

## ВИРТУАЛЬНЫЙ СПЕКТРОМЕТР ВРЕМЕНИ ЖИЗНИ ПОЗИТРОНОВ НА ОСНОВЕ СИМУЛЯТОРА

© 2023 г. В. П. Шантарович<sup>1\*</sup>, Ю. А. Новиков<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н.Н. Семёнова Российской академии наук, Москва, Россия

<sup>2</sup>Институт общей физики им. А.М. Прохорова Российской академии наук, Москва, Россия

\*E-mail: nua@kapella.gpi.ru; shant@chph.ras.ru

Поступила в редакцию 18.10.2022;

после доработки 15.11.2022;

принята в печать 21.11.2022

В работе рассмотрены основные принципы создания виртуального спектрометра времени жизни позитронов. Обсуждается возможность использования такого виртуального прибора для верификации данных о распределении микропор по размерам, полученных на основании реально измеренных аннигиляционных характеристик в системах с развитым свободным объемом.

*Ключевые слова:* позитрон, аннигиляция, виртуальный прибор, микропоры, обратная задача, корректность решения.

DOI: 10.31857/S0207401X23050114, EDN: PCBUTZ

### ВВЕДЕНИЕ

Ядерно-химический позитронный метод исследования, импульс в развитии которого в России в 60-х годах прошлого века дал известный ученый академик В.И. Гольданский [1], и в наше время остается весьма уникальным. Тем не менее позитронные измерения дают полезную и недоступную иным методам информацию о микроструктуре конденсированных систем, об особенностях, определяющих многие физико-химические свойства материалов. Настоящую публикацию, связанную с особенностями позитронных измерений, мы посвящаем 100-летию со дня рождения В.И. Гольданского.

Измерения являются основой науки, техники и технологии. Поэтому все новейшие достижения науки и техники применяются для создания измерительных приборов. Особенно тех, у которых визуальные представления выходной информации затруднены. Одним из таких приборов является спектрометр времени жизни позитронов (ВЖП) [1–6].

Спектрометр времени жизни позитронов с использованием метода аннигиляции позитронов позволяет исследовать свободные объемы (микропоры) в различных веществах в диапазоне размеров от нескольких ангстрем до нескольких нанометров. Необходимо отметить, что этот диапазон размеров пор с некоторыми допущениями перекрывается в настоящее время лишь при ис-

пользовании метода низкотемпературной сорбции газов, и в этом смысле комбинация двух методов оказывается уникальной и взаимодополняющей [6–8].

Трудность визуального представления информации в методе аннигиляции позитронов заключается в том, что в результате измерения получают не характеристику объекта, а измерительную информацию, в которой содержатся измеряемые характеристики. Для их получения используется решение обратной задачи, которая в большинстве случаев является некорректной. Некорректность решения обратной задачи не позволяет убедительно доказать, что полученный при ее решении результат правильно воспроизводит характеристики исследуемого объекта. Как же в этих условиях подойти к верификации получаемых решений? Интересно было бы применять различные методики решения к разным задачам, правильный ответ для которых заранее известен. Помочь здесь могут компьютерные технологии.

Практически все современные измерительные приборы работают под управлением компьютеров. Однако компьютеры можно использовать и в другом качестве – как материальные носители виртуальных измерительных приборов [9–11]. Настоящая работа посвящена описанию конструкции виртуального спектрометра времени жизни позитронов, позволяющего верифицировать информацию, получаемую на реальном спектрометре време-

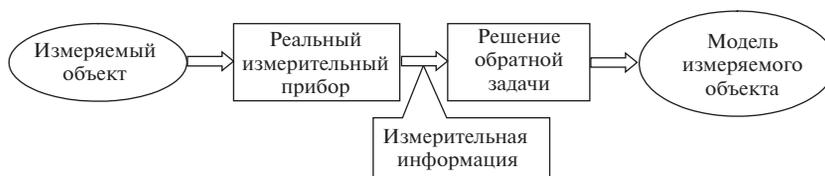


Рис. 1. Общая схема измерений характеристик измеряемого объекта с помощью реальных измерительных приборов.

ни жизни позитронов, и описанию применения виртуального спектрометра в разных работах.

### РЕАЛЬНЫЕ И ВИРТУАЛЬНЫЕ ИЗМЕРИТЕЛЬНЫЕ ПРИБОРЫ

Виртуальный измерительный прибор (ВИП) [9–11] – это компьютерная программа, которая с использованием входных данных, воспроизводящих характеристики объекта, исследуемого на реальном измерительном приборе, генерирует выходные данные, аналогичные выходным данным реального измерительного прибора (РИП).

Виртуальный ИП отличается от обычных компьютерных программ, моделирующих физические процессы, происходящие в реальных измерительных приборах, в основном своей целью. Цель обычного моделирования – установление физических явлений, процессов и механизмов, осуществляемых в процессе исследования объекта измерения. У виртуального измерительного прибора другая цель. Она заключается в верификации решения некорректной обратной задачи, состоящей в определении характеристик измеряемого объекта. Поэтому в качестве ВИП можно использовать программы, реализующие обычное моделирование, если они для своей работы занимают малое время.

#### Реальные измерительные приборы

Для того чтобы понять работу виртуальных измерительных приборов, сначала рассмотрим общую схему работы реальных измерительных приборов [9, 10]. Она представлена на рис. 1. Измеряемый объект помещается в реальный измерительный прибор. В результате измерения получают не характеристики объекта, а измерительную информацию, в которой содержатся измеряемые характеристики. Для их получения используется решение обратной задачи – по измерительной информации определяются измеряемые характеристики, и строится модель измеряемого объекта с измеренными характеристиками. Однако решение обратной задачи имеет одну трудность [9, 10]. Она заключается в том, что обратная задача в большинстве случаев является некорректной.

Все задачи (прямые и обратные) делятся на два класса – корректные и некорректные [9, 10, 12–16].

Корректной задачей называется такая задача, в которой увеличение точности входной информации приводит к гарантированному увеличению точности выходной информации. У некорректной задачи увеличение точности входной информации не гарантирует увеличение точности выходной информации – последняя может улучшиться, ухудшиться или не измениться. Причем не удается установить, что на самом деле произошло. Некорректность решаемой обратной задачи не позволяет убедительно доказать, что полученный при решении этой задачи результат правильно воспроизводит характеристики исследуемого объекта.

В настоящее время для решения некорректных обратных задач используются три метода:

- 1) поиск диапазона корректности;
- 2) коррекция решения задачи в процессе самого решения;
- 3) использование виртуальных измерительных приборов.

Подробное рассмотрение этих методов приведено, например, в работах [9, 10]. В настоящей работе рассмотрим только третий метод.

#### Виртуальные измерительные приборы

Схема работы виртуального и реального измерительных приборов в процессе измерения показана на рис. 2 [9, 10]. Она состоит из двух ветвей – реальной и виртуальной.

Реальная ветвь совпадает с общей схемой измерений (см. рис. 1). Виртуальная ветвь подобна реальной, но в ней все реальные составляющие заменены на виртуальные. Связь реальной и виртуальной ветвей осуществляется в трех местах (см. рис. 2). Во-первых, выходные данные реальной ветви являются входными данными виртуальной. Во-вторых, метод решения обратной задачи и параметры этого метода являются общими для реальной и виртуальной ветвей измерений. В-третьих, решение о правильности выполнения измерительной задачи осуществляется путем сравнения моделей измеряемого и виртуального объектов. Работает новая общая схема измерений следующим образом.

Реальный измерительный прибор проводит измерения некоторых характеристик объекта из-

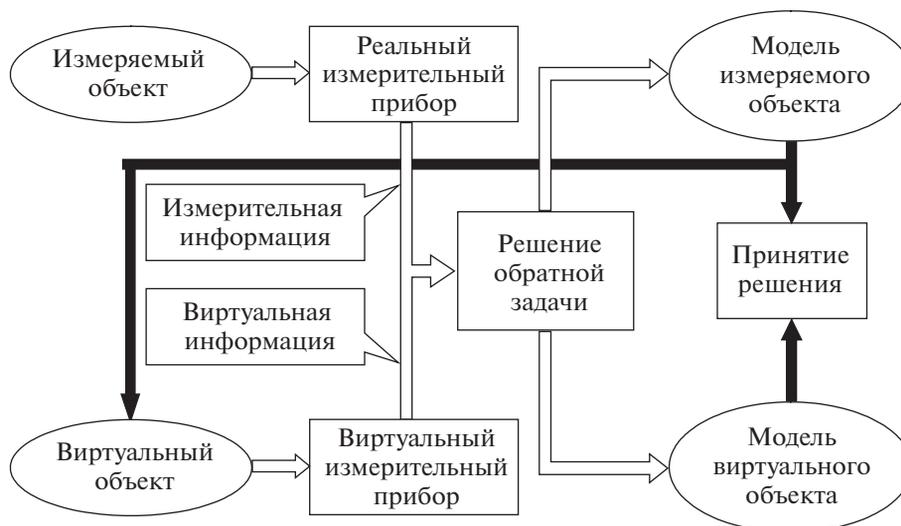


Рис. 2. Общая схема работы реального и виртуального измерительных приборов в процессе измерений.

мерений. В результате работы РИП получается измерительная информация об измеряемых характеристиках объекта. Параметры этих характеристик определяют из решения обратной задачи. В результате этого процесса получается модель объекта измерений с его измеренными характеристиками. Так как модель была получена в результате решения в общем случае некорректной задачи, то требуется доказательство правильности модели (правильности решения некорректной задачи). Это доказательство предоставляет работа виртуального измерительного прибора.

На основе полученной модели объекта измерений создается виртуальный объект (см. рис. 2), который используется виртуальным измерительным прибором для получения виртуальной информации, аналогичной реальной, получаемой на реальном измерительном приборе. Далее эта виртуальная информация используется для решения обратной задачи тем же методом и при тех же параметрах метода, что и при обработке измерительной информации. В результате этого получается модель виртуального объекта. Сравнивая между собой модели измеряемого и виртуального объектов, можно принять решение о достоверности решения задачи измерения характеристик измеряемого объекта, если эти модели совпадают.

В противном случае проводится новое решение обратной задачи для измерительной информации другим методом или при других параметрах метода решения обратной задачи и строятся новая модель измеряемого объекта и новый виртуальный объект. Далее получается новая виртуальная информация, решается обратная задача при новом методе решения обратной задачи и строится новая модель виртуального объекта. И

так проводится до тех пор, пока модели измеряемого и виртуального объектов не совпадут.

Если же совпадений не будет достигнуто, то необходимо менять реальный измерительный прибор и его виртуальный аналог. Далее вновь проводятся измерения на новом измерительном приборе и новом виртуальном измерительном приборе так, как это было описано выше.

Отметим, что отличие виртуальной информации от измерительной заключается в том, что в случае виртуальной информации мы знаем, какой объект имеется на входе виртуального измерительного прибора и каковы характеристики этого объекта. А в случае измерительной информации мы не знаем, какой объект был на входе реального измерительного прибора. Поэтому применение ВИП является гарантией правильности решения обратной некорректной задачи и, следовательно, всего измерительного процесса в целом.

## ИЗМЕРЕНИЕ СПЕКТРА ВРЕМЕНИ ЖИЗНИ ПОЗИТРОНОВ

Рассмотрим физические процессы, с помощью которых проводятся измерения времени жизни позитронов в твердых телах, а также конструкцию и работу реального измерительного прибора, на котором реализованы эти процессы.

### *Физические процессы, используемые для измерения времени жизни позитронов*

Для измерения времени жизни позитронов в веществе обычно используется  $\beta$ -распад радиоактивного источника  $^{22}\text{Na}$  (период полураспада – 2.6 года, энергия  $\beta$ -распада – 0.54 МэВ) [1–3]. Схема  $\beta$ -распада имеет два ветви – распад на ос-

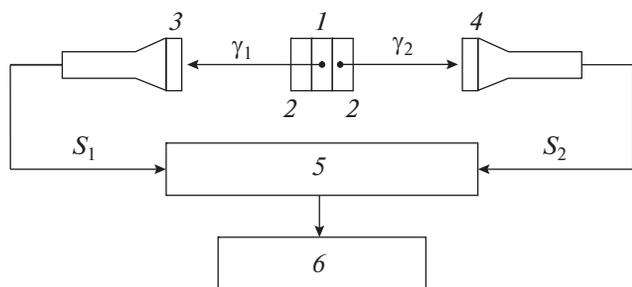


Рис. 3. Схема установки для измерения времени жизни позитронов (подробности см. в тексте).

новное ( $\beta_1$ ) состояние конечного ядра  $^{22}\text{Ne}$  и на возбужденное состояние ( $\beta_2$ ) [3, 17]. Для измерения времени жизни позитронов используется распад на возбужденное состояние  $^{22}\text{Ne}^*$  с последующим испусканием ядерного  $\gamma$ -кванта ( $\gamma_1$ ) с энергией 1.28 МэВ.

Суть метода определения времени жизни позитронов заключается в измерении скорости счета запаздывающих совпадений между ядерным  $\gamma$ -квантом 1.28 МэВ, который дает начало отсчета времени (старт-сигнал), и одним из аннигиляционных  $\gamma$ -квантов с энергией 0.511 МэВ ( $\gamma_2$ ), испущенных при аннигиляции позитрона в исследуемом веществе (стоп-сигнал). Позитрон и ядерный  $\gamma$ -квант испускаются практически одновременно. Далее позитроны замедляются до тепловых энергий [1–3] и диффундируют [13–16] до аннигиляции. Время термализации позитронов составляет  $\sim 10$  пс [1–3, 16]. Таким образом, регистрация ядерного  $\gamma$ -кванта служит сигналом попадания позитрона в среду, а аннигиляционный  $\gamma$ -квант свидетельствует об аннигиляции позитрона.

#### Установка измерения времени жизни позитронов

Схема установки измерения времени жизни позитронов приведена на рис. 3. Радиоактивный источник 1 с интенсивностью излучения 0.5–1 МБк испускает позитроны, которые попадают в исследуемое вещество 2 и аннигилируют в нем. При помощи двух сцинтилляционных детекторов 3 и 4 регистрируются стартовый,  $\gamma_1$ , и стоповый,  $\gamma_2$ , кванты. Детекторы генерируют сигналы  $S_1$  и  $S_2$ , которые привязаны во времени к испусканию соответствующих  $\gamma$ -квантов. Интервал времени между этими событиями измеряется с помощью системы блоков наносекундной электроники, включающей детекторы нуля во временных каналах, блоки амплитудного анализа и конвертор 5 (рис. 3), преобразующий интервал времени в амплитуду сигнала. Спектр временного распределения аннигиляционных фотонов регистрируется многоканальным анализатором импульсов 6.

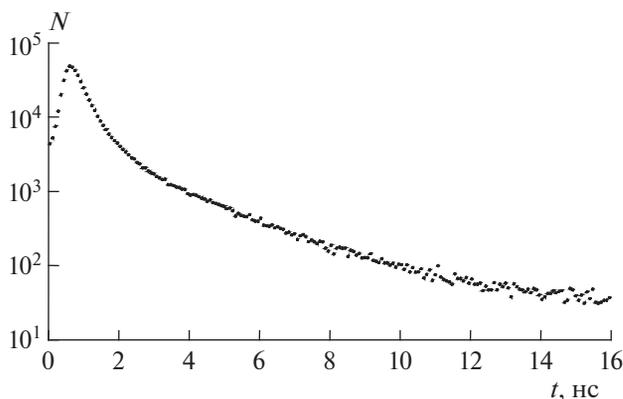


Рис. 4. Спектр задержанных совпадений в ПММА.

Пример спектра задержанных совпадений в полиметилметакрилате (ПММА) показан на рис. 4. Он демонстрирует, что в полимерных материалах позитроны живут очень долго (до 16 нс и более), в то время как время жизни позитронов в кремнии лежит в диапазоне 0.2–0.3 нс. Наблюдаемый спектр обычно является суперпозицией нескольких спектров с различными временами жизни и может быть представлен в виде [13–15]

$$N(t) = A \int R(t, r) \sum_{j=1}^n (I_j / \tau_j) \exp\{-(t-r)/\tau_j\} dr, \quad (1)$$

где  $n$  — число компонент в спектре,  $\tau_j$  — время жизни позитронов в веществе,  $I_j$  — доля позитронов с этим временем жизни,  $A$  — нормировочная константа,  $R(t, r)$  — приборная функция установки измерения ВЖП. Полуширина (ширина на половине высоты) приборной функции для большинства современных установок лежит в диапазоне 0.2–0.5 нс. Обработка спектров — определение числа компонент  $n$  в спектре, времен жизни  $\tau_j$  и вкладов  $I_j$  этих времен, осуществляется на компьютерах (как правило, используются программы RATFIT [18], CONTIN [19] или MELT [12]), что позволяет определять времена жизни позитронов в веществе, лежащие в диапазоне от 0.1 до нескольких десятков наносекунд.

#### Связь времени жизни позитронов с размерами пор

Время жизни позитронов в веществе определяется пространственной плотностью электронов в районе аннигиляции позитронов, а также тем обстоятельством, что часть позитронов может образовывать связанную систему позитрон–электрон, называемую позитроний ( $P_s$ ). Из-за ван-дер-ваальсового взаимодействия электрона позитрония со средой атом  $P_s$  стремится локализоваться в поре. В районе поры электронная плотность уменьшается, а время жизни позитрония увеличивается, так как определяется размером поры [20, 21]. С исполь-

зованием сферического приближения формы поры связь между временем жизни позитрония в наносекундах и размером поры описывается полуэмпирической формулой Тао–Элдрупа [21]:

$$\tau = \frac{1}{2} \left[ 1 - \frac{R}{R + \Delta R} + \frac{1}{2\pi} \sin \left( \frac{2\pi R}{R + \Delta R} \right) \right]^{-1}, \quad (2)$$

где  $R$  – радиус поры,  $\Delta R = 0.166$  нм – толщина электронного слоя. Как видно из выражения (2), метод временного распределения аннигиляционных фотонов позволяет получать информацию о размерах дефектов вещества.

Вообще, измерение параметров временных аннигиляционных спектров (средние времена жизни  $\tau_j$  и интенсивности  $I_j$ ) дает возможность судить о природе позитронных состояний и механизме аннигиляции позитронов в среде, а тем самым – и о свойствах самой среды.

### ВИРТУАЛЬНЫЙ СПЕКТРОМЕТР ВРЕМЕНИ ЖИЗНИ ПОЗИТРОНОВ

В настоящее время существует два типа компьютерных программ, с помощью которых можно создать виртуальные измерительные приборы. Они основаны на имитации или симуляции работы реального измерительного прибора [9–11].

Имитация – от латинского слова “*imitatio*” – подражание. Это моделирование некоторых (основных) действий, происходящих в реальном измерительном приборе в процессе измерения, – моделирование процесса работы измерительного прибора.

Симуляция [9, 11] – от латинского слова “*simulatio*” – видимость, притворство. Симуляция – это моделирование основных свойств реального процесса без имитации его действия.

Симуляция возможна только тогда, когда известна функциональная связь входной и выходной информации решаемой задачи. Обычно это выражается в виде соответствующих уравнений, связывающих входную и выходную информацию. При симуляции моделирование процесса работы реального прибора не происходит. Компьютерная программа создает только информацию, аналогичную информации, получаемой на реальном измерительном приборе, за время, сравнимое со временем получения информации на реальном приборе.

Для создания виртуального спектрометра ВЖП можно использовать как имитатор, так и симулятор.

#### *Виртуальный спектрометр времени жизни позитронов на основе имитатора*

Имитатор строится на основе метода статистического моделирования, более известного как ме-

тод Монте-Карло [22, 23]. Этот метод моделирует движение позитрона в веществе до аннигиляции и саму аннигиляцию. Поэтому при его использовании необходимо знать, как взаимодействуют позитроны с веществом. Эти взаимодействия можно разделить на четыре вида:

- 1) торможение позитронов в веществе [1–3];
- 2) диффузия позитронов в веществе [24, 25];
- 3) взаимодействие медленных позитронов с веществом [1–3, 24];
- 4) аннигиляция позитронов в веществе [1–3].

Все эти виды взаимодействия позитронов с веществом достаточно хорошо изучены. Однако при исследовании пористых веществ возникают большие трудности при моделировании методом Монте-Карло [22, 23]. Не вполне ясно, как расположить поры в веществе. А для метода Монте-Карло это очень важно. Кроме того, возникают сложности с наличием необходимого количества случайных чисел и большим временем моделирования [9, 11] даже на современных персональных компьютерах.

Все эти трудности удается обойти, если для создания виртуального спектрометра времени жизни позитронов использовать симулятор.

#### *Виртуальный спектрометр времени жизни позитронов на основе симулятора*

При создании виртуального спектрометра ВЖП методом симуляции необходимо знать функциональную связь входных параметров прибора (время жизни позитронов) и его выходных параметров (кривая задержанных совпадений). Эта связь хорошо известна. Она описывается выражением (1). Поэтому виртуальный спектрометр ВЖП был создан на основе симулятора.

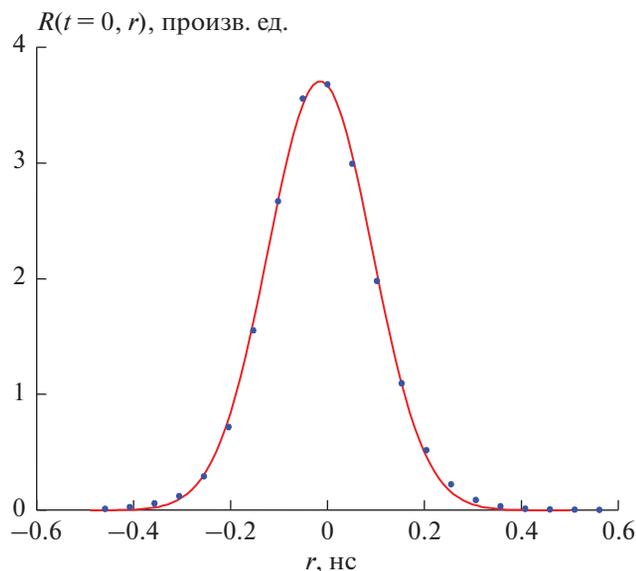
Генерируемый виртуальным спектрометром времени жизни позитронов спектр задержанных совпадений описывается выражением

$$N(t) = A \int R(t, r) [(1 - B) N_I(t, r) + B N_S(t, r)] dr + F. \quad (3)$$

Здесь  $A$  – нормировочная константа,  $R(t, r)$  – приборная функция реального спектрометра ВЖП,  $N_I(t, r)$  – величина аннигиляции позитронов в исследуемом образце,  $N_S(t, r)$  – величина аннигиляции позитронов в источнике,  $B$  – величина вклада аннигиляции позитронов в источнике, а  $F$  задает среднее значение величины фона реального спектра.

Аннигиляция позитронов в источнике описывается выражением

$$N_S(t, r) = \sum_{i=1}^m (J_i / \tau_i) \exp \{ -(t - r) / \tau_i \}, \quad (4)$$



**Рис. 5.** Приборная функция  $R(t=0, r)$  установки, использовавшейся для измерения времени жизни позитронов. Точки соответствуют форме, экспериментально измеренной с использованием радиоактивного источника  $^{60}\text{Co}$ , а кривая является наилучшим приближением при однокомпонентном описании (8).

где  $m$  — количество компонент,  $\tau_i$  — времена жизни, а  $J_i$  — величины вкладов этих времен. Параметры аннигиляции позитронов в источнике (количество компонент, времена жизни, величины вкладов этих времен и вклад аннигиляции позитронов в источнике) определяются конкретным реальным спектрометром ВЖП, на котором проводятся реальные измерения. Они являются постоянными величинами при генерации всех спектров на данном виртуальном спектрометре. В нашем конкретном случае  $\tau_1 = 0.1529$  нс,  $J_1 = 85.8815\%$ ,  $\tau_2 = 0.4302$  нс,  $J_2 = 14.1185\%$ . Доля аннигиляции в материале источника  $B = 18\%$ .

Для монохроматических линий аннигиляция в исследуемом образце определяется выражением

$$N_I(t, r) = \sum_{j=1}^n (I_j/\tau_j) \exp\{-(t-r)/\tau_j\}, \quad (5)$$

где  $n$  — количество компонент,  $\tau_j$  — времена жизни, а  $I_j$  — величины вкладов этих времен.

В случае непрерывного распределения времен жизни позитронов это распределение описывается линиями с гауссовой формой:

$$g_j(r, s_j, \sigma_j) = \frac{1}{\sigma_j\sqrt{2\pi}} \exp\left\{-\frac{(r-s_j)^2}{2\sigma_j^2}\right\}, \quad (6)$$

где  $s_j$  — положение, а  $\sigma_j$  — ширина гауссиана. Тогда аннигиляция в исследуемом образце определяется выражением

$$N_I(t, r) = \sum_{j=1}^n \int (I_j/\tau_j) g_j(r, s_j, \sigma_j) \exp\{-(t-r+s_j)/\tau_j\} ds_j. \quad (7)$$

Приборная функция  $R(t, r)$  виртуального спектрометра ВЖП определяется приборной функцией реальной установки. В описываемом виртуальном спектрометре она может быть задана тремя способами:

- экспериментально измеренной приборной функцией, заданной в виде таблицы;
- параметрами непрерывной функции, лучше всего описывающей экспериментально измеренную приборную функцию;
- задаваемыми пользователем параметрами непрерывной функции, описываемой несколькими гауссовыми кривыми, сдвинутыми друг относительно друга.

В нашем случае приборную функцию реального спектрометра аналитически описывали суммой гауссовых кривых, сдвинутых друг относительно друга:

$$R(t, r) = \sum_{i=1}^k \frac{C_i}{\sigma_i\sqrt{2\pi}} \exp\left\{-\frac{(t-r+t_i)^2}{2\sigma_i^2}\right\}, \quad (8)$$

где  $k$  — число гауссовых компонент,  $t_i$  — положение гауссиана,  $\sigma_i$  — ширина гауссиана,  $C_i$  — вклад гауссиана. Оказалось, что приборную функцию установки Института химической физики РАН (спектрометр ВЖП) можно описать однокомпонентной кривой с  $r = -0.015$  нс,  $\sigma = 0.1075$  нс (рис. 5). Форма приборной функции нормирована в соответствии с выражением

$$\int R(t=0, r) dr = 1. \quad (9)$$

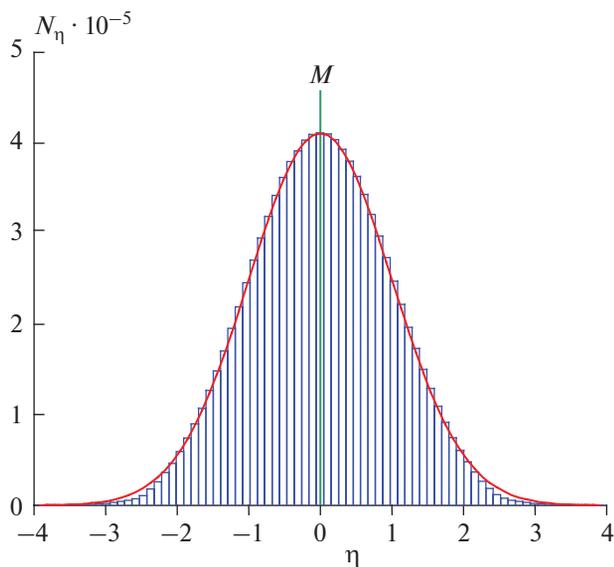
Нормировочная константа  $A$  в выражении (3) выбирается из условия

$$\int N(t) dt = N_0, \quad (10)$$

где  $N_0$  — сумма отсчетов по всем каналам реального спектра. Кроме того, в спектр вводится случайный разброс данных  $\Delta N$ , описываемый формулой

$$\Delta N(t) = \eta[N(t)]^{1/2}. \quad (11)$$

Здесь  $\eta$  — псевдослучайные [9, 10] (далее — случайные) числа с нормальным распределением. В качестве генератора случайных чисел в настоящей работе используется генератор, входящий в математическую библиотеку языка программирования FORTRAN и имеющий периодичность [9, 10] в 30 миллионов случайных чисел. На рис. 6 приведена гистограмма распределения 10 миллионов случайных чисел с нормальным распределением. На это распределение наложена гауссова функция со средним значением  $M = 0$ , стандарт-



**Рис. 6.** Гистограмма распределения  $10^7$  псевдослучайных чисел с нормальным распределением, полученных генератором, входящим в математическую библиотеку языка программирования FORTRAN, и наложенное на гистограмму нормальное распределение.

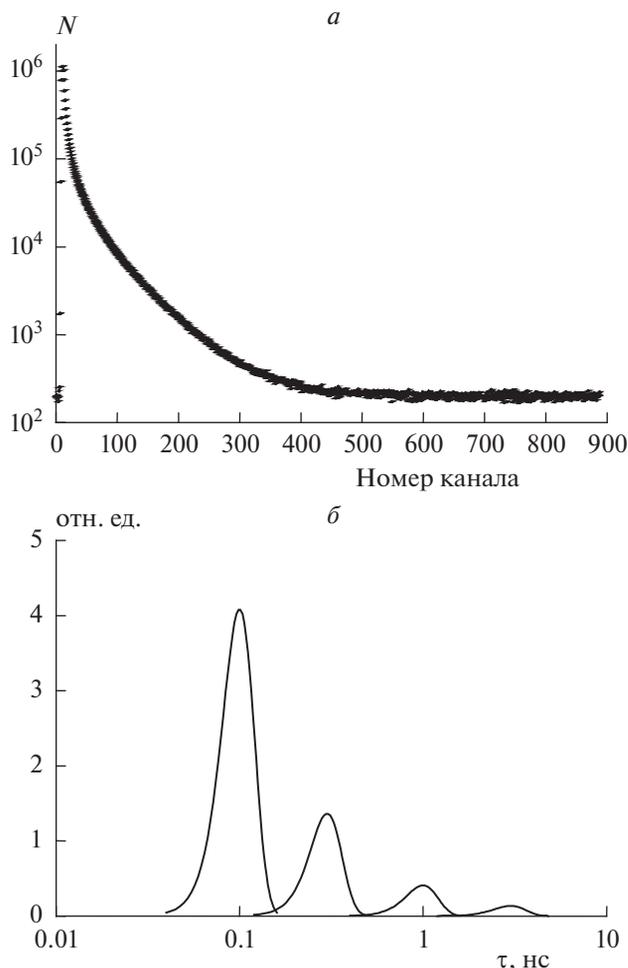
ным отклонением  $\sigma = 1$  и интегралом, равным 10 миллионам. Видно, что гистограмма хорошо описывается нормальным распределением. Это указывает на достаточно хорошие свойства используемого генератора случайных чисел.

После ввода случайного разброса данных опять проводится нормировка спектра с использованием выражения (10). Оканчивается генерация спектра округлением значений до целых чисел.

В качестве задаваемых пользователем исходных данных виртуального спектрометра ВЖП (см. выражение (5) для монохроматических линий) используются: число  $n$  компонент времени жизни позитронов, времена жизни  $\tau_i$  и интенсивности  $I_i$  компонент спектра. Для линий с гауссовыми распределениями (7) во входные данные добавляются ширины гауссианов  $\sigma_i$ . Это позволяет проверить правильность определения времен жизни позитронов как с помощью программы RATFIT [18] (дает информацию о монохроматических временах жизни), так и с помощью программы CONTIN [19] (дает информацию о непрерывных распределениях времен жизни позитронов). Такую же информацию, но при меньшей необходимой статистике, может дать и MELT [12].

### РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Примеры работы виртуального спектрометра времени жизни позитронов, реализованного на основе симулятора, показаны на рис. 7. На рис. 7а показаны сгенерированные спектры задержан-



**Рис. 7.** а – Спектр задержанных совпадений, полученный при четырех распределенных по Гауссу временах жизни; б – распределения времен жизни позитрония, цена одного канала анализатора – 0.051 нс. Параметры распределений приведены в тексте.

ных совпадений, задаваемые распределенными по Гауссу временами жизни, а рис. 7б демонстрирует сами распределения времен жизни позитронов. Параметры спектров выбирались следующими:  $\tau_1 = 0.1$ ,  $\tau_2 = 0.3$ ,  $\tau_3 = 1.0$ ,  $\tau_4 = 3.0$  нс;  $\sigma_1 = 0.02$ ,  $\sigma_2 = 0.06$ ,  $\sigma_3 = 0.2$ ,  $\sigma_4 = 0.6$  нс;  $I_1 = I_2 = I_3 = I_4 = 25\%$ .

Средняя величина фона в спектрах, показанных на рис. 7, равна 200. Время генерации спектра составляет порядка 1 с на персональном компьютере с тактовой частотой процессора 3.2 ГГц и тактовой частотой шины материнской платы 800 МГц.

В дальнейшем степень совпадения результатов машинной обработки сгенерированных спектров с заложенными при генерации данными может быть использована для оценки адекватности примененных математических программ и моделей.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Созданный на основе симулятора виртуальный спектрометр времени жизни позитронов позволяет за короткое время на персональных компьютерах генерировать спектры задержанных совпадений в широком диапазоне времен жизни позитронов. При этом спектры могут задаваться монохроматическими или распределенными по гауссу компонентами. В дальнейших работах планируется рассмотреть применение виртуального спектрометра времени жизни позитронов для анализа корректности результатов работы программ PATFIT, CONTIN и MELT при обработке спектров задержанных совпадений для получения распределений размеров свободных объемов в веществе.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Гольданский В.И. Физическая химия позитрона и позитрония. М.: Наука, 1968.
2. Green J., Lee J. Positronium Chemistry. New York—London: Academic Press, 1964.
3. Positrons in Solids / Ed. Hautajarvi P. Topics in Current Physics. V. 12. Berlin: Springer-Verlag, 1979.
4. Шантарович В.П., Ямпольский Ю.П., Кевдина И.Б. // Химия высоких энергий. 1994. Т. 28. № 1. С. 53.
5. Principles and Applications of Positron and Positronium Chemistry / Eds. Jean Y.C., Mallon, P.E., Schrader D.M. New Jersey, London, Singapore, Hong Kong: World Scientific, 2003.
6. Shantarovich V.P. // J. Polym. Sci., Part B: Polym. Phys. 2008. V. 46. P. 2485.
7. Zaleski R., Kierys A., Dzijadosz M., Goworek J., Halasz I. // RSC Adv. 2012. V. 2. P. 3729.
8. Шантарович В.П., Бекешев В.Г., Бермешев М.В. и др. // Химия высоких энергий. 2009. Т. 53. № 4. С. 276.
9. Новиков Ю.А. // Нано- и микросистемная техника. 2014. № 11. С. 29–36.
10. Новиков Ю.А. // Микроэлектроника. 2013. Т. 42. № 1. С. 34.
11. Новиков Ю.А. // Микроэлектроника. 2013. Т. 42. № 4. С. 262.
12. Shukla S., Peter M., Hoffman L. // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res., Sect. A. 1993. V. 335. P. 310.
13. Dlubek G., Eichler S. // Phys. Status Solidi A. 1998. V. 168. P. 333.
14. Dlubek G., Eichler S., Hubner Ch., Nagel Ch. // Phys. Status Solidi A. 1999. V. 174. P. 313.
15. Rudel M., Krause J., Ratzke K. et al. // Macromol. 2008. V. 41. P. 788.
16. Stepanov S., Zvezhinskii D., Duplatre G., Byakov V., Sabrahmanyam V. // Math. Sci. Forum 2009. V. 607. P. 260.
17. Wong S.M. Introductory Nuclear Physics. Second ed. Wiley-VCH, 2012. P. 207–233.
18. Kierkegaard P., Pedersen N.J., Eldrup M. PATFIT-88. Riso National Laboratory. Roskilde, Denmark, 1989.
19. Provencher S.W. // Comput. Phys. Commun. 1982. V. 27. P. 213.
20. Tao S.J. // J. Chem. Phys. 1972. V. 56. P. 5499.
21. Eldrup M., Lightbody D., Sherwood J.N. // Chem. Phys. V. 63. № 1–2. P. 51.
22. Ермаков С.М., Михайлов Г.А. Курс статистического моделирования. М.: Наука, 1976.
23. Applications of Monte Carlo Method in Science and Engineering / Ed. Mordechai S. Croatia: InTech, 2011.
24. Новиков Ю.А., Раков А.В., Хорев А.Б., Шантарович В.П. // Поверхность. Физика, химия, механика. 1992. № 8. С. 62.
25. Goldanskii V.I., Novikov Yu.A., Rakov A.V., Shantarovich V.P. // Struct. Chem. 1991. V. 2. P. (135)343.