

Методологія та алгоритм багатокомпонентного аналізу позитронних анігіляційних спектрів для наноструктурованих функціональних матеріалів

Г.І. Клим^{1,*}, А.І. Івануса², Ю.М. Костів¹, Д.О. Чалий², Т.І. Ткачук¹, Р.Б. Дунець¹, І.І. Васильчишин¹

¹ Національний університет «Львівська політехніка», вул. С. Бандери, 12, 79013 Львів, Україна

² Львівський державний університет безпеки життєдіяльності, вул. Клепарівська, 35, 79000 Львів, Україна

(Одержано 19.03.2017, у відредагованій формі – 12.06.2017, опубліковано online 15.06.2017)

Запропоновано методологію опрацювання позитронних анігіляційних спектрів комп'ютерною програмою LT для керамічних наноструктурованих матеріалів. Продемонстровано особливості математичного опису анігіляційних спектрів. Представлений покроковий алгоритм відбору оптимальних значень параметрів припасування та обчислення параметрів захоплення позитронів нанопустотами. Проаналізовано анігіляційні спектри для функціональної температурно-чутливої кераміки при розкладі програмою LT на різну кількість компонент. Показано, що трикомпонентний розклад дає змогу визначити радіуси нанопор у функціональних керамічних матеріалах.

Ключові слова: Позитронні анігіляційні спектри, Комп'ютерна програма LT, Методологія, Алгоритм, Наноструктурована кераміка

DOI: [10.21272/jnep.9\(3\).03037](https://doi.org/10.21272/jnep.9(3).03037)

PACS numbers: 82.45.Xy, 92.60.Jq

1. ВСТУП

Упродовж останніх років спостерігається підвищена активність у сфері дослідження структурних особливостей наноматеріалів для створення сенсорних елементів, які застосовуються у багатьох сферах людської діяльності, у тому числі і у інтелектуальних кібер-фізичних системах [1 – 5]. Однак вихід на наторівень вимагає використання сучасних альтернативних методів вивчення структури цих матеріалів, серед яких слід виокремити позитронну анігіляційну спектроскопію (ПАС) – один з найчутливіших методів для дослідження внутрішніх порожнин у твердих тілах, об'ємних дефектів та деяких їх видозмін (клас-терів, агломератів, нанопустот, тощо) [6, 7]. Проте, по відношенню до порошкових та дрібнодисперсних матеріалів з функціональними властивостями, цей метод рідко використовувався через ускладнення в інтерпретації одержаних результатів, відсутність методологічних підходів та алгоритмів аналізу спектрів ПАС.

Перші результати, одержані методом ПАС для дрібнодисперсних матеріалів, були представлені школою Р. Краузе-Рехберга і стосувалися металевих Cu, W- та Ni-містких порошоків [8]. При опрацюванні одержаних спектрів ПАС використовувалася трикомпонентна процедура математичного припасування. Перша компонента (часи життя $\tau_1 = \tau_2 \approx 0,10 - 0,12$ нс) відповідала анігіляції позитронів на внутрішніх поверхнях зерен, друга компонента (часи життя $\tau = \tau_{gb} \approx 0,25 - 0,35$ нс) – на міжзеренних границях, а третя компонента (часи життя $\tau_3 = \tau_{surf} \approx 0,5 - 0,6$ нс) – захопленню позитронію (Ps) нанопорами. Цією школою також було представлено двостанову модель захоплення позитронів дефектами.

Групі Х.Т. Лангхамера при дослідженні перовскітної кераміки BaTiO₃ (кращі результати одержані при двокомпонентній процедурі математичного при-

пасування) вдалося встановити, що основними місцями захоплення позитронів є міжзеренні границі (час життя $\sim 0,25 - 0,35$ нс) та пори (час життя $\sim 0,50 - 0,60$ нс) [9].

У роботі [10], при дослідженні кераміки BaTiO₃, легованої La, було показано неможливість довільного розкладу спектру ПАС, а захоплення позитронів приписувалось вакансіям O або Ba. Було також показано, що чим менше керамічне зерно, тим більший середній час життя позитронів τ_{av} . При дослідженні діелектричної кераміки SrTiO₃ [9], вдалося встановити, що основними дефектами структури в цьому матеріалі є вакансійні кластери (час життя $\tau_2 = 450$ пс).

Однак найбільшій увазі заслуговує школа Є. Дризєка [12], якою було обґрунтовано можливість виникнення Ps у поруватих матеріалах і показано, що спектр ПАС має три основні складові: від анігіляції позитронів у вільному стані ($\tau = \tau_0 = 0,3 - 0,4$ пс), від анігіляції пара-позитронію p - Ps ($\tau_1 - \tau_p$, $\tau_s - 125$ пс) та від анігіляції орто-позитронію o - Ps в порах ($\tau_3 = \tau_p^{o-Ps} = 0,5$ нс).

Для розвитку моделі позитронної анігіляції у функціональній поруватій кераміці було зроблено три основні кроки. Перші два кроки – при дослідженні перовскітної кераміки систем La-Pb-Mn-Cr-O, La-Pb-Mn-O [13] та нанокристалічних шпінельних феритів [14]. В цих випадках, при математичному опрацюванні спектрів дво-, три- та чотирикомпонентною процедурою припасування, кращі результати одержувалися при розкладі на три компоненти. При опрацюванні спектрів феритів було показано, що довготривала компонента з часом життя $\tau_3 \approx 1,15$ нс відповідає анігіляції o - Ps в нанорозмірних пустотах. Однак, через малу інтенсивність цієї компоненти ($I_3 < 0,02 - 0,03$), в подальших дослідженнях вона не розглядалася.

* halyna.i.klym@lpnu.ua

Наступний крок був зроблений при дослідженні прозорої кераміки $MgAl_2O_4$, одержаної методом гарячого пресування [15]. При комп'ютерному опрацюванні спектрів ПАС кращі результати ($\tau_1 = 0,20$ нс, $I_1 = 0,80$; $\tau_2 = 0,40$ нс, $I_2 = 0,19$) одержувалися при трикомпонентній процедурі математичного припасування, однак третя компонента не аналізувалася.

Таким чином, в переліченій вище матеріалах позитронна анігіляція приписується, в основному, індивідуальним вакансіям, вакансійним кластерам, міжзеренним границям та нанорозмірним пустотам, які можуть захоплювати атоми P_s . Кращі результати одержувалися при математичному розкладі спектру часів життя позитронів на три незалежні компоненти, дві з яких відносилися до каналу захоплення позитронів дефектами, а третя – до анігіляції o - P_s . Однак у жодній з робіт не запропоновано універсальних методологічних підходів та алгоритмів, які б дозволяли адекватно проаналізувати досліджувані спектри ПАС для наноструктурованих матеріалів та обрати необхідну кількість компонент розкладу спектрів.

Метою цієї роботи є розроблення універсального методологічного підходу та алгоритму для аналізу спектрів ПАС у функціональних наноструктурованих матеріалах. Дослідження проведені з використанням комп'ютерної системи ПАС ORTEC [16 – 19].

2. МЕТОДОЛОГІЧНИЙ ПІДХІД ДО АНАЛІЗУ СПЕКТРІВ ПАС

2.1 Теоретичні моделі опису анігіляційних спектрів

Для комп'ютерного опрацювання спектрів ПАС використовувався пакет програм LT [21], який відзначається цілим рядом суттєвих методологічних переваг в порівнянні з такими широко розповсюдженими програмами як POSITRONFIT, PATFIT, CONFIT та MELT [6, 17].

Опрацювання спектрів ПАС проводилося відповідно до теоретичної моделі з врахуванням форми спектру, який складається з суми кількох компонент: дискретних

$$C_d = \frac{I}{\tau \cdot \exp\left(-\frac{t}{\tau}\right)}, \quad (2.1)$$

що залежать від двох модельних параметрів – інтенсивності I , часу життя τ , або/та неперервних:

$$C_{cont} = \int_0^{\infty} L_n(\lambda) d\lambda \cdot I \cdot \lambda \cdot \exp(-\lambda t),$$

одержаних з неперервних сум кривих (2.1), взятих з логарифмічно нормального розподілу:

$$L_n(\lambda) d\lambda = (2\pi)^{-\frac{1}{2}} \sigma^{-1} \cdot \exp\left\{-\left[\ln(\lambda) - \ln\left(\frac{1}{\tau_0}\right)\right]^2 / (2\sigma^2)\right\} \lambda^{-1} d\lambda \quad (2.2)$$

Неперервна компонента залежить від трьох модельних параметрів: інтенсивності I , середнього часу життя τ_{av} .

$$\tau_{av} = \int_0^{\infty} L_n(\lambda) d\lambda \cdot \lambda^{-1} = \tau_0 \left(\exp\left(\frac{\sigma^2}{2}\right)\right)$$

та середньоквадратичне відхилення від середнього часу життя σ_γ

$$\sigma_\gamma^2 = \int_0^{\infty} L_n(\lambda) d\lambda \cdot (\lambda^{-1} - \tau)^2 = \tau^2 \cdot (\exp(\sigma^2) - 1). \quad (2.3)$$

Кожна компонента (дискретна або неперервна) пов'язана з функцією рішення спектрометра. Для наближення реальної форми цієї функції використовувалися дві її моделі: Гаусова сума та експоненціальна Гаусова функція.

В першому випадку рішення визначається сумою трьох складових:

$$R = f_0 G(t; FWHM_0, 0) + f_1 G(t; FWHM_1, \Delta_1) + f_2 G(t; FWHM_2, \Delta_2),$$

де $G(t; FWHM, \Delta)$ – Гаусова функція часу, центрована в Δ , $FWHM$ – повна ширина на половині максимуму, f_i – відносна частка i -го члена.

Альтернативно, функція рішення апроксимується експоненціальною Гаусовою функцією, тобто, Гаусовою розгорткою \otimes з двома експоненціальними функціями:

$$R = G(FWHM) \otimes \exp\left(-\frac{t}{\tau_l}\right) \otimes \exp\left(-\frac{t}{\tau_r}\right), \quad (2.4)$$

де τ_l, τ_r – константи.

Реальна форма дискретної компоненти залежить від типу функції рішення. У випадку функції рішення, представленій рівнянням (2.3), дискретна компонента перетвориться у:

$$M(t_k) = I[f_0 F(t_k; \tau, s_0) + f_1 F(t_k - \Delta_1; \tau, s_1) + f_2 G(t_k - \Delta_2; \tau, s_2)], \quad (2.5)$$

де t_k – час, пов'язаний з k -тим каналом,

$$F(t_k; \tau, s) = \frac{1}{2} [Y(t_k; \tau, s) - Y(t_{k+1}; \tau, s) + \Phi\left(\frac{t_k}{s}\right) - \Phi\left(\frac{t_{k+1}}{s}\right)], \quad (2.6)$$

$$Y(t; \tau, s) = \exp\left(\frac{s^2}{4\tau^2}\right) \Phi\left(\frac{s}{2\tau} - \frac{t}{s}\right) \exp\left(-\frac{t}{\tau}\right), \quad (2.7)$$

де $s = 1/2(\ln 2)^{-1/2} \cdot FWHM$ та $\Phi(x) = 1 - erf(x)$

Альтернативно, дискретну компоненту модифікованої функції рішення (2.4) виражено рівнянням:

$$M'(t_k) = I[\alpha F(t_k; \tau, s) + \alpha_l F(-t_k; \tau_l, s) + \alpha_r F(t_k; \tau_r, s)]$$

де $\alpha = \tau^2 / [(\tau + \tau_1)(\tau + \tau_r)]$, $\alpha_l = \tau_l^2 / [(\tau + \tau_1)(\tau_r + \tau_l)]$,
 $\alpha_r = \tau_r^2 / [(\tau_r - \tau)(\tau_r + \tau_l)]$.

Неперервна компонента, одержується з інтегрування $M(t_k)$ рівняння (2.5) з логарифмічно нормальним розподілом (2.2):

$$M_{cont}(t_k) = \int_0^\infty L_n(\lambda) d\lambda M(t_k).$$

Неперервна компонента чисельно обчислюється з подібного до (2.9) інтегралу:

$$M'_{cont}(t_k) = \int_0^\infty L_n(\lambda) d\lambda M'(t_k).$$

Час життя спектру містить n компонент і описується рівнянням:

$$N(t_k) = N_0 \sum M_j(t_k) + B, \quad j = 1..n$$

де N_0 – загальна кількість злічень в спектрі, B – кількість злічень фону, M_j – спектри компонент типів: M , M' , M_{cont} та M'_{cont} .

2.2 Аналіз спектрів ПАС комп'ютерною програмою LT

Опрацювання спектрів часів життя позитронів програмою LT проводилося за описаною вище теоретичною моделлю з врахуванням форми теоретичного спектру на одну, дві, три та чотири компоненти. Типовий експериментальний спектр часів життя позитронів зображений на рис. 1.

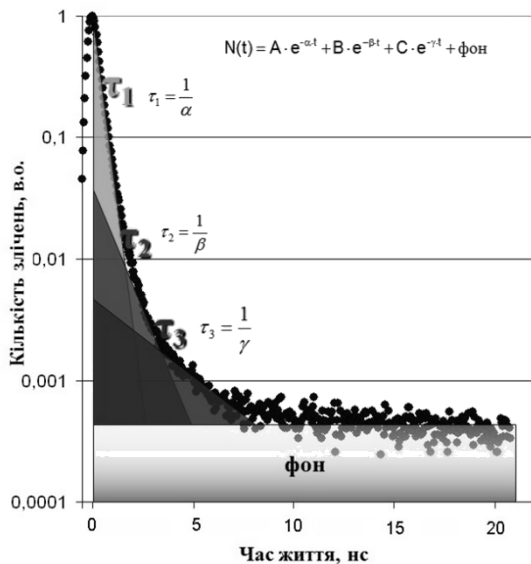


Рис. 1 – Типовий розклад спектру ПАС на три компоненти комп'ютерною програмою LT

Така крива, зокрема, при розкладі на три компоненти представляється сумою спадних експоненціальних функцій з різними значеннями показників степеня, обернено пропорційних до величин часів життя позитронів [20]:

$$N(t) = Ae^{-\alpha t} + Be^{-\beta t} + Ce^{-\gamma t} + D,$$

де $N(t)$ – залежність кількості злічень N від часу t , $Ae^{-\alpha t}$ – крива, пов'язана з розпадом p -Ps, $Be^{-\beta t}$ – крива, пов'язана з анігіляцією вільних позитронів з електронами, $Ce^{-\gamma t}$ – крива, пов'язана з розпадом o -Ps, D – фон, зареєстрований апаратурою, A , B та C – початкові моменти часу для відрізків трьох кривих, які містять три форми розпаду позитронів, α , β та γ – нахили кривих, які відображають швидкість анігіляції в кожній формі розкладу.

Для досліджуваних пар зразків використовувались три виміри спектру ПАС, які відрізнялися загальною кількістю простих анігіляційних подій, що коливалися від 800000 до 1200000 [20]. Кожен спектр багатократно опрацьовувався завдяки незначним змінам кількості завершальних каналів, фону анігіляції та часу зміни спектру. Кращі результати відбиралися на основі припасування, визначеного як найменше середньоквадратичне відхилення між експериментальними точками та теоретичною кривою. Опрацювання типового спектру ПАС програмою LT на три компоненти зображено на рис. 2 – рис. 5.

Після багатократного опрацювання кращі результати відбиралися на основі припасування, визначеного як найменше середньоквадратичне відхилення між експериментальними точками та теоретичною кривою (FIT).

Таким чином, в кінцевому результаті було сформовано декілька груп з різною кількістю експериментальних точок N в середині обраної процедури

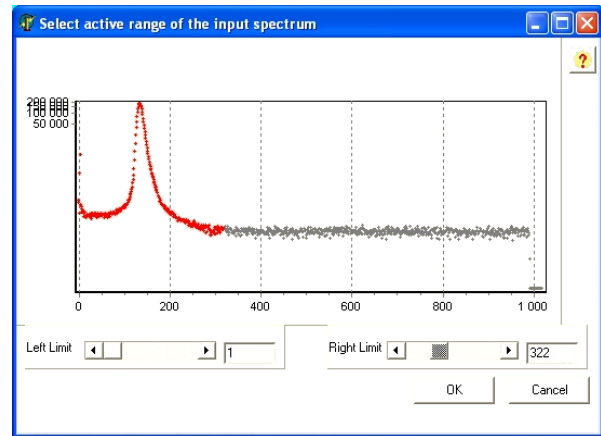


Рис. 2 – Вікно опрацювання спектру ПАС програмою LT

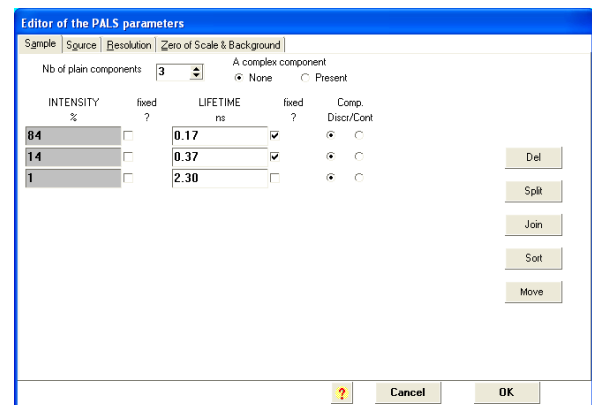


Рис. 3 – Вікно вибору та налаштування компонент спектру ПАС програмою LT

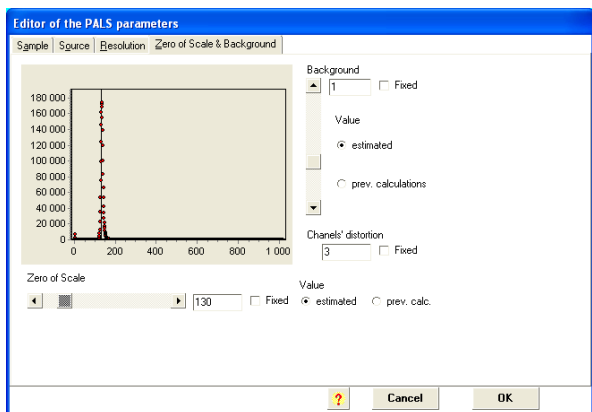


Рис. 4 – Вікно редагування параметрів припасування спектру ПАС

математичного припасування. Тільки результати із значеннями FIT близькими до 1 (оптимальне відхилення знаходилось в межах від 0,95 до 1,1 – 1,2) вважались абсолютно відповідними. На наступному етапі ці значення та визначені характеристики ПАС контролювалися в залежності від анігіляційного фону та часу зміни спектру.

Відбір кращих результатів часів життя та інтенсивностей проводився у кілька етапів. На першому етапі з численних результатів відбирались тільки ті, для яких FIT не перевищував 1. На другому етапі формувались групи з близькими значеннями FIT в напрямку його збільшення, а також відкидалися ті результати, для яких часи життя в межах кожної групи з близькими значеннями FIT значно відрізнялися. З метою попередньої оцінки одержаних результатів, в кожній з груп обчислювалися середні часи життя позитронів. На четвертому етапі в кожній із сформованих в попередньому етапі груп проводилися усереднення значення FIT , а також часів життя та інтенсивностей кожної компоненти. На наступному п'ятому етапі відбирались кращі результати з мінімальним значенням FIT . Одержані у такий спосіб дані використовувалися для подальшого аналізу.

Слід відзначити, що опрацьовуючи спектри ПАС програмою LT, вдається одержати значення параметрів припасування, тобто часів життя та інтенсивно-

стей з точністю до $\pm 0,001$ та $\pm 0,01$. Однак, враховуючи те, що точність вимірювання спектрометра ORTEC становить $\pm 0,01$ нс, одержані в процесі математичного припасування інтенсивності відповідних компонент в деяких випадках доцільно заокруглювати до 0,01.

Використовуючи основні параметри математичного припасування (часи життя позитронів, а також інтенсивності), одержані безпосередньо програмою LT, також можна обчислити параметри захоплення позитронів дефектами чи нанопустотами.

3. ЗАСТОСУВАННЯ МЕТОДОЛОГІЇ АНАЛІЗУ СПЕКТРІВ ПАС ДО НАНОСТРУКТУРОВАНОЇ КЕРАМІКИ $\text{Cu}_{0,4}\text{Co}_{0,4}\text{Ni}_{0,4}\text{Mn}_{1,8}\text{O}_4$

З використанням запропонованої методології та алгоритму аналізу спектри ПАС для температурно-чутливої кераміки $\text{Cu}_{0,4}\text{Co}_{0,4}\text{Ni}_{0,4}\text{Mn}_{1,8}\text{O}_4$ опрацьовувалися комп'ютерною програмою LT при розкладі на одну, дві, три та чотири компоненти. Одержані результати наведено у табл. 1. Розклад на одну компоненту не відображає ймовірних процесів внутрішньо-об'ємного наноструктурування, розклад на дві компоненти, в даному випадку, є нетиповим, оскільки інтенсивність другої компоненти становить 1%. Для даної кераміки лише трикомпонентну процедуру можна застосувати для адекватного опису одержаних результатів, оскільки розклад на чотири компоненти – це спотворений трикомпонентний розклад, в якому час життя та інтенсивність четвертої компоненти відповідають значенням третьої компоненти при трикомпонентному розкладі, а вклади другої та третьої компонент не відображають фізичних процесів у даному матеріалі.

Як зазначалося у роботах [20], в керамічних матеріалах перша короткотривала компонента спектру ПАС з часом життя τ_1 відображає мікроструктурні особливості кераміки.

Час життя другої компоненти τ_2 відповідає вільно-об'ємним дефектам (або пасткам, якими захоплюються позитрони) поблизу міжзеренних границь (вакансійним кластерам, агломератам, тощо) [22 – 26].

Отже, вклад першої компоненти (τ_1 , I_1) в розклад

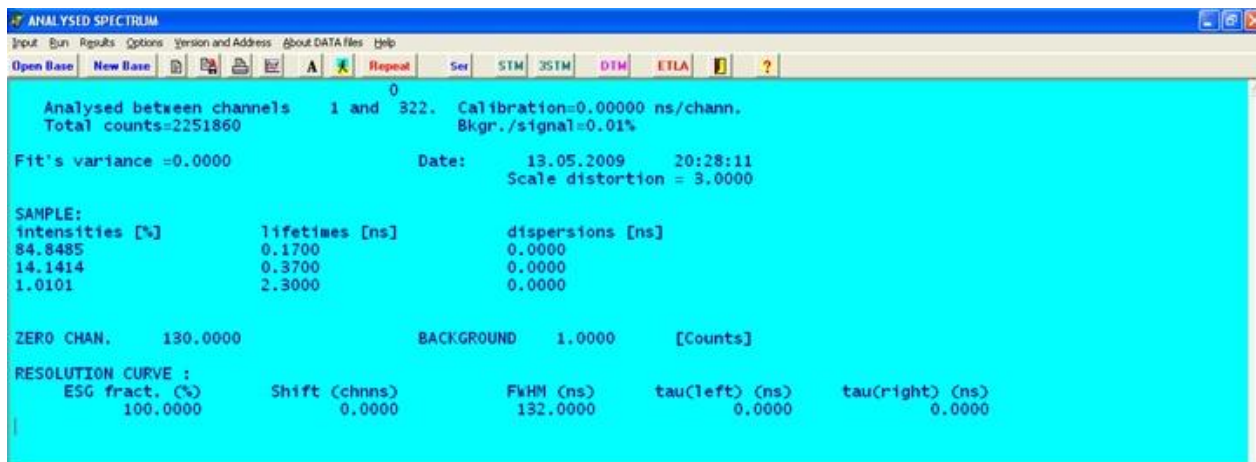


Рис. 5 – Результати припасування (значення часів життя та інтенсивностей) при розкладі на три компоненти спектру ПАС комп'ютерною програмою LT. Вікно редагування параметрів припасування спектру ПАС

Таблиця 1 – Параметри розкладу спектрів ПАС комп'ютерною програмою LT на одну, дві, три та чотири компоненти для кераміки $\text{Cu}_{0,4}\text{Co}_{0,4}\text{Ni}_{0,4}\text{Mn}_{1,8}\text{O}_4$

[FIT-1]	τ_1 , нс	I_1 , в.о.	τ_2 , нс	I_2 , в.о.	τ_3 , нс	I_3 , в.о.	τ_4 , нс	I_4 , в.о.
2,41	0,22	1, 0	-	-	-	-	-	-
0,25	0,25	0,99	2,76	0,01	-	-	-	-
0,15	0,21	0,78	0,37	0,20	1,85	0,02	-	-
0,65	0,17	0,56	0,30	0,20	0,34	0,22	1,86	0,023

спектру ПАС буде частково визначатися розподілом середньої електронної щільності, яка відображатиме структурну компактність досліджуваного матеріалу [27, 28]. Час життя другої дефектної компоненти τ_2 безпосередньо пов'язаний з розміром вільно-об'ємних включень, а інтенсивність цієї компоненти I_2 пропорційна до їх кількості.

Інтенсивність третьої компоненти I_3 , яка відображає утворенню P_s у нанопорах становить 2%. Незважаючи на низьке значення I_3 , виключити цю компоненту без істотних втрат у вибраній процедурі приписування не можна. Подібну компоненту було виявлено в різних поруватих субстанціях різного структурного типу [15, 21]. Найімовірніше, ця компонента пов'язана з розпадом атомів $o\text{-}P_s$ через процес "pick-off" анігіляції [29]. Однак не можна виключити і інших каналів захоплення позитронів в спектрі ПАС, зокрема, каналу розпаду $p\text{-}P_s$ з характерним часом життя 0,125 нс.

Крім цього, застосування трикомпонентної процедури аналізу спектрів ПАС дає змогу оцінити розміри нанопустот у досліджуваному матеріалі [20]. Тому з використанням часу життя третьої компоненти τ_3 також визначено середній розмір нанопор за моделлю Тао-Ельдрупа [17]. Значенню часу життя τ_3 , яке становить $\sim 1,8$ нс (обчислене за значенням τ_3 з табл. 1) відповідають нанопори радіусом $\sim 0,27$ нм. Слід відзначити, що порозиметричні методи чутливі лише до відкритих пор розміром більше 2 нм [20], які мають доступ до певного середовища, тоді як метод ПАС можна використовувати як для вивчення відкритої, так і закритої поруватості у твердих тілах, зокрема, оксидних керамічних матеріалах від атомного розміру до декількох десятків нанометрів.

4. ВИСНОВКИ

Запропоновано методологію для опрацювання спектрів ПАС комп'ютерною програмою LT для аналізу фізичних процесів у керамічних наноструктурованих матеріалах, яка дає можливість одержувати кращі значення часів життя та інтенсивностей компонент розкладу. Представлено детальний математичний опис та особливості аналізу спектрів ПАС у програмному пакеті LT. Запропоновано універсальний алгоритм відбору параметрів розкладу анігіляційних спектрів для функціональних наноматеріалів. На прикладі температурно-чутливої кераміки $\text{Cu}_{0,4}\text{Co}_{0,4}\text{Ni}_{0,4}\text{Mn}_{1,8}\text{O}_4$ продемонстровано особливості розкладу спектру на різну кількість компонент та методологію відбору оптимальної кількості параметрів розкладу. Встановлено, що для досліджуваного матеріалу, в рамках трикомпонентного розкладу спектру ПАС, перша короткотривала компонента відображає мікроструктурні особливості кераміки, а об'ємні дефекти поблизу міжзеренних границь описуються другою компонентою. Час життя третьої компоненти відображає "pick-off" анігіляцію $o\text{-}P_s$ в нанопорах радіусом $\sim 0,27$ нм, обчислений за моделлю Тао-Ельдрупа.

ПОДЯКА

Робота виконана в рамках науково-дослідної роботи ДБ/Наносенсор (№ держреєстрації 0116U004411) за фінансової підтримки Міністерства освіти та науки України та гранту Президента України докторам наук для здійснення наукових досліджень. Г.І. Клим вдячна А. Інграму за допомогу у постановці ПАС експериментів та О.Й. Шпотюку за дискусію та цінні зауваження.

Методология и алгоритм многокомпонентного анализа позитронных аннигиляционных спектров для наноструктурированных функциональных материалов

Г.И. Клым^{1,2}, А.И. Ивануса², Ю.М. Костив¹, Д.О. Чалый², Т.И. Ткачук¹, Р.Б. Дунец¹,
И.И. Васильчышын¹

¹ Национальный университет «Львовская политехника», ул. С. Бандеры, 12, 79013 Львов, Украина

² Львовский государственный университет безопасности жизнедеятельности, ул. Клепаровская, 35, 79000 Львов, Украина

Предложена методология обработки позитронных аннигиляционных спектров компьютерной программой LT для керамических наноструктурированных материалов. Продемонстрированы особенности математического описания аннигиляционных спектров. Представлен пошаговый алгоритм отбора оптимальных значений параметров подгонки и вычисления параметров захвата позитронов нанопустотамы. Проанализированы аннигиляционные спектры для функциональной температурно-чувствительной керамики при разложении программой LT на разное количество компонент. Показано, что трехкомпонентное разложение позволяет определить радиусы нанопор в функциональных керамических материалах.

Ключевые слова: Позитронные Аннигиляционные Спектры, Компьютерная Программа LT, Методология, Алгоритм, Наноструктурированная Керамика.

Methodology and Algorithm of Multicomponent Analysis of Positron Annihilation Spectra for Nanostructured Functional Materials

H.I. Klym¹, A.I. Ivanusa², Yu.M. Kostiv¹, D.O. Chalyy², T.I. Tkachuk¹, R.B. Dunets¹, I.I. Vasylyshyn¹

¹ Lviv Polytechnic National University, 12, Bandera Str., 79013 Lviv, Ukraine

² Lviv State University of Life Safety, 35, Kleparivska Str., 79000 Lviv, Ukraine

Methodology for treatment of positron annihilation lifetime spectra by LT computer program in the nanostructured ceramic materials was proposed. Features of mathematical description of annihilation spectra was demonstrated. The algorithm for selection of optimum values of fitting and positron trapping parameters in nanovoids was shown. Annihilation spectra were analyzed for functional temperature-sensitive ceramics using LT program at different amount of components. It is shown that three-component fitting procedure enables to define the radius of nanopores in functional ceramic materials.

Keywords: Positron Annihilation Lifetime Spectra, LT Computer Program, Methodology, Algorithm, Nanostructured Ceramics.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. W. Wolf, *Embedded Computing* **42** No 3, 88 (2009).
2. L. Sha, S. Gopalakrishnan, X. Liu, Q. Wang, *Mach. Learn. in Cyber Trust* **3**, 2009.
3. R. Baheti, H. Gill, *The impact of control technology* **12**, 161 (2011).
4. D.D. Hoang, Hye-Young Paik Chae-Kyu Kim, *Int. J. Computer Sci. and Network Secur.* **12** No 1, 79 (2012).
5. T. Schoeler, *J. Electrotech. Comp. Syst.* **13** No 89, 197 (2014).
6. O. Shpotyuk, J. Filipecki, *Free volume in vitreous chalcogenide semiconductors: possibilities of positron annihilation lifetime study* (Wydawnictwo Wyzszej Szkoły Pedagogicznej w Czestochowie: 2003).
7. P.M.G. Nambissan, C. Upadhyay, H.C. Verma, *J. Appl. Phys.* **93**, 6320 (2003).
8. T.E.M. Staab, E. Zschech, R. Krause-Rehberg, B. Kieback, *J. Mater. Sci.* **35** No 18, 4667 (2000).
9. H.T. Langhammer, T. Müller, R. Böttcher, H.P. Abicht, *J. Phys. Condens. Mat.* **20** No 8, 085206 (2008).
10. M. Mohsen, R. Krause-Rehberg, A.M. Massoud, H.T. Langhammer, *Rad. Phys. Chem.* **68**, 549 (2003).
11. A. Uedono, K. Shimayama, M. Kiyohara, Z.Q. Chen, K. Yamabe, *J. Appl. Phys.* **92** No 5, 2697 (2002).
12. J. Dryzek, E. Dryzek, *Tribology International* **40** No9, 1360 (2007).
13. A. Banerjee, B.K. Chaudhuri, A. Sarkar, D. Sanyal, D. Banerjee, *Physica B* **229**, 130 (2001).
14. S. Ghosh, P.M.G. Nambissan, R. Bhattacharya, *Physica B* **353**, 75 (2004).
15. J. He, L. Lin, T. Lu, P. Wang, *Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B* **191**, 596 (2001).
16. Y. Kobayashi, K. Ito, T. Oka, K. Hirata, *Radiat. Phys. Chem.* **76**, 224 (2007).
17. Y.C. Jean, P.E. Mallon, D.M. Schrader, *Principles and application of positron and positronium chemistry* (World Scientific, Singapore: 2003).
18. G. Dlubek, Yu. Yang, R. Krause-Rehberg, W. Beichel, S. Bulut, N. Pogodina, I. Krossing, Ch. Friedrich, *Journal of Chemical Physics* **133**, 123502 (2010) K. Kotera, T. Saito, T. Yamanaka, *Phys. Lett. A* **345**, 184 (2005).
19. K. Kotera, T. Saito, T. Yamanaka, *Phys. Lett. A* **345**, 184 (2005).
20. H. Klym, I. Hadzaman, A. Ingram, O. Shpotyuk, *Can. J. Phys.* **92** No 7/8, 822 (2013).
21. D. Giebel, J. Kany, *Mater. Sci. Forum* **666**, 138 (2011).
22. M.A. Kashi, A. Ramazani, H. Abbasian, A. Khayyatian, *Sensors and Actuators A* **174**, 69 (2012) T. Goworek, *Chem. Phys. Lett.* **366** No 1, 184 (2002).
23. G.S. Armatas, C.E. Salmas, M.G. Louludi, P. Androutsopoulos, P.J. Pomonis, *Langmuir* **19**, 3128 (2003).
24. M. Hajnos, J. Lipiec, R. Świeboda, Z. Sokolowska, B. Witkowska-Walczak, *Geoderma* **135**, 307 (2006).
25. A. Grosman, C. Ortega, *Langmuir* **21**, 10515 (2005).
26. I. Leifer, R.K. Patro, *Cont. Shelf Res.* **22** No 16, 2409 (2002).
27. H. Klym, I. Hadzaman, O. Shpotyuk, M. Brunner, *Nanoscale Res. Lett.* **9** No 1, 1 (2014).
28. M. Vakiv, I. Hadzaman, H. Klym, O. Shpotyuk, M. Brunner, *J. Phys. Conf. Ser.* **289** No 1 012011 (2011).
29. T. Goworek, *Chem. Phys. Lett.* **366** No 1, 184 (2002)