

KfK 3710
Juli 1984

Ein Programm zur Berechnung der Ansprechwahrscheinlichkeit eines 4π -Szintillationszählers

G. Schatz, J. Oehlschläger
Institut für Kernphysik

Kernforschungszentrum Karlsruhe

KERNFORSCHUNGSZENTRUM KARLSRUHE

Institut für Kernphysik

KfK 3710

Ein Programm zur Berechnung der
Ansprechwahrscheinlichkeit
eines 4π -Szintillationszählers

G. Schatz und J. Oehlschläger

Kernforschungszentrum Karlsruhe GmbH, Karlsruhe

Als Manuskript vervielfältigt
Für diesen Bericht behalten wir uns alle Rechte vor

Kernforschungszentrum Karlsruhe GmbH
ISSN 0303-4003

Zusammenfassung:

Es werden ein Rechenverfahren und ein FORTRAN-Programm beschrieben, die es gestatten, die Ansprechwahrscheinlichkeit eines 4π -Szintillationszählers für γ -Strahlung zu berechnen. Der Detektor hat die Form einer Hohlkugel mit der Strahlungsquelle im Mittelpunkt. Das Programm berechnet die Verteilung der an den Zähler abgegebenen Energie für die Szintillatormaterialien Wismutgermanat oder Bariumfluorid.

Abstract:

A Program to Calculate the Efficiency of a 4π Scintillation Detector

A FORTRAN program is described which allows to calculate the efficiency of a 4π scintillation detector for γ rays. The detector has the shape of a hollow sphere with the γ ray source at the centre. The program calculates the distribution of the energy deposited in the scintillator for the materials bismuth germanate or barium fluoride.

Inhaltsverzeichnis

Zusammenfassung, Abstract

Inhaltsverzeichnis

1. Einleitung	1
2. Wirkungsquerschnitte für die Wechselwirkung von Photonen mit BGO und BaF ₂	2
2.1 Compton-Effekt	3
2.2 Photo-Effekt	4
2.3 Paarbildung	6
2.4 Lineare Schwächungskoeffizienten für BaF ₂ .	9
3. Der Rechengang bei der Berechnung der Ansprechwahrscheinlichkeit	9
3.1 Die primäre Wechselwirkung	11
3.2 Die sekundäre Wechselwirkung nach Compton-Effekt	11
3.3 Das Energieverlustspektrum nach zweifachem Compton-Effekt	15
3.4 Die dritte Wechselwirkung nach zweifachem Compton-Effekt	18
3.5 Die Absorption der Vernichtungs-Quanten nach primärer Paarbildung	24
3.6 Konstruktion des Impulshöhenspektrums . . .	28

4. Beschreibung des Programmablaufs	32
4.1 Das Hauptprogramm	32
4.2 Die Unterprogramme	34
4.3 Eingabe	34
4.4 Ausgabe	34
5. Exemplarische Ergebnisse	36
Literaturverzeichnis	40
Anhang	
A. Berechnung der Funktion $T(R, \theta)$	41
B. Geometrische Verhältnisse bei doppelter Compton-Streuung	43
C. Einfluß der Polarisation bei der doppelten Compton-Streuung	44
D. Abdruck des Hauptprogramms	48
Abdruck der Unterprogramme	59
E. Ausgabe eines Rechenbeispiels	64

1. Einleitung

In diesem Bericht wird ein FORTRAN-Programm beschrieben, das es gestattet, die Ansprechwahrscheinlichkeit eines 4π -Szintillationszählers zu berechnen. Es wurde entwickelt und benutzt, um die Dimensionen eines derartigen Detektors festzulegen, der z.Z. im Bau ist und der zur Messung von Einfangquerschnitten für Neutronen im keV-Bereich benutzt werden soll. Derartige Messungen werden seit mehreren Jahren in unserem Institut ausgeführt, um Fragen der Elemententstehung in Sternen zu klären. Die physikalische Motivation ist an anderer Stelle ausführlich dargestellt ¹⁾ und soll daher hier nicht wiederholt werden.

Bei Messungen von Neutroneneinfang-Querschnitten trifft ein kollimierter Neutronenstrahl auf ein dünnes Target. Bei einem Einfangprozeß wird die Bindungsenergie zusammen mit der kinetischen Energie des Neutrons in Form von Gammastrahlung abgegeben. Auch bei fester Einschußenergie können dabei sehr unterschiedliche Gamma-Kaskaden emittiert werden, denen nur die Gesamt-Energie von etwa 5 bis 8 MeV gemeinsam ist. Zur Abtrennung von Untergrund-Ereignissen ist es daher das Ideale, das Target mit einem Gamma-Detektor zu umgeben, der den vollen Raumwinkel ausfüllt, und die Energien aller einzelnen Gamma-Quanten aufzusummieren. Das teure Szintillatormaterial wird dabei am besten ausgenutzt, wenn der Detektor die Form einer Hohlkugel mit dem Target im Zentrum hat. Innen- und Außenradius dieser Hohlkugel bestimmen die Ansprechwahrscheinlichkeit eines derartigen Detektors. Da das Szintillatormaterial bei einer derartigen Anordnung den bei weitem größten Kostenfaktor darstellt, ist es wichtig, vor der Realisierung die Abhängigkeit der Ansprechwahrscheinlichkeit vom Innen- und Außenradius der Hohlkugel zu bestimmen. Zu diesem Zweck diente das hier beschriebene Programm.

Das Programm berechnet für ein Gamma-Quant der Energie E_0 , das vom Zentrum der Hohlkugel ausgeht, den Bruchteil der Energie, der an den Szintillator abgegeben wird. Da ein Teil der Energie als Comptonstreu- oder Vernichtungs-Quanten aus dem Szintillator hinauslaufen kann, ergibt sich für die abgegebene Energie im allgemeinen ein kontinuierliches Spektrum. Da die Gesamtenergie der Gamma-Kaskade 5 - 8 MeV beträgt und man bei der Messung zur Diskriminierung

des Untergrundes eine Energieschwelle vermutlich im Bereich von 2 bis 3 MeV setzen wird, war es vor allem wichtig, das Spektrum terhalb von 3 MeV richtig wiederzugeben. Die Form des Spektrums oberhalb dieser Schwelle ist demgegenüber weniger interessant, da diese Ereignisse in jedem Fall erfaßt werden.

Im Abschnitt 2 werden zunächst für die Wirkungsquerschnitte der Wechselwirkung von Gamma-Quanten mit den beiden betrachteten Szintillatormaterialien, Wismut-Germanat (BGO) und Barium-Fluorid, analytische Näherungs-Ausdrücke hergeleitet. Im Abschnitt 3 werden der weitgehend analytische Rechengang dargelegt und die benutzten Formeln hergeleitet. Abschnitt 4 erläutert das im Anhang wiedergegebene Programm. In Abschnitt 5 wird an zwei Beispielen das Ergebnis der Rechnung beschrieben und kommentiert

Das Programm wurde nicht in einem Zuge geschrieben, sondern stufenweise aufgebaut. Dabei ergab sich verständlicherweise, daß sich die ursprünglich gewählte Nomenklatur bei der Erweiterung des Programmes als nicht unbedingt zweckmäßig herausstellte. Dies erleichtert das Verständnis des Programms vermutlich nicht. Es wurde trotzdem davon abgesehen, dies nachträglich zu ändern, teils wegen des damit verbundenen Arbeitsaufwandes, teils auch wegen der wohl unvermeidlichen Fehlermöglichkeiten. Bei der Beschreibung des Rechenprogramms in Abschnitt 3 wurde demgegenüber eine durchgängige und (hoffentlich) leicht verständliche Nomenklatur gewählt. Sie stimmt deshalb mit der im Programm gewählten nicht immer überein. Darauf wird in Abschnitt 4 im einzelnen hingewiesen.

2. Wirkungsquerschnitte für die Wechselwirkung von Photonen mit BGO und BaF₂

Im betrachteten Energiebereich können Photonen über Compton-Effekt, Photo-Effekt und Paarbildung mit Materie in Wechselwirkung treten. Diese Querschnitte werden im folgenden konsequent durch den linearen Schwächungskoeffizienten für den jeweiligen Prozeß ausgedrückt. Die benutzten Formeln wurden im wesentlichen dem Übersichts-Artikel von Davisson ²⁾ entnommen.

BGO hat die Dichte 7,13 [g/cm³]. Seine chemische Zusammensetzung entspricht der Summenformel Bi₄Ge₃O₁₂. Daraus ergeben sich für die drei beteiligten Elemente die folgenden partiellen Dichten:

$$\rho_{\text{Bi}} = 4,78 \text{ [g/cm}^3\text{]} = 0,0229 \text{ [Mol/cm}^3\text{]}$$

$$\rho_{\text{Ge}} = 1,25 \text{ [g/cm}^3\text{]} = 0,0172 \text{ [Mol/cm}^3\text{]}$$

$$\rho_{\text{O}} = 1,10 \text{ [g/cm}^3\text{]} = 0,0687 \text{ [Mol/cm}^3\text{]}$$

2.1 Compton-Effekt

Aus der angegebenen Dichte und chemischen Zusammensetzung ergibt sich für BGO eine Elektronendichte von $n = 1,81 \cdot 10^{24}$ [cm⁻³]. Multipliziert man dies mit dem Wirkungsquerschnitt für Compton-Streuung an einem freien Elektron, so erhält man den partiellen Schwächungs-Koeffizienten τ_{C} für Compton-Streuung:

$$\tau_{\text{C}} = 0,9032 \left[\frac{\alpha^2 - 2\alpha - 2}{2\alpha^3} \ln(1+2\alpha) - \frac{1+3\alpha}{(1+2\alpha)^2} + \frac{2(1+\alpha)^2}{\alpha^2(1+2\alpha)} \right] \text{ [cm}^{-1}\text{]} \quad (1)$$

Dabei ist $\alpha = E_0/(mc^2)$ und m die Ruhemasse des Elektrons.

Da die Bindungsenergie der K-Elektronen im Wismut etwa 90 keV beträgt, ist dies nur für Energien oberhalb etwa 1 MeV eine gute Näherung. Durch die Berücksichtigung von Bindungseffekten wird der Streuquerschnitt vor allem bei kleinen Streuwinkeln vergrößert (vergl. dazu Davisson²⁾), so daß der benutzte Ausdruck eine ungünstige Abschätzung ist.

Im Abschnitt 3 werden außerdem die Ausdrücke für die Energie des Compton-Streuquants in Abhängigkeit vom Streuwinkel θ , die Energieverteilung der Rückstoß-Elektronen $\Sigma(E, E_0)$ und die der Streuquanten benötigt. Im folgenden sei E die Energie des Rückstoßelektrons, die des Streuquants ist dementsprechend $E_0 - E$.

$$\frac{E_0 - E}{E_0} = \frac{1}{1 + \alpha(1 - \cos\theta)} \quad (2)$$
$$\alpha = \frac{E_0}{mc^2}$$

$$\Sigma(E, E_0) = \frac{N}{E_0} \left[2 + \left(\frac{\epsilon}{1-\epsilon} \right)^2 \left(1 + \frac{1}{\alpha^2} - \epsilon - \frac{2}{\alpha} \frac{1-\epsilon}{\epsilon} \right) \right] \quad (3)$$

$$\epsilon = \frac{E}{E_0}$$

$$\frac{1}{N} = \frac{2}{\alpha} + \frac{2(\alpha^3 + 5\alpha^2 + 4\alpha + 1)}{\alpha(1+2\alpha)^2} + \frac{\alpha^2 - 2\alpha - 2}{\alpha^2} \ln(1+2\alpha).$$

Der Ausdruck für $\Sigma(E, E_0)$ ist normiert, d.h.

$$\int_0^{E_m} \Sigma(E, E_0) dE = 1.$$

Dabei ist

$$E_m = \frac{2E_0^2}{mc^2 + 2E_0}$$

die Maximalenergie der Rückstoßelektronen.

2.2 Photo-Effekt

Abb. 1 zeigt den Wirkungsquerschnitt für Photo-Effekt an BGO-Molekülen in Abhängigkeit von der Energie. Er wurde aus den Angaben für die Elemente berechnet. Die Angaben der verschiedenen Autoren^{3,4,5)} stimmen in dem betrachteten Energiebereich zwischen 0.1 und 10 MeV recht gut überein. (Dies muß nicht notwendigerweise ein Indiz für systematische Zuverlässigkeit sein.) Die ausgezogene Kurve wurde mit der folgenden einfachen Interpolationsformel berechnet:

$$\sigma_F = 14,09 E^{-2,725} + 12,64 E^{-1,2375} \left[\frac{b}{\text{Molekül}} \right].$$

Dabei ist die Gamma-Energie E in MeV einzusetzen. Wie man sieht, werden die tabellierten Werte durch die Formel sehr gut wiedergegeben. Mit der oben angegebenen Moleküldichte ergibt sich der lineare Schwächungs-Koeffizient für Photo-Effekt daraus zu

$$\tau_F = 0,04855 E^{-2,725} + 0,04355 E^{-1,2375} [\text{cm}^{-1}]. \quad (4)$$

Es sollte darauf hingewiesen werden, daß die K-Kante von Wismut bei etwa 90 keV liegt. Dies ist in der angegebenen Formel nicht

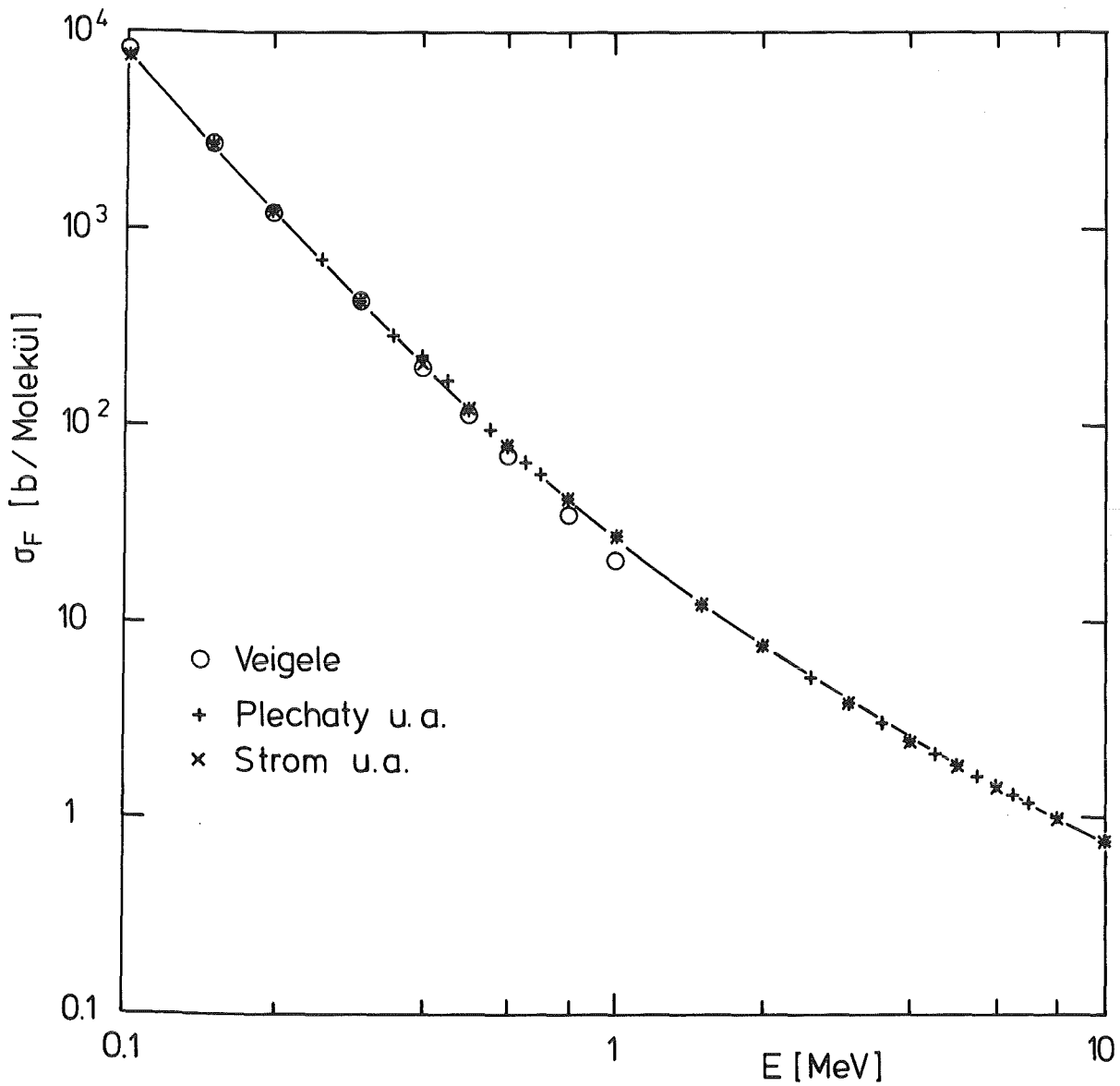


Abb. 1 Wirkungsquerschnitt für Photoeffekt an BGO nach den Berechnungen verschiedener Autoren ^{3,4,5} verglichen mit der Interpolationsformel (ausgezogene Kurve).

berücksichtigt. Unterhalb der K-Kante ist der Ausdruck daher grob falsch. Für die hier interessierende Fragestellung ist dies irrelevant, da Quanten so niedriger Energie in jedem Fall vollständig absorbiert werden. Inwieweit Gl. (4) oberhalb von 10 MeV den Wirkungsquerschnitt für den Photoeffekt gut wiedergibt, wurde nicht geprüft.

2.3 Paarbildung

Abb. 2 gibt den Wirkungsquerschnitt für Paarbildung am BGO-Molekül unterhalb von 10 MeV Gamma-Energie wieder. Die ausgezogene Kurve wurde mit dem folgenden Ausdruck berechnet:

$$\sigma_P = \left[\frac{12,84}{(E-E_S)^2} + \frac{20,91}{\sqrt{E-E_S}} \right]^{-1} \quad [\text{b/Molekül}]$$

$$E_S = 1,022 \text{ [MeV]}$$

E in MeV

Mit Ausnahme des Punktes mit der niedrigsten Energie 1,25 MeV werden die Daten durch die angegebene Formel sehr gut reproduziert. Unmittelbar oberhalb der Schwelle ist die Berechnung des Paarbildungsquerschnitts wegen des Einflusses des Coulomb-Feldes und der Elektronenhülle systematisch unsicher. Der von Plechaty u.a.³⁾ angegebene Wert wurde durch Interpolation gewonnen, die in der Nähe der Schwelle nur ungenau möglich ist. Andererseits macht dort der Querschnitt für Paarbildung nur etwa 2 % des totalen Querschnitts aus. Deswegen wurde nicht versucht, den numerischen Ausdruck weiter zu verbessern.

Für den linearen Schwächungskoeffizienten ergibt sich dann wie oben der folgende Ausdruck:

$$\tau_P = \left[\frac{22,67}{(E-E_S)^2} + \frac{13,92}{\sqrt{E-E_S}} \right]^{-1} \quad [\text{cm}^{-1}] \quad (5)$$

E in MeV

Die berechneten linearen Schwächungs-Koeffizienten sind in Abb. 3 dargestellt. Sie werden dort mit den Angaben aus dem Prospekt eines Herstellers von BGO-Kristallen (Harshaw) verglichen. Die Übereinstimmung ist insgesamt befriedigend. Die relativ größte Abweichung tritt beim Photoeffekt bei hohen Energien auf. Dort beträgt der Photoeffekt jedoch nur einen kleinen Bruchteil des gesamten Querschnitts. Ferner liegt der Ausdruck von Gl. (4) unter der von Harshaw angegebenen Kurve, stellt also die pessimistischere Abschätzung dar. Da nicht bekannt ist, auf welchen Daten die (vermut-

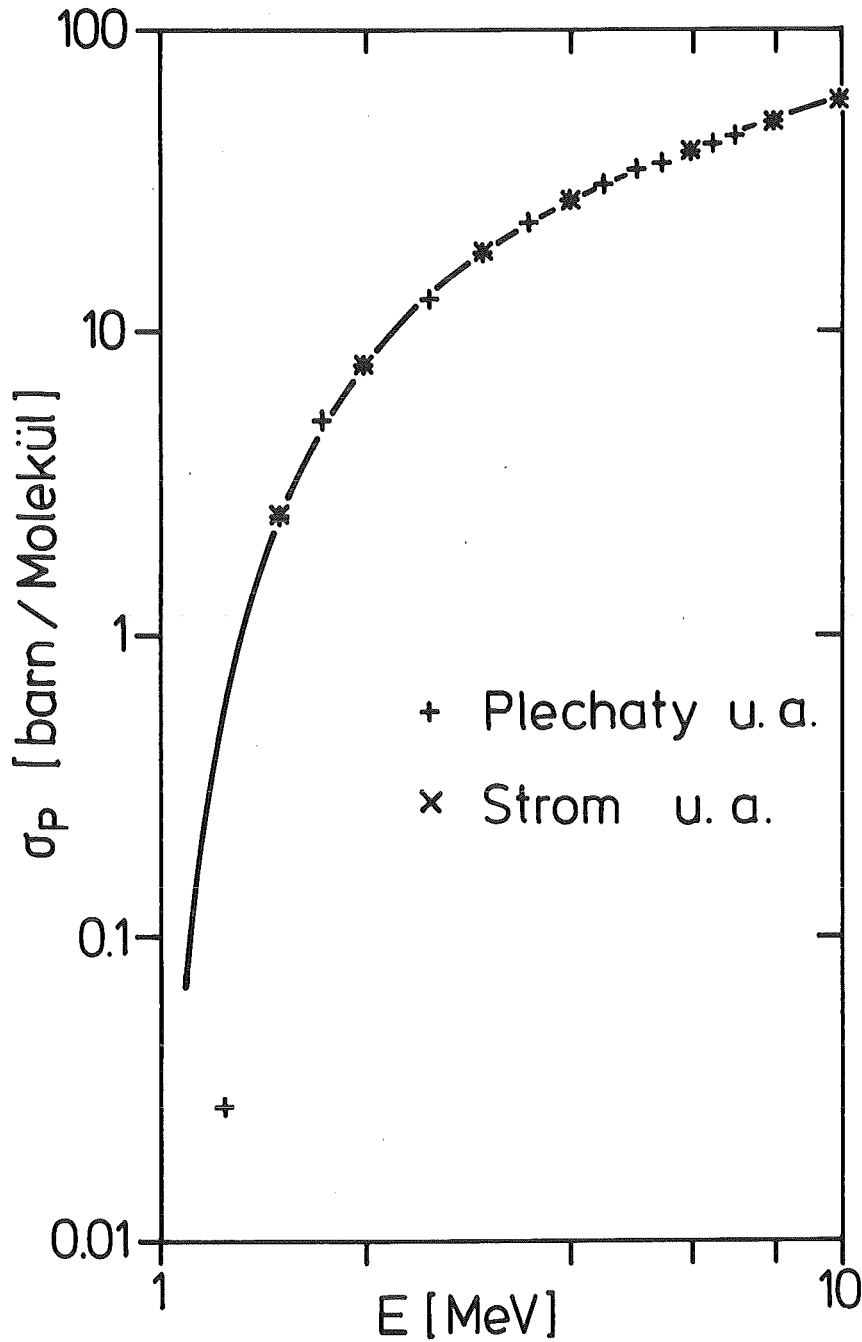
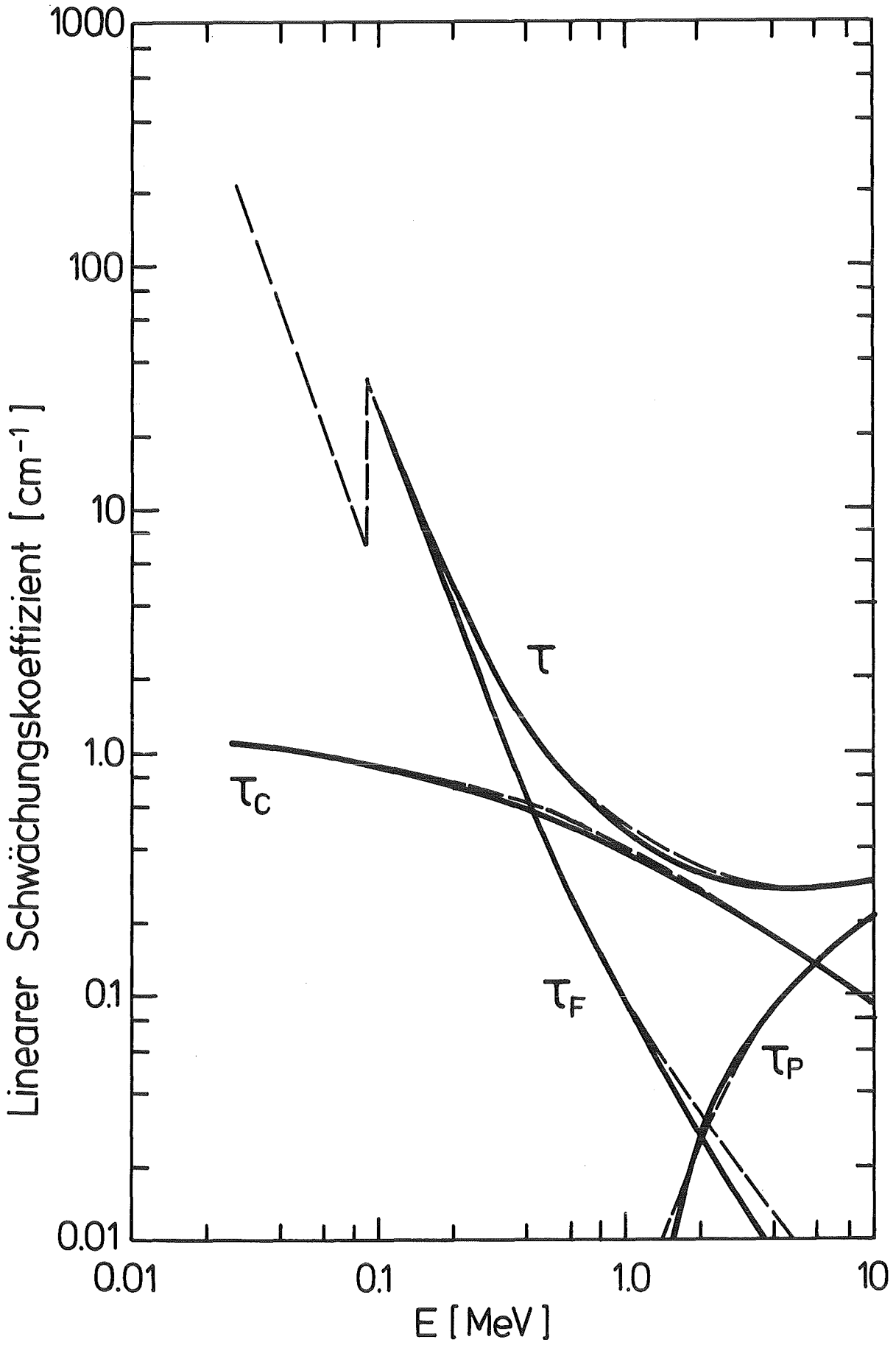


Abb. 2 Wirkungsquerschnitt für Paarbildung an BGO nach den Berechnungen verschiedener Autoren ^{3,4)} verglichen mit der Interpolationsformel (ausgezogene Kurve)

lich ebenfalls berechneten) Kurven von Harshaw beruhen, läßt sich nicht entscheiden, welche die Wirklichkeit besser wiedergibt. Der von Harshaw angegebene Verlauf des Paarbildungsquerschnitts unmittelbar oberhalb der Schwelle erscheint uns allerdings nicht sehr plausibel. Insgesamt sind die Unterschiede jedoch so geringfügig, daß die Ausdrücke in den Gln. (1), (4) und (5) für die in der Einleitung dargestellten Zwecke hinreichend genau sind.



2.4 Lineare Schwächungskoeffizienten für BaF₂

Auf dieselbe Weise lassen sich die linearen Schwächungskoeffizienten für Bariumfluorid (BaF₂) als Szintillator darstellen. Das Material hat eine Dichte von $\rho = 4,88 \text{ [g cm}^{-3}\text{]}$. Dem entspricht eine Elektrodendichte von $n = 1,24 \cdot 10^{24} \text{ [cm}^{-3}\text{]}$. Daraus folgt für den Compton-effekt derselbe Ausdruck wie für BGO, nur mit einem anderen Koeffizienten:

$$\tau_C(\text{BaF}_2) = \frac{0,6189}{0,9032} \tau_C(\text{BGO})$$

Für Photoeffekt und Paarbildung erhält man die folgenden empirischen Ausdrücke:

$$\tau_F = 0,00905 E^{-2,915} + 0,00897 E^{-1,20} \text{ [cm}^{-1}\text{]}$$

$$\tau_P = \left[\frac{56,71}{(E-E_S)^2} + \frac{25,79}{\sqrt{E-E_S}} \right]^{-1} \text{ [cm}^{-1}\text{]}$$

Sie geben die numerischen Werte in Ref. 3, 4 und 5 ebenso genau wieder wie die entsprechenden bei BGO.

Andere Szintillatormaterialien (wie z.B. NaJ) waren für die hier ins Auge gefaßte Anwendung nicht interessant. Es steht zu vermuten, daß sich deren Schwächungskoeffizienten ebenfalls durch Näherungsformeln derselben Struktur beschreiben ließen.

3. Der Rechengang bei der Berechnung der Ansprechwahrscheinlichkeit

Wenn ein Photon mit dem BGO-Kristall in Wechselwirkung tritt, so wird es in den meisten Fällen nicht total absorbiert, sondern es entstehen ein oder zwei sekundäre Quanten. Eine Ausnahme bilden allein diejenigen Photo-Absorptions-Prozesse, bei denen das Loch in der Atomhülle strahlungslos durch Auger-Effekt aufgefüllt wird. In den anderen Fällen tritt entweder ein Fluoreszenzquant, ein Compton-Streu-Quant oder ein Paar von Vernichtungsquanten auf.

Abb. 3 Lineare Schwächungskoeffizienten für Gammastrahlung in BGO. Die ausgezogenen Kurven geben die hier benutzten Anpassungsformeln wieder, die gestrichelten Kurven wurden einem Prospekt der Fa. Harshaw entnommen.

Im folgenden werden die Fluoreszenz-Quanten nach Photo-Effekt vernachlässigt, d.h. es wird angenommen, daß bei einem Photo-Effekt die Gesamt-Energie des Photons an den Kristall abgegeben wird. Dies ist aus zwei Gründen gerechtfertigt:

Erstens ist die Energie der Fluoreszenz-Quanten von maximal 90,5 keV klein gegen die Gesamtenergie von mehr als 5 MeV, die mit hoher Ansprechwahrscheinlichkeit gemessen werden soll. Nur wenn die Multiplizität der Gamma-Kaskade sehr hoch ist und ein großer Teil der Photonen durch Photo-Effekt absorbiert wird, kommt ein Energieverlust zustande, der die Ansprechwahrscheinlichkeit merklich reduzieren kann. Dies ist jedoch nur bei einem kleinen Bruchteil der Neutroneneinfang-Ereignisse der Fall.

Dazu kommt zweitens, daß die mittlere Reichweite der Fluoreszenz-Quanten kleiner als 1,2 mm ist. Dies ist klein gegen die Gesamtabmessungen des Kristalls, die von der Größenordnung 10 cm sind. Die Fluoreszenzquanten werden also mit großer Wahrscheinlichkeit im Kristall selbst absorbiert.

Das weitere Schicksal von Streu- und Vernichtungsquanten muß weiterverfolgt werden. Das heißt, es wird berechnet, mit welcher Wahrscheinlichkeit diese Quanten ihre Energie ganz oder nur teilweise an den Kristall abgeben. Die dabei angewandten Rechenverfahren werden in den folgenden Unterabschnitten beschrieben. Dabei werden maximal bis zu 3 Compton-Streuungen nacheinander berücksichtigt. Ziel der Rechnung ist es, die Verteilung der vom Gammaquant insgesamt an den Kristall abgegebenen Energie zu bestimmen. Dabei wurden die unvermeidlichen Näherungen nach Möglichkeit so gewählt, daß die abgegebene Energie unterschätzt wird. In diesem Sinne sollten die Ergebnisse eine pessimistische Abschätzung darstellen.

Im folgenden bedeutet der Index F stets Photo-Effekt, C Compton-Effekt und P Paarbildung. Ein Index E zeigt an, daß ein Vernichtungsquant aus dem Kristall herausgelaufen ist. Eine Kombination mehrerer Indizes bedeutet entsprechend, daß die durch die Buchstaben gekennzeichneten Prozesse nacheinander stattgefunden haben.

3.1 Die primäre Wechselwirkung

Die Wahrscheinlichkeit P_0 dafür, daß ein vom Zentrum der Hohlkugel ausgehendes Quant der Energie E_0 den Detektor-Kristall durchsetzt, ohne irgendeine Wechselwirkung zu machen, läßt sich unmittelbar angeben:

$$P_0 = \exp[-(R_2 - R_1) \tau(E_0)] \quad (6)$$

Entsprechend ist $1 - P_0$ die Wahrscheinlichkeit dafür, daß eine Wechselwirkung stattfindet. Dieser Anteil verteilt sich auf Photo-Effekt, Compton-Effekt und Paarbildung im Verhältnis der entsprechenden linearen Schwächungskoeffizienten:

$$P_F = \frac{\tau_F(E_0)}{\tau(E_0)} (1 - P_0)$$

$$P_C = \frac{\tau_C(E_0)}{\tau(E_0)} (1 - P_0)$$

$$P_P = \frac{\tau_P(E_0)}{\tau(E_0)} (1 - P_0)$$

Es gilt offensichtlich

$$P_0 + P_F + P_C + P_P = 1.$$

Entsprechend dem oben Gesagten betrachten wir P_F als einen Beitrag zur Photolinie.

3.2 Die sekundäre Wechselwirkung nach Compton-Effekt

Bei der Compton-Streuung gibt das Quant einen Teil seiner Energie an die Elektronen des Detektors ab. Die Energieverteilung dieser Rückstoß-Elektronen wird durch die Gl. (3) in Abschnitt 2.1 gegeben. In vielen Fällen wird jedoch das Compton-Streu-Quant den Kristall nicht verlassen, sondern in einer zweiten (und evtl. weiteren) Wechselwirkung seine Restenergie ganz oder teilweise verlieren. Dadurch verändert sich das Energieverlustspektrum, und zwar verschiebt es sich im Mittel zu höheren Energien. Der Berechnung der Änderung dieses Spektrums liegt der folgende Gedankengang zugrunde (vgl. dazu Abb.4):

Jeder Energie E innerhalb des Compton-Kontinuums entspricht ein Streuquant mit der Energie $E_0 - E$ und ein bestimmter Streuwinkel θ . Die Verknüpfung der drei Größen E_0 , E und θ ist durch Gl. (2) gegeben. Wenn die Streuung im Abstand R vom Zentrum der Kugel stattfindet, so ist durch R und θ die Strecke T bis zum Rande des Detektors festgelegt. Die Funktion $T(R, \theta)$ läßt sich geschlossen darstellen. Die Ableitung der entsprechenden Formeln befindet sich im Anhang A. Damit ist die Wahrscheinlichkeit dafür, daß ein am Ort R um den Winkel θ gestreutes Compton-Quant nach der Streuung aus dem Kristall entkommt, gegeben durch

$$\exp[-T(R, \theta) \cdot \tau(E_0 - E)].$$

Mittelt man den Ausdruck über den Radius R bei festem θ , so erhält man die Wahrscheinlichkeit $V(E)$ dafür, daß ein Compton-Streuquant der Energie $E_0 - E$ aus dem Kristall entweicht. Bei dieser Mittelung ist zu berücksichtigen, daß durch die Schwächung der Primärstrahlung die Streu-Intensität exponentiell von innen nach außen abnimmt. Das führt auf den folgenden Ausdruck:

$$V(E) = \frac{\int_{R_1}^{R_2} dr \exp[-r\tau(E_0) - T(r, \theta)\tau(E_0 - E)]}{\int_{R_1}^{R_2} dr \exp[-r\tau(E_0)]} \quad (7)$$

$$= \tau(E_0) \frac{\int_{R_1}^{R_2} dr \exp[-r\tau(E_0) - T(r, \theta)\tau(E_0 - E)]}{\exp[-R_1\tau(E_0)] - \exp[-R_2\tau(E_0)]}$$

Das Integral im Nenner dieses Ausdrucks wurde aus Normierungsgründen hinzugefügt. Dies hat zur Folge, daß $V(E) \rightarrow 1$ für $\tau(E_0 - E) \rightarrow 0$ (d.h. keinerlei Absorption der Streuquanten).

Das Produkt des ursprünglichen Compton-Spektrums mit der eben berechneten energieabhängigen Entkomm-Wahrscheinlichkeit $V(E)$ ergibt einen Beitrag zum endgültigen Energiespektrum, der sich durch weitere Wechselwirkungen nicht mehr ändern kann:

$$S_V(E) = P_C V(E) \Sigma(E, E_0) \quad (8)$$

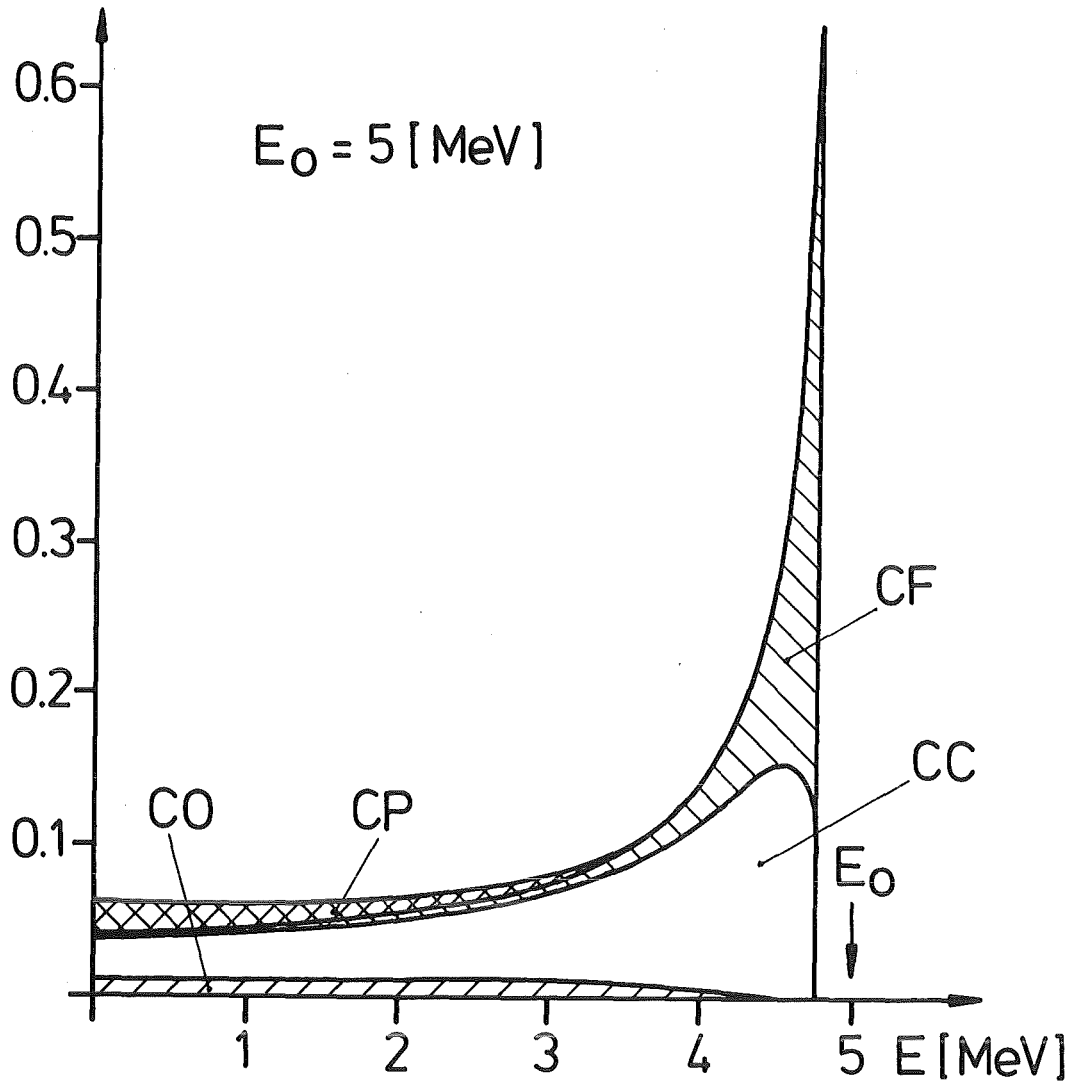


Abb. 4 Primäres Comptonkontinuum bei der Wechselwirkung von Gammaquanten von 5 MeV (obere Kurve) und seine Zerlegung in verschiedene Anteile nach Art der sekundären Wechselwirkung des Streuquants. CF: sekundärer Photoeffekt; CC: Comptoneffekt; CP: Paarbildung, CO: keine weitere Wechselwirkung. Die Grenze des Bereiches CO entspricht der Funktion $S_V(E)$.

Er ist in Abb. 4 schraffiert hervorgehoben. Das Integral dieser Größe über das gesamte Compton-Kontinuum bezeichnen wir mit P_{CO} . Es gibt also die Wahrscheinlichkeit dafür an, daß ein Compton-Streuquant beliebiger Energie nach der 1. Wechselwirkung den Kristall verläßt.

$$P_{CO} = \int_0^E S_V(E) dE \quad (9)$$

Für jede Energie E können wir jetzt den Bruchteil der Quanten, die aus dem Kristall entkommen, $V(E) \Sigma(E, E_0)$, vom ursprünglichen Compton-Kontinuum subtrahieren. Dies ergibt das Spektrum derjenigen Quanten, die nach der ersten Compton-Streuung noch eine weitere Wechselwirkung mit dem Kristall machen. Ob dies Photo-Effekt, eine weitere Compton-Streuung oder Paarbildung ist, hängt, ganz wie oben in Abschnitt 3.1 für die primäre Wechselwirkung erläutert, vom Verhältnis der linearen Schwächungskoeffizienten bei der Energie $E_0 - E$ des Streuquants ab.

Falls das Streuquant Photo-Effekt macht, so gibt es in zwei Stufen seine gesamte Energie an den Kristall ab. Diese Ereignisse tragen also zur Photo-Linie im Kristall bei. Der Gesamtbeitrag P_{CF} ergibt sich durch das folgende Integral:

$$P_{CF} = P_C \int_0^{E_0} \frac{\tau_F(E_0 - E)}{\tau(E_0 - E)} [1 - V(E)] \Sigma(E, E_0) dE \quad (10)$$

Entsprechende Ausdrücke erhält man für die Wahrscheinlichkeit eines sekundären Compton-Effektes P_{CC} und einer sekundären Paarbildung P_{CP} nach primärem Compton-Effekt. Man überzeugt sich leicht, daß die folgende Beziehung gilt:

$$P_{C0} + P_{CF} + P_{CC} + P_{CP} = P_C .$$

Bei einer sekundären Paarbildung nach primärem Compton-Effekt wird mindestens die Energie $E_0 - 1,022 \text{ MeV}$ an den Kristall abgegeben. Das heißt, im Spektrum liegen die entsprechenden Ereignisse zwischen der Photolinie und dem Doppel-Escape-Peak. Wie weiter unten in Abschnitt 3.5 gezeigt wird, ist andererseits die Wahrscheinlichkeit dafür, daß beide Vernichtungsquanten des Positrons ohne weitere Wechselwirkung aus dem Kristall herauslaufen, sehr klein. Da andererseits P_{CP} keine sehr großen Werte annimmt und insbesondere nur dann eine Rolle spielt, wenn die primäre Gamma-Energie recht groß ist, wurde dieser Anteil schematisch dem single-escape-Peak zugeschlagen.

Durch das eben beschriebene Vorgehen wurde die Wahrscheinlichkeit P_C in vier verschiedene Anteile zerlegt. Die Anteile P_{CF} und P_{CP} tragen zur Photolinie bzw. zu der Linie bei, die um 0,511 MeV unterhalb der Photolinie liegt (single escape). Der Anteil P_{CO} verteilt sich auf den gesamten Energiebereich unterhalb der Compton-Kante, die der primären Gamma-Energie E_0 entspricht. Für diese drei Anteile brauchen weitere Wechselwirkungen nicht mehr betrachtet werden. Für den verbleibenden Anteil P_{CC} können wir der Abb. 4 unmittelbar die Verteilung der Energie entnehmen, die bei der ersten Compton-Streuung abgegeben wurde. Es ist der in der Abbildung mit CC bezeichnete Streifen. Numerisch ergibt sich der folgende Ausdruck:

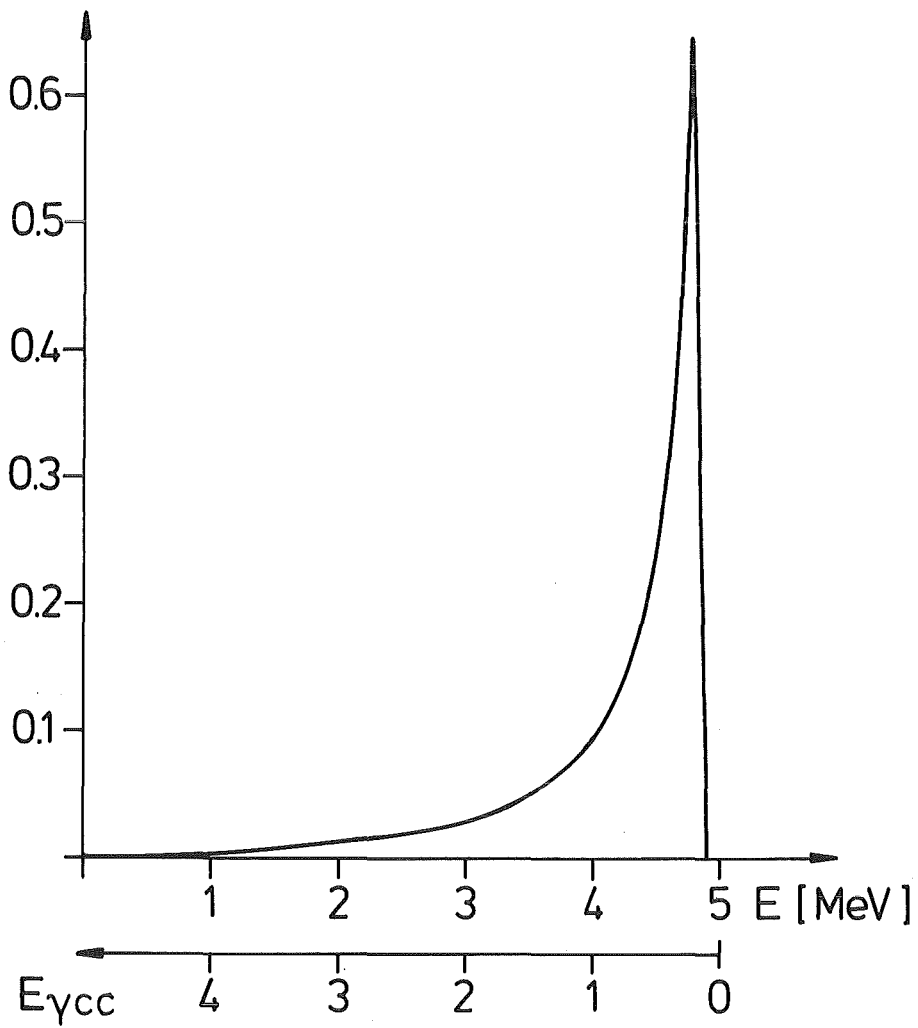
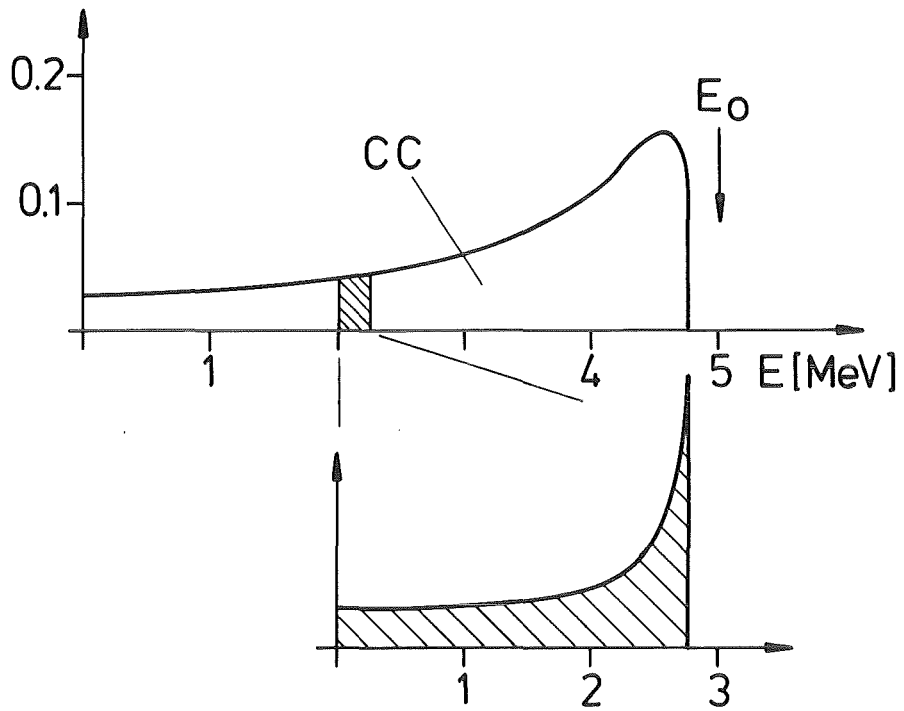
$$S_C(E) = P_C \frac{\tau_C(E_0 - E)}{\tau(E_0 - E)} [1 - V(E)] \Sigma(E, E_0) \quad (11)$$

Da wir wissen, daß jedes der an diesen Ereignissen beteiligten Quanten noch eine weitere Compton-Streuung macht, ist dieses Energiespektrum nicht endgültig, sondern es wird durch den Energieverlust bei der 2. Compton-Streuung zu höheren Energien hin verschoben. Das Spektrum der Energieverluste nach zwei Compton-Streuungen wird im nächsten Abschnitt berechnet.

3.3 Das Energieverlustspektrum nach zweifachem Compton-Effekt

Die Funktion $S_C(E)$ gibt die Verteilung der bei der ersten Compton-Streuung an den Kristall abgegebenen Energie für diejenigen Ereignisse an, bei denen die Quanten zweimal hintereinander Compton-Streuung machen. Sie ist in Abb. 5 oben dargestellt. Bei der zweiten Streuung wird natürlich noch weitere Energie abgegeben. Für jede Energie E innerhalb des Compton-Kontinuums läßt sich sofort die Verteilung der Energieverluste E bei der zweiten Streuung angeben. Es ist dies nämlich das Compton-Kontinuum für eine Primärenergie $E_0 - E$, d.h. die Funktion $\Sigma(E', E_0 - E)$. Durch eine Faltung dieser Verteilung mit dem in Abb. 5 oben gezeigten Spektrum erhält man die Verteilung der Energien, die das Quant insgesamt nach zwei Streuungen verloren hat:

$$S_{C3}(E) = \int_b^a S_C(E') \Sigma(E - E', E_0 - E') dE' \quad (12)$$



Die Integrationsgrenzen a und b werden dadurch festgelegt, daß die Funktion $S_C(E')$ nur im Bereich $0 \leq E' \leq E_m$ (vgl. Abschnitt 2.1) definiert ist und $\Sigma(E-E', E_0-E')$ nur für

$$0 \leq E - E' \leq \frac{2(E_0 - E)^2}{mc^2 + 2(E_0 - E)} .$$

Daraus folgt

$$a = \begin{cases} E_m & \text{für } E \geq E_m \\ E & \text{für } E < E_m \end{cases}$$

$$b = \begin{cases} \frac{2E_0(E_0 - E) + Emc^2}{2(E_0 - E) + mc^2} & \text{für } E \geq E_m \\ 0 & \text{für } E < E_m . \end{cases}$$

Dieser Rechengang wird in Abb. 5 verdeutlicht. Der untere Teil der Abbildung zeigt das resultierende Spektrum. Anders als das primäre Compton-Kontinuum verschwindet es bei der Energie 0 und steigt von dort mit der Energie an. Bei der ursprünglichen Compton-Kante hat das Spektrum eine Spitze und fällt von dort bis zur Maximal-Energie E_3 auf 0 ab. Man kann sich leicht überlegen, daß diese Maximal-Energie E_3 erreicht wird, wenn das Quant in beiden Streuungen den maximal möglichen Energieverlust erleidet. Daraus folgt für E_3 :

Abb. 5 Änderung des Energieverlustspektrums durch die zweite Comptonstreuung. Im oberen Teil ist der Bereich CC von Abb. 4 noch einmal dargestellt, darunter das Compton-Kontinuum solcher Quanten, deren Energieverlust bei der ersten Streuung in dem schmalen, schraffierten Streifen von CC lag. Die untere Kurve gibt das Ergebnis der Faltung von CC mit den entsprechenden Comptonkontinua wieder. Diese Kurve stellt auch die Energieverteilung der Streuquanten nach zwei Compton-Streuungen dar, wenn man sie zusammen mit der unteren, nach links laufenden Skala betrachtet.

$$E_3 = E_m + \frac{2(E_o - E_m)^2}{mc^2 + 2(E_o - E_m)}$$
$$= \frac{4 E_o^2}{mc^2 + 4E_o}$$

Dem Energieverlustspektrum von Abb. 5 unten entspricht natürlich völlig die Energieverteilung der Streuquanten nach zweifachem Compton-Effekt. Dasselbe Spektrum ist nur mit umgekehrt gerichteter und verschobener Skala zu lesen. Dies ist durch den Pfeil in Abb. 5 ganz unten angedeutet, wobei die Restenergie des Streuquants mit $E_{\gamma CC}$ bezeichnet ist. Man sieht, daß die Energieverteilung der Streuquanten nach dem 2. Compton-Effekt wesentlich weicher ist als vorher. Damit ist auch die Wahrscheinlichkeit, daß diese Quanten ihre Energie ganz oder teilweise an den Kristall abgeben, recht groß. Das weitere Schicksal dieser Quanten wird im nächsten Abschnitt behandelt.

3.4 Die dritte Wechselwirkung nach zweifachem Compton-Effekt

In diesem Abschnitt sollen die Überlegungen, die in den Abschnitten 3.2 und 3.3 durchgeführt wurden, für solche Quanten wiederholt werden, die schon zweimal Compton-Effekt im Kristall gemacht haben. Auch hier berechnen wir zunächst die Wahrscheinlichkeit dafür, daß ein Streuquant, dessen Energieverteilung wir ja kennen (vgl. Abb. 5), aus dem Kristall entkommt. Das nach Subtraktion dieser Ereignisse verbleibende Spektrum läßt sich dann leicht wieder in Photo-Effekt, Compton-Effekt und Paarbildung aufteilen. Gegenüber dem Abschnitt 3.2 ergeben sich hierbei zwei wesentliche Komplikationen:

1. Bei der ersten Compton-Streuung ist die Strecke, die das Streuquant bis zum Rand des Kristalls zurücklegen muß, durch den Ort der Streuung und den Energieverlust eindeutig bestimmt. Bei der zweiten Compton-Streuung ist das nicht mehr der Fall, da bei vorgegebener Rest-Energie die Energie des Quants vor der zweiten Compton-Streuung und der Ort der ersten Streuung in weiten Bereichen schwanken können. Dies führt auf Mehrfach-Integrale, deren Berechnung einen erheblichen Rechenaufwand erfordert.

2. Bei der ersten Streuung hängt die Intensitäts-Verteilung allein vom Streuwinkel ab. Dies ist bei der zweiten Streuung deswegen nicht mehr der Fall, weil die Compton-Quanten nach der ersten Streuung teilweise polarisiert sind. Die Richtung der ersten Streuung beeinflusst daher die Intensitäts-Verteilung bei der zweiten.

Die geometrischen Verhältnisse bei einer doppelten Compton-Streuung sind in Abb. 6 verdeutlicht. M sei das Zentrum des Detektors (d.h. die Strahlenquelle), S_1 und S_2 die Orte der 1. bzw. 2. Streuung

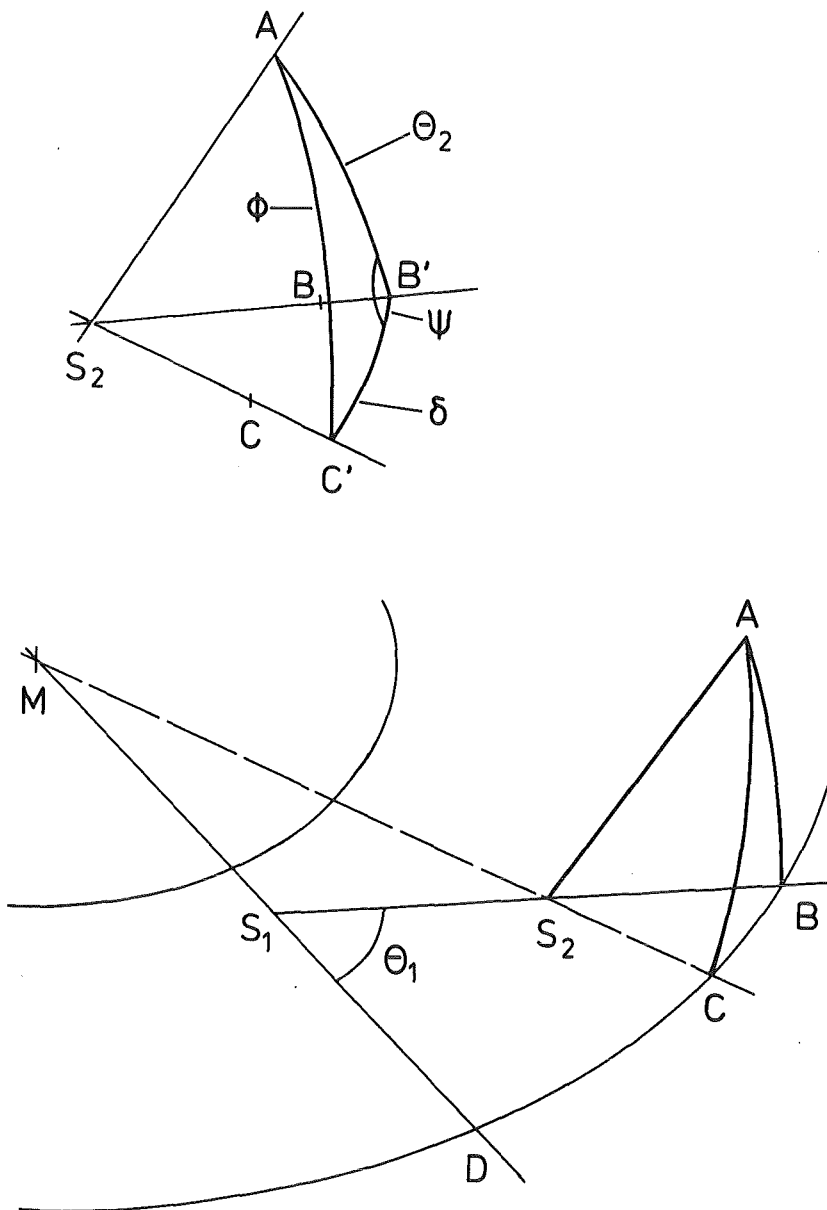


Abb. 6 Geometrische Verhältnisse bei zweifacher Comptonstreuung.

und A der Punkt, an dem der Richtungsvektor des Quants nach der 2. Streuung die Außenwand des Detektors schneidet. Bezeichnet man die Strecke \overline{MS}_2 mit ρ und den Winkel $\angle AS_2C$ mit ϕ , so läßt sich die Strecke \overline{AS}_2 , die das Streuquant nach der 2. Streuung noch im Kristall zurücklegt, unmittelbar angeben:

$$\overline{AS}_2 = \sigma = T(\rho, \phi)$$

Die Größen ρ und ϕ lassen sich aus rein geometrischen Betrachtungen berechnen. Dies wird im Anhang B im einzelnen ausgeführt. Im folgenden werden sie also als bekannt vorausgesetzt.

Wir betrachten jetzt eine bestimmte Streusequenz mit den Streuwinkeln $\theta_1 = \angle BS_1D$ und $\theta_2 = \angle AS_2B$. Die Wahrscheinlichkeit dafür, daß das Streuquant nach der 2. Streuung aus dem Kristall entweicht, ist gegeben durch:

$$\exp(-\sigma\tau_2)$$

mit $\tau_2 = \tau(E_2)$, wobei E_2 die Energie des Quants nach der zweiten Comptonstreuung ist. Diese Größe hängt natürlich von der Lage der Punkte S_1 und S_2 ab. Die Mittelung über diese Streuorte läßt sich leicht durchführen. Dabei ist wie oben in Abschnitt 3.2 zu berücksichtigen, daß die Intensität der Strahlung in Ausbreitungsrichtung exponentiell abnimmt. Diese Mittelung führt daher auf den folgenden Ausdruck:

$$\frac{\int_{R_1}^{R_2} dr \exp(-r\tau_0) \int_0^{T(r, \theta_1)} ds \exp(-s\tau_1) \exp(-\sigma\tau_2)}{\int_{R_1}^{R_2} dr \exp(-r\tau_0) \int_0^{T(r, \theta_1)} ds \exp(-s\tau_1)}$$

Er entspricht völlig dem für die Größe $V(E)$ in Abschnitt 3.2. Die Größen τ_0 und τ_1 sind analog zu τ_2 die totalen linearen Schwächungskoeffizienten bei der Anfangsenergie E_0 bzw. der Energie E_1 des Quants zwischen den beiden Streuungen. Dieser Ausdruck ist noch nicht ganz vollständig, weil er die oben erwähnten Polarisations-effekte nicht berücksichtigt. Wie in Anhang C näher ausgeführt wird, hängt die Streu-Intensität vom Winkel ψ zwischen den beiden Streuebenen ab. Darüber ist also noch mit der im Anhang C berechneten

Gewichtsfunktion $f(\psi)$ zu mitteln. Dies führt schließlich auf die Größe

$$W(E_1, E_2) = \frac{\int_{R_1}^{R_2} dr \exp(-r\tau_0) \int_0^{T(r, \theta_1)} ds \exp(-s\tau_1) \int_0^{2\pi} d\psi f(\psi) \exp(-\sigma\tau_2)}{\int_{R_1}^{R_2} dr \exp(-r\tau_0) \int_0^{T(r, \theta_1)} ds \exp(-s\tau_1)}$$

Der Nenner läßt sich hier teilweise integrieren und mit Hilfe von Gl. (7) umformen, wodurch man erhält:

$$W(E_1, E_2) = \tau_0 \tau_1 \frac{\int_{R_1}^{R_2} dr \exp(-r\tau_0) \int_0^{T(r, \theta_1)} ds \exp(-s\tau_1) \int_0^{2\pi} d\psi f(\psi) \exp(-\sigma\tau_2)}{[\exp(-R_1\tau_0) - \exp(-R_2\tau_0)] [1 - V(E_1)]} \quad (13)$$

Diese Funktion $W(E_1, E_2)$ gibt die Wahrscheinlichkeit dafür an, daß ein Streuquant mit der Energie E_2 aus dem Kristall entkommt, wenn die Energie nach der ersten Streuung E_1 betrug. Eine Mittelung über E_1 ergibt dann also den Bruchteil der Quanten mit der Energie E_2 , die nach der 2. Compton-Streuung den Kristall ohne weitere Wechselwirkung verlassen haben. Bei dieser Mittelung ist jedoch noch zu berücksichtigen, daß die Energien E_1 nicht alle gleich häufig vorkommen. Ein Maß dafür ist die schon früher mehrfach benutzte Funktion Σ . Bei der ersten Streuung wird ja die Energie $E_0 - E_1$ an den Detektor abgegeben. Die Funktion $\Sigma(E_0 - E_1)$ gibt also unmittelbar die gesuchte Häufigkeit von Quanten der Energie E_1 an. Damit ergibt sich die Wahrscheinlichkeit dafür, daß ein Compton-Streuquant der Energie E_2 nach der zweiten Streuung aus dem Kristall entweicht, als

$$W_{CCO}(E_2) = \int_b^a W(E_1, E_2) \Sigma(E_0 - E_1, E_0) dE_1. \quad (14)$$

Die Integrationsgrenzen a und b folgen einerseits aus der Bedingung, daß die Energie der Quanten bei der Streuung nicht zunehmen kann,

$$E_2 \leq E_1 \leq E_0,$$

und andererseits daraus, daß die Streuquanten eine Minimalenergie

besitzen:

$$E_1 \geq E_0 - \frac{2E_0^2}{mc^2 + 2E_0} = \frac{mc^2 E_0}{mc^2 + 2E_0} = E'$$

$$E_2 \geq \frac{mc^2 E_1}{mc^2 + 2E_1} \geq \frac{mc^2 E_0}{mc^2 + 4E_0} = E''.$$

Das Gebiet der physikalisch möglichen Kombinationen von E_1 und E_2 ist in Abb. 7 verdeutlicht. Daraus folgt für die Integrationsgrenzen:

$$a = \begin{cases} E_0 & \text{falls } E_2 \geq E' \\ \frac{mc^2 E_2}{mc^2 + 2E_2} & \text{falls } E_2 < E' \end{cases}$$

$$b = \begin{cases} E_2 & \text{falls } E_2 \geq E' \\ E' & \text{falls } E_2 < E' \end{cases}$$

Die Energie E_2 ist identisch mit der Energie $E_{\gamma CC}$ in Abb. 5 unten. Damit können wir mit der Funktion W_{CC0} das Impulshöhenspektrum von Abb. 5 unten ganz analog wie in Abb. 4 zerlegen. Die Funktion $W_{CC0}(E_2)$ entspricht völlig dem $V(E)$ in Abschnitt 3.2. Völlig parallel zu dem dortigen Vorgehen erhalten wir für das Energieverlust-Spektrum der Ereignisse, bei denen das Streuquant den Kristall verläßt,

$$S_{VV}(E) = W_{CC0}(E_0 - E) S_{C3}(E), \quad (15a)$$

für die Wahrscheinlichkeit des Entweichens

$$P_{CC0} = \int S_{VV}(E) dE, \quad (15b)$$

für die Wahrscheinlichkeit eines Photoeffektes nach der zweiten Comptonstreuung

$$P_{CCF} = \int \frac{\tau_F(E_0 - E)}{\tau(E_0 - E)} [1 - W_{CC0}(E_0 - E)] S_{C3}(E) dE \quad (16)$$

und entsprechende Ausdrücke für P_{CCC} und P_{CCP} . P_{CCF} gibt einen Beitrag zur Photolinie, P_{CCP} wird wie oben in Abschnitt 3.2 dem single-escape-peak zugeschlagen. P_{CCC} bezeichnet den Anteil der primären Ereignisse, bei denen das Quant dreimal hintereinander Compton-

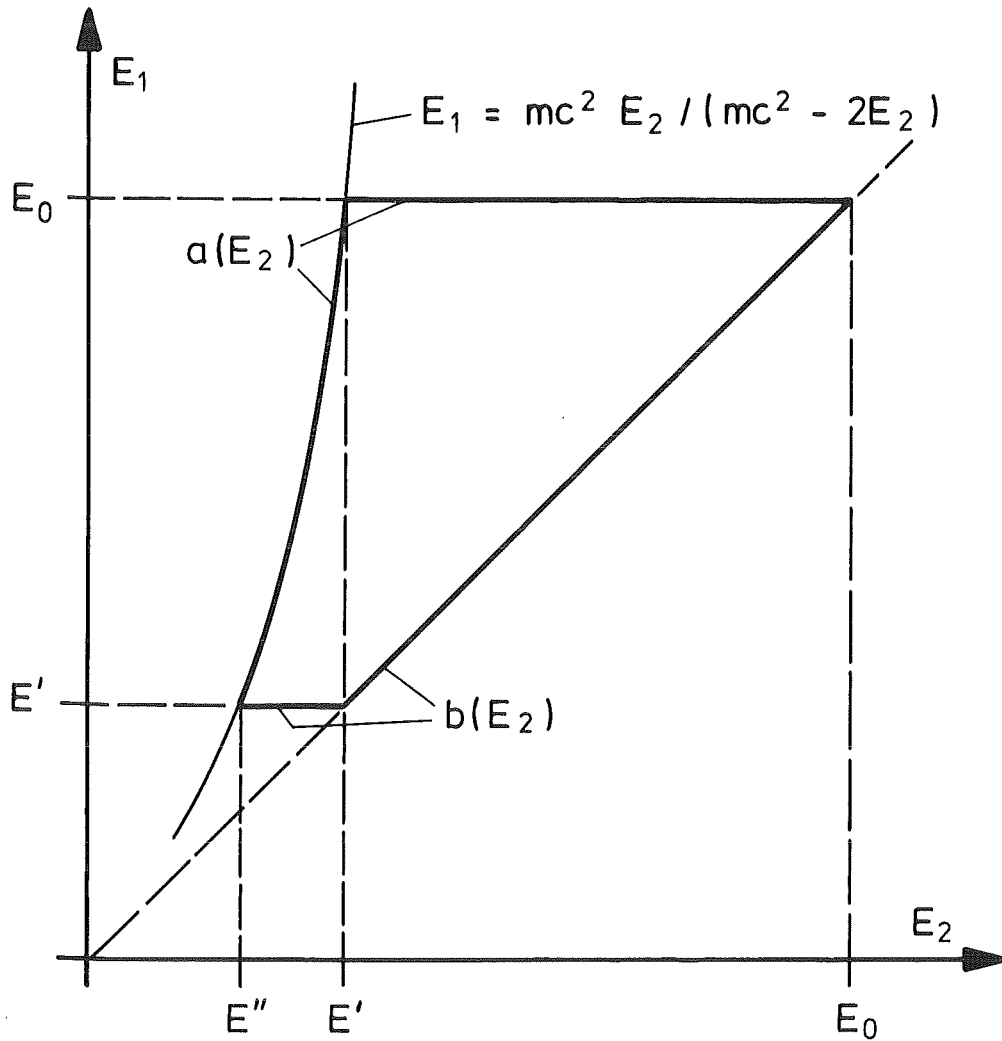


Abb. 7 Verdeutlichung der Integrationsgrenzen bei der Berechnung von W_{CCO} gemäß Gl. (14).

streuung erfährt. Es sei E' die Summe der Energien, die bei den ersten beiden Streuungen an den Kristall abgegeben werden. Dann läßt sich die Energie-Verteilung der in P_{CCC} zusammengefaßten Ereignisse unmittelbar angeben:

$$S_{C4}(E') = \frac{\tau_C(E_0 - E')}{\tau(E_0 - E')} [1 - W_{CCO}(E_0 - E')] S_{C3}(E') \quad (17)$$

Um das Spektrum der Energieverluste E zu erhalten, die bei den drei Comptonstreuungen insgesamt abgegeben wird, ist dieser Ausdruck noch genau wie in Gl. (12) mit der Funktion Σ zu falten:

$$S_{C5}(E) = \int_b^a S_{C4}(E') \Sigma(E - E', E_0 - E') dE' \quad (18)$$

Das Spektrum $S_{C3}(E')$ ist im Bereich $0 \leq E' \leq E_3$ definiert (vgl. Abschnitt 3.3). Für S_{C5} ergibt sich völlig analog die Obergrenze

$$E_5 = E_3 + \frac{2(E_0 - E_3)^2}{mc^2 + 2(E_0 - E_3)} = \frac{6E_0^2}{mc^2 + 6E_0}$$

Für die Integrationsgrenzen erhält man dieselben Ausdrücke wie im Anschluß an Gl. (12), nur daß E_m durch E_3 zu ersetzen ist.

3.5 Die Absorption der Vernichtungs-Quanten nach primärer ----- Paarbildung -----

Bei der Paarbildung entsteht im Feld eines Kerns (hier vor allem in dem des Wismut) ein Elektron-Positron-Paar, dessen kinetische Energie $E_0 - 2mc^2$ beträgt. Dieser Energiebetrag wird also mindestens an den Kristall abgegeben. Am Ende seiner Reichweite zerstrahlt das Positron in praktisch allen Fällen in zwei Quanten der Energie $mc^2 = 0,511$ MeV, die entgegengesetzte Richtung haben. Jedes dieser beiden Vernichtungsquanten kann Photoeffekt oder Comptoneffekt auslösen oder dem Kristall entkommen. Das Energieverlustspektrum besteht dementsprechend aus drei Linien bei der Gesamtenergie E_0 , bei $E_0 - mc^2$ (single escape) und bei $E_0 - 2mc^2$ (double escape) sowie einem Kontinuum im Bereich zwischen den Linien.

Im folgenden soll der Index E andeuten, daß ein Vernichtungs-Quant aus dem Kristall hinausläuft. Der Index V am linearen Schwächungskoeffizienten τ soll bedeuten, daß der Koeffizient bei der Energie des Vernichtungsquants von 0,511 MeV zu nehmen ist.

Die Energie der bei der Paarbildung entstehenden Elektronen und Positronen beträgt maximal etwa 8 MeV. Im Mittel wird die Energie wesentlich darunter liegen, da sie sich einerseits auf beide Teilchen verteilt und da andererseits nur in den seltensten Fällen die gesamte Bindungsenergie des Neutrons an ein einzelnes Gamma-Quant abgegeben wird. Der Maximalenergie entspricht eine Reichweite im BGO von mehreren Millimetern. Dies ist klein gegen die Dimensionen des Kristalls, deswegen wird im folgenden so gerechnet, als ob die Vernichtungsquanten am Ort der Paarbildung selbst entstehen.

Die Wahrscheinlichkeit dafür, daß ein Vernichtungsquant aus dem Kristall herausläuft, hängt ab vom Entstehungsort und der Emissionsrichtung. Bezeichnet man den Abstand des Entstehungsortes vom Zentrum des Detektors mit R und den Winkel zwischen Emissionsrichtung und Radiusvektor mit θ , so ist die Entkommwahrscheinlichkeit mit der obigen in Abschnitt 3.2 definierten Funktion $T(R, \theta)$ gegeben durch

$$\exp[-\tau_V T(R, \theta)]$$

und entsprechend für das Entkommen beider Vernichtungsquanten durch

$$\exp[-\tau_V T(R, \theta) - \tau_V T(R, \pi - \theta)].$$

Es ist unmittelbar anschaulich, daß kleinen Werten von $T(R, \theta)$ große Werte von $T(R, \pi - \theta)$ entsprechen. Da andererseits die mittlere freie Weglänge von Vernichtungsquanten etwa 11 mm beträgt und daher klein ist gegen die Gesamtdimension des Kristalls, ist die Wahrscheinlichkeit, daß beide Vernichtungsquanten dem Kristall entkommen, zu vernachlässigen. Auf den numerischen Beweis soll hier verzichtet werden. Damit ist die Größe P_{P2E} praktisch null, und es tritt kein Doppel-Escape-Peak auf. Die mittlere Wahrscheinlichkeit für das Entkommen eines Vernichtungsquants erhält man nun durch Mittelung über den Ort R und die Emissionsrichtung θ . Das führt auf das folgende Integral:

$$B = \frac{\int_{R_1}^{R_2} dR \exp(-\tau R) \int_{-1}^{+1} d(\cos\theta) \exp[-\tau_V T(R, \theta)]}{2 \int_{R_1}^{R_2} dR \exp(-\tau R)} \quad (19)$$

$$= \frac{\int_{R_1}^{R_2} dR \exp(-\tau R) \int_{-1}^{+1} d(\cos\theta) \exp[-\tau_V T(R, \theta)]}{\exp(-\tau R_1) - \exp(-\tau R_2)} \cdot \frac{\tau}{2}$$

Über die Größe τ im ersten Integranden hängt das Integral im Zähler auch von der Anfangsenergie E_0 ab. Nach dem oben qualitativ erläuterten Argument ist dies praktisch identisch mit der Wahrscheinlichkeit dafür, daß ein Quant entkommt und das andere eine Wechselwirkung macht.

Da die Richtung, in denen die beiden Vernichtungsquanten emittiert werden, streng korreliert sind, gilt für die gemittelte Wahrscheinlichkeit, daß ein Quant dem Kristall entkommt, während das andere eine Wechselwirkung macht, der folgende Ausdruck:

$$A = \frac{\int_{R_1}^{R_2} dR \exp(-\tau R) \int_{-1}^{+1} d(\cos\theta) \exp[-\tau_V T(R,\theta)] \{1 - \exp[-\tau_V T(R,\pi-\theta)]\}}{2 \int_{R_1}^{R_2} dR \exp(-\tau R)} \approx B.$$

Die letzte Näherung gilt, da die Größe

$$\exp[-\tau_V T(R,\theta) - \tau_V T(R,\pi-\theta)]$$

im weitaus größeren Teil des Integrationsgebietes $\ll 1$ ist. Damit erhalten wir für die Wahrscheinlichkeit, daß eines der Vernichtungsquanten den Kristall verläßt und daß das andere Photo- bzw. Compton-Effekt macht, die folgenden Ausdrücke:

$$P_{PEF} = 2 P_P \frac{\tau_{FV}}{\tau_V} B = 0,8862 P_P B$$

$$P_{PEC} = 2 P_P \frac{\tau_{CV}}{\tau_V} B = 1,1137 P_P B$$

Die Wahrscheinlichkeit dafür, daß jedes der beiden Vernichtungsquanten eine weitere Wechselwirkung im Kristall macht, wird durch das folgende Integral gegeben

$$A = \frac{\int_{R_1}^{R_2} dR \exp(-\tau R) \int_{-1}^{+1} d(\cos\theta) \{1 - \exp[-\tau_V T(R,\theta)]\} \{1 - \exp[-\tau_V T(R,\pi-\theta)]\}}{2 \int_{R_1}^{R_2} dR \exp(-\tau R)}$$

$$A \approx 1 - 2B$$

Damit erhalten wir dann für die Wahrscheinlichkeit, daß beide Quanten eine bestimmte Wechselwirkung machen, die folgenden Ausdrücke:

$$P_{P2F} = P_P \left(\frac{\tau_{FV}}{\tau_V} \right)^2 A = 0,1964 P_P A$$

$$P_{P2C} = P_P \left(\frac{\tau_{CV}}{\tau_V} \right)^2 A = 0,3101 P_P A$$

$$P_{PFC} = 2 P_P \frac{\tau_{CV} \tau_{FV}}{\tau_V^2} A = 0,4936 P_P A$$

Damit haben wir die Wahrscheinlichkeit P_P in fünf verschiedene Anteile zerlegt. Davon gibt P_{P2F} einen Beitrag zur Photolinie, P_{PEF} trägt zum single-escape-peak bei. Den anderen drei Anteilen entsprechen kontinuierliche Spektren, da mindestens eines der Quanten Compton-Effekt macht. Weitere Wechselwirkungen der Compton-Streu-Quanten wurden nicht mehr berücksichtigt. Für den ungünstigsten, wenn auch sehr unwahrscheinlichen Fall, daß alle Compton-Streu-Quanten ohne weitere Wechselwirkung aus dem Kristall herauslaufen, läßt sich das Energieverlustspektrum für die drei verbleibenden Fälle sofort angeben. Dem Anteil P_{PEC} entspricht ein Kontinuum zwischen den Energien $E_0 - 2mc^2$ und $E_0 - \frac{4}{3}mc^2$. Die Form des Kontinuums ist dabei gegeben durch die Energieverteilung der Rückstoßelektronen beim Compton-Effekt eines Quants mit der Primär-Energie mc^2 . Dem Anteil P_{PFC} entspricht ein Kontinuum gleicher Spektrumsform zwischen den Energien $E_0 - mc^2$ und $E_0 - \frac{1}{3}mc^2$. Dem Anteil P_{P2C} entspricht unter diesen (pessimistischen) Annahmen ein Kontinuum zwischen $E_0 - 2mc^2$ und $E_0 - \frac{2}{3}mc^2$. Die Form dieses Spektrums läßt sich leicht durch Faltung der eben beschriebenen Compton-Verteilung mit sich selbst berechnen.

Es wurde nicht versucht, die kontinuierlichen Spektren unter Ein-schluß weiterer Wechselwirkungen der Compton-Streu-Quanten genauer zu berechnen. Das erscheint für den hier ins Auge gefaßten Anwen-dungszweck aus folgenden Gründen gerechtfertigt:

Hauptzweck dieser Berechnung ist die Dimensionierung des Detektors, d.h. die Berechnung der Ansprechwahrscheinlichkeit in Abhängigkeit von R_1 und R_2 . Die Ansprechwahrscheinlichkeit bestimmt sich aus der

Zahl der Ereignisse, die über einer bestimmten Schwelle von 2 bis 3 MeV liegen. Bei kleinen Energien E_0 des primären Quants trägt die Paarbildung nicht oder nur wenig bei. Wenn die primäre Wechselwirkung eine Paarbildung ist, wird in jedem Fall die primäre Energie E_0 bis auf einen Betrag von höchstens 1,022 MeV an den Kristall abgegeben. Das heißt, daß schon bei einer Primärenergie von 3 bis 4 MeV die Ereignisse in jedem Fall oberhalb der Schwelle liegen werden. Dies rechtfertigt eine gewisse pauschale Behandlung des kontinuierlichen Spektrums, wie dies im folgenden Abschnitt näher ausgeführt wird.

3.6 Konstruktion des Impulshöhenspektrums

In den vorhergehenden Abschnitten wurde für die verschiedenen Wechselwirkungen bzw. Wechselwirkungs-Sequenzen die einzelnen Wahrscheinlichkeiten berechnet. Im einzelnen handelt es sich um die folgenden 14 Größen:

$$P_0; P_F, P_{CF}, P_{CCF}, P_{P2F}; P_{PEF};$$

$$P_{C0}, P_{CC0}, P_{CCC}; P_{PEC}, P_{PFC}, P_{P2C}; P_{CP}, P_{CCP}.$$

Die Summe dieser Größen ergibt 1. P_0 ist die Wahrscheinlichkeit dafür, daß ein im Zentrum des Detektors entstehendes Quant keinerlei Wechselwirkung mit dem Detektor macht. Diese Ereignisse werden also in keinem Fall registriert. Die nächsten 4 Größen tragen alle zu einer Linie bei der gesamten Energie des ursprünglichen Quants bei. Der Bruchteil der Ereignisse, die in die Photolinie fallen, ist deswegen gegeben durch:

$$P_{FTOT} = P_F + P_{CF} + P_{CCF} + P_{P2F}$$

Die Größe P_{PEF} gibt die Intensität der Linie, die um mc^2 unterhalb der Gesamtenergie liegt (single escape). Die restlichen 8 Größen entsprechen verschiedenen Beiträgen zum kontinuierlichen Impulshöhen-

spektrum. P_{C0} ist die Wahrscheinlichkeit dafür, daß das Compton-Quant nach der ersten Wechselwirkung aus dem Kristall entkommt. Das Spektrum der Energieverluste für diese Ereignisse wird durch die Funktion $S_V(E)$ gegeben (vgl. Abschn. 3.3). Entsprechend gibt die Funktion $S_{VV}(E)$ die Impulshöhenverteilung für den durch P_{CC0} gekennzeichneten Beitrag zum Impulshöhenspektrum. Diese beiden Beiträge zum kontinuierlichen Spektrum wurden exakt berechnet. Die verbleibenden 6 Terme repräsentieren die Intensität solcher Beiträge zum Gesamtspektrum, die nicht exakt berechnet wurden, da die nach diesen Wechselwirkungen verbleibenden Streu- bzw. Vernichtungsquanten noch weitere Wechselwirkungen mit dem Kristall gemacht haben. Allerdings läßt sich in jedem dieser Fälle eine ungünstige Abschätzung der Spektrumsform angeben; ungünstig insofern, als sich das Spektrum durch die weiteren, vernachlässigten Wechselwirkungen zu höheren Energien hin verschieben kann. (Dabei bleibt die Form des Spektrums nicht erhalten.) Man erhält diese pessimistische Abschätzung, indem man annimmt, daß die nach der Wechselwirkungssequenz verbleibenden Streu- bzw. Vernichtungsquanten den Kristall ohne weitere Wechselwirkung verlassen. Den 6 verbleibenden Termen entsprechen dann die folgenden Spektren:

$$P_{CCC}: \quad S_{C5}(E)$$

$$P_{PEC}: \quad P_{PEC} \cdot \Sigma(E-E_0+2mc^2, mc^2) \\ (E_0 - 2mc^2 \leq E \leq E_0 - \frac{4}{3} mc^2)$$

$$P_{PFC}: \quad P_{PFC} \cdot \Sigma(E-E_0+mc^2, mc^2) \\ (E_0 - mc^2 \leq E \leq E_0 - \frac{1}{3} mc^2)$$

$$P_{P2C}: \quad P_{P2C} \int dE' \Sigma(E', mc^2) \Sigma(E-E_0+2mc^2-E', mc^2) \\ (E_0 - 2mc^2 \leq E \leq E_0 - \frac{2}{3} mc^2)$$

Der erste dieser Ausdrücke ergibt sich unmittelbar aus den Erläuterungen in Abschnitt 3.4. Die nächsten beiden sind die zur Energie der Vernichtungsquanten mc^2 gehörenden Compton-Kontinua, nur in der Energie so verschoben, daß sie bei E_0-2mc^2 bzw. E_0-mc^2 beginnen. Der letzte Ausdruck schließlich ist das am Ende von Abschn. 3.5 erläuterte Faltungs-Integral. Dieser Teil des kontinuierlichen Spektrums hat die untere Grenze E_0-2mc^2 .

Bei den beiden verbleibenden Termen, P_{CP} und P_{CCP} , sind im Endzustand zwei Vernichtungsquanten vorhanden. Es wird also mindestens die Energie $E_0 - 2mc^2$ an den Detektor abgegeben. Im Sinne einer pessimistischen Abschätzung wäre diesen beiden Beträgen daher eine Linie bei der Energie $E_0 - 2mc^2$ zuzuordnen (double escape). Wie im Abschnitt 3.5 erwähnt, ist jedoch die Wahrscheinlichkeit dafür, daß beide Quanten ohne weitere Wechselwirkung den Kristall verlassen, vernachlässigbar klein. Tatsächlich werden sich diese Ereignisse daher zu höheren Energien verschieben. Um dem wenigstens auf pauschale Art Rechnung zu tragen, wurde der Beitrag $P_{CP} + P_{CCP}$ stattdessen der Linie bei $E_0 - mc^2$ zugeschlagen, d.h. es wurde angenommen, daß im Mittel eines der beiden Vernichtungsquanten vollständig absorbiert wird. Nach dem eben Erläuterten läßt sich unmittelbar ein "pessimistisches Spektrum" berechnen. Statt des differentiellen Spektrums geben wir das integrale an, d.h. zu jeder Energie E den Bruchteil der Ereignisse, für die der Energieverlust im Kristall $>E$ ist. Dies ist naheliegend, da der Bruchteil der Ereignisse, die über einer gewissen Schwelle liegen, der primär interessierende Wert ist. Dieses integrale Spektrum, das mit $S_{WMIN}(E)$ bezeichnet wird, beginnt bei der Energie 0 mit dem Wert $1 - P_0$ und hat bei der Gesamtenergie E_0 den Wert P_{FTOT} .

Von den vier bei der Berechnung des integralen Spektrums nur näherungsweise behandelten Termen P_{CCC} , P_{P2C} , P_{CP} und P_{CCP} ist der erste der größte. Das Spektrum der zu P_{CCC} gehörenden Ereignisse erstreckt sich auch zu niedrigen Impulshöhen, während die der anderen oberhalb von $E_0 - 2mc^2$ liegen. Um eine Abschätzung der Ungenauigkeit des integralen Spektrums S_{WMIN} in der Nähe der Schwelle zu erhalten, wurde als eine optimistische Annahme zusätzlich das Spektrum berechnet, das sich ergibt, wenn die Streuquanten nach dreifacher Comptonstreuung vollständig absorbiert werden, d.h. wenn man P_{CCC} zu P_{FTOT} addiert. Das zugehörige Spektrum wird mit $S_{WMAX}(E)$ bezeichnet. Das tatsächliche integrale Spektrum sollte zwischen S_{WMAX} und S_{WMIN} liegen.

Die so berechneten Spektren sind Verteilungen der an den Kristall abgegebenen Energie. Die am Ausgang eines Szintillationszählers gemessenen elektrischen Signale unterliegen zusätzlichen statistischen Schwankungen der Lichtausbeute im Kristall, der Anzahl der Photoelek-

tronen und der Verstärkung im Photomultiplier. Mit der Verteilung dieser Größen wäre das berechnete Spektrum daher noch zu falten. Da diese Verteilung von zusätzlichen experimentellen Einzelheiten, vor allem der Wahl des Photomultipliers und der Kopplung zwischen Kristall und Photokathode abhängt, wurde diese Faltung in dem vorliegenden Programm nicht durchgeführt.

4. Beschreibung des Programmablaufs

Vorbemerkung: In diesem Abschnitt soll das in Anhang D abgedruckte Programm erläutert werden. Es wurde stufenweise aufgebaut; deswegen ist die Nomenklatur nicht völlig einheitlich und - in der Retrospektive - nicht überall leicht verständlich. In den vorangegangenen Abschnitten wurde demgegenüber eine einheitliche Bezeichnungsweise verwendet, die deshalb mit der im Programm verwendeten nicht immer übereinstimmt. Dies schien zur besseren Verständlichkeit zweckmäßig, andererseits schreckten wir vor dem Arbeitsaufwand (und den wohl unvermeidlichen Fehlern) einer durchgehenden nachträglichen Programmänderung zurück.

Das Programm berechnet die kontinuierlichen Spektren an diskreten, äquidistanten Werten der Impulshöhe E . Als Schrittweite ΔE wurde ein bestimmter Bruchteil der Comptonkante $E_m = 2E_0^2 / (mc^2 + 2E_0)$ gewählt, die zur Primärenergie E_0 gehört. Dies deshalb, weil die differentiellen Spektren bei E_m z.T. eine Spitze bzw. Unstetigkeit haben, dieser Wert also in jedem Fall miterfaßt werden sollte.

4.1 Das Hauptprogramm

Anweisung 1 bis 32:

Hier werden allgemeine Vereinbarungen getroffen und eine Reihe von Konstanten definiert. Die Größe IMAX in Zeile 25 bestimmt den Abstand der Energiewerte, für die die Spektren berechnet werden: $\Delta E = E_m / \text{IMAX}$. Die Hilfsfunktionen T1 und T2 (Zeilen 19 und 20) werden zur Berechnung der Funktion $T(R, \theta)$ benötigt (vgl. Anhang A).

Anweisung 33 bis 48:

Einlesen, Kontrolle und Ausdruck der Eingabedaten.

Anweisung 49 bis 63:

Berechnung einiger zusätzlicher Konstanten, die von den Eingabewerten abhängen, darunter die linearen Schwächungskoeffizienten $\tau_F(E_0)$ usw.

Anweisung 64 bis 77:

Berechnung und Ausgabe von P_O , P_C , P_F und P_P .

Anweisung 78 bis 135:

Berechnung der Funktionen $V(E)$, $S_V(E)$, $S_C(E)$ und $S_{C3}(E)$ entsprechend den Gln. (7), (8), (11) und (12) der Abschnitte 3.2 und 3.3. Für die Integration in Gl. (7) wird eine Bibliotheks-Routine (QA05AD) verwendet; die Integration in Gl. (13) benutzt die Simpson-Formel.

Anweisung 136 bis 173:

Berechnung und Ausdruck von P_{CO} , P_{CC} , P_{CP} und P_{CF} entsprechend Gl. (9) und (10) in Abschnitt 3.2 mit der Simpson-Formel.

Anweisung 174 bis 186:

Berechnung der linearen Schwächungskoeffizienten für alle Energien der Tabelle.

Anweisung 187 bis 239:

Berechnung der Größe W gemäß Gl. (13) in Abschnitt 3.4. Das Dreifach-Integral wird mit der Gauß'schen Formel berechnet.

Anweisung 240 bis 282:

Berechnung der Größen W_{CC0} gemäß Gl. (14) in Abschnitt 3.4.

Anweisung 283 bis 313:

Berechnung von S_{VV} , P_{CC0} , P_{CCF} , P_{CCC} und P_{CCP} gemäß Gln. (15) bis (16).

Anweisung 314 bis 338:

Berechnung von S_{C5} gemäß Gl. (18) in Abschnitt 3.4.

Anweisung 339 bis 364:

Berechnung der Größe B in Gl. (19) und der Wahrscheinlichkeiten für die verschiedenen Sekundärprozesse nach Paarbildung gemäß Abschnitt 3.5 sowie Ausdruck der Ergebnisse.

Anweisung 365 bis 430:

Berechnung der integrierten Impulshöhenspektren wie in Abschnitt 3.6 beschrieben. Das Integral, das dem Term P_{P2C} entspricht, wurde dabei abschnittsweise durch analytische Ausdrücke approximiert, um nicht bei jedem Wert von E_0 dasselbe Doppelintegral berechnen zu müssen (Anweisung 387 bis 408),

Anweisung 431 bis 488:

Tabellarischer Ausdruck der Spektren. Die Bedeutung der einzelnen Größen wird in Abschnitt 4.4 beschrieben.

4.2 Die Unterprogramme

TAUCF(X)

Dieses Unterprogramm berechnet die linearen Schwächungskoeffizienten bei der Energie X für die Materialien BGO oder Bariumfluorid.

SIE(E1,E2)

Dieses Unterprogramm berechnet das Energiespektrum der Comptonelektronen bei der Energie E1. E2 ist die Energie des Gammaquants vor der Streuung.

FU(R)

Dieses Unterprogramm berechnet den Integranden des Integrals in Gl. (7), Abschnitt 3.2.

RU(R) und UF(R)

Diese beiden Unterprogramme dienen zur Berechnung des Zweifachintegrals von Gl. (19), Abschnitt 3.5. UF(R), das von RU(R) aufgerufen wird, berechnet den Integranden des inneren Integrals. RU(R) führt das Integral unter Benutzung der Simpson-Formel aus und berechnet so den Integranden des äußeren Integrals. Das äußere Integral wird mit Hilfe der Bibliotheksroutine QA05AD bestimmt.

4.3 Eingabe

Das Programm erfordert vier Eingabegrößen:

MATE Materialkennzahl, die für BGO gleich 1 und für BaF₂ gleich 2 zu setzen ist.

EO Primäre Gamma-Energie in MeV.

R1 Innenradius der Hohlkugel in cm.

R2 Außenradius der Hohlkugel in cm.

4.4 Ausgabe

Das Beispiel einer Programmausgabe findet sich in Anhang E. Zunächst werden die Eingabegrößen ausgedruckt, anschließend die linearen Schwächungskoeffizienten bei der Primärenergie. TAUE bezeichnet den totalen Schwächungskoeffizienten, die zusätzlichen Buchstaben C, F und P kennzeichnen Comptoneffekt und Paarbildung. Die sich daran anschließenden Wahrscheinlichkeiten für die einzelnen Prozesse sind in Ab-

schnitt 3.6 erklärt. E3 ist die obere Grenze des Comptonkontinuums nach zweifacher, E5 entsprechend nach dreifacher Comptonstreuung.

An diese Größen schließt sich die Tabelle der kontinuierlichen Spektren an. Die Schrittweite beträgt $E_m/IMAX$. In dem gezeigten Beispiel ist $IMAX = 100$. Die einzelnen Spalten der Tabelle bedeuten:

- EI Energie in MeV.
- CS Primäres Comptonpektrum in MeV^{-1} . Das Spektrum ist auf PC normiert.
- SV Funktion $S_V(E)$ in MeV^{-1} , normiert auf PC0 (vgl. Gl. 8, Abschnitt 3.2).
- SC Funktion $S_C(E)$ in MeV^{-1} , normiert auf PCC (vgl. Gl. 11, Abschnitt 3.2).
- SC3 Funktion $S_{C3}(E)$ in MeV^{-1} , normiert auf PCC (vgl. Gl. 12, Abschnitt 3.3). Die Maximalenergie dieses Spektrums beträgt E3.
- SVV Funktion $S_{VV}(E)$ in MeV^{-1} , normiert auf PCC0 (vgl. Gl. 15, Abschnitt 3.4).
- SC5 Funktion $S_{C5}(E)$ in MeV^{-1} , normiert auf PCCC (vgl. Gl. 18, Abschnitt 3.4). Die Maximalenergie dieses Spektrums beträgt E5.
- SWMA, SWMI Die in Abschnitt 3.6 erläuterten Abschätzungen des integrierten Gesamtspektrums

Die Energiewerte für diese Tabelle sind bei einem runden Wert für die Primärenergie im allgemeinen sehr "unrunde" Zahlen. Sie wurden, wie erwähnt, so gewählt, damit die Comptonkante, an der die Teilspektren z.T. unstetig sind oder Spitzen haben, miterfaßt wird. Um die integrierten Spektren für runde Energiewerte zu erhalten, werden SWMA und SWMI anschließend durch Interpolation bestimmt und in einer weiteren Tabelle ausgedruckt.

5. Exemplarische Ergebnisse

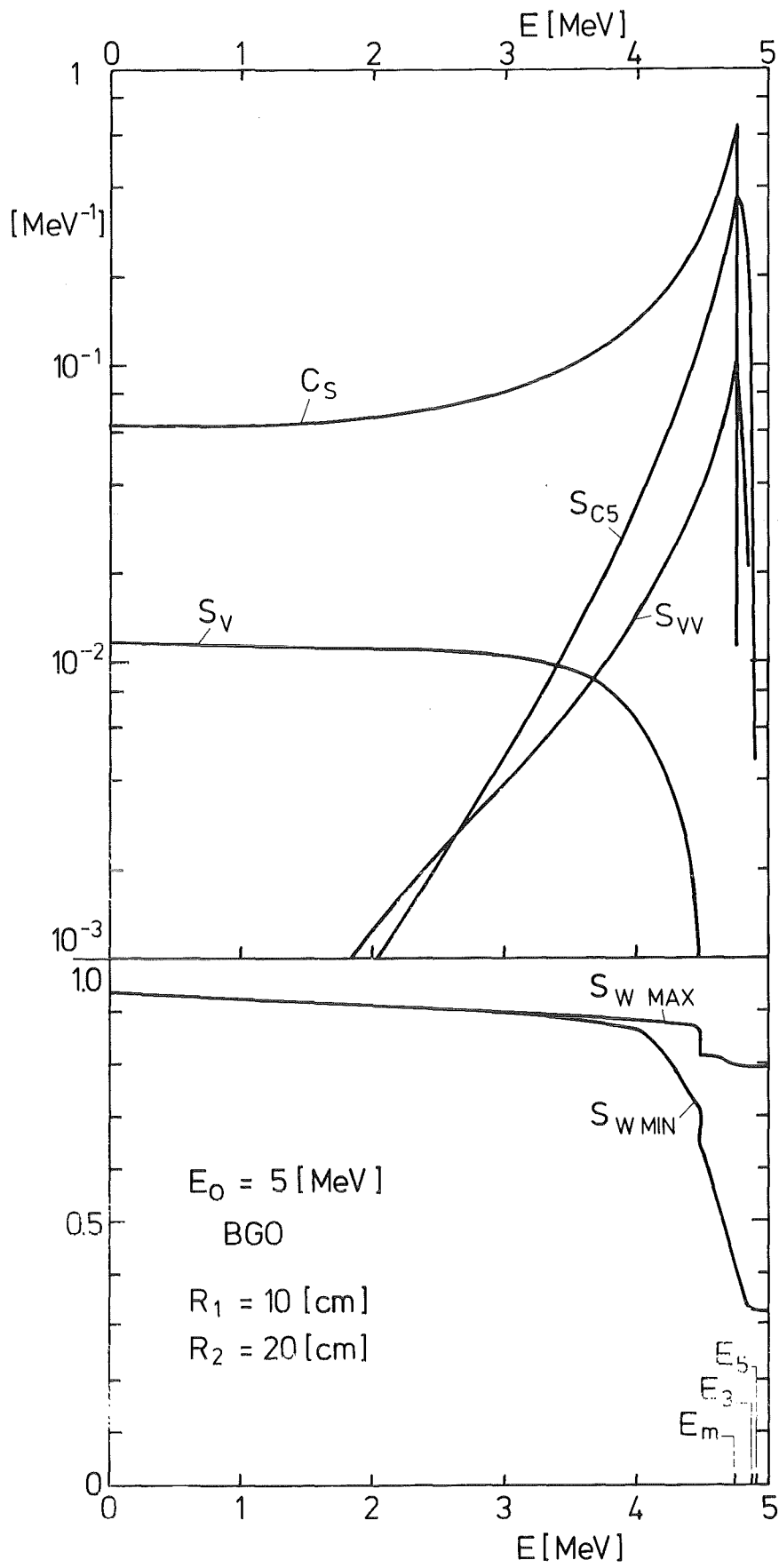
Für das in Anhang E gezeigte Beispiel ($E_0 = 5$ [MeV]; BGO) sind in Abb. 8 die kontinuierlichen Spektren in linearem Maßstab dargestellt. Der untere Teil zeigt die beiden Abschätzungen S_{WMIN} und S_{WMAX} der integralen Spektren. Das wahre Spektrum muß zwischen den beiden Kurven liegen. Unterhalb von etwa 3 MeV stimmen die beiden Kurven fast überein, so daß die Unsicherheit im Bereich der Schwelle nur gering ist. Die Fotolinie enthält mindestens 33,1 % und höchstens 79,3 % der Ereignisse.

Einige der differentiellen Spektren sind im oberen Teil in logarithmischem Maßstab dargestellt. $C_S(E)$ ist das primäre Comptonkontinuum. $S_V(E)$ stellt das Spektrum der Energieverluste für solche Ereignisse dar, bei denen das Comptonstreuquant nach der ersten Streuung den Kristall verläßt. Man sieht an dem großen Unterschied zwischen beiden Kurven bei hohen Energieverlusten, d.h. niedrigen Energien des Streuquants, daß diese Quanten kaum ohne weitere Wechselwirkung den Kristall verlassen können.

Die Kurve $S_{VV}(E)$ zeigt das entsprechende Energieverlustspektrum für Ereignisse, bei denen das Streuquant nach zweimaliger Comptonstreuung aus dem Kristall entkommt. Man sieht, daß hier überwiegend ein Gesamtenergiebetrag in der Nähe der Comptonkante an den Kristall abgegeben wird. S_V und S_{VV} sind Beiträge zum kontinuierlichen Gesamtspektrum.

Die Kurve $S_{C5}(E)$ stellt das Spektrum für die Ereignisse dar, bei denen das Quant dreimal hintereinander gestreut wird. Über das weitere Schicksal des Streuquants ist dabei nichts gesagt, d.h. durch weite-

Abb. 8 Berechnete kontinuierliche Spektren für $E_0 = 5$ [MeV] und einen Detektor aus BGO. Im oberen Teil sind das primäre Comptonkontinuum sowie die differentiellen Teilspektren S_V , S_{VV} und S_{C5} dargestellt. Der untere Teil zeigt die obere und untere Schranke für die integralen Energieverlustspektren.



re Wechselwirkungen kann sich das Spektrum noch zu höheren Energien (bis in die Photolinie) verschieben. Auch hier liegt der größte Teil der Ereignisse in der Nähe der Comptonkante E_m .

Abb. 9 zeigt dieselben Spektren für eine Primärenergie von $E_0=2$ [MeV] und BaF_2 als Detektormaterial. Qualitativ ergibt sich ein sehr ähnliches Bild. In der Photolinie liegen in diesem Fall mindestens 30,5 % und höchstens 63,1 % aller Ereignisse. Diese (in Anbetracht der niedrigeren Energie) verhältnismäßig ungünstigen Werte sind in erster Linie eine Folge der geringen Dichte von BaF_2 verglichen mit BGO, da die Kristalldimensionen dieselben sind wie im ersten Beispiel.

Das Programm wurde zu ausführlichen Berechnungen zur Dimensionierung eines Detektors für (n,γ) -Messungen im keV-Bereich benutzt. Die Ergebnisse sind veröffentlicht ⁶⁾.

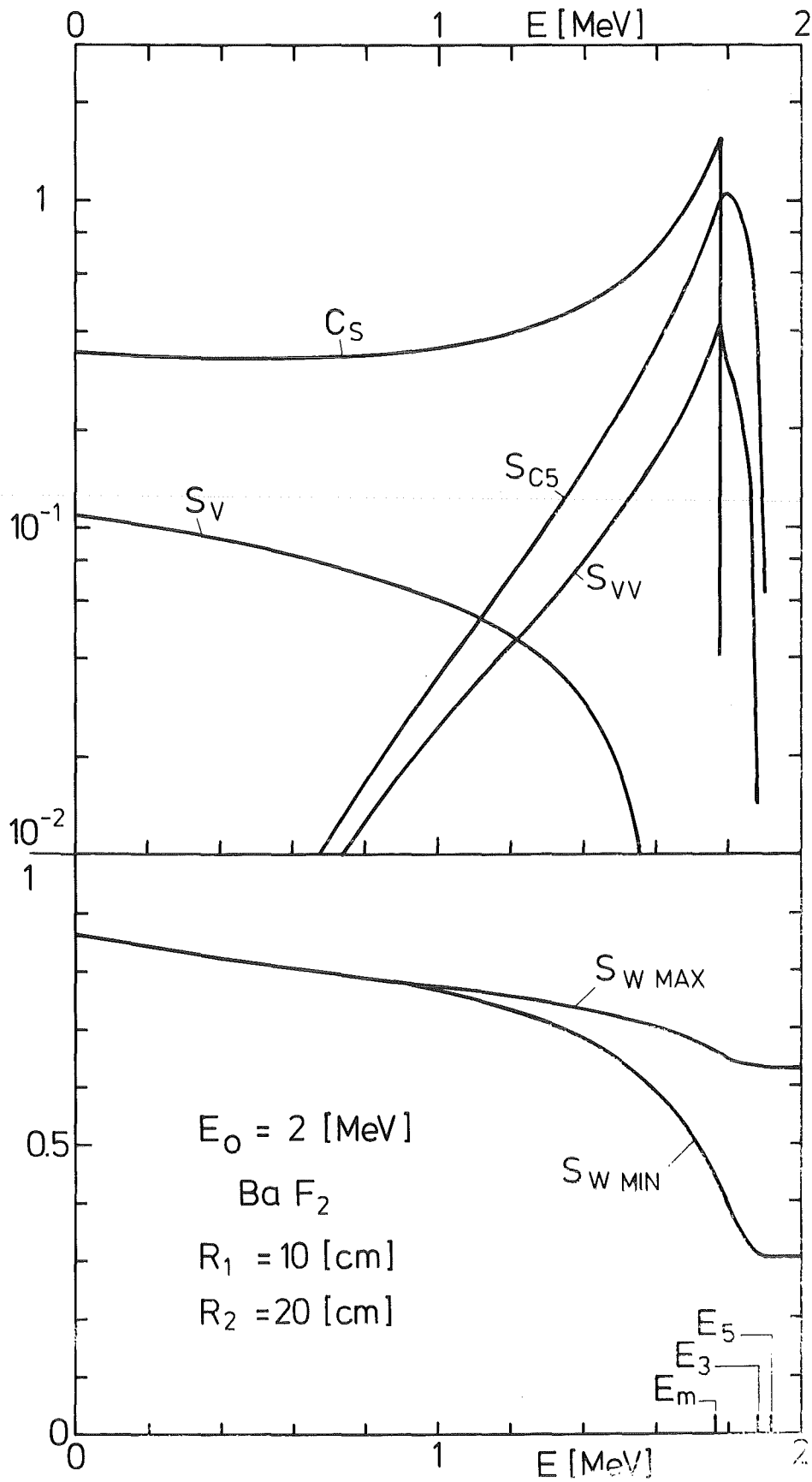


Abb. 9 Berechnete kontinuierliche Spektren für $E_0 = 2$ [MeV] und einen Detektor aus BaF₂. Die Darstellung ist dieselbe wie in Abb. 8.

Literatur

1. F. Käppeler, G. Schatz, K. Wisshak, KfK-Bericht 3472 (1983)
2. C.M. Davisson, Interaction of γ -radiation with matter, in Alpha-, Beta-, and Gamma-Ray Spectroscopy, K. Siegbahn Ed., 2nd ed., 1965, Vol. 1, p. 37 ff. North-Holland
3. E.F. Plechaty, D.E. Cullen, R.J. Howerton, UCRL-50400, Vol. 6, Revision 1 (1975)
4. E. Storm, H. I. Israel, Nucl. Data Tables A7 (1970) 565
5. W.J. Veigele, Atom. Data Tables 5 (1973) 51
6. K. Wisshak, F. Käppeler, G. Schatz, KfK-Bericht 3580 (1983) und Nucl. Instr. Meth., im Druck

Anhang A

Berechnung der Funktion $T(R, \theta)$

In diesem Abschnitt soll die Strecke T berechnet werden, die ein vom Mittelpunkt des Detektors ausgehendes Quant, das im Abstand R vom Mittelpunkt um den Winkel θ gestreut wird, nach der Streuung noch im Detektor zurücklegt. Die geometrischen Verhältnisse sind in Abb. A1 verdeutlicht. Offenbar sind zwei Fälle zu unterscheiden, je nachdem ob der Streustrahl die innere Hohlkugel durchsetzt oder nicht. Die Grenze zwischen den beiden Fällen liegt bei dem Streuwinkel θ_g , den man aus dem rechtwinkligen Dreieck MES leicht berechnet:

$$\frac{R_1}{R} = \sin(\pi - \theta_g) = \sin \theta_g,$$

da $\overline{MD} = R$.

Für kleinere Streuwinkel ergibt der Kosinussatz im Dreieck AMS

$$R_2^2 = R^2 + T^2 + 2RT \cos \theta,$$

$$T = R \cos \theta + \sqrt{R_2^2 + R^2 (\cos^2 \theta - 1)}.$$

Bei größeren Streuwinkeln findet man ebenso

$$\overline{BS} = -R \cos \theta + \sqrt{R_2^2 + R^2 (\cos^2 \theta - 1)}.$$

Davon ist noch die Strecke \overline{CD} abzuziehen. Hierzu ergibt der Sinussatz im Dreieck DMS

$$\sin(\angle MDS) = \frac{R}{R_1} \sin(\pi - \theta) = \frac{R}{R_1} \sin \theta,$$

$$\begin{aligned} \overline{BC} &= 2 R_1 \cos(\angle CDM) = 2 R_1 |\cos(\angle MDS)| \\ &= 2 \sqrt{R_1^2 + R^2 (\cos^2 \theta - 1)}. \end{aligned}$$

Mit der Abkürzung $\cos\theta = u$ und den beiden Hilfsfunktionen

$$T_1(u, R, S_1) = \sqrt{R^2 + S^2(u^2 - 1)} ,$$

$$T_2(u, R, S) = \sqrt{R^2 + S^2(u^2 - 1)} - uS$$

läßt sich die gesuchte Funktion $T(u, R)$ schreiben:

$$T(u, R) = T_2(u, R_2, R) \text{ falls } \theta \leq \theta_g \text{ oder } u \geq \sqrt{1 - R_1^2/R^2} ,$$

$$T(u, R) = T_2(u, R_2, R) - 2 T_1(u, R_1, R) \text{ falls } u < \sqrt{1 - R_1^2/R^2} .$$

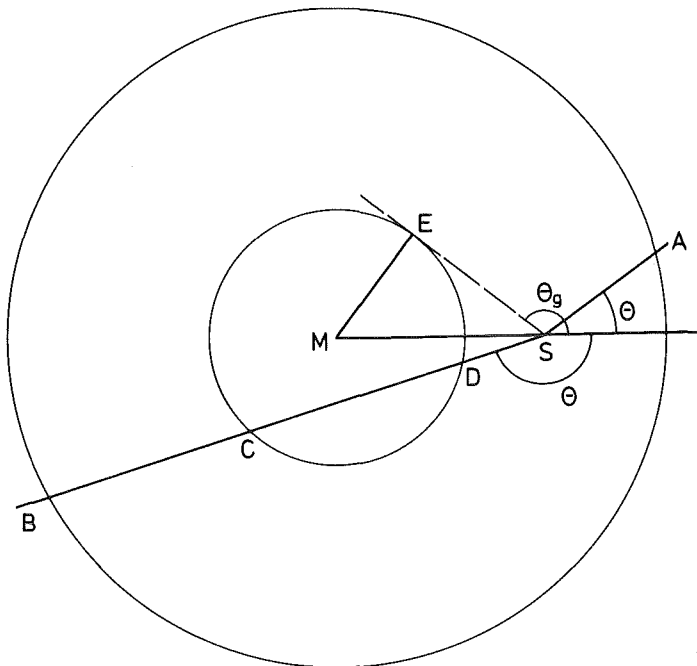


Abb. A1 Geometrische Verhältnisse bei der Berechnung der Funktion $T(R, \theta)$.

Anhang B

Geometrische Verhältnisse bei doppelter Compton-Streuung

In Abschnitt 3.4 wird die Strecke $\sigma = T(\rho, \phi)$ benötigt. Sie entspricht der Strecke \overline{AS}_2 in Abb. 6 (s. Seite 19). Sie hängt ab von den beiden Streuwinkeln θ_1 und θ_2 , vom Winkel ψ zwischen den beiden Streuebene, vom Ort der ersten Streuung und von der Strecke $s = \overline{S_1S_2}$ zwischen den Orten der beiden Streuprozesse. Der Kosinussatz im Dreieck MS_1S_2 ergibt

$$\rho^2 = (\overline{MS}_2)^2 = r^2 + s^2 + 2 rs \cos \theta_1 \quad \text{mit} \quad r = \overline{MS}_1.$$

Mit Hilfe des Sinussatzes im gleichen Dreieck ergibt sich für

$$\delta = \sphericalangle BS_2C = \sphericalangle MS_2S_1$$

$$\sin \delta = \frac{r}{\rho} \sin \theta_1.$$

Im oberen Teil von Abb. 6 ist ein Ausschnitt einer Kugel um S_2 durch den Punkt A gezeigt. In dem sphärischen Dreieck $AB'C'$ entspricht die Seite AC' dem gesuchten Winkel ϕ , die Seite AB' dem zweiten Streuwinkel θ_2 und die Seite $B'C'$ dem eben berechneten Winkel δ . Der $\sphericalangle AB'C'$ ist der Winkel ψ zwischen den beiden Streuebene. Dann folgt nach dem Kosinussatz der sphärischen Trigonometrie

$$\cos \phi = \cos \delta \cos \theta_2 + \sin \delta \sin \theta_2 \cos \psi.$$

Damit sind die beiden in Abschnitt 3.4 benutzten Größen ρ und ϕ berechnet.

Anhang C

Einfluß der Polarisierung bei der doppelten Compton-Streuung

Die Strahlung, die in dem Detektor nachgewiesen werden soll, ist von der Quelle her unpolarisiert. Durch eine Compton-Streuung wird aber eine Polarisierung erzeugt, und diese Polarisierung hat Einfluß auf die Winkelverteilung der Intensität bei der zweiten Streuung. Wie in Abschnitt 3.4 erwähnt, hängt diese Intensitätsverteilung deswegen nicht nur vom Winkel der zweiten Streuung, sondern auch vom Winkel zwischen den beiden Streuebene ab. Diese Abhängigkeit soll in diesem Anhang berechnet werden. Da es uns allein auf die Form der Winkelverteilung ankommt, vernachlässigen wir im folgenden alle Faktoren, die nicht von den beiden Streuwinkeln θ_1 und θ_2 oder dem Winkel ψ zwischen den beiden Streuebene abhängen.

Für den differentiellen Streuquerschnitt beim Compton-Effekt wird von Evans ¹⁾ der folgende Ausdruck angegeben:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} \propto \frac{E_0}{E_1} + \frac{E_1}{E_0} - 2 + 4 \cos^2 \beta \quad (C1)$$

Hierbei ist E_0 die Energie vor, E_1 die nach der Streuung und β der Winkel zwischen den E-Vektoren der Wellen vor und nach der Streuung. Wir bezeichnen mit \vec{n}_i die Einheits-Vektoren in Ausbreitungsrichtung der Quanten nach der i-ten Streuung und wählen ein Koordinaten-System, dessen x-Achse mit \vec{n}_1 zusammenfällt und dessen y-Achse in der Ebene der ersten Streuung liegt (vgl. dazu Abb. C1). Mit \vec{P}_i ($i = 0, 1, 2$) bezeichnen wir die Polarisations-Vektoren, die auf der jeweiligen Ausbreitungsrichtung \vec{n}_i senkrecht stehen. Die Indizes p und s bezeichnen die zur Streuebene parallelen bzw. zu ihr senkrechten Komponenten der Polarisations-Vektoren. In dem gewählten Bezugssystem haben die insgesamt neun Einheits-Vektoren die folgenden cartesianischen Koordinaten:

$$\begin{aligned} \vec{n}_0 &= (\cos \theta_1, -\sin \theta_1, 0) \\ \vec{n}_1 &= (1, 0, 0) \\ \vec{n}_2 &= (\cos \theta_2, -\sin \theta_2 \cos \psi, \sin \theta_2 \sin \psi) \\ \vec{P}_{0s} &= (0, 0, 1) \end{aligned}$$

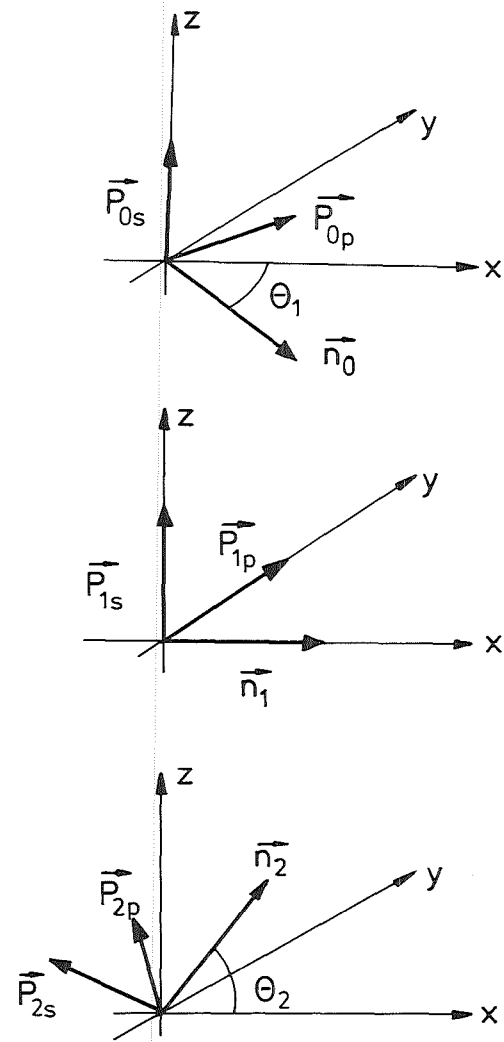
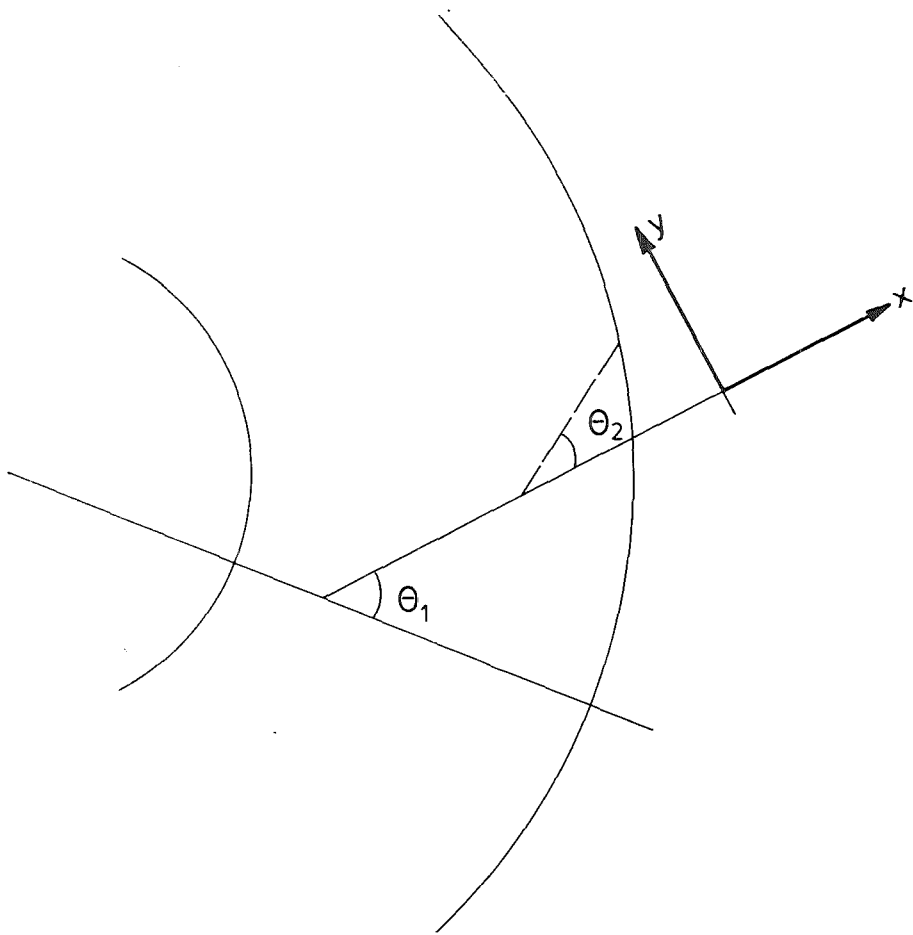


Abb. C1 Links: Verdeutlichung des gewählten Koordinatensystems. Die z -Achse steht auf der Zeichenebene senkrecht. Rechts: Lage der Richtungsvektoren \vec{n} und Polarisationsvektoren \vec{p} im cartesischen Koordinatensystem.

$$\begin{aligned} \vec{P}_{op} &= (\sin \theta_1, \cos \theta_1, 0) \\ \vec{P}_{1s} &= (0, 0, 1) \\ \vec{P}_{1p} &= (0, 1, 0) \\ \vec{P}_{2s} &= (0, \sin \psi, \cos \psi) \\ \vec{P}_{2p} &= (-\sin \theta_2, -\cos \theta_2 \cos \psi, \cos \theta_2 \sin \psi). \end{aligned}$$

Dabei ist ψ der Winkel zwischen den beiden Streuebene.

Mit I_i ($i = 0, 1, 2$) bezeichnen wir die Intensitäten nach der i -ten Streuung, wobei die Indizes p und s dieselbe Bedeutung haben wie oben. Die Intensitäten nach der ersten Streuung lassen sich z.B. für die auf der Streuebene senkrechte Polarisation mit Hilfe von Gl. (C 1) unmittelbar angeben (wobei wieder polarisationsunabhängige Faktoren weggelassen werden):

$$I_{1s} = I_{os} \left[\frac{E_o}{E_1} + \frac{E_1}{E_o} - 2 + 4 (\vec{P}_{os} \cdot \vec{P}_{1s})^2 \right] + I_{op} \left[\frac{E_o}{E_1} + \frac{E_1}{E_o} - 2 + 4 (\vec{P}_{op} \cdot \vec{P}_{1s})^2 \right].$$

Einen entsprechenden Ausdruck erhält man für I_{1p} , wenn man den Polarisations-Vektor \vec{P}_{1s} durch \vec{P}_{1p} ersetzt. Da die ursprüngliche Strahlung unpolarisiert ist, setzen wir

$$I_{os} = I_{op} = \frac{1}{2}.$$

Mit Hilfe der angegebenen Ausdrücke für die Polarisationsvektoren erhält man dann leicht

$$\begin{aligned} I_{1s} &= \frac{E_o}{E_1} + \frac{E_1}{E_o}, \\ I_{1p} &= \frac{E_o}{E_1} + \frac{E_1}{E_o} - 2 \sin^2 \theta_1. \end{aligned}$$

Dieselben Schritte müssen nun noch einmal wiederholt werden. Für I_{2s} erhält man z.B. ganz analog

$$I_{2s} = I_{1s} \left[\frac{E_1}{E_2} + \frac{E_2}{E_1} - 2 + 4 (\vec{P}_{1s} \cdot \vec{P}_{2s})^2 \right] + I_{1p} \left[\frac{E_1}{E_2} + \frac{E_2}{E_1} - 2 + 4 (\vec{P}_{1p} \cdot \vec{P}_{2s})^2 \right].$$

Die Auswertung dieses und des entsprechenden Ausdruckes für I_{2p} führt auf

$$I_2 = \left[\frac{E_0}{E_1} + \frac{E_1}{E_0} - \sin^2 \theta_1 \right] \cdot \left[\frac{E_1}{E_2} + \frac{E_2}{E_1} - \sin^2 \theta_2 \right] + \sin^2 \theta_1 \sin^2 \theta_2 \cos 2\Psi.$$

Damit ergibt sich für die in Abschnitt 3.4 benutzte Funktion $f(\Psi)$, die bezüglich Ψ im Intervall zwischen 0 und 2π normiert ist, folgender Ausdruck

$$f(\Psi) = \frac{1}{2\pi} [1 + D_1 D_2 \cos 2\Psi]$$

$$D_1 = \left[\frac{E_0}{E_1} + \frac{E_1}{E_0} - \sin^2 \theta_1 \right]^{-1} \sin^2 \theta_1$$

$$D_2 = \left[\frac{E_1}{E_2} + \frac{E_2}{E_1} - \sin^2 \theta_2 \right]^{-1} \sin^2 \theta_2$$

Literatur:

1. R.D. Evans, Handbuch d. Physik, Bd. 34, S. 221 ff.

Anhang D

```
C-----  
C  
C          G A M M A E F F                29. 02. 1984  
C-----  
C  
C  Eingabe :  
C  =====  
C  
C  1. Zeile :  MATE                        FORMAT( 6X, I4 )  
C  
C  2. Zeile :  E0, R1, R2                  FORMAT( 3 ( 4X, F6.2. ) )  
C-----  
C  
C          E0  =  ENERGIE-WERT  
C          R1  =  KLEINERER KUGELRADIUS  
C          R2  =  GROESSERER KUGELRADIUS  
C-----
```

```
1      PROGRAM   GAMEFF
2      IMPLICIT  DOUBLE PRECISION (A-H,O-Y)
3      EXTERNAL  FU,RU
4      DIMENSION SV(0:100),SC(0:100),SP(0:100),V(0:100),CS(0:100)
5      DIMENSION SVV(0:200),SC5(0:200),WS(0:200),SWMI(0:200)
6      DIMENSION SC3(0:200),EI(0:200),FTAU(0:200),CTAU(0:200)
7      DIMENSION W(0:20300),PTAU(0:200),TTAU(0:200),SWMA(0:200)
8      DIMENSION GA(10),GX(10),EP(0:100),SWMAP(0:100),SWMIP(0:100)
9      COMMON   /CO/C1,C2,C3,C4,R1,R2,E0,FI,UI
10     COMMON   /EA/ALFA,GAMMA,ALFA2,C1P2A
11     COMMON   /EY/ABSERR,RELEERR,ERROR,LEVEL,IFLAG,XYZ
12     COMMON   /PE/PO,PC,PF,FS,VPO
13     COMMON   /PS/PCO,PCC,PCF,PCP
14     COMMON   /TA/TAU,TAUC,TAUF,TAUP,MATE
15     COMMON   /TE/TAUE,TAUCE,TAUFE,TAUPE
16     COMMON   /TF/TAUFI,TAUCFI,TAUFFI,TAUPFI
17     DATA    GA/.03333567D0,.07472568D0,.10954318D0,.13463336D0,
@         .14776211D0,.14776211D0,.13463336D0,.10954318D0,
@         .07472568D0,.03333567D0/
18     DATA    GX/.01304674D0,.06746832D0,.16029521D0,.28330230D0,
@         .42556283D0,.57443717D0,.71669770D0,.83970479D0,
@         .93253168D0,.98695326D0/
19     T1(X1,W1,A1)=DSQRT(A1*A1+(W1*W1-1.D0)*X1*X1)
20     T2(X2,W2,A2)=DSQRT(A2*A2+(W2*W2-1.D0)*X2*X2)-X2*W2

21     PI=3.141592653589793D0
22     EPSILO=1.D-10
23     RELEERR=1.D-10
24     ABSERR=0.D0
25     IMAX=100
26     C1=1.D0
27     C2=2.D0
28     C3=3.D0
29     C4=4.D0
30     D333=C1/C3
31     C511=0.511D0
32     D511=1.D0/C511
33     READ(5,FMT='(6X,I4)') MATE
34     READ(5,FMT='(3(4X,F6.2))') E0,R1,R2
35     IF (DABS(R2-R1).LT.EPSILO) THEN
36         WRITE(6,FMT='(//25X,''R2 IST GLEICH R1.'')')
37         GOTO 99
38     ENDIF
39     WRITE(6,FMT='(''1'',24X,''E0 ='',F7.2/25X,11(''=''))') E0
40     WRITE(6,FMT='(//25X,''R1 ='',F7.2/25X,''R2 ='',F7.2)') R1,R2
41     IF (MATE.GT.0) THEN
42         WRITE(6,FMT='(/25X,''MATERIAL - KENNZIFFER :'',I3)') MATE
43         IF (MATE.EQ.1) WRITE(6,FMT='(''+'',53X,''(BI-GE)'')')
44         IF (MATE.EQ.2) WRITE(6,FMT='(''+'',53X,''(BA-F2)'')')
45     ELSE
46         WRITE(6,FMT='(/25X,''MATERIAL-KENNZIFFER UNGUELTIG.'')')
47         GOTO 99
48     ENDIF
49     ALFA=E0*D511
50     ALFA2=ALFA*ALFA
```



```
51      C1P2A=C1+C2*ALFA
52      GAMMA=C1+ALFA
53      FS=C2*(C1+ALFA)*(C1+ALFA)/(ALFA*C1P2A)
@ - C2*ALFA2/(C1P2A*C1P2A) + C2/ALFA
@ + (C1-C2*GAMMA/ALFA2)*DLOG(C1P2A)
54      FS=FS*E0

55      CALL TAUCF(E0)
56      TAUCE=TAUC
57      TAUFE=TAUF
58      TAUPE=TAUP
59      TAUE=TAU
60      WRITE(6,FMT='(/25X, ''TAUE = '',1PE12.4)') TAUE
61      WRITE(6,FMT='(25X, ''TAUCE = '',1PE12.4)') TAUCE
62      WRITE(6,FMT='(25X, ''TAUFE = '',1PE12.4)') TAUFE
63      WRITE(6,FMT='(25X, ''TAUPE = '',1PE12.4)') TAUPE

64      DEPS=(C1P2A-C1)/(C1P2A*IMAX)
65      PO=DEXP(TAUE*(R1-R2))
66      X=(C1-PO)/TAUE
67      PC=X*TAUCE
68      PF=X*TAUFE
69      PP=X*TAUPE
70      EX=TAUE*R1
71      IF (EX.GT.174.D0) EX=174.D0
72      EX=DEXP(EX)
73      VPO=EX/X
74      WRITE(6,FMT='(/25X, ''PO = '',1PE12.4)') PO
75      WRITE(6,FMT='(25X, ''PC = '',1PE12.4)') PC
76      WRITE(6,FMT='(25X, ''PF = '',1PE12.4)') PF
77      WRITE(6,FMT='(25X, ''PP = '',1PE12.4)') PP

78      E3=C4*E0/(C511+C4*E0)
79      KM=IDINT(E3/DEPS)
80      E3=E3*E0
81      A=E0*DEPS
82      DO 6 J=0,KM
83      EI(J)=A*J
84      IF (J.LE.IMAX) THEN
85          EB=DEPS*J
86          CS(J)=PC*SIE(EI(J),E0)
87          FI=E0-EI(J)
88          CALL TAUCF(FI)
89          TAUFI=TAU
90          TAUCFI=TAUC
91          TAUFFI=TAUF
92          TAUPFI=TAUP
93          TTAU(J)=TAU
94          CTAU(J)=TAUC
95          FTAU(J)=TAUF
96          PTAU(J)=TAUP
97          UI=(ALFA-GAMMA*EB)/(ALFA*(C1-EB))
98          CALL QA05AD(FUINT,FU,R1,R2,ABSERR,RELERR,LEVEL,ERROR,IFLAG)
99          V(J)=VPO*FUINT
100         SV(J)=V(J)*CS(J)
101         X=CS(J)*(C1-V(J))/TAUFI
102         SC(J)=X*TAUCFI
```

```
103         SP(J)=X*TAUPFI
104         ENDIF
105     TS=0.DO
106     E1=EI(J)
107     E2=E0
108     IF (E1.LE.C2*E2*E2/(C511+E2+E2)) TS=SC(0)*SIE(E1,E2)
109     L=MINO(J,IMAX)
110     IF (L.GT.0) THEN
111         I1=MOD(L,2)
112         IF (I1.EQ.1) L=L-1
113         DO 5 K=1,L-1
114             IF (J.EQ.0) GOTO 5
115             E1=EI(J)-EI(K)
116             E2=E0-EI(K)
117             IF (E1.GT.C2*E2*E2/(C511+E2+E2)) GOTO 5
118             ST=SC(K)*SIE(E1,E2)
119             ST=ST+ST
120             IF (MOD(K,2).EQ.1) ST=ST+ST
121             TS=TS+ST
122     5     CONTINUE
123         E1=E1-A
124         E2=E2-A
125         ST=SC(L)*SIE(E1,E2)
126         TS=(TS+ST)*D333
127         IF (I1.EQ.1) THEN
128             E1=E1-A
129             E2=E2-A
130             ST=SC(L+1)*SIE(E1,E2)
131             TS=TS+ST*0.5DO
132         ENDIF
133     ENDIF
134     SC3(J)=TS*A
135     6     CONTINUE

136     SC3(0)=0.DO
137     TV=SV(0)
138     TC=SC(0)
139     TP=SP(0)
140     T3=SC3(0)
141     DO 7 K=0,IMAX-1
142         STA=SV(K)
143         STA=STA+STA
144         STB=SP(K)
145         STB=STB+STB
146         STC=SC3(K)
147         STC=STC+STC
148         IF (MOD(K,2).NE.1) THEN
149             STA=STA+STA
150             STB=STB+STB
151             STC=STC+STC
152         ENDIF
153         TV=TV+STA
154         TP=TP+STB
155         T3=T3+STC
156     7     CONTINUE
157     PC0=A*(TV+SV(IMAX))*D333
158     TC=A*(TC+SC(IMAX))*D333
```



```
214     IF (U1.LT.UA) SS=ST-R*(U1+TS)
215     RHO=DSQRT(R*R+SS*SS+C2*R*SS*U1)
216     DEL=R/RHO*DSQRT(C1-U1Q)
217     DEL=DMIN1(DEL,C1)
218     DEL=DMAX1(DEL,-C1)
219     DEL=DASIN(DEL)
220     TS=0.DO
221     DO 10 I1=1,10
222     PHI=PI*GX(I1)
223     A3=U2*DCOS(DEL)-DCOS(PHI)*DSQRT(C1-U2Q)*DSIN(DEL)
224     A2=T2(R,A3,R2)
225     IF (A3.LT.-DSQRT(C1-R1/R*R1/R)) A2=A2-C2*T1(R,A3,R1)
226     IF (A2*TTAU(J).GE.4.6D0) GOTO 10
227     TS=TS+(C1+D1*D2*DCOS(PHI+PHI))*DEXP(-A2*TTAU(J))*GA(I1)
228 10  CONTINUE
229     TSS=TSS+TS*DEXP(-ST*TTAU(I))*GA(I2)
230 11  CONTINUE
231     TTS=TTS+TSS*X*DEXP(-R*TAUE)*GA(I3)
232 12  CONTINUE
233     IF (TTS.GT.1.D-14) THEN
234         TTS=TTS*DR
235         W(IJ)=TAUE*TTAU(I)*TTS/
236 @      ((C1-V(I))*DEXP(-R1*TAUE)-DEXP(-R2*TAUE)))
237 @      WRITE(9,FMT='(' W ('',I4,'',',',I4,'') =',1PE13.4,
238 @      10X,' IJ =',I6)') I,J,W(IJ),IJ
239     ENDIF
240 13  CONTINUE
241 14  CONTINUE

240     EA=C511*E0/(C511+E0*C4)
241     EB=C511*E0/(C511+E0+E0)
242     DO 18 J=0,KM
243     E2=E0-EI(J)
244     WS(J)=0.DO
245     IF (E2.LE.EA) GOTO 18
246     IF (E2.LE.EB) GOTO 16
247     TS=0.DO
248     TSN=0.DO
249     DO 15 I=0,J
250     IJ=KM*I+J-I*(I-1)/2
251     ED=EI(I)
252     E1=E0-EI(I)
253     EC=E1-E2
254     STN=SIE(ED,E0)*SIE(EC,E1)
255     IF (I.EQ.0) STN=STN*0.5D0
256     IF (I.EQ.J) STN=STN*0.5D0
257     TS=TS+STN*W(IJ)
258     TSN=TSN+STN
259 15  CONTINUE
260     WS(J)=TS/TSN
261     GOTO 18
262 16  CONTINUE
263     EC=C511*E2/(C511-(E2+E2))
264     EC=E0-EC
265     X=EC*(C511+E0+E0)*IMAX*0.5D0/(E0*E0)
266     K=IDINT(X)+1
267     TS=0.DO
```

```
268      TSN=0. D0
269      DO 17 I=K, IMAx
270      IJ=KM*I+J-I*(I-1)/2
271      ED=EI(I)
272      E1=E0-EI(I)
273      EC=E1-E2
274      STN=SIE(ED,E0)*SIE(EC,E1)
275      IF (I.EQ.K) STN=STN*(0.5D0-X+K)
276      IF (I.EQ.IMAX) STN=STN*0.5D0
277      ST=STN*W(IJ)
278      TS=TS+ST
279      TSN=TSN+STN
280 17  CONTINUE
281      WS(J)=TS/TSN
282 18  CONTINUE

283      S1=0. D0
284      S2=0. D0
285      S3=0. D0
286      S4=0. D0
287      DO 19 I=0, KM
288      IJ=KM-I
289      SVV(I)=SC3(I)*WS(IJ)
290      A=SVV(I)
291      IF (I.EQ.0) A=A*0.5D0
292      IF (I.EQ.KM) A=A*0.5D0
293      S1=S1+A
294      A=SC3(I)-SVV(I)
295      A=A/TTAU(I)
296      B=A*FTAU(I)
297      IF (I.EQ.0) B=B*0.5D0
298      IF (I.EQ.KM) B=B*0.5D0
299      S2=S2+B
300      B=A*CTAU(I)
301      IF (I.EQ.0) B=B*0.5D0
302      IF (I.EQ.KM) B=B*0.5D0
303      S3=S3+B
304      B=A*PTAU(I)
305      IF (I.EQ.0) B=B*0.5D0
306      IF (I.EQ.KM) B=B*0.5D0
307      S4=S4+B
308 19  CONTINUE
309      X=DEPS*E0
310      PCC0=X*S1
311      PCCF=X*S2
312      PCCC=X*S3
313      PCCP=X*S4

314      SC5(0)=0. D0
315      DO 21 I=1, KMS
316      TS=0. D0
317      L=MINO(I, KM)
318      DO 20 J=0, L
319      E1=EI(I)-EI(J)
320      E2=E0-EI(J)
321      IF (E1.GT.C2*E2*E2/(C511+E2+E2)) GOTO 20
322      A=SIE(E1,E2)*SC3(J)*(C1-WS(J))*CTAU(J)/TTAU(J)
```

```
323      IF (J.EQ.0) A=A*0.5D0
324      IF (J.EQ.L) A=A*0.5D0
325      TS=TS+A
326      20  CONTINUE
327      SC5(I)=TS*X
328      21  CONTINUE

329      TS=0.D0
330      DO 22  I=1,KMS
331      A=SC5(I)
332      IF (I.EQ.KMS) A=A*0.5D0
333      TS=TS+A
334      22  CONTINUE
335      A=PCCC/(TS*DEPS*E0)
336      DO 23  I=1,KMS
337      SC5(I)=SC5(I)*A
338      23  CONTINUE

339      IF (E0.GT.1.022D0) THEN
340      B=EX
341      CALL QA05AD(RUINT,RU,R1,R2,ABSERR,RELERR,LEVEL,ERROR,IFLAG)
342      B=B*RUINT
343      A=(C1-P0)/TAUE-B
344      A=TAUPE*A
345      B=TAUPE*B
346      PP2F=0.1964D0*A
347      PP2C=0.3101D0*A
348      PPFC=0.4936D0*A
349      PPEF=0.4431D0*B
350      PPEC=0.5569D0*B
351      WRITE(6,FMT='(/25X, 'PP2F = ',1PE12.4)') PP2F
352      WRITE(6,FMT='(25X, 'PP2C = ',1PE12.4)') PP2C
353      WRITE(6,FMT='(25X, 'PPFC = ',1PE12.4)') PPFC
354      WRITE(6,FMT='(25X, 'PPEF = ',1PE12.4)') PPEF
355      WRITE(6,FMT='(25X, 'PPEC = ',1PE12.4)') PPEC
356      ENDIF

357      PFTOT=PF+PCF+PCCF+PP2F
358      WRITE(6,FMT='(/25X, 'PFTOT = ',1PE12.4)') PFTOT
359      WRITE(6,FMT='(/25X, 'PCCO = ',1PE12.4)') PCCO
360      WRITE(6,FMT='(25X, 'PCCF = ',1PE12.4)') PCCF
361      WRITE(6,FMT='(25X, 'PCCC = ',1PE12.4)') PCCC
362      WRITE(6,FMT='(25X, 'PCCP = ',1PE12.4)') PCCP
363      WRITE(6,FMT='(/25X, 'E3 = ',1PE12.4)') E3
364      WRITE(6,FMT='(25X, 'E5 = ',1PE12.4)') E5

365      B=DEPS*E0*0.5D0
366      TS=C1-P0
367      SWMA(0)=TS
368      SWMI(0)=TS
369      A1=SV(0)
370      A3=SV(0)
371      D1=0.D0
372      D3=0.D0
373      F1=0.D0
374      K=1
375      DO 25  I=1,KMS
```

```
376      A2=SVV(I)
377      IF (I.LE.IMAX) A2=A2+SV(I)
378      SWMA(I)=SWMA(I-1)-B*(A2+A1)
379      A4=A2+SC5(I)
380      SWMI(I)=SWMI(I-1)-B*(A3+A4)
381      A1=A2
382      A3=A4
383      IF (E0.LE.1.022D0) GOTO 25
384      E1=E0-EI(I)
385      IF (E1.GE.1.022D0) GOTO 25
386      EX=1.022D0-E1
387      X=3.D0*EX/1.022D0-C1
388      A=0.25D0*X*(3.D0-X*X)+0.5D0
389      IF (X.LT.-0.4D0) THEN
390          C=0.0908D0*(X+1.D0)**2
391      ELSE
392          IF (X.LE.-0.2D0) THEN
393              C=(-0.125D0*(X+0.3D0)+0.0815D0)*(X+0.3D0)+0.0415D0
394          ELSE
395              IF (X.LE.0.25D0) THEN
396                  C=1.5625D0*(X-3.D-2)*((X-3.D-2)**2-0.12D0)+0.025D0
397              ELSE
398                  IF (X.LT.0.8D0) THEN
399                      C=-0.55D0*(X-5.D-1)*((X-5.D-1)**2-0.12D0)+0.0088D0
400                  ELSE
401                      C=0.0725D0*(1.D0-X)
402                  ENDIF
403              ENDIF
404          ENDIF
405      ENDIF
406      F2=A-C
407      IF (F2.GT.C1) F2=C1
408      IF (EX.GE.0.68133D0) F2=C1
409      SWMI(I)=SWMI(I)+PP2C*(F1-F2)
410      F1=F2
411      IF (E1.GT.0.511D0) GOTO 24
412      X=(PPEF+PCP+PCCP)*K
413      SWMA(I)=SWMA(I)-X
414      SWMI(I)=SWMI(I)-X
415      K=0
416      TC=C511-E1
417      D2=(6.815024D0+0.870619D0/E1-1.66708D0*TC)*TC+
@      2.611858D0*DLOG(E1*D511)
418      IF (D2.GT.C1) D2=C1
419      IF (TC.GE.0.340667D0) D2=C1
420      SWMI(I)=SWMI(I)+PPFC*(D1-D2)
421      D1=D2
422      GOTO 25
423 24 CONTINUE
424      TC=1.022D0-E1
425      D4=(6.815024D0+0.870619D0/(C511-TC)-1.66708D0*TC)*TC+
@      2.611858D0*DLOG(E1*D511-C1)
426      IF (D4.GT.C1) D4=C1
427      IF (TC.GE.0.340667D0) D4=C1
428      SWMI(I)=SWMI(I)+PPEC*(D3-D4)
429      D3=D4
430 25 CONTINUE
```

```
431      WRITE(6,FMT='(///15X,'EI',10X,'CS',10X,'SV',10X,
@      'SC',10X,'SC3',9X,'SVV',9X,'SC5',9X,
@      'SWMA',8X,'SWMI'//)')
432      IF (KM.LE.IMAX) THEN
433          DO 26 J=0,KM
434          WRITE(6,FMT='(10X,9(1PE12.3))' ) EI(J),CS(J),SV(J),SC(J),
@          SC3(J),SVV(J),SC5(J),SWMA(J),SWMI(J)
435          IF (MOD(J,10).EQ.0) WRITE(6,FMT='(8X,I4)' ) J
436      26      CONTINUE
437      ELSE
438          DO 27 J=0,IMAX
439          WRITE(6,FMT='(10X,9(1PE12.3))' ) EI(J),CS(J),SV(J),SC(J),
@          SC3(J),SVV(J),SC5(J),SWMA(J),SWMI(J)
440          IF (MOD(J,10).EQ.0) WRITE(6,FMT='(8X,I4)' ) J
441      27      CONTINUE
442          DO 28 J=IMAX+1,KM
443          WRITE(6,FMT='(10X,1PE12.3,36X,5(1PE12.3))' ) EI(J),SC3(J),
@          SVV(J),SC5(J),SWMA(J),SWMI(J)
444          IF (MOD(J,10).EQ.0) WRITE(6,FMT='(8X,I4)' ) J
445      28      CONTINUE
446          DO 29 J=KM+1,KMS
447          WRITE(6,FMT='(10X,1PE12.3,60X,3(1PE12.3))' )
@          EI(J),SC5(J),SWMA(J),SWMI(J)
448          IF (MOD(J,10).EQ.0) WRITE(6,FMT='(8X,I4)' ) J
449      29      CONTINUE
450      ENDIF

451      K=KMS+1
452      X=E0/IMAX
453      SWMA(K)=SWMA(KMS)
454      SWMI(K)=PFTOT
455      SWMAP(0)=SWMA(0)
456      SWMIP(0)=SWMI(0)
457      EP(0)=0.D0
458      DO 30 I=1,IMAX
459      EP(I)=EP(I-1)+X
460      30      CONTINUE
461      L=IMAX-KMS-2
462      DO 32 I=1,IMAX
463      J=I+L
464      J=MAX0(J,0)
465      31      CONTINUE
466      J=J+1
467      IF (J.GT.K) THEN
468          X=(EP(I)-EI(KMS))/(EI(K)-EI(KMS))
469          SWMAP(I)=(SWMA(K)-SWMA(KMS))*X+SWMA(KMS)
470          SWMIP(I)=(SWMI(K)-SWMI(KMS))*X+SWMI(KMS)
471          GOTO 32
472      ENDIF
473      IF (.NOT.(EP(I).GE.EI(J-1).AND.EP(I).LT.EI(J))) GOTO 31
474      X=(EP(I)-EI(J-1))/(EI(J)-EI(J-1))
475      SWMAP(I)=(SWMA(J)-SWMA(J-1))*X+SWMA(J-1)
476      SWMIP(I)=(SWMI(J)-SWMI(J-1))*X+SWMI(J-1)
477      32      CONTINUE
478      SWMAP(IMAX)=SWMA(K)
479      SWMIP(IMAX)=PFTOT
```



```
480     WRITE(6,FMT='(///16X,'EI',11X,'SWMA',10X,'SWMI'/)')
481     DO 33 J=0,IMAX
482     WRITE(6,FMT='(12X,1PE12.3,1P2E14.5)') EP(J),SWMAP(J),SWMIP(J)
483     IF (MOD(J,10).EQ.0) WRITE(6,FMT='(8X,I4)') J
484 33 CONTINUE

485 99 CONTINUE
486     WRITE(6,FMT='(///16X,'ENDE DES PROGRAMMS.')
```

```
C-----
C
C   MATE = 1 :   ***  VERSION  WISMUT - GERMANIUM  ***
C   MATE = 2 :   ***  VERSION  BARIUM - FLUORID   ***
C
1   SUBROUTINE TAUCF (X)
2   IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H,O-Y)
3   COMMON /TA/TAU,TAUC,TAUF,TAUP,MATE
4   C1=1.DO
5   C2=2.DO
6   C3=3.DO
7   ALFA=X/0.511DO
8   ALFA2=ALFA*ALFA
9   C1P2A=C1+C2*ALFA
10  GAMMA=C1+ALFA
11  GAMM2=GAMMA*GAMMA
C-----
12  IF (MATE.EQ.1) THEN
13    TAUC=((ALFA2-C2*GAMMA)/(C2*ALFA*ALFA2)*DLOG(C1P2A)
@    - (C1+C3*ALFA)/(C1P2A*C1P2A)
@    + C2*GAMM2/(ALFA2*C1P2A)) * 0.9032DO
14    TAUF=0.04855DO*(X**(-2.725DO))+0.04355DO*(X**(-1.2375DO))
15    IF (X.LE.1.022DO) THEN
16      TAUP=0.DO
17    ELSE
18      E=X-1.022DO
19      TAUP=C1/(22.67DO/(E*E)+13.92/DSQRT(E))
20    ENDIF
21  ENDIF
C-----
22  IF (MATE.EQ.2) THEN
23    TAUC=((ALFA2-C2*GAMMA)/(C2*ALFA*ALFA2)*DLOG(C1P2A)
@    - (C1+C3*ALFA)/(C1P2A*C1P2A)
@    + C2*GAMM2/(ALFA2*C1P2A)) * 0.6189DO
24    TAUF=0.00905DO*(X**(-2.915DO))+0.00897DO*(X**(-1.2DO))
25    IF (X.LE.1.022DO) THEN
26      TAUP=0.DO
27    ELSE
28      E=X-1.022DO
29      TAUP=C1/(56.71DO/(E*E)+25.79/DSQRT(E))
30    ENDIF
31  ENDIF
C-----
32  TAU=TAUF+TAUC+TAUP
33  RETURN
34  END
```

C-----
C
C
C

```
1  DOUBLE PRECISION FUNCTION SIE (E1,E2)
2  IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H,O-Y)
3  COMMON /CO/C1,C2,C3,C4,R1,R2,E,FI,UI
4  SIE=0.D0
5  IF (E1.GT.E2*E2*C2/(E2+E2+0.511D0)) RETURN
6  A=E2/0.511D0
7  B=E1/E2
8  SIE=( C2+(B/(A-A*B))**2 + B/(C1-B)*(B-C2/A) ) /
@  ( (C2*(C1+A)**2/(A*(C1+A+A)) - C2*(A/(C1+A+A))**2
@  + C2/A + (C1-C2*(A+C1)/(A*A))*DLOG(C1+A+A)) * E2 )
9  RETURN
10 END
```

C-----
C
C
C

```
1  DOUBLE PRECISION FUNCTION FU (R)
2  IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H,O-Y)
3  COMMON /CO/C1,C2,C3,C4,R1,R2,E,FI,UI
4  COMMON /EA/ALFA,GAMMA,ALFA2,C1P2A
5  COMMON /EY/ABSERR,RELERR,ERROR,LEVEL,IFLAG,XYZ
6  COMMON /PE/PO,PC,PF,FS,VPO
7  COMMON /PS/PCO,PCC,PCF,PCP
8  COMMON /TA/TAU,TAUC,TAUF,TAUP,MATE
9  COMMON /TE/TAUE,TAUCE,TAUFE,TAUPE
10 COMMON /TF/TAUFI,TAUCFI,TAUFFI,TAUPFI
11 T1(X,W,A)=DSQRT(A*A+(W*W-1.DO)*X*X)
12 T2(X,W,A)=DSQRT(A*A+(W*W-1.DO)*X*X)-X*W
13 TRUI=T2(R,UI,R2)
14 IF (UI.LT.-DSQRT(C1-R1/R*R1/R)) TRUI=TRUI-C2*T1(R,UI,R1)
15 CALL TAUCF(FI)
16 TAUFI=TAU
17 TAUCFI=TAUC
18 TAUFFI=TAUF
19 TAUPFI=TAUP
20 EXPO=R*TAUE+TRUI*TAUFI
21 FU=DEXP(-EXPO)
22 RETURN
23 END
```

```
C-----  
C  
C  
C  
1  DOUBLE PRECISION FUNCTION RU (R)  
2  IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H,O-Y)  
3  COMMON /CO/C1,C2,C3,C4,R1,R2,E,FI,UI  
4  COMMON /EA/ALFA,GAMMA,ALFA2,C1P2A  
5  COMMON /EY/ABSERR,RELERR,ERROR,LEVEL,IFLAG,XYZ  
6  COMMON /PE/PO,PC,PF,FS,VPO  
7  COMMON /PS/PCO,PCC,PCF,PCP  
8  COMMON /TA/TAU,TAUC,TAUF,TAUP,MATE  
9  COMMON /TE/TAUE,TAUCE,TAUFE,TAUPE  
10 COMMON /TF/TAUFI,TAUCFI,TAUFFI,TAUPFI  
11 XYZ=R  
12 EXA=R*TAUE  
13 IF (EXA.GT.174.DO) EXA=174.DO  
14 UINT=0.DO  
15 DQ=5.D-2  
16 IMAX=41  
17 QA=-C1  
18 QB=C1  
19 Q=QA  
20 FUR=UF(Q)  
21 UINT=UINT+FUR  
22 Q=QA+DQ  
23 FUR=UF(Q)  
24 UINT=UINT+FUR*C4  
25 DO 1 I=2,IMAX-3,2  
26 QQ=QA+DQ*I  
27 Q=QQ  
28 FUR=UF(Q)  
29 UINT=UINT+FUR*C2  
30 Q=QQ+DQ  
31 FUR=UF(Q)  
32 UINT=UINT+FUR*C4  
33 1 CONTINUE  
34 Q=QB  
35 FUR=UF(Q)  
36 UINT=UINT+FUR  
37 UINT=UINT*DQ/C3  
38 RU=DEXP(-EXA)*UINT  
39 RETURN  
40 END
```

```
C-----  
C  
C  
C  
1      DOUBLE PRECISION FUNCTION UF (U)  
2      IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H,O-Y)  
3      COMMON /CO/C1,C2,C3,C4,R1,R2,E,FI,UI  
4      COMMON /EY/ABSERR,RELERR,ERROR,LEVEL,IFLAG,XYZ  
5      T1(X,W,A)=DSQRT(A*A+(W*W-1.DO)*X*X)  
6      T2(X,W,A)=DSQRT(A*A+(W*W-1.DO)*X*X)-X*W  
7      Q=XYZ  
8      TRU=T2(Q,U,R2)  
9      IF (U.LT.-DSQRT(C1-R1/Q*R1/Q)) TRU=TRU-C2*T1(Q,U,R1)  
10     UF=DEXP(-TRU*0.932D0)  
11     RETURN  
12     END
```

Anhang E

Gesamte Ausgabe einer Rechnung:

E0 = 5.00

=====

R1 = 10.00

R2 = 20.00

MATERIAL - KENNZIFFER : 1 (BGO)

TAUE = 2.7544D-01

TAUCE = 1.5001D-01

TAUFE = 6.5477D-03

TAUPE = 1.1888D-01

PO = 6.3650D-02

PC = 5.0995D-01

PF = 2.2259D-02

PP = 4.0414D-01

PCO = 4.4893D-02

PCC = 2.9769D-01

PCF = 1.2081D-01

PCP = 4.6556D-02

PP2F = 7.8279D-02

PP2C = 1.2360D-01

PPFC = 1.9673D-01

PPEF = 2.4663D-03

PPEC = 3.0997D-03

PFTOT = 3.3051D-01

PCCO = 4.3450D-02

PCCF = 1.0916D-01

PCCC = 1.3931D-01

PCCP = 5.8714D-03

E3 = 4.8754D+00

E5 = 4.9163D+00

	EI	CS	SV	SC	SC3	SVV	SC5	SWMA	SWMI
0	0.0	6.276D-02	1.175D-02	2.778D-02	0.0	0.0	0.0	9.364D-01	9.364D-01
	4.757D-02	6.270D-02	1.173D-02	2.794D-02	1.931D-04	1.422D-07	2.346D-07	9.358D-01	9.358D-01
	9.514D-02	6.265D-02	1.171D-02	2.810D-02	3.311D-04	5.208D-07	8.789D-07	9.352D-01	9.352D-01
	1.427D-01	6.260D-02	1.169D-02	2.827D-02	4.168D-04	7.061D-07	1.814D-06	9.347D-01	9.347D-01
	1.903D-01	6.255D-02	1.167D-02	2.845D-02	6.743D-04	1.164D-06	3.208D-06	9.341D-01	9.341D-01
	2.378D-01	6.251D-02	1.165D-02	2.862D-02	7.631D-04	1.390D-06	5.077D-06	9.336D-01	9.336D-01
	2.854D-01	6.248D-02	1.164D-02	2.880D-02	1.031D-03	2.204D-06	7.458D-06	9.330D-01	9.330D-01
	3.330D-01	6.245D-02	1.162D-02	2.899D-02	1.123D-03	3.211D-06	1.037D-05	9.325D-01	9.325D-01
	3.806D-01	6.243D-02	1.160D-02	2.918D-02	1.401D-03	5.349D-06	1.386D-05	9.319D-01	9.319D-01
	4.281D-01	6.241D-02	1.158D-02	2.938D-02	1.497D-03	7.457D-06	1.794D-05	9.314D-01	9.314D-01
	4.757D-01	6.240D-02	1.156D-02	2.958D-02	1.786D-03	1.147D-05	2.266D-05	9.308D-01	9.308D-01
10	5.233D-01	6.240D-02	1.155D-02	2.979D-02	1.886D-03	1.535D-05	2.805D-05	9.303D-01	9.302D-01
	5.708D-01	6.240D-02	1.153D-02	3.000D-02	2.188D-03	2.200D-05	3.416D-05	9.297D-01	9.297D-01
	6.184D-01	6.241D-02	1.151D-02	3.022D-02	2.293D-03	2.837D-05	4.102D-05	9.292D-01	9.291D-01
	6.660D-01	6.242D-02	1.150D-02	3.045D-02	2.608D-03	3.879D-05	4.869D-05	9.286D-01	9.286D-01
	7.135D-01	6.245D-02	1.148D-02	3.068D-02	2.717D-03	4.795D-05	5.721D-05	9.281D-01	9.280D-01
	7.611D-01	6.248D-02	1.147D-02	3.092D-02	3.047D-03	6.339D-05	6.663D-05	9.275D-01	9.275D-01
	8.087D-01	6.251D-02	1.145D-02	3.116D-02	3.161D-03	7.642D-05	7.700D-05	9.270D-01	9.269D-01
	8.562D-01	6.256D-02	1.144D-02	3.142D-02	3.506D-03	9.795D-05	8.840D-05	9.264D-01	9.264D-01
	9.038D-01	6.261D-02	1.142D-02	3.168D-02	3.626D-03	1.159D-04	1.009D-04	9.259D-01	9.258D-01
	9.514D-01	6.267D-02	1.141D-02	3.195D-02	3.988D-03	1.441D-04	1.145D-04	9.253D-01	9.253D-01
20	9.990D-01	6.274D-02	1.139D-02	3.222D-02	4.115D-03	1.667D-04	1.293D-04	9.248D-01	9.247D-01
	1.047D+00	6.282D-02	1.138D-02	3.251D-02	4.496D-03	2.018D-04	1.455D-04	9.242D-01	9.242D-01
	1.094D+00	6.291D-02	1.137D-02	3.280D-02	4.629D-03	2.283D-04	1.630D-04	9.237D-01	9.236D-01
	1.142D+00	6.301D-02	1.135D-02	3.311D-02	5.030D-03	2.698D-04	1.820D-04	9.231D-01	9.231D-01
	1.189D+00	6.312D-02	1.134D-02	3.342D-02	5.171D-03	2.989D-04	2.025D-04	9.226D-01	9.225D-01
	1.237D+00	6.324D-02	1.133D-02	3.374D-02	5.593D-03	3.457D-04	2.247D-04	9.220D-01	9.219D-01
	1.284D+00	6.337D-02	1.132D-02	3.408D-02	5.743D-03	3.767D-04	2.487D-04	9.214D-01	9.214D-01
	1.332D+00	6.351D-02	1.130D-02	3.442D-02	6.189D-03	4.285D-04	2.746D-04	9.209D-01	9.208D-01
	1.380D+00	6.366D-02	1.129D-02	3.478D-02	6.348D-03	4.618D-04	3.025D-04	9.203D-01	9.202D-01
	1.427D+00	6.383D-02	1.128D-02	3.514D-02	6.821D-03	5.195D-04	3.326D-04	9.198D-01	9.196D-01
30	1.475D+00	6.401D-02	1.127D-02	3.552D-02	6.990D-03	5.554D-04	3.650D-04	9.192D-01	9.191D-01
	1.522D+00	6.420D-02	1.126D-02	3.592D-02	7.492D-03	6.191D-04	3.999D-04	9.186D-01	9.185D-01
	1.570D+00	6.440D-02	1.125D-02	3.632D-02	7.673D-03	6.575D-04	4.374D-04	9.181D-01	9.179D-01
	1.617D+00	6.462D-02	1.124D-02	3.674D-02	8.207D-03	7.275D-04	4.777D-04	9.175D-01	9.173D-01
	1.665D+00	6.486D-02	1.123D-02	3.718D-02	8.400D-03	7.684D-04	5.211D-04	9.169D-01	9.167D-01

	EI	CS	SV	SC	SC3	SVV	SC5	SWMA	SWMI
	1.712D+00	6.511D-02	1.122D-02	3.763D-02	8.969D-03	8.450D-04	5.677D-04	9.164D-01	9.161D-01
	1.760D+00	6.537D-02	1.121D-02	3.809D-02	9.177D-03	8.885D-04	6.178D-04	9.158D-01	9.155D-01
	1.808D+00	6.566D-02	1.120D-02	3.858D-02	9.785D-03	9.720D-04	6.717D-04	9.152D-01	9.149D-01
	1.855D+00	6.596D-02	1.119D-02	3.908D-02	1.001D-02	1.018D-03	7.296D-04	9.146D-01	9.143D-01
	1.903D+00	6.628D-02	1.118D-02	3.960D-02	1.066D-02	1.109D-03	7.918D-04	9.141D-01	9.137D-01
40	1.950D+00	6.662D-02	1.117D-02	4.014D-02	1.090D-02	1.158D-03	8.587D-04	9.135D-01	9.130D-01
	1.998D+00	6.698D-02	1.116D-02	4.070D-02	1.160D-02	1.257D-03	9.307D-04	9.129D-01	9.124D-01
	2.045D+00	6.736D-02	1.115D-02	4.128D-02	1.186D-02	1.310D-03	1.008D-03	9.123D-01	9.118D-01
	2.093D+00	6.777D-02	1.114D-02	4.188D-02	1.262D-02	1.418D-03	1.091D-03	9.117D-01	9.111D-01
	2.141D+00	6.820D-02	1.113D-02	4.251D-02	1.290D-02	1.473D-03	1.181D-03	9.111D-01	9.105D-01
	2.188D+00	6.865D-02	1.111D-02	4.316D-02	1.372D-02	1.591D-03	1.277D-03	9.105D-01	9.098D-01
	2.236D+00	6.914D-02	1.110D-02	4.384D-02	1.403D-02	1.651D-03	1.381D-03	9.099D-01	9.092D-01
	2.283D+00	6.964D-02	1.109D-02	4.454D-02	1.492D-02	1.780D-03	1.493D-03	9.093D-01	9.085D-01
	2.331D+00	7.018D-02	1.108D-02	4.528D-02	1.526D-02	1.844D-03	1.613D-03	9.087D-01	9.078D-01
	2.378D+00	7.075D-02	1.106D-02	4.604D-02	1.622D-02	1.985D-03	1.743D-03	9.080D-01	9.071D-01
50	2.426D+00	7.136D-02	1.104D-02	4.684D-02	1.659D-02	2.054D-03	1.883D-03	9.074D-01	9.064D-01
	2.474D+00	7.199D-02	1.103D-02	4.767D-02	1.765D-02	2.209D-03	2.035D-03	9.068D-01	9.057D-01
	2.521D+00	7.267D-02	1.101D-02	4.853D-02	1.806D-02	2.284D-03	2.198D-03	9.062D-01	9.049D-01
	2.569D+00	7.338D-02	1.099D-02	4.943D-02	1.921D-02	2.454D-03	2.375D-03	9.055D-01	9.042D-01
	2.616D+00	7.414D-02	1.096D-02	5.037D-02	1.967D-02	2.536D-03	2.566D-03	9.049D-01	9.034D-01
	2.664D+00	7.494D-02	1.094D-02	5.136D-02	2.094D-02	2.724D-03	2.774D-03	9.042D-01	9.027D-01
	2.711D+00	7.578D-02	1.091D-02	5.238D-02	2.145D-02	2.814D-03	2.998D-03	9.036D-01	9.019D-01
	2.759D+00	7.668D-02	1.088D-02	5.346D-02	2.285D-02	3.022D-03	3.242D-03	9.029D-01	9.011D-01
	2.807D+00	7.763D-02	1.084D-02	5.458D-02	2.342D-02	3.121D-03	3.506D-03	9.023D-01	9.002D-01
	2.854D+00	7.863D-02	1.080D-02	5.575D-02	2.498D-02	3.354D-03	3.794D-03	9.016D-01	8.994D-01
60	2.902D+00	7.970D-02	1.075D-02	5.697D-02	2.562D-02	3.463D-03	4.107D-03	9.009D-01	8.985D-01
	2.949D+00	8.083D-02	1.070D-02	5.826D-02	2.736D-02	3.723D-03	4.448D-03	9.003D-01	8.976D-01
	2.997D+00	8.204D-02	1.065D-02	5.960D-02	2.808D-02	3.845D-03	4.820D-03	8.996D-01	8.967D-01
	3.044D+00	8.331D-02	1.059D-02	6.101D-02	3.004D-02	4.137D-03	5.226D-03	8.989D-01	8.958D-01
	3.092D+00	8.467D-02	1.052D-02	6.248D-02	3.085D-02	4.274D-03	5.670D-03	8.982D-01	8.948D-01
	3.140D+00	8.612D-02	1.044D-02	6.403D-02	3.306D-02	4.605D-03	6.156D-03	8.975D-01	8.939D-01
	3.187D+00	8.766D-02	1.035D-02	6.565D-02	3.399D-02	4.759D-03	6.689D-03	8.967D-01	8.928D-01
	3.235D+00	8.931D-02	1.026D-02	6.735D-02	3.650D-02	5.135D-03	7.275D-03	8.960D-01	8.918D-01
	3.282D+00	9.106D-02	1.015D-02	6.913D-02	3.757D-02	5.311D-03	7.918D-03	8.953D-01	8.907D-01
	3.330D+00	9.294D-02	1.003D-02	7.101D-02	4.043D-02	5.741D-03	8.628D-03	8.945D-01	8.895D-01
70	3.377D+00	9.495D-02	9.898D-03	7.297D-02	4.167D-02	5.942D-03	9.410D-03	8.938D-01	8.884D-01
	3.425D+00	9.710D-02	9.752D-03	7.503D-02	4.497D-02	6.438D-03	1.028D-02	8.930D-01	8.871D-01
	3.473D+00	9.942D-02	9.589D-03	7.720D-02	4.641D-02	6.671D-03	1.123D-02	8.923D-01	8.858D-01
	3.520D+00	1.019D-01	9.410D-03	7.947D-02	5.023D-02	7.246D-03	1.230D-02	8.915D-01	8.845D-01
	3.568D+00	1.046D-01	9.212D-03	8.186D-02	5.193D-02	7.518D-03	1.348D-02	8.907D-01	8.831D-01

	EI	CS	SV	SC	SC3	SVV	SC5	SWMA	SWMI
	3.615D+00	1.075D-01	8.994D-03	8.437D-02	5.640D-02	8.191D-03	1.479D-02	8.899D-01	8.816D-01
	3.663D+00	1.106D-01	8.756D-03	8.701D-02	5.841D-02	8.511D-03	1.626D-02	8.891D-01	8.801D-01
	3.710D+00	1.140D-01	8.496D-03	8.978D-02	6.368D-02	9.307D-03	1.791D-02	8.882D-01	8.784D-01
	3.758D+00	1.177D-01	8.212D-03	9.269D-02	6.610D-02	9.688D-03	1.975D-02	8.874D-01	8.767D-01
	3.806D+00	1.217D-01	7.904D-03	9.574D-02	7.237D-02	1.064D-02	2.183D-02	8.865D-01	8.748D-01
80	3.853D+00	1.262D-01	7.571D-03	9.895D-02	7.530D-02	1.110D-02	2.417D-02	8.856D-01	8.728D-01
	3.901D+00	1.310D-01	7.213D-03	1.023D-01	8.287D-02	1.224D-02	2.682D-02	8.847D-01	8.707D-01
	3.948D+00	1.363D-01	6.830D-03	1.059D-01	8.647D-02	1.280D-02	2.982D-02	8.838D-01	8.684D-01
	3.996D+00	1.422D-01	6.422D-03	1.096D-01	9.571D-02	1.420D-02	3.324D-02	8.828D-01	8.656D-01
	4.043D+00	1.488D-01	5.992D-03	1.135D-01	1.002D-01	1.490D-02	3.714D-02	8.818D-01	8.599D-01
	4.091D+00	1.561D-01	5.543D-03	1.176D-01	1.117D-01	1.664D-02	4.162D-02	8.808D-01	8.515D-01
	4.139D+00	1.643D-01	5.073D-03	1.220D-01	1.174D-01	1.753D-02	4.676D-02	8.797D-01	8.410D-01
	4.186D+00	1.736D-01	4.583D-03	1.266D-01	1.319D-01	1.973D-02	5.272D-02	8.786D-01	8.285D-01
	4.234D+00	1.841D-01	4.073D-03	1.314D-01	1.394D-01	2.088D-02	5.961D-02	8.775D-01	8.142D-01
	4.281D+00	1.962D-01	3.543D-03	1.363D-01	1.581D-01	2.373D-02	6.769D-02	8.762D-01	7.972D-01
90	4.329D+00	2.102D-01	2.993D-03	1.413D-01	1.681D-01	2.527D-02	7.712D-02	8.749D-01	7.763D-01
	4.376D+00	2.266D-01	2.421D-03	1.462D-01	1.931D-01	2.906D-02	8.831D-02	8.735D-01	7.555D-01
	4.424D+00	2.461D-01	1.824D-03	1.510D-01	2.072D-01	3.123D-02	1.015D-01	8.719D-01	7.369D-01
	4.472D+00	2.694D-01	1.196D-03	1.553D-01	2.415D-01	3.645D-02	1.174D-01	8.703D-01	7.196D-01
	4.519D+00	2.979D-01	5.305D-04	1.588D-01	2.626D-01	3.968D-02	1.365D-01	8.135D-01	6.289D-01
	4.567D+00	3.336D-01	2.032D-05	1.608D-01	3.125D-01	4.727D-02	1.601D-01	8.114D-01	5.842D-01
	4.614D+00	3.793D-01	8.201D-09	1.606D-01	3.479D-01	5.269D-02	1.894D-01	8.091D-01	5.421D-01
	4.662D+00	4.399D-01	1.106D-12	1.574D-01	4.282D-01	6.489D-02	2.278D-01	8.063D-01	5.033D-01
	4.709D+00	5.238D-01	5.710D-14	1.503D-01	5.035D-01	7.638D-02	2.812D-01	8.029D-01	4.657D-01
	4.757D+00	6.470D-01	5.028D-16	1.381D-01	6.714D-01	1.019D-01	3.671D-01	7.987D-01	4.228D-01
100	4.804D+00				3.613D-01	5.490D-02	3.260D-01	7.949D-01	3.722D-01
	4.852D+00				1.388D-01	2.111D-02	1.774D-01	7.931D-01	3.347D-01
	4.900D+00						4.719D-03	7.926D-01	3.299D-01

	EI	SWMA	SWMI
0	0.0	9.36350D-01	9.36350D-01
	5.000D-02	9.35763D-01	9.35763D-01
	1.000D-01	9.35177D-01	9.35177D-01
	1.500D-01	9.34592D-01	9.34592D-01
	2.000D-01	9.34008D-01	9.34008D-01
	2.500D-01	9.33425D-01	9.33425D-01
	3.000D-01	9.32843D-01	9.32842D-01
	3.500D-01	9.32262D-01	9.32261D-01
	4.000D-01	9.31682D-01	9.31680D-01
	4.500D-01	9.31102D-01	9.31099D-01
	5.000D-01	9.30524D-01	9.30520D-01
10	5.500D-01	9.29945D-01	9.29940D-01
	6.000D-01	9.29368D-01	9.29361D-01
	6.500D-01	9.28791D-01	9.28781D-01
	7.000D-01	9.28214D-01	9.28202D-01
	7.500D-01	9.27638D-01	9.27623D-01
	8.000D-01	9.27061D-01	9.27043D-01
	8.500D-01	9.26485D-01	9.26462D-01
	9.000D-01	9.25908D-01	9.25881D-01
	9.500D-01	9.25331D-01	9.25298D-01
	1.000D+00	9.24753D-01	9.24715D-01
20	1.050D+00	9.24174D-01	9.24129D-01
	1.100D+00	9.23595D-01	9.23542D-01
	1.150D+00	9.23014D-01	9.22952D-01
	1.200D+00	9.22433D-01	9.22361D-01
	1.250D+00	9.21849D-01	9.21767D-01
	1.300D+00	9.21265D-01	9.21170D-01
	1.350D+00	9.20679D-01	9.20570D-01
	1.400D+00	9.20091D-01	9.19967D-01
	1.450D+00	9.19501D-01	9.19361D-01
	1.500D+00	9.18910D-01	9.18751D-01
30	1.550D+00	9.18316D-01	9.18137D-01
	1.600D+00	9.17720D-01	9.17519D-01
	1.650D+00	9.17122D-01	9.16897D-01
	1.700D+00	9.16521D-01	9.16269D-01
	1.750D+00	9.15918D-01	9.15637D-01
	1.800D+00	9.15311D-01	9.14999D-01
	1.850D+00	9.14702D-01	9.14356D-01
	1.900D+00	9.14090D-01	9.13706E-01
	1.950D+00	9.13475D-01	9.13050D-01
	2.000D+00	9.12857D-01	9.12386D-01
40	2.050D+00	9.12234D-01	9.11715D-01
	2.100D+00	9.11609D-01	9.11036D-01
	2.150D+00	9.10979D-01	9.10349D-01
	2.200D+00	9.10345D-01	9.09653D-01
	2.250D+00	9.09708D-01	9.08947D-01
	2.300D+00	9.09066D-01	9.08231D-01
	2.350D+00	9.08419D-01	9.07505D-01
	2.400D+00	9.07768D-01	9.06767D-01
	2.450D+00	9.07113D-01	9.06017D-01
	2.500D+00	9.06452D-01	9.05254D-01
50			

	2.550D+00	9.05786D-01	9.04477D-01
	2.600D+00	9.05114D-01	9.03686D-01
	2.650D+00	9.04437D-01	9.02878D-01
	2.700D+00	9.03754D-01	9.02054D-01
	2.750D+00	9.03065D-01	9.01211D-01
	2.800D+00	9.02369D-01	9.00350D-01
	2.850D+00	9.01667D-01	8.99467D-01
	2.900D+00	9.00959D-01	8.98562D-01
	2.950D+00	9.00243D-01	8.97632D-01
	3.000D+00	8.99519D-01	8.96676D-01
60			
	3.050D+00	8.98788D-01	8.95691D-01
	3.100D+00	8.98049D-01	8.94676D-01
	3.150D+00	8.97301D-01	8.93627D-01
	3.200D+00	8.96545D-01	8.92543D-01
	3.250D+00	8.95780D-01	8.91419D-01
	3.300D+00	8.95005D-01	8.90252D-01
	3.350D+00	8.94220D-01	8.89039D-01
	3.400D+00	8.93425D-01	8.87774D-01
	3.450D+00	8.92619D-01	8.86454D-01
	3.500D+00	8.91802D-01	8.85071D-01
70			
	3.550D+00	8.90972D-01	8.83619D-01
	3.600D+00	8.90128D-01	8.82091D-01
	3.650D+00	8.89271D-01	8.80479D-01
	3.700D+00	8.88398D-01	8.78772D-01
	3.750D+00	8.87509D-01	8.76959D-01
	3.800D+00	8.86601D-01	8.75027D-01
	3.850D+00	8.85673D-01	8.72961D-01
	3.900D+00	8.84721D-01	8.70743D-01
	3.950D+00	8.83743D-01	8.68330D-01
	4.000D+00	8.82734D-01	8.65075D-01
80			
	4.050D+00	8.81691D-01	8.58724D-01
	4.100D+00	8.80606D-01	8.49514D-01
	4.150D+00	8.79474D-01	8.37958D-01
	4.200D+00	8.78285D-01	8.24356D-01
	4.250D+00	8.77029D-01	8.08388D-01
	4.300D+00	8.75693D-01	7.88981D-01
	4.350D+00	8.74259D-01	7.67034D-01
	4.400D+00	8.72709D-01	7.46223D-01
	4.450D+00	8.71015D-01	7.27390D-01
	4.500D+00	8.36265D-01	6.65239D-01
90			
	4.550D+00	8.12157D-01	5.99848D-01
	4.600D+00	8.09761D-01	5.54710D-01
	4.650D+00	8.06947D-01	5.12881D-01
	4.700D+00	8.03554D-01	4.73059D-01
	4.750D+00	7.99269D-01	4.28999D-01
	4.800D+00	7.95274D-01	3.76936D-01
	4.850D+00	7.93192D-01	3.36330D-01
	4.900D+00	7.92612D-01	3.29875D-01
	4.950D+00	7.92612D-01	3.29869D-01
	5.000D+00	7.92612D-01	3.30511D-01
100			

ENDE DES PROGRAMMS.