

Sistema de programas para la espectrometría Mössbauer

F. Martínez y J. Matutes
Universidad de La Habana

RESUMEN

En este trabajo se desarrolla un sistema de programas para el tratamiento matemático de los espectros Mössbauer.

Los programas se elaboraron en lenguaje Basic N-88 y se corrieron en la serie de microcomputadoras NEC-9801, ajustándose varios espectros Mössbauer.

ABSTRACT

In this work a program system for the mathematical treatment of Mössbauer spectra was developed.

The program system was written in language Basic N-88 for the NEC-9801 computer serie. Several Mössbauer spectra were fitten.

1. INTRODUCCIÓN

La obtención de la información física y química de una muestra a partir de sus parámetros Mössbauer requiere en la mayoría de los casos que el espectro se descomponga en sus líneas lorentzianas integrantes. Esta tarea es complicada y requiere un número elevado de operaciones, por lo que es necesario elaborar programas de computadoras para realizar la deconvolución de los espectros Mössbauer.

En este trabajo se presenta un sistema de programas elaborado para dicho fin.

2. MÉTODO DE AJUSTE Y ESTRUCTURA DEL SISTEMA DE PROGRAMAS

Se utilizó un método iterativo no lineal por mínimos cuadrados, el cual minimiza la suma S de los cuadrados ponderados de los errores siguientes:

$$S = \sum_{i=1}^n [Y_i - Y_T]^2$$

donde:

Y_i son los datos experimentales y Y_T es la función que describe el modelo teórico.

Para la bondad del ajuste se utiliza el criterio de Chi-Cuadrado expresado de la forma siguiente:

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^n \frac{[Y_i - Y_T]^2}{Y_T}$$

El ajuste se considera estadísticamente aceptable, con un nivel de confiabilidad del 98 %, si el valor de Chi-Cuadrado se encuentra dentro del intervalo siguiente:

$$[(\gamma+2, 2-3, 3\sqrt{\gamma}), (\gamma+2, 2+3, 3\sqrt{\gamma})]$$

donde γ es el número de grados de libertad, igual al número de canales utilizados menos el número de parámetros a ajustar.

La envolvente teórica del espectro se describe por el modelo matemático siguiente:

$$Y_T = \phi - \sum_{j=1}^n \frac{I_{0j}}{1 + \left(\frac{X - X_{0j}}{\Gamma_j} \right)^2}$$

donde ϕ es el valor del fondo, I_{0j} es la intensidad de una línea, X_{0j} es la posición de una línea y Γ_j es el semiancho de una línea.

Los programas pueden trabajar con los tipos de curvas siguientes:

- Lorentzianas simples
- Dobletes simétricos de lorentzianas
- Dobletes asimétricos de lorentzianas
- Sextetos simétricos de lorentzianas
- Sextetos asimétricos de lorentzianas

3. DESCRIPCIÓN DE LOS PROGRAMAS DEL SISTEMA

El sistema de programas está compuesto por 13 programas de servicio y los datos de un espectro de prueba. Los programas están elaborados en lenguaje Basic N-88 para las microcomputadoras NEC 9801 (cualquiera que sea capaz de soportar el intérprete N-88 Basic, puede trabajar con el sistema de programas).

A continuación se describen los programas del sistema en orden alfabético:

- a. ARECAL. Este programa calcula las razones de áreas entre cada una de las componentes de la envolvente teórica y ésta última.
- b. CREAMFI. Con este programa es posible crear en el disco ficheros de juegos de datos experimentales para ser utilizados con otros programas del sistema.
- c. EPARAM. Este programa calcula el error por parámetro ajustado por mínimos cuadrados.
- d. FILESP. Este programa está elaborado con el objetivo de crear en el disco ficheros que contengan información tanto del experimento como del ajuste de un espectro.
- e. GENING y GENIFI. Estos dos programas contienen una explicación de el uso y estructura del sistema de programas. Dicha información puede ser leída en pantalla y al mismo tiempo impresa en papel. Este programa puede correrse con sólo oprimir la tecla "HELP".
- f. GRAFIC. Este programa grafica en pantalla datos experimentales y si se desea el ajuste obtenido para ellos. Todos los gráficos pueden ser copiados en papel.
- g. GRAMOND. Permite el modelaje de espectros y si se desea superponer el modelo obtenido a un juego de datos concretos.
- h. LORFIT. Es el programa inicial del sistema de trabajo y es el que debe llamarse a ejecución inicialmente para tener acceso a todos los otros programas del sistema.
- i. MECENT. Es el que permite escoger en el menú de trabajo el programa que desea ejecutarse y a este programa se puede entrar desde cualquiera de los programas del sistema con sólo oprimir la tecla "STOP".
- j. MINSQD y MINSQR. Estos programas calculan ambos los mejores parámetros por mínimos cuadrados. En MINSQD los cálculos se realizan en doble precisión y en MINSQR, se realizan en simple precisión.
- k. TERMIN. Este programa permite abandonar el sistema de programas.

4. COMPROBACIÓN DEL SISTEMA DE PROGRAMAS

Podemos observar en las figuras dos espectros ajustados por el sistema de programas.

El primero corresponde a la Nitroprucida de Sodio, que es una línea lorentziana pura, para la cual se obtuvieron los siguientes resultados:

Corrimiento isométrico - 0.169 ± 0.001 mm/s
Semiancho 0.120 ± 0.001 mm/s

El segundo corresponde al espectro de un Nitruro de Hierro que es una fase con fórmula química Fe_3N . Para esta fase existen dos posiciones no equivalentes para el Fe por lo cual su espectro debe estar conformado por dos sextetos. Se propuso un modelo compuesto por dos sextetos asimétricos obteniéndose los siguientes resultados.

	Sexteto # 1	Sexteto # 2
Corrimiento isométrico (mm/s)	0.33 ± 0.01	0.040 ± 0.003
Efecto cuadrupolar (mm/s)	0.024 ± 0.004	0.022 ± 0.002
Campo efectivo (kOe)	326 ± 1	208 ± 1
Razones de áreas (adimensional)	0.60	0.40

5. BIBLIOGRAFÍA

1. Martínez Ríos, Félix O.

Sistema de programas para la espectrometría Mössbauer
Trabajo de Diploma defendido en el departamento de Física de los Metales de la Universidad de La Habana.

2. Miliá, I.; F. Cruz; A. Serra y J. Matutes

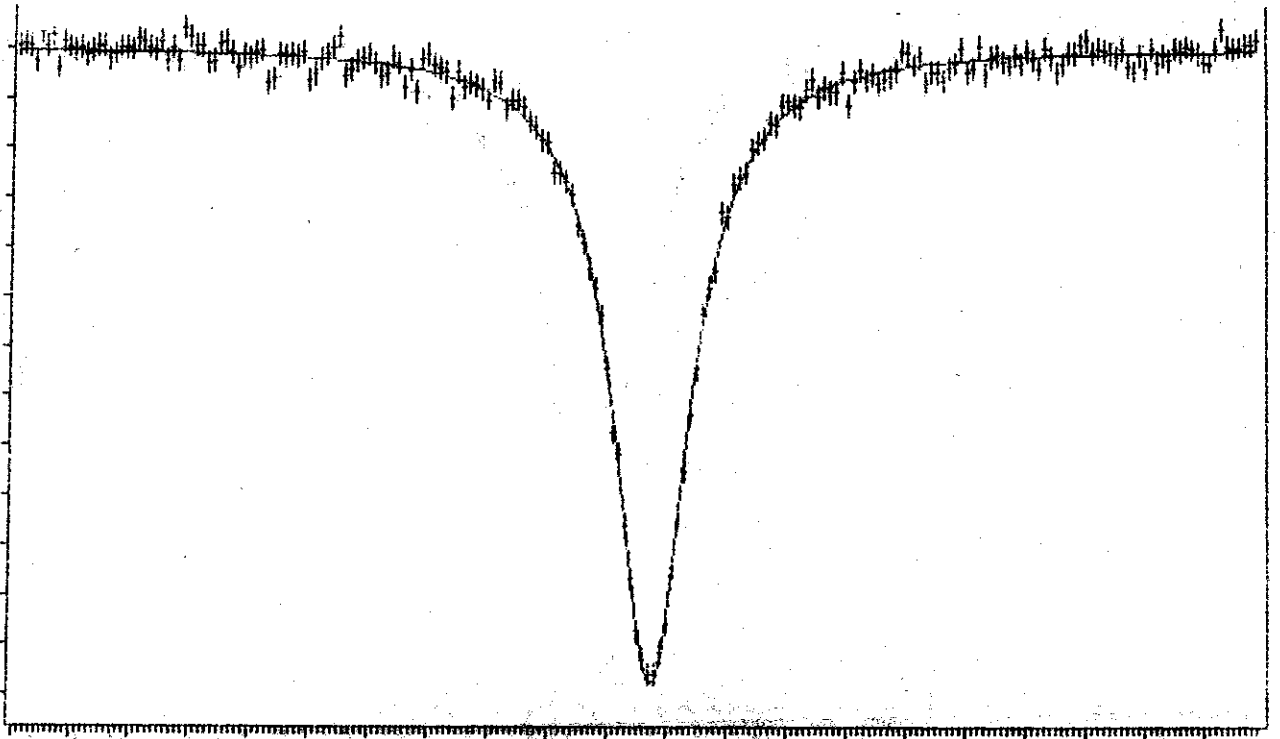
Caracterización de serpentinas cubanas por varias técnicas físicas.
Revista Cubana de Física (aceptado para publicar).

3. Linnik, Y.V.

Method of least squares and principles of the theory of observation (1964).

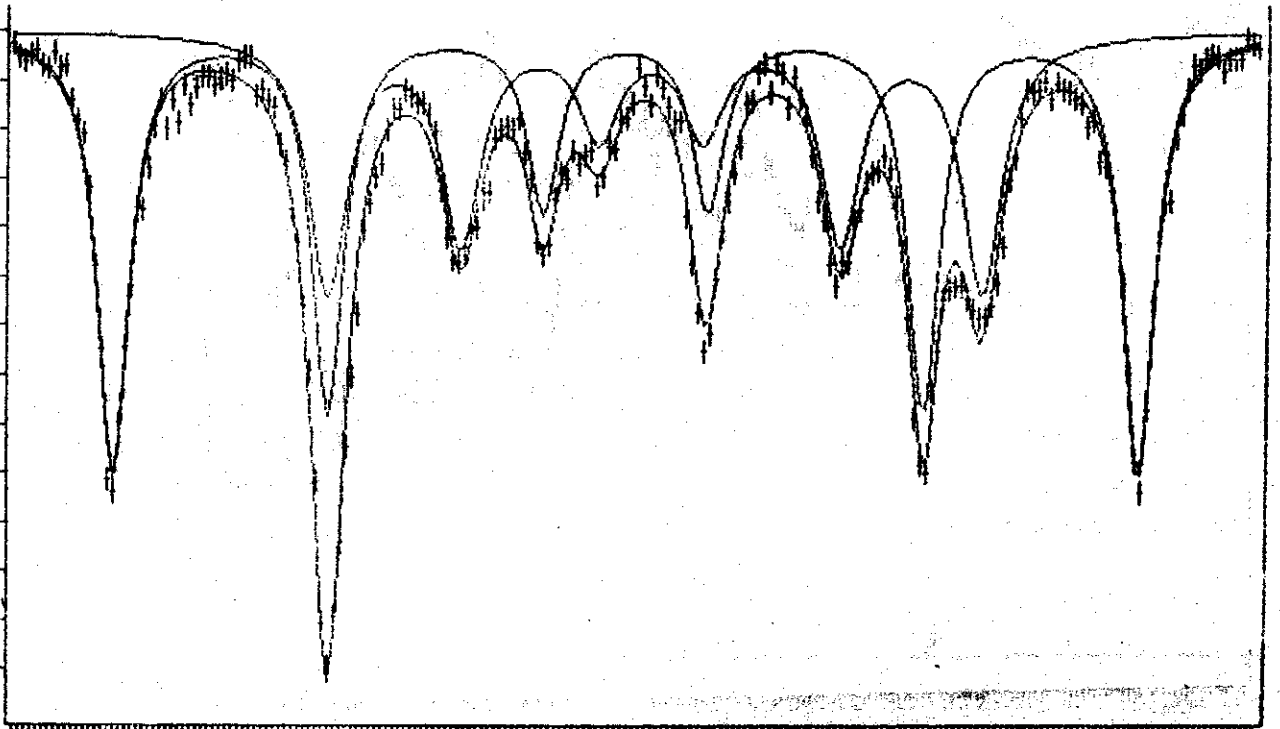
4. Mössbauer spectroscopy. Edited by U. Gonser (1973).

GRÁFICO DE LA ENVOLVENTE TEÓRICA Y SUS COMPONENTES



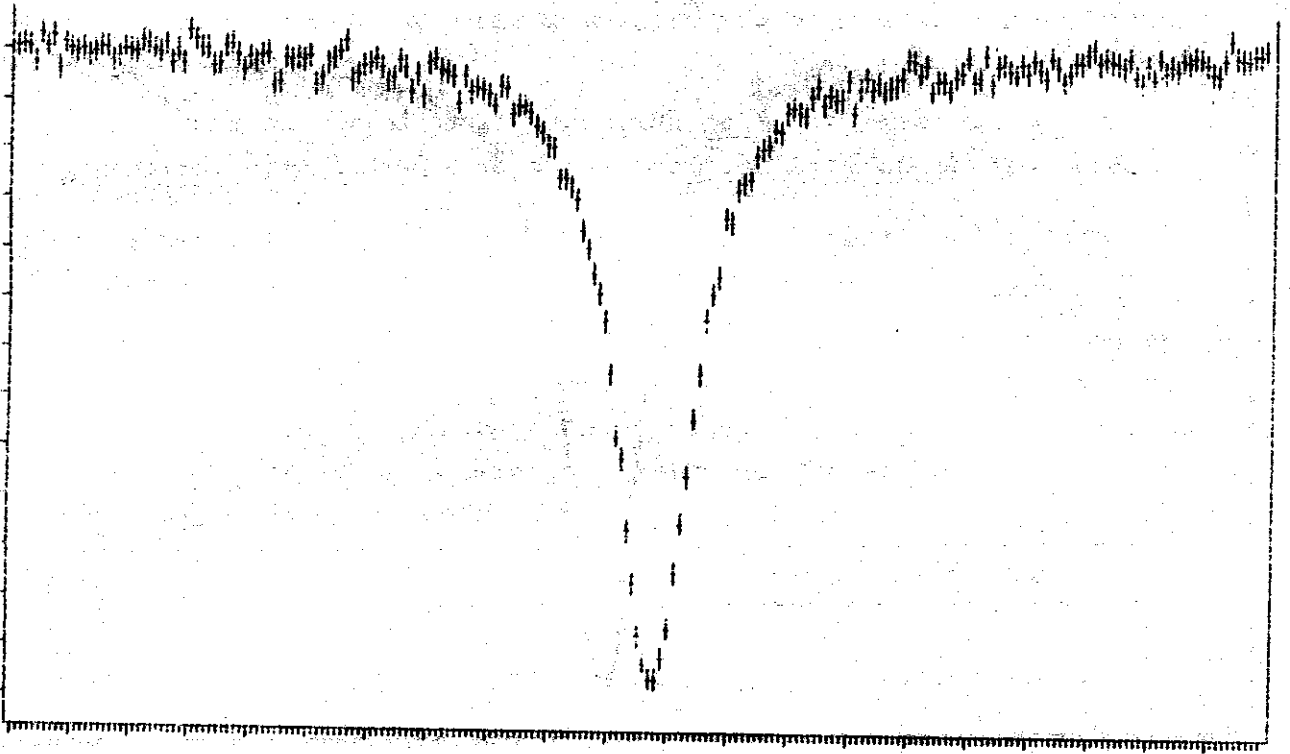
EJE DE CONTEOS → 5000 CONTEOS POR DIVISIÓN, LA PRIMERA ES EL FONDO
EJE DE CANALES → 1 CANAL POR DIVISIÓN, LA PRIMERA ES EL CANAL # 10

GRÁFICO DE LA ENVOLVENTE TEÓRICA Y SUS COMPONENTES



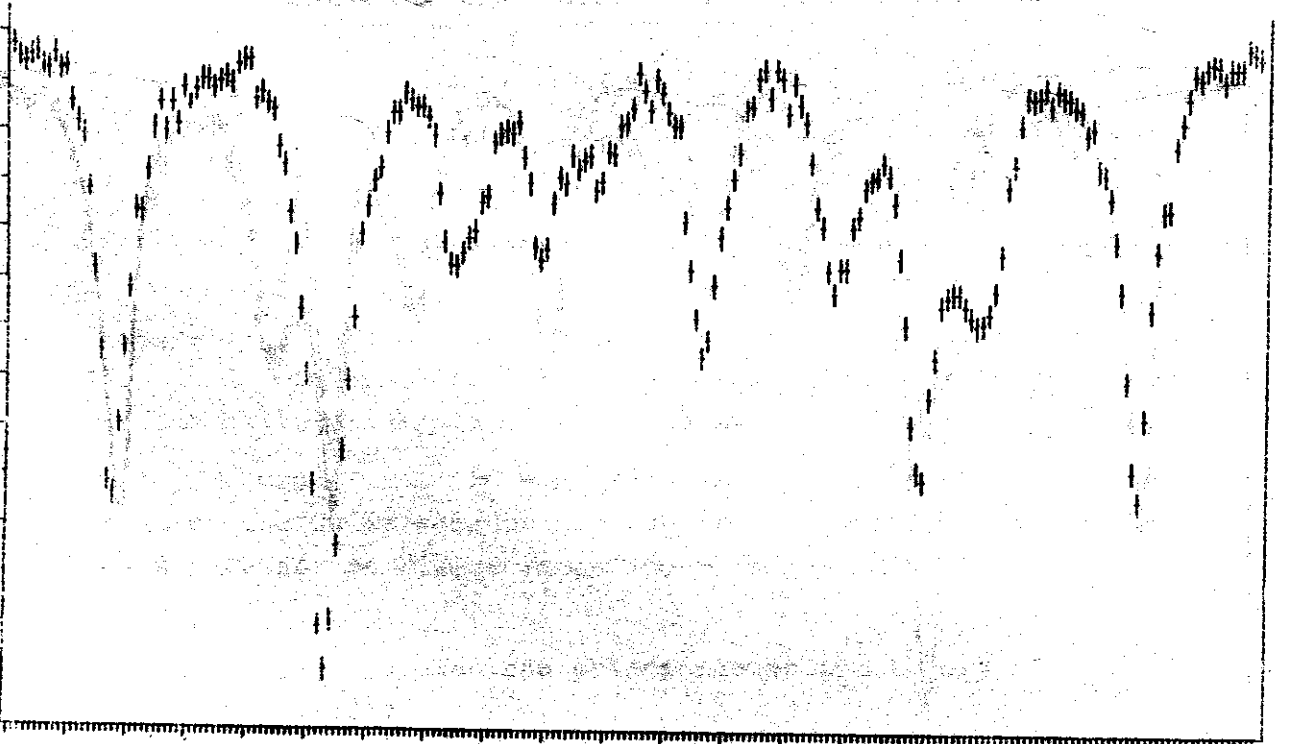
EJE DE CONTEOS → 5000 CONTEOS POR DIVISIÓN, LA PRIMERA ES EL FONDO
EJE DE CANALES → 1 CANAL POR DIVISIÓN, LA PRIMERA ES EL CANAL # 25

GRÁFICO DE LOS DATOS EXPERIMENTALES



EJE DE CONTEOS -> 5000 CONTEOS POR DIVISIÓN. LA PRIMERA ES EL FONDO
EJE DE CANALES -> 1 CANAL POR DIVISIÓN. LA PRIMERA ES EL CANAL # 10

GRÁFICO DE LOS DATOS EXPERIMENTALES



EJE DE CONTEOS -> 5000 CONTEOS POR DIVISIÓN. LA PRIMERA ES EL FONDO
EJE DE CANALES -> 1 CANAL POR DIVISIÓN. LA PRIMERA ES EL CANAL # 25