

01;07;12

Функция распределения атомов макроскопически изотропных объектов в дифракционных исследованиях

© Н.И. Гуливец, А.В. Бобыль, А.И. Дедоборец, Б.И. Пелешенко

НПК Санкт-Петербургского государственного университета

Поступило в Редакцию 4 декабря 1996 г.

В работе использование весовой функции при нахождении функции распределения атомов методом регуляризации уравнения Тихонова в дифракционных задачах исследования макроскопически изотропных объектов позволяет значительно уменьшить осциллирующую компоненту, связанную с погрешностью измерений и наличием верхнего предела величины изменений волнового вектора. Предлагаемая процедура демонстрируется на примере дифракционных исследований металлических расплавов.

При проведении различных дифракционных исследований (рентгено-, электроно- и нейтродифракционных) широко используется так называемый структурный фактор $a(s)$, где s — модуль изменения волнового вектора при рассеянии. Основное уравнение дифракции, применяемое для изучения атомной структуры макроскопически изотропных объектов [1], обычно записывают в виде

$$a(s) = 1 + s^{-1} \int_0^{\infty} 4\pi r (\rho(r) - \rho_0) \sin sr \, dr, \quad (1)$$

где ρ_0 — средняя атомная плотность исследуемого образца, $\rho(r)$ — атомная плотность на расстоянии r от произвольно выбранного атома. Соотношение (1) можно использовать для получения разностной радиальной функции распределения атомов

$$\varphi(r) \equiv 4\pi r (\rho(r) - \rho_0) = \frac{2}{\pi} \int_{\pi}^{\infty} s (a(s) - 1) \sin sr \, ds. \quad (2)$$

Поскольку измерения интенсивности рассеяния содержат погрешность и ведутся до некоторого верхнего значения модуля s_m , то получаемая

из (2) зависимость $\varphi(r)$ содержит осциллирующие ошибки, особенно заметные при малых r [2–6].

В данной работе функция $\varphi(r)$ находится путем преобразования (1) с использованием весовой функции в невязке сглаживающего функционала Тихонова [7,8]. Роль этой функции сводится к тому, чтобы путем изменения ее параметра получить из сглаживающего функционала ядро уравнения Тихонова в виде экспоненты. Предлагаемая процедура демонстрируется на примере дифракционных исследований металлических расплавов.

Преобразуем соотношение (1) к виду

$$\int_0^{\infty} \varphi(r) \sin sr \, dr = j(s), \quad (3)$$

где $j(s) \equiv s(a(s) - 1)$, и построим функционал Тихонова нулевого порядка

$$Q = \int_0^{s_m} B^2(s) \left(\int_0^{\infty} \varphi(x) \sin sx \, dx - j(s) \right)^2 ds + \alpha \int_0^{\infty} \rho(r) \varphi^2(r) dr, \quad (4)$$

где $B(s)$ — положительная монотонно убывающая функция на $[0, s_m]$, α — константа регуляризации. Варьирование Q по $\varphi(x)$ приводит задачу к следующему уравнению Тихонова:

$$\int_0^{\infty} \varphi(x) dx \int_0^{s_m} B(s) \sin sx \sin sr \, ds + \alpha \rho(r) \varphi(r) = \int_0^{s_m} B(s) j(s) \sin sr \, ds. \quad (5)$$

При $B(s) \equiv 1$ из (5) следует

$$\int_{-\infty}^{\infty} \varphi(x) \frac{\sin s_m(r-x)}{\pi(r-x)} dx + \frac{2\alpha}{\pi} \rho(r) \varphi(r) = \frac{2}{\pi} \int_0^{s_m} j(s) \sin sr \, ds. \quad (6)$$

Правую часть (6) часто и считают равной искомой функции $\varphi(r)$, что, как видно, выполняется при условии отсутствия погрешности эксперимента и при $s_m \rightarrow \infty$.

Выбираем функцию $B(s)$ в виде

$$B(s) = \exp(-\beta s^2/2), \quad 0 \leq s \leq s_m \quad (7)$$

и будем считать, что ошибка приближительного равенства

$$\int_0^{s_m} \exp(-\beta s^2) \cos sx \, ds \approx k \left(\frac{\pi}{4\beta} \right)^{1/2} \exp\left(-\frac{x^2}{4\beta}\right) \quad (8)$$

не больше экспериментальной погрешности для заданного k , близкого к единице. Кроме того, для функции (7) с точностью $\delta > 0$ выполняется неравенство

$$\left\{ \int_0^{s_m} \left(\exp\left(\frac{\beta s}{2}\right) j(s) - j(s) \right)^2 dx \right\}^{1/2} \leq \delta, \quad (9)$$

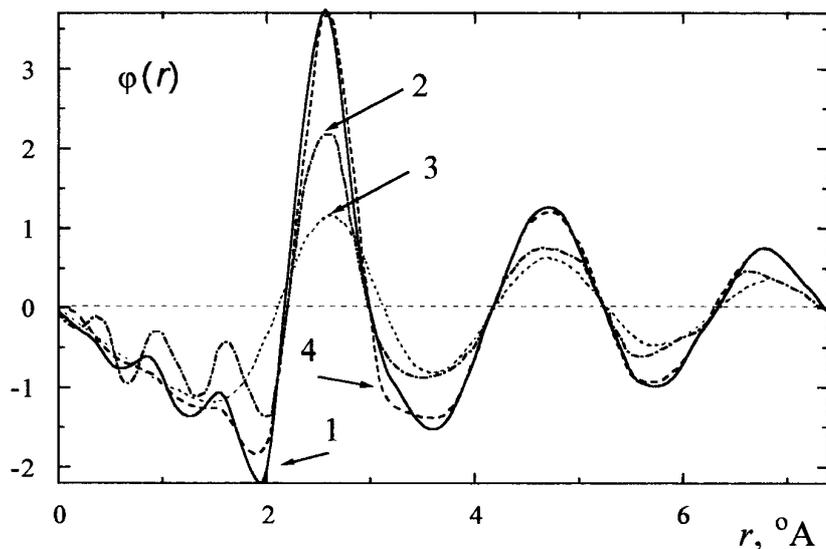
обеспечивающее несильное искажение (размывание) экспериментальных значений структурного фактора. Величина параметра β выбирается следующим образом. Вначале определяется наибольшее β , при котором выполняется условие (9), затем проверяется условие (8) при $k = 1$. При необходимости, уменьшая k , подбирают его так, чтобы условие (8) выполнялось. Расчетным путем было установлено, что значение β , обеспечивающее выполнение (8) при $k = 1$ и требуемой величине погрешности δ , оказалось равным $\sim 2\pi/s_m^2$.

Далее из (5) получаем

$$\begin{aligned} (4\pi\beta)^{-1/2} \int_{-\infty}^{\infty} \varphi(x) \exp\left(-\frac{(r-x)^2}{4\beta}\right) dx + \frac{2\alpha}{\pi} \rho(r) \varphi(r) \\ = \frac{2}{\pi} \int_0^{s_m} e^{-\beta s^2} j(s) \sin sr \, ds. \end{aligned} \quad (10)$$

Правая часть (10) отличается от правой части (6), в частности ее экстремумы более размыты, хотя их положение и площадь под кривыми не изменяются.

Наиболее эффективным методом решения уравнений (6) и (10) относительно $\varphi(r)$ является решение соответствующих систем линейных



Разностная функция распределения атомов расплава Cu при 1393 К. 1, 2 — правая часть и решение уравнения (6); 3, 4 — правая часть и решение уравнения (10) соответственно.

уравнений. В этом случае задача сводится к решению системы уравнений относительно $\varphi(r)$ в узлах квадратуры и последующей интерполяцией полученных значений [9]. Матрица системы уравнений для решения (10) проще по сравнению с матрицей для (6). Она ленточная и, как показывает опыт, для нахождения константы регуляризации достаточно нескольких десятков решений системы уравнений, что значительно экономит время компьютерных расчетов.

Предлагаемую процедуру можно продемонстрировать на примере дифракционных исследований структурного фактора расплава меди при $T = 1393$ К [3]. На рис. 1 показаны графики правых частей (6) и (10), рассчитанных с использованием результатов работы [3], а также соответствующие им решения относительно $\varphi(r)$. При решении (10) использовано значение $\beta = 0.08 \text{ \AA}^{-2}$, которое обеспечивало требуемую точность. В качестве критерия оптимальности константы регуляризации

α использовано соотношение [9]

$$\left\| \alpha \frac{d\varphi_\alpha}{d\alpha} \right\| = \min_{\alpha > 0}. \quad (11)$$

При решении (6) оптимальное значение константы регуляризации, согласно (11), оказалась равным $\alpha_{\text{опт}} = 0.49$, тогда как при решении (10) для указанного значения β константа регуляризации была равной $\alpha_{\text{опт}} = 0.007$. Ее малая величина указывает на то, что введение весовой функции выполняет (за счет более короткодействующего ядра) дополнительную регуляризацию уравнения Тихонова (5). Тогда как ядро в уравнении (6) представляет собой пик с осциллирующими, слабо затухающими крыльями.

Сравнение представленных на рис. 1 кривых указывает на то, что хотя $\varphi(r)$, полученная при решении (10), и близка к значениям правой части (6), однако имеются заметные отклонения на переднем фронте первого пика (со стороны малых r), а также менее заметные отклонения при других значениях r . Эти отклонения связаны с отличием правой части (6) от истинной функции $\varphi(r)$, поскольку первая является сверткой с приближенным видом δ -функции Дирака (т. е. с функцией $\sin(s_m r)/(\pi r)$). Как отмечалось, результат этой свертки особенно заметен на крыльях главного пика правой части (6), где наблюдаются значительные осцилляции и, следовательно, более предпочтительным является использование решения (10). Кроме того, в решениях (6) и (10) при $\alpha = 0$, т. е. при отсутствии регуляризации, заметно возрастает осциллирующая компонента, а для решения (6) она значительна даже для значений α , оптимальных для решения (10). Аналогичная ситуация возникает при дифракционных исследованиях других макроскопических изотропных объектов.

Таким образом, введение весовой функции при нахождении функции распределения атомов методом регуляризации уравнения Тихонова в дифракционных задачах исследования макроскопически изотропных объектов позволяет значительно уменьшить осциллирующую компоненту, связанную с погрешностью измерений и наличием верхнего предела величины изменений волнового вектора. Тогда как при отсутствии весовой функции процедура получения приводит к размытию пиков функции распределения атомов.

Авторы выражают благодарность С.Г. Конникову, Р.Н. Кютту и Р.А. Сурису за полезные замечания. Работа поддержана проектом РФФИ № 18563.

Список литературы

- [1] *Физика простых жидкостей. Экспериментальные исследования* / Под ред. Г. Темперли и др. М.: Мир, 1973. 400 с.
- [2] *Lorch E.* // J. Phys. C. 1969. V. 2. P. 229–237.
- [3] *Eder O.J., Erdpresser E., Kunsch B.* et al. // J. Phys. E. 1980. V. 10. P. 183–195.
- [4] *Hosokawa S., Matsuoka T., Tamura K.* // J. Phys.: Cond. Mat. 1991. V. 3. P. 4443–4457.
- [5] *Сокольский В.Э., Казимиров В.П., Шовский В.А.* // Кристаллография. 1995. Т. 40. С. 989–991.
- [6] *Lee J.H., Owens A.P., Pradel A.* et al. // Phys. Rev. B. 1996. V. 54. P. 3895–3909.
- [7] *Тихонов А.Н., Арсенин В.Я.* Методы решения некорректных задач. М.: Наука, 1979. 288 с.
- [8] *Тихонов А.Н., Леонов А.С., Ягола А.Г.* Нелинейные некорректные задачи. М.: Наука, 1995. 311 с.
- [9] *Верлань А.Ф., Сизиков В.С.* Интегральные уравнения. Киев: Наук. думка, 1986. 544 с.