

65

CONTROLE E AQUISIÇÃO DE DADOS NO DIFRATÔMETRO DE NÊUTRONS
DO IPEN-CNEN/SP.

Carlos B. R. Parente e Vera L. Mazzocchi

INTRODUÇÃO

A difratometria de nêutrons é uma técnica que busca essencialmente estudar o estado cristalino de uma substância através da observação do espalhamento coerente de nêutrons. Experimentalmente, a observação é feita utilizando-se um difratômetro de nêutrons, normalmente instalado junto a um reator nuclear. A figura 1 é um esquema de um difratômetro de nêutrons com suas partes principais indicadas.

A técnica de medida em difratometria de nêutrons envolve o posicionamento angular de um detetor em torno da amostra em estudo, tendo como referência zero a direção do feixe monocromático incidente. Se a amostra é policristalina sem orientações preferenciais, ou seja, é formada por grãos monocristalinos cristalograficamente orientados ao acaso, são necessários, no máximo, duas movimentações angulares. A principal delas é a acima referida movimentação do detetor em torno da amostra, correspondente à variação do ângulo de espalhamento 2θ , onde θ é o ângulo relacionado na conhecida lei de Bragg $n\lambda = 2d \cdot \sin \theta$. A outra movimentação angular, θ , é usada no caso de porta-amostras com a forma de placa com o fim de manter a simetria no espalhamento. Esta simetria é importante para simplificar o cálculo do fator de absorção da amostra. Na figura 1, uma amostra em forma de placa está posicionada simetricamente com relação aos feixes incidente e espalhado. A simetria deve ser conservada durante todo o processo de medida por meio de um acoplamento $2\theta - \theta$ entre as duas movimentações angulares. Para porta amostras cilíndricos, que corresponde ao caso mais comum em

difratometria de pó, basta a movimentação 2θ .

Se a amostra é um monocristal, torna-se necessário posicioná-lo no feixe incidente de forma a obter o espalhamento coerente pela família de planos cristalinos desejada. Este posicionamento é feito com a utilização de um goniostato para monocristais. A figura 2 mostra esquematicamente os movimentos angulares existentes em um goniostato para monocristais. Deve-se observar que na figura estão incluídos os movimentos 2θ e θ , mencionados anteriormente. O movimento 2θ é aplicado ao detetor, enquanto que, com monocristais, o θ é aplicado ao conjunto do goniostato, particularmente no caso em que se faz uma medida de intensidade utilizando o acoplamento $2\theta - \theta$. Este tipo de medida, que não tem nada a ver com o acoplamento $2\theta - \theta$ em amostras policristalinas mencionado anteriormente, é utilizado como alternativa ao método do cristal girante. O método do cristal girante, que resulta na obtenção de curvas de "rocking" das reflexões escolhidas, consiste na medição de intensidade mantendo o cristal posicionado para a obtenção do máximo da reflexão em estudo, girando-se o detetor (movimentação 2θ) em torno desse máximo. Outra observação a ser feita, é que a movimentação angular indicada com W é realizada através de um eixo comum com a movimentação θ , somente que, no caso de W , esta movimentação é independente da 2θ . As rotações indicadas com X e ϕ são normalmente utilizadas na orientação dos planos cristalinos da reflexão em estudo, conjuntamente com a W . A rotação Σ não é comum de se encontrar em goniostatos. A sua função é permitir o giro do cristal em torno do vetor de espalhamento de uma reflexão em estudo. Um goniostato do tipo esquematizado na figura 2 é comumente chamado de 5-círculos, correspondentes aos movimentos angulares θ , W , X , ϕ e Σ . Os goniostatos mais comuns tem somente 4-círculos, ou seja, não incluem o eixo Σ .

O que se pode resumir, da descrição acima, é que, se um

difratômetro de nêutrons deve ser usado para amostras policristalinas, sem restrição na sua forma, 2 movimentos são necessários 2θ e θ . No caso de amostras monocristalinas, devem ser adicionados mais 3 movimentos: W, X e ϕ sendo que o W tem o seu eixo comum com o eixo de movimentação θ . Um movimento só é acrescentado em um difratômetro caso se queira fazer experiências em difração múltipla. É evidente que um difratômetro para monocristais pode ser usado para policristais. O reverso é que não é possível. Finalmente, deve-se acrescentar que, em aplicações da difratometria em estudos que não sejam de estruturas, como é o caso da determinação de texturas, os movimentos angulares existentes em um difratômetro para monocristais são suficientes. Entretanto, muitas vezes são utilizados goniostatos especialmente construídos para o estudo de texturas.

A movimentação dos diversos eixos de rotação de um difratômetro de nêutrons (ou de raios-X) se faz, em geral, em intervalos de vários graus com passos angulares da ordem de poucos décimos de grau. Uma exceção, por exemplo, constitui-se na determinação de texturas onde os passos são da ordem de graus. Um diagrama de pó típico pode ter uma extensão de, por exemplo, 60 graus com passos angulares de 0,1°. Em um caso como este seriam 601 pontos experimentais, cada um podendo levar vários minutos para ser obtido. Portanto, a obtenção de um diagrama de difração de nêutrons de uma amostra policristalina é um processo longo e tedioso e, se feito manualmente, necessita da presença constante de um operador. No caso de amostras monocristalinas, as medições de intensidade são feitas de modo totalmente diverso do que ocorre com amostras policristalinas. Conforme já foi mencionado, a medição da intensidade difratada por uma família de planos cristalinos, em um monocristal, implica primeiro em orientar esses

planos, para a obtenção do feixe difratado em um ângulo 2θ , e, em seguida, medir a intensidade desse feixe usando do acoplamento $2\theta - \theta$, ou simplesmente de 2θ . De qualquer forma, no caso de monocristais, embora as intensidades envolvidas sejam bem maiores do que com policristais, significando tempos de medida menores, os intervalos angulares e os passos envolvidos são de mesma ordem de grandeza, acrescido o fato de serem mais eixos em movimentação. Portanto, também com monocristais, torna-se necessária a presença de um operador. Convém lembrar um outro aspecto: a operação de um difratômetro, nas condições acima descritas, tende a ser imprecisa e sujeita a erros se feita manualmente.

Um operador pode ser substituído, vantajosamente, por um sistema automatizado de operação, encarregado não somente do posicionamento angular mas também da própria aquisição de dados no difratômetro. São vários os sistemas possíveis envolvendo maior ou menor grau de flexibilidade de programação. Entre os sistemas de menor flexibilidade encontram-se aqueles dotados de relés para o acionamento dos motores elétricos, usados na movimentação angular, e de microrrutores para a definição dos passos angulares, fixados anteriormente durante o projeto do sistema. Alguns desses sistemas tem ainda pré-selecionadores de ângulo que permitem definir o intervalo angular em que deve se efetuar a medição. Um sistema deste tipo pode ser chamado de eletro-mecânico, embora deva receber algum tipo de comando proveniente do sistema eletrônico de contagem de nêutrons, a fim de possibilitar a mudança de ângulo no término de uma contagem. Mais avançado, e mais flexível, é um sistema que empregando um sistema eletro-mecânico como o anterior, ou um sistema mais avançado de chaveamento eletrônico, porém comandado segundo uma programação gravada em fita de papel perfurada. Finalmente, os sistemas realmente flexíveis são aqueles que empregam microprocessadores, ou melhor ainda, computadores, mini ou micro,

dedicados. Em um sistema comandado por microcomputador, por exemplo, a flexibilidade é governada essencialmente pelo programa desenvolvido. O usuário estabelece, antes do início de um experimento, as condições em que se deve efetuar as medições experimentais, tais como quais ângulos e qual a frequência em que devem ser operados, o intervalo e o passo angular para cada um deles, tipo de contagem por tempo ou monitor, duração de cada contagem. Na sequência serão apresentadas algumas características do sistema de comando e aquisição de dados implantado recentemente no difratômetro de nêutrons do IPEN-CNEN/SP, precedidas de um breve histórico sobre o difratômetro e os sistemas anteriormente utilizados.

O DIFRATÔMETRO DE NÊUTRONS DO IPEN-CNEN/SP.

O projeto do difratômetro de nêutrons do IPEN-CNEN/SP, foi iniciado em 1965 dentro do projeto "Neutron Diffractometry" da Agência Internacional de Energia Atômica (AIEA). A AIEA enviou, na ocasião, o Dr. Morris G. Nereson, do "Los Alamos Scientific Laboratory" (LASL), na qualidade de "expert" para dar assistência técnica no desenvolvimento do projeto. A Agência enviou também uma parte do equipamento necessário, ou seja, detetores de nêutrons, monocromadores, discriminadores, medidores de taxa de contagem ("ratemeters"), contadores de pulsos ("scalers") e impressoras. Participavam do projeto o Dr. Silvio B. Herdade, como supervisor, e o Dr. Carlos B. R. Parente, como projetista. A figura 3 é um desenho feito durante a fase de projeto do difratômetro. Na época o IPEN era o então Instituto de Energia Atômica (IEA). O Dr. Nereson concluiu a sua colaboração ainda em 1965. No ano seguinte, na sua segunda metade, a AIEA enviou o Dr. Robert G. Wenzel do LASL para continuar o trabalho iniciado com a vinda do Dr. Nereson. Este segundo "expert" supervisionou

trabalhos finais de construção do difratômetro, a escolha e instalação
um monocromador e a calibração do instrumento. Por ocasião do retorno do
Dr. Wenzel ao seu país, o que ocorreu nos meados de 1967, o Dr. Parente
ficou encarregado de projetar um sistema de operação automática do
difratômetro. Esse sistema foi projetado, construído e, em seguida,
instalado no difratômetro. A fotografia da figura 4 mostra o sistema que,
na época, contava com 2 grupos motrizes para as movimentações 2θ e W .
Esses grupos, perfeitamente identificáveis na fotografia, possuíam 2 servo-
motores cada um. Um dos motores servia para a movimentação rápida e o
outro, acoplado ao primeiro por uma unidade de embreagem e freios
magnéticos, servia para o posicionamento mais lento. A unidade de embreagem
e freio, vista na fotografia separando os motores, permitia um
posicionamento mais preciso. O grupo da direita acionava o detetor (2θ) e,
através de um diferencial com uma relação 2:1, acionava também o eixo θ . O
diferencial é visto entre as duas engrenagens iguais, colocadas
verticalmente e próximas da coroa de acionamento do movimento 2θ . O outro
grupo motriz, idêntico ao primeiro, acionava o mesmo eixo θ , porém agora
como eixo W , independente do 2θ . O sistema tinha também 2 unidades com
microinterruptores que permitiam a seleção do passo angular de 2θ e W . Eram 4
passos possíveis para cada um dos ângulos: $0,025$; $0,05$; $0,1$ e $0,2$. A
informação sobre a posição angular dos 2 movimentos era enviada a um painel
onde estavam instalados os equipamentos eletrônicos de registros das
contagens. A transferência de informação era realizada por pares de "s-
salsyns", ou seja, sincro-transmissores acoplados a sincro-receptores. Na
fotografia, os sincro-transmissores dos 2 movimentos são vistos, lado a
lado, na direita do sistema. A unidade de controle do passo angular de 2θ
está colocada no canto superior direito da caixa que contém o sistema. A

outra, correspondente ao ângulo W , está ao lado de um dos sincro-transmissores. Finalmente, o sistema possuía um câmbio para alterar a velocidade de atuação dos motores de acionamento W . O câmbio era acionado por um solenoide de tração, que é visto na fotografia próximo ao motor de movimentação lenta 2θ , assim como as demais partes do mecanismo do câmbio.

Para o acionamento do sistema mecânico, foi projetado um circuito eletrônico com relés, que é mostrado na figura 5. Esse circuito não chegou, na realidade, a ser construído, uma vez que os contadores de pulsos, inicialmente fornecidos pela AIEA, eram do tipo eletro-mecânico, não suportando taxas de contagens além de 10 pulsos por segundo, inapropriado mesmo no caso de difratometria de pó. Esses contadores foram substituídos por contadores eletrônicos, fornecidos posteriormente pela AIEA, muitas vezes mais rápidos. Em 1969, ficou decidido que o difratômetro de nêutrons seria um instrumento de dupla aplicação, isto é, serviria não só para o estudo de amostras policristalinas como também para as monocristalinas. Com este objetivo, nos 3 anos seguintes foram providenciadas a construção de um goniostato, com as características daquele esquematizado na figura 2, e a compra de um minicomputador para operar o difratômetro. Foi escolhido um minicomputador VARIAN, modelo 620/L, sistema ADAPTS, com console apropriado para a entrada e saída de pulsos de controle. Antes que o minicomputador e o equipamento associado estivessem disponíveis, um sistema provisório de comando, utilizando relés, foi construído. Este sistema foi pouco depois substituído por outro, mais elaborado, com sistema de segurança para limitar os movimentos angulares do difratômetro, a fim de evitar a colisão entre uma parte móvel e uma outra fixa ou também móvel. Este sistema era comandado pelo sistema eletrônico de contagem, através de uma interface adequada. Com a aquisição de motores de passos ("stepping motors") e módulos de chaveamento eletrônico ("drivers") adequados, foi

iniciado um projeto de automatização utilizando o minicomputador VARIAN, no início de 1979. Por volta de 1981, com a colaboração do Engo. Eduardo W. Pontes, do IPEN, o sistema por ele projetado foi implantado no difratômetro e tornado operacional com um programa de controle e aquisição de dados. O minicomputador VARIAN controlava os movimentos 2θ , W , ϕ , X e Z no difratômetro. No sistema da figura 4, os grupos motrizes foram substituídos por dois motores de passos, um para cada movimento. O diferencial foi removido, uma vez que seria mais cômodo programar o acoplamento $2\theta - \theta$, se necessário. As unidades de controle dos passos angulares, bem como o câmbio de velocidades da movimentação W , foram conservados porém sem função. Os "pulsos" de indicação das posições angulares foram conservados com esta mesma função. Este sistema, bastante versátil, funcionou até recentemente. Pelo fato do minicomputador VARIAN ter-se tornado obsoleto e de manutenção difícil, no início de 1986 ficou decidido que seria substituído por microcomputador moderno, com maior capacidade operacional. A substituição completou-se nesse mesmo ano, em setembro. Uma idéia geral do sistema atualmente em uso é dada a seguir.

O SISTEMA DE CONTROLE E AQUISIÇÃO DE DADOS POR MICROCOMPUTADOR

O microcomputador atualmente utilizado no controle e aquisição de dados do Difratômetro de Nêutrons do IPEN-CNEN/SP é um EXATO, MC-4000, da ACE - Indústria e Comércio de Componentes Eletrônicos S/A, compatível com microcomputadores da linha APPLE II. A ele foram acoplados os seguintes periféricos:

Duas unidades de disco flexível, com interface apropriada, que tem a função de armazenamento e leitura de programas e dados.

Uma impressora matricial, com interface apropriada, que tem a função de

imprimir, em papel, dados, gráficos ou programas armazenados em disco.

Um monitor de vídeo que tem a função de mostrar o que é teclado, bem como a reação do microcomputador aos comandos teclados, além de permitir o acompanhamento da evolução de um programa pré-estabelecido.

O microcomputador em questão, possui também interfaces que aprimoram a ligação entre ele e os periféricos. Essas interfaces serão sucintamente descritas a seguir.

- Módulo de memória auxiliar ("buffer"): A maioria das impressoras operam somente com 80 a 100 caracteres por segundo, enquanto que o micro é capaz de fornecer até 3000 caracteres por segundo. Assim, devido à baixa velocidade da impressora, o micro fica limitado a 1/30 de sua capacidade, o que ocupa todo o sistema até a impressora terminar o trabalho. O "buffer" que atua como um tanque de armazenamento entre o micro e a impressora, permite que o micro seja liberado para fornecer dados à máxima velocidade, sem esperar o tempo que a impressora necessitaria para aceitá-los. Desta forma, enquanto a impressora esta trabalhando, o micro pode acessar disquetes, computar dados ou receber novos dados.

- Microprocessador Z-80: Cartão de expansão que permite utilizar o sistema operacional CP/M (Control Program / Microcomputer), além do sistema DOS (Disk Operating System), este último residente no micro.

- Módulo de expansão de memória 16K: Cartão de expansão que aumenta a memória do micro, inicialmente de 48K, para 64 Kbytes. Por ser compatível com o módulo Z-80, a combinação dessas duas expansões transforma o micro em um computador com dois microprocessadores (CP/M e DOS), e com uma memória RAM (Random-Access Memory) de 56K, uma vez que 8K ficam dedicados à memória ROM (Read-Only Memory).

- Módulo de 80 colunas: Profissionaliza o monitor de vídeo, permitindo a

apresentação de dados em 40 ou 80 colunas, comutável por " software ".
 Oferece caracteres maiúsculos, minúsculos, normais ou invertidos, e possibilita a geração de caracteres especiais. Apresenta 24 linhas de texto.

Softvideo Switch: Ativa e desativa, automaticamente, a placa de 80 colunas.

Para que o microcomputador pudesse atuar sobre o sistema de geração do difratômetro, isto é, sobre os motores de passos, bem como realizar a aquisição de dados, tornou-se necessário o projeto de uma interface adequada. Deste projeto encarregou-se o Engo. Eduardo W. Pontes, e de sua execução, o técnico Algeny V. Leite, ambos da Divisão de Instrumentação e Controle (RTI) do IPEN. Esta interface atua sobre os 5 motores de passos, instalados no difratômetro, enviando o número de pulsos adequados para a movimentação desses motores, no sentido e no intervalo regular desejados. Além disso, a interface tem um contador de tempo (" timer ") com pré-seleção e três contadores de pulsos (" scalers "), um deles com pré-seleção para que possa ser utilizado como canal de monitoração. A figura 6 é um diagrama de blocos simplificado dessa interface. Nela, os pulsos provenientes do sistema de detecção são encaminhados aos contadores de pulsos, através de discriminadores seguidos de formadores de pulsos adequados. Estes contadores e o contador de tempo são interligados para a atuação da pré-seleção de tempo, ou de contagem. O controle dos motores é feito através de um circuito de entrada/saída. No total, podem ser acionados 6 motores. A intercomunicação entre os contadores de tempo e de pulsos e o circuito de entrada/saída é feita pelo " Bus APPLE " do micro, com a supervisão de um programa de controle e aquisição de dados. Esse programa deve estabelecer a pré-seleção do contador de tempo ou do contador de pulsos, de acordo com a escolha do

usuário. Deve também selecionar os motores a serem acionados, enviando a eles o número de pulsos adequado para que girem no sentido e no intervalo angular corretos, de acordo ainda com a determinação do usuário. A supervisão é feita pelo programa de forma a estabelecer, além dos parâmetros corretos da operação e a aquisição de dados, a sequência correta das operações.

O programa que efetua o controle e a aquisição de dados no sistema atual e identificado pelo nome de DIFRAT. Este programa baseou-se em programa que era utilizado no sistema anterior, controlado pelo minicomputador VARIAN. O Dr. José Mestnik Fo. da Divisão de Física Nuclear (TFP) do IPEN, tendo a colaboração do Engo. Daniel A. G. Penteado da Divisão de Instrumentação e Controle (RTI) do IPEN, foi o responsável pela elaboração do novo programa. As modificações consistiram, essencialmente, na adaptação de subrotinas em BASIC, do sistema anterior para o novo sistema, e a elaboração de novas subrotinas em BASIC ou linguagem de máquina, dependendo da particular finalidade. Parte das subrotinas em BASIC tem a função de executar a programação definida pelo usuário. São subrotinas que expõem diferentes " menus " ao usuário, fazem a leitura dos dados iniciais, calculam os números de pulsos e o sentido de rotação de cada motor de passo a ser acionado, etc. Outras subrotinas, que podem estar escritas em BASIC ou, para maior agilização na sua execução, em linguagem de máquina, são aquelas que providenciam a operação do sistema propriamente dito. São subrotinas que enviam pulsos para os motores, inicializam o sistema, controlam a pré-seleção e fazem a leitura dos contadores, etc. A execução do programa é iniciada pela apresentação, na tela do monitor, do menu abaixo, o qual chamaremos de menu principal:

DIFRATOMETRO DE NEUTRONS

1. VALORES ATUAIS DOS ANGULOS
2. POSICIONAR DIFRATOMETRO
3. INICIAR EXPERIMENTO
4. CONTINUAR EXPERIMENTO
5. SAIDA DE RESULTADOS

A opção 1., permite ao usuário atualizar os valores das posições angulares do difratômetro, uma vez que essas posições podem ser alteradas pelo próprio usuário, sem a intervenção do micro. Nesta opção existem duas possibilidades:

1. ENTRADA POR DISCO DO ULTIMO EXPERIMENTO
2. ENTRADA MANUAL

A primeira permite que os valores dessas posições sejam lidas do último arquivo de dados, gravado no disco. Antes de assumir como exatos esses valores, é feita a pergunta se estão corretos. Em caso de resposta negativa, é perguntado qual ângulo deve ser mudado (os ângulos são identificados por números de 1 a 5) e qual o valor correto desse ângulo. O processo se repete até que a resposta dada pelo usuário seja afirmativa. Em seguida, os valores corrigidos são regravados no disco. A segunda possibilidade corresponde à entrada, pelo próprio usuário, dos valores atuais de cada um dos ângulos. Deve ser entendido que, nesta opção 1., não há qualquer movimentação angular do difratômetro, apenas os valores são alterados para a execução correta do programa.

A opção 2., permite a movimentação de quaisquer ângulos no difratômetro, com o objetivo de posicioná-lo de acordo com as conveniências do usuário. Feita esta segunda opção, o programa volta a de número 1., a fim de ter a informação dos valores atuais dos ângulos. Uma vez obtida esta

informação, são listados, na tela, os valores atuais dos ângulos, e é perguntado qual eixo deve ser movimentado e qual a nova posição angular desejada. Após a movimentação de um ou mais eixos, o programa grava as novas posições, e retorna ao menu principal.

A opção 3. é aquela que permite ao usuário programar um experimento. Para isso, o programa pede uma série de informações, a fim de poder dar início às medições. Essas informações serão descritas a seguir.

1. DATA = : registra a data em que o experimento teve início.

2. HORA = : registra a hora em que o experimento teve início.

3. VARREDURA SIMPLES (1) OU DUPLA (2) ? : Existem dois tipos de varreduras possíveis de serem feitas com o DIFRAT. A varredura simples, que corresponde à movimentação de um só eixo do difratômetro, e a varredura dupla, que corresponde à movimentação de dois dos cinco eixos do instrumento. Este último tipo de movimentação é feita da seguinte forma: após ser estabelecido o início, o fim e o passo dos ângulos a serem movimentados, para cada ponto do primeiro ângulo escolhido, é feita toda a varredura referente ao segundo ângulo. Em seguida, o processo é repetido para o segundo ponto do primeiro ângulo escolhido, e assim por diante, até percorrer todo o intervalo angular referente ao primeiro ângulo. Este tipo de medida é muito usada em determinação de texturas. Na versão atual do programa não está incluída a varredura dupla paralela, que corresponde a alternar os dois ângulos, um em seguida do outro. É o caso do acoplamento 2θ e, por exemplo.

4. ANGULO No. ? : serve para se estabelecer o eixo do difratômetro que deverá ser movimentado durante o experimento. Caso se tenha escolhido, no item 3., a varredura dupla, a qual corresponde à movimentação de dois eixos, a pergunta é novamente feita após a primeira resposta, a fim de se introduzir o segundo movimento.

INICIAL, FINAL, PASSO = : serve para se estabelecer o ângulo inicial, o ângulo final e o passo angular da varredura. Como no item anterior, se a varredura escolhida foi a dupla, a pergunta é repetida duas vezes.

CONT.TEMPO (S/N) ? : serve para se estabelecer se o contador de tempo será ou não utilizado durante o experimento.

MONITOR (S/N) ? : serve para se estabelecer se o monitor será ou não utilizado durante o experimento.

CONT#2 (S/N) ? : serve para se estabelecer se o segundo contador será ou não utilizado durante o experimento. Este segundo contador é normalmente usado para medir, por exemplo, a variação de potência do feixe incidente, antes o mesmo ter atravessado o cristal.

PRESET MONITOR(1) OU TEMPO(2) ? : serve para se estabelecer se a pré-seleção será feita pelo monitor ou pelo contador de tempo.

PRESET = : serve para se estabelecer o valor da pré-seleção, anterior.

CONT.MAX.ESPERADA = : serve para se estabelecer o valor da contagem máxima esperada. O programa DIFRAT fornece os resultados do experimento tanto na forma de tabela, como na forma de gráfico de contagens x ângulo recolhido. A informação da contagem máxima esperada, é para que a escala do eixo das ordenadas no gráfico possa ser ajustada de forma adequada.

DISCO (S/N) ? : serve para se estabelecer se os resultados serão ou não gravados em disco. Caso a resposta seja afirmativa, será perguntado em qual mídia:

ARQUIVO = : serve para se estabelecer o nome do arquivo no qual os resultados do experimento deverão ser gravados.

IMPRESSORA (S/N) ? : serve para se estabelecer se os resultados deverão ser impressos em papel. Caso a resposta seja afirmativa, a impressora será ser ligada a fim de que os resultados das medições possam ser

impressos, à medida em que vão sendo produzidos.

Após serem recolhidas as informações acima, o DIFRAT lista na tela essas informações e pergunta se alguma delas deve ser alterada. Em caso de resposta afirmativa, permite que sejam alterados os itens necessários, voltando a listá-los na tela, agora em forma correta. Em caso de resposta negativa, monta o cabeçalho da tabela, de acordo com as informações fornecidas pelo usuário, e começa as medições.

A opção 4. permite ao usuário continuar o experimento, após uma interrupção. Feita esta opção, é perguntado o nome do arquivo onde se encontra gravado o experimento que se quer continuar; além disso, pergunta também se o início do experimento deve ou não ser reimpresso no papel. Em seguida, o programa volta à opção 1., a fim de ter a informação dos valores atuais dos ângulos. Confirmados esses valores, lista na tela e, se necessário, imprime em papel o início do experimento, continuando em seguida as medições.

A opção 5. permite ao usuário ver, na tela, a saída dos resultados de um experimento, bem como imprimir esta saída em papel. Para isso é perguntado o nome do arquivo e se este arquivo deve ser impresso em papel.

Durante a execução de um experimento, existem três comandos de controle do programa, de forma que se possa ter acesso a diferentes telas. Esses comandos são ativados teclando-se as seguintes letras: G, para mostrar na tela a evolução do gráfico do experimento; T, para mostrar na tela a evolução da tabela com os resultados do experimento, e P, para parar as contagens. Com este último comando, as contagens são imediatamente interrompidas, e o programa vai para o menu abaixo:

CONTINUAR EXPERIMENTO

1. MUDAR PRESET

2. MUDAR CONT. MAXIMA
3. MUDAR PRESET E CONT. MAXIMA
4. PARAR EXPERIMENTO
5. CONTINUAR EXPERIMENTO

As opções 1., 2. e 3. permitem ao usuário alterar a pré-seleção, respectivamente, a contagem máxima esperada e a pré-seleção e a contagem máxima, simultaneamente.

A opção 4. permite ao usuário parar o experimento. Uma vez escolhida esta opção, o programa retorna ao menu principal.

A opção 5. permite ao usuário continuar o experimento, após uma interrupção. Uma vez escolhida esta opção, o programa retorna ao item 4. do menu principal.

Nas páginas seguintes, estão três exemplos de saídas de resultados, obtidos no difratômetro de nêutrons do IPEN-CNEN/SP. O primeiro corresponde a uma varredura dupla \emptyset/W , com pré-seleção de tempo. No final da saída de resultados está o gráfico correspondente, que serve apenas para uma verificação qualitativa desses resultados. O segundo exemplo corresponde a uma varredura simples W , com pré-seleção de tempo. Nos dois exemplos, há apenas a indicação do contador de no. 1. O gráfico correspondente vem logo em seguida. Finalmente, o terceiro exemplo corresponde a uma varredura simples \emptyset . Entretanto, neste exemplo, o monitor foi acionado, embora a pré-seleção tenha sido feita por tempo, e não por monitor. A tabela deste exemplo não é colocada inteiramente, por ser muito extensa; entretanto, o gráfico correspondente é mostrado na última página. Em nenhum dos exemplos acima foi acionado o contador no. 2. Caso ele fosse acionado, as contagens por ele registradas apareceriam em coluna seguinte à do contador no. 1. Os gráficos mostrados correspondem sempre aos resultados obtidos com o contador no. 1.

1. DATA: 6.11.87 HORA: 11.56 81

2. VARREDURA DUPLA

3. FI INICIAL= 0 FINAL= 270 PASSO= 90

4. OMEGA INICIAL= 5.5 FINAL= 8 PASSO= .05

5. CONTAGEM: TEMPO / CONT#1 /

6. PRESET POR TEMPO= 30

7. CONTAGEM MAXIMA ESPERADA= 2000

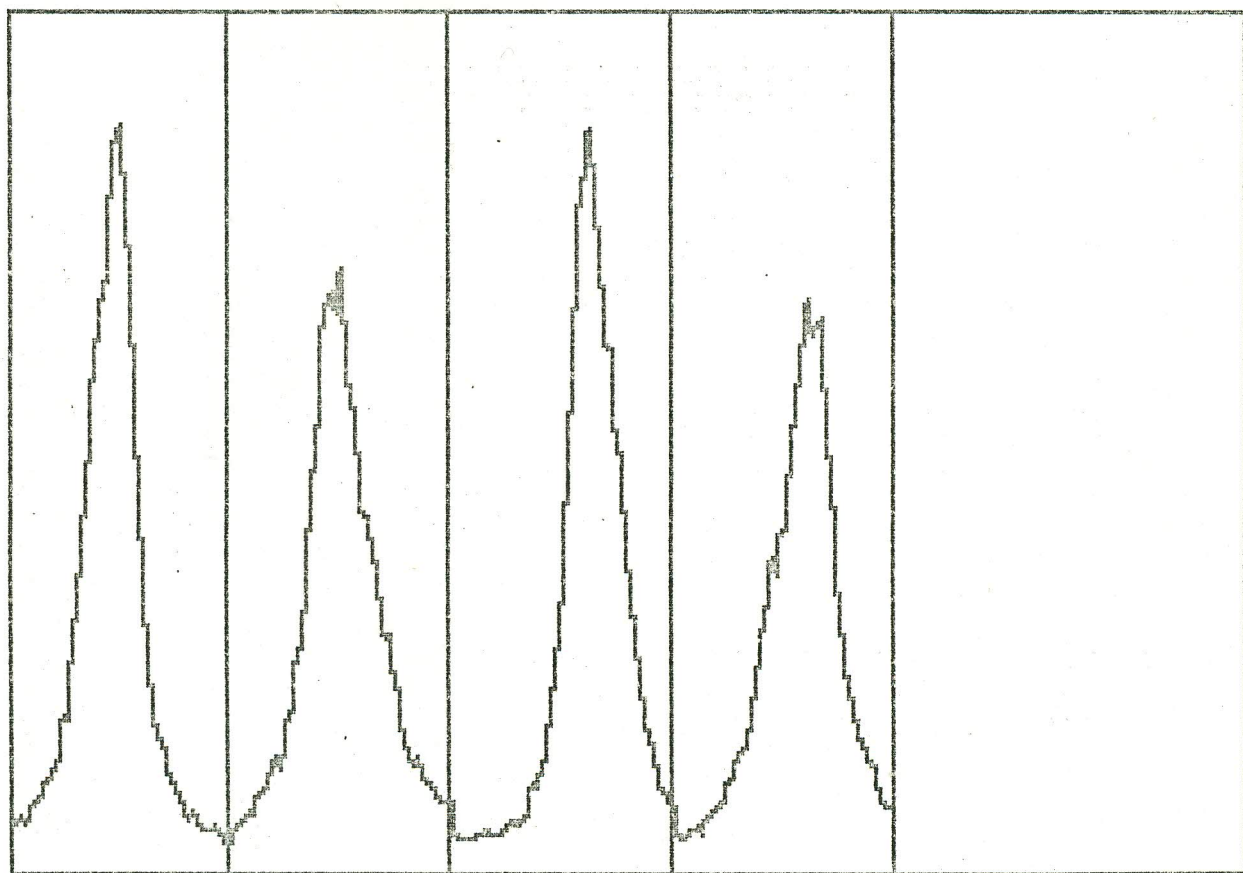
8. DISCO ARQUIVO: MAG.ALI4 IMPRESSORA

| FI | OMEGA | TEMPO | CONT#1 |
|----|-------|-------|--------|
| 0 | 5.5 | 30 | 125 |
| 0 | 5.55 | 30 | 132 |
| 0 | 5.6 | 30 | 110 |
| 0 | 5.65 | 30 | 135 |
| 0 | 5.7 | 30 | 161 |
| 0 | 5.75 | 30 | 169 |
| 0 | 5.8 | 30 | 181 |
| 0 | 5.85 | 30 | 217 |
| 0 | 5.9 | 30 | 218 |
| 0 | 5.95 | 30 | 245 |
| 0 | 6 | 30 | 265 |
| 0 | 6.05 | 30 | 359 |
| 0 | 6.1 | 30 | 354 |
| 0 | 6.15 | 30 | 494 |
| 0 | 6.2 | 30 | 588 |
| 0 | 6.25 | 30 | 696 |
| 0 | 6.3 | 30 | 834 |
| 0 | 6.35 | 30 | 962 |
| 0 | 6.4 | 30 | 1144 |
| 0 | 6.45 | 30 | 1237 |
| 0 | 6.5 | 30 | 1339 |
| 0 | 6.55 | 30 | 1382 |
| 0 | 6.6 | 30 | 1573 |
| 0 | 6.65 | 30 | 1703 |
| 0 | 6.7 | 30 | 1738 |
| 0 | 6.75 | 30 | 1612 |
| 0 | 6.8 | 30 | 1439 |
| 0 | 6.85 | 30 | 1211 |
| 0 | 6.9 | 30 | 946 |
| 0 | 6.95 | 30 | 755 |
| 0 | 7 | 30 | 559 |
| 0 | 7.05 | 30 | 422 |
| 0 | 7.1 | 30 | 326 |
| 0 | 7.15 | 30 | 303 |
| 0 | 7.2 | 30 | 277 |
| 0 | 7.25 | 30 | 216 |
| 0 | 7.3 | 30 | 193 |
| 0 | 7.35 | 30 | 172 |
| 0 | 7.4 | 30 | 148 |
| 0 | 7.45 | 30 | 119 |
| 0 | 7.5 | 30 | 146 |
| 0 | 7.55 | 30 | 123 |
| 0 | 7.6 | 30 | 96 |
| 0 | 7.65 | 30 | 100 |

| | | | |
|-----|------|----|------|
| 0 | 7.7 | 30 | 103 |
| 0 | 7.75 | 30 | 112 |
| 0 | 7.8 | 30 | 93 |
| 0 | 7.85 | 30 | 87 |
| 0 | 7.9 | 30 | 59 |
| 0 | 7.95 | 30 | 75 |
| 90 | 5.5 | 30 | 109 |
| 90 | 5.55 | 30 | 116 |
| 90 | 5.6 | 30 | 130 |
| 90 | 5.65 | 30 | 146 |
| 90 | 5.7 | 30 | 129 |
| 90 | 5.75 | 30 | 179 |
| 90 | 5.8 | 30 | 187 |
| 90 | 5.85 | 30 | 207 |
| 90 | 5.9 | 30 | 235 |
| 90 | 5.95 | 30 | 263 |
| 90 | 6 | 30 | 232 |
| 90 | 6.05 | 30 | 275 |
| 90 | 6.1 | 30 | 365 |
| 90 | 6.15 | 30 | 383 |
| 90 | 6.2 | 30 | 496 |
| 90 | 6.25 | 30 | 534 |
| 90 | 6.3 | 30 | 612 |
| 90 | 6.35 | 30 | 806 |
| 90 | 6.4 | 30 | 938 |
| 90 | 6.45 | 30 | 1040 |
| 90 | 6.5 | 30 | 1277 |
| 90 | 6.55 | 30 | 1324 |
| 90 | 6.6 | 30 | 1346 |
| 90 | 6.65 | 30 | 1291 |
| 90 | 6.7 | 30 | 1394 |
| 90 | 6.75 | 30 | 1266 |
| 90 | 6.8 | 30 | 1119 |
| 90 | 6.85 | 30 | 1059 |
| 90 | 6.9 | 30 | 954 |
| 90 | 6.95 | 30 | 821 |
| 90 | 7 | 30 | 810 |
| 90 | 7.05 | 30 | 762 |
| 90 | 7.1 | 30 | 709 |
| 90 | 7.15 | 30 | 618 |
| 90 | 7.2 | 30 | 544 |
| 90 | 7.25 | 30 | 548 |
| 90 | 7.3 | 30 | 455 |
| 90 | 7.35 | 30 | 418 |
| 90 | 7.4 | 30 | 323 |
| 90 | 7.45 | 30 | 281 |
| 90 | 7.5 | 30 | 248 |
| 90 | 7.55 | 30 | 265 |
| 90 | 7.6 | 30 | 234 |
| 90 | 7.65 | 30 | 207 |
| 90 | 7.7 | 30 | 199 |
| 90 | 7.75 | 30 | 182 |
| 90 | 7.8 | 30 | 163 |
| 90 | 7.85 | 30 | 162 |
| 90 | 7.9 | 30 | 148 |
| 90 | 7.95 | 30 | 158 |
| 180 | 5.5 | 30 | 74 |
| 180 | 5.55 | 30 | 76 |
| 180 | 5.6 | 30 | 83 |
| 180 | 5.65 | 30 | 79 |
| 180 | 5.7 | 30 | 85 |
| 180 | 5.75 | 30 | 86 |
| 180 | 5.8 | 30 | 103 |
| 180 | 5.85 | 30 | 90 |
| 180 | 5.9 | 30 | 87 |
| 180 | 5.95 | 30 | 90 |

| | | | |
|-----|------|----|------|
| 180 | 6 | 30 | 101 |
| 180 | 6.05 | 30 | 107 |
| 180 | 6.1 | 30 | 122 |
| 180 | 6.15 | 30 | 114 |
| 180 | 6.2 | 30 | 120 |
| 180 | 6.25 | 30 | 128 |
| 180 | 6.3 | 30 | 138 |
| 180 | 6.35 | 30 | 209 |
| 180 | 6.4 | 30 | 196 |
| 180 | 6.45 | 30 | 235 |
| 180 | 6.5 | 30 | 269 |
| 180 | 6.55 | 30 | 356 |
| 180 | 6.6 | 30 | 438 |
| 180 | 6.65 | 30 | 529 |
| 180 | 6.7 | 30 | 632 |
| 180 | 6.75 | 30 | 865 |
| 180 | 6.8 | 30 | 1075 |
| 180 | 6.85 | 30 | 1309 |
| 180 | 6.9 | 30 | 1556 |
| 180 | 6.95 | 30 | 1614 |
| 180 | 7 | 30 | 1719 |
| 180 | 7.05 | 30 | 1632 |
| 180 | 7.1 | 30 | 1483 |
| 180 | 7.15 | 30 | 1347 |
| 180 | 7.2 | 30 | 1211 |
| 180 | 7.25 | 30 | 1203 |
| 180 | 7.3 | 30 | 1012 |
| 180 | 7.35 | 30 | 962 |
| 180 | 7.4 | 30 | 827 |
| 180 | 7.45 | 30 | 688 |
| 180 | 7.5 | 30 | 582 |
| 180 | 7.55 | 30 | 484 |
| 180 | 7.6 | 30 | 388 |
| 180 | 7.65 | 30 | 322 |
| 180 | 7.7 | 30 | 289 |
| 180 | 7.75 | 30 | 234 |
| 180 | 7.8 | 30 | 179 |
| 180 | 7.85 | 30 | 168 |
| 180 | 7.9 | 30 | 147 |
| 180 | 7.95 | 30 | 140 |
| 270 | 5.5 | 30 | 77 |
| 270 | 5.55 | 30 | 74 |
| 270 | 5.6 | 30 | 100 |
| 270 | 5.65 | 30 | 99 |
| 270 | 5.7 | 30 | 114 |
| 270 | 5.75 | 30 | 92 |
| 270 | 5.8 | 30 | 128 |
| 270 | 5.85 | 30 | 136 |
| 270 | 5.9 | 30 | 156 |
| 270 | 5.95 | 30 | 156 |
| 270 | 6 | 30 | 174 |
| 270 | 6.05 | 30 | 213 |
| 270 | 6.1 | 30 | 214 |
| 270 | 6.15 | 30 | 271 |
| 270 | 6.2 | 30 | 291 |
| 270 | 6.25 | 30 | 292 |
| 270 | 6.3 | 30 | 341 |
| 270 | 6.35 | 30 | 417 |
| 270 | 6.4 | 30 | 483 |
| 270 | 6.45 | 30 | 569 |
| 270 | 6.5 | 30 | 628 |
| 270 | 6.55 | 30 | 731 |
| 270 | 6.6 | 30 | 691 |
| 270 | 6.65 | 30 | 789 |
| 270 | 6.7 | 30 | 789 |
| 270 | 6.75 | 30 | 929 |

| | | | |
|-----|------|----|------|
| 270 | 6.8 | 30 | 1047 |
| 270 | 6.85 | 30 | 1132 |
| 270 | 6.9 | 30 | 1229 |
| 270 | 6.95 | 30 | 1321 |
| 270 | 7 | 30 | 1240 |
| 270 | 7.05 | 30 | 1272 |
| 270 | 7.1 | 30 | 1283 |
| 270 | 7.15 | 30 | 1102 |
| 270 | 7.2 | 30 | 946 |
| 270 | 7.25 | 30 | 835 |
| 270 | 7.3 | 30 | 638 |
| 270 | 7.35 | 30 | 538 |
| 270 | 7.4 | 30 | 445 |
| 270 | 7.45 | 30 | 388 |
| 270 | 7.5 | 30 | 338 |
| 270 | 7.55 | 30 | 302 |
| 270 | 7.6 | 30 | 280 |
| 270 | 7.65 | 30 | 251 |
| 270 | 7.7 | 30 | 241 |
| 270 | 7.75 | 30 | 182 |
| 270 | 7.8 | 30 | 147 |
| 270 | 7.85 | 30 | 151 |
| 270 | 7.9 | 30 | 144 |



1. DATA: 5.11.87 HORA: 16.10

2. VARREDURA SIMPLES

3. OMEGA INICIAL= 5 FINAL= 9 PASSO= .05

5. CONTAGEM: TEMPO / CONT#1 /

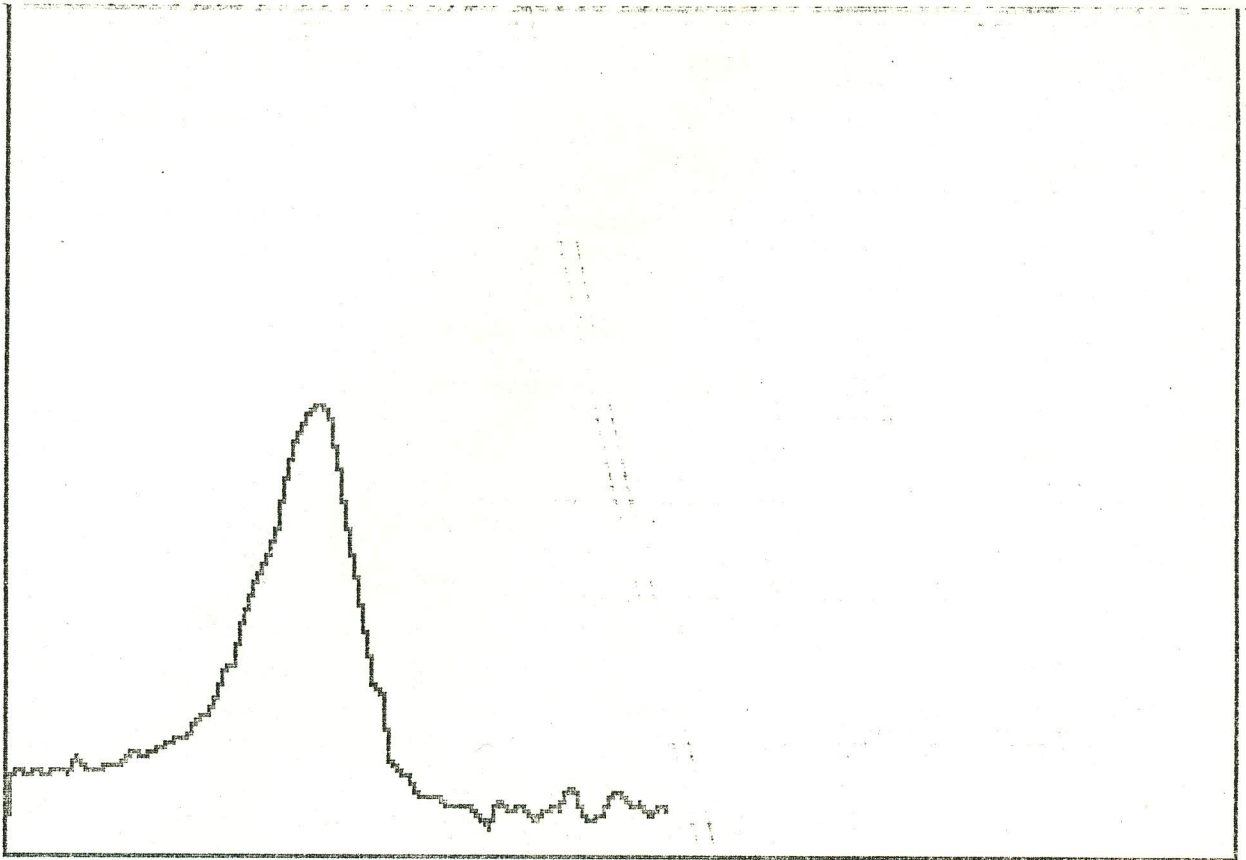
6. PRESET POR TEMPO= 20

7. CONTAGEM MAXIMA ESPERADA= 2500

8. DISCO ARQUIVO: MAG.ALI2 IMPRESSORA

| OMEGA | TEMPO | CONT#1 |
|-------|-------|--------|
| 5 | 20 | 242 |
| 5.05 | 20 | 233 |
| 5.1 | 20 | 243 |
| 5.15 | 20 | 234 |
| 5.2 | 20 | 236 |
| 5.25 | 20 | 239 |
| 5.3 | 20 | 232 |
| 5.35 | 20 | 281 |
| 5.4 | 20 | 243 |
| 5.45 | 20 | 246 |
| 5.5 | 20 | 255 |
| 5.55 | 20 | 251 |
| 5.6 | 20 | 270 |
| 5.65 | 20 | 296 |
| 5.7 | 20 | 286 |
| 5.75 | 20 | 288 |
| 5.8 | 20 | 303 |
| 5.85 | 20 | 315 |
| 5.9 | 20 | 331 |
| 5.95 | 20 | 331 |
| 6 | 20 | 366 |
| 6.05 | 20 | 403 |
| 6.1 | 20 | 400 |
| 6.15 | 20 | 469 |
| 6.2 | 20 | 537 |
| 6.25 | 20 | 556 |
| 6.3 | 20 | 693 |
| 6.35 | 20 | 762 |
| 6.4 | 20 | 830 |
| 6.45 | 20 | 883 |
| 6.5 | 20 | 959 |
| 6.55 | 20 | 1104 |
| 6.6 | 20 | 1208 |
| 6.65 | 20 | 1266 |
| 6.7 | 20 | 1298 |
| 6.75 | 20 | 1300 |
| 6.8 | 20 | 1252 |
| 6.85 | 20 | 1104 |
| 6.9 | 20 | 940 |
| 6.95 | 20 | 790 |
| 7 | 20 | 636 |
| 7.05 | 20 | 479 |
| 7.1 | 20 | 448 |
| 7.15 | 20 | 252 |
| 7.2 | 20 | 227 |
| 7.25 | 20 | 225 |

| | | |
|------|----|-----|
| 7.3 | 20 | 161 |
| 7.35 | 20 | 162 |
| 7.4 | 20 | 165 |
| 7.45 | 20 | 137 |
| 7.5 | 20 | 140 |
| 7.55 | 20 | 142 |
| 7.6 | 20 | 138 |
| 7.65 | 20 | 95 |
| 7.7 | 20 | 75 |
| 7.75 | 20 | 149 |
| 7.8 | 20 | 118 |
| 7.85 | 20 | 138 |
| 7.9 | 20 | 118 |
| 7.95 | 20 | 104 |
| 8 | 20 | 121 |
| 8.05 | 20 | 131 |
| 8.1 | 20 | 130 |
| 8.15 | 20 | 196 |
| 8.2 | 20 | 169 |
| 8.25 | 20 | 102 |
| 8.3 | 20 | 115 |
| 8.35 | 20 | 114 |
| 8.4 | 20 | 176 |
| 8.45 | 20 | 160 |
| 8.5 | 20 | 131 |
| 8.55 | 20 | 155 |
| 8.6 | 20 | 111 |
| 8.65 | 20 | 139 |
| 8.7 | 20 | 124 |



1. DATA: 12.11.87 HORA: 9.15
 2. VARREDURA SIMPLES
 3. FI INICIAL= 0 FINAL= 25 PASSO= .1
 5. CONTAGEM: TEMPO / CONT#1 / MONITOR /
 6. PRESET POR TEMPO= 300
 7. CONTAGEM MAXIMA ESPERADA= 40000
 8. DISCO ARQUIVO: MAG.DM2 IMPRESSORA

| FI | TEMPO | CONT#1 | MONITOR |
|-----|-------|--------|---------|
| 0 | 300 | 18676 | 290601 |
| .1 | 300 | 18537 | 290184 |
| .2 | 300 | 18279 | 290050 |
| .3 | 300 | 18442 | 290426 |
| .4 | 300 | 18552 | 290164 |
| .5 | 300 | 18581 | 290375 |
| .6 | 300 | 18508 | 291004 |
| .7 | 300 | 18426 | 290668 |
| .8 | 300 | 18346 | 290420 |
| .9 | 300 | 18474 | 290306 |
| 1 | 300 | 18130 | 290328 |
| 1.1 | 300 | 18176 | 291184 |
| 1.2 | 300 | 18027 | 292554 |
| 1.3 | 300 | 17968 | 292000 |
| 1.4 | 300 | 18205 | 292574 |
| 1.5 | 300 | 17981 | 291884 |
| 1.6 | 300 | 18008 | 292829 |
| 1.7 | 300 | 17500 | 292634 |
| 1.8 | 300 | 17654 | 291666 |
| 1.9 | 300 | 17472 | 293388 |
| 2 | 300 | 17179 | 294885 |
| 2.1 | 300 | 17599 | 292082 |
| 2.2 | 300 | 17446 | 294462 |
| 2.3 | 300 | 17652 | 294813 |
| 2.4 | 300 | 17834 | 294684 |
| 2.5 | 300 | 17785 | 294577 |
| 2.6 | 300 | 18150 | 293728 |
| 2.7 | 300 | 17802 | 294163 |
| 2.8 | 300 | 17847 | 293747 |
| 2.9 | 300 | 17587 | 293508 |
| 3 | 300 | 17315 | 293732 |
| 3.1 | 300 | 16745 | 293867 |
| 3.2 | 300 | 16410 | 293548 |
| 3.3 | 300 | 15825 | 293815 |
| 3.4 | 300 | 15255 | 294029 |
| 3.5 | 300 | 14694 | 293530 |
| 3.6 | 300 | 13927 | 292977 |
| 3.7 | 300 | 13625 | 293939 |
| 3.8 | 300 | 13058 | 293221 |
| 3.9 | 300 | 12859 | 292353 |
| 4 | 300 | 12562 | 292710 |
| 4.1 | 300 | 12572 | 292117 |
| 4.2 | 300 | 12800 | 293144 |
| 4.3 | 300 | 12895 | 292068 |
| 4.4 | 300 | 13119 | 292102 |

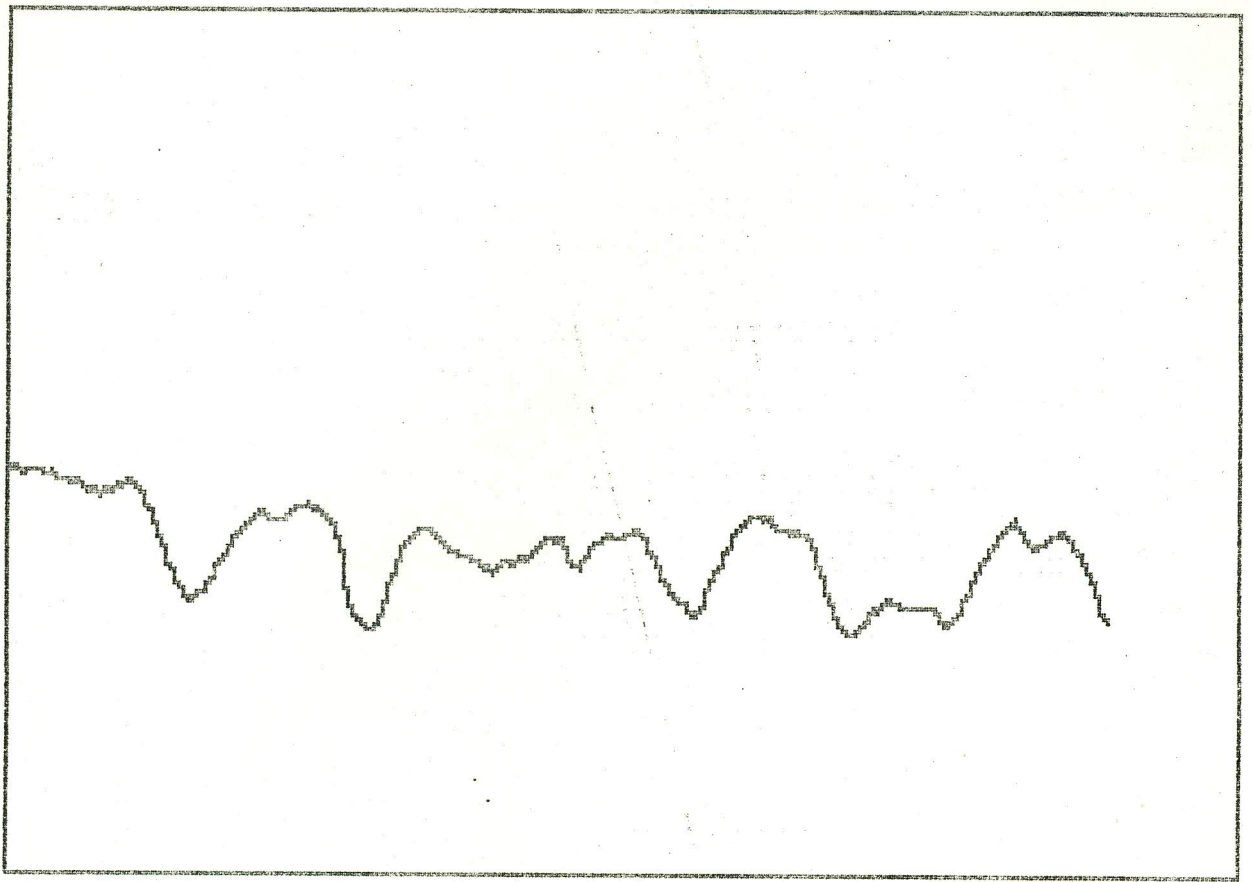
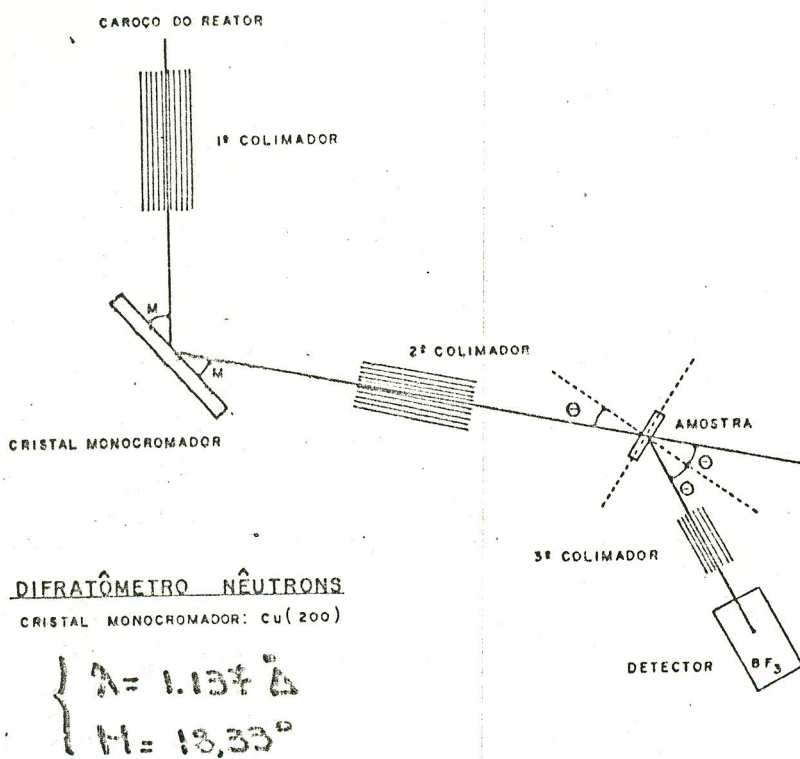


FIGURA 1.1 - Disposição esquemática das partes constituintes de um difratômetro de nêutrons.



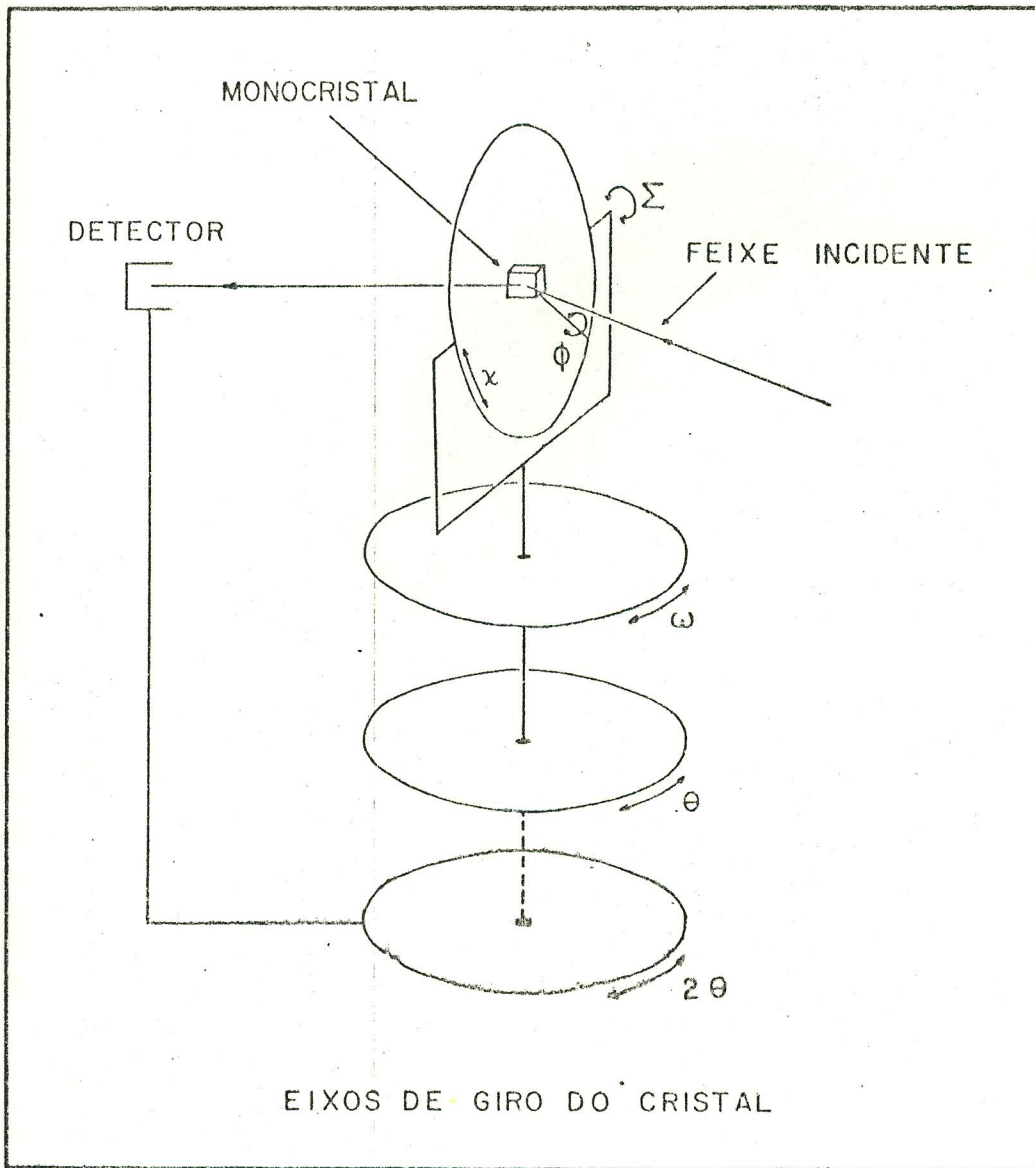


Figura ~~IV-1~~^Z - Os movimentos circulares existentes no goniostato para monocristais.

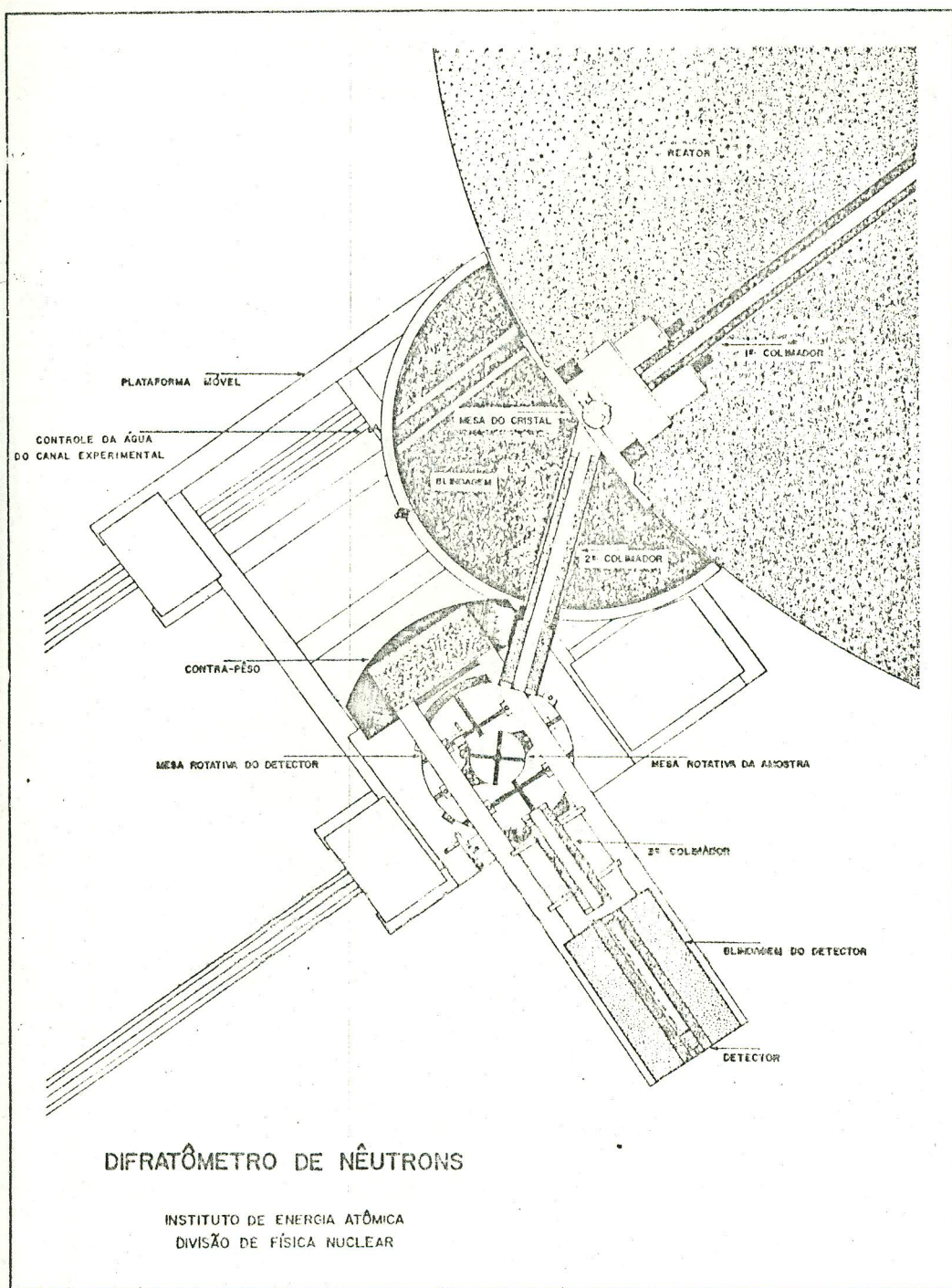
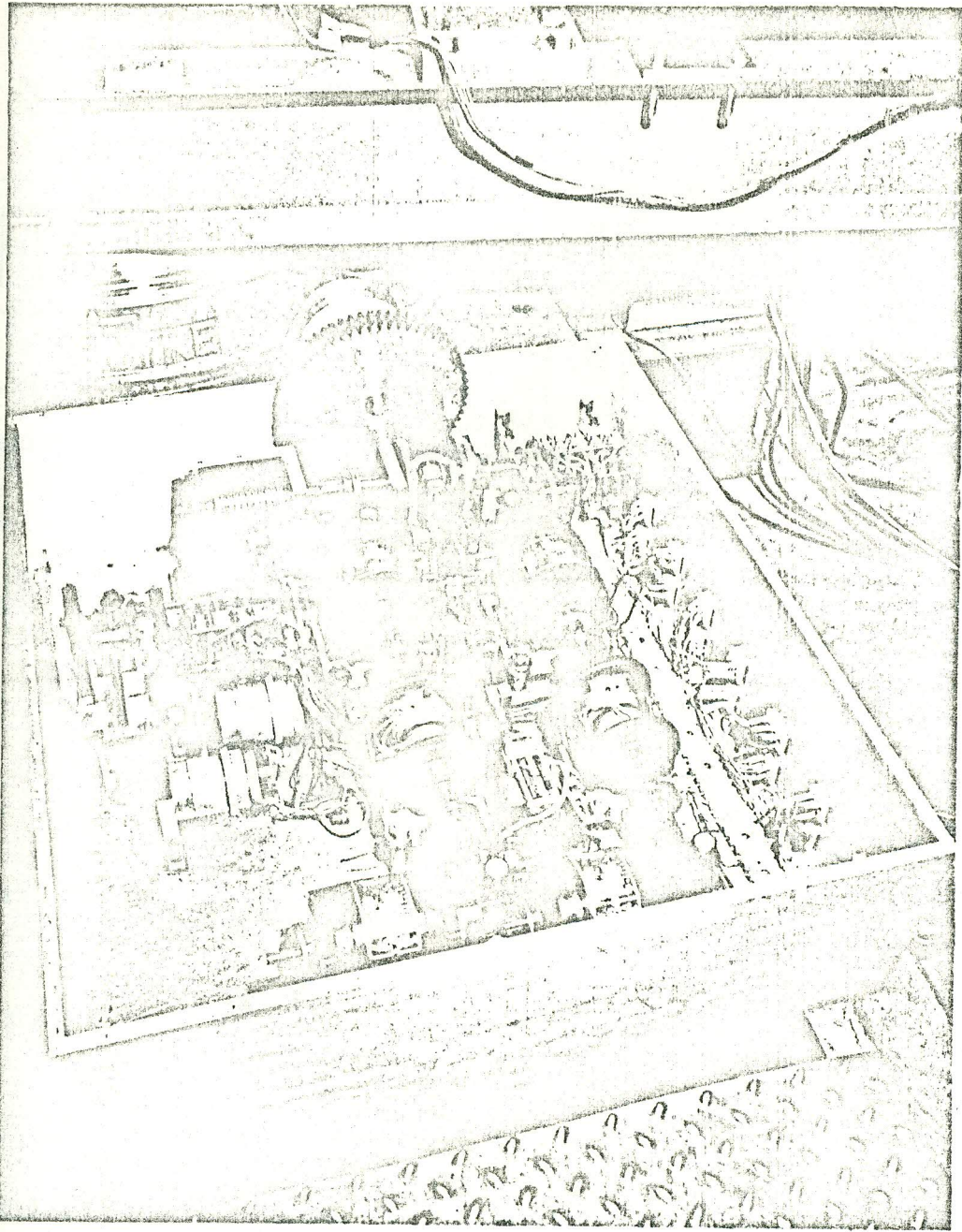
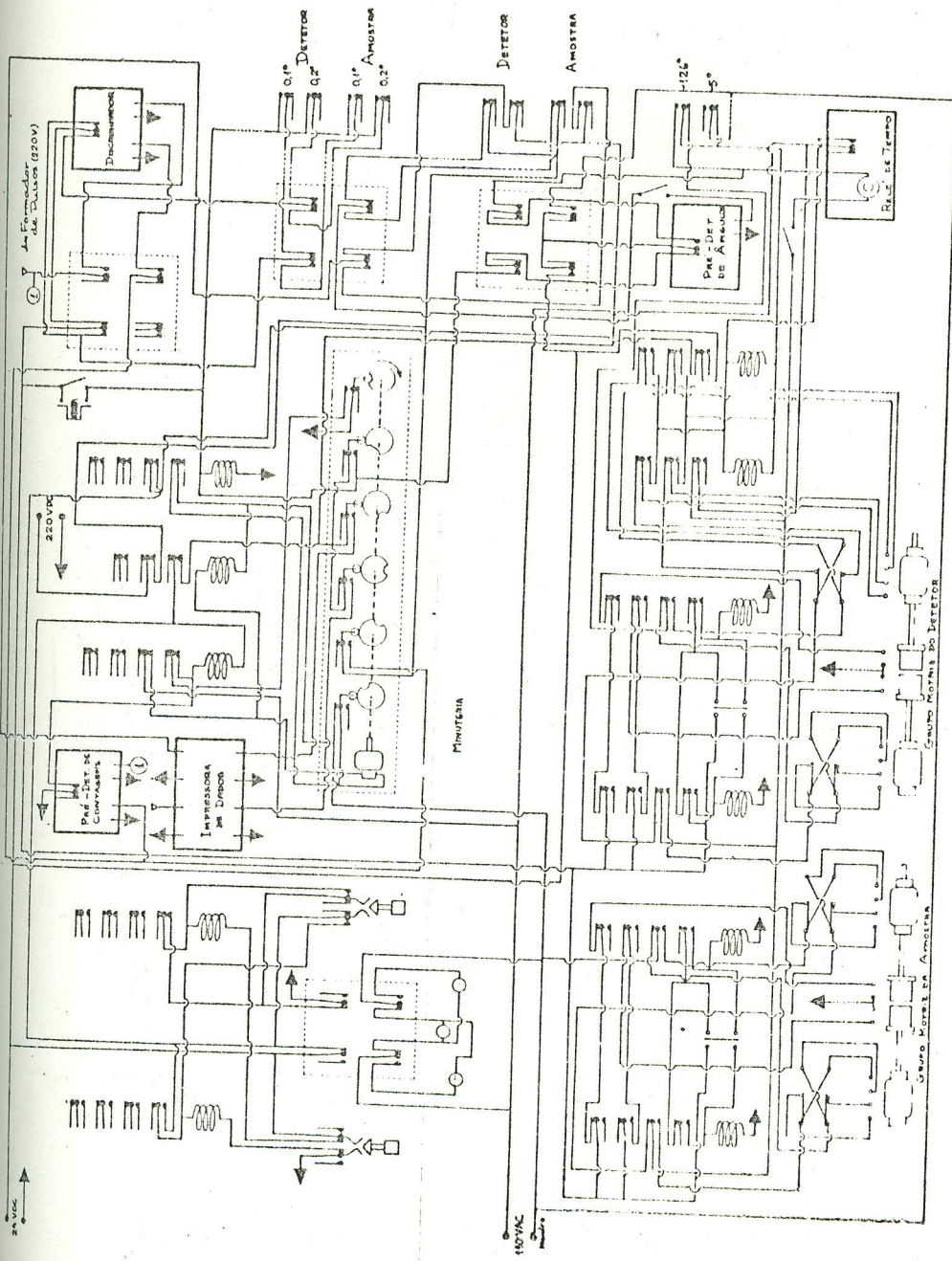


Figura 3 - Vista superior do difratômetro de nêutrons mostrando suas partes principais. Desenho feito durante a fase de projeto do instrumento.



4
Figura 1.3 - Parte mecânica do sistema de operação do difratômetro de nêutrons do IEA.



5
 Figura 1.10 - Circuito elétrico do sistema de operação do difratômetro de nêutrons
 (foi substituído por outro adequado ao sistema eletrônico de contagem).

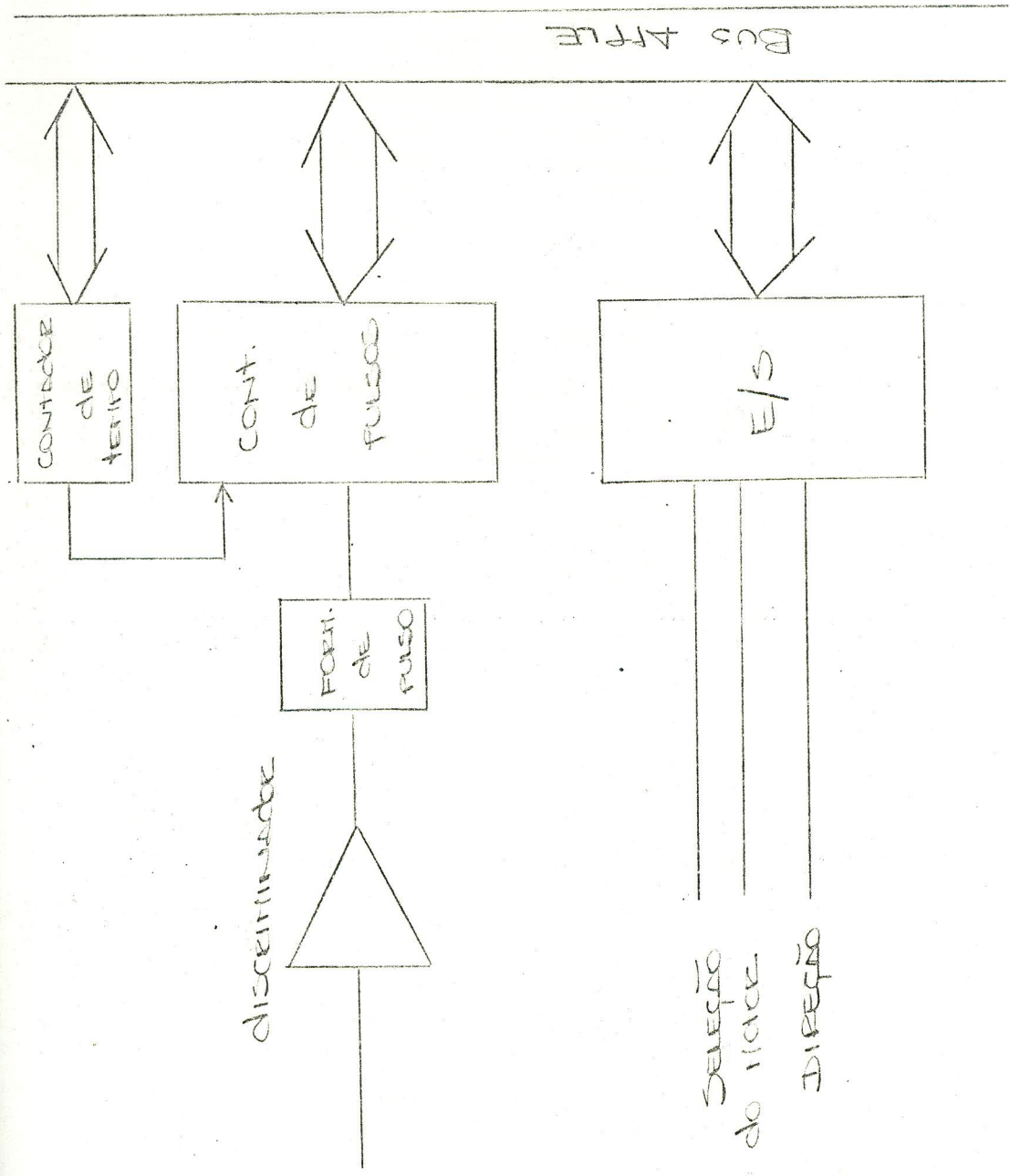


FIGURA 6 - Diagrama de busos simplificado da Interface de Controle do Difusor de Neutrons do IFGW - CNEN/SP.