

Ф.С. ДЖЕПАРОВ^{1,2}, Д.В. ЛЬВОВ^{1,2}, А.Н. ТЮЛЮСОВ^{1,2}, Й. ШМАЙСНЕР^{1,2}

¹ Национальный исследовательский ядерный университет МИФИ, Москва, Россия

² Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт», Москва, Россия

РАСЧЕТ ПАРНОЙ КОРРЕЛЯЦИОННОЙ ФУНКЦИИ ДЛЯ РАЗЛИЧНЫХ ГЕОМЕТРИЙ ОБРАЗЦА

Рассмотрена задача определения парной корреляционной функции неоднородностей материала исходя из данных, полученных для образца малого размера. Проведен анализ влияния на парную корреляционную функцию размера и формы образца. Получено общее выражение для геометрического множителя, учитывающего данное влияние. Приведены примеры расчета парной корреляционной функции с учетом геометрического множителя на модельных системах прямоугольной, цилиндрической и конической геометрий.

F.S. DZHEPAROV^{1,2}, D.V. LVOV^{1,2}, A.N. TYULYUSOV^{1,2}, J. SCHMEISSNER^{1,2}

¹ National Research Nuclear University MEPHI (Moscow Engineering Physics Institute), Moscow, Russia

² National Research Center "Kurchatov Institute", Moscow, Russia

PAIR CORRELATION FUNCTION VALUATION IN SAMPLES WITH VARIOUS GEOMETRIES

The problem in determining the pair correlation function of material inhomogeneities based on a data obtained for a small-sized sample is considered. An analysis of the samples size and shape influencing the pair correlation function is performed. A general expression for the geometric factor for such influence is obtained. The examples of the pair correlation function calculation using the geometric factor on model systems of rectangular, cylindrical and conical geometries are given.

В последнее время исследования мезомасштабных (от нескольких нанометров до нескольких микрон) структур проводятся одновременно микроскопическими и спектроскопическими методами. Одним из таких объединений экспериментальных методов является применение атомно-зондовой томографии [1,2] в связке с малоугловым рентгеновским и нейтронным рассеянием [3]. Однако для корректной обработки малоугловых спектров необходимо получение информации о пространственной парной корреляционной функции (радиальной функции распределения) расположения рассеивающих неоднородностей в исследуемом материале. Определить вид парной корреляционной функции можно двумя способами: смоделировать систему на основе предполагаемого эффективного взаимодействия частиц или получить информацию о пространственном распределении центров напрямую при помощи наблюдения микроскопическим методом, таким как атомно-зондовая томография.

Текущие алгоритмы расчета парной корреляционной функции основаны на выделении системы сферического или кубического объема, размеры которого существенно превышают характерную длину корреляции. Специфическая геометрия исследуемых образцов в методе атомно-зондовой томографии, представляющих собой тонкие вытянутые иголки, потребовала построения нового алгоритма расчета парной корреляционной функции. Для этого были рассмотрены системы с прямоугольной, цилиндрической и конической геометрией, наиболее похожей на реальные образцы. Получено аналитическое выражение на геометрический множитель, учитывающий пространственные ограничения при расчете парной корреляционной функции для данных систем, и приведены примеры расчетов парной корреляционной функции для модельных систем с известной пространственной корреляцией.

Список литературы

1. С. В. Рогожкин, А. А. Алеев, А. А. Лукьянчук А. С. Шутов, О.А. Разницын, С.Е. Кириллов, Прототип атомного зонда с лазерным испарением, Приборы и техника эксперимента. – 2017. – № 3. – С. 129-134.
2. Rogozhkin, S.V.; Klauz, A.V.; Ke, Y.; Almásy, L.; Nikitin, A.A.; Khomich, A.A.; Bogachev, A.A.; Gorshkova, Y.E.; Bokuchava, G.D.; Kopitsa, G.P.; et al. Study of Precipitates in Oxide Dispersion-Strengthened Steels by SANS, TEM, and APT. *Nanomaterials* 2024, 14, 194.
3. Ф.С. Джепаров, Д.В. Львов, Нейтронные исследования конденсированных сред. Учебное пособие. М.: НИЯУ МИФИ, 2012. – 188 с.