

**ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ
ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
ФИЛИАЛ МОСКОВСКОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО УНИВЕРСИТЕТА
имени М.В. ЛОМОНОСОВА
Физический факультет
Кафедра фундаментальных ядерных взаимодействий**

МАГИСТЕРСКАЯ ДИССЕРТАЦИЯ

**«Трёхмерное непрерывное сканирование обратного
пространства кристалла на нейтронном дифрактометре»**

Выполнил: студент 202 группы
Гаркин Александр Абдурахманович

Научный руководитель:
д.ф.-м.н., проф. Балагуров Анатолий Михайлович

Дубна
2026

Актуальность исследования

Роль нейтронных методов в физике конденсированного состояния:

- Высокая проникающая способность нейтронов позволяет исследовать объёмные образцы.
- Чувствительность к лёгким элементам (водород, дейтерий) и магнитным моментам.
- Метод времени пролёта (TOF) на импульсных источниках (реактор ИБР-2) даёт возможность одновременно регистрировать широкий диапазон межплоскостных расстояний.

Проблема: Изучение структур с доменным строением (сегнетоэластики) требует трёхмерного анализа обратного пространства.

Решение: Вращение кристалла в сочетании с позиционно-чувствительным детектором позволяет за один эксперимент получить полную 3D-картину рассеяния. Необходимо специализированное ПО для обработки таких данных.

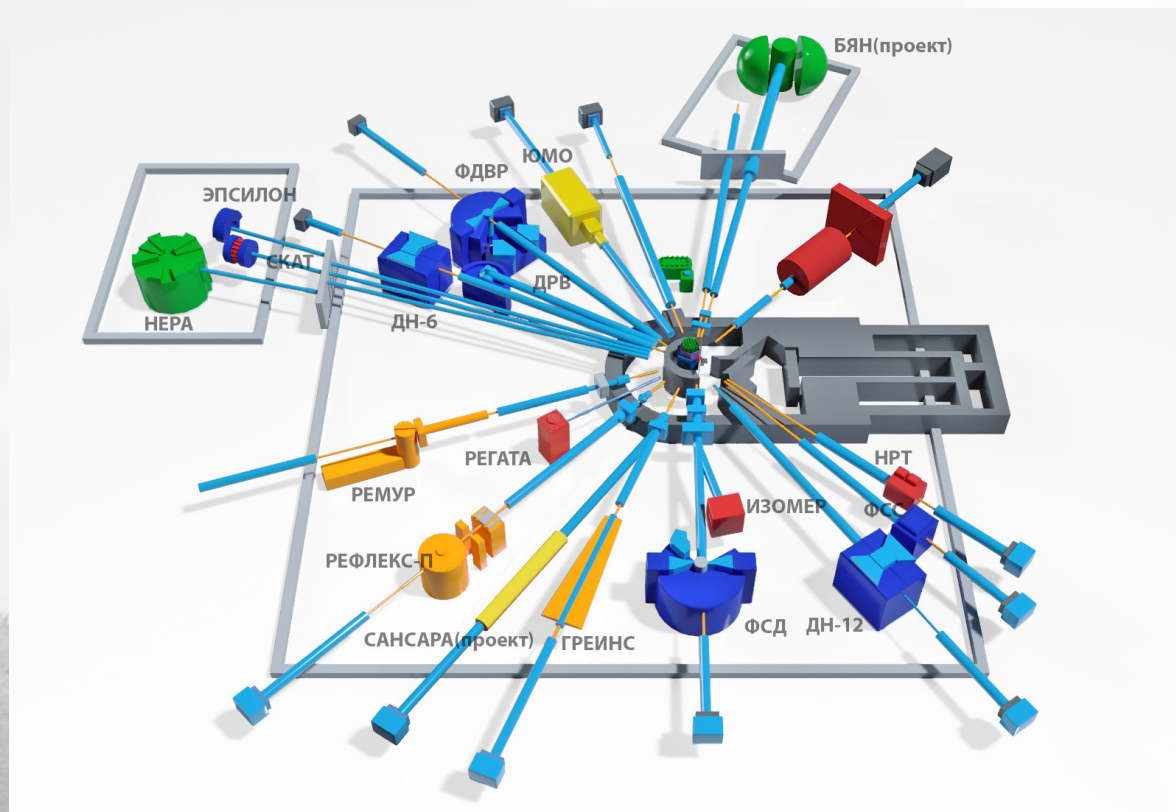
Цель и задачи работы

Цель: Разработка методики и программного обеспечения для трёхмерного непрерывного сканирования обратного пространства монокристаллов на нейтронном TOF-дифрактометре с 2D позиционно-чувствительным детектором и её апробация на модельных объектах.

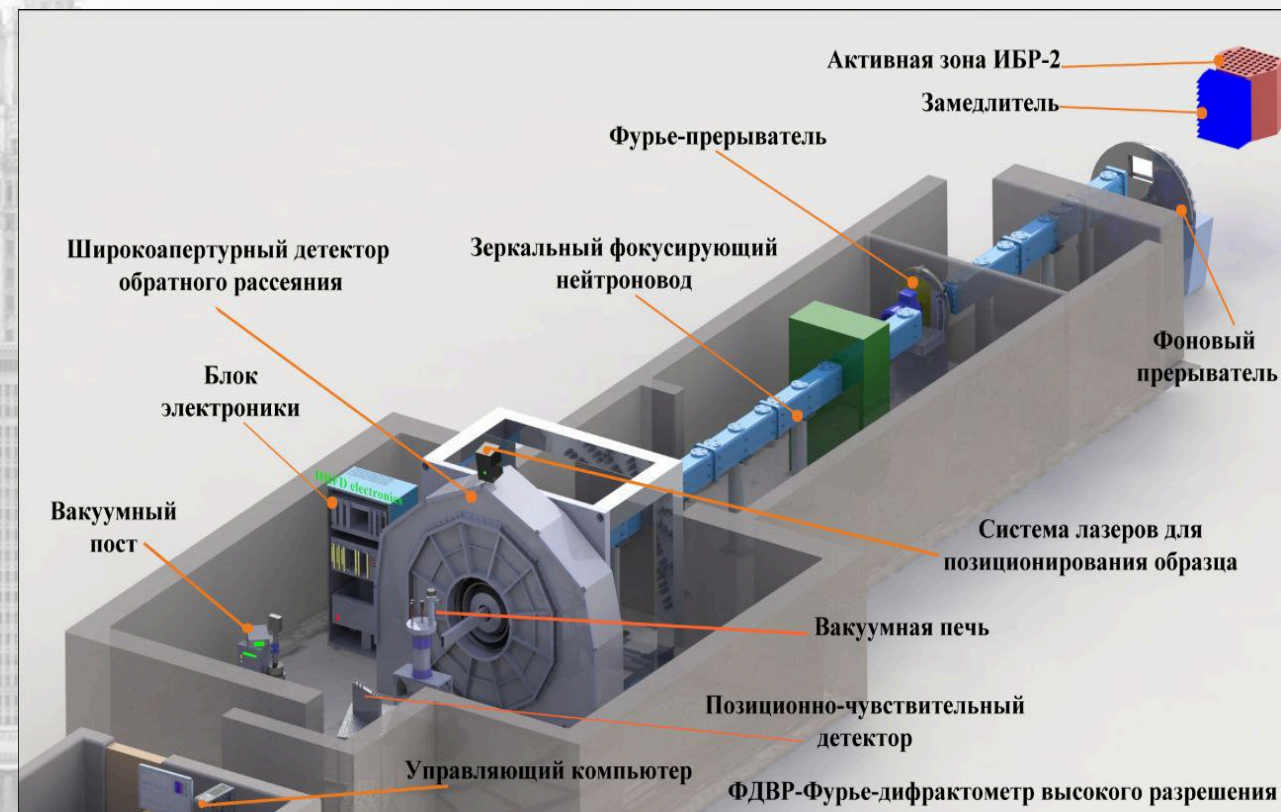
Задачи

- Изучить основы TOF-дифракции на монокристаллах и принцип работы гелиевого ПЧД.
- Разработать алгоритмы и программу на Python для чтения бинарных данных, фильтрации шумов и восстановления координат событий (X, Y, TOF).
- Реализовать интерактивные модули визуализации и анализа 3D-данных (проекции, срезы, геометрию).
- Провести эксперименты для определения пространственного разрешения и однородность пространственного разрешения детектора
- Провести эксперимент с сегнетоэластиком KD_2PO_4 , проанализировать изменение обратного пространства при фазовом переходе и определить угол двойникования при разной температуре .

Экспериментальная установка и метод



Реактор ИБР 2 и комплекс спектрометров



Фурье дифрактометр высокого разрешения (ФДВР)

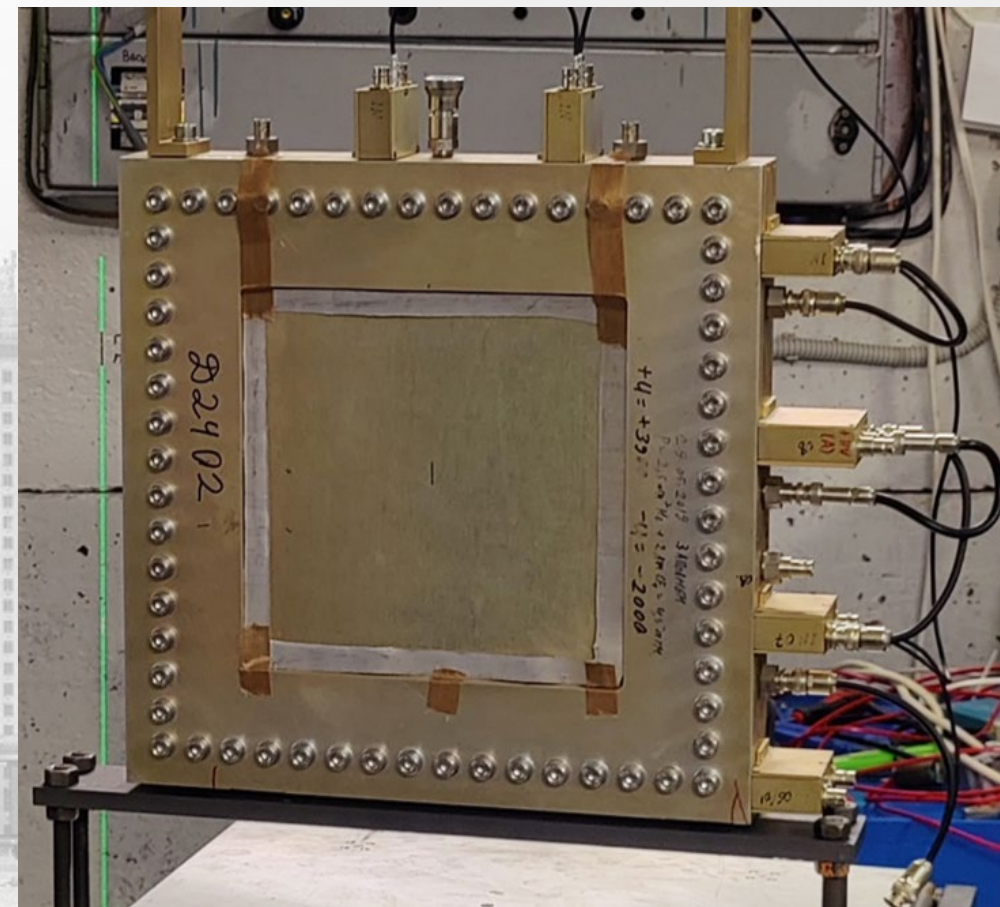
Экспериментальная установка

Принцип 3D-сканирования:

Кристалл вращается вокруг одной оси .

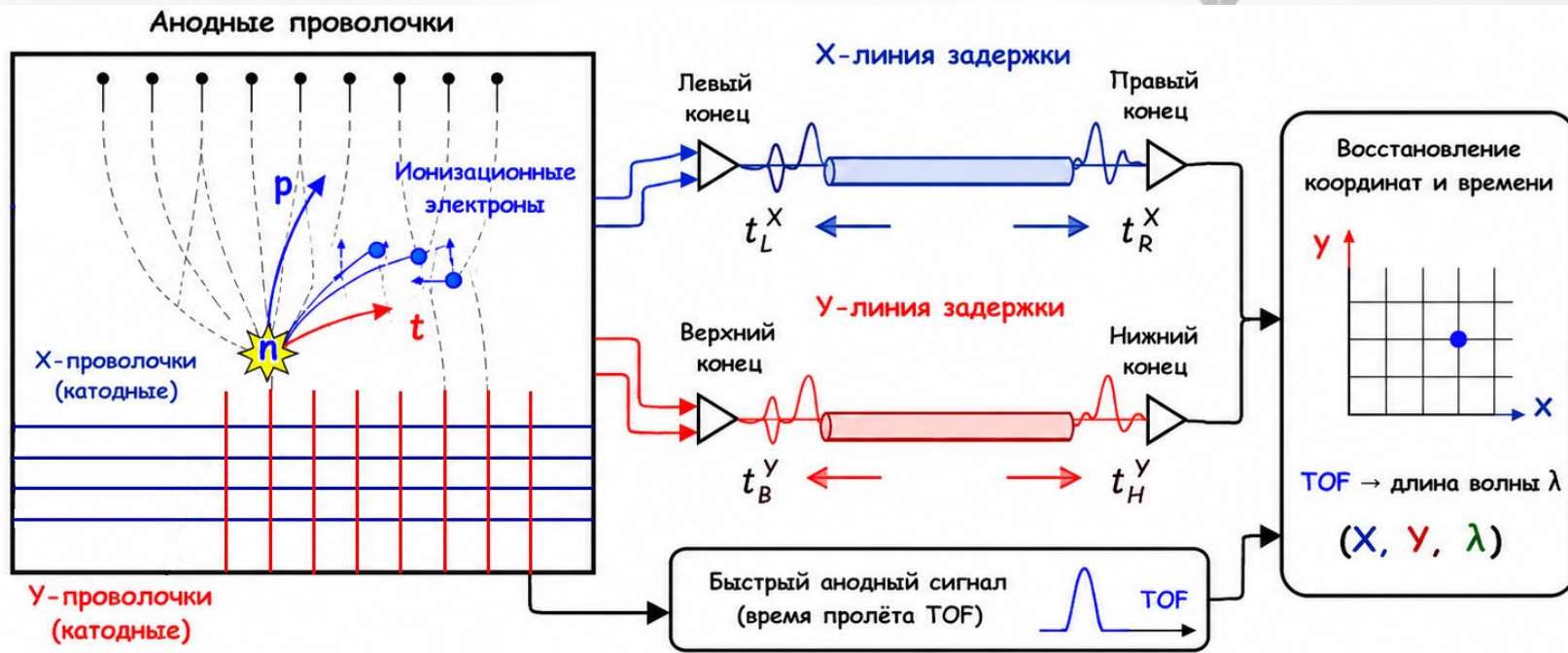
Детектор регистрирует каждое событие с координатами (X, Y) и временем пролёта TOF.

Совокупность событий формирует трёхмерный массив интенсивности в координатах (X, Y, TOF), который напрямую отображает обратное пространство кристалла.



2D Позиционно чувствительный детектор
200x200 мм (ПЧД)

Принцип работы 2D ПЧД



3 Определение координат (X, Y)

Координата X (горизонталь):

$$X = K_x \cdot (t_R^X - t_L^X)$$

где:

t_R^X – время прихода сигнала с правого конца X-линии задержки

t_L^X – время прихода сигнала с левого конца X-линии задержки

K_x – калибровочный коэффициент по X (мм/нс)

Знак X определяется положением, где сигнал пришёл раньше:

если $t_R^X > t_L^X$, то $X > 0$, иначе $X < 0$.

Координата Y (вертикаль):

$$Y = K_y \cdot (t_U^Y - t_D^Y)$$

где:

t_U^Y – время прихода сигнала с верхнего конца Y-линии задержки

t_D^Y – время прихода сигнала с нижнего конца Y-линии задержки

K_y – калибровочный коэффициент по Y (мм/нс)

Знак Y определяется положением, где сигнал пришёл раньше:

если $t_U^Y > t_D^Y$, то $Y > 0$, иначе $Y < 0$.

Время пролёта (TOF):

$$TOF = t_{Anod} - t_{stop}$$

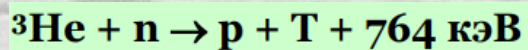
По TOF определяется длина волны нейтрона:

$$\lambda = \frac{h}{m_n} \cdot \frac{TOF}{L}$$

где

L – расстояние от мишени до детектора (101.5 см)

m_n – масса нейтрона, h – постоянная Планка



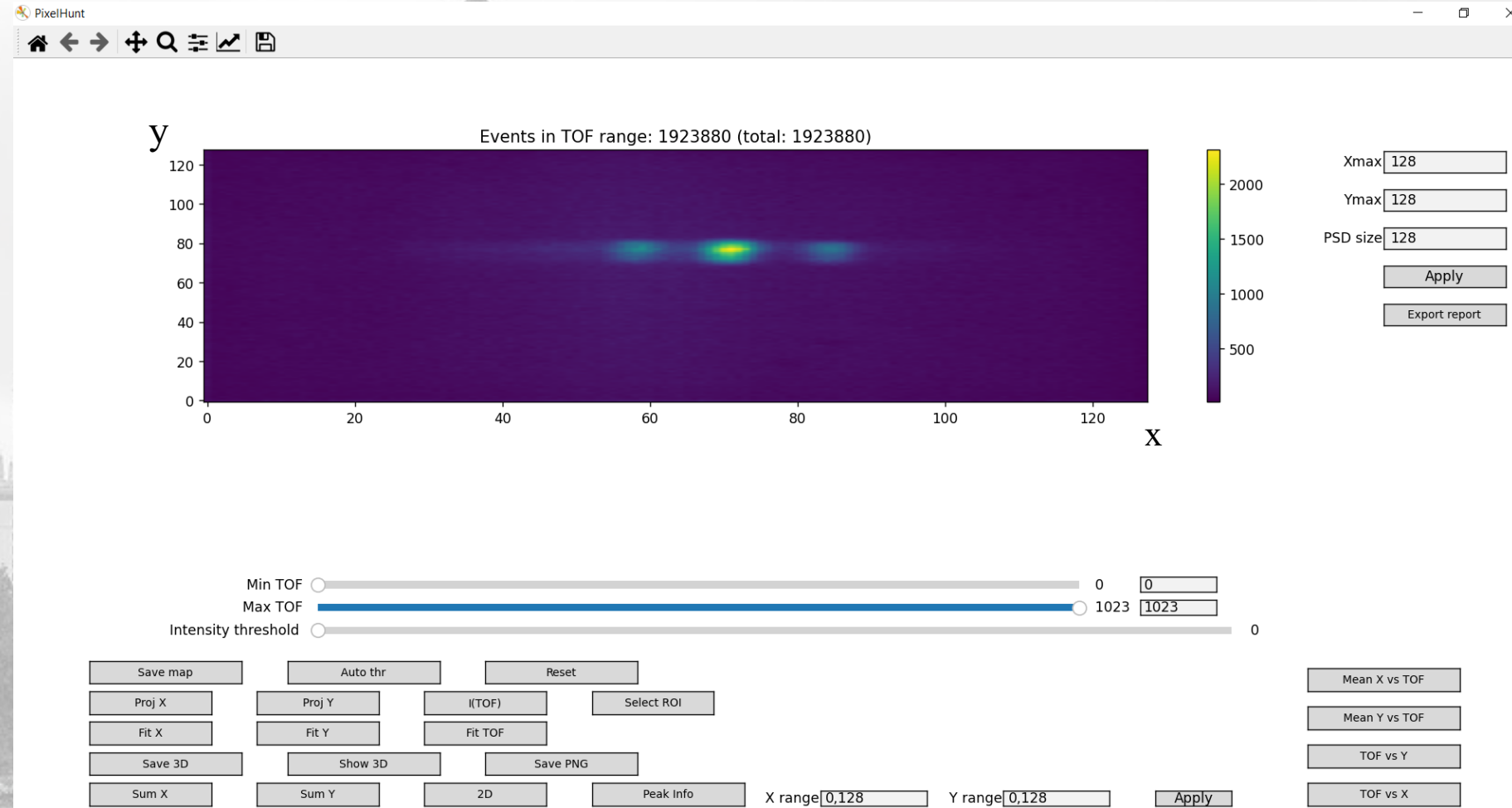
$$\sigma = 5300 \text{ барн}$$

Разработанное программное обеспечение «PixelHunt»

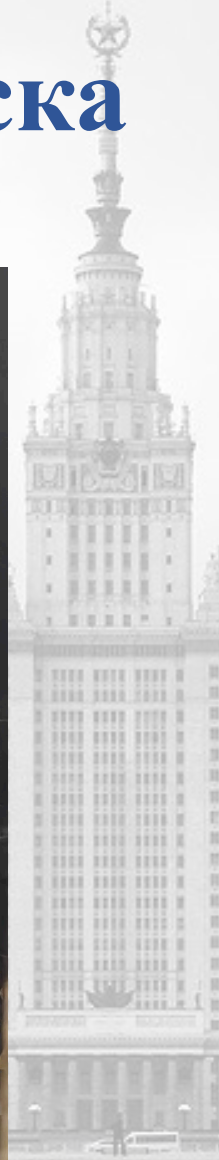
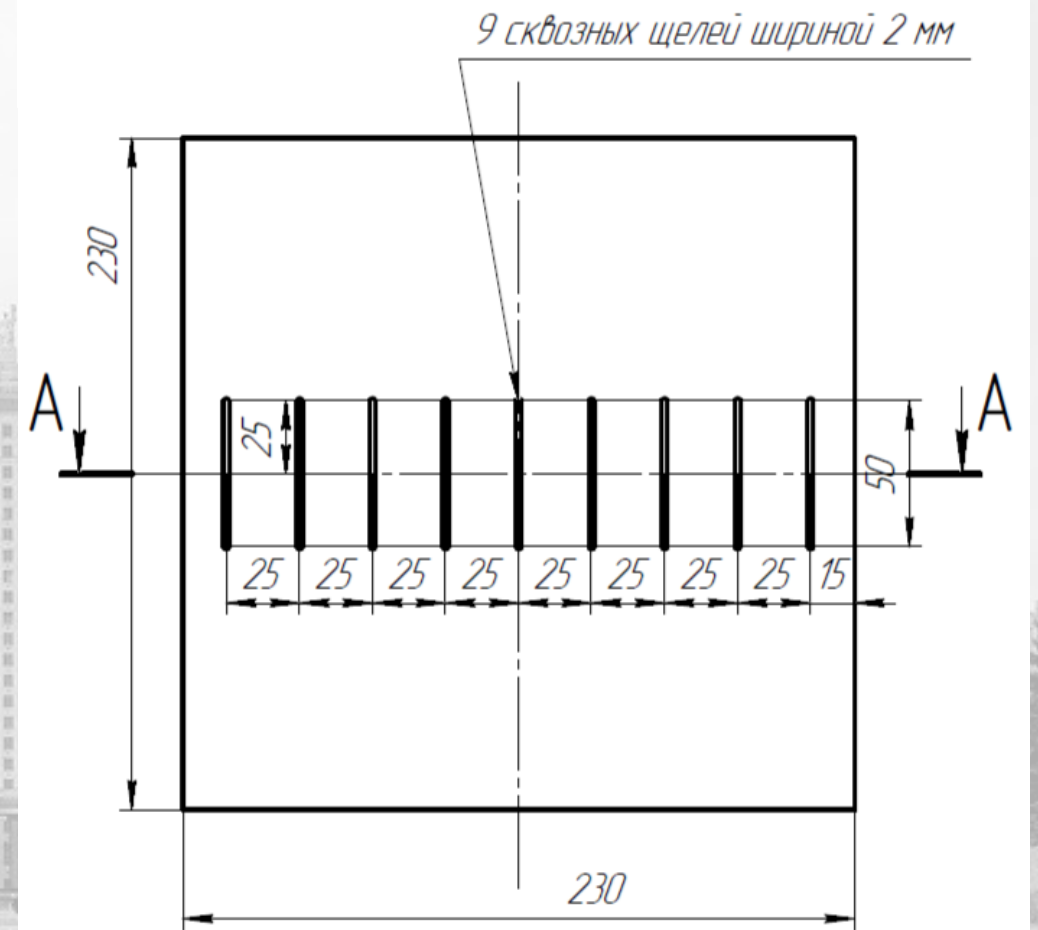
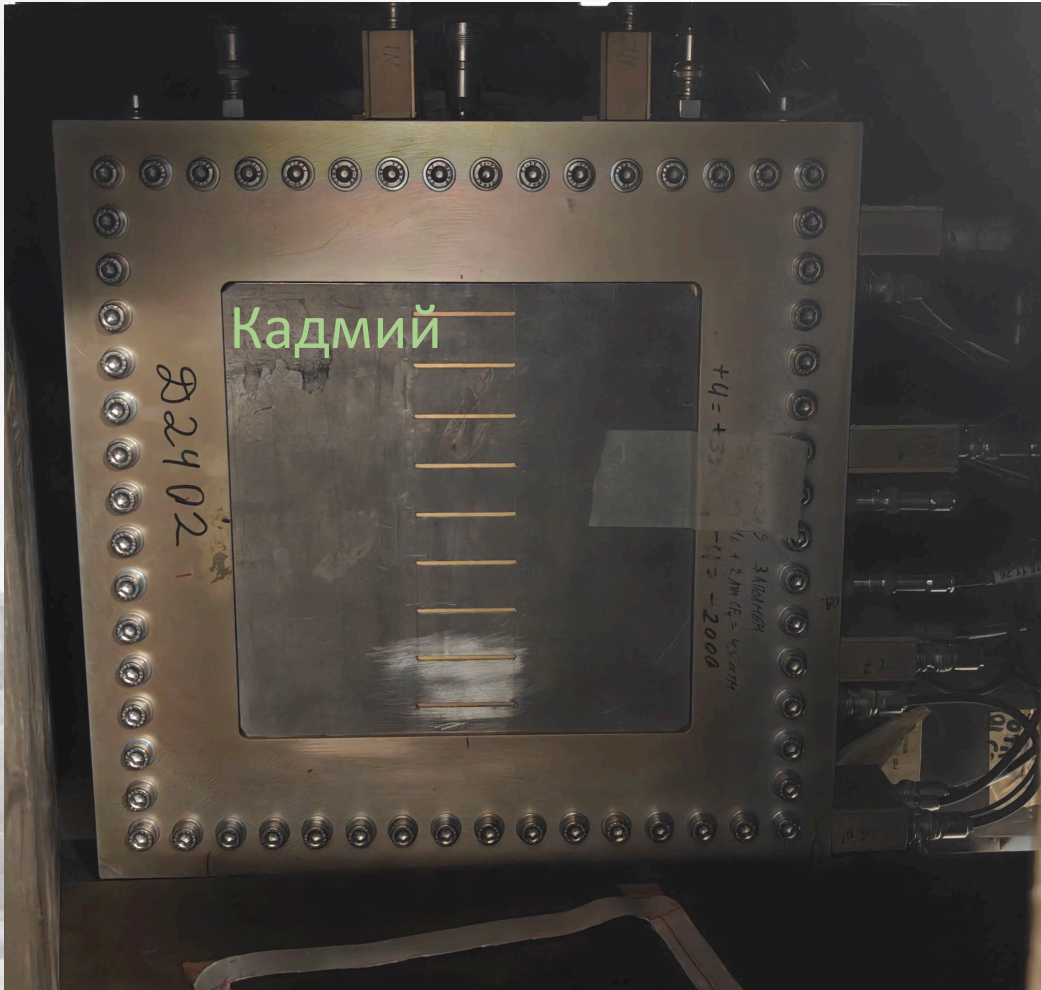
Языки: Python, C.

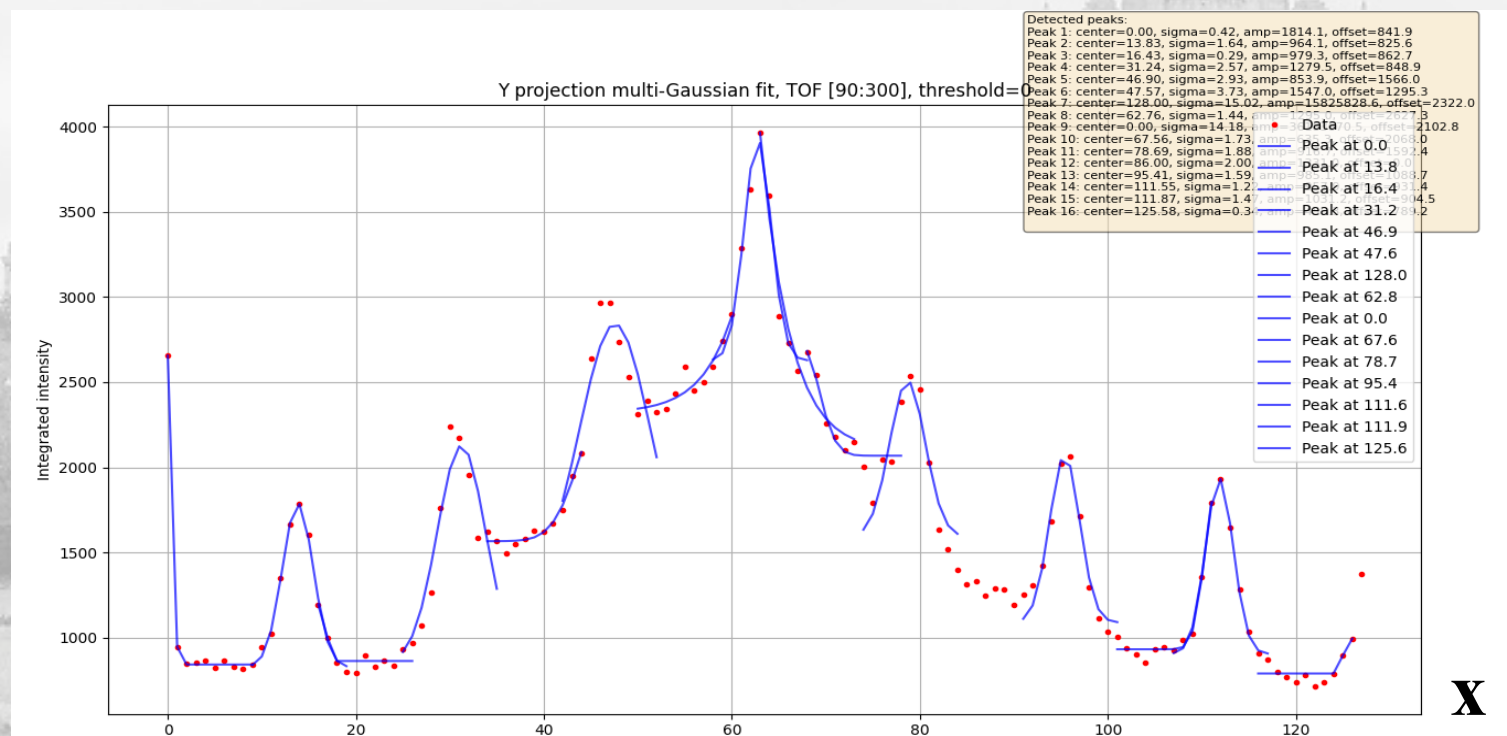
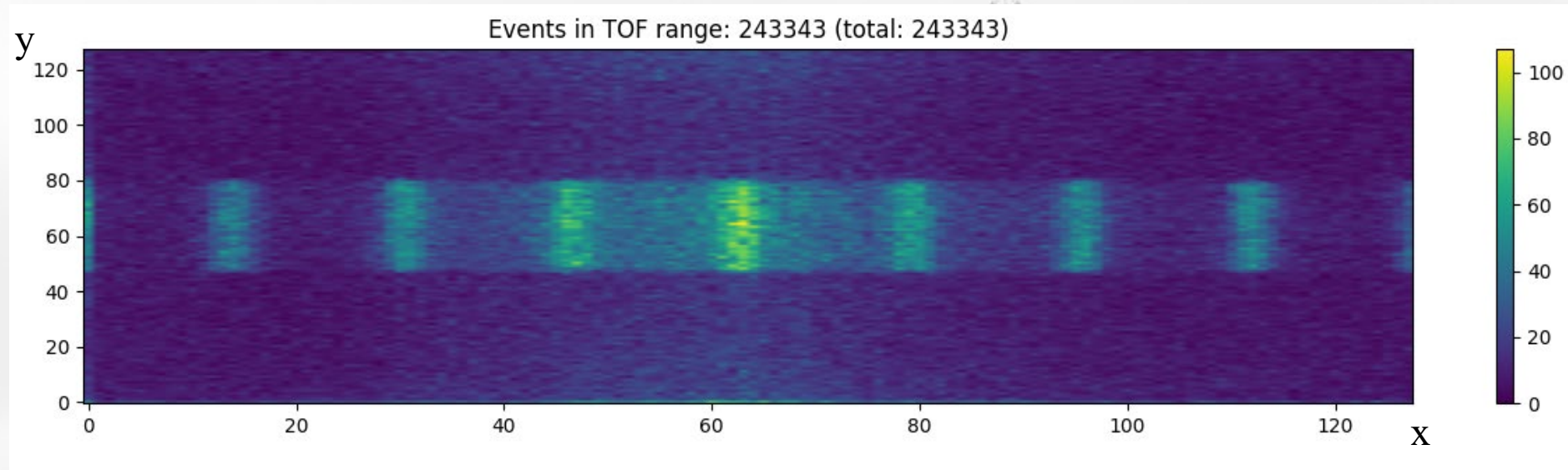
Основные функциональные блоки:

- Парсинг RAW-файлов с фильтрацией по задержкам (X_DELAY, Y_DELAY, допуски).
- Восстановление координат X, Y и номера TOF-канала, экспорт в CSV.
- Интерактивная 2D-визуализация: карта ПЧД, слайдеры выбора TOF-диапазона и порога интенсивности.

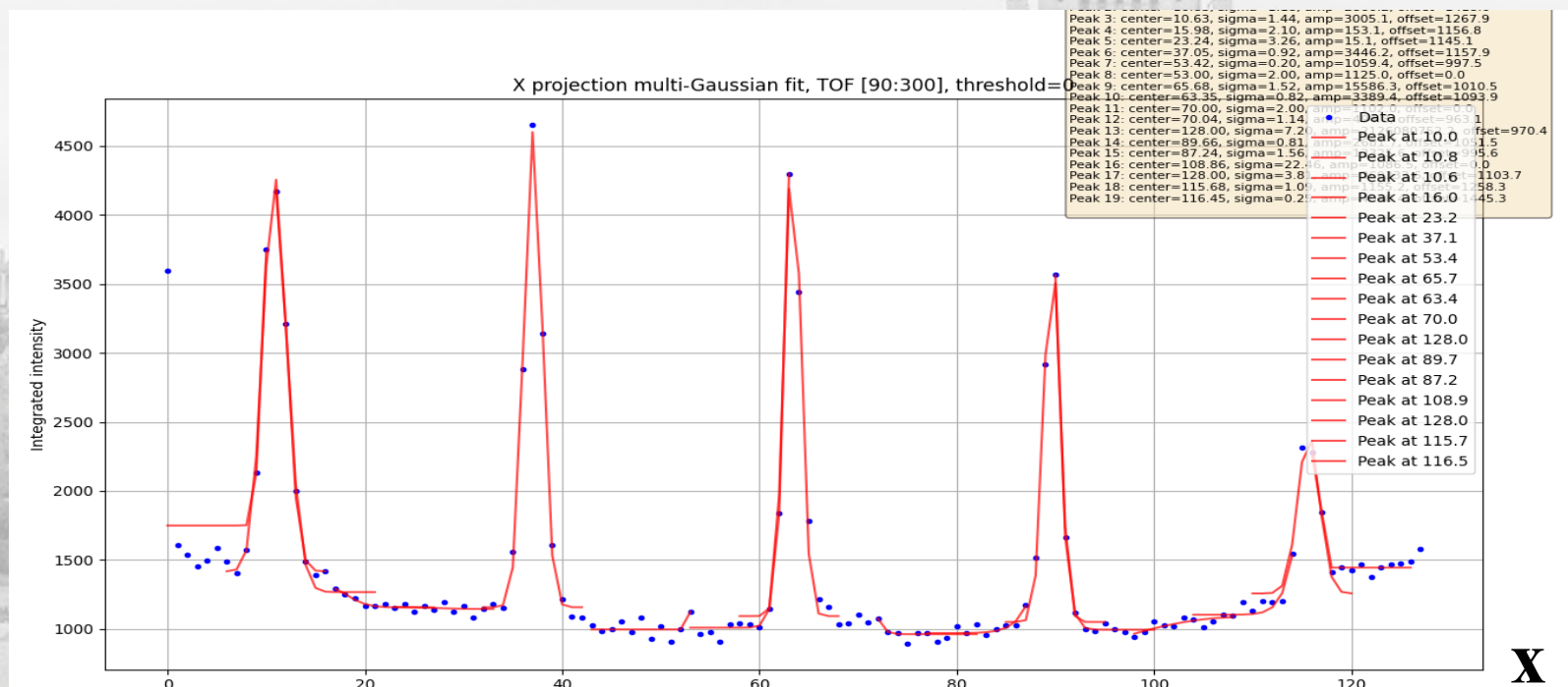
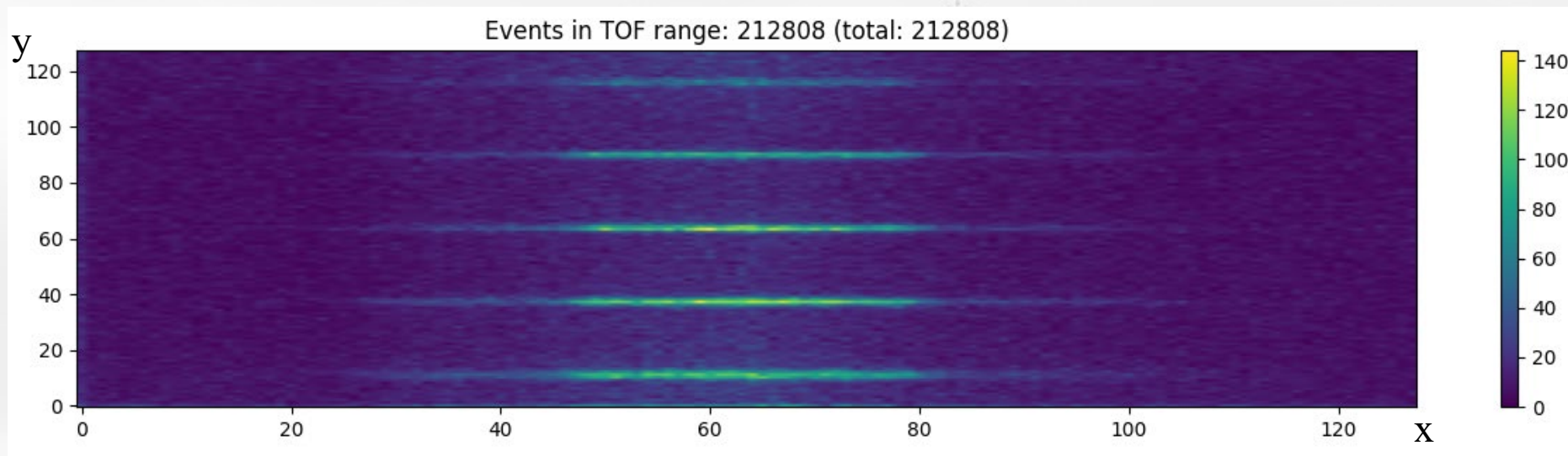


ска

A tall, ornate building with a star on top, likely the Moscow State University tower. The building is light-colored with many windows and a decorative top section featuring a large star. The sky is a pale, hazy blue. At the bottom, a small white car and a person are visible on a street.



- 1-й пик=16,43 , ширина =1.29
- 2-й пик=31,24 , ширина =2.57
- 3-й пик=47,57 , ширина =3.73
- 4-й пик=67,56 , ширина =1.73
- 5-й пик=78,69 , ширина =1.88
- 6-й пик=86,00 , ширина =2.00
- 7-й пик=111,55 , ширина =1.22



- 1-й пик=10,63 , ширина =1.44
- 2-й пик=37,05 , ширина =0.92
- 3-й пик=65,68 , ширина =1.52
- 4-й пик=87,24 , ширина =1.56
- 5-й пик=115,68 , ширина =1.09

DKDP– материалы для нелинейной оптики

Кристаллы DKDP используются в ячейках Поккельса, а также в системах удвоения, утроения и учетверения частоты в лазерных системах .



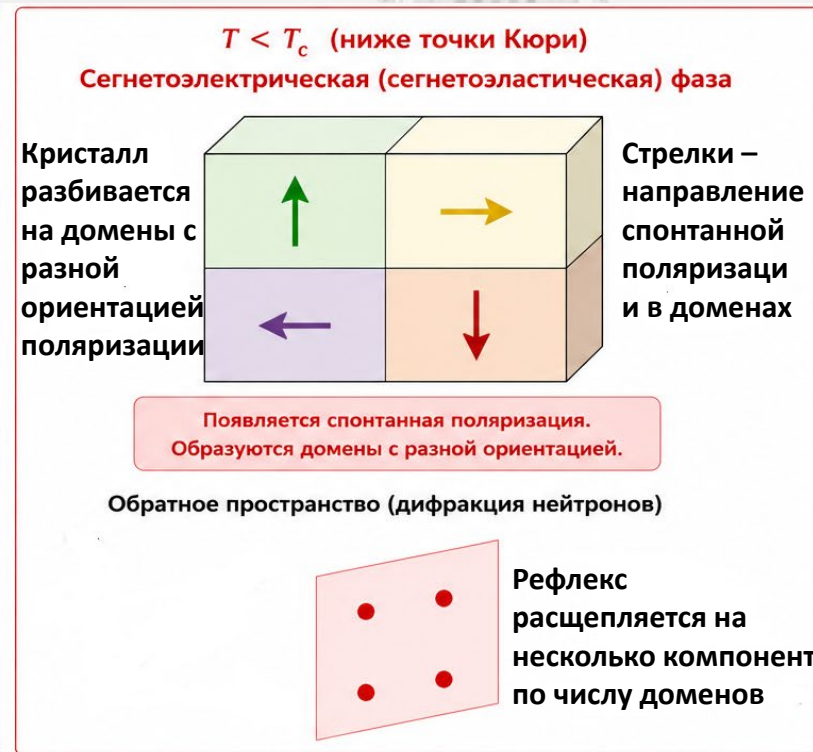
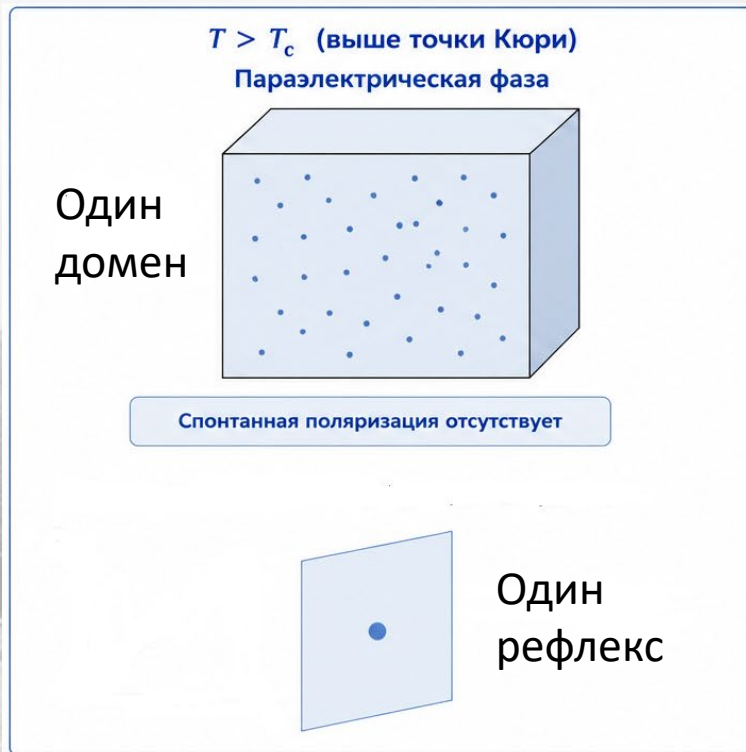
Один из крупнейших монокристаллов монофосфата калия



Результаты: KD_2PO_4 выше температуры Кюри ($T > T_c$) и ниже температуры Кюри ($T < T_c$)

Образец: дейтерированный дигидрофосфат калия KD_2PO_4 (DKDP) — сегнетоэластик.

Параэлектрическая фаза ($T > T_c \approx 210\text{K}$): тетрагональная структура



Сегнетоэластическая фаза ($T < T_c$):

- Происходит спонтанная деформация решётки (тетрагональная → ромбическая).

Возникает трансформационное двойникование — кристалл разбивается на домены с различной ориентацией осей.

Наблюдения в 3D-спектре

- Исходный рефлекс расщепляется на два (или более) компонента.
- Каждый компонент соответствует домену с определённой ориентацией.

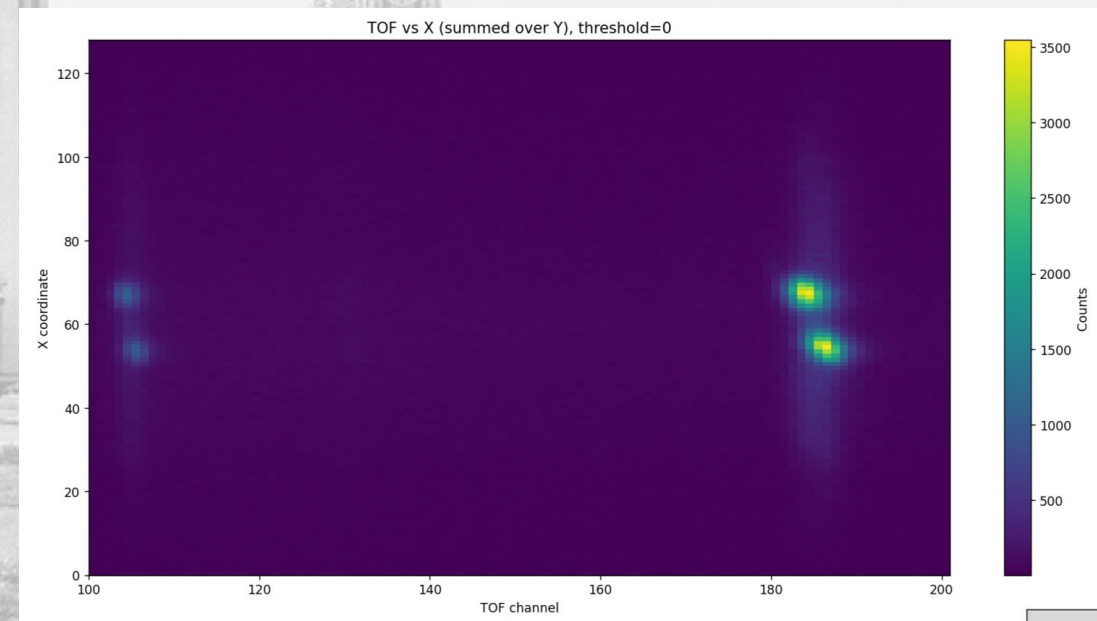
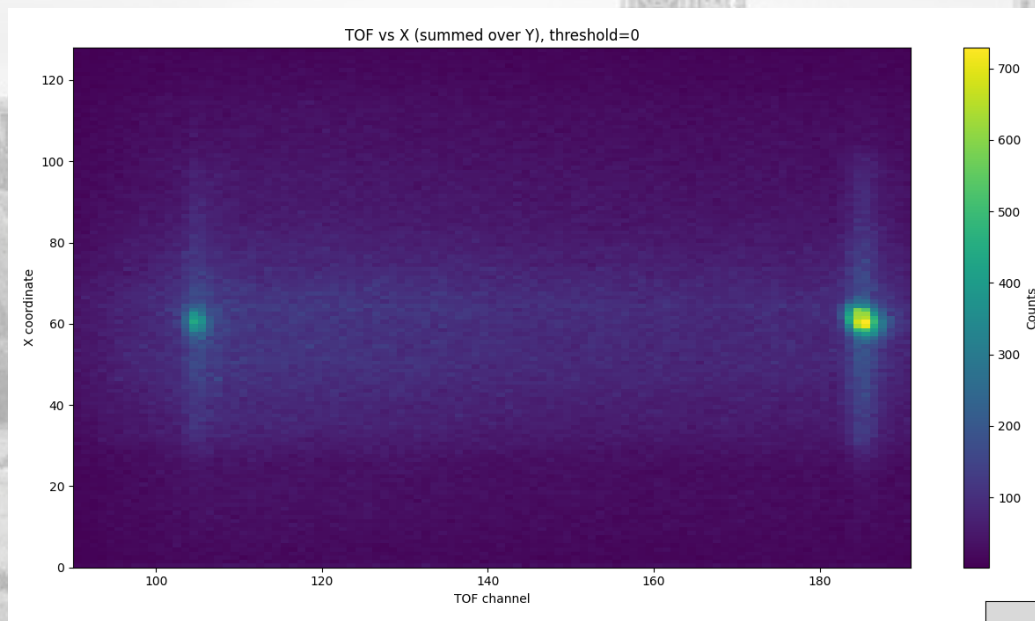
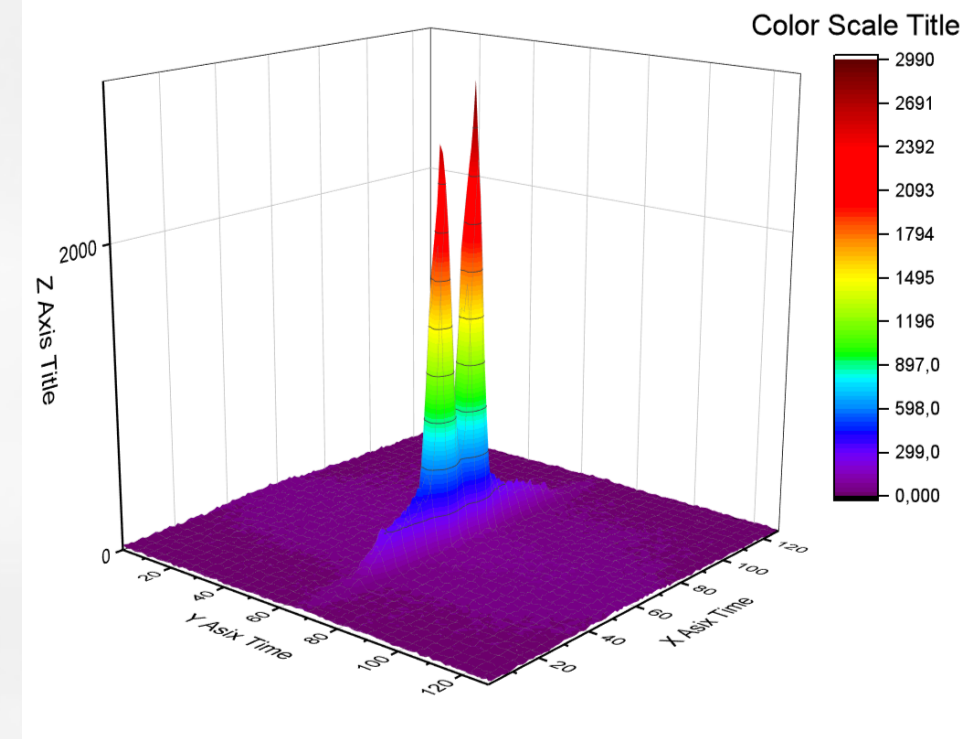
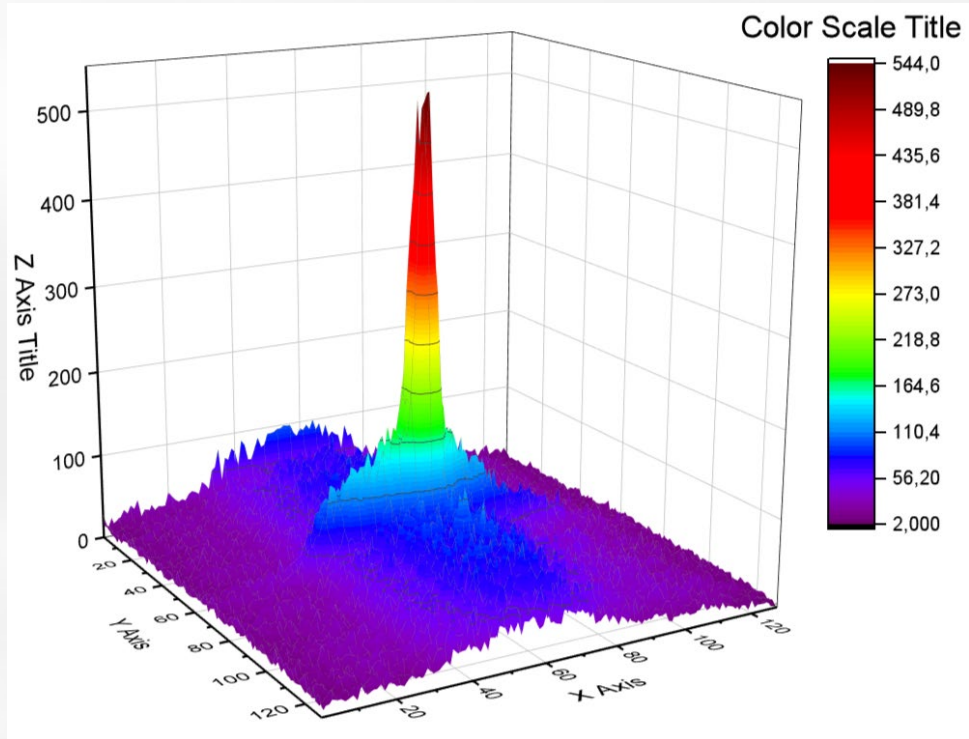


Таблица расщепления рефлексов

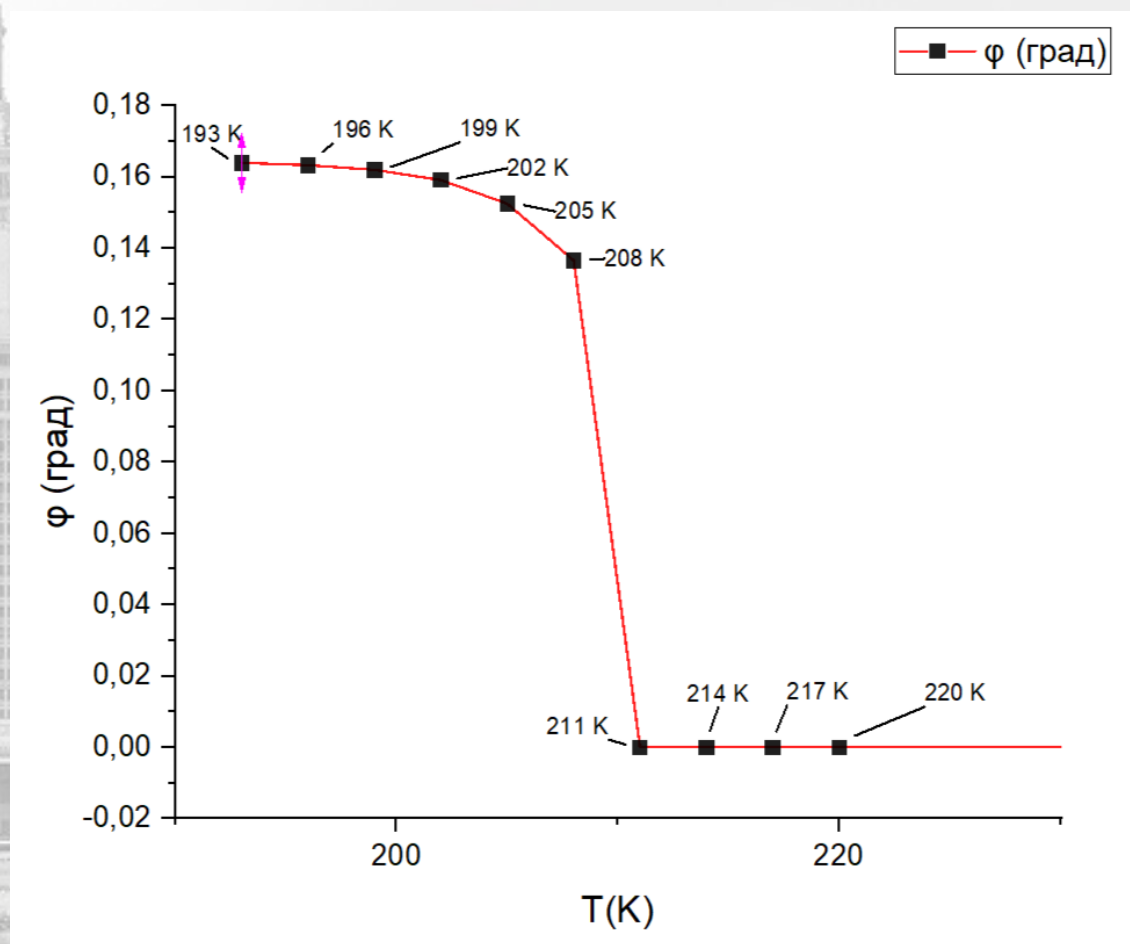
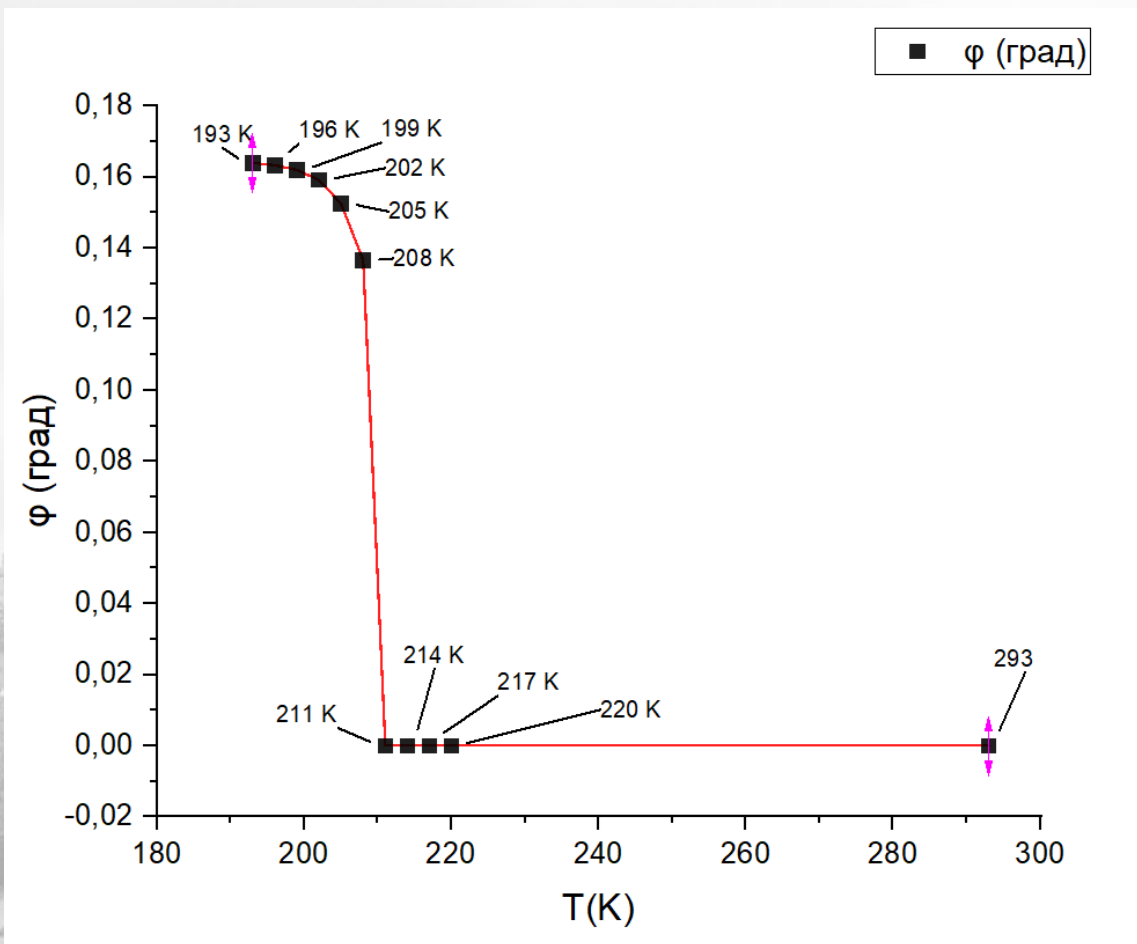
Т (К)	yx1 (Peak 1)	error_yx1	yx2 (Peak 2)	error_yx2	Δх (пиксели)	error_Δх	φ (град)	error_φ
193	67.88	0.012	54.87	0.02	13.01	0.02	0.16	0.001
196	67.81	0.012	54.86	0.02	12.95	0.02	0.16	0.001
199	67.75	0.014	54.91	0.02	12.84	0.02	0.16	0.001
202	67.61	0.015	55.01	0.02	12.62	0.02	0.16	0.001
205	67.32	0.016	55.22	0.02	12.1	0.02	0.15	0.001
208	66.76	0.022	55.94	0.03	10.83	0.03	0.14	0.001

Таблица расщепления рефлексов

Т (К)	φ (град)	δφ (град)
193	0.16	0.001
196	0.16	0.001
199	0.16	0.001
202	0.15	0.001
205	0.15	0.001
208	0.14	0.001

№	Название	Формула	Пояснение
1	Расстояние между пиками (пиксели)	$\Delta x = x_{c2} - x_{c1} $	x_{c1}, x_{c2} – центры пиков
2	Погрешность расстояния	$\delta_{\Delta x} = \sqrt{(\delta_{xc1})^2 + (\delta_{xc2})^2}$	$\delta_{xc1}, \delta_{xc2}$ – погрешности центров
3	Угол двойникования (градусы)	$\phi = (\Delta x \cdot p / L) \cdot (180 / \pi)$	$p=1.56$ мм, $L=1015$ мм
4	Погрешность угла (градусы)	$\delta_{\phi} = (\delta_{\Delta x} \cdot p / L) \cdot (180 / \pi)$	

Температура фазового перехода



Преимущества разработанного подхода

- Непрерывное сканирование исключает «слепые зоны» и значительно сокращает время эксперимента.
- Интерактивная визуализация в 3D позволяет быстро идентифицировать особенности обратного пространства (двойникование, диффузное рассеяние).
- Программное обеспечение с открытым исходным кодом легко адаптируется к другим дифрактометрам.

Заключение

Выполнены все поставленные задачи:

- Изучены основы TOF-дифракции и принцип работы гелиевого ПЧД.
- Разработано и протестировано программное обеспечение «PixelHunt» для обработки данных 3D-сканирования.
- Проведены эксперименты на монокристалле KD_2PO_4 .

Основные выводы:

- Программа позволяет в интерактивном режиме анализировать 3D-данные, строить проекции, выделять пики и визуализировать обратное пространство.
- На примере KD_2PO_4 продемонстрировано расщепление рефлексов при сегнетоэластическом фазовом переходе и определён угол двойникования, согласующийся с литературой.

Перспективы:

- Применение методики к исследованию магнитных структур и мультиферроиков.
- Интеграция с алгоритмами автоматической индексации рефлексов.
- Развитие программы в сторону онлайн-обработки данных во время эксперимента.

Личный вклад

Личный вклад автора:

- Полная разработка программного пакета «PixelHunt»: архитектура, реализация алгоритмов фильтрации и визуализации, создание графического интерфейса.
- Участие в подготовке и проведении экспериментов на реакторе ИБР-2.
- Обработка, анализ и интерпретация всех представленных экспериментальных данных.

Спасибо за внимание !

