

ДИФРАКЦИЯ И РАССЕЯНИЕ ИОНИЗИРУЮЩИХ ИЗЛУЧЕНИЙ

УДК 548.732

СТАТИСТИЧЕСКАЯ ТЕОРИЯ ФОРМИРОВАНИЯ РЕНТГЕНОДИФРАКЦИОННОГО ФАЗОВОГО КОНТРАСТА

© 2023 г. В. А. Бушуев^{1,*}

¹ *Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия*

**E-mail: vabushuev@yandex.ru*

Поступила в редакцию 10.01.2023 г.

После доработки 10.01.2023 г.

Принята к публикации 18.01.2023 г.

Проведено последовательное рассмотрение формирования рентгенодифракционного фазового контраста слабопоглощающих некристаллических объектов со статистически распределенными мелкомасштабными неоднородностями плотности при падении рентгеновского излучения с произвольной степенью пространственной когерентности и с учетом изменения статистических характеристик этого излучения в процессе брэгговского дифракционного отражения от монохроматора и анализатора. Дано объяснение явлениям повышения и/или уменьшения величины фазового контраста от областей с хаотически распределенными микрокальцинами в зависимости от их средне-квадратичных размеров, величины относительного декремента преломления, длин пространственной когерентности излучения и корреляции фазы в результате дифракционно усиленного диффузного рассеяния.

DOI: 10.31857/S002347612370008X, EDN: XAQCWX

ВВЕДЕНИЕ

Традиционная рентгенография (рентгеновская интроскопия), основанная на регистрации абсорбционных изображений, ограничена в чувствительности и не способна обеспечить уверенное распознавание внутренних органов живых организмов без применения контрастирующих веществ, в качестве которых обычно используются соли бария и растворы йодсодержащих соединений. Монохроматизация рентгеновского пучка позволяет несколько повысить контраст и уменьшить дозу поглощаемой энергии, однако абсорбционные методы становятся совершенно непригодными при исследовании практически однородных по составу медико-биологических объектов, особенно их мелких деталей (кровеносные сосуды, лимфатические узлы, аденокарциномы и т.п.). Это связано с тем, что мягкие ткани живых организмов состоят из легких химических элементов, их плотности близки к плотности воды, поэтому коэффициенты поглощения разных тканей (исключая костную) различаются всего на несколько процентов.

С другой стороны, хорошо известно, что наряду с поглощением существует явление преломления, которое характеризуется показателем преломления $n = 1 - \delta + i\beta$. Для рентгеновских лучей с длиной волны $\lambda \sim 1 \text{ \AA}$ и среды на основе легких углеводородсодержащих соединений величина

$\delta \sim 10^{-6}$. В результате прохождения излучения через объект фаза волны изменяется на величину $\varphi = 2\pi\delta l/\lambda$, определяемую длиной пути в объекте l и относительным декрементом преломления δ . Именно это явление фазового сдвига лежит в основе нескольких разновидностей метода получения так называемых рентгеновских фазоконтрастных изображений.

Метод рентгеновского фазового контраста (ФК) заключается в анализе изображения объекта на фотопленке или двумерном координатном детекторе, которое образуется в результате изменения фазы квазиплоской рентгеновской волны после ее прохождения через исследуемый объект. Этот метод оказался чрезвычайно эффективным для исследования внутренней структуры слабопоглощающих объектов, что особенно важно для медико-биологической диагностики. Существуют две основные методики получения ФК-изображений.

В первом методе неоднородное пространственно-угловое распределение интенсивности поля, прошедшего через объект, регистрируется с помощью кристалла-анализатора (КА), установленного в окрестности максимума кривой дифракционного отражения (КДО) [1–31]. Анализатор может быть расположен как в геометрии Брэгга [1–4, 7–9, 12, 17, 19–28, 30, 31], так и в схеме дифракции по Лауэ [5, 6, 10, 11, 13–17, 20, 29].

В основе метода лежит использование явления преломления рентгеновских лучей в объекте, в связи с чем он известен также под названиями рефракционный контраст [2–4, 12], фазодисперсионная и фазоконтрастная интроскопия и радиография [10, 13–15, 22], рентгеновский ФК [6–9, 16], дифракционно усиленное изображение [19]. В [2, 3] радиография с рефракционным контрастом впервые была предложена с использованием тепловых нейтронов.

Известно, что углы преломления в рентгеновском диапазоне длин волн составляют всего единицы и доли угловой секунды, тем не менее они сравнимы с угловыми интервалами склонов КДО от высокосовершенного КА. Именно по этой причине контраст ФК-изображений получается достаточно высоким (до 20–90%) [6, 10, 15, 16, 22–24], тогда как традиционный абсорбционный метод крайне не эффективен, особенно при исследовании слабопоглощающих мягких тканей медико-биологических объектов. Углы преломления $\Delta\theta(x)$, которые фигурируют в приближении геометрической (лучевой) оптики, связаны с искажением волнового фронта, т.е. с локальным изменением фазы $\varphi(x)$, рассматриваемой в волновой оптике, простым соотношением $\Delta\theta(x) = -(\lambda/2\pi)d\varphi(x)/dx$, где ось x перпендикулярна направлению распространения проходящего пучка. Собственное пространственное разрешение метода составляет несколько глубин экстинкции в КА [10, 22] (см. также ниже).

Уникальные возможности метода ФК с кристаллом-анализатором были убедительно продемонстрированы как в экспериментах с различными тест-объектами (пластиковые капсулы, нити, пустые и заполненные капилляры, призмы, пластинки, ткани, пустоты и волокна в полимерной матрице) [4–12, 15, 16, 22], так и с биологическими образцами (аквариумные рыбки, белые мыши, конечности лягушки и т.п. [6, 12–14, 17], насекомые [11, 20]).

Тот факт, что ФК-интроскопия может дать больше информации о границах деталей в объекте и границах самого объекта по сравнению с абсорбционной интроскопией, оказался чрезвычайно важным для использования этого метода в скрининговой маммографии, в которой наличие ранней стадии рака выявляется с помощью радиографического обнаружения характерных микрокальцинатов и небольших изменений плотности тканей молочной железы. Обнаружение микрокальцинатов ($\text{Ca}_5(\text{PO}_4)_3\text{OH}$ — фосфат кальция, CaC_2O_4 — оксалат кальция и проч.) особенно важно в тех случаях, когда их наличие и динамика их роста являются единственными выявляемыми признаками ранней стадии рака при радиографическом исследовании молочной железы.

Вначале на маммографических фантомах [11, 20], а затем и для реальных биологических [19] и человеческих [21] образцов тканей с аденокарциномой на различных стадиях развития злокачественных и доброкачественных раковых опухолей [40] была показана убедительная регистрация с достаточно высоким черно-белым контрастом новообразований (опухолей) размером 1–2 мм и отдельных микрокальцинатов размером 50–150 мкм, что недоступно методам современной маммографии.

Во второй методике КА не используется, а детектор устанавливается на некотором расстоянии от исследуемого объекта в области дифракции Френеля [32–40]. Изображение объекта, как и в известной схеме осевой (in-line) голографии, формируется в результате интерференции высококогерентного падающего и рассеянного объектом излучений. Результаты ФК-маммографии, полученные в этой схеме, описаны в обзоре [40].

В [10, 16, 22–29, 32, 34] решены прямые задачи, т.е. развита волновая теория формирования ФК-изображения объекта с известной структурой. Обратная задача рентгеновской ФК-томографии заключается в реконструкции трехмерного пространственного распределения декремента преломления исследуемого объекта, пропорционального его плотности, по данным интенсивности, измеренной координатным детектором. Соответствующая теория в приближении геометрической оптики развита в [25, 26] с использованием в схеме КА, в том числе с учетом влияния статистического шума на ФК-изображении на точность и однозначность решения обратной задачи восстановления внутреннего строения объекта, а также в [36–38] с помощью метода рентгеновской осевой голографии.

В настоящей работе с использованием формализма, развитого в статистической оптике и радиофизике [41], предложена статистическая волновая теория формирования рентгенодифракционного ФК в двухкристальной схеме с КА. Ранее теория формирования такого контраста развивалась как в приближении геометрической оптики [4, 6–8, 11, 12], так и в рамках волновой оптики [9, 10, 16, 18, 22–31], но в предположении о полностью когерентном падающем рентгеновском излучении и объектах с заданными размерами, формой и с детерминированным пространственным распределением диэлектрической проницаемости.

Ниже в достаточно общей постановке задачи проведено последовательное рассмотрение формирования ФК объектов в случае рентгеновского излучения с произвольной степенью пространственной когерентности и учетом изменения статистических характеристик этого излучения при брэгговской дифракции [42, 43] на пути от источ-

ника излучения, отражения от монохроматора, прохождения через объект и дифракционного отражения от КА. Используются как спектральный подход (обратное пространство), так и формализм функции Грина (прямое пространство). Исследуемые объекты могут быть как детерминированными, так и со статистически распределенными неоднородностями плотности вещества и шероховатостями поверхности. В частности, особое внимание уделено задаче возможности визуализации биологической ткани с выпадением в ней хаотически распределенных микрокальцинов, размеры которых много меньше величины пространственного разрешения рентгенодифракционного ФК-метода.

В качестве методологического рассмотрен также дискуссионный вопрос о свертке КДО в двухкристальной схеме, т.е. о соотношении между сверткой интенсивностей дифракционных отражений от монохроматора и анализатора и интенсивности свертки амплитудных коэффициентов этих отражений.

ТЕОРИЯ

В двухкристальной схеме регистрации ФК (рис. 1) ограниченный в поперечном направлении монохроматический рентгеновский пучок с полем $E_A(\mathbf{r}) = A_0(\mathbf{r})\exp(i\mathbf{k}_0\mathbf{r})$, сформированный отражением излучения источника от кристалла-монохроматора, проходит через объект, падает на КА, и, дифракционно отражаясь от него, регистрируется координатным детектором. Поле на поверхности $z = 0$ КА можно записать в виде $E_A(x) = A_0(x)\exp(ik_{0x}x)$, где $A_0(x)$ – в общем случае комплексная и случайная медленно меняющаяся амплитуда, $k_{0x} = k_0\cos\theta$, $k_0 = 2\pi/\lambda$, λ – длина волны, $\theta = \theta_B + \psi + \Delta\theta$, θ_B – угол Брэгга, ψ – угол наклона отражающих атомно-кристаллических плоскостей по отношению к поверхности кристалла ($|\psi| < \theta_B$), $\Delta\theta$ – фиксированная угловая отстройка КА от точного брэгговского положения.

Здесь $A_0(x) = A_M(x)T(x)$, где $A_M(x)$ – амплитуда поля пучка, отраженного от монохроматора и падающего на объект, $T(x) = \exp[i\varphi(x)]$ – функция пропускания излучения объектом, которая зависит от пространственного распределения показателя преломления $n(x', z')$, а комплексная фаза $\varphi(x) = k_0 \int [n(x', z') - 1] dz'$ определяется интегрированием в пределах материала объекта вдоль направления распространения рентгеновского пучка с центральным волновым вектором $\mathbf{k}_0$; $x' = x\sin\theta - z\cos\theta$, $z' = x\cos\theta + z\sin\theta$.

Представим поле $E_A(x)$ в виде фурье-разложения по плоским волнам:

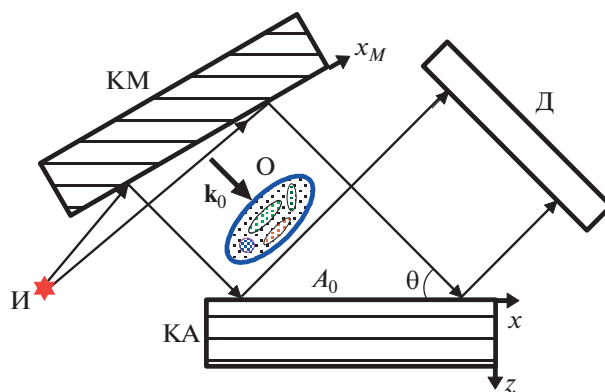


Рис. 1. Двухкристальная схема регистрации рентгенодифракционного ФК: И – источник, КМ – кристалл-монохроматор, О – образец, КА – кристалл-анализатор, Д – детектор.

$$E_A(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{E}_A(k_x) \exp(ik_x x) dk_x, \quad (1)$$

где $\tilde{E}_A(k_x)$ – угловой (пространственный) спектр падающего на анализатор излучения, который определяется соотношением

$$\tilde{E}_A(k_x) = (1/2\pi) \int_{-\infty}^{\infty} A_0(x) \times \exp[-i(k_x - k_{0x})x] dx \equiv \tilde{A}_0(q), \quad (2)$$

где $q = k_x - k_{0x}$. В соответствии с результатами динамической теории дифракции плоских волн с амплитудами $\tilde{A}_0(q)$ и последующего синтеза отраженных волн медленно меняющуюся амплитуду дифрагированного поля на поверхности анализатора $z = 0$ можно представить в виде интеграла

$$A_R(x, \Delta q) = \int_{-\infty}^{\infty} R_A(\Delta q - q) \tilde{A}_0(q) \exp(iqx) dq, \quad (3)$$

где $R_A(\Delta q - q)$ – амплитудный коэффициент отражения от КА. Здесь $\Delta q = -k_0\gamma_0\Delta\theta$, $\gamma_0 = \sin(\theta_B + \psi)$, а явный вид функции $R_A(q)$ определяется выражением [22]:

$$R_A(q) = \sqrt{b} \left(-\eta \pm \sqrt{\eta^2 - 1} \right), \quad (4)$$

где $\eta = (q + q_0)/\Delta q_B$,

$$q_0 = \frac{k_0\chi_0(\gamma_0 + \gamma_h)}{2\sin 2\theta_B}, \quad \Delta q_B = \frac{Ck_0\sqrt{\gamma_0\gamma_h}\sqrt{\chi_h\chi_{\bar{h}}}}{\sin 2\theta_B}.$$

Здесь Δq_B – полуширина КДО в q -представлении, $\chi_{0,h,\bar{h}}$ – фурье-компоненты рентгеновской поляризуемости, $\gamma_h = \sin(\theta_B - \psi) > 0$, $b = \gamma_0/\gamma_h$ – коэффициент асимметрии брэгговского отражения, $C = 1$ и $C = \cos 2\theta_B$ для σ - и π -поляризованного излучения соответственно.

Подстановка углового спектра $\tilde{A}_0(q)$ (2) в интеграл (3) приводит к следующему выражению для амплитуды дифрагированного поля на поверхности анализатора в координатном представлении:

$$A_R(x, \Delta q) = \int_{-\infty}^{\infty} A_0(x - \xi) G(\xi) \exp(i\Delta q \xi) d\xi, \quad (5)$$

где

$$G(\xi) = (1/2\pi) \int_{-\infty}^{\infty} R_A(q) \exp(-iq\xi) dq \quad (6)$$

— функция Грина в задаче о брэгговском дифракционном отражении пространственно неоднородного рентгеновского пучка от кристалла. Соотношения (3) (в спектральном представлении) и (5) (в прямом пространстве) являются полностью эквивалентными. Однако в ряде случаев на практике в условиях справедливости приближения модели искаженной плоской волны и статистической теоремы Винера—Хинчина [41] удобнее использовать соотношение (3) (подробнее см. ниже).

Из соотношения (6) легко получить простую оценку для величины пространственного разрешения метода фазового контраста с КА: $\Delta x_A \approx 1/\Delta q_B = \Lambda \sin 2\theta_B / 2\gamma_0 \gamma_h$, где $\Lambda = \lambda \sqrt{\gamma_0 \gamma_h} / \pi C |\chi_h|$ — глубина экстинкции. В случае симметричной дифракции $\Delta x_A = \Lambda \operatorname{ctg} \theta_B$. Интересно отметить, что угловая полуширина КДО $\Delta \theta_B = \Delta q_B / k_0 \gamma_0$ связана с длиной волны и глубиной экстинкции соотношением $\Delta \theta_B = \lambda \gamma_h / \pi \Lambda \sin 2\theta_B$, которое формально совпадает с полушириной углового спектра пучка при прохождении плоской волны через щель [44] с шириной, примерно равной глубине экстинкции.

В случае существенного увеличения расстояний между элементами схемы на рис. 1 или при наличии достаточно мелких деталей в объекте с микронными размерами можно внести в соотношения (3) и (5) пропагаторы распространения излучения в свободном пространстве [44]. Критерием нахождения элементов схемы в ближнем поле, когда можно пренебречь этими пропагаторами, является выполнение условия для волновых параметров $D_j = \lambda l_j / \pi a^2 \leq 1$ [44], где l_j — последовательные расстояния между элементами на рис. 1, a — характерные размеры либо источника излучения, самого объекта, либо его внутренних мелких деталей. Если, например, $a \approx 5$ мкм, то требуемые расстояния $l_j \leq 1$ м, что почти всегда заведомо выполняется в лабораторных условиях.

Амплитуда поля $A_M(x_M)$, отраженного от монохроматора и падающего на образец, также определяется соотношениями типа (1)–(5) с учетом очевидной замены A_0 на амплитуду поля A_S излучения источника и замены $R_A(q)$ на амплитудный

коэффициент дифракционного отражения от монохроматора $R_M(q)$.

В общем случае амплитуды полей и их угловые спектры, а также функция пропускания являются случайными функциями. Это определяется как статистическими свойствами поля источника излучения, так и приводящими к некогерентному диффузному рассеянию возможными флуктуациями плотности вещества в объеме образца и шероховатостями на его внутренних и внешних границах.

Интенсивность ФК-изображения при фиксированном положении КА Δq определяется как $I_R(x, \Delta q) = \langle |A_R(x, \Delta q)|^2 \rangle$, где угловые скобки означают статистическое усреднение. С учетом соотношения (3) выражение для этой интенсивности имеет следующий вид:

$$I_R(x, \Delta q) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \Phi_0(q, q') R(\Delta q - q) \times \\ \times R^*(\Delta q - q') e^{i(q-q')x} dq dq', \quad (7)$$

где $\Phi_0(q, q') = \langle \tilde{A}_0(q) \tilde{A}_0^*(q') \rangle$ — спектральная (в обратном q -пространстве) корреляционная функция излучения, падающего на КА. В свою очередь угловой спектр $\tilde{A}_0(q)$ поля за объектом равен свертке углового спектра падающего излучения $\tilde{A}_M(q')$ и спектра функции пропускания $T(q - q')$.

Если использовать соотношение (5) и учесть, что амплитуда поля на поверхности КА $A_0(x) = A_M(x) T(x)$, то

$$I_R(x, \Delta q) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \Gamma_M(\xi, \xi') F(\xi, \xi') G(x - \xi) \times \\ \times G^*(x - \xi') e^{-i\Delta q(\xi - \xi')} d\xi d\xi', \quad (8)$$

где $\Gamma_M(\xi, \xi') = \langle A_M(\xi) A_M^*(\xi') \rangle$ — коррелятор амплитуды поля, отраженного от монохроматора и падающего на образец, $F(\xi, \xi') = \langle T(\xi) T^*(\xi') \rangle$ — корреляционная функция пропускания исследуемого объекта. Здесь учтено, что статистические свойства функции пропускания $T(x)$ не зависят от амплитуды поля $A_M(x)$, сформированной отражением от монохроматора и определяемой статистическими характеристиками источника излучения.

Расчеты ФК-интенсивности следует начинать с рассмотрения статистических свойств источника. Одной из важных моделей является представление об однородном и стационарном случайном поле, для которого коррелятор $\Phi_S(q, q') = \langle \tilde{A}_S(q) \tilde{A}_S^*(q') \rangle = S_S(q) \delta(q - q')$, где $S_S(q)$ — спектральная плотность. В соответствии с теоремой

Винера—Хинчена [41] она связана преобразованием Фурье от поперечной пространственной корреляционной функции $\Gamma_S(\rho) = \langle A_S(x)A_S^*(x + \rho) \rangle$, откуда следует, что

$$S_S(q) = (1/2\pi) \int_{-\infty}^{\infty} \Gamma_S(\rho) \exp(iq\rho) d\rho. \quad (9)$$

В случае гауссова случайного поля $\Gamma_S(\rho) = \exp[-(\rho/\rho_S)^2]$, где ρ_S — длина пространственной (поперечной) когерентности (ДПК) на поверхности источника. Тогда из соотношения (9) следует, что спектральная плотность излучения источника $S_S(q) = \nu \rho_S \exp[-(q\rho_S/2)^2]$, где $\nu = 1/(2\sqrt{\pi})$. Угловая полуширина спектра этого излучения связана с ДПК соотношением $\Delta\theta_S = \lambda/\pi\rho_S$.

Аналогично с привлечением соотношения (7) можно показать [42], что ДПК поля, отраженного от кристалла-монокроматора, примерно равна $\rho_M = (1/b_M)(\rho_S^2 + L_h^2)^{1/2}$, где $L_h = \Lambda_M \sin 2\theta_B/\gamma_{hM}$, Λ_M — глубина экстинкции монокроматора, b_M — коэффициент асимметрии брэгговского отражения. Следовательно, угловая расходимость рентгеновского пучка, отраженного от монокроматора, определяется в основном степенью асимметрии отражения и шириной КДО монокроматора. С увеличением расстояния z от поверхности рентгеновской трубки ДПК ее излучения увеличивается в соответствии с соотношением

$$\rho_S(z) \approx \rho_S [1 + 2(\lambda z/\pi\rho_S)^2]^{1/2} \approx \lambda z\sqrt{2}/\pi\rho_S, \quad (10)$$

где r_S — размер фокуса трубки и считается, что ДПК $\rho_S \ll r_S$ [42]. Однако даже в случае микрофокусной трубки с $r_S \approx 10$ мкм условие $\rho_S(z) \approx L_h$ начинает выполняться лишь на расстояниях $z \geq 1-3$ м. А в общем случае, включая источники синхротронного излучения, зависимости поперечного размера пучка, длины пространственной когерентности и угловой ширины спектра от расстояния при произвольных величинах ρ_S , r_S и искривления волнового фронта в начальной плоскости источника $z = 0$ получены при обобщении теоремы Ван Циттерта—Цернике в [42].

Таким образом, частичная степень пространственной когерентности и, как следствие, конечность ДПК приводят к некоторому размытию контраста ФК-изображения. Особенно это касается объектов с характерными размерами порядка глубины экстинкции анализатора в силу конечного пространственного разрешения самого метода регистрации изображения с КА.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

В качестве примера влияния статистических свойств объекта на рентгеновский ФК рассмотрим

среду в форме плоскопараллельного слоя из слабо поглощающего аморфного материала, который является в среднем однородным, но в нем имеются хаотически распределенные мелкомасштабные включения с электронной плотностью, отличающейся от средней плотности. Фактически это есть модель биологической ткани, в которой содержатся выпадения микрокальцинатов, характерных на начальной стадии образования аденокарциномы.

На ряде ФК-маммограмм помимо участков с метастазами раковой опухоли и плотной фиброзной ткани, областей лобулярной и протоковой гиперплазии, а также отдельных микрокальцинатов размером $\sim 50-150$ мкм были обнаружены достаточно протяженные области с почти равномерно распределенным положительным или отрицательным контрастом, которые практически никак не проявляли себя в обычном абсорбционном контрасте [21]. Знак ФК в ряде случаев зависел от знака и величины угловой отстройки КА. Ранее это явление не получило своего объяснения.

Покажем, что к такому эффекту может приводить диффузное рассеяние рентгеновского излучения на включениях с микронными и субмикронными размерами, много меньшими, чем пространственное разрешение ФК-метода. Наличие хаотически распределенных в объеме микрокальцинатов приводит к появлению флуктуационной части фазы $\delta\phi(x)$ в комплексной функции пропускания через объект $T(x)$ (см. также обсуждение влияния явлений декогерентности и экстинкции на ФК-изображения в схемах осевой голографии и с КА соответственно в [39]).

В случае гауссовой статистики из соотношения (7) можно получить следующее достаточно простое аналитическое выражение для интенсивности ФК-изображения:

$$I_R(x, \Delta q) = \int_{-\infty}^{\infty} S_0(q) |R(\Delta q - q)|^2 dq. \quad (11)$$

Здесь $S_0(q)$ — спектральная плотность излучения, падающего на КА, которая имеет вид суммы двух слагаемых:

$$S_0(q) = S_M(q)f_{DW} + S_{ds}(q), \quad (12)$$

где

$$S_M(q) = \nu \rho_M \exp[-(q\rho_M/2)^2],$$

$$S_{ds}(q) = W \nu \rho_{ds} \exp[-(q\rho_{ds}/2)^2],$$

$$f_{DW} = \exp(-W), \quad W = \langle |\delta\phi(x)|^2 \rangle,$$

$$\rho_{ds} = \rho_M \rho_\phi / (\rho_M^2 + \rho_\phi^2)^{1/2}.$$

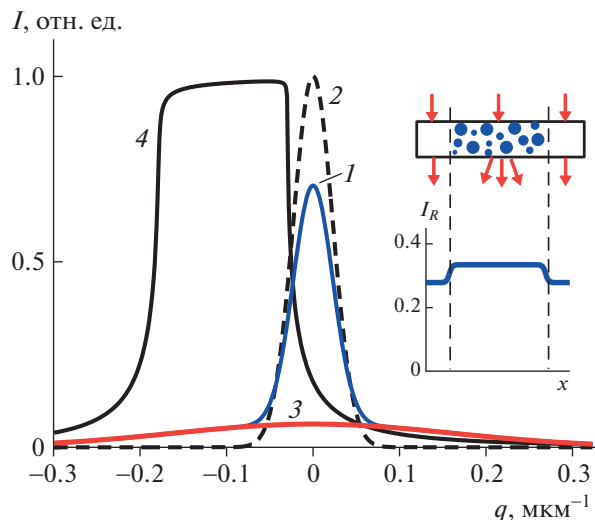


Рис. 2. Угловые спектры падающего на анализатор излучения и КДО: 1 – $S_0(q)$, 2 – $S_M(q)$, 3 – $S_{ds}(q)$, 4 – $|R(\Delta q - q)|^2$. Профиль ФК-изображения $I_R(x, \Delta q)$ показан на вставке. Излучение $\text{MoK}\alpha$, $\text{Si}(111)$, $\Delta\theta = -1.4\Delta\theta_B$, $b = 1$, $b_M = 0.2$, $\rho_M = 7$ мкм, $\sigma_I = 2$ мкм, $\sigma_\delta = 0.75 \cdot 10^{-6}$, $N = 10$, $\rho_\phi = 1$ мкм.

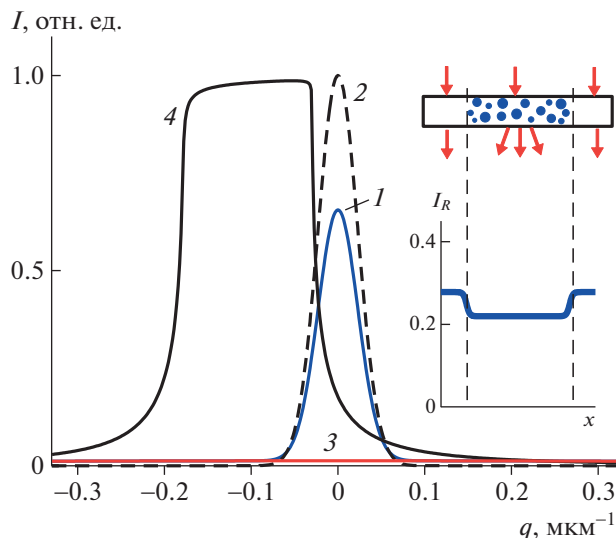


Рис. 3. Угловые спектры падающего на анализатор излучения и КДО: 1 – $S_0(q)$, 2 – $S_M(q)$, 3 – $S_{ds}(q)$, 4 – $|R(\Delta q - q)|^2$. Профиль интенсивности ФК-изображения $I_R(x, \Delta q)$ показан на вставке. Длина корреляции флуктуаций фазы $\rho_\phi = 0.2$ мкм. Остальные параметры, как в подписи к рис. 2.

Здесь $S_M(q)$ – спектральная плотность пучка излучения, отраженного от монохроматора, $S_{ds}(q)$ – угловой спектр диффузного рассеяния на шероховатостях и объемных неоднородностях (микровключениях) в объекте, f_{DW} – фактор Дебая–Валлера, ρ_M – длина пространственной когерентности излучения, отраженного от монохроматора, ρ_{ds} – корреляционная длина излучения, диффузно рассеянного образцом, ρ_ϕ – корреляционная длина флуктуаций фазы вдоль поверхности КА. Случайная фаза $\delta\phi(x) \approx k_0 N \Delta\delta(x) \Delta l(x)$, где N – среднее число микровключений вдоль нормали к поверхности объекта, определяется флуктуациями декремента преломления $\Delta\delta(x)$ и случайными размерами микроальцинатов $\Delta l(x)$ (или высот шероховатостей на границах объекта, в этом случае $N = 2$) со своими среднеквадратичными величинами $\sigma_\delta = \langle \Delta\delta(x)^2 \rangle^{1/2}$ и $\sigma_l = \langle \Delta l(x)^2 \rangle^{1/2}$.

Интенсивность ФК-изображения (11) определяется площадью пересечения падающего спектра $S_0(q)$ и КДО кристалла-анализатора $|R(\Delta q - q)|^2$. Из рис. 2 видно, что при данных параметрах из-за наличия фиксированной угловой отстройки Δq и смещения спектра падающего излучения по отношению к КДО левая часть спектра диффузного рассеяния $S_{ds}(q)$ (кривая 3) попадает в область с достаточно большим коэффициентом отражения $|R(\Delta q - q)|^2 \approx 1$, тогда как правая часть этого спектра почти выходит за пределы КДО, где

$|R(\Delta q - q)|^2 \ll 1$. В итоге, несмотря на описываемое фактором Дебая–Валлера некоторое уменьшение максимума спектра $S_0(q)$ (кривая 1) по сравнению с $S_M(q)$ (кривая 2), общая интенсивность $I_R(x, \Delta q)$ превышает контраст в той области образца, где микровключения отсутствуют (вставка на рис. 2).

Однако отметим, что при некоторых других параметрах, входящих в (12), возможно понижение интенсивности ФК-изображения по отношению к окружающему фону. Например, из рис. 3 видно, что уменьшение продольной корреляционной длины флуктуаций фазы ρ_ϕ приводит к уменьшению и уширению углового спектра диффузного рассеяния и, как следствие, к изменению знака ФК с положительного на отрицательный.

К ВОПРОСУ О СВЕРТКАХ

В основополагающих монографиях [45–49] по динамической теории дифракции рентгеновских лучей в разделе, посвященном двухкристальному спектрометру, приведено следующее соотношение для интенсивности прошедшего излучения в виде свертки КДО монохроматора и анализатора:

$$I(\Delta\theta) = \int_{-\infty}^{\infty} P_M(\alpha) P_A(\alpha - \Delta\theta) d\alpha, \quad (13)$$

где $P_j(\alpha) = |R_j(\alpha)|^2$ — кривые дифракционного отражения интенсивности при падении плоской монохроматической волны ($j = M, A$). Отметим, что в реальности в спектрометре распространяются не плоские волны, а ограниченные пучки. Кроме того, аргументы функций в (13) появляются просто из анализа хода различных падающих и отраженных лучей, рассматриваемых в приближении геометрической оптики. Наконец, во входящих в интеграл (13) интенсивностях (КДО) отсутствуют фазы волн, поэтому теряется информация о статистических свойствах излучения, падающего на двухкристальный спектрометр.

В связи с этим, а также исходя из самых общих представлений, развитых в рентгеновской волновой оптике, естественно поставить вопрос — а нельзя ли вместо свертки интенсивностей в (13) использовать квадрат модуля свертки соответствующих амплитудных коэффициентов отражения, т.е. вместо (13) использовать выражение

$$I(\Delta\theta) = \left| \int_{-\infty}^{\infty} R_M(\alpha) R_A(\alpha - \Delta\theta) d\alpha \right|^2. \quad (14)$$

Обсудим этот вопрос более подробно. По аналогии с соотношением (3) запишем выражение для пространственного распределения амплитуды поля на выходе из анализатора при отсутствии образца, т.е. при $T(x) = 1$:

$$A_R(x, \Delta q) = \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{A}_M(q) R_A(\Delta q - q) \exp(iqx) dq, \quad (15)$$

где угловой спектр излучения, отраженного от монохроматора, определяется произведением $\tilde{A}_M(q) = \tilde{A}_S(q) R_M(q)$ углового спектра излучения источника и амплитудного коэффициента отражения от монохроматора, установленного в точном брэгговском положении. Тогда интенсивность отраженного излучения в точке x может быть записана в виде двойного интеграла

$$I(x, \Delta\theta) = \langle |A_R(x, \Delta\theta)|^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \Gamma_S(q, q') R_M(q) R_M^*(q') R_A(\Delta q - q) \times \quad (16)$$

$$\times R_A^*(q - q') e^{i(q - q')x} dq dq',$$

где $\Gamma_S(q, q') = \langle \tilde{A}_S(q) \tilde{A}_S^*(q') \rangle$ — корреляционная функция излучения источника в q -представлении. Следовательно, профиль отраженного пучка, измеряемый, например, координатным детектором, несет определенную информацию о статистических свойствах излучения источника.

Однако, если детектор измеряет полную (интегральную) интенсивность, отраженную от КА, т.е.

$$I(\Delta q) = \int_{-\infty}^{\infty} I(x, \Delta q) dx, \quad (17)$$

то такая информация теряется. Действительно, при подстановке соотношения (16) в интеграл (17) в результате интегрирования функции $\exp[i(q - q')x]$ по координате x появляется дельта-образный множитель $2\pi\delta(q - q')$, что при последующем интегрировании по q' приводит к появлению квадратов модулей амплитудных коэффициентов отражения, т.е. к КДО. В итоге, если в (16) перейти к угловым переменным $\Delta\theta = -\Delta q/k_0\gamma_0$, $\alpha = -q/k_0\gamma_0$ и вынести из-под знака интеграла угловой спектр источника $\Gamma_S(\alpha) = \langle |\tilde{A}_S(\alpha)|^2 \rangle$ в том случае, когда его ширина много больше ширины КДО монохроматора и анализатора, то приходим в точности к общепринятому выражению (13). Однако может иметь место другая ситуация, которая реализуется в случае конечного интервала интегрирования в (17), что эквивалентно, например, установлению перед детектором достаточно узкой щели и может приводить к искажению угловой зависимости (17) по сравнению с (14).

Угловой спектр $\Gamma_S(\alpha)$ падающего на спектрометр излучения можно трактовать как аппаратную функцию, которую часто используют при сопоставлении теории с экспериментом. Его ширина $\Delta\alpha_S$ зависит от таких параметров, как размер падающего пучка, ДПК и форма функции пространственной когерентности. Так как одно и то же значение ширины $\Delta\alpha_S$ может быть реализовано для разных наборов этих параметров, то они не могут быть определены из измеренной КДО. Иными словами, двухкристальная кривая интенсивности дифракционного отражения не несет никакой информации о статистических характеристиках как падающего, так и дифрагированного излучений.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Предложен статистический подход для описания формирования рентгеновских фазоконтрастных изображений в схеме с КА в случае слабо поглощающих некристаллических объектов со случайными мелкомасштабными неоднородностями плотности среды. Дано объяснение явлениям повышения и/или уменьшения величины ФК от областей с хаотически распределенными микрокальцинатами в зависимости от их среднеквадратичных размеров, величины относительного декремента преломления, длин пространственной когерентности излучения и

корреляции фазы в результате дифракционно усиленного малоуглового диффузного рассеяния. Показана эквивалентность подходов в теории двухкристального рентгеновского спектрометра, основанных на анализе свертки кривых интенсивности дифракционного отражения и статистически усредненного квадрата модуля свертки амплитудных коэффициентов отражения от монокроматора и анализатора.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Forster E., Goetz K., Zaumseil P.* // Kristall Technik. 1980. V. 15. P. 937.
<https://doi.org/10.1002/crat.19800150812>
2. *Подурец К.М., Соменков В.А., Шильштейн С.Ш.* // ЖТФ. 1989. Т. 59. С. 115.
3. *Podurets K.M., Somenkov V.A., Shilstein S.Sh.* // Physica B. 1989. V. 156–157. P. 691.
[https://doi.org/10.1016/0921-4526\(89\)90765-5](https://doi.org/10.1016/0921-4526(89)90765-5)
4. *Соменков В.А., Ткалич А.К., Шильштейн С.Ш.* // ЖТФ. 1991. Т. 61. С. 197.
5. *Ингал В.Н., Беляевская Е.А.* // ЖТФ. 1993. Т. 63. С. 137.
6. *Ingal V.N., Beliaevskaya E.A.* // J. Phys. D. 1995. V. 28. P. 2314.
<https://doi.org/10.1088/0022-3727/28/11/012>
7. *Gao D., Davis T.J., Wilkins S.W.* // Aust. J. Phys. 1995. V. 48. P. 103.
<https://doi.org/10.1071/PN950103>
8. *Davis T.J., Gao D., Gureyev T.E. et al.* // Nature. 1995. V. 373. P. 595.
<https://doi.org/10.1038/373595a0>
9. *Davis T.J., Gureyev T.E., Gao D. et al.* // Phys. Rev. Lett. 1995. V. 74. P. 3173.
<https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.74.3173>
10. *Бушуев В.А., Ингал В.Н., Беляевская Е.А.* // Кристаллография. 1996. Т. 41. № 5. С. 808.
11. *Chapman D., Thomlinson W., Arfelli F. et al.* // Rev. Sci. Instrum. 1996. V. 67. P. 3360.
<https://doi.org/10.1063/1.1147502>
12. *Шильштейн С.Ш., Подурец К.М., Соменков В.А., Манушкин А.А.* // Поверхность. Рентген., синхротр. и нейтр. исследования. 1996. № 3–4. С. 231.
13. *Ingal V.N., Beliaevskaya E.A.* // Physica Medica. 1996. V. 12. P. 75.
14. *Ингал В.Н., Беляевская Е.А.* // Поверхность. Рентген., синхротр. и нейтр. исследования. 1996. № 3–4. С. 222.
15. *Ингал В.Н., Беляевская Е.А.* // ЖТФ. 1997. Т. 67. С. 68.
16. *Bushuev V.A., Beliaevskaya E.A., Ingal V.N.* // Nuovo Cimento Soc. Ital. Fis. 1997. V. 19 D. P. 513.
<https://doi.org/10.1007/BF03041011>
17. *Ingal V.N., Beliaevskaya E.A.* // Nuovo Cimento Soc. Ital. Fis. 1997. V. 19 D. P. 553.
<https://doi.org/10.1007/BF03041016>
18. *Gureyev T.E., Wilkins S.W.* // Nuovo Cimento Soc. Ital. Fis. 1997. V. 19 D. P. 545.
<https://doi.org/10.1007/BF03041015>
19. *Chapman D., Thomlinson W., Johnston R.E. et al.* // Phys. Med. Biol. 1997. V. 42. P. 2015.
<https://doi.org/10.1088/0031-9155/42/11/001>
20. *Beliaevskaya E.A., Gambaccini M., Ingal V.N. et al.* // Physica Medica. 1998. V. 14. P. 19.
21. *Ingal V.N., Beliaevskaya E.A., Brianskaya A.P., Merkurieva R.D.* // Phys. Med. Biol. 1998. V. 43. P. 2555.
<https://doi.org/10.1088/0031-9155/43/9/009>
22. *Бушуев В.А., Ингал В.Н., Беляевская Е.А.* // Кристаллография. 1998. Т. 43. № 4. С. 586.
23. *Бушуев В.А., Сергеев А.А.* // Письма в ЖТФ. 1998. Т. 24. № 21. С. 55.
24. *Бушуев В.А., Конев А.* // Поверхность. Рентген., синхротр. и нейтр. исследования. 1998. № 10. С. 5.
25. *Бушуев В.А., Сергеев А.А.* // Письма в ЖТФ. 1999. Т. 25. № 3. С. 1.
<https://doi.org/10.1134/1.1262407>
26. *Бушуев В.А., Сергеев А.А.* // Поверхность. Рентген., синхротр. и нейтр. исследования. 2000. № 9. С. 48.
27. *Бушуев В.А., Петраков А.П.* // Кристаллография. 2001. Т. 46. № 2. С. 209.
<https://doi.org/10.1134/1.1358388>
28. *Бушуев В.А., Сергеев А.А.* // Поверхность. Рентген., синхротр. и нейтр. исследования. 2003. № 1. С. 52.
29. *Бушуев В.А., Гуськова М.А.* // Изв. РАН. Сер. физ. 2005. Т. 69. С. 229.
30. *Pavlov K.M., Kewish C.M., Davis J.R., Morgan M.J.* // J. Phys. D: Appl. Phys. 2001. V. 34. P. A168.
<https://doi.org/10.1088/0022-3727/34/10A/335>
31. *Pavlov K.M., Gureyev T.E., Paganin D. et al.* // J. Phys. D: Appl. Phys. 2004. V. 37. P. 2746.
<https://doi.org/10.1088/0022-3727/37/19/021>
32. *Snigirev A., Snigireva I., Kohn V. et al.* // Rev. Sci. Instrum. 1995. V. 66. P. 5486.
<https://doi.org/10.1063/1.1146073>
33. *Snigirev A., Snigireva I., Kohn V.G., Kuznetsov S.M.* // Nucl. Instrum. Methods. Phys. Res. A. 1996. V. 370. P. 634.
[https://doi.org/10.1016/0168-9002\(95\)00849-7](https://doi.org/10.1016/0168-9002(95)00849-7)
34. *Wilkins S.W., Gureyev T.E., Gao D. et al.* // Nature. 1996. V. 384. P. 335.
<https://doi.org/10.1038/384335a0>
35. *Cloetens P., Barrett R., Baruchel J. et al.* // J. Phys. D. 1996. V. 29. P. 133.
<https://doi.org/10.1088/0022-3727/29/1/023>
36. *Gureyev T.E., Wilkins S.W.* // J. Opt. Soc. Am. A. 1998. V. 15. P. 579.
37. *Gureyev T.E., Wilkins S.W.* // Opt. Commun. 1998. V. 147. P. 229.
[https://doi.org/10.1016/S0030-4018\(97\)00637-8](https://doi.org/10.1016/S0030-4018(97)00637-8)
38. *Gureyev T.E., Raven C., Snigirev A. et al.* // J. Phys. D. 1999. V. 32. P. 563.
<https://doi.org/10.1088/0022-3727/32/5/010>

39. *Nesterets Ya. I.* // Opt. Commun. 2008. V. 281. P. 533.
<https://doi.org/10.1016/j.optcom.2007.10.025>
40. *Шовкун В.Я.* // Медицинская физика. 2007. № 2. С. 25.
41. *Ахманов А.С., Дьяков Ю.Е., Чиркин А.С.* Введение в статистическую радиофизику и оптику. М.: Наука, 1981. 640 с.
42. *Бушуев В.А.* // Изв. РАН. Сер. физ. 2009. Т. 73. С. 56.
<https://doi.org/10.3103/S1062873809010158>
43. *Бушуев В.А.* // Изв. РАН. Сер. физ. 2010. Т. 74. С. 47.
<https://doi.org/10.3103/S1062873810010119>
44. *Виноградова М.Б., Руденко О.В., Сухоруков А.П.* Теория волн. М.: Наука, 1990. 432 с.
45. *Джеймс Р.* // Оптические принципы дифракции рентгеновских лучей. М.: ИЛ, 1950. С. 283.
46. *Пинскер З.Г.* // Динамическое рассеяние рентгеновских лучей в идеальных кристаллах. М.: Наука, 1974. С. 240.
47. *Пинскер З.Г.* // Рентгеновская кристаллооптика. М.: Наука, 1982. С. 225.
48. *Иверонова В.И., Ревкевич Г.П.* // Теория рассеяния рентгеновских лучей. М.: Изд-во Моск. ун-та. 1978. С. 135.
49. *Authier A.* // Dynamical theory of X-ray diffraction. N.-Y.: Oxford University Press, 2001. P. 455.