

Die Verwendung von Rechenautomaten für radiochemische Analysen

Von H. MÜNDEL

Institut für Radiochemie, Kernforschungszentrum Karlsruhe (BRD)

Summary

The usefulness of the application of radiochemical methods in analytical chemistry depends quite often on the question, if one is able to determine the activity of the single components in a mixture of radionuclides. One way to solve this problem is to analyse the gamma-spectra or the decay curve of the sample. The graphical methods normally applied for this evaluation of the data show some drawbacks which could be avoided by using numerical methods. But the numerical analysis of the measured data are so elaborate, that one has to use electronic computers. Therefore, a lot of work has been done in the last years to develop the necessary calculation programs. It is now possible to calculate the γ -energy and relative intensity or

half-lives and the activity of the components by a least square fit. In addition to the very good accuracy of the results and the high speed of the analysis, the use of the computer for the evaluation of the measured data turned out to be rather cheap. Depending on the problem, the price per analysis amounts to \$ 0.50 to \$ 40.00.

In den letzten Jahrzehnten wurde in Wissenschaft und Technik in ständig steigendem Maße versucht, moderne Datenverarbeitungsmaschinen zur Auswertung von Meßergebnissen heranzuziehen. Das Ziel dieser Bestrebungen war, durch die Verwendung solcher Maschinen einerseits die Experimentatoren von Routinearbeit zu entlasten

und andererseits die Auswertung schneller und genauer durchzuführen. Im allgemeinen handelt es sich bei den benutzten Datenverarbeitungsmaschinen um elektronische Rechenautomaten, welche die eingegebenen Meßdaten nach einem vorgegebenen Rechenprogramm auswerten. Je nach Größe und Flexibilität der Maschine ist dieses Programm entweder durch die Verdrahtung festgelegt oder in einem Gedächtnis gespeichert. Die zeitlich sehr aufwendige Entwicklung eines solchen Rechenprogrammes ist nur dann zu empfehlen, wenn durch dessen Verwendung bei der maschinellen Datenauswertung entweder viel Arbeitszeit eingespart werden kann oder sich sonstige Vorteile, wie kurze Auswertzeit oder hohe Genauigkeit der Resultate ergeben. Alle drei Gründe treffen für die Auswertung der Aktivitätsmessungen bei radiochemischen Analysen zu. Es sind deshalb eine Reihe von Rechenprogrammen zur Auswertung von Abfallskurven und γ -Spektren entwickelt worden. Die Grundlagen dieser Programme sowie die sich bei deren Anwendung ergebenden Schwierigkeiten sollen kurz beschrieben werden.

Allen radiochemischen Analysenverfahren ist gemeinsam, daß die beim Zerfall der verwendeten Radionuklide emittierte Strahlung zur qualitativen und/oder quantitativen Bestimmung von Elementen oder Verbindungen dient. So lautet z.B. die Problemstellung bei der Aktivierungsanalyse: Ermittle durch die Bestimmung der Art und Menge der bei der Bestrahlung der Analysenprobe gebildeten Radionuklide die Art und Menge der darin enthaltenen Elemente. Zur Lösung dieser Aufgabe wird für das Meßpräparat entweder das γ -Spektrum oder die Abfallskurve bestimmt und in geeigneter Weise ausgewertet. Im zweiten Fall erfolgt die Identifizierung der gebildeten Radionuklide durch die Ermittlung der Halbwertszeit. Im ersten Fall dient dazu der Nachweis der Energie und relativen Intensität der emittierten γ -Quanten. Zur Mengenbestimmung wird dagegen in beiden Fällen die für die einzelnen Radionuklide in der gewählten Meßanordnung registrierte Aktivitätsrate herangezogen.

Die üblicherweise zur Durchführung dieser Auswertungen benutzten Methoden weisen eine Reihe von Nachteilen auf. So ist z.B. die Genauigkeit der durch die graphische Analyse einer Abfallskurve erhaltenen Ergebnisse nicht sehr gut. Noch dazu ist es schwierig, die tatsächlich erreichte Genauigkeit bzw. die Standardabweichung der ermittelten Werte auch nur einigermaßen zuverlässig abzuschätzen. Hinzu kommt, daß die Ergebnisse durch die im Verlauf der Analyse erforderlichen subjektiven Entscheidungen in schwer überschaubarer Weise beeinflußt werden. Diese Nachteile treten bei einer numerischen Auswertung der Meßdaten nicht auf. Eine solche Rechnung liefert als Resultat nicht nur die besten Werte für die gewünschten Größen, sondern auch deren Standardabweichung. Der Begriff «bester Wert» (W) ist dabei im Sinne der Methode der kleinsten Fehlerquadrate in der Weise definiert, daß die Ableitung

der Fehlerquadratsumme nach dieser Größe an der Stelle W gleich null ist.

Die zur Ermittlung der gewünschten Werte benutzten Rechenprogramme können in drei Abschnitte aufgeteilt werden. Abschnitt 1 dient zur Eingabe der vorgeschriebenen Meß- und Kontroll-Daten und zu deren Aufbereitung, so daß am Ende dieses Teiles alle zu der im Abschnitt 2 erfolgenden Berechnung der besten Werte erforderlichen Größen vorhanden sind. Der dritte Abschnitt umfaßt die Ausgabe der Endergebnisse. Der Aufbau der einzelnen Abschnitte hängt ab

- von den speziellen Anforderungen des späteren Programmbenutzers,
- den besonderen apparativen Gegebenheiten, wie der Zahl der Speicherplätze im Rechenautomaten und der Art des Datentransports zwischen Meßanordnung und Rechner und
- von den Überlegungen des Programmierers.

Die in den folgenden allgemeinen Programmbeschreibungen gegebenen Details beziehen sich deshalb auf die von uns verwendeten Programme *BRITTA* und *RADAR*.

Betrachten wir zunächst die Auswertung von γ -Spektren. Wie bereits erwähnt, wird diese Analyse zur Ermittlung von Energie $E(j)$ und relativer Häufigkeit $H(j)$ der im Spektrum vorhandenen γ -Linien durchgeführt. Diese Problemstellung ist nicht nur für die Auswertung von radiochemischen Analysen von Interesse, sondern z.B. auch bei der Untersuchung der Zerfallsdaten von Radionukliden. Es wurde deshalb schon verschiedentlich versucht, diese vollständige Analyse von γ -Spektren zu programmieren. Prinzipiell kann man dabei von der in Gl. (1) dargestellten Grundgleichung ausgehen.

$$Q(i) = \sum_{j=1}^K H(j) \cdot P(i, j) \quad (1)$$

$$P(i, j) = f[E(j)] \quad (2)$$

$$\sum_{i=1}^{\infty} P(i, j) = 1 \quad (3)$$

$Q(i)$ ist die Zahl der im i -ten Energie (Amplituden)-Intervall registrierten Ereignisse und $P(i, j)$ die normierte Wahrscheinlichkeit dafür, daß ein γ -Quant der Energie $E(j)$ an den Detektor die dem i -ten Intervall entsprechende Energie abgibt. K ist die Zahl der γ -Linien im Gesamtspektrum. Setzt man die Funktion $f[E(j)]$ als bekannt voraus, so enthalten die für die N -Intervalle geltenden Gleichungen (siehe Gl. 1) nur noch die zu berechnenden Größen $H(j)$ und $E(j)$. Durch eine Ausgleichsrechnung ergeben sich aus diesem System an Gleichungen die gewünschten Werte. Auf dieser Basis wurde von *BURRUS* ein Rechenprogramm entwickelt. Die Funktion $f[E(j)]$ wurde dabei durch eine Näherung ersetzt, so daß zur Berechnung der $E(j)$ und $H(j)$ eine Reihe von Iterationen erforderlich waren. Die mit diesem Programm erhaltenen Ergebnisse stellten jedoch

nicht zufrieden. Selbst in relativ einfachen Fällen konvergierten die Rechnungen mit steigender Anzahl an Iterationen nicht, sondern führten zu Schwingungen um die Erwartungswerte.

Andere Rechenprogramme zur vollständigen Analyse von γ -Spektren basieren auf dem üblichen Subtraktionsverfahren. Dabei geht man ebenfalls von dem in Gl. (1) gegebenen Ansatz aus, führt die Rechnung aber nicht für die gleichzeitige Näherung der $E(j)$ und $H(j)$ der K γ -Linien aus, sondern ermittelt jeweils nur die γ -Linie mit der höchsten Energie. Dazu wird angenommen, daß die Form des Photopeaks einer Normalverteilung entspricht und führt am hochenergetischen Ende des Spektrums die dementsprechende Anpassung durch. Für die sich dabei ergebende Energie $E(j)$ und Häufigkeit $H(j)$ wird das Spektrum, d.h. also $H(j) \cdot P(i,j)$, konstruiert und dieses vom Gesamtspektrum abgezogen. Mit diesem Restspektrum wird in der gleichen Weise verfahren, bis schließlich auch die Daten für $E(1)$ und $H(1)$ bekannt sind. Ein auf diesem Verfahren beruhendes Rechenprogramm ist u.a. von HEATH und Mitarbeitern soweit entwickelt worden, daß es auch in komplizierten Fällen recht gute Ergebnisse liefert. Diese Autoren zerlegen das Spektrum einer einzelnen γ -Linie in mehrere Abschnitte und konstruieren zur Ermittlung von $P(i,j)$ zunächst diese Teile, welche dann wieder zusammengesetzt werden. Dieses Verfahren führt zu überraschend guten Ergebnissen, woraus sich letztlich auch der Erfolg des Gesamtprogrammes erklärt. Bei der Beurteilung der Ergebnisse ist jedoch zu beachten, daß die berechneten Werte für $E(j)$ bzw. $H(j)$ nicht die besten Werte im Sinne der Methode der kleinsten Fehlerquadrate darstellen. Alle Fehler, welche bei der Analyse der γ -Linien $(j+1)$ bis (K) gemacht wurden, addieren sich bei der Auswertung der j -ten Linie.

Trotz der von HEATH und Mitarbeitern erzielten Erfolge bei der maschinellen Auswertung von γ -Spektren ist eine solche Analyse zeitlich noch sehr aufwendig. Sie wird deshalb nur in speziellen Fällen, keinesfalls jedoch bei Routinearbeiten eingesetzt werden können. Bezogen auf radiochemische Analysen bedeutet diese Einschränkung, daß nur bei der Untersuchung von einer kleinen Anzahl von Proben eine derartige vollständige Spektrumsanalyse durchgeführt werden kann. Da der Zeitaufwand sehr groß ist, sollte außerdem selbst in diesen wenigen Fällen überprüft werden, ob nicht durch eine zusätzliche chemische Trennung die Identifizierung der Radionuklide und damit die Spektrumsanalyse vereinfacht werden kann.

Setzt man voraus, daß die Zahl und Art der im Meßpräparat enthaltenen Radionuklide bekannt ist, so sind zur Auswertung nur noch die besten Werte für die linear in Gl. (1) eingehenden relativen Häufigkeiten $H(j)$ zu berechnen. Die Größe $P(i,j)$ in Gl. (1) bedeutet dann die normierte Intensität im i -ten Energie-Intervall des γ -Spektrums des j -ten Radionuklids. Die besten Werte für $H(j)$ ergeben sich dann aus Gl. (4).

$$VH = A \quad (4)$$

$$\text{mit } V = M'GM \quad \text{und} \quad A = M'GN$$

Die Vektoren H und N sowie die Matrix M enthalten die Elemente $H(i)$, $Q(i)$ und $P(i,j)$. Die den einzelnen Intervallen i zugeordneten Gewichte sind als Elemente $g(i,i)$ in der Diagonalmatrix G enthalten. M' ist die transponierte Matrix M .

Zur Berechnung von H sind demnach zunächst einige Matrizenmultiplikationen durchzuführen und im Anschluß daran die Kehrmatrix von V zu bilden. Dies alles sind Operationen, welche mit einem Rechenautomaten leicht durchzuführen sind, so daß vom Prinzip her keine Schwierigkeiten bei der Berechnung der $H(j)$ auftreten. Bei der praktischen Anwendung muß jedoch sehr sorgfältig darauf geachtet werden, daß die zur Bestimmung der Einzelspektren $P(i,j)$ und der Gesamtspektren $Q(i)$ verwendeten Meßanordnungen in ihren Eigenschaften miteinander übereinstimmen. So müssen im besonderen Photopeak-Ausbeute P_A , Peak zu Totalverhältnis V und Auflösung d gleich sein. Außerdem ist erforderlich, daß die Konstanten K_1 und K_2 in der Energie E und Impulsamplitude S verknüpfenden Gleichung (5) unverändert sind. Wird zur Aufnahme der γ -Spektren die gleiche Meßanordnung verwendet, so sind die zuerst genannten Forderungen, d.h. die Konstanz der Größen P_A , V und d , erfüllt. Die gleichbleibende Verstärkung und damit die Konstanz der Größen K_1 und K_2 kann

$$E = K_1 + K_2 \cdot S \quad (5)$$

jedoch nur durch einen erheblichen apparativen Aufwand gewährleistet werden.

Ein anderer Weg ist, für eine Verstärkungsänderung nachträglich zu korrigieren. Dazu ist es erforderlich, die Einzelspektren $P(i,j)$ und/oder das Gesamtspektrum zu dehnen oder zu stauchen, um sie dadurch an die Bezugsverstärkung anzupassen. Diese Dehnung oder Stauchung ergibt unter Verwendung einer quadratischen Interpolationsgleichung selbst bei einer Änderung von K_2 um den Faktor 2 neue Spektren, welche weitgehend mit den erwarteten Spektren übereinstimmen. Die Güte dieser Übereinstimmung hängt u.a. von der Genauigkeit der Größen K_1 und K_2 ab. Wie die Erfahrungen mit unserem Programm BRITTA zeigen, ergibt jedoch selbst eine numerische Auswertung von Eichspektren die gewünschten Werte nicht mit der erforderlichen Genauigkeit. Dies liegt u.a. daran, daß einerseits die Verstärkung von Photovervielfachern von der Impulsrate abhängt und andererseits eine gleichmäßige Impulsrate während der Eichung mit mehreren Radionukliden nur schwer zu erreichen ist. Wir konnten jedoch zeigen, daß geringe Ungenauigkeiten Δ in der Verstärkung rechnerisch ausgeglichen werden können. Der Grundgedanke für diese Korrektur ist, daß die auf ein Δ zurückzuführenden Differenzen zwischen experimentellen und gedehnten (gestauchten) Spektren eine Funktion der ersten Ableitung

des Intensitätsverlaufes nach der Energie sein sollten. Vergleicht man in einem speziellen Programmteil diese Differenzen mit der Ableitung im Intervall i und findet eine strenge Korrelation in bezug auf Vorzeichen und absolute Größe, so ist offensichtlich eine Verstärkungskorrektur erforderlich. Diese Korrektur wird dann sinnvollerweise durch ein Eingabelungsverfahren durchgeführt.

Aus den obigen Ausführungen geht hervor, daß die Berechnung der besten Werte für die $H(j)$ durch die Anpassung von bekannten Einzelspektren an das Spektrum eines Radionuklidgemisches möglich ist. Außerdem kann man nach den bekannten Regeln auch gute Schätzwerte für die Standardabweichung (Streuung) $\sigma(j)$ für die relativen Häufigkeiten $H(j)$ berechnen. Die Praxis zeigt, daß im allgemeinen der Quotient $\sigma(j)/H(j)$ kleiner als 0,01 und somit die Genauigkeit der berechneten $H(j)$ hoch ist. Nur in sehr ungünstigen Fällen, z. B. bei sehr kleinem Anteil der Komponente j an der Gesamtintensität, wird dieser Quotient die angegebene Größe erheblich überschreiten. Zur Prüfung auf die Güte der Anpassung des berechneten Gesamtspektrums an das experimentell ermittelte Spektrum wird zumeist der χ^2 -Test verwendet. Bei der Beurteilung dieses Testes muß man jedoch sehr kritisch vorgehen (siehe unten).

Wenden wir uns nun der Auswertung von Abfallskurven zu. Die zeitliche Abhängigkeit der Aktivitätsrate R , d. h. die Zahl der pro Zeiteinheit in einer gegebenen Meßanordnung registrierten Impulse, für ein K Komponenten enthaltendes Radionuklid-Gemisch wird durch Gl. (6) beschrieben.

$$R(i) = \sum_{j=1}^K \frac{A(j) \cdot \exp[-Z(j) \cdot B(i)]}{Z(j) \cdot D(i)} \cdot (1 - \exp[-Z(j) \cdot D(i)]) \quad (6)$$

Es bedeuten $A(j)$ die Aktivitätsrate der Komponente j zur Zeit $B = 0$ und $Z(j)$ deren Zerfallskonstante, $B(i)$ bzw. $D(i)$ den Beginn bzw. die Dauer der Messung i . Wie bereits erläutert, lautet die Problemstellung für die Auswertung von Abfallskurven: Berechne die besten Werte für die Größen $A(j)$ und/oder $Z(j)$. Zur Lösung dieser Aufgabe sind drei Fälle zu unterscheiden:

1. Für alle Komponenten des Radionuklidgemisches sind die Halbwertszeiten genau bekannt. Die linear in Gl. (6) eingehenden Größen $A(j)$ werden in diesem Fall nach dem in Gl. (4) gegebenen Schema berechnet.

2. Für mindestens eine Komponente des Gemisches ist nur ein guter Näherungswert für die Halbwertszeit bekannt. In diesem Fall kann das in Gl. (4) angegebene Schema nicht direkt verwendet werden, da es nur für die Berechnung der linear in Gl. (6) eingehenden Größen geeignet ist. Um diese Voraussetzung zu erfüllen, wird die Gl. (6) in einer Taylor-Reihe um die Näherungswerte $Z'(j)$ und $A'(j)$ entwickelt. Behält man nur die Glieder, welche die Korrekturgrößen $d[Z(j)]$ und $d[A(j)]$ linear enthalten bei, so können diese nach dem

Schema der Gl. (4) berechnet werden. Durch den Abbruch der Taylor-Reihe sind die berechneten Korrekturgrößen jedoch selbst nur Näherungswerte. Die Summe aus Näherungswert $Z'(j)$ bzw. $A'(j)$ und $d[Z(j)]$ bzw. $d[A(j)]$ ergibt somit noch nicht den gewünschten besten Wert, sondern nur eine verbesserte Näherung dazu. Um die besten Werte zu erhalten, ist deshalb eine mehrfache Wiederholung der Rechnung unter Verwendung der jeweils verbesserten Näherungswerte erforderlich. Nach unseren Erfahrungen sind im allgemeinen 6 bis 10 Iterationen bis zum Erreichen der Konvergenzkriterien notwendig. Die für die erste Iteration erforderlichen Näherungswerte für $A(j)$ werden wie unter Fall 1 beschrieben berechnet.

3. Für mindestens eine Komponente des Gemisches ist die Halbwertszeit nicht bekannt. Das vorstehend beschriebene Verfahren ist in diesem Fall nicht anwendbar, da ja für alle $Z(j)$ zumindest Näherungswerte eingesetzt werden müssen. Der erste Schritt in der Rechnung ist deshalb die Ermittlung dieser Näherungswerte. Es sind mehrere Verfahren dafür vorgeschlagen worden, welche alle von willkürlich eingesetzten Werten ausgehen und diese solange variieren, bis ein Minimum in der Summe der Fehlerquadrate erreicht wird. Nach unserer Erfahrung führen jedoch alle Verfahren nur in einfachen Fällen zum Erfolg. Sobald sich die Zerfallskonstanten $Z(j)$ nur wenig bzw. die Aktivitätsraten $A(j)$ beträchtlich voneinander unterscheiden, ist die Wahrscheinlichkeit für die Konvergenz der Verfahren sehr klein. Dies ist einer der Gründe, warum in der letzten Version unseres Rechenprogrammes RADAR der Programmteil für die Ermittlung unbekannter $Z(j)$ nicht mehr enthalten ist. Dieser freiwillige Verzicht bedeutet jedoch kaum eine wesentliche Beschränkung für das Gesamtprogramm, da die für Fall 2 erforderlichen Näherungswerte in kurzer Zeit durch eine graphische Analyse erhalten werden können.

Obwohl in den drei Fällen die Berechnung der gewünschten «besten Werte» letztlich auf die Lösung der Gl. (4) zurückgeführt wird, unterscheiden sie sich in der Gestaltung des Programmes sowie in der zur Durchführung der Rechnung erforderlichen Zeit erheblich. Dagegen sind die Dateneingabe, Datenaufbereitung und Datenausgabe davon weitgehend unabhängig. Diese Programmteile hängen dagegen von den speziellen Gegebenheiten der Zählordnung und besonderen Wünschen des Benutzers ab. So akzeptiert z. B. unser Programm RADAR II Daten, die durch Impuls- oder Zeitvorwahl am Zählgerät oder durch manuellen Betrieb der Meßanordnung erhalten wurden. Im Programmteil Datenaufbereitung werden aus den Eingabedaten die für Nulleffekt, Totzeit und Standardmessung korrigierte Aktivitätsrate sowie die den Messungen zugeordneten Gewichte berechnet. Zum Schluß werden u. a. die Eingabedaten und die ermittelten besten Werte, deren Standardabweichung sowie die für die einzelnen Messungen berechnete Aktivitätsrate ausgegeben. Wie die Erfahrungen mit RADAR zeigen, ist eine so umfassende Aus-

gabe nur in solchen Fällen erforderlich, in denen Zweifel am Ergebnis aufgetreten sind und deshalb der Ablauf der Rechnung kontrolliert werden soll. Da es jedoch nur schwer von vornherein zu übersehen ist, wann solche Zweifel auftreten, wird die ganze Liste in allen Fällen ausgegeben.

Es ist allgemein üblich, als Maß für die insgesamt erreichte Anpassung, den χ^2 -Test auszuführen. Das dabei erhaltene Resultat sollte jedoch nach unseren Erfahrungen sehr kritisch bewertet werden. Bei der Ermittlung des χ^2 -Wertes geht u. a. der Erwartungswert $s(i)$ für die Streuung der Einzelmessung ein. Berücksichtigt man bei der Berechnung von $s(i)$ nur die Statistik des radioaktiven Zerfalls und nicht die Streuung in Nulleffekt, Standard, Meßbeginn und Meßdauer, so sind alle Werte für $s(i)$ zu klein und damit χ^2 zu groß.

Ein außerhalb der Vertrauensgrenzen liegender χ^2 -Wert kann aber auch auf andere Ursachen zurückgeführt werden:

1. Fehler in der Meßanordnung,
2. Fehler in der Dateneingabe,
3. Fehler in der Zahl der Komponenten,
4. Über- oder Unterschätzung der Streuung in der Standard- und Zeit-Messung.

Eine Entscheidung zwischen diesen Möglichkeiten ist auf Grund des berechneten χ^2 -Wertes nicht möglich. Wir haben deshalb in unser Programm RADAR einen weiteren Test aufgenommen, welcher von den normierten Differenzen $W(i)$, d. h. dem Quotienten $U(i)/s(i)$, ausgeht. $U(i)$ ist die Differenz zwischen berechneter und experimentell ermittelter Aktivitätsrate. Diese $W(i)$, deren Häufigkeitsverteilung einer Gauß-Kurve entsprechen sollte, werden in 10 Klassen einsortiert. Die Grenzen dieser Klassen sind so gewählt, daß jede Klasse 10% der Fläche einer Gauß-Kurve einschließt. Durch diese Wahl der Klassengrenzen ergibt sich, daß bei einem fehlerfreien Experiment alle Klassen gleichmäßig populiert sein sollten. Ist die Population der den großen $W(i)$ entsprechenden Klassen systematisch verschieden von der Population der anderen Klassen, so deutet dies auf einen Fehler in der Berechnung von $s(i)$ hin. Wird die Zahl der Komponenten bei der Rechnung zu klein angesetzt, so sollte sich dies in einem zusammenhängenden Bereich der Messungen durch systematische Abweichungen nach positiven oder negativen $W(i)$ bemerkbar machen. Fehler in der Meßanordnung oder in den Eingabedaten sind dagegen im allgemeinen an sporadisch auftretenden besonders großen Werten von $W(i)$ zu erkennen.

Für die Anwendung von Rechenautomaten in der Auswertung von γ -Spektren oder Abfallskurven war es

zunächst wichtig, den Nachweis zu erbringen, daß diese Analysen tatsächlich programmiert werden können. Nachdem dieser Beweis in vielen Laboratorien erbracht wurde, gilt die nächste Frage der Wirtschaftlichkeit. Abgesehen von den bereits erwähnten Vorteilen, wie Schnelligkeit der Auswertung und Genauigkeit der Ergebnisse, muß die Anwendung auch finanziell tragbar sein. Eine generelle Antwort auf diese Frage kann nicht gegeben werden, da sie von vielen speziellen Bedingungen abhängt. Um jedoch einen allgemeinen Eindruck zu übermitteln, seien einige Beispiele für die von uns benutzten Programme BRITTA und RADAR aufgeführt. Für die Analyse eines γ -Spektrums zur Berechnung der Häufigkeit $H(j)$ von insgesamt 5 Komponenten ohne Änderung der Verstärkung werden etwa 0,1 Minuten, mit Änderung der Verstärkung und Berechnung der Konstanten K_1 und K_2 in Gl. (5) aus Eichspektren etwa 5 bis 10 Minuten benötigt. Die Analyse einer Abfallskurve für ein aus 4 Komponenten bestehendes Radionuklidgemisch auf die $A(j)$ und $Z(j)$ erfordert eine Rechenzeit von etwa 3 bis 10 Minuten. Sind dagegen nur die besten Werte für die $A(j)$ zu ermitteln, so ist die Rechnung in etwa 0,3 bis 2 Minuten beendet. Die angegebenen Zeiten beziehen sich auf einen IBM-7074-Rechenautomaten. Nach Auskunft unseres Rechenzentrums ist die Benutzungsgebühr für diesen Automaten mit etwa DM 15,00 pro Minute anzusetzen. Demnach ergibt sich ein Preis von DM 1,50 bis 150,00 pro Analyse.

Bei der Abschätzung der sich insgesamt pro Analyse ergebenden Kosten ist noch zu berücksichtigen, daß die Daten für die Eingabe in den Rechenautomaten in der durch das Programm festgelegten Weise geordnet sein müssen. Besitzt die Meßanordnung keine automatische Registriereinrichtung, so ist es weiterhin erforderlich, daß die Daten manuell in eine von den Eingabeeinrichtungen des Rechenautomaten lesbare Form (Lochband, IBM-Karten, Magnetband) überführt werden. Der damit verbundene zeitliche und personelle Aufwand ist zu meist so groß, daß die daraus resultierenden Kosten den Preis der reinen Rechenzeit beträchtlich übersteigen. In den letzten Jahren ist deshalb die Tendenz zu erkennen, durch geeignete Apparaturen den Datenfluß von Meßanordnung und Rechenautomaten weitgehend zu automatisieren, um damit die Zeit und Kosten für diese Übertragung einzusparen.

Die vorstehenden Ausführungen zeigen, daß es heute möglich ist, die Auswertung von γ -Spektren und Abfallskurven mittels großer, programmgesteuerter Rechenautomaten durchzuführen. Bei richtiger Anwendung der Programme und kritischer Beurteilung der Ergebnisse stellt diese Entwicklung einen echten Fortschritt in bezug auf die radiochemische Analytik dar.