

УДК 538.9

## К ТЕОРИИ РЕНТГЕНОВСКОЙ ДИФРАКЦИОННОЙ ТОМОГРАФИИ КРИСТАЛЛОВ С НАНОРАЗМЕРНЫМИ ДЕФЕКТАМИ

© 2024 г. В. А. Григорьев<sup>а,\*</sup>, П. В. Конарев<sup>а</sup>, Ф. Н. Чуховский<sup>а</sup>, В. В. Волков<sup>а</sup>

<sup>а</sup>Институт Кристаллографии им. А. В. Шубникова, ФНИЦ “Кристаллография и фотоника” РАН, Москва, 119333 Россия

\*e-mail: vasilij.grigorev.1996@mail.ru

Поступила в редакцию 11.06.2023 г.

После доработки 22.07.2023 г.

Принята к публикации 22.07.2023 г.

Рентгеновская дифракционная томография – инновационный метод, который широко применяют для получения двумерных фаза-контрастных дифракционных изображений и последующей трехмерной реконструкции структурных дефектов в кристаллах. Наиболее частыми объектами исследования являются линейные и винтовые дислокации в кристалле. В этом случае наиболее информативными являются плоско волновые дифракционные изображения, поскольку они не содержат дополнительные интерференционные артефакты, не связанные с изображениями самих дефектов. В работе представлены результаты моделирования и анализа двумерных плосковолновых дифракционных изображений нанодефекта кулоновского типа в тонком кристалле Si(111) на основе построения численных решений динамических уравнений Такаги–Топена. Использовано адаптированное физическое выражение для поля упругих смещений точечного дефекта, исключаяющее сингулярность в точке расположения дефекта в кристалле. Предложен и применен в расчетах критерий, позволяющий оценить точность численных решений уравнений Такаги–Топена. Показано, что в случае поля упругих смещений дефекта кулоновского типа из двух разностных алгоритмов для решения уравнений Такаги–Топена, используемых при их численном решении, только алгоритм решения уравнений Такаги–Топена, в которых функция поля смещений входит в экспоненциальной форме, является приемлемым с точки зрения необходимой точности и длительности расчетов.

**Ключевые слова:** рентгеновская томография, точечный дефект кулоновского типа, двумерные дифракционные изображения, структурные дефекты, уравнения Такаги–Топена, трехмерная функция поля смещений дефекта.

DOI: 10.31857/S1028096024020102, EDN: AYBPMA

### ВВЕДЕНИЕ

Рентгеновская дифракционная томография – это метод исследования структурных дефектов в кристаллах с высокой пространственной разрешающей способностью и чувствительностью. В обзорной статье [1] описаны физические основы формирования секционных топограмм и приведены результаты моделирования двумерных изображений дислокаций, дефектов упаковки и квазиточечных дефектов в монокристалле кремния на основе численного решения уравнений Такаги–Топена. С целью улучшения трехмерной реконструкции дислокационных полупетель в кристалле кремния в работе [2] авторы применили метод непараметрического сглаживания с ядром

Хэмминга для фильтрации шумов на экспериментальных изображениях.

При численном моделировании распространения электромагнитных волн в кристаллах с дефектами используют динамические уравнения Такаги–Топена [3–5]. Например, эти уравнения использовали для анализа рентгеновской оптики и применили к синхротронному монохроматору с тепловой нагрузкой [6]. Численное моделирование дифракционных двумерных изображений скоплений включений и дислокаций широко применяли в ранних работах [7–13]. Так, трехмерная реконструкция дислокационной полупетли в кристалле кремния с использованием экспериментальных изображений была выполнена в работах

[2, 12]. Авторы работы [14] реконструировали трехмерные зерна в поликристаллических материалах, а также провели численное моделирование дифракционно-контрастных экспериментальных изображений зерен. В работах [15–17] методом компьютерной томографии была восстановлена трехмерная функция поля смещений точечного дефекта кулоновского типа в кристалле кремния с использованием полукинематического приближения теории дифракции. Следует отметить, что в недавней работе [18] были рассчитаны двумерные изображения точечных дефектов кулоновского типа в полуфеноменологической (полукинематической) теории дифракции в сильно поглощающем кристалле, а также проведено сравнение с экспериментальными топограммами микродефектов в кристалле  $ZnGeP_2$  (подробнее также в [19]).

В настоящей работе были приведены результаты численного расчета дифракционных двумерных изображений точечного дефекта кулоновского типа в кристалле кремния. Использовано адаптированное физическое выражение для поля упругих смещений, исключаяющее сингулярность в точке расположения дефекта в кристалле. Предложена оптимальная разностная схема решения уравнений Такаги–Топена с точки зрения точности и длительности численных расчетов, что позволило улучшить точность моделирования двумерных изображений в методе компьютерной рентгеновской дифракционной томографии.

### ТЕОРЕТИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ

Для проведения численных расчетов был взят программный код [11], который был адаптирован для целей настоящей работы. Алгоритм построен на основе решения уравнений Такаги–Топена:

$$\begin{aligned} -\frac{2i}{k} \frac{\partial D_0(s_0, s_h)}{\partial s_0} &= \chi_{\bar{h}} D_h(s_0, s_h) \exp(-i\mathbf{h}\mathbf{u}(\mathbf{r})), \\ -\frac{2i}{k} \frac{\partial D_h(s_0, s_h)}{\partial s_h} &= \chi_h D_0(s_0, s_h) \exp(i\mathbf{h}\mathbf{u}(\mathbf{r})), \end{aligned} \quad (1)$$

где  $k = 2\pi/\lambda$ ,  $\chi_h$  и  $\chi_{\bar{h}} = h$  и  $\bar{h}$ -я фурье-компоненты диэлектрической восприимчивости кристалла;  $D_0$  и  $D_h$  – амплитуды прошедшей и дифрагированной волн,  $s_0$  и  $s_h$  – единичные вектора, указывающие направление прошедшей и дифрагированной волн (рис. 1),  $\mathbf{h}$  – вектор дифракции,  $\mathbf{u}$  – поле смещений дефекта. Отклонение от точного условия Брэгга принято равным нулю:  $\alpha = (\mathbf{k}_h^2 - \mathbf{k}^2)/\mathbf{k}^2 = 0$ . Также результирующие амплитуды модулированы коэффициентом  $\exp(ik\chi_0(s_0 + s_h)/2)$ .

В общем случае уравнения также можно представить в другой форме, сделав подстановку  $D_h \rightarrow D_h \exp(i\mathbf{h}\mathbf{u}(s_0, s_h))$ :

$$\begin{aligned} -\frac{2i}{k} \frac{\partial D_0(s_0, s_h)}{\partial s_0} &= \chi_{\bar{h}} D_h(s_0, s_h), \\ -\frac{2i}{k} \frac{\partial D_h(s_0, s_h)}{\partial s_h} &= \chi_h D_0(s_0, s_h) - \\ & - \frac{2}{k} \frac{\partial (\mathbf{h}\mathbf{u}(s_0, s_h))}{\partial s_h} D_h(s_0, s_h). \end{aligned} \quad (2)$$

Встает вопрос: какую форму стоит использовать для того или иного случая и как оценить точность получаемых решений? Для этого из уравнений Такаги–Топена было выведено следующее выражение (см. Приложение):

$$\text{div}(I_0, I_h) = \frac{\partial I_0(s_0, s_h)}{\partial s_0} + \frac{\partial I_h(s_0, s_h)}{\partial s_h} = 0. \quad (3)$$

Дивергенция вектора  $\langle I_0, I_h \rangle$  равна нулю только в случае непоглощающего кристалла. При учете поглощения выражение становится громоздким и, вообще говоря, зависит от координат  $(s_0, s_h)$ . Очевидно, что при численном расчете дивергенция отличается от нуля, поскольку производные переходят к конечным разностям. Однако при уменьшении шага сетки она должна приближаться к нулю. Кроме того, результаты будут отличаться для разных форм уравнений Такаги–Топена, что позволит нам судить об адекватности результатов расчета по той или иной форме.

Для непосредственного расчета производные были преобразованы:

$$\begin{aligned} \frac{\partial D_0(s_0, s_h)}{\partial s_0} &\rightarrow \frac{D_0(X, S) - D_0(X + 2p\sin\theta, S - p)}{p}, \\ \frac{\partial D_h(s_0, s_h)}{\partial s_h} &\rightarrow \frac{D_h(X, S) - D_h(X, S - p)}{p}. \end{aligned}$$

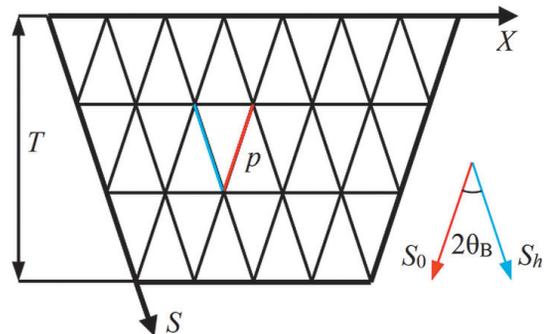


Рис. 1. Разностная сетка для расчета амплитуд прошедшей и дифрагированной волн в кристалле.  $T$  – толщина кристалла,  $p$  – шаг сетки.

Правые части уравнений (1) и (2) взяты в точке  $(X, S)$ . Координаты  $(s_0, s_h)$  переведены в  $(X, S)$  по следующему правилу (рис. 1):

$$s_0 = -X/2 \sin \theta, \quad s_h = X/2 \sin \theta + S.$$

Выражение для поля смещений дефекта было взято из [17], но с одним изменением, позволившем учитывать в расчетах поле в малой окрестности от центра дефекта:

$$\mathbf{u}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) = \frac{F}{4\pi} \frac{\mathbf{r} - \mathbf{r}_0}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|^3 + \varepsilon^3}, \quad (4)$$

где  $F = 0.001$  мкм<sup>3</sup> – константа, характеризующая степень упругости в приближении изотропного упругого континуума;  $\varepsilon = 0.4$  мкм – характерный размер дефекта [20],  $\mathbf{r}_0 = (0, 0, 0)$  – координаты центра дефекта.

Как видно из выражения (4), функция поля смещений непрерывная и гладкая, в ней совмещены кулоновская составляющая, которая преобладает при больших  $\mathbf{r}$ , а также линейная часть при малых  $\mathbf{r}$ . Граница между этими областями регулируется параметром  $\varepsilon$ . Таким образом, выражение может использоваться как для микродефектов, так и для точечных дефектов.

Координаты  $(x, y, z)$  поля смещений связаны с координатами  $(X, Y, S)$  следующим образом:

$$\begin{aligned} x &= X + S \sin \theta - T \operatorname{tg} \theta - \Delta X/2, \\ y &= Y, \quad z = S \cos \theta - T/2. \end{aligned} \quad (5)$$

где  $\Delta X$  – длина расчетной области по  $X$ . При этом производная от поля смещений в (2) преобразуется как:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathbf{h}\mathbf{u}(s_0, s_h)}{\partial s_h} &= \frac{\partial \mathbf{h}\mathbf{u}(X, Y, S)}{\partial S} = \\ &= \sin \theta \frac{\partial \mathbf{h}\mathbf{u}(x, y, z)}{\partial x} - \cos \theta \frac{\partial \mathbf{h}\mathbf{u}(x, y, z)}{\partial z}. \end{aligned}$$

В качестве объекта исследования была выбрана кристаллическая пластинка Si(111) (рис. 2) толщиной  $T = \Lambda = \lambda \cos \theta / \operatorname{Re}(\chi_h \chi_{\bar{h}})^{1/2} = 36.287$  мкм, где  $\Lambda$  – длина экстинкции,  $\theta = 10.65^\circ$  – угол Брэгга,

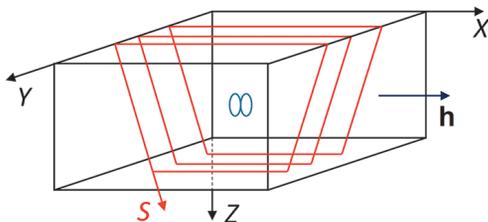


Рис. 2. Схематическое изображение кристалла.

$\lambda = 0.709$  Å – длина волны рентгеновского излучения;  $\chi_{\bar{h},h} = -1.9209 \times 10^{-6} + i1.5496 \times 10^{-8}$ ,  $\chi_0 = -3.1745 \times 10^{-6} + i1.6059 \times 10^{-8}$  – фурье-компоненты диэлектрической восприимчивости, дифракционное отражение  $\mathbf{h} = [2, \bar{2}, 0]$ . Координаты  $X$  и  $Y$  меняются в пределах от  $-\Lambda$  до  $\Lambda$ ,  $S$  меняется от 0 до  $\Lambda/\cos \theta$ .

Центр дефекта расположен в центре кристалла. В качестве топограммы взяты значения интенсивности на нижней границе разностной сетки (рис. 2).

Дивергенцию рассчитывали на основе вычисленных значений интенсивности в плоскости  $Y = 0$ , поскольку в области центра дивергенция максимальна.

## РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Для адекватности расчетов шаг сетки  $p = 0.054$  мкм был выбран таким образом, чтобы при расчете амплитуд волн для идеального кристалла результаты отличались от аналитических не более, чем на 1%. Уравнения (1) и (2) условно назовем типами 1 и 2 соответственно. В настоящей работе представлены результаты расчетов для непоглощающего кристалла ( $\operatorname{Im}(\chi_0, \chi_{\bar{h},h}) = 0$ ), поскольку в этом случае возможно сравнение значений дивергенции с нулевым значением. Изображения, рассчитанные для обоих типов уравнений, показаны на рис. 3. Видно, что изображения сильно

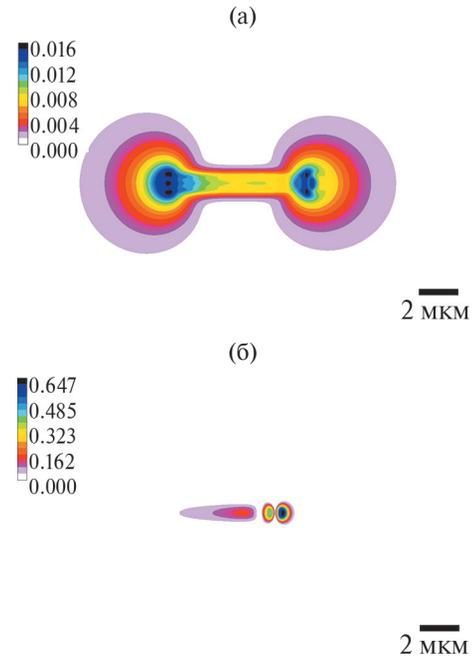


Рис. 3. Изображения дефекта, рассчитанные с помощью уравнений Такаги–Топена типа 1 (а) и 2 (б). На цветовой шкале обозначено значение интенсивности.

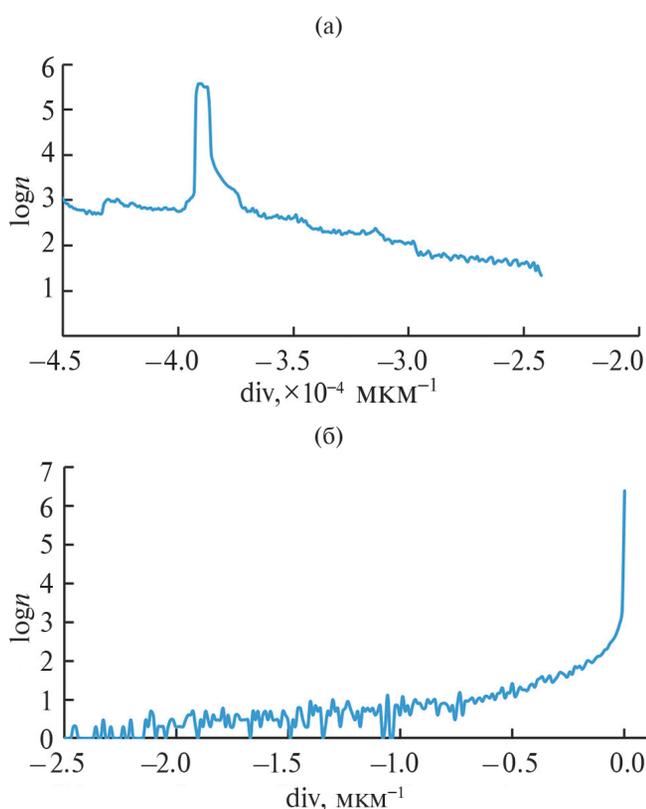
отличаются. Распределение интенсивности, рассчитанное для типа 1, более широкое и имеет более низкое значение максимума, в то время, как для типа 2 распределение узкое, а максимальное значение интенсивности выше более, чем на порядок.

Такое различие можно объяснить с помощью критерия дивергенции, который указывает на качество численного расчета. Идеальное значение  $\text{div}(I_0, I_h) = 0$ . На рис. 4 показано распределение числа точек, взятых в плоскости  $Y = 0$ , по значениям дивергенции. Заметно, что для уравнений типа 1 значения дивергенции составляют  $\sim 10^{-4}$ . Пик на значении  $-3.89 \times 10^{-4}$  соответствует дивергенции для идеального кристалла в его центре. Напротив, уравнения типа 2 демонстрируют значительные отклонения от нулевого значения дивергенции. Хотя большая часть точек лежит в области  $\sim 10^{-6}$ , наиболее существенными являются предельные значения дивергенции. Это связано с тем, что решение уравнений Такаги–Топэна носит причинно-следственный характер: значения амплитуд волн в каждом слое  $S = m$  зависят от значений в предыдущем слое  $S = m - 1$  ( $m$  – целое). Таким образом, если в некоторой области значения дивергенции далеки от нулевого, то есть значения

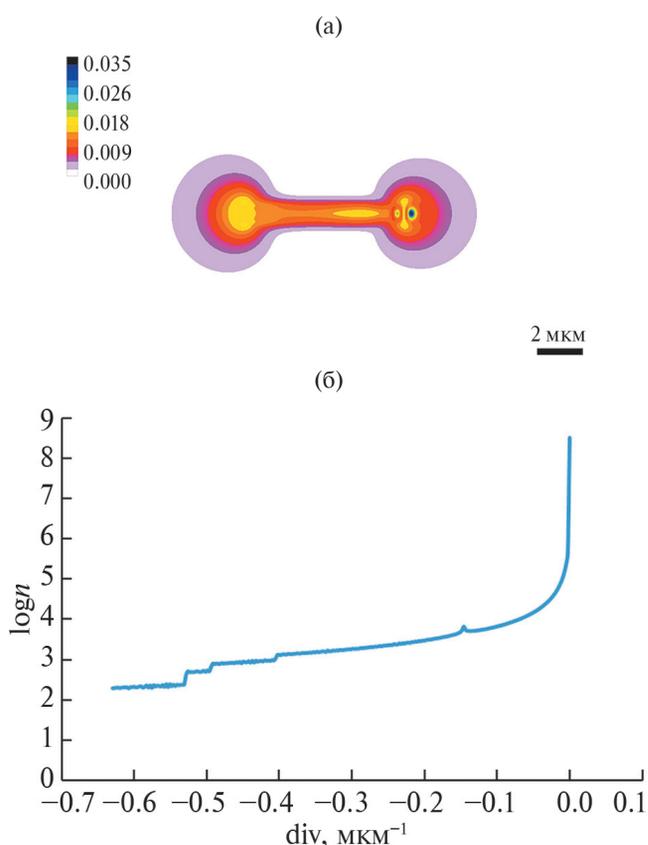
амплитуд волн в этой области имеют большие погрешности, то все значения амплитуд, зависящих от данных, также будут обладать большими погрешностями, даже если им соответствуют близкие к нулю значения дивергенции.

Поскольку выбор типа уравнений не может влиять на истинность результатов вычислений, то тип 2 должен при определенных условиях давать те же результаты, что и тип 1. Единственным параметром, который можно изменить, является шаг сетки. Для второго типа уравнений дополнительно получено изображение дефекта и распределение по значениям дивергенции при шаге  $p = 0.0027$  мкм (уменьшено в 20 раз) (рис. 5).

При уменьшении шага в 20 раз максимальное абсолютное значение дивергенции уменьшилось приблизительно в 5 раз. При этом качественно топограмма достаточно близка к топограмме для типа 1. Можно предположить, что при дальнейшем уменьшении шага результат расчета для уравнений типа 2 будет приближаться к случаю 1. Действительно, из уравнений типа 2 в координатах  $(X, S)$  можно вывести выражение для дивергенции в развернутом виде:



**Рис. 4.** Распределение числа  $n$  точек в плоскости расчетной сетки  $Y = 0$  по значениям дивергенции. Значения дивергенции сгруппированы на 255 диапазонов. а) тип 1, б) тип 2. Шаг сетки  $p = 0.054$  мкм.



**Рис. 5.** Топограмма дефекта (а) и распределение по значениям дивергенции (б) для уравнений типа 2 и шага сетки  $p = 0.0027$  мкм.

$$\begin{aligned} \operatorname{div}(I_0, I_h) &= \\ &= \frac{I_0(X, S) - I_0(X + 2p \sin \theta, S - p) + I_h(X, S) - I_h(X, S - p)}{p} = \\ &= -p \frac{\left(\frac{\partial f}{\partial S}\right)^2 I_h + \frac{k\chi_h}{2} \sqrt{2I_0 I_h} \frac{\partial f}{\partial S}}{1 + p^2 \left(\frac{\partial f}{\partial S}\right)^2} \approx -p \frac{\left(\frac{\partial f}{\partial S}\right)^2}{1 + p^2 \left(\frac{\partial f}{\partial S}\right)^2}. \end{aligned} \quad (6)$$

где  $f = \mathbf{h}\mathbf{u}$ ,  $I_{0,h} = D_{0,h} D_{0,h}^*$ . При упрощении выражения (6) принято во внимание то, что второе слагаемое в числителе меньше первого на 3 порядка, а  $I_h \approx 1$  в центре кристалла. Именно в центральной области дивергенция максимальна по абсолютному значению. Следует отметить, что максимальное значение дивергенции является функцией одной переменной  $p$ , поскольку максимальное значение производной  $f$  не зависит от  $p$ .

Из выражения (6) видно, что дивергенция зависит нелинейно от шага  $p$ , а для наших данных модуль дивергенции как функция от  $p$  является монотонно возрастающей до  $p = 0.054$  мкм. Таким образом, дальнейшее уменьшение шага действительно уменьшает значение дивергенции и, как следствие, приближает результаты по типу уравнений 2 к типу 1. Решая уравнение (6) относительно  $p$ , можно получить, что дивергенция достигает значения  $\sim 10^{-4}$  при  $p \sim 10^{-6}$ . Такой малый шаг свидетельствует о нецелесообразности использования вида уравнений 2 для численного расчета топограммы точечного дефекта.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В настоящей работе использована новая разностная схема для решения уравнений Такаги–Топена в случае численного расчета дифракционных двумерных изображений точечного дефекта кулоновского типа в кристалле кремния Si(111). Применено физически адаптированное выражение для поля смещений дефекта, которое позволило исключить сингулярность в точке его расположения в кристалле. Проведен анализ точности численных решений Такаги–Топена в стандартной форме типа (1) и (2). Предложен и использован критерий точности численных решений на основании свойств уравнений Такаги–Топена для непоглощающего кристалла. Показано, что расчеты по уравнениям Такаги–Топена типа (2) плохо сходятся, в то время как расчеты по уравнениям Такаги–Топена типа (1) приводят к решениям, обладающим приемлемой точностью с точки зрения достоверности и времени проводимых расчетов. Из проведенного в работе

исследования следует, что расчеты по уравнениям Такаги–Топена типа (1) являются на данный момент ключевыми для получения дифракционных двумерных изображений в методе компьютерной рентгеновской дифракционной томографии.

## ПРИЛОЖЕНИЕ

Выведем выражение для дивергенции вектора  $\langle I_0, I_h \rangle$  для непоглощающего кристалла из уравнений Такаги–Топена. Для этого умножим первое и второе уравнение системы (1) на комплексно-сопряженные  $D_0^*$  и  $D_h^*$ :

$$\begin{aligned} -\frac{2i}{k} \frac{\partial D_0}{\partial s_0} D_0^* &= \chi_{\bar{h}} D_h D_0^* \exp(-i\mathbf{h}\mathbf{u}), \\ -\frac{2i}{k} \frac{\partial D_h}{\partial s_h} D_h^* &= \chi_h D_0 D_h^* \exp(i\mathbf{h}\mathbf{u}). \end{aligned} \quad (7)$$

Аргументы функций опущены для наглядности и компактности выражений. Поскольку мы не учитываем поглощение, то мнимые части  $\chi_h$  и  $\chi_{\bar{h}}$  равны нулю, то есть они не изменятся при комплексном сопряжении. В таком случае, вычитая уравнения (7) из комплексно-сопряженных, получим:

$$\begin{aligned} \frac{2i}{k} \left( \frac{\partial D_0}{\partial s_0} D_0^* + \frac{\partial D_0^*}{\partial s_0} D_0 \right) &= \\ = C\chi_{\bar{h}} \left( D_h^* D_0 \exp(i\mathbf{h}\mathbf{u}) - D_h D_0^* \exp(-i\mathbf{h}\mathbf{u}) \right), \\ \frac{2i}{k} \left( \frac{\partial D_h}{\partial s_h} D_h^* + \frac{\partial D_h^*}{\partial s_h} D_h \right) &= \\ = C\chi_h \left( D_0^* D_h \exp(-i\mathbf{h}\mathbf{u}) - D_0 D_h^* \exp(i\mathbf{h}\mathbf{u}) \right). \end{aligned} \quad (8)$$

Учитывая, что  $\chi_{\bar{h}} = \chi_h$ , а также очевидное соотношение:

$$\frac{\partial D_i}{\partial s_i} D_i^* + \frac{\partial D_i^*}{\partial s_i} D_i = \frac{\partial (D_i^* D_i)}{\partial s_i} = \frac{\partial I_i}{\partial s_i}, i = 0, h;$$

сложив уравнения (8), получим:

$$\frac{2i}{k} \left( \frac{\partial I_0}{\partial s_0} + \frac{\partial I_h}{\partial s_h} \right) = 0$$

или

$$\operatorname{div}(I_0, I_h) = \frac{\partial I_0(s_0, s_h)}{\partial s_0} + \frac{\partial I_h(s_0, s_h)}{\partial s_h} = 0.$$

Отметим, что выражение справедливо как для дефектного, так и для идеального кристалла, а также в случае неточного условия Брэгга ( $\alpha \neq 0$ ), однако только для непоглощающего кристалла. В случае поглощающего кристалла дивергенция, вообще говоря, зависит от координат  $(s_0, s_h)$ .

## БЛАГОДАРНОСТИ

Работа выполнена в рамках Государственного задания ФНИЦ “Кристаллография и фотоника” РАН.

**Конфликт интересов.** Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Шульпина И.Л., Суворов Э.В., Смирнова И.А., Аринунова Т.С. // Журнал технической физики. 2022. Т. 92. № 10. С. 1475.  
<https://www.doi.org/10.21883/JTF.2022.10.53240.23-22>
2. Золотов Д.А., Асадчиков В.Е., Бузмаков А.В., Волков В.В., Дьячкова И.Г., Конарев П.В., Григорьев В.А., Суворов Э.В.  
<https://www.doi.org/10.3367/UFNr.2022.05.039199>.
3. Takagi S. // Acta Cryst. 1962. V. 15. P. 1311.  
<https://www.doi.org/10.1107/S0365110X62003473>
4. Takagi S. // J. Phys. Soc. Jpn. 1969. V. 26. № 5. P. 1239.  
<https://www.doi.org/10.1143/JPSJ.26.1239>
5. Taupin D. // Bulletin de la Société française de Minéralogie et de Cristallographie. 1964. V. 87. № 4. P. 469.  
<https://doi.org/10.3406/bulmi.1964.5769>
6. Mocella V., Lee W.-K., Tajiri G., Mills D., Ferrero C., Epelboin Y. // J. Appl. Cryst. 2003. V. 36. P. 129.  
<https://www.doi.org/10.1107/S0021889802020526>
7. Epelboin Y., Ribet M. // Phys. Stat. Solidi A. 1974. V. 25. P. 507.  
<https://www.doi.org/10.1002/pssa.2210250217>
8. Epelboin Y. // Mater. Sci. Engineer. 1985. V. 73. P. 1.  
[https://www.doi.org/10.1016/0025-5416\(85\)90294-0](https://www.doi.org/10.1016/0025-5416(85)90294-0)
9. Holy V. // Phys. Stat. Solidi B. 1982. V. 111. P. 341.  
<https://www.doi.org/10.1002/pssb.2221110139>
10. Holy V. // Phys. Stat. Solidi B. 1982. V. 112. P. 161.  
<https://www.doi.org/10.1002/pssb.2221120118>
11. Besedin I.S., Chukhovskii F.N., Asadchikov V.E. // Cryst. Rep. 2014. V. 59. P. 323.  
<https://www.doi.org/10.1121/1.5138606>
12. Asadchikov V., Buzmakov A., Chukhovskii F., Dyachkova I., Zolotov D., Danilewsky A., Baumbach T., Bode S., Naaga S., Hänschke D., Kabukcuoglu M., Balzer M., Caselle M., Suvorov E. // J. Appl. Cryst. 2018. V. 51. P. 1616.  
<https://www.doi.org/10.1107/S160057671801419X>
13. Золотов Д.А., Асадчиков В.Е., Бузмаков А.В., Дьячкова И.Г., Суворов Э.В. // ЖЭТФ. 2021. Т. 113. № 3. С. 161.  
<https://www.doi.org/10.31857/S1234567821030046>
14. Reischig P., King A., Nervo L., Vigano N., Guilhem Y., Palenstijn W.J., Batenburg K.J., Preussdand M., Ludwig W. // J. Appl. Cryst. 2013. V. 46. P. 297.  
<https://www.doi.org/10.1107/S0021889813002604>
15. Chukhovskii F.N., Konarev P.V., Volkov V.V. // Sci. Rep. 2019. V. 9. № 14216.
16. Chukhovskii F.N., Konarev P.V., Volkov V.V. // Cryst. Rep. 2019. V. 64. № 2.  
<https://www.doi.org/10.1134/S1063774519020172>
17. Chukhovskii F.N., Konarev P.V., Volkov V.V. // Acta Cryst. A. 2020. V. 76. P. 163.  
<https://www.doi.org/10.1107/S2053273320000145>
18. Lei Z., Okunev A., Zhu C., Verozubova G., Yang C. // J. Crystal Growth. 2020. V. 534. № 125487.  
<https://www.doi.org/10.1016/j.jcrysgro.2020.125487>
19. Lei Z., Okunev A., Zhu C., Verozubova G., Yang C. // J. Appl. Cryst. 2018. V. 51. P. 361.
20. Кривоглаз М.А. Дифракция рентгеновских лучей и нейтронов в неидеальных кристаллах. Киев: Наукова думка, 1983. 408 с.

## Towards to Theory of the X-ray Diffraction Tomography of Crystals with Nano Sized Defects

V. A. Grigorev<sup>1,\*</sup>, P. V. Konarev<sup>1</sup>, F. N. Chukhovskii<sup>1</sup>, V. V. Volkov<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Shubnikov Institute of Crystallography FSRC “Crystallography and Photonics” RAS, Moscow, 119333 Russia

\*e-mail: vasilii.grigorev.1996@mail.ru

X-ray diffraction tomography is an innovative method that is widely used to obtain 2D-phase-contrast diffraction images and their subsequent 3D-reconstruction of structural defects in crystals. The most frequent objects of research are linear and helical dislocations in a crystal, for which plane wave diffraction images are the most informative, since they do not contain additional interference artifacts unrelated to the images of the defects themselves. In this work the results of modeling and analysis of 2D plane wave diffraction images of a nano-dimensional Coulomb-type defect in a Si(111) thin crystal are presented based on the construction of numerical solutions of the dynamic Takagi-Taupin equations. An adapted physical expression for the elastic displacement field of the point defect, which excludes singularity at the defect location in the crystal, is used. A criterion for evaluating the accuracy of numerical solutions of the Takagi-Taupin equations is proposed and used in calculations. It is shown that in the case of the Coulomb-type defect elastic displacement field, out of the two difference algorithms for solving the Takagi-Taupin equations used in their numerical solution, only the algorithm for solving the Takagi-Taupin equations where the displacement field function enters in exponential form is acceptable in terms of the required accuracy-duration of the calculations.

**Keywords:** X-ray tomography, Coulomb-type point defect, 2D diffraction images, structural defects, Takagi-Taupin equations, 3D function of the defect displacement field.