

РЕАЛИЗАЦИЯ 3D ПРЕОБРАЗОВАНИЯ ФУРЬЕ ДЛЯ РАСЧЕТА ДИФРАКЦИИ ЛАЗЕРНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ НА КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ СТРУКТУРАХ

О.А. Моссоулина

Самарский государственный аэрокосмический университет имени академика С.П. Королёва (национальный исследовательский университет) (СГАУ), Самара, Россия

Рассмотрено преобразование Фурье для моделирования кристаллических структур с помощью функции Гаусса от многих переменных.

Ключевые слова: Преобразование Фурье, кристаллическая решетка, квазикристаллы, функция Гаусса

Введение

Кристаллы привлекали людей с давних времен. Одни из первых серьезных достижений в области кристаллографии принадлежат французскому минералогу Рене Джюст Гаюи, который в начале 19 века вывел геометрический закон кристаллизации [1], в котором говорится о периодичности структуры кристалла.

Это повлекло за собой ряд научных исследований природы кристаллической решетки.

Важным событием в 1913 году стало открытие Уильямом Генри и Уильямом Лоуренсом Брэггом, что для исследования положения атомов внутри кристалла, а главное, его трёхмерной структуры могут быть использованы рентгеновские лучи [2].

В конце 20 века было открыт новый вид твердого вещества, которые также как и кристаллы обладают дискретной дифракционной картины, однако при этом обладают запрещенной симметрической структурой – квазикристаллы [3,4].

Задача расчета дифракции на кристаллических структурах может быть сведена к выполнению 3D преобразования Фурье [5, 6].

Актуальность реализации прямого метода расчета картины дифракции на кристаллической структуре связана с появлением большого разнообразия новых искусственных кристаллов - квазикристаллов, для которых актуальны не только трехмерные, но и 2-х, и даже одномерные структуры [7, 8].

В данной статье рассматриваются реализации одномерного, двумерного и трёхмерного преобразования Фурье для Гауссова пучка.

1 Расчетные формулы

Рассмотрим преобразование Фурье:

$$F(\xi) = \mathfrak{F}[f(x)](\xi) = \int_R f(x) \exp(-2\pi i x \xi) dx, \quad (1)$$

где $f(x)$ - входная функция от одной переменной, $F(\xi)$ - полученная выходная функция, $\mathfrak{F}[f(x)](\xi)$ - оператор преобразования Фурье.

Тогда в двумерном случае он запишется таким образом:

$$\begin{aligned} F(\xi, \eta) &= \mathfrak{F}[f(x, y)](\xi, \eta) = \\ &= \iint_{R^2} f(x, y) \exp[-2\pi i(x\xi + y\eta)] dx dy, \end{aligned} \quad (2)$$

где $f(x, y)$ - входная функция от двух переменных.

В случаи функции от трёх переменных преобразование Фурье будет выглядеть следующим образом:

$$\begin{aligned} F(\xi, \eta, \zeta) &= \mathfrak{F}[f(x, y, z)](\xi, \eta, \zeta) = \\ &= \iiint_{R^3} f(x, y, z) \exp[-2\pi i(x\xi + y\eta + z\zeta)] dx dy dz, \end{aligned} \quad (3)$$

где $f(x, y, z)$ - входная функция от трёх переменных.

Рассмотрим суперпозицию Гауссовых пучков одного распределения со сдвигом x_p :

$$f(x) = \sum_{p=1}^p c_p \exp\left[-\frac{(x-x_p)^2}{\sigma^2}\right], \quad (4)$$

где x_p и σ - некоторые вещественные числа.

Рассчитаем преобразование Фурье от функции (4), таким образом, получаем:

$$F(\xi) = \sigma\sqrt{\pi} \exp(-\pi^2 \xi^2 \sigma^2) \sum_{p=1}^p c_p \exp(2\pi i x_p \xi). \quad (5)$$

Аналогично, получаем в двумерном и трёхмерном случаях.

$$\begin{aligned} F(\xi, \eta) &= \sigma\sqrt{\pi} \exp(-\pi^2 (\xi^2 + \eta^2) \sigma^2) \times \\ &\times \sum_{p=1}^p c_p \exp[2\pi i(x_p \xi + y_p \eta)]. \end{aligned} \quad (6)$$

$$\begin{aligned} F(\xi, \eta, \zeta) &= \sigma\sqrt{\pi} \exp(-\pi^2 (\xi^2 + \eta^2 + \zeta^2) \sigma^2) \times \\ &\times \sum_{p=1}^p c_p \exp[-2\pi i(x_p \xi + y_p \eta + z_p \zeta)]. \end{aligned} \quad (7)$$

2 Результаты моделирования

В данной статье была разработана программа, в которой была промоделирована входная суперпозиция Гауссовых пучков одномерного, двумерного и трёхмерного распределений со сдвигом, а так же их модуль преобразования Фурье.

На рис. 1 показано изображение входных Гауссовых симметрично-разнесённых пучков одинакового размера. На выходе была получена интерференцированная картина от этих двух разнесённых пучков (рис. 2).

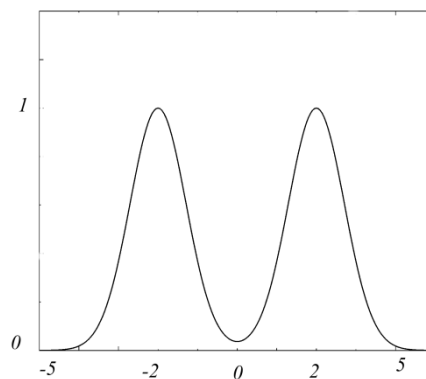


Рис.1. Входное одномерное распределение в виде суперпозиции функций Гаусса

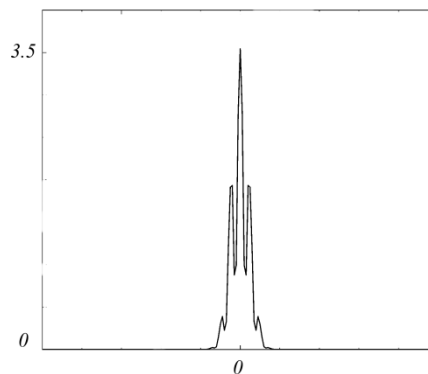


Рис.2. Модуль преобразования Фурье от одномерного распределения, показанного на рис. 1

На рис. 3 и 4 соответственно показаны результаты моделирования для двумерного случая. Входные данные представлены в виде двумерной ячейки с Гауссовыми пучками, разнесённых на одинаковое расстояние с поворот на 45° . В результате получившийся спектр выглядит как интерференция от четырёх точек.

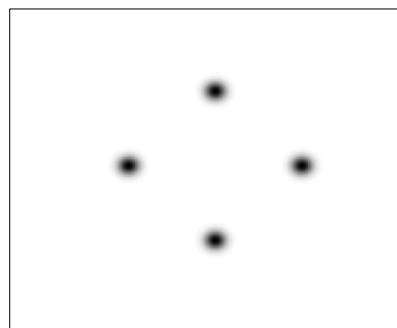


Рис.3. Входное двумерное распределение в виде суперпозиции функций Гаусса с поворот на 45°

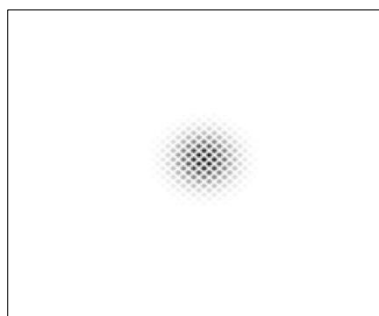


Рис.4. Модуль преобразования Фурье от двумерного распределения, показанного на рис. 3

Визуализация для трёхмерного случая была выполнена с помощью программного пакета ParaView, который позволяет изобразить 3D вид входной суперпозиции Гауссовых пучков, расположенных в вершинах куба (рис. 5), а так же получившуюся интерференционную картину (рис. 6).

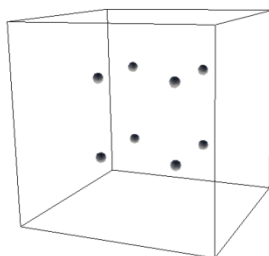


Рис.5. Входного трёхмерное распределение в виде суперпозиции функций Гаусса

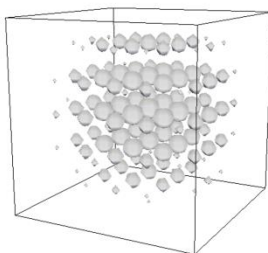


Рис.6. Модуль преобразования Фурье от трёхмерного распределения, показанного на рис. 5 (приближение 14:1)

Заключение

В работе выполнена программная реализация одномерного, двумерного и трёхмерного преобразования Фурье. С помощью разработанных программ выполнен расчет преобразования Фурье для тестовых распределений в виде суперпозиции смещенных гауссовых пучков. Результаты численного моделирования совпадают с аналитическими выкладками. Разработанные программы планируется в дальнейшем использовать для моделирования дифракции на объемных структурах.

Благодарности

Работа выполнена при поддержке Министерства образования и науки РФ.

Литература

1. Haüy, R. J. Essai d'une Théorie sur la Structure des Crystaux // Gogué et Née de La Rochelle, 1784.
2. Nature Milestones in Crystallography. - 2014. <http://www.nature.com/milestones/milecrystal/index.html>
3. Steinhardt, D. L. and Steinhardt, P. J. Quasicrystals: A New Class of Ordered Structures // Physical Review Letters, 1984, vol. 53, 2477–2480 p.
4. Lidin S. The Discovery of Quasicrystals // Scientific Background on the Nobel Prize in Chemistry, 2011.
5. Харитонов, С.И. Дифференциальный метод расчёта дифракции рентгеновских лучей на кристалле: скалярная теория / С.И. Харитонов, С.Г. Вологовский, С.Н. Хонина, Н.Л. Казанский // Компьютерная оптика. – 2015. – Т. 39, № 4. С. 469-479.
6. Kharitonov, S.I. Calculating x-ray diffraction on crystals by means of the differential method / S.I. Kharitonov, N.L. Kazansky, S.G. Volotovskiy, S.N. Khonina // Proceedings SPIE. – 2016. – V. 9807. – P. 98070V.
7. Buczek, P. Periodic diffraction patterns for 1D quasicrystals / P. Buczek, L. Sadun, J. Wolny // Acta Physica Polonica B. – 2005. - vol. 36, No. 3.
8. Ferralis, N. Diffraction from one- and two-dimensional quasicrystalline gratings / N. Ferralis, A. W. Szmodis, and R. D. Diehl // American Journal of Physics - 2004, vol. 72, 1241.