

## Программа CDRSR (CD ACLp)

Victor Kohn, 03.05.19 / 30.01.20 / 14.10.25

### Сокращения

БПФ – быстрое преобразование Фурье  
 ГППИ – главная папка программы интерпретатора  
 КДО – кривая дифракционного отражения  
 РПП – рабочая папка программы  
 ЯП – язык программирования

### 1. Введение.

Первоначально программа была создана с целью выполнить расчеты по теории, опубликованной в [1]. Речь идет об экспериментальной схеме (источник, монохроматор бабочка, щель, образец, детектор), которая создана и функционирует на станции РКФМ КИСИ. В этой теории общие формулы были весьма сложные для вычислений. Для упрощения расчетов были предложены два приближения: широкой и узкой щели. Второе приближение наиболее соответствует ситуации, реализуемой в эксперименте. По этой причине оно, то есть приближение узкой щели и было использовано для создания программы. В последующее время программа дописывалась и развивалась по мере необходимости.

Главное уравнение для расчета угловой зависимости отражения, иными словами, КДО  $S(\theta_r)$  можно записать в виде

$$S(\theta_r) \propto \int dx G_B([1 - M]x) G_M(Mx) G_C(x) G_s(x) \exp(-iq_r x), \quad q_r = K\theta_r \quad (1)$$

Здесь вычисляется преобразование Фурье от произведения 4-х функций. Функция источника вычисляется по аналитической формуле

$$G_B(x) = \exp(-\sigma^2 x^2 / 2) \quad (2)$$

где параметр  $\sigma$  определяется поперечным размером источника согласно уравнению  $\sigma = KS_0/L_0$  где  $K = 2\pi/\lambda = 0.506774 E_0$  ( $\lambda$  – длина волны излучения,  $E_0$  – энергия фотонов в кэВ),  $L_0$  – расстояние от источника до щели,  $S_0 = W_s / 2.355$  где  $W_s$  – полуширина функции Гаусса, описывающая эффективный поперечный размер источника.

Функция щели тоже вычисляется по аналитической формуле

$$G_s(x) = (1 - |x|/2x_0) \theta(2x_0 - |x|) \quad (3)$$

где  $x_0$  – половина ширины щели. Функция  $G_M(x)$  – это образ Фурье функции  $|P_M(q)|^2$ , а функция  $G_C(x)$  – образ Фурье функции  $|P_C(q)|^2$ . Здесь  $P_M(q)$  – амплитуда отражения кристаллами монохроматора, а  $P_C(q)$  – амплитуда отражения кристаллом образцом. Амплитуды отражения вычисляются по теории дифракции плоской волны в кристалле и хорошо известны по учебникам и статьям большой давности. Ниже они будут записаны в более сложном случае..

Для РПП внутри ГППИ ЯП VKACL выбрано такое имя (s/CD) .

На первом этапе программа вычисляет все 4 функции, указанные выше, используя входные параметры, которые определяются в отдельном файле ( \_input.acl ). В процессе расчета есть возможность показать эти комплексные функции на графике, либо записать графики в файл. На втором этапе вычисляется преобразование Фурье произведения всех 4-х функций, а также функции кристалла образца для сравнения и обе функции показываются на графике. Параметры дифракции вычисляются по онлайн программе [2].

Так как ширина или высота кривых может различаться, то оси координат размечаются по самой широкой и высокой функции, а у второй функции высота или ширина может быть увеличена на коэффициент. Обычно на коэффициент умножается высота реальной КДО, то есть от произведения, и ширина собственной кривой, то есть только КДО образца.

Преобразование Фурье вычисляется с помощью процедуры БПФ на интервале  $X$  в реальном пространстве ( $x$ ) и с числом точек  $N$ . Предполагаются симметричные пределы интегрирования. Число точек в обратном пространстве ( $q$ ) то же самое, а шаг сетки точек  $d_q = 2\pi/X$  в то время как шаг в реальном пространстве  $d_x = X/N$ . Шаг на угловой оси равен  $d_\theta = d_q/K = \lambda/X$ .

Пользователь должен удовлетворить условию чтобы все функции были локализованы внутри выбранного интервала, то есть они должны быть равны нулю на его границах как в прямом, так и в обратном пространствах. На самом деле функции локализованы на более коротком интервале, то есть только в центре расчетной сетки. По этой причине только  $N_1$  точек в центре системы из  $N$  точек показываются на графиках отдельных множителей произведения, а КДО рисуется только по числу точек  $N_3$  в центре.

Для сравнения расчета с экспериментом можно использовать постскрипт графику. Для этой цели числа в `dat` файлах конвертируются в текстовый формат и для уменьшения числа точек пользователь может брать точки из массива с  $N_3$  точками с шагом  $N_4$ . Например, если  $N_4 = 3$ , то будут взяты точки с номерами 2, 5, 8, ... Соответственно шаг сетки должен быть умножен на  $N_4$ . Как уже отмечалось выше, на график выводятся две функции: реальная кривая и собственная кривая. Кривые отмечаются индексами 1 и 2 соответственно, либо цветом.

Экспериментальная кривая имеет индекс 3. Удобство постскрипт графики в том, что можно рисовать кривые с любым шагом и числом точек. Иногда экспериментальные данные могут иметь много точек, которые шумят. Чтобы исключить шум программа сначала суммирует каждые 9 точек в одну среднюю и затем многократно делает сглаживающую процедуру посредством усреднения по формуле  $f_k = f_k/2 + (f_{k-1} + f_{k+1})/4$ . График показывает все экспериментальные точки, которые находятся внутри интервала теоретической кривой. При этом центр и максимум кривой варьируются для наилучшего совпадения теории и эксперимента.

Программа создает `eps` файл и `bat` файл для его показа. Однако в данной версии JRE запустить `bat` файл автоматически не получается. Кроме того, для изменения максимума и центра необходимо вручную редактировать `eps` файл.

## 2. Структура программы.

Программа имеет главное вертикальное меню с 10-ю кнопками.

**1-я кнопка** показывает этот текст.

**2-я кнопка** открывает текстовый редактор для приготовления входных данных в отдельном файле (`_input.acf`) внутри РПП. Этот файл просто содержит часть кода программы на ЯП VKACL. Для правильной работы с программой пользователь должен знать как определяются параметры в этом языке. Это просто. В файле можно записать много вариантов и это удобно. Если ЯП не знаем, то менять можно только числа.

В самом файле есть краткая справка о том, что означают разные параметры. Она продублирована в этом описании в виде дополнения. Важно знать, что графики создаются в файлах типа `png` с названиями **Ob(x).png** (источник), **Om(x).png** (монохроматор), **Oo(x).png** (кристалл образец), **Os(x).png** (щель). Числа, которые используются для рисунков, записываются в `dat` файлы с теми же именами.

Сами КДО показываются на графике из файла `cdr00.png` где 00 будет заменен на номер варианта (параметр  $V$  входных данных). Например, если  $V = 4$ , то будет файл `cdr04.png`. Изменяя параметр  $V$  можно записать картинки результатами расчетов для разных вариантов, а остальные файлы переписываются каждый раз с новым содержанием без изменения имени.

Удобно в программе сначала записать какие-либо базовые значения для всех вариантов, а потом в каждом варианте записывать лишь то, что изменилось. Это позволит записывать все варианты в более коротком виде, не повторяя тех параметров, которые не меняются. Варианты записываются в скобках (`#case N . . . #end |`).

**3-я кнопка** запускает программу на расчет с получением описанных результатов согласно формуле (1).

**4-я кнопка** объединяет функции 2-й и 3-й кнопки, то есть сразу после редактирования входных данных запускается расчет.

**5-я кнопка** делает предварительную работу конвертирования чисел из формата компьютера в текстовый формат. Именно тут используется параметр  $N4$  если исходное число точек очень большое, что неудобно при чтении текста. Результаты записываются в файлы `cdr040.txt` and `cdr041.txt` если источником был файл `cdr04.dat`. Исходное число точек легко вычислить из размера файла, а пределы интервала углов записываются над графиком в файле `cdr04.png`. Эти значения можно использовать для создания собственных графиков и при создании графиков в формате `eps` в данной программе. Программа также показывает два раза сумму всех значений для контроля.

**6-я кнопка** делает другую предварительную работу. Она преобразует экспериментальные данные, полученные в новой технике изогнутого пьезоактуатора. Снова используется номер варианта из переменной  $V$ . При этом программа должна иметь внутреннюю папку внутри РПП с названием (`exp`). Внутри этой папки должен быть создан файл (`list.txt`). В этом файле в каждой строке должны быть записаны имена файлов с экспериментальными данными. Программа берет содержание  $V$ -й строки и читает файл с указанным именем. Этот файл должен существовать.

Файл должен содержать два числа в каждой строке, разделенные символом пробела. Символ `tab` нужно заменить на пробел. Каждая строка должна заканчиваться символом конца строки (`ascii 10`), включая последнюю строку. Программа берет второе число в каждой строке. Затем вычисляется среднее значение по каждой группе из 9 чисел. Новый массив сглаживается по процедуре, описанной в первом разделе и каждый раз показывается на графике. Последняя кривая записывается в файл `cdr042.txt` если  $V = 4$ . И эти значения используются на `eps` графике. Шаг рассчитывается из первой колонки исходного экспериментального файла, в которой записаны значения аргумента. А положение максимума варьируется в процессе подгонки под расчет. Все значения на кривой должны быть  $< 1$ . Если максимум равен 1 его необходимо заменить на 0.9999.

**7-я кнопка** снова делает предварительную работу. Она преобразует экспериментальные данные, полученные в другой технике, когда кристалл вращается с шагом 0.0002 градуса. Снова используется значение параметра  $V$ . Снова нужна внутренняя папка внутри РПП с названием (`exp`). И далее все как в 6-й кнопке, только значения из второй колонки берутся как есть. То есть никаких преобразований не делается.

**8-я кнопка** делает `eps` файл, который показывает теоретическую и экспериментальную кривые на одном графике. Эта операция использует два дополнительных файла с названиями `01.psf` и `02.psf`. Первый файл стандартный и не меняется. Второй файл должен быть отредактирован пользователем. Он показывается в текстовом редакторе и имеет 5 строк. В первой строке 5-е и 6-е значения означают первый и последний угол на оси аргумента графика, а 7-е и 8-е означают то же самое на оси функции. Нужно использовать одинаковые единицы для всех значений как аргумента, так и функции. Обычно углы

измеряются в градусах. Другие 3 (с 9 по 11) и 3 (с 12 по 14) значения указывают первое значение длинной риски, шаг до следующей длинной риски и число коротких рисок между ними.

Вторая строка имеет следующие значения: R G B компоненты цвета, первое и последнее значение аргумента, число точек и коэффициент масштабирования для первой кривой. Третья строка имеет те же значения для второй кривой. Четвертая строка имеет те же значения для третьей кривой. В пятой строке пользователь может изменить текст внутри первых круглых скобок. Текст появится над графиком.

Редактор текстов нужно закрывать клавишей [esc]. После этого программа создает файлы fig04.eps и fig04.bat если  $V = 4$ . Пользователь должен кликнуть второй файл, чтобы программа создала файл fig04.pdf и показала его.

**9-я кнопка** позволяет делать другие операции, которые могут понадобиться при составлении документов, то есть дополнительные графики, какие-то предварительные расчеты и так далее. Она, в основном, сделана для тех, кто знает ЯП VKACL и может сам написать что ему интересно. Тут нет ограничений и может быть все, что угодно.

**10-я кнопка** закрывает программу.

### 3. Расчет собственной КДО кристалла образца.

Исходно в программе использовались формулы для расчета КДО в геометрии Брэгга для совершенных кристаллов как в монохроматоре, так и в образце. В 2025 году в программу добавился модуль для расчета КДО от деформированного кристалла. Предполагается, что постоянная решетки кристалла изменяется только по нормали к поверхности. Расчет дифференциальных уравнений в этом случае представляет собой весьма сложную задачу, так как очень быстро накапливаются ошибки.

По этой причине много лет назад был выбран другой способ решения задачи в модели многослойного кристалла. В наиболее полном виде такое решение задачи было представлено в [3] и использовалось в некоторых статьях для описания экспериментальных данных [4,5]. В данной программе использовался модуль расчета собственной КДО для многослойного кристалла, разработанный ранее при написании указанных статей. Там же можно посмотреть и расчетные формулы.

Важно, что в таком расчете необходимо определить больше параметров во входных данных. В данной версии программы предполагается, что все слои имеют одинаковую толщину **tl**, а число слоев задается параметром **nl**. Значения параметров деформации кристалла ( $\Delta d/d$ ) в каждом слое задается в одной строке файла ( \_prof.txt ) в РПП, в порядке от поверхности в глубь кристалла, а номер строки, которая конкретно используется определяет параметр **Nl**. Для удобства записи чисел они могут иметь относительные значения и перед их использованием все числа умножаются на множитель **Ср**.

Сдвиг угла Брэгга  $\Delta\theta_B = -(\Delta d/d) \operatorname{tg}(\theta_B)$ . Кроме того, вводится параметр **t3** – сдвиг угла Брэгга в подложке, то есть в кристалле ниже всех слоев. Обычно он равен нулю, но если необходимо выключить подложку из дифракции, то можно задать большое значение. Сам модуль написан так, что подложка всегда есть.

### 4. Входные данные программы

Ниже перечислены все входные параметры программы с кратким описанием

E0 – энергия фотонов в кэВ

S0 – поперечный размер источника (мкм). См. текст после формулы (2)

$L0$  – расстояние от источника до щели (м)

$x0$  – половина ширины щели (мкм)

$X$  – размер области в (х) пространстве для БПФ (мкм)

$N$  – число точек сетки для БПФ

$N1$  – число точек на график для разных объектов схемы

$N3$  – число точек на график КДО

$N4$  – шаг по точкам для массива КДО в txt формате

$t1$  – угол Брэгга для кристаллов монохроматора (градусы)

$t2$  – угол Брэгга для кристалла образца (градусы)

$t3$  – сдвиг угла Брэгга в подложке (градусы)

$M0 = K\chi_{0i}$ ,  $M1 = K\chi_{hr}$ ,  $M2 = K\chi_{hi}$ ,  $M3 = K\chi_{0i}$ ,  $M4 = K\chi_{hr}$ ,  $M5 = K\chi_{hi}$  – здесь  $K = 2\pi/\lambda$ ,  $\chi_{0,h}$  – компоненты ряда Фурье, для периодической восприимчивости кристаллов монохроматора (0,1,2) и образца (3,4,5), индексы  $r, i$  означают реальную и мнимую части.

$b0$  – фактор асимметрии отражения в кристалле образце

$nl$  – число слоев над подложкой, может быть равно 0

$tl$  – толщина слоев многослойного кристалла образца

$Nl$  – номер строки в файле ( \_prof.txt )

$ss$  – множитель для ширины угловой области КДО образца

$Cs$  – множитель для высоты экспериментальной КДО

$Cr$  – множитель для значений деформации кристалла

$Q$  – кнопки включения процессов, пока имеет два значения. Если 0, то графики вкладов разных элементов элементарной схемы не показываются. Если 1, то показываются.

$V$  – номер варианта

## Ссылки

[1] V. G. Kohn, Crystallography Reports, 2019, **64**, N.1, 16–23.

[2] <http://kohnvict.ucoz.ru/jsp/3-difpar.htm>

[3] V. G. Kohn, Phys. Stat. Sol. (b), 2002, **231**, N.1, 132-148.

[4] V. G. Kohn, A. Kazimirov, Phys. Rev. B., 2007, **75**, N. 224119 (9).

[5] A Kazimirov, V G Kohn, Z-H Cai, J. Phys. D: Appl. Phys., 2009, **42**, N. 012005 (3)