

## КОМПЬЮТЕРНЫЙ АНАЛИЗ ДВУМЕРНЫХ ИЗОБРАЖЕНИЙ В МЕТОДЕ ФАЗОВОГО КОНТРАСТА ЦЕРНИКЕ ДЛЯ ЖЕСТКИХ РЕНТГЕНОВСКИХ ЛУЧЕЙ

© 2012 г. В. Г. Кон, М. А. Орлов\*

Национальный исследовательский центр “Курчатовский институт”, Москва  
E-mail: kohnvict@yandex.ru

\* Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова

Поступила в редакцию 05.04.2012 г.

Проанализированы проблемы численного моделирования двумерных изображений в методе фазового контраста Цернике в жестком рентгеновском излучении. Расчеты выполнены для условий эксперимента, характерных для источников синхротронного излучения третьего поколения (ESRF, APS, Spring-8 и др.). Рассмотрены схемы, в которых фокусирующими элементами являются преломляющая линза и зонная пластинка, а фазосдвигающий элемент располагается в точке изображения источника. Показано, что преломляющая линза позволяет достичь лучшего разрешения, чем зонная пластинка. Для улучшения качества изображений, формируемых в методе фазового контраста Цернике, может быть успешно применен метод, аналогичный методу птихографии.

### ВВЕДЕНИЕ

С появлением синхротронных источников третьего поколения (ESRF, APS, Spring-8 и др.), в которых пучки рентгеновского излучения обладают высокой степенью пространственной когерентности, широкое распространение получил метод рентгеновского фазового контраста [1], позволяющий неразрушающим образом исследовать внутреннюю структуру слабопоглощающих некристаллических объектов. В данном методе регистрируется изменение фазы, а не амплитуды волны, прошедшей через объект, и за счет этого получается информация о строении объекта. Однако у этого метода имеются недостатки. Во-первых, он дает не прямое изображение объекта, а только голограмму Габора, по которой необходимо восстановить объект. Лишь на малых расстояниях (в ближнем поле) такая голограмма фактически изображает контуры объекта. В области дифракции Фраунгофера голограмма существенно отличается от изображения объекта, и восстановление не является простой задачей, поскольку регистрируется изменение амплитуды поля, связанное с изменением фазы при распространении излучения в воздухе, а когерентность пучка не является полной, и решение обратной задачи известными методами получения фазы из двух интенсивностей может давать непредсказуемые искажения.

Во-вторых, этот метод слабо чувствителен к плавным изменениям плотности в образце. В-третьих, в [2] было показано, что данный метод является малоэффективным при исследовании структуры объектов субмикронного размера. Ука-

занных недостатков можно избежать, если использовать в рентгеновском диапазоне метод фазового контраста Цернике [3], широко применяемый в оптике. На данный момент метод Цернике использовался лишь в нескольких экспериментальных работах, например в [4–6], где фокусирующим элементом служила зонная пластинка. В [7] было проведено численное моделирование эксперимента по визуализации микрообъектов с использованием метода Цернике в одномерном случае, и было показано, что преломляющая линза в качестве объектива позволяет достичь лучшего разрешения.

Настоящая работа является второй частью исследования, начатого в [7]. Здесь представлены результаты двумерных расчетов, подтверждающие и дополняющие результаты [7], а также показано, что качество изображения можно существенно улучшить путем использования метода, аналогичного методу птихографии [8], когда в объектную плоскость вводится диафрагма и изображение объекта получается по частям.

### СХЕМА ЧИСЛЕННОГО ЭКСПЕРИМЕНТА И МЕТОД РАСЧЕТА

Рассматриваемая схема эксперимента изображена на рис. 1. Обозначим через  $r_1$ ,  $r_2$ ,  $r_3$ , и  $r_4$  расстояния от источника рентгеновского излучения до соответственно объекта наблюдения, фокусирующего элемента (линзы или зонной пластинки), точки фокусировки источника и координатного детектора. Объект  $O$  находится на двойном фокусном расстоянии от фокусирующего эле-

мента (объект  $L$ ), т.е.  $r_2 - r_1 = 2F$ . Фазосдвигающий элемент (объект  $S$ ) помещается в точке изображения источника  $r_3 = r_2 + F/(1 - F/r_2)$ , определяемой по формуле линзы (здесь  $F$  – фокусное расстояние линзы). Детектор (объект  $D$ ) располагается на расстоянии  $r_4 - r_2 = 2F$  от линзы, вследствие чего изображение получается перевернутым и неувеличенным.

При решении задач распространения жесткого рентгеновского излучения с высокой точностью выполняется парааксиальное приближение. Соответственно перенос излучения в воздухе описывается с помощью интегральной формулы Кирхгофа для решения уравнения Максвелла. Направим ось  $z$  декартовой системы координат параллельно оптической оси, вдоль которой распространяется пучок излучения. Задача заключается в вычислении зависимости амплитуды волнового поля от поперечных координат  $x$  и  $y$  в каждой точке на оси  $z$ . Специфика задачи состоит в том, что в поперечных направлениях волновое поле заметно меняется на расстояниях меньше микрона, в то время как характерный интервал изменения волнового поля вдоль оси  $z$  больше сантиметра. Так как поляризация в рассматриваемых процессах не изменяется, то достаточно ограничиться скалярной волновой функцией поля.

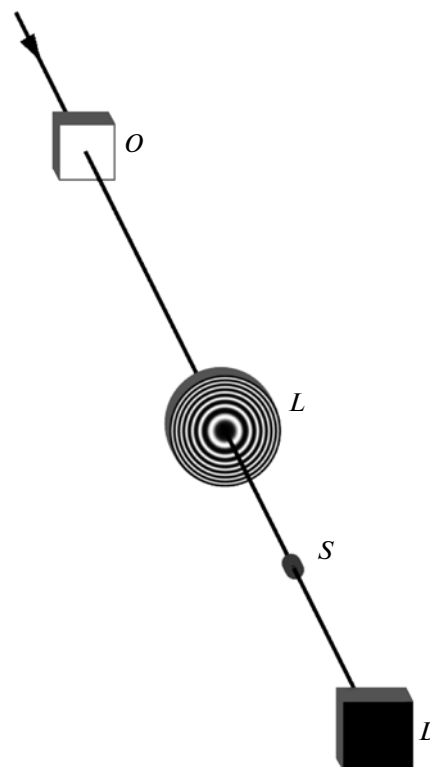
Пусть  $E_1(x, y)$  – волновая функция в точке  $z_1$ . Тогда волновая функция  $E(x, y)$  в точке  $z$  при условии, что между  $z_1$  и  $z$  нет объектов, определяется следующим образом:

$$E(x, y) = \int dx_1 dy_1 P(x - x_1, y - y_1, z - z_1) E_1(x_1, y_1), \quad (1)$$

$$P(x, y, z) = \frac{1}{i\lambda z} \exp\left(i\pi \frac{x^2 + y^2}{\lambda z}\right).$$

Здесь  $P(x, y, z)$  – пропагатор Кирхгофа в парааксиальном приближении,  $\lambda$  – длина волны излучения. Что касается объектов, то, если их продольные размеры не слишком сильно отличаются от поперечных, можно пренебречь изменением траектории лучей при прохождении объекта, поскольку углы рассеяния весьма малы (обычно десятки микрорадиан). При этом для описания взаимодействия излучения с объектом можно пренебречь продольной длиной объекта и считать его плоским, расположенным в плоскости, проходящей через середину его продольного размера. Однако длина объекта учитывается как пустое пространство. Иногда это оказывается важным, например, для составной преломляющей линзы, длина которой сравнима с ее фокусным расстоянием. Таким образом, взаимодействие излучения с объектом описывается путем умножения волновой функции поля излучения на так называемую трансмиссионную функцию

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



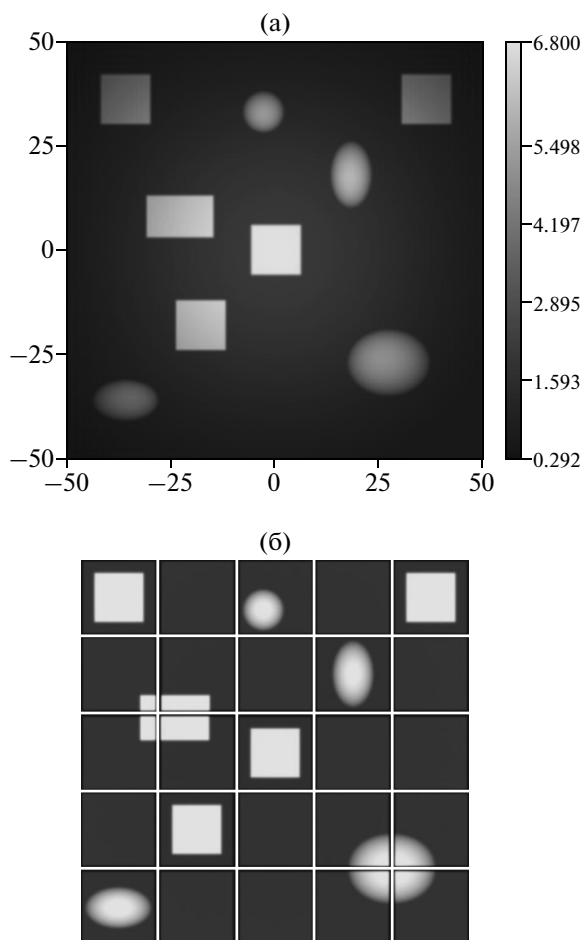
**Рис. 1.** Схема фазового контраста Цернике для рентгеновских лучей. Почти параллельный пучок синхротронного излучения падает слева и сверху.  $O$  – объект,  $L$  – преломляющая линза или зонная пластинка,  $S$  – фазосдвигающая пластинка,  $D$  – координатный детектор. При изображении без увеличения объект и детектор ставятся на двойном фокусном расстоянии от объектива, а фазосдвигающая пластинка – в точке фокусировки источника.

где  $t(x, y)$  – локальное изменение толщины материала внутри объекта вдоль оси  $z$  при условии, что он состоит из одного материала,  $\delta$  и  $\beta$  – величины, определяющие комплексный показатель преломления материала объекта:  $n = 1 - \delta + i\beta$ .

Расчет проводится в несколько этапов и начинается от точечного источника. Волновая функция в плоскости источника формально может быть взята в виде дельта-функции:  $E_0(x, y) = \delta(x, y)$ . Подставляя ее в (1), получаем волновую функцию перед исследуемым объектом в виде пропагатора Кирхгофа:  $E_1(x, y) = P(x, y, r_1)$ . Далее необходимо умножить волновую функцию на трансмиссионную функцию объекта, в которой учесть конкретный вид зависимости  $t(x)$ , после чего применить формулу (1) еще раз:

$$E_2(x, y) = \int dx_1 dy_1 P(x - x_1, y - y_1, r_2 - r_1) \times T(x_1, y_1) E_1(x_1, y_1). \quad (3)$$

В первом расчете  $r_2$  равно расстоянию от источника до фокусирующего элемента (преломляющей линзы или зонной пластинки, рис. 1). За-



**Рис. 2.** Изображение линзой серии кремниевых объектов без применения метода птихографии (а) и с его применением (б). Координата в микронах указана цифрами.

тем расчет по формуле (3) нужно повторить с новым объектом в виде фокусирующего элемента. При этом надо сделать замену  $r_2 \rightarrow r_3$ ,  $r_1 \rightarrow r_2$ . В случае двояковогнутой преломляющей параболической линзы  $t(x, y) = (x^2 + y^2)/R$ , где  $R$  – радиус кривизны у вершины параболы. В данном случае бесконечные пределы интегрирования эффективно обрезаются из-за поглощения в линзе, поскольку линза на краях апертуры достаточно толстая. В случае зонной пластинки поглощением можно пренебречь, и проблема с пределами интегрирования остается. Зонная пластинка имеет конечную апертуру, а за пределами апертуры она однородная с толщиной  $t_0$ . Внутри апертуры у зонной пластинки  $t(x, y) = 0$  в зонах, где нет материала, и  $t(x, y) = t_0$  в зонах с материалом. Границы зон определяются формулой  $r_n = r_1(n)^{1/2}$ , где  $r_1$  – радиус первой зоны,  $n$  – номер зоны. В третьем расчете объектом является фазосдвигающий элемент с размерами порядка размера пучка в фо-

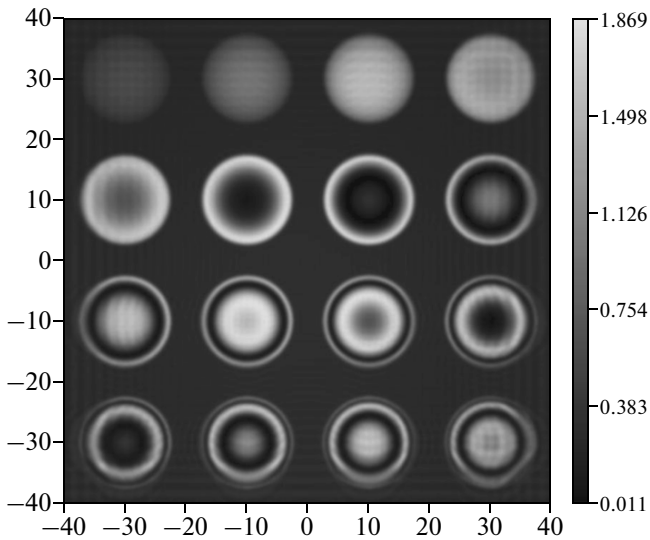
кусе объектива. В этом случае в формуле (3) надо сделать замену  $r_2 \rightarrow r_4$ ,  $r_1 \rightarrow r_3$ .

Интеграл (3) представляет собой свертку двух комплексных функций, и его расчет удобно выполнять с использованием преобразования Фурье. Сначала вычислялся фурье-образ произведения функций аргументов  $x_1, y_1$ , затем он умножался на фурье-образ пропагатора Кирхгофа, который имеет аналитический вид  $P(q_x, q_y, r) = \exp(-i\lambda r(q_x^2 + q_y^2)/4\pi)$ , после чего вычислялось обратное преобразование Фурье, для вычисления которого использовалась процедура быстрого преобразования Фурье [9].

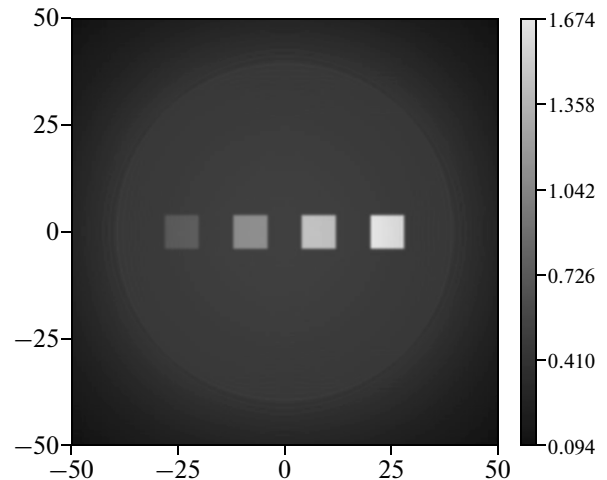
### РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТОВ ДЛЯ СХЕМЫ С ЛИНЗОЙ

Расчеты были выполнены для стандартных параметров 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 рассмотрена составная параболическая бериллиевая линза, состоящая из 60 элементов с радиусами кривизны  $R = 50$  мкм, фокусное расстояние линзы равнялось 31.4 см. Расчеты проводились для энергии падающего излучения  $E = 16$  кэВ. Использовалась расчетная сетка из  $1024 \times 1024$  точек. При таком числе точек получалось разумное время расчета и не возникало проблем с размерами массивов. Источник является некогерентным в том смысле, что каждая его точка светит независимо по фазе. Так как источник имеет поперечный размер  $S_0$ , то его изображение в фокусе будет иметь размер  $S = S_0(r_3 - r_2)/r_2$ . Учет размеров источника проводился вычислением свертки распределения интенсивности для точечного источника с гауссовой кривой, полуширина которой равна  $S_d = S_0(r_4 - r_2)/r_2$ .

На рис. 2а показано изображение серии кремниевых объектов одинакового продольного размера, формируемое линзой. Виден постепенный спад интенсивности при движении от центра к краю, при этом контраст также ослабевает. Рисунок обрезан по краям, поскольку возле границ изображения возникают артефакты. Основная сложность при проведении двумерных расчетов заключается в невозможности задания сетки с большим числом точек из-за большого времени вычислений и ресурсов памяти. Известно, что в методе FFT имеются ограничения, налагаемые на такие параметры, как шаги в прямом и обратном пространстве, размер расчетной области в прямом пространстве. Часто эти ограничения приводят к возникновению артефактов в изображении объектов. В результате достаточно надежно получаются только дифракционные картины от мелких объектов, размеры которых значительно меньше расчетной области. В одномерном случае



**Рис. 3.** Изображение линзой серии эллипсоидальных пор в кристалле SiC. Верхняя левая пора имеет продольный диаметр 3 мкм, следующая справа – 5 мкм, далее к каждой поре добавляется 5 мкм.



**Рис. 4.** Изображение кремниевых прямоугольников разного продольного размера линзой с апертурой 80 мкм.

таких проблем не возникает, поскольку можно задать большие размеры расчетной области и мелкий шаг одновременно.

Из рис. 2а видно, что наиболее отчетливо линзой изображаются объекты, расположенные в центре апертуры. Однако можно получить такое же качественное изображение и остальных объектов, если использовать метод, аналогичный методу птихографии. Он заключается в том, что крупный объект изображается не целиком, а по частям, при этом каждый раз рассматриваемая часть объекта располагается напротив той области объектива, где изображение наиболее качественное. В случае с линзой это центр апертуры. Впоследствии полученные изображения участков объекта складываются в единую картину. При этом существенно, что изображаемая часть объекта выделяется щелью, в то время как остальная часть пучка блокируется. На рис. 2б показано изображение тех же объектов, что и на рис. 2а, но полученное описанным методом. В этом случае в центре апертуры помещалась щель, вырезающая в изображении только центральную область, и объекты перемещались относительно щели. Из рис. 2б видно, что такой подход позволяет заметно улучшить качество изображения и выровнять контраст.

В [10] с помощью одномерных расчетов показано, что в изображении сильно вытянутых в продольном направлении эллиптических объектов возникают специфические осцилляции, позволяющие определить продольный размер объекта. В настоящей работе этот факт подтверждается двумерными расчетами. На рис. 3 показано изобра-

жение набора эллипсоидальных пор в кристалле SiC (изображение обрезано по краям). При этом, как и в [10], вместо фазосдвигающей пластинки использовалась выемка в веществе. На рис. 3 верхняя левая пора имеет продольный диаметр 3 мкм, следующая от нее справа – 5 мкм, далее к каждой поре добавляется 5 мкм.

С увеличением вносимого сдвига фаз вначале наблюдается нарастание интенсивности, после чего интенсивность в центре спадает и появляются специфические осцилляции. Природа осцилляций заключается в том, что продольная толщина эллипсоидальной поры при движении от центра к краю все быстрее уменьшается и с возрастающей скоростью уменьшается сдвиг фазы, вносимый порой. Каждый раз, когда в поре теряется сдвиг фаз  $2\pi$ , трансмиссионная функция поры умножается на величину  $\exp(2\pi i) = 1$ , т.е. принимает одинаковые значения. В этом случае интенсивность на детекторе также принимает одинаковые значения. Таким образом, в изображении поры возникают осцилляции, толщина которых уменьшается при удалении от центра. Зная полное число осцилляций, легко понять, сколько раз в поре накопился сдвиг фазы  $2\pi$ , и тем самым определить ее продольный размер.

На рис. 2 и 3 все же видны незначительные артефакты на краях изображения. Чтобы получить изображение практически без артефактов, следует в качестве фокусирующего элемента рассмотреть линзу с маленькой апертурой. Так, на рис. 4 показано изображение кремниевых объектов бериллиевой линзой, окруженной непрозрачной щелью, с апертурой 80 мкм и радиусом кривизны

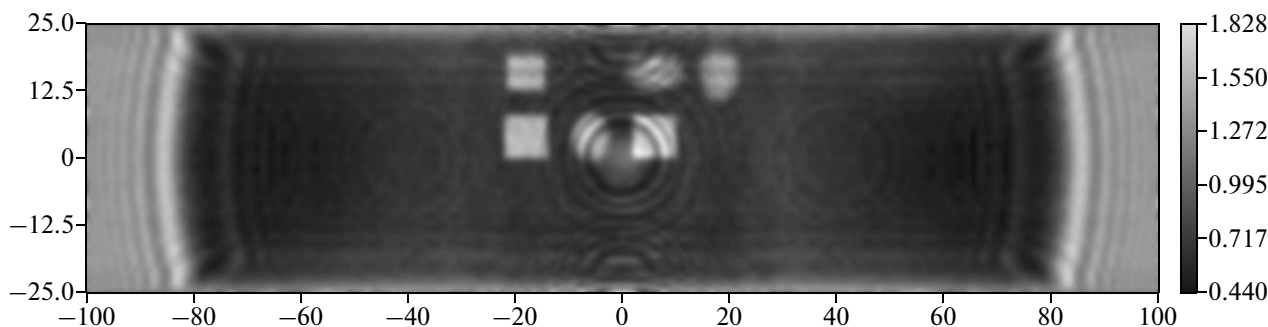


Рис. 5. Изображение зонной пластинкой серии кремниевых объектов одинакового продольного размера.

$R_0 = 0.83$  мкм. Продольный размер крайнего слева объекта равен 1 мкм, что соответствует сдвигу фаз  $\varphi \sim 0.2$ , к каждому следующему объекту добавляется 1 мкм. Видно, что, как и в одномерном случае, высота поднятия пика равна удвоенному сдвигу фазы, вносимому объектом.

#### РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТОВ ДЛЯ СХЕМЫ С ЗОННОЙ ПЛАСТИНКОЙ

Рассматривалась зонная пластинка из золота с апертурой  $A = 160$  мкм, числом зон 200, фокусным расстоянием  $F = 16$  см. Зонная пластинка в отличие от преломляющей параболической линзы имеет много порядков фокусировки. Даже для идеальной зонной пластинки, сдвигающей фазу волнового поля в зонах на  $\pi$ , непосредственно за формирование изображения отвечает первый порядок, на который приходится около 40% общей интенсивности. Оставшиеся 60% излучения не участвуют напрямую в формировании изображения, однако интерferируют с основной волной, и тем самым ухудшают качество изображения.

В данной работе рассматривается идеальная зонная пластинка, у которой отсутствует нулевой порядок. Для того чтобы исключить влияние минус первого порядка фокусировки на изображение, исследуемый объект помещается не по центру, а смещается в сторону от оптической оси. При этом перевернутое изображение объекта в первом порядке фокусировки формируется в противоположной части апертуры зонной пластинки, в то время как несфокусированное изображение в минус первом порядке возникает в той же части апертуры и за ее пределами, и они не перекрываются.

Еще одна причина ухудшения изображения заключается в слишком высокой степени когерентности падающего пучка. Известно, что подобный уровень когерентности зачастую приводит к образованию деструктивных спеклов [11], поэтому в некоторых экспериментах специально создается фазовый шум. В настоящей работе для подавления паразитной интерференции разных порядков ис-

пользовалось усреднение расчетной картины с гауссовой функцией определенной полуширины. Оптимальная полуширина составила  $S = 1.5$  мкм.

На рис. 5 представлены результаты расчета на сетке из  $2048 \times 512$  точек. На рисунке показано изображение зонной пластинкой серии кремниевых объектов одинакового продольного размера, расположенных в нижней части центральной области апертуры. Поскольку изображение перевернуто, на рисунке объекты видны в верхней полуплоскости. При этом на изображение самих объектов накладывается изображение центральных зон зонной пластинки. Видно также, что изображение центральных зон повторяется на краях расчетной области. Это связано с тем, что интеграл Фурье заменяется на ряд Фурье и существует минимальный вектор обратной решетки. Шаг сетки в  $q$ -пространстве равен  $dq = 2\pi/X$ , где  $X$  – размер расчетной области. Поскольку сетка имеет четное число точек, то нулевой точки нет и минимальный вектор обратной решетки равен  $dq/2$ . Поэтому изображение в прямом пространстве является периодическим с периодом  $X/2$ . При удалении от центра интенсивность этих артефактов ослабляется, что связано с наличием более высоких гармоник в ряде Фурье.

В случае с зонной пластинкой, как и в случае с линзой, для улучшения качества изображения может быть применена методика, аналогичная птихографии. Однако при этом щель (диафрагму), вырезающую часть объекта, следует помещать не в центре, а на определенном удалении от него. В экспериментах объект помещают ближе к краю апертуры, где находятся наиболее мелкие зоны, и за счет этого улучшают разрешение. В численных расчетах объект следует расположить так, чтобы, с одной стороны, зоны были достаточно мелкими, с другой – чтобы на одну зону приходилось достаточное число точек для адекватного описания рельефа зонной пластинки. На рис. 6 показано изображение тех же объектов, что и на рис. 5, методом птихографии. Центр щели находился в точке с координатами  $(-40, 0)$ . Как и

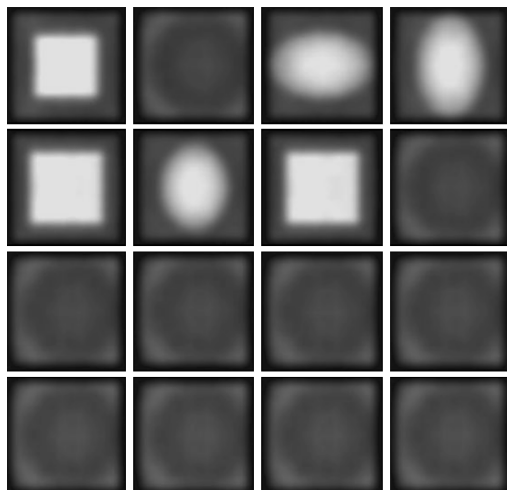


Рис. 6. Изображение зонной пластинкой тех же объектов, что и на рис. 5, с применением метода птихографии.

в случае с линзой, данный подход позволяет сделать изображение более качественным.

### ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Методом компьютерного моделирования проведено исследование особенностей фазового контраста Цернике в двумерном случае. Показано, что преломляющая линза в качестве фокусирующего элемента позволяет получить лучшее разрешение, чем зонная пластинка. Особенно-

стью двумерных расчетов является то, что из-за малого количества точек по обеим осям в изображениях могут возникать артефакты, особенно проявляющиеся в схеме с зонной пластинкой. Изображение может быть скорректировано путем использования метода птихографии. В случае использования линзы щель следует размещать в центре апертуры, а в случае зонной пластинки — ближе к ее краю.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Snigirev A., Snigireva I., Kohn V. et al.* // Rev. Sci. Instrum. 1995. V. 66. P. 5486.
2. *Кон В.Г., Арзунова Т.С., Jung Ho Je* // Поверхность. Рентген., синхротрон. нейтрон. исслед. 2011. Т. 1. С. 3.
3. *Zernike F.* // Z. Tekh. Fiz. 1935. В. 16. S. 454.
4. *Schmahl G., Rudolph D., Guttman P. et al.* // Rev. Sci. Instrum. 1995. V. 88. P. 1282.
5. *Yokosuka H., Watanabe N., Ohigashi T. et al.* // J. Synchrotron Rad. 2002. V. 9. P. 179.
6. *Chu Y.S., Yi J.M., De Carlo F. et al.* // Appl. Phys. Lett. 2008. V. 92. P. 103119.
7. *Кон В.Г., Орлов М.А.* // Поверхность. Рентген., синхротрон. нейтрон. исслед. 2010. Т. 11. С. 76.
8. *Rodenburg J.M.* // Adv. Imag. Electron Phys. 1996. V. 150. P. 87.
9. <http://alglib.sources.ru/fft>
10. *Кон В.Г., Орлов М.А.* // Кристаллография. 2011. Т. 56. № 6. С. 1007.
11. *White D.L., Wood O.R. II, Bjorkholm J.E.* // Rev. Sci. Instrum. 1995. V. 66. P. 1930.