

О работе с программой XRWP на конкретных примерах

В. Г. Кон, 06-05-2023, <http://kohnvict.narod.ru>

СОДЕРЖАНИЕ

01. Введение	02
02. Длинная Составная Преломляющая Линза	03
2.1 Нулевое расстояние	
2.2 Расстояние фокусировки	
2.3 Анализ и промежуточные выводы	
2.4 Проверка условия на пропегатор	
2.5 Обобщение на двумерный случай	
2.6 Фактор увеличения	
03. Расчет Фазового Контраста от тонких объектов	13
3.1 Расчет объекта, заданного профилем толщины из файла	
3.1.1. Киноформ	
3.1.2. Аксикон	
3.2. Расчет борного волокна	
04. Симметричная Дифракция в Геометрии Брэгга	16
4.1. Простейший вариант	
4.2. Короткая СПЛ плюс Симметричная ДГБ	
4.3. Угловая зависимость симметричной ДГБ в кристалле с пленкой	
4.4. Короткая СПЛ плюс симметричная ДГБ в многослойном кристалле	
4.5. Щель плюс симметричная ДГБ, одно отражение с разделением пучка	
4.6. Щель плюс Симметричная ДГБ, два и четыре отражения	
4.7. О том, что делать дальше	
05. Асимметричная Дифракция в Геометрии Брэгга	24
5.1. Щель и кристаллы	
5.2. Щель, и линза между двумя кристаллами.	
06. Симметричная Дифракция в Геометрии Лауэ	29
6.1. Зависимость от расстояния	
6.2. Дифракция после интерферометра на длинных СПЛ	
6.3. Дифракция после интерферометра на коротких СПЛ	
6.4. Анализ полученных результатов и кое-какие выводы	
6.5. Расчет с продолжением. Старый вариант.	
6.6. Расчет с продолжением. Новый вариант.	
07. Уравнения Такаги для дифракции в кристалле произвольной формы	41
7.1 Тестирование программы по решению уравнений Такаги	
7.2 Дифракционная фокусировка сферической волны	
7.3 Дифракция узкого пучка, то есть секционная топография	
7.4 Расчет интерферометрии методом уравнений Такаги	
08. Примеры расчетов для 3D объектов	47
09. О том, что за пределами, и дополнительные возможности	49
9.1 Тестирование и работа с ошибками.	
9.2 О других программах в основном меню	
9.3 Об универсальных программах общего назначения	
10. Справочник	55
10.1 Основные параметры входных данных программы	
10.2 Дополнительные параметры входных данных программы	
10.3 Параметры части программы для решения уравнений Такаги	
10.4 Входные данные расчетов в некоторых научных статьях	
11. Ссылки	61

Сокращения

АДО – Амплитуда Дифракционного Отражения, то есть отношение амплитуды волновой функции отраженной волны к амплитуде падающей волны
 БПФ – Быстрое Преобразование Фурье, метод расчета интегралов Фурье
 ВДП – Входные Данные Программы
 ВФ – Волновая Функция излучения, квадрат ее модуля равен интенсивности
 ДГБ – Дифракция в Геометрии Брэгга, то есть на отражение от поверхности
 ДГЛ – Дифракция в Геометрии Лауэ, то есть на прохождение через толщину пластинки
 ПФ – Пропагатор Френеля, волновая функция излучения от точечного источника
 ПФГ – Полуширина Функции Гаусса
 РО – Расчетная Область, произведение числа точек сетки на шаг сетки
 СИ – Синхротронное Излучение
 СПЛ – Составная Преломляющая Линза
 СРВ – Стоячая Рентгеновская Волна, комбинация двух плоских волн
 ТФ – Трансмиссионная Функция, она описывает тонкий объект при прохождении излучения
 ФК – Фазовый Контраст, один из методов изображения объектов
 ФП – Фурье Преобразование, математическая процедура

1. ВВЕДЕНИЕ

Программа исходно проектировалась как инструмент для моделирования процесса распространения волны рентгеновского СИ вдоль оптической оси от источника до детектора. Так появилось название программы, то есть по первым буквам английских слов (X-Ray Wave Propagation). В программе фактически реализованы две версии – для объектов с изменением структуры в двух направлениях (2D) и в трех направлениях (3D). Они дают на позиционно чувствительном детекторе изменение интенсивности соответственно в одном направлении и в двух направлениях в плоскости, поперечной направлению пучка. Обе версии используют одни и те же файлы входных данных и имеют много общих параметров, хотя некоторые из параметров все же различаются. Версия для 2D объектов является основной, так как у нее больше возможностей для расчетов. Версия для 3D объектов дольше считает и пока развита меньше.

В версии для 2D объектов исходно считается, что на своем пути ВФ СИ проходит через разные объекты с двумерным сечением (типа проволоки), у которых в одном направлении структура не меняется. Между объектами может быть произвольное расстояние. Известно, что теория прохождения СИ через разнообразные объекты еще не до конца развита и могут быть различные варианты решения этой задачи. В результате программа сформировалась и как инструмент для проверки различных методов расчета изменения ВФ СИ при прохождении через одни и те же объекты. В частности, в программе реализованы 4 метода расчета СПЛ.

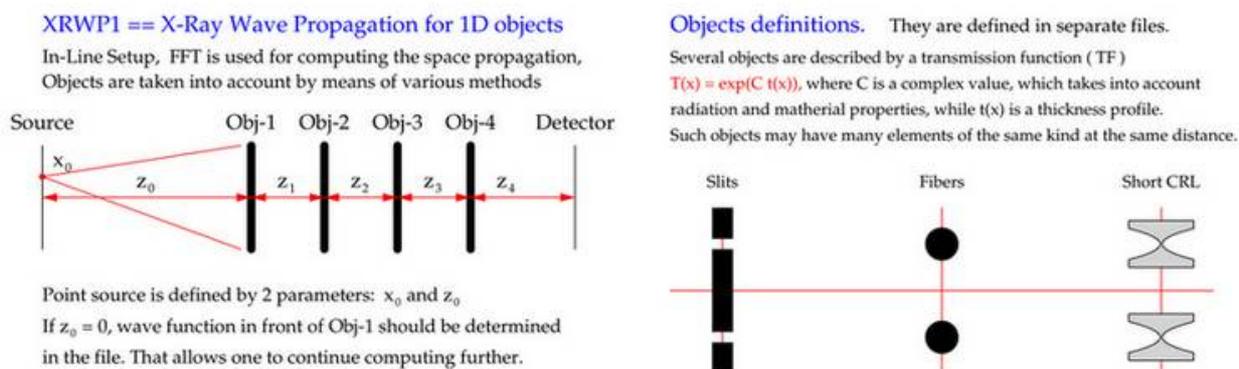


Рис. 1.1. Иллюстрация идеи программы

Каждый объект может быть как одиночным, так и множественным (составным) в направлении, поперечном направлению пучка. Например, одна или две щели, одна или две линзы и так далее. Эту идею иллюстрирует рис. 1.1. В программе учитывается, что когерентным является точечный источник. Это может быть атом на аноде рентгеновской трубки или электрон на орбите синхротрона. Источник характеризуется поперечной координатой x_0 и расстоянием z_0 от него до первого объекта. Если реальный источник имеет размеры, то надо делать расчет интенсивности в детекторе для всех точек на источнике и суммировать результат.

Иногда такое суммирование сводится просто к расчету свертки результата (кривой интенсивности) с гауссианом, полуширина которого задается параметром dr . Но свертка результата с гауссианом может учитывать также и разрешение детектора, и вибрации экспериментальной схемы и многие другие факторы. Как показывает практика, очень часто расчет свертки с правильно подобранной ПФГ позволяет хорошо описать изображения объектов на экспериментальных картинках даже если и причины, почему это надо делать, выяснить не удастся.

В данном документе показаны типичные примеры использования программы в тех случаях, которые она способна моделировать. Показаны варианты ВДП, результат работы с этими вариантами в виде графики, и дается объяснение особенностей работы программы и результатов в каждом конкретном случае. Это позволит пользователю быстрее понять логику и технику использования программы для его работы. Документ создавался в процессе работы, а варианты периодически проверялись после очередного изменения в программе.

В программе реализовано несколько способов задания ВДП, в том числе есть быстрый способ задания ВДП на один вариант по кнопке 6. Именно этот способ используется ниже для показа ВДП. Он удобен при работе с конкретным вариантом, но такие ВДП не сохраняются. Для этого есть другие способы, о которых написано в главе 8. Главы этого документа писались и затем переписывались в разное время, но под заголовком указана лишь дата самого последнего изменения. Сокращения, показанные выше, позволят быстрее читать слова, которые часто повторяются и делают запись текста более компактной.

Ссылки на статьи указываются минимально, хотя реально их очень много. Обзор публикаций можно посмотреть в отдельном документе. Иногда указываются фамилии авторов, а дальше можно смотреть список публикаций автора в сети Research Gate и в других базах. Главным местом публикации документа является сайт программы. Тем не менее, возможен вариант копирования и отдельного распространения. По этой причине я указываю на адрес сайта программы. Вот он <http://xray-optics.ucoz.ru/XR/xrwp.htm> .

2. ДЛИННАЯ СОСТАВНАЯ ПРЕЛОМЛЯЮЩАЯ ЛИНЗА

2.1 Нулевое расстояние

Программа для объектов с одномерным сечением наиболее точно рассчитывает планарные длинные СПЛ. Удобно рассматривать 3 типа длинных СПЛ с апертурами 50 мкм, 30 мкм и 10 мкм, которые реально изготовлены группой Снигирева. Линзы с апертурой 50 мкм были первыми. Самый прогрессивный метод их расчета – это использовать аналитическую теорию, но закрывать пучок щелью на размере реальной апертуры. При этом для простоты рассмотрен точечный источник и вычисляется кривая интенсивности на конце длинной СПЛ. Ниже показаны входные данные сразу для 4х вариантов

```
0 1 : nr=1; d=0.02; n=4*1024; m=1; E=50; x0=0; z0=5000; dr=0; x1=-35; x2=35; nx=400; kw=0; ki=1; kp=1; dz=0;
      nz=1; no=2; np=1; ! 4 21 1 1 2 1 | np=2; ! 1 24 2 | np=3; ! 1 24 3 | np=4; no=1; ! 2 21 2 4 |
1 1 : Nr=1; mc=1; sb=1; na=1; xp=0; ss=50; ra=0; z=0; |
2 1 : Nr=1; mC=4; mc=1; na=1; po=1; nl=300; z=0; z1=0; |
2 2 : Nr=1; mC=3; mc=1; na=1; po=1; nl=300; z=0; |
2 3 : Nr=300; mC=2; mc=1; na=1; po=1; nl=1; xp=0; xc=999; xb=-xc; z=102e-4; |
2 4 : Nr=1; mC=1; mc=1; na=1; po=1; nl=300; z=0; |
99 1 : # ne=1; Z1=14; n1=1; de=2.33; pl=102; R=6.25; dl=2; !
```

(2.1)

Как записывать ВДП и что они означают написано в отдельном документе описания работы программы для пользователей. Здесь я отмечу только самое важное. В данном способе ввода каждая строка начинается двумя целыми числами. В данной книге длинные строки искусственно прерываются из-за особенностей представления, но в программе это не так. Поэтому строки без двух чисел в начале являются просто продолжением предыдущей строки и при копировании их в программу все нужно разместить в одной строке.

Варианты указываются в первой строке (с числами 0 1 в самом начале) и разделяются символом вертикальной черты. 4 таких символа означают 4 варианта. Все варианты в данном примере различаются строками с числом 2 в начале. Строка с числом 1 описывает щель, а строки с числом 2 – разные методы расчета длинной СПЛ. Метод задается параметром mC. Из ВДП можно понять, что энергия фотонов 50 кэВ, точечный источник находится на оси на расстоянии 50 м, РО чуть больше 80 мкм, на график выводится 70 мкм. В параметрах щели $ga=0$, значит параметры gr , rk и ro не используются и они не выписаны. Щель имеет размер 50 мкм, края сглажены на 1 мкм.

Работа СПЛ моделируется 4-мя разными методами, причем номера методов обратные, то есть в 1-м варианте СПЛ считается 4-м методом, после нее расстояние 0, число элементов 300, параметры xr , xb , xe не используются и не выписаны. Из последней строки с номером 99 можно понять, что линза сделана из кремния и имеет стандартные параметры с апертурой 50 мкм. Удобство такого варианта ВДП в том, что при изменении энергии фотонов не надо пересчитывать параметры δ и β , они вычисляются автоматически. Результат 1-го расчета записывается в файл с номером 1, затем номер увеличивается на 1 в каждом новом варианте. Это самый простой расчет, который представляет интерес только для диагностики СПЛ в том смысле, что показывает сжатие пучка в самой линзе.

Особенность 1-го метода расчета ($mC=1$) состоит в том, что линза должна быть первым объектом, поэтому щель ставить нельзя. Для 2-го метода ($mC=2$) параметр n_l все равно используется. Если мы хотим каждый элемент учитывать точно, то нужно указывать расстояние, равное длине элемента, но в см, а число повторений расчета указывается параметром N_r . Соответственно $n_l = 1$.

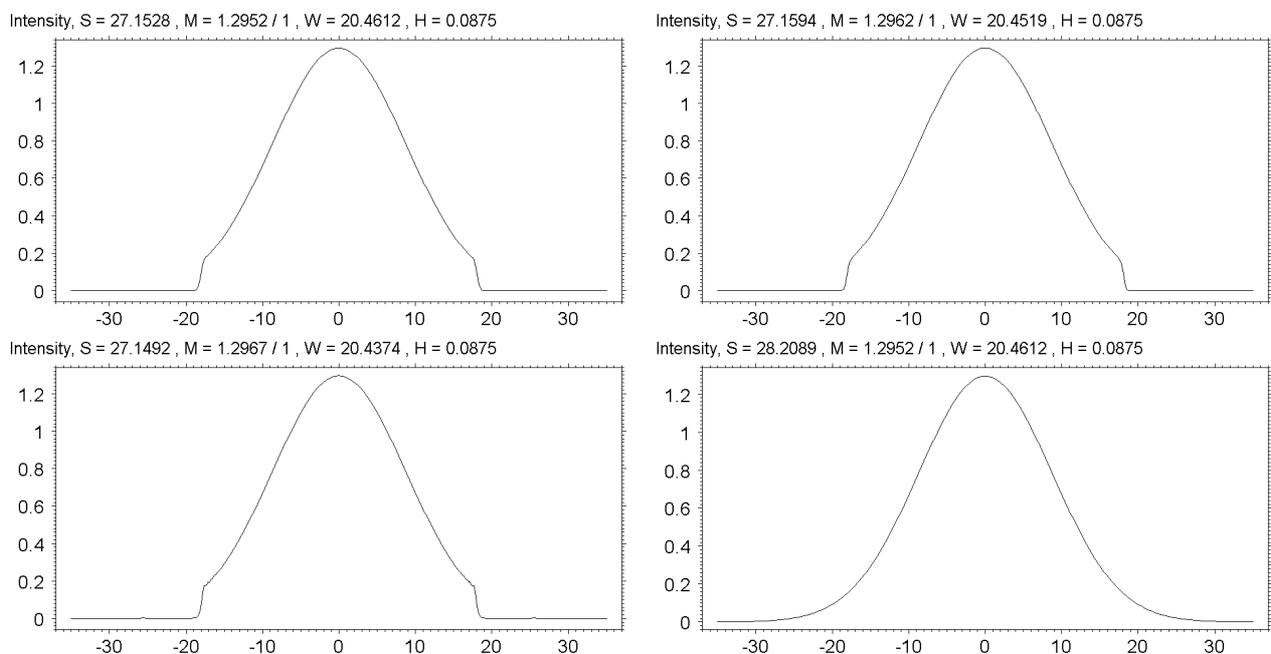


Рис. 2.1. Расчет интенсивности на конце СПЛ разными методами

Но могут быть варианты, когда несколько элементов объединяется и считается тонкой линзой. Тогда $n_l = K$, расстояние должно быть в K раз больше, а число итераций в K раз меньше. В данном случае линза описывается с помощью ТФ для одного элемента и используется вариант итерационного расчета. На самом деле более правильно считать СПЛ задавая предыдущее расстояние на $p_l/2$ больше, затем считать линзу $N_r = n_l - 1$ раз и потом

еще 1 раз снова с расстоянием $p_l/2$. Но учитывая, что расстояние $p_l/2$ весьма мало я упростил ввод и сделал не совсем правильный расчет, хотя ошибка пренебрежимо мала.

Для 3-го и 4-го методов щель необходима. Вообще говоря, она необходима и для 2-го метода и используется, но в этом случае она не так важна, как в 3-м и 4-м методах. 3-й метод является приближенным и считается быстрее всех, а 4-й метод является основным и точным. Он считается намного быстрее 2-го метода, но по точности не уступает ему. Результаты расчета показаны на рис. 2.1. Используется стандартный порядок графиков (слева направо и сверху вниз), а номер метода расчета при этом убывает от 4-го до 1-го.

Рассмотрим особенности полученных результатов. Видно, что методы 4 и 2 дают практически идентичные результаты, хотя и считаются разными способами, причем 4-й способ намного быстрее. Метод 1 в центральной части тоже дает правильный профиль, но он никак не учитывает апертуру СПЛ. Для расчета специально была выбрана нанофокусирующая СПЛ при относительно высокой энергии.

При этом пучок СИ существенно поджимается из-за поглощения, но не до конца. На конце апертуры поглощение не полностью обнуляет пучок. Он обнуляется щелью. Видно, что размер такого пучка меньше 50 мкм, так как он частично сфокусировался в самой линзе. Эффект наличия апертуры (щели) не учитывает метод 1. Для него апертура не существует и он правильно работает только тогда, когда пучок полностью поглощается на краях апертуры.

Метод 3, хоть и является приближенным, но тоже дает очень хороший результат, весьма близкий к точному. Можно отметить только чуть более высокий максимум. Вообще говоря, 1-й и 3-й методы расчета имеют только исторический интерес. 2-й метод универсальный, он может учесть апертуру даже без щели. Но он весьма долго считает и иногда это может быть неудобством, особенно в двумерных расчетах. Например, в данном расчете 4-й метод считает в 12 раз быстрее, чем 2-й метод. По этой причине только 4-й метод можно признать как оптимальный, то есть совмещающий достаточную точность и быстроту расчета.

Различие между методами можно заметить если рассмотреть щель с резкими краями. То есть задать параметр $sb=0$. Вообще говоря, это неправильно, потому что щелей с абсолютно резкими краями в природе не бывает, а в экспериментах специально используют щели с нерезкими краями. Так что этот расчет имеет только философско-методический интерес. Результаты такого расчета показаны на рис. 2.2. Здесь снова 2-й и 4-й методы очень близко совпадают и они показывают отголоски дифракции на щели. 1-й метод от щели не зависит и результат никак не изменяется.

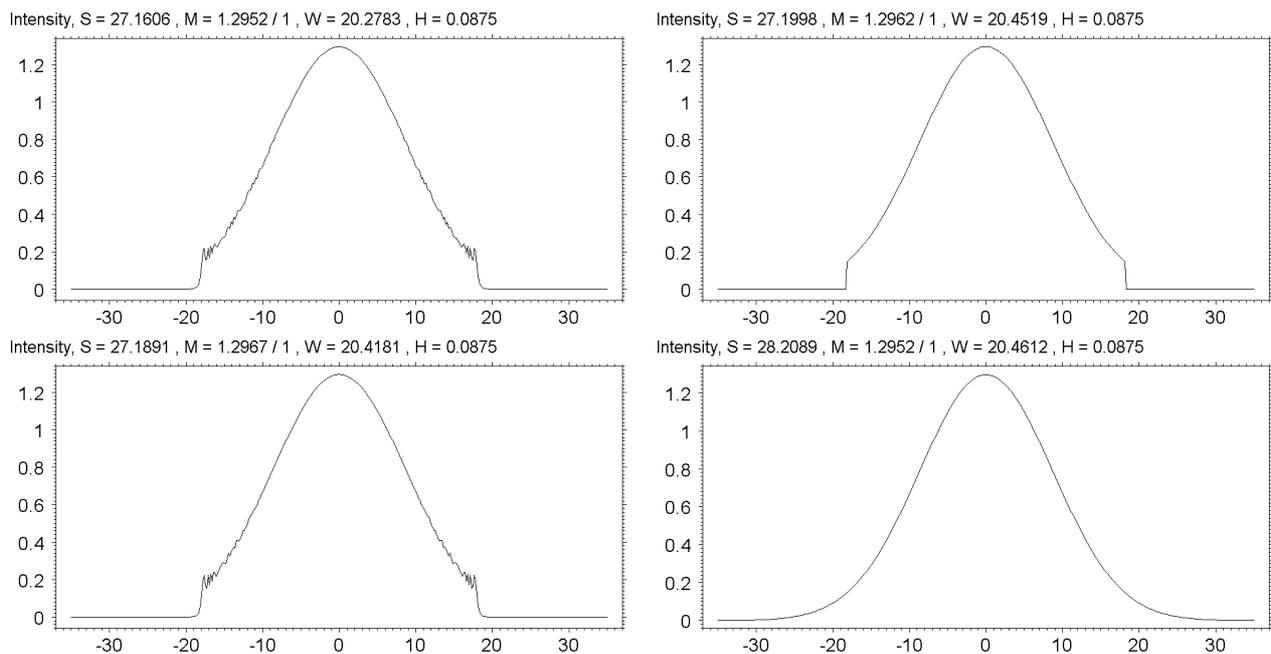


Рис. 2.2. Расчет интенсивности на конце СПЛ разными методами

А 2-й метод отличается тем, что он дифракцию на щели не показывает. И это как раз связано с тем, что он вычислен методом стационарной фазы, который всегда дает усредненную картину. Иногда это даже полезно. Дело в том, что мелкие осцилляции из-за резких скачков фазы или поглощения, то есть на краях объектов не соответствуют эксперименту и их приходится усреднять разными способами. Один из них – использовать сглаженную щель. Второй – считать не совсем точно. Однако последнее не всегда возможно, да и точность такого расчета сложно определяется. Важно отметить, что методы 3 и 4 являются ноу-хау. Они были опубликованы в мае 2022 года [1] (статья 244 в моем списке научных статей на персональном сайте, адрес указан под заголовком.).

2.2 Расстояние фокусировки

Самая сложная задача – это расчет пучка СИ в фокусе. Дело в том, что для правильного учета апертуры размер РО должен быть больше апертуры, а в фокусе размер пучка в 1000 раз меньше. То есть, чтобы получить хорошую точность необходимо очень много точек и мелкий шаг. Расчет интенсивности около фокуса удобно считать в виде матрицы чисел на плоскости (x, z) . Программа такие расчеты делать умеет. ВДП показаны ниже

```
0 1 : nr=1; d=0.00125; n=64*1024; m=1; E=50; x0=0; z0=5000; dr=0; x1=-0.2; x2=0.2; nx=400; kw=0; ki=1; kp=2;
      dz=0.00125; nz=81; no=2; np=1; ! 4 21 1 1 2 1 |
1 1 : Nr=1; mc=1; sb=1; na=1; xp=0; ss=50; z=0; |
2 1 : Nr=1; mC=4; mc=1; na=1; po=1; nl=300; z=4.34; z1=0; |
99 1 : # ne=1; Z1=14; n1=1; de=2.33; pl=102; R=6.25; dl=2; !
```

(2.2)

Фактически изменились только файлы (0 1) и (2 1), остальные такие же, как в формуле (2.1). Для расчетов СПЛ выбран 4-й метод. В таком расчете задано $kp=2$ просто потому, чтобы узнать время расчета. Сам график никакого интереса не представляет, потому что он строится только для одного расстояния. Матрица чисел записывается в файл (m001.dat) и ее можно показать 4-я различными способами: как анимацию, картинку, квази-3D и аксонометрическую проекцию поверхности в 3-мерном пространстве.

Во втором случае видно все сразу, но с низкой точностью по значениям функции, а в первом случае показываются сечения, которые изменяются с течением времени, то есть координата z разворачивается во времени. Остальные два случая наглядные, но информацию искажают. Расчет картинки делается отдельной операцией и требует дополнительных входных данных из файла (inrpar.txt). Для нашего расчета картинки они такие

```
ir=0; pa=3; np=1; nx=400; nz=81; x1=-0.2001; x2=0.2; z1=4.33999; z2=4.44; nn=15; M=0;
```

(2.4)

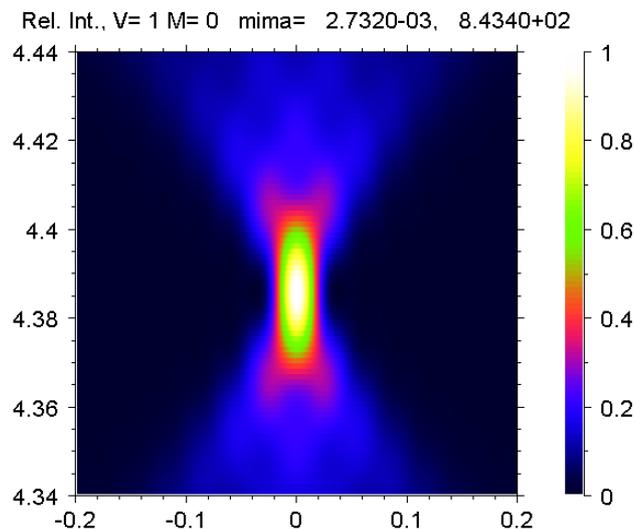


Рис. 2.3. Двумерное распределение интенсивности около фокуса.

Для этой операции ВДП основного расчета не используются, поэтому некоторые параметры надо повторить, но в другом виде. Задается угол поворота картинка, номер файла, число точек и границы области по каждому направлению. Минимальные значения чуть сдвинуты вниз, чтобы они появились на графике. В конце указывается сколько пикселей нужно на одну точку одним двухразрядным числом. При этом можно использовать не более 9 пикселей на точку. И параметр логарифмирования, если необходимо. Если $M=0$, то логарифмирование не делается, иначе делается логарифм и минимальное значение на график в M раз меньше максимального.

Результат расчета цветной карты показан на рисунке 2.3. Особенностью этой картинка является то, что в ней шаг по оси X в 8 раз больше расчетного и показаны только центральные 400 точек с таким шагом. То есть 3200 расчетных точек из более, чем 64 тысяч. А размер пучка в фокусе еще в 20 раз меньше.

Центральная часть фокуса соответствует расстоянию $z_f = 4.386$ см, и как раз такое число выдает аналитическая теория даже без учета апертуры. Вообще говоря, это расстояние определяется центральной частью параболического профиля толщины и слабо зависит от апертуры. Можно выполнить расчет сечения на таком расстоянии. Для этого достаточно поставить $nz=1$; и $z=4.386$. Остальные параметры остаются без изменений. В результате мы получаем график, показанный на рис. 2.4.

Над графиком показаны некоторые параметры кривой. Так поперечный размер пучка равен $W = 30.8$ нм, максимальное значение равно $M = 845$, а распределение интенсивности немного отличается от функции Гаусса и это уже как раз определяется влиянием апертуры. Что касается времени расчета, то на расчет матрицы было затрачено несколько секунд, а на расчет одного сечения доли секунды. Но это зависит от скорости ноутбука и для медленного процессора скорость может быть больше. Также надо понимать, что время берется с часов компьютера, а современные операционные системы могут в любой момент решать дополнительно другие задачи. Определить время, необходимое для расчета по конкретной программе можно только приблизительно.

Матрица по пустому пространству считается методом переноса ВФ с одного расстояния на другое, то есть СПЛ считается один раз и затем просто делается перенос. Так как перенос делается на постоянный шаг, то пропагатор Френеля вычисляется всего один раз и затем последовательно вычисляется свертка ВФ с заранее вычисленным пропагатором Френеля. Возможна и дальнейшая оптимизация.

Главная особенность расчета в том, что на каждом шаге делается интерполяция интенсивности на нужное число точек, а также возможна свертка интенсивности с функцией Гаусса для учета разрешения детектора и частичной когерентности. Она определяется параметром dr (detector resolution). В расчете $dr=0$, то есть усреднение не проводилось.

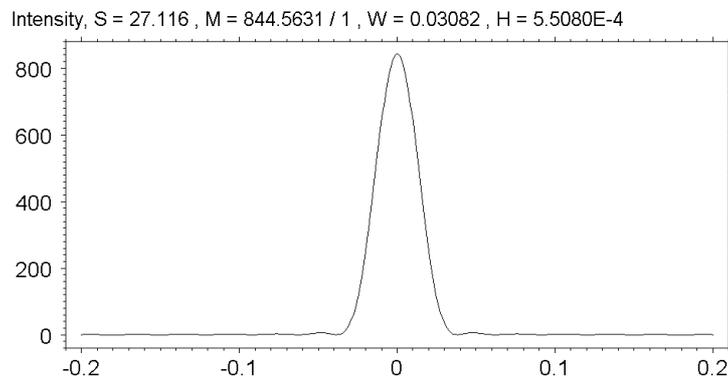


Рис. 2.4. Распределение интенсивности пучка в фокусе на сетке с мелким шагом

2.3 Анализ и промежуточные выводы

Итак, выше показано, что можно выполнить адекватный расчет на конце СПЛ при размере РО чуть больше 80 мкм и шаге сетки $d_x = 0.02$ мкм. Число точек согласно указанным

входным данным $N=4K$, $K=1024$. И можно выполнить расчет на фокусном расстоянии с таким же размером РО и шагом в 16 раз меньше, а числом точек в 16 раз больше. Интересно, а как выглядит результат на фокусном расстоянии при расчете на первой сетке. Это легко проверить. В этом случае ширина пика чуть больше одного шага сетки. Но пик появляется. Точность невысокая и максимум достигается не точно, но ширина пика примерно соответствует точному расчету. Это как раз показывает сложность расчетов пучка СИ в фокусе для хорошо фокусирующих СПЛ. Расчет был выполнен по стандартной схеме, когда ВФ вычислялась сначала на конце СПЛ и затем вычислялась свертка с ПФ на заданное расстояние. Далее такой способ называется М2Ш.

Но в программе при задании 4-го метода расчета возможна альтернатива, так как пропагатор написан сразу для произвольного расстояния после СПЛ. Этот вариант появился позднее других и стал рабочим 24 июня 2021 года. Далее он называется М1Ш. Однако особенность осталась. Новый вариант правильно работает для параметров рисунка 4, то есть при шаге 0.02 мкм. Далее возьмем эти параметры за основу и введем множитель md уменьшения шага без изменения РО, то есть одновременно увеличивая число точек. Оказалось, что М1Ш правильно работает также при $md = 2$ и 4 , но уже при 8 происходит потеря точности и результат получается неадекватный.

С другой стороны, М2Ш дает разумный результат для $md=16$ как показано на рисунках 3 и 4. Неадекватность наступает при $md=32$. Известно, что расчет с использованием метода БПФ имеет много особенностей. Он не всегда дает правильные результаты и выбор параметров расчета имеет важное значение. Например, шаги в прямом и обратном пространствах d и d_q связаны соотношением $d_q = 2\pi/Nd$. При этом увеличение числа точек N приводит к увеличению расчетной области в обратном пространстве без изменения шага. С другой стороны, ПФ на относительно большом расстоянии сильно осциллирует как в прямом, так и в обратном пространствах и может возникать ситуация, когда шаг сетки становится больше периода таких осцилляций.

Период осцилляций ПФ в обратном пространстве уменьшается с увеличением расстояния. При расчете схемы, в которой есть щель в прямом пространстве функция равна нулю на краях расчетной сетки, что требуется. Но это может плохо выполняться в обратном пространстве. И в таких условиях имеет значение даже то, какой пропагатор и как он вычисляется. По этой причине ничего удивительного в полученных результатах нет.

Анализ применимости метода БПФ к решению оптических задач – задача весьма сложная и до сих пор нет общей теории этого дела. Более того, например, в языке программирования Питон метод БПФ вообще используется неадекватно. Что касается времени расчета, то этот вопрос надо анализировать более сложными методами. Например, в программе есть возможность многократно повторять один и тот же расчет. Это может помочь.

Рассмотрим что происходит на половине фокусного расстояния $z_f/2$. При $md = 1$ оба способа расчета показывают одинаковый результат. При увеличении md каждый раз в два раза универсальный М2Ш и более быстрый М1Ш методы дают правильный ответ до $md = 8$ и неадекватность возникает при $md = 16$. Правильные картинки, естественно совпадают, а вот неадекватные различаются. Так как число точек можно увеличивать лишь на множитель 2, то переход от правильной к неправильной картинке происходит скачком. Либо полностью правильная, либо совсем неправильная.

Итак, промежуточные результаты для 4го метода таковы: расстояние 0 – максимально $md = 8$ (оба метода совпадают), расстояние $z_f/2$ – максимально $md = 8$ (методы различаются, но применимость совпадает), расстояние z_f – максимально $md = 16$ для М2Ш и $md = 4$ для М1Ш. Парадокс в том, что на нулевом расстоянии М2Ш не дает правильный ответ для $md = 16$, а на фокусном расстоянии дает. Это выглядит странно и требует более глубокого исследования.

Можно менять расстояние с мелким шагом. Так удалось зафиксировать момент когда портится результат расчета с использованием М1Ш. На расстоянии $0.6 z_f$ оба метода дают

одинаковый результат при $md = 8$, а на расстоянии $0.63 z_f$ кривые начинают заметно различаться. Процесс порчи результата происходит постепенно с увеличением расстояния. Это странный эффект. Я привык думать, что чем больше аналитики и меньше расчетов, тем точнее результат. В данном примере все как раз наоборот.

С другой стороны, интересно посмотреть что происходит около фокусного расстояния. Расчет был выполнен с использованием М2Ш при $md = 16$. Как видно на рисунках 3 и 4 удалось просчитать область фокуса. Но за пределами этой области адекватный расчет не получается. И ошибки возникают постепенно по мере удаления от фокуса. Разумеется, что причиной является поведение подинтегральной функции при выполнении ПФ.

Надо понимать, что в расчете суммируются очень сильно осциллирующие функции, и только согласованное взаимодействие осцилляций приводит к гладкому и правильному результату. Как только это нарушается, мелкие осцилляции начинают проявляться даже в модуле ВФ, а что происходит с реальной и мнимой частями даже трудно себе представить. Пока не ясно каким образом происходит потеря точности. Опыт подсказывает, что надо расширить РО в прямом пространстве. Это можно сделать увеличивая число точек вдвое без изменения шага.

Расчет показал, что это работает и результат получается правильный. Что произошло. Увеличение N в 2 раза без изменения d привело к уменьшению d_q в 2 раза без изменения РО в обратном пространстве. То есть фактически обратное пространство такого же размера сейчас представлено более детально.

Само по себе увеличение РО в прямом пространстве нам никаких преимуществ не дает, на краях РО ничего нет. Но более мелкий шаг в обратном пространстве позволил более детально описать осцилляции пропагатора в той области, которая еще влияет на результат. И вот это важно. Ошибки могут возникать когда точки расчетной сетки перескакивают через переменный период осциллирующей подинтегральной функции произвольным образом.

Это можно использовать для генератора случайных чисел. Большим преимуществом одномерных расчетов является возможность использовать очень большое число точек расчетной сетки. Когда размер пучка в фокусе в тысячи раз меньше апертуры двумерные расчеты не могут обеспечить нужную точность численных расчетов.

Можно попробовать сформулировать какие-то общие рецепты выбора параметров. Их может быть много. За основу можно взять два параметра в прямом пространстве: шаг сетки d и число точек сетки N . При этом $d_q = 2\pi/Nd$ уже определяется однозначно, а число точек совпадает. Если использовать щель с относительно плавными краями, то первое условие очевидно, то есть $Nd > A$, где A – размер щели, равный апертуре. Вообще говоря, такую щель разумно использовать в любом расчете с использованием метода БПФ. В базовом расчете был сделан такой выбор $d = 0.02$, $N = 4K$. В этом случае программа с использованием как М1Ш, так и М2Ш правильно вычисляет все расстояния от 0 до 2 в единицах z_f . Это легко проверить, На большем расстоянии пучок расширяется за пределы РО.

При этом шаг сетки получается слишком крупным, чтобы правильно описать профиль пучка в фокусе, но на всех других расстояниях все вполне прилично. Для двумерных расчетов часто используют и меньшее значение N , соответственно большее значение d и все получается неплохо. Почему так происходит?

Сформулируем условие на использование ПФ. Его аргумент в обратном пространстве пропорционален $(\lambda z/4\pi) q^2$. Период осцилляций на краях РО можно приближенно оценить как $p_q = 4\pi^2/(\lambda z q)$. Минимальный период получается при максимальном $q = d_q N/2$. Необходимо, чтобы такой период был больше d_q . Указанное условие можно записать в виде

$$2d^2N > \lambda z. \quad (2.5)$$

При используемых нами параметрах расчета левая и правая части этого неравенства для $z = 2z_f$ примерно равны 1.6 и 1.1 соответственно, то есть условие выполняется. Однако если последовательно уменьшать d вдвое, сохраняя произведение Nd , то на определенном шаге условие нарушится. Необходимо увеличивать N без уменьшения d . Именно это и

наблюдалось в численных расчетах. Также очевидно, что условие труднее выполнить при больших расстояниях, чем при маленьких.

Тут можно вспомнить аналогию с расчетом ФП от функции Гаусса. Известно, что полуширины этой функции w_x и ее ФП w_q , а также расчетные области в прямом PO_x и обратном PO_q пространствах метода БПФ удовлетворяют условиям

$$w_x w_q = 5.55, \quad PO_x PO_q = 6.28 N. \quad (2.6)$$

То есть второе произведение зависит от N , а первое не зависит. И возникает естественное условие, чтобы функции Гаусса в обоих пространствах занимали примерно одинаковое число точек расчетной сетки, то есть $w_x = d_x n$, $w_q = d_q n$. Подставляя в (2.6) получаем $n = 0.94 N^{1/2}$. Это условие можно переписать в виде $d^2 N = 1.132 w_x$.

То есть снова условие на постоянство $d^2 N$. Более простым языком это можно сформулировать так: при увеличении числа точек сетки в 4 раза надо уменьшать шаг сетки в 2 раза. То есть увеличивать PO в прямом пространстве даже если там ВФ просто равна нулю. Надо понимать, что условие (2.5) никак не учитывает вид самой ВФ на конце ДСПЛ. А фокусировка происходит как раз потому, что на фокусном расстоянии периоды осцилляций ПФ и ВФ согласованы. Именно поэтому расчет может дать правильный ответ в фокусе даже при нарушении условия (2.5), однако на других расстояниях результат будет неадекватный. Из проведенного анализа следует, что выбор параметров зависит от расстояния и нельзя делать расчет для всех расстояний с одним и тем же шагом и числом точек.

2.4 Проверка условия на пропагатор

Из условия (2.5) следует что для ДСПЛ с одной и той же апертурой расчет труднее сделать, если ДСПЛ имеет большое фокусное расстояние. Это легко проверить. Рассмотрим ту же самую ДСПЛ, но с числом элементов 100 вместо 300. Программа позволяет легко определить, что фокусное расстояние будет равно $z_f = 15.914$ см. Используем М2Ш. Оказалось, что правильный расчет получается до $md = 64$ на всем интервале значений z от 0 до $2z_f$.

Хотя на некотором шаге удвоения md программа и перестает точно считать, но это происходит тогда, когда условие давно нарушается. Я уже писал, что надо учитывать ВФ, потому что модуль ее ФП может обрезать область интегрирования. При этом максимальное значение q надо записать так $q = \varepsilon d_q N/2$, где $\varepsilon < 1$ и может иметь разные значения. Это меняет условие на такое

$$2d^2 N > \lambda z \varepsilon, \quad \varepsilon < 1. \quad (2.7)$$

Вообще говоря, так можно было бы сразу написать. ДСПЛ, которая фокусирует на большом расстоянии имеет более гладкий профиль фазы и соответственно более компактное ФП. Если взять 25 элементов, то $z_f = 65.575$ см. Результат оказался неожиданным. Программа правильно считает до $md = 256$ на всем диапазоне расстояний. Дальше увеличивать md я не стал, потому что время расчета очень быстро растет, да в этом и нет никакого смысла. Полуширина пучка в фокусе уже и так намного больше шага сетки.

Я помню, что у меня были проблемы с расчетом пучка в фокусе, но я не делал расчетов со сглаженной щелью. Это разумно делать для всех объектов и это снимает много проблем. Я проверил еще случай $E = 10$ кэВ, $n_l = 10$. При этом $z_f = 6.33$ см и щель фактически не нужна так как эффективная апертура меньше реальной апертуры. Снова все хорошо считается для всех расстояний и до $md = 32$. Дальше считать нет никакого смысла. Получается так, что короткие линзы считаются намного лучше длинных.

Разумно проверить как считаются двумерные линзы из алюминия и бериллия используя М2Ш. Я до сих пор М2Ш в таких расчетах не использовал. Первый расчет для алюминия (Al) при $E = 25$ кэВ, $p_l = 1000$, $d_l = 10$, $n_l = 10$, $R = 200$ (все в мкм), щель размером $ss=890$, сглаживание $sb=3$, сетка $d=0.25$, $n=4K$, $z_f=15.05$ м. То есть очень короткая линза и огромное фокусное расстояние. Результат такой, что все считается точно до $md = 32$ на всем интервале z от 0 до $2z_f$, включая фокус.

При $n_l = 100$ имеем $z_f = 1.151$ м. Эффективная апертура сейчас много меньше реальной апертуры и аналитическая теория в данном случае очень хорошо применима. Расчет также получается точный до $md = 32$. Считать более длинные СПЛ нет смысла, они и без программы отлично считаются. Особенностью линзы из Al является относительно большое поглощение, что плохо для фокуса, но хорошо для метода расчета.

Следующий шаг – линзы из бериллия (Be). Они слабо поглощают, поэтому взята $E = 10$ кэВ, остальные параметры те же самые и $n_l = 10$. При этом $z_f = 3.112$ м. Расчет на базовой сетке снова прошел нормально для всех расстояний. Профили интенсивности на расстояниях 0 и $2z_f$ почти совпадают. Как известно из геометрической оптики для фокусирующей линзы, она на расстоянии $2z_f$ воспроизводит волновую функцию на нулевом расстоянии.

Это прекрасно выполняется, но есть еще дифракция на щели, которая показывает осцилляции вблизи краев. В данном случае линза немного поглощает, но эффективная апертура значительно превосходит реальную апертуру и поэтому щель видна. Тот факт, что края щели сглажены, позволяет получить вполне чистую картинку без спеклов из-за скачков модуля ВФ.

Переход к $n_l = 100$ с $z_f = 26.1$ см выявил еще одну проблему расчетов методом БПФ. Что здесь интересно? Поглощение выросло и эффективная апертура стала меньше, чем реальная. Поэтому щель не имеет значения. Но волновая функция не воспроизводится даже на конце СПЛ при использовании базовой сетки. Возникают провалы интенсивности, окруженные интерференционными осцилляциями. Соответственно нет воспроизводимости и на расстоянии $2z_f$.

Такой эффект я наблюдал и раньше и был весьма удивлен, что никак не могу его повторить. И вот получилось. При $md = 2$ все стало почти правильно, но мелкие артефакты еще остались. При $md = 4$ кривая стала совсем правильной. И оставалась такой до $md = 32$. В результате расчета для $md = 32$ интересно то, что кривая на расстоянии $2z_f$ точно воспроизводит кривую на расстоянии 0.

Итак, тут наблюдается обратный эффект тому, что наблюдалось вначале. На базовой сетке расчет не получается, но при увеличении числа точек даже без увеличения РО ситуация исправляется. Пока трудно понять каким образом такое происходит. Раньше я делал расчет с короткой СПЛ и такие провалы получались на некотором расстоянии от СПЛ. Тут пропагатор сам имеет более сложную структуру, а интеграл содержит свертку двух разных функций. Этот эффект требует более детального изучения.

Пока важно то, что от него можно избавиться правильным выбором параметров расчета. И что ошибочность результата легко распознать чисто нефизическими артефактами. Интересно, что расчет с использованием М1Ш проходит только для $md = 8$ и 16. Он не проходит как для меньших md , так и для больших. То есть М1Ш оказался оказался более критичным к выбору сетки и это тоже весьма загадочный результат. Тут можно анализировать как это все зависит от длины ДСПЛ, от расстояния и так далее. И все равно ясно, что как метод М2Ш, так и метод М1Ш можно использовать для решения задачи с произвольной ВФ на входе и для СПЛ произвольной длины.

2.5 Обобщение на двумерный случай

В статье [2] я рассматривал двумерный случай и там показано, что пропагатор по обоим координатам один и тот же, только перемины учитываются один раз. То есть метод очень просто использовать в двумерных расчетах. Единственным отличием может быть круглая щель, вырезающая апертуру.

Но если рассматривать ВФ общего вида перед линзой, то она все равно описывается двумерной матрицей и круглая щель не усложняет задачу. В программе XRWP двумерные расчеты выполняются на квадратной сетке. Для двумерных расчетов лучше всего подходит ДСПЛ из алюминия. Ее параметры $R = 200$ мкм, $p_l = 1000$ мкм, $d_l = 10$ мкм. Диаметр круглой

апертуры равен 890 мкм. Сложность двумерных расчетов в том, что нельзя задавать слишком много точек. По этой причине число точек нужно проверять на одномерных расчетах.

Рассмотрим случай, который реально использовался в эксперименте, то есть $E = 25$ кэВ, $z_0 = 50$ м. Казалось бы, самый простой выбор параметров $d = 1$ мкм, $N = 1K$ и самое простое – считать ВФ на конце линзы. Расчет показал, что для $n_l = 30$ еще все хорошо, но для $n_l = 60$ уже заметно плохо. Отметим, что ВФ перед ДСПЛ никак не ограничивалась, то есть результат можно получить аналитически и это всегда функция Гаусса. При $n_l = 60$ уже видны отличия от функции Гаусса.

Для $md = 2$ можно получить правильный результат для $n_l = 60$, но для $n_l = 100$ снова получаются искажения. Для $md = 3$ можно продвинуться в сторону увеличения n_l и мелкие искажения возникают при $n_l = 150$. Для $md = 4$ то же самое происходит при $n_l = 250$. Наконец, для $md = 8$ правильный ответ получается даже при $n_l = 400$. Именно для такого максимального числа был выполнен эксперимент. Но число точек 8K для двумерных расчетов очень сложно выполнить, хотя одномерные расчеты делаются мгновенно. Нужно искать оптимизацию.

Очевидно, что в этом случае происходит сильное сжатие ВФ в самой линзе из-за поглощения. По этой причине нет смысла делать расчет на такой большой РО. Оказалось, что вполне разумный результат получается при $d = 1/8$ мкм и $N = 2K$. В этом случае учитывается РО около 250 мкм, что значительно меньше апертуры, но расчет все равно получается правильный. Ясно, что далее до фокуса расчет не потребует большого размера РО. То есть в данном случае было существенно значительно уменьшить шаг сетки, но число точек увеличивать не обязательно. Этот пример показывает, что выбор параметров РО имеет очень важное значение, и тут нет универсальных значений. Все зависит от объекта и от параметров эксперимента.

Следующий этап – расчет на фокусном расстоянии. В программе это можно сделать двумя способами, выше обозначаемыми как М1Ш и М2Ш. Фокусное расстояние легко определяется с помощью отдельной операции как $z_f = 14.4$ см. Результаты расчета показаны на рисунке 13. И вот здесь, наконец, получилось так, что М1Ш лучше, чем М2Ш, как и должно было быть. М2Ш все правильно дает в центре, но появились непонятные артефакты, причем на половине РО, если считать от центра. В М1Ш артефактов нет.

Но стоит обратить внимание на один немаловажный факт. Данные расчеты легко выполняются аналитически, так как профиль интенсивности представляет собой функцию Гаусса. Аналитические расчеты дают для этого случая на конце линзы полуширину пика 27 мкм, интегральную интенсивность 12 мкм, и максимум примерно 0.44. В фокусе полуширина пика равна 0.12 мкм, что равно одному шагу расчетной сетки, соответственно максимум должен быть равен 100, но этого нет, потому что программа не может прописать максимум с нужной точностью.

На этот раз оба метода дают идентичные результаты, интегральная интенсивность получилась правильно, а вот полуширина и максимум в 2 раза больше. Но это уже очень хороший результат при том, что шаг сетки равен полуширине реального максимума. Парадокс в том, что делать двумерные расчеты пучка в фокусе численно не имеет смысла, результаты невозможно адекватно показать, так как нигде ничего нет, кроме очень малой области.

Более интересно смотреть пучок либо до, либо после фокуса, либо то, что остается вокруг него. Если в задаче есть аксиальная симметрия, то достаточно одномерных расчетов.

2.6 Фактор увеличения

В численном расчете с учетом апертуры можно и фактор увеличения считать численно. Во всяком случае можно проверить, что аналитика работает как надо.

3. РАСЧЕТ МЕТОДОМ ФАЗОВОГО КОНТРАСТА

Программа первоначально создавалась как инструмент для моделирования прохождения пучков СИ вдоль оптической оси от источника до детектора, включая самые разные объекты с одномерным сечением. Но это возможно только для ограниченных пучков, размер которых не превышает размера РО. То есть это могут быть щели, линзы, кое-что еще. С другой стороны, при освещении мелких (ограниченных) объектов широким пучком, поперечный размер которого не ограничен, есть проблема ограничения пучка конечной РО. Сам размер РО работает как щель и дает артефакты в виде искаженной дифракции на щели.

Как раз такая ситуация возникает в методе ФК. Ситуацию легко исправить в простой схеме эксперимента "источник-объект-детектор", когда падающее на объект излучение описывается ПФ. В этом случае интеграл можно представить в виде свертки ПФ с ТФ, причем ПФ зависит от эффективного расстояния и эффективной координаты. Если ТФ равна константе на границе расчетной сетки, то эту константу легко вычесть и потом снова прибавить к результату. При этом вычисляется относительная интенсивность, и она всегда имеет фон в виде указанной константы.

В программе такой режим включается при задании отрицательного расстояния z_0 . Знак просто указывает на выбор режима, а реально используется модуль расстояния $z_0 = |z_0|$. При этом надо задавать только 1 объект и не использовать цикл по расстоянию после объекта. В программе задается реальное расстояние после объекта z , а расчет свертки делается для эффективного расстояния $Z = z \cdot z_0 / z_t$, $z_t = z + z_0$, а затем результат расчета интерполируется на указанную во ВДП область (x_1, x_2) из части РО с размерами (X_1, X_2) , где $X_k = x_k \cdot z_0 / z_t$. В частности, при определенных расстояниях можно задавать область на детекторе с размером больше РО, так как размер РО задается на объекте, а не на детекторе.

3.1 Расчет объекта, заданного профилем толщины из файла

ТФ объекта номер 3 программы задается через профиль толщины из числового файла. Профиль толщины предварительно записывается в файл с именем (obj001.dat) в папке (obj) внутри папки программы. Номер 1 можно менять на любой другой. Записать профиль можно с помощью небольшой ACL программы по кнопке (D). Программа определяет число точек профиля по размеру файла в байтах, который делится на 4. Затем она определяет число точек, которое отводится на объект внутри РО методом деления размера объекта на шаг сетки. Если число точек не совпадает с тем, что есть в файле, выполняется интерполяция. Затем профиль умножается на комплексную константу и вычисляется экспонента. Таким образом получается ТФ объекта.

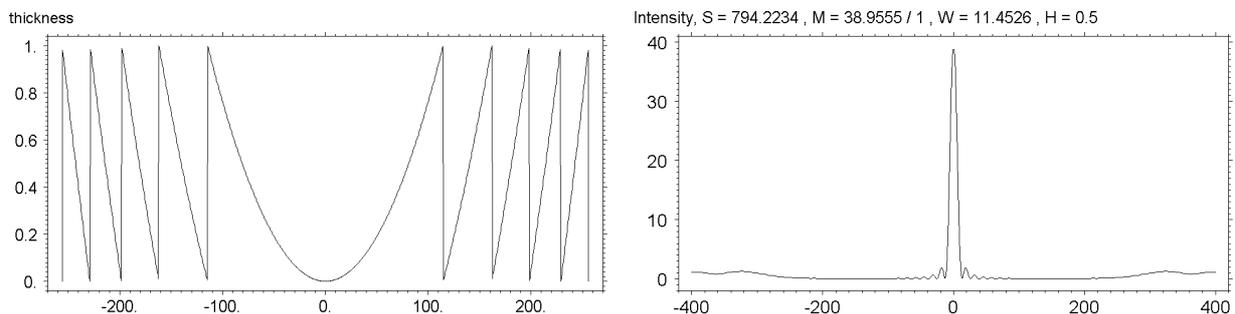


Рис. 3.1. Киноформный профиль (слева) и фокусировка пучка СИ (справа)

3.1.1. Киноформ. Типичным примером такого профиля является парабола, нарезанная в киноформный профиль, в котором каждый раз вычитается целая часть, так что фрагменты профиля меняются только в интервале $(0, 1)$. Такой профиль показан на рисунке 3.1 слева. Рассмотрим объект из кремния, $E = 25$ кэВ и выберем комплексную константу в виде $(c_r + i c_i) = -2\pi(\gamma + i)$, $\gamma = \beta/\delta$. С другой стороны, из теории фазового контраста известно, что должно быть $c_i = -K \delta t$, $K = (2 \cdot 10^4 \cdot \pi / 12.3984)E$. При указанном значении E и $\delta = 7.7301e-7$

получаем, что в выбранном нами случае $t = 64.16$ мкм. На графике видно, что первый раз 2π набирается примерно при $x = 115$ мкм.

Значит можно вычислить радиус кривизны параболы $R = x^2/2t = 103$ мкм. А фокусное расстояние такой линзы для плоской падающей волны (источник очень далеко) равно $F = R/\delta = 133.25$ м. Это очень большое расстояние, но и линза плоская, с большим радиусом и при относительно большой энергии фотонов. На рис. 3.1 справа показан расчет профиля интенсивности пучка на указанном расстоянии. Расчет был сделан при следующих значениях параметров:

$$\begin{aligned} 0 \ 1 : & \text{nr}=1; \text{d}=1/2; \text{n}=1024*4; \text{m}=1; \text{E}=25; \text{x0}=0; \text{z0}=-41\text{e}9; \text{dr}=0; \text{x1}=-400; \text{x2}=400; \text{nx}=800; \text{kw}=0; \text{ki}=1; \text{kp}=1; \text{dz}=0; \\ & \text{nz}=1; \text{no}=1; \text{np}=2; ! \ 2 \ 21 \ 3 \ 1 \ | \\ 3 \ 1 : & \text{Nr}=1; \text{mc}=1; \text{na}=1; \text{xp}=0; \text{ss}=512; \text{cr}=-1.6095\text{e}-2; \text{ci}=-6.283185; \text{nf}=1; \text{z}=13325; | \end{aligned} \quad (3.1)$$

Так как линза не поглощает, то легко оценить максимальное значение относительной интенсивности в фокусе по формуле $I_{ma} = A^2/(\lambda F)$. Подставляя значения $A = 512$ мкм, $\lambda = 1.23984/E$ нм, получаем $I_{ma} = 39.65$, что весьма хорошо соответствует расчету на рис. 3.1. То есть программа нормально работает и правильно вычисляет форму пучка на фокусном расстоянии для плоской падающей волны и при учете линзы через ТФ с киноформным профилем. И нет артефактов.

3.1.2. Аксикон. Другим примером может служить расчет фокусировки пучка СИ с помощью СПЛ с профилем толщины типа аксикон. Для расчетов используется объект номер 3, в котором профиль толщины объекта под пучком задается числовым массивом из файла с именем (obj003.dat) в папке (obj) внутри папки программы. В файле 1024 точки. Профиль показан на рисунке 3.2 слева. Он был записан с помощью небольшой ACL программы по кнопке (D).

Рассматривается профиль толщины типа аксикон, который описывается следующей формулой

$$t(x) = |x|(|x| + b)/R, \quad |x| < A/2 \quad (3.2)$$

Параметры означают следующее: A – апертура аксикона, b – расстояние между центрами двух парабол, R – радиус кривизны парабол. Центры парабол находятся ниже нуля, а профиль отсчитывается от нуля. Для расчетов были взяты значения параметров из статьи [3]. При этом энергия фотонов $E = 12.4$ кэВ, $A = 380$ мкм, $R = 50$ мкм, $b = 46$ мкм. Материал СПЛ алюминий. Профиль вычислялся с правильной толщиной для указанных параметров, а константы определялись для толщины 1 мкм. Эти константы сразу выдает программа (Refra). Они равны $c_r = -N \cdot 1.7653 \cdot 10^{-3}$; $c_i = -N \cdot 2.2223 \cdot 10^{-1}$, где $N = 2$ – число линз в СПЛ. В приближении ТФ множители для одной линзы просто умножаются на число линз. Входные данные показаны ниже для трех расстояний в трех вариантах:

$$\begin{aligned} 0 \ 1 : & \text{nr}=1; \text{d}=1/4; \text{n}=1024*2; \text{m}=1; \text{E}=12.4; \text{x0}=0; \text{z0}=5800; \text{dr}=0; \text{x1}=-200; \text{x2}=200; \text{nx}=400; \text{kw}=0; \text{ki}=1; \text{kp}=1; \text{dz}=0; \\ & \text{nz}=1; \text{no}=2; \text{np}=1; ! \ 4 \ 21 \ 1 \ 1 \ 3 \ 1 \ | \text{np}=2; ! \ 1 \ 24 \ 2 \ | \text{np}=3; ! \ 1 \ 24 \ 3 \ | \\ 1 \ 1 : & \text{Nr}=1; \text{mc}=1; \text{sb}=0; \text{na}=1; \text{xp}=0; \text{ss}=380; \text{ra}=0; \text{z}=0; | \\ 3 \ 1 : & \text{Nr}=1; \text{mc}=1; \text{na}=1; \text{xp}=0; \text{ss}=380; \text{cr}=-2*1.7653\text{e}-3; \text{ci}=-2*2.2223\text{e}-1; \text{nf}=3; \text{z}=0; | \\ 3 \ 2 : & \text{Nr}=1; \text{mc}=1; \text{na}=1; \text{xp}=0; \text{ss}=380; \text{cr}=-2*1.7653\text{e}-3; \text{ci}=-2*2.2223\text{e}-1; \text{nf}=3; \text{z}=100; | \\ 3 \ 3 : & \text{Nr}=1; \text{mc}=1; \text{na}=1; \text{xp}=0; \text{ss}=380; \text{cr}=-2*1.7653\text{e}-3; \text{ci}=-2*2.2223\text{e}-1; \text{nf}=3; \text{z}=376; | \end{aligned} \quad (3.3)$$

На рисунке 3.2 слева единицы мкм на обоих осях, а справа показан рассчитанный программой профиль интенсивности на нулевом расстоянии. График почти похож на параболу, но в середине, то есть в максимуме есть острый угол. Поглощение на краях апертуры очень сильное, то есть работает фактически эффективная апертура.

Наибольший интерес представляют профили интенсивности на фокусном расстоянии парабол и в области их интерференции. Расчет проводился на сетке из 2048 точек с шагом 0.25 мкм для точечного источника на расстоянии $z_0 = 58$ м. Размер источника не учитывался. Это легко сделать простым вычислением свертки. На рисунке 3.3 показаны распределения интенсивности на расстояниях $z = 1$ м (слева) и 3.76 м (справа). Второе расстояние

соответствует фокусировке на параболическом профиле каждой из сторон аксикона, но точки фокусировки смещены на расстояние b .

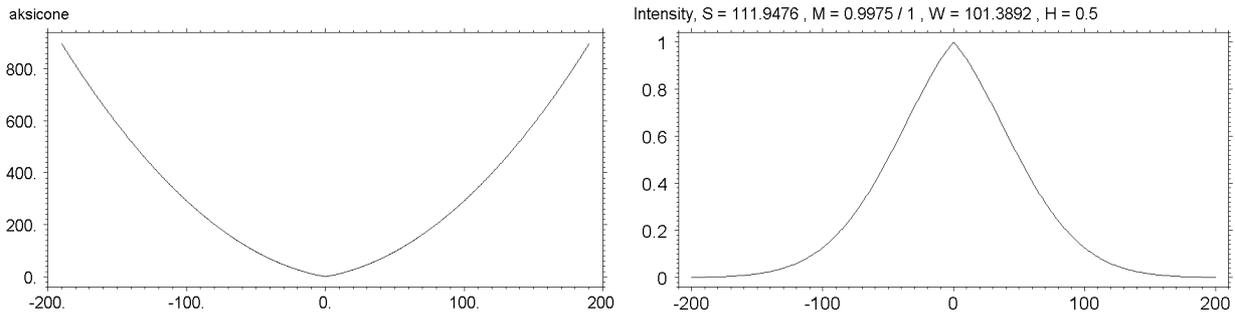


Рис. 3.2. Профиль толщины (слева) и профиль интенсивности на нулевом расстоянии (справа)

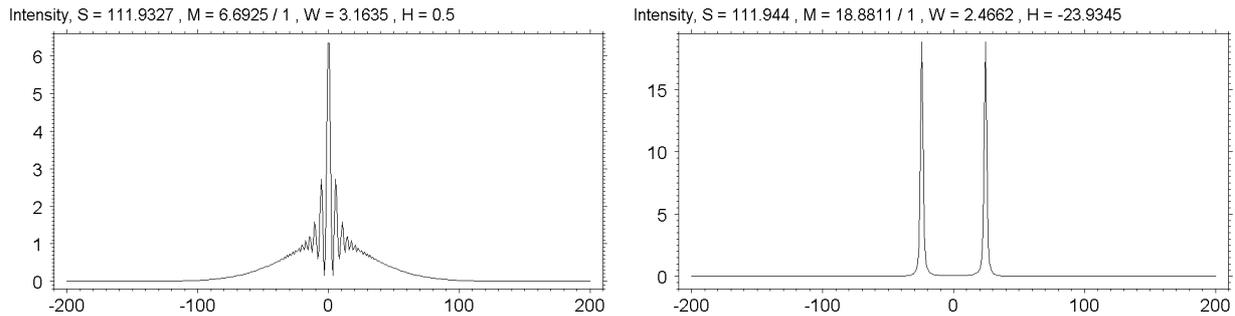


Рис. 3.3. Распределения интенсивности на расстояниях 1 м (слева) и 3.76 м (справа)

Отметим, что фокусировка не очень сильная по той причине, что фокусируются лучи только с части апертуры. Кроме того угловой диапазон пучков после фокусировки такой, что они не перекрываются. Перекрытие происходит только в области до фокусировки. В области перекрытия центральный максимум имеет величину всего в 3 раза меньше, чем в области фокусировки. Эти результаты полностью совпадают с теми, что представлены в статье [2].

Программа без всяких проблем может вычислять и более сложные схемы с участием СПЛ с профилем аксикона и не только аксикона. Более сложные случаи надо анализировать отдельно.

3.2. Расчет борного волокна

В работе [4] (113 в моем списке) представлены результаты расчета для волокна (волокна) диаметром 100 мкм из бора с сердцевиной диаметром 30 мкм из вольфрама. Остальные параметры такие $E = 17$ кэВ, $z_0 = 41$ м, $z = 5$ м. Чтобы учесть сложный состав волокна достаточно рассмотреть 3 элемента: бор диаметром 100 мкм, бор диаметром 30 мкм с отрицательными параметрами преломления и поглощения и вольфрам с таким же диаметром.

Входные параметры для расчета следующие

$$\begin{aligned}
 &0 \ 1 : nr=1; u=2; d=1/u; n=1024*u; m=1; E=17; x0=0; z0=-4100; dr=0; x1=-400/u; x2=400/u; nx=800; kw=0; ki=1; \\
 &\quad kp=1; dz=0; nz=1; no=1; np=2; ! 2 \ 21 \ 4 \ 1 \ | \\
 &4 \ 1 : Nr=1; z=500; mc=1; na=3; po=1; xp=0; | po=2; | po=3; | \\
 &99 \ 1 : \# ne=1; Z1=5; n1=1; de=2.34; R=50; ! \\
 &99 \ 2 : \# ne=11; Z1=5; n1=1; de=2.34; R=15; ! \\
 &99 \ 3 : \# ne=1; Z1=74; n1=1; de=19.3; R=15; !
 \end{aligned}
 \tag{3.4}$$

На рисунке 3.4 результат расчета по таким входным данным показан на правом фрагменте. На левом фрагменте то же самое, но с шагом d в 2 раза больше ($u=1$) и соответственно область графика также в 2 раза больше. Результат расчета на левом графике в целом соответствует картинке, показанной в статье, хотя и есть некоторые отличия в центре. Это скорее всего связано с тем, что в статье использовались другие значения для параметров δ и β , которые брались из других источников. Различия наиболее сильны там, где роль играет вольфрам, что как раз указывает на правильность такого вывода. В расчете

использовалось правило, что отрицательные параметры преломления и поглощения задаются в файле (99) через 1 во втором разряде значения для параметра pe .

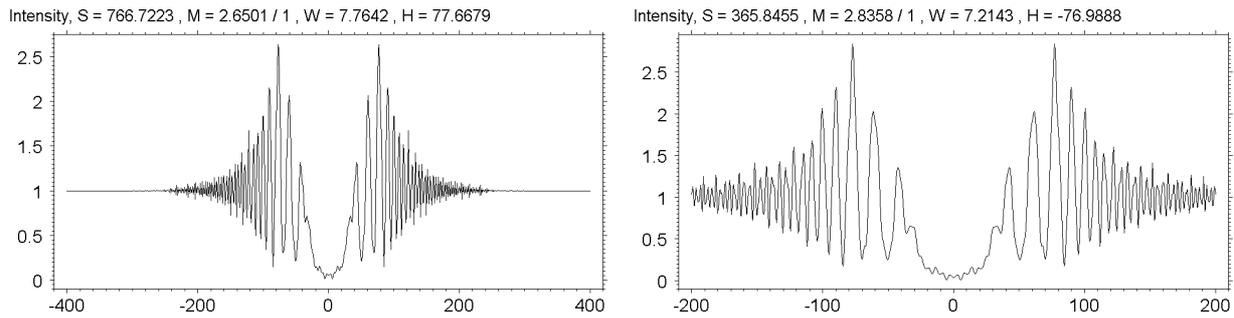


Рис. 3.4. Расчет борного волокна с вольфрамовым кором

4. СИММЕТРИЧНАЯ ДИФРАКЦИЯ В ГЕОМЕТРИИ БРЭГГА

Одной из возможных экспериментальных схем является комбинация классических оптических элементов типа щелей и линз с дифракцией в кристалле. Наиболее интересна геометрия Брэгга в асимметричном случае, так как в ней возможно предварительное сжатие пучка. Также этот вариант использовался в новой схеме монохроматора. Асимметричная ДГБ реализована в программе как объект номер 5. Как задавать входные данные для него написано в техническом и математическом описаниях программы. Симметричная ДГБ является частным случаем такого объекта.

4.1. Простейший вариант

Рассмотрим для начала самый простейший вариант, а именно, точечный источник на расстоянии 50 м, щель размером 1 мкм, длину волны излучения $\lambda = 0.1$ нм и толстый кристалл кремния, с симметричным отражением 220. Все другие расстояния равны нулю. Угловые и частотные отклонения тоже равны нулю. Дифракционные параметры вычислялись по программе `vkDifPar`. Входные данные для этого случая показаны ниже.

```
0 1 : nr=1; d=0.01; n=8*1024; m=1; E=12.3984; x0=0; z0=5000; dr=0; x1=-7.68; x2=15.36; nx=384; kw=0; ki=1; kp=1; dz=0; nz=1;
      no=1; np=1; ! 2 21 1 1 | no=2; np=2; ! 2 23 5 1 |
1 1 : Nr=1; mc=1; sb=0; na=1; xp=-5; ss=1; ra=0; z=0; |
5 1 : Nr=1; mc=1; na=1; po=1; z=0; z1=0; z2=0; bf=1; qb=0; |
99 1 : # ne=0; tb=15.09; q0=0; t0=1e9; h0=3.969e-3; h1=-0.24147; h2=3.846e-3; #d 10 r(4) tb bf q0 t0 h0 h1 h2 h1 h2 0 ! (4.1)
```

Здесь записаны сразу два варианта. В первом делается расчет только для щели размером 1 мкм, сдвинутой на 5 мкм влево. Во втором после щели стоит кристалл. Результат расчета для обоих вариантов показан на рисунке 4.1. Видно, что при отражении в кристалле в области щели интенсивность монотонно возрастает, начиная от нуля. Слева от щели ничего не может быть, так как отражение идет вправо. После того, как щель закончилась, идет отражение из глубоких слоев кристалла, которое уменьшается по мере удаления от щели.

Правый склон пика весьма похож на профиль интенсивности для пропагатора кристалла, который соответствует нулевому размеру щели (или достаточно малому). Пропагатор кристалла был вычислен еще в начале 70-х годов прошлого века, в том числе в статье [5]. Согласно формуле (3.22) указанной статьи максимальное значение квадрата модуля пропагатора $I_{\max} = dB^2/4$, а первый ноль интенсивности $x_0 = a_0/B$. Здесь d – ширина щели, $B = K|\chi_h|/2\cos(\theta_B)$, a_0 есть первое решение уравнения $J_1(a) = 0$, где $J_1(x)$ – функция Бесселя 1-го порядка. Более конкретно, $a_0 = 3.83$. Для наших входных данных $B = 0.125$, $d = 1$ мкм. В результате получаем $I_{\max} = 0.00391$, $x_0 = 30.63$ мкм.

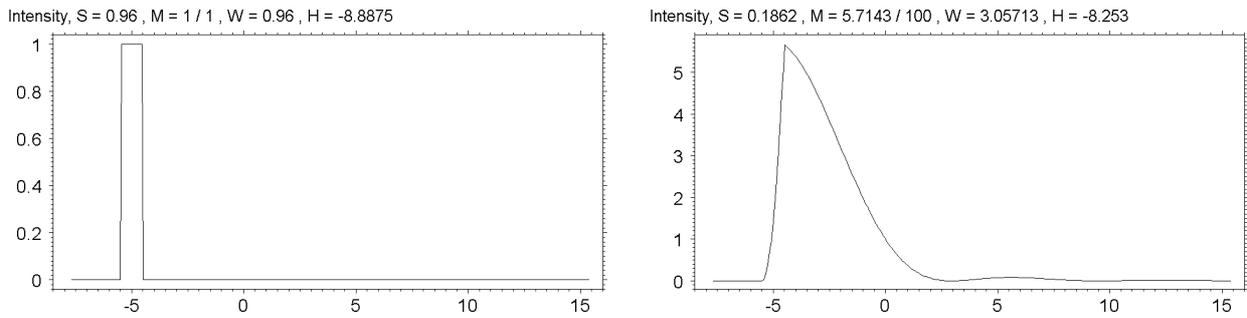


Рис. 4.1. Профиль интенсивности пучка после щели (слева) и после кристалла (справа)

Эти значения не совпадают с теми, которые показаны на рисунке 4.1 по той причине, что они вычислены вдоль поверхности кристалла, а программа делает расчет в направлении, перпендикулярном направлению отраженного пучка. Соответственно x_0 надо умножить на $\sin(\theta_B) = 0.26$, а I_{\max} – разделить на ту же величину, так как энергия сохраняется. В результате получаем $x_0 = 7.97$ мкм и $I_{\max} = 0.015$. Теперь первое значение точно соответствует графику на рисунке 4.1, а второе значение примерно в 4 раза меньше. Причина в том, что в программе за единицу принято падающее излучение по нормали к направлению пучка, а в формуле – вдоль поверхности. Учет этого факта приводит к необходимости еще раз разделить I_{\max} на $\sin(\theta_B)$, что приведет к совпадению.

В том, что программа работает правильно, можно убедиться на примере с теми же параметрами, как на рис. 4.1, но с шириной щели 10 мкм, расположенной в центре расчетной области. Результат расчета показан на рисунке 4.2. Здесь видно, что интенсивность отраженного пучка начинается от нуля, возрастает до величины слегка превышающей 1 и затем начинает уменьшаться. За пределами щели происходит примерно такой же спад, как и для узкой щели.

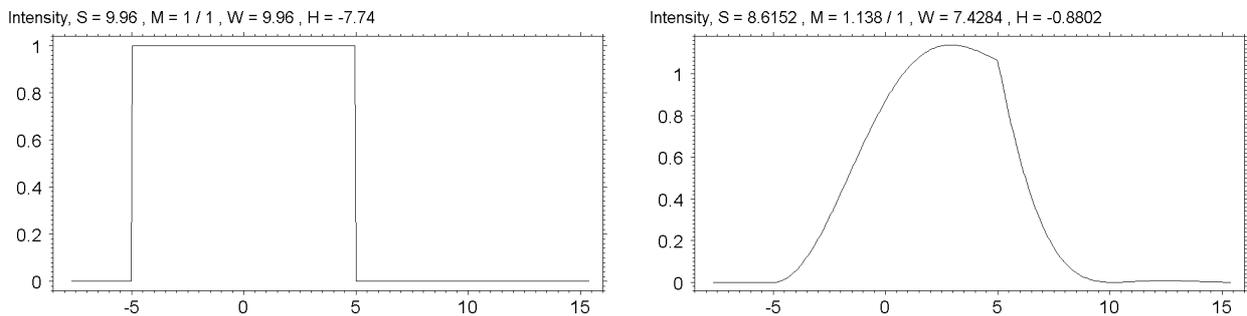


Рис. 4.2. Профиль интенсивности пучка после щели (слева) и после кристалла (справа)

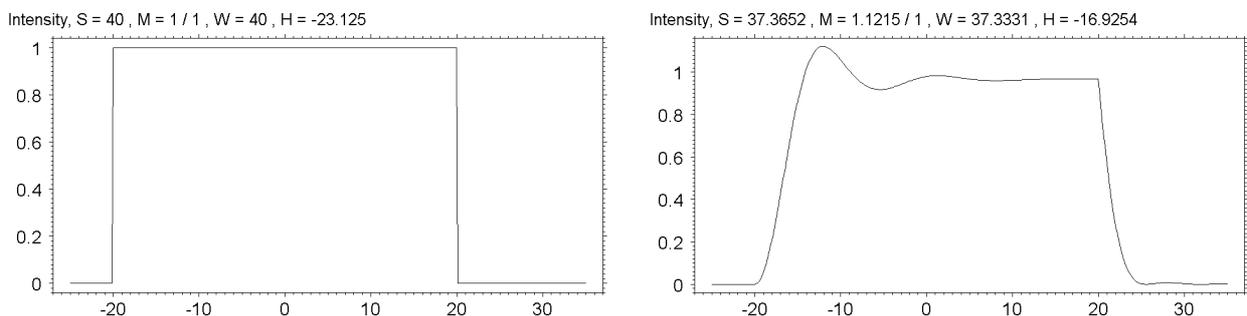


Рис. 4.3. Профиль интенсивности пучка после щели (слева) и после кристалла (справа)

Очевидно, что для очень широкой щели ситуация на правом краю щели будет аналогична отражению плоской волны, а в центре угловой области отражения (как раз она и рассматривается) коэффициент отражения весьма близок к единице. Полная картина показана на рисунке 4.3, где расчет сделан для щели размером 40 мкм, на интервале от -25 до 35 мкм. Здесь хорошо видно, что интенсивность внутри щели после двух максимумов выходит на константу, чуть меньшую единице по величине, которая равна коэффициенту отражения плоской волны.

Интересно, что на рисунках 4.2 и 4.3 хорошо видно, что убывание интенсивности на правом краю происходит быстрее, чем возрастание на левом краю. Осцилляции интенсивности на левом краю максимума я лично раньше не обсуждал. Какой от них может быть толк надо подумать.

4.2. Короткая СПЛ плюс Симметричная ДГБ

В статье [6], опубликованной в 2007 году, выполнены расчеты дифракции пучка после фокусировки короткой линзой. Было бы интересно повторить эти расчеты с новой программой. Использовалось число точек $n = 64 \times 1024$ с шагом $d = 0.005$ мкм, энергия $E = 25$ кэВ, $z_0 = 50$ м, СПЛ из алюминия с $R = 1.729$ мкм. Результаты расчета фокусировки пучка только одной СПЛ показаны на рисунке 4.4. Слева сразу после СПЛ, справа – на фокусном расстоянии 102 см.

Графики вполне соответствуют рисунку 2 указанной статьи. Входные данные для указанного расчета показаны ниже. Здесь поставлено 10 элементов с радиусом в 10 раз больше, но это неважно, так как результат не зависит от числа элементов при корректировке радиуса. Также видно, что расчет был проведен с использованием аналитического метода ($mC=1$), то есть апертура СПЛ не учитывается, так как считается, что размер апертуры в 2 и более раза больше эффективной апертуры.

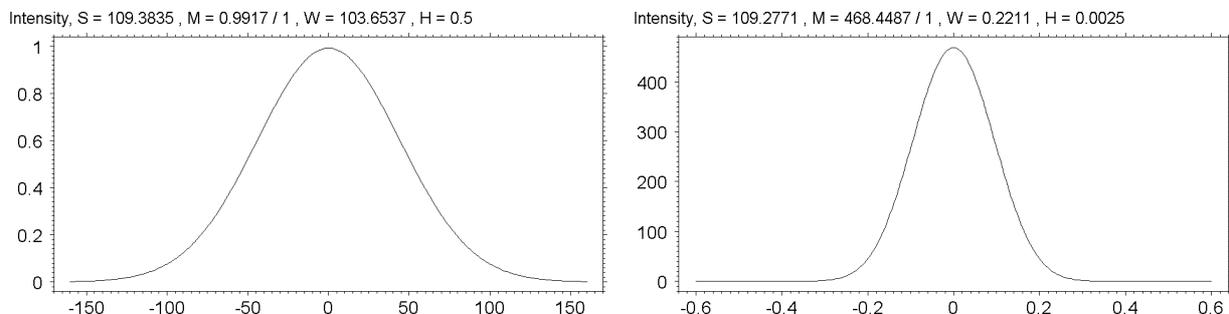


Рис. 4.4. Интенсивность пучка сразу после СПЛ (слева) и в фокусе (справа)

Параметр pl в таком расчете определяет апертуру, но она не учитывается и от нее ничего не зависит. Вот входные данные

```
0 1 : nr=1; d=0.005; n=64*1024; m=1; E=25; x0=0; z0=5000; dr=0; x1=-160; x2=160; nx=320; kw=0; ki=1; kp=1; dz=0; nz=1;
      no=1; np=1; ! 2 21 2 1 | x1=-0.6; x2=0.6; nx=240; np=2; ! 1 22 2 |
2 1 : Nr=1; mC=1; mc=1; na=1; po=1; nl=10; z=0;|
2 2 : Nr=1; mC=1; mc=1; na=1; po=1; nl=10; z=102.75;|
99 1 : # ne=1; Z1=13; n1=1; de=2.694; pl=102; R=17.29; dl=2; ! (4.2.1)
```

Интересно также повторить рисунок 3 этой же статьи. Это можно сделать набором входных данных, показанным ниже. Результат расчета показан на рисунке 4.5. Слева – первый вариант, где используется щель с шириной 0.01 мкм, то есть всего два шага сетки. Справа – второй вариант, где используется СПЛ и кристалл стоит в фокусе СПЛ.

Отличие от рис. 3 статьи только в нормировке левого рисунка. В статье щель служила моделью дельта функции и ее размер не учитывался. В данной программе квадрат ширины щели, то есть 10^{-4} является множителем и как раз на этот множитель и умножается интенсивность. Вот входные данные

```
0 1 : nr=1; d=0.005; n=64*1024; m=1; E=25; x0=0; z0=5000; dr=0; x1=-3; x2=22; nx=500; kw=0; ki=1; kp=1; dz=0; nz=1; no=2;
      np=1; ! 4 21 1 1 5 1 | np=2; ! 1 21 2 |
1 1 : Nr=1; mc=1; na=1; sb=0; ss=0.01; xp=0; ra=0; z=0;|
2 1 : Nr=1; mC=1; mc=1; na=1; po=1; nl=1; z=102.75;|
5 1 : Nr=1; mc=1; na=1; po=2; z=0; z1=0; z2=0; bf=1; qb=0; |
99 1 : # ne=1; Z1=13; n1=1; de=2.694; pl=12; R=1.729; dl=2; !
99 2 : # ne=0; tb=4.536; q0=0; t0=63.223; h0=5.017e-4; h1=-0.10307; h2=3.506e-4; #d 10 r(4) tb bf q0 t0 h0 h1 h2 h1 h2 0 ! (4.2.2)
```

Итак, программа XRWP вполне способна воспроизвести рисунки статьи [6]. Оригинальная программа, которая использовалась при написании статьи, не была универсальной, и менее удобна для использования. Она уже давно на пенсии. Данная

универсальная программа решает весь класс задач по дифракции сфокусированного пучка от многослойного кристалла.

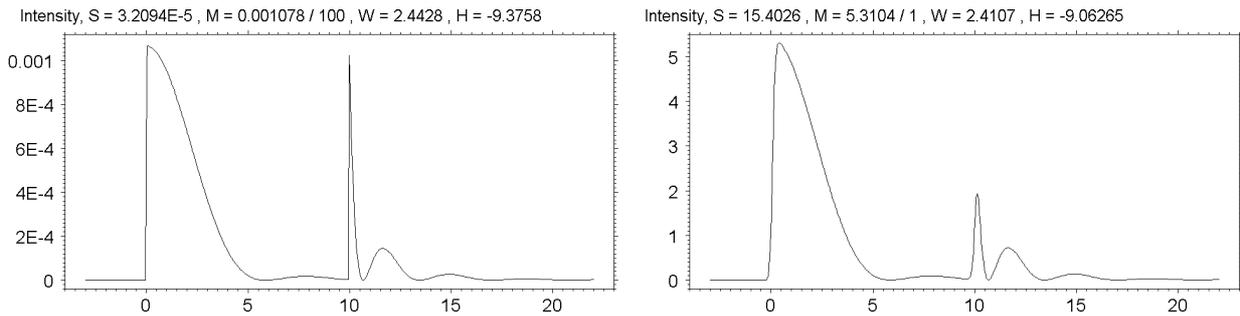


Рис. 4.5. Отражение кристаллом толщиной 5 мкм. Подробности в тексте.

Можно без труда реанимировать эту деятельность и придумать новые задачи. Вполне возможно, что асимметричная дифракция даст более высокое пространственное разрешение, но надо сильно монохроматизировать излучение. Даже с симметричной дифракцией не все задачи решены, особенно для многослойного кристалла.

4.3. Угловая зависимость симметричной ДГБ в кристалле с пленкой

Рассмотрим теперь как можно было бы получить рисунок 5 статьи [6]. На нем показана угловая зависимость отражения от кристалла с пленкой В программе XRWP угловая зависимость симметричной ДГБ не вычисляется, так как все заточено на реальное пространство. Чисто физически угловую зависимость можно было бы получить при дифракции сферической волны на очень большом расстоянии. Результат такого расчета показан на рис. 4.6 слева.

Расчет выполнен для точечного источника на расстоянии 100 м от кристалла и в области от -4 до 8 мм. Это соответствует угловому диапазону от -40 до 80 мкрад, как и было на рисунке 5 статьи [6]. Входные данные для такого расчета необходимо подбирать так, чтобы и в угловом и в реальном пространстве размер РО был достаточен для правильного расчета. Входные данные показаны ниже

```
0 1 : nr=1; d=0.3; n=64*1024; m=1; E=25; x0=0; z0=1e4; dr=0; x1=-4000; x2=8000; nx=480; kw=0; ki=1; kp=1; dz=0; nz=1; no=1;
    np=1; ! 2 21 5 1 | z0=1; dr=0; x1=-40; x2=80; np=2; ! 1 22 2 |
5 1 : Nr=1; mc=1; na=1; po=2; z=0; z1=0; z2=0; bf=1; qb=0; |
5 2 : Nr=1; mc=1; na=1; po=2; z=0; z1=-1; z2=0; bf=1; qb=0; |
99 2 : # ne=0; tb=4.536; o=RD*tb; q0=100*KE*tan(o); t0=1e3/sin(o); t1=2/sin(o); h0=5.017e-4; h1=-0.10307; h2=3.506e-4;
    #d 17 r(4) tb bf 0 t0 h0 h1 h2 h1 h2 1 q0 t1 h0 h1 h2 h1 h2 !
```

(4.3)

Здесь снова заданы два варианта расчета, результаты которых показаны на графиках рис. 4.6 слева и справа. Первый вариант (слева) относится к расчету в прямом пространстве, как указано выше. Размер РО равен 19.661 мм, что превышает 16 мм, необходимые для показа на графике. Расчет делается в симметричных пределах, а на графике область обрезана слева. С другой стороны, размер РО в обратном пространстве равен $2\pi/d \approx 21$ мкм⁻¹. В пересчете на угол для данной энергии получаем чуть меньше 164 мкрад, что также превышает 160 мкрад, необходимые для построения графика.

Расчет в прямом пространстве для заданных параметров почти соответствует угловой зависимости за исключением левого края пика от подложки. Подложка имеет толщину 1 мм, как следует из входных данных. А над ней слой имеет толщину 2 мкм и несоответствие периодов $\Delta d/d = D \times 10^{-4}$, где $D = 4$ (нижний фрагмент на рисунке 5 статьи [3]). Дело в том, что на большом расстоянии результат вычисляется как интеграл от произведения АДО для кристалла и ФП ПФ.

Последняя функция сильно осциллирует с переменным периодом и интеграл можно вычислять методом стационарной фазы всюду, где АДО для кристалла ведет себя плавно по сравнению с периодом этих осцилляций. Но как раз на левом краю пика от подложки это не

так. Там реальная часть АДО имеет очень резкий пик. И мелкие осцилляции ФП ПФ не усредняются и показывают себя.

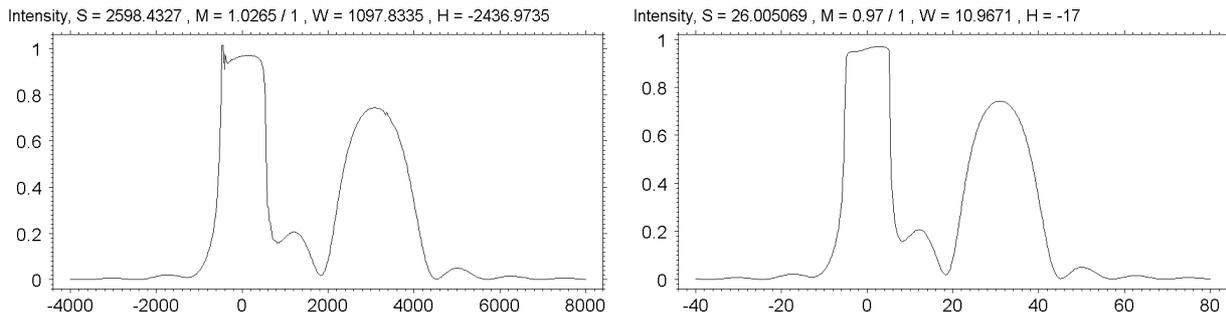


Рис. 4.6. Угловая зависимость СДГБ. Подробности в тексте.

На правом графике показан второй вариант, который сделан специально для показа КДО при дифракции в кристалле. Его специфика в том, что расстояние $z_1 = -1$. Если задать только один объект с номером 5 и отрицательное значение для z_1 , то программа вычисляет только КДО. При этом параметры x_1 и x_2 надо задавать как углы в единицах мкрад. Интересно, что параметр z_0 в таком варианте не играет роли, но его все же надо задавать больше 1, так как при нулевом значении программа запрашивает ВФ из файла.

Сравнение двух графиков показывает, что не только левый, но и правый край пика от подложки искажен при расчете на большом расстоянии. Причина та же – резкие изменения АДО. Увеличивать расстояние еще больше нельзя, так как при увеличении шага сетки d сужается размер РО в обратном пространстве, а число точек и так велико и намного его увеличить не получится.

4.4. Короткая СПЛ плюс симметричная ДГБ в многослойном кристалле

В данном разделе показано как получить рисунок 4 в статье [6]. Система та же, что и в предыдущем разделе, то есть толстая подложка и слой толщиной 2 мкм. Но перед кристаллом стоит СПЛ на фокусном расстоянии. СПЛ обеспечивает нужную угловую расходимость пучка, но для правильного описания фокусировки шаг сетки должен быть малым. Одновременно можно было бы повторить расчет рисунка 6, но это не так интересно.

Более интересно рассмотреть систему из трех слоев, в которой второй слой сильно выведен из условия Брэгга, а третий слой соответствует подложке. Толщина слоев в два раза меньше, то есть 1 мкм. Такая система в статье не рассматривалась. Вот входные данные двух таких вариантов, которые вычисляются одновременно

```
0 1 : nr=1; d=0.005; n=64*1024; m=1; E=25; x0=0; z0=5e3; dr=0; x1=-3; x2=15; nx=360; kw=0; ki=1; kp=1; dz=0; nz=1; no=2;
      np=1; ! 4 21 2 1 5 1 | np=2; ! 1 24 2 |
2 1 : Nr=1; mC=1; mc=1; na=1; po=1; nl=10; z=102.75; |
5 1 : Nr=1; mc=1; na=1; po=2; z=0; z1=0; z2=0; bf=1; qb=0; |
5 2 : Nr=1; mc=1; na=1; po=3; z=0; z1=0; z2=0; bf=1; qb=0; |
99 1 : # ne=1; Z1=13; n1=1; de=2.694; pl=102.75; R=17.29; dl=2; !
99 2 : # ne=0; tb=4.536; o=RD*tb; q0=100*KE*tan(o); t0=1e3/sin(o); t1=2/sin(o); h0=5.017e-4; h1=-0.10307; h2=3.506e-4;
      #d 17 r(4) tb bf 0 t0 h0 h1 h2 h1 h2 1 q0 t1 h0 h1 h2 h1 h2 !
99 3 : # ne=0; tb=4.536; o=RD*tb; q0=1e4*KE*tan(o); t0=1e3/sin(o); t1=1/sin(o); h0=5.017e-4; h1=-0.10307; h2=3.506e-4;
      #d 24 r(4) tb bf 0 t0 h0 h1 h2 h1 h2 2 q0 t1 h0 h1 h2 h1 h2 0 t1 h0 h1 h2 h1 h2 !
```

(4.4)

Для многослойного кристалла приходится вводить много параметров и в этом случае особенно удобно использовать программирование при задании параметров. Как видно из входных данных, второй слой имеет в 100 раз большее значение D , то есть 400. Результат расчета показан на рисунке 4.7.

Рисунок 4.7 наглядно показывает как работает отражение тонкого пучка в кристалле. Прежде всего отметим, что левый график точно соответствует второму снизу фрагменту рисунка 4 статьи [6]. Здесь верхний слой выведен из точного условия Брэгга и он отражает не так сильно, как раньше. Но ход кривой весьма близок к тому, что был на рисунке 5, только максимум меньше.

Однако кривая не успевает дойти до нуля на нижней границе слоя, а пучок входит в подложку, где условия Брэгга выполняются точно. Отражение снова резко возрастает, но теперь кривая имеет более сложную форму со слабыми признаками интерференции. На рисунке 5 отражение от нижней границы кристалла имеет серию узких пиков. Теперь эти пики едва заметны, так как накладываются на сильное отражение от подложки.

На правом графике ситуация еще более интересная. Здесь в верхнем слое условия Брэгга выполняются точно и максимум соответствует рисунку 5. Но слой тонкий и кривая резко обрывается. Отражения от границы слоя, как на рисунке 5 нет, так как кривая еще не дошла до нуля. Затем пучок идет через слой, который совсем не отражает и снова входит в подложку, которая отражает.

Отражение меньше, так как пучок ослаблен из-за отражения в верхнем слое, но интересно то, что максимум имеет длинный хвост. Вполне возможно, что это происходит из-за дополнительного отражения вниз на нижней границе верхнего слоя и повторного отражения от подложки. Однако все это происходит в материале и поглощение сильно ослабляет отражение.

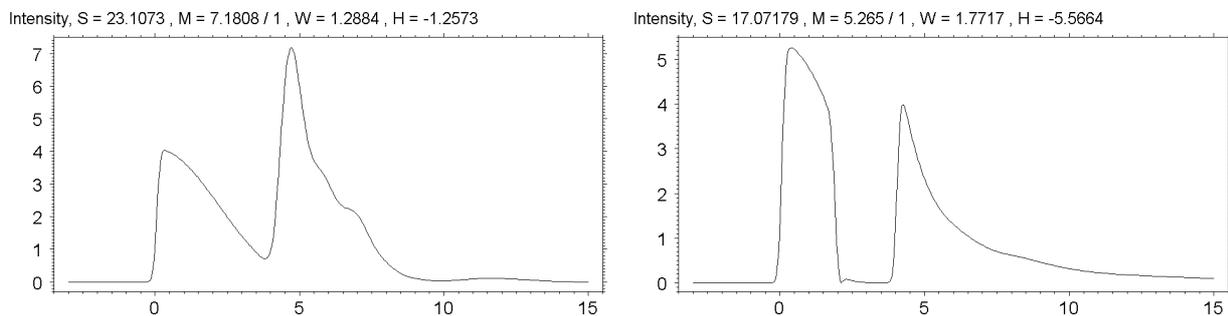


Рис. 4.7. Отражение сфокусированного пучка многослойным кристаллом. Подробности в тексте.

Более интересная ситуация возникает, когда в промежуточном слое совсем ничего нет. Задавать нули для параметров дифракции нельзя, так как при этом возникнет ошибка деления на ноль. Но можно взять те же значения, что и для слоев и умножить их на 0.001. На рисунке 4.8 показаны результаты такого расчета.

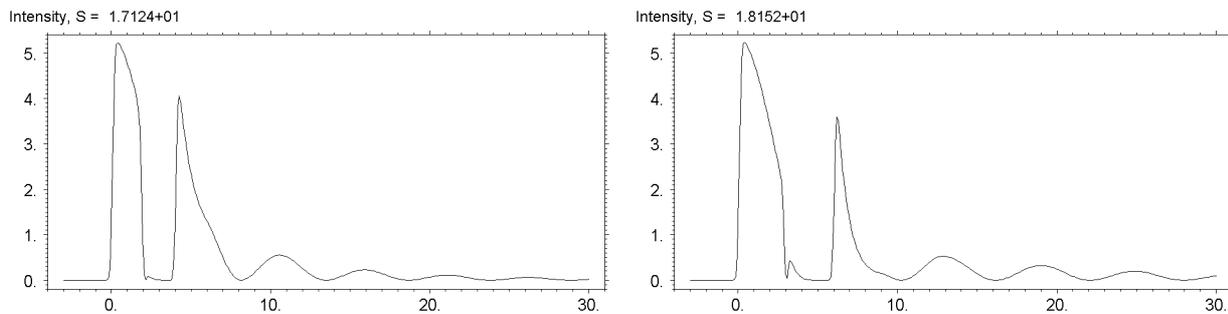


Рис. 4.8. Отражение сфокусированного пучка многослойным кристаллом. Подробности в тексте.

Входные данные для графика слева такие же, как и для рисунка 4.7 справа за исключением уже указанного умножения на 0.001 параметров дифракции для промежуточного слоя и увеличения области справа до 30 мкм вместо 15 мкм. На рисунке справа толщины слоев увеличены в полтора раза.

Если сравнить график рис. 4.7 справа (график 1) с графиком рис. 4.8 слева (график 2), то до 5 мкм все совпадает, а дальше картина существенно меняется. На графике 1 просто затянутый хвост, а на графике 2 уже видна структура в виде затухающей системы максимумов с постоянным периодом.

Интересно, что период структуры слабо зависит от толщины слоев. На графике 2 он равен примерно 5.5 мкм, а на графике 3 (справа на рис. 4.8) он равен 6 мкм. Положение первого максимума на графике 2 равно 10.5 мкм, а на графике 3 – 13 мкм. Разница 2.5 мкм лишь чуть больше разницы в начале отражения от подложки 2 мкм. Высота дополнительных

максимумов на графике 3 также немного подросла, но каких-то простых зависимостей не видно.

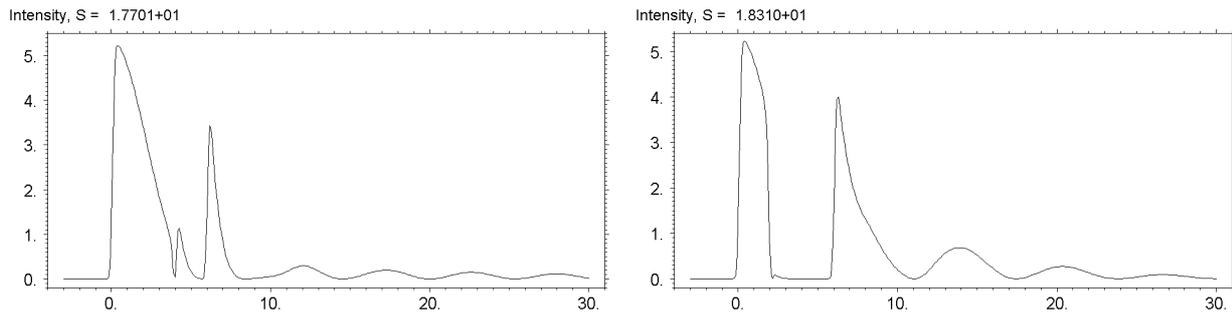


Рис. 4.9. Отражение сфокусированного пучка многослойным кристаллом. Подробности в тексте.

Дополнительные максимумы – это интересный эффект, но не очень понятно как его интерпретировать. Разумно посмотреть что происходит при изменении параметров. На рисунке 4.9 слева показан результат расчета для тех же параметров, что и на рисунке 4.8, но с единственным изменением, а именно толщина верхнего слоя равна 2 мкм, а толщина воздушного зазора – 1 мкм. На фрагменте справа все наоборот, то есть толщина верхнего слоя равна 1 мкм, а толщина воздушного зазора – 2 мкм.

Сразу видно, что толстый слой приводит к более сильному отражению на его нижней границе и более слабому отражению от подложки, включая дополнительные максимумы. Очевидно, что максимумы имеют интерференционную природу и лишь частично обусловлены многократным отражением внутри слоя с пустотой.

4.5. Щель плюс симметричная ДГБ, одно отражение с разделением пучка

Рассмотрим снова тот же случай, что и в начале раздела 4.1, только щель сдвинем на 0.5 мкм влево. Очевидно, результат получается такой же, но с другим сдвигом, и нет смысла рисовать графики. Далее сделаем расчет того же случая, когда щель сдвинута на 0.5 мкм вправо. Снова получим то же самое, но с другим сдвигом. А теперь интересно сложить ВФ двух вариантов и вычислить интенсивность в тех же точках сетки, как и раньше. А затем сделать расчет для щели размером 2 мкм, размещенной в центре. Ясно, что результаты двух таких расчетов должны совпадать. Они показаны на рис. 4.10 слева и справа. Как можно видеть, совпадение реально имеет место быть.

Технически расчет левого графика делается следующим образом. При задании параметра $kw=1$ программа записывает волновую функцию на выходе в файл. Затем специальный код на языке ACL прочитывает две ВФ из файлов и складывает их, а результат записывает в массив `wfa.dat`. После этого расчет при $z_0=0$ и одной щелью очень большого размера дает интенсивность в нужных точках из падающей ВФ. А расчет с размером щели 2 мкм делается обычным способом. При увеличении размера щели в 2 раза интенсивность в максимуме возрастает в 4 раза.

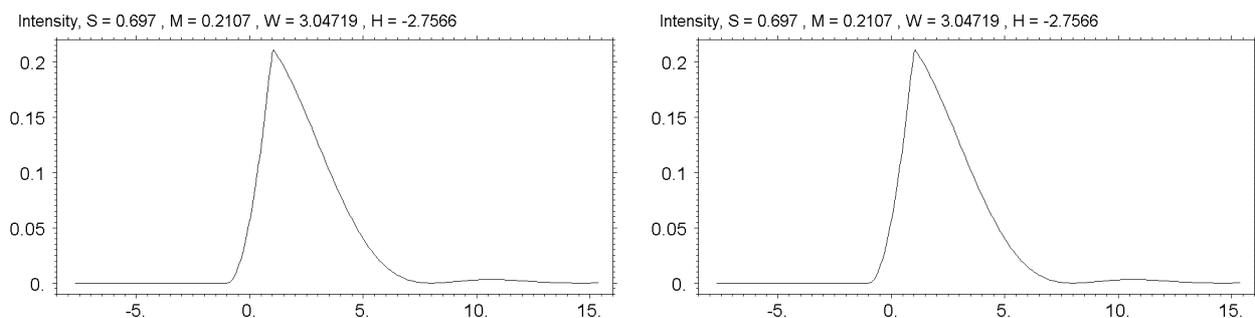


Рис. 4.10. Профиль интенсивности пучка после кристалла двумя способами

4.6. Щель плюс Симметричная ДГБ, два и четыре отражения

Рассматривается два и четыре отражения от системы из двух одинаковых кристаллов с параллельными поверхностями, расположенными на небольшом расстоянии. Система также может представлять собой щель в одном кристалле, то есть двухблочный интерферометр. Два и четыре отражения не меняют направление падающего пучка. Для начала будем считать, что расстояние между поверхностями мало и им можно пренебречь. При отражении 220 дифракционные параметры на векторе обратной решетки с разными знаками совпадают.

В программе XRWP несколько отражений можно задать как несколько объектов. Рассмотрим снова щель размером 1 мкм, сдвинутую на 0.5 мкм вправо для двух отражений и на 0.5 мкм влево для четырех отражений. Результаты расчета показаны на рисунке 4.11 слева для двух и справа для четырех отражений. Можно видеть, что добавление отражений не очень сильно меняет форму отраженного пучка. Она имеет вид пика, слегка похожего на гауссовый пик и серии более слабых пиков справа.

Расчет сделан таким образом, что никакие расстояния между отражениями и на выходе не учитываются. Предполагается, что расстояния малы и никак не влияют на результат. Это приближение можно легко исправить, так как программа способна учитывать любые расстояния между объектами. Это будет сделано позднее. А пока просто интересно понять что получается с учетом того, что есть аналитика.

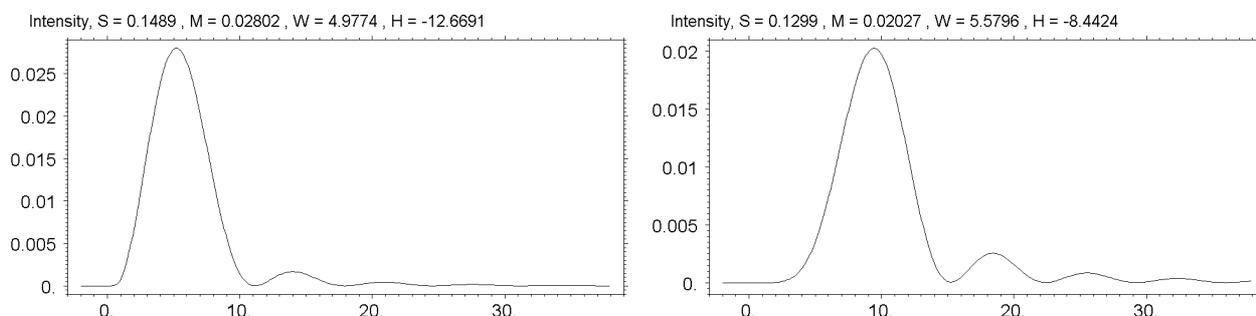


Рис. 4.11. Профиль интенсивности пучка после двух (слева) и после четырех (справа) отражений

В обоих случаях пучки идут в одном направлении, а на входе они проходят через щель в разных местах. Но теперь складывать ВФ нельзя, потому что в реальном пространстве траектории пучков разные. На графиках показаны распределения интенсивности вдоль оси, перпендикулярной главной траектории, которая определяется волновыми векторами главной экспоненты, которая представляет собой несущую частоту, говоря словами метода передачи звука радиоволнами.

4.7. О том, что делать дальше

После двух и четырех отражений пучки будут находиться совсем в разных местах пространства. Однако есть место, где пучки пересекаются после двух и трех отражений, но идут в разные стороны. Там образуется стоячая волна с периодом обратной решетки. Это может быть интересно с точки зрения метода стоячих волн и этот вариант разумно обдумать, но к волноводу это не имеет отношения.

Грубо говоря, я увлекся заключением Егорова, которое оказалось ошибочным. Ситуация с зеркалами не такая тривиальная, как кажется. Волновод на полном внешнем отражении и дифракция в кристалле – это совершенно разные вещи. При дифракции пучки, отраженные от верхней и нижней поверхностей двигаются в очень разные стороны и их нельзя просто так складывать, нужно учитывать несущую частоту.

Совместить оба пучка в пространстве сложно, так как они должны идти в одном направлении. Но вот новый метод стоячих волн – это вполне разумная идея. Обычно стоячая волна образуется комбинацией падающей и отраженной волн. И зависит от угла падения на кристалл плоской волны. В зазоре можно сделать стоячую волну на одних отражениях, то есть без падающей волны.

При этом надо рассматривать не узкую щель, а широкую, которая засвечивает весь зазор. И сделать так, чтобы половина пучка имела на одно отражение больше. Такую систему легко просчитать в программе XRWP. Более того, потом можно поставить какой-либо объект, который может реагировать на стоячую волну. И надо понять как ей можно управлять при изменении, например угла падения. Реально можно вращать кристалл с зазором.

Для стоячей волны надо иметь на одно отражение больше. Стандартная стоячая волна использует ситуацию 0+1, то есть падающий пучок (0 отражений) и отраженный (1 отражение). В зазоре можно реализовать случаи 1+2, 2+3 и так далее. В чем тут может быть преимущество? Вот этот вопрос и следует изучить.

Первое преимущество может быть таким. В случае 0+1 стоячая волна образуется около поверхности кристалла. В случае 1+2 она образуется в чистом пространстве, далеко от поверхности. Нужно понять какие объекты можно изучать такой волной. Второе преимущество можно увидеть в том, что можно делать локальную стоячую волну в узком зазоре.

Как известно в трехкристальном интерферометре по Лауэ, пучки сначала расходятся, потом сходятся, образуя стоячую волну. Третий кристалл взаимодействует с этой волной. Вставляя клин в одно из плеч можно получить интерференционные полосы, связанные с тем, что узлы СВВ то находятся на атомах, то не находятся. В новой системе используется отражение по Брэггу, которое имеет определенные преимущества. Оно более сильное и у него другие свойства.

Также относительно просто сделать длину плеч большой, чтобы можно было вставить объект, но надо понять каковы требования к ориентации кристаллической решетки во втором блоке относительно первого. Как известно, интерферометр на базе стоячей волны позволяет использовать метод фазового контраста для некристаллических объектов. И такой интерферометр может иметь преимущества.

5. АСИММЕТРИЧНАЯ ДИФРАКЦИЯ В ГЕОМЕТРИИ БРЭГГА.

5.1. Щель и кристаллы

Асимметричная дифракция имеет особенность, которая состоит в том, что меняется шаг расчетной сетки. При показе результата необходимо изменять параметры на оси аргумента. Соответственно все последующие объекты нужно вычислять на новой сетке, либо интерполировать ВФ на старую сетку. Программа интерполяцию не проводит, то есть результаты оказываются на новой сетке. Так они и показываются и это правильно.

Кроме того, меняется параметр эффективной толщины кристалла $t_0 = t/\gamma_0$, $\gamma_0 = \cos(a_0)$, так как меняется угол a_0 между направлением пучка, падающего на кристалл, и внутренней нормалью к поверхности кристалла. Этот угол удобно выразить как $a_0 = \pi/2 - \theta_B + \psi$, при этом симметричный случай соответствует значению $\psi = 0$. Угол ψ изменяется в интервале от $\theta_B - \pi$ до θ_B . На левой границе пучок идет вдоль поверхности назад (в сторону отрицательных значений координаты x), а на правой границе он идет вдоль поверхности вперед.

Дифракция по Брэггу для указанного диапазона угла ψ реализуется не при всех значениях θ_B . Для вычисления угла a_0 можно использовать указанную выше формулу после того, как сначала вычислить угол ψ по формуле

$$\operatorname{tg}(\psi) = \operatorname{tg}(\theta_B)(1 - b)/(1 + b). \quad (5.1)$$

Из этой формулы следует, что отрицательные значения ψ соответствуют $b > 1$. Сам угол a_0 может находиться в диапазоне от $-\pi/2$ до $\pi/2$. В данном документе параметр b в программе я обозначаю как b в формулах.

При малом значении θ_B возможности асимметричной дифракции ограничены по углу вращения кристалла. Максимальное значение ψ равно θ_B . При этом $a_0 = \pi/2$ и $b = 0$.

Минимальное значение при условии, что угол $a_1 = \pi/2 - \theta_B - \psi$ между направлением отраженного пучка и внешней нормалью к поверхности меньше $\pi/2$, равно $\psi = -\theta_B$. При этом значении $b = \infty$.

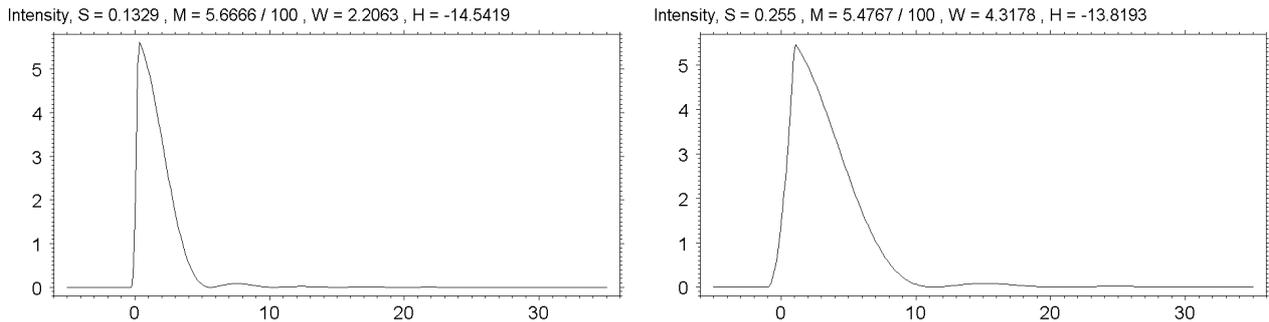


Рис. 5.1. Профиль интенсивности пучка при асимметричной дифракции ($bf = 2$ слева и $1/2$ справа)

С точки зрения изменения размера пучка важно только значение b и можно получить весь диапазон при любом значении угла Брэгга. То есть можно смело задавать любое значение b , а угол ψ затем определить по указанной выше формуле (5.1). Рассмотрим снова простейший пример, обсуждавшийся в разделе 4.1, где ширина щели равна 1 мкм, и просто поменяем значение параметра bf , а также сдвинем центр щели в точку 0.

На рисунке 5.1 показаны результаты расчета для двух случаев асимметрии. При $bf = 2$ пучок на выходе сжимается по сравнению с симметричным случаем, а при $bf = 1/2$ он, наоборот расширяется. Легко также заметить, что при уменьшении bf в 4 раза ширина пучка увеличивается в 2 раза, то есть она пропорциональна $b^{-1/2}$. Что касается формы пучка и максимума отражения, то они меняются слабо.

Максимум зависит от ширины щели и кривая показана после умножения на 100. Это видно в тексте над графиками (параметр M). Там же указана полуширина максимума (параметр W). Реальное значение максимума 0.05, как это видно на рис. 4.1, где такое умножение не проводилось. Интересно теперь посмотреть, что происходит при увеличении размеров щели. Входные данные для такого расчета показаны далее в (5.1).

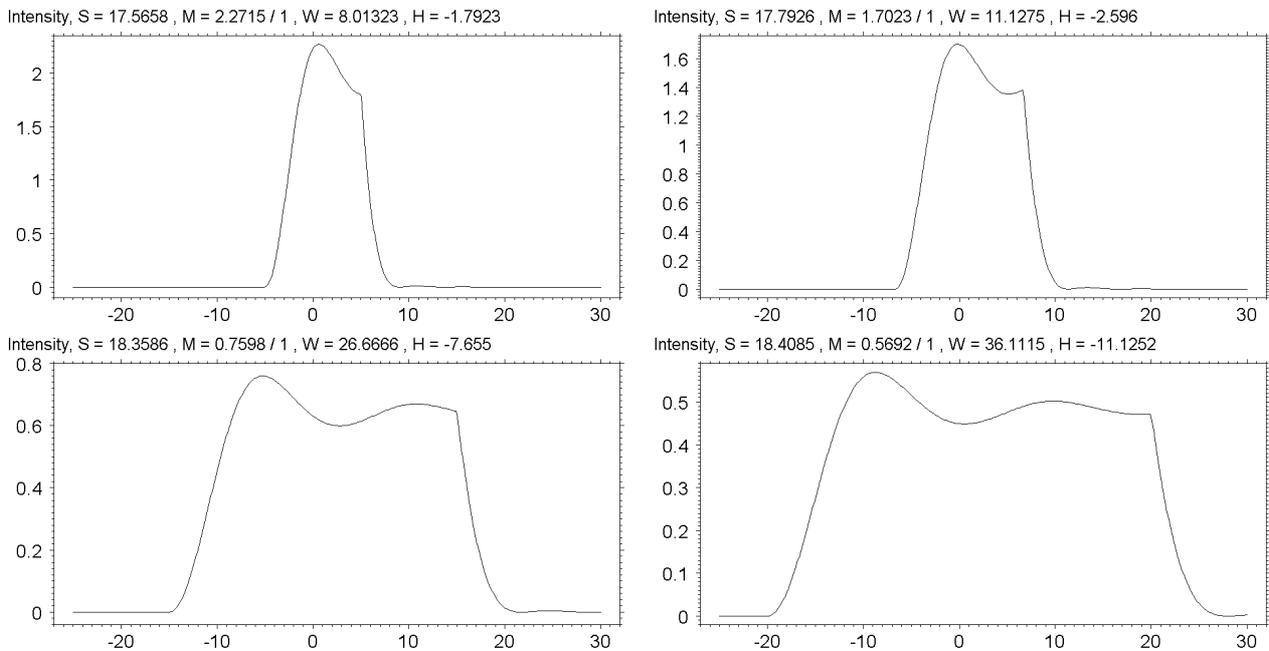


Рис. 5.2. Профиль интенсивности пучка при асимметричной дифракции ($bf = 2, 3/2, 2/3$ и $1/2$)

Результаты расчета показаны на рис. 5.2. Как видно из входных данных, ширина щели равна 20 мкм и ее центр находится в начале координат. Рассмотрены 4 случая асимметрии при значениях параметра $b = 2, 3/2, 2/3, 1/2$. Теперь картина зависимости от параметра

асимметрии совсем другая. Пучок не просто увеличивает ширину при уменьшении параметра b , но также меняется и его структура.

```
0 1 : nr=1; d=0.01; n=16*1024; m=1; E=12.3984; x0=0; z0=5000; dr=0; x1=-25; x2=30; nx=384; kw=0; ki=1; kp=1; dz=0; nz=1;
      no=2; np=2; ! 4 21 1 1 5 1 | np=3; ! 2 23 5 2 | np=4; ! 2 23 5 3 | np=5; ! 2 23 5 4 |
1 1 : Nr=1; mc=1; sb=0; na=1; xp=0; ss=20; ra=0; z=0; |
5 1 : Nr=1; mc=1; na=1; po=1; z=0; z1=0; z2=0; bf=2; qb=0; |
5 2 : Nr=1; mc=1; na=1; po=1; z=0; z1=0; z2=0; bf=3/2; qb=0; |
5 3 : Nr=1; mc=1; na=1; po=1; z=0; z1=0; z2=0; bf=2/3; qb=0; |
5 4 : Nr=1; mc=1; na=1; po=1; z=0; z1=0; z2=0; bf=1/2; qb=0; |
99 1 : # ne=0; tb=15.09; q0=0; t0=1e9; h0=3.969e-3; h1=-0.24147; h2=3.846e-3; #d 10 r(4) tb bf q0 t0 h0 h1 h2 h1 h2 0 ! (5.1)
```

При $b = 2$ максимум равен 2.3, пучок узкий и видно только первый максимум. При $b = 3/2$ максимум равен 1.7, пучок немного шире и уже видно первый минимум. При $b = 2/3$ максимум равен 0.76, пучок еще шире и видно второй максимум. При $b = 1/2$ максимум равен 0.57, пучок еще шире и видно второй минимум. Получается так, что асимметрия при уменьшении параметра b как бы расширяет пределы интеграла пропорционально $1/b$, а пропагатор расширяется как $b^{-1/2}$, и в результате пропагатор на ширине щели показывает больше осцилляций.

Можно также без труда просчитать двойное отражение от двух кристаллов с обратной асимметрией при нулевом расстоянии между ними. На рисунке 5.3 показаны результаты такого расчета для значений ширины щели 1 мкм и 20 мкм. Для узкой щели с шириной 1 мкм отраженный пучок намного шире, сильно сдвинут из начала координат и относительно слабый по интенсивности, хотя второе отражение уменьшает его не так сильно, как первое.

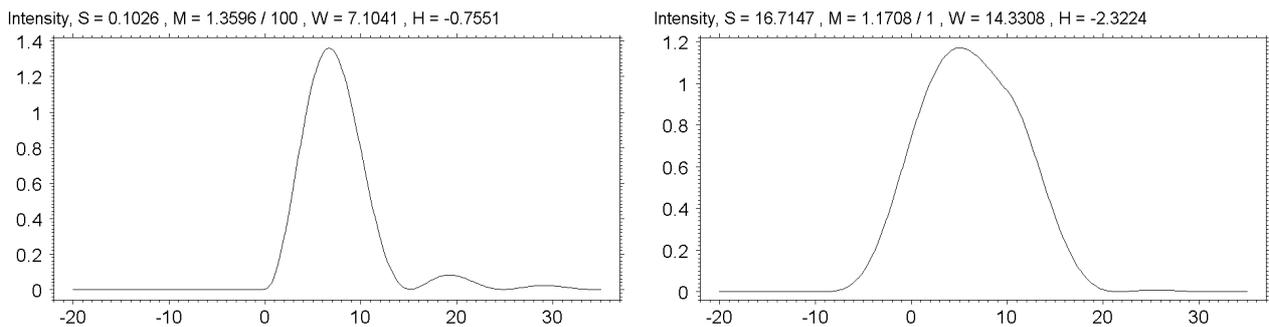


Рис. 5.3. Профиль интенсивности пучка при двойном отражении ($bf = 2$ и $1/2$)

Для широкой щели с шириной 20 мкм, пучок тоже сдвинут из начала координат, его полуширина 14 мкм соизмерима с начальной шириной, максимум тоже на уровне 1. Но форма совсем не прямоугольная. Во всех расчетах ставились нулевые расстояния. Делать кристалл последним в расчете, как выясняется, не обязательно. Просто при описании всех объектов разумно указывать их параметры в мкм, а шаг сетки при асимметричной дифракции меняется автоматически, и можно продолжать расчет на другой сетке.

Чтобы понять полученный результат нужно вспомнить как именно проводится расчет, а также сравнить с аналитическим решением, полученным в [5]. Это решение для плоской волны, проходящей через щель, удобно записать в виде

$$E_h(x) = ib^{1/2} \frac{B}{2} \int_0^x dx' G(x-x'), \quad G(x) = [J_0(Bx) + J_2(Bx)] \exp(iAx), \quad (5.2)$$

где

$$A = \frac{\gamma_0}{2 \sin(2\theta_B)} \left[(K \chi_{or} + i\mu) \left(1 + \frac{1}{b} \right) - K\alpha \right], \quad B = \frac{K \chi_h \gamma_0}{\sin(2\theta_B) b^{1/2}}. \quad (5.3)$$

Формула написана для ВФ на поверхности кристалла при очень большом размере щели и для начала координат на левом краю щели. Она показывает как изменяется ВФ при движении в области внутри щели.

Очевидно, что максимальный вклад в интеграл дают точки вблизи точки наблюдения $x' = x$ и по мере уменьшения x' вклад в интеграл уменьшается, пока совсем не прекратится,

так как модуль функции $G(x)$ уменьшается до нуля с ростом аргумента. То есть при достаточно больших значениях x интеграл превращается в константу. Об этом написано в статье [5].

Также очевидно, что при малых значениях x интеграл пропорционален Cx (а интенсивность пропорциональна C^2x^2), где коэффициент C не зависит от b явно, но зависит от параметра γ_0 , который слегка меняется при изменении b . Это наблюдается на рис. 5.1 для узкой щели. Максимум пропорционален ширине щели и слабо зависит от b .

При увеличении x интеграл сначала растет, так как функция $G(x)$ (реальная часть) положительна и достигает максимума, когда она становится равной нулю. Затем интеграл уменьшается, так как функция $G(x)$ становится отрицательной и слабо осциллирует из-за осцилляций этой функции. Осцилляции постепенно затухают.

В программе ширина щели задается в направлении, перпендикулярном направлению падающего пучка. При проектировании на поверхность кристалла ее надо разделить на γ_0 . При этом размер щели на поверхности увеличивается. При проектировании ее на отраженный пучок ее надо умножить на $\gamma_1 = \cos(\alpha_1)$. В результате размер щели в направлении, перпендикулярном отраженному пучку, получается после умножения исходного размера щели на коэффициент $1/b$.

Это хорошо демонстрирует рис. 5.2. С другой стороны, при изменении параметра асимметрии размер щели на поверхности получается после деления на γ_0 , а аргумент подинтегральной функции умножается на $\gamma_0 b^{-1/2}$. Расчет был выполнен при фиксированном размере щели для разных значений b . При этом максимальное значение аргумента пропорционально $b^{-1/2}$. То есть это значение на 4-м графике должно быть в 2 раза больше, чем на первом. Как раз это и демонстрирует результат расчета.

В формуле (5.3) параметр α зависит как от углового сдвига кристалла, так и от изменения энергии фотонов. Детали расчета для многослойного кристалла описаны в документе, где обсуждаются методы расчета (расчетные формулы) для всех объектов. Важно, что при этом положение кристалла, которому соответствует нулевой угловой сдвиг выбрано таким, что компенсируется член, пропорциональный χ_{0r} , а этот член зависит от асимметрии.

Впрочем, это просто надо помнить, а реально каждый вариант асимметрии – это отдельная задача и выставлять угловое положение кристалла можно по разному. Просто угол, при котором указанный член компенсируется, оказывается оптимальным.

Двойное отражение с точки зрения геометрической оптики не должно никак изменять падающий пучок. Действительно, его направление не меняется. Но кристалл все же не зеркало и форма пучка заметно искажается. Более того, происходит сдвиг пучка. Но сдвиг пучка снова не так важен, так как еще больший сдвиг происходит в базовой траектории, если есть расстояние между кристаллами.

Интересная задача – асимметричное отражение с расширением пучка после объекта, который дает фазовый контраст в ближнем поле. В том числе это могут быть поры в кристалле SiC. Можно проверить насколько возможно увеличение и какое изображение получается.

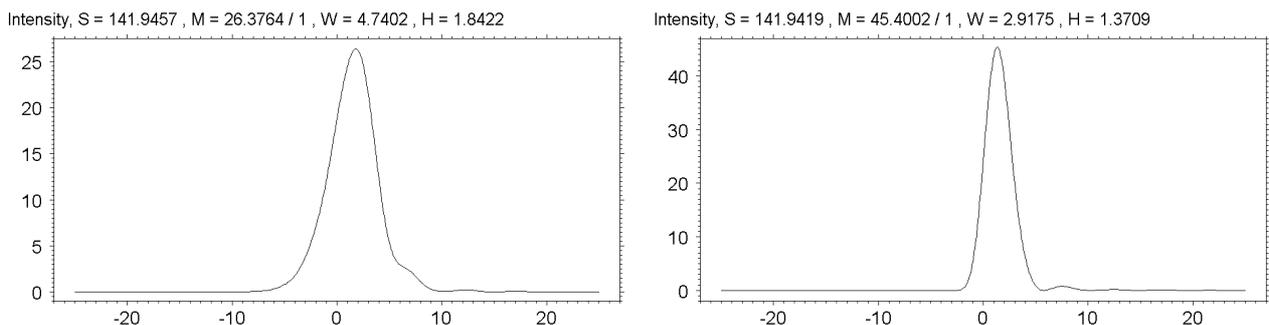


Рис. 5.4. Профиль интенсивности пучка при двойном отражении ($bf = 2$ и $1/2$) через линзу на расстояниях 8 м (слева) и 8.3 м (справа)

5.2. Щель, и линза между двумя кристаллами.

Более сложная задача – расчет двойного отражения в случае, когда между кристаллами находится линза. В качестве примера рассмотрим следующие входные данные

$$\begin{aligned}
 0\ 1 : & nr=1; d=0.03; n=64*1024; m=1; E=12.3984; x0=0; z0=5000; dr=0; x1=-25; x2=-x1; nx=500; kw=0; ki=1; kp=1; dz=0; nz=1; \\
 & no=4; np=1; !\ 8\ 21\ 5\ 1\ 1\ 2\ 2\ 1\ 5\ 2\ | \\
 5\ 1 : & Nr=1; mc=1; na=1; po=1; z=0; z1=0; z2=0; bf=1/2; qb=0; | \\
 1\ 2 : & Nr=1; mc=1; sb=0; na=1; xp=0; ss=885; ra=0; z=0; | \\
 2\ 1 : & Nr=1; mc=1; na=1; po=2; mC=4; z=0; z1=0; n1=1; xp=0; xb=-9999; xe=9999; | \\
 5\ 2 : & Nr=1; mc=1; na=1; po=1; z=830; z1=0; z2=0; bf=2; qb=0; | \\
 99\ 1 : & \# ne=0; tb=15.09; q0=0; t0=1e9; h0=3.969e-3; h1=-0.24147; h2=3.846e-3; \#d\ 10\ r(4)\ tb\ bf\ q0\ t0\ h0\ h1\ h2\ h1\ h2\ 0\ ! \\
 99\ 2 : & \# ne=1; Z1=13; n1=1; de=2.694; R=200; pl=1000; dl=20; !
 \end{aligned} \tag{5.2}$$

Здесь сразу рассмотрено 4 объекта. Первый – это кристалл с асимметрией $bf = 1/2$, затем щель с размером 885 мкм, размер которой точно равен апертуре линзы. Фактически, это необходимо для чистоты использования метода расчета линзы. Так требует 4-й метод расчета линзы. Затем сама линза, которая вычисляется наиболее прогрессивным 4-м методом, но в данном случае он совсем не нужен. Можно было считать методом фазового контраста. А точнее все методы дают одинаковый ответ.

После линзы снова идет кристалл с обратной асимметрией, и для него задается пропагирование по воздуху нормальным способом на расстояние 8.3 м. Дело в том, что после второго кристалла расчетная сетка вернулась в исходное состояние и это можно делать без проблем. Что касается линзы, то она вычисляется на искаженной сетке, но ей как бы все равно. Ее параметры определяются в микронах и работают на любой сетке.

Результат расчета показан на рис. 5.4, причем слева расстояние равно 8 м, а справа 8.3 м. При этом правый пучок показывает фокусировку, а левый – состояние пучка на расстоянии, чуть меньше фокусного расстояния. Размер пучка в фокусе 3 мкм, увеличение в 45 раз. Интересно, что СПЛ стояла строго по центру, но сфокусированный пучок слегка сдвинул вправо.

Чтобы понять – правильно ли получен результат расчета, необходимо привлечь аналитические оценки. Итак рассматривается двойко-вогнутая линза из алюминия с радиусом кривизны $R = 200$ мкм. Задавая нужные параметры в специальный модуль программы легко получить, что при энергии $E = 12.3984$ кэВ и расстоянии $z_0 = 50$ м фокусное расстояние равно 66.12 м. А полуширина пучка в фокусе равна 7.3 мкм.

Но у нас перед СПЛ стоит первый кристалл с асимметрией $b = 1/2$. Он увеличивает ширину пучка в 2 раза. Такой же результат можно было бы получить увеличивая расстояние z_0 в 4 раза. То есть для СПЛ эффективно $z_0 = 200$ м. Надо пересчитать параметры пучка для такого расстояния. Получаем фокусное расстояние 33.2 м, а полуширину пучка в фокусе 3.7 мкм. Но после СПЛ у нас стоит кристалл с асимметрией $b = 2$. Он сжимает пучок в 2 раза, что эквивалентно уменьшению фокусного расстояния в 4 раза. После деления получаем 8.3 м. Размер пучка стал еще чуть меньше, но не сильно.

Итак, с помощью двух кристаллов с относительно слабой асимметрией удалось уменьшить фокусное расстояние в 8 раз. Сфокусированный пучок оказался смещенным и асимметричным. То есть влияние кристаллов не ограничивается только уменьшением фокусного расстояния.

Важно также понимать, что угловая область отражения кристаллами ограничена и они эффективно работают только с длиннофокусными СПЛ. Для рассмотренной СПЛ угловой интеграл определяется отношением апертуры к фокусному расстоянию. То есть 0.885 мм надо разделить на 66.1 м. Получаем 1.34×10^{-5} рад. То есть у такой СПЛ приемный угловой интервал (ПУИ) очень маленький. А при учете поглощения он еще меньше.

В этом случае кристаллы вполне справляются с задачей. Короткофокусные СПЛ имеют намного более широкий ПУИ и для них кристаллы можно использовать как раз для

измерения ПУИ. Рассмотренный здесь эффект впервые обсуждался в [7], а измерение ПУИ с помощью кристаллов сделано недавно в [8].

6. СИММЕТРИЧНАЯ ДИФРАКЦИЯ В ГЕОМЕТРИИ ЛАУЭ

Теория дифракции в геометрии Лауэ развивалась в серии статей в 2020 году, а затем еще раз в статье [9], где исследовалась интерферометрия от двух источников при такой дифракции в кристалле. В этих расчетах кристалл учитывается сразу вместе с расстоянием до и после него. И весьма полезно иметь результат в цикле не только по расстоянию, но и по толщине кристалла. В указанных работах расчеты проводились с помощью других, более специальных программ.

Расчетные блоки, написанные в то время, используются в данной ACL программе. В геометрии Лауэ существенно, что на кристалл могут падать 2 пучка и сам он генерирует 2 пучка. То есть фактически нужно вычислять сразу матрицу размером 2×2 . Так основная расчетная процедура и делает.

Но в данной программе рассматривается прохождение только одного пучка по одной траектории. В результате пришлось сделать так, что матрица в расчетной процедуре считается вся, но из нее за один вариант можно взять только один элемент. Кроме того, в расчете использовалась специальная нормировка, которая не позволяет делать цикл по расстоянию после кристалла.

В результате был введен новый вариант цикла с повторением расчета с самого начала, при котором можно менять любой параметр. Но пока реализовано только изменение расстояния и толщины кристалла в частном случае как раз дифракции в геометрии Лауэ. Для каждого из этих двух параметров надо указывать шаг изменения, но пользователь должен следить, чтобы от нуля отличался только один из них. При нулевом шаге параметр не меняется.

6.1. Зависимость от расстояния

Пример такого цикла показан ниже.

```
0 1 : nr=1191; d=0.1; n=32*1024; m=1; E=8; x0=0; z0=10000; dr=0; x1=-100; x2=100; nx=384; kw=0; ki=1; kp=0;
      dz=10; nz=1; no=2; np=1; ! 4 21 1 1 6 1 |
1 1 : Nr=1; mc=1; sb=0; na=1; xp=0; ss=1; ra=0; z=0; |
6 1 : Nr=1; z=0; mc=1; na=1; z1=100; nt=1; qb=0; po=1; |
99 1 : # ne=0; tb=23.8; t=500; dt=0; h1=-0.38115; h2=0.013916; #d 9 r(4) tb 0 t -0.62379 0.01436 h1 h2 h1 h2 ! (6.1)
```

Здесь существенно используется параметр nr. Три его младших разряда показывают сколько раз надо повторить расчет, а старший, 4-й разряд, показывает, что надо собирать матрицу чисел. То есть результаты каждого расчета записывать в новую строку массива результатов, который потом копируется в файл. Сейчас в программе используются шаг dt для параметра t в строке (99 1) и шаг dz в строке (0 1) для параметра z1 в строке (6 1). То есть цикл по расстоянию после всех объектов не используется (nz=1), но параметр dz все же используется.

В указанном варианте dt=0, а dz=10. Значит вычисляется зависимость от расстояния. Результат (матрица) записывается в файл и не показывается. Ее можно посмотреть разными способами. Один из них – цветная карта, которая делается по кнопке 8. Ниже на рис. 6.1 показана эта карта. Распределение интенсивности ясно показывает дифракционную фокусировку при расстоянии около 14 метров. Важно понимать как определяется нормировка.

Обычно нормировка соответствует единичной интенсивности перед первым объектом. В этом расчете первым объектом является щель с шириной 1 мкм. На расстоянии 14 метров от щели интенсивность уже существенно падает. Кроме того, сам кристалл берет только часть угловой расходимости пучка. Так что даже в максимуме остается 0.15%.

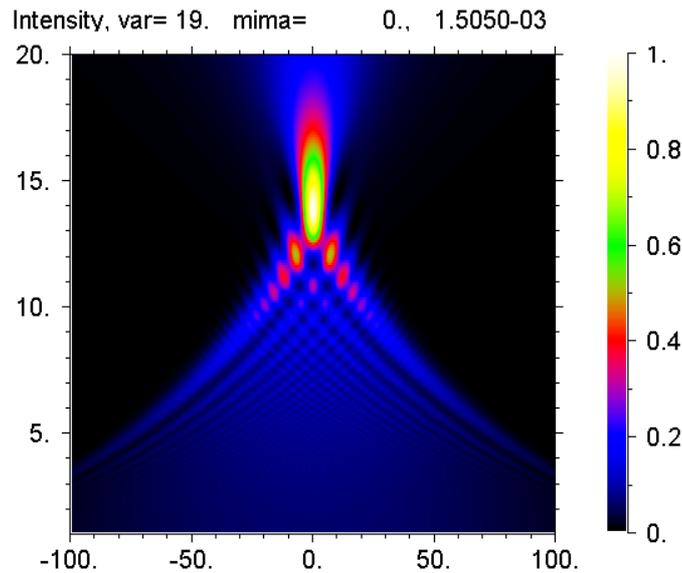


Рис. 6.1. Зависимость от расстояния дифракции по Лауэ.

Входные данные для этого рисунка показаны ниже

$ir=0$; $np=1$; $nx=384$; $nz=191$; $x1=-100$; $x2=-x1$; $z1=1$; $z2=20$; $nn=12$; $M=0$;

6.2. Дифракция после интерферометра на длинных СПЛ

Длинную СПЛ данная программа вычисляет только для случая, когда она находится на оптической оси. Но падающая на нее волна может быть произвольной. Например, точечный источник можно сместить на любое расстояние в поперечном направлении от оптической оси. Пусть половина апертуры СПЛ равна x_a .

Можно сделать расчет при сдвиге источника на $x_0 < -x_a$, записать ВФ, и потом сдвинуть ее на $-x_0$. Сдвиг вправо означает удаление числа точек в интервале x_0 справа и добавление нулей слева. Если не менять пределы РО, то это будет эквивалентно сдвигу СПЛ, в то время как источник остается на оптической оси.

Затем можно сделать такую же процедуру с противоположным знаком сдвига. Наконец, на третьем этапе нужно взять правую половину РО от первой функции после сдвига и левую половину – от второй. Эта процедура будет законной, если апертура линзы ограничена щелью, и за пределами апертуры все равно ВФ равны нулю.

В результате мы получим на выходе такой процедуры ВФ как бы после интерферометра из двух СПЛ с некоторым расстоянием между их апертурами. Сдвиги полных ВФ можно и не делать, а просто сразу выбрать правильные куски из двух массивов и сформировать третий массив. Если расстояние до источника очень большое, то можно даже не делать два расчета, а использовать один расчет.

Такой расчет будет правильным на всех расстояниях после СПЛ от нуля и до такого, при котором пучки начинают пересекаться после фокусировки. Наиболее точно это делать на фокусном расстоянии. Но тогда необходим очень мелкий шаг РО. Оптимальным возможно является половина расстояния до фокусировки.

В новой версии программы сборку полной ВФ из двух массивов делает операция 5 по кнопке (А). Описанный выше расчет был выполнен для следующих входных данных

```
0 1 : nr=1; d=0.01; n=32*1024; m=1; E=10; x0=-15; z0=5000; dr=0; x2=160; x1=-x2; nx=640; kw=1; ki=1; kp=1;
      dz=0; nz=1; no=2; np=1; ! 4 21 1 1 2 1 | np=2; x0=15; |
1 1 : Nr=1; z=0; mc=1; sb=1; na=1; xp=0; ss=30; ra=0; |
2 1 : Nr=1; z=2; mC=4; z1=0; mc=1; na=1; po=1; nl=10;|
99 1 : # ne=1; Z1=14; n1=1; de=2.33; pl=62; R=3.75; dl=2; !
```

(6.2)

СПЛ вычислялась по 4-му методу на расстоянии 2 см, в то время как расстояние фокусировки равно 3.795 см. Апертура линзы равна 30 мкм и сдвиги делались на половину апертуры.

Затем из двух файлов (wf001.dat) и (wf002.dat) в папке (data) был получен файл (wfa.dat) по 5-й операции кнопки (A). Входные данные этой операции такие

```
# n=32*1024; np=1; ns=1500;
```

После этого сделан расчет Лауэ дифракции на расстоянии 1.795 см и для разной толщины кристалла. На рис. 6.2 показаны результаты для толщин 1 мкм (слева) и 10 мкм (справа). На рис. 6.3 толщину 50 мкм (слева) и 100 мкм (справа). На рис. 6.4 толщину 200 мкм (слева) и 400 мкм (справа).

Входные данные для расчета последнего варианта были такие

```
0 1 : nr=1; d=0.01; n=32*1024; m=1; E=10; x0=0; z0=0; dr=0; x2=160; x1=-x2; nx=640; kw=0; ki=1; kp=1; dz=0;
      nz=1; no=1; np=1; ! 2 21 6 1 |
```

```
6 1 : Nr=1; z=0; mc=1; na=1; z1=1.795; nt=1; qb=0; po=1; |
```

```
99 1 : # ne=0; tb=18.84; t=400; dt=0; h1=-0.3042; h2=0.007244; #d 9 r(4) tb 0 t -0.4983 0.007476 h1 h2 h1 h2 ! (6.3)
```

Из рисунков видно, что интерференция есть, но расстояние между пиками слишком маленькое, по этой причине период осцилляций большой и в область перекрытия попадает мало периодов. А выходить на более толстые кристаллы не позволяет размер РО. То есть все надо пересчитать для большего размера РО, то есть увеличить шаг сетки и одновременно увеличить сдвиги источника, что приводит в увеличению расстояния между СПЛ.

Главная цель данного расчета состояла в том, чтобы протестировать новый вариант расчета интерферометра на длинных СПЛ, приготовленный специально для этой цели. Видно, что все работает. Осталось оптимизировать параметры. И еще возможно вставить сдвиг фазы в одном из пучков.

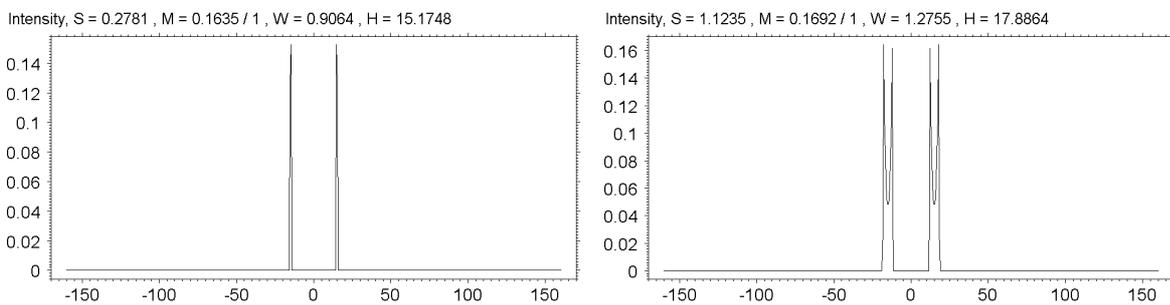


Рис.6.2

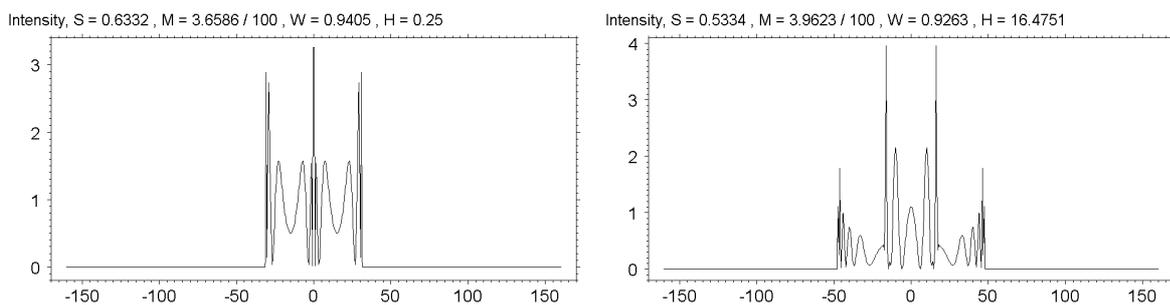


Рис.6.3

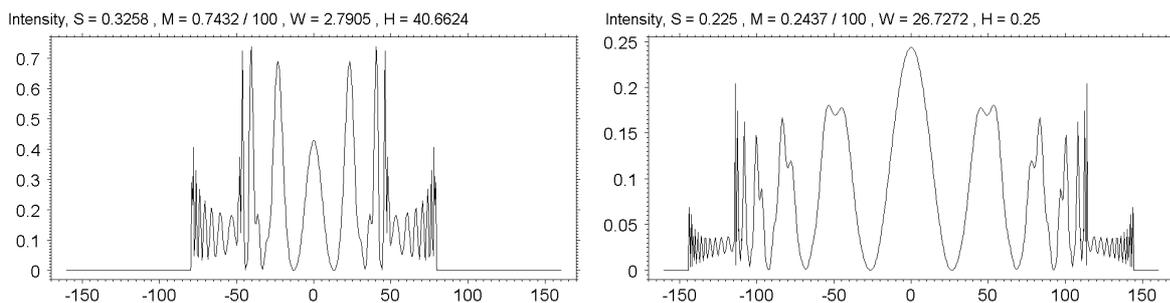


Рис.6.4

6.3. Дифракция после интерферометра на коротких СПЛ

Для интерферометрии вполне годятся короткие СПЛ, так как супер узкий пучок не требуется. Это относится и к интерферометрии в кристалле. Для этой цели расчет сфокусированного пучка вполне можно выполнить и по второму методу. Ниже показаны входные данные, которые использовались в расчете

```
0 1 : nr=1; d=0.01; n=32*1024; m=1; E=10; x0=0; z0=5000; dr=0; x2=160; x1=-x2; nx=640; kw=0; ki=1; kp=1; dz=0;
      nz=1; no=3; np=1; ! 8 21 1 1 2 1 2 2 6 1 |
1 1 : Nr=1; z=0; mc=1; sb=1; na=1; xp=0; ss=180; ra=0; |
2 1 : Nr=9; z=1.02e-2; mC=2; mc=1; na=2; po=2; nl=1; xp=-30; xb=-999; xc=0; xp=30; xb=0; xc=999;|
2 2 : Nr=1; z=0.51e-2; mC=2; mc=1; na=2; po=2; nl=1; xp=-30; xb=-999; xc=0; xp=30; xb=0; xc=999;|
6 1 : Nr=1; z=0; mc=1; na=1; z1=6.3297; nt=1; qb=0; po=1; |
99 1 : # ne=0; tb=18.84; t=400; dt=0; h1=-0.3042; h2=0.007244; #d 9 r(4) tb 0 t -0.4983 0.007476 h1 h2 h1 h2 !
99 2 : # ne=1; Z1=14; n1=1; de=2.33; pl=102; R=6.25; dl=2; !
```

(6.4)

Были рассмотрены те же толщины кристалла, что и выше, только интерферометр имел линзы с апертурой 50 мкм и перемычкой 10 мкм. Как раз такие СПЛ были выполнены самые первые. Расстояние между пиками фокусировки равно при этом 60 мкм, в то время как в предыдущем разделе было 30 мкм. Результаты показаны на рис. 6.5–6.7.

Специфика интерференции в кристалле в том, что область перекрытия пропорциональна толщине кристалла и период полос также пропорционален толщине кристалла. То есть с увеличением толщины кристалла число полос хоть и увеличивается, но это происходит за счет того, что при малой толщине период полос на краях области перекрытия может быть мал и они не разрешаются.

Формально число полос никак не меняется. Увеличить число полос можно только за счет увеличения расстояния между пиками фокусировки. Это легко увидеть сравнивая правые рис. 6.4 и 6.7. Как следует из входных данных интерферометр можно сформировать одной строкой и считать на нулевом расстоянии. Фокусное расстояние в этом случае равно 6.33 см, в то время как длина СПЛ равна 0.1 см. То есть приближение короткой линзы очень хорошо выполняется.

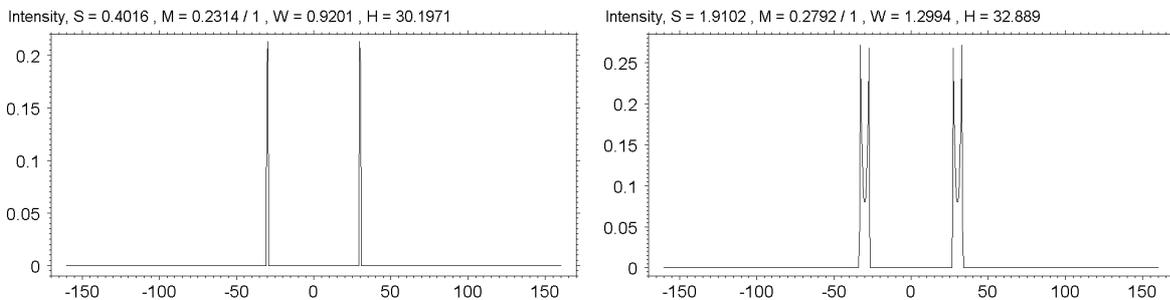


Рис.6.5

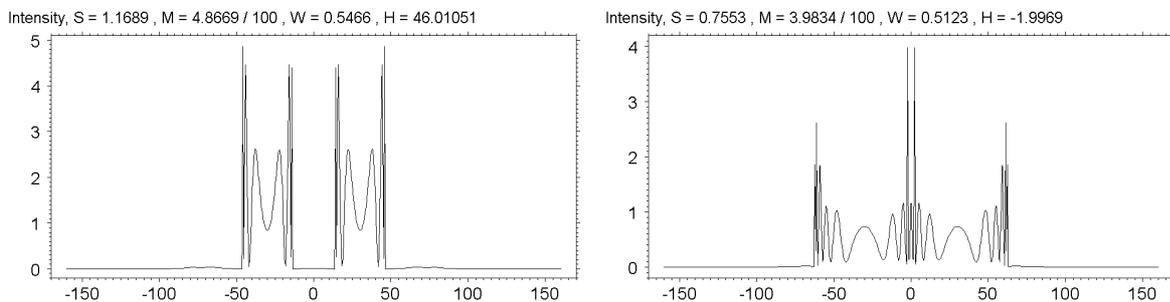
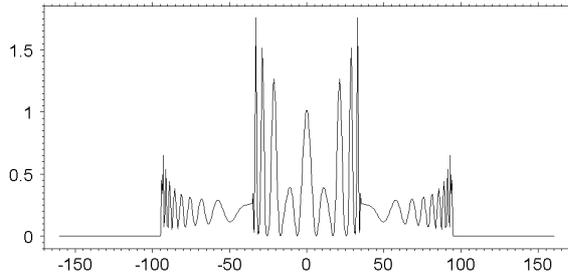


Рис.6.6

Intensity, S = 0.5604 , M = 1.7992 / 100 , W = 1.01641 , H = 33.1135



Intensity, S = 0.3624 , M = 0.3651 / 100 , W = 12.1691 , H = 26.5916

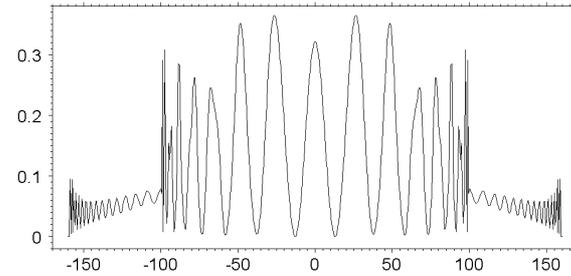
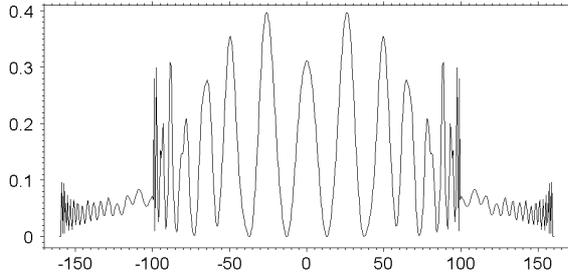


Рис.6.7

Intensity, S = 0.3688 , M = 0.3969 / 100 , W = 11.1815 , H = 26.1924



Intensity, S = 0.3814 , M = 0.4392 / 100 , W = 0.6367 , H = -98.5529

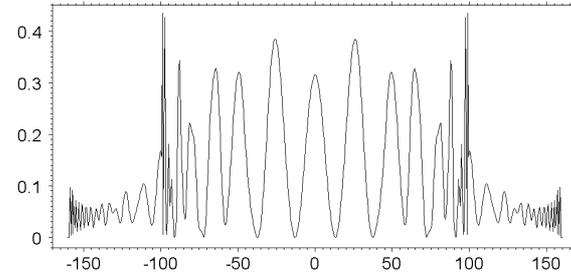
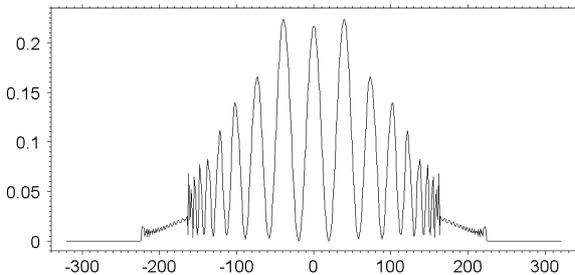


Рис.6.8

Для расчета более толстых кристаллов необходимо увеличить размер РО. Отметим, что интерферометрия в кристалле делает экспериментальную схему весьма компактной. Но для короткофокусных линз и без кристалла расстояния не очень большие. Интересный вопрос состоит в том как влияет размер щели на результат. На рисунке 6.8 показаны результаты расчетов для размера щели 180 мкм (слева) и большего размера РО (справа) для толщины кристалла 400 мкм.

Сравнивая графики между собой, а также с правым графиком рис. 6.7 можно заметить, что центральные полосы не зависят от размера щели но боковые части области перекрытия зависят. Так же, как и части за пределами этой области. Это несколько неожиданно, учитывая что эффективная апертура СПЛ и так меньше реальной апертуры. Но, видимо, какие то хвосты остаются и суммируются.

Intensity, S = 0.2796 , M = 0.2238 / 100 , W = 19.49 , H = -38.6595



Intensity, S = 0.2289 , M = 0.1604 / 100 , W = 25.831 , H = -51.5831

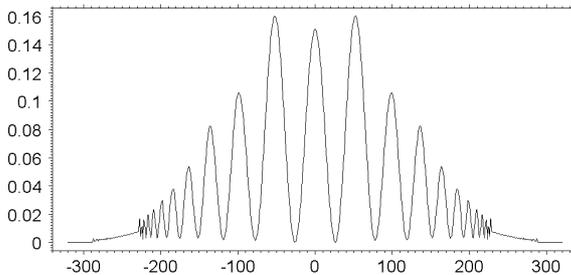


Рис.6.9

Для тех же входных данных, что и выше, но увеличивая шаг сетки в два раза, то есть $d = 0.02$, можно получить интерференционные полосы для толщин 600 мкм и 800 мкм. Результаты показаны на рис. 6.9 слева и справа соответственно. Здесь все осцилляции имеют правильную форму, а боковые осцилляции затухают, что однозначно свидетельствует о том, что интерферируют только поля с низким коэффициентом поглощения (В-поля). Именно такая интерференция имеет относительно простой вид.

При меньшей толщине кристалла поля с высоким коэффициентом поглощения (А-поля) могут интерферировать с собственными В-полями и без второго источника. Оба типа интерференции делают более сложной картину около краев области перекрытия пучков. Только в центре возникают интерференционные полосы правильного типа, которых с ростом толщины кристалла становится все больше. Еще больше увеличивать толщину уже не имеет смысла.

Данный интерферометр удобен тем, что легко вставить на пути одного из пучков небольшое количество вещества и измерить либо его размер при известном коэффициенте преломления, либо состав при известном размере. Как это выглядит показано на рис. 6.10, где в левый пучок перед кристаллом вставлено борное волокно диаметром 4 мкм (слева) и 8 мкм (справа). Это приводит к смещению позиции центрального пика влево на небольшую, но вполне измеримую величину, пропорциональную сдвигу фазы $\Delta_0 = -K\delta D$, где K – волновое число, δ – декремент преломления, D – диаметр волокна. В общем случае последний параметр характеризует толщину материала под пучком.

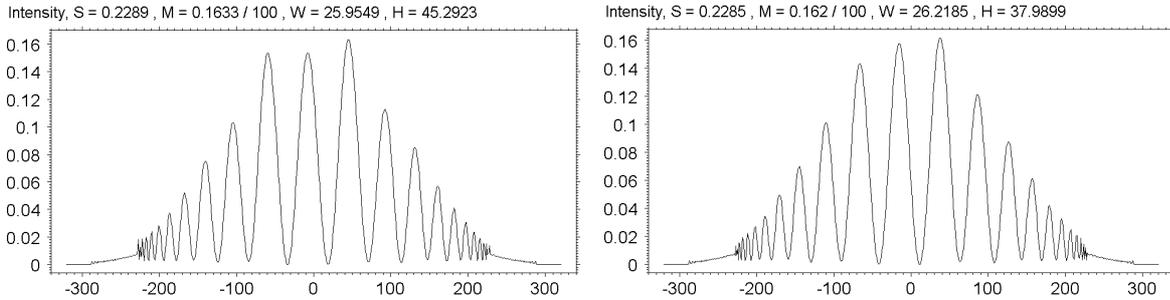


Рис.6.10

Интересно, что при сдвиге полос меняется также их амплитуда. Полный вариант входных данных для такого расчета показан ниже

```

0 1 : nr=1; d=0.02; n=32*1024; m=1; E=10; x0=0; z0=5000; dr=0; x2=320; x1=-x2; nx=640; kw=0; ki=1; kp=1; dz=0;
nz=1; no=5; np=1; ! 10 21 1 1 2 1 2 2 4 1 6 1 |
1 1 : Nr=1; z=0; mc=1; sb=1; na=1; xp=0; ss=110; ra=0; |
2 1 : Nr=9; z=104e-4; mC=2; mc=1; na=2; po=2; nl=1; xp=-30; xb=-999; xe=0; | xp=30; xb=0; xe=999;|
2 2 : Nr=1; z=6.33; mC=2; mc=1; na=2; po=2; nl=1; xp=-30; xb=-999; xe=0; | xp=30; xb=0; xe=999;|
4 1 : Nr=1; z=0; mc=1; na=1; po=1; xp=-30; po=3; |
6 1 : Nr=1; z=0; mc=1; na=1; z1=0; nt=1; qb=0; po=1; |
99 1 : # ne=0; tb=18.84; t=800; dt=0; h1=-0.3042; h2=0.007244; #d 9 r(4) tb 0 t -0.4983 0.007476 h1 h2 h1 h2 !
99 2 : # ne=1; Z1=14; n1=1; de=2.33; pl=102; R=6.25; dl=2; !
99 3 : # ne=1; Z1=5; n1=1; de=2.34; R=4; !

```

(6.5)

Наличие интерференционных полос с разным периодом удобно для измерения когерентных свойств экспериментальной схемы. Есть в общем случае три источника, приводящие к усреднению и смазыванию периодических изменений интенсивности. Первый – это поперечный размер источника. Второй – наличие возможных вибраций пучка или образца. Третий – разрешение позиционного детектора. Все три фактора, как правило приводят к необходимости вычислять свертку точного результата с функцией Гаусса, которая имеет определенную полуширину. Такой параметр можно назвать полушириной функции Гаусса или сокращенно ПФГ.

ПФГ можно определить для конкретной установки из сравнения результатов расчета с экспериментом и потом постоянно использовать при моделировании других экспериментов. Программа делает такой расчет автоматически. Заметим, что в данном случае период полос настолько большой, что крайние полосы исчезают только при очень большом значении ПФГ. На рис. 6.11 показаны два расчета для параметров правого графика рис. 6.10, но с ПФГ 5 мкм и 10 мкм слева и справа соответственно.

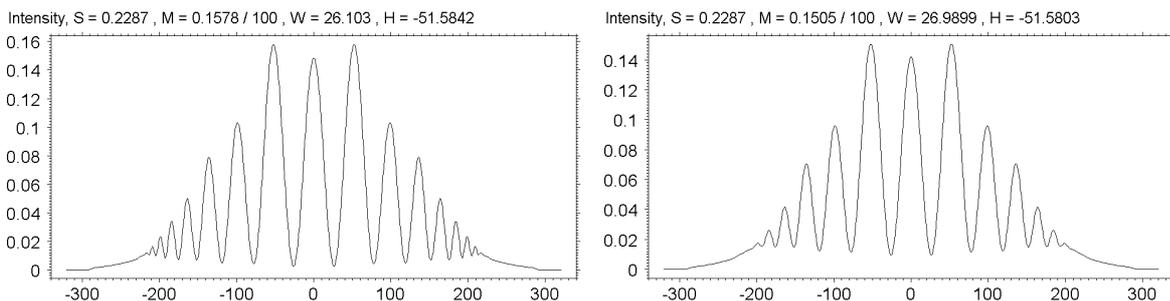


Рис.6.11

Использование кристалла для создания интерференции удобно в том плане, что варьируя параметры дифракции в кристалле можно получать интерференцию с разным периодом. Также можно проверять качество кристаллической решетки.

6.4. Анализ полученных результатов и кое-какие выводы

В работе [9] в самом начале указана формула для периода интерференционных полос в направлении, параллельном поверхности кристалла, а именно

$$p_s = 2\lambda t C_B T_B^2 (|\chi_h| x_{0s})^{-1}, \quad C_B = \cos(\theta_B), \quad T_B = \operatorname{tg}(\theta_B). \quad (6.6)$$

Здесь t – толщина кристалла, x_{0s} – расстояние между пиками в том же направлении, что и период. С другой стороны, в конце статьи получена формула для периода в другом случае, когда есть два одинаковых блока кристалла и зазор между ними с толщиной t_g .

В этом случае была получена следующая формула в направлении, перпендикулярном направлению отраженного пучка,

$$p = 2\lambda t_b C_B S_B (|\chi_h| t_g)^{-1}, \quad t_g = x_{0s} (2T_B)^{-1}. \quad (6.7)$$

Если подставить t_g и учесть, что толщина одного блока $t_b = t/2$, а также, что $p = p_s C_B$, то формула (6.7) вполне соответствует формуле (6.6).

Нас интересует формула (7.1), но с заменой p_s на p и x_{0s} на $x_0 = x_{0s} C_B$. В результате получаем следующую формулу

$$p = 2\lambda t C_B S_B^2 (|\chi_h| x_0)^{-1}. \quad (6.8)$$

Параметры для рис. 6.10 имеют следующие значения $t = 800$ мкм, $\lambda = 0.124$ нм, $C_B S_B^2 = 0.0987$, $|\chi_h| = 6 \times 10^{-6}$, $x_0 = 60$ мкм. Подставляя все числа получаем для периода значение 54.4 мкм. Это полностью соответствует рисунку 15. То есть формула правильная и расчет правильный. Всегда полезно проверять работу на совпадения.

Не менее интересны другие особенности аналитической формулы (6.8). Например, видно, что период полос пропорционален толщине кристалла, а также длине волны излучения. И обратно пропорционален расстоянию между пиками фокусировки. На рис. 6.4 толщина кристалла равна 400 мкм, а расстояние между пиками 30 мкм, то есть отношение такое же, как и на рис. 6.9. И период тоже равен величине, равной на глаз 54 мкм. Так как линейная зависимость от толщины проверяется независимо, можно делать вывод, что обе зависимости правильные.

Из формулы (6.8) следует, что период полос уменьшается при уменьшении длины волны излучения. Но при этом уменьшается и угол Брэгга, а значит и ширина области перекрытия. Пока не видно каким образом можно было бы увеличить число полос. Только возможно переход к более плотному кристаллу типа Ge. В статье [9] на рис. 3 период полос равен примерно 12.5 мкм при $t = 1150$ мкм, $\lambda = 0.0496$ нм, $C_B S_B^2 = 0.0152$, $|\chi_h| = 2.27 \times 10^{-6}$, $x_0 = 62$ мкм. Расчет по формуле (7.3) дает более точное значение 12.4 мкм.

Получается так, что на рисунке 15 всего три полосы имеют одинаковый максимум, а на рис. 3 статьи [9] их никак не больше. Есть существенная разница между распределением интенсивности при наличии зазора в двух кристаллах и при наличии двух источников. В первом случае осцилляции происходят в середине пика интенсивности. Они затухают в то время, когда сам пик еще не закончился. А во втором случае они идут на всей ширине пика. При этом период уменьшается при движении от центра к краям.

Это весьма заметное различие двух случаев, которое имеет смысл обсудить. Сдвиг полос при изменении фазы ВФ в одном из источников в [9] не обсуждался. В данной схеме это легко выполнить экспериментально и полезно обсудить. Для интерференции в воздухе аналитический анализ достаточно простой. Пусть z_0 – расстояние от плоскости источников до плоскости наблюдения, x_0 – расстояние между источниками в плоскости источников, x – отклонение точки наблюдения от оси z .

Разность фаз волн между левым ($-x_0/2$) и правым ($x_0/2$) источниками равна

$$\Delta = \Delta_0 + 2\pi x_0 x / (z_0 \lambda), \quad (6.9)$$

где Δ_0 – разность фаз ВФ на самих источниках. Обычно она равна нулю, но при наличии лишних предметов на пути пучков может быть отличной от нуля. Период интерференции очевидно равен $p = z_0 \lambda / x_0$. Об этом написано в статье [9]. На периоде разность фаз меняется на 2π . Следовательно смещение полос равно $x_1 = -p\Delta_0/2\pi$. Есть надежда что формула для смещения, выраженная через период, является более общей и работает также и в нашем случае.

На рис. 6.10 справа видно, что сдвиг центрального пика происходит приблизительно на $x_1 = -16$ мкм. При этом в левый пучок вставлен борный фибер диаметром 8 мкм. Он дает разность фаз $\Delta_0 = -1.82$. Согласно указанной формуле сдвиг должен быть вправо на величину $x_1 = 54.4 * 1.82 / 6.28 = 15.8$ мкм. То есть величина получается, только знак не тот. Расчет показал, что при диаметре фибера 13.78 мкм в центре стоит минимум, причем картинка асимметричная, наиболее высокий максимум слева, а число полос слева и справа совпадает. При этом сдвиг фазы равен $\Delta_0 = -0.228 * 13.78 = -3.1418$, что весьма близко к $-\pi$.

Вообще говоря, в кристалле распространяются вовсе не сферические волны, а фаза зависит не от z_0 , а от t . Поэтому знак и не совпадает. В [9] компонента Фурье пропагатора перехода из падающего в отраженный пучок записывается в виде

$$M_{10} = (X_h/2g)[\exp(A + G) - \exp(A - G)], \quad (6.10)$$

где

$$g = (\alpha_q^2 + X^2)^{1/2}, \quad G = igt/2\gamma_0, \quad \alpha_q = (q - q_0) \sin(2\theta_B), \quad A = i\alpha_q t/2\gamma_0 + iX_0 t/2\gamma_0, \quad X^2 = X_h X_{-h} \quad (6.11)$$

По определению g имеет положительную мнимую часть. Нас интересует только поле со слабым поглощением, то есть второй член в разности. Все можно вычислить методом стационарной фазы. Но ответ все равно получается не простым. С другой стороны все и так известно, получается функция Бесселя, можно взять асимптотику. Важно, что область перекрытия не находится в центре треугольника Бормана. Для каждого из источников она смещена с разную сторону.

Отличие от воздуха в том, что в воздухе аргумент пропагатора пропорционален $(z_0^2 + x^2)^{1/2}$, а в кристалле $(t_0^2 - x^2)^{1/2}$, $t_0 = t \operatorname{tg}\theta_B$. Скорее всего этого достаточно. Словами это звучит так, что при отходе от центра в воздухе фаза растёт, а в кристалле она убывает. И для компенсации отрицательной фазы надо смещаться ближе к точке источника, где фаза максимальна.

6.5. Расчет с продолжением. Старый вариант.

Дифракция в геометрии Лауэ из одного пучка порождает два. Но программа все время проводит один пучок. Значит приходится выбирать один из двух пучков для продолжения. В данной программе для этого есть параметр nt , который в младшем разряде может принимать значения от 0 до 3. Как уже отмечалось, данная программа умеет считать с продолжением. То есть для всех объектов можно запомнить ВФ на каком то этапе и потом начать с нее, если $z_0 = 0$.

Начальная ВФ должна находиться в файле **wfa.dat**. А программа записывает ВФ в файлы **data/wf000.dat**, где 000 надо заменить на номер, указанный параметром pr . Однако продолжение по кристаллу в случае дифракции по Лауэ делается сложнее. Чтобы продолжить расчет на вход надо подать два пучка, которые были получены на предыдущем расчете.

В данной программе это может выглядеть так.

- (1) делаем расчет из падающего пучка в отраженный пучок при толщине 200 и $nt = 11$, $pr = 1$. Это контрольный расчет.
- (2) делаем расчет из падающего пучка в проходящий пучок при толщине 100 и $nt = 10$, $pr=2$.
- (3) делаем расчет из падающего пучка в отраженный пучок при толщине 100 и $nt = 11$, $pr=3$.

Получили 2 пучка при толщине 100. Для продолжения расчета на такую же толщину необходимо:

- (4) ВФ с номером 2 скопировать в файл начальной ВФ и затем сделать расчет при $z_0=0$, $nt=11$, $nr=4$.
- (5) ВФ с номером 3 скопировать в файл начальной ВФ и затем сделать расчет при $z_0=0$, $nt=13$, $nr=5$. Копирование делается независимо от меню программы. Это значит, что задать все варианты сразу во входных данных не получится. Программу придется запускать несколько раз.

В конце расчета необходимо сложить ВФ с номерами 4 и 5 и результат сравнить с номером 1. Достаточно сравнить интенсивности, то есть квадраты модулей. Они должны совпадать. Первоначально фокус был в том, что при таком расчете нельзя сдвигать аргументы ВФ, как это делается в стандартном расчете путем добавления фазового множителя в образ Фурье для ВФ перед расчетом процедуры обратного БПФ.

Дело в том, оптическая ось во всех расчетах связана в падающим пучком, который в данном случае является прямым. И его координате соответствует точка 0 на оси X. Но дифракция порождает засветку в треугольнике Бормана в сторону отрицательных координат. Чтобы показать этот треугольник симметрично и приходится сдвигать начало отсчета на оси.

Для отмены такого сдвига к параметру nt добавлен второй разряд. В стандартном режиме он равен 0, а если он равен 1, то сдвиг аргумента через умножение на фазовый множитель образа Фурье для ВФ не производится. Дело в том, что при разных толщинах кристалла сдвиг получается разный, а матричные элементы, матрицы перехода никак сдвиг не учитывают.

Если сдвига нет, то для нулевого расстояния полезная область находится только в половине расчетной области, но в крайнем случае лишние точки можно просто заполнить нулями. Проблема с учетом кристалла различными методами может быть изучена эмпирически. Например, сетка уравнений Такаги может использовать только часть расчетной области для процедуры БПФ.

В рассмотренном выше подходе есть один минус. А именно, невозможно сделать расчет автоматически от начала до конца используя описанные методы. Для этой цели в программе была сделана модификация, позволяющая автоматический расчет выполнить. Для этого можно использовать накопитель вариантов входных данных в файле (`var/01.txt`) и файл (`var/00.txt`) – указатель вариантов.

Эти файлы все равно надо готовить вручную и они используются для демонстрации работы программы. По одной кнопке выбирается номер варианта и этот вариант преобразуется в основные входные данные программы. Остается запустить расчет и все. Программа была преобразована таким образом, что выбор варианта определяет только номер, а потом преобразование номера во входные данные делается отдельной процедурой, которая принимает номер как значение переменной `&`. Это позволяет запускать программу с помощью вот такого кода (`# &=5; #e _1idn 1mca`) для варианта 5.

В результате можно по кнопке [D] программы запустить любой код, который много раз запускает программу с различными вариантами входных данных, которые приготовлены заранее, а между этими запусками можно писать любой другой код, который будет копировать файлы, складывать ВФ и все, что угодно. Так как код программы по кнопке [D] является процедурой общей программы, то все отлично работает.

Вот пример кода, который автоматически выполняет намеченную выше программу

```
#pro 1111 #rob [mo=1; le=10;] @
# &=1; #e _1idn 1mca #e _1111 # &=2; #e _1idn 1mca #e _1111 # &=3; #e _1idn 1mca #e _1111
#f [op=copy; n=1; file=wfa.dat;] data/wf002.dat\E #e _1111 # &=4; #e _1idn 1mca #e _1111
#f [op=copy; n=1; file=wfa.dat;] data/wf003.dat\E #e _1111 # &=5; #e _1idn 1mca #e _1111
#f [op=size; file=data/wf004.dat;] # n=s(1)/8; J=1; J1=J+n; #io [op=rd; mo=3; fir=r(J); n=n; le=0;]
#io [fir=r(J1); file=data/wf005.dat;] #ma [op=vva; b=J; le=n; tx=n;]
#io [op=wd; fir=r(J); file=wfa.dat;] #e _1111 # &=6; #e _1idn 1mca
```

(6.12)

Здесь используется процедура 1111 для остановки программы на очень короткое время. Дело в том, что программа записывает и считывает файлы, и это как бы независимая операция в

другом потоке, которая требует какого-то времени. И лучше перестраховаться и остановить программу на очень короткое время, чтобы другой поток был запущен.

А сам файл входных данных (var/01.txt) имеет вот такой вид

```
// 1 расчет дифракции по Лайэ
0 1 : nr=1; d=0.1; n=8*1024; m=1; E=25; x0=0; z0=5000; dr=0; x1=-55; x2=5; nx=600; kw=0; ki=1; kp=0; dz=0;
    nz=1; no=2; np=1; ! 4 21 1 1 6 1 |
1 1 : Nr=1; mc=1; sb=0; na=1; xp=0; ss=1; ra=0; z=0; |
6 1 : Nr=1; z=0; mc=1; na=1; z1=0; nt=11; qb=0; po=1; |
99 1 : # ne=0; tb=7.121; t=200; dt=0; h1=-0.2911; h2=0.01193; #d 9 r(4) tb 0 t -0.3992 0.01221 h1 h2 h1 h2 !
// 2 расчет дифракции по Лайэ
0 1 : nr=1; d=0.1; n=8*1024; m=1; E=25; x0=0; z0=5000; dr=0; x1=-55; x2=5; nx=600; kw=1; ki=1; kp=0; dz=0;
    nz=1; no=2; np=2; ! 4 21 1 1 6 1 |
1 1 : Nr=1; mc=1; sb=0; na=1; xp=0; ss=1; ra=0; z=0; |
6 1 : Nr=1; z=0; mc=1; na=1; z1=0; nt=10; qb=0; po=1; |
99 1 : # ne=0; tb=7.121; t=100; dt=0; h1=-0.2911; h2=0.01193; #d 9 r(4) tb 0 t -0.3992 0.01221 h1 h2 h1 h2 !
// 3 расчет дифракции по Лайэ
0 1 : nr=1; d=0.1; n=8*1024; m=1; E=25; x0=0; z0=5000; dr=0; x1=-55; x2=5; nx=600; kw=1; ki=1; kp=0; dz=0;
    nz=1; no=2; np=3; ! 4 21 1 1 6 1 |
1 1 : Nr=1; mc=1; sb=0; na=1; xp=0; ss=1; ra=0; z=0; |
6 1 : Nr=1; z=0; mc=1; na=1; z1=0; nt=11; qb=0; po=1; |
99 1 : # ne=0; tb=7.121; t=100; dt=0; h1=-0.2911; h2=0.01193; #d 9 r(4) tb 0 t -0.3992 0.01221 h1 h2 h1 h2 !
// 4 расчет дифракции по Лайэ
0 1 : nr=1; d=0.1; n=8*1024; m=1; E=25; x0=0; z0=0; dr=0; x1=-55; x2=5; nx=600; kw=1; ki=1; kp=0; dz=0; nz=1;
    no=1; np=4; ! 2 21 6 1 |
6 1 : Nr=1; z=0; mc=1; na=1; z1=0; nt=11; qb=0; po=1; |
99 1 : # ne=0; tb=7.121; t=100; dt=0; h1=-0.2911; h2=0.01193; #d 9 r(4) tb 0 t -0.3992 0.01221 h1 h2 h1 h2 !
// 5 расчет дифракции по Лайэ
0 1 : nr=1; d=0.1; n=8*1024; m=1; E=25; x0=0; z0=0; dr=0; x1=-55; x2=5; nx=600; kw=1; ki=1; kp=0; dz=0; nz=1;
    no=1; np=5; ! 2 21 6 1 |
6 1 : Nr=1; z=0; mc=1; na=1; z1=0; nt=13; qb=0; po=1; |
99 1 : # ne=0; tb=7.121; t=100; dt=0; h1=-0.2911; h2=0.01193; #d 9 r(4) tb 0 t -0.3992 0.01221 h1 h2 h1 h2 !
// 6 расчет дифракции по Лайэ
0 1 : nr=1; d=0.1; n=8*1024; m=1; E=25; x0=0; z0=0; dr=0; x1=-55; x2=5; nx=600; kw=0; ki=1; kp=0; dz=0; nz=1;
    no=1; np=6; ! 2 21 1 1 |
1 1 : Nr=1; mc=1; sb=0; na=1; xp=0; ss=1e3; ra=0; z=0; |
```

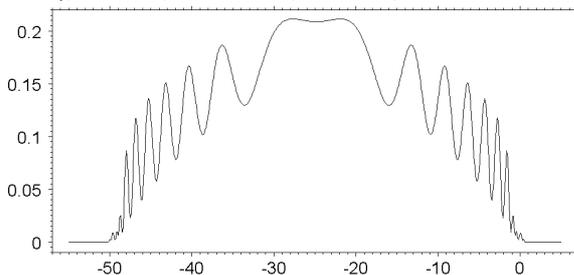
(6.13)

Несмотря на то, что входные данные имеют относительно громоздкий вид, записываются они достаточно просто. С другой стороны, файл (var/00.txt) совсем простой и для экономии места символ конца строки заменен на символ вертикальной черты

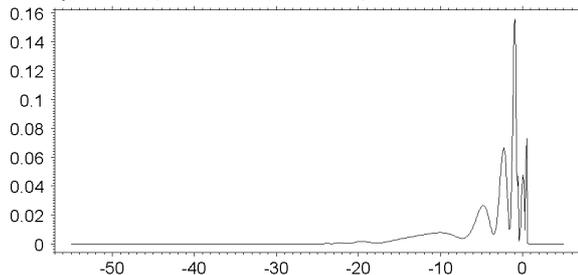
```
1 2 4 | 1 7 4 | 1 12 4 | 1 17 3 | 1 21 3 | 1 25 2 |
```

На графиках рис. 6.12 показаны результаты проведенного по указанным данным расчета. Графики упорядочены слева направо и сверху вниз. Первый график соответствует отражению для кристалла 200 мкм. Показано основание треугольника Бормана для нулевого расстояния и щели размером 1 мкм. Графики 2 и 3 относятся к кристаллу 100 мкм и точно такому же входному пучку излучения. Графики 4 и 5 соответствуют переходу проходящего и отраженного пучков в отраженный пучок еще через 100 мкм. График 6 получен после сложения ВФ для рисунков 4 и 5 и вычисления интенсивности. Как видим он полностью совпадает с графиком 1.

Intensity, S = 0.06897 , M = 0.2114 / 100 , W = 27.1522 , H = 3.1574



Intensity, S = 0.2973 , M = 0.1589 / 1 , W = 0.4726 , H = 24.05833



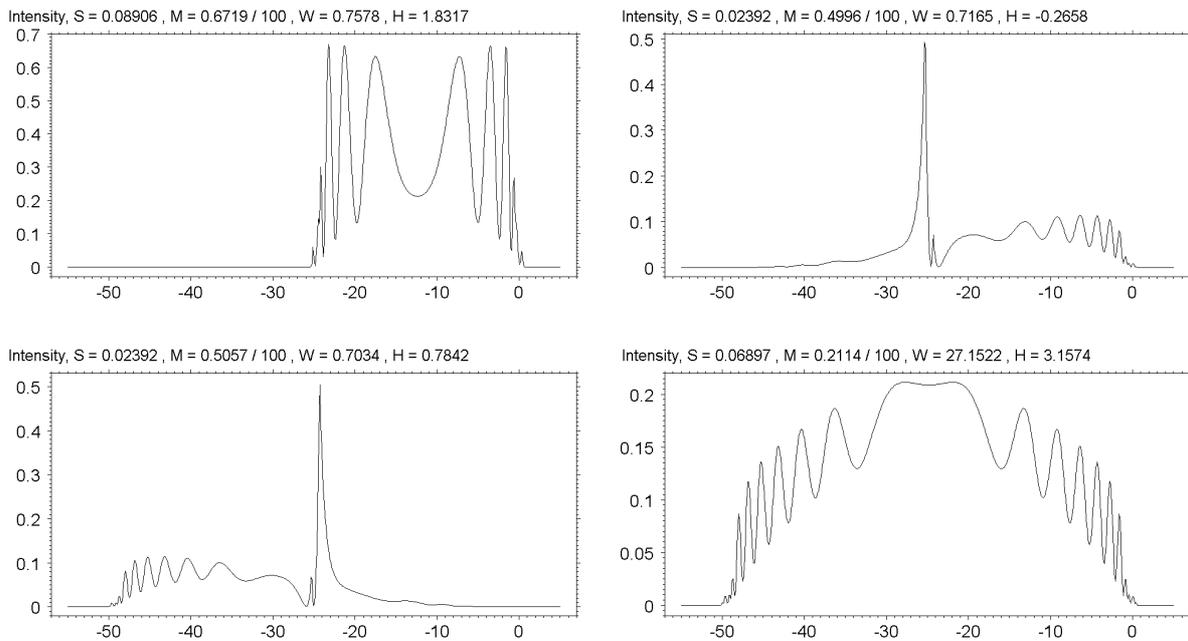


Рис. 6.12

Интересно, что две траектории (проходящий, отраженный) и (отраженный, проходящий) дают обращенные распределения интенсивности, которые после сложения ВФ приводят к симметричному распределению. Возможность продолжать произвольную ВФ по совершенному кристаллу позволяет относительно просто учитывать локальные дефекты в толстых кристаллах, так как уравнения Такаги достаточно решать только в тонком слое на любой глубине внутри кристалла.

6.6. Расчет с продолжением. Новый вариант.

Метод использования программы, описанный выше годится не только для задачи дифракции по Лауэ с продолжением, но и в других сложных ситуациях. Он интересен тем, что можно не просто много вариантов просчитать сразу, но и проделать любую работу между этими вариантами. Много вариантов умеет считать и исходная программа.

Однако, как раз для случая дифракции по Лауэ, особенно в многослойных кристаллах, когда продолжение надо делать много раз, так считать все же неудобно. С другой стороны, относительно легко написать дополнительный код, который сразу работает с двумя пучками. Это было сделано и программа имеет возможность делать такие расчеты более просто и быстро.

Для этой цели к параметру nt прибавлены еще два значения 4 и 5. При значении 4 программа, берет текущее значение волновой функции как падающий пучок, добавляет нулевой отраженный пучок и результат в виде ВФ для двух пучков записывает в файл **wfa.dat**, сначала прямой пучок, потом отраженный пучок. При значении 5 ВФ для двух пучков сразу считывается из файла **wfa.dat**, а результат в виде ВФ для двух пучков снова записывает в файл **wfa.dat**.

Дополнительно в программе прямой пучок остается как ВФ для продолжения, если старший разряд nt , назовем его nP , равен 0. А если он равен 1, то ВФ для отраженного пучка остается как ВФ для продолжения расчета других объектов. Вот как выглядят ВДП для тестирования расчета по новой схеме.

```
0 1 : nr=1; d=0.1; n=32*1024; m=1; E=25; x0=0; z0=5000; dr=0; x1=-124; x2=0; nx=496; kw=0; ki=1; kp=1; dz=0;
      nz=1; no=2; np=1; ! 4 21 1 1 6 1 | np=2; ! 1 24 2 | np=3; ! 1 24 3 | np=4; ! 1 24 4 |
1 1 : Nr=1; mc=1; sb=0; na=1; xp=0; ss=10; ra=0; z=0; |
6 1 : Nr=1; z=0; mc=1; na=1; z1=0; nt=10; qb=0; po=1; |
6 2 : Nr=1; z=0; mc=1; na=1; z1=0; nt=4; qb=0; po=1; |
6 3 : Nr=1; z=0; mc=1; na=1; z1=0; nt=11; qb=0; po=1; |
```

```
6 4 : Nr=1; z=0; mc=1; na=1; z1=0; nt=14; qb=0; po=1; |
99 1 : # ne=0; tb=7.121; t=500; dt=0; h1=-0.2911; h2=0.01193; #d 9 r(4) tb 0 t -0.3992 0.01221 h1 h2 h1 h2 ! (6.14)
```

Здесь используется относительно толстый кристалл с толщиной 500 мкм для энергии 25 кэВ и относительно узкая щель. В первом варианте вычисляется переход $t \rightarrow t$ без сдвига по старой схеме. Во втором варианте вычисляется два пучка и берется пучок t . В третьем варианте вычисляется переход $t \rightarrow r$ без сдвига по старой схеме. В четвертом варианте вычисляется два пучка и берется пучок r . Результаты 1-го и 2-го, а также 3-го и 4-го вариантов полностью совпадают.

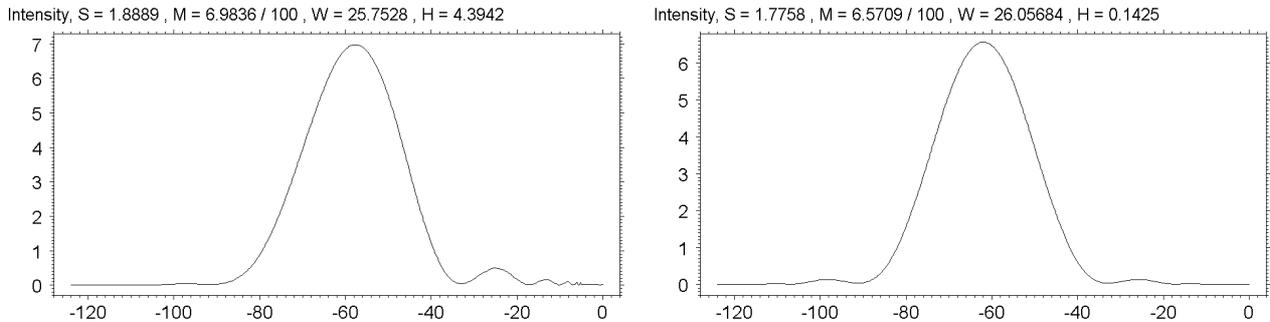


Рис. 6.13.

На рис. 6.13 показаны результаты расчета для этого случая. Так как кристалл относительно толстый, то имеет место эффект Бормана. Интенсивность отлична от нуля в центре палатки Бормана, причем для прямого пучка (слева) максимум на кривой чуть выше, кривая асимметричная и слегка смещена вправо. Для отраженного пучка максимум находится в центре палатки Бормана и кривая симметричная. А сама палатка Бормана находится слева от точки 0. Ее размер 124 мкм.

Позднее оказалось, что если правильно написать код, то сдвиг центра на кривой можно делать и в расчете с продолжением по новой схеме. Для этой цели к параметру nP вариантов с $nt = 4$ и 5 добавлены еще два значения 2 и 3. Они соответствуют 0 и 1 с той лишь разницей, что сдвиг аргумента в расчете делается. Проверку такого расчета с продолжением можно сделать с помощью следующих ВДП.

```
0 1 : nr=1; d=0.1; n=32*1024; m=1; E=25; x0=0; z0=5000; dr=0; x1=-124; x2=0; nx=496; kw=0; ki=1; kp=1; dz=0;
      nz=1; no=2; np=1; ! 4 21 1 1 6 1 | no=3; np=2; ! 3 24 2 6 3 |
1 1 : Nr=1; mc=1; sb=0; na=1; xp=0; ss=10; ra=0; z=0; |
6 1 : Nr=1; z=0; mc=1; na=1; z1=0; nt=11; qb=0; po=1; |
6 2 : Nr=1; z=0; mc=1; na=1; z1=0; nt=4; qb=0; po=2; |
6 3 : Nr=1; z=0; mc=1; na=1; z1=0; nt=15; qb=0; po=2; |
99 1 : # ne=0; tb=7.121; t=500; dt=0; h1=-0.2911; h2=0.01193; #d 9 r(4) tb 0 t -0.3992 0.01221 h1 h2 h1 h2 !
99 2 : # ne=0; tb=7.121; t=250; dt=0; h1=-0.2911; h2=0.01193; #d 9 r(4) tb 0 t -0.3992 0.01221 h1 h2 h1 h2 ! (6.15)
```

Здесь заказаны два варианта. Первый вариант – это вариант 3 из предыдущего расчета, то есть расчет отраженного пучка для кристалла толщиной 500 мкм. А второй вариант имеет 3 объекта. Первый объект – щель тот же самый а второй и третий объекты – это кристаллы толщиной 250 мкм. При этом второй объект берет ВФ обычным образом, в третий объект использует то, что записал в файл второй объект, то есть сразу два пучка, а на выходе выдает тот же результат.

Легко убедиться, имея программу, что оба варианта дают один и тот же ответ, только первый считает сразу кристалл толщиной 500 мкм, а второй – два раза кристалл толщиной 250 мкм. И в данном случае ВДП записываются напрямую, и они весьма компактны, а дополнительный код не требуется. К сожалению при изменении всего одного параметра пришлось вводить новую строку с номером 99. Напрашивается оптимизация, но пока так.

7. УРАВНЕНИЯ ТАКАГИ ДЛЯ ДИФРАКЦИИ В КРИСТАЛЛЕ ПРОИЗВОЛЬНОЙ ФОРМЫ

В 2020 году была опубликовано несколько статей о дифракции СИ в кристалле с треугольным вырезом и просто наклонной ступенькой на выходной поверхности. Такая дифракция может быть смоделирована методом численного решения уравнений Такаги. При этом расчет делается на сетке точек, которая построена линиями вдоль направлений падающего и отраженного пучков. В каждом узле сетки вводятся параметры дифракции для кристалла, если узел принадлежит кристаллу, или параметры для аморфной области, если узел принадлежит этой области.

Частным случаем аморфной области является пустое пространство, когда все параметры дифракции равны нулю. В общем случае равен нулю только параметр, соответствующий переходу из одного пучка в другой, а другие параметры произвольны. Для решения такой задачи была создана специальная программа, в которой кроме расчетного модуля было много всего другого.

В начале июня 2022 года в программе XRWP был организован отдельный объект в виде кристалла с аморфной областью разной формы и размера, который моделируется как раз с помощью решения уравнений Такаги. Его номер 7. Для этого объекта характерно то, что он работает на собственной сетке, узлы которой могут не совпадать с узлами основной сетки, а также он делает свою графику, которая является более адекватной именно этому методу расчета.

Несколько позже метод решения уравнений Такаги был оптимизирован и упрощен одновременно. Новый подход к решению уравнений Такаги был опубликован в статье [10]. Особенностью нового подхода является то, что схема, которая первоначально была предложена только для симметричной дифракции в геометрии Лауэ, используется для кристаллов произвольной формы, в том числе и в геометрии Брэгга.

В современной реализации программы данный объект должен быть последним в цепочке объектов, но перед ним работает общая схема расчета и может быть все, что угодно. Падающая на данный объект ВФ должна быть определена на области, размер которой больше, чем размер области, используемый непосредственно для расчета на сетке, которую использует метод решения уравнений Такаги.

Перед расчетом ВФ определяется на новой сетке методом интерполяции. Специфика данного расчета в том, что размер области на выходе меньше размера области на входе, а минимальный размер области на входе может зависеть от толщины кристалла. Но возможны и другие варианты.

Расчет использует общие параметры программы не в полном объеме. Также для него надо задавать параметры, которые относятся только к данному объекту. Таких параметров достаточно много, определяются они легко и таким же образом, как и для всех других объектов. В частном случае этим методом можно считать и кристалл в форме пластинки, когда аморфная область вообще отсутствует. Ниже показаны некоторые примеры такого расчета.

7.1 Тестирование программы по решению уравнений Такаги

Прежде всего необходимо протестировать программу на случае дифракции плоской волны в совершенном кристалле в форме пластины в случае геометрии Лауэ, когда решение задачи хорошо известно. Входные данные для такого расчета показаны ниже

```
0 1 : nr=1; d=0.03; n=16*1024; m=1; E=10; x0=0; z0=50000; dr=0; x2=40; x1=-x2; nx=800; kw=0; ki=0; kp=0; dz=0;
    nz=1; no=2; np=1; ! 4 21 1 1 7 1 |
1 1 : Nr=1; z=0; mc=1; sb=0; na=1; xp=0; ss=500; ra=0; |
7 1 : Nr=1; z=0; na=1; tb=18.84; X1=-0.4983; X2=0.007476; X3=-0.3042; X4=0.007244; X5=0; X6=0; d0=0.04;
    N0=5000; N1=5000; A=0; kR=001; dR=505; mC=0; ct=500; zd=200; xd=70; Q=0100001111; V=1; Mt=0e4;
    Mr=0e4; ng=300; |
```

(7.1)

Здесь рассмотрены 2 объекта, а именно, 1-й и 7-й. Строки, которые заданы как продолжение предыдущей строки записаны с отступом, а начало каждой строки имеет номера. В таком расчете надо задавать $k_w = k_i = k_r = 0$, а параметр p_r не используется. Из общих используются только параметры d , n , E , x_0 , z_0 , no и указание на объекты.

Конкретное значение каждого параметра описано в файле `rules.pdf`. Отметим только, что данный вариант соответствует дифракции плоской волны потому, что z_0 имеет очень большое значение. Размер щели ss больше размера основной расчетной области, которая равна $(N_0 + N_1) \cdot d_0 \cdot 2 \cdot \sin(tb) = 258$ мкм в направлении, перпендикулярном направлению пучка. Размер области по оси X , в которой выдается результат, равен $N_1 \cdot d_0 \cdot 2 \cdot \tan(tb) = 136$ мкм. Замена синуса на тангенс не сильно меняет ширину области, так как угол Брэгга мал.

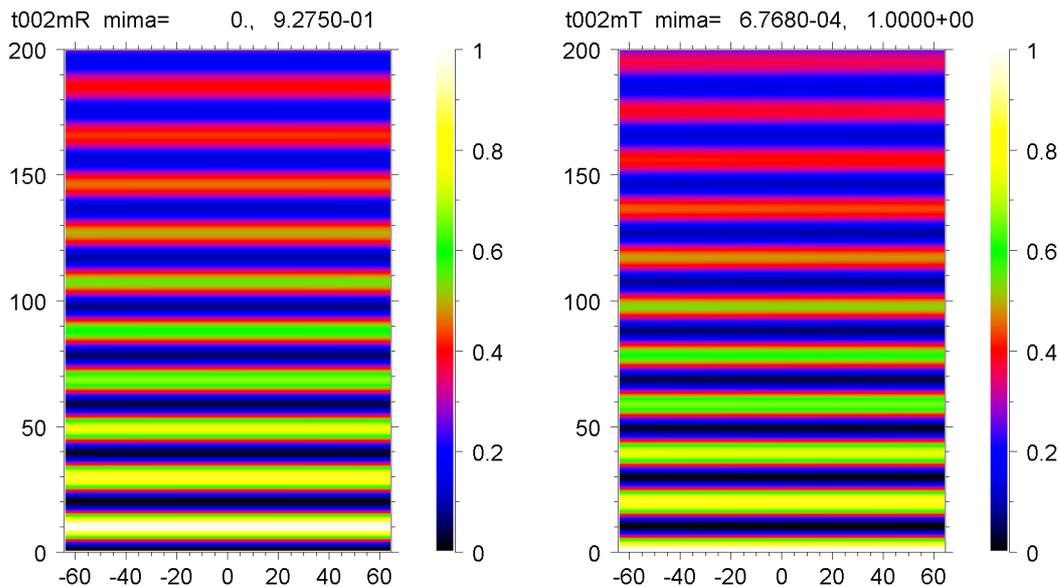


Рис. 7.1

Результат расчета показан на рисунке 7.1. Хорошо видны экстинкционные полосы и тот факт, что там, где максимальна проходящая волна, минимальна отраженная, и наоборот. Максимум проходящей волны на входе равен единице, а отраженная на входе отсутствует. Размеры в горизонтальном направлении показаны перпендикулярно направлению пучков, и результат выдается с пропуском нескольких точек (а именно, 5), как указывает параметр dR . Вертикальный размер – это толщина кристалла по нормали к поверхности.

Фактически результат получен для сферической падающей волны, но на очень большом расстоянии, когда сферичность никак себя не проявляет. Данное решение является одномерным и легко получается аналитически. Расчет сделан просто для проверки правильной работы программы.

Как видно из входных данных, для 7-го объекта задаются не только параметры самого кристалла, но и параметры, регулирующие особенности расчета и выдачи результатов. К таким параметрам относятся kR , mC , Q , Mt , Mr , ng . Так как это важно и относительно сложно для понимания, я попробую тут повторить то, что написано в файле `rules.pdf`, но несколько иначе.

Так параметр kR – это целое число из 3-х разрядов. Младший (самый правый) разряд указывает в какой форме нужен результат. Если он равен 0, то выдается кривая в последней точке на оси Z , то есть на выходной поверхности кристалла, если он имеет форму пластины. Но реально кристалл может иметь любую форму и речь идет только о расчетной сетке. То есть выдается результат в конце расчета.

Если он равен 1, как в данном расчете, то выдается матрица чисел во всех точках расчетной сетки, но с пропуском некоторых точек. Пропуск необходим потому, что точек очень много и если выдавать все, что файлы будут очень большие. Много точек необходимо для расчета, но в них нет нужды при показе картинки. А результат в конце не выдается.

А если он равен 2, то выдается сначала матрица с пропуском точек, а затем результат в конце во всех точках. Иногда бывает необходимо иметь полную информацию. Результат в конце позволяет продолжать расчет далее, а матрица показывает динамику процесса.

Старший и средний разряды параметра kR указывают тип задания аморфной области и формы кристалла. Тут важно, что все многообразие форм как аморфной области, так и кристалла программа обеспечить не может. Пока сделано так, что информацию о форме программа берет из массивов, которые записаны в файлы (`rbam.dat`) для аморфной области и (`rbcr.dat`) для кристалла. Массивы имеют $2 \cdot N_0$ точек и указывают границы области по оси X в каждой точке на оси Z .

То есть внутри интервала между точками аморфная область и кристалл есть, а вне интервала их нет. Указанные массивы должны присутствовать в папке программы, иначе расчет невозможен. Но есть варианты. Если 2-й разряд параметра Q слева (или 8-й справа) равен 0, то программа просто считывает числа из файла и все. А если он равен 1, то программа способна сама вычислить эти массивы. И вот каким способом она будет это вычислять как раз и определяют разряды параметра kR .

Всего таких способов может быть 10 при значениях от 0 до 9. И пока еще не все они реализованы. Так значение 0 означает отсутствие аморфной области и кристалл с шириной st . Параметр st в мкм должен быть указан во входных данных. Было указано 500 мкм, что заведомо больше расчетной области. Поэтому ширина кристалла на результат не повлияла.

Параметры Mt и Mr в данном расчете равны 0. По этой причине результат выдается в виде нормальной интенсивности (в линейном масштабе). Но бывает и так, что значения интенсивности очень сильно изменяются и линейная шкала не вполне удобная. Если эти параметры больше нуля, то на графики выдается логарифм интенсивности. При этом минимальное значение устанавливается как отношение максимального значения и указанных параметров для прямого (Mt) и отраженного (Mr) пучков.

Картинка распределения интенсивности в объеме кристалла имеет низкую точность. Иногда хочется посмотреть более точно зависимость интенсивности от координаты z в какой-то точке на оси X . Это программа делает в том случае, если параметр ng больше 0 и у параметра Q 3-й разряд справа равен 1. В этом случае картинка получается не как на рис. 7.1, а повернутой на 90 градусов, то есть ось Z горизонтально.

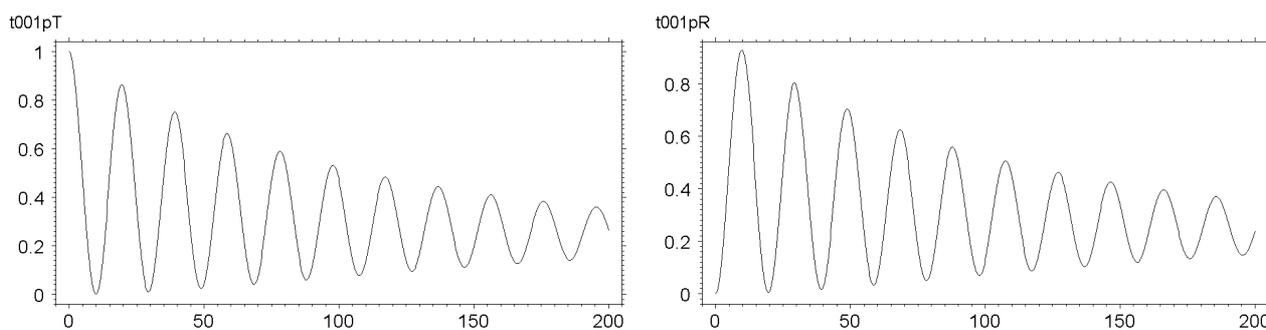


Рис. 7.2. Зависимость интенсивности вдоль оси Z .

Такие графики строятся из значений матрицы, то есть с учетом пропущенных точек. Графики матриц записываются в файлы типа `t000mV.png`, а графики зависимости от z – в файлы `t000pV.png`, где $V = T, R$ для прямого и отраженного пучков, а вместо 000 стоит номер варианта V . Для данного варианта эти графики показаны на рис. 7.2. Разные разряды параметра Q регулируют форму представления результатов и кое-что еще. Это все хорошо описано в файле `rules.pdf`.

На этих графиках хорошо видно, что не только среднее значение, но и амплитуда осцилляций уменьшается с ростом толщины кристалла благодаря роли поглощения. Хотя формулы все это показывают, но менее наглядно, чем графики.

7.2 Дифракционная фокусировка сферической волны

Следующий расчет сделан для тех же параметров, что и выше, с заменой единственного параметра, а именно, $z_0 = 300$. Результат расчета показан на рис. 7.3. Здесь хорошо виден эффект дифракционной фокусировки. Эффект не очень сильный, так как маленькое расстояние, всего 3 м, и фокусировка происходит при малой толщине кристалла 120 мкм. Но динамика хорошо видна.

Экстинционные полосы по мере увеличения толщины кристалла искажаются, сжимаются и при определенной толщине возникает узкий пик в центре расчетной области. Для отраженного пучка распределение интенсивности симметричное, а для проходящего нет. При этом для проходящего пучка пик интенсивности оказался выше.

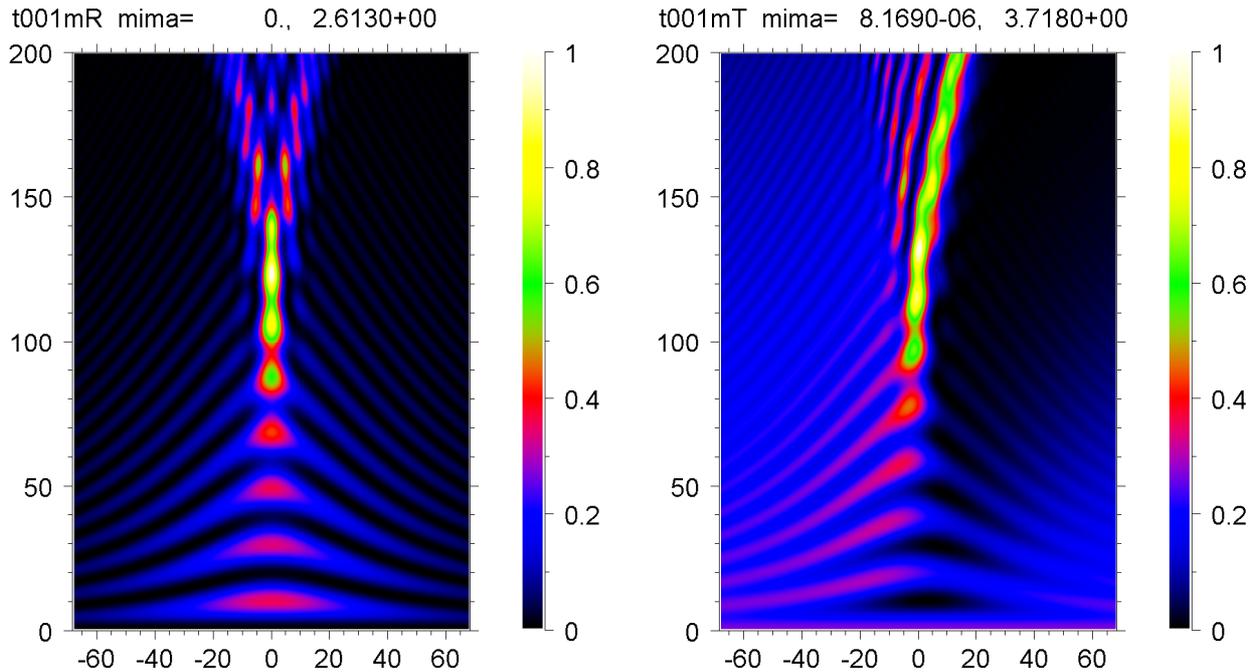


Рис. 7.3. Расстояние до точечного источника 3 м.

Также можно увидеть что происходит при больших толщинах кристалла. А именно, пучок снова начинает расширяться, показывая интерференцию не только вдоль оси Z , но и в поперечном направлении. Все эти особенности также хорошо изучены еще в 80-х годах прошлого века, с использованием разных приближений, а также получены кое-какие аналитические результаты. Кроме того, такого типа результат можно получить в самой программе для объекта номер 6. Там результат для каждой толщины кристалла получается методом преобразования Фурье, а здесь все толщины получаются последовательно, каждая следующая из предыдущей.

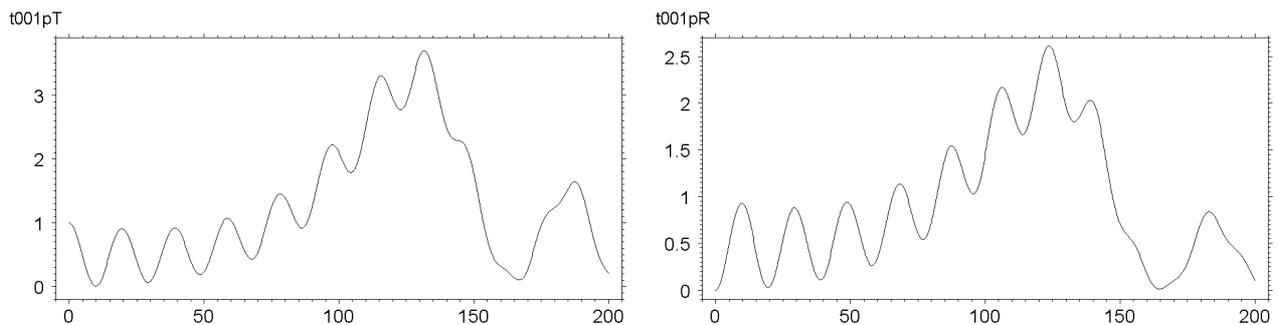


Рис. 7.4. Зависимость от z в центре, при $x = 0$.

Зависимость от z в центре горизонтальной области показана на рис. 7.4. Во избежание непонимания отмечу, что на нечетных рисунках отраженный пучок показан слева, а на четных – справа. Это не совсем симметрично, но так получилось. Дифракционная

фокусировка более ярко получается при более далеком источнике, когда толщина кристалла велика и реализуется эффект Бормана.

При малых толщинах фокусировка слабая, а высота пика зависит еще и от того на какой фазе находятся экстинкционные осцилляции. Главным результатом такого расчета является проверка работы программы на известных примерах.

7.3 Дифракция узкого пучка, то есть секционная топография

Рассмотрим теперь случай, в котором перед кристаллом установлена очень узкая щель размером 2 мкм. При этом входные данные те же, что указаны в начале раздела 6.1, только изменяются параметры $z_0 = 5000$, $ss = 2$, $Mt = Mr = 1e4$. Последние параметры, если они больше 0, указывают, что минимум функции (обозначим его M_i) обрезается на величине $M_i = Ma/Mb$, где Ma – максимум функции, $b = t$ и r параметров прямого и отраженного пучков. И затем вычисляется натуральный логарифм интенсивности. Это необходимо, когда перепад интенсивности весьма велик и контраст плохо виден на фоне пика падающего пучка. Результат расчета показан на рис. 7.5.

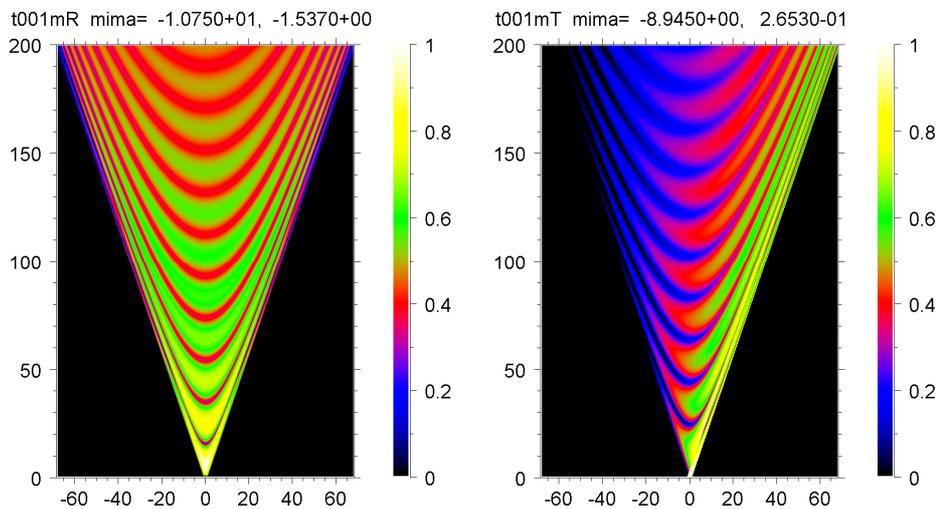


Рис. 7.5

Здесь интересно то, что максимум проходящего пучка слегка больше 1, хотя на щели интенсивность равна 1. Четко виден треугольник Бормана с углом $2\theta_B$ при вершине. Однако на картинках угол несколько меньше, так как горизонтальный размер соответствует направлению по нормали к направлению пучков, а не вдоль поверхности кристалла. При этом горизонтальный размер сжат на множитель $\cos\theta_B$. При относительно малых значениях угла Брэгга этот множитель не сильно меньше 1.

В этом случае тоже видны экстинкционные полосы, но их кривизна имеет противоположный знак. Асимметрия проходящего пучка также имеет другой знак, меньше слева, а не справа. Вообще говоря, возможности данной программы достаточно велики и их можно еще увеличить. Показан только самый простейший пример, который полезен в учебных целях и будет интересен начинающим физикам.

7.4 Расчет интерферометрии методом уравнений Такаги

Одним из более сложных случаев является расчет интерференционной картины от двух источников. В частности, очень просто задать две узкие щели перед кристаллом на любом расстоянии между ними. Входные данные для такого расчета не сильно отличаются от предыдущего случая. Они показаны ниже

```
0 1 : nr=1; d=0.035; n=16*1024; m=1; E=10; x0=0; z0=500; dr=0; x2=40; x1=-x2; nx=800; kw=0; ki=0; kp=0; dz=0;
      nz=1; no=2; np=1; ! 4 21 1 1 7 1 |
1 1 : Nr=1; z=0; mc=1; sb=0; na=2; xp=-30; ss=1; ra=0; | xp=30; |
7 1 : Nr=1; z=0; na=1; tb=18.84; X1=-0.4983; X2=0.007476; X3=-0.3042; X4=0.007244; X5=0; X6=0; d0=0.04;
```

$$N0=5000; N1=7500; A=0; kR=1; dR=505; mC=0; ct=500; Q=11; V=1; Mt=1e5; Mr=1e3; | \quad (7.2)$$

В этом случае пришлось расширить область выдачи результата в полтора раза, так как картинка имеет ширину, которая больше предыдущего случая на расстояние между щелями. Соответственно было необходимо увеличить шаг исходной сетки при сохранении числа точек. Результат показан ниже на рис. 7.6. Как и выше, используется логарифмическая шкала, но в этот раз параметры M_t и M_r имеют разное значение. Специфика данного расчета в том, что он сразу дает всю зависимость от толщины кристалла, при этом расчет выполняется не очень долго.

Дело в том, что такого же типа расчет можно было бы выполнить, используя объект номер 6, то есть симметричную дифракцию по Лауэ. Но в этом случае расчет для каждой толщины кристалла нужно было бы проводить независимо. Такой расчет может быть полезен для очень толстых кристаллов, потому что его точность не зависит от толщины кристалла. Как раз такой способ был использован в статье [11].

С другой стороны, объект номер 7 использовать тем проще, чем меньше толщина кристалла. Для толстых кристаллов может понадобиться очень много точек и время расчета растет пропорционально квадрату толщины кристалла. Дело в том, что чем дальше мы отходим от входной границы, тем меньше шаг нужно использовать, чтобы не потерять точность расчетов.

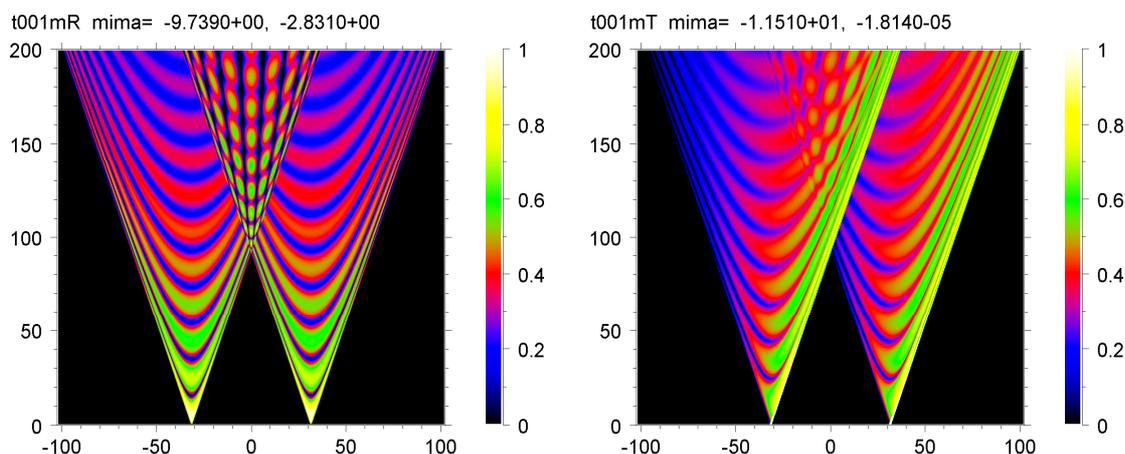


Рис. 7.6

По этой причине он наиболее эффективен для расчета мелких аморфных областей, когда области совершенного кристалла до и после слоя с аморфной областью можно рассчитать методом объекта номер 6. Соответственно, методом уравнений Такаги будет достаточно просчитать только тонкий слой с аморфной областью.

Как следует из рисунка 7.6, в тонком кристалле область интерференции выглядит не как набор полос, а более сложным образом. Сами полосы промодулированы по толщине кристалла. Дело в том, что в этом случае в самом кристалле есть интерференция двух полей, которые возникают при дифракции. Только в толстом кристалле такая интерференция пропадает.

Вторая особенность состоит в том, что в отраженном пучке контраст интерференции выше, чем за пределами области перекрытия пучков. А в проходящем пучке интерференция очень слабая, так как из-за асимметрии пучки имеют разную интенсивность в области перекрытия. Конкретный анализ физики и применений такой интерференции выходит за рамки данной книги.

Ее цель просто показать как пользоваться программой и использовать все возможности для более наглядного представления результатов. С этой целью будет не лишним отметить, что программа выдает две картинки, отдельно для проходящего и отраженного пучков. Но в данном документе показана одна картинка, где оба пучка представлены сразу. Это легко делается в самой программе с использованием операции (Make PicMatrix, C).

8. ПРИМЕРЫ РАСЧЕТОВ ДЛЯ 3D ОБЪЕКТОВ

Расчетов для 3D объектов пока сделано мало. Я приведу в этой главе примеры, с которыми сам протестировал программу. В будущем, возможно, этот раздел станет более полным. ВДП для таких расчетов записываются полностью аналогично случаю 2D объектов, хотя некоторые параметры все же различаются. Определить к какому объекту относятся ВДП очень просто по наличию определения параметра y_0 . Для 3D объектов его нужно обязательно указывать, а для 2D объектов он не используется.

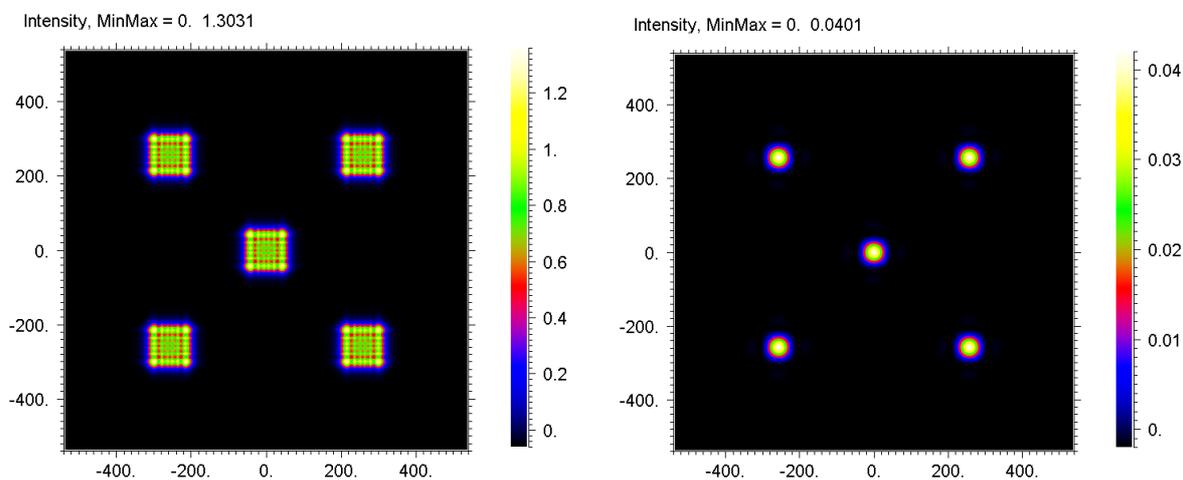


Рис. 8.1. Изображения 5 квадратных щелей с плавными краями.

Расчет квадратных щелей (объект номер 1) сделан точно так же, как и одномерных щелей, только пока нет шероховатости. В частности, может быть много элементов этого объекта и они различаются координатами x_p и y_p центра элемента. Вот первый пример входных данных

$$\begin{aligned}
 0 \ 1 : & \text{nr}=1; \text{pa}=3; \text{d}=1; \text{n}=1024; \text{m}=1; \text{E}=25; \text{x0}=0; \text{y0}=0; \text{z0}=5000; \text{dr}=0; \text{x2}=500; \text{x1}=-\text{x2}; \text{nx}=500; \text{kw}=0; \text{ki}=1; \text{kp}=1; \\
 & \text{dz}=0; \text{nz}=1; \text{no}=1; \text{np}=1; ! \ 2 \ 21 \ 1 \ 1 \ | \ \text{np}=2; ! \ 1 \ 22 \ 2 \ | \\
 1 \ 1 : & \text{z}=1000; \text{mc}=1; \text{sb}=3; \text{na}=5; \text{xp}=0; \text{yp}=0; \text{ss}=100; | \ \text{xp}=200; \text{yp}=200; | \ \text{xp}=200; \text{yp}=-200; | \ \text{xp}=-200; \text{yp}=200; | \\
 & \ \text{xp}=-200; \text{yp}=-200; | \\
 1 \ 2 : & \text{z}=1000; \text{mc}=1; \text{sb}=3; \text{na}=5; \text{xp}=0; \text{yp}=0; \text{ss}=10; | \ \text{xp}=200; \text{yp}=200; | \ \text{xp}=200; \text{yp}=-200; | \\
 & \ \text{xp}=-200; \text{yp}=200; | \ \text{xp}=-200; \text{yp}=-200; |
 \end{aligned} \tag{8.1}$$

Здесь сразу заказаны два варианта щелей, причем различие только в их линейном размере. Вторые щели имеют в 10 раз меньший размер. Границы щелей размыты функцией Гаусса с ПФГ равной 3 мкм в обоих случаях. На рис. 8.1 показаны результаты расчета по программе для этих двух вариантов.

Как можно видеть в ВДП, расчет сделан на сетке с довольно крупным шагом 1 мкм и 1024 точки. То есть размер расчетной области чуть больше 1 мм. На картинке выводится точно 1 мм. Энергия фотонов относительно большая 25 кэВ, расстояние очень большое 10 м. При этом 5 щелей размером 100 мкм показывают интерференционные полосы, характерные для области среднего поля, а щели размером 10 мкм уже показывают изображения в дальнем поле, то есть квадратов не видно и размер изображения больше размера объекта.

Несмотря на очень грубую сетку, картинки вполне разумные. Причина в том, что используемый способ показа зависимостей очень грубый, и он дает только общее представление, не показывая мелкие детали. Но часто и такого представления достаточно для получения какой-то информации. Интересно, что на картинке слева максимум больше 1 из-за интерференции, а на картинке справа он значительно меньше 1, так как излучение увеличено в размере. Обычно считается, что щели только ограничивают пучок, но ничего в нем не меняют. Результаты расчета показывают, что это не всегда так. Особенно для щелей относительно небольшого размера.

Другой пример является типичным примером 3D объекта, и у него нет аналога среди 2D объектов. Наиболее близким к нему среди 2D объектов является волокно, номер 4. Этот объект также имеет номер 4. Это эллипсоид, который описывается тремя диаметрами по трем осям и тремя углами, определяющими ориентацию его собственных осей относительно осей координат экспериментальной схемы.

Математические формулы, которые показывают зависимость его толщины под пучком представлены в документе (xgwr-equations.pdf). Эллипсоид определяется тремя радиусами и тремя углами, а также материалом, из которого он состоит или в котором он находится как пустота. В частном случае, когда все радиусы равны, получаем сферу. В этом случае зависимость от углов исчезает и их можно задавать нулевыми.

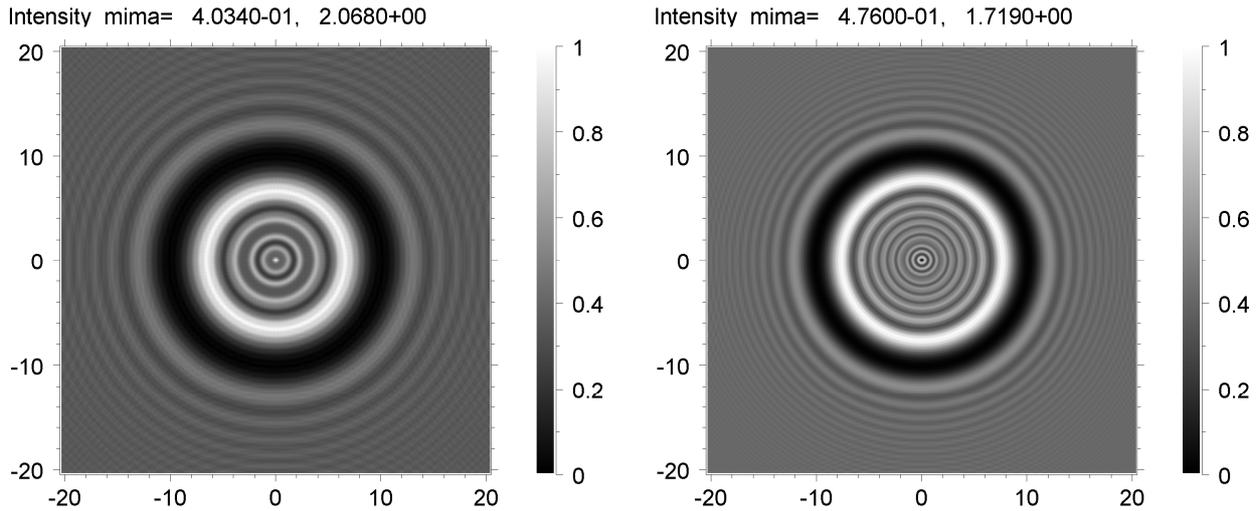


Рис. 8.2. Изображение сферы диаметром 20 мкм на расстояниях 20 м (слева) и 10 м (справа)

Рассмотрим пустую сферу диаметром 20 мкм внутри кристалла сапфира. Для этого задаем 3 радиуса r_1 r_2 r_3 одинаковыми и 3 угла a_1 a_2 a_3 нулевыми. Сфера из материала в пустоте или пустая сфера в материале различаются параметром ph . Входные данные для расчета показаны ниже. Здесь сразу заказано два варианта на расстояниях 20 и 10 см. Энергия 23 кэВ, расстояние до источника 36 м, а знак минус указывает на расчет в режиме фазового контраста. Материал сапфир (Al_2O_3). Кроме того, заказана серая карта цветов.

```
0 1 : nr=1; pa=0; d=0.04; n=1024; m=1; E=23; x0=0; y0=0; z0=-3600; dr=0; x2=20.48; x1=-x2; nx=1024; kw=0; ki=1;
      kp=1; dz=0; nz=1; no=1; np=1; ! 2 21 4 1 |np=2; ! 1 22 2 |
4 1 : z=20; mc=1; na=1; ph=-1; xp=0; yp=0; po=1; r1=10; r2=r1; r3=r1; a1=0; a2=0; a3=0;|
4 2 : z=10; mc=1; na=1; ph=-1; xp=0; yp=0; po=1; r1=10; r2=r1; r3=r1; a1=0; a2=0; a3=0;|
99 1 : # ne=2; Z1=13; n1=2; Z2=8; n2=3; de=3.974; !
```

(8.2)

Результат расчета показан на рис. 8.2. На картинке справа (расстояние 10 м) хорошо видно, что пустая сфера в ближнем поле показывает картинку интерференционных полос, весьма похожую на то, что делает квадратная щель, только тут полосы круглые, а не линейные в двух направлениях как в щели. На расстоянии 20 м интерференция проявляет себя уже более сложным образом. Кольца сжимаются и яркость крайнего кольца увеличивается по сравнению с внутренними кольцами.

Интересным и практически важным вопросом является такой. Насколько хорошо распределение интенсивности по диаметру совпадает с одномерным случаем цилиндра. Если рассматривать горизонтальный диаметр, то полосы, которые через него проходят почти вертикальные. Их кривизна становится все меньше по мере увеличения расстояния от центра.

Этот случай также легко рассчитать. Входные данные те же самые, меняется только $r_2 = r_1 * 900$. Увеличивая радиус эллипсоида по оси Y мы превращаем его в цилиндр.

Результат расчета показан на рис. 8.3. Сразу видно ограничение программы для расчета одномерных объектов. Дело в том, что расчет проводится методом БПФ на конечной области. Даже в режиме фазового контраста необходимо, чтобы трансмиссионная функция равнялась константе на границах этой области. То есть объект должен полностью поместиться в ней.

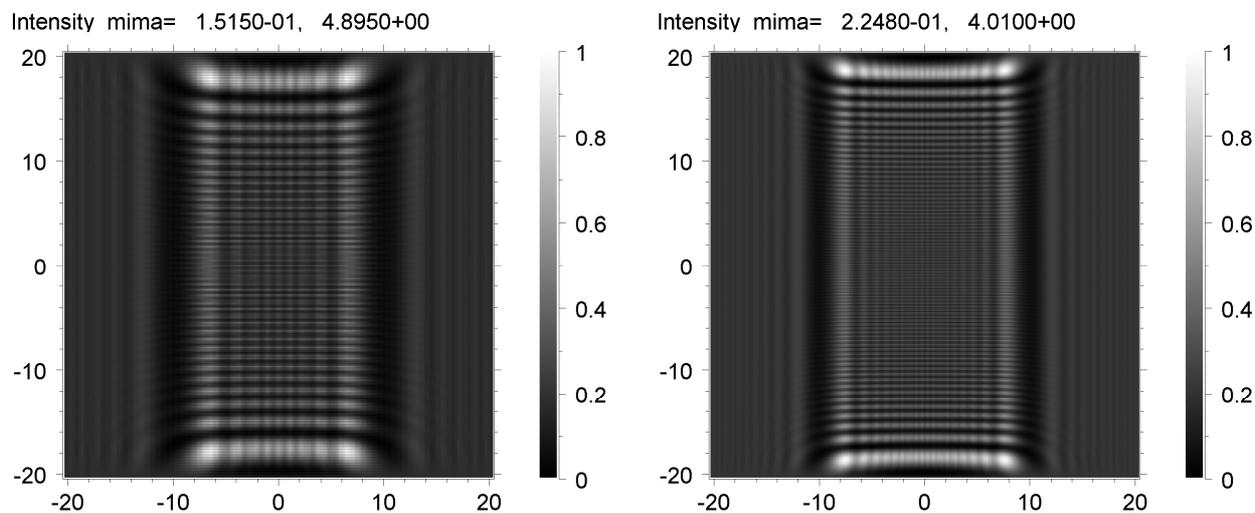


Рис. 8.3. Изображение цилиндра диаметром 20 мкм на расстояниях 20 м (слева) и 10 м (справа)

Но для цилиндра это не так. Особенно на горизонтальных границах. По этой причине конечные размеры области по вертикали рассматриваются как щель и соответственно дают интерференционные полосы, характерные для щели. Как и положено, период этих полос зависит от расстояния. Поэтому он справа меньше, чем слева. Дополнительный контраст мешает сравнивать картинку.

Дело в том, что контраст показывается от минимального (черный) до максимального (белый) значения. А эти значения на двух картинках разные. То есть непосредственно в программе такое сравнение провести все же невозможно. Нужен дополнительный код. Примеры показывают как программой пользоваться и какие ответы получают. Для более сложных объектов необходимы дополнительные данные.

9. О ТОМ, ЧТО ЗА ПРЕДЕЛАМИ И ДОПОЛНИТЕЛЬНЫЕ ВОЗМОЖНОСТИ

У данной программы на самом деле намного больше возможностей, чем представлено выше. Дело в том, что она написана на интерпретируемом языке программирования ACL и находится в оболочке интерпретатора этого языка. А код программ на этом языке пишется текстом, и можно без труда записать очень много самых разных программ без какого-либо увеличения размера файлов программы.

Возможно кому-либо из пользователей не нужно и нет желания всем этим пользоваться, но среди общих программ есть и такие, которые полезны при обработке научных данных или презентации полученных результатов. Очевидно, что использование какой-либо программы требует потратить время на изучение правил ее работы. Обычно у каждого пользователя есть свои инструменты как делать что-то из того, что ему нужно.

Однако жизнь так устроена, что все время что-то меняется и надо сравнивать. Возможно то, что вам предлагают, лучше и удобнее того, к чему вы уже привыкли. И через какое-то время эффективность использования нового окупит затраты на ее изучение. А часто просто бывает интересно узнать что-то новое. Но есть и такое понятие как внештатная ситуация. Что делать если программа не работает или работает не так, как надо. Об этом написано в следующем разделе.

9.1 Тестирование и работа с ошибками

В процессе работы над программой большой степени сложности, которая использует значения многих параметров, разные методы расчета и разные объекты, всегда существует вероятность того, что очередное улучшение в каком то варианте приведет к потере работоспособности программы в другом варианте. Указанные выше примеры можно использовать для проверки работы программы, но это не так быстро, как хотелось бы.

В программах такого типа гибкость в задании ВДП имеет большое значение. С одной стороны, программу можно использовать в учебных целях. При этом желательно иметь заранее заготовленные варианты расчетов, которые бы запускались в один клик. С другой стороны, иногда необходимо за один клик пройти много вариантов с единственной целью проверки правильности работы программы.

Выбранный метод определения ВДП вполне решает все эти проблемы. Для начинающих есть вариант, когда параметры задаются постепенно, сначала общие, затем по каждому объекту отдельно. При этом подсказка о значениях параметров присутствует в том же самом тексте, где они определяются, что удобно при их использовании. Это реализуется кнопками (2) и (3).

С другой стороны, есть возможность создавать базы ВДП, с помощью которых легко провести демонстрацию работы программы в любой ситуации. О таком методе я уже частично писал в разделе 6.5. Рассмотрим этот вариант более подробно. Кнопка (3) открывает таблицу из 99 чисел. Число 99 используется для выхода из цикла. Число 98 запускает процесс редактирования файла (00.txt) в папке (var) внутри папки (vkXRWP) программы. Число 97 позволяет редактировать файл (01.txt) в той же папке.

Используя этот режим работы я собрал в файле (02.txt) все варианты ВДП, которые указаны в этом документе. Их достаточно просто скопировать в некоторые строки текста в таком виде, как они и есть. Затем используя кнопку с числом 98 надо указать параметры вариантов в файле (00.txt). Это три числа в каждой строке, а номером варианта является номер строки в этом тексте.

Первое число – это номер файла (2). Второе число – это номер первой строки варианта. Третье число – это число всех строк в варианте. После того, как оба файла готовы достаточно по кнопке (4) выбрать вариант и по кнопкам (5) или (7) запустить его. Кнопки выбираются из условия к какому варианту относятся ВДП. В файле (02.txt) комментарии можно писать между строками входных данных, а в файле (00.txt) комментарии можно писать справа от трех чисел в каждой строке. В исходной версии программы для скачивания я собрал 21 вариант и все их можно последовательно просмотреть. Некоторые из вариантов сами запускают несколько вариантов расчета. Такой режим ввода данных тоже существует.

На самом деле файл (00.txt) может быть нужен в работе. По этой причине разумно делать копию этого файла, например, в файле (001.txt) и перед тестированием временно заменять исходный файл (00.txt) на этот файл, а потом обратно заменять его на ту копию, которая была спасена до замены.

Но в принципе можно все варианты отдельно для 2D и 3D объектов собрать в одном варианте. Это может относительно долго работать, и результаты надо распределять по разным файлам, так как показывать их сразу не очень удобно. И это совсем не удобно в реальной работе, когда требуется изучить какой-либо один вариант и оптимизировать параметры. Для такой работы как раз наиболее удобной являются кнопки (6) и (8). Но если необходимо просто протестировать программу на работоспособность, то это самый быстрый способ.

Интересно, что такой вариант тоже можно запускать по кнопке (6). Просто его надо готовить в каком-либо внешнем файле и копировать, потому что по кнопке (6) ВДП не сохраняются. Правда в самом файле можно хранить сколько угодно ВДП. Но считываются только первые строки, а ограничителем является строка с менее, чем 5 символами. Я сам обычно использую один символ @.

Для запуска других вариантов, записанных в этом файле, их строки надо переместить на первое место. Такой режим работы также может быть удобен, если вариантов не очень много. В качестве примера я покажу один из таких очень больших вариантов ВДП.

```

0 1 : nr=1; d=0.02; n=64*1024; m=1; E=25; x0=0; z0=5000; dr=0; x1=-35; x2=35; nx=700; kw=0; ki=1; kp=1; dz=0; nz=1; no=1;
    np=1; ! 2 21 1 1 | no=2; np=2; ! 2 23 2 1 | no=3; np=3; ! 4 23 2 2 2 3 | no=2; np=4; ! 2 23 2 4 | no=2; np=5; ! 2 23 2 5 |
    np=6; no=1; ! 2 21 3 1 | np=7; x2=300; x1=-x2; nx=600; ! 2 21 3 2 | np=8; x2=99; x1=-x2; ! 2 21 4 1 |
    np=9; E=12.3984; x1=-2; x2=37.9; nx=400; no=3; ! 6 21 1 2 5 1 5 1 | np=10; x2=80; x1=-x2; nx=400; no=2; ! 4 21 1 2 6 1 |
1 1 : Nr=1; mc=1; sb=1; na=1; xp=0; ss=50; ra=0; z=1; |
1 2 : Nr=1; mc=1; sb=0; na=1; xp=0; ss=1; ra=0; z=0; |
2 1 : Nr=1; mC=1; mc=1; na=1; po=1; nl=300; z=1; |
2 2 : Nr=299; mC=2; mc=1; na=1; po=1; nl=1; xp=0; xe=999; xb=-xe; z=102e-4; |
2 3 : Nr=1; mC=2; mc=1; na=1; po=1; xp=0; xe=999; xb=-xe; z=1; |
2 4 : Nr=1; mC=3; mc=1; na=1; po=1; nl=300; z=1; |
2 5 : Nr=1; mC=4; mc=1; na=1; po=1; nl=300; z=1; z1=0; |
3 1 : Nr=1; mc=1; na=1; xp=0; ss=613; nf=5; ci=-8*3.14159265; cr=ci*2.56e-3; z=1175; |
3 2 : Nr=1; mc=1; na=1; xp=0; ss=380; nf=3; cr=-4*2.2294e-4; ci=-4*1.0953e-1; z=850; |
4 1 : Nr=1; z=100; mc=1; na=3; po=2; xp=0; | po=3; | po=4; |
5 1 : Nr=1; mc=1; na=1; po=5; z=0; z1=1; z2=1; bf=1; qb=0; |
6 1 : Nr=1; z=0; mc=1; na=1; z1=700; nt=1; qb=0; po=6; |
99 1 : # ne=1; Z1=14; n1=1; de=2.33; pl=102; R=6.25; dl=2; !
99 2 : # ne=1; Z1=5; n1=1; de=2.34; R=50; !
99 3 : # ne=11; Z1=5; n1=1; de=2.34; R=15; !
99 4 : # ne=1; Z1=74; n1=1; de=19.3; R=15; !
99 5 : # ne=0; tb=15.09; q0=0; t0=1e9; h0=3.969e-3; h1=-0.24147; h2=3.846e-3; #d 10 r(4) tb bf q0 t0 h0 h1 h2 h1 h2 0 !
99 6 : # ne=0; tb=7.121; t=320; dt=0; h1=-0.2911; h2=0.01193; #d 9 r(4) tb 0 t -0.3992 0.01221 h1 h2 h1 h2 !

```

(9.1)

В указанных входных данных 1-й вариант использует только щель, то есть объект номер 1. Варианты с 2-го по 5-й используют четыре способа расчета СПЛ, то есть объект номер 2. Варианты 6-й и 7-й используют объект номер 3, а именно, киноформ и аксикон. Варианты с 8-го по 10-й используют объекты номер 4, 5 и 6.

Самый общий и удобный способ тестирования программы состоит в использовании внешнего кода. Дело в том, что модули входных данных и вычислений можно запускать не только из меню, но и в коде любой внешней программы. Такие программы могут быть написаны пользователем по кнопке (F). А по кнопке (C) я уже написал программу запуска всех вариантов этого документа, ее номер 3.

Весьма важный вопрос при работе с любой программой такой – что делать, если программа работает неправильно. Возможны несколько вариантов. Первый такой. Программа работает, но результат не тот, который ожидался. В этом случае необходимо внимательно проверить ВДП. А также изучить что происходит если их поменять. Второй вариант – программа перестает работать и указывает на ошибку в коде.

Тут надо понимать, что программа написана на языке ACL и ошибка к коду может быть связана с ней самой. В этом случае тоже надо внимательно изучить ВДП и проверить, все ли правильно задано. Хотя такие ошибки частично отслеживаются и блокируются, но это происходит не всегда, так как вариантов сделать ошибку бесконечно много. Чтобы заново запустить программу достаточно нажать на клавиатуре [Alt] и [U]. Сначала первую клавишу, затем не отпуская ее – вторую. Или выбрать в меню окна [Run] и затем [User's ACLpro].

Третий и самый сложный тип ошибки может быть связан с тем, что сам язык ACL интерпретируется программой, написанной на языке Java (более низкого уровня). И такая программа также может делать ошибки. Хотя это бывает редко, но бывает. Для обнаружения таких ошибок программу интерпретатора надо запускать через bat-файл [run.bat]. Появится окно терминала и именно там может появиться сообщение об ошибке.

Сама программа в этом случае может перестать работать совсем или просто не выдавать результат. Соответственно основное меню тоже не появится. Если интерпретатор перестает работать, то его надо заново запустить, а если нет меню, то его можно восстановить способом, который указан выше.

И надо снова проверить правильность входных данных. Никаких других источников ошибок быть не может. Если же ошибки в ВДП не обнаружено, то надо просто попробовать

изменить ВДП таким образом, чтобы программа работала. Если и это не помогает, то можно написать мне письмо и указать что и как делалось. Я буду разбираться и исправлять.

Надо понимать, что любая программа имеет ограничения на объем памяти, запись параметров и так далее. Поэтому при задании входных данных надо придерживаться разумных решений. Это особенно касается расчетов 3D объектов, где используются двумерные массивы. По крайней мере, все указанные варианты работают и не только они.

9.2 О других программах в основном меню

Данный документ не является полным и основным описанием программы. Это сделано в файле (rules.htm). Не останавливаясь на деталях я все же решил объяснить словами назначение других кнопок меню, которые никак не обсуждались выше. Итак, основные кнопки меню имеют номера от (1) до (8). При этом наиболее часто используется кнопка б для 2D и (8) для 3D объектов, остальные полезны только новичкам и используются в самом начале работы с программой. Они просто альтернативно вводят ВДП и выполняют расчет.

Иногда программа используется с помощью скриптов по сложному сценарию. В этом случае все входные данные должны быть введены заранее и это как раз можно сделать используя кнопки (2) и (3). Так что были бы кнопки, а применение найдется.

Кнопки от (9) и до (В) частично обсуждались. Дело в том, что основной расчетный модуль показывает только одномерные зависимости на графиках с осями аргумента и функции. Это обеспечивает программа, которая способна показывать серию графиков один за другим, да еще и в цикле. При этом переход к новому графику выполняется при нажатии клавиши пробела, а выход из цикла (и показа) – при нажатии клавиши [Esc]. Кликать на таких графиках нет смысла, так как программа на это не реагирует.

Но иногда программа для одномерных расчетов вычисляет двумерные зависимости функции сразу от двух параметров. И сама она такие зависимости не показывает, а просто записывает числовые массивы в файлы. Чтобы посмотреть эти файлы как раз и необходимы кнопки от (9) до (В). Первая кнопка (9) показывает анимацию зависимости от первого параметра, а изменение второго параметра происходит во времени. В этом и состоит анимация. Такой способ показывает зависимость от первого аргумента максимально точно, но ее изменение при изменении второго аргумента нужно долго смотреть. Есть возможность выбирать сечения.

Вторая кнопка (0) показывает сразу двумерную зависимость, но с низкой точностью, которая изображается цветом. Это стандартная форма показа такой зависимости и она широко используется в научных публикациях. Именно такие картинки показаны выше в основном тексте. Как работать с этими программами написано в самих файлах их входных данных и в полном описании программы.

Третья кнопка (А) показывает снова двумерный массив, но другим способом. Она показывает максимально точно все сечения на одном рисунке. Но каждое новое сечение смещается вправо и вверх и показывается не полностью, а только те части, которые не закрываются предыдущими сечениями. Такую форму показа я называю квази 3D графикой. Тут компромисс состоит в том, что достаточно точно показываются не все зависимости, а только самые первые. Чем больше номер сечения, тем меньше его видно. По этой причине такие рисунки обычно делаются в двух вариантах, в прямом и обратном порядке сечений. Это выглядит как просмотр спереди и сзади.

Четвертая кнопка (В) использует принцип трехмерного пространства. Два аргумента и функция представляются как координаты x , y , z трехмерной точки. Выбирается точка зрения, то есть не только направление, но и расстояние и рисуется аксонометрическая проекция трехмерного тела, причем снова устраняются невидимые линии, чтобы было легче представить объект. Если зависимости по разным осям имеют разные единицы и не соизмеримы, то перед рисованием координаты по осям X и Y масштабируются так, чтобы размеры объекта по этим осям были примерно равны размеру по оси Z , который берется за основу.

Если расстояние до точки зрения большое размеры объекта не искажаются параллаксом, а противном случае передние части объекта будут больше задних частей. Выбирая разные точки зрения можно увидеть объект со всех сторон. Такого типа рисунки также часто показываются в научных публикациях. Но так можно показать не все точки массива, так как в программе есть ограничения на число точек. Если точек в массиве очень много, то перед рисованием его надо проинтерполировать на меньшее число точек, причем их произведение не может быть больше 65536. Разумно однако делать около 100 точек по каждому направлению, иначе рисунок будет весь черный от пересекающихся линий. То есть такой рисунок хорош для презентаций и общего представления.

Кнопка **(C)** вообще говоря не очень-то и нужна. Просто в самом начале основные параметры расчета сразу записывались в файл (inpr00.txt) в одну строку. И по умолчанию это была первая строка. Но можно записывать параметры в любую строку этого файла. И если варианты с файлами (curvar.txt) по кнопке 6 или кнопка 5 не используются, то любую строку файла (inpr00.txt) можно использовать для расчета.

Однако в программе задан номер первой строки. И вот как раз кнопка **(C)** позволяет это изменить на время до следующего изменения или до выхода из программы. То есть новый номер не действует вечно. При перезапуске программы снова будет установлен номер первой строки.

Кнопка **(D)** запускает специальную программу, которая выдает некоторые параметры пучка СИ после фокусировки СПЛ на основе аналитической теории. Иногда это может быть полезно. Так можно узнать фокусное расстояние, полуширину гауссова пучка СИ на любом расстоянии, влияние размера источника и кое-что еще.

Кнопка **(E)** запускает специальную программу помощника, которая выполняет серию операций, которые необходимы для нестандартной работы. Например, для копирования или переименования файлов, выделения кусков из числовых матриц и так далее. По замыслу код таких операций я (автор) пишу сам и сам же описываю что они делают. Есть специальный файл (hlpinfo.pdf), в котором записана информация об этих операциях. Они будут прирастать постепенно от версии к версии, а некоторые из них будут потом переноситься в другие формы.

Эта программа снова показывает 99 чисел, 1-е используется для информации, 99-е – для выхода из цикла, остальные выбирают нужную операцию. При этом сами операции возникают постепенно, по мере необходимости. Именно здесь по номеру 3 можно провести тестирование программы по 21 варианту.

Кнопка **(F)** показывает картинки. Так как программа создает много графиков, то нужен инструмент для их быстрого просмотра. Программ, которые показывают картинки в форматах png (или jpg), очень много. Лично я часто использую программу (FastStone Image Viewer). Но кнопка **(F)** тоже может быть использована для этой цели. Она показывает графики в указанных файлах и имеет средства навигации. В новой версии программы эта кнопка предлагает два варианта просмотра графиков и рисунков.

Первый вариант сразу показывает все файлы папки (pic) и при этом в папке не должно быть файлов другого типа. Показывается таблица иконок всех картинок, точнее серия таблиц по 25 штук в каждой, а затем и по требованию (клик на иконке) – сама картинка, которую выбрал пользователь. У программы есть свое описание, которое можно прочитать по кнопке **(H)** и в интернете. Картинки показываются в браузере и масштабируются на ширину его окна.

Второй вариант показывает все папки, нужную папку можно выбрать, начиная с папки (pic). В выбранной папке показывается каталог файлов и один клик показывает иконку выбранного файла. Двойной кликом или кнопкой выбора показывает саму картинку в натуральную величину, то есть с теми размерами, с какими она была записана в файл.

Кнопка **(G)** выше обсуждалась. Она очень просто и быстро создает матрицу картинок из нескольких файлов в одном файле. Это можно использовать для вставки матрицы картинок в какой-либо документ, либо в презентацию. Матрица картинок может быть показана на сайте

или в социальных сетях. Важно, что данная операция сразу открывает папку (pic) где находятся все картинки, которые создает программа.

Кнопка **(H)** ориентирована на тех пользователей, которые умеют писать программы на языке ACL. Например, для расчетов типа калькулятора. Расчеты и показ их результатов на языке ACL делаются очень просто и этому можно научиться за 10 минут. Достаточно прочитать небольшой текст в описании языка на моем сайте. Но реально по этой кнопке можно написать код программы любой степени сложности и выполнить его. Иногда это бывает даже удобнее, чем использовать другие средства работы с ACL. Дело в том, что можно использовать все процедуры, которые определила сама программа, ведь этот код как бы станет частью этой программы.

Кнопка **(I)** может быть интересна научным работникам, публикующим статьи в западных научных журналах. Она запускает программу, которая по числовым файлам способна создавать 1D и 2D графики в eps и pdf форматах. Причем сразу в виде, который удовлетворяет стандартам научных публикаций. Как это делается и что для этого нужно записано в файле с входными данными программы.

Наконец, кнопка **(J)** закрывает данную программу. Но само окно интерпретатора остается. После закрытия программы становится активным меню этого окна. И программу можно снова запустить из меню или по клавишам [Alt] и [U], как указано выше. Но и это еще не все. Можно запускать большую серию программ из меню (General) и (Popular). Это программы общего назначения, которые не имеют прямого отношения к рентгеновской оптике. Вкратце я расскажу о них в следующем разделе.

9.3 Об универсальных программах общего назначения

Универсальные программы общего назначения являются как бы элементами операционной системы и общей работы на компьютере независимо от специальности пользователя. К ним обычно относятся программы работы с файловой системой, редакторы текстов, программы работы с картинками (изображениями), а также звуком и видео. Таких программ обычно бывает много и самых разных.

Среди программ работы с текстами отдельно выделяют разные форматы и вообще форматирование. Это могут быть простые тексты, офисные документы, интернет сайты, электронные книги разных форматов, postscript и pdf файлы и так далее. Среди программ работы с картинками можно выделить программы презентации, слайд-шоу, создания слайдов и так далее.

Современные операционные системы уже обеспечивают пользователей такими программами, но как и велосипед можно изобретать бесконечно, так и все эти программы также не могут всех устроить и не всегда всем удобны. С другой стороны, средств для создания таких программ тоже много, и можно изобретать новые формы.

Язык программирования ACL фактически создавался не только для расчетов, но и для создания таких программ в форме, максимально удобной для их автора. И эти программы создавались и развивались в течение многих лет параллельно с развитием языка программирования. В меню окна интерпретатора они вызываются по кнопкам (Run), (General) и (Popular).

Соответственно, каждая из них может запускаться и по горячим клавишам, которые также указаны в меню. Небольшое описание этих программ можно почитать в меню (Program) => (Help) => (How to work). Но про них есть и отдельное описание на моем сайте. Вот ссылка <http://kohnvict.ucoz.ru/vkacl/aclprolist.pdf> . Есть также 8 лекций, записанных на моем канале Ютуба, вот ссылка на канал

<https://www.youtube.com/channel/UCUXuUB3az5ZW-dUwXnT0RvQ/videos> .

Указанные сайты описывали более старые версии этих программ, так как со временем они продолжают развиваться. Но наиболее точное описание как с ними работать есть в них самих, либо в виде подсказок, либо внутри файла ВДП.

В данном документе нет смысла подробно их описывать, так как основную работу можно выполнить без их использования. Более того, я еще не все программы протестировал для работы с новой среде данной программы. Но это дело времени и в будущем все они будут хорошо работать, а наиболее массовые программы и сейчас уже работают. Просто надо знать о том, что у программы есть дополнительные возможности значительно упростить и облегчить работу не только по добыванию научной информации, но и по ее оформлению в документах и представлению для рекламы.

10. СПРАВОЧНИК

Так как программа является универсальной и призвана решать задачи симулирования экспериментов с самыми разными объектами, то у нее вовсе не простые ВДП. Программа написана на уникальном языке программирования, который записывается текстом и весьма компактно. Компактность является главным приоритетом, потому что к любой абстракции можно привыкнуть, а вот писать много букв всегда утомляет и к этому привыкнуть невозможно.

ВДП представляют собой фактически часть кода программы, которая вынесена в отдельные файлы. Это самая простая часть кода, которая присваивает числовые значения переменным, но иногда необходимо использовать и несколько более сложные конструкции. Фактически можно использовать любые конструкции языка, потому что запись ВДП реально исполняется программой. В данном справочнике дается минимальная информация по всем параметрам, которые используются в программе с описанием их смысла.

Параметры разделены на общие параметры и параметры объектов, которые распределены по файлам с разными номерами. По этой причине в скобках {nn} указаны номера объектов, для которых параметры используются. Объекты с 1-го по 6-й описываются и симулируются примерно одинаково с использованием метода БПФ. 7-й объект считается совсем иначе и имеет много параметров, которые выписаны в отдельную таблицу.

Кроме того, некоторые объекты используют дополнительную информацию, которая может быть общей для нескольких объектов. Справочник только помогает вспомнить то, что пользователь знает, но неточно. Для полного понимания как используются параметры ВДП нужно читать полное описание программы.

10.1 Основные параметры входных данных программы

a1,a2,a3 – углы эллипсоида {04 – 3D}

bf – фактор асимметрии {05}

cr – реальная часть комплексного коэффициента в аргументе экспоненты {03}

ci – мнимая часть комплексного коэффициента в аргументе экспоненты {03}

d – шаг расчетной сетки точек в реальном пространстве (мкм) {00}

dr – полуширина функции Гаусса для усреднения интенсивности на детекторе (мкм) {00}

dz – шаг по оси Z при расчете матрицы (nx,nz) движения по пустому пространству (см) {00}

E – энергия фотонов в кэВ {00}

kw – ключ записи волновой функции, 0 – не записывать, 1 – записывать {00}

ki – ключ записи интенсивности, 0 – не записывать, 1 – записывать {00}

kr – ключ показа анимации по картинкам, 0 – не показывать, 1 – показывать {00}

n – число точек расчетной сетки, расчетная область (PO) равна n·d {00}

na – число элементов в массиве объекта (все объекты с ТФ)

nf – номер файла с числовым массивом толщины в папке (obj) {03}

nl – число элементов в СПЛ {02}

no – число объектов, которые рассматриваются в данном варианте {00}

pr – номер файла для записи интенсивности в данном варианте (не более 999) {00}
 Nr – число повторений объекта и расстояния, обычно = 1 (все объекты)
 nr – число повторений расчета с изменением разных параметров в цикле, обычно = 1 {00}
 nt – номер перехода при дифракции по Лауэ, от 0 до 5, 2-й разряд 0 или 1 {06}
 px – число точек в массиве, который выводится на график {00}
 pz – число точек по оси z при расчете матрицы (px,nz), обычно = 1 {00}
 m – расширитель расчетной сетки для метода БПФ, обычно = 1 {00}
 mc – метод учета расстояния после объекта (1 или 2) (все объекты)
 mC – метод расчета СПЛ (1,2,3,4) {02}
 po – номер строки в файле parobj.txt, где записаны данные о объекте (все объекты)
 pa – номер карты цветов для 3D объектов {00}
 ph – знак пустоты для эллипсоида {04 – 3D}
 qb – волновой вектор сдвига по энергии, $= -K*(DE/E)*tg(tb)$ {05,06}
 r1,r2,r3 – радиусы эллипсоида {04 – 3D}
 ga – высота шероховатости одной поверхности внутри щели (мкм), обычно = 0 {01}
 gp – период шероховатости в шагах сетки, лучше чтобы целое число {01}
 rk – номер файла с массивом случайных чисел. {01}
 sb – ширина границы щелей в массиве одного объекта {01}
 ss – размер одного элемента в массиве объекта (мкм) {01, 03}
 x0 – сдвиг точечного источника из центра РО (мкм) {00}
 x1 – значение координаты первой точки области на график (мкм) {00}
 x2 – значение координаты последней точки области на график (мкм) {00}
 xb – координата начала области данной ДСПЛ (мкм) {02}
 xe – координата конца области данной ДСПЛ (мкм) {02}
 xp – координата центра одного элемента в массиве объекта (мкм) {01,02,03,04}
 y0 – сдвиг точечного источника из центра РО (мкм) для 3D объектов {00}
 yp – координата центра одного элемента для 3D объектов (мкм) {01,02,03,04}
 z – расстояние после объекта (см) (все объекты)
 z0 – расстояние от точечного источника до первого объекта (см) {00}
 z1 – расстояние после объекта (см) для расчета ДСПЛ при mc = 4 {02,05,06}
 z2 – расстояние после кристалла (см) {05}

10.2 Дополнительные параметры входных данных программы

Эти параметры не имеют номера в имени файла и записываются в файл parobj.txt. В некоторых способах задания ВДП этому файлу присвоен номер 99. В отличие от других файлов, где выполняется только присваивание значений переменным, в этом файле нужно писать чистый код программы на языке ACL. При этом перед записью присваиваний надо писать символ (#) и пробел после него. А после присваиваний символ (!). Но могут быть использованы и другие команды. Некоторые параметры этого файла могут совпадать с другими параметрами. Это не приводит к ошибкам, так как входные данные используются последовательно.

Для объектов {1},{2},{4}

надо указать следующие параметры

pe – число элементов в химической формуле материала (< 5)

Z1,n1,Z2,n2,Z3,n3,Z4.n4 – атомный номер и число атомов в химической формуле материала

de – плотность (г/см³) материала, соответствующего химической формуле

R – радиус (мкм) сечения волокна или кривизны поверхности одного элемента СПЛ

pl – длина (мкм) одного элемента СПЛ

d_l – толщина (мкм) перемычки (материала между поверхностями) элемента СПЛ

Данные в первых трех строках используются для расчета индексов преломления и поглощения δ и β , которые в программе записаны как (de) и (be). Параметр (ne) может иметь 1 во втором разряде, которая указывает, что эти параметры будут определены с противоположным знаком. Это иногда требуется для описания сложной структуры объекта. Если $ne < 4$, то лишние Z_k и nk можно не определять.

Для объекта {5}

надо определить $ne=0$ и 10 элементов реального массива начиная с 4-го если делается расчет для одного слоя кристалла (подложки). В эти элементы надо задать любым способом значения таких параметров: tb – угол Брэгга в градусах, bf – фактор асимметрии (он определяется ранее и надо передать его значение), $q_0 = -K*a$ – волновой вектор углового сдвига кристалла в 1/мкм (K – волновое число, a – угол), $t_0 = t/\gamma_0$ – эффективная толщина подложки ($\gamma_0 = \cos(a_0)$, a_0 – острый угол между направлением пучка (оптическая ось) и нормалью к поверхности кристалла), $h_0 = X_{0i}$, $h_1 = X_{hr}$, $h_2 = X_{hi}$, $h_3 = X_{-hr}$, $h_4 = X_{-hi}$, 0. Здесь $X_{mk} = K*\chi_{mk}$, χ_{mk} – компонента Фурье поляризуемости кристалла на векторе обратной решетки m , $k=r$, если реальная часть, и $k=i$, если мнимая часть. Последнее значение должно быть равно нулю. Вот пример как это может выглядеть для кристалла с центром инверсии.

```
# ne=0; tb=15.09; q0=0; t0=9e9; h0=3.965e-3; h1=-0.24144; h2=3.842e-3; #d 10 r(4) tb bf q0 t0 h0 h1 h2 h1 h2 0 !
```

Такая конструкция удобнее читается теми, кто знает язык ACL. Для тех, кто не знает я показываю альтернативную запись этих же входных данных

```
# ne=0; r(4)=15.09; r(5)=bf; r(6)=0; r(7)=9e9; r(8)=3.965e-3; r(9)=-0.24144; r(10)=3.842e-3; r(11)=-0.24144; r(12)= 3.842e-3; r(13)=0; !
```

Вторая запись полностью эквивалентна первой и определяет параметры непосредственно так, как они потом и будут использоваться. А в первой записи вместо того, чтобы сразу определять элементы массива, сначала определяются значения переменных и потом эти значения пересылаются в элементы массива с использованием более компактного оператора языка ACL #d .

Если над подложкой в кристалле есть еще слои (отсчет идет снизу вверх), то последний параметр должен быть равен числу этих слоев и для каждого слоя надо задать дополнительно 7 параметров q_0 , t_0 , h_0 , h_1 , h_2 , h_3 , h_4 . Значения всех параметров дифракции следует вычислять для заданной энергии фотонов в отдельной программе.

Для объекта {6}

надо определить $ne=0$, dt и 9 элементов реального массива начиная с 4-го, способ задания аналогичен предыдущему объекту и выглядит так, как показано в примере, который соответствует Ge, 220 и $E = 25$.

```
# ne=0; tb=7.121; t=500; dt=0; h1=-0.2911; h2=0.01193; #d 9 r(4) tb 0 t -0.3992 0.01221 h1 h2 h1 h2 !
```

Отличие лишь в том, что здесь параметр t указывает толщину кристалла по нормали и дополнительно параметр dt указывает изменение толщины при расчете с повторением (в цикле), когда параметр $nr > 1$. И не надо писать 0 в конце.

10.3 Параметры части программы для решения уравнений Такаги

Решение уравнений Такага – это самостоятельная и весьма сложная задача, но именно таким способом можно смоделировать дифракцию СИ в кристаллах произвольной формы и структуры. Метод преобразования Фурье, который используется для всех других объектов и для переноса СИ по воздуху, в данном случае не решает задачу, если имеется неоднородность структуры в двух направлениях, как по нормали, так и вдоль поверхности.

Тем не менее, удобно включить эту задачу в общую схему расчета, потому что излучение, падающее на такой кристалл и выходящее из него, все равно проходит другие объекты и данная задача является частью более общей задачи. Структура входных данных сформировалась частично случайно, частично связана с методом расчета. Она частично использует общие параметры, но есть и много параметров, характерных только для этого объекта. К кратким описаниям некоторым параметрам необходимы комментарии.

Итак, вот **список**

tb – угол Брэгга в градусах, есть особенность, см примечание **0
 X1, X2, X3, X4 – параметры дифракции $K \cdot h_i[0, h]$ кристалла для 0 и h отражений **1
 X5, X6 – то же для аморфной среды
 d0 – шаг расчетной сетки по нормали к поверхности кристалла, т.е. по оси Z (мкм)
 N0 – число шагов сетки по оси Z
 N1 – число шагов сетки по оси X, т.е. вдоль поверхности, шаг вычисляется **2
 A – угловое отклонение кристалла от точного положения Брэгга в радианах
 kR – указывает как программа использует параметры и выдает результат **3
 dR – указывает число пропущенных точек сетки при записи картинки (когда kR=1) **4
 mC – указывает вариант расчета **5
 Q – набор ключей для разных режимов работы программы, **6
 Mt, Mr – если $Mt \cdot Mr \geq 1$, то берется $\ln(I)$, значения снизу равны Max/Mb, b = t, r
 V – номер варианта, он записывается в имена файлов
 ng – сдвиг точки по оси X из начала, для которой строятся графики зависимости от z. **7
 ct – толщина кристалла в случае Брэгга (ширина в случае Лауэ) в мкм при kR2=0. **3

Вот комментарии

**0 можно задавать отрицательное значение. В этом случае используется модуль, а знак служит сигналом, что область для расчета матрицы нужно выбирать по точке номер 3 (в соответствии с рис. 1 статьи [10]). Если она в кристалле, то матрица кристалла, если в пустоте, то перенос. Другие матрицы границы кристалл-вакуум не используются. Режим сделан для сравнения с более точным расчетом.

**1 нужно задавать произведение волнового числа на компоненты Фурье поляризуемости кристалла в 1/мкм, точные значения со знаком минус у реальной части. Предполагаются кристаллы с центром инверсии, для которых параметры не зависят от направления вектора обратной решетки.

**2 шаг сетки по оси x, т.е. $dx = 2 \cdot d0 \cdot tg(tb)$

**3 Этот параметр имеет три независимых разряда, назовем их kR3, kR2, kR1, где номер указывает позицию разряда при отсчете справа налево. Если kR1=0 то результат расчета выдается только в конце как комплексная ВФ в последней точке оси Z и во всех расчетных точках, сначала массив R, потом массив T. Если kR1=1, то результат выдается только в объеме кристалла (картинка) с учетом пропущенных шагов, которые задает параметр dR. Если kR1=2, то делается как в первых двух случаях одновременно. При этом сначала выдается картинка, а сразу вслед за ней расчетные точки в конце расчета. Пропускать точки для картинки необходимо по той причине, что массив может быть очень большим. Параметр kR2 указывает тип задания формы кристалла, он может принимать значения от 0 до 9 для 10 вариантов. Пока есть всего один с номером 0, в котором задается параметр ct (мкм). Это ширина кристалла по центру расчетной области для геометрии Лауэ (толщина для геометрии Брэгга). Параметр ct надо определить во входных данных. Параметр kR3 делает то же самое для формы аморфной области. Номера те же и могут комбинироваться. Пока есть значение 0, по которому аморфной области нет, и 1, при котором аморфная область имеет форму гиперболы на входной границе кристалла. Гипербола определяется двумя параметрами: zd (мкм) означает глубину области, xd означает проценты от величины $zd \cdot tg(tb)$. Проценты не могут быть больше 100.

**4 два параметра в одном числе, по два разряда на каждый параметр. Старшие разряды для оси X (sx), младшие -- для оси Z (sz). Для правильной работы программы нужно задавать

четное число N_0 и нечетное число пропусков по оси Z , то есть sz . Также разумно задавать четное число N_1 , а для сохранения формы $sx=sz$. На самом деле оптимально задавать число N_0 так, чтобы остаток от деления $(sz+1)$ был не более, чем 2. А число N_1 так, чтобы нацело делилось на $(sx+1)$. Причина в том, что остальные точки не показываются.

****5** Это двухразрядное целое число. Младший разряд определяет вариант расчета. Есть 4 варианта, соответствующие значениям 0, 1, 2, 3. По другому я эти типы расчета называю как схемы СЛ, СБ, РЛ, РБ. Здесь первая буква взята от слов Сходящаяся и Расходящаяся, вторая буква от слов Лауэ и Брэгг. Значение 0 (СЛ) указывает на первоначальный тип расчетов, описанный в первых публикациях, при котором входные данные задаются в области с числом точек N_0+N_1+1 , а результат выдается в полосе с числом точек N_1+1 либо в конце, либо при всех значениях z . Значение 1 (СБ) указывает на второй тип расчетов, в котором входные данные и выдачи результатов те же самые, но за пределами области шириной $N_1 \cdot dx$ предполагается вакуум и это учитывается автоматически. Точки по вакууму переносятся без умножения на матрицу. Они нужны, чтобы засветить левую (падающим пучком) и возможно правую (отраженным пучком) поверхности, которые находятся внутри расчетной области. Вообще говоря задать кристалл такой ширины можно и другим способом, но тогда в результат не попадет область вне кристалла. А это важно для продолжения расчета. Кроме того, вакуум через форму кристалла определяется немного дольше. Хотя разница во времени невелика, но сделать такой режим совсем не трудно и иногда он может быть полезен. Значение 2 указывает на расходящуюся схему аналогично значению 0. Но в этом случае входные данные задаются в области с числом точек N_1+1 , а результат выдается в полосе с числом точек N_0+N_1+1 . Внутри этой полосы есть нулевые значения для ВФ при малых значениях z , то есть за пределами треугольника Бормана. Эти нули записываются автоматически, без выполнения расчета. Это схема секционной топографии. Она дает ответ в треугольной области сразу, но нули приходится записывать, так как картинки прямоугольные. Значение 3 указывает на расходящуюся схему аналогично значению 1. То есть предполагается, что за пределами области шириной $N_1 \cdot dx$ находится вакуум и это автоматически учитывается. Картинки записываются в папку [pic] с именами файлов типа t000mR.png и t000mT.png для отраженного и падающего пучка. В схеме ГБ дополнительно записываются кривые на оси Z при фиксированном значении x . Показываются числа из матрицы картинки, сдвиг делается на заданное число строк (после транспонирования матрицы). Это число определяет параметр ng . При $ng=0$ показывается ВФ на входной поверхности кристалла. Кривые записываются в файлы с именами t000pR.png и t000pT.png и оказываются на экране. Числовые матрицы для картинок записываются в папку [data] с названием t000.dat, оба пучка в одном файле, сначала отраженный, потом проходящий. Дополнительно в папку [doc] записывается файл t000.txt, где указывается число точек n_1 , n_2 в числовых файлах и число точек n_3 при интерполяции на одинаковый шаг по обоим направлениям. И еще кое-какая информация. В именах файлов 000 заменяется на значение параметра V . Старший разряд пока не используется. Сейчас работает режим, в котором в массиве $r()$ сразу за входной ВФ должны быть размещены два массива из N_0+1 пар координат (x_1, x_2) для каждой точки по оси Z . Аморфная область на оси X находится между точками первого массива. Он берется из файла (rbam.dat). А второй массив определяет форму кристалла. То есть в точках за пределами этого интервала вакуум. Он берется из файла (rbcr.dat). Координаты в массивах задаются в мкм. Так происходит если $Q_2=0$, а если $Q_2=1$, то эти массивы вычисляются и записываются в файлы. При вычислении массивов могут быть варианты. Номер варианта определяют параметры kR_2 и kR_3 (см. замечание ****3**). Пока работают только номера 0 для обоих массивов. Старший разряд использовался раньше и имел много значений, назовем его mC_1 . Со временем это будет частично восстановлено в несколько измененном виде. Раньше было так, что если $mC_1=1$, то аморфная область состоит из трех кусков. Первый кусок находится между x_1 и x_2 и начинается при $z=z_1$, а затем с ростом z до $z=z_2$ она постепенно увеличивается влево на левый шаг, умноженный на параметр Co , и то же самое вправо. В симметричном случае левый и правый шаги равны

$dx/2$. Второй кусок находится при $x < x_1$ и $z_3 < z < z_4$. Третий кусок находится при $x > x_2$ и $z_5 < z < z_6$. Параметры x_1 и x_2 , z_1 , ..., z_6 измеряются в мкм. Если $mC_1=2$, то параметры z_d , x_d определяют центр круглой аморфной области в мкм, а R_1 -- ее радиус в мкм. Если $mC_1=3$, то параметры z_d , x_d определяют центр круглой области кристалла в мкм, а R_2 -- ее радиус в мкм, а за пределами этой области среда аморфная.

****6** В общем случае Q -- это целое число из 9 разрядов, каждый из них независимо определяет какой-то режим работы. Обозначим их слева направо как Q_1, \dots, Q_9 . Нули слева можно не писать. Если $Q_9 = 1$, то при $kR = 1$ или 2 рисунок (x, z) зависимости делается с разметкой (оси, шкала цветов, текст сверху), а если $= 0$, то голая картинка. Если $Q_8 = 1$, то картинки и графики показываются, а если $= 0$, то просто записываются файлы без показа. Если $Q_7 = 1$, то программа показывает ось Z горизонтально, а если $= 0$, то вертикально. Если $Q_6 = 1$, то программа показывает время работы Java модуля для решения уравнений Такаги, размер массива матрицы, который она создает, а также саму матрицу значений волновой функции в файл `data/t000tm.dat`. Если $Q_5 = 1$, то из файла (`waves.dat`) сразу считываются ВФ для обоих пучков на правильной расчетной сетке, а если $= 0$, то учитываются предыдущие объекты и выполняется интерполяция. Если $Q_4 = 1$, то показывается график падающей волны, а если $= 0$, то программа работает в обычном режиме. Если $Q_3 = 1$, то показывается график всех точек, которые выдает Java процедура, и расчет заканчивается (режим отладки), а если $= 0$, то программа работает в обычном режиме. Если $Q_2 = 1$, то граница кристалла и аморфной области вычисляется и записывается в файл, а если $= 0$, то считывается из файла. Если $Q_1 = 1$, то максимальное значение двумерных массивов обрезается на 2, если оно больше 2. Так может быть только в результате ошибок в расчетах. При значении 0 ничего не происходит.

****7** Имеются в виду точки матрицы, которая рисуется на картинках, то есть с учетом пропущенных расчетных точек и после интерполяции. Для первой точки должно быть значение 0. Если ng меньше нуля, то графики не строятся. Они также не строятся если Q_7 не равно 1. Правда они могут быть построены если $ng = -abs(Q_7-1)$.

10.4 Входные данные расчетов в некоторых научных статьях

В статье [12] рассчитано фазово-контрастное изображение фотонного кристалла в схеме рентгеновского микроскопа. Фотонный кристалл имел относительно малую толщину и рассматривался как фазовый объект, который описывается ТФ. Для данной программы – это объект номер 3. Перед объектом была установлена СПЛ, то есть объект номер 2. Для объекта номер 3 необходимо вычислить и записать в файл профиль толщины. В данном случае это было 11 периодов размером 0.5 мкм, внутри которых цилиндры диаметром 0.3 мкм.

Профиль толщины можно вычислять любым способом, но данные должны быть записаны в компьютерном коде float языка Java, то есть 4 байта на число. При использовании программ системы Виндовс необходимо менять порядок байтов на обратный. Наиболее удобно делать расчеты на языке ACL. Вот как выглядит код программы для такой работы на этом языке. Он записан в список Help Operations с номером 7.

```
# n=1365; m=(n-1)/11; d=0.5/m; r(1)=0; j=1; x=0; x1=d*m/2; R=0.15; R2=R*R;
#rep m # x=x+d; j=j+1; a=x-x1; b=R2-a*a; &=(b*1e9)<1; r(j)=0; #case 1 # r(j)=2*sqr(b); #end | #end # j=j+1;
#rep 10 #pas m r(2) r(j) # j=j+m; #end #d 7 A 1 n 1 1 247 1100 #pr obj/obj004|obj004\E #e [n=1;] _scom
#io [op=wd; mo=1; file=obj/obj004.dat; fir=r(1); n=n;]
```

(9.1)

Здесь профиль толщины вычислен для одного ряда фотонного кристалла, а число рядов входит как множитель в параметры sg и ci . Входные данные для 8-ми графиков, показанных в статье на рис. 3 и 4 выглядят следующим образом

```
0 1 : nr=1; d=0.004; n=64*1024; m=1; E=25; x0=0; z0=5000; dr=0; x2=5; x1=-x2; nx=401; kw=0; ki=1; kp=1; dz=0;
      nz=1; no=3; np=1; ! 6 21 1 1 2 1 3 1 | np=2; nx=2001; ! 1 26 2 | np=3; nx=1001; ! 1 26 3 | np=4; nx=1001; ! 1 26 4
      | np=5; x2=5; x1=-x2; nx=501; ! 4 23 2 2 3 4 | np=6; x2=10; x1=-x2; nx=501; ! 4 23 2 2 3 5 | np=7; x2=20; x1=-x2;
      nx=501; ! 4 23 2 2 3 6 | np=8; x2=40; x1=-x2; nx=501; ! 4 23 2 2 3 7 |
1 1 : Nr=1; z=0; mc=1; sb=1; na=1; xp=0; ss=50; ra=0; |
```

2 1 : Nr=1; mC=4; z=12.1664; z1=0; mc=1; na=1; po=1; nl=150; |
 2 2 : Nr=1; mC=4; z=2.5664; z1=0; mc=1; na=1; po=1; nl=150; |
 3 1 : Nr=1; z=0; mc=1; na=1; xp=0; ss=5.46; o=30; cr=-2.569e-4*0.3*o; ci=-9.794e-2*0.3*o; nf=4; |
 3 2 : Nr=1; z=0.01; mc=1; na=1; xp=0; ss=5.46; o=30; cr=-2.569e-4*0.3*o; ci=-9.794e-2*0.3*o; nf=4; |
 3 3 : Nr=1; z=0.1; mc=1; na=1; xp=0; ss=5.46; o=30; cr=-2.569e-4*0.3*o; ci=-9.794e-2*0.3*o; nf=4; |
 3 4 : Nr=1; z=0.4; mc=1; na=1; xp=0; ss=5.46; o=30; cr=-2.569e-4*0.3*o; ci=-9.794e-2*0.3*o; nf=4; |
 3 5 : Nr=1; z=1.2; mc=1; na=1; xp=0; ss=5.46; o=30; cr=-2.569e-4*0.3*o; ci=-9.794e-2*0.3*o; nf=4; |
 3 6 : Nr=1; z=2.8; mc=1; na=1; xp=0; ss=5.46; o=30; cr=-2.569e-4*0.3*o; ci=-9.794e-2*0.3*o; nf=4; |
 3 7 : Nr=1; z=6.0; mc=1; na=1; xp=0; ss=5.46; o=30; cr=-2.569e-4*0.3*o; ci=-9.794e-2*0.3*o; nf=4; |
 99 1 : # ne=1; Z1=14; n1=1; de=2.33; pl=102; R=6.25; dl=2; !

(9.2)

Показывать сами рисунки нет смысла, они точно такие же, как в указанной статье. Программа, показанная выше, также покажет и график профиля толщины.

11. ССЫЛКИ

- [1] V. G. Kohn, J. Synchrotron Rad., 2022, 23, N.3, 615-621 •244.
- [2] В. Г. Кон, ЖЭТФ, 2003, 124, 1, 224-236 •133
- [3] D. Zverev, A. Barannikov, I. Snigireva, A. Snigirev, Opt. Express, 2017, **25**, 28469-77.
- [4] V. Kohn, I. Snigireva, A. Snigirev, Phys. Rev. Lett., 2000, **85**, 2745-2748 •113
- [5] A. M. Afanasev, V. G. Kohn, Acta Cryst. A, 1971, **27**, 421-430 •2
- [6] V. G. Kohn, A. Kazimirov, Phys. Rev. B., 2007, **75**, 224119 (9) •162
- [7] A. H. Grigoryan, M. K. Balyan, A. H. Toneyan, J. Synchr. Rad., 2010, **17**, 332-347
- [8] М. С. Фоломешкин, В. Г. Кон, А. Ю. Серегин, Ю. А. Волковский, П. А. Просеков, В. А. Юнкин, Д. А. Зверев, А. А. Баранников, А. А. Снигирев, Ю. В. Писаревский, А. Е. Благоев, М. В. Ковальчук, Кристаллография, 2023, **68**, в.1, 5-10 •249
- [9] В. Г. Кон, И.А. Смирнова, Кристаллография, 2022, 67, 185-193 •241
- [10] В. Г. Кон, Кристаллография, 2023, 68, N.2, 196-203 •250
- [11] V. G. Kohn, I. A. Smirnova, Crystallography Reports, 2022, 68, N.7, 1068-1074 •248
- [12] В. Г. Кон, Кристаллография, 2022, 67, N.6, 892-899 •246