

PACS numbers: 07.05.Tr, 42.25.Bs, 42.30.Va, 61.05.cp, 61.72.Ff, 62.20.F-, 81.70.Fy

Вплив механічних деформацій на оптичні властивості металевих стопів у Рентгеновому діапазоні

А. Ю. Овчаренко, Ю. М. Овчаренко

*Інститут прикладної фізики Національної академії наук України,
вул. Петропавлівська, 58,
40000 Суми, Україна*

У рамках теорії Френеля–Кірхгоффа проведено комп’ютерне моделювання взаємодії Рентгенового випромінювання з довжиною хвилі $\lambda = 1.5374 \text{ \AA}$ (лінія CuK_α) з тривимірними зразками довільної геометричної форми, виготовленими зі стопів $\text{Fe-13\%Cr-(2, 4, 6, 8)\%Al}$ та $\text{Fe-1,3\%Cu-1\%Ni}$ за температури у 300 К, які піддавалися деформації стиснення–розтягання. Величини відносної деформації ε дорівнювали $-0,10$, $-0,05$, $0,00$, $0,05$ і $0,10$. Було показано, що Рентгенове випромінювання під час взаємодії з речовиною є дуже чутливим до зміни електронної густини матеріалу. На основі відомих теоретичних співвідношень і результатів молекулярно-динамічного моделювання запропоновано підхід щодо числових розрахунків декременту заломлення δ та коефіцієнта вбирання β Рентгенового випромінювання для багатокомпонентних стопів із різним процентним вмістом хемічних елементів і різною величиною деформації. Результати роботи носять прикладний характер і можуть бути корисними розробникам лабораторного обладнання та спеціалістам з матеріалознавства.

Ключові слова: дифракція Рентгенового випромінювання, теорія Френеля–Кірхгоффа, фазовий контраст, оптичний декремент заломлення, коефіцієнт вбирання, механічна деформація.

Corresponding author: Artur Yuriiovych Ovcharenko
E-mail: oartturr@gmail.com

*Institute of Applied Physics, National Academy of Sciences of Ukraine,
58 Petropavlivska Str., UA-40000 Sumy, Ukraine*

Citation: A. Yu. Ovcharenko and Yu. M. Ovcharenko, The Influence of Mechanical Deformations on the Optical Properties of Metal Alloys in the X-Ray Range, *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, 47, No. 5: 453–471 (2025), DOI: [10.15407/mfint.47.05.0453](https://doi.org/10.15407/mfint.47.05.0453)

© Publisher PH “Akadempriodyka” of the NAS of Ukraine, 2025. This is an open access article under the CC BY-ND license (<https://creativecommons.org/licenses/by-nd/4.0>)

Within the framework of the Fresnel–Kirchhoff theory, a computer simulation of the interaction of x-ray radiation with a wavelength of $\lambda = 1.5374 \text{ \AA}$ (line $\text{CuK}\alpha$) with three-dimensional samples of arbitrary geometric shape made of alloys $\text{Fe-13\%Cr-(2, 4, 6, 8)\%Al}$ and $\text{Fe-3\%Cu-1\%Ni}$ at a temperature of 300 K, which are subjected to compression–tension deformation. The values of the relative deformation ε are equal to -0.10 , -0.05 , 0.00 , 0.05 , and 0.10 . As shown, the x-ray radiation interacting with matter is very sensitive to changes in the electron density of the material. Based on known theoretical relations and the results of molecular-dynamic modelling, an approach of numerical calculations of refraction decrement δ and absorption coefficient β of x-ray radiation for multicomponent alloys with different percentage composition of chemical elements and different amount of deformation is proposed. The results of this work are applied in nature and can be useful both to developers of laboratory equipment and to specialists in the field of materials science.

Key words: x-ray diffraction, Fresnel–Kirchhoff theory, phase contrast, optical refraction decrement, absorption coefficient, mechanical deformation.

(Отримано 29 квітня 2024 р.; остаточн. варіант — 14 січня 2025 р.)

1. ВСТУП

Стопи на основі Fe, Cr, Cu, Ni, Al та інших металів широко використовуються в різних галузях промисловості, таких як машинобудування, енергетика, авіація та космічна техніка, через їхню високу міцність, корозійну стійкість, магнетні властивості тощо. Невід’ємною частиною технологічних процесів виготовлення виробів із цих стопів часто є механічна деформація [1, 2]. Тому розуміння змін оптичних властивостей внаслідок деформації може допомогти контролювати якість продукції та передбачати її експлуатаційні характеристики, наприклад, за допомогою Рентгенового випромінювання (РВ) як неруйнівного методу виявлення структурних особливостей і змін досліджуваних об’єктів [3–6].

У даній роботі ми пропонуємо методи розрахунку оптичних декрементів заломлення та коефіцієнтів вбирання багатокомпонентних металевих стопів на основі теоретичних співвідношень і результатів молекулярно-динамічного моделювання. У рамках скалярної теорії Френеля–Кірхгофа провели комп’ютерну симуляцію взаємодії РВ з металевими стопами $\text{Fe-13\%Cr-(2, 4, 6, 8)\%Al}$ та $\text{Fe-1,3\%Cu-1\%Ni}$ за температури у 300 К, які піддавалися механічній деформації стиснення–розтягання.

Результати даних досліджень можуть бути використані для розробки нових методів неруйнівного контролю якості матеріалів, заснованих на мірянні оптичних властивостей, а також корисні для створення прототипів нового обладнання та проведення реальних експериментів в області матеріалознавства.

2. ОПТИЧНІ ВЛАСТИВОСТІ МЕТАЛЕВИХ СТОПІВ

2.1. Аналітичний модель розрахунку оптичних властивостей об'єктів

У процесі моделювання взаємодії РВ з речовиною для одержання точних результатів слід враховувати параметри, які характеризують властивості об'єкта. Під час проходження РВ через досліджуваний зразок відбувається заломлення та вбирання РВ, що кількісно можна охарактеризувати за допомогою комплексного показника заломлення n :

$$n = 1 - \delta + i\beta, \quad (1)$$

де δ — декремент заломлення, β — коефіцієнт вбирання.

Величина δ залежить від хемічного складу, електронної густини матеріялу об'єкта та довжини хвилі падного РВ. Цей параметер визначає фазовий зсув і амплітуду вторинних хвиль, розсіяних об'єктом, що істотно впливає на дифракційну картину. Неврахування декремента може призвести до значних похибок у розрахунках.

Очевидно, що за механічної деформації буде відбуватися зміна електронної густини і це приведе до зміни оптичних властивостей досліджуваного матеріялу. Одержимо співвідношення для декремента заломлення δ та коефіцієнта вбирання β багатокомпонентного стопу.

В загалі-то величину δ можна обчислити за формулою [7, 8]:

$$\delta = \frac{r_0 \lambda^2 n_e}{2\pi}, \quad (2)$$

де $r_0 = e^2/(4\pi\epsilon_0 mc^2)$ — класичний радіус електрона, n_e — електронна густина, e — заряд електрона, ϵ_0 — діелектрична проникність вакууму, m — маса електрона, c — швидкість світла у вакуумі.

У формулі (2) електронна густина n_e визначається кількістю електронів z в одному атомі та концентрацією атомів n_a :

$$n_e = zn_a = z \frac{k_c}{V_c}, \quad (3)$$

де k_c і V_c — кількість атомів в одній елементарній комірці кристалу й об'єм елементарної комірки відповідно.

Для багатокомпонентного стопу, де концентрації компонентів дорівнюють $c_1, c_2, \dots, c_l$, формула (3) може бути записана так:

$$n_e = \frac{k_c}{V_c} (z_1 c_1 + z_2 c_2 + \dots + z_l c_l), \quad (4)$$

де $z_1, z_2, \dots, z_l$ — порядкові номери хемічних елементів, які є компонентами стопу, l — кількість елементів у стопі.

Підставляючи (4) в (2), одержуємо вираз для декременту заломлення δ стопу з рівномірним розподілом компонентів по об'єму кристалу:

$$\delta = \frac{e^2 \lambda^2 k_c}{8\pi^2 \varepsilon_0 m c_0^2 V_c} (z_1 c_1 + z_2 c_2 + \dots + z_l c_l). \quad (5)$$

Для більш точного розрахунку величини δ порядкові номери $z_1, z_2, \dots, z_l$ у формулі (5) потрібно замінити на дійсні частини комплексних атомових формфакторів $f = z + f' + if''$ [7]:

$$\delta = \frac{e^2 \lambda^2 k_c}{8\pi^2 \varepsilon_0 m c_0^2 V_c} [c_1 (z_1 + f'_1) + c_2 (z_2 + f'_2) + \dots + c_l (z_l + f'_l)]. \quad (6)$$

Коефіцієнт вбирання β визначається уявною частиною f'' комплексного атомового формфактора [7]:

$$\beta = \frac{e^2 \lambda^2 k_c}{8\pi^2 \varepsilon_0 m c_0^2 V_c} f''. \quad (7)$$

Тоді коефіцієнт вбирання стопу з рівномірним розподілом компонентів можна знайти як суму коефіцієнтів вбирання від кожного компонента:

$$\beta = \frac{e^2 \lambda^2 k_c}{8\pi^2 \varepsilon_0 m c_0^2 V_c} [c_1 f''_1 + c_2 f''_2 + \dots + c_l f''_l]. \quad (8)$$

Фазовий зсув Рентгенової хвилі, що пройшла через зразок, залежить від варіацій декременту заломлення δ всередині зразка і від його товщини. У випадку монохроматичної хвилі, що поширюється вздовж осі Oz , зміна фази може бути записана в такому вигляді [8]:

$$\varphi(x, y) = -\frac{2\pi}{\lambda} \int \delta(x, y, z) dz, \quad (9)$$

де інтеграл розраховується по всій товщині об'єкта в напрямку поширення Рентгенового пучка. Пізніше формула (9) буде використана для обчислення зсуву фаз під час проходження РВ через досліджувані зразки.

2.2. Вибір параметрів джерела РВ

Реальні джерела РВ мають певні скінченні розміри, які необхідно враховувати під час вибору віддалі від Рентгенового джерела до

об'єкта дослідження для одержання когерентного випромінення в області розташування зразків. Типові розміри джерел мають бути порядку мікрометрів. Врахування геометрії випромінювача є особливо важливим для малих кутів розсіювання.

Зазвичай РВ не є строго монохроматичним, а має певну спектральну ширину. У результаті відбувається суперпозиція дифракційних картин зі своїм ваговим внеском для різних довжин хвиль, що відповідають спектральному розподілу РВ. Наявність спектрального інтервалу РВ приводить до певного зміщення максимумів інтенсивності у вислідній дифракційній картині від кожної з монохроматичних компонент.

У даному дослідженні не ставилася мета вивчити особливості формування зображень з урахуванням розмірів і ступеня монохроматичності джерел; тому для моделювання дифракції РВ на різних об'єктах було вибрано монохроматичне точкове джерело з довжиною хвилі $\lambda = 1,5374 \text{ \AA}$ (лінія CuK_α).

2.3. Параметри розрахунку декрементів заломлення δ і коефіцієнтів вбирання β для металевих стопів

Для вирішення даної задачі необхідно скористатися формулами (6) і (8). У даній роботі розглядаються стопи на основі кристалу заліза, які мають об'ємноцентровану кубічну (ОЦК) ґратницю. Це означає, що одній елементарній комірці належать $k_c = 2$ атоми. Атомові формфактори чистих металів, які є компонентами досліджуваних нами стопів, подано у табл. 1 [7].

Основною перешкодою використання співвідношень (6) і (8) є об-

ТАБЛИЦЯ 1. Порядкові номери z , атомові формфактори f_1 і f_2 , оптичні декременти заломлення δ та коефіцієнти вбирання β для РВ з довжиною хвилі $\lambda = 1,5374 \text{ \AA}$ (лінія CuK_α) для деяких чистих металів [7].

TABLE 1. Serial numbers z , atomic form factors f_1 and f_2 , optical refraction decrements δ and absorption coefficients β for x-ray radiation with a wavelength of $\lambda = 1.5374 \text{ \AA}$ (CuK_α line) for some pure metals [7].

Параметер	Хемічний елемент				
	Fe	Cu	Ni	Cr	Al
z	26	29	28	24	13
$f_1 = z + f'$	24,88	27,01	24,93	23,85	13,21
$f_2 = f''$	3,199	0,6054	0,5221	2,423	0,2406
$\delta \cdot 10^5$	2,2391	2,4311	2,4139	2,1055	0,84366
$\beta \cdot 10^6$	2,8793	0,54491	0,50552	2,1387	0,15364

числення об'ємів елементарної комірки V_c для сплавів з різною концентрацією компонентів. У загальному випадку V_c для ОЦК-структури можна визначити за формулою $V_c = a^3$, де a — параметр кристалічної ґратки. Але параметр a залежить від температури зразків, процентного вмісту різних хімічних елементів у сполуку, наявності дефектів, а такі експериментальні дані практично відсутні. Для визначення сталої кристалічної ґратки a у даній роботі проведено комп'ютерне моделювання методом молекулярної динаміки з використанням програми LAMMPS [9] з відкритим програмним кодом. Були створені комп'ютерні моделі кристалів сплавів Fe–13%Cr–(2, 4, 6, 8)%Al та Fe–1,3%Cu–1%Ni. У якості прикладу на рис. 1, а показано кристал сплаву Fe–13%Cr–8%Al.

Моделювання здійснювалося за допомогою *NVE*- та *NPT*-статистичних ансамблів з використанням термостата Нозе–Гувера. Важливим параметром під час використання таких статистичних ансамблів є середній час τ між двома послідовними актами обміну енергією між термостатом і досліджуваною системою. Очевидно,

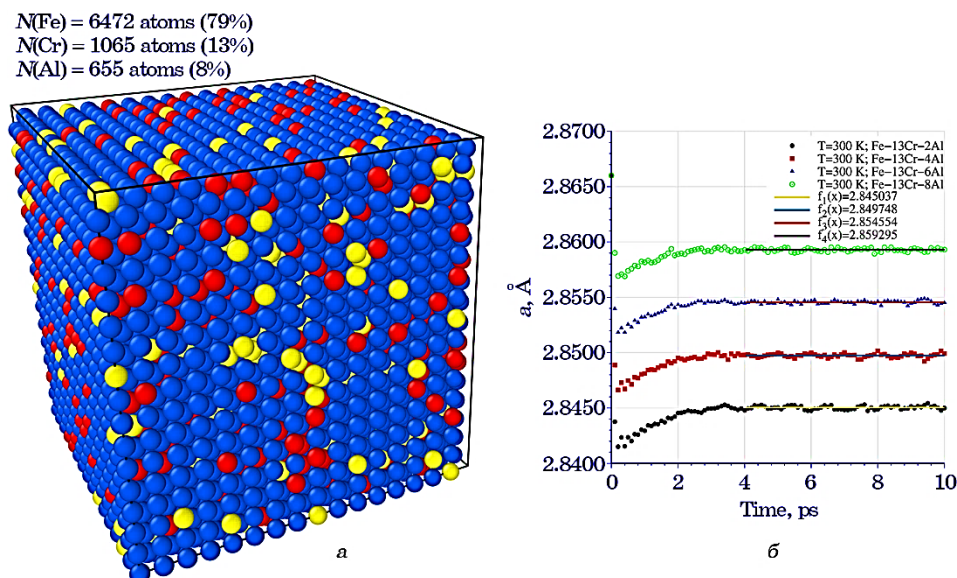


Рис. 1. а) Комп'ютерний модель сплаву Fe–13%Cr–8%Al (атоми Fe, Cr й Al показано синім, червоним і жовтим кольорами відповідно); б) часові залежності параметрів кристалічної ґратки сплавів Fe–13%Cr–(2, 4, 6, 8)%Al під час термічного відпалювання зразків за температури $T = 300 \text{ K}$.

Fig. 1. а) Computer model of Fe–13%Cr–8%Al alloy (iron, chromium, and aluminium atoms are shown in blue, red, and yellow colours, respectively); б) time dependences of crystal-lattice parameters of Fe–13%Cr–(2, 4, 6, 8)%Al alloys during thermal annealing of samples at temperature $T = 300 \text{ K}$.

що час τ дорівнює середньому періоду теплових коливань атомів у кристалічній ґратниці.

Проведемо розрахунок часу τ для стопів на основі заліза методами статистичної фізики.

Кількість різних квантових станів $d\Omega$ для будь-якого вибраного атома можна знайти так:

$$d\Omega = 2 \frac{d\Gamma}{h^3}, \quad (10)$$

де $d\Gamma$ — елемент фазового об'єму для одного атома, h — Планкова стала. Множник 2 у формулі (10) означає, що кожен атом може породжувати механічні хвилі у кристалі з двома типами поляризації. Елемент фазового об'єму $d\Gamma$ можна виразити через період коливань атома у кристалі:

$$d\Gamma = 4\pi V p^2 dp = \left\{ p = \frac{h}{\lambda} = \frac{h}{vT}, dp = \left| -\frac{hdT}{vT^2} \right| \right\} = \frac{4\pi V h^3 dT}{v^3 T^4}, \quad (11)$$

де p — імпульс атома, λ — довжина де Бройлевої хвилі для атома, v — швидкість звуку у кристалі, T — період коливань атома, V — об'єм кристалу.

Після підстановки (11) в (10) одержимо:

$$d\Omega = \frac{8\pi V dT}{v^3 T^4}. \quad (12)$$

Запишімо умову нормування для функції розподілу (12):

$$\Omega = 3N = \int_{T_{\min}}^{\infty} \frac{8\pi V dT}{v^3 T^4} = -\frac{8\pi V dT}{v^3 T^4} \Big|_{T_{\min}}^{\infty} = \frac{8\pi V}{3v^3 T_{\min}^3}, \quad (13)$$

де N — кількість атомів у кристалі, $T_{\min}$ — мінімальне значення періоду коливань атома у кристалі.

Комбінуючи вирази (12) та (13), одержимо:

$$d\Omega = \frac{9NT_{\min}^3 dT}{T^4}. \quad (14)$$

Тоді ймовірність $d\omega$ того, що період коливань атома лежить у межах від T до $T+dT$, можна знайти так:

$$d\omega = \frac{d\Omega}{\Omega} = \frac{3T_{\min}^3 dT}{T^4}. \quad (15)$$

Середній період коливань атомів у кристалічній ґратниці можна обчислити за допомогою виразу (15):

$$\tau = \int_{T_{\min}}^{\infty} T d\omega = \int_{T_{\min}}^{\infty} \frac{3T_{\min}^3 dT}{T^3} = \frac{3T_{\min}}{2}. \quad (16)$$

Мінімальний період $T_{\min}$ коливань атомів обчислюється через сталу кристалічної ґратниці a :

$$T_{\min} = \frac{\lambda_{\min}}{\nu} = \frac{2a}{\nu}. \quad (17)$$

Після підстановки (17) в (16) одержуємо остаточну формулу для розрахунку середнього періоду коливань атомів у кристалі:

$$\tau = \frac{3a}{\nu}. \quad (18)$$

Оскільки основним елементом у досліджуваних стопах є Fe, то числову оцінку величини τ здійснимо за параметром кристалічної ґратниці заліза, що становить $a = 2,866 \text{ \AA}$, та за середньою швидкістю поширення звуку у кристалі заліза $\nu = 5950 \text{ м/с}$. Таким чином, параметер термостату τ , необхідний для проведення коректного комп'ютерного моделювання, обчислюємо за формулою (18):

$$\tau = \frac{3a}{\nu} = \frac{3 \cdot 2,866 \cdot 10^{-10}}{5950 \cdot 10^{-12}} \cong 0,14 \text{ [пс]}. \quad (19)$$

Визначення параметрів a кристалічних ґратниць досліджуваних стопів методом молекулярної динаміки розглянемо нижче.

2.4. Створення геометричних моделей кристалів стопів

У даній роботі були розроблені програмні коди, які уможливають генерувати комп'ютерні моделі кристалів стопів Fe-13%Cr-(2, 4, 6, 8)%Al та Fe-1,3%Cu-1%Ni із заданими концентраціями компонентів.

Водночас є можливість створення зразків із різним статистичним розташуванням компонентів, що уможливорює проводити моделювання одного і того самого процесу багато разів, як і у реальних експериментах, з метою накопичення статистичних даних.

На цьому етапі ми не знаємо реальних значень параметрів кристалічної ґратниці досліджуваних об'єктів, оскільки сталі a залежать від температури матеріалів і концентрації компонентів. Тому усі комп'ютерні моделі стопів будуються за параметрами кристалічної ґратниці чистого заліза, оскільки Fe є базовим елементом досліджуваних зразків.

Наступний етап — це одержання кристалів у стані термодинамічної рівноваги.

ТАБЛИЦЯ 2. Параметри кристалічних ґратниць досліджуваних стопів за температури $T = 300$ К.**TABLE 2.** Crystal-lattice parameters of the investigated alloys at a temperature of $T = 300$ K.

Стоп	a , Å
Fe-13%Cr-2%Al	2,8450
Fe-13%Cr-4%Al	2,8497
Fe-13%Cr-6%Al	2,8546
Fe-13%Cr-8%Al	2,8593
Fe-1,3%Cu-1%Ni	2,8758

2.5. Термічний відпал зразків до стану термодинамічної рівноваги

Для проведення будь-якого комп'ютерного моделювання фізичних процесів методами молекулярної динаміки необхідно підключити потенціал міжатомової взаємодії та надати усім атомам початкові швидкості відповідно до заданої температури. У нашій роботі для стопів Fe-Cr-Al був використаний потенціал міжатомової взаємодії, розроблений авторами [10], а для стопів Fe-Cu-Ni нами був створений власний потенціал. Термічне відпалювання кристалів здійснювалося за температури $T = 300$ К за допомогою термостата Нозе-Гувера. Після відпалювання досліджуваних зразків ми одержали кристали у стані термодинамічної рівноваги з параметрами кристалічної ґратниці, що відповідають дійсності. На рисунку 1, б показано часові залежності параметрів a кристалічної ґратниці стопів Fe-13%Cr-(2, 4, 6, 8)%Al під час термічного відпалювання зразків за температури $T = 300$ К. З цих залежностей бачимо, що через 4 пс після початку відпалювання ці параметри ґратниці перестають змінюватися з часом, якщо не брати до уваги невеликі теплові флюктуації. Використовуючи метод найменших квадратів, за даними графіками було знайдено параметри a для ґратниць усіх досліджуваних стопів за температури $T = 300$ К (див. табл. 2).

2.6. Розрахунок оптичних декрементів заломлення та коефіцієнтів вбирання стопів

Використовуючи формули (6) і (8) та дані таблиць 1 і 2, було розраховано декременти заломлення δ та коефіцієнти вбирання β стопів Fe-13%Cr-(2, 4, 6, 8)%Al та Fe-1,3%Cu-1%Ni. У таблиці 3 показано результати цих розрахунків.

Отже, одержано оптичні властивості досліджуваних металевих стопів для РВ з довжиною хвилі $\lambda = 1,5374$ Å (лінія CuK_α), які

ТАБЛИЦЯ 3. Розраховані за формулами (6) і (8) оптичні декременти заломлення δ та коефіцієнти вбирання β для РВ з довжиною хвилі $\lambda = 1,5374$ Å (лінія CuK_α) для деяких металевих стопів за різних значень величини відносної деформації ε .

TABLE 3. The optical refraction decrements δ and absorption coefficients β for x-ray radiation with a wavelength of $\lambda = 1.5374$ Å (CuK_α line) for some metal alloys at different values of the relative strain ε are calculated according to formulae (6) and (8).

ε	-0,10	-0,05	0,00	0,05	0,10
Fe-13%Cr-2%Al					
$\delta \cdot 10^5$	2,5076	2,3756	2,2569	2,1494	2,0517
$\beta \cdot 10^6$	3,1088	2,9452	2,7979	2,6647	2,5436
Fe-13%Cr-4%Al					
$\delta \cdot 10^5$	2,4715	2,3414	2,2243	2,1184	2,0221
$\beta \cdot 10^6$	3,0332	2,8736	2,7299	2,5999	2,4817
Fe-13%Cr-6%Al					
$\delta \cdot 10^5$	2,4351	2,307	2,1916	2,0873	1,9924
$\beta \cdot 10^6$	2,9577	2,802	2,6619	2,5352	2,4199
Fe-13%Cr-8%Al					
$\delta \cdot 10^5$	2,3996	2,2733	2,1597	2,0568	1,9633
$\beta \cdot 10^6$	2,8835	2,7318	2,5952	2,4716	2,3592
Fe-1,3%Cu-1%Ni					
$\delta \cdot 10^5$	2,4672	2,3373	2,2204	2,1147	2,0186
$\beta \cdot 10^6$	3,1076	2,9440	2,7968	2,6636	2,5426

уможливляють зробити висновок, що декремент заломлення δ та коефіцієнт вбирання β є дуже чутливими до зміни значення електронної густини n_e . У даній роботі ми дослідили, як зміна концентрації компонентів у металевих стопах і механічна деформація впливають на електронну густину n_e та пропорційні їй декремент заломлення δ та коефіцієнт вбирання β .

Зміна електронної густини для кожного досліджуваного зразка зумовлюється механічною деформацією. За деформацій стискання $\varepsilon = -0,05$ і $\varepsilon = -0,10$ вздовж одного з напрямків об'єм кристалів зменшується, а отже, згідно з формулами (3), (6), (8), електронна густина n_e , декремент заломлення δ та коефіцієнт вбирання β зростають у порівнянні з недеформованим ($\varepsilon = 0,00$) зразком, і навпаки — у випадку деформації розтягання $\varepsilon = 0,05$ і $\varepsilon = 0,10$ вздовж одного з напрямків об'єм кристалів зростає, а n_e , δ та β зменшуються у порівнянні з недеформованим зразком.

Зміна концентрації компонентів у досліджуваних металевих стопах також приводить до істотних змін оптичних властивостей.

Для будь-якої без виключення деформації чи недеформованого стану зразка зі збільшенням концентрації Алюмінію спостерігається зменшення декременту заломлення δ та коефіцієнта вбирання β . Такий результат пояснюється тим, що кожний атом Алюмінію має у 2 рази менше електронів, ніж атом заліза, — 13 електронів в одному атомі Алюмінію і 26 електронів в атомі Феруму. Це означає, що зі зростанням концентрації атомів Алюмінію у стопках Fe–Cr–Al кількість електронів у кристалі зменшується, а об'єм практично не змінюється, бо параметри кристалічних ґратниць для стопів з різною концентрацією Алюмінію мало відрізняються один від одного (див. табл. 2). Це приводить до зменшення електронної густини n_e і, відповідно, до зменшення δ та β .

3. МОДЕЛЮВАННЯ ВЗАЄМОДІЇ РВ ІЗ МЕТАЛЕВИМИ ЗРАЗКАМИ СТОПІВ

3.1. Створення моделей об'єктів дослідження та схема проведення комп'ютерних експериментів

Запропонований у попередньому розділі даної роботи підхід щодо розрахунку оптичних властивостей металевих стопів у Рентгеновому діапазоні може бути застосований практично до будь-яких систем. Нами було проведено моделювання взаємодії РВ зі стопом Fe–1,3%Cu–1%Ni, оптичні параметри якого наведено у табл. 3. Кожний досліджуваний зразок (див. рис. 2, а) незалежно від величини деформації задавався як геометричне місце точок, які формують його поверхню. Розглянемо більш детально процес генерування комп'ютерних моделей таких досліджуваних об'єктів.

Для створення тривимірних об'єктів дослідження запропоновано власний підхід, суть якого полягає в наступному: 1) розбиваємо куб із ребром, рівним 1, на маленькі кубики по $N = 31$ штук вздовж кожної осі та визначаємо координати $x_1, y_1, z_1, x_2, y_2, z_2, \dots, x_l, y_l, z_l$ усіх точок, які є центрами маленьких кубиків, — всього $l = N^3 = 29791$ точок; 2) за допомогою підбраного аналітичного виразу

$$2000x^2 \frac{\sin(2z)}{3} + 1000y^2 + 10z^2 + 0,05\cos(50y) + 0,7\cos(50x) \leq 17\cos(x)$$

із усієї сукупності точок вибираємо тільки ті точки, які задовольняють цей вираз і, відповідно, формують деяку геометричну фігуру; 3) із геометричного місця точок, які відібрані на етапі 2 і формують фігуру, вибираємо точки, що лежать на поверхні цієї фігури, і таким чином одержуємо сформовану з точок замкнену поверхню (див. рис. 2, а). Останнім етапом створення комп'ютерного моделювання зразка для моделювання є масштабування геометричних розмірів

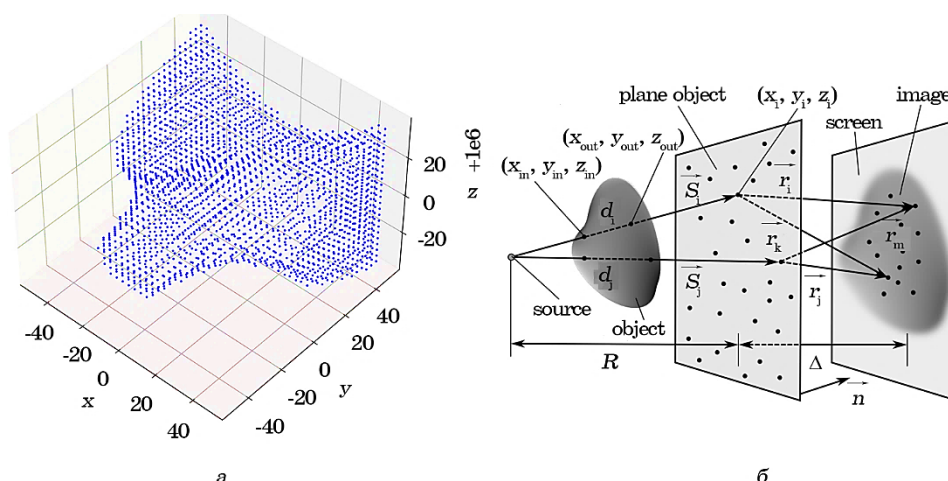


Рис. 2. а) Тривимірний модель об'єкта досліджень, поверхню якого сформовано 2404 точками; усі розміри по осях координат вказані у мікрометрах; зміщення по осі Oz на величину $1 \cdot 10^6$ мкм показує віддаленість центра області об'єкта від джерела РВ; б) схема моделювання дифракції РВ від точкового джерела на тривимірних зразках довільної геометричної форми.

Fig. 2. а) Three-dimensional model of the investigated object, the surface of which is formed by 2404 points; all dimensions along the co-ordinate axes are indicated in micrometres; displacement along the Oz axis by $1 \cdot 10^6$ μm shows the distance of the centre of the object area from the source of x-ray radiation; б) scheme of modelling x-ray diffraction from a point source on three-dimensional samples of arbitrary geometric shape.

за допомогою коефіцієнта збільшення $M = 100$, повороту на кут $\alpha = 90^\circ$ навколо осі Ox і паралельного переносу у просторі на віддаль у $1 \cdot 10^6$ мкм вздовж осі Oz — віддаль від джерела РВ до центра області об'єкта.

На рисунку 2, б показано загальну схему моделювання дифракції РВ на тривимірному об'єкті довільної геометричної форми від точкового джерела, яка використовувалась у нашій роботі. Площина об'єкта вибиралася безпосередньо за об'єктом по напрямку поширення РВ. Для кожного напрямку поширення РВ, який задавався вектором $\vec{s}_i$, проводилися розрахунки товщин a_i досліджуваного зразка та відповідних зсувів фаз.

Розглянемо основні теоретичні формули, що використовувалися для проведення моделювання.

3.2. Аналітичний модель

Розрахунок дифракційних картин від досліджуваних зразків було

виконано в рамках дифракційної теорії Френеля–Кірхгоффа для комплексної скалярної амплітуди $\psi(x_{\text{scr}}, y_{\text{scr}})$ [8, 11, 12]:

$$\begin{aligned} \psi(x_{\text{scr}}, y_{\text{scr}}) &= \\ &= \frac{1}{i\lambda} \int \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\exp(ik(r+s))}{rs} \left[\frac{\cos(\vec{n}, \vec{r}) + \cos(\vec{n}, \vec{s})}{2} \right] \exp(i\phi) \exp(-k\gamma) dx_i dy_i, \quad (20) \\ s &= \sqrt{(x_{\text{obj}} - x_{\text{source}})^2 + (y_{\text{obj}} - y_{\text{source}})^2 + R^2}, \\ r &= \sqrt{(x_{\text{obj}} - x_{\text{scr}})^2 + (y_{\text{obj}} - y_{\text{scr}})^2 + \Delta^2}, \end{aligned}$$

де $\vec{s}$ — вектор, направлений із джерела до певної точки на площині об'єкта, $\vec{r}$ — вектор, проведений із точки на площині об'єкта до точки спостереження на екрані, λ — довжина хвилі, $k = 2\pi/\lambda$ — хвильове число, n — нормаль до площини об'єкта, R — віддаль від джерела до площини об'єкта («джерело–об'єкт»), Δ — віддаль від площини об'єкта до екрана («об'єкт–екран»), ϕ — додатковий фазовий зсув, що виникає після проходження РВ через об'єкт завдяки його оптичним властивостям, $\gamma = \int \beta(x, y, z) dz$ — параметр, що описує згасання інтенсивності РВ, зумовлене вбиранням.

Оптичні властивості об'єкта проявляються у зсуві фаз ϕ , який спричинений проходженням променів крізь нього. Фазовий зсув Рентгенової хвилі, що пройшла через зразок, залежить від варіацій декременту заломлення всередині зразка та від його товщини. У разі монохроматичного паралельного пучка, що поширюється вздовж осі Oz , зміна фази може бути записана в наступній формі [8]:

$$\phi(x, y) = -\frac{2\pi}{\lambda} \int \delta(x, y, z) dz, \quad (21)$$

де δ — фазовий зсув хвильового фронту, спричинений проходженням променів крізь об'єкт, а інтеграл розраховується по всій товщині об'єкта в напрямку поширення Рентгенового пучка.

Зразки, які ми досліджували у даній роботі, були однорідними та оптично ізотропними. З урахуванням цього для розрахунку зсуву фаз ϕ формула (21) спрощується до такого вигляду:

$$\phi(x, y) = -\frac{2\pi}{\lambda} \delta d, \quad (22)$$

де δ — оптичний декремент заломлення для об'єкта, d — товщина об'єкта.

За взаємодії РВ з металами та їхніми стопами надзвичайно важ-

ливу роль відіграє процес вбирання. Параметер γ у випадку монохроматичного паралельного пучка, що поширюється вздовж осі Oz в однорідному ізотропному зразку, можна обчислити так:

$$\gamma = \beta d. \quad (23)$$

3.3. Параметри моделювання та метод проведення розрахунків

Для обчислення вислідної інтенсивности у кожній точці екрана за формулою (20) треба інтегрувати по всій площині об'єкта. Це на практиці зробити неможливо. Тому обчислення подвійного інтеграла здійснювалося чисельними методами шляхом вибору області площини об'єкта так, щоб за відсутности об'єкта інтенсивність РВ в усіх точках екрана була сталою величиною за винятком мінімумів і максимумів по краях екрана, зумовлених дифракцією від країв апертури. За таких параметрів можна коректно проводити моделювання дифракції РВ на створеному об'єкті.

Для розрахунку було вибрано область площини об'єкта у вигляді круглого диска радіусом у 200 мкм і розбито його у полярній системі координат на 1601 точку по азимутальному куту та на 800 точок по радіусу-вектору (всього $1601 \times 800 = 1280800$ точок). Екран діаметром у 1600 мкм було розміщено на віддалі у 3,5 м від центра області об'єкта. В усіх дослідях екран розбивався у полярній системі координат на 301 точку по азимутальному куту і на 150 точок по радіусу-вектору. Інтеграл у формулі (20) для комплексної амплітуди РВ у кожній точці екрана обчислювався за методом Монте-Карло. Дані розрахунки є достатньо витратними; тому у даній роботі було розроблено програмні коди для паралельних обчислень з використанням технології OpenCL.

3.4. Результати моделювання дифракції РВ на досліджуваних зразках та їх аналіза

У моделюванні можна точно контролювати та варіювати параметри: склад стопу, ступінь деформації, температуру тощо, що уможливорює ізолювати та детально вивчати вплив окремих чинників.

Використовуючи цю перевагу комп'ютерного моделювання, у даній роботі з метою виявлення зміни оптичних властивостей внаслідок механічної деформації стиснення–розтягання вздовж однієї з осей було проведено симуляцію взаємодії монохроматичного РВ з довжиною хвилі $\lambda = 1,5374 \text{ \AA}$ (лінія CuK_α) з тривимірними зразками, форму яких показано на рис. 2, а. Матеріал зразків — це стоп $\text{Fe-1,3\%Cu-1\%Ni}$ за температури у 300 К. Оскільки величини відносної деформації ε дорівнювали $-0,10$, $-0,05$, $0,00$, $0,05$ і $0,10$, то

для зручності порівняння результатів ми використовували 5 різних за геометричними розмірами недеформованих зразків. Водночас, розміри зразків були підібрані так, що за їхньої деформації на вказані величини ε для усіх зразків у деформованому стані геометричні розміри є абсолютно однаковими. Цей спосіб уможливило без зміни геометричних розмірів об'єктів змінювати оптичні декременти δ та коефіцієнти вбирання β (див. табл. 3) і виявляти зміну оптичних властивостей матеріалів внаслідок механічної деформації.

На рисунках 3 та 4 показано Рентгенові зображення та профілі інтенсивності для 5 зразків. Результати моделювання, показані на рисунках 3, *в* і 4, *в*, відносяться до недеформованого зразка.

На рисунках 3, *а*, 3, *б*, 4, *а*, 4, *б* показано результати моделювання для зразків, що мали більші геометричні розміри порівняно з недеформованим зразком, але після деформації стискання вздовж однієї осі на величину $\varepsilon = -0,10$ і $\varepsilon = -0,05$, відповідно, набувають абсолютно такого самого розміру, як і недеформований зразок і, згідно із даними табл. 3, мають різні значення декременту заломлення δ та коефіцієнта вбирання β . Зі збільшенням величини деформації стискання ширина частково прозорої області біля країв об'єкта стає меншою. На це також вказує і порівняння профілів інтенсивності. Дійсно, якщо порівнювати інтенсивність РВ на екрані вздовж радіального напрямку з азимутальним кутом 0° на віддалі у ± 200 мкм (це — області зображення, близькі до країв об'єктів), то зі збільшенням деформації стискання інтенсивність зменшується, що повністю узгоджується з фактом зростання електронної густини і, відповідно, збільшення коефіцієнта вбирання β . Деформації розтягання (див. рис. 3, *г*, 3, *д*, 4, *г*, 4, *д*), навпаки, приводять до збільшення інтенсивності РВ, що пройшло через об'єкт біля його країв. Це також відповідає зменшенню електронної густини та коефіцієнта вбирання випромінювання за деформації розтягання (див. табл. 3).

Одержані у ході комп'ютерних експериментів результати показують, що метали та їхні стопи достатньо сильно вбирають РВ. Про це свідчить темний колір зображень і відповідні профілі інтенсивності. Для виявлення ступеня важливості вбирання РВ металами ми провели комп'ютерне моделювання на недеформованому зразку, який показаний на рис. 1, *а*, з декрементом заломлення $\delta = 2,2204 \cdot 10^{-5}$ і коефіцієнтом вбирання $\beta = 0$, а також здійснили такий самий експеримент для даного об'єкта у випадку, коли б він мав біологічну природу (для біологічних об'єктів $\delta \cong 1 \cdot 10^{-6}$ і $\beta \cong 1 \cdot 10^{-8}$). Результати такого моделювання показано на рис. 5. Вони демонструють, що під час комп'ютерної симуляції взаємодії РВ з металами та їхніми стопами коефіцієнтом вбирання β нехтувати не можна.

Таким чином, моделювання взаємодії РВ з металевими стопами показує, що РВ дійсно можна застосовувати для виявлення механічних деформацій у різних металевих конструкціях.

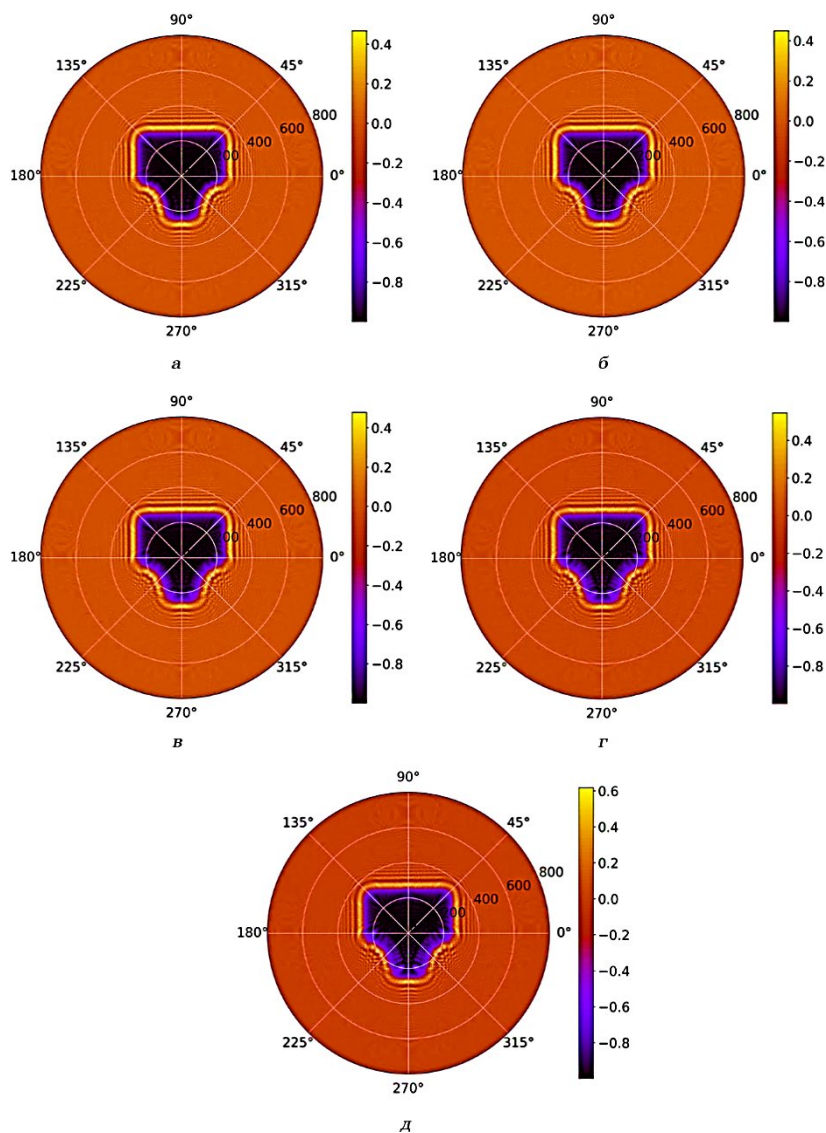


Рис. 3. Рентгенові зображення зразка Fe-1,3%Cu-1%Ni для різних деформацій ε : а) $\varepsilon = -0,10$; б) $\varepsilon = -0,05$; в) $\varepsilon = 0,00$; г) $\varepsilon = 0,05$; д) $\varepsilon = 0,10$.

Fig. 3. X-ray images for the Fe-1.3%Cu-1%Ni sample under different deformations ε : а) $\varepsilon = -0.10$; б) $\varepsilon = -0.05$; в) $\varepsilon = 0.00$; г) $\varepsilon = 0.05$; е) $\varepsilon = 0.10$.

4. ВИСНОВКИ

Використовуючи відомі теоретичні співвідношення та результати моделювання методами молекулярної динаміки, ми запропонували

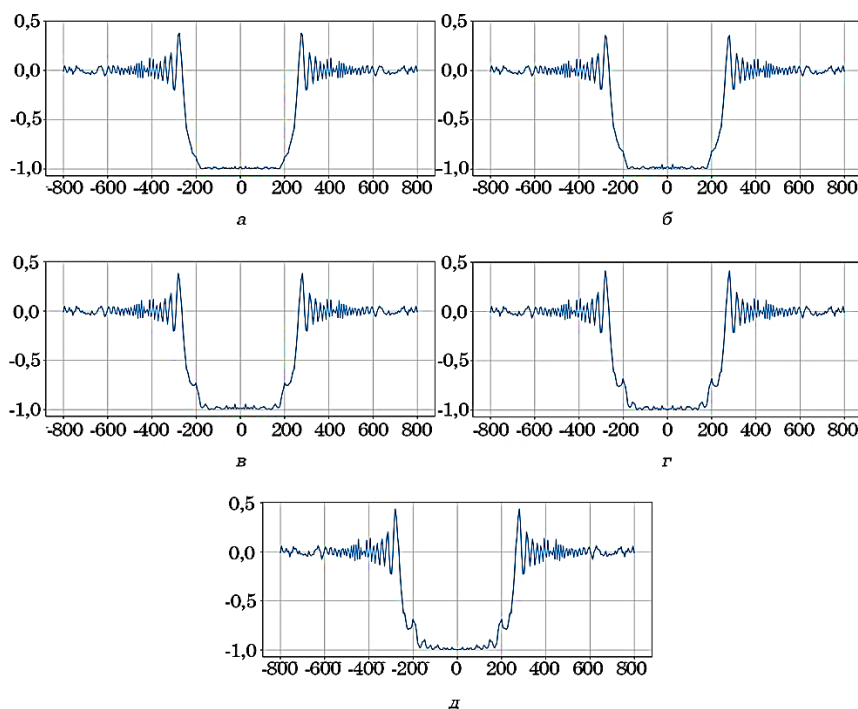


Рис. 4. Профілі інтенсивності вздовж радіального напрямку з азимутальним кутом у 0° для зразка Fe-1,3%Cu-1%Ni за різних деформацій ε : а) $\varepsilon = -0,10$; б) $\varepsilon = -0,05$; в) $\varepsilon = 0,00$; г) $\varepsilon = 0,05$; д) $\varepsilon = 0,10$.

Fig. 4. Intensity profiles along the radial direction with the azimuthal angle 0° for the Fe-1.3%Cu-1%Ni sample under different deformations ε : а) $\varepsilon = -0.10$; б) $\varepsilon = -0.05$; в) $\varepsilon = 0.00$; г) $\varepsilon = 0.05$; е) $\varepsilon = 0.10$.

підхід щодо числових розрахунків декрементів заломлення δ та коефіцієнтів вбирання β РВ для багатокомпонентних металевих стопів з різним процентним складом хемічних елементів і різною величиною деформації.

Подібний підхід можна також застосовувати до будь-яких інших фізичних процесів у кристалічних та аморфних тілах для випадків, коли ці процеси спричиняють зміну електронної густини. Наприклад, це можуть бути фазові переходи, дифузійні процеси, теплове розширення та ін. Тому ці результати мають практичне застосування та можуть бути корисними як для розробників лабораторного обладнання, так і для спеціалістів в галузі матеріалознавства.

Були розроблені програмні коди для проведення комп'ютерного моделювання взаємодії РВ з тривимірними зразками довільної геометричної форми у рамках скалярної теорії Френеля-Кірхгоффа. На прикладі моделей зразків, виготовлених із металевих стопів Fe-

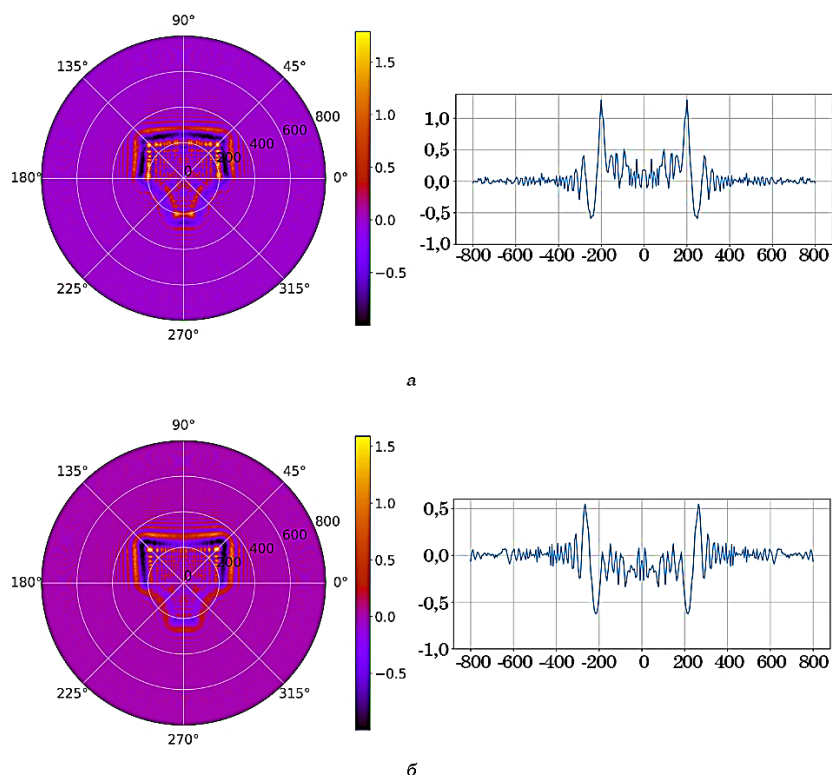


Рис. 5. Рентгенові зображення та профілі інтенсивності вздовж радіального напрямку з азимутальним кутом 0° : а) недеформований зразок із сплаву Fe–1,3%Cu–1%Ni з декрементом заломлення $\delta=2,2204 \cdot 10^{-5}$ і коефіцієнтом вбирання $\beta=0$; б) недеформований зразок з декрементом заломлення $\delta=1 \cdot 10^{-6}$ і коефіцієнтом вбирання $\beta=1 \cdot 10^{-8}$, що по порядку величин відповідає біологічним об'єктам.

Fig. 5. X-ray images and intensity profiles along the radial direction with an azimuthal angle of 0° : а) unstrained sample from the Fe–1.3%Cu–1%Ni alloy with the refractive index $\delta=2.2204 \cdot 10^{-5}$ and the absorption coefficient $\beta=0$; б) unstrained sample with refraction decrement $\delta=1 \cdot 10^{-6}$ and absorption coefficient $\beta=1 \cdot 10^{-8}$, which in order of magnitude corresponds to biological objects.

1,3%Cu–1%Ni за температури у 300 К, проведено комп'ютерну симуляцію дифракції монохроматичного РВ з довжиною хвилі $\lambda = 1,5374 \text{ \AA}$ (лінія CuK_α) на цих зразках. Зразки були піддані деформації стисненням і розтяганням з величинами відносної деформації ε , які становили $-0,10$, $-0,05$, $0,00$, $0,05$ і $0,10$. Наші результати підтвердили високу чутливість РВ до зміни електронної густини матеріялу та показали необхідність обов'язкового врахування вбирання випромінювання під час моделювання взаємодії РВ з металами.

ЦИТОВАНА ЛІТЕРАТУРА—REFERENCES

1. H. Shi, J. Zou, J. Chen, P. Xiao, F. Cao, and S. Liang, *Mater. Res. Express*, **7**, No. 11: 116504 (2020).
2. K. Nakagawa, M. Hayashi, K. Takano-Satoh, H. Matsunaga, H. Mori, K. Maki, Y. Onuki, S. Suzuki, and S. Sato, *Quantum Beam Sci.*, **4**, No. 4: 36 (2020).
3. L. Massimi, S. J. Clark, S. Marussi, A. Doherty, S. M. Shah, J. Schulz, S. Marathe, C. Rau, M. Endrizzi, P. D. Lee, and A. Olivo, *Sci. Rep.*, **12**, No. 1: 12136 (2022).
4. K. Hellbach, E. Beller, A. Schindler, F. Schoeppe, N. Hesse, A. Baumann, R. Schinner, S. Auweter, C. Hauke, M. Radicke, and F. G. Meinel, *Investig. Radiol.*, **53**, No. 6: 352 (2018).
5. S. Muhammad, S. Lee, H. Kim, J. Yoon, D. Jang, J. Yoon, J.-H. Park, and W. S. Yoon, *J. Power Sources*, **285**: 156 (2015).
6. E. R. Wainwright, S. V. Lakshman, A. F. T. Leong, A. H. Kinsey, J. D. Gibbins, S. Q. Arlington, T. Sun, K. Fezzaa, T. C. Hufnagel, and T. P. Weihs, *Combust. Flame*, **199**: 194 (2019).
7. B. L. Henke, E. M. Gullikson, and J. C. Davis, *At. Data Nucl. Data Tables*, **54**, No. 2: 181 (1993).
8. D. Paganin, *Coherent X-Ray Optics* (Oxford University Press: 2013).
9. <https://www.lammmps.org>
10. Z. Liu, Q. Han, Y. Guo, J. Lang, D. Shi, Y. Zhang, Q. Huang, H. Deng, F. Gao, B. Sun, and S. Du, *J. Alloy. Compd.*, **780**: 881 (2019).
11. M. Born and E. Wolf, *Principles of Optics* (Cambridge University Press: 1999).
12. A. Olivo and E. Castelli, *Riv. Nuovo Cim.*, **37**, No. 9: 467 (2014).