

ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДОВ МОНТЕ-КАРЛО И ВАРИАЦИОННЫХ МЕТОДОВ ДЛЯ ОПТИМИЗАЦИИ ХАРАКТЕРИСТИК ВРЕМЯПРОЛЕТНЫХ НЕЙТРОННЫХ ДИФРАКТОМЕТРОВ

А. А. Хрущинский^а, С. А. Кутень^а, К. А. Веренич^а, Ф. А. Сперанский^{б,1}

^а Институт ядерных проблем БГУ, Минск

^б Департамент по ядерной и радиационной безопасности
Министерства по чрезвычайным ситуациям, Минск

Предложена процедура оптимальной аппроксимации поверхности детектора времяпролетного нейтронного дифрактометра методами вариационного исчисления. Получено точное решение для точечной мишени и детектора нулевой толщины. С использованием полученной формы поверхности детектора проведена оптимизация методами Монте-Карло параметров спектрометра, зависящих от размеров мишени и толщины детектора, его азимутального и брэгговского угловых размеров, с учетом поглощения нейтронов в мишени и детекторе.

Based on variational calculus, the procedure of the optimal approximation of the detector surface of a time-of-flight neutron diffractometer has been suggested. The exact solution for a point target and zero thickness detector has been derived. Using this shape of the detector surface, the optimized Monte-Carlo simulations have been performed for parameters of the spectrometer dependent on the target size and the detector thickness, its azimuth and Bragg angular dimensions, taking into account the absorption of neutrons in both target and detector.

PACS: 29.40.Wk

ВВЕДЕНИЕ

Особенности взаимодействия тепловых и холодных нейтронов с веществом, в частности, их большая проникающая способность и длина волны, соответствующая характерным межатомным расстояниям, обусловили широкое распространение нейтронной дифрактометрии как метода исследования физики конденсированного состояния [1]. Нейтронная дифрактометрия приобрела особенно сильные стимулы для своего развития после разработки обратного времяпролетного фурье-метода [2, 3] и создания финскими и советскими специалистами так называемых фурье-дифрактометров [3–5].

¹E-mail: PhilSA2.71@gmail.com

Важнейшими характеристиками любого времяпролетного нейтронного спектрометра, в том числе фурье-дифрактометра, являются его разрешение и светосила. Одним из методов увеличения светосилы является метод временной фокусировки на детекторе. Увеличение светосилы детектора при сохранении временного разрешения спектрометра оказывается возможным благодаря использованию кинематических условий при дифракции нейтронов в мишени. Рассеяние на мишени происходит по закону Вульфа–Брэгга, и угол рассеяния θ однозначно связан с длиной волны нейтрона λ . Поскольку $\lambda \sim \sin(\theta/2)$ и скорости нейтронов по выходе из мишени распределены по закону $v \sim 1/\sin(\theta/2)$, 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 L нейтрона от прерывателя до детектора изменяется по закону $L \sim 1/\sin(\theta/2)$ (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 располагаться чувствительная поверхность детектора. Описанный выше метод временной фокусировки [6, 7] впервые реализован в Дубне на реакторе ИБР [8]. В экспериментах с поликристаллами этот метод позволяет существенно (примерно в пять раз) увеличить светосилу дифрактометра без заметного ухудшения разрешающей способности [1].

Параметры нейтронного времяпролетного спектрометра, в том или ином виде используемого в нейтронной дифрактометрии, зависят от множества факторов, которые определяются процессами взаимодействия нейтронов с различными средами по пути следования нейтронного импульса от источника до детектора.

Как известно, разрешающая способность порошкового времяпролетного дифрактометра имеет две составляющие, условно называемые «временная» и «геометрическая» [1]. Первая из них обусловлена возможными отклонениями во времени пролета, основная ее часть определяется шириной импульса тепловых нейтронов после прохождения прерывателя. Вторая, включающая угловые неопределенности процесса рассеяния, связанные с отклонениями в угле рассеяния, с размером мишени, толщиной детектора, расходимостью пучка и др., является предметом рассмотрения в данной статье. Следует, однако, отметить, что при Монте-Карло-моделировании времяпролетного дифрактометра различие между этими двумя составляющими стирается: в модель можно включить временную составляющую, обусловленную разбросом времен старта нейтронов с прерывателя.

Неопределенность множества факторов, влияющих на разрешение, с одной стороны, и отсутствие систематического метода, позволяющего теоретически оценивать характеристики времяпролетного спектрометра, с другой стороны, неявно обусловили применение Монте-Карло-моделирования при расчете характеристик как единственного метода, позволяющего достаточно точно учесть основную физику явлений при весьма сложной геометрии. Оптимизация характеристик при этом сводится к расчету различных вариантов геометрии, требующему значительных затрат машинного времени, и в целом малоэффективна.

Наряду с этим задача оптимизации характеристик времяпролетного спектрометра может быть поставлена на строгую математическую основу с использованием методов вариационного исчисления [9]. Мишень можно рассматривать как объемный источник

частиц, угловое и энергетическое распределение которых полностью соответствует законам дифракции. В сущности это задача о распространении нейтрона как классической частицы из одной точки пространства (образец) в другую (детектор) за заданное время. В этом смысле она близка к классическим задачам вариационного исчисления — задаче о брахистохроне или задаче о распространении света в геометрической оптике в соответствии с принципом Ферма. По этой причине задачу оптимизации характеристик времяпролетного спектрометра можно решать методами вариационного исчисления.

Ниже на примере дифрактометра на основе детекторов обратного рассеяния (ИБР-2, ОИЯИ) описаны методы оптимизации формы поверхности детекторов, наилучшим образом приближающих поверхность временной фокусировки, и расчета его характеристик. Излагаемая методология вместе с Монте-Карло-моделированием может быть использована при проектировании фурье-дифрактометров высокого разрешения с улучшенными характеристиками.

ПРИНЦИП РАБОТЫ ВРЕМЯПРОЛЕТНОГО СПЕКТРОМЕТРА

Быстрые нейтроны из реактора ИБР-2 термализуются на водяном замедлителе. Тепловые нейтроны захватываются зеркальным нейтроноводом и транспортируются в экспериментальный зал. Поток тепловых нейтронов модулируется прерывателем. Момент времени, соответствующий открытому состоянию прерывателя, считается началом отсчета времени пролета нейтронов. Далее поток нейтронов транспортируется к исследуемой мишени, нейтроны рассеиваются на мишени по закону Брэгга и, в конце концов, после рассеяния в воздухе и деталях конструкции детектора регистрируются детектором.

Детектор обратного рассеяния с большой апертурой для дифрактометров высокого и сверхвысокого разрешения предназначен для углов рассеяния $\theta \geq 130^\circ$. Один из вариантов фурье-дифрактометра высокого разрешения (ФДВР) был предложен в [10], другой вариант детектора большой апертуры, предложенный Е. А. Кузьминым [11] и обсуждаемый ниже, показан на рис. 1. Детектор имеет кольцевую структуру, отражающую осевую симметрию рассеяния нейтронов на мишени. Он содержит семь кольцевых сборок (колец) из сцинтилляционных экранов. Каждое кольцо состоит из так называемых экранов. Экран — это пластинка гибкого пластика (полиметилметакрилат) толщиной 0,42 мм с однородно распределенным в нем атомами Li^6 и кристаллами ZnS . Нейтроны взаимодействуют с атомами Li^6 по реакции $n(\text{Li}^6, \text{He}^4)\text{H}^3$. Образовавшиеся две тяжелые энергичные заряженные частицы, взаи-

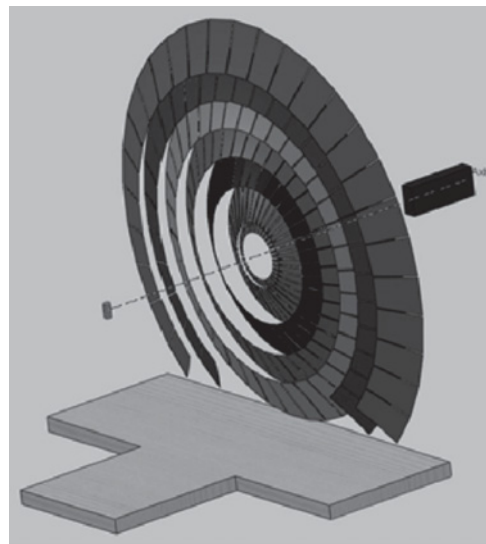


Рис. 1. Расположение чувствительных слоев в детекторе. На переднем плане условно изображена мишень. На заднем плане — оконечный участок нейтроновода [11]

модействуя с кристаллами ZnS, вызывают сцинтилляции, которые регистрируются ФЭУ. В любом варианте каждый экран является какой-то поверхностью, аппроксимирующей ПВФ.

Каждое кольцо детектора аппроксимирует свою ПВФ. Задачей оптимизации является выбрать количество колец, количество лепестков на них и форму лепестков так, чтобы среднее время регистрации нейтронов лепестком не отличалось от значения времени на аппроксимируемой ПВФ, а дисперсия времен прихода была минимальной.

В данной работе в задаче оптимизации времяпролетного дифрактометра мы используем два подхода.

1. С помощью методов вариационного исчисления разрабатывается оптимальная аппроксимация ПВФ поверхностями из заданного класса поверхностей, технологически реализуемых. Эта задача решается для идеальных условий — точечная мишень и детектор нулевой толщины.

2. С помощью моделирования методом Монте-Карло при выбранной оптимально аппроксимации ПВФ исследуется зависимость разрешения и светосилы дифрактометра от таких параметров, как:

- размеры мишени;
- конечная толщина детектора;
- поглощение нейтронов в детекторе;
- поглощение нейтронов в мишени;
- энергетический спектр;
- конечная временная ширина нейтронного импульса от прерывателя.

Следует отметить: несмотря на то, что метод временной фокусировки развивается уже свыше 30 лет, до сих пор нет общего математического подхода для решения задачи о минимизации временного разрешения времяпролетного спектрометра, позволяющего теоретически рассчитывать характеристики времяпролетного спектрометра. В частности, нет единого подхода к задаче о выборе конкретной формы реальной поверхности детектора. Реализованные к настоящему времени фурье-дифрактометры используют конечную аппроксимацию ПВФ, т. е. реальная поверхность детектора представляет собой набор из нескольких кусков (большая часть просто один кусок) конусной поверхности. При этом считается, что простая минимизация среднеквадратичных отклонений этих элементов от поверхности временной фокусировки методом взвешенных наименьших квадратов (детально описан в [12]) способна обеспечить минимум разрешения спектрометра. С точки зрения вариационных методов применяемая для расчета времяпролетных дифрактометров методология [12] способна обеспечить отсутствие сдвига первого момента функции распределения времен пролета нейтронов, но при этом второй момент остается неминимизованным.

Оптимизация нейтронных детекторных систем по параметрам энергетического и геометрического разрешения, а также по ориентационной зависимости их чувствительности требует детального моделирования процессов взаимодействия нейтронов различных энергий с мишенью, детектирующими элементами отдельных детекторов и их конструктивными материалами.

Во времяпролетной спектрометрии спектр времен пролета нейтронов от прерывателя до детектора несет в себе необходимую физическую информацию. Характер спектра (расположение и интенсивность отдельных пиков) определяется кристаллической структурой мишени, которая может быть восстановлена по измеренному спектру.

ВАРИАЦИОННЫЙ МЕТОД ОПТИМИЗАЦИИ

В идеальном случае поверхность детектора должна быть расположена на ПВФ. Все нейтроны, стартующие с линии прерывателя в момент времени $t = 0$, приходят на ПВФ одновременно. По этой причине для идеального случая среднее отклонение времени прилета нейтронов на детектор равно нулю. Это же справедливо и для дисперсии времени прилета на детектор. Наличие мишени конечных размеров и отклонения поверхности детектора от ПВФ приведут в общем случае не только к изменению среднего времени прихода нейтронов на детектор (смещение первого момента), но и к ненулевой дисперсии их времен прихода (уширение функции отклика). Указанные параметры зависят от множества факторов, перечисленных выше. К ним можно добавить:

— угловую и пространственную расходимость падающего на мишень нейтронного пучка;

— неизотропность углового распределения нейтронов при дифракции на мишени.

Ниже совокупность всех факторов, влияющих на характеристики спектрометра, обозначена символом « Γ ».

Задачу оптимизации можно сформулировать следующим образом: найти такую поверхность экрана на данном кольце, которая бы удовлетворяла двум требованиям:

— она обращает в нуль первый момент случайной величины $t - t_0$ (t_0 — время прилета нейтрона на идеальную ПВФ) при усреднении по всем факторам, определяющим распределение времен пролета;

— на ней достигается минимум второго момента случайной величины $t - t_0$.

Математически эти условия можно записать в виде

$$J_2 = \min, \quad J_1 = 0, \quad (1)$$

где функционалы J_1, J_2 являются первым и вторым моментами функции распределения нейтронов по временам пролета:

$$\begin{aligned} J_1 &= \int f(\Gamma, t)(t - t_0) d\Gamma dt = \langle (t - t_0) \rangle, \\ J_2 &= \int f(\Gamma, t)(t - t_0)^2 d\Gamma dt = \langle (t - t_0)^2 \rangle, \end{aligned} \quad (2)$$

здесь функция $f(\Gamma, t)$ описывает распределение времен прихода нейтронов на экран. Символ « d » включает в себя усреднение по всем вышеперечисленным факторам и, в частности, интегрирование по поверхности экрана.

Нахождение функций, на которых достигается этот минимум, осуществляется с помощью метода множителя Лагранжа, т. е. ищется минимум функционала

$$F = J_2 + \lambda J_1. \quad (3)$$

Решение получающихся дифференциальных уравнений Эйлера–Лагранжа для этого функционала совместно с уравнением связи $J_1 = 0$ позволяет однозначно определить как саму функцию, на которой достигается минимум, так и множитель Лагранжа λ , причем условие $J_1 = 0$ будет выполнено автоматически.

Более детально вся процедура, связанная с выводом и решением уравнений Эйлера–Лагранжа для нахождения оптимальной формы поверхности детектора в реальной ситуации, изложена в [13]. Там же приведен явный вид линейного и квадратичного функционалов, отвечающих соответственно за сдвиг линии и ее ширину, с учетом упомянутых выше физических факторов, влияющих на характеристики нейтронного времяпролетного спектрометра.

ДЕТЕКТОРЫ НА ПВФ

Проиллюстрируем постановку и решение задачи о нахождении формы идеальной ПВФ (точечная мишень, детектор нулевой толщины), используя методы вариационного исчисления. В идеальном случае поверхность детектора должна быть расположена на поверхности временной фокусировки. Все нейтроны, стартующие с линии прерывателя в момент времени $t = 0$, приходят на ПВФ одновременно при $t = t_0$.

Будем использовать правостороннюю систему координат, в которой ось Z вертикальна, ось Y соответствует направлению нейтронного пучка. Полярный угол θ отсчитывается от направления пучка, азимутальный угол φ — от плоскости $Z = 0$.

Рассмотрим время, в течение которого нейтрон проходит путь от прерывателя до некоторой точки детектора. В простейшем случае путь состоит из пути a_0 от прерывателя до мишени (начало координат) и пути $r(\theta)$ от мишени до детектора. Функция распределения времен прихода в этом случае имеет вид

$$f(\Gamma, t) = \delta \left(\frac{a_0 + r(\theta)}{v(\theta)} - t \right), \quad (4)$$

где δ — дельта-функция Дирака; $v(\theta)$ — скорость нейтрона.

Если искать аксиально-симметричное решение, не зависящее от φ , то указанный функционал с точностью до константы может быть представлен в виде

$$F = \int_{\theta_{\min}}^{\theta_{\max}} \left(\frac{a_0 + r(\theta)}{v(\theta)} - t_0 \right)^2 \sin \theta \, d\theta + \lambda \int_{\theta_{\min}}^{\theta_{\max}} \left(\frac{a_0 + r(\theta)}{v(\theta)} - t_0 \right) \sin \theta \, d\theta, \quad (5)$$

где θ_{\min} , θ_{\max} — соответственно минимальный и максимальный полярные углы, под которыми виден детектор из начала координат.

Таким образом, решение вариационной задачи $\delta F = 0$ сводится к уравнению

$$\frac{a_0 + r(\theta)}{v(\theta)} - t_0 + \frac{\lambda}{2} = 0, \quad (6)$$

причем вариационный параметр λ в соответствии с условием (1) равен нулю ($\lambda = 0$). Тогда константа t_0 имеет смысл времени пролета от прерывателя до идеальной ПВФ для нейтронов, обладающих скоростью $v(\theta)$:

$$t_0 = \frac{a_0 + r(\theta)}{v(\theta)}. \quad (7)$$

Задавая произвольную точку θ_0 , через которую проходит ПВФ, из (6), (7) находим уравнение для кривой временной фокусировки в общем виде при произвольном законе рассеяния $v(\theta)$:

$$r(\theta) = \frac{v(\theta)}{v(\theta_0)}(a_0 + r(\theta_0)) - a_0. \quad (8)$$

При дифракции нейтронов в точечной мишени из нее в направлении θ вылетают нейтроны с энергией E и скоростью $v(\theta)$ в соответствии с законом Брэгга:

$$E = \frac{E_0}{\sin^2(\theta/2)}, \quad (9)$$

$$v(\theta) = \frac{v_0}{\sin(\theta/2)}, \quad (10)$$

$$v_0 = \sqrt{\frac{2E_0}{m}}, \quad (11)$$

где E_0 — зависящая от типа решетки постоянная:

$$E_0 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m_n d_{\text{lattice}}^2}. \quad (12)$$

Здесь m_n — масса нейтрона; \hbar — постоянная Планка; d_{lattice} — расстояние между отражающими плоскостями кристалла. В случае кубических кристаллов, например, железа с объемно-центрированной решеткой, величина d_{lattice} связана с постоянной решетки d_0 соотношением

$$d_{\text{lattice}} = \frac{d_0}{\sqrt{h^2 + k^2 + l^2}}, \quad (13)$$

где h, k, l — индексы Миллера для исследуемого рефлекса.

Согласно (9), (10) для поверхности идеальной ПВФ будем иметь знакомое выражение

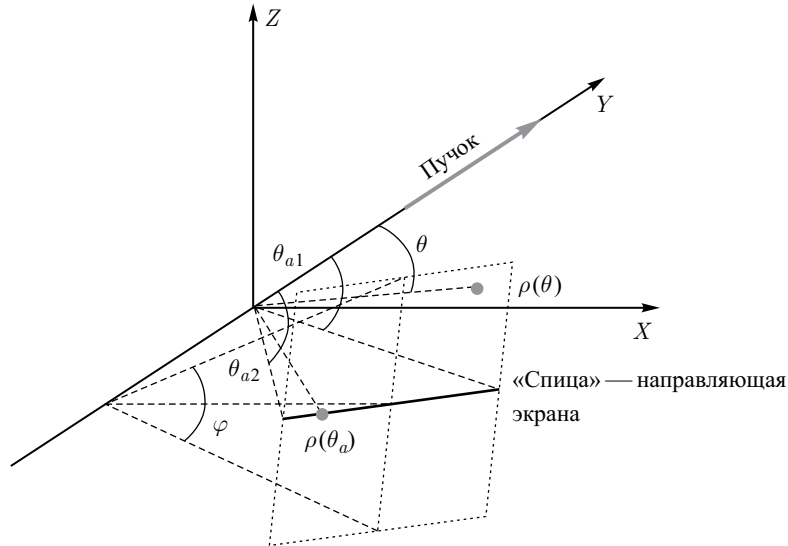
$$r(\theta) = \frac{c_0}{\sin(\theta/2)} - a_0, \quad (14)$$

где a_0 — пролетная база; константа c_0 , имеющая смысл полной пролетной базы для рассеяния назад $c_0 = a_0 + r(\pi)$, определяется соотношением

$$c_0 = v_0 t_0. \quad (15)$$

ЗОНТИЧНАЯ СТРУКТУРА ДЕТЕКТОРА

Ясно, что в силу аксиальной симметрии достаточно найти уравнение поверхности экрана для одного углового сектора; в качестве такого сектора был выбран сектор, пересекающий плоскость $z = 0$. Ограничимся только задачей оптимальной аппроксимации ПВФ набором цилиндрических экранов и найдем оптимальную форму «спицы». В случае точечной мишени функция распределения времен прихода нейтронов должна быть

Рис. 2. Центральный лепесток нулевого кольца (угловая координата центра лепестка $\varphi = 0$)

такой же, как и в приведенном выше идеальном случае. Условный функционал, который следует минимизировать, имеет вид

$$F = \iint \left(\frac{a_0 + r(\theta)}{v(\theta)} - t_0 \right)^2 ds + \lambda \iint \left(\frac{a_0 + r(\theta)}{v(\theta)} - t_0 \right) ds, \quad (16)$$

где ds — площадь элемента искомой поверхности (аппроксиманты).

Для удобства рассмотрим только тот лепесток одного из колец, который пересекается посередине плоскостью $z = 0$. Остальные лепестки получаются из него путем вращения вокруг направления пучка. Этот лепесток (рис. 2) представляет собою цилиндрическую поверхность, образующая которой параллельна оси Z , а направляющая (проекция спицы) находится на плоскости $z = 0$ и описывается функцией $\rho(\theta_a)$ (расстояние от начала координат до текущей точки на спице), где θ_a — угол между осью пучка (ось Y) и вектором ρ на плоскости $z = 0$.

Точка на лепестке может быть задана либо полярными координатами $(r(\theta, \varphi), \theta, \varphi)$, либо внутренними координатами поверхности $(\rho(\theta_a), z)$. Связь между этими двумя представлениями дается формулами

$$\begin{aligned} r &= \rho \frac{\cos(\theta_a)}{\cos(\theta)} = \rho \frac{1}{\sqrt{1 + \operatorname{tg}^2(\varphi) \sin^2(\theta_a)}}, & \operatorname{tg}(\theta) &= \frac{\operatorname{tg}(\theta_a)}{\cos(\varphi)}; \\ z &= r \sin(\theta) \sin(\varphi), & & \\ z &= \rho \frac{\cos(\theta_a)}{\cos(\theta)} \sin(\theta) \sin(\varphi) = \rho \cos(\theta_a) \operatorname{tg}(\theta_a) \operatorname{tg}(\varphi). \end{aligned} \quad (17)$$

Тогда площадь элемента поверхности лепестка есть

$$ds = \left| \frac{d\boldsymbol{\rho}}{d\theta_a} \right| d\theta_a dz = \rho \sqrt{\left(\frac{d\rho}{d\theta_a} \right)^2 + \rho^2} d\theta_a \sin(\theta_a) d(\operatorname{tg}(\varphi)). \quad (18)$$

Теперь плотность лагранжиана может быть представлена в виде интеграла:

$$L \left(\frac{d\rho}{d\theta_a}, \rho(\theta_a), \theta_a \right) = \int_{-\varphi_{\max}}^{\varphi_{\max}} \left(\frac{a_0 + r(\rho, \theta_a, \varphi)}{v(\theta_a, \varphi)} - t_0 \right)^2 ds + \\ + \lambda \int_{-\varphi_{\max}}^{\varphi_{\max}} \left(\frac{a_0 + r(\rho, \theta_a, \varphi)}{v(\theta_a, \varphi)} - t_0 \right) ds. \quad (19)$$

Соответствующее дифференциальное уравнение Эйлера–Лагранжа для спицы на плоскости $z = 0$

$$\frac{d}{d\theta_a} \frac{\partial L}{\partial \dot{\rho}} - \frac{\partial L}{\partial \rho} = 0 \quad (20)$$

в общем случае решается численно.

Решение уравнений Эйлера–Лагранжа (20) определяет форму поверхности детектора, обеспечивающую отсутствие сдвига первого момента функции распределения времен прилета и минимум ее второго момента (ширина линии), которые определяются с помощью соответствующего усреднения функционалов $J_1(\Gamma)$ и $J_2(\Gamma)$ по всем переменным, включая полярный угол спицы θ .

РЕШЕНИЕ УРАВНЕНИЯ ЭЙЛЕРА–ЛАГРАНЖА ДЛЯ ТОЧЕЧНОЙ МИШЕНИ И НУЛЕВОЙ ТОЛЩИНЫ ДЕТЕКТОРА

Для данной задачи для точечной мишени существует аналитическое решение, которое может быть получено в пренебрежении разбросом времен прилета нейтронов на детектор, обусловленным его конечной толщиной. В вариационном методе конечная толщина сцинтилляционного экрана может давать два разных по природе вклада в функционалы J_1 и J_2 . Один из них обусловлен процессами поглощения нейтронов в экране и вносит вклад в функции усреднения (фазовый элемент $d\Gamma$). Второй вклад, кинематический, вызван разным временем пролета в экране от его поверхности до момента поглощения. Однако одновременное присутствие обоих членов в плотности лагранжиана (19) требует дополнительного обоснования. По этой причине вклад детектора в ширину линии в вариационном подходе будет оценен ниже в простейшей аналитической модели.

В пренебрежении вкладом процессов поглощения в детекторе и кинематическим вкладом в функционал F для точечной мишени решение вариационной задачи, определяющее угловую зависимость радиуса-вектора спицы ρ от полярного угла на плоскости θ_a , будет иметь вид

$$\rho(\theta_a) = \frac{(\lambda/2)^* g(\theta_a) + g_1(\theta_a)}{g_2(\theta_a)}, \quad (21)$$

где множитель Лагранжа λ в соответствии с (1) определяется из условия отсутствия сдвига первого момента распределения времен прилета нейтронов на детектор:

$$\frac{\lambda}{2} = \frac{\int_{\theta_{a1}}^{\theta_{a2}} \left(p(\theta_a) - g(\theta_a) \frac{g_1(\theta_a)}{g_2(\theta_a)} \right) d\theta_a}{\int_{\theta_{a1}}^{\theta_{a2}} \frac{g^2(\theta_a)}{g_2(\theta_a)} d\theta_a}. \quad (22)$$

Фигурирующие в уравнениях (21), (22) функции $g(\theta_a)$, $p(\theta_a)$, $g_{1,2}(\theta_a)$ имеют следующий вид:

$$\begin{aligned} g(\theta_a) &= \sin(\theta_a) \int_{-\varphi/2}^{\varphi/2} \frac{\sin(\theta(\theta_a, \varphi')/2)}{\nu^2(\theta_a, \varphi') \cos^2(\varphi')} Q_L(\theta(\theta_a, \varphi')) d\varphi', \\ p(\theta_a) &= \sin(\theta_a) \int_{-\varphi/2}^{\varphi/2} \frac{c(\theta(\theta_a, \varphi'))}{\nu^3(\theta_a, \varphi') \cos^2(\varphi')} Q_L(\theta(\theta_a, \varphi')) d\varphi', \\ g_1(\theta_a) &= \sin(\theta_a) \int_{-\varphi/2}^{\varphi/2} c(\theta(\theta_a, \varphi')) \frac{\sin(\theta(\theta_a, \varphi')/2)}{\nu^2(\theta_a, \varphi') \cos^2(\varphi')} Q_L(\theta(\theta_a, \varphi')) d\varphi', \\ g_2(\theta_a) &= \sin(\theta_a) \int_{-\varphi/2}^{\varphi/2} \frac{\sin^2(\theta(\theta_a, \varphi')/2)}{\nu(\theta_a, \varphi') \cos^2(\varphi')} Q_L(\theta(\theta_a, \varphi')) d\varphi'. \end{aligned} \quad (23)$$

В (23) фактор Лоренца $Q_L(\theta)$ отражает неизотропность углового распределения нейтронов при дифракции на поликристаллической мишени. Для одного лепестка вследствие малости углового сектора по углу Брэгга u фактор Лоренца $Q_L(\theta)$ можно считать постоянной величиной. Множитель $\nu(\theta_a, \varphi)$ преобразует радиус на плоскости ρ в соответствующий ему радиус r в сферической системе координат:

$$\nu(\theta_a, \varphi) = \sqrt{1 + \sin^2(\theta_a) \operatorname{tg}^2(\varphi)}, \quad \rho(\theta_a) \nu(\theta_a, \varphi) = r. \quad (24)$$

Функция $c(\theta)$ определяется параметрами идеальной ПВФ:

$$c(\theta) = c_0 - a_0 \sin(\theta/2), \quad (25)$$

где c_0 выражается соотношением (15).

Решение (21), определяющее форму поверхности детектора, дает также возможность найти его длину.

Сдвиг центра линии t_1 определяется первым M_1 , а полная ширина линии на полувысоте FWHM — вторым моментом M_2 распределения времен прилета на детектор:

$$t_1 = t_0 + M_1, \quad \text{FWHM} = \sqrt{8 \ln 2} \sqrt{M_2}. \quad (26)$$

Численный множитель $\sqrt{8 \ln 2} \approx 2,35$ отражает связь между FWHM и дисперсией распределения времен прилета на детектор, если считать его гауссовым. Сами моменты распределения $M_{1,2}$ определяются выражениями

$$M_1 = \frac{\langle\langle q(\theta_a, \varphi)[c(\theta(\theta_a, \varphi)) - \nu(\theta_a, \varphi)\rho(\theta_a) \sin(\theta(\theta_a, \varphi)/2)] \rangle\rangle}{\langle\langle q(\theta_a, \varphi) \rangle\rangle},$$

$$M_2 = \frac{\langle\langle q(\theta_a, \varphi)c(\theta(\theta_a, \varphi)) \rangle\rangle - \int_{\theta_{a1}}^{\theta_{a2}} (2\rho(\theta_a)g_1(\theta_a) + \rho^2(\theta_a)g_2(\theta_a)) d\theta_a}{\langle\langle q(\theta_a, \varphi) \rangle\rangle}, \quad (27)$$

где символом $\langle\langle \dots \rangle\rangle$ обозначена операция двойного интегрирования по переменным θ_a, φ в пределах $\{\theta_{a1}, \theta_{a2}\}$ и $\{-\varphi/2, \varphi/2\}$ соответственно; функция q имеет вид

$$q(\theta_a, \varphi) = \frac{\sin(\theta_a)}{\nu^3(\theta_a, \varphi) \cos^2(\varphi)} Q_L(\theta(\theta_a, \varphi)). \quad (28)$$

Для численного решения вариационной задачи были взяты следующие исходные данные. Максимальный брэгговский угол спектрометра определяется экспериментальными условиями на мишени и для условий в ОИЯИ (ИБР-2) составляет $\theta_2 = 172,7^\circ$. Оптимальное значение меньшего угла $\theta_1 = \theta_2 - u$ для нулевого кольца, примыкающего к максимальному углу, можно выбрать из решения вариационной задачи. Величина u подлежит определению. Это решение должно обеспечить отсутствие сдвига первого момента (центр линии) и минимум ширины линии. Будем считать, что ПВФ, к которой будет приближаться искомая поверхность детектора (аппроксиманта ПВФ, или АПВФ), характеризуется параметрами $\theta_0 = 170^\circ$ и $r_0 = y_0 / \cos(\pi - \theta_0)$, где $y_0 = 125$ см.

Такая ПВФ описывается уравнением

$$r(\theta) = \frac{r_0 + a_0}{\sin(\theta/2)} \sin(\theta_0/2) - a_0, \quad (29)$$

где $a_0 = 2000$ см — пролетная база.

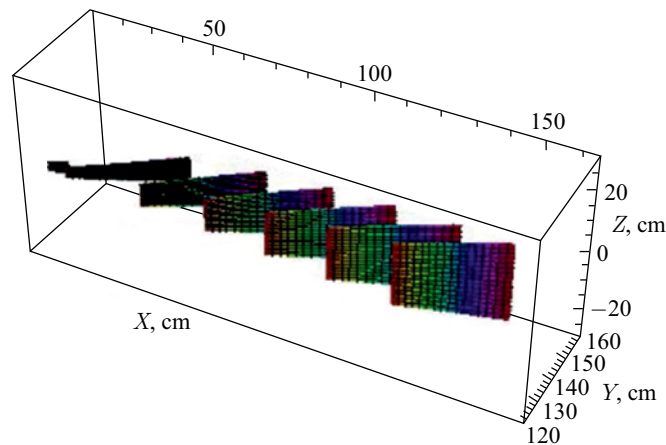
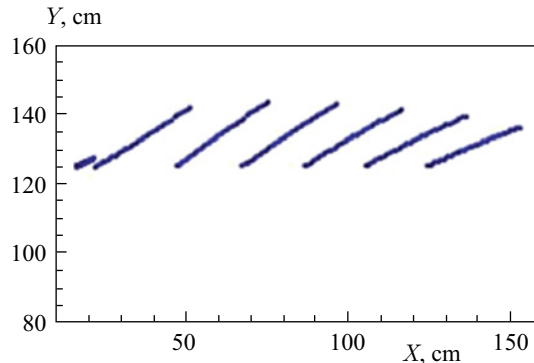


Рис. 3. Аппроксиманты ПВФ для углового сектора $(-5^\circ, 5^\circ)$

Рис. 4. Кривые пересечения ПВФ с плоскостью $z = 0$

В соответствии с (19) центр линии t_0 следует ожидать при значении

$$t_0 = \frac{a_0 + r(\pi)}{v_0} = \frac{c_0}{v_0}, \quad (30)$$

что для рефлекса Fe(211) составляет $t_0 = 12526,4$ мкс.

Для указанных параметров на рис. 3 приведены решения для спиц различных колец, а на рис. 4 — сами лепестки, расположенные в плоскости $z = 0$.

На этом этапе конструирование системы колец с оптимально подогнанными экранами-детекторами нулевой толщины, полученные путем натяжения на спицы, можно считать завершенным. При этом кольца спектрометра могут находиться на разных поверхностях временной фокусировки и их оптимальная конфигурация может определяться независимо друг от друга.

МОНТЕ-КАРЛО-МОДЕЛИРОВАНИЕ НЕЙТРОННОГО ДИФРАКТОМЕТРА С ВРЕМЕННОЙ ФОКУСИРОВКОЙ

Следующий шаг состоит в Монте-Карло-моделировании детектора с поверхностью, определенной вариационным методом. Моделирование производилось с помощью программы MCNP-4b [14].

Любой код Монте-Карло отслеживает чисто классические траектории частиц и не обладает возможностью решать дифракционные задачи. Поэтому источник нейтронов в коде Монте-Карло должен быть таким, чтобы имитировать брэгговскую дифракцию и особенности времяпролетного спектрометра.

Имитация брэгговского рассеяния осуществляется за счет того, что нейтрон всегда излучается под углом к направлению исходного пучка, равным углу Брэгга для данной энергии (см. формулу (9)). В плоскости (X, Z) это направление выбирается изотропно. Модель дифракции для моделирования по методу Монте-Карло, основанная только на кинематической связи (9), наиболее адекватна случаю дифракции на поликристаллической мишени. В этом случае нет необходимости учитывать эффекты первичной и вторичной экстинкции. По этой причине все нижеследующее относится только к поликристаллическим мишеням.

Для поликристаллических мишеней интенсивность рефлекса пропорциональна фактору повторяемости η [15, 16]. В табл. 1 приведены основные параметры рефлексов для Fe- и Si-мишеней, которые наблюдаются на стресс-дифрактометрах Фурье, а именно: индексы Миллера hkl , расстояние между отражающими плоскостями d_{lattice} (в ангстремах), фактор повторяемости η .

Таблица 1. Параметры рефлексов для мишеней из железа и кремния [16]

Fe			Si		
(hkl)	$d_{\text{lattice}}, \text{Å}$	η	(hkl)	$d_{\text{lattice}}, \text{Å}$	η
(110)	2,0268	12	(111)	5,0568	8
(200)	1,4332	6	(220)	3,09664	12
(211)	1,1702	24	(311)	2,64083	24
(220)	1,0134	12	(331)	2,00937	24
(310)	0,9064	24	(422)	1,78785	24
(321)	0,7661	48			

Для Fe- и Si-мишеней задаваемыми параметрами соответственно являются:

$$(hkl) = (211), \quad d_0 = 2,86633 \text{ Å};$$

$$(hkl) = (422), \quad d_0 = 5,4304 \text{ Å}.$$

Для Fe-мишени наиболее интенсивным является рефлекс (211) с фактором повторяемости $\eta = 24$, который в основном и исследовался в работе.

Чтобы определить временной характер процедуры розыгрыша начальных положений и скоростей (направлений вылета) нейтронов в мишени, необходимо представлять весь путь нейтронов от источника до детектора. Получаемые быстрые нейтроны термализуются на замедлителе и транспортируются в экспериментальный зал. Поток тепловых нейтронов модулируется прерывателем. Начало отсчета старта нейтронов задается прерывателем, а именно, момент времени, соответствующий открытому состоянию прерывателя, считается началом отсчета времени пролета нейтронов. Далее поток нейтронов транспортируется к исследуемой мишени, нейтроны рассеиваются на ней по закону Брэгга и, в конце концов, после рассеяния в воздухе и деталях конструкции детектора попадают в его рабочий объем. Функция отклика определялась как распределение вероятности моментов времени (n, α) -реакций с ${}^6\text{Li}$, входящим в состав вещества детектора. Тип реакции (n, α) фиксировался с помощью задания номера реакции R в коде MCNP. Момент реакции нейтрона с литием-6 в объеме детектора считается концом отсчета времени пролета.

Для имитации брэгговской дифракции и учета особенностей времяпролетного спектрометра с временной фокусировкой была разработана специальная программа Фортран (source.f), описывающая источник нейтронов для кода MCNP. Старт нейтронов начинается на однородно распределенном по мишени массиве точек. Каждый старт в MCNP характеризуется временем старта, которое устанавливается равным времени пролета нейтрона от прерывателя до упомянутой точки старта в мишени с учетом возможного разброса времени старта нейтронов с прерывателя. Далее к этому времени MCNP добавляет время пролета нейтрона от точки старта до точки, где он взаимодействует с ядром ${}^6\text{Li}$

в каком-либо экране. Это есть полное время пролета нейтрона. Кроме этого программа источника учитывает следующее:

- энергетическое распределение нейтронного пучка на интервале (E_{\min} , E_{\max}), который определяется размахом углов рассеяния на детектор (однородное или максвелловское распределение);
- распределение времен старта (однородное или гауссово распределение в интервале, определяемом частотой вращения прерывателя);
- поглощение нейтронного пучка в цилиндрической мишени на пути от точки пучка входа в мишень до точки старта.

Программа источника естественным образом учитывает все процессы взаимодействия нейтронов в мишени, на пути от мишени до детектора (воздух), в самом детекторе. Поглощение нейтронного пучка в цилиндрической мишени на пути от точки входа пучка в мишень до точки старта частицы учитывается путем изменения ее веса при Монте-Карло-моделировании (вес умножается на соответствующий фактор поглощения).

Для моделирования строится объемная модель спектрометра. Она включает объемную модель каждого лепестка в кольце, построенную по правилам, описанным ниже. Вначале для каждого радиального сектора (кольца) рассчитываются кривые пересечения аппроксиманты ПВФ с плоскостью $z = 0$ (основной аксиальный сектор) с использованием вышеупомянутых уравнений Эйлера–Лагранжа для функционала, находятся уравнения для спицы (в данном случае она расположена на плоскости $z = 0$). Они определяют проекцию передней поверхности лепестка. Проекция задней поверхности (задняя спица) определяется аналитически из уравнения передней спицы как линия, расположенная на расстоянии по нормали к передней, равном толщине экрана. Через эти две кривые (передняя и задняя спицы) проводятся цилиндрические поверхности с образующими, параллельными оси Z . Сверху и снизу эти цилиндры ограничены плоскостями $z = \pm \operatorname{tg}(\Delta\varphi/2)x$, спереди и сзади — также плоскостями, перпендикулярными к ПВФ на плоскости $z = 0$ и расположенными на расстоянии, определяемом θ_{\min} и θ_{\max} для каждого кольца. Полученный угловой сектор с семью лепестками, симметричный относительно плоскости $Z = 0$, является основным порождающим сектором для последующего Монте-Карло-моделирования всего детектора (см. рис. 3). Остальные угловые сектора детектора вращением вокруг направления пучка.

Система колец, построенных из отдельных лепестков, дополняется образцом (цилиндрический образец), произвольно ориентированным по отношению к направлению пучка (практическую ценность имеет только перпендикулярная ориентация). При необходимости могут быть учтены конструкционные элементы и технологические особенности (зазоры между элементами) дифрактометра.

Ниже будут приведены результаты Монте-Карло-моделирования только для нулевого кольца при перпендикулярной ориентации мишени относительно пучка.

ФОРМА И ШИРИНА ЛИНИИ ДЛЯ НУЛЕВОГО КОЛЬЦА

Оптимизация формы экрана позволяет утверждать, что ширина линии, связанная с несовпадением поверхности экрана и ПВФ, будет минимальна. Выше были перечислены факторы, которые вносят дополнительный вклад в форму и ширину линии. Мы ограничились только двумя наиболее важными факторами. Ниже приведены результаты исследо-

вания методом Монте-Карло влияния конечных размеров мишени с учетом поглощения нейтронов как в мишени, так и в детекторе.

Поскольку форма линии и ее ширина являются важнейшими элементами для идентификации спектров, представляет интерес рассмотреть их зависимость от перечисленных выше параметров. В качестве репера для сравнения выберем точечную мишень при отсутствии разброса времен старта в прерывателе. Исследование влияния разброса времен старта в прерывателе на форму линии физического интереса не представляет: линия уширяется, а ее ширина содержит соответствующий аддитивный вклад, обусловленный разбросом времен старта в прерывателе. На рис. 5 приведена форма линии (функция отклика, нормированная на один нейтрон в образце) как для точечной мишени, так и

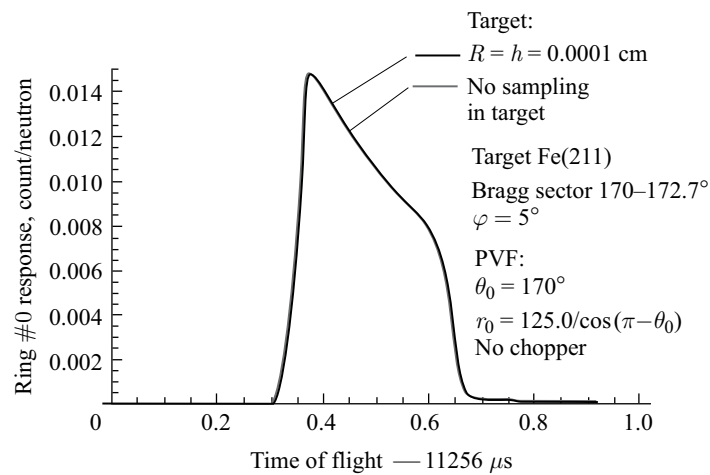


Рис. 5. Отклик нулевого кольца (брэгговский сектор 170,0–172,7°) при азимутальном размере одного лепестка $\varphi = 5^\circ$ для истинно точечной мишени Fe(211) (no sampling) и почти точечной мишени размером $R = h = 0,0001$ см

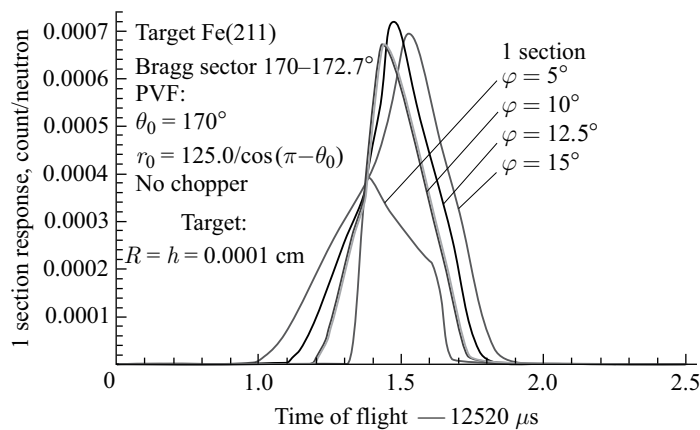


Рис. 6. Зависимость отклика лепестка нулевого кольца (брэгговский сектор 170,0–172,7°, угловое положение центра лепестка $\varphi = 0$) для точечной мишени от азимутальной ширины детектора

Таблица 2. Характеристики нулевого кольца и его одного лепестка (брэгговский сектор 170,0–172,7°; ПВФ: $\theta_0 = 170^\circ$, $r_0 = 126,9$)

Величина	Вариант исполнения	Азимутальный угловой размер, °			
		5	10	12,5	15
FWHM, мкс	1 лепесток	0,258	0,246	0,278	0,349
	Кольцо	0,260	0,247	0,279	0,349
Разрешение, %	1 лепесток	2,064e-3	1,965e-3	2,221e-3	2,79e-3
	Кольцо	2,077e-3	1,969e-3	2,222e-3	2,79e-3

для мишени конечных, но малых размеров ($R = h = 0,0001$ см) при азимутальном размере лепестка $\Delta\varphi = (-\varphi/2, \varphi/2) = 5^\circ$. Поскольку обе формы практически совпадают, в дальнейшем мы не будем делать различие между ними.

Зависимость формы линии одиночного сектора для точечной мишени от его азимутального размера, полученная с помощью кода MCNP, приведена на рис. 6. С увеличением азимутального размера происходит уширение линии. Суммарная интенсивность, или число регистрируемых нейтронов, выражаемая площадью под кривой, определяется объемом лепестка. Видно, что площадь под кривой $\varphi = 5^\circ$ примерно в два раза меньше площади под кривой $\varphi = 10^\circ$, что и следует ожидать, исходя из соотношения объемов.

В табл. 2 приведены ширины функций отклика для одного лепестка и всего нулевого кольца.

ВЛИЯНИЕ ТОЛЩИНЫ ДЕТЕКТОРА НА ФОРМУ ЛИНИИ ДЛЯ ТОЧЕЧНОЙ МИШЕНИ

Влияние толщины детектора на форму линии было исследовано путем увеличения и уменьшения толщины детектора в два раза по сравнению с номинальной величиной $t_{\text{det}} = 0,042$ см. Изменение формы линии при этом показано на рис. 7, а соответствующие

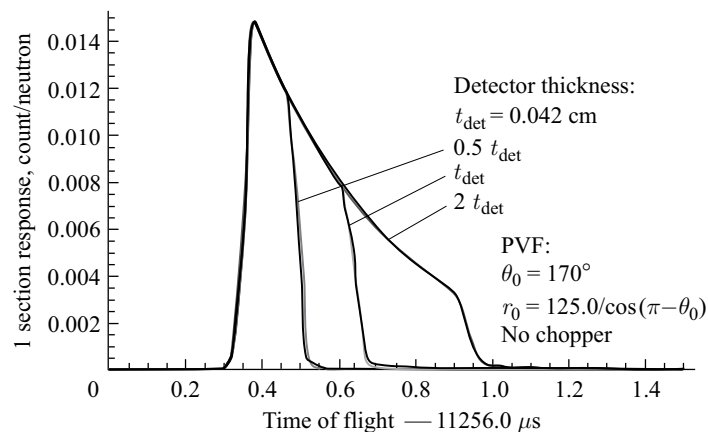


Рис. 7. Влияние толщины детектора на отклик нулевого кольца (брэгговский сектор 170,0–172,7°) при азимутальном размере одного лепестка $\varphi = 5^\circ$ для точечной мишени Fe(211) размером $R = h = 0,0001$ см

Таблица 3. Характеристики формы линии нулевого кольца для точечной мишени Fe(211) при изменении толщины детектора

Толщина детектора ($t_{\text{det}} = 0,042$ см)	FWHM, мкс	Разрешение, %
$0,5 t_{\text{det}}$	0,137436	0,0011
t_{det}	0,260056	0,0021
$2 t_{\text{det}}$	—	—

характеристики приведены в табл. 3 (представлены только для случая, когда форма линии близка к гауссовой).

Проведенные исследования с точечной мишенью показывают достаточно понятную картину образования формы линии и дают оценку ее характеристик.

Из рис. 7 следует, что используемая толщина экрана близка к оптимальной. Увеличение ее приводит к ухудшению разрешения (ширина линии увеличивается, и ее форма существенно отличается от гауссовой), а уменьшение — к потере светосилы.

ВЛИЯНИЕ РАЗМЕРОВ МИШЕНИ И УГЛОВОГО РАЗМЕРА СЕКТОРА НА ФОРМУ ЛИНИИ

Влияние размеров мишени на форму линии и ее характеристики изучено для нулевого кольца с угловым размером сектора $\varphi = 5^\circ$. Были исследованы мишени высотой 2 см и радиусом в интервале $R = 0,05–0,4$ см. Абсолютные отклики нулевого кольца приведены на рис. 8. С увеличением радиуса мишени линия уширяется и сдвигается влево, в сторону меньших времен пролета.

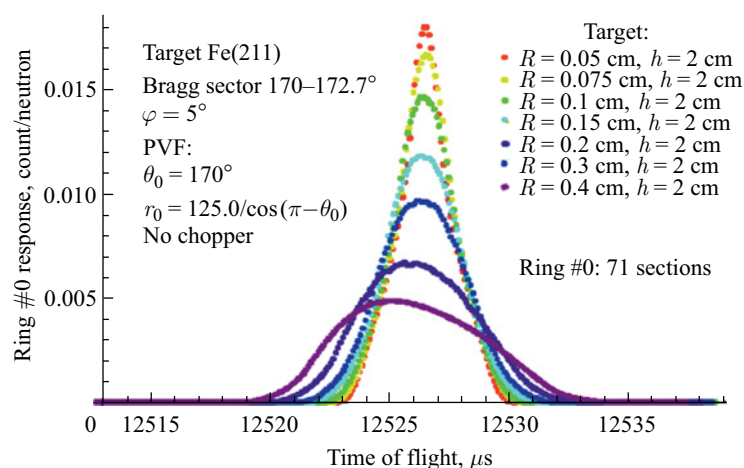


Рис. 8. Абсолютный отклик нулевого кольца (брэгговский сектор $170,0–172,7^\circ$; азимутальный размер одного лепестка $\varphi = 5^\circ$) для мишени Fe(211) высотой $h = 2$ см разных размеров

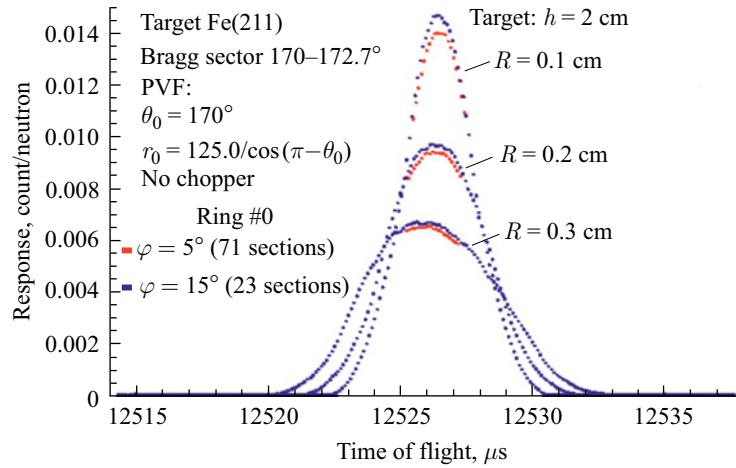


Рис. 9. Временной отклик нулевого кольца при угловых размерах его детектора 5 и 15° для различных размеров мишени

Влияние размеров мишени и углового размера сектора на форму линии рассматривалось для двух угловых размеров сектора — 5 и 15°. Абсолютные отклики нулевого кольца для трех типичных радиусов мишени 0,1, 0,2, 0,3 см (высота $h = 2$ см) приведены на рис. 9 для угловых размеров сектора 5 и 15° (соответственно 71 и 23 лепестка в кольце). Видно, что ширина линии практически не зависит от углового размера лепестка и определяется исключительно размером мишени.

В количественном отношении зависимость разрешения как кольца в целом, так и одного горизонтального сектора кольца от радиуса мишени ($h = 2$ см) при угловых размерах сектора 5 и 15° приведена на рис. 10.

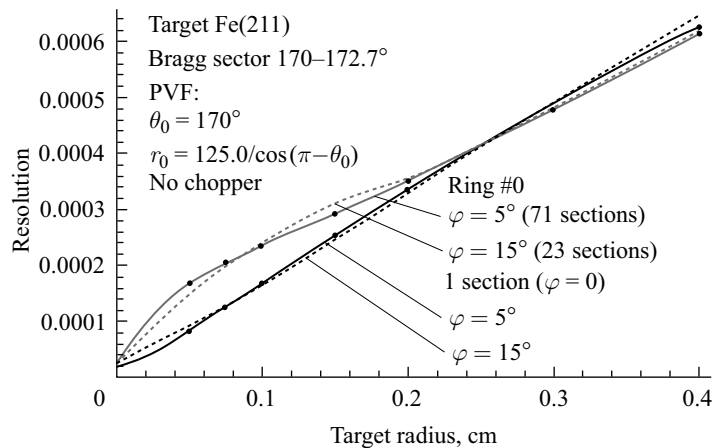


Рис. 10. Зависимость разрешения нулевого кольца и одного его лепестка ($\varphi = 0$) от радиуса мишени (высота $h = 2$ см) при угловых размерах детектора 5 и 15°

Небольшое различие при больших радиусах в величинах FWHM, ges для угловых размеров сектора 5 и 15°, а также в этих же величинах для кольца и отдельного сектора при фиксированном размере практически целиком обусловлено особенностями нахождения ширины линии для негауссовой формы.

Общие выводы, которые следуют из результатов моделирования методом Монте-Карло, состоят в следующем:

— ширина линии и разрешение для кольца в целом выше аналогичных величин для одного сектора вплоть до радиуса $R = 0,2$ см. В диапазоне $R = 0,2-0,3$ см характеристики нулевого кольца и его отдельного сектора неразличимы;

— характеристики нулевого кольца или его отдельного сектора слабо зависят от углового размера последнего в диапазоне 5–15°.

ОЦЕНКА ВКЛАДА КОНЕЧНОЙ ТОЛЩИНЫ ДЕТЕКТОРА В ШИРИНУ ЛИНИИ В ВАРИАЦИОННОМ МЕТОДЕ

Вклад детектора толщиной t_{det} в ширину линии обусловлен разбросом пробегов $l_d(\theta) = t_{\text{det}} / \cos \alpha$ для разных направлений θ (см. рис. 11, α — острый угол между нормалью к поверхности и направлением пучка). При заданном θ пробег $l_d(\theta)$ может быть разным в зависимости от того, в какой точке в детекторе в направлении θ поглотится нейтрон.

Вероятность, что нейтрон будет поглощен в точке, находящейся на расстоянии t от передней поверхности детектора по нормали, при входе в детектор под углом α , дается уравнением

$$dP = \frac{\mu}{\cos \alpha(\theta_a, \varphi)} \exp\left(-\frac{\mu}{\cos \alpha(\theta_a, \varphi)} t\right) dt, \quad (31)$$

где μ — линейный коэффициент поглощения нейтронов в материале детектора (для тепловых нейтронов $\mu \approx 9,21 \text{ см}^{-1}$).

Зависимость $\cos \alpha(\theta_a, \varphi)$ легко рассчитывается и может быть представлена в виде

$$\cos \alpha = \frac{(\dot{\rho}(\theta_a) \cos \theta_a - \rho(\theta_a) \sin \theta_a) \text{tg } \theta_a - (\dot{\rho}(\theta_a) \sin \theta_a + \rho(\theta_a) \cos \theta_a)}{\left(\sqrt{\frac{\text{tg}^2(\theta_a)}{\cos^2 \varphi} + 1}\right) \sqrt{(\dot{\rho})^2 + \rho^2}}. \quad (32)$$

Среднее время задержки регистрации нейтронов за счет конечной толщины детектора и средний квадрат времени могут быть получены путем интегрирования выражения $\frac{t / \cos \alpha(\theta_a, \varphi)}{v(\theta)}$ и квадрата от этого выражения с весом, определяемым формулой (31), по переменной t и путем усреднения по площади детектора. Воспользовавшись теоремой о среднем, можно дать оценку этих величин с помощью выражений

$$\begin{aligned} \langle \tau \rangle &= \int_0^{t_{\text{det}}} \frac{t / \langle \cos \alpha \rangle}{\langle v(\theta) \rangle} \frac{\mu}{\langle \cos \alpha \rangle} \exp\left(-\frac{\mu}{\langle \cos \alpha \rangle} t\right) dt, \\ \langle \tau^2 \rangle &= \int_0^{t_{\text{det}}} \left(\frac{t / \langle \cos \alpha \rangle}{\langle v(\theta) \rangle}\right)^2 \frac{\mu}{\langle \cos \alpha \rangle} \exp\left(-\frac{\mu}{\langle \cos \alpha \rangle} t\right) dt, \end{aligned} \quad (33)$$

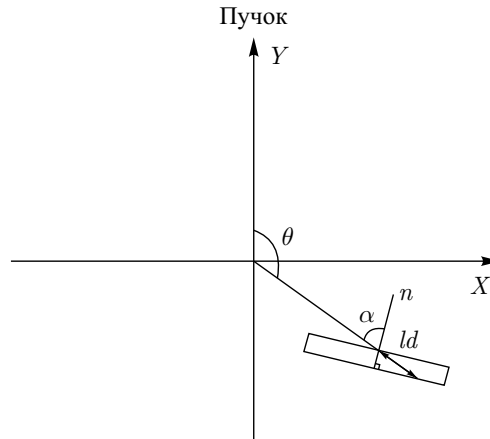


Рис. 11. Пробеги нейтронов в детекторе (n — нормаль к поверхности детектора, l_d — пробег нейтрона в детекторе в направлении θ)

где угловые скобки означают усреднение по площади детектора, $t_{\text{det}} = 0,42$ мм. После этого дисперсия времен задержки и вклад в ширину линии из-за конечной толщины детектора дается уравнением

$$\sigma^2 = \langle \tau^2 \rangle - \langle \tau \rangle^2. \quad (34)$$

Считая, что разброс времен задержки регистрации нейтронов эффективно приводит к гауссовому распределению времен пролета нейтрона в детекторе, можно ввести вклад детектора FWHM_{det} в полную ширину линии, связанный коэффициентом $\sqrt{8 \ln 2} \approx 2,35$ со средней дисперсией σ времен пролета нейтрона в детекторе:

$$\text{FWHM}_{\text{det}} = \frac{\sqrt{8 \ln 2}}{\mu v(\theta) G(x)}, \quad (35)$$

где функция $G(x)$ имеет вид

$$G(x) = \sqrt{1 - x^2 e^{-x} - (1 + x)^2 e^{-2x}}, \quad x = \frac{\mu t_{\text{det}}}{\langle \cos \alpha \rangle}.$$

Это выражение используется ниже для оценки вклада детектора в вариационную ширину линии отдельного сектора. Рассчитанные величины дополнительного уширения линии приведены в таблице в следующем разделе.

СРАВНЕНИЕ ХАРАКТЕРИСТИК, ПОЛУЧЕННЫХ ВАРИАЦИОННЫМ МЕТОДОМ И МЕТОДОМ МОНТЕ-КАРЛО ДЛЯ ОТДЕЛЬНОГО СЕКТОРА НУЛЕВОГО КОЛЬЦА И ТОЧЕЧНОЙ МИШЕНИ

Сравнение ширин линий, полученных методом Монте-Карло и вариационным методом для горизонтального сектора нулевого кольца (угловой размер 5°) для точечной

Таблица 4. Сравнение ширин линий, полученных методом Монте-Карло и вариационным методом для горизонтального сектора нулевого кольца (угловой размер 5°) для точечной мишени Fe(211) при разной брэгговской ширине сектора

Брэгговская ширина, $^\circ$	Вариационная ширина FWHM_{var} , мкс	Вклад детектора FWHM_{det} , мкс	Полный вклад $\text{FWHM}_{\text{var}} + \text{FWHM}_{\text{det}}$, мкс	Ширина линии (метод Монте-Карло), FWHM_{MC} , мкс	Длина детектора L , см
2,7	0,038	0,310	0,348	0,260	6,97
4,7	0,048	0,291	0,339	0,269	12,68
6,7	0,061	0,275	0,336	0,304	18,93
8,7	0,075	0,264	0,339	0,505	25,75
10,7	0,091	0,254	0,345	0,861	33,19
12,7	0,108	0,247	0,355	1,333	41,28

мишени Fe(211) при разной брэгговской ширине сектора, приведено в табл. 4. Все вычисления по методу Монте-Карло проведены для одного лепестка.

Следует отметить, что удовлетворительное соответствие результатов вариационного и Монте-Карло методов для ширины линии отдельного лепестка наблюдается для его брэгговской ширины вплоть до $6,7^\circ$. Следует при этом учитывать, что сама оценка вклада детектора в уширение линии носит условный характер (гауссов характер распределения). Этим можно объяснить слабое превышение полной вариационной оценки ширины линии над ее MCNP-значением для брэгговской ширины $u < 6,7^\circ$. Для области $u > 6,7^\circ$ сами MCNP-ширины не имеют однозначного толкования вследствие раздвоения линий (см. ниже рис. 12).

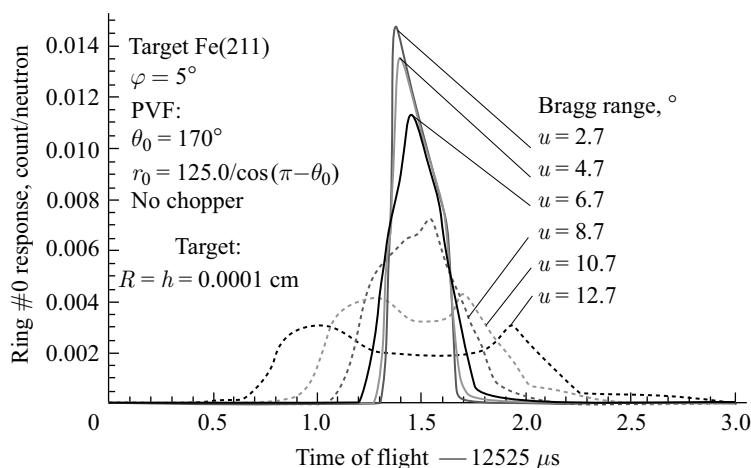


Рис. 12. Зависимость отклика нулевого кольца для точечной мишени ($R = h = 0,0001$ см) от полярной (брэгговской) ширины кольца при угловой ширине его сектора $\varphi = 5^\circ$

ВЛИЯНИЕ БРЭГГОВСКОЙ УГЛОВОЙ ШИРИНЫ СЕКТОРА НА ФОРМУ ЛИНИИ И ЕЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ

Влияние брэгговской угловой ширины сектора на форму линии и ее характеристики исследовалось при следующих условиях: точечная мишень Fe(211), угловой размер сектора 5° . Максимальный угол кольца зафиксирован и равен $172,7^\circ$. Размах кольца по полярному углу (брэгговская ширина) представлен рядом значений: 2,7; 4,7; 6,7; 8,7; 10,7; 12,7°. Поверхность временной фокусировки характеризовалась двумя параметрами: $\theta_0 = 170^\circ$, $r_0 = 126,9$.

Картина изменения отклика кольца в зависимости от его угловой брэгговской ширины для точечной мишени показана на рис. 12, а ширина линии и разрешение приведены в табл. 5. Для брэгговских угловых ширин $u > 6,7^\circ$ линия практически раздваивается, и, по-видимому, величина $6,7^\circ$ является предельной для брэгговской ширины нулевого кольца.

Таблица 5. Зависимость ширины линии и разрешения нулевого кольца ($\varphi = 5^\circ$) от брэгговской ширины (размах по полярному углу) для точечной мишени

Величина	Брэгговская ширина u , °					
	2,7	4,7	6,7	8,7	10,7	12,7
FWHM, мкс	0,260	0,269	0,304	0,505	0,861	1,333
Разрешение, %	$2,077 \cdot 10^{-3}$	$2,147 \cdot 10^{-3}$	$2,430 \cdot 10^{-3}$	$4,030 \cdot 10^{-3}$	$6,876 \cdot 10^{-3}$	$1,064 \cdot 10^{-2}$

Таблица 6. Зависимость ширины линии нулевого кольца (FWHM, мкс) от радиуса Fe(211)-мишени ($h = 2$ см) при разных брэгговской (u) и азимутальной (φ) ширинах его сектора

Радиус образца, см	Азимутальная ширина φ , °	Брэгговская ширина u , °					
		2,7	4,7	6,7	8,7	10,7	12,7
0,0001*		0,260	0,269	0,304	0,505	0,861	1,333
0,1	5	2,952	3,165	3,333	3,511	3,724	4,042
	15	3,031	3,287	3,508	3,706	3,985	4,315
	30	3,309	3,711	4,139	4,544	4,968	5,398
0,2	5	4,387	4,595	4,801	5,001	5,183	5,398
	15	4,425	4,642	4,817	5,044	5,249	5,514
	30	4,518	4,834	5,218	5,558	5,907	6,343
0,3	5	5,989	6,153	6,357	6,515	6,741	6,957
	15	5,995	6,162	6,374	6,588	6,777	6,961
	30	6,041	6,246	6,543	6,818	7,127	7,467
0,4	5	7,567	7,790	7,980	8,187	8,347	8,557
	15	7,630	7,896	8,089	8,211	8,401	8,640
	30	7,642	7,843	8,098	8,333	8,596	8,839

* Точечная мишень $R = h = 0,0001$ см.

Таблица 7. Зависимость разрешения нулевого кольца (%) от радиуса Fe(211)-мишени ($h = 2$ см) при разных брэгговской (u) и азимутальной (φ) ширинах его сектора

Радиус образца, см	Азимутальная ширина φ , °	Брэгговская ширина u , °					
		2,7	4,7	6,7	8,7	10,7	12,7
0,0001*		2,077e-3	2,147e-3	2,430e-3	4,030e-3	6,876e-3	1,064e-2
0,1	5	2,357e-2	2,527e-2	2,661e-2	2,803e-2	2,973e-2	3,227e-2
	15	2,419e-2	2,624e-2	2,800e-2	2,958e-2	3,182e-2	3,445e-2
	30	2,641e-2	2,962e-2	3,304e-2	3,628e-2	3,966e-2	4,309e-2
0,2	5	3,502e-2	3,668e-2	3,833e-2	3,992e-2	4,138e-2	4,309e-2
	15	3,533e-2	3,706e-2	3,845e-2	4,026e-2	4,190e-2	4,402e-2
	30	3,606e-2	3,859e-2	4,166e-2	4,437e-2	4,716e-2	5,064e-2
0,3	5	4,781e-2	4,912e-2	5,075e-2	5,201e-2	5,381e-2	5,554e-2
	15	4,786e-2	4,919e-2	5,088e-2	5,259e-2	5,410e-2	5,557e-2
	30	4,823e-2	4,987e-2	5,223e-2	5,443e-2	5,690e-2	5,961e-2
0,4	5	6,042e-2	6,220e-2	6,371e-2	6,536e-2	6,663e-2	6,832e-2
	15	6,092e-2	6,304e-2	6,458e-2	6,555e-2	6,707e-2	6,898e-2
	30	6,101e-2	6,261e-2	6,465e-2	6,653e-2	6,863e-2	7,056e-2

* Точечная мишень $R = h = 0,0001$ см.

Для полноты картины в табл.6 приведены зависимости ширины линии нулевого кольца от радиуса мишени ($h = 2$ см) при разных брэгговской (u) и азимутальной (φ) ширинах его сектора, в табл. 7 представлены результаты разрешения для тех же условий.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В результате исследования продемонстрировано, что, используя подход, включающий оптимизацию формы поверхности детектора вариационным методом, и моделирование методом Монте-Карло, можно существенно оптимизировать параметры времяпролетного дифрактометра и тем самым улучшить его разрешение и светосилу.

На первой стадии с помощью вариационного подхода решается задача оптимальной аппроксимации ПВФ поверхностями из некоторого семейства поверхностей, удобных для практической реализации. Оптимизация проводится на основе принципа равенства нулю первого момента отклонения времен прихода на детектор от времени прихода на ПВФ и минимума второго момента. С использованием метода лагранжевых множителей для поиска условного минимума выводятся дифференциальные уравнения Эйлера-Лагранжа, решение которых определяет оптимальную аппроксиманту поверхности детектора. Для точечной мишени и детектора нулевой толщины получено аналитическое решение.

На второй стадии производится учет отклонения других параметров (конечного размера образца, конечной толщины детектора, поглощения в мишени и детекторе, конечной длительности импульса нейтронного пучка после прерывателя и т. д.) от идеальных.

Эта часть задачи решается с помощью моделирования методом Монте-Карло. Путем отклонения по очереди того или иного параметра рассчитывается функция отклика, и по ее характеристикам корректируется конструкция дифрактометра.

Получены временные отклики, и исследованы ширина линии и разрешение как нулевого кольца спектрометра, так и отдельного его лепестка. Показано, что для точечной мишени и мишени малых размеров характеристики кольца (ширина линии, разрешение) не отличаются от характеристик его одного лепестка.

Методами Монте-Карло исследовано влияние толщины детектора на форму линии для точечной мишени. Разработана аналитическая оценка дополнительного вклада в вариационную ширину линии лепестка, обусловленного пролетом нейтрона внутри детектора и его поглощением на разной глубине в детекторе.

Показано, что основной вклад в ширину линии как нулевого кольца, так и отдельного его лепестка вносит конечный размер мишени. Исследованы зависимости ширины линии, разрешения нулевого кольца и его одного лепестка от размеров мишени, углового брэгговского и азимутального размеров одного лепестка.

Авторы благодарны Е. С. Кузьмину и А. М. Балагурову за постановку задачи, многочисленные обсуждения и полезные советы.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Аксенов В. Л., Балагуров А. М. Времяпролетная нейтронная дифрактометрия // УФН. 1996. Т. 166. С. 955–985.
2. Hiismaki P. // Proc. of Symp. on Neutron Inelastic Scattering, Grenoble, March 6–10, Vienna: IAEA, 1972. 803 p.
3. Poyry H., Hiismaki P., Virjo A. Principles of Reverse Neutron Time-of-Flight Spectrometry with Fourier Chopper Applications // Nucl. Instr. Meth. 1975. V. 126, No. 3. P. 421–433.
4. Трунов В. А. и др. Дифрактометр высокого разрешения «Мини-Сфинкс». Препринт ЛИЯФ № 1277. 1987.
5. Аксенов В. Л. и др. Нейтронный дифрактометр на реакторе ИБР-2. Сообщ. ОИЯИ РЗ-91-172. Дубна: ОИЯИ, 1991.
6. Carpenter J. M. Extended Detectors in Neutron Time-of-Flight Diffraction Experiments // Nucl. Instr. Meth. 1967. V. 47, No. 1. P. 179–180.
7. Holas A. // Nucleonika. 1968. V. 13, No. 8. P. 871.
8. Holas A. et al. JINR Commun. E14-3759. Dubna: JINR, 1968.
9. Гельфанд И. М., Фомин В. С. Вариационное исчисление. М., 1961. С. 228.
10. Balagurov A. M., Kudryashov V. A. Correlation Fourier Diffraction for Long-Pulse Neutron Sources: A New Concept // 19th Meeting on Collab. of Advanced Neutron Sources (ICANS-XIX), PSI, Grindelwald, Switzerland, March 8–12, 2010.
11. Кузьмин Е. С. Результаты расчета ФДВР. Дубна: ОИЯИ, 2012.
12. Kudryashev V. A. et al. Optimization of Detectors in Time-Focusing Geometry for RTOF Neutron Diffractometers // Nucl. Instr. Meth. B. 1994. V. 93. P. 355–361.
13. Кутень С. А., Хрущинский А. А. Отчет о НИР х/д 17/2003 «Оптимизация нейтронного детектора специализированного дифрактометра ДН-12». № 20034475. Минск: НИИ ядерн. проблем, 2003. С. 44.

14. *Briesmeister J. F.* MCNP — A General Monte Carlo N-Particle Transport. Version 4A, LA-12625. Los Alamos Nat. Lab. Los Alamos, New Mexico, 1993.
15. *Уинздор К.* Рассеяние нейтронов от импульсных источников. М.: Энергоатомиздат, 1985.
16. *Александров Ю. А., Шарапов Э. И., Чер Л.* Дифракционные методы в нейтронной физике. М.: Энергоиздат, 1981. 217 с.

Получено 20 декабря 2015 г.