<sup>1</sup> Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт» <sup>2</sup> Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова

# Корректировка изображения в методе фазового контраста Цернике для жесткого рентгеновского излучения

Проведено численное моделирование эксперимента по визуализации прозрачных (фазовых) микрообъектов с использованием метода фазового контраста Цернике в жестком рентгеновском излучении. В расчетах использованы параметры пучков, характерные для источников синхротронного излучения третьего поколения. В качестве фокусирующего элемента рассмотрена преломляющая параболическая линза. Фазосдвигающая четвертьволновая пластинка расположена в области изображения точечного источника. Показано, что изображение объектов может быть скорректировано путем деления регистрируемого детектором профиля интенсивности на профиль интенсивности, формируемый сразу за линзой из-за поглощения.

**Ключевые слова:** численное моделирование, жесткое рентгеновское излучение, фазовый контраст Цернике, преломляющая параболическая линза, фазосдвигающая четвертьволновая пластинка, корректировка изображения.

## І. Введение

В последние 15 лет активно развивается метод рентгеновского фазового контраста, позволяющий неразрушающим образом исследовать внутреннюю структуру слабопоглощающих некристаллических объектов. Различают две основных разновидности этого метода: метод фазового контраста с кристаллом-анализатором [1], применяющийся для исследования объектов субмиллиметровых размеров и имеющий принципиальное ограничение по разрешению, составляющее несколько микрон, и метод фазового контраста в in-line схеме [2], применяющийся для исследования объектов с меньшими размерами и требующий высокой степени когерентности падающего пучка рентгеновского излучения. Принципиально другим подходом является использование метода фазового контраста Цернике для жесткого рентгеновского излучения. На данный момент не сделано ни одного эксперимента, в котором этот метод применялся бы с преломляющей линзой в качестве объектива. В опубликованных работах объективом служила более распространенная в рентгенооптических исследованиях зонная пластинка [3-5]. В работе [6] был проведен теоретический анализ соответствующих экспериментов, показавший, что зонная пластинка обладает худшим разрешением (около 3 мкм), чем преломляющая линза, позволяющая получить разрешение меньше 1 мкм. Это объясняется наличием у зонной пластинки большого количества порядков фокусировки. Тем не менее из результатов работы следовало, что рентгеновская преломляющая линза обладает существенным недостатком, а именно плохо изображает объекты, удаленные от центра апертуры. Это связано с тем, что толщина линзы на краях существенно больше, чем в центре, и значительная часть излучения, проходящего через края апертуры, поглощается. Однако, как оказалось, изображение легко скорректировать путем деления регистрируемого детектором профиля интенсивности на профиль интенсивности, формируемый сразу за линзой из-за поглощения. Удивительный факт заключается в том, что при этом не только выравнивается фон, но и контраст выравнивается сам собой. Такая корректировка позволит, в частности, наблюдать с помощью метода Цернике движущиеся объекты субмиллиметрового размера. Таким образом, линза в качестве объектива превосходит зонную пластинку, поскольку обладает лучшим разрешением и после корректировки позволяет получить неискаженное изображение вдоль практически всей апертуры.

### II. Метод расчета

При решении задач распространения жесткого рентгеновского излучения с высокой точностью выполняется параксиальное приближение. При этом перенос волновой функции излучения в воздухе описывается с помощью интегральной формы Кирхгофа для решения уравнения Максвелла. Пусть ось z декартовой системы координат направлена вдоль оптической оси, то есть вдоль распространения пучка излучения. Задача состоит в вычислении зависимости амплитуды волнового поля от поперечных координат x и y в каждой точке на оси z. При этом характерный интервал существенного изменения волнового поля вдоль оси z равен десяткам сантиметров, в то время как в поперечных направлениях волновое поле меняется на расстояниях в несколько микрон и меньше. Так как поляризация в рассматриваемых нами процессах не

УДК 548.73

изменяется, то достаточно ограничиться скалярной волновой функцией поля. Более того, для упрощения задачи мы будем рассматривать только одномерные объекты, однородные вдоль оси *y*.

Пусть  $E_1(x)$  — волновая функция в точке  $z_1$ . Тогда волновая функция E(x) в точке z при условии, что между  $z_1$  и z нет объектов, определяется следующим образом:

$$E(x) = \int dx_1 P(x - x_1, z - z_1) E_1(x_1), \quad P(x, z) = \frac{1}{(i\lambda z)^{1/2}} \exp\left(i\pi \frac{x^2}{\lambda z}\right).$$
(1)

Здесь P(x, z) — пропагатор Кирхгофа в параксиальном приближении,  $\lambda$  — длина волны излучения. Что касается объектов, то если их продольные размеры не слишком сильно отличаются от поперечных, мы можем пренебречь изменением траектории лучей при прохождении объекта, поскольку углы рассеяния весьма малы (обычно — десятки микрорадиан). При этом можно пренебречь длиной объекта вдоль оптической оси и считать его плоским в плоскости его середины. Тогда взаимодействие излучения с таким объектом описывается путем умножения волновой функции поля излучения на так называемую трансмиссионную функцию:

$$T(x) = \exp\left(-i[\delta - i\beta]\frac{2\pi}{\lambda}t(x)\right),\tag{2}$$

где t(x) — локальное изменение толщины объекта вдоль оси z, при условии, что он состоит из одного материала, а  $\delta$  и  $\beta$  — действительная и мнимая части комплексного показателя преломления  $n = 1 - \delta + i\beta$  материала, из которого состоит объект.

Вычисления начинаются с точечного источника. Волновая функция в плоскости источника формально может быть взята в виде дельта-функции  $E_0(x) = \delta(x)$ . Подставляя это в (1), сразу получаем волновую функцию перед исследуемым объектом в виде пропагатора Кирхгофа  $E_1(x) = P(x, r_1)$ , где  $r_1$  — расстояние от источника до объекта. Далее необходимо умножить волновую функцию на трансмиссионную функцию объекта, в которой учесть конкретный вид зависимости t(x), и применить формулу (1) еще раз. Однако в формуле (1) пределы интегрирования бесконечные, в то время как в конкретных численных расчетах область интегрирования конечна. Поэтому для проведения расчетов мы будем предполагать, что трансмиссионная функция не меняется за пределами конкретной области интегрирования и равна константе, то есть  $T(x) = T_0$ , где  $T_0$  описывается формулой (2) при  $t(x) = t_0$ . В частности, может быть  $t_0 = 0$ . Тогда интеграл (1) можно преобразовать к виду

$$E_2(x) = T_0 P(x, r_2) + \int dx_1 P(x - x_1, r_2 - r_1) [T(x)E_1(x_1) - T_0 P(x_1, r_1)].$$
(3)

В этой формуле  $r_2$  — расстояние от точки наблюдения до источника. Кроме того, в общем случае предполагается, что  $E_1(x) = P(x, r_1)$  за пределами области интегрирования. В первом расчете это равенство выполняется и внутри области интегрирования, но при следующих расчетах ситуация более сложная.

В первом расчете  $r_2$  равно расстоянию от источника до фокусирующей линзы (рис. 1). Затем расчет по формуле (3) нужно повторить с новым объектом в виде фокусирующей линзы. При этом надо сделать замену  $r_2 \to r_3$ ,  $r_1 \to r_2$ , где  $r_3$  — расстояние от источника до плоскости его фокусировки, в которой стоит фазосдвигающий элемент. В случае двояковогнутой преломляющей параболической линзы  $t(x) = x^2/R$ , где R — радиус кривизны у вершины параболы. В данном случае бесконечные пределы интегрирования эффективно обрезаются из-за поглощения в линзе, если линза на краях апертуры достаточно толстая. В третьем расчете объектом является фазосдвигающий элемент с размерами порядка размера пучка в фокусе линзы. В этом случае в формуле (3) надо сделать замену  $r_2 \to r_4$ ,  $r_1 \to r_3$ , где  $r_4$  — расстояние от источника до координатного детектора.

Интеграл (3) представляет собой свертку двух комплексных функций, и его прямой расчет является достаточно сложной задачей. Поэтому расчет проводился с использованием преобразования Фурье. Сначала вычислялся фурье-образ функции в квадратных скобках, затем он умножался на фурье-образ пропагатора Кирхгофа, который имеет аналитический вид  $P(q, r) = exp(-i\lambda r q^2/4\pi)$ , и вычислялось обратное преобразование Фурье. Преобразование Фурье рассчитывалось с использованием известной процедуры быстрого преобразования Фурье [7].

#### III. Схема численного эксперимента, результаты и выводы

Численный эксперимент был проведен в соответствии со схемой, изображенной на рис. 1. Источник жесткого рентгеновского излучения с размером  $S_0$  удален от объекта наблюдения 1 на расстояние  $r_1$ . Объект 1 находится на двойном фокусном расстоянии от рентгеновской преломляющей линзы 2, то есть  $r_2 - r_1 = 2F$ . Фазосдвигающая пластинка 3 помещается в точке изображения источника  $r_3 = r_2 + F/(1 - F/r_2)$ , определяемой по формуле линзы. Детектор 4 располагается на расстоянии  $r_4 - r_2 = 2F$  от линзы, вследствие чего изображение получается перевернутым и без увеличения.

Для расчетов были выбраны стандартные параметры синхротронных источников 3-го поколения, а именно расстояние от источника до объекта  $r_1 = 50$  м и размер источника  $S_0 = 50$  мкм. В качестве объектива была рассмотрена бериллиевая линза со следующими параметрами: фокусное расстояние F = 20 см, длина линзы p = 5 см, радиус кривизны линзы  $R_0 = 0.88$  мкм, геометрическая апертура  $A_0 = 400$  мкм. Расчеты проводились для энергии падающего излучения E = 12.4 кэВ, что соответствует длине волны  $\lambda = 0.1$  нм. Источник является некогерентным в том смысле, что каждая его точка светит независимо по фазе. Так как источник имеет конечный размер  $S_0$ , то его изображение в фокусе также будет иметь определенный размер  $S = S_0(r_3 - r_2) / (r_1 + r_2)$ , и в нашем случае этот размер равен 0,2 мкм, что превышает размер пучка при фокусировке точечного источника (дифракционный предел).

Учет размеров источника проводился вычислением свертки распределения конечной интенсивности от точечного источника с гауссовой кривой, полуширина которой равна  $S_d = S_0(r_4 - r_2) / (r_1 + r_2)$ . Радиус фазосдвигающей пластинки также подбирался с учетом значения S. Чтобы выделить изображение объекта в чистом виде, в экспериментах часто применяют специальный прием, а именно записывают изображение в отсутствие объекта и с объектом и затем вычитают первое изображение из второго. При построении графиков распределения интенсивности мы использовали такой же прием, то есть для получения изображения объектов из полного профиля интенсивности проводилось вычитание профиля интенсивности, формируемого линзой в отсутствие объекта.

В работе [6] утверждалось, что качество изображения объектов заметно ухудшается при удалении объектов от центра апертуры. Однако оказалось, что изображение легко восстановить путем деления профиля интенсивности, формируемого линзой, на функцию поглощения в линзе exp  $(-A[4\pi x^2/\lambda R_0]\beta)$ , где  $\beta = 5,19 \cdot 10^{-10}$  — индекс поглощения для бериллия. Из рис. 2 видно, что при этом изображение восстанавливается на значительной части апертуры. Поясним значение коэффициента A. Как оказалось, внесение фазовой пластинки само по себе приводит к некоторому искажению профиля интенсивности в плоскости изображения (рис. 3). Он опускается в центре и поднимается на краях. Такое поведение не имеет простой интерпретации, однако ясно, что в силу закона сохранения энергии интегральная интенсивность должна сохраняться. Поскольку нашей целью является получение правильного изображения объектов, в показатель экспоненты следует добавить множитель A, немного меньший 1 (в нашем случае — 0,95). Понятно, что реальные линзы будут неидеальными. И если отклонение от идеальности будет велико, то наилучший вид корректирующей функции можно будет определять непосредственно из эксперимента, беря тестовый образец с известными параметрами и определяя, как искажается его изображение в разных точках х.

Таким образом, линза, будучи более точным оптическим инструментом, чем зонная пластинка, обладает несомненными преимуществами перед зонной пластинкой и в рентгеновском диапазоне, однако здесь необходимо учитывать ее специфику, а именно сильное поглощение на краях, и делить результирующий профиль интенсивности на функцию поглощения в линзе.

#### Литература

**1.** Ингал В.В., Беляевская Е.А. Метод фазодисперсионной интроскопии // ЖТФ. — 1997. — Т. 61, вып. 1. — С. 68–77.

**2.** Snigirev A., Snigireva I., Kohn V., Kuznetsov S., Schelokov I. On the possibilities of x-ray phase contrast microimaging by coherent high-energy synchrotron radiation // Rev. Sci. Instrum. - 1995. - V. 66, N. 12. - P. 5486-5492.

**3.** Awaji M., Suzuki Y., Takeuchi A., Takano H., Kamijo N., Tamuraa S., Yasumoto M.. Zernike-type X-ray imaging microscopy at 25 keV with Fresnel zone plate optics // J. Synchrotron Rad. - 2002. - N. 9. - P. 125-127.

4. Hiroki Yokosuka, Norio Watanabe, Takuji Ohigashi, Yasutoshi Yoshida, Shunichi Maeda, Sadao Aoki, Yoshio Suzuki, Akihisa Takeuchi, Hidekazu Takano. Zernike-type phase-contrast hard X-ray microscope with a zone plate at the Photon Factory // J. Synchrotron Rad. - 2002. - N. 9. - P. 179-181.

5. Chu Y.S., Yi J.M., De Carlo F., Shen Q., Lee Wah-Keat, Wu H.J., Wang C.L., Wang J.Y., Liu C.J., Wang C.H., Wu S.R., Chien C.C., Hwu Y., Tkachuk A., Yun W., Feser M., Liang K.S., Yang C.S., Je J.H., Margaritondo G. Hard-x-ray microscopy with Fresnel zone plates reaches 40 nm Rayleigh resolution // Appl. Phys. Lett. - 2008. - N. 92, 103119-103121.

**6.** Кон В.Г., Орлов М.А. Численное моделирование фазового контраста Цернике в жестком рентгеновском излучении с использованием преломляющих линз и зонных пластинок // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. — 2010. — Вып. 11. — С. 76–81.

7. Интернет-pecypc : http://alglib.sources.ru/fft



Рис. 1. Схема фазового контраста Цернике при использовании преломляющей линзы. Почти параллельный пучок СИ падает слева. 1— объект, 2— преломляющая линза, 3— фазосдвигающая пластинка, 4— координатный детектор. При изображении без увеличения объект и детектор ставятся на двойном фокусном расстоянии от линзы, а фазосдвигающая пластинка— в точке фокусировки источника



Рис. 2. Изображение параболической преломляющей линзой с апертурой 400 мкм серии кремниевых объектов прямоугольной и эллиптической формы, с продольными размерами 0,5 и 0,1 мкм: (а) до корректировки; (б) после корректировки. Во втором случае все объекты, кроме крайних, изображаются без существенных искажений



