

基于蒙特卡罗方法的 XPCS 散斑动力学全流程仿真及关键参数依赖性分析*

周子木¹⁾²⁾ 崔晨辉³⁾ 李松林³⁾ 徐以会⁴⁾⁵⁾ 田丰²⁾
周平²⁾ 张明俊^{2)†} 郭智^{2)‡} 邵仁忠²⁾³⁾

1) (中国科学院上海应用物理研究所, 上海 201800)

2) (中国科学院上海高等研究院, 上海光源科学中心, 上海 201210)

3) (上海科技大学物质科学与技术学院, 上海 201210)

4) (上海科技大学, 大科学中心, 上海 201210)

5) (中国科学技术大学, 国家同步辐射实验室, 合肥 230026)

(2025 年 5 月 23 日收到; 2025 年 7 月 11 日收到修改稿)

基于散斑技术的同步辐射 X 射线光子关联谱 (XPCS) 是研究材料介观尺度动态过程的重要方法, 但实验中的光源特性、光束传输及探测器响应等因素对散斑动力学信号的影响机制复杂, 难以对其中的影响因素进行单独且直接的观测. 为此, 本文旨在通过蒙特卡罗模拟开展全光路数值建模, 系统解析各因素的影响, 为实验设计与优化提供理论支撑. 研究构建了包含布朗粒子动力学、光束相干性及探测器响应的三维仿真框架, 模拟从光子发射到信号采集的全流程. 基于夫琅禾费衍射理论, 开发散斑光场生成算法, 通过原子位置动态演化与相位调制, 复现实验散斑涨落特性, 并通过 Siegert 关系拟合、散射矢量区域选择及粒子运动步长与温度关系验证了模拟程序的可行性. 关键参数灵敏度分析表明: 光阑孔径与光束束腰存在最优匹配条件 $r/\sigma = 1$, 此时相干性与光子通量达到平衡; 机械振动振幅达到运动步长 1500 倍时, 关联函数出现周期性振荡, 导致动力学参数提取失真; 低光强条件下泊松噪声与光强波动显著降低信噪比. 研究建立的全光路模拟框架, 揭示了光源特性、光学元件参数及噪声因素对实验结果的影响机制, 为 XPCS 实验参数优化提供了理论依据, 明确了噪声抑制与动力学解析的协同机制, 为该技术在更多实验场景的应用奠定了模拟基础.

关键词: X 射线光子关联谱, 蒙特卡罗模拟, 散斑动力学, 全光路模拟

PACS: 02.70.Uu, 61.05.cf, 42.30.Ms, 07.05.Tp

DOI: 10.7498/aps.74.20250673

CSTR: 32037.14.aps.74.20250673

1 引言

在同步辐射光源的前沿研究领域, X 射线光子关联谱技术 (XPCS) 作为解析材料介观尺度动态

过程的核心手段, 正发挥着日益关键的作用^[1,2]. 该技术通过捕捉 X 射线散射产生的动态散斑信号, 能够精准探测纳米颗粒布朗运动、聚合物链段弛豫、生物大分子构象变化等复杂体系的瞬态动力学行为, 为软物质物理、纳米材料科学及生物医学等领

* 国家重点研发计划 (批准号: 2022YFB3503904, 2022YFA1603503)、上海市科技重大专项 (批准号: E33G661D01) 和国家自然科学基金 (批准号: 12075304) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: zhangmingjun@sari.ac.cn

‡ 通信作者. E-mail: guoz@sari.ac.cn

域提供了独特的微观动力学表征工具, 通过监测肌动蛋白丝的布朗运动解析其聚合动力学, 或利用散斑涨落表征抗体-抗原结合过程中的构象变化^[3-5].

在 XPCS 的研究中, 散斑动力学信号的精确解析是实现复杂体系微观动力学机制表征的关键环节. 基于蒙特卡罗算法的全光路数值模拟方法, 已发展为与实验测量同样重要的研究手段, 在实验参数解耦分析、极端条件预测及仪器配置优化等领域展现出独特价值^[6-8]. 该技术通过建立光子传输的随机过程模型, 能够在各种实验条件下, 系统性地量化光源特性 (如时间和空间相干性、脉冲波形)、束线传输误差 (如光学元件热形变) 以及探测器响应函数 (如量子效率衰减效应) 等因素对散斑信号动力学的影响. 相较于多参数相互耦合的传统实验手段, 数值建模通过精确调控单一变量参数, 为研究多种光学效应、动态噪声源分离及相干性演变的物理机制提供了可验证的理论平台^[9].

全光路数值模拟方法的核心优势体现在对光子传输路径的高保真度重构: 通过概率统计方法跟踪个体光子运动轨迹, 可精确复现相干光场与物质相互作用中的散斑生成机制^[10]. 在低通量光源量子噪声、超短脉冲时间相干性畸变等特殊工况下, 该方法能突破实验观测的技术瓶颈, 有效提取如纳米颗粒布朗运动微观轨迹、聚合物链段弛豫时间分布等瞬态动力学信息^[11]. 近期提出的离散化随机行走模型, 显著提升了动态结构因子相位场的重建精度. 通过构建包含探测器硬件噪声与算法误差的联合仿真系统, 该技术可开展参数空间扫描分析, 定量评估器件配置对实验结果的影响阈值, 进而指导实验装置的针对性优化. 更为重要的是, 数值模拟能够在微观分子动力学模型与宏观散斑信号之间建立多尺度解析方法, 通过建立动力学特征参数的跨尺度关联模型, 推动 XPCS 技术向理论预测与实验观测深度融合的方向发展^[12].

2 XPCS 全光路蒙特卡罗模拟物理模型构建

在 XPCS 实验的数值模拟研究中, 本模型开发采用分层物理建模策略: 首先基于同步辐射装置特征, 简化提取光束线关键参数、样品环境条件及探测器系统特性; 继而对各子系统分别建立数学模型, 涵盖 X 射线波前传播的波动力学模型、样品散

射截面概率模型以及探测器噪声的统计模型; 最终通过 MATLAB 平台整合算法模块, 构建涵盖光路传输至信号探测全过程的数值仿真系统, 实现实验流程的高保真重构. 本研究构建的蒙特卡罗物理模型致力于平衡复杂体系的动态散射过程精确描述与计算效率优化目标^[6,13]. 该模型通过统计采样技术解析材料介观尺度动力学特征, 适用于纳秒至毫秒量级的典型 XPCS 动力学时间窗口. 其核心优势表现为对实验参数的可控性调控机制——能够独立设定光源入射光斑尺寸、散射矢量范围及样品结构参数, 从而系统性量化各因素对时间关联函数的影响权重^[14,15]. 本方法采用布朗粒子模型对分子运动进行处理, 能精确捕捉波矢依赖的动态结构因子等关键参数, 并有效实现了典型实验时间尺度的高效模拟^[13,16]. 这种理论与实验的交叉验证机制, 不仅深化了对复杂体系动力学的理论认知, 更为软物质动态异质性研究^[4]、纳米材料相转变机制^[17]以及生物大分子构象动力学^[15]等领域提供了重要研究工具.

在 XPCS 仿真的蒙特卡罗模拟流程中, 包含了从粒子运动模型、光路元件作用及光束参数描述这三个方面进行设计:

1) 粒子运动模型: 考虑样品粒子为独立的个体, 其动力学行为满足布朗运动, 即全体粒子的初始坐标为满足随机分布的随机数, 其后的每一步运动均在上一步的二维位置上叠加一个均值为 0、标准差为 s 的正态分布随机数. 因此, 粒子在时间轴上呈现布朗运动的随机模式. 粒子尺寸远小于光阑孔径时, 可将其近似为点散射体, 以点源形式参与散射. 粒子尺寸参数需根据探测器尺寸与样品-探测器距离调整, 确保探测器能清晰捕获散射环及散斑信号.

2) 光路元件作用: 入射端孔径光阑通过限制光束横截面积控制相干体积, 其直径决定横向相干长度; 样品至探测器的距离直接影响散射矢量范围, 而像素尺寸与积分时间分别决定空间分辨率与散斑时间平均效应. 探测器噪声由光子计数的泊松噪声与电子读出的高斯噪声叠加构成, 二者共同影响散斑可见度与数据信噪比.

3) 光束参数描述: 光束的横向相干长度由光源尺寸决定, 纵向相干长度则由光谱宽度决定. 波长选择需匹配样品散射特性以确保散射图案形态的有效解析. 实际光束中常存在多类噪声, 包括

光子统计的泊松噪声、光束强度的波动噪声及机械振动导致的噪声等,需在模拟中分别建模。

总之,在 XPCS 模拟实验中,蒙特卡罗模型通过布朗粒子动力学、光路几何及噪声统计的协同建模,实现动态散射过程的全要素仿真。模型以点散射体近似简化粒子尺寸,通过正态分布位移描述布朗运动,整合光源相干性、探测器参数及散射几何的物理关联,为 XPCS 样品体系的动态研究提供了理论支撑工具。

3 散斑光场生成算法实现

在 XPCS 实验中,蒙特卡罗模拟散斑光场生成的算法基于原子位置的空间概率分布与夫琅禾费衍射理论的耦合机制。其核心步骤包括如下三方面。

1) 随机粒子生成与动态演化

在动态散射体系的模拟研究中,采用基于概率统计理论的蒙特卡罗抽样方法构建模型。该方法通过随机抽样模拟复杂物理过程,尤其适用于处理具有随机性和动态性的粒子运动问题。

对于第 i 个粒子,其初始坐标 (p_i, q_i) 服从均值为 0、标准差为 1 的正态分布 $N(0, 1)$ 。这一设定意味着粒子在初始时刻围绕原点 $(0, 0)$ 随机分布,且空间分布相对均匀,为后续动态演化提供了合理的初始条件。在编程实现中,通过 MATLAB 的 `normrnd` 函数生成随机数: `normrnd(0, 1, n, 1)` 可生成 n 个符合标准正态分布的随机数,分别对应 x 和 y 方向的坐标,从而模拟 n 个粒子的初始位置分布。为刻画介观尺度下粒子受环境随机作用的扩散行为,引入随机位移增量 $\Delta \mathbf{r}_i$,其统计特性服从均值为 0、标准差为 s 的正态分布 $N(0, s)$ 。其中,标准差 s 决定了位移幅度, s 越大,粒子在每个时间步的随机位移可能越大。代码中通过 $s \cdot \text{normrnd}(0, 1, n, 1)$ 生成位移增量,累加到当前坐标上,即可得到下一时刻的粒子位置。

上述过程遵循马尔可夫链蒙特卡罗 (MCMC) 抽样方法,其核心是通过构建马尔可夫链生成符合特定概率分布的样本。在动态散射体系中,MCMC 抽样的关键作用是确保模拟的时间相关函数与真实物理过程一致。时间相关函数描述了体系不同时刻状态的关联性,是研究动态演化规律的核心工具。通过 MCMC 方法,粒子的动态演化过程被赋予与真实布朗运动相似的统计特性,从而保证模拟

结果能准确反映散射体系的动力学行为。

这一建模策略通过“初始随机分布-随机位移迭代”的框架,结合概率统计理论与数值算法,为复杂散射体系的动态过程模拟提供了可靠的起点与演化机制,确保理论模型与实验观测的动力学特征相契合。

2) 单原子散射振幅计算

在单原子散射现象的研究中,像平面 (x, y) 处第 i 个粒子的散射场复振幅 U_i ,其分布特征由衍射核函数决定。研究中通常引入两个关键假设以简化计算:一是近轴近似,即假设光线与光轴的夹角极小,借此可对三角函数进行线性化处理;二是夫琅禾费衍射假设,适用于远场条件,能简化衍射积分运算。这两个假设共同构建了散射场的理论分析框架。在上述假设下,单个粒子的散射场复振幅可表示为特定的数学形式:

$$U_i(x, y) = \frac{e^{ikd}}{j\lambda d} \exp \left\{ j \frac{k}{2d} [(x - p_i)^2 + (y - q_i)^2] \right\}, \quad (1)$$

其中, k 为波数, $k = 2\pi/\lambda$; λ 是入射光波长; d 为散射体到像平面的距离; (p_i, q_i) 代表第 i 个粒子在物平面的位置坐标。(1) 式包含了丰富的物理信息:系数项 $e^{ikd}/(j\lambda d)$ 决定了散射场的幅度分布,而指数项 $\exp \left\{ j \frac{k}{2d} [(x - p_i)^2 + (y - q_i)^2] \right\}$ 则刻画了不同位置处的相位变化,完整描述了单粒子散射场在像平面的复振幅分布特征。

在实际的数值计算中,由于像平面是连续的无限空间,需对其进行离散化处理。具体通过网格化方法将像平面转化为离散坐标 \mathbf{r}_x 和 \mathbf{r}_y ,进而基于光波叠加原理,对各原子的散射场进行线性叠加。代码实现时,通过循环遍历每个原子,将其相位贡献逐步累加到临时变量 U_{temp} 中,最终合成总散射场复振幅。这种方法能够准确模拟多原子散射场的相互作用,有效反映实际物理过程中散射场的叠加效应。

3) 多体干涉与强度分布重构

总散射场 U_{total} 是由各个粒子的散射场 U_i 叠加而成,即 $U_{\text{total}} = \sum_i U_i$ 。总散射场的强度分布 $I(\mathbf{r}) = |U_{\text{total}}|^2$ 。散斑是由大量随机散射体的散射光相互干涉形成的随机分布的亮暗斑点,其统计特性反映了散射体系的无序性和随机性。

该方法在计算总散射场强度分布时能够实现 $O(N_{\text{particle}} \times R_0^2)$ 的数值精度,其中 N_{particle} 表示粒子

的数量, R_0 为像平面分辨率. 像平面分辨率 R_0 决定了像平面上对散射场强度分布进行离散化处理时的网格密度, 分辨率越高, 网格越细密, 计算结果就越精确, 但同时计算量会显著增加. 因为对于每个粒子, 都需要在像平面的每个网格点上进行散射场的叠加和强度计算, 所以计算复杂度与粒子数量和像平面分辨率的平方成正比.

$$I_r(x, y) = \left| \sum_{i=1}^n e^{j(k\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_i)} \frac{[\sin(kR) - kR \cos(kR)]^2}{(kR)^6} \right|^2, \quad (2)$$

式中, I_r 为在像平面的 (x, y) 处的累计像素强度, R 为原子等效散射半径, 反映了原子对入射光的散射能力; \mathbf{q} 是散射矢量; \mathbf{r}_i 是第 i 个粒子的位置矢量. 式中的 $\sum_{i=1}^n e^{j(k\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_i)}$ 表示各个粒子散射波的相位叠加, 体现了多体干涉的效果; 而 $\frac{[\sin(kR) - kR \cos(kR)]^2}{(kR)^6}$ 这一项则与原子的散射特性有关, 它描述了单个原子的散射强度随散射角度的变化.

在程序的最后阶段, 将累计场强 $I_r = |U_{\text{temp}}|^2 I_0$ 代入关联运算模块. 其中, U_{temp} 是逐原子计算得到的总散射场的复振幅, I_0 是初始光强. 通过将累计场强代入关联运算模块, 能够实现对动态散斑的全光路模拟. 全光路模拟能够考虑到从光源到探测器的整个光路中各种因素的影响, 包括散射体的分布、散射波的干涉以及探测器的响应等, 从而更准确地模拟出实际观测到的动态散斑现象.

4 模拟程序的可行性验证

为了确认模拟实验程序能够准确再现 XPCS 实验的物理过程并输出可靠的定量分析数据, 本文从多个层面和角度对模拟系统的核心模块进行了实验参数验证. 在复杂散射体系的数值模拟中, 程序的有效性不仅要求粒子动力学行为、光束相干特性及探测器响应机制等关键物理过程的建模准确无误, 还需要验证模拟结果与经典理论模型的契合度, 从而为后续开展关键参数的灵敏度分析建立可靠的理论基准.

4.1 Siegert 关系拟合

在动态光散射中, Siegert 关系式的建立源于热力学平衡体系的涨落-耗散定理^[18,19], 而 XPCS

通过硬 X 射线光子统计特性将其拓展至非平衡系统^[4,17]. 对于处于布朗运动状态的单分散粒子体系, 二阶时间相关函数 $g_2(t)$ 的表达式为

$$g_2(t) = 1 + \beta e^{-2(\Gamma t)^\gamma}. \quad (3)$$

在理论模型中, 空间相干因子 β 、拉伸指数 γ 及弛豫率 Γ 共同表征体系的动力学行为. 其中拉伸指数 γ 作为有序度参量具有明确的物理意义: 当 $\gamma = 1$ 时对应均匀介质的单指数弛豫行为, 此时粒子运动遵循自由扩散规律^[20]; 当 $\gamma < 1$ 时体现出弛豫时间分布的增宽效应; 而 $\gamma > 1$ 可理解为应力驱动下协同运动导致的动力学压缩现象. 针对硅基胶体玻璃体系的 XPCS 实验结果表明, 随着温度趋近玻璃转变点 T_g , γ 参数呈现非单调演变趋势, 这与 Adam-Gibbs 理论中协同运动单元尺寸发散的预测相符合^[21]. 中子自旋回波技术的解析进一步揭示, 在 $\gamma < 1$ 的动力学区域内活化能垒分布呈现出双模态特征, 这一现象源于自由体积动态冻结与纳米级流变单元生成之间的竞争机制^[22]. 通过多尺度计算机模拟与实验数据的交叉验证, 证实 KWW 模型对复杂体系动力学特征的描述具备显著有效性^[23]. 值得注意的是, 对密度关联函数做傅里叶空间分析时发现, γ 参数的空间涨落与结构因子主峰半高宽之间存在显著相关性, 该关联性为揭示动态异质性与局部结构有序度的耦合机理提供了直接实验证据. 在理想自由扩散模型中, 完全的相干条件将导致 $\beta = 1$ 与 $\gamma = 1$ 的极限情况, 此理论预测可为实验系统的校准提供重要基准.

本研究基于蒙特卡罗算法构建了随机分布初始构型的粒子体系, 通过数值模拟布朗运动获得动态演化的时间序列数据. 为系统考察扩散系数与散射矢量的影响规律, 特别设计了多层次参数条件下的多组对照实验.

图 1 和图 2 数据拟合结果显示, 所有模拟数据集的 β 值和 γ 值均落在 1.00 ± 0.08 范围内, 与理论预测高度吻合. 由于模拟数据存在随机统计涨落, 且需定量评估样本均值与理论值的一致性, 采用单样本 t 检验可有效检验在考虑样本标准差和自由度的情况下, 观测均值与理论值的差异是否由随机误差引起. 通过单样本 t 检验, 发现拟合结果均支持均值为 1, 表明实验数据与理论模型具有良好的统计一致性. 例如图 1 中在不同散射矢量处的空间相干因子:

$\beta = [0.93688, 0.99849, 1.0003, 0.997, 1.0506, 1.0693, 1.0063, 1.0053, 1.0141, 0.99295]$.

β 的均值为 $\bar{x} = 1.007$, 标准差 $s = 0.035$, 计算得到 β 的 t 统计量为

$$t = (\bar{x} - \mu_0)/(s/\sqrt{n}) \approx 0.64. \quad (4)$$

自由度 $df = n - 1 = 9$. 对于 95% 置信区间, 计算空间相干因子的样本范围应满足:

$$\bar{x} \pm t_{\alpha/2, df} \cdot (s/\sqrt{n}) \approx (0.9819, 1.0323), \quad (5)$$

其中 $t_{\alpha/2, df=9} = 2.262$ 为 t 分布双侧临界值. 该 95% 置信区间包含假设均值 1, 即代表支持均值为 1 的假设. 这一结果不仅验证了蒙特卡罗模拟方法的可靠性, 为后续的 XPCS 模拟实验研究奠定了基准.

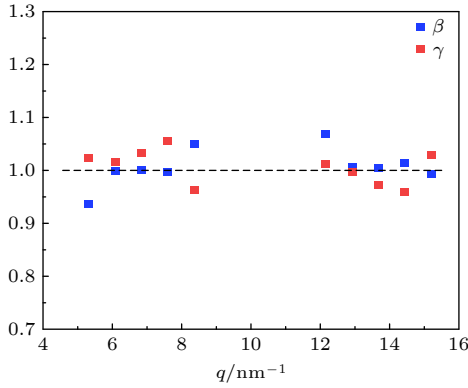


图 1 在不同散射矢量 q 处的空间相干因子 β 和拉伸指数 γ 模拟数据

Fig. 1. Simulated spatial coherence factor β and stretching exponent γ at different scattering vectors q .

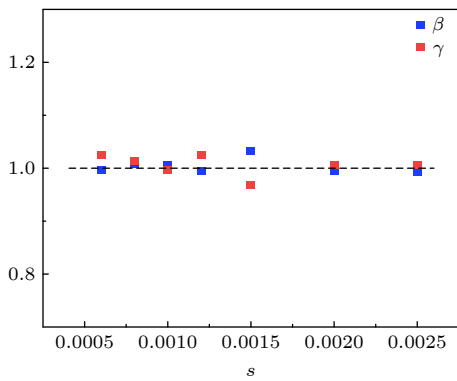


图 2 在不同步长 s 时的空间相干因子 β 和拉伸指数 γ 模拟数据

Fig. 2. Simulated spatial coherence factor β and stretching exponent γ at different step lengths s .

4.2 散射矢量区域的选择

在单分散体系的动态光散射研究中, 弛豫率

Γ 与扩散系数 D 及散射矢量 q 之间存在如下定量关系^[6]:

$$\Gamma = Dq^2, \quad (6)$$

(6) 式适用于 $\gamma = 1$ 的理想布朗运动体系, 反映了散射信号衰减速率与微观粒子运动特性的内在联系. 其中散射矢量 q 的数学表达式为

$$q = \frac{4\pi \sin \theta}{\lambda}, \quad (7)$$

式中 θ 为散射角. 这一物理量在倒易空间中表征了散射过程的动量转移, 其对应的实空间特征尺度为 $\xi = 2\pi/q$. 该关系式解释了散射实验中空间分辨率与动量转移量之间的倒数关系, 即较大的散射矢量对应较小的观测尺度, 反之亦然. 当固定扩散系数时, 弛豫率随散射矢量平方的线性增长趋势应与理论模型完全符合. 对不同散射矢量处的像素进行关联运算并提取其对应的弛豫率, 得到的拟合结果如图 3 所示.

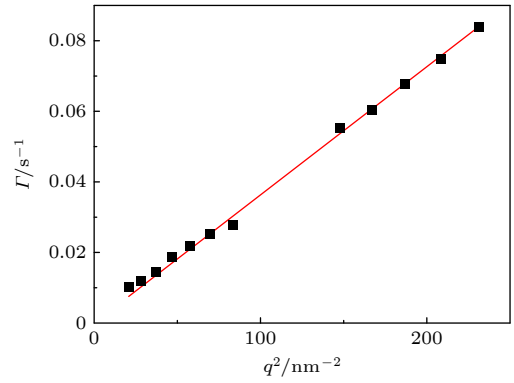


图 3 弛豫率与散射矢量的拟合: $\Gamma = Dq^2$, 其中 $D = 3.63 \times 10^{-4} \text{ nm}^2/\text{s}$

Fig. 3. Fitting of relaxation rate to scattering vector: $\Gamma = Dq^2$, where $D = 3.63 \times 10^{-4} \text{ nm}^2/\text{s}$.

从图 3 可知, 不同散射矢量处的光强均符合 (6) 式中的线性关系, 决定系数 $R^2 = 0.99904$, 证明拟合效果较好. 在实际数据处理过程中, 散射矢量的空间分布呈现明显的径向对称性. 具体表现为探测器平面上距离中心点越远的像素点, 其对应的散射矢量值越大, 而中心点附近区域的散射矢量趋近于零. 但在实际的数据选取中, 由于模拟实验中选择的实验体系为球形粒子散射体系, 其产生的 SAXS 图样会产生明暗交替的圆环状图样, 强度随着散射矢量的增加而出现明显的波动情况 (图 4). 为了获取到较强的信号, 通常选取散射矢量较小处的前几个高强度环的区域进行计算.

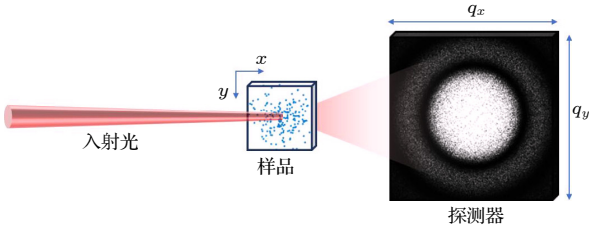


图 4 模拟衍射的光路图与 SAXS 图样

Fig. 4. Simulated diffraction light path diagram and SAXS pattern.

这种空间分布特性为实验参数的选择提供了重要依据: 通过合理选取散射矢量区域, 可以有效分离不同尺度的动力学信息. 该参数体系可用于检验模拟结果与理论预测的一致性, 从而为算法的正确性提供量化判据.

4.3 粒子运动步长与温度的关系

在经典扩散理论中, 微观粒子的扩散能力由爱因斯坦-斯托克斯定律描述^[24], 该定律建立了粒子运动与宏观温度的直接联系:

$$D = \frac{k_B T}{6\pi\eta R}, \quad (8)$$

式中, k_B 为玻尔兹曼常数, T 代表热力学温度, η 和 R 分别对应溶剂黏度和粒子流体力学半径. 这一模型与动态光散射技术的理论体系高度一致, 为后续模拟提供了关键理论支撑: 温度越高, 粒子获得的热运动能量越强, 扩散系数 D 越大, 在液体中的迁移速度越快.

在数值模拟中, 粒子的布朗运动被简化为在随机方向上的位移叠加: 每一步的位移大小由一个基础步长 s 和服从正态分布的随机扰动共同决定, 其中 s 反映了粒子在单位时间内的平均位移幅度. 根据布朗运动理论, 粒子的“均方位移”(即位移平方的平均值) 与扩散系数 D 和时间 t 满足线性关系:

$$\langle r^2(t) \rangle = 2Dt. \quad (9)$$

这意味着, 步长 s 的平方直接决定了扩散系数的大小 ($s^2 \propto D$). 结合爱因斯坦-斯托克斯定律, 温度 T 的变化会通过影响扩散系数 D , 进一步与步长 s 形成线性映射关系 ($s^2 \propto T$)——温度越高, 粒子的基础步长 s 越大, 无规则运动的幅度越显著.

图 5 实验数据表明, 样品弛豫率与步长的平方之间存在显著的线性增长趋势, 这一现象与宏观热力学理论预测完全吻合. 进一步分析发现, 弛豫率

与热力学温度 T 的正相关关系可转化为步长参数与温度的线性映射, 即 $s^2 \propto T$. 相关文献^[25]指出, 在特定环境条件下, 温度变化会导致布朗运动粒子的均方位移呈现线性增长. 根据爱因斯坦的经典理论, 布朗运动的均方位移满足关系式 $\langle \Delta(t) \rangle^2 = 2Dt$, 其中扩散系数 D 通过斯托克斯-爱因斯坦方程与温度直接相关 ((8) 式), 表明温度升高会显著增强粒子的扩散能力并加速均方位移的线性增长^[24]. 此外, 在存在温度梯度或非平衡条件的系统中, 布朗粒子的动力学行为可能进一步耦合热泳效应, 导致其迁移速率与局部温度场呈现复杂的依赖关系^[26]. 这一结论不仅验证了当前模拟方法的理论合理性, 更为后续研究提供了可靠的参数校准依据.

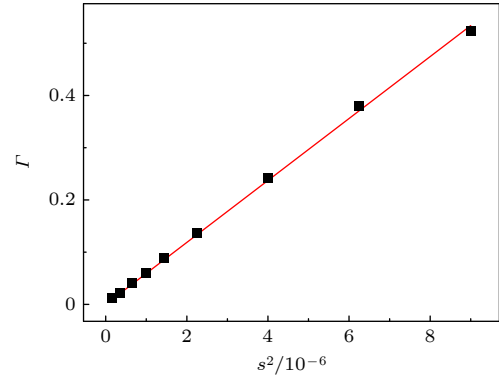


图 5 弛豫率与步长平方的拟合: $\Gamma = ks^2$, 其中 $k = 5.93 \times 10^4 \text{ s}^{-1}$

Fig. 5. Fitting of relaxation rate versus the square of step length: $\Gamma = ks^2$, where $k = 5.93 \times 10^4 \text{ s}^{-1}$.

5 实验关键参数的灵敏度分析

5.1 光阑孔径的复合效应

在基于蒙特卡罗方法的 XPCS 实验模拟中, 光阑孔径对 X 射线光束的调制行为与经典光学系统的空间滤波理论高度契合. 这一现象的物理机理主要源自夫琅禾费衍射理论中的空间频率选择性机制. 作为光学系统的核心调控元件, 孔径光阑通过限制入射光束的横向延伸范围, 实现对 X 射线时间-空间相干性的有效控制. 从定量分析的角度来看, 光阑的二维几何参数直接决定光束的有效传输截面面积, 而不同尺寸的衍射孔径将通过相应的波动光学效应显著改变光子束的空间相干特性. 依据范西泰特-策尼克定理揭示的物理规律, 横向相干长度可定量表征为与孔径尺寸成反比的函数

关系. 当采用较小孔径时, 增强的衍射效应使得在焦平面处的光斑尺寸显著收缩, 由此获得较高的横向相干性参数, 但这也导致探测端的光子计数率呈现指数型下降趋势. 采用较大孔径时的情况则呈现相反的特点, 在维持较高光子通量的同时必然伴随相干度的降低. 该能量传输效率与相干性指标的动态平衡在数值模拟中具体体现为: 非理想的部分相干同步辐射光源在经过精确设计的光阑调制后, 可转化为具备优异准单色特征的相干光束, 此时束流的空间频率谱分布由光阑自身的傅里叶变换特性完全主导.

在数值模拟过程中, 采用基于高斯统计的随机采样方法来描述光束相位与振幅的随机涨落特性, 并据此计算不同孔径条件下的光强关联函数 $g_2(q, \tau)$. 其中, 空间相干因子 β 为 g_2 函数的衬比度, 体现在关联函数的第一个点的绝对值大小. 它作为关键指标, 用于量化光场相干涨落的强度. 研究的核心目标是优化孔径半径 r 与光束束腰半径 σ 的匹配关系, 通过将无量纲参数 r/σ (即孔径尺寸与光束特征尺寸的比值) 在 0.2—3.0 范围内连续调节, 观察其对相干特性的影响.

图 6 模拟结果显示: 当 r/σ 超过 1 时, 空间相干因子迅速上升并逐渐趋于饱和; 若进一步增大孔径使 $r/\sigma > 1$, 空间相干因子的增长速度显著变缓, 这是因为孔径会选择性地过滤掉部分空间频谱成分. 分析表明: 当 $r/\sigma < 1$ 时, 较小的孔径导致系统相干体积不足, 使得高频噪声在信号中占主导; 而当 $r/\sigma > 1$ 时, 虽然能保留更多低频信号, 但会引入额外的非相干背景噪声. 通过大量重复模拟的统计分析发现, 最优参数出现在 $r = \sigma$ 时——此时孔径边缘的光强恰好下降至光束中心最大值的 $1/e$,

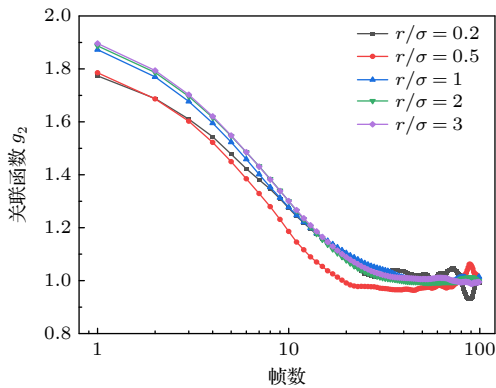


图 6 光阑孔径对于关联函数的影响

Fig. 6. Effect of pinhole size on the correlation function.

满足高斯光束的截断标准, 使得衍射引起的相位畸变与仪器的通光效率达到动态平衡, 相干涨落信号的可探测性达到理论最佳状态.

这一优化准则为实验中光阑的设计提供了重要理论依据, 成功实现了光束相干性维持与光子通量优化的协同调控. 该理论模型不仅适用于单色 X 射线光源的特性分析, 还能推广到宽谱光源的相干性调控研究, 展现出良好的普适性和工程应用价值.

5.2 光涨落与光强噪声的影响

光涨落与光强噪声对系统性能的影响, 本质上源于光子统计特性与探测过程的相互作用. 其中, 光涨落是由量子层面的光子发射随机性引起的, 其光子计数行为可通过泊松统计描述: 单像素在曝光时间 t 内接收的光子数 N 服从概率分布:

$$P(N|\mu) = \mu^N e^{-\mu} / N!, \quad (10)$$

式中 μ 表示由光强决定的平均光子数. 这种噪声的方差等于均值 ($\text{Var}(N) = \langle N \rangle$), 导致低光强条件下散粒噪声显著降低关联函数的估计精度. 具体来说, 当平均光子数 μ 远小于 1 时, 泊松分布的离散性会使暗区噪声水平急剧上升; 而在 μ 远大于 1 的高光强区域, 根据中心极限定理, 噪声近似为均值和方差均为 μ 的高斯分布. 这种依赖光强的特性造成了噪声的空间不均匀性: 数值模拟显示, 随着光子计数率下降, 关联函数 $g_2(q, \tau)$ 的估计偏差会增大, 根本原因在于信噪比 ($\text{SNR} = \sqrt{\mu}$) 与光强呈亚线性关系.

与光涨落的量子特性不同, 光强噪声主要包括暗电流、热电子涨落、模数转换量化误差和环境杂散光等经典干扰. 其中, 量化误差表现为步长决定的均匀分布, 仅在高位量化时可近似为高斯分布; 暗电流由探测器热激发电子的随机性产生, 遵循泊松统计, 大样本下简化为高斯分布; 电子学读出噪声则是均值为零、方差恒定的高斯噪声. 值得注意的是, 信号光子计数的涨落属于与信号相关的泊松噪声, 而暗电流涨落是与信号无关的泊松噪声; 读出噪声和量化误差则是与信号无关的加法性噪声. 上述噪声共同构成混合观测信号, 最终导致相关函数出现基线偏移和振幅缩减, 偏离理论值.

在非均匀光强分布的探测场景中, 泊松噪声的方差随光强变化 (异方差性) 与经典噪声的方差恒定 (同方差性) 形成复合噪声场: 高光强区域, 泊松噪声可近似为高斯分布, 与读出噪声和量化噪声的

方差线性叠加; 低光强区域, 泊松噪声仍保持显著的离散特性. 这类复合噪声需要通过方差稳定变换等算法实现噪声均匀化和信号去相关.

数值模拟中采用分步建模策略来描述噪声耦合效应: 首先生成符合样品动力学的时空光子分布, 引入泊松涨落模拟量子噪声, 然后叠加光涨落噪声和光子计数噪声等经典噪声, 最后通过关联函数提取动态变化情况. 这种分步策略的理论依据是两类噪声的物理本源差异, 即光涨落是信号光子的本征统计特性, 而光子计数噪声属于独立泊松过程, 其统计模型具有可分离处理的特性.

对实验结果中噪声影响的分析表明 (图 7), 噪声会显著干扰 XPCS 实验的关联函数测量, 图中 Poisson 后的数字代表了泊松噪声强度与信号的比值. 当泊松噪声强度达到信号的四倍时, 弛豫曲线会出现明显的随机扰动. 特别是在长延迟时间区域, 这种扰动的累积效应会使残差平方和显著增加, 导致以决定系数 R^2 表征的拟合优度急剧下降. 这一现象的根源在于, 低光子计数条件下泊松统计的离散特性会直接影响关联函数的衰减趋势, 使得信号难以准确提取.

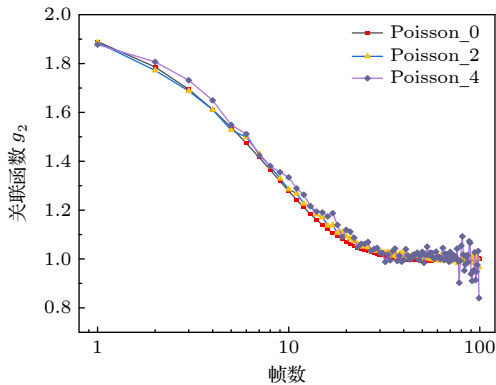


图 7 光子计数噪声 (泊松噪声) 对实验散斑衬度的影响
Fig. 7. Effect of photon counting noise (Poisson noise) on the correlation function.

与之形成对比的是光强噪声的影响机制 (图 8), 当光强波动达到信号的两倍时, 关联函数 $g_2(q, \tau)$ 的标准差会极大增加, 且其高频波动强度与延迟时间 τ 无关. 这表明, 这类非信号依赖的噪声会直接破坏基线稳定性, 对测量结果的可靠性产生负面影响.

在单光子极限 ($\mu \approx 1$) 等极端低计数场景中, 散粒噪声主导的统计误差会超过检测器的固有噪声, 导致信噪比 (SNR) 低于 1. 此时, 常规的短时积分方法无法有效提取信号特征. 针对这一问题,

可采取双路径优化策略: 一是延长积分时间, 将平均光子数 μ 提高至 SNR 大于 5 的可检测范围; 二是适度增强入射光功率, 但需注意避免高能光束对生物样品等敏感材料造成损伤. 在计算层面, 推荐采用组合算法进行优化, 例如 Multitau 算法通过分层平均技术对长延时区域的数据进行统计合并, 能够有效消除高频噪声对慢弛豫过程的调制效应 [13,16]; Binning 算法则通过时空像素聚合, 在不延长总曝光时间的前提下实现局部信噪比的提升.

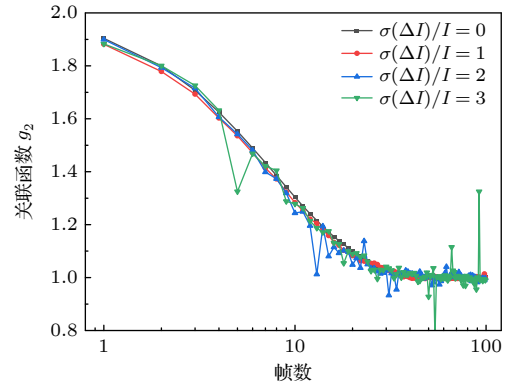


图 8 光强波动对于实验散斑衬度的影响

Fig. 8. Effect of light intensity fluctuation on the correlation function.

噪声模型的定量分析对实验体系具有重要的指导意义. 以软物质体系的 XPCS 检测为例, 当单像素光子计数率处于 $\mu = 10-100$ 的中低区间时, 泊松噪声与暗电流噪声的共同作用会导致相关函数的振幅显著衰减. 基于模型预计算, 可针对性地优化实验参数, 如选用低暗电流探测器、调节曝光时间以平衡散粒噪声与读取噪声的占比, 并开发自适应降噪算法. 对于光敏感的生物样品, 噪声模型还可用于量化光漂白效应的阈值, 明确在不损失分子动态信息的前提下, 样品所能承受的最大辐照强度. 随着探测技术向单光子灵敏度不断迈进, 噪声机制的理论建模与实验抑制手段已成为保障微弱信号可靠表征的关键技术环节, 对于提升 XPCS 实验的精度和适用性具有重要意义.

5.3 机械振动的调制

由于外部设备机械振动的影响是制约模拟精度的关键因素, 本研究基于对机械振动影响的探索在模拟实验中加入了模拟机械振动的调制. 这类振动主要源于实验装置的支撑结构形变、制冷系统的周期性脉冲以及运动部件的非理想运动, 其本质是

时空域上的随机扰动过程. 从物理机制分析, 振动引起的位移涨落通过改变光程差引入动态相位噪声, 进而通过相位因子 $\exp[jk(x - p_i)^2/(2d)]$, 其物理意义为粒子位置 (p_i) 与像平面坐标 (x) 的光程差导致的相位延迟耦合到散射波函数中, 最终表现为光子相关函数 $g_2(q, \tau)$ 的衰减或畸变.

在实验模拟中考虑一种理想的振动模型, 即假设所有物理元件的振动仅包含横向分量, 这类振动只会改变样品粒子在垂直光路方向的空间位置, 而不会对沿光路方向的运动产生影响. 此时, 整个散射过程可近似等效为样品平面内的二维随机位移场问题. 为了量化振动的影响, 选取外界振动引起的振动幅度 Δx 与粒子运动步长 s 的比值作为关键参数, 通过调节这一比值来观察其对关联函数的作用规律.

模拟结果表明 (图 9), 外部机械振动对关联函数 $g_2(q, \tau)$ 的调制效应随着振动振幅的增加呈现出非线性增强的特征. 当振动幅度与运动步长的比值 $\Delta x/s$ 达到 1500 时, 振动引发的动态涨落会完全掩盖样品自身的弛豫信息, 表现为 $g_2(q, \tau)$ 曲线出现与振动主频一致的周期性振荡结构. 这一现象的物理本质在于, 当振动振幅相对于粒子运动步长达到显著水平时, 振动导致的散射体空间位置周期性扰动, 会通过光程差的动态变化在散射波函数中引入同频率的相位振荡.

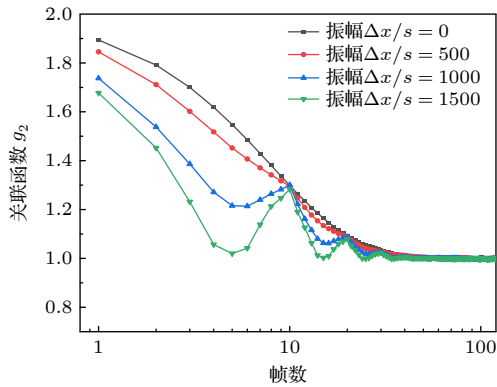


图 9 机械振动对于关联函数的影响

Fig. 9. Effect of mechanical vibration on the correlation function.

在模拟实验之外, 我们进行了现实实验以验证外部机械振动对关联函数的调制效应是否会随着振动振幅的增加呈现出非线性增强的特征, 即设计了一个将机械泵放置在实验样品一定距离处观测其对实验结果中关联函数影响的实验. 为满足定量

计算要求, 在实验光路中距离样品的不同位置 (距离范围 0.5—2 m) 放置已知振动频率约为 24.658 Hz 的机械泵, 并在每次测量期间启动机械泵, 以此测量样品台振动振幅, 结果如表 1 所列. 相较于静态工况, 机械泵启动使得振幅显著增大, 且随着距离 d 减小振幅大小呈现持续上升趋势, 如水平振幅从 2 m 处的 1538 nm 增至 0.5 m 处的 2785 nm, 证实振幅与机械泵的距离存在相关性.

表 1 不同距离处放置机械泵对样品台振动振幅的影响
Table 1. Effect of mechanical pump at different distances on sample stage vibration amplitude.

Distance/m	Horizontal amplitude/nm	Frequency/Hz
Steady	723	24.378
2	1538	24.326
1	2129	24.240
0.5	2785	24.220
Steady	755	24.166

为了从另一方面验证振幅与机械泵的距离是否存在相关性, 本文定量计算了振幅的变化情况. 在二维平面内, 二氧化硅粒子的布朗运动步长可通过均方根位移 (root mean square displacement, RMSD) 定量描述. 根据布朗运动的统计理论, 二维体系中粒子的均方位移 (mean square displacement, MSD) 满足 $\langle r^2(t) \rangle = 4Dt$, 其中 $\langle r^2(t) \rangle$ 为 t 时间内的均方位移. 因此, 粒子在单位时间 ($t = 1.33$ ms) 内的二维运动步长 (均方根位移) 可表示为

$$r = \sqrt{\langle r^2(t) \rangle} = \sqrt{4D}. \quad (11)$$

扩散系数 D 的计算基于爱因斯坦-斯托克斯方程 $D = k_B T / (6\pi\eta r)$, 其中玻尔兹曼常数 $k_B = 1.38 \times 10^{-23}$ J/K, 室温条件取 $T = 298$ K (25 °C), 甘油溶液的黏度 $\eta = 1.41 \times 10^{-3}$ Pa·s, 粒子半径 $r = 250$ nm. 将上述参数代入二维步长公式, 即可计算得到单位时间内的运动步长 $r = 1.81$ nm.

计算结果表明, 在室温下, 粒径为 500 nm 的二氧化硅粒子在甘油溶液中做二维布朗运动时, 单位时间内的步长约为 1.81 nm. 按照表 1 中的数值, 可以发现在机械泵距离样品 0.5 m 时, 样品台在水平方向的振幅达到了 2785 nm, 约为粒子步长的 1538 倍, 与模拟实验中的 1500 倍十分接近. 在我们先前的实验中, 实验测得在机械泵距离样品 1 m 时关联函数开始出现明显的振荡, 且在 0.5 m 时振荡更加强烈, 与模拟实验的结果相互印证 [27].

该现象揭示了外部机械振动对散射场相干性的周期性调制作用, 振动输入能量超过系统固有弛豫过程的能量尺度时, 外部振动信号将主导相关函数的动力学行为, 导致样品本征动力学信息的提取难以实现. 这一结论为实验中机械振动的控制与噪声滤波提供了重要的理论依据, 说明在高精度的 XPCS 实验中, 需严格控制外源的振动以避免其对样品本征动力学信号的干扰.

因此, 在模拟中精确复现机械振动的统计特性, 包括振幅、频率、空间相关性, 是提高 XPCS 实验数据解释可靠性的关键步骤, 尤其对于高精度相干散射实验如单粒子追踪、纳米结构动力学研究具有重要意义. 通过建立包含振动模态的动力学模型, 结合实验测量的振动谱, 可以显著提升 XPCS 模拟对复杂实验环境的逼真度, 为纳米材料动力学行为的精准表征提供理论支撑.

6 小 结

本文系统开展了 XPCS 实验的数值模拟研究, 通过蒙特卡罗方法构建全光路物理模型, 揭示了光源特性、光学元件参数及噪声因素对实验结果的影响机制. 首先, 建立了包含布朗粒子动力学、光束相干性及探测器响应的三维仿真框架, 实现了从光子发射到信号采集的全流程模拟. 其次, 发展了基于夫琅禾费衍射理论的散斑光场生成算法, 通过原子位置的动态演化与相位调制, 成功复现了实验观测的散斑涨落特性. 关键参数分析表明: 1) 光阑孔径存在最优匹配条件 ($r/\sigma = 1$), 此时相干性与光子通量达到平衡; 2) 机械振动振幅达到运动步长 1500 倍时, 关联函数出现明显的周期性振荡, 导致动力学参数提取失真; 3) 泊松噪声与光强波动显著降低低光强条件下的信噪比, 需进一步通过其他算法优化. 研究结果为实验参数优化提供了理论依据, 揭示了噪声抑制与动力学解析的协同机制, 为 XPCS 技术在更多实验站进行实验的降噪优化奠定了模拟基础, 未来可发展分子动力学与蒙特卡罗耦合的多尺度模拟.

参考文献

[1] Martinelli A, Baldi G, Dallari F, Rufflé B, Zontone F,

- Monaco G 2020 *Philos. Mag.* **100** 2636
- [2] Zhong W, Liu F, Wang C 2021 *J. Phys. Condens. Matter* **33** 313001
- [3] Jo W, Stern S, Westermeier F, Rysov R, Riepp M, Schmeier J, Lange J, Becker J, Sprung M, Laurus T, Graafisma H, Lokteva I, Gruebel G, Roseker W 2023 *Opt. Express* **31** 3315
- [4] Sandy A R, Zhang Q, Lurio L B 2018 *Annu. Rev. Mater. Res.* **48** 167
- [5] Sutton M, Lhermitte J R, Ehrburger-Dolle F, Livet F 2021 *Phys. Rev. Res.* **3** 013119
- [6] Mohanty S, Cooper C B, Wang H, Liang M, Cai W 2022 *Modell. Simul. Mater. Sci. Eng.* **30** 075004
- [7] Rudd R E, Briggs G, Sutton A, Medeiros-Ribeiro G, Williams R S 2003 *Phys. Rev. Lett.* **90** 146101
- [8] Miao J, Charalambous P, Kirz J, Sayre D 1999 *Nature* **400** 342
- [9] Tessarini S 2022 *Ph. D. Dissertation* (Zurich: ETH Zurich)
- [10] Sheyfer D, Zhang Q, Lal J, Loeffler T, Dufresne E M, Sandy A R, Narayanan S, Sankaranarayanan S K R S, Szczygiel R, Maj P, Soderholm L, Antonio M R, Stephenson G B 2020 *Phys. Rev. Lett.* **125** 125504
- [11] Sheyfer D, Zheng H, Krogstad M, Thompson C, You H, Eastman J A, Liu Y, Wang B X, Ye Z G, Rosenkranz S, Phelan D, Dufresne E M, Stephenson G B, Cao Y 2024 *J. Synchrotron Radiat.* **31** 55
- [12] Chen Y, Han W, Bin G, Wu S, Morgan S P, Sun S 2024 *Sci. Rep.* **14** 27665
- [13] Hu Z, Donatelli J J 2024 *Phys. Rev. B* **110** 214305
- [14] Semeraro E F, Möller J, Narayanan T 2018 *J. Appl. Crystallogr.* **51** 706
- [15] Narayanan T, Sztucki M, Van Vaerenbergh P, Léonardon J, Gorini J, Claustre L, Sever F, Morse J, Boesecke P 2018 *J. Appl. Crystallogr.* **51** 1511
- [16] Andrews R N, Narayanan S, Zhang F, Kuzmenko I, Ilavsky J 2018 *J. Appl. Crystallogr.* **51** 35
- [17] Lehmkuhler F, Dallari F, Jain A, Sikorski M, Moller J, Frenzel L, Lokteva I, Mills G, Walther M, Sinn H, Schulz F, Dartsch M, Markmann V, Bean R, Kim Y, Vagovic P, Madsen A, Mancuso A P, Grubel G 2020 *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.* **117** 24110
- [18] Berne B J, Pecora R 2000 *Dynamic Light Scattering: with Applications to Chemistry, Biology, and Physics* (Chelmsford: Courier Corporation) pp40, 41
- [19] Patterson G D, Lindsey C P 1981 *Macromolecules* **14** 83
- [20] Khan F, Narayanan S, Sersted R, Schwarz N, Sandy A 2018 *J. Synchrotron Radiat.* **25** 1135
- [21] Arango M T, Zhang Y, Zhao C, Li R, Doerk G, Nykypanchuk D, Chen-Wiegart Y C K, Fluerasu A, Wiegart L 2020 *Mater. Today Phys.* **14** 100220
- [22] Ruta B, Evenson Z, Hechler S, Stolpe M, Pineda E, Gallino I, Busch R 2015 *Phys. Rev. Lett.* **115** 175701
- [23] Katzav E, Schwartz M 2004 *Phys. Rev. E* **69** 052603
- [24] Einstein A 1905 *Ann. Phys.* **322** 549
- [25] Pérez-Madrid A, Rubí J M, Mazur P 1994 *Physica A* **212** 231 (in Chinese)
- [26] Dühr S, Braun D 2006 *Phys. Rev. Lett.* **96** 168301
- [27] Zhou Z, Zhang M, Cui C, Wei L, Li S, Guo Z, Xu Y, Tian F, Li X, Jiang H, Tai R 2025 *Phys. Scr.* **100** 075115

Full-process simulation of XPCS speckle dynamics based on Monte Carlo method and analysis of key parameter dependencies*

ZHOU Zimu¹⁾²⁾ CUI Chenhui³⁾ LI Songlin³⁾ XU Yihui⁴⁾⁵⁾ TIAN Feng²⁾

ZHOU Ping²⁾ ZHANG Mingjun^{2)†} GUO Zhi^{2)‡} TAI Renzhong²⁾³⁾

1) (*Shanghai Institute of Applied Physics, Chinese Academy of Sciences, Shanghai 201800, China*)

2) (*Shanghai Synchrotron Radiation Facility, Shanghai Advanced Research Institute, Chinese Academy of Sciences, Shanghai 201210, China*)

3) (*School of Physical Science and Technology, ShanghaiTech University, Shanghai 201210, China*)

4) (*Center for Transformative Science, ShanghaiTech University, Shanghai 201210, China*)

5) (*National Synchrotron Radiation Laboratory, University of Science and Technology of China, Hefei 230026, China*)

(Received 23 May 2025; revised manuscript received 11 July 2025)

Abstract

X-ray photon correlation spectroscopy (XPCS) is important for probing mesoscale material dynamics by using synchrotron radiation. However, the complex influences of parameters such as light source properties, beam propagation, and detector response on speckle dynamics are hard to directly observe. In this study, a Monte Carlo-based full optical path numerical model is developed to systematically analyze these effects, thereby aiding experimental optimization.

A simulation framework integrating Brownian dynamics, beam coherence, and detector response is constructed to replicate the entire photon emission-to-detection process. A Fraunhofer diffraction-based speckle generation algorithm reproduces speckle fluctuations via atomic position evolution and phase modulation. Feasibility is validated via Siegert relation fitting ((β, γ)), Γ - q^2 linearity ($R^2 = 0.99904$), and consistency with the Einstein-Stokes law.

Key parameter sensitivity analysis reveals some points below. 1) Optimal aperture matching ($r/\sigma = 1$) balances coherence and photon flux; 2) Mechanical vibrations with $\Delta x/s = 1500$ induce periodic oscillations in $g_2(q, \tau)$, masking intrinsic relaxation, which is validated by a 24.658-Hz pump experiment; 3) Poisson noise and intensity fluctuations degrade low-light signal-to-noise ratio, with Poisson noise causing discrete errors and classical noise inducing baseline shifts.

This framework clarifies how source properties, optical parameters, and noise affect experimental results, providing guidance for XPCS optimization and a foundation for extending its applications to high-precision coherent scattering scenarios.

Keywords: X-ray photon correlation spectroscopy, Monte Carlo simulation, speckle dynamics, full optical path simulation

PACS: 02.70.Uu, 61.05.cf, 42.30.Ms, 07.05.Tp

DOI: [10.7498/aps.74.20250673](https://doi.org/10.7498/aps.74.20250673)

CSTR: [32037.14.aps.74.20250673](https://cstr.cn/32037.14.aps.74.20250673)

* Project supported by the National Key Research and Development Program of China (Grant Nos. 2022YFB3503904, 2022YFA1603503), the Shanghai Municipal Science and Technology Major Project, China (Grant No. E33G661D01), and the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 12075304).

† Corresponding author. E-mail: zhangmingjun@sari.ac.cn

‡ Corresponding author. E-mail: guoz@sari.ac.cn



基于蒙特卡罗方法的XPCS散斑动力学全流程仿真及关键参数依赖性分析

周子木 崔晨辉 李松林 徐以会 田丰 周平 张明俊 郭智 邵仁忠

Full-process simulation of XPCS speckle dynamics based on Monte Carlo method and analysis of key parameter dependencies

ZHOU Zimu CUI Chenhui LI Songlin XU Yihui TIAN Feng ZHOU Ping ZHANG Mingjun GUO Zhi
TAI Renzhong

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 74, 180201 (2025) DOI: 10.7498/aps.74.20250673

CSTR: 32037.14.aps.74.20250673

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.74.20250673>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

基于蒙特卡罗模拟研究锆钛酸铅镧材料的中子辐照损伤

Simulation of neutron irradiation damage in lead lanthanum zirconate titanate by Monte Carlo method

物理学报. 2022, 71(7): 076101 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20212041>

含复杂近邻的二维正方格子键渗流的蒙特卡罗模拟

Monte Carlo simulation of bond percolation on square lattice with complex neighborhoods

物理学报. 2022, 71(6): 066401 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20211757>

混合沉积有机分子区域选择性生长的动力学蒙特卡罗模拟研究

Kinetic Monte Carlo simulation of selective area growth of mix deposited organic molecules

物理学报. 2024, 73(12): 126801 <https://doi.org/10.7498/aps.73.20231779>

SiGe合金和SiGe/Si异质结构质子位移损伤的蒙特卡罗模拟

Monte Carlo simulations of proton-induced displacement damage in SiGe alloys and SiGe/Si heterostructures

物理学报. 2025, 74(16): 162401 <https://doi.org/10.7498/aps.74.20250162>

高温热辐射输运模拟的蒙特卡罗全局降方差方法

Global variance reduction method for Monte Carlo simulation of thermal radiation transport

物理学报. 2023, 72(13): 139501 <https://doi.org/10.7498/aps.72.20230218>

Fe-Cr二元合金微观组织演化的质量密度场耦合动力学Monte-Carlo模拟研究

Monte-Carlo simulation of mass density field coupled dynamics for microstructural evolution of Fe-Cr binary alloys

物理学报. 2023, 72(13): 136401 <https://doi.org/10.7498/aps.72.20230291>