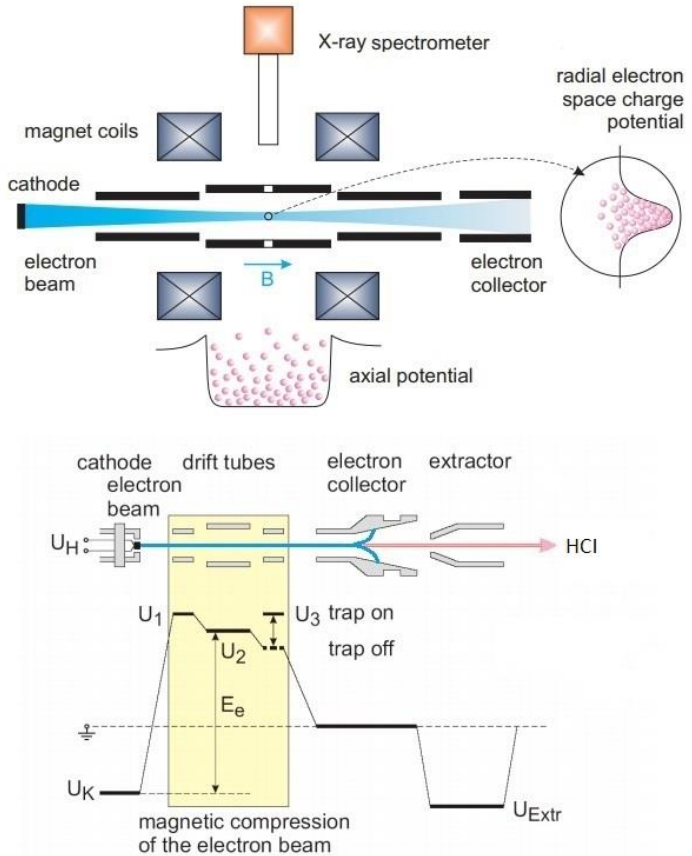


Projekt zaliczeniowy Python

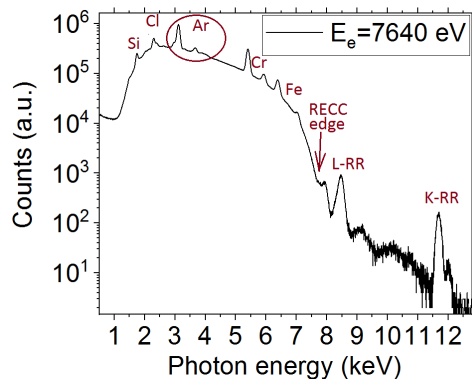
Projekt dotyczyć będzie bezpośrednio analizy danych, którą przeprowadzam w swoich badaniach.

Pracuję nad efektami atomowymi w ciężkich jonach badanymi przy pomocy Electron Beam Ion Trap (pułapka jonów z wiązką elektronów). Idea pracy tej aparatury jest następująca: wysokonapięciowy prąd płynący przez katodę produkuje wiązkę elektronów, następnie jest ona przyspieszana oraz zacieśniana przez zestaw pól elektrycznych i magnetycznych, jej przebieg kończy się w chłodzonym wodą kolektorze. W środku pułapki znajdują się trzy elektrody, których ustawienia potencjałów pozwalają na pułapkowanie dodatnich jonów (Rys. 1- U_1 , U_2 , U_3), jednak nie wpływają one na przepływ elektronów, czy ruch neutralnych atomów. Do środka pułapki wpuszczamy trochę argonu (ciśnienie bazowe wewnątrz pułapki jest na poziomie 10^{-10} mbar więc tego aktywnego gazu wystarczy bardzo niewiele). Gdy w procesie jonizacji zderzeniowej atomów z rozpędzoną wiązką elektronów, uda nam się wyprodukować jony będą one odczuwały potencjał pułapkujący w kierunku podłużnym produkowany przez elektrody oraz potencjał pułapkujący w kierunkach poprzecznych, którego źródłem jest gradient gęstości wiązki elektronów (wiązka będzie wciągać dodatnie jony do swojego środka- tam gdzie jest największa gęstość elektronów). Wyprodukowane i spułapkowane jony oddziałują z wiązką elektronów, jak z tarczą elektronową- zachodzą różne procesy atomowe. Najprostszym przykładem procesu, który możemy obserwować, jest proces radiacyjnej rekombinacji, będący odwróconym w czasie efektem fotoelektrycznym. Elektron zostaje wychwycony do stanu związanego jonu i towarzyszy temu emisja fotonu o energii równej zmianie energii elektronu (suma energii kinetycznej swobodnego elektronu i energii wiązania powłoki, na którą „wskakuje” elektron). Ten i inne radiacyjne procesy zachodzącym w pułapce rejestrowane są przy pomocy detektora Bruker 1053 – zbiera informacje o fotonach, które opuszczają pułapkę. Na wyjściu z pułapki i na wejściu do detektora znajdują się okna berylowe o grubości 12,5 μm . Okna te powodują silną absorpcję nisko energetycznych fotonów. Pułapka pozostaje zamknięta przez pewien ustalony czas np. 500ms, następnie na 20 ms potencjał trzeciej elektrody zostaje obniżony i jony opuszczają pułapkę.



Rysunek 1. Schemat aparatury typu EBIT

1. Kalibracja



Rysunek 2. Przykładowe widmo SPX

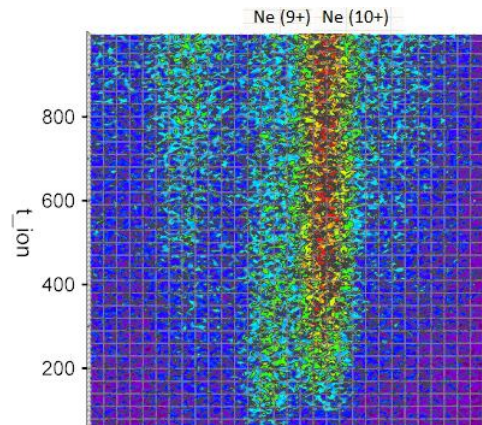
wprowadzana jest ręcznie, ale dla różnej energii elektronów jest ona trochę inna, więc zamiast ustalać jaka powinna być na początku pomiaru, mierzymy z pewnymi przybliżonymi parametrami, a następnie zmieniamy kalibrację tak aby odpowiadała plikowi SPX. Informacje o zadanej wstępnej kalibracji oraz o zmienianym czasie jonizacji znajdują się w osobnym pliku txt, gdzie podane są tylko 4 wartości- minimalna wartość czasu jonizacji (np. 20 ms), krok w jakim się zmieniała (np. 1 ms), minimalna wartość energii mierzonych fotonów (np. 6 keV) oraz krok wynikający z ustalonej wstępnie kalibracji (np. 5,09076 eV).

W każdym widmie znajdują się pewne maksima, związane z promieniowaniem charakterystycznym pierwiastków, znajdujących się wewnątrz pułapki (lotne pierwiastki z katody, metale budujące samą pułapkę). Zmiana kalibracji polega na znalezieniu lokalnych maksimów w pliku SPX i w wycałkowanym po czasie jonizacji pliku TERX. Następnie przypisane ich sobie (będę się różnić ale nieznacznie) i przeprowadzenie regresji liniowej. Na koniec należy plikowi TERX przypisać nową kalibrację energii elektronów.

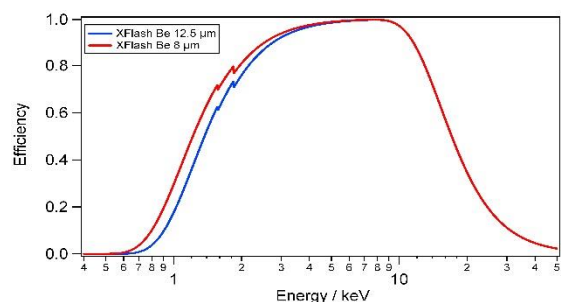
Do poprawy kalibracji użyte są biblioteki **pandas** oraz **scipy**.

PROBLEM: Używając funkcji `find_peak` można ustawić tylko ograniczenie na „globalny” `threshold` i `height`- w ten sposób ciężko jest ustawić warunki dla których otrzymuję mało (tylko te znaczące peaki). Jeżeli chcę żeby dany peak wystawał ponad tło to muszę pociąć moje dane, następnie określić średnią liczbę zliczeń w tym przedziale i z tego wybrać peaki.

Podczas pomiarów dane z detektora zapisywane są w dwóch plikach. Pierwszy plik, o domyślnym rozszerzeniu SPX, zawiera informacje o wszystkich zmierzonych fotonach podczas pułapkowania, ma więc formę zależności intensywności od energii fotonów (Rysunek 2). Plik ten ma bardzo dobrą kalibrację energii fotonów. Drugi plik pochodzi z systemu akwizycji danych nazywanego TERX. Zapisuje on fotony w funkcji czasu jonizacji np. jonizacja od 20 ms do 1000 ms co 1 ms (Rys. 3). Domyślne rozszerzenie tego pliku to txt, znajduje się w nim macierz intensywności zliczeń fotonów o danej energii (kolejne wiersze to kolejna energia) dla określonych czasów jonizacji (kolejne kolumny). Funkcja kalibracji



Rysunek 3. Przykładowe widmo TERX w obszarze energii fotonów odpowiadającej radiacyjnej rekombinacji do powłoki K neonu



Rysunek 4. Krzywa wydajności detektora dla okien berylowych 8 um i 12,5 um

Funkcja calibration(ścieżka_do_pliku)

Jako argument przyjmuje pliki znajdujące się w danej lokalizacji. Pliki te są trzech typów- plik spx (stanowi kalibrację wzorcową), plik terx (stanowi właściwy argument funkcji, zapis detektora w postaci dużej tablicy zliczeń, którą należy wycałkować dla wszystkich czasów jonizacji, a następnie zmienić jej kalibrację), plik par (znajdują się w nim tylko 4 liczby, które określają parametry opisu osi czasu i energii z pliku terx). Pliki terx i par są wpisywane do słownika, aby łatwo można znajdować parametry dla konkretnego pliku terx. Następnie należy znaleźć 2-5 maksimum w pliku spx i terx (w zależności od energii elektronów przy której zbierane były dane liczba maksimum będzie różna) i wykonać regresję liniową $y=ax+b$, gdzie y to kalibracja spx (wzorcową), x aktualna kalibracja terx, a i b to parametry, które posłużą do wprowadzenia korekty między kalibracjami. Funkcja powinna zwracać tylko dwie liczby: EO_first_corr i E_bin_corr, które są analogiczne jak te w pliku z parametrami i dają pełną informację o poprawionej kalibracji. W celu wygody dobrze żeby funkcja wpisywała je do nowego pliku.

2. Wydajność detektora

Jak wspomniałam między detektorem a pułapką, znajdują się dwa okna berylowe, o efektywnej wspólnej grubości 25 um. Należy utworzyć plik z charakterystyką absorpcji przez materiał o danej grubości. Z amerykańskiej bazy internetowej (http://henke.lbl.gov/optical_constants/) można ściągać fragmenty takiej charakterystyki, należy je jednak odpowiednio skleić. Należy przemnożyć SPX oraz macierz TERX przez tą funkcję. Problem: pliki które dostaję z detektora to plik o rozszerzeniu SPX, którego nie umiem odkodować. Innym typem jest plik TXT, który jednak ma dziwne kodowanie (aktualnie znajduje się on pod ścieżką data/spx/Raw). Plik ten wciągam do notatnika i zapisuje ponownie z innym kodowaniem w ten sposób dostaję plik z folderu data/spx, ale może da się pominąć ten krok.

Aktualnie prowadzone są także pomiary przy użyciu dodatkowego absorbera- 70 um warstwy aluminium. Ponownie- należy ściągnąć ze strony http://henke.lbl.gov/optical_constants/ odpowiednie charakterystyki dla wybranego materiału i jego grubości, a następnie użyć do korekty liczby zliczeń.

Funkcja det_eff(ścieżka_do_pliku)

Jako argumenty przyjmuje kolejne pliki umieszczane w danej lokalizacji, pliki te pochodzą z zapisu detektora. Każdy z plików jest przetwarzany tak, aby znaleźć fragment w którym zapisana jest energia od 0.5 keV do 19 keV. Następnie dla tego wybranego przedziału energii wartość zliczeń przemnażana jest przez współczynnik korekcyjny na absorpcję w oknie berylowym. Lista współczynników absorpcji dla energii fotonów co 1 eV znajduje się w pliku 25uBe.csv. Funkcja zwraca plik o nazwie takiej jak argument z dopiskiem _corrected, zwraca także dwa wykresy wygenerowane przez matplotlib.pyplot (pierwszy przed korektą, drugi po korekcji na absorpcję w berylu). Ponadto zwracany jest napis „Detector Efficiency Applied”.

Funkcja detector_eff_aluminium(ścieżka_do_pliku)

Jako argumenty przyjmuje kolejne pliki umieszczane w danej lokalizacji, pliki te pochodzą z zapisu detektora. Każdy z plików jest przetwarzany tak, aby znaleźć fragment w którym zapisana jest energia od 0.5 keV do 19 keV. Następnie dla tego wybranego przedziału energii wartość zliczeń przemnażana jest przez współczynnik korekcyjny na absorpcję w oknie berylowym oraz warstwie aluminium. Lista współczynników absorpcji dla energii fotonów co 1 eV znajduje się w plikach 25uBe.csv oraz 70uAl.csv. Współczynniki te są wymnażane. Funkcja zwraca plik o nazwie takiej jak argument z dopiskiem _Al_corrected, zwraca także napis „Detector Efficiency Applied”.