

сообщения
объединенного
института
ядерных
исследований
дубна

479/2-80

7/2-80
P14 - 12840

А.М.Балагуров, В.Е.Новожилов, Ю.М.Останевич,
В.Д.Шибяев

СЖАТИЕ ИНФОРМАЦИИ

В ТРЕХМЕРНОМ НЕЙТРОННОМ ДИФРАКЦИОННОМ
ЭКСПЕРИМЕНТЕ

ПО МЕТОДУ ВРЕМЕНИ ПРОЛЕТА

1979

P14 - 12840

А.М.Балагуров, В.Е.Новожилов, Ю.М.Останевич,
В.Д.Шибяев

СЖАТИЕ ИНФОРМАЦИИ
В ТРЕХМЕРНОМ НЕЙТРОННОМ ДИФРАКЦИОННОМ
ЭКСПЕРИМЕНТЕ
ПО МЕТОДУ ВРЕМЕНИ ПРОЛЕТА

Балагуров А.М. и др.

P14 - 12840

Сжатие информации в трехмерном нейтронном дифракционном эксперименте по методу времени пролета

Рассмотрена задача получения гистограммы экспериментальных данных в нейтронном дифракционном эксперименте по методу времени пролета с использованием двумерного позиционно-чувствительного детектора. Показано, что существенного /в 100 и более раз/ уменьшения числа элементов гистограммы можно достичь предварительным преобразованием экспериментальных координат каждого события /т.е. координат места регистрации в детекторе и времени пролета/ в координаты пространства векторов рассеяния и последующим накоплением гистограммы в ячейках этого пространства. Число и размеры ячеек выбираются оптимальными для конкретной изучаемой структуры. Приведена блок-схема электронного устройства, на котором возможна обработка каждого события за время, не превышающее 1,1 мкс.

Работа выполнена в Лаборатории нейтронной физики ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1979

Balagurov A.M. et al.

P14 - 12840

Experimental Data Accumulation in the Three-Dimensional Neutron Diffraction Experiment by the Time-of-Flight Method

Experimental data on-line accumulation in histogram form in the time-of-flight neutron diffraction experiment using a two-dimensional position-sensitive detector is discussed. It is shown that an essential (more than by a factor of 100) decrease of the number of histogram elements may be achieved with the help of the preliminary transformation of the experimental coordinates of each event (i.e., detector spatial coordinates and the time of flight) into the scattering vector space coordinates with the following accumulation of the number of events in the form of histograms with elements representing the cells of that space. The number and dimensions of those cells may be chosen adequately to the structure under investigation. The block diagram of the electronic unit for the on-line data processing within 1.1 mks is presented.

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

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1979

1. ВВЕДЕНИЕ

В последние годы интенсивно развиваются методы, увеличивающие скорость набора экспериментальных данных в исследованиях структуры монокристаллов. Применение двумерных позиционно-чувствительных детекторов в рентгеновской^{1/} и нейтронной^{2/} дифрактометрии позволяет измерять одновременно несколько десятков отражений от кристалла, т.е. существенно сокращает продолжительность эксперимента. В случае нейтронографии метод времени пролета дает возможность вести измерение дифракционных отражений сразу в широком интервале длин волн, что равноценно съемке некоторого объема в обратном пространстве, тем самым требуемая продолжительность эксперимента уменьшается еще примерно в 10^3 раз.

Однако наивный подход к реализации этой идеи приводит к неразумно большим размерам запоминающего устройства для накопления информации. При использовании позиционно-чувствительного детектора, имеющего 1024 ячейки, и временного анализатора с шириной канала, соответствующей длительности импульса источника нейтронов / ~ 16 мкс/, оценки дают требуемую оперативную память / $2^{24} \cdot 10^6$ слов. Помимо технической трудности реализации столь большой памяти, очевидна ее избыточность, если учесть, что речь идет о регистрации примерно 100 дифракционных максимумов. Первичная обработка экспериментальной информации при этом должна привести к сжатию информации в 10^4 раз.

10^3 раз, по-видимому, впервые было высказано предложение выполнять часть сжатия, представляя интенсивность дифракционных отражений непосредственно в координатах обратного пространства. Ниже это предложение рассмотрено подробно и показано, что существенное сжатие экспериментальной информации /до 300 раз/ можно производить непосредственно в процессе накопления, что значительно упрощает весь комплекс задач, связанных с накоплением, хранением и обработкой первичной информации дифракционного эксперимента.

2. ОРГАНИЗАЦИЯ НАКОПЛЕНИЯ ИНФОРМАЦИИ

2.1. Схема метода

Будем считать, что пространство волновых векторов нейтрона / k -пространство/ разделено на некоторое число ячеек, такое, что на каждый узел обратной решетки кристалла их приходится m^3 /по m в каждом базисном направлении/. Для уверенного определения фона и обработки частично перекрывающихся пиков достаточно, если m будет равно $4 \div 6$. Тогда для регистрации 100 дифракционных пиков нужно всего $6400 \div 21600$ ячеек оперативной памяти. Столь существенное уменьшение числа ячеек по сравнению с приведенной выше оценкой достигается по существу выбором разрешающей способности, одинаковой для всех узлов обратной решетки и адаптированной к исследуемой структуре. Этот путь не является оптимальным по величине отношения эффекта к фону, однако для дифракционных задач фоновые условия обычно благоприятны и обсуждаемый здесь метод сжатия вполне применим*.

Реализация изложенного метода требует преобразовать координаты каждого события /отсчета детектора/ из "лабораторной" системы в координаты обратного пространства кристалла. Организация накопления измеряемой информации при этом распадается на три этапа.

На подготовительном этапе выбирается система координат и изучаемый объем k -пространства некоторым оптимальным образом заполняется 3-мерными "ячейками". Решение этой задачи допускает известный произвол и будет обсуждаться далее.

На этапе собственно накопления необходимо выполнить две операции: 1/ перейти от координат x, y, t /где x, y - место события в системе координат детектора, t - время пролета/ к координатам в пространстве вектора рассеяния \vec{k} ; 2/ отнести событие к какой-либо ячейке k -пространства, и в ней произвести регистрацию, т.е. увеличить ее содержимое на единицу.

Наконец, необходимо произвести идентификацию измеренных отражений, т.е. учесть симметрию кристалла и его ориентацию относительно лабораторной системы координат. Если выбранное разбиение в k -пространстве соответствует симметрии кристалла /что в принципе вполне возможно/, то присвоение отражениям индексов Миллера происходит уже на этапе накопления.

* В случае плохих фоновых условий оптимальным является метод сжатия, адаптированный к разрешающей способности дифрактометра. Для временной координаты эта задача решена в [4] применением переменной ширины канала, пропорциональной полному времени пролета нейтронов.

ления. Первичную обработку накопленной дифракционной информации /определение интегральных интенсивностей/ можно проводить как в координатах k -пространства, так и в координатах обратной решетки кристалла.

Сжатие информации, таким образом, можно производить в процессе накопления, и представляется целесообразным изменить алгоритм, реализующий эту схему.

2.2. Связь координат точки в пространстве векторов рассеяния с экспериментальными координатами

Вектор рассеяния $\vec{k} = \vec{k}'' - \vec{k}'$ / \vec{k}' и \vec{k}'' - волновые векторы нейтрона до и после рассеяния/ удобно представить в виде

$$\vec{k} = k_0 \cdot \vec{Q}, \quad /1/$$

где $\vec{Q} = (\vec{k}'' - \vec{k}') / k_0$, k_0 - модуль волнового вектора нейтрона. Величина k_0 полностью определяется временем пролета t , а именно:

$$k_0 = 2\pi \frac{m}{h} \cdot \frac{L}{t}, \quad /2/$$

где m - масса нейтрона, h - постоянная Планка, L - полное пролетное расстояние.

Для отыскания связи вектора \vec{Q} с координатами (x, y) точки регистрации нейтрона рассмотрим схему эксперимента. На рис. 1 образец находится в начале лабораторной ортонормированной системы координат $\{\vec{n}\}$, такой, что $\vec{n}_1 \parallel \vec{k}'$, а \vec{n}_2 лежит в горизонтальной плоскости. К плоскому двумерному детектору D привязана ортонормированная система координат $\{\vec{l}\}$, причем $\vec{l}_2 \parallel \vec{n}_3$. $\vec{Q} = x\vec{l}_1 + y\vec{l}_2$ - вектор, определяющий точку регистрации, вектора \vec{P}_0 и \vec{P} соединяют начало координат системы $\{\vec{n}\}$ с началом координат системы $\{\vec{l}\}$ и с точкой регистрации соответственно. На том же рисунке показаны углы ϕ_1 и ϕ'_1 .

Очевидны следующие разложения векторов по базису $\{\vec{n}\}$:

$$\vec{l}_1 = (\sin \phi_1, -\cos \phi_1, 0).$$

$$\vec{l}_2 = (0, 0, 1).$$

$$\vec{Q} = (\cos \phi'_2 \cos \phi'_1 - 1, \cos \phi'_2 \sin \phi'_1, \sin \phi'_2),$$

$$\vec{P}_0 = (P_0 \cos \phi_2 \cos \phi_1, P_0 \cos \phi_2 \sin \phi_1, P_0 \sin \phi_2),$$

$$\vec{P} = (P \cos \phi'_2 \cos \phi'_1, P \cos \phi'_2 \sin \phi'_1, P \sin \phi'_2).$$

/3/

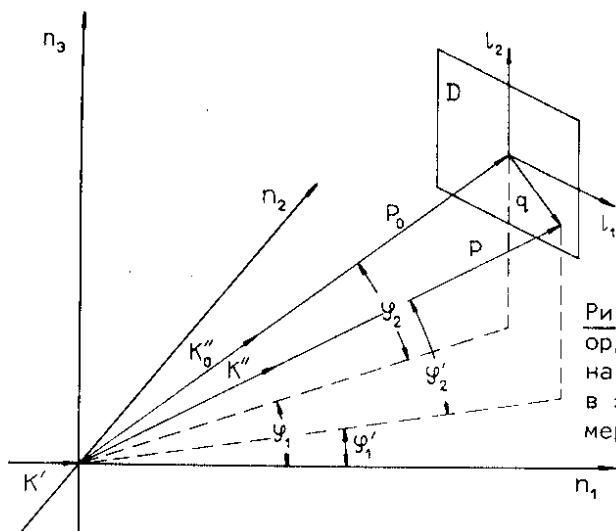


Рис. 1. Системы координат и основные направления векторов в эксперименте с двумерным детектором D.

Пользуясь равенством $\vec{P} = \vec{P}_0 + \vec{q}$ и полагая для простоты $\phi_2 = 0$, из /3/ легко получить:

$$\operatorname{tg} \phi_1' = (P_0 \sin \phi_1 - x \cos \phi_1) / (P_0 \cos \phi_1 + x \sin \phi_1),$$

$$\sin \phi_2' = y / P,$$

/4/

$$P^2 = P_0^2 + x^2 + y^2.$$

Таким образом, зная P_0 , ϕ_1 , x и y , можно найти координаты \vec{Q} , а затем из /1/- координаты $\vec{\kappa}$ в лабораторной системе $\{\vec{n}\}$:

$$\kappa_{n1} = k_0 (\cos \phi_2' \cos \phi_1' - 1),$$

$$\kappa_{n2} = k_0 \cos \phi_2' \sin \phi_1',$$

/5/

$$\kappa_{n3} = k_0 \sin \phi_2',$$

где k_0 находится из /2/.

2.3. Выбор системы координат в пространстве волновых векторов

Для регистрации событий необходимо в k -пространстве образовать 3-мерную сетку, состоящую из ячеек некоторого объема, и суммировать отсчеты, соответствующие величинам κ_i , значения которых лежат в интервале $(\kappa_i)_m \leq \kappa_i \leq (\kappa_i)_{m+1}$, где $(\kappa_i)_m$ и $(\kappa_i)_{m+1}$ - границы m -й ячейки в направлении i -го базисного вектора некоторой системы координат. Выбор базиса для регистрации, очевидно, неоднозначен, желательно лишь, чтобы он был связан с системой $\{\vec{p}\}$ линейным преобразованием.

На рис. 2 приведены три варианта выбора сетки /для наглядности изображен двумерный случай/, когда направления разбиения k -пространства на ячейки совпадают с:

а/ \vec{b}_1, \vec{b}_2 - векторами элементарных трансляций в обратной решетке кристалла;

б/ \vec{p}_1, \vec{p}_2 - базисными векторами лабораторной системы координат;

в/ \vec{s}_1, \vec{s}_2 - базисными векторами ортонормированной системы $\{s\}$, такой, что $\vec{s}_1 \parallel \vec{\kappa}$, а \vec{s}_2 лежит в горизонтальной плоскости.

Наиболее симметричное заполнение пространства между узлами обратной решетки достигается в случае а/, когда симметрия ячейки разбиения и обратной элементарной ячейки кристалла совпадают. Наиболее экономно покрытие наблюдаемой области сеткой происходит в случае в/, т.к. при этом конфигурации наблюдаемой области и области разбиения наиболее похожи. Наконец, случай б/ может быть выгоден тем, что переход от (x, y, t) - координат $k(\kappa_1, \kappa_2, \kappa_3)$ - координатам требует минимума вычислений /по формулам /5//, тогда как в случаях а/ и в/ необходимо учесть поворот системы координат. Конечно, возможны и другие варианты, например, можно привести аргументы в пользу косоугольной сетки с направлениями разбиения по \vec{p}_1 и $\vec{\kappa}$.

Нам представляется, что вариант, изображенный на рис. 2в, наиболее удачен по следующим, кроме отмеченной выше, причинам: вычисления не сильно усложняются по сравнению с вычислениями по формулам /5/, т.к. требуется лишь произвести переход между двумя ортонормированными системами координат; ориентация сетки не зависит от ориентации кристалла, и, следовательно, формулы преобразования не будут изменяться при поворотах образца. Ниже именно этот случай рассмотрен подробно.

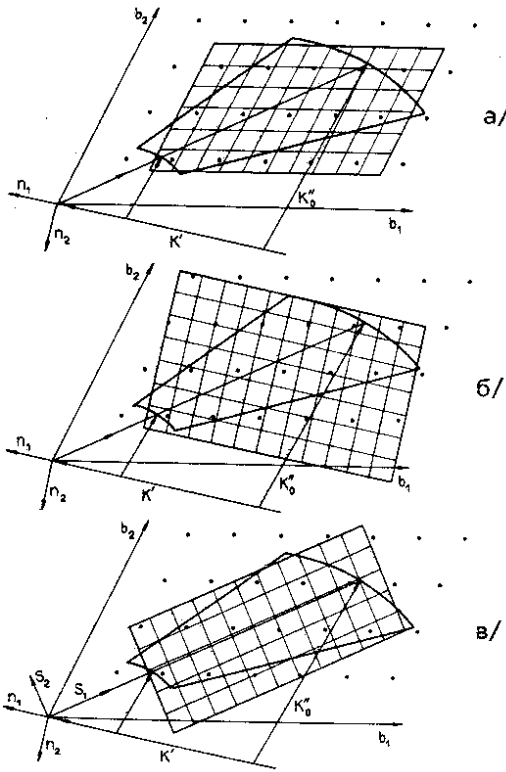


Рис. 2. Варианты выбора сетки в k -пространстве /двумерный случай/. Точками обозначены узлы обратной решетки кристалла, показаны одновременно наблюдаемая область обратного пространства и область, разделенная на ячейки, в которых производится регистрация. Векторы \vec{b}_1 , \vec{b}_2 указывают базисные направления в обратной решетке, вектор \vec{k}_0'' направлен от образца в центр детектора.

2.4. Координаты вектора \vec{k} в системе $\{\vec{s}\}$ и их связь с координатами обратной решетки

Ортонормированную систему координат $\{\vec{s}\}$ выберем следующим образом: $\vec{s}_1 \parallel \vec{k}_0$ и $\vec{s}_3 \parallel \vec{n}_3$, \vec{k}_0 соответствует вектору \vec{k}'' , направленному в центр детектора, т.е. $\vec{k}_0 = \vec{k}'' - \vec{k}$. Связь систем $\{\vec{n}\}$ и $\{\vec{s}\}$ изображена на рис. 3, где $2\theta_0$ - угол рассеяния при попадании нейтрона в центр детектора. Из рис. 3 видно, что

$$\vec{n}_i = R_{ij} \vec{s}_j, \quad /6/$$

где R_{ij} - матрица поворота на угол $\pi/2 + \theta_0$ вокруг \vec{n}_3 , т.е.

$$R = \begin{pmatrix} -\sin \theta_0 & -\cos \theta_0 & 0 \\ \cos \theta_0 & -\sin \theta_0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad /7/$$

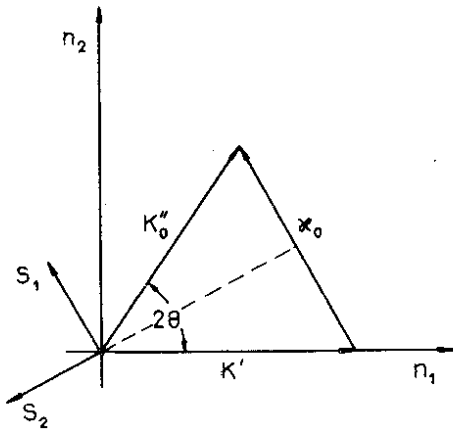


Рис. 3. Связь систем координат $\{\vec{n}\}$ и $\{\vec{s}\}$. Векторы \vec{n}_3 и \vec{s}_3 перпендикулярны плоскости рисунка.

Из /1/ и /6/ получаем

$$\vec{\kappa} = k_0 Q_i \vec{n}_i = k_0 Q_i R_{ij} \vec{s}_j, \quad /8/$$

т.е.

$$\kappa_{sj} = \kappa_{ni} R_{ij}, \quad /9/$$

При брэгговском рассеянии вектор \vec{H} в обратном пространстве кристалла пропорционален вектору рассеяния: $\vec{H} = \vec{\kappa} / 2\pi$, и обычно представляется в виде разложения по базисным векторам обратной решетки:

$$\vec{H} = H_i \vec{b}_i = H_i U_{ij} \vec{n}_j = H_i U_{ij} R_{jk} \vec{s}_k, \quad /10/$$

где U - матрица ориентации, связывающая системы $\{\vec{n}\}$ и $\{\vec{b}\}$:

$$\vec{b}_j = U_{jk} \vec{n}_k.$$

Сравнивая /10/ и /8/, /9/, получаем:

$$\vec{H}_i = \kappa_j (R^{-1} U^{-1})_{ji}; \quad /11/$$

где $\kappa_j = k_0 Q_k R_{kj}$.

Формулы /5/, /9/, /11/ дают решение поставленной задачи: осуществлен переход от экспериментальных координат (x, y, t) к координатам вектора рассеяния κ_j и далее - к координатам обратного пространства кристалла H_i .

2.5. Линеаризация формул

Как отмечалось выше, сжатие экспериментальной информации происходит при переходе от (x, y, t) - координат к κ_{sj} - координатам и при суммировании событий, принадлежащих одной ячейке сетки, изображенной на рис. 2с. Явный вид формул перехода следует из /7/ и /9/:

$$\begin{aligned}\kappa_{s1} &= -\frac{C}{t} (Q_1 \sin \theta_0 - Q_2 \cos \theta_0), \\ \kappa_{s2} &= -\frac{C}{t} (Q_1 \cos \theta_0 + Q_2 \sin \theta_0), \\ \kappa_{s3} &= \frac{C}{t} Q_3,\end{aligned} \quad /12/$$

где через C обозначена константа $2\pi \frac{m}{h} \lambda$, а Q_j связаны с координатами x и y формулами /3/, /4/.

Реализация перехода от (x, y, t) к κ_{sj} непосредственно в процессе накопления по формулам /12/ затруднена сложностью вычисления величин Q_j . Однако в практически важном случае, когда размеры детектора малы по сравнению с расстоянием от образца до детектора, углы ϕ'_1 и ϕ'_2 можно рассчитать приближенно и линеаризовать формулы для Q_j по координатам x и y . Для $(x/P_0)_{\max} = (y/P_0)_{\max} \leq 0,2$ из /4/ следует:

$$\phi'_1 = \phi_1 - x/P_0, \quad /13/$$

$$\phi'_2 = y/P_0$$

с точностью $\sim 1\%$. Учитывая, что $\phi_1 = 2\theta_0$ при $\phi_2 = 0$, для Q_j получаем

$$\begin{aligned}Q_1 &= \cos 2\theta_0 - 1 + \frac{x}{P_0} \sin 2\theta_0, \\ Q_2 &= \sin 2\theta_0 - \frac{x}{P_0} \cos 2\theta_0, \\ Q_3 &= y/P_0.\end{aligned} \quad /14/$$

Подставляя /14/ в /12/, получаем для κ_{sj} :

$$\begin{aligned}\kappa_{s1} &= \frac{C}{t} (2 \sin \theta_0 - \frac{x}{P_0} \cos \theta_0), \\ \kappa_{s2} &= -\frac{C}{t} \cdot \frac{x}{P_0} \sin \theta_0, \\ \kappa_{s3} &= \frac{C}{t} \cdot \frac{y}{P_0}.\end{aligned} \quad /15/$$

Формулы /15/ представляются уже достаточно простыми для перехода от (x, y, t) к κ_{sj} непосредственно в процессе накопления информации. Если, однако, пренебречь вторым слагаемым в κ_{s1} /что приведет к некоторому искажению сетки при больших $x \cdot \cos \theta_0$ и малых t /, то возможно дальнейшее упрощение алгоритма перехода.

Номер ячейки /вдоль κ_{sj} /, в которой необходимо произвести регистрацию, определим, разделив κ_{sj} на Δ_j -размер ячейки по j -ому направлению - и выделив целую часть:

$$k_j = [\kappa_{sj} / \Delta_j]. \quad /16/$$

В качестве Δ_j возьмем величину интервала изменения κ_{sj} , деленную на M_j -число ячеек сетки в j -м направлении:

$$\begin{aligned} \Delta_1 &= \frac{2C}{t_{\min}} \cdot \sin \theta_0 \cdot \frac{1}{M_1}, \\ \Delta_2 &= \frac{2C}{t_{\min}} \cdot \sin \theta_0 \cdot \frac{x_{\max}}{P_0} \cdot \frac{1}{M_2}, \\ \Delta_3 &= \frac{2C}{t_{\min}} \cdot \frac{y_{\max}}{P_0} \cdot \frac{1}{M_3}, \end{aligned} \quad /17/$$

где t_{\min} - время пролета, соответствующее минимальной используемой длине волны, $2x_{\max}$ и $2y_{\max}$ - размеры детектора.

Для $\kappa_{s1} = \frac{2C}{t} \sin \theta_0$, используя /17/, получим

$$k_1 = \left[\frac{t_{\min}}{t} \cdot M_1 \right]$$

и аналогично

$$k_2 = \left[- \frac{t_{\min}}{t} \cdot \frac{x}{x_{\max}} \cdot M_2 \right], \quad k_3 = \left[\frac{t_{\min}}{t} \cdot \frac{y}{y_{\max}} \cdot M_3 \right]. \quad /18/$$

2.6. Регистрация

Для двумерного многонитового детектора с полным числом нитей N /по каждой координате/ и расстоянием между нитями δ

$$x = \delta (n_1 - N/2), \quad y = \delta (n_2 - N/2), \quad /19/$$

где n_1 и n_2 - номера нитей, отсчитываемые от левого нижнего угла детектора. С учетом /19/ перепишем /18/ в виде:

$$k_1 = \left[\frac{t_{\min}}{t} \cdot M_1 \right], \quad k_2 = \left[\frac{t_{\min}}{t} \left(\frac{N}{2} - n_1 \right) \cdot \frac{M_2}{N} \right], \quad k_3 = \left[\frac{t_{\min}}{t} \left(n_2 - \frac{N}{2} \right) \cdot \frac{M_3}{N} \right]. \quad /20/$$

Значение отношения t_{\min}/t удобно определять, применяя временной кодировщик с шириной канала $r(t) \sim t^2$. Аналогично вычислениям, проведенным в /4/ для $r(t) \sim t$, имеем для номера временного канала

$$M(t) = \alpha \int_{t_{\min}}^t dt/t^2 = \alpha \left(\frac{1}{t_{\min}} - \frac{1}{t} \right) = M_1 \left(1 - \frac{t_{\min}}{t} \right), \quad /21/$$

здесь $M_1 = \alpha/t_{\min}$ - полное число каналов. Из /21/ следует, что $t_{\min}/t = (M_1 - M(t))/M_1$, и, подставляя этот результат в /20/, получаем окончательно:

$$k_1 = M_1 - M(t), \quad k_2 = \left[(M_1 - M(t)) \frac{\frac{N}{2} - n_1}{N \cdot M_1} \cdot M_2 \right], \quad k_3 = \left[(M_1 - M(t)) \frac{n_2 - \frac{N}{2}}{N \cdot M_1} \cdot M_3 \right]. \quad /22/$$

Обозначив

$$x' = -n_1 + \frac{N}{2}, \quad y' = n_2 - \frac{N}{2}, \quad /23/$$

получим следующие выражения для k_2 и k_3 :

$$k_2 = \left[\frac{k_1 \cdot x' \cdot M_2}{N \cdot M_1} \right], \quad k_3 = \left[\frac{k_1 \cdot y' \cdot M_3}{N \cdot M_1} \right]. \quad /24/$$

Номер ячейки K запоминающего устройства, в котором добавляется единица при регистрации события, можно найти теперь по формуле

$$K = k_1 + (k_2 - 1)M_1 + (k_3 - 1)M_1 \cdot M_2. \quad /25/$$

Раскрыв скобки и подставив значения k_2 и k_3 , запишем:

$$K = k_1 + k_1 \cdot x' \cdot \frac{M_2}{N} + k_1 \cdot y' \cdot \frac{M_2 \cdot M_3}{N} - (M_1 + M_1 \cdot M_2). \quad /26/$$

Окончательный алгоритм, по которому будет работать устройство сжатия информации, выглядит следующим образом:

$$K = (y' \cdot M_3 + x') k_1 \cdot M_2 / N + (k_1 - (M_1 + M_1 \cdot M_2)). \quad /27/$$

Функциональная схема устройства представлена на рис. 4. Информация из квадратного многонитевого детектора КМД с полным числом нитей N поступает на блоки кодирования номера нити /КНН/. Выходные сигналы с этих блоков, объединенные по схеме И, служат для получения кода k_1 с запущенного сигналом "Старт" временного кодировщика /ВК/. Код с выхода блока КНН₂ y' подается на блок умножения U_1 , на второй

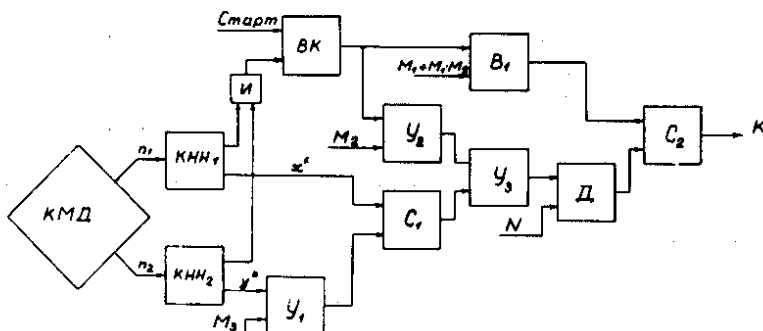


Рис. 4. Функциональная схема устройства для сжатия информации.

вход которого постоянно поступает код M_3 . Полученное произведение $y' \cdot M_3$ и код с выхода блока $KНН_1$ x' подаются на вход блока суммирования C_1 , образуя код $y' \cdot M_3 + x'$. Одновременно на выходе блока умножения Y_2 получаем произведение $k_1 \cdot M_2$. Коды с выхода блоков C_1 и Y_2 поступают на входы блока умножения Y_3 , на выходе которого получаем произведение $(y' \cdot M_3 + x') \cdot k_1 \cdot M_2$. Так как число N всегда равно значению 2^n , где n - целое, то операция деления на N , выполняемая в блоке D_1 , сводится к сдвигу кода с выхода блока Y_3 на соответствующее число разрядов перед подачей его на один из входов блока суммирования C_2 . На второй вход этого блока подается код $k_1 - (M_1 + M_2 \cdot M_3)$, образуемый в блоке вычитания V_1 . Код с выхода блока C_2 и будет служить адресным кодом в используемом для накопления информации запоминающем устройстве.

Все блоки в устройстве сжатия информации - потенциального типа. Максимальное время выполнения операции определяется наиболее длинной цепью блоков устройства: $Y_1 - C_1 - Y_3 - D_1 - C_2$ и не будет превышать 1,1 мкс.

Выбор величин M_1 , M_2 и M_3 определяется условиями эксперимента и подчиняется одному требованию:

$$M_1 \cdot M_2 \cdot M_3 \leq M, \quad /28/$$

где M - емкость запоминающего устройства.

3. ОБСУЖДЕНИЕ

Формулы /20/ были получены в предположении, что размеры детектора много меньше расстояния от образца до детектора, а угол рассеяния не мал. Однако эти упрощения не сказыва-

ются на основной измеряемой величине - интегральной интенсивности дифракционных отражений, происходит лишь незначительное изменение положений пиков.

В случае применения более протяженного детектора, чем предполагалось при получении /13/, вычисление κ_{sj} необходимо проводить по точным формулам /12/. Возможны два варианта организации расчетов в процессе измерений.

Детектор разделяется на несколько частей, каждая из которых характеризуется своим центром, и вычисление κ_{sj} проводится по формулам /15/ с дополнительным анализом для выяснения, в какой части детектора произошла регистрация события. По-видимому, этим вариантом удобно пользоваться, если отношение размеров детектора к расстоянию образец - детектор не превышает 1. Если это отношение > 1 , выходом из положения может быть предварительное вычисление величин Q_j для любых возможных сочетаний номеров нитей детектора n_1 и n_2 и запоминание матрицы рассчитанных значений. Координаты κ_{sj} получают далее по формулам /12/. Общее число арифметических операций при этом такое же, как и в случае малого детектора.

При сокращении числа размерностей детекторной системы проблема сжатия информации становится менее острой и решать ее можно другими, менее радикальными и более простыми способами. Но, в принципе, все полученные выше соотношения остаются справедливыми и в случае применения одно- или нульмерного детектора, необходимо лишь фиксировать соответствующие угловые координаты. Изложенные здесь способы сжатия информации будут опробованы в ближайшее время при создании нейтронного дифрактометра на импульсном реакторе ИБР-2.

ЛИТЕРАТУРА

1. Xuong Ng.H. et al. Acta Cryst., 1978, A34, p.289-296.
2. Alberi J. et al. Nucl. Instr. Meth., 1975, 127, p.507-523.
3. Балагуров А.М. и др. ОИЯИ, Б1-3-9011, Дубна, 1975. Report IFA, FN-48, Bucharest, 1975.
4. Балагуров А.М., Барабаш И.П., Шибяев В.Д. ПТЭ, 1977, 2, с.79-82.

Рукопись поступила в издательский отдел
5 октября 1979 года.