

ИССЛЕДОВАНИЕ ХАРАКТЕРИСТИК ФУРЬЕ-ДИФРАКТОМЕТРА ВЫСОКОГО РАЗРЕШЕНИЯ МЕТОДОМ МОНТЕ-КАРЛО

К.А. Веренич, С. А. Кутень, А. А. Хрущинский

Научно-исследовательское учреждение «Институт ядерных проблем» Белорусского
Государственного университета

Реферат

Рассмотрено формирование сигнала детектора обратного рассеяния (ДОР) при рассеянии пучка тепловых нейтронов на цилиндрической мишени из железа. Создана компьютерная модель ДОР для Фурье-дифрактометра высокого разрешения (ФДВР). Проведена аппроксимация существующей формы сцинтилляторов поверхностями второго порядка. С использованием метода Монте-Карло проведено компьютерное моделирование временной зависимости сигнала в шести кольцах ДОР. Определены ширины линий и разрешения для каждого кольца. Исследованы зависимости этих величин от размеров мишени.

1. Введение

В предыдущей серии работ, посвященной созданию математических основ в задаче оптимизации характеристик времяпролетных нейтронных детекторов, нами был разработан вариационный подход для решения этой задачи [1-3]. Созданы математические методы, позволяющие аналитически определять форму чувствительной поверхности детектора, обеспечивающую наилучшие характеристики времяпролетного нейтронного спектрометра.

Детектор обратного рассеяния с большой апертурой для дифрактометров высокого и сверхвысокого разрешения предназначен для углов рассеяния $\theta=(133-170)^\circ$. Один из вариантов детектора большой апертуры, предложенный Кругловым В.В. [4], имеет конфигурацию «шесть основных колец». Детектор содержит 6 кольцевых сборок (колец) из сцинтилляционных экранов. Первое кольцо разделено на сектора по 10° , второе – на сектора по $7,5^\circ$, третье – на сектора по 6° , четвертое – на сектора по 5° , два внешних кольца разделены на сектора по $3,75^\circ$. Шесть кольцевыхборок полностью перекрывают область углов рассеяния $\Theta=(132,745 -175,047)^\circ$. Полный телесный угол детектора составляет $\Omega_D \approx 2$ ср.

2. Основные результаты применения методов компьютерного моделирования для расчета характеристик времяпролетного нейтронного спектрометра

Структура одного сектора детектора изображена на рисунке 1. Другие сектора получаются из центрального лепестка вращением вокруг направления пучка и в совокупности образуют кольцо спектрометра, занимающее определенный диапазон углов рассеяния (брэгговский размах).

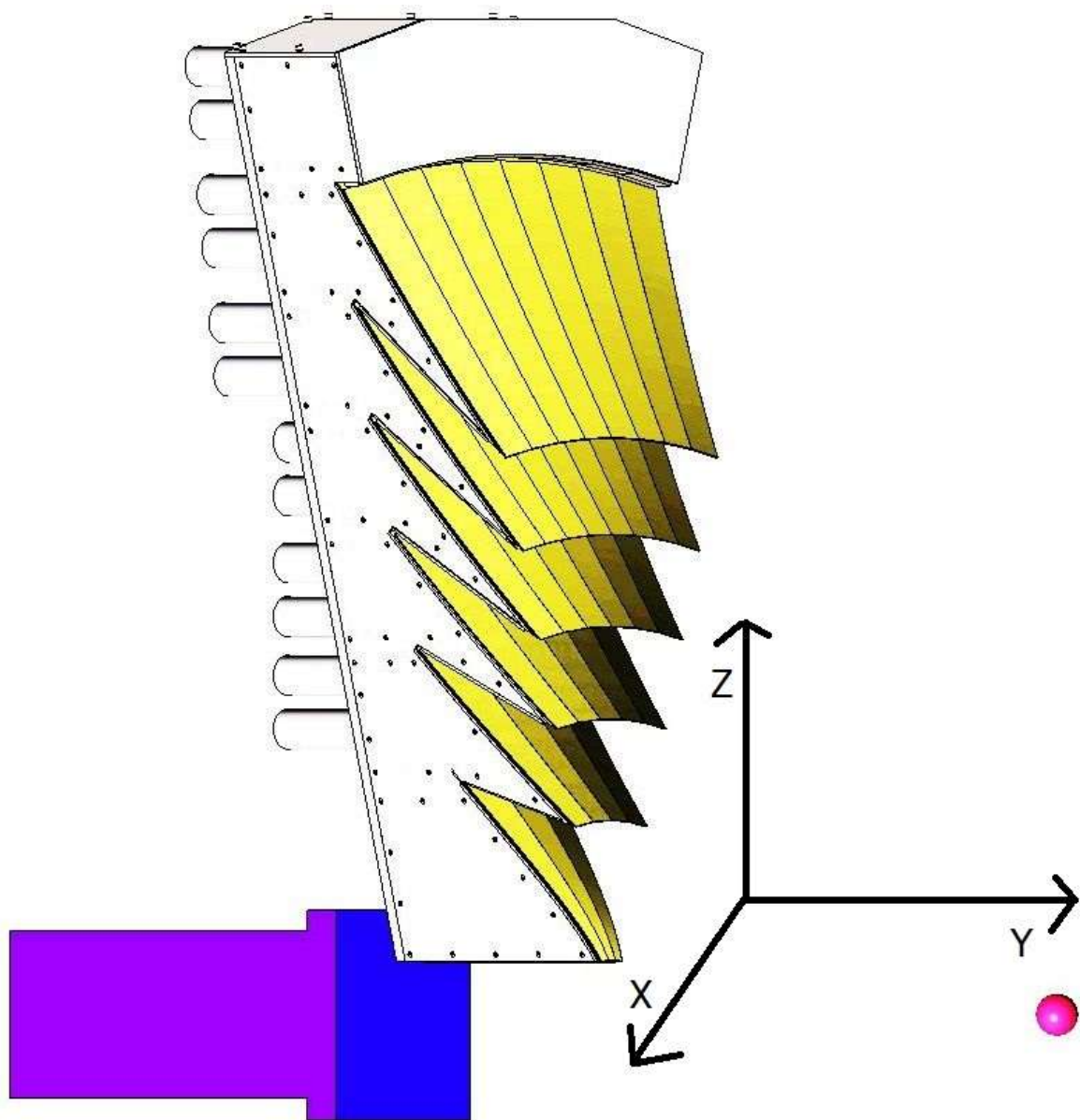


Рисунок 1 –CAD модель одного сектора детектора ФДВР.

Системы CAD-моделирования позволяют задать конфигурацию детектора таким образом, что отдельный его элемент (лепесток) описан последовательно в несколько шагов:

1) Задание функции телесного угла $f_i(\theta)$, где i - номер кольца. В данном случае функции задаются параметрическими уравнениями для координат $x_i(\theta)$ и $y_i(\theta)$. Полученная на этом шаге кривая лежит на поверхности временной фокусировки (ПВФ).

2) Из плоской функции в трехмерном пространстве вытягивается цилиндрическая поверхность в направлении, перпендикулярном плоскости кривой.

3) На основе поверхности формируются объемные тела путем нарастания объема перпендикулярно к поверхности, полученной на втором шаге, в обоих направлениях. Толщина сцинтиллятора составляет 0,45 мм. Поскольку объем распределяется в обе стороны относительно исходной поверхности, в каждую сторону откладывается по 0,225 мм.

Проекция исходных кривых, соответствующих ПВФ, на плоскость YX показана на рисунке 2 в системе координат CAD.

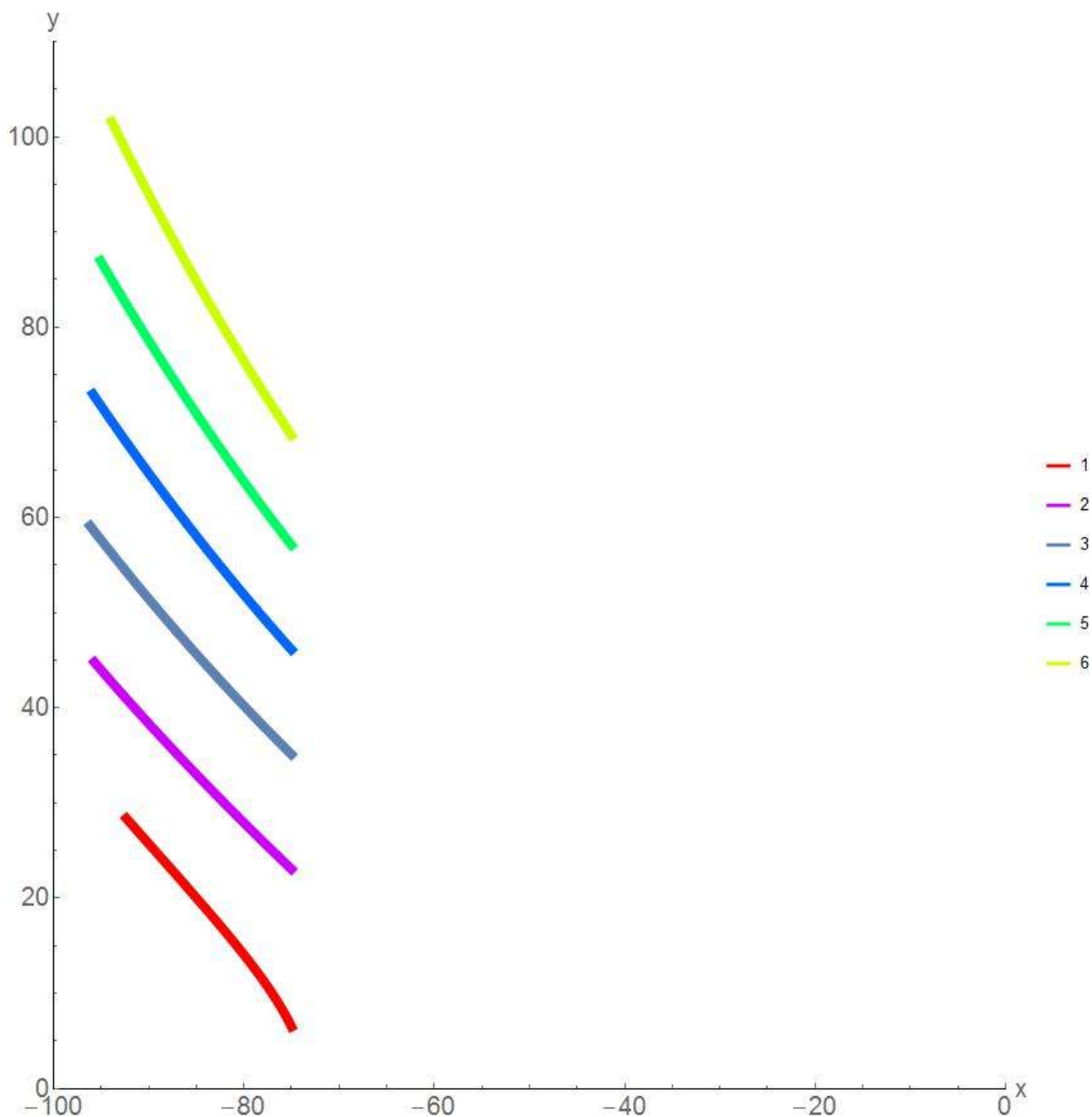


Рисунок 2 – Общий вид направляющих кривых, лежащих на ПВФ.

Ниже будем считать, что крайняя точка нулевого кольца находится на ПВФ $\theta^* = 175.047^\circ$ и отстоит от начала координат на расстояние $y_0 = 75,3034$ см.

3 Результаты аппроксимации геометрической формы лепестков и колец детектора поверхностями второго порядка

Монте-Карло моделирование проводилось с помощью кода MCNP 5 [5], который позволяет задавать тела в терминах комбинационной геометрии. Поверхности, которыми формируются эти тела, могут быть как плоскостями, так и поверхностями второго порядка. Аппроксимирующая поверхность зонтичного типа с учетом реальной геометрии детектора находилась методом наименьших квадратов.

Расчеты были проведены для шести колец, определяемыми параметрами θ_{\min} , θ_{\max} (Таблица 1), предварительно рассчитанными в [4]:

Таблица 1 Угловые брэгговские границы колец детектора

Номер кольца	1	2	3	4	5	6
θ_{\min} , градус	163,913	154,917	148,417	142,721	137,547	132,745
θ_{\max} , градус	175,047	162,913	154,917	148,417	142,721	137,547

Угловые границы колец в таблице 1 не учитывают возможный технологический зазор между ними. Согласно [4], технологические и технические решения, применяемые в настоящее время в Лаборатории нейтронной физики ОИЯИ, позволяют практически полностью исключить технологические потери при перекрытии телесного угла. При расчетах использовались следующие значения параметров, определяющих установку: размер Fe[211]-мишени: радиус – R, высота h, пролетная база $a_0=2000,0$ см.

Все расчеты в отчете были проведены в соответствии с угловыми брэгговскими границами колец детектора, указанными в таблице 1.

Поверхность временной фокусировки в пределах одного лепестка натянута на спицу и представляет собой цилиндрическую поверхность с направляющей, задаваемой параметрически уравнениями вида:

$$x(t)=A_1*(-L_0+B_1/\sin(t/2))*\cos(t), \quad (1)$$

$$y(t)=A_2*(-L_0+B_2/\sin(t/2))*\sin(t). \quad (2)$$

Переменная t представляет собой азимутальный угол рассеяния нейтронов.

Параметр L_0 представляет собой пролетную базу нейтронов и равен 2000,0 см. Для аппроксимации уравнений поверхностью второго порядка используется функция FindFit системы Mathematica.

В основу Монте-Карло модели положен метод, разработанный в работе [6]. Для кода MCNP были созданы шесть базовых входных файлов, каждый из которых представляет собой модель одного кольца дифрактометра. Форма «спицы» $r_a(\theta_a)$ аппроксимируется в виде, удобном для кода MCNP, в виде так называемой sq-card или gq-card. Простейшая из них, sq-card используется при Монте-Карло моделировании, она эквивалентна фитированию формы «спицы» аналитической функцией $y(x)$ вида:

$$y(x) = f\sqrt{ax^2 + bx + c} + d \quad (3)$$

где коэффициенты a , b , c , d и f определялись из процедуры фитирования. При этом находилась как передняя, так и задняя поверхность лепестка при заданной его толщине ($t_{det}=0,45$ мм). Задняя поверхность определялась из передней путем задания нормали к ней в каждой ее точке. По бокам каждый лепесток детектора фиксировался плоскостями $z=\pm x \operatorname{tg}(\varphi_0/2)$. На основе базового лепестка детектора, расположенного симметрично относительно горизонтальной плоскости $z=0$, как объемного тела, получались другие лепестки кольца детектора путем поворота базового лепестка на соответствующий угол вокруг направления пучка.

Число лепестков в кольце определяется азимутальным размахом φ_0 лепестка.

В первом и четвертом кольцах отклик от каждого трех лепестков кольца суммировался, поскольку сигнал на один ФЭУ собирается с трех лепестков. Во втором, пятом и шестом кольцах ФЭУ подключен к четырем фрагментам, в третьем кольце - к пяти фрагментам.

Далее специальная программа при заданной форме «спицы» $r_a(\theta_a)$ генерирует входной файл для одного лепестка или целого кольца, или всех семи колец для кода MCNP. В программе учитываются особенности, связанные с построением источника в коде MCNP, адекватного физике задачи. Для обработки результатов Монте-Карло моделирования создан специальный скрипт на языке Perl, позволяющий получить форму линии в удобной для дальнейшей обработки форме.

Возможности MCNP в описании геометрии ограничены. Они не позволяют одновременно построить только одно кольцо. По этой причине системы колец исследовались независимо друг от друга (см. рисунок 3).

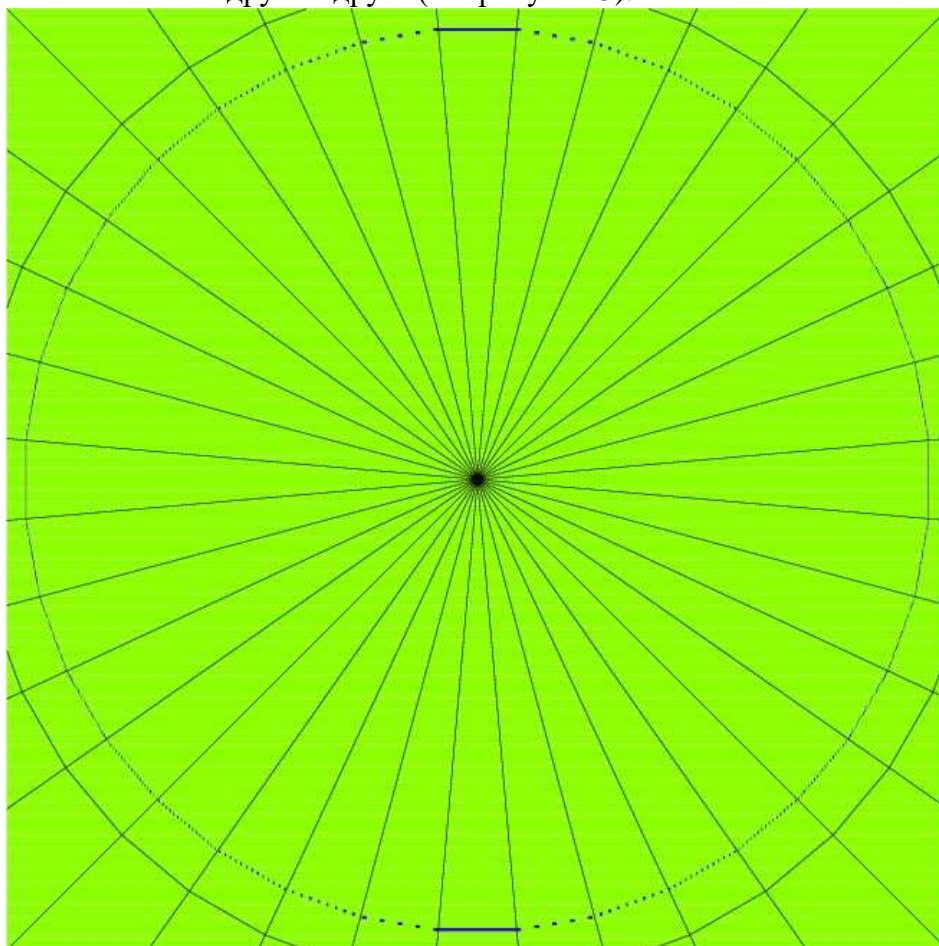


Рисунок 3 – Сечение колец 1-3 плоскостью $y=-88,87$ см при азимутальном размахе одного лепестка детектора $\varphi_0=10^\circ$, полученное в коде MCNP (ширина показанного изображения соответствует 23 см).

Входные файлы для пятого и шестого колец описывают только половину лепестков ввиду ограничений кода MCNP, однако из-за осевой симметрии полученные разрешение и ширина линии соответствуют значениям для полных колец.

3 Результаты Монте-Карло моделирования

В предыдущих работах нами было исследовано влияние разновидности формы поверхности отдельного лепестка, рассчитываемой с помощью вариационного метода. В вариационном методе она может быть рассчитана двумя способами – для точечной мишени и для мишени конечных размеров. При этом, при Монте-Карло моделировании детектора мишень всегда физически присутствует в модели. Было показано, что мишень конечных размеров в определении поверхности вызывает сдвиг отклика, обусловленный дополнительным пробегом в мишени. Ширины линий при этом практически не отличаются: Уменьшение ширины для поверхности, рассчитанной с учетом конечных размеров мишени по сравнению шириной линии для неоптимизированной поверхности (точечная мишень) крайне незначительно. Относительное изменение ширины линии для детектора с размахом в 10° лепестка из-за способа «приготовления» его поверхности составляет в процентах {0,18; 0,65; 0,79; 0,76; 0,73; 0,70} соответственно для всех шести колец для мишени Fe[211] радиусом 0,2 см и высотой 2 см.

Предыдущими исследованиями было показано, что основной вклад в ширину линии вносит размер мишени, при этом радиальная зависимость ширины линии наиболее значительная. В настоящем отчете приведены результаты подобных исследований для

детектора, форма поверхности которого определена аппроксимацией поверхностей работающего детектора. На рисунке 4 приведены временные отклики отдельных колец широкоапертурного детектора обратного рассеяния для дифрактометра ФДВР для Fe[211] мишени размерами $R=0,3$ см, $h=3$ см. При этом надо иметь в виду, что из-за упоминавшихся ограничений используемой версии MCNP сравнение по амплитуде времяпролетных спектров имеет смысл проводить только в группах 1-3 и 4-6 колец по отдельности. Эти группы при моделировании помещались в ящики разного объема. Эта процедура не влияет на величину ширины линии и ее разрешение. При этом сравнение спектров между группами требует их корректировки по амплитуде, которая не проводилась.

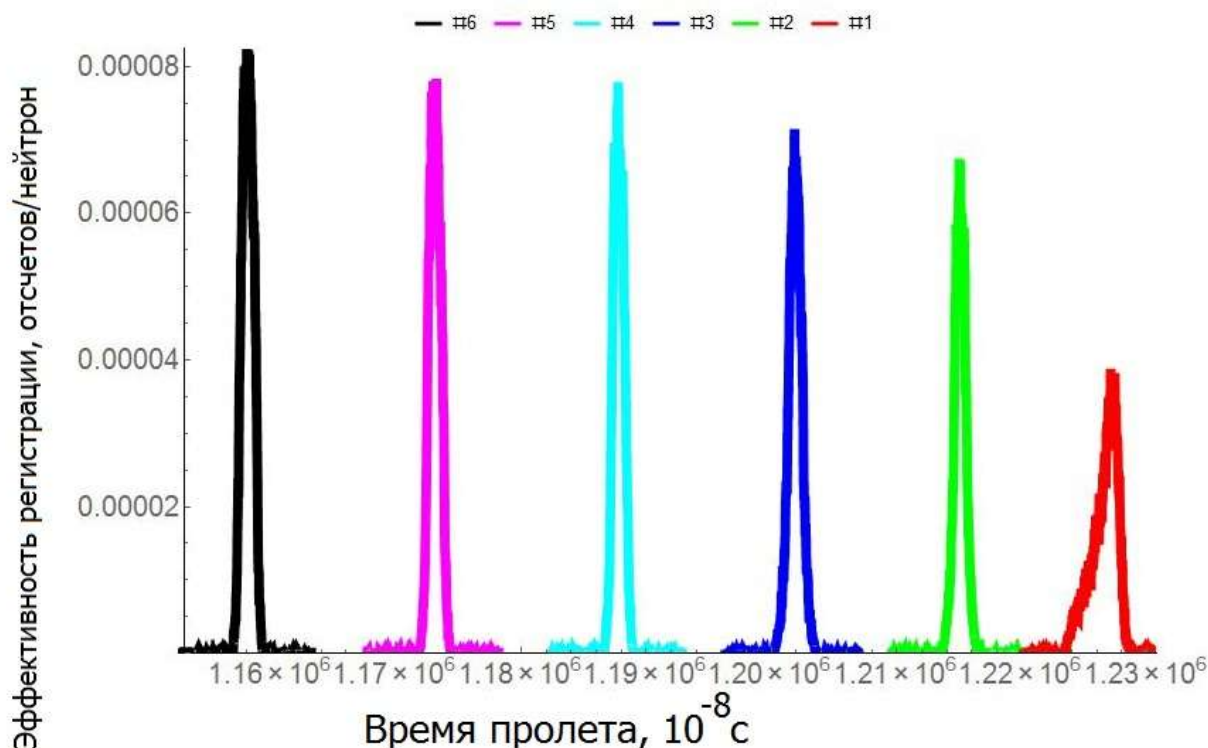


Рисунок 4 – Временной отклик колец широкоапертурного детектора обратного рассеяния для дифрактометра ФДВР для Fe[211] мишени радиусом 0,3 см и высотой 5 см.

Рассчитаны отклики всех колец детектора ДОР при изменении размеров образца (радиус R , высота h). При этом четыре внутренних кольца образовывались лепестками с соответствующими им азимутальными размахами, два внешних – по $3,75^\circ$. Информация в них суммировалась соответственно количеству лепестков, сигнал с которых собирался на один ФЭУ.

Детальная информация о зависимости ширины линии и разрешения от радиуса мишени представлена на рисунках 5 (ширина линии, мксек) и 6 (разрешение, %) и в таблицах 2 и 3. Значения ширины линии и разрешения при различных высотах мишени, радиус которой составляет 0,25 см, приведены в таблицах 4 и 5.

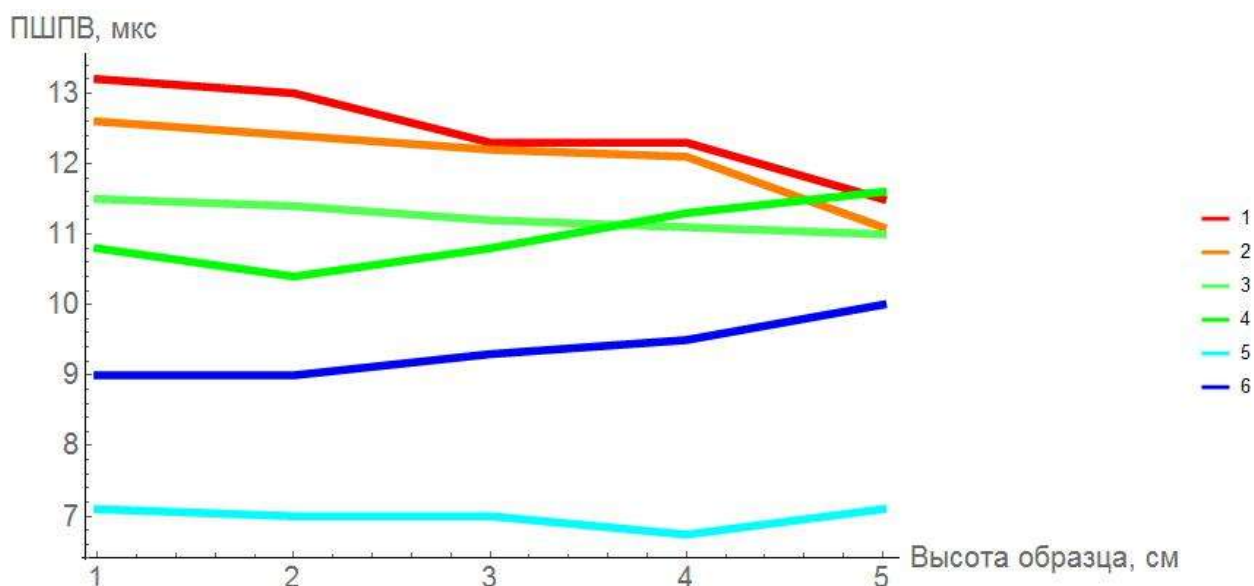


Рисунок 5 – Зависимость ширины линии (мксек) для колец широкоапертурного детектора ДОР для дифрактометра ФДВР для Fe[211] мишени (радиус 0,3 см) от ее высоты

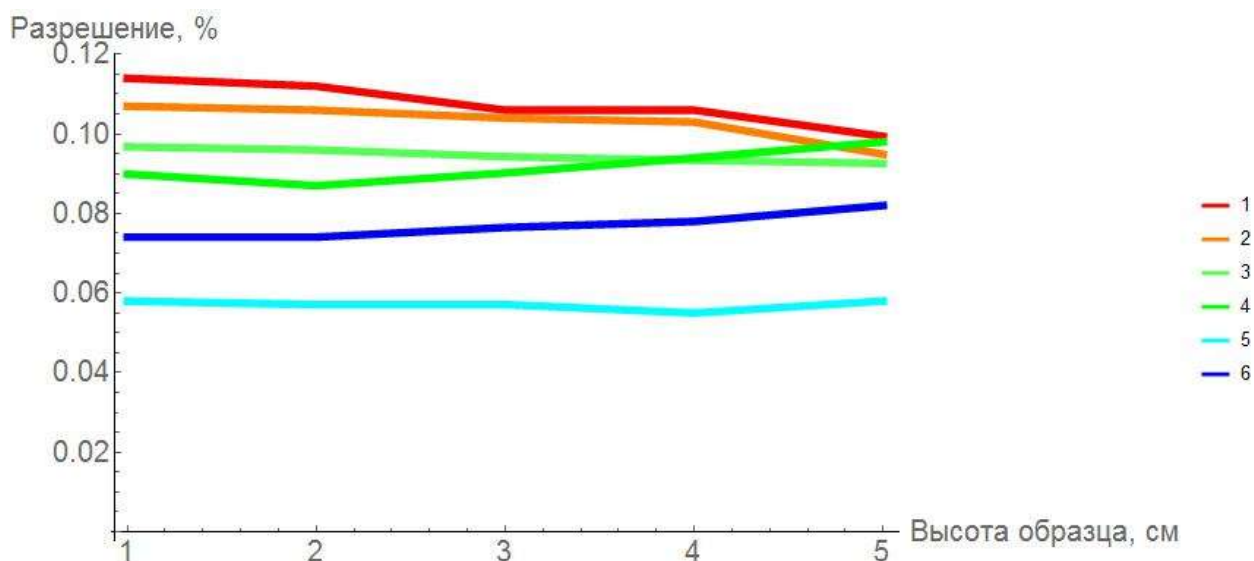


Рисунок 6 – Зависимость разрешения (%) для колец широкоапертурного детектора ДОР для дифрактометра ФДВР для Fe[211] мишени радиусом 0,3 см от ее высоты.

Таблица 2. Зависимости полной ширины линии на полувысоте (мкс) от высоты мишени Fe[211] радиус мишени 0,3 см для колец детектора ДОР

Высота мишени, см	Номер кольца					
	1	2	3	4	5	6
1,0	7,1	9,0	10,8	11,5	12,6	13,2
2,0	7	9,0	10,4	11,4	12,4	13
3,0	7	9,3	10,8	11,2	12,2	12,3
4,0	6.74	9,5	11,3	11,1	12,1	12,3
5,0	7,1	10	11,7	11	11,1	11,5

Таблица 3. Зависимости разрешения (%) от высоты мишени Fe[211] R=0,3 см для колец детектора ДОР

Высота мишени, см	Номер кольца					
	1	2	3	4	5	6
1,0	0,058	0,0740681	0,0899	0,0968	0,107	0,114

2,0	0,0571104	0,0740686	0,087	0,096	0,106	0,112
3,0	0,0571108	0,0765	0,0902	0,0943	0,104	0,106
4,0	0,055	0,078	0,094	0,0934	0,103	0,106
5,0	0,058	0,082	0,098	0,0926	0,0949	0,0994

Таблица 4. Зависимости ширины линии и разрешения от высоты мишени Fe[211] R=0,25 см для колец детектора ДОР

Высота мишени, см	Номер кольца					
	1	2	3	4	5	6
1,0	5,7	7,75	8,52	9,3	10,3	10,7
2,0	5,7	7,45	8,63	9,4	10,1	10,4
3,0	5,8	7,45	8,91	8,4994	10,1	10,4
4,0	5,9	8,3	9,7	9,1	10,1	10,4
5,0	8,2	8,6	10,2	9,2	10,3	10,7

Таблица 5. Зависимости разрешения (%) от высоты мишени Fe[211] R=0,25 см для колец детектора ДОР

Высота мишени, см	Номер кольца					
	1	2	3	4	5	6
1,0	0,0465036	0,0638	0,0709	0,0808	0,0878	0,0923885
2,0	0,0465037	0,061	0,0718	0,0791	0,0861	0,0897983
3,0	0,0473	0,061	0,074	0,071556	0,0860953	0,0897986
4,0	0,0481	0,068	0,0807	0,0766	0,0860955	0,0897987
5,0	0,056	0,0708	0,0851	0,0775	0,0878	0,0923892

Для первого кольца было проведено сравнение спектров времени пролета для сцинтилляционного экрана без окружающего полистирола и со слоем полистирола толщиной 1 мм на пути от мишени к сцинтиллятору. Наличие слоя полистирола практически не изменяет ширину линии и их разрешение.

Заключение

Методом Монте-Карло проведено моделирование времяпролетного широкоапертурного детектора ДОР дифрактометра ФДВР с учетом конечных размеров мишени.

Далее полученная форма «спицы» в виде аппроксимируется в виде, удобном для кода MCNP. Программа создает поверхности отдельного лепестка детектора.

Список использованных источников

1 Отчет о НИР х/д 17/2003 “Оптимизация нейтронного детектора специализированного дифрактометра ДН-12”, № 20034475. / Н. рук. Кутень С.А. – Минск: НИИ ядерных проблем, 2003. - с.44.

2 Khrushchinsky, A. A. Application of the Monte-Carlo Methods and Variational Procedure for Optimization of Time-off-Flight Neutron Diffractometer Characteristics / A. A. Khrushchinsky, S. A. Kuten, K. A. Viarenich, P. A. Speransky // Physics of Particles and Nuclei Letters. - 2016. - Vol. 13. - No. 3. - pp. 390–405.

3 Хрущинский, А.А. Применение методов Монте-Карло и вариационных методов для оптимизации характеристик времяпролётных нейтронных дифрактометров / А.А. Хрущинский, С.А. Кутень, К.А. Веренич, Ф.А. Сперанский // Письма в ЭЧАЯ. – 2016. - т.13. - № 3 (201). - с. 611-636.

4 Круглов В.В. Проект "Разработка широкоапертурного детектора обратного рассеяния (ДОР) для дифрактометра ФДВР", ОИЯИ, Дубна, 2018.

5 MCNP- A General Monte Carlo N-particle Transport, Version 4A, LA-12625. / Editor Briesmeister J.F. - Los Alamos National Laboratory, Los Alamos , New Mexico, 1993.

6 Отчет о НИР х/д 47/326 “Моделирование и оптимизация широкоапертурного нейтронного дифрактометра ФДВР как системы независимых детекторов”, № 20164054. / Н. рук. Кутень С.А. – Минск: НИИ ядерных проблем, 2016. - с.45.