

垂直聚焦单色器的蒙特卡罗模拟计算

黎光武^{1,2}, 李峻宏², 刘艳红¹, 刘丽鹃¹, 陈东风²

(1. 中国工程物理研究院 核物理与化学研究所, 四川 绵阳 621900;

2. 中国原子能科学研究院 核物理研究所, 北京 102413)

摘要:利用蒙特卡罗方法对引进的1台粉末衍射仪上的垂直聚焦单色器进行模拟检验,以得到起实际作用的单色器尺寸、聚焦曲率半径和倾角等参数。计算和对比了使用聚焦单色器和平板单色器的强度增益和样品位置处的中子强度分布。结果表明:受孔道尺寸的限制,使用垂直聚焦单色器相对于使用平板单色器在样品尺寸较大的情况下无明显的强度增益,样品尺寸较小(10 mm×40 mm)时,使用垂直聚焦单色器能获得较显著的强度增益。

关键词:中子散射谱仪;蒙特卡罗方法;垂直聚焦单色器

中图分类号:O242.4; TL817.4

文献标识码:A

文章编号:1000-6931(2006)06-0741-04

Simulation of Vertically Focused Monochromator by Monte-Carlo Method

LI Guang-wu^{1,2}, LI Jun-hong², LIU Yan-hong¹, LIU Li-juan², CHEN Dong-feng²

(1. China Academy of Engineering Physics, P. O. Box 919-213, Mianyang 621900, China;

2. China Institute of Atomic Energy, P. O. Box 275-30, Beijing 102413, China)

Abstract: The vertically focused monochromator of the neutron powder diffractometer was simulated using Monte-Carlo method. The effective dimension, curvature radius and tilting angle of monochromator were obtained. The intensity gains comparing to flat monochromator and the neutron intensity distribution at sample position were also given. The result shows that there is not evident intensity gain for greater size sample because of the limit of hole dimension. Only for smaller size sample there is evident intensity gain.

Key words: neutron scattering instrumentation; Monte-Carlo method; vertically focused monochromator

目前,垂直聚焦单色器广泛应用在中子散射谱仪上,它可将垂直发散的入射中子束聚焦,起到提高样品处中子注量的作用^[1,2]。最近,

我国从俄罗斯引进了1台中子粉末衍射谱仪,准备安装在目前运行的300[#]反应堆上。垂直聚焦单色器是这台谱仪的核心部件之一,因此,

收稿日期:2005-01-31;修回日期:2005-07-20

基金项目:中国工程物理研究院科学技术基金资助项目(20030212)

作者简介:黎光武(1959—),男,湖南祁东人,研究员,博士,核物理专业

用蒙特卡罗方法对其进行模拟计算检验。

1 McStas 简介

模拟使用的程序为 McStas1.8 版。1.8 版支持稳态和脉冲源,包括 90 多个标准部件的模拟程序库,能够模拟各种类型中子散射谱仪^[3]。国内曾在 Linux 操作系统上用 McStas1.6 版进行过蒙特卡罗模拟研究^[4,5]。1.8 版出现后,McStas 模拟程序的显著改进是能运行在 Windows 操作系统上。本工作利用 Windows 系统下的 McStas 模拟平台就引进的中子粉末衍射仪上的单色器对中子的聚焦性能和样品处中子空间分布等关键参数进行模拟计算。

模拟计算检验的步骤:建立垂直聚焦单色器模型;根据设计的谱仪各部件和参数编写模拟程序,建立谱仪整体绝对坐标系和各部件局部坐标系,按与实际谱仪相同的顺序安排所用部件(注意部件间的距离和旋转的角度),构成用来模拟计算的谱仪;进行聚焦单色器的模拟计算,并与平板单色器做比较,计算出强度增益。

2 垂直聚焦单色器模型

单色器由 15 片锗单晶条(73 mm×18 mm×8 mm)纵向排列,并依次旋转构成,相邻单晶条间留有 0.5 mm 间隙,通过调节相邻单晶条间的倾角 ϕ 来改变单色器的曲率半径 R ,使入射中子束聚焦于样品处。选用平板型单色器模块模拟各单晶条,按照 McStas 中坐标轴方向约定将 15 片单晶条组成垂直聚焦单色器(图 1)。

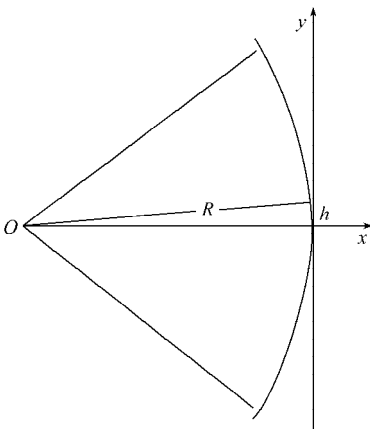


图 1 垂直聚焦单色器侧视示意图

Fig. 1 Side view of vertically focused monochromator

3 模拟程序所用主要参数

模拟程序所用的主要参数如下:热孔道, $\phi 100 \text{ mm} \times 1\,290 \text{ mm}$;堆内直导管, $6.5 \text{ mm} \times 70 \text{ mm} \times 1\,200 \text{ mm}$;堆外弯导管, $6.5 \text{ mm} \times 70 \text{ mm} \times 5\,214 \text{ mm}$;弯导管曲率半径, $603\,077 \text{ mm}$;特征波长, 0.135 nm ;热孔道前端与堆内直导管前端间的距离, $1\,294 \text{ mm}$;垂直聚焦单色器, $73 \text{ mm} \times 277 \text{ mm} \times 8 \text{ mm}$;嵌镶分布, $18'$;反射面(511)晶面;起飞角, 94° ;中子波长, $\lambda = 0.159 \text{ nm}$;弯导管出口与单色器距离, 350 mm ;单色器与样品距离 L , $2\,650 \text{ mm}$ 。设置变量 ϕ 用来改变单色器相邻单晶条之间的倾角。图 2 是孔道、导管和谱仪的布置图。俄方根据反应堆现有条件以及堆旁的剩余空间,设计了有关部件和参数。本工作根据俄方提供的参数编写了模拟程序并进行模拟计算。

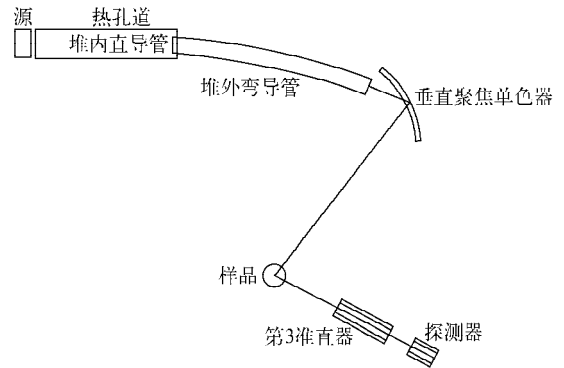


图 2 孔道、导管和谱仪布置图

Fig. 2 Scheme of passage, guide and instrument

4 垂直聚焦单色器模拟检验

模拟时先去掉单色器,并在其位置处放置一足够大的面探测器(100 mm×400 mm),探测从堆外弯导管出来的全部中子。图 3 示出单色器位置的中子强度分布。从图 3 可看出,在垂直方向 80 mm 范围内,中子强度不为 0,实际上,只有中间 5 片单晶条起作用,其余单晶条处于闲置状态;在水平方向,只有单晶条中心附近 13 mm 宽的部分起作用,两边剩下约 60 mm 宽的部分未接收到中子。因俄方设计的垂直聚焦单色器今后将移至新建的研究堆上使用,目前先安装在 300[#] 反应堆上,所以,单色器的设计尺寸较大,便于未来升级改造。模拟计算结果表明,在 300[#] 反应堆上,单色器的实际利用

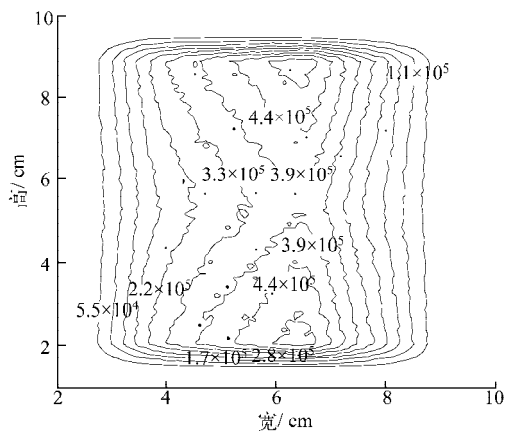


图3 单色器位置中子强度分布

Fig. 3 Neutron intensity distribution at monochromator

率很低。从图3还可看出,中子强度分布不均匀,水平方向中子强度的最高点偏离了中心位置,垂直方向两侧的中子强度比中间的中子强度高。这主要是受反应堆旁的空间所限,在堆外弯导管的后面没有空间放置使中子束流均匀化的直导管,而是在弯导管后面直接放置了垂直聚焦单色器,从而导致单色器位置处的中子束流不均匀。

曲率半径是聚焦单色器的重要参数,它决定单色中子是否聚焦于样品位置处。在样品位置处放置与实验测量中最大样品尺寸相等的面探测器,改变程序中对应于相邻单晶条间倾角的变量 ϕ (即改变聚焦单色器的曲率半径 R , $R=h/\phi$, h 为每片单晶条高),当探测器的计数达到最大时,所得到的倾角即为聚焦倾角,对应的曲率半径为聚焦曲率半径。模拟计算时,在样品位置处($L=2\ 650\text{ mm}$)放置1台尺寸为 $10\text{ mm}\times 80\text{ mm}$ 的面探测器,对单色器相邻单晶条间倾角 ϕ 做扫描。模拟结果表明,当 $\phi=0.26^\circ$ 、 $R=4\ 080\text{ mm}$ 时,中子强度达到最大(图4)。

模拟计算垂直聚焦单色器的中子强度增益时,使用 $16\text{ mm}\times 80\text{ mm}$ 的平板单色器与之进行比较。在样品位置处放置不同尺寸的面探测器,分别得到使用垂直聚焦单色器和平板单色器条件下探测器记录的中子强度,然后计算出垂直聚焦单色器的中子强度增益,结果列于表1。可以看出:随着样品处探测器尺寸的

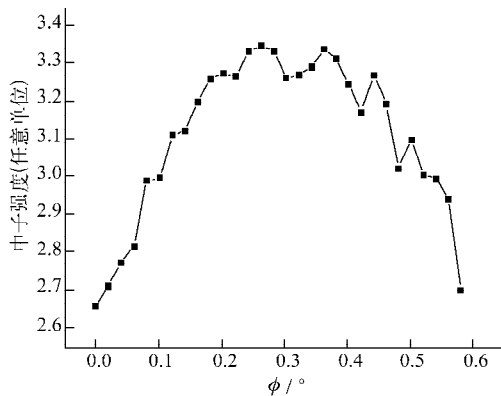


图4 样品处中子强度随倾角 ϕ 的变化

Fig. 4 Neutron intensity at sample position versus tilting angle

减小,中子强度增益变大。因从弯导管出来的中子束流在单色器处约为 $15\text{ mm}\times 80\text{ mm}$,与所用的平板单色器尺寸几乎相等,使用尺寸较大的面探测器时,聚焦单色器和平板单色器的作用类似,中子强度增益很小。当用尺寸较小的面探测器时,由于平板单色器无聚焦作用,不能将中子聚集在更小的区域内,所以,用尺寸较小的面探测器记录的中子强度低。因此,在用以测量的样品尺寸较小时,垂直聚焦单色器将获得明显的中子强度增益。

表1 垂直聚焦单色器的强度增益
Table 1 Intensity gains of vertically focused monochromator

面探测器尺寸	样品处探测器记录的 中子强度/($\text{cm}^{-2}\cdot\text{s}^{-1}$)		中子强度增益
	聚焦单色器	平板单色器	
10 mm×100 mm	$1.524\ 51\times 10^6$	$1.506\ 19\times 10^6$	1.012
10 mm×80 mm	$1.523\ 17\times 10^6$	$1.309\ 42\times 10^6$	1.163
10 mm×50 mm	$1.471\ 96\times 10^6$	$9.573\ 81\times 10^5$	1.537
10 mm×40 mm	$1.324\ 67\times 10^6$	$7.645\ 56\times 10^5$	1.733
6 mm×20 mm	$5.067\ 73\times 10^5$	$2.411\ 78\times 10^5$	2.101

对样品位置处的中子强度分布进行了模拟计算,并与使用平板单色器下的中子强度分布进行了比较。样品位置处放置的面探测器尺寸为 $100\text{ mm}\times 200\text{ mm}$ 。模拟计算结果示于图5。

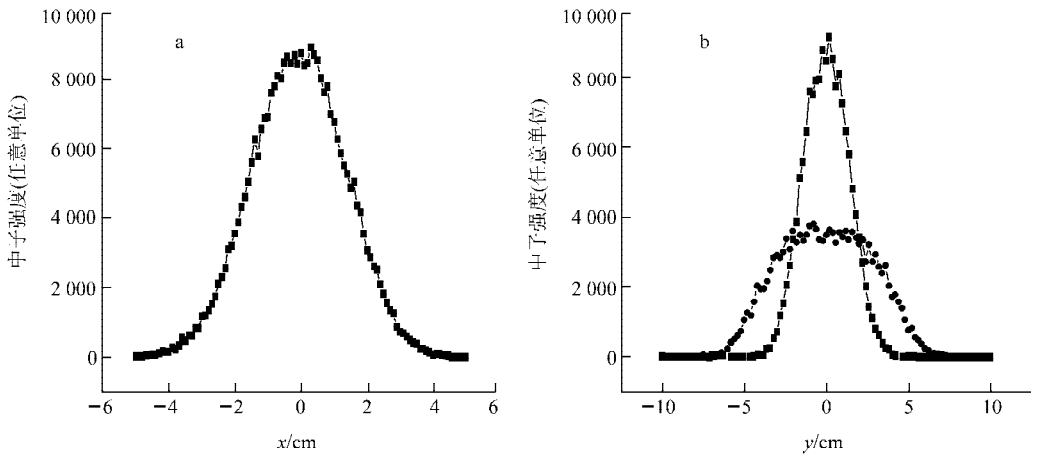


图5 样品处中子束强度分布

Fig.5 Neutron intensity distribution at sample position

a——水平方向中子束强度分布;b——垂直方向中子束强度分布

■——聚焦单色器;●——平板单色器

5 结论

根据俄方提供的谱仪参数,用蒙特卡罗方法对将在 $300^{\#}$ 反应堆上使用的垂直聚焦单色器进行了模拟计算检验,结果说明:聚焦倾角为 0.26° 、曲率半径为4 080 mm时,样品位置处的中子强度最大;因受孔道尺寸的限制,在样品尺寸大(量足)的情况下使用垂直聚焦单色器相对于使用平板单色器无明显的中子强度增益,在样品尺寸小(量少)时,使用垂直聚焦单色器能获得较显著的中子强度增益。从模拟结果还可看出,设计的垂直聚焦单色器在 $300^{\#}$ 反应堆上的实际利用率较低。另外,中子弯导管后面无空间放置使中子束流均匀化的直导管,致使聚焦单色器位置处的中子强度分布不均匀。

本工作得到了中国原子能科学研究院中子散射组的大力帮助,并与勾成研究员、张百生研究员、成之绪研究员和薛艳杰副研究员进行了许多有益的讨论,在此表示衷心感谢。

参考文献:

[1] AXE J D, CHEUNG S, COX D E, et al. Composite germanium monochromators for high resolution neutron powder diffraction applications [J]. Journal of Neutron Research, 1994, 2(3): 85-94.

[2] LECHNER R E, WALLPACH R V, GRAF H A, et al. A monochromator with variable horizontal and vertical curvatures for focusing in real and reciprocal space[J]. Nucl Instrum Methods Phys Res Sect, 1994, A338:65-70.

[3] WILLENDROP P, FARHI E, LEFMANN K, et al. User and programmers guide to the neutron ray-tracing package McStas (Version 1.8) [R]. Roskilde, Denmark; Risø National Laboratory, 2004.

[4] 郭立平,陈东风,孙凯,等.中国先进研究堆高分辨中子粉末衍射谱仪模拟研究[J].原子能科学技术,2002,36(1):29-31.
GUO Liping, CHEN Dongfeng, SUN Kai, et al. Simulation of the high resolution neutron powder diffractometer at China Advanced Research Reactor[J]. Atomic Energy Science and Technology, 2002,36(1):29-31(in Chinese).

[5] 郭立平,孙凯,陈东风,等.CARR堆HRPD谱仪垂直聚焦单色器的选取和强度增益计算[J].核技术,2002,25(6):413-418.
GUO Liping, SUN Kai, CHEN Dongfeng, et al. Choice of the vertically focused monochromator of the high resolution neutron powder diffractometer at CARR[J]. Nuclear Techniques, 2002,25(6):413-418(in Chinese).