.

Poslední možností v tomto menu je **Quit**. Jedná se jednu ze dvou možností jak ukončit program. Druhou je jednoduché kliknutí levým tlačítkem myši na křížek v pravém horním rohu hlavního okna.

2.0.1 Jména vstupních souborů

Názvy jednotlivých souborů musí být v jednom z následujících tvarů:

- a5NaCl3p2, kde
 - a je označení detektoru,
 - 5NaCl je název vzorku,
 - 3 je číslo měření,
 - p2 je pozice během měření.
- aNaCl5_3_p2, kde jsou název vzorku, číslo měření a pozice během měření odděleny podtržítky.

2.0.2 Informace o pících ve spektrech

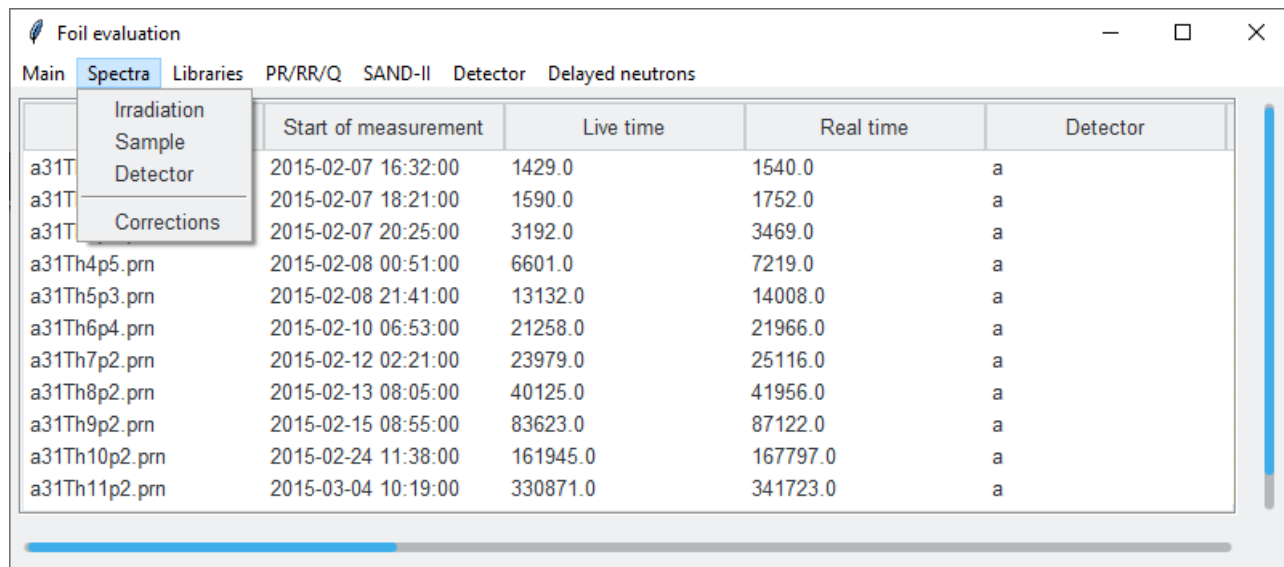
Pro každý nalezený pík ve spektru jsou načteny následující údaje:

- *Channel* - kanál středu píku (-),
- *Cherr* - nejistota kanálu (-),
- *Energy* - energie (keV),
- *Area* - plocha (-),
- *Aerr%* - nejistota plochy (%),
- *FWHM* - pološířka (-),
- *Chisq* - χ^2 (chí kvadrát) z fitu píku (-),

-
- *It* - počet iterací při fitování,
 - *Left* - první kanál v oblasti,
 - *N* - počet kanálů v oblasti,
 - *Lim* - detekční limit (-),
 - *Cor energy* - energie po provedení korekce na nelinearitu detektoru (keV),
 - *Energy change* - změna energie po provedení korekce na nelinearitu detektoru (keV),
 - *Cor energy unc* - nejistota energie po provedení korekce na nelinearitu detektoru (-),
 - *Bcg cor area* - plocha po odečtu pozadí (-),
 - *Bcg cor area unc* - nejistota plochy po odečtu pozadí (-),
 - *SEP-DEP cor area* - plocha po odečtu píků jednoduchého a dvojitého výletu (-),
 - *SEP-DEP corection* - korekce odečtu píků jednoduchého a dvojitého výletu (-),
 - *Att cor* - korekce na samoabsorpci (-),
 - *Eff FEP* - píková účinnost detektoru (-).

3 Menu Spectra

Sekce **Spectra** (na Obr. 5) v hlavním menu slouží ke vložení doplňujících informací popisujících parametry experimentu a vlastnosti použitých detektorů. O tom, které parametry jsou nebo nejsou nezbytné rozhoduje jaký výstup požaduje uživatel. Následuje popis jednotlivých nabídek v menu Spectra.

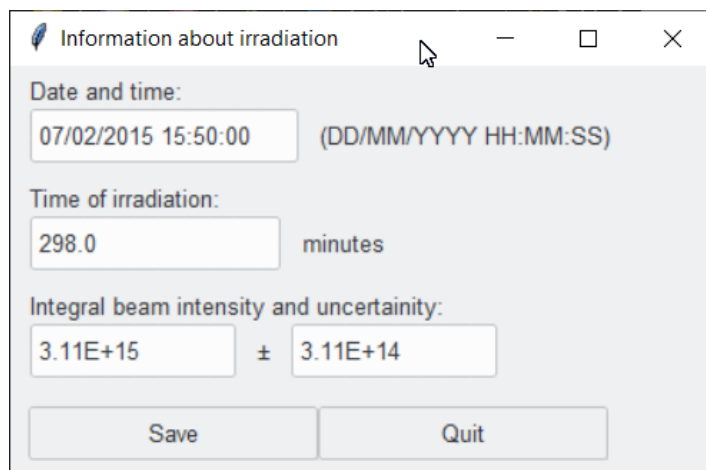


The screenshot shows the 'Foil evaluation' application window. The 'Spectra' menu is open, showing options: Irradiation, Sample, Detector, and Corrections. Below the menu is a table with the following data:

	Start of measurement	Live time	Real time	Detector
a31T	2015-02-07 16:32:00	1429.0	1540.0	a
a31T	2015-02-07 18:21:00	1590.0	1752.0	a
a31T	2015-02-07 20:25:00	3192.0	3469.0	a
a31Th4p5.prn	2015-02-08 00:51:00	6601.0	7219.0	a
a31Th5p3.prn	2015-02-08 21:41:00	13132.0	14008.0	a
a31Th6p4.prn	2015-02-10 06:53:00	21258.0	21966.0	a
a31Th7p2.prn	2015-02-12 02:21:00	23979.0	25116.0	a
a31Th8p2.prn	2015-02-13 08:05:00	40125.0	41956.0	a
a31Th9p2.prn	2015-02-15 08:55:00	83623.0	87122.0	a
a31Th10p2.prn	2015-02-24 11:38:00	161945.0	167797.0	a
a31Th11p2.prn	2015-03-04 10:19:00	330871.0	341723.0	a

Obrázek 5: Uživatelská nabídka - sekce Spectra

Irradiation slouží k zadání základních parametrů experimentu (ozařování). Jedná se o datum a čas kdy skončilo ozařování a doba jeho trvání. Posledním parametrem je integrál počtu částic ve svazku a jeho nejistota. Zadávání probíhá v samostatném okně, viz Obr. 6. Formát data a času je uveden v samotném okně. Jako oddělovač desetinných míst slouží tečka.



The dialog box 'Information about irradiation' contains the following fields and controls:

- Date and time:** A text box containing '07/02/2015 15:50:00' with a label '(DD/MM/YYYY HH:MM:SS)' to its right.
- Time of irradiation:** A text box containing '298.0' followed by the label 'minutes'.
- Integral beam intensity and uncertainty:** A text box containing '3.11E+15' followed by a plus-minus sign and another text box containing '3.11E+14'.
- At the bottom, there are two buttons: 'Save' and 'Quit'.

Obrázek 6: Okno pro zadání parametrů ozařování

Sample (obr. 7) umožňuje uživateli zadat informace o hmotnostech jednotlivých vzorků a také informace pro výpočet korekce na samopohlčení. Pokud je vzorek tvořen pouze jedním prvkem, uživatel zadává chemické označení prvku, který tvoří materiál vzorku a tloušťku vzorku. Pokud je materiálem vzorku sloučenina, je třeba do kolonky **Material** zadat označení prvků

tvořících sloučeninu oddělené lomítkem, dále hmotnostní zlomek, ve kterém budou poměry ve stejném pořadí jako jim příslušné prvky, hustotu materiálu a tloušťku vzorku.

Sample Weight (g)	Weight err (g)	Molar mass (-)	Material (-)	Frac. by weight (-)	Density (g/cm ³)	Thickness (mm)
31Th	1.964	0.001	232.0	90Th	1	11.72

Obrázek 7: Okno pro vložení informací o hmotnostech, tloušťce a materiálu vzorků

Volba **Non-point Source** v rámci okna Sample (Obr. 8) umožňuje uživateli zadat vlastní hodnoty korekcí na nebodovost zdroje, a to pro všechny pozice vzorku u každého detektoru.

Detector a	p2	p3	p4	p5	p7	p8	p11
31Th	1	1	1	1	1	1	1

Obrázek 8: Okno pro vložení koeficientů pro korekci na nebodovost vzorku

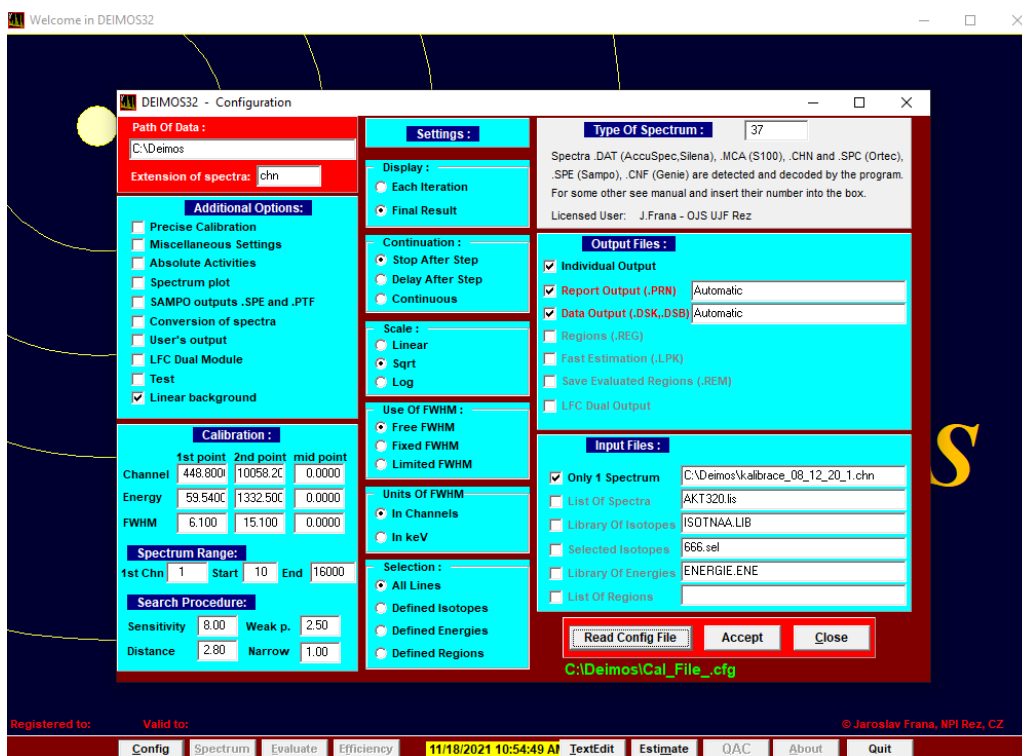
Další nabídkou je **Detector** (obr. 9), která slouží k vložení informace o kalibračních energiích z programu Deimos32, viz Obr. 10 v levé dolní části okna. Tato kalibrace je využívána pouze v případě, kdy byla provedena dodatečná energetická kalibrace. V tom případě program Deimos32 přepočítá kalibraci použitou při měření na kalibraci použitou při vyhodnocení. Bez těchto hodnot také není možné provést korekci na nelinearitu použitého detektoru. Tu lze provést pokud jsou uloženy parametry příslušných opravných funkcí pro použitý detektor v knihovně nonlinearity, viz 4.

	Cal. en. 1 (keV)	Cal. en. 2 (keV)
a	158.0	2614.0

Obrázek 9: Okno pro vložení informací o kalibračních energiích.

Výše popsané vstupy jsou automaticky uloženy do souboru `parameters.txt` ve stejné složce jako jsou původní spektra. Při novém běhu programu dojde k jejich automatickému načtení. Uživatel je tím pádem nemusí znovu zadávat.

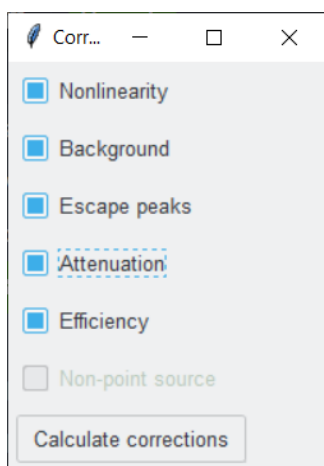
Poslední volbou je **Correction**, viz Obr. 11 a slouží k výběru spektrometrických korekcí a jejich výpočet. Následuje krátký popis jednotlivých korekcí:



Obrázek 10: Okno pro konfiguraci vstupu vyhodnocovacího softwaru Deimos.

- *Nonlinearity* Tato funkce přepočítá energii jednotlivých píků podle korekčních funkcí. Její použití je doporučeno, protože nelinearita některých detekčních systémů může dosahovat jednotky až desítky keV v různých částech spektra. Pokud není energie určena správně, může docházet k nesprávnému vyhodnocení PR a RR.
- *Background* Korekce na pozadí vyžaduje zpracovaný soubor spektra programem Deimos32 z použitého detektoru u měření bez vzorku. Program si automaticky najde které píky je potřeba korigovat a s pomocí doby měření provede výpočet potřebné korekce.
- *Escape peaks* Tato korekce umožňuje zjistit příspěvky únikových píků pro píky s energiemi vyššími než 1024 keV a odečíst je od píků ze spektra, se kterými mohly interagovat.
- *Attenuation* Korekce na samostínění se uplatňuje zejména u vzorků s nezanedbatelnou tloušťkou a při měření nižších energií. Pro její správné provedení je třeba aby v knihovnách byly údaje o hodnotách lineárního součinitele zeslabení pro zvolené prvky a vyhodnocovaný energetický rozsah.
- *Efficiency* patří mezi nejdůležitější korekce a bez jejího provedení není možné provést výpočet PR ani RR. Pro její vyhodnocení je nutné, aby v knihovnách byly parametry pro všechny detektory a měřící pozice využité při měření.
- *non-point source* Jedná se o doplňkovou korekci, jež umožňuje vzít v potaz nebodovost měřeného vzorku. Samotný program neumožňuje spočítat hodnotu této korekce. K tomu je možné použít např. kódy založené na metodě Monte Carlo, za předpokladu že jsou známé přesné rozměry použitého detektoru a lze tak vytvořit jeho model.

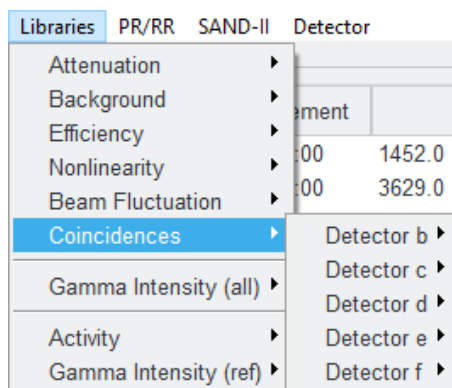
Príslušné výpočty korekcí jsou provedeny po kliknutí na tlačítko **Calculate corrections**. Výsledné korekce lze zobrazit u každého spektra pomocí výše zmíněné funkce **Open selection** nebo dvojitým kliknutím levého tlačítka myši na kterékoliv spektrum.



Obrázek 11: Okno pro volbu požadovaných korekcí

4 Menu Libraries

Data nezbytná pro výpočet jednotlivých korekcí jsou načítána z knihoven uložených ve složce `libraries`, která je vytvořena vedle hlavního souboru. Menu **Libraries** (obr. 12) umožňuje uživateli načtení vlastní knihovny. Formát jednotlivých knihoven je popsán níže. Pro všechny knihovny platí, že komentáře uvnitř knihoven jsou označeny symbolem dvojitého křížku na začátku řádku. Preferovanou příponou souborů knihoven je koncovka `.lib` a preferované kódování je **UTF-8**.



Obrázek 12: Uživatelská nabídka - sekce Libraries

V programu jsou uloženy cesty k výchozím knihovnám uloženým ve složce **libraries**. Uživatel může jít cestou tvorby vlastních knihoven jež nahraje po spuštění programu případně modifikací výchozích knihoven. Následuje výčet základních knihoven s krátkým popisem. Dále bude podrobněji popsána struktura jednotlivých souborů. Samotný výběr knihovny probíhá najetím kurzoru myši na nabídku **Libraries**, kdy po najetí dojde k zobrazení jednotlivých typů knihoven. Při najetí kurzorem myši na jednotlivé nabídky, dojde k zobrazení vybraného souboru a tlačítka pro nahrání nového souboru. Některé knihovny obsahují vnitřní nabídky, např. **Background** nebo **Coincidences** jejichž počet závisí na parametrech nahraných spekter².

- **Attenuation** - `AttLib.lib` - jedná se o soubor, jež obsahuje informace o hmotnostním součiniteli zeslabení ($\text{m}^2 \cdot \text{kg}^{-1}$) a hustotě materiálu pro různé chemické prvky. Knihovna neobsahuje data pro všechny prvky z periodické tabulky. V případě že data chybí nebo je nutné upravit hustotu materiálu, lze je modifikací knihovny doplnit.
- **Background** - `b.bcg` nebo `Background.fon` - upřesnit která varianta se tedy používá.
- **Efficiency** - `efficiency.lib` - obsahuje parametry funkcí, jež byly použity při prokladu dat z měření a vyhodnocení píkové efektivity detektoru. Každý detektor a jeho měřící pozice mají unikátní hodnoty těchto parametrů.
- **Nonlinearity** - `NonLin.lib` - podobně jako předchozí knihovna, obsahuje parametry funkcí jež popisují odchylky použitých detektorů od lineární závislosti funkce kanál-energie.
- **Beam Fluctuation** - `Beam_fluct.lib` - jedná se o volitelnou knihovnu, která obsahuje informace o průběhu ozařování (časová značka a výkon svazku³).
- **Coincidences** - obsahuje informaci o korekcích na pravé kaskádní koincidence pro jednotlivé detektory, resp. měřící pozice a radionuklidy. Tuto korekci je nutno spočítat např. v programu `Truecoinc` na základě znalosti píkové a totální účinnosti daného detektoru.

²Každý detektor, jež byl použit pro měření spekter má svůj vlastní soubor pro korekci pravých kaskádních koincencí a taktéž potřebuje svůj vlastní soubor pro korekci pozadí.

³může být jako relativní nebo absolutní hodnota.

- **Gamma Intensity (all)** - `Gamma.lib` - slouží jako databáze gama přechodů, jejich intenzit a poločasů přeměny radionuklidů.
- **Gamma Intensity (ref)** - `Gamma_eff.lib` - obdobná databáze jako *Gamma Intensity (all)*, která ale obsahuje pouze informace o radionuklidech, jež se používají jako kalibrační zářiče při určování účinnosti detektoru nebo jeho energetické kalibraci.
- **Activity** - `Activity.lib` - obsahuje informace o jednotlivých kalibračních zářičích, jako referenční datum, referenční aktivita, identifikátor a označení radionuklidu formou chemické značky a nukleonového čísla.

4.1 Attenuation (samoabsorpce)

Pro výpočet korekce na samoabsorpci slouží knihovna `AttLib.lib` a její změna je možná pomocí výběru **Attenuation**. Struktura knihovny je patrná z Obr. 13.

```

92UC  1  19.043 density[g/cm^3]  0.1156  dividing energy[MeV]
92U   2.17574E-02  9.222E+01
92U   3.00000E-02  4.128E+01
92U   4.00000E-02  1.983E+01
92U   5.00000E-02  1.121E+01
92U   6.00000E-02  7.035E+00
92U   8.00000E-02  3.395E+00
92U   1.00000E-01  1.954E+00
92U   1.15590E-01  1.378E+00
92U   1.15610E-01  4.893E+00
92U   1.50000E-01  2.591E+00
92U   2.00000E-01  1.298E+00
92U   3.00000E-01  5.192E-01
92U   4.00000E-01  2.922E-01
92U   5.00000E-01  1.976E-01
92U   6.00000E-01  1.490E-01
92U   8.00000E-01  1.016E-01
92U   1.00000E+00  7.896E-02
92U   1.25000E+00  6.370E-02
92U   1.50000E+00  5.587E-02
92U   2.00000E+00  4.878E-02
92U   2.50000E+00  4.628E-02
92U   3.00000E+00  4.447E-02
#####
90ThC 1  11.724 density[g/cm^3]  0.109605  dividing energy[MeV]
90Th  2.04721E-02  1.018E+02
90Th  3.00000E-02  3.892E+01

```

Obrázek 13: Formát knihovny pro výpočet korekce na samoabsorpci

V knihovně jsou zahrnuta data pro jednotlivé prvky, které tvoří materiál použitého vzorku. Jednotlivé záznamy jsou odděleny řádkem dvojitých křížků. První řádek údajů pro každý prvek obsahuje název prvku, složený z jeho protonového čísla a chemické značky, doplněný o písmeno C⁴. Následuje informace o tom, zda je nutné data v knihovně prokládat jednou křivkou (0) nebo dvěma křivkami (1). Proklad slouží k interpolaci hodnoty pro energie píků ze spekter⁵.

Dále je zde uvedena hustota materiálu v g/cm³ a hodnota dělicí energie v MeV (v případě prokladu jednou křivkou je hodnota dělicí energie 0). Další řádky obsahují jednotlivé body

⁴jedná se o strukturu vycházející ze staršího SW bez GUI jež využíval právě tento formát. Z důvodu zachování určité kompatibility nebylo přistoupeno k jeho modifikaci.

⁵hodnoty lineárního, resp. hmotnostního součinitele zeslabení nemají spojitý charakter s ohledem na strukturu elektronového obalu a princip absorpce nepřímého ionizujícího záření jako jsou RTG záření a záření γ

funkce μ/ρ , popisující pokles intenzity záření při průchodu materiálem. Každý řádek obsahuje název prvku, energii v MeV a hodnotu funkce pro tuto energii v cm^2/g .

4.2 Background (odečet pozadí)

Knihovna `Background.fon` obsahuje data pro odečet pozadí. Pro změnu souboru slouží položka `Background`. Formát knihovny je znázorněný na Obr. 14.

```
A  t_live 102928.0 s
A  185.979  0.041      2339      150
A  238.791  0.061      2521      126
A  241.140  0.062       280       78
A  242.180  0.062       781       84
A  295.391  0.087      1752      110
A  328.364  0.105       254       56
A  338.558  0.111       673       84
A  344.422  0.114       379       61
A  352.071  0.012      3292      119
A  510.919  0.017      3236      123
A  513.583  0.017       115       76
A  558.613  0.019       996       75
A  583.390  0.020      1263       77
A  609.455  0.021      3317      106
A  661.792  0.023       411       58
```

Obrázek 14: Formát knihovny pro odečet pozadí

Data pro daný detektor jsou označena písmenem detektoru na první pozici každého řádku. V prvním řádku je uveden efektivní čas měření t_{live} . Další řádky za označením detektoru obsahují energii daného píku, absolutní velikost nejistoty energie, plochu píku a absolutní velikost nejistoty plochy. Ze struktury knihovny plyne že ji lze poměrně snadno připravit z běžného spektra úpravou do správného formátu.

4.3 Efficiency (účinnost detektoru)

Data pro výpočet korekce na účinnost detektoru jsou obsažena v knihovně `Efficiency.lib`, kterou je možné změnit při výběru `Efficiency`. Formát knihovny je patrný z obr. 15.

```
a      p9      210 keV  dubna      # Dubna detA
7.038140887      -0.814772477      0.150901906      -0.138006147
7.0480264165     -0.8634397265     0.0201645344     -0.1488655673     -0.0727182154

a      p11      0 keV   dubna      # Dubna detA
6.2795640479     -0.8318314844     0.0686881751     -0.1505625703     -0.1270915965

b      p0      0 keV   keV      # Brno
-640.377      509.867      -161.535      25.4162      -1.99059
```

Obrázek 15: Formát knihovny pro korekci na účinnost detektoru

Knihovna obsahuje data pro každý detektor a každou pozici, ve které bylo provedeno měření. První řádek tvoří označení detektoru, označení měřicí pozice, dělicí energii v keV a informaci o způsobu získání koeficientů funkcí použitých pro proklad. Aktuálně jsou dostupné tři typy možných způsobu výpočtu účinnosti, resp. provedení prokladu.

- **keV** - proklad funkce popisující účinnost byl proveden pro energie v jednotce **keV**. Funkce použitá pro proklad $\varepsilon_{FEP}(E_\gamma) = e^{\sum_{i=0} a_i \ln^i(E_\gamma)}$ (keV).
- **MeV** - proklad funkce popisující účinnost byl proveden pro energie v jednotce **MeV**. Funkce použitá pro proklad $\varepsilon_{FEP}(E_\gamma) = e^{\sum_{i=0} a_i \ln^i(E_\gamma)}$ (MeV).
- **dubna** - proklad funkce popisující účinnost byl proveden způsobem používaným ve výzkumné skupině v JINR v Dubně⁶. Funkce použitá pro proklad $\varepsilon_{FEP}(E_\gamma) = e^{\sum_{i=0} a_i \ln^i(E_\gamma/1000)}$ 10^{-6} (keV).

V závislosti na tom, zda proklad funkce tvoří jedna nebo dvě křivky, následuje jeden nebo dva řádky obsahující koeficienty polynomu z exponentu příslušné funkce. Maximální stupeň polynomu není teoreticky omezen ale prakticky se uvažuje použití nejvýše polynomu 8. stupně. Jednotlivé záznamy jsou od sebe odděleny prázdnými řádky.

4.4 Nonlinearity (nelinearita detektoru)

Data pro výpočet korekce na nelinearitu detektoru jsou obsažena v knihovně `NonLin.lib`, kterou je možné změnit při výběru **Nonlinearity**. Formát knihovny je na Obr. 16.

Formátování je obdobné jako v případě knihovny pro výpočet účinnosti detektoru. Pro každý detektor je první řádek tvořen označením detektoru, následuje informace o dělicí energii v keV. V závislosti na tom, zda byla data proložena jednou nebo dvěma křivkami, následuje jeden nebo dva řádky koeficientů funkce. Jednotlivé záznamy jsou odděleny prázdným řádkem.

```

a      350 keV      # Dubna detA
-9.27129300e-2  1.98558000e-3  -2.77439582e-6
1.99080790e-1  2.23723895e-4  -1.04598745e-7

b      2505 keV     # Brno
-0.00709756    0.00147105    -6.41296e-07
0.992073       0.0984365     -3.95087e-05

c      160 keV     # Vyskov Canberra
-2.95441       0.035025      -8.69507e-05
0.369525      0.000561377  -6.13674e-07

```

Obrázek 16: Formát knihovny pro výpočet korekce na nelinearitu detektoru

V případě potřeby vyhodnotit nelinearitu pro další detektory je nutné sestavit závislost odchylek mezi změřenou a teoretickou energií píků na energii změřené. Následně provést proklad pomocí jedné nebo dvojice kvadratických funkcí kdy hodnoty dosazené do prokladu jsou v jednotce keV.

4.5 Beam Fluctuation (kolísání intenzity svazku částic)

Informace pro výpočet korekce na kolísání intenzity svazku částic, jimiž byly vzorky ozařovány, se nachází v souboru `Beam_fluct.lib` a změna je možná při výběru možnosti **Beam Fluctuation**. Soubor tvoří tři sloupce údajů - datum, čas a počet částic ve svazku v příslušném čase, a to buď v absolutních nebo relativních hodnotách (viz obr. 17). Korekce na kolísání intenzity svazku se

⁶skupina historicky působící na pracovišti YaSNaPP-2.

provádí až při určování produkční nebo reakční rychlosti, jelikož jedním ze vstupů do výpočtu je poločas přeměny, jež nelze určit dokud není znám vyhodnocovaný radionuklid.

```

25.05.2018  15:20:06  0.56
25.05.2018  15:20:22  1.16
25.05.2018  15:20:39  1.85
25.05.2018  15:20:55  2.98
25.05.2018  15:21:12  3.06
25.05.2018  15:21:28  3.04
25.05.2018  15:21:45  2.96
25.05.2018  15:22:01  3.03
25.05.2018  15:22:18  3.03
25.05.2018  15:22:34  3.00
25.05.2018  15:22:51  2.99
25.05.2018  15:23:10  2.99
25.05.2018  15:23:26  2.98

```

Obrázek 17: Formát knihovny pro výpočet korekce na nelinearitu svazku

4.6 Coincidences (pravé kaskádní koincidence)

Data potřebná pro výpočet korekce na pravé kaskádní koincidence jsou pro jednotlivé detektory rozdělena do více souborů s názvem `XFisDef.clib`, kde `X` je označení detektoru. V menu se ve výběru **Coincidences** vytvoří položka pro každý použitý detektor použitý u změřených spekter.

Samotné soubory tvoří řádky informací pro energie přechodů jednotlivých izotopů (viz obr. 18). Řádek obsahuje označení izotopu, energii a hodnoty korekce na koincidence pro dané pozice. Korekce na pravé kaskádní koincidence by měla být použita vždy když měření probíhalo v blízké měřící geometrii. Zároveň je nutné je určit vždy pro danou píkovou účinnost, resp. nastavení detektoru.

#	Isotope	Energy	P2	P3	P4	P5	P6	P7	P8
100Rh	446.153		0.811	0.867	0.891	0.917	1.000	1.000	1.000
100Rh	539.512		0.878	0.918	0.932	0.948	1.000	1.000	1.000
100Rh	822.654		0.823	0.877	0.899	0.923	1.000	1.000	1.000
100Rh	1107.223		0.839	0.889	0.908	0.930	1.000	1.000	1.000
100Rh	1362.152		0.926	0.954	0.959	0.969	1.000	1.000	1.000
100Rh	1553.348		0.868	0.911	0.925	0.944	1.000	1.000	1.000
100Rh	1929.811		0.882	0.922	0.934	0.950	1.000	1.000	1.000
100Rh	2375.976		0.895	0.932	0.942	0.957	1.000	1.000	1.000
103Ru	497.080		1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000
105Rh	306.250		1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000
105Rh	319.140		1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000

Obrázek 18: Formát knihovny pro výpočet korekce na koincidence

4.7 Gamma Intensity (all) (Databáze gama linek)

Knihovna `gamma_lib.lib` slouží pro výpočet produkční nebo reakční rychlosti a její změna je možná při výběru **Gamma Intensity (all)**. Jednotlivé řádky obsahují vždy energii γ přechodu, absolutní velikost nejistoty této energie, intenzitu a absolutní velikost nejistoty intenzity gama přechodu, označení izotopu, poločas rozpadu a absolutní velikost nejistoty poločasu rozpadu, následovaný časovou jednotkou (viz Obr. 19).

V názvech izotopů se mohou nacházet různé doplňkové znaky, v případě písmena „m“ nebo „m2“ apod. se jedná o tzv. izomer (metastabilní hladinu) daného izotopu a tento znak se uvádí za nukleonovým číslem. Druhým případem je písmeno „D“, které se uvádí za standardním označením chemického prvku, např. „ ^{130}LaD “. Tento symbol se používá v okamžiku, kdy je ^{130}La součástí rozpadové řady, u které má mateřský izotop, jež se přeměňuje na ^{130}La , výrazně delší poločas přeměny než ^{130}La . V takovém případě je rozpadová křivka pro ^{130}La determinována primárně delším poločasem mateřského radionuklidu.

Stejný formát má i knihovna `gamma_lib_ref.lib`, která obsahuje data pouze pro referenční zářiče. Její změna je možná při výběru **Gamma Intensity (ref)**.

```

250.332 0.001 0.4630000 0.0160000 39Cl      T1/2 = 55.600 0.200 m
1517.508 0.001 0.3920000 0.0090000 39Cl      T1/2 = 55.600 0.200 m
372.760 0.001 0.8700000 0.0100000 43K       T1/2 = 22.300 0.100 h
617.490 0.001 0.7920000 0.0060000 43K       T1/2 = 22.300 0.100 h
396.861 0.001 0.1185000 0.0008000 43K       T1/2 = 22.300 0.100 h
593.390 0.001 0.1126000 0.0008000 43K       T1/2 = 22.300 0.100 h
220.631 0.001 0.0480000 0.0006000 43K       T1/2 = 22.300 0.100 h
271.130 0.010 0.8670000 0.0030000 44mSc      T1/2 = 58.600 0.100 h

```

Obrázek 19: Formát knihovny energií γ linek

4.8 Gamma Intensity (ref) (aktivita referenčních zářičů)

V knihovně `Activity.lib` jsou obsaženy informace o referenčních zářičích. Změna knihovny je možná výběrem **Activity**.

Jednotlivé řádky obsahují informace vždy o jednom referenčním zářiči, ve formátu, který je patrný z Obr. 20. Jako první je uvedeno označení izotopu složené z nukleonového čísla a chemické zkratky. Dále následuje identifikační číslo, referenční datum, referenční aktivita v Bq a nejistota referenční aktivity v %.

```

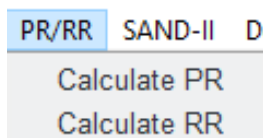
-----
44Ti 5651 23-01-2017 108000 10
44Ti 6844 01-05-2013 11500 5
-----
55Fe 5884 23-01-2017 150500 10
55Fe 6844 01-05-2013 22700 5
-----
54Mn 5199 23-01-2017 116800 10
54Mn 6844 01-05-2013 40400 5

```

Obrázek 20: Formát knihovny s aktivitou referenčních zářičů

5 Výpočet produkční a reakční rychlosti

Po nahrání souborů se spektry, doplnění potřebných informací v sekci **Spectra** a vypočtení požadovaných korekcí je možné přistoupit k hlavním výpočtům. Uživatel má na výběr mezi výpočtem produkční rychlosti (PR) a reakční rychlosti (RR). K tomu slouží položka **PR/RR** v menu (Obr. 21). Rozdíl mezi výsledky je patrný z jejich jednotky. Reakční rychlost je definovaná jako počet reakcí dané jaderné reakce přepočtené na jeden atom vzorku/detektoru a jednu incidenční částici. Zatímco produkční rychlost je v tomto případě definovaná jako počet reakcí dané jaderné reakce bez normalizace na počet jader nebo částic jež dopadly na terč.



Obrázek 21: Uživatelská nabídka - sekce PR/RR

Okna pro oba typy výpočtů se prakticky neliší, pouze volba RR umožňuje navíc provést korekci na kolísání intenzity svazku. Okno je rozděleno na dvě části. V levé části (na obr. 22) se nachází tlačítka pro výpočet a seznam výsledků, vpravo (obr. 23) se nachází okno pro zobrazení grafu.

RR calculation

Spectrum name	Energy (keV)	RR	dRR	Coinc. corr.	Beam corr.
<input checked="" type="checkbox"/> a31Th1p11	847.034	1.63899e-27	1.65732e-28	1.0	1.0
<input checked="" type="checkbox"/> a31Th2p8	847.011	2.02760e-27	2.05028e-28	1.0	1.0
<input type="checkbox"/> a31Th3p7	845.135	4.35647e-28	7.00767e-29	1.0	1.0
<input checked="" type="checkbox"/> a31Th3p7	846.96	1.69815e-27	1.88364e-28	1.0	1.0
<input checked="" type="checkbox"/> a31Th4p5	846.831	2.52405e-27	3.42972e-28	1.0	1.0

Sample: 31Th Nuclide: 201mBi Energy: 846.4 Isotopic ratio: 1

Corrections: Coincidence Beam fluctuation Y-axis: Lin Log

Calculate RR Plot selection Save to XLSX Add to export file Close window

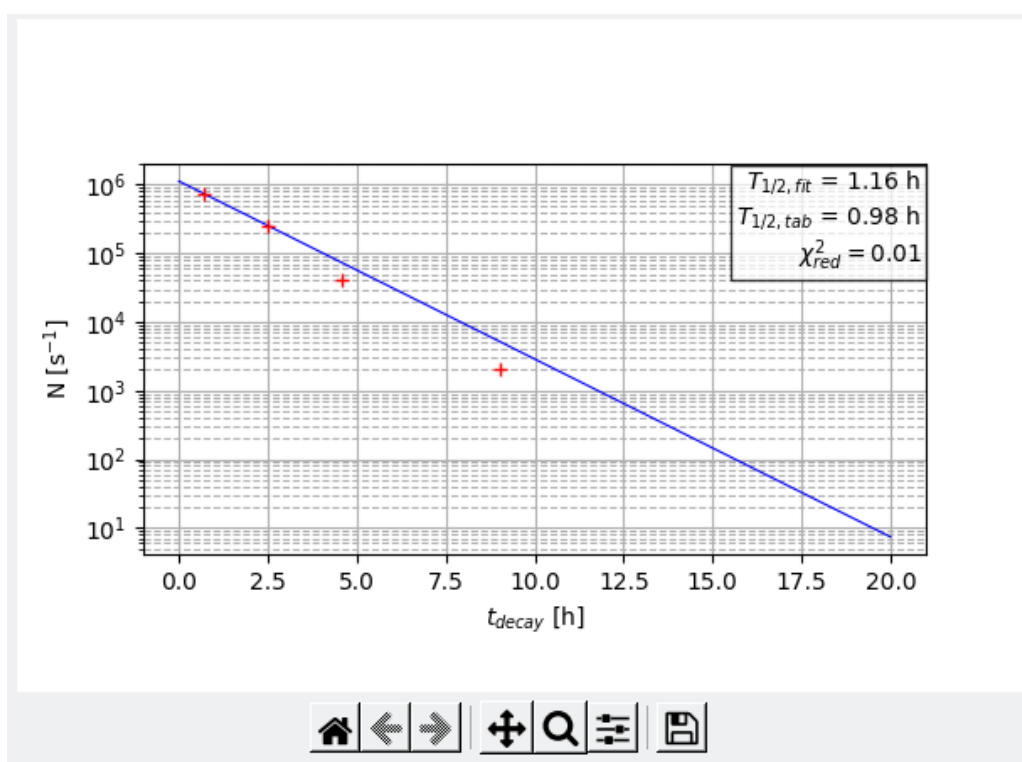
Obrázek 22: Levá část okna pro výpočet reakční rychlosti

Uživatel zvolí vzorek, pro který má být výpočet proveden, spolu s izotopem a energií γ linky. Dále je možné nastavit, zda má být provedena korekce na koincidence a v případě výpočtu RR korekce na nelinearitu svazku. Pokud je vzorek složen z více izotopů, je v poli **Isotopic ratio**

možné zadat poměrné množství konkrétního izotopu. Tlačítka **Lin** a **Log** umožňují přepínání mezi logaritmickým a lineárním měřítkem svislé osy grafu.

Po kliknutí na tlačítko **Calculate** program vyhodnotí, zda se v nahraných spektrech nachází zvolená energie nebo její přibližná hodnota. Pokud ano, zobrazí se dané spektrum v seznamu výsledků. Dále se zobrazí hodnota vypočtené RR/PR, hodnota její nejistoty, velikost korekce na koincidence a případně na fluktuaci svazku.

Zároveň je vykreslena rozpadová křivka, tedy závislost počtu přeměn daného izotopu na čase. Z této křivky je vypočítán poločas přeměny $T_{1/2,fit}$, který je spolu s referenčním poločasem rozpadu z knihovny $T_{1/2,tab}$ uveden v grafu. Dále je vypočten a vypsán i redukovaný chí-kvadrát (χ_{red}^2). Tlačítka pod grafem umožňují uživateli změnit rozložení grafu a jeho export jako obrázku.

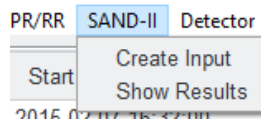


Obrázek 23: Pravá část okna pro výpočet reakční rychlosti

Pomocí zaškrťovacích políček může uživatel zvolit hodnoty pro další kroky. Tlačítko **Plot selection** umožňuje vykreslit data vybraná uživatelem pomocí zaškrťovacích políček přímo v tabulce výsledků, **Save to XLSX** data uloží do souboru `RR(PR)_results.xlsx` do složky Output vytvořené v kořenovém adresáři, **Add to export file** přidá vybrané hodnoty do paměti, jež umožňuje vypočítat finální PR/RR z více měření, resp. energií jednoho radionuklidu. Tyto hodnoty je pak možné uložit nebo použít pro výpočet dekonvoluce.

6 Propojení se SAND-II

Položka **SAND-II** v menu (Obr. 24) nabízí několik funkcí. Hlavním účelem je zjednodušit přípravu vstupních souborů do programu **SAND-II** a vykreslení jeho výstupů v grafickém modulu. Hlavním účelem programu **SAND-II** je dekonvoluce neutronového spektra na základě znalosti reakčních rychlostí pro různé prahové aktivační detektory. Vedlejší funkcí tohoto menu je výpočet vážených průměrů produkčních nebo reakčních rychlostí z jednotlivých měření pro jednu energii a následně pro všechny energie z jednoho radionuklidu.



Obrázek 24: Uživatelská nabídka - sekce SAND-II

Výběrem možnosti **Create input** se zobrazí strom výsledků (na obr. 25), spolu s hodnotami reakčních rychlostí vypočtenými pro jednotlivé izotopy, jejich energie a jednotlivé vzorky pomocí vážených průměrů. Dále je možno dodatečně načíst dříve uložená data pomocí tlačítka **Import data**. Uživatel opět může pomocí zaškrťovacích tlačítek zvolit, která data budou použita pro výpočet a pomocí tlačítka **Recalculate** následně výsledek přepočítat. Kromě vytvoření vstupu pro **SAND-II** tlačítkem **Export to SAND-II** lze tlačítkem **Save** výsledné hodnoty uložit do **.xlsx** souboru pro další použití.

Tlačítko **Export to SAND-II** pak slouží k samotnému uložení výsledků do paměti a otevření okna editoru pro vytvoření vstupního souboru do **SAND-II**.

 A screenshot of a window titled 'Data check for export'. It contains a table with the following data:

	Nuclide	Ref. Energy	Sample	Spectrum	RR	dRR
✓	100Rh	all	all	all	1.1154e-30	6.5072e-31
✓		446.153	all	all	1.1154e-30	6.5072e-31
> ✓			31Th	all	1.1154e-30	6.5072e-31
✓	201mBi	all	all	all	1.8293e-27	1.5343e-28
✓		846.4	all	all	1.8293e-27	1.5343e-28
> ✓			31Th	all	1.8293e-27	1.5343e-28

 Below the table are five buttons: 'Import data', 'Recalculate', 'Export to SAND-II', 'Save', and 'Quit'.

Obrázek 25: Okno pro kontrolu výstupních dat

6.1 Editor vstupu do SAND-II

Okno **Export settings** (na obr. 26) slouží pro vygenerování vstupního souboru pro program **SAND-II** [2].

Obrázek 26: Editor pro přípravu vstupního souboru do SAND-II

Pod prvním vstupem (**Name**) je název úlohy. Ten je následně využit softwarem SAND-II i při vytváření výstupních souborů.

Pro každý izotop, pro který byla vypočtena reakční rychlost, je vytvořeno jedno pole pro vstup, kam uživatel zadá označení názvu reakce, která vedla ke vzniku tohoto radionuklidu. Produkty reakcí jsou v zápisu reprezentované jedním znakem, například:

- (n, γ): G,
- (n, α): A,
- (n, p): P,
- (n, d): D,
- (n, n'): N,
- (n, 2n): 2.

Název musí korespondovat s názvy v knihovnách účinných průřezů, které slouží jako další vstup pro SAND-II.

Dále uživatel volí počáteční aproximaci spektra. Na výběr je ze tří možností - **Library**, ke které je třeba zadat pořadové číslo počáteční aproximace spektra v knihovně referenčních spekter, **Function**, ke které uživatel doplní číslo použité funkce, a nebo **Tabular**, které uživatel doplní informací o počtu energetických bodů. Pokud uživatel zvolí **Tabular**, je navíc nutné, aby následně doplnil do souboru příslušné hodnoty na místa označená textem **Please insert bins** (příklad vstupního souboru s doplněnými hodnotami je na Obr. 27).

Dále je třeba zadat limit počtu iterací (**Limit**), kritérium řešení (**Deviation**) a standardní odchylku (**Discard**).

Následují informace o tvaru extrapolací pro dolní část spektra - **Low End** - je na výběr doplnění vstupního spektra spektrem ve tvaru $1/E$ pro volbu **E**, \sqrt{E} pro volbu **SQRTE**, a nebo tepelného spektra pro volbu **THERMAL** (tato je navíc doplněna o informaci o teplotě).

To samé platí i pro horní část spektra - **High end** - kde je na výběr mezi volbou **Fission** pro štěpné spektrum nebo **Fusion** pro fúzní spektrum. Hodnota **Norm** pak udává normalizační energii v MeV. Poslední uživatelský vstup - **Smooth** - udává počet bodů použitých ve váhové vyhlazovací funkci.

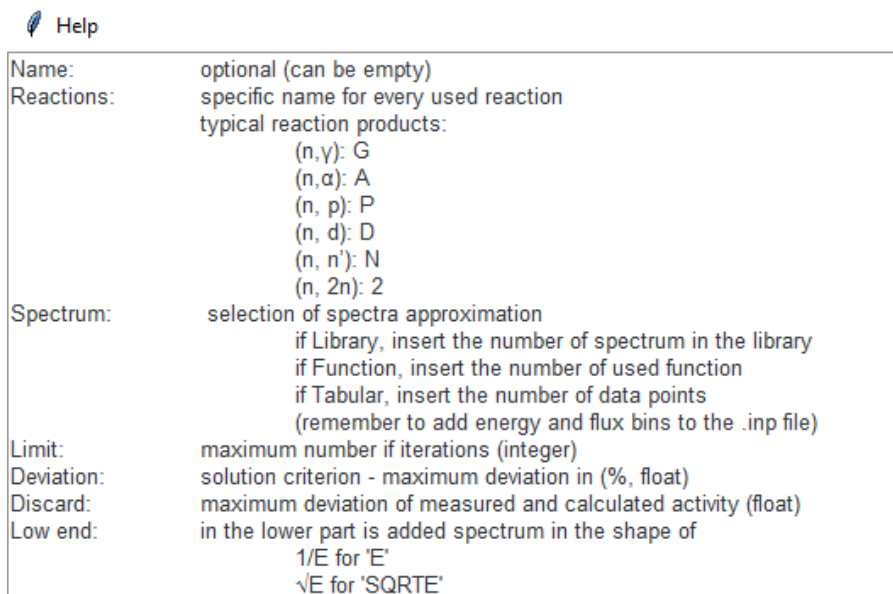
```

SPECTRUM TABULAR
106 POINTS
ENER 5.0E-09 1.5E-08 2.5E-08 3.5E-08 4.5E-08 5.5E-08 6.5E-08 7.5E-08 8.5E-08
ENER 9.5E-08
ENER 1.5E-07 2.5E-07 3.5E-07 4.5E-07 5.5E-07 6.5E-07 7.5E-07 8.5E-07 9.5E-07
ENER 1.5E-06 2.5E-06 3.5E-06 4.5E-06 5.5E-06 6.5E-06 7.5E-06 8.5E-06 9.5E-06
ENER 1.5E-05 2.5E-05 3.5E-05 4.5E-05 5.5E-05 6.5E-05 7.5E-05 8.5E-05 9.5E-05
ENER 1.5E-04 2.5E-04 3.5E-04 4.5E-04 5.5E-04 6.5E-04 7.5E-04 8.5E-04 9.5E-04
ENER 1.5E-03 2.5E-03 3.5E-03 4.5E-03 5.5E-03 6.5E-03 7.5E-03 8.5E-03 9.5E-03
ENER 1.5E-02 2.5E-02 3.5E-02 4.5E-02 5.5E-02 6.5E-02 7.5E-02 8.5E-02 9.5E-02
ENER 1.5E-01 2.5E-01 3.5E-01 4.5E-01 5.5E-01 6.5E-01 7.5E-01 8.5E-01 9.5E-01
ENER 1.1E+00 1.2E+00 1.3E+00 1.4E+00 1.5E+00 1.6E+00 1.7E+00 1.8E+00 1.9E+00
ENER 2.0E+00 2.1E+00 2.2E+00 2.3E+00 2.4E+00 2.5E+00 2.8E+00 3.5E+00 4.5E+00
ENER 5.5E+00 6.5E+00 7.5E+00 8.5E+00 9.5E+00 1.1E+01 1.2E+01 1.3E+01 1.4E+01
ENER 1.5E+01 1.6E+01 1.7E+01 1.8E+01 1.9E+01 2.0E+01
FLUX 1.59E+05 4.04E+05 5.05E+05 4.74E+05 4.58E+05 3.68E+05 3.16E+05 2.69E+05 2.29E+05
FLUX 1.83E+05 6.72E+04 1.97E+04 1.11E+04 8.58E+03 6.22E+03 6.15E+03 5.70E+03 4.48E+03
FLUX 3.51E+03 1.50E+03 1.53E+03 9.23E+02 7.85E+02 7.03E+02 5.04E+02 5.38E+02 3.99E+02
FLUX 3.81E+02 3.15E+02 1.78E+02 1.31E+02 9.73E+01 7.46E+01 7.20E+01 1.02E+02 5.82E+01
FLUX 4.17E+01 3.24E+01 1.67E+01 1.35E+01 9.45E+00 8.46E+00 7.21E+00 4.79E+00 5.56E+00
FLUX 5.57E+00 3.28E+00 1.91E+00 1.33E+00 9.81E-01 8.06E-01 9.08E-01 5.67E-01 6.39E-01
FLUX 6.27E-01 3.98E-01 2.60E-01 1.55E-01 1.38E-01 1.06E-01 1.21E-01 1.18E-01 8.45E-02
FLUX 5.98E-02 6.35E-02 4.45E-02 4.54E-02 3.12E-02 3.40E-02 2.90E-02 3.07E-02 2.50E-02
FLUX 2.01E-02 1.63E-02 1.70E-02 1.93E-02 1.69E-02 1.70E-02 1.46E-02 1.50E-02 1.29E-02
FLUX 1.38E-02 1.19E-02 9.87E-03 1.17E-02 1.10E-02 1.18E-02 1.05E-02 8.68E-03 4.51E-03
FLUX 2.49E-03 1.54E-03 6.59E-04 4.01E-04 1.48E-04 7.83E-05 3.13E-05 1.17E-05 6.17E-06
FLUX 1.75E-06 5.07E-06 9.69E-21 9.71E-21 9.72E-21 9.74E-21 9.75E-21

```

Obrázek 27: Vstupní soubor pro SAND-II s doplněnými hodnotami pro volbu Tabular

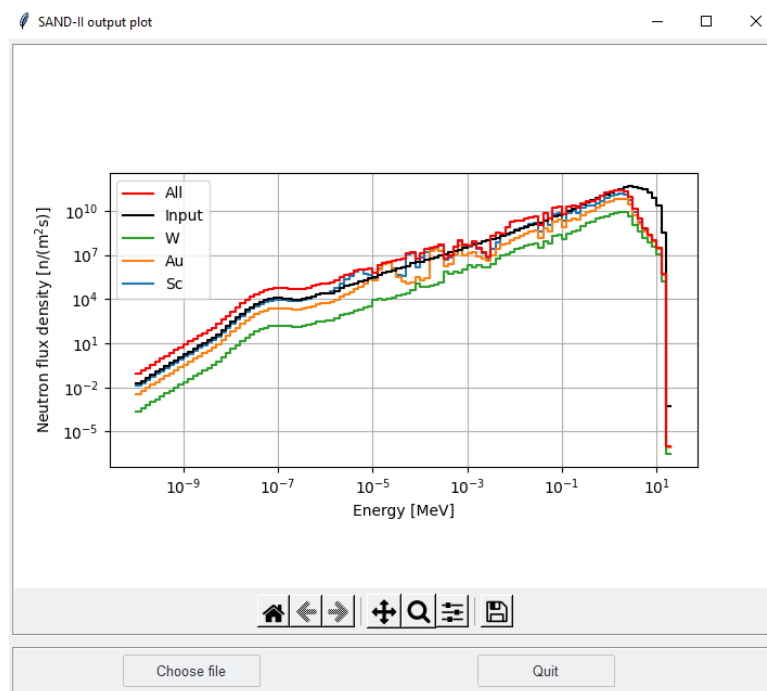
Výsledný výstup může uživatel zobrazit v pravé části okna kliknutím na tlačítko **View output**. Kliknutím na tlačítko **Save** se vygeneruje soubor s koncovkou `.inp`, sloužící jako vstup pro SAND-II. Tlačítko **Help** otevře okno s nápovědou k vyplnění jednotlivých vstupů 28.



Obrázek 28: Okno s nápovědou pro vytvoření vstupu pro SAND-II.

6.2 Grafické zobrazení výstupu

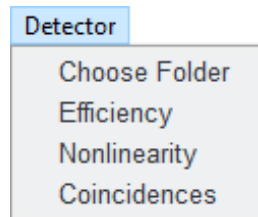
Program nabízí možnost vytvoření grafu na základě výstupních dat získaných ze SAND-II. To je možné pomocí volby **Show results**. Po otevření nového okna (Obr. 29) a kliknutí na tlačítko **Choose file** uživatel zvolí požadovaný výstupní soubor (jedná se o soubor s koncovkou `.txt`). Data jsou následně vynesena do grafu, který je možné stejně uživatelsky měnit, jako v případě okna pro výpočet reakčních rychlostí.



Obrázek 29: Okno pro vytvoření grafu z výstupu SAND-II

7 Doplnkové funkce

Program kromě výše popsaných funkcí umožňuje uživateli určit tzv. píkovou účinnost detektoru⁷, nelinearitu detektoru a vytvořit knihovny s korekcemi na koincidence.



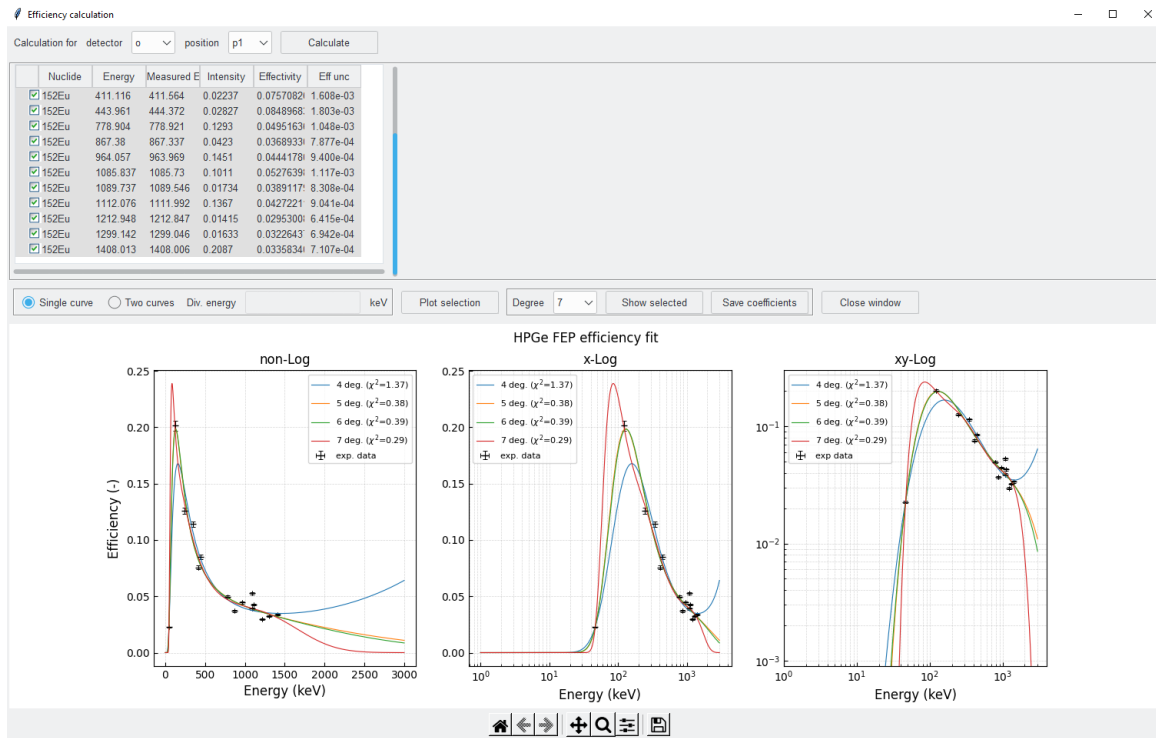
Obrázek 30: Uživatelská nabídka - sekce Detector

Pro výpočet účinnosti a nelinearity detektoru je nejprve nutné načíst složku se soubory obsahujícími jednotlivá data. To je, jak bylo předesláno v první kapitole, možné výběrem **Work directory** v menu **Main**. Název souboru má předepsaný formát ve tvaru:

- a152Eu1111_p1, kde
 - *a* je označení detektoru,
 - *152Eu* je název referenčního zářiče,
 - *1111* je identifikační označení zářiče, a
 - *p1* je pozice během měření.

7.1 Píková účinnost detektoru

Stanovení píkové účinnosti detektoru je možné při výběru **Efficiency**.



Obrázek 31: Okno pro výpočet píkové účinnosti detektoru

⁷anglické označení, resp. zkratka je FEP - Full Energy Peak

Uživatel nejprve v horní části okna (obr. 31) zvolí detektor a pozici, pro kterou bude účinnost vypočítána. Po kliknutí na tlačítko **Calculate** jsou provedeny výpočty.

Výsledná data jsou uspořádána do seznamu, který opět umožňuje výběr použitých hodnot pomocí zaškrtačacích políček. Dále je možné zvolit, zda budou data proložena jednou, nebo dvěma křivkami. V případě prokladu dvěma křivkami je třeba zadat i dělicí energii. Při výběru **Plot selection** se vykreslí závislost píkové účinnosti detektoru na energii, a to v lineárním, semilogaritmickém a logaritmickém zobrazení. Naměřená data jsou proložena křivkami, které lze popsat rovnicí

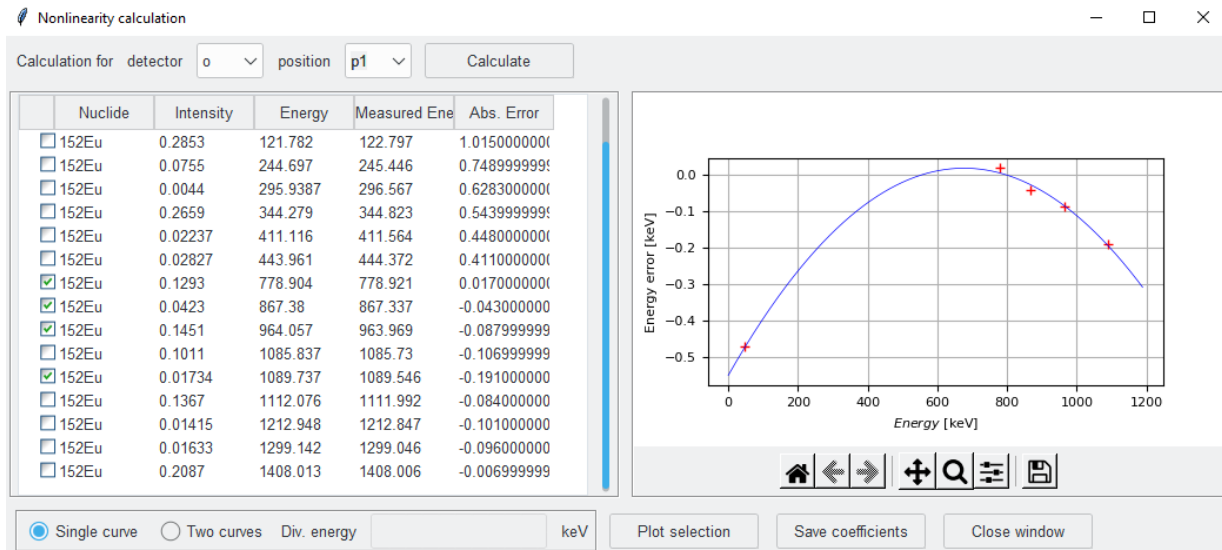
$$\epsilon(E) = \exp \sum_{i=0}^n a_i \cdot (\ln(E))^i \quad (1)$$

, kde $n = 4$ až 7 a pro každou funkci je určen redukovaný chí-kvadrát χ_{red}^2 . Lišta tlačítek ve spodní části okna umožňuje stejnou práci s rozložením grafů, jako v okně pro výpočet reakčních rychlostí.

Uživatel si následně zvolí stupeň polynomu (případně jejich dvojici), nejlépe odpovídající naměřeným datům. Zvolenou křivku je možné zobrazit kliknutím na tlačítko **Show selected**, tlačítkem **Save coefficients** jsou data přidána do knihovny `Efficiency.lib`.

7.2 Nelinearita detektoru

K výpočtu nelinearity detektoru slouží výběr **Nonlinearity**. Okno pro výpočet je na Obr. 32. Možnosti jsou stejné jako v případě výpočtu píkové účinnosti: uživatel zvolí detektor a pozici, pro kterou bude po stisknutí tlačítka **Calculate** proveden výpočet. Ze seznamu výsledků zvolí hodnoty, které budou zahrnuty do výpočtu.

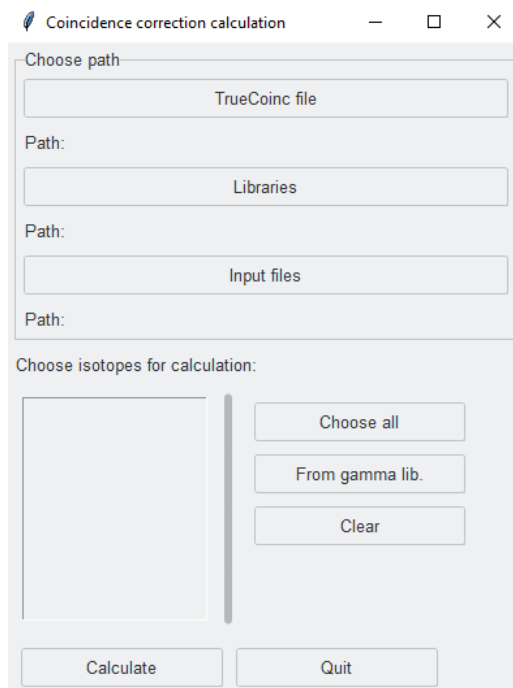


Obrázek 32: Okno pro výpočet nelinearity detektoru

Dále je možné zvolit, zda budou data proložena jednou nebo dvěma křivkami. V případě dvou křivek je třeba zadat dělicí energii. Graf se vykreslí pomocí tlačítka **Plot selection**. Koeficienty funkce prokladu je možné zobrazit pomocí tlačítka **Show coefficients**, tlačítko **Save coefficients** umožňuje přidání dat do knihovny `NonLin.lib`.

7.3 Koincidence

Volba **Coincidences** otevře okno (na Obr. 33), které slouží k přípravě knihoven pro korekci na koincidence. Podmínkou pro fungování je nainstalovaný program **TrueCoinc** [3].



Obrázek 33: Okno pro výpočet korekcí na koincidence

Tlačítko **TrueCoinc file** umožňuje zadání cesty k programu **TrueCoinc**, tlačítko **Libraries** zadání cesty k potřebným knihovnám. Ty jsou v základní složce uspořádány do podsložek podle hmotnostního čísla. Samotné knihovny tvoří soubory **.enx** pro jednotlivé izotopy a obsahují údaje potřebné pro výpočty programu **TrueCoinc**. Názvy souborů sestávají z písmene "p" a označení izotopu (např. **p014B.enx** pro ^{14}B). Na základě těchto souborů se vytvoří seznam dostupných izotopů, ze kterého si uživatel vybírá, pro které budou vypočítány korekce na koincidence.

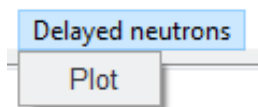
Tlačítko **Input files** slouží k načtení složky, ve které jsou umístěny **.tcd** soubory. Jedná se o export nastavení programu **TrueCoinc** obsahující informace o totální a píkové účinnosti detektoru v dané měřící geometrii. Názvy souborů tvoří označení detektoru a pozice (např. **A_P2.tcd** pro detektor A na pozici p2). Tyto soubory je nutné vytvořit před tím než se přistoupí k samotnému určování koincidenčních korekcí. Aktuálně je tato funkce dostupná pouze na OS **MS Windows**.

Okno pod touto skupinou tlačítek slouží k výběru izotopů, pro které budou počítány koincidence. Pomocí tlačítek vpravo je též možné zvolit všechny izotopy (**Choose all**), zvolit izotopy obsažené v knihovně s γ linkami (**From gamma lib.**), případně volbu smazat (**Clear**).

Kliknutí na tlačítko **Calculate** se spustí robot, jež ovládá program **TrueCoinc** a provede určení koincidenčních korekcí pro všechny radionuklidy ze seznamu. Výstupy jsou uloženy a z nich jsou následně vybrány korekce pro energie, jež se nacházejí v seznamech gama energií ve složce **libraries**. Tyto energie a jejich korekce jsou následně transformovány do formátu knihoven pro korekci na koincidence, popsáno v kapitole 4.6. Takto vygenerované knihovny jsou poté uloženy do složky **libraries**.

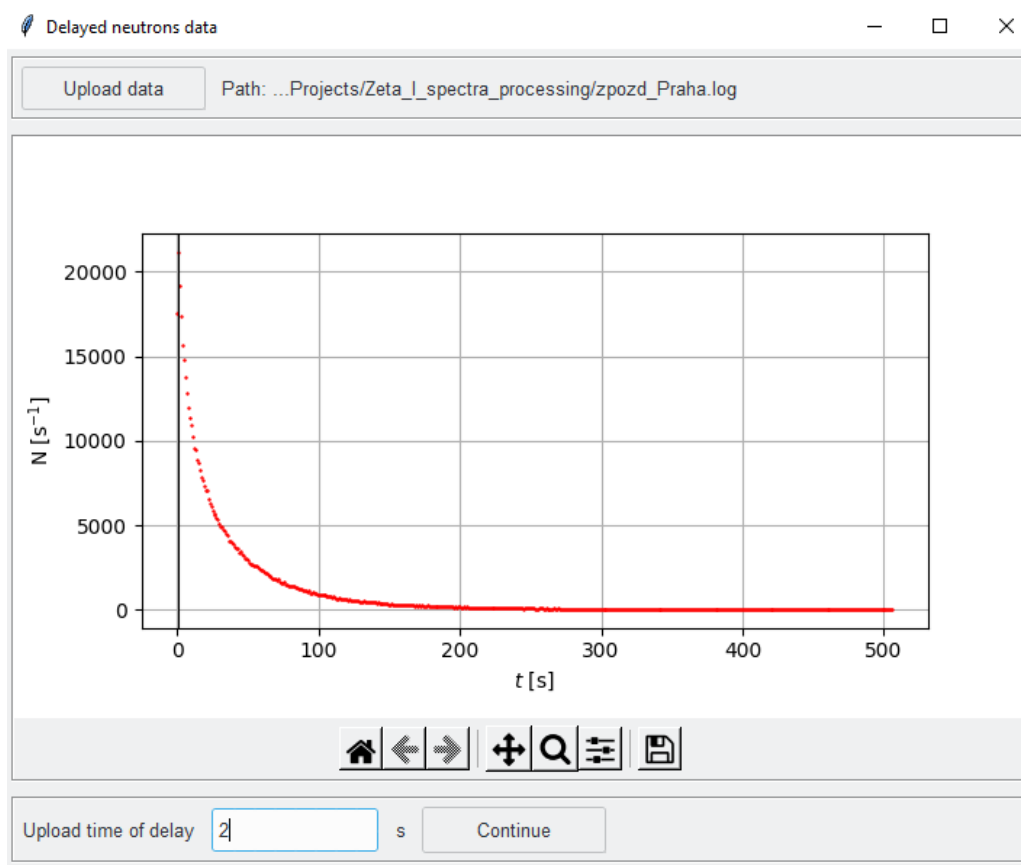
8 Zpožděné neutrony

Položka **Delayed neutrons** v menu (obr. 34 slouží k vykreslení dat z měření zpožděných neutronů, jejich proložení vhodnou křivkou a určení jejich parametrů.



Obrázek 34: Menu pro vykreslení dat z měření zpožděných neutronů.

Tlačítkem **Plot** uživatel otevře okno (obr. 35) pro načtení dat z měření zpožděných neutronů.



Obrázek 35: Okno pro nahrání naměřených dat.

Prvním krokem je načtení souboru s naměřenými daty ve formátu `.log`. Ukázka takového souboru je na Obr. 36. Software využívá časovou značku (datum a čas měření) a dále počet událostí za sekundu v příslušném čase.

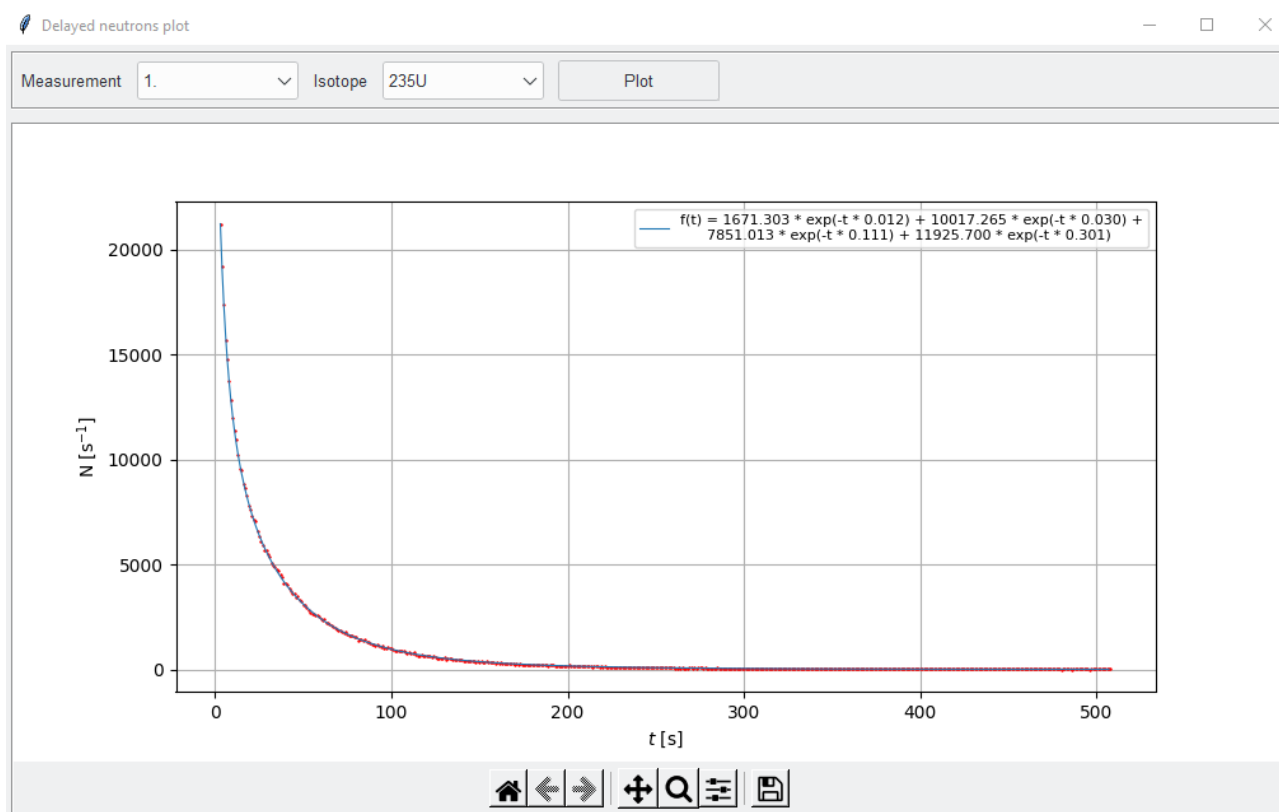
Po načtení software určí maximum z nahraných dat (případně maxima, pokud soubor obsahuje data z více měření) a toto maximum označí v grafu z naměřených dat (černá svislá příčka). Uživatel dále v poli **Upload time of delay** uvede v sekundách čas, který uběhl mezi koncem ozařování vzorku a začátkem měření.

Po výběru tlačítka **Continue** se otevře okno pro proklad naměřených dat (Obr. 37. Pokud původní soubor s daty obsahoval více měření, ve výběru **Measurement** uživatel zvolí, pro které z měření bude vypočtena fitovací funkce. Ve výběru **Isotope** pak uživatel vybírá izotop vzorku, pro nějž budou počítány parametry fitovací funkce. Samotný proklad je následně proveden

yy.mm.dd	hh:mm:ss	Value int.	Unit	Value ext.	Unit	Status
21.03.30	16:10:19	0.0000E+0	μSv/h	0.1561E+4	cps	00
21.03.30	16:10:20	0.0000E+0	μSv/h	0.1463E+4	cps	00
21.03.30	16:10:21	0.0000E+0	μSv/h	0.1242E+4	cps	00
21.03.30	16:10:22	0.0000E+0	μSv/h	0.1131E+4	cps	00
21.03.30	16:10:23	0.0000E+0	μSv/h	0.1004E+4	cps	00
21.03.30	16:10:24	0.0000E+0	μSv/h	0.8763E+3	cps	00
21.03.30	16:10:25	0.0000E+0	μSv/h	0.8325E+3	cps	00
21.03.30	16:10:26	0.0000E+0	μSv/h	0.7096E+3	cps	00
21.03.30	16:10:27	0.0000E+0	μSv/h	0.6914E+3	cps	00
21.03.30	16:10:28	0.0000E+0	μSv/h	0.6751E+3	cps	00
21.03.30	16:10:29	0.0000E+0	μSv/h	0.6098E+3	cps	00
21.03.30	16:10:30	0.0000E+0	μSv/h	0.6107E+3	cps	00
21.03.30	16:10:31	0.0000E+0	μSv/h	0.5712E+3	cps	00
21.03.30	16:10:32	0.0000E+0	μSv/h	0.5054E+3	cps	00
21.03.30	16:10:33	0.0000E+0	μSv/h	0.5091E+3	cps	00
21.03.30	16:10:34	0.0000E+0	μSv/h	0.5092E+3	cps	00
21.03.30	16:10:35	0.0000E+0	μSv/h	0.4950E+3	cps	00
21.03.30	16:10:36	0.0000E+0	μSv/h	0.4542E+3	cps	00
21.03.30	16:10:37	0.0000E+0	μSv/h	0.3902E+3	cps	00
21.03.30	16:10:38	0.0000E+0	μSv/h	0.3762E+3	cps	00
21.03.30	16:10:39	0.0000E+0	μSv/h	0.3801E+3	cps	00

Obrázek 36: Ukázka souboru obsahujícího naměřená data.

při výběru tlačítka **Plot**. Kromě naměřených dat a vypočtené funkce se v okně grafu vypíše i rovnice fitu.



Obrázek 37: Okno pro vykreslení dat z měření a jejich prokladu.

Závěr

Program popsany v předchozích kapitolách byl vyvinut za účelem optimalizace procesu vyhodnocování experimentálních dat v rámci tohoto projektu. Díky jednoduchému ovládní uživatelského prostředí je vyhodnocení dat podstatně méně časově náročné, než při využití standardních tabulkových procesorů a ručním zpracování dat. Grafické výstupy generované v průběhu zpracování navíc umožňují průběžnou kontrolu získaných výsledků. Další výhodou je vzájemná kompatibilita jednotlivých modulů a možnost doplnění knihoven vstupních dat přímo z uživatelského rozhraní. Díky tomu je možné udržovat knihovny aktuální i bez nutné znalosti jejich přesné struktury. To vše by mělo vést nejen ke zvýšení rychlosti zpracování experimentálních dat, ale i k omezení možných chyb.

Odkazy

- [1] J Frána. „Program DEIMOS32 for gamma-ray spectra evaluation“. In: *Journal of Radioanalytical and Nuclear Chemistry* 257.3 (2003), s. 583–587.
- [2] M Matzke. *Unfolding by least-squares methods: SAND-II, STAY'SL*. Tech. zpr. 1980.
- [3] S Sudár. „TrueCoinc'software utility for calculation of the true coincidence correction“. In: (2002).