

Численное моделирование экспериментов в когерентной оптике и кристаллооптике рентгеновских лучей с программой XRWP

Виктор Г. Кон (<http://kohnvict.narod.ru>)

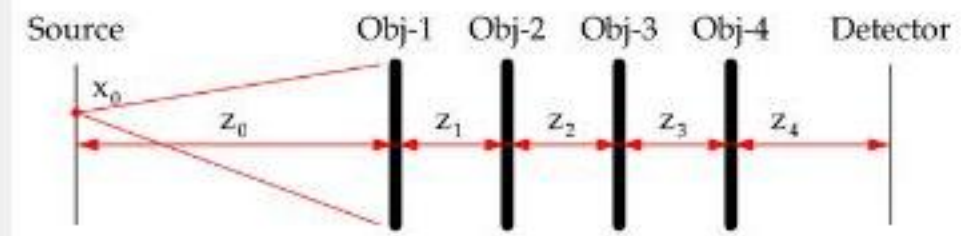
*НИИЦ "Курчатовский институт",
г. Москва, пл. Курчатова, 1.*

Ссылка на сайт программы
<http://xray-optics.ucoz.ru/XR/xrwp.htm>

2327 [Web site](#) [Proza](#) [Programs](#) [Photo shows](#) [Literature](#) [YouTube](#) [V kontakte](#) [Slide shows](#)

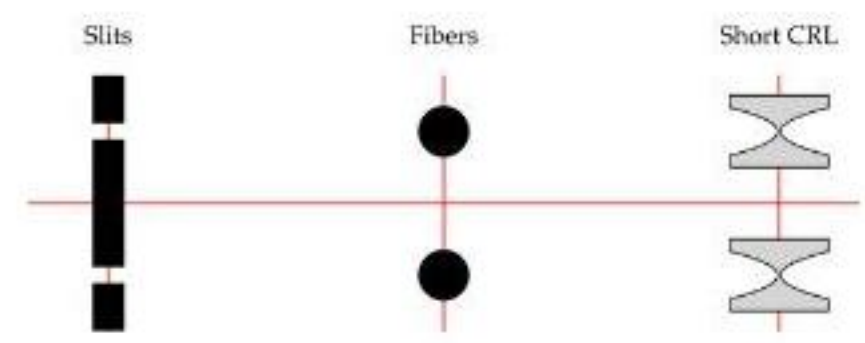
To read the site in **other language** please ▾

XRWP is a short name for **X-Ray Wave Propagation**
 In-Line Setup. FFT is used for computing the space propagation,
 Objects are taken into account by means of various methods



Point source is defined by 2 parameters: x_0 and z_0
 If $z_0 = 0$, wave function in front of Obj-1 should be determined
 in the file. That allows one to continue computing further.

Objects definitions. They are defined in separate files.
 Several objects are described by a transmission function (TF)
 $T(x) = \exp(C t(x))$, where C is a complex value, which takes into account
 radiation and material properties, while $t(x)$ is a thickness profile.
 Such objects may have many elements of the same kind at the same distance.



X-Ray Wave Propagation





универсальная программа рентгеновской оптики для СИ и XFEL

На данном сайте представлена новая версия (06-05-2023) программы XRWP. Она вычисляет распределение интенсивности в пучке рентгеновского синхротронного излучения (СИ), а более конкретно, в поперечном его сечении, которое измеряется координатным детектором после того, как пучок прошел через серию объектов, расположенных между источником и детектором на разных расстояниях внутри станции источника СИ или на станции рентгеновского лазера на свободных электронах (x-ray free electron laser, XFEL). Программа работает как с двумерными объектами, у которых электронная плотность меняется только по осям x и z , а по оси y она однородна, так и с трехмерными объектами, структура которых меняется по трем осям x , y и z . Соответственно, она вычисляет либо одномерные функции $int(x)$ на ограниченном участке оси X , либо двумерные $int(x,y)$ в квадратной области определенного размера на плоскости XY . Эти функции описывают безразмерную относительную интенсивность излучения. Обычно вычисляется отношение интенсивности на детекторе к интенсивности перед первым объектом, но могут быть варианты.

Для двумерных объектов программа тоже может вычислять двумерные распределения, когда в качестве второго аргумента выступает любой другой параметр любого объекта или схемы в целом. Вычислять трехмерные и выше распределения уже не разумно, так как и массивы получаются большие и смотреть их не удобно. Универсальность программы определяется тем, что


В программе частично представлен опыт моей работы в данной области науки за более, чем 50 лет, начиная от аспирантуры в 1968 году и до 2023 года. Последние 30 лет я программирую на собственном языке программирования, который называется ACL (advanced command language). Это скриптовый язык. Он исполняется еще более универсальной программой, написанной на языке Java. Фактически, пользователь имеет дело именно с программой, написанной на Java. Вся информация о программе разбита на разделы, которые показываются в данном окне при клике на соответствующую кнопку оглавления, представленного ниже.


Работа еще не окончена. Программа развивается и будет развиваться еще относительно долгое время. Соответственно, и данный сайт будет дополняться и изменяться. По этой причине я буду ставить даты публикации материалов. И не забывайте заходить сюда чаще. Кому интересно узнавать изменения по почте, присылайте мне заявку на адрес моей электронной почты. Адрес есть на моем персональном сайте.


-  **Как скачать и установить программу.** Технические вопросы и их решение.
-  **Документация к программе.** Как пользоваться и Теоретические основы.
-  **Введение в проблему.** О том как и почему все начиналось.
-  **Научные статьи,** в которых использована программа.

Документация к программе. Как пользоваться и Теоретические основы. 27-05-2023.


Прежде всего есть:

Описание основных свойств и структуры входных данных программы XRWP, которое показывает сама программа. Вот ссылка . Это фактически справочник, определяющий большое число параметров, и описывающий много разных функций, которые программа реализует.

Теоретическая документация с формулами и ссылками, в которой описаны теория и методы расчета почти всех объектов. Теория и методы расчета одинаковы для 2D и 3D объектов. Документ написан как бы для 2D объектов, но он почти без изменений относится и к 3D объектам тоже, только одномерные интегралы заменяются на двумерные. Но это касается только щелей, фокусировки и фазового контраста. Дифракция в кристаллах в трехмерном виде не существует, а ее теория намного сложнее и в документе описана лишь частично. Вот ссылка .

Самый большой по объему документ о том как работает программа XRWP на примерах с указанием входных данных, результатов, и их анализа. Он дает отличное введение в проблему освоения программы для начинающих. Вот ссылка .

Последние два документа интересно читать даже если вы совсем не собираетесь использовать программу. Там есть теория и физика и можно много всего узнать об этом.

Еще один документ дублирует информацию, которую дает сама программа по мере необходимости. Он содержит информацию о небольших программах в помощь основной программе, которые запускаются по кнопке (Help operations). Необходимость их использования возникает не сразу, но рано или поздно они могут понадобиться. Частично об этих операциях написано в других описаниях, но здесь собрано все вместе. Вот ссылка .

О работе с программой XRWP на конкретных примерах

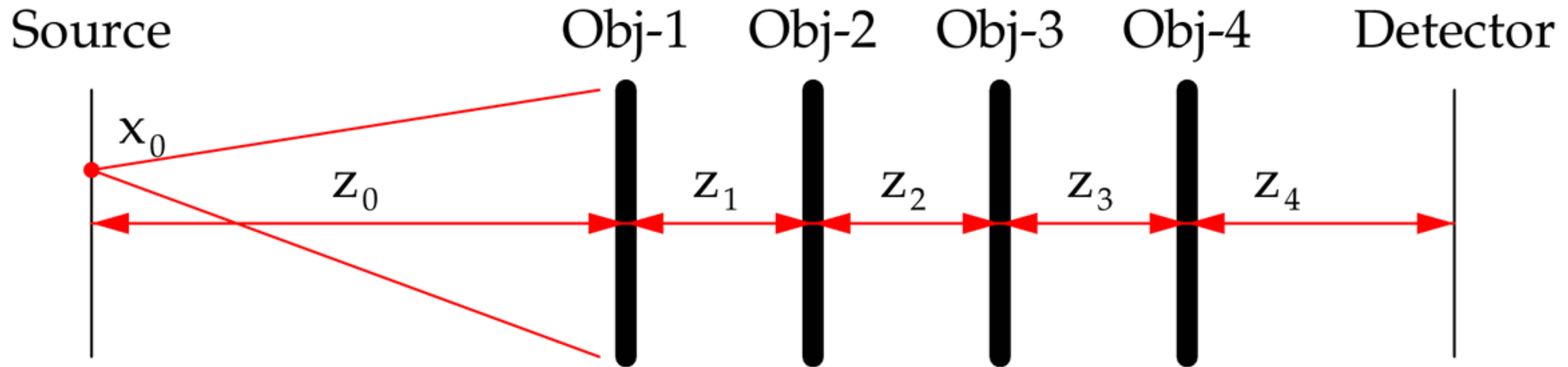
В. Г. Кон, 06-05-2023, <http://kohnvict.narod.ru>

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 пропагатор	
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	28
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	40

XRWP is a short name for X-Ray Wave Propagation

In-Line Setup, FFT is used for computing the space propagation,
Objects are taken into account by means of various methods



Point source is defined by 2 parameters: x_0 and z_0

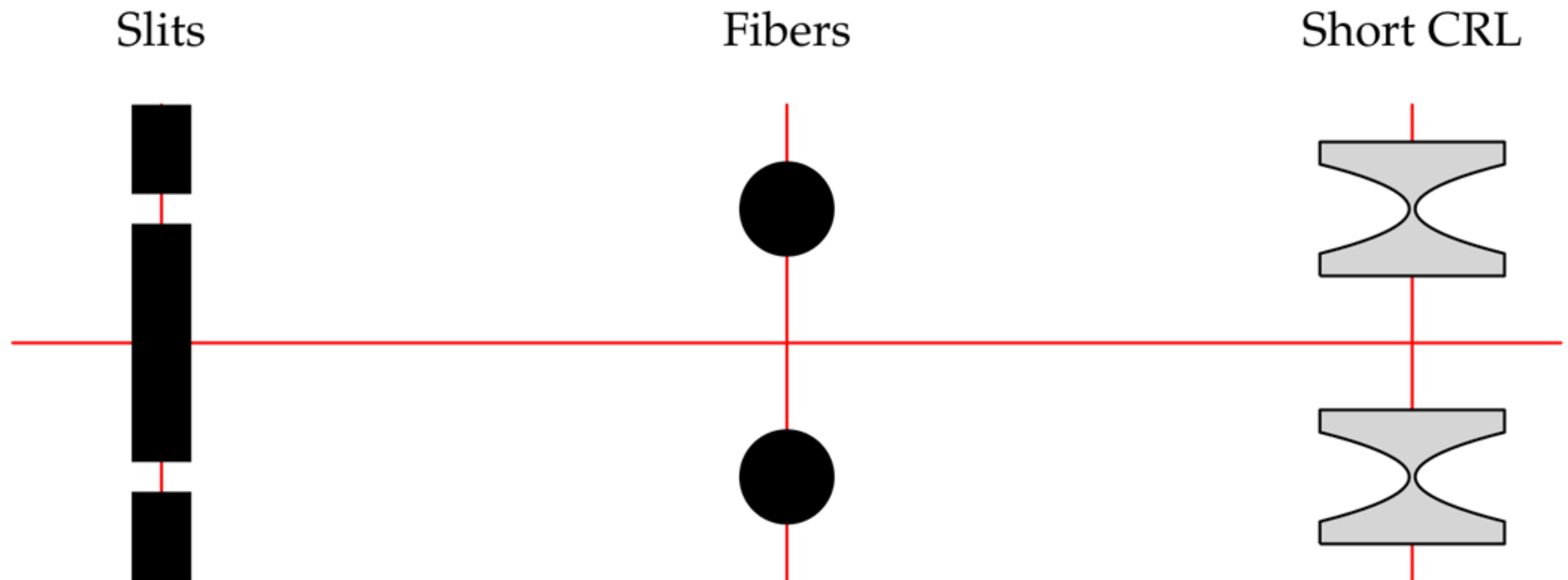
If $z_0 = 0$, wave function in front of Obj-1 should be determined in the file. That allows one to continue computing further.

Objects definitions. They are defined in separate files.

Several objects are described by a transmission function (TF)

$T(x) = \exp(C t(x))$, where C is a complex value, which takes into account radiation and material properties, while $t(x)$ is a thickness profile.

Such objects may have many elements of the same kind at the same distance.



Технические подробности

Программа написана на языке программирования **Java**,
но не непосредственно, а в два этапа.

На Java написан только интерпретатор моего языка **ACL**.
ACL есть сокращение от Advanced Command Language

По русски я его называю **Экол**.

Основное окно программы – это окно интерпретатора ACL.

То есть кроме программы **XRWP** в этом окне можно
выполнить очень большое число других моих программ,
а также написать много своих программ на языке **Экол**.

Язык **Экол** в чем-то похож на Питон, но намного
проще в использовании и совсем другой в грамматике.

XRWP, Choose operation

Game rules (read first)	1	q3d figure of 2D data	A
Input Data (main)	2	axon figure of 2D data	B
Input Data (other)	3	Choose ID main	C
Choose ID total	4	Other problems solution	D
Computing 1D	5	Help Operations	E
Input+Computing 1D	6	Picture Viewer	F
Computing 2D	7	Make PicMatrix	G
Input+Computing 2D	8	Calculations by Code	H
Animation of 2D data	9	Make pdf from data	I
Color map of 2D data	0	Exit	J

Journal of Synchrotron Radiation

ISSN 0909-0495

Received 0 XXXXXXXX 2022

Accepted 0 XXXXXXXX 2022

Online 0 XXXXXXXX 2022

On the theory of synchrotron radiation nanofocusing with planar compound refractive lenses

V. G. Kohn^{a,b*}

^aNational Research Centre "Kurchatov institute", 123182 Moscow Russia, and ^bShubnikov Institute of Crystallography of Federal Scientific Research Centre "Crystallography and Photonics" of Russian Academy of Sciences, 119333 Moscow Russia. Correspondence e-mail: kohnvict@yandex.ru

Two new methods of computer simulations of synchrotron radiation nanofocusing with planar compound refractive lenses (PCRL) are presented. The methods are based on the results of analytical theory. In contrast to previous works, they make it possible to take into account the PCRL aperture. It is especially important for high energies of photons, when the absorption is low and the calculations based on the analytical theory, i. e. without taking into account the aperture, give wrong results. The computer program was created and specific results were obtained for a silicon PCRL having the aperture of 50 μm , the element length of 102 μm and the thickness minimum of 2 μm . For the energy of 50 keV and the number of elements 300, it focuses the beam to 31 nm size at a distance of one and a half times its length. The analysis of the calculation accuracy for the proposed methods is performed, as well as a demonstration of the capabilities of the computer program.

$$E(x, z, t) = \exp(iKz - i\omega t) A(x, z)$$

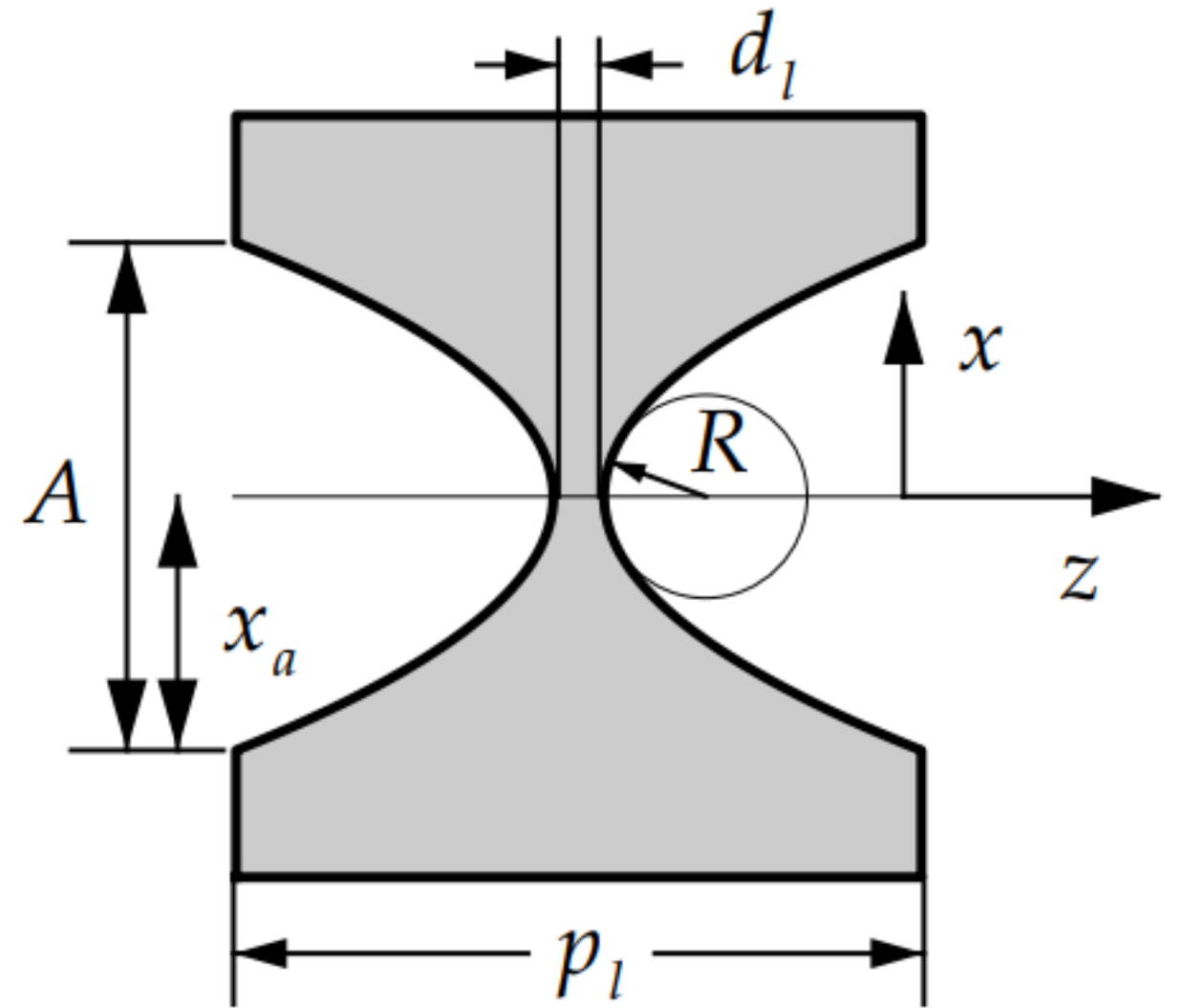
$$\frac{dA}{dz} = -iK\eta(x, z)A + \frac{i}{2K} \frac{d^2A}{dx^2}$$

$$A(x, z) = \int dx_1 P(x - x_1, z) A(x_1, 0)$$

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

$$A(x, z) = T(x) A(x, 0)$$

$$T(x) = \exp(-iK\eta t(x)), \quad t(x) = \int_0^z dz_1 s(x, z_1)$$



$$t(x) = \begin{cases} x^2/R + d_l, & x < x_a \\ x_a^2/R + d_l, & x \geq x_a \end{cases}$$

$$A(x, z) = C_0 B_0(x) \int dx_1 P(x - x_1, b) B_1(x_1) A(x_1, 0).$$

$$B_{0,1}(x) = \exp\left(-i\pi a_{0,1} \frac{x^2}{\lambda b}\right), \quad z_c = \left(\frac{p_l R}{2\eta}\right)^{1/2}$$

$$b = z c_L + z_c s_L, \quad a_0 = 1 - c_L, \quad a_1 = a_0 + s_L \frac{z}{z_c},$$

$$c_L = \cos(L/z_c), \quad s_L = \sin(L/z_c), \quad L = p_l n_l$$

$$\eta(x, z) = \eta \frac{(d_l + x^2/R)}{p_l}$$

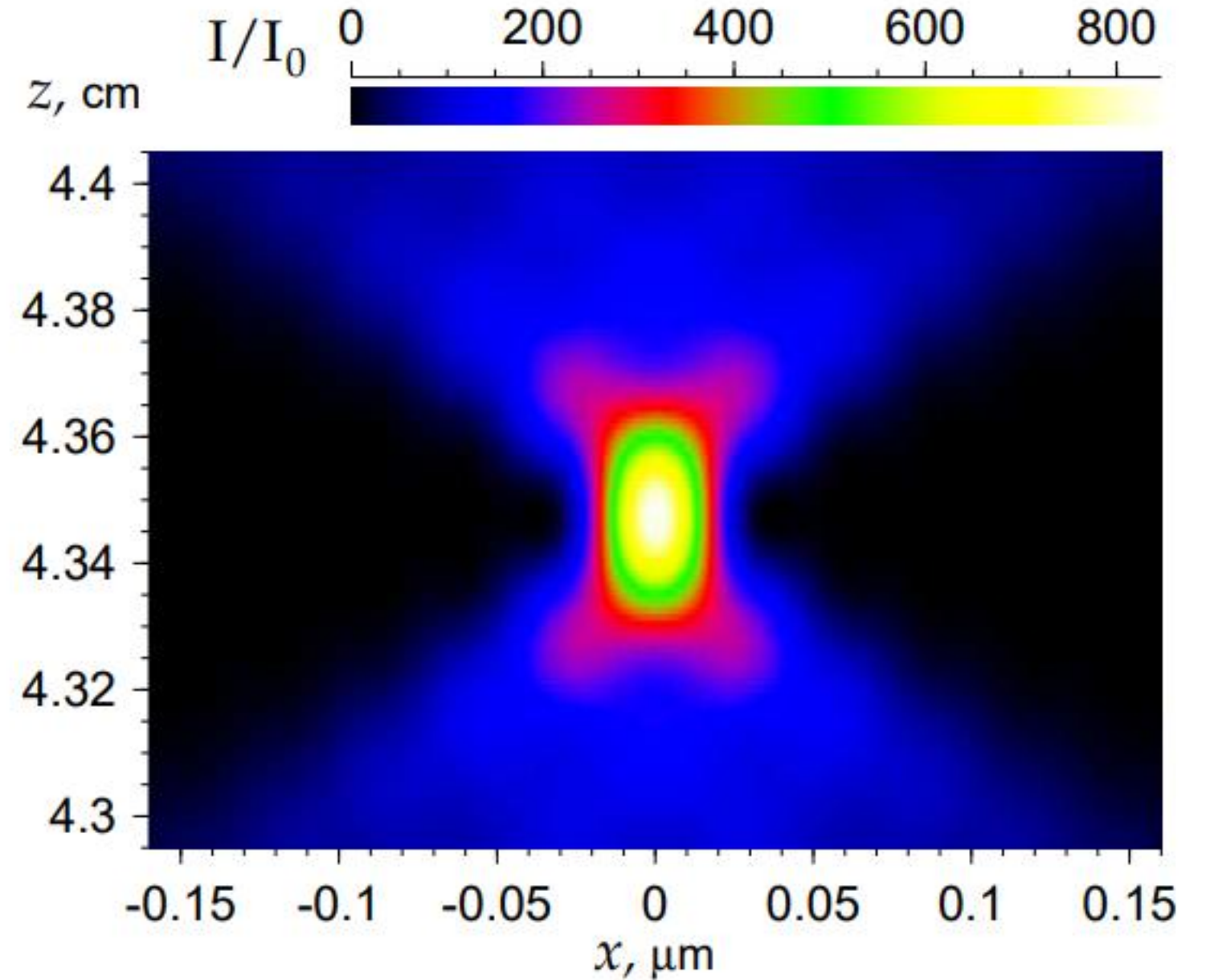
$$A(x, L) = \frac{C_0}{c_L^{1/2}} \exp\left(i\pi \left[c_L - \frac{1}{c_L}\right] \frac{x^2}{x_L^2}\right) A\left(\frac{x}{c_L}, 0\right)$$

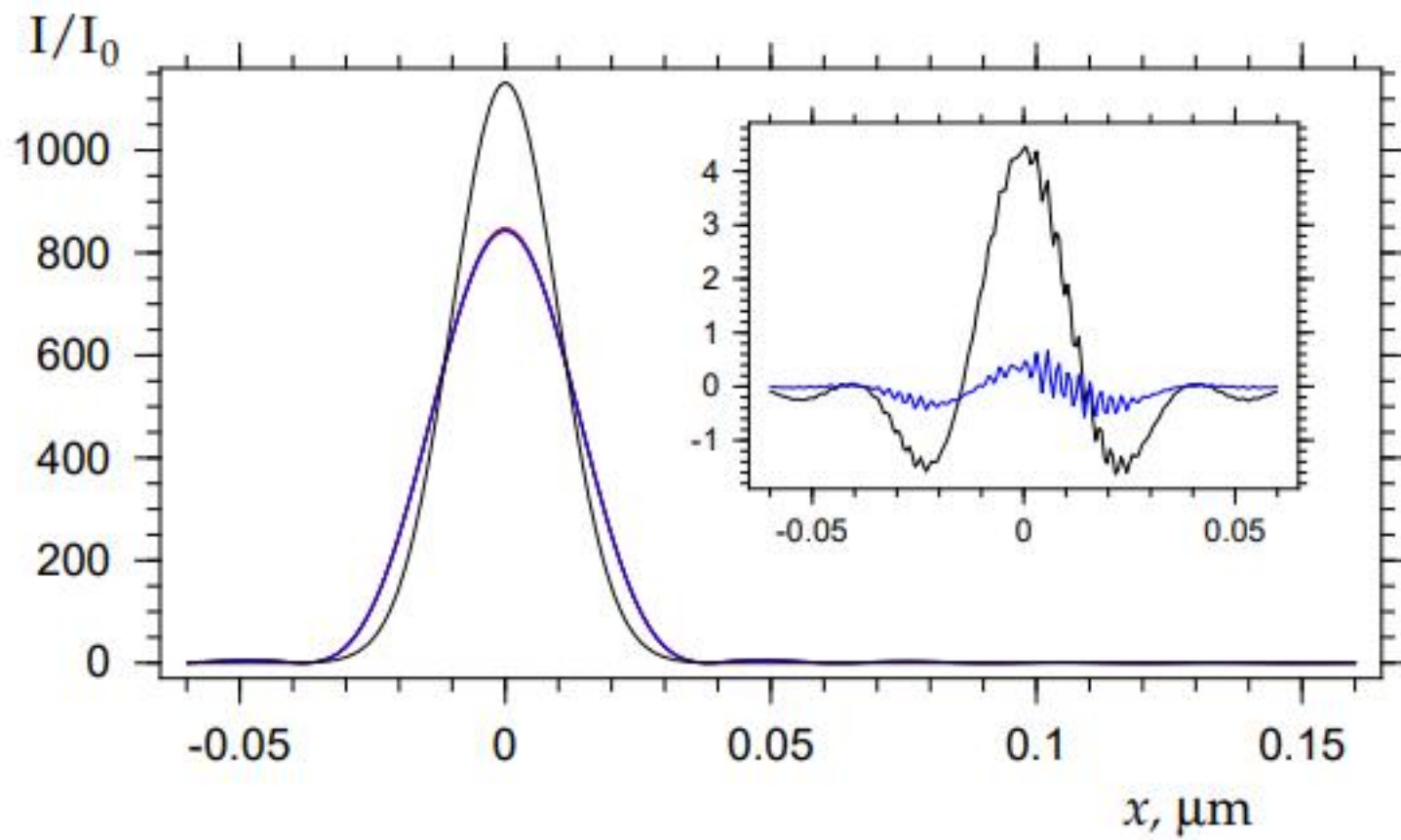
$$C_L = \cos(L/L_c), \quad L_c = (p_l R/2\delta)^{1/2}$$

$$E = 50 \text{ keV}, \quad z_0 = 50 \text{ m}, \quad n_l = 300,$$

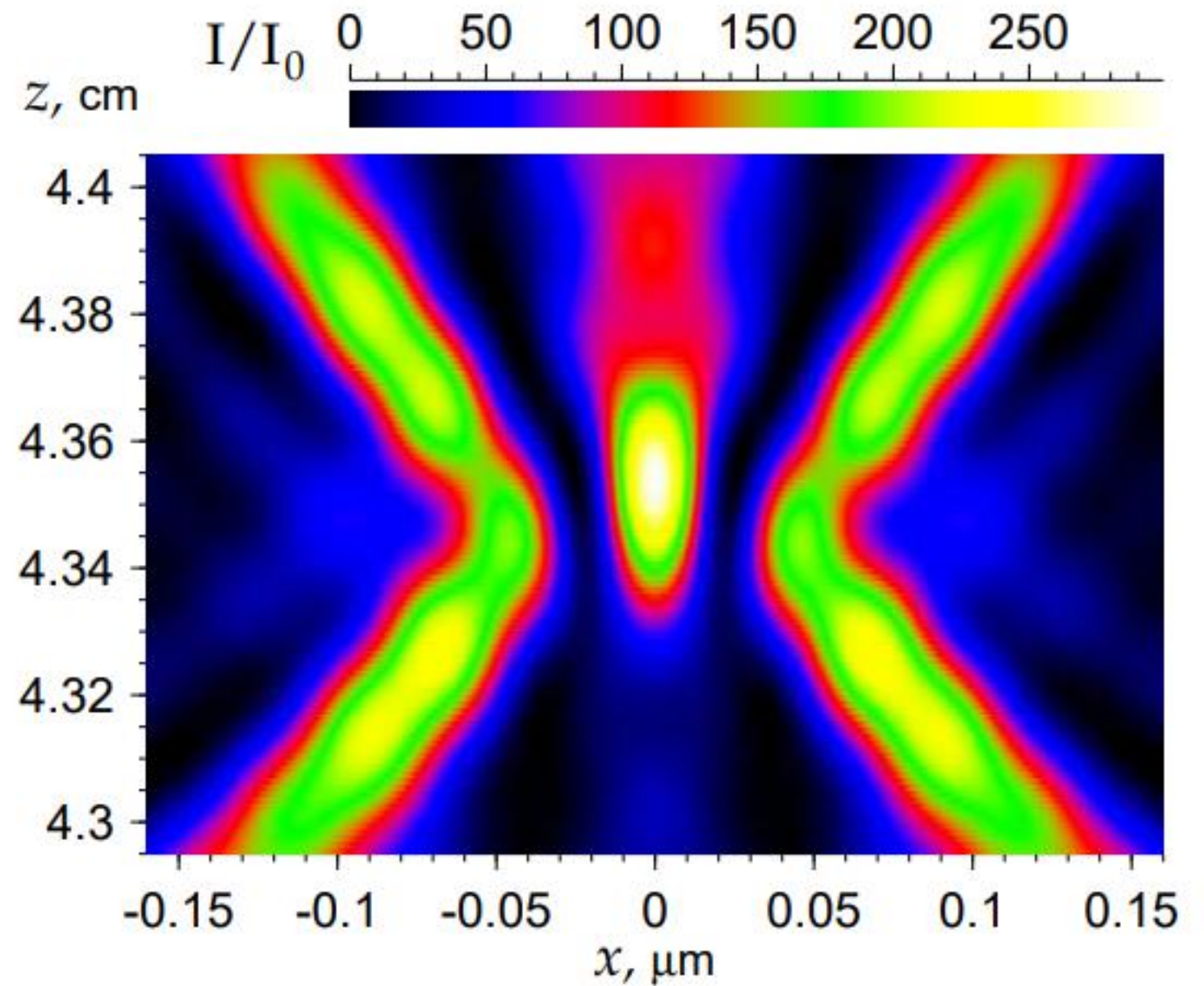
$$A = 50 \text{ } \mu\text{m}, \quad R = A/8 = 6.25 \text{ } \mu\text{m}, \quad d_l = 2 \text{ } \mu\text{m},$$

$$p_l = d_l + A^2/4R = 102 \text{ } \mu\text{m}$$





Relative intensity distribution at the focus distance calculated by four methods: first (compressed lenses approach, CLA), second (smeared lenses approach, SLA), third (approximate SLA), fourth (Gaussian, SLA without aperture)



Intensity distribution in area near the focus
In the case when the tungsten wire with a diameter of 10 μm is located at zero distance in front of the slit and the PCRL

Кристаллография, 2022, 67, в.6, 892-899

ДИФРАКЦИЯ И РАССЕЯНИЕ ИОНИЗИРУЮЩИХ ИЗЛУЧЕНИЙ

УДК 548.73

**РЕНТГЕНОВСКИЙ ФАЗОВО-КОНТРАСТНЫЙ МИКРОСКОП.
ТЕОРИЯ И КОМПЬЮТЕРНЫЙ ЭКСПЕРИМЕНТ.**

В. Г. КоH^{1,2}

¹ *Национальный исследовательский центр "Курчатовский институт", 123182, Москва, Россия*

² *Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова ФНИЦ
"Кристаллография и фотоника" РАН, 119333, Москва, Россия*

E-mail: kohnvict@yandex.ru

$$E(x, x_s, t) = \exp(ikz - i\omega t) A(x, x_s, \omega) \quad (1)$$

где t – время, $k = 2\pi/\lambda$, $\omega = c/k$, медленная функция равна

$$A(x, x_s) = \int dx_o P(x - x_o, z_1) T(x_o) P(x_o - x_s, z_0) \quad (2)$$

В формуле (2) z_0 и z_1 – расстояния источник–объект и объект–детектор соответственно. Пропагатор Френеля

$$P(x, z) = (i\lambda z)^{-1/2} \exp(i\pi x^2/\lambda z) \quad (3)$$

позволяет вычислить распространение пучка СИ в пустом пространстве. Он представляет собой поперечную часть сферической волны в параксиальном приближении. Микро-объект описывает трансмиссионная функция

$$T(x) = \exp(-ik[\delta - i\beta] t_o(x)) \quad (4)$$

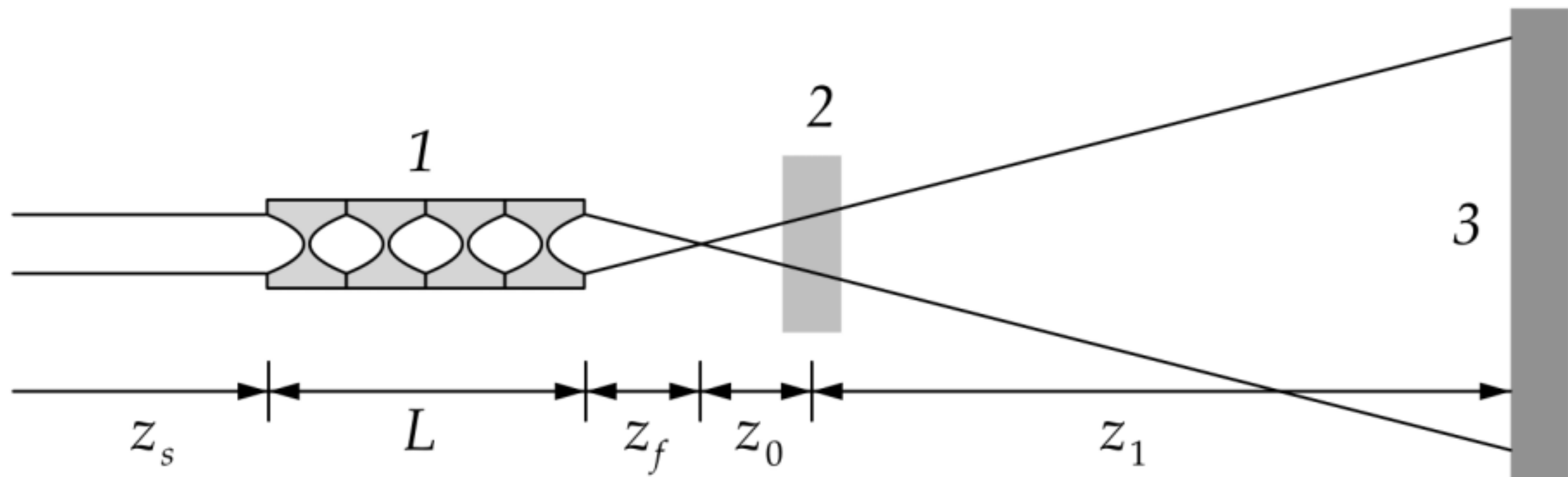
$$A(x, x_s) = P(x - x_s, z_t) a_i(x_i, z_i) \quad (5)$$

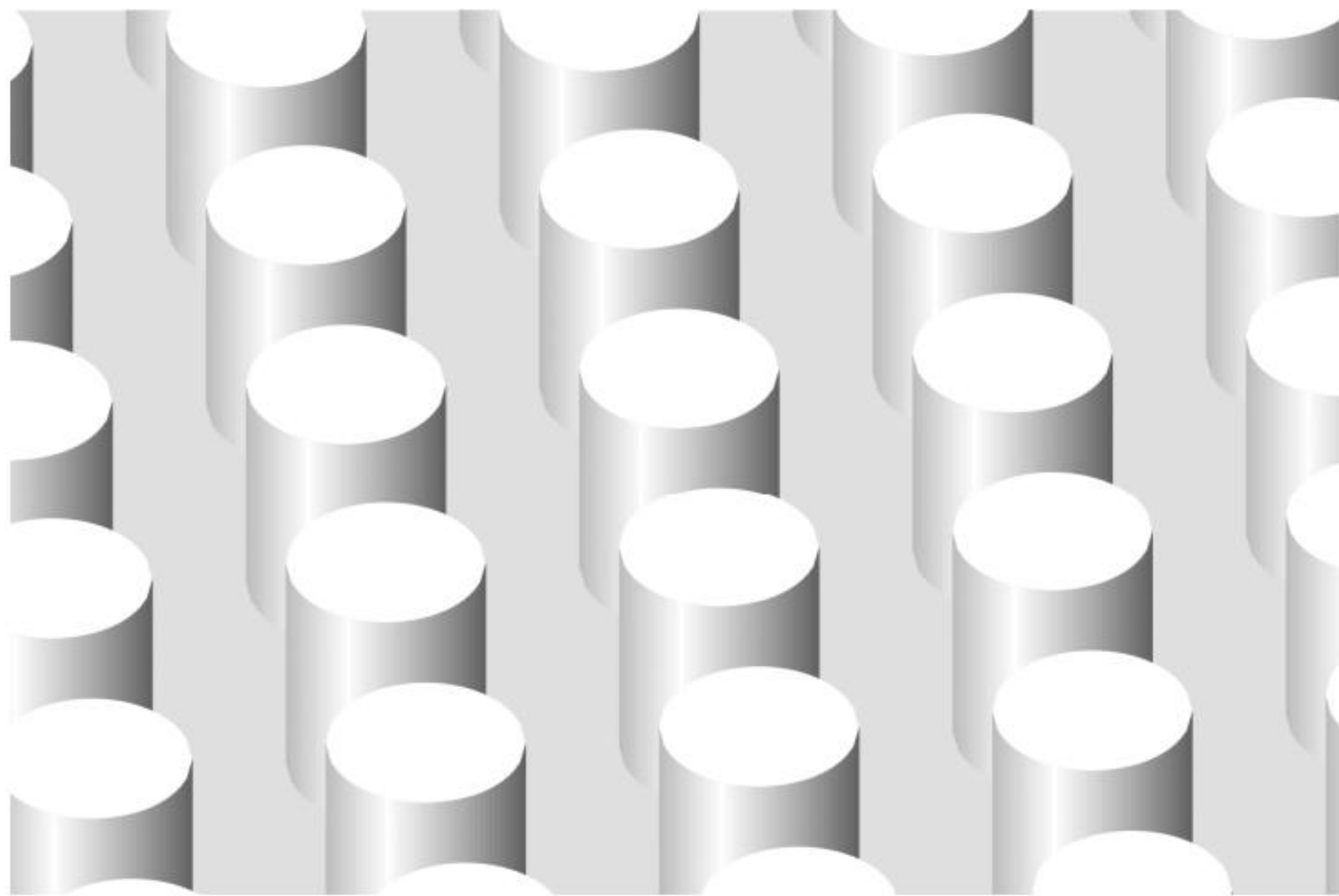
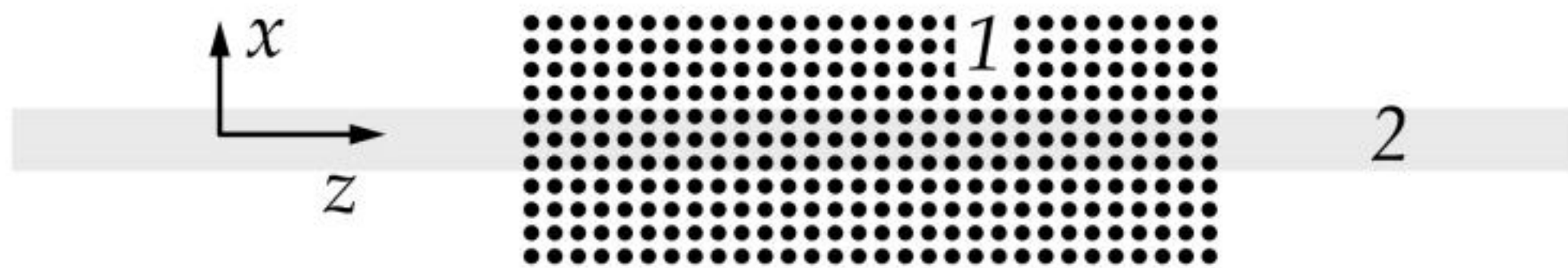
$$a_i(x_i, z_i) = \int dx_o P(x_i - x_o, z_i) T(x_o) \quad (6)$$

$$z_t = z_0 + z_1, \quad z_i = z_0 z_1 / z_t, \quad x_i = (z_0 / z_t)[x + x_s (z_1 / z_0)] \quad (7)$$

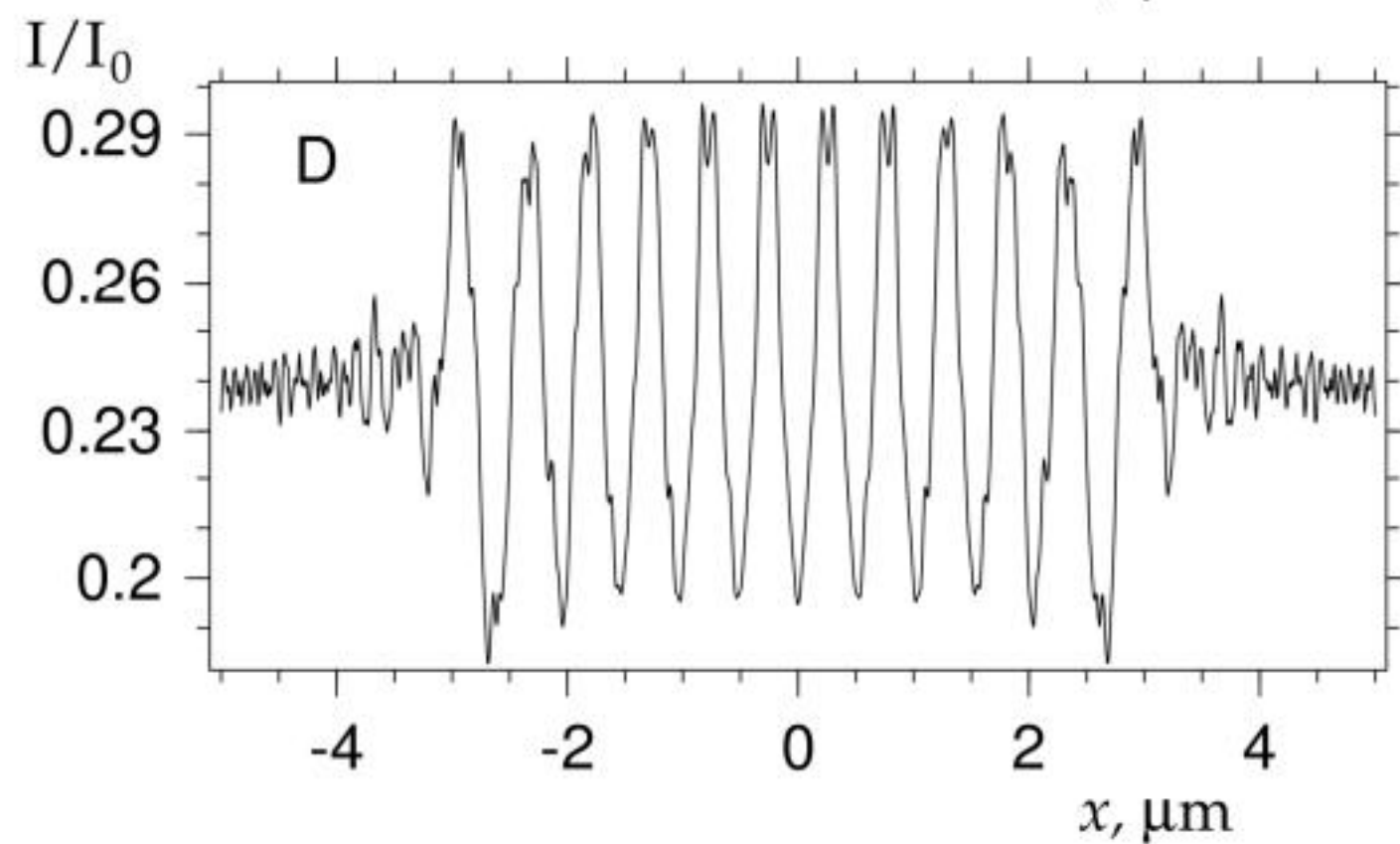
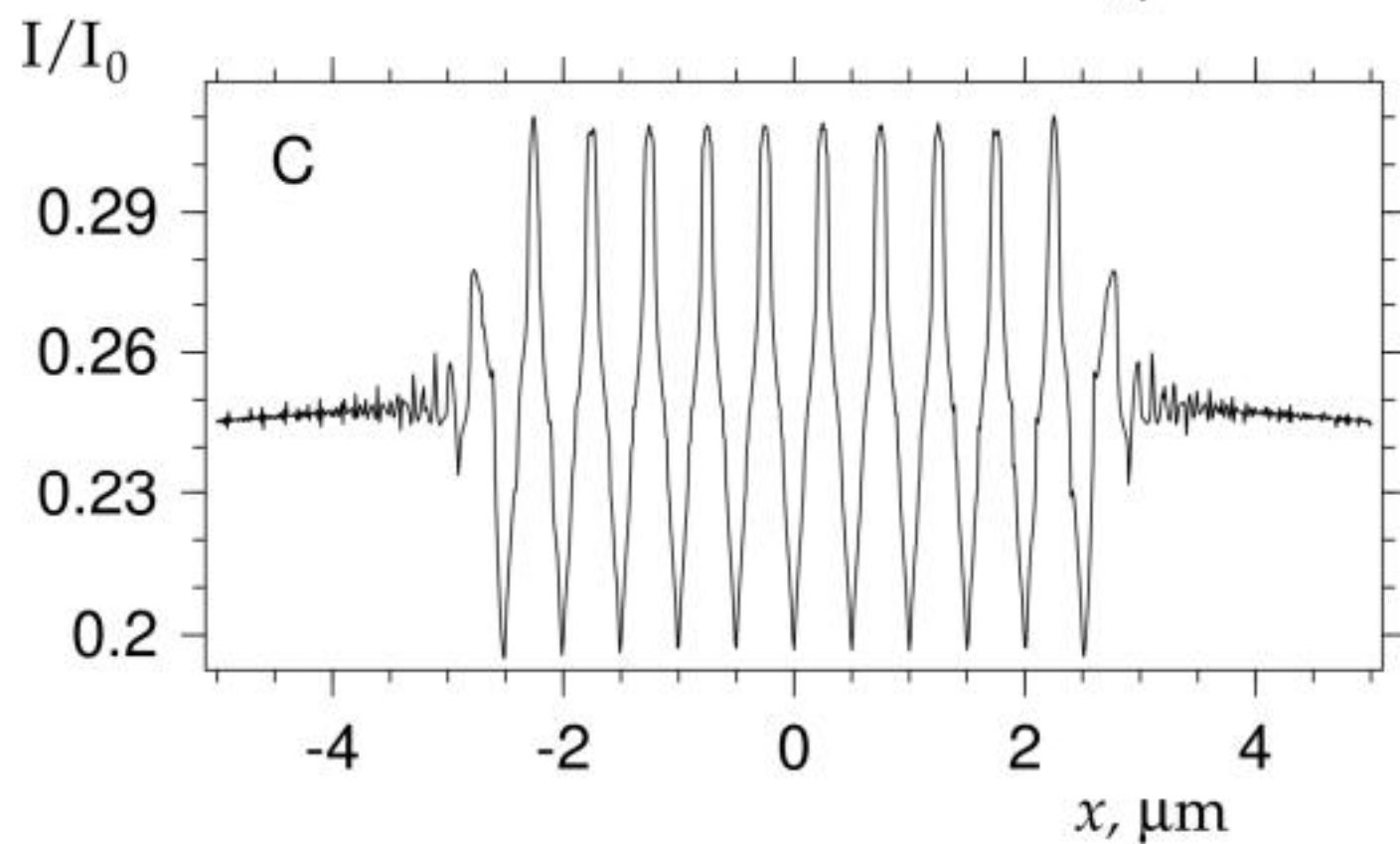
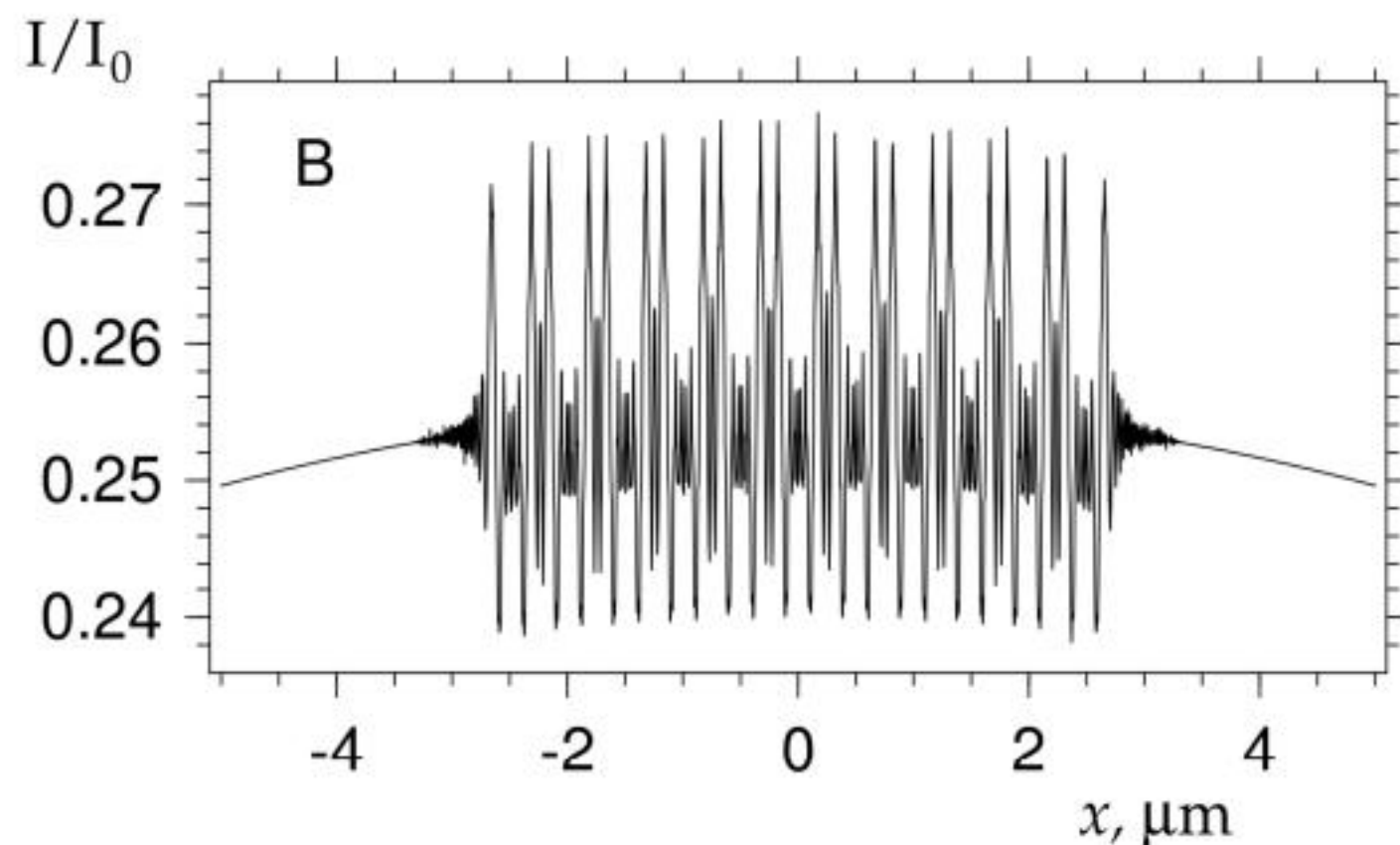
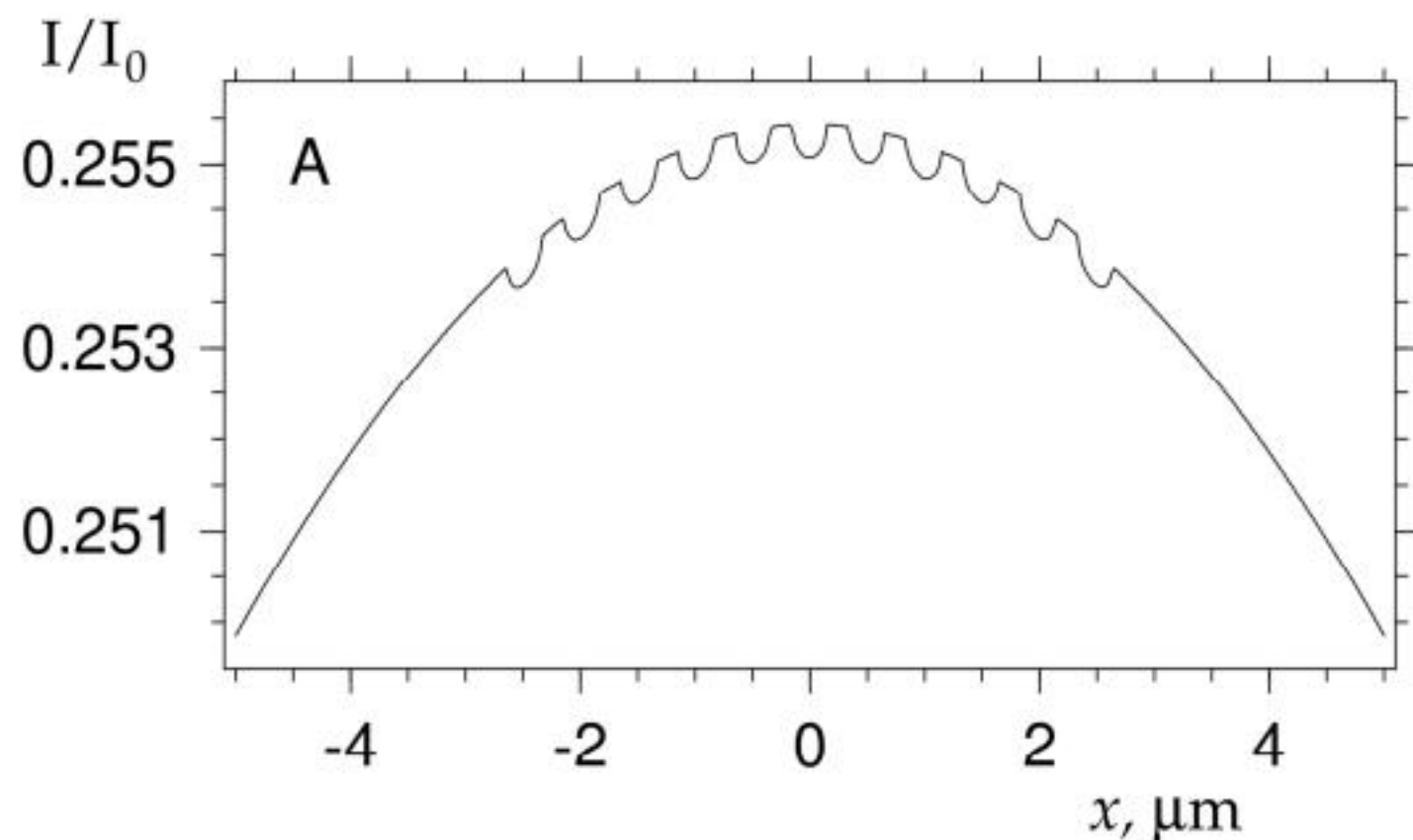
In many investigations (standard) $z_0 \gg z_1$

New approach to experiment $z_0 \ll z_1$

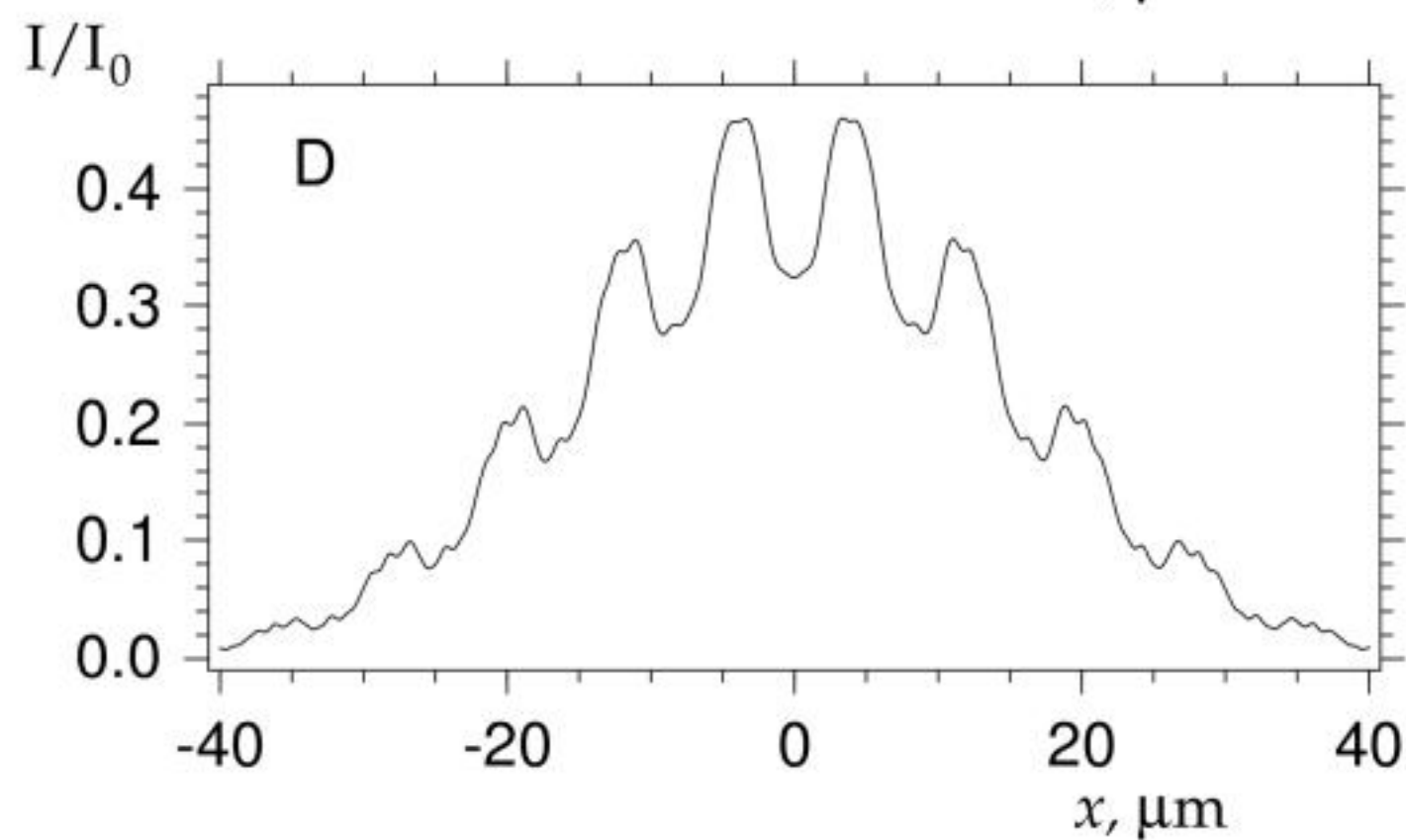
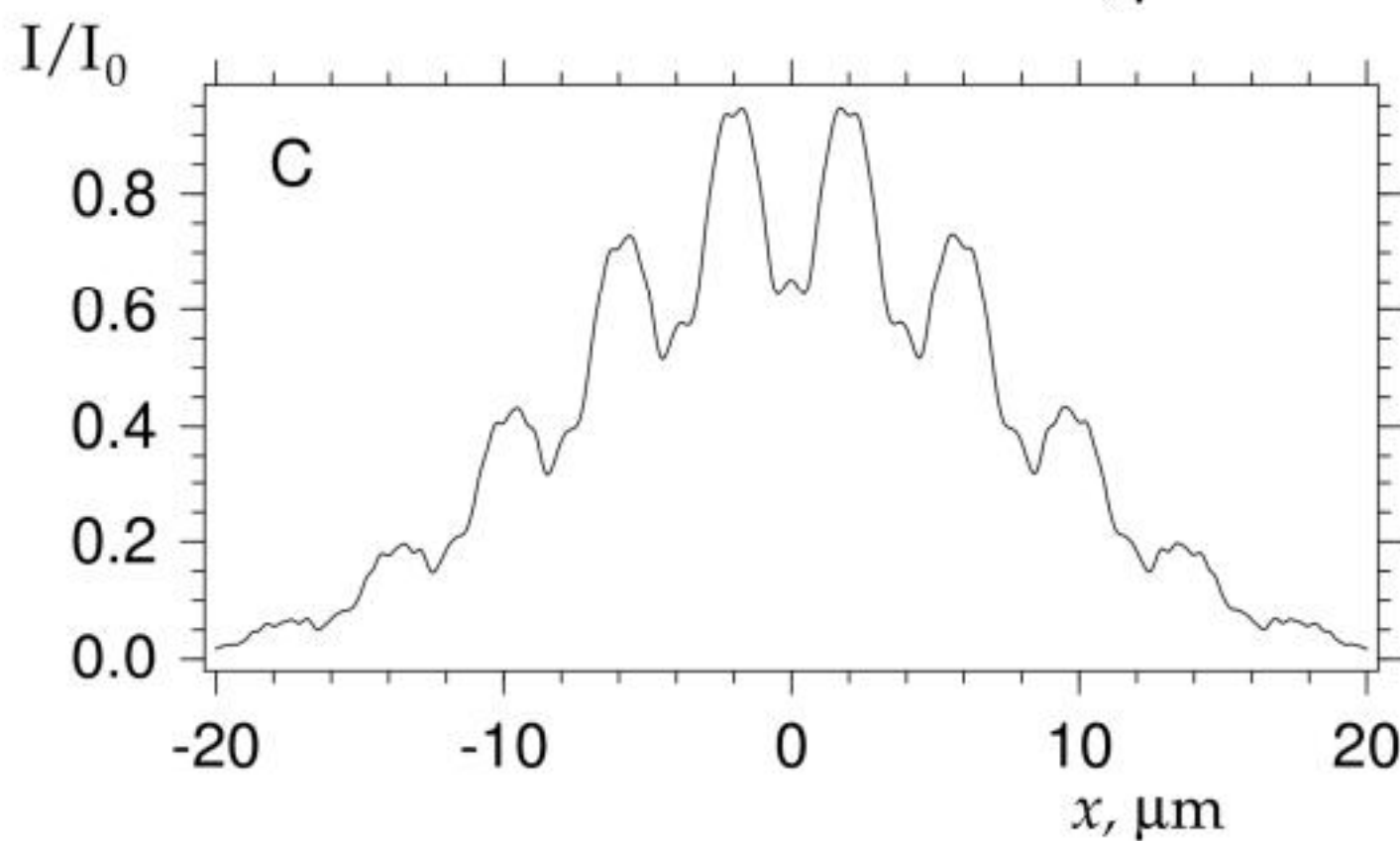
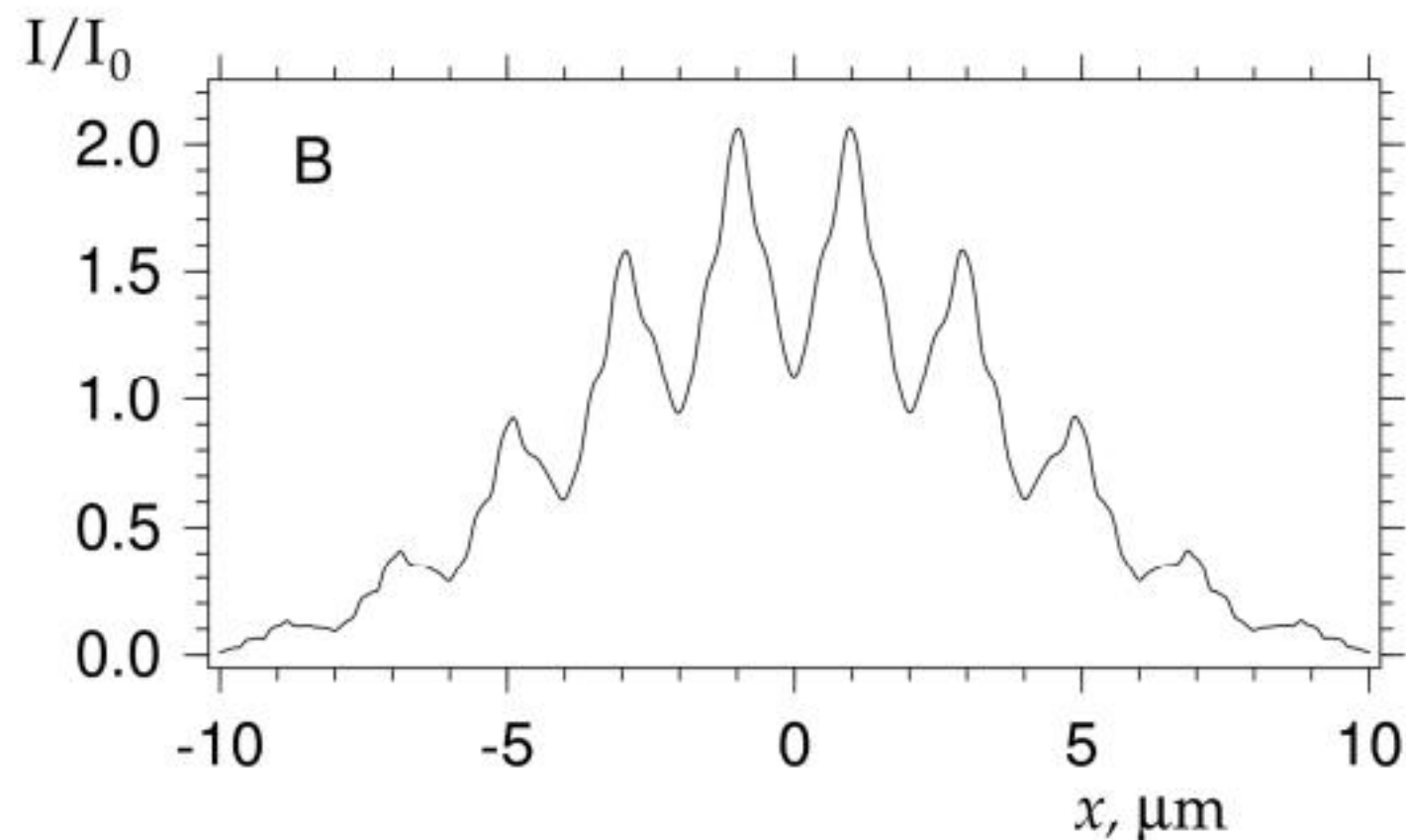
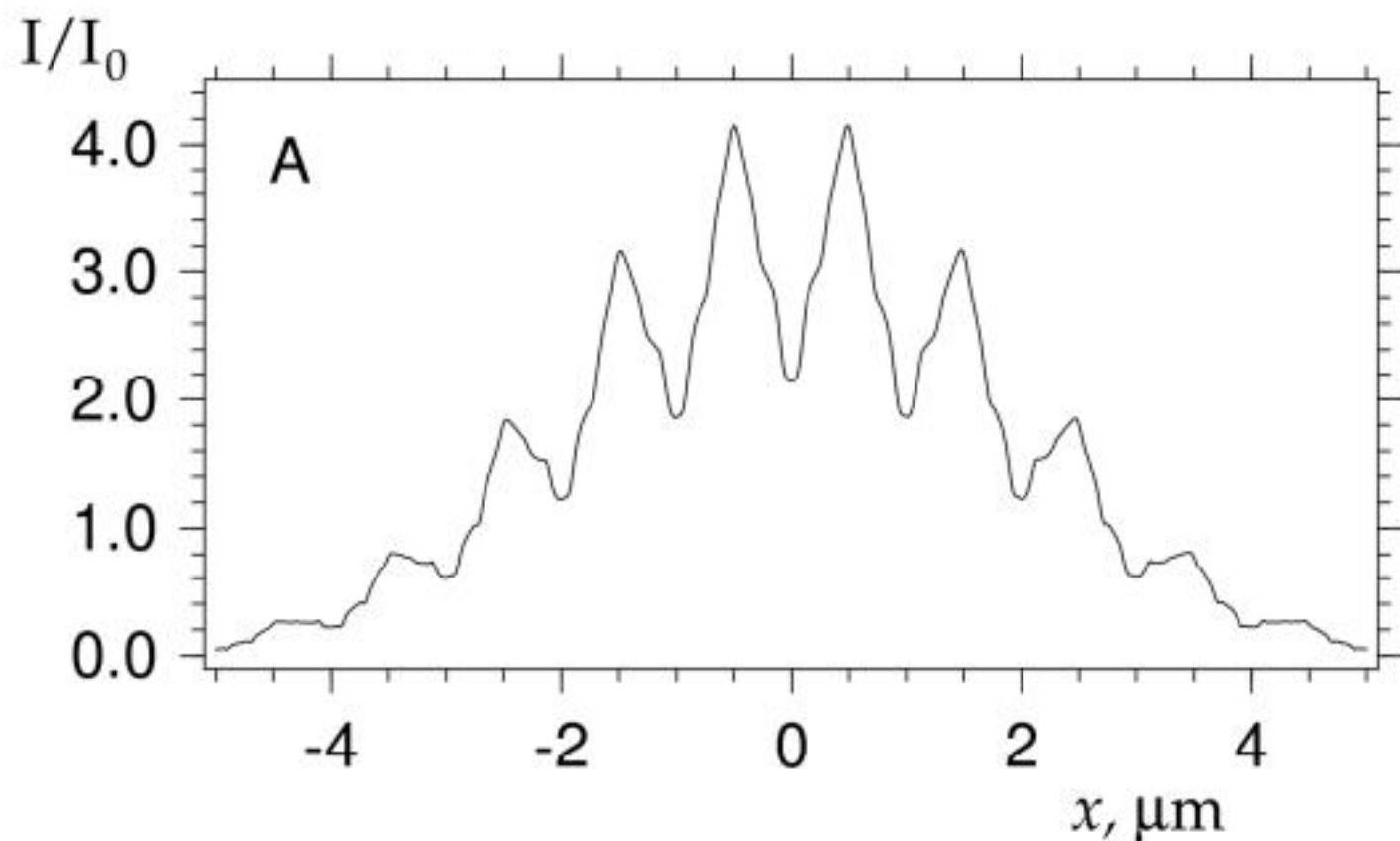




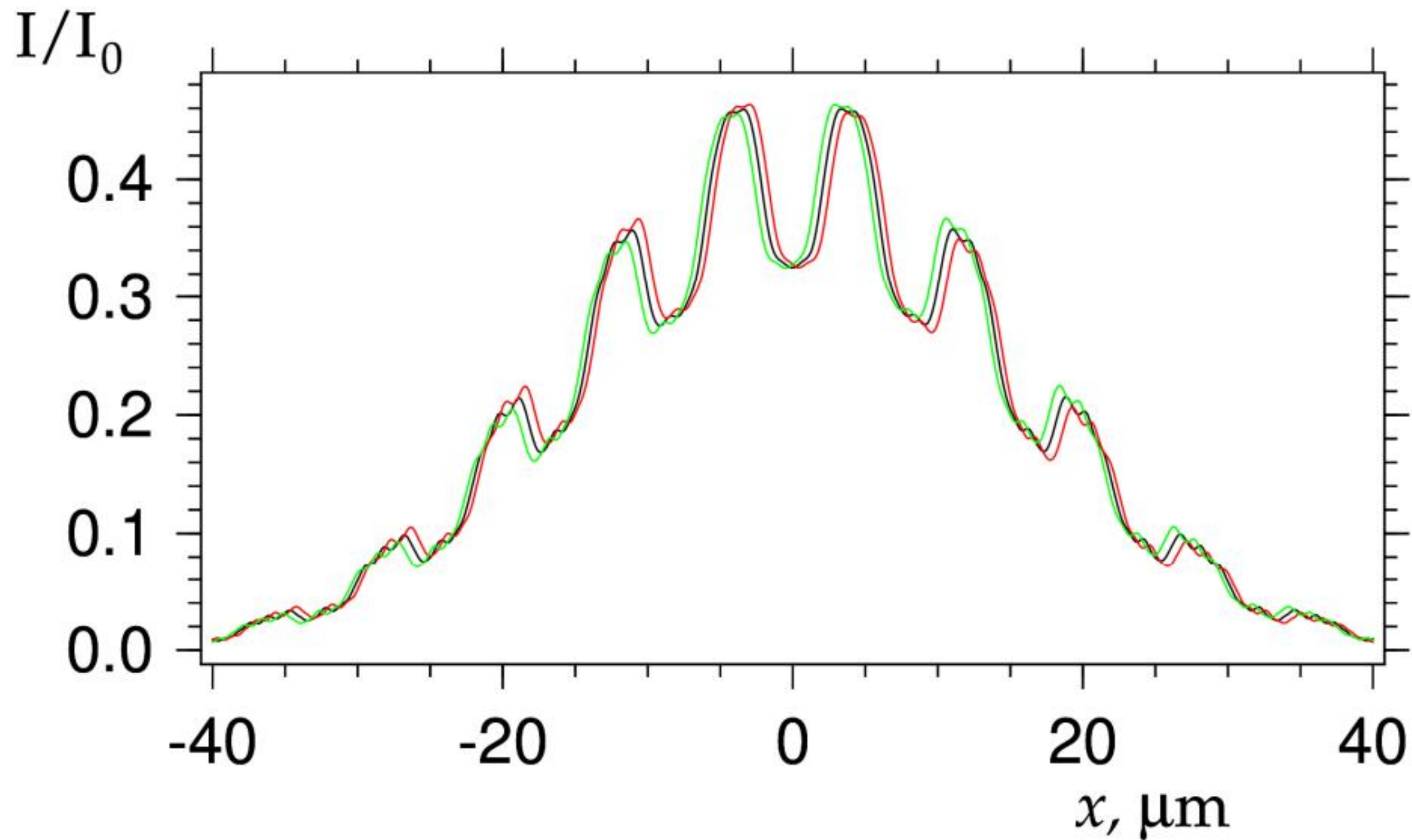
$E = 25$ keV, $z_s = 50$ m, $n_l = 150$, $A = 50$ μm , $R = 6.25$ μm , $d_l = 2$ μm , $p_l = 102$ μm ,
 $z_f = 2.1664$ cm, $L = 1.53$ cm, $A_e = 18$ cm, $z_0 = 10$ cm, $z_1 = 0$ (A), 0.01 (B), 0.1 (C), 0.4 (D) cm



$E = 25$ keV, $z_s = 50$ m, $n_l = 150$, $A = 50$ μm , $R = 6.25$ μm , $d_l = 2$ μm , $p_l = 102$ μm ,
 $z_f = 2.1664$ cm, $L = 1.53$ cm, $z_0 = 0.4$ cm, $z_1 = 0.4$ (A), 1.2 (B), 2.8 (C), 6.0 (D) cm



$z_0 = 0.4 \text{ cm}$, $z_1 = 6.0 \text{ cm}$, $x_s = 0$ (black), $50 \text{ }\mu\text{m}$ (red), $-50 \text{ }\mu\text{m}$ (green)



БЛАГОДАРЮ

ЗА

ВНИМАНИЕ