

P3-2025-37

С. В. Сумников, Б. Ержанов, Р. Н. Васин,
Д. А. Балагуров, В. М. Милков, М. М. Подлесный,
А. А. Богдзель, В. В. Журавлев, Н. Д. Зернин,
С. А. Куликов, В. И. Боднарчук, А. М. Балагуров

НЕЙТРОННЫЙ ФУРЬЕ-ДИФРАКТОМЕТР
ВЫСОКОГО РАЗРЕШЕНИЯ
С ШИРОКОАПЕРТУРНЫМ ДЕТЕКТОРОМ

Направлено в журнал «Nuclear Instruments and Methods
in Physics Research. Section A: Accelerators, Spectrometers,
Detectors and Associated Equipment»

Нейтронный фурье-дифрактометр высокого разрешения с широкоапертурным детектором

Нейтронный фурье-дифрактометр высокого разрешения (ФДВР), на котором реализован корреляционный метод накопления дифракционных данных, успешно эксплуатируется на импульсном реакторе ИБР-2 в ЛНФ ОИЯИ уже более 30 лет. В настоящей работе подведены итоги проведенной модернизации ряда основных узлов ФДВР. Фурье-прерыватель, зеркальный нейтронвод, электроника накопления данных были заменены на новые, современные устройства, и приведены первые результаты ввода в строй нового широкоапертурного сцинтилляционного детектора с общей площадью чувствительных элементов около 13 м^2 и полным телесным углом около $2,0 \text{ ср}$. Обсуждаются появившиеся новые возможности в изучении атомных и магнитных структур кристаллических материалов и в анализе различного рода переходных процессов в них в режиме реального времени.

Работа выполнена в Лаборатории нейтронной физики им. И. М. Франка ОИЯИ.

High-Resolution Neutron Fourier Diffractometer with Wide-Aperture Detector

The high-resolution neutron Fourier diffractometer (HRFD), which implements the correlation method of diffraction data acquisition, has been successfully operated at the IBR-2 pulsed reactor at the Frank Laboratory of Neutron Physics (JINR) for more than 30 years. This paper summarizes the results of the modernization of a number of the HRFD main units. The Fourier chopper, neutron guide, and data acquisition electronics were replaced with new, state-of-the-art devices, and the initial results from commissioning a new wide-aperture scintillation detector with a total sensitive element area of about 13 m^2 and a total solid angle of about 2.0 sr are presented. The newly emerged capabilities for investigating atomic and magnetic structures of crystalline materials and analyzing various types of transient processes in them in real time mode are discussed.

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

ВВЕДЕНИЕ

Действующий в ОИЯИ (Дубна, Россия) исследовательский импульсный реактор ИБР-2 принадлежит к типу источников нейтронов с длинным импульсом: $\Delta t_0 \approx 350$ мкс для тепловых нейтронов. При такой ширине импульса разрешающая способность $R = \Delta d/d$, d — межплоскостное расстояние, стандартного дифрактометра, расположенного на ИБР-2 на разумном пролетном расстоянии ($L \leq 40$ м) и действующего с использованием метода времени пролета (TOF-дифрактометр), составляет $R \geq 0,01$ при $d = 2$ Å. Достижение уровня высокого разрешения, под которым понимается $R \leq 0,002$, потребовало бы увеличения пролетного расстояния до $L \approx 200$ м с неизбежным значительным уменьшением потока нейтронов на образце. Соответственно, единственным способом получения высокого разрешения на ИБР-2 является сокращение длительности нейтронного импульса с помощью того или иного типа быстрого дискового прерывателя.

Для реализации этой цели еще в конце 1980-х гг. было предложено использовать на ИБР-2 механический фурье-прерыватель, включающий вращающийся диск (ротор) с регулярным расположением прозрачных и непрозрачных для тепловых нейтронов промежутков (щелей) одинаковой ширины и неподвижный статор с такой же, как на роторе, конфигурацией щелей. Периодическая, пилообразная функция пропускания такого прерывателя по форме близка к синусоиде, и, как следует из математического анализа, при фиксированной частоте модуляции первичного пучка нейтронов интенсивность рассеянных нейтронов представляет собой функцию, близкую к соответствующей фурье-гармонике сечения рассеяния. Варьируя частоту вращения ротора от нулевой до некоторой максимальной и выполняя обратное фурье-преобразование, можно восстановить вид сечения рассеяния. Малая ширина щелей фурье-прерывателя (~ 1 мм при полном их числе ~ 1000) позволяет сократить эффективную ширину нейтронного импульса до ~ 10 мкс, причем пропускание прерывателя составляет около 25 % вместо стандартных 0,5 % для однощелевого прерывателя, а система ротор–статор обеспечивает большое поперечное сечение нейтронного пучка (до ~ 50 см²). Однако перекрытие спектров от соседних импульсов прерывателя требует использования корреляционных способов восстановления спектра рассеянных нейтронов.

Первая версия фурье-дифрактометра высокого разрешения (ФДВР) была введена в строй на ИБР-2 в 1994 г. [1] коллаборацией ОИЯИ (Дубна),

ПИАФ (Гатчина) и VTT (Еспоо, Финляндия), который стал первым в мире корреляционным дифрактометром высокого разрешения на импульсном источнике нейтронов. Итоги двадцатилетней успешной эксплуатации ФДВР с примерами полученных научных результатов подведены в обзоре [2]. В 2015 г. началось обновление основных функциональных узлов ФДВР, которое включало замену зеркального нейтронотода, фурье-прерывателя и электроники накопления данных. Предварительные результаты модернизации ФДВР изложены в работе [3], в которой было анонсировано, что следующим этапом будет замена детекторной системы дифрактометра. В 2021 г. началось изготовление нового кольцевого широкоапертурного детектора обратного рассеяния ДОР-А, которое было завершено в конце 2024 г.; подробное описание проекта приведено в работе [4].

Главной особенностью ДОР-А является использование в его конструкции принципа пространственно-временной (или геометрической) фокусировки, впервые изложенного в работе [5]. В этой работе было показано, что для измеряемого на ТОФ-дифрактометре дифракционного пика с межплоскостным расстоянием d_{hkl} вследствие корреляции угла Брэгга, θ , и длины волны нейтрона, λ (связанных уравнением Брэгга–Вульфа), время регистрации нейтронов детектором не будет зависеть от θ , если точки поверхности детектора удовлетворяют условию

$$[L_1 + L_2(\theta)] \sin \theta = \text{const}, \quad (1)$$

где L_1 — длина пути от импульсного источника нейтронов до образца, L_2 — длина пути от образца до детектора. Выполнение условия (1) позволяет резко увеличить линейные размеры детектора при сохранении приемлемого уровня разрешающей способности дифрактометра. В исходной версии детекторной системы ФДВР условие (1) выполнялось кусочно-непрерывным образом с использованием двух блоков, расположенных при углах рассеяния $\pm 152^\circ$, с шестью квадратными плоскими ^6Li -стеклами с линейными размерами от 100 до 150 мм в каждом. Эта конструкция действительно обеспечила относительно большой телесный угол, $\Omega_d = 0,16$ ср, при геометрическом вкладе в функцию разрешения, не превышающем $4 \cdot 10^{-4}$.

Известно, что альтернативным решением проблемы увеличения телесного угла детекторной системы с сохранением высокого уровня разрешения является использование многопиксельных детекторов с характерными размерами пикселей 5×5 мм (см., например, [6]). Перевод спектров, измеренных отдельными элементами, в абсолютную шкалу, например, межплоскостных расстояний, и последующее их суммирование производится на компьютере. Этот вариант набора данных с широкоапертурных детекторов получил название электронной фокусировки. Его основным недостатком является необходимость большого объема регистрирующей электроники, поскольку в этом случае полное число независимых элементов может составлять десятки тысяч.

Первая версия использовавшейся на ФДВР корреляционной электроники была весьма дорогой, и вариант геометрически сфокусированного де-

тктора с одним выходным сигналом был фактически единственно возможным. В последующем была разработана заметно менее дорогая электроника, что позволило предложить метод накопления корреляционных данных с использованием комбинированной электронно-геометрической фокусировки [7]. В этом методе предполагается, что многоэлементная детекторная система состоит из относительно больших по размерам отдельных элементов, поверхность каждого из которых удовлетворяет условию геометрической фокусировки, а формирование единого дифракционного спектра выполняется с применением электронной фокусировки. Именно такой подход использован при создании фурье-дифрактометра ФСД, предназначенного для анализа механических напряжений в объемных материалах и изделиях, успешно действующего на реакторе ИБР-2 с 2010 г. [8]. Основная детекторная система ФСД состоит из 14 независимых элементов, площадь каждого из которых составляет около 1400 см². Аналогичный подход — многоэлементный детектор и комбинированная электронно-геометрическая фокусировка — было решено использовать и при создании ДОР-А.

В настоящей работе подведены итоги ранее проведенной модернизации ряда узлов ФДВР, приведены актуальные характеристики нового детектора ДОР-А, выполнен анализ результатов проведенных с ним тестовых и научных экспериментов и обсуждены новые возможности, появившиеся на ФДВР в результате ввода ДОР-А в строй.

1. ХАРАКТЕРИСТИКИ ФДВР ДО ВВОДА В СТРОЙ ДОР-А

Конфигурация основных механических узлов ФДВР на конец 2023 г. показана на рис. 1. Непосредственно к дифрактометру относятся фурье-прерыватель, зеркальный нейтроновод и детекторная система с электроникой накопления данных.

В новой версии фурье-прерывателя (ФП), изготовленной фирмой Mirotron Ltd (Hungary) в 2016 г., были сохранены основные механические характеристики предыдущей версии, а именно, диаметр ротора (540 мм),

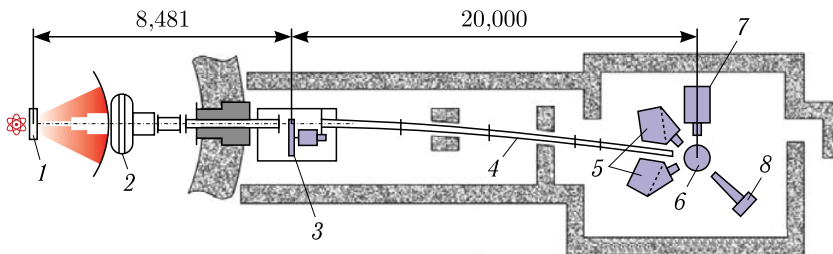


Рис. 1. Конфигурация ФДВР на реакторе ИБР-2 до модернизации детекторной системы: 1 — замедлитель быстрых нейтронов, 2 — фоновый прерыватель, 3 — фурье-прерыватель, 4 — изогнутый зеркальный нейтроновод, 5 — детекторы обратного рассеяния ($2\theta = \pm 152^\circ$), 6 — позиция образца, 7 — детектор при $2\theta = 90^\circ$, 8 — позиционно-чувствительный детектор при $2\theta = 30^\circ$

число щелей (1024), длина щелей (60 мм), ширина щели в середине (0,70 мм), поглощающий материал (Gd_2O_3), толщина слоя Gd_2O_3 (0,8 мм). Ротор выполнен из упрочненного сплава на основе Al (Al 7075 T6) и допускает максимальную частоту вращения 6000 об/мин. В отличие от предыдущей версии ротор и статор помещены в герметичный кожух с уровнем вакуума $5 \cdot 10^{-2}$ мм. рт. ст., механическая конструкция статора обеспечивает точную настройку и фиксацию фазы pick-up сигналов. Новые датчик pick-up сигналов и система управления позволили заметно уменьшить дифференциальную нелинейность мгновенной скорости ротора. Сканирование по всем частотам модуляции интенсивности нейтронного пучка вплоть до максимальной, необходимое для получения дифракционных спектров с высоким разрешением, происходит в поступательно-возвратном режиме и, как правило, занимает 1–3 ч.

В 2017 г. на ФДВР был установлен новый зеркальный нейтронвод, изготовленный компанией SwissNeutronics (Switzerland), со следующими параметрами: полная длина 18,8 м, сечение плоскопараллельное в горизонтальной и сходящееся по параболе в вертикальной плоскостях (входное окно 15×200 мм², выходное окно 15×100 мм²), покрытие стекол суперзеркальное на основе Ni/Ti с $m = 1,75$, пропускание 96%. В диапазоне длин волн (2–6) Å увеличение потока составило около 2,5, доходя до 9 вблизи $\lambda = 1$ Å.

Еще одним важным этапом в развитии фурье-дифрактометрии было внедрение в 2017 г. метода регистрации всех событий эксперимента (старты реактора, сигналы от всех элементов детекторной системы, pick-up сигналы прерывателя) в списочном режиме (list-mode). Был использован разработанный в ЛНФ ОИЯИ унифицированный блок MPD, предназначенный для регистрации и сбора исходных данных в режиме list-mode с индивидуальных счетчиков нейтронов или модулей детекторов [9, 10]. Такой способ накопления данных позволил использовать новые возможности, которые не были доступны на анализаторах первых версий, и существенно улучшить качество дифракционных спектров высокого разрешения. В частности, в режиме list-mode стала возможной коррекция фазовой ошибки (рассогласование pick-up сигналов прерывателя с реальным состоянием системы ротор–статор), которая ранее приводила к характерным провалам на крыльях профилей дифракционных пиков. Кроме того, новая версия накопления данных позволила ввести еще одну важную поправку в формирование дифракционных спектров. А именно, в этом режиме преобразование данных в гистограммы производится независимо для каждого элемента детектора, а последующее суммирование выполняется после приведения спектров к единой шкале. Эта процедура позволила уменьшить инструментальное уширение дифракционных пиков и, соответственно, улучшить разрешающую способность на $\sim 10\%$.

Помимо блоков основного синтиллиационного детектора, расположенных при средних углах рассеяния $2\theta = \pm 152^\circ$, в детекторную систему ФДВР входили аналогичный синтиллиационный детектор при $2\theta = 90^\circ$ и линейный ПЧД при $2\theta = 30^\circ$. Низкая частота повторения импульсов

реактора ИБР-2 (5 Гц) позволяла этими детекторами одновременно измерять дифракционные спектры в широком диапазоне межплоскостных расстояний d_{hkl} : (0,5–4,5) Å для $2\theta = \pm 152^\circ$, (0,8–5) Å для $2\theta = 90^\circ$ и до ~ 15 Å при $2\theta = 30^\circ$.

Важной особенностью ФДВР является возможность простого переключения между модами высокого разрешения ($\Delta d/d \approx 0,001$) и высокой светосилы со средним разрешением ($\Delta d/d \approx 0,015$). Нейтронограммы, измеренные с высоким разрешением, используются для прецизионного уточнения структуры и анализа профилей дифракционных пиков. Для перехода ко второй моде фурье-прерыватель выдвигается из нейтронного пучка, и для накопления дифракционных спектров используется стандартный метод времени пролета. Интенсивности дифракционных пиков при этом заметно (в ~ 10 раз) увеличиваются, и полный дифракционный спектр может быть измерен с необходимой статистикой за время 1–5 мин. Эта мода применяется, например, для анализа фазовых трансформаций в образце в реальном времени. Так, стандартная постановка экспериментов по изучению структурных и магнитных переходов в сплавах на основе железа состоит в измерении спектров высокого разрешения перед нагревом образца и после его охлаждения и спектров среднего разрешения в ходе его непрерывного нагрева до ≈ 1200 К и последующего охлаждения при скорости изменения температуры от одного до нескольких градусов в минуту.

2. ФУНКЦИЯ РАЗРЕШЕНИЯ ФДВР

Как показано в [11], в случае непрерывного изменения частоты вращения фурье-прерывателя от нулевой до ν_{\max} вклад в профиль дифракционного пика, связанный с временем пролета, может быть представлен в виде

$$\phi(t) \approx \Omega^{-1} \int_0^{\Omega} g(\omega) \cos(\omega t) d\omega, \quad (2)$$

где t — время пролета, $g(\omega)$ — функция распределения частот вращения прерывателя, $\Omega = 2\pi \cdot N \cdot \nu_{\max}$ — максимальная частота модуляции нейтронного пучка фурье-прерывателем, $N = 1024$ — число щелей на прерывателе. В стандартном режиме работы ФДВР вращение прерывателя определяется частотным распределением Блэкмана: $g(u) = 1 + p \cdot \cos(\pi u) + q \cdot \cos(2\pi u)$, где $u = \omega/\omega_{\max}$, $p = 1,03$, $q = 0,08$. В этом случае профиль $\phi(t)$ близок к гауссиану. Иногда используется равномерное распределение частот (окно Пуассона), при котором $g(\omega) = \text{const}$, $0 \leq \omega \leq \omega_{\max}$. В этом случае ширина $\phi(t)$ становится несколько меньше, чем для окна Блэкмана, но на крыльях профиля присутствуют характерные дополнительные максимумы. Как следует из модельных расчетов, ширина распределения $\phi(t)$ (эффективная ширина импульса) слабо зависит от вида функции $g(\omega)$, в основном, она определяется значением Ω , а именно $\Delta t_0 \approx 2\pi/\Omega =$

$= 1/(N \cdot \nu_{\max})$, и при $\nu_{\max} = 100$ Гц (6000 об/мин) ширина $\phi(t)$ на половине высоты составляет $\Delta t_0 \approx 10$ мкс.

Качество дифрактометра высокого разрешения, прежде всего, определяется его функцией разрешения, под которой в экспериментах с поликристаллами понимается зависимость относительной ширины дифракционных пиков от межплоскостного расстояния: $R(d) = \Delta d/d$, Δd — полная ширина на половине высоты (FWHM). В случае ТОФ-дифрактометра в выражение для функции разрешения принято включать три слагаемых, связанных с дисперсиями соответствующих гауссовых распределений:

$$R(d) = \Delta d/d = \sqrt{(\Delta t_0/t)^2 + (\Delta\theta/\text{tg } \theta_0)^2 + (\Delta L/L)^2}, \quad (3)$$

где $t = 252,778L\lambda$ — полное время пролета (в мкс), λ — длина волны нейтрона (в \AA), L — пролетное расстояние (от замедлителя до детектора для ТОФ-дифрактометра или от фурье-прерывателя до детектора для фурье-дифрактометра, в м), θ_0 — угол Брэгга. В $\Delta\theta$ следует учитывать все геометрические неопределенности процесса рассеяния, которые в основном определяются коллимацией первичного пучка и размерами образца, а в ΔL входят разбросы в пролетном расстоянии, связанные с размерами образца и толщиной детектирующих элементов.

Для ТОФ-дифрактометров, действующих на источниках с коротким импульсом (типа spallation), Δt_0 примерно линейно растет со временем пролета и, как результат, $R(d) \approx \text{const}$ в довольно широком диапазоне d . Для ФДВР Δt_0 является константой, что определяет гиперболическое поведение функции $R(d)$. Эта особенность, с одной стороны, затрудняет анализ дифракционных спектров при $d < 1$ \AA , но, с другой стороны, разрешение улучшается с ростом d_{hkl} , что благоприятствует профильному анализу пиков при больших межплоскостных расстояниях. Учитывая, что для ФДВР $L \approx 21$ м, получаем для времени пролета нейтроном расстояния между фурье-прерывателем и детектором: $t \approx 10617 \cdot d_{hkl}$, (при $\theta_0 \approx 90^\circ$), где время — в мкс, d_{hkl} — в \AA . Соответственно, временная компонента функции разрешения ФДВР есть $R_t = \Delta t_0/t \approx 9,4 \cdot 10^{-4}/d_{hkl} \approx 0,0005$ при $d_{hkl} = 2$ \AA . Геометрический вклад в $R(d)$ сильно зависит от угла Брэгга и для ДОР-А может составлять $R_\theta \approx 0,0009$. При толщине сцинтиллятора < 1 мм толщине образца вдоль пучка нейтронов ~ 5 мм и $L > 20$ м последнее слагаемое в (3) не превышает 0,0002 и может не учитываться. Таким образом, при $\nu_{\max} = 6000$ об/мин и $d = 2$ \AA разрешающая способность ФДВР должна быть близка к $R \approx 0,001$.

При исследовании реальных кристаллов дифракционные пики могут быть значительно уширены из-за эффектов, связанных с конечными размерами областей когерентного рассеяния, микродеформациями и дефектами упаковки в кристаллитах. Из нашей практики следует, что, например, при изучении металлических сплавов оптимальной разрешающей способностью дифрактометра является $R \approx 0,002$. Переход к более высокому разрешению необходим в случае структурного анализа низкосимметричных кристаллов

с большими элементарными ячейками или при изучении тонких эффектов искажения профилей дифракционных пиков.

3. ШИРОКОАПЕРТУРНЫЙ ДЕТЕКТОР ОБРАТНОГО РАССЕЯНИЯ

Схема и внешний вид ДОР-А показаны на рис.2. Детектор имеет кольцевую и секторную структуру и состоит из отдельных элементов, с каждого из которых снимаются детектируемые сигналы. Элементами детектора являются пластиковые экраны, изготовленные на основе сцинтиллятора $ZnS(Ag)/^6LiF$. Поверхность каждого элемента с необходимой точностью соответствует условию геометрической фокусировки, подроб-

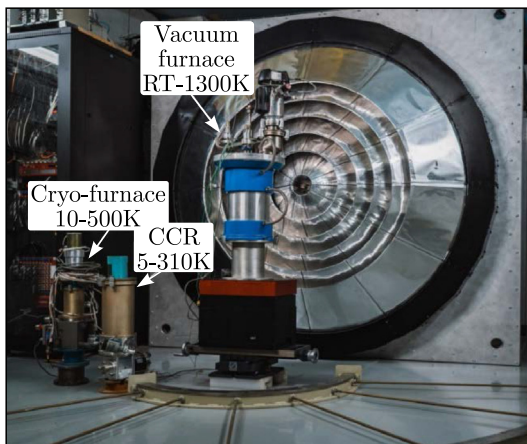
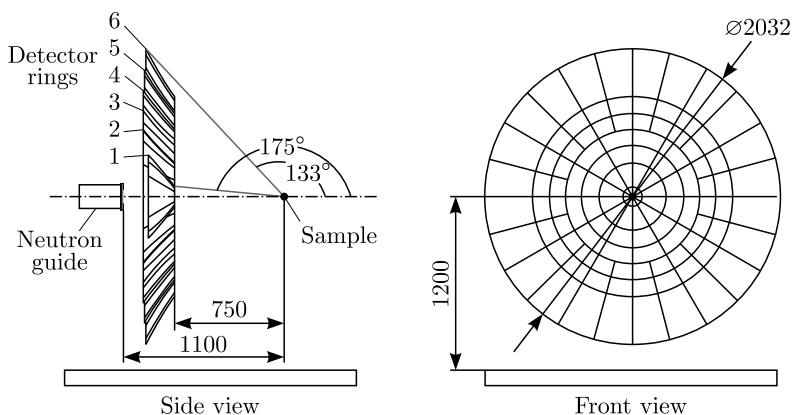


Рис. 2. Вверху: схема многокольцевого, многоэлементного сцинтилляционного детектора ДОР-А, вид сбоку и вид спереди. Внизу: детектор и устройства задания температуры образца

ное математическое описание которой дано в работе [12]. Использование фокусировки позволяет значительно увеличить полный телесный угол детектора при радикальном уменьшении числа детектирующих элементов и при сохранении геометрической компоненты функции разрешения на приемлемом уровне. Как результат, ДОР-А при диаметре около 2 м и телесном угле 2,0 ср (в 12,5 раз больше существовавшего) имеет всего 108 независимых чувствительных элементов. Три внутренних кольца ДОР-А разделены на 12 секторов (по 30°), три внешних кольца разделены на 24 сектора (по 15°). Кольца детектора перекрывают интервал углов рассеяния (133–175)°, причем технические особенности конструкции позволяют практически полностью исключить потери, связанные с перекрытиями чувствительных элементов. Геометрические характеристики колец детектора, необходимые для анализа дифракционных спектров, приведены в таблице. Указанная в ней константа дифрактометра используется для связи шкал времени и межплоскостных расстояний в соответствии с формулой $t \approx 505,556 \cdot (L \sin \theta) \cdot d$, из которой следует, что на ДОР-А регистрация спектров в интервале $d \approx (0,5-5) \text{ \AA}$ происходит в интервале времен пролета $\sim (5-50) \text{ мс}$.

Для увеличения эффективности регистрации нейтронов элементы сцинтилляторов сделаны двухслойными. Толщина каждого слоя составляет 0,42 мм, но с учетом наклона экранов относительно рассеянного пучка она увеличивается (до 1,6 мм для внешнего кольца) в достаточной степени, чтобы обеспечить необходимую эффективность регистрации нейтронов. Согласно модельным расчетам, средняя по кольцам эффективность детектора (для $\lambda = 1,8 \text{ \AA}$) находится в диапазоне от 59 до 96% для внутренних и внешних колец соответственно. Введение второго слоя увеличивает число электронных детекторных трактов до 216, но оно по-прежнему много меньше числа трактов в случае многопиксельных детекторов. Сбор и транспортировка светового сигнала от экрана к фотоумножителю осуществляется по спектросмещающим волокнам (WLS fibers), наклеенным с обеих сторон сцинтиллятора. Детальное описание особенностей использования $\text{ZnS(Ag)}/^6\text{LiF}$ сцинтилляторов для регистрации тепловых нейтронов приведено в работе [13].

Данные для колец BSD. Указаны номер кольца, L — полное пролетное расстояние прерыватель–образец–детектор, θ° — максимальный угол Брэгга, $L \cdot \sin \theta$ — константа дифрактометра для каждого кольца

Кольцо	L , м	θ°	$L \cdot \sin \theta$
R1	20,749	87,525	20,730
R2	20,777	81,455	20,546
R3	20,814	77,460	20,318
R4	20,862	74,210	20,075
R5	20,924	71,360	19,827
R6	20,994	68,775	19,570

На первом этапе введения ДОР-А в эксплуатацию для регистрации всех событий эксперимента (старты реактора, сигналы от всех элементов детекторной системы, *pick-up* сигналы прерывателя) использовалась та же электроника, что и на предыдущем детекторе, обеспечивающая накопление данных в режиме *list-mode*. Для восстановления дифракционных спектров из накопленных корреляционных данных в стандартном гистограммном виде применялись те же алгоритмы, что и ранее. Однако увеличившийся поток данных потребовал значительного улучшения пропускной способности системы их накопления.

4. РЕЗУЛЬТАТЫ ТЕСТИРОВАНИЯ ДЕТЕКТОРА ДОР-А

Для определения характеристик ДОР-А и сравнения их с характеристиками предыдущей версии детектора использовались несколько стандартных поликристаллов: La^{11}B_6 (NIST SRM 660b), Al_2O_3 (NIST SRM 676) и $\text{Na}_2\text{Al}_2\text{Ca}_3\text{F}_{14}$ (NAC). Примеры измеренных на них дифракционных спектров показаны на рис. 3. Они получены прямым суммированием спектров, зарегистрированных всеми двенадцатью элементами кольца R1. Это оказалось возможным благодаря отсутствию значимых сдвигов положений дифракционных пиков в различных элементах кольца (рис. 4). Есть небольшие вариации амплитуды пиков, что связано с настройкой электронных трактов, но ширины пиков от отдельных элементов и ширина суммарного пика практически совпадают. Например, при частоте оборотов прерывателя 6000 об/мин разрешение для суммарного пика с $d = 1.386 \text{ \AA}$ составляет $R = 0,0011$, тогда как для пиков от отдельных элементов оно близко к 0,0010. При основной рабочей частоте 2500 об/мин различие еще меньше. Профили отдельных пиков имеют небольшую асимметрию, но близки к гауссиану. Несколько более точное описание профиля достигается с использованием функций Фогта или псевдо-Фогта, являющихся комбинацией функций Гаусса и Лоренца (рис. 5). Основные характеристики дифракционных пиков — положение, площадь, ширина — при описании профиля функциями Гаусса или Фогта остаются практически неизменными.

Из приведенной таблицы следует, что угол Брэгга заметно изменяется при переходе от кольца к кольцу и в соответствии с (3) при переходе от R1 к R6 происходит уширение дифракционных пиков. Если эффекты конечных размеров областей когерентного рассеяния и микродеформаций в кристаллитах (идеальный поликристалл), уширяющих дифракционные пики, отсутствуют, то функциональная зависимость ширины пиков от межплоскостного расстояния, как следует из (3), выражается формулой

$$\Delta d^2 = C_1 + C_2 d^2, \quad (4)$$

где $C_1 \sim \Delta t_0$, $C_2 \sim \Delta \theta$. Соответственно, зависимость Δd^2 от d^2 должна быть линейной. Из рис. 6, а видно, что линейность этой функции действительно выполняется с хорошей точностью. Перевод экспериментальных величин, приведенных на рис. 6, а, и описывающих их ли-

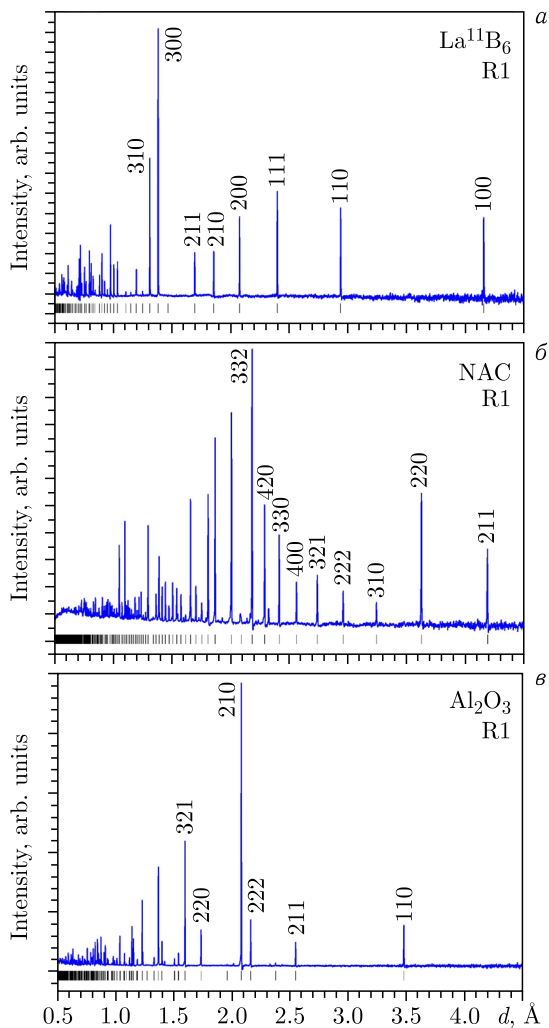


Рис. 3. Примеры дифракционных спектров стандартных поликристаллов La^{11}B_6 (а), $\text{Na}_2\text{Al}_2\text{Ca}_3\text{F}_{14}$ (NAC) (б) и Al_2O_3 (в). Показаны данные от кольца R1, измеренные при максимальной частоте вращения прерывателя 2500 об/мин и нормированные на эффективный спектр. Указаны индексы Миллера некоторых пиков. Для Al_2O_3 они даны в ромбоэдрической установке

нейных зависимостей в соответствующие функции разрешения, показан на рис. 6, б. Их гиперболическое поведение полностью соответствует формуле (3). Оно сильнее выражено для внутренних колец детектора, тогда как для внешних колец геометрическая компонента становится основной и $R(d) \approx \text{const}$ в широком интервале межплоскостных расстояний.

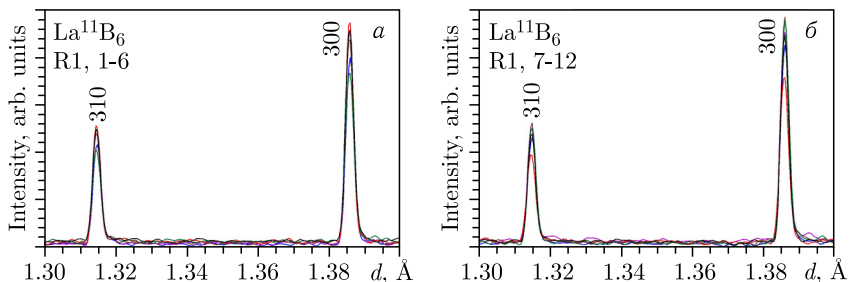


Рис. 4. Участок дифракционного спектра поликристалла La^{11}B_6 с пиками 300 и 310, кольцо R1, элементы 1–6 (а) и 7–12 (б)

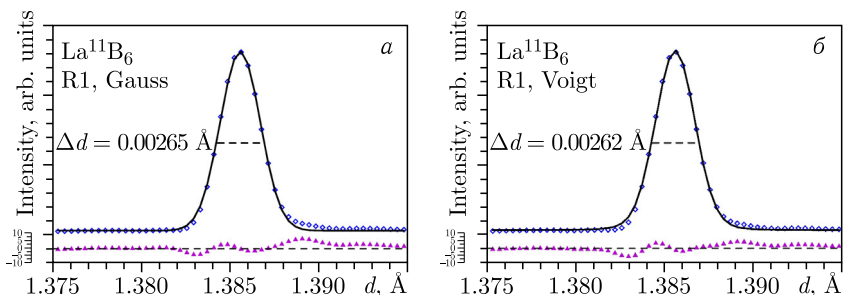


Рис. 5. Описание одного из дифракционных пиков La^{11}B_6 , измеренного кольцом R1, функцией Гаусса (а) и функцией Фогта (б). Показаны экспериментальные интенсивности, расчетная функция, разностная кривая, нормированная на ошибку в точке и FWHM. Статистические ошибки интенсивностей сравнимы с размером символов

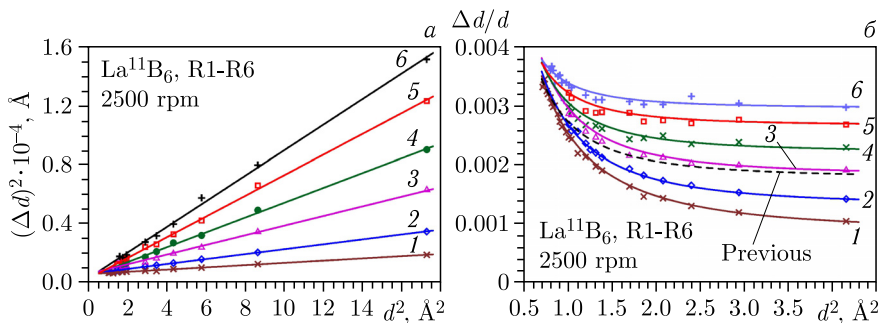


Рис. 6. а) Зависимости Δd^2 от d^2 для всех шести колец ДОР-А, измеренные на стандарте La^{11}B_6 при частоте вращения прерывателя 2500 об/мин (величины Δd^2 умножены на 10^{-4}); б) соответствующие функции разрешения. Пунктиром показана функция разрешения предыдущей версии детектора. На обоих графиках ошибки экспериментальных точек сравнимы с размером символов

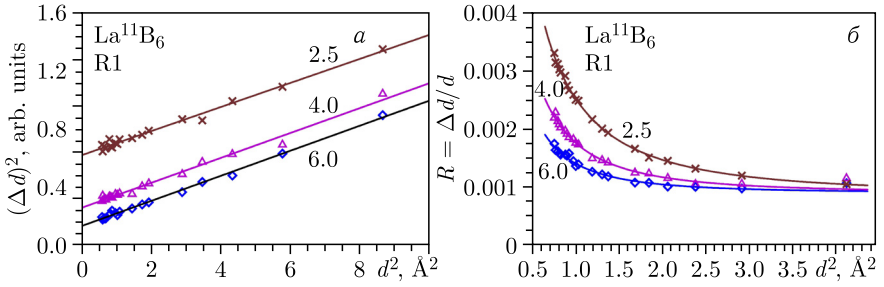


Рис. 7. а) Зависимости Δd^2 от d^2 для кольца R1, измеренные на стандарте La^{11}B_6 при частотах вращения прерывателя 2500, 4000 и 6000 об/мин; б) соответствующие функции разрешения. Линии соответствуют формуле (3). На обоих графиках ошибки экспериментальных точек сравнимы с размером символов

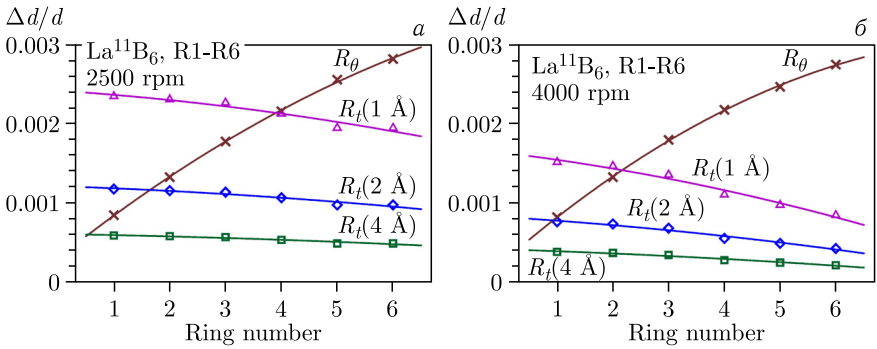


Рис. 8. а) Временная, R_t , и угловая, R_θ , компоненты функции разрешения, измеренные при максимальной частоте вращения прерывателя 2500 (а) и 4000 об/мин (б) для всех шести колец детектора. R_t показана для $d = 1, 2$ и 4 \AA

Аналогичные зависимости для первого кольца ДОР-А для разных максимальных частот вращения прерывателя показаны на рис. 7. Видно, что эффект от увеличения частоты вращения для функции разрешения значителен при $d < 2 \text{ \AA}$ и почти отсутствует при увеличении межплоскостного расстояния. Из линейных зависимостей (4) могут быть определены константы C_1 и C_2 и трансформированы во временную и угловую компоненты функции разрешения $R_t = \Delta t_0/t$ и $R_\theta = \Delta\theta/\tan\theta_0$, показанные на рис. 8 для всех колец детектора для максимальных частот вращения ФП 2500 и 4000 об/мин. Небольшое уменьшение R_t при увеличении угла рассеяния связано, по-видимому, с корреляциями вклада этих двух компонент функции разрешения в профили дифракционных пиков.

При переходе от кольца к кольцу дифракционные пики не только изменяются по ширине, но и заметно смещаются по положению на шкале времен пролета (рис. 9, а). Для суммирования спектры необходимо привести

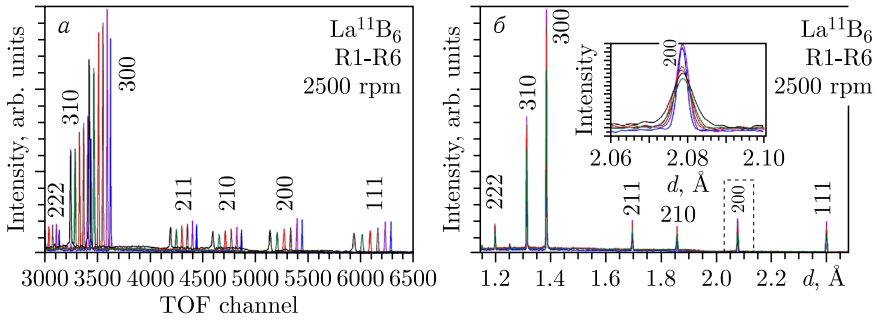


Рис. 9. а) Участки дифракционных спектров поликристалла La^{11}B_6 в шкале TOF каналов шириной 4 мкс, измеренные шестью кольцами детектора. Указаны индексы Миллера дифракционных пиков. б) Те же спектры, переведенные в шкалу межплоскостных расстояний, на вставке — пик (200)

к единой временной шкале, т. е. выполнить электронную фокусировку. Для этого с помощью созданного программного обеспечения производится пересчет шкалы с использованием коэффициентов, определяемых формулой

$$k_i = (L_i \cdot \sin \theta_i) / (L_0 \cdot \sin \theta_0), \quad (5)$$

где L_i и θ_i — пролетное расстояние и угол Брэгга для i -го кольца, L_0 и θ_0 — то же для базового кольца, в качестве которого может быть выбрано любое из 6 колец детектора. В качестве второго варианта производится перевод спектров в шкалу межплоскостных расстояний (рис. 9, б), после чего возможно их суммирование. Суммирование спектров, измеренных разными кольцами, приводит к увеличению ширин пиков и некоторому изменению их профиля. Например, для пика, показанного на рис. 5, после суммирования всех шести колец, его ширина увеличивается с $\Delta d = 0,0026 \text{ \AA}$ до $0,0034 \text{ \AA}$, хотя изменение профиля невелико (рис. 10). При суммиро-

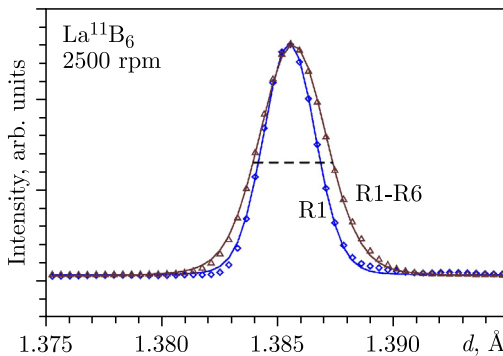


Рис. 10. Сравнение профилей пика 300 от кольца R1 и после суммирования спектров от всех колец (R1–R6). Пики нормированы по амплитуде

вании спектров от первых четырех колец уширение и изменение профиля пиков практически незаметно. Поскольку интенсивности пиков, измеренных отдельными кольцами, примерно одинаковы, то при суммировании происходит пропорциональное увеличение интенсивности. Соответственно, решение о числе спектров для суммирования принимается исходя из условий конкретной решаемой задачи.

5. ПРИМЕРЫ ПОЛУЧЕННЫХ РЕЗУЛЬТАТОВ

Основными физическими и материаловедческими задачами, решаемыми на ФДВР, являются уточнение атомной и магнитной структуры поликристаллов, анализ морфологии микроструктуры объемных материалов и исследование процессов в реальном времени, происходящих в материалах при внешнем воздействии. При необходимости ФДВР может использоваться для анализа эффектов искажения профилей дифракционных пиков от монокристаллов, чему способствует его высокое разрешение.

5.1. Уточнение параметров с использованием метода Ритвельда.

Интенсивности дифракционных пиков, измеряемые на ФДВР, описываются формулами, справедливыми для обычного TOF-дифрактометра, и для анализа атомной и магнитной структуры поликристаллов может быть использован метод Ритвельда, реализованный в различных программах, например: FullProf [14], MRIA [15] или GSAS [16]. Примером анализа по методу Ритвельда с использованием программы FullProf полученных на ФДВР данных является анализ зависимости магнитной структуры сплава Fe_3Ge от температуры, представленный в [17]. В настоящей работе метод Ритвельда использовался для определения экспериментальных констант детекторных колец ДОР-А по спектрам стандартных поликристаллов

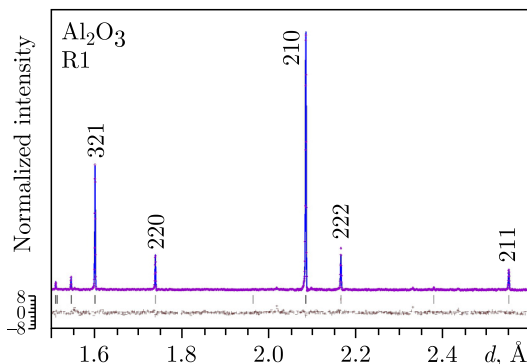


Рис. 11. Участок дифракционного спектра стандартного поликристалла Al_2O_3 , измеренный кольцом R1 и обработанный по методу Ритвельда. Показаны экспериментальные точки, расчетная и разностная функция (нормированная на статистическую ошибку) и штрихи, указывающие расчетные положения дифракционных пиков. Индексы Миллера некоторых пиков указаны в ромбоэдрической установке

Al_2O_3 ($R\bar{3}c$, $a = 5,13016 \text{ \AA}$, $\alpha = 55,27^\circ$), LaB_6 ($Pm\bar{3}m$, $a = 4,15689 \text{ \AA}$) и NaCl ($Fm\bar{3}m$, $a = 3,56562 \text{ \AA}$). Для исключения систематических ошибок, возможных при малых d_{hkl} , для уточнения пролетного расстояния использовались участки дифракционных спектров в области $d \approx 2 \text{ \AA}$ и больше. Уточнение проведено с использованием программы MR1A, в которой в качестве модельной функции для описания профилей пиков задавался реальный дифракционный пик из измеренного спектра. Пример обработки участка спектра от Al_2O_3 приведен на рис. 11. Уточнение экспериментальных констант для всех колец ДОР-А по спектрам трех стандартных поликристаллов дало очень близкие результаты. Например, для пролетного расстояния между прерывателем и кольцом R1 получено: 20,749, 20,748, 20,747 м для Al_2O_3 , LaB_6 и NaCl соответственно. Средняя величина есть $L = 20,748 \pm 0,001$, что дает относительную систематическую ошибку при уточнении линейных параметров ячейки изучаемых кристаллов $\Delta a/a = 0,00005$.

5.2. Анализ микроструктурной организации сплавов Fe-26(Al, Ga). Ранее для сплавов типа Fe-Ga и Fe-Al было показано, что в закаленном состоянии при определенных концентрациях Ga и Al они могут находиться в неоднородном состоянии, представляющем собой матрицу неупорядоченной фазы $A2$ с дисперсно распределенными в ней кластерами частично упорядоченных фаз $B2$ или DO_3 [18, 19]. Для учета относительно малых размеров кластеров и возможных микродеформаций в них в функциональную зависимость ширины дифракционных пиков от межплоскостного расстояния (4) следует добавить дополнительные слагаемые, а именно:

$$\Delta d^2 = C_1 + (C_2 + C_3)d^2 + C_4d^4, \quad (6)$$

где C_1 , C_2 — по-прежнему константы дифрактометра, $C_3 \approx (2\varepsilon)^2$, ε — микродеформация, $C_4 \approx (1/L_{\text{coh}})^2$, L_{coh} — характерный размер областей когерентного рассеяния (в первом приближении — размер кластеров). Формула (6) является обобщением известного построения Вильямсона–Холла на случай TOF-дифрактометра и анализа спектров, представленных в d -шкале в предположении, что форма дифракционных пиков с хорошей точностью описывается функцией Гаусса. Для определения констант C_3 и C_4 уровень разрешающей способности дифрактометра должен быть высоким. Например, только при $\Delta d/d \sim 0,001$ возможно уверенное определение L_{coh} вплоть до величин $\sim 3000 \text{ \AA}$.

На ФДВР с новым детектором ДОР-А проведены измерения дифракционных спектров высокого разрешения серии сплавов Fe-26 (Al, Ga) с различным соотношением Al и Ga (примеры спектров показаны на рис. 12). Из традиционной интерпретации наличия в спектрах специфических сверхструктурных пиков (111, 200, 311 и т. д.) следует, что сплавы находятся в упорядоченной фазе DO_3 . Однако рассмотрение, включающее анализ ширины пиков, показывает, что сплав Fe-26Ga находится в неоднородном $B2 + DO_3$ состоянии. Действительно, как видно из рис. 13, а, экспериментальные значения ширины пиков, разрешенных в фазе $B2$ (200, 220,

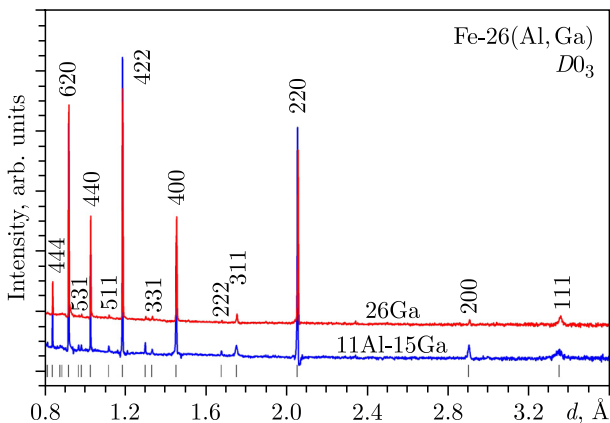


Рис. 12. Дифракционные спектры сплавов Fe-26Ga и Fe-11Al-15Ga, находящихся в фазе $D0_3$. Обозначены индексы Миллера некоторых пиков. Спектры сдвинуты по вертикальной шкале для наглядности

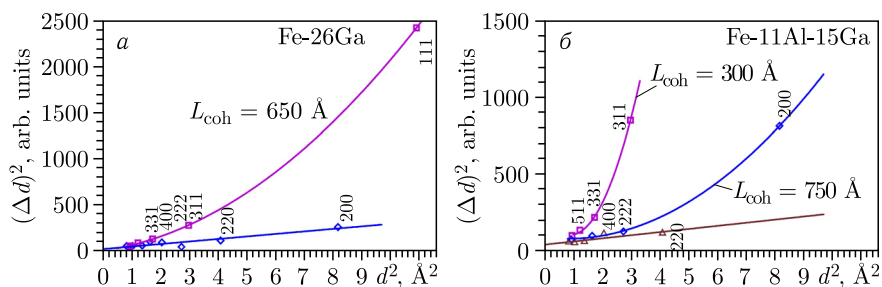


Рис. 13. Построения Вильямсона–Холла для ширин дифракционных пиков сплавов Fe-26Ga (а) и Fe-11Al-15Ga (б) после их закалки в воде. Сплошные линии — описание экспериментальных точек с использованием метода наименьших квадратов. Приведены индексы Миллера первых дифракционных пиков. Цифрами указаны характерные размеры областей когерентного рассеяния (кластеров упорядоченной фазы). На обоих графиках ошибки экспериментальных точек сравнимы с размером символов

222 и т. д.) и разрешенных в фазе $D0_3$ (111, 311, 331 и т. д.), ложатся на две разные зависимости, соответствующие разным характерным размерам областей когерентного рассеяния. Для пиков фазы $B2$ зависимость Δd^2 от d^2 линейная, что соответствует $L_{\text{coh}} > 3000 \text{ \AA}$, тогда как для сверхструктурных пиков фазы $D0_3$ она квадратичная, соответствующая $L_{\text{coh}} \approx 650 \text{ \AA}$. Состояние микроструктуры сплава Fe-11Al-15Ga еще более сложное. Ширины его дифракционных пиков ложатся на три заметно различающиеся зависимости, соответствующие неупорядоченной фазе $A2$ (пики 220,

400 и т. д.), кластерам фазы $B2$ (пики 200, 222 и т. д.) с $L_{\text{coh}} \approx 750 \text{ \AA}$ и кластерам фазы DO_3 (пики 311, 331 и т. д.) с $L_{\text{coh}} \approx 300 \text{ \AA}$.

5.3. Дифракция на монокристалле. Полезные результаты были получены при измерении дифракционных спектров от монокристалла $\alpha\text{-SiO}_2$ с малой мозаичностью, имевшего вид шестигранной призмы с шириной граней 10 мм. При комнатной температуре $\alpha\text{-SiO}_2$ имеет тригональную симметрию (пр. гр. $P3_221$) с параметрами элементарной ячейки $a = 4,9133 \text{ \AA}$, $c = 5,4053 \text{ \AA}$. Низкая симметрия решетки и сравнительно большие параметры ячейки приводят к тому, что дифракционные отражения от кристаллографических плоскостей различной ориентации наблюдаются почти во всех элементах всех колец детектора. В качестве примера на рис. 14, *a* показан один из измеренных спектров, представляющий собой порядки отражения от плоскости (110). На этом же рисунке показан профиль пика 110, измеренный при максимальной частоте вращения прерывателя 6000 об/мин. Вследствие большой частоты, минимального геометрического вклада и высокого совершенства структуры $\alpha\text{-SiO}_2$ дифракционные пики очень узкие ($\Delta d/d \approx 0,0007$) и хорошо видна некоторая асимметрия профиля пика, причина которой достоверно неизвестна.

Малая ширина дифракционных пиков от $\alpha\text{-SiO}_2$ позволила с хорошей точностью восстановить зависимость эффективной ширины нейтронного импульса, Δt_0 , от максимальной частоты вращения прерывателя, ν_{max} . Как показано в разд. 2, эти величины связаны соотношением $\Delta t_0 \approx 1/(N \times \nu_{\text{max}})$, соответственно зависимость Δt_0 от обратной частоты должна быть линейной. Экспериментальные величины Δt_0 , определенные из дифракционных спектров $\alpha\text{-SiO}_2$, измеренных при частотах вращения прерывателя 2500, 4000 и 6000 об/мин, показаны на рис. 15. Расчетная линия соответствует уравнению $\Delta t_{\text{calc}} = 58,59/\nu_{\text{max}}$ мкс, из эксперимента получено: $\Delta t_{\text{exp}} = 0,06 + 63,0/\nu_{\text{max}}$ мкс, здесь ν_{max} — в тысячах об/мин. Есть небольшое систематическое различие Δt_{calc} и Δt_{exp} , но в целом их соответствие друг другу хорошее.

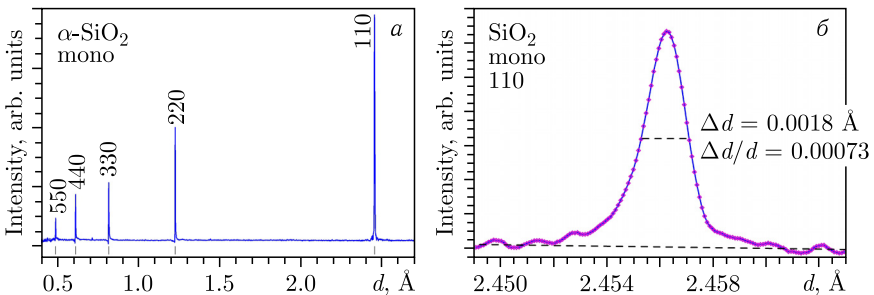


Рис. 14. *a*) Дифракционный спектр монокристалла $\alpha\text{-SiO}_2$; направление $[hh0]$, порядки отражения от плоскости (110), измеренные одним из элементов кольца R2. *б*) Пик 110 в увеличенном масштабе, измеренный при ширине канала анализатора 1 мкс

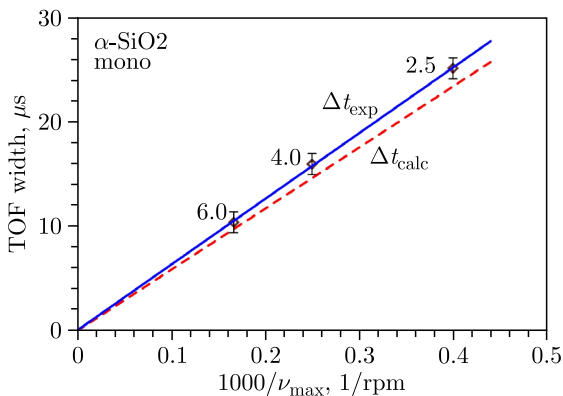


Рис. 15. Эффективная ширина импульса нейтронов как функция максимальной частоты вращения прерывателя. Показаны экспериментальные точки, проведенная через них линейная функция (Δt_{exp}) и расчетная кривая (Δt_{calc}). Цифрами обозначены величины ν_{max} в тысячах об/мин

5.4. Фазовые переходы в сплаве Fe-27.2Ga. Дифракция нейтронов является наиболее эффективным методом изучения температурных фазовых переходов в металлических сплавах. Это определяется несколькими обстоятельствами: большой глубиной проникновения нейтронов, большим поперечным сечением нейтронных пучков, высоким контрастом рассеяния на атомах, близко расположенных в таблице Менделеева, возможностью проводить набор данных в режиме *in situ* и в реальном времени. Первые два обстоятельства обеспечивают объемный характер получаемой информации, что исключает влияние эффектов поверхности и неоднородности структуры. Существенное различие когерентных длин рассеяния атомов металлов приводит к относительно большим интенсивностям сверхструктурных дифракционных пиков, по которым проводится идентификация структурных фаз. Наконец, современные нейтронные дифрактометры позволяют регистрировать спектры в достаточно широком интервале d_{hkl} за время $t_s \leq 5$ мин, что вполне достаточно для наблюдения сравнительно медленной, с постоянной времени $\tau \sim 10$ мин, кинетики фазовых переходов в сплавах. Все перечисленное справедливо и для ФДВР, и в ряде наших работ режим *in situ* с измерением спектров в реальном времени с $t_s = 1$ мин успешно использовался (см. например, [20, 21]). При этом фурье-прерыватель выдвигался из пучка нейтронов и спектры накапливались в стандартной моде времени пролета.

Ввод в строй ДОР-А расширил возможности работы в режиме *in situ* – real-time. Поскольку светосила каждого кольца примерно равна светосиле предыдущего детектора, то спектры с $t_s = 1$ мин можно накапливать каждым кольцом, что увеличивает светосилу после суммирования. В качестве примера на рис. 16 показана карта эволюции дифракционных спектров от сплава Fe-27.2Ga. В отличие от наших предыдущих исследований по-

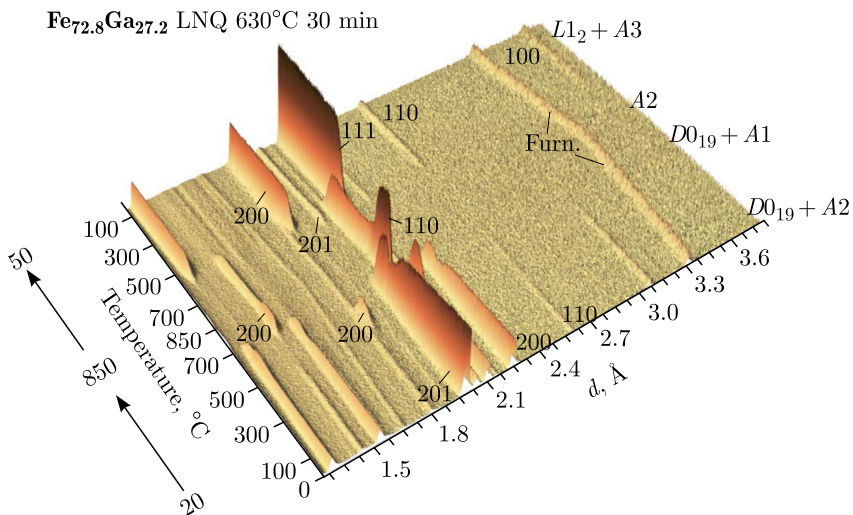


Рис. 16. Эволюция дифракционных спектров в сплаве Fe-27.2Ga (LNQ) в ходе его нагревания до 850 °С с и последующего охлаждения с постоянной скоростью ± 2 °С/мин. Ось температуры — снизу вверх, ось межплоскостных расстояний — слева направо. Указаны индексы Миллера структурных фаз $D0_{19}$ (нижний ряд), A_1 (пик 200), A_2 (пики 110 и 200), L_{12} (верхний ряд). Отдельные спектры измерялись каждую минуту, вся карта содержит около 900 спектров. Пик при $d \approx 3,3$ Å (furn.) связан с рассеянием на деталях печи

добных составов (см., например, [22]), в которых исходным состоянием сплавов после отливки была фаза $D0_3$, сплав Fe-27.2Ga (LNQ) был получен закалкой в жидком азоте с последующим отжигом в течение 30 мин при $T = 630$ °С и находился в фазе $D0_{19}$ с небольшой долей фазы A_2 .

Последующая математическая обработка полученных данных позволяет определить температуры переходов между различными структурными фазами, эволюцию их объемных долей и параметров элементарных ячеек (см., например, [21]).

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Выполненная модернизация детекторной системы ФДВР вывела оба основных режима его работы — высокого разрешения и высокой светосилы — на новый качественный уровень: разрешающая способность улучшилась в ~ 2 раза, светосила — в ~ 5 раз, что открывает новые области для исследований. Тем не менее, для ФДВР имеется перспектива дальнейшего улучшения характеристик и расширения тематики. Что касается разрешающей способности, то величина $\Delta d/d \approx 0,001$, в принципе, достаточна для решения большинства структурных задач; прецизионного анализа сложных структур, фазовых переходов с понижением симметрии, выявления тонких

особенностей организации микроструктуры кристаллитов и т. д. Зачастую уширение дифракционных пиков, связанное с микроструктурными особенностями образца, превышает эту величину, и необходимость в лучшем разрешении отсутствует. В случае ФДВР дополнительный резерв улучшения разрешения состоит в уменьшении расходимости первичного пучка нейтронов на образце с помощью установки соллеровского коллиматора на выходе нейтронотода.

Достигнутая на ФДВР светосила, позволяющая измерять полный дифракционный спектр большинства образцов за время ~ 1 мин в моде высокой интенсивности, также, в принципе, достаточна для анализа диффузионных процессов в кристаллах, поскольку их характерные времена, как правило, заметно больше. Соответственно, основным следствием полученного увеличения светосилы стало улучшение статистической точности экспериментальных данных. Более важным представляется расширение рабочего диапазона межплоскостных расстояний при работе в режиме *in situ* – real-time, что может быть достигнуто созданием аналогичного широкоапертурного детектора, расположенного при углах рассеяния вблизи 90° . Прототипом может служить детектор, введенный в строй на дифрактометре ФСД [8]. Следует еще раз отметить, что использование комбинированной электронно-геометрической фокусировки в конструкциях детекторных систем фурье-дифрактометров на реакторе ИБР-2 позволило в сотни раз сократить число независимых детекторных трактов по сравнению с многопиксельными детекторами на нейтронных источниках типа spallation.

Помимо улучшения условий для стандартных на ФДВР типов экспериментов, ДОР-А за счет своей многоэлементной структуры позволяет реализовать новое направление исследований — изучение кристаллографических текстур материалов. В проводившихся на ФДВР экспериментах с металлическими сплавами на основе железа было надежно установлено, что большинство изучаемых образцов были сильно текстурированы, что, конечно же, затрудняло их структурный анализ. По спектрам, измеренным различными элементами ДОР-А, возможно восстановить функции распределения по ориентациям для всех кристаллических фаз образца и учесть преимущественные ориентировки кристаллитов уже в анализе кристаллических структур. Предварительные оценки показали, что для этого обычные ТОФ-спектры достаточно измерить всего лишь при нескольких (≤ 5) различных ориентациях образца относительно первичного пучка и ДОР-А. Быстрые измерения дифракционных спектров в моде высокой интенсивности при минимальном количестве необходимых ориентаций образца открывают возможность для изучения эволюций текстуры поликристаллических материалов в ходе фазовых переходов в металлах, сплавах и минералах.

Благодарности. В модернизации ФДВР участвовали многие специалисты из ЛНФ, прежде всего, из Отдела комплекса спектрометров, которым авторы выражают глубокую благодарность. Особо мы хотели бы

отметить В. В. Круглова, первого руководителя проекта создания нового детектора, безвременно ушедшего от нас в 2020 г. Именно он внес огромный вклад в подготовку научно-технического обоснования, проведение расчетов, разработку конструкции и технологии изготовления элементов ДОР-А. Авторы благодарны В. Г. Симкину за большую помощь в работе по установке и тестированию ДОР-А. Исследования, выполненные с использованием нового детектора, частично финансировалась в рамках проекта РФФ 19-72-20080.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Aksenov V. L., Balagurov A. M., Simkin V. G., Bulkin A. P., Kudryashev V. A., Trounov V. A., Antson O., Hiismaki P., Tiitta A.* Performance of the High Resolution Fourier Diffractometer at the IBR-2 Pulsed Reactor // *J. Neutron Res.* 1997. V. 5. P. 181–200.
2. *Балагуров А. М., Бобриков И. А., Бокучава Г. Д., Журавлев В. В., Симкин В. Г.* Корреляционная фурье-дифрактометрия: 20-летний опыт эксплуатации на реакторе ИБР-2 // *ЭЧАЯ.* 2015. Т. 46. С. 453–501.
3. *Balagurov A., Balagurov D., Bobrikov I., Bogdzel A., Drozdov V., Kirilov A., Kruglov V., Kulikov S., Murashkevich S., Prikhodko V., Shvetsov V., Simkin V., Sirotin A., Zernin N., Zhuravlev V.* High-Resolution Neutron Fourier Diffractometer at the IBR-2 Pulsed Reactor: A New Concept // *Nucl. Instr. Meth. B.* 2018. V. 436. P. 263–271.
4. *Kruglov V. V., Balagurov A. M., Belova M. O., Bobrikov I. A., Bogdzel A. A., Bodnarchuk V. I., Bulavina V. V., Daulbaev O., Drozdov V. A., Zhuravlev V. V., Kirilov A. S., Kulikov S. A., Kurilkin A. K., Milkov V. M., Murashkevich S. M., Podlesnyy M. M., Prikhodko V. I., Churakov A. V., Shvetsov V. V.* Wide-Aperture Back-Scattering Detector (BSD) for the High-Resolution Fourier Diffractometer (HRFD) at the IBR-2 Reactor // *J. Neutron Res.* 2021. V. 23. P. 243–250.
5. *Carpenter J. M.* Extended Detectors in Neutron Time-of-Flight Diffraction Experiments // *Nucl. Instr. Meth.* 1967. V. 47. P. 179–180.
6. *He L., Deng S., Shen F., Chen J., Lu H., Tan Z., Zheng H., Hao J., Zhao D., Ma Q.* The Performance of General Purpose Powder Diffractometer at CSNS // *Nucl. Instr. Meth. A.* 2023. V. 1054. 168414.
7. *Kudryashev V. A., Trounov V. A., Mouratov V. G.* Improvement of Fourier Method and Fourier Diffractometer for Internal Residual Strain Measurements // *Physica B.* 1997. 234–236. P. 1138–1140.
8. *Bokuchava G.* Correlation RTOF Diffractometry at Long-Pulse Neutron Source: I. Data Acquisition in List-Mode // *Nucl. Instr. Meth. A.* 2020. V. 964. 163770 (1–21).
9. *Kulikov S. A., Prikhodko V. I.* New Generation of Data Acquisition and Data Storage Systems of the IBR-2 Reactor Spectrometers Complex // *Phys. Part. Nucl.* 2016. V. 47. P. 702–710.
10. *Bogdzel A. A., Drozdov V. A., Kruglov V. V., Murashkevich S. M., Prikhodko V. I., Shvetsov V. V.* The New Data Acquisition System MPD-32 for the High-Resolution Fourier Diffractometer at the IBR-2 Pulsed Reactor // *Proc. of the 27th Intern. Symp. on Nuclear Electronics and Computing.* 2019.

11. *Hiismäki P., Pöyry H., Tiitta A.* Exploitation of the Fourier Chopper in Neutron Diffractometry at Pulsed Sources // *J. Appl. Cryst.* 1988. V. 21. P. 349–354.
12. *Kudryashev V. A., Priesmeyer H. G., Keuter J. M., Trounov V. A.* Optimization of Detectors in Time-Focusing Geometry for RTOF Neutron Diffractometers // *Nucl. Instr. Meth. B.* 1994. V. 93. P. 355–361.
13. *Kuzmin E. S., Balagurov A. M., Bokuchava G. D., Zhuk V. V., Kudryashev V. A., Bulkin A. P., Trounov V. A.* Detector for the FSD Fourier-Diffractometer Based on ZnS(Ag)⁶LiF Scintillation Screen and Wavelength Shifting Fiber Readout // *J. Neutron Res.* 2002. V. 10. P. 31–41.
14. *Rodriguez-Carvajal J.* Recent Advances in Magnetic Structure Determination by Neutron Powder Diffraction // *Physica B.* 1993. V. 192. P. 55–69.
15. *Zloказov V. B., Chernyshev V. V.* MRIA — A Program for a Full Profile Analysis of Powder Multiphase Neutron-Diffraction Time-of-Flight (Direct and Fourier) Spectra // *J. Appl. Cryst.* 1992. V. 25. P. 447–451.
16. *Toby B. H., Von Dreele R. B.* GSAS-II: The Genesis of a Modern Open-Source All Purpose Crystallography Software Package // *J. Appl. Cryst.* 2013. V. 46. P. 544–549.
17. *Balagurov A. M., Samoylova N. Yu., Sumnikov S. V., Palacheva V. V., Golovin I. S.* Structural and Magnetic Phase Transitions in Fe₃Ge: A Neutron Diffraction Study // *Phys. Rev. Mater.* 2023. V. 7. 063603.
18. *Balagurov A. M., Bobrikov I. A., Sumnikov S. V., Golovin I. S.* Antiphase Domains or Dispersed Clusters? Neutron Diffraction Study of Coherent Atomic Ordering in Fe₃Al-Type Alloys // *Acta Mater.* 2018. V. 153. P. 45–52.
19. *Balagurov A. M., Bobrikov I. A., Sumnikov S. V., Golovin I. S.* Coherent Cluster Ordering in Fe-*x*Al and Fe-*x*Ga Alloys // *J. Alloys Compd.* 2021. V. 895. 162540 (1–8).
20. *Балагуров А. М., Головин И. С.* Рассеяние нейтронов в исследованиях функциональных сплавов на основе железа (Fe-Ga, Fe-Al) // *УФН.* 2021. Т. 191(7). С. 738–759.
21. *Yerzhanov B., Balagurov A. M., Mukhametuly B., Samoylova N. Yu., Sumnikov S. V., Palacheva V. V., Golovin I. S.* RE-Dependent Structures and Phase Transformations in Fe₇₃Ga₂₇-RE Alloys // *Appl. Phys. A.* 2025. V. 131. 356.
22. *Golovin I. S., Mohamed A. K., Bobrikov I. A., Balagurov A. M.* Time-Temperature Transformation from Metastable to Equilibrium Structure in Fe–Ga // *Mater. Lett.* 2020. V. 263. 127257 (1–4).

Получено 8 июля 2025 г.

ТЕМАТИЧЕСКИЕ КАТЕГОРИИ ПУБЛИКАЦИЙ ОБЪЕДИНЕННОГО ИНСТИТУТА ЯДЕРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ

Индекс	Тематика
1.	Экспериментальная физика высоких энергий
2.	Теоретическая физика высоких энергий
3.	Экспериментальная нейтронная физика
4.	Теоретическая физика низких энергий
5.	Математика
6.	Ядерная спектроскопия и радиохимия
7.	Физика тяжелых ионов
8.	Криогеника
9.	Ускорители
10.	Автоматизация обработки экспериментальных данных
11.	Вычислительная математика и техника
12.	Химия
13.	Техника физического эксперимента
14.	Исследования твердых тел и жидкостей ядерными методами
15.	Экспериментальная физика ядерных реакций при низких энергиях
16.	Дозиметрия и физика защиты
17.	Теория конденсированного состояния
18.	Использование результатов и методов фундаментальных физических исследований в смежных областях науки и техники
19.	Биофизика

Редактор *М. И. Зарубина*

Подписано в печать 13.08.2025.

Формат 60 × 90/16. Бумага офсетная. Печать цифровая.

Усл. печ. л. 1,75. Уч.-изд. л. 1,77. Тираж 125 экз. Заказ № 61150.

Издательский отдел Объединенного института ядерных исследований
141980, г. Дубна, Московская обл., ул. Жолио-Кюри, 6.

E-mail: publish@jinr.ru

www.jinr.ru/publish/