

Załącznik 1

(przykłady otrzymywanych plików komputerowych)

Przykład **zbioru_1** z punktami pomiarowymi widma mössbauerowskiego (po złożeniu; w skali prędkości, po przeprowadzonej kalibracji, podana jest maksymalna prędkość źródła względem absorbenta - 10,05415 mm/s)

256

225539	226320	224721	225450	224881	225816	225544	225279
225365	225002	225017	225704	225311	224948	225686	225245
224886	225167	226097	226011	224996	225235	225801	225094
224890	225372	225226	224697	225543	225416	224892	224259
224798	224569	224725	225036	225500	225048	224840	224791

.....
.....

221779	222865	223085	223919	223485	224445	224252	223857
224821	224285	224743	224774	224632	224962	225039	226020
224497	225185	225014	225144	225095	225372	225274	225775
225357	225254	225004	225723	224945	225135	225561	225161
225511	224754	225046	225330	224174	225178	225239	224982
225529	225350	224804	225996	225390	225410	224964	225381
225485	224990	226214	226144	225016	225636	224853	225273

512 256.6244 1 10.05415

Przykład **zbioru_2** z parametrami startowymi dla $v_{\max} = 0$ (wartości parametrów w kanałach)

Fe_kal

256

225539	226320	224721	225450	224881	225816	225544	225279
225365	225002	225017	225704	225311	224948	225686	225245
224886	225167	226097	226011	224996	225235	225801	225094
224890	225372	225226	224697	225543	225416	224892	224259
224798	224569	224725	225036	225500	225048	224840	224791

224497	225185	225014	225144	225095	225372	225274	225775
225357	225254	225004	225723	224945	225135	225561	225161
225511	224754	225046	225330	224174	225178	225239	224982
225529	225350	224804	225996	225390	225410	224964	225381
225485	224990	226214	226144	225016	225636	224853	225273

512 256.6244 1 0.00000

0 0 1

1 256

0

1	'B'	226320	0	0	
2	'C'	54782.00	0	0	1
3	'IS'	127.50	0	0	1
4	'QS'	0.00	0	0	1
5	'G'	3.50	0	0	1
6	'H'	67.50	0	0	1

Przykład zbioru_3

Na początku zbioru uwidocznione są wstępne iteracje danych, a poniżej znajduje się koniec zbioru_3.

9.097062262501840E-001 4.601430588814991E-001 3.398279170453801E-001
99.979 99.978 99.978 99.978 99.977 99.977 99.977 99.976 99.976 99.975

.....

.....

99.943 99.945 99.946 99.947 99.949 99.950 99.951 99.952 99.953 99.954
99.955 99.956 99.957 99.958 99.959 99.960 99.960 99.961 99.962 99.963
99.963 99.964 99.965 99.965 99.966 99.967 99.967 99.968 99.969 99.969
99.970 99.970 99.971 99.971 99.972 99.972 99.973 99.973 99.974 99.974
99.974 99.975 99.975 99.976 99.976 99.976

ZBIEZNOSC !

ITER. 3 CHISQ= .9097

PARAMETRY TLA

1 B .10680D+07 +- .97517D+02
2 B2 .00000D+00 FIX
3 B3 .00000D+00 FIX

PARAMETRY POWIERZCHNI

4 C .19602D+05 +- .55014D+03

PARAMETRY POLOZEN

5 IS .23525D+00 +- .23062D-01

SZEROKOSCI LINII

6 G .12446D+01 +- .40478D-01

NR LINII POWIERZCHNIA POLOZENIE [MM/S] SZEROKOSC [MM/S]
STOS.POW.

1 19602. .2353 1.2446

CHISQ = .910 MISFIT = .460 +- .340 %

**Opis parametrów zbioru wejściowego dla programu MOS_1
w kolejności ich występowania.
(wg instrukcji dołączonej do programu)**

A. Parametry definiujące widmo doświadczalne.

1. Nazwa widma.
2. Liczba danych w widmie złożonym (max. 512).
3. Widmo złożone.
4. Liczba danych przed złożeniem, punkt złożenia, rodzaj ruchu wibratora określony zależnością prędkości od czasu (1 dla ruchu liniowego - wariant realizowany w tym ćwiczeniu; 0 dla ruchu sinusoidalnego),, wartość prędkości maksymalnej $v_{\max}$ (prędkość w punkcie złożenia), przy czym, jeżeli:
 $v_{\max} = 0$ to parametry dopasowania podane są w kanałach,
 $v_{\max} < \text{lub} > 0$ to parametry dopasowania podane są w [mm/s]
i [kGs}.

B. Parametry startowe dopasowania

5. LPOJ - liczba pojedynczych linii, LKW - liczba dubletów, LZEM - liczba sekstetów.
6. NP, NK - dopasowanie od kanału NP do NK.
7. GS - połowa szerokości połówkowej linii mössbauerowskiej źródła (0 w przypadku dopasowania w przybliżeniu cienkiego absorbenta - wariant realizowany w tym ćwiczeniu).
8. JNR, JN1, PAR1, AL1, BL1, (BMXy) gdzie:
NR nr parametru,
JN1 nazwa parametru,
AL1, BL1 dolna i górna granica zmian parametrów,
(BMXy) współczynniki określające udział parametru w danej składowej widma.
9. Numeracja parametrów dowolna. Ostatni parametr musi posiadać nr większy lub równy 100.

Nazwy parametrów:

▪ **parametry tła:**

B (lub B1) tło płaskie;

B1, B2, B3 tło paraboliczne, parabola zadana w postaci:

$$B1 + B3 \cdot (v - B2)^2 ;$$

S zadaje się tylko w przypadku dopasowywania całki transmisji (TI) - wariant nie realizowany w tym ćwiczeniu, gdzie funkcja dopasowywana ma postać ogólną:

$$f(v)=B1 + B3 \cdot (v-B2)^2 + S \cdot TI(v).$$

(UWAGA: Równoczesne dopasowywanie S oraz parametrów amplitud jest trudne.)

▪ **parametry amplitud:**

C dla pojedynczych linii;

C, C1, C2 dla dubletów:

C obie linie dubletu mają takie same amplitudy,

C1, C2 amplitudy różne;

C, C1, C2, C3 - dla sekstetów:

C ampl. (3),(4) linii w sekstecie,

C1 ampl. (1),(6) linii,

C2 ampl. (2),(5) linii,

C3 ampl. (3),(4) linii,

(jeśli podana jest wartość C, to potrzebne są parametry stosunku amplitud)

UWAGA: W przypadku całki transmisji (wariant nie realizowany w tym ćwiczeniu) parametr amplitudy ma znaczenie grubości efektywnej absorbenta pomnożonej przez znormalizowany współczynnik Clebscha-Gordona.

▪ **parametry położeń:**

IS dla pojedynczych linii;

IS, QS dla dubletów:

$$IS = [(1)+(2)]/2, \text{ położenie środka dubletu,}$$

$$QS = [(2)-(1)]/2 ;$$

IS, H, QS dla sekstetów:

IS - położenie środka sekstetu,

H - parametr rozszczepienia magnetycznego (wyrażony dla $v_{\text{MAX}} \neq 0$ w [kGs], natomiast dla $v_{\text{max}} = 0$ w [kanał]),

$$H = [(6)-(1)]/2,$$

QS - parametr oddziaływania kwadrupolowego,

$$QS = [(6)-(5)]/4 - [(2)-(1)]/4$$

▪ **parametry szerokości połówkowej (połowa szerokości połówkowej l i n i i)**

G dla pojedynczych linii;

G, G1, G2

dla dubletów:

G - obie linie mają taką samą szer.,

G1, G2 - szerokości różne;

G, G1, G2, G3

dla sekstetów:

G - wszystkie linie mają taką samą szerokość,

G1 - taką samą szerokość mają linie (1) i (6),

G2 - taką samą szerokość mają linie (2) i (5),

G3 - taką samą szerokość mają linie (3) i (4).

▪ **parametry stosunku amplitud w sekstecie:**

$$CL1, CL2, \quad - CL1 \quad = \quad \text{ampl (1) / ampl (3)}$$

oraz

$$CL1 \quad = \quad \text{ampl(6) / ampl(4),}$$

$$- CL2 \quad = \quad \text{ampl(2) / ampl (3)}$$

oraz

$$CL2 \quad = \quad \text{ampl (5) / ampl (4);}$$

CL1, CL2 są wspólne dla wszystkich sekstetów

Dolna i górna granica zmian parametrów:

AL1 = 0 i BL1 = 0 wartość parametru może zmieniać się dowolnie,

AL1 = 1 i BL1 = 1 wartość parametru jest ustalona.

Współczynniki określające udział parametru w danej składowej widma (BMXy):

podaje się tylko dla parametrów amplitud, położenia i szerokości. Dla każdego z tych parametrów podaje się ich tyle, ile wynosi suma (LPOJ + LKW + LZEM) wszystkich składowych widma.

UWAGI:

Format czytania wszystkich parametrów jest swobodny.

W obrębie danego rodzaju parametrów startowych (amplitud, położenia, szerokości) **musi** być zachowana następująca kolejność:

1) parametry pojedynczych linii,

2) parametry dubletów,

3) parametry sekstetów.

Wartości startowych parametrów energetycznych (położeń i szerokości) muszą być podane w odpowiednich jednostkach określonych wartością prędkości maksymalnej

$v_{\max}$ oraz:

dla $v_{\max} = 0$ jednostką jest [kanał]

dla $v_{\max} < \text{lub} >$ jednostka to [mm/s] i [kGs].