

## ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДОВ МОНТЕ-КАРЛО В ПРОБЛЕМЕ ЮСТИРОВКИ ВРЕМЯПРОЛЕТНЫХ НЕЙТРОННЫХ СПЕКТРОМЕТРОВ

**Г. Д. Бокучава\***, **Е. С. Кузьмин\***, **И. С. Кутень\*\***,  
**С. А. Кутень\*\*\***, **В. В. Жук\***, **А. А. Хрущинский\*\*\***

\* *Объединенный институт ядерных исследований, г. Дубна*

\*\* *Институт физики НАН Беларуси, г. Минск*

\*\*\* *НИИ ядерных проблем Белгосуниверситета, г. Минск*

Изучение свойств вещества в настоящее время немыслимо без рентгеновской, электронной или нейтронной дифрактометрии. Особенности взаимодействия тепловых и холодных нейтронов с веществом, в частности их большая проникающая способность и длина волны порядка 1–10 Å, соответствующая характерным межатомным расстояниям, обусловили широкое распространение нейтронной дифрактометрии как метода исследования физики конденсированного состояния [1]. Классическим прибором для этих целей является времяпролетный нейтронный спектрометр, в котором осуществляется регистрация нейтронов по времени пролета определенного расстояния.

В последнее время расширяется круг вопросов, связанных со структурными исследованиями, который может быть решен с помощью нейтронной дифрактометрии, особенно после создания финскими и советскими специалистами так называемых фурье-спектрометров [2–4]. При этом одним из основных направлений применения является исследование внутренних механических напряжений в деталях конструкций и конструкционных материалов, в том числе и при внешних воздействиях [1, 5].

Начальным пунктом для слежения за нейтроном обычно служит вращающийся прерыватель, модулирующий поток тепловых нейтронов после замедлителя. Момент времени, соответствующий открытому состоянию прерывателя, считается началом отсчета времени пролета нейтронов. Нейтроны затем транспортируются к образцу, рассеиваются в нем по закону Брэгга и регистрируются детектором. Спектр времени пролета нейтронов от прерывателя до детектора несет в себе физическую информацию, по которой можно в определенной степени восстановить кристаллическую структуру образца.

Важнейшими характеристиками времяпролетного нейтронного спектрометра являются его разрешение и светосила. В общем случае временное разрешение зависит от многих факторов, таких как характеристики прерывателя, длина пролета нейтронов, угловой аксептанс нейтроновода, толщина чувствительной области детектора и ее форма, толщина образца, юстировка и пр. Увеличение разрешения спектрометра обычно влечет за собой резкое увеличение времени эксперимента. Поэтому, чтобы увеличить точность эксперимента, необходимо увеличивать светосилу прибора. Одним из методов увеличения светосилы является метод временной фокусировки на детекторе [6–8]. Увеличение светосилы детектора при сохранении временного разрешения спектрометра оказывается возможным благодаря использованию кинематических условий при

дифракции нейтронов в образце. Рассеяние на образце происходит по закону Вульфа – Брэгга и угол рассеяния  $\theta$  однозначно связан с длиной волны нейтрона  $\lambda$ . Поскольку  $\lambda \sim \sin(\theta/2)$  и скорости нейтронов по выходе из мишени распределены по закону  $v \sim 1/\sin(\theta/2)$ , то нейтроны разных энергий, стартующие с прерывателя в один момент времени, будут достигать детектора за разное время. Однако, если расположить детектор на линии так, что полный путь нейтрона от прерывателя до детектора  $L \sim 1/\sin(\theta/2)$  (линия временной фокусировки), то нейтроны разных энергий, стартующие одновременно с линии прерывателя, придут, после их дифракции на одной и той же системе отражающих плоскостей в мишени, на детектор одновременно. Вращая линию временной фокусировки вокруг оси нейтронного пучка, можно получить поверхность временной фокусировки (ПВФ), на которой и должна лежать чувствительная поверхность детектора.

Поскольку на практике требуется массовое исследование образцов, то должны применяться приборы с большой светосилой, а следовательно, и с большими размерами детекторов. Большие размеры детекторов, с одной стороны, и высокое временное разрешение, с другой, предъявляют жесткие требования к юстировке детекторного блока спектрометра. В настоящей работе предлагается исследовать эти требования путем численного моделирования детекторного блока методом Монте-Карло.

Метод Монте-Карло в настоящее время – пока единственный метод, позволяющий достаточно точно учесть основную физику явлений при весьма сложной геометрии в задаче. Для его реализации использован пакет программ MCNP (Monte-Carlo Nuclear Particles) [9]. Все расчеты были проведены нами для нейтронного дифрактометра, работающего на линии с импульсным реактором на быстрых нейтронах ИБР-2 (г. Дубна, Россия)

В данной работе методом Монте-Карло рассчитана функция отклика детектора, выяснен вклад различных рассеивателей в ширину линии спектрометра, проведено сравнение с экспериментальными данными, полученными на ИБР-2.

## 1. Моделирование дифракции нейтронов методом Монте-Карло

Общий вид детектора по отношению к направлению нейтронного пучка (ось  $y$ ) изображен на рис. 1. Исследуемый образец (мишень) расположен в начале координат. Детектор состоит из восьми секций, каждая из которых представляет собой набор (от трех до пяти) участков поверхностей конусов, аппроксимирующих ПВФ и имеющих ось симметрии вдоль направления пучка. Угловой обзор детектора составляет  $70\text{--}110^\circ$ . Секции покрыты защитной алюминиевой пленкой, расположенной перпендикулярно медиане секции. Материал детектора представляет собой органическое стекло (полиметилметакрилат) с равномерно распределенными в нем микрокристаллами  $\text{ZnS}(\text{Ag})$  и  $\text{Li}^6\text{F}$ . Физика регистрации нейтронов основана на  $(n,\alpha)$ -реакции с ядром  ${}^6\text{Li}$ . Вылетающая из ядра  $\alpha$ -частица, имеющая энергию 4,78 МэВ, вызывает вспышку сцинтилляций в  $\text{ZnS}$ . Важнейшим достоинством сцинтиллятора является его нечувствительность к  $\gamma$ -излучению, что позволяет обходиться без громоздкой свинцовой защиты. В то же время низкая прозрачность к собственному излучению и наличие медленной

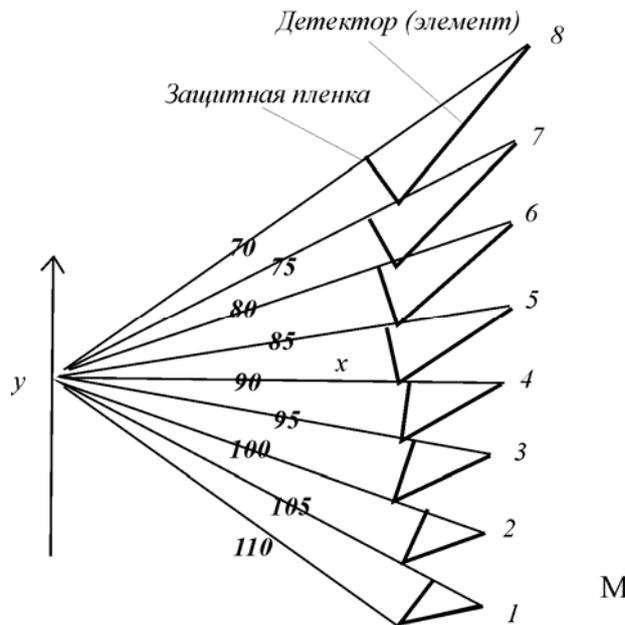


Рис. 1. Геометрия спектрометра: 70–110 (градусов) – угловые размеры детекторов (секций), М – точка юстировки первого детектора

компоненты во вспышке приводят к необходимости применения для регистрации специальной обработки светимпульсов от нейтронов.

Классической схемой применения метода Монте-Карло к исследованию процессов прохождения частиц через вещество является схема «источник – детектор», т. е. в заданной точке (объеме) испускаются частицы, и затем прослеживается их путь до поглощения их в детекторе. Для решения задачи прохождения нейтронов через вещество использовался код MCNP.

Пакет предназначен для моделирования методом Монте-Карло процессов прохождения нейтронов,  $\gamma$ - и  $\beta$ -излучения через вещество. В MCNP не предусмотрено решение задач, связанных с когерентным рассеянием нейтронов на кристаллах. Поэтому мы не можем проследить полный путь нейтронов от прерывателя до детектора с учетом брэгговского рассеяния на мишени. Однако можно построить такой источник нейтронов, расположенный в общем случае в объемной мишени, который позволит рассчитать функцию отклика детектора как с учетом дифракции нейтронов на мишени, так и с учетом дрейфа нейтронов от прерывателя. Для каждого набора кристаллографических плоскостей будем рассматривать мишень как источник нейтронов с угловым и энергетическим распределением, жестко связанным условием Вульфа – Брэгга:

$$E(\theta) = n^2 * E_0 / \sin(\theta / 2), \quad (1)$$

где  $n$  – порядок дифракции,  $E_0$  – зависящая от типа решетки постоянная:

$$E_0 = 0,5 * \pi^2 * \hbar^2 / (M_n * d)^2. \quad (2)$$

Здесь  $\hbar$  – постоянная Планка,  $M_n$  – масса нейтрона,  $d$  – расстояние между соответствующими отражающими плоскостями кристалла,  $\theta$  – угол вылета нейтрона с энергией  $E(\theta)$  из мишени по отношению к направлению падающего пучка. По азимутальному углу нейтроны распределены изотропно.

Модель дифракции для моделирования по методу Монте-Карло, основанная только на кинематической связи (1), наиболее адекватна случаю дифракции на поликристаллической мишени (только в этом случае нет необходимости учитывать эффекты первичной и вторичной экстинкции). Чтобы отразить время движения нейтрона в нейтронноводе от прерывателя до мишени, время старта нейтрона в мишени сдвигалось на это время. Такой источник нейтронов, моделирующий брэгговское рассеяние на поликристаллических мишенях, учитывает дисперсию времени прихода нейтронов на мишень, определяемую их энергетическим спектром.

Функция отклика в данной работе определялась как распределение вероятности моментов времени (n,α)-реакций с  ${}^6\text{Li}$ , входящим в состав вещества детектора. Получаемое в результате моделирования с помощью MCNP эмпирическое распределение нормировано на полное число разыгранных историй. В данной работе исследовалась только ядерно-физическая часть функции отклика детектора и не принималась во внимание часть, связанная с работой оптического и электронного трактов спектрометра.

## 2. Результаты MCNP-моделирования

Для исследования влияния рассеяния нейтронов в воздухе (на пути от мишени до детектора) и в алюминиевой защитной пленке моделировались различные ситуации с включением и выключением рассеяния в воздухе, алюминиевой пленке и мишени. Поликристаллическая мишень цилиндрической формы была ориентирована по падающему на нее нейтронному пучку. Для поликристаллических образцов интенсивность рефлекса пропорциональна фактору повторяемости  $\eta$  [10]. В работе исследовалась Fe-мишень, для которой наиболее интенсивным является рефлекс [211], соответствующий максимальному значению  $\eta = 24$  в области длин волн  $\sim 1\text{Å}$ . Выполненное моделирование показывает, что рассеяние в слое воздуха между мишенью и детектором не сказывается на ширине и амплитуде основной части функции отклика. Вклад рассеяния сводится к образованию небольшого пьедестала на уровне  $10^{-3}$  к функции отклика. Пьедестал распределен по большому временному интервалу. В целом влияние воздуха приводит к уширению далекого крыла линии.

Изменение формы линии TOF-спектра для стандартной мишени (2×2 мм), обусловленное присутствием защитной алюминиевой фольги, учитывающее все факторы (воздух, конечные размеры мишени, рассеяние нейтронов в мишени), показано на рис. 2. Видно, что фактически никакого влияния фольга толщиной 0,1мм (фактическая толщина фольги) на TOF-спектр не оказывает, кроме образования вышеупомянутого пьедестала.

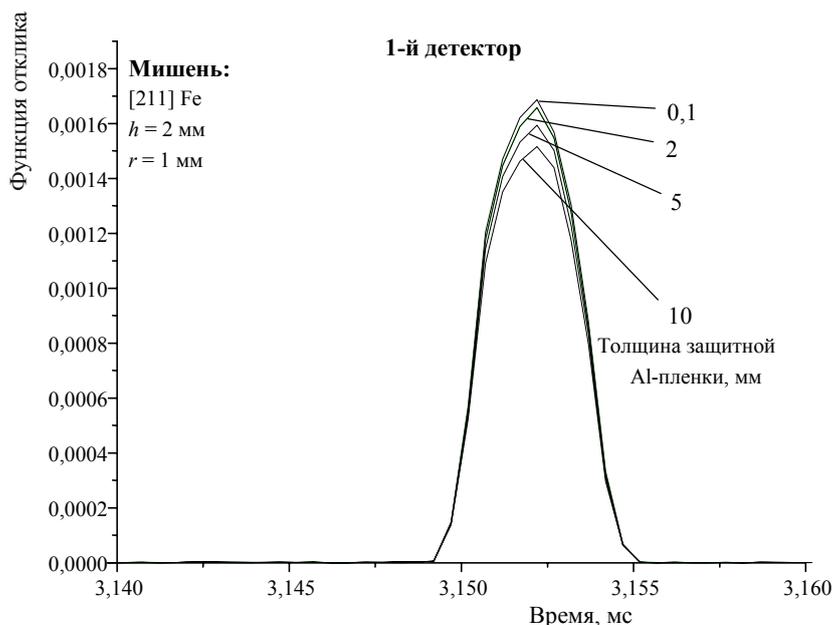


Рис. 2. Изменение амплитуды [211] – линии времяпролетного спектра для стандартной Fe-мишени из-за присутствия защитной фольги из алюминия

### 3. Моделирование точности юстировки детектора

Одной из задач настоящего моделирования являлось исследование влияния точности юстировки детектора на функцию отклика и, как следствие, на точность определения кристаллографических параметров. Начало системы координат помещено в центр мишени. Юстировка проводилась по углу вращения детектора вокруг вертикальной оси  $z$  вокруг фиксированной точки  $M$  (см. рис. 1, ось  $z$  перпендикулярна плоскости рисунка) с известными координатами и по сдвигу его вдоль нейтронного пучка (ось  $y$ ). Эффекты неточности юстировки вдоль горизонтальной оси  $x$  являются эффектами второго порядка по отклонению, и ими можно пренебречь.

При заданной погрешности в установке детектора по углу или линейному сдвигу проводился расчет функции отклика с помощью программы MCNP. Затем по полученной функции отклика рассчитывались ее четыре первых момента  $M_i, i=1, \dots, 4$ , и стандартные статистические параметры [11] – дисперсия  $\sigma^2 = M_2$ , асимметрия  $A$ , эксцесс  $\eta$ :

$$M_i = \frac{1}{M_0} \sum_{k=N_{\min}}^{N_{\max}} (t_k)^i * f_k, \quad (3)$$

$$A = \frac{M_3}{M_2^{3/2}}, \quad \eta = \frac{M_4}{M_2^2} - 3,$$

где  $t_k$  – центр  $k$ -го временного бина,  $k = (N_{\min}, N_{\max})$ ,  $f_k$  – значение функции отклика в  $k$ -м временном бине,  $M_0$  – нормировочный множитель:

$$M_0 = \sum_{k=N_{\min}}^{N_{\max}} f_k .$$

Конкретный анализ влияния параметров юстировки на функцию отклика проводился для линии железа (кристаллографическая плоскость (211)). Поскольку для мишеней больших (несколько сантиметров) размеров основной вклад в полуширину функции отклика будет вносить протяженность мишени, то вклад неточности юстировки будет трудно выделить для мишеней большого размера. По этой причине ниже приведены результаты для мишеней малой протяженности (цилиндр радиусом  $r = 1$  мм и высотой  $h = 2$  мм, ориентированный по нейтронному пучку).

На рис. 3 приведены функции отклика для различных (от  $0,5^\circ$  до  $3^\circ$ ) значений отклонений углов юстировки относительно оси  $z$ . По этим функциям проводились расчеты первого, второго и четвертого моментов (рис. 4).

На рис. 5 приведен набор функций отклика при различных значениях ошибки юстировки вдоль оси  $y$ . По значениям этих функций вычислялись первые четыре момента и параметры функции отклика. Оказывается, что смещение детектора вдоль пучка на  $\pm 5$  см приводит к увеличению ширины функции отклика в 3 раза.

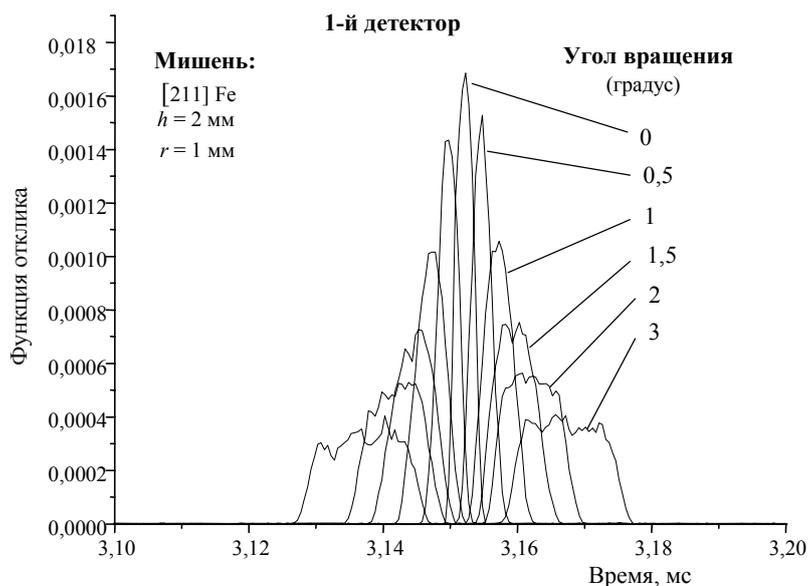


Рис. 3. Вид функции отклика при различных ошибках в углах юстировки (первая секция детектора). Непрономерованные линии слева соответствуют вращению детектора в противоположную сторону

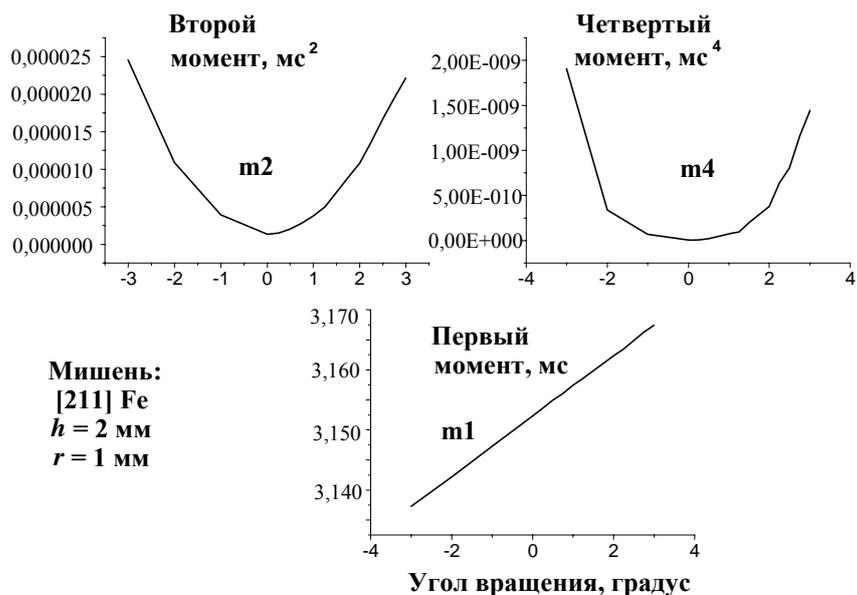


Рис. 4. Зависимость первого, второго и четвертого моментов функции отклика от точности угловой юстировки вокруг вертикальной оси z (спектры на рис. 3)

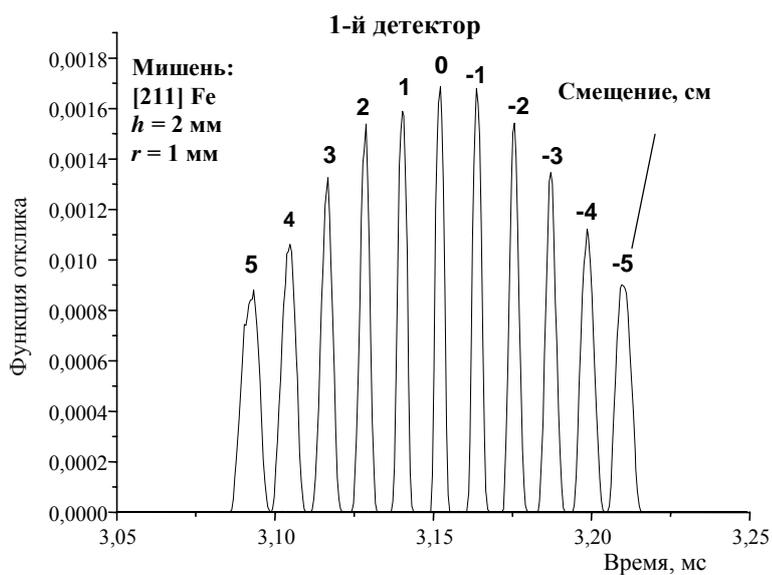


Рис. 5. Вид функции отклика при смещении детектора вдоль нейтронного пучка (ошибки юстировки по оси y)

#### 4. Сравнение теоретических и экспериментальных ТОФ-спектров

Поскольку абсолютные значения положения и ориентации детектора для выполненных измерений [10] неизвестны, абсолютное сравнение теоретических и экспериментальных ТОФ-спектров не представляется возможным. Однако можно провести их относительное сравнение по зависимости ширины линии от угла поворота вокруг вертикальной оси  $z$ . Такое сравнение было выполнено для Fe-мишени размером  $36,5 \times 5,0$  мм для отражения [211], наиболее интенсивного в ТОФ-спектре для этой мишени (рис. 6).

Из набора экспериментальных данных (подобных приведенным на рис. 6) была взята область, соответствующая наиболее интенсивному пику [211]. В предположении гауссовой формы измеряемых спектров методом нелинейного фитирования была найдена ориентационная зависимость положения пика и полуширины линии [211] при изменении угла вращения гониометра.

Ориентационная зависимость положения пика позволяет судить о величине систематической ошибки в определении межплоскостного расстояния за счет неточности юстировки. Наблюдается примерно линейная зависимость положения пика от угла вращения. В то же время второй момент определяет статистическую ошибку в определении межплоскостных расстояний. Полученная в результате моделирования угловая зависимость моментов и параметров функции отклика при вращении детектора вокруг вертикальной оси  $z$  приведена на рис. 7.

На рис. 8 приведена зависимость модельной и экспериментальной полуширины функции отклика от ошибки угловой юстировки. На эксперименте угловая юстировка осуществлялась с помощью гониометра посредством вращения детектора вокруг точки М, указанной на рис. 1. Характер ориентационной

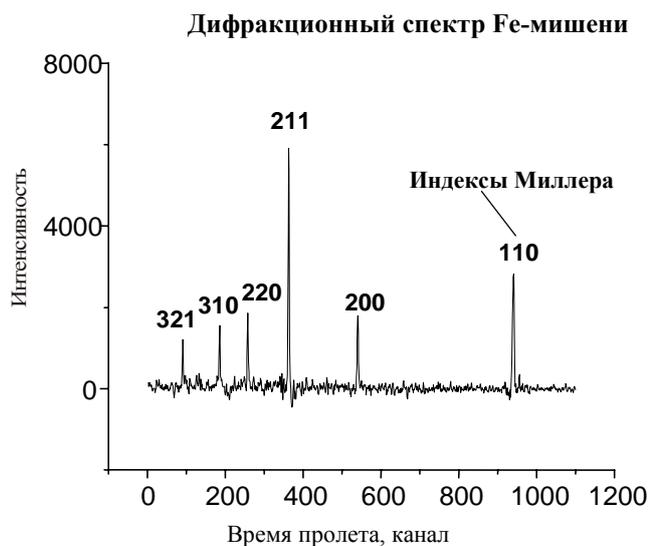


Рис. 6. Экспериментальный ТОФ-спектр нейтронного фурье-дифрактометра [12]. Цена деления канала фурье-дифрактометра составляет 4 мкс

зависимости полуширины линии при моделировании и в эксперименте одинаков. Экспериментальные и теоретические полуширины линий близки друг к другу, но теоретические спектры всегда уже экспериментальных. В минимуме ориентационной характеристики это отличие составляет 5%. Это небольшое отличие может быть отнесено за счет дополнительного вклада в ширину линии, обусловленного процессами в электронно-оптическом тракте спектрометра, которые здесь не рассматриваются.

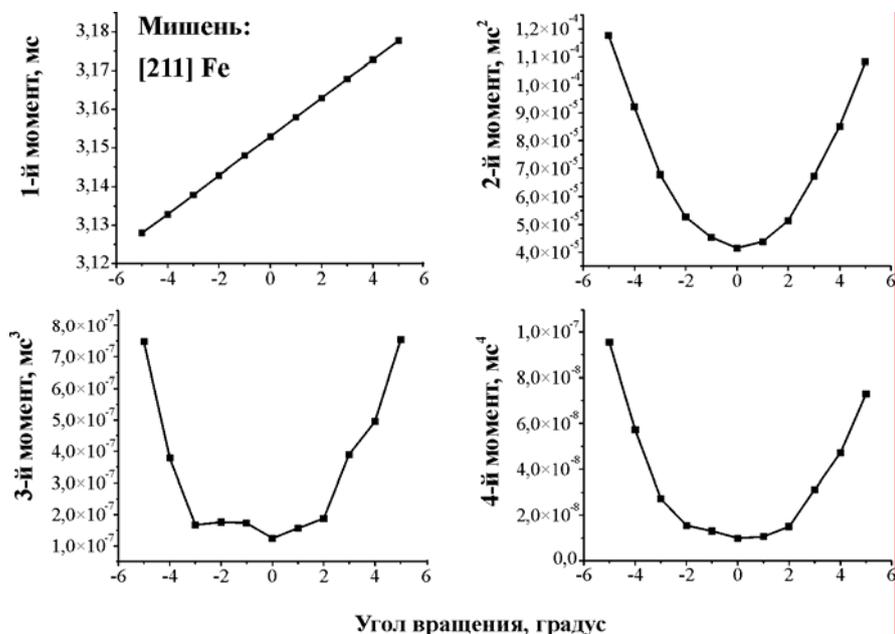


Рис. 7. Теоретическая зависимость первых четырех моментов функции отклика  $m_1$ ,  $m_2$ ,  $m_3$ ,  $m_4$  от точности юстировки детектора по углу вокруг вертикальной оси  $z$  для Fe-мишени размером  $36,5 \times 5,0$  мм

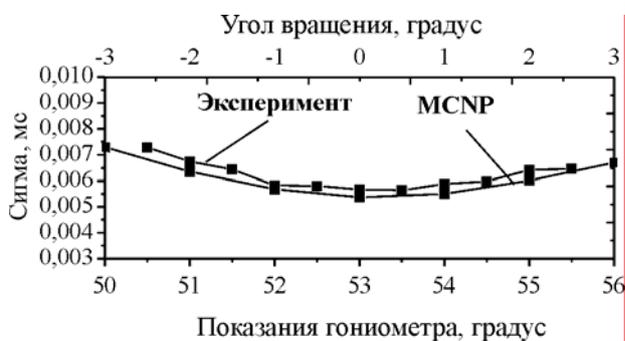


Рис. 8. Сравнение поведения полуширины экспериментального спектра и MCNP-функции отклика в зависимости от ошибки угловой юстировки для Fe-мишени размером  $36,5 \times 5,0$  мм

В работе исследовано влияние точности юстировки детектора на параметры функции отклика с использованием методов Монте-Карло. Показано, что неточность в угловой юстировке по углу поворота вокруг вертикальной оси на 3–4 градуса приводит к уширению линии в 3–4 раза для мишени большого размера. Смещение детектора вдоль пучка на  $\pm 5$  см приводит к увеличению ширины функции отклика в 3–5 раз. Удовлетворительное согласие теоретического и экспериментального значений полуширины линий для Fe-мишени свидетельствует о достаточной корректности разработанной MCNP-модели дифракции нейтронов на поликристаллической мишени.

Разработанный метод может быть применен для решения и других задач, связанных с разработкой и изготовлением времяпролетного нейтронного детектора, в частности для исследования влияния конечных размеров мишени и детектора и процессов, происходящих в них, а также влияния конструктивных элементов на параметры нейтронного времяпролетного спектрометра.

### Литература

1. Аксенов В. Л., Балагуров А. М. // УФН. 1996. Т. 166. С. 955–985.
2. Hiismaki P. // Proc. IAEA Symp. Neutron Inelastic Scattering. Grenoble, 1972. P. 803.
3. Pouyu H., Hiismaki P., Virjo A. // Nucl. Instr. Meth. 1975. Vol. 126. P. 421–433.
4. Аксенов В. П. и др. Нейтронный фурье-дифрактометр на реакторе ИБР-2. Дубна, 1991. Препринт ОИЯИ № РЗ – 91–172.
5. Hutchings M. T. // Nondestr. Test. Eval. 1990. Vol. 5. P. 395–413.
6. Carpenter J. M. // Nucl. Instr. Meth. 1967. Vol. 47. P. 179.
7. Holas A. // Nucleonika. 1968. Vol. 8. P. 871.
8. Александров Ю. А., Шаранов Э. И., Чер Л. Дифракционные методы в нейтронной физике. М, 1981.
9. Briesmeister J. F. (Ed.) MCNP- A General Monte-Carlo N-particle Transport, Version 4A, LA-12625, Los Alamos Natinal Laboratory, Los Alamos , New Mexico, November 1993.
10. Уиндзор К. Рассеяние нейтронов от импульсных источников. М., 1975.
11. Корн Г., Корн Е. Справочник по математике для научных работников и инженеров. М., 1974.
12. Бокучава Г. Д., Жук В. В., Кузьмин Е. С. Частное сообщение, 2000.

### APPLICATION OF MONTE-CARLO METHODS IN PROBLEM OF ADJUSTMENT OF TIME-OF-FLIGHT NEUTRON SPECTROMETERS

**G. D. Bokuchava, E. S. Kuzmin, I. S. Kuten, S. A. Kuten,  
V. V. Zhuk, A. A. Khrutchinsky**

The application of Monte-Carlo methods in problem of angular and spatial adjustment of time-of-flight neutron spectrometers is proposed. Results of numerical simulation are discussed.