

РТОФ-метод в нейтронных дифрактометрах высокого разрешения

Кудряшев В.А. Петербургский институт ядерной физики

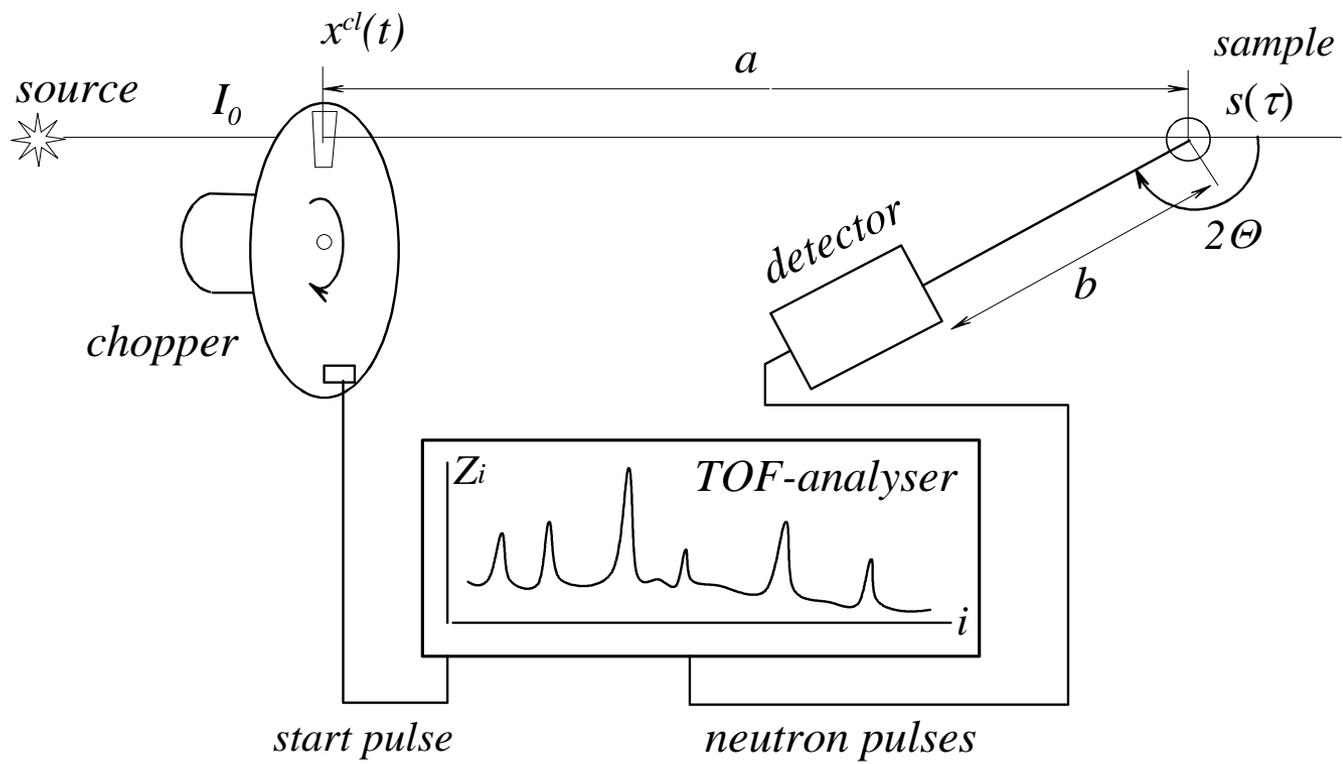
Принцип работы РТОФ-метода

Разрешающая способность РТОФ-метода

Действующие РТОФ-дифрактометры на ИБР-2М

Сравнение РТОФ-метода на реакторе непрерывного действия и на длинно-импульсном источнике.

Классический TOF-дифрактометр



$$\lambda = 2d \cdot \sin \Theta$$

$$\tau = \lambda L m_n / h$$



$s(\tau)$ - TOF-спектр, τ - время пролета нейтрона с длиной волны λ , $L = a + b$ - пролетная база, m_n - масса нейтрона, h - постоянная Планка.

Примем для простоты: $\int_0^{T_s} s(\tau) d\tau = 1$
и $I_0 = 1$

Классический TOF-дифрактометр, продолжение

Интенсивность нейтронов на детекторе

$$z(t) = \int_0^{T_s} x^{cl}(t - \tau) s(\tau) d\tau + b_0 = \frac{\Delta}{T_s} s^{cl}(t) + b_0$$

Ожидаемая величина счета в i -м канале анализатора для:

стационарного реактора

$$Z_i = \frac{T_m}{T_s} \int_{t_i - \frac{1}{2}\Delta}^{t_i + \frac{1}{2}\Delta} z_i(t) dt = T_m \frac{\Delta}{T_s} \left(\frac{\Delta}{T_s} s_i^{cl} + b_0 \right)$$

импульсного реактора

$$Z_i = T_m \frac{\Delta}{T_s} (s_i^{cl} + b_0)$$

Величина дисперсии в i -канала анализатора для:

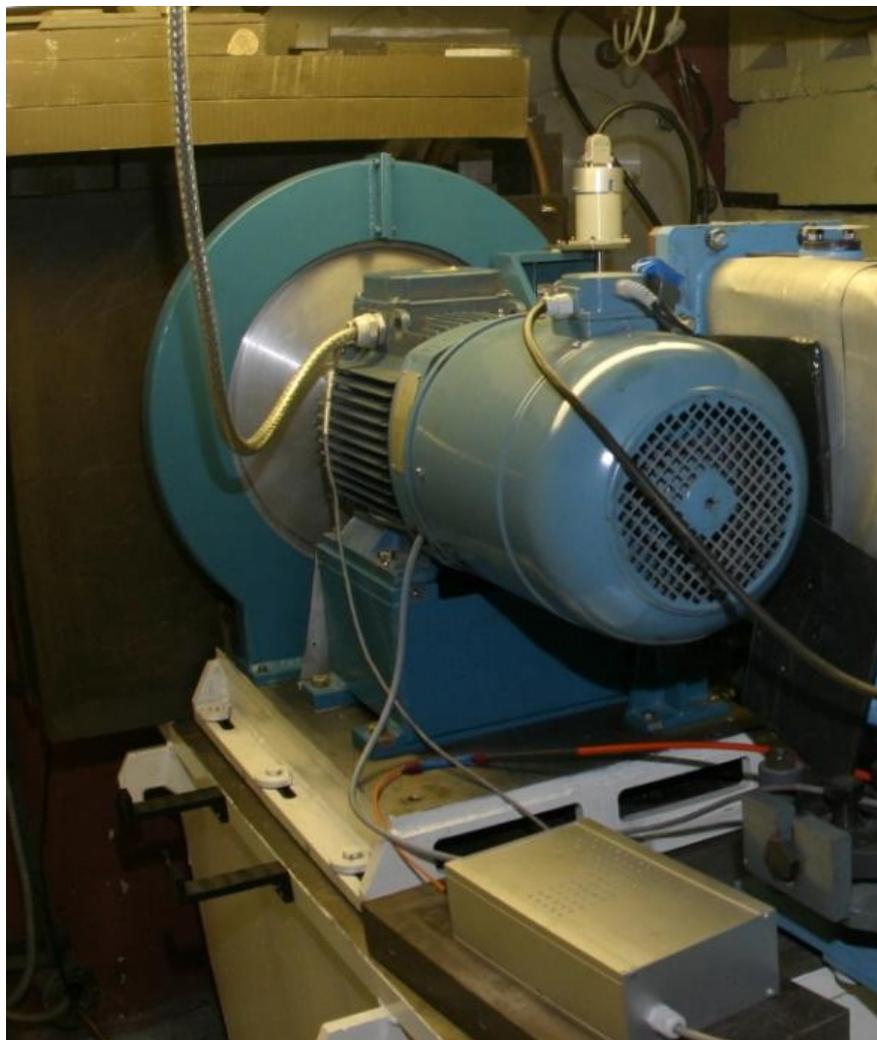
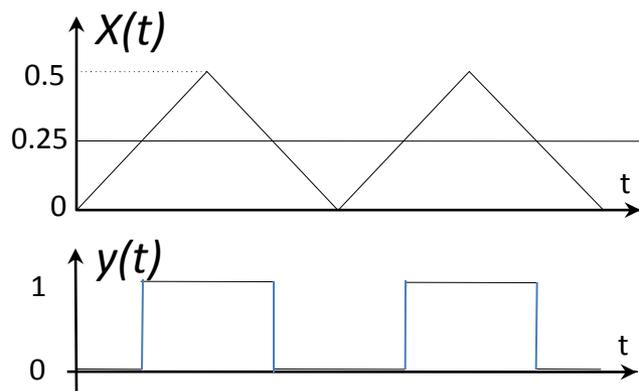
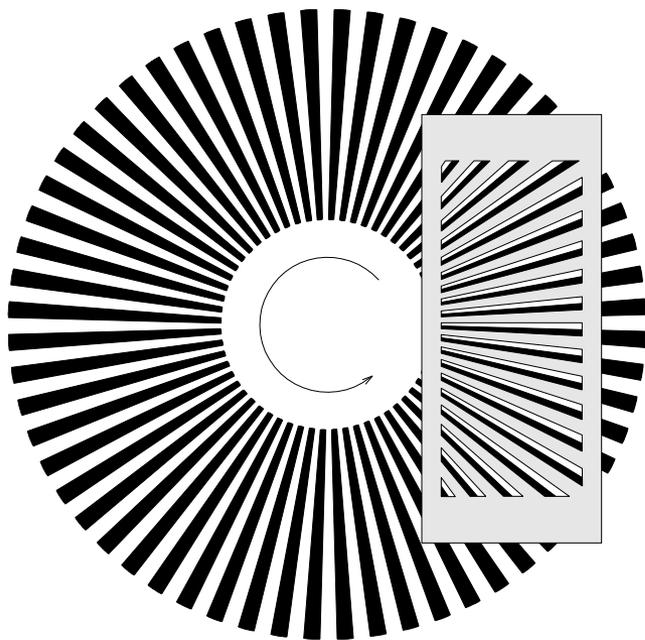
стационарного реактора

$$\sigma^2[s_i^{cl}] = T_m \frac{\Delta}{T_s} \left(\frac{\Delta}{T_s} s_i^{cl} + 2b_0 \right)$$

импульсного реактора

$$\sigma^2[s_i^{cl}] = T_m \frac{\Delta}{T_s} (s_i^{cl} + 2b_0)$$

Фурье-прерыватель



Основные соотношения для RTOF-метода

Интенсивность нейтронов на детекторе при фиксированной частоте

$$z^{(\omega)}(t) = \frac{1}{2} \int_0^{T_s} x^{(\omega)}(t - \tau) s(\tau) d\tau + b_0$$

Используем опорный сигнал $y^{(\omega)}(t)$ и интенсивность нейтронов $z^{(\omega)}(t)$ для образования взаимной корреляционной функции

$$\Delta Z^{(\omega)}(\tau) = \int_0^{\Delta t^{(\omega)}} z^{(\omega)}(t) \cdot y^{(\omega)}(t - \tau) dt$$

Фурье-прерыватель изменяет частоту ω модуляции нейтронного пучка от 0 до $\omega_{max} = \Omega$ согласно весовой функции $g(\omega)$.

Интегрируя $\Delta Z^{(\omega)}(\tau)$ по ω от 0 до $\omega_{max} = \Omega$, получим :

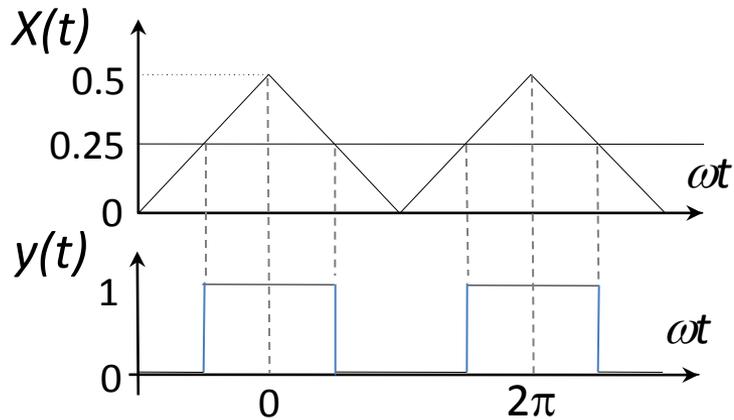
$$Z(\tau) = c \int_0^{T_s} s(\tau') R(\tau - \tau') d\tau' + (S_0 \bar{x} + B_0) \bar{y}$$

Рассмотрим явный вид функции разрешения $R(\tau)$, чтобы понять, от каких параметров она зависит.

Функция разрешения $R(\tau)$ для RTOF-метода

$$R(\tau) = \frac{1}{C} \sum_{r=1}^{\infty} [a_r F_C(r\tau) + b_r F_S(r\tau)]$$

1. фаза $\varphi_0=0$

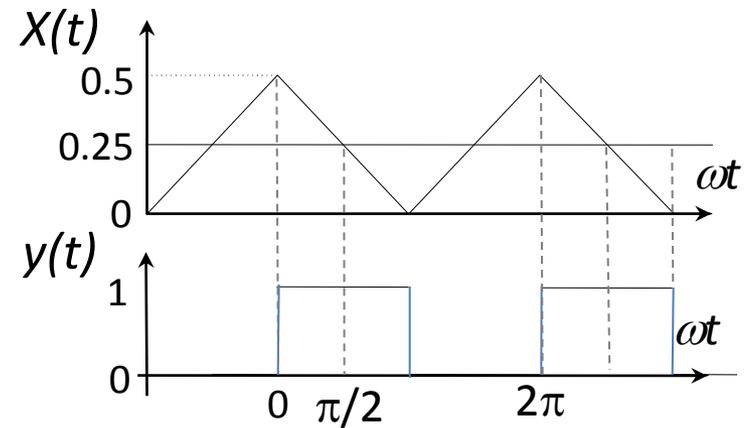


$$F_C(x) = \int_0^{\Omega} g(\omega) \cos(\omega x) d\omega$$

$$a_r \neq 0$$

$$b_r = 0$$

2. фаза $\varphi_0=\pi/2$



$$F_S(x) = \int_0^{\Omega} g(\omega) \sin(\omega x) d\omega$$

$$a_r = 0$$

$$b_r \neq 0$$

Функция разрешения $R(\tau)$, продолжение

Случай, когда сдвиг фазы между $x^{(\omega)}(t)$ и $y^{(\omega)}(t)$ равен $\varphi_0=0$

$$g_0(u) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \cdot \hat{\sigma} \cdot e^{-\frac{\hat{\sigma}^2 u^2}{2}}$$

$g_0(u)$ -распределение частот в “Фурье-трансформанте”.
Реализуется посредством изменения скорости вращения Фурье-прерывателя в соответствии с $g_0(u)$.
 $g_0(u)$ иногда называют частотным окном,
 $u=\omega/\Omega$ –относительная частота.

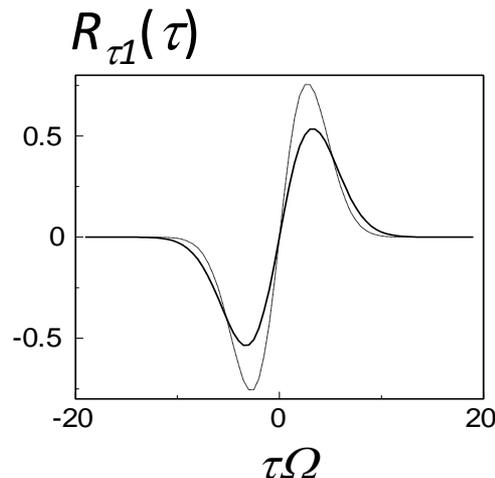
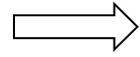
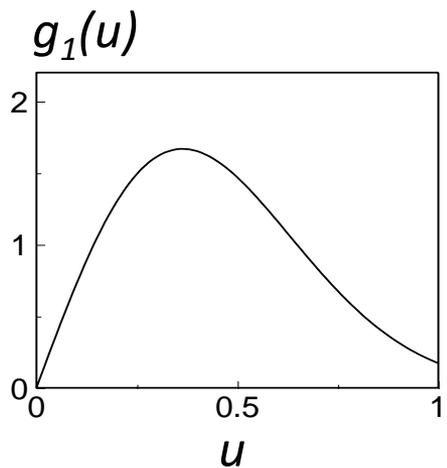
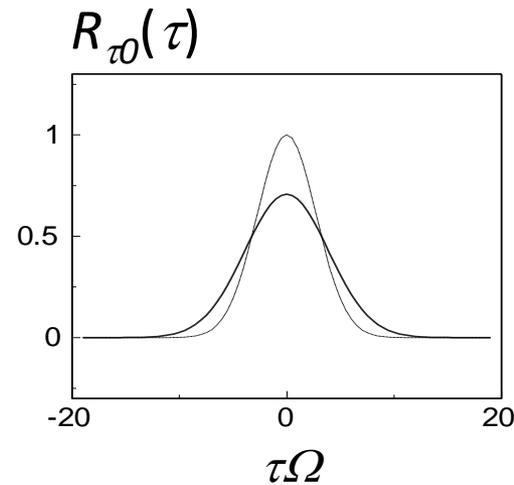
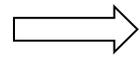
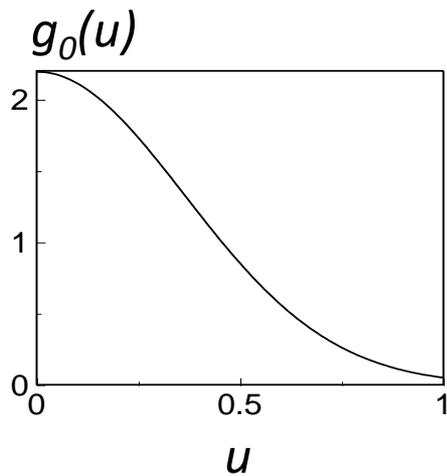
В каждом цикле измерения частота модуляции ω меняется от $\omega=0$ до $\omega_{max}=\Omega$.

После подстановки коэффициентов разложения $x(t)$ и $y(t)$ в выражение для $R_{\tau 0}(\tau)$ получим:

$$R_{\tau 0}(\tau) = \frac{1.011}{\sqrt{2\pi} \cdot \sigma_\tau} \left(e^{-\frac{\tau^2}{2\sigma_\tau^2}} - \frac{1}{3^3} e^{-\frac{(3\tau)^2}{2\sigma_\tau^2}} + \frac{1}{5^3} e^{-\frac{(5\tau)^2}{2\sigma_\tau^2}} \mp \dots \right)$$

Аналогично ищется выражение для $R_{\tau 1}(\tau)$ в случае $\varphi_0=\pi/2$ и $g_1(u)$,
 $g_1(u)$ первая производная от $g_0(u)$.

Форма функции разрешения $R(\tau)$

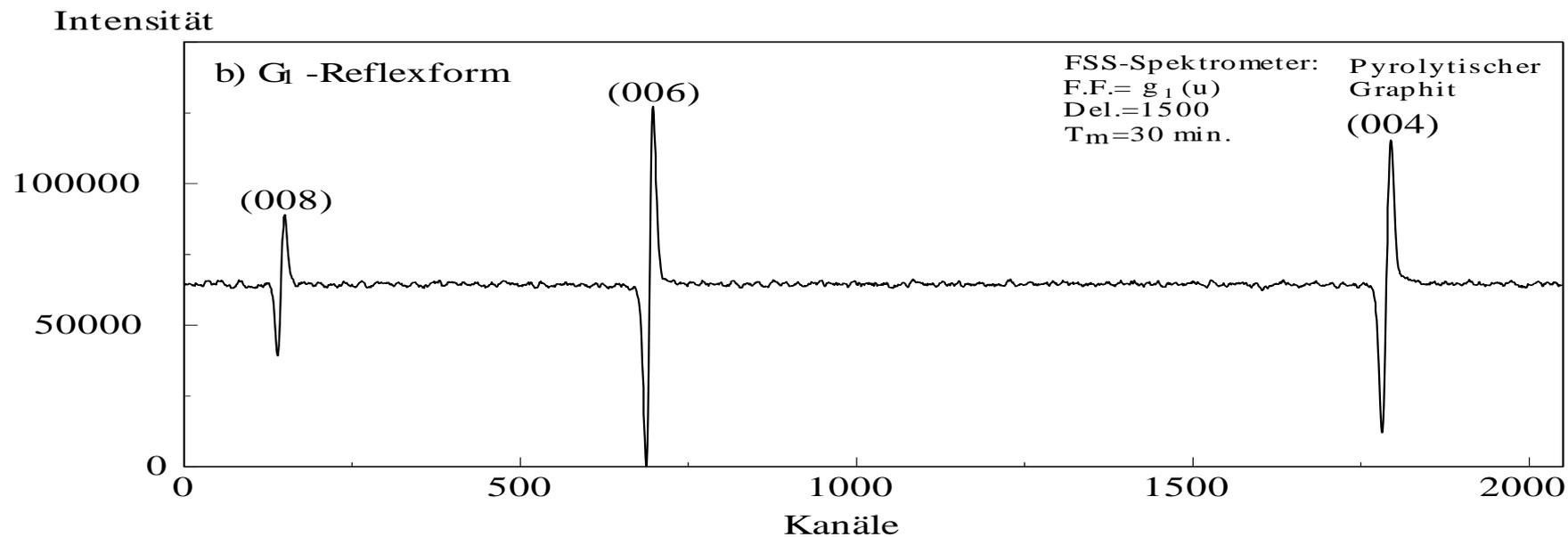
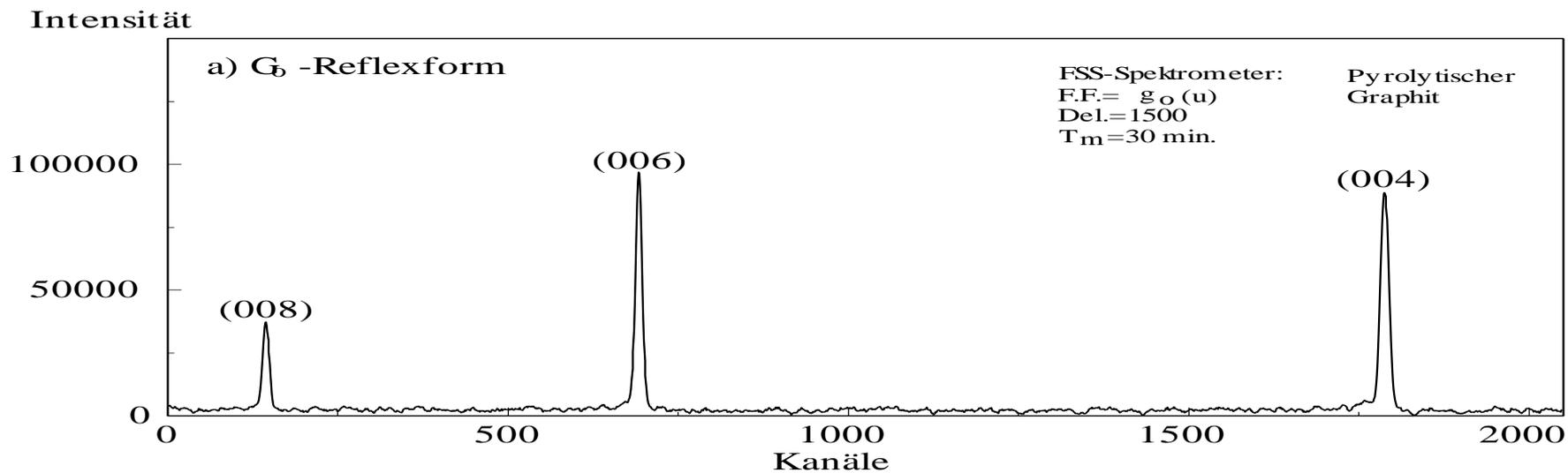


При скорости вращения от 0 до 6000 об/мин и 1024 щелях на диске величина Δ_τ равна:
 $\Delta_\tau = 8.8$ мкс

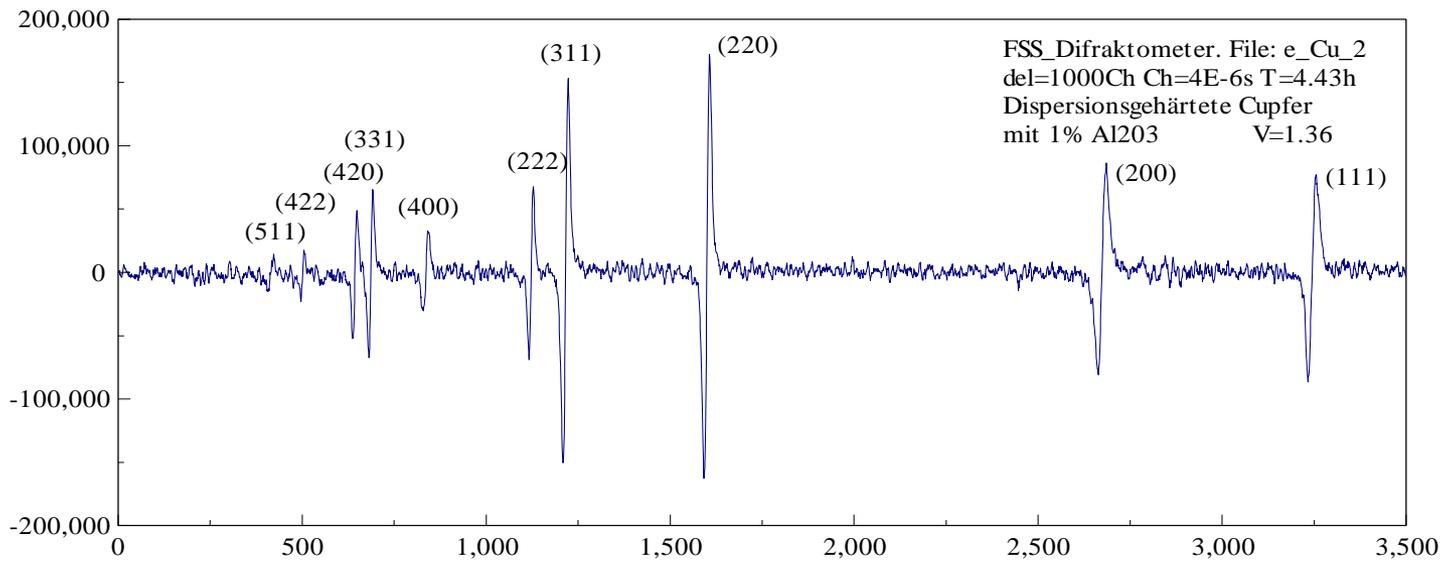
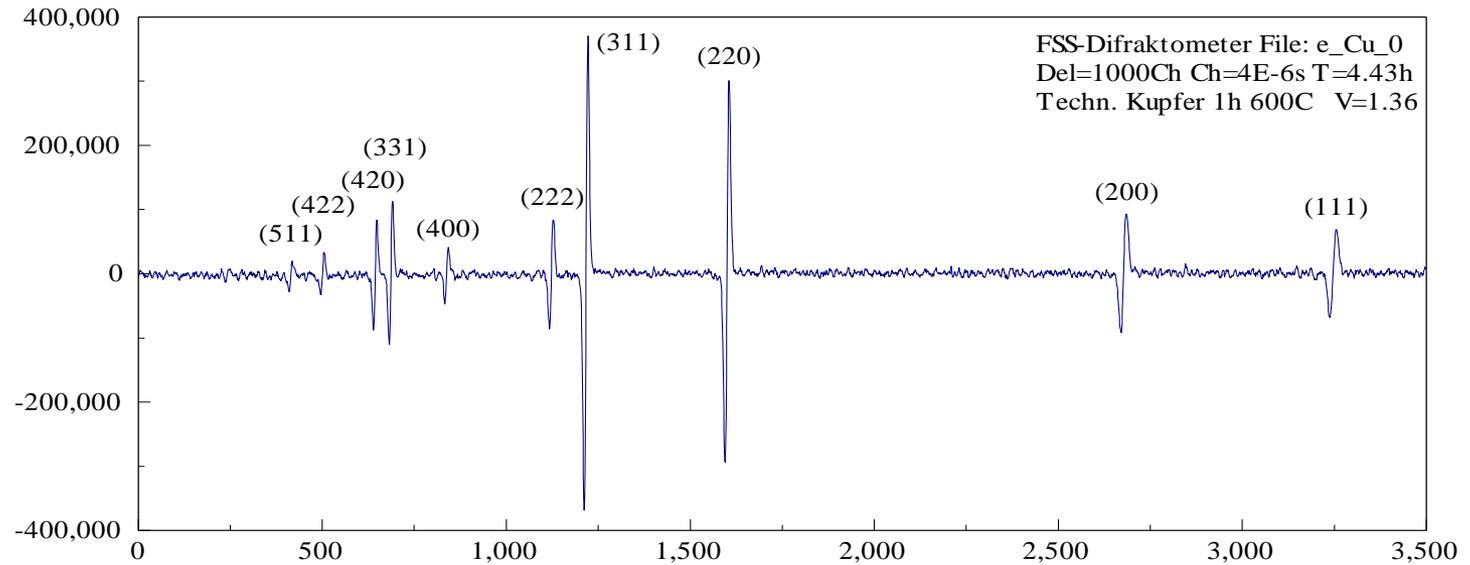
Связь между $\hat{\sigma}$ и σ_τ имеет вид: $\sigma_\tau = \hat{\sigma} / \Omega$

Для значений $\hat{\sigma} \approx 2.5$ имеет место оценочная формула: $\Delta_\tau = \frac{0.94}{f_m}$

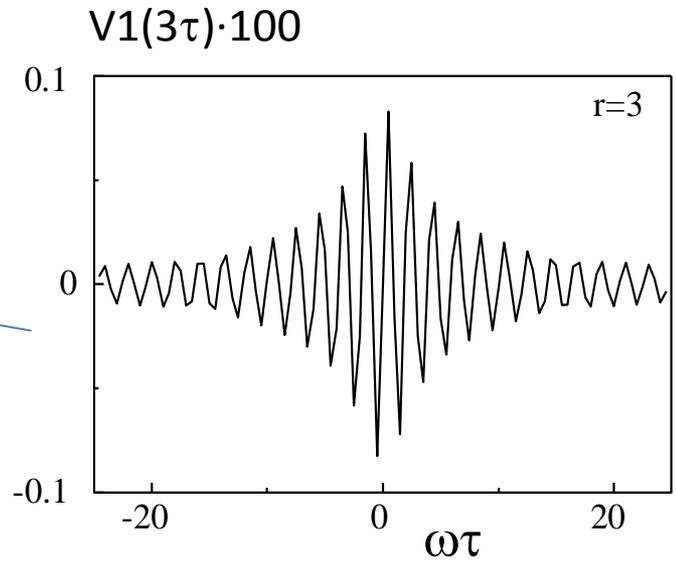
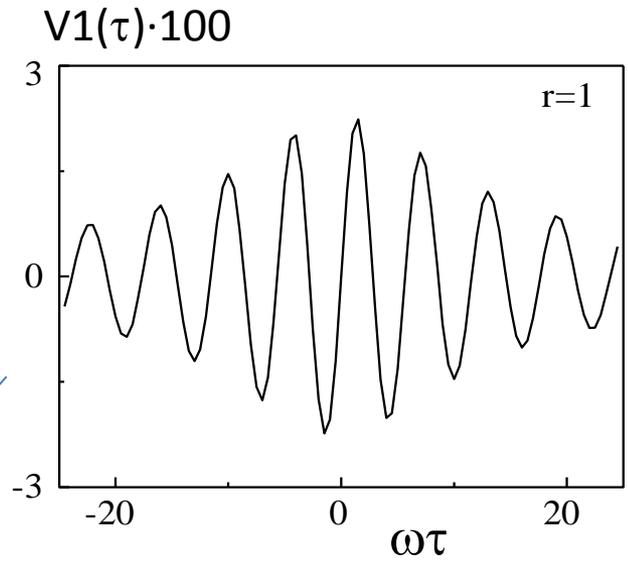
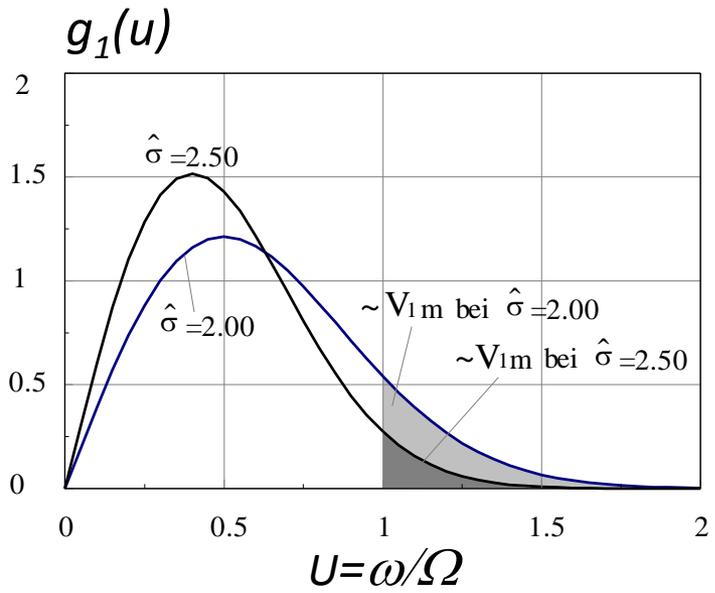
Функция разрешения $R(\tau)$, примеры.



Функция разрешения $R(\tau)$, примеры.

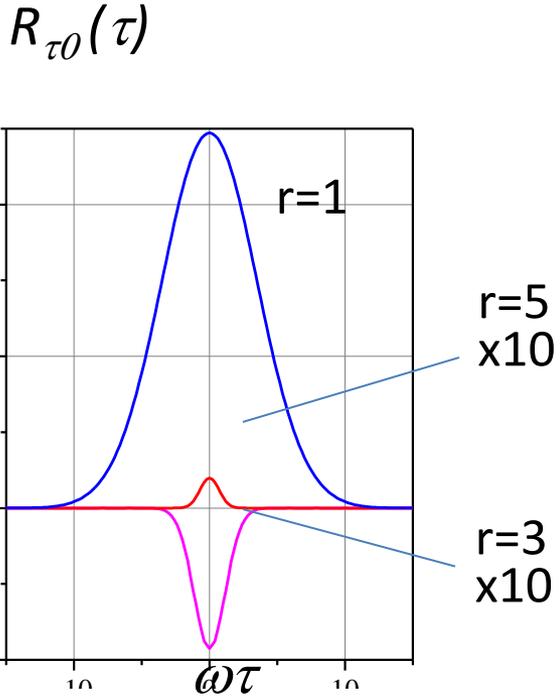
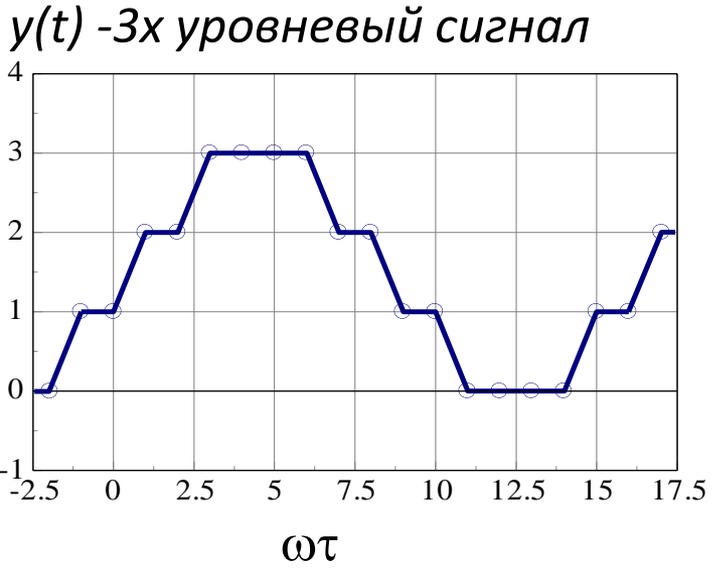
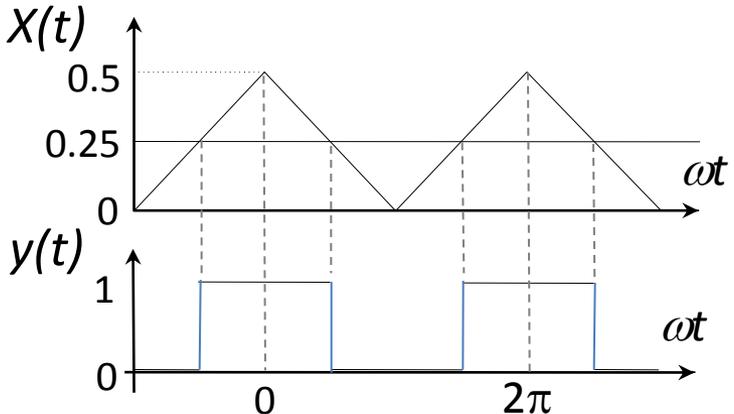


Функция разрешения $R(\tau)$, влияние границы Ω



Появление осцилляций на функции разрешения из-за ограничения ω .
Случай $\hat{\sigma} = 2.5$

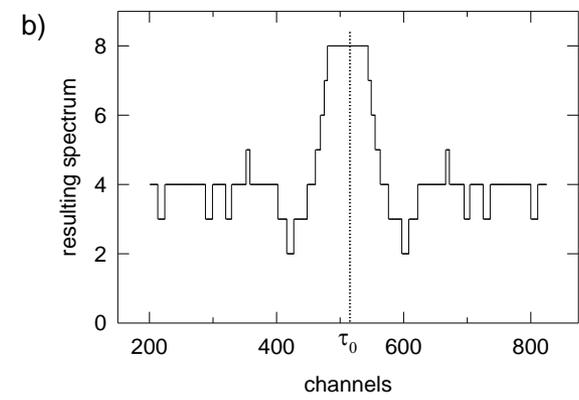
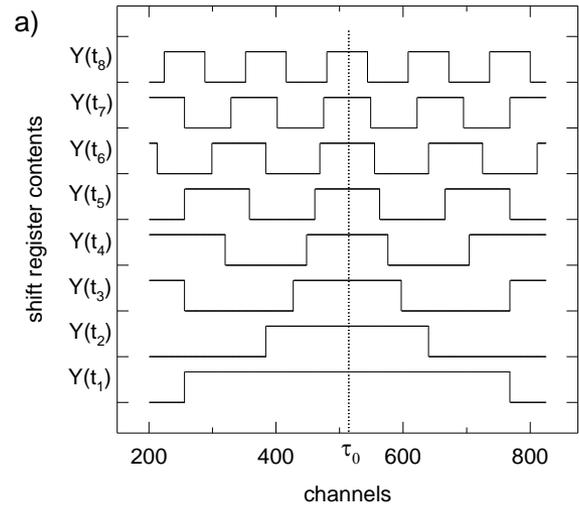
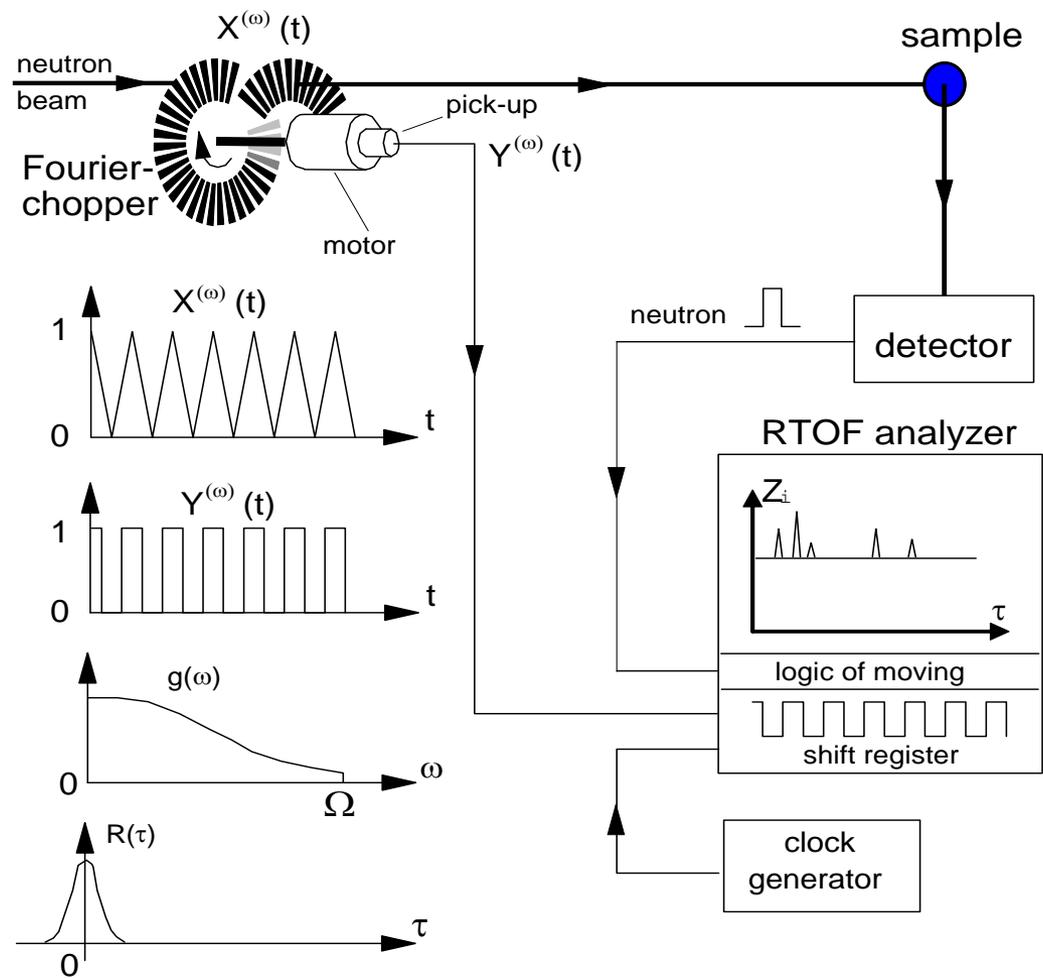
Функция разрешения $R(\tau)$, влияние формы $y(t)$



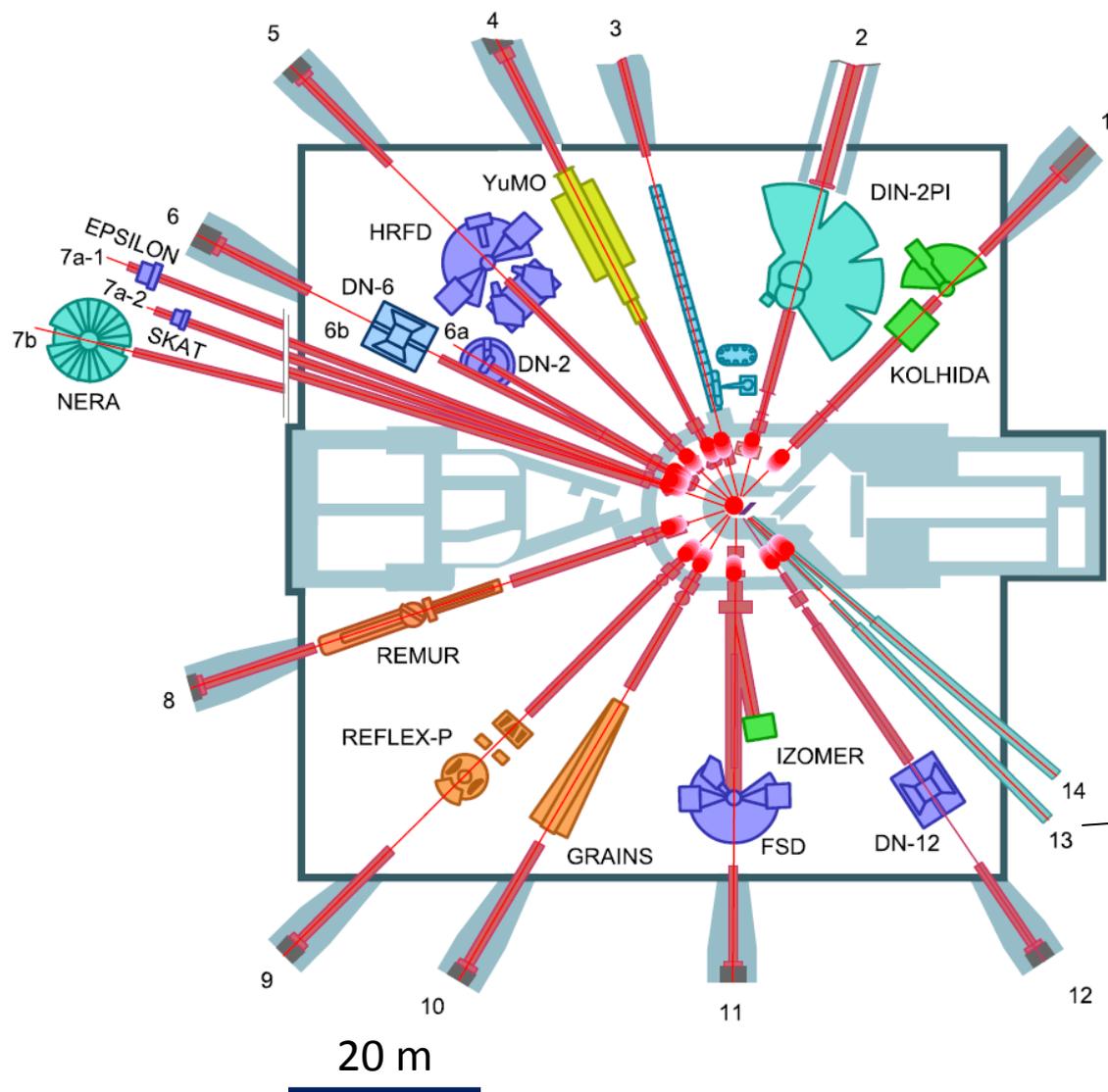
Вклад членов разложения с $r=1$, $r=3$ и $r=5$.

3х - уровневый сигнал подавляет гармонику $r=3$ на порядок

Пояснение работы RTOF-дифрактометра

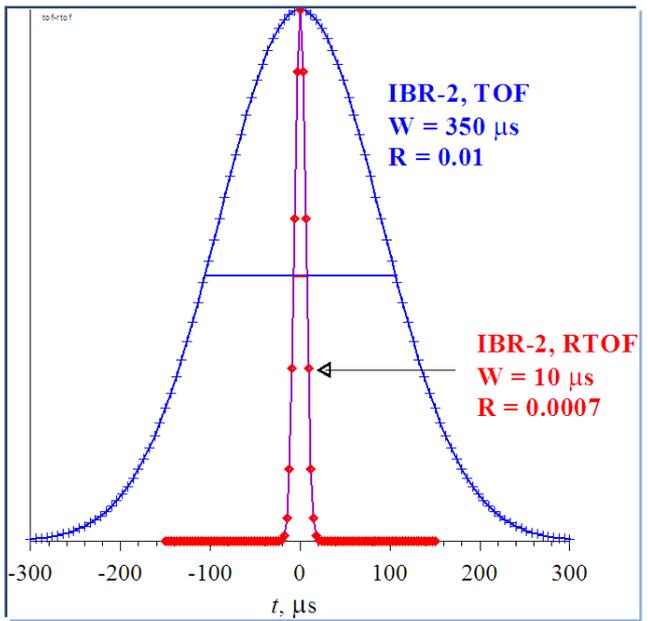
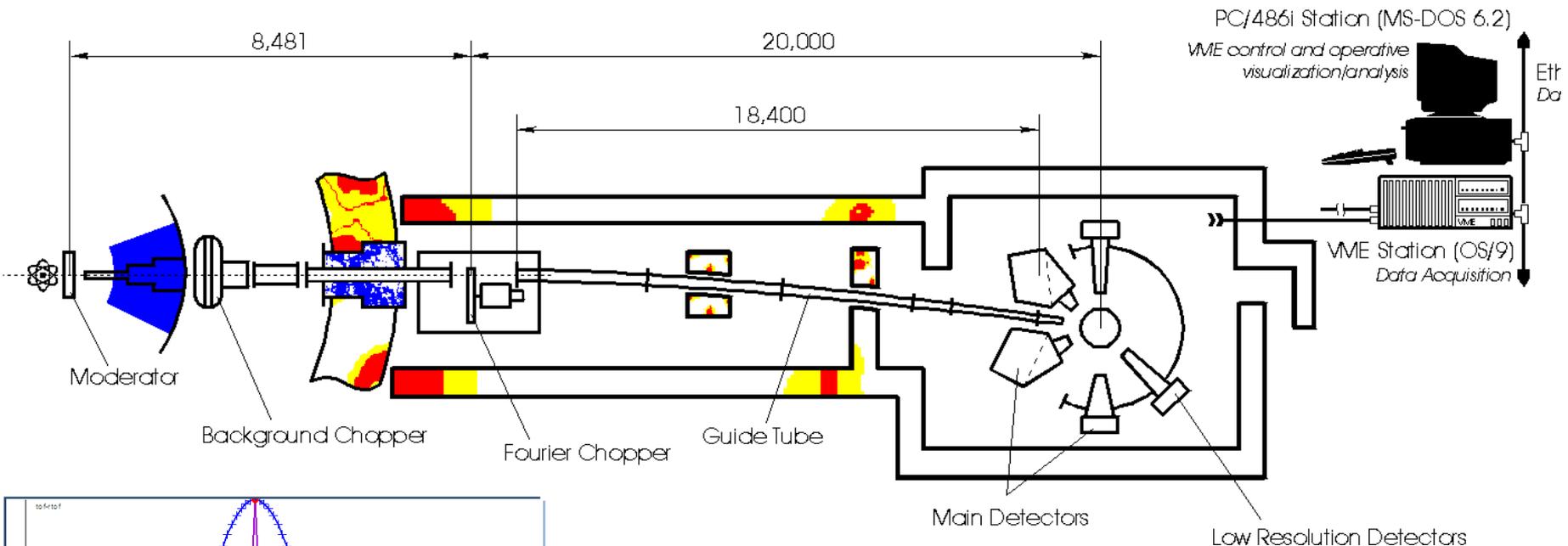


Experimental Facilities of IBR-2



- Diffraction:** HRFD, DN-2, DN-6 (project), DN-12, SKAT, EPSILON, FSD
- Small-angle scattering:** YuMO
- Reflectometry:** REMUR, REFLEX, GRAINS
- Inelastic scattering:** DIN-2PI, NERA
- Nuclear Physics:** ISOMER, KOLHIDA
- Irradiation Facility**

FSS

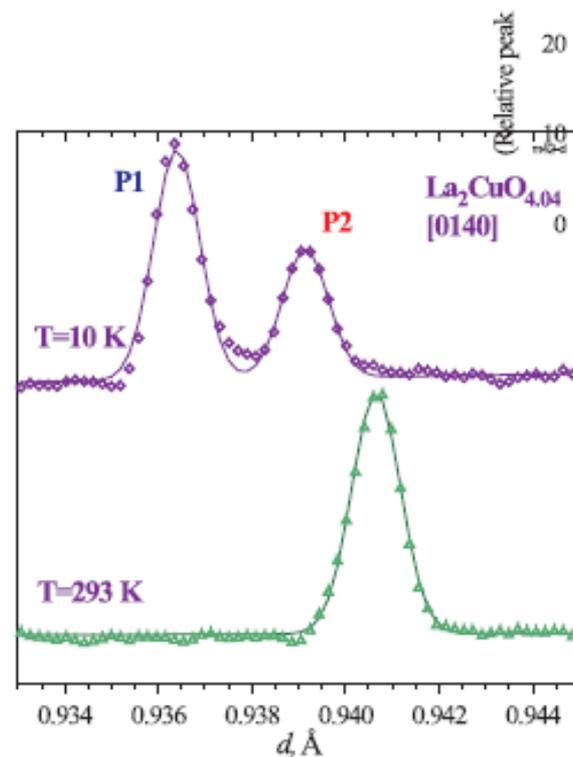
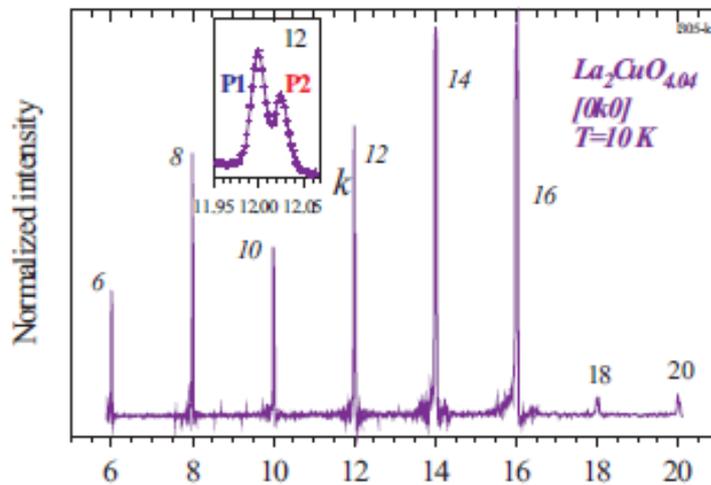


Разрешение до
 $\Delta d/d = 0.0007$
Детектор
 Телесный угол
 BS-детектора
 $0.16 \text{ str} = 2 \times 0.08$

прерыватель
 Al-сплав
 $\varnothing = 54 \text{ cm}$
 $N = 1024$
 $V_{\text{max}} = 6000 \text{ rpm}$
 $\Omega = 100 \text{ kHz}$
 $\Delta t_0 = 10 \mu\text{s}$
 $S_{\text{beam}} = 3 \times 30 \text{ cm}^2$

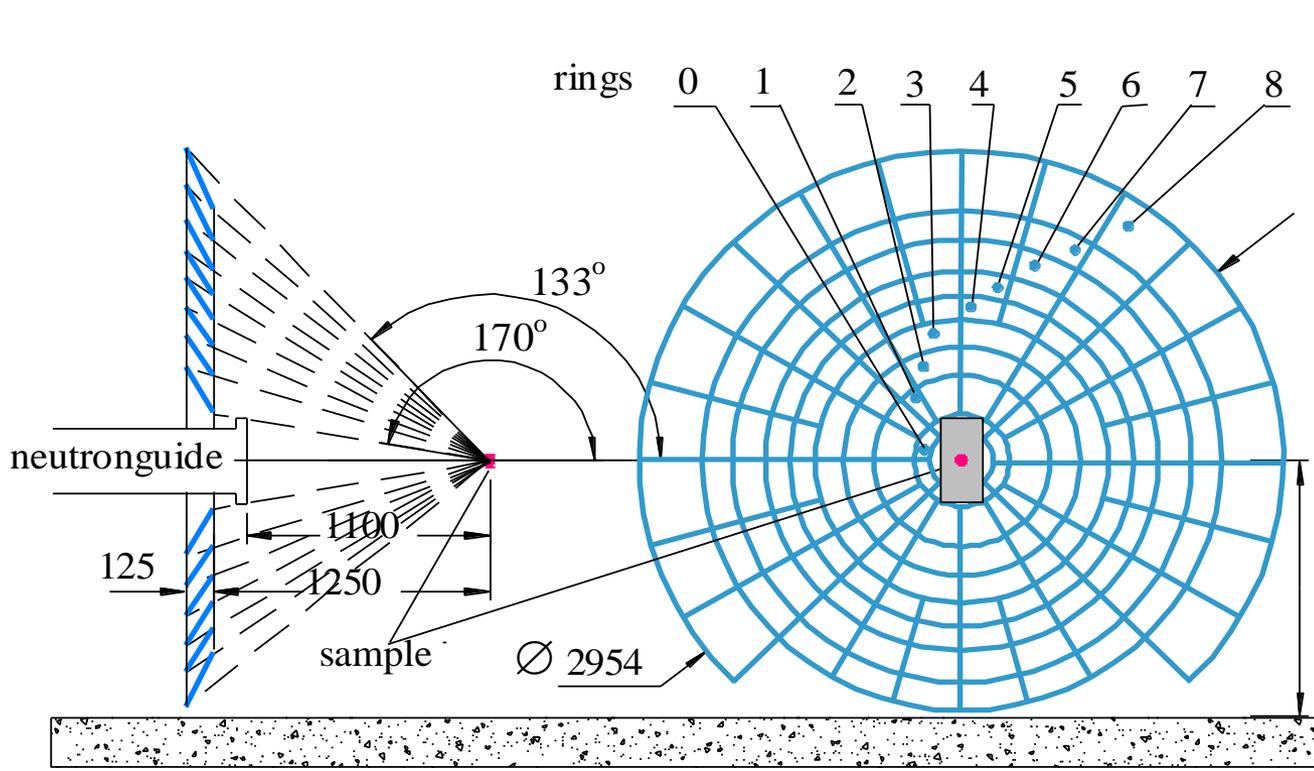
Фрагменты спектра, измеренные с $\Delta d/d = 0.009$

Splitting of the diffraction peak of $\text{La}_2\text{CuO}_{4.04}$ in low-temperature phase separated state (upper pattern). The patterns were measured at HRFD with $d/d_0.0009$.



Новый детектор обратного рассеяния на основе ZnS(Ag)/⁶LiF, предложение

Ref. A.M.Balagurov, V.A.Kudryashov



$\Omega = 1.5 \text{ Str}$
 $S = 13.5 \text{ m}^2$
 $\approx 190 \text{ elements}$
 R_g : from 0.0004
to 0.0009

Ring	Ω , str
0	0.050
1	0.202
2	0.208
3	0.216
4	0.225
5	0.237
6	0.252
7	0.202
8	0.221
Σ	1.813

Geometrical contribution to the resolution function for sample of 5x5x5 mm³

1	2	3	4	5	6	7	8
3.7E-4	5.4E-4	6.1E-4	6.7E-4	7.3E-4	7.8E-4	8.3E-4	8.8E-4

Особенности Фурье-метода на длинно-импульсных источниках

$$Z_i = S_i + \frac{1}{2} Z_{0p}$$

ожидаемая величина счета в i -м канале

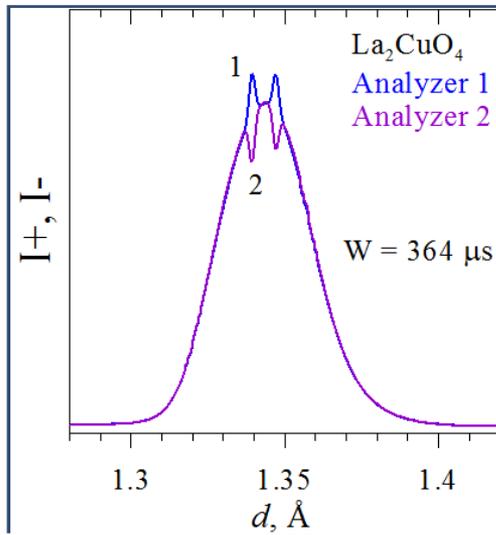
$$S_i = c \frac{1}{2} T_m \frac{\Delta}{T_s} S_i^r$$

ожидаемая величина спектра в i -м канале

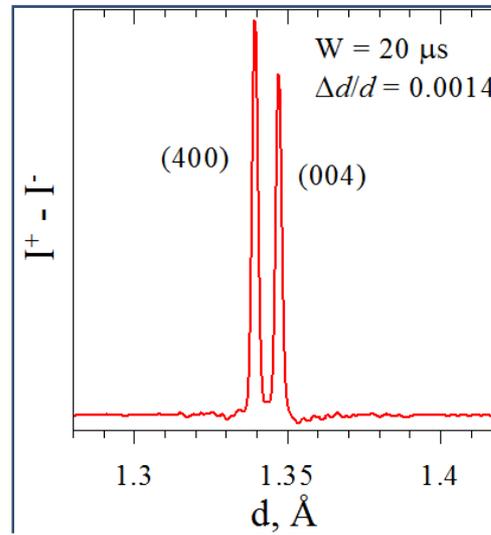
$$\sigma^2[S_i] \simeq \frac{1}{2} Z_{0p}$$

величина дисперсии в i -канала анализатора равна половине полного числа нейтронов под кривой низкого разрешения.
Для стационарного реактора величина дисперсии постоянна по всему спектру и равна половине полного числа нейтронов

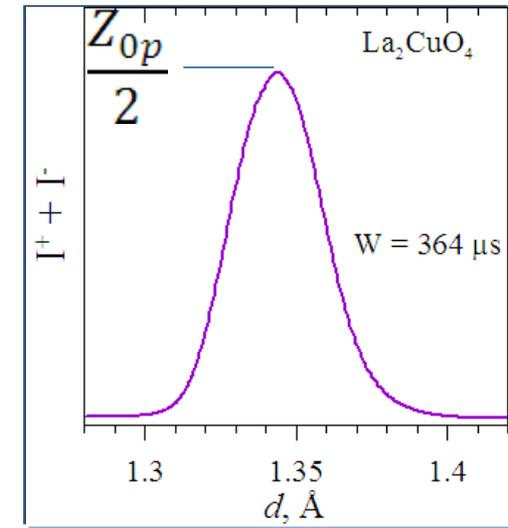
$$c \sim 1$$



Z_i содержимое каналов анализатора I+ и I-

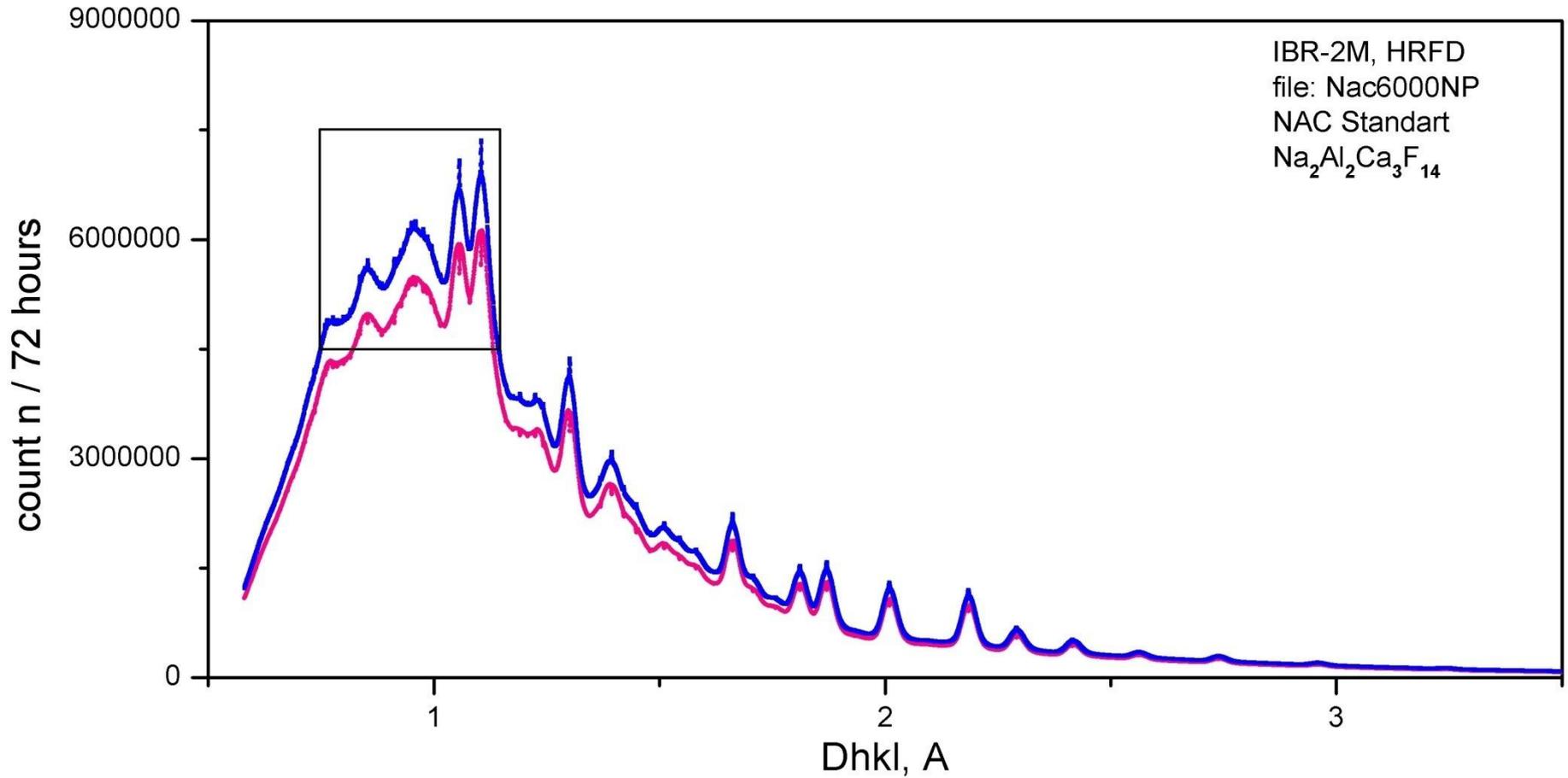


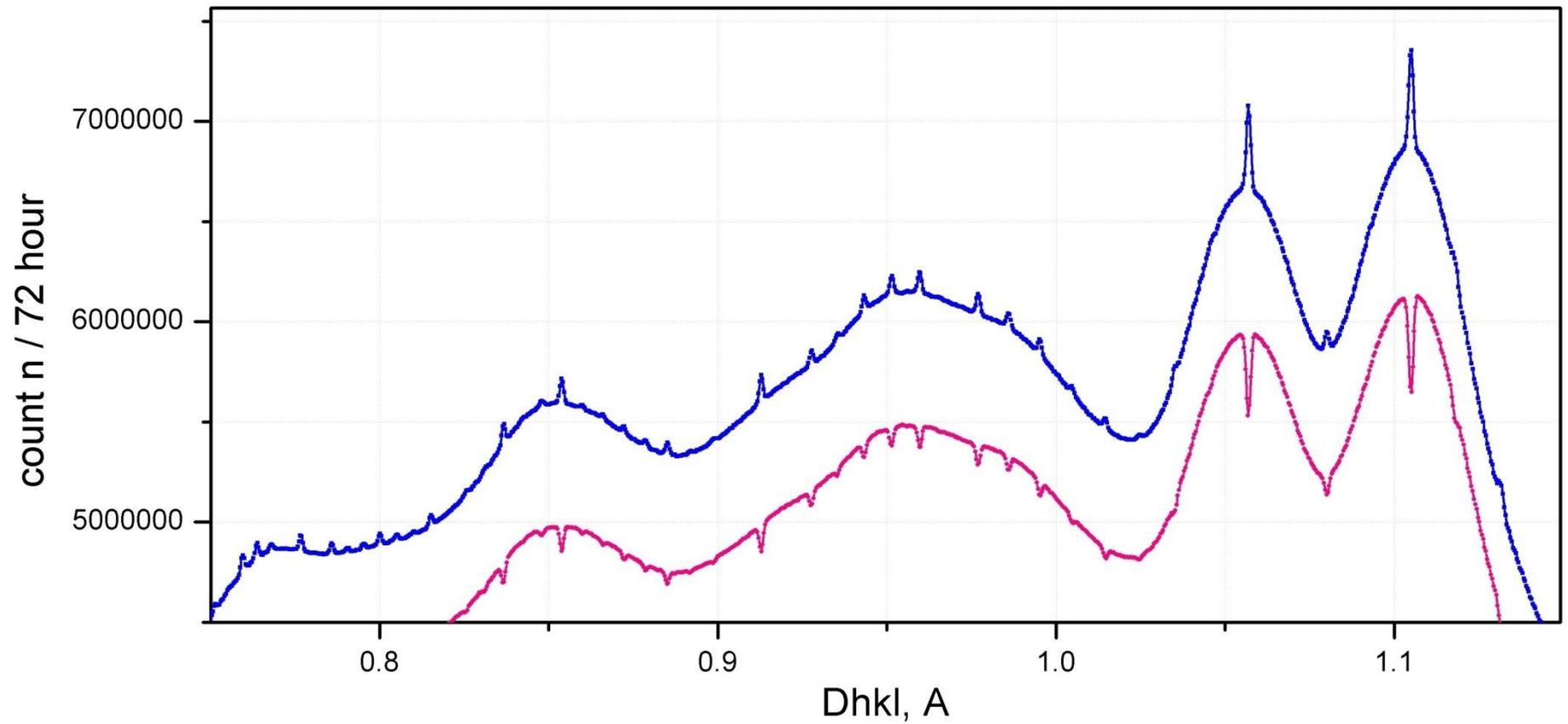
S_i экспериментальный спектр высокого разрешения



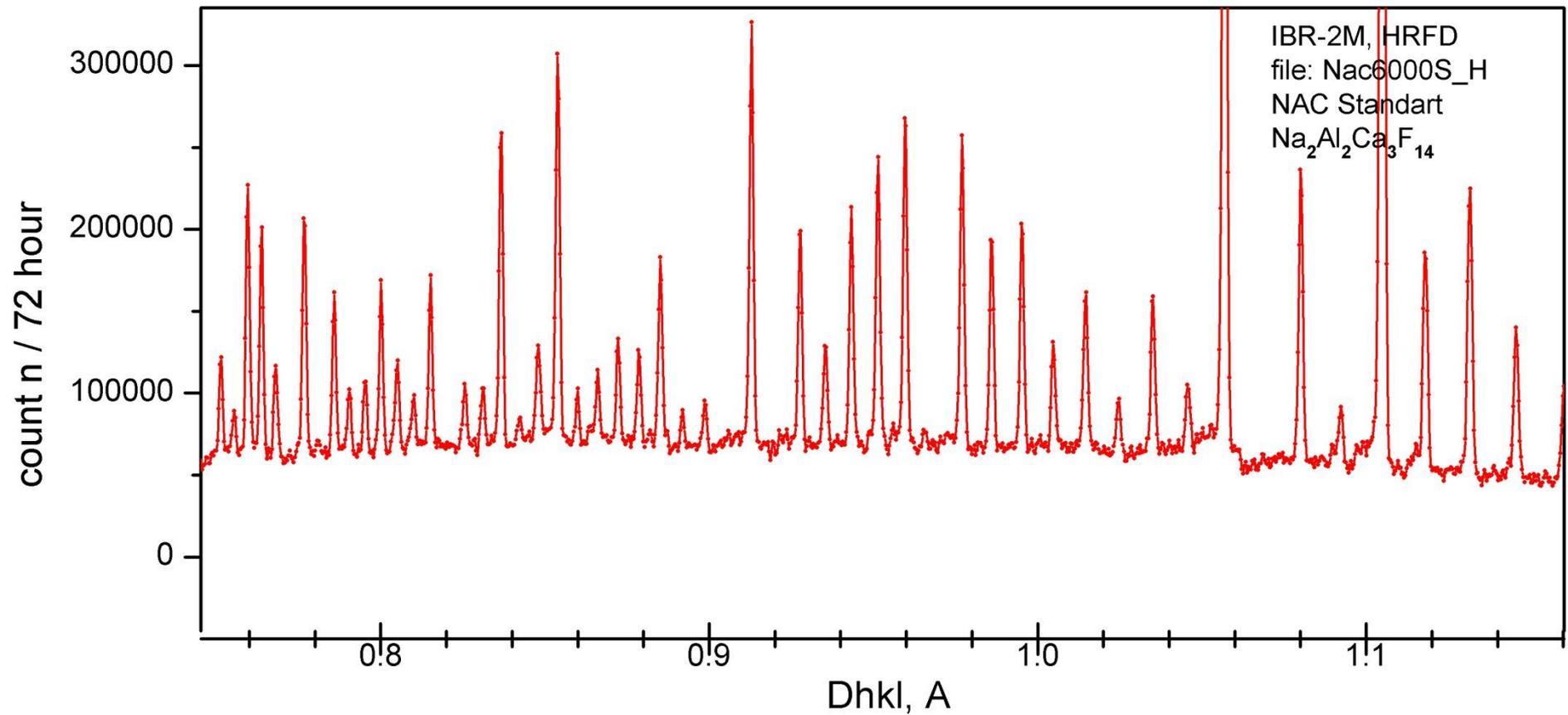
Z_{0p} корреляционный фон: спектр низкого разрешения

Пояснение накопления спектра





Пояснение накопления спектра



Оценка фактора выигрыша для импульсного источника

Импульсный источник

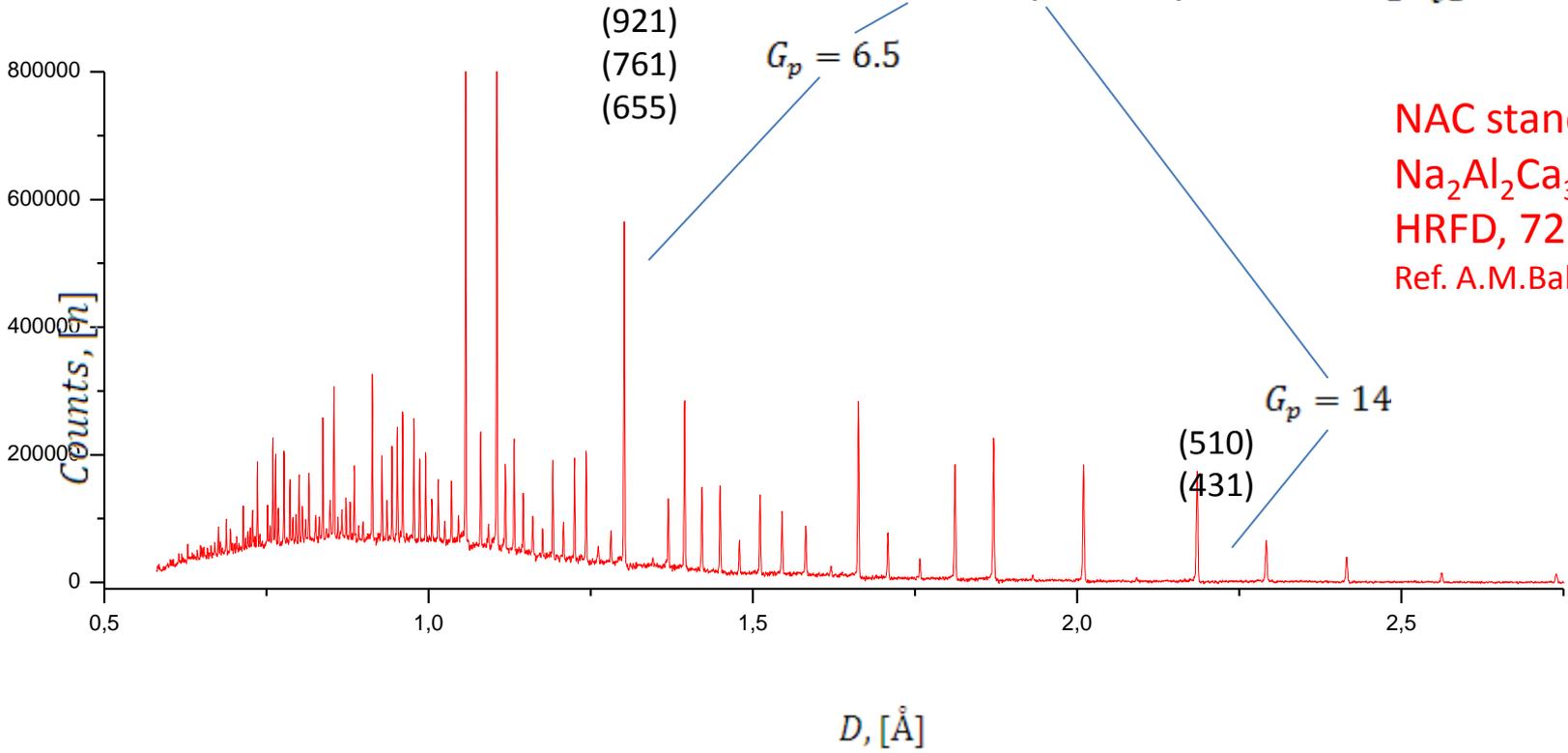
$\frac{1}{2} Z_{0p}$ - пропорциональна площади S_p под кривой низкого разрешения

Стационарный реактор

$\frac{1}{2} Z_0$ - пропорциональна площади S_0 под кривой всего спектра

$G_p^2 = \frac{S_0}{S_p}$ - фактор выигрыша во времени измерения

Фактор выигрыша в $\sigma[S_i]$



NAC standard:
 $\text{Na}_2\text{Al}_2\text{Ca}_3\text{F}_{14}$,
 HRFD, 72 hours
 Ref. A.M.Balagurov & all

Фурье-метод: достоинства, недостатки, проблемы

Позволяет получать малую временную ширину $\Delta\tau \sim 10$ нс для $R(\tau)$ что дает возможность при сравнительно коротких пролетных базах $\sim 20-50$ м реализовать прибор высокого разрешения.

Позволяет использовать нейтронные пучки большого сечения.

Наиболее эффективен на источниках с длинным импульсом 0.3-2 нс

Постоянная стат.ошибка в пределах пика. Это уменьшает чувствительность метода к малым пикам, расположенных на склоне больших пиков.

Из-за недостатков конструкции существующих Фурье-прерывателей наблюдается длинновременная нестабильность формы пиков.