arXiv:2601.06340v1 [physics.optics] 9 Jan 2026

使用光束传播法求解变形晶体动力学衍射问题的模拟软件包。

示例：布拉格、劳厄几何、非对称反射、弯曲晶体、位错、任意形状和应变分布的晶体，以及时间依赖问题

Jacek Krzywinski[a,b] 和 Aliaksei Halavanau[a]

[a]SLAC国家加速器实验室，美国加利福尼亚州门洛帕克市 Sand Hill Road 2575号，邮编 94025b</style}国家核研究中心，波兰 Otwock-´Swierk，A. So-ltana 路7号

摘要

我们展示了如何使用快速傅里叶变换光束传播法（FFT BPM）模拟动态衍射效应，包括布拉格、劳厄和非对称几何结构中任意形状变形晶体的散射。该方法的算法简明，并结合快速傅里叶变换实现快速计算，且易于用 Python 实现。它成功复现了文献中使用 Takagi–Taupin方程模拟弯曲晶体、位错和有限形状晶体所得的结果。我们在公开的 GitHub 仓库中提供了每种情况的 Python 实现，代码采用并行计算结构。

关键词： 动力学衍射；傅里叶光学；光束传播法。

1. 引言

最近，我们开发了一种新方法，利用快速傅里叶变换光束传播法（FFT BPM）求解畸变晶体中的时变动力学衍射问题。我们关于这一主题的论文[1]着重介绍了理论方法，并给出了若干布拉格几何结构中的示例。本文将更详细地介绍我们理论的数值实现及其 Python 实现。该实现针对并行计算进行了优化，Python 代码可在公开的 GitHub 仓库中获取。[2]

我们还将展示一些示例，包括模拟布拉格、劳厄和非对称几何结构中任意形状变形晶体的散射。涉及弯曲晶体和含位错晶体的示例说明，使用 FFT BPM 方法模拟动力学衍射时，如何考虑晶体内部的非均匀应变分布。我们对代码进行了基准测试，成功复现了文献中使用 Takagi–Taupin方程模拟弯曲晶体、位错和有限形状晶体所得的结果。

为保　持连贯性，我们将重复先前论文中的部分章节，以维持阅读的流畅性　　.

2. 理论方法

恒定角频率 ω下的标量亥姆霍兹方程：

$$\left(\nabla^2 + k(n(x,y,z))^2\right) E(x,y,z) = 0 \tag{1}$$

可写成如下形式：[3,4]

$$\frac{d\psi}{d\hat{z}} = i\left(\sqrt{1+\nabla_\perp{}^2 - \delta\epsilon(\hat{x},\hat{y},\hat{z})} - 1\right)\psi \tag{2}$$

作者补充信息：（请联系 J. Krzywinski）J. Krzywinski：电子邮箱：krzywins@gmail.com A. Halavanau：电子邮箱：aliaksei@slac.stanford.edu

其中，$\hat{x}$、$\hat{y}$、$\hat{z} = kx$、ky、kz、k为波矢，$\nabla_\perp{}^2$为关于横向坐标$\hat{x}$、$\hat{y}$的拉普拉斯算子，$\delta\epsilon(\hat{x}$、$\hat{y}$、$\hat{z})$ $= n(\hat{x}$、$\hat{y}$、$\hat{z})^2 - \bar{n}^2$，$n(\hat{x}$、$\hat{y}$、$\hat{z})$为折射率，$\bar{n}$为其平均值，且$E(x$、y、$z)$ $= \psi(x$、y、$z)e^{-ikz}$。对于角谱较窄的光束，该方程可近似为：

$$\frac{d\psi}{d\hat{z}} = i\left(\sqrt{1+\nabla_\perp{}^2} - \frac{\delta\epsilon(\hat{x},\hat{y},\hat{z})}{2\sqrt{1-\langle k_x^2+k_y^2\rangle}} - 1\right)\psi \tag{3}$$

这里，$\sqrt{1+\nabla_\perp{}^2}$右端第二项分母中的算符被近似为$\sqrt{1-\langle k_x^2+k_y^2\rangle}$其中，$\langle k_x^2+k_y^2\rangle$是平均角谱，$k_x^2+k_y^2 = F[\nabla_\perp{}^2]$是 $\nabla_\perp{}^2$ 算符的傅里叶变换。式（3）导出以下 FFT BPM 方程：

$$\psi(\hat{x},\hat{y},\hat{z}+\Delta\hat{z}) \approx F^{-1}\left\{F\left[\psi(\hat{x},\hat{y},\hat{z})\right]e^{i\Delta\hat{z}\sqrt{1-k_x^2-k_y^2}}\right\}e^{i\Delta\hat{z}\frac{\delta\epsilon(\hat{x},\hat{y},\hat{z})}{2\cos\alpha}} \tag{4}$$

其中，F和 F^{-1}分别表示傅里叶变换和逆傅里叶变换，$\cos\ \alpha = \sqrt{1-\langle k_x^2+k_y^2\rangle}$。角度 α对应于相对于传播方向的掠入射角。我们此前已应用式（4）来考虑使用光栅和多层光学元件模拟X射线束相互作用时的动态衍射效应。[5–8]

在一大类动态衍射问题中，散射 X 射线束的角谱由两个狭窄频带组成，分别以入射角和反射角为中心。有意义的信息包含在这些频带内。可以从物理图像中去除与晶面间距相关的快速振荡分量，并推导出适用于透射光束和反射光束缓变包络的 FFT BPM 方程。为简单起见，我们考虑二维 $(x,\ z)$ 情形，推广到三维情形也很直接。具体步骤如下。首先，可以将散射 X 射线场写成两个分量之和：

$$\psi(\hat{z},\hat{x}) = \psi(\hat{z},\hat{x})_+ + \psi(\hat{z},\hat{x})_-. \tag{5}$$

然后定义缓变包络如下：

$$\widetilde{\psi}(\hat{z},\hat{x})_+ = \psi(\hat{z},\hat{x})_+e^{-i\frac{k_d}{2}\hat{x}},\quad \widetilde{\psi}(\hat{z},\hat{x})_- = \psi(\hat{z},\hat{x})_-e^{i\frac{k_d}{2}\hat{x}} \tag{6}$$

其中 k_d 是与晶面间距相关的倒易矢量。接下来，将式（4）中与介电磁化率相关的指数项展开为：

$$e^{i\hat{z}\frac{\delta\epsilon(\hat{z},\hat{x})}{2cos\alpha}} = \sum_{n=-\infty}^{+\infty}\Delta\epsilon(\hat{z},\hat{x})_n e^{ik_d n\hat{x}} \tag{7}$$

当参与反射的晶面垂直于 x轴时，可以将式（ $\delta\epsilon(\hat{z},\ \hat{x})$）中的量描述为以晶面间距为周期的复谐函数：

$$\delta\epsilon(\hat{z},\hat{x}) = \chi_0 + 2\chi_h\cos k_d\hat{x} \tag{8}$$

以及 $\chi_0 = \chi_{0r} + i\chi_{0h}$和 $\chi_h = |\chi_{rh}| - i|\chi_{ih}|$。复振幅由 χ_{0r}、χ_{0h}、χ_{rh}和 χ_{ih}组成，例如可以在网页“在线 X 射线动态衍射数据”（https://x- server.gmca.aps.anl.gov/x0h.html）或 XOP X 射线光学软件工具包中找到这些数据。[9]

应用雅可比–安格尔展开：$e^{iw\ 余弦^\theta} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} i^n J_n(w)e^{in\theta}$方程（7）中的前三个展开项可写成以下形式：

$$\Delta\epsilon_0 = J_0\left(z\frac{\chi_h}{\cos\alpha}\Pi(x,z)\right)e^{\frac{iz}{2\cos\alpha}\chi_0\Pi(x,z)} \tag{9}$$

$$\Delta\epsilon_1 = \Delta\epsilon_{-1} = iJ_1\left(z\frac{\chi_h}{\cos\alpha}\Pi(x,z)\right)e^{\frac{iz}{2\cos\alpha}\chi_0\Pi(x,z)} \tag{10}$$

其中 $\Pi(x,\ z)\ =1$ i 在晶体内部，以及在晶体外部的 $\Pi(x,z)\ =0$ ，其中 $J_n(w)$ 为贝塞尔函数 s.

我们将晶体的形变视为极化率的改变：[10]

$$\Delta\epsilon_n^{'}(\hat{z},\hat{x}) = \Delta\epsilon_n(\hat{z},\hat{x})e^{in\mathbf{k_d}\mathbf{u}(\hat{z},\hat{x})} \tag{11}$$

其中 $\mathbf{k_d}\mathbf{u}$ 是倒易矢量与位移矢量的标量积。注意，根据定义，$\mathbf{k_d}$ 与$\hat{}x$ 平行，因此仅使用$\mathbf{k_d}$ 的 x分量。

我们的先前的论文[1] 已表明，对于缓慢变化的~ ~包络 $\psi(\hat{}z,\ \hat{}x)_+$ 和 $\psi(\hat{}z,\ \hat{}x)_-$，可以得到以下方程组：

$$\begin{aligned}\widetilde{\psi}(\hat{z}+\Delta\hat{z},\hat{x})_+ &= \widetilde{\psi}(\hat{z},\hat{x})_{p+}\Delta\epsilon_0(\hat{z},\hat{x}) + \widetilde{\psi}(\hat{z},\hat{x})_{p-}\Delta\epsilon_{+1}^{'}(\hat{z},\hat{x})\\ \widetilde{\psi}(\hat{z}+\Delta\hat{z},\hat{x})_- &= \widetilde{\psi}(\hat{z},\hat{x})_{p-}\Delta\epsilon_0(\hat{z},\hat{x}) + \widetilde{\psi}(\hat{z},\hat{x})_{p+}\Delta\epsilon_{-1}^{'}(\hat{z},\hat{x}),\end{aligned} \tag{12}$$

其中 $\widetilde{\psi}(\hat{}z,\ \hat{}x)_{p\pm} = F^{-1}\left[F\left[\widetilde{\psi}(\hat{}z,\ \hat{}x)_\pm\right]p_\mp\right]$。算子 $p_\pm = e^{i\Delta\hat{z}\sqrt{1-(k_x\pm\frac{k_d}{2})^2}}$对应于的傅里叶像，该像在角谱空间中平移了。方程（4）可改写为算子形式：

$$\begin{aligned}\psi(\hat{x},\hat{y},\hat{z}+\Delta\hat{z}) &\approx \prod_i A(a_i\Delta_z)B(b_i\Delta_z)\psi(\hat{x},\hat{y},\hat{z}),\\ A &= F^{-1}\left\{F\left[\psi(\hat{x},\hat{y},\hat{z})\right]e^{ia_i\Delta\hat{z}\sqrt{1-k_x^2-k_y^2}}\right\},\\ B &= e^{ib_i\Delta\hat{z}\frac{\delta\epsilon(\hat{x},\hat{y},\hat{z})}{2\cos\alpha}}.\end{aligned} \tag{13}$$

对于一阶分裂，当 $a_1=1, b_1=1$ 时，式 (13) 可简化为式 (4)。对于大多数实际问题，这种分裂方案具有足够的精度。高阶分裂可提高 FFT BPM 在布拉格角较大时的效率。例如，当 $a_1=0.0, a_2=1.0, b_1=0.5, b_2=0.5$ 时，式 (13) 的精度可达 $O(\Delta z^2)$；当 $t=1.3512, a_1=0.0, a_2=t, a_3=1-2t, a_4=t, b_1=t/2, b_2=(1-t)/2, b_3=(1-t)/2, b_4=t/2$ 时，其精度可达 $O(\Delta z^4)$；见.[11]

.

我们指出，式 (12) 可视为 FFT BPM 的双光束近似。这些方程类似于双光束近似下的高木-陶品方程（TTE）。[10] 然而，TTE 与 FFT BPM 方程之间存在显著差异。TTE 方程组是双曲型方程组，其中忽略了光束传播方向上横向的二阶导数。因此，TTE 的表述未考虑 X射线的衍射。文献中介绍的 TTE 数值求解算法通常需要设置边界条件。在复杂几何结构中，或边界定义不明确时，这本身可能就是一个难题。另一方面，FFT BPM 方程组是抛物型方程组，能够自动包含衍射。此外，正如我们先前提到的，FFT BPM方法在处理复杂形状或非均匀边界时尤其方便。

3. 数值实现

该算法封装在一个类中；用户通过提供配置文件（YAML 格式）来运行一个仿真实例，例如指定入射角和/或波长。由于大多数衍射问题都是“线性的”，原则上所有实例都可以并行计算。输入配置文件提供了主要的输入模拟参数和数据：光子能量、晶体学数据、电极化率、晶体几何结构、数值网格参数、积分方法及其参数、X射线束特性、晶体形变数据和程序设置。

对于布拉格几何等简单情况，可以直接在配置文件中定义晶体边界；也可以通过额外的 Jupyter 笔记本生成掩模并将其保存到文件中。我们已

提供了后一种方法的示例，用于模拟非对称反射，以及长方体形、立方体形和半球形三维有限晶体的散射。

用户通过 Jupyter 笔记本或用户脚本（类似于 SRW 方法）与代码进行交互。Python 脚本分为三类：[2] XBPM、XCrystal 和 XCrTools

先前的论文中的主要传播方程，即公式（9–14），[1] 已编码在 XBPM类中。 XCrTools 类用于配置入射 X 射线束，并提供进行快速傅里叶变换、填充、裁剪、插值等操作所需的数值工具。 XCrystal 类整合 YAML 配置文件中提供的参数和数据，并创建主要的 'run3D()' 函数。'run3D()' 可用于定义单个实现的反射对象，该对象可与具有不同参数（例如光子能量、入射角等）的其他反射并行计算。因此，摇摆曲线或含时衍射的计算可以作为一个极易并行化的问题来实现。

4. 劳厄几何中的反射模拟与非对称反射

前文展示了对称布拉格反射情形的模拟。现在，我们来考虑光子能量为 9.831 千电子伏特时，金刚石晶体在 (400)反射下的劳厄几何。晶体呈平板状。我们将 s 轴定义为垂直于晶体表面的方向。 s 轴相对于晶面的取向由配置 YAML 文件中的 $asymm\ angle$ 参数定义。布拉格几何对应 $asymm\ angle = 0\ deg$ ，劳厄几何对应 $asymm\ angle = 90\ deg$。

劳厄几何下反射模拟的示例在一个 Jupyter笔记本中实现，可在 `example` 子目录中找到，该子目录位于 Crystal-fft-bpm GitHub 仓库中。[2] 相应的配置文件位于 `config` 子目录中。模拟结果如图 1 所示。模拟了两种情况：入射光束以布拉格角入射（左上），以及以布拉格角 $+1。5\ \mu$弧度入射（右上）。

Jupyter笔记本和配置文件的名称为：

- SingleRealization C400 Laue.ipynb
- C400 9p8keV LaueFig1.yaml

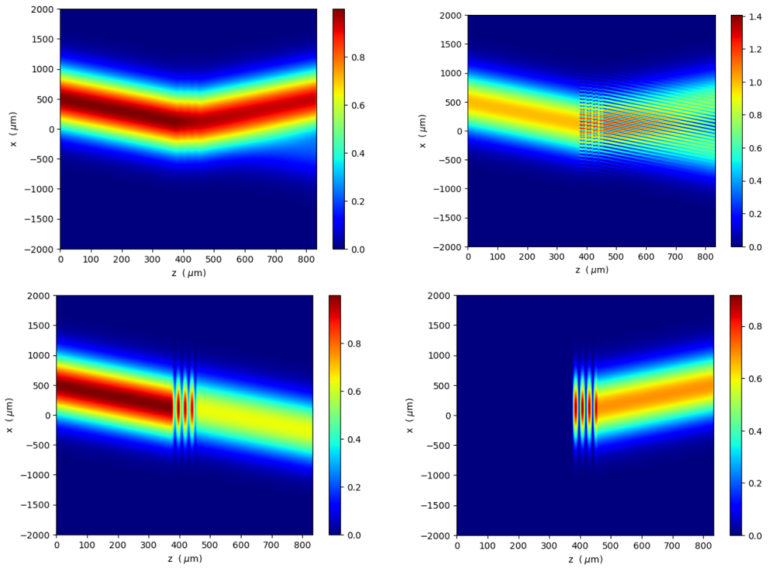


图 1. 金刚石（400）劳厄反射的二维可视化：入射光束位于布拉格角处（左上），以及位于布拉格角 $+1.5$ μ弧度处（右上）。底行显示了透射分量 $\widetilde{\psi}_+$（左）和反射部分 $\widetilde{\psi}_-$，对应于偏离布拉格角 1.5 μ弧度的情况。彭德尔振荡清晰可见。色标单位为任意单位

当 $0° < \text{非对称角} < 90°$ 时，会出现非对称反射几何结构。图 非对称角 $= 15°$ 和 $-15°$ 分别为 2 时的非对称反射可视化结果。这些角度相对于布拉格条件的偏离量分别为 20 μ弧度和 10 μ弧度。用于生成晶体边界掩膜、执行光束传播以及生成 非对称角 $= 15°$ 配置文件的相应 Jupyter 笔记本如下：

- 几何结构-AsymetricReflection15deg.ipynb
- 单次实现 C400 非对称反射.ipynb
- C400 9p8千电子伏特 劳厄AssymRefl15degFig2.yaml

要运行模拟，必须先执行 geometry-AsymetricReflection15deg.ipynb 笔记本以生成晶体边界掩膜文件。

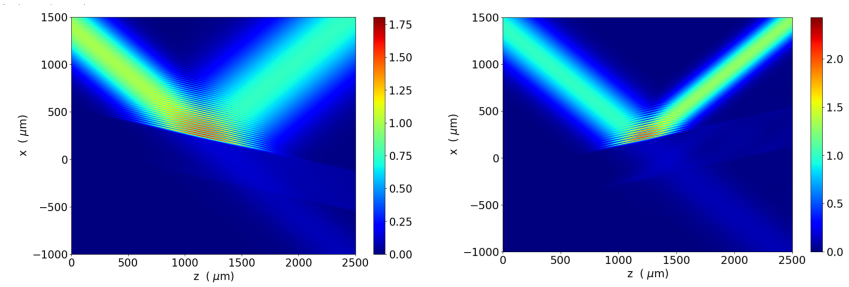


图 2. 金刚石（400）非对称反射的场振幅二维可视化：非对称角=15 deg （左），非对称角=15 deg （右）。色标单位为任意单位。

劳厄情形的摇摆曲线采用上一段所述的并行算法计算，并按照入射角进行并行化。FFT BPM方法的结果与XOP工具包的结果进行了比较，[9] 如图 3所示。我们的方法与XOP的输出结果非常吻合。两条曲线之间的微小差异可归因于有限光束腰，以及有限网格尺寸导致的数值误差。用于并行计算的相应 Python 代码、用于显示结果的 Jupyter笔记本以及配置文件如下：

- 运行_parallel angleC400 9831eV 劳厄.py
- process-parallel-data-angleC400 9p8千电子伏特 劳厄.ipynb
- C400 9p8千电子伏特 劳厄图3.YAML。

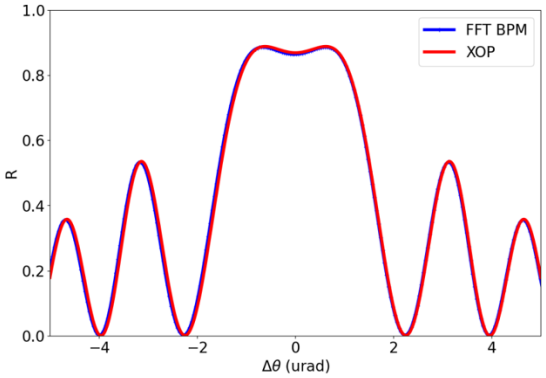


图3。在劳厄几何下，对厚度为 82 μm的金刚石晶体在9.813千电子伏特光子能量下模拟得到的摇摆曲线。

5. 弯曲晶体的模拟

弯曲晶体已成功用于为XFEL应用构建单次曝光光谱仪。[12,13] 为验证我们的代码，我们模拟了应用于欧洲X射线自由电子激光器的弯曲金刚石晶体的摇摆曲线。该晶体的摇摆曲线已由Samoylova等人在文献中进行了理论研究。[14] 在该文献中，模拟针对一块厚度为 20 μm 的晶体进行，该晶体绕轴 [001] （y轴）弯曲，表面取向为 [110] （x轴）。 u_x 圆柱弯曲晶体的位移可表示为：

$$u_x = \frac{1}{2R}\left(z^2 + \nu x^2\right) \tag{14}$$

其中，R为弯曲半径， ν 为泊松比。[14] 弯曲晶体产生的散射是通过对Takagi–Taupin方程进行数值求解得出的，该求解基于Authier等人提出的算法。[10] 作者研究了14.4千电子伏特单色X射线的440对称布拉格反射。入射波前的宽度由入射狭缝限制为 10 μm 。

我们使用自己的FFTBPM方法模拟了相同的情况。图中展示了弯曲半径分别为R= 65 毫米和R= 95 毫米时的摇摆曲线，见图4

使用我们的 FFT BPM方法计算得到的结果，如图所示。4，与 L. Samoylova等人在文章图 2 中展示的 Takagi–Taupin方程的数值解完全一致。[14] 用于并行计算的相应 Python 代码、用于展示结果的 Jupyter笔记本，以及适用于 $R = 65$mm 和 $R = 95$ mm 的配置文件为：

- 并行运行 angleC440CurvedSpectrometerR65.py

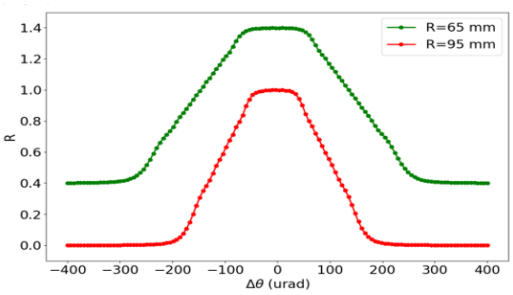


图4. 弯曲半径为65和95 mm时模拟的摇摆曲线。

- 运行_parallel angleC440CurvedSpectrometerR95.py
- process-parallel-data-angleC440Spectrometer.ipynb
- 晶体C440Fig4 R65.yaml
- 晶体C440Fig4 R95.yaml

要运行笔记本并显示结果，需要使用其中一个配置文件运行两次 Python 代码。

6. 位错模拟

我们的 FFT BPM方法可轻松用于模拟位错等晶体缺陷。我们将模拟两个采用 TTE方法研究过的案例：劳厄 [220] 和 [440] 硅晶体中存在螺型位错和混合位错时的反射。[10],[15]。[16]

第一个案例取自 Besedin等人的研究示例。[15] 选择一块平行平板硅片作为模型晶体。在该结构中，未解离的直线位错的伯格斯矢量大小为 $|\mathbf{b}| = a/\sqrt{2}$，其中 a 为晶格常数。伯格斯矢量和衍射矢量 $\boldsymbol{h}$ 均沿 (110) 轴方向。

这里我们将考虑两种位错：螺型位错和混合60度位错。螺型位错的单位位错线矢量 $\boldsymbol{\tau}$ 平行于伯格斯矢量（沿 (110) 轴方向）。混合60度位错的单位位错线矢量 $\boldsymbol{\tau}$ 平行于 (101) 轴方向，如图5所示。

根据[15] 在其固有坐标系（x_0，y_0，z_0）中的直线位错的位移矢量 u(r)，其形式为：

$$\boldsymbol{u} = \frac{\boldsymbol{b}}{2\pi}\arctan\frac{z_0}{y_0} + \frac{\boldsymbol{b}-\boldsymbol{\tau}(\boldsymbol{b}\cdot\boldsymbol{\tau})}{2\pi}\frac{y_0 z_0}{2(1-\nu)(y_0^2+z_0^2)} - \frac{\boldsymbol{\tau}\times\boldsymbol{b}}{2\pi}\left(\frac{1-2\nu}{4(1-\nu)}\ln(y_0^2+z_0^2) + \frac{y_0^2-z_0^2}{4(1-\nu)(y_0^2+z_0^2)}\right) \quad (15)$$

其中，x_0 轴沿 $\boldsymbol{\tau}$方向，z_0 轴沿矢量 $\boldsymbol{\tau}\times\boldsymbol{b}$方向，而 ν 为泊松比（硅的泊松比为$\nu = 0.22$）。

我们只关注 u_x 矢量的 $\boldsymbol{u}$ 分量。因此，对于此处考虑的情况，方程（10）简化为：

$$u_x = \frac{a}{\sqrt{2}2\pi}\arctan\frac{z_0}{y_0} \quad (16)$$

对于螺型位错，以及

$$u_x = \frac{a}{\sqrt{2}2\pi}\left(\arctan\frac{z_0}{y_0} + \frac{y_0 z_0}{4(1-\nu)(y_0^2+z_0^2)}\right) \quad (17)$$

对于 60度混合位错。坐标（x_0，y_0，z_0）通过矩阵变换 $\boldsymbol{M}$ 与坐标（x,y,z）相关，其中 x_d、y_d 和 z_d 是位错固有坐标系的原点相对于坐标（x,y,z）原点的位置。

$$\begin{bmatrix} x_0 \\ y_0 \\ z_0 \end{bmatrix} = \boldsymbol{M} \begin{bmatrix} x - x_d \\ y - y_d \\ z - z_d \end{bmatrix} \tag{18}$$

螺型位错情况下为 $\boldsymbol{M} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$，60度混合位错情况下为 $\boldsymbol{M} = \begin{bmatrix} \frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$。

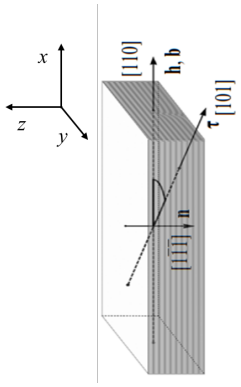


图5. 存在螺型位错和混合位错时，硅晶体中劳厄 [220]反射的几何结构。螺型位错的单位位错线矢量 $\boldsymbol{\tau}$ 平行于伯格斯矢量（沿(110)轴）。60度混合位错的单位位错线矢量 $\boldsymbol{\tau}$ 平行于(101)轴。晶体侧面的图案表示彭德尔-孙古条纹。

图中展示了XBPM模拟的结果。6 和图7。总体而言，XBPM的结果与Besedin等人采用TTE方法得到的结果一致。[15] 例如，图6左侧所示的晶体内部强度分布，与文献中的图4(a)所示强度一致。[15] 同样，图7 左侧所示的分布与文献中的图4(e)所示强度图样一致。[15] 比较结果时我们还注意到，I. S. Besedin等人论文中图4(e)的纵向比例尺与所采用的三斜坐标系不一致，因此需要将比例尺增大约25%。只有进行这一修正后，XBPM和TTE得到的结果才一致。

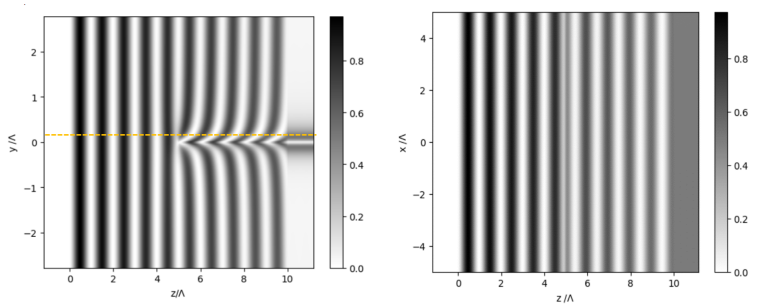


图6. 使用 XBPM方法计算的含螺型位错硅晶体中的反射波强度，显示在 yz（左）和 xz（右）平面上。xy平面上的横截面取自 x 的位置，该位置由左图中的虚线标出。

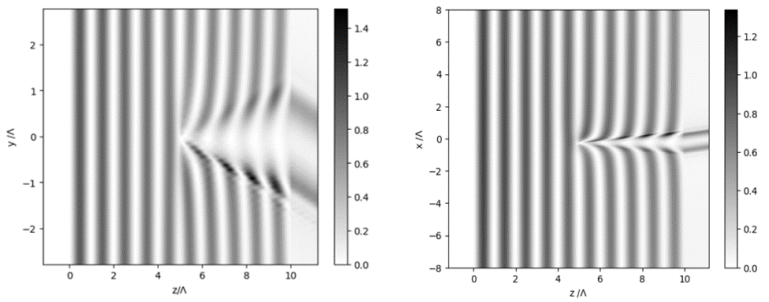


图7. 含60度混合位错的硅晶体中反射波的强度。结果与通过TTE方法获得的结果相同（[15]中的图4(e)）。

我们还在图8 中展示了光束离开晶体后衍射波在xy 平面内的强度。这对应于使用单色光束拍摄的X射线形貌学图像（图8）。相应的Jupyter笔记本和配置文件如下：

- SingleRealization Si220 17p45keVScrewDislChukhovskii.ipynb
- Si220 17p45keVScrewDislChukhovskii.yaml

对于螺型位错以及

- SingleRealization 60degDislocationSi220 17p45keVChukhovskii.ipynb
- Si220 17p45keV60degDislChukhovskii.yaml

对于60度混合位错。

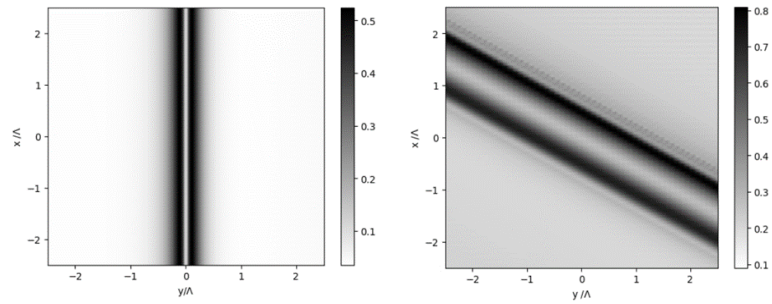


图8. 光束离开晶体后，xy平面内衍射波的强度：左侧为螺型位错，右侧为60度混合位错。

在前面的示例中，位错线与晶体的散射表面平行。现在，我们将展示一个位错线不与表面平行的示例。我们将模拟G. Kowalski等人在论文中描述的X射线截面形貌学实验。[16] 模拟针对(440)和(220)反射进行，光子能量为17,450 eV。一个415 μm厚 [112]、沿 [112]取向的硅单晶中含有一条混合60度 [110] 位错线，其伯格斯矢量为1/2 [1 -1 0] $\mathbf{b}$。几何结构的
模拟结果如图 9 所示。该情况下的变换矩阵 $\boldsymbol{M}$如下所示： $\boldsymbol{M} = \begin{bmatrix} 0 & -\sqrt{\frac{2}{3}} & -\sqrt{\frac{1}{3}} \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{\frac{1}{3}} & -\sqrt{\frac{2}{3}} \end{bmatrix}$。

在X射线截面形貌法中，入射X射线束由宽度为微米量级的狭缝整形。在我们的情况下，采用了宽度为 5 μm的狭缝。

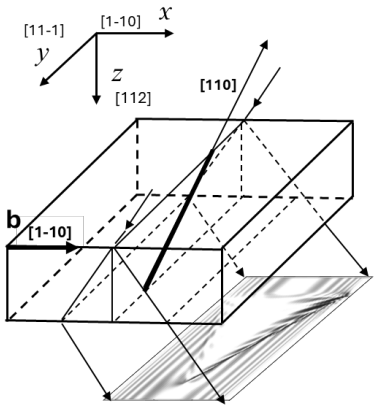


图9。模拟的几何结构。

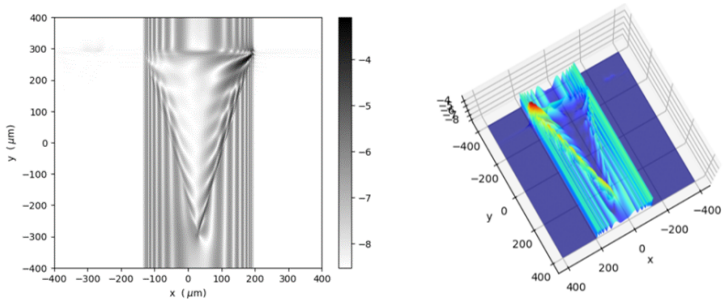


图10。使用Lang方法对硅晶体中混合型60°位错的(440)反射进行形貌模拟。强度标度为对数的

模拟结果见图10 和图11，与G. Kowalski等人的工作结果在定性上是一致的。[16] 遗憾的是，我们无法进行定量比较，因为所引用工作的作者未提供有关所展示图中强度标度的充分信息。

相应的Jupyter笔记本和配置文件如下:

- SingleRealization Si440 60deg DislocationGronkowski.ipynb
- Si440 17p45keVDislk60degGronkowski.yaml

对于(400)反射,
and

- SingleRealization Si220 60deg DislocationGronkowski.ipynb 和
- Si220 17p45keVDislk60degGronkowski.yaml

对于 (200) 反射。

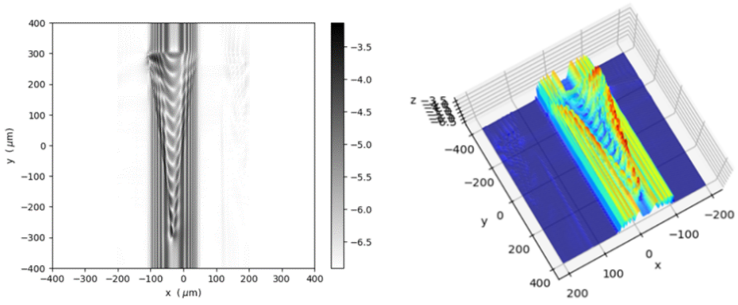


图 11。使用 Lang方法模拟硅晶体中 60°位错的形貌，针对 (220)反射。强度标度为对数的

7. 晶体　　具有任意形状和应变分布的晶体　　S

与 TTE方法相比，我们的 FFT BPM方法无需求解边界条件问题，因此简化了模拟。它非常适合模拟任意形状且具有应变分布的有限晶体中的散射。所需的仅是晶体边界图，以及垂直于晶面的变形矢量分量 u_x。

下面将通过几个示例来说明这一通用方法。

首先，我们应用该方法模拟具有以下尺寸的 Si(004)矩形晶体的反射 100 μ米 × 300 μ米、光子能量为 12 keV的情况；该示例也在文章“具有任意形状和应变场的单晶体*X*射线动力学衍射：一种用于建模的通用方法”中进行了模拟。[17] 晶体边界图使用`geometry-finite Si crystal-2D.ipynb` Jupyter笔记本生成。

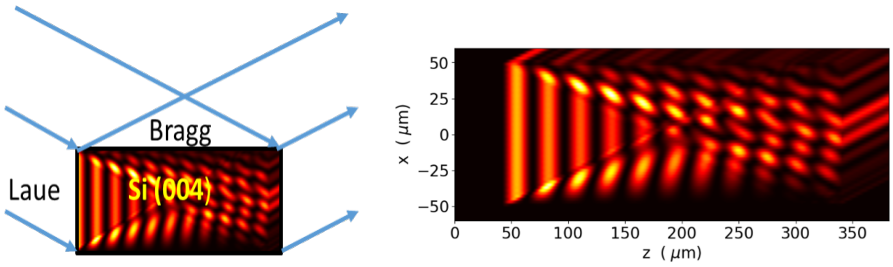


图 12. 12 keV光子能量下，尺寸为 100 μm x 300 μm 的 Si(004)矩形晶体的反射。晶体入口处可见 Pendell¨osung 条纹。混合劳厄-布拉格情形下会产生更复杂的衍射图样。

模拟结果与文献中展示的结果相同，[17] 如图所示。12。晶体入口处可见潘德尔松条纹¨。对于劳厄-布拉格混合情形，会形成更复杂的衍射图样。相应的 Jupyter 笔记本和配置文件如下：

- SingleRealization Si400 12 千电子伏特 FiniteCrystal-2D.ipynb
- Si400 12keV finite Crystal 2D.yaml

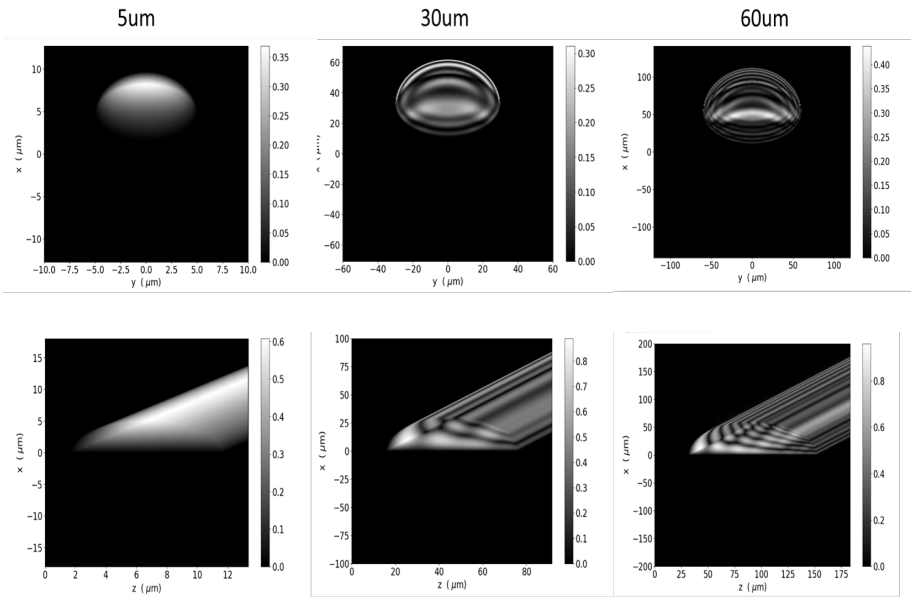


图 13. 光子能量为 9.8 千电子伏特时，尺寸为 5 μm、 30 μm 和 60 μm 的 C(400) 半球晶体的反射。y=0 处 xz 平面内反射波的横截面（下排），以及波离开晶体后在 xy 平面内的反射波强度。当晶体尺寸大于消光长度时，会形成复杂的衍射图样。

接下来，我们展示半径分别为 5 μ米、 30 μ米和 60 μ米的半球形 C(400) 晶体在 9.8 千电子伏特光子能量下的模拟结果，如图 13所示。这些结果凸显了当晶体尺寸接近或超过消光长度时，考虑动力学衍射效应的必要性。半径为 5 μ米时，模拟强度与运动学理论的预测十分相似。然而，半径较大时，反射波强度会因动力学效应而呈现复杂图样。

用于运行模拟、生成晶体边界图的 Jupyter 笔记本，以及半径为 10 μm 时的配置文件如下：

- SingleRealization C400-hemi-sphere.ipynb
- geometry-hemi-sphere.ipynb
- C400_9p8keV_劳厄-半球.yaml

此外，我们还提供了一个 Python 脚本，用于模拟半径为 10 μm 的半球在 xz 平面内摇摆时的角度扫描。模拟得到的、距晶体 2 m 处的远场图像覆盖角度范围$\pm$10 μrad，如图所示。14。作为参考，图 15 显示了相应的近场图像。

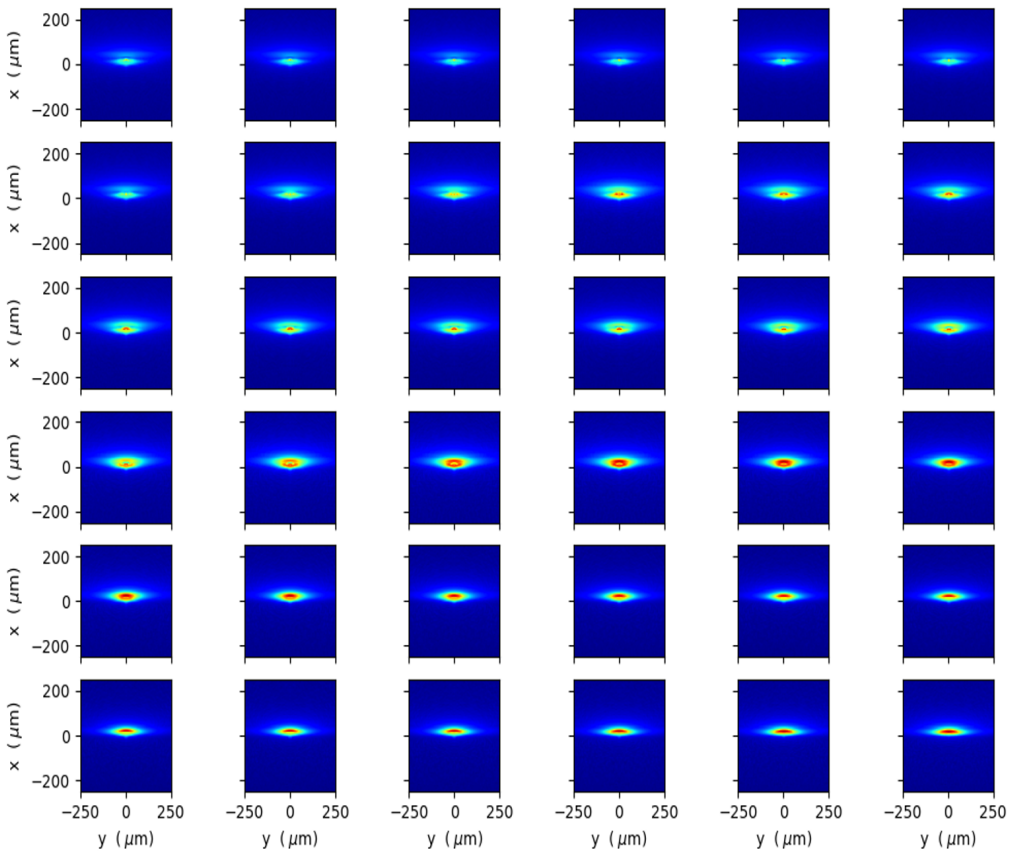


图14. 远场图像模拟于距晶体 2 m 处，通过对 ± 10 μrad 进行角度扫描获得。

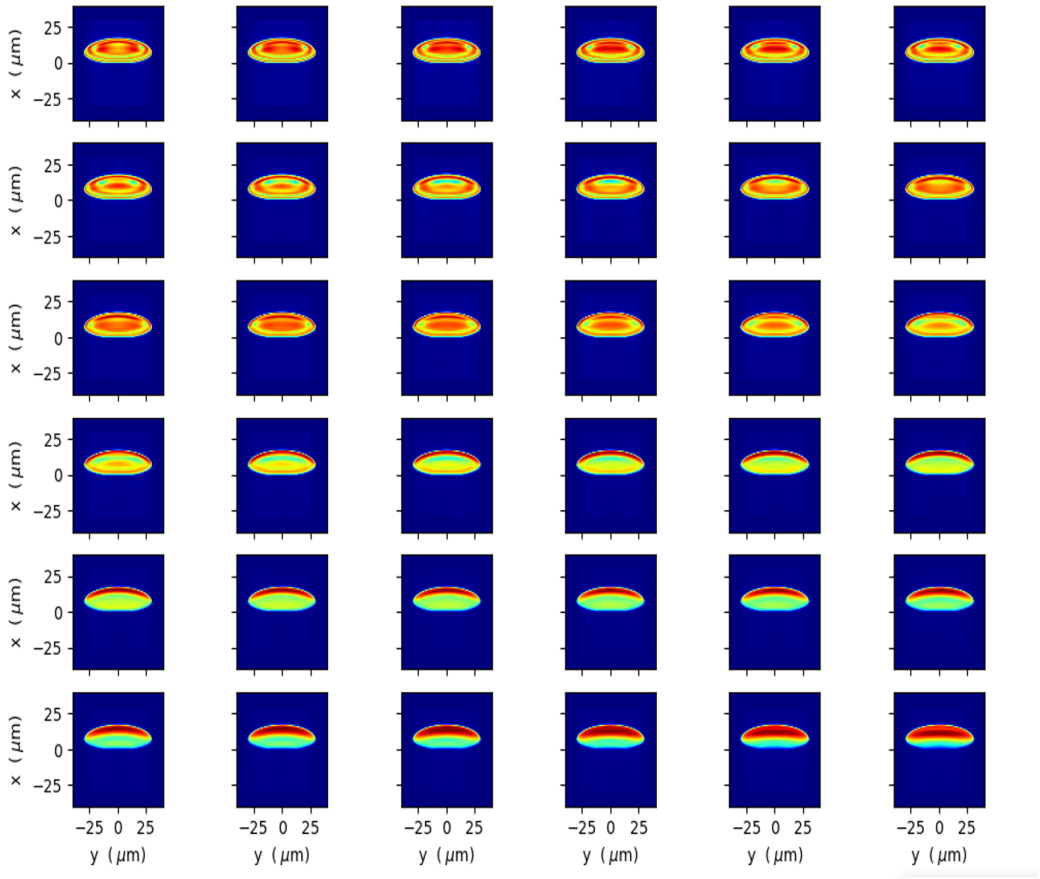


图15。对 ± 10 μ 弧度进行角度扫描获得的近场图像。

用于并行计算的相应 Python 代码、配置文件以及用于显示结果的 Jupyter笔记本如下：

- 运行 parallel angleC400 9p8千电子伏特 劳厄 Asym-sphere.py
- C400_9p8keV 劳厄非对称球形-par.yaml
- process-parallel-data-angleC400 9p8keV 劳厄 Asym-sphere.ipynb

在本节的最后一个示例中，我们模拟了一个 10 μ米硅立方晶体的 Si(440)反射，该晶体受到混合型 60° [110] 位错的形变，其$\frac{1}{2}$[1 -1 0] 伯格斯矢量对应的光子能量为 17,450 eV。模拟结果见图 16 和图 17。我们重点展示了该方法的数值效率：模拟在 Perlmutter 高性能计算机的单个节点上运行，使用 $300 \times 200 \times 300$ 矩形网格，耗时[18] 约 13 秒。

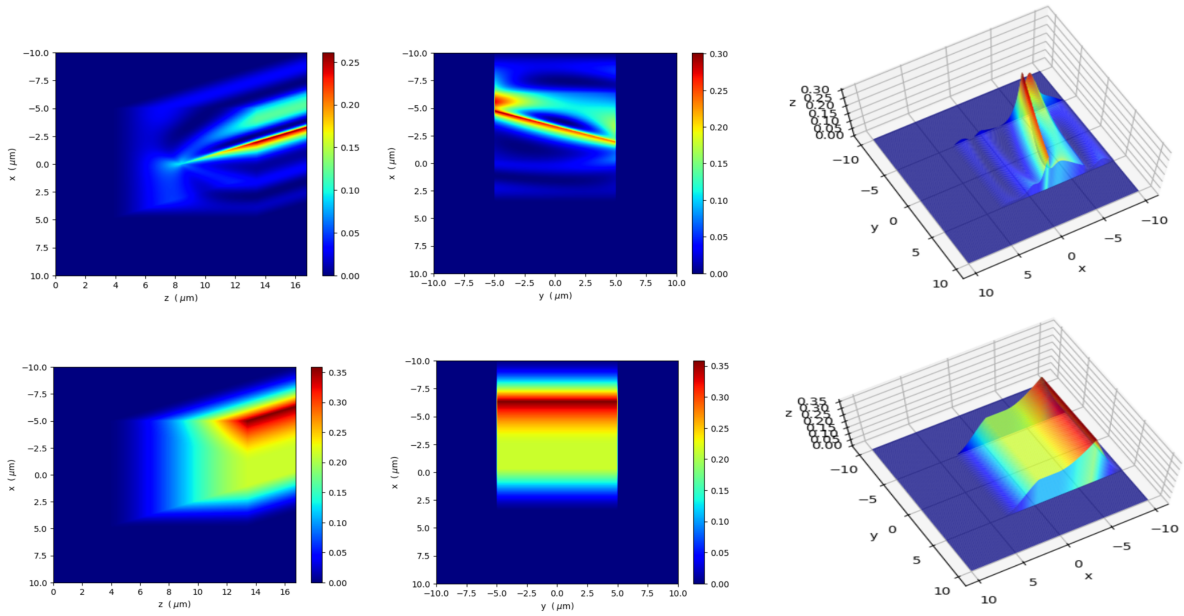


图 16. 光子能量为 17,450 eV 时，来自边长为 $10\ \mu$m 的硅立方晶体的 Si(440)反射。晶体受到具有 $\frac{1}{2}[1\,1\,0]$ 伯格斯矢量的混合型 60° $[110]$ 位错的形变。左上图显示了 xz平面上 $y=0$处反射波的横截面；中上图和右上图则显示了反射波离开晶体后在 xy平面上的强度。作为比较，下面一行给出了同一晶体在无位错情况下的模拟结果。

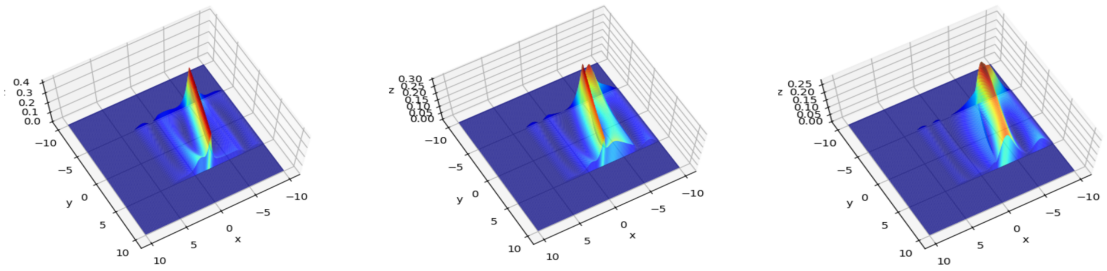


图 17. 反射波离开晶体后在 xy平面上的强度，分别对应不同的入射角：布拉格角（中间）、低于布拉格角 $-3\ \mu$rad（左侧）和高于布拉格角 $+3\ \mu$rad（右侧）。

用于运行模拟、生成晶体边界图的 Jupyter 笔记本，以及用于一个受到混合型 60° $[110]$ 位错形变的 $10\ \mu$米硅立方晶体的配置文件如下：

- SingleRealizationFiniteCrystal Si440 60deg Dislocation.ipynb
- geometry-finite Si440crystal-60degDislocation.ipynb
- Si440 17p45keVDislk60degGronkowskiFiniteCrystal3D.yaml

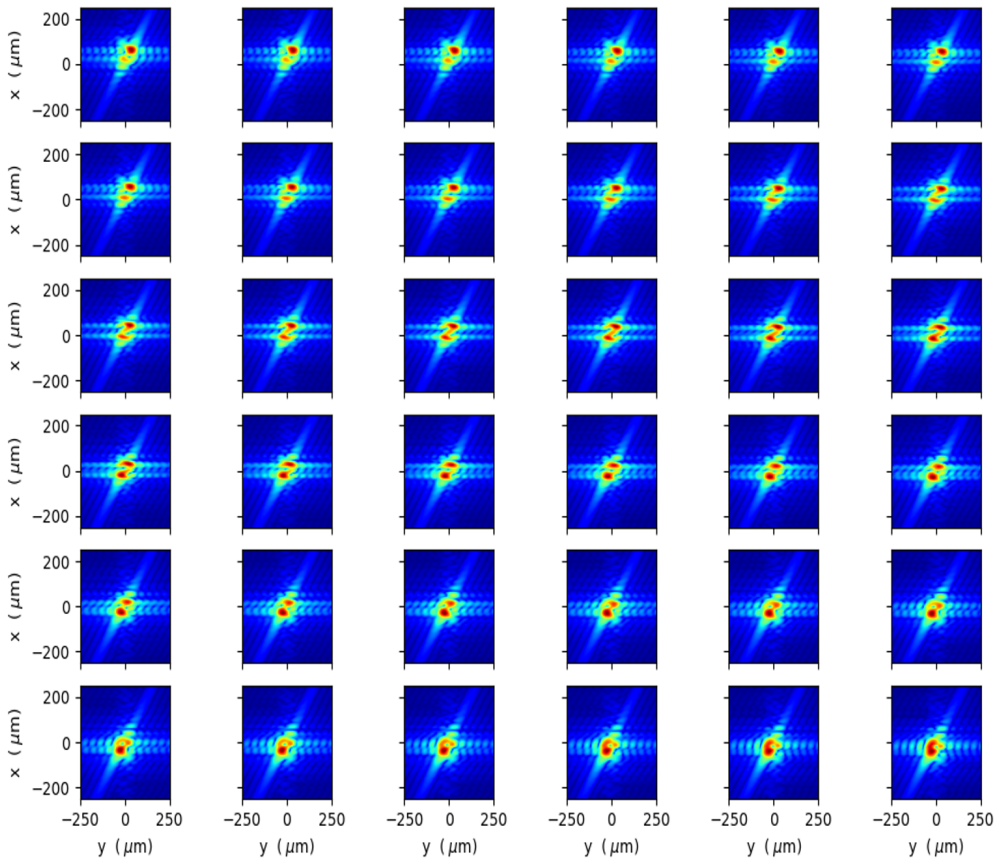


图18. 对晶体进行 ± 10 μrad角度扫描后，模拟得到的远场图像（距晶体4米）。

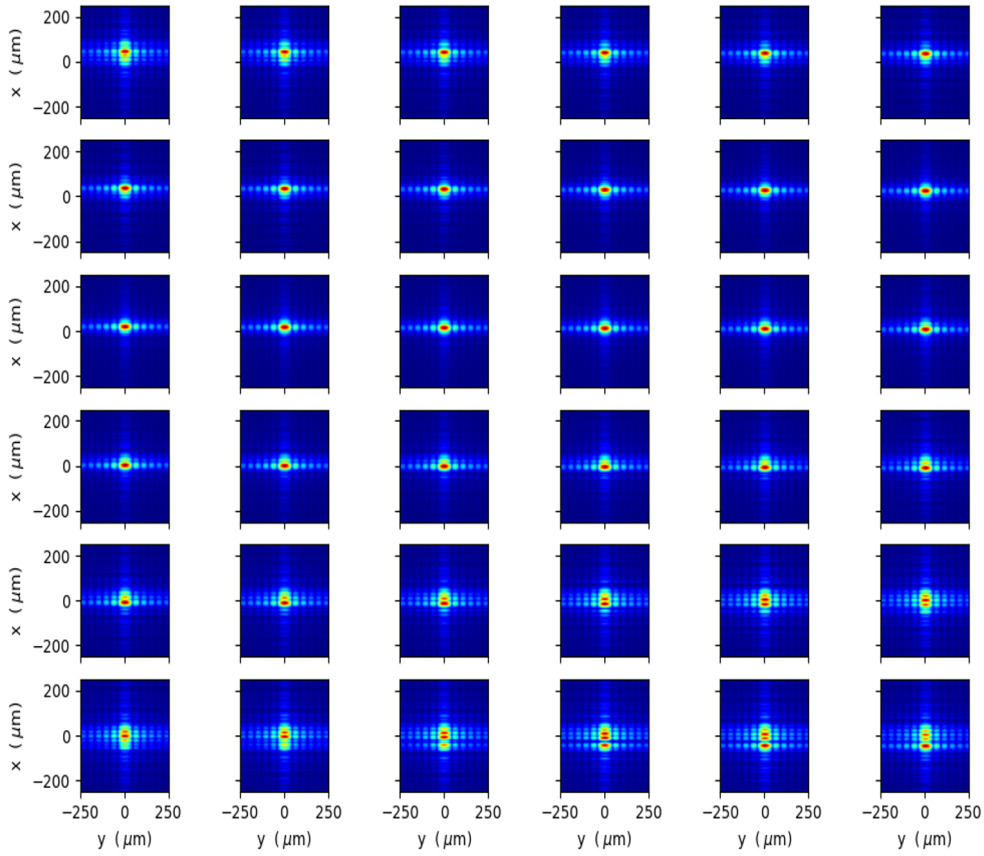


图 19. 通过对 ± 10 μrad 进行角度扫描，模拟得到的距无位错晶体 4米 处的远场图像。

我们还提供了一个 Python 脚本，用于模拟晶体在 xz-平面内转动时的角度扫描。距晶体 4米 处、角度范围为 ± 10 μrad 的远场图像如图 18 所示。作为对比，图 19 展示了对同一块无位错晶体进行模拟得到的类似图像。

用于并行计算的相应 Python 代码、配置文件以及用于显示结果的 Jupyter笔记本 如下：

- 运行并行角度扫描FiniteCrystal Si440 60deg 位错.py
- Si440 17p45keVDislk60degGronkowskiFiniteCrystal3Dpar.yaml
- process-parallel-data-angleFinite晶体 Si440 60deg 位错.ipynb

我们注意到，FFT BPM 模拟在分析布拉格相干 X 射线衍射成像（相干 X 射线衍射成像）数据时可能特别有用，尤其是在晶体尺寸接近消光长度时。由于 FFT BPM方法简单且计算效率高，因此可将其集成到迭代算法中，以重建所研究晶体的形状和应变分布。

8. 畸变晶体反射的时变模拟

以下部分概述了公共代码库中提供的 Jupyter 笔记本、配置文件和 Python 脚本，这些资源用于文献所述的时变模拟。[1] 理论背景和详细的模拟条件见该文献。代码库中的每个示例都直接对应于文献中的图，[1] 便于用户复现和扩展已发表的结果。

8.1 时变快速傅里叶变换束传播方法的基准测试

第一组示例将时变快速傅里叶变换光束传播法（TD FFT BPM）与 Shvyd'ko 和 Lindberg 针对完美晶体给出的解析解进行基准比较。[19] 图 20 的左、右图分别对应参考文献中的图 5 和图 6，[1] 请注意，参考文献图 5 的图注中，[1] 束腰 W_0 被误写为 $50\,\mu$m，而正确值应为 $250\,\mu$m。

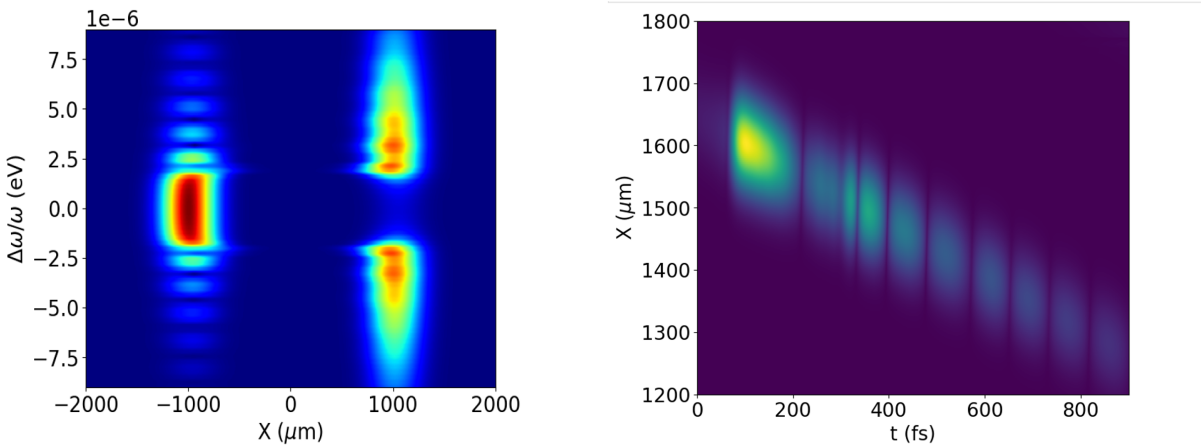


图 20. 在 $y = 0$ 条件下，使用 $t = 10\,$fs、$W_0 = 250\,\mu$m、$\omega_0 = 12.8$ 千电子伏特的入射高斯光束照射厚度为 50 微米的 C*(333) 金刚石晶体时，反射光束和透射光束的时空光谱强度分布（左）；在其余参数均相同的情况下，使用 $W_0 = 50\,\mu$m 计算得到的布拉格衍射光束的时空强度分布（右）；色标单位为任意单位。

图 20所示的模拟使用以下 Python 脚本、配置文件和 Jupyter笔记本生成：

左图：

- 运行_parallel-omegaC333-250um.py
- C333 Omega12p8千电子伏特 束腰250um.yaml
- process-parallel-data-omegaC333-250.ipynb

右图：

- 运行_parallel-omegaC333-50um.py
- C333 Omega12p8keV 束腰50um.yaml
- process-parallel-data-omegaC333-50.ipynb

如参考文献所述，[1] FFT-BPM 方法与 Shvyd'ko 和 Lindberg（2012）的理论计算结果完全一致。

8.2 变形晶体的反射

第二组示例展示了变形晶体的含时反射。这些模拟对应参考文献中的图 7、8 和 10。[1] 这些示例展示了如何在FFT-BPM框架中加入形变场，以模拟由此产生的含时衍射响应。

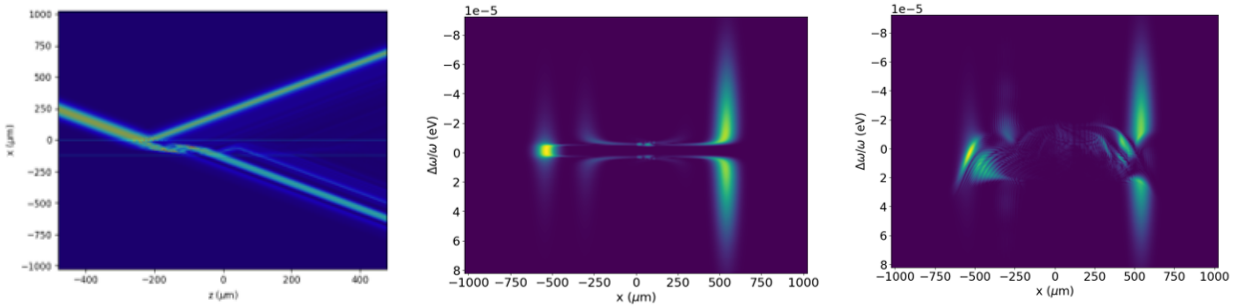


图 21. 中心 XFEL 频率下变形晶体布拉格反射的二维可视化（左），以及使用快速傅里叶变换-光束传播方法模拟得到的理想晶体（中）和变形晶体（右）的布拉格衍射光束时空光谱强度分布；色标单位为任意单位。

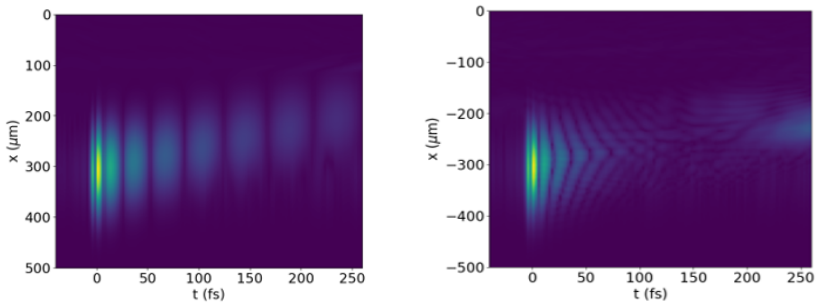


图 22. 理想晶体（左）和变形晶体（右）的布拉格衍射光束与透射光束的时空强度分布；色标单位为任意单位。

图 21 和图 22 所示的模拟由以下 Python 脚本、配置文件和 Jupyter 笔记本生成：

图 21左图：

- SingleRealization C400 ThermalBump.ipynb
- C400 TD 9p8keV ThermalBump.yaml

图21 的中央面板，以及图22的左侧面板：

- run parallel TD Not-deformed.py
- C400 TD 9p8keV No-ThermalBump.yaml
- process-parallel-data-omegaC400-No-ThermalBump.ipynb

图21和图22的右侧面板：

- 运行并行 TD deformed.py

- C400 TD 9p8keV ThermalBump.yaml
- process-parallel-data-omegaC400-ThermalBump.ipynb

请注意，在交叉核对参考文献中发表的结果时，[1] 第“3.4 含时问题：变形晶体”节，我们发现了以下错误：

1. **输入脉冲参数：**高斯脉冲持续时间应为**2 fs**，均方根横向尺寸应为 **60** μ**m**，而非先前所述的**1 fs** 和 **30** μ**m**。

2. **图的更正（参考文献[1]中的图8）：**纵轴上的最大值应为 8×10^{-5}，而非 8×10^{-4}，并且图应**相对于横轴反转**。

9. 总结

我们已证明，快速傅里叶变换光束传播法（FFT BPM）可用于模拟广泛问题中的动态衍射效应，包括任意形状变形晶体在布拉格、劳厄或非对称几何中的散射。我们成功复现了文献中针对弯曲晶体、位错以及使用Takagi–Taupin方程模拟的有限形状晶体所给出的结果。[14–17]

与 TTE 方法相比，我们的 FFT BPM 方法通过免去求解边界条件问题，简化了模拟过程。这使其非常适合模拟任意形状和应变分布的有限晶体所产生的散射，以及具有任意角谱分布（例如 FEL SASE束）的 X射线束照射。FFT BPM 方法的算法直观易懂，便于用 Python 实现，而快速傅里叶变换可确保计算快速完成。例如，在Jupyter笔记本中实现并在高性能计算机的单个节点上运行，在 $300 \times 200 \times 300$ 矩形网格上模拟应变 10 μm 硅立方体的三维反射，仅需十几秒。

我们的方法可自然地在多核机器上实现，在不同参数（如光子能量或入射角）下，可并行计算单个反射物体的实现。这样一来，通过旋转样品来计算布拉格峰附近角度区域内的一系列衍射图样，或进行含时衍射，便成为易于并行化的问题。

我们精简的 FFT BPM Python 代码实现简单，可通过 GitHub 轻松分享给 X 射线领域的研究人员。本文提供了一个 GitHub 仓库链接[2]，其中包含用于模拟本文所述示例的 Python 代码包。通过调整模拟参数，可以修改这些示例，以解决当前研究中感兴趣的特定动力学问题。

附录 A. 标准化模拟配置（75 个参数）

下表给出了 FFT BPM Python 软件包中所用模拟参数的一一对应关系。按照我们的物理约定，索引 1 指顶部薄膜或表面层，索引 2 则代表衬底或块体材料。

表 1. 75 参数主模板的完整参数映射。

类别	参数	描述
物理与晶格	ω0，a0	光子能量（eV）和晶格常数（ Å).
	米勒指数 h、k、l	反射指数（H, K, L）。
	δ1，β1	折射率减量和吸收（**薄膜**）。
	xrh1，xih1	傅里叶极化率分量（**薄膜**）。
	delta2，beta2	折射率减量和吸收（**衬底**）。
	xrh2，xih2	傅里叶极化率分量（**衬底**）。
网格与几何结构	xgrid，ygrid	X 和 Y中的网格点数。
	res x，res y	手动分辨率覆盖（0 =自动）。
	xxmax，yymax	模拟窗口总尺寸（μ米）。
	非对称角	非对称角（0° =布拉格， 90° =劳厄）。
	厚度	衬底厚度（μ米）。
	d_薄膜	表面薄膜厚度（μ米）。
	宽度	有限晶体宽度（μ米）。
	xs、x00	晶体横向位移和全局原点偏移（μ米）。
	几何结构	“非来自文件”， “来自文件”， “半球”。
	几何形状文件	任意形状的 .npy 文件路径。
数值积分	M	沿 Z 的积分步数。
	tpad	用于环绕效应预防的 FFT 填充。
	Z步进因子	步长稳定性乘数。
	方法、模式	积分方法（欧拉/Verlet）和模式（TIDP/TDP）。
	zsep	保存 Z 层的间隔。
Beam 属性	光束、束腰	光束轮廓类型和半高全宽/束腰尺寸（μ米）。
	狭缝x方向尺寸，狭缝y方向尺寸	模拟狭缝尺寸（μ米）。
	时间依赖	“无”或“时间”。
	tgrid，tmax	时间步数和总时间范围。
	σ t	脉冲持续时间（fs/ps）。
形变与位错	形变	类型（弯曲光谱仪、螺型位错等）。
	应变，R	均匀应变和弯曲半径（m）。
	vC100、vC、vSi	特定材料的泊松比。
	x0d、y0d、z0d	位错芯坐标（μ米）。
	位错角，伯格斯矢量	位错角和伯格斯矢量分量。
	形变振幅	周期性形变振幅（ Å).
	形变周期	周期性形变周期（μ米）。
程序设置	线程数 快速傅里叶变换	用于快速傅里叶变换执行的 CPU线程数。
	静默模式	抑制控制台输出。
	存储场	用于保存最终电场分布的标志。

致谢

本研究由美国能源部（DOE）与 SLAC 签订的合同（编号 DE-AC02-76SF00515）提供支持。

参考文献

[1] Krzywinski, J. 和 Halavanau, A., 《变形晶体中含时动力学布拉格衍射的光束传播法》, 《晶体学报》A辑 78，465–472（2022年11月）。[2] Krzywinski, J. 和 Halavanau, A., 《Crystal-fft-bpm》。https://github.com/balticfish/crystal-fft-bpm（2022）。[3] Hadley, G. R., 《使用Pad´é近似算子的广角光束传播》, 《光学快报》17(20)，1426–1428（1992）。[4] Ersoy, O. K., 《衍射、傅里叶光学与成像》, [John Wiley I& Sons, Ltd（2007）。[5] Gaudin, J., Ozkan, C., Chalupsk´y, J., Bajt, S., Burian, T., Vy˘s´ın, L., Coppola, N., Farahani, S. D., Chapman, H. N., Galasso, G., H´ajkov´a, V., Harmand, M., Juha, L., Jurek, M., Loch, R. A., M¨oller, S., Nagasono, M., St¨ormer, M., Sinn, H., Saksl, K., Sobierajski, R., Schulz, J., Sovak, P., Toleikis, S., Tiedtke, K., Tschentscher, T. 和 Krzywinski, J., 《探究X射线自由电子激光辐射与光栅结构的相互作用》, 《光学快报》37(15)，3033–3035（2012）。[6] Andrejczuk, A., Krzywinski, J. 和 Bajt, S., 《利用光束传播法研究楔形多层劳厄透镜中的缺陷对X射线聚焦的影响》, 《核仪器与方法物理研究B辑：与材料和原子相互作用》364，60–64（2015）。[7] Morgan, A. J., Prasciolu, M., Andrejczuk, A., Krzywinski, J., Meents, A., Pennicard, D., Graafsma, H., Barty, A., Bean, R. J., Barthelmess, M., Oberthuer, D., Yefanov, O., Aquila, A., Chapman, H. N. 和 Bajt, S., 《高数值孔径多层劳厄透镜》, 《科学报告》5(1)，9892（2015）。[8] Bajt, S., Prasciolu, M., Morgan, A. J., Chapman, H. N., Krzywinski, J. 和 Andrejczuk, A., 《使用高数值孔径多层劳厄透镜进行一维聚焦》, 《AIP会议论文集》1696(1)，020049（2016）。[9] del Rio, M. S. 和 Dejus, R. J., 《XOP v2.4：X射线光学软件工具包的近期进展》, 《国际光学工程学会论文集》8141，8141–8141–5（2011）。[10] Authier, A., 《X射线衍射动力学理论》, [国际晶体学联合会晶体学专著，牛津大学出版社，牛津（2003）。[11] Omelyan, I., Mryglod, I. 和 Folk, R., 《用于多体系统运动积分的优化Forest–Ruth及Suzuki类算法》, 《计算物理通讯》146(2)，188–202（2002）。[12] Zhu, D., Cammarata, M., Feldkamp, J. M., Fritz, D. M., Hastings, J. B., Lee, S., Lemke, H. T., Robert, A., Turner, J. L. 和 Feng, Y., 《用于硬X射线自由电子激光器的单次透射式光谱仪》, 《应用物理快报》101，034103（2012年7月）。[13] Kujala, N., Freund, W., Liu, J., Koch, A., Falk, T., Planas, M., Dietrich, F., Laksman, J., Maltezopoulos, T., Risch, J., Dall'Antonia, F. 和 Gr¨unert, J., 《欧洲X射线自由电子激光器上的硬X射线单次光谱仪》, 《科学仪器评论》91，103101（2020年10月）。[14] Samoylova, L., Boesenberg, U., Chumakov, A., Kaganer, V., Petrov, I., Roth, T., R¨uffer, R., Sinn, H., Terentyev, S. 和 Madsen, A., 《用作XFEL脉冲色散光谱仪的强弯曲金刚石晶体的衍射特性》, 《同步辐射杂志》26，1069–1072（2019年7月）。[15] Besedin, I. S., Chukhovskii, F. N. 和 Asadchikov, V. E., 《X射线形貌断层成像中位错衍射衬度的研究：计算机模拟与图像分析》, 《晶体学报告》59，323–330（2014年5月）。[16] Kowalski, G. 和 Gronkowski, J., 《关于X射线截面形貌学中的中间像》, 《固体物理学（a）》71(2)，611–617（1982）。[17] Yan, H. 和 Li, L., 《任意形状和应变场单晶的X射线动力学衍射：一种通用建模方法》, 《物理评论B辑》89，014104（2014年1月）。[18] 《Perlmutter架构》。https://docs.nersc.gov/systems/perlmutter/architecture（2026）。[19] Shvyd'ko, Y. 和 Lindberg, R., 《晶体在X射线布拉格衍射中的时空响应》, 《物理评论：加速器与光束》15，100702（2012年10月）。