

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ТЕНЗОРА ДЕФОРМАЦИЙ И ПОЛЕЙ УПРУГИХ НАПРЯЖЕНИЙ В АЛМАЗНОЙ ПЛАСТИНЕ С БОЛЬШОЙ КРИВИЗНОЙ ИЗГИБА НА ОСНОВЕ ДАННЫХ ЛОКАЛЬНОГО ДИФРАКЦИОННОГО МЕТОДА ЛАУЭ

Р. В. Дигуров^{a*}, В. Д. Бланк^a, В. Н. Денисов^{a,b}, С. Ю. Мартюшов^a, В. П. Сорокин^a,
С. А. Терентьев^a, С. Н. Поляков^{a,c**}

^a Технологический институт сверхтвердых и новых углеродных материалов
108840, Москва, Троицк, Россия

^b Институт спектроскопии Российской академии наук
108840, Москва, Троицк, Россия

^c Институт нефтехимического синтеза им. А.В. Топчиева Российской академии наук
119071, Москва, Россия

Поступила в редакцию 31 марта 2023 г.,
после переработки 26 мая 2023 г.
Принята к публикации 29 мая 2023 г.

Алмазные монокристаллические пластины с цилиндрическим изгибом имеют большой потенциал для создания энергодисперсионных спектрометров и фокусирующих кристалл-монохроматоров. При их конструировании требуется учитывать значительные напряжения, возникающие при изгибе пластин. Представлены результаты расчета тензора деформаций и полей упругих напряжений в цилиндрически изогнутой монокристаллической алмазной пластине с ориентацией поверхности (110). Расчеты основаны на экспериментальных данных, полученных с помощью локального дифракционного метода Лауэ. Результаты расчетов могут быть использованы при проектировании новых рентгенооптических устройств с возможностью управления их параметрами.

DOI: 10.31857/S0044451023120027

EDN: NBMVBN

1. ВВЕДЕНИЕ

Работа рентгенооптических элементов в условиях сверхъярких пучков синхротронных источников 4-го поколения и рентгеновских лазеров требует использование материалов, устойчивых к таким экстремальным нагрузкам. Алмаз является наилучшим материалом для изготовления элементов рентгеновской оптики, пригодных для работы в таких условиях [1–3]. Большие перспективы для фокусировки рентгеновских пучков в геометрии Лауэ имеют монокристаллические пластины с цилиндрическим изгибом. В работе [4] предложен новый подход

для реализации метода энергодисперсионной рентгеновской абсорбционной спектроскопии с использованием в качестве фокусирующего элемента цилиндрически изогнутого монокристалла кремния с радиусом изгиба 2 м, что позволило достичь высокой интенсивности в фокусе размером 5 мкм. Проблема использования кремниевых пластин с малым радиусом изгиба обусловлена возникновением напряжений при изгибе, близких к пределу разрушения. Для уменьшения радиуса изгиба до 1 м в работе [5] создана и испытана оригинальная конструкция фокусирующего кремниевого кристалл-монохроматора. Изогнутые кремниевые пластины толщиной 10 мкм использовались для создания спектрометра, работающего в геометрии на отражение по Брэггу [6]. К недостаткам таких фокусирующих монохроматоров из кремния следует отнести их низкую теплопроводность и сравнительно большой коэффициент поглощения, особенно для энергий менее 10 кэВ, что

* E-mail: roman.digurov@yandex.ru

** E-mail: spolyakov@phys.msu.ru

ограничивает их применение для работы в мощных пучках. Эти недостатки можно устранить за счет использования для фокусировки рентгеновских пучков монокристаллических пластин из алмаза. Вследствие высокой прозрачности алмаза для рентгеновского излучения, для энергий 8–10 кэВ толщина пластин в несколько десятков микрометров становится сравнимой с глубиной экстинкции при дифракции на просвет, что позволит значительно повысить интенсивность в фокусе лауэ-монокроматоров. Высокая теплопроводность алмаза, которая на порядок выше, чем у кремния, будет обеспечивать высокую стабильность работы монокроматоров в условиях высоких тепловых нагрузок. Это послужило стимулом для создания конструкции для изгиба тонких алмазных пластин, позволяющей многократно изменять радиус изгиба в широком диапазоне от 1 м до нескольких миллиметров. Это открывает перспективу для разработки рентгенооптических модулей различного назначения. В частности, такая конструкция была использована для создания спектрографов, работающих в геометрии на отражение по Брэггу, для анализа спектров излучения рентгеновских лазеров [7, 8]. Однако, с нашей точки зрения, потенциал изогнутых алмазных пластин для создания других элементов рентгеновской оптики до конца не исчерпан. Особенно это касается использования лауэ-геометрии на просвет для фокусировки рентгеновских пучков различной энергии, их коллимации и деления с целью создания нескольких рабочих станций. При толщинах пластин, сравнимых с глубиной экстинкции, значительно снижаются потери фотонов при прохождении рентгеновских пучков через кристалл. Важно отметить, что возможность изменения радиуса изгиба пластин в больших пределах позволит создавать энергодисперсионные спектрографы для анализа спектров в широком диапазоне энергий от 5 до 100 кэВ. При малых радиусах изгиба в тонких алмазных пластинах будут возникать значительные напряжения сжатия и растяжения, достигающие в максимуме десятков гигапаскалей, которые необходимо учитывать при проектировании новых рентгенооптических систем, например, фокусирующих кристалл-монокроматоров и широкодиапазонных спектрографов, работающих в геометрии на просвет [9].

Цель настоящей работы — расчет тензора деформаций и полей упругих напряжений в цилиндрически изогнутой алмазной пластине, которая может быть использована для изготовления фокусирующих элементов рентгеновской оптики, работающих при высоких радиационных нагрузках. Расчет про-

водился на основе экспериментальных данных, полученных с помощью локального дифракционного метода Лауэ.

2. МЕТОДИКА ЭКСПЕРИМЕНТА

2.1. Конструкция для цилиндрического изгиба алмазной пластины

Цилиндрический изгиб тонкой алмазной пластины осуществлялся с помощью специально разработанной конструкции (рис. 1*b*). Для изгиба использовалась пластина треугольной формы из структурно-совершенного монокристалла алмаза с ориентацией поверхности (110). Алмазная пластина изготавливалась из монокристаллического алмаза, выращенного методом температурного градиента при высоких температурах и давлениях [10]. Ее структурное совершенство контролировалось на каждой стадии технологической операции с помощью методов рентгеновской топографии и дифрактометрии высокого разрешения [11]. По данным рентгеновской топографии пластина практически свободна от дефектов (дислокаций, дефектов упаковки, объемных включений). Полуширина кривой дифракционного отражения (220) по данным дифрактометрии высокого разрешения близка к полуширине кривой, рассчитанной теоретически. Пластина толщиной 40 мкм вырезалась из ростового монокристалла с помощью наносекундного импульсного лазера с длиной волны 532 нм, энергией в импульсе 1 мДж и частотой повторения импульсов 5 кГц. Механическая полировка проводилась с использованием стандартного оборудования для огранки. Шероховатость поверхности пластины составляла примерно 2 нм. Ориентация поверхности и кристаллографические направления определялись с помощью дифракционного метода Лауэ. После осуществления технологических операций пластина отжигалась для устранения остаточных напряжений, особенно на краях пластины (рис. 2). Высокое структурное совершенство монокристаллической пластины делает ее пригодной для работы с когерентным рентгеновским излучением и в геометриях на просвет и отражение в сверхъярких пучках современных синхротронных источников и рентгеновских лазеров [12].

Толщина пластины позволяет изменять радиус кривизны в широких пределах от 1 м до 5 мм. Изгиб пластины осуществлялся с помощью перемещения ползунка клиновидной формы в продольном направлении, изготовленного из монокристаллического алмаза. Треугольная пластина жестко крепилась

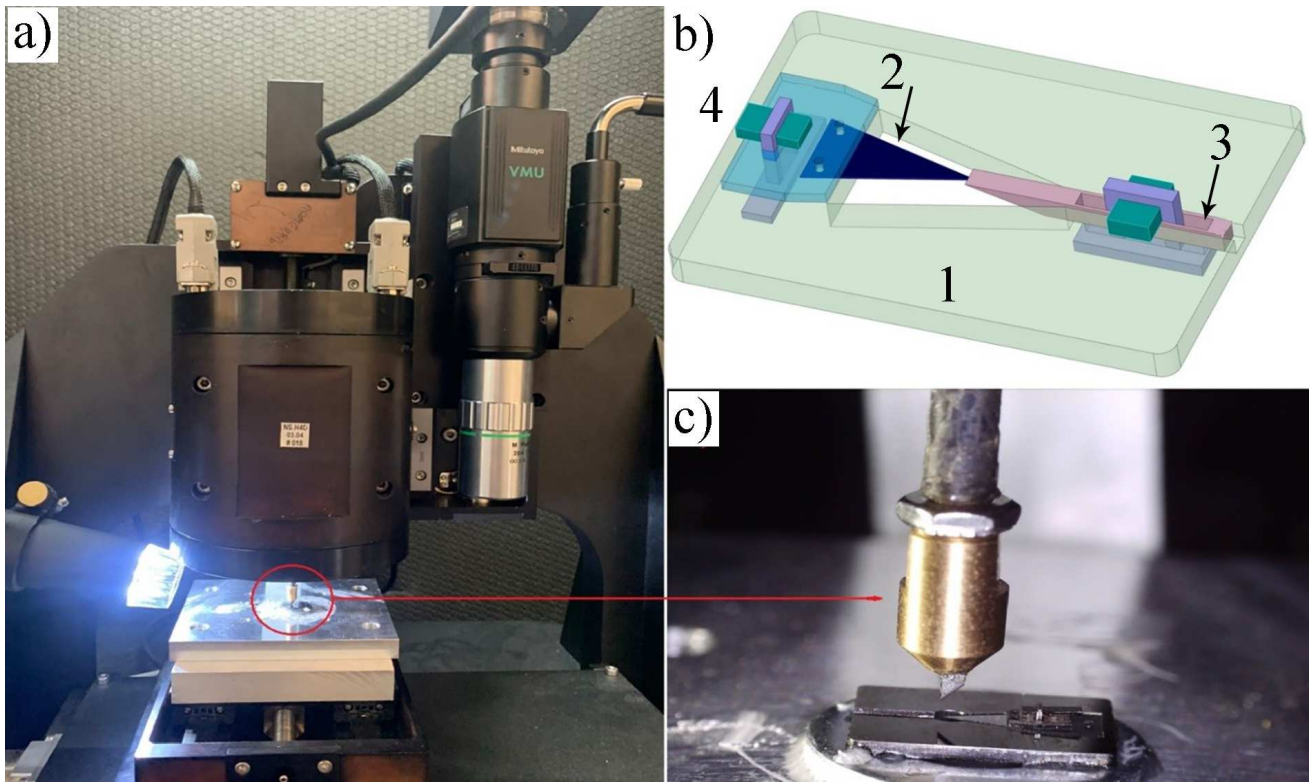


Рис. 1. (В цвете онлайн) *a)* Устройство для определения значений нагрузки на вершину пластины в зависимости от величины смещения индентора. *b)* Конструкция для цилиндрического изгиба алмазной пластины: 1 — основание из поликристаллического алмаза; 2 — алмазная пластина треугольной формы; 3 — графитовый клин для изгиба пластины; 4 — прижимная графитовая деталь. *c)* Увеличенное изображение индентора

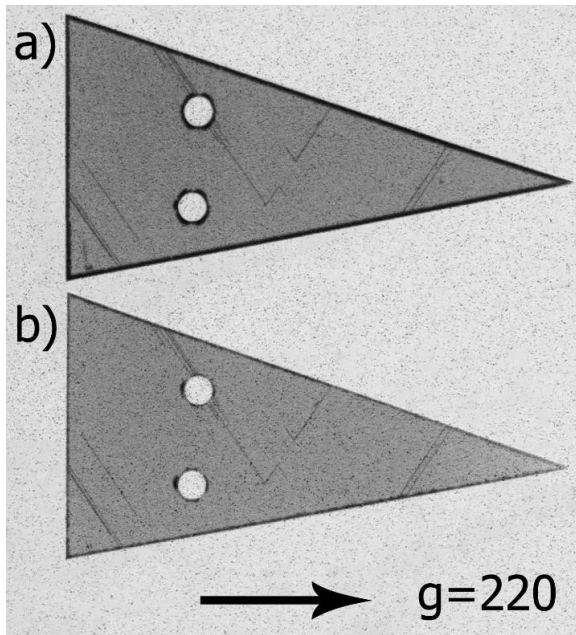


Рис. 2. Рентгеновские топограммы по Лангу монокристаллической пластины алмаза до *(a)* и после *(b)* отжига. Стрелкой указано направление вектора дифракции

к основанию, изготовленному из поликристаллического алмаза, с помощью натяжного графитового клина. Другие крепежные элементы также изготавливались из алмаза, что в целом обеспечивало эффективность теплоотвода от пластины. Конструкция для изгиба пластины разрабатывалась для работы в ярких пучках синхротронных источников и рентгеновских лазеров. В частности, в работе [6] на основе этой конструкции был создан спектрограф для контроля спектра каждого импульса излучения лазера на свободных электронах, работающего в режиме самоусиления спонтанного ондуляторного излучения на станции MDI (Material Imaging and Dynamics) Европейского лазера на свободных электронах.

Для сопоставления величины смещения вершины треугольной пластины в вертикальном направлении, осуществляемого с помощью ползунка, с величиной нагрузки, которая приводит к такому же смещению, использовался нанотвердомер НаноСкан-4D (рис. 1*a*) [13]. Фактически выполнялась калибровка зависимости смещений от величины приложенных нагрузок. Воздействие на вершину пластины осу-

ществлялось с помощью специально изготовленного алмазного индентора. Подвод индентора для нагружения выполнялся вертикальным транслятором (рис. 1с). Точность позиционирования контролировалась шаговым двигателем с редуктором. В процессе нагружения задавалась величина смещения, а расстояние, на которое сместился индентор (d_{ind}), равнялось разнице смещений штока (d_{tr}) и вершины треугольной пластины (d_s), т. е. определялась как

$$d_{ind} = d_{tr} - d_s. \quad (1)$$

Сила, прикладываемая к образцу, вычислялась по формуле

$$F_s = d_{ind} S_{ind}, \quad (2)$$

где S_{ind} — коэффициент жесткости штока.

В итоге, после серии экспериментов, были определены значения величин нагрузок на вершину треугольной пластины в зависимости от заданных смещений. Эти данные в дальнейшем были использованы для расчетов полей упругих напряжений в пластине с цилиндрическим изгибом.

2.2. Локальный дифракционный метод Лауэ

С целью определения тензора деформаций использовался рентгенодифракционный метод Лауэ. Достоинством метода для достижения этой цели является возможность получения полной картины дифракции без необходимости выполнения операции сканирования образца. Картина дифракции от неподвижного монокристалла в методе Лауэ формируется при облучении его рентгеновским пучком с непрерывным спектром (рис. 3). Благодаря такой специфике метода Лауэ, его можно отнести к категории самых быстрых методов сбора дифракционных данных. В работе [14] тензор деформаций в изогнутом

монокристалле меди для случая объемного сжатия–растяжения в гидростатическом приближении определялся с помощью дифракционного метода Лауэ в геометрии на отражении и метода рентгенофлуоресцентного анализа. Эксперименты по регистрации лауэграмм в геометрии на отражение проводились на станции CRG-IF VM32 синхротронного источника ESRF (Гренобль, Франция). В экспериментах использовался полихроматический рентгеновский пучок (5–23 кэВ) размерами $0.5 \times 0.5 \text{ мкм}^2$ и $0.8 \times 0.8 \text{ мкм}^2$, сформированный с помощью двух зеркал Кирпатрика–Баеза. Входным параметром для расчета деформации служило значение энергии, определяемой на основе данных рентгенофлуоресцентного анализа. Углы Брэгга для конкретных отражений рассчитывались с использованием именно этих данных. Аналогичным способом осуществлялся расчет деформаций в поликристаллических пленках алюминия на кремниевой подложке и в медной фольге [15]. Эксперименты в геометрии на просвет проводились на станции синхротронного источника NSLS Брукхейвенской национальной лаборатории (США). Для получения лауэграмм использовался полихроматический пучок диаметром 300 и 30 мкм, сформированный с помощью прямых и конусообразных стеклянных капилляров. Расчет деформаций кристаллической решетки проводился с использованием метода пси-наклона, применимым только для поликристаллических материалов. Работа [16] посвящена сравнительному анализу деформаций, определенных методами Лауэ и комбинационного рассеяния света (КРС) при растяжении полоски монокристаллического германия. Используемая авторами конструкция позволяет создавать только деформацию растяжения. Напряжения, возникающие при растяжении, определялись по сдвигу фонного пика в спектрах КРС германия в сторону меньших частот. Эксперименты проводились, как и в работе [14], на станции VM32 синхротронного источника ESRF с использованием сфокусированного до размера $0.5 \times 0.5 \text{ мкм}^2$ полихроматического рентгеновского пучка. Метод конфокального КРС нами применялся для определения упругих напряжений растяжения и сжатия в изогнутой алмазной пластине по сдвигу фонного пика алмаза 1332 см^{-1} в сторону низких (растяжение) и высоких (сжатие) частот.

В настоящей работе тензор деформаций определялся для случая одноосного растяжения–сжатия в изогнутой тонкой алмазной пластине с применением только дифракционного метода Лауэ в лабораторных условиях. Для случая одноосного растяжения–

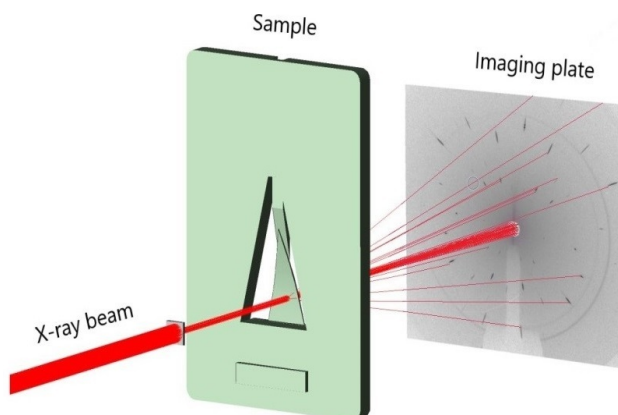


Рис. 3. (В цвете онлайн) Схема регистрации лауэграмм от цилиндрически изогнутого алмаза с использованием пластины с оптической памятью

сжатия деформация определяется только тремя линейными компонентами: ε_{xx} , ε_{yy} , ε_{zz} . Длины пятен Лауэ являлись входными параметрами для определения деформаций в различных кристаллографических направлениях в диапазоне энергий 9–50 кэВ с учетом анизотропии упругих свойств алмаза.

В экспериментах по регистрации лауэграмм от цилиндрически изогнутой пластины алмаза использовалось «белое излучение» рентгеновского источника Rigaku UltraX-18 с вращающимся серебряным анодом. Для повышения яркости излучения использовался острофокусный катод с размерами по вертикали и горизонтали $0.3 \times 0.3 \text{ мм}^2$. Размер падающего на образец рентгеновского пучка круглого сечения ограничивался вольфрамовыми диафрагмами диаметром 400, 200, 100 мкм. Вольфрам использовался с целью предотвращения возникновения флуоресцентного излучения на краях отверстий диафрагм, что обеспечивало высокое соотношение сигнал/фон. Расстояние от фокуса источника рентгеновского излучения до диафрагмы составляло 1100 см, расстояние от диафрагмы до образца было равно 15 см, а от образца до пластины с оптической памятью (imaging plate, IP) — 2.75 см. Позиционирование алмазной пластины относительно оси рентгеновского пучка осуществлялось с помощью гониометра рентгеновской топографической системы Rigaku XRT-100CCM.

Для регистрации лауэграмм использовалась IP-пластина марки Fujifilm BAS-TR2025 с поперечными размерами $126 \times 126 \text{ мм}^2$, размер пикселя составлял 50 мкм. Считывание картины дифракции осуществлялось с помощью устройства FUJIFILM BAS-1800 II (IP-reader). Среднее время регистрации лауэграммы составляло 40 мин при работе источника излучения в режиме $V = 50 \text{ кВ}$, $I = 100 \text{ мА}$. Для индирования лауэграмм использовалась программа LauePt [17].

3. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ

Цилиндрический изгиб алмазной пластины приводит к тому, что кристаллографические плоскости (110) принимают форму дуги окружности, а поперечные плоскости ($\bar{1}\bar{1}0$) остаются прямыми, но развернутыми на некоторый угол, зависящий от радиуса изгиба (рис. 4). В каждой цепочке атомов, расположенных на дуге окружности в плоскостях (110), расстояние между атомами остается одинаковым благодаря осуществлению «чистого» изгиба [18]. Это эквивалентно случаю одноосного растяжения или сжатия. В атомарных цепочках, рас-

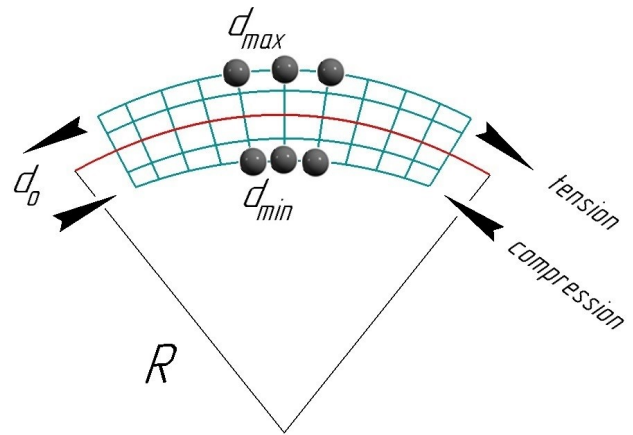


Рис. 4. Возникновение деформаций растяжения–сжатия при цилиндрическом изгибе алмазной пластины с ориентацией поверхности (110)

положенных на других дугах окружности, эти расстояния различаются, т.е. имеет место градиент однородной деформации. Максимального значения деформации достигают на поверхностях пластины. На выпуклой поверхности имеет место деформация растяжения, а на вогнутой — деформация сжатия. Межплоскостные расстояния d_{\perp} в радиальном (поперечном) направлении практически не изменяются из-за малого значения у алмаза коэффициента Пуассона $\nu \approx 0.03$ и остаются практически равными значению межплоскостных расстояний d_0 в неизогнутой пластине. Вследствие этого, при рассмотрении брэгговской дифракции на отражение изменением межплоскостных расстояний можно пренебречь. Это свойство было использовано при создании спектрометров для работы в геометрии на отражение [7,8,19]. В случае дифракции Лауэ на просвет необходимо учитывать изменение межплоскостных расстояний, поскольку деформация вследствие изгиба может достигать значительных величин.

Информацию о деформации кристаллической решетки получали на основе данных обработки лауэграмм. Разница в наклоне брэгговских плоскостей ($\bar{1}\bar{1}0$) и деформация кристаллической решетки должны приводить к астеризму пятен Лауэ, что и наблюдалось в реальных экспериментах. Удлиненные пятна Лауэ содержат информацию о деформации кристаллической решетки в различных кристаллографических направлениях. Это позволяет строить карты деформаций, фактически определять часть полного тензора деформаций [20]. На рис. 5 представлены лауэграммы неизогнутой и изогнутой алмазных пластин с радиусом изгиба $R = 2.06 \text{ см}$. Диаметр рентгеновского пучка составлял 400 мкм. Эксперименты по регистрации лауэ-

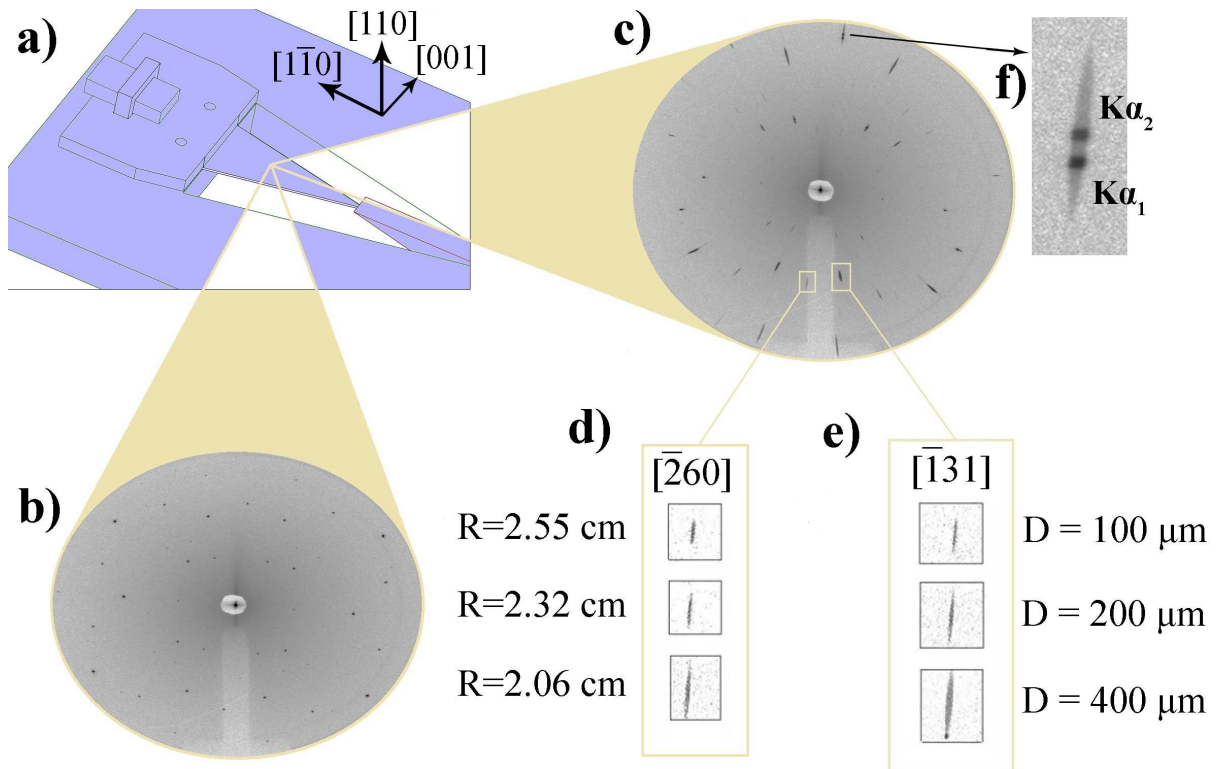


Рис. 5. (В цвете онлайн) *a*) Показаны закрепленная в держатель пластина и клиновидный ползунок для осуществления цилиндрического изгиба. Стрелками указаны направления векторов лабораторной системы координат и соответствующие им кристаллографические направления. Приведены лауэграммы неизогнутой (*b*) и изогнутой (*c*) алмазных пластин, зависимости длин пятен Лауэ рефлекса $(\bar{2}60)$ от радиуса изгиба (*d*) и от диаметра падающего на пластину рентгеновского пучка для рефлекса $(\bar{1}31)$ (*e*). Справа сверху (*f*) показано увеличенное изображение рефлекса $(6\bar{2}0)$

грамм проводились при радиусах изгиба пластины 2.55, 2.32, 2.06 см и диаметрах рентгеновского пучка 100, 200, 400 мкм (рис. 5*d,e*). На рис. 5*a* указаны кристаллографические направления и направления векторов лабораторной системы координат, показывающие, как ориентирована пластина относительно оси падающего рентгеновского пучка.

Как видно на рис. 5, лауэграммы неизогнутой и изогнутой пластин резко различаются. Для ненапряженного кристалла характерно наличие узких пятен Лауэ, в изогнутом же кристалле пятна имеют удлинненную форму и вытянуты в радиальном направлении. Поперечный размер вытянутых пятен значительно меньше их длины в радиальном направлении. Отметим, что интенсивности вытянутых пятен по всей длине практически одинаковы, что свидетельствует о непрерывном изгибе решетки кристалла при наличии градиента деформации в объеме [21]. На рис. 5*f* показано увеличенное изображение рефлекса $(6\bar{2}0)$, на котором наблюдаются характеристические линии $AgK_{\alpha 1}$ и $AgK_{\alpha 2}$, демонстрирующие работоспособность изогнутой пластины как диспергирующего элемента. Поскольку раз-

ница между энергиями этих линий хорошо известна, можно определить радиус изгиба пластины, используя приведенную ниже формулу (3). Как видно из лауэграммы изогнутой пластины, длины пятен Лауэ в разных кристаллографических направлениях различны. С учетом данных индексирования установлено, что наиболее вытянуты пятна Лауэ, расположенные ближе к направлению $[1\bar{1}0]$, совпадающему с осью изгиба, т. е. в направлении биссектрисы треугольника. Наиболее вытянуты следующие рефлексы: $(6\bar{2}0)$, $(\bar{2}60)$, $(3\bar{1}\bar{1})$, $(3\bar{1}1)$, $(\bar{1}3\bar{1})$, $(\bar{1}31)$. В противоположность этому рефлексы (113) , $(11\bar{3})$, (135) , $(31\bar{5})$, расположенные ближе к направлению $[001]$, практически не удлинены, что и должно иметь место при цилиндрическом изгибе. Экспериментально показано, что удлинение пятен Лауэ линейно зависит от радиуса кривизны: чем меньше радиус, тем длиннее пятна Лауэ (рис. 5*d*). Также было установлено, что их длина зависит от диаметра рентгеновского пучка (см. рис. 5*e*). Для расчета максимальных значений деформации кристаллической решетки, которые имеют место на выпуклой и вогнутой поверхностях пластины, необходимо учитывать

два эффекта, влияющих на астеризм пятен Лауэ. Первый связан с различным наклоном брэгговских плоскостей из-за кривизны решетки в результате изгиба пластины (см. рис. 4). Этот эффект можно назвать эффектом геометрической кривизны. Это означает, что не учитывается сжатие или растяжение кристаллической решетки, приводящее к изменению межплоскостных расстояний d . Энергия каждого дифрагированного луча в основном определяется углом дифракции 2θ . Спектральная ширина падающего на изогнутый кристалл рентгеновского пучка зависит от угла Брэгга, диаметра рентгеновского пучка и радиуса кривизны пластины и может быть рассчитана по формуле [6]

$$\frac{\Delta E_g}{E} = \frac{D \cos \theta}{R \sin^2 \theta}, \quad (3)$$

где D — диаметр рентгеновского пучка, R — радиус кривизны пластины, E — энергия излучения, ΔE_g — спектральная ширина в абсолютных единицах, θ — угол Брэгга. Второй эффект, также приводящий к астеризму пятен Лауэ в радиальном направлении, связан со сжатием и растяжением кристаллической решетки за счет деформации, возникающей при изгибе кристалла. Дифракция полихроматического пучка также происходит по закону Брэгга, однако разброс длин волн $\Delta\lambda$ или ширина спектра ΔE_p будет определяться исключительно разбросом межплоскостных расстояний Δd , т. е. деформацией кристаллической решетки, которая определяется соотношением

$$\Delta d/d = \Delta\theta \operatorname{ctg} \theta.$$

Для этого случая должно выполняться следующее соотношение:

$$\frac{\Delta E_p}{E} = \frac{\Delta\lambda}{\lambda} = \frac{\Delta d}{d}.$$

При радиусе кривизны $R = 20.6$ мм и диаметрах рентгеновского пучка, используемых в эксперименте (50, 100 и 400 мкм), удлинение пятен Лауэ в основном определяется геометрической кривизной, т. е. первый эффект превалирует над вторым. В равной степени влияние этих эффектов на удлинение рефлексов будет иметь место, когда $\Delta E_p/E = \Delta E_g/E$. Используя рефлекс ($6\bar{2}0$), оценим диаметр рентгеновского пучка, который будет соответствовать этому условию, которое можно назвать «условием равного влияния». Для расчета использовались формулы, приведенные в работе [22]. Согласно расчетам, условие равного влияния будет выполняться

при диаметре рентгеновского пучка 8–10 мкм. Это означает, что при таком диаметре пучка лауэграмма может использоваться для визуализации полей деформаций изогнутого монокристалла алмаза. При радиусе изгиба $R = 4\text{--}5$ мм, что вполне достижимо для пластины толщиной 40 мкм, длина пятен Лауэ при расстоянии от изогнутого кристалла до регистрирующей системы $L = 50$ мм будет составлять 120–200 мкм. Это позволяет с достаточно высокой точностью определять величины деформаций $\Delta d/d$ в диапазоне энергий 9–50 кэВ, соответствующем ширине λ -кривой спектра «белого» излучения серебряного анода. Важно отметить, что упруго изогнутую пластину можно рассматривать как диспергирующий элемент, действующий в широком диапазоне энергий 9–50 кэВ, поскольку каждому пятну на лауэграмме соответствует конкретная энергия в этом диапазоне в соответствии с условиями дифракции метода Лауэ. Это открывает перспективу ее использования для создания широкодиапазонных энергодисперсионных спектрографов с возможностью управления дисперсией путем изменения диаметра рентгеновского пучка и радиуса изгиба пластины.

4. МЕТОДЫ РАСЧЕТА

4.1. Расчет полей упругих напряжений

Расчет полей упругих напряжений в объеме и на поверхностях пластины проводился с использованием программы конечно-элементного анализа Ansys. При расчетах учитывались физические свойства материалов, используемых в конструкции для цилиндрического изгиба тонкой алмазной пластины треугольной формы. Входными параметрами для моделирования служили граничные условия контакта алмазной пластины заданной толщины с крепежными элементами, значения смещений индентора, геометрические формы элементов конструкции и др. Шероховатость поверхности пластины не принималась в расчет ввиду ее малого значения (около 0.5 нм) [23]. По сути решались две симметричные задачи контактного взаимодействия, в одной из которых учитывался контакт алмазной пластины с основанием из поликристаллического алмаза и графитового клина для ее фиксации, а во второй — контакт индентора твердомера с вершиной пластины (см. рис. 2с).

Важно отметить, что усилие прижима пластины к основанию влияет на величины изгибающих моментов. Для решения второй задачи задавались величины смещений индентора по вертикали, и для

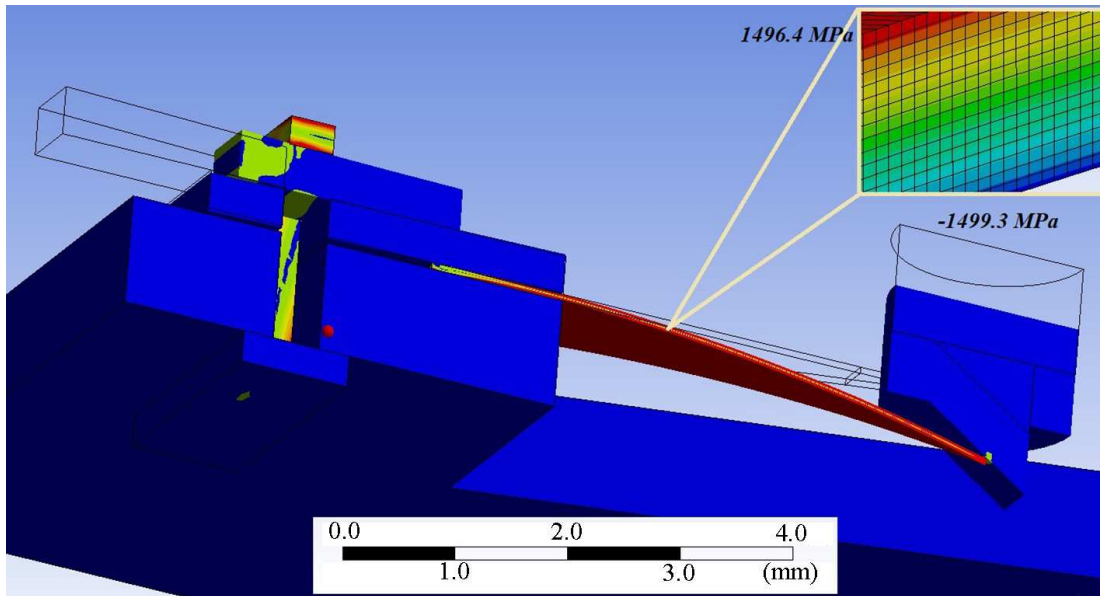


Рис. 6. (В цвете онлайн) Вид устройства для цилиндрического изгиба и результаты расчета распределения полей упругих напряжений в объеме изогнутой пластины алмаза

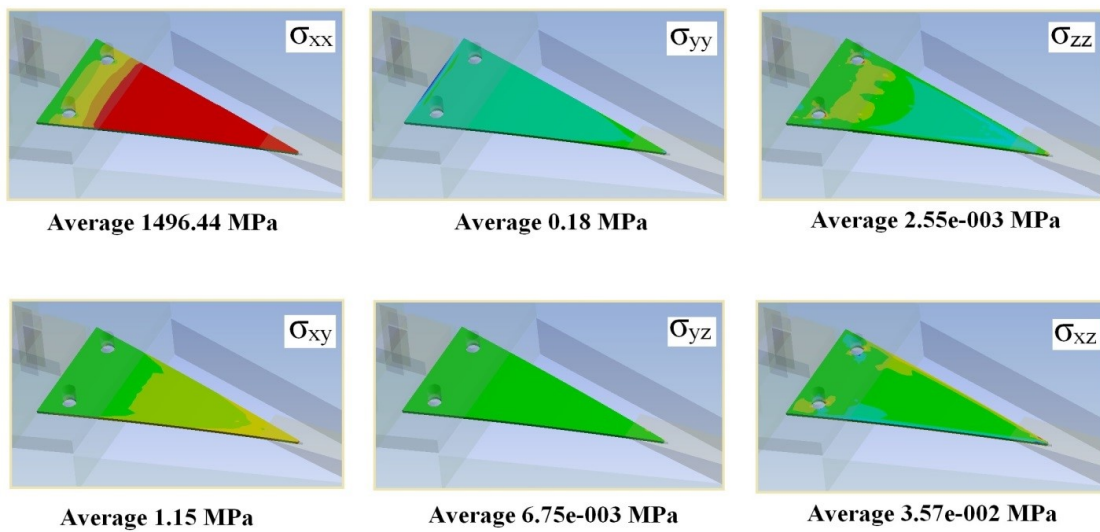


Рис. 7. (В цвете онлайн) Результаты расчета максимальных значений упругих напряжений для нормальных и сдвиговых компонент тензора

каждого значения смещения рассчитывалась сила реакции. В итоге ошибка отклонения экспериментальных значений прикладываемых нагрузок от расчетных не превышала 1%.

Поперечный размер плоской треугольной пластины изменяется по линейному закону:

$$a = a_0 \left(1 - \frac{\xi}{L}\right), \quad (4)$$

где a_0 — поперечный размер закрепленного основания, L — расстояние от основания до вершины треугольника, ξ — координата сечения в направлении биссектрисы треугольника. Изгибающий момент M изменяется линейно вдоль направления биссектрисы от 0 в точке приложения силы до максимума в жестко закрепленном основании по закону [24]

$$M = \iint_s [\mathbf{r} \times \mathbf{F}] ds = \frac{1}{6} kb^3 a_0 \left(1 - \frac{\xi}{L}\right) \mathbf{m}, \quad (5)$$

где b — толщина пластины, k — константа, определяющая упругие свойства материала, \mathbf{F} — сила, действующая на каждый элемент слоя, \mathbf{r} — радиус-вектор точки приложения силы, \mathbf{m} — единичный вектор, направленный вдоль основания треугольника. Определим тензор напряжений через величину изгибающего момента, используя формулу (4):

$$\sigma = \frac{6M}{b^2 a_0} x_i \mathbf{q}, \quad (6)$$

где \mathbf{q} — единичный вектор вдоль оси растяжения-сжатия (биссектрисы треугольника пластины).

В лабораторной декартовой системе координат не равна нулю лишь одна компонента тензора напряжений, а именно $\sigma_{xx} \neq 0$, $\sigma_{yy} = \sigma_{zz} = \tau_{xy} = \tau_{yz} = \tau_{zx} = 0$.

Результаты расчета распределения полей упругих напряжений в объеме представлены на рис. 6 справа вверху. На этом же рисунке показан разрез конструкции для цилиндрического изгиба вдоль биссектрисы треугольной пластины. Справа показан разрез индентора. Как видно на рисунке, напряжения растяжения и сжатия достигают максимальных значений 1.5 ГПа на противоположных поверхностях пластины. В радиальном направлении имеет место градиент однородной деформации. Несмотря на большие абсолютные значения напряжений на поверхностях, они значительно ниже предела разрушения алмаза. Это позволяет избежать ее разрушения с течением длительного времени под действием изменяющихся нагрузок. Кроме того, такая конструкция обеспечит стабильную работу в условиях воздействия значительных тепловых нагрузок.

На рис. 7 представлены результаты расчета максимальных значений упругих напряжений для нормальных и сдвиговых компонент тензора. Как видно на рисунке, расчеты подтверждают правомерность допущения о неравенстве нулю лишь одной компоненты σ_{xx} тензора, как и должно быть при цилиндрическом изгибе.

4.2. Расчет тензора деформаций

Расчеты тензора деформаций проводились с учетом условия «равного влияния» (см. разд. 2). Поскольку упругие константы алмаза строго зависят от кристаллографических направлений, точный расчет следует проводить с учетом этого обстоятельства. В расчетах используются значения длин пятен Лауэ, которые определяются из экспериментальных лауэграмм с учетом значений радиуса изгиба и диаметра рентгеновского пучка. Для расчетов

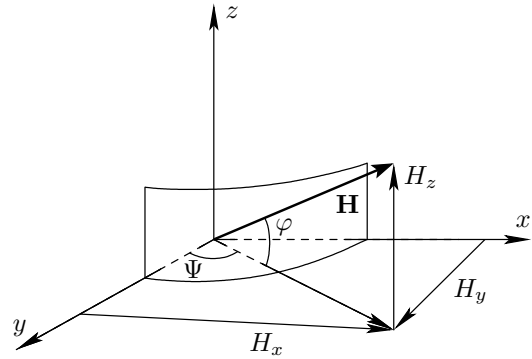


Рис. 8. Направления вектора обратной решетки \mathbf{H} и его компонент в лабораторной системе координат (x, y, z)

применялись формулы теории дифракции рентгеновских лучей. В уравнения для определения приращений компонент вектора обратной решетки (ΔH_x , ΔH_y , ΔH_z) деформированного кристалла подставлялись значения упругих податливостей S_{11} , S_{12} , S_{44} . Эти уравнения имеют вид

$$\begin{aligned} \Delta H_x &= -H_x 2\sigma E_{[1\bar{1}0]}^{-1}, \\ \Delta H_y &= H_y 2\sigma E_{[1\bar{1}0]}^{-1} \nu_{[001][1\bar{1}0]}, \\ \Delta H_z &= H_z 2\sigma E_{[001]}^{-1} \nu_{[110][1\bar{1}0]}, \end{aligned} \quad (7)$$

где $E_{[110]}^{-1}$ и $E_{[001]}^{-1}$ — модули Юнга, определяемые по формулам

$$E_{[110]}^{-1} = \frac{1}{4}(2S_{11} + 2S_{12} + S_{44}), E_{[001]}^{-1} = S_{11},$$

а $\nu_{[001][1\bar{1}0]}$ и $\nu_{[110][1\bar{1}0]}$ — коэффициенты Пуассона для анизотропных тел, определяемые по формуле

$$\nu(\mathbf{m}, \mathbf{q}) = -S_{ijkl} m_i m_j q_k q_l / S_{mprs} q_p q_r q_s. \quad (8)$$

В нашем случае эти коэффициенты вычисляются следующим образом:

$$\nu_{[001][1\bar{1}0]} = -\frac{S_{12}}{2S_{11} + 2S_{12} + S_{44}},$$

$$\nu_{[110][1\bar{1}0]} = -\frac{2S_{11} + S_{12} - S_{44}}{2S_{11} + 2S_{12} + S_{44}}.$$

Значения упругих податливостей S_{11} , S_{12} , S_{44} были взяты из работы [25]. На рис. 8 указаны направления вектора обратной решетки \mathbf{H} и его компонент относительно лабораторной системы координат (x, y, z) . Рентгеновский пучок направлен вдоль оси y .

Итоговая формула для расчета длин пятен Лауэ имеет вид

$$\begin{aligned} \Delta\theta &= \frac{1}{\cos\theta} \sum \frac{\partial}{\partial H_i} \frac{Hy}{\sqrt{Hx^2 + Hy^2 + Hz^2}} \Delta H_i = \\ &= \sigma \operatorname{tg} \theta \cos^2 \alpha \left(E_{[\bar{1}\bar{1}0]}^{-1} + \nu_{[110][\bar{1}\bar{1}0]} E_{[001]}^{-1} \right) + \\ &+ \sin^2 \varphi \left(\nu_{[110][\bar{1}\bar{1}0]} E_{[\bar{1}\bar{1}0]}^{-1} - \nu_{[110][\bar{1}\bar{1}0]} E_{[001]}^{-1} \right), \quad (9) \end{aligned}$$

где $\cos \alpha = \cos \psi \sin \varphi$ — угол между вектором \mathbf{H} и осью x , ψ — долгота стереографической проекции, φ — широта стереографической проекции.

Результаты расчета максимальных значений деформации приведены в таблице.

Таблица. Результаты расчета максимальных значений деформаций

hkl	Энергия, кэВ	$\Delta\theta_{exp}$	$\Delta\theta_{calc}$	$(\Delta d/d)_{max}, 10^{-4}$
$\bar{6}\bar{2}0$	24.5943	1.8°	0.10°	17.7
$\bar{2}\bar{6}0$	24.5696	1.5°	0.09°	15.6
$3\bar{1}\bar{1}$	13.6629	1.5°	0.09°	16.7
$\bar{1}3\bar{1}$	13.3802	1.1°	0.07°	13.1
$\bar{1}\bar{3}\bar{1}$	13.6490	1.2°	0.08°	14.8
$3\bar{1}\bar{1}$	13.3935	1.6°	0.10°	18.2
$\bar{1}\bar{5}1$	16.5045	1.7°	0.10°	13.3

В третьей колонке таблицы представлены значения длин пятен Лауэ ($\Delta\theta_{exp}$), взятых из экспериментальной лауэграммы, полученной от пластины с радиусом кривизны 20.6 мм при диаметре рентгеновского пучка 400 мкм. Длина пятен в этом случае определяется в основном за счет наклона брэгговских плоскостей, т. е. геометрической кривизной. В четвертой колонке таблицы приведены расчетные величины длин пятен Лауэ ($\Delta\theta_{calc}$), соответствующие «условиям равного влияния», когда можно считать, что длина определяется только деформацией кристаллической решетки.

Таким образом, при малых радиусах изгиба пластины в различных кристаллографических направлениях деформация кристаллической решетки имеет значительную величину, что необходимо учитывать при проектировании фокусирующих кристалл-монохроматоров и широкодиапазонных спектрографов для работы в геометрии на просвет. Конструкция держателя позволяет использовать монокристаллические пластины алмаза разной толщины и с другими ориентациями поверхности, деформация в которых, возникающая при их изгибе, может быть рассчитана с помощью разработанной методики.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Локальный дифракционный метод Лауэ показал свою высокую информативность при исследовании тонкой цилиндрически изогнутой алмазной пластины за счет возможности регистрации полной картины дифракции. На основе экспериментальных данных этого метода рассчитаны максимальные значения деформаций на поверхностях пластины в различных кристаллографических направлениях с учетом анизотропии упругих свойств алмаза. Сформулированы условия, при которых астеризм пятен Лауэ в равной степени зависит от наклона брэгговских плоскостей вследствие изгиба и деформации кристаллической решетки. Это позволяет использовать метод Лауэ для визуализации полей деформации в пластинах с большой кривизной изгиба. С помощью программы конечно-элементного анализа определены поля упругих напряжений в объеме и на поверхностях упруго изогнутой алмазной пластины. Высокие напряжения, достигающие несколько единиц гигапаскалей, открывают перспективу использования метода комбинационного рассеяния света как независимого метода для определения их значений по сдвигу фонового пика алмаза 1332 см^{-1} . Продемонстрировано, что метод Лауэ можно использовать для управления дисперсионными характеристиками изогнутых пластин путем изменения диаметра рентгеновского пучка или радиуса изгиба. Универсальность конструкции для изгиба пластины позволяет на ее основе создавать многофункциональные рентгенооптические модули. В частности, используя пластины с разной кристаллографической ориентацией поверхности и толщиной, сравнимой с глубиной экстинкции, можно разрабатывать фокусирующие кристалл-монохроматоры и широкодиапазонные энергодисперсионные спектрографы для работы в геометрии на просвет. Высокое структурное совершенство алмазной пластины обеспечит возможность работы с когерентными рентгеновскими пучками. Разработанная методика обладает общностью и может быть использована для определения тензора деформаций и полей упругих напряжений в тонких изогнутых пластинах других монокристаллов.

Благодарности. Эксперименты проводились на оборудовании Центра коллективного пользования «Исследования наноструктурных, углеродных и сверхтвердых материалов ФГБНУ ТИСНУМ».

Финансирование. Работа выполнена в рамках Государственного задания на 2023 год.

ЛИТЕРАТУРА

1. Y. Shvyd'ko, S. Terentyev, V. Blank et al., *J. Synchrotron Rad.* **28**, 1720 (2021).
2. I. Nam, C.-K. Min, B. Oh et al., *Nat. Photon.* **15**, 435 (2021).
3. J. Amann, W. Berg, V. Blank et al., *Nat. Photon.* **6**, 693 (2012).
4. B. Larson, W. Yang, G.E. Ice et al., *Nature* **415**, 887 (2002).
5. Д. М. Хейкер, В. А. Шишков, Ю. Н. Шилин и др., *Кристаллография* **52**, 767 (2007).
6. U. Boesenberg, L. Samoylova, T. Roth et al., *Opt. Express.* **25**, 2852 (2017).
7. S. Terentyev, V. Blank, T. Kolodziej et al., *Rev. Sci. Instrum.* **87**, 125117 (2016).
8. L. Samoylova, U. Boesenberg, A. Chumakov et al., *J. Synchrotron Rad.* **26**, 1069 (2019).
9. P. Qi, N. Samadi, M. Martinson, O. Ponomarenko et al., *Sci. Rep.* **9**, 17734 (2019).
10. V. D. Blank, M. S. Kuznetsov, S. Nosukhin et al., *Diam. Relat. Mater.* **16**, 800 (2007).
11. S. Polyakov, V. Denisov, N. Kuzmin et al., *Diam. Relat. Mater.* **20**, 726 (2011).
12. S. Terentyev, V. Blank, S. Polyakov et al., *Appl. Phys. Lett.* **107**, 111108 (2015).
13. В. Н. Решетов, И. В. Красногоров, В. В. Соловьев и др., *Наноиндустрия* **7–8**, 466 (2022).
14. A. Abboud, C. Kirchlechner, J. Keckes et al., *J. Appl. Cryst.* **50**, 901 (2017).
15. P. C. Wang, G. S. Cargill, and I. C. Noyan, *MRS Online Proc. Library* **375**, 247 (1994).
16. S. Tardif, A. Gassenq, K. Guilloy et al., *J. Appl. Cryst.* **49**, 1402 (2016).
17. X. Huang, *J. Appl. Cryst.* **43**, 926 (2010).
18. С. Г. Лехницкий, *Теория упругости анизотропного тела*, Наука, Москва (1977), с 87.
19. L. Xing, K. Zhang, P. Liu et al., *Proc. SPIE* **12169**, 1216982 (2022).
20. Samuel Tardif, Alban Gassenq, Kevin Guilloy et al., *J. Appl. Cryst.* **43**, 926 (2010).
21. M. Morita and O. Umezawa, in *Optical Measurements, Modeling, and Metrology*, Vol. 5 (2011), p. 91.
22. P. Qi, X. Shi, N. Samadi et al., *Proc. SPIE* **11108**, 111080E (2019).
23. M. A. Doronin, S. N. Polyakov, K. S. Kravchuk et al., *Diam. Relat. Mater.* **87**, 149 (2018).
24. Ю. И. Сиротин, М. П. Шаскольская, *Основы кристаллофизики*, Наука, Москва (1979).
25. Б. П. Сорокин, Г. М. Квашнин, М. С. Кузнецов и др., *Журнал СФУ, сер. Матем. и физ.* **6:1** (2013).