

УДК 538.9:621

## КОНЦЕПТУАЛЬНЫЙ ПРОЕКТ ПОРОШКОВОГО ДИФРАКТОМЕТРА ПО ВРЕМЕНИ ПРОЛЕТА ДЛЯ КОМПАКТНОГО ИСТОЧНИКА НЕЙТРОНОВ

© 2023 г. Е. В. Москвин<sup>a, b, \*</sup>, Н. А. Григорьева<sup>a</sup>, Н. А. Коваленко<sup>a, b</sup>, С. В. Григорьев<sup>a, b</sup>

<sup>a</sup>Санкт-Петербургский государственный университет,  
Санкт-Петербург, 199034 Россия

<sup>b</sup>Петербургский институт ядерной физики им. Б.П. Константинова Национального исследовательского центра  
“Курчатовский институт”, Гатчина, 188300 Россия

\*e-mail: moskvin\_ev@pnpi.nrcki.ru

Поступила в редакцию 20.12.2022 г.

После доработки 14.02.2023 г.

Принята к публикации 14.02.2023 г.

Представлен концептуальный проект порошкового дифрактометра для компактного источника нейтронов DARIA на основе линейного протонного ускорителя. Предложенная концепция расширяет возможности оптимизации производительности прибора не только за счет варьирования параметров дифрактометра, но и параметров нейтронного источника, таких как температура замедлителя, частота повторения и длительность нейтронных импульсов. Приведены результаты расчета спектра мишенной сборки для замедлителей разных типов. В программном пакете McStas проведена оценка эффективности работы нейтроннопроводной системы для увеличения потока нейтронов на образце. Результаты расчетов показывают принципиальную возможность реализации метода нейтронной дифракции в условиях ограниченной светимости компактного источника нейтронов.

**Ключевые слова:** нейтронная дифракция, порошковый дифрактометр, компактный источник нейтронов, метод Монте-Карло.

**DOI:** 10.31857/S1028096023070105, **EDN:** TCSHSM

### ВВЕДЕНИЕ

Компактные источники нейтронов — это современная тенденция развития исследовательских методик с использованием рассеяния нейтронов. Под компактным источником нейтронов понимают источник нейтронов малой мощности на базе импульсных ионных или электронных ускорителей, снабженных мишенью, замедлителем нейтронов и нейтроннопроводной системой, позволяющей размещать несколько нейтронных приборов на одной мишени. К настоящему моменту в мире работает несколько компактных источников нейтронов [1–7] (табл. 1).

В условиях, когда по всему миру закрываются ядерные реакторы малой и средней мощности (Orphee (LLB, Сакле, Франция), FRG-2 (HZG, Геестхахт, Германия), FRG (HZB, Берлин, Германия), BBR-M (Гатчина, Россия)), основное назначение компактных источников нейтронов смещается в сторону развития методик и техники нейтронного эксперимента для исследования конденсированного состояния вещества и в сторону подготовки персонала для нейтронных источников мега-класса. Поэтому нейтронные центры

активно разрабатывают компактные источники на базе импульсных ускорителей, позволяющих достичь интенсивности нейтронных пучков в импульсе до  $10^{15}$  н/с/см<sup>2</sup>. Мишень компактного источника снабжена замедлителями различного типа для термализации полученных нейтронов, что обеспечивает на выходе мишенной сборки поток в пучке тепловых нейтронов для исследований в физике конденсированного состояния вещества на уровне около  $10^{12}$  н/с/см<sup>2</sup>. Если минимизировать потери при транспортировке, такой поток нейтронов достаточен для проведения дифракционных, рефлектометрических и радиографических исследований. Разработка компактных источников нейтронов для физики конденсированного состояния вещества началась в конце нулевых годов текущего столетия, однако лишь немногие, например, LENS в США [5], CPHS в Китае [7], RIKEN в Японии [8], вышли на стадию строительства нейтронных станций. На LENS построены три установки: малоуглового рассеяния нейтронов (МУРН), спин-эхо МУРН и нейтронной радиографии. На компактном источнике CPHS в Китае запущены два инструмента (из заявленных

**Таблица 1.** Компактные источники нейтронов в мире

| № п/п | Название                                                                     | Ускоряемые частицы | Мощность, МэВ | Нейтронные методы                    |
|-------|------------------------------------------------------------------------------|--------------------|---------------|--------------------------------------|
| 1     | Soreq Applied Research Accelerator Facility (SARAF) [1]                      | Протоны/дейтроны   | 40            | Облучение                            |
| 2     | Hokkaido University Neutron Source (HUNS) [2]                                | Электроны          | 45            | Дифракция<br>Радиография             |
| 3     | Electron Linac for Beams with High Brilliance and Low Emittance (n-ELBE) [3] | Электроны          | 30            | Облучение                            |
| 4     | The RIKEN Accelerator-Driven Compact Neutron Source (RANS) [4]               | Протоны            | 7             | Неразрушающий контроль               |
| 5     | Low Energy Neutron Source (LENS) [5]                                         | Протоны            | 13            | МУРН<br>Радиография<br>Спин-эхо      |
| 6     | Neutron Source in Geel (GELINA) [6]                                          | Электроны          | 150           | Облучение                            |
| 7     | Compact Pulsed Hadron Source (CPHS) [7]                                      | Протоны            | 13            | МУРН<br>Радиография                  |
| 8     | RIKEN Accelerator-Driven Compact Neutron Source (RANS) [8]                   | Протоны            | 7             | Радиография<br>Стресс-дифрактометрия |

шести): станция МУРН и установка нейтронной радиографии. На компактном источнике RIKEN работает стресс-дифрактометр и установка нейтронной радиографии.

На установках МУРН, спин-эхо МУРН, нейтронной радиографии и томографии используют широкий спектральный диапазон пучка и сравнительно низкое разрешение по длинам волн (порядка 10%), что обеспечивает достаточную светосилу эксперимента в условиях относительно низкой интенсивности источника. Именно из-за низкой интенсивности метод нейтронной дифракции на компактных источниках недостаточно активно развивался. В мировой практике существует лишь один нейтронный прибор — стресс-дифрактометр на источнике RANS [8, 9], который весьма успешно работает на протяжении нескольких лет. Это означает, что метод времяпролетной дифракции может быть успешно реализован и на других компактных источниках нейтронов. В настоящей работе рассматривается концепция дифрактометра по времени пролета для реализации порошковой (монокристалльной) дифракции на компактном источнике нейтронов DARIA. Моделирование мишенной сборки источника проводили методом Монте-Карло с помощью программного пакета PHITS [10], а нейтронной системы дифрактометра — методом Монте-Карло с использованием программного пакета McStas [11].

## УНИВЕРСАЛЬНЫЙ ВРЕМЯПРОЛЕТНЫЙ ДИФРАКТОМЕТР

Компактный источник нейтронов DARIA (DARIA – Dedicated for Academical Research and Industrial Application) является источником университетского класса. В отличие от уже существующих источников, DARIA не модернизируется или перестраивается, а проектируется “с нуля”. Отправная точка проектирования — образец и исследовательская задача, под которую конструируется источник протонов с необходимыми характеристиками, главная из которых — максимальный поток “полезных” нейтронов на образце. Таким образом, оптимизируются все элементы источника в целом (ускоритель протонов, мишенная сборка, замедлители и нейтронные станции) и каждый канал в отдельности, ведущий к установке рассеяния нейтронов [12]. На источнике предполагается расположить три нейтронных инструмента: МУРН, рефлектометр поляризованных нейтронов и порошковый дифрактометр нейтронов [13].

Универсальный времяпролетный дифрактометр для компактного источника нейтронов DARIA задуман как инструмент с опцией перестройки диапазона длин волн нейтронов, а также частоты и длительности импульсов, что позволит варьировать соотношение разрешение—светосила для решения широкого круга научных и методических задач. Прямое назначение дифрактометра — порошковая либо монокристалльная дифракция

для определения кристаллической и магнитной структуры твердых тел в широком интервале магнитных полей и температур. Для таких исследований по времяпролетной методике выбрана ширина спектральной полосы  $\lambda = 1\text{--}5 \text{ \AA}$  и высокое разрешение по длине волны  $\Delta\lambda/\lambda < 1\%$ , чтобы различать дифракционные пики, соответствующие близким межплоскостным расстояниям  $d$ . Высокую интенсивность нейтронов в широком спектре длин волн  $1\text{--}5 \text{ \AA}$  обеспечивают, включая в мишенную сборку холодный замедлитель. Необходимое разрешение достигается сужением спектральной полосы с помощью дискового прерывателя, формирующего конечную форму нейтронных импульсов. Рассеянные нейтроны регистрируют с помощью многоэлементных детекторов (detector banks) при определенных средних углах рассеяния в угловом диапазоне около  $10^\circ\text{--}20^\circ$  для охвата как можно большего телесного угла в целях увеличения светосилы.

Схема универсального времяпролетного дифрактометра с пролетной базой  $L = 23.5 \text{ м}$  в двух вариантах с разными нейтронными системами представлена на рис. 1. На расстоянии  $0.1 \text{ м}$  от замедлителя устанавливают прямой нейтронный канал длиной  $0.8 \text{ м}$ . За ним следует дисковый прерыватель. Далее (рис. 1а) расположены секция прямого нейтронного канала длиной  $3.9 \text{ м}$ , второй дисковый прерыватель и продолжение прямого нейтронного канала длиной  $17 \text{ м}$ . В другой конфигурации (рис. 1б) на место прямых нейтронных каналов устанавливают изогнутые такой же длины, что и прямые. Изогнутый нейтронный канал позволяет увести пучок тепловых нейтронов из прямой видимости источника, что обеспечивает уменьшение фона быстрых нейтронов и  $\gamma$ -излучения на детекторе. Общая длина нейтронных каналов в обоих случаях  $21 \text{ м}$ , сечение  $30 \times 30 \text{ мм}$ , все стенки покрыты суперзеркалами с  $m = 2$ . Для дополнительного ограничения расходимости нейтронного пучка и уменьшения фона на детекторе непосредственно перед образцом предусмотрена диафрагма с изменяющейся апертурой. После рассеяния на образце нейтроны попадают на детектор, находящийся на расстоянии  $1.5 \text{ м}$  от образца. Детекторные группы расположены симметрично относительно оси падающего пучка на локусе геометрической фокусировки [14] в диапазоне углов рассеяния  $2\theta$  от  $\pm 10^\circ$  до  $\pm 170^\circ$  для увеличения телесного угла захвата, каждая отдельная группа охватывает сектор порядка  $10^\circ\text{--}20^\circ$ . Размер охватываемого сектора для каждой группы детекторов будет уточнен в дальнейшем, поскольку при увеличении угла рассеяния изменяется (улучшается) разрешение. В вертикальном направлении размеры детекторных групп можно наращивать вплоть до полного кольца подобно дифрактометру GEM [15]. Заявленные диапазон углов рассеяния и спектральная полоса позволяют измерять диапазон межплос-

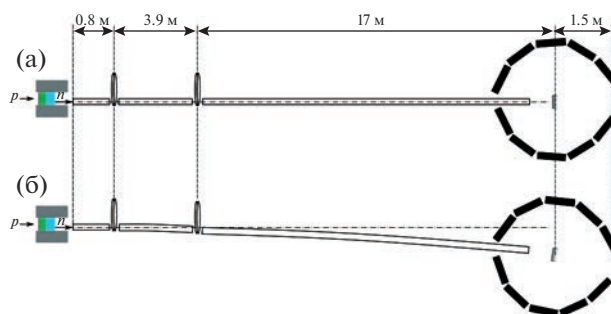


Рис. 1. Схема универсального времяпролетного дифрактометра для компактного источника нейтронов DARIA с нейтронным каналом: а — прямым; б — изогнутым.

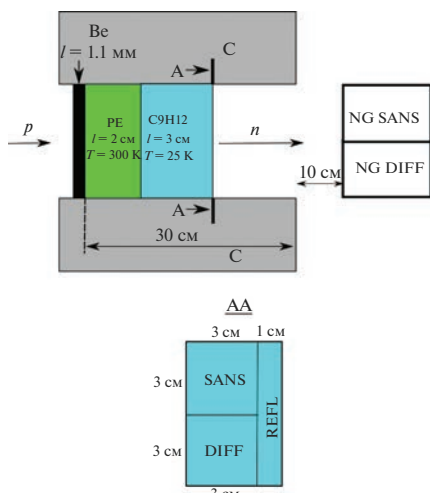
костных расстояний  $d = 0.5\text{--}29 \text{ \AA}$ . Разрешение дифрактометра в горизонтальной плоскости задается на уровне  $\Delta d/d = 0.5\%$ .

### МИШЕННАЯ СБОРКА

Для получения спектральной полосы  $1\text{--}5 \text{ \AA}$  необходимы нейтроны как теплового, так и холодного спектров. Для этого используют замедлители, расположенные после мишени из бериллия, толщина мишени  $l = 1.1 \text{ мм}$ , сечение  $40 \times 60 \text{ мм}$  (рис. 2). Для дифрактометра рассматривают три варианта мишенной сборки: с тепловым замедлителем (полиэтиленом) толщиной  $2 \text{ см}$ , либо тепловым замедлителем в паре с холодным, толщина последнего  $3 \text{ см}$ . В качестве холодного используют мезитилен ( $\text{C}_9\text{H}_{12}$ ) или параводород ( $p\text{-H}_2$ ) при температуре  $T = 25 \text{ К}$ . Ключевой особенностью мезитиленового холодного замедлителя является возможность менять температуру хладагента в широком интервале температур  $T = 25\text{--}220 \text{ К}$ , регулируя тем самым положение максимума нейтронного спектра. Недостаток замедлителя на мезитиле состоит в меньшем выходе нейтронов в холодном режиме по сравнению с параводородом.

На рис. 3 представлены расчетные значения спектральной плотности потока нейтронов в зависимости от длины волны для трех описанных вариантов мишенной сборки в телесном угле, соответствующем правой полусфере  $2\pi \text{ ср}$  по отношению к протонному пучку. Расчеты проводили методом Монте-Карло в программном пакете PHITS [10] для двух вариантов реализации холодного замедлителя: на основе мезитилена и комбинированного (мезитилен + метан) в широком диапазоне длин волн  $3\text{--}12 \text{ \AA}$ . В первом случае поверхность холодного замедлителя была представлена прямоугольником с размерами  $4 \times 6 \text{ см}$  (Ш  $\times$  В). Интегральная плотность потока нейтронов на поверхности замедлителя для указанного диапазона длин волн  $8.3 \times 10^{11} \text{ н/см}^2/\text{с}$ .

Во втором случае были выбраны аналогичные размеры священной поверхности —  $4 \times 6 \text{ см}$ .



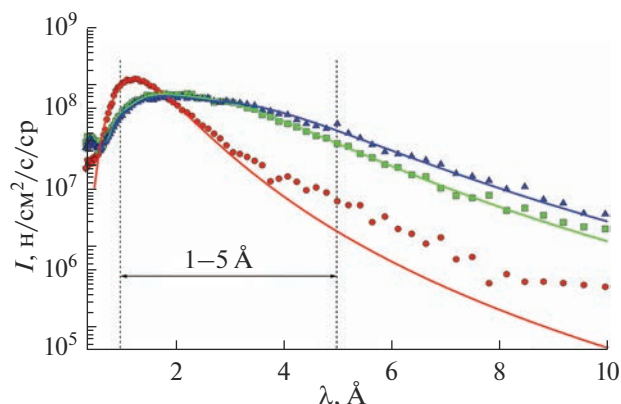
**Рис. 2.** Схема мишенной сборки компактного источника нейтронов DARIA (а):  $p$  – импульс падающих на мишень протонов,  $n$  – нейтронный импульс после замедлителей. С – графитовый отражатель тепловых нейтронов, окружающий мишенную сборку. Геометрическое разделение нейтронного потока после мишенной сборки на отдельные нейтронотводы (NG) (б) для трех приборов: МУРН (SANS), дифрактометра (DIFF) и рефлектометра (REFL).

Центральная часть ( $2 \times 4$  см) была заполнена мезитиленом, а остальная светящаяся поверхность – твердым метаном. Это позволило увеличить плотность потока в рассматриваемом диапазоне длин волн до  $1.0 \times 10^{12}$  н/см<sup>2</sup>/с, что примерно на 20% выше, чем в первом варианте. Следует отметить, что техническая реализация комбинированного замедлителя представляет определенные сложности, так как в этом случае потребуются создание дополнительных секций в криогенной камере под метан. Введение излишней конструкции, по предварительным оценкам, снизит выигрыш от использования комбинированного замедлителя до 8%. Как видно из графиков, вариант с замедлителем  $C_9H_{12}$  не хуже комбинированного с  $p-H_2$ , однако его реализация намного проще, поэтому для дальнейших расчетов использовали вариант мезитилена. На графиках показана интенсивность для телесного угла  $\Omega = 2\pi$  ср, нормированная на телесный угол канала для дифрактометра DIFF (рис. 2), который для такой мишенной сборки составляет  $\Omega_{DIFF} = 0.01$  ср.

### ДЛИНА ПРОЛЕТНОЙ БАЗЫ

Длина пролетной базы дифрактометра определяет его разрешение  $R(d)$ . В общем виде:

$$R(d) = \Delta d/d = \left( [\Delta\tau/T]^2 + [\Delta L/L]^2 + [\Delta\theta/\tan\theta]^2 \right)^{1/2}, \quad (1)$$



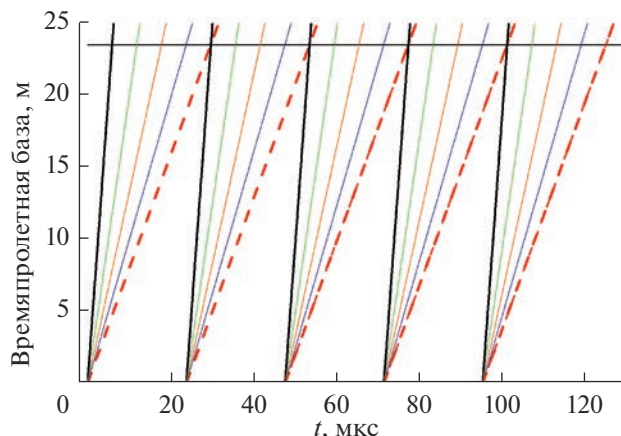
**Рис. 3.** Спектральная плотность потока нейтронов как функция длины волны для трех типов мишенной сборки компактного источника нейтронов DARIA на расстоянии 10 см от отражателя на входе в нейтронотводы NG: кружки – тепловой замедлитель (PE); квадраты – тепловой (PE) + холодный ( $C_9H_{12}$ ); треугольники – тепловой (PE) + холодный ( $p-H_2$ ). Сплошные линии – аппроксимация функцией распределения Максвелла. Рабочий спектральный диапазон 1–5 Å выделен вертикальными пунктирными линиями.

где  $\Delta\tau$  – длительность импульса,  $T$  – полное время пролета нейтрона,  $L$  – пролетная база,  $\theta$  – брэгговский угол рассеяния. Для выбранного разрешения  $R = 0.005$  длина пролетной базы  $L$  составляет:

$$L \sim v\Delta\tau/R, \quad (2)$$

где  $v$  – скорость самых быстрых нейтронов в импульсе. Таким образом, для заданного диапазона длин волн 1–5 Å и длительности  $\Delta\tau = 30$  мкс длина пролетной базы составляет 23.5 м. Пролетная база от первого прерывателя до образца составляет 22 м, от образца до детектора – 1.5 м.

На рис. 4 представлена диаграмма время–расстояние, с помощью которой удобно рассчитать период импульсов и фазы прерывателей. Предполагаем, что длительность нейтронного импульса много меньше периода импульсов, т.е. все нейтроны в импульсе летят из одной точки на диаграмме. Траектории нейтронов в импульсе схематически показаны прямыми линиями с наклонами, соответствующими скорости нейтронов и конкретной длине волны. Период импульсов с выбранной пролетной базой рассчитывают таким образом, чтобы нейтронные импульсы не перекрывали друг друга на детекторе. Иными словами, когда коротковолновые нейтроны (сплошные линии  $\lambda = 1$  Å) последующего импульса не “догоняют” длинноволновые нейтроны предыдущего (пунктирные линии  $\lambda = 5$  Å). Для  $L = 23.5$  м и спектральной ширины 1–5 Å время регистрации нейтронного импульса на детекторе 5 мс, период  $T = 23.8$  мс, задержка  $t_0 = 1.4$  мс.



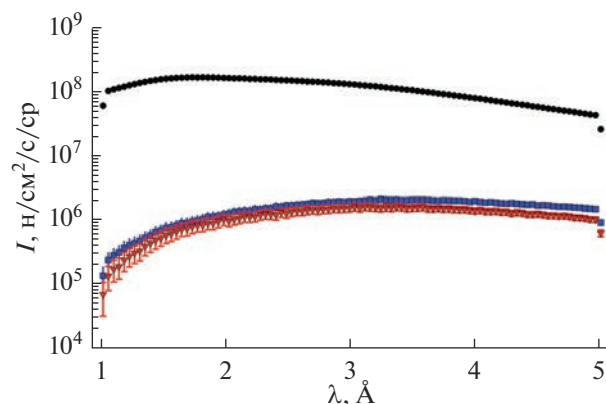
**Рис. 4.** Диаграмма время–расстояние для расчета периода импульсов  $T$  и фазы прерывателей  $\phi$ . Пролетная база  $L = 23.5$  м, спектральная ширина импульса  $1\text{--}5$  Å.

### НЕЙТРОНОВОДНАЯ СИСТЕМА

Эффективность работы нейтронной установки определяется плотностью потока нейтронов на образце. За транспортировку нейтронов от источника до образца с минимальными потерями отвечает нейтронородная система. Как уже упоминалось выше, в настоящее время рассматривают два варианта нейтронородной системы дифрактометра: с прямым и изогнутым нейтронородами (рис. 1). Прямой нейтронород позволяет уменьшить потери нейтронного потока за счет уменьшения числа отражений, фон от быстрых нейтронов и  $\gamma$ -излучения отсекается первым дисковым прерывателем. На его месте при необходимости можно использовать ферми-прерыватель. Изогнутый нейтронород позволяет избавиться от быстрых нейтронов и  $\gamma$ -излучения вследствие ухода из прямой видимости мишени. Два обсуждаемых нейтронорода имеют одинаковые параметры: сечение  $30 \times 30$  мм и суперзеркальное покрытие  $m = 2$ .

На рис. 5 представлено изменение спектральной плотности потока нейтронов на выходе источника и после нейтронородной системы, рассчитанное в программной среде McStas [10]. Как видно из рисунка, и в прямом, и в изогнутом нейтронороде потери интенсивности составляют два порядка, причем для нейтронов с  $\lambda \leq 1.5$  Å потери увеличиваются до трех порядков. Оба варианта показывают одинаковый результат, что обусловлено тем фактом, что при длине изогнутого нейтронорода  $L = 21$  м для уверенного ухода из прямой видимости (с коэффициентом 1.4) радиус кривизны должен быть равен [16]:

$$\rho = (1.4L)^2 / (8\varpi) = 3601.5 \text{ м}, \quad (3)$$



**Рис. 5.** Изменение спектральной плотности потока для  $\lambda = 1\text{--}5$  Å после нейтронородной системы длиной 21 м: кружки — на выходе из источника; квадраты — на выходе прямого нейтронорода; треугольники — на выходе изогнутого нейтронорода.

где  $\varpi$  — ширина нейтронорода, равная 0.03 м. При изготовлении нейтронорода из набора прямых секции длиной  $l_s = 0.5$  м их поворот относительно друг друга составляет  $\alpha = \arctg(l_s/\rho) = 0.00795^\circ$ , что гораздо меньше критического угла полного отражения  $\alpha_c = 0.194^\circ$  для покрытия  $m = 2$ .

Большие потери спектральной плотности потока для коротких длин волн  $\lambda \leq 1.5$  Å связаны с тем, что характерная длина волны  $\lambda^*$  для покрытия  $m = 2$  равна:  $\lambda^* = 575/m(2\varpi/\rho)^{1/2} = 1.173$  Å, т.е. для  $\lambda^* = 1$  Å необходимо зеркальное напыление с  $m \geq 2.35$ .

Предварительные расчеты показывают, что дифрактометр с любым из рассмотренных вариантов нейтронородной системы в телесном угле  $\Omega = 0.01$  ср мишенной сборки будет иметь интегральную интенсивность около  $6.2 \times 10^7$  н/с/см<sup>2</sup>/ср на образце (верхняя граница), что достаточно для проведения дифракционных измерений. Для оптимизации параметров самого дифрактометра потребуются более точные и детальные расчеты с моделированием процесса рассеяния на образце. Учет потерь в неидеальном нейтронороде уменьшит оценку верхней границы интенсивности на образце.

### ДИСКОВЫЙ ПРЕРЫВАТЕЛЬ

Для контроля и изменения спектральной ширины нейтронных импульсов используют дисковые прерыватели нейтронного пучка. Для формирования прерывателем симметричного во времени импульса применяют систему из двух дисков, вращающихся синхронно навстречу друг другу. В схеме дифрактометра первая пара прерывателей расположена на расстоянии 1 м от замедлителя и предназначена для привязки точки отсчета к

**Таблица 2.** Расчет характеристик прерывателей, расположенных на расстояниях 1 и 5 м от замедлителя

| Ширина<br>спектральной<br>полосы, Å | Время открытия окна прерывателя, мс |  |  |  |      |  |  |  |
|-------------------------------------|-------------------------------------|--|--|--|------|--|--|--|
|                                     | 1 м                                 |  |  |  | 5 м  |  |  |  |
| 1                                   | 1.01                                |  |  |  | 5.04 |  |  |  |
| 2                                   | 0.76                                |  |  |  | 3.78 |  |  |  |
| 3                                   | 0.51                                |  |  |  | 2.52 |  |  |  |
| 4                                   | 0.25                                |  |  |  | 1.26 |  |  |  |

| Окно прерывателя, град           |      |      |      |      |      |      |      |      |
|----------------------------------|------|------|------|------|------|------|------|------|
| $\lambda_{\text{max}}, \text{Å}$ | 5    | 4    | 3    | 2    | 5    | 4    | 3    | 2    |
| 1                                | 15.1 | 15.1 | 15.1 | 15.1 | 75.6 | 75.6 | 75.6 | 75.6 |
| 2                                | 11.3 | 10.0 | 7.55 |      | 56.7 | 50.4 | 37.8 |      |
| 3                                | 7.6  | 5.0  |      |      | 37.8 | 25.2 |      |      |
| 4                                | 3.8  |      |      |      | 18.9 |      |      |      |

времяпролетной базе. Вторая пара расположена на расстоянии 5 м от замедлителя и предназначена для устранения перекрытия импульсов и сужения спектральной полосы для улучшения разрешения.

Используя диаграмму время–расстояние (рис. 4), можно рассчитать времена открытия/закрытия прерывателя, т.е. фазу и размер сектора окна прерывателя. Например, для прерывателя, установленного на расстоянии 5 м от замедлителя, времена открывания (1.4 мс) и закрывания (6.4 мс) окна соответствуют времени пролета 5 мс импульса нейтронов с  $\lambda = 1\text{--}5 \text{ Å}$  с периодом  $T = 23.8 \text{ мс}$  и задержкой  $t_0 = 1.4 \text{ мс}$ .

Тогда угловая скорость

$$\omega = 2\pi\nu = \frac{2\pi}{T} \approx 264 \text{ рад/с}, \quad (4)$$

частота вращения

$$\nu = \frac{1}{T} = 42 \text{ Гц} \quad (5)$$

и фаза прерывателя

$$\phi = \frac{2\pi t_0}{T} = 0.37 \text{ рад} = 21.2^\circ. \quad (6)$$

В табл. 2 приведено время открывания окна прерывателя в зависимости от ширины спектральной полосы и размеры окон прерывателей для разных длин волн.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Для универсального времяпролетного дифрактометра для компактного источника нейтронов DARIA выбраны спектральный диапазон  $\lambda = 1\text{--}5 \text{ Å}$ , разрешение  $R = \Delta d/d = 0.005$  и продолжительность импульса  $\Delta\tau = 30 \text{ мкс}$ . На основе

этого определены пролетная база и параметры дисковых прерывателей (расположение, фаза, частота вращения, размер окна). Рассмотрены три варианта мишенной сборки с разными замедлителями и две нейтронные схемы дифрактометра. В качестве рабочей выбрана мишень с тепловым замедлителем на основе полиэтилена в паре с холодным замедлителем на основе мезителена. Для нейтронной системы определены: длина 21 м, сечение  $30 \times 30 \text{ мм}$ , покрытие стенок — нейтронные суперзеркала с  $m = 2$ . Расчет методом Монте-Карло показал, что оба варианта нейтронной системы (прямой и изогнутый) дают одинаковые потери спектральной плотности потока нейтронов — два порядка от исходной величины. Для длин волн  $\lambda \leq 1.5 \text{ Å}$  потери составляют три порядка. Компенсировать потери коротковолновых нейтронов можно небольшим увеличением коэффициента  $m$  суперзеркал. Увеличить светосилу дифрактометра без потери разрешения возможно, используя группы детекторов, расположенных симметрично относительно оси падающего пучка и соответствующих одинаковому углу рассеяния  $\pm 2\theta$ .

Принципиально, что дифрактометр может быть реализован на компактном источнике нейтронов DARIA с энергией линейного ускорителя 13 МэВ, однако для полноценной оптимизации всех параметров дифрактометра потребуются более точные и детальные расчеты с моделированием процесса рассеяния на образце.

## БЛАГОДАРНОСТИ

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках Соглашения № 075-15-2022-830 от 27 мая 2022 г. (продолжение Соглашения No. 075-15-2021-1358 от 12 октября 2021 г.).

**Конфликт интересов:** авторы подтверждают, что у них нет конфликтов интересов.

# СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Silverman I., Arenshtam A., Berkovits D. et al. // AIP Conf. Proceed. 2018. V. 1962. P. 020002. <https://doi.org/10.1063/1.5035515>
2. Furusaka M., Sato H., Takashi K., Ohnuma M., Kiyanagi Y. // Phys. Procedia. 2014. V. 60. P. 167. <https://doi.org/10.1016/j.phpro.2014.11.024>
3. Beyer R., Birgersson E., Elekes Z., Ferrari A., Grosse E., Hannaske R., Junghans A., Kögler T., Massarczyk R., Matić A. et al. // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. A. 2013. V. 23. P. 151. <https://doi.org/10.1016/j.nima.2013.05.010>
4. Kobayashi T., Ikeda S., Otake Y., Ikeda Y., Hayashizaki N. // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. A. 2021. V. 994. P. 65091. <https://doi.org/10.1016/j.nima.2021.165091>
5. Baxter D. // The Eur. Phys. J. Plus. 2016. V. 131. P. 83. <https://doi.org/10.1140/epjp/i2016-16083-9>
6. Ene D., Borcea C., Flaska M., Kopecky S., Negret A., Mondelaers W., Plompen A.J.M. // Int. Conf. on Nuclear Data for Science and Technology. 2008. V. ND 2007. <https://doi.org/10.1051/ndata:07330>
7. Wei J., Chen H.B., Huang W.H., Tang C.X., Xing Q.Z., Loong C.-K., Fu S.N., Tao J.Z., Guan X.L., Shimizu H.M. // Proceed. PAC09, Vancouver, BC, Canada, 2009. <https://s3.cern.ch/inspire-prod-files-f/f4fca313b2051-fb1e4e7bf3650e70af1>
8. Ikeda Y., Taketani A., Takamura M., Sunaga H., Kumagai M., Oba Y., Otake Y., Suzuki H. // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. A. 2016. V. 833. P. 61. <https://doi.org/10.1016/j.nima.2016.06.127>
9. Iwamoto C., Takamura M., Ueno K., Kataoka M., Kurihara R., Xu P., Otake Y. // ISIJ Int. 2022. V. 62. № 5. P. 1013. <https://doi.org/10.2355/isijinternational.ISIJINT-2021-420>
10. Niita K., Sato T., Iwase H., Nose H., Nakashima H., Silver L. // Rad. Measur. 2006. V. 41. № 9–10. P. 1080. <https://doi.org/10.1016/j.radmeas.2006.07.013>
11. Lefmann K., Nielsen N.K. // Neutron News. 1999. V. 10. № 3. P. 20. <https://doi.org/10.1080/10448639908233684>
12. Павлов К.А., Коник П.И., Коваленко Н.А., Кулевой Т.В., Серебренников Д.А., Субботина В.В., Павлова А.Е., Григорьев С.В. // Кристаллография. 2022. Т. 67. № 1. С. 5. <https://doi.org/10.31857/S002347612201009X>
13. Pavlova A.E., Petrova A.O., Konik P.I., Pavlov K.A., Grigoriev S.V. // J. Surf. Invest.: X-Ray, Synchrotron Neutron Tech. 2021. V. 15. № 1. P. 70. <https://doi.org/10.1134/S1027451021010122>
14. Carpenter J.M. // Nucl. Instrum. Methods. 1967. V. 47. P. 179. <https://deepblue.lib.umich.edu/bitstream/handle/2027.42/33373/0000771.pdf?sequence=1>
15. Hannon A.C. // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. A. 2005. V. 551. P. 88. <https://doi.org/10.1016/j.nima.2005.07.053>
16. Maier-Leibnitz H., Springer T. // J. Nucl. En. 1963. V. 17. № 4–5. P. 217. [https://doi.org/10.1016/0368-3230\(63\)90022-3](https://doi.org/10.1016/0368-3230(63)90022-3)

## Conceptual Design of a Time-of-Flight Powder Diffractometer for a Compact Neutron Source

E. V. Moskvina<sup>1, 2, \*</sup>, N. A. Grigoryeva<sup>1</sup>, N. A. Kovalenko<sup>1, 2</sup>, S. V. Grigoriev<sup>1, 2</sup>

<sup>1</sup>Saint-Petersburg State University, Saint-Petersburg, 199034 Russia

<sup>2</sup>Petersburg Nuclear Physics Institute named by B.P. Konstantinov of NRC “Kurchatov Institute”, Gatchina, 188300 Russia

\*e-mail: moskvina\_ev@npni.nrcki.ru

A conceptual design of a powder diffractometer for a compact neutron source DARIA based on a linear proton accelerator is presented. The proposed concept extends the possibilities of optimizing the device performance not only by varying the diffractometer parameters, but also the neutron source parameters, such as the moderator temperature, repetition rate, and duration of neutron pulses. The results of calculating the spectrum of the target assembly for different types of moderators are presented. The efficiency of the neutron source system for increasing the neutron flux on the sample is evaluated in the McStas software package. The calculation results show the principal possibility of implementing the neutron diffraction method under conditions of limited luminosity of the compact neutron source.

**Keywords:** neutron diffraction, powder diffractometer, compact neutron source, Monte Carlo method.