

# Neutron kutatási instrumentális fejlesztések a BNC-ben

Markó Márton

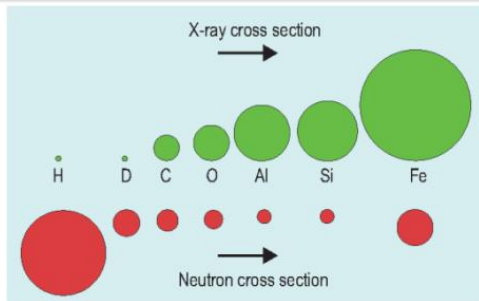


MTA WIGNER Fizikai Kutatóközpont  
BNC

## A neutron

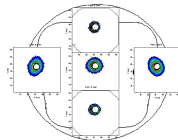
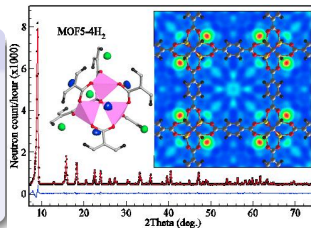
A neutron töltés nélküli mágneses momentummal rendelkező elemi részecske:

- Mélyen behatol az anyagba
- Az atommagon és a mágneses téren szóródik
- Hatáskeresztmetszet izotópfüggő és a rendszámtól független
- Tömege közelítőleg megegyezik a hidrogén atom tömegével
- $1\text{\AA}$  hullámhossznál  $E=80\text{meV}$  ( $\sim$  fonon energia és impulzus)



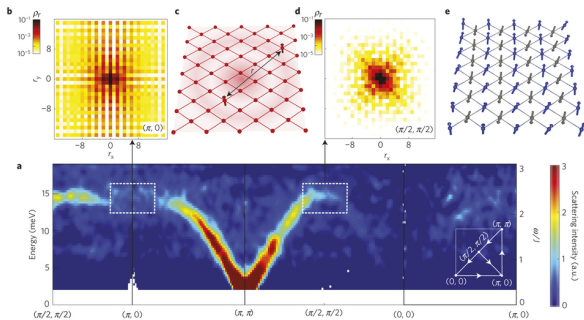
## Szerkezetvizsgálatok

- Makroszkópikus: Radiográfia
- Nano mérettartomány: Kiszögű neutronszórás (SANS), reflektometria
- Atomi felbontás: Diffrakció



## Dinamikus szerkezetvizsgálatok

- $\sim$  eV: molekularezgések
- $\sim$  1-200 meV: fononok, spinhullámok
- $\sim$   $<1$  meV: diffúzió ...



a, Momentum and energy dependence of the (total) dynamic structure factor  $S(\mathbf{q}, \omega)$  measured by time-of-flight inelastic neutron scattering. Square boxes (black dashed) highlight the  $(0, 0)$  and  $(\pi/2, \pi/2)$  wavevectors. a.u., arbitrary units. b, d, Corresponding distributions of real-space fractional quasiparticle-pair separations, as calculated in the [JSF] variational state (equation (3)), evidencing, respectively, the unbound and bound nature of the pair excitations. c, e, Pictorial representation of a quasiparticle-pair excitation and a spin-wave excitation (magnon), respectively.

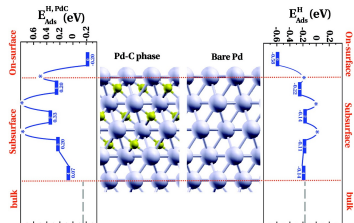
Piazza et al. Nature Physics 11, 62768 (2015)

## Elem - izotóp analízis

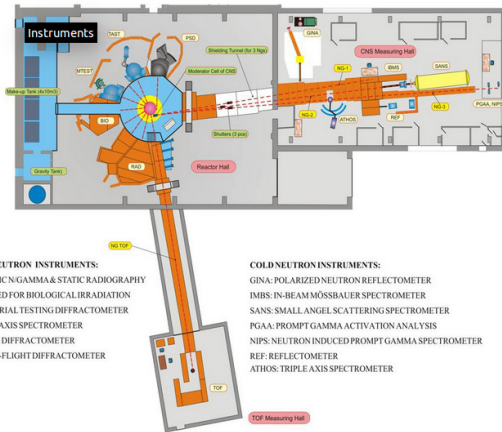
- Neutron aktivációs analitika
- Prompt gamma aktivációs analitika



Photo 1. Pre-Columbian (12th-15th c. A.D.) ceramic figurines. Found in Los Roques Archipelago, Venezuela



# Budapesti Kutatóreaktor Műszerközpont Budapest Neutron Centre



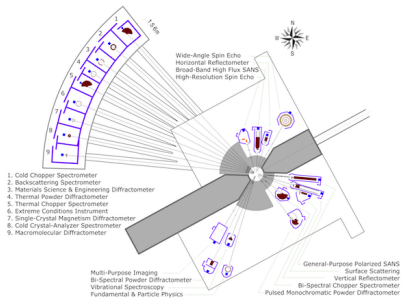
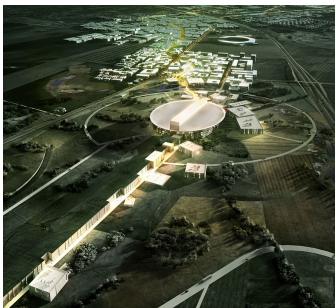
**THERMAL NEUTRON INSTRUMENTS:**  
 RAD: DYNAMIC N/GAMMA & STATIC RADIOGRAPHY  
 BIO: PORT USED FOR BIOLOGICAL IRRADIATION  
 MTEST: MATERIAL TESTING DIFFRACTOMETER  
 TAST: TRIPLE AXIS SPECTROMETER  
 PSD: POWDER DIFFRACTOMETER  
 TOF: TIME-OF-FLIGHT DIFFRACTOMETER

**COLD NEUTRON INSTRUMENTS:**  
 GINA: POLARIZED NEUTRON REFLECTOMETER  
 IMBS: IN-BEAM MÖSSBAUER SPECTROMETER  
 SANS: SMALL ANGLE SCATTERING SPECTROMETER  
 PGAA: PROMPT GAMMA ACTIVATION ANALYSIS  
 NIPS: NEUTRON INDUCED PROMPT GAMMA SPECTROMETER  
 REF: REFLECTOMETER  
 ATHOS: TRIPLE AXIS SPECTROMETER



# European Spallation Source

- Impulzusüzemű spallációs forrás
- A világ legnagyobb intenzitású neutronforrása
- 22 tervezett berendezés
- első neutronok: 2019



### A teljesség igénye nélkül

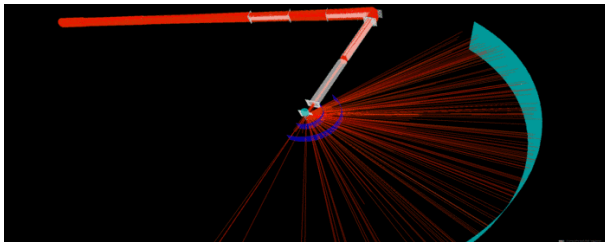
- Kloroplasztisz vizsgálata
- Ionos folyadékok szerkezetvizsgálata (SANS)
- Szilika gélek
- Komplex folyadékok szerkezetvizsgálata: diffrakció, RMC
- Neutron holográfia
- Archeometriai mérések (ND, SANS, PGAA)
- Meglévő berendezések fejlesztése
- Neutron optika
- ESS berendezések fejlesztése optimalizációja



## Instrumentális fejlesztések a BNC-ben

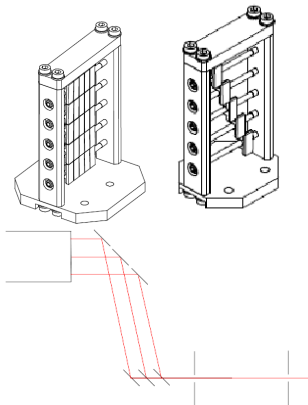
- Új monokromátor - analizátor geometriák
- Neutron optika: neutron tükör geometria fejlesztés
- Neutronvezető rendszer analitikus és Monte-Carlo modellezése
- Műszerek felbontásfüggvényének analitikus vizsgálata
- **Műszerfejlesztés az ESS-hez**
  - ▶ BIFROST: Extreme environment spectrometer
  - ▶ MIRACLES: Backscattering spectrometer
  - ▶ NMX: Protein single crystal diffractometer

- MonteCarlo kódok: Vitess, McStas
- Egyszerűbb kódok (analitikus, ray-tracing) (Matlab, Scilab, Igor)
- Analitikus felbontásfüggvények (Cooper-Nathan, Popovichi)



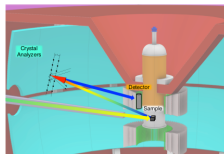
# Monokromátor fejlesztések

Reflektométer monokromátor  
REF @ BNC:



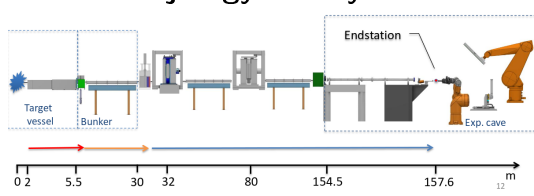
továbbfejlesztés Si monokromátorra

Backscattering idő-fókuszáló  
analizátor  
MIRACLES @ ESS:



További vizsgálatok:  
Véges mintavastagság hatása, Si  
fononok hatása

## Dedikált fehérje egykristály diffraktométer



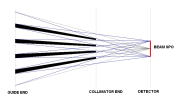
### Jelenlegi design

- Egyszerű guide rendszer
- Olcsó(nak tűnik)
- $3 \times 3 \text{ cm}^2$  neutronvezető,  $200 \times 200 \mu\text{m}^2$  minta
- Padló mozgása tükör hullámossága nem vizsgált ( $\theta_c = 0.2^\circ @ 2\text{Å}$ )

### Továbbfejlesztés

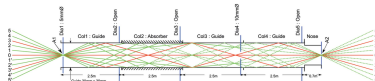
- Zavaró hatások feltérképezése
- Fókuszáló optika vizsgálata
- Tükör degradáció számolása
- Végleges optimalizáció

# Fókuszáló Kisszögű berendezés széles mérettartományok (10-1000 nm) vizsgálatára



## Soron következő feladatok

- Fókuszáló tükör hibáinak vizsgálata
- Multibeam fókuszálás vizsgálata
- Multibeam SANS vizsgálata,



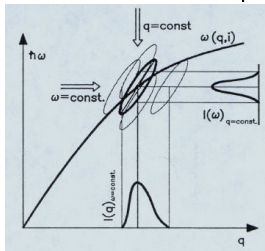
(C. D. Dewhurst J. Appl. Cryst. (2014)  
47, 1180-1189)

## Általános felbontásszámoló kód fejlesztése

A neutronszórási műszerek 3-4D-ben mérnek (reciprok tér + E)  
A felbontásfüggvényük közelíthető 3 v 4 dimenziós ellipszoiddal

Létező analitikus eljárások  
(Gauss közelítéssel):

- Cooper-Nathan
- Popovichi: Mátrix módszer
- ...



Berendezésenként újra kell számolni, és kikeresni a nyomdahibákat

### CÉL

- Közelítések miatti torzításokat kiszűzése (javítása)
- Moduláris felbontásszámoló algoritmus írása
- Általános felbontásszámoló kód fejlesztése
- Összeépítés már meglévő modellszámító kódokkal (WASP, SpinW ...)