Univerzita Palackého v Olomouci

Přírodovědecká fakulta

Společná laboratoř optiky UP a FZÚ AV ČR

Bakalářská práce

Časové rozlišení detekce bezodrazových gama fotonů

Autor:	Tomáš Jüngling
Studijní program:	Aplikovaná fyzika
Forma studia:	Prezenční
Vedoucí práce:	Mgr. Vlastimil Vrba, Ph.D.
Rok:	2024

Bibliografická identifikace

Jméno a příjmení autora:	Tomáš Jüngling
Název práce:	Časové rozlišení detekce bezodrazových gama fotonů
Typ práce:	Bakalářská
Pracoviště:	Společná laboratoř optiky UP a FZÚ AV ČR
Vedoucí práce:	Mgr. Vlastimil Vrba, Ph.D.
Rok obhajoby práce:	2024
Klíčová slova:	Nukleární kvantová optika, časové rozlišení, Mössbauerův jev, gama optické pulzy, časové koincidence, vysokofrekvenční modulace
Počet stran:	69
Počet příloh:	1
Jazyk:	Český

Bibliographical identification

Author's name:	Tomáš Jüngling
Title:	Time resolution of recoilless gamma photons detection
Type of thesis:	Bachelor's
Department:	Joint Laboratory of Optics of Palacký University and Institute of Physics AS CR
Supervisor:	Mgr. Vlastimil Vrba, Ph.D.
Year of presentation:	2024
Keywords:	Nuclear quantum optics, time resolution, Mössbauer effect, gamma optical pulses, time coincidence, high frequency modulation
Number of pages:	69
Number of appendices:	1
Language:	Czech

Prohlášení

Prohlašuji, že jsem bakalářskou práci na téma „Časové rozlišení detekce bezodrazových gama fotonů“ vypracoval samostatně a s použitím uvedené literatury.

Datum: ____________________ Podpis: ....

Poděkování

Tímto bych chtěl poděkovat vedoucímu práce Mgr. Vlastimilu Vrbovi, Ph.D. za ochotu, trpělivost a cenné rady během doby vedení této práce. Dále bych neméně rád poděkoval Mgr. Aleši Stejskalovi, Ph.D. především za rady v oblasti experimentální aparatury. V neposlední řadě také děkuji rodině za podporu a trpělivost během mých studií.

Abstrakt

Práce se zaměřuje na určení časového rozlišení aparatury pro oblast nukleární kvantové optiky. Hodnota časového rozlišení je vyhodnocena na základě provedených časově koincidenčních měření využívajících interakci 14.41 keV gama fotonů s jádry ^{57}Fe, kde vystupuje jako jeden z parametrů. V práci je dále blíže popsána problematika určení a uveden návrh metodiky, kterou je možné pro vyhodnocení uplatnit.

Abstract

The presented study focuses on the determination of the time resolution of the apparatus in the field of nuclear quantum optics. The value of time resolution is determined on the basis of performed time-coincidence measurements utilizing the interaction of 14.41 keV gamma photons with ^{57}Fe nuclei measurements, where it acts as one of the parameters. In the work, the problematics of its determination is further described in detail, and a proposal of the methodology which can be applied for the evaluation is given.

Obsah

Úvod

Bakalářská práce se zaměřuje na oblast nukleární kvantové optiky využívající interakce gama záření s tzv. mössbauerovskými jádry. Vhodnou kontrolou experimentálních podmínek lze docílit generace časově proměnné intenzity detekovaného gama záření. Jednou z možností je modifikace vysokofrekvenčními pohyby absorbátorů s mössbauerovskými jádry, jenž jsou srovnatelné s dobou života excitovaných stavů jader. Na základě této vysokofrekvenční modulace lze získat časové závislosti intenzity gama záření (například ve formě soustav gama pulzů) při koincidenčních experimentech, kdy se měří čas detekce gama fotonu vzhledem ke startovacímu signálu. Významnou roli v těchto měřeních hraje časové rozlišení experimentální aparatury, které vystupuje jako jeden z parametrů výsledných koincidenčních měření, popisující jak vlastnosti komponent experimentální aparatury, tak také kvalitu jejího nastavení. Tato práce se zabývá právě problematikou určování časového rozlišení v experimentech nukleární kvantové optiky, kdy znalost tohoto parametru pak hraje významnou roli pro správné vyhodnocení experimentálních výsledků.

Cílem této práce je realizace měření časových koincidencí a analýza naměřených dat za účelem vyhodnocení časového rozlišení aparatury pro experimenty nukleární kvantové optiky. Součástí práce je sestavení a otestování experimentální aparatury pro gama optické časově koincidenční měření a určení experimentálních podmínek vhodných pro vyhodnocení časového rozlišení. Pro analýzu experimentálních dat byl navržen softwarový kód v programovacím jazyce Python. V rámci této práce byla též navržena a popsána metodika vyhodnocení časového rozlišení, která může být v budoucnu použita v rámci využívaných gama optických sestav.

Práce je rozdělena do tří hlavních kapitol, kde první kapitola obsahuje stručný úvod do teorie Mössbauerovy spektroskopie a nukleární kvantové optiky s využitím vysokofrekvenčně modulovaného pohybu absorbátoru. Následuje druhá kapitola, ve které je popsáno experimentální vybavení, jenž bylo v průběhu měření používáno a vytvořený software pro vyhodnocení provedených koincidenčních měření. V poslední kapitole jsou uvedeny výsledky práce a diskuze řešené problematiky, včetně určení časového rozlišení námi užívané aparatury a popisu metodiky pro její vyhodnocení.

Pro zápis desetinných čísel jsou v celé práci jednotně používány desetinné tečky namísto desetinných čárek.

1 Teoretická část

1.1 Mössbauerova spektroskopie

Mössbauerova spektroskopie patří mezi velmi významné experimentální metody v oblasti jaderné spektroskopie, se značným přesahem do materiálového výzkumu, chemie, geologie, či studia interakce záření s hmotou [1]. Tato metoda pracuje na bázi stejnojmenného Mössbauerova jevu, jenž využívá bezodrazové emise a absorbce gama fotonů.

1.1.1 Bezodrazová emise a absorbce gama fotonů

V případě vyzáření gama fotonu z excitovaného jádra, které přechází do základního stavu, je třeba uvažovat zákon zachování hybnosti. Pokud bude mít vyzářený foton hybnost P_γ, tak musí námi uvažované jádro získat hybnost stejné velikosti, ale opačného směru P_r. To vede k zavedení energie zpětného rázu E_r, o kterou je hodnota energie vyzářeného fotonu snížena dle vztahu

$$E_\gamma = E^* - E - E_\mathrm{r}, \tag{1.1}$$

kde E^* a E ve vztahu (1.1) jsou energie excitovaného jádra a energie základního stavu v tomto pořadí.

Jestliže je uvažovaný atom součástí systému, jako je např. krystalická pevná látka, tak můžeme nahradit hmotnost jednotlivých jader hmotností celého krystalu. To vede z důvodu nepřímé úměry E_r na hmotnosti k hodnotám E_r, které se limitně blíží nule. Takový jev, kdy hybnost p_γ je předána celému krystalu, nazýváme bezodrazová emise gama fotonů. Obdobnou úvahu bychom byli schopni provést i pro případ absorpce gama záření a excitace jader, kdy může docházet k bezodrazové absorpci gama fotonů.

V případě Mössbauerova jevu jsou tedy spektrální vlastnosti, jako je třeba šířka spektrální čáry, určeny pouze samotnými vlastnostmi jaderných přechodů. Vzhledem k tomu, že šířky spektrálních čar se pohybují řádově kolem 10^{-7} eV, a energie fotonů E_γ bývá v řádech 10^3–10^5 eV, tak je možno docílit rozlišovací schopnosti až 10^{-12} eV.

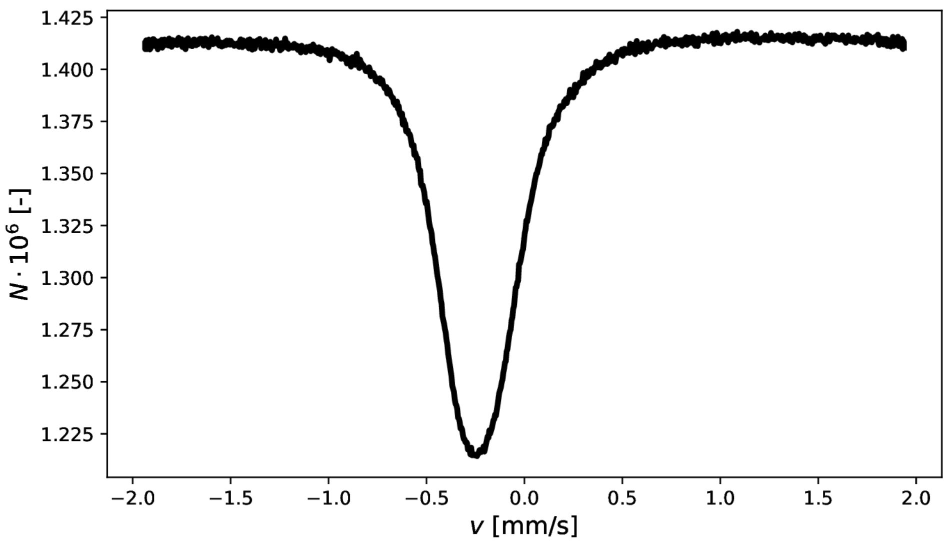
Pro pozorování Mössbauerova jevu je třeba zajistit modulaci energie E_γ, která se pohybuje na úrovni spektrální čáry studovaného materiálu. Za tímto účelem využíváme Dopplerovy modulace, která funguje na principu relativního pohybu zdroje záření a absorpčního materiálu tak, že při pohybu, kdy dochází k přiblížení, je energie záření zvýšena o ΔE a naopak při pohybu, kdy se vzdalují, je energie snížena o

ΔE. Tuto modulaci energie ΔE pak můžeme popsat dle vztahu

$$\Delta E = \frac{v}{c} E_0, \tag{1.2}$$

kde ΔE je hodnota modulační energie, v je rychlost, kterou je dopplerovská modulace prováděna, c je rychlost světla ve vakuu a E_0 je původní energie modulovaného záření, v našem případě gama fotonu. Ze vztahu (1.2) a typických hodnot šířky spektrální čáry a energií gama fotonů lze tedy dopočítat, že je třeba docílit pohybu o rychlostech v řádu mm/s. Těchto rychlostí lze snadno docílit za použití pohybových zařízení, které s daným zářičem nebo absorbátorem, vykonávají již zmiňovaný dopředný a zpětný periodický pohyb. Nejčastěji se využívají trojúhelníkové, nebo pilovité rychlostní profily, které zajišťují rovnoměrné zastoupení rychlostí.

Příklad, jak může takové Mössbauerovo spektrum vypadat, lze vidět na obrázku 1.1, kde na vodorovné ose vidíme rychlosti dopplerovské modulace a svislá osa nám udává počet detekcí N v závislosti na v (tedy ΔE). Zde se konkrétně jedná o data naměřena pomocí transmisní Mössbauerovy spektroskopie (TMS), tedy transmisního (přímého) geometrického uspořádání zářič–absorbátor–detektor. V tomto případě můžeme pozorovat pokles počtu detekcí v oblasti spektrální čáry absorbátoru, který je dán tím, že opětovné vyzáření absorbovaného fotonu má pravděpodobnostní charakter a foton je vyzařován do všech směrů, zatím co záření s energiemi mimo tuto spektrální čáru absorbátoru, prochází beze změny (uvažujeme-li pouze rezonanční interakci fotonu s jádry). Dalším často užívaným uspořádáním Mössbauerovy spektroskopie je uspořádání zpětného rozptylu, kde je uvažovaný detektor mimo osu zářiče a absorbátoru. Dochází tedy pouze k detekcím rozptýlených fotonů [2].



Obrázek 1.1: Příklad Mössbauerova spektra v režimu uspořádaní TMS.

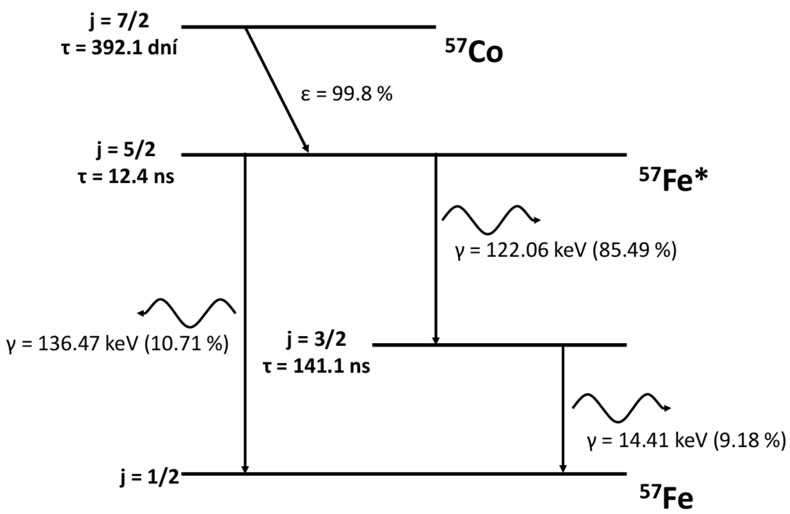
Nakonec je vhodné zmínit, že z různých důvodů byl Mössbauerův jev pozorován pouze u řádově desítek různých izotopů [3]. Mezi těmito izotopy jsou dále i takové, které buď nejsou vhodné pro výrobu zářičů, případně mají příliš krátký poločas rozpadu, aby byly použitelné. V literatuře je uváděno, že počet použitelných izotopů nabývá hodnoty 45 izotopů [4]. Existuje i alternativa k zářičům, která nevyužívá rozpadu radioizotopů, ale synchrotronového záření. Tato metoda nám dovoluje studium více materiálů, avšak za cenu nižší dostupnosti.

1.1.2 ^{57}Fe Mössbauerova spektroskopie

V případě Mössbauerovy spektroskopie s izotopem ^{57}Fe se zabýváme přechodem prvního excitovaného stavu do základního s energii $E_\gamma \approx 14.41$ keV, s dobou života $\tau = 141.1$ ns. Spektrální šířku tohoto přechodu jsme tedy schopni dopočítat pomocí vztahu

$$\Gamma_0 = \frac{\hbar}{\tau}, \tag{1.3}$$

kde Γ_0 je šířka spektrální čáry (FWHM), $\hbar$ je redukovaná Planckova konstanta $\hbar = \frac{h}{2\pi}$ a τ doba života. Z výpočtu Heisenbergova principu neurčitosti (1.3) pak víme, že Γ_0 nabývá hodnoty 4.66 neV. Samotné železo ^{57}Fe* v excitovaném stavu pak vzniká při radioaktivní přeměně ^{57}Co. Pro přehlednost přeměnové schéma ^{57}Co uvádíme na obrázku 1.2.

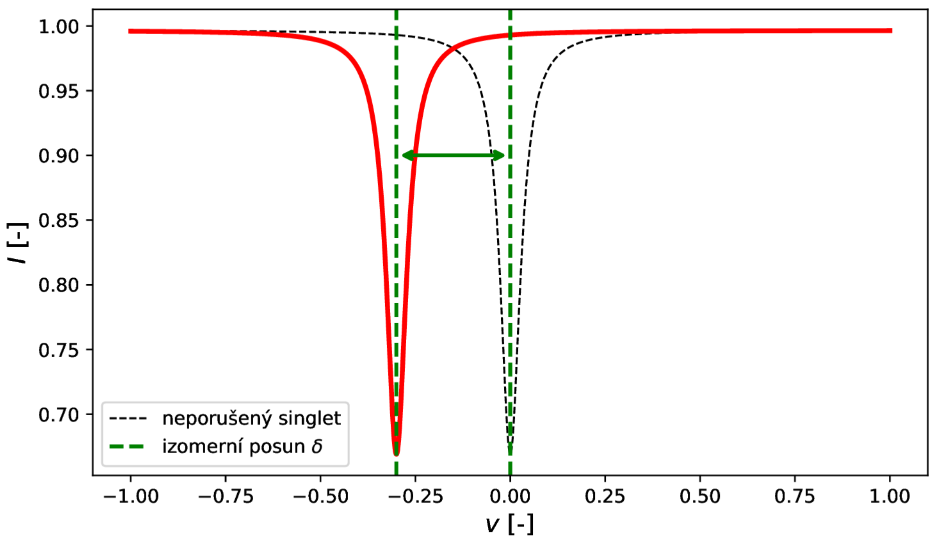


Obrázek 1.2: Rozpadové schéma ^{57}Co, který přechází na ^{57}Fe.

Veličina j zde reprezentuje kvantování celkového momentu hybnosti a τ dobu života na dané energetické hladině. Dále kromě gama fotonů z výše vyobrazených přechodů lze zaznamenat konverzní elektrony a rentgenové zaření o energii přibližně 6 keV. To je spojeno s nižší pravděpodobností vyzáření fotonu o energii 14.41 keV, jelikož dochází k interakcím těchto fotonů s elektrony na vnitřních slupkách atomu, a tak k uvolnění Augerových a konverzních elektronů, za doprovodu rentgenového záření. Jak již bylo zmíněno, tak nás budou zajímat právě fotony s energií 14.41 keV a z tohoto důvodu je nutné stínit detektor před zářením v oblasti 6 keV, aby nedocházelo k zahlcení detektoru a následnému „pile-up“ efektu. Popis a metodika tohoto odstínění bude popsaná v sekci 2.2.2 a 2.4.

1.1.3 Hyperjemné interakce

Vlivem působení elektrických a magnetických polí, které jsou tvořeny elektrony v atomové slupce samotného Mössbauerova jádra, či sousedícími atomy, vznikají „poruchy“ v energetické struktuře jader. Interakce jader s těmito elektrickými a magnetickými poli se souhrnně označují jako hyperjemné interakce. Mezi hyperjemné interakce, které je nutno v oblasti Mössbauerovy spektroskopie zohlednit, patří posun energetických hladin (interakce elektrického monopólu), nebo rozštěpení hladin (interakce elektrického kvadrupólu a magnetického dipólu). Právě znalosti hyperjemných interakcí většinou poskytují velmi cenné informace o lokálních elektrických a magnetických vlastnostech okolí daných jader ve studovaném materiálu [5].



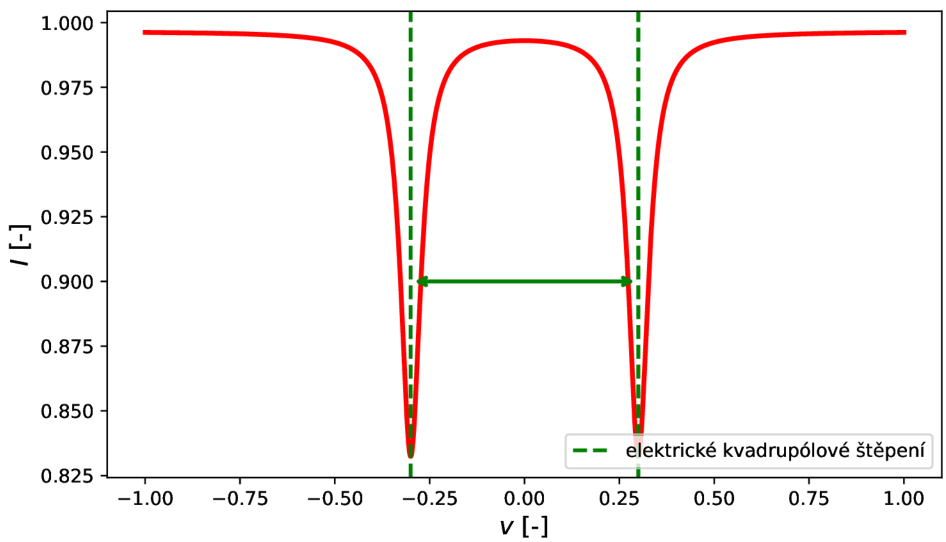
Obrázek 1.3: Ukázka izomerního posunu δ simulovaná za pomocí Lorentzových funkcí.

Díky interakci elektrického monopólu dochází vlivem různých distribucí náboje v různých okolích ^{57}Fe k relativnímu posunu energetických hladin. Tento posun se nazývá izomerní posun δ a jak název napovídá, tak je způsobován primárně tím, že atomy stejného prvku, ale jiného izomeru, mají také různé energetické hladiny (jak δE_g, tak i δE_e, tedy excitované a základní hladiny)[1]. Důsledkem je, že dochází k posunu spektrální čáry, a k absorbci γ fotonů dochází pouze tehdy, je-li dané příchozí záření dopplerovsky modulováno. Tento efekt si nyní názorně ukážeme na simulovaném Mössbauerově spektru za pomocí Lorentzovy funkce, jak lze pozorovat na obrázku 1.3, kde na horizontální ose máme bezrozměrné rychlosti dopplerovské

[1]Izomerní posun ^{57}Fe bývá typicky vztažen k αFe.

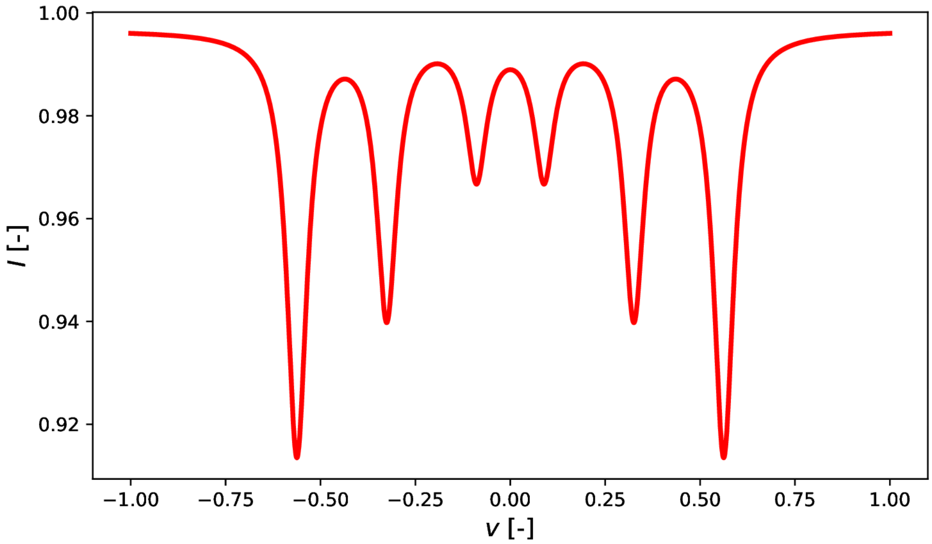
modulace v a na vertikální ose bezrozměrnou intenzitu I. Jedná se o spektrum singletu, tedy spektra bez rozštěpeného rezonančního přechodu.

Další hyperjemnou interakcí je interakce elektrického kvadrupólu vedoucí na kvadrupólové štěpení hladin. K tomuto jevu dochází vlivem různých uspořádání elektronových obalů atomů a uspořádání atomů v krystalové mřížce, které svým působením deformují tvar atomového jádra. To je v kvantové mechanice popsáno za pomocí kvantového čísla j, které popisuje celkový spin jádra. Příklad tohoto štěpení pak může být takový, že první excitovaná hladina na obrázku 1.2 s $j = 3/2$ může být rozštěpena do dvou degenerovaných hladin s $m = \pm 3/2$ a $m = \pm 1/2$, kde m je kvantové číslo reprezentující průmět spinu do osy kvantování. Výsledné Mössbauerovo spektrum pak může vypadat, jak je naznačeno na obrázku 1.4, kde jsme opět využili simulace pomocí Lorentzovských funkcí. Výsledné spektrum pak nabývá tvaru dubletu, tedy spektra s dvěma rezonančními přechody.



Obrázek 1.4: Ukázka kvadrupólového štěpení simulovaná za pomocí Lorentzových funkcí.

Poslední interakci, kterou si zde popíšeme, je magnetická interakce jader související s magnetickým hyperjemným štěpením (jaderný Zeemanuv jev). K tomu dochází interakcí s magnetickým polem prostřednictvím magnetického dipólového momentu $\vec{\mu}$. U tohoto jevu dochází pro ^{57}Fe k rozštěpení rezonančního přechodu do takzvaného sextetu s relativními intenzitami spektrálních čar v poměru 3:2:1:1:2:3, jak lze pozorovat na obrázku 1.5.



Obrázek 1.5: Ukázka magnetického dipólového štěpení simulovaná za pomocí Lorentzových funkcí.

Dále jsou samozřejmě také možné různé kombinace výše popsaných jevů. Tato tématika ovšem převyšuje rozsah této práce. Podrobnější informace lze nalézt v příslušné literatuře [3, 5].

1.1.4 Efektivní tloušťka absorbátoru

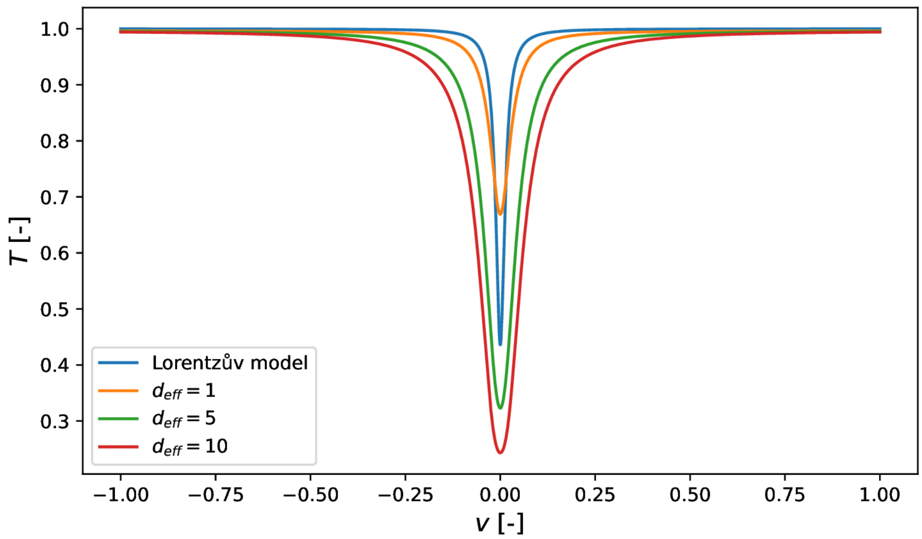
Mössbauerova spektra bývají převážně popisována za pomocí Lorentzových funkcí

$$S(E_\gamma) = \frac{1}{\pi} \frac{\frac{\Gamma_0}{2}}{(E_\gamma - E_\mathrm{a})^2 + (\frac{\Gamma_0}{2})^2}, \tag{1.4}$$

kde E_γ je energie gama fotonu a E_a představuje energii nukleárního přechodu absorbátoru. Pro přesnější popis si však s jednoduchým modelem jako je v (1.4) nevystačíme. Z důvodu, že tento model popisuje situace pouze pro ideální tenký absorbátor, kde dochází jen k jedné absorbci a vyzáření, tak se zavádí model transmisního integrálu [5] ve tvaru

$$S(E_\gamma)_\mathrm{TI} = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\frac{\Gamma_0}{2}}{(E - E_\gamma)^2 + (\frac{\Gamma_0}{2})^2} \exp\left(-d_\mathrm{eff} \frac{\left(\frac{\Gamma_0}{2}\right)^2}{(E - E_\mathrm{a})^2 + (\frac{\Gamma_0}{2})^2} \right) \mathrm{d}E. \tag{1.5}$$

Jak lze pozorovat, tak má výraz (1.5) podobu konvoluce emisní čáry a odezvy absorbátoru, kde d_eff představuje efektivní tloušťku absorbátoru [5]. Efektivní tloušťka absorbátoru je bezrozměrný parametr, shrnující vlastnosti rezonanční absorpce jaderného systému v dané látce. Porovnání těchto modelů si lze prohlédnout na obrázku 1.6.



Obrázek 1.6: Porovnání modelů Lorentzovy funkce a transmisního integrálu pro různé d_{eff}. Horizontální osa představuje rychlosti dopplerovské modulace a vertikální transmisi záření absorbátorer.

1.1.5 Zdroj rezonančních gama fotonů

V jaderné fyzice, či fyzice využívající zdroje záření s vysokými energiemi, existuje mnoho zdrojů ionizujícího záření. Ty bychom mohli rozdělit do skupin, jako jsou: kosmické záření, radioizotopy, zdroje rentgenového záření, urychlovače částic, případně synchrotrony. My se v této sekci omezíme především na zdroje záření na bázi radionuklidů.

Jedná se o širokou škálu materiálů, s různými druhy a energiemi záření. I přesto, že existují metody, jak dosáhnout téměř jakéhokoliv záření za pomocí urychlovačů či synchrotronů, tak může být využití radionuklidů značně výhodné, především z důvodu dostupnosti, kompaktnosti (realizace v poměrně malá aparatuře) anebo stability (možnost nepřerušovaného dlouhodobého provozu).

Z důvodu, že v našich experimentech využíváme Mössbauerova jevu, tak se také omezíme na radionuklidy, jenž se vyznačují právě bezodrazovou emisí a absorbcí gama fotonů. Příkladem takových isotopů mohou být například: ^{151}Eu, ^{103}Rh, nebo nejčastěji užívaný ^{57}Co.

Právě zmiňovaný ^{57}Co byl použit i v našich experimentech. Po takovémto zdroji záření požadujeme především vysokou aktivitu užitečného záření (v našem případě 14.41 keV γ fotonů), co nejnižší aktivitu jiného záření, a také co nejužší spektrální šířku čáry pro užitečné záření [6]. Šířka spektrální čáry pro 14.41 keV přechod ^{57}Fe, jak jsme si již za pomocí (1.3) ukázali, nabývá hodnoty 4.66 neV. Avšak této hodnoty nelze dosáhnout za současného splnění i dalších zmiňovaných požadavků, které na zářič máme.

Samotný radioisotop bývá obsažen v pevnolátkové matrici. Pro ^{57}Co jsou nejvhodnější materiály s kubickou FCC nebo BCC krystalickou strukturou [7]. Námi použitý zdroj konkrétně využívá rhodiové matrice, do které jsou atomy ^{57}Co difundovány. Rh patří k materiálům, které šířku spektrální čáry rozšiřují nejméně. Dále může mít na šířku spektrální čáry vliv také samotná příprava zdroje, kupříkladu atmosferický vodík, který vniká do matrice, nebo rychlost difuzního procesu.

1.2 Detekce gama fotonů

Stejně jako v optice světelné detektory ve viditelné oblasti spektra patří detekce gama záření k jedné z hlavních disciplín odvětví nukleární fyziky a souvisejících vědních oblastí. V této sekci si stručně popíšeme detektory ionizuícího záření, jenž jsou nedílnou součástí každé aparatury, souvísející s prací s ionizuícím zářením a také stručně uvedeme základní popis Mössbauerova spektrometru.

1.2.1 Mössbauerův spektrometr

Mössbauerův spektrometr je zařízení určeno k záznamu mössbauerovských spekter. Je tedy nutno, aby takovéto zařízení disponovalo jak detekční částí, tak i blokem pro řízení rychlostního profilu pohybového zařízení, jenž je nezbytný k dopplerovské modulaci vyzářených gama fotonů, což nám umožňuje realizovat vybraný rozsah rychlostí (z principu relativity je jasné, že lze místo zářiče modulovat pohyb absorbátoru).

Detekční část je realizována za pomocí komparátorů a diskriminátorů, jenž nám umožňují vybrat a přiřadit požadované pulzy, vystupující z detektoru k rychlostem pohybového zařízení (modulované energii).

Řízení rychlosti transduceru[2] je povětšinou realizováno převodem zadávacího napětí na proud, který je následně využit k excitaci zadávací cívky transduseru. Důležitá je v tomto případě znalost odezvové charakteristiky transduceru, jejímž změřením získáme informaci o souvislosti mezi zadávacím napětím a příslušným proudem.

1.2.2 Detektory

Obecně bychom mohli říci, že se detektory ionizujícího záření dělí do tří hlavních kategorií, ale samozřejmě jich je mnohem více a každá má jiná specifika a použití. Tyto tři kategorie jsou plynové detektory, scintilační detektory a polovodičové detektory, které se zejména v posledích letech těší stálému vývoji a rostoucímu využití. My jsme však v našich experimentech použili scintilační detektory, jejichž specifika budou popsána v sekci 2.2, avšak nejdříve jednotlivé metody detekce a jejich specifika popíšeme.

Plynové detektory fungují na principu ionizace plynu, kde jsou ionty a uvolněné elektrony urychlovány pomocí elektrického pole a zachytávány elektrodami. V dnešní době již nejsou až na jisté specifické oblasti (například měření ve vysokých magnetických polích) běžně užívány v tak vysoké míře. Důvodem je zejména nízká účinnost detekce, střední energetické rozlišení, středně dobré časové rozlišení a poměrně velké rozměry.

[2]Pohybové zařízení budeme v této práci dále označovat pomocí anglického názvu transducer.

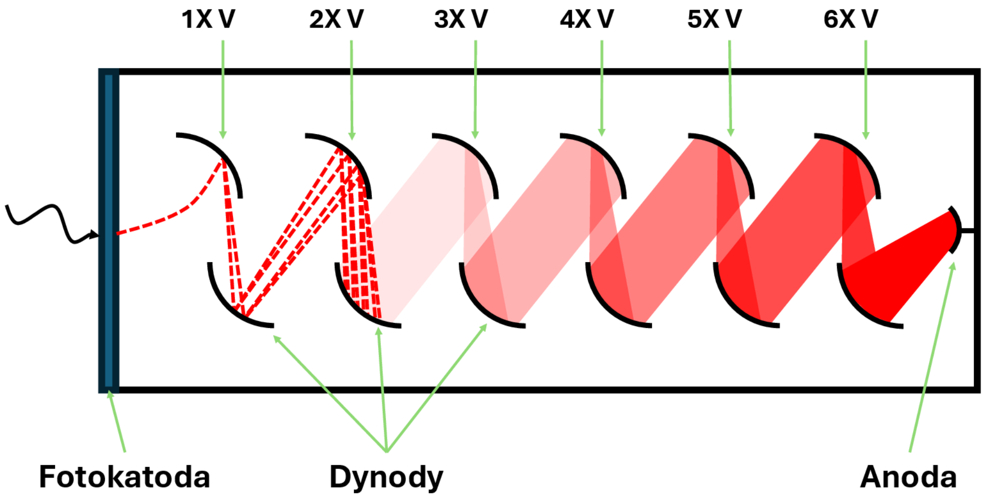
Často využívanou alternativou detektorů ionizujícího záření jsou detektory scintilační. Ty fungují na principu scintilace, což je přeměna ionizujícího záření na záblesky viditelného světla, jenž jsou následně dále zesíleny pomocí fotonásobiče (PM což je zkratkou z anglického „photomultiplier“). V současné době se jedná nejspíše o nejvyužívanější metodu detekce ionizujícího záření, a to především díky velmi dobrému poměru mezi parametry detektoru a cenou. Celkově lze shrnout, že scintilační detektory mají střední účinnost detekce záření, průměrné až nadprůměrné energetické rozlišení, dobré časové rozlišení a prostorové rozlišení, které je závisle především na výběru fotonásobiče.

Poslední druh detektotu, který si zde uvedeme, jsou detektory polovodičové. Ty fungují na principu PN přechodu, který je zapojen do závěrného směru. Při průletu ionizujícího zářeni PN přechodem dochází k excitaci elektronů, které se dostávají do vodivostního pásu a vznikají elektron-děrové páry. Jak již bylo zmíněno, tak lze říci, že se v současnosti jedná o nejlepší metodu detekce ionizuícího záření. Tomu nasvědčuje především vysoká účinnost a výborné energetické, časové a prostorové rozlišení. Nevýhodou je však vysoká cena a vysoká teplotní závislost.

Detailnějšího popisu detektorů ionizuícího záření je možné se dočíst např. v [8, 9], nebo [10], kde je detailnější popis především scitilačních materiálů.

1.2.3 Fotonásobič

Fotonásobič patří do skupiny detektorů, pracujících na principu vnějšího fotoelektrického jevu. Jedná se o zařízení obsahující fotokatodu, která musí být vhodně volena, aby odpovídala vlnové délce fotonů, které chceme detekovat. V našem případě se jedná o scintilační fotony scintilátoru YAP:Ce, který má vyzařovací maximum na vlnové délce 370 nm. Dále musí fotonásobič obsahovat sérii dynod, které zajišťují emisi sekundárních fotoelektronů. Většinou lze nalézt 15-20 dynod, kde na každé jeden elektron vyrazí dva, či více sekundárních elektronů a dochází tak k lavinovému jevu. Avšak, aby mohlo k této sekundární fotoemisi dojít, tak je třeba zajistit i urychlení elektronů, k němuž je využito zdroje vysokého napětí a také děliče napětí. Dělič napětí slouží k vytvoření skokového rozdělení napětí tak, aby se každá dynoda nacházela na větším potenciálu. Schéma typického fotonásobiče si lze prohlédnout na obrázku 1.7.



Obrázek 1.7: Schéma konstrukce fotonásobiče. Potenciály jednotlivých dynod jsou zde uvedeny jako nX V.

Obecně však nejsme omezeni pouze výše zobrazenou konstrukcí, ale máme celou řadu různých fotozesilovačů s širokou škálou využití. Jako příklad bychom si mohli uvést například gradientní fotonásobiče, které jak název naznačuje nevyužívají skokové změny napětí z dynody na dynodu, ale gradientní změny napětí v jednom z mnoha kanálků fotonásobiče. Takovéto zařízení se pak nazývá kanálkový fotonásobič, jehož výhodou je schopnost poskytnout prostorovou informaci o dopadajícím záření [8].

Nyní ještě stručně zmíníme některé z parametrů fotonásobíčů. Mezi hlavní parametry patří účinnost. Ta je dělena na kvantovou účinnost fotokatody (pravděpodobnost vyražení elektronu) a účinnost kolekce, která nám říká, kolik fotoelektronů je zachyceno další dynodou (do velké míry závislé na geometrické konstrukci PM). Celkové účinnosti se pak pohybují v rozmezí 20 % až 40 %. Dalšími důležitými parametry fotonásobičů jsou časová odezva a energetické rozlišení. Tato rozlišení nám říkají to, jak rychle je fotonásobič schopen reagovat na dopadající fotony a jaký je nejmenší energetický rozdíl, který jsme pomocí fotonásobiče ještě schopni zaznamenat v tomto pořadí.

1.3 Vysokofrekvenční pohyb absorbátoru

Jak bylo v předchozí sekci ukázáno, tak Mössbauerovo spektrum v energetické doméně může nabývat tvarů singletu, dubletu, nebo sextetu v závislosti na hyperjemných interakcích. To je pravdou za předpokladu, že v případě dopplerovské modulace zářiče je absorbátor v klidu. V této kapitole se ovšem zaměříme na případ, kdy tomu tak není a absorbátor je vysokofrekvenčně modulován.

1.3.1 Spektrální komby

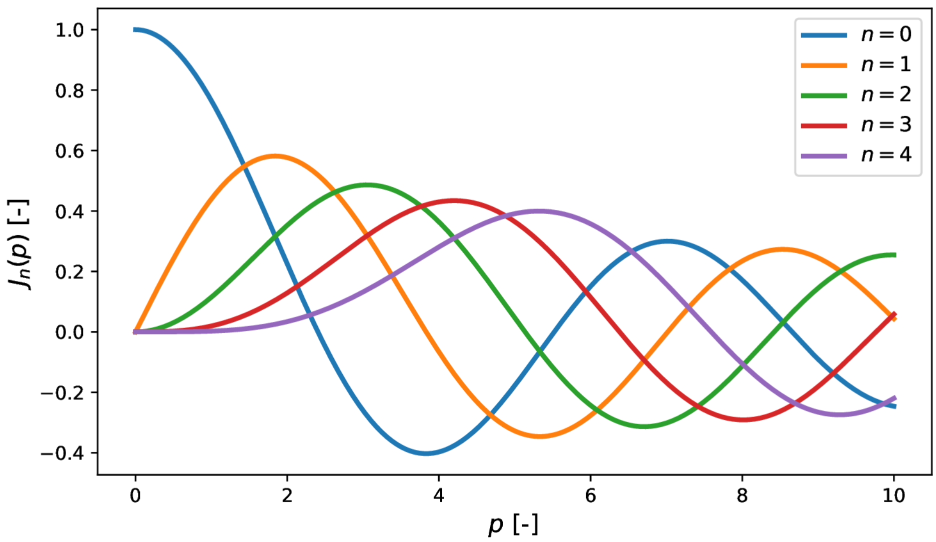
V případě vysokofrekvenční modulace v řádech MHz vznikají v Mössbauerovu spektru takzvané postranní komby[3] [11, 12]. Příchozí gama záření je v tomto případě během průletu absorbátorem přetvořeno do spektrálních kombů a následně opouští absorbátor. Popis generace těchto kombů pro homogenní vibrace absorbátoru (koherentní model [13]) nyní stručně nastíníme. Pohyb absorbátoru je možné popsat pomocí rovnice

$$z(t) = z_0 + R\sin(\Omega t), \tag{1.6}$$

kde z_0 je počáteční pozice absorbátoru, R amplituda pohybu a Ω úhlová frekvence pohybu ($\Omega = 2\pi f$). Elektrické pole vyzářeného 14.41 keV gama fotonu v laboratorní souřadné soustavě je popsáno vlnovou funkcí

$$E_\gamma(z,\tau) = E_0\Theta(\tau - z/c)e^{-i(\omega_\gamma+\Gamma_\gamma/(2\hbar))(\tau - z/c)+i\varphi_0}, \tag{1.7}$$

kde $\Theta(x)$ je Heavisidova funkce, $\tau = t - t_0$ prodleva emise fotonu oproti času t_0[4], Γ_γ šířka spektrální čáry gama fotonu, ω_γ úhlová frekvence gama fotonu a φ_0 fáze. Z pohledu vysokofrekvenčně modulovaných jader je tato vlnová funkce frekvenčně modulována a sestává ze superpozice spektrálních čar o frekvencích $\omega_\gamma \pm n\Omega$. Jednotlivé amplitudy a fáze těchto postranních čar jsou popsány modulačním indexem p, vystupujícím v Besselové funkci prvního druhu $J_n(p)$, kde n představuje danou postranní čáru [13]. Parametr p je definován jako $p = \frac{2\pi R}{\lambda}$, kde λ je vlnová délka gama fotonu. Besselovy funkce si lze prohlédnout na obrázku 1.8.



Obrázek 1.8: Tvary Besselových funkcí prvního druhu.

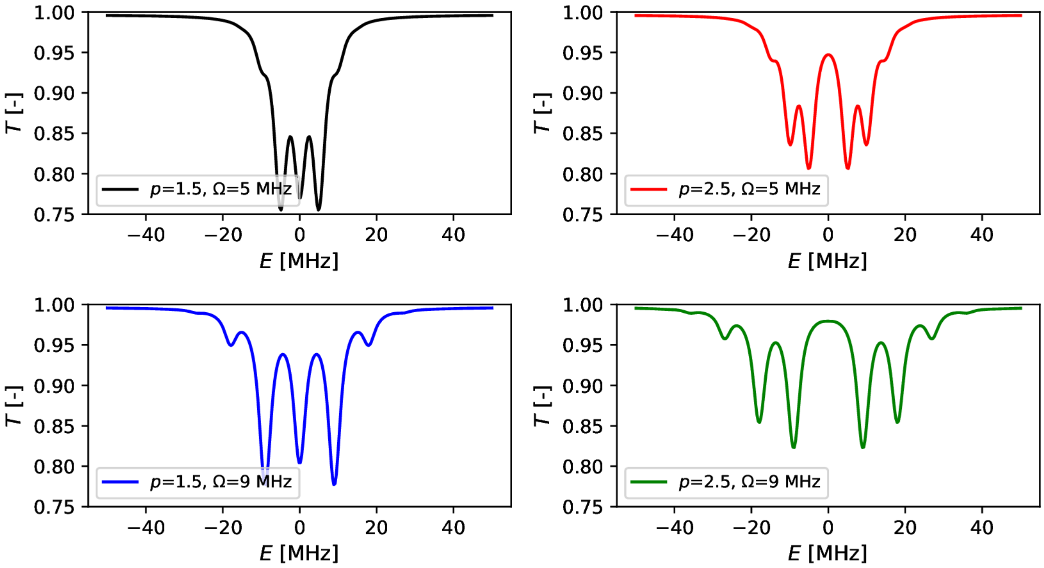
[3]Pro zjednodušení budeme dále v práci využívat terminologii pomocí označení „komb“ a „rozkombení“ spektra, přejatou z anglického označení „spectral comb“. Alternativou by tedy mohlo být i označení spektrální hřeben.

[4]Čas t_0 představuje vyzáření gama fotonu o energii 122.06 keV (vznik prvního excitovaného stavu ^{57}Fe).

Výsledné Mössbauerovo spektrum $S(\omega_\gamma)$ popsané za pomocí transmisního integrálu, které jsme popsaly výše, tedy bude nabývat tvaru

$$S(\omega_\gamma) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} J_n^2(p) S_{\mathrm{TI}_n}(\omega_\gamma), \tag{1.8}$$

kde index u $S_n(\omega_\gamma)$ reprezentuje posun spektrální čáry absorbátoru o $n\Omega$ [14]. Výraz $(\omega - \omega_\mathrm{a})$ v (1.5) tedy přechází na $(\omega - \omega_\mathrm{a} - n\Omega)$. Příklady rozkombených Mössbauerových spekter si lze prohlédnout na obrázku 1.9, kde vrchní sloupec představuje rozkombené spektrum za pomocí frekvence $\Omega = 5$ MHz a spodní za pomocí $\Omega = 9$ MHz s příslušnými hodnotami parametru p. Pro danou simulaci jsme volili efektivní tloušťku $d_\mathrm{eff} = 5$.



Obrázek 1.9: Simulovaná Mössbauerova spektra rozkombena pomocí vysokofrekvenčního pohybu absorbátoru.

Jak si lze povšimnout, tak jsou jednotky na horizontální ose v MHz místo $\mathrm{mm \cdot s^{-1}}$ [11]. Důvodem je snažší orientace, jelikož u spekter dochází ke štěpení čar, odpovídajícímu akustické modulaci vzájemného pohybu zářiče a absorbátoru. Převodní konstantou mezi těmito jednotkami je

$$1\ \mathrm{mm \cdot s^{-1}} = 11.615\ \mathrm{MHz}. \tag{1.9}$$

Tuto přepočetní konstantu můžeme získat tak, že v rovnici (1.2) dosadíme za ΔE výraz hf. Pak po úpravě získáváme výraz

$$f = \frac{E_0}{h}\frac{v}{c}, \tag{1.10}$$

kde za E_0 dosadíme hodnotu energie uvažovaného gama fotonu v jednotkách Joulů ($E_0 \cdot q$, kde q je elementární elektrický náboj) a za v dosadíme $1\ \mathrm{mm \cdot s^{-1}}$.

1.3.2 Koincidenční měření

Koincidenčním měřením rozumíme experimentální metodu, která poskytuje informaci o časovém rozdílu mezi událostmi v různých detektorech. V nukleární kvantové optice je tato technika využívána pro měření takzvaných „quantum beats“ (kvantových záznějů) [15, 16, 17], v závislostech intenzity gama záření na čase.

Časovou závislost intenzity gama záření lze získat tak, že rovnici (1.7) převedenou do soustavy pohybujícího absorbátoru

$$E_{\gamma\mathrm{m}}(\tau) = E_0\Theta[\tau - z_0/c - R\sin(\Omega t)/c]e^{-i[\omega_\gamma+\Gamma_\gamma/(2\hbar))(\tau - z_0/c - R\sin(\Omega t)/c+\varphi_0]}, \quad (1.11)$$

kde $R\sin(\Omega t)/c$ vyjadřuje harmonický pohyb absorbátoru kolem rovnovážné polohy, převedeme za pomocí Fourierovy transformace do frekvenční domény, kde výslednou komplexní amplitudu lze zapsat jako

$$E_{\gamma m}(\omega) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} E_{\gamma n}. \quad (1.12)$$

Jednotlivé frekvenční příspěvky v sumě 1.12 pak splňují

$$E_{\gamma n}(\omega) \propto \frac{J_n(p)e^{i(n\Omega t_0+\omega t_0+(\omega+n\Omega)z_0/c+\varphi_0)}}{\omega + n\Omega - \omega_\gamma + i\frac{\Gamma_\gamma}{2\hbar}}. \quad (1.13)$$

Ve frekvenční doméně komplexní amplitudu následně vynásobíme s komplexní funkcí absorbátoru $\widetilde{A}$, která může mít například pro singletový absorbátor tvar [18]

$$\widetilde{A}(\omega) = e^{-i\frac{d_{\mathrm{eff}}}{2}\frac{\Gamma_\gamma/(2\hbar)}{\omega-\omega_\mathrm{a}+i\Gamma_\gamma/(2\hbar)}}, \quad (1.14)$$

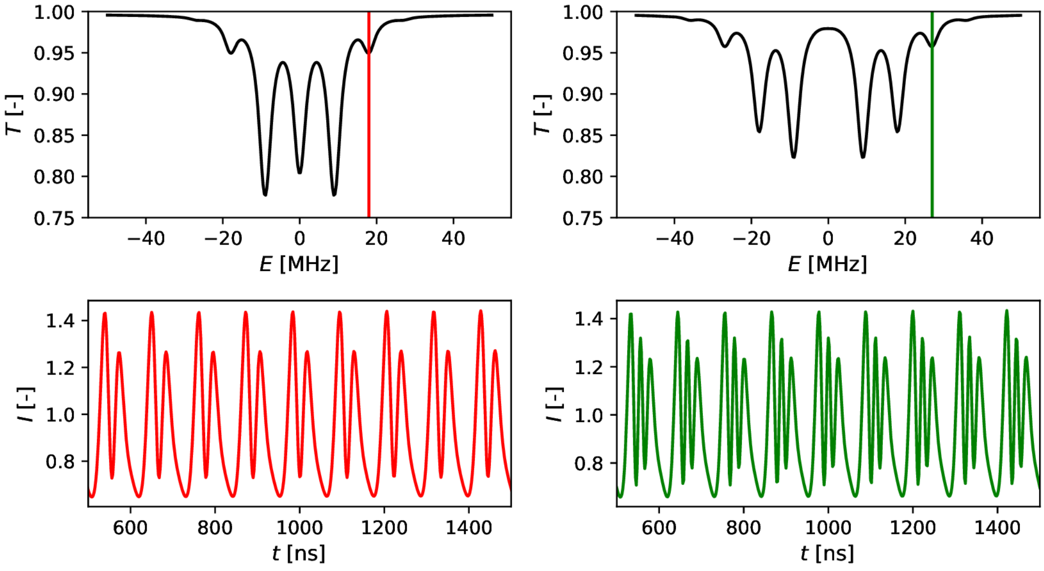
kde ω_a představuje energii nukleárního přechodu uvažovaného absorbátoru a zpětnou Fourierovou transformací se vrátíme do časové domény. Tak získáváme modulovanou vlnu E_{out} jejíž intenzita, kterou jsme schopni experimentálně měřit [19], je pak vyjádřena jako

$$I_{\mathrm{out}}(\tau) = E_{\mathrm{out}}(\tau)E_{\mathrm{out}}(\tau)^*. \quad (1.15)$$

Dále by bylo dobré zmínit, že v našich experimentech nevyužíváme dvou detektorů, kde jeden detekuje gama fotony o energii 122.06 keV (start koincidence) a druhý fotony o energii 14.41 keV (stop koincidence). Místo toho využíváme napěťových pulzů z generátoru funkcí, a tudíž je nutné intenzitu (1.15) středovat přes všechny hodnoty t_0

$$I(t) \propto \int_{-\infty}^{\infty} I_{\mathrm{out}}(\tau)\mathrm{d}t_0. \quad (1.16)$$

Na obrázku 1.10 je ukázáno, jak takováto koincidenční spektra vypadají, kde jsme pro simulaci využili rozkombení s frekvencí 9 MHz, se stejnými parametry jako na obrázku 1.9. Lze si povšimnout, že pro energii dopplerovské modulace laděnou do druhého kombu, má závislost intenzity na čase, podobu opakujících se dvojpulzů, zatím co pro energie laděné do třetího kombu, mají podobu trojpulzů.



Obrázek 1.10: Simulovaná koincidenční měření, kde horní grafy, odpovídají rozkombeným spektrům pro hodnoty 9 MHz z obrázku 1.9 a spodní grafy, odpovídají koincidenčním měřením pro stejné parametry a energie dopplerovské modulace, odpovídající svislým čarám na horních grafech.

V současné době je také experimentováno nejen s jednoduchým harmonickým pohybem absorbátoru, ale také se složitějšími profily pohybu, které umožňují generaci odlišných časových struktur, jako je například generace jednotlivých pulzů, nebo jiných složitějších závislostí.

1.3.3 Piezotransducer

Výše zmiňovaný vysokofrekvenční pohyb jsme uvažovali pouze pro absorbátor. Hlavním důvodem je, že je generace takovéhoto vysokofrekvenčního pohybu pro případ absorbátorové fólie mnohonásobně snažší, než v případě zářiče.

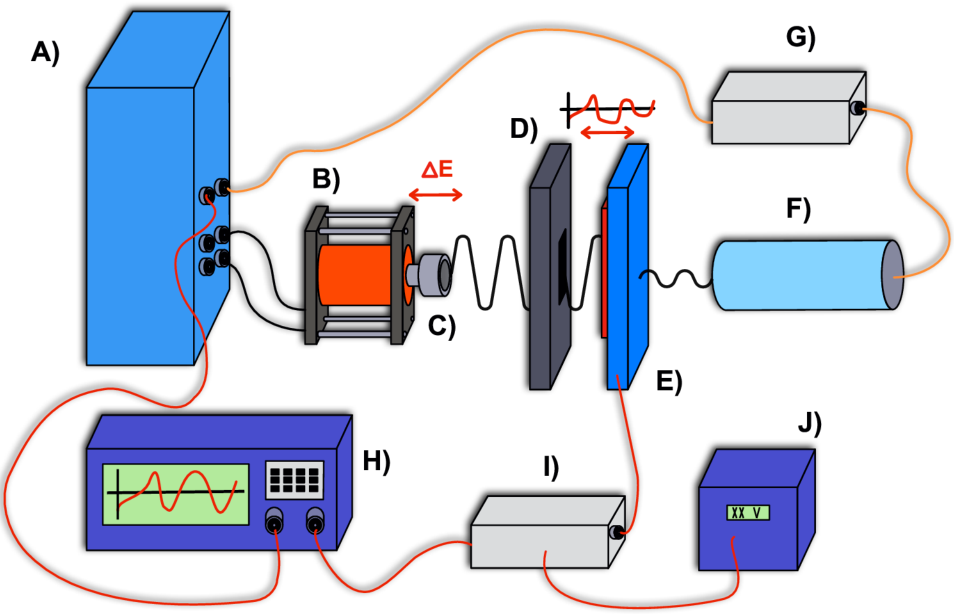
Ke generaci se využívají piezotransducery, pracující na principu piezoelektrického jevu. Tento jev lze využít ke generaci napětí, vlivem mechanického tlaku na piezokrystal, nebo naopak k deformaci tohoto krystalu, vlivem napětí, čehož využívají právě zmiňované piezotransducery.

Pokud je k takovémuto krystalu přiloženo napětí, tak vlivem asymetrické struktury dochází k přeuspořádání distribuce elektrického náboje a tedy i vzniku mechanické deformace. Tuto deformaci je následně možné ovlivňovat například velikostí působícího napětí, nebo volbou samotného piezomateriálu.

Hlavní výhodou piezotransducerů je vysoká přesnost řízení pohybu, rychlost a velký frekvenční rozsah.

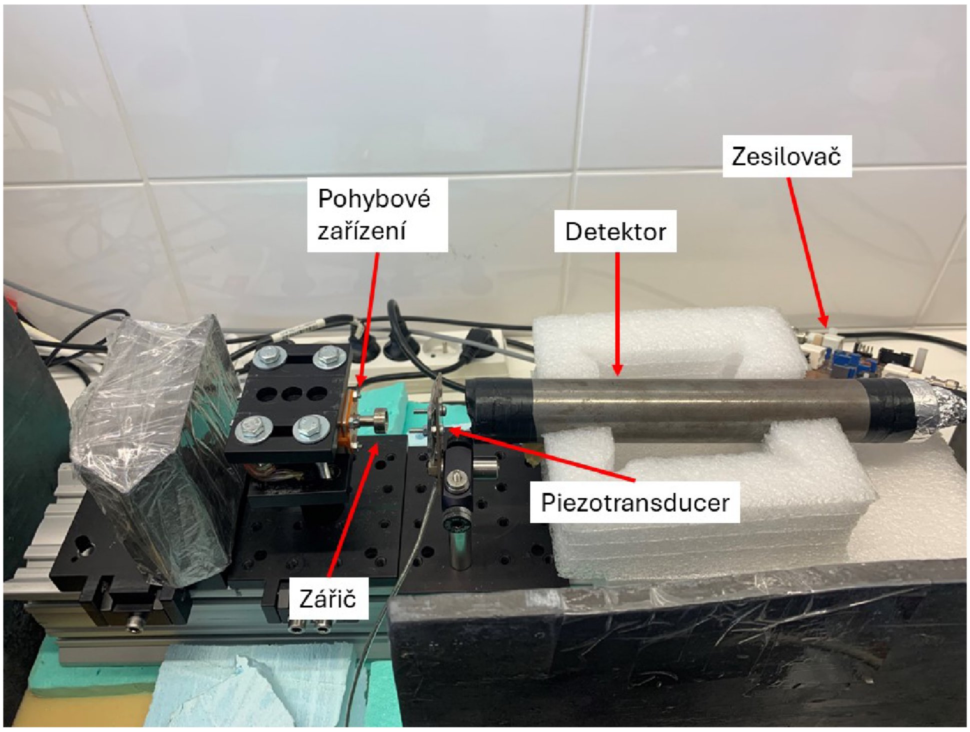
2 Experimentální část

V této kapitole se zaměříme na popis experimentálního vybavení a softwarových balíčků, jenž byly použity pro realizovaná měření. Softwarová část zahrnuje jak software pro ovládání spektrometru, tak software pro analýzu naměřených dat, který jsem upravoval pro specifické účely vyhodnocení časových měření.

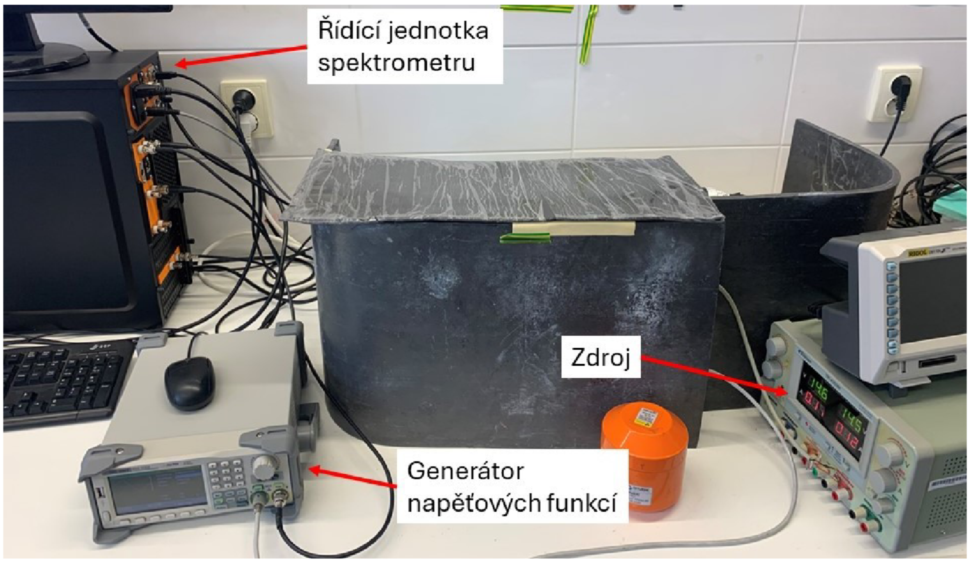


Obrázek 2.1: Schéma experimentální aparatury, kde jsou jednotlivé prvky následující, A) řídící jednotka spektrometru, B) pohybové zařízení, C) zářič, D) kolimátor, E) piezotransducer s absorbátorem, F) detektor, G) zesilovač, H) generátor funkcí, I) výkonový zesilovač, J) zdroj napětí.

Na obrázku 2.1 lze pozorovat zapojení sestavy v koincidenčním režimu, kdy jeden kanál je využíván pro registraci startovacího signálu z napěťového generátoru funkcí (dále jen generátor funkcí) a na druhý kanál je přiváděn signál z detektoru. Sestavu lze rozdělit do tří základních částí, jenž jsou na obrázku 2.1 barevně rozlišené (barvy vodičů). Fotony vzniklé deexcitací ^{57}Fe se od radioaktivního zářiče šíří do všech směrů. Pro odstínění nežádoucího záření, jenž neprochází absorbátorem, se využil kolimátor. Samotný absorbátor byl umístěn na piezoelementu, jenž byl za účelem generace γ optických časových signálů při měření rozvibrován pomocí harmonického signálu, pocházejícího z generátoru funkcí a dále zesíleného pomocí výkonového zesilovače. Fotony prošlé absorbátorem byly následně detekovány pomocí scintilačního detektoru. K zesílení signálu z detekcí byl využit lineární zesilovač (dále jen zesilovač). Na obrázku 2.2 a 2.3 lze dále vidět fotografii experimentální sestavy s jednotlivými komponentami.



Obrázek 2.2: Snímek používané experimentální aparatury.



Obrázek 2.3: Snímek používané experimentální aparatury odstíněné olověným stíněním.

2.1 Řídící jednotka spektrometru

Jednou z hlavních komponent experimentální aparatury je Mössbauerův spektrometr. Konkrétně se jednalo o zařízení, které je popsáno v [20] pro specifické potřeby v oblasti nukleárních kvantových experimentů. V této sekci bude proveden stručný popis obecných vlastností zařízení a následně se zaměříme na popsání funkcionality měření časových histogramů v koincidenčním režimu.

Jak již bylo zmíněno, tak běžné komerční spektrometry nejsou pro experimenty v oblasti nukleární kvantové optiky dostačující. Hlavním rozdílem jsou nároky nejen na měření v energii, ale také především na měření v čase.

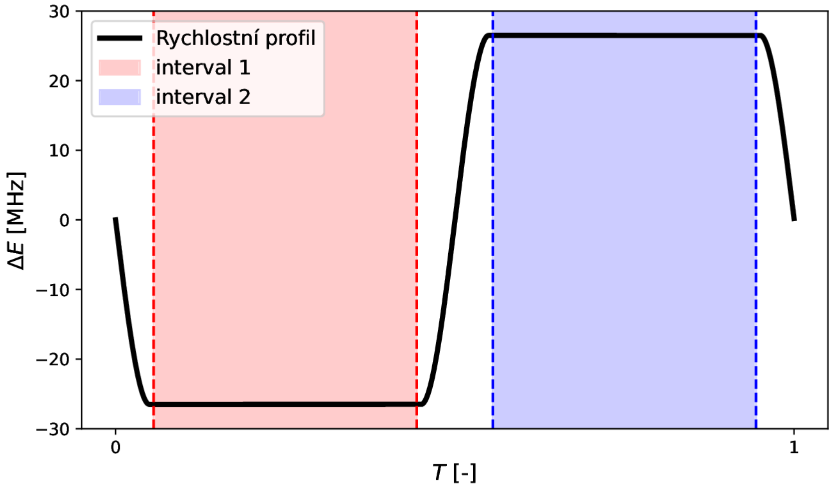
Spektrometr je konstruován s dvěma kanály, které jsou schopny současného řízení transducerů a zaznamenání příslušných detekovaných spekter. K řízení každého transduceru je využito dvou cívek, kde jedna obstarává pohyb samotného transduceru a druhá snímá rychlost tohoto pohybu za účelem korekce na požadovaný rychlostní profil, díky kterému lze docílit přesné dopplerovské modulace. Proud řídící cívky je kontinuálně upravován na základě zpětnovazebního signálu ze snímací cívky [21]. Zařízení pak nabízí hned několik přednastavených rychlostních profilů, jako jsou například trojúhelníkový, pilový a konstantní, u kterých stačí pouze zadat příslušné parametry jako například rozsah rychlostí. Alternativně lze také nahrát vlastní rychlostní profil ze souboru.

Zařízení nám umožňuje měření ve dvou hlavních módech. Prvním módem je měření konvenčních Mössbauerových spekter. Zde bychom mohli zdůraznit především možnost záznamu dvou spekter současně, případně měření v konfiguraci rezonančního spektrometru [22], kde je třeba současného pohybu jak zářiče, tak i detektoru.

Další mód je zaměřen na koincidenční měření. Zde je využito obou detekčních kanálů, které spektrometr nabízí, kde první kanál plní startovací funkci časově digitálního převodníku (TDC) a druhý naopak funkci pro zastavení. Dále řídící jednotka spektrometru nabízí dva druhy diskriminace signálu, kde jeden pracuje na bázi pulzního tvarového diskriminátoru (PSD) a druhý na bázi asynchronního amplitudového diskriminátoru (AAD) který byl využit v našich experimentech. Samotná posloupnost je pak taková, že je příchozí signál nejdříve zpracováván pomocí AAD a následně přechází na TDC.

Příchozí signál je tedy nejen zpracováván pomocí amplitudového diskriminátoru, ale zároveň také časového, jenž nám dává informaci o příletu detekovaného fotonu. Časový interval koincidenčního měření může být nastaven buď na 1024 ns nebo 2002 ns s příslušnými rozlišeními 250 ps a 500 ps.

Výsledkem koincidenčních měření jsou dva časové histogramy, které odpovídají dvěma nastavitelným intervalům rychlostního profilu transduceru, tedy každý histogram může mít rozdílnou fázi dopplerovské modulace. V našem případě měření v režimu konstantní rychlosti histogramy odpovídají právě intervalům, kde je daná rychlost konstantní, tak jak to je vyobrazeno na obrázku 2.4.



Obrázek 2.4: Příklad rychlostního profilu transduceru, kde zvýrazněné intervaly odpovídají jednotlivým časovým histogramům. Rychlosti (resp. příslušné dopplerovsky modulované energie) jsou uvedeny v jednotkach MHz. Horizontalni osa udává čas v rámci jedné periody T pohybu.

Zde se jedná o symetrický rychlostní profil, kde transducerem laděná energie ΔE odpovídá hodnotám ± 26.5 MHz. Tato symetrie však není nutností a řídící jednotka spektrometru umožňuje nastavení i pro dvě různé hodnoty ΔE.

2.2 Detektor

2.2.1 Scintilační materiál

V našich experimentech jsme užívali scintilačních detektorů, jejichž základem byl scintilační materiál YAP:Ce [23, 24]. Společně s NaI:Tl se jedná o nejpoužívanější scintilační materiály v oblasti Mössbauerovy spektroskopie. Vyznačuje se svou krátkou dobou scintilace 28 ns a světelnou výtěžností 25000 fotonů/MeV [10].

2.2.2 Fotonásobič

Fotonásobiče byly v průběhu experimentů použity dva, a to Hamamatsu R6094 s paticí C9028-01 a Hamamatsu R6427 se zdrojem vysokého napětí C9619-50 a paticí E2624-05. Jednotlivá specifika zařízení je možno dohledat v dokumentaci zařízení [25, 26][1].

Jednotlivé scintilační krystaly byly pomocí fotovodivé pasty připevněny na fotocitlivou plochu fotonásobiče (PM). Je nutno dávat pozor, aby nebyl krystal umístěn svou reflektivní ploškou k fotocitlivé katodě PM trubice, jelikož daná reflektivní

[1] Hamamatsu R6427 bylo zcela nové a tudíž ještě nebyly jednotlivé dynody „opáleny“, což může mít vliv na detekci v podobě například neustálené hodnoty časového rozlišení fotonásobiče.

ploška krystalu slouží k odrazu scintilačních fotonů a došlo by tedy ke snížení světelné výtěžnosti. Snímek detektoru si lze prohlédnout na obrázku 2.5. Jak lze pozorovat, tak je užitý fotonásobič z důvodu snížení magnetických vlivů umístěn ve feromagnetickém stínění, jenž zároveň společně s obmotáním alobalovou fólií zabraňuje parazitním světelným vlivům.

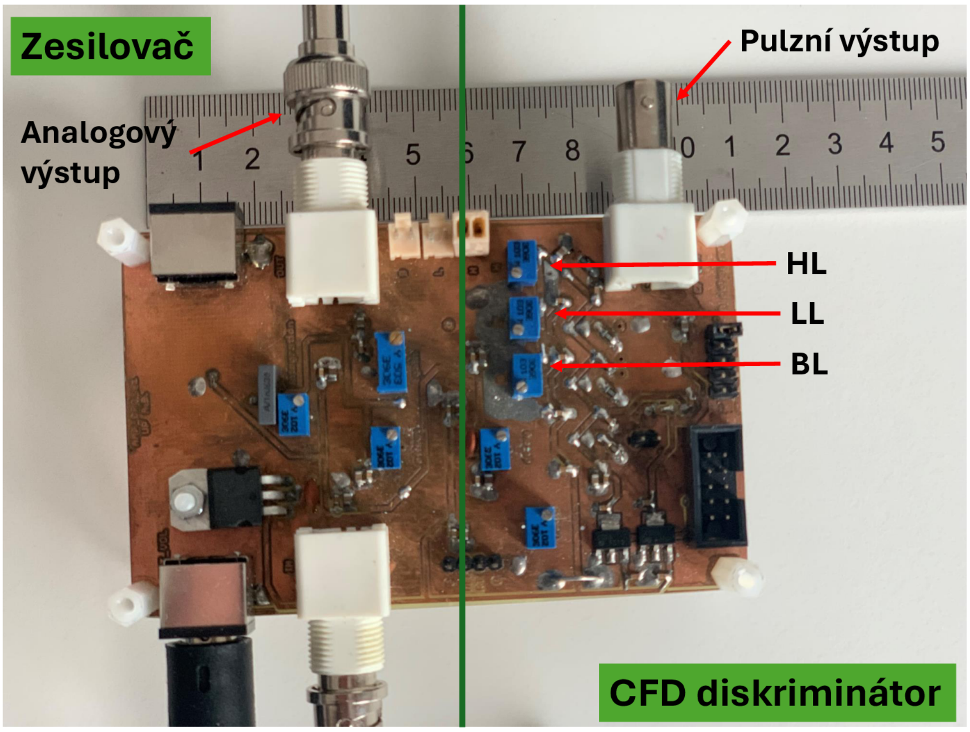
Obrázek 2.5: Snímek detektoru γ záření užitého během experimentů.

2.2.3 Zesilovač

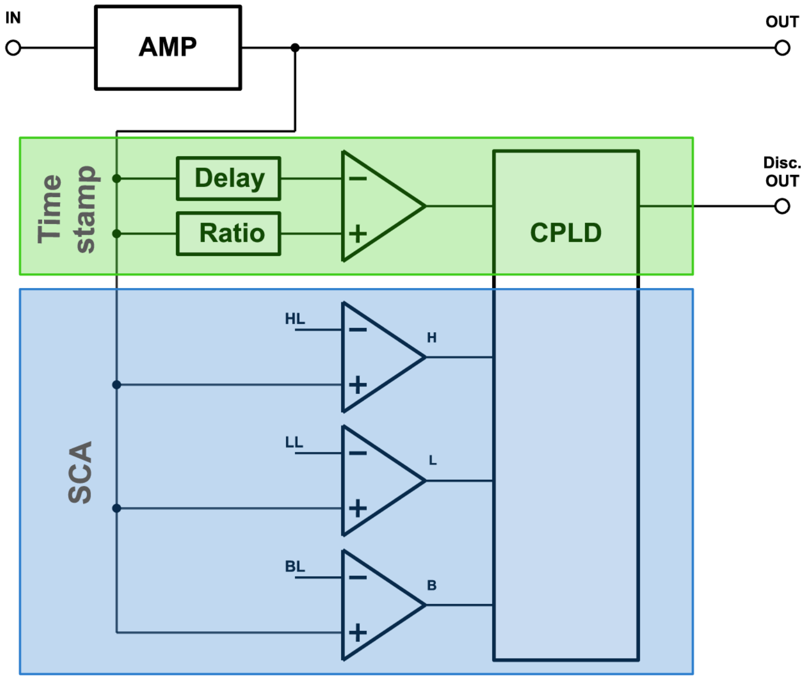
Nyní si uvedeme poslední komponentu detekční části aparatury, kterou je zesilovač výstupního signálu fotonásobiče. Bylo testováno větší množství zesilovačů, ale pro výsledné měření (viz kapitola 3.6), kde došlo k vyhodnocení časového rozlišení aparatury, byl použit jen jeden, který obsahoval CFD (angl. constant fraction discriminator). Důvodem pro tuto volbu byla časová stabilita, která je pro tuto práci velmi významná.

Jednalo se o zařízení, které neobsahovalo pouze zesilovač, ale také diskriminátor, na jehož výstupu se nacházel pulzní signál, posílán s definovanou časovou značkou. Důvodem této volby byla časová nestabilita, která způsobovala nekonzistenci výsledků jednotlivých měření, která by znemožnila vyhodnocení výsledného časového rozlišení experimentální aparatury, což bude dále diskutováno v sekci 3.6. Pro porovnání si ukážeme i výsledky, jež byly vyhodnoceny pouze pomocí zesilovače bez využití zmiňovaného diskriminátoru.

Samotné zařízení je zobrazeno na obrázku 2.6, kde si lze kromě potenciometrů k nastavení běžných parametrů jako zesílení, offset a integrace povšimnout i možnosti nastavení diskriminačního okna. To bylo realizováno tak, že se nejdříve změřilo spektrum pomocí jednokanálového analizátoru (SCA) v řídící jednotce spektrometru s analogovým výstupem zesilovače a po určení hladin se pomocí přepočtu 1 kanál = 0,61 mV nastavily na potenciometrech příslušné hodnoty baseline (BL), horní hranice diskriminátoru (HL) a dolní hranice diskriminátoru (LL). Po tomto nastavení jsme již mohli okno SCA řídící jednotky spektrometru rozšířit, aby byly detekovány veškeré pulzy vycházející z diskriminátoru. Blokové schéma daného zapojení si lze prohlédnout na obrázku 2.7.

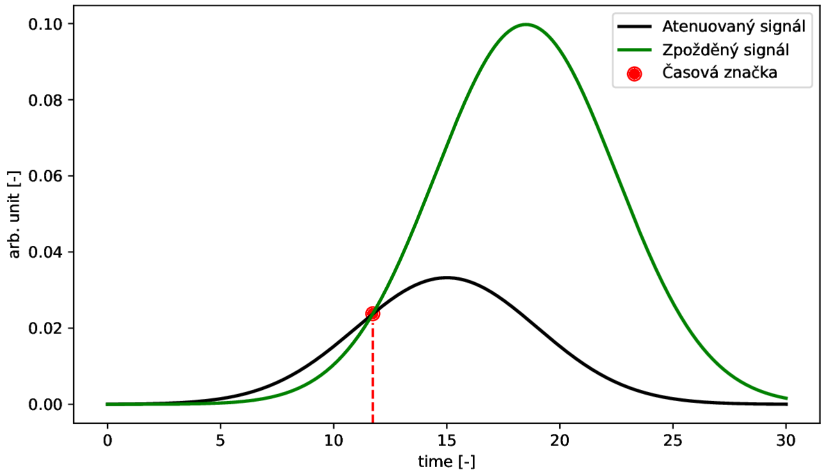


Obrázek 2.6: Snímek zesilovače s diskriminačním blokem užitý během experimentů.



Obrázek 2.7: Blokové schéma zesilovače s diskriminačním blokem.

Generace časové značky probíhala tak, že byl daný zesílený analogový signál rozdělen do dvou větví, kde na jedné byl signál atenuován (došlo tedy ke snížení jeho amplitudy) a na druhé zpožděn. Výsledná časová značka byla určena jako bod překřížení obou signálů jak je vyobrazeno na obrázku 2.8, kde jsme pro ilustraci využili Gaussovy funkce. Pokud jsou tvary příchozích pulzů přibližně zachovány, což je v našem případě splněno, tak CFD určuje časovou značku ve stejném místě tvaru pulzu. Změna časové značky je v našem případě tedy malá, a můžeme ji zanedbat.



Obrázek 2.8: Princip určení časové značky zesilovače, demonstrováno na simulovaných signálech popsaných Gaussovými funkcemi.

2.3 Zářič a pohybové zařízení

V experimentech jsme jako zdroje 14.41 keV rezonančních fotonů využívali zářiče s izotopem ^{57}Co v Rh matrici od firmy RITVERC [27]. Specifikaci použitého zářiče si lze prohlédnout v tabulce 2.1.

Tabulka 2.1: Informace o použitém zdroji gama záření.

Mössbauerův zdroj:	Cobalt-57
Aktivita:	50 mCi
Sériové číslo:	MCo7.124/62.20
Datum produkce:	12.10.2020

Dopočítaná aktivita zářiče se v průběhu experimentů během roku 2023 pohybovala v rozmezí od 6.3 mCi do 2.5 mCi.

Dále si popíšeme transducer, který zprostředkovává dopplerovskou modulaci. Jeho základem je feromagnetické jádro umístěné na 3D tištěných membránách, jehož pohyb je řízen pomocí zadávací cívky. Pro přesnou modulaci je užito také snímací cívky [28], která daný pohyb snímá a posílá zpět do řídící jednotky spektrometru, který následně provádí náležité korekce, aby byl výsledný rychlostní profil dodržen s co největší přesností [21].

2.4 Absorbce gama fotonů

V této části jsou popsány komponenty, které byly v experimentech využity k ovlivnění průchodu gama fotonů, včetně jejich rezonanční absorpce, kolimace a stínění.

K vysokofrekvenční modulaci jsme využili absorbátoru ve formě fólie z nerezové oceli o tloušťce 25 μm s přirozeným zastoupením ^{57}Fe (2.1 %). Tento absorbátor má spektrální profil singletu. Konkrétně se jedná o fólii z nerezové oceli typu 304 od firmy FischerSientific [29].

Ke kalibraci spektrometru jsme využili absorbátoru αFe [30] o tloušťce 25 μm.

Jak si lze na obrázku 2.1 povšimnout, tak se před samotným rezonančním absorbátorem, který je nalepen na piezotransducer, nachází také olověný kolimátor, jehož čtvercový otvor má přibližné rozměry 6×6 mm^2. Ten slouží k účinnému zabránění detekce záření, jenž by přes rezonanční absorbátor neprocházelo, a tedy zvýšení efektu měření. Navíc vysokofrekvenční pohyb piezoelementu může vykazovat nehomogenity výchylky. Ty by v našem případě díky zmenšení aktivní oblasti absorbátoru měly mít menší vliv.

Dále můžeme zmínit i hliníkovou fólii, která byla využita k odstínění fotonásobiče vůči rentgenovému záření v oblasti 6 keV a odstínění aparatury pomocí olověných plátů. To slouží k zvýšení radiační bezpečnosti tak, aby byla úroveň radiace v okruhu nad jeden metr na úrovni pozadí.

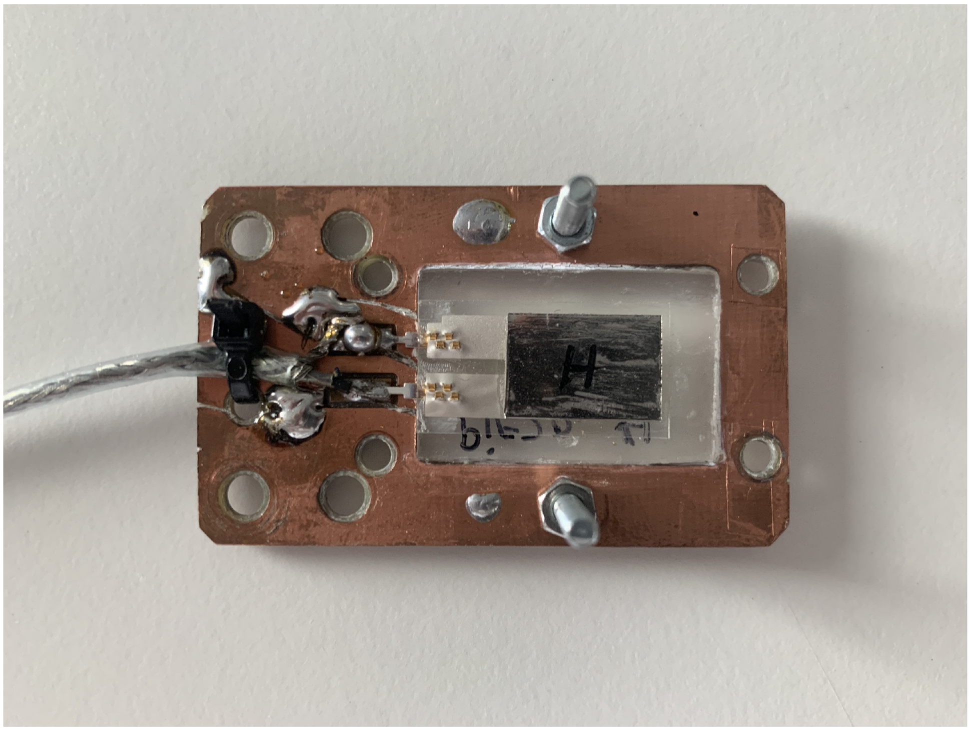
2.5 Vysokofrekvenční modulace

Zásadním rozdílem experimentů nukleární kvantové optiky oproti konvenční Mössbauerově spektroskopii je vysokofrekvenční modulace rezonančního absorbátoru, kdy amplituda vychýlení je srovnatelná s vlnovou délkou příslušných gama fotonů. Za tímto účelem jsme použili piezotransducer, na kterém byl rezonanční absorbátor nalepen [19]. Jednotlivé části si blíže popíšeme níže.

2.5.1 Piezotransducer

Základem použitého piezoelementu je organický polymer β-PVDF, který se obecně vyznačuje jak dobrým převodem elektrické energie na mechanickou a nízkou absorpci gama záření, tak dobrou odezvou na vysoké frekvence [31].

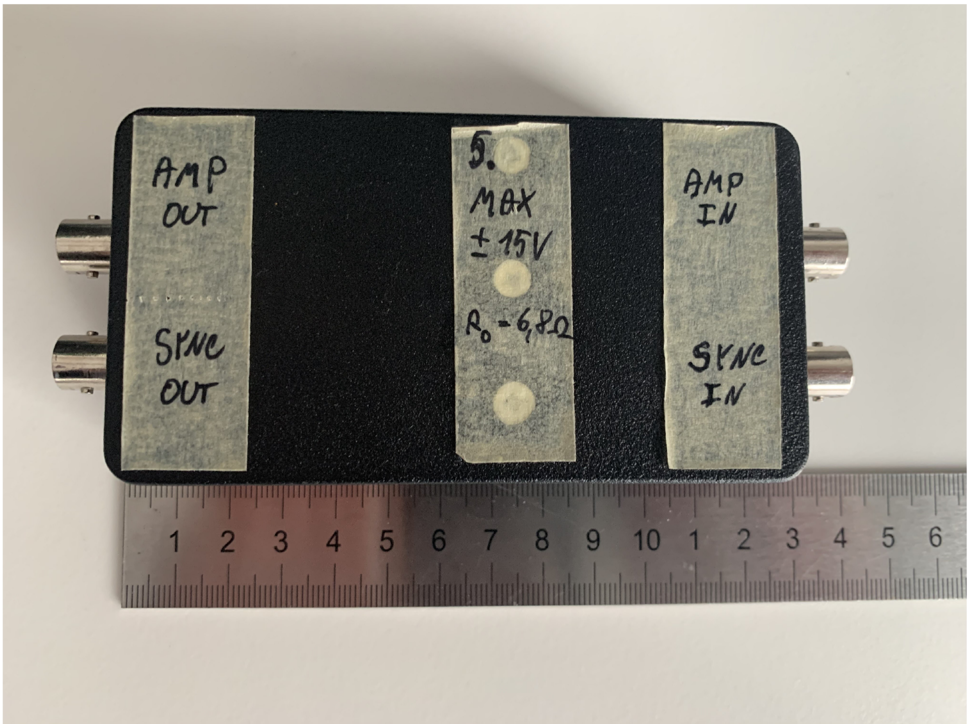
K tomuto piezomateriálu je následně nalepen rezonanční absorbátor popsaný v kapitole 2.4 a ty jsou nalepeny na plexiskelnou podložku. Zařízení si je možné prohlédnout na obrázku 2.9



Obrázek 2.9: Snímek použitého piezotransduceru.

2.5.2 Výkonový zesilovač

Z důvodu kapacitní zátěže a přenosu energie piezoelementu nemusí být daný generátor funkcí správně schopen řídit daný piezoelement. To je z důvodu, že piezoelement má nízkou impedanci a výstup generátoru funkcí disponuje 50Ω sérivou terminací. Vytváří tak dělič napětí, v jehož důsledku je napětí na piezoelementu menší, než kdybychom měli zdroj s menší výstupní impedancí. Proto byl využit výkonový zesilovač, který zajišťuje impedanční přizpůsobení. Námi použitý výkonový zesilovač [19] umožňuje výstupní napětí ±14 V s lineárním výstupním proudem do hodnoty 200 mA. Oproti aparatuře bez výkonového zesilovače jsme tedy schopni dosáhnout až o 40 % většího rozsahu napětí a také dodání výkonu, jenž umožňuje užití piezotransduceru v oblasti jeho fyzických limitů. Snímek tohoto zařízení si lze prohlédhout na obrázku 2.10.

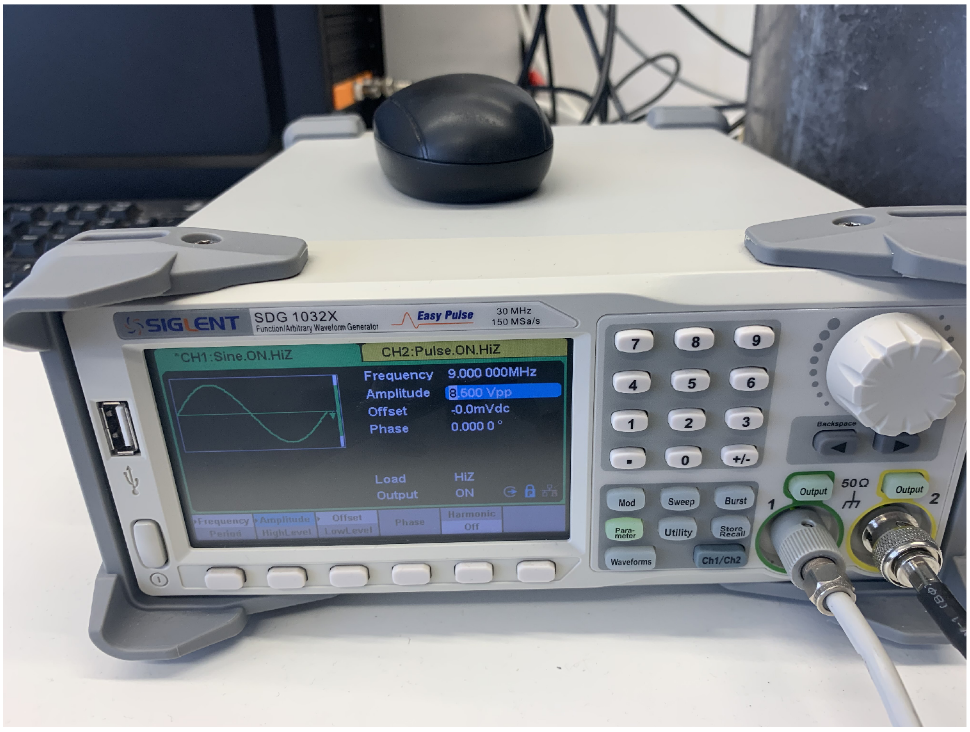


Obrázek 2.10: Snímek výkonového zesilovače.

2.5.3 Generátor funkcí

Jako generátoru startovacích pulzů a pohybového profilu piezoelementu bylo v našich experimentech užito zařízení Siglent SDG1032X [32]. Konkrétní specifikace lze dohledat v dokumentaci výrobce. Samotné zařízení je vyobrazeno na obrázku 2.11.

Startovací pulzy pro naše měření měly amplitudu 400 mV, offset 200 mV, náběžnou hranu 16.8 ns a šířku 32.6 ns. Pro řízení piezotransduceru byly použity pouze harmonické signály (funkce sinus), u nichž jsme pro různá měření měnili parametry frekvence a amplitudy.



Obrázek 2.11: Snímek generátoru funkcí Siglent SDG1032X.

2.6 Software

V této části jsou popsány použité softwarové balíčky, zahrnující jak software pro řízení spektrometru, tak vyhodnocovací software použitý pro fitování experimentálních dat. Vyhodnocovací software vycházel z již vytvořeného programu, který byl však pro účely této práce významně modifikován a zobecněn, viz dále.

2.6.1 Řízení spektrometru

K řízeni spektrometru a komunikaci s PC byl využit příslušný software OLTWINS, který umožňuje řízení měření jak v energetické, tak i v časové doméně. Software je možné využívat v operačním systému Windows nebo Linux. Podrobnější popis je možné nalézt na stránkách výrobce [33].

Ke skriptování sérií koincidenčních měření byly vytvořené skripty pro řízeni v prostředí Bash, jenž je kompatibilní se softwarem OLTWINS (verze 2.7.1), který samostatně takovéto nastavení neumožňuje. Aplikace vytvořených skriptů významně zjednodušila provádění experimentů.

2.6.2 Analýza koincidenčních experimentů

Při vývoji softwaru k fitování časových histogramů jsem vycházel z kódu uvedeného v disertační práci [19], jenž byl napsán za účelem simulací časových měření v oblasti nukleární kvantové optiky. V průběhu vývoje došlo hned k několika iteracím, kde každá obsahovala jisté vylepšení a rozlišný účel použití. Kód v příloze A je poslední iterací, jenž byla použita k vyhodnocení finálních výsledků v této práci. Všechny vytvořené iterace, které lze k daným experimentům využít, jsou k dispozici na uložišti v GitHub [34]. Jednotlivé módy jsou označovány jako „ModeX“, kde X udává danou iteraci.

Prvním módem je Mode0, jenž je původní simulační software z již dříve zmíněné práce. Mode1 a Mode2 umožňují vyhodnocení jednoho datového souboru, s fitováním jednoho ($+\Delta E$) a obou ($\pm\Delta E$) časových histogramů. Módy 3 a 4 slouží k separátnímu fitování všech souborů v cílové složce a stejně jako v případě Mode1 a Mode2 se liší tím, zda fitují pouze jeden nebo oba časové histogramy. Dále již všechny další módy fitují oba časové histogramy, tudíž tuto informaci nebudeme dále zmiňovat. Mode5 fituje všechny soubory v cílové složce současně. Důležité je ovšem zmínit, že jsou automaticky vybrány pouze soubory se souhlasnou (námi volenou) hodnotou nastaveného napětí na generátoru funkcí. Důvodem je souvislost napětí V_{pp} s parametrem p. Mode6 stejně jako Mode5 současně fituje sadu souborů, s tím rozdílem, že nyní nemusí mít jednotlivé datasety stejné hodnoty V_{pp}. Mode7 přináší vylepšení v podobě sdílené hodnoty časového rozlišení σ_{t} napříč všemi soubory. Posledním módem je Mode8, který přidává možnost uvolnění ΔE a níže si jej detailněji popíšeme.

Na začátku kódu v příloze A si lze povšimnout možnosti nastavení parametrů specifikujících vlastnosti absorbátoru (včetně d_{eff}), frekvenci piezotransduceru, výběr oblasti dat (na počátku simulace až do přibližně 320 ns jsou numerické artefakty), povolené hodnoty ΔE a V_{pp}, počáteční podmínky pro fitování časových histogramů, cestu k datovým souborům, cílové složky pro ukládání fitovaných dat s nafitovanými parametry, atd.

Následuje část se simulačním skriptem intenzity záření, který je konvoluován s normalizovanou Gaussovou křivkou, kde právě σ ve vyjádření

$$G(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}} \tag{2.1}$$

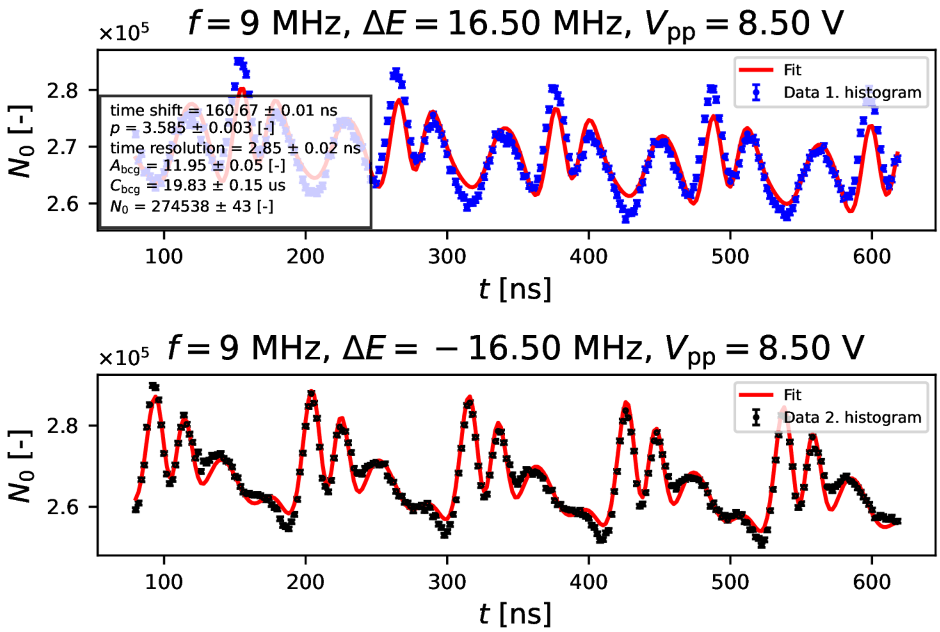
představuje časové rozlišení experimentální aparatury. Jak si lze povšimnout, tak funkce (2.1) musí být za účelem správné interpretace parametru počtu detekcí N_0 normalizována. Tvar fitovací funkce si můžeme popsat jako

$$F_{\mathrm{fit}} = G(t, \sigma_t) \otimes \left(\frac{A_{\mathrm{bcg}} + I(t, \delta_t)}{A_{\mathrm{bcg}} + 1} e^{-\frac{t}{C_{\mathrm{bcg}}}} \right) N_0, \tag{2.2}$$

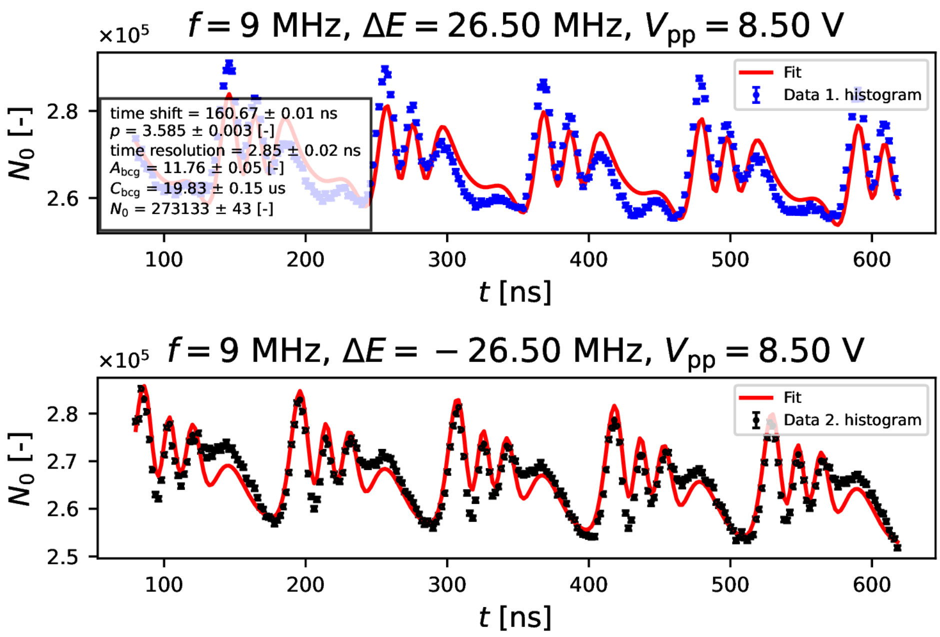
kde G je Gaussova funkce, $\otimes$ symbol konvoluce a I intenzita záření (1.16).

Dalšími kroky zpracování dat je výběr vyhodnocovaného intervalu dat a napojení jednotlivých (dvou a více) datasetů a přislušných funkcí. Důležitou součástí tohoto posledního úkonu je správné poskládání a kombinování jednotlivých parametrů. To je dále ukázano na příkladu čtyř naměřených datasetů (každý se skládá ze dvou větví pro kladnou a zápornou rychlost), které byly společně fitovány, viz obrázky 2.12–2.15. Konkrétně jediný parametr, jenž je sdílen všemi datasety, je parametr časového rozlišení σ_t, parametr vibrační amplitudy p, δ_t a C_{bcg} je sdílen pro datasety se shodně nastavenou hodnotou napětí generátoru funkcí V_{pp} a zbylé parametry odpovídají vždy kladné a záporné větvi laděných energií $\pm E$ jednotlivých datasetů.

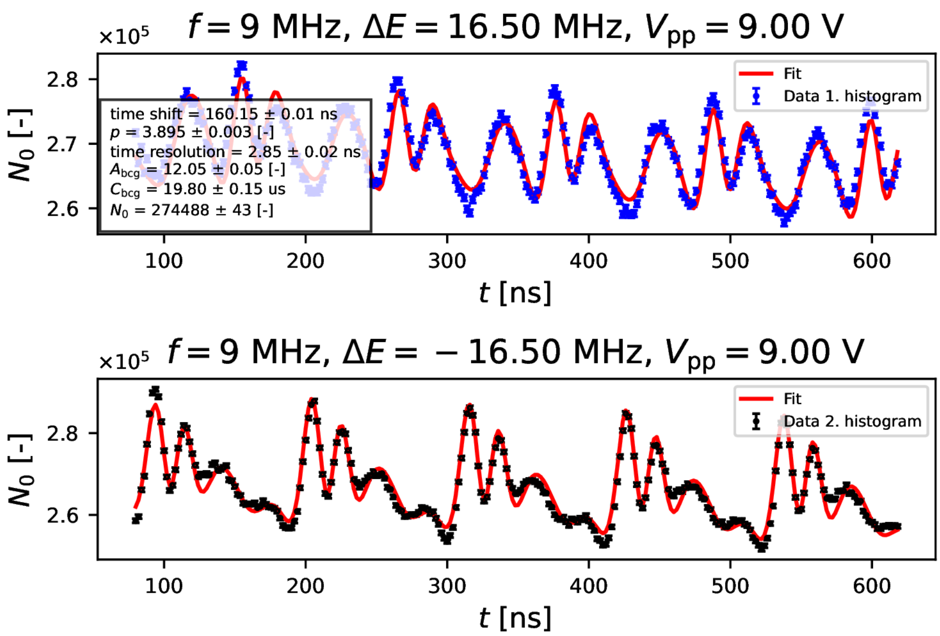
Dále se zde nachází samotná fitovací část, jíž předchází vytvoření počátečních odhadů, a horních a dolních mezí fitovaných parametrů. Následující část kódu obsahuje finální úpravy zpracovávaných dat a jejich uložení do výsledné podoby. Nahrání je opatřeno podmínkami pro výběr pouze žádoucích hodnot ΔE a V_{pp} z názvu souborů. Úplným závěrem je extrakce fitovaných parametrů, jenž jsou uloženy do textového souboru, aby bylo možné provádět snazší analýzu výsledků.



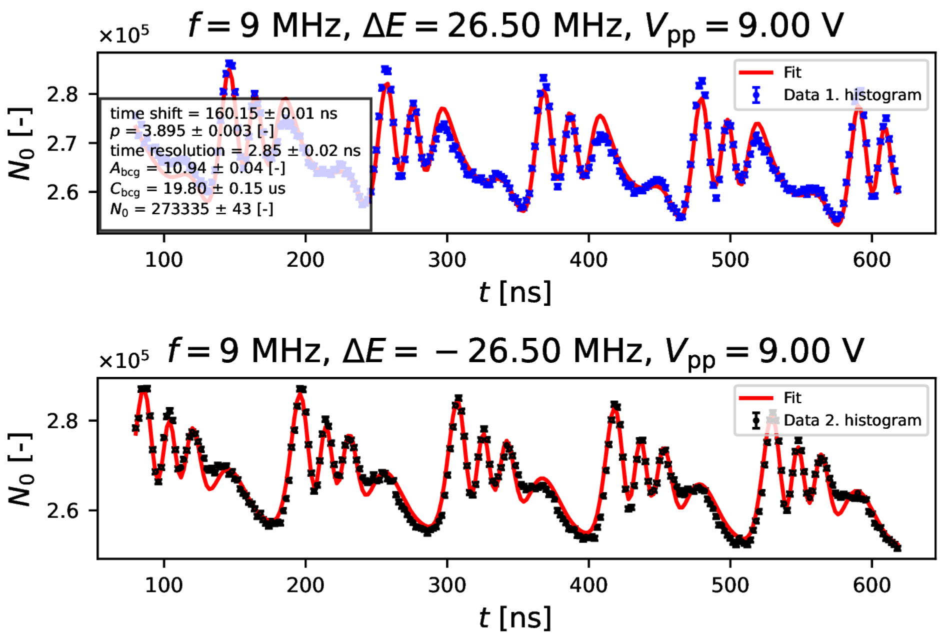
Obrázek 2.12: Výsledek fitování pro laděnou energii 16.5 MHz a napětí generátoru funkcí 8.5 Vpp.



Obrázek 2.13: Výsledek fitování pro laděnou energii 25.5 MHz a napětí generátoru funkcí 8.5 Vpp.



Obrázek 2.14: Výsledek fitování pro laděnou energii 16.5 MHz a napětí generátoru funkcí 9 Vpp.

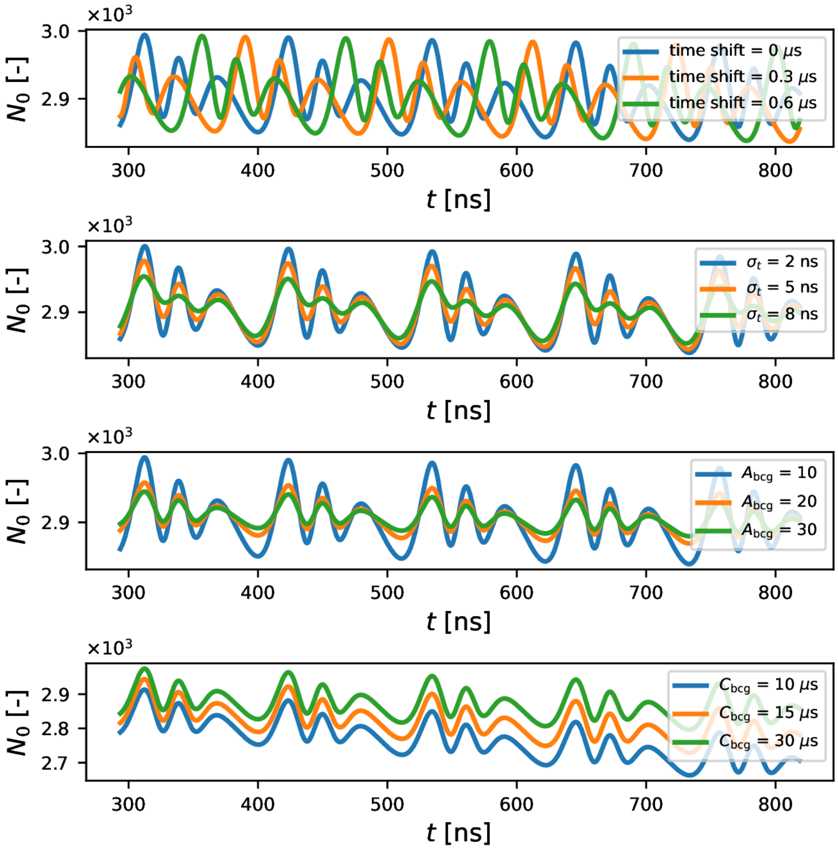


Obrázek 2.15: Výsledek fitování pro laděnou energii 25.5 MHz a napětí generátoru funkcí 9 Vpp.

Fitované parametry na obrázcích 2.12–2.15 jsou popsány v tabulce 2.2 a jejich vliv si lze prohlédnout na simulovaných časových závislostech na obrázku 2.16, kde jsme volili frekvenci piezotransduceru 9 MHz, $\Delta E = 27$ MHz a parametr $p = 2$ (vliv parametru p je vysvětlen v kapitole 1.3.1, a proto si jej zde uvádět nebudeme). Výchozí parametry, jenž zrovna nejsou variovány, jsou nastaveny na hodnoty time shift $= 0$ μs, $\sigma_t = 3$ ns, $A_{\mathrm{bcg}} = 10$ a $C_{\mathrm{bcg}} = 80$ μs. Vliv parametru počtu detekcí N_0 je triviální, a tudíž jej také nebudeme řešit.

Tabulka 2.2: Fitované parametry.

time shift (δ_t)	Časový posun
p	Vibrační amplituda
time resolution (σ_t)	Časové rozlišení aparatury
A_{bcg}	Amplituda pozadí
C_{bcg}	Konstanta exponenciály pozadí
N_0	Počet detekcí



Obrázek 2.16: Názorné zobrazení vlivu parametrů fitační funkce (2.2).

3 Výsledky a diskuze

Po teoretickém úvodu (kapitola 1) a seznámení se s použitým vybavením (kapitola 2) se nyní můžeme přesunout k samotným měřením a jejich výsledkům. Měření zde budou seřazena tak, jak by měla být chronologicky prováděna (více v sekci 3.7). První dvě sekce jsou zaměřeny na nastavení spektrometru a získání potřebných parametrů k fitování koincidenčních měření, samotná problematika časového rozlišení je pak popsána v kapitole 3.3.

3.1 Kalibrace spektrometru

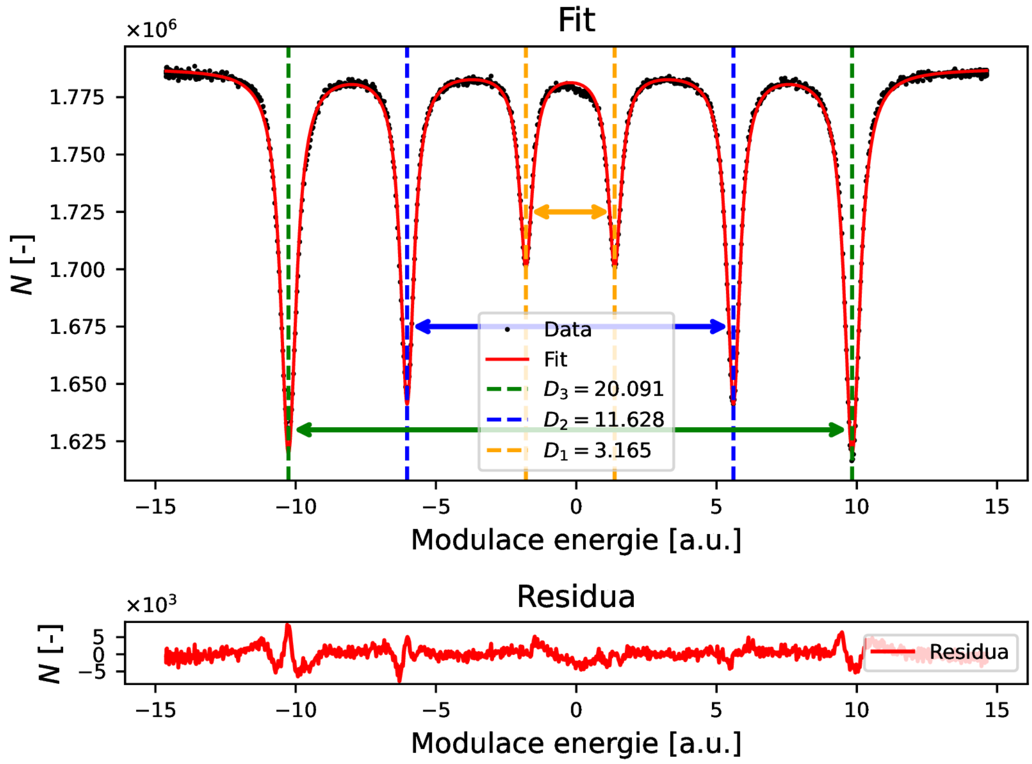
Jeden z prvních úkonů, jenž je nutno provést před začátkem experimentů v oblasti Mössbauerovy spektroskopie, je kalibrace rychlostního rozsahu spektrometru. Ta zahrnuje změření spektra se známou spektrální strukturou a následné určení kalibrační konstanty K. Tato kalibrační konstanta je následně zadána do softwaru spektrometru a zaručuje získání spekter s odpovídajícími hodnotami rychlostí dopplerovské modulace (přiřadí jednotlivým bodům spektra v relativních jednotkách spektrometru [a.u.] odpovídající rychlosti dopplerovské modulace)[1].

My jsme pro kalibraci využili αFe, jehož rozdíly pozic (D_1, D_2 a D_3) absorbčních čar rozštěpeného spektra jsou definované jako podíl $D_1 = 1.677$ mm·s^{-1}, $D_2 = 6.167$ mm·s^{-1} a $D_3 = 10.657$ mm·s^{-1} [5]. Kalibrační konstantu pak získáváme jako $K_i = D_i/L_i$, kde L_i je vzdálenost absorbčních píků v kanálech (i =1, 2, 3).

Při měření kalibrační konstanty jsme nejdříve náležitě natavili spektrometr, což zahrnovalo nastavení zesílení výstupního signálu fotonásobiče a nastavení hladin MCA tak, aby odpovídaly pulzům detekcí 14.41 keV fotonů. Tyto náležitosti již nebudou v textu dále zmiňovány. Následně byl αFe absorbátor upevněn ke statickému detektoru (stínící trubici PM). Když byla aparatura uvedena do náležitého geometrického rozložení, tak pouze zbývalo nastavit rychlostní profil transduceru a změřit kalibrační spektrum.

Naměřené a nafitované kalibrační spekrum si lze prohlédnout na obrázku 3.1, kde na vertikální ose vidíme počet detekcí N pro jednotlivé kanály spektrometru. Výslednou kalibrační konstantu jsme určili jako průměrnou hodnotu K_i, která nabývá hodnoty 0.5302 pro mm·s^{-1}, nebo 6.1593 pro jednotky MHz.

[1] V mössbauerovských experimentech bývá konvenčně součástí kalibrace i vztažení nulového bodu rychlostní osy ke kanálu symetrie kalibračního spektra (tj. v našem případě nulový isomerní posun vzhledem k αFe). V této práci tento krok proveden není a nulová hodnota ve spektru je vztažena k nulové rychlosti zářiče.



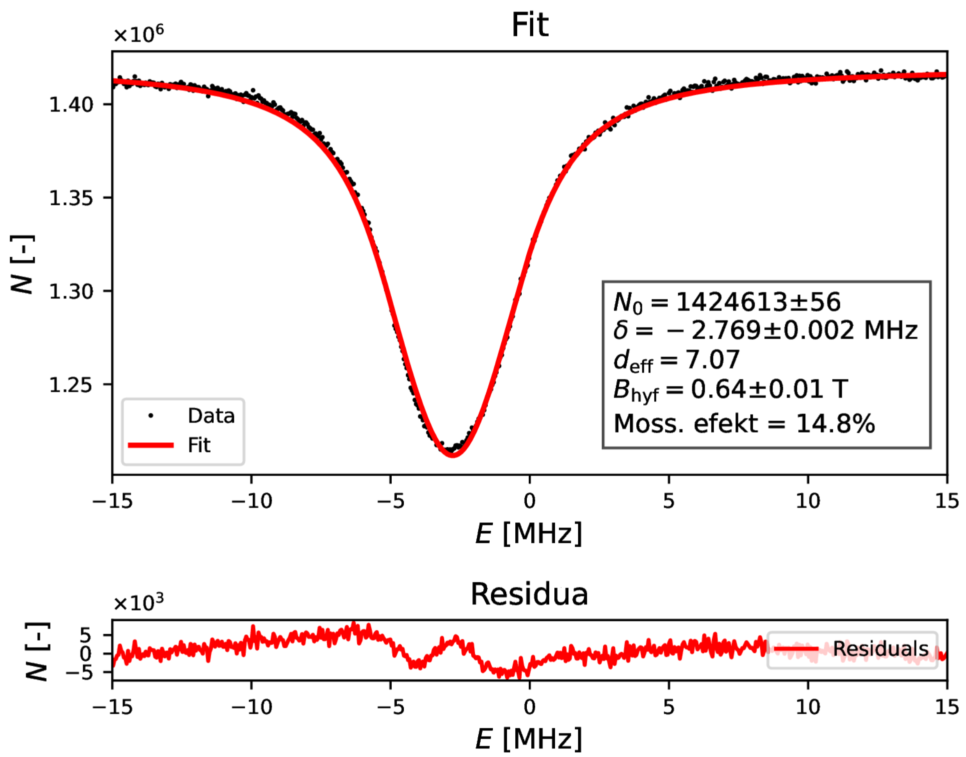
Obrázek 3.1: Kalibrační spektrum αFe.

3.2 Charakterizace absorbátoru

Dále bylo před začátkem koincidenčních experimentů třeba určit parametry užívaného absorbátoru, který vykonává vysokofrekvenční pohyb. Mezi tyto parametry patří například efektivní tloušťka d_{eff}, izomerní posun δ, jenž zde bereme jako posun spektrální čáry vůči nulové rychlosti[2] a hyperjemné magnetické pole B_{hyf}, popisující rozšíření spektrální čáry. V našich experimentech jsme měřili pouze hodnotu izomerního posunu a hyperjemného pole. Hodnota efektivní tloušťky byla převzata z přechozích měření za pomocí konfigurace rezonančního spektrometru, jenž nám danou hodnotu d_{eff} umožňuje získat spolehlivěji, než za pomocí fitování transmisního integrálu. Pro další měření budeme tedy pracovat s hodnotou $d_{\text{eff}} = 7.07$.

Při měření transmisního spektra jsme aparaturu uvedli do stavu tak, jak je uvedeno na obrázku 2.1. Absorbátorem nalepeném na piezoelementu nebylo v průběhu měření vibrováno (nevyužili jsme generátoru funkcí). Nastavený rychlostní profil transduceru (trojúhelníkový) a jeho meze budeme uvádět v jednotkách MHz. Jednotky MHz byly voleny z důvodu následného usnadnění výpočtů a vyvarování se následné nutnosti převodů mm$\cdot$s^{-1} na MHz. Převodní konstanta je 1 mm $\cdot$ s^{-1} = 11.615 MHz. Výsledný fit naměřeného spektra si můžeme prohlédnout na obrázku 3.2.

[2]Přestože nejsou pozice spektrálních čar vztaženy k referenci (αFe), tak pro zjednodušení budeme pro tuto veličinu dále používat toto konvenční označení.



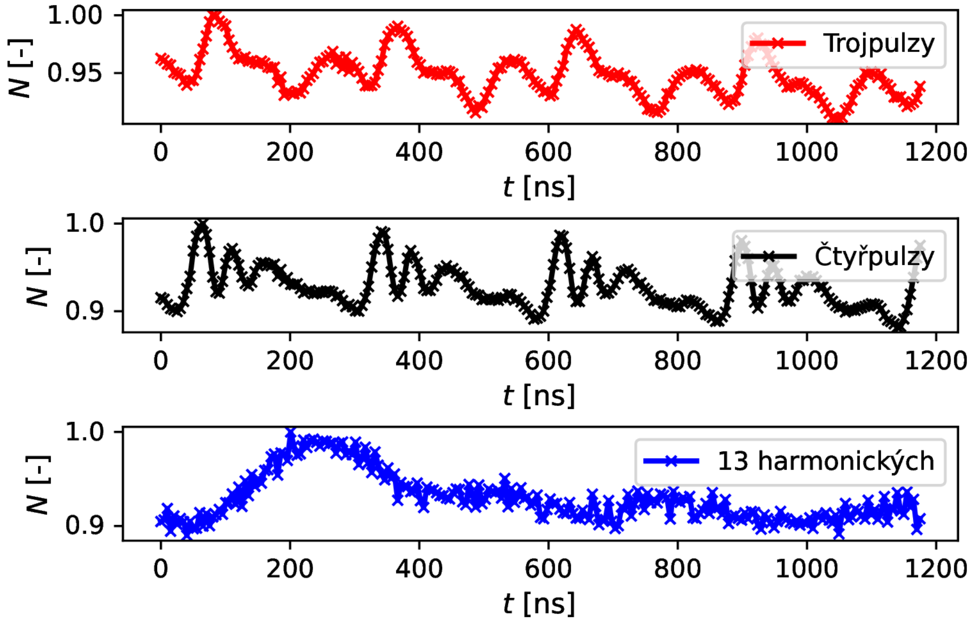
Obrázek 3.2: Výsledná data a fit transmisního spektra nevibrujícího absorbátoru.

Fitování naměřených dat bylo provedeno za pomocí transmisního integrálu, kdy byl fixován parametr d_{eff}. Jak je z výsledku fitování vidět, tak izomerní posun nabývá hodnoty $\delta = -2.77$ MHz. Tato hodnota je následně společně s parametrem $B_{\text{hyf}} = 0.64$ T využívána ve vytvořeném Pythonovském kódu, jenž je určen k fitování časových histogramů koincidenčního měření.

3.3 Výběr pracovní oblasti měření

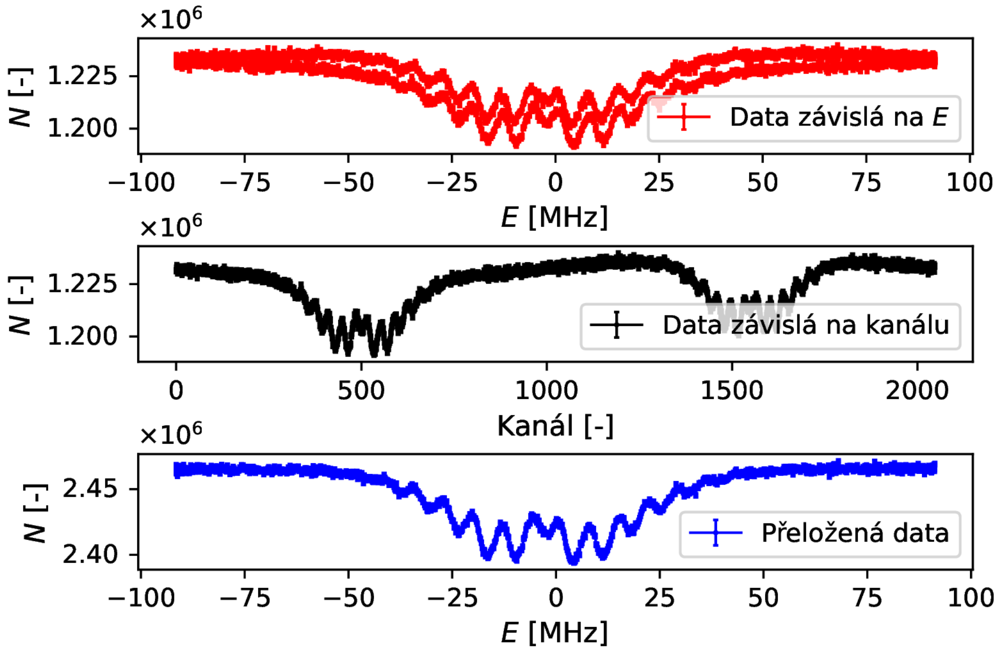
Výběrem pracovní oblasti měření rozumíme zvolení frekcence a napětí V_{pp} signálu generátoru funkcí, jenž řídí piezotransducer a volbu intervalu transducerem dopplerovsky laděných energií. V experimentech používáme harmonické signály, díky kterým získáváme poměrně jednoduché časové struktury v podobě opakujících se shluků pulzů, na kterých je snazší určení časového rozlišení, než kdybychom využili složitějších signálů složených z více harmonických. To by vyžadovaly zavedení dalších parametrů do procesu generování simulační funkce, jako jsou například amplitudy jednotlivých harmonických.

Srovnání časové struktury pro jednoduchý harmonický signál a signál složen z více harmonických si lze prohlédnout na obrázku 3.3, kde nahoře máme trojpulzní časovou strukturu pro jednoduchý harmonický signál, uprostřed čtyřpulzní časovou strukturu pro jednoduchý harmonický signál a dole se nachází časová struktura pro signál jenž je složen z třinácti harmonických. Zde je nutno dodat, že v posledním případě se jedná pouze o ukázkový příklad a lze generovat celou řadu složitých koincidenčních struktur, v závislosti na parametrech neharmonického signálu generátoru funkcí.

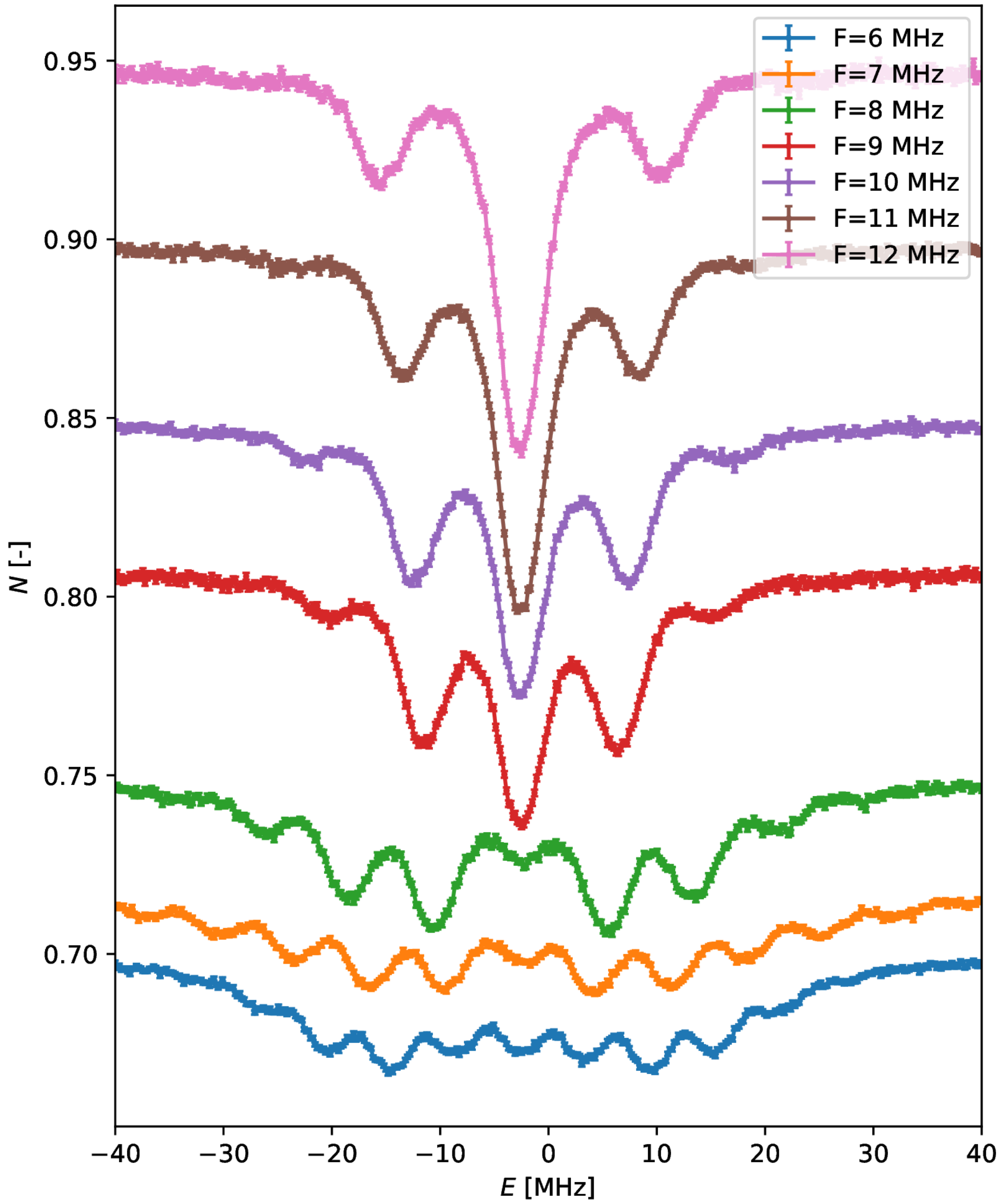


Obrázek 3.3: Srovnání časových struktur pro sinusový signál a signál složen z více harmonických, kde dva horní grafy reprezentují časové struktury, generované za pomocí funkce s jednou harmonickou a spodní reprezentuje strukturu generovanou za pomocí třinácti harmonických.

Jako první se zaměříme na volbu frekvence piezotransduceru. Zde jsme provedli sérii měření s postupně se navyšující frekvencí, jejíž výsledky si lze prohlédnout na obrázku 3.5. Spektra byla zpracována tak, že jsme pro naměřené spektrum, jenž má dvě symetrické větve, nalezli pomocí maxima autokorelační funkce, optimální bod přeložení a náležitě dané větve sečetli. Díky této metodě tedy získáváme lepší statistiku a také přehlednější zobrazení. Tato procedura je zobrazena na obrázku 3.4, kde na horním grafu je naměřené spektrum v závislosti na laděné energii, na prostředním je spektrum v závislosti na kanálu a v posledním je již výsledné přeložené spektrum.



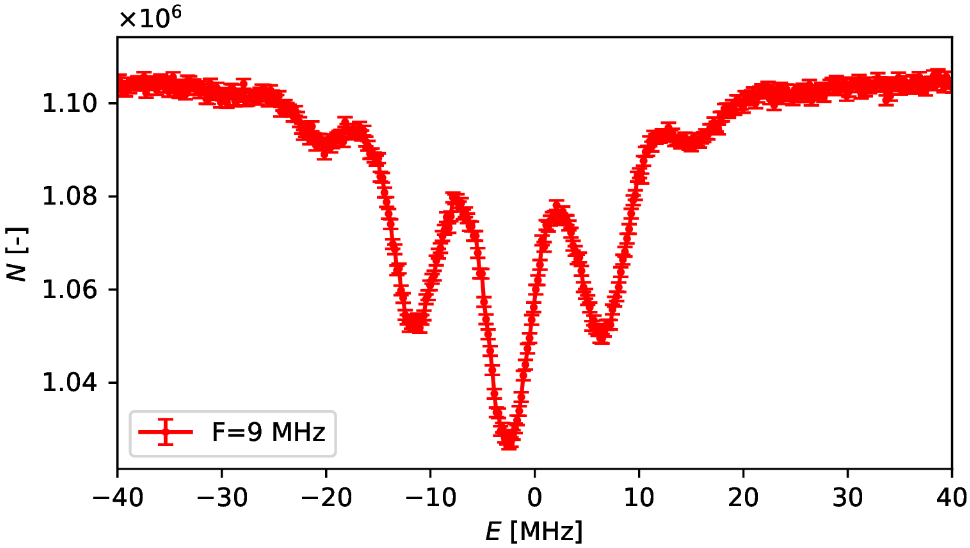
Obrázek 3.4: Procedura přeložení spekter.



Obrázek 3.5: Rozkombené spektra pro frekvence 6–12 MHz.

Spektra byla měřena pro hodnotu 4 V_{pp} na generátoru funkcí. Dále si lze povšimnout, že rezonanční frekvence daného piezoelementu se bude nacházet právě v okolí 7 MHz, kde je dané spektrum nejvíce rozkombeno (tedy vibrační amplidudа p nabývá nejvyšší hodnoty). Z výsledků na obrázku 3.5 tedy také vyplývá, že mezi mírou rozkombení a frekvencí není monotonní závislost.

Na základě těchto měření jsme následně volili frekcenci 9 MHz, jenž má pro druhou vedlejší spektrální čáru nejvýraznější absorbční čáru. To nás zajímá převážně z důvodu, že v případě ladění energie do oblasti druhého kombu získáváme časové struktury, jenž mají tvar dvoj- až čtyřpulzů. Právě tyto struktury se pro určení časového rozlišení jeví jako nejlepší. Samotné spektrum pro 9 MHz si pak lze prohlédnout na obrázku 3.6.



Obrázek 3.6: Rozkombené spektrum pro frekvenci 9 MHz.

3.4 Měření stability v čase

Jedním ze zásadních kriterií pro určení časového rozlišení experimentální sestavy je stabilita a opakovatelnost měření časových histogramů detekcí rezonančních gama fotonů. Důvodem je, že námi volená metodika vyhodnocení časového rozlišení aparatury je založena na kombinaci několika měření s rozdílně nastavenými parametry, které jsou prováděny v po sobě jdoucích sériích měření, a tak by i jedno měření výrazně ovlivněno vnějšími vlivy, mohlo mít značný vliv a zkreslit výslednou hodnotu časového rozlišení aparatury.

V průběhu experimentů bylo zjištěno, že při opakovaných měřeních se stejnými počátečními parametry jako jsou ΔE, V_{pp}, atd., se výsledky neshodují. Konkrétně se jednalo o p parametr a parametr časového rozlišení σ_t, jenž je hlavním předmětem této práce. Prvotní hypotézou byl vliv teploty, který ovlivňoval elektronické komponenty, a tak i samotné výsledky. Na základě této hypotézy bylo provedeno několik sérií měření.

Jako první jsme provedli porovnání měření s různými nastavenými napětími na generátoru funkcí. Samotný piezoelement generuje poměrně značné množství tepla, které se mění se změnou napětí. Bylo tedy ověřeno, zda teplotní stabilita nesouvisí s hodnotou napětí V_{pp} v důsledku změny stability podmínek v blízkosti piezoelementu při změně generovaného tepla.

Po vyhodnocení bylo zjištěno, že velikost napětí generátoru funkcí nejspíše vliv mít bude, avšak nejedná se o dostatečné potlačení, aby šly výsledky považovat za časově (teplotně) nezávislé (série měření 6 V_{pp} a 8.5 V_{pp} na obrázku 3.7). Další série měření byla provedena za podmínek, kdy byla teplota v místnosti za pomocí klimatizace alespoň částečně kontrolována (data 8.5 V_{pp} AC na obrázku 3.7). V tomto případě již lze pozorovat znatelné zlepšení stability v čase.

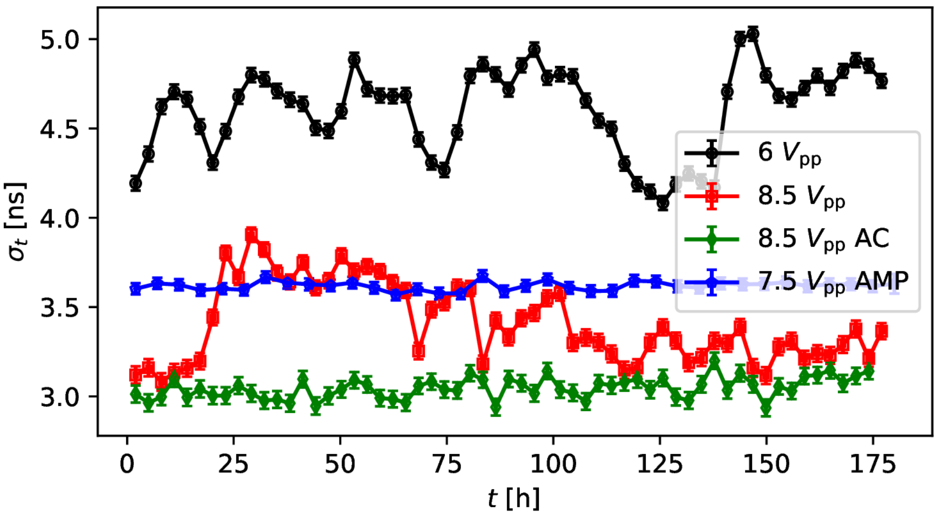
Jednou z možností redukce fluktuací výsledků měření je tedy stabilizace vnějších podmínek (teploty) v oblasti experimentální sestavy. Pro dosažení ještě vyšší stability měření bylo dále využito Zesilovače s diskriminátorem CFD popsaného v kapitole 2.2.3. Po této změně jsme již dosáhli dostačujících hodnot, kde má směrodatná odchylka série měření nižší hodnoty, než průměr nejistot fitovaných parametrů jednotlivých měření časového rozlišení σ_t. Toto porovnání hodnot si lze prohlédnout v tabulce 3.1. Sérii tohoto měření si lze opět prohlédnout na obrázku 3.7 (jako 7.5 V_{pp} AMP).

	6 V_{pp}	8.5 V_{pp}	8.5 V_{pp} AC	7.5 V_{pp} AMP
průměr nejistot [ns]	0.039	0.045	0.046	0.033
směrodatná odchylka [ns]	0.245	0.218	0.059	0.025

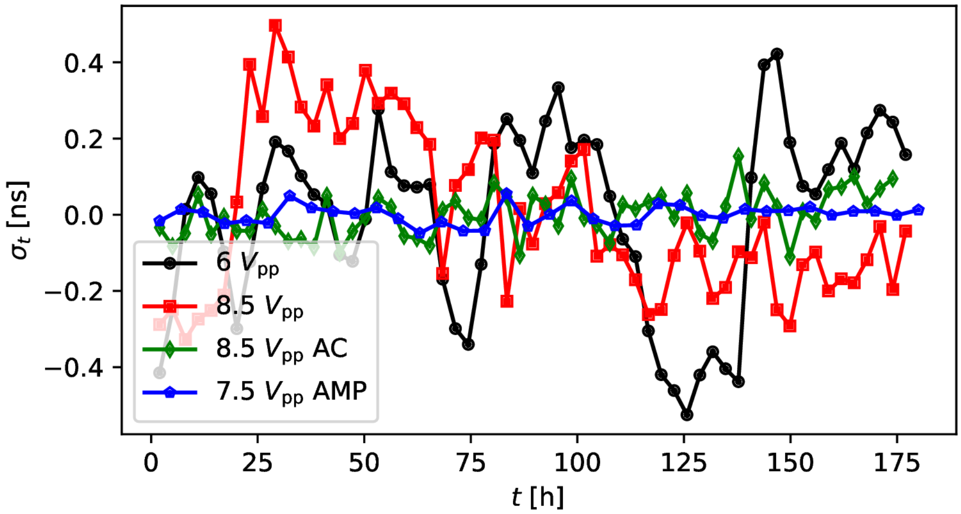
Tabulka 3.1: Porovnání hodnot průměru nejistot fitu σ_t a směrodatné odchylky σ_t.

Jednotlivé série měření si lze prohlédnout na obrázku 3.7 a na obrázku 3.8, kde jsou za účelem snažšího porovnání jednotlivé série měření „normalizované“. Normalizace byla provedena za pomocí napočítaného průměru hodnoty časového rozlišení jednotlivých sérií měření, který byl následně od dat odečten.

Pro série měření 6 V_{pp}, 8.5 V_{pp} a 8.5 V_{pp} AC byla přibližná doba jednoho měření tři hodiny, zatímco pro sérii měření 7.5 V_{pp} AMP trvalo jedno měření přibližně pět hodin. Důvodem byl požadavek na stejnou statistiku při nižším počtu detekcí za časovou jednotku, jenž se snížil výměnou zesilovače. Dále si lze při bližším pohledu na dataset 6 V_{pp} také povšimnout, že jednotlivé série měření mají přibližnou periodu 24 h, která souhlasí s hypotézou teplotního vlivu (24hodinový teplotní cyklus).

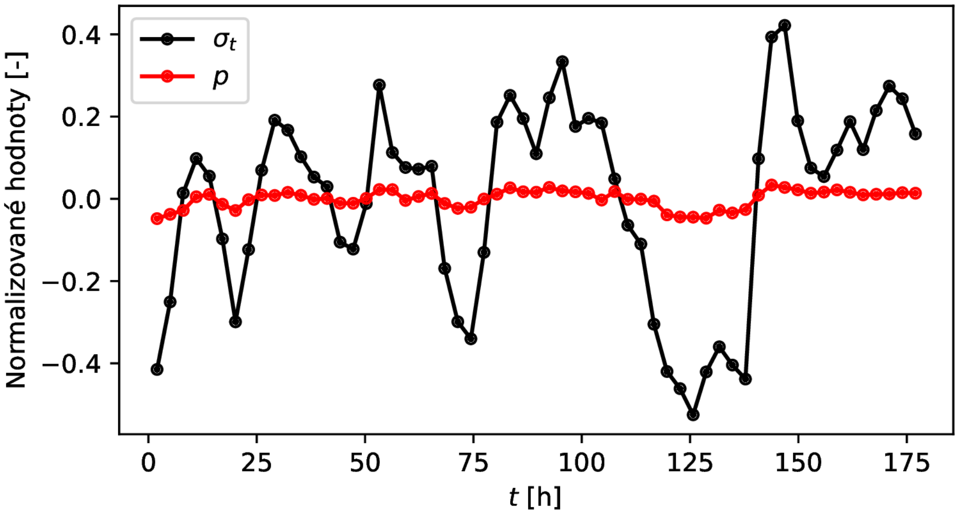


Obrázek 3.7: Časový vývoj parametru σ_t pro opakované měření při jednotlivých napětích. 8.5 Vpp AC označuje měření při spuštěné klimatizaci a 7.5 Vpp AMP měření při spuštěné klimatizaci a současném užití zesilovače s CFD.



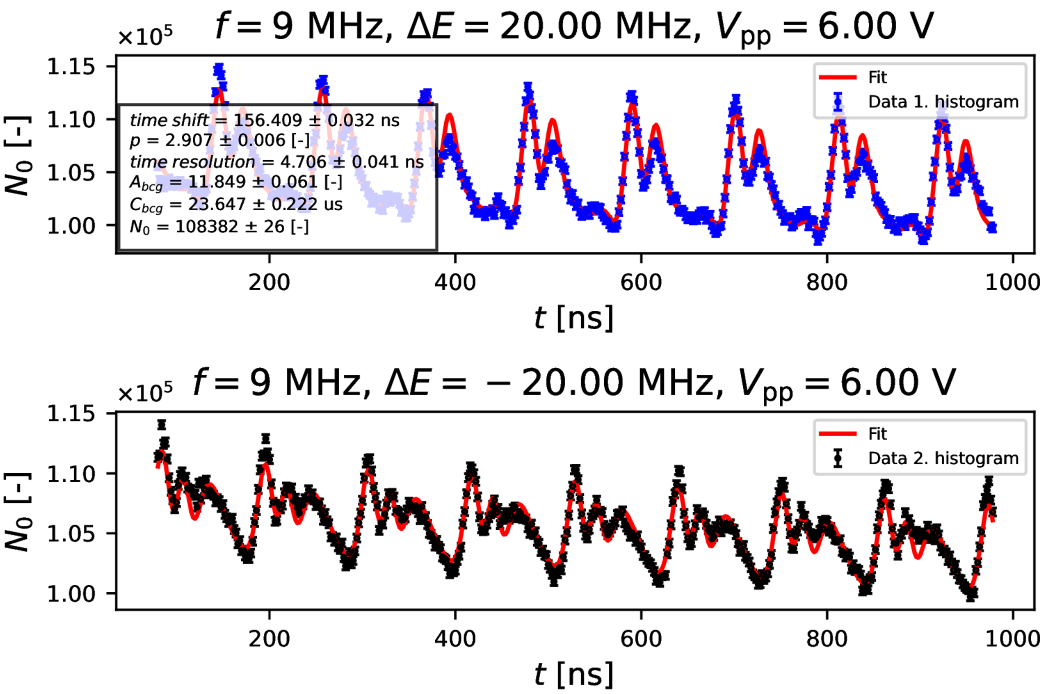
Obrázek 3.8: Normalizovaný časový vývoj parametru σ_t pro opakované měření při jednotlivých napětích. 8.5 Vpp AC označuje měření při spuštěné klimatizaci a 7.5 Vpp AMP měření při spuštěné klimatizaci a současném užití zesilovače s CFD.

Samotné rozdílné hodnoty časového rozlišení σ_t pro měření 6 V_{pp} bychom mohli přisoudit jak vlivu teploty na celkové časové rozlišení, tak korelaci parametrů časového rozlišení σ_t a p, což bude diskutováno v následující kapitole 3.5. Rozdíly hodnot sérií měření 8.5 V_{pp} a 8.5 V_{pp} AC nejsou až tak výrazné v oblasti 0–20 h a 110–174 h. V oblasti 20–110 h naopak nejspíše došlo k vyšší teplotní výchylce. Rozdíl přibližně 0.6 ns mezi 8.5 V_{pp} AC a 7.5 V_{pp} AMP může být dán jak korelací parametrů, tak užitím již dříve zmiňovaného zesilovače bez CFD, který nám časové rozlišení aparatury zhoršuje. Na závěr si ještě na obrázku 3.9 ukážeme teplotní závislost parametru p. Jako sérii měření jsme volili měření 6 V_{pp}, kde jsou výchylky p nejlépe pozorovatelné.

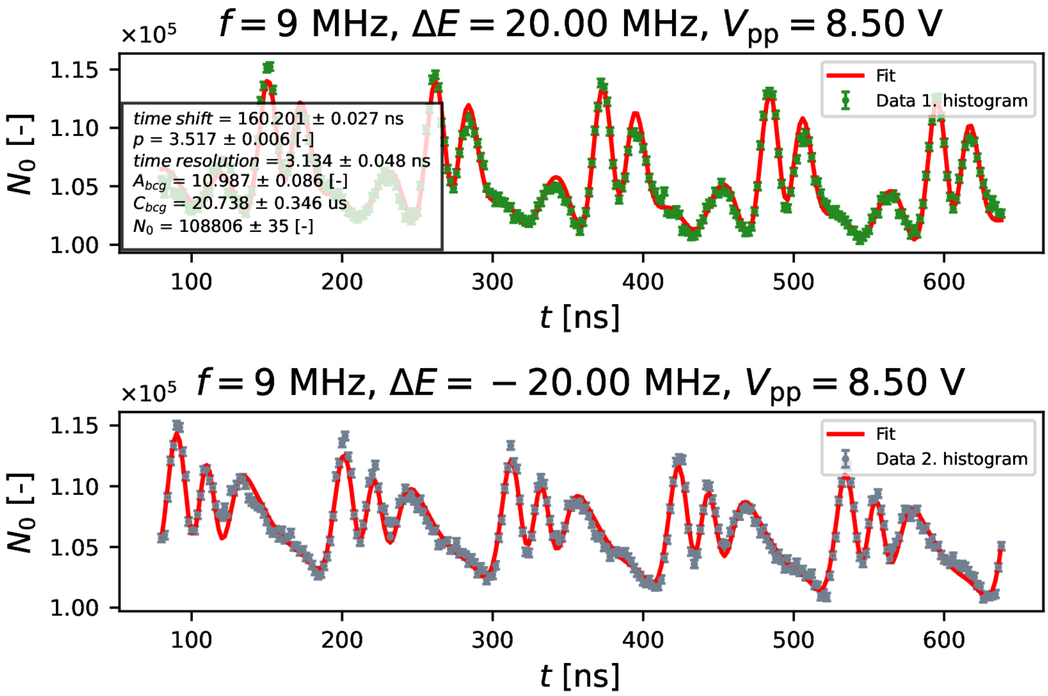


Obrázek 3.9: Ukázka teplotní závislosti normalizovaných hodnot parametru p v porovnání s parametrem σ_t.

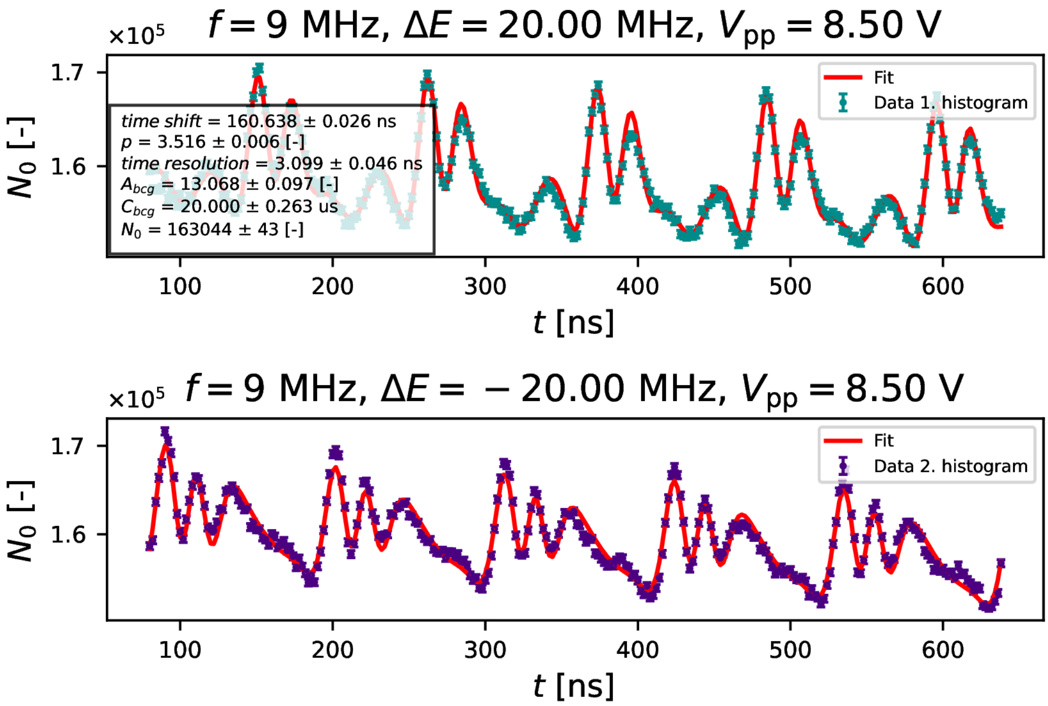
Příklady výsledných fitací si lze prohlédnout na obrázcích 3.10–3.13, jenž odpovídají pátému bodu jednotlivých sérií měření z obrázku 3.7.



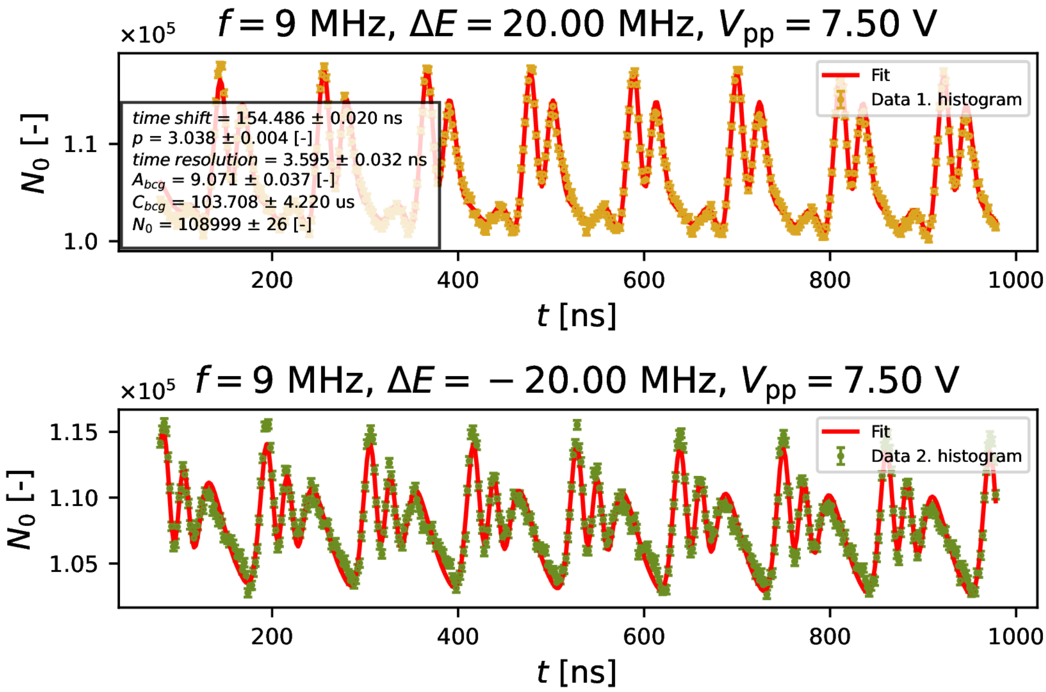
Obrázek 3.10: Ukázka nafitovaných koincidenčních histogramů pro sérii měření 6 V_{pp}, jenž je vyobrazena na obrázku 3.7.



Obrázek 3.11: Ukázka nafitovaných koincidenčních histogramů pro sérii měření 8.5 V_{pp}, jenž je vyobrazena na obrázku 3.7.



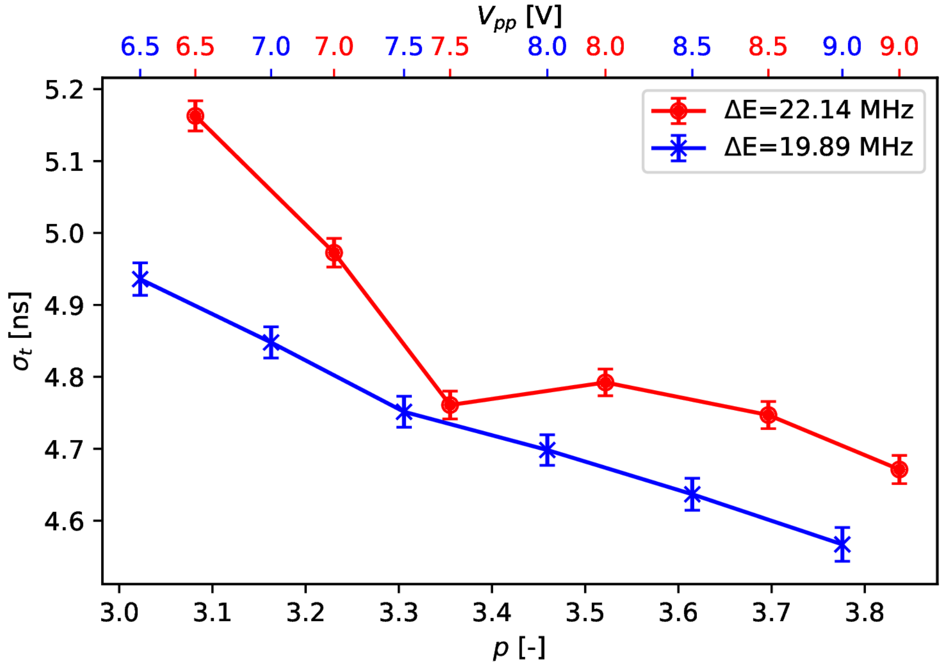
Obrázek 3.12: Ukázka nafitovaných koincidenčních histogramů pro sérii měření 8.5 V_{pp} AC, jenž je vyobrazena na obrázku 3.7.



Obrázek 3.13: Ukázka nafitovaných koincidenčních histogramů pro sérii měření 7.5 V_{pp} AMP, jenž je vyobrazena na obrázku 3.7.

3.5 Korelace parametrů σ_t a p

Jak již bylo v kapitole 3.4 nastíněno, tak dochází ke korelaci parametrů σ_t a p, kterou si lze prohlédnout na obrázku 3.14, kde lze pozorovat výsledky fitování časového rozlišení v závislosti na V_{pp} (parametru p). Konkrétně se jedná o zápornou korelaci, tedy hodnoty časového rozlišení s roustoucím parametrem p mají klesající tendenci. Je nutno dodat, že data, z nichž provádíme vyhodnocení, byla měřena se zesilovačem bez CFD, a tudíž zde opět může hrát roli teplotní nestabilita.

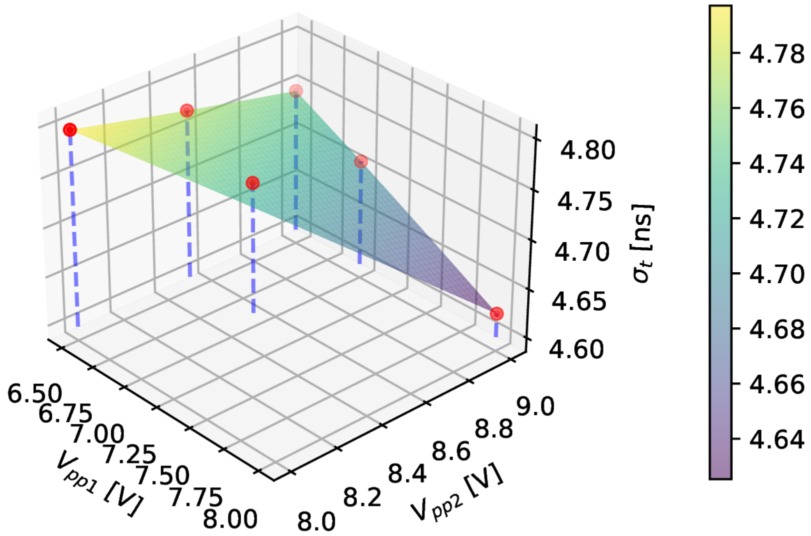


Obrázek 3.14: Ukázka závislosti parametrů σ_t a p pro série měření s laděnými energiemi 22.14 MHz a 19.89 MHz. Na horní horizontální ose vidíme hodnoty V_{pp} a na spodní hodnoty p pro jednotlivá měření.

Tato skutečnost vedla k takové úpravě kódu na fitování koincidenčních měření, která umožňuje současné fitování několika souborů, jenž sdíli parametr σ_t, což je popsáno v kapitole 2.6.2. Z dat vyobrazených na obrázku 3.14 jsme si zvolili sérii měření provedenou pro hodnoty $\Delta E = 19.89$ MHz a ověření korelace provedli znovu při volbě dvojic dat, jenž lze pozorovat v tabulce 3.2, která je graficky interpretovaná na obrázku 3.15. Z provedeného měření je patrné, že zmiňovaná korelace stále setrvává, avšak interval rozptylu hodnot parametru σ_t se snížil o přibližně 53 %. Předpokládáme, že použití zesilovače s CFD a fitování více souborů s rozlišnými hodnotami V_{pp} a ΔE současně povede k dalšímu zlepšení.

Tabulka 3.2: Výsledná tabulka hodnot p a σ_t při využití fitování více souborů s rozlišně nastavenou hodnotou V_{pp} současně.

V_{pp1} [V]	V_{pp2} [V]	p_1 [-]	p_2 [-]	σ_t [ns]	u_{σ_t} [ns]
6.5	8.0	3.017	3.465	4.7986	0.0157
6.5	8.5	3.016	3.624	4.7720	0.0160
6.5	9.0	3.016	3.787	4.7471	0.0165
7.0	8.5	3.160	3.622	4.7337	0.0157
7.0	9.0	3.160	3.786	4.7079	0.0161
8.0	9.0	3.460	3.783	4.6243	0.0159

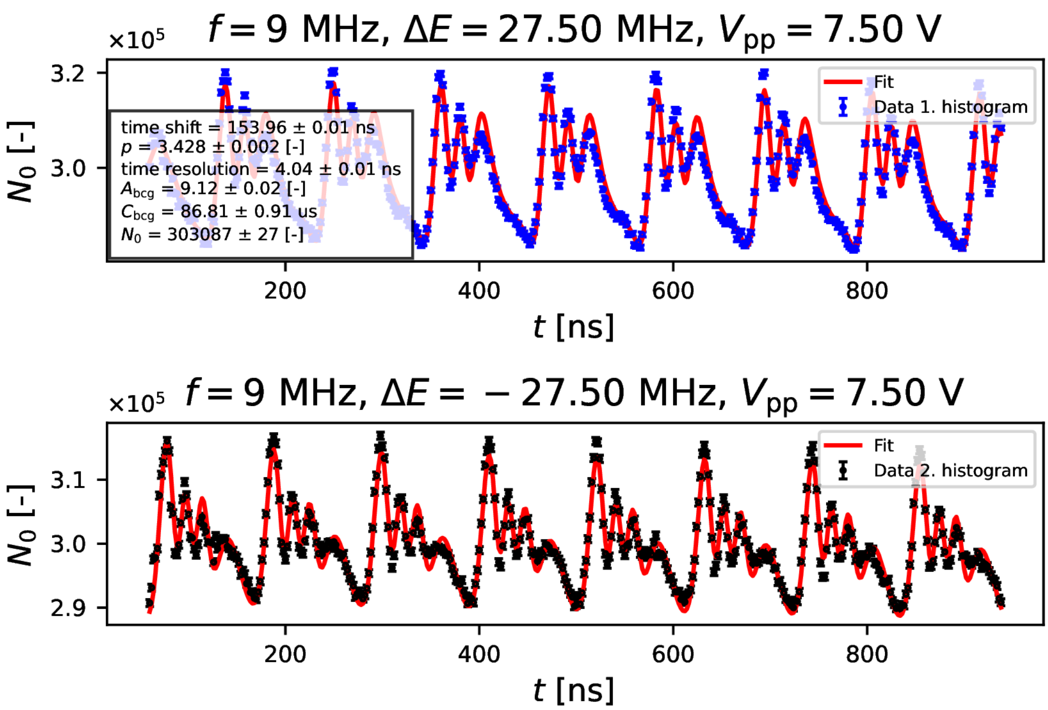


Obrázek 3.15: Hodnoty parametru σ_t v případě společného fitování dvou souborů dat s odlišně nastavenou hodnotou V_{pp}.

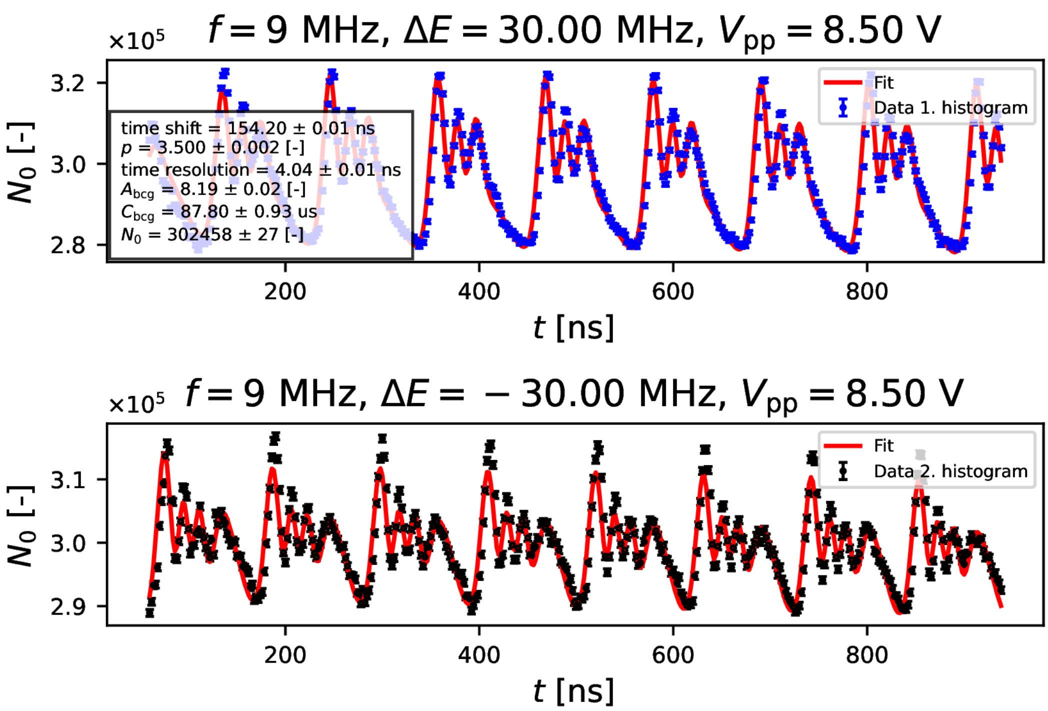
3.6 Určení časového rozlišení aparatury

Na základě výsledků a diskuze v předchozích kapitolách nyní můžeme provést vyhodnocení časového rozlišení σ_t. To provedeme za pomocí dat měřených s nastavenými hodnotami $V_{\mathrm{pp}} = (6.5; 7.5; 8.5)$ V, $\Delta E = (25.0; 27.5; 30.0; 32.5)$ MHz a frekvencí piezotransduceru 9 MHz.

Pro určení výsledné hodnoty časového rozlišení jsme fitovali současně celou množinu časových histogramů pro výše uvedené parametry V_{pp} a ΔE. Příklady nafitovaných spekter z této série si lze prohlédnout na obrázcích 3.16–3.17. Získaná hodnota časového rozlišení je $\sigma_t = 4.04 \pm 0.01$ ns. Pro srovnání jsme provedli obdobné fitování v případě dvojic energií ΔE, kde pro dvojici 27.5 MHz a 32.5 MHz je výsledná hodnota $\sigma_t = 4.14 \pm 0.01$ ns a pro dvojic 25.0 MHz a 30.0 MHz je $\sigma_t = 3.90 \pm 0.01$ ns.



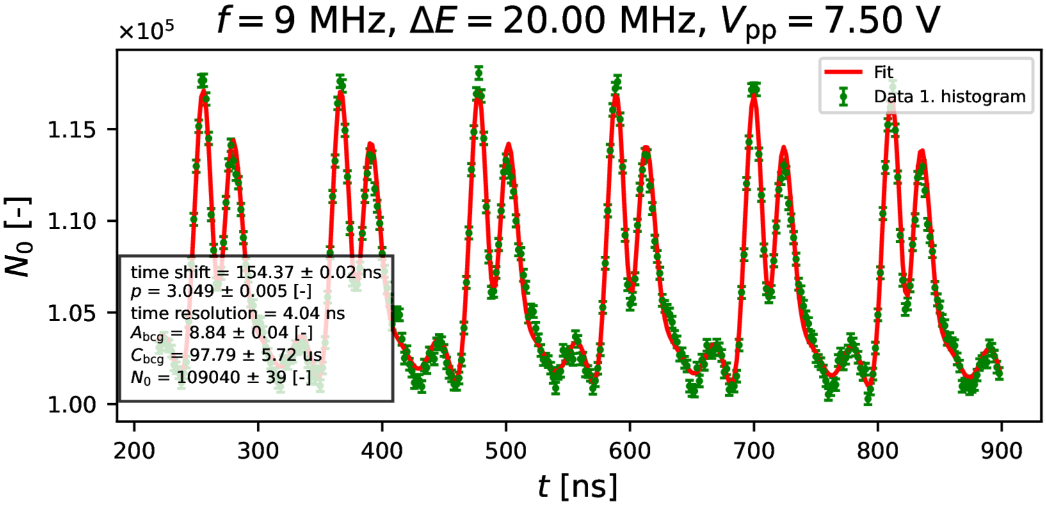
Obrázek 3.16: Ukázka nafitovaných koincidenčních histogramů ($\Delta E = 27.5$ MHz a $V_{\mathrm{pp}} = 7.5$ V) pro určení časového rozlišení.



Obrázek 3.17: Ukázka nafitovaných koincidenčních histogramů ($\Delta E = 30.0$ MHz a $V_{\mathrm{pp}} = 8.5$ V) pro určení časového rozlišení.

Pro ověření správnosti výsledné hodnoty časového rozlišení aparatury by bylo možné provést srovnání s jinou metodou. Taková metoda ovšem zahrnuje generaci záření vhodných časových vlastností (délka časového pulzu a definovaný čas příletu), jenž je aktuálně dostupné pouze na synchrotronech.

Na závěr uvádíme ukázku spektra s fixovaným parametrem časového rozlišení 4.04 ns určeným výše popsaným postupem, kterou lze pozorovat na obrázku 3.18.



Obrázek 3.18: Ukázka nafitovaného koincidenčního histogramu s fixovananou hodnotou časového rozlišení na 4.04 ns.

3.7 Návrh metodiky

Na základě výsledků z předchozích kapitol si nyní stručně nastíníme návrh metodiky určení časového rozlišení aparatury pro experimenty v oblasti nukleární kvantové optiky, která se skládá z výběru pracovní oblasti, kontroly časové stability měření a samotného vyhodnocení, které si nyní nastíníme.

Po nastavení aparatury doporučujeme provést měření za účelem výběru pracovní oblasti. Toto měření je v podobě spekter v energetické doméně, jenž je provedeno pro různé frekvence piezotransduceru, který moduluje dané gama záření. Volbu frekvence by měla ovlivnit především míra rozkombení daného energetického spektra, kdy požadujeme výskyt postranních spektrálních čár, se současným požadavkem na výrazné amplitudy těchto čar. Dále následuje výběr intervalu hodnot V_{pp} generátoru funkcí, jenž by měl obsahovat alespoň tři různé hodnoty. Volba těchto hodnot se odvíjí především od vlastností daného piezotransduceru. Na závěr doporučujeme zvolit alespoň tři různé hodnoty energie dopplerovské modulace mezi druhou a čtvrtou postranní čarou, což nám umožňuje generovat časové histogramy v podobě opakujících se dvou- až čtyřpulzních struktur.

Dalším krokem procedury určení časového rozlišení je zajištění časové stability opakujících se měření. Jak bylo v této práci ukázáno, tak opakující se měření se stejně nastavenými parametry nemusí dávat stejné výsledky. Primární příčinu tohoto jevu přisuzujeme změně teplot během měření. Tento jev by mělo být možné výrazně potlačit kontrolou prostředí, v němž je měření prováděno. V případě nedostatečné možnosti kontroly okolních podmínek je vhodné využít zesilovače s CFD, případně jiné alternativní metody.

Posledním krokem je provedení samotné série měření, z níž bude parametr časového rozlišení σ_t vyhodnocen. Tato série by měla obsahovat měření s parametry nastavenými na hodnoty, jenž byly zvoleny při výběru pracovní oblasti. Po změření těchto časových histogramů zbývá dané časové struktury nafitovat za pomocí kódu, který je prezentován v příloze A.

Závěr

V této práci jsme se zaměřili na určení časového rozlišení aparatury pro experimenty v oblasti nukleární kvantové optiky. Toto rozlišení obecně závisí na časových charakteristikách jednotlivých komponent experimentální sestavy v rámci detekce a následného zpracování příslušných pulsních signálů. Námi prezentovaná metoda umožňuje získat informaci o celkovém časovém rozlišení dané sestavy na základě změření a vyhodnocení několika časově-koincidenčních histogramů. Jedná se tak o relativně jednoduchou a rychlou metodu určení.

Pro vypracování metodiky určení časového rozlišení byla sestavena a otestována experimentální aparatura využívající časových koincidencí detekcí 14.41 keV rezonančních fotonů vůči startovacímu pulznímu signálu z generátoru funkcí. Modulace mössbauerovské interakce gama fotonů s jádry ^{57}Fe pomocí vysokofrekvenčních vibrací absorbátoru umožňovala generaci časových histogramů ve formě periodické soustavy gama pulzů (dvoj- až čtyř pulzů). Takovéto signály se ukazují jako vhodné pro určení časového rozlišení, které je získáno jako parametr fitovaných experimentálních dat.

Během experimentů bylo zjištěno, že v důsledku korelací fitovaných parametrů v rámci koincidenčních měření je vhodné vyhodnocování provádět pomocí současného fitování více datasetů. Za tímto účelem byl vytvořen kód programu v jazyce Python. Vyhodnocení je v tomto kódu realizováno tak, že všechny fitované datasety sdílí společný parametr časového rozlišení, zatímco ostatní parametry se pro jednotlivé datasety liší.

Experimentální parametry mohou být ovlivněné vnějšími podmínkami (například teplotou). Pro správné vyhodnocení je tak nutné zajistit stabilní laboratorní podmínky. Opakovatelnost měření tak, aby bylo možné analyzovat soubor několika po sobě měřených datasetů, bylo možné v našich experimentech zajistit vytvořením stabilních teplotních podmínek za pomocí klimatizace, případně využitím vhodné elektroniky pro zpracování detekčních pulzů (CFD).

Na základě provedených měření a jejich vyhodnocení byl v rámci bakalářské práce popsán návrh metodiky vyhodnocení, která zahrnuje volbu pracovní oblasti měření (frekvence piezotransduceru, amplituda napětí z generátoru funkcí, volba dopplerovské modulace), ověření časové stability a samotné vyhodnocení časového rozlišení pomocí vytvořeného programu. Pro experimentální sestavu použitou pro naše měření nabývá časové rozlišení hodnoty 4.04 ns.

Seznam použitých zdrojů

1. GÜTLICH, Philipp. Fifty years of Mössbauer spectroscopy in solid state research–remarkable achievements, future perspectives. *Zeitschrift für anorganische und allgemeine Chemie*. 2012, roč. 638, č. 1, s. 15–43. [cit. 2024-03-24].
2. PROCHÁZKA, Vít. *Neobvyklá Mössbauerova spektroskopie*. Univerzita Palackého v Olomouci, 2014. [cit. 2024-03-24].
3. GREENWOOD, Norman Neill. *Mössbauer spectroscopy*. Springer Science & Business Media, 2012. [cit. 2024-03-24].
4. GINDER-VOGEL, Matthew; SPARKS, Donald L. Chapter 1 - The Impacts of X-Ray Absorption Spectroscopy on Understanding Soil Processes and Reaction Mechanisms. In: SINGH, Balwant; GRÄFE, Markus (ed.). *Synchrotron-Based Techniques in Soils and Sediments*. Elsevier, 2010, sv. 34, s. 1–26. Developments in Soil Science. ISSN 0166-2481. Dostupné z DOI: `https://doi.org/10.1016/S0166-2481(10)34001-3`. [cit. 2024-03-24].
5. GÜTLICH, Philipp; BILL, Eckhard; TRAUTWEIN, Alfred X. *Mössbauer spectroscopy and transition metal chemistry: Fundamentals and applications*. Springer Berlin Heidelberg, 2011. ISBN 978-3-540-88427-9. Dostupné z DOI: `10.1007/978-3-540-88428-6`. [cit. 2024-03-24].
6. LONGWORTH, G; WINDOW, B. The preparation of narrow-line Mössbauer sources of 57Co in metallic matrices. *Journal of Physics D: Applied Physics*. 1971, roč. 4, č. 6, s. 835. Dostupné z DOI: `10.1088/0022-3727/4/6/316`. [cit. 2024-03-24].
7. QAIM, SM; BLACK, PJ; EVANS, MJ. The preparation of narrow-line 57Fe Mössbauer sources and an investigation of some of the causes of their line broadening. *Journal of Physics C: Solid State Physics*. 1968, roč. 1, č. 5, s. 1388. [cit. 2024-03-24].
8. OUSEPH, P. *Introduction to nuclear radiation detectors*. Sv. 2. Springer Science & Business Media, 2012. [cit. 2024-03-24].
9. AHMED, Syed Naeem. *Physics and engineering of radiation detection*. Academic Press, 2007. [cit. 2024-03-24].
10. KOČIŠČÁK, Jan. *Aplikace práškových scintilačních materiálů v Mössbauerově spektroskopii [online]*. 2023 [cit. 2024-03-02]. Dostupné také z: `https://theses.cz/id/5ddeki/`. Disertační práce. Univerzita Palackého v Olomouci, Přírodovědecká fakulta Olomouc. [cit. 2024-03-24].

11. RUBY, SL; BOLEF, DI. Acoustically modulated γ rays from Fe 57. *Physical Review Letters*. 1960, roč. 5, č. 1, s. 5. [cit. 2024-03-26].

12. CRANSHAW, TE; REIVARI, P. A Mössbauer study of the hyperfine spectrum of 57Fe, using ultrasonic calibration. *Proceedings of the Physical Society*. 1967, roč. 90, č. 4, s. 1059. [cit. 2024-03-26].

13. VAGIZOV, Farit; ANTONOV, Vladimir; RADEONYCHEV, YV; SHAKHMURATOV, RN; KOCHAROVSKAYA, Olga. Coherent control of the waveforms of recoilless γ-ray photons. *Nature*. 2014, roč. 508, č. 7494, s. 80–83. [cit. 2024-03-26].

14. SHAKHMURATOV, RN; VAGIZOV, FG. Application of the Mössbauer effect to the study of subnanometer harmonic displacements in thin solids. *Physical Review B*. 2017, roč. 95, č. 24, s. 245429. [cit. 2024-03-26].

15. MONAHAN, JE; PERLOW, GJ. Theoretical description of quantum beats of recoil-free γ radiation. *Physical Review A*. 1979, roč. 20, č. 4, s. 1499. [cit. 2024-03-26].

16. PERLOW, Gilbert J. Quantum beats of recoil-free γ radiation. *Physical Review Letters*. 1978, roč. 40, č. 13, s. 896. [cit. 2024-03-26].

17. SHAKHMURATOV, RN; VAGIZOV, FG; ANTONOV, VA; RADEONYCHEV, YV; SCULLY, Marlan O; KOCHAROVSKAYA, Olga. Transformation of a single-photon field into bunches of pulses. *Physical Review A*. 2015, roč. 92, č. 2, s. 023836. [cit. 2024-03-26].

18. PROCHÁZKA, Vít; NOVÁK, Petr; STEJSKAL, Aleš; DUDKA, Michal; VRBA, Vlastimil. Lamb-Mössbauer factor determination by resonant Mössbauer spectrometer. *Physics Letters A*. 2022, roč. 442, s. 128195. [cit. 2024-03-24].

19. STEJSKAL, Aleš. *Coherent Control of Gamma-radiation Intensity by Vibrating Resonant Medium [online]*. 2023 [cit. 2024-03-02]. Dostupné také z: `https://theses.cz/id/cq6qcq/`. Disertační práce. Univerzita Palackého v Olomouci, Přírodovědecká fakulta Olomouc. [cit. 2024-03-24].

20. STEJSKAL, Aleš; PROCHÁZKA, Vít; DUDKA, Michal; VRBA, Vlastimil; KOČIŠČÁK, Jan; ŠRETROVÁ, Pavla; NOVÁK, Petr. A dual Mössbauer spectrometer for material research, coincidence experiments and nuclear quantum optics. *Measurement*. 2023, roč. 215, s. 112850. ISSN 0263-2241. Dostupné z DOI: `https://doi.org/10.1016/j.measurement.2023.112850`. [cit. 2024-03-04].

21. PROCHÁZKA, Vít; NOVÁK, Petr; VRBA, Vlastimil; STEJSKAL, Aleš; DUDKA, Michal. Autotuning procedure for energy modulation in Mössbauer spectroscopy. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*. 2020, roč. 483, s. 55–62. ISSN 0168-583X. Dostupné z DOI: `https://doi.org/10.1016/j.nimb.2020.08.015`. [cit. 2024-03-04].

22. PROCHAZKA, Vít; NOVAK, Petr; STEJSKAL, Ales; DUDKA, Michal; VRBA, Vlastimil. Lamb-Mössbauer factor determination by resonant Mössbauer spectrometer. *Physics Letters A*. 2022, roč. 442, s. 128195. Dostupné z DOI: `10.1016/j.physleta.2022.128195`. [cit. 2024-03-04].

23. BACCARO, S; BLAŽEK, K; DE NOTARISTEFANI, F; MALY, P; MARES, J.A; PANI, R; PELLEGRINI, R; SOLURI, A. Scintillation properties of YAP:Ce. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*. 1995, roč. 361, č. 1, s. 209–215. ISSN 0168-9002. Dostupné z DOI: https://doi.org/10.1016/0168-9002(95)00016-X. [cit. 2024-03-24].

24. CRYTUR.CZ. *YAP:Ce*. Dostupné také z: https://www.crytur.com/materials/yap-ce/. [cit. 2024-03-04].

25. HAMAMATSU. *Photomultiplier tube R6094*. Dostupné také z: https://www.hamamatsu.com/eu/en/product/optical-sensors/pmt/pmt_tube-alone/head-on-type/R6427.html. [cit. 2024-03-04].

26. HAMAMATSU. *Photomultiplier tube R6427*. Dostupné také z: https://www.hamamatsu.com/us/en/product/optical-sensors/pmt/pmt_tube-alone/head-on-type/R6427.htmll. [cit. 2024-03-04].

27. RITVERC. *RITVERC zářič*. Dostupné také z: https://ritverc.com/en/products/industrial-sources/gamma-radiation-sources/57co. [cit. 2024-03-04].

28. NOVÁK, P.; PROCHÁZKA, V.; STEJSKAL, A. Universal drive unit for detector velocity modulation in Mössbauer spectroscopy. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*. 2022, roč. 1031, s. 166573. ISSN 0168-9002. Dostupné z DOI: https://doi.org/10.1016/j.nima.2022.166573. [cit. 2024-03-04].

29. FISCHERSIENTIFIC. *Absorbátor z nerezové oceli*. Dostupné také z: https://www.fishersci.ca/shop/products/stainless-steel-foil-0-025mm-0-001in-thick-type-304-thermo-scientific/p-4782161. [cit. 2024-03-04].

30. FISCHERSIENTIFIC. *αFe kalibrační vzorek*. Dostupné také z: https://www.fishersci.ca/shop/products/iron-foil-0-025mm-0-001in-thick-hard-99-5-metals-basis-thermo-scientific/aa44687gt. [cit. 2024-03-04].

31. AMBROSY, A; HOLDIK, K. Piezoelectric PVDF films as ultrasonic transducers. *Journal of Physics E: Scientific Instruments*. 2000, roč. 17, s. 856. Dostupné z DOI: 10.1088/0022-3735/17/10/011. [cit. 2024-03-04].

32. SIGLENT. *Generátor funkcí*. Dostupné také z: https://siglentna.com/product/sdg1032x/. [cit. 2024-03-04].

33. DEPARTMENT OF EXPERIMENTAL PHYSICS. *OLTWINS*. Dostupné také z: https://www.prf.upol.cz/en/department-of-experimental-physics/oltwins/about-oltwins/. [cit. 2024-05-05].

34. JÜNGLING, Tomáš. *Python code for determining time resolution*. Dostupné také z: https://gist.github.com/TJungling/f89555035904554e92716bab863641ec. [cit. 2024-03-04].

Seznam použitých symbolů a zkratek

Značka	Popis
AAD	amplitudový diskriminátor (amplitude discriminator)
ABG	generátor napěťových funkcí (arbitrary function generator)
BL	základní hladina diskriminátoru (baseline)
CFD	diskriminátor s časovou značkou (constant fraction discriminator)
FWHM	čířka v polovině výsky (full width half maximum)
HL	horní hladina diskriminétoru (high level)
LL	dolní hladina diskriminátoru (low level)
PM	fotonásobič (photomultiplayer tube)
PSD	pulzní tvarový diskriminátor (pulse shape discriminator)
SCA	jednokanáloví analyzátor (single channel analyser)
TDC	časově digitální převodník (time digital convertor)
TMS	transmisní Mössbauerova spektroskopie
A_{bcg}	amplituda pozadí
B_{hyf}	hyperjemné magnetické pole
c	rychlost světla $c = 299792458$ m/s
C_{bcg}	konstanta exponenciály pozadí
d_{eff}	efektivní tloušťka absorbátoru
δ	izomerní posun
ΔE	energie Dopplerovy modulace
δt	časový posun
E	energie základního stavu
E^*	energie excitovaného jádra
E_0	původní energie modulovaného záření
E_γ	energie gama fotonu
E_{r}	energie zpětného rázu
f	frekvence absorbátoru
Γ_0	šířka spektrální čáry
h	Planckova konstanta $h = 6.62607515 \cdot 10^{-34}$ J·s
$\hbar$	redukovaná Planckova konstanta $\hbar = 1.054572613 \cdot 10^{-34}$ J·s
I	intenzita
i	imaginární jednotka $i = \sqrt{-1}$

j	číslo kvantování celkového momentu hybnosti
λ	vlnová délka
m	průmět spinu do osy kvantování
$\vec{\mu}$	magnetický dipólový moment
N	počet detekcí
Ω	úhlová frekvence pohybu absorbátoru
ω_{a}	energie nukleárního přechodu absorbátoru
ω_{γ}	energie gama fotonu
p	vibrační amplituda
P_{γ}	hybnost gama fotonu
π	Ludolfovo číslo $\pi = 3.141592$
P_{r}	hybnost Mössbauerova jádra
R	amplituda pohybu absorbátoru
σ_t	časové rozlišení
t	čas
t_0	čas emise gama fotonu
τ	doba života
v	rychlost
V_{pp}	hodnota rozsahu napětí minima k maximu (voltage peak to peak)
φ	fáze
z	pozice absorbátoru
z_0	počáteční pozice absorbátoru

A Software k fitování koincidenčních spekter

Listing A.1: Kód k fitování koincidenčních měření.

```
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
import os
import re
import itertools
from scipy.optimize import curve_fit
from collections import Counter


def Fit_file(E_tuned_values, Vpp_values, signal_data_combined, save_folder, data_range):


    ###########################################
    ###############  Parameters  ###############


    ###  Elementary constants  ###
    gamma_0 = 1.126830  # [1/us] natural linewidth in [MHz] (0.097 mm/s * 11.61685)
    E0 = 14413  # resonant transition energy level [eV]
    q = 1.602176 * 10 ** (-19)  # elementary charge [C]
    c = 299.792458  # speed of light in vacuum [m/us]
    h = 6.62607015 * 10 ** (-34)  # Planck constant [J/s]
    j = complex(0, 1)  # complex unit

    ###  Simulation parameteres  ###
    minus_t = 0.500  # [us] lower limit of the time integration [1 us requires to cut the first]
    time_range = 2.048  # [us] simulation time range - upper limit of the time integration
    num_of_points = 1024  # [-] number of points in time domain
    dt = time_range / num_of_points  # [us] time axis step
    Time_axis = np.linspace(0, ((num_of_points - 1) * dt), num=(num_of_points))  # time axis generation
    vibration_freq = 9  # [MHz] fundamental vibration frequency
    num_of_harmonics = 1  # [-] number of harmonics in the Fourier series of the absorber motion profile
    d_eff = 7.07  # [-] effective thickness
    absorption_shift = 2.61  # 2.493  # [MHz]  of the absorption function relative to the source
    bhyf = 0.58  # [T] hyperfine magnetic field
    gamma_source_multiple = 1.00  # broadening of source emission line in multiple of natural linewidth
    gamma_absorber_multiple = 1.00  # broadening of absorber line in multiple of natural linewidth
    motion_waveform_inverted = "No"  # inversion of motion profile "yes" = inverted, others = original

    ###  Fourier series parameteres - amplitudes and phases  ###
    f_amps = [2.292, 0.0, 0.764, 0.0, 0.458, 0.0, 0.327, 0.0, 0.254, 0.0, 0.208, 0.0, 0.176, 0.0, 0.152, 0.0, 0.134,
              0.0, 0.12, 0.0, 0.109, 0.0, 0.099, 0.0, 0.091, 0.0, 0.084, 0.0, 0.078, 0.0, 0.073, 0.0, 0.068, 0.0, 0.064,
              0.0, 0.061, 0.0, 0.058, 0.0, 0.055, 0.0, 0.052, 0.0, 0.05, 0.0, 0.047, 0.0, 0.045, 0.0]
    f_phases = [0.0, 0, 0.0, 0, 0.0, 0, 0.0, 0, 0.0, 0, 0.0, 0, 0.0, 0, 0.0, 0, 0.0, 0, 0.0, 0, 0.0, 0, 0.0, 0, 0.0, 0,
                0.0, 0, 0.0, 0, 0.0, 0, 0.0, 0, 0.0, 0, 0.0, 0, 0.0, 0, 0.0, 0, 0.0, 0, 0.0, 0, 0.0, 0, 0.0, 0]

    ###  Define the parameters of the Gaussian function  ###
    A = 1  # Amplitude
    B = 0  # Baseline
    mu = 1.024  # Mean, because of the asymmetry of the data around 0 it is necessary to choose the value 1.024
    G_Time_axis = np.linspace(0, 2.048, 1024)  # Gauss time-axis

    ################################################
    ################################################


    ################################################
```

```
    ###############  Define functions  ###############


    ### Define Simulation function of gamma pulses ###
    def Simulation_func(motion_time_shift, E_tuned, p):
        def generate_motion(t, num_of_harmonics, f_amps, f_phases, w, time_delay):
            val = 0
            t = np.subtract(t, time_delay)  # shifting of the time axis (and thus the motion profile) in time
            for i in range(1, num_of_harmonics + 1):
                val += f_amps[i - 1] * np.sin(w * i * t - f_phases[i - 1])  # sum over all harmonics
            return val

        def normalize(array):
            norm_constant = max(np.abs(array))  # normalize array by its maximum absolute value
            return np.multiply(array, 1 / norm_constant)

        def generate_photon_field(t, A, j_w_s_plus_gmmma_over_2, p_over_w_s, z_motion):
            return A * np.heaviside(t, 1) * np.exp(-(j_w_s_plus_gmmma_over_2) * (
                    t - p_over_w_s * z_motion))  # generation of the to the absorber incident gamma photon field

        def magnetic_splitting(bhyf,
                               absorption_shift):  # calculation of the absorption lines positions induced by
            # mangetic splitting
            gg = 0.18125  # gyromagnetic ration of ground state
            ge = -0.10348  # gyromagnetic ratio of excited state
            un = 7.6226077  # nuclear magneton in [MHz]

            un_bhyf = un * bhyf / 2  # preparatory calculation

            ### calculation of individual lines ###
            E1 = (-gg + 3 * ge) * un_bhyf + absorption_shift
            E2 = (-gg + ge) * un_bhyf + absorption_shift
            E3 = (-gg - ge) * un_bhyf + absorption_shift
            E4 = (gg + ge) * un_bhyf + absorption_shift
            E5 = (gg - ge) * un_bhyf + absorption_shift
            E6 = (gg - 3 * ge) * un_bhyf + absorption_shift
            lines_positions = [E1, E2, E3, E4, E5, E6]  # assembling in list
            lines_amps = [3, 2, 1, 1, 2, 3]  # sextet lines amplitudes
            normalized_lines_amps = np.divide(lines_amps, sum(lines_amps))  # normalization of the lines ampltidues
            return lines_positions, normalized_lines_amps

        def absorption_function(f, bhyf, absorption_shift, gamma_0):
            lines_positions, lines_amplitudes = magnetic_splitting(bhyf,
                                                                   absorption_shift)  # get the lines positions and
            # amplitudes by magnetic splittin function

            ### conversion into the angular frequencies: w = 2*pi*f ###
            lines_positions_w = np.multiply(lines_positions, 2 * np.pi)
            absorption_shift_w = np.multiply(absorption_shift, 2 * np.pi)
            gamma_0_w = np.multiply(gamma_0, 2 * np.pi)
            w = np.multiply(f, 2 * np.pi)
            j_gamma_0w_2 = j * gamma_0_w / 2  # preparatory calculation

            val = 0
            for i in range(len(lines_positions)):
                val += lines_amplitudes[i] * (-j_gamma_0w_2) / (w - lines_positions_w[
                    i] - j_gamma_0w_2)  # sum of complex conjugated Lorentzian, complex conjugation is necessary due
                # to numpy FFT algorithm definition   complex conjugate in energy domain causes the reversal in the
                # time domain
            return val

        gamma_source = gamma_0 * gamma_source_multiple  # [1/us] source linewidth
        gamma_absorber = gamma_0 * gamma_absorber_multiple  # [1/us] absorber linewidth

        w_0 = np.pi / (
            dt)  # [rad/us] maximum angular frequency of the wave for simulation given by two times lower frequency
        # than the maximum frequency range ((2*Pi)/dt)
        w_s = w_0 - 2 * np.pi * E_tuned  # [rad/us] minus is implemented maybe due to FFT which turns the energy sign
        vibration_w = 2 * np.pi * vibration_freq  # [rad/us] angular frequency of absorber ultrasound movement
        gamma_source_w = gamma_source * (2 * np.pi)  # [rad/us] angular freqency of the source linewidth
        gamma_absorber_w = gamma_absorber * (2 * np.pi)  # [rad/us] angular freqency of the absorber linewidth
        absorption_shift_w = absorption_shift * (2 * np.pi)  # [rad/us] angular freqency of absorption functin shift

        w_E0 = 10 ** (-6) * 2 * np.pi * E0 * q / h  # [rad/us] angular frequency of the 14.413 keV transition
        wavelength = 10 ** (12) * (2 * np.pi * c / w_E0)  # [pm] gamma photon wavelength
        Amp = p * c / (w_E0)  # [m] amplitude of vibrations

        t0_integration_range = np.linspace(-minus_t, time_range, int((minus_t / (
                time_range / num_of_points))) + num_of_points)  # time intensity integration range (t0)
```

```

        ### generation of the energy domain axis ###
        frequency_axis = np.fft.fftfreq(num_of_points, d=dt)  # frequency axis generation
        frequency_axis = np.fft.fftshift(frequency_axis)  # frequency axis shift for FFT
        w_axis = np.multiply(frequency_axis, 2 * np.pi)  # angular frequency axis generation

        ### iniciation of the gamma radiation intensity array ###
        wave_intensity = np.zeros(num_of_points)

        ### generation of movement waveform ###
        absorber_motion = generate_motion(Time_axis, num_of_harmonics, f_amps, f_phases, vibration_w, motion_time_shift)
        absorber_motion_normalized = normalize(absorber_motion)
        if motion_waveform_inverted == "yes":
            absorber_motion_normalized = np.multiply(absorber_motion_normalized,
                                                     -1)  # inversion of the absorber motion profile

        ### generation of absorption function of absorber ###
        absorption = absorption_function(w_axis, bhyf, absorption_shift_w, gamma_absorber_w)

        ### Calculate exponential values for absorption_function array ###
        exponential_absorption = np.exp(-(d_eff / 2) * absorption)

        ### preparatory calculations for generation of the incident photon field ###
        p_over_w_s = p / w_s
        j_w_s_plus_gmmma_over_2 = j * w_s + gamma_source_w / 2
        photon_field_amplitude = np.sqrt(gamma_source_w)

        counter = 0  # counter for watching the

        ### Numerical integration over t0 ###
        for t0 in t0_integration_range:
            Time_axis_t0 = np.subtract(Time_axis, t0)  # preparatory calculation (time axis shift)

            ### generation of electric intensity wave ###
            incident_wave = generate_photon_field(Time_axis_t0, photon_field_amplitude, j_w_s_plus_gmmma_over_2,
                                                  p_over_w_s, absorber_motion_normalized)

            ## FFT transforamtion of the electric intensity from the time domain to energy domain ###
            incident_field_energy_domain = np.fft.fft(incident_wave)

            ### Absorption process ###
            energy_domain_after_absorption = incident_field_energy_domain * exponential_absorption

            ### Conversion of the energy domain by inverse FFT back to time domain ###
            wave_after_absorption = np.fft.ifft(energy_domain_after_absorption)

            ### Elctric field intensity calculation ###
            wave_intensity += np.abs(wave_after_absorption) ** 2 * dt

            counter += 1
            if counter % 500 == 0:
                print(str(round((counter / len(t0_integration_range)) * 100, 0)) + " % done", end='\r')

        return wave_intensity

    ###  Define intensity function ###
    def Simulation_func_exp(Time_axis, E_tuned, motion_time_shift, A_bcg, C_bcg, N_0, p):
        Simulation_func_exp = (((A_bcg + Simulation_func(motion_time_shift, E_tuned, p)) / (A_bcg + 1)) * (
                np.exp((-Time_axis) / C_bcg) * N_0))  # Use the desired value from the tuple
        return Simulation_func_exp

    ###  Define the Gaussian function  ###
    def Gaussian(G_Time_axis, time_resolution):
        Gaussian = B + (A / ((np.sqrt(2 * np.pi) * time_resolution))) * np.exp(
            -(G_Time_axis - mu) ** 2 / (2 * time_resolution ** 2))  # Normalized Gaussian function
        return Gaussian

    ###  Convolution of intensity function with Gaussian  ###
    def Fit_func(Time_axis, E_tuned, motion_time_shift, p, time_resolution, A_bcg, C_bcg, N_0):
        Fit_func = np.convolve(Gaussian(G_Time_axis, time_resolution),
                               (1 / 500) * Simulation_func_exp(Time_axis, E_tuned, motion_time_shift, A_bcg, C_bcg, N_0,
                                                               p),
                               mode='same')  # The 1/500 factor is there because of the dt in convolution integral
        return Fit_func

    ###  Cuted Fit_func  ###
    def Cuted_fit_func(Time_axis, E_tuned, motion_time_shift, p, time_resolution, A_bcg, C_bcg, N_0):
        Cuted_fit_func = Fit_func(Time_axis, E_tuned, motion_time_shift, p, time_resolution, A_bcg, C_bcg, N_0)[
            data_range]  # Function is cuted due to the numerical artefacts at the begining of simulation_function
        # and data format
        return Cuted_fit_func
```

```python

    ### Define your Combined_fit_function to accept variable arguments ###
    def Combined_fit_function(Time_axis, time_resolution, *args):
        num_args = len(args)
        motion_time_shift_values = args[:(len(E_tuned_values) // repetitions)]
        C_bcg_values = args[(len(E_tuned_values) // repetitions):2 * (len(E_tuned_values) // repetitions)]
        p_values = args[2 * (len(E_tuned_values) // repetitions):3 * (len(E_tuned_values) // repetitions)]
        A_bcg_values = args[3 * (len(E_tuned_values) // repetitions):3 * (len(E_tuned_values) // repetitions) + (
                (num_args - 3 * (len(E_tuned_values) // repetitions)) // 2)]
        N_0_values = args[3 * (len(E_tuned_values) // repetitions) + (
                (num_args - 3 * (len(E_tuned_values) // repetitions)) // 2):]
        combined_fits = []

        ### Create a cycle iterator for p_values ###
        motion_time_shift_cycle = itertools.cycle(motion_time_shift_values)
        C_bcg_cycle = itertools.cycle(C_bcg_values)
        p_cycle = itertools.cycle(p_values)

        for E_tuned, N_0, A_bcg in zip(E_tuned_values, N_0_values, A_bcg_values):
            motion_time_shift = next(motion_time_shift_cycle)
            C_bcg = next(C_bcg_cycle)
            p = next(p_cycle)

            combined_fits.append(
                Cuted_fit_func(Time_axis, E_tuned, motion_time_shift, p, time_resolution, A_bcg, C_bcg, N_0))
            combined_fits.append(
                Cuted_fit_func(Time_axis, -E_tuned, motion_time_shift, p, time_resolution, A_bcg, C_bcg, N_0))

        return np.concatenate(
            combined_fits)  # The first half corresponds to data with positive E_tuned (first time histogram) ...

    ##########################################
    ##########################################


    ##################################################
    ###############  Data processing  ###############


    ###  Load data  ###
    signal_data = signal_data_combined
    error = np.sqrt(signal_data)

    ##################################################
    ##################################################


    ##########################################
    ###############  Fitting  ###############

    value_counts = Counter(Vpp_values)
    repetitions = min(value_counts.values())
    print('datafiles for one Vpp:', repetitions)

    initial_guess_list = [0.15, 3.5, 0.0035, 15.5, 80,
                          300000]  # Initial guess for the parameters --> [time_shift, p, time_resolution, A_bcg,
    # C_bcg, N_0]
    lower_bounds_list = [0, 2.5, 0.002, 5, 20, 2e5]  # Lower limits for each parameter
    upper_bounds_list = [1, 4.5, 0.005, 20, 180, 3.5e5]  # Upper limits for each parameter

    p_i = np.ones(len(E_tuned_values) // repetitions) * initial_guess_list[1]
    N_0_i = np.ones(len(E_tuned_values)) * initial_guess_list[5]
    A_bcg_i = np.ones(len(E_tuned_values)) * initial_guess_list[3]
    motion_time_shift_i = np.ones(len(E_tuned_values) // repetitions) * initial_guess_list[0]
    C_bcg_i = np.ones(len(E_tuned_values) // repetitions) * initial_guess_list[4]

    p_l = np.ones(len(E_tuned_values) // repetitions) * lower_bounds_list[1]
    N_0_l = np.ones(len(E_tuned_values)) * lower_bounds_list[5]
    A_bcg_l = np.ones(len(E_tuned_values)) * lower_bounds_list[3]
    motion_time_shift_l = np.ones(len(E_tuned_values) // repetitions) * lower_bounds_list[0]
    C_bcg_l = np.ones(len(E_tuned_values) // repetitions) * lower_bounds_list[4]

    p_h = np.ones(len(E_tuned_values) // repetitions) * upper_bounds_list[1]
    N_0_h = np.ones(len(E_tuned_values)) * upper_bounds_list[5]
    A_bcg_h = np.ones(len(E_tuned_values)) * upper_bounds_list[3]
    motion_time_shift_h = np.ones(len(E_tuned_values) // repetitions) * upper_bounds_list[0]
    C_bcg_h = np.ones(len(E_tuned_values) // repetitions) * upper_bounds_list[4]

    ### Perform the curve fitting ###
    initial_guess = [initial_guess_list[2]] + list(motion_time_shift_i) + list(C_bcg_i) + list(p_i) + list(
        A_bcg_i) + list(N_0_i)  # Initial guess for the parameters
    print('initial guess:', initial_guess)
    lower_bounds = [lower_bounds_list[2]] + list(motion_time_shift_l) + list(C_bcg_l) + list(p_l) + list(
        A_bcg_l) + list(N_0_l)  # Lower limits for each parameter
    upper_bounds = [upper_bounds_list[2]] + list(motion_time_shift_h) + list(C_bcg_h) + list(p_h) + list(
```

```python
        A_bcg_h) + list(N_0_h)  # Upper limits for each parameter

    fit_params, covariance_matrix = curve_fit(Combined_fit_function, Time_axis, signal_data, p0=initial_guess,
                                              sigma=error, absolute_sigma=True, bounds=(lower_bounds, upper_bounds),
                                              ftol=3e-16, verbose=2, method="trf", maxfev=300)

    ### Extract parameter uncertainties from the covariance matrix (diagonal elements) ###
    parameter_uncertainties = np.sqrt(np.diag(covariance_matrix))

    ### Extract the fitted parameters and uncertainties ###
    time_resolution_fit, *args_fit = fit_params
    time_resolution_unc, *args_unc = parameter_uncertainties
    num_args_fit = len(args_fit)
    motion_time_shift_fit = [x for x in args_fit[:(len(E_tuned_values) // repetitions)] for _ in
                             range(repetitions)]  # duplicate elements (e.g. [1 ,2] --> [1, 1, 2, 2])
    motion_time_shift_unc = [x for x in args_unc[:(len(E_tuned_values) // repetitions)] for _ in range(repetitions)]
    C_bcg_fit = [x for x in args_fit[(len(E_tuned_values) // repetitions):2 * (len(E_tuned_values) // repetitions)] for
                 _ in range(repetitions)]
    C_bcg_unc = [x for x in args_unc[(len(E_tuned_values) // repetitions):2 * (len(E_tuned_values) // repetitions)] for
                 _ in range(repetitions)]
    p_fit = [x for x in args_fit[2 * (len(E_tuned_values) // repetitions):3 * (len(E_tuned_values) // repetitions)] for
             _ in range(repetitions)]
    p_unc = [x for x in args_unc[2 * (len(E_tuned_values) // repetitions):3 * (len(E_tuned_values) // repetitions)] for
             _ in range(repetitions)]
    A_bcg_fit = args_fit[3 * (len(E_tuned_values) // repetitions):3 * (len(E_tuned_values) // repetitions) + (
            (num_args_fit - 3 * (len(E_tuned_values) // repetitions)) // 2)]
    A_bcg_unc = args_unc[3 * (len(E_tuned_values) // repetitions):3 * (len(E_tuned_values) // repetitions) + (
            (num_args_fit - 3 * (len(E_tuned_values) // repetitions)) // 2)]
    N_0_fit = args_fit[3 * (len(E_tuned_values) // repetitions) + (
            (num_args_fit - 3 * (len(E_tuned_values) // repetitions)) // 2):]
    N_0_unc = args_unc[3 * (len(E_tuned_values) // repetitions) + (
            (num_args_fit - 3 * (len(E_tuned_values) // repetitions)) // 2):]

    print('Fitted parameters [motion_time_shift, time_resolution, C_bcg, p, A_bcg, N_0]=', fit_params)

    ### Generate the fitted curve ###
    fitted_curve = Combined_fit_function(Time_axis, time_resolution_fit, *args_fit)

    ### Calculate residuals ###
    residuals = (signal_data_combined - fitted_curve)
    abs_residuals = np.abs(residuals)
    residuals_mean = np.mean(abs_residuals)
    print('residuals mean:', residuals_mean)

    ### Calculate chi**2 ###
    def chi2(signal_data_combined, fitted_curve):
        if len(signal_data_combined) != len(fitted_curve):
            raise ValueError("signal_data and fitted_curve lists must have the same length")

        diff = signal_data_combined - fitted_curve
        squared_diff = diff ** 2
        weighted_squared_diff = squared_diff / signal_data_combined
        total_sum = np.sum(weighted_squared_diff)

        return total_sum

    chi_2 = chi2(signal_data_combined, fitted_curve)
    chi_2_norm = chi_2 / (len(signal_data_combined) - 6)
    print("chi2:", chi_2_norm)

    ######################################
    ######################################


    ######################################
    ###############  Plot  ###############


    length = len(signal_data_combined) / (2 * len(E_tuned_values))

    for i in np.linspace(0, len(E_tuned_values) - 1, len(E_tuned_values)):
        i = int(i)  # Convert i to an integer

        idx_start_1 = int(2 * i * length)
        idx_end_1 = int(idx_start_1 + length)
        idx_start_2 = int(2 * i * length + length)
        idx_end_2 = int(idx_start_2 + length)

        fig, ((ax1), (ax2), (ax3), (ax4)) = plt.subplots(4, 1, gridspec_kw={'height_ratios': [7, 2.5, 7, 2.5]},
                                                         figsize=(16, 9))

        ax1.set_title(f'FIT of 9 MHz, E={E_tuned_values[i]:.2f}, Vpp={Vpp_values[i]:.2f}', fontweight='bold',
```

```
                      fontsize=17)
        ax1.errorbar(Time_axis[data_range] * 1000, signal_data_combined[idx_start_1:idx_end_1],
                     yerr=error[idx_start_1:idx_end_1], fmt='o', markersize=2, capsize=2, linewidth=1,
                     label='Data 1. histogram')
        ax1.plot(Time_axis[data_range] * 1000, fitted_curve[idx_start_1:idx_end_1], linewidth=1.5, label='Fit')
        ax1.set_xlabel(r'$\mathbf{t}$ [ns]', fontsize=13, fontweight='bold')
        ax1.set_ylabel(r'$\mathbf{N_0}$ [-]', fontsize=13, fontweight='bold')
        info_str = f'$time\;shift$ = {1000 * motion_time_shift_fit[i]:.3f}    {1000 * motion_time_shift_unc[i]:.3f} ns\n'
        info_str += f'$p$ = {p_fit[i]:.3f}    {p_unc[i]:.3f} [-]\n'
        info_str += f'$time\;resolution$ = {1000 * time_resolution_fit:.3f}    {1000 * time_resolution_unc:.3f} ns\n'
        info_str += f'$A_{{bcg}}$ = {A_bcg_fit[i]:.3f}    {A_bcg_unc[i]:.3f} [-]\n'
        info_str += f'$C_{{bcg}}$ = {C_bcg_fit[i]:.3f}    {C_bcg_unc[i]:.3f} us\n'
        info_str += f'$N_{0}$ = {N_0_fit[i]:.0f}    {N_0_unc[i]:.0f} [-]'
        ax1.text(0.01, 0.1, info_str, transform=ax1.transAxes,
                 bbox=dict(facecolor='white', edgecolor='black', alpha=0.7))
        ax1.legend(loc='upper right')

        ax2.set_title(f'Residuals, E={E_tuned_values[int(i)]:.2f}', fontweight='bold', fontsize=13)
        ax2.plot(Time_axis[data_range] * 1000, residuals[idx_start_1:idx_end_1], label='Residuals')
        ax2.axhline(np.sqrt(N_0_fit[i]), color='green', linestyle='--', label='$\sigma_{N_0}$')
        ax2.axhline(-np.sqrt(N_0_fit[i]), color='green', linestyle='--')
        ax2.axhline(2 * np.sqrt(N_0_fit[i]), color='red', linestyle='--', label='$2\sigma_{N_0}$')
        ax2.axhline(-2 * np.sqrt(N_0_fit[i]), color='red', linestyle='--')
        ax2.set_xlabel(r'$\mathbf{t}$ [ns]', fontsize=9, fontweight='bold')
        ax2.set_ylabel(r'$\mathbf{N_0}$ [-]', fontsize=9, fontweight='bold')
        ax2.legend(fontsize='7', loc='upper right')

        ax3.set_title(f'FIT of 9 MHz, E={-E_tuned_values[i]:.2f}, Vpp={Vpp_values[i]:.2f}', fontweight='bold',
                      fontsize=17)
        ax3.errorbar(Time_axis[data_range] * 1000, signal_data_combined[idx_start_2:idx_end_2],
                     yerr=error[idx_start_2:idx_end_2], fmt='o', markersize=2, capsize=2, linewidth=1,
                     label='Data 2. histogram')
        ax3.plot(Time_axis[data_range] * 1000, fitted_curve[idx_start_2:idx_end_2], linewidth=1.5, label='Fit')
        ax3.set_xlabel(r'$\mathbf{t}$ [ns]', fontsize=13, fontweight='bold')
        ax3.set_ylabel(r'$\mathbf{N_0}$ [-]', fontsize=13, fontweight='bold')
        ax3.legend(loc='upper right')

        ax4.set_title(f'Residuals, E={-E_tuned_values[i]:.2f}', fontweight='bold', fontsize=13)
        ax4.plot(Time_axis[data_range] * 1000, residuals[idx_start_2:idx_end_2], label='Residuals')
        ax4.axhline(np.sqrt(N_0_fit[i]), color='green', linestyle='--', label='$\sigma_{N_0}$')
        ax4.axhline(-np.sqrt(N_0_fit[i]), color='green', linestyle='--')
        ax4.axhline(2 * np.sqrt(N_0_fit[i]), color='red', linestyle='--', label='$2\sigma_{N_0}$')
        ax4.axhline(-2 * np.sqrt(N_0_fit[i]), color='red', linestyle='--')
        ax4.set_xlabel(r'$\mathbf{t}$ [ns]', fontsize=9, fontweight='bold')
        ax4.set_ylabel(r'$\mathbf{N_0}$ [-]', fontsize=9, fontweight='bold')
        ax4.legend(fontsize='7', loc='upper right')

        plt.subplots_adjust(bottom=0.1, hspace=0.8)

        ### Save the figure ###
        figure_filename = file_names[int(i)]
        figure_path = os.path.join(save_folder, f'{figure_filename}.png')
        plt.savefig(figure_path, dpi=900)
        plt.close()  # Close the current figure to release memory

    ######################################
    ######################################

    return motion_time_shift_fit, time_resolution_fit, C_bcg_fit, absorption_shift, p_fit, A_bcg_fit, N_0_fit, \
        residuals_mean, chi_2_norm, motion_time_shift_unc, time_resolution_unc, C_bcg_unc, p_unc, A_bcg_unc, N_0_unc


##################################################################
############### select data and extract parameters ###############


folder_path = 'D:/xxx/'  # select a folder with files to fit
save_folder = 'D:/xxx/'  # select a folder for saving fits
parameter_file_path = 'D:/xxx/fited_param.txt'  # select a folder for saving fitted
# parameters
data_range = slice(100, 300)
E_tuned_values = []  # To store extracted E_tuned values
Vpp_values = []
signal_data_combined = []  # To store concatrated signal data
file_names = []

allowed_E_values = [13, 16.5]
allowed_Vpp_values = [8, 8.25]

for filename in os.listdir(folder_path):
    if filename.endswith('.sumdata'):
```

```
        match_E = re.search(r'E=([\d.]+)\.sumdata', filename)
        if match_E:
            extracted_value_E = float(match_E.group(1))
            if extracted_value_E in allowed_E_values:
                match_Vpp = re.search(r'Vpp=([\d.]+)_', filename)
                if match_Vpp:
                    extracted_value_Vpp = float(match_Vpp.group(1))
                    if extracted_value_Vpp in allowed_Vpp_values:
                        file_path = os.path.join(folder_path, filename)

                        ### Load data from the current file ###
                        data = np.loadtxt(file_path)

                        ### Process first time histogram ###
                        First_signal_data_1half = data[:, 5]
                        First_signal_data_2half = data[:, 6]
                        Histogram_1 = np.concatenate((First_signal_data_1half, First_signal_data_2half))
                        Histogram_1_cut = Histogram_1[data_range]
                        error1 = np.sqrt(Histogram_1_cut)

                        ### Process second time histogram ###
                        Second_signal_data_1half = data[:, 7]
                        Second_signal_data_2half = data[:, 8]
                        Histogram_2 = np.concatenate((Second_signal_data_1half, Second_signal_data_2half))
                        Histogram_2_cut = Histogram_2[data_range]
                        error2 = np.sqrt(Histogram_2_cut)

                        ### Data for fitting ###
                        signal_data = np.concatenate((Histogram_1_cut, Histogram_2_cut))

                        ### Store the signal data and extract E_tuned from the filename ###
                        signal_data_combined.append(signal_data)
                        E_tuned_str = re.search(r'E=([\d.]+)\.sumdata', filename)
                        if E_tuned_str:
                            E_tuned = float(E_tuned_str.group(1))
                            E_tuned_values.append(E_tuned)
                            print(f"Processed file: {filename}, E_tuned: {E_tuned}")
                        file_names.append(os.path.splitext(filename)[0])  # Append the filename to the list

                        ### Extract Vpp value ###
                        Vpp_str = re.search(r'Vpp=([\d.]+)_', filename)
                        if Vpp_str:
                            Vpp = float(Vpp_str.group(1))
                            Vpp_values.append(Vpp)

### Concatenate all the processed histograms ###
signal_data_combined = np.concatenate(signal_data_combined)

print('signal data combined len:', len(signal_data_combined))
print('E tuned values:', E_tuned_values)
print('Vpp values:', Vpp_values)

### Perform the fitting process after processing all files ###
motion_time_shift_fit, time_resolution_fit, C_bcg_fit, absorption_shift, p_fit, A_bcg_fit, N_0_fit, residuals_mean, \
    chi_2_norm, motion_time_shift_unc, time_resolution_unc, C_bcg_unc, p_unc, A_bcg_unc, N_0_unc = Fit_file(
    E_tuned_values, Vpp_values, signal_data_combined, save_folder, data_range)

parameter_names = ['E_tuned', 'V_pp', 'absorption_shift', 'time_resolution_fit', 'time_resolution_unc', 'p_fit',
                   'p_unc', 'C_bcg_fit', 'C_bcg_unc', 'A_bcg_fit', 'A_bcg_unc', 'N_0_fit', 'N_0_unc', 'residuals_mean',
                   'chi_2_norm']
parameter_file = open(parameter_file_path, 'a')
parameter_file.write(', '.join(parameter_names) + '\n')

for i in range(len(E_tuned_values)):
    i = int(i)  # Convert i to an integer

    ###  Create a list to hold the parameter values as strings  ###
    parameter_lines = [f'{E_tuned_values[i]}\t{Vpp_values[i]}\t{absorption_shift}\t{time_resolution_fit}'
                       f'\t{time_resolution_unc}\t{p_fit[i]}\t{p_unc[i]}\t{C_bcg_fit[i]}'
                       f'\t{C_bcg_unc[i]}\t{A_bcg_fit[i]}\t{A_bcg_unc[i]}\t{N_0_fit[i]}'
                       f'\t{N_0_unc[i]}\t{residuals_mean}\t{chi_2_norm}']

    ###  Write the parameter values in the subsequent lines  ###
    parameter_file.write(', '.join(parameter_lines) + '\n')

### Close the parameter file ###
parameter_file.close()

############################################################################
############################################################################

# Script:
# Jungling Tomas
# Stejskal Ales
```