

Algoritmo di Deconvoluzione del Theremino MCA

Marco Catalano

I cristalli di Ioduro di Sodio drogati con atomi di Tallio sono utilizzati da decenni come rivelatori di radiazioni, per alcune caratteristiche interessanti quali l'alto stopping power, una buona risoluzione in energia, il costo relativamente contenuto.

I rivelatori a scintillazione sono senza dubbio tra i più diffusi rivelatori di particelle usati oggi in fisica nucleare.

Essi comprendono un materiale scintillante accoppiato otticamente ad un fotomoltiplicatore. Quando la radiazione interagisce nello scintillatore causa emissione di luce da parte di quest'ultimo. La luce è trasmessa, attraverso il cristallo scintillatore al fotomoltiplicatore (dall'inglese: PM o PMT) dove è convertita in una debole corrente di fotoelettroni che viene poi ulteriormente amplificata. Il segnale in corrente così prodotto viene successivamente analizzato dall'elettronica di acquisizione.

Tra le principali caratteristiche che contraddistinguono un rivelatore ci sono la sua efficienza di rivelazione e la risoluzione energetica. La prima definisce il rapporto fra il numero di particelle incidenti sul rivelatore rispetto a quello per cui viene generato un segnale misurabile e dipende da diversi fattori (natura del rivelatore, geometria, tipologia della radiazione incidente, etc.)

La risoluzione energetica di un rivelatore rappresenta invece la capacità del rivelatore di distinguere tra valori di energia prossimi tra loro.

Infatti l'interazione della radiazione con la materia, a livello microscopico, è un fenomeno di tipo stocastico risulta pertanto inevitabile una dispersione delle eccitazioni e ionizzazioni nel mezzo: conseguentemente la risposta di un rivelatore ad una radiazione monocromatica, piuttosto che corrispondere ad una riga stretta o più correttamente una funzione delta di Dirac, assume una forma gaussiana o poissoniana, con larghezza dipendente, a parità di radiazione, dal tipo di rivelatore.

Convenzionalmente si definisce risoluzione energetica il rapporto tra la FWHM (Full Width at Half Maximum) del picco, cioè la larghezza della distribuzione spettrale in corrispondenza di metà della massima ordinata, e il valore energetico centrale, E_m . Quindi la risoluzione è data come una grandezza adimensionale, normalmente espressa in percentuale, ossia:

$$R = \frac{FWHM}{E_m} \cdot 100 = \frac{235 \cdot \sigma}{E_m}$$

Da cui si vede la relazione esistente tra FWHM e la deviazione standard (σ) della distribuzione Gaussiana.

I rivelatori al germanio iperpuro possono raggiungere una risoluzione inferiore all' 1%, mentre gli scintillatori usati per la spettrometria γ hanno normalmente una risoluzione del 7÷20%.

Tra gli scintillatori i più usati ricordiamo NaI(Tl), CsI(Tl), KI(Tl), LiI(Eu) e il CsF₂. Fra i materiali non alcalini ricordiamo soprattutto il Bi₄Ge₃O₁₂ (ossigermanato di Bismuto, noto brevemente come BGO), il BaF₂, il ZnS(Ag). In questi cristalli il passaggio di una radiazione ionizzante può provocare il passaggio di un elettrone dalla banda di valenza alla banda di conduzione per poi ritornare nella banda di valenza con emissione luminosa. Poiché i PMT rispondono meglio quando sono interessati da radiazioni nella regione visibile (e molto meno nell'UV) ed essendo i cristalli trasparenti in questa zona dello spettro, per aumentare la probabilità di emissione di fotoni ottici durante il meccanismo di diseccitazione, la struttura delle bande viene modificata mediante l'introduzione di apposite impurezze, cioè atomi di sostanze opportune, dette droganti ed indicate in parentesi tonda accanto la formula del materiale scintillante. Gli scintillatori inorganici, rispetto a quelli organici, a parità di energia depositata dalla radiazione incidente emettono molta più luce (quasi un ordine di grandezza) inoltre il loro relativamente alto numero atomico che li rende molto più efficienti.

Algoritmo di Deconvoluzione del Theremino MCA

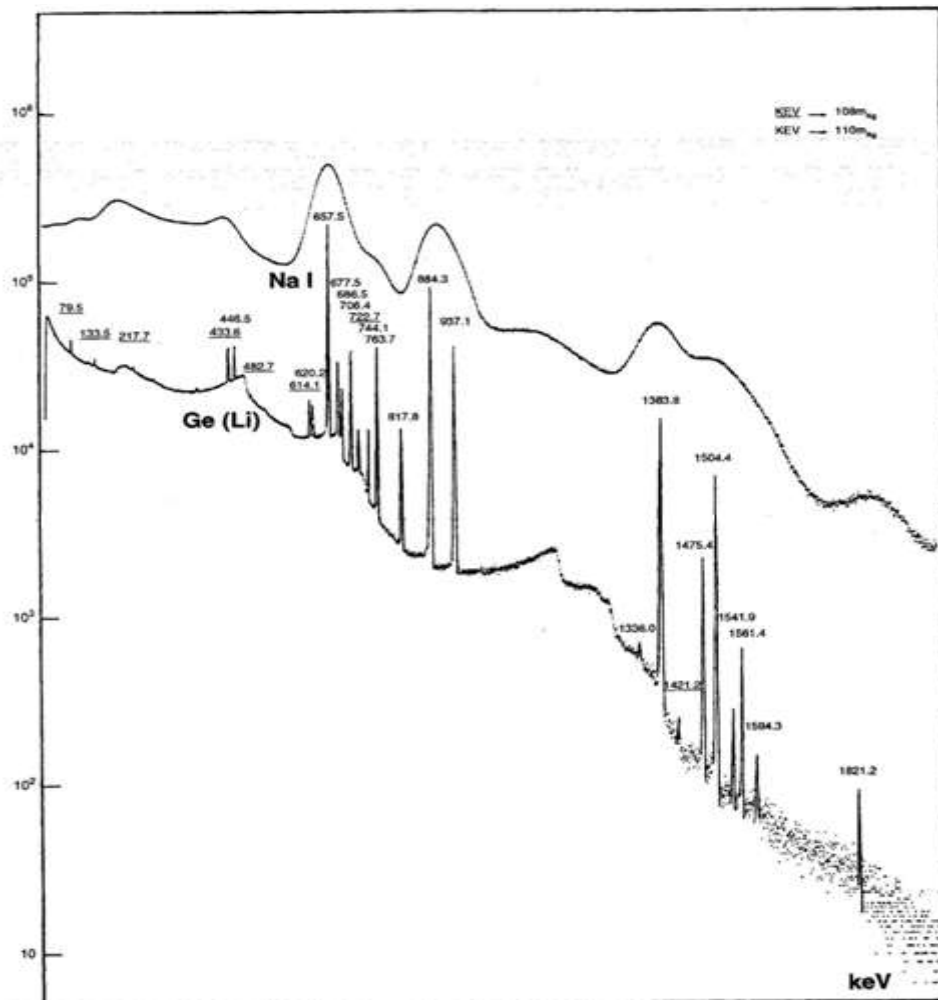
Marco Catalano

Come già enunciato ogni misura è il frutto di una dispersione degli impulsi prodotti nello scintillatore cui si aggiungono altri errori di tipo statistico o sistematico come le fluttuazioni dovute al rumore della catena elettronica, il rumore intrinseco del rivelatore, etc.

Tutti questi elementi causano un allargamento dei picchi, che assumono un andamento di tipo gaussiano.

L'allargamento dei picchi rende più probabile la sovrapposizione degli stessi con conseguente difficoltà di riconoscimento delle energie dei fotoni gamma che le hanno generate ed inoltre con la complicazione derivante dal dover discriminare i conteggi associati a più decadimenti "interferenti". Per questo motivo, a scopo analitico, si predilige l'impiego dei detector a semiconduttore come il GeHP operati alla temperatura dell'azoto liquido che garantiscono l'ottenimento di picchi sottili (FWHM di circa 1 %) rispetto ai molto più economici e facili da gestire (non richiedono l'impiego dell'azoto liquido) detector a scintillazione. Di seguito è messo a confronto il comportamento dei due tipi di rivelatore:

2



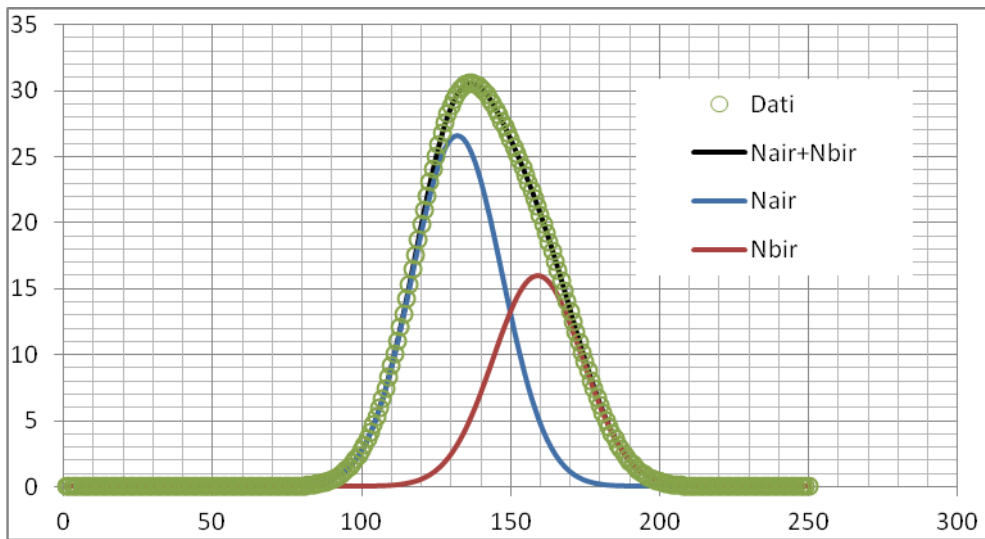
Come si vede l'analisi di uno spettro gamma ottenuto con uno scintillatore potrebbe risultare difficile o addirittura impossibile da interpretare. Di seguito si propone un metodo di deconvoluzione dei dati sperimentali capace di ricostruire la forma gaussiana dei fotopicchi di uno spettro gamma rendendolo adatto ad una interpretazione qualitativa e quantitativa.

Algoritmo di Deconvoluzione del Theremino MCA

Marco Catalano

Qualcuno pensa che le tecniche di deconvoluzione non possano aggiungere nulla ai dati grezzi e "ciò che si è sottratto è ormai perso e non si può ricreare". Ma quando si conoscono alcune caratteristiche del sistema oggetto di studio come i possibili radioisotopi all'origine dello spettro emissivo osservato nonché la larghezza associata ai singoli fotopicchi in funzione dell'energia è possibile "ricreare" la parti mancanti "aggiungendo" le conoscenze che abbiamo per ottenere un effettivo e reale miglioramento della qualità dei dati.

Il grafico sottostante mostra un semplice esempio in cui i dati sperimentali nascondono due righe emissive di cui la seconda (più a destra) mascherata dalla prima. La tecnica di deconvoluzione gaussiana qui proposta consente la risoluzione dei due picchi originali la cui somma, come si vede, si sovrappone perfettamente ai dati.



Vediamone lo sviluppo usando gli indici i e j col seguente significato:

i: indice riferito al bin;

j: indice riferito alla riga energetica.

In generale il numero di conteggi relativi al bin i-esimo sarà dato dalla somma di tutti i contributi dei radionuclidi con emissione gamma dei quali i predominanti saranno quelli caratterizzati da righe emissive vicinali ad i mentre saranno trascurabili i contributi di quei radionuclidi con energie di emissione molto distanti da i:

$$N_i = \sum_j N_j f_{i,j}$$

dove

$$f_{i,j} = \frac{1}{\sqrt{2 \cdot \pi \cdot \sigma^2}} e^{-\frac{(E_i - E_j)^2}{2 \cdot \sigma^2}}$$

con E_i ad indicare l'energia associata al bin i-esimo ed E_j l'energia del bin cui corrisponde quella della riga emissiva j

Il numero di conteggi nei bin 1, 2, 3, ...etc, scelti ad esempio fra quelli a cui si associano le energie delle righe alla base dell'involuppo, consentono di costruire il seguente sistema lineare di equazioni:

Algoritmo di Deconvoluzione del Theremino MCA

Marco Catalano

$$\begin{aligned} N_1 &= \bar{N}_1 \cdot f_{1,1} + \bar{N}_2 \cdot f_{1,2} + \bar{N}_3 \cdot f_{1,3} + \dots \\ N_2 &= \bar{N}_1 \cdot f_{2,1} + \bar{N}_2 \cdot f_{2,2} + \bar{N}_3 \cdot f_{2,3} + \dots \\ N_3 &= \bar{N}_1 \cdot f_{3,1} + \bar{N}_2 \cdot f_{3,2} + \bar{N}_3 \cdot f_{3,3} + \dots \\ &\vdots \end{aligned}$$

La cui soluzione consente di ricavare i termini \bar{N}_j che esprimono il numero totale di conteggi di energia E_j che nel caso di un radionuclide con una sola riga (e probabilità unitaria) di emissione gamma corrisponde alla concentrazione (o all'attività) del radionuclide j .

Impiegando il metodo di Cramer si ottengono le soluzioni seguenti:

$$\bar{N}_j = \frac{\det A_j}{\det A}$$

dove A è la matrice dei coefficienti:

$$A = \begin{vmatrix} f_{1,1} & f_{1,2} & f_{1,3} & \dots \\ f_{2,1} & f_{2,2} & f_{2,3} & \dots \\ f_{3,1} & f_{3,2} & f_{3,3} & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{vmatrix}$$

mentre A_j è la matrice A in cui la colonna j -esima è stata sostituita col vettore dei termini noti:

Es.

$$\begin{aligned} A_1 &= \begin{vmatrix} \bar{N}_1 & f_{1,2} & f_{1,3} & \dots \\ \bar{N}_2 & f_{2,2} & f_{2,3} & \dots \\ \bar{N}_3 & f_{3,2} & f_{3,3} & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{vmatrix} \\ A_2 &= \begin{vmatrix} f_{1,1} & \bar{N}_1 & f_{1,3} & \dots \\ f_{2,1} & \bar{N}_2 & f_{2,3} & \dots \\ f_{3,1} & \bar{N}_3 & f_{3,3} & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{vmatrix} \end{aligned}$$

e così via.

A questo punto, noto il numero totale di conteggi relativi a ciascuna riga di emissione, si può decidere di ottenere una più conveniente visualizzazione dello spettro utilizzando dei picchi stretti quanto si vuole ridistribuendo i conteggi \bar{N}_j in una curva gaussiana di cui si è scelto a piacimento il relativo sigma. Lo spettro deconvoluto risultante sarà dato dalla somma dei contributi N_i , cioè

$$N = \sum_i \sum_j N_{i,j} g_{i,j}$$

dove

$$g_{i,j} = \frac{1}{\sqrt{2 \cdot \pi \cdot \sigma_c^2}} e^{-\frac{(E_i - E_j)^2}{2 \cdot \sigma_c^2}}$$

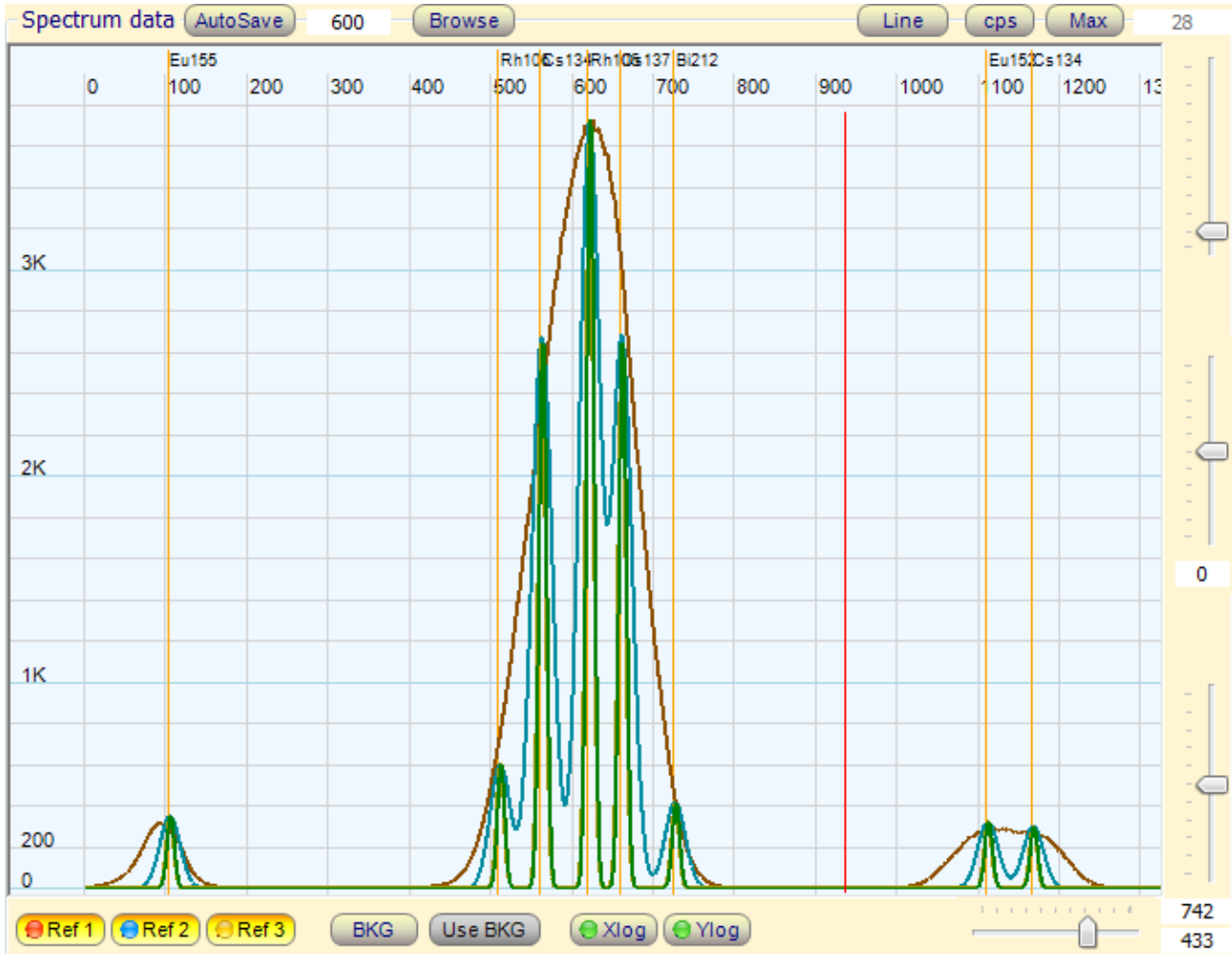
in cui σ_c è la larghezza della nuova distribuzione gaussiana, N è il numero totale di conteggi su tutto lo spettro ed $N_{i,j}$ è il numero di conteggi captati dal bin i -esimo prodotti dall'emissione di energia E_j .

Algoritmo di Deconvoluzione del Theremino MCA

Marco Catalano

Si può notare che quanto più σ_c tende al valore di σ tanto più la curva de convoluta tenderà a riassumere la forma dello spettro di partenza.

Di seguito è mostrato l'effetto dell'algoritmo impostando una larghezza fissa dei picchi all'origine dell'involuppo ($\sigma=20$ Kev) ed una larghezza via via decrescente dei picchi ricostruiti ($\sigma_c = 25, \sigma_c = 12, \sigma_c = 4$).



Il metodo di deconvoluzione sopra illustrato potrebbe prestarsi ancora meglio (data la migliore approssimazione associata all'impiego della funzione gaussiana) in tutti quei casi in cui si debbano risolvere picchi cromatografici sovrapposti.