

ВЕСЦІ

НАЦЫЯНАЛЬНАЙ АКАДЭМІІ НАВУК БЕЛАРУСІ

СЕРЫЯ
ФІЗІКА-МАТЭМАТЫЧНЫХ
НАВУК

№ 2

АСОБНЫ АДЫТАК



Мінск 1998

УДК 519.63:548

С. Н. СЫТОВА

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ДИФРАКЦИИ РЕНТГЕНОВСКОГО ИЗЛУЧЕНИЯ В КРИСТАЛЛАХ

1. В настоящей работе предлагается разностная схема решения системы дифференциальных уравнений первого порядка гиперболического типа, описывающей процессы дифракции излучения в нестационарных деформированных кристаллах в рентгеновском диапазоне длин волн. При решении данной системы применялся многокомпонентный вариант метода переменных направлений. В работе [1] и др. для различных классов многомерных задач математической физики были разработаны многокомпонентные схемы варианта метода переменных направлений. Этот метод является безусловно устойчивым без стабилизирующих поправок для задач любой размерности, экономичным и не требует коммутативности пространственных операторов для выполнения условий устойчивости. Он эффективен при решении многомерных задач и работе с комплексной арифметикой.

2. В [2] получена система дифференциальных уравнений типа уравнений Такаги, описывающая динамическую дифракцию рентгеновских лучей на нестационарном деформированном кристалле. В качестве одного из возможных источников деформации рассмотрен его нагрев, обусловленный релятивистским электронным пучком (РЭП).

Предположим, что к монокристаллической пластинке толщиной L_z и длиной L_x приложено некоторое меняющееся во времени поле сил, под воздействием которого кристалл деформируется. Пусть на кристалл одновременно с приложением меняющегося во времени поля деформации падает плоская электромагнитная волна с амплитудой D_0 . Если рассматривать слабо искаженную область деформации и приближение медленно меняющихся амплитуд, то из уравнений Максвелла для случая двухволновой дифракции получится система дифференциальных уравнений первого порядка вида

$$\begin{aligned} \frac{\partial D}{\partial t} + A_{11} \frac{\partial D}{\partial z} + A_{12} \frac{\partial D}{\partial x} + Q_{11} D + Q_{12} D_\tau &= 0, \\ \frac{\partial D_\tau}{\partial t} + A_{21} \frac{\partial D_\tau}{\partial z} + A_{22} \frac{\partial D_\tau}{\partial x} + Q_{21} D + Q_{22} D_\tau &= 0. \end{aligned} \quad (1)$$

Комплекснозначные функции $D(z, x, t)$ и $D_\tau(z, x, t)$ описывают соответственно амплитуды электрической индукции проходящей и дифрагированной волн. В общем случае коэффициент Q_{22} зависит от времени t и пространственных координат z и x и описывает отклонение локальной ориентации деформированной кристаллической структуры от точного выполнения условия Брэгга. Остальные коэффициенты системы (1) постоянны.

Начальные и граничные условия задаются в области $G = \{(z, x, t), 0 \leq z \leq L_z, 0 \leq x \leq L_x, 0 \leq t \leq T\}$. Начальные условия определяются дифракцией плоской волны на идеальном кристалле и имеют вид

$$D|_{t=0, 0 \leq z \leq L_z} = D^0(z), \quad D_\tau|_{t=0, 0 \leq z \leq L_z} = D_\tau^0(z). \quad (2)$$

Формулы для коэффициентов Q_{ij} и A_{ij} , а также амплитуд $D^0(z)$ и $D_\tau^0(z)$ приводятся в [2].

Граничные условия в геометрии Брэгга запишутся следующим образом:

$$D|_{t>0, z=0} = D_0, \quad D_\tau|_{t>0, z=L_s} = 0. \quad (3)$$

Легко показать, что начальные и граничные условия корректны и обеспечивают существование единственного решения из класса C_1 .

Существенную трудность при решении системы (1) — (3) представляют следующие факторы: многомерность задачи, все коэффициенты и переменные являются комплексными, существует определенная жесткость в уравнениях (1). Это связано с тем, что поскольку система (1) — (3) была получена в двухволновом двухмодовом приближении, то каждая из амплитуд D и D_τ представляет собой сумму двух мод, соответствующих сильно и слабо поглощающимся блоховским волнам рентгеновских фотонов в кристалле, и эти амплитуды имеют вид [3]:

$$D = D_1 \exp(i\tilde{\Phi}^1) + D_2 \exp(i\tilde{\Phi}^2), \quad D_\tau = D_{1\tau} \exp(i\tilde{\Phi}^1) + D_{2\tau} \exp(i\tilde{\Phi}^2). \quad (4)$$

3. В работе использованы обозначения [4]. Для системы уравнений (1) — (3) область непрерывного изменения переменных G заменяется сеточной областью

$$G_{zxt} = \{(z_i, x_j, t_k); z_i = ih_z, i = 0, 1, \dots, N_1, N_1 = [L_z/h_z], \\ x_j = jh_x, j = 0, 1, \dots, N_2, N_2 = [L_x/h_x], t_k = kh_t, k = 0, 1, \dots, N_3, N_3 = [T/h_t]\}.$$

На сетке G_{zxt} (1) — (3) аппроксимируется следующей системой разностных уравнений:

$$D_t^1 + A_{11}\hat{D}_z^1 + A_{12}D_x^2 + Q_{11}\hat{D}^{1*} + Q_{12}\hat{D}_\tau^{1*} = 0, \\ D_{\tau t}^1 + A_{21}\hat{D}_{\tau z}^1 + A_{22}D_{\tau x}^2 + Q_{21}\hat{D}^{1*} + (Q_{22}\hat{D}_\tau^1)^* = 0; \quad (5)$$

$$D_t^2 + A_{11}\hat{D}_z^2 + A_{12}\hat{D}_x^2 + Q_{11}\hat{D}^{1*} + Q_{12}\hat{D}_\tau^{1*} = 0, \\ D_{\tau t}^2 + A_{21}\hat{D}_{\tau z}^2 + A_{22}\hat{D}_{\tau x}^2 + Q_{21}\hat{D}^{1*} + (Q_{22}\hat{D}_\tau^2)^* = 0. \quad (6)$$

В (5) — (6) введены обозначения: $D^* = 0,5(D_i + D_{i-1})$, $Q_{22}^* = 0,5(Q_{22}(z_i, x_j, t_{k+1}) + Q_{22}(z_{i-1}, x_j, t_{k+1}))$.

Направление производных по x (левой или правой) выбирается в соответствии с направлением распространения волн.

Начальные и граничные условия для разностной задачи (5) — (6) на G_{zxt} аппроксимируются следующим образом:

$$D^{1,2}(z, x, 0) = D^0(z), \quad D_\tau^{1,2}(z, x, 0) = D_\tau^0(z) \quad \text{для } 0 \leq z \leq L_z, 0 \leq x \leq L_x; \\ D^{1,2}(0, x, t) = D_0, \quad D_\tau^{1,2}(L_z, x, t) = 0 \quad \text{для } t > 0, 0 < x < L_x. \quad (7)$$

В разностных уравнениях (5) — (7) $D^1, D^2, D_\tau^1, D_\tau^2$ — пары приближенных значений D и D_τ соответственно. В качестве решения в каждой точке области G_{zxt} может быть взято одно из решений (первое или второе) или их полусумма.

При численном решении (5) — (6) сначала D^1, D_τ^1 при коэффициентах Q брались просто на верхнем слое. Однако в связи с тем, что в линейном приближении справедливо (4), требовались слишком мелкие шаги h_z для получения достаточно хороших разностных решений. Это можно объяснить тем, что чисто неявные схемы для гиперболических уравнений обладают большой аппроксимационной вязкостью, пропорциональной величине шагов расчетной сетки [5]. Схема же (5) — (6) даже при достаточно больших шагах h_z дает удовлетворительную качественную картину решения.

Приведенные разностные схемы являются экономичными. Они являются схемами полной аппроксимации. На достаточно гладких решениях схемы (5) — (7) имеют первый порядок аппроксимации по времени и пространству.

Для разностных схем (5) — (7) можно доказать устойчивость по начальным данным, а также сходимость решения данной разностной задачи к решению исходной дифференциальной (1) — (3) при $h_z, h_x, h_t \rightarrow 0$. Это следует из свойств варианта метода переменных направлений для задач любой размерности [1].

4. Приведенная разностная схема реализована в виде комплекса программ. Его тестирование проводилось в два этапа. На первом этапе сравнивались результаты численного моделирования с аналитическими решениями соответствующей линейной стационарной задачи дифракции в идеальном поглощающем кристалле. Подчеркнем, что динамическая дифракция рассматривалась в геометрии Брэгга, когда дифрагированная волна выходит через переднюю стенку кристалла, а на задней стенке кристалла ее амплитуда равна 0. На рис. 1 приводится график $|D^1|$ (штриховая линия) и соответствующего аналитического решения линейной системы (сплошная линия). Расчеты проводились для недеформированной кристаллической пластинки кремния толщиной $L_z = 0,005$ см с расстоянием между кристаллическими плоскостями $d = 1,9201$ Å при дифракции рентгеновских фотонов на плоскостях (220) и угле Брэгга, равном $\pi/4$, для частоты рентгеновского излучения $\omega = 6,94 \cdot 10^{18} \text{ с}^{-1}$ и $N_z = 25$. Поляризуемости кристалла рассчитаны по программе [6]: $\chi_0 = (-4,74 \cdot 10^{-5}, 3,13 \cdot 10^{-6})$, $\chi_\tau = (-2,82 \cdot 10^{-5}, 2,92 \cdot 10^{-6})$, $\chi_{-\tau} = (-2,82 \cdot 10^{-5}, -2,92 \cdot 10^{-6})$. Если размерность сетки N_z увеличить до 40, то получается идеальное совпадение. Для амплитуды D_τ можно было бы привести аналогичный график. При $L_z \gg 0,005$ см также получены очень хорошие результаты.

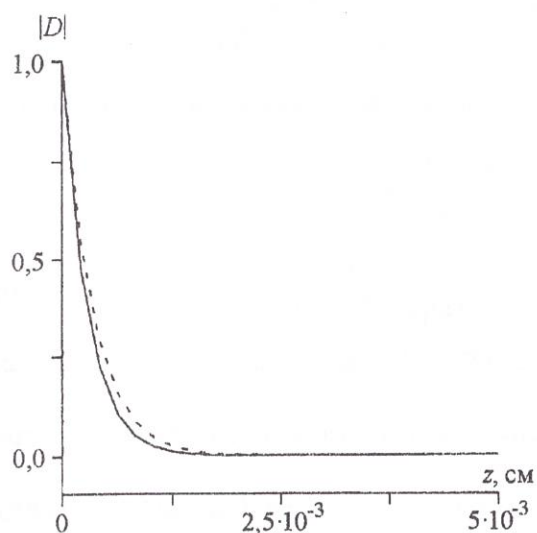


Рис. 1. Модуль амплитуды проходящей волны в идеальном кристалле. Сплошная линия — аналитическое решение линейной системы, штриховая — результат численного моделирования

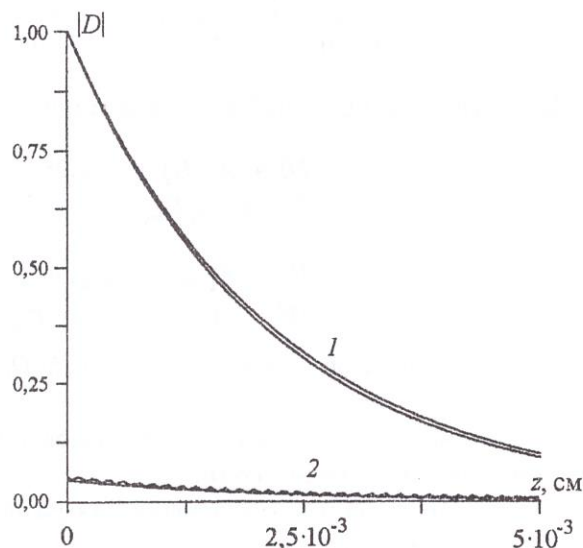
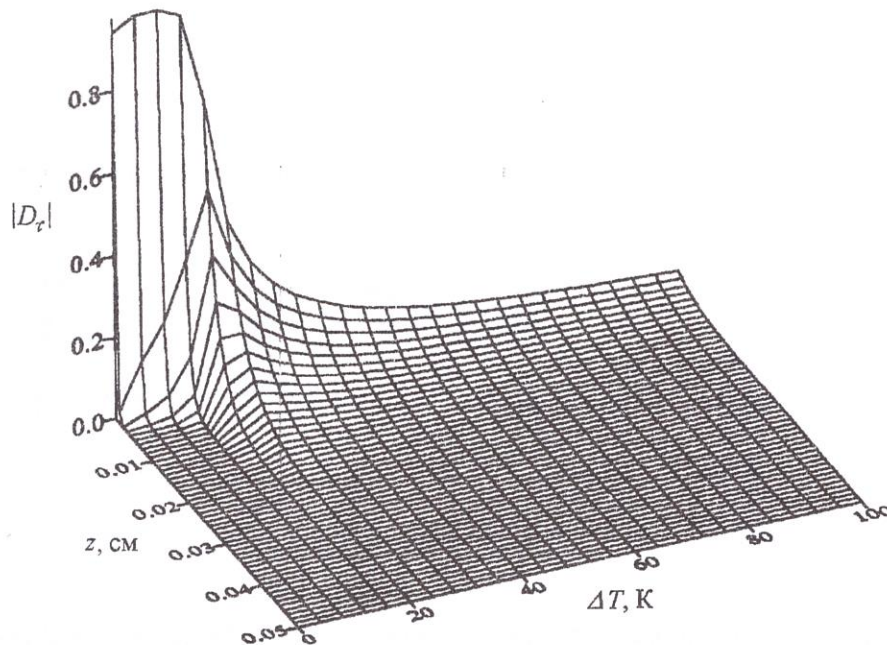


Рис. 2. Модуль амплитуды проходящей волны (кривые 1) и дифрагированной волны (кривые 2) в деформированном кристалле после нагрева его на 100 К

В данных расчетах считалось, что деформация кристалла происходит вследствие его нагрева, причем источник нагрева не конкретизировался. Считалось, что кристалл нагревается равномерно в соответствии с линейным законом $T(t) = T_0 + at$, где T_0 — начальная температура кристалла, a — скорость нагрева.

Чтобы проверить достоверность результатов численного моделирования рентгеновской дифракции на нестационарном деформированном кристалле, было проведено сравнение полученных результатов при нагреве кристалла на $\Delta T = T - T_0$ градусов с аналитическими решениями линейной стационарной задачи дифракции в кристалле, нагретом на ΔT . Данные для расчетов решения стационарной задачи дифракции ($\chi_{\pm\tau}(\Delta T)$) были получены с помощью программы [6]. На рис. 2 приводятся графики для $|D^1|$ (кривая 1) и $|D_\tau^1|$ (кривая 2) и соответствующих аналитических решений линейной системы для набора параметров, указанного выше, $\Delta T = 100$ К, $a = 5 \cdot 10^{10}$ К/с. Анализ полученных результатов и их сравнение с расчетами по линейной теории показали, что используемая математическая модель в сочетании с разработанным эффективным численным алгоритмом позволяет с достаточной точностью получить распределения амплитуд электромагнитных волн в нестационарных кристаллах.

Рис. 3. Модуль амплитуды дифрагированной волны при нагреве кристалла на 100 К



В заключение приведем эволюцию амплитуды $|D_r^1|$ (см. рис. 3) в кристалле толщиной $L_z = 0,05$ см в процессе его нагрева на 100 К. Видно, что с увеличением температуры, начиная с $\Delta T = 20$ К, модуль амплитуды дифрагированной волны, вышедшей из кристалла (при $z = 0$), резко падает.

В качестве примера переменной во времени деформации может быть рассмотрена деформация, обусловленная нагревом кристалла РЭП, описанная в [2]. Возможно также рассмотрение дифракции рентгеновского излучения в стационарных деформированных (изогнутых каким-либо образом) кристаллах. Отметим, что рассмотренная выше задача позволяет осуществить анализ возможности наблюдения коллективного рентгеновского излучения, генерируемого РЭП при прохождении через монокристалл [7] с учетом его одновременного нагрева РЭП. В этом случае в правую часть первого из уравнений (1) необходимо подставить член, зависящий от плотности тока пучка, которую можно описать в гидродинамической модели аналогично [8]. Там же приводятся соответствующие разностные схемы для решения дифференциальных уравнений относительно амплитуд возмущения скорости и плотности РЭП в рамках варианта метода переменных направлений.

Автор выражает глубокую благодарность В. Н. Абрашину за помощь в работе, А. О. Грубичу за обсуждение результатов работы, а также О. М. Луговской за полезные консультации.

Summary

A numerical method for solving the system of differential equations describing X-ray dynamical diffraction in nonstationary deformed crystals is proposed. Results of numerical modeling are discussed.

Литература

1. Абрашин В. Н. // Дифференц. уравнения. 1990. Т. 26, № 2. С. 316 – 323.
2. Грубич А. О., Сытова С. Н. // Весці АН Беларусі. Сер. фіз.-мат. навук. 1993. № 3. С. 90 – 94.
3. Пинскер З. Г. Рентгеновская кристаллооптика. М., 1976.
4. Самарский А. А. Теория разностных схем. М., 1983.
5. Шокин Ю. И., Яненко Н. Н. Метод дифференциального приближения. Новосибирск, 1985.
6. Луговская О. М., Степанов С. А. // Кристаллография. 1991. Т. 36. С. 856 – 860.
7. Барышевский В. Г., Феранчук И. Д., Дубовская И. Я. // Весці АН Беларусі. Сер. фіз.-мат. навук. 1988. № 1. С. 92 – 97.
8. Абрашин В. Н., Грубич А. О., Сытова С. Н. // Матем. моделирование. 1991, № 8. С. 21 – 29.