

DETLEF GAUDYN,
IZYDOR PODGÓRSKI,
JACEK FILIPECKI

PROGRAM DO ANALIZY CZASÓW ŻYCIA POZYTONÓW

1. Problem fizyczny

Jedną z metod badań struktur elektronowych ciał stałych jest metoda pomiaru czasów życia pozytonów w badanych próbkach. Analiza mierzonego widma czasów życia pozytonów pozwala określić charakter zjawisk elektronowych, oraz występowanie ewentualnych luk międzyatomowych poprzez możliwość wykrycia zjawiska tworzenia pozytu [1, 2, 3, 4].

2. Metoda rozwiązania

Model matematyczny [5, 6, 7] zakłada, że mierzone widmo czasów życia pozytonów jest sumą eksponentyjalnych funkcji stałych rozpadu, funkcji czasowej zdolności rozdzielczej oraz stałego tła.

Widmo analizowane jest półliniową metodą najmniejszych kwadratów typu Marquardt'a [5]. Estymowanymi parametrami są: czasy życia pozytonów, ich względne natężenia, tło oraz kanał zerowy, dla którego czas = 0. Model uwzględnia również więzy, które mogą być narzucone na czasy życia i ich względne natężenia poprzez:

- (a) ustalenie dowolnej ilości czasów życia
- (b) ustalenie M względnych natężeń czasów życia
- (c) wprowadzenie M liniowych kombinacji względnych natężeń czasów życia $\alpha_j = 0$

$$\sum_{j=1}^{K0} k_{1j} \alpha_j = 0 \quad \begin{matrix} (1 = 1, \dots, M) \\ M < K0 \end{matrix}$$

Pozytony anihilują również w źródle, dlatego uwzględnia się korekcję dla tego typu anihilacji. Przeprowadzona analiza statystyczna pozwala wyznaczyć wariancje i macierz kowariancji estymowanych parametrów.

2.1. Zakres działania programu

Opisany program został przygotowany na mikrokomputer SM-4 w architekturze podstawowej, tzn. z pamięcią operacyjną 56 kB i pod systemem operacyjnym DOS. Ograniczenie takie zawęży ilość analizowanych kanałów do 300.

W przypadku pracy mikrokomputera SM-4 pod systemem operacyjnym DOS RW zakres analizowanego widma czasów życia pozytonów można łatwo poszerzyć do pełnych możliwości 512-kanałowego analizatora.

Ponadto w programie przyjęto, że funkcja czasowej zdolności rozdzielczej może być sumą dwóch gaussianów. Wynika to z powszechności stosowania izotopu ^{60}Co do zdejmowania krzywej czasowej zdolności rozdzielczej.

3. Opis programu

Program napisany jest w formie zadania pakietowego BA (batch), które realizuje siedem kolejno następujących po sobie programów (TRJB, T1, T2, T3, T4, T5, WYDRUK), korzystających łącznie z siedmiu procedur (D2, E2, D5, E5, C, F, G). Najobszerniejszy program T2 zajmuje w pamięci komputera 24886 słów. Wszystkie obliczenia prowadzone są w podwójnej precyzji. Pomiedzy programami i podprogramami przesyłane są wyniki pośrednie zapisane w postaci zbiorów na dysku (patrz: schemat blokowy).

W programie TRJB wczytywane są dane wejściowe ze zbioru o nazwie JOBGD oraz dokonywany jest podział na dwa zbiory DT1 i DT3, które wykorzystywane są odpowiednio w podprogramach T1 i T3.

Program T1 wczytuje analizowane widmo ze zbioru TABGD i oblicza początkowe wagi statystyczne oraz pole pod krzywą pochodzącą z analizatora wielokanałowego (A_{tabl} = całkowita ilość zliczeń w widmie).

Program T2 wylicza estymowane parametry (stałe rozpadu λ_j , kanał zerowy T_0 , tło B) metodą najmniejszych kwadratów typu Marquardt'a. Korzysta on z trzech procedur: G, D2, E2. Podprogram G służy do obliczania funkcji błędu (erf x) dla liczb typu DOUBLE PRECISION. Podprogramy D2, E2 służą do rozwiązania symetrycznego, dodatnio określonego układu równań liniowych $Ax=b$. D2 rozkłada macierz A na iloczyn macierzy trójkątnych $A=LL^T$ metodą Choleskiego, natomiast E2 na bazie tego rozkładu rozwiązuje układ równań liniowych.

Program T3 dokonuje korekcji analizowanego widma poprzez uwzględnienie anihilacji pozytonów w źródle. Korzysta z procedur: C, która oblicza poprawki do korekcji źródła oraz z procedury G.

Program T4 jest identyczny pod względem strukturalnym z T2. Analizuje jednak widmo z uwzględnioną korekcją źródła.

W programie T5 następuje ostateczne opracowanie estymowanych parametrów oraz przeprowadzona jest analiza statystyczna. Program korzysta z podprogramów E5, D5, F, z których E5 i D5 mają takie samo zadanie jak E2 i D2, różnią się tylko obszarem zajmowanej pamięci komputera, natomiast F jest odpowiednikiem procedury G dla liczb typu REAL.

Program WYDRUK służy do wyprowadzenia wyników na drukarkę.

4. Wejście

Dane wprowadzone są z dysku w postaci dwóch oddzielnych zbiorów o nazwach JOBGD i TABGD.

Pierwszy rekord zbioru JOBGD zawiera dwie liczby typu całkowitego — format 2I4: IJOB — określa numer jobu, IPRINT — pozwala wprowadzić iteracje z cyklu dopasowania ($\text{IPRINT} \neq 0$).

W następnym rekordzie formatem 78A1 zapisana jest nazwa analizowanej próbki.

Rekord trzeci zawiera następujące dane: MP — ilość składowych gaussianów krzywej czasowej zdolności rozdzielczej: (FWHM (IP), IP = 1, MP) — szerokość w połowie wysokości maksimum składowych krzywej czasowej zdolności rozdzielczej w [nsek]: (OMEGA (IP), IP = 1, MP) — pro-

centowy udział poszczególnych składowych krzywej czasowej zdolności rozdzielczej: (DT (IP), IP = 1, MP) — dopuszczalne odchylenie pików składowych gaussianów krzywej zdolności rozdzielczej od ich stacjonarnego położenia (dopuszczalne „płynięcie” pików) w [nsek]. Format zapisu tego rekordu I2, 9F6.4.

W rekordzie czwartym formatem 2E10.5, 2I4 zapisane są TOGUES, CHATIM, ICHMIN, ICHMAX. TOGUES odpowiada numerowi kanału, dla którego czas = 0 i może być on parametrem lub posiadać wartość ustaloną. Jeżeli jest parametrem podaje się jako daną wartość przybliżoną kanału zerowego. CHATIM jest przedziałem czasu w [nsek] przypadającym na kanał. ICHMIN jest numerem kanału, od którego rozpoczyna się analiza widma, natomiast ICHMAX numerem ostatniego analizowanego kanału.

Rekord piąty stanowią stałe typy całkowitego K0, KF, M, KB, KT0, zapisane formatem 7I4. K0 podaje ilość czasów życia w widmie, a KF określa liczbę ustalonych czasów życia. |M| jest liczbą wieżów narzuconych na względne natężenia czasów życia. KB podaje, czy tło jest parametrem (KB=0) lub wielkością ustaloną (KB=1). Analogicznie KT0 podaje, czy kanał zerowy jest parametrem (KT0=0) lub wielkością ustaloną (KT0=1).

Szósty rekord zawiera przybliżone (ustalone) czasy życia (TA0 (J), J=1, K0), format 7E10.5.

Jeżeli $M > 0$, M względnych natężeń jest stałych, wówczas w siódmym rekordzie formatem 7I4 umieszczone są dane (JL (L), L=1, M) a w ósmym formatem 7E10.5, (RINTF (L), L=1, M). JL(L) jest liczbą podającą, który kolejny czas życia (umieszczony na liście wejścia) ma ustalone względne natężenie RINTF (L) podane w procentach.

Jeżeli $M < 0$, |M| liniowych kombinacji względnych natężeń czasów życia jest równych zero

$$\sum_{j=1}^{K0} k_j \alpha_j = 0 \quad (j = 1, \dots, M)$$

i l kolejnych rekordów zawiera współczynniki k_j zapisane jako (COMB (J, L), J=1, ..., K0), formatem 7E10.5.

Jeżeli KB=1, w kolejnym rekordzie zapisane jest stałe tło BACKGR formatem E10.5.

Kolejny rekord stanowi liczba całkowita KCOR, format I4, podająca ilość czasów życia w widmie źródła. KCOR=0 powoduje przebieg programu bez korekcji źródła i wówczas rekord ten jest ostatnim w zbiorze

JOBGD. Jeżeli $KCOR \neq 0$ wówczas kolejno następujące po sobie rekordy zawierają ((TACOR (J), $J=1$, KCOR), (RINTCR (J), $J=1$, KCOR)), format 7E10.5, ALPHA, format E10.5, ISOUR, format I4. TACOR są czasami życia w nsek pozytonów w źródle a RINTCR są ich procentowymi natężeniami. ALPHA jest procentowym udziałem anihilacji pozytonów w źródle. ISOUR jest liczbą całkowitą, która może przyjmować wartość zero lub jeden. ISOUR=0 oznacza „normalną kontynuację” tzn., że obliczanie czasów życia z uwzględnieniem źródła, startuje od wartości obliczonych w programie T2, natomiast ISOUR=1 oznacza kontynuację dla specjalnych czasów życia (TASOUR (J), $J=1$, KV) zapisanych formatem 7E10.5.

W pierwszym rekordzie zbioru TABGD zapisane są, format 2I4, dwie liczby całkowite IDENT, NFULL, z których pierwsza oznacza numer identyfikacyjny programu a druga liczbę kanałów wprowadzanego widma (maksimum 512). Kolejne rekordy zawierają analizowane widmo, format 10F7.0.

5. Wyjście

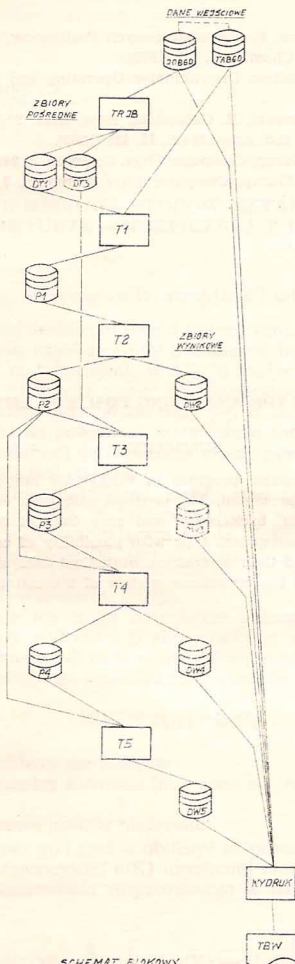
Wydruk rozpoczyna się od wyprowadzenia analizowanego widma. Następnie drukowane jest słowo JOB z numerem, numer identyfikacyjny parametrów oraz dane ze zbioru JOBGD: K0, KF, M, KB, KT0 oraz nazwa próbki.

Jeżeli IPRINT $\neq 0$, wówczas drukowane są iteracje Marquardt'a. Przy każdej z nich podane są wartości stałych rozpadu λ_j , kanału zerowego T0, współczynników $I_0/2\lambda_j$, tła, sumy kwadratów błędów Φ , współczynnika Marquardt'a k oraz typu iteracji (A lub B). Po iteracjach następuje wydruk dalszych danych ze zbioru JOBGD z komentarzami. Pojawia się między tymi danymi informacja o ilości iteracji, po których następuje zbieżność lub informacja o braku takiej zbieżności, o ile nie nastąpiła ona po 25 cyklach iteracyjnych.

Po wyczerpaniu danych ze zbioru JOBGD następuje wydruk obliczonych parametrów. Wariancja dopasowania S^2 (VARIANCE OF THE FIT) jest parametrem rozkładu χ^2 informującym o poprawności przyjętego modelu (wartość S^2 około 1, świadczy o poprawności przyjętego modelu). „Excess probability” jest prawdopodobieństwem otrzymania wariancji dopasowania S^2 . Następnie drukowane są czasy życia, ich względne natężenia, wartość tła oraz kanału zerowego. Pod każdym obliczonym parametrem podane jest odchylenie standardowe. Drukowane jest również pole pod krzywą doświadczalną „area from table” oraz pole obliczone w oparciu o otrzymane parametry „area from fit”. Przeprowadzona analiza statystyczna pozwala wyprowadzić macierz kowariancji estymowanych parametrów. Jeżeli liczony jest JOB 2, czyli model uwzględniający poprawkę na wpływ źródła, drukowane są również parametry bez uwzględnienia poprawki źródła. IPRINT $\neq 0$ powoduje wyprowadzenie także iteracji typu Marquardt'a po korekcji źródła.

6. Test programu

Program został przetestowany na danych pochodzących z prac [6, 7]. Uzyskano całkowitą zgodność wyników.



SCHEMAT BLOKOWY

BIBLIOGRAFIA

- [1] U.A. Arifow, P.U. Arifow, Fizika Miedliennych Pozitronow, FAN, Taszkient 1971.
- [2] H.J. Ache, Angewandte Chemie, **11**, 179 (1972).
- [3] Model 473 Constant-Fraction Discriminator Operating and Service Manual, Inc Ortec, 1976.
- [4] J. Filipecki, J. Dworakowski, B. Calusiński, Phys. Stat. Sol. a, **66**, 463 (1981).
- [5] D.W. Marquardt, J. Soc. Ind. Appl. Math. **11**, 431 (1963).
- [6] P. Krikegaard and M. Eldrup, Computer Phys. Commun. **3**, 240, 55 (1972).
- [7] P. Krikegaard and M. Eldrup, Computer Phys. Commun. **7**, 401—409, (1974).

DETLEF GAUDYN,
IZYDOR PODGÓRSKI,
JACEK FILIPECKI

A PROGRAM FOR ANALYSING POSITRON LIFETIME

SUMMARY

Description of the computer program in FORTRAN language, useful in analysing positron lifetime, is presented. The program calculates estimated parameters: lifetimes, relative intensities, background and zero channel by an iterative last-squares technique of the Marquardt type with possibility of considering additional conditions for life times and their intensities. Statistical analysis allows to compute the resulting variances and the covariance matrix of the estimated parameters.