МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ АВТОНОМНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ

«НОВОСИБИРСКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ» (НОВОСИБИРСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ, НГУ)

Факультет ФИЗИЧЕСКИЙ

Кафедра ФИЗИКИ ПЛАЗМЫ_

Направление подготовки 03.03.02 ФИЗИКА

Образовательная программа: БАКАЛАВРИАТ

ВЫПУСКНАЯ КВАЛИФИКАЦИОННАЯ РАБОТА БАКАЛАВРА

Казанцева Сергея Романовича		
	(Фамилия, Имя, Отчество автора)	
Тема работы	Моделирование дифракции синхротронного излучения	
	на мозаичном монокристалле	

«К защите допущена»	
Заведующий кафедрой	Научный руководитель
Иванов А. А.	Аракчеев А.С.
д. фм. н., профессор	к. фм. н., с. н. с.,
ИЯФ СО РАН	ИЯФ СО РАН
/ (фамилия И., О.) / (подпись, МП)	///
«»	«»
	Дата защиты: «»

Оглавление

Введение	3
Диагностика деформаций на основе быстрой дифрактометрии	4
Измеренные аппаратные функции	7
Описание рассеяния СИ на монокристалле вольфрама	9
Аналитические расчеты	11
Расчёт для тонкого пучка СИ	11
Расчёт для пучка СИ конечной ширины	12
Учёт мозаичности кристалла	18
Численные расчеты	19
Расчет реальной функции распределения	
Заключение	23

Введение

В термоядерном реакторе под действием импульсных тепловых нагрузок на вольфрамовую стенку дивертора ожидается возникновение трещин. Причиной появления трещин является возникновение пластических деформаций [1]. Для того чтобы понять, как деформации образуются, и как этого избежать, нужно измерить их динамику во время импульсной тепловой нагрузки. Сейчас в ИЯФ СО РАН идет разработка динамической диагностики таких деформации на основе быстрой дифрактометрии. Метод быстрой заключается в измерении дифракционной дифрактометрии картины рассеянного на образце монокристалла пучка синхротронного излучения (СИ), деформаций в образце по полученной восстановлении динамики И дифракционной картине. Это задача является обратной. Для интерпретации результатов дифракционной картины необходимо уметь решать прямую задачу, которая и решается в данной работе: задача о рассеянии пучка СИ на монокристалле вольфрама. Работа проводится в режиме дифракции на просвет [2], образца используется мозаичный (геометрия Лауэ) В качестве монокристалл с толщиной порядка длины поглощения СИ в вольфраме. В модели учитывались поглощение СИ и мозаичность кристалла потому, что ожидалось что они будут иметь сильное влияние. При этом пренебрегаем угловой расходимостью начального пучка. Для описания использовалось приближение кинематической теории дифракции. Eë основными положениями являются однократность рассеяния и отсутствие влияния рассеянной волны на исходную.

Диагностика деформаций на основе быстрой дифрактометрии

Динамическая диагностика деформаций на основе быстрой дифрактометрии находится в разработке на станции «Плазма» в Сибирском центре синхротронного и терагерцового излучения (СЦСТИ). Суть диагностики на основе быстрой дифрактометрии состоит в следующем. Пучок СИ рассеивается в образце из монокристаллического вольфрама, и рассеянное СИ регистрируется однокоординатным детектором. Прямой пучок во избежание взаимодействия с детектором обрезается ножом. Источником СИ служил вигглер, установленный на основном кольце комплекса ВЭПП-4М. Схема эксперимента представлена на Рисунке 1.



Рисунок 1. Схема проведения эксперимента с рассеянием СИ на образце монокристалла вольфрама.

Если образец не подвергается импульсной тепловой нагрузке, то СИ будет отражаться от кристаллической плоскости под одним и тем же углом по всей толщине образца. Далее начнем облучать образец лазером, имитирующим импульсный нагрев. Тогда из-за нагрева кристалл будет расширяться, вследствие чего будет происходит поворот отражающей кристаллической плоскости, которой в свою очередь ведет к изменению угла

рассеяния СИ. Координата детектора однозначно связана с углом рассеяния линейным преобразованием. Поэтому если угол рассеяния изменится, то и изменится распределение рассеянного СИ, регистрируемое детектором – дифракционные пики будут расширятся В область координат, соответствующей новым углам рассеяния. Схема искривления кристаллической плоскости образца и изменения дифракционной картины представлена на Рисунке 2.





В случае если образец прогревается полностью, то дифракционный пик полностью смещается в другую точку на детекторе. Когда облучение лазером прекращается, то образец начинает остывать и сжиматься, в следствие чего отражающая кристаллическая плоскость стремится вернуться к исходному состоянию, а дифракционный пик к своему положению до нагрева. Если же после остывания пик не вернулся на исходное положение, то это означает что в образце произошла пластическая деформация. По результатам динамики изменения формы дифракционного пика можно восстановить распределение деформации. На Рисунке 3 изображены дифракционные пики до и после нагрева. Малость уширения пика после охлаждения связана с тем, что облучался достаточно толстый образец, поэтому прогрелся только приповерхностный слой.



Рисунок 3. Дифракционный пик на детекторе до нагрева и после охлаждения.

Измеренные аппаратные функции

При любой динамической диагностике имеют место аппаратные искажения, связанные с тем, что измерительный прибор влияет на приходящий сигнал. По определению аппаратная функция соответствует тому что покажет прибор при регистрации импульса, описываемого δ-функцией Дирака [3]. В применении к диагностике динамики напряжении в образце аппаратные функции проявляют себя следующим образом. Эффекта поворота отражающей кристаллической плоскости можно добиться с помощью вращения образца. При вращении образца меняется угол рассеяния и, соответственно, положение пика на детекторе. Угол рассеяния определяет энергию дифрагированного излучения. В ходе одного из экспериментов на станции «Плазма» изменялся наклон образца по отношению к входящему пучку СИ. Измерения проводились вблизи угла рассеяния, соответствующего К-краю поглощения вольфрама. Полученные зависимости являются аппаратными функциями для задачи восстановления деформации образца по форме дифракционного пика. Каждая кривая соответствует определенному углу рассеяния. В последствии данные аппаратные функции можно использовать для анализа динамики изменения положения дифракционного пика на детекторе, вследствие чего можно вычислить как повернулась кристаллическая плоскость и какие возникли напряжения в образце. На Рисунке 4 представлены измеренные аппаратные функции для образца толщиной порядка 500 мкм.



Рисунок 4. Измеренные аппаратные функции.

Задачей данной работы было создание модели, описывающей рассеяние СИ на монокристалле вольфрама и рассчитывающей аппаратные функции детектора. По рассчитанным аппаратным функциям можно восстановить динамику напряжений в образце.

Описание рассеяния СИ на монокристалле вольфрама

Рассеянное излучение является результатом отражения СИ от системы параллельных кристаллических плоскостей образца. Условием интерференции рассеянных волн является закон Вульфа-Брэггов и записывается в следующем виде:

$$2d\sin\theta = n\lambda\tag{1}$$

где d - межплоскостное расстояние, θ - угол между кристаллической плоскостью и направлением распространения начального пучка СИ, λ - длина волны, а n -целое число (порядок дифракции). Это условие говорит о том, что при заданных длинах волн под определенными углами рассеяния происходит появление интерференционных максимумов в точке наблюдения.

Для дальнейшего описания рассеяния на кристалле воспользуемся кинематической моделью дифракции. Данная модель состоит из ряда допущений [4]:

- 1. Элементарная ячейка состоит из сферически симметричных атомов.
- 2. Тепловые колебания атомов отсутствуют.
- 3. Все элементарные ячейки в кристалле одинаковы дефектов нет.
- 4. Рассеяние однократно, т.е. рассеянная один раз волна выходит из кристалла.
- 5. Рассеянная волна не влияет на падающую.

Несмотря на все свои упрощения, кинематическая модель наиболее часто используется в дифрактометрии.

Следующим фактором нужно учесть поглощение излучения в материале. Интенсивность пучка, проходящего через образец толщиной *L*, экспоненциально падает с толщиной образца, что можно описать следующим выражением:

$$I = I_0 e^{-kL} \tag{2}$$

где I – интенсивность прошедшего пучка, I_0 – интенсивность входящего пучка, L – длина пути излучения в образце, k – линейный коэффициент поглощения, зависящий от энергии.

Важным моментом является то, что вигглер СИ ВЭПП-4 в реальности не является монохроматическим источником СИ. Однако влиянием спектра пучка на ширину аппаратных функций можно пренебречь, так как измерение аппаратных функций обычно проводится на К-краю поглощения вольфрама, т.е. при энергии пучка 69 кэВ. В этой области спектра вигглера, изменение энергии на 1-2 кэВ не оказывает существенного влияния на уширение одной дифракционной кривой, так как при оценке углового расширения кривой по формуле $\delta\theta \sim \frac{\delta\lambda}{2dcos\theta}$, $\delta\theta$ будет порядка 0,02°. Однако для всего набора аппаратных функций нужно учитывать изменение спектра и чувствительность детектора путем умножения рассеянного сигнала на функцию энергии, известную из эксперимента.

Аналитические расчеты

Расчёт для тонкого пучка СИ

Вычислим результат измерения одномерным детектором рассеяния СИ на монокристалле. Сначала рассмотрим случай, когда на образец падает бесконечно тонкий пучок СИ. В образце пучок движется по прямой, рассеиваясь в каждой точке на ней под углом 2θ . После рассеяния под этим углом пучок проходит еще некоторый путь *l* в образце, причем его длина зависит от координаты той точки, в которой пучок рассеялся. Отложим ось *x* из точки попадания пучка на образец (точки *O*, Рис 4) вдоль пути его следования в образце. Точкой *B* назовем точку, в которой прямой пучок выходит из образца. Красной пунктирной линией обозначим кристаллическую плоскость на которой происходит рассеяние. Введем следующие параметры: *a* - толщина образца, угол α – угол, под которым пучок падает на образец (Рис. 5).



Рисунок 5. Геометрия рассеяния бесконечно тонкого пучка СИ на монокристалле.

Тогда интенсивность рассеянного в точке *х* излучения можно записать в следующем виде:

$$I_1(x,\alpha,\theta) = I_0 e^{-k(x+l(x,\alpha,\theta))}$$
(3)

Вычислим *l*, применяя теорему синусов для треугольника *ABC*:

$$\frac{OB - x}{\sin(\pi - 2\theta - \alpha)} = \frac{l(x)}{\sin \alpha}, \quad OB = \frac{a}{\sin \alpha}$$
(4)

Тогда

$$l(x,\alpha,\theta) = \frac{\sin\alpha}{\sin(\pi - 2\theta - \alpha)} \left(\frac{a}{\sin\alpha} - x\right)$$
(5)

Расчёт для пучка СИ конечной ширины

Рассмотрим случай когда пучок имеет конечную ширину *b*. Можно представить такой пучок суммой пучков с бесконечно малой шириной. Тогда суммарная интенсивность *I* "широкого" пучка, рассеянного в объёме *V* через который проходит пучок и приходящая на детектор будет иметь вид :

$$I = \iiint I'_{1} dV, \quad I'_{1} = I_{1} e^{-d}$$
(6)

где d – дополнительный путь, который проходит "тонкий" пучок в образце. Интегрирование по объёму вдоль координаты, перпендикулярной плоскости рисунка пучка даст некий постоянный множитель, который обозначим A. Проложим вторую координатную ось y под углом 2θ к оси x с началом координат в точке 0 и направим её в направлении, противоположном направлении рассеяния, чтобы координата по этой оси некоторой точки в объёме, на который попал пучок, была положительной (Рис. 6). Тогда:

$$I = A \iint I_1 \sin 2\theta dx dy \tag{7}$$





Нам нужно вычислить распределение рассеянного СИ на детекторе. Так как рассеянное излучение из точки с координатой x приходит в одну и ту же точку на детекторе при всех значениях координаты y, то нас интересует величина $\frac{dI}{dx}$, т.е.:

$$\frac{dI}{dx} = A \int_{D(x)}^{U(x)} I_1 \sin 2\theta dy$$
(8)

где U(x) и D(x) – соответственно верхний и нижний пределы интегрирования по координате *y*. Так как эти пределы зависят от *x*, нужно найти эти

зависимости. При x < BP U(x) должна линейно расти как длина отрезка *OP* в зависимости от x, это можно записать в виде:

$$U(x) = \frac{x \sin \alpha}{\sin(\pi - 2\theta - \alpha)}$$
(9)

При $x > BP = \frac{b\sin(\pi - 2\theta - \alpha)}{\sin\alpha\sin2\theta}$, U(x) становится постоянной и равняется

длине отрезка *OB*:

$$U(x) = \frac{b}{\sin 2\theta} \tag{10}$$

При x < 0 и $x > BG = BP + \frac{a}{\sin \alpha}$, U(x) = 0 т.к. такие значения x лежат

вне

области интегрирования. Обобщая эти рассуждения и используя свойства функции Хевисайда, можно записать выражение для U(x) следующим образом:

$$U(x) = \frac{x \sin \alpha}{\sin(\pi - 2\theta - \alpha)} \left(H(x) - H\left(x - \frac{b \sin(\pi - 2\theta - \alpha)}{\sin \alpha \sin 2\theta}\right) \right) + \frac{b}{\sin 2\theta} \left(H\left(x - \frac{b \sin(\pi - 2\theta - \alpha)}{\sin \alpha \sin 2\theta}\right) - H\left(x - \left(\frac{b \sin(\pi - 2\theta - \alpha)}{\sin \alpha \sin 2\theta} + \frac{a}{\sin \alpha}\right) \right) \right)$$
(11)

При x < OA D(x) = 0, так как интегрирование начинается с верхней грани пучка. Когда x > OA, D(x) должна линейно убывать как длина отрезка *AG* в зависимости от x, это можно записать как:

$$D(x) = \frac{\left(x - \frac{a}{\sin\alpha}\right)\sin\alpha}{\sin(\pi - 2\theta - \alpha)}$$
(12)

При
$$x < 0$$
 и $x > BG = BP + \frac{a}{\sin \alpha}$, $D(x) = 0$, т.к. такие значения x лежат

вне области интегрирования, и итоговое выражение для D(x) можно записать следующим образом:

$$D(x) = \frac{\left(x - \frac{a}{\sin\alpha}\right)\sin\alpha}{\sin(\pi - 2\theta - \alpha)} \left(H\left(x - \frac{a}{\sin\alpha}\right) - H\left(x - \left(\frac{b\sin(\pi - 2\theta - \alpha)}{\sin\alpha\sin2\theta} + \frac{a}{\sin\alpha}\right)\right)\right)$$
(13)

На Рисунке 7 отображена зависимость пределов интегрирования U(x), D(x) от координаты вдоль распространения пучка, при a = 100 мкм, b = 500мкм.



Рисунок 7. Пределы интегрирования в формуле (8) при $\beta = 93^{\circ}$, $\alpha = 87^{\circ}$

По рисунку видно, что при малых углах рассеяния интегрирование при большинстве значений координаты вдоль направления распространения начального пучка СИ ведётся по интервалу постоянной длины. Отличия возникают только на малых участках вблизи краевых значений координаты вдоль направления распространения начального пучка СИ.

Теперь найдем *d* в формуле (6). На Рисунке 6 пунктирной линей обозначен оптический путь "тонкого" пучка, рассеивающемся в некоторой

точке (x, y). Видно что d = y - d'(y), т.к. d'(y) соответствует пути пучка вне образца, причем

$$d'(y) = y \frac{\sin(\pi - 2\theta - \alpha)}{\sin \alpha}$$
(14)



Рисунок 8. Обозначения углов при рассеянии СИ на монокристалле

Также сделаем переобозначение углов: $\beta = \theta + \alpha$, так как устройство экспериментальной установки позволяет задавать именно угол β , а не θ (Рис.8). Таким образом, окончательное выражение для распределения интенсивности на детекторе можно записать в следующем виде:

$$\frac{dI}{dx}(x,\beta,\alpha) = AI_0 \int_{D(x)}^{U(x)} e^{-kL(x,y,\beta,\alpha)} \sin 2\theta dy$$
(15)

$$L(x, y, \beta, \alpha) = \frac{a}{\sin(2\beta - \alpha)} + x \left(1 - \frac{\sin\alpha}{\sin(2\beta - \alpha)}\right) + y \left(1 - \frac{\sin(2\beta - \alpha)}{\sin\alpha}\right) \quad (16)$$

$$U(x) = \frac{x \sin \alpha}{\sin(2\beta - \alpha)} \left(H(x) - H\left(x - \frac{b \sin(2\beta - \alpha)}{\sin \alpha \sin 2(\beta - \alpha)}\right) \right) + \frac{b}{\sin 2(\beta - \alpha)} \left(H\left(x - \frac{b \sin(2\beta - \alpha)}{\sin \alpha \sin 2(\beta - \alpha)}\right) - H\left(x - \left(\frac{b \sin(2\beta - \alpha)}{\sin \alpha \sin 2(\beta - \alpha)} + \frac{a}{\sin \alpha}\right) \right) \right)$$
(17)

$$D(x) = \frac{\left(x - \frac{a}{\sin\alpha}\right)\sin\alpha}{\sin(2\beta - \alpha)} \left(H\left(x - \frac{a}{\sin\alpha}\right) - H\left(x - \left(\frac{b\sin(2\beta - \alpha)}{\sin\alpha\sin(2(\beta - \alpha))} + \frac{a}{\sin\alpha}\right)\right)\right) (18)$$

На Рисунке 9 изображен результат численного интегрирования выражения (15) при различных значения ширины пучка и толщины образца. Значения и ширины пучка, и толщины образца брались 100 мкм и 500 мкм, что соответствует характерным значениям этих величин в экспериментах. Углы были выбраны для соответствия геометрии положения и ориентации кристаллической структуры образца в экспериментах. Отличие формы сигнала на детекторе от прямоугольной существенно только для случая самого тонкого пучка СИ (100 мкм) и толстого образца (500 мкм). Уменьшения расчётного сигнала с увеличением толщины образца связано с большим поглощением СИ в более толстом образце.



Рисунок 9. Распределение интенсивности на детекторе для различных ширин пучка СИ (*a*) и толщины образца (*b*) и при углах $\beta = 46^{\circ}$, $\alpha = 44^{\circ}$

Учёт мозаичности кристалла

В нашем случае образец является не идеальным монокристаллом, а мозаичным. Идеальный монокристалл представляет собой единую решетку во всем объеме, мозаичный монокристалл состоит из слегка разориентированных кристаллических блоков. Это означает, что нужно ввести некоторый разброс по углу β , для этого возьмем плотность нормального распределения $f(\beta, \beta_0, \sigma)$:

$$f(\beta,\beta_0,\sigma) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma}} e^{-\frac{(\beta-\beta_0)^2}{2\sigma^2}}$$
(19)

Вообще говоря, если мы хотим расположить детектор так, чтобы начало отсчета графика распределения интенсивности на нем совпадало с краем рассеянного пучка СИ, то нужно ввести следующее преобразование координат:

$$x = \frac{x + 2R(\beta - \beta_0)}{\sin 2(\beta - \alpha)}$$
(20)

где, x'- координата детектора. Детектор расположен перпендикулярно к направлению рассеянного пучка. Здесь добавка к положению на детекторе изза изменения угла рассеяния взята в линейном приближении. Таким образом, выражение для интенсивности рассеянного излучения уже будет функцией от x', то есть показывать распределение интенсивности уже непосредственно на детекторе. Осталось лишь проинтегрировать по углу β для учета углового разброса:

$$\frac{dI}{dx}(x,\beta,\alpha) = AI_0 \int_{D(x)}^{U(x)} e^{-kL(x,y,\beta,\alpha)} f(\beta,\beta_0,\sigma) \sin 2(\beta-\alpha) dy d\beta$$
(21)

Данный интеграл вычислялся с помощью численного интегрирования в пакете программного обеспечения Wolfram Mathematica.

Численные расчеты

Для проверки правильности моделирования рассеяния СИ на мозаичном кристалле была рассчитана зависимость интенсивности рассеянного СИ от координаты вдоль щели одномерного детектора. Было проведено сравнение измеренных аппаратных функций с расчетными. Благодаря тому, что в эксперименте были проведены измерения около К-края поглощения, где аппаратная функция ведет себя довольно сложным образом, сравнение с расчётными данными позволяет судить о точности воспроизведения в моделировании реальной ситуации. Сравнение экспериментальных данных с расчётными представлено на Рисунке 10.



Рисунок 10. Сравнение экспериментальных аппаратных функций с расчетными.

Наилучшее совпадение было получено при следующих параметрах расчёта: $\beta_0 = 45^\circ$, $\sigma = 0.06^\circ$, $\alpha = 85.4^\circ$, a = 470 мкм, b = 560 мкм. Параметры σ и α подбирались для наилучшего соответствия

экспериментальных и расчётных данных. Результат расчёта передаёт характерную форму огибающей дифракционной картины, однако, есть расхождения по форме отдельных пиков, непосредственно находящихся около К-края (Рис.11). Видимо это связано с использованным гауссовой функции распределения по углу β (19). Учёт реального распределения может улучшить совпадение.





В области К-края расчетные кривые резко обрываются, в отличие от экспериментальных где наблюдается некоторое размытие. Данное отличие свидетельствует о том, что фотоны, прилетевшие в каналы до К-края, приводят к появлению сигнала в нескольких каналах по сторонам от точки регистрации. Следующим шагом является вычисление реальной функции распределения углов по рассчитанным дифракционным пикам. Для этого выражение (21) являющееся уравнением Фредгольма 1-го рода, было решено относительно функции $f(\beta, \beta_0, \sigma)$. Представив ее суммой прямоугольников одинаковой ширины с неизвестными высотами, добиваемся хорошего совпадения расчетной и экспериментальной кривых при величине разбиения N=30 (Рис.12):



Рисунок 12. Сравнение формы расчетной и измеренной аппаратных функций, при использовании реальной функции распределения.

Таким образом была получена реальная функция распределения по углам в образце. Сравнение с модельной гауссовой функцией распределения приведено на Рисунке 13.



Рисунок 13. Сравнение гауссовой и реальной функций распределения.

Заключение

В пакете Wolfram Mathematica была написана программа для моделирования процесса рассеяния пучка СИ в мозаичном монокристалле вольфрама для расчета аппаратных функций для задачи восстановления деформации образца по форме дифракционного пика. Были проведены численные расчёты для тонкого пучка СИ, пучка СИ с конечной шириной и расчёты с учётом мозаичности кристалла. Было проведено сравнение с экспериментальными данными, которое выявило расхождения по форме дифракционного пика. Данное расхождение было устранено посредством вычисления реального распределения углов в кристалле. Отличие поведения расчетной кривой от экспериментальной в области К-края связано с размытием сигнала детектором при работе в области более высоких энергий.

Список литературы

- K. Ikeda. Progress in the ITER Physics Basis // Nuclear Fusion. –2007. Vol 47, N 6.
- Warren B.E. X-ray Diffraction. N.Y: Addison Wesley Pub. Co., 1969. 381 p.
- Физический энциклопедический словарь / Под. ред. А.М. Прохорова. М.: Советская энциклопедия, 1983.
- Джеймс Р. Оптические принципы дифракции рентгеновских лучей. Пер. с англ. – М.: Издательство иностранной литературы, 1950. – 572 с.