1 Lentoaikakalibrointi (21.4.2013 Samuli Rahkonen)

Käyn tässä tekstissä pikaisesti läpi ongelmia, joita lentoaikakalibroinnin kanssa on tähän mennessä tullut vastaan.

1.1 Etureunan sovitus

En saanut tehtyä minkäänlaista järkevää etureunan sovitusta Jaakko Julinin antamalla kaavalla (kaava 1), joten etsin netistä korvaavaa ratkaisua.

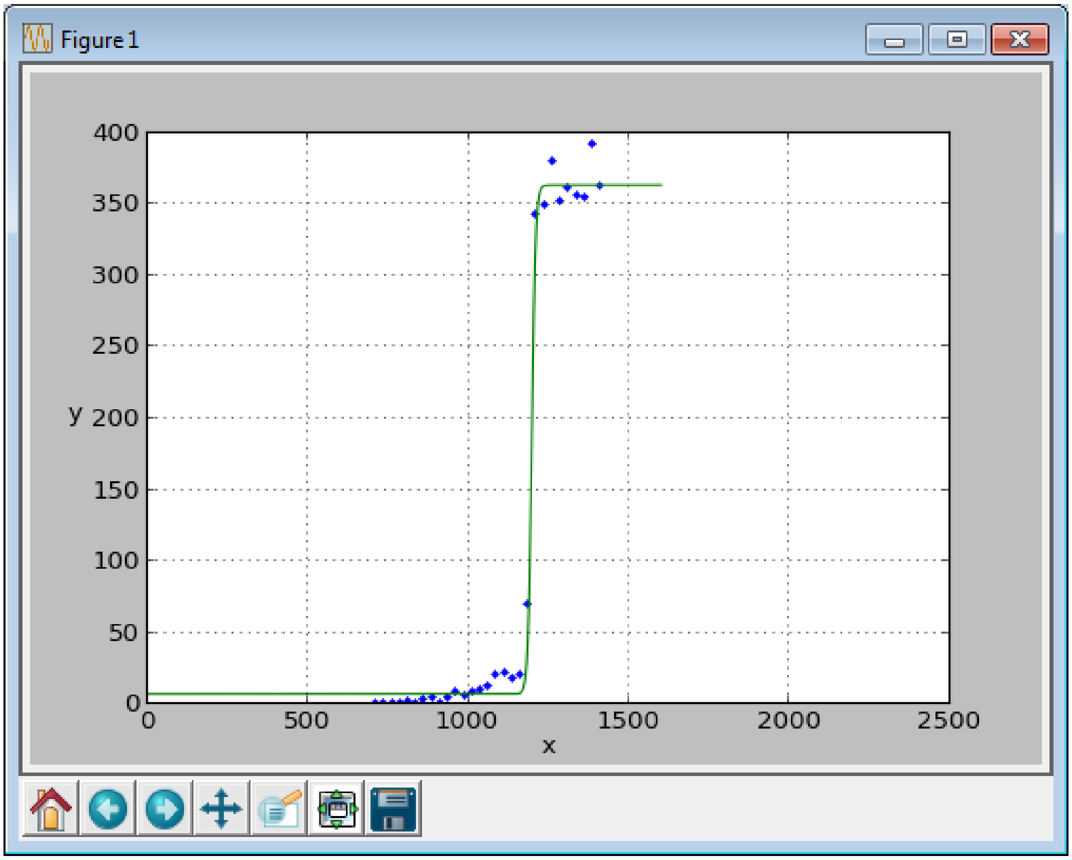
$$P(x) = \frac{A * (erf(x - x0) + 1)}{2} \tag{1}$$

Löysin tällaisen funktion, jolla pitäisi saada sovitettua halutun muotoinen käyrä pistejoukkoon.

$$y(x) = \frac{c}{1 + e^{-k(x-x_0)}} + y_0 \tag{2}$$

Esimerkin pistejoukko on muodostettu piin cut-tiedostosta, joka on ajettu hist:in läpi ja siitä on leikattu loppuosa pois. Sille sain arvatuista lähtöarvoista ($x_0 = 900$,$y_0 = 0$,$c = 100$ ja $k = 0.1$) generoitua sovituksen (kuva **??**), jonka parametrit ovat:

$$\begin{aligned}
x_0 &= 1196.55721890832 \\
y_0 &= 7.493438168881017 \\
c &= 355.7991234501531 \\
k &= 0.16934077066326653
\end{aligned}$$



Kuva 1: Etureunan sovitus piille.

Nyt vaikeuksia tuottaa etureunan keskikohdan laskeminen. Lähdin liikkeelle määrittämällä käyrän maksimin ja jakamalla sen kahdella, jolloin saadaan käyrän keskikohta y-akselilla (noin 180 tässä esimerkissä). Seuraavaksi käänsin käyrän funktion muotoon $x(y)$, jotta saisin selville missä kohtaa x-akselilla tämä keskikohta sijaitsee.

Eli kaava 2:stä saadaan:

$$x(y) = -\frac{ln\left(\frac{c}{y} - 1 - y_0\right)}{k} + x_0 \tag{3}$$

Ongelmaksi muodostuu, että logaritmin sisään tulee aina negatiivinen luku, enkä omalla päättelylläni keksi miten sen estäisin.

1.2 Teoreettisen lentoajan laskeminen

Rekyloituneen atomin energia.

$$E_R = \Lambda E_{I_0} - \Delta E_{R(T1)} \tag{4}$$

$$\Lambda = \frac{4M_I M_R cos^2\phi}{(M_I + M_R)^2} \tag{5}$$

Sironneen ionin energia.

$$E_{I_2} = E_{I_0} - E_R - \Delta E_{I_2(T1)} = K_1 E_{I_0} - \Delta E_{I_2(T1)} \tag{6}$$

$$K = \left(\frac{\sqrt{M_R^2 - M_I^2 sin^2\theta} + M_1 cos\phi}{M_I + M_R} \right) \tag{7}$$

Energia:

$$E = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{1}{2}m\left(\frac{l}{t}\right)^2 \tag{8}$$

Edellä mainittujen kaavojen muuttujat ovat:
E_{I_0} = Ionisuihkun energia
M_I = Ionisuihkun ionin massa
E_R = Rekyloituneen atomin energia
M_R = Rekyloituneen atomin massa
$\Delta E_{I_2(T1)}$ = Sironneen ionin lentoaikaportissa kuluttama energia
$\Delta E_{R(T1)}$ = Rekyloituneen atomin lentoaikaportissa kuluttama energia
ϕ = Näytteen kulma
l = Lentomatka
t = Lentoaika
Ratkaistaan lentoaika t rekyloituneelle atomille (kaavoilla 4, 5 ja 8):

$$\frac{1}{2}M_R\left(\frac{l}{t}\right)^2 = \Lambda E_{I_0} - \Delta E_{R(T1)}$$

$$t = \frac{l}{\sqrt{\frac{2(\Lambda E_{I_0} - \Delta E_{R(T1)})}{M_R}}}$$

Sijoitetaan samat arvot kuin annetussa "tof.in"-tiedostossa ja muutetaan ne jouleiksi ja kilogrammoiksi:
$E_{I_0} = 11.915\ MeV * 1\,000\,000/6.24150934 * 10^{18} \frac{eV}{J}$
$M_I = (Cu)\ 63\ u * 1.660538921 * 10^{-27} \frac{kg}{u}$
$M_R = (Si)\ 28\ u * 1.660538921 * 10^{-27} \frac{kg}{u}$
$\Delta E_{R(T1)} = 0$
$\phi = 41° * \pi/180°$ (Tässä kohtaa huomasin, että käytän asteita enkä radiaaneja...)
$l = 0.623\ m$

Kaikki sijoitettuna tulos on $t = 9.868624548178266 * 10^{-8}\ s \approx 98.7\ ns$. Finlandian tulos on $t \approx 99.2\ ns$.