

穆斯堡尔谱镜像折叠新方法

施海蓉 林 俊 吴东岷 肖煜明 黄红波 李世民 夏元复

(南京大学物理系 南京 210093)

摘要 通常,对穆斯堡尔镜像谱折叠是消除基线几何效应的有效方法,数据获取效率也有所提高。介绍了一种新的折叠方法,解决了折叠过程中一般以谱线中心作为折叠点,而没有考虑到多普勒速度落后于驱动信号,这种方法会带来明显的线宽加宽的问题。

关键词 穆斯堡尔谱,镜像折叠,穆斯堡尔方法学

中图分类号 O572

等加速穆斯堡尔谱仪测得的谱线是镜像谱,通过折叠可以有效地消除基线的几何效应,并缩短测量时间。尤其当源强或者吸收体中共振原子数受到限制时,更为重要。通常,以镜像谱中心为折叠点进行折叠,但往往没考虑实际多普勒速度较驱动波形有滞后而造成的偏差,本文介绍一种新的折叠方法,能有效地避免上述问题。

1 原理

用速度扫描谱仪测量驱动装置提供的一定的多普勒速度范围内各种瞬时速度下的 γ 射线强度,尤以等加速度的速度扫描方式为常用。在原理上,速度线性地从 $-V_{\max}$ 开始,经过零增至 $V_{\max}$,然后按原方式减到 $-V_{\max}$ 。速度扫描电压波形是三角波。使用这种驱动波形时可在两个相反方向上交替等加速扫描同一个谱。如果同时利用三角波的两个边,可以同时得到两个互为镜像的谱。如果驱动装置是高质量的,三角波向前扫描波形和向后扫描波形是对称的,则可以把这两个速度谱的相应道计数加起来得到一个谱。这种“折叠手续”可以减小基线上的几何效应,并缩短一半测量时间。理想和实际的三角波驱动信号示意图见图 1。

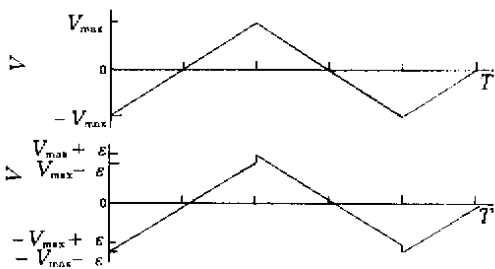


图 1 理想的(上)和实际的(下)三角波驱动信号示意图

Fig.1 A schematic drawing for ideal triangle driving signal (Above) and real signal (Under)

然而对称波形实际操作时必然存在如下问题:虽然意在自 $-V_{\max}$ 到 $V_{\max}$ 操作后,即起用 $V_{\max}$ 至 $-V_{\max}$ 的波形,而实际所得的速度都较驱动波形有滞后,自 $-V_{\max} - \epsilon$ 至 $V_{\max} - \epsilon$,以及自 $V_{\max} + \epsilon$ 至 $-V_{\max} + \epsilon$ (如图 1)。因此当谱之一反转,速度偏差为 2ϵ ,或者说偏差为 $2\epsilon N/V$,这里 N 是总道数。分数 ϵ/V 和波形重复频率与使驱动系统有效工作的伺服系统的最高频率之比有关,在千分之几的量级^[1]。因此发展一个程序使叠加前的谱有相对移动是有用的。

检验折叠质量的判据有两个：一是折叠前后谱线增宽值，常以 α -Fe 内双峰的半宽度为准比较；二是折叠前后对谱的积分非线性系数影响，典型的方法是用二次曲线拟合 α -Fe 的六峰峰位-速度关系点，如二次曲线表达式为

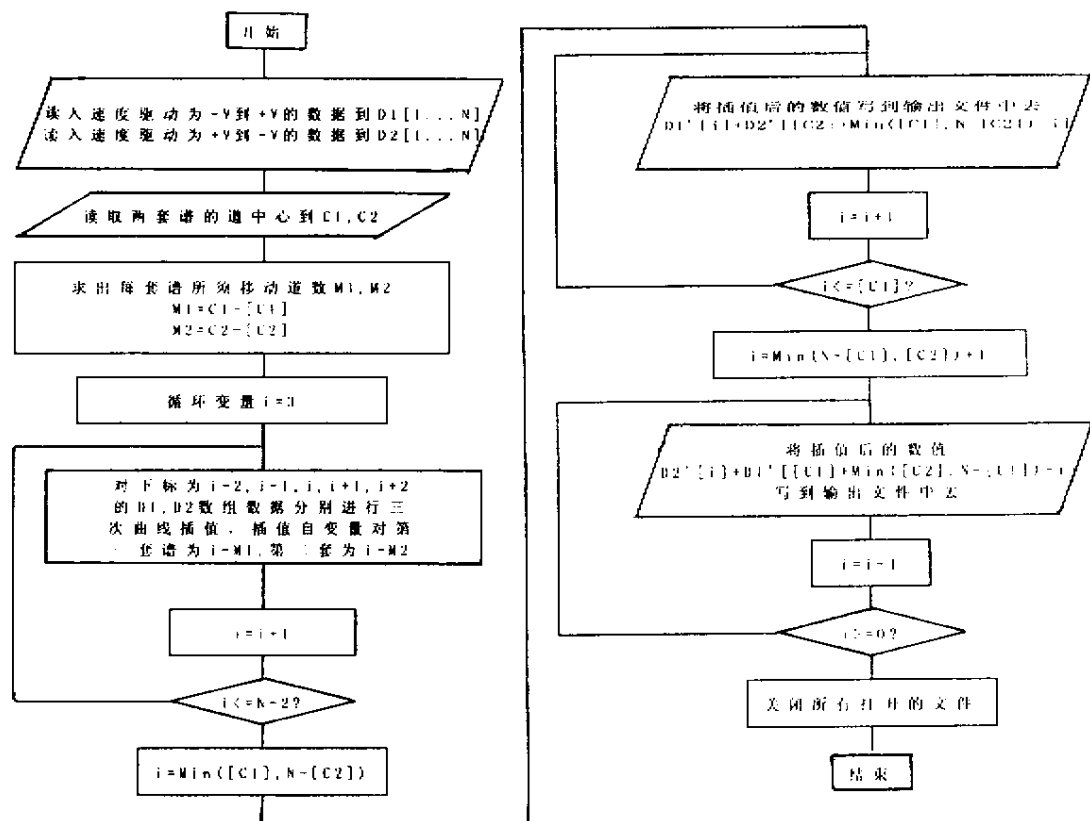
$$y = A + B_1x + B_2x^2 \quad (1)$$

则积分非线性定义为^[2]

$$\epsilon_{IN} = B_2/2B_1 \quad (2)$$

2 方法

通常，校准步骤给出 2 套相反方向运动的参数，在分析中，可以用两套标准数据同时拟合这两个谱，两者本底曲率数值相等，符号相反。但其相当花费计算时间。我们采用寻找两个谱线共有的速度范围，分成同样的道数作为原始谱，用插入算法建立两个新谱，它们可以彼此叠加。程序流程如下面所示（其中， $[x]$ 为 Newton 记号，代表对 x 取整）。



这是较省时间的程序，但缺点是谱线会稍有畸变，代表“计数”的数字不再按泊松分布。在选用插入算法时，我们采用了三次曲线插入算法，“计数”的标准偏差减小到约 10%。由于谱中心往往不在整数道，在进行共有速度范围叠加时必须先经过三次曲线插值处理，使数组中存

放的是相同速度值下的计数。然后,以零速度为基准,取两边共有速度区域叠加。虽然这样会导致折叠后数据变少,不过所少的部分均为速度最大区域的计数,因而在穆斯堡尔实验中可以不加考虑。

3 结果

为了验证方法的可行性,对实验测得的 $\alpha - \text{Fe}$ 穆斯堡尔谱进行了拟合。为便于比较,我们拟合了 $\alpha - \text{Fe}$ 的扫描波形从 $-V$ 到 V 得到的谱(谱 1)、扫描波形从 V 到 $-V$ 得到的谱(谱 2)、以镜像点为中心的折叠谱(谱 3)以及采用本程序得到的镜像折叠谱(谱 4)。拟合以后,谱 1、2、3、4 的 $\alpha - \text{Fe}$ 内双峰的半高半宽值分别为 0.1150、0.1181、0.1753、0.1185mm/s 谱 3 和谱 4 的折叠谱与谱 1 内双峰半高半宽的差值分别为 0.0603、0.0035mm/s。由此可见,用镜像点为中心的折叠谱,其半宽度值明显增宽, 2Γ 的值已经超过了实验中道增量的值(= 0.1102mm/s) 偏差 $2\epsilon N/V$ 的值在 1 道左右。采用本程序得到的半宽度仅展宽了 3% 左右,完全符合实用要求。

如同常规,用测得的 $\alpha - \text{Fe}$ 磁超精细分裂谱线位置检验折叠前后的非线性程度。用式(1)进行拟合,经本程序折叠以后的拟合见图 2。拟合后各参数见表 1。

表 1 据 $\alpha - \text{Fe}$ 峰位用 $y = A + B_1x + B_2x^2$,以求谱仪的非线性

Table 1 The linearity determined by quadratic curve with the data of $\alpha - \text{Fe}$ M ⁹ ssbauer parameters				
谱标号 No.	A	B ₁	B ₂	$\epsilon_{\text{IN}} \times 100\% / \%$
谱 1 No.1	135.4 ± 0.1	9.696 ± 0.004	4.198 × 10 ⁻⁴ ± 0.001	0.002
谱 2 No.2	132.0 ± 0.1	9.685 ± 0.003	0.002 ± 0.001	0.01
谱 4 No.4	132.2 ± 0.1	9.695 ± 0.003	0.0019 ± 0.0009	0.0098

由表 1 可见,折叠前后谱仪非线性都小于 10^{-4} ,因此都是合格的 经本程序折叠之后,谱线的积分非线性 ϵ_{IN} 虽然比谱 1 的 ϵ_{IN} 值大 4 倍,但该值主要是由于谱 2 本身的非线性 ϵ_{IN} 值较大而引起的 第三,折叠后的非线性 ϵ_{IN} 值依然较小,说明实验用速度驱动装置质量较高,也说明本折叠程序并未造成折叠谱质量明显变差。

4 结论

采用本方法进行穆斯堡尔谱的折叠,能有效地避免由于速度波形较驱动波形滞后对镜像点折叠法的影响,实测谱线展宽约为 3%,积分非线性 ϵ_{IN} 值小于 0.01%,很好地满足了折叠穆斯堡尔谱所需的要求。

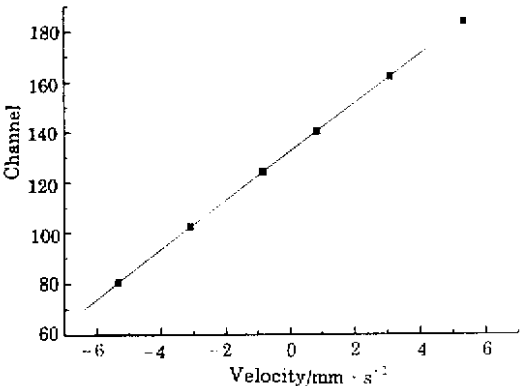


图 2 由 $\alpha - \text{Fe}$ 磁超精细分裂值测定谱仪的非线性 图中实线为对实验数据点的二次曲线拟合

Fig.2 The linearity of the M⁹ ssbauer spectrometer determined by the magnetic hyperfine splitting of $\alpha - \text{Fe}$ The solid line is fitting into a quadratic curve with the experimental data

参 考 文 献

- 1 Cranshaw T E. In Long G J ed. M^9 ssbauer spectroscopy applied to inorganic chemistry. Vol. 1, Chapter 3, New York, London : Plenum Press, 1984
- 2 夏元复, 王述新, 刘荣川. 核技术, 1986, 8(1) 44—45
XIA Yuanfu, WANG Shuxin, LIU Rongchuan. Nucl Tech, 1986, 8(1) 44—45

A new approach for folding M^9 ssbauer mirror spectra

SHI Hairong LIN Jun WU Dongmin XIAO Yuming HUANG Hongbo
LI Shimin XIA Yuanfu

(*Department of Physics, Nanjing University, Nanjing 210093*)

Abstract

Usually, for M^9 ssbauer mirror spectra folding procedure is an effective way to eliminate the geometric effect of the base line, and to raise the data acquisition efficiency. Folding is often proceeded by taking the center of mirror spectra as folding point, but a disadvantage of obvious line – broadening, resulted by the fact that the Doppler velocity lags behind the drive signal is usually overlooked. In this paper, a new approach was developed, which could avoid the above problem.

Key words M^9 ssbauer spectra, Mirror folding, M^9 ssbauer effect methodology

CLC O572