

**сообщения
объединенного
института
ядерных
исследований
дубна**

P10-86-313

А.М.Балагуров, А.И.Островной, **В.Д.Шibaев**

**РЕГИСТРАЦИЯ НЕЙТРОНОГРАММ
В КООРДИНАТАХ ПРОСТРАНСТВА
ВОЛНОВЫХ ВЕКТОРОВ
(ОДНОМЕРНЫЙ СЛУЧАЙ)**

1986

ВВЕДЕНИЕ

В Лаборатории нейтронной физики ОИЯИ на установке ДН-2^{/1/} ведутся дифракционные эксперименты по изучению структуры кристаллов. Регистрация дифракционных спектров на ДН-2 производится по методу времени пролета с использованием позиционно-чувствительной детекторной системы. Одной из методических проблем, возникающих в такого рода экспериментах, является накопление и хранение больших массивов исходной информации и, соответственно, реализация способов ее сжатия. Возможным решением является применение временных кодировщиков, ширина канала которых может быть представлена в виде растущей функции времени. Ранее в ЛНФ был создан и испытан кодировщик с линейной зависимостью ширины канала от времени^{/2/}, что позволило в 2÷3 раза уменьшить объем запоминающего устройства. Существенно большего сжатия массива исходных данных можно достичь, если ширина канала кодировщика растет пропорционально квадрату времени. Как показано ниже, в этом случае номер временного канала линейно связан с модулем волнового вектора нейтрона k , который и становится независимой координатой дифракционного спектра. Для краткости такое представление спектра ниже называется представлением в k -шкале.

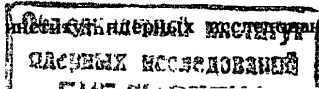
В настоящем сообщении обсуждаются некоторые вопросы, связанные с переходом в k -шкалу, и описано программное обеспечение, реализующее такой способ накопления информации в экспериментах на дифрактометре ДН-2.

1. ПЕРЕХОД В k -ШКАЛУ

Известно, что при измерении по методу времени пролета порядков отражения нейтронов от кристаллографической плоскости они располагаются на временной оси следующим образом /см., например,^{/3/} /:

$$t_n = t_1/n, \quad /1/$$

где $n = 1, 2, 3, \dots$ - номер порядка отражения, $t = 252,778 \cdot L \cdot 2d \cdot \sin \theta$ /мкс/ - время, при котором наблюдается первый порядок, L /м/ - полное пролетное расстояние, d (Å) - межплоскостное расстояние в кристалле, 2θ - угол рассеяния. Если ширина канала временного кодировщика постоянна, то есть



$r(t) = \text{const} = \tau$, то и для временных каналов справедливо соотношение /1/.

Из /1/ следует, что временной интервал между соседними порядками отражения изменяется как t_n^2 и при большом числе порядков заполнение памяти анализатора полезной информацией /дифракционными пиками/ оказывается существенно неравномерным.

Известно также, что в пространстве обратной решетки вдоль любого кристаллографического направления \vec{H} узлы обратной решетки располагаются эквидистантно с периодом \vec{H} , то есть положение n -го от начала координат узла, а следовательно, и дифракционного пика в шкале H определяется соотношением

$$\vec{H}_n = n \cdot \vec{H}_1 \quad /2/$$

Таким образом, если непосредственно в ходе набора дифракционных данных от монокристалла производить их перекодирование из t - в H -шкалу, то появляется возможность сократить объем запоминающего устройства и оптимизировать его заполнение полезной информацией.

Нетрудно показать, что указанное перекодирование произойдет автоматически, если ширина канала временного анализатора будет изменяться как $\sim t^2$. Действительно, связь времени пролета t и модуля волнового вектора нейтрона k /который при дифракции согласно закону Брэгга - Вульфа пропорционален H , а именно $\pi H = k \sin \theta$ / выражается формулой

$$t = \frac{m}{h} \cdot L \cdot \frac{2\pi}{k}, \quad /3/$$

где m - масса нейтрона, h - постоянная Планка. Из /3/ следует, что

$$\Delta k \sim \Delta t / t^2, \quad /4/$$

то есть приращение Δk модуля волнового вектора будет постоянно, если приращение времени $\Delta t \sim t^2$.

Получим связь между номером временного канала N и временем, если ширина канала $r(t)$ изменяется по закону

$$r(t) = t^2 / \beta, \quad /5/$$

где β - константа. Из соотношения между дифференциалами

$$dN(t) = dt / r(t) \quad /6/$$

следует, что

$$N(t) = \int_{t_0}^t dt / r(t) = \beta \left(\frac{1}{t_0} - \frac{1}{t} \right) = N_{\max} (1 - t_0 / t), \quad /7/$$

где t_0 - время задержки относительно стартового сигнала, $N_{\max} = \beta / t_0$ - максимальный номер канала. Подставляя в /7/ $t = t_n = t_1 / n$, получаем $N_n - N_{n+1} = N_{\max} t_0 / t_n^2 = \text{const}$, то есть действительно квадратичный рост ширины канала обеспечивает эквидистантность в расположении дифракционных пиков. Именно по этому признаку шкалу, реализуемую по формуле /7/, мы будем называть k -шкалой, хотя от истинной k -шкалы она отличается направлением, так как дифракционные пики, соответствующие малым значениям k , регистрируются в каналах с большими номерами. Форма дифракционного пика в k -шкале, очевидно, будет представлена функцией

$$F(k) = f(t) \cdot \left| \frac{dt}{dk} \right|, \quad /8/$$

где $f(t)$ - функция формы пика в t -шкале, dt/dk находится из /3/. Если $f(t)$ симметрична относительно некоторого t_n , то $F(k)$ не симметрична относительно k_n и ее максимум сдвинут в сторону малых k . Например, для гауссовой функции $f(t)$ максимум $F(k)$ находится при

$$k = k_n (1 - 2\sigma_t^2 / t_n^2), \quad /9/$$

где σ_t^2 - дисперсия $f(t)$. Из /7/ можно приближенно найти ширину дифракционного пика в k -шкале, если в t -шкале его ширина на половине высоты есть W_t :

$$W_k \approx N(t_n + W_t / 2) - N(t_n - W_t / 2) = N_{\max} \cdot t_0 \cdot \frac{W_t}{t_n^2 - W_t^2 / 4} \quad /10/$$

Обычно $t_n \gg W_t / 2$, а W_t никогда не растет быстрее, чем $\sim t$, следовательно, W_k быстро уменьшается с ростом t_n , то есть с уменьшением номера порядка отражения. Если выразить ширину временного канала в виде функции от номера канала:

$$r(N) = \frac{t_0}{(1 - N / N_{\max})^2}, \quad /11/$$

где $t_0 = t_0^2 / \beta$ - начальная ширина канала, то видно, что $r(N)$ быстро растет при приближении N к N_{\max} и, следовательно, квазипостоянные во времени функции, например постоянная составляющая фона детектора, превращаются в k -шкале в функции, растущие с номером канала в соответствии с /11/. Оценим коэффициент сжатия информации при переходе в k -шкалу. Если $r(t) = \text{const} = \tau$, то число каналов, необходимое для регистрации спектра в интервале времен (t_0, t) , есть

$$M = (t - t_0) / \tau = (1 - t_0 / t) \cdot t / \tau. \quad /12/$$

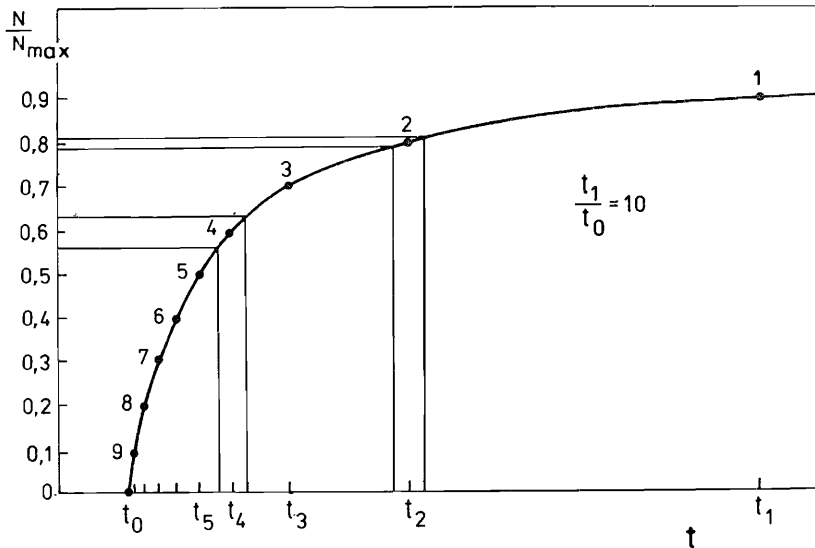


Рис.1. График зависимости $N(t) = N_{\max} (1 - t_0/t)$ /формула /7// для $t_1/t_0 = 10$. При этом регистрируются все порядки отражения с $1 \leq n < 10$. По оси абсцисс отмечены положения порядков отражения в t -шкале, по оси ординат - в k -шкале. Для $n = 2$ и 4 показано изменение ширины пиков при переходе в k -шкалу.

Вводя начальную ширину канала $\tau_0 = t_0^2/\beta = t_0/N_{\max}$, запишем /7/ в виде

$$N = (t_0/\tau_0)/(1 - t_0/t). \quad /13/$$

Обычно $t \gg t_0$ и, пренебрегая в /12/ и /13/ t_0/t , получаем

$$M/N \approx (t/t_0) \cdot (\tau_0/\tau). \quad /14/$$

Если регистрация в k -шкале начинается при $\tau_0 \approx \tau$, то коэффициент сжатия, то есть уменьшения числа каналов в k -шкале по сравнению с t -шкалой, есть (t/t_0) и в практически важных случаях может достигать нескольких десятков. Для иллюстрации приведенных соотношений на рис.1 показана зависимость $N(t)$ и положения дифракционных пиков в t - и k -шкалах для $t_1/t_0 = 10$, где t_1 - положение 1-го порядка отражения.

2. РЕАЛИЗАЦИЯ k -ШКАЛЫ В КОДИРОВЩИКЕ. ПВК-1

Для реализации изложенного способа сжатия исходной информации в измерительную систему дифрактометра ДН-2 был включен

программируемый временной кодировщик ПВК-1 /4/ и создано соответствующее программное обеспечение. ПВК-1 позволяет использовать любой закон изменения ширины канала во времени. Для этого он имеет внутреннюю память емкостью 1024 шестнадцатиразрядных слова. Каждое слово может содержать код временной задержки /для ее значения отведено 15 разрядов/ либо код временного канала. Для значения ширины канала используется 12 разрядов. В одном слове памяти можно закодировать до 8 каналов одинаковой ширины.

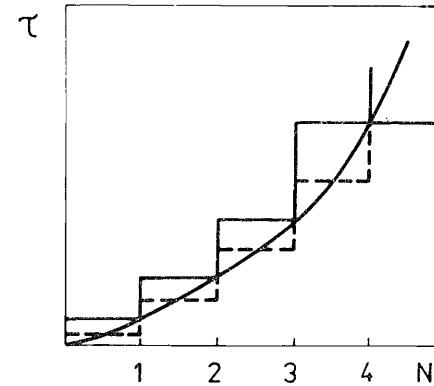


Рис.2. Аппроксимация квадратичной зависимости $\tau(t) = t^2/\beta$ дискретной функцией.

Подставляя в /17/ $\lambda = \lambda_2$ получаем, что вычисления по /11/ необходимо выполнять в интервале $1 \leq N \leq N_2$, где $N_2 = N_{\max} \cdot (1 - \lambda_1/\lambda_2)$. Наилучшая аппроксимация плавной зависимости $\tau(t)$ дискретной функцией $\tau(N)$ получается, если вычисления ведутся для середины канала /рис.2/. Действительно, разность времен $t(N+1) - t(N)$ должна равняться ширине канала $\tau(N + \delta)$, где δ надо определить. Вычисляя $t(N)$ с помощью /7/ и сравнивая разность времен с $\tau(N)$, вычисленной по /11/, можно получить, что $\delta = 1/2$ с точностью до члена $-(N_{\max} - N)^{-1}$, то есть

$$\tau(N) = \tau_0 \cdot N_{\max} / (N_{\max} - N - 0,5)^2. \quad /18/$$

Программа SCL, созданная для подготовки кодировщика ПВК-1 к работе, обеспечивает вычисление ширин временных каналов по формуле /18/ в диапазоне $1 \leq N \leq N_2$. Предварительно она определяет величины N_{\max} и t_0 . Исходные параметры $\lambda_1, \lambda_2, \tau_0, L$ вводятся в интерактивном режиме и вместе с вычисленными N_2 и N_{\max} записываются в файл на магнитном диске. В дальнейшем эти параметры могут быть распечатаны на терминале для справки о текущем состоянии кодировщика.

Временная шкала, состоящая из начальной задержки и ширины временных каналов, записывается программой SCL в память кодировщика. При этом производится проверка правильности выполнения этой операции. В процессе вычисления временной шкалы SCL контролирует величину ширины канала, чтобы она не превышала максимально допустимого значения, общее количество каналов, чтобы в упакованном виде временная шкала поместилась в память кодировщика. Сообщения об ошибках, временная шкала и содержимое памяти кодировщика по желанию пользователя могут быть выведены на печатающее устройство и терминал. Помимо квадратичной шкалы SCL позволяет записывать в память ПВК-1 равномерную шкалу с постоянной шириной канала.

3. ОРГАНИЗАЦИЯ ИЗМЕРЕНИЯ СПЕКТРОВ

Для проведения измерений создана программа MSP. Следует отметить, что накопление экспериментальной информации осуществляется по каналу прямого доступа из кодировщика в буферное запоминающее устройство /ЗУ/ емкостью 16К слов ^{5/}. Программа обеспечивает все операции, связанные с работой аппаратуры во время эксперимента: инициализацию блоков КАМАК, очистку буферного ЗУ и используемых счетчиков, начало и прекращение измерения, запись накопленных данных в файлы на диске, визуализацию спектров на экране точечного дисплея. Помимо этого MSP обеспечивает ряд тестовых и сервисных операций. Например, операции проверки работоспособности буферного ЗУ, вывод на терминал информации о текущем состоянии измерительной системы, параметров временной шкалы, занесенной в память кодировщика, списка допустимых приказов (HELP). Операции начала и прекращения измерений могут выполняться непосредственно после приема приказа либо в указанное время. Время начала и окончания измерений, показания счетчиков в этот момент запоминаются в специальном файле на диске, который содержит информацию о состоянии системы в целом, и выводятся на терминал пользователя.

При выполнении операции записи данных из буферного ЗУ в файл на диске программа MSP обеспечивает автоматическое наращивание номера версии файла в его спецификации. Отдельным приказом данные можно записать в файл, имя которого вводится в интерактивном режиме.

Процесс визуализации экспериментальной информации организован в виде бесконечного цикла, во время которого на экран точечного дисплея кадрами по 1024 канала выводятся спектрометрические данные, хранящиеся в буферном ЗУ или в файле на диске. Каждый кадр задерживается на экране около 1/2 с, затем появляется следующий. После вывода на экран дисплея последнего кадра вновь появляется первый. В режиме просмотра спектрометрических данных на экране точечного дисплея пользователю предо-

ставляются односимвольные команды, срабатывающие от однократного нажатия клавиши на клавиатуре терминала. Они позволяют остановить, продолжить и прекратить цикл автоматического вывода последовательных кадров на экран дисплея, после останова цикла вывести следующий или предыдущий кадры, распечатать на терминале или печатающем устройстве содержимое текущего кадра в виде массива целых чисел. Имеются также команды увеличения и уменьшения масштаба изображения, сервисные команды, обеспечивающие вывод на терминал номера текущего кадра, масштаба изображения и списка односимвольных приказов, допустимых в режиме визуализации спектров.

Программы SCL и MSP написаны на языке Паскаль и работают под управлением операционной системы РАФОС на микро-ЭВМ МЕРА-60, оснащенной накопителями на гибких магнитных дисках и установленной в экспериментальном зале реактора ИБР-2. Разработка выполнена на основе методики программирования систем автоматизации экспериментов, описанной в работе ^{6/}. Несмотря на различия в используемой аппаратуре, в программе MSP реализован диалог "человек-ЭВМ", единый по стилю с соответствующими средствами в программе VIS ^{7/}, которая также используется для проведения экспериментов на дифрактометре ДН-2, но на другой ЭВМ - СМ-4, находящейся в измерительном центре ЛНФ ОИЯИ.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Основными достоинствами регистрации дифракционных спектров в k -шкале являются большой коэффициент сжатия исходных данных и эквидистантность в распределении пиков. Первый фактор особенно сильно сказывается при исследовании кристаллов с большими периодами повторяемости. На рис. 3 и 4 показан участок дифракционного спектра, представляющего собой набор порядков отражения от плоскости /001/ монокристалла слюды с $d \approx 10 \text{ \AA}$. При регистрации обычным способом с $\tau(t) = \tau = 32 \text{ мкс}$ потребовалось около 3000 каналов памяти для записи спектра с $n \geq 3$. Переход в k -шкалу позволил сократить число необходимых для записи этого участка спектра каналов до 500, то есть коэффициент сжатия составил 6. Если регистрируются и первые два порядка отражения, то коэффициент сжатия достигает 20. Очевидно, что при прочих равных условиях увеличение периодов повторяемости кристалла приведет к пропорциональному увеличению коэффициента сжатия регистрируемого спектра. К отрицательным моментам перехода в k -шкалу следует отнести быстрое уменьшение ширины дифракционного пика с ростом номера канала, что, если ширина становится меньше одного канала, приводит к ухудшению отношения эффекта к фону.

Изложенный метод перекодирования экспериментальной дифракционной информации непосредственно в процессе ее накопления

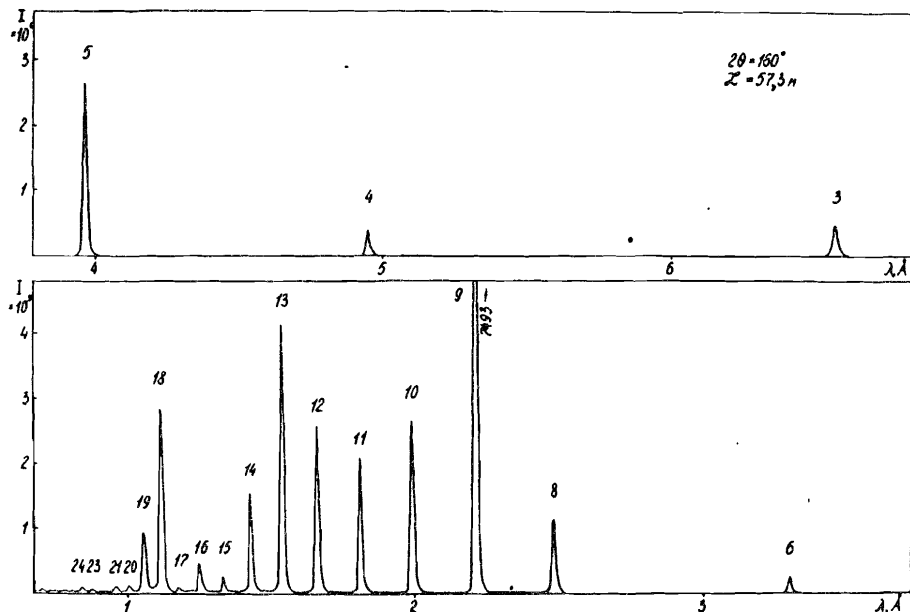


Рис.3. Участок спектра, содержащий порядки отражения с $n \geq 3$ от плоскости /001/ кристалла слюды. Ширина временного канала постоянна.

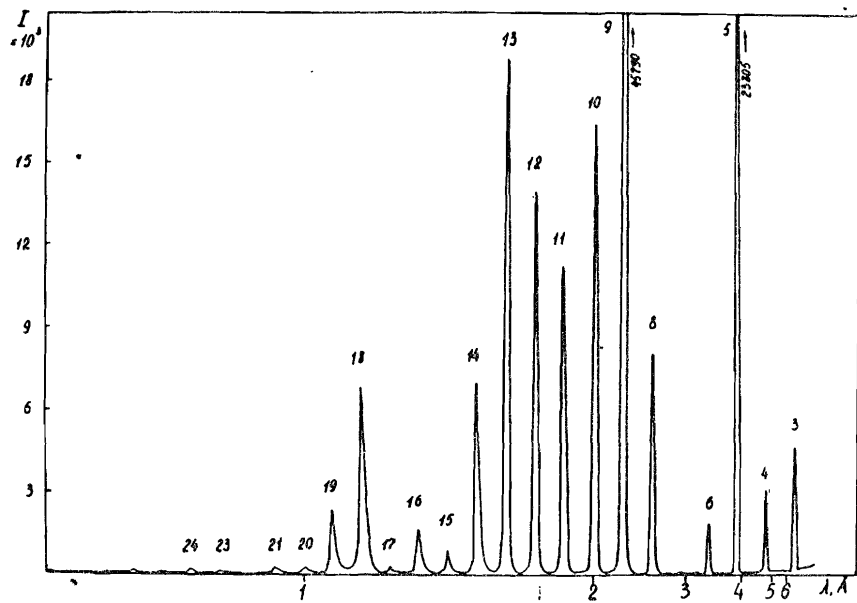


Рис.4. Тот же, что на рис.3, участок спектра, зарегистрированный в к-шкале.

может быть обобщен на случай регистрации двух- и трехмерных дифракционных спектров^{/8/}. Соответствующий коэффициент сжатия достигает при этом нескольких сотен.

В заключение авторы благодарят И.П.Барабаша, Г.Н.Зимина, В.Е.Новожилова и В.К.Широкова за большую помощь в наладке аппаратуры КАМАК и ЭВМ МЭРА-60.

ЛИТЕРАТУРА

1. Балагуров А.М. и др. ОИЯИ, 3-84-291, Дубна, 1984.
2. Балагуров А.М., Барабаш И.П., Шибяев В.Д. ПТЭ, 1977, 2, с.79.
3. Александров Ю.А., Шаратов Э.И., Чер Л. Дифракционные методы в нейтронной физике. Энергоиздат, М., 1981, с.165.
4. Шибяев В.Д., Харасты Я., Ле Кхак Мань. ОИЯИ, 10-84-345, Дубна, 1984.
5. Ермаков В.А., Зимин Г.Н. ОИЯИ, 10-83-194, Дубна, 1983.
6. Островной А.И. ОИЯИ, Р10-85-581, Дубна, 1985.
7. Балагуров А.М. и др. ОИЯИ, Р10-84-440, Дубна, 1984.
8. Балагуров А.М. и др. ОИЯИ, Р14-12840, Дубна, 1979.

Рукопись поступила в издательский отдел
16 мая 1986 года.

Балагуров А.М., Островной А.И., Шибяев В.Д. P10-86-313
Регистрация нейтронограмм
в координатах пространства волновых векторов
/одномерный случай/

Рассмотрены вопросы, связанные с регистрацией в координатах пространства волновых векторов нейтронных дифракционных спектров, измеряемых на дифрактометре по методу времени пролета. Показано, что непосредственно в ходе накопления данных достигается сжатие информации в несколько десятков раз. Для реализации такого способа накопления спектров используется программируемый временной кодировщик ПВК-1, во внутреннюю память которого программой записывается временная шкала с растущей пропорционально квадрату времени шириной канала. Описаны программы, управляющие работой ПВК-1 и набором блоков КАМАК для проведения измерений спектров.

Работа выполнена в Лаборатории нейтронной физики ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1986

Перевод О.С.Виноградовой

Balagurov A.M., Ostrovnoj A.I., Shibaev V.D. P10-86-313
Neutron Diffraction Spectra Registration
in Wave Vector Space Coordinates
(One-Coordinate Case)

Problems related to registration in wave vector space coordinates of neutron diffraction spectra measured at the time-of-flight spectrometer are considered. It is shown that during data acquisition squeezing of information by a factor of ten times is achieved. Programmed time coder PVK-1 with written in its inner memory the time scale with a channel width growing proportionally to time squared is used to realize this method of spectrum acquisition. The programs to control the PVK-1 coder and some CAMAC blocks for spectra measuring are described.

The investigation has been performed at the Laboratory of Neutron Physics, JINR.

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1986