

Новый алгоритм численного решения уравнений Такаги-Топена для кристаллов с дефектами

В.А. Григорьев¹, Ф.Н. Чуховский¹, П.В. Конарев¹

¹ Отделение «Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова» Курчатковского комплекса кристаллографии и фотоники
НИЦ “Курчатowski институт”, 119333 Москва, Россия
vasiliy.grigorev.1996@mail.ru

В последние годы техника компьютерной рентгеновской дифракционной микротомографии активно развивается как перспективный метод исследования микродефектов в кристаллах и их трехмерной реконструкции [1–3]. Важным этапом развития данной техники является совершенствование методов численного решения уравнений Такаги–Топена, обеспечивающих корректный расчет дифракционного контраста.

В докладе предложен новый подход к численному решению уравнений Такаги–Топена. Предлагаемая схема основана на интегрировании уравнений на каждом шаге расчетной сетки. В новой схеме использовалась интегральная теорема о среднем [4], позволяющая вынести амплитуды волн из-под интеграла:

$$\begin{aligned} D_0(s_0, s_h) - D_0(s_0 - p, s_h) &= \\ \frac{ik\chi_h}{4} (D_h(s_0, s_h) + D_h(s_0 - p, s_h)) \int_{s_0-p}^{s_0} \exp(ihu(s, s_h)) ds, \\ D_h(s_0, s_h) - D_h(s_0, s_h - p) &= \\ \frac{ik\chi_h}{4} (D_0(s_0, s_h) + D_0(s_0, s_h - p)) \int_{s_h-p}^{s_h} \exp(-ihu(s_0, s)) ds \end{aligned}$$

где $k = 2\pi/\lambda$ (λ – длина волны излучения), D_0 и D_h – амплитуды прошедшей и дифрагированной волн, χ_h и $\chi_{\bar{h}}$ – фурье-компоненты диэлектрической восприимчивости кристалла; s_0 и s_h – координаты вдоль направлений прошедшей и дифрагированной волн, $\mathbf{h}$ – вектор дифракции, $\mathbf{u}$ – поле смещений дефекта.

Расчеты контролировались с помощью улучшенной разностной схемы критерия точности:

$$\begin{aligned} \text{div}(s_0, s_h) &= \text{div}_0 + \\ 2k\text{Im}(\chi_h) \text{Re}(D_0(s_0, s_h) D_h^*(s_0, s_h) \exp(-ihu(s_0, s_h))) \end{aligned}$$

где

$$\text{div}_0 = (I_0(s_0 + p, s_h) - I_0(s_0 - p, s_h) + I_h(s_0, s_h + p) - I_h(s_0, s_h - p)) / p,$$

что является аппроксимацией выражения:

$$\frac{\partial I_0(s_0, s_h)}{\partial s_0} + \frac{\partial I_h(s_0, s_h)}{\partial s_h}$$

где I_0 , I_h – интенсивности прошедшей и дифрагированной волн.

Расчеты были проведены для дефекта в Si(111) радиусом $R = 0.4$ мкм и $\epsilon = 10^{-3}$ (ϵ – величина, характеризующая упругость континуума) и для дефекта в SiC-6H с $R = 10$ мкм и $\epsilon = 10^{-4}$. Шаг сетки по X и Y (Δx) в плоскости изображения принят равным 0.4 мкм.

Из анализа расчетного контраста точечного дефекта показано, что новая схема позволяет получить точность расчетов, сопоставимую с точностью расчетов, проведенных с помощью дифференциальной схемы с $\Delta x = 0.05$ мкм [5]. Значения критерия точности решения составили $\sim 10^{-3}$ для Si(111) и для SiC-6H, что свидетельствует о достоверности проведенных расчетов.

На рис. 1 даны изображения дефекта в Si(111) и SiC-6H.

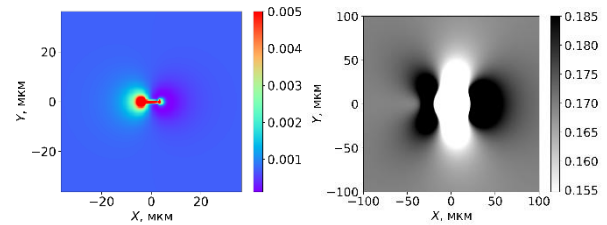


Рис. 1. Изображения дефекта в Si(111) (слева) и в SiC-6H (справа).

Сравнение профилей интенсивности на рис. 1 и в [5] показывает, что предложенная схема позволяет воспроизводить те же распределения интенсивности при существенно большем шаге сетки. Таким образом, новая схема позволяет проводить расчеты дифракционного контраста при существенно меньшем объеме вычислений, чем при использовании дифференциальной схемы [5].

Работа проведена в рамках выполнения государственного задания НИЦ “Курчатowski институт”.

1. И.Л. Шульпина, Э.В. Суворов, И.А. Смирнова, Т.С. Арзунова // Журнал технической физики. – 2022. – Т. 92. – № 10. – С. 1475-1496.
2. Д.А. Золотов, В.Е. Асадчиков, А.В. Бузмаков, В.В. Волков, И.Г. Дьячкова, П.В. Конарев, В.А. Григорьев, Э.В. Суворов // УФН. – 2023. – Т. 193. – № 9. – С. 1001-1009.
3. В.А. Григорьев, П.В. Конарев, Ф.Н. Чуховский, В.В. Волков // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. – 2024. – № 2. – С. 68-73.
4. Г.М. Фихтенгольц, Курс дифференциального и интегрального исчисления : учебник : в 3 томах / Г. М. Фихтенгольц. — 14-е изд., стер. — Санкт-Петербург : Лань, 2020 — Том 1 — 2020. — 608 с.
5. P.V. Konarev, F.N. Chukhovskii, V.A. Grigorev V.V. Volkov // Crystallogr. Rep. – 2026. – V. 71. – P. 1-6.