

ПРИМЕНЕНИЕ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ ТЕХНИКИ В ЭКСПЕРИМЕНТЕ

УДК 53.08:004

СИСТЕМА АВТОМАТИЗАЦИИ ЭКСПЕРИМЕНТОВ, ПРОВОДИМЫХ НА НЕЙТРОННОМ ПОРОШКОВОМ ДИФРАКТОМЕТРЕ

© 2013 г. А. А. Богдзель, С. Велешки, А. И. Журавлев, В. В. Журавлев, Ф. В. Левчановский,
А. С. Кирилов, М. В. Михин, Т. Б. Петухова, С. М. Мурашкевич, В. И. Приходько,
А. П. Сиротин, А. И. Калюканов*, Л. Е. Фыкин*

Объединенный институт ядерных исследований

Россия, 141980, Дубна Московской обл., ул. Жолио-Кюри, 6

**Филиал ФГУП “НИФХИ им. Л.Я. Карпова”*

Россия, 249033, Обнинск Калужской обл., Киевское шоссе, 109 км

Поступила в редакцию 11.05.2012 г.

Описана модернизация детекторной системы и системы управления нейтронным порошковым дифрактометром (н.п.д.) на канале ГЭК-5 реактора ВВР-ц (филиал ФГУП “НИФХИ им. Л.Я. Карпова”, Обнинск). Создан подключенный к персональному компьютеру аппаратно-программный комплекс, обеспечивающий сбор и накопление данных, а также управление экспериментом. Кратко описаны разработанные в ЛНФ ОИЯИ основные блоки системы автоматизации н.п.д. и управляющего программного комплекса Sonix+. Модернизация позволила увеличить светосилу дифрактометра и полностью автоматизировать процесс измерений.

DOI: 10.7868/S0032816213020031

1. ВВЕДЕНИЕ

С 1966 года на канале ГЭК-5 реактора ВВР-ц (филиал ФГУП “НИФХИ им. Л.Я. Карпова”, Обнинск) работает нейтронный порошковый дифрактометр (н.п.д.) [1, 2], предназначенный для исследования атомной структуры поликристаллических материалов (металлов, упорядочивающихся сплавов, сегнетоэластиков со структурой типа перовскита, гидридов и оксидов металлов и др.) с высокосимметричной элементарной ячейкой, обладающей небольшими периодами. В качестве кристалла монохроматора используется монокристалл цинка (плоскость 002), что при угле монохроматизации $\theta_m = 15^\circ$ дает длину волны 1.279 Å. Перед кристаллом-монохроматором расположен соллеровский коллиматор длиной 300 мм и расходимостью $\sim 23'$. Плотность потока нейтронов на образце $\sim 5 \cdot 10^6$ нейтронов/(см² · с). Вклад нейтронов в монохроматическом пучке с $\lambda/2$ составляет 1.5%. Таким образом, установка обладает достаточной светосилой и средним разрешением (для $\theta_B = 60^\circ$, $\Delta d/d = 0.015$). Расстояние от кристалла-монохроматора до образца 3050 мм. Непосредственно после монохроматора расположен однощелевой нейтронный провод длиной 2150 мм и расходимостью $\sim 40'$.

Нейтронный порошковый дифрактометр на канале ГЭК-5 реактора ВВР-ц содержит следующие основные функциональные узлы: дифрактометр John Cigan; первичный коллиматор; моно-

хроматор; вторичный коллиматор; детекторную систему; электронику автоматизации измерений, включающую аппаратуру контроля, управления и накопления данных.

2. СИСТЕМА АВТОМАТИЗАЦИИ ЭКСПЕРИМЕНТОВ НА Н.П.Д.

Общая организация системы автоматизации экспериментов дифрактометра представлена на рис. 1. Система включает в себя аппаратно-программный комплекс, обеспечивающий управление экспериментом и накопление данных измерительной аппаратурой, а именно: блок предусилителей с высоковольтными развязками и фильтрами; NIM-крейт с детекторной электроникой и электронной накопления данных; двигатель с редуктором, датчиком OCD-SL00B1212 и адаптером RS485/SSI ЛИР916; частотный привод VF-S11; оптический преобразователь в USB 2.0 и преобразователи USB/RS485 AC4; персональный компьютер.

2.1. Детекторная система

Модернизированная детекторная система (рис. 2) дифрактометра состоит из коллиматора соллеровского типа с расходимостью $\sim 80^\circ$, десяти нейтронных счетчиков и поворотной платформы. Поворот осуществляется трехфазным асинхронным двигателем через редуктор или с помощью ручного управления. На оси редуктора устанавли-

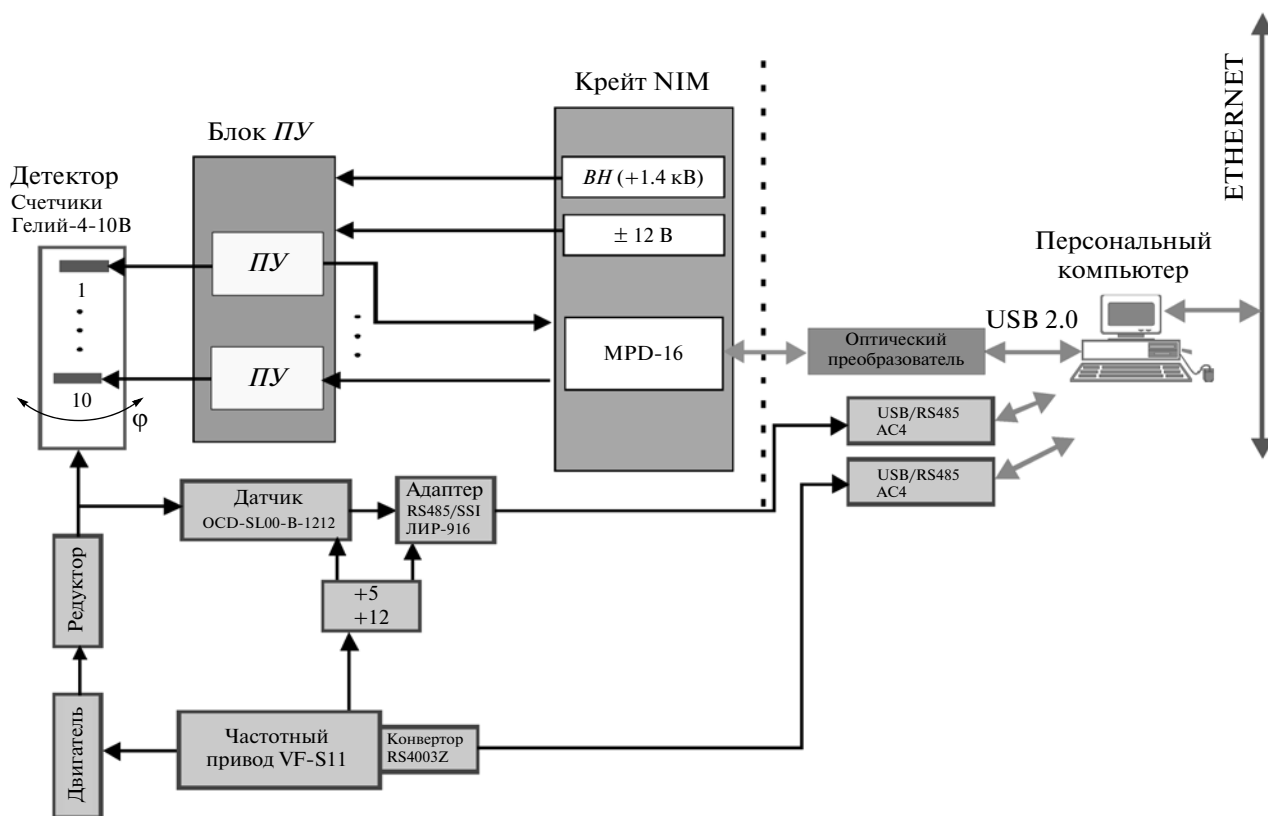


Рис. 1. Структурная схема системы автоматизации экспериментов на нейтронном порошковом дифрактометре. ПУ – предусилители, ВН – блок высокого напряжения, MPD-16 – программируемый электронный блок накопления экспериментальных данных.

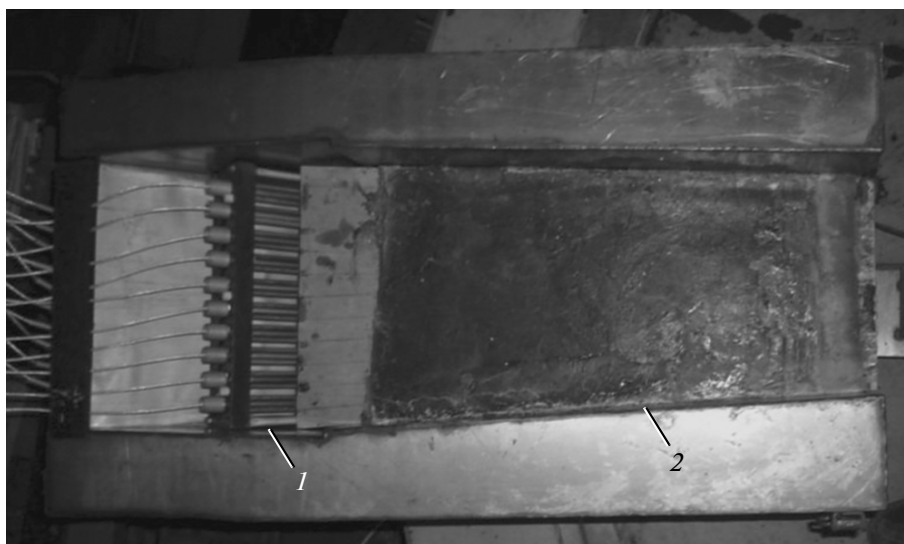


Рис. 2. Внешний вид модернизированной детекторной системы. 1 – нейтронные счетчики, 2 – соллеровский коллиматор в защите (парафин с карбидом бора).

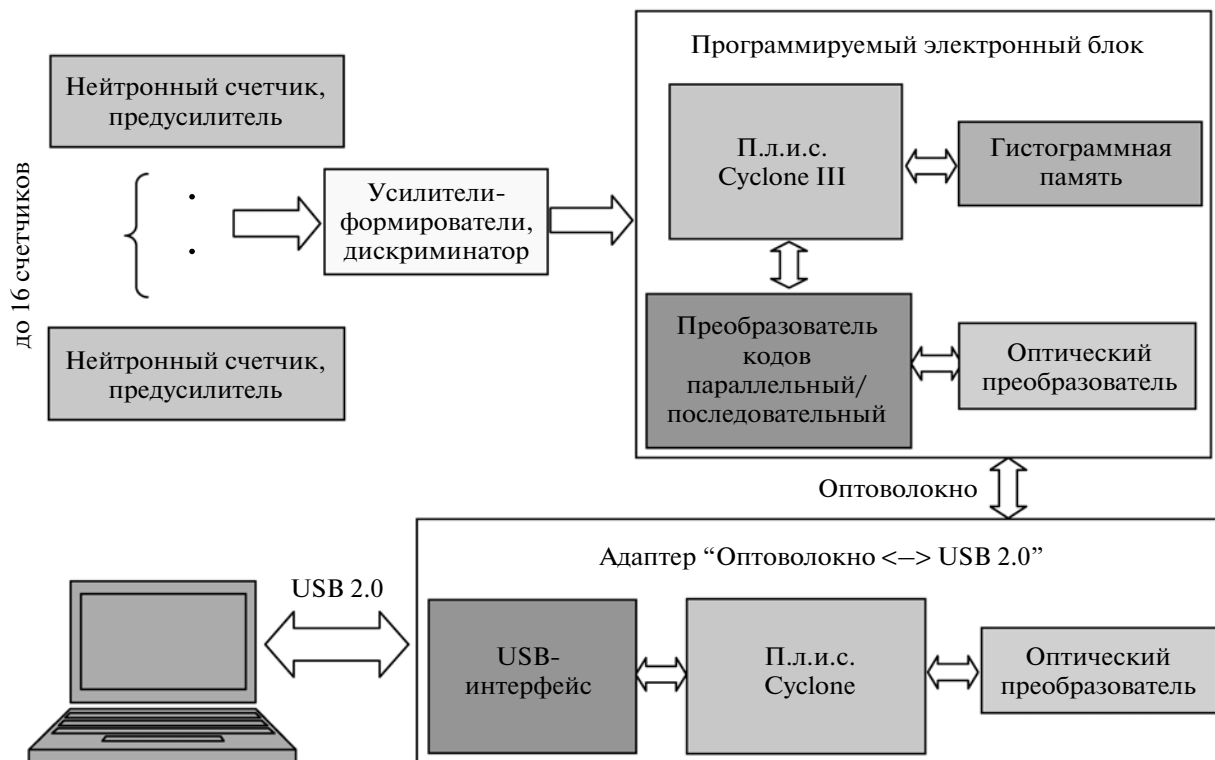


Рис. 3. Блок-схема системы сбора и накопления данных с детекторов нейтронного порошкового дифрактометра.

вается абсолютный многооборотный угловой датчик OCD-SL00-B1212 с параметрами:

| | |
|------------------------------|---------------|
| 1 оборот | 12' |
| количество оборотов 240°/12' | 1200 |
| разрешение | не хуже 0.06° |

Угловое расстояние между детекторами, расположенными на удалении 800 мм от образца, равно 1°. Детекторы передвигаются с угловым шагом, равным 0.1° (или 0.05°), поэтому каждый n -й детектор займет положение $(n - 1)$ -го детектора через 10 (20) шагов.

Основные параметры детекторной системы: масса 200 кг; радиус вращения 1.2 м; диапазон вращения 140°; точность сканирования не хуже $\pm 0.06^\circ$; скорость вращения "быстро" 1°/40 с; скорость вращения "медленно" 1°/600 с.

Люфт выбирается программно движением системы детекторов к точке сканирования только с одной стороны.

2.2. Электроника управления

Сигнал с углового датчика через адаптер RS485/SSI ЛИР916 и интерфейс USB/RS485 подается на управляющий компьютер (см. рис. 1). Поворот детекторной системы осуществляется

частотным электроприводом VF-S11. Электропривод имеет встроенный микроконтроллер, который реализует алгоритм управления по скорости вращения и по моменту на валу двигателя. Связь микроконтроллера привода с управляющим компьютером осуществляется через конвертор RS4003Z и USB/RS485 интерфейс.

В режиме ручного управления поворот детекторной системы выполняется при помощи кнопок "Пуск"/"Стоп" с контролем по цифровому индикатору угла поворота. Управляющий компьютер позволяет осуществлять угловое сканирование и накопление дифракционных спектров по заданным параметрам: начальному и конечному углам; шагу угла; времени экспозиции.

2.3. Накопление спектров

Сбор и накопление данных осуществляются программируемым электронным блоком MDP-16 (рис. 3), который принимает сигналы от счетчиков, осуществляет их преобразование, предварительную обработку и передачу в персональный компьютер. Все эти операции выполняются микропрограммами, "защитными" в программируемые логические матрицы блока (п.л.и.с.). Комплекс микропрограмм обеспечивает регистрацию и накопление данных со счетчиков, построение гистограмм, промежуточное запоминание в па-

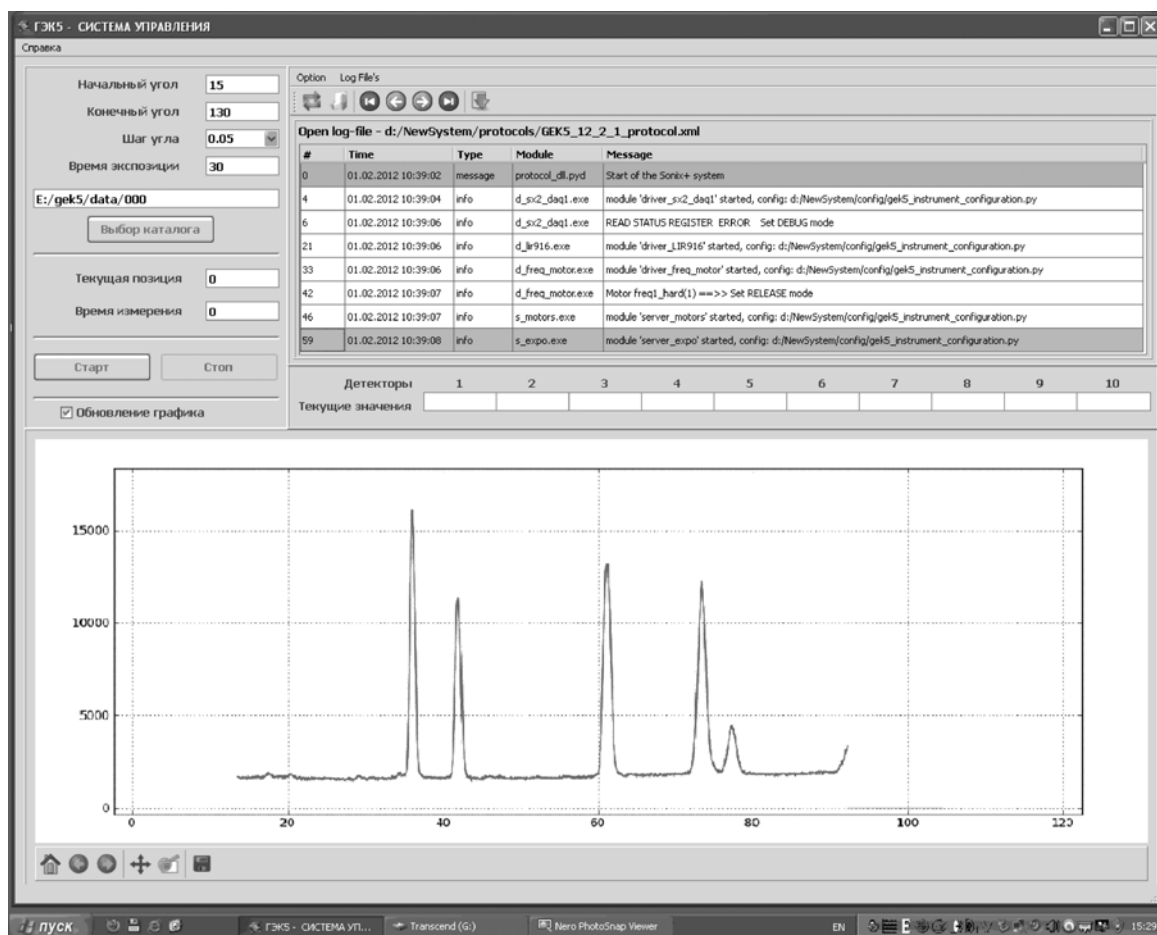


Рис. 4. Общий вид диалогового окна специализированного интерфейса программы ObninskMainRelease.

мяти блока и передачу в персональный компьютер для хранения и последующей off line обработки. Параллельно с накоплением, по запросам пользователя, данные передаются в компьютер для визуализации с целью контроля эксперимента.

В электронику встроен тестовый генератор, имитирующий работу системы накопления данных. Это позволяет провести быструю проверку работоспособности аппаратуры перед сеансом, а также ее автономную отладку без подключения детекторных элементов. Передача данных между электроникой сбора данных и портом USB 2.0 осуществляется через интерфейсный блок по последовательной волоконно-оптической линии связи. Скорость передачи данных 1.25 Гбит/с, максимальная удаленность компьютера – до 100 м. Конструктивно блок MDP-16 состоит из двух плат стандарта NIM: указанного выше программируемого блока и блока усилителей-формирователей, в котором осуществляются дискриминация сигналов, преобразование их к единому логическому представлению (LVDS) и переход от разъемов LEMO на ленточный кабель.

2.4. Программное обеспечение

Для управления экспериментом применен программный инструментальный комплекс Sonix+ [3]. Использована типовая схема организации работы комплекса за единственным исключением. Поскольку методика проведения измерений на спектрометре неизменна и достаточно проста, для повышения комфортности пользователей было принято решение о разработке специализированной программы графического интерфейса (GUI) ObninskMainRelease (рис. 4).

В одной программе объединены все функции, которые могут потребоваться при проведении эксперимента, а именно: задание параметров эксперимента; пуск и остановка экспозиции; вывод истории измерения (протокольного файла); визуализация накапливаемых спектров и текущих значений для выбранных счетчиков.

Загрузка всего комплекса программ скрыта от пользователя и выполняется автоматически при первом вызове программы интерфейса (GUI). Интерфейс можно отключать, не останавливая изме-

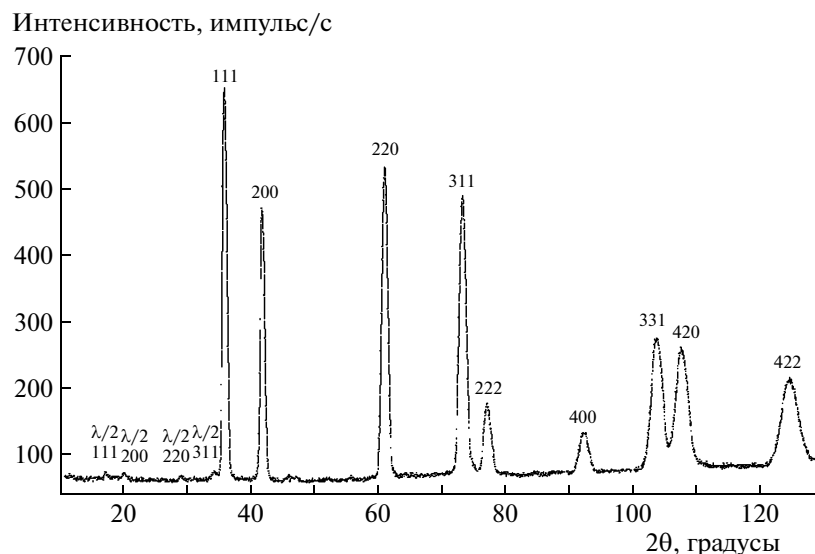


Рис. 5. Нейтронная дифрактограмма образца Ni; шаг сканирования 0.05° , время экспозиции 30 с (интенсивность приведена к 1 с).

рений. При повторном запуске интерфейс “подхватывает” текущее измерение самостоятельно.

Отметим, что, наряду со специализированным GUI, доступен и стандартный пользовательский интерфейс Sonix+, которым можно воспользоваться по необходимости.

Программа ObninskMainRelease написана на языке Python [4] с использованием PyQt [5] и графической библиотеки matplotlib [6].

3. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Результатом выполненных работ является коренная модернизация детекторной системы дифрактометра, а также управляющей электроники и электроники сбора и накопления данных. В состав оборудования н.д.п. включен персональный компьютер и разработан комплекс программ для накопления данных и управления экспериментом. Вся аппаратура системы автоматизации экспериментов, проводимых на н.д.п., установлена на пучке и сдана в эксплуатацию вместе с программным обеспечением. Проведены тестовые испытания и рабочие измерения. В качестве примера на рис. 5 показана нейтронная дифрактограмма образца Ni, измеренная на н.д.п.

Монотонное возрастание фона на нейтронной дифрактограмме обусловлено повышением фона в центральном зале реактора при приближении батареи счетчиков к защите от прямого пучка. Отношение сигнал/фон можно существенно улучшить за счет усиления защиты счетчиков от фона зала, а также путем подбора минимальной апертуры для падающего на образец пучка.

В результате модернизации светосила н.д.п. была увеличена по сравнению с установкой на од-

ном счетчике в 10 раз, что позволило уменьшить время измерения, а также оптимизировать расходимость коллимирующей системы для достижения лучшего разрешения. С другой стороны, указанный выигрыш в светосиле позволяет на порядок (в 10 раз) уменьшить объем (массу) образца, что весьма существенно, так как часто бывает сложно получить образец большой массы.

Возможность использования графического интерфейса ObninskMainRelease с заданием параметров съемки, визуализацией накапливаемых спектров, а также выводом нейтронных дифрактограмм на современные носители является существенным преимуществом по сравнению со старой системой, в которой ввод параметров эксперимента выполнялся с магнитной ленты, а вывод нейтронных дифрактограмм — только на цифropечать.

В заключение авторы считают своим долгом выразить благодарность В.В. Сумину, В.П. Чубыкину за помощь в работе и полезные обсуждения.

Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки в рамках государственных контрактов № 16.518.11.7086 и № 16.518.11.7108.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Нозик Ю.З., Озеров Р.П., Хенниг К. Нейтроны и твердое тело. Структурная нейтронная дифрактография. Т. 1. М.: Атомиздат, 1979. С. 18, 104–105, 109.
2. Глазков В.П., Головин А.Е., Соменков В.А. и др. // ПТЭ. 1974. № 3. С. 47.
3. <http://sonix.jinr.ru/wiki/doku.php?id=ru:index>
4. <http://www.python.org/>
5. <http://qt.nokia.com/products/>
6. <http://matplotlib.sourceforge.net/users/intro.html>