

Entwicklung von DECAN, einer Makrosammlung zur Analyse von γ -Zerfallsdaten

M. Rupp, N. Wiehl, J.V. Kratz
Institut für Kernchemie, Universität Mainz

Traditionell wurden durch eine Reihe von Programmen der Kernchemiegruppe der Gesellschaft für Schwerionenforschung in Darmstadt (GSI) und des Instituts für Kernchemie aus den Peakflächen in γ -Spektren von Kernreaktionprodukten Wirkungsquerschnitte berechnet. Durch die Stilllegung des IBM-Rechners der GSI sind nun einige der genutzten Programme nicht mehr lauffähig.

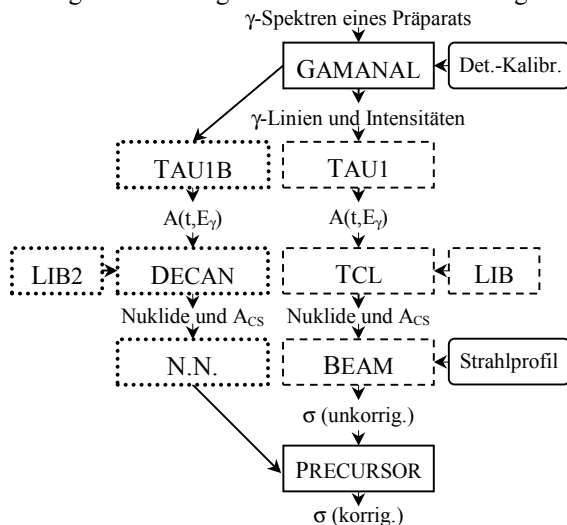


Abb.1: Schema zur Auswertung von γ -Zerfallsdaten
durchgezogen/gestrichelt : ursprünglicher Weg [1];
gestrichelt : nicht mehr verfügbare Programme;
gepunktet : neu zu entwickelnde Programme

GAMANAL bestimmt einen Comptonuntergrund in den gemessenen γ -Spektren und berechnet zu automatisch identifizierten Peaks die dazugehörige γ -Energie, Peakfläche und die Aktivität. Zur Auswertung braucht es einen Satz von Kalibrationsparametern, welche die Efficiency des Detektors, die Peakform und Kanalenergieeichung enthält. TAU1 sowie das neugeschaffene TAU1B sortieren die Datensätze nach der Zeitnahme der Probe und stellen innerhalb eines einstellbaren Energie-Intervalls Datensätze zusammen, die den Zerfall der Aktivität für jede beobachtete γ -Energie beschreiben. Das Programm TCL ordnete den mit TAU1 sortierten Zerfallsdaten anhand ihrer Energie und der Halbwertszeit Nukliden zu. Dazu verwendet es γ -Bibliotheken, die durch das Programm LIB aus γ -Katalogen zusammengestellt worden waren. Für die in der Bibliothek gefundenen Linien wurde dann mit der Halbwertszeit des zugehörigen Nuklids nach der Methode der kleinsten Fehlerquadrate eine Zerfallskurve an die Zerfallsdaten angepasst, mit einem freien Parameter, der Aktivität A_{CS} zum

Zeitpunkt der chemischen Trennung. BEAM berechnete daraus mit Hilfe des Strahlprofils Wirkungsquerschnitte σ (unkorr.); das Nachfolgeprogramm, in der Abb.1 N.N., fehlt hier noch. Die Vorläuferkorrekturen wurden durch das Programm PRECURSOR automatisch durchgeführt.

DECAN ist ein Paket von Command Macros für PLOTDATA. Es sucht innerhalb eines einstellbaren Intervalls um die γ -Energie der beobachteten Linie, nach γ -Linien in der entweder von LIB2 zur Verfügung gestellten oder manuell eingerichteten Bibliothek. Findet sich im Intervall keine γ -Linie, setzt DECAN die Halbwertszeiten ebenfalls als freie Parameter. Danach wird über die Anfangs- und Endsteigung eine Fallunterscheidung getroffen. Das Programm unterscheidet zwischen einer oder zwei unabhängigen Komponenten oder einer Nachbildung. Für die in der Bibliothek gefundenen Linien wird dann mit der Halbwertszeit der zugehörigen Nuklide nach der Methode der kleinsten Fehlerquadrate eine Zerfallskurve an die gemessenen Aktivitäten angepasst. Als freie Parameter treten die Aktivitäten A_{CS} auf. DECAN wählt die Zerfallskurve mit dem geringsten χ^2 (als Maß für die Abweichung zwischen Kurve und Messdaten) und gibt sie zusammen mit den Messwerten graphisch aus. Wurde kein Nuklid im gewählten Intervall gefunden, wird mit den freien Parametern A_{CS} und $t_{1/2}$ nach der Methode der kleinsten Fehlerquadrate eine Zerfallskurve berechnet und auch hier graphisch ausgegeben. Wenn die vorgeschlagene Zerfallskurve die Daten nicht zufriedenstellend wiedergibt, können manuell in der Bibliothek andere Nuklide aus einem vorher angegebenen größeren Intervall ausgewählt werden. Dabei ist es möglich, auch drei unabhängige Komponenten oder eine Nachbildung plus einer unabhängigen Komponente fitten zu lassen. Weiterhin lässt DECAN zu, einzelne Ausreißer auszuklammern, den ganzen Datensatz vorläufig nicht auszuwerten oder ganz zu verwerfen. Das akzeptierte Ergebnis wird weggeschrieben, der Graph lässt sich auf Wunsch ebenfalls speichern[2].

Eine erste praktische Anwendung erfuhr DECAN bei der Auswertung von Experiment [3].

Literatur:

1. Wirtz, Ch. Dissertation, Universität Mainz (1998)
2. Rupp, M.; Diplomarbeit, Universität Mainz (1999)
3. Rupp, M. et al., dieser Jahresbericht