

МЕТОДИКА ПАСПОРТИЗАЦІЇ ДОЗИМЕТРИЧНИХ МАТЕРІАЛІВ: ПРОГРАМНІ ПАКЕТИ LUMINI TA COMMON

О. М. Поп¹, В. Т. Маслюк^{1,2}, П. В. Яворський^{1,2}, В. С. Кузнецов²

¹*Інститут електронної фізики НАН України, Ужгород, Україна*

²*ДВНЗ «Ужгородський національний університет», Ужгород, Україна*

Відомо, що дозиметрія іонізуючого випромінювання із використанням твердотільних матеріалів базується на процесах накопичення носіїв заряду на пастках електронного чи діркового типу. Інформацію про величину запасеної енергії отримують за спектрами випромінювання, стимульованого нагрівом (термостимульована люмінесценція) чи оптичним опроміненням (оптично стимульована люмінесценція). Ефективність дозиметричних матеріалів визначається параметрами пасток захоплення, зокрема енергією активації та частотними факторами, які характеризують чутливість фіксації та тривалентність зберігання поглинутої дози та кінетику її релаксації. На практиці ці параметри формуються в широкозонних оптичних матеріалах шляхом спеціального легування, яке забезпечує набір локальних рівнів у забороненій зоні, що служать рівнями пасток та рекомбінації носіїв заряду. Основна задача твердотільної дозиметрії полягає у встановленні оптимального набору енергетичних та кінетичних параметрів матеріалу, які забезпечують ефективність фіксації поглинутої дози. Така задача не є простою, враховуючи великий вибір оптичних матеріалів для дозиметричних досліджень (LiF, Li₂B₄O₇, MgB₄O₇, BeO) та різних схем їх легування. Відсутні також усталені критерії вибору енергій рівнів пасток чи анігіляційних рівнів, а також факторів, що визначають кінетику люмінесценції. Наявність таких критеріїв важлива для розробки практичних рекомендацій щодо отримання дозиметрів. Першим кроком вирішення цих завдань є формування баз даних щодо енергетичних/кінетичних констант шляхом паспортизації наявних дозиметричних матеріалів, використовуючи модельні представлення про характер перебігу в них люмінесцентних явищ.

Паспортизація дозиметричних матеріалів є ключовим етапом їх кваліфікації, що передбачає кількісну оцінку властивостей, необхідних для стабільного, відтворюваного та лінійного дозового відгуку. Такі дані можна отримати шляхом дослідження термолюмінесцентних характеристик опромінених дозиметричних зразків та їх інтерпретації на основі теоретичних моделей, що описують кінетику перетворення захоплених носіїв заряду при зміні температури. Експериментальною основою дослідження є аналіз кривих термостимульованої люмінесценції опромінених зразків. Порівняльний аналіз експериментальних кривих із теоретичними моделями дозволяє визначити порядок кінетики для кожного піка, а також оцінити енергію активації та частотний фактор. На основі температурного положення максимумів та форми піків, а також декомпозиції складних ТСЛ-кривих на елементарні компоненти визначаються параметри пасток за допомогою методу початкового зростання інтенсивності (initial rise), методу Чена або аналізу форми піка. Отримана енергія активації характеризує глибину пастки та визначає термічну стабільність накопиченого сигналу. Частотний фактор відображає ймовірність вивільнення носія заряду з пастки та пов'язаний із кінетикою процесу термолюмінесценції. Аналіз цих параметрів дозволяє класифікувати пастки за ступенем стабільності, прогнозувати фейдинг сигналу при зберіганні інформації про поглинуту дозу та встановлювати оптимальні режими зчитування. Зіставлення цих параметрів для різних матеріалів або умов опромінення дозволяє встановити фізичну природу дефектних центрів та визначити оптимальні режими термообробки і зчитування.

Паспортизація передбачає формування повного профілю матеріалу, що включає визначення наступних параметрів:

- типи й глибини пасток зарядів,
- ефективність рекомбінаційних центрів,
- позиція та форма ТСЛ/ОСЛ піків,
- енергетичні рівні домішок,
- температурна та дозова стабільність сигналу,
- ефекти затухання та затримки сигналу,
- поведінка матеріалу при повторному опроміненні (відновлюваність).

Такі дані можна отримати в рамках моделі OTOR (One Trap One Recombination), яка дає основу для паспортизації дозиметричних матеріалів. Існує два підходи для вирішення цієї задачі: у першому із них використовуються різного роду наближення аналізу кінетики люмінесценції для OTOR, та інший, який дозволяє її ab initio

інтерпретацію на основі скейлінг-перетворення [1]. Перший модельний підхід дозволяє встановити тип/порядок кінетики, що є важливим для коректного визначення параметрів пасток та інтерпретації механізмів релаксації запасеної енергії через інтенсивність люмінесценції, I :

$$I(T) = n^b s \exp\left(-\frac{E}{kT}\right) \quad (1)$$

де E – енергія активації, s – частотний фактор, b – порядок кінетики ($1 \leq b \leq 2$), n – концентрація заповнених пасток, k – стала Больцмана, T – абсолютна температура. Параметр b характеризує ступінь повторного захоплення носіїв: при $b = 1$ реалізується кінетика першого порядку, при $b = 2$ – другого порядку, тоді як проміжні значення відображають змішані механізми рекомбінації. Отже, визначення порядку кінетики термолюмінесценції відображає механізми рекомбінації та повторного захоплення носіїв і суттєво впливає на форму кривих світіння та стабільність дозиметричного сигналу. Використання узагальненої моделі дозволяє адекватно описувати реальні ТСЛ-криві складних матеріалів.

Інший підхід [1] застосовує процедуру скейлінгу, яка дає можливість використати апробовані методики розв'язання диференціальних рівнянь із достатньою точністю. Цей пакет представляє результати першопринципних розрахунків люмінесцентних характеристик дозиметричних матеріалів без обмежень на значення параметрів моделі, які описують кінетику збудження електрон-діркової системи дозиметричних матеріалів, ступеню заповнення пасток носіїв заряду, переходів рівень-зона, а також їх рекомбінацію. Ці підходи можуть бути застосовані для задач паспортизації дозиметричних матеріалів. Їх використання потребує розробку програмних пакетів, які дозволяють обробляти експериментальні спектри термолюмінесценції таких матеріалів.

В даній роботі представлено результати розробки програмних пакетів Commoni та Lumini [1], які дозволяють встановлювати енергетичні та кінетичні параметри дозиметричних матеріалів шляхом фіксації та обробки їх експериментальних спектрів ТСЛ. Для теоретичної їх інтерпретації використано модель OTO. Пакет Commoni орієнтований на фіксацію параметра кінетики люмінесценції (1), а також енергії пастки та частотного фактора «пастка-зона провідності». Пакет Lumini [1] дає більший вибір знаходження частотних факторів: «пастка-зона провідності», «зона провідності-пастка», «зона провідності-рівень рекомбінації». Обговорюються алгоритми роботи пакетів Commoni та Lumini, вибір наборів ідентифікаційних показників дозиметричних матеріалів; методики їх знаходження із експериментальних даних (деконволюції, ab initio розрахунку із залученням методів ШІ, оцінці критерію FOM (Figure of Merit). Показано, що знаходження ідентифікаційних показників дозиметричних матеріалів вирішується в класі задач оптимізації багатопараметричних систем щодо знаходження глобального екстремуму критерію FOM.

Приведено перші результати паспортизації дозиметричних матеріалів на основі легованих LiF, Al₂O₃, Li₂V₄O₇ на базі дозиметричних експериментів на мікротроні М-30 відділу фотоядерних процесів ІЕФ НАН України. Показано, що інтеграція оптимізаційних підходів і інструментів ШІ створює підґрунтя для побудови інтелектуальних систем аналізу та верифікації складу та схеми дозиметричних матеріалів, що є необхідною умовою цілеспрямованого синтезу нових люмінофорів та розвитку високотехнологічної дозиметрії у сучасних умовах.

Паспортизація кінетичних параметрів із застосуванням програмних пакетів дає змогу ідентифікувати домінуючі механізми рекомбінації, оцінити ступінь повторного захоплення носіїв, прогнозувати стабільність сигналу, підвищувати достовірність їх калібрування.

Таким чином, результатом паспортизації є формування сукупності параметрів, що визначають область ефективного застосування дозиметричного матеріалу та дозволяють проводити його калібрування для практичного використання у радіаційному контролі.