

## 用高斯与劳伦兹卷积分析核能级宽度

顾锡良 钱景华 郭箴第 胡毓德

(复旦大学)

关键词: 劳伦兹分布讯号 高斯与劳伦兹卷积 能级宽度  $(p, \gamma)$  反应

一定能量的质子轰击铝靶, 可产生共振反应而形成  $^{28}\text{Si}$  的激发态, 其退激时放出的  $\gamma$  射线是劳伦兹分布讯号, 它反映激发态的能级总宽度  $\Gamma$ 。用  $\gamma$  能谱仪测量劳伦兹分布讯号时, 实际上测得的能谱应是劳伦兹分布讯号与仪器特征函数的卷积<sup>[1]</sup>, 通常认为仪器的响应是高斯分布。所以, 测得的能谱是高斯与劳伦兹的卷积, 这个卷积就是 Voigt 积分<sup>[2]</sup>。用最小二乘法拟合这些实验点时, 需要用数值方法计算这个积分

$$C(E) = \frac{A}{N} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{E'^2}{2\sigma^2}\right) \frac{dE'}{(E-E'-E_0)^2 + \Gamma^2/4} \quad (1)$$

式中,  $\Gamma$  是劳伦兹分布的半宽度, 即所测能级的总宽度;  $E_0$  是产生共振反应的共振能量;  $\sigma$  是高斯分布的均方根误差, 对应于高斯分布的半宽度有关系式

$$W = 2\sqrt{2 \ln 2} \sigma \approx 2.35\sigma \quad (2)$$

$A$  是共振峰的计数;  $N$  是归一化常数, 可以表示为

$$N = \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{E'^2}{2\sigma^2}\right) \frac{dE'}{E'^2 + \Gamma^2/4} \quad (3)$$

作变量变换, 令  $x = (E - E_0)/\sqrt{2}\sigma$ ,  $y = \Gamma/(2\sqrt{2}\sigma)$  与  $t = E'/\sqrt{2}\sigma$ 。那么(1)式可以变换成

$$C(x) = \frac{A}{N} \cdot \frac{2}{\Gamma} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{ye^{-t^2} dt}{(x-t)^2 + y^2} \quad (4)$$

(4)式是高斯-厄密型的积分

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-t^2} f(t) dt \quad (5)$$

因此, 用高斯-厄密积分求  $C(x)$  的值应该是一种很好的方法。但是, 在  $x$  的值较小的区域内, 而且  $\Gamma/W \leq 0.5$  时, 用高斯-厄密积分求  $C(x)$ ,  $C(x)$  将会振荡<sup>[3]</sup>。

另一方面, (4)式也可以改写为

$$C(x) = (A/N) \cdot (2/\Gamma) \pi R_e \omega(z) \quad (6)$$

式中,  $R_e \omega(z)$  是复误差函数  $\omega(z)$ <sup>[4]</sup> 的实数部分,

$$\omega(z) = e^{-z^2} \operatorname{erfc}(-iz), \quad z = x + iy \quad (7)$$

$$\operatorname{erfc}(z) = 1 - \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^z e^{-t^2} dt \quad (8)$$

Gautschi<sup>[5]</sup>给出了用连分数的方法计算复误差函数的数值方法, 这种方法的运算速度比变步长的辛普生积分方法快得多, 而且对于所有的  $x, y$  值均适用。还给出了用连分数方法计算复误差函数的 ALGOL 程序<sup>[6,7]</sup>。我们已在 PDP11/34 计算机中用 FORTRAN 语言对这个卷积进行了运算。并且作为非线性最小二乘法的拟合函数。用梯度展开法(Marquard 法)进行最优

化计算,以搜索出满足最小二乘法准则的参数值。

由于观测值的分布中包括了仪器分辨函数的影响,有些实验用误差传播的办法来扣除测量误差的影响,这种方法比较简单。但是,在仪器分辨曲线比较宽(例如 $\sigma \geq \Gamma$ )时会导致较大的误差<sup>[8]</sup>。所以,这时就不能使用误差传播公式,必须用非线性拟合的一般方法来推断间接观测量。将 $C(x)$ 用非线性最小二乘法拟合实验点时, $A, E_0, \sigma$ 与 $\Gamma$ 作为拟合参数,因而可求出能级宽度 $\Gamma$ 。

## 一、实验过程与结果

质子束由本系静电加速器提供, $^{27}\text{Al}$ 靶用99.99%的铝喷镀在0.1mm厚的钽片上制成, $^{28}\text{Si}$ 激发态的能谱用体积120cm<sup>3</sup>的Ge(Li) $\gamma$ 谱仪进行测量,用Canberra公司生产的2010放大器及S-80多道分析器记录。

用 $E_p=992\text{keV}$ 的共振反应 $^{27}\text{Al}(p, \gamma)^{28}\text{Si}$ 中所放出的7个已知 $\gamma$ 能量来刻度多道测量系统, $\gamma$ 能量范围从1.78MeV到10.762MeV,用最小二乘法按二项式关系拟合 $\gamma$ 能量及道数的关系。实验中测得992keV共振反应的 $\gamma$ 能谱图表示在图1中,为了得到较好的统计误差,测量时间达10000秒左右。用高斯-劳伦兹卷积对这个共振反应所得到的 $\gamma$ 能谱中10.762MeV的全能峰以及它的第一、第二逃逸峰进行拟合,可得到拟合参数 $\Gamma$ 的数值。对这个能级用不同的靶厚先后曾进行过四次测量,再对四次实验的结果作加权平均。并且与1978年所发表的轻核反应数据汇编<sup>[9]</sup>所推荐的该能级宽度作比较。所得结果如表1所示。

表1  $^{28}\text{Si}$  12.33MeV能级宽度

|          | 实验 1            | 实验 2            | 实验 3            | 实验 4           | 4次结果的统计     | 1978年推荐值     |
|----------|-----------------|-----------------|-----------------|----------------|-------------|--------------|
| 能级宽度(eV) | $105.9 \pm 3.7$ | $109.3 \pm 6.9$ | $105.4 \pm 8.3$ | $99.5 \pm 8.6$ | $105 \pm 4$ | $100 \pm 15$ |

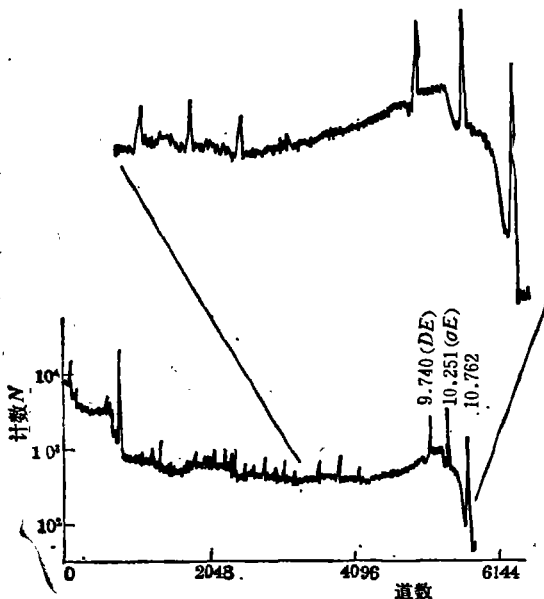


图1  $E_p=992\text{keV}$ 时 $^{27}\text{Al}(p, \gamma)^{28}\text{Si}$ 共振反应的 $\gamma$ 能谱  
 $\text{SE}$ 和 $\text{DE}$ 分别表示单逃逸峰和双逃逸峰,单位:MeV

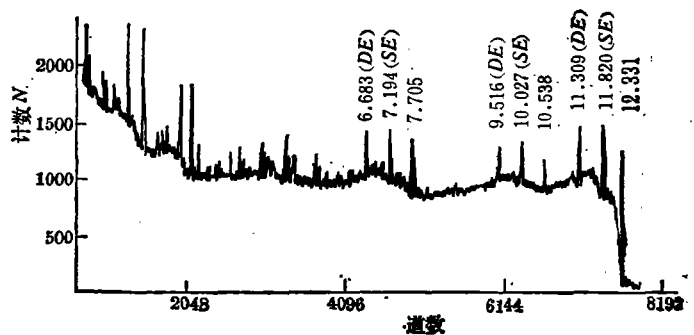


图2  $E_p=774\text{keV}$ 的 $^{27}\text{Al}(p, \gamma)^{28}\text{Si}$ 共振反应的 $\gamma$ 能谱  
 $\text{SE}$ 和 $\text{DE}$ 分别表示单逃逸峰和双逃逸峰,单位:MeV;其中7.705与12.331分别是 $E_p=767\text{keV}$ 与774keV产生的 $^{28}\text{Si}$ 全能峰能量

在 $E_p=774\text{keV}$ 的 $^{27}\text{Al}(p, \gamma)^{28}\text{Si}$ 的共振反应中,由于靶厚与加速器的能散,所以可同时进行 $E_p=767\text{keV}$ 的共振反应。 $^{28}\text{Si}$ 这两个激发态的主要 $\gamma$ 跃迁分支比(约75%)的能量差达4.617

MeV, 而且互相不干扰, 其能谱图的主要部分如图 2 所示。因此, 可分别对这二个能级进行拟合分析, 其结果见表 2。曾用  $\gamma$  共振吸收法测得  $^{28}\text{Si}$  12.332MeV 能级宽度为  $13.7 \pm 1.4\text{eV}^{[10]}$ , 但是, 对  $E_p=767\text{keV}$  共振反应产生的能级宽度还没给出确定的结果, 而非线性最小二乘法拟合方法给出了  $^{28}\text{Si}$  的这个能级(12.325MeV)宽度及其误差。

表 2 实验结果

| 质子能量<br>(keV) | $^{28}\text{Si}$ 能级<br>(MeV) | 能级宽度<br>(eV)   | 1978年推荐值<br>(eV) |
|---------------|------------------------------|----------------|------------------|
| 767           | 12.325                       | $45 \pm 6$     | $< 50$           |
| 774           | 12.332                       | $14.0 \pm 0.5$ | 15               |
| 885           | 12.442                       | $10.8 \pm 3.0$ | 12               |
| 937           | 12.490                       | $137 \pm 14$   | $130 \pm 15$     |
| 1800          | 13.321                       | $470 \pm 30$   | $< 200$          |

用同样的方法, 对  $E_p=885\text{keV}$ 、 $937\text{keV}$  与  $1800\text{keV}$  的  $^{27}\text{Al}(p, \gamma)$  共振反应产生的  $^{28}\text{Si}$  能级宽度进行测量, 其结果见表 2 所示, 虽然  $E_p=1800\text{keV}$  的结果与 1978 年的推荐值差别较大, 但是, 曾报导过这一能级宽度为小于  $2\text{keV}^{[11]}$ 。

## 二、讨 论

由于要求拟合的实验数据点不能小于参数的个数, 如果所拟合的全能峰能量在  $10\text{MeV}$  量级时, 那么可分析的能级宽度大于  $10\text{eV}$  量级, 而且可得到较高的精度。实际上, 这也就是所要分析的能级宽度的限制。

诚然, 用这一方法也可以对  $\gamma$  能谱中的其他峰进行非线性拟合, 但是这些峰是叠加在较高水平的本底上的, 特别在较低  $\gamma$  能量时, 更加明显。这个本底是较高能量峰产生的康普顿连续谱。如果所要拟合的数据点是在较小的能量区间上, 那么可近似地<sup>[12]</sup>认为这一本底具有线性函数

$$B(x) = B + CX. \quad (9)$$

对于那些较低能量的  $\gamma$  峰, 要得到较好的统计误差, 测量时间将会更长。对于较宽的峰, 为了反映本底斜率的变化, 也有人使用二次或三次函数作为本底<sup>[13, 14]</sup>。

在不同的几何条件下, 重复测量同一能级, 然后进行加权平均, 可得到该能级宽度的统计结果, 这样的结果更为准确。用非线性最小二乘法拟合方法分析谱是一种精确度较高的谱分析方法。不仅可分析得出能级宽度, 而且可解决干扰峰与重峰等分析的问题, 其精度也是其他方法所不能比拟的。

杨福家教授仔细阅读了全文, 并提出了有益的建议, 还得到了加速器组与计算机组同志们的大力协助, 作者在此表示感谢。实验是在中国科学院科学基金会的资助下进行的。

## 参 考 文 献

- [1] 冯康等, 数值计算方法, p.121。
- [2] B. L. Robert *et al.*, *Nucl. Instr. Meth.* 30, 559 (1975)。
- [3] C. J. Batty *et al.*, *ibid.*, 137, 179 (1976)。
- [4] M. Absamovity & L. A. Stegun, *Handbook of mathematical functions* (Nat. Bur. Std. Appl. Math., Ser 55, Washington, D. C., 1964), p.297。
- [5] W. Gautschi, *SIAM, J. Numer. Anal.*, 7, 187, (1970)。
- [6] W. Gautschi, *CACM*, 12, 635 (1969)。
- [7] K. S. Köllig, *CACM*, 12, 465 (1972)。
- [8] D. Coyne *et al.*, *Nucl. Phys.*, 32B, 333(1971)。
- [9] P. M. Endt, *Nucl. Phys.*, A310, 211 (1978)。
- [10] 郭贇等, 原子核物理, 4, 209(1982)。
- [11] P. M. Endt & C. Van Der Leun, *Nucl. Phys.*, A214, 203 (1973)。
- [12] C. E. Crouthamel, *Applied Gamma-ray spectrometry*, chapter 8。
- [13] D. Robinson, *Nucl. Instr. Meth.*, 78, 120(1970)。
- [14] J. Kern, *Nucl. Instr. Meth.*, 79, 233 (1970)。

(1983年12月23日收到)

## Some problems about the spline curve fitting method

Qi Huiquan  
(Qinghua University)

The parameters including knot numbers, knot positions and the weights associated with the systematic errors in the cubic spline curve fitting method were discussed. The conditions of using fitting criterion were given as well.

**Keywords:** spline function      curve fitting

## Fitting the energy level width by using Lorentzian and Gaussian convolutions

Gu Xiliang      Qian Jinghua      Guo Zhendi      Hu Yude  
(Fudan University)

The  $\gamma$  spectra from  $^{27}\text{Al}(p,\gamma)^{28}\text{Si}$  reaction were fitted by using Lorentzian and Gaussian convolutions. The widths of  $^{28}\text{Si}$  levels produced by resonance reactions have been analyzed for the proton bombarding energy of 992 keV, 885 keV, 774 keV and so on. The results of  $\Gamma_{992}=105\pm 4$  eV,  $\Gamma_{885}=10.8\pm 3.0$  eV,  $\Gamma_{774}=14.0\pm 0.5$  eV,  $\Gamma_{767}=45\pm 6$  eV,  $\Gamma_{937}=137\pm 14$  eV and  $\Gamma_{1800}=470\pm 30$  eV were also compared with other published results.

**Keywords:** Lorentzian signal      convolution of Lorentzian and Gaussian  
energy level width      (p,  $\gamma$ ) reaction

## Fringing field measurement of dipole magnet

Lü Hongyou      Jiang Weisheng      Mao Naifeng      Mao Xingwang  
(Institute of Atomic Energy)

The fringing field of a dipole magnet with a c-type circuit and homogeneous field in the gap has been measured including the distributions of fringing fields with and without magnetic shield. The measured data was analyzed by using the concept of virtual field boundary.

**Keywords:** magnet      measurement of fringing field      virtual field boundary  
magnetic shield

## Analysis of the abundance and labelled position of deuterium in $^2\text{H}$ -leucine

Dai Tengchang      Zhang Jianhua      Zhou Wenda      Xia Zongqin  
(Shanghai Second Medical College)

DL-(4,5- $^2\text{H}$ )-leucine was prepared by catalytic deuteration of its double-bond pre-  
1985年第5期

• 57 •