arXiv:2603.08333v1 [physics.ins-det] 9 Mar 2026

中国散裂中子源中子散射实验的仪器响应建模*

Ni Yang, [1,2,3] Zi-Yi Pan, [1,2] Ming Tang, [1,2] Wen Yin, [1,2] 以及
Xiao-Xiao Cai[1], 2, †[1]中国科学院高能物理研究所，中国北京 *100049*[2]散裂中子源科学中心，中国东莞 *523803*[3]中国科学院大学，中国北京 *101408*

使用中国散裂中子源自主研发的蒙特卡罗热中子输运代码 Prompt，模拟了轻水和重水的热中子总散射实验，重点研究仪器探测器响应以及热中子散射截面的准确推导。本文开发了一种数据归约方法，用于处理实测和模拟的探测器事件，从而估算角度和波长分布以及角微分截面。模拟和实验的归约结果高度一致。实验中观察到的显著非弹性特征可在模拟中准确再现。我们讨论了非弹性效应的成因，并展示了在模拟中考虑非弹性散射过程后，这些效应如何消除。此外，还分析并讨论了样品中的多重散射。

关键词：中子输运、热中子截面、中子总散射、中子仪器、蒙特卡罗模拟

I. 引言

模拟中子仪器样品中的热中子散射过程至关重要，因为这不仅有助于优化仪器，也能清晰地了解仪器的响应。进一步而言，这有助于更准确地解读测量数据。热中子散射截面是评价核数据库（ENDF）中的一个关键子库，世界各地主要的国家评价核数据库（包括 CENDL-3.2 [1, 2], ENDF/B-VIII.0 [3], JEFF-3.3 [4] 和 JENDL-4.0 [5], ）都将这些数据作为重要组成部分。然而，该子库仅包含约二十种材料的截面数据，且这些数据仅适用于固定温度。值得注意的是，这些温度通常高于室温，因为该子库最初是为满足反应堆应用的需求而开发的。

为模拟中子散射仪器在精确实验条件下的晶体材料、液体、聚合物和纳米材料，中国散裂中子源 (CSNS) [7–11] 与欧洲散裂中子源的研究人员合作开发了热中子散射引擎 NCrystal [6], , 该引擎具有稳健的数值实现 [12, 13]和详细的散射过程 [14, 15]。

蒙特卡罗射线追踪技术，例如 McStas [16] , , 被广泛用于优化中子散射仪器 [17–19]。由于散射物理模型经过简化且固有地采用线性链近似，计算绝对散射强度通常颇具挑战——。此外，实验中的非线性物理布局也难以描述，尤其是在探测器系统以及样品/样品环境中 [20]。

最近，基于 NCrystal 中的物理原理，中国散裂中子源的研究人员发布了一款新的开源蒙特卡罗粒子输运软件包 Prompt [21],。该软件包同时采用蒙特卡罗光线追踪与输运技术，既可进行常规的中子光学光线追踪模拟，又可在不受线性约束的情况下模拟任意形状材料中的详细物理散射过程。这一进展使仪器响应模拟能够在绝对尺度上实现。

中子总散射技术是一种强大的方法，能够在宽动量转移范围内捕获散射图样，因而适用于同时测量长程有序与短程有序 [22–24]。由于总散射实验中每次散射事件的能量转移未知，对数据中的非弹性效应 [25] 进行校正颇具挑战，对于富含轻元素的材料尤为如此。

本研究旨在利用 Prompt 中的全部物理过程，对入射束与样品的相互作用进行建模，并将模拟结果直接与实验数据进行比较，同时考虑所有主要畸变效应。本研究采用的方法与成熟的数据分析方法略有不同 [26], , 因为其目的不是校正畸变，而是使用软件 Prompt 重现这些畸变，从而帮助仪器用户更好地理解它们。模拟中考虑了准直器、样品和探测器中的核吸收、弹性散射、非弹性散射、相干散射、非相干散射和多重散射等过程。第 II 节简要介绍飞行时间中子总散射技术。本节还介绍了实验和模拟的设置，以及统一的数据分析方法。第 III节比较了实验和模拟探测器响应的分析结果。第 IV节分析了 Prompt 中样品的多重散射和非弹

*本研究得到国家自然科学基金（项目编号：12075266）、国家重点研发计划（项目编号：2022YFA1604100）以及广东省基础与应用基础研究基金（广东—东莞联合基金）（项目编号：2023A1515140057）的资助。
†通讯作者：Xiao-Xiao Cai，地址：中国广东省东莞市大朗中子源路，电话：+86 769-88932163，电子邮箱：caixx@ihep.ac.cn

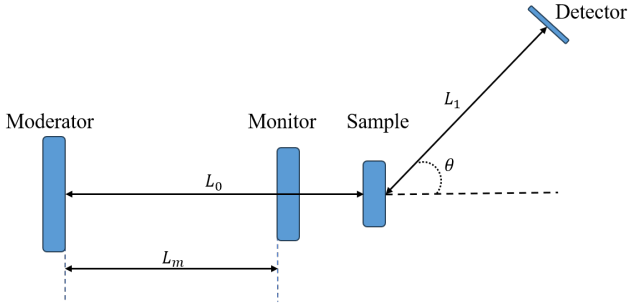

图 1. 飞行时间中子总散射技术的基本实验装置，展示了入射飞行路径距离 L_0、散射飞行路径距离 L_1、慢化体至监测器的距离 L_m 以及散射角 θ。

性。最后，第V节给出本研究的结论和展望。

II. 方法

A. 数据归一化

本节介绍了用于对仪器的探测器事件计数进行归一化的方法。

基本实验装置 [11] 如图1所示，为飞行时间（TOF）中子总散射技术的实验装置。波长为 λ 的中子从慢化体到样品的飞行距离为 L_0 。与样品相互作用后，波长为 λ' 的散射中子飞行L_1 到达位于散射角 θ处的探测器。动量转移 $\hbar Q$ 和能量转移 $\hbar\omega$ 由下式给出

$$Q = 2\pi \left(\frac{1}{\lambda^2} + \frac{1}{\lambda'^2} - \frac{2\cos\theta}{\lambda\lambda'} \right)^{\frac{1}{2}} \tag{1}$$

$$\omega = \frac{2\pi^2\hbar}{m} \left(\frac{1}{\lambda^2} - \frac{1}{\lambda'^2} \right) \tag{2}$$

其中 m 为中子的质量。根据公式（2），λ'可表示为 λ 和 ω的函数。

$$\lambda' = \lambda \left(1 - \frac{m\omega\lambda^2}{\pi h} \right)^{-\frac{1}{2}} \tag{3}$$

探测到的中子的飞行时间（TOF）通过以下方式获得

$$t = \frac{m}{h} \left(L_0\lambda + L_1\lambda' \right) \tag{4}$$

将式（3）代入式（4），可得

$$t = \frac{m\lambda}{h} \left[L_0 + L_1 \left(1 - \frac{m\omega\lambda^2}{\pi h} \right)^{-\frac{1}{2}} \right] \tag{5}$$

忽略样品吸收和多重散射的贡献后，在飞行时间 TOF 下，t处、散射角为 θ 时单位立体角的探测散射事件计数率可计算为 [27, 28]

$$c(t,\theta) = \int_{\substack{0 \\ t=\text{const}}}^{+\infty} d\lambda \Phi(\lambda) \varepsilon(\lambda',\theta) \frac{\lambda}{\lambda'} S(Q,\omega) \left. \frac{\partial\omega}{\partial t} \right|_{\lambda} \tag{6}$$

此处 $\Phi(\lambda)$ 表示中子注量，$\varepsilon(\lambda', \theta)$ 表示探测效率，$S(Q, \omega)$ 表示散射函数 [27], 且 $\left. \frac{\partial\omega}{\partial t} \right|_{\lambda}$可使用公式（6）计算。

对于飞行时间为 t、散射角为 θ 的探测中子，相应的弹性波长 λ_e 定义如下

$$\lambda_e = \frac{ht}{m\left(L_0 + L_1\right)} \tag{7}$$

与 λ_e 对应的弹性动量转移 $\hbar Q_e$ 可通过将 $\lambda = \lambda_e$ 和 $\lambda' = \lambda_e$ 代入公式（1）得到。

$$Q_e = \frac{2\pi \left[2\left(1 - \cos\theta\right) \right]^{\frac{1}{2}}}{\lambda_e} \tag{8}$$

由于 t 可表示为 λ_e 的函数，如公式（7）所示，因此，$c(t, \theta)$ 在公式（6）中可表示为λ_e的函数。

$$c(\lambda_e,\theta) = \int_{\substack{0 \\ t=\text{const}}}^{+\infty} d\lambda \Phi(\lambda) \varepsilon(\lambda',\theta) \frac{\lambda}{\lambda'} S(Q,\omega) \left. \frac{\partial\omega}{\partial t} \right|_{\lambda} \frac{dt}{d\lambda_e} \tag{9}$$

注意，$c(\lambda_e, \theta)$ 表示在 λ_e 和 θ处每单位波长、每单位立体角的微分计数。

根据 Powles [27], $S(Q, \omega)$ 可在 Q_e附近展开为泰勒级数。

$$S(Q,\omega) = S\left(Q_e,\omega\right) + \left. \frac{\partial S}{\partial Q} \right|_{Q=Q_e} \delta Q_L + \ldots \tag{10}$$

请注意，高于一阶的项均被忽略。偏差 δQ_L 可在参考文献 [27]的式（4.17）中找到。

当 $S(Q, \omega)$ 被截断为首项，即 $S(Q_e, \omega)$ 时，这本质上就是所谓的弹性近似。尽管对于富含轻元素、非弹性效应显著的材料，这种近似会引入不可忽略的误差，但它仍可用于实现本研究的目标，即模拟观测到的实验数据，同时考虑非弹性效应。因此，式（9）变为

$$c(\lambda_e,\theta) = \int_{\substack{0 \\ t=\text{const}}}^{+\infty} d\lambda \Phi(\lambda) \varepsilon(\lambda',\theta) \frac{\lambda}{\lambda'} S(Q_e,\omega) \left. \frac{\partial\omega}{\partial t} \right|_{\lambda} \frac{dt}{d\lambda_e} \tag{11}$$

为考虑吸收和多重散射过程产生的畸变效应，$c(\lambda_e, \theta)$ 乘以相应的畸变因子 $d(\lambda_e, \theta)$。

$$\tilde{c}(\lambda_e,\theta) = c(\lambda_e,\theta) d(\lambda_e,\theta) \tag{12}$$

在飞行时间总散射实验中，每个探测器事件都由中子飞行时间 t 和探测位置表征。

原则上，应通过对已知样品进行单独的布拉格衍射测量来校准探测位置。但由于预计这种校准对于本研究所考察的水样品并非关键，因此未进行校准。

根据样品和探测位置，可以直接求得散射角。如式（7）所示，可根据 TOF 和飞行路径距离计算弹性中子波长 λ_e。因此，可将探测到的散射事件计数记录在由 λ_e 和 θ构成的二维直方图中。该直方图针对 λ_e包含 N_{λ_e} 个等宽分箱，箱宽为 $\Delta\lambda_e$；针对 θ包含 N_θ 个等宽分箱，箱宽为 $\Delta\theta$。对于 λ_e， $j_{th}(j = 1, \ldots N_{\lambda_e})$分箱的中心为 $\lambda_{e,\ j}$；散射角对应的 $k_{th}(k = 1, \ldots N_\theta)$分箱的中心为 θ_k。中心分别为 $\lambda_{e,\ j}$和 θ_k 的分箱中的探测到的散射事件计数可表示为

$$\tilde{C}(\lambda_{e,j}, \theta_k) = \tilde{c}(\lambda_{e,j}, \theta_k)\Delta\lambda_e\Delta\Omega_k \tag{13}$$

此处 $\Delta\Omega_k$ 表示中心位于 θ_k的分箱所对应的立体角覆盖范围。微分计数 $\tilde{c}(\lambda_{e,\ j},\ \theta_k)$可估算为

$$\tilde{c}(\lambda_{e,j}, \theta_k) = \frac{\tilde{C}(\lambda_{e,j}, \theta_k)}{\Delta\lambda_e\Delta\Omega_k} \tag{14}$$

对于位于样品上游、距离为 L_m （如图 1所示）的监测器，每个探测到的事件的观测量为飞行时间（TOF） t_m。相应的波长 λ 可通过以下公式计算：

$$\lambda = \frac{ht_m}{mL_m} \tag{15}$$

同样，使用 λ 直方图记录监测器事件的计数。中心为 λ_j 的箱中的监测器事件计数为

$$M(\lambda_j) = a_m\Phi(\lambda_j)P_m(\lambda_j)\Delta\lambda \tag{16}$$

这里， a_m 是监测器的受照面积， P_m（λ_j）是监测器在 λ_j处探测到事件的概率。此外， λ_j 、 $\Delta\lambda$ 的值分别等于$\lambda_{e,\ j}$和 $\Delta\lambda_e$的值。对于几何厚度较薄且吸收能力较弱的监测器， P_m（λ_j）可视为与波长 [29]成正比。

因此，波长谱归一化强度 I（$\lambda_{e,\ j},\ \theta_k$）计算为散射事件~计数 C（$\lambda_{e,\ j},\ \theta_k$）与监测器事件计数 M（λ_j）之比。

$$I(\lambda_{e,j}, \theta_k) = \frac{\tilde{C}(\lambda_{e,j}, \theta_k)}{M(\lambda_j)} \tag{17}$$

B. 数据分析

为了获得样品的绝对散射强度，分析过程中还需要两组额外数据，分别用于探测器校准和背景扣除。

首先，从装有容器的样品的归一化强度 $I_{sc}(\lambda_{e,j}, \theta_k)$ 中减去空容器的归一化强度 $I_c(\lambda_{e,j}, \theta_k)$，后者包含背景信号。对装有容器的钒的归一化强度 $I_{vc}(\lambda_{e,j}, \theta_k)$ 也进行同样的处理。

$$I_s(\lambda_{e,j}, \theta_k) = I_{sc}(\lambda_{e,j}, \theta_k) - I_c(\lambda_{e,j}, \theta_k) \tag{18}$$

$$I_v(\lambda_{e,j}, \theta_k) = I_{vc}(\lambda_{e,j}, \theta_k) - I_c(\lambda_{e,j}, \theta_k) \tag{19}$$

这里，下标 s、 v 和 c 分别表示样品、钒和空容器。组合 sc 和 vc 分别表示样品与容器，以及钒与容器。

接下来，为了消除 $I_s(\lambda_{e,j}, \theta_k)$ 中监测器和探测效率的影响，样品的校准强度 $G(\lambda_{e,j}, \theta_k)$ 可表示为

$$G(\lambda_{e,j}, \theta_k) = \frac{N_v I_s(\lambda_{e,j}, \theta_k)}{N_s I_v(\lambda_{e,j}, \theta_k)} \tag{20}$$

其中， N 是材料中受照射原子的数量，计算方式为相应数密度与受照射体积的乘积。

然而，式（20）所述的校准程序也会消去立体角覆盖范围 $\Delta\Omega_k$，而该范围本身已包含在 $I_s(\lambda_{e,j}, \theta_k)$ 中，并由式（13）引入。由于探测器的几何构型， $\Delta\Omega_k$ 具有角度依赖性，这是由探测器相对于样品的方向和距离变化造成的。为将缺失项 $\Delta\Omega_k$ 加入 $G(\lambda_{e,j}, \theta_k)$，利用理想各向同性散射材料的模拟数据计算一个理想化因子；该材料与钒具有相同的总散射截面、数密度和几何形状。在对理想化材料进行模拟时，中子以各向同性方式散射，且不发生能量交换、吸收或多重散射。此外，探测器和监测器的探测效率均为 100%。根据式（17），理想化因子 $F(\lambda_{e,j}, \theta_k)$ 定义为

$$F(\lambda_{e,j}, \theta_k) = \frac{I_{ideal}(\lambda_{e,j}, \theta_k)}{N_{ideal}} \tag{21}$$

其中，下标符号 $ideal$ 表示理想化材料。式（13）和式（17）显然表明，$F(\lambda_{e,\ j},\ \theta_k)$包含项 $\Delta\Omega_k$。

绝对散射强度 $G'(\lambda_{e,\ j},\ \theta_k)$，通过纳入相应的立体角覆盖范围得到，如下式所示

$$G'(\lambda_{e,j}, \theta_k) = G(\lambda_{e,j}, \theta_k)F(\lambda_{e,j}, \theta_k) \tag{22}$$

根据式（8）， $F(\lambda_{e,\ j},\ \theta_k)$ 和 $G'(\lambda_{e,\ j},\ \theta_k)$ 可分别化简为 $H_F(Q_e)$ 和 $H_{G'}(Q_e)$。

最后，定义并计算样品所对应的导出微分散射截面（DDCS）的绝对尺度，具体如下：

$$\frac{d\sigma_s^{'}}{d\Omega}(Q_e) = \frac{d\sigma_v}{d\Omega}\frac{H_{G'}(Q_e)}{H_F(Q_e)} \tag{23}$$

其中钒微分散射截面$d\sigma_v/d\Omega = \sigma_v/4\pi$，以及钒散射截面$\sigma_v$，被视为常数5.1b。

C. 测量

在中国散裂中子源的多物理谱仪（MPI）上对液态轻水和重水进行了测量。这些材料已得到充分的实验研究 [30–32]。

MPI的布局见参考文献 [11]。一个有效表面为100 mm（水平）×100mm（垂直）的退耦合水慢化器位于样品上游30 m处。一根配备三个带宽斩波器的长距离中子导管置于慢化体与六通道准直器之间。该准直器将样品处的中子发散度在水平方向限制为 0.2° 。置于样品上游0.5 m处的四刀狭缝将束流尺寸限制为10 mm(h)×30 mm(v)。狭缝之后，在样品前方0.457 m处设有一台飞行时间束流监测器。由B_4C叶片组成的圆形径向准直器环绕样品。该准直器叶片的角间距为 1.5°。穿过准直器的散射中子由28个探测器模块探测，覆盖的散射角范围为 31° 至 170°。每个探测器模块由八根相邻的 ^{3}He管组成，管径为25.4 mm，气压为20 bar。谱仪配备了两种不同长度的探测器管，即300 mm和500 mm。对于每根管，沿长度方向每5 mm的区段被定义为一个像素。多物理谱仪探测器的详细信息见参考文献 [11]的表1。

在室温下，对两种液体样品——轻水和重水（制造商：Aladdin，产品编号：D113903）进行了总散射实验。样品置于圆柱形钒容器中，容器内半径为 4.476mm，厚度为 0.29 mm。选用半径为 4.42mm 、高度为 30.04mm 的钒棒作为校准样品。此外，还对空容器进行了测量，以去除噪声。测量详情见表 1。

表1. 在 MPI 仪器上进行的测量。除了样品之外，钒容器始终放置在样品位置。

样品	体积密度 (cm^3)	($克\cdot厘米^{-3}$)	运行编号	时间 (s)	事件率 (计数 · 秒$^{-1}$)
D_2O	0.90	1.105	0017672	7200	860149
H_2O	0.30	0.998	0017673	7200	848616
钒	1.84	6.118	0017327	46950	804825
void	N/A	N/A	0017262	57772	178997

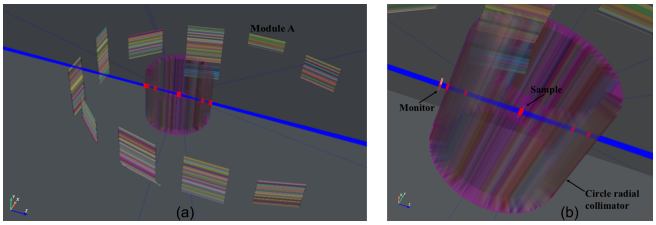

图2. (a) Prompt 中模拟的 MPI 几何可视化 .
(b) 模拟的 MPI 放大图。

D. 基于 Prompt 的模拟

轻水和重水在理论上已得到充分研究 [33–35]。在飞行时间总散射装置中，其可观测截面的积分表达式已广为人知，参见 [25] 的式（5）和 [36] 的式（3）。本研究采用软件 Prompt [21]，通过蒙特卡罗方法进行积分。

为了使用 Prompt 重现总散射实验，我们根据第 IIC 节所述的实验装置对 MPI 模型的各组成部分进行建模并定位，其中包括监测器、圆形径向准直器和所有探测器管。调制器和狭缝的尺寸与位置由一种新的粒子枪 `MPIGun` 定义，其参数列于表 2 中。模拟中 `MPIGun` 的水平发散度设为 0.2°。由于样品产生平滑的角分布，因此未对中子导管和六通道准直器的详细几何结构进行建模；这些结构对于准确描述束流发散度是必要的。不过，这种简化使得模拟中的中子发散度预计会与实验中的略有不同。第 III 节中模拟与测量所得钒布拉格峰之间的差异将体现这一点。图2 展示了 Prompt 中 MPI 几何结构的可视化结果以及 300 条中子轨迹。

与表 1中的测量相对应，开展了五项模拟，并列于表 3。这些模拟在由四颗 Intel Xeon Gold 6238 处理器组成的 88 核集群上进行，未采用任何方差缩减方法。样品、钒棒和钒容器的几何结构均与实验中所用的完全相同。NCrystal [6] 提供了 D_2O、H_2O 和钒的截面文件，分别为 `LiquidHeavyWaterD2O_T293.6K.ncmat`，`LiquidWaterH2O_T293.6K.ncmat` 和 `V_sg229.ncmat` ，均位于标准库中。针对 D_2O 和 H_2O 的截面由 CAB 模型评估 [35]。

名为`WlAngle` 的新计分器直接在 Prompt 中生成˜事件计数 $C(\lambda_{e,\ j},\ \theta_k)$，并附加到探测器上。WlAngle 配置字符串中可用的参数列于表4。为了考虑模拟探测器的探测效率，只记录被 ^{3}He 气体吸收的散射事件，即将计分器 WlAngle 的粒子追踪状态设置为ABSORB。监测器计数

表 2. MPIGun 配置字符串中可用的参数。未提供默认值的参数为必填项。

参数	默认值	描述	Unit
src_w		粒子源表面的 X 方向尺寸（宽度）。	mm
src h_		粒子源表面的 Y 方向尺寸（高度）。	mm
源 z_		粒子源中心在全局参考系中的 Z 坐标。	mm
狭缝 w_		狭缝表面的 X 尺寸（宽度）。	mm
狭缝 h_		狭缝表面的 Y 尺寸（高度）。	mm
狭缝 z_		全局参考系中狭缝中心的 Z 坐标。	mm

表3。本研究开展的模拟。每次运行模拟 3×10^{11} 个中子。除运行5外，所有运行均包含钒容器。

运行	样品	体积密度 (厘米^3)	(克 ·厘米$^{-3}$)	时间[1] (CPU小时)
1	D_2O	0.90	1.105	524.6
2	H_2O	0.30	0.998	559.9
3	钒	1.84	6.118	545.0
4	void	N/A	N/A	465.0
5	理想化散射	2.14	6.118	414.1

[1] CPU 时间按核心数与每个核心的使用小时数之积计算。通过在 Prompt 中应用偏置技术 [21]，可以显著提高计算效率，如第IVA节所示。

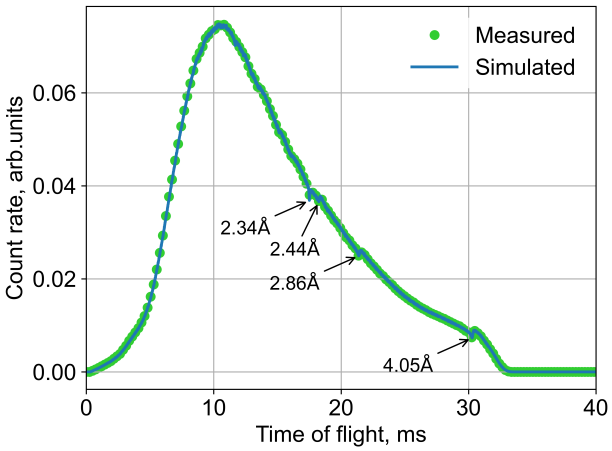

图 3. 测量（圆点）和模拟（实线）中监视器的飞行时间计数率。由于慢化体到监视器的距离为 29.543 米，因此在两种结果中观察到的四个尖锐凹陷对应的波长分别为 2.34 Å、2.44 Å、2.86 Å 和 4.05 Å。

$M(\lambda_j)$ 可通过附加到监测器的 WlSpectrum 计分器 [21] 获得。由于监视器材料的信息不明确，每个模拟监视器的 $P_m(\lambda_j)$ 均设为 100%。这意味着所有入射到监测器上的事件都会被计数，即将 WlSpectrum 计分器的粒子追踪状态设为 ENTRY。

III. 结果

图3 根据监测器的实验飞行时间数据，按照式（16）得出了模拟中子在初始波长处的中子注量分布。模拟监视器中飞行时间计数率曲线与测量数据重合；该监视器中充有少量 ^{3}氦气体。这证实入射波长得到了正确建模。

图 4 展示了 D_2O 测量（运行 0017672）的飞行时间数据，这些数据由探测器模块 A 的所有像素采集（见图2(a)）。模块 A 由八根探测器管组成，每根管有 100 个像素。可以观察到，飞行时间数据每隔 100 个像素呈现周期性模式，这表明相邻探测器管的响应相似。

根据式（13）和式（14），将所有探测器模块的 D_2O 测量和模拟所得飞行时间数据转换为波长和散射角下的微分计数，如图5所示。实测结果和模拟结果中均出现空白区域，这是由于探测器的角覆盖范围有限所致。实验数据和模拟数据的散射角范围看起来一致，证实探测器在实验和模拟中的放置位置一致。此外，模拟数据总体上与实验数据相似，但后者存在明显波动。差异可能归因于实验探测效率偏离标称值。

图6 比较了 D_2O在散射角方向上的测量计数与模拟计数，这些计数由对图 5 中的数据沿波长积分得到。尽管测量数据存在明显波动，但两种结果的形状吻合良好。由于测量的统计误差小于模拟的统计误差，预计测量中的波动是由探测效率不均匀造成的。

由式（20）计算得到的测量和模拟的校准强度D_2氧分别展示于图7（a）和图7（b）中。可以看出，模拟结果总体上与测量结果吻合良好。对应于钒布拉格峰的谷值 [37] 分别对应 (110)晶面、间距为 $Q_e = 2.938\text{Å}^{-1}$；(200)晶面、间距为 $Q_e = 4.156\text{Å}^{-1}$；以及 (211)晶面、间距为 $Q_e = 5.089\text{Å}^{-1}$，清晰可见。正如式（20）所述，这些谷值源自校准过程中的钒。不过，测量谷值的分辨率低于模拟谷值。这表明

表 4. WlAngle 配置字符串中可用的参数。没有默认值的参数为必需参数，其余为可选参数。

参数	默认值	描述	单位（数据类型）
name		直方图的名称。	str
样品_位置		样品在全局参考系中的位置向量。	mm
beam_dir		束流的方向向量。	mm
dist		中子源与样品之间的距离。	mm
波长下限_		直方图的最小波长。	Å
波长上限_		直方图的最大波长。	Å
波长箱数_	100	波长的箱数。	int
角度_最小值		直方图的最小角度。	°
角度_最大值		直方图的最大角度。	°
numbin_角度	100	角度的箱数。	int
方法	0	用于计算波长[1]的方法。	str
粒子追踪状态	入射	粒子追踪状态，可用选项为：表面、入射、ABSORB、传播、退出。字符串	
msname	“”	附加到散射体[2]上的 MultiScat 计分器的名称。	str
散射次数	-2	要计数的散射次数[3]。	int

[1] 默认值 0 表示考虑能量转移的方法，而值 1 表示基于中子在散射中不改变能量这一假设的方法。[2] 每个事件的散射次数由该 MultiScat 计分器计数。[3] 应为大于或等于 -2 的整数。默认值表示直方图累积事件时不考虑散射次数。值 -1 表示累积未进入由 msname 指定的 MultiScat 计分器所附加散射体的事件。其他值则对指定的散射次数进行累积。

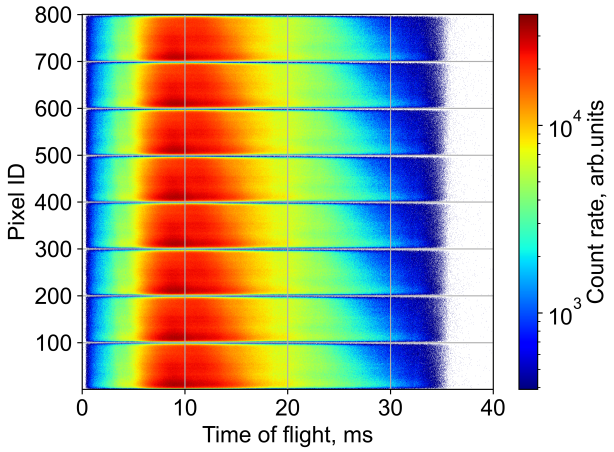

图4. 使用带容器的 D_2O 样品进行测量时，探测器模块 A 中全部800个像素的飞行时间计数率。

实验与模拟发散度之间的微小差异，源于对模拟源项的简化。此外，由于分析中使用的像素位置未经标准硅样品校准，测量谷值略微偏离预期轨迹。上述现象也可在测量和模拟得到的氢$_2$氧 校准强度中观察到（见图8）。

从图D_2O中提取的 60°、 100°和 140° 散射角下的测量和模拟校准强度，见图7，并展示于图9（a）中。测量数据中观察到的结构被模拟曲线很好地再现。图9（b）展示了从图氢$_2$氧中提取的对应校准强度，见图8。类似地，模拟结果

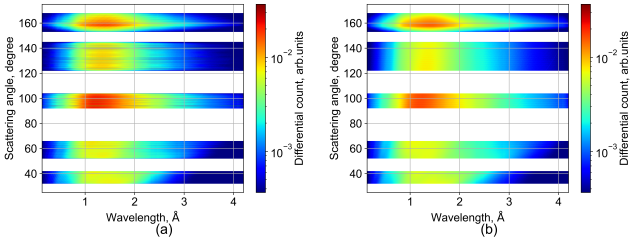

图5. D_2O 样品（带容器）在波长和散射角上的微分计数（公式（（14））。(a) 测量数据；(b) 相应的模拟数据。

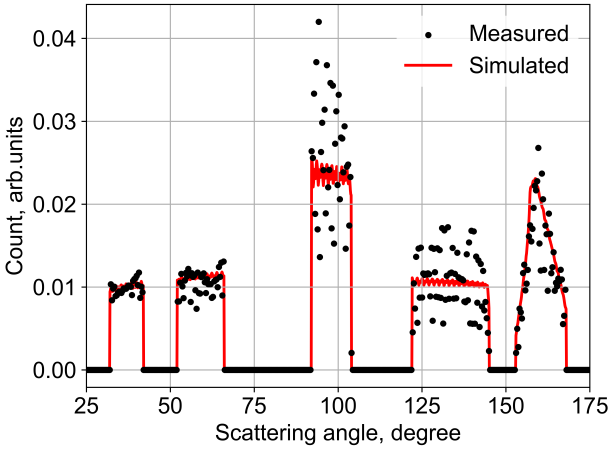

图6. D_2O 样品（带容器）的散射角计数；测量结果以圆点表示，模拟结果以实线表示。该数据通过对图5的数据按波长积分计算得到。

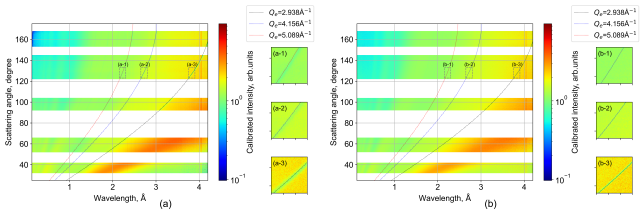

图7. 校准强度（方程（20））D_2氧。（a）测量数据和（b）模拟数据。黑色、蓝色和红色虚线分别表示 Q_e=2.938Å^{-1}、4.156 Å^{-1}和 5.089 Å^{-1}。子图（a-1）、（a-2）和（a-3）放大显示了图（a）中对应的区域，以突出由钒的布拉格峰造成的谷值。类似地，子图（b-1）、（b-2）和（b-3）展示了图（b）中模拟得到的谷值。

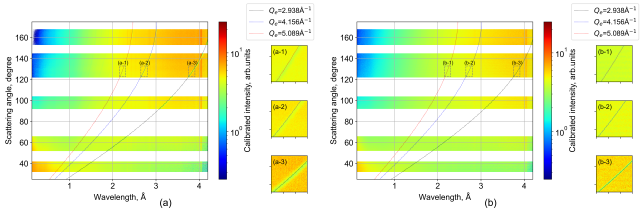

图8. 校准强度（方程（20））氢$_2$氧。（a）测量数据和（b）模拟数据。黑色、蓝色和红色虚线分别表示 Q_e=2.938Å^{-1}、4.156 Å^{-1}和 5.089 Å^{-1}。子图（a-1）、（a-2）和（a-3）放大显示了图（a）中对应的区域，以突出由钒的布拉格峰造成的谷值。类似地，子图（b-1）、（b-2）和（b-3）展示了图（b）中模拟得到的谷值。

当波长超过 1.5 Å 时，模拟结果与测量数据一致。然而，在实验结果中，三个不同散射角对应的 0.8 Å 至 1.5 Å 波长范围内观察到的平缓谷值并未在模拟中再现。此外，散射角为 60° 时，实验数据中 0.46 Å 处的峰值也未能被模拟捕捉到。这些差异源于 H 和 O 在 H_2O 模拟 [35] 中缺少相干散射过程。

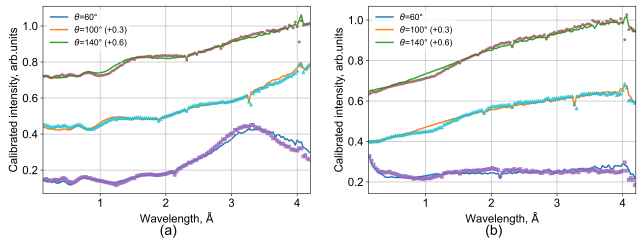

图9。（a）在20）中的D_2O 于以下散射角 60°、 100°和 140° 处的测量和模拟校准强度。（b）H_2O对应的测量和模拟结果。实线由模拟获得，而正方形、三角形和圆点分别表示在 60°、 100°和140°处的测量数据。

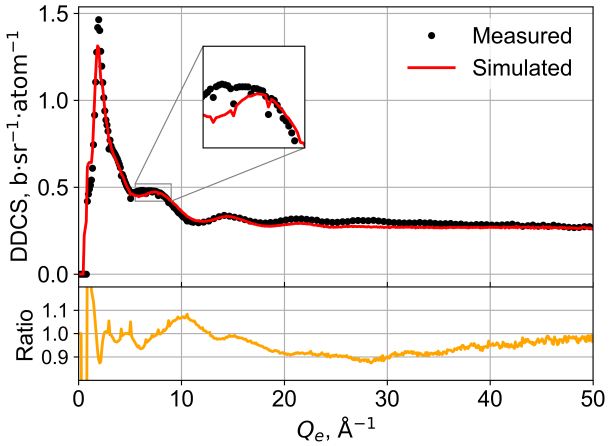

图10。由测量（圆点）和模拟（红色实线）获得的23）中D_2O 的微分截面。橙色实线表示模拟结果与测量结果之比。

为评估实验与模拟在 Q_e方面的一致性，通过将公式（23）应用于从所有探测器模块收集的测量数据和模拟数据，获得了绝对尺度下D_2O和H_2O的微分截面。D_2O的结果如图10所示，H_2O的结果如图11所示。除D_2O在 7.4 Å^{-1} 处峰值以及H_2O在1.7 Å^{-1} 处峰值存在小幅差异外，模拟很好地再现了测量曲线的结构，包括钒的布拉格效应引入的凹陷，如图10和图11的放大插图所示。由于探测器未覆盖低于 31° 的散射角（如图2（a）所示），因此在低 Q_e 区域的下降同时出现在D_2O和H_2O的结果中。在绝对尺度下，当 Q_e 大于1.5 Å^{-1}时，差异小于15%。当 Q_e 低于1.5 Å^{-1} 时，比值曲线上的尖锐结构由统计误差引起。D_2O和H_2O的比值曲线形状总体相似，表明两个样品的差异来源一致。需要注意的是，D_2O的散射截面 [35] 是在 [38] 使用精化后的静态结构因子 [32]生成的。因此，预计精化过程会导致轻微差异。

IV. 讨论

A. 多重散射

畸变因子的完整评估， $d(\lambda_e,\ \theta)$见公式（12），超出了本文稿件的范围，近期将在其他地方进行讨论。在本节中，我们采用偏置技术——Prompt 中的一种方差缩减技术——来高效评估多重散射的贡献。

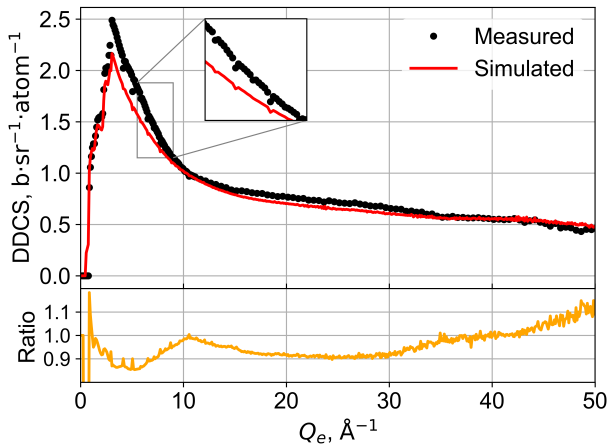

图 11. 由测量（圆点）和模拟（红色实线）得到的 H_2O 微分截面（式（23））。橙色实线表示模拟结果与测量结果之比。

通过对样品中中子轨迹的分段次数进行计数，可以提取单次散射和多重散射的贡献。图 12（a）展示了表 D_2O 模拟中所有探测器的单次、两次和四次散射贡献，如表3所述。与更高散射次数的贡献相比，两次散射造成的影响最为显著。经评估，两次散射的事件计数为单次散射事件计数的 19.2%。由于不同散射次数的曲线形状相似，单次散射和所有散射结果的形状之间差异很小。考虑到样品厚度为 8.952mm，这种过厚的样品导致了强烈的多次散射噪声。为测试厚度对多重散射的影响，计算了厚度为 D_2O 板中的多重散射贡献，结果如图 1 mm 所示。12（b）。不出所料，两次散射与单次散射事件计数之比大幅降低至 6.8%。

图 12（a）和图 12（b）还展示了通过截面偏置技术计算得到的单次散射和多重散射贡献结果。非偏置运行结果表明，随着散射次数增加，不同散射次数对应的统计质量会变差。然而，与相应的非偏置曲线相比，高散射次数的偏置曲线在统计上表现更优。这一观察表明，偏置技术能够显著提高计算效率，尤其是在分析方差较大的物理过程时。

B. 非弹性特征

对于强非弹性样品，在

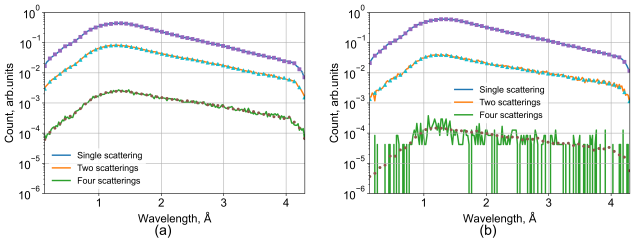

图 12. 通过对式（14）中的微分计数在散射角上积分，得到不同散射次数对应的波长计数。（a）对带容器的 D_2O 圆柱形样品进行非偏置和偏置模拟得到的结果；（b）对 D_2O 平板进行模拟得到的相应结果。（a）和（b）中所有模拟的入射中子数均为 10^9。实线表示非偏置结果，方块、三角形和圆点分别表示单次散射、两次散射和四次散射的偏置结果。

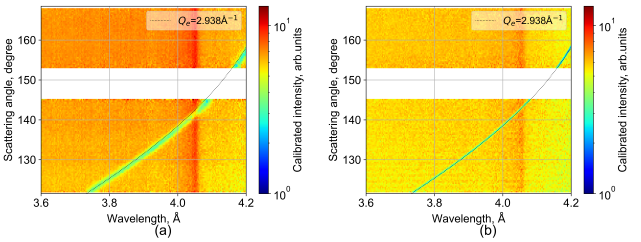

图 13。（a）测量数据中H_2O 的非弹性特征，以及（b）在 `WlAngle` 计分器中采用弹性近似得到的相应模拟结果。（a）和（b）分别是波长范围 3.6Å ∼ 4.2Å 和散射角范围 121.5° ∼ 168.5° 在图 8（a）和图 8（b）中的放大部分。

式（11）中所作的中子不与样品交换能量这一假设不再成立。非弹性效应源于中子与样品相互作用后，探测器处的波长谱偏离了原始入射谱。

在实验标定强度和相应的模拟结果中均观察到了一些意外的峰结构，这些结构与波长无关，因此排除了布拉格衍射的可能性（见图 7和图 8）。这些峰的位置恰好与入射谱中的小凹陷结构一致。这些尖锐的凹陷是由束流路径上的金属材料（最有可能是铝）发生相干弹性散射造成的，如图 3所示。为便于观察，图 13 展示了轻水中的这些峰结构的放大部分，图 14 展示了重水中的相应部分，重点关注波长范围 3.6Å 至 4.2Å。

为进一步研究单能 4.05 Å 入射中子的非弹性，对 H_2O 进行了额外模拟。在该模拟中，一个小样品被探测效率为 100% 的理想球形探测器包围。图 15 显示了在散射角为 10°、 40°、 90°、 120° 和 150° 时的归一化微分计数，$\tilde{c}_n(\lambda_{e,j},\theta_k) = \tilde{c}(\lambda_{e,j},\theta_k)/[M(\lambda_j)/\Delta\lambda]$。散射后波长短于

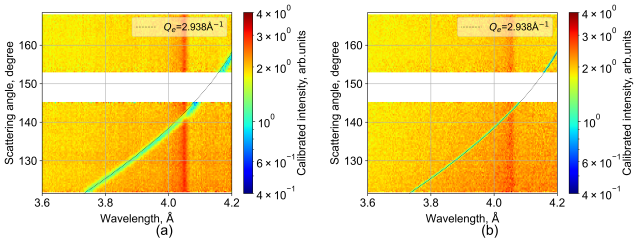

图 14. (a) 测量数据中氢$_2$氧 的非弹性特征，以及 (b) 在 `WlAngle` 计分器中采用弹性近似得到的相应模拟结果。(a) 和 (b) 分别是图 3.6 Å ∼ 4.2Å 波长范围及121.5° ∼ 168.5° 散射角范围内的放大部分，分别取自图 7(a) 和图 7(b)。

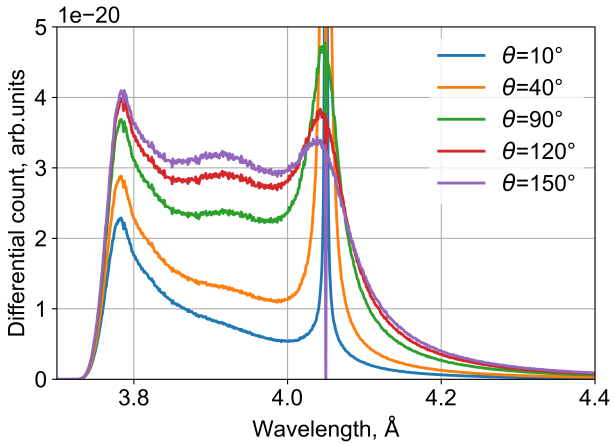

图 15. 散射角为 θ=10°、 40°、 90°、 120° 和 150°时，归一化微分计数随波长的变化。

入射波长，列于表5中。

在这五个散射角下，超过 76% 的散射事件表现出明显的波长变短，这是由于中子与氢发生非弹性散射所致。这种优先获得能量的效应使散射中子的波长发生偏移，导致探测器谱本身相较于近乎弹性的钒校准样品谱发生偏移和畸变。关键在于，将包含这种非弹性畸变的原始样品谱除以

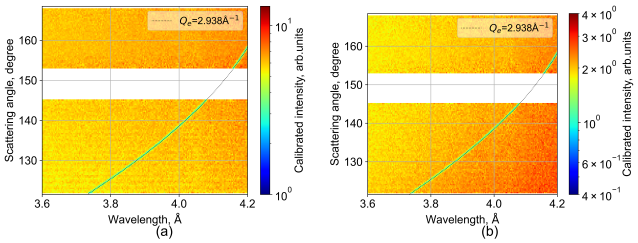

图 16. (a) WlAngle 计分器中采用非弹性处理得到的 H_2O 模拟结果，以及 (b) D_2O 的相应模拟结果。

根据监测器谱，如表达式中所示$\tilde{c}_n(\lambda_{e,\ j},\ \theta_k) = \tilde{c}(\lambda_{e,\ j},\ \theta_k)/[M(\lambda_j)/\Delta\lambda]$，归一化后的布拉格峰位置（包括 4.05Å 边缘）向较短波长偏移。这一现象直接导致了图 4.05Å 处观察到的尖锐凹陷，见图 15。

因此，显然仅非弹性就会在入射谱形状凹陷所在位置引入意外峰。为证明这一点，我们进行了两次新的模拟氢$_2$氧 和D_2氧 ，以明确考虑每次散射中的能量交换。结果如图16所示。观察到的结构减弱，证实非弹性是这些效应的主要成因。换言之，在弹性近似下得到的这些图样正是非弹性的特征。

表5. 对应图15的五个散射角下，波长短于入射波长的加速散射中子的比例。

散射角	10°	40°	90°	120°	150°
比例	0.812	0.767	0.782	0.787	0.789

五、结论

本研究利用蒙特卡罗模拟代码 Prompt，成功复现了非弹性样品的总散射实验。模拟纳入了真实的物理过程，包括吸收、非弹性和多重散射。模拟结果可与实验数据直接比较，在多个方面均表现出良好的一致性，包括角度和波长分布，以及角微分截面。

本文还报告了因中子与样品相互作用后波长发生偏移而产生的非弹性特征。测量中的这些特征可作为评估非弹性效应程度的指标。此外，能否消除这些特征预计将成为评估未来数据校正算法有效性的主要标准。

除了具备模拟多重散射的能力外，蒙特卡罗技术预计也适用于校正实验中预期出现的效应。未来将开展进一步研究，以开发一种在蒙特卡罗模拟指导下减少并校正实验数据的通用方法。

致谢

我们感谢 Xianxiu Qiu 在样品制备方面提供的帮助。感谢中国散裂中子源的同事 Huaican Chen、Bo Bai、Yuanguang Xia 和 Xujing Li 参与测量工作。我们感谢国家高能物理科学数据中心粤港澳大湾区分中心提供的计算和数据资源

（广东省材料科学数据中心）。作者感谢各方提供的宝贵讨论和大力支持。

作者贡献

Xiao-Xiao Cai 和 Ni Yang 主导了研究构思、设计和方法论。所有作者均参与了测量工作。Ni Yang 负责模拟和数据分析。Xiao-Xiao Cai、Zi-Yi Pan、Ming Tang 和 Ni Yang 参与了软件开发。Ni Yang 撰写了稿件初稿，所有作者均对稿件的先前版本提出了意见。

数据可用性

包含模拟数据、数据分析脚本和示例模拟文件的 ZIP 压缩文件可通过以下链接获取：https://doi.org/10.5281/zenodo.17046517

[1] Z. Ge、R. Xu、H. Wu、Y. Zhang、G. Chen、Y. Jin、N. Shu、Y. Chen、X. Tao、Y. Tian 等，《EPJ Web of Conferences》，第 239 卷（EDP Sciences，2020 年），第 09001 页。[2] B. Zhang、X.-B. Ma、K. Hu、T. Zhang、X. Ma 和 Y.-X. Chen，《核科学与技术》33，8（2022 年）。[3] D. A. Brown、M. B. Chadwick、R. Capote、A. Kahler、A. Trkov、M. Herman、A. Sonzogni、Y. Danon、A. Carlson、M. Dunn 等，《核数据表》148，1（2018 年）。[4] A. J. Plompen、O. Cabellos、C. de Saint Jean、M. Fleming、A. Algora、M. Angelone、P. Archier、E. Bauge、O. Bersillon、A. Blokhin 等，《欧洲物理学杂志 A》56，181（2020 年）。[5] K. Shibata、O. Iwamoto、T. Nakagawa、N. Iwamoto、A. Ichi- hara、S. Kunieda、S. Chiba、K. Furutaka、N. Otuka、T. Ohsawa 等，《核科学与技术杂志》48，1（2011 年）。[6] X.-X. Cai 和 T. Kittelmann，《计算机物理学通讯》246，106851（2020 年）。[7] H. Chen 和 X.-L. Wang，《自然·材料》15，689（2016 年）。[8] J.-Y. Tang、Q. An、J.-B. Bai、J. Bao、Y. Bao、P. Cao、H.-L. Chen、Q.-P. Chen、Y.-H. Chen、Z. Chen 等，《核科学与技术》32，11（2021 年）。[9] W. Jie、F. Shi-Nian、T. Jing-Yu、T. Ju-Zhou、W. Ding-Sheng、W. Fang-Wei 和 W. Sheng，《中国物理 C》33，1033（2009 年）。[10] J. Wei、H. Chen、Y. Chen、Y. Chen、Y. Chi、C. Deng、H. Dong、L. Dong、S. Fang、J. Feng 等，《核仪器与方法物理学研究 A 辑：加速器、光谱仪、探测器及相关设备》600，10（2009 年）。[11] J. Xu、Y. Xia、Z. Li、H. Chen、X. Wang、Z. Sun 和 W. Yin，《核仪器与方法物理学研究 A 辑：加速器、光谱仪、探测器及相关设备》1013，165642（2021 年）。[12] T. Kittelmann 和 X.-X. Cai，《计算机物理学通讯》267，108082（2021 年）。[13] X.-X. Cai、T. Kittelmann、E. Klinkby 和 J. M. Damián，《计算物理学杂志》380，400（2019 年）。[14] X.-X. Cai 和 E. Klinkby，《新物理学杂志》19，103027（2017 年）。[15] R. Du 和 X.-X. Cai，《计算物理学杂志》466，111382（2022 年）。[16] P. K. Willendrup 和 K. Lefmann，《中子研究杂志》23，7（2021 年）。[17] Y. Tang、S. Zhong、G. Yan 和 J. Chen，《仪器学杂志》18，P09032（2023 年）。[18] T. Wang、X. Tu、Y. Wang、X. Li、J. Gong 和 G. Sun，《核仪器与方法物理学研究 A 辑：加速器、光谱仪、探测器及相关设备 1024, 166041 (2022)。[19] Z. Han、T. Zuo、C. Ma 和 H. Cheng，《仪器科学与技术》47, 448 (2019)。[20] J. Y. Lin、H. L. Smith、G. E. Granroth、D. L. Abernathy、M. D. Lumsden、B. Winn、A. A. Aczel、M. Aivazis 和 B. Fultz，《核仪器与物理研究方法A辑：加速器、光谱仪、探测器及相关设备》810, 86 (2016)。[21] Z.-Y. Pan、N. Yang、M. Tang、P. Shen 和 X.-X. Cai，《计算机物理学通讯》295, 109004 (2024)。[22] J. Xu、L. Mei、W. Yin、X. Wang、W. Cai、Z. Li、T. Bo、H. Chen、B. Wang 和 Y. Chen，《核仪器与物理研究方法A辑：加速器、光谱仪、探测器及相关设备》927, 161 (2019)。[23] H. Qin、C. Ma、S. Gärtner、T. F. Headen、T. Zuo、G. Jiao、Z. Han、S. Imberti、C. C. Han 和 H. Cheng，《结构动力学》8 (2021)，https://doi.org/10.1063/4.0000065A。[24] M. Yang、T. Yang、M. Dong、Z. Huang、Y. Pu、L. Jin、R. Wang、Y. Luo、T. Zeng、Y. Tang 等，《先进材料》，2500984 (2025)。[25] A. K. Soper，《分子物理学》107, 1667 (2009)。[26] J. Dawidowski、G. Cuello 和 L. R. Palomino，《中子衍射中的数据处理步骤：从原始数据到微分截面》（开放获取出版社，Rijeka，2012）。[27] J. Powles，《分子物理学》26, 1325 (1973)。[28] L. R. Palomino、J. Blostein 和 J. Dawidowski，《核仪器与物理研究方法A辑：加速器、光谱仪、探测器及相关设备》646, 142 (2011)。[29] E. Farhi、V. Hugouvieux、M. Johnson 和 W. Kob，《计算物理学杂志》228, 5251 (2009)。[30] Y. Kameda、M. Sasaki、T. Usuki、T. Otomo、K. Itoh、K. Suzuya 和 T. Fukunaga，《中子研究杂志》11, 153 (2003)。[31] A. Zeidler、P. S. Salmon、H. E. Fischer、J. C. Neuefeind、J. M. Simonson 和 T. E. Markland，《物理学杂志：凝聚态》24, 284126 (2012)。[32] A. K. Soper，《国际学术研究通知》2013, 279463 2013( )。[33] M.-C. Bellissent-Funel、S. Chen 和 J.-M. Zanotti，《物理评论E》51, 4558 (1995)。[34] Y. Abe、T. Tsuboi 和 S. Tasaki，《核仪器与物理研究方法A辑：加速器、光谱仪、探测器及相关设备》735, 568 (2014)。[35] J. M. Damian、J. Granada 和 D. Malaspina，《核能年鉴》65, 280 (2014)。

[36] J. Granada、V. Gillette 和 R. Mayer，《Physica B》+C **142**，223（1986）。

[37] J. Zemann，《晶体学报》**18**，139（1965）。

[38] K. Sköld，《物理评论快报》**19**，1023（1967）。