

正电子湮没寿命谱多指数函数拟合程序分析

尹传元
(南京大学)

本文分析美国乔治亚大学徐孝华教授提供的正电子湮没寿命谱多指数函数拟合程序NFIXED, 详细地介绍了其使用方法。在使用中略加改进, 对 α -Fe样品的正电子湮没寿命谱进行多次计算, 将获得的寿命值与通用的寿命值相比较, 相差均 $<10\text{ps}$ 。显然, 这个程序的计算效果是好的。

关键词: 正电子湮没寿命谱 多指数函数 非线性函数 矩阵 寿命 强度

一、引言

在正电子湮没寿命谱测量过程中, 由于加进了测量仪器的时间分辨函数, 使实测谱偏离多指数函数而畸变。但是, 为什么在数据处理时又可考虑仪器的时间分辨函数影响, 把实际测量的寿命谱作多指数函数拟合呢? 文献[1,2]对这个问题已通过近似计算作了证明。要满足一定条件才能这样做, 这个条件就是要丢弃零时间 T_0 处的前几道计数, 不参加拟合。究竟如何确定丢弃的道数, 目前知道有两种方法:

(1) 由计算机自动逐点计算正电子寿命谱延迟峰以下的平坦部分直线斜率, 然后选取斜率绝对值最大的一点作为拟合计算的起始点。

(2) 凭计算正电子寿命谱的经验来确定正电子寿命谱拟合计算的起始点。

拟合计算的起始点选择是否得当, 是直接影响计算正电子寿命谱的正确性。作者对这一问题作了探讨, 并在上述两个方法基础上提出改进的方法, 即凭经验大概确定一个拟合起始道, 然后由该点起, 逐点计算3—5次正电子湮没寿命谱, 从不同次的计算结果中找出一组精度较高的结果。这个方法经多次应用, 得到的结果均是满意的。

本文又把该程序 NFIXED 和考虑时间分辨函数用卷积方法设计的程序 POSTRON FIT-EXTENDED 在同样条件下, 对 α -Fe 样品的正电子湮没寿命谱分别计算。把计算结果列表比较, 也说明程序 NFIXED 是可行的(见表1)。

二、程序设计的数学方法

用常用的最小二乘法编制这个程序^[3]。

设多指数函数:

$$y(a, t_I) = \sum_{j=1}^3 a_{2j} \cdot \exp(-a_{2j-1} \cdot t_I), \quad I=1, N$$

则正电子寿命谱的实验数据点 $y_I(I=1, N)$ 的均方差为

$$WVAR = \sum_{I=1}^N w_I [y_I - y(a, t_I)]^2 \quad (1)$$

式中, $w_I = 1/y_I$ 。

$y(a, t_I)$ 是一组非线性函数, 要预先确定好参变量初值 a_k , 然后在初值 a_k 附近将非线性函数 $y(a, t_I)$ 进行泰勒展开^[4], 略去二阶以上的高次项, 可得到一组线性函数:

$$y(a_K + \Delta a_K, t_I) \approx y(a_K, t_I) + \sum_{k=1}^M P_{KI}(a_K, t_I) \cdot \Delta a_K \quad (2)$$

式中,

$$P_{KI} = \frac{\partial y(a_K + \Delta a_K, t_I)}{\partial \Delta a_K} = \begin{cases} \exp(-a_{2I} \cdot t_I) \\ -a_{2I-1} \cdot t_I \cdot \exp(-a_{2I-1} \cdot t_I) \end{cases}$$

将(2)式代入(1)式得:

$$WVAR = \sum_{I=1}^N w_I [y_I - y(a_K, t_I) - \sum_{K=1}^M P_{KI}(a_K, t_I) \cdot \Delta a_K]^2 \quad (3)$$

将(3)式对 Δa_K 求偏导数, 并令,

$$\frac{\partial WVAR}{\partial \Delta a_K} = 0$$

经整理得:

$$\begin{aligned} \sum_{I=1}^N \sum_{K=1}^M w_I P_{KI}(a_K, t_I) \cdot \Delta a_K \cdot P_{KI}(a_K, t_I) &= \sum_{I=1}^N w_I [y_I - y(a_K, t_I)] \cdot P_{KI}(a_K, t_I) \\ \sum_{I=1}^N \sum_{K=1}^M w_I P_{KI}(a_K, t_I) \cdot P_{KI}^T(a_K, t_I) \cdot \Delta a_K &= \sum_{I=1}^N w_I [y_I - y(a_K, t_I)] \cdot P_{KI}(a_K, t_I) \end{aligned}$$

令,

$$\begin{aligned} \sum_{K=1}^M P_{KK}(a_K) &= \sum_{I=1}^N w_I P_{KI}(a_K, t_I) \cdot P_{KI}^T(a_K, t_I) \\ b_K &= \sum_{I=1}^N w_I [y_I - y(a_K, t_I)] \cdot P_{KI}(a_K, t_I) \end{aligned}$$

则得:

$$\begin{aligned} \sum_{K=1}^M \sum_{K=1}^M P_{KK}(a_K) \cdot \Delta a_K &= b_K \\ P \cdot \Delta a &= b \end{aligned}$$

上式亦可写成矩阵形式:

$$\begin{bmatrix} P_{11} & P_{12} & \cdots & P_{1K} \\ P_{21} & P_{22} & \cdots & P_{2K} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ P_{K1} & P_{K2} & & P_{KK} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \Delta a_1 \\ \Delta a_2 \\ \vdots \\ \Delta a_K \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_K \end{bmatrix}$$

本文的程序是从此矩阵出发, 用行列式解方程组的迭代方法编制而成^[5]。

三、程序中引入的误差公式

本文程序引入的误差计算公式有:

(1) 均方偏差 $WVAR$:

$$WVAR = WVAR / (N - NPV)$$

$N=1$, NPV (拟合参数的个数)。

$NPV=4$ (表示有固定成分), 或 6(表示无固定成分)。

(2) 标准相对百分误差 $PCNT(J)$:

$$\begin{aligned} D(J) &= \sqrt{WVAR \cdot P_{LL}} \\ PCNT(J) &= 100.0 [D(J) / a_J] \\ L &= 1, NPV \\ J &= 1, NPV \end{aligned}$$

* $P_{KI}^T(a_K, t_I)$ 是 $P_{KI}(a_K, t_I)$ 的转置矩阵

1985年10月4日收到

四、程序计算流程图

图1 为本文程序的计算流程。

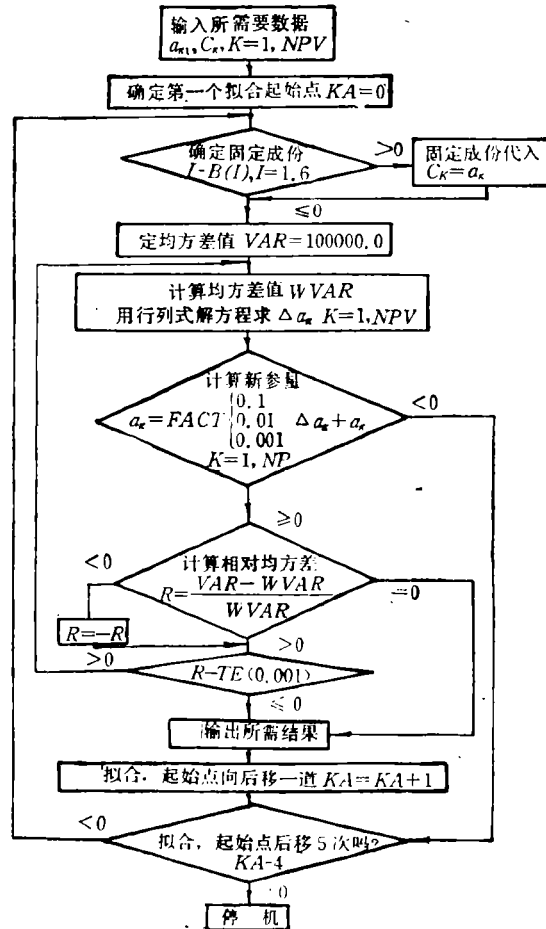


图1 计算流程图

五、计算结果

程序 NFIXED 在计算机上对 α -Fe 样品的正电子湮没寿命谱用三个寿命成分 (α -Fe, ^{22}Na 、源的衬底材料) 完全没有固定成分进行试算, 运算一次的时间是 40 秒。为了验证计算结果是否合理, 作者把得到的运算结果一方面和 α -Fe 样品的正电子湮没寿命现在的通用值相比较, 相差 $< 10\text{ps}$ 。另一方面又和考虑仪器的分辨时间而设计的程序 POSITYON FIT-EXTENDED 对同样 α -Fe 样品的正电子湮没寿命谱在同样的计算机上进行试算, 所得的结果进行比较相差仍约 10ps 相对强度值相差 < 0.026 (见表 1), 由此可见程序 NFIXED 计算是可行的。

六、程序的使用方法

1. 确定拟合参变量初值 (a_k): 首先把实验测得的正电子寿命谱每个数据 (y_i) 乘上一个因子 K , 这个因子 K 是用 36000 被谱的四个最大的道计数之和除得的数。然后用 $y_i \sim t_i$ (相应道数) 作正电子湮没寿命谱曲线图, 根据曲线图最平坦部分划直线, 由各直线的斜率和截距确定正电子湮没寿命谱参变量初值 (a_k)。

2. 丢弃道数的选取：丢弃道数一般选取时间 T_0 处的前4—5道为宜。如果正电子湮没寿命谱仪的时间分辨率差，可适当多丢弃1道，反之则可少丢弃1道，这样可保证寿命谱曲线延迟峰的拐点 N 落在程序的拟合点可改变的范围，以获得最佳拟合（见图2）。

3. 程序拟合起点改变次数的确定：原来程序的拟合起点设定改变三次就运算结束。为了保证使正电子湮没寿命谱的延迟峰的拐点落在拟合点的范围，把拟合起点改变设定为五次才运算结束，这样有利于找到一组精度较高的寿命和强度值。

4. 按照程序NFIXED要求的顺序输入相应的数据。

5. 这个程序可以同时输入 JNO 个正电子湮没寿命谱，然后分别进行计算，计算结束后输出其结果。

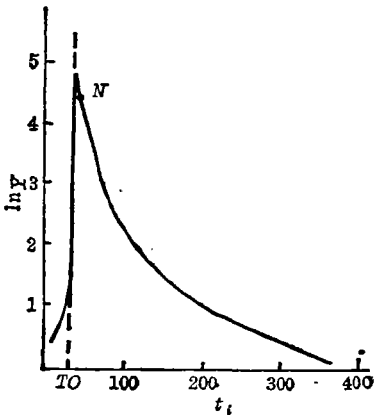


图2 正电子湮没寿命谱

表 程序NFIXED和程序POSITRON FIT—EXTENDED的计算结果

参 变 量 类 型	参 变 量 值	程 序 名	
		NFIXED	POSITRON FIT—EXTENDED
三成分寿命	$T_1(PS)$	126.0	115.0
	$T_2(PS)$	370.0	362.0
	$T_3(PS)$	2053.0	2063.3
寿命百分误差(%)	$PCNT_1$	6.670	3.500
	$PCNT_2$	0.040	4.000
	$PCNT_3$	3.160	5.040
三成分百分强度(%)	A_1	82.56	79.92
	A_2	14.18	16.78
	A_3	3.260	3.300
强度百分误差(%)	ER_1		1.270
	ER_2	4.280	1.260
	ER_3	5.870	0.090

七、结 束 语

本文介绍的程序NFIXED计算流程结构紧凑，运算速度快，迭代精度要求高，一般为 10^{-6} ，可以根据分析样品的需要方便的固定一个或几个拟合参数。此外，整个程序的语句不到400条，适合使用IBM PC/XT微机计算正电子湮没寿命谱的寿命和强度，并可获得满意的结果。

参 考 文 献

[1] 薛嘉渔，核技术，6，17(1983)。
 [2] 熊兴民，核技术，5，11(1983)。
 [3] 聂铁军，计算方法，第二版，国防工业出版社，1984年，第356页。
 [4] 刘玉琰和傅沛仁，数学分析讲义，第二版，高等教育出版社，1981年，上册第226页。
 [5] 清华大学和北京大学，计算方法，第二版，科学出版社，1981年，第65页。

The effects of ion sputtering in high dose implantation

Zhang Tonghe

(Institute of Low Energy Nuclear Physics, Beijing Normal University)

The effects of ion sputtering was studied in ion implantation. These are: surface sputtering, profile correction of doping concentration and total amount of doping. Relations among these effects and energy, dose, ions and target atoms were analysed. The calculations showed that the amount of Sn implanted into Fe was saturated when Sn was implanted at 100keV in the dose of greater than $3 \times 10^{16}/\text{cm}^2$. The saturated amount of Sn in Fe is dependent on energy of Sn. For example, the saturated amount of dose is only $1.35 \times 10^{16}/\text{cm}^2$, when Sn is implanted at 5keV. But the amount of Sn reaches $5.6 \times 10^{16}/\text{cm}^2$ when Sn is implanted at 300keV. The amount is raised about four times.

Keywords: implantation of high dose ion sputtering amount of sputtering
surface saturation concentration

A multi-exponential function fitting program for the analysis of the positron annihilation life spectrum

Yin Chunyuan

(Nanjing University)

The multi-exponential function fitting program for analysis of the positron annihilation life spectrum /NFIXED/ is introduced and discussed in detail. This program was originally provided by Prof. Hsiao- Hua Hsu. In practice, it have been improved and have been run for many α -Fe spectra. The differences of the life time between our computations and references are less than 10ps. Obviously, the program is rather efficient.

Keywords: positron annihilation life time spectrum multi-exponential function
non-linear function matrix life time intensity

Epithermal neutron activation analysis of trace gold standard samples

Tong Chunhan Guan Heguo

(Chengdu College of Geology)

The paper has made a general discussion about the conditions under which the ENAA will be valid and listed the respective analysis results at two different quantities.

It is discussed that a proper quantity of the standard sample depends on the sensitivity of the method and the size of gold; and also under discussion is the interference