

Школа Инженерная школа ядерных технологий

Направление подготовки 03.03.02 «Физика»

Отделение школы (НОЦ) Отделение экспериментальной физики

БАКАЛАВРСКАЯ РАБОТА

Тема работы
Разработка алгоритма для анализа спектров доплеровского уширения аннигиляционной линии позитронов

УДК 539.124.6:535.33

Студент

Группа	ФИО	Подпись	Дата
150B52	Чжэн Кэли		

Руководитель ВКР

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент	Лаптев Р. С.			

Консультант

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Ассистент	Бордулев Ю. С.			

КОНСУЛЬТАНТЫ:

По разделу «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент	Конотопский В. Ю.	к.э.н.		

По разделу «Социальная ответственность»

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Старший преподаватель	Скачкова Л. А.			

ДОПУСТИТЬ К ЗАЩИТЕ:

Руководитель ООП	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Руководитель ОЭФ	Лидер А.М.	д.т.н., доцент		

Запланированные результаты обучения по программе

Код результата	Результат обучения (выпускник способен)	Требования ФГОС, критериев и/или заинтересованных сторон
<i>Общекультурные компетенции</i>		
P1	Использовать основные этапы и закономерности исторического развития общества, основы философских, экономических, правовых знаний для формирования мировоззренческой, гражданской позиций и использования в различных сферах жизнедеятельности	Требования ФГОС3 + (ОК-1, ОК-2, ОК-3, ОК-4)
P2	К самоорганизации и самообразованию, работать в коллективе, к коммуникации в устной и письменной формах, в том числе на иностранном языке, толерантно воспринимать социальные, этические и культурные различия, использовать методы и средства физической культуры, приёмы первой помощи и методы защиты в условиях ЧС.	Требования ФГОС3 + (ОК-5, ОК-6, ОК-7, ОК-8, ОК-9)
<i>Общепрофессиональные компетенции</i>		
P3	Использовать в профессиональной деятельности базовые естественнонаучные знания, современные концепции и ограничения естественных наук, использовать фундаментальные знания разделов общей и теоретической физики, математики для создания моделей и решения типовых профессиональных задач, в том числе с использованием знаний профессионального иностранного языка.	Требования ФГОС3 + (ОПК-1, ОПК-2, ОПК-3, ОПК-7)
P4	Понимать сущность и значение информации, соблюдать основные требования информационной безопасности, использовать методы, способы, средства получения и хранения информации, решать стандартные задачи на основе информационной и библиографической культуры.	Требования ФГОС3 + (ОПК-4, ОПК-5, ОПК-6)
P5	Получить организационно-управленческие навыки при работе в научных группах, критически переосмысливать накопленный опыт, изменять при необходимости профиль своей профессиональной деятельности, нести ответственность за последствия своей инженерной деятельности.	Требования ФГОС3 + (ОПК-8, ОПК-9)

<i>Профессиональные компетенции</i>		
Р6	<p><u>Научно-исследовательская деятельность</u></p> <p>Проводить научные теоретические и экспериментальные исследования в областях: материаловедения, атомной и ядерной физики, водородной энергетики, физики плазмы с помощью современной приборной базы с использованием специализированных знаний физики и освоенных профильных дисциплин.</p>	Требования ФГОСЗ + (ПК-1, ПК-2)
Р7	<p><u>Научно-инновационная деятельность</u></p> <p>Применять на практике профессиональные знания теории и методов физических исследований, а также профессиональные знания и умения в результате освоения профильных дисциплин для проведения физических исследований в инновационных областях науки, используя современные методы обработки, анализа и синтеза информации.</p>	Требования ФГОСЗ + (ПК-3, ПК-4, ПК-5)
Р8	<p><u>Организационно-управленческая</u></p> <p>Использовать на практике теоретические основы организации и планирования физических исследований, участвовать в подготовке и составлении научной документации по установленной форме, понимать и применять на практике методы управления в сфере природопользования</p>	Требования ФГОСЗ + (ПК-6, ПК-7, ПК-8)
Р9	<p><u>Педагогически-просветительская</u></p> <p>Проектировать, организовывать, анализировать педагогическую деятельность, владеть последовательностью изложения материала с использованием междисциплинарных связей физики с другими дисциплинами, участвовать в информационно-образовательных мероприятиях по пропаганде и распространению научных знаний</p>	Требования ФГОСЗ + (ПК-9)

Школа Инженерная школа ядерных технологий
 Направление подготовки 03.03.02 «Физика»
 Отделение школы (НОЦ) Отделение экспериментальной физики

УТВЕРЖДАЮ:
 Руководитель ООП

 (Подпись) (Дата) (Ф.И.О.)

ЗАДАНИЕ на выполнение выпускной квалификационной работы

В форме:

Бакалаврской работы

(бакалаврской работы, дипломного проекта/работы, магистерской диссертации)

Студенту:

Группа	ФИО
150Б52	Чжэн Кэли

Тема работы:

Разработка алгоритма для анализа спектров доплеровского уширения аннигиляционной линии позитронов	
Утверждена приказом директора (дата, номер)	

Срок сдачи студентом выполненной работы:	
--	--

ТЕХНИЧЕСКОЕ ЗАДАНИЕ:

<p>Исходные данные к работе</p> <p><i>(наименование объекта исследования или проектирования; производительность или нагрузка; режим работы (непрерывный, периодический, циклический и т. д.); вид сырья или материал изделия; требования к продукту, изделию или процессу; особые требования к особенностям функционирования (эксплуатации) объекта или изделия в плане безопасности эксплуатации, влияния на окружающую среду, энергозатратам; экономический анализ и т. д.).</i></p>	<p><i>Исходные спектры ДУАЛ образцов циркониевого сплава, насыщенные водородом до различных концентраций (0-610 ppm). Данные получены с помощью системы DBS.</i></p> <p><i>Исходные двухмерные спектры ДУАЛ образцов чистого циркония, чистого ниобия и комбинационного образца эти двух образцов. Данные получены с помощью системы CDBS.</i></p>
<p>Перечень подлежащих исследованию, проектированию и разработке вопросов</p> <p><i>(аналитический обзор по литературным источникам с целью выяснения достижений мировой науки техники в рассматриваемой области; постановка задачи исследования, проектирования, конструирования; содержание процедуры исследования, проектирования, конструирования; обсуждение результатов выполненной работы; наименование дополнительных разделов, подлежащих разработке; заключение по работе).</i></p>	<ul style="list-style-type: none"> • Обзор литературы • Разработка алгоритма • Получение данных для апробации • Апробация алгоритма • Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение • Социальная ответственность • Заключение

Перечень графического материала (с точным указанием обязательных чертежей)	<ul style="list-style-type: none"> • <i>Графики спектров</i> • <i>Скриншот программы</i> • <i>Диаграммы принципа работы</i> • <i>Схемы структуры приборов</i>
--	---

Консультанты по разделам выпускной квалификационной работы
(с указанием разделов)

Раздел	Консультант

Названия разделов, которые должны быть написаны на русском и иностранном языках:

Дата выдачи задания на выполнение выпускной квалификационной работы по линейному графику	
---	--

Задание выдал руководитель / консультант (при наличии):

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
150Б52	Чжэн Кэли		

ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА «ФИНАНСОВЫЙ МЕНЕДЖМЕНТ, РЕСУРСОЭФФЕКТИВНОСТЬ И РЕСУРСОСБЕРЕЖЕНИЕ»

Студенту:

Группа		ФИО	
150Б52		Чжэн Кэли	
Инженерная школа ядерных технологий		Отделение экспериментальной физики	
Уровень образования	Бакалавр	Направление/специальность	Физика

Исходные данные к разделу «Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение»:

1. Стоимость ресурсов научного исследования: материально-технических, энергетических, финансовых, информационных и человеческих	
2. Используемая система налогообложения, ставки налогов, отчислений, дисконтирования и кредитования	

Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:

1. Планирование и формирование бюджета научных исследований	
2. Определение ресурсной (ресурсосберегающей), финансовой, бюджетной, социальной и экономической эффективности исследования	

Перечень графического материала (с точным указанием обязательных чертежей):

1. Оценка конкурентоспособности технических решений
2. Альтернативы проведения НИ
3. График проведения и бюджет НИ
4. Оценка ресурсной, финансовой и экономической эффективности НИ

Дата выдачи задания для раздела по линейному графику	
--	--

Задание выдал консультант:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент	Конотопский В. Ю.	к.э.н.		

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
150Б52	Чжэн Кэли		

ЗАДАНИЕ ДЛЯ РАЗДЕЛА «СОЦИАЛЬНАЯ ОТВЕТСТВЕННОСТЬ»

Студенту:

Группа 150Б52		ФИО Чжэн Кэли	
Школа	Инженерная школа ядерных технологий	Отделение (НОЦ)	Отделение эксперимен- тальной физики
Уровень образования	Бакалавр	Направление/специальность	Физика (03.03.02)

Тема ВКР: Разработка алгоритма для анализа спектров доплеровского уширения аннигиляционной линии позитронов

Исходные данные к разделу «Социальная ответственность»:

1. Характеристика объекта исследования (вещество, материал, прибор, алгоритм, методика, рабочая зона) и области его применения	<ul style="list-style-type: none"> Алгоритм для анализа спектров ДУАЛ; Вещество – чистый ниобий и цирконий; Прибор – система CDBS; Рабочая зона – лаборатория в ТПУ.
--	--

Перечень вопросов, подлежащих исследованию, проектированию и разработке:

1. Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности: 1.1. Специальные (характерные при эксплуатации объекта исследования, проектируемой рабочей зоны) правовые нормы трудового законодательства; 1.2. Организационные мероприятия при компоновке рабочей зоны.	<ul style="list-style-type: none"> Трудовой кодекс Российской Федерации от 30.12.2001 N 197-ФЗ (ред. от 01.04.2019); ГОСТ 12.2.032-78 ССБТ. Рабочее место при выполнении работ сидя. Общие эргономические требования. ГОСТ 22615-77. Система «человек-машина». Выключатели и переключатели типа «Тумблер». Общие эргономические требования. ГОСТ 23000-78. Система «человек-машина». Пульты управления. Общие эргономические требования.
2. Производственная безопасность: 2.1. Анализ выявленных вредных и опасных факторов 2.2. Обоснование мероприятий по снижению воздействия	<p>Опасные факторы:</p> <ul style="list-style-type: none"> Жидкий азот Высоковольтное электричество <p>Вредные факторы</p> <ul style="list-style-type: none"> Порошок ниобия и оксида ниобия Ионизирующие излучения
3. Экологическая безопасность	<p>Воздействия на атмосферу:</p> <ul style="list-style-type: none"> Влияние выброса газообразного азота <p>Воздействия на гидро- и литосферу:</p> <ul style="list-style-type: none"> Влияние отхода порошка ниобия и его оксида Потенциальный риск загрязнения, вызванного радиоактивным изотопом
4. Безопасность в чрезвычайных ситуациях	<p>Возможные ЧС</p> <ul style="list-style-type: none"> Пожар Затопление

Дата выдачи задания для раздела по линейному графику

Задание выдал консультант:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Старший преподаватель	Скачкова Лариса Александровна			

Задание принял к исполнению студент:

Группа	ФИО	Подпись	Дата
150Б52	Чжэн Кэли		

Школа Инженерная школа ядерных технологий

Уровень образования Бакалавриат

Направление подготовки 03.03.02 «Физика»

Отделение школы (НОЦ) Отделение экспериментальной физики

Период выполнения _____

Форма представления работы:

бакалаврская работа <small>(бакалаврская работа, дипломный проект/работа, магистерская диссертация)</small>

КАЛЕНДАРНЫЙ РЕЙТИНГ-ПЛАН
выполнения выпускной квалификационной работы

Срок сдачи студентом выполненной работы:	
--	--

Дата контроля	Название раздела (модуля) / вид работы (исследования)	Максимальный балл раздела (модуля)
01.03.2018	Обзор литературы	15
01.09.2018	Разработка алгоритма	15
30.12.2018	Получение данных для апробации	15
30.04.2019	Апробация алгоритма	20
25.05.2019	Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение	15
25.05.2019	Социальная ответственность	15
25.05.2019	Заключение	5

Составил преподаватель:

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Ассистент	Бордулев Юрий Сергеевич			

СОГЛАСОВАНО:

Руководитель ООП	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Руководитель ОЭФ	Лидер А.М.	д.т.н.		

Реферат

Выпускная квалификационная работа содержит 65 страницы, 32 рисунков, 10 таблицы, 46 литературный источник, 0 приложений.

Ключевые слова: позитронная аннигиляция, метод доплеровского уширения аннигиляционной линии (ДУАЛ).

Объектом исследований являлся образцы циркониевого сплава, насыщенные водородом до различных концентраций (0-610 ppm), образец чистого циркония и образец чистого ниобия.

Разработана программа для анализа спектров ДУАЛ. С помощью системы DBS с системы CDBS получены данные, с которыми проведена апробации программы.

Цель работы – разработка алгоритма для анализа данных метода ДУАЛ и создание новой программы для использования алгоритма. Для достижения цели необходимо выполнить следующие **задачи**:

- Разработать алгоритм для анализа спектров ДУАЛ.
- Реализовать каждый этап алгоритма в виде программного кода.
- Создать оболочку с интерфейсом пользователя.
- Провести тестирование и апробацию разработанной программы.

Область применения: результаты работы могут помочь другим исследователям, использующим метод ДУАЛ, удобно обрабатывать данных и анализировать спектры.

Оглавление

ВВЕДЕНИЕ	12
ГЛАВА 1. ФИЗИЧЕСКИЕ ОСНОВНЫЕ ПОВЕДЕНИЯ ПОЗИТРОНОВ.....	14
1.1 Получение позитронов	14
1.2 Термализация и диффузия позитрона.....	14
1.3 Захват позитрона дефектами	15
1.4 Аннигиляция позитрона.....	17
1.5 Позитроний.....	18
ГЛАВА 2. МЕТОД ДОПЛЕРОВСКОГО УШИРЕНИЯ АННИГИЛЯЦИОННОЙ ЛИНИИ	19
2.1 Теоретическое введение	19
2.2 Экспериментальная реализация	19
2.2.1 Источник позитронов.....	19
2.2.2 Расположение образца	20
2.2.3 Система измерения без совпадения (DBS)	21
2.2.4 Система измерения с совпадением (CDBS).....	22
2.3 Методы анализа спектров	24
2.3.1 Оценка S- и W-параметра	24
2.3.2 Относительные кривые.....	25
ГЛАВА 3. ПРОЦЕДУРА АЛГОРИТМА	28
3.1 Предварительная обработка спектров для системы без совпадения	29
3.1.1 Загрузка исходных данных.....	29
3.1.2 Расчёт ошибки спектра	30
3.1.3 Оценка энергетического разрешения	30
3.1.4 Удаление фона.....	31
3.2 Предварительная обработка для системы с совпадением	33
3.2.1 Загрузка исходных данных.....	33
3.2.2 Расчёт ошибки спектра	34
3.2.3 Преобразование координат	34
3.2.4 Оценка энергетического разрешения	35
3.2.5 Извлечение энергетического спектра.....	37
3.3 Анализ энергетических спектров	38
3.3.1 Расчёт S- и W-параметра	38
3.3.2 Построение относительных кривых	38
ГЛАВА 4. ПРАКТИЧЕСКОЕ ИСПОЛЬЗОВАНИЕ.....	40
4.1 Создание программы «DBSpy»	40
4.1.1 Ядро	40
4.1.2 Интерфейс пользователя	40
4.2 Аprobация алгоритма	42
4.2.1 Сравнение с программой SP-11	42
4.2.2 Компонентный анализ	42
ГЛАВА 5. ФИНАНСОВЫЙ МЕНЕДЖМЕНТ, РЕСУРСОЭФФЕКТИВНОСТЬ И РЕСУРСОСБЕРЕЖЕНИЕ	44
5.1 Планирование научно-исследовательских работ	44

5.1.1 Структура работ в рамках научного исследования	44
5.1.2 Расчёт продолжительности этапов работ	45
5.2 Бюджет научно-исследовательского проекта	48
5.2.1 Затраты на материалы.....	48
5.2.2 Затраты на электроэнергию.....	48
5.2.3 Затраты на амортизацию оборудования	50
5.2.4 Заработные платы.....	50
5.2.5 Затраты на социальный налог	51
5.2.6 Расходы, учитываемых непосредственно на основе платёжных (расчётных) документов.....	51
5.2.7 Прочие затраты.....	51
5.2.8 Формирование бюджета научно-исследовательского проекта.....	52
5.2.9 Оценка экономической эффективности проекта	52
ГЛАВА 6. СОЦИАЛЬНАЯ ОТВЕТСТВЕННОСТЬ	53
6.1 Введение	53
6.2 Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности.....	53
6.2.1 Специальные (характерные для рабочей зоны исследователя) правовые нормы трудового законодательства.....	53
6.2.2 Организационные мероприятия при компоновке рабочей зоны исследователя ..	55
6.3 Производственная безопасность	56
6.3.1 Жидкий азот.....	57
6.3.2 Высоковольтное электричество	58
6.3.3 Порошок ниобия и оксида ниобия.....	58
6.3.4 Ионизирующие излучения	58
6.4 Экологическая безопасность	59
6.4.1 Влияние на атмосферу и соответственные мероприятий.....	59
6.4.2 Влияние на гидро- и литосферу, и соответственные мероприятия	59
6.5 Безопасность в чрезвычайных ситуациях.....	60
6.5.1 Пожар	60
6.5.2 Затопление	61
6.6 Заключение.....	62
ЗАКЛЮЧЕНИЕ.....	63
СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ.....	64

Введение

Метод аннигиляции позитронов – это инструмент, основанный на применении позитронов в материаловедении и физике твёрдого тела. Этот метод включает множество экспериментальных методов. Данная работа связана с одним из них – методом доплеровского уширения аннигиляционной линии (ДУАЛ).

Данный метод очень широко используется во многих отраслях. С помощью этого метода можно исследовать такие дефекты в решётке, как вакансии, кластеры вакансий, дислокации и т. д., сформированные методами деформации, усталости [1], закалки, облучения [2], насыщением водорода [3] и т. д., а также влияние отжига на эти дефекты [4]. Этот метод широко используется во многих областях, таких как физика конденсированного состояния [5], микроэлектроника [6], химия [7], медицина [8] и т. д.

Метод аннигиляции позитронов имеет много преимуществ. Во-первых, основным преимуществом является высокая чувствительность к вакансиям. Данный метод является одним из немногих методов, которые могут исследовать дефекты в атомном масштабе. Во-вторых, этот метод применяется почти ко всем материалам. Исследуемый материал может быть твёрдым телом, газом, металлом, полупроводником, изолятором или полимером. Кроме этого, этот метод не разрушает образец, что позволяет избежать изменений свойств материала в процессе исследования [9].

Актуальность работы заключается в том, что метод ДУАЛ требует обработку объёмных данных, на пример, анализ энергетического спектра аннигиляционного излучения. Однако, в настоящий момент имеется ограниченное количество программного обеспечения для обработки этих данных. Существуют несколько программ, как SP-11 [10], CDB Tools [11], MePASTo [12] и т. д. Но эти программы, либо не обладают некоторыми 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, что в некоторой степени снижает достоверность результатов.

Один из способов решения данной проблемы – прямо использовать научную вычислительную среду (например MATLAB, Jupyter Notebook и т. д.) для обработки данных. Но это требует высший уровень программирования, которым не обладают множество исследователей. Кроме этого, так неудобно, потому что каждый раз необходимо вручную настраивать параметры.

Поэтому необходимо создать программное обеспечение для этого метода. Это 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-параметра, соответствие между номером канала и значением энергии, и т. д.

Цель работы – разработка алгоритма для анализа данных метода ДУАЛ и создание новой программы для использования алгоритма. Для достижения цели необходимо выполнить следующие **задачи**:

- Разработать алгоритм для анализа спектров ДУАЛ.
- Реализовать каждый этап алгоритма в виде программного кода.
- Создать оболочку с интерфейсом пользователя.
- Провести тестирование и апробацию разработанной программы.

Глава 1. Физические основные поведения позитронов

1.1 Получение позитронов

Позитрон – античастица электрона. Позитрон обладает той же массой, что и электрон. Заряд позитрона положительный, противоположный заряду электрона.

В 1930 году британский физик Поль Дирак предсказал существование позитронов в теории [13]. Потом в 1932 году американский физик Карл Дэвид Андерсон обнаружил позитроны в космических лучах [14].

Позитроны могут быть получены в результате β^+ -распада радиоактивных изотопов. Это основной способ получения позитронов в лаборатории. Изотопы, используемые в качестве источника позитронов в лаборатории: ^{22}Na , ^{44}Ti , ^{58}Co и т. д [15]. Возьмём ^{22}Na в качестве примера для объяснения процесса β^+ -распада. В результате β^+ -распада ^{22}Na , с вероятностью 90,4%, испускается один позитрон и один γ -квант с энергией 1,27 МэВ (см. рисунок 1) [9].

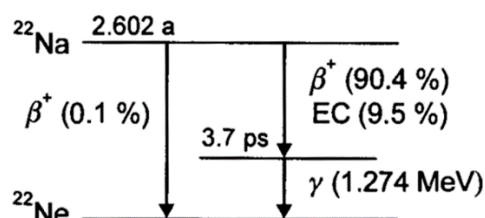


Рисунок 1. - Схема распада радиоактивного изотопа ^{22}Na [9]

Следует отметить, что в ходе распада данного изотопа, кроме позитронов, ещё образуется один γ -квант с определённой энергией. Этот сигнал может быть использован в качестве временной привязки к рождению позитрона, позволяя нам знать, когда появился один позитрон. Это выгодно для некоторых методов исследования, использующих позитроны.

Ещё можно производить позитроны в процессе столкновения с мишенью (тантал или вольфрам) электронами с высокой энергией [16]. Этот метод может стабильно генерировать большое количество позитронов. Но, для реализации этого метода требуется электронный ускоритель. Реализация этого метода гораздо сложнее и дороже [17].

1.2 Термализация и диффузия позитрона

После рождения позитроны обычно имеют высокую кинетическую энергию (например, 500 кэВ). Когда позитроны с высокой кинетической энергией входят в решётку твёрдого тела, происходит неупругое столкновение с атомами, электронами и ионами [18]. В этом процессе позитроны теряют свою кинетическую энергию и соответственно генерируют фононы, ионизирующее излучение, теплоту и т. д. В результате, в течение

несколько пикосекунд, кинетическая энергия позитрона снижается до термического уровня (в масштабе kT , например 0,02 эВ). Этот процесс называется термализацией.

После термализации позитроны только движутся с низкой скоростью по материалу, т. е. происходит диффузия. До аннигиляции диффузия может продолжаться в течение 100-10000 пс. Длительность зависит от свойства этого материала. В процессе диффузии позитроны обычно не могут далеко перемещаться из-за медленной скорости. Поэтому глубина проникновения позитронов в материал в основном определяется стадией термализации.

Распределение позитронов по глубине в образце связано с подготовкой образца и регулированием источника, что важно для эксперимента, особенно для эксперимента над поверхностью или тонкой плёнкой.

Учитывая хаотичность столкновения, можно считать, что, когда позитроны с определённой одинаковой энергией входят в однородный материал, распределение позитронов по глубине представляет собой распределение Пуассона.

Но в реальных ситуациях позитроны имеют разную энергию. Мы можем использовать эмпирическую формулу [19]

$$P(r) = \frac{N_0}{R} \exp\left(-\frac{r}{R}\right) = N_0 a \exp(-ar) \quad (1)$$

где N_0 – суммарное количество позитронов; R – глубина проникновения; a – коэффициент поглощения позитронов.

1.3 Захват позитрона дефектами

Дефект кристалла – устойчивое нарушение трансляционной симметрии кристалла. Из-за нарушения трансляционной симметрии плотность атомов около дефекта кристалла меньше, чем в бездефектной области. Поэтому около дефекта может существовать вакансии и микропоры.

Существует одно интересное явление - вакансии и микропоры около дефекта могут захватить позитроны. Примерно, принцип этого явления может быть пояснён рассмотрением распределения электронов. Возьмём вакансию в качестве примера, как показано на рисунке 2, в вакансии отсутствует один атом, соответственно отсутствуют ядро атома и связанные с ним электроны. Но электроны из соседних атомов могут попадать в вакансии. Таким образом, в вакансии отсутствует отталкивающий потенциал для позитронов, вследствие чего, вакансия притягивает позитроны.

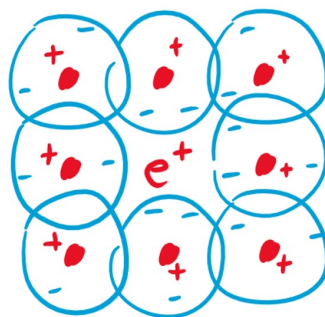


Рисунок 2. - Захват позитрона дефектами

При наличии вакансии значительная часть позитронов притягивается к вакансии, входит в неё, оказывается в т. н. «захваченном состоянии» с вакансией, и на конец аннигилирует в вакансиях. В принципе может происходить и захват, и побег из вакансии. Но чтобы уйти из дефектов, позитрону ещё надо преодолеть потенциальный барьер. Учитывая, что время жизни позитронов не очень долго, можно считать, что выход из дефектов типа вакансии для позитронов очень маловероятен.

Легко понять, что из-за отсутствия атома позитроны в вакансиях и микропорах реже встречаются с электронами внутреннего слоя атома. Более вероятно, они аннигилируют с электронами внешнего слоя соседних атомов. А электроны внешнего слоя тесно связаны с химическими свойствами. Таким образом, получаемые результаты могут отражать химические свойства в окрестности дефектов.

Кроме этого, благодаря этому явлению, энергетический спектр аннигиляция позитронов очень чувствителен к свойствам дефектов (до 0,1 ppm) [9]. Даже при наличии незначительного количества дефектов, разница в спектрах позитронной аннигиляции может быть чётко выражена. Очень высокая чувствительность к дефектам является одним из преимуществ метода позитронной аннигиляции. Однако, если дефектов слишком много (больше 100 ppm), все позитроны будут захвачены дефектами. Тогда, даже если концентрация дефектов продолжает увеличиваться, этого не будет видно в спектрах. В этом случае говорят о насыщенном захвате позитронов дефектами.

Следует отметить, что явление захвата позитронов дефектами существует не во всех материалах. Дефекты некоторых металлов не могут захватить позитроны. Если металл имеет низкую электроотрицательность и в нем существует много свободных электронов, позитроны окружены этими электронами и в целом нейтральны. Тогда дефекты не могут захватить позитроны.

1.4 Аннигиляция позитрона

Позитрон, как античастица электрона, аннигилирует, когда встречается с электроном. При аннигиляции испускаются γ -кванты. Согласно теории квантовой электродинамики, для свободных позитронов существуют 3 вида аннигиляции – однофотонная, двухфотонная и трёхфотонная (см. рисунок 3).

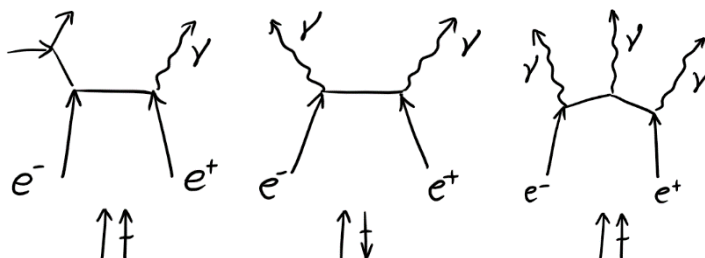


Рисунок 3. - Диаграммы Фейнмана трёх вида аннигиляции

В большинстве ($\approx 99.3\%$) происходит двухфотонная аннигиляция [19]. Поэтому, на практике принято считать, что происходит только двухфотонная аннигиляция.

Испущенные фотоны несут информацию об энергии и импульсе исходных позитронов и электронов. Исследуя характеристики этих фотонов, можно получить энергию и импульс этих электронов, и таким образом исследовать свойства материала в атомном масштабе.

Согласно квантовой электродинамике, скорость аннигиляции позитронов определяется по формуле:

$$\lambda = \frac{1}{\tau} = \pi r_e^2 c n_e \quad (2)$$

где λ – скорость аннигиляции;

r_e – классический радиус электрона;

c – скорость света ;

n_e – концентрация электронов;

Видно, что скорость аннигиляции позитронов пропорциональна концентрации электронов.

Распределение электронов около дефектов решётки и поверхностей отличается от распределения в объёме. Мы можем узнать концентрацию электронов вблизи позитрона путём измерения времени жизни позитрона и, следовательно, исследовать структуру (дефекты и поверхность) в атомном масштабе.

1.5 Позитроний

Позитрон с электроном иногда достигает метастабильного связанного состояния – позитроний [20]. В позитронии электрон и позитрон движутся вокруг их центра масс и образуют нейтральное целое.

Позитроний также может распадаться (аннигилировать), при котором испускаются γ -кванты. Количество выпущенных γ -квантов зависит от состояния исходного позитрония. В большинстве случаев испускаются два (p-Ps) или три (o-Ps) γ -кванта [21], редко испускаются больше γ -квантов.

Поведение позитрония очень отличается от свободных позитронов. Поэтому иногда необходимо учитывать образование и существование позитрония. Но в данной работе, этот вопрос не исследуется.

Глава 2. Метод доплеровского уширения аннигиляционной линии

2.1 Теоретическое введение

По закону сохранения импульса, если полный импульс электрона и позитрона не равен нулю, то при аннигиляции возникает эффект Доплера. Частота фотона, который направлен под острым углом к исходному направлению импульса, становится выше, а частота другого фотона становится ниже [22]. Смещение энергии (увеличение или уменьшение) γ -кванта определяется по следующей формуле:

$$\Delta E_{\gamma} = \frac{p_0 c}{2h} \quad (3)$$

В общем случае, после термализации, скорость позитрона уже очень маленькая, то есть импульс у него уже довольно маленький. Игнорируя малый импульс позитронов, энергия фотона зависит от импульса электрона.

В атомах импульс внутреннего электрона больше, чем внешнего электрона. Поэтому аннигиляционные фотоны с большим смещением энергии обычно возникает при аннигиляции позитрона и электрона из внутреннего слоя атома. А около дефекта отсутствуют атомы. Позитроны там с больше вероятностью аннигилируется с внешними электронами, а не внутренними электронами. Таким образом, материал с большим количеством дефектов имеет меньшее значение в области большого смещение в энергетическом спектре.

2.2 Экспериментальная реализация

2.2.1 Источник позитронов

В лаборатории наиболее удобным источником позитронов является радиоизотоп. Некоторые радиоизотопы, используемые для получения позитронов, перечислены в таблице ниже.

Таблица 1 Некоторые радиоизотопы, используемые для получения позитронов [23]

Изотоп	Период полураспада	Вероятность излучения позитронов при распаде, %	Максимальная энергия генерируемого позитрона, МэВ	Энергия γ -кванта, сопровождающий распад, МэВ
^{22}Na	2,6 лет	90	0,545	1,275
^{44}Ti	47 лет	94	1,47	1,156
^{64}Cu	12,8 часов	19	0,573	-
^{58}Co	71 день	15	0,474	0,811
^{68}Ge	275 дней	15	1,90	1,078
^{57}Ni	35 часов	46	0,85	1,37

Сейчас наиболее широко используют изотоп ^{22}Na в качестве источника позитронов для всех методов позитронной аннигиляции. Изотоп ^{22}Na имеет умеренный период

полураспада и подходящую радиоактивность. Кроме этого, изотоп ^{22}Na легко готовить и хранить, и соответственно он относительно дешёвый.

Изотоп ^{22}Na не используют в форме простого вещества. На практике такой источник присутствует в форме соли, например, $^{22}\text{NaCl}$, где содержатся ионы $^{22}\text{Na}^+$. Сейчас уже можно купить раствор соли $^{22}\text{NaCl}$ (или $^{22}\text{NaHCO}_3$, $^{22}\text{NaOC}_2\text{H}_5$ и др.). Чтобы подготовить источник, который можно удобно использовать повторно, можно выращивать кристаллы на подложке. Например, можно использовать титановую фольгу в качестве подложки и защитного слоя. В этом случае соль $^{22}\text{NaCl}$ завернута в тонкую полимерную фольгу во избежание загрязнения и утечки.

Для генерации позитронов также используют изотоп ^{44}Ti , представляющий собой завернутое в титановую фольгу соединение соль $^{44}\text{TiCl}_4$. Данный изотоп гораздо дороже чем ^{22}Na , поэтому он не так популярно используется. Но источник на основе изотопа ^{44}Ti имеет ряд преимуществ по сравнению с источником позитронов ^{22}Na [24]. Например, изотоп ^{44}Ti имеет гораздо больший период полураспада, чем ^{22}Na , соответственно один источник может использоваться в течение длительного времени, без нужды в замене каждые несколько лет. В данной работе мы использовали именно этот изотоп.

2.2.2 Расположение образца

Источник позитронов излучает позитроны практически во всех направлениях. Чтобы в полной мере использовать испускаемые позитроны, на практике обычно располагают источник позитронов между двумя образцами, как показано на рисунке 4. Такая структура выглядит как сандвич.

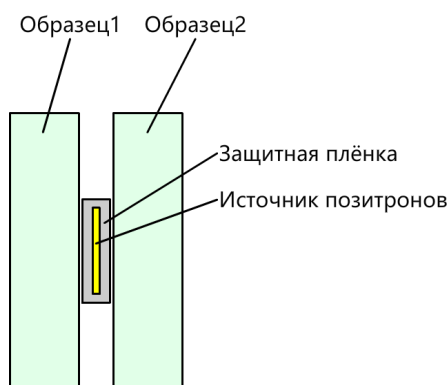


Рисунок 4. - Сэндвич-структурное расположение образца

Образцы должны быть достаточно толстыми, чтобы позитроны не проходили насквозь. Таким образом все позитроны будут аннигилировать в соли с изотопом, в титановой капсуле и в образце.

Заметим, что здесь имеются два листа образца. В общих исследованиях они должны быть одинаковыми. Но при апробации алгоритма в следующих главах, мы также будем использовать два разных образца.

2.2.3 Система измерения без совпадения (DBS)

Схема измерительной системы, реализующей метод Доплеровского уширения аннигиляционной линии показана на рисунке 5. Это самый простой вариант – система измерения без модуля совпадения.

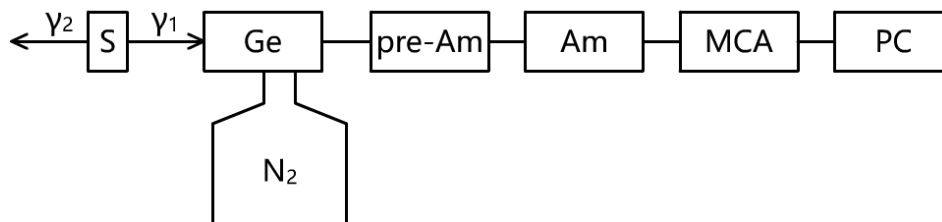


Рисунок 5. - Система измерения без модуля совпадения:

S – образец; γ_1 , γ_2 – аннигиляционные γ -кванты;

Ge – детектор γ -квантов на основе особо чистого германия;

N₂ – жидкий азот для охлаждения детектора;

pre-Am – предварительный усилитель; Am – основной усилитель;

MCA – многоканальный анализатор импульсов; PC – персональный компьютер.

В этой системе используется сверхчистый германиевый детектор для приёма только одного из пары аннигиляционных γ -квантов.

Сверхчистый германиевый детектор представляет собой род полупроводникового детектора (ППД). ППД работает на основе куска монокристаллического полупроводника, который охлаждается до низкой температур и находится под высоким напряжением. При этом из-за низкой температуры, в полупроводнике не хватает свободных носителей заряда, следовательно, электрический ток через не протекает. Когда сквозь кристалл пролетают частица с высокой энергией (например, γ -квант), в нем возбуждаются электроны и образуются свободные электроны и дырки, которые действуют в качестве носителей заряда. Соответственно по кристаллу проходит импульс тока, который выводится в виде сигнала. Благодаря лавинному эффекту полупроводниковые усилители обладают мощной способностью усиления, что позволяет захватывать сигналы одной высокоэнергетической частицы.

ППД отличается от других детектор высоким энергетическим разрешением, что является основной причиной использования данного выбора. ППД бывает разным – чистым кремниевым, чистый германиевым, легированным и т. д. Они подходят для приёма частиц разных диапазонов энергии. В данной работе используем сверхчистый германиевый детектор, чтобы принимать γ -кванты с высокой энергией до 500 кэВ.

После детектора сигнал проходит через систему усиления. Система усиления состоит из предварительного и основного усилителя. Эти два усилителя настроены так, чтобы отношение сигнал/шум было максимальным.

Далее усиленный сигнал входит в многоканальный анализатор. Многоканальный анализатор содержит ряд чисел (каналов). Каждый из них соответствует одному диапазону амплитуде. Когда поступает сигнал, многоканальный анализатор оценивает амплитуду сигнала, и записывает это событие в соответствующий канал, т. е. увеличивает то число на единицу. Таким образом, после работы некоторое время, многоканальный анализатор получает зависимость количества событий от энергии – энергетический спектр.

Многоканальный анализатор подключён к персональному компьютеру. Таким образом мы можем с помощью компьютера получить этот спектр и сохранить его как, например, текстовой файл.

Вышесказанная система измерения простая, и соответственно дешёвая, но такая система записывает любой входящий сигнал, не обладая способностью фильтровать шум. Под действием множественных факторов такие как тормозное излучение, коррекционное излучения и термическая колебания, полученный энергетический спектр не симметричен, что увеличивает сложность обработки данных и снижает отношение сигнала-шума.

2.2.4 Система измерения с совпадением (CDBS)

Чтобы преодолеть недостатки предыдущей системы, разработана лучшая система, в которой оба γ -кванта из пары регистрируются двумя германиевыми детекторами под контролем модуля совпадений. На рисунке 6 показана схема этой системы.

В этой системе используются два детектора для захвата пары аннигиляционных фотонов и соответственно используются две системы усиления. Усиленные сигналы дальше отправляются к модулю совпадения. Этот модуль производит сигнал только в том случае, когда одновременно приходят два входных сигнала. Выходной сигнал модуля совпадения отправляется к триггерному порту многоканального анализатора (многоканальный анализатор работает только когда триггерный порт принимает совпадающий сигнал). Таким образом, мы получаем сигнал, вызываемый парой γ -квантов, соответствующих одному событию аннигиляции. Это позволяет нам уменьшить уровень шума.

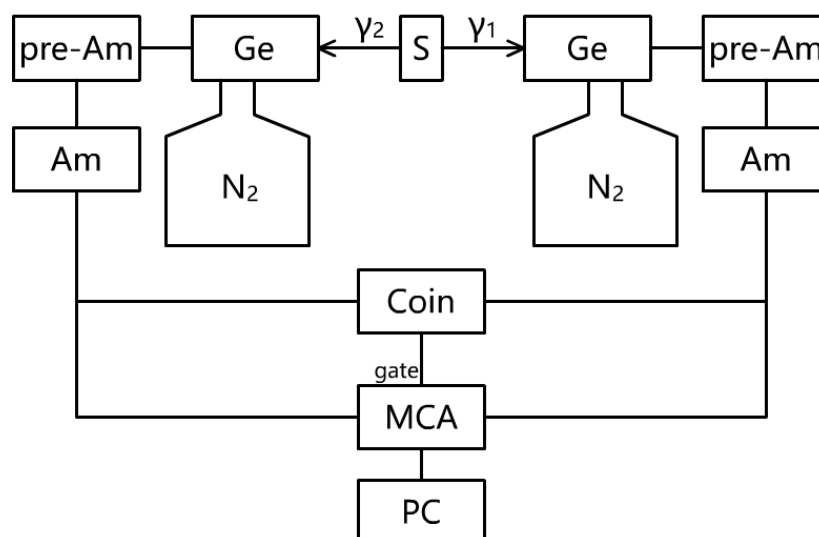
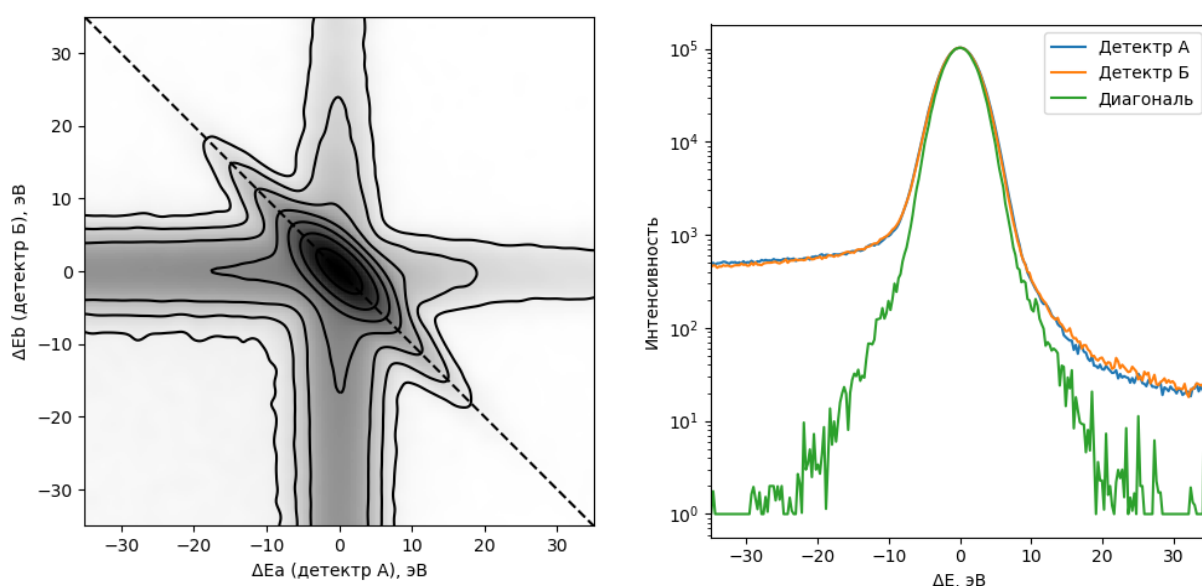


Рисунок 6. - Система измерения с совпадением,
 где S – образец; γ_1, γ_2 – аннигиляционные γ -кванты;
 Ge – детектор γ -квантов на основе особо чистого германия;
 N₂ – жидкий азот для охлаждения детектора;
 pre-Am - предварительный усилитель; Am – основной усилитель;
 Coin – модуль совпадения; gate – триггерный порт многоканального анализатора;
 MCA – многоканальный анализатор; PC – персональный компьютер.

Многоканальный анализатор в этой системе может принимать два входных сигнала. Получаемый на компьютере набор трёхмерных данных имеет две размерности энергии и одну размерность интенсивности (см. рисунок 7а).

Существует факт, что энергия двух генерируемых γ -квантов связана друг с друга – всегда одна больше, а другая меньше. На основании этого факта мы можем ещё уменьшить фоновый шум – если мы возьмём диагональное сечение, уровень шума уменьшается на несколько порядков (см. рисунок 7б).



а) контурный график трёхмерных данных б) спектр детектора и сечение диагонали

Рисунок 7. - Пример трёхмерных данных, полученных с помощью системы с совпадением

2.3 Методы анализа спектров

По закону сохранения импульса, если полный импульс электрона и позитрона не равен нулю, то при аннигиляции возникает эффект Доплера. Частота фотона, который направлен под острым углом к исходному направлению импульса, становится выше, а частота другого фотона становится ниже. [22] В результате спектр энергии аннигиляционных γ -квантов уширен (см. рисунок 8).

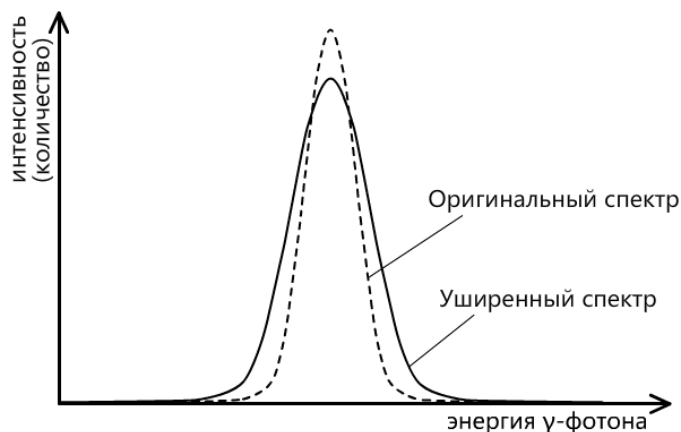


Рисунок 8. - Спектры Доплеровского уширения аннигиляционной линии

На представленном рисунке представлено, как именно отличаются друг от друга спектры материала с большим количеством дефектов (имеет меньшее значение в области большого смещения в энергетическом спектре) и меньшим количеством дефектов.

2.3.1 Оценка S- и W-параметра

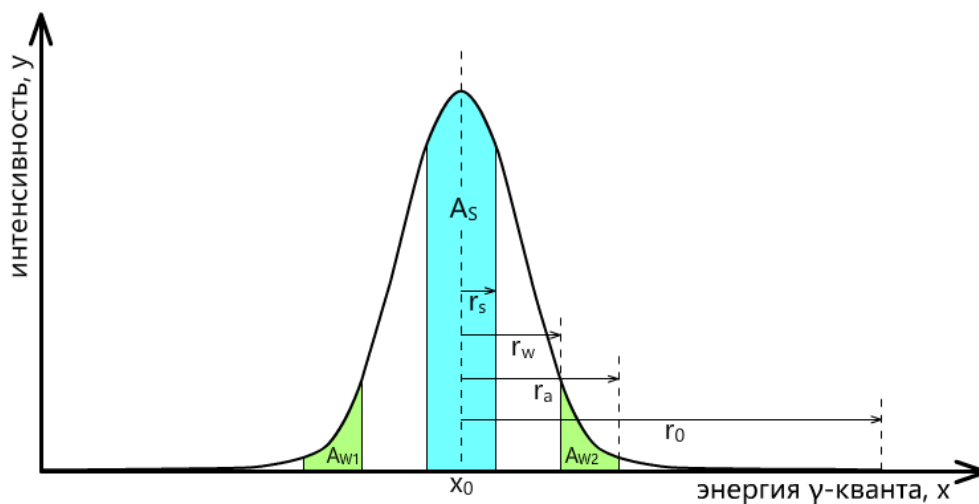


Рисунок 9. - Определение S и W

Очень часто используют S- и W-параметры для оценки формы спектров. Чтобы рассчитать значения этих параметров, необходимо сначала задать три диапазона (r_s , r_w и r_a), по которым определяются зоны A_s , A_{w1} и A_{w2} около пика, как показано на рисунке 9. Считаем, что радиус пика равен r_0 . Обозначаем интенсивность функцией $y(x)$, где x – энергия γ -кванта. Значения параметров определяются таким образом:

$$S = \frac{A_S}{A_0} = \frac{\int_{x_0-r_s}^{x_0+r_s} y(x)dx}{\int_{x_0-r_0}^{x_0+r_0} y(x)dx} \quad (4)$$

$$W = \frac{A_{W1} + A_{W2}}{A_0} = \frac{\int_{x_0-r_a}^{x_0-r_w} y(x)dx + \int_{x_0+r_w}^{x_0+r_a} y(x)dx}{\int_{x_0-r_0}^{x_0+r_0} y(x)dx} \quad (5)$$

где A_0 – общая площадь зоны под спектром;

A_S, A_{W1}, A_{W2} – площадь зона A_S, A_{w1}, A_{w2} соответственно;

В идеале при расчёте W-параметра должна быть использована сумма зон с обеих сторон (A_{w1} и A_{w2}), как показано в формуле (5). Но для системы без совпадения, из-за несимметричности фона, иногда используется только зона A_{w1} (зона на стороне высокой энергии, где фон меньше), тогда

$$W_2 = \frac{A_{W2}}{A_0} = \frac{\int_{x_0+r_w}^{x_0+r_a} y(x)dx}{\int_{x_0-r_0}^{x_0+r_0} y(x)dx} \quad (6)$$

В исследовании необходимо сначала определить фиксированные координаты диапазонов зон A_S и A_W для всех спектров. Потом рассчитывать соответственные S- и W-параметры.

Сравнивая значения S и W разных образцов, можно проводить качественный и количественный анализ. Можно схематично рисовать кривые, отражающие зависимость S- и W-параметра от других факторов (например, степень деформации, температура отжига и т. д.). Также можно рассчитывать R-параметр – отношение S-параметра к W-параметру, который зависит только от типа дефектов и не от концентрации [25].

2.3.2 Относительные кривые

Кроме S- и W-параметра, можно в спектрах ДУАЛ анализируют относительные кривые, чтобы более интуитивно отражать разницу в образцах. Относительные кривые, как следует из названия, строятся относительно от эталонного материала.

Чтобы построить относительные кривые, необходимо сначала указать один спектр в качестве эталонного (обозначаем индексом $j = 0$). Потом рассчитать разности или частное других спектров к эталонному спектру. Если используем разность, то получаем кривые разности (по англ. difference curves), а если используем частное, то получаем кривые отношения (по англ. ratio curves).

Запишем расчёт кривых разности в виде математической формулы, получаем:

$$z_j(x) = y_j(x) - y_0(x) \quad (7)$$

А формула кривых отношения:

$$z_j(x) = y_j(x)/y_0(x) \quad (8)$$

где $y_j(x)$ – интенсивность j -го спектра;

$z_j(x)$ – относительное значение j -го спектра.

По умолчанию, выбирают спектр бездефектного образца в качестве эталонного спектра. Соответственная относительная кривая параллельна горизонтальной оси, имея значение 0 (кривые разности) или 1 (кривые отношения). А кривые других образцов колеблются вверх и вниз. Учитывая симметричность пика, в исследовании используют кривые, сложенные вдоль центральной оси (или используют только правую часть, когда пик не такой симметричный).

Ниже показан пример кривых отношения на рисунке 10. В том опущена кривая отношения эталонного, которая должна иметь значение 1.

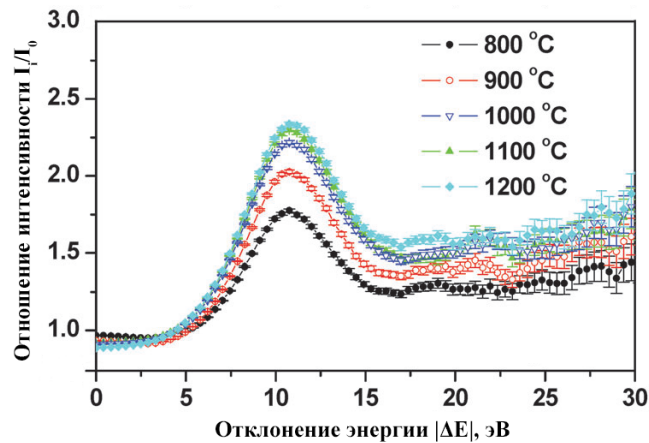


Рисунок 10. - Пример кривых отношения [26]

Относительные кривые отражают влияние легирования (примеси) на дефекты. Например, если кривая образца, легированного марганцем, смещена к кривой марганца, то это показывает тенденцию аннигиляции позитронов вблизи марганца. Таким образом, можно изучать влияние различных фазовых компонентов на образование дефектов и изменение химических свойств.

Для кривых разности также можем проводить компонентный анализ, допуская, что некоторые кривые являются линейной комбинацией других кривых и проведя фитинг чтобы получить коэффициенты пропорциональности. Эти коэффициент отражают сколько позитронов аннигилируют в определённой среде.

Чтобы проводить компонентный анализ, надо сначала указать p ($p \geq 1$) кривые в качестве базисов $u_k(x)$. Потом предполагаем, что остальные кривые $z_l(x)$ являются линейной комбинацией этих базисов с коэффициентами θ_{kl} . Математическая уравнение выглядит как:

$$\hat{z}_l(x) = \sum_{k=1}^p \theta_{kl} u_k(x) \quad (9)$$

где $\hat{z}_l(x)$ – l -ая подогнанная кривая.

Тогда наш задача – найти значения коэффициентов θ_{kl} , чтобы «расстояние» между подогнанной и реальной кривой $\rho(z_l(x), \hat{z}_l(x))$ минимальным. Чтобы использовать метод наименьших квадратов, в данном случае используем квадратичное расстояние:

$$\rho_l(z_l(x), \hat{z}_l(x)) = \int_{-\infty}^{+\infty} (\hat{z}_l(x) - z_l(x))^2 dx \quad (10)$$

Тогда для каждого индекса $k = k_0$

$$\frac{\partial \rho_l}{\partial \theta_{k_0 l}} = 0 \Leftrightarrow \sum_k^p \left(\theta_{kl} \int_{-\infty}^{+\infty} u_{k_0}(x) u_k(x) dx \right) = \int_{-\infty}^{+\infty} z_l(x) u_{k_0}(x) dx \quad (11)$$

У нас получаются всего p таких уравнений, и p неизвестных (θ_{kl}). Решаем эту систему уравнений, можем получить значения θ_{kl} .

Система уравнений решается с помощью матричных операции. Строим матрицу \mathbf{P} размера $p \times p$ и \mathbf{B} размера $p \times 1$ элементы которых определяются следующим образом (Для удобства, опуская письмо l):

$$p_{k_0 k} = \int_{-\infty}^{+\infty} u_{k_0}(x) u_k(x) dx \quad (12)$$

$$b_{k_0 1} = \int_{-\infty}^{+\infty} z_l(x) u_{k_0}(x) dx \quad (13)$$

Тогда имеем

$$\mathbf{P}[\theta_k] = \mathbf{B} \Rightarrow [\theta_k] = \mathbf{P}^{-1} \mathbf{B} \quad (14)$$

где $[\theta_k]$ – матрица размера $p \times 1$.

Пока вычисленной обратной матрицы \mathbf{P}^{-1} , можем получить значения θ_k . Проводим вышесказанный процесс для каждый l , можем получать все значение θ_{kl} .

Поскольку сумма всех компонент должен равен единице, коэффициент эталонного компонента (например, подложка) θ_{0l} определяется по формуле:

$$\theta_{0l} = 1 - \sum_{k=1}^p \theta_{kl} \quad (15)$$

В некоторых случаях θ_{0l} будет меньше нули. В том случае результат фитинга неразумный. Тогда, нельзя считать, что данный спектр является линейной комбинацией заданных базисов. И может быть, требуется ещё какой-то необходимый базис.

Глава 3. Процедура алгоритма

Алгоритм программы описан следующей схемой на рисунке 11. Весь алгоритм делится на две части – обработка спектров и расчёт нужных результатов.

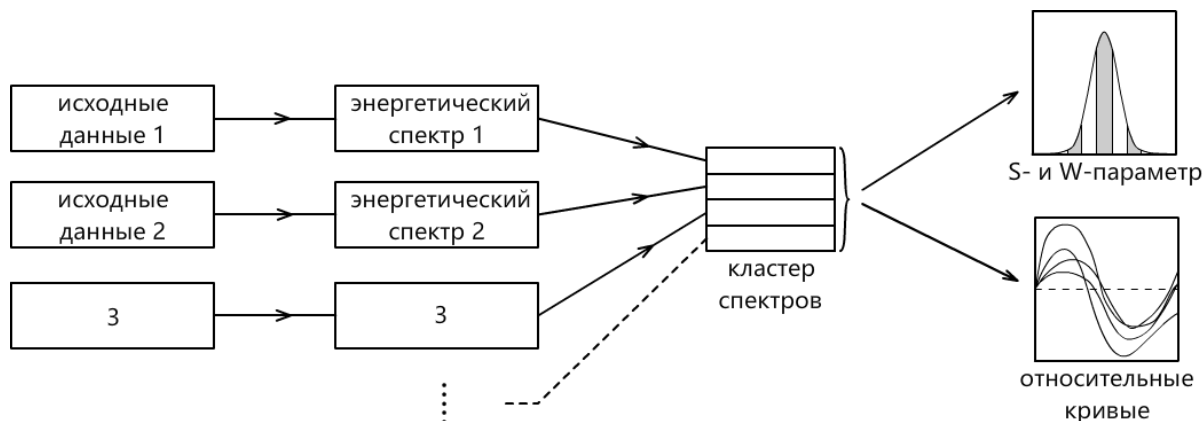


Рисунок 11. - Схема процедуры алгоритма

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 трёхмерных данных, полученных системой с совпадением, необходимо объединить два спектра в один, или вырезать трёхмерный спектр в двухмерный. После обработки получаем «чистый» энергетический спектр аннигиляционных γ -квантов с погрешностью.

Во второй части мы объединяем обработанные спектры и проводим обработку всей совокупности, чтобы сравнивать спектры друг с другом. При этом обработка данных требует единых параметров для всего набора данных. По требованию мы можем получить результат как значения S- и W-параметра, относительные значения 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.

Алгоритм в основном реализован на языке программирования Python, что гарантирует читаемость алгоритма. А интерфейс сделан с помощью различных инструментов, обеспечивая удобство пользования.

3.1 Предварительная обработка спектров для системы без совпадения

3.1.1 Загрузка исходных данных

Для системы без совпадения исходные данные представляют собой энергетический спектр, прямо полученный из многоканального анализатора. Данные представлены в виде текстового файла (см. рисунок 12). В файле есть много строк чисел. Каждая строка соответствует одному каналу многоканального анализатора. В каждой строке три числа. Первое число – энергия γ -кванта, а второе – интенсивность (количество событий). Третье число идентично второму.

В этом случае оно является избыточным. В программе мы прямо используем функцию `loadtxt()` [27] для загрузки текстовых данных из библиотеки `NumPy`.

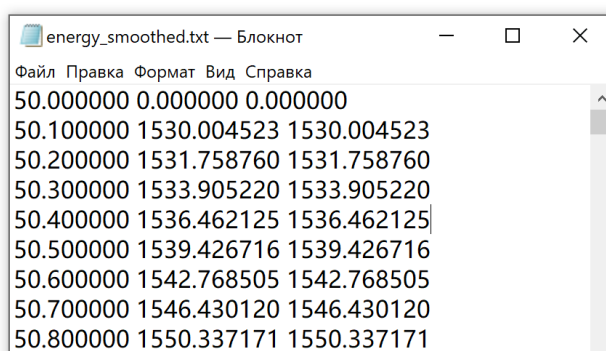


Рисунок 12. - Исходные данные в текстовом виде

Прочитав файл, мы можем нарисовать спектр. Этот спектр содержит широкий диапазон энергии, в котором есть несколько пиков, как показано на рисунке 13. В этом примере мы использовали изотоп ^{44}Tl в качестве источника позитронов. Пик с энергией около 511 кэВ посередине соответствует аннигиляционным γ -квантам. А пик около 1157 кэВ справа соответствует γ -квантам, излучаемым из источника позитронов при β^+ -распаде атомов. А пики слева являются низкоэнергетическими пиками. Нам они не нужны.

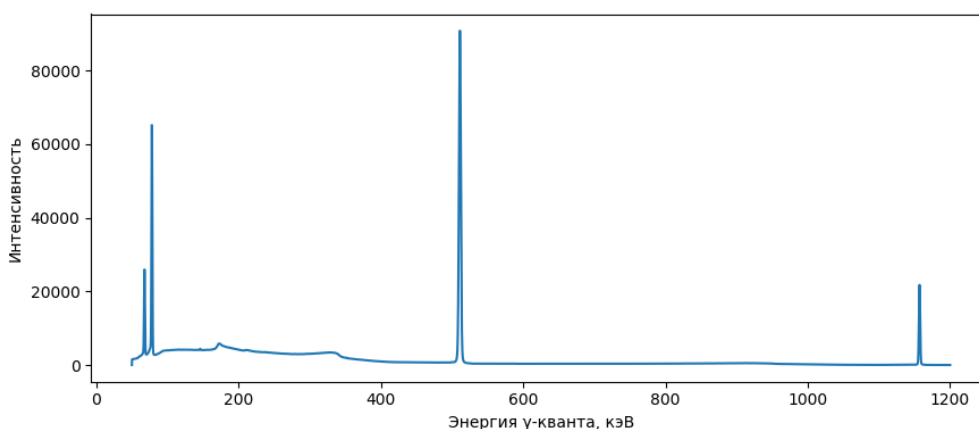


Рисунок 13. - Пример исходного спектра

3.1.2 Расчёт ошибки спектра

Считаем, что для каждого канала значение интенсивности подчиняется биномиальному распределению. Количество событий – это сумма интенсивности всех каналов, а вероятность успеха – соотношение интенсивности этого канала к сумме интенсивности всех каналов.

Пусть количество каналов обозначено буквой n , интенсивность i -го канала обозначена буквой Y_i . А в каком-то конкретном эксперименте значение величины Y_i обозначено y_i , общее количество событий (γ -квантов) обозначено буквой $s = \sum_{i=1}^n y_i$. Тогда величина Y_i подчиняется биномиальному распределению, т. е. имеем:

$$Y_i \sim B\left(n, \frac{y_i}{s}\right) \quad (16)$$

где $B(n, p)$ – банальное распределение с количеством независимых случайных экспериментов n и вероятностью успеха каждого эксперимента p .

Тогда дисперсия величины Y_i определяется по следующей формуле

$$\sigma_i^2 = y_i \left(1 - \frac{y_i}{s}\right) \quad (17)$$

Когда количество событий s достаточно большое, а интенсивность одного канала y_i не очень маленькое, распределение величины Y_i стремится к нормальному распределению (распределению Гаусса) с одной и той же дисперсией. Для обычного спектра значение s более 10^6 , а значение y_i около исследуемой области более 10^2 – эта условия выполняется. Тогда приблизительно имеем:

$$Y_i \sim N(y_i, \sigma_i^2) \quad (18)$$

где $N(\mu, \sigma^2)$ – нормальное распределение с математическим ожиданием μ и дисперсией σ^2 .

Тогда можем считать, что Y_i с вероятностью 68% попадает в диапазон $y_i \pm \sigma_i$.

Возьмём среднеквадратическое отклонение σ_i в качестве неопределённости. В последующих расчётах эта неопределённость будет передана до конечного результата.

3.1.3 Оценка энергетического разрешения

Перед использованием этой измерительной системы необходимо определить её разрешение, чтобы уточнить что она работает правильно.

Поскольку β^+ -распад происходит в атомном ядре, которое почти неподвижное, считаем, что γ -кванты, генерирующие при β^+ -распаде, не подвержены эффекту Доплера. Тогда форма соответствующего пика (1157 кэВ) зависит только от прибора. Причём этот пик находится в высокоэнергетической области, где фон меньше. Поэтому возьмём этот пик для оценки разрешения.

Сначала нам надо определить точное значение координаты этого пика. При этом нужно пользователю указать диапазон, в котором программа ищет вершину – просто возьмёт координаты той самой высокой точки. Потом вырезаем область около пика в пределах указанного пользователем радиуса.

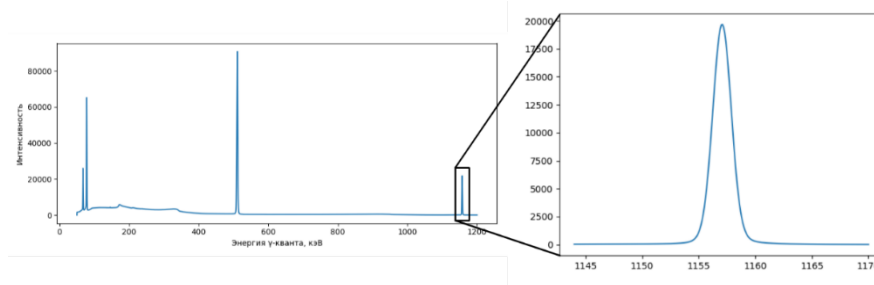


Рисунок 14. - Локализация пика 1157 кэВ

Потом проводим гауссовский фитинг, чтобы получить некоторые параметры пика. Функция для фитинга выглядит следующим образом:

$$f(x) = a \exp\left(-\frac{(x - b)^2}{2c^2}\right) + d \quad (19)$$

Видно, что мы использовали четыре регулируемых параметра – a , b , c и d , где a определяет высоту, b определяет горизонтальное положение, c определяет ширину, а d определяет фон.

Существует множество алгоритмов для фитинга. В данной работе используется функция для оптимизации из библиотеки SciPy. После фитинга получим эти четыре параметра.

Возьмём полуширину (FWHM) в качестве разрешения. А полуширина функции гаусса определяется следующим образом:

$$\text{FWHM} = 2\sqrt{2 \ln 2} c \quad (20)$$

Поставим полученное значение параметра c и получим энергетическое разрешение измерительной системы.

3.1.4 Удаление фона

Исследуемый пик – пик с энергией 511 кэВ. Этот пик соответствует аннигиляционным γ -квантам. Похож на прежний, сначала надо определить координаты пика и потом пик вырезать. Вырезанная часть спектра показана на рисунке 15.

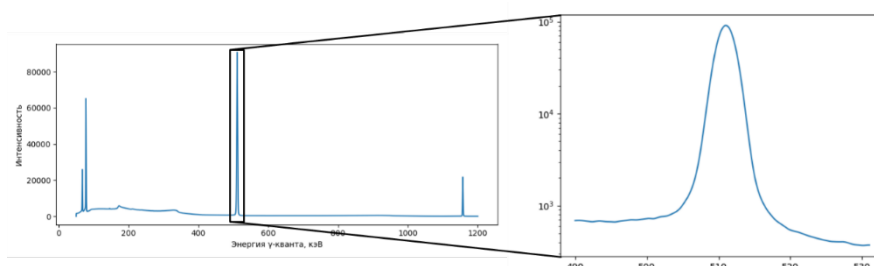


Рисунок 15. - Локализация пика 511 кэВ

Для дальнейшего расчёта нам надо удалить фон из спектра. Видно, что фон с обеих сторон пика различен. Это увеличивает сложность удаления фона. Фон определяется следующим образом, как показано на рисунке 16.

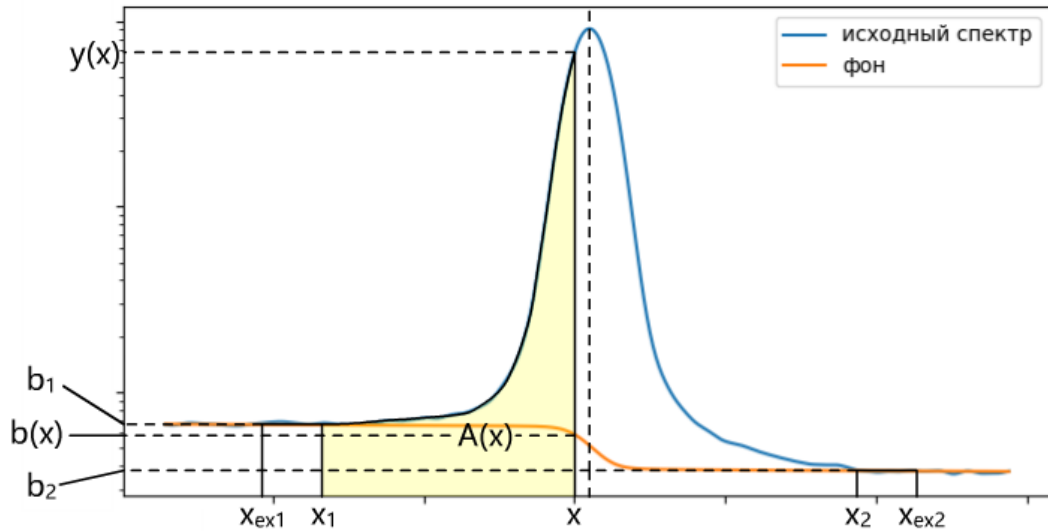


Рисунок 16. - Определение фона

Сначала необходимо указать пользователем диапазон для расчёта фона — $[x_1, x_2]$. Обычно этот диапазон симметричен относительно центральной оси пика. Потом расширяем этот диапазон и получим диапазон $[x_{ex1}, x_{ex2}]$. Расстояния расширения на обеих сторонах указаны пользователем. С учётом несимметричности пика расстояния на обеих сторонах могут быть разными. Тогда фон определён по формуле:

$$b(x) = b_1 + (b_2 - b_1) \frac{A(x)}{A_0} \quad (21)$$

где $b(x)$ — интенсивность фона с энергией x .

$$b_1 = \int_{x_{ex1}}^{x_1} y(t) dt / (x_1 - x_{ex1}) - \text{интенсивность фона левой стороны};$$

$$b_2 = \int_{x_2}^{x_{ex2}} y(t) dt / (x_{ex2} - x_2) - \text{интенсивность фона правой стороны};$$

$$A(x) = \int_{x_1}^{x_2} y(t) dt - \text{площадь области перед } x;$$

$$A_0 = A(x_2) = \int_{x_1}^{x_2} y(t) dt - \text{полная площадь области } [x_1, x_2].$$

Грубо говоря, интенсивность фона в области $[x_1, x_2]$ снижается с b_1 до b_2 линейно по объёму $A(x)$. А интенсивность фона на сторонах определяется по среднему значению по диапазонам $[x_{ex1}, x_1]$ и $[x_2, x_{ex2}]$.

Поскольку данный спектр на самом деле дискретный, в программе фон определён по изменённой формуле:

$$b_i = b_1 + (b_2 - b_1) \frac{A_i}{A_0} \quad (22)$$

где b_i – интенсивность фона i -го канала.

$b_1 = \sum_{k=i_{ex1}}^{i_1} y_k / (i_1 - i_{ex1})$ – интенсивность фона левой стороны.

$b_2 = \sum_{k=i_2}^{i_{ex2}} y_k / (i_{ex2} - i_2)$ – значение фона на сторонах.

$A_i = \sum_{k=i_1}^i y_i$ – площадь области перед каналом i .

$A_0 = A_{i_2} = \sum_{k=i_1}^{i_2} y_i$ – полная площадь области $[i_1, i_2]$.

Получив фон, вычитаем его из исходного спектра. Следует отметить, что значение неопределённости (σ_i^2) спектра остаётся неизменной, поскольку суть удаления фона – перемещение кривых вверх и вниз, при котором неопределённость кривых не изменяется.

Таким образом уже получен подготовленный энергетический спектр. Этот спектр и побочная информация (разрешение, координаты вершины и т. д.) переданы в модуль анализа программы для дальнейшего анализа.

3.2 Предварительная обработка для системы с совпадением

3.2.1 Загрузка исходных данных

Для системы без совпадения исходные данные – двумерный энергетический спектр, прямо полученный из многоканального анализатора или дигитайзера. Данные представлены в виде текстового файла (см. рисунок 17). В файле три колонки. Первая и вторая колонка – энергия пары γ -кванта, а третья колонка – интенсивность (количество событий).

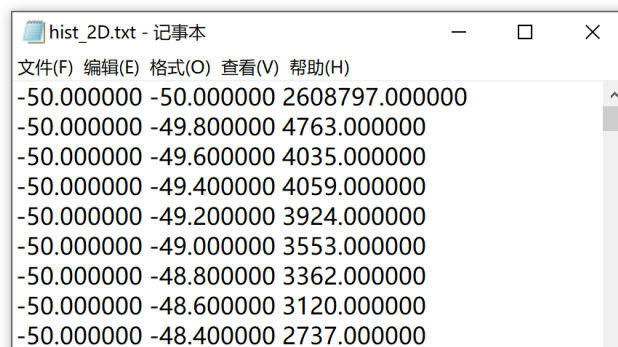


Рисунок 17. - Исходные данные в текстовом виде

Нарисуем этот двухмерный спектр, получив такое изображение как показано на рисунке 18. Видно, что благодаря использованию модуля соответствия, большинство шума отфильтровываются. За исключением области вблизи энергии аннигиляции, другие пики

практически не видны. А в окрестности энергии аннигиляции спектр выглядит как крест и косяя черта, наложенные вместе.

Эта косяя черта распространена вдоль прямой линии $E_a + E_b = 2E$. События над ней удовлетворяют распределению энергии эффекта Доплера. Именно вдоль этой линии извлекаем энергетический спектр аннигиляционных γ -квантов.

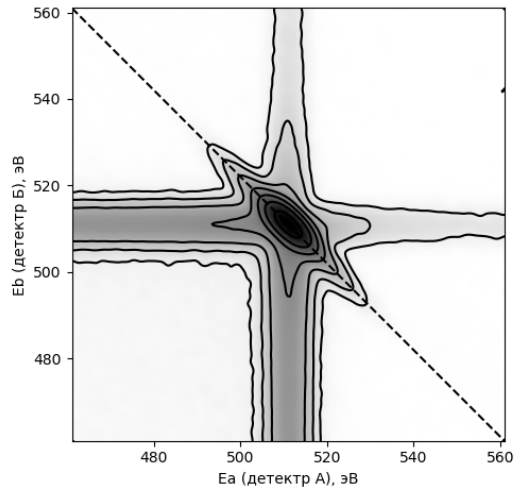


Рисунок 18. - Изображение исходного двухмерного спектра

3.2.2 Расчёт ошибки спектра

Неопределённость можно оценить так, как показано в параграфе 0. Обозначим количество каналов обоих многоканальных анализаторов буквой n , интенсивность перед преобразованием буквой $y_{i_a i_b}$. Тогда имеем

$$\sigma_{i_a i_b}^2 = y_{i_a i_b} \left(1 - \frac{y_{i_a i_b}}{s} \right) \quad (23)$$

где $s = \sum_{i_a}^n \sum_{i_b}^n y_{i_a i_b}$ – общее количество событий.

3.2.3 Преобразование координат

Чтобы удобно извлечь энергетический спектр вдоль линии $E_a + E_b = 2E$, сначала проведём преобразование координат. Мы изменили базу координат с E_a и E_b на $E'_s = \frac{E_a + E_b}{2}$ и $E'_d = \frac{E_a - E_b}{2}$. После этого изображение выглядит как показано на рисунке 19.

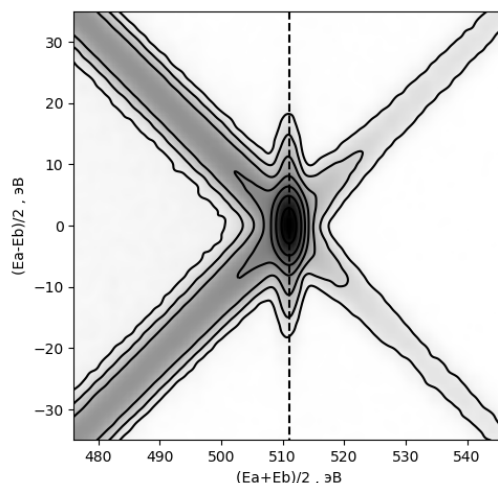


Рисунок 19. - Изображение после преобразования координат

Обозначаем интенсивность перед преобразованием функцией $y(E_a, E_b)$, а после преобразования – $y'(E'_s, E'_d)$, тогда имеем:

$$y'(E'_s, E'_d) = y(E'_s + E'_d, E'_s - E'_d) \quad (24)$$

С учётом, что данные спектра дискретные, обозначаем количество каналов обоих многоканальных анализаторов буквой n , интенсивность перед преобразованием буквой $y_{i_a i_b}$, а после преобразования – буквой $y'_{i_s i_d}$. Таким образом, интенсивность после преобразования рассчитываем по изменённой формуле:

$$y'_{i_s i_d} = y_{(i_s + i_d)(i_s - i_d + \frac{n}{2})} \quad (25)$$

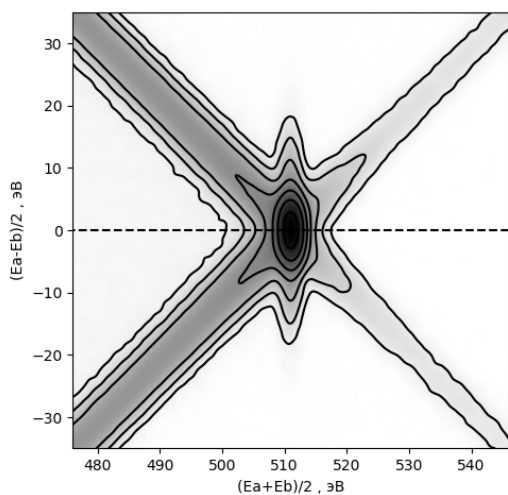
где $i_s, i_d \in \left[1, \frac{n}{2}\right]$.

Видно, что при преобразовании координат каждая точка может соответствовать взаимно-однозначно, поэтому не требуется интерполяция.

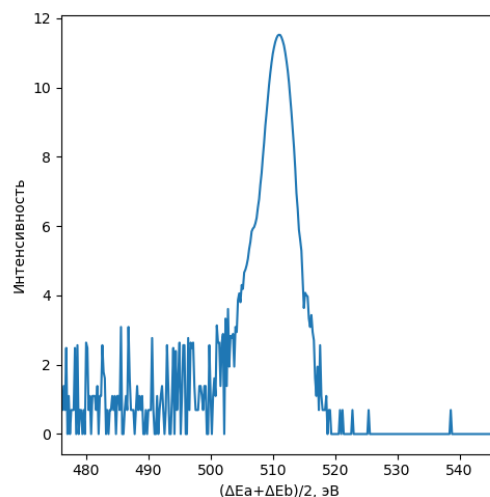
Некоторые из экспериментальных устройств поставляются с программным обеспечением, которое может автоматически выполнять это преобразование и прямо выпускать вышеуказанное изображение.

3.2.4 Оценка энергетического разрешения

Если возьмём горизонтальное сечение как показано на рисунке 20а, получим спектр как показано на рисунке 20б.



а) Горизонтальное сечение



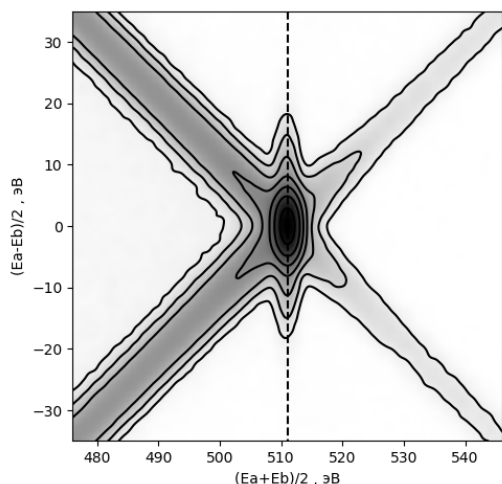
б) Спектр по горизонтальному сечению

Рисунок 20. - Оценка энергетического разрешения

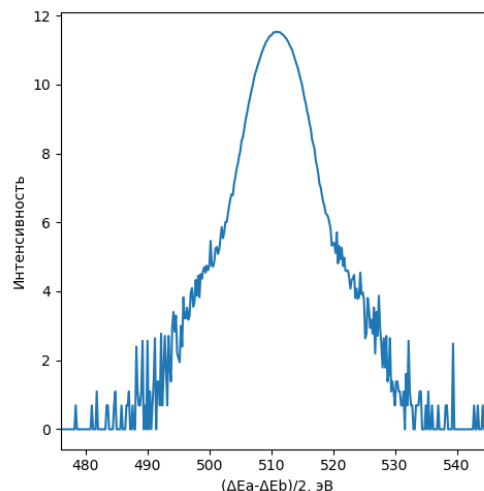
Расхождение спектра в этом направлении зависит только от точности прибора. Можем проводить гауссовский фитинг как описано в параграфе 3.1.3 и рассчитать энергетическое разрешение исходя из результатов фитинга.

3.2.5 Извлечение энергетического спектра

Если возьмём вертикальное сечение как показано на рисунке 21а, получим спектр как показано на рисунке 21б.



а) Вертикальное сечение

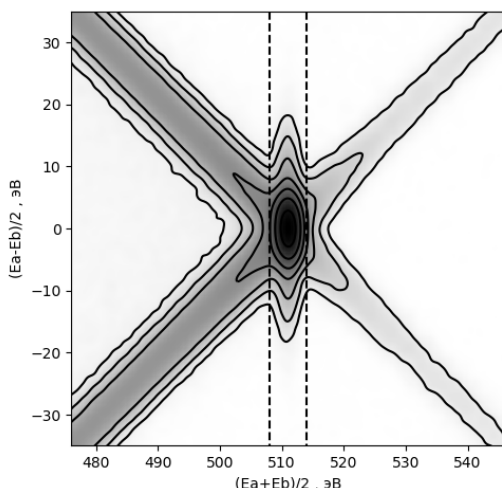


б) Спектр по вертикальному сечению

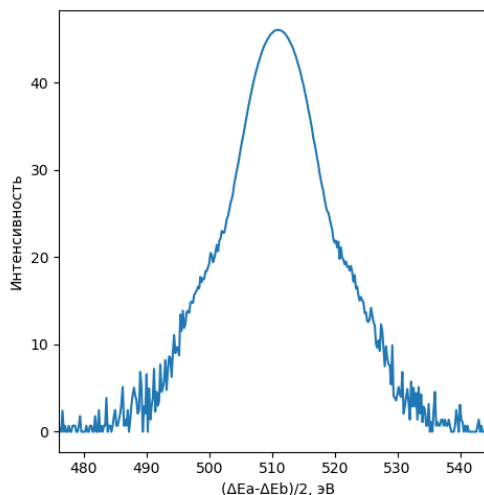
Рисунок 21. - Извлечение энергетического спектра

Видно, что этот спектр практически не имеет фона, симметричность спектра хорошая. Но есть немного шума. Это происходит потому, что количество событий слишком мало (в этом примере не превышает 12).

Чтобы использовать больше событий, мы можем не только взять одну линию, но и узкую полосу около неё, как показано на рисунке 22а. Таким образом, шум значительно уменьшается, как показано на рисунке 22б.



а) Узкая полоса



б) Спектр по полосе

Рисунок 22. - Извлечение энергетического спектра полосой

После вышеуказанной операции получается достаточно хороший энергетический спектр для дальнейшего анализа.

3.3 Анализ энергетических спектров

3.3.1 Расчёт S- и W-параметра

После обработки сырых данных получим некоторые спектры, содержащие аннигиляционный пик. Согласно математическому описанию в предыдущей главе 2.3.1, в программе параметры и их неопределённости определяются по формуле:

$$S = \frac{A_S}{A_0} = \frac{\sum_{i=i_{s1}}^{i_{s2}} y_i}{\sum_{i=1}^n y_i}, \quad \sigma_S^2 = S^2 \left(\frac{\sum_{i=i_{s1}}^{i_{s2}} \sigma_i^2}{A_S^2} + \frac{\sum_{i=1}^n \sigma_i^2}{A_0^2} \right) \quad (26)$$

$$W_1 = \frac{A_{W1}}{A_0} = \frac{\sum_{i=i_{a1}}^{i_{w1}} y_i}{\sum_{i=1}^n y_i}, \quad \sigma_{W1}^2 = W_1^2 \left(\frac{\sum_{i=i_{a1}}^{i_{w1}} \sigma_i^2}{A_{W1}^2} + \frac{\sum_{i=1}^n \sigma_i^2}{A_0^2} \right) \quad (27)$$

$$W_2 = \frac{A_{W2}}{A_0} = \frac{\sum_{i=i_{w2}}^{i_{a2}} y_i}{\sum_{i=1}^n y_i}, \quad \sigma_{W2}^2 = W_2^2 \left(\frac{\sum_{i=i_{w2}}^{i_{a2}} \sigma_i^2}{A_{W2}^2} + \frac{\sum_{i=1}^n \sigma_i^2}{A_0^2} \right) \quad (28)$$

$$W = W_1 + W_2, \quad \sigma_W^2 = \sigma_{W1}^2 + \sigma_{W2}^2 \quad (29)$$

Полученные параметры, как S , W_1 , W_2 , W и соответствующие значения неопределённости будут показаны пользователю как результаты. Программа также может строить кривые, описывающие изменение параметров по внешним факторам, заданным пользователем для каждого спектра.

3.3.2 Построение относительных кривых

Математическая формула расчёта относительных кривых уже приведена в главе 2.3.2. Но в практике ситуация немного сложнее.

Из-за влияния различных факторов (например, незначительные изменения в свойствах материала детектора, параметры настройки приборов, флуктуация спектра и т. д.) центр пика (координат вершины) может незначительно смещаться. Поэтому, сначала необходимо выровнять спектры, чтобы их центр находился в одном месте, а потом вырезать перекрывающую часть. После этого получаем аккуратный набор спектров. Программа также может сложить или отрезать спектр вдоль центральной оси при необходимости. Весь вышесказанный процесс показан ниже на рисунке 23.

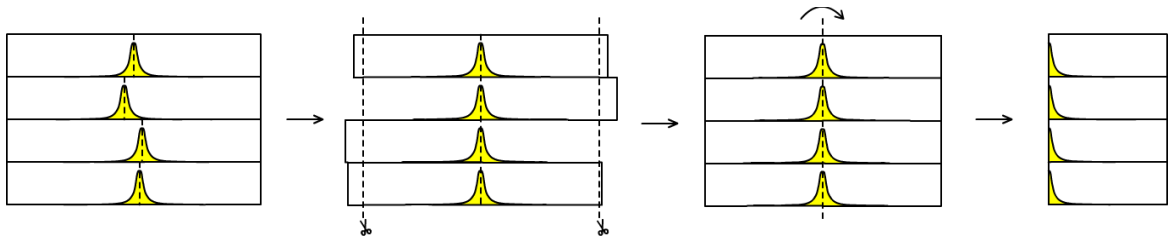


Рисунок 23. - Выравнивание спектров

Учитывая, что полученная интенсивность каждого спектра отличается друг друга по размеру из-за влияния различных факторов (например, время набора спектров, интенсивность источника и т. д.), необходимо проводить нормализацию, т. е. масштабированием сделать общую площадь A_0 разных спектров равной. При

нормализации необходимо напрямую разделить значение интенсивности в каждом канале на общую площадь A_0 . Таким образом общая площадь всех нормализованных спектров будет равна единице. Ещё учитывая дискретность данных, формулы записываются так, как

Кривые разности:

$$z_{ij} = \frac{y_{ij}}{A_{0j}} - \frac{y_{i0}}{A_{00}} = \frac{y_{ij}}{\sum_{i=1}^n y_{ij}} - \frac{y_{i0}}{\sum_{i=1}^n y_{i0}} \quad (30)$$

Кривые отношения:

$$z_{ij} = \frac{y_{ij}/A_{0j}}{y_{i0}/A_{00}} = \frac{y_{ij}/\sum_{i=0}^n y_{ij}}{y_{i0}/\sum_{i=1}^n y_{i0}} \quad (31)$$

где z_{ij} – относительное значение i -го канала j -го спектра;

y_{ij} – интенсивность i -го канала j -го спектра;

A_{0j} – общая площадь зоны под j -ым спектра.

Расчёт неопределённости тоже проводится по правилу передачи. Этот расчёт лёгкий и механический, а его формула представляется очень большой, поэтому здесь формулу показывать не будем.

Пользователь может настроить программу таким образом, чтобы использовать вычитание (30) или отношение (31) для расчёт относительных кривых. Рассчитав относительные кривые спектров, программа нарисует эти кривые, поставит соответствующие легенды и покажет пользователю графики в качестве результата.

Также в данной программе можно сделать компонентный анализ. Сначала надо указать пользователю некоторые спектры в качестве «базиса» (индексом k) и другие спектры (индексом l) для проведения фитинга.

Процесс анализа для программы в основном соответствует математическим выражениям в параграфе 2.3.2. Но поскольку данные дискретные, все интегралы заменены суммированием. Тогда элементы матрицы \mathbf{P} и вектор \mathbf{B} определяются следующим образом

$$p_{k_0k} = \sum_{i=1}^n u_{ik_0} u_{ik} \quad (32)$$

$$b_{k_01} = \sum_{i=1}^n z_{il} u_{ik_0} \quad (33)$$

А значение θ_k определяется с помощью обратной матрицы \mathbf{P}^{-1} по формуле (14), рассчитываемой с помощью функции *inv()* [28] из инструментария *linalg* в лаборатории *Nimru*. А коэффициент эталонного компонента θ_{0l} по формуле (15).

Чтобы оценить качество фитинга, программа ещё рассчитывать среднеквадратическое отклонение σ_l по следующей формуле

$$\sigma_l = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (\hat{z}_{il} - z_{il})^2} = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \left(\left(\sum_{k=1}^p \theta_{kl} u_{ik} \right) - z_{il} \right)^2} \quad (34)$$

Глава 4. Практическое использование

4.1 Создание программы «DBSpy»

DBSpy – разработанная в данной работе программа на языке программирования Python. Существует две основных причин выбора языка Python. Во-первых, существуют много зрелых научных вычислительных инструментов, использующихся в среде Python. Во-вторых, язык Python легче может быть понят, поскольку количество исследователей, использующих Python, большое.

Исходный код этой программы открыт с самого начала разработки. Мы открыли исходный код, чтобы поделиться результатами исследований, помогать в использовании других исследователей и предлагать возможности добавления функционального расширения. Исходный код доступен на сайте GitHub (<https://github.com/ZhengKeli/DBSpy>).

В данном тексте не будем подробно рассматривать реализацию кодом, а только будем представлять архитектуру программы и идею реализации.

4.1.1 Ядро

Ядро – это то, где работает алгоритм. Ядро предназначено для работы независимо, т. е. ядро само может работать без интерфейса пользователя через команды. Это позволяет использование ядра различными способами. В ядре, использованы для различных расчётов популярные научные вычислительные лаборатории, такие как *Numpy* [29], *SciPy* [30] и т. д.

Чтобы удовлетворить потребности интерфейса пользователя и улучшить читаемость программы, вся обработка в ядре делится на несколько этапов. В каждом этапе принимаются параметры настройки и ещё выпуск других этапов, проводится расчёт и получается результат. Результаты всех этапов держатся чтобы избежать ненужного повторяющегося расчёта. При расчёте будет проверены, и обновлены значения параметров настройки и других связанных величин. Только при обновлении связанных величин будет происходить пересчёт результатов этого этапа.

4.1.2 Интерфейс пользователя

В данной работе реализован интерфейс пользователя с помощью лаборатории *Tkinter* [31] и *matplotlib* [32] на языке программирования *Python*.

Ниже на рисунке 24, рисунке 25 и рисунке 26 представлен примерный вид интерфейса пользователя. Видно, что интерфейс в основном разделился в две части. Слева – перечень спектров, этапов обработки и анализов спектров. Справа – конфигурации и результаты соответствующего этапа анализа.

Выбирая пункт «Main», открывается главная панель (см. рисунок 24), в которой можно добавить спектр и анализ. Выбирая пункт этапа обработки или анализа, открывается

соответствующая панель (см. рисунок 25 и рисунок 26), в которой можно настроить параметры обработки и одновременно наблюдать за результатами этого этапа.

Так очень удобно для регулирования параметров. Например, для анализа расчёта S- и W-параметра, обычно мы хотим, чтобы значение S было около 0.5, а значение W – 0.03 [9]. регулируя параметры r_s , r_w и r_a , наблюдается изменение значений S- и W-параметра. Таким образом будет легко поставить их в соответствующем диапазоне.

Это также очень полезно для устранения ошибок. Если на каком-то этапе обработки появляется ошибка. Результат этого этапа получается странным или вообще не получается ни чего. Тогда мы будем знать, что в этом этапе что-то настроено неправильно.

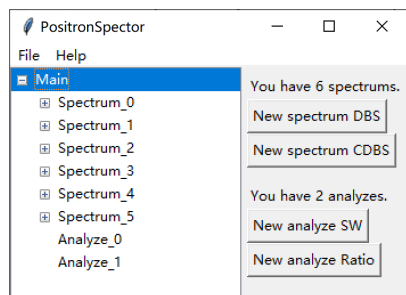


Рисунок 24. - Главная панель

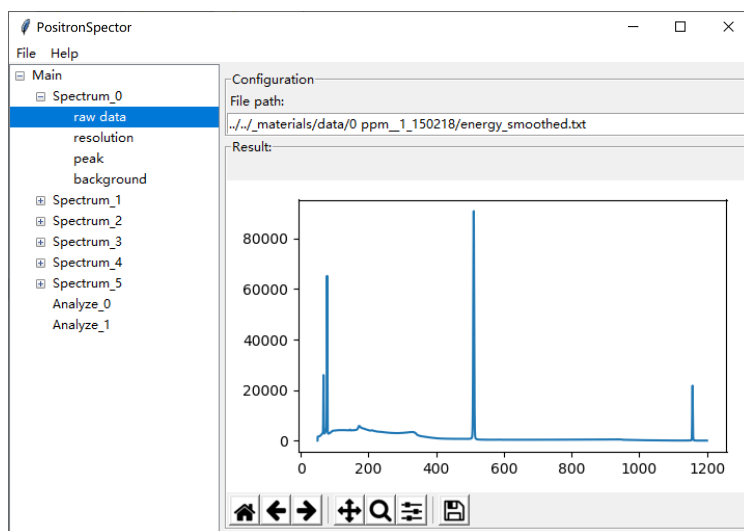


Рисунок 25. - Панель загрузки исходных данных

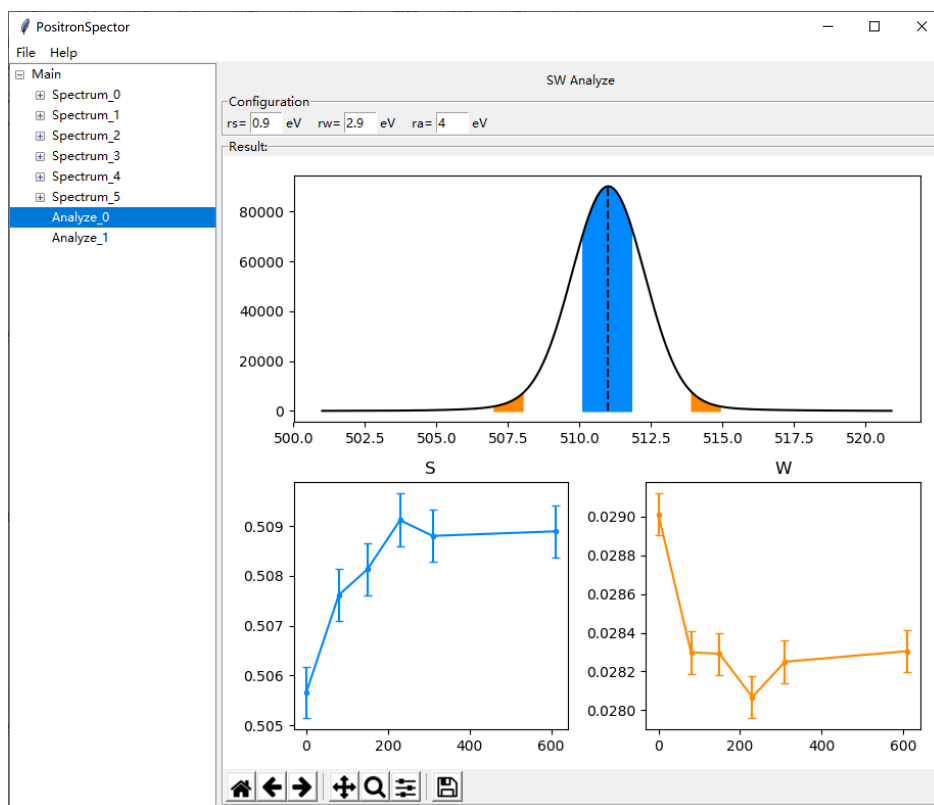


Рисунок 26. - Панель расчёта S- и W-параметра

4.2 Апробация алгоритма

4.2.1 Сравнение с программой SP-11

Чтобы проверить, работает ли программа, мы сравнили результаты, получаемые из своей программы *DBSpy* с существующей программой *SP-11*, написанной *Jerzy Dryzek* [10]. Эта программа может рассчитать S- и W-параметр, но не обладает функцией построения относительных кривых. При тестировании мы установим параметры одинаковыми и проведём расчёт для серии спектров и получим диаграмму отношения величин S и W от концентрации дефектов. Результат сравнения показан вниз на рисунке 27.

Для подготовки образцов с различной концентрацией дефектов были выбраны образцы циркониевого сплава, насыщенные водородом до различных концентраций (0-610 ppm). Из литературных данных [33] известно, что увеличение концентрации водорода в металлическом материале приводит к росту концентрации дефектов. Ниже представлены результаты данного сравнения.

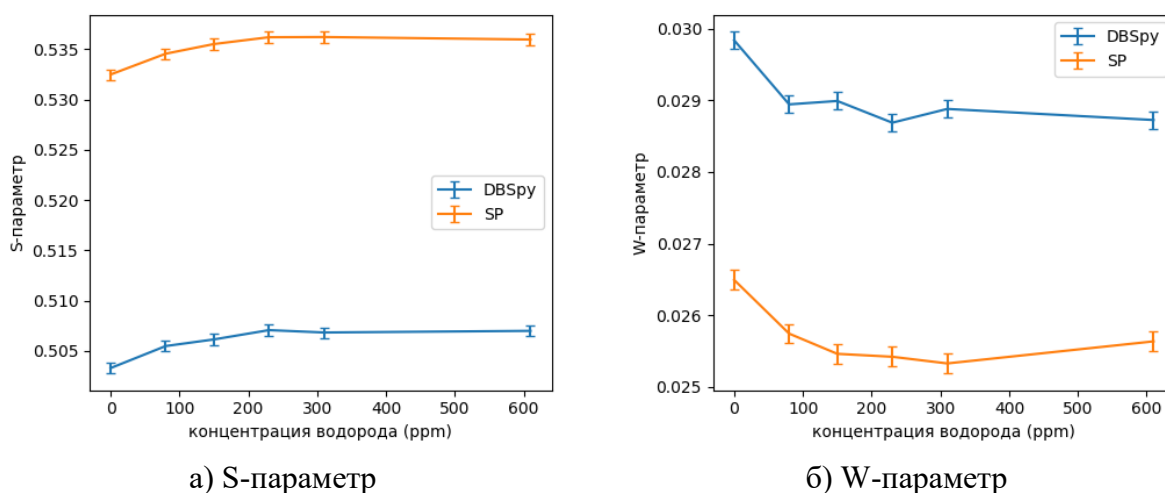


Рисунок 27. - Сравнение результатов обработки спектров, полученных при помощи программы *DBSpy* и *SP-11*

Видно, что флуктуация двух кривых в основном одинакова. Но общая кривая немного смещена. Это должно быть вызвано нюансом оценки фона.

В результате апробации, считаем, что программа рассчитывает S- и W-параметр правильно.

4.2.2 Компонентный анализ

Чтобы проверить правильности расчёта относительных кривых, проведён анализ элементного состава. Были использованы три образца. Первый образец – чистый цирконий, а второй – чистый ниобий (Nb). Ещё использован комбинационный третий образец, который состоит из циркония, и ниобия (Zr+Nb).

В параграфе 2.2.2 описано, что в эксперименте используются два листа образца. Обычно они одинаковы, но в данном исследовании для третьего измерения были

использованы два разных материала – один образец циркония и один образец ниобий. Легко понять, что половина позитронов аннигилируют в цирконии, а другая половина – в ниобии. Тогда энергетический спектр третьего измерения должен быть средним между первым и вторым.

С помощью этой программы нарисуем относительные кривые (возьмём Zr в качестве эталонного), как показано на Рисунок 28.

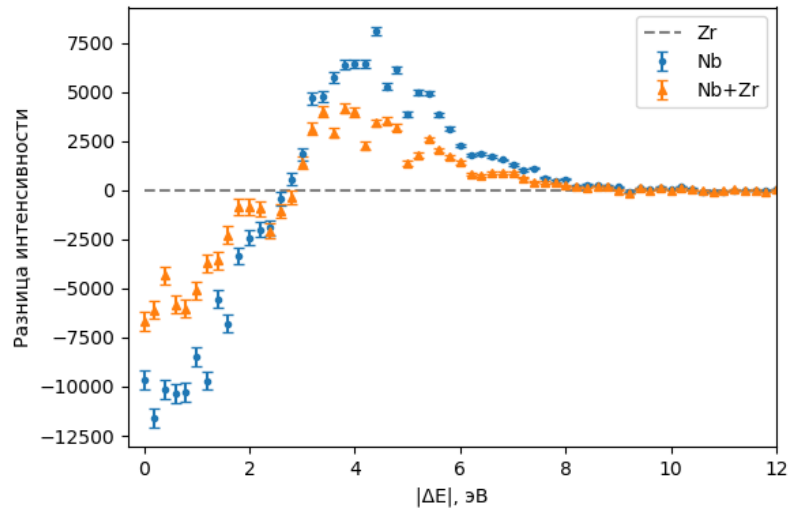


Рисунок 28. - Относительные кривые трёх образца

Проводим компонентный анализ, т. е. проводим фитинг определяющий параметр k в следующей формуле:

$$z_{Zr+Nb} = z_{Zr} + \theta_{Nb} \cdot z_{Nb} \quad (35)$$

После фитинга получим:

Коэффициент пропорциональности $\theta_{Nb} = 0,528$

Среднеквадратическое отклонение фитинга $\sigma_{Nb} = 1,0923 \times 10^{-4}$

В результате апробации, считаем, что программа рассчитывает относительные кривые правильно.

Глава 5. Финансовый менеджмент, ресурсоэффективность и ресурсосбережение

5.1 Планирование научно-исследовательских работ

5.1.1 Структура работ в рамках научного исследования

Для совершения данного проекта необходимо разумно планировать работу с занятостью участников и рабочее время каждого человека. В плане, разделены работы, которые выполняются в разном этапе разным люди. В таблице 1 перечислены участники, вовлечённые в работу. А в таблице 2 перечислены этапы проекта и распределение исполнителей.

Таблица 1. Перечень участников

Обозначение	Должность исполнителя
НР	Научный руководитель
И	Исполнитель

Таблица 2. Перечень этапов проекта и распределение исполнителей

Основной этап	№ работ	Содержание работ	Исполнитель и загрузка
Подготовка	1	Проставление цель и задачи	НР – 100% И – 30%
	2	Обзор литературы	НР – 10% И – 100%
	3	Обсуждение способа решения	НР – 100% И – 100%
Разработка	4	Предварительная реализация алгоритма	НР – 50% И – 100%
	5	Создание ядро программы	И – 100%
	6	Создание интерфейс пользователя	И – 100%
Апробация	7	Получение данные DBS	НР – 100%
	8	Проведение апробации DBS	НР – 20% И – 100%
	9	Получение данные CDBS	НР – 30% И – 100%
	10	Проведение апробации CDBS	НР – 20% И – 100%
Публикация	11	Подготовка материалов	НР – 30% И – 100%
	12	Написание и редакция стадии	НР – 30% И – 100%

5.1.2 Расчёт продолжительности этапов работ

Для планирования работ, необходимо оценить время для завершения работ каждого этапа. Существует два метода расчёта продолжительности этапа работы.

Первый метод – метод технология и экономика: этот метод применим к полностью разработанной нормативно-правовой базе для трудоёмкости процесса планирования, что, в свою очередь, обусловлено их высокой воспроизводимостью в стабильной среде.

Второй метод – опытно-статистический метод, который может быть реализован двумя способами – аналоговый и экспертный. Аналоговый метод возможен только при наличии устаревшего симулятора в поле зрения исполнителя. В большинстве случаев его можно применять только локально – для отдельных элементов (этап работы). Так что выбирайте экспертный метод для оценки. Экспертные методы пригодны для использования при отсутствии информационных ресурсов, а эксперты в конкретных предметных областях проводят необходимые количественные оценки на основе своего профессионального опыта.

Поскольку исполнители не имеют соответствующих стандартов, мы отказываемся от использования метода технология и экономика, а используем опытно-статистический метод.

Рассчитываем ожидаемое время для каждого этапа по следующей формуле:

$$t_{ож} = (3t_{min} + 2t_{max})/5 \quad (36)$$

где $t_{ож}$ – ожидаемая продолжительность работы;

t_{min} – минимальная продолжительность работы;

t_{max} – максимальная продолжительность работы.

Чтобы построить линейную графику, необходимо рассчитать длительность этапов в рабочих днях, а затем перевести её в календарные дни. Продолжительность в рабочих днях ($T_{рД}$) рассчитывается по формуле (37). А расчёт продолжительности работ в календарных днях ($T_{кД}$) ведётся по формуле (38).

$$T_{рД} = \frac{t_{ож}}{K_{ВН}} \cdot K_{Д} \quad (37)$$

$$T_{кД} = T_{рД} \cdot T_{К} \quad (38)$$

где $t_{ож}$ – ожидаемая продолжительность работы;

$K_{ВН}$ – коэффициент выполнения работ, учитывающий влияние внешних факторов на соблюдение длительностей (принимается $K_{ВН} = 1.2$);

$K_{Д}$ – коэффициент, учитывающий дополнительное время на компенсацию непредвиденных задержек и согласование работ (принимается $K_{Д} = 1.1$);

$T_{К}$ – коэффициент календарности, позволяющий перейти от длительности работ в рабочих днях к их аналогам в календарных днях.

Коэффициент календарности T_K рассчитываемый по следующей формуле:

$$T_K = \frac{T_{КАЛ}}{T_{КАЛ} - T_{ВД} - T_{ПД}} = \frac{365}{365 - 52 - 10} = 1,205 \quad (39)$$

где $T_{КАЛ} = 365$ – календарные дни;

$T_{ВД} = 52$ – выходные дни;

$T_{ПД} = 10$ – праздничные дни.

Рассчитываем по вышесказанным формулам. Трудозатраты на выполнение каждого этапа перечислены ниже в таблице 3. Потом построен линейный график работ в таблице 4.

Таблица 3. Трудозатраты этапов проекта

№ работ	Продолжительность работ, дн.			Трудоёмкость работ по исполнителям, чел. дн.			
	t_{min}	t_{max}	$t_{ож}$	$T_{рд}$		$T_{кд}$	
				НР	И	НР	И
1	2	5	3.2	2.9	0.9	3.5	1.1
2	12	30	19.2	1.8	17.6	2.1	21.2
3	2	4	2.8	2.6	2.6	3.1	3.1
4	7	14	9.8	4.5	9.0	5.4	10.8
5	7	14	9.8	0.0	9.0	0.0	10.8
6	14	30	20.4	0.0	18.7	0.0	22.5
7	5	7	5.8	5.3	0.0	6.4	0.0
8	2	4	2.8	0.5	2.6	0.6	3.1
9	4	7	5.2	1.4	4.8	1.7	5.7
10	2	4	2.8	0.5	2.6	0.6	3.1
11	3	5	3.8	1.0	3.5	1.3	4.2
12	5	7	5.8	1.6	5.3	1.9	6.4
Итого			91.4	22.1	76.6	26.6	92

Таблица 4. Линейный график работ

№ работ	$T_{\text{кд}}$, дн.	Март			Апрель			Май			Июнь		
1	НР – 3.5 И – 1.1												
2	НР – 2.1 И – 21.2												
3	НР – 3.1 И – 3.1												
4	НР – 5.4 И – 10.8												
5	И – 10.8												
6	И – 22.5												
7	НР – 6.4												
8	НР – 0.6 И – 3.1												
9	НР – 1.7 И – 5.7												
10	НР – 0.6 И – 3.1												
11	НР – 1.3 И – 4.2												
12	НР – 1.9 И – 6.4												

5.2 Бюджет научно-исследовательского проекта

В данной параграфе рассчитывается бюджет данного научно-технического исследования. Для создания проекта необходимо рассчитать затраты, необходимые для реализации комплекса работ. В расчёте учитываются затраты по следующим статьям:

- Затраты на материалы
- Затраты на электроэнергию
- Затраты на амортизацию оборудования
- Заработные платы
- Затраты на социальный налог
- Расходы, учитываемых непосредственно на основе платёжных (расчётных) документов (кроме суточных)
- Прочие затраты

5.2.1 Затраты на материалы

В данном проекте чтобы получить экспериментальные данные для апробации алгоритма требуются некоторые металлические образцы. При подготовке образцов требуются наждачная бумага и резиновые перчатки для полировки. Кроме этого, чтобы поддерживать работу лабораторного оборудования, мы должны продолжать оказывать жидкий азот для охлаждения.

Таблица 5. Перечень материальных затрат

Материал	Единица измерения	Цена за единицу, руб.	Количество	Сумма, руб.
Цирконий (Zr)	кг	25000	0.05	1250
Ниобий (Nb)	кг	10000	0.05	500
Жидкий азот (N ₂)	литр	60	60	3600
Резиновые перчатки	шт.	100	2	200
Наждачная бумага	шт.	60	5	300
Итого				5850

(транспортно-заготовительные расходы: $5850 \times 0.05 = 292.5$ руб.)

Тогда общий затрат на материалы: $C_{\text{мат}} = 5850 + 292.5 = 6142.5$ руб.

5.2.2 Затраты на электроэнергию

Для расчёта затрат на электроэнергию нужно знать местную цену на электроэнергию, мощность устройства и время использования. Затрат на электроэнергию рассчитывается по следующей формуле.

$$C_{\text{эл}} = P_{\text{об}} \cdot t_{\text{раб}} \cdot C_{\text{эл}} \quad (40)$$

где $C_{\text{эл}}$ – затрат на электроэнергию;

$P_{\text{об}}$ – мощность оборудования;

$t_{\text{раб}}$ – время работы оборудования;

$\text{Ц}_{\text{эл}}$ – цена на электроэнергию, в ТПУ $\text{Ц}_{\text{эл}} = 5.748$ руб./($\text{кВт} \cdot \text{час}$).

Потребляемая оборудованием мощность, определяется по следующей формуле.

$$P_{\text{об}} = P_{\text{ном}} \cdot K_c \quad (41)$$

где $P_{\text{об}}$ – потребляемая оборудованием мощность;

$P_{\text{ном}}$ – номинальная мощность оборудования;

K_c – КПД при передаче электроэнергии.

В данном случае мощность оборудования не большая, принимаем $K_c = 1$. Тогда можем считать, что $P_{\text{об}} = P_{\text{ном}}$.

В лаборатории запишем энергетический спектр аннигиляционных фотонов с помощью системы, состоящая из некоторых оборудования. Поскольку используем данные другого связанного проекта для апробации DBS, здесь только учитываем потребляемая электроэнергия экспериментальных систем для получения данных CDBS. Эта система после создания и апробации необходимо продолжительно работать на протяжении всего эксперимента. Поэтому время работы гораздо больше рабочего времени человека.

Также надо обратить внимание на оборудования для поддержания лабораторной среды. Это включает в себя освещение, вентиляцию и кондиционирование. Системы вентиляции и кондиционирования необходимо работает 24 часа в сутки, а освещение работает только в рабочее время.

Кроме этого, для обработки данных, разработки программы и апробации алгоритма требует персональный компьютер. В данном случае время работы оборудования (компьютер) соответствует рабочему времени человека.

Таблица 6. Перечень затраты на электроэнергию

Оборудование	Время работы $t_{\text{раб}}$, ч	Потребляемая Мощность $P_{\text{об}}$, кВт	Цена единицы оборудования $\text{Ц}_{\text{эл}}$, кВт/ч	Затраты на электроэнергию $\text{С}_{\text{эл}}$, руб.
Система CDBS	168	0.3	5.748	289.70
Система вентиляции		0.1		96.57
Кондиционер		1.2		1158.80
Лампа	60	0.08		27.59
Компьютер	364	0.2		418.45
Итого				1991.11

5.2.3 Затраты на амортизацию оборудования

В учёте затрат учитывается не только счёт за электроэнергию оборудования, но и амортизация оборудования. Амортизация рассчитывается по следующей формуле.

$$C_{\text{ам}} = \frac{H_a \cdot C_{\text{об}} \cdot t_{\text{рф}}}{F_d} \quad (42)$$

где $C_{\text{ам}}$ – амортизация оборудования;

H_a – годовая норма амортизации;

$C_{\text{об}}$ – балансовая стоимость оборудования с учётом транспортно-заготовительных расходов;

$t_{\text{рф}}$ – фактическое время работы оборудования в ходе выполнения проекта, задаётся исполнителем проекта;

F_d – действительный годовой фонд времени работы оборудования.

Таблица 7. Перечень затрат на оборудование (амортизации)

Оборудование	Цена оборудования, $C_{\text{об}}$, тыс. руб.	Годовая норма H_a	Действительный годовой фонд времени F_d , ч	Время работы $t_{\text{рф}}$, ч	Амортизация, руб.
Система CDBS	53	10%	350×24=8400	168	106.00
Система вентиляции	12	10%			24.00
Кондиционер	15	10%			30.00
Лампа	2	50%	303×24=7272	60	8.00
Компьютер	30	20%		364	300.00
Итого					468.00

5.2.4 Заработные платы

Среднедневная тарифная заработная плата рассчитывается по следующей формуле:

$$З_{\text{дн}} = \frac{O_{\text{мес}}}{D_{\text{мес}}} \quad (43)$$

где $З_{\text{дн}}$ – среднедневная тарифная заработная плата;

$O_{\text{мес}}$ – месячный оклад;

$D_{\text{мес}}$ – среднемесячные рабочие дни;

Считаем, что рабочие дни в год $D_{\text{год}} = 365 - 52 - 10 = 303$ дн. Тогда среднемесячные рабочие дни составляет $D_{\text{мес}} = D_{\text{год}}/12 = 25.25$ дн.

Для учёта в составе премий, дополнительной зарплаты и районной надбавки используется следующий ряд коэффициентов – $K_{пр} = 1.1$; $K_{доп} = 1.188$; $K_p = 1.3$ Добавим тарифы к базовой зарплате и оценить соответствующий коэффициент:

$$K_{и} = K_{пр} \cdot K_{доп} \cdot K_p = 1.699 \quad (44)$$

Таблица 8. Перечень заработных плат

Исполнитель	Оклад, руб./мес.	Среднедневная ставка, руб./раб. дн.	Рабочее время, раб. дн.	Коэффициент	Фонд заработной платы, руб.
НР	26624.00	1054.42	22.1	1.699	39591.26
И	15470.00	612.67	76.6	1.62	76027.45
Итого					115618.71

5.2.5 Затраты на социальный налог

Затраты на единый социальный налог (ЕСН), включающий в себя отчисления в пенсионный фонд, на социальное и медицинское страхование, составляют 30% от полной заработной платы по проекту. Тогда затрат на социальный налог:

$$C_{соц} = C_{зп} \cdot 30\% = 34685.61 \text{ руб.} \quad (45)$$

5.2.6 Расходы, учитываемых непосредственно на основе платёжных (расчётных)

документов

Сюда относятся:

- Командировочные расходы;
- Арендная плата за пользование имуществом;
- Оплата услуг связи;
- Услуги сторонних организаций;
- Оплаты суточных.

В данном проекте нет командировок. Оплата проживания в общежитии – 50 руб./день. Сторонний сервис (лазерная резка образцов) – 300 руб. Время проживания – 96 дней. Итого по данному пункту:

$$C_{нп} = 50 \times 96 + 300 = 5100 \text{ руб.} \quad (46)$$

5.2.7 Прочие затраты

В данном разделе отражены расходы на выполнение проекта, которые не учтены в предыдущих разделах. считаем, что их следует принять равными 10% от суммы всех предыдущих расходов.

$$C_{\text{проч}} = (C_{\text{мат}} + C_{\text{эл}} + C_{\text{ам}} + C_{\text{зп}} + C_{\text{соц}} + C_{\text{нп}}) \times 10\%$$

$$= (6142.50 + 1991.11 + 468 + 115618.71 + 34685.61 + 5100) \times 10\%$$

$$= 16400.59 \text{ руб.}$$

5.2.8 Формирование бюджета научно-исследовательского проекта

Консолидировать и суммировать расходы по вышеуказанным разделам. Все затраты на этот эксперимент представлены ниже в таблице 9.

Таблица 9. Перечень всех затрат

Затраты	Сумма, руб.
Затраты на материалы	6142.50
Затраты на электроэнергию	1991.11
Затраты на амортизацию оборудования	468.00
Заработные платы	115618.71
Затраты на социальный налог	34685.61
Расходы, учитываемых непосредственно на основе платёжных документов	5100.00
Прочие затраты	16400.59
Итого	180406.52

5.2.9 Оценка экономической эффективности проекта

В этом проекте разработана программа, исходный код которого открыт и свободно доступен в интернете. Этот проект практически не имеет прямого практического применения. Поэтому оценка его экономической эффективности невозможна.

Глава 6. СОЦИАЛЬНАЯ ОТВЕТСТВЕННОСТЬ

6.1 Введение

Данный проект заключается в разработке алгоритмов для обработки данных. Но для апробации алгоритма необходимо проводить эксперимент, чтобы получить определённые данные.

Все работы (получение данные, обработка данные, разработка алгоритма) выполняются в лаборатории в цокольном этаже корпуса №3 ТПУ. Эксперимент проводится в комнате с системой CDBS. Схема этой системы показана в предыдущих главах. Обработка данных и разработка алгоритма проводится в общественной зоне лаборатории с компьютерами.

6.2 Правовые и организационные вопросы обеспечения безопасности

6.2.1 Специальные (характерные для рабочей зоны исследователя) правовые нормы трудового законодательства

Лаборатория принадлежит университету ТПУ и является учебной аудиторией.

Согласно разделу VI трудового кодекса Российской Федерации, заработная плата каждого работника зависит от его квалификации, сложности выполняемой работы, количества и качества затраченного труда и максимальным размером не ограничивается, за исключением случаев, предусмотренных настоящим Кодексом. Запрещается какая бы то ни было дискриминация при установлении и изменении условий оплаты труда [34].

При исследовании в лаборатории существуют много вредных и опасных факторов производства. Согласно разделу X трудового кодекса [34], работодатель (в этом случае, ИЯТШ ТПУ) обязан обеспечить:

- Безопасность работников при эксплуатации зданий, сооружений, оборудования, осуществлении технологических процессов, а также применяемых в производстве инструментов, сырья и материалов;
- Создание и функционирование системы управления охраной труда;
- Применение прошедших обязательную сертификацию или декларирование соответствия в установленном законодательством Российской Федерации о техническом регулировании порядке средств индивидуальной и коллективной защиты работников;
- Соответствующие требованиям охраны труда условия труда на рабочем месте;
- Режим труда и отдыха работников в соответствии с трудовым законодательством и иными нормативными правовыми актами, содержащими нормы трудового права;
- Приобретение и выдачу за счёт собственных средств специальной одежды, специальной обуви и других средств индивидуальной защиты, смывающих и

обезвреживающих средств, прошедших обязательную сертификацию или декларирование соответствия в установленном законодательством Российской Федерации о техническом регулировании порядке, в соответствии с установленными нормами работникам, занятым на работах с вредными и (или) опасными условиями труда, а также на работах, выполняемых в особых температурных условиях или связанных с загрязнением;

- Работники, занятые на работах с вредными и (или) опасными условиями труда проходят обязательные предварительные (при поступлении на работу) и периодические (для лиц в возрасте до 21 года - ежегодные) медицинские осмотры для определения пригодности этих работников для выполнения поручаемой работы и предупреждения профессиональных заболеваний.

Для исключения возможности несчастных случаев должны проводиться обучение, инструктажи и проверка знаний работников требований безопасности труда. На рабочем месте должны быть запасы сырья и материалов, не превышающие сменную потребность. Необходимо знать специфические свойства применяемых веществ и соблюдать установленные правила работы с ними. Производственный процесс должен быть организован так, чтобы не допускать выделения в воздух рабочей зоны пыли и вредных веществ.

Все эксплуатируемые электроустановки должны соответствовать требованиям «правил технической эксплуатации электроустановок потребителей», и др. нормативных документов. Эксплуатация электрооборудования без заземления не допускается. Помещения опытно-производственной лаборатории обеспечиваются первичными средствами пожаротушения согласно действующим нормам.

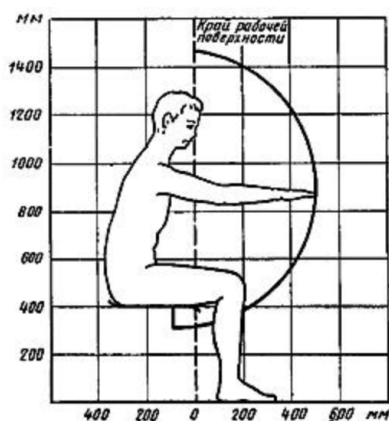
Все работники должны уметь пользоваться средствами пожаротушения и уметь оказывать первую помощь при несчастном случае. Не допускается загромождения рабочих мест, проходов, выходов из помещений и здания, доступа к противопожарному оборудованию.

Кроме этого, все исследователи должны приобрести страховку от несчастных случаев, которая составляет не менее 10% от зарплаты. Единовременные и ежемесячные страховые выплаты назначаются, если по заключению учреждения медико-социальной экспертизы застрахованный работник в результате несчастного случая на производстве или профессионального заболевания полностью или частично утратил профессиональную трудоспособность, либо могут быть назначены лицам, имеющим право на получение таких выплат в случае смерти застрахованного.

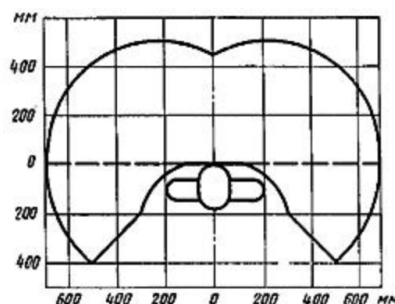
6.2.2 Организационные мероприятия при компоновке рабочей зоны исследователя

Работа в лаборатории в основном выполняется сидя. Согласно ГОСТ 12.2.032-78, конструкция рабочего места и взаимное расположение всех его элементов (сиденье, органы управления, средства отображения информации и т. д.) должны соответствовать антропометрическим, физиологическим и психологическим требованиям, а также характеру работы [35].

Конструкцией рабочего места должно быть обеспечено выполнение трудовых операций в пределах зоны досягаемости моторного поля. Зоны досягаемости моторного поля в вертикальной и горизонтальной плоскостях для средних размеров тела человека приведены ниже на рисунке 29 [35].



а) Зона досягаемости моторного поля в вертикальной плоскости



б) Зона досягаемости моторного поля в горизонтальной плоскости

Рисунок 29. - Зона досягаемости моторного поля

Выполнение трудовых операций "часто" и "очень часто" должно быть обеспечено в пределах зоны лёгкой досягаемости и оптимальной зоны моторного поля, приведённых ниже на Рис. 30 [35].

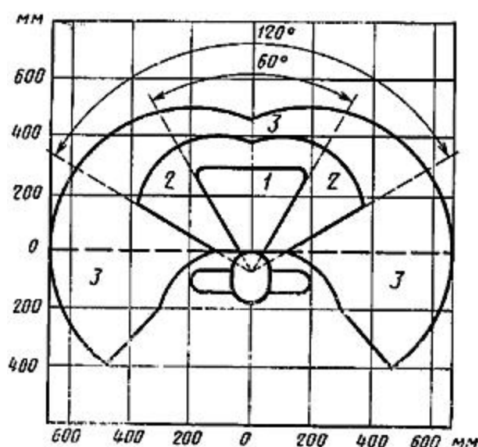


Рисунок 30. - Зоны досягаемости

- 1 – зона для размещения наиболее важных и часто используемых органов управления;
- 2 – зона для размещения часто используемых органов управления;
- 3 – зона для размещения редко используемых органов управления.

Конструкцией рабочего места должно быть обеспечено оптимальное положение работающего. Числовые значения высоты рабочей поверхности, сиденья и пространства для ног определяют по Рис. 31 [35].

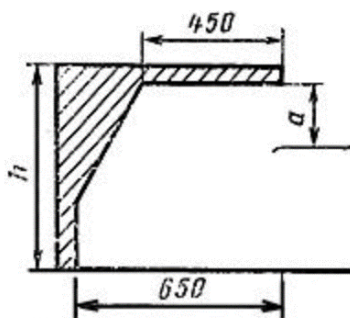


Рисунок 31. - Параметры конструкции рабочего места
а – расстояние от сиденья до нижнего края рабочей поверхности не менее 150 мм;
h – высота пространства для ног не менее 600 мм.

Согласно ГОСТ 22615-77, форма и размеры приводного элемента (ПЭ) выключателей и переключателей типа «тумблер» в панели управления системы CDBS должны соответствовать антропометрическим данным пальцев человека и обеспечивать максимальное удобство захвата приводного элемента в процессе управления с учётом спецснаряжения. Форма приводного элемента должна быть цилиндрической, конусообразной или в виде параллелепипеда. Цилиндрическую часть на конце ПЭ допускается выполнять в виде "шарика" или "лопатки", а приводной элемент, имеющий конусообразную форму, основанием конуса должен быть обращён в сторону оператора [36].

Согласно ГОСТ 23000-78, панели пультов управления система CDBS не должны иметь посторонних элементов, затрудняющих работу оператора (неоправданные функциональным назначением пульта выступы, углубления, разноплоскостность, выступающие элементы наружного крепежа и т. п.). Расположение и углы наклона панелей информации и панелей управления на пультах должны соответствовать связанным нормам. Панели информации и органов управления не должны располагаться друг против друга [37].

6.3 Производственная безопасность

Согласно документу ГОСТ 12.0.003-2015, неблагоприятные производственные факторы по результирующему воздействию на организм человека делятся на два вида – вредные факторы и опасные факторы. Вредные производственные факторы (ВПФ) – факторы, приводящие к заболеванию, в том числе усугубляющие уже имеющиеся заболевания. А опасные производственные факторы (ОПФ) – факторы, приводящие к

травме, в том числе смертельной [38]. Согласно приведённому выше определению, перечислены опасные и вредные факторы ниже в таблице 10.

Таблица 10. Перечень опасные и вредные факторы при исследовании

Фактор (ГОСТ 12.0.003-2015)	Этапы работ		Нормативные документы
	Подготовка образцов	Получение данных	
Жидкий азот		√	ГОСТ 9293-74. Азот газообразный и жидкий. Технические условия (с изменениями N 1, 2, 3) [39]. ГОСТ 12.1.019-2017 Система стандартов безопасности труда (ССБТ). Электробезопасность. Общие требования и номенклатура видов защиты [40]. ГОСТ 26252-84. Порошок ниобиевый. Технические условия (с изменением N 1) [41]. СанПиН 2.6.1.2523-09 Нормы радиационной безопасности НРБ– 99/2009 [42].
Высоковольтное электричество		√	
Порошок ниобия и оксида ниобия	√		
Ионизирующие излучения		√	

6.3.1 Жидкий азот

Жидкий азот является необходимым для охлаждения полупроводниковых детекторов.

Согласно ГОСТ 9293-74, жидкий азот при его использовании может воздействовать с организмом человека следующими тремя способами.

Во-первых, температура кипения жидкого азота в атмосфере составляет -196°C. Контакт кожи с жидким азотом в течение нескольких секунд может вызвать обморожение. Поэтому надо провести предварительную подготовку для исследователей перед работой с жидким азотом. По защите исследователя при работе необходимо применить рукавицы.

Во-вторых, при использовании жидкого азота он испаряется с образованием избыточного азота, что может снизить содержание кислорода в воздухе и вызвать гипоксию и удушье. Поэтому в лаборатория установлена система вентиляции, градируя, что содержание кислорода на рабочем месте не менее 19% [39].

В-третьих, поскольку температура испарения жидкого азота ниже, чем у жидкого кислорода (лишь -183°C). В жидком азоте может обогащаться кислород. При повышении в жидком азоте содержания кислорода до 30% (по объёму) возможно образование пожаро-, взрывоопасных смесей с органическими веществами. Поэтому, перед использованием и проведением работ с применением жидкого азота должна проводиться проверка содержания в нем кислорода. Начинать работать разрешается только после того, как содержание кислорода внутри цистерны и оборудования будет не больше 19% (по объёму). Слив жидкого азота должен проводиться в специально отведённых местах, не имеющих покрытий из асфальта, дерева или других органических материалов [39].

6.3.2 Высоковольтное электричество

Детекторы работают под высоким постоянным электрическим напряжением (несколько тысяч вольт). Согласно ГОСТ Р 12.1.019-2017 данная лаборатория относится к третьему классу опасности, т. е. помещения с особой опасностью поражения электрическим током [40]. В прямом контакте с таким электричеством могут возникать ожоги, фибрилляция желудочков сердца и повреждение нервной системы. В тяжёлых случаях может привести к смерти.

Мероприятии по защите исследователя от действия высокого электрического напряжения включается в себя недоступность токоведущих частей путём их надёжной изоляции, применения защитных ограждений (кожухов, крышек, сеток и т. д.). Кроме этого, в системе питания должен устроить защитное отключение, оградительное устройство и сигнализация [40].

Согласно ГОСТ 12.1.030-81, надо гарантировать, что все электрооборудование и приборы находятся на своих местах и имеют защитное заземление с сопротивлением не более 4 Ом, напряжением не более 12 В (шахты), 36 В (стройка) и током не более 0,1 мА [43].

При работе, которая может подвергаться воздействию высокого напряжения электричества, нужно ещё принимать индивидуальные защиты, например резиновые изоляционные одежды, обуви и перчатки.

6.3.3 Порошок ниобия и оксида ниобия

Образцы ниобия вырезаны лазером на определённый размер сторонней организацией. Полученные образцы имеют оксидный слой на поверхности. Перед экспериментом этот слой оксида должен быть удалён полировкой. В этом процессе образуется порошок металла и его оксида.

Согласно ГОСТ 26252-84, ниобий и их оксид нетоксичны. Но порошок может раздражать органы дыхания, глаза и кожу. Кроме этого, порошок может сгореть в случае открытого пламени или воздействия окислителей [41].

В процессе подготовки образцов следует надевать химически стойкие перчатки, носить обычную защитную одежду и использовать воду или спирт для впитывания порошка. В конце работы необходимо мыть руки с мылом.

6.3.4 Ионизирующие излучения

При исследовании используется радиоизотоп ^{44}Ti в качестве источника позитронов. При аннигиляции позитронов выпускается ещё γ -излучение. В лаборатории используемый источник является слабым (около 1.5 МБк), но длительное облучение увеличивает частоту возникновения рака и генетические заболевания.

Согласно СанПиН 2.6.1.2523-09, предел доз для исследователя составляет 20 мЗв в год в среднем за любые последовательные 5 лет, но не более 50 мЗв в год [42].

По защите исследователя от ионизирующих излучений, необходимо установить свинцовый экран на рабочем столе. Для хранения и использования радиоактивных источников необходимо использовать специализированный контейнер и инструменты. Ещё надо экипировать счётчик Гейгера людям, работающим с радиоизотопом.

6.4 Экологическая безопасность

В процессе исследовании используются и образуются некоторые вещества. Соответственно, процесс исследования может оказать влияние на окружающую среду, также существует риск загрязнения окружающей среды. В данном разделе будем рассматривать влияние исследования на атмосферу, гидросферу и литосферу, и будем обосновать мероприятия по защите окружающей среды.

6.4.1 Влияние на атмосферу и соответственные мероприятия

В процессе исследования используется жидкий азот. Соответственно, газообразный выброс представляет собой газообразный азот. В лаборатории оборудован системой вентиляции чтобы обеспечить концентрацию кислорода в рабочей зоне не менее 19%. Газообразный азот, образующийся в процессе исследования, непосредственно сбрасывается в открытый воздух.

Азот – основной компонент воздуха, не токсичен и безвреден [39], и не является загрязняющим веществом [44].

В процессе исследования выбрасывается очень мало количества азота (менее 40 м³), поэтому он не оказывает существенного влияния на содержание воздуха в окружающей области. Считаем, что процесс исследования не оказывает никакого воздействия на окружающую среду. По защите атмосферы не требуется специальных мероприятий.

6.4.2 Влияние на гидро- и литосферу, и соответственные мероприятия

В данной работе используется немного цирконий (Zr) и ниобий (Nb) в качестве образца для получения энергетических спектров. Поскольку эксперимент является неразрушающим, после эксперимента данного исследования эти образцы будут переработаны и использованы ещё в других исследованиях. Поэтому эти образцы не выгружаются в качестве отходы. Однако, как уже отметил в параграфе 6.3.3, при подготовке образца ниобия образуется порошок ниобия и его оксида. Таким образом, этот порошок становится отходом.

Ниобий и его оксид нетоксичны [41]. При комнатной температуре ниобий чрезвычайно устойчивы в воздухе и не взаимодействуют с воздухом. Но в природе при

определённом условиях ниобий и его оксид всё-таки могут образовать другие химические соединения. Некоторые химические соединения ниобия токсичны и растворимы в воде, но их очень редко и трудно образуется. В ГН 2.1.5.1315-03 не найдено соответствующей записи [45].

Исследование производится отход ниобия и его оксида очень мало (менее 1 г). Считаем, что отход ниобия и его оксида не оказывает значительные воздействия на окружающую среду.

Кроме вышесказанные отходы, существует ещё фактор риска – радиоактивный изотоп. В исследовании используется радиоактивный изотоп ^{44}Ti в виде соли TiCl_4 . Его время службы очень долго (больше 50 лет). При его утечке может влиять окружающую среду в течение длительного времени.

Поскольку в лаборатории используется источник с не большой радиоактивностей (около 1.5 МБк), считаем, что его воздействие на окружающую среду является контролируемым. Но все же необходимо принять ряд мер для предотвращения утечки – применять специальные контейнеры и инструменты для хранения и транспортировки радиоактивный изотоп, разработать нормы управления радиоактивным изотопом.

6.5 Безопасность в чрезвычайных ситуациях

В данном пункте рассмотрены вероятные ЧС, которые могут возникнуть на рабочем месте при проведении исследований, соответствующие мероприятия по их предотвращению и порядка действия в случае их возникновения.

Рассмотрим следующие наиболее вероятные ЧС – пожар и затопления.

6.5.1 Пожар

Существуют много возможных факторов, которые могут вызвать пожар, в них включаются перегрев приборов, электрическая утечка и т. д.

По ГОСТ 12.0.003-2015, объекты, пожары на которых могут привести к массовому поражению людей, находящихся на этих объектах, и окружающей территории опасными и вредными производственными факторами, а также опасными факторами пожара и их вторичными проявлениями [38].

Имеется система пожарной безопасности, обеспечивающие минимально возможную вероятность возникновения пожара. Конкретные значения минимально возможной вероятности возникновения пожара определяются проектировщиками и технологами при паспортизации этих объектов в установленном порядке.

Согласно ГОСТ 12.0.004-2015, предотвращение возгорания достигается за счёт исключения легко воспламеняющихся предметов и источников воспламенения, а также для поддержания окружающей среды в условиях, которые препятствуют возгоранию [46]. Во

избежание пожара все приборы, выделяющие тепло, должны быть оснащены системой охлаждения для предотвращения перегрева. Необходимо рационально проектировать цепи электропитания и часто их проверять. В помещении надо установить средства противопожарной защиты. Кроме этого, надо максимально возможно применять негорючие и трудногорючие вещества, ограничить их массы и (или) объёма и размещать наиболее безопасным способом.

В случае пожара система противопожарной защиты должна автоматически сигнализировать и звонить пожарникам. В том случае необходимо отключить электричество, правильно размещать опасные химические вещества и радиоактивные материалы, затем эвакуировать от помещения по плану эвакуации (см. рисунок 32). Пожарным должен честно заявлять об опасных химических веществах и радиоактивных материалах.



Рисунок 32. - План эвакуации цокольного этажа корпуса №3 ТПУ

6.5.2 Затопление

Томская область имеет влажный климат с большим количеством осадков. В течение этого возможно возникать наводнения. Лаборатория находится в цокольном этаже, что сильно увеличивает риск затопления.

В лаборатории размещено много ценных экспериментальных приборов, образцов и документов. Затопления лаборатории может приводит к серьёзному материальному ущербу. Кроме этого, поскольку в лаборатории существует высоковольтное электрическое питание, наводнение может привести к электрической утечке и соответственно привести к жертвам.

Более того, утечка химических и радиоактивных веществ из лаборатории может также вызвать серьёзное экологическое загрязнение.

Защитные меры включают в себя размещение прибора на столе на высоте не менее 0,5 м над землёй, строение дренажной системы вокруг лаборатории и добавление водостойких слоёв.

В случае затопления необходимо отключить электричество, правильно размещать опасные химические вещества и радиоактивные материалы, затем эвакуировать от помещения к высокой местности.

6.6 Заключение по разделу

Исследование сопровождается некоторыми опасными факторами, исследователи должны пройти обучение и приобрести страховку от несчастных случаев перед работой. Компонировка рабочего места должна соответствовать требованиям эргономики и безопасности.

В процессе исследования существуют такие опасные и вредные факторы, как жидкий азот, высоковольтное электричество и ионизирующие излучения. По защите исследователя от этих факторов, должны приниматься индивидуальная защита, система вентиляция, защитное заземление, защитное отключение, свинцовый экран, счётчик Гейгера и т. д.

В процессе исследования только используются немного нетоксических металлических образцов, жидкий азот долгосрочный слабый источник позитронов. Считаем, что процесс исследования почти не оказывает воздействия на окружающую среду.

В лаборатории могут возникать чрезвычайные ситуации, как пожар, затопление. Для предотвращения возникновения следует принимать систему противопожарной защиты, водонепроницаемые меры и системы защиты от молнии. При возникновении ЧС особое внимание требуется для правильного размещения химических и радиоактивных веществ.

Заключение

Метод ДУАЛ является широко используемым методом во многих отраслях для исследования различных дефектов и влияния внешних факторов на эти дефекты. Данный метод требует обработки объёмных данных. В ходе данной работы была разработана программа *DBSpy* для обработки данных и анализ спектров ДУАЛ. Эта программа написана на языке программирования *Python*. Исходный код открыт и доступен на сайте *GitHub*.

Инструментарий данной программы включает в себя обработку данных ДУАЛ в двух режимах: традиционный одноканальный режим, а также режим совпадений. Перед анализом программа выполняет предварительную обработку данных. На этой стадии происходит загрузка данных, определение местоположения пика, оценка разрешения, удаление фона и т. д. Целью данного этапа является получение энергетических спектров, готовых к непосредственному анализу.

Анализ спектров ДУАЛ, выполненный в программе *DBSpy*, включает в себя:

- Анализ формы спектров и оценка S- и W-параметров;
- Построение относительных кривых с варьируемыми параметрами (кривые разности, кривые отношения) с пользовательским выбором эталонного материала;
- Может выполнять вышесказанные анализы с помощью научно-исследовательских инструментов.

Программа имеет интерфейс пользователя. В пользовательской панели можно удобно настроить параметры обработки и одновременно наблюдать за результатами каждого этапа. Это также очень полезно для регулирования параметров и устранения ошибок.

Наконец, чтобы проверить правильности работы программы, была проведена её апробация. В процессе апробации функции расчёта S- и W-параметра мы сравнили результаты, полученные с помощью программы *DBSpy* и существующего аналога – программы *SP-11*. А в процессе апробации функции построения относительных кривых, мы с помощью программы *DBSpy* построили кривые разности и оценили компонентный анализ. Результат апробации подтверждает правильности работы программы *DBSpy*.

Список литературы

1. Хайруллин Р. Р., Влияние кривизны кристаллической решетки в поверхностных слоях образцов титанового сплава ВТ6 на механизмы усталостного разрушения/ Хайруллин Р. Р., Власов И. В., Бордулёв Ю. С.// - 2018.
2. Дружков А. П., Структурно-фазовые состояния и радиационные дефекты в Ni-Cr сплавах/ Дружков А. П., Колотушкин В. П., Арбузов В. Л. и др.// Физика металлов и металловедения. - 2006 г.
3. Арефьев К. П., Аннигиляция позитронов в насыщенном водородом титане/ Арефьев К. П. и др.// Физика твердого тела. - 2003 г.
4. Yu Weizhong, Физика позитронов и ее приложения/ Yu Weizhong, Wu Ziqin и Yang Guozhen. - Beijing : China Science Publishing & Media Ltd, 2003 г.
5. Hautajarvi P, Positrons in Solids / Hautajarvi P // Topics in Current Physics. - 1979 г.
6. Gebauer J., Effects of the growth temperature and As/Ga flux ratio on the incorporation of excess As into low temperature grown GaAs/ Gebauer J. и Krause-Rehberg R. // Journal of Applied Physics. - 1 1 1998 г.. - стр. 561-566.
7. Гольданский В. Н., Физическая химия позитрона и позитрония/ Гольданский В. Н. // Наука. - 1969 г.
8. Бекман И. Н., Позитронная Эмиссионная Томография [Электронный ресурс]/ Бекман И. Н. - <http://profbeckman.narod.ru/MED5.htm>.
9. Krause-Rehberg R., Positron Annihilation in Semiconductors /Krause-Rehberg R. и Leipner H. S.. - Martin-Luther-Universitat Halle-Wittenberg, Fachbereich Physik, Friedemann-Bach-Platz 6 D-06108 Halle, Germany : Springer, 1973.
10. Dryzek Jerzy., Home page [Электронный ресурс]/ Dryzek Jerzy. - https://ifj.edu.pl/private/jdryzek/page_r18.html.
11. Petriska Martin, CDBTools - Evaluate Positron Annihilation Coincidence Doppler Broadening Spectrum/ Petriska Martin, Sabelová Veronika и Slugeň Vladimír // scientific.net. - 2017 г.
12. Steiner Kurt., MePASto [Электронный ресурс]/ Steiner Kurt. - 2004 г. - <https://fahrzeugtechnik.fh-joanneum.at/software/MePASto/index.php>.
13. M.M. Jibaly, Measurement of the positron work functions of iron, molybdenum, titanium and vanadium / M.M. Jibaly. - Texas Univ., Arlington, TX (USA) : [б.н.], 1987 г.
14. I. T. Iakubov, Mater Science Forum/ I. T. Iakubov и V. V. Pogosov. - 1995. - стр. 175-178.
15. MacKenzie I.K., Proceedings International School of Physics «Enrico Fermi» / MacKenzie I.K.. - 1983. - T. Course LXXXIII : стр. 196.

16. Strong slow positron beam - Institute of High Energy Physics Chinese Academy of Sciences. - 12 2018 г. - www.ihep.cas.cn/kxcb/kjqy/200907/t20090723_2160247.html.
17. Бордулев Ю. С., Реализация и применение методов электрон-позитронной аннигиляции для исследования дефектной структуры материалов / Бордулев Ю. С. / Физика конденсированного состояния вещества ; Физико-технический . - Томск : [б.н.], 2013. - стр. 15-16.
18. Беспалов В. И., Взаимодействие ионизирующих излучений с веществом / Беспалов В. И. - Томск : [б.н.], 2006. - стр. 368.
19. Minkang Teng, Метод аннигиляции позитрона и его применения /Minkang Teng, Dexun Shen. - Beijing : Atomic Energy Press, 2000.
20. Positronium / Ruark E. // Phys. Rev. - 1945 г.
21. Schrader D. M., Positron and Positronium Chemistry, Studies in Physical and Theoretical Chemistry/ Schrader D. M. и Jean Y. C. - 1988.
22. Графутин В.И., Применение позитронной аннигиляционной спектроскопии для изучения строения вещества / Графутин В.И., Прокопьев, Е.П.. - стр. 68-69.
23. Brandt W., Positron Solid-State Physics/ Brandt W. и Dupasquier A.// - Amsterdam, North-Holland : [б.н.], 1983.
24. Frisch O.R., Induced radioactivity of fluorine and calcium/ Frisch O.R. // Nature. - 1935 г.. - стр. 220.
25. Mantl S., Defect annealing studies on metals by positron annihilation and electrical resistivity measurements/ Mantl S. и Triftshäuser W. // Phys. Rev. B. - 1978 г.
26. Gupta Santosh K., Role of various defects in the photoluminescence characteristics of nanocrystalline Nd₂Zr₂O₇: an investigation through spectroscopic and DFT calculations/ Gupta Santosh K. и др. // Journal of Materials Chemistry C. - 6 2016 г.
27. numpy.loadtxt . [Электронный ресурс]/ - SciPy.org. - <https://docs.scipy.org/doc/numpy/reference/generated/numpy.loadtxt.html>.
28. numpy.linalg.inv. [Электронный ресурс]/ - SciPy.org. - <https://docs.scipy.org/doc/numpy/reference/generated/numpy.linalg.inv.html>.
29. NumPy. [Электронный ресурс] / - SciPy.org. - <https://www.numpy.org/>.
30. SciPy library. [Электронный ресурс]/ - SciPy.org. - <https://www.scipy.org/scipylib/index.html>.
31. tkinter — Python interface to Tcl/Tk. [Электронный ресурс]/ - Python Software Foundation. - <https://docs.python.org/3.5/library/tkinter.html>.
32. Matplotlib: Python plotting. [Электронный ресурс] / - <https://matplotlib.org/>.

33. Bordulev Iurii, Positron annihilation spectroscopy study of defects in hydrogen loaded Zr-1Nb alloy / Bordulev Iurii и др. // Journal of Alloys and Compounds. - 10 2018 г.
34. Трудовой кодекс Российской Федерации от 30.12.2001 N 197-ФЗ (ред. от 01.04.2019).
35. ГОСТ 12.2.032-78 ССБТ. Рабочее место при выполнении работ сидя. Общие эргономические требования.
36. ГОСТ 22615-77 Система «человек-машина» выключатели и переключатели типа "тумблер". Общие эргономические требования.
37. ГОСТ 23000-78. Система «человек-машина». Пульты управления. Общие эргономические требования.
38. ГОСТ 12.0.003-2015 ССБТ. Опасные и вредные производственные факторы. Классификация.
39. ГОСТ 9293-74 (ИСО 2435-73) Азот газообразный и жидкий. Технические условия (с изменениями N 1, 2, 3).
40. ГОСТ 12.1.019-2017 Система стандартов безопасности труда (ССБТ). Электробезопасность. Общие требования и номенклатура видов защиты.
41. ГОСТ 26252-84. Порошок ниобиевый. Технические условия (с изменением N 1).
42. СанПиН 2.6.1.2523-09 Нормы радиационной безопасности НРБ-99/2009.
43. ГОСТ 12.1.030-81 ССБТ. Электробезопасность. Защитное заземление. Зануление (с Изменением N 1).
44. ГН 2.2.5.3532–18. Предельно допустимые концентрации (ПДК) вредных веществ в воздухе городских и сельских поселений.
45. ГН 2.1.5.1315-03 Предельно допустимые концентрации (ПДК) химических веществ в воде водных объектов хозяйственно-питьевого и культурно-бытового водопользования.
46. ГОСТ 12.0.004-2015 Система стандартов безопасности труда (ССБТ). Организация обучения безопасности труда. Общие положения.