

СООБЩЕНИЯ
ОБЪЕДИНЕННОГО
ИНСТИТУТА
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ

ДУБНА



СЗ44.11

Г-522

10/v-76

14 - 9485

1787/2-76

И.А.Гладких, Н.Кроо, Ш.Салаи, В.Г.Симкин, Л.Чер

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДА
КОРРЕЛЯЦИОННОГО АНАЛИЗА
ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ СПЕКТРА РАССЕЯНИЯ
МЕДЛЕННЫХ НЕЙТРОНОВ

(Теория)

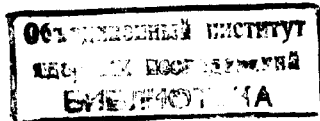
1976

14 - 9485

И.А.Гладких, Н.Кроо, Ш.Салаи, В.Г.Симкин, Л.Чер

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДА
КОРРЕЛЯЦИОННОГО АНАЛИЗА
ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ СПЕКТРА РАССЕЯНИЯ
МЕДЛЕННЫХ НЕЙТРОНОВ

(Теория)



Введение

В 1972 году было предложено применить на импульсном реакторе корреляционный прерыватель для исследования неупругих процессов /1/. Согласно этой работе преимуществом корреляционной методики является использование всего падающего белого пучка и получение двумерного спектра рассеяния. Данный метод объединяет достоинства методов прямой и обратной геометрии, т.е. обещает большую светосилу и высокое разрешение.

В настоящей работе детально рассмотрены некоторые аспекты корреляционной спектроскопии на импульсных источниках нейтронов с целью выяснения области и границ ее применения.

1. Светосила и статистическая точность

Результирующая светосила спектрометра определяется многими факторами и прежде всего потоком нейтронов на образце, определяемым формулой

$$d\phi \sim I_0(\lambda) \frac{dS \cdot d\delta}{L^2} \cdot C, \quad /1.1/$$

где $I_0(\lambda)$ - число нейтронов, испускаемых реактором в телесный угол 4π /за единицу времени/; dS - поверхность образца; $d\delta$ - видимая поверхность замедлителя; L - расстояние от замедлителя до образца; C - рабочий цикл /относительное количество открытых щелей корреляционного прерывателя/.

Хотя в измерении участвуют все нейтроны падающего квазимаквелловского спектра, интенсивность $d\phi$ зависит

от степени коллимации пучка и площади прозрачного участка /щели/ прерывателя. Высота щели ограничена конечным диаметром (D) прерывателя, а ширина, помимо значения D, - длиной псевдослучайного ряда, которая должна быть достаточно большой. Так, ряд длиной в 127 элементов может быть размещен на прерывателе диаметром 50 см, и при этом щель имеет ширину 1 см и высоту 6 см. В случае увеличения D до 1 м ширину можно довести до 2 см, а высоту до 7 см. При таких условиях полезная площадь образца, равная площади щели, будет $\sim 10 \text{ см}^2$.

Для улучшения разрешения по времени пролета необходимо увеличивать пролетную базу (L). При этом интенсивность падает, как L^{-2} . Благодаря большой поверхности замедлителя, условия коллимации и условия достижения нужного разрешения по времени пролета вполне совместимы, т.е. уменьшение интенсивности при увеличении L компенсируется увеличением "видимой" части поверхности замедлителя. Эта компенсация, естественно, ограничивается линейными размерами замедлителя.

При сравнении с методом обратной геометрии с Ве-фильтром, в случае использования которого площадь образца dS можно увеличивать до размера 300 см², метод корреляционной техники по светосиле проигрывает.

Чаще всего, однако, образцы /особенно монокристаллы/ недоступны в таком количестве, чтобы получить столь большую площадь, а при dS $\sim 10 \text{ см}^2$ условия по светосиле двух методов выравниваются.

Кроме того, метод обратной геометрии в обычном исполнении не дает хорошего разрешения в κ пространстве ввиду широкого раствора телесного угла детекторов, следовательно, метод КОРАН, без сомнения, возьмет верх при исследованиях дисперсионных соотношений в монокристаллах и уступит лишь в случае исследования бездисперсионных возбуждений.

Что касается методов прямой геометрии, т.е. монохроматизации пучка с помощью фермиевских прерывателей или монокристаллов, то сразу видно, что хорошая степень монохроматизации достигается ценой потери большой доли входного максвелловского спектра, порой

до 99%. Эти потери только частично можно компенсировать применением большого количества детекторов.

В конечном итоге интенсивность $d\phi$ определяет статистическую точность измерения. Особенностью КОРАНа является одинаковая статистическая точность во всех точках спектра /в двумерном случае это касается только сегментов, относящихся к одному значению полного времени пролета/, причем величина статистической точности определяется суммарным числом отсчетов, приходящихся на измеренную кривую ^{1/2}/. Отсюда следует такая особенность КОРАНа: в присутствии большого /как правило, упругого/ пика неупругие пики маскируются. Этот эффект особенно ощутим в случае образца, имеющего сильную некогерентную рассеивающую способность, что приводит к появлению упругих пиков во всех сегментах двумерного спектра.

Некоторую дополнительную выгоду можно получить при рассеянии с потерей энергии, поскольку нейтроны, рассеянные упруго в данный сегмент, относятся к менее светосильному участку падающего спектра, чем нейтроны, потерявшие энергию в процессе рассеяния. Разумеется, это рассуждение имеет силу только для той части спектра, для которой $\lambda > \lambda_{\text{макс}}$ /см. рис. 16/, где

$$\lambda_{\text{макс}} = \frac{h}{(5kTm)^{1/2}} \quad /1.2/$$

Здесь h - постоянная Планка, k - постоянная Больцмана, T - температура замедлителя, m - масса нейтрона.

В тех случаях, когда исследуются сами упругие пики, КОРАН служит отличным фильтром для отсеивания неупругих эффектов.

Идеальным решением была бы возможность фильтрации спектра от упругих пиков. Это можно осуществить, если в непосредственной близости от корреляционного прерывателя расположить второй статистический прерыватель, который управлял бы чувствительностью детекторов, а именно, в случае открытой щели запирает бы их. При выполнении условия непрерывного сдвига фаз между вращениями двух прерывателей и соответствующего растяжения времени запираения все упругие пики могут быть удалены из спектра.

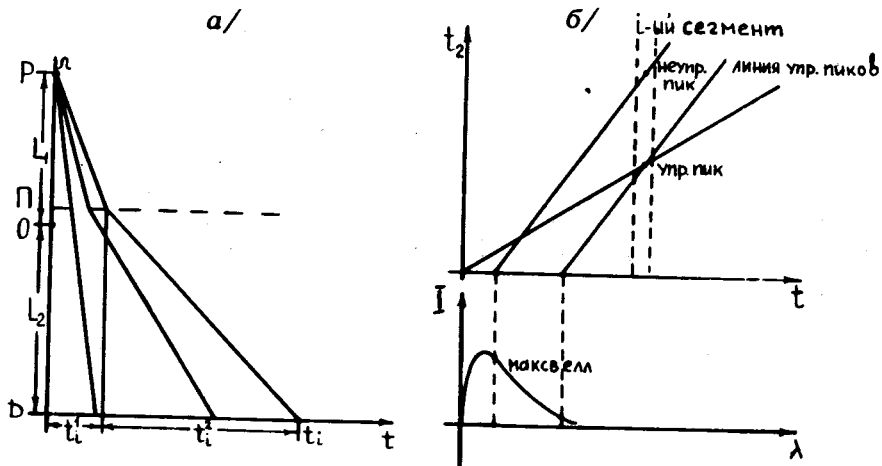


Рис. 1. а/ Временная диаграмма процесса рассеяния нейтронов при произвольной фазе прерывателя. Р - реактор, П - прерыватель, О - образец, Д - детектор. б/ Упругий и неупругий пики в одном сегменте возникают в результате рассеяния нейтронов разных длин волн. t - полное время пролета базы $L_1 + L_2 = L$, t_2 - время пролета базы L_2 .

Изложим идею фильтрации более подробно. На рис. 2 изображена временная диаграмма пролета нейтронов. В момент $t=0$ на короткое время появляются нейтроны с разными длинами волн, т.е. разными скоростями. Первым прерывателем нейтроны монохроматизируются с достаточной точностью. Проходя через прерыватели, нейтроны рассеиваются на образце. Упруго рассеянные нейтроны на нашей диаграмме не меняют своего направления движения. Они изображены прямыми линиями, исходящими из точки $t=0$ и $L=0$. При прохождении через открытые участки a_1-a_2 и a_3-a_4 второго прерывателя они попадают на детектор во временные интервалы $a'_1-a'_2$ и $a'_3-a'_4$ соответственно. Если на время этих интервалов заставить детекторы бездействовать, то, согласно работе^{/3/}, упругие пики в спектре не появляются. Упругие пики, однако, удаляются не "бесплатно". Процесс фильтрации сопровождается дополнительной потерей интенсивности неупругих пиков в два раза.

Статистическую точность обычно определяют как

$$\sigma_i^2 = \sum S_i, \quad /1.3/$$

где S_i - функция рассеяния.

Формула /1.3/, взятая из работы^{/1/}, является обобщением формулы для статистической точности в случае монохроматизированного пучка на стационарных реакторах и учитывает лишь статистику счета нейтронов. При сочетании КОРАНа с импульсными источниками нейтронов требуется, чтобы для всех длин волн все положения прерывателя появлялись одинаковое число раз. Для удовлетворения этого требования необходимо было либо обеспечить такие условия, чтобы число оборотов прерывателя за единицу времени не имело общего делителя с частотой появления нейтронных вспышек, либо менять фазу вращения прерывателя случайным образом по отношению к фазе нейтронных вспышек.

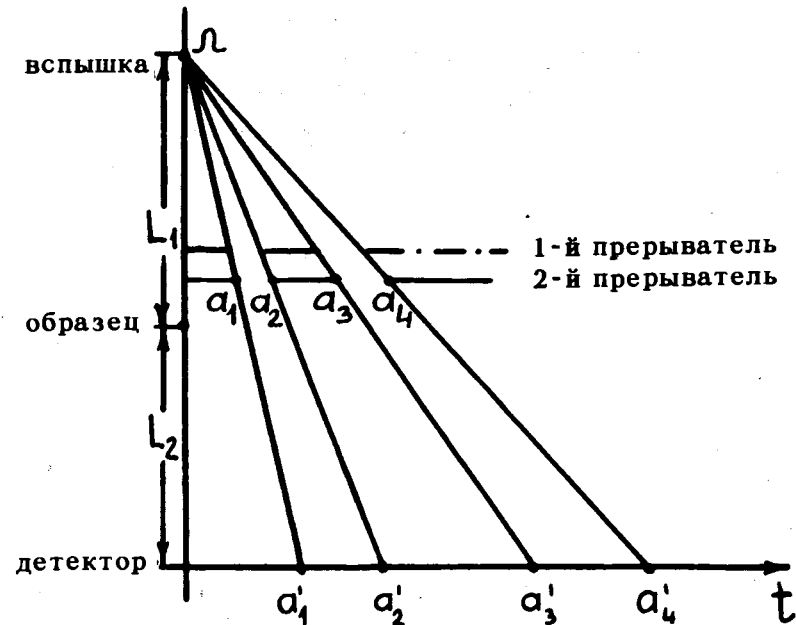


Рис. 2. Принцип действия корреляционного фильтра.

В последнем случае статистическая точность измерения определяется не только статистикой отсчета нейтронов, но и статистикой появления той или иной щели прерывателя /фазы/ при регистрации нейтронов разной длины волны.

В пределе низкой интенсивности нейтронного пучка и высоких оборотов прерывателя эффект от статистики появления фазы прерывателя пренебрежимо мал и формула /1.3/ все еще остается в силе.

В другом предельном случае, когда интенсивность пучка столь велика, что его можно рассматривать как непрерывный и флюктуирующий поток, статистический разброс полностью задается статистикой появления фазы прерывателя.

Если содержание n -го канала какого-либо сегмента обозначить Z_n , то оно выражается через функцию рассеяния S_i как

$$Z_n = \ell \cdot I_0 \sum_{i=0}^{N-1} S_i \cdot a_{in} + b\ell, \quad /1.4/$$

где a_{in} - суть элементы псевдослучайного ряда; ℓ - число появлений какой-либо фазы, т.е. число вспышек реактора; b - интенсивность некоррелированного фона.

Спектр рассеяния после корреляционного счета будет иметь вид:

$$K_r^{(\ell)} = m\ell \left(\frac{I_0 \sum S_i}{2} + \frac{I_0 S_r}{2} + mb \right). \quad /1.5/$$

Здесь рабочий цикл $\bar{c} = \frac{1}{2}$, а m - число открытых щелей прерывателя.

Далее,

$$\text{Var}(K_r^{(\ell)}) = \sigma_k^2 = \sum_n \sigma_{Z_n}^2 = \sum_n Z_n, \quad /1.6/$$

а $Z_n = Z_n(\ell)$.

Если все фазы реализуются с равной вероятностью, то легко показать, что статистика появления фазы подчиняется нормальному распределению с дисперсией ℓ_n :

$$\sigma_{Z_n}^2 = \left(\frac{\partial Z_n}{\partial \ell} \right)^2 \sigma_{\ell_n}^2 \approx \left(\frac{\partial Z_n}{\partial \ell} \right)^2 \ell_n. \quad /1.7/$$

Отсюда

$$\sigma_{K_r}^2 = \sum_n \left(\frac{\partial Z_n}{\partial \ell} \right)^2 \ell_n = \frac{\ell}{N} \sum_n \left(\frac{\partial Z_n}{\partial \ell} \right)^2. \quad /1.8/$$

Ожидается, что реактор ИБР-2 позволит накапливать информацию достаточно быстро. Если исходить из результатов предварительных экспериментов, проведенных на ИБР-30 с помощью модельного варианта статистического прерывателя, то фононный пик для алюминия со статистической точностью /в любой точке спектра/ в 1% вблизи узла /222/ и с энергией 5 МэВ можно будет измерить за 20-30 мин. Как следует из формулы /1.8/, такую же статистическую точность для случайной фазы при числе вспышек 300 в минуту и при $N=127$ можно получить не менее чем за 9 часов измерений. /Конечно, при снижении требований к точности время измерения квадратично сокращается, но потеря информации все же ощутима/.

Выход из положения можно найти, если создать устройство, следящее за выполнением условия взаимной неделимости числа оборотов прерывателя и реактора, а также контролирующее число появления разных фаз.

2. Разрешающая способность

Обычно в случае измерений по методу времени пролета под разрешающей способностью понимают отношение

$\frac{\Delta t}{t}$, где Δt - точность определения времени пролета t .

Величина Δt складывается из разных слагаемых, например, ширины вспышки реактора, ширины канала временного анализатора, времени открытого состояния вращающегося монохроматора и т.д.

Применять это же определение разрешающей способности для условий двумерного анализа не имеет смысла.

Поскольку в большинстве реальных ситуаций в каждом сегменте имеется упругий пик, то предлагается определять разрешающую способность, как отношение расстояния между упругим и неупругим пиками к ширине пика /скажем, неупругого Γ_1 /. Если неупругих пиков больше, чем один, то выбирается ближайший к упругому пику.

Ясно, что определенная таким способом разрешающая способность не будет постоянной во всей области двумерного спектра, но, по крайней мере, будет служить хорошим инструментом для сравнения КОРАНа с другими методами измерений по времени пролета.

Прежде всего попытаемся выяснить, как разрешающая способность установки зависит от ее параметров.

Пусть ϵ - величина передачи энергии в процессе рассеяния нейтронов. Если падающий нейтрон имеет энергию E_0 , а после рассеяния - энергию E_1 , то

$$E_0 - E_1 = \epsilon. \quad /2.1/$$

Кинетическую энергию можно выразить через время пролета:

$$E_i = C \cdot \frac{1}{r_i^2} = C \left(\frac{L_i}{t_i} \right)^2, \quad /2.2/$$

где L_i - длина i -й пролетной базы, t_i - время пролета этой базы, r_i - время пролета базы единичной длины.

Вместо уравнения /2.1/ с помощью /2.2/ можно получить

$$C \left(\frac{L_1^2}{t_1^2} - \frac{L_2^2}{t_2^2} \right) = \epsilon, \quad \text{или же} \quad /2.3/$$

$$\frac{L_1^2}{t_1^2} - \frac{L_2^2}{t_2^2} = \frac{\epsilon}{C}.$$

Учитывая, что $t = t_1 + t_2$, после несложных алгебраических преобразований получаем:

$$\Delta t = \sqrt{C} \frac{L_1 L_2}{L} \left(\frac{1}{\sqrt{E_1}} - \frac{1}{\sqrt{E_0}} \right), \quad /2.4/$$

где Δt является расстоянием между упругой линией и положением неупругого пика в данном сегменте /A'B на рис. 3/.

Из структуры формулы /2.4/ видно, что величину Δt , т.е. разрешающую способность, можно оптимизировать по пролетным базам. Результатом такой оптимизации являются следующие соотношения:

$$L_1 = L_2 \quad \text{при } L = \text{константе} \quad /2.5/$$

и

$$L_1 + L_2 = L \rightarrow \infty. \quad /2.6/$$

К сожалению, условие равенства баз на пучках реакторов ИБР-30 и ИБР-2 может быть удовлетворено только в довольно узком интервале углов рассеяния.

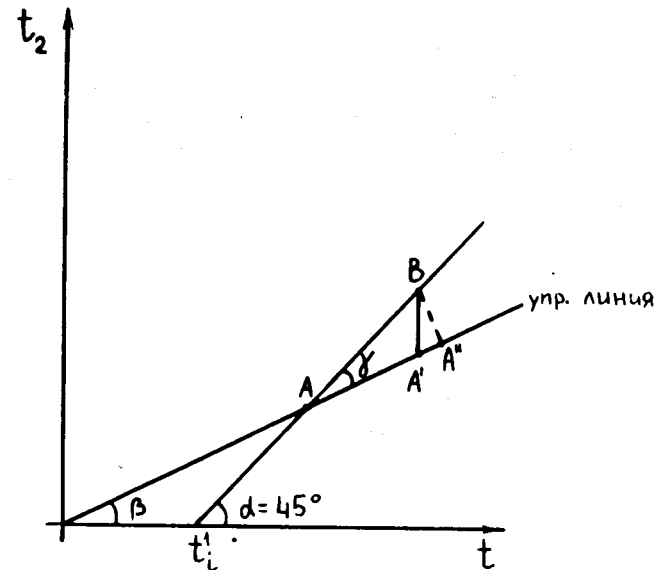


Рис. 3. Места упругих и неупругих пиков на плоскости (t, t_2) в случае конвенционального метода времени пролета /A - упругий пик, B - неупругий пик/ и в случае метода КОРАН /A' и A'' - упругие пики, B - неупругий пик/.

При помощи сформулированного нами определения разрешающей способности представляется возможным провести сравнение между методом измерений по времени пролета с монохроматизированным пучком и методом КОРАН.

Из временной диаграммы /рис. 1а/ ясно, что монохроматический сгусток нейтронов, имеющих длину волны λ_i , пролетает расстояние L_1 за время $t_i^1 = L_1 \cdot a \cdot \lambda_i$, где a - константа.

После рассеяния скорость нейтронов /и длина волны/ изменится и время пролета второй базы будет t_i^2 . Геометрическое место спектра рассеянных нейтронов на плоскости (t_2, t) изображается прямой линией с наклоном к оси t , равным 45° /рис. 3/.

Предположим, что образец рассеивает некогерентно, так что при всех падающих длинах волн имеется упругий пик. С помощью конвенционального метода времени пролета упругий пик появится в точке А, а неупругий пик при этом пусть будет в точке В. Очевидно, разрешение определяется расстоянием $\Delta t = AB$. Однако в случае КОРАНа упругие пики появляются во всех сегментах и $\Delta t_{\min} = A''B$, что всегда существенно меньше AB . AB и $A''B$ связаны между собой соотношением

$$A''B = \sin \gamma \cdot AB. \quad /2.7/$$

Поскольку $\gamma = \alpha - \beta = 45^\circ - \beta$, то

$$A''B = \sin(45^\circ - \beta) \cdot AB \leq 0,71 \cdot AB. \quad /2.8/$$

В связи с тем, что с неупругим пиком В скоррелирован упругий пик А', целесообразнее рассматривать величину $\Delta t' = A'B$ при сравнении разрешающей способности методов.

Из определения разрешающей способности получаем:

$$\delta_{\text{корр.}} = \frac{A'B}{\Gamma_{\text{корр.}}} \quad \text{и} \quad \delta_{\text{вр. пр.}} = \frac{AB}{\Gamma_{\text{вр. пр.}}}. \quad /2.9/$$

Если $\Gamma_{\text{корр.}} = \Gamma_{\text{вр. пр.}}$, то

$$\Delta = \frac{\delta_{\text{корр.}}}{\delta_{\text{вр. пр.}}} = \frac{\sin \alpha}{\sin(135^\circ - \gamma)} = \quad /2.10/$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}}(1 - \text{tg} \beta) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(1 - \frac{L_2}{L}\right) = \frac{1}{\sqrt{2}} \cdot \frac{L_1}{L}.$$

С увеличением L_1 при постоянной L_2 отношение /2.10/ стремится к пределу $\frac{1}{\sqrt{2}} \sim 0,7$.

На реакторе ИБР-2 ожидается $L_2 \sim 8$ м, $L \sim 32$ м, т.е. $\Delta \sim 0,5$, так что разрешающая способность примерно в два раза хуже, чем в случае традиционного метода времени пролета.

Отношение пролетных баз составляет только одну компоненту величины разрешения. Второй его компонентой является ширина линии Γ .

Γ определяется следующими величинами:

- шириной вспышки реактора,
- шириной щели прерывателя,
- шириной каналов анализатора,
- точностью коллимации.

Ширина вспышки реактора влияет на ширину пиков в "t"-проекции спектра. В t_2 -направлении на ширину пика доминирующим образом влияет ширина щели прерывателя τ , если $\sqrt{2}\tau < \tau_{\text{реактора}}$. τ определяется геометрической шириной щели и скоростью вращения прерывателя.

При увеличении последней разрешение линейно растет и в случае традиционного метода времени пролета, и в случае КОРАНа. В первом случае, однако, за улучшение разрешения платим ценой потери интенсивности, тогда как в методе КОРАН улучшение достигается при неизменном значении интенсивности. Увеличению числа оборотов может препятствовать прочность материала прерывателя и эффект рецикличности.

Под рецикличностью мы подразумеваем двух-, трех- или более кратные появления всего случайного ряда во время одной вспышки реактора /рис. 4а/. Следовательно, зарегистрированный нейтрон, имеющий индексы

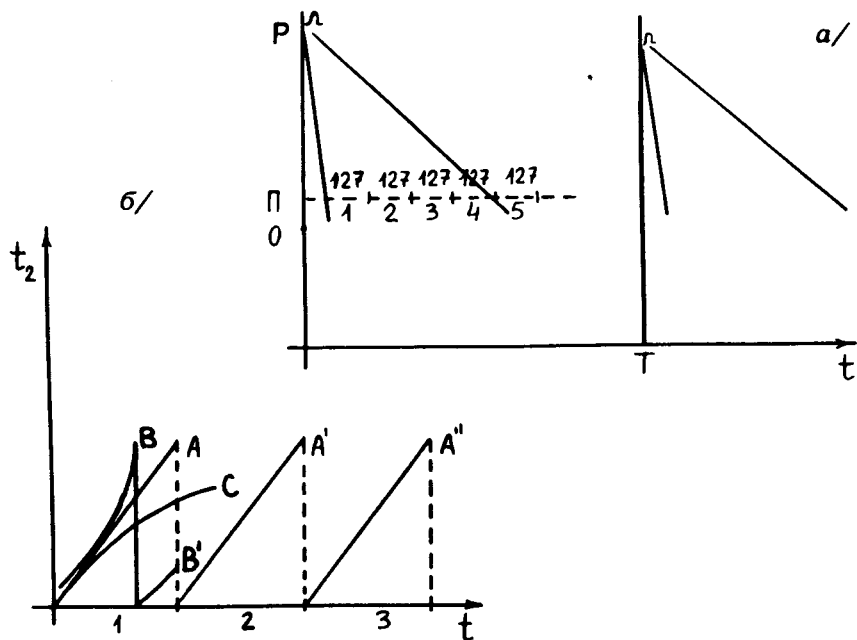


Рис. 4. Рецикличность вследствие слишком большой скорости вращения корреляционного прерывателя. б/ Возникновение разрывов в результате рецикличности на линиях местонахождения упругих и неупругих пиков. А, А', А'' - упругие линии, В, В' и С - линии неупругих пиков.

$/t$ и \bar{k} /, будет определен только с точностью $+n \cdot 127$ /где n - число рецикличностей/, т.е. его индекс будет $(t; k + n \cdot 127)$.

В реальных ситуациях число n не превосходит величину $3 \div 4$ и полученная картина рассеяния легко расшифровывается /рис. 4б/.

Ширина каналов известным образом ухудшает разрешение, поэтому каналы, соответствующие положению прерывателя, должны быть разделены на m одинаковых частей. Число m должно быть выбрано так, чтобы

$$\frac{\Delta t_2}{m} \ll \Gamma. \text{ Влияние коллимации на ширину пика одинаково}$$

и в случае КОРАНа, и в случае конвенционального метода времени пролета, поэтому здесь не рассматривается.

Необходимо, однако, обратить внимание на один опасный эффект, вытекающий из возможного изменения числа оборотов прерывателя. Если частота вращения прерывателя изменится от ω_0 до ω_1 , то ширина каналов Δt_2 изменится пропорционально отношению ω_0/ω_1 . При этом регистрируемое положение пиков на плоскости (t, t_2) тоже меняется - и тем сильнее, чем больше значение t_2 пика. Так, например, линия упругих пиков может сместиться поворотом вокруг точки $(0,0)$, а угол поворота α будет пропорционален отношению ω_0/ω_1 . Этот эффект особенно опасен при случайных изменениях фазы прерывателя, которые, как правило, осуществляются путем модуляции числа оборотов.

При слишком большой глубине модуляции длинноволновая часть спектра может полностью размываться.

Выводы

В настоящей работе нами был рассмотрен ряд специфических аспектов использования метода КОРАН на импульсном источнике нейтронов и проведено сравнение с некоторыми другими методами нейтронной спектроскопии.

В результате этого рассмотрения было выявлено следующее:

Невыгодно применять КОРАН, если образец существенно больше, чем размеры щели, и исследуются некогерентные неупругие процессы рассеяния. Присутствие упругих пиков /некогерентных/ ухудшает статистическую точность измерения неупругих пиков. От упругих пиков, однако, нетрудно избавиться с помощью фильтра. Требуется специально подобранный режим управления сдвигом фазы прерывателя по отношению к вспышке реактора. Подбором отношения пролетных баз достигаются оптимальные условия высокого разрешения.

Преимущества метода КОРАН:

1/ Большая светосила при исследовании дисперсионных соотношений в малых /~ размера щели/ образцах благодаря возможности проведения двумерного анализа.

2/ Возможность улучшения разрешающей способности без изменения рабочего цикла за счет увеличения числа оборотов прерывателя.

3/ Сравнительно легкое отделение неупругих пиков от упругих /если мы не интересуемся величиной и параметрами неупругих пиков, то КОРАН может быть использован для эффективной фильтрации рассеянного спектра/.

Круг компетентности метода КОРАН на сегодня можно свести к следующим задачам:

1. Измерение фононного и магнитного спектров кристаллов низкой симметрии.
2. Измерение фононного спектра для расчетов процесса замедления нейтронов в различных материалах, для расчета электрического сопротивления металлов без привлечения моделей фононного спектра и для расчета теплоемкости и теплопроводности.
3. Исследование некогерентных неупругих процессов /например, в жидкостях/.
4. Изучение некогерентных упругих процессов в случае, когда необходимо разделить упругие и неупругие компоненты спектров, а неупругая часть не представляет интереса /например, диффузное магнитное рассеяние в разбавленных сплавах/.
5. Проведение измерения на малых образцах /объемом в несколько кубических миллиметров/ или в условиях присутствия сильного некоррелированного фона.

Авторы благодарят Ю.М.Останевича за ценные обсуждения и И.М.Франка за стимулирующий интерес к работе.

Литература

1. N.Kroo, P.Pellionisz, I.Vizi, G.Zsigmond, G.Zhukov, G.Nagy. Proc. of Symp. on Neutron Inelastic Scattering. Grenoble, 1972. IAEA-SM-155/F-6.
2. R.Amadori and F.Hossfeld. Proc. of Symp. on Neutron Inelastic Scattering, Grenoble, 1972. IAEA-SM-155/F-5.
3. N.Kroo, P.Pellionisz and F.Mezei. Proc. of Symp. on Neutron Inelastic Scattering, Grenoble, 1972. IAEA-SM-155/F-8.

Рукопись поступила в издательский отдел
26 января 1976 года.