

Full Simulation of Detector Performance of Neutron Instrumentation at ESS

PhD Tézisfüzet

Klausz Milán

Témavezető: Dr. Zagyvai Péter

Konzulensek: Dr. Légrády Dávid

Prof. Dr. Richard Hall-Wilton

Energiatudományi Kutatóközpont
Környezetfizikai Laboratórium

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem
Nukleáris Technikai Intézet

European Spallation Source ESS ERIC

2020

A kutatások előzménye

Az anyagok természetének megismerése alapvető fontosságú számos tudományterület, mint például a fizika, kémia, geológia, biológia, mérnöki és orvostudomány számára is. A kutatók különböző vizsgálati módszereket alkalmaznak az anyagok szerkezetének és viselkedésének feltérképezésére, ezek közé tartozik a mikroszkópia, röntgenszórás és neutronszórás is. A különböző módszerek eltérő, egymást kiegészítő információkkal szolgálhatnak a vizsgálandó mintákról. Ebben nagy szerepe van annak, hogy a vizsgálathoz használt különböző részecskék (fotonok, elektronok vagy neutronok) és a minta anyagának kölcsönhatásai eltérőek.

A neutronoknak megvan az az egyedi előnye, hogy nagyméretű mintákba is képesek behatolni, hiszen elsősorban az atommagokkal lépnek kölcsönhatásba a kis hatótávolságú magerő révén. Ez a gyenge kölcsönhatás egyben a neutronszórásos technikák legnagyobb hátulütője is, hiszen nagy neutronfluxusokat tesz szükségessé, melyek elérése nagy intenzitású forrásokkal lehetséges, ezek azonban nem olyan könnyen hozzáférhetőek, mint más technikák például röntgenszórásos berendezések esetén. Ebből kifolyólag a neutronszórást alkalmazó vizsgálatok kutatóközpontokban összpontosulnak, és erős neutronforrás, jellemzően kutatóreaktor vagy spallációs neutronforrás üzemeltetésén alapszanak.

A tudomány határainak tágításához elengedhetetlen a tudományos berendezések és az ezeknek otthont adó kutatóközpontok fejlesztése és új létesítmények építése, melyek képességei meghaladják elődeikét. Mind a meglévő tudományos berendezések fejlesztése, mind pedig újak építése jelentős fejlesztést igényel számos, a neutronszóráshoz kapcsolódó területen. Kifejezetten igaz ez a svédországi Lundban jelenleg is épülő Európai Neutronkutató Központ (European Spallation Source, rövidítve ESS) [Peggs, 2013] esetében, mely a tervek szerint a világ legnagyobb teljesítményű spallációs neutronforrását kihasználva fog üzemelni. Az ESS építése napjaink egyik legnagyobb tudományos és technológiai infrastrukturális projektje, mely egyedülállóan magas neutronfluxusok megteremtésével fog különleges lehetőséget nyújtani számos neutronszórásos vizsgálat számára [Andersen, 2020].

Egy ilyen erős neutronforrás kihasználása magában hordozza annak a veszélyét, hogy a használt neutrondetektorok szaturálódnak, mely leronthatja a berendezések teljesítményét. Annak elkerülése érdekében, hogy egy berendezés esetén a detektorok képessége jelentse a szűk keresztmetszetet, szimulációs tanulmányokat folytatnak a tervezési folyamat részeként, melyek a detektorok iránt támasztott követelmények meghatározásának alapjaként szolgálnak.

A Monte Carlo szimulációk [Lux, 1991] szerepe kulcsfontosságú berendezések fejlesztése és tanulmányozása számára, mint olcsó, megbízható és sokoldalú eszköz [Kanakai, 2018]. Szimulációkból nyerhető információk jelentősen csökkenthetik a megépítendő prototípusok számát, és lehetővé tehetik nehezen vagy egyáltalán nem megmérhető mennyiségek és tulajdonságok tanulmányozását is. Átfogó és részletes szimulációs modellek elkészítése lehetővé teszi berendezések neutronforrástól egészen a detektorokig tartó szimulációját, mellyel összekapcsolt és kumulatív hatások is felfedezhetővé válhatnak.

Egy olyan komplex rendszer szimulációja, mint amilyen egy neutronszórásos berendezés, nem egyszerű, és bizonyos korlátokkal jár. Jelenleg még nem érhető el egyetlen szoftver, amellyel részletes és hatékony szimuláció valósítható meg egyszerre lefedve olyan aspektusokat, mint a neutronok keletkezése, transzportja neutronvezetőkben nagy távolságon és kristályos anyagokon keresztül, illetve detektálásuk másodlagos részecskék keltése révén. Rendelkezésre állnak azonban olyan szimulációs eszközök, mint a McStas [Lefmann, 1999] és a Geant4 [Agostinelli, 2003], melyekkel különböző folyamatok megbízhatóan modellezhetőek, és a közelmúltbeli fejlesztéseknek köszönhetően ezek között megvalósítható a részecskeadatok átvitele úgynevezett MCPL fájlok [Kittelmann, 2017] használatával. Ezzel lehetőség nyílik arra, hogy egy szimulációs láncot alkotva a különböző eszközökkel a berendezés egészét modellezzük minden területen a megfelelő szoftvert alkalmazva.

Célkitűzések

Ebben a PhD munkában több Monte Carlo szimulációs eszköz, köztük a McStas és a Geant4 együtt kerül felhasználásra két ESS-es berendezés teljes szimulációs modelljének elkészítése érdekében. Ez a két berendezés a kisszögű neutronszórást (SANS) vizsgáló LoKI [Jackson, 2015], és az indirekt geometriájú hideg spektrométer BIFROST [Ronnow, 2014]. Ezeknek a modelleknek az elsődleges felhasználási célja a várhatóan a berendezések detektorait érő neutronintenzitások meghatározása különböző felhasználási körülmények, köztük a legnagyobb intenzitásokat eredményező forgatókönyv esetén, amely segítséget nyújthat detektorokkal szemben támasztott követelmények meghatározásában.

A LoKI berendezés szimulációs modelljének kidolgozása és létrehozása kettős célt szolgál. A munka első részének célja a LoKI detektorait érő intenzitások tanulmányozása a mintán szóródó neutronok térbeli és időbeli eloszlásának vizsgálatán keresztül. Ennek része egy reális legrosszabb forgatókönyv elemzése is, melyből a detektorok számlálási sebességére vonatkozó követelmények meghatározhatók. A vizsgálat fókuszában a kisszögű neutronszórásos technika számára fontos szögtartományban szóródó neutronok és egy tipikus 1 m^2 felületű detektorrendszer áll. A munka második részének feladata a szimulációs modell megfelelő részének felhasználása az úgynevezett Boron-Coated Straws (BCS) [Lacy, 2013] neutrondetektor technológia átfogó tanulmányozására. Az elsődleges cél ezen újszerű detektortechnológia teljesítményének kiértékelése és neutronszórásos berendezésekben való felhasználhatóságának vizsgálata különös tekintettel a LoKI berendezésre. A detektálási határfok kulcsparaméter a detektorrendszerek tekintetében, amely egy darab BCS detektorcső esetében köztudottan alacsony, ezért természetes módon több átlapoló réteg alkalmazásával lehet a globális határfokot növelni. Ezzel azonban megnő a rendszerben a detektor strukturális anyagának mennyisége is, amellyel emelkedik ezekben a neutronelnyelés mértéke és ezzel járó felaktiválódás is. Emellett szintén megnő a detektorrendszeren belüli neutronszórás mértéke is, amely belső háttér formájában ronthatja a jel-háttér viszonyt. A BCS detektortechnológia teljesítményének kiértékelése során mindezek a szempontok vizsgálatra kerülnek potenciális detektorrendszerek esetében.

A BIFROST berendezést érintő munka célja a már meglévő modell kiegészítése és továbbfejlesztése, hogy megvalósítható legyen a teljes berendezés szimulációja a neutronforrástól egészen a detektorokig, és metodológia kidolgozása a detektorokat érő időátlagolt és a pillanatnyi bejövő intenzitások meghatározására. A várhatóan a detektorokat érő intenzitások meghatározása kiemelt fontosságú a detektorokkal szemben támasztott követelmények kialakításához, elkerülendő azt, hogy a detektor teljesítménye váljon szűk keresztmetszetté a teljes berendezés teljesítménye szempontjából. Különösen igaz ez a BIFROST berendezés esetében, mely úgy lett megtervezve, hogy kis mintákból rugalmatlan szórással származó gyenge jeleket legyen képes detektálni, ellenben a mintát érő különlegesen nagy neutronintenzitás magában hordozza extrém nagy detektorra jutó intenzitás lehetőségét koherens rugalmas (Bragg) csúcsok esetében. Éppen ebből kifolyólag a szimulációk egy része a várhatóan a detektorokat érő maximális időátlagolt és a maximális pillanatnyi bejövő intenzitás meghatározását célozza. Mivel bizonyos berendezés- és mintaparaméterek hatása a detektorokat érő intenzitásra nem könnyen kikövetkeztethető, ezért egy paramétervizsgálat is része a munkának, amely kiterjed a minta és az analizátorok mozaicitására, a minta méretre, az impulzusformáló nyalábszaggató nyitási idejére és a részecskegyorsító teljesítményére. Mindezekon túl a detektorokat érő nagy intenzitások szempontjából legrosszabb forgatókönyv mellett a normál működési jobban reprezentáló körülmények mellett is meghatározásra kerülnek a detektorokat érő időátlagolt és maximális pillanatnyi bejövő intenzitások.

Új tudományos eredmények

A disszertáció új tudományos eredményei a következő tézispontokban összegezhetők:

1. Kidolgoztam egy általános Geant4 Monte Carlo szimulációs modellt a ^{10}B izotóppal dúsított szilárd bór-karbid konverter rétegű, Ar/CO₂-dal töltött Boron-Coated Straws neutrondetektor vizsgálatára. Ezt a modellt használtam az ESS-hez tervezett kisszögű neutronsórásos berendezésekben való felhasználás esetén a detektorok várható bejövő és detektált intenzitásának meghatározására. Megállapítottam, hogy normális működési körülményeket reprezentáló berendezéskonfigurációk esetében a pillanatnyi detektált intenzitás jelentősen meghaladja a konvencionális paraméterekkel rendelkező detektorok számlálási sebességét, ami nagy forrásteljesítmény esetén korlátozná a berendezés tudományos kihasználhatóságát. Az elkészült modell ez ESS-es LoKI berendezés hivatalos teljes szimulációs modelljévé vált. [P0 és P1]
2. Az 1. tézispontban szereplő Boron-Coated Straws detektorrendszer Geant4 szimulációs modelljét felhasználva tanulmányoztam a neutronabszorpciót, a felaktiválódást valamint a konverziós és detektálási hatásfokot a detektor teljesítménye szempontjából. Megállapítottam, hogy a 0,6–11 Å hullámhossztartományban a detektorra jutó neutronok 13–33%-a nyelődik el anélkül, hogy a detektorgázban elegendő töltéshordozó keltését okoznák detektálási esemény kiváltásához. Neutronsórásos berendezésekben való felhasználáshoz ilyen mértékű elnyelődés elfogadható, azonban az alacsony 0,6–1,8 Å hullámhossztartományban tapasztalt magas 60–27%-os transzmisszió szükségessé teszi a detektorrendszer mögé elhelyezett elnyelő árnyékolás használatát 5 Å alatti felhasználás esetében. Demonstráltam, hogy az ESS-ben tervezett felhasználás esetén a detektort felépítő anyagok felaktiválódása várhatóan nem fogja befolyásolni a jel-háttér viszonyt, és a karbantartás során okozott dózis szempontjából sem fog megkötést jelenteni. Kimutattam, hogy a detektor detektálási hatásfoka alacsony ugyan, azonban átlapoló detektorrétegek alkalmazásával 50–66%-os hatásfok is elérhető az 1,8–11 Å hullámhossztartományban. [P1 és P2]
3. Az 1. tézispontban szereplő Boron-Coated Straws detektorrendszer Geant4 szimulációs modelljét felhasználva tanulmányoztam a detektorrendszeren belüli szóródás hatását a jel-háttér viszonyra különböző neutronsórásos vizsgálatok számára releváns mennyiségek szempontjából. Megállapítottam, hogy a hagyományos módon a szórt háttér és a jel plusz szórt háttér intenzitásának arányaként definiált szórási hányad együtt növekszik a rendszerben található anyagok mennyiségével, kis hullámhosszú neutronok esetében a legmagasabb, és a Bragg-levágás alatt jelentős. Az eredmények alapján a szóródás elfogadható mértékű kisszögű neutronsórásos alkalmazásra, de túl jelentős lehet olyan háttérérzékeny technikák számára, mint amilyen a spektroszkópia. Ehhez kapcsolódóan megvizsgáltam egy a detektorrendszer mögé elhelyezett polietilén visszaszóró réteg alkalmazásának lehetőségét, amely ugyan észrevehetően növelte a hasznos jel nagyságát, azonban ennél jóval jelentősebb mértékben növelte a szóródásból származó háttérrel, így ennek felhasználhatósága a pozíció felbontásra nem érzékeny területekre korlátozódik. Ilyen lehet a nemzetvédelmi célokra való alkalmazás. [P2]

4. Kidolgoztam az ESS-es BIFROST berendezés szóródást karakterizáló rendszerének első teljes geometriát lefedő Geant4 szimulációs modelljét, mely egyben az első alkalmazása az NCrystal neutronszórásos berendezések analizátorainak modellezésére fejlesztett speciális pirolitikus grafit anyagának. MCPL fájlok segítségével megteremttem az összeköttetést a BIFROST berendezés meglévő McStas modellje és az említett Geant4 modell között, mellyel neutronforrástól a detektor pozícióig tartó szimulációt valósítottam meg. A modell használhatóságát általános vanádium kalibrációs minta szimulációjával demonstráltam, meghatározva a detektorokat érő bejövő intenzitásokat, és kimutatva az analizátorrendszer energiafelbontásainak egyezését a berendezés tervezett értékeivel. [P3]
5. Kidolgoztam az ESS-es BIFROST berendezés szóródást karakterizáló rendszerének McStas modelljét, melyet a Geant4 modellel megegyező paraméterekkel használva összehasonlítottam a két szoftvert, és meghatároztam a berendezés detektorainál várható legnagyobb bejövő neutronintenzitásokat. Demonstráltam, hogy a Geant4 alkalmasabb hasonló komplexitású geometria modellezésére, és hogy a két szoftver eredményei egyezést mutatnak, a transzmisszióban tapasztalt 10%-os eltérést kivéve. Megállapítottam, hogy a legnagyobb intenzitásokat eredményező berendezés- és mintaparaméterek esetén az egyetlen detektorcsövet érő maximális pillanatnyi bejövő intenzitás akár 1–1,7 GHz is lehet, 40–70 MHz-es időátlagolt bejövő intenzitás mellett. Ezek az értékek jelentősen meghaladják a jelenlegi detektorcsövek maximális számlálási sebességét, így a detektorok szaturációja várható, mely az elektromosan összekapcsolt tripletek esetén több mint 6 ms-ig is tarthat. [P3]
6. Az ESS-es BIFROST berendezés 4. tézispontban szereplő összekapcsolt McStas és Geant4 modelljét használva tanulmányoztam a detektorokat rugalmas csúcsok esetén érő neutronintenzitásra gyakorolt hatását olyan paramétereknek, mint a minta és analizátor mozaicitása, a minta mérete, az impulzusformáló nyalábszagató nyitási ideje és a részecskegyorsító teljesítménye. Bemutattam a felsorolt paraméterek hatását, és levontam azt a következtetést, hogy egy a normális működést reprezentáló forgatókönyv esetén a detektorokat érő bejövő neutronintenzitások nagyságrendekkel kisebbek a legnagyobb intenzitást eredményező esetenél tapasztaltaknál, azonban így is meghaladják a detektorcsövek számlálási képességét. Ez azt jelenti, hogy a detektorok helyreállási idejét és nagyintenzitás-tűrő képességét gondosan ki kell értékelní mérésekkel a berendezés feltételezett tudományos teljesítményének biztosítása érdekében. [P3]

Irodalmi hivatkozások listája

- [Peggs, 2013] S. Peggs et al. ESS Technical Design Report, ESS 2013-001. 2013. URL: https://europenspallationsource.se/sites/default/files/downloads/2017/09/TDR_online_ver_all.pdf.
- [Andersen, 2020] K. H. Andersen et al. “The instrument suite of the European Spallation Source”. *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. A* 957 (2020), p. 163402. ISSN: 0168-9002. DOI: [10.1016/j.nima.2020.163402](https://doi.org/10.1016/j.nima.2020.163402).
- [Lux, 1991] I. Lux and L. Koblinger. *Monte Carlo Particle Transport Methods: Neutron and Photon Calculation*. Boca Raton: CRC Press., 1991. ISBN: 9780849360749.
- [Kanaki, 2018] K. Kanaki et al. “Simulation tools for detector and instrument design”. *Physica B: Condensed Matter* 551 (2018), pp. 386-389. ISSN: 0921-4526. DOI: [10.1016/j.physb.2018.03.025](https://doi.org/10.1016/j.physb.2018.03.025).
- [Kittelmann, 2017] T. Kittelmann et al. “Monte Carlo Particle Lists: MCPL”. *Computer Physics Communications* 218 (2017), pp. 17-42. DOI: [10.1016/j.cpc.2017.04.012](https://doi.org/10.1016/j.cpc.2017.04.012).
- [Lefmann, 1999] K. Lefmann and K. Nielsen. “McStas, a general software package for neutron ray-tracing simulations”. *Neutron News* 10.3 (1999), pp. 20-23. DOI: [10.1080/10448639908233684](https://doi.org/10.1080/10448639908233684).
- [Agostinelli, 2003] S. Agostinelli et al. “GEANT4: A Simulation toolkit”. *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. A* A506 (2003), pp. 250-303. DOI: [10.1016/S0168-9002\(03\)01368-8](https://doi.org/10.1016/S0168-9002(03)01368-8).
- [Jackson, 2012] A. J. Jackson et al. *LoKI- A broad-band SANS instrument*. 2012. URL: https://europenspallationsource.se/sites/default/files/files/document/2017-09/loki_proposal_stc_sept2013.pdf.
- [Ronnow, 2014] H. Ronnow et al. *BIFROST Instrument proposal*. 2014. URL: https://ess-public-legacy.ess.lu.se/sites/default/files/bifrost_proposal_may_2014.pdf.
- [Lacy, 2013] J. L. Lacy et al. “The Evolution of Neutron Straw Detector Applications in Homeland Security”. *IEEE Transactions on Nuclear Science* 60.2 (2013), pp. 1140-1146. DOI: [10.1109/TNS.2013.2248166](https://doi.org/10.1109/TNS.2013.2248166).
- [Whitelegg, 2020] L. Whitelegg and R. Toft-Petersen. *BIFROST Detectors Requirements Specification*. Unpublished internal document. 2020
- [Kanaki, 2017] K. Kanaki and M. Klausz. Rate limitations for LoKI detectors && costing tables. LoKI Phase 2 review. 2017. URL: https://indico.ess.lu.se/event/831/sessions/3163/attachments/6366/9104/Detectors_loki_phase2_review_20170628.pdf.
- [Houston, 2019] J. Houston et al. Combining Simulation and Measurement to Understand Complex Detector Geometries. International Collaboration on Advanced Neutron Sources (ICANS XXIII). 2019. URL: <https://conference.sns.gov/event/138/contributions/407/contribution.pdf>.
- [Lacy, 2019] J. L. Lacy et al. “Boron-Coated Straw Neutron Imaging Detector Testing at the CSNS”. In: *2019 IEEE Nuclear Science Symposium and Medical Imaging Conference (NSS/MIC)*. 2019, pp. 1-3.

Az eredmények hasznosítása

A BIFROST esetében a magas neutronintenzitások nyújtotta kihívás előre látott volt már a berendezés javaslásakor, azonban a szimulációkban tapasztalt intenzitások nagysága meghaladta az előzetes várakozásokat. A szimulációk segítséget nyújtottak a berendezés felelőseinek a probléma alaposabb megismerésében, a megállapított intenzitásértékeket pedig felhasználták ESS-es tanácsadói értekezleteken, és hasznos információként szolgáltak a detektorkövetelmények véglegesítésében a szóródást karakterizáló rendszer tenderének kiírásához. Végeredményként a detektorokkal szembeni elvárások közt szerepel, hogy képesek legyenek üzemelni 3 milliszekundos időtartamú Bragg-csúcsok ellenére, melyek 10^8 n/s/cm² maximális pillanatnyi és 10^7 n/s/cm² időátlagolt fluxussal járhatnak [Whitelegg, 2020]. Tervben van a detektorok teljesítményének alapos kiértékelése, és a nagy intenzitások problémájára potenciális megoldások között szerepel a mintaméret és mintatípusok korlátozása is a berendezés számára.

A LoKI berendezés és a BCS detektorok szimulációjára létrehozott eszközök és eredmények szintén felhasználásra kerültek. A detektorokat érő intenzitások tanulmánya segítséget nyújtott az ESS-es döntéshozási és ellenőrzési folyamatokban például a LoKI berendezés 'Phase 2 review' találkozásánál [Kanaki, 2017], a modellt pedig a LoKI csapata átvette és az ESS detektor csoportjának segítségével továbbfejlesztette a berendezés hivatalos teljes szimulációs modelljévé [Houston, 2019]. Ezt a modellt összekapcsolták a Mantid méréskiértékelő szoftverrel, mellyel az eredmények adatredukciója és elemzése elvégezhetővé vált. Ezzel az összekapcsolással a LoKI berendezés teljes szimulációja a neutronforrástól egészen az adatkiértékelési folyamatokig elvégezhető, mely lehetőséget nyújt kalibrációs és korrekciós rutinok elkészítésére már a berendezés működésbe kerülését megelőzően is.

A BCS detektor átfogó tanulmányozása nem kizárólag az ESS számára hasznos. Ez volt az első alkalom, hogy a detektor strukturális anyagjain történő szóródást ilyen módon tanulmányozták, ami felkeltette a detektort gyártó cég figyelmét is, mely szeretné csökkenteni az ilyen jellegű detektorrendszeren belüli másodlagos szóródásokat. [Lacy, 2019].

A tézispontokhoz kapcsolódó tudományos közlemények

- [P0] M. Klausz, "Geant4 based Monte Carlo simulation of neutron detector with boron carbide converter layer". In: Simon, Ferenc (szerk.) Proceedings of the PhD workshop of the Physics Doctoral School at the Faculty of Science Budapest University of Technology and Economics, Budapest, Hungary: BME (2017)
- [P1] K. Kanaki, M. Klausz, T. Kittelmann, G. Albani, E. Perelli Cippo, A. Jackson, S. Jaksch, T. Nielsen, P. Zagyvai, R. Hall-Wilton, "Detector rates for the Small Angle Neutron Scattering instruments at the European Spallation Source". *Journal of Instrumentation* 13.07 (2018), P07016.
- [P2] M. Klausz, K. Kanaki, P. Zagyvai, R.J. Hall-Wilton, "Performance evaluation of the Boron Coated Straws detector with Geant4", *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. A* 943 (2019), 162463
- [P3] M. Klausz, K. Kanaki, T. Kittelmann, R. Toft-Petersen, J. O. Birk, M. A. Olsen, P. Zagyvai, R. J. Hall-Wilton, "A simulational study of the indirect geometry neutron spectrometer, BIFROST at the European Spallation Source, from neutron source position to detector position", submitted to *J. Appl. Cryst.*, 2020. arXiv: 2004.00335 [physics.ins-det].