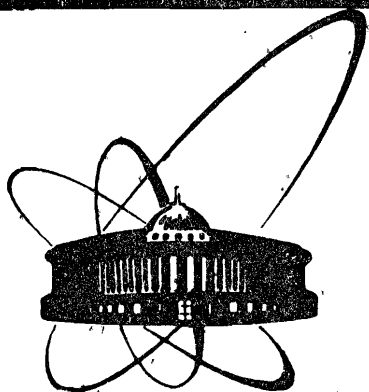


87-531



СООБЩЕНИЯ
ОБЪЕДИНЕННОГО
ИНСТИТУТА
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА

Б20

РЗ-87-531

А.М.Балагуров, А.И.Бескровный, Н.Попа

ФУНКЦИЯ РАЗРЕШЕНИЯ
НЕЙТРОННОГО ДИФРАКТОМЕТРА
НА ИМПУЛЬСНОМ РЕАКТОРЕ ИБР-2

1987

В наших предыдущих работах^{/1,2/} были представлены конструкция, основные параметры и метод определения эффективного спектра нейтронов дифрактометра по времени пролета ДН-2, действующего на импульсном реакторе ИБР-2 в ЛНФ ОИЯИ. Общее рассмотрение функции разрешения в нейтронной дифрактометрии и конкретизация ее вида для дифрактометра по времени пролета проведены в^{/3/}. В настоящей работе сообщается о практическом применении разработанного в^{/3/} метода, включая экспериментальную проверку. Для краткости работа^{/3/} далее обозначается 1, ссылки на формулы в^{/3/} даются в виде /1, ...,/, там же определены все величины, кроме вновь вводимых.

1. ОСНОВНЫЕ СООТНОШЕНИЯ

Дифрактометр ДН-2 оборудован однокоординатным позиционно-чувствительным детектором и, таким образом, при фиксированном положении изучаемого монокристалла осуществляется двумерное сканирование его обратного пространства. Параметрами сканирования являются $\Delta T_0 = T_0 - T_B$ и $\Delta 2\theta_0$ (T_0 и T_B - времена пролета, соответствующие λ_0 и λ_B) и, следовательно, счет в детекторе /формула 1,11/ можно записать в виде

$$I(\Delta T_0, \Delta 2\theta_0, 0) = I(\Delta T_0, \Delta 2\theta_p) = \tag{1/1}$$

$$= \Phi_0(\lambda_B) \cdot V \cdot A(\mu) \cdot \varrho \cdot \int d(\Delta \vec{Q}) \cdot R(\Delta \vec{Q}) \cdot \sigma(\vec{H} + \vec{q} + \Delta \vec{Q}),$$

причем вектор сканирования

$$\vec{q}_0 = q_{0x} \cdot \vec{i} + q_{0y} \cdot \vec{j} = H \left[\left(-\frac{1}{2} \Delta 2\theta_0 \right) \cdot \vec{i} + \left(-\frac{\Delta T_0}{T_B} + \frac{1}{2} \operatorname{ctg} \theta_B \cdot \Delta 2\theta_0 \right) \cdot \vec{j} \right].$$

В 1 было показано, что для образца малых размеров функция разрешения ДН-2

$$R(\Delta \vec{Q}) = R_H(\Delta Q_x, \Delta Q_y) \cdot R_V(\Delta Q_z), \tag{1/3/}$$

где R_H и R_V - функции, определяющие разрешение в горизонтальной и вертикальной плоскостях соответственно:

$$R_H(\Delta Q_x, \Delta Q_y) = \frac{2L_2 \cdot T_0}{Q_0^2} \int d\gamma_1 \cdot P_r(-T_0 \frac{\Delta\lambda^*}{\lambda_B}) \cdot \phi(\gamma_1) \cdot D(L_2 \gamma_2^*), \quad /4/$$

$$R_V(\Delta Q_z) = \frac{L_2}{k_0} \int d\delta_1 \cdot \Psi(\delta_1) \cdot E(L_2 \delta_2^*), \quad /5/$$

здесь

$$\Delta\lambda^*/\lambda_B = -\text{ctg}\theta_0 \cdot \gamma_1 - \text{ctg}\theta_0 \cdot \Delta Q_x / Q_0 - \Delta Q_y / Q_0, \quad /6a/$$

$$\gamma_2^* = -\gamma_1 - 2\Delta Q_x / Q_0, \quad \delta_2^* = \delta_1 + \Delta Q_z / Q_0. \quad /6b/$$

Обе функции R_H и R_V нормированы на единицу. Факторизация /3/ дает возможность записать /1/ в следующем виде:

$$I(\Delta T_0, \Delta 2\theta_0) = \Phi_0 \cdot V \cdot A \cdot \mathcal{L} \cdot \int d(\Delta Q_x) d(\Delta Q_y) \cdot R_H(\Delta Q_x, \Delta Q_y) \cdot \sigma_0(Q_{0x} + \Delta Q_x, N + Q_{0y} + \Delta Q_y), \quad /7/$$

где

$$\sigma_0(Q_x, Q_y) = \int d(\Delta Q_z) \cdot R_V(\Delta Q_z) \cdot \sigma(Q_x, Q_y, \Delta Q_z). \quad /8/$$

Из /7/ следует, что если известна R_H , то возможна деконволюция $I(\Delta T_0, \Delta 2\theta_0)$, но результат будет совпадать с сечением рассеяния только в случае большой ширины функции R_V . В этом случае σ_0 будет, с точностью до константы $R_V(0)$, проекцией сечения рассеяния на плоскость (Q_x, Q_y) .

Свяжем функцию разрешения с экспериментальными переменными, которыми являются номера каналов N и M для времени пролета и угла рассеяния соответственно. Величины ΔN и ΔM линейно связаны с ΔQ_x и ΔQ_y :

$$\Delta Q_x = -\frac{Q_0}{2} \cdot \Delta 2\theta_0 = -\frac{Q_0}{2} \cdot \frac{v_0}{L_2} \cdot \Delta M, \quad /9a/$$

$$\Delta Q_y = Q_0 \left[-\frac{\Delta T_0}{T_0} + \frac{1}{2} \text{ctg}\theta_0 \cdot \Delta 2\theta_0 \right] = Q_0 \left[-\frac{\Delta N}{N} + \frac{1}{2} \text{ctg}\theta_0 \cdot \frac{v_0}{L_2} \Delta M \right],$$

v_0 - ширина /в см/ позиционной группы детектора. Тогда

$$R_H(\Delta N, \Delta M) = \left| \frac{\partial(\Delta Q_x, \Delta Q_y)}{\partial(\Delta N, \Delta M)} \right| \cdot R_H(\Delta Q_x, \Delta Q_y) =$$

$$= \tau \cdot v_0 \int d\gamma_1 \cdot P_r(-T_0 \frac{\Delta\lambda^*}{\lambda_B}) \cdot \phi(\gamma_1) \cdot D(L_2 \gamma_1^*), \quad /10/$$

где $\Delta\lambda^*$, γ_2^* определяются формулами /6/, в которых ΔQ_x и ΔQ_y заменены на ΔN и ΔM по /9/.

Во многих случаях необходимо знать положение центра тяжести и матрицу ковариации функции разрешения. Эти величины легко получаются из /4/ и /5/. Положение центра тяжести:

$$\overline{\Delta Q_x} = -\frac{Q_0}{2} \left(\bar{\gamma}_1 + \frac{\bar{v}}{L_2} \right), \quad \overline{\Delta Q_y} = \frac{Q_0}{2} \left[2 \frac{\bar{t}}{T_0} - \text{ctg}\theta_0 \left(\bar{\gamma}_1 - \frac{\bar{v}}{L_2} \right) \right], \quad /11a, б/$$

где \bar{t} , $\bar{\gamma}_1$, \bar{v} - центры тяжести распределений P , ϕ и D соответственно. Обозначая σ_t^2 , $\sigma_{\gamma_1}^2$, σ_v^2 дисперсии этих распределений, запишем матрицу ковариаций в виде:

$$c_{xx} = \frac{Q_0^2}{4} \left(\sigma_{\gamma_1}^2 + \frac{\sigma_v^2}{L_2^2} \right), \quad c_{xy} = \frac{Q_0^2}{4} \text{ctg}\theta_0 \cdot \left(\sigma_{\gamma_1}^2 - \frac{\sigma_v^2}{L_2^2} \right), \quad /12a, б/$$

$$c_{yy} = \frac{Q_0^2}{4} \left[4 \frac{\sigma_t^2}{T_0^2} + \text{ctg}^2\theta_0 \cdot \left(\sigma_{\gamma_1}^2 + \frac{\sigma_v^2}{L_2^2} \right) \right]. \quad /12в/$$

Дисперсия функции R_V есть

$$c_{zz} = \frac{Q_0^2}{4 \sin^2\theta_0} \cdot \left(\sigma_{\delta_1}^2 + \frac{\sigma_w^2}{L_2^2} \right), \quad /13/$$

где $\sigma_{\delta_1}^2$ и σ_w^2 - дисперсии распределений ψ и E . Положение центра тяжести и матрицу ковариации в переменных $(\Delta N, \Delta M)$ легко найти из /12/, /13/, используя /9/.

Позиционно-чувствительный детектор на ДН-2 применяется и при измерении спектров от поликристаллических образцов. В этом случае формулы /1, 14/ и /1, 15/ для интенсивности и функции разрешения переходят в

$$I(\Delta T_0, \Delta 2\theta_0) = \Phi_0(\lambda_{B_0}) \cdot V \cdot A(\mu) \cdot \mathcal{L} \cdot \int d(\Delta Q) \cdot R_p(\Delta Q) \cdot \sigma(N - N \frac{\Delta T_0}{T_{B_0}} + \Delta Q), \quad /14/$$

$$R_p(\Delta Q) = \frac{L_2 T_0}{Q_0} \iint d\gamma_1 d\gamma_2 \phi(\gamma_1) \cdot P_r(-T_0 \frac{\Delta\lambda^{**}}{\lambda_0}) \cdot D(L_2 \gamma_2), \quad /15/$$

где

$$\Delta \lambda^{**} / \lambda_0 = -\frac{1}{2} \operatorname{ctg} \theta_0 \cdot (\gamma_1 - \gamma_2) - \Delta Q / Q_0. \quad /16/$$

В /14/ T_{B_0} означает T_B для угла $2\theta_B + \Delta 2\theta_0$, λ_{B_0} - соответствующая T_{B_0} длина волны нейтрона, $\Delta T_0 = T_0 - T_{B_0}$. Для представления дифракционного спектра в зависимости от одного параметра сканирования, выполняется суммирование по позиционным группам детектора. Параметром сканирования может быть $\Delta Q_0 = Q_0 - H$ или, что эквивалентно, $\Delta d_0 = d_0 - d_B$, где $d = 2\pi / Q$ - межплоскостное расстояние. Суммирование по группам возможно, если функция разрешения и первичный поток изменяются лишь незначительно в интервале суммирования, т.е., если для данного ΔT_0 функция $I(\Delta T_0, \Delta 2\theta_0)$ в действительности не зависит от $\Delta 2\theta_0$. Интенсивность в шкалах $x = Q$ или $x = d$ после суммирования есть

$$I(\Delta x_0) = I(\Delta T_0) \cdot \frac{\Delta T(\tau_x)}{r} \cdot n_g, \quad /17/$$

где $\Delta T(\tau_x)$ - временной интервал, соответствующий каналу x с шириной τ_x / r - ширина временного канала/, n_g - число позиционных групп, по которым проведено суммирование. Учитывая /17/, перепишем /14/ в виде:

$$I(\Delta x_0) = \Phi_0(\lambda_B) \cdot V \cdot A(\mu) \cdot L \cdot n_g \cdot \frac{\tau_x}{r} \cdot \frac{T_0}{x_0} \cdot \int R_p(\Delta x) \cdot \sigma H(1 \pm \frac{\Delta x_0 + \Delta x}{x_0}) d(\Delta x),$$

где

$$R_p(\Delta x) = \frac{L_2 T_0}{x_0} \int \int d\gamma_1 d\gamma_2 \phi(\gamma_1) \cdot P_r(-T_0 \frac{\Delta \lambda^{**}}{\lambda_0}) D(L_2 \gamma_2), \quad /19/$$

$$\Delta \lambda^{**} / \lambda_0 = -\frac{1}{2} \operatorname{ctg} \theta_B \cdot (\gamma_1 - \gamma_2) \mp \Delta x / x_0. \quad /20/$$

Центр тяжести и дисперсия R_p есть:

$$\overline{\Delta x} = \pm x_0 \left[\frac{t}{T_0} - \frac{1}{2} \operatorname{ctg} \theta_B \cdot (\bar{\gamma}_1 - \frac{\bar{v}}{L_2}) \right], \quad /21/$$

$$\sigma_x^2 = x_0^2 \left[\frac{\sigma_t^2}{T_0^2} + \frac{1}{4} \operatorname{ctg}^2 \theta_B (\sigma_{\gamma_1}^2 + \frac{\sigma_v^2}{L_2^2}) \right]. \quad /22/$$

В формулах /18/, /20/ и /21/ верхний знак относится к случаю $x_0 = Q_0$.

В заключение этой части отметим, что во всех формулах, написанных выше, величины $\lambda_0, Q_0, T_0, d_0, \theta_0$ можно заменить на $\lambda_B, H, T_B, d_B, \theta_B$, кроме случаев, когда они появляются в разностях типа $Q_0 - H, d_0 - d_B$ и т.д.

2. РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ПЛОТНОСТИ ВЕРОЯТНОСТИ ОТДЕЛЬНЫХ КОМПОНЕНТ

Рассмотрим теперь, как были получены независимые распределения, дающие вклад в функцию разрешения.

Для измерения $\phi(\gamma_1)$ - углового распределения первичного пучка на образце в горизонтальной плоскости, применялся детектор малых размеров и с низкой эффективностью, укрепленный на месте образца. Детектор был закрыт экраном из Cd, имевшим отверстие 2 мм диаметром. Выход зеркального нейтропровода сканировался щелью из Cd шириной 1 мм и высотой 200 мм /в этом случае счет детектора $\sim \phi(\gamma_1) \cdot \int d\delta_1 \cdot \psi(\delta_1) = \phi(\gamma_1)$. Измерения проведены в 10 эквидистантных точках, первая и последняя из которых находились вне зоны пучка и давали значения фона. Угловой шаг составлял при этом 0,00225 рад., ширина временного канала была 256 мкс, т.е. шаг по λ составлял 0,0426 Å. Достоверные данные об угловом распределении получены для длин волн 1,2-8 Å. Его зависимость от γ_1 и λ оказалась довольно сложной и неподдающейся описанию с помощью аналитических функций. Поэтому измеренные распределения предварительно сглаживались по λ , а для получения зависимости от γ_1 аппроксимировались кубическими сплайнами. Нормированные коэффициенты сплайновой функции для каждого дискретного значения λ хранились в виде файла и при дальнейших вычислениях $\phi(\gamma_1)$ для заданного λ_B выбирались ближайшие. На рис. 1 показаны измеренные значения и сплайновая аппроксимация углового распределения для некоторых λ . На рис. 2 представлены зависимости от λ положения центра тяжести $\bar{\gamma}_1$ и среднеквадратичного отклонения σ_{γ_1} . Для $\bar{\gamma}_1$ интерес представляет только изменение, а не абсолютная величина, которая зависит от выбора начала координат. Выбранное здесь начало координат соответствует линии, соединяющей центры образца и окна нейтропровода. Впоследствии оно будет переопределено на основании данных, полученных от стандартного образца.

Угловое распределение первичного пучка нейтронов в вертикальной плоскости $\psi(\delta_1)$ в принципе может быть измерено с помощью аналогичной процедуры. Однако его влияние на практичес-

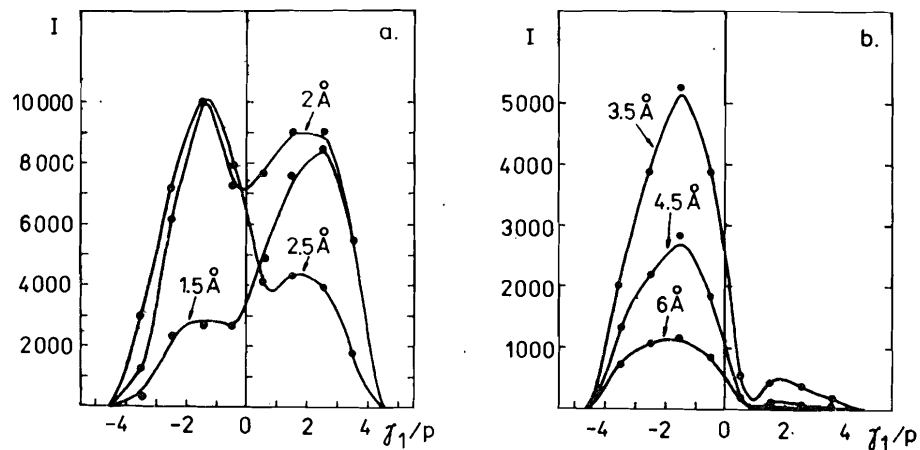


Рис.1. Угловые распределения в горизонтальной плоскости первичного пучка на образце для различных длин волн. Шаг по углу составляет $P = 0,00225$ рад. Точки и гладкие кривые на а/ и б/ - экспериментальные значения и их описание сплайновой функцией. На с/ представлены нормированные распределения $\phi(\gamma_1)$.

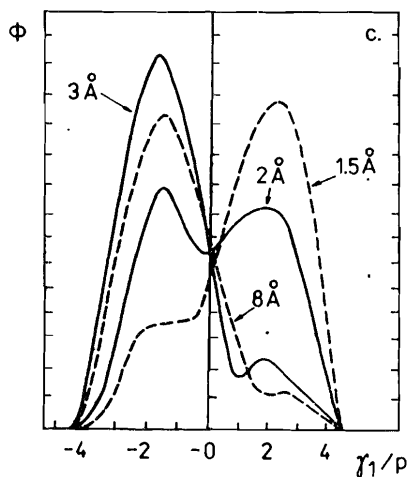


Рис.2. Зависимость от длины волны: 1 - $\bar{\gamma}_1$ - центра тяжести, 2 - σ_{γ_1} - среднеквадратичного отклонения распределения $\phi(\gamma_1)$. Как $\bar{\gamma}_1$, так и σ_{γ_1} выражены в угловых минутах.

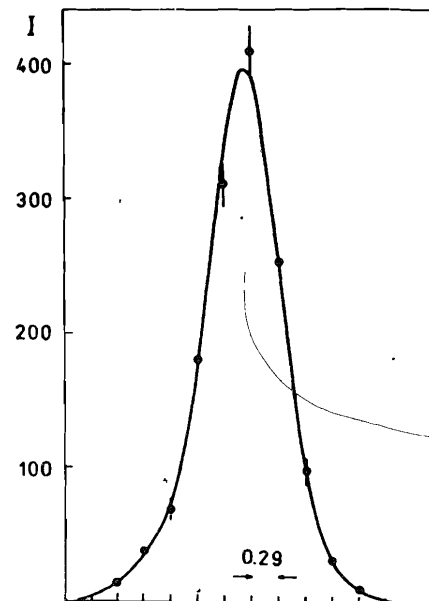
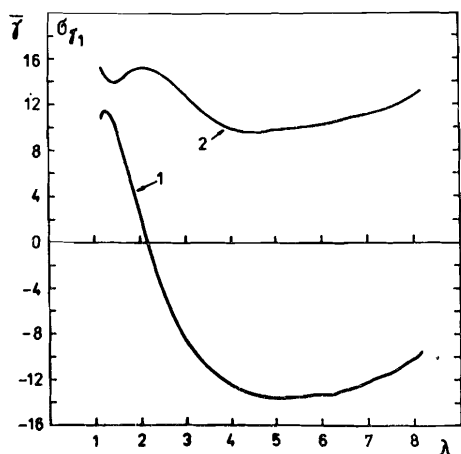


Рис.3. Распределение отсчетов детектора, находящегося за узкой /1 мм/ щелью, по позиционным группам. Точки - измеренные значения, линия - их описание функций /23б/. По оси абсцисс отмечены центры позиционных групп, ширина группы 0,29 см.

ки интересные результаты невелико, поэтому точная форма $\psi(\delta_1)$ не измерялась.

Измерение горизонтального разрешения позиционно-чувствительного детектора проводилось следующим образом: позиционная характеристика детектора делилась на 64 группы шириной 0,29 см каждая, детектор закрывался экраном из Cd с щелью шириной 1 мм, и измерялось распределение отсчетов по группам. Можно предложить много аналитических функций, хорошо описывающих измеренное распределение $D_m(v)$, но желательно найти такую, которая позволяет легко перейти к другим возможным разбиениям характеристики детектора, например, на 32 или 16 групп. Подходящей функцией является конечный ряд Грама-Чарлиера. Необходимо взять четыре члена этого ряда, чтобы получить хорошее описание разрешения детектора с R-фактором $\sim 0,044$. На рис.3 показаны измеренное распределение $D_m(v)$ и расчетная кривая. Разрешение детектора $D(v)$ выражается через $D_m(v)$ как $D_m(-v) / \int D_m(v) dv$. Если детектор разделен на 32 или 16 групп, то функция разрешения получается сверткой $D(v)$ для 64 групп с прямоугольной функцией ширины 2s или 4s, где $s = 0,29$ см - ширина канала при разбиении на 64. Результат свертки может быть выражен аналогичным рядом Грама-Чарлиера, коэффициенты которого находятся по моментам компонент /4/. Итак, обозначая

запишем $D(v)$ в виде

$$z = (v - p_1) / \sqrt{2} p_2, \quad /23a/$$

$$D(v) = \frac{1}{\sqrt{2\pi} p_2} e^{-z^2} \cdot [1 + p_3 H_3(z) + p_4 H_4(z) + p_5 H_5(z) + p_6 H_6(z)], \quad /23б/$$

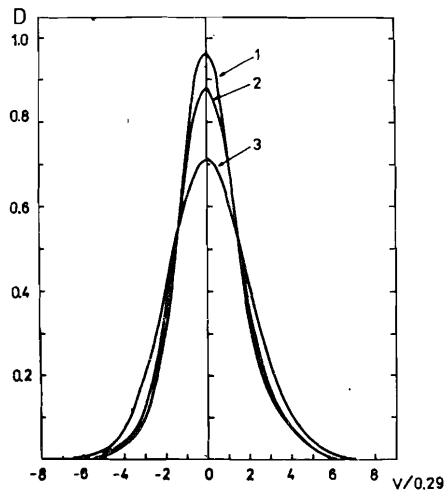


Рис.4. Разрешение детектора $D(v)$ в зависимости от числа групп: 64/1/, 32/2/ и 16/3/.

где H_n - полиномы Эрмита, а коэффициенты p_n для 64, 32 и 16 групп даны в таблице вместе с β -шириной на половине высоты и $\sigma_{\gamma_2} = \sigma_v/L_2 = p_2/L_2$ для $L_2 = 120$ см. Функция $D(v)$ показана на рис.4. Заметными являются два обстоятельства: а/ разделение детектора на 64 группы не дает существенного улучшения разрешения по сравнению со случаем 32 и даже 16 групп;

б/ вклад детектора в полную функцию разрешения сравним с вкладом от углового распределения первичного пучка нейтронов.

Таблица

Коэффициенты p_i для /236/, ширина на половине высоты β /в см/ и σ_{γ_2} /в мин/ для $L_2 = 120$ см,

n_g - число позиционных групп

n_g	p_1	p_2	p_3	p_4	p_5	p_6	β	σ_{γ_2}
64	0,45E-1	0,4694	0,13E-1	0,68E-2	-0,66E-3	-0,35E-3	0,91	13,4
32	0,43E-1	0,4983	0,11E-1	0,52E-2	-0,49E-3	-0,24E-3	0,99	14,3
16	0,40E-1	0,5766	0,70E-2	0,16E-2	-0,24E-3	-0,56E-4	1,28	16,5

В заключение этой части отметим, что если размер образца больше чем 1 см, его вклад в функцию разрешения становится сравнимым с вкладом детектора. Для учета размеров образца коэффициенты в /236/ должны быть модифицированы. Главная трудность возникает из-за неоднородного распределения первичного пучка на образце, обозначенного в 1 через $g(y, z)$, что при больших размерах образца может приводить к ошибкам в нормировке измеренного спектра на $\Phi_0(\lambda)$.

Определение функции $F_r(t)$ описано в работе /4/.

3. ВЫЧИСЛЕНИЕ ФУНКЦИИ РАЗРЕШЕНИЯ И ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ПРОВЕРКА

Интегралы /4/ или /10/ и /19/ находились численно, Интеграл по y_1 вычислялся по формуле Гаусса-Лежандра с 10 узлами. Для интеграла по y_2 в /19/ формула Гаусса-Эрмита дала нужную точность уже при 6 узлах. Время вычисления функции разрешения для дифракционного пика как от моно-, так и от поликристалла составляет около 2 с на PDP-11/70 для обычно используемых экспериментальных условий. Для иллюстрации на рис.5 представлена горизонтальная функция разрешения для монокристалла, вычисленная в $(\Delta Q_x, \Delta Q_y)$ - и $(\Delta N, \Delta M)$ - осях. На рис.6 показана функция разрешения для поликристалла, вычисленная в шкале Δd ; на рис.6а постоянен угол Брэгга, изменяется d_0 ; на рис.6б - наоборот, d_0 - константа, изменяется θ_0 . Начало координат всех кривых на рис.6 совпадает с их центром тяжести. Наконец, на рис.7 показаны изменения с d_0 центра тяжести $\bar{\Delta d}$ и среднеквадратичного отклонения σ_d . Пунктирная часть кривых соответствует области $\lambda > 8$ А, в которой $\phi(y_1)$ не измерялось из-за недостатка интенсивности. Можно, однако, ожидать, что при $\lambda > 8$ А $\phi(y_1)$ изменяется незначительно, поэтому для вычислений использовалось распределение $\phi(y_1)$ при $\lambda = 8$ А.

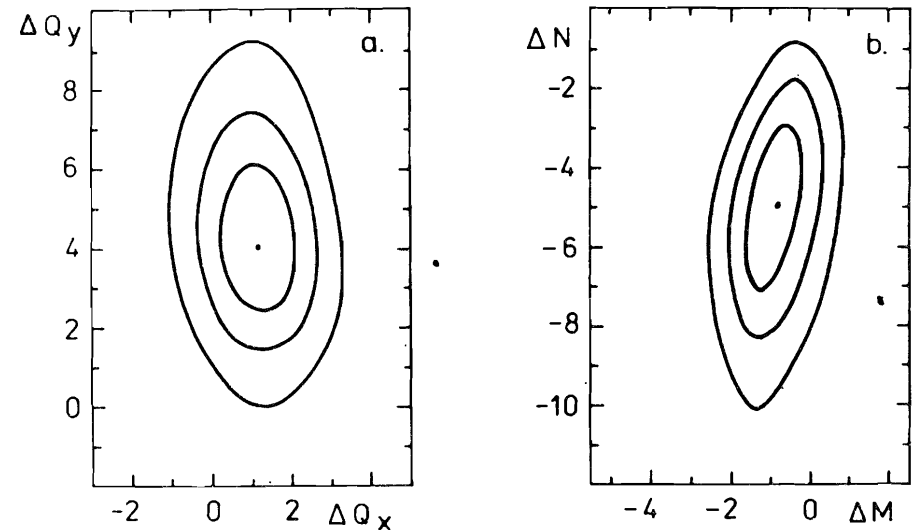


Рис.5. Функция разрешения в горизонтальной плоскости для $\theta_B = 45^\circ$, $L_2 = 128$ см, $\tau = 64$ мкс, $n_g = 32$, $Q_0 = 1,683 \text{ \AA}^{-1}$. а/ в $(\Delta Q_x, \Delta Q_y)$ -шкале шаг - $0,003 \text{ \AA}^{-1}$. б/ в $(\Delta N, \Delta M)$ -шкале.

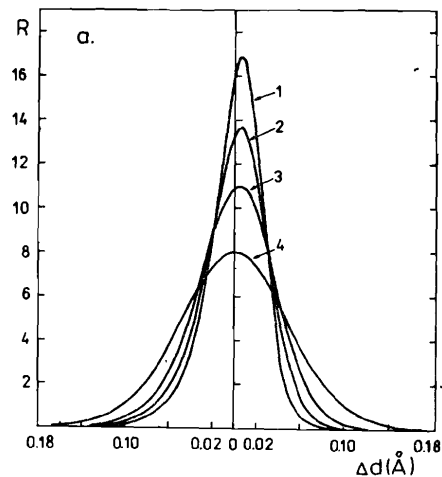


Рис.6. Функция разрешения для поликристалла в шкале $\Delta d = d - \bar{d}$ - центр тяжести / при $L_2 = 125$ см, $\tau = 64$ мкс, $n_g = 32$.
 a/ $\theta_B = 30^\circ$ и $d_0 = 1 \text{ \AA}$ /1/,
 $3,5 \text{ \AA}$ /2/, 6 \AA /3/, 9 \AA /4/;
 б/ $d_0 = 4 \text{ \AA}$ и $\theta_B = 75^\circ$ /1/,
 45° /2/, 30° /3 /, 15° /4/.

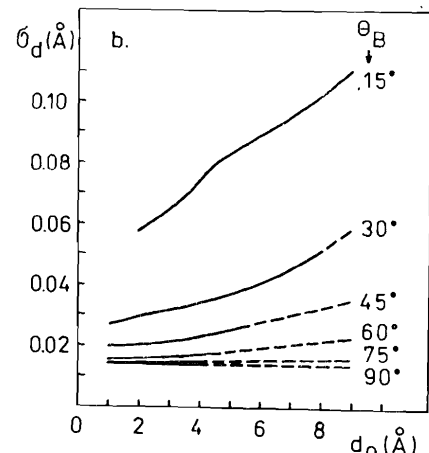
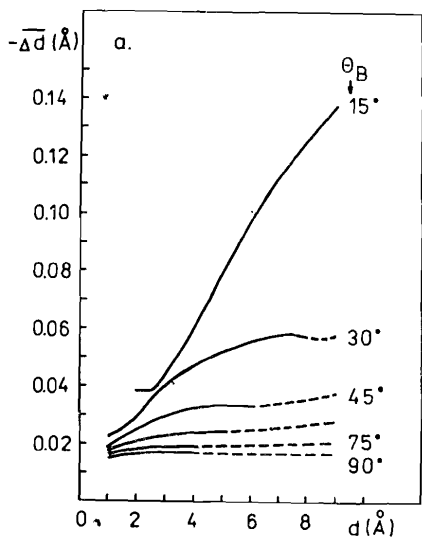
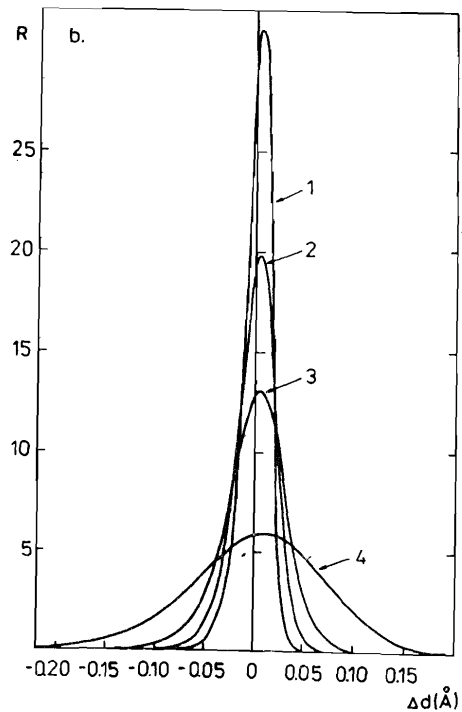


Рис.7. Зависимость от d_0 и θ_B центра тяжести $\Delta \bar{d}$ /а/ и средне-квадратичного отклонения σ_d /б/

функции разрешения для поликристалла в шкале Δd при $L_2 = 125$ см, $\tau = 64$ мкс, $n_g = 32$. Прерывистые части кривых соответствуют $\lambda > 8 \text{ \AA}$.

Корректность вычислений функции разрешения для порошка была проверена экспериментально с помощью стандартного образца Al_2O_3 - керамика в форме цилиндра 0,6 см диаметром и 2 см высотой, без текстуры и с неуширенными дифракционными линиями. Дифференциальное сечение рассеяния единичного объема образца

$$\sigma(Q) = 2\pi^2 \frac{F_H^2 \cdot j_H}{v_c^2 \cdot H^2} \delta(Q - H). \quad /24/$$

Принимая во внимание выражение /1, 31/ для светосилы

$$\mathcal{L} = \tau \cdot \Omega_1 \cdot v_o \cdot w_o \cdot \lambda_o / L_2 \cdot T_o, \quad /25/$$

запишем скорость счета в d -шкале:

$$I(\Delta d_o) = n_g \cdot \tau_d \cdot \Omega_1 \cdot \frac{v_o \cdot w_o}{L_2^2} \cdot V \cdot \Phi_o(\lambda_B) \cdot A(\lambda_B) \cdot \frac{F_H^2 \cdot j_H}{32\pi \cdot v_c^2} \cdot \frac{\lambda_B^4}{\sin^3 \theta_B} \cdot R_p(-\Delta d_o). \quad /26/$$

Выражение /26/ дает профиль отдельного пика H ; суммируя по пикам, попавшим в заданный интервал d , и добавляя параметризованное выражение для фона, мы получаем модельную функцию для анализа профиля нейтронограммы по методу Ритвельда. Для того, чтобы исключить влияние $\Phi_o(\lambda_o)$ на качество описания профиля, применялась следующая модель:

$$I(d_i) = B(d_i) + \sum_{k=1}^N c_k \cdot R_p[-(d_i - d_{Bk})], \quad /27/$$

где $B(d_i)$ - фон, сумма берется по всем пикам, дающим вклад в анализируемый интервал спектра. На небольших интервалах фон задавался линейной /или квадратичной/ функцией. Свободными параметрами являлись: c_k - площадь пика, d_{Bk} - положение пика и параметры функции B . Обработывались три нейтронограммы от Al_2O_3 , измеренные при $\theta_B = 40^\circ, 60^\circ$ и 75° . Выбирались интервалы различной длины, в том числе и содержащие хорошо разделенные пики. Обычный R -фактор по профилю был всегда меньше, чем 0,025, а взвешенный R_w -фактор меньше, чем 0,045, что свидетельствует о вполне удовлетворительном описании профиля с помощью функции разрешения. На рис.8 иллюстрируется результат, полученный для одного из интервалов.

Для некоторых участков спектра была проведена его деконволюция /см.1/. В этом случае в качестве фона брались значения, полученные в результате обработки профиля спектра. После деконволюции все отсчеты для каждого пика концентрировались максимум в двух каналах. С другой стороны, интегральные интенсивности пиков, полученные в результате описания профиля и декон-

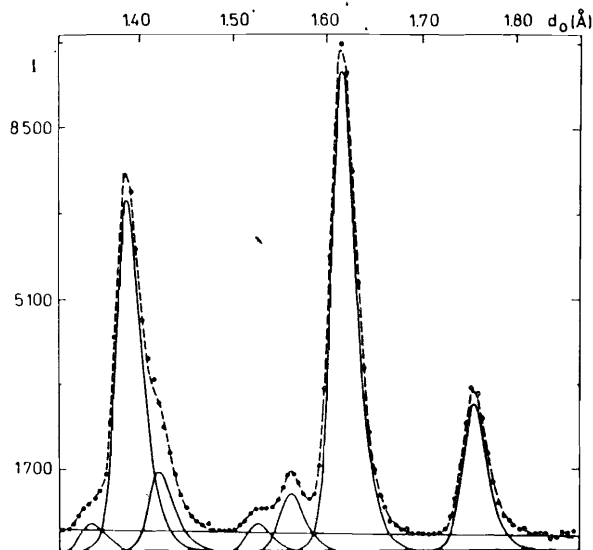


Рис.8. Описание с помощью /27/ участка нейтронограммы от Al_2O_3 , измеренной при $\theta_B = 60^\circ$, $L_2 = 125$ см, $\tau = 64$ мкс, $n_g = 32$. Спектр /точки/ представлен в шкале d и нормирован на Φ_0 , сплошные линии - компоненты спектра /семь пиков и фон/, прерывистая линия - сумма компонент.

волюции, совпадали всегда в пределах 2%. Отсюда следует, что для нашего образца Al_2O_3 действительно

справедливо соотношение /24/ и, кроме того, это является еще одним подтверждением корректности функции разрешения R_p . Результат деконволюции профиля, представленного на рис.8, показан на рис.9. Для монокристалла пример деконволюции, выполненной с помощью функции разрешения типа /10/, был уже представлен в 1. Применение функции разрешения для анализа дифракционных спектров от поликристаллов по методу Ритвельда является предметом следующей публикации.

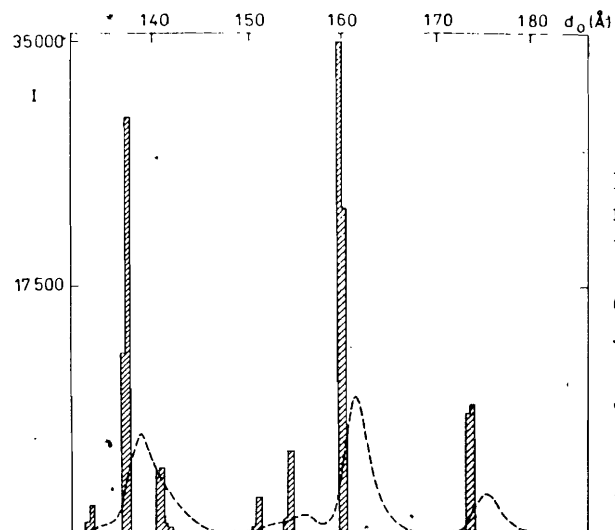


Рис.9. Результат деконволюции того же участка спектра от Al_2O_3 , что и на рис.8. Спектр после деконволюции показан в виде гистограммы, т.к. каждый пик занимает максимум два канала. Прерывистая линия - измеренный спектр.

ЛИТЕРАТУРА

1. Балагуров А.М. и др. ОИЯИ, 3-84-291, Дубна, 1984.
2. Балагуров А.М., Бескровный А.И., Попа Н. ОИЯИ, РЗ-84-765, Дубна, 1984.
3. Попа Н. ОИЯИ, Р14-87-293, Дубна, 1987.
4. Мюле Э., Попа Н., Попеску М. ОИЯИ, РЗ-85-279, Дубна, 1985.

Рукопись поступила в издательский отдел
10 июля 1987 года.

НЕТ ЛИ ПРОБЕЛОВ В ВАШЕЙ БИБЛИОТЕКЕ?

Вы можете получить по почте перечисленные ниже книги, если они не были заказаны ранее.

D7-83-644	Труды Международной школы-семинара по физике тяжелых ионов. Алушта, 1983.	6 р.55 к.
D2,13-83-689	Труды рабочего совещания по проблемам излучения и детектирования гравитационных волн. Дубна, 1983.	2 р.00 к.
D13-84-63	Труды XI Международного симпозиума по ядерной электронике. Братислава, Чехословакия, 1983.	4 р.50 к.
D2-84-366	Труды 7 Международного совещания по проблемам квантовой теории поля. Алушта, 1984.	4 р.30 к.
D1,2-84-599	Труды VII Международного семинара по проблемам физики высоких энергий. Дубна, 1984.	5 р.50 к.
D10,11-84-818	Труды V Международного совещания по проблемам математического моделирования, программированию и математическим методам решения физических задач. Дубна, 1983.	3 р.50 к.
D17-84-850	Труды III Международного симпозиума по избранным проблемам статистической механики. Дубна, 1984. /2 тома/	7 р.75 к.
D11-85-791	Труды Международного совещания по аналитическим вычислениям на ЭВМ и их применению в теоретической физике. Дубна, 1985.	4 р.00 к.
D13-85-793	Труды XII Международного симпозиума по ядерной электронике. Дубна, 1985.	4 р.80 к.
D4-85-851	Труды Международной школы по структуре ядра. Алушта, 1985.	3 р.75 к.
D3,4,17-86-747	Труды V Международной школы по нейтронной физике. Алушта, 1986.	4 р.50 к.
	Труды IX Всесоюзного совещания по ускорителям заряженных частиц. Дубна, 1984. /2 тома/	13 р.50 к.
D1,2-86-668	Труды VIII Международного семинара по проблемам физики высоких энергий. Дубна, 1986. /2 тома/	7 р.35 к.
D9-87-105	Труды X Всесоюзного совещания по ускорителям заряженных частиц. Дубна, 1986. /2 тома/	13 р.45 к.
D7-87-68	Труды Международной школы-семинара по физике тяжелых ионов. Дубна, 1986	7 р.10 к.
D2-87-123	Труды Совещания "Ренормгруппа-86". Дубна, 1986	4 р.45 к.

Заказы на упомянутые книги могут быть направлены по адресу: 101000 Москва, Главпочтамт, п/я 79. Издательский отдел Объединенного института ядерных исследований.

Балагуров А.М., Бескровный А.И., Попа Н. P3-87-531
Функция разрешения нейтронного дифрактометра на импульсном реакторе ИБР-2

На основе экспериментальных данных построена функция разрешения нейтронного дифрактометра по времени пролета ДН-2, действующего на импульсном реакторе ИБР-2. Сравнение вычисленного и измеренного профилей дифракционного спектра от стандартного поликристаллического образца Al_2O_3 показало их соответствие в пределах 2,5%.

Работа выполнена в Лаборатории нейтронной физики ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1987

Перевод О.С.Виноградовой

Balagurov A.M., Beskrovnyi A.I., Popa N. P3-87-531
Resolution Function of Neutron Diffractometer on IBR-2 Pulsed Reactor

The resolution function of the time-of-flight neutron diffractometer DN-2 on the IBR-2 is constructed on the base of experimental data. The comparison of calculated and measured diffraction spectra from the standard Al_2O_3 polycrystalline sample pointed to their conformity within the 2.5% limit.

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

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1987