

## РАЗВИТИЕ МЕТОДОВ МОДЕЛИРОВАНИЯ НЕЙТРОННЫХ СПЕКТРОМЕТРОВ И ВИРТУАЛЬНЫХ ЭКСПЕРИМЕНТОВ ПО НЕЙТРОННОМУ РАССЕЯНИЮ

*С. А. Маношин*<sup>1,\*</sup>, *А. В. Белушкин*<sup>1</sup>, *А. И. Иоффе*<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Объединенный институт ядерных исследований, Дубна

<sup>2</sup> Исследовательский центр Юлиха, Германия

МОДЕЛИРОВАНИЕ НЕЙТРОННЫХ СПЕКТРОМЕТРОВ МЕТОДОМ МОНТЕ-КАРЛО. КРАТКОЕ ОПИСАНИЕ СУЩЕСТВУЮЩИХ ПАКЕТОВ МОДЕЛИРОВАНИЯ: VITESS, MCSTAS, NISP, RESTRAX	1229
МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭФФЕКТА ГРАВИТАЦИИ И НЕЙТРОННО-ОПТИЧЕСКИЕ МНОГОКАНАЛЬНЫЕ УСТРОЙСТВА	1231
МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРЕЦЕССИИ ПОЛЯРИЗОВАННЫХ НЕЙТРОНОВ В ПЕРЕМЕННЫХ МАГНИТНЫХ ПОЛЯХ	1233
РАДИОЧАСТОТНЫЙ ФЛИППЕР, РЕЗОНАТОР ДРАБКИНА, АДИАБАТИЧЕСКИЙ ГРАДИЕНТНЫЙ ФЛИППЕР	1235
МОДЕЛИРОВАНИЕ СПИН-ЭХО-СПЕКТРОМЕТРОВ С РАДИОЧАСТОТНЫМИ ФЛИППЕРАМИ И ВРАЩАЮЩИМИСЯ МАГНИТНЫМИ ПОЛЯМИ. МАЛОУГЛОВОЙ СПИН-ЭХО-ДИФРАКТОМЕТР (SESANS)	1240
ИСПОЛЬЗОВАНИЕ РЕАЛЬНЫХ МАГНИТНЫХ ПОЛЕЙ ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ СПИН-ЭХО-СПЕКТРОМЕТРОВ. СРАВНЕНИЕ ПОЛУЧЕННЫХ РЕЗУЛЬТАТОВ С ЭКСПЕРИМЕНТОМ	1244
ЗАКЛЮЧЕНИЕ	1246
СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ	1247

---

\*E-mail: manoshin@nf.jinr.ru

## РАЗВИТИЕ МЕТОДОВ МОДЕЛИРОВАНИЯ НЕЙТРОННЫХ СПЕКТРОМЕТРОВ И ВИРТУАЛЬНЫХ ЭКСПЕРИМЕНТОВ ПО НЕЙТРОННОМУ РАССЕЯНИЮ

*С. А. Маношин*<sup>1,\*</sup>, *А. В. Белушкин*<sup>1</sup>, *А. И. Иоффе*<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Объединенный институт ядерных исследований, Дубна

<sup>2</sup> Исследовательский центр Юлиха, Германия

Рассмотрены результаты моделирования нейтронных инструментов с помощью программного пакета VITESS, дополненного разработанными авторами компонентами для работы с поляризованными нейтронами. Работы выполнены в рамках сотрудничества Лаборатории нейтронной физики им. И. М. Франка ОИЯИ с Исследовательским центром Юлиха (Германия). Продемонстрировано успешное моделирование с использованием метода Монте-Карло резонансного и градиентного адиабатического спиновых вращателей, резонатора Драбкина, классического спин-эхо-спектрометра, спектрометра резонансного спинового эха, дифрактометра малоуглового спинового эха, спин-эхо-установки с вращающимися магнитными полями. Особое внимание было уделено разработке возможности использования экспериментально измеренных или вычисленных методом конечных элементов магнитных полей. Результаты моделирования хорошо совпадают с нейтронно-поляриметрическими экспериментами.

In this review we present some results of modeling of the polarized neutron scattering instruments, using developed by the authors' components of the Monte-Carlo based VITESS simulation package. The work was performed within the framework of collaboration between the Frank Laboratory of Neutron Physics JINR and the Juelich Center of Neutron Science (Forschungszentrum Juelich, Germany). Successful VITESS simulations were carried out for resonance and adiabatic gradient spin flippers, Drabkin resonator, classical spin-echo spectrometer, resonance spin-echo spectrometer, spin-echo diffractometer for small angle neutron scattering, spin-echo spectrometer with the rotating magnetic fields. Special efforts were undertaken to introduce in the VITESS the possibility to load the magnetic field 3-dimensional space map from an external source (file), obtained by direct measurements or calculated by dedicated final elements calculations. A very good agreement of neutron polarimetric experiments with the VITESS calculations is demonstrated.

PACS: 28.20.-v; 28.41.Ak

---

\*E-mail: manoshin@nf.jinr.ru

## **1. МОДЕЛИРОВАНИЕ НЕЙТРОННЫХ СПЕКТРОМЕТРОВ МЕТОДОМ МОНТЕ-КАРЛО. КРАТКОЕ ОПИСАНИЕ СУЩЕСТВУЮЩИХ ПАКЕТОВ МОДЕЛИРОВАНИЯ: VITESS, MCSTAS, NISP, RESTRAX**

Моделирование методом Монте-Карло сегодня играет очень важную роль в контексте дизайна и оптимизации инструментов для нейтронного рассеяния. Точная и адекватная математическая модель позволяет осуществлять разработку концепций новых, а также вырабатывать рекомендации по оптимизации уже существующих установок. Указанные факторы определяют актуальность развития специальных оптимизированных многофункциональных программ моделирования нейтронных инструментов. В настоящее время практически каждый новый или модернизируемый нейтронный инструмент сначала моделируется методом Монте-Карло для проверки его функциональности и/или реализации новых идей посредством одного из четырех программных комплексов: VITESS [1], McStas [2], NISP [3] или RESTRAX [4]. Все они являются бесплатными и свободно распространяемыми, но наиболее широко используются две первые программы.

С физической точки зрения все эти комплексы основываются на давно известном в оптике методе трассировки лучей (ray tracing), в котором изображение объекта образуется как множество точек пересечения испускаемых источником лучей с плоскостью изображения. При этом направление распространения каждого луча изменяется из-за преломления на границах оптических элементов (линз или призм) и вычисляется по закону преломления Снеллиуса. Аналогично изображение на нейтронном детекторе образуется как множество точек попадания «нейтронных лучей», которыми являются рассматриваемые как классические частицы нейтроны, испускаемые нейтронным источником.

Однако в отличие от световых лучей изменение направления распространения нейтронов выбирается случайным образом и вычисляется согласно вероятности, определяемой законами рассеяния. При этом каждому нейтрону приписывается вес, равный вероятности рассеяния, который в процессе прохождения нейтрона через различные нейтронно-оптические элементы инструмента умножается на веса последующих актов рассеяния. Суммарный вес, полученный в результате нескольких последовательных процессов рассеяния при прохождении нейтрона через различные элементы, соответствует вероятности распространения нейтрона в выбранном направлении. Неупругие процессы, определяемые функцией рассеяния, оцениваются посредством вычисления вероятности изменения кинетической энергии (скорости) нейтрона. Полная информация о нейтроне, прошедшем через инструмент, описывается 12 координатами: временем распространения от источника, длиной волны, весом (вероятностью), тремя координатами  $(x, y, z)$ , тремя направляющими косинуса и тремя компонентами вектора спина.

Аналогичный процесс проводится с другими нейтронами, 12 начальных координат которых выбираются случайным образом в рамках заданных параметров входного пучка на поверхности замедлителя — расходимости, монохроматичности и степени поляризации. В результате моделирования с большим количеством нейтронов получается набор данных, описывающих множество траекторий нейтронов в пучке. Выборка из этих данных по одной или нескольким координатам (сечение многомерного массива) позволяет визуализировать нейтронный пучок по любому желаемому параметру и таким образом получить его угловое и пространственное распределения, энергетический спектр и поляризацию.

Программный комплекс McStas разрабатывается с 1998 г. и на сегодняшний день представляет собой наиболее широко используемый пакет для моделирования нейтронных инструментов. Основой программы является компилятор, который считывает описание инструмента на специальном высокоуровневом языке и затем генерирует программу моделирования на языке С. Основные модули пакета McStas разработаны в Техническом университете Дании, Копенгагенском университете (в прошлом RISØ DTU и RISØ National Lab), Институте Пауля Шеррера (Швейцария) и Институте Лауэ–Ланжевена (Франция). Следует отметить, что в настоящее время основной вклад в развитие McStas вносят его многочисленные пользователи, создающие программные компоненты для решения своих конкретных задач, которые после необходимой проверки включаются в официальную версию. McStas обеспечивает возможности моделирования трехосных, времяпролетных спектрометров и, частично, инструментов с поляризованными нейтронами. Включено моделирование следующих основных компонентов: импульсных и стационарных нейтронных источников, нейтронопроводов (в том числе многоканальных), коллиматоров, рассеяния на стандартных образцах, прерывателей, селекторов скоростей и различных видов детекторов.

Проект VITESS (Virtual Instrument Tool for European Spallation Source) является международным: он начинался в Институте Гана–Мейтнер (Берлин), позднее к нему присоединились ЛНФ ОИЯИ и Исследовательский центр Юлиха (FZJ). В данной статье приведен обзор некоторых возможностей программного комплекса, в развитии которых активно участвовала Лаборатория нейтронной физики ОИЯИ в кооперации с FZJ.

Первым вкладом ЛНФ ОИЯИ в развитие VITESS было моделирование влияния гравитации на движение нейтронов от источника до детектора [5, 6]. (Данный алгоритм позже был использован и в комплексе McStas.) Следующим шагом стало введение в VITESS специального универсального модуля, который позволял моделировать многоканальные оптические отражающие системы (многоканальные нейтронопроводы) [6, 7]. С 2001 г. началось интенсивное сотрудничество ЛНФ ОИЯИ и FZJ, наиболее значительным результатом которого стало введение в VITESS моделирования инструментов, использующих

поляризованные нейтроны, что было невозможно ни в одном из существующих программных пакетов [8]. ЛНФ ОИЯИ и FZJ провели большую совместную работу по моделированию спиновой динамики нейтрона как в стационарных, так и в зависящих от времени магнитных полях, что позволило успешно описать такие устройства, как радиочастотный и адиабатический градиентный флипперы и резонатор Дрбкина. Используя эти компоненты в различных комбинациях, VITESS сегодня позволяет успешно моделировать практически все типы нейтронных спин-эхо-спектрометров (классических, резонансных и др.) как в модельных, так и в реальных магнитных полях.

В отличие от McStas в VITESS каждый компонент моделируемой установки описывается отдельным модулем. Компоненты встраиваются в нужном порядке в программу для моделирования конкретного инструмента. При этом основные возможности VITESS и McStas аналогичны: практически все модули, входящие в пакет McStas, имеют свои функциональные аналоги и в VITESS.

Наличие двух конкурирующих программ было изначальной идеей, поскольку такой подход позволяет независимо сравнивать полученные результаты моделирования одинаковых систем различными способами. Хотя, как правило, результаты, полученные в VITESS и McStas, в общем совпадают, но из-за значительных различий в используемых математических моделях компонентов нейтронных инструментов получаемые результаты могут несколько различаться. Поэтому необходимо провести расчет двумя программами, если планируется моделирование сложного и/или дорогого инструмента или имеются сомнения в правильности результатов, полученных с использованием одного из программных пакетов. Кроме того, VITESS имеет более развитую часть для моделирования инструментов с поляризованными нейтронами.

Две другие программы, NISP и RESTRAX, не получили широкого распространения вследствие их ориентированности на конкретные задачи. В то время как VITESS и McStas больше ориентированы на задачи универсального моделирования различных инструментов и их компонент, RESTRAX, например, является программой для моделирования трехосных нейтронных спектрометров.

## 2. МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭФФЕКТА ГРАВИТАЦИИ И НЕЙТРОННО-ОПТИЧЕСКИЕ МНОГОКАНАЛЬНЫЕ УСТРОЙСТВА

Нейтрон в VITESS трактуется как классическая частица, и его движение описывается классическими уравнениями движения:

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}_0 + \mathbf{V}_0 t + \frac{\mathbf{g}t^2}{2}, \quad \mathbf{V} = \mathbf{V}_0 + \mathbf{g}t, \quad \mathbf{r} = (x, y, z),$$

$$\mathbf{V} = V(\cos \alpha, \cos \beta, \cos \chi),$$

где  $\mathbf{r}, \mathbf{r}_0$  — текущая и начальная позиции;  $\mathbf{V}, \mathbf{V}_0$  — текущая и начальная скорости;  $t$  — текущее время;  $\mathbf{g}$  — ускорение свободного падения.

На начальном этапе ни один пакет моделирования не учитывал влияния эффекта гравитации на траекторию движения нейтронов. Однако в случаях малых энергий нейтронов и длинных пролетных баз между источником и детектором нейтронов этот эффект становится существенным [5, 6]. В качестве примера можно привести типичную установку малоуглового рассеяния, работающую на больших длинах волн (более  $10 \text{ \AA}$ ), длина которой превышает 20 м. Другой пример: длинные (более 50 м) нейтронотводы, где эффект гравитации необходимо учитывать при моделировании пространственного распределения интенсивности нейтронного пучка на выходе из нейтронотвода. Все эти возможности реализованы в соответствующих модулях программного пакета VITESS. Конечно, в модулях, описывающих компоненты малых размеров, влиянием эффекта гравитации можно пренебречь и для ускорения вычислений не включать его в моделирование.

Следующим важным шагом в VITESS было развитие универсального модуля для моделирования многоканальных нейтронно-оптических и коллимирующих устройств: многоканальных нейтронотводов, радиальных коллиматоров и т. п. Разработанный модуль пригоден для моделирования устройств различной геометрической конфигурации. Схематическое изображение многоканального нейтронотвода представлено на рис. 1.

Поверхности, описывающие стенки каналов, могут быть как первого, так и второго порядков. Кроме того, данные поверхности могут быть как

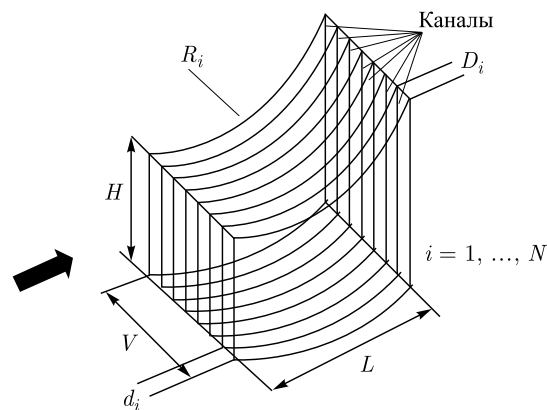


Рис. 1. Общий вид многоканального изогнутого нейтронотвода. Основные параметры, описывающие геометрию нейтронотвода: общая длина  $L$  и высота  $H$ , число каналов  $N$ , радиус кривизны каждого канала  $R_i$ , толщина на входе  $d_i$  и выходе  $D_i$  ( $i = 1, \dots, N$ ). Такой набор исходных параметров позволяет моделировать очень широкий класс зеркальных нейтронотводов и коллиматоров

отражающими, так и поглощающими, с параметрами, задаваемыми свойствами конкретных материалов, нанесенных на стенки многоканального нейтронновода.

Важной оригинальной особенностью данного модуля является то, что он дает возможность учитывать эффект прохождения части нейтронов через стенки каналов. Это позволяет учесть эффект ухудшения параметров реального многоканального нейтронновода по сравнению с идеальной модельной ситуацией, когда нейтроны не могут проникать в соседние каналы. Этот модуль уже использовался при моделировании длинного изогнутого нейтронновода канала 7а на реакторе ИБР-2М [9].

Кроме того, включена очень важная возможность моделирования устройства при использовании поляризованных нейтронов. Это открывает недоступные ранее возможности для оптимизации поляризаторов и анализаторов, используемых в установках с поляризованными нейтронами. Часто бывает необходимо оценить влияние неидеальности параметров поляризатора или анализатора на параметры нейтронного спектрометра, что и позволяет сделать соответствующий модуль VITESS.

### **3. МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРЕЦЕССИИ ПОЛЯРИЗОВАННЫХ НЕЙТРОНОВ В ПЕРЕМЕННЫХ МАГНИТНЫХ ПОЛЯХ**

Прецессия спина нейтрона в магнитном поле в большинстве случаев может быть в соответствии с теоремой Эренфеста [10] описана классически, т. е. как вращение единичного вектора спина вокруг текущего направления магнитного поля (ларморовская прецессия). Исключением является случай сильных градиентных магнитных полей, когда необходим учет эффекта Штерна–Герлаха [11], который не рассматривается нами, поскольку не встречается в нейтронно-оптических экспериментах, о которых идет речь в данном обзоре.

В общем случае магнитное поле может быть неоднородным в пространстве и/или во времени. Поэтому для целей моделирования заполненное магнитным полем пространство разделяется на столь малые конечные элементы, что в каждом из них магнитное поле практически является однородным в пространстве и постоянным во времени — каждому конечному элементу соответствует индивидуальный по направлению и величине вектор магнитного поля. Форма конечных элементов выбирается исходя из конкретных условий задачи. Например, если поле может быть просто и эффективно описано в декартовых координатах, то формой конечного элемента принимается параллелепипед.

Магнитное поле в каждом конечном элементе вычисляется либо аналитически (в случае модельных полей), либо посредством специализированных

программ (например, AnSyS [12], MagNet [13] и т. п.) для полей со сложной пространственной конфигурацией.

Специальный модуль для моделирования непостоянных во времени и пространстве магнитных полей [14] введен в VITESS начиная с версии 2.3. Необходимость разработки такого модуля возникла в связи с моделированием спин-эхо-установок с вращающимися магнитными полями.

Как отмечено выше, пространство с магнитным полем разбивается на конечные элементы длиной  $S$ . Внутри каждого элемента магнитное поле  $H$  предполагается однородным и постоянным во времени, но меняется от элемента к элементу (рис. 2, *a*). Фаза прецессии спина нейтрона в каждом элементе вычисляется как произведение ларморовской частоты прецессии в поле и времени пролета нейтрона через конечный элемент:  $\varphi = \gamma HS/v$  ( $\gamma$  — гиромагнитное отношение для нейтрона,  $v$  — скорость нейтрона). В результате вычисляются выходные компоненты спина нейтрона после прохождения через элемент, которые используются как входные компоненты вектора спина для вычислений в следующем элементе. Таким образом, последовательно вычисляются компоненты вектора спина нейтрона в процессе прохождения

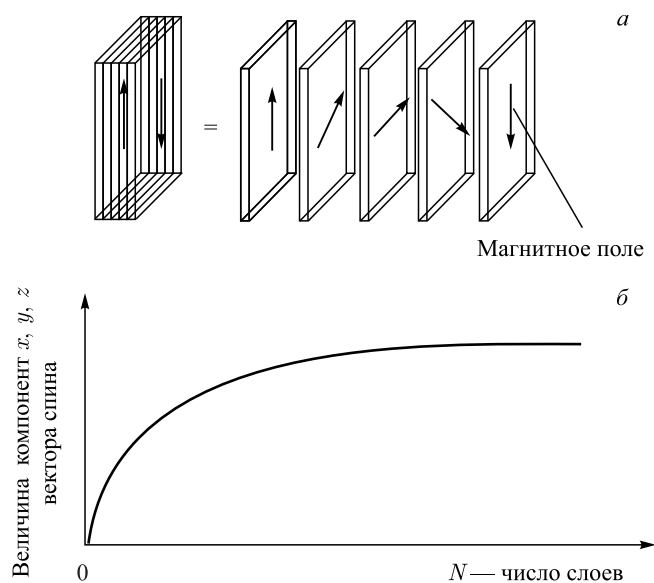


Рис. 2. *a*) Представление пространства с вращающимся магнитным полем (поворот на  $180^\circ$ ) в виде тонких слоев с фиксированным направлением и величиной вектора магнитного поля. *б*) Зависимость конечного положения компонент вектора спина от числа слоев: наблюдается эффект насыщения, так что начиная с некоторого числа слоев дальнейшее разбиение не требуется



через все элементы. Результат, полученный для последнего элемента, является поляризацией прошедшего через магнитное поле нейтронного пучка.

В следующей итерации размер элементов уменьшается вдвое, и вычисления повторяются. Итерационный процесс прекращается, когда конечный результат моделирования — поляризация выходящего нейтронного пучка — перестает зависеть от размера элементов  $S$  (рис. 2, б).

Для моделирования реальных устройств к компонентам вращающегося магнитного поля могут быть добавлены компоненты постоянного магнитного поля, как будет продемонстрировано ниже.

#### 4. РАДИОЧАСТОТНЫЙ ФЛИППЕР, РЕЗОНАТОР ДРАБКИНА, АДИАБАТИЧЕСКИЙ ГРАДИЕНТНЫЙ ФЛИППЕР

Одним из наиболее важных устройств поляризационных нейтронных спектрометров является радиочастотный флиппер [15] (рис. 3), представляющий комбинацию (модулированного по амплитуде) радиочастотного (RF) и перпендикулярного ему постоянного магнитных полей. Линейно-осциллирующее радиочастотное поле  $B_{RF}$  можно представить как комбинацию двух противоположно вращающихся магнитных полей. При этом достаточно рассматривать только одну из компонент поля, направление вращения которой совпадает с направлением прецессии спина вокруг постоянного магнитного поля  $B_0$ . Эффект от второй компоненты проявляется только во втором порядке.

Радиочастотный флиппер переворачивает спин нейтрона на  $180^\circ$  при выполнении условия резонанса

$$\omega_{RF} = \gamma B_0 \quad (1)$$

и при определенной амплитуде вращающегося магнитного поля, которая определяет эффективность флиппера (вероятность переворота):

$$B_{RF} = \frac{n\pi\nu}{\gamma d}, \quad (2)$$

где  $d$  — размер флиппера в  $x$ -направлении и  $n = 1, 3, 5, \dots$

В качестве примера рассмотрим моделирование RF-флиппера длиной 3 см с  $B_0 = 100$  Гс, предназначенного для работы с нейтронами с длиной волны  $2,35 \text{ \AA}$ . Область магнитного поля была разбита на 40 слоев в горизонтальном направлении. Зависимость поляризации нейтронного пучка на выходе резонансного флиппера от частоты радиочастотного поля  $\omega_{RF}$  (рис. 4) демонстрирует ярко выраженный резонансный характер. Глубина резонанса (вероятность переворота) достигает  $-1$  (100 %-й поворот вектора поляризации) при 289 кГц, что соответствует выполнению условий (1) и (2) при  $B_{RF} = 9,57$  Гс. Другим длинам волн нейтронов будет соответствовать другая резонансная частота.

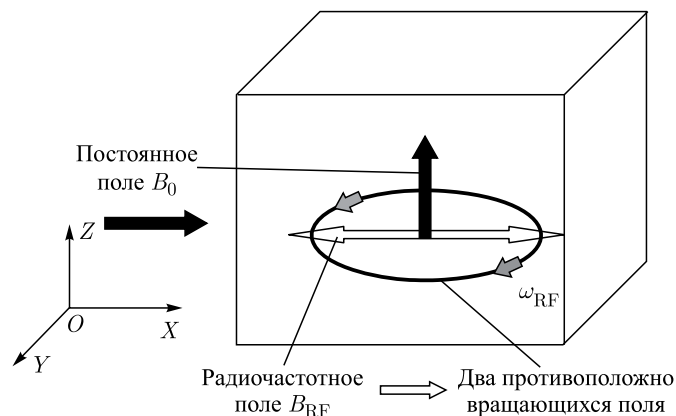
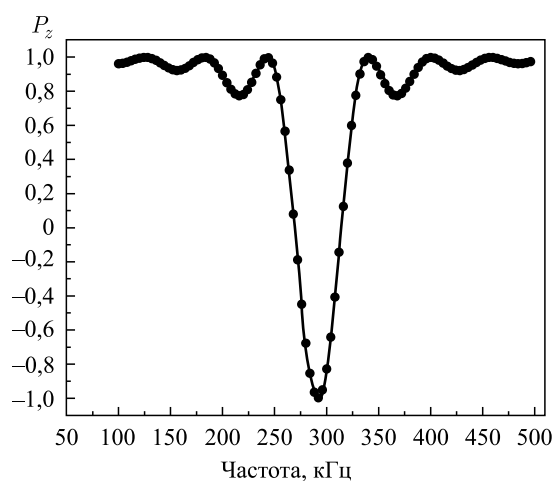
Рис. 3. Схема радиочастотного флиппера. Нейтронный поток направлен вдоль оси  $OX$ 

Рис. 4. Поляризация нейтронного пучка на выходе резонансного флиппера. Падающий пучок имел поляризацию  $P(0, 0, 1)$  на фиксированной длине волны  $2,35 \text{ \AA}$ . Для 100 %-го переворота спина  $P(0, 0, -1)$  частота радиочастотного поля должна быть выбрана равной  $289 \text{ кГц}$  при  $B_{RF} = 9,57 \text{ Гс}$  и  $B_0 = 100 \text{ Гс}$ . Расчетная ошибка не превышает размеров точек

Дополнительным результатом является возможность отслеживания направления вектора спина от слоя к слою, т. е. визуализации его эволюции при прохождении через флиппер. Как видно из рис. 5, вектор спина движется по спиралеобразной траектории, которая заканчивается в точке  $(0, 0, -1)$ , что и соответствует 100 %-й вероятности переворота спина.

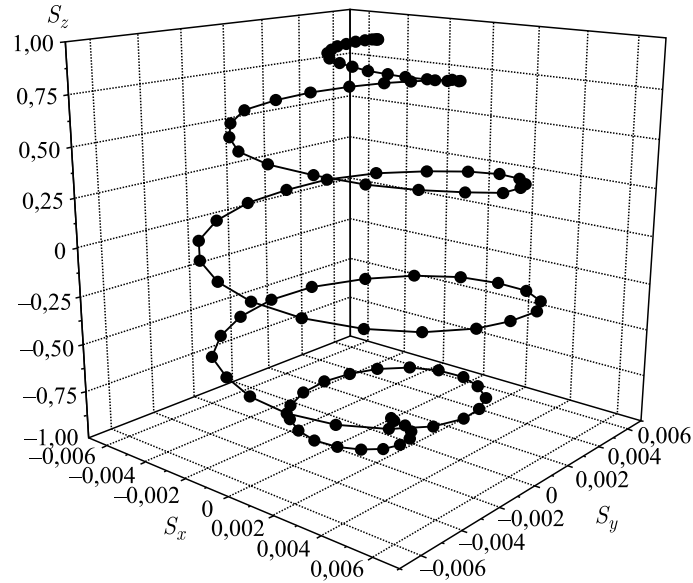


Рис. 5. Эволюция вектора спина нейтрона в радиочастотном флиппере:  $\mathbf{S}(0, 0, 1) \rightarrow \mathbf{S}(0, 0, -1)$  при выполнении резонансных условий (1) и (2). Расчетная ошибка не превышает размеров точек

Рассмотрим теперь резонатор Драбкина [16, 17]. Он также выполняет задачу поворота спина на резонансной частоте подобно радиочастотному флипперу, рассмотренному ранее. Главное отличие от резонансного флиппера заключается в том, что радиочастотное (и соответственно вращающееся) магнитное поле заменено периодической последовательностью противоположно направленных в пространстве магнитных полей. Для данного резонатора можно вывести резонансные условия, которые оказываются подобными тем, что приведены выше для радиочастотного флиппера. Так как форма резонансной линии определяется фурье-преобразованием от распределения амплитуды периодического поля, прямоугольное распределение приведет к наличию побочных максимумов, которые должны быть подавлены для синусоидального и особенно гауссова пространственных распределений.

На рис. 6 приведены результаты моделирования трех вариантов резонатора [18]. Параметры резонатора были выбраны следующими: длина 20 см, период поля 2 мм, постоянное (ведущее магнитное) поле  $B_0 = 170$  Гс, что соответствует резонансной длине волны нейтронов, равной  $3,989 \text{ \AA}$ . Были рассмотрены три варианта распределения амплитуды периодического поля: постоянное, полупериод синусоидального и гауссова распределение. Амплитуды этих полей равнялись 1,33, 2,1 и 3,24 Гс соответственно. Полученные

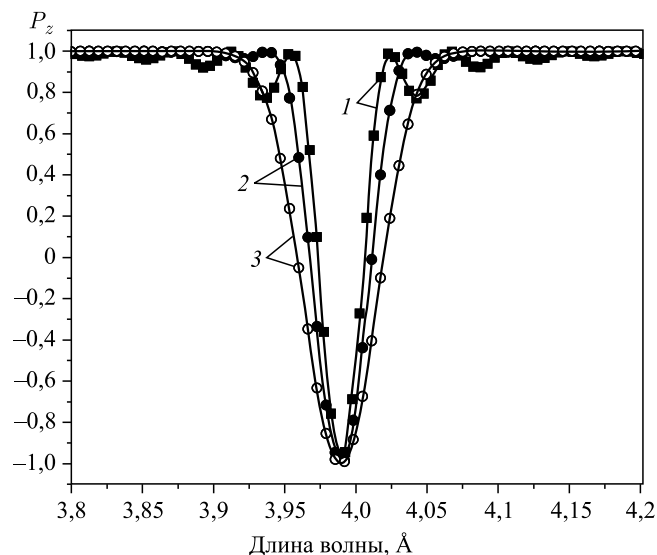


Рис. 6. Моделирование резонатора Дрaбкина с разным распределением амплитуды периодического магнитного поля. Приведены 3 варианта распределения амплитуды периодического поля: постоянное (1), полупериод синусоидального (2) и гауссово распределение (3) с амплитудами 1,33, 2,1 и 3,24 Гс соответственно. Расчетная ошибка не превышает размеров точек

результаты (см. рис. 6) демонстрируют преимущество использования синусоидального или нормального распределений.

Особенностью радиочастотного флиппера и резонатора Дрaбкина является тот факт, что в этих устройствах условие переворота направления поляризации нейтронного пучка выполняется только для определенной длины волны нейтронов. В то же время в экспериментах по времени пролета необходимо иметь возможность управлять направлением поляризации нейтронов в широком диапазоне длин волн. Такую возможность предоставляет адиабатический градиентный флиппер, рассмотренный ниже [19, 20].

Адиабатический градиентный флиппер эффективно производит переворот спина практически на 100% для длин волн выше некоторой критической длины волны  $\lambda^*$ . Схема адиабатического градиентного флиппера приведена на рис. 7.

Структура магнитных полей в этом флиппере более сложная, чем в резонансном флиппере. Аналогично резонансному флипперу в устройстве используется постоянное магнитное поле, изменяющееся линейно вдоль направления оси пучка нейтронов. Амплитуда радиочастотного поля, направленного перпендикулярно постоянному полю, не постоянная, а изменяется вдоль

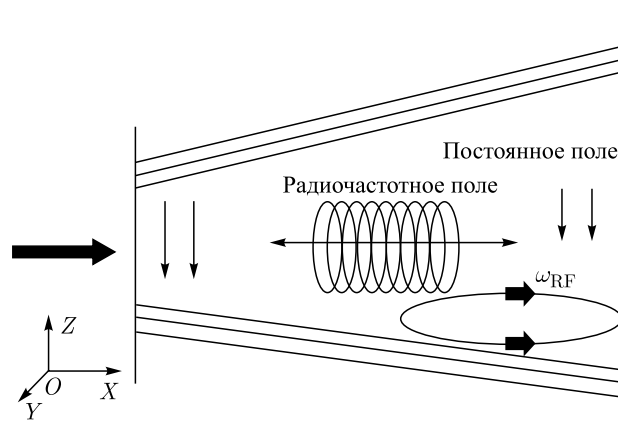


Рис. 7. Общая схема адиабатического (радиочастотного) градиентного флиппера

оси пучка по синусоидальному закону (полупериод) или близкому к нему. Комбинация двух таких полей обеспечивает адиабатический поворот спина нейтрона в широком диапазоне длин волн.

Был разработан специальный программный модуль VITESS для моделирования такого флиппера. В разработанном модуле также имеется возможность использовать постоянное во времени поле, рассчитанное внешней программой. Это может быть необходимо при расчете реального флиппера для учета влияния паразитных внешних магнитных полей.

Пример моделирования эффективности флиппера приведен на рис. 8. Параметры флиппера выбирались следующие: длина 10 см, амплитуда вращающегося магнитного поля 12 Гс изменялась по полупериоду синуса. Постоянное магнитное поле спадало линейно с 114 Гс на входе флиппера до 84 Гс на его выходе. Частота вращения магнитного поля составляла 288,7 кГц. Для корректного моделирования флиппер был разбит на 1000 слоев. Большое число слоев требуется для адекватного описания вращающегося магнитного поля, обеспечивающего адиабатический поворот спина нейтрона. Критическая длина волны для данного флиппера  $\lambda^*$  равна приблизительно 3 Å. Для нейтронов с длиной волны больше этой величины поляризация нейтронного пучка варьируется на выходе из флиппера в диапазоне от  $-0,97$  до  $-0,99$  при начальной поляризации, равной  $+1$ . Это говорит о высокой эффективности работы данного флиппера.

Необходимо отметить, что вышеописанные устройства при правильном изготовлении работают практически идеально (необходимо избегать краевых эффектов: не проводить пучок нейтронов у краев устройств, катушек). В нашем случае при моделировании предполагалось, что поляризаторы и

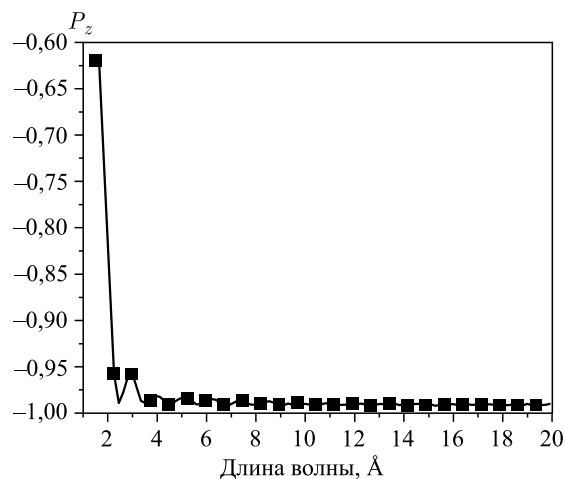


Рис. 8. Пример моделирования адиабатического (радиочастотного) градиентного флиппера с критической длиной волны  $\lambda^* = 3 \text{ \AA}$ . Расчетная ошибка не превышает размеров точек. Линия на графике проведена для наглядности

анализаторы пучка обладают 100 %-й эффективностью. В экспериментальных условиях это далеко не так: эффективность хороших поляризаторов и анализаторов, как правило, равна 95–97 %. Кроме того, для предотвращения деполяризации пучка необходимо иметь равномерное ведущее магнитное поле вдоль направления распространения нейтронов. Поэтому основной вклад в искажение экспериментальных данных вносят не столько вышеописанные устройства, сколько устройства для проводки, поляризации и анализа параметров нейтронного пучка.

## 5. МОДЕЛИРОВАНИЕ СПИН-ЭХО-СПЕКТРОМЕТРОВ С РАДИОЧАСТОТНЫМИ ФЛИППЕРАМИ И ВРАЩАЮЩИМИСЯ МАГНИТНЫМИ ПОЛЯМИ. МАЛОУГЛОВОЙ СПИН-ЭХО-ДИФРАКТОМЕТР (SESANS)

Техника нейтронного спинового эха [21], основанная на явлении ларморовской прецессии спина нейтрона в магнитном поле, является наиболее высоко разрешающим методом нейтронной спектроскопии с энергетическим разрешением, достигающим 1 нэВ. Идея спектрометра спинового эха заключается в измерении величины фазы прецессии нейтрона после прохождения через две области (два плеча) магнитного поля с противоположными направлениями прецессии спина. Магнитные поля в спектрометре настраиваются таким образом, чтобы фаза прецессии спина, набранная при прохо-

ждении через первое плечо, была равна, но противоположна по знаку фазе прецессии спина после прохождения через второе плечо. В результате начальное направление спина (поляризации нейтронного пучка) восстанавливается: этот эффект не зависит от времени пролета нейтрона (т. е. его скорости) через спектрометр и называется спин-эхо-фокусировкой. Неупругое рассеяние на образце, помещенном между плечами спектрометра, изменяет скорость нейтрона, что нарушает симметрию и приводит к повороту вектора спина, т. е. к изменению поляризации нейтронного пучка, которая и служит мерой изменения энергии нейтрона при рассеянии.

Существуют две разновидности спин-эхо-спектрометров: в одной из них спин нейтрона прецессирует вокруг поперечного магнитного поля, во второй высокочастотное магнитное поле вращается вокруг спина нейтрона. Примерами установок второго типа являются резонансный спин-эхо-спектрометр [22] и спин-эхо-спектрометр с вращающимися магнитными полями [23], которые будут рассмотрены ниже.

**5.1. Резонансный спин-эхо спектрометр.** Два радиочастотных флиппера, расположенных на некотором расстоянии друг от друга, могут эффективно заменять протяженное равномерное постоянное магнитное поле, т. е. изменять направление поляризации нейтронного пучка. В спектрометре используются две пары радиочастотных флипперов. Расстояние между флипперами равно  $D_1$  и  $D_2$  соответственно (рис. 9). Пространство между флипперами должно быть полностью, до 1 мГс, экранировано от внешних магнитных полей. Для получения эффекта спинового эха направления вращения магнитных полей и постоянного поля во флипперах второго плеча должны быть противоположны по отношению к первому плечу.

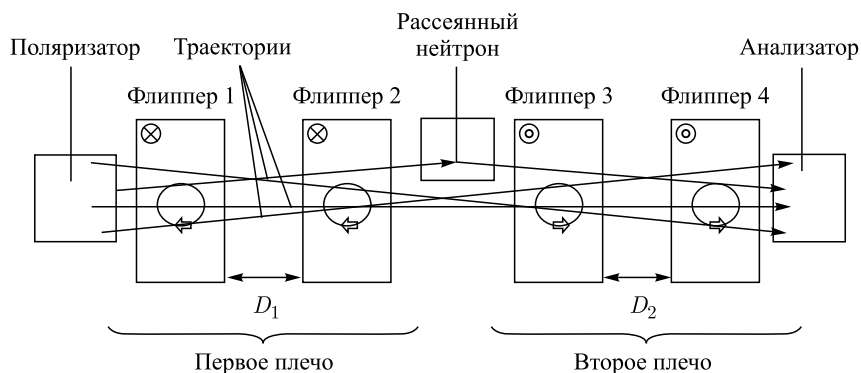


Рис. 9. Общая схема спектрометра резонансного спигового эха с четырьмя радиочастотными флипперами. В случае классического спин-эхо-спектрометра вместо радиочастотных флипперов помещаются соленоиды, создающие постоянные магнитные поля в каждом из двух плеч спектрометра

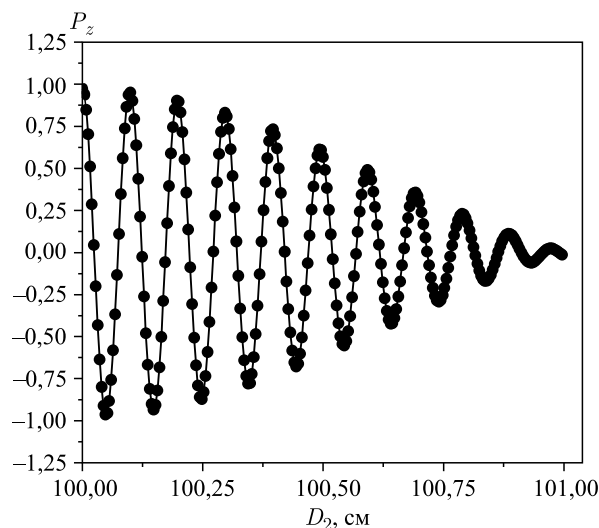


Рис. 10. Спин-эхо-сигнал в резонансном спин-эхо-спектрометре. Поляризатор и анализатор нейтронного пучка предполагались идеальными. Точка  $D_1 = D_2 = 100$  см соответствует спин-эхо-фокусировке. Расчетная ошибка не превышает размеров точек

На рис. 10 приведен сигнал, полученный при моделировании резонансного спин-эхо-спектрометра с четырьмя резонансными флипперами. Толщина каждого флиппера равна 3 см, амплитуда вращающегося с частотой 500 кГц магнитного поля была выбрана равной 5,6 Гс, постоянного поля 171 Гс. Нейтроны имели длину волны  $\lambda = 4 \text{ \AA}$ , степень монохроматизации  $\Delta\lambda/\lambda = 10\%$ . Эффект спин-эхо-фокусировки достигается при  $D_1 = D_2$ , а при увеличении расстояния  $D_2$  наблюдаются затухающие осцилляции интенсивности, называемые спин-эхо-сигналом.

**5.2. Спин-эхо дифрактометр малоуглового рассеяния.** Техника спинового эха может быть использована для целей высокоразрешающей нейтронной дифракции, когда фаза прецессии нейтрона при прохождении области магнитного поля зависит от направления распространения нейтрона, что достигается при использовании магнитных полей с наклонными границами. В этом случае возникает чувствительность к изменению направления распространения нейтронов при рассеянии на образце.

В качестве примера спин-эхо-дифрактометра рассмотрим установку с вращающимися магнитными полями (рис. 11) [23]. В спин-эхо-дифрактометре используются тонкие области с вращающимися магнитными полями (спин-прецессоры). В каждом из них спин нейтрона поворачивается на  $180^\circ$  вокруг мгновенного положения вектора вращающегося магнитного поля. Пространство между спин-прецессорами полностью экранировано от внешних маг-



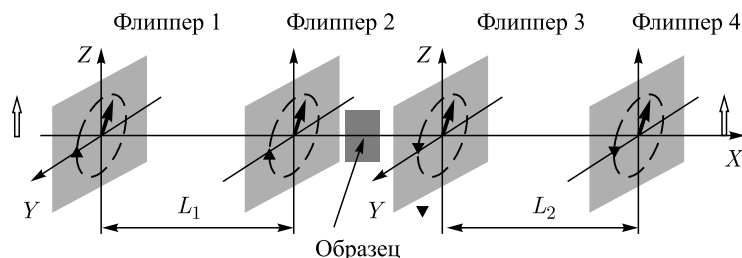


Рис. 11. Схема спин-эхо-спектрометра с вращающимися магнитными полями. Все четыре магнитных поля вращаются синхронно

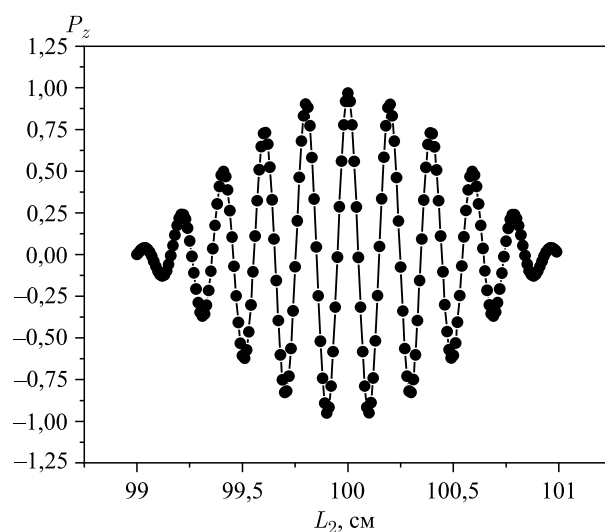


Рис. 12. Спин-эхо-сигнал от спектрометра с тонкими вращающимися магнитными полями. Падающий пучок имел длину волны  $\lambda = 20 \text{ \AA}$ , степень монохроматизации  $\Delta\lambda/\lambda = 20\%$ . Расчетная ошибка не превышает размеров точек

нитных полей. Спин-эхо-сигнал, полученный при моделировании с частотой вращения магнитного поля, равной 50 кГц, и расстоянием между флипперами  $L_1 = L_2 = 1 \text{ м}$ , представлен на рис. 12.

Такой спин-эхо-дифрактометр может работать как высокоразрешающая установка малоуглового рассеяния [24] аналогично дифрактометру SESANS [25]. Для повышения разрешающей способности спин-прецессоры должны быть повернуты вокруг вертикальной оси. Чем больше они наклонены к направлению падающего нейтронного пучка, тем больше угловая чувствительность дифрактометра. Важной особенностью такой установки является нечувствительность к расходимости падающего нейтронного пучка: можно измерить рассеяние нейтронного пучка на углы, которые на 1–2 порядка

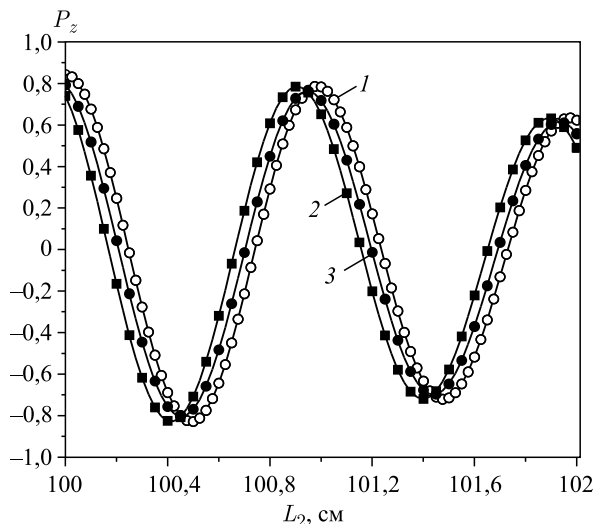


Рис. 13. Спин-эхо-сигналы, полученные при угловом отклонении нейтронов между плечами дифрактометра с вращающимися магнитными полями: 1 — спин-эхо-сигнал при нулевом отклонении; 2 — отклонение всех нейтронов в пучке на угол  $\theta = 0,01^\circ$ ; 3 — отклонение на  $\theta = 0,01^\circ$  половины от всех нейтронов в пучке. Длина волны нейтронов  $\lambda = 4 \text{ \AA}$ , степень монохроматизации  $\Delta\lambda/\lambda = 20\%$ , расходимость пучка  $1^\circ$  в вертикальной и горизонтальной плоскостях. Угол наклона флипперов равен  $75^\circ$

меньше, чем величина расходимости падающего пучка. Указанный эффект наблюдается в виде сдвига спин-эхо-сигнала по отношению к сигналу, измеренному в отсутствие образца. В классической установке малоуглового рассеяния такое угловое разрешение практически недостижимо, так как требует такой же высокой коллимации падающего на образец пучка, что практически сводит к нулю его интенсивность.

Рис. 13 иллюстрирует чувствительность к угловому отклонению пучка на образце (см. рис. 11). Частота вращения магнитного поля полагалась равной 50 кГц, расстояния между флипперами  $L_1 = 1 \text{ м}$ . Как видно из рисунка, такой относительно короткий спин-эхо-дифрактометр малоуглового рассеяния имеет очень высокое угловое разрешение порядка  $0,01^\circ$ .

## 6. ИСПОЛЬЗОВАНИЕ РЕАЛЬНЫХ МАГНИТНЫХ ПОЛЕЙ ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ СПИН-ЭХО-СПЕКТРОМЕТРОВ. СРАВНЕНИЕ ПОЛУЧЕННЫХ РЕЗУЛЬТАТОВ С ЭКСПЕРИМЕНТОМ

Моделирование спин-эхо-спектрометров с аналитически вычисленными вращающимися и радиочастотными полями было описано выше. Однако реальные магнитные поля зачастую имеют более сложную конфигурацию из-за

неидеальности создающих их электромагнитных устройств, постоянных магнитов, магнитных экранов и наличия рассеянных магнитных полей. Поэтому при моделировании стационарных и/или зависящих от времени магнитных полей необходимо иметь возможность использовать в расчетах не только аналитически вычисленные магнитные поля, но и магнитные поля, максимально приближенные к реальной ситуации в экспериментах. Их параметры можно получить при помощи непосредственных измерений или рассчитать с помощью специальных программ, основанных на методе конечных элементов (AnSys [12], MagNet [13] и др.).

Для этих целей несколько модулей VITESS были модифицированы таким образом, чтобы иметь возможность проводить моделирование не только с аналитически вычисленными, но также и с рассчитанными или экспериментально измеренными магнитными полями [26, 27]. В качестве программы расчета магнитных полей была выбрана программа MagNet (Infolityca.com), которая вычисляет значения проекций вектора магнитного поля  $B_x, B_y, B_z$  в конечных элементах с центрами в точках  $x, y, z$ .

В качестве примера приведем моделирование спин-прецессора для спин-эхо-дифрактометра (см. разд. 5). Он представляет собой расположенную на расстоянии 8,2 см пару магнитных систем, состоящих из двух тонких (2 мм) ортогональных прямоугольных соленоидов с плотностью намотки, уменьшающейся от центра к периферии, и создающих вращающееся в плоскости соленоидов магнитное поле. Для замыкания рассеянных магнитных полей соленоиды окружены экранами из  $\mu$ -металлических пластин.

При низких частотах вращения спин быстро пролетающего через спин-прецессор нейтрона «видит» мгновенное положение вектора магнитного поля и, адиабатически вращаясь вокруг него на  $180^\circ$ , эффективно совершает вращение с удвоенной частотой. Однако при увеличении частоты вращения положение вектора поля меняется с течением времени пролета нейтрона через спин-прецессор, так что положение вектора спина не отслеживает вращение вектора поля. Кроме того, имеет место дополнительная прецессия спина на рассеянных магнитных полях, создаваемых соленоидами и не полностью захваченных магнитными экранами. Это приводит к отклонению зависимости измеренной поляризации нейтронного пучка от идеальной синусоидальной зависимости (рис. 14).

На рис. 14, *а* приведены результаты измерения частотной зависимости поляризации проходящего через спин-прецессор нейтронного пучка в сравнении с результатами моделирования идеальной системы [26, 27]. Значительные расхождения показывают, что пространственное распределение реальных магнитных полей далеко от идеального. При использовании же вычисленного посредством MagNet распределения поля (которое показывает наличие достаточно сложной конфигурации остаточных магнитных полей) наблюдается достаточно хорошее совпадение с экспериментом (рис. 14, *б*), что также под-

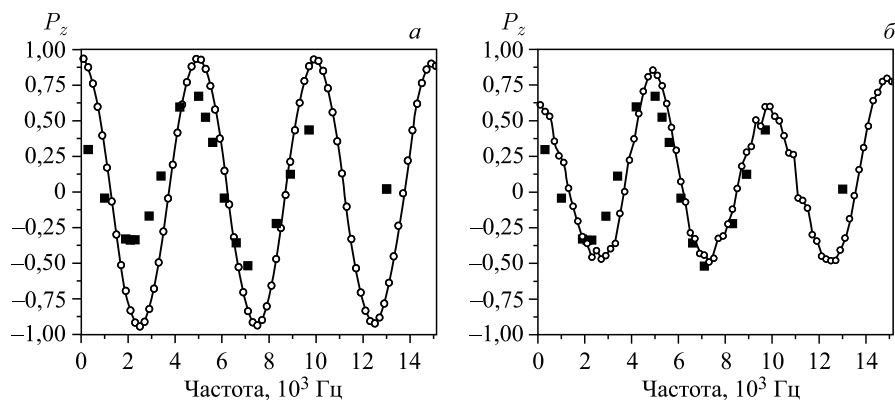


Рис. 14. Частотная зависимость поляризации нейтронного пучка при прохождении через тонкий (2 мм) спин-прецессор в сравнении с моделированием идеальных (а) и рассчитанных с помощью MagNet (б) магнитных полей. Темные квадраты — результаты эксперимента

тверждает адекватность математических моделей, примененных при моделировании вращающихся магнитных полей.

В заключение данного раздела можно сделать вывод, что разработанные модули VITESS могут использоваться не только с аналитически вычисленными, но также и с рассчитанными или экспериментально измеренными магнитными полями, а также позволяют получить на выходе результат, хорошо согласующийся с экспериментом. Это особенно важно для моделирования реальных установок, в которых применяются поляризованные нейтроны, так как устройства для проводки, поляризации и анализа параметров нейтронного пучка вносят существенные отклонения от идеальной ситуации.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Благодаря многолетнему сотрудничеству ЛНФ ОИЯИ с Исследовательским центром Юлиха был внесен определяющий вклад в развитие программного пакета VITESS, позволяющего моделирование практически любых сложных нейтронных инструментов, использующих поляризованные нейтронные пучки. Были успешно промоделированы классические спин-эхо-спектрометры, спектрометры резонансного спинового эха, дифрактометры малоуглового спинового эха, спин-эхо-установка с адиабатическими градиентными флипперами и т. п.

Важной особенностью VITESS является возможность использования реальных магнитных полей (как стационарных, так и зависящих от времени), рассчитанных внешней программой.

В VITESS также встроены и успешно используются универсальные модули для моделирования многоканальных нейтронно-оптических устройств, нейтронных линз, призм и оптических систем на основе этих элементов, а также алгоритмы, позволяющие учитывать эффект гравитации, что особенно актуально для использующих холодные нейтроны длинных инструментов, планируемых к реализации на европейском импульсном источнике нейтронов ESS [28]. Следующей задачей является моделирование полного эксперимента по рассеянию нейтронов с учетом закона рассеяния от исследуемого образца. Разработанный программный пакет может служить хорошей основой для решения таких задач.

Авторы выражают благодарность разработчикам VITESS (F. Mezei, G. Zsigmond, D. Wechsler, F. Streffer, M. Fromme, K. Lieutenant) из Исследовательского центра Гельмгольца в Берлине, В. И. Боднарчуку (ЛНФ ОИЯИ) за ценные обсуждения и тестирование VITESS, Р. Эрхану и А. Б. Рубцову (ЛНФ ОИЯИ) за помощь в создании новых модулей VITESS, работающих с программой MagNet.

Работа была выполнена при финансовой поддержке программы сотрудничества в рамках соглашения между Федеральным министерством образования и науки Германии (BMBWF) и ОИЯИ за 2012–2015 гг., Европейского союза (номера контрактов RII3-CT-2003-505925 и CP-CSA-INFRA-2008-1.1.1/Number 226507-NMI3) и грантов полномочного представителя правительства Румынии в ОИЯИ за 2011–2015 гг.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Wechsler D. et al. VITESS: Virtual Instrumentation Tool for Pulsed and Continuous Sources // *Neutron News*. 2000. V. 11, No. 4. P. 25–28.
2. Lefmann K. et al. (*McStas Collab.*). Virtual Experiments: the Ultimate Aim of Neutron Ray-tracing Simulations // *J. Neutron Res.* 2008. V. 16. P. 97.
3. Seeger P. A. et al. A Model Instrument for Monte Carlo Code Comparisons // *Neutron News*. 2002. V. 13, No. 4. P. 24–29.
4. Šaroun J., Kulda J. RESTRAX — a Program for TAS Resolution Calculation and for Scan Profile Simulations // *Physica B*. 1997. V. 234–236. P. 1102–1104.
5. Belushkin A. V., Manoshin S. A. Monte Carlo Optimisation of SANS Spectrometer at IBR-2 Reactor // *J. Phys. Soc. Japan*. 2001. V. 70. P. 451–452.
6. Belushkin A. V., Manoshin S. A. Simulations of Virtual SANS Spectrometers at IBR-2 Reactor // *J. Neutron Res.* 2002. V. 10. P. 79–91.
7. Manoshin S. A. et al. Simulations of a Convergent Bender as Neutron Polariser for NSE Spectrometers // *Physica B: Condens. Matter*. 2003. V. 335, No. 1–4. P. 270–273.
8. Manoshin S. A., Belushkin A. V., Ioffe A. I. VITESS Polarized Neutron Suite: Allows for the Simulation of Performance of Any Existing Polarized Neutron Scattering Instrument // *Physica B: Condens. Matter*. 2011. V. 406, No. 12. P. 2337–2341.

9. *Manoshin S. A. et al.* Optimization of a Moderator-Neutron Guide System for Diffractometers of Beam Line 7a of the IBR-2M Reactor // Nucl. Instr. Meth. A. 2009. V. 608, No. 3. P. 447—453.
10. *Эренфест П.* Замечание о приближенной справедливости классической механики в рамках квантовой механики // Относительность. Кванты. Статистика: Сб. ст. М., 1972. С. 82–84.
11. *Gerlach W., Stern O.* Der Experimentelle Nachweis der Richtungsquantelung im Magnetfeld // Z. Phys. 1922. Bd. 9. S. 349–352.
12. <http://www.ansys.com/>
13. <http://www.infolytica.com/en/products/magnet/>
14. *Ioffe A. I., Manoshin S. A.* Larmor Labeling by Thin Spin Flippers with Rotating Magnetic Field: Simulations of Performance of Neutron Scattering Instruments // Nucl. Instr. Meth. A. 2004. V. 529. P. 45–49.
15. Neutron Spin Echo / Ed. F. Mezei // Lecture Notes Phys. V. 128. Berlin: Springer, 1980.
16. *Драбкин Г. М.* Анализ энергетического спектра поляризованных нейтронов с помощью магнитного поля // ЖЭТФ. 1962. Т. 43. С. 1107–1108.
17. *Agatalyan M. M., Drabkin G. M., Sbitnev V. I.* Spatial Spin Resonance of Polarized Neutrons. A Tunable Slow Neutron Filter // Phys. Rep. 1988. V. 168, No. 5. P. 265–303.
18. *Manoshin S. A.* New Software Tools for Simulations of New Instruments for the Future Neutron Sources. Ph. D. Thesis. Berlin: TU-Berlin, 2005.
19. *Vazhenov A. N. et al.* An Adiabatic Resonance Spin-Flipper for Thermal and Cold Neutrons // Nucl. Instr. Meth. A. 1993. V. 332. P. 534–536.
20. *Grigoriev S. V., Okorokov A. I., Runov V. V.* Peculiarities of the Construction and Application of a Broadband Adiabatic Flipper of Cold Neutrons // Nucl. Instr. Meth. A. 1997. V. 384, No. 23. P. 451–456.
21. *Mezei F.* Neutron Spin-Echo — New Concept in Polarized Thermal-Neutron Techniques // Z. Phys. 1972. V. 255. P. 146.
22. *Golub R., Gaehler R.* A Neutron Resonance Spin Echo Spectrometer for Quasi-Elastic and Inelastic Scattering // Phys. Lett. A. 1987. V. 123, No. 1. P. 43–48.
23. *Ioffe A. I.* Wide Angle High-Resolution Spectroscopy at Pulsed Neutron Sources // Physica B. 2003. V. 335. P. 169–173.
24. *Felcher G. P. et al.* Spin-Echo Resolved Grazing Incidence Scattering (SERGIS) of Cold Neutrons // Proc. of SPIE Optical Engin. Press. 2002. V. 4785. P. 164–174.
25. *Rekveldt M. Th. et al.* Spin-Echo Small Angle Neutron Scattering in Delft // Rev. Sci. Instr. 2005. V. 76, No. 3. P. 033901.
26. *Manoshin S. A. et al.* Extension of the VITESS Polarized Neutron Suite towards the Use of Imported Magnetic Field Distributions // J. Neutron Res. 2014. V. 17. P. 19–26.
27. *Рубцов А. Б. и др.* Оценка влияния рассеянных магнитных полей на поляризацию пучка тепловых нейтронов при прохождении системы электромагнит – камера нулевого поля методом Монте-Карло // Поверхность: Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исслед. 2013. Т. 12. С. 5–9.
28. <http://europeanspallationsource.se>