

4166/88

Грос Т. и др.
Б1-3-88-403

03486



+

✓

ОБЪЕДИНЕННЫЙ ИНСТИТУТ ЯДЕРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ

Б1-3-88-403

ДЕПОНИРОВАННАЯ ПУБЛИКАЦИЯ

Дубна 1988

61-3-88-403

ОБЪЕДИНЕННЫЙ ИНСТИТУТ ЯДЕРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ
Лаборатория нейтронной физики

Т. Грос, Н. Кроо, Д. Рубин, В. Г. Симкин, Л. Чер

СПЕКТРОМЕТР КОРА
ПРИМЕНЕНИЕ КОРРЕЛЯЦИОННОЙ МЕТОДИКИ НА РЕАКТОРЕ ИБР-2

Дубна, 1988.

РЕЦЕНЗИЯ
6 06 88.

Объединенный институт
ядерных исследований
Библиотека

Спектрометр КОРА. Применение корреляционной методики на реакторе ИБР-2.

Аннотация.

В работе рассмотрены общие принципы корреляционной методики и ее применение для исследования рассеяния нейтронов на импульсном реакторе методом времени пролета. Модуляция пучка нейтронов осуществляется с помощью дискового прерывателя, на котором расположена двойная псевдослучайная последовательность открытых и закрытых для нейтронов элементов. Рабочий цикл прерывателя $c=1/2$, и, таким образом, используется практически весь спектр падающих на образец нейтронов. В процессе измерения регистрируются полное время пролета нейтроном базы реактор-детектор и положение корреляционного прерывателя, расположенного перед образцом, в момент регистрации нейтрона. Эти два параметра совместно с углом рассеяния позволяют определить энергию и импульс нейтрона до и после рассеяния. Результатом измерения является функция рассеяния $S_{i,j}$, получаемая после кросс-корреляции накопленного спектра $Z_{i,j}$ и псевдослучайной последовательности. Основные параметры спектрометра КОРА и принцип его работы рассмотрены на соответствующих диаграммах и картах.

Рассмотрены абсолютные и относительные ошибки измеряемых спектров, и определен фактор локального выигрыша g , дающий возможность сравнивать в одинаковых условиях корреляционную и конвенциональную методики измерений.

Основные области применения спектрометра-неупругое и квазиупругое рассеяние нейтронов. Исследования процессов неупругого рассеяния занимает диапазон переданной энергии до нескольких десятков миллиэлектронвольт, а используемый диапазон длин волн $\lambda=1.5\div 3$ А. Разрешение спектрометра по энергии в этих экспериментах $\delta\varepsilon=0,85\div 6,5$ мэв. Для задач квазиупругого рассеяния необходим диапазон длин волн $\lambda=3\div 8$ А, и поэтому требуется применение зеркального нейтронновода. Разрешение по энергии для этого класса экспериментов равно $\delta\varepsilon=60\div 850$ мкэв. Спектр нейтронов на выходе зеркального нейтронновода и

результаты некоторых экспериментов на различных образцах приведены на соответствующих рисунках.

Определено разрешение спектрометра по переданному импульсу, и оно представлено в виде таблицы.

Для определения требований, предъявляемых к электронной системе накопления данных, получен средний и максимальный счет детекторов, а также дана оценка необходимого минимального счета при заданной максимально допустимой статистической ошибке.

На основании разрешения по энергии дана оценка необходимого числа и ширины каналов регистрации времени пролета, а на основании разрешения по переданному импульсу - числа и размера детекторных блоков. По этим оценкам определен необходимый объем памяти системы накопления данных.

Abstract

The principles of the correlation method and its application for time of flight (TOF) neutron scattering experiments at pulsed reactor are discussed. The primary neutron beam is modulated by means of a disk type chopper with neutron transmitting and absorbing areas around its perimeter according to a pseudorandom binary sequence. The duty cycle of the chopper is $c=1/2$ so practically the whole primary neutron beam, falling onto the sample can be used. In the time of the experiment the full time of flight by the reactor-detector flight path and the angle position of the chopper placed before the sample at the moment of detection of the neutron are registered simultaneously. These parameters and the scattering angle make possible to determine the energy and impulse of the neutron before and after the scattering process. The scattering function S_{ij} as the result of the measurement is obtained after cross-correlation procedure carried out between the raw spectrum z_{ij} and the pseudorandom sequence. The basic parameters of the spectrometer CORA and its working principle are presented on diagrams and maps.

The absolute and relative errors of the measured spectra are analysed and the local gain factor g is calculated making possible to compare the correlation and conventional method in the same condition.

The main fields of application of the spectrometer are the inelastic and quasielastic neutron scattering experiments, with energy transfer range up to approx 50meV, wave length range $\lambda=1.5-3\text{\AA}$ and energy resolution $\delta\varepsilon=0.85-6.5\text{meV}$ for inelastic case and wave length range $\lambda=3-8\text{\AA}$ and energy resolution $\delta\varepsilon=60-850\mu\text{eV}$ for quasielastic case. For the second case it is necessary the application of a mirror neutron guide tube. The wave length distribution of the primary neutron beam at the outlet of the guide tube and the results of some experiments with different samples are presented on figures.

The resolution of momentum transfer for the spectrometer is calculated and presented in tables.

The mean and maximal counting rates of the detector system are obtained in order to determine the requirements for the

data acquisition system and an estimation is made for the minimal amounts of counts at a given statistical error level.

The necessary number and width of TOF registration channels due to the energy resolution and the number and size of detector blocks due to the momentum transfer resolution are estimated. According to these estimations the necessary amount of memory for data acquisition system is given.

1. Принцип корреляционной методики

Метод времени пролета, широко используемый в нейтронной спектроскопии [1], может рассматриваться как часть более общей проблемы идентификации системы [2]. В данном случае системой является исследуемый образец, возбуждением падающие нейтроны а откликом - распределение скоростей рассеянных нейтронов. Анализ отклика дает информацию о свойствах образца. Практически можно считать, что образцы не изменяются со временем, а интенсивность нейтронного пучка достаточно мала, чтобы не появилось насыщение. Поэтому достаточно ограничиться рассмотрением стационарных и линейных систем. Для таких систем выходной сигнал $z(t)$ является сверткой входного сигнала $M(t)$ и весовой функции системы $S(t)$:

$$z(t) = \int_0^{T_s} S(\tau)M(t/\tau) d\tau + \beta \quad (1.1)$$

где T_s - характеристическое время весовой функции (время затухания отклика на импульсное возбуждение), β - независимый от системы и возбуждения фон, который считается постоянным.

В случае корреляционной методики [3] принимается, что входной сигнал $M(t)$ имеет вид белого шума, так что его автокорреляционная функция есть δ функция:

$$A^{MM}(\tau) = \frac{1}{T} \int_0^T M(t)M(t/\tau) dt = c_1 \delta(\tau) + c_2 \quad (1.2)$$

В этом случае кросс-корреляционная функция между откликом $z(t)$ и входным сигналом $M(t)$ линейно зависит от весовой функции $S(\tau)$:

$$K(\tau) = \frac{1}{T} \int_0^T z(t)M(t/\tau) dt \quad (1.3)$$

$$K(\tau) = c_1 S(\tau) + c_2 \int_0^T S(\tau) d\tau + c_3 \beta \quad (1.4)$$

где
$$c_3 = \frac{1}{T} \int_0^T M(t) dt \quad (1.5)$$

В приложениях в качестве входного сигнала используется функция типа квази-белого шума, которая отличается от настоящего белого шума в двух отношениях :

а. имеется периодический входной сигнал, который состоит из повторяющихся конечных интервалов,

б. входной сигнал представляет собой дискретную двоичную последовательность коротких импульсов:

$$M(t) = \sum_{i=1}^N a_i \varphi(t/t_i) \quad (1.6)$$

где N - число элементов двоичной последовательности $\{a_i\}$, $\varphi(t)$ - функция, описывающая форму импульса. Импульс является коротким в том смысле, что его характерная ширина Δ намного меньше, чем характерное время T_s весовой функции:

$$\Delta = \int_{-\infty}^{\infty} \varphi(t) dt \quad (1.7)$$

Для того, чтобы входной сигнал соответствовал корреляционной методике, автокорреляция последовательности $\{a_i\}$ должна иметь свойства белого шума:

$$A_k = \sum_{i=1}^N a_i a_{i+k} = \begin{cases} A_0 > k10 \\ A > k10 \end{cases} \quad (1.8)$$

а форма элементарного импульса удовлетворять условию симметрии:

$$\sum_{i=1}^N \varphi(t/t_i) = \text{const} \quad \text{для любого значения } t \quad (1.9)$$

Для псевдослучайной модуляции выходной сигнал по (1.1) запишется в виде:

$$z(t) = \sum_{i=1}^N a_i \int_0^{\tau} S(\tau) M(t/t_i/\tau) d\tau + \beta \quad (1.10)$$

Если выходной сигнал накапливается в каналах с шириной Δt , соответствующей ширине импульса входного сигнала, содержание k -ого канала

$$z_k = \int_t^{t_k + \Delta t} z(t) dt = \sum_{i=1}^N a_i s_{k-i} + b, \quad (1.11)$$

где

$$s_{k-i} = \int_{t_k}^{t_k + \Delta t} \int_0^{\tau_s} S(\tau) \varphi(t/t_i/\tau) d\tau dt; \quad b = \beta \Delta t \quad (1.12)$$

При этом кросс-корреляция по (1.3) имеет вид:

$$K_l = \sum_{k=1}^N a_{k-l} z_k = (A_0/A) S_l + A \sum_{i=1}^N S_i + b \sum_{i=1}^N a_i \quad (1.13)$$

Если элементы двоичной последовательности $\{a_i\}$ принимают значения 1 либо 0 (например представляют состояния 'открыто' и 'закрыто'), тогда по [3]

$$A_0 = m; \quad A = cm \quad (1.14)$$

где m - число элементов ряда со значением "1", $c = (m-1)/(N-1)$ рабочий цикл.

Легко реализуются и поэтому распространены последовательности типа двоичного сдвигового регистра (ПДСР) [4], где $N = 2^d - 1$, $m = 2^{d-1} = (N+1)/2$ и $c = 1/2$.

Подставляя (1.14) в (1.13) для выражения S_l получаем:

$$S_l = \frac{1}{(1-c)m} \sum_{k=1}^N (a_{k-l} - c) z_k - \frac{b}{m} \quad (1.15)$$

Здесь использованы следующие тождества:

$$\sum_{i=1}^N a_i = m \quad \text{и по (1.11)} \quad m \sum_{i=1}^N S_i = \sum_{i=1}^N z_i \quad (1.16)$$

Наконец, в случае ПДСР из выражения (1.15) получаем:

$$S_l = \frac{2}{N+1} \left[\sum_{k=1}^N (2a_{k-l} - 1) z_k - b \right] \quad (1.17)$$

2. Принцип действия спектрометра

Двойной времяпролетный спектрометр прямой геометрии КОРА расположен на 5-ом канале ИБР-2 и использует представленную выше корреляционную технику [5-7]. Спектрометр КОРА применяется для исследования рассеяния термических и холодных нейтронов в процессах с передачей энергии. Определение переданной энергии сводится к определению скоростей нейтрона до и после рассеяния, следовательно, при фиксированных пролетных базах - к измерению двух времен. Поскольку источником нейтронов является импульсный реактор, в качестве одного из времен можно использовать непосредственно полное время пролета (t) нейтроном базы источник-детектор (L). Поэтому достаточно применить один прерыватель для измерения еще одного времени пролета.

Спектрометр схематически представлен на рис. 1. Нейтроны, испущенные замедлителем импульсного реактора с шириной импульса $\Delta t = 320$ мсек [9], попадают на образец, находящийся на расстоянии $L_1 = 19$ м, и после рассеяния с измененной скоростью пролетают вторую базу $L_2 = 6.5$ м до детектора. Статистический прерыватель расположен перед образцом на расстоянии $\Delta L = 0.35$ м. Он вращается со скоростью 3000 об/мин. Для модуляции пучка имеется 3 сменных диска с одинаковым диаметром 0.7 м, по периметру которых размещены одна или несколько идентичных псевдослучайных последовательностей, то есть пропускающие и поглощающие нейтроны области меняются согласно ПДСР. Параметры 3-х дисков следующие: число рядов на диске 2, 4, 1; число элементов ряда $N = 127, 127, 255$; время периода $T_c \cong 10, 5, 20$ мсек; ширина элементарного временного окна прерывателя $\Delta t_c \cong 80, 40, 80$ мсек; ширина окна $W_w = 7, 3.5, 7$ мм; высота окна $W_1 = 55, 55, 55$ мм.

Принцип действия спектрометра объясняется на диаграмме расстояние-время на рис. 2. Формально можно рассматривать дважды модулированный функциями $M_1(t)$ и $M_2(t)$ пучок стационарного источника. Значения обеих функций меняются между 0 и 1. Через $i(v_1)dv_1 dt$ обозначим число нейтронов, испущенных стационарным источником за время dt со скоростью $v \in [v_1, v_1 + dv_1]$, которые без модуляции попали бы на образец, а после 100%-ого рассеяния регистрировались бы детектором.

Информацию о свойствах образца несет функция рассеяния $s(v_1, v_2)$. $s(v_1, v_2) dv_2$ означает вероятность того, что нейтрон, падающий со скоростью v_1 , рассеивается со скоростью $v_2 \in [v_2, v_2 + dv_2]$. По соотношениям $v_1 = L_1/\tau_1$ и $v_2 = L_2/\tau_2$ можно перейти к временам пролета τ_1 и τ_2 (величиной ΔL здесь для простоты можно пренебречь) и пользоваться функциями $i(\tau_1)$ и $s(\tau_1, \tau_2)$. Поскольку измеряется полное время пролета $\tau = \tau_1 + \tau_2$ и τ_2 - время пролета базы L_2 , целесообразно перейти к функциям $i(\tau, \tau_2)$ и $s(\tau, \tau_2)$. В этом случае число нейтронов, зарегистрированных в интервале времени $[t_1, t_1 + dt_1]$ и характеризующихся временами пролета $[\tau_1, \tau_1 + d\tau_1]$ и $[\tau_2, \tau_2 + d\tau_2]$:

$$dz = M_1(t - \tau) M_2(t - \tau_2) i(\tau, \tau_2) s(\tau, \tau_2) d\tau d\tau_2 dt \quad (2.1)$$

В случае импульсного источника и псевдослучайного прерывателя имеются следующие функции модуляции:

$$M_1(t) = \psi(t) \quad (2.2)$$

$$M_2(t) = \sum_{k=1}^N a_k \varphi(t - t_k), \quad (2.3)$$

где форма импульсов подчиняется следующим условиям:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi(t) dt = \Delta t \quad (2.4)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \varphi(t) dt = \Delta t_2 \quad (2.5)$$

Следовательно, если время затухания функции рассеяния намного меньше, чем период времени реактора и прерывателя: ($T_r \ll T_r > T_s \ll T_c$), тогда число нейтронов, накапливающихся за время одного импульса реактора в канале регистрации $[t_i, t_i + dt_i]$:

$$z_i^{(j)} = \int_{t_i}^{t_i + \Delta t_i} \int_0^{\tau_s} \int_0^{\tau_s} \psi(t - \tau) \sum_{k=1}^N a_k^{(j)} \varphi(t - \tau_2 - t_k) i(\tau, \tau_2) s(\tau, \tau_2) d\tau d\tau_2 dt + b_i \quad (2.6)$$

Здесь верхним индексом j обозначена фаза псевдослучайной последовательности прерывателя относительно импульса реактора.

Накопление данных осуществляется в двумерный спектр. За один импульс реактора все нейтроны с одинаковым временем пролета регистрируются в одном и том же канале. Из уравнения

(2. 6) получаем:

$$z_{i j} = \sum_{k=1}^N a_{k-j} S_{i k} + b_i \quad (2. 7)$$

где

$$S_{i k} = \int_{t_i}^{t_i + \Delta t_i} \int_0^{\tau_i} \int_0^{\tau_i} \psi(t-\tau) \varphi(t-\tau_2 - t_k) i(\tau, \tau_2) s(\tau, \tau_2) d\tau d\tau_2 dt \quad (2. 8)$$

является тем пропорциональным функции рассеяния откликом, который получался бы в случае прерывателя с одним пропускающим нейтроны окном.

Ясно, что необходимым условием правильной работы корреляционного спектрометра является несинхронное вращение прерывателя относительно импульса старта реактора, потому что лишь в этом случае обеспечено появление с одинаковой вероятностью всех фаз. Если это условие удовлетворено, тогда за достаточно длительное время измерения T_m каждая фаза появляется $T_m / (\nu NT_r)$ раз. Здесь ν - деление, которое означает, во сколько раз элементарный импульс прерывателя ($\Delta t_c = T_c / N$) шире канала регистрации фазы прерывателя: $\Delta t_2 = \Delta t_c / \nu$. Таким образом, за полное время измерения в канале (i, j) набирается счет

$$z_{i j} = \frac{T_m}{\nu NT_r} \left[\sum_{k=1}^N a_{k-j} S_{i k} + b_i \right] \quad (2. 9)$$

По уравнению (1. 13) кросс-корреляция имеет вид:

$$K_{i l} = \sum_{j=1}^N a_{j-l} z_{i j}, \quad (2. 10)$$

и для дискретной функции рассеяния (2. 8) получится

$$S_{i l} = \frac{2\nu NT_r}{(N+1)T_m} \left[\sum_{j=1}^N (2a_{j-l} - 1) z_{i j} - b \right] \quad (2. 11)$$

Результатом измерения, содержащим наглядную информацию о свойствах образца, является функция рассеяния $S_{i l}$, полученная после кросс-корреляции накопленного спектра $z_{i j}$ и псевдослучайной последовательности. Этот двухмерный спектр можно изобразить в форме гистограммы или карты в зависимости от времен пролета (τ, τ_2) или номеров канала (i, l) . Функция $S(Q, \omega)$, описывающая зависимость рассеяния от переданного

импульса и энергии, получается из функции $S(\tau, \tau_2)$ с помощью нелинейного преобразования. Однако с точки зрения определения требований, касающихся системы накопления данных, целесообразно анализировать изменение параметров спектрометра в зависимости от координат τ, τ_2 , то есть в плоскости $\tau-\tau_2$.

В каждой точке плоскости $\tau-\tau_2$ однозначно определены параметры нейтрона: энергия и импульс падающего нейтрона, переданные энергия и импульс, разброс параметров и локальная разрешающая способность спектрометра. На рис. 3 приведены примеры таких карт параметров. На рис. 3а изображена карта передачи энергии. По линии, характеризующей передачей энергии $\epsilon=0$, находятся события упругого рассеяния, выше этой линии события с потерей энергии, а ниже с приобретением энергии нейтроном. Наклон упругой линии определяется отношением длин пролетных баз L_2 расстояние прерыватель-детектор и L расстояние замедлитель-детектор. Нейтроны, падающие на образец с одинаковой энергией, расположены на линиях под углом 45° , несколько таких линии показано на рисунке пунктиром. Линия, обозначенная знаком ∞ , соответствует нейтронам с бесконечно большой энергией. Поэтому выше этой линии не могут быть физически реальные события. Выделены пунктиром области, которые по интенсивности и по разрешающей способности являются подходящими для исследования неупругих процессов с передачей энергии до нескольких десятков meV и для квази-упругого рассеяния с разрешением по энергии в интервале $60 - 850 \text{ } \mu\text{eV}$. Неупругая область обозначена буквой Н, квази-упругая буквой К.

На рис. 3б представлена карта разрешения по энергии (только главная тенденция, подробный анализ разрешающей способности ниже), а на рис. 3в - карта переданных импульсов для угла рассеяния $2\vartheta=60^\circ$.

3. Статистическая точность и области применения спектрометра

Для канала $S_{i,l}$, измеренного корреляционной техникой, статистический разброс $\Delta S_{i,l}$ равен:

$$(\Delta S_{i,l})^2 = \sum_{j=1}^N (\partial S_{i,l} / \partial z_{i,j}) \Delta z_{i,j} \quad (3.1)$$

Поскольку $(\Delta z_{i,j})^2 = z_{i,j}$, из (2.11) получаем:

$$\Delta S_{i,l} = \frac{2\nu NT_r}{(N+1)T_m} \left(\sum_{j=1}^N z_{i,j} \right)^{1/2} \quad (3.2)$$

Здесь использовано тождество $\sum_{j=1}^N (2a_{j-l} - 1)^2 z_{i,j} = \sum_{j=1}^N z_{i,j}$,

верное, так как $a_{j-l}^2 = a_{j-l}$, если элементы последовательности $\{a_i\}$ равны 0 или 1.

В выражении (3.2) предположено, что величина b некоррелированного фона точно известна из независимых измерений, и оно приводится к следующему упрощенному виду:

$$\Delta S_{i,l} = \frac{2\nu NT_r}{(N+1)T_m} \Delta Z_i, \quad (3.3)$$

где $(\Delta Z_i)^2 = Z_i$ и $Z_i = \sum_{j=1}^N z_{i,j}$ - сумма счетов во всех каналах j в сегменте i . Выражение (3.3) является известным результатом для корреляционной техники в случае псевдослучайной модуляции с рабочим циклом $c=1/2$. Оно означает, что абсолютная статистическая ошибка одинакова для каждой точки спектра (в случае двумерного спектра спектрометра КОРА для каждой точки одного сегмента). Следовательно, для измеренного спектра относительная ошибка точек этого спектра определяется после кросс-корреляции:

$$\Delta S_{i,l} / S_{i,l} = \Delta Z_i \left(\sum_{j=1}^N (2a_{j-l} - 1) z_{i,j} - b \right)^{-1} \quad (3.4)$$

Из выражения (3.4) ясно, что относительная ошибка каждой точки коррелированного спектра зависит от счета в данном канале, от счета во всем измеренном спектре (во всем сегменте), от формы спектра и от положения данной точки. В случае корреляционной техники относительные ошибки в разных точках спектра не являются независимыми друг от друга.

Статистическую ошибку в разных точках спектра можно также выразить с помощью фактора локального выигрыша g [3], который определяется отношением разбросов соответствующих точек конвенциональных и корреляционных спектров, снятых в одинаковых условиях. Для конвенциональной техники, то есть в случае использования прерывателя с одним окном, статистический разброс точек спектра S_{i1} :

$$\Delta S_{i1}^{conv} = \left[S_{i1}^{conv} \right]^{1/2} \quad (3.5)$$

Фактор выигрыша выражает, насколько дольше надо измерять конвенциональной техникой, чтобы для данной точки спектра достичь такой же статистической точности, как для соответствующей точки спектра, измеренного корреляционной техникой. По [3] квадрат фактора выигрыша:

$$g_{i1}^2 = \left[\Delta S_{i1}^{conv} \right]^2 / \left[\Delta S_{i1}^{corr} \right]^2 = \frac{m(1-c)(\sigma_{i1} + \beta_i)}{(1-2c)\sigma_{i1} + cN + (1-c/m)\beta_i} \quad (3.6)$$

где $\sigma_{i1} = S_{i1} / \bar{S}_i$ - относительный уровень спектра; $\beta_i = b_i / \bar{S}_i$ - относительный уровень фона; $\bar{S}_i = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N S_{ik}$ - средний уровень спектра в сегменте i .

В случае последовательности типа сдвигового регистра (3.6) упрощается, и с хорошим приближением можно записать:

$$g_{i1}^2 = \frac{\sigma_{i1} + \beta_i}{2 + 4\beta_i / N} \quad (3.7)$$

Если фон экстремально высокий, фактор выигрыша для всех точек спектра:

$$g_{i1}^2 = N/4 \quad (3.8)$$

Для относительно небольшого фона:

$$g_{i1}^2 = \sigma_{i1} / 2 \quad (\beta_i \ll N) \quad (3.9)$$

Из (3.8) и (3.9) ясно, что корреляционная техника имеет преимущество во всех точках спектра лишь в присутствии большого некоррелированного фона, который возникает в случаях либо низкой глубины модуляции, либо высокого немодулированного шума. Для спектрометра КОРА глубина модуляции механического прерывания близка к 100%, уровень неконтролируемого и поэтому

немодулированного шума также низкий, так как некоррелированный фон сравнительно небольшой (не превышает нескольких процентов). В результате имеется преимущество лишь в тех точках спектра, значение которых не менее чем в два раза превышает среднее значение спектра в данном сегменте.

С помощью фактора локального выигрыша и относительного уровня спектра относительная ошибка точек спектра выражается в следующем виде:

$$\left(\Delta S_{i1}/S_{i1}\right)_{\text{corr}}^2 = g_{i1}^{-2} \left(\Delta S_{i1}/S_{i1}\right)_{\text{conv}}^2 = g_{i1}^{-2} \left(-\frac{\sigma_{i1} \bar{z}_i}{N/2}\right)^{-1} \quad (3.10)$$

где $\bar{z}_i = z_i / N$ - средний счет в одном канале i -го сегмента. В случае небольшого фона, подставляя (3.9), получим:

$$\left(\Delta S_{i1}/S_{i1}\right)_{\text{corr}}^2 = \frac{N}{2\sigma_{i1}^2 \bar{z}_i} \quad (3.11)$$

Эта формула будет использована в дальнейшем для определения среднего счета в канале при заданной статистической точности.

Рассмотренные выше параметры определяют область применения спектрометра: неупругое и квази-упругое рассеяние. Исследование процессов неупругого рассеяния нейтронов (например, фононные спектры, дисперсионные соотношения) занимает диапазон переданной энергии в несколько десятков meV [5]. Задачей такого измерения является определение положения неупругих пиков, и этим задается необходимая разрешающая способность по энергии. Практически обычно достаточно разрешения порядка нескольких meV . В далеких от линии упругих событий областях двухмерного спектра в плоскости $\tau - \tau_2$ (в областях больших передач энергии) энергетическая шкала сильно нелинейная и разрешающая способность резко ухудшается. Поэтому внутри сечения двухмерного спектра, характеризуемого фиксированным полным временем пролета (внутри одного сегмента), максимальная передача энергии не может превышать больше чем в три раза энергию нейтрона, упруго рассеянного в данный сегмент. Энергия нейтрона E [meV] как функция длины волны λ [А]:

$$E = h^2 / 2m_n \lambda^2 = 81.83 / \lambda^2 \quad (3.12)$$

Из этого выражения ясно, что с ростом длины волны нейтронов, падающих на образец полезный диапазон передачи энергии резко сокращается. Для исследования процессов с передачей энергии порядка нескольких десятков meV используемый диапазон длин волн не может превышать $\lambda=3\text{A}$. В области до $\lambda=3\text{A}$ интенсивность источника нейтронов (реактор ИБР-2) также достаточная. Диапазон длин волн снизу ограничен (до $\lambda=1.5\text{A}$) ухудшением разрешающей способности по энергии.

В спектрах, накопленных спектрометром КОРА, практически всегда присутствует некогерентный упругий пик, интенсивность которого обычно на два порядка превышает интенсивность неупругих пиков. Поэтому среднее значение спектра, определенное доминирующим упругим пиком, превышает максимум неупругих пиков. Следовательно, имеется выигрыш только в том случае, если упругий пик отфильтрован из спектра.

Корреляционная техника вблизи упругого пика естественным образом, то есть без фильтрации, имеет преимущество, поскольку интенсивность в этих точках спектра значительно превышает среднее значение спектра и позволяет эффективно (с выигрышем) исследовать квази-упругое рассеяние, то-есть процессы, связанные с микродинамикой вещества и приводящие к уширению упругого пика [8].

В этом случае измеряется изменение (уширение) формы упругого пика, которое для широкого класса задач попадает в область от десятков μeV до meV . Ниже показано, что значительное улучшение разрешения по энергии требует перехода диапазона измерений в сторону нейтронов низких энергий, то-есть больших длин волн. Однако с ростом длины волны интенсивность источника нейтронов в значительной мере падает, а необходимое время измерения недопустимо возрастает. Сдвиг диапазона измерений возможен лишь в том случае, если относительное и абсолютное число нейтронов с большими длинами волн достаточно велико, т.е. для экспериментов по квази-упругому рассеянию необходимо использовать зеркальный нейтронпровод. На рис. 4 представлен спектр на выходе зеркального нейтронпровода.

В экспериментах всегда измеряется свертка формы исследуемого пика с функцией разрешения спектрометра. Для

правильной обработки данных необходимо учитывать форму линии функции разрешения, недостаточно, если известна только полуширина этой функции, то есть разрешающая способность. Поэтому ширина канала внутри сегмента должна быть меньше, чем необходимо было бы для простого определения разрешающей способности. В экспериментах по квази-упругому рассеянию необходимо использовать деление каналов Δt не меньше, чем на $\nu=2$ относительно ширины окна прерывателя.

На рис. 5 представлены, как пример, некоторые сегменты двумерных спектров, снятых на воде при комнатной температуре, толщина слоя образца $d=0.5$ мм, время измерения $T_m=150$ часов. На рисунках 5а, 5б, 5в и 5г - одномерные спектры после кросс-корреляции для углов рассеяния соответственно $2\vartheta = 90^\circ$, 70° , 50° и 30° и длины волны $\lambda=4\text{А}$. На них видно уширение квази-упругого пика, связанное с трансляционной самодиффузией воды. Наблюдается также сильная зависимость от угла рассеяния т.е. от переданного импульса. На рис. 5д представлен тот же самый сегмент первоначально измеренного спектра что и на рис. 5б, но без кросс-корреляции. На рис. 5е спектр полного времени пролета для детекторного блока, расположенного под углом $2\vartheta=70^\circ$ в диапазоне длин волн $\lambda=3-8\text{А}$.

На рис. 6 подобные спектры, сняты на жидкокристаллическом образце ЕВВА в нематическом (рис. 6а) и в твердом (рис. 6б) состоянии. Угол рассеяния $2\vartheta=70^\circ$, длина волны $\lambda=4\text{А}$, время измерения в обоих измерениях $T_m=120$ часов. Здесь также видно уширение квази-упругого пика, связанное с ротационным движением молекул жидкокристаллического вещества в нематическом состоянии. На твердом образце квази-упругое уширение пика практически не наблюдается, форма пика полностью определяется инструментальным уширением.

4. Разрешающая способность

Одномерные спектры, измеренные другими спектрометрами соответствуют сечениям двухмерного спектра, измеренного спектрометром КОРА. Следовательно, в случае спектрометра КОРА вместо таких обычных понятий, как положение, площадь, полуширина и форма упругого и неупругих пиков, надо использовать их двухмерные обобщения. Необходимо также обратить внимание на это обобщение при определении разрешающей способности спектрометра. Для выбора оптимальной области использования спектрометра особенно важно определение разрешающей способности по энергии и по импульсу.

В неупругих процессах неопределенность величины переданной энергии характеризуется полушириной функции распределения, полученного как отклик в случае переданной энергии четко определенного значения. Разрешающая способность меняется в плоскости $\tau-\tau_2$, но важнейшие ее характеристики хорошо отражаются в неопределенности относительно энергии падающих нейтронов при малых передачах энергии. В графическом представлении это означает, что достаточно обратить внимание на события в непосредственной близости от упругой линии на плоскости $\tau-\tau_2$. Физически это означает случай квази-упругого рассеяния, но полученные результаты могут быть использованы для оценки разрешения и в случае неупругого рассеяния.

Для спектрометра КОРА переданная энергия определяется через время пролета следующим образом:

$$\varepsilon = E_1 - E_2 = \frac{m}{2^n} \left[\left(\frac{L_2}{\tau_2} \right)^2 - \left(\frac{L_1}{\tau_1} \right)^2 \right] = \frac{m}{2^n} \left[\left(\frac{L_2}{\tau_2} \right)^2 - \left(\frac{L_1}{\tau - \tau_2} \right)^2 \right], \quad (4.1)$$

где m_n - масса нейтрона.

Соответственно двум временам пролета неопределенность переданной энергии состоит из двух слагаемых:

$$\delta \varepsilon_{\tau} = \frac{\partial \varepsilon}{\partial \tau} \delta \tau = m_n \frac{L_1^2}{(\tau - \tau_2)^3} \delta \tau \quad (4.2a)$$

$$\delta \varepsilon_{\tau_2} = \frac{\partial \varepsilon}{\partial \tau_2} \delta \tau_2 = m_n \left[\frac{L_2^2}{\tau_2^3} + \frac{L_1^2}{(\tau - \tau_2)^3} \right] \delta \tau_2 \quad (4.2b)$$

Для упругого рассеяния: $\tau_2 = 1$ и $\tau * L_2 / L$ и $(\tau / \tau_2) = \tau_1 = \tau * L_1 / L$,

$\tau_1 = L_1 \lambda m_n / h$; $\tau_2 = L_2 \lambda m_n / h$ и $\tau = L \lambda m_n / h$. Отсюда получим

$$\delta \varepsilon_{\tau} = \frac{h^3 \delta \tau}{m^2 L_1 \lambda^3} \approx \frac{647}{L_1 \lambda^3} \delta \tau \quad (4.3a)$$

$$\delta \varepsilon_{\tau_2} = \frac{h^3 \delta \tau_2}{m^2 \lambda^3} \left(\frac{1}{L_1} + \frac{1}{L_2} \right) \approx \frac{L}{L_2} \frac{647}{L_1 \lambda^3} \delta \tau_2, \quad (4.3b)$$

где $\delta \tau$ и $\delta \varepsilon_{\tau}$ - неопределенность по времени пролета [μ сек] и по энергии [μ eV] на базе замедлитель-детектор L [м], $\delta \tau_2$ и $\delta \varepsilon_{\tau_2}$ - на базе прерыватель-детектор L_2 [м], λ - длина волны нейтрона в [А]. Полное разрешение по энергии спектрометра:

$$\delta \varepsilon = \left(\delta \varepsilon_{\tau}^2 + \delta \varepsilon_{\tau_2}^2 \right)^{1/2} \quad (4.4)$$

Неопределенность времен пролета определяется параметрами экспериментальной установки и системы накопления данных:

$$\delta \tau = \left(\delta \tau_{\tau}^2 + \Delta t_i^{\circ 2} \right)^{1/2} \quad (4.5a)$$

$$\delta \tau_2 = \left(\delta \tau_{\tau_2}^2 + \Delta t_2^{\circ 2} \right)^{1/2}, \quad (4.5b)$$

где $\delta \tau_{\tau}$ и $\delta \tau_{\tau_2}$ - неопределенности измерения τ и τ_2 , связанные с параметрами установки, Δt_i° - эффективная ширина i -го канала регистрации полного времени пролета, Δt_2° - эффективная ширина канала регистрации времени пролета по второй базе.

Главными факторами неопределенности при измерении времени пролета являются эффективная ширина импульса источника нейтронов Δt_r° (рис. 7а), эффективная ширина элементарного окна прерывателя Δt_c° (рис. 7б), неопределенность длины пролетной базы δL (рис. 7в), относительное изменение скорости вращения прерывателя $\Delta n/n = \Delta T_c / T_c$ (рис. 7г):

$$\delta \tau_s = \left(\delta \tau_r^2 + \delta \tau_c^2 + \delta \tau_l^2 \right)^{1/2} \quad (4.6a)$$

$$\delta \tau_{s2} = \left(\delta \tau_r^2 + \delta \tau_c^2 + \delta \tau_l^2 + \delta \tau_n^2 \right)^{1/2} \quad (4.6b)$$

где $\delta\tau_r = (L_2/L_1) \Delta t_r^\circ$

$\delta\tau_c = (L/L_1) \Delta t_c^\circ$

$\delta\tau_l = 252.7 \delta L \lambda$

$\delta\tau_n = 252.7 (\Delta n/n) L_2 \lambda$

Если в выражениях (4.4)–(4.6) разные компоненты неопределенности времени пролета подчиняются нормальному распределению, то результирующее распределение тоже будет нормальным, квадрат полуширины которого получится суммированием квадратов полуширин компонент. Чтобы распространить гауссовое приближение и на другие распределения, введем понятие эффективной полуширины. В (4.5а) и (4.5б) $\Delta t_i^\circ = 0.75 \Delta t_i$ и $\Delta t_2^\circ = 0.75 \Delta t_2$, где Δt_i и Δt_2 ширины каналов накопления данных. Импульс реактора следует приблизительно нормальному распределению, т.е. $\Delta t_r^\circ = \Delta t_r$. Аналогично $\delta\tau_l$ и $\delta\tau_n$ можно непосредственно использовать в соотношении (4.6). Перед прерывателем ширина коллимированного пучка $W_c = 7\text{мм}$. Ширина окна на 1-ом и 3-ем диске также $W_{v1,3} = 7\text{мм}$, так как форма сигнала модулированного пучка треугольник, поэтому $\Delta t_{c1,3}^\circ = \Delta t_{c1,3} = 80\mu\text{сек}$. У 2-ого диска ширина окна $W_{v2} = 3.5\text{мм}$, форма сигнала трапециевидальная, так что $\Delta t_{c2}^\circ = 1.58 \Delta t_{c2} = 63\mu\text{сек}$.

В результате получаем:

$$\delta\tau_\sigma = (K\lambda^2 + K_0)^{1/2} \quad \delta\tau_{\lambda,2} = (K_2\lambda^2 + K_0)^{1/2}, \quad (4.7)$$

где $K = 252,7^2 \delta L^2$

$[\mu\text{сек}^2 \text{А}^{-2}]$;

$K_2 = 252,7^2 (\delta L^2 + L_2^2 (\Delta n/n)^2)$

$[\mu\text{сек}^2 \text{А}^{-2}]$;

$K_0 = ((L_2 \Delta t_r)^\circ)^2 + (L \Delta t_c^\circ)^2 / L_1^2$

$[\mu\text{сек}^2]$

На рис. 8 изображены значения компонент неопределенности времени пролета в диапазоне длин волн $\lambda = 1-10\text{А}$.

По (4.6) компонента неопределенности при измерении времени пролета, связанная с шириной импульса реактора $\Delta t_r = 320\mu\text{сек}$, будет равна $\delta\tau_r = 108\mu\text{сек}$, компонента, полученная из-за эффективной ширины окна 1-ого и 3-его прерывателя $\Delta t_{c1,3}^\circ = 80\mu\text{сек}$ - $\delta\tau_{c1,3} = 107\mu\text{сек}$, а в случае 2-ого прерывателя

$$\Delta t_{c_2}^{\circ} = 63 \mu\text{сек} - \delta \tau_{c_2} = 84 \mu\text{сек}.$$

Неопределенность пролетной базы в основном задается конечной толщиной δL счетчиков. Эффективная толщина использованных счетчиков типа СНО-5 $\delta L = 25 \text{мм}$, и ее влияние станет соизмеримым с предыдущими компонентами лишь около $\lambda = 13 \text{А}$. Для повышения эффективности детектирования используются два ряда счетчиков, т.е. $\delta L = 50 \text{мм}$ и существенное влияние этой толщины появится уж около $\lambda = 6.5 \text{А}$.

Скорость вращения прерывателя не стабилизирована и во время измерения может отклоняться от номинального значения. На рис. 7б видно, что допустимое отклонение зависит от диапазона длин волн использованных в измерении. Для экспериментов по неупругому рассеянию нейтронов в области до $\lambda = 3 \text{А}$ допустимый разброс не должен превышать $\Delta n/n = 1.5\%$. В дальнейшем будет показано, что в случае экспериментов по квази-упругому рассеянию верхний предел области длин волн полезных нейтронов $\lambda = 8 \text{А}$, а допустимый разброс скорости вращения $\Delta n/n = 0.6\%$.

Разрешение по энергии $\delta \varepsilon_{\mu}$, характерное для спектрометра, определяется по формулам (4.3) - (4.7), если подставить в них значения ширины каналов накопления данных $\Delta t_1 = 0$ и $\Delta t_2 = 0$:

$$\delta \varepsilon_{\mu} = (A\lambda^2 + B)^{1/2} \lambda^{-3} \quad (4.8)$$

$$\text{где } A = \left(\frac{647}{L_1}\right)^2 \left[K + \left(\frac{L}{L_2}\right)^2 K_2 \right]; \quad B = \left(\frac{647}{L_1}\right)^2 \left[1 + \left(\frac{L}{L_2}\right)^2 \right] K_0.$$

Из выражения (4.8) ясно, что разрешающая способность $\delta \varepsilon_{\mu}$ зависит от длины волны при малых значениях λ как λ^{-3} , при больших значениях - как λ^{-2} . При рассмотренных выше параметрах экспериментальной установки этот переход находится около $\lambda = 8 \text{А}$.

Так как эффективная ширина окна 2-ого прерывателя меньше, ($\Delta t_{c_2}^{\circ} < \Delta t_{c_{1,3}}^{\circ}$), с ним можно достичь лучшего разрешения, чем с 1-ым или 3-им прерывателем, но возможности его использования ограничены меньшим размером окна и значительным эффектом повторяемости в связи с более коротким периодом T_c . Это обстоятельство особенно мешает при экспериментах по квази-упругому рассеянию из-за большого времени пролета, поэтому в этих экспериментах 2-ой прерыватель не используется.

Разрешение по энергии $\delta \varepsilon_{\mu}$ спектрометра с 1-ым, 3-им и 2-ым прерывателем в зависимости от длины волны и от полного времени

пролета в диапазоне $\lambda=1-3\text{A}$ представлено на рис. 9. Видно, что с увеличением длины волны разрешающая способность резко улучшается, и выше $\lambda=1.5\text{A}$ соответствует требованиям экспериментов по неупругому рассеянию. Таким образом, полезный диапазон $\lambda=1.5-3\text{A}$, и разрешение для 1-ого и 3-ого прерывателя $\delta\varepsilon_{\bullet}=0.85-6.30\text{meV}$, для 2-ого прерывателя $\delta\varepsilon_{\bullet}=0.75-5.75\text{meV}$.

Разрешение по энергии $\delta\varepsilon_{\bullet}$ спектрометра с 1-ым и 3-им прерывателем в диапазоне $\lambda=1-10\text{A}$ представлено на рис. 10. Разрешающая способность спектрометра соответствует требованиям экспериментов по квази-упругому рассеянию лишь в области $\lambda>3\text{A}$, и ее значение меняется в пределах $\delta\varepsilon_{\bullet}=55-820\mu\text{eV}$ в интервале длин волн $\lambda=3-8\text{A}$.

Далее рассмотрим, как зависит разрешение по энергии спектрометра от ширины каналов накопления данных и как надо подобрать их значения в разных режимах измерения.

В экспериментах по квази-упругому рассеянию особенно важно улучшение разрешения по энергии, определяемое также выбором ширины каналов регистрации. С уменьшением ширины каналов не только улучшается разрешение, но увеличивается число каналов и соответственно необходимый объем памяти в системе накопления данных. Из уравнений (4.3а-б) видно, что член $\delta\tau_2$ отличается от $\delta\tau$ множителем $L/L_2 \gg 1$, поэтому желательно прежде всего уменьшение ширины канала регистрации времени пролета по второй базе. Надо учитывать кроме того, что ширина окна прерывателя Δt_c должна быть кратной ширине канала Δt_2 ($\Delta t_c = \nu \Delta t_2$).

ДЛИНА ВОЛНЫ [A]	ДЕЛЕНИЕ		
	1	2	4
3	6.3	1.6	0.4
4	5.9	1.5	0.3
5	5.4	1.4	0.3
6	5.0	1.2	0.3
7	4.5	1.1	0.2
8	4.1	1.0	0.2

Таблица 1

Ухудшение разрешения спектрометра по энергии в зависимости от длины волны λ при разных ширинах канала Δt_2 , то есть при разных числах $\nu \left(\frac{\delta \varepsilon - \delta \varepsilon}{\delta \varepsilon} [\%] \right)$, представлено в таблице 1. Из таблицы следует, что величину ν нет смысла выбирать больше 2-х (такое деление необходимо для определения формы функции разрешения), т.к. даже при $\nu=4$ разрешение улучшается лишь на 1.2% по сравнению с $\nu=2$. Однако удваивается число каналов регистрации времени пролета по второй базе и нужный объем памяти растет пропорционально величине деления: $CN2=\nu N$, где N - число элементов последовательности прерывателя. В дальнейшем все расчеты проведены с делением $\nu=2$.

Проанализируем также влияние ширины канала регистрации полного времени пролета базы замедлитель-детектор Δt_i в случае экспериментов по квази-упругому рассеянию. На рис. 11 представлено изменение разрешения по энергии $\delta \varepsilon_r(\Delta t_i)$ как функция ширины канала Δt_i при разных длинах волн. Видно, что при малых длинах волн с увеличением ширины канала Δt_i быстро ухудшается разрешение, однако с увеличением длины волны можно использовать все большую ширину канала без значительного ухудшения разрешающей способности. Свободный выбор значения Δt_i позволяет оптимизировать величины разрешения в диапазоне измеряемых длин волн. В диапазоне $\lambda=3-8\text{А}$ интервал времени пролета $T=\tau(8\text{А})-\tau(3\text{А})\approx 32000\mu\text{сек}$, этот интервал должен быть заполнен определенным числом каналов шириной Δt_i :

$$T = \sum_{i=1}^{CN} \Delta t_i \quad (4.9)$$

В следующей публикации будут рассмотрены разные возможности выбора ширины каналов Δt_i . В наших измерениях мы используем временные каналы с одинаковой шириной $\Delta t=256 \mu\text{сек}$, их число $CN=T/256=128$.

При указанных выше параметрах разрешение по энергии спектрометра КОРА меняется в пределах $\delta \varepsilon=60-850\mu\text{eV}$ в диапазоне длин волн $\lambda=3-8\text{А}$. Необходимый для накопления данных диапазон адресов памяти $\text{MEM}_A = CN2 * CN = \nu * N * CN = 32\text{К}$.

В случае эксперимента по неупругому рассеянию нет необходимости использования деления, поскольку измеряется

только положение пиков. Для регистрации полного времени пролета мы выбрали одинаковую ширину канала во всем диапазоне. Соответствующий интервалу длин волн $\lambda=1.5-3\text{А}$ диапазон полного времени пролета $T=\tau(3\text{А})-\tau(1.5\text{А})\approx 10000\mu\text{сек}$, и при числе каналов $CN=64$ получается ширина канала $\Delta t=T/CN=144\mu\text{сек}$. При указанных выше параметрах разрешающая способность меняется в диапазоне $\delta\varepsilon\approx 0.80-6.00\text{meV}$ (2-ой диск) или $\delta\varepsilon\approx 0.85-6.60\text{meV}$ (1-ый и 3-ий диск). Необходимый для накопления данных диапазон адресов памяти $MEM_A=CN^2*CN=8K$.

Кроме переданной энергии другой существенной физической величиной, которая также определяется в экспериментах на спектрометре, является переданный в процессе рассеяния нейтронов импульс, поэтому важно знать и разрешение по этой величине. Переданный импульс в процессе рассеяния характеризуется вектором рассеяния $Q=k_0-k$, где k_0 и k - волновой вектор нейтрона до и после рассеяния. При упругом рассеянии $k_0=|k_0|=|k|$, где $k_0=(2m_n E_0)^{1/2}/h$. В этом случае модуль вектора рассеяния равен $Q=|Q|=2k_0 \sin\vartheta$, если угол рассеяния равен 2ϑ . Из этого выражения относительный разброс переданного импульса

$$\Delta Q/Q = \Delta k_0/k_0 + ctg\vartheta \Delta\vartheta \quad (4.10)$$

В использованном диапазоне длин волн ($\lambda=3-8\text{А}$) $\Delta k_0/k_0 = \delta\tau/\tau < 1\%$, поэтому неопределенность переданного импульса в основном определяется неопределенностью угла рассеяния, которая связана со следующими факторами:

1. неопределенность угла $\Delta\vartheta_n$ из-за расходимости падающего пучка;
2. неопределенность угла $\Delta\vartheta_d$, связанная с конечной шириной детекторного блока.

Эти две неопределенности суммируются, потому что обе подчиняются равномерному распределению. В экспериментах по квази-упругому рассеянию вследствие использования зеркального нейтронотода расходимость падающего пучка растет с ростом длины волны, и соответствующая неопределенность угла рассеяния (в радианах):

$$\Delta\vartheta_n \approx 1.72 \cdot 10^{-3} \lambda \quad (4.11)$$

Диапазон углов рассеяния детекторной системы спектрометра

КОРА $2\vartheta=30^\circ-90^\circ$. Из-за расходимости падающего пучка при $\lambda=8\text{А}$ эта компонента относительного разброса по (4.10) и (4.11) меняется в пределах 1.4%-5.6%. Использование детекторных блоков разной ширины в зависимости от угла рассеяния частично можно выровнять относительный разброс. По выражениям (4.10) и (4.11) ширина детекторных блоков W_d при постоянной относительной неопределенности передачи импульса $\Delta Q/Q$ равна

$$W_d = L_2 ((\Delta Q/Q) \operatorname{tg} \vartheta - \Delta \vartheta_n) \quad (4.12)$$

Здесь использовано соотношение $\Delta \vartheta_d = W_d / L_2$.

По соотношению (4.12) в таблице 2. представлено какие допускаются ширины детекторных блоков при разных $\Delta Q/Q$ в зависимости от угла рассеяния.

2ϑ [град]	$\Delta Q/Q$ [%]		
	10	15	20
30	8	17	25
40	14	26	38
50	21	36	51
60	28	47	66
70	36	59	82
80	45	72	100
90	56	88	121
	W_d [см]		

Таблица 2

5. Средние и максимальные счета

Энергетический спектр нейтронов импульсного реактора ИБР-2 с замедлителем приблизительно соответствует распределению Максвелла при температуре $T=300\text{K}$. Усредненный по времени поток нейтронов $\bar{\varphi}(\lambda)$ [сек⁻¹см⁻²А⁻¹] в зависимости от длины волны λ [А] на образце (без прерывателя) дается следующим выражением:

$$\bar{\varphi}(\lambda) = \bar{\varphi}_T M(\lambda; \lambda_T) = \bar{\varphi}_T \frac{2}{\lambda_T} (\lambda_T/\lambda)^5 \exp(-(\lambda_T/\lambda)^2), \quad (5.1)$$

где $\lambda_T = h/(2m_n kT)^{1/2} \approx 1.78\text{А}$;

$\bar{\varphi}_T = 9 \times 10^7$ сек⁻¹см⁻² - усредненный по времени полный поток нейтронов на образце (без прерывателя).

Усредненная по времени скорость счета $\bar{R}(\lambda)$ [сек⁻¹А⁻¹]:

$$\bar{R}(\lambda) = c \eta_D(\lambda) \eta_s A_s \frac{\Omega_d}{4\pi} T_{sd} \bar{\varphi}(\lambda), \quad (5.2)$$

где $c=0.5$ - средняя трансмиссия (рабочий цикл) прерывателя;

$\eta_D(\lambda)$ - эффективность детекторов;

$\eta_s=0.1$ - эффективность рассеяния образцом;

$A_s=3$ см² - площадь образца;

$T_{sd} \approx 1$ - пропускание пролетной базы образец-детектор;

$\Omega_d = A_d/L_2^2$ - телесный угол детекторного блока на месте образца;

$A_d=0.1$ м² - площадь детекторного блока, 2 каналов;

$L_2=6.5$ м - расстояние образец-детектор.

Эффективность использованных обогащенных борных счетчиков типа СНО-5 "А" можно описать следующей эмпирической формулой:

$$\eta_d(\lambda) = 1 - \exp(-\lambda/\lambda_d), \quad (5.3)$$

где $\lambda_d \approx 5\text{А}$.

В детекторной системе сейчас используется двойной слой счетчиков, поэтому эффективность детектирования:

$$\eta_D(\lambda) = 1 - \exp(-2\lambda/\lambda_d) \quad (5.4)$$

Подставляя (5.4) в (5.2), получаем:

$$\bar{R}(\lambda) = A_\lambda (1 - \exp(-2\lambda/\lambda_d)) (\lambda_T/\lambda)^5 \exp(-(\lambda_T/\lambda)^2) \quad (5.5)$$

где $A_\lambda = c p / \lambda_T = 2.86 \times 10^3$ [сек⁻¹А⁻¹] и $p = 2\eta_{sd} \bar{\varphi}_T \approx 10^{-4}$ [сек⁻¹].

В экспериментах по квази-упругому рассеянию используется зеркальный нейтронотвод для транспортировки пучка к образцу. Фактор выигрыша нейтронотвода выражается следующим приближением:

$$G(\lambda) = (\lambda/\lambda_N)^2, \quad \text{где } \lambda_N \approx 4A \quad (5.6)$$

В этом случае средняя скорость счета $\bar{R}^N(\lambda)$:

$$\bar{R}^N(\lambda) = A_\lambda^N (1 - \exp(-2\lambda/\lambda_d)) (\lambda_T/\lambda)^5 \exp(-(\lambda_T/\lambda)^2) \quad (5.7)$$

где $A_\lambda^N = \text{ср} \lambda_T / \lambda_N^2 \approx 4.5 \times 10^2 \text{ [сек}^{-1} \text{A}^{-1} \text{]}$.

На рис. 12 представлены $\bar{R}(\lambda)$ и $\bar{R}^N(\lambda)$ в зависимости от длины волны.

В предыдущих обсуждениях показано, что с ростом длины волны быстро улучшается разрешение, но возможность использования лучшего разрешения ограничена тем, что число нейтронов при больших длинах волн слишком мало и требуется огромное время измерения. В случае зеркального нейтронотвода зависимость усредненной по времени скорости счета от длины волны меняется с λ^{-5} на λ^{-3} , т.е. накопленный спектр станет более равномерным. Как представлено на рис. 12, при длинах волн больше $\lambda = 4A$ $\bar{R}^N(\lambda) > \bar{R}(\lambda)$, т.е. используемый диапазон длин волн расширяется. Верхний предел длин волн определяется улучшением разрешающей способности и одновременным уменьшением скорости счета. В настоящих условиях для спектрометра КОРА выбор верхнего предела $\lambda_{\text{max}} = 8A$ является хорошим компромиссом, потому что скорость счета зависит от длины волны как λ^{-3} , а разрешающая способность около $\lambda_{\text{max}} = 8A$ меняется с λ^3 на λ^2 .

В экспериментах непосредственно определяются времена пролета, так что целесообразно перейти в формулах от длин волн к временным переменным [мсек]:

$$M(\tau; \tau_T) = \frac{2}{\tau_T} (\tau_T/\tau)^5 \exp(-(\tau_T/\tau)^2), \quad (5.8)$$

где $\tau_T = q\lambda_T \approx 1.15 \times 10^4 \text{ мсек}$; $q = h/Lm_n = 6.46 \times 10^3 \text{ мсекA}^{-1}$

$$\eta_D(\tau) = 1 - \exp(-2\tau/\tau_d), \quad \text{где } \tau_d = q\lambda_d \approx 3.2 \times 10^4 \text{ мсек} \quad (5.9)$$

$$G(\tau) = (\tau/\tau_N)^2, \quad \text{где } \tau_N = q\lambda_N \approx 2.9 \times 10^4 \text{ мсек} \quad (5.10)$$

Счет за одну секунду в интервале времени пролета $[\tau, \tau+d\tau]$ по

выражениям (7.8), (7.9) и (7.10) без нейтроновода $\bar{R}(\tau)$ и с нейтроноводом $\bar{R}^N(\tau)$:

$$\bar{R}(\tau) = A_{\tau} r(\tau), \quad (5.11)$$

где $A_{\tau} = qA_{\lambda} \approx 0.44 \text{ сек}^{-1} \mu\text{сек}^{-1}$ и

$$r(\tau) = (1 - \exp(-2\tau/\tau_d)) (\tau_T/\tau)^5 \exp(-(\tau_T/\tau)^2)$$

$$\bar{R}^N(\tau) = A_{\tau}^N r^N(\tau), \quad (5.12)$$

где $A_{\tau}^N = qA_{\lambda}^N \approx 0.07 \text{ сек}^{-1} \mu\text{сек}^{-1}$ и

$$r^N(\tau) = (1 - \exp(-2\tau/\tau_d)) (\tau_T/\tau)^3 \exp(-(\tau_T/\tau)^2)$$

Исходя из усредненной по времени скорости счета, можно определить среднее число событий \bar{n}_i , накапливающихся за одну секунду в i -ом канале полного времени пролета (сегмент i). Предполагая, что все нейтроны упруго рассеиваются, и пренебрегая конечной шириной импульса реактора Δt_{τ} , получим:

$$\bar{n}_i = \int_{\tau_i}^{\tau_i + \Delta t_{\tau}} \bar{R}(\tau) d\tau \approx \bar{R}(\tau_i + \Delta t_{\tau}/2) \Delta t_{\tau}, \quad (5.13)$$

где τ_i - время пролета начального момента i -го канала;

Δt_{τ} - ширина канала i .

Подставляя (5.12) в (5.13) получим:

$$\bar{n}_i = A_{\tau} r(\tau_{mi}) \Delta t_{\tau} \quad (5.14a)$$

$$\bar{n}_i^N = A_{\tau}^N r^N(\tau_{mi}) \Delta t_{\tau}, \quad (5.14b)$$

где $\tau_{mi} = \tau_i + \Delta t_{\tau}/2$ - время пролета середины канала i .

Число каналов в полезном диапазоне полного времени пролета NC , т.е. число всех событий, накапливающихся за одну секунду, равно

$$\bar{n}_{\tau} = \sum_{i=1}^{NC} \bar{n}_i \quad (5.15)$$

Из применения корреляционной техники следует, что непосредственно измеренный спектр есть спектр типа белого шума, так что в разных каналах времени пролета второй базы, принадлежащих к одному и тому же каналу полного времени пролета (к одному сегменту), счет примерно одинаков. Средний

счет по каналам

$$\bar{c}h_{ij} = \bar{n}_i / CN_2, \quad (5.16)$$

где CN_2 - число каналов регистрации времени пролета по второй базе, то есть число точек спектра в одном сегменте. Полный счет, накопленный за время измерения T_m в одном канале, равен

$$z_{ij} = T_m \bar{c}h_{ij} \quad (5.17)$$

В сегментах с большим полным временем пролета счет меньше. В экспериментах по неупругому рассеянию в интервале $\lambda = 1.5 - 3\text{А}$ по (5.14а) отношение счета в первом и последнем сегменте $\bar{n}_1 / \bar{n}_{CN} = 6.4$. В экспериментах по квази-упругому рассеянию, в интервале $\lambda = 3 - 8\text{А}$ по (5.14б) это отношение равно $\bar{n}_1^N / \bar{n}_{CN}^N = 10$.

Важным вопросом является оценка необходимого минимального счета при заданной максимальной допустимой статистической ошибке точек коррелированного спектра. Статистический разброс точек спектра 1 сегмента i по (3.3), (3.5) и (3.6) равен:

$$\Delta S_{i1} = (2\bar{S}_i)^{1/2} \quad (5.18)$$

Другим важным фактором является отношение интенсивности в тех точках спектра, где есть полезная информация к средней по спектру величине. Интенсивность точки спектра S_{i1} выражается с помощью средней по спектру \bar{S}_i и относительного уровня спектра σ_{i1} :

$$S_{i1} = \sigma_{i1} \bar{S}_i \quad (5.19)$$

В разных областях применения спектрометра требования по точности также разные. В экспериментах по неупругому рассеянию задачей измерения является определение положения неупругих пиков, т.е. пики должны с большой уверенностью отличаться от других точек спектра. Если интенсивность пика более, чем в 6 раз превышает статистический разброс, то с вероятностью 99% он отличается от фона:

$$\sigma_{i1} \bar{S}_i \geq 6(2\bar{S}_i)^{1/2} \quad (5.20)$$

По (5.20) необходимый средний счет в канале равен:

$$\bar{z}_i \geq \frac{N\bar{S}_i}{2} = N \left(\frac{6}{\sigma_{i1}} \right)^2 \quad (5.21)$$

В случае неупругого рассеяния важно исследовать также такие пики, которые измеряются с относительно малым выигрышем. Если

для нижнего предела относительного уровня спектра выбрано $\sigma_{i1} = 2$, то необходимый минимальный счет равен $\bar{z}_{cN} = 1200$. Очевидно, что самый маленький счет набирается в последнем сегменте, $i = cN$, и в более интенсивных сегментах возможно определить с такой же вероятностью положение и таких пиков, для которых $\sigma_{i1} < 2$. В первом сегменте за то же время средний счет $\bar{z}_1 = 8000$. При этих требованиях точности необходимая длина слова памяти накопления данных имеет 16 разрядов а минимальное время измерения $T_m = \bar{z}_{cN} / \bar{n}_{cN} = 20$ часов. Эти расчеты относятся к ширине детекторного блока $W_d = 0.4$ м. Для удовлетворения условия $\Delta Q/Q < 15\%$ в диапазоне углов рассеяния $2\vartheta = 30^\circ - 50^\circ$ использована ширина детектора $W_d = 0.2$ м и минимальное время измерения становится равным $T_m = 40$ часов.

В экспериментах по квази-упругому рассеянию задачей измерения является определение формы упругого пика. Удовлетворительная точность достигается, если в основании пика статистический разброс точек спектра не превышает 20%. Необходимый средний счет в канале пс (3.11):

$$\bar{z}_i = \frac{N}{2\sigma_{i1}^2 \cdot 0.2^2} = \frac{12.5N}{\sigma_{i1}^2} \quad (5.22)$$

Если форма пика анализируется в тех точках спектра, которые не меньше чем в два раза превышают среднее значение спектра, тогда необходимый счет в одном канале последнего сегмента $\bar{z}_{cN} = 800$, первого сегмента $\bar{z}_1 = 4000$, а время измерения $T_m = 330$ часов при ширине детекторного блока $W_d = 0.4$ м. В более интенсивных сегментах относительная ошибка измерения уменьшается и в первых сегментах равна около 10%. Учитывая, что при малых углах рассеяния ширина детекторного блока $W_d = 0.2$ м, необходимое минимальное время измерения становится равным $T_m = 660$ часов, то есть около 4-х недель. Такие длительные измерения имеют смысл только в случае одновременного использования полного диапазона углов рассеяния. Это означает, что в диапазоне углов $2\vartheta = 72^\circ - 90^\circ$, где применяются детекторы с шириной $W_d = 0.6$ м, счет в одном канале наиболее интенсивных сегментов достигает 6000, так что для длины слова памяти накопления данных недостаточно 12-и разрядов.

Мгновенная скорость счета описывает временное поведение

загрузки, появляющейся на входе электронной системы накопления данных. За время периода реактора $T_r = 1/fr$ ($fr = 5$ Герц - частота импульсов реактора) среднее число dn зарегистрированных нейтронов, характеризующихся временем пролета $[\tau, \tau + d\tau]$, равно:

$$dn = \bar{R}(\tau) d\tau T_r = \bar{R}(\tau) d\tau / fr \quad (5.23)$$

Это количество нейтронов регистрируется за время $d\tau$, так как мгновенная скорость счета $R(\tau)$:

$$R_{max}(\tau) = 2dn/d\tau = 2\bar{R}(\tau)/fr \quad (5.24)$$

Здесь появление коэффициента 2 следует из того, что при определении усредненной по времени скорости счета $\bar{R}(\tau)$ учитывается рабочий цикл прерывателя $c = 1/2$, а максимальный мгновенный счет регистрируется при полностью открытом окне прерывателя.

Если началом временной шкалы считать импульс реактора, а шириной импульса можно пренебречь, тогда, переходя от переменной τ к t и подставляя (5.11) в (5.24), получаем:

$$R_{max}(t) = 2A_r r(t) / fr = M_t r(t), \quad (5.25)$$

где $M_t = 1.76 \times 10^5 \text{ сек}^{-1}$.

В случае нейтронновода аналогично получим, подставляя (5.12) в (5.24), максимальный мгновенный счет:

$$R_{max}^N(t) = 2A_r^N r(t) / fr = M_t^N r(t), \quad (5.26)$$

где $M_t^N = 3.5 \times 10^4 \text{ сек}^{-1}$.

Мгновенный счет является произведением функции модуляции прерывателя и максимального мгновенного счета:

$$R(t) = R_{max}(t) M_2(t - t_{st}), \quad (5.28)$$

где t_{st} - время, прошедшее от сигнала старта прерывателя (начало функции модуляции) до появления импульса вспышки реактора, которое стохастически принимает значения от нуля до $T_c L/L_1$.

6. Заключение

В настоящей работе мы рассмотрели принцип действия, основные параметры и статистическую точность корреляционного спектрометра КОРА, определили оптимальную область его применения, диапазон используемых длин волн для экспериментов по неупругому рассеянию ($\lambda=1.5-3\text{Å}$) и по квази-упругому рассеянию ($\lambda=3-8\text{Å}$) и привели примеры результатов измерений. Мы подробно проанализировали влияние разных факторов на разрешающую способность по энергии и по переданному импульсу. Предельные значения разрешения по энергии для экспериментов по квази-упругому рассеянию равны 60-850 μeV , а по неупругому рассеянию 0.85-6.5 meV . Рассчетом определен поток нейтронов на образце и на детекторных блоках, усредненный по времени и мгновенный счет детектора.

Эти результаты позволяют нам точно определить, каким требованиям должна удовлетворять электронная система накопления данных. На основе разрешения по энергии дана оценка необходимого числа и ширины каналов регистрации времени пролета, а на основе разрешения по переданному импульсу числа и размера детекторных блоков. По этим оценкам определен необходимый объем памяти для накопления данных. Величиной мгновенного счета определяется допустимое мертвое время детекторной системы и необходимый размер буфера в системе накопления данных.

Для случаев неупругого и квази-упругого рассеяния, из-за существенной разницы в требованиях по разрешению, диапазону длин волн, счету и т. д., разработаны два независимых перечня минимальных требований для системы накопления данных.

В случае экспериментов по неупругому рассеянию

-число каналов регистрации полного времени пролета $CN=64$;

-ширина канала $t=144 \mu\text{сек}$;

-число элементов прерывателя $N=127$;

-величина деления $\nu=1$ (без деления);

-число каналов регистрации положения прерывателя

$$CN_2 = \nu N = 127;$$

-объем памяти для одного детекторного блока

$$\text{mem}_A = CN \times CN_2 = 8K;$$

-число одновременно действующих детекторных блоков $d=2$;

-полный объем памяти $MEM_A = d \times mem_A = 16K$;

-длина слова памяти $MEM_L = 12 \text{ bit}$;

-средний счет для одного детекторного блока $\bar{n}_T \approx 10^3 \text{ сек}^{-1}$;

-максимальный мгновенный счет $R_{max} \approx 6 \times 10^4 \text{ сек}^{-1}$;

В случае экспериментов по квази-упругому рассеянию

-число каналов регистрации полного времени пролета $CN=128$;

-ширина канала $t=256 \text{ мсек}$;

-число элементов прерывателя $N=127$;

-величина деления $\nu=2$;

-число каналов регистрации положения прерывателя

$$CN_2 = \nu N = 254;$$

-объем памяти для одного детекторного блока

$$mem_A = CN \times CN_2 = 32K;$$

-число одновременно действующих детекторных блоков $d=20$;

-полный объем памяти $MEM_A = d \times mem_A = 640K$;

-длина слова памяти $MEM_L = 16 \text{ bit}$;

-средний счет для одного детекторного блока $\bar{n}_T \approx 8 \times 10^2 \text{ сек}^{-1}$;

-максимальный мгновенный счет $R_{max} \approx 7 \times 10^4 \text{ сек}^{-1}$;

Авторы выражают благодарность Ю. М. Останевичу за полезные обсуждения.

Grigoriy V. V. V.

Кроо

Чер Висло

*Владимир
Кубин*

Литература

- [1] B.Buras, J.Leciejewicz, Nukleonika 8 (1963) 75.
- [2] A.P.Sage, J.L.Melsa, 'Estimation Theory with Applications to Communication and Control', McGraw-Hill, New York, 1971
- [3] R.von Jan, R.Scherm, Nucl.Instr.and Meth. 80 (1970) 69.
- [4] F.Hossfeld, R.Amadori, Report KFA, Jul-684-FF, 1970
- [5] N.Kroo, P.Pellionisz, I.Vizi, G.Zsigmond, G.P.Zhukov, G.Nagy Proc.Symp.Inel.Scatt., Grenoble (IAEA, Vienna, 1972) 763.
- [6] И. А. Гладких, Н. Кроо, Ш. Салаи, В. Г. Симкин, Л. Чер, ОИЯИ, 14-9485, Дубна, 1976
- [7] И. А. Гладких, Н. Кроо, Ш. Салаи, В. Г. Симкин, Ф. Ференци, Л. Чер, ОИЯИ, 14-9486, Дубна, 1976
- [8] T.Grosz, P.Pacher, V.G.Simkin, Gy.Torok, in 'Workshop on Neutron Physics', Budapest, 1986, p.31.
- [9] Э. Мюле, Н. Попа, М. Попеску ОИЯИ, P3-85-279, Дубна, 1985

ПОДПИСИ К РИСУНКАМ

Рис. 1 Принципиальная схема спектрометра КОРА.

Рис. 2 Принцип действия спектрометра.

Рис. 3 Карты основных параметров: а) переданной энергии, б) разрешения по энергии, в) переданного импульса.

Рис. 4 Спектр нейтронов на выходе зеркального нейтронотода.

Рис. 5 Двумерные спектры квази-упругого рассеяния на воде. Ширина канала на рис. 5а, 5б, 5в, 5г и 5д $N=40\text{мксек}$, а на рис. 5е $N=256\text{мксек}$.

Рис. 6 Двумерные спектры квази-упругого рассеяния на жидком кристалле ЕББА в нематическом (а) и твердом (б) состояниях. Ширина канала $N=40\text{мксек}$.

Рис. 7 Главные факторы неопределенности при измерениях времени пролета.

Рис. 8 Неопределенность в измерении времени пролета в зависимости от длины волны и нестабильности скорости вращения прерывателя.

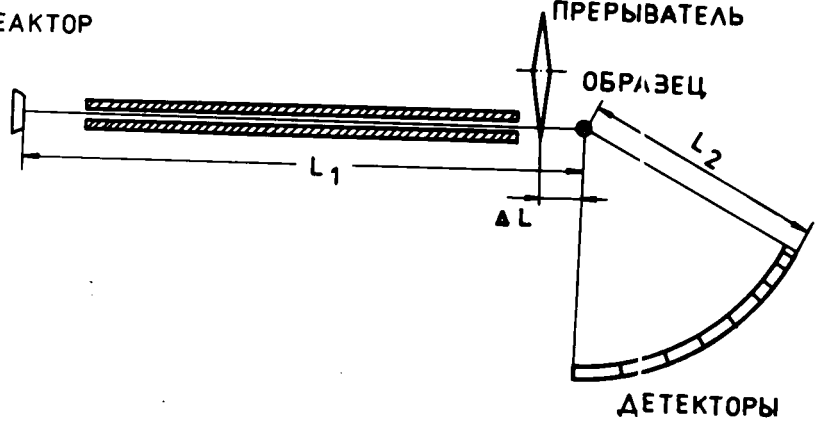
Рис. 9. Разрешение по энергии спектрометра для 3-х прерывателей как функция длины волны.

Рис. 10 Разрешение по энергии спектрометра для 1-го и 3-го прерывателей в диапазоне длин волн 1-10А.

Рис. 11 Изменение разрешения по энергии как функция ширины канала для длин волн 3, 5 и 8А.

Рис. 12 Усредненная по времени скорость счета $\bar{R}(\lambda)$ и $\bar{R}^N(\lambda)$ как функция длины волны.

РЕАКТОР



ПРЕРЫВАТЕЛЬ

ОБРАЗЕЦ

L_2

ΔL

ДЕТЕКТОРЫ

