КРИСТАЛЛОГРАФИЯ, 2019, том 64, № 2, с. 173–183

ДИФРАКЦИЯ И РАССЕЯНИЕ ИОНИЗИРУЮЩИХ ИЗЛУЧЕНИЙ

УДК 548.73, 538.97

К РЕШЕНИЮ ОБРАТНОЙ ЗАДАЧИ ДИФРАКЦИОННОЙ РЕНТГЕНОВСКОЙ ТОПО-ТОМОГРАФИИ. КОМПЬЮТЕРНЫЕ АЛГОРИТМЫ И 3D-РЕКОНСТРУКЦИЯ НА ПРИМЕРЕ КРИСТАЛЛА С ТОЧЕЧНЫМ ДЕФЕКТОМ КУЛОНОВСКОГО ТИПА

П. В. Конарев[1,2,*], Ф. Н. Чуховский[1,], В. В. Волков[1]**

[1]Институт кристаллографии им. А.В. Шубникова ФНИЦ "Кристаллография и фотоника" РАН, Москва, Россия

[2]Национальный исследовательский центр "Курчатовский институт", Москва, Россия

* E-mail: konarev@crys.ras.ru

** E-mail: f_chukhov@yahoo.ca

Поступила в редакцию 06.04.2018 г.
После доработки 17.04.2018 г.
Принята к публикации 17.04.2018 г.

На основе полукинематического решения уравнений Такаги–Топена для амплитуды дифрагированной σ-поляризованной волны предложен последовательный подход к решению обратной задачи дифракционной рентгеновской топо-томографии. Рассмотрен пример точечного дефекта кулоновского типа в кристаллической пластине Si(111) в условиях симметричной лауэ-дифракции и набора наклонных двумерных топографических проекций, отвечающих вращению плоскопараллельного кристалла-образца вокруг вектора дифракции $[\bar{2}20]$. Для компьютерной реконструкции трехмерной функции поля смещений вокруг точечного дефекта использованы итерационные алгоритмы моделирования отжига и квазиньютоновского типа. Представлены результаты компьютерного моделирования функции поля смещений по данным одной 2D-проекции, отвечающей изображению точечного дефекта на рентгеновской топограмме в классическом смысле рентгеновской дифракционной топографии.

DOI: 10.1134/S0023476119020176

ВВЕДЕНИЕ

Как известно [1–6], дифракционная рентгеновская топография **(ДРТ)** является высокочувствительным неразрушающим инструментом диагностики различных дефектов кристаллической решетки, таких как полосы роста, границы зерен, дефекты упаковки, отдельные включения и дислокации различного типа. Все эти дефекты приводят к изменению положений отдельных атомов кристаллической структуры относительно их правильного положения. При этом в схемах лауэвской и/или брэгговской дифракции реальная структура кристалла изучается по его 2D-проекциям. Как правило, для интерпретации и анализа экспериментальных ДРТ-изображений дефектов на 2D-проекциях они сопоставляются с 2D-проекциями, рассчитанными на основе компьютерного моделирования изображений дефектов с использованием численных методов решения динамических уравнений Такаги–Топена [1–3, 6–8].

В последние 20 лет в структурном анализе реальных кристаллов широко применяется метод дифракционной рентгеновской топо-томографии **(ДРТТ)**. В методе ДРТТ кристалл-образец поворачивается вокруг оси, перпендикулярной семейству отражающих плоскостей кристалла (ось вращения выбирается вдоль вектора дифракции $\mathbf{h}$). Поэтому при различных значениях соответствующего угла поворота получается набор дифракционных 2D-проекций, каждая из которых отвечает разным ориентациям плоскости дифракционного рассеяния рентгеновского излучения по отношению к собственной системе координат кристалла-образца (рис. 1).

Первые ДРТТ-эксперименты были успешно выполнены на синхротронных источниках рентгеновского излучения ESRF [9] и SPring-8 [10], а затем и в России на лабораторных установках с использованием характеристического рентгеновского излучения [11, 12]. При этом для компьютерной 3D-реконструкции дефекта в кристалле по соответствующему набору 2D-проекций ДРТ использовались различные модификации алгоритмов поглощающей томографии [13].

Особый интерес, напрямую связанный с применением метода ДРТТ, представляет идея компьютерной реконструкции пространственного положения дефектов в кристалле, а также, что

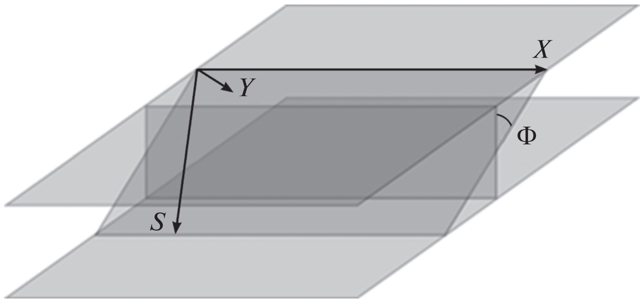

Рис. 1. Схема взаимного расположения плоскопараллельной пластины кристалла-образца и тригональной системы координат *XYS*, связанной с наклонной плоскостью дифракционного рассеяния. Φ – угол поворота образца вокруг вектора дифракции **h**.

особенно важно, локальных полей смещений (напряжений) вокруг дефектов в кристаллических веществах.

И здесь компьютерная 3D-реконструкция по экспериментальным данным ДРТТ в равной, если не в большей, степени связана с теми же трудностями, что и интерпретация картин изображения дефектов на 2D-проекциях ДРТ (топограммах) из-за сложного механизма формирования дифракционного контраста, отвечающего различным областям вокруг дефектов в кристаллах [1, 2].

В этой связи представляются важными нахождение и использование аппроксимационных аналитических решений уравнений Такаги–Топена, которые позволили бы с достаточной точностью описать особенности контраста дефектов на ДРТ-топограммах, связанные с формированием контраста в той или иной области кристалла вблизи дефекта, что стало бы ключевым моментом для решения обратной задачи ДРТТ, в частности компьютерной 3D-реконструкции функции поля смещений вокруг дефектов.

Настоящая работа посвящена построению аппроксимационного аналитического решения уравнений Такаги–Топена, на базе которого строится решение обратной задачи ДРТТ.

Затем с использованием полукинематического приближения для амплитуды дифрагированной σ-поляризованной волны $E_{\mathbf{h}}(\mathbf{r})$ построена теория 3D-реконструкции функции поля упругих статических смещений $\mathbf{u}(\mathbf{r}-\mathbf{r}_0)$ точечного дефекта кулоновского типа ($\mathbf{r}_0$ – радиус-вектор положения точечного дефекта в кристалле).

На примере одной 2D-проекции с вектором дифракции $\mathbf{h} = [\bar{2}20]$ для кристалла Si(111) с применением итерационных алгоритмов моделирования отжига [14] и квазиньютоновского спуска [15, 16] найдено решение обратной задачи ДРТТ, а именно, проведена компьютерная реконструкция трехмерной функции поля смещений точечного дефекта, $f(\mathbf{r}-\mathbf{r}_0) = \mathbf{h}\cdot\mathbf{u}(\mathbf{r}-\mathbf{r}_0)$.

Отметим, что первая попытка трехмерной реконструкции статического поля точечного дефекта в кристалле была предпринята в [17], где использовался алгоритм модифицированного алгебраического метода (алгоритм SART [11]), широко применяемого в поглощающей рентгеновской томографии. К сожалению, оказалось, что трехмерные решения для функции поля смещений точечного дефекта, полученные с использованием алгоритма SART, сходятся только при ограниченном количестве разбиений области кристалла вокруг точечного дефекта (не более чем 5 × 5 × 5 = 125 вокселей).

2D-ИЗОБРАЖЕНИЕ ТОЧЕЧНОГО ДЕФЕКТА В КРИСТАЛЛЕ В УСЛОВИЯХ НАКЛОННОЙ СИММЕТРИЧНОЙ ЛАУЭ-ДИФРАКЦИИ. ПОЛУКИНЕМАТИЧЕСКОЕ ПРИБЛИЖЕНИЕ

Целью данного раздела является построение решения динамических уравнений Такаги–Топена в полукинематическом приближении, которое будет использовано в качестве базового для трехмерной реконструкции поля статических смещений по наклонным 2D-проекциям ДРТ.

Как известно [1–3], и это подтверждается неоднократными численными расчетами [16], прямое изображение дефекта в кристалле, если оно есть, обусловлено межветвевым рассеянием блоховских рентгеновских волн в сильно искаженной области кристалла непосредственно вблизи дефекта, что можно интерпретировать как кинематическое рассеяние блоховских волн, распространяющихся в совершенном кристалле вдали от центральной области дефекта.

Для наглядности, а также с целью избежать громоздких формул и вычислений ограничимся рассмотрением распространения σ-поляризованного рентгеновского волнового поля внутри искаженного кристалла, который "в среднем" находится в точном брэгговском положении.

В рассматриваемом случае распространение рентгеновского волнового поля внутри искаженного кристалла в условиях симметричной двухволновой лауэ-дифракции описывается уравнениями Такаги–Топена [7, 8]:

$$\begin{gathered}-\frac{2i}{k}\frac{\partial E_0}{\partial s_0} = \chi_0 E_0 + \chi_{\bar{h}} e^{-i\mathbf{hu}(\mathbf{r})} E_h - \frac{2i}{k}\delta(s_0+s_h),\\ -\frac{2i}{k}\frac{\partial E_h}{\partial s_h} = \chi_0 E_h + \chi_h e^{i\mathbf{hu}(\mathbf{r})} E_0\end{gathered} \tag{1}$$

вместе с граничными условиями на входной поверхности кристалла $z = 0$ в виде

$$\begin{gathered}E_0(-s_h, s_h) = 1,\\ E_h(-s_h, s_h) = 0.\end{gathered} \tag{2}$$

Граничные условия (2) можно непосредственно учесть, модифицируя уравнения (1), в частности добавляя в правую часть первого уравнения дополнительный член $-\dfrac{2i}{k}\delta(s_0 + s_h)$.

Иользуя известные подстановки $E_0 \to E_0 e^{ik\chi_0\frac{s_0+s_h}{2}}$, $E_h \to E_h e^{ik\chi_0\frac{s_0+s_h}{2}}$ и сохраняя для амплитуд проходящей и дифрагированной волн $E_0(s_0, s_h)$, $E_h(s_0, s_h)$ прежние обозначения, легко показать, что амплитуда дифрагированной волны $E_h(s_0, s_h)$ удовлетворяет неоднородному дифференциальному уравнению гиперболического типа в частных производных второго порядка

$$\frac{\partial^2 E_h}{\partial s_0 \partial s_h} + \frac{\chi_h \chi_{\bar{h}} k^2}{4} E_h = \frac{ik\chi_h}{2} e^{i\mathbf{hu}(\mathbf{r})} \delta(s_0 + s_h) + \\ + \frac{ik\chi_h}{2} E_0 \frac{\partial e^{i\mathbf{hu}(\mathbf{r})}}{\partial s_0}. \tag{3}$$

Здесь $E_0(s_0, s_h)$ и $E_h(s_0, s_h)$ – амплитуды проходящей и дифрагированной волн в среде, зависящие от координат s_0, s_h в плоскости рассеяния; $\dfrac{\partial}{\partial s_0}$ и $\dfrac{\partial}{\partial s_h}$ – производные вдоль направлений проходящей и дифрагированной волн, удовлетворяющих точному условию Брэгга; θ_B – угол Брэгга; χ_0, χ_h, $\chi_{\bar{h}}$ – нулевая, h и $\bar{h}$ компоненты Фурье диэлектрической проницаемости совершенного кристалла соответственно; $k = 2\pi/\lambda$, λ – длина волны падающего излучения; $\mathbf{u}(\mathbf{r})$ – вектор поля смещений, описывающий искажение идеальной кристаллической структуры; $\mathbf{k}_0$ – волновой вектор плоской волны, падающей на кристалл-образец в точном брэгговском положении; $\mathbf{s}_0 = \dfrac{\mathbf{k}_0}{k_0}$, $\mathbf{s}_h = \dfrac{\mathbf{k}_h}{k_h}$; $\mathbf{h}$ – вектор дифракции.

Интересует поле упругих статических смещений точечного дефекта кулоновского типа $\mathbf{u}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)$, которое имеет следующий вид:

$$\mathbf{u}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) = \frac{C}{4\pi} \frac{\mathbf{r} - \mathbf{r}_0}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|^3}, \quad C = \text{const}, \tag{4}$$

где $\mathbf{r}_0$ – радиус-вектор положения точечного дефекта.

В качестве модельного кристалла выбрана плоскопараллельная пластина Si(111), вектор дифракции $\mathbf{h} = [\bar{2}20]$, длина волны падающего рентгеновского характеристического излучения $\lambda =$ $= 0.071$ нм. Использовалась лабораторная рентгеновская трубка с молибденовым анодом, энергия излучения 17.48 КэВ; Λ – длина экстинкции, равная 36.287 ммк, угол Брэгга $\theta_B = 10.65°$.

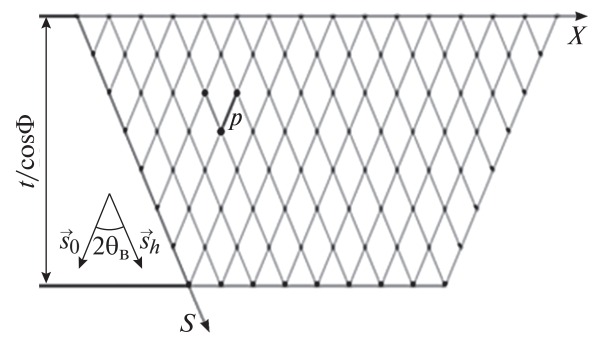

Рис. 2. Косоугольные координаты X, S в наклонной плоскости дифракционного рассеяния; t – толщина образца, θ_B – угол Брэгга.

Отметим, что второй член в правой части первого из двух уравнений Такаги–Топена отвечает плоской волне $E_0(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}_0\mathbf{r}}$, падающей на входную поверхность кристалла $z = 0$.

На рис. 2 показана дискретная треугольная сетка, построенная на векторах $\mathbf{s}_0$, $\mathbf{s}_h$ с одинаковым шагом p, которая может быть использована для компьютерного моделирования и анализа наклонных 2D-проекций ДРТ на основе численного решения уравнений Такаги–Топена (1) с граничными условиями (2) в переменных S, X [11].

Отметим, что S, X – координаты косоугольной системы координат SXY (ось Y перпендикулярна плоскости (SX)), связаны с координатами s_0, s_h линейными соотношениями

$$s_0 + \cos 2\theta_B s_h = \cos 2\theta_B S - X, \\ \cos 2\theta_B s_0 + s_h = S + \sin\theta_B X$$

Уравнение (3) можно записать в интегральной форме, вводя в рассмотрение функцию Грина, описывающую распространение дифрагированного излучения в идеальном кристалле от точечного источника в треугольной области (треугольник Бормана) с вершиной в точке (s'_0, s'_h) характеристиками вдоль направлений $\mathbf{s}_0 = \dfrac{\mathbf{k}_0}{k}$, $\mathbf{s}_h = \dfrac{\mathbf{k}_h}{k}$ ($k = k_0 = k_h$), а именно:

$$E_h(s_0, s_h) = \frac{ik}{2}\chi_h \int_{-s_0}^{s_h} ds'_h \int_{-s_h}^{s_0} ds'_0 J_0 \times \\ \times \left(k\sqrt{\chi_h\chi_{\bar{h}}(s_0 - s'_0)(s_h - s'_h)}\right) \times \\ \times \left[\begin{matrix} \delta(s'_0 + s'_h) e^{i\mathbf{hu}(s'_0, s'_h)} + \\ E_0(s'_0, s'_h) \dfrac{\partial e^{i\mathbf{hu}(s'_0, s'_h)}}{\partial s'_0} \end{matrix}\right], \tag{5}$$

где $J_0(u)$ – функция Бесселя нулевого порядка действительного аргумента u.

Дальнейшее рассмотрение компьютерной реконструкции 3D-поля статических смещений точечного дефекта (4) основывается на утверждении, что в области сильных искажений вблизи дефекта рассеяние носит кинематический характер, что обусловлено межветвевым рассеянием блоховских волн вблизи дефекта [1–6]. При этом волновое поле, формирующее так называемое “прямое” изображение дефекта на 2D-проекциях ДРТ, распространяется вдоль направления поля дифрагированной волны $\mathbf{s}_h = \frac{\mathbf{k}_h}{k}$.

Математически это означает, что для описания прямого ДРТ-изображения дефекта соответствующее выражение для амплитуды дифрагированной волны может быть найдено в результате интегрирования по частям второго члена в квадратных скобках в правой части интегрального уравнения (5).

Кроме того, ограничиваясь только первым членом двойного интеграла в правой части (5), находим

$$E_h(s_0, s_h) = \frac{ik}{2}\chi_h \int_{-s_0}^{s_h} ds'_h E_0(s_0, s'_h) \mathrm{e}^{i\mathbf{hu}(s_0, s'_h)}. \quad (6)$$

Далее, следуя предположению, что прямое изображение дефекта на 2D-проекциях ДРТ отвечает кинематическому рассеянию проходящей волны в области сильных искажений вблизи дефекта, в правой части интегрального уравнения (6) амплитуду проходящей волны в первом приближении можно заменить на соответствующее выражение для идеального кристалла, т.е. $E_0(s_0,\ s'_0) \to E_0^{(id)}(s_0,\ s'_h)$, где $E_0^{(id)}(s_0, s'_h)$ есть не что иное, как решение для амплитуды проходящей волны в идеальном кристалле соответственно:

$$E_0^{(\mathrm{id})}(s_0, s'_h) = \cos\left[k\sqrt{(\chi_h\chi_{-h})}\frac{(s_0 + s'_h)}{2}\right] \quad \text{и}$$

$$E_h^{(\mathrm{id})}(s_0, s'_h) = i\sqrt{\frac{\chi_h}{\chi_{-h}}}\cos\left[k\sqrt{(\chi_h\chi_{-h})}\frac{(s_0 + s'_h)}{2}\right].$$

Таким образом, для компьютерной 3D-реконструкции поля статических искажений вблизи точечного дефекта (4) для амплитуды дифрагированной волны будем использовать выражение

$$E_h(s_0, s_h) = \frac{ik}{2}\chi_h \int_{-s_0}^{s_h} ds'_h E_0^{(\mathrm{id})}(s_0, s'_h) e^{i\mathbf{hu}(s_0, s'_h)}. \quad (7)$$

Формула (7) для амплитуды $E_h(s_0, s_h)$ описывает кинематическое рассеяние проходящей волны $E_0^{(id)}(s_0, s'_h)$ сильно искаженной области вблизи дефекта, которая представляет собой фазовый объект. При этом волна $E_h(s_0, s_h)$ распространяется вдоль направления дифрагированной волны $\mathbf{s}_h = \frac{\mathbf{k}_h}{k}$. Таким образом, формула (7), полученная в полукинематическом приближении, будет использоваться для описания 2D-проекций ДРТ в той части, которая формируется за счет рассеяния рентгеновской волны в сильно искаженной области кристалла вблизи дефекта.

Для проведения численных расчетов выберем начало системы координат s_0, s_h в левой верхней вершине трапеции (рис. 2) и введем косоугольную аффинную систему координат XYS (ср. с рис. 1), в которой ось X направлена вдоль вектора дифракции $\mathbf{h}$, а ось S вдоль вектора $\mathbf{s}_h$, ось Y перпендикулярна плоскости XS.

При этом связь между координатами s_0, s_h и X, S задается соотношениями

$$s_0 = -\frac{X}{2\sin\theta_\mathrm{B}}, \quad s_h = S + \frac{X}{2\sin\theta_\mathrm{B}}. \quad (8)$$

Кроме соотношений (8) потребуются соотношения между координатами s_0, s_h и x, Z, а именно:

$$s_0 = \frac{1}{2}\left(\frac{Z}{\cos\theta_\mathrm{B}} - \frac{x}{\sin\theta_\mathrm{B}}\right), \quad s_h = \frac{1}{2}\left(\frac{Z}{\cos\theta_\mathrm{B}} + \frac{x}{\sin\theta_\mathrm{B}}\right). \quad (9)$$

Имея в виду компьютерную 3D-реконструкцию функции упругих статических смещений точечного дефекта $f(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)$ по данным наблюдаемых 2D-проекций, $I_h(s_0, s_h) = |E_h(s_0, s_h)|^2$, запишем формулу (7) в переменных X, y, z (ось вращения проходим через точку $r_0 = (x_0, y_0, z_0)$)

$$E_h(X, y, z; \theta_\mathrm{B}, \Phi) = \frac{ik}{2\cos\theta_\mathrm{B}\cos\Phi}\chi_h \times \int_0^T dz \cos\left[k\sqrt{(\chi_h\chi_{-h})}\frac{z}{2\cos\theta_\mathrm{B}}\right]\mathrm{e}^{if(\mathbf{r}-\mathbf{r}_0)}, \quad (10)$$

где Φ – угол вращения образца вокруг вектора дифракции $\mathbf{h}$, функция $f(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)$ определяется следующим выражением (ср. (4)):

$$f(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) = G\frac{X - X_0 + \frac{\mathrm{tg}\,\theta_\mathrm{B}}{\cos\Phi}(z - z_0)}{\left(\left(X - X_0 + \frac{\mathrm{tg}\,\theta_\mathrm{B}}{\cos\Phi}(z - z_0)\right)^2 + (y - y_0 + \mathrm{tg}\,\Phi(z - z_0))^2 + (z - z_0)^2\right)^{3/2}}, \quad G = \mathrm{const}. \quad (11)$$

Отметим, что координаты x, y, z “жестко” связаны с декартовыми координатами в кристалле.

В формуле (11) в явной форме учтена зависимость функции поля смещений точечного дефекта (4) в переменных X, y, z от угловых параметров θ_B, Φ.

Теоретическая формула (10) для амплитуды дифрагированной волны $E_h(X, y, z; \theta_B, \Phi)$ наряду с формулой (11) для функции поля смещений точечного дефекта $f(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)$ в области сильных искажений является основным выражением для решения обратной задачи ДРТТ.

Имея в виду компьютерную 3D-реконструкцию функции $f(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)$ на основе минимизации целевой χ^2-функции вида

$$\chi^2\{f(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)\} = \frac{1}{N(X, y, z)} \times \\ \times \sum_{\{X,y,z\}} \sum_{\Phi} (I_{h,obs}\{X, y, z; \theta_B, \Phi\} - \\ - I_{h,calc}\{X, y, z; \theta_B, \Phi\})^2 = \mathrm{Min}, \tag{12}$$

будем использовать итерационные алгоритмы моделирования отжига [14] и квазиньютоновского спуска [15, 16], адаптированные применительно к решению обратной задачи ДРТТ.

В (12) $I_{h,obs}\{X, y, z; \theta_B, \Phi\}$ есть модельная (наблюдаемая) ДРТ-проекция, отвечающая значению угла наклона Φ, а $I_{h,calc}\{X, y, z; \theta_B, \Phi\}$ рассчитывается по формуле (10) в соответствии с выбранным итерационным алгоритмом, начиная с некоторой стартовой функции поля смещений $f_{in}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)$.

КОМПЬЮТЕРНАЯ 3D-РЕКОНСТРУКЦИЯ ФУНКЦИИ СМЕЩЕНИЙ ТОЧЕЧНОГО ДЕФЕКТА НА ОСНОВЕ ПРИМЕНЕНИЯ МЕТОДОВ СИМУЛИРОВАННОГО ОТЖИГА И КВАЗИНЬЮТОНОВСКОГО СПУСКА

Моделирование на основе алгоритма симулированного отжига. Как известно [14], алгоритм симулированного отжига (**SA**) широко применяется для минимизации нелинейных целевых функций и является одним из эффективных методов для решения задачи с большим количеством переменных и комбинаторной природой итерационных вычислений.

Стартуя с заданной в качестве начального приближения модели и варьируя ее параметры псевдослучайным образом, программа SA работает до достижения наилучшей сходимости расчетной модели с наблюдаемыми данными ДРТ-проекции дефекта (минимум целевой χ^2-функции (12)).

Будем различать два состояния системы – функции поля смещений $f(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)$: текущее и пробное значения функции $f(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}_0)$. В итерационном процессе текущее состояние, становясь пробным, служит в дальнейшем в качестве нового текущего состояния системы.

Псевдослучайное изменение системы применяется к текущему состоянию, которое затем становится пробной функцией $f(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}_0)$. Вероятность принятия пробной функции в качестве новой текущей определяется значением больцмановской функции $\exp(-\Delta\chi^2/T)$, где $\Delta\chi^2$ – изменение целевой функции, T – параметр, называемый температурой отжига. Выбор нового текущего состояния системы существенно зависит от значения T. Легко видеть, что более высокая температура означает более высокую вероятность $\exp(-\Delta\chi^2/T)$), это позволяет принять пробную модель в качестве новой текущей даже в случае худшего пробного приближения в сравнении с текущим, когда $\Delta\chi^2 > 0$. Но если $\Delta\chi^2 < 0$, то пробная модель всегда принимается в качестве новой текущей. В начале итерационной минимизации целевой χ^2-функции температура T выбирается достаточно высокой, так что частота принятия худшего состояния системы в качестве текущего в 10–100 раз превышает частоту обновления лучших состояний системы (другими словами, изменения системы носят почти случайный характер). Это заставляет программу SA “блуждать” по пространству поиска минимальных значений функции системы f. В принципе, программа SA может преодолевать локальные минимумы целевой χ^2-функции, которые являются одним из главных препятствий для многих других нелинейных методов минимизации целевой χ^2-функции, например, для градиентных методов спуска [15, 16].

В итерационном процессе минимизации целевой χ^2-функции температура T_{n+1} на следующем после предыдущего n-шага (внешний цикл по n) снижается монотонно как $T_{n+1} = FT_n$, где коэффициент отжига F равен 0.9–0.95, а значение целевой χ^2-функции уменьшается аналогично тому, как снижается внутренняя энергия системы в процессе понижения температуры (так называемая машина Больцмана). По этой причине программа-алгоритм SA получила название “симулированного отжига” (алгоритм Метрополиса [18]). В табл. 1 представлены детали протокола итерационной программы SA согласно [14, 18].

Для простоты все последующие результаты расчетов приводятся в безразмерных координатах. Положение точечного дефекта задается радиус-вектором $\mathbf{r}_0$, $\mathbf{r}_0 = \mathbf{n}t/2$, $\mathbf{n}$ – внутренняя нормаль к входной поверхности кристалла $z = 0$. Толщина t модельного кристалла Si(111) выбрана такой, что поглощением рентгеновского излучения в образце можно пренебречь.

Таблица 1. Протокол использования итерационной программы-алгоритма SA

Последовательные стадии протокола SA	Программа-алгоритм SA – функциональные стадии
Инициализация число элементов системы $\{i, j, k\}$ температура $T_1 = T_{in}$ целевая функция $\chi^2_{1,1} = \chi^2_{in}$	N – номер итерации внешнего цикла по температуре T_n m – номер итерации внутреннего цикла (при фиксированном значении температуры T_n система $f_{1,1}(\{i, j, k\}) = f_{in}(\{i, j, k\})$, $n = (1, 2, .., N)$, $N = 200$ – число внешних циклов по T $m = (1, 2, .., M)$, $M = 500000$ – число внутренних циклов $T_{n+1} = T_n^* F$, $F = 0.95$
Итерации $n = (1, 2, .., N)$, $N = 200$ для каждого номера итерации n и номера в цикле по m	$f_{m+1,n} = f_{m,n}(\{i, j, k\}) \mid \mathrm{U}\{i, j, k\} \to \hat{\mathrm{U}}\{i, j, k\}$ для одного произвольно выбранного элемента $\mathrm{U}\{i, j, k\}$; изменение энергии системы $\Delta_{m,n} = \chi^2_{m+1,n}(f_{m+1,n}) - \chi^2_{m,n}(f_{m,n})$
Алгоритм SA внутренний цикл по $m = (1, 2, .., M)$, $M = 500000$	$\Delta_{m,n} < 0$: безусловно принимается пробная модель $f_{m+1,n}$; $\Delta_{m,n} > 0$: принимается пробная модель $f_{m+1,n}$, если вероятность $W_{m,n} = \exp(-\Delta_{m,n}/\mathrm{T}_n)$ больше случайно генерируемого числа в единичном интервале чисел [0, 1]. В обратном случае принимается модель $f_{m,n}$
Внешний цикл по $n = (1, 2, .., N)$, если $N = 200$ – остановка работы программы SA	Если частота ν успешных изменений системы $f_{m,n}$ на данной температуре T_n такая, что $\nu > M/10$, программа переходит на следующий шаг по температуре T_{n+1} внешнего цикла. Если частота $\nu < 50$ при значении текущей температуры T_n и/или $n = N$, программа SA выходит из режима работы, сохраняя последнее состояние системы $f_{m,n}$

На первом этапе решения обратной задачи ДРТТ программа SA была протестирована на примере минимизации целевой χ^2-функции в случае одной 2D-проекции, когда в формуле (12) остается одно слагаемое с $\Phi = 0$, а именно:

$$\chi^2 = 1/N\{X, y, z\} \sum_{\{X,y,z\}} (I_{h,obs}\{X, y, z; \theta_B, 0\} - I_{h,calc}\{X, y, z; \theta_B, 0\})^2 = \mathrm{Min}, \quad (13)$$

$$I_{h,calc}\{X, y, z; \theta_B, 0\} = |E_h\{X, y, z; \theta_B, 0\}|^2,$$

где $I_{h,obs}\{X, y, z; \theta_B, 0\}$ наблюдаемая (модельная) 2D-проекция, рассчитанная на основе формулы (10) с учетом теоретической функции смещений (11) при значении масштабирующего коэффициента $G = 1$, а интенсивность $I_{h,calc}\{X, y, z; \theta_B, 0\}$ рассчитывается по формуле (10) с пробными функциями смещений в процессе итерационной минимизации целевой χ^2-функции (13).

Отметим, что масштабирующий коэффициент G в формуле (11) можно выбрать равным единице за счет соответствующего выбора шага дискретной пространственной сетки координат в кристалле, на которой задается функция поля смещений $f(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)$.

Кроме того, преследуя цель оценить степень сходимости итерационного процесса минимизации целевой χ^2-функции к правильной (теоретической) функции $f_{obs}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)$ (см. (11)), будем использовать контрольный параметр (**CP**), который определяется как

$$\mathrm{CP} = 1/N\{X, y, z\} \times \sum_{\{X,y,z\}} \frac{|f_{obs}\{X, y, z; \theta_B, 0\} - f_{calc}\{X, y, z; \theta_B, 0\}|}{|f_{obs}\{X, y, z; \theta_B, 0\}|} \quad (14)$$

и представляет собой среднестатистическую оценку относительного отклонения текущего решения от истинного решения.

Для случая наблюдаемой 2D-проекции ДРТ (рис. 3) результаты компьютерной 3D-реконструкции функции смещений $f(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)$ для различных пространственных сеток, на которых она определена, а также ее различных линейных комбинаций в качестве стартовых функций с индексами убывания $\{p_i\}$ в интервале значений $i = 1$–4 представлены в табл. 2.

Диапазон поиска каждого индекса убывания $\{p_i\}$, $i = 1$–4, в части действия алгоритма SA (внутренний цикл, табл. 1) задавался с равной вероятностью в интервале чисел 0.0–3.0.

Как видно из табл. 2, в случае одного индекса убывания $\{p_i\}$, $i = 1$, в качестве стартового значения теоретическое решение для функции смещений $f(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)$ с индексом убывания $p = 1.5$ достигается с точностью, по крайней мере CP = 10^{-6}, в то время как для большего, чем единица, числа индексов убывания $\{p_i\}$, $i = 1–4$, теоретическое решение достигается с точностью порядка CP = 10^{-2}.

На практике представляет интерес 3D-реконструкция функции поля смещений $f(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)$ деффекта в кристалле без необходимости его описания в аналитической форме. В отличие от случая, описанного выше, будем рассматривать функцию $f(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)$ в каждом узле дискретной пространственной сетки как искомый параметр. При этом будут использованы только свойства симметрии функции $f(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)$ по координатам $x - x_0$, $y - y_0$, $z - z_0$, а также "включено" требование монотонного убывания с увеличением расстояний $|y - y_0|$ и/или $|z - z_0|$.

Наблюдаемая 2D-проекция ДРТ от тонкого (непоглощающего) кристалла Si(111) (рис. 3) рассчитана на основе формулы (10) с учетом (11) на пространственной сетке, состоящей из 15 × 15 × 15 узлов. Видно, что проекция является симметричной относительно координаты y и в направлении распространения дифрагированной волны сдвигается от центра вдоль координаты x как целое на величину $t/2 \times \mathrm{tg}\,\theta_B$ (в данном случае этот сдвиг равен 4/3 в безразмерных координатах x и z).

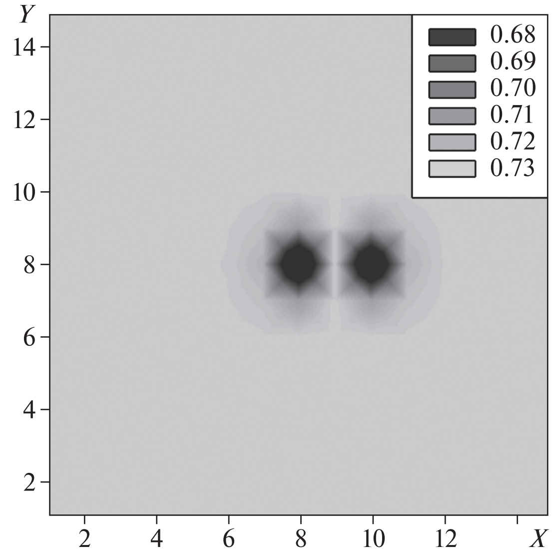

Рис. 3. Наблюдаемая 2D-проекция ДРТ кристалла Si(111) с точечным дефектом. Теоретическая функция поля смещений $f(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)$ с индексом убывания $p = 1.5$ задана в узлах пространственной сетки {15, 15, 15}.

Входные данные и результаты компьютерной 3D-реконструкции функции $f(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)$ по данным наблюдаемой 2D-проекции ДРТ представлены в табл. 3. В первом столбце указаны пространственные сетки, на которых проводятся расчеты, жирным шрифтом (здесь и далее) выделены номера плоскостей вдоль оси z, в которых значения функции $f(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)$ варьируются, в то время как в остальных плоскостях они фиксированы в соот-

Таблица 2. Компьютерная 3D-реконструкция функции поля смещений $f(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)$ для точечного дефекта кулоновского типа в кристаллах с использованием алгоритма SA. Входные данные и результаты расчетов

Пространственная сетка $\{i, j, k\}$	Стартовые значения			Конечные значения		
	p_i, $\{i = 1–4\}$	Целевая χ^2-функция	CP	p_i, $\{i = 1–4\}$	Целевая χ^2-функция	CP
{21, 21, 21}	{0.9}	0.77	0.79	{1.5}	1×10^{-7}	6×10^{-7}
{21, 21, 21}	{0.5, 1.0, 1.8}	0.48	0.95	{1.51, 1.47, 1.52}	3×10^{-4}	5×10^{-3}
{21, 21, 21}	{0.9, 1.2, 1.8, 2.1}	1.43	0.99	{1.51, 1.50, 1.49, 1.50}	6×10^{-3}	1×10^{-2}
{41, 41, 41}	{0.9}	0.79	1	{1.5}	8×10^{-7}	4×10^{-7}
{41, 41, 41}	{0.5, 1.0, 1.8}	0.48	0.96	{1.49, 1.49, 1.52}	3×10^{-4}	1×10^{-2}
{41, 41, 41}	{0.9, 1.2, 1.8, 2.1}	1.44	1	{1.48, 1.54, 1.49, 1.49}	3×10^{-3}	1.4×10^{-2}

Примечание. Функция поля смещений $f(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)$ ищется в виде аналитического выражения с индексом убывания $\{p_i\}$, $i = 1–4$. Время одного расчета составляет 10–12 ч на персональном компьютере с процессором IntelCore 2, 2.24 ГГц.

Таблица 3. Компьютерная 3D-реконструкция функции поля смещений $f(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)$ для точечного дефекта кулоновского типа в кристалле с использованием алгоритма SA. Входные данные и результаты расчетов

Пространственная сетка $\{i, j, k\}$	Стартовые значения			Конечные значения	
	P_{ini}	Целевая χ^2-функция	CP	Целевая χ^2-функция	CP
{15, 15, 1–6 | **7–9** | 10–15}	1.55	1.67×10^{-2}	0.0161	1.31×10^{-5}	0.0171
{15, 15, 1–5 | **6–10** | 11–15}	1.55	1.56×10^{-2}	0.0273	2.94×10^{-6}	0.029
{15, 15, 15}	1.55	1.42×10^{-2}	0.0658	2.63×10^{-8}	0.118

Примечание. Искомая функция поля смещений $f(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)$ задается в численном виде. Время одного расчета составляет 5–6 ч на персональном компьютере с процессором IntelCore 2, 2.24 ГГц.

ветствии с теоретическим индексом убывания $p = 1.5$.

Из табл. 3 видно, что в случае пространственной сетки {15, 15, 15} удается снизить значение целевой χ^2-функции более чем на 6 порядков, в то время как контрольный параметр CP растет до 0.118 против стартового значения, равного 0.0658.

Вероятно, это может происходить по двум причинам, первая из которых – неоднозначность решения обратной задачи ДРТТ. Такой вывод следует, в частности, из того факта, что в случае перехода к пространственным сеткам с меньшим числом узлов по толщине кристалла контрольный параметр CP уменьшается.

Вторая причина заключается в эффективности работы самого алгоритма SA для минимизации целевой χ^2-функции. Расчеты показывают, что, если вместо минимизации целевой χ^2-функции (13) применяется алгоритм SA для минимизации CP-функции, согласно (14), значение параметра CP уменьшается только примерно в 2 раза, например, для пространственной сетки {15, 15, 15} параметр CP изменяется от 0.0658 до 0.0371, в то время как его значение должно было бы снизиться до нуля в предположении, что алгоритм SA работает эффективно.

Моделирование на основе алгоритма квазиньютоновского спуска. Для сравнения с результатами, полученными с использованием алгоритма SA, был применен для минимизации целевой χ^2-функции (13) алгоритм квазиньютоновского спуска по схеме Левенберга–Марквардта. Был использован программный код NL2SNO, имеющийся в открытом доступе (подробнее в [15, 16, 19], вариант NL2SOL с расчетом градиентов по методу конечных разностей).

Результаты минимизации целевой χ^2-функции (13) с использованием алгоритма квазиньютоновского спуска для различных пространственных сеток и различных стартовых значений индекса убывания p_{ini} функции $f(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)$ представлены в табл. 4. Обозначения для идентификации пространственных сеток приняты аналогично тому, как это сделано в табл. 3. Видно, что для двух пространственных сеток {15, 15, 1–6 | **7–9** | 10–15} и {15, 15, 1–5 | **6–10** | 11–15} удается достичь значений контрольного параметра CP $\sim 5 \times 10^{-5}$ при конечных значениях целевой χ^2-функции порядка 10^{-22}.

Отметим, что в случае пространственной сетки {15, 15, 15} и различных стартовых значениях индекса убывания p_{ini} контрольный параметр CP практически не уменьшается по сравнению со стартовым CP, а в некоторых случаях даже растет.

Как показывают расчеты, последнее обстоятельство можно преодолеть, если последовательно использовать итерационную схему, корректируя при каждой итерации значения функции $f(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)$ в периферийной области от центра точечного дефекта. Детали расчетов с использованием корректировки значений функции $f(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)$ периферийных областях пространственной сетки выходят за рамки данной работы и являются отдельной темой будущего исследования.

На рис. 4 приведены сечения трехмерной функции $f(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)$ в плоскостях $z = \mathrm{const}$ для значений $z = 6, 8, 10$ ($z = 8$ – центральное сечение).

Верхние рисунки 4а, 4б, 4в – сечения теоретической 3D-функции $f(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)$, индекс убывания $p = 1.5$, нижние – сечения 3D-функции $f(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)$ как результат компьютерной 3D-реконструкции с использованием метода квазиньютоновского спуска. Наилучшее согласие соответствующих изображений имеет место для центрального сечения $z = 8$. В принципе, это может означать, что

Таблица 4. Результаты компьютерной 3D-реконструкции функции поля смещений $f(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)$ для точечного дефекта кулоновского типа в кристалле с использованием алгоритма квазиньютоновского спуска

Пространственная сетка $\{i, j, k\}$	Стартовые значения			Конечные значения	
	P_{ini}	Целевая χ^2-функция	CP	Целевая χ^2-функция	CP
{15, 15, 1–6 | **7–9** | 10–15}	5.0	8.24×10^{-3}	$8.30 \times 10^{+2}$	3.76×10^{-6}	1.374
	3.0	4.54×10^{-5}	2.581	4.46×10^{-9}	**8.07** $\times 10^{-2}$
	2.0	6.32×10^{-9}	0.211	5.27×10^{-14}	**4.37** $\times 10^{-2}$
	1.55	2.52×10^{-11}	1.77×10^{-2}	5.67×10^{-14}	**1.81** $\times 10^{-2}$
	1.45	1.21×10^{-11}	1.71×10^{-2}	6.88×10^{-21}	**4.90** $\times 10^{-6}$
	1.00	8.79×10^{-11}	0.112	5.74×10^{-13}	0.116
	0.50	7.21×10^{-11}	0.155	3.67×10^{-13}	0.132
	0.05	7.02×10^{-11}	0.174	3.45×10^{-13}	0.128
	5.0	8.24×10^{-3}	$8.30 \times 10^{+2}$	3.76×10^{-6}	1.374
	3.0	4.54×10^{-5}	2.581	4.46×10^{-9}	**8.07** $\times 10^{-2}$
{15, 15, 1–5 | **6–10** | 11–15}	5.0	1.71×10^{-2}	$2.09 \times 10^{+3}$	3.39×10^{-5}	3.066
	3.0	6.29×10^{-5}	5.291	3.01×10^{-8}	0.249
	2.0	8.47×10^{-9}	0.408	1.57×10^{-14}	**6.69** $\times 10^{-2}$
	1.55	2.82×10^{-11}	2.92×10^{-2}	2.14×10^{-22}	**2.70** $\times 10^{-3}$
	1.45	1.47×10^{-11}	2.79×10^{-2}	9.56×10^{-28}	**6.00** $\times 10^{-4}$
	1.00	1.29×10^{-10}	0.185	5.61×10^{-13}	0.212
	0.50	1.07×10^{-10}	0.260	2.32×10^{-13}	0.226
	0.05	1.00×10^{-10}	0.291	1.74×10^{-12}	0.231
{15, 15, 15}	5.0	1.94×10^{-02}	$2.46 \times 10^{+3}$	9.74×10^{-06}	46.2
	3.0	4.92×10^{-05}	1.047	1.20×10^{-08}	8.771
	2.0	5.39×10^{-09}	1.011	9.59×10^{-16}	0.692
	1.55	2.42×10^{-11}	7.06×10^{-2}	5.03×10^{-24}	0.119
	1.52	3.31×10^{-12}	2.82×10^{-2}	3.33×10^{-17}	**4.46** $\times 10^{-2}$
	1.48	2.46×10^{-12}	2.72×10^{-2}	6.38×10^{-27}	**4.24** $\times 10^{-2}$
	1.45	1.24×10^{-11}	6.65×10^{-2}	7.99×10^{-17}	0.107
	1.00	1.36×10^{-10}	0.476	4.30×10^{-14}	0.694
	0.50	1.48×10^{-10}	0.704	1.40×10^{-13}	0.778
	0.05	1.49×10^{-10}	0.814	1.87×10^{-12}	0.659

Примечание. Время одного расчета составляет 0.5 часа на персональном компьютере с процессором IntelCore 2, 2.24 ГГц.

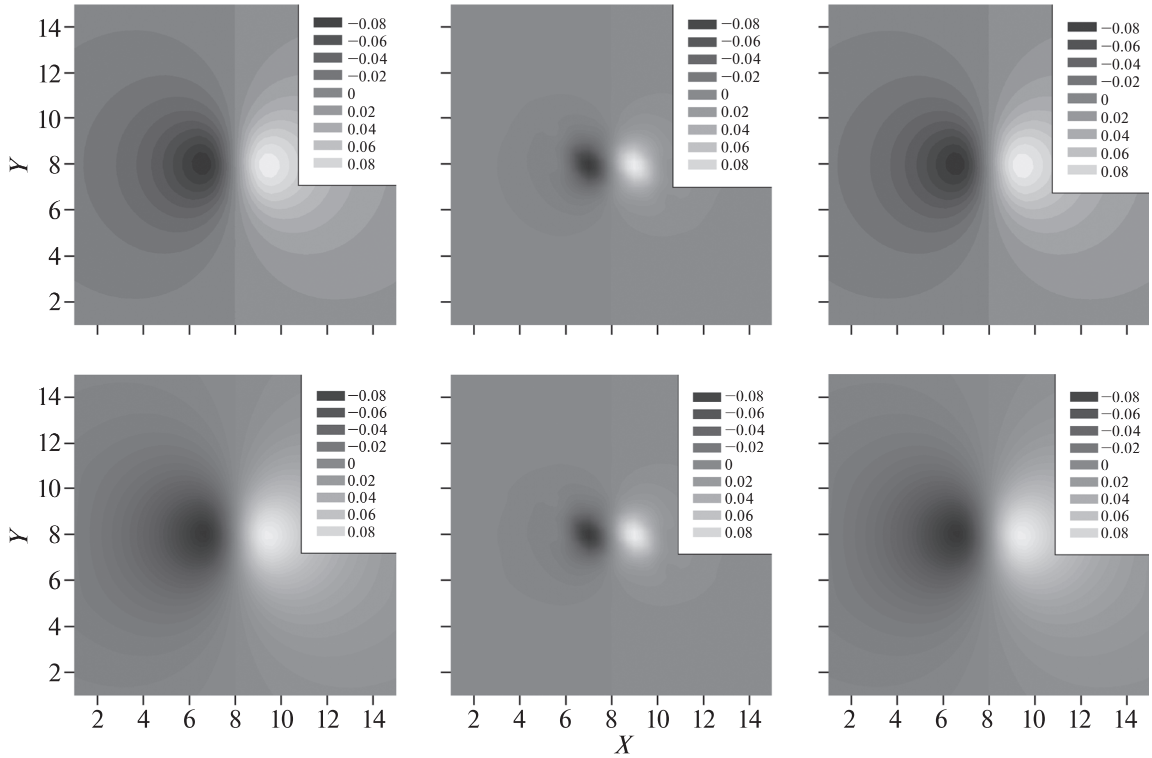

Рис. 4. Сечения 3D-функции поля смещений точечного дефекта $f(\mathbf{r}-\mathbf{r}_0)$ в плоскостях z = const. В безразмерных единицах: $z = 6$ (а), $z = 8$ (центральное сечение (б)), $z = 10$ (в). Верхняя панель – сечения теоретической 3D-функции поля смещений $f(\mathbf{r}-\mathbf{r}_0)$, индекс убывания $p = 1.5$; нижняя панель – сечения 3D-функции поля смещений $f(\mathbf{r}-\mathbf{r}_0)$, восстановленной в узлах пространственной сетки {15, 15, 15} с использованием алгоритма квазиньютоновского спуска.

наилучшим образом удается восстановить 3D-функцию $f(\mathbf{r}-\mathbf{r}_0)$ в области непосредственно вблизи центра дефекта.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Развит последовательный подход к решению обратной задачи ДРТТ. Предложено полукинематическое приближение для решения уравнений Такаги–Топена, соответствующего дифракционному рассеянию рентгеновских лучей в сильно искаженной области вблизи дефекта в кристалле.

Для решения обратной задачи ДРТТ были использованы итерационные алгоритмы моделирования отжига и квазиньютоновского спуска, приведены результаты компьютерной 3D-реконструкции функции поля смещений точечного дефекта $f(\mathbf{r}-\mathbf{r}_0)$. Показано, что использованные в работе алгоритмы при определенных ограничениях на класс функций, на котором ищется функция $f(\mathbf{r}-\mathbf{r}_0)$, работают в случае одной 2D-проекции ДРТ, что позволяет восстановить теоретическую 3D-функцию поля смещений $f(\mathbf{r}-\mathbf{r}_0)$, заданную как в аналитической форме, так и в численном виде в узлах пространственной сетки кристаллической пластины.

Проведенные предварительные расчеты показали, что алгоритм квазиньютоновского спуска допускает определенную возможность улучшить работу итерационной схемы, корректируя при каждой итерации значения 3D-функции $f(\mathbf{r}-\mathbf{r}_0)$ в узлах пространственной сетки в периферийной области на некотором расстоянии от центра точечного дефекта.

Представляется весьма вероятным, что сходимость процесса минимизации целевой χ^2-функции с использованием алгоритма квазиньютоновского спуска также должна улучшиться в случае использования набора наблюдаемых наклонных 2D-проекций (общая формула (12)), что является немаловажным обстоятельством для фильтрации шумов и практической обработки 2D-проекций в условиях ДРТТ.

Авторы выражают благодарность В.Е. Асадчикову за обсуждения и полезные замечания, сделанные им в ходе выполнения данной работы.

Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования в рамках выполнения работ по Государственному заданию ФНИЦ “Кристаллография и фотоника” РАН в

области развития методов исследования структуры с помощью рентгеновского и синхротронного излучений.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Инденбом В.Л., Чуховский Ф.Н.* // УФН. 1972. Т. 107. Вып. 2. С. 229.
2. *Epelboin Y.* // Acta Cryst. A. 1975. V. 31. P. 591.
3. *Authier A.* Dynamical theory of X-ray diffraction. Oxford: University press, 2003. 513 p.
4. *Смирнова И.А., Суворов Э.В., Шулаков Е.В.* // ФТТ. 2007. Т. 49. Вып. 6. С. 1050.
5. *Шульпина И.Л., Прохоров И.А.* // Кристаллография. 2012. Т. 57. № 5. С. 740.
6. *Беседин И.С., Чуховский Ф.Н., Асадчиков В.Е.* // Кристаллография. 2014. Т. 59. № 3. С. 365.
7. *Takagi S.* //Acta Cryst. 1962. V. 15. P. 1311.
8. *Taupin D.* // Bull. Soc. Fr. Mineral. 1961. V. 84. P. 51.
9. *Ludwig W., Cloetens P., Härtwig J. et al.* // J. Appl. Cryst. 2001. V. 34. P. 602.
10. *Kawado S., Taishi T., Iida S. et al.* // J. Synchrotron Rad. 2004. V. 11. P. 304.
11. *Золотов Д.А., Бузмаков А.В., Асадчиков В.Е. и др.* // Кристаллография. 2011. Т. 56. № 3. С. 426.
12. *Золотов Д.А., Бузмаков А.В., Елфимов Д.А. и др.* // Кристаллография. 2017. Т. 62. № 1. С. 12.
13. *Календер В.* Компьютерная томография. Основы, техника, качество изображений в области клинического использования. М.: Техносфера, 2006. 344 с.
14. *Kirkpatrick S., Gelatt C.D., Vecci M.P.* // Science. 1983. V. 220. P. 671.
15. *Gill P.E., Murray W., Wright M.H.* Practical Optimization. London: Academic Press. 1981. 401 p.
16. *Dennis J., Gay D., Welsch R.* // ACM Trans. Math. Soft. 1981. V. 7. P. 348.
17. *Asadchikov V., Besedin I., Buzmakov A. et al.* // Acta Cryst. A. 2014. V. 70. P. C1132.
18. *Metropolis N., Rosenbluth A.W., Rosenbluth M.N. et al.* // J. Chem. Phys. 1953.V. 21(6). P. 1087.
19. *More J.J.* // The Levenberg-Marquardt algorithm, implementation and theory. Springer Lecture Notes in Mathematics № 630 / Ed. Watson G.A. Berlin; New York: Springer-Verlag, 1978. P. 105.