

Санкт – Петербургский Государственный Университет

Физический факультет

Кафедра вычислительной физики

Пермяков Александр Валерьевич

**Моделирование функции профиля по известной несимметричной
интенсивности рентгеновского излучения**

Специализация 010600/52

” Математическая физика и математическое моделирование”

Магистерская программа

“ Прикладная математика и физика”

Диссертация на соискание академической степени

магистра физики

Руководитель программы

д.ф.-м.н., профессор _____ Яковлев С.Л.

Научный руководитель

д.ф.-м.н., профессор _____ Славянов С. Ю.

Рецензент

д.ф.-м.н., профессор _____ Казаков А.Я.

Санкт – Петербург

2008

Оглавление

1. Введение.....	3
2. Модель рассеяния рентгеновских лучей на структурированных тонких пленках.....	5
3. Пиковые функции	
3.1 Функция Гаусса.....	6
3.2 Функция Лапласа.....	11
3.3 Склеенная функция.....	11
3.4 Логистическая пиковая функция.....	12
4. Восстановление профиля в случае несимметричной интенсивности.....	16
4.1 Модифицированная функция Гаусса.....	17
4.2 Модифицированное логистическое распределения.....	23
5. Выводы.....	27
6. Список литературы.....	28

1. Введение

Для физики металлов большой интерес представляет исследование структур тонких пленок различных сплавов и соединений. Под тонкими пленками понимаются наноструктуры, имеющие толщину порядка 100 ангстрем и состоящие из монослоев, полученных методом молекулярной эпитаксии. Тонкие пленки сплавов находят применение в микроэлектронике, космической промышленности, машиностроении, а также в легкой промышленности.

Структура тонких пленок претерпевает изменения под действием различных внешних факторов или воздействий, например таких как температура, давление, механическая деформация, ударные воздействия и другие. Перед экспериментаторами стоит задача оценить структурные свойства полученных материалов. Для этого необходимо знать, как изменяется внутренняя структура после воздействия всех внешних факторов. Еще одно направление интереса экспериментаторов изучение структуры материала уже бывшего в эксплуатации, возможно даже определение причин поломки устройства. Все это сопряжено с необходимостью исследовать структуры тонких пленок.

Эксперименты по рассеянию рентгеновских лучей являются одним из наиболее эффективных способов исследования структуры и свойств тонких пленок. В экспериментах мы имеем возможность наблюдать интенсивность дифракционной картины рассеяния на кристаллической структуре. В связи с этим возникает задача восстановления структуры пленки по измеренной в ходе эксперимента интенсивности рассеянного поля. Решению этой задачи посвящена данная работа.

За последнее пятнадцать лет появились мощные синхротроны, на которых стало возможным получать узко направленное, жесткое рентгеновское излучение с длиной волны в несколько нанометров, обладающее высокой когерентностью и монохромностью. В определенной степени именно с появлением этих новых экспериментальных возможностей и технологий связано повышение интереса к исследованию наноструктур, в частности в тонких пленках сплавов. В Европе подобные синхротроны есть в Берлине, Гамбурге, Карлсруе, Гренобле.

На прямолинейном участке происходит начальный разгон заряженных частиц. На криволинейных участках частицы движутся ускоренно, испуская излучение рентгеновского диапазона, имеются специальные отводы, с помощью которых излучение выводится от синхротрона и попадает на образец. Образец облучают под углом равным полному внутреннему отражению для подложки, это требование означает, что в наблюдаемом дифракционной картине рассеяния отсутствует вклад от структуры подложки. Как правило в экспериментах используется рентгеновские лучи с энергией порядка 10-15 кэВ.

В основе моделирования рассеяния лежит представление структуры тонкой пленки в виде некоторого эффективного профиля, на котором происходит рассеяние. Этот эффективный профиль может быть описан функцией $Y(x)$, обладающей определенными свойствами.

Интенсивность рассеяния излучения может быть найдена прямым методом (прямая задача), используя кинематическое или динамическое приближение теории рассеяния. На практике, однако, часто необходимо получить профиль по измеренной интенсивности рассеяния (обратная задача).

В известном кинематическом приближении интенсивность рассеивания $I(\xi)$ связана с функцией профиля кристаллической структуры $Y(x)$, описывающей разрушение отдельных монослоев, преобразованием Фурье

$$U(\xi) = \int_{-\infty}^{\infty} Y(x)e^{icx\xi} dx \quad (1)$$

$$I(\xi) = \|U(\xi)\|^2$$

Обратная задача отыскания функции профиля по интенсивности в общем случае поставлена некорректно, т.к. Фурье образ $U(\xi)$, неизвестен, известна только его амплитуда (корень из интенсивности).

$$Y(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} U(\xi) e^{-icx\xi} d\xi \quad (2)$$

Поэтому функция профиля однозначно не находится. Необходимо принимать дополнительные ограничения на вид функции профиля или на вид фазы ее Фурье образа. С математической точки зрения эти ограничения эквивалентны, но, принимая во внимания то, что мы рассматриваем физический процесс, все ограничения должны иметь ясный физический смысл. Этим и объясняется наш выбор в пользу ограничений первого типа.

Известны несколько вариантов решения рассматриваемой обратной некорректной задачи:

1. Задание явной формулы для функции профиля, зависящей от малого числа параметров.
2. Последовательный итерационный процесс, состоящий из рекурсивного применения прямого и обратного преобразования Фурье с выходом на измеренную функцию интенсивности.
3. Использование метода пиковых функций, когда регуляризация состоит в сужении пространства, в котором описывается решение. Это сужение во многом аналогично нелинейному моделированию физического процесса. С численной точки зрения задача сводится к оптимизации отыскания параметров моделирующей функции. Первоначальное исследование было предложено в Работы Доша Славянова Трепкова и Акопяна [1-5].

Данное исследование продолжает реализацию третьего подхода, расширяя его как за счет использования пиковых функций с более богатыми свойствам, так и за счет рассмотрения тех измеренных экспериментально интенсивностей, которые обладают асимметрией по отношению к положению центрального максимума. Такая асимметрия трактуется не как результат разрушения одного из монослоев, а как результат изменения расстояний между слоями в тонкой пленке.

2. Модель рассеяния рентгеновских лучей в терминах пиковых функций

Как было предложено ранее [1-4] представим функцию профиля $Y(x)$ в виде интеграла от суммы пиковых функций $y_i(x)$.

$$Y(x) = \int_{-\infty}^x \sum_{i=1}^N \frac{A_i}{\sigma_i} y_i\left(\frac{x-d_i}{\sigma_i}\right) dx \quad (3)$$

Здесь d_i отвечает за смещение пиковой функции (аналог математического ожидания для плотностей распределения), а σ_i за ширину пика (дисперсия). Коэффициенты A_i это веса, с которыми пиковые функции вносят вклад в функцию профиля или коэффициенты разложения по базису. Пиковыми функциями мы считаем функции вещественные строго положительные сильно локализованные и достаточно гладкие, имеющие один максимум. В известном смысле они являются альтернативой вейвлетов, со следующими близкими и противоположными свойствами:

1. Пиковая функция задается сдвигом и масштабированием, но и сдвиги и масштабирование не являются фиксированными, а ищутся в ходе решения задачи. d_i - это аналог сдвигов для вейвлетов, а σ_i это аналог масштабирования для вейвлетов
2. И пиковые функции и вейвлеты характеризуются свойством локализации, но в отличие от вейвлета обычно полагается что интеграл от пиковой функции равен 1. Заметим что это базис, конечно, не является ортогональным, но интегралы перекрывания функций базиса малы.

Так как пиковые функции определены с точностью до константы, введем стандартное условие нормировки

$$\int_{-\infty}^{\infty} y(x) dx = 1 \quad (4)$$

Представление (3) связано с общим видом функции профиля и ее производной Рис 1. Производная функции профиля состоит «как бы» из двух частей, которые «очень похожи» на пиковые функции. Именно их мы и пытаемся «поймать».

Конечно, такое объяснение довольно пространное, но дать четкого объяснения невозможно в силу неопределенности изначальной задачи. Мы накладываем ограничения на класс допустимых функций, в котором мы ищем функцию профиля. Это дополнительное ограничение возможно (математически) из-за свободы выбора фазы (некорректности задачи).

Введем условие финитности носителя, т.е. ограничим область, на которой функция отлична от нуля, что эквивалентно

$$\sum_{i=1}^N A_i = 0 \quad (5)$$

Это условие соответствует тому, что тонкая пленка имеет ограниченные размеры.

Если обозначить Фурье образ пиковой функции как $u(\xi)$

$$u_i(\xi) = \int_{-\infty}^{\infty} y_i(x) e^{icx\xi} dx \quad (6)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} y_i(x) dx = 1$$

то, используя свойства Фурье преобразования, можно написать выражение для интенсивности нашего представления профильной функции:

$$U(\xi) = F(Y(x)) = \frac{1}{ic\xi} \sum_{j=1}^N A_j e^{icd_j} u_j(\sigma_j \xi) \quad (7)$$

Если комплексную функцию $u(\xi)$ представить в виде

$$u(\xi) = |u(\xi)| e^{i\delta(\xi)} \quad (8)$$

то для интенсивности получим следующее выражение

$$I(\xi) = |U(\xi)|^2 = \frac{1}{c^2 \xi^2} \left[\sum_{i=1}^N A_i^2 u_i^2(\sigma_i \xi) + \right. \\ \left. 2 \sum_{i=1}^N \sum_{j < i} A_i A_j |u_i(\sigma_i \xi)| |u_j(\sigma_j \xi)| \cos \left(c\xi(d_i - d_j) + \delta_i(\sigma_i \xi) - \delta_j(\sigma_j \xi) \right) \right] \quad (9)$$

Формула (8) имеет особенность вблизи нуля. Для ее исследования необходимо найти предел

$$\lim_{\xi \rightarrow 0} I(\xi) \quad (10)$$

для этого можно воспользоваться правилом Лопиталья или разложить $I(\xi)$ в ряд Тейлора. Используя условие финитности (3) получаем

$$I(0) = \left[\sum_{i=1}^N A_i \left(d_i + \frac{\sigma_i \delta_i'(0)}{c} \right) \right]^2 \quad (11)$$

3.1 Функции Гаусса

Теперь перейдем к непосредственному использованию метода пиковых функций. Введем ряд допущений.

1. В качестве пиковых функций будем использовать только одну пиковую функцию вида

$$y(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-x^2} \quad (12)$$

называемую функцией Гаусса.

2. В формуле (9), оставим только два слагаемых.

Тогда

$$I(\xi, \sigma_i, d_i, A) = \frac{A^2}{c^2 \xi^2} \left[e^{-c^2 \frac{\xi^2 \sigma_1^2}{2}} + e^{-c^2 \frac{\xi^2 \sigma_2^2}{2}} - 2e^{-c^2 \frac{\xi^2 (\sigma_1^2 + \sigma_2^2)}{4}} \cos(c\xi(d_1 - d_2)) \right] \quad (13)$$

При выводе (13) использовалось (7), (8), (10), а также тот факт, что выбранная нами пиковая функция симметричная действительная функция. В этом случае ее Фурье образ будет действителен.

Выражение (13) получилось симметричным, т.е. оно может описать только симметричные интенсивности, об описание несимметричных интенсивностях будет сказано ниже.

Наша задача заключается в нахождении параметров σ_i, A и $d = d_1 - d_2$, из условия

$$\min \|I(\xi) - I(\xi, \sigma_i, d, A)\| \quad (14)$$

Норма выбирается L_2 в пространстве непрерывных функций с непрерывной первой производной

$$\|f(\xi)\| = \int f^2(\xi) d\xi \quad (15)$$

Изучим поведение построенного нами вида интенсивности (13). Так как в дальнейшем предстоит решать задачу минимизации функционала (14) по 4 или более параметрам, хотелось бы ввести ряд ограничений на искомое решение, чтобы упростить задачу минимизации.

Нетрудно заметить, что выражение (12) симметрично относительно σ_1 и σ_2

$$I(\xi, \sigma_1, \sigma_2, d_i, A) = I(\xi, \sigma_2, \sigma_1, d_i, A)$$

Поэтому первое ограничение, которое можно наложить

$$\sigma_1 \geq \sigma_2 \quad (16)$$

Аналогично получаем ограничение на A

$$A > 0 \quad (17)$$

Кроме того используя (11) можно получить априорную оценку для A и d

$$A^2 d^2 = I(0) \quad (18)$$

В принципе условие (18) можно использовать для понижения размерности задачи. Это будет эффективно, если вычисление нормы (14) достаточно трудоемко.

В принципе условие (18) можно использовать для понижения размерности задачи. Это будет эффективно, если вычисление нормы (14) достаточно трудоемко.

Само значение функции интенсивности в нуле мы нашли, но нас интересует более полное описание поведения функции в нуле. Очевидно, что она должна иметь там максимум. Расчеты показывают (теоретические) что

$$\lim_{\xi \rightarrow 0} \frac{dI(\xi)}{d\xi} = 0 \quad (19)$$

Это означает, что интенсивность имеет экстремум в нуле, однако его тип предстоит определить

$$\lim_{\xi \rightarrow 0} \frac{d^2I(\xi)}{d\xi^2} = \frac{A^2 c^2 [3(\sigma_1^2 - \sigma_2^2)^2 - 12(\sigma_1^2 + \sigma_2^2)d^2 - 4d^4]}{24} \quad (20)$$

Для того чтобы в нуле был максимум, необходимо (18), а достаточно, чтобы вторая производная была меньше нуля.

$$3(\sigma_1^2 - \sigma_2^2)^2 < 12(\sigma_1^2 + \sigma_2^2)d^2 + 4d^4 \quad (21)$$

Условие (21) получилось достаточно громоздким. Если норма (14) достаточно проста, то практической ценности в (21) нет, однако важным является тот факт, что эта зависимость не тривиальна. Т.е. интенсивность (13) может иметь в нуле и минимум, что недопустимо.

Обратимся теперь к вторичным экстремумам, точнее к вторичным минимумам, так как именно они наиболее выражены в представлении (13). Как было показано в работах Трепкова [4] минимумы тем глубже, чем меньше разница между ширинами пиковых функций $\sigma_1 - \sigma_2$.

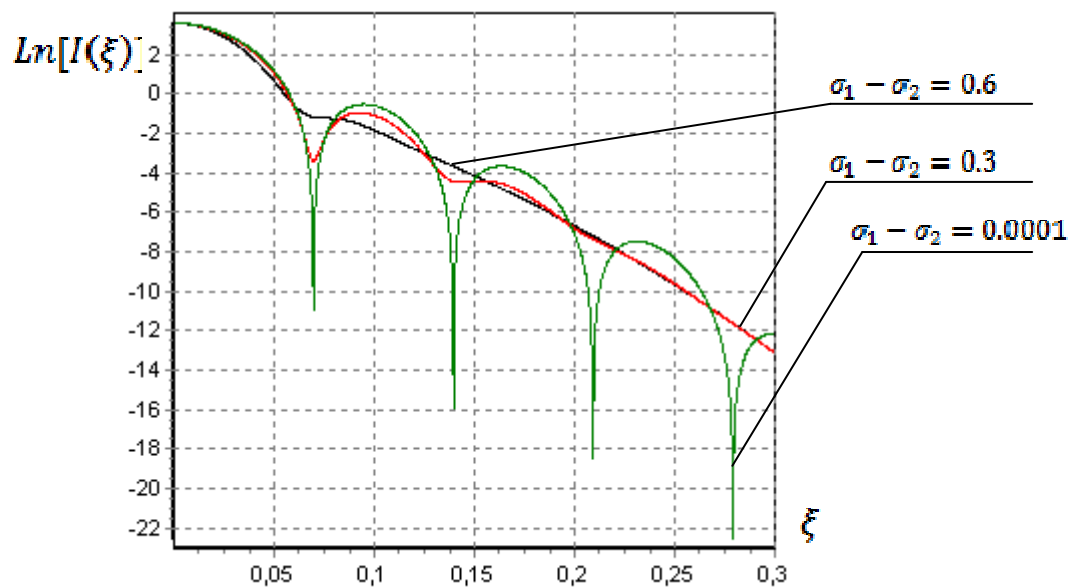


Рис 1, Зависимость интенсивности рассеяния от разности $\sigma_1 - \sigma_2$ $c = 15, d = 6, A = 1$

$$\xi_n = \frac{2\pi}{cd} + \frac{2\pi n}{cd} \quad (22)$$

А если разность $\sigma_1 - \sigma_2$ немала, то формула (22) неверна, но тогда и сам минимум становится очень неявный. Т.е. визуально их не видно, можно сказать что их «как бы» нет.

В таком случае если у нас есть экспериментальные значения интенсивности, мы можем без труда найти точки ξ_0, ξ_1 . Зная их можно априорно оценить d .

$$d = \frac{4\pi}{c\xi_1} \quad (23)$$

Или можно использовать все известные (из эксперимента) минимумы, взяв среднее значение

$$d = \frac{1}{K} \sum_{n=0}^K d_n = \frac{1}{K} \sum_{n=0}^K \frac{2\pi(n+1)}{c\xi_n} \quad (24)$$

Как и с выражением (18) (24) можно использовать для понижения размерности задачи минимизации функционала (14). Кроме того, если мы определили положение минимумов, то мы можем определить значение в этих минимумах. Подставим (24), (18) в (13)

$$\frac{A^2}{c^2\xi_n^2} \left(e^{-c^2\frac{\xi_n^2\sigma_1^2}{2}} + e^{-c^2\frac{\xi_n^2\sigma_2^2}{2}} - 2e^{-c^2\frac{\xi_n^2(\sigma_1^2+\sigma_2^2)}{4}} \right) = I(\xi_n)$$

$$\left(e^{-c^2\frac{\xi_n^2\sigma_1^2}{2}} - e^{-c^2\frac{\xi_n^2\sigma_2^2}{2}} \right)^2 = 4\pi^2(n+1)^2 \frac{I(\xi_n)}{I(0)}$$

Используя $\sigma_1 \geq \sigma_2$, получим

$$e^{-c^2\frac{\xi_n^2\sigma_2^2}{2}} - e^{-c^2\frac{\xi_n^2\sigma_1^2}{2}} = 2\pi(n+1) \sqrt{\frac{I(\xi_n)}{I(0)}} \quad (25)$$

В выражениях (22) и (25) ровно K уравнений. Хотя на самом деле среди них всего одно независимое уравнение. Математически это означает следующее, предположим что в (22) более одного независимого уравнения, тогда мы можем дважды найти один параметр d , и что же делать, если они не совпадают. Если такая ситуация все же возникает, то это означает, что наша модель для интенсивности (13) не может аппроксимировать данные экспериментальные значения. Скажем если пики вторичных максимумов (минимумов) расположены неэквидистантно, то формулой (13) такое рассеивание не описать. Нужно использовать другие пиковые функции или другой подход.

Еще одно условие применимости данной модели

$$2\pi(n+1) \sqrt{\frac{I(\xi_n)}{I(0)}} \leq 1 \quad (26)$$

Так как слева стоят экспоненты, которые не могут превосходить 1.

Итак (25) дает нам еще одно уравнение и еще одну возможность уменьшить размерность пространства для задачи минимизации функционала (14). Выражение получилось достаточно простым и можно выразить одну сигму через другую .

Если посчитать все наши допущения (25), (23) и (18) то мы понизили размерность пространства до одного. Осталась задача минимизации функции одной переменной.

Далее можно предложить следующую схему: использовать (18), (23), (25) и решать задачу минимизации функции одной переменной, а уже далее полученное решение уточнять, используя его в качестве начальной точки для задачи минимизации в четырехмерном пространстве.

Условие (26) очень жесткое условие на экспериментальную интенсивность. Большинство реальных интенсивностей не удовлетворяют ему рис 2.

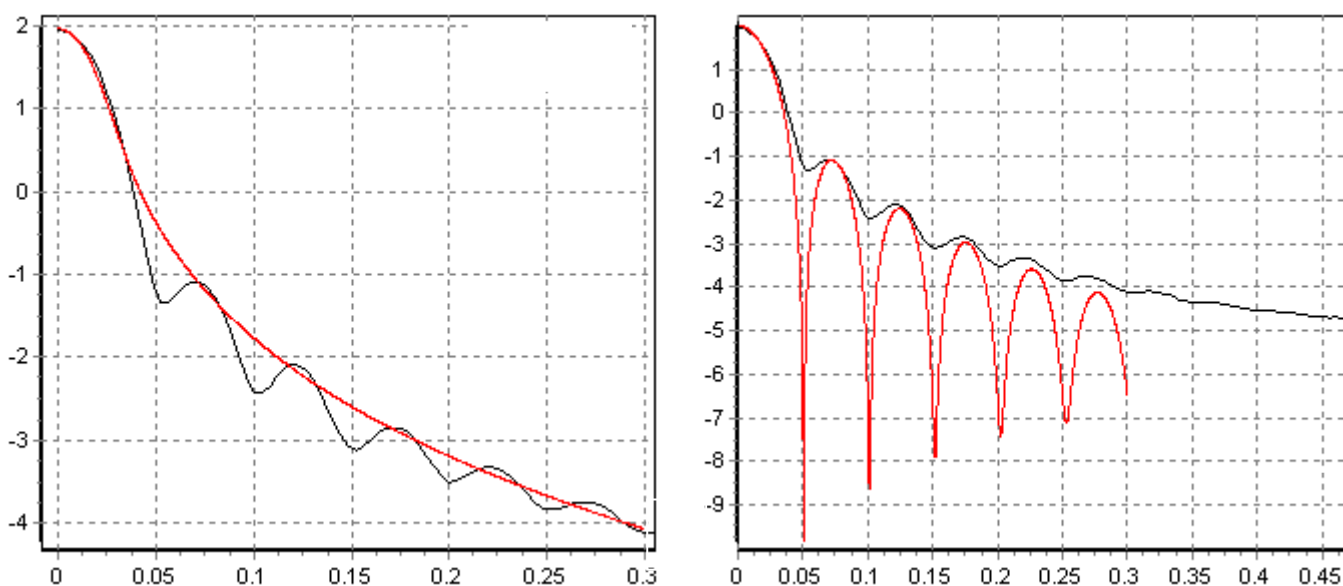


Рис 2, Интенсивность рассеяния и ее аппроксимация

На рис 2а) видно, что аппроксимирующая кривая совсем не описала вторичные максимумы. Это и понятно так, как если перевести этот график из логарифмической шкалы в обычную то мы увидим, что условие (26) не выполняется. По той же причине на рис 2б) минимумы не совпадают. В этом случае насильственно были выбраны параметра модели так, что бы совпадали вторичные максимумы, однако это приводит, как видно из рисунка, совсем не к тому чего хочется.

Из рис 2 также видно, что вблизи нуля скорость убывания интенсивности отлична от скорости убывания в дали от нуля. Это наталкивает на мысль использовать склеенную пиковую функцию.

3.3 Склеенная функция

Воспользуемся склеиванием функции интенсивности.

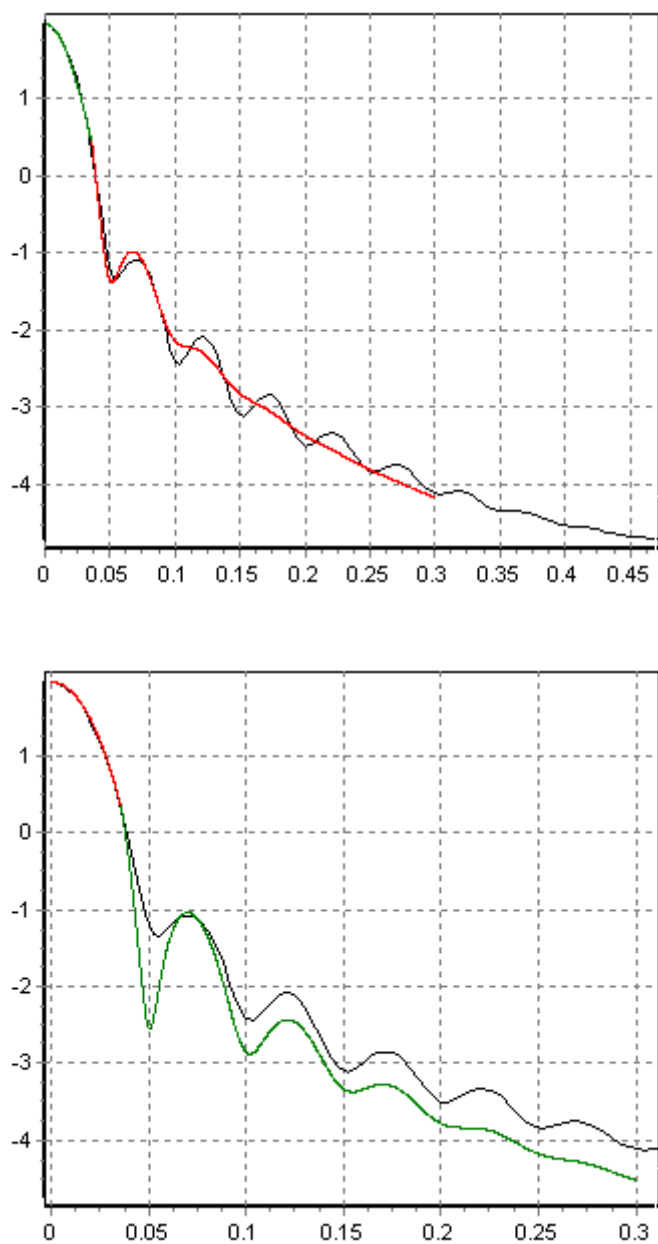


Рис 3, Интенсивность рассеяния и ее аппроксимация модельной интенсивностью, построенной с помощью склеенных пиковых функций

На рис 3 представлены различные склеивания функции. В первом случае мы точно описываем первый минимум и совсем не описываем остальные, во втором случае мы описываем все минимумы, но достаточно посредственно.

3.4 логистическая пиковая функция

Логистическое распределение задается следующей формулой

$$f(x) = \frac{1}{4\lambda ch^2\left(\frac{x}{2\lambda}\right)} \quad (27)$$

она имеет мат ожидание 0 и дисперсию $\frac{(\lambda\pi)^2}{3}$, но в отличие от нормального распределения она так же имеет отличный от нуля коэффициент эксцесса, который показывает насколько остр пик исследуемой функции. Для нормального распределения он равен 0, если он больше >0 , то пик более острый если меньше то более пологий. Не надо путать дисперсию и коэффициент эксцесса, первый характеризует ширину пиковой функции в целом, второй отвечает только за ширину (или точнее остроту) максимума пиковой функции. На рис 4 изображены функция гаусса и логистическое распределение с одинаковыми дисперсиями и мат ожиданиями. Обе функции нормированы, а их основное отличие в коэффициенте эксцесса, в результате чего они имеют четыре точки пересечения.

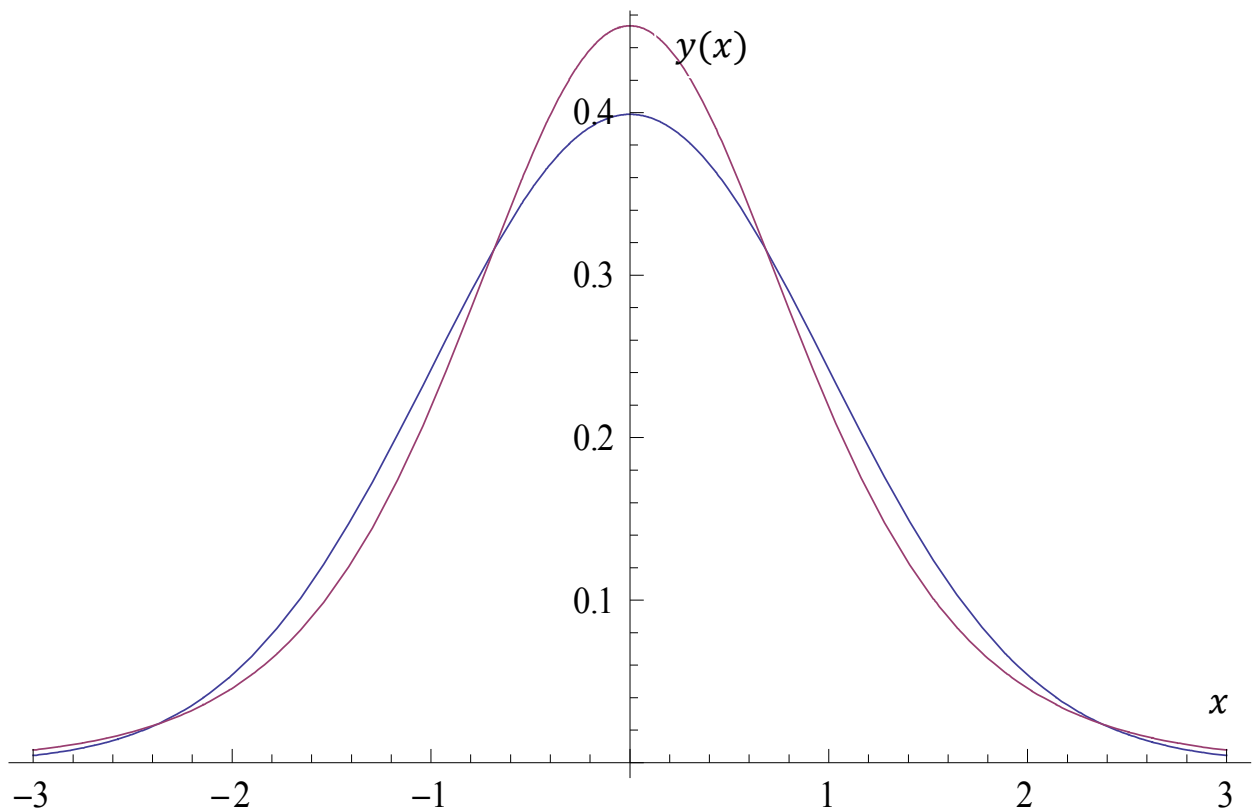


Рис 4 Нормальное распределение и логистическое распределение с одинаковыми мат. ожиданиями и дисперсиями.

В дальнейшем мы будем работать с логистической пиковой функцией. Она так же определяется формулой (27), однако в отличии от функции распределения пиковые функции устроены по другому. Функции распределения всюду нормированы на единицу и имеют одно математическое ожидание и дисперсию. Когда речь идет о пиковых функциях мы работаем с целым семейством функций, которые получены при различных сдвигах и масштабных преобразованиях. В этом смысле пиковые функции больше похожи на вейвлеты.

Рассмотрим логистическую пиковую функцию с нулевым математическим ожиданием, единичной дисперсией и нормированной на единицу:

$$y(x) = \frac{\pi}{4\sqrt{3}ch^2\left(\frac{\pi x}{2\sqrt{3}}\right)} \quad (28)$$

Найдем прямое преобразование Фурье:

$$u(\xi) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\pi}{4\sqrt{3}ch^2\left(\frac{\pi x}{2\sqrt{3}}\right)} e^{ix\xi} dx \quad (29)$$

В итоге получаем:

$$u(\xi) = \frac{\sqrt{3}\xi}{Sh(\sqrt{3}\xi)} \quad (30)$$

Выражение (30) получилось очень простым. Это очень важный факт, что нам удалось аналитически взять интеграл (29). Как уже было сказано раньше, мы смогли свести нашу некорректную обратную задачу к задаче минимизации с малым числом параметров. Кроме того, нигде не надо производить численное интегрирование по бесконечному контуру, что сильно упрощает численный вариант задачи минимизации (14).

Выражение (30) имеет особенность в нуле.

$$\lim_{x \rightarrow 0} \frac{\sqrt{3}\xi}{Sh(\sqrt{3}\xi)} = 1 \quad (31)$$

эта особенность легко раскрывается, в итоге мы получаем широко известный первый замечательный предел, который равен единице.

Наличие корня из трех в (30) обусловлено тем, что мы взяли логистическую функцию с единичной дисперсией и нормировали ее на единицу. Благодаря тому, что в числителе (30) стоит линейно возрастающая функция, мы имеем гораздо более медленное убывание Фурье образа логистической пиковой функции по сравнению с функцией Гаусса. Хотя конечно гиперболический синус растет гораздо быстрее линейной функции, и общая тенденция характеризуется убывающей функцией.

$$\lim_{x \rightarrow \pm\infty} \frac{\sqrt{3}\xi}{Sh(\sqrt{3}\xi)} = 0 \quad (32)$$

Выражение (32) означает локализованность образа логистической пиковой функции, а значит в какой-то мере и локализованность модельной интенсивности рассеяния рентгеновского излучения.

На рис 5 представлено сравнение Фурье образов функции Гаусса и логистической пиковой функции, как видно логистическая пиковая функция спадает более плавно, такое поведение представляет для нас больший интерес.

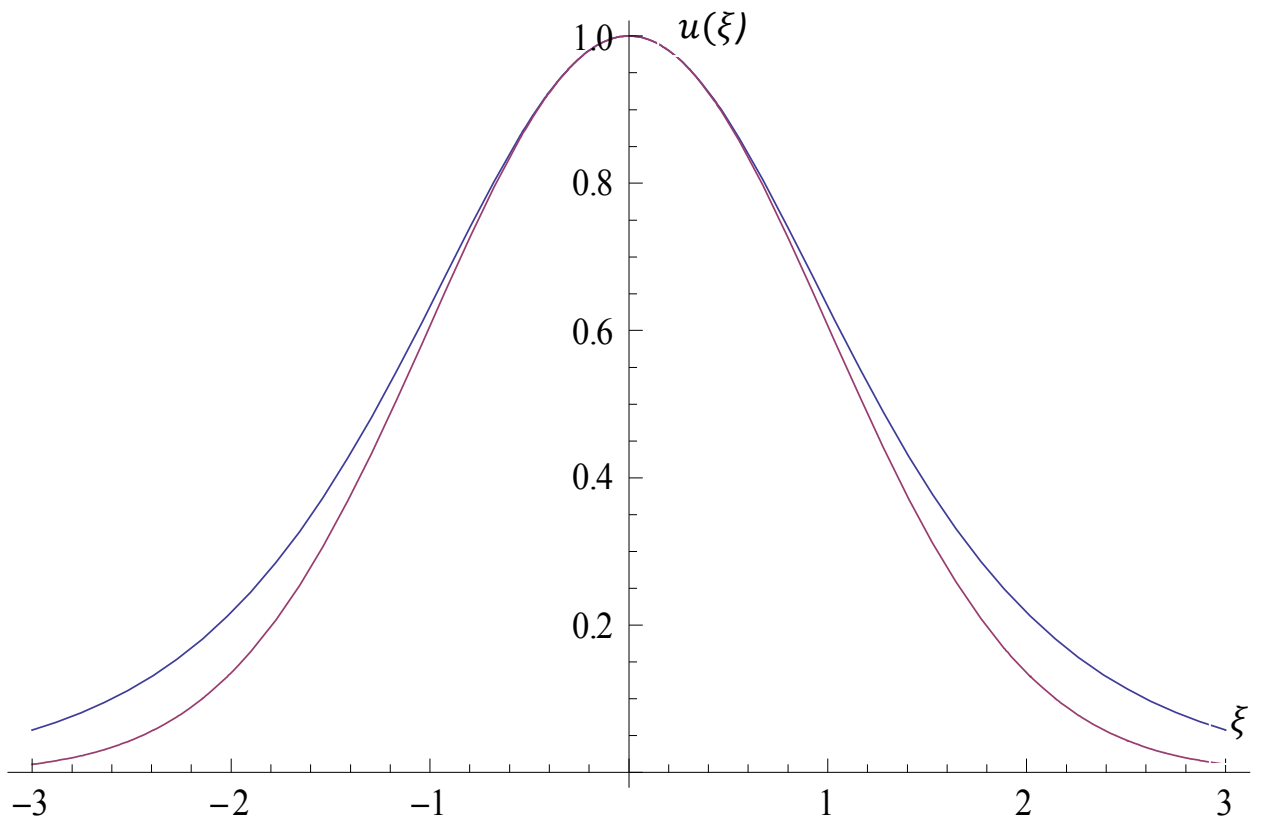


Рис 5 Фурье образы нормального и логистического распределений.

Логистическая пиковая функция и функция Гаусса имеют одинаковое число параметров, хотя логистическая пиковая функция и имеет отличный от нуля четвертый центральный момент, он все равно, вместе с дисперсией, управляется одним параметром, а значит, их можно полноценно сравнить при одинаковых параметрах.

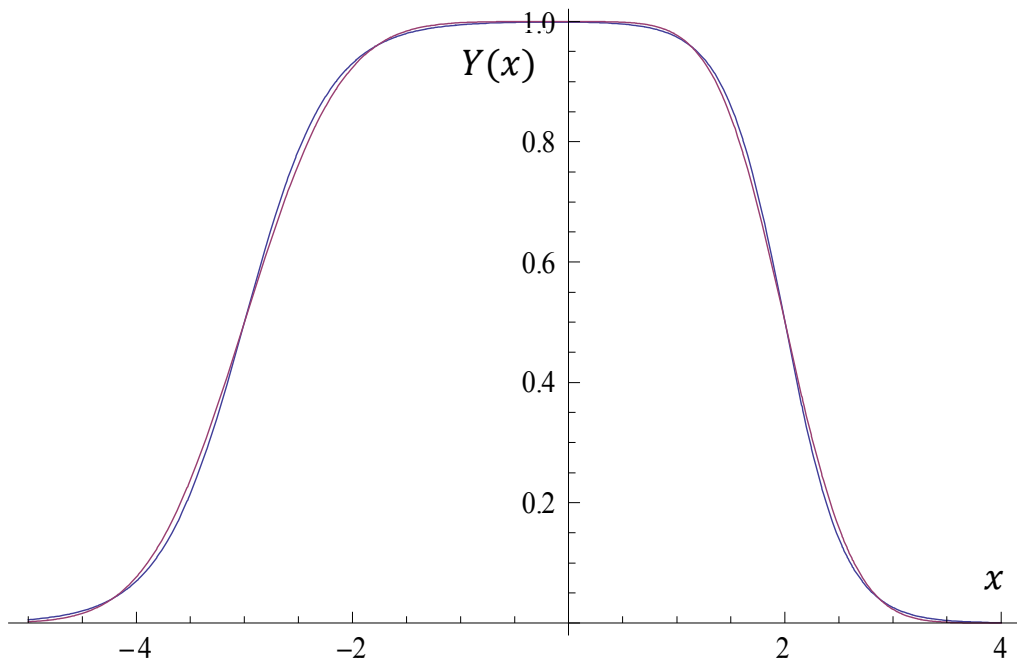


Рис 6 Модельная функция профиля для логистической пиковой функции и функции

Как видно из рис 6 модельная функция профиля очень близка к профилю, полученному с помощью функций Гаусса.

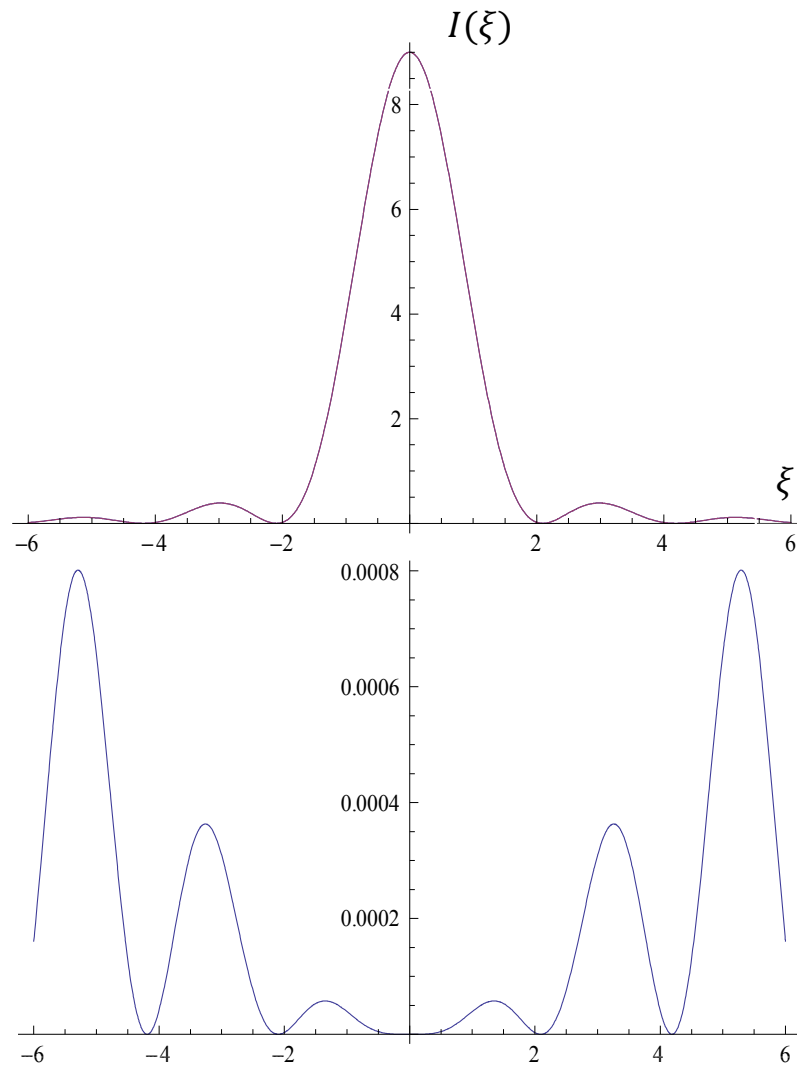


Рис 7 Зависимости моделируемых интенсивностей от ξ для функции Гаусса и логистической пиковой функции, внизу разность этих функций

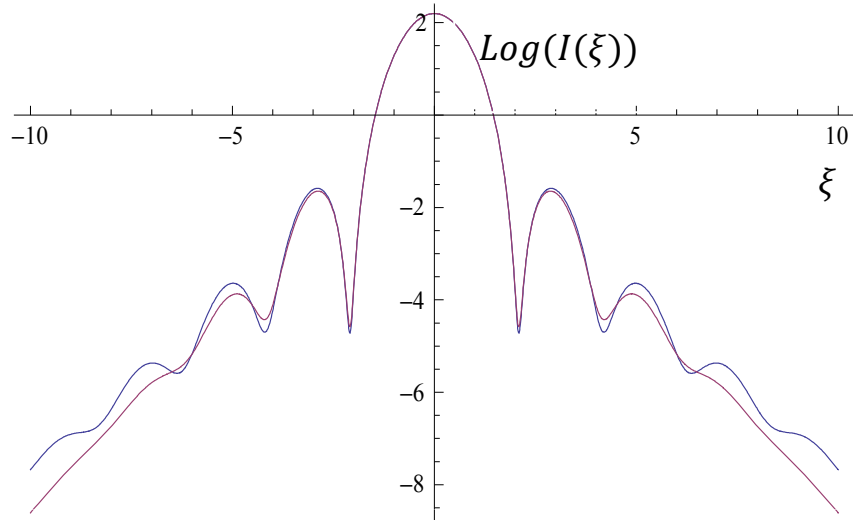


Рис 8 Зависимости логарифма моделируемых интенсивностей от ξ для функции Гаусса и логистической пиковой функции, $d=3, \sigma_1 = 0.4, \sigma_2 = 0.2$

Как и следовало ожидать, логистическая пиковая функция лучше ведет себя вдали от нуля, в то время как вблизи нуля эти две функции идентичны.

4. Модель восстановления профиля по несимметричной интенсивности

Как уже было сказано раньше, реальные сигналы не являются симметричными, это в первую очередь связано с тем, что кристаллическая структура тонкой пленки претерпевает неоднородную деформацию, в результате чего располагаются друг относительно друга не эквидистантно. Поэтому мы имеем искажение симметричного сигнала. Возникает задача построения модели, которая могла бы учитывать эту деформацию и количественно описывать как профиль, так и взаимное смещение слоев.

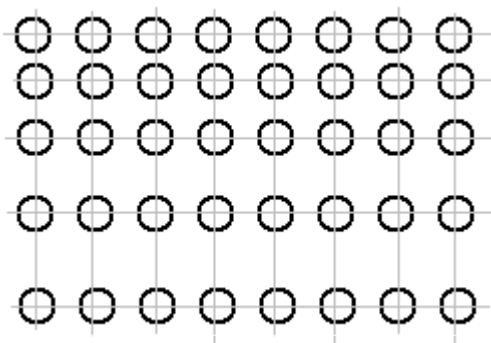


Рис 9 Равномерная деформация слоев в кристалле. Модельное обоснование несимметричности интенсивности рассеяния

По свойству преобразования Фурье если мы работаем с действительной симметричной пиковой функцией, то ее образ будет вещественен, если же пиковая функция не симметрична, то образ будет комплексным, однако фаза этого образа будет нечетной функцией и тем самым интенсивность сохранит симметрию. В связи с этим любые вещественные пиковые функции не смогут описать несимметричное рассеяние.

Из всевозможных вариантов нужно выбрать наиболее простой вид комплекснозначной функции, сохранив при этом идеологию представления профиля как интеграл от суммы пиковых функций. В таком случае формула (9) справедлива

$$I(\xi) = |U(\xi)|^2 = \frac{1}{c^2 \xi^2} \left[\sum_{i=1}^N A_i^2 u_i^2(\sigma_i \xi) + \right. \quad (33)$$

$$\left. 2 \sum_{i=1}^N \sum_{j<i} A_i A_j |u_i(\sigma_i \xi)| |u_j(\sigma_j \xi)| \cos \left(c\xi(d_i - d_j) + \delta_i(\sigma_i \xi) - \delta_j(\sigma_j \xi) \right) \right]$$

Наша задача подобрать вид функции фазы Фурье образа. Он должен быть либо четным, либо функцией общего вида, такой подход обеспечит не симметрию интенсивности. Тогда для построения пиковой функции нужно будет взять обратное Фурье преобразование от функции с уже известной амплитудой и придуманной нами фазой

$$\tilde{y}(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} u(\xi) e^{i\tilde{\delta}(\xi)} e^{-ix\xi} d\xi$$

4.1 Модифицированная функция Гаусса

Рассмотрим на примере функции Гаусса процедуру построения новой комплекснозначной пиковой функции, позволяющей описывать несимметричное рассеяние. Для функции Гаусса выражение (33) имеет следующий вид:

$$I(\xi, \sigma_i, d_i, A) = \frac{A^2}{c^2 \xi^2} \left[e^{-c^2 \frac{\xi^2 \sigma_1^2}{2}} + e^{-c^2 \frac{\xi^2 \sigma_2^2}{2}} - 2e^{-c^2 \frac{\xi^2 (\sigma_1^2 + \sigma_2^2)}{4}} \cos(c\xi(d_1 - d_2)) \right] \quad (34)$$

Добавим к фазе четную функцию самого простого вида, такая функция это αx^2 , так как константа нарушает предельный переход в нуле, а линейная функция будет неотличима от уже имеющейся функции. Таким образом, мы получили Фурье образ новой пиковой функции

$$\tilde{y}(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{\xi^2}{2}} e^{\alpha i \xi^2} e^{i \xi x} d\xi \quad (35)$$

сама функция будет выглядеть следующим образом

$$\tilde{y}(x) = \frac{e^{-\frac{x^2}{2+8\alpha^2} \left(\cos \left[\frac{\alpha x^2}{1+4\alpha^2} + \frac{1}{2} \text{Arg}[1-2i\alpha] \right] - i \text{Sin} \left[\frac{\alpha x^2}{1+4\alpha^2} + \frac{1}{2} \text{Arg}[1-2i\alpha] \right] \right)}}{(1+4\alpha^2)^{1/4} \sqrt{2\pi}} \quad (36)$$

Параметр α тут является количественным эквивалентом степени деформации слоев. Полученную функцию можно назвать модифицированной функцией гаусса. Физический смысл этого параметра пока не ясен, т.е. как именно связан он с тензором деформации еще предстоит определить. Данная модель является феноменологической и на этапе построения не предполагает точного сопоставления. Однако после того как модель будет построена все эти связи будут найдены.

При $\alpha = 0$, получается обычная функция Гаусса.

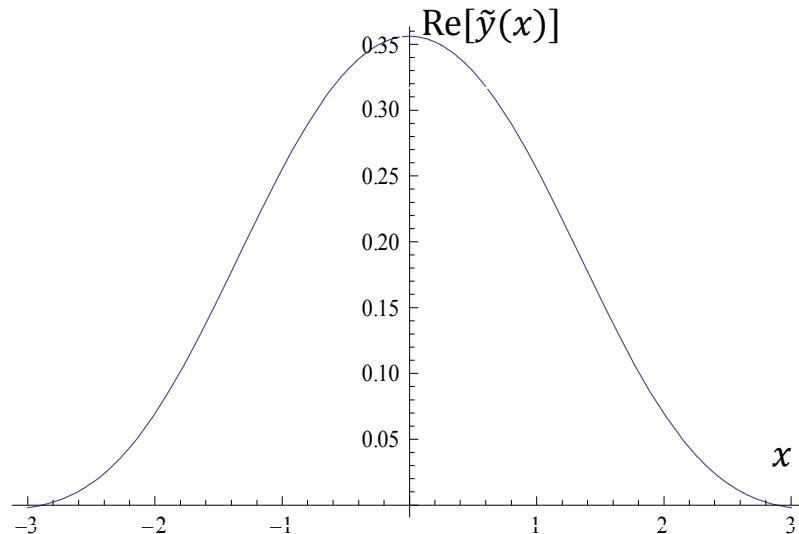


Рис 10 Модифицированная функция Гаусса, ее действительная часть. $\alpha = 0.3$

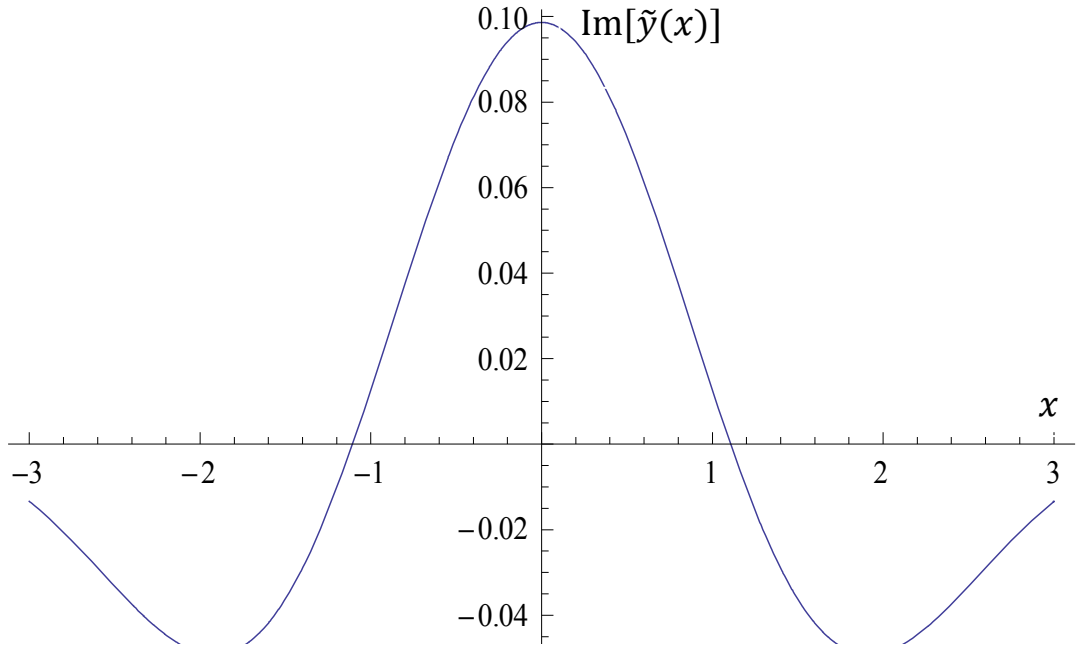


Рис 11 Модифицированная функция Гаусса, ее мнимая часть. $\alpha = 0.3$

Параметр α влияет не только на мнимую часть пиковой функции, но и на действительную, причем главным образом на поведение в окрестности нуля. Экспонента и косинус в окрестности нуля имеют один порядок малости, поэтому поведение функции в этой окрестности будет полностью определяться значением α .

Исследуем поведение модифицированной функции Гаусса (36) в нуле.

$$\lim_{x \rightarrow 0} \frac{d}{dx} \tilde{y}(x) = 0 \quad (37)$$

Условие (37) означает, что модифицированная функция Гаусса имеет экстремум в нуле, однако оно не гарантирует что это максимум.

$$\tilde{y}''(0) = \frac{\cos\left[\frac{1}{2} \text{Arg}(1 - 2i\alpha)\right] + 2\alpha \sin\left[\frac{1}{2} \text{Arg}(1 - 2i\alpha)\right]}{(1 + 4\alpha^2)^{5/4} \sqrt{2\pi}} \quad (38)$$

Выражение (38) не является знакоопределенным. При различных значениях параметра α оно может принимать значения разных знаков. График зависимости второй производной модифицированной функции Гаусса в нуле от параметра α изображен на рис 12

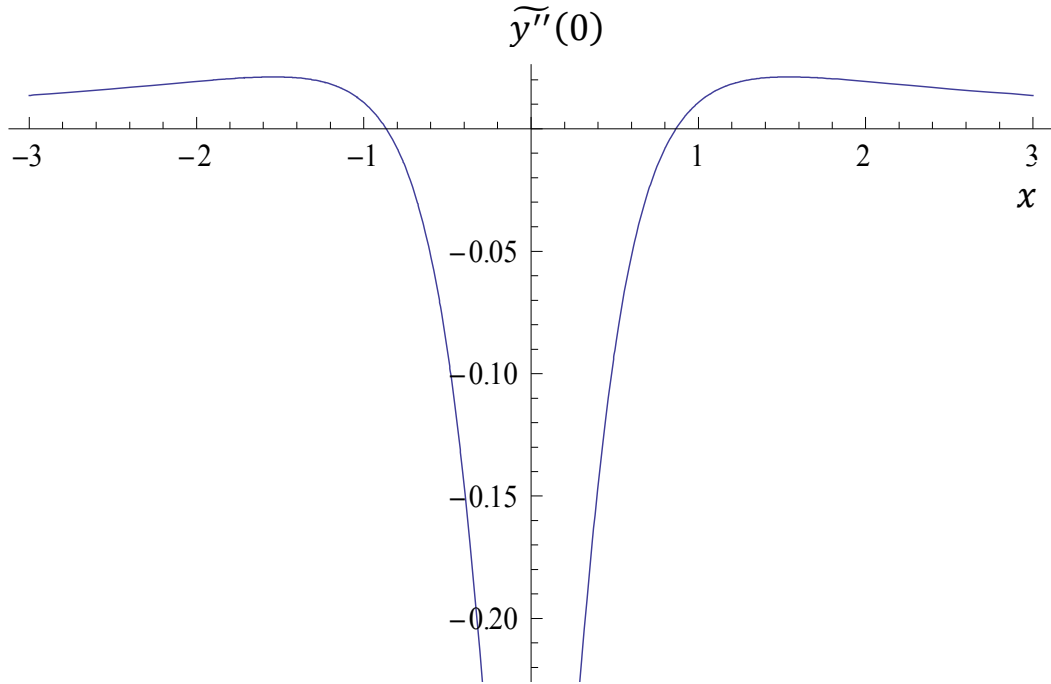


Рис 12 Зависимость значения второй производной модифицированной функции гаусса в нуле от параметра α .

Из рис 12 видно, что только при малых значениях α , вторая производная отрицательна, а значит, модифицированная функция Гаусса в нуле имеет максимум.

Такое ограничение достаточно логичное, оно означает что, такой моделью мы можем описывать только малые одноосные деформации. Мы пытаемся описать деформацию всего одним параметром, хотя она в общем случае описывается симметричным тензором второго ранга.

В модифицированной функции Гаусса параметр α вносит вклад не только в мнимую часть, но и в действительную. Это означает, что и для Фурье образа сохранится такая тенденция, т.е. параметр α будет влиять на симметричную часть модельной интенсивности. Перепишем (9) для модифицированной функции Гаусса

$$I(\xi, \sigma_i, d_i, A) = \frac{A^2}{c^2 \xi^2} \left[e^{-c^2 \frac{\xi^2 \sigma_1^2}{2}} + e^{-c^2 \frac{\xi^2 \sigma_2^2}{2}} - 2e^{-c^2 \frac{\xi^2 (\sigma_1^2 + \sigma_2^2)}{4}} \cos(c\xi(d_1 - d_2) + c(\alpha_1 - \alpha_2)\xi^2) \right] \quad (39)$$

Как и раньше точно найти α_1 и α_2 нельзя, можно найти только их разность. Выражение (39) уже не является симметричным относительно нуля, выделим у него симметричную и антисимметричную части, предварительно обозначив $d = d_1 - d_2$ и $\alpha = \alpha_1 - \alpha_2$:

$$I_s(\xi, \sigma_i, d, A, \alpha) = \frac{A^2}{c^2 \xi^2} \left[e^{-c^2 \frac{\xi^2 \sigma_1^2}{2}} + e^{-c^2 \frac{\xi^2 \sigma_2^2}{2}} - 2e^{-c^2 \frac{\xi^2 (\sigma_1^2 + \sigma_2^2)}{4}} \cos(c\xi d) \cos(c\alpha \xi^2) \right] \quad (40)$$

$$I_{as}(\xi, \sigma_i, d, A, \alpha) = \frac{A^2}{c^2 \xi^2} \left[2e^{-c^2 \frac{\xi^2 (\sigma_1^2 + \sigma_2^2)}{4}} \sin(c\xi d) \sin(c\alpha \xi^2) \right] \quad (41)$$

Выражение (41) так же как и (40) имеет особенность в нуле. Она раскрывается гораздо проще, так как в числителе стоит произведение синуса и синуса от квадрата аргумента. Получаем

$$I_{as}(0, \sigma_i, d, A, \alpha) = 0 \quad (42)$$

Антисимметричная часть модельной интенсивности зависит от четырех параметров, а симметричная часть от пяти. Все соотношения, полученные ранее, на параметры остаются справедливы. Антисимметричная часть зависит только от суммы $\sigma_1^2 + \sigma_2^2$, которая, как и раньше характеризует степень и быстроту спада интенсивности.

Вообще говоря, мы увеличили пространство не решений на 1. Однако если рассмотреть реальные интенсивности, то мы получим что их антисимметричные части по сравнению с симметричными частями на порядок меньше. В таком случае если решать задачу в пятимерном пространстве мы можем не отличить антисимметричную часть от погрешности расчетов, нам придется вычислять с высокой точностью, а наши параметры будут иметь разный масштаб, что всегда плохо отражается на устойчивости метода.

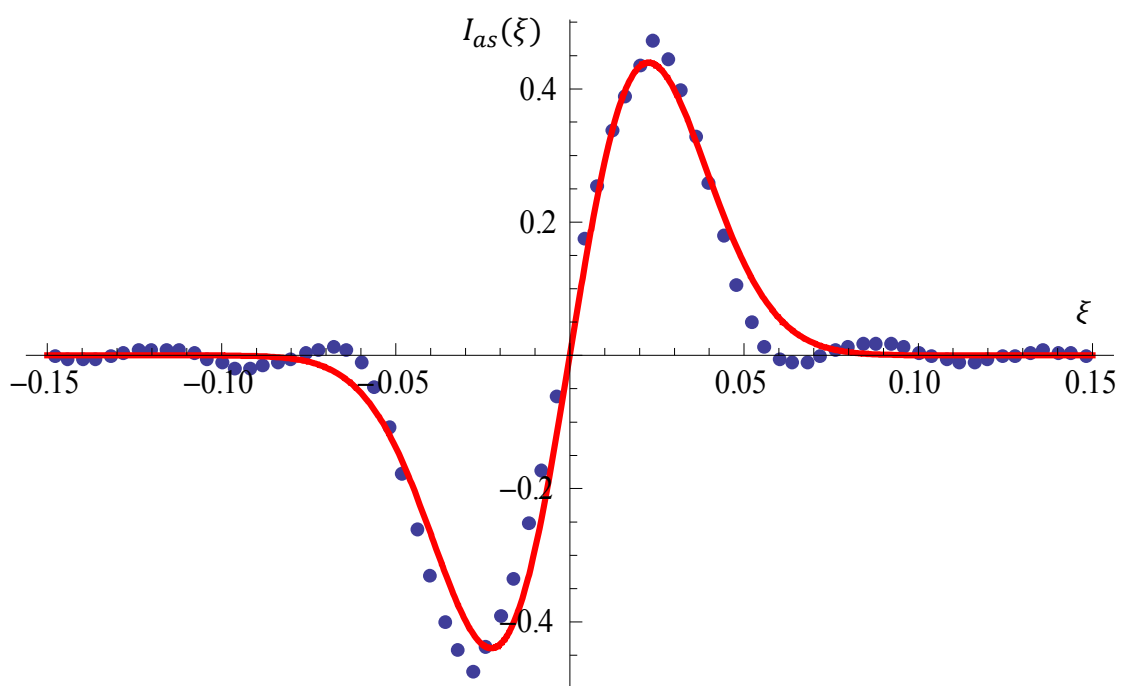


Рис 13 Антисимметричная часть интенсивности рассеяния (синие точки), и ее аппроксимация методом наименьших квадратов (красная линия) $c = 1, \alpha = 5.912, d = 5.222, A = 1.019, \sigma_1^2 + \sigma_2^2 = 60.49$

На рис 13 изображенная аппроксимация методом наименьших квадратов антисимметричной части интенсивности рассеяния с помощью выражения (41). Относительная погрешность такой аппроксимации составила чуть более 20%. Такое большое значение связано с тем, что аппроксимируемая функция имеет большой вес в областях вторых и третьих пиков (там просто больше точек) и именно в этой области аппроксимация является плохой. С другой стороны мы смогли аппроксимировать главный пик, который и вносит основной вклад в не симметрию сигнала.

Аппроксимация рис 13 была получена с учетом того что все параметры свободные, т.е. минимизация проходила в четырехмерном пространстве. Кроме того, мы совсем не поймали вторичные пики, а два синуса оказались перегруженными. В связи с этим возникает идея воспользоваться ограничениями (18) и (22), откуда можно приближенно, априорно найти A и d .

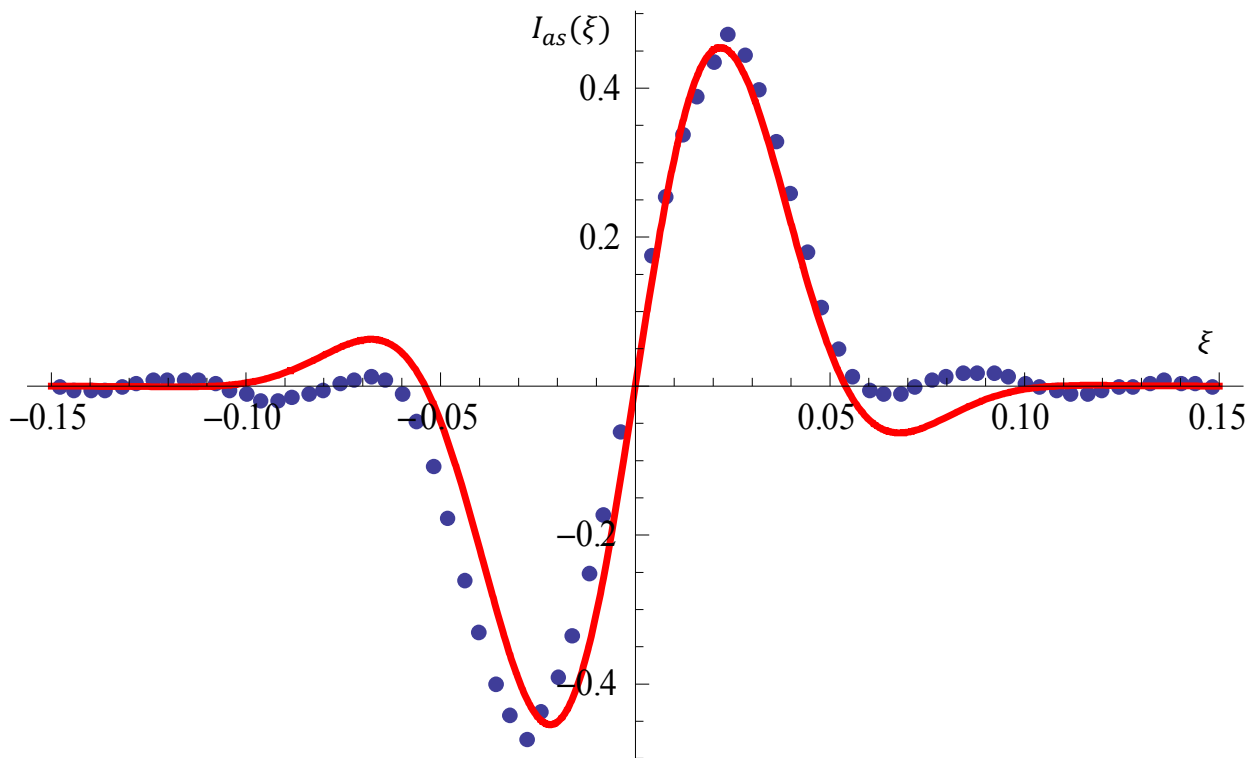


Рис 14 Антисимметричная часть интенсивности рассеяния (синие точки), и ее аппроксимация методом наименьших квадратов (красная линия) $c = 1, \alpha = 10.082, d = 58.1, A = 0.239, \sigma_1^2 + \sigma_2^2 = 40.56$

К сожалению, при использовании функций Гаусса, численная схема минимизации по методу наименьших квадратов расходится. Добиться количественно хорошей аппроксимации не получается, хотя качественно построенная модифицированная функция Гаусса охватывает все эффекты и может быть применима для грубых оценок функции профиля.

Симметричная часть модельной интенсивности построенной на модифицированных функциях Гаусса (40) имеет две частоты, в отличие от простой функции Гаусса. Если $\alpha = 0$, мы получаем обычную модельную интенсивность, построенную на функции Гаусса (13). Проанализируем как (40) зависит от параметра α .

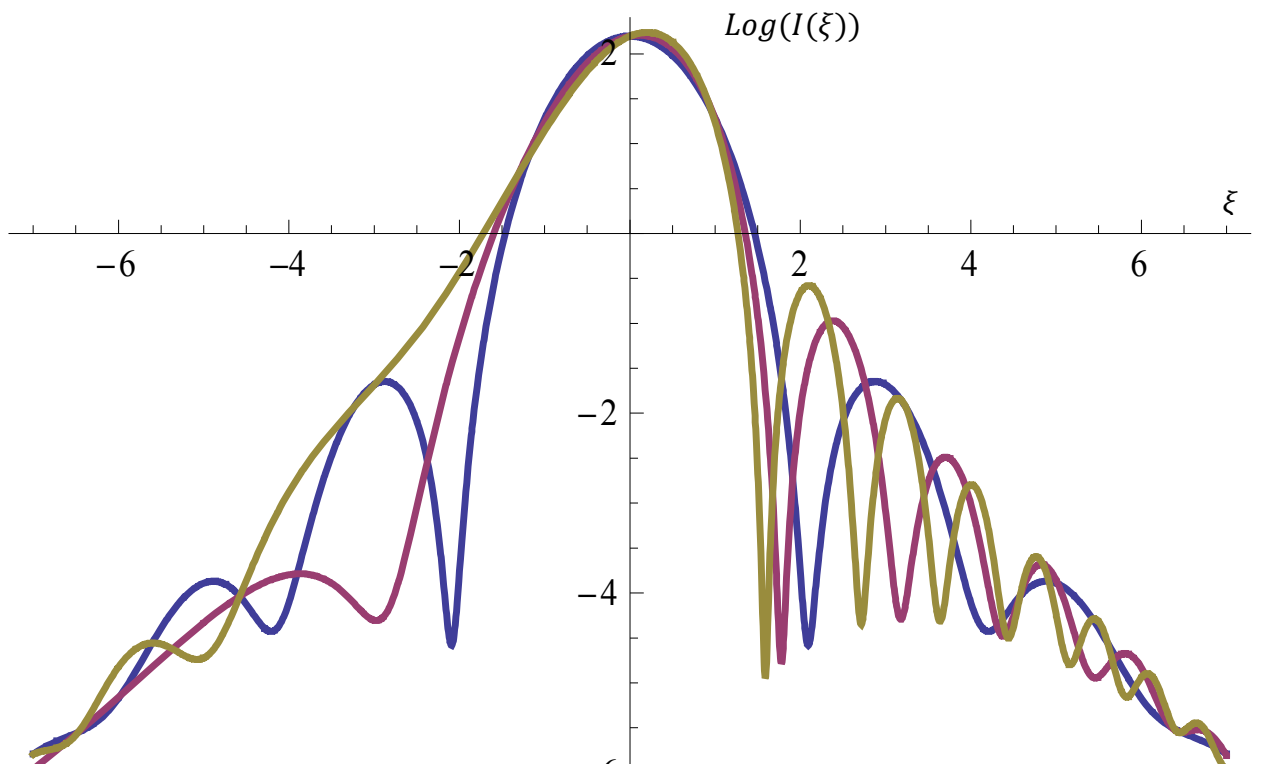


Рис 15 Зависимость модельной интенсивности рассеяния при различных α $c = 1, d = 3, A = 1, \sigma_1 = 0.4, \sigma_2 = 0.2, \alpha_1 = 0$ (синяя линия), $\alpha_2 = 0.3$ (малиновая линия), $\alpha_3 = 0.6$ (бежевая линия)

На рис 15 видно, какую именно не симметрию вносит параметр α . Слева от нуля он как бы растягивает функцию, т.е. увеличивает ее период, а справа от нуля он ее сжимает, т.е. уменьшает период. Чем больше значение параметра, тем больше проявляется этот эффект.

Такие большие значения как на рис 15 не надо использовать, они приведены для того, что бы понять какая зависимость интенсивности от параметра α .

4.2 Модифицированная логистическая пиковая функция

Согласно предложенному подходу в пункте 4, построим модифицированную логистическую пиковую функцию, изменив ее так, что бы построенная на ней интенсивность рассеяния обладала асимметрией. Для этого необходимо взять обратное Фурье преобразование. В качестве искажающей симметрию фазы возьмем, как и в прошлый раз величину $\alpha\xi^2$. В качестве амплитуды берется амплитуда Фурье образа стандартной логистической функции.

$$\tilde{y}(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\sqrt{3}\xi e^{\alpha i \xi^2}}{\text{Sh}(\sqrt{3}\xi)} e^{-ix\xi} d\xi \quad (43)$$

К сожалению, интеграл (43) не берется аналитически и не выражается через элементарные функции. С логистической пиковой функцией можно работать только численно.

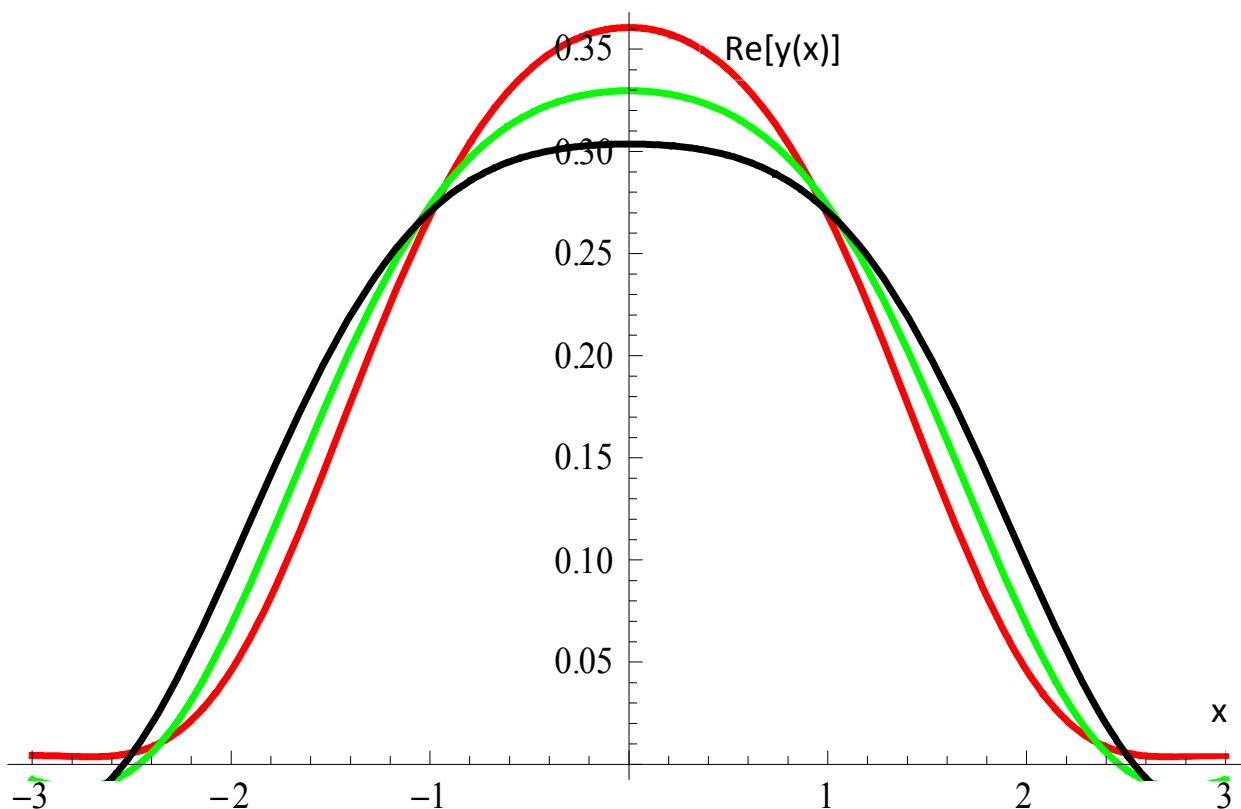


Рис 16 Зависимость действительной части модифицированной логистической пиковой функции при различных α $\alpha_1 = 0.3$ (красная линия), $\alpha_2 = 0.4$ (зеленая линия), $\alpha_3 = 0.5$ (черная линия)

На рис изображена зависимость действительной части модифицированной логистической пиковой функции при различных значениях параметра α , вычисление интеграла (43) осуществлялось численно. Конечно, численные вычисления сильно затрудняют счет, возрастает время расчетов и необходимые для этого ресурсы, однако логистическая пиковая функция представляет большой интерес, так как имеет разную степень спада вблизи нуля и вдали. Вычисление этих трех графиков на процессоре AMD Turion™ 64 Mobile Technology 2.0GHz с 2 Гбайтами оперативной памяти заняло чуть больше минуты.

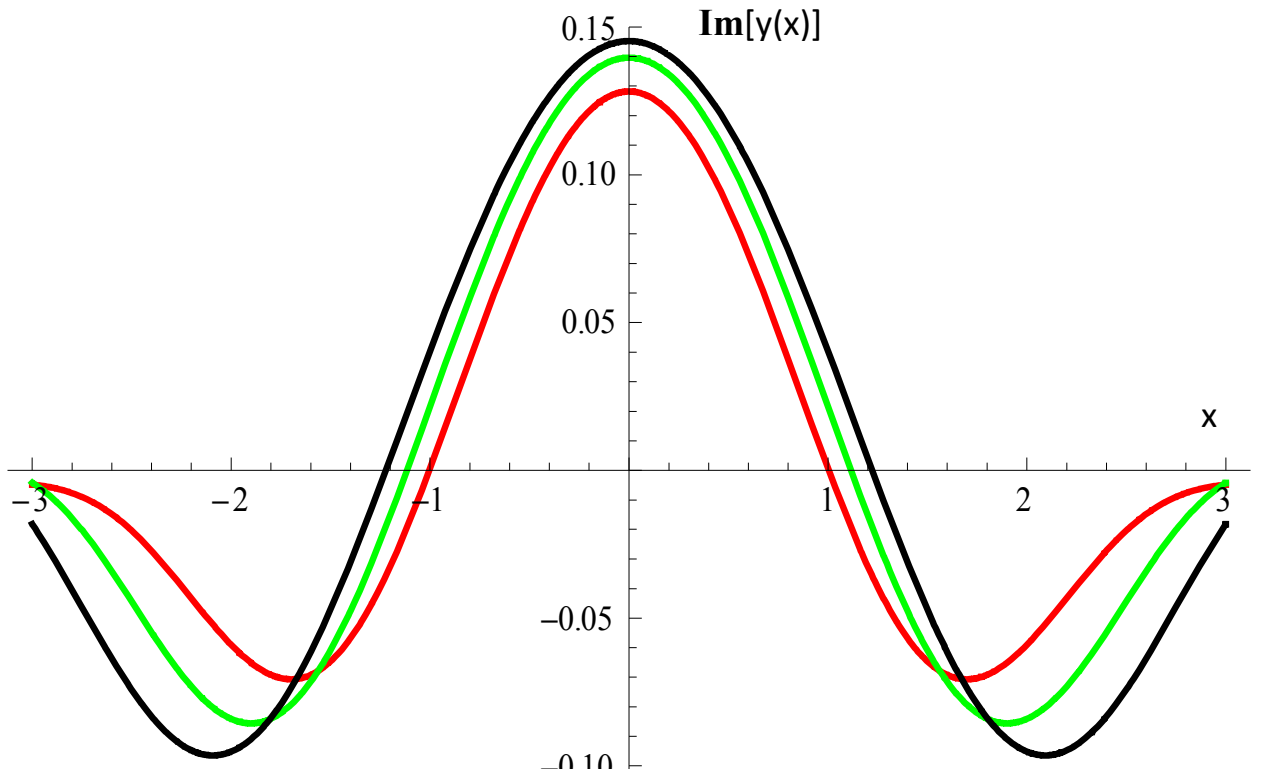


Рис 17 Зависимость мнимой части модифицированной логистической пиковой функции при различных α $\alpha_1 = 0.3$ (красная линия), $\alpha_2 = 0.4$ (зеленая линия), $\alpha_3 = 0.5$ (черная линия)

На рис изображена зависимость мнимой части при различных значениях параметра α . Параметр α играет точно такую же роль, как в модифицированной функции Гаусса. Во-первых, он вносит асимметрию, во-вторых, он количественно описывает степень деформации моно слоев в тонких пленках. Параметр α вносит вклад, как в симметричную часть интенсивности, так и в антисимметричную, и так же влияет на пиковую функцию, т.е. вносит вклад, как в действительную часть, так и в мнимую. Он так же не должен принимать большие значения, чтобы построенная нами функция оставалась пиковой, а это означает, что мы так же рассматриваем только малые одноосные деформации. Ось деформирования расположена перпендикулярно слоям в тонкой пленке.

Несмотря на то, что (43) не удастся взять численно, мы все равно избегаем численного интегрирования в задачи минимизации. Преимущество в том, что обычная логистическая пиковая функция имеет аналитическое выражение для Фурье образа, а модифицированную мы строим сами используя ее образ, поэтому в выражении (9) все величины имеют аналитическое выражение. Трудности численного интегрирования возникают только при построении функции профиля по уже найденным параметрам пиковых функций, но это проблема куда более проста по сравнению с численным интегрированием в задачи минимизации (14).

На рис изображена зависимость модельной интенсивности построенной на модифицированной логистической пиковой функции при различных значениях параметра α .

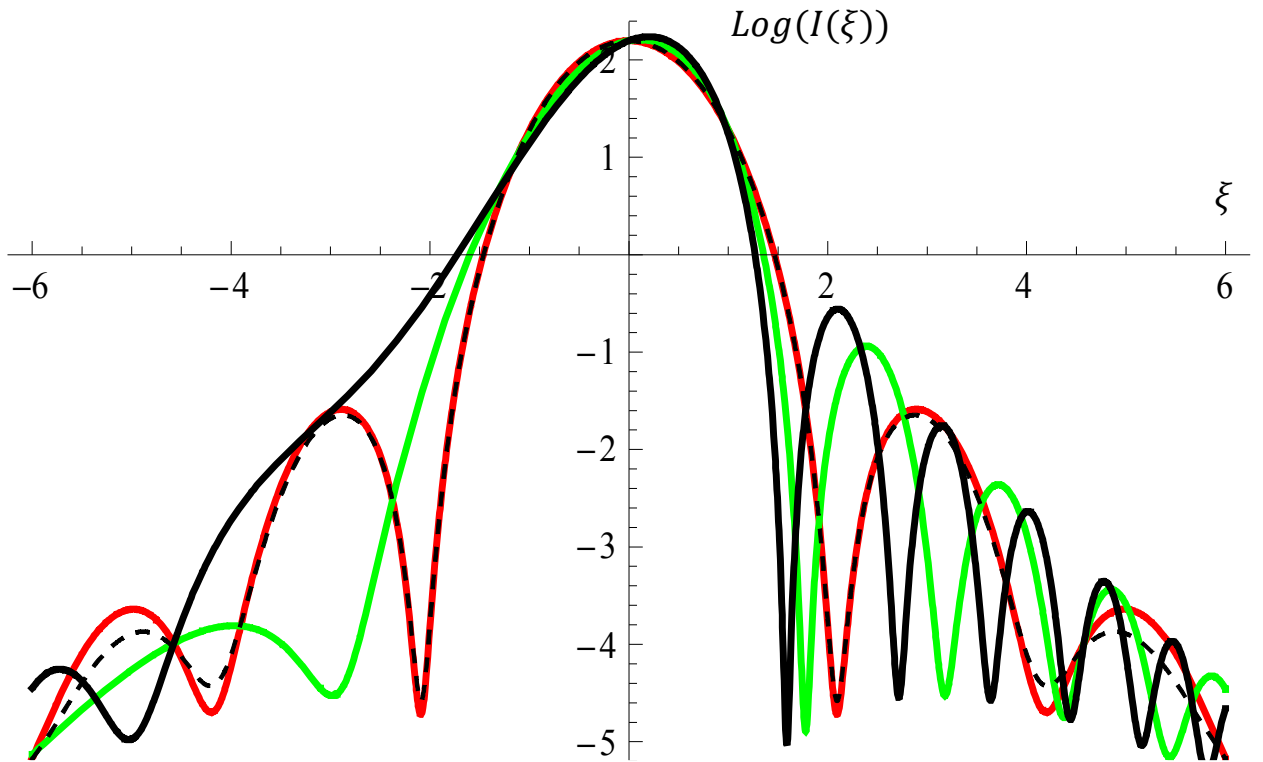


Рис 18 Зависимость модельной интенсивности построенной на модифицированных логистических пиковых функциях при различных α $\alpha_1 = 0.0$ (красная линия), $\alpha_2 = 0.3$ (зеленая линия), $\alpha_3 = 0.6$ (черная линия) пунктирной линией изображена интенсивность построенная по модифицированной функции Гаусса

Пунктирной линией изображена зависимость модельной интенсивности для функции Гаусса. Можно провести полную аналогию с модифицированной функцией Гаусса.

Из рисунка 18 следует, что логистические пиковые функции лучше описывают симметричные интенсивности, так как они спадают более плавно.

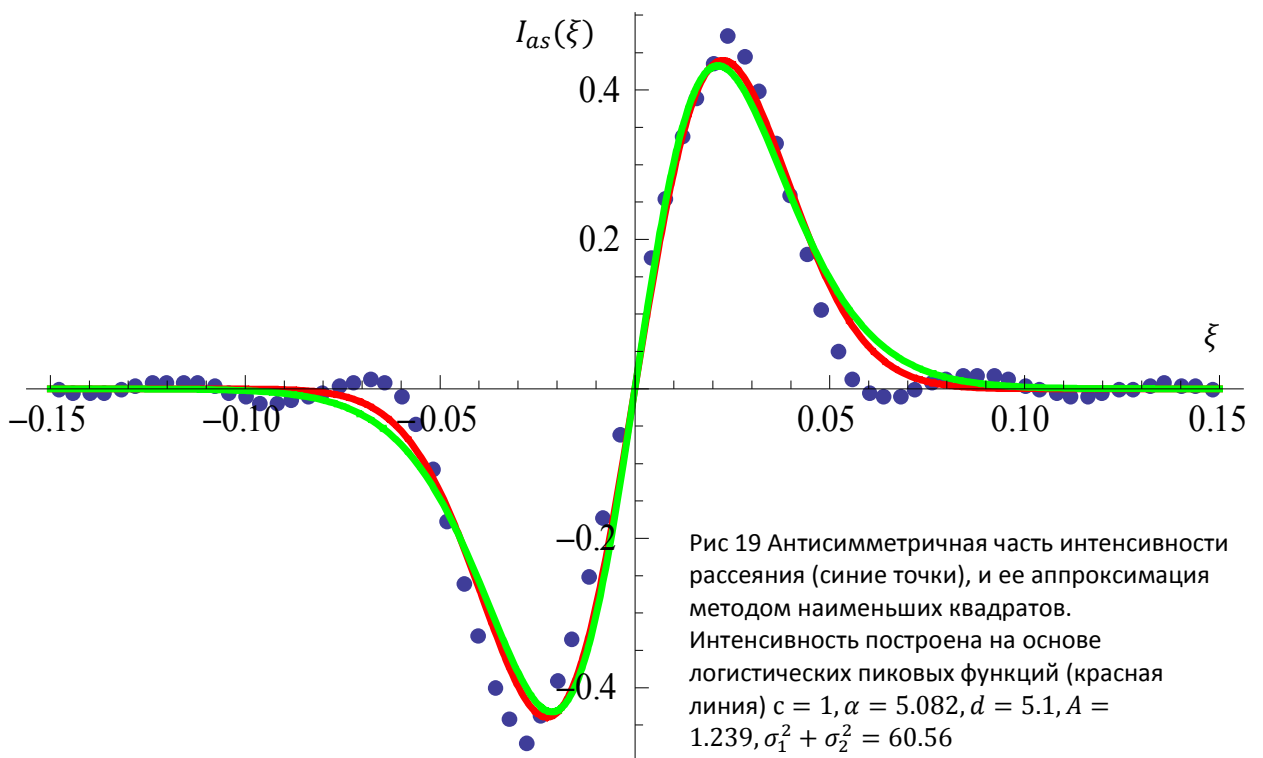


Рис 19 Антисимметричная часть интенсивности рассеяния (синие точки), и ее аппроксимация методом наименьших квадратов. Интенсивность построена на основе логистических пиковых функций (красная линия) $c = 1, \alpha = 5.082, d = 5.1, A = 1.239, \sigma_1^2 + \sigma_2^2 = 60.56$

Аппроксимация не симметричной части изображена на рис 19. Аппроксимация проводилась методом наименьших квадратов, как и в предыдущем случае, численная схема минимизации совсем не поймала вторичные всплески. Как видно из рисунка антисимметричная часть модельной интенсивности одинакова для модифицированных функций Гаусса и логистических пиковых функций.

Для того что бы поймать вторичные пики жестко зафиксируем параметр d . На след рисунке 20 изображена аппроксимация антисимметричной части интенсивности при упомянутом выше условии.

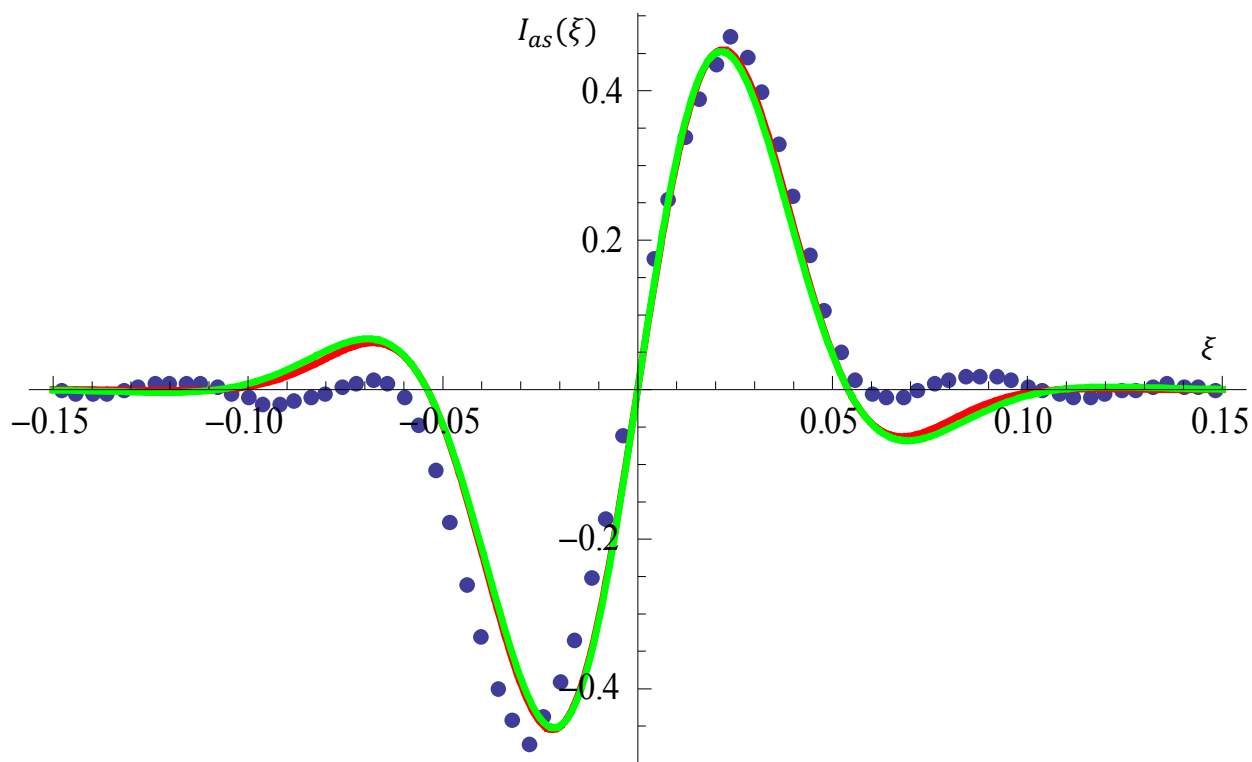


Рис 20 Антисимметричная часть интенсивности рассеяния (синие точки), и ее аппроксимация методом наименьших квадратов. Интенсивность построена на основе логистических пиковых функций (красная линия) $c = 1, \alpha = 10.082, d = 58.1, A = 0.239, \sigma_1^2 + \sigma_2^2 = 40.56$

В заключении можно отметить, что при описании антисимметричной части интенсивности рассеяния нет большой разности какие пиковые функции использовать, основным механизмом описания является метод их модификации, с помощью которого они становятся комплексными и имеют несимметричную модельную интенсивность.

5. Выводы

1. Проанализирована рассмотренная ранее симметричная модель восстановления профиля по известной интенсивности рассеяния рентгеновских лучей.

- рассмотрены пиковые функции Гаусса;
- рассмотрены логистические пиковые функции, которые более лучше описывают профиль тонких пленок;
- найдены дополнительные соотношения, которые могут априорно оценить искомые параметры моделируемой интенсивности;
- найдены ограничения на применения симметричной модели;
- показано что функции Гаусса не описывают весь спектр реальных симметричных интенсивностей;
- получена аппроксимации экспериментальных интенсивностей, модельными интенсивностями, построенными на функциях гаусса и логистических пиковых функциях.

2. Предложена модель восстановления профиля тонких пленок по известной, несимметричной интенсивности рассеянная рентгеновских лучей.

- предложенная общая модель с использование комплекснозначной пиковой функции;
- рассмотрен самый простой случай – добавление к фазе квадратичного члена, получены общие представления на возможные модификации фазы Фурье образа пиковой функции
- построена модифицированная функция Гаусса;
- построена модифицированная логистическая пиковая функция, которая исследована численно, так как, к сожалению, аналитического вида, даже в самом простом случае добавления квадратичного члена, она не имеет.
- получена аппроксимации экспериментальных интенсивностей, модельными интенсивностями, построенными на модифицированных функциях гаусса и модифицированных логистических пиковых функциях.

Список литературы

- [1] С. Ю. Славянов, Х. Дош, Метод локальных пиковых функций для восстановления оригинального профиля в преобразовании Фурье, Теоретическая и математическая физика, том 131, N1, апрель, 2002
- [2] S. Slavyanov, H Dosh, Analytic modeling for x-ray scattering in thin films“, Max-Planck-Institute fur Metallforschung, Stuttgart, 2001.
- [3] S. Slavyanov, C. Ern, H. Dosh, (2000), in Proceeding of the conference “Day on Diffraction 2000”, St.-Petersburg, p. 161-167.
- [4] Трепков Р. В. Магистерская работа «Численное и асимптотическое моделирование рассеяния рентгеновских лучей на тонких пленках» 2002г.
- [5] Акопян А. Решение задачи глобальной оптимизации при помощи генетических алгоритмов, январь 1999
- [6] H. Dosh, Critical Phenomena at Surface and Interfaces, Springer Tracts in Modern Phisics, vol. 126 (Springer, Berlin 1992)
- [7] I. Vartanyants, C. Ern, W. Donner, H. Dosh, W. Caliebe Strain profiles in epitaxial films from x-ray Bragg diffraction phases, Applied Phisics Letters, vol. 77, num. 24, 2000
- [8] Яновская Т.Б., Порохова Л.Н. Обратные задачи геофизики, 2004
- [9] Шадан К., Сабатье П. Обратные задачи в квантовой теории рассеяния. М. Мир, 1980г. 408с
- [10] В. Ю. Теребиж. Введение в статистическую теорию обратных задач, Физматлит 2005
- [11] В. М. Бабич, В. С. Булдерев, И. А. Молотков 1-я Всесоюзная школа-семинар по дифракции и распространению волн Москва-Харьков, 1968
- [12] Л.А. Гладков, В.В. Курейчик В.М. Курейчик Генетические алгоритмы, Москва физматлит, 2006