

Программа XRWP. Введение в расчетные формулы.

В. Г. Кош, <http://kohnvict.narod.ru>, (02.02.24)

В этом документе представлены некоторые формулы, которые используются в программе XRWP для расчетов. Эти формулы, в основном, опубликованы в научных публикациях автора, а частично публикуются в этом документе впервые. О том, как пользоваться самой программой можно узнать из ее встроенного описания и других документов, которые даются вместе с программой, а также существуют на сайте программы.

Сокращения

БПФ – быстрое преобразование Фурье
ВФ – волновая функция
СПЛ – составная преломляющая линза
ПФ – пропагатор Френеля
РО – расчетная область, учитываемая в процедуре БПФ
СИ – синхротронное излучение
ТФ – трансмиссионная функция
ФП – фурье-преобразование

1. Введение

Данная программа написана на языке программирования АСЛ, который исполняется программой, написанной на языке Java (jar-файл). Название программы составлено из первых букв слов X-Ray Wave Propagation. Программа вычисляет прохождение рентгеновской волны как через объекты, так и через пустое пространство между ними. Движение неоднородной рентгеновской волны по воздуху приводит к трансформации ее интенсивности. При этом именно фазовые изменения превращаются в изменения интенсивности, но интегральная интенсивность сохраняется. Волна сжимается в одном месте и расширяется в другом, а также многое другое происходит именно при распространении в пустом пространстве.

При прохождении через объекты могут возникать различные ситуации. Часто этот процесс достаточно описывать с помощью трансмиссионной функции, которая представляет собой экспоненту от комплексного аргумента и является результатом решения задачи в рамках упрощенной геометрической оптики. Но бывают и более сложные случаи.

Расчет прохождения ВФ по воздуху выполняется методом свертки ВФ излучения с ПФ. Свертка же считается наиболее эффективно через ФП, которое, в свою очередь использует процедуру БПФ. Но с однородной волной в пустом пространстве как раз ничего не происходит. А неоднородной волна становится после прохождения объектов, которые ее трансформируют.

И это тоже важная часть расчета. Объектов может быть много и разных. Соответственно программа по необходимости имеет много параметров и ее структура не может быть простой. О том, как пользоваться программой, написано в ее встроенном описании. Но в том

описании сложно писать научные формулы. Поэтому в данном документе выписаны расчетные формулы программы в развернутом виде.

Особенностью программы является то, что она способна на каждом уровне, где есть объект на определенном расстоянии от источника, делать расчет с несколькими экземплярами объекта, размещенными в разных местах на оси X (вариант 2D объектов) или на плоскости XY (вариант 3D объектов) перпендикулярной оптической оси (Z), вдоль которой и движется пучок СИ. Они имеют ту же структуру, но разные параметры. Например, можно вычислять дифракцию на одной щели, а можно – сразу на двух щелях, то есть интерферометр Юнга. При этом все экземпляры находятся на одном расстоянии от источника, но на разных расстояниях от оптической оси в перпендикулярном к ней направлении.

Для части объектов расчет делается как бы в два этапа. Сначала вычисляется прохождение ВФ через один экземпляр в центре РО, а затем вырезается часть расчетной области и смещается на нужное число шагов. При этом все такие части должны плотно прилегать друг к другу. Вообще говоря, такой метод годится только для объектов, описываемых ТФ, поэтому его применение надо изучать специально. И тут надо сделать оговорку. Хотя формально все объекты имеют параметр размножения элементов, но реально не все объекты способны размножаться. При описании объектов это оговаривается специально.

Есть также возможность рассчитывать в цикле прохождение через объект и расстояние после него, что особенно удобно для составных объектов. Но и эта возможность реализована только для объектов, элементы которых описываются ТФ. Для более сложных объектов это не работает и это тоже оговаривается.

2. Расчет пустого пространства

Многие расчетные формулы неоднократно представлены в научных статьях. Здесь будут выписаны только те из них, которые непосредственно используются в программе. Некоторые формулы в статьях все же отсутствуют, но они просто развивают дальше то, что началось.

Рентгеновское излучение вполне достаточно описать переменным электрическим полем, так как магнитное поле возникает из изменения электрического поля и

не является независимым. Поляризацию мы рассматривать не будем, так как СИ в большой степени линейно поляризовано, а те эффекты рассеяния, которые мы будем рассматривать (например, рассеяние вперед) поляризацию не изменяют. По этой причине мы будем рассматривать зависимость от координат и времени для скалярной функции электрического поля $E(\mathbf{r}, t)$, которая и называется волновой функцией.

С временем ситуация весьма простая. Когерентным является только монохроматическое излучение, которое только и рассматривается, то есть зависимость от времени имеет вид $\exp(-i\omega t)$ и вместо частоты используется энергия фотонов $E = \hbar\omega$ в единицах кэВ (кило-ЭлектронВольты). Соответственно длина волны такого излучения равна $\lambda = hc/E$, $hc = 12.3984 \text{ \AA} \cdot \text{кэВ}$. При этом ангстрем $\text{\AA} = 0.1 \text{ нм}$.

Что касается координат, то оптическая ось, вдоль которой распространяется пучок, выбрана как ось z и расстояния вдоль этой оси измеряются в см. Соответственно величина $(\lambda z)^{1/2}$ сразу получается в мкм, так как произведение ангстрема на сантиметр дает квадрат микрона. И вот поперечные координаты x, y измеряются в мкм.

Интерес представляет поперечная зависимость интенсивности рентгеновского излучения, которая вычисляется как квадрат модуля ВФ $E(x, y)$. В данной статье рассматривается одномерный случай, то есть предполагается, что все объекты имеют структуру с переменной плотностью только по оси x . Соответственно поперечные изменения интенсивности СИ происходят только вдоль оси x . И формулы выписаны для этого частного случая, хотя обобщение на двумерный случай делается очень просто, только формулы получаются более громоздкие. Одномерные расчеты выполняет программа XRWP1, а двумерные – XRWP2.

Излучение начинается от точечного источника. Источниками являются либо атомы, либо электроны, то есть точечные объекты. СИ возникает от точечного источника в виде квазисферической волны внутри конуса определенного углового размера. Для простоты будем считать, что объект находится внутри этого конуса и для него волна просто сферическая.

Но есть упрощающее обстоятельство. Так как расстояния вдоль оси z много больше расстояний в поперечном направлении, то достаточно использовать параксиальное приближение, в котором зависимость от z описывается экспонентой $\exp(iKz)$, $K = 2\pi/\lambda = \omega/c = C \cdot E$, $C = 2\pi/hc = 0.506774 (1/\text{\AA} \cdot \text{кэВ})$, а зависимость от x определяется ПФ

$$P(x, z) = \frac{1}{(i\lambda z)^{1/2}} \exp\left(i\pi \frac{x^2}{\lambda z}\right). \quad (1)$$

ПФ как раз, и описывает излучение от точечного источника на объекте при условии, что расстояние между источником и объектом равно z . Но еще и при дополнительном условии, что объект достаточно мал и полностью находится внутри конуса излучения. Грубо го-

воря, излучение имеет конечные поперечные размеры и их иногда надо учитывать.

ПФ в виде (1) удобен тем, что интеграл от него по координате x равен единице, а при $z = 0$ он равен дельта-функции. Существует принцип Гюйгенса-Френеля, который состоит в том, что если в какой-то точке есть излучение, то эту точку можно рассматривать как новый источник излучения и просто забыть про то как это излучение попало в эту точку. Это означает, что если мы знаем ВФ излучения на каком-то расстоянии от источника, то мы можем предсказать ее поведение при распространении вперед, даже не зная что было раньше.

Это поведение описывается сверткой известной нам ВФ излучения с ПФ, то есть

$$E(x, z) = \int dx_0 P(x - x_0, z) E(x_0) \quad (2)$$

Здесь предполагается, что z есть расстояние между точкой наблюдения (или регистрации детектором) и объектом, а ВФ нам известна сразу после прохождения объекта. А есть еще расстояние z_0 между объектом и источником, которое как бы в задачу не входит, если мы знаем ВФ после прохождения объекта. Ее вычисление – это другая задача, которую можно решать отдельно и записать решение в файл.

Формула (2) позволяет решить задачу, если у нас есть возможность прочитать ВФ $E(x_0)$ из файла. Тогда мы можем использовать ее для вычисления ВФ на расстоянии z от объекта.

Наиболее удобный способ расчета свертки состоит в том, что мы вычисляем ФП функции $E(x_0)$, то есть функцию $E(q)$, затем умножаем ее на ФП ПФ

$$P(q, z) = \exp\left(-i \frac{\lambda z}{4\pi} q^2\right) \quad (3)$$

и затем вычисляем обратное ФП от произведения.

При этом ФП вычисляется на определенной симметричной сетке точек с шагом d и числом точек $n = 2^k$, где k – целое число. Так как интеграл в (2) вычисляется в бесконечных пределах, то нужно следить за тем, чтобы функция $E(x_0)$ была равна нулю на краях рассматриваемой области и за ее пределами. Иначе ответ получится неправильным. Более подробно об этом написано дальше.

ФП вычисляется с использованием метода БПФ, у которого есть свои особенности. В частности результат получается на системе точек с таким же точно числом n и с шагом $d_q = 2\pi/X$, где $X = dn$ – размер РО в прямом пространстве. То есть шаг в обратном пространстве не только обратно пропорционален шагу в прямом пространстве, но и зависит от числа точек сетки.

Это весьма сильное ограничение и не все функции удается просчитать таким способом. Самая простая функция, которая легко считается таким методом – это обобщенная функция Гаусса. Ее легко себе представить как ПФ (1) от комплексного расстояния z с отрицатель-

ной мнимой частью. Если реальная часть z равна нулю, то получаем чистую функцию Гаусса.

С учетом (3) легко понять, что произведение полуширин в прямом и обратном пространствах для чистой функции Гаусса равно $w_x w_q = 8 \ln 2 = 5.545$, то есть константа, а произведение шагов сетки $d d_q = 2\pi/n$, то есть зависит от числа точек сетки. Соответственно произведение расчетных областей $X = dn$ и $Q = d_q n$ равно $2\pi n$, то есть растет с ростом n . При этом, чтобы функция Гаусса в прямом и обратном пространствах имела одинаковую ширину на сетке с заданным числом точек, при задании шага в прямом пространстве нужно соблюдать условие, которое можно сформулировать так. При увеличении числа точек n в 4 раза необходимо уменьшать шаг d в 2 раза.

И все равно функции будут отличны от нуля только в малой центральной области сетки. Для расчета таких функций с учетом изложенного выше факта в программу введен параметр расширителя сетки m . Его цель – делать расчет ФП на сетке с числом точек nm , но сама функция при этом вычисляется только в центральной области с n точками. Остальная область заполняется нулями. Это существенно сокращает время расчета в двумерном случае и позволяет получить результат с меньшим числом точек.

Но для других функций, например, для прямоугольника с резкими краями (так выглядит излучение после щели) это может приводить к интересным эффектам вычислительной математики, например, эффекту Гиббса. По этой причине данным методом надо пользоваться аккуратно и разумно.

Кроме того, в программу введен параметр ширины границы щели, который позволяет рассматривать щель с плавным переходом от 0 до 1 слева и от 1 до 0 справа. Это позволяет значительно снизить эффект резких осцилляций вблизи края щели.

Указанный выше метод прямого и обратного преобразований Фурье для расчета свертки с пропагатором Френеля не является единственным. Можно также использовать явный вид самого ПФ и переписать формулу (2) в следующем виде

$$E(x, z) = P(x, z) \int dx_0 \exp(-iqx_0) F(x_0) \quad (4)$$

где

$$q = \frac{2\pi x}{\lambda z}, \quad F(x) = \exp\left(i\pi \frac{x^2}{\lambda z}\right) E(x) \quad (5)$$

В этом случае достаточно вычислить ФП всего один раз, но необходимо до и после этого провести умножение ВФ на экспоненту. При использовании метода БПФ результат получается на сетке с таким же числом точек n и с шагом $\Delta x = \lambda z/X$, где X – размер РО на объекте.

То есть в этом методе шаг сетки точек результата расчета получается отличным от исходного шага сетки точек на объекте. Очевидно, что этот метод будет давать разумные ответы только для достаточно большого

расстояния. Снова можно ввести параметр m расширителя сетки и вычислять ФП на более широкой сетке, чем саму функцию, когда это имеет смысл.

Интересно, что если в первом методе размер РО в обратном пространстве должен быть таким, чтобы вся функция находилась внутри него и была равна нулю за его пределами, то во втором методе размер области, на котором определяется новая волновая функция, прямо от ее свойств не зависит. Например, видно, что этот размер не зависит от числа точек, но зависит от величины шага на объекте и от расстояния.

В программе реализованы оба метода расчета на выбор. Решение о том, каким методом пользоваться в каждом конкретном случае, принимает пользователь. Есть специальный параметр, определяющий метод расчета.

3. Расчетные формулы для объектов

В программе для расчета одномерных объектов используется следующий подход: если параметр z_0 (расстояние между точечным источником и первым объектом) не равно нулю, то вычисляется ВФ на расстоянии z_0 от источника как ПФ в прямом пространстве без нормировки, то есть с единичной амплитудой. При этом если параметр x_0 не равен нулю, то учитывается сдвиг точечного источника от оптической оси. Если $z_0 = 0$, то ВФ считывается из файла. Далее рассматриваются объекты с учетом расстояния между каждым из них и следующим объектом, а в конце детектором. Реализованы следующие объекты:

3.1. Щель с нерезкими краями.

Для расчета ТФ указанного варианта объекта программа использует три параметра: xp , ss и sb . Первый задает поперечную координату центра щели, второй – ширину щели, третий – полуширину функции Гаусса, которая используется для расчета свертки функции щели и функции Гаусса. Все параметры в мкм. Но только первые два можно менять, третий остается одинаковым для всех элементов, потому что свертка считается после того, как все щели определены, то есть на полной РО.

Если ТФ других объектов не равна нулю на границах расчетной области, то можно первым объектом поставить щель с нерезкими краями и использовать центральную часть расчетной области, где границы щели не портят результат расчета. В этом случае надо использовать одну щель и располагать ее в центре расчетной области.

Дополнительно к этому варианту была добавлена функция шероховатости, которую можно воспринимать так, что излучение перед щелью проходит через плоскую пластинку с шероховатой поверхностью. Если шероховатости нет, что пластинка никак не изменяет зависимость ВФ от поперечной координаты. И только шероховатость может ее изменить. Она задается параметрами ra , rp , rk и po . При этом ra – это высота шеро-

ховатости в мкм, rp – период шероховатости в шагах сетки, лучше целое число, rk – номер файла, где записан массив случайных чисел. Он вычисляется заранее с помощью специальной процедуры.

Наконец, po – это номер строки в файле (parobj.txt), где записаны данные об объекте. Такими данными являются химический состав и плотность материала пластины с шероховатостью, а также некоторые другие. Эти данные могут быть использованы при расчете разных объектов, поэтому они вынесены в отдельный файл. Шероховатость просто добавляет в ВФ фазу и поглощение, которые вычисляются из толщины материала и его комплексного коэффициента преломления.

Если задать $ra = 0$, то расчет проводится без шероховатости. При этом остальные параметры шероховатости не используются

3.2. Длинная Составная Преломляющая Линза

Этот объект вычисляется 4-мя разными способами и в качестве параметра имеет переменную mC , которая принимает значения 1, 2, 3, 4. Ниже каждый способ описан отдельно.

3.2.1. Аналитический расчет.

Теория прохождения рентгеновского излучения через длинную СПЛ описана в статье [1]. Здесь рассматривается частный случай, когда волновая функция излучения определяется на конце СПЛ и данная линза является первым объектом, то есть расстояние $z_0 > 0$ всегда.

Используется следующая расчетная формула для ТФ объекта

$$T(x) = \left(\frac{z_0}{r_g}\right)^{1/2} \exp(a_0 + a_1x + a_2x^2) \quad (6)$$

где

$$a_0 = i\frac{\pi}{\lambda} \left[x_0^2 \left(\frac{c_L}{r_g} - \frac{1}{z_0} \right) - 2\eta d_l n_l \right], \quad \eta = \delta - i\beta, \quad (7)$$

$$a_1 = -2i\frac{\pi}{\lambda} x_0 \left(\frac{1}{r_g} - \frac{1}{z_0} \right), \quad r_g = z_0 c_L + z_c s_L, \quad (8)$$

$$a_2 = i\frac{\pi}{\lambda} \left(\frac{c_L - s_L z_0 / z_c}{r_g} - \frac{1}{z_0} \right), \quad z_c = \left(\frac{p_l R}{2\eta} \right)^{1/2}, \quad (9)$$

$$c_L = \cos\left(\frac{L}{z_c}\right), \quad s_L = \sin\left(\frac{L}{z_c}\right), \quad L = p_l n_l \quad (10)$$

Здесь введены такие параметры: p_l – продольная длина одного двояковогнутого элемента СПЛ в мкм, R – радиус кривизны одной параболической поверхности в мкм, n_l – число двояковогнутых элементов, d_l – толщина перемычки между двумя поверхностями одного элемента, x_0 – поперечный сдвиг точечного источника от оптической оси в мкм, z_0 – расстояние от источника до СПЛ в см, δ – параметр преломления материала СПЛ, β – параметр поглощения.

Последние два параметра формируют комплексный коэффициент преломления $n = 1 - \delta + i\beta$ и являются

свойствами конкретного материала при заданной энергии фотонов. Про это можно почитать в [2]. В настоящее время есть много программ, где вычисляются данные параметры. Есть онлайн программы Степанова и Аткина, есть моя онлайн программа, а также моя АСЛ программа. В современном варианте программы эти параметры вычисляются автоматически по химической формуле и плотности материала.

Соответствие между обозначениями параметров здесь и в коде программы – $\lambda = 12.3984/E$, $\delta = de$, $\beta = be$, $p_l = pl$, $n_l = nl$, $R = R$, $x_0 = x0$, $z_0 = z0$. Указанные выше формулы соответствуют случаю, когда СПЛ является первым объектом и расположена в центре РО. Они учитывают, что полученная ТФ будет умножена на ВФ от точечного источника с координатой x_0 сдвига источника от оптической оси. Затем часть РО перемещается на координату x_p . Но при таком перемещении результат будет соответствовать источнику, который тоже перемещен. То есть работа программы для нескольких элементов при фиксированном положении источника будет давать неправильный результат. Лучше этого не делать. Программа нуждается в доработке.

3.2.2. Короткая линза.

Здесь объект тот же самый, что и в предыдущем разделе, но расчет проводится другим способом. Объект описывается ТФ в виде

$$T(x) = \exp\left(-i\frac{2\pi}{\lambda}\eta t(x - x_p)\right) \quad (11)$$

где

$$t(x) = \frac{x^2}{R} + d_l \quad (12)$$

Указанная в (12) зависимость $t(x)$ имеет место в области, где справедливо условие $x_a > |x|$. Здесь $x_a = [(p_l - d_l)R]^{1/2}$ – половина апертуры линзы. В области, где справедливо обратное условие $x_a < |x|$ имеет место равенство $t(x) = t(x_a)$. Расчет выполняется следующим образом. Сначала формируется ТФ для всех элементов объекта. Затем ВФ умножается на ТФ и пропагируется на указанное расстояние z .

Но в такой постановке задача не имеет большого смысла, так как другие способы тоже умеют считать короткую линзу как частный случай. Данный вариант удобен тем, что в современную версию программы введен параметр N_r (Nr), который позволяет учитывать составные объекты. Он указывает сколько раз надо сделать расчет прохождения через объект и пустое расстояние после него. В большинстве случаев он равен 1, но для данного объекта он может быть больше 1.

Если необходимо сделать расчет СПЛ, состоящей из n_l коротких линз итерационным способом сжатых линз, то нужно прибавить к расстоянию после предыдущего объекта или к z_0 расстояние $p_l/2$. Затем сделать расчет с $N_r = n_l - 1$ и с $z = p_l$, и затем еще один расчет с $N_r = 1$ и $z = p_l/2$ если результат необходим на конце СПЛ. Если результат необходим на заданном расстоя-

нии, например расстоянию фокусировки z_f , то нужно задать $z = z_f + p_l/2$.

Сам параметр n_l в данном расчете тоже используется. Можно указать любое число и соответственно при итерациях указывать расстояние, большее, чем p_l в это число раз. Если расстояние до СПЛ, например, z_0 очень велико, то учет $p_l/2$ ничего не изменит, а вот добавление $p_l/2$ к расстоянию после СПЛ может быть существенным. Если же ВФ считывается из файла и заранее не известно какое было расстояние, то расчет надо делать в три этапа и первый раз прогнать ВФ по пустому пространству на расстояние $p_l/2$. Для этого можно использовать щель очень большого размера с нулевым размером границ.

Это довольно затратный метод расчета, но он самый точный из всех известных на сегодня методов. Кроме того, он позволяет аккуратно учесть апертуру СПЛ в том случае, когда она влияет на результат, то есть поглощение излучения в линзе слабое. Это бывает для высоких энергий и малых размеров апертуры. Что касается расчета для многих элементов поперек пучка, то тут ситуация лучше, потому что ТФ не зависит от источника и представляет собой простую экспоненту.

3.2.3. Длинная СПЛ в общем случае приближенно.

Этот вариант пока правильно работает только для одного экземпляра объекта, расположенного в центре РО. Хотя формально можно задавать параметры сдвига, но такой расчет не будет правильным и лучше его не делать. Когда ситуация будет исправлена, я изменю описание.

Этот вариант расчета является проблемным и интересен только в целях исследования приближений. В предыдущем варианте результат не зависел от источника и он просто преобразовывал ВФ из одного состояния в другое.

Таким же способом хотелось бы вычислить и такой объект, как СПЛ. Дело в том, что в разделе 3.2.1 рассматривалась ситуация, когда на СПЛ падает сферическая волна (в параксиальном приближении) от источника. Рассмотрим здесь общий случай для варианта, когда СПЛ находится на оптической оси. Как показано в статье [1], в общем случае для ВФ до и после СПЛ имеет место соотношение, которое описывает следующая формула

$$E(x, L) = \int dx_1 P_L(x, x_1) E(x_1, 0), \quad (13)$$

где

$$P_L(x, x_1) = CA(x)A(x_1) \exp(-iq_x x_1). \quad (14)$$

Здесь

$$C = \frac{C_0}{i^{1/2}x_L}, \quad C_0 = \exp(-iK\eta d_l n_l), \quad q_x = \frac{2\pi x}{x_L^2}, \quad (15)$$

$$A(x) = \exp\left(i\pi c_L \frac{x^2}{x_L^2}\right), \quad x_L = (\lambda z_c s_L)^{1/2} \quad (16)$$

Параметры z_c, s_L, c_L определены в разделе 3.2.1

Согласно выписанным формулам в общем случае необходимо сначала умножить ВФ $E(x_1, 0)$ на функцию $A(x_1)$, затем вычислить ФП и затем умножить результат на функцию $A(x)$ и на константу C . Сложность в том, что ФП при использовании БФП меняет шаг сетки точек. Если исходный шаг сетки был d , то новый шаг сетки будет равен $d_1 = \lambda z_c s_L / X$. В пределе короткой линзы, когда $L \ll z_c$ и $s_L = L/z_c$ имеем $d_1 = \lambda L / X$. То есть шаг будет мал при малом значении L , и он растет с увеличением L . Он достигает максимального значения при $L = (\pi/2)z_c$ и затем снова уменьшается.

Из формул раздела 3.2.1 можно увидеть, что при такой длине СПЛ фокусирует параллельный пучок на своем конце и более длинные линзы обычно не рассматриваются. Например, для таких параметров $d = 0.005$ мкм, $n = 16384$, $\lambda = 1.21$, $L = p_l n_l$, $p_l = 0.0102$ см, $n_l = 58$, линза из кремния ($R = 6.25$, $z_c = 1.21$ см) имеем $d_1 = 0.008$ мкм, что вполне соизмеримо. Для меньших значений n_l шаг будет меньше.

Но самая большая сложность в том, что x_L , а значит и q_x – комплексные величины. А я не умею вычислять ФП для комплексного волнового вектора. Кроме того, у такого подхода есть проблемы при малых значениях L . В этом случае и шаг сетки получается маленьким и локальность плохо считается.

Поэтому приближенно реализован другой подход. Представим падающую волну интегралом Фурье

$$E(x_1, 0) = \int \frac{dq}{2\pi} E(q, 0) \exp(iq x_1) \quad (17)$$

и подставим в интеграл (13). Переставляя интегралы получим следующую формулу

$$E(x, L) = \int \frac{dq}{2\pi} E(q, 0) \int dx_1 P_L(x, x_1) \exp(iq x_1) \quad (18)$$

Интеграл по x_1 вычисляется аналитически, ответ можно записать в виде

$$E(x, L) = C_1 A_1(x) \int \frac{dq}{2\pi} E(q, 0) A_2(q) \exp(iq x / c_L) \quad (19)$$

где

$$C_1 = \frac{i^{1/2} x_L}{c_L^{1/2}}, \quad A_1(x) = A(x) \exp\left(-i\pi \frac{x^2}{x_L^2 c_L}\right), \quad (20)$$

$$A_2(q) = \exp\left(-i \frac{q^2 x_L^2}{4\pi c_L}\right) \quad (21)$$

Теперь очень хорошо просматривается предел малых значений L . Если положить $c_L = 1$, то $A_1(x)$ равно 1, $C_1 = 0$. Отличие результата от исходной функции определяется только множителем $A_2(q)$. Интересно, что получить ТФ при малых значениях L сразу не получается.

Но здесь снова c_L имеет мнимую часть и ФП вычислить методом БФП не получается. То есть аналитические формулы для частных случаев гауссовых пучков получить можно, а полное решение задачи получить

нельзя. Только видно, что при $L = 0$ получаем исходную функцию. То есть пропагатор работает как дельта функция.

Однако можно формально вычислять интегралы методом стационарной фазы (СФ). В интеграле (13) точка СФ равна $x_0 = x/c_L$. Вычисляя интеграл без $E(x_1)$ получаем ответ

$$E(x, L) = C_1 A_1(x) E(x/c_L, 0), \quad (22)$$

а в более развернутом виде

$$E(x, L) = \frac{C_0}{c_L^{1/2}} \exp\left(i\pi \left[c_L - \frac{1}{c_L}\right] \frac{x^2}{x_L^2}\right) E\left(\frac{x}{c_L}, 0\right) \quad (23)$$

Такой же ответ получается, если положить в (19) $A_2(q) = 1$. При падении на линзу плоской волны вдоль оптической оси эта формула дает точный ответ. Это как раз хорошо видно из формулы (19), так как $E(q, 0) = \delta(q)$. И этот ответ совпадает с формулами раздела 3.2.1. Если волна не плоская, то учитывается искривление траектории лучей в линзе в согласии с аналитической теорией. При этом мнимой частью c_L в аргументе ВФ можно пренебречь.

В результате такая формула даже лучше, чем приближение короткой линзы. Она учитывает увеличение интенсивности в центре и уменьшение апертуры за счет сходимости лучей. В линейном по L приближении получаем формулу короткой линзы через трансмиссионную функцию. То есть такое приближение – уже шаг вперед по сравнению с короткой линзой и даже формулами раздела 3.2.1, потому что может использоваться в общем виде.

В программе реализован вариант вычисления по формуле (23), где мнимая часть c_L в аргументе $E(x/c_L, 0)$ не учитывается, но она учитывается в экспоненте, так как экспонента как раз дает эффективную ТФ линзы.

3.2.4. Длинная СПЛ в общем случае точно.

Вообще говоря, в работе [1] получен пропагатор изображения с помощью СПЛ при любых расстояниях до и после линзы. Если вместо точечного источника использовать произвольную ВФ, то можно выписать интеграл с таким пропагатором. Нас однако интересует влияние апертуры СПЛ на результат. По этой причине расстояние до СПЛ должно быть равно нулю, так как пучок за пределами апертуры СПЛ можно закрыть щелью и таким образом эффективно учесть апертуру. А расстояние после щели можно оставить произвольным.

Такой подход приводит к следующему интегралу

$$E(x, L) = C_0 B_0(x) \int dx_1 P(x - x_1, b) B_1(x_1) E(x_1, 0), \quad (24)$$

где $P(x, b)$ – ПФ от комплексного расстояния b , и

$$b = z c_L + z_c s_L, \quad B_{0,1}(x) = \exp\left(-i\pi a_{0,1} \frac{x^2}{\lambda b}\right), \quad (25)$$

$$a_0 = 1 - c_L, \quad a_1 = a_0 + s_L z / z_c \quad (26)$$

Здесь интеграл имеет вид свертки двух функций и его можно вычислить методом двойного ФП для произвольных функций. При этом ВФ сначала умножается на $B_1(x)$. ФП ПФ вычисляется по аналитической формуле (3). И затем используется стандартная процедура свертки при известном ФП ПФ. Коэффициент C_0 сразу умножается на ФП ПФ. После вычисления свертки надо еще раз умножить результат на $B_0(x)$. Код программы весьма простой, а по точности и скорости расчета этот результат самый лучший и он общий.

Тут надо оговориться, что программа сделана таким образом, что прохождение ВФ по объекту и по пустому пространству выполняются в разных блоках, а данный объект включает в себя еще и пустое пространство. Но противоречия нет. Можно всегда задать $z = 0$ для объекта (параметр z_1) и учитывать пустое пространство в отдельном общем расчете, а можно там задать $z = 0$ и все учитывать в объекте или задать оба расстояния, тогда ответ будет соответствовать сумме расстояний. Практика показала что расчет расстояния в общем блоке является более устойчивой процедурой, которая правильно работает при более широком выборе параметров расчетной сетки.

3.3. Объект с произвольным профилем толщины.

Этот объект описывается трансмиссионной функцией, которая для общности записывается в виде

$$T(x) = \exp([c_r + i c_i] t(x - x_p)) \quad (27)$$

где реальные константы c_r и c_i могут иметь любое значение, но если рассматривается вещество под пучком, то $c_r = -K\beta$, $c_i = -K\delta$, где $K = 2\pi/\lambda$. При этом функция $t(x)$ в виде числового массива считывается из файла и должна иметь правильный размер в микронах. Если же она нормирована на единицу, то максимальную толщину надо учесть в константах c_r и c_i в виде дополнительного множителя.

А дальше расчет делается точно так же, как описано в разделе 3.2.2. Размер числового массива определяется по размеру файла. Если задана область ss для элемента объекта и она не совпадает с размером массива, то выполняется интерполяция. Сдвиг области из центра РО выполняется на координату x_r , как указано в (27) Объект и расстояние можно размножать, задавая $N_r > 1$. Можно учитывать пору в материале, задавая обратный знак у констант. При этом трансмиссионная функция автоматически нормируется на единичный максимум.

Этот объект позволяет выполнять расчеты с большим числом вариантов для описания самых разных реальных объектов, использующихся при моделировании эксперимента. Это могут быть, например, киноформные линзы, аксиконы, как простые, так и составные а также объекты фазового контраста произвольной формы.

3.4. Волокно.

Этот объект является модельным и имеет более простую структуру, чем реальные объекты. Реальное оптоволокно обычно имеет сердцевину в виде цилиндра малого размера из твердого материала, на который намотан цилиндр из более мягкого материала, например, бор сверху, вольфрам внутри. В данном объекте есть всего один цилиндр, но такие объекты тоже бывают.

Используется расчетная формула (11) для ТФ объекта где

$$t(x) = 2(R^2 - x^2)^{1/2} \quad (28)$$

Функция $t(x)$ считается равной нулю для области, где $R < |x|$, причем параметр R имеет смысл радиуса сечения круглого цилиндра, каким является волокно. Предполагается, что оно ориентировано перпендикулярно оси z . Вычисляются ТФ для разных элементов объекта и ВФ последовательно умножается на каждый из них.

Вообще говоря, данный объект можно задать как частный случай предыдущего объекта. Но здесь есть специфика, которая состоит в том, что для каждого элемента ТФ вычисляется на всей РО. И разные элементы могут перекрываться. То есть можно задать волокно с сердцевиной из другого материала как два элемента одного объекта. Ну и задание такого объекта проще. Это важно учитывая его массовость.

3.5. Асимметричное дифракционное отражение по Брэггу от многослойного кристалла.

Дифракционное отражение по Брэггу от монокристаллов используется в монохроматорах. Стандартно используется симметричное отражение от двух последовательных монокристаллов. Но в высокоразрешающих монохроматорах применяют и асимметричное отражение. Такой тип рассеяния меняет направление оптической оси, а в асимметричном случае и шаг сетки точек. Но если использовать пару кристаллов с противоположной асимметрией, то ни направление пучка ни шаг сетки не меняются.

Однако выполняются эксперименты и для исследования структуры самих кристаллов, причем на поверхности таких кристаллов могут быть выращены эпитаксиальные пленки другого состава, но примерно с таким же межплоскостным расстоянием между отражающими плоскостями. В качестве примера можно указать работу [3], но таких работ было много. Асимметричное отражение сфокусированной волны рассматривалось в работе [4].

Расчет в данном случае выполняется так же, как и для пустого пространства, то есть делается ФП ВФ, оно умножается на ФП пропатора кристалла (ПК), затем умножается на ФП ПФ и затем делается обратное ФП. Новым элементом здесь является расчет ФП ПК.

После кристалла ВФ имеет вид

$$E_n(x) = \exp(-iq'_0xb) \int \frac{dq}{2\pi} \exp(iqxb) \times P(q, z) P_c(q - q_0, b) E_o(q) \quad (29)$$

Здесь $P(q, z)$ – ФП ПФ, $z = z_1 + z_2b^2$, где z_1 – расстояние до кристалла, z_2 – расстояние после кристалла, $q_0 = q_a + q_b$, $q_a = -K\varphi$, где φ – угол поворота кристалла от точного угла Брэгга для заданной частоты, $q_b = K\theta_\omega \tan(\theta_B)$, $\theta_\omega = \Delta E/E$. При этом учитывается, что сдвиг центра кривой дифракционного отражения (КДО) может зависеть от двух факторов, а именно, углового положения кристалла и сдвига частоты в спектре излучения.

Вообще говоря, все расчеты в данной программе делаются для заданной энергии фотонов, но спектр излучения никогда не содержит только одно значение энергии. Он всегда имеет ширину. Однако, если она мала, то никакие другие параметры от нее не зависят, точнее их зависимостью можно пренебречь, а вот дифракционное отражение в кристалле зависит весьма сильно. С другой стороны, появляется фазовый множитель, который приводит к сдвигу пучка, при этом

$$q'_0 = q_a(1 + 1/b) + q_b(1 - 1/b).$$

Отсюда следует, что в симметричном случае дифракции при повороте кристалла на угол φ пучок поворачивается на угол 2φ . Обычно вместо φ пишут тета и это правило называется тета – два тета. А при изменении частоты пучок остается на месте в симметричном случае, но смещается в асимметричном случае. При расчете угловой зависимости коэффициентов отражения сдвиг пучка не играет роли и это не важно, но в задачах о переносе излучения с отражением в кристалле это может быть важно.

Если $\varphi = \theta_\omega = 0$, то никаких проблем нет, но важно помнить, что если интеграл Фурье вычислялся методом ФФТ, то после отражения число точек сохраняется, но шаг сетки точек изменяется умножением на множитель $1/b$. Расчет ФП ПК выполняется итерационно. Сначала вычисляется подложка r_0 при условии, что $r_{-1} = 0$. Затем все слои над ней в порядке снизу вверх. Последним учитывается самый верхний слой.

Рекуррентные формулы имеют вид

$$P_c(q - q_0, b) = r_n = \frac{R_1 - R_2 C \exp(i\phi)}{1 - C \exp(i\phi)}, \quad C = \frac{R_1 - r_{n-1}}{R_2 - r_{n-1}},$$

$$\phi = at_0, \quad t_0 = \frac{t_n}{\gamma_0}, \quad R_{1,2} = \frac{\sigma \pm a}{sf}, \quad a = (\sigma^2 - b f s^2)^{1/2}, \quad (30)$$

$$\sigma = (q - q_n) b \sin(2\theta_B) - i\mu_0(1 + b)/2, \quad s = K\chi_h, \quad f = \frac{\chi_{-h}}{\chi_h}.$$

Здесь $\mu_0 = K\chi''_0$, θ_B – угол Брэгга, t_n – толщина n -го слоя кристалла, γ_0 – косинус острого угла между направлением падающего пучка и нормалью к поверхности кристалла, $b = \sin(\theta_0)/\sin(\theta_h)$ – фактор асимметрии, $\theta_{0,h}$ – углы между поверхностью кристалла и направлениями падающего и отраженного пучков, χ''_0 – мнимая часть χ_0 , а χ_0 , χ_h , χ_{-h} – компоненты Фурье поляризуемости кристалла на векторах обратной решетки 0 , h , $-h$. Эти параметры, как и q_n могут быть разными в разных слоях. Параметр q_0 относится к подложке.

Полезно отметить происхождение выписанных формул в указанном виде. Впервые они появились в статье [5], но в симметричном случае. При этом в статье сделана ссылка на работу [6] (формула 22), в которой указано, что эта формула впервые появилась в работе 1985 года. Но более развернутый вывод рекуррентного соотношения в асимметричном случае, правда в других обозначениях был дан в статье [7]. Из формулы (12) этой статьи само рекуррентное соотношение выводится относительно просто, но в других переменных.

И это весьма принципиальный момент. В статье [7] используются параметры $x_{1,2} = -R_{1,2}(f/b)^{1/2}$. При этом $x_1x_2 = 1$ (симметрично). Для параметров $R_{1,2}$ такой симметрии нет. При этом формула для подложки имеет вид

$$r_0 = R_1 \frac{1 - \exp(i\phi)}{1 - (R_1/R_2) \exp(i\phi)}. \quad (31)$$

Видно, что она сразу содержит указанный множитель. И он сохраняется при добавлении всех новых слоев.

Кроме того, параметр $(q - q_n)$ имеет противоположный знак, то есть отклонение направлено в другую сторону. Это не преступление, так как кривую всегда можно перевернуть. Также в центросимметричном кристалле $f = 1$, так что это тоже не так важно, а вот параметр b в асимметричном случае может быть весьма отличным от единицы. С другой стороны, постоянный множитель не должен влиять на угловую зависимость, а следовательно и на пространственную зависимость. Он никак не меняется при любом числе слоев.

Происхождение этого множителя легко объяснить. В статье [7] рассматривается не отношение реальных амплитуд полей E_h/E_0 , а более симметричная величина R_7 (по номеру статьи), и при этом $E_h/E_0 = R_7(b/f)^{1/2}$ (формула 4). В таком виде уравнение для R_7 становится более симметричным, но это не физическая величина, амплитуда отражения все же равна E_h/E_0 и именно она должна быть непрерывной на границах слоев. Так как параметр b постоянный во всех слоях, то с ним проблем нет, а вот параметр f может быть разным в разных слоях. Если это так, то величина R_7 не обязана быть непрерывной.

В формулах (30) амплитуды $R_{1,2}$ как раз соответствуют отношению E_h/E_0 и результат расчета сразу дает правильный ответ. Интересно, что в статье [4] в формуле (18) фактор $b^{1/2}$ в знаменателе выписан неправильно.

Расчет ФП ПК вычисляется с помощью встроенной процедуры, написанной на Java. При этом для подложки задаются 9 параметров: θ_B , b , q_0 , t_0 , μ_0 , χ_h , χ_{-h} (здесь последние 2 параметра комплексные и задаются парой чисел) и еще 7 параметров (кроме первых двух) для каждого слоя независимо. То есть разделение, например, q_0 на q_a и q_b не делается, и так же точно для остальных слоев. Поэтому при задании входных данных надо самому понимать как формируется q_0 , а при вычислении q_n в каждом слое учитывать, что q_b в каждом

слое не меняется, а q_a меняется не только из-за изменения параметра решетки (угла Брэгга), но еще и в том случае, если меняется реальная часть параметра χ_0 , которая также включена в q_a . Как именно можно посмотреть в указанной статье [7].

Дело в том, что эта величина не учитывается в формуле и считается, что параметр q_a (то есть угол) выбран таким способом, что он ее компенсирует. Но в отдельных слоях она может меняться, если меняется химический состав. И так, если кристалл просто поворачивается или меняется частота, то все параметры q_n в слоях должны быть одинаковые. Различия наступают только в том случае, если в слоях меняется химический состав или, что чаще, угол Брэгга через изменение параметра решетки.

При этом разделение q_0 на q_a и q_b не связано в расчете многослойного кристалла и самой Java процедурой, его можно задать в АСЛ программе и затем вычислить фазовый множитель. Так как q_b должно быть одинаковым во всех слоях, то удобно при описании слоев задавать только q_a , а перед расчетом добавлять q_b в самой АСЛ программе и задавать его отдельно.

3.6. Симметричное отражение при дифракции по Лауэ.

Хотя расчетные формулы опубликованы в [7] в общем случае асимметричного отражения и многослойного кристалла как для случая Брэгга, так и для случая Лауэ, в программе реализован только симметричный случай для одного слоя кристалла. Дело в том, что асимметричный случай при дифракции по Лауэ используется редко, а многослойный кристалл можно вычислить последовательно, если в этом будет необходимость.

Расчет выполняется так же, как и для пустого пространства, то есть через пропагатор, просто вместо пропагатора Френеля используется пропагатор кристалла. Он вычисляется с помощью встроенной процедуры, написанной на языке Java. Все такие встроенные процедуры описаны в специальном документе, который можно посмотреть по ссылке [8] выбирая кнопку 14 и затем функцию 4. Особенность случая Лауэ в том, что на входе и на выходе ВФ имеет две компоненты для проходящего и отраженного пучка. Соответственно пропагатор представляет собой матрицу 2×2 .

Ниже скопированы формулы, приведенные в указанном документе. Сам пропагатор получается методом БПФ и достаточно указать его вид в обратном пространстве

$$M_{00}(q) = (1 + x_1^2)^{-1} [E_1(q) + x_1^2 E_2(q)] \quad (32)$$

$$M_{h0}(q) = X_h(2g)^{-1} [E_1(q) - E_2(q)] \quad (33)$$

$$M_{0h}(q) = X_{-h}(2g)^{-1} [E_1(q) - E_2(q)] \quad (34)$$

$$M_{hh}(q) = (1 + x_1^2)^{-1} [x_1^2 E_1(q) + E_2(q)] \quad (35)$$

Здесь использованы обозначения: $\gamma_0 = \cos \theta_B$,

$$E_1(q) = \exp(M + G) \quad (36)$$

$$E_2(q) = \exp(M - G) \quad (37)$$

$$M = i[X_0 + \alpha]t/2\gamma_0, \quad G =igt/2\gamma_0, \quad (38)$$

$$g = (\alpha^2 + X^2)^{1/2}, \quad X^2 = X_h X_{-h}, \quad (39)$$

$$x_1 = (\alpha + g)/X, \quad \alpha = [q - q_0] \sin(2\theta_B) \quad (40)$$

При этом нужно специально следить за тем, чтобы мнимая часть параметра g была больше нуля.

Есть известная проблема, которая состоит в том, что при использовании БПФ функция должна быть равна нулю на границах области. В приведенных формулах так получается для диагональных элементов. Для недиагональных элементов функции выходят на постоянный предел $T_0 = \exp(iX_0 t/2\gamma_0)$. Здесь и выше $X_{0,h} = K\chi_{0,h}$, где $\chi_{0,h}$ есть компоненты Фурье поляризуемости кристалла, $K = 2\pi/\lambda$ есть волновое число. Это приводит к дельта-функции в пропагаторе. Чтобы ее убрать можно было бы вычитать T_0 , то есть рассматривать разность $(T - T_0)$.

Пропагатор вычислен для случая, когда источник находится на поверхности кристалла. При этом засветка кристалла происходит внутри треугольника Бормана, основание которого занимает область от $-2t \sin \theta_B$ до 0. То есть область сдвинута влево. Сдвиг можно ликвидировать, если убрать из M член $i\alpha t/2\gamma_0$. Но программа это не делает. Сдвиг на любое расстояние легко сделать умножением функции на экспоненту, аргумент которой линейно зависит от q . Это делается в ACL программе, а Java процедура вычисляет как указано выше.

Входные данные для данного объекта просты и перечислены далее: N – число точек расчетной сетки, d – шаг сетки точек, θ_B – угол Брэгга в градусах, q_0 – угловое отклонение кристалла t – толщина кристалла, X_0 , X_h , X_{-h} – комплексные параметры дифракции.

3.7. Дифракция в кристалле произвольной формы. Решение уравнений Такаги.

Этот случай реализован в программе, но пока не описан. Расчетные формулы опубликованы в [9].

3.8. Трехмерный эллипсоид.

Объект номер 4 в варианте программы для 3D объектов вычисляет ТФ для трехмерного эллипсоида произвольным образом ориентированного в пространстве и относительно направления пучка СИ (ось Z). Такой эллипсоид в собственной системе координат (x_1, y_1, z_1) имеет три радиуса (R_1, R_2, R_3) и его поверхность описывается уравнением

$$x_1^2/R_1^2 + y_1^2/R_2^2 + z_1^2/R_3^2 = 1 \quad (41)$$

В лабораторной системе координат (x, y, z) с осью Z вдоль пучка СИ он может быть повернут произвольным образом. Удобно ввести полярный угол θ , который образуют оси Z и Z_1 , а также угол φ , который образуют ось X и проекция оси Z_1 на плоскость XY . Плоскость X_1Y_1 может быть дополнительно повернута вокруг оси Z_1 на угол ψ . В результате общая зависимость координат (x_1, y_1, z_1) от координат (x, y, z) имеет следующий вид

$$x_1 = u_1 x + u_4 y + u_7 z,$$

$$y_1 = u_2 x + u_5 y + u_8 z, \quad (42)$$

$$z_1 = u_3 x + u_6 y + u_9 z$$

где

$$\begin{aligned} u_1 &= \cos(\theta) \cos(\varphi) \cos(\psi) + \sin(\varphi) \sin(\psi), \\ u_2 &= \cos(\theta) \cos(\varphi) \sin(\psi) + \sin(\varphi) \cos(\psi), \\ u_4 &= \cos(\theta) \sin(\varphi) \cos(\psi) + \cos(\varphi) \sin(\psi), \\ u_5 &= \cos(\theta) \sin(\varphi) \sin(\psi) + \cos(\varphi) \cos(\psi), \\ u_3 &= \sin(\theta) \cos(\varphi), \quad u_6 = \sin(\theta) \sin(\varphi), \\ u_7 &= -\sin(\theta) \cos(\psi), \\ u_8 &= -\sin(\theta) \sin(\psi), \quad u_9 = \cos(\theta) \end{aligned} \quad (43)$$

Легко проверить, что если все углы равны нулю, то системы координат совпадают. С другой стороны суммы квадратов координат совпадают при любых значениях углов. Если $\theta = 90^\circ$, а остальные углы равны нулю, то $x_1 = -z$, $y_1 = y$, $z_1 = x$. То есть имеем вращение вокруг оси Y против часовой стрелки. При произвольных значениях углов можно получить любую ориентацию.

Подставляя формулы преобразования в уравнение (41) мы получаем уравнение

$$A_2 z^2 + A_1 z + A_0 = 1 \quad (44)$$

где

$$\begin{aligned} A_2 &= u_7^2/R_1^2 + u_8^2/R_2^2 + u_9^2/R_3^2, \\ A_1 &= a_4 x + a_5 y, \quad A_0 = a_1 x^2 + a_2 y^2 + a_3 xy. \end{aligned} \quad (45)$$

Здесь

$$\begin{aligned} a_1 &= u_1^2/R_1^2 + u_2^2/R_2^2 + u_3^2/R_3^2, \\ a_2 &= u_4^2/R_1^2 + u_5^2/R_2^2 + u_6^2/R_3^2, \\ a_3 &= 2(u_1 u_4/R_1^2 + u_2 u_5/R_2^2 + u_3 u_6/R_3^2), \\ a_4 &= 2(u_1 u_7/R_1^2 + u_2 u_8/R_2^2 + u_3 u_9/R_3^2), \\ a_5 &= 2(u_4 u_7/R_1^2 + u_5 u_8/R_2^2 + u_6 u_9/R_3^2), \end{aligned} \quad (46)$$

Толщина эллипсоида в лабораторной системе координат равна $t = z_2 - z_1$, где $z_{1,2}$ – решения квадратного уравнения. Окончательно получаем

$$t = 2(p^2 + q)^{1/2}, \quad p = A_1/2A_2, \quad q = (1 - A_0)/A_2 \quad (47)$$

Эта толщина вычисляется при всех значениях координат x и y .

4. Модификация расчетных формул.

В некоторых частных случаях возможен альтернативный вариант расчета. Это, например, относится к случаям, когда функция $E(x_0)$ в формуле (2) не убывает до нуля на краях расчетной области.

В частном случае, когда она имеет вид

$$E(x_0) = (i\lambda z_0)^{1/2} T(x_0) P(x_0, z_0) \quad (48)$$

и ТФ объекта $T(x_0)$ равна T_0 на краях расчетной области, интеграл (2) можно преобразовать к следующему точному виду

$$E(x, z_1) = (i\lambda z_0)^{1/2} [T_0 P(x, z_t) + \int dx_0 P(x - x_0, z) [T(x_0) - T_0] P(x_0, z_0)] \quad (49)$$

Здесь $z_t = z_0 + z$. Сразу отмечу, что существуют и другие способы преобразования интеграла, но для наших целей вполне достаточно и такого.

Здесь использовано свойство ПФ, что свертка двух ПФ на разных расстояниях равна снова ПФ на суммарном расстоянии. Это свойство физически вполне очевидно и означает, что сферическая волна при распространении в пустом пространстве остается сферической волной.

При выполнении численного расчета первое слагаемое вычисляется точно, а во втором слагаемом в интеграле подинтегральная функция уже равна нулю на краях расчетной области, если функция $T(x_0)$ успеваеет выйти на свое предельное значение. Такому свойству удовлетворяет, например, объект номер 4 (волокно) и некоторые из вариантов объекта номер 3.

Альтернативный вариант расчета реализован при задании $z_0 < 0$. При этом в схеме должен быть всего один объект, а в расчете используется модуль z_0 . Знак просто указывает на рассматриваемый вариант. Этот вариант для указанных объектов дает намного более красивые и разумные результаты [9].

5. Расчеты для прогнозирования значений параметров.

Аналитическая теория длинной СПЛ дает формулы для быстрого расчета некоторых параметров, которые можно проверить численным расчетом. Для этой цели в программу встроен модуль (LCRL Parameters) для таких расчетов. Он принимает значения следующих параметров: E , z_0 , z , p_l , R , d_l , n_l , а также параметры материала ДСПЛ для вычисления δ и β и затем использует следующие формулы

$$z_c = \left(\frac{p_l R}{2\eta} \right)^{1/2}, \quad \eta = \delta - i\beta, \quad c_L = \cos\left(\frac{L}{z_c}\right),$$

$$B_0 = z_0 c_L + z_c s_L, \quad L = p_l n_l, \quad s_L = \sin\left(\frac{L}{z_c}\right),$$

$$B_1 = c_L - s_L \frac{z_0}{z_c}, \quad z_f = -\frac{B_{0r}}{B_{1r}}, \quad B_n = B_{nr} + iB_{ni},$$

$$G = (B_1 B_0^*)_i, \quad Z_0 = \frac{G}{B_{1i}} - z_0, \quad Z_1 = \frac{B_{0i}}{B_{1i}},$$

$$M_0 = \frac{Z_1}{z_0 + Z_0}, \quad M_1 = \frac{z_f + Z_1}{z_0 + Z_0}, \quad M_2 = \frac{z + Z_1}{z_0 + Z_0},$$

$$w_0 = C |B_0|, \quad w_1 = C |B_0 + z_f B_1|, \quad w_2 = C |B_0 + z B_1|,$$

$$C = C_w (2KG)^{-1/2}, \quad K = \frac{2\pi}{hc} E, \quad C_w = (8 \ln 2)^{1/2},$$

$$S = z_0 \left(\frac{\pi}{KG} \right), \quad H = \exp(-2K\beta d_l n_l). \quad (50)$$

На выходе программа выдает значения следующих параметров: δ , β , Z_0 , Z_1 , S , H , z_f , w_0 , w_1 , w_2 , M_0 , M_1 , M_2 . Здесь S – интегральная интенсивность на конце СПЛ без учета поглощения на перемычках, z_f – фокусное расстояние, отсчет от конца СПЛ, $w_{0,1,2}$ – полуширина пучка на конце СПЛ, на фокусном расстоянии и на расстоянии z , $M_{0,1,2}$ – коэффициент увеличения источника на тех же расстояниях, H – множитель уменьшения интенсивности на перемычках.

Литература

- [1] В. Г. Кон, ЖЭТФ, 2003, **124**, 224-236. [Посмотреть](#)
- [2] В. Г. Кон, Кристаллография, 2006, **51**, 1001-1005. [Посмотреть](#)
- [3] A. Kazimirov, V. G. Kohn, Z-H. Cai, Phys. Rev. B., 2010, **81**, 214112 (8). [Посмотреть](#)
- [4] V. G. Kohn, A. I. Chumakov, R. Ruffer, J. Synchr. Rad. 2009, **16**, 635-641. [Посмотреть](#)
- [5] V. G. Kohn, A. Kazimirov, Phys. Rev. B., 2007, **75**, 224119 (9). [Посмотреть](#)
- [6] V. G. Kohn, Yu. V. Shvydko, E. Gerdau Phys. Stat. Sol. (b), 2000, **221**, 597-615. [Посмотреть](#)
- [7] V. G. Kohn, Phys. Stat. Sol. (b), 2002, **231**, 132-148. [Посмотреть](#)
- [8] <http://kohnvict.ucoz.ru/a/1/papers-pdf.htm>. [Посмотреть](#)
- [9] В. Г. Кон, Кристаллография, 2023, **68**, 196-203. [Посмотреть](#)
- [10] . [Посмотреть](#)