

**РАЗРАБОТКА АЛГОРИТМА ДЛЯ АНАЛИЗА СПЕКТРОВ ДОПЛЕРОВСКОГО УШИРЕНИЯ
АННИГИЛЯЦИОННОЙ ЛИНИИ ПОЗИТРОНА**Чжэн Кэли

Научный руководитель: ассистент, Ю.С. Бордулев

Национальный исследовательский Томский политехнический университет,

Россия, г. Томск, пр. Ленина, 30, 634050

Электронная почта: keli1@tpu.ru**DEVELOPMENT OF ALGORITHM FOR ANALYSIS OF DOPPLER BROADENING OF POSITRON
ANNIHILATION LINE**Zheng Keli

Scientific Supervisor: Assistant, Yu.S. Bordulev

Tomsk Polytechnic University, Russia, Tomsk, Lenin str., 30, 634050

E-mail: keli1@tpu.ru

***Abstract.** In the present study, we performed an algorithm for data analysis of Doppler broadening spectrum of positron annihilation line. This algorithm can handle the data, got with system DBS and CDBS. It involves things like background removal, error evaluation, and calculation of S and W parameters, plotting of Ratio curves and so on. Based on this algorithm, we developed a program named Positron Spector with GUI frontend for normal use. In the program, this algorithm is implemented in Python with common libraries for scientific computing.*

Введение. Метод аннигиляции позитронов – это технология, основанная на применении позитронов в материаловедении и физике твёрдого тела. Этот метод включает множество экспериментальных методов. Данная работа связана с разработкой алгоритма для анализа спектров доплеровского уширения аннигиляционной линии (ДУАЛ).

Данный метод широко используется во многих отраслях. Он применяется для исследования дефектов, такие как вакансии, дислокации и кластеры вакансий в решётке, сформированные методами деформации, усталости, закалки, облучения, насыщением водорода и т. д., а также эффект отжига этих дефектов. Также, данный метод может быть применён для определения зонной структуры, плоскости Ферми и энергии формирования вакансий [1].

Метод аннигиляции позитронов имеет много преимуществ. Во-первых, основное его преимущество – очень высокая чувствительность к вакансиям. Данный метод является одним из немногих методов, которые могут исследовать дефекты в атомном масштабе. Во-вторых, этот метод не разрушает вещество и применяется почти ко всем материалам. Исследуемый материал может быть твёрдым телом, газом, металлом, полупроводником, изолятором или полимером. Кроме этого, этот метод не требует погружения исследуемого материала в экстремальную среду (вакуум, высокие и низкие температуры и т. д.) [2].

Метод аннигиляции позитронов требует обработку объёмных данных, например спектров времени жизни позитронов или спектров энергии излучения. Однако, в настоящий момент имеется ограниченное количество программного обеспечения для обработки таких данных. Существующие программы, либо не

обладают всеми нужными функциями, либо обладают какими-то проблемами. Некоторые из них уже со временем устарели. Кроме этого, большинство из этих программ не открытые, т. е. исходный код не доступен. Без исходного кода мы не можем точно узнать принцип работы. Это в некоторой степени снижает достоверность результатов.

Один из способов решения данной проблемы – использовать научную вычислительную среду (например MATLAB, Jupyter Notebook и т. д.) для обработки данных напрямую. Однако, для этого требуется высокий уровень программирования, которым не обладают множество исследователей. Кроме этого, это не является удобным, потому что каждый раз необходимо вручную настраивать параметры.

Исходя из этого, вытекает необходимость создания программного обеспечения для этого метода. Программное обеспечение должно иметь более открытую архитектуру, позволяя людям легко добавлять или изменять функции. Кроме того, исходный код будет открыт в интернете, позволяя людям узнать подробный принцип работы. Кроме этого, в разрабатываемой системе добавлены новые, не реализованные ранее функции, такие как автоматическое определение диапазона координат, используемого для расчёта S- и W-параметров, соответствие между номером канала и значением энергии, и т. д.

Краткое описание алгоритма. На Рис. 1 показана схема алгоритма. Весь алгоритм делится на две части – обработка спектров и расчёт нужных результатов. Алгоритм в основном реализован на языке программирования Python, что гарантирует читаемость кода.

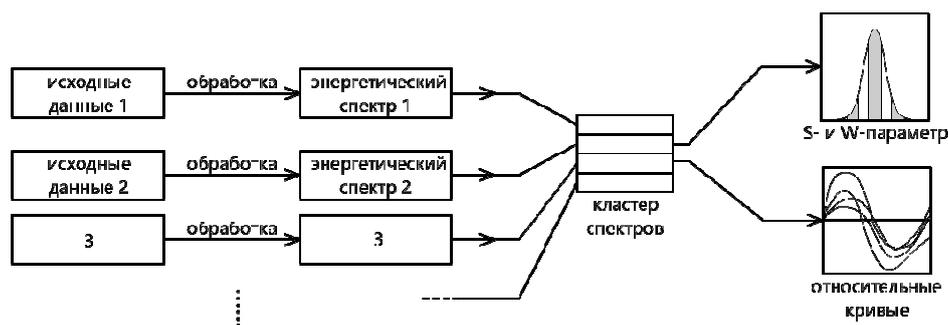


Рис. 1. Схема алгоритма

В первой части, обработка исходных данных каждого спектра проводится отдельно. Обработка включает в себя форматирование и масштабирование спектра, удаление фона, оценка разрешения, оценка погрешности и т. д. Исходя из типа данных, обработка проводится по-разному. Например, для данных CDBS необходимо объединить два спектра в один, или вырезать трёхмерный спектр в двухмерный. После обработки получаем «чистый» энергетический спектр аннигиляционных γ -квантов с погрешностью.

В исследованиях нам необходимо сравнить спектры друг с другом. При этом дальнейшая обработка требует единых параметров для всего набора данных. Поэтому во второй части, мы объединяем обработанные спектры и проводим обработку всей совокупности. По требованию мы можем получить результат как S- и W-параметра, относительных значений S- и W-параметра, так и относительные кривые. На каждом шаге обработки данных пользователь может настроить соответствующие параметры, чтобы улучшить результаты или привести к соответствию с другими исследованиями.

Интерфейс пользователя. Пока активно разрабатывается программа «PositronSpector» с интерфейсом пользователя, основанным на библиотеке «tkinter» на языке Python.

Как показано справа на Рис. 2, эта программа может показывать результаты каждого этапа обработки в качестве диаграммы. Таким образом программа позволяет нам удобно настроить параметры с наблюдением промежуточных результатов.

Исходный код программы доступен на сайте: <https://github.com/ZhengKeli/PositronSpector>

Тестирование и практика. Проведено тестирование для проверки программы, при котором мы рассчитали S- и W-параметры серии спектров с разной концентрацией водорода и построили диаграмму зависимости S- и W-параметров от концентрации водорода. Потом провели расчёт с одним и теми же данными и параметрами, но с помощью существующей программы SP-11, написанной Jerzy Dryzek [3]. Результаты показаны на Рис. 3.

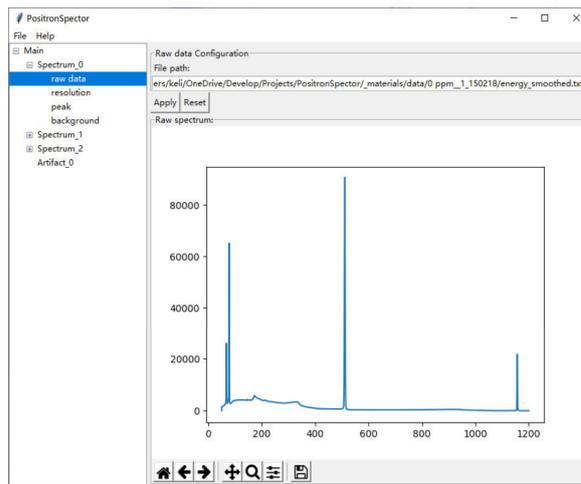
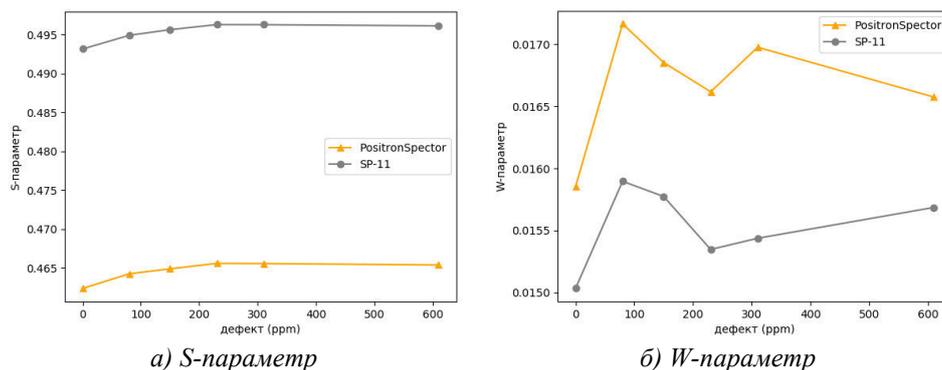


Рис. 2. Интерфейс пользователя



а) S-параметр

б) W-параметр

Рис. 3. Сравнение S- и W-параметров

Видно, что флуктуация двух кривых в основном одинакова, что подтверждает правильность расчёта. Общая кривая слегка смещена, что вызвано нюансом оценки фона.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Y. Weizhong, W. Ziqin и Y. Guozhen (2007). Positron physics and its applications. Beijing: China Science Publishing & Media Ltd.
2. R. Krause-Rehberg и H. S. Leipner (1973). Positron Annihilation in Semiconductors. Friedemann-Bach-Platz 6 D-06108 Halle. Germany: Springer.
3. J. Dryzek, «SP code,» [Electronic version]. Available: https://ifj.edu.pl/private/jdryzek/page_r18.html.