Anleitung zur Bedienung von GammaSpekFit

Ziel des Programms:

Ausgleichen von Gauß-förmigen Linien in einem Spektrum.

Berechnung von Brutto-, Untergrund- und Nettoflächen der Linien in einem ROI, sowie Unsicherheit, Erkennungs- und Nachweisgrenze der Nettolinienflächen (alles nach DIN 25482 Teil 5 + Beiblatt).

Erzeugen von gnu-Dateien zum einfachen Erstellen von Graphen des Spektrums, des ROIs und der Statistik der Ausgleichung.

Erzeugen von txt-Dateien mit vollständiger Info über Ausgleichung

Erzeugen von txt-Dateien zum Einlesen der obigen Größen zur Liniennettofläche in das vorgefertigte Excel-Blatt.

• 1. Schritt (obsolet, da für den Praktikumsrechner bereits erledigt):

Lege Ordner GammaSpekFit auf dem Laufwerk <u>C:\</u> ab.

• 2. Schritt (nur bei erstmaliger Andwendung vorzunehmen; obsolet, da für den Praktikumsrechner bereits erledigt):

Öffne Datei "GammaSpekFit_settings.txt" und trage Startparameter ein:

1. Zeile: Laufwerksbuchstabe, also einfach nur "C", "D", ...

- 2. Zeile: Pfad bis zum Spektrenordner eingeben, also etwa: "<u>C:\Dokumente</u> und Einstellungen\Spektren"
- 3. Zeile: Spaltentyp der Datei

1cN	= 1 column – N
2cChnN	= 2 columns – Channel – N
2cEN	= 2 columns – Energy – N
3cChnNuN	= 3 columns – Channel – N – u(N)
3cENuN	= 3 colums – Energy – N – u(N)
spc	= *.spc File
chn	= *.chn File

4. Zeile Dateinamen-Dummy:

z.B. einfach "Test", später wird dort der Name der jeweils bearbeiteten Datei automatisch eingetragen.

5. Zeile: Energiekalib-Params a, b für E = a * Kanal + b, Startwerte sind a = 1 und b = 0. Parameter aus E-Kalib werden danach automatisch eingetragen und beim nächsten Start geladen.

- **3. Schritt:** Exe-File starten.
- **4. Schritt:** Evtl. Laufwerk + Ordner einstellen und Datei auswählen.
- 5. Schritt: Dateityp auswählen
- **6. Schritt:** Reset-File-List Button klicken (Optional)
- **7. Schritt:** Open-File Button klicken → Spektrum wird geladen.
- **8. Schritt:** Linie aus Spektrum vergrößern (Mit Mauszeiger in Hauptdiagramm gehen, linke Maustaste gedrückt halten und von oben rechts nach unten links ziehen. Um das Zoomen rückgängig zu machen, von unten rechts nach oben links ziehen.).
- **9. Schritt**: Radiobutton FWHM aktivieren und 2 Marker in Linie setzen.
- **10. Schritt:** Radiobutton Zentroid aktivieren und an die Peakmitten der auszugleichenden Peaks Marker setzen.
- **11. Schritt**: Radiobutton ROI aktivieren und 2 Marker für ROI-Grenzen setzen (makierte Peaks müssen darin liegen).
- **12. Schritt:** Deconvolution Button drücken und staunen.

Das Programm legt drei Unterordner an: einen mit ladbaren gnu-Dateien für die graphische Darstellung des ROI, des Spektrums und der Statistik der Ausgleichung; einen weiteren mit vollständiger Dokumentation der Ausgleichung und einen weiteren für das Laden der relevanten Daten in das Excel-Blatt "Peak_data_creator.xls". Damit das Excel-Blatt funktioniert, müssen die gnu-Dateien mit gnuplot ausgeführt worden sein, da es den ROI mit ausdruckt.

Bei der Energiekalibrierung jeweils nur an eine Linie eine Gaußfunktion anpassen, dann Button Write-one-peak-params-to-calib drücken und dann in die erste Input-Box die Energie eingeben, in die zweitedie Energieunsicherheit oder einfach eine 1.

Wenn an alle Energiekalibrierungslinien nacheinander Gaußfunktionen angepasst worden sind, Button "Energy calibration" drücken, dort auf "Fit".

Bediendung Excelblatt "Peak_data_creator.xls"

- 1. Schritt: Drücke Button Load-file-list.
- 2. Schritt: Klicke auf einen Eintrag der File-List (Enthält Dateinamen des Spektrums)
- 3. Schritt: Drücke Button Load-selected-file

Viel Spaß damit!