

王功庆

(中国科学院上海原子核研究所)

本文应用三次样条函数来求解某一核素特定能量 γ 跃迁的内转换系数值。用三组三次样条函数拟合 Ge(Li) 探测器的实验测定效率, 给出该区域中任一能量 γ 射线的探测效率。

关键词 三次样条函数 内转换系数 Ge(Li)效率拟合

一、引言

样条函数就是为了改进函数的多项式逼近而找到的一种新的强有力工具, 即找出一个比较简单的函数 $y=s(x)$, 去较好地近似代替或表达一个复杂的函数 $y=f(x)$ 或者用表格给出的点列 (x_i, y_i) ($0 \leq i \leq n$)。它的研究和应用近来已成为我国最活跃的数学分支之一。本文对三次样条函数应用于实验核物理作了初步尝试, 结果表明, 此方法有其独特的优点。

二、内转换系数的样条内插

原子核由激发态退激发到基态或较低受激态, 除了通过放出 γ 量子外, 也能通过发射一个虚光子衰变来实现。这个虚光子不是为原子的电子所吸收(内转换), 就是转换成(当 $E > 1.02\text{MeV}$) 电子-正电子对(内对形成)。内转换系数 α 定义为核从某一受激态退激发时放出的电子总数 I_e 与在同一时间内放出的 γ 量子总数 I_γ 之比, $\alpha = I_e/I_\gamma$ 。它描述这两个竞争过程的相对几率。理论上可通过计算内转换几率及辐射跃迁几率来求取 α 。计算中不论用半经典方法还是严格的量子力学方法, 都要对原子中电子的波函数等作某种近似, 而与核态波函数有关的矩阵元在计算中相互抵消了。在跃迁能量远远超过原子中 K 壳层电子结合能, 并可用非相对论电子波函数的条件下, 电多极辐射的内转换系数 $\alpha(EL)$ 可近似表达为(磁多极 $\alpha(ML)$ 也类似):

$$\alpha(EL) \sim Z^3 \frac{L}{L+1} \left(\frac{e^2}{\hbar C} \right)^4 \left(\frac{2m_e C^2}{E^*} \right)^{L+5/2}$$

式中, Z 是原子序数; L 是跃迁多极性, 即核态之间的角动量转换; m_e 是电子质量; E^* 是跃迁能量。如果用微扰理论, 用基于相对论自洽场的电子波函数, 考虑到核的有限大小及核电荷分布等, 计算更为繁杂, 只能给出一系列的图表或点列值, 提供参考使用^[1]。

虽然 α 与核的具体模型无关, 但是它与核素的原子序数、 γ 跃迁的能量、电磁多极性以及电子壳层有着密切的关系。所以, α 是检验核模型、确定原子核能级的自旋和宇称的重要参数之一。它的实验测定主要是定准 γ 射线的绝对强度及各壳层转换电子的绝对强度。由于实验方面的困难, 往往只能测出部分数据。为了把实验数据与理论计算值作比较, 或者要了解某一电磁跃迁的 α 值, 以确定有关能级的自旋, 采用直接作理论计算的方法工作量太大, 所以通常只对理论算出的 α 列表值作适当内插。如用图解内插法则误差大。而我们采用三次样条函数内插法, 取得了较好的结果。

在 1977 年 ^{238}U 衰变纲图编评报告中^[1], 我们用样条方法对 19 条 γ 射线的内转换系数作了分析。例如, Yamazaki 等^[2]测到 $E_\gamma = 267.539\text{keV}$ γ 线的 $I_\gamma = 0.765 \pm 0.014$, $I_{eK} = 0.596 \pm 0.004$; $E_\gamma = 368.603\text{keV}$ γ 线的 $I_\gamma = 0.050 \pm 0.003$, $I_{eK} = 0.027 \pm 0.001$, 它能给出的 α_K 值分别为 0.776 ± 0.038 及 0.545 ± 0.060 。实际上, 使用文献[2]给出的 I_γ , 绝对值要除以 1.04, 误差要包括 208keV 相对强度测量的误差。

在对各家 I_γ 测量值评价基础上, 我们给出加权平均的 $\bar{I}_\gamma$ 。利用 Hager 等人^[3]的内转换系数表, 由 $Z=92$ 及上述 E_γ 能量, 用样条函数方法, 对有关的电磁跃迁多极性及各原子壳层的内转换系数作了计算内插。进而以 I_{eK} 的实验值为标准, 计算出最佳的多极性混合比 $\delta^2 = N_\gamma^{(L+1)}/N_\gamma^{(L)}$, 混合份额 $\Delta = \delta^2/(1+\delta^2)$, 从而算出各壳层的 α 及相应的转换电子强度 I_e 值。现将样条内插算得的结果列于表 1 中。

由表 1 可知, 267keV γ 线的总内转换系数为 $\alpha_t = 1.10$, 总跃迁强度 $I_t = (1+\alpha)I_\gamma = 1.558$, 跃迁多极性是 $E1+M2$ 混合, 混合比 $\delta^2 = 0.242$, 这与该射线从 $3/2^-$ 态跃迁到 $5/2^+$ 基态是一致的。368keV γ 线的 $\alpha_t = 0.625$, $I_t = 0.0715$, 它是 $M1$ 和 $E2$ 混合, $\delta^2 = 0.01$, 这与 368keV γ 线是从 $K=1/2^+$ 带的 $5/2^+$ 态跃迁到 $K=5/2^+$ 基

带的 $5^{+}/2$ 态是符合的。

表 1 ^{235}U β^{-} 衰变部分 γ 跃迁内转换系数的样条内插

壳层	$E_{\gamma}=267.539\text{keV}$				$E_{\gamma}=368.603\text{keV}$			
	样条内插		$\delta^2=0.242, \Delta=0.195$		样条内插		$\delta^2=0.01$	
	E1	M2	I_{γ}	α	M1	E2	I_{γ}	α
K	4.136E-2	3.817E0	5.960E-1	7.770E-1	4.889E-1	5.214E-2	2.700E-2	4.846E-1
L_I	5.489E-3	1.003E0	1.533E-1	1.999E-1	9.131E-2	1.057E-2	5.043E-3	9.051E-2
L_{II}	1.691E-3	1.559E-1	2.434E-2	3.174E-2	1.154E-2	2.411E-2	6.499E-4	1.166E-2
L_{III}	1.032E-3	1.084E-3	7.993E-4	1.042E-3	4.056E-3	7.917E-3	2.281E-4	4.094E-3
M_I	1.297E-3	2.620E-1	3.996E-2	5.209E-2	2.188E-2	2.596E-3	1.208E-3	2.169E-2
M_{II}	4.366E-4	4.409E-2	6.859E-3	8.942E-3	3.105E-3	6.661E-3	1.750E-4	3.140E-3
M_{III}	2.941E-4	2.832E-2	4.414E-3	5.755E-3	1.134E-4	2.323E-3	7.538E-6	1.353E-4
M_{IV}	9.861E-6	4.711E-4	7.650E-5	9.973E-5	3.144E-6	3.263E-5	1.914E-7	3.436E-6
M_V	1.090E-5	3.485E-5	1.194E-5	1.557E-5	2.103E-6	1.580E-5	1.247E-7	2.239E-6
N+	7.088E-4	1.226E-1	1.875E-2	2.445E-2	8.889E-3	—	4.951E-4	8.889E-3

三、样条函数方法^[3]

1. 三次样条函数的插值问题

在区间 $[a, b]$ 上给定一组结点 $A: a=x_0 < x_1 < \dots < x_n=b$, 若 $[a, b]$ 上的一个实函数 $s(x)$ 满足条件:

(1) 在每个子区间 $[x_{j-1}, x_j]$ ($1 \leq j \leq n$) 内, $s(x)$ 为次数不超过 $l=3$ 的多项式; (2) 在整个区间 $[a, b]$ 上, $s(x)$ 为 $l-1=2$ 次连续可导函数, 即在点 x_j ($1 \leq j \leq n-1$) 处, 有

$$s^{(K)}(x_{j-}) = s^{(K)}(x_{j+}) \quad K=0, 1, 2$$

则 $s(x)$ 就是 $[a, b]$ 上对应于结点 A 的三次样条函数。

插值问题就是求 $[a, b]$ 上的一个插值函数 $s_{\Delta}(x)$, 且 $s_{\Delta}(x) \in C^2[a, b]$, 在每个结点有

$$s_{\Delta}(x_j) = y_j, \quad j=0, 1, \dots, n$$

y_j 为相应于结点 x_j 的函数值, 而在每个子区间 $[x_{j-1}, x_j]$ ($1 \leq j \leq n$) 上

$$s_{\Delta}(x) = A_j x^3 + B_j x^2 + C_j x + D_j, \quad x_{j-1} \leq x \leq x_j$$

在整个区间, $s_{\Delta}(x)$ 本质上是一个逐段解析函数, 共有 $4n$ 个系数; 而每个内结点满足三个约束, 共有 $3(n-1)$ 个约束, 所以三次样条函数的自由参数为 $4n-3(n-1)=n+3$ 。

2. 结点关系式及边界条件

三次样条函数的二阶导数是一个逐段线性函数, 可写成

$$s_{\Delta}''(x) = M_{j-1} \frac{x_j - x}{h_j} + M_j \frac{x - x_{j-1}}{h_j} \quad x_{j-1} \leq x \leq x_j$$

式中, $h_j = x_j - x_{j-1}$, 表示子区间 $[x_{j-1}, x_j]$ 的长度。

把上式积分二次, 定出积分常数, 可得此子区间内函数的表达式:

$$s_{\Delta}(x) = M_{j-1} \frac{(x_j - x)^3}{6h_j} + M_j \frac{(x - x_{j-1})^3}{6h_j} + \left(y_{j-1} - \frac{M_{j-1}}{6} h_j^2 \right) \frac{x_j - x}{h_j} + \left(y_j - \frac{M_j}{6} h_j^2 \right) \frac{x - x_{j-1}}{h_j}$$

$$x_{j-1} \leq x \leq x_j, \quad 1 \leq j \leq n$$

式中, $2n+2$ 个参数 y_j, M_j 必须满足 $(n-1)$ 个方程。

应用一阶导数在内部结点上的连续性。

$$s_{\Delta}'(x_{j-}) = s_{\Delta}'(x_{j+})$$

可得三个相邻点上二阶导数的关系式, 即一阶导数的连续性方程:

$$\mu_j M_{j-1} + 2M_j + \lambda_j M_{j+1} = d_j \quad j=1, 2, \dots, n-1$$

这是 $n+1$ 个二阶导数 M_j 所应满足的 $n-1$ 个方程。结点关系式中

$$\lambda_j = \frac{h_{j+1}}{h_j + h_{j+1}} \quad \mu_j = 1 - \lambda_j$$

$$d_j = 3 \left(\frac{y_{j+1} - y_j}{h_{j+1}} - \frac{y_j - y_{j-1}}{h_j} \right) / \left(\frac{h_j + h_{j+1}}{2} \right)$$

还必须附加两个方程, 结点关系式才有唯一解。我们按具体问题的要求, 采用边界条件为:

$$\begin{aligned} M_0 - \lambda M_1 &= 0 \\ M_n - \lambda M_{n-1} &= 0 \end{aligned} \quad 0 < \lambda < 1$$

类似于 M 关系式, 可导出 m 关系式

3. 方程组解法

结点关系式和边界条件组成 $(n+1)$ 个未知数的 $(n+1)$ 个方程组, 可写成矩阵方程

$$AM = D$$

式中, M 、 D 是 $(n+1)$ 维列矢, 系数矩阵 A 是 $n+1$ 阶方程, 而且是对角线矩阵, 可用追赶法求解。全部计算公式如下:

系数递推公式:

$$\begin{aligned} q_{-1} &= 0 \\ P_K &= \mu_K q_{K-1} + 2 \\ q_K &= -\lambda_K / P_K \quad (K=0, 1, \dots, n) \end{aligned}$$

追赶公式:

$$\begin{aligned} Z_{-1} &= 0 \\ Z_K &= (d_K - \mu_K Z_{K-1}) / P_K \quad (K=0, 1, \dots, n) \end{aligned}$$

回代公式:

$$\begin{aligned} M_n &= Z_n \\ M_K &= q_K M_{K+1} + Z_K \quad (K=n-1, n-2, \dots, 0) \end{aligned}$$

从而由给定的 x , 求出相应子区间上的三次样条函数 $s_\Delta(x)$ 值。

我们用 Basic 语言编写了上述程序, 在 Multi-8 电子计算机上作了运算。一个常用程序的框图示于下图中。

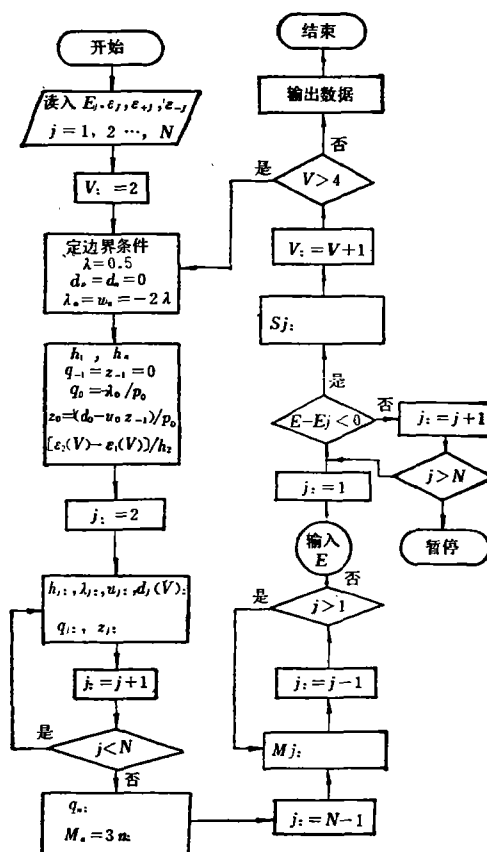
四、探测器效率刻度的样条拟合内插

实验核物理中最常用的探测器, 如 NaI (Tl), Ge (Li), Si (Li), HPGe 等, 用作定量分析时, 必须在一定几何条件下, 用各种能量的标准强度源作探测效率的实验测定, 得到一组点列, 表明相应于某一能量的效率值。为描述整个能量范围的探测器效率, 通常用各种经验公式来拟合这些点^[4~7]。但这些描述方法, 均为多项式拟合, 至少有二个弱点: 拟合函数并不经过实验上测定的点, 甚至在某个小能区中, 内插值有“振荡”; 如果刻度的实验点增补几点或数值有变动就要重新拟合, 各个参数会有较多的变化, 使用上很不方便。

在探测器光峰效率刻度方面, 我们首先采用样条函数来拟合实验测得的点列^[8]。由于采用三次样条, 拟合函数必通过实验给出的型值点, 而型值点数目的增减或数值的变动, 只要把程序的输入数据作相应的改动就行了。在效率内插时, 也只要输入内插的能量值, 就可算出相应的效率值, 不必象多项式拟合那样, 要先给定各个参数的具体值, 才能计算出内插值。当然, 要逐段写出三次样条的具体形式也是方便的, 我们可在程序执行过程中, 打印出各个 M_j 的值。

在效率刻度中, 我们使用三次样条函数有两个特点:

(1) 相对效率曲线的归一。我们用 ^{75}Se 、 ^{152}Eu 等对 Ge (Li) 探测器作相对效率刻度。它们是分布在不同



效率刻度样条拟合内插程序框图

能区的多能 γ 源,彼此虽有部分能区是重叠的,但又没有共同的型值点。通常用直线内插来衔接。我们在 ^{75}Se 的 66~400keV 能区及 ^{152}Eu 的 344~1400keV 能区上,分别用三次样条,由各自的相对效率值内插出 391.69keV 处的相对效率值,再相互归一,得到 66~1400keV 能区的相对效率。而 391.69keV 处的绝对探测效率是用 $4\pi\beta$ 标定过的 $^{115\text{m}}\text{In}$ 测定的,把该点的相对效率归一于绝对效率,就得上述能区的绝对探测效率。在 高能区,用 ^{56}Co 、 ^{152}Eu 及 $4\pi\beta-\gamma$ 符合法标定过的 ^{60}Co 来确定绝对效率。作了上述归一,得到 Ge(Li) 探测器在 60~3500keV 能区的绝对光峰探测效率。

(2) 给出探测效率的实验误差。在内插某一能量效率时,我们用实验测定的绝对效率值及其相应误差上限和误差下限,分别组成三组型值点。输入内插的能量值后,程序先计算出该能量的效率值,继而给出相应的误差大小。这些量不仅与整个区域的型值有关,与其邻近点的型值关系更大,这是符合实际情况的。一般多项式内插只给出内插值的大小,而其误差由整个情况估算。

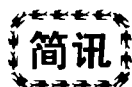
我们用这种拟合内插方法,求取衰变核素、活化核素和裂变产物核素各 γ 线的效率,得到的定量分析结果,均较满意。

除样条插值外,样条的数值积分和数值微分在核物理实验中还可有许多应用。

参 考 文 献

- [1] R. S. Hager *et al.*, *CALT*-63-60 (1967).
- [2] T. Yamazaki *et al.*, *Nucl. Phys.*, **84**, 505 (1966).
- [3] 潘承洞, 数学的实践与认识, 3, 64(1975); 4, 56(1975); 1, 63(1976); 2, 59(1976)。
- [4] R. S. Mowatt, *Nucl. Instr. Meth.*, **70**, 237 (1969).
- [5] L. A. McNelles *et al.*, *Nucl. Instr. Meth.*, **109**, 241 (1973).
- [6] 一室能谱组, 原子核物理(1978年会议资料选编), 原子能出版社, 第118页。
- [7] W. J. Gallagher *et al.*, *Nucl. Instr. Meth.*, **122**, 405 (1974).
- [8] 王功庆等, 核技术, **4**, 33(1981)。

(1980年11月6日收到 1982年2月23日收到修改稿)



ND-A 型核子土基密度计通过鉴定

湖南省交通厅于 1983 年 6 月 22 日至 24 日在长沙市召开 ND-A 型核子土基密度计鉴定会, 来自全国有关交通、科研和高教部门的 40 多位代表参加了会议。

由湖南省交通科学研究所研制的这种密度计, 是依据 γ 射线反散射的原理来测量土基容重的。经有关施工单位使用, 认为它适用于现场土基压实质量的检查, 作为一种新的技术方法有推广意义。与会代表认为, 该装置是我国第一台表面型核子土基密度计, 这是核技术在我国土基容重测量方面的应用。仪器具有结构简单、操作方便、稳定可靠、快速准确等优点, 可对土基进行非破坏性的测量, 具有较高的使用价值。同时, 代表们还建议着手研制中子土基水分计与该仪器配合使用, 使之发挥更大的效益; 并建议仪器增加数据处理系统, 以便直接读出容重值, 更加方便使用者。

(江立人)

Abstracts in English

Spline function applied to experimental nuclear physics

Wang Gongqing

(Shanghai Institute of Nuclear Research, Academia Sinica)

Cubical spline function has been applied to determine internal conversion coefficient of γ -ray with a definite energy which belongs to a particular nuclide. In order to fit the experimental photopeak efficiency of a Ge(Li) detector, three groups of cubic spline function are used. The detection efficiency of any γ -rays can be obtained by spline interpolation.

A program for the analysis of positron annihilation lifetime spectra with a multi-exponential function fitting

Xiong Xingmin

(Institute of High Energy Physics, Academia Sinica)

This paper presents a method of eliminating the affects of the time resolution function in the positron annihilation lifetime spectrum fitted with a multi-exponential function. The peeling method has been used to estimate initial value of the parameters, then the iterative process in Gauss-Newton's method is easily converged. The program (PLSEF) has been worked out. Its reliability and applicability has been shown in its applications.

Unfolding spectra of Doppler broadening in the positron annihilation

Fan Qinmin

(Institute of High Energy Physics, Academia Sinica)

An unfolding method was applied to doppler broadened spectra in the positron annihilation. In this method the experimental data were used directly in the unfolding process without assuming any functional forms of the spectra. The advantage of this method rested on the decrement of certain errors. These errors may usually be introduced when the functional forms were assumed in some unfolding processes.

Spectrum stripping techniques in analysis of complex Mössbauer spectra

Zheng Yufang Yu Zhengfang Lu Jingye

(Zhongshan University)

In this paper a method for the analysis of the complex Mössbauer spectra involving