

НАЦІОНАЛЬНА АКАДЕМІЯ НАУК УКРАЇНИ
ІНСТИТУТ МЕТАЛОФІЗИКИ ім. Г. В. КУРДЮМОВА

На правах рукопису

ВЕЛІХОВСЬКИЙ ГЛІБ ОЛЕГОВИЧ

УДК 539.26:548.4

ДИСЕРТАЦІЯ

**ДИНАМІЧНА ТЕОРІЯ РОЗСІЯННЯ У НЕКРИСТАЛІЧНИХ
БАГАТОШАРОВИХ ОБ'ЄКТАХ ДОВІЛЬНОЇ ФОРМИ**

01.04.07 – фізика твердого тіла

Фізико-математичні науки

Подається дисертація на здобуття наукового ступеня
кандидата фізико-математичних наук

Дисертація містить результати власних досліджень. Використання ідей, результатів і текстів інших авторів мають посилання на відповідне джерело

Г. О. Веліховський

Науковий керівник:

Лізунов Вячеслав Вячеславович
доктор фізико-математичних наук,
завідувач відділу фізики багатопараметричної
структурної діагностики Інституту металофізики
ім. Г. В. Курдюмова НАН України

КИЇВ – 2019

АНОТАЦІЯ

Веліховський Г. О. Динамічна теорія розсіяння у некристалічних багат шарових об'єктах довільної форми. – Кваліфікаційна наукова праця на правах рукопису.

Дисертація на здобуття наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.07 – фізика твердого тіла. – Інститут металофізики ім. Г. В. Курдюмова НАН України, Київ, 2019.

Дисертаційну роботу присвячено розвитку методів рентгенографічного дослідження внутрішньої структури некристалічних об'єктів, а саме створенню теоретичних основ для опису процесу заломлення рентгенівського випромінення у таких об'єктах та розробці і апробації підходів на основі запропонованої теоретичної моделі, що дозволять усунути недоліки та покращити існуючі методи діагностики некристалічних об'єктів.

Перш за все, в роботі проведено порівняльний аналіз процесів заломлення і поглинання високоенергетичного випромінення об'єктами досліджуваного класу та обґрунтовано доцільність та практичну значимість використання явища заломлення і відповідних експериментальних методів при дослідженні внутрішньої структури некристалічних об'єктів. Викладено короткий огляд використовуваних сьогодні методів отримання та інтерпретації таких фазоконтрастних зображень некристалічних об'єктів. Для подальшої роботи обрано тривісьову схему з кристалом-аналізатором (analyzer-based imaging), яка є відносно простою та дозволяє отримати висококонтрастні зображення. Відзначено, що для більш точного аналітичного опису процесу формування фазоконтрастних зображень і, як наслідок, поліпшення якості діагностики необхідно врахування ефектів багатократності розсіяння у кристалах аналізатора та монохроматора, а також у самому об'єкті.

Для опису особливостей процесу заломлення випромінення у багат шарових системах, які можуть використовуватись у якості аналізаторів, побудовано динамічну модель, що описує зміну когерентної складової картини розсіяння за

рахунок взаємодії скануючого променя із речовиною. З використанням даної моделі проведено детальний аналіз особливостей процесу розсіювання у одно- і двошарових системах, в яких шари складаються з кристалічної та/або аморфної речовин. На прикладі двошарової системи показано, що використання квантово-механічного підходу із застосуванням граничних умов дозволяє врахувати багатократність перерозсіювання випромінювання як в межах одного шару, так і між шарами.

Використовуючи еквівалентність основних рівнянь динамічної теорії розсіювання для різних типів випромінювання, зокрема, квантово-механічних рівнянь, що описують динамічне розсіювання електронів і нейтронів, та співвідношень, що впливають з рівнянь Максвелла та використовуються для опису дифракції електромагнітних хвиль, обгрунтовано загальність теорії по відношенню до природи скануючого випромінювання.

Виходячи з параметрів випромінювання і речовин, масштабних характеристик досліджуваних об'єктів та особливостей експериментальних методів дослідження обгрунтовано застосування так званого колонкового наближення для опису процесу формування картини розсіювання.

На цій основі в рамках квантово-механічного підходу та при застосуванні колонкового розбиття розроблено модель, що описує зв'язок між параметрами структури багатошарового некристалічного об'єкта і характеристиками скануючого променя після проходження через досліджуваний об'єкт.

Зокрема, описано процес формування рефрагованого променя при його проходженні через окремий шар некристалічної речовини, та встановлено зв'язок величини кута рефракції із граничними умовами. Описано зміни інтенсивності в пучках випромінювання, обумовлені взаємодією з речовиною всередині вказаного шару (в тому числі враховано досліджений раніше ефект розмиття променя на неоднорідностях).

Даний підхід узагальнено на випадок багатошарової системи та отримано спрощений вираз, що встановлює вплив параметрів як зовнішньої поверхні об'єкта так і поверхонь розділу між речовинами всередині нього, та власне самих речовин і розмірів об'єкта на зміну характеристик скануючого променя після проходження

через складний об'єкт. При цьому даний вираз має форму, зручну для подальшого опису формування картини розсіяння та відповідно розв'язку оберненої задачі.

Окремо досліджено критерії та межі застосування запропонованої моделі.

В результаті на основі створеної моделі описано процес формування фазоконтрастних зображень у тривісній схемі з кристалом-аналізатором.

Для підтвердження адекватності розробленого підходу було проведено розрахунки із застосуванням даної теорії для ряду модельних об'єктів, зокрема, капронового дроту, акрилового стержня, капілярів із поліетилену і боросилікатного скла як порожніх, так і наповнених метиловим спиртом. Вибір модельних об'єктів був обумовлений наявністю для них експериментальних профілів інтенсивності, виміряних раніше іншими авторами.

Отже, було продемонстровано, що розраховані в рамках запропонованої теоретичної моделі профілі інтенсивності досить добре узгоджуються із відомими експериментальними даними для модельних об'єктів. При цьому відсутність врахування певних інструментальних факторів призвела до відмінностей результатів розрахунків від експерименту для тих значень параметрів, які наближаються до меж застосовності теорії. Зокрема, розраховані профілі інтенсивності біля країв об'єкта мають дельта-подібні піки та дуже гострі провали. Це пов'язано з тим, що розрахунки зроблені з припущенням, що поверхня об'єкта гладка. При цьому тангенс кута падіння прямує до нескінченності і, таким чином, глибина ям фактично визначається лише величиною кроку інтегрування. Однак у реальних об'єктів поверхня має неоднорідності, не є гладкою, і тому провали на експериментальних кривих мають інший вигляд.

Таким чином, для більш точного опису процесів формування фазоконтрастних зображень було необхідне врахування додаткових інструментальних факторів, таких як розміри системи, неоднорідності в різних елементах оптичної схеми та ін.

Врахування мікронеоднорідностей у всіх елементах оптичної схеми (кристалі аналізаторі, кристалі монохроматорі та некристалічному об'єкті) було виконано шляхом введення в модель так званого уширення скануючого променя. Це дозволило зменшити розбіжності між експериментальними даними і теорією

поблизу кутів падіння, близьких до 90 градусів, та разом з тим дозволило врахувати таке явище, як розсіяння на ультра-малі кути (USAXS).

Іншим інструментальним фактором, що впливає на фазоконтрастне зображення, є відстань між об'єктом та кристалом-аналізатором. При достатньо великих відстанях між об'єктом та аналізатором внесок перерозподілу випромінення між колонками стає суттєвим. Врахування масштабів системи дозволило описати процес перерозподілу інтенсивності між колонками та відповідне розмиття зображення. Це дозволило описати засвіти поблизу границь об'єкта, що відсутні в ідеалізованому випадку. Крім того, даний результат надав можливість шляхом зміщення кристала-аналізатора відносно об'єкта цілеспрямовано змінювати форму профілю інтенсивності та, в результаті, покращити контрастність зображень.

Окремо розглянуто вплив параметрів кристалів монохроматора і аналізатора, та, відповідно, згорнутої кривої гойдання на результуючу картину розсіяння. Проведені розрахунки демонструють, що шляхом відповідного вибору кристалів монохроматора і аналізатора можна сформувати згорнуту криву з необхідними наперед заданими параметрами. Так, зокрема, використання геометрії дифракції за Бреггом для кристалів монохроматора і аналізатора дозволяє отримати згорнуту криву із гострим піком та, водночас, малий кут нахилу на половині висоти кривої і плавне затухання. В той час послідовне використання геометрії дифракції за Бреггом для кристалу монохроматора і геометрії дифракції за Лауе для кристалу аналізатора забезпечують більш гладкий пік, але при цьому більший кут нахилу на половині висоти кривої і більш різке затухання. Отже, за рахунок вибору товщин кристалів та геометрії дифракції можна регулювати ширину згорнутої кривої на половині висоти та її амплітуду. Наприклад, для матеріалів, що заломлюють слабо, доцільно використовувати згорнуті криві із більшим кутом нахилу, які забезпечують кращий контраст, а для матеріалів, що заломлюють випромінення більш сильно, потрібно вибирати більш широкі криві, що забезпечить виділення сигналу із шуму.

З метою аналізу впливу вищезазначених факторів на картину розсіяння проведено ряд розрахунків для скляного напівциліндра із округлим виступом за різних масштабів та параметрів неоднорідностей. Показано, що навіть за відносно слабкого впливу цих факторів окремо один від одного, сумарний вплив на картину розсіяння може бути дуже суттєвим.

З метою ілюстрації способів подальшого практичного застосування розробленої моделі проведено чисельний експеримент, в рамках якого показано принципову можливість та запропоновано спосіб розв'язку оберненої задачі розсіяння.

Так, для скляного напівциліндра з виступом отримано ряд профілів інтенсивності за різних параметрів експерименту. На основі отриманих профілів в межах запропонованої теорії розраховано ряд параметрів модельного об'єкта: товщину шару речовини в межах кожної колонки, кути нахилу поверхні. На основі різних комбінації розрахованих даних кількома способами відтворено початкову форму об'єкта.

Отже, показано важливість врахування різних ефектів як в процесі формування фазоконтрастних зображень, так і при відтворенні параметрів об'єкта з огляду на можливі похибки та критерії застосовності теорії. При цьому показано можливість при аналізі спостережуваних величин виділити певні параметри, пов'язані з окремими характеристиками некристалічного об'єкта, такими як товщина, форма чи склад речовини, та як наслідок використати найбільш інформативні і при цьому найменш спотворені величини для відтворення форми об'єкта.

Ключові слова: рентгенографія, динамічне розсіяння, фазоваріаційне зображення, рефракція, некристалічний об'єкт, обернена задача розсіяння, чисельний експеримент, тривісьова схема.

Список публікацій за темою дисертації

1. Шелудченко, Б., Молодкин, В., Лизунова, С., Олиховский, С., Кисловский, Е., Гаевский, А., Лизунов, В., Низкова, А., Владимиров, Т., Молодкин, В., Фузик, Е., Гошкодеря, А., Белоцкая, А., **Велиховский, Г.**, Музыченко, А. и

- Лехняк, Р. (2014) Теоретическая трехосевая модель динамического рассеяния и формирования изображений некристаллических объектов. *Металлофиз. новейшие технол.* 36 (4), 561–575.
2. Патон, Б., Молодкін, В., Карнаухов, І., Неклюдов, І., Сторіжко, В., Горбик, П., Низкова, Г., Оліховський, С., Гаєвський, О., Лізунова, С., Шелудченко, Б., Лізунов, В., Третяк, О., Репецький, С., Толмачов, М., Шевченко, А., Фузік, К., Молодкін, В., **Веліховський, Г.** (2016) *Спосіб фазової рентгенографії некристалічного об'єкта довільних форми і розмірів*, Патент України на винахід № 111437
 3. Молодкін, В., Сторіжко, В., Лізунова, С., Шелудченко, Б., Лізунов, В., Толмачов, М., Кисловський, Є., Оліховський, С., Вершинський, С., Денисенко, В., Фузік, К., **Веліховський, Г.**, Лехняк, Р., Лень, Є., Скапа, Л., Бровчук, С. (2015) Нові можливості створення фазоконтрастних томографів для медицини, *Наносистеми, наноматеріали, нанотехнології*. 13(3), 469–502.
 4. Лизунова, С., Шелудченко, Б., Молодкин, В., Толмачёв, Н., Айс, Дж., Барабаш, Р., Сторижко, В., Лизунов, В., Фузик, Е., **Велиховский, Г.**, Молодкин, В., Дмитриев, С., Скапа, Л. (2017) Аналитическая модель формирования фазоконтрастных изображений неоднородных некристаллических объектов произвольной формы, *Металлофиз. новейшие технол.*, 39(2), 143–162.
 5. Molodkin V., **Velikhovskii, G.**, Lizunova, S., Lizunov, V., Sheludchenko, B., Kislovskii, E., Vasilik, Ya., Skakunova, O., Dmitriev, S., Fuzik, K. And Lekhnyak, R. (2016). Quantum-Mechanical Model for Phase-Contrast Imaging of Non-Crystalline Objects, *Materialwissenschaft und Werkstofftechnik [Materials Science and Engineering Technology]*, 47(2–3), 246–253.
 6. Дмитрієв, С., Лізунова, С., Толмачов, М., Шелудченко, Б., Скакунова, О., Молодкін, В., Лізунов, В., Голентус, І., Карпов, А., Войток, О., Почекуєв, В., Репецький, С., Вишивана, І., Скапа, Л., Барабаш, О., **Веліховський, Г.** (2017) Статистична теоретична модель динамічної брегівської дифракції в двошаровій кристалічній системі з аморфним поверхневим шаром, *Металлофиз. новейшие технол.*, 39(12), 1587–1610.

7. Дмитрієв, С., Молодкін, В., Толмачов, М., Скакунова, О., Лізунова, С., Лехняк, Р., Фузік, К., **Веліховський, Г.**, Васькевич, О., Лізунов, В., Катасонов, А., Голентус, І., Оліховський, С., Скапа, Л., Молодкін, В. (2017) Ефекти повної багатократності дифузного розсіювання в кристалах з дефектами другого класу за Кривоглазом, *Металлофиз. новейшие технол.*, 39(1), 1–9.
8. Скапа, Л., Лизунов, В., Молодкин, В., Лень, Е., Шелудченко, Б., Лизунова, С., Скакунова, Е., Толмачев, Н., Дмитриев, С., Лехняк, Р., **Велиховский, Г.**, Молодкин, В., Заболотный, И., Фузик, Е., Васькевич, О. (2015) Дисперсионные эффекты взаимосвязанности зависимостей от различных условий дифракции картины рассеяния и колоссального усиления этих зависимостей и их структурной чувствительности и информативности, *Металлофиз. новейшие технол.* 37(11), 1567–1582.
9. Дмитриев, С., Лехняк, Р., Молодкин, В., Лизунов, В., Скапа, Л., Скакунова, Е., Лизунова, С., Олиховский, С., Лень, Е., Толмачев, Н., Шелудченко, Б., Фузик, Е., **Велиховский Г.** (2015) Теория динамического фактора Кривоглаза–Дебая–Валлера, *Металлофиз. новейшие технол.* 37(9), 1169–1181.
10. Molodkin, V., **Velikhovskiy, G.**, Lizunova, S., & Lizunov, V. (2019). Dynamical diffraction model for phase-contrast analyzer-based imaging. *Optics Communications*, 439, 1–7
11. **Velikhovskiy, G.**, Molodkin, V., Lizunov, V., Vladimirova, T., Lizunova, S., Vasilik, Ya., Kulish, M. and Pavlenko, O. (2019). Solving Direct and Inverse Scattering Problems for Heterogeneous Non-Crystalline Objects in Analyzer-Based Imaging, *Металлофиз. новейшие технол.*, 41(3), 1001–1003.

ABSTRACT

Velikhovskiy G. O. Dynamical scattering theory for non-crystalline multilayer objects of arbitrary shape. - Manuscript.

Thesis for a scientific degree of Candidate of Sciences in Physics and Mathematics (Philosophy Doctor) in specialty 01.04.07 – Solid-State Physics. G.V. Kurdyumov Institute for Metal Physics of the NAS of Ukraine, Kyiv, 2019.

The thesis is devoted to the development of the methods for X-ray diagnostics of the internal structure of non-crystalline objects, namely to the creation of theoretical bases for describing the process of refraction of X-rays in such objects, and to development and verification of the approaches, based on the proposed theoretical model, those would allow to eliminate deficiencies and improve existing methods for non-crystalline objects diagnostics.

First of all, the work contains the comparative analysis of the processes of absorption and refraction of high energy radiation by the objects of the studied class, and the substantiation of expediency and practical significance of the usage of the refraction phenomena and corresponding experimental methods during the study of the internal structure of non-crystalline objects. A brief overview of the methods of obtaining and interpreting such phase-contrast images of non-crystalline objects is presented. The triple-axis optical scheme, also called analyzer-based imaging, was selected for further work because it is both simple and allows to receive high-quality images. It is noted that in order to more precisely describe the process of phase contrast images formation, and as a consequence, in order to improve the quality of diagnostics, it is necessary to take into account the effects of multiple scattering in the monochromator and analyzer crystals as well as in the object itself.

In order to describe the features of the radiation refraction process in multilayer systems, those can be used as analyzers, a dynamic model describing the change in the coherent component of the scattering pattern caused by the interaction of the scanning beam with the substance is constructed. Using this model, a detailed analysis of the features of the scattering process in single- and double-layer systems, in which the layers

consist of crystalline and/or amorphous substances, has been carried out. On the example of a two-layer system, it is shown that the use of a quantum-mechanical approach with the use of boundary conditions allows to take into account the multiplicity of radiation re-scattering, both within a single layer and between layers.

Using the equivalence of the basic equations of the dynamic scattering theory for various types of radiation, in particular, the quantum-mechanical equations describing the dynamic scattering of electrons and neutrons, and the relations arising from the Maxwell equations and used to describe the diffraction of electromagnetic waves, the universality of the theory in relation to the nature of the scanning radiation was substantiated.

Proceeding from the parameters of radiation and substances, the scale characteristics of the studied objects and the features of experimental methods, the use of the so-called column approximation for describing the process of forming a scattering image was substantiated.

On this basis, within the quantum-mechanical approach and with the application of the column approximation, a model describing the relationship between the parameters of the structure of a multilayer non-crystalline object and the characteristics of the scanning beam after passing through the studied object was developed.

In particular, the process of forming a refracted beam during its passage through a separate layer of a non-crystalline substance was described, and a connection of the magnitude of the refraction angle with boundary conditions was established. The changes of the intensity of the radiation beams caused by the interaction with the substance inside the specified layer were described (including the previously known effect of the ray blurring by the inhomogeneities).

This approach was generalized to the case of a multilayer system, and also there was obtained a simplified expression that describes the influence of the parameters of both the outer surface of the object and the surfaces between different substances inside it, and actually the substances and the size of the object on change the characteristics of the scanning beam after passing through the composite object. At the same time, this expression has a form suitable for further description of the formation of a scattering image and thus the solution of the inverse problem.

The criteria and limits of application of the proposed model have been explored too.

As a result, on the basis of the created model, the process of forming phase contrast images within the triple-axis ABI method was described.

To confirm the adequacy of the developed approach, there were made the calculations with the use of this theory for a number of model objects, in particular, nylon wire, acrylic rod, capillaries of polyethylene and borosilicate glass both empty and filled with methyl alcohol. Such set of the model objects was used due to the presence of respective experimental intensity profiles, measured earlier by other authors.

Thus, it was demonstrated that the intensity profiles calculated within the currently proposed theoretical model are in good agreement with the known experimental data for model objects. In this case, certain instrumental factors were not taken into account, which caused some differences between the results of calculations and the experimental data for the values those are close to the limits of the applicability of the theory. In particular, the calculated intensity profiles have delta-like peaks and very sharp pits near the edges of the object. This is due to the fact that the calculations were made with the assumption that the surface of the object is smooth. In this case, the tangent of the incident angle goes to infinity, and thus the depth of the pits is actually determined only by the size of the integration step. However, in the case of real objects, the surface has heterogeneities, it is not smooth, and therefore pits on the experimental curves have a different shape.

Thus, for more accurate description of the formation of phase contrast images, it was necessary to take into account additional instrumental factors such as the size of the system, heterogeneity in various elements of the optical scheme, etc.

The account of micro-inhomogeneities in all elements of the optical scheme (analyzer crystal, monochromator crystal and non-crystalline objects) was accomplished by introducing into the model a so-called widening of the scanning beam. This allowed to reduce the divergence between the experimental data and the theory near the incidence angles close to 90 degrees, and at the same time allowed to take into account the phenomenon of ultra-small angles scattering (USAXS).

Another instrumental factor that influences the phase contrast image is the distance between the object and the crystal analyzer. At sufficiently large distances between the

object and the analyzer, the redistribution of radiation between the columns becomes significant. Taking into account the scale of the system allowed to describe the process of redistribution of the intensity between the columns and thus the corresponding blurring of the image. This allowed to describe illuminated regions near the boundaries of the object those were absent in the ideal case. In addition, this gave the possibility to purposefully change the shape of the intensity profile and, as a result, to improve the contrast of the images by displacing the analyzer crystal relatively to the object.

Separately, the influence of the parameters of the monochromator and analyzer crystals, and respectively the rocking curve on the resulting scattering picture was considered. The calculations show that by choosing proper monochromator and analyzer crystals it is possible to achieve the rocking curve with the necessary pre-set parameters. Thus, in particular, using the Bragg diffraction geometry for the monochromator and analyzer crystals allows to achieve the rocking curve with a sharp peak and, at the same time, a small angle at half the height of the curve and smooth attenuation. At the same time, the consecutive use of the Bragg diffraction geometry for the monochromator crystal and the Laue diffraction geometry for the analyzer crystal provides a smoother peak but greater angle at half the height of the curve and a more sharp attenuation. Therefore, by choosing the thickness of the crystals and the diffraction geometry, it is possible to adjust the width of the rocking curve at half height and its amplitude. For example, for weakly refracting materials, it is expedient to use rocking curves with a greater angle at half height, those provide better contrast, and for materials that refract radiation more strongly, it is necessary to choose wider curves those provide better signal to noise ratio.

In order to analyze the influence of the above-mentioned factors on the scattering image, there were performed a series of calculations for a glass semicylinder with a round bulge with the various scales and heterogeneity parameters. It is shown that even with relatively weak influence of these factors separately from each other, the total effect on the scattering image can be very significant.

In order to illustrate the options for further practical application of the developed model, there was performed a numerical experiment, in which there was shown the principal possibility and proposed the method for solving the inverse scattering problem.

Thus, for a glass semicylinder with a bulge, there were obtained a number of intensity profiles with different parameters of the experiment. Based on the profiles received within the proposed theory, a number of parameters of a model object were calculated: the thickness of the substance layer within each column, the angles of the inclination of the surface. Based on a different combination of calculated data, the initial form of the object was reconstructed in several ways.

Finally, the importance of taking into account various effects both during the process of phase contrast images formation and during the reconstruction of the parameters of the object from the point of view of possible errors and criteria of the applicability of the theory was shown. It was shown that during the analysis of the observed values it is possible to define certain parameters related to the individual characteristics of the non-crystalline object, such as thickness, shape or composition of the substance, and as a result to use the most informative and at the same time least distorted values for reconstruction of the object's shape.

Keywords: X-ray diagnostics, dynamical scattering, phase-contrast image, refraction, non-crystalline object, inverse scattering problem, numerical experiment, triple-axis scheme.

List of publications relevant to the thesis

1. Шелудченко, Б., Молодкин, В., Лизунова, С., Олиховский, С., Кисловский, Е., Гаевский, А., Лизунов, В., Низкова, А., Владимирова, Т., Молодкин, В., Фузик, Е., Гошкодеря, А., Белоцкая, А., **Велиховский, Г.**, Музыченко, А. и Лехняк, Р. (2014) Теоретическая трехосевая модель динамического рассеяния и формирования изображений некристаллических объектов. *Металлофиз. новейшие технол.* 36 (4), 561–575.
2. Патон, Б., Молодкін, В., Карнаухов, І., Неклюдов, І., Сторіжко, В., Горбик, П., Низкова, Г., Оліховський, С., Гаєвський, О., Лізунова, С., Шелудченко, Б., Лізунов, В., Третяк, О., Репецький, С., Толмачов, М., Шевченко, А., Фузік, К., Молодкін, В., **Веліховський, Г.** (2016) *Спосіб фазової рентгенографії*

некристалічного об'єкта довільних форми і розмірів, Патент України на винахід № 111437

3. Молодкін, В., Сторіжко, В., Лізунова, С., Шелудченко, Б., Лізунов, В., Толмачов, М., Кисловський, Є., Оліховський, С., Вершинський, С., Денисенко, В., Фузік, К., **Веліховський, Г.**, Лехняк, Р., Лень, Є., Скапа, Л., Бровчук, С. (2015) Нові можливості створення фазоконтрастних томографів для медицини, *Наносистеми, наноматеріали, нанотехнології*. 13(3), 469–502.
4. Лизунова, С., Шелудченко, Б., Молодкин, В., Толмачёв, Н., Айс, Дж., Барабаш, Р., Сторижко, В., Лизунов, В., Фузик, Е., **Велиховский, Г.**, Молодкин, В., Дмитриев, С., Скапа, Л. (2017) Аналитическая модель формирования фазоконтрастных изображений неоднородных некристаллических объектов произвольной формы, *Металлофиз. новейшие технол.*, 39(2), 143–162.
5. Molodkin V., **Velikhovskii, G.**, Lizunova, S., Lizunov, V., Sheludchenko, B., Kislovskii, E., Vasilik, Ya., Skakunova, O., Dmitriev, S., Fuzik, K. And Lekhnyak, R. (2016). Quantum-Mechanical Model for Phase-Contrast Imaging of Non-Crystalline Objects, *Materialwissenschaft und Werkstofftechnik [Materials Science and Engineering Technology]*, 47(2–3), 246–253.
6. Дмитрієв, С., Лізунова, С., Толмачов, М., Шелудченко, Б., Скакунова, О., Молодкін, В., Лізунов, В., Голентус, І., Карпов, А., Войток, О., Почекуєв, В., Репецький, С., Вишивана, І., Скапа, Л., Барабаш, О., **Веліховський, Г.** (2017) Статистична теоретична модель динамічної бреггівської дифракції в двошаровій кристалічній системі з аморфним поверхневим шаром, *Металлофиз. новейшие технол.*, 39(12), 1587–1610.
7. Дмитрієв, С., Молодкін, В., Толмачов, М., Скакунова, О., Лізунова, С., Лехняк, Р., Фузік, К., **Веліховський, Г.**, Васькевич, О., Лізунов, В., Катасонов, А., Голентус, І., Оліховський, С., Скапа, Л., Молодкін, В. (2017) Ефекти повної багатократності дифузного розсіювання в кристалах з дефектами другого класу за Кривоглазом, *Металлофиз. новейшие технол.*, 39(1), 1–9.
8. Скапа, Л., Лизунов, В., Молодкин, В., Лень, Е., Шелудченко, Б., Лизунова, С., Скакунова, Е., Толмачев, Н., Дмитриев, С., Лехняк, Р., **Велиховский, Г.**,

- Молодкин, В., Заболотный, И., Фузик, Е., Васькевич, О. (2015) Дисперсионные эффекты взаимосвязанности зависимостей от различных условий дифракции картины рассеяния и колоссального усиления этих зависимостей и их структурной чувствительности и информативности, *Металлофиз. новейшие технол.* 37(11), 1567–1582.
9. Дмитриев, С., Лехняк, Р., Молодкин, В., Лизунов, В., Скапа, Л., Скакунова, Е., Лизунова, С., Олиховский, С., Лень, Е., Толмачев, Н., Шелудченко, Б., Фузик, Е., **Велиховский Г.** (2015) Теория динамического фактора Кривоглаза–Дебая–Валлера, *Металлофиз. новейшие технол.* 37(9), 1169–1181.
 10. Molodkin, V., **Velikhovskiy, G.**, Lizunova, S., & Lizunov, V. (2019). Dynamical diffraction model for phase-contrast analyzer-based imaging. *Optics Communications*, 439, 1–7
 11. **Velikhovskiy, G.**, Molodkin, V., Lizunov, V., Vladimirova, T., Lizunova, S., Vasilik, Ya., Kulish, M. and Pavlenko, O. (2019). Solving Direct and Inverse Scattering Problems for Heterogeneous Non-Crystalline Objects in Analyzer-Based Imaging, *Металлофиз. новейшие технол.*, 41(3), 1001–1003.

ЗМІСТ

Перелік умовних позначень	17
Вступ	18
1. Способи неруйнівної діагностики некристалічних об'єктів	24
1.1. Вступ	24
1.2. Методи фазового контрасту	26
1.2.1. Рентгенівська кристалічна інтерферометрія	26
1.2.2. Гратковий інтерферометр бонзе-харта	28
1.2.3. Граткова інтерферометрія (інтерферометрія талбота)	30
1.2.4. Метод вільного поширення	34
1.2.5. Схема з кристалом-аналізатором (abi)	37
1.2.6. Метод освітлення краю	41
1.3. Висновки	44
2. Теоретичні основи тривісьового методу формування фазоконтрастних зображень	46
2.1. Вступ	46
2.2. Вихідні положення моделі	47
2.2.1. Колонкове розбиття	47
2.2.2. Тривісьова схема	48
2.3. Розсіяння в аморфному поглинаючому шарі	49
2.4. Розсіяння в двошаровій аморфній системі	52
2.5. Розсіяння в монокристалічній плоско-паралельній пластині	54
2.6. Розсіяння в двошаровій системі з аморфним і кристалічним шарами	59
2.7. Дифракція в двошаровій кристалічній системі. Метод підсумовування амплітуд	61
2.8. Дифракція в двошаровій кристалічній системі. Метод граничних умов	66
2.9. Висновки	68
3. Формування зображення некристалічних багатошарових об'єктів довільної форми	69
3.1. Вступ	69

3.2. Теорія багатократного розсіювання в некристалічних об'єктах довільної форми.....	71
3.2.1. Випадок нормального падіння променя	79
3.2.2. Випадок довільного кута α_1 падіння променя на поверхню об'єкта	84
3.3. Тривісьова модель формування зображень некристалічних об'єктів	87
3.4. Ітеративна процедура узагальнення	90
3.4.1. Граничні умови.....	90
3.4.2. Кут рефракції	93
3.4.3. Зміна фази	95
3.5. Чисельні розрахунки та результати.....	97
3.6. Висновки	101
4. Вплив інструментальних факторів при розв'язку прямої і оберненої задач розсіювання.....	103
4.1. Вступ.....	103
4.2. Вплив неоднорідностей об'єкту та інструментальних факторів на розподіл інтенсивності.....	104
4.2.1. Вплив кривих відбивання монохроматора та аналізатора на розподіл інтенсивності.....	105
4.2.2. Вплив неоднорідностей поверхні об'єкта на розподіл інтенсивності ...	108
4.2.3. Вплив флуктуацій складу об'єкта на розподіл інтенсивності	110
4.2.4. Вплив масштабних параметрів системи на розподіл інтенсивності.....	112
4.3. Розв'язання оберненої задачі	114
4.3.1. Знаходження геометричних параметрів об'єкта	115
4.3.2. Реконструкція форми об'єкту	116
4.4. Висновки	118
Основні результати та висновки	120
Список використаних джерел	123
Додаток 1 публікації за темою дисертації	138

ПЕРЕЛІК УМОВНИХ ПОЗНАЧЕНЬ

ABI — analyzer-based imaging

MIR — multi-imaging radiography

USAXS — ultra small angle X-ray scattering

КГ — крива гойдання

ТЗ — теорія збурень

ВСТУП

Актуальність теми дослідження.

Розвиток багатьох сучасних галузей науки і техніки потребує відповідного вдосконалення методів неруйнівної діагностики складу та внутрішньої структури досліджуваних об'єктів. Вказані об'єкти можуть складатися із різноманітних речовин і матеріалів, зокрема, із композитних, та мати складну будову. При цьому в залежності від області застосування розмір та форма об'єктів змінюються у широкому діапазоні. Тому розвиток методів та створення моделей, що дозволяють покращити чутливість та підвищити інформативність діагностики за рахунок врахування нових фізичних ефектів, є важливою задачею.

Сучасні методи структурної діагностики засновані на формуванні за допомогою високоенергетичного випромінення картини розсіяння об'єкта, яка при цьому містить інформацію про внутрішню будову і склад, та її подальший розшифровці на основі використання теорій, що описують зв'язок між параметрами об'єкта та дифракційною картиною. Отримання детальної інформації про складні об'єкти потребує варіювання параметрів експерименту і призводить до збільшення часу діагностики та, в результаті, дози опромінення, що зазвичай має негативний вплив на досліджуваний об'єкт. Найбільш критичним є створення такої ситуації при дослідженні некристалічних біологічних об'єктів, для яких саме дифракційні методи не можуть бути застосовані.

Традиційні методи рентгенографічної діагностики некристалічних об'єктів засновані на явищі поглинання, що для переважної більшості речовин проявляється набагато слабкіше ніж заломлення. При цьому у більш сучасних підходах, що базуються на явищі заломлення випромінення та дозволяють одержувати так звані фазоконтрастні зображення, зазвичай використовують спрощену теорію для опису процесу розсіяння як в безпосередньо досліджуваних об'єктах, так і в елементах оптичних схем. Зокрема, зазвичай використовується наближення геометричної оптики та не враховується вплив факторів, що можуть спричинити неможливість такого наближення. Водночас, для опису розсіяння випромінення на елементах

оптичних схем, які найчастіше є монокристалами, майже завжди застосовують або кінематичну, або динамічну теорії розсіювання, але лише для ідеальних кристалів та, навіть, наближення геометричної оптики, що унеможлиблює точний опис формування фазоконтрастних зображень. Отже, для збільшення інформативності сучасних методів діагностики некристалічних об'єктів важливим є створення теорій, які дають більш адекватний опис процесів розсіювання і, відповідно, формування фазоконтрастних зображень.

Таким чином, теоретична модель тривісного способу формування фазоконтрастних зображень на основі динамічної теорії розсіювання з урахуванням наявності мікродефектів у монокристалах оптичної схеми та процесів багатократного розсіювання в некристалічних багатошарових об'єктах довільної форми може дати змогу принципово збільшити інформативність діагностики і суттєво зменшити дозу випромінювання, та при цьому, зокрема, отримувати зображення, чутливі до структурних особливостей, що є непомітними для традиційних методів. Тому задача створення такої теорії, що дає більш повний опис процесу формування фазоконтрастних зображень і при цьому може забезпечити розв'язок оберненої задачі розсіювання, є актуальною.

Зв'язок роботи з науковими програмами, планами, темами

Робота виконувалась в Інституті металофізики ім. Г. В. Курдюмова НАН України і була складовою частиною науково-дослідницької роботи за темами:

- «Нові підходи, методи та принципи радикального підвищення на основі ефектів багатократності розсіювання чутливості та інформативності дифракційних досліджень функціональних матеріалів» (постанова Бюро ВФА НАН України від 23.05.2012 № 5, № держреєстрації 0113U000032) — (виконавець);

- «Створення та практична реалізація новітніх способів кількісної багатопараметричної структурної діагностики на фазоваріаційних принципах» (затверджена Рішенням Бюро ВФА НАН України від 06.06.2017 р. протокол № 4, № держреєстрації 0118U001039) — (виконавець).

Мета роботи:

Теоретичне описання на основі динамічної теорії розсіювання ефектів, що виникають при взаємодії високоенергетичного випромінення з багатошаровими некристалічними об'єктами, та створення моделі, що встановлює кількісний зв'язок між структурними особливостями та складом таких структурно неоднорідних об'єктів із характеристиками картини розсіювання в рамках фазоваріаційного методу із врахуванням процесів багатократності розсіювання на всіх етапах формування зображення.

Для досягнення мети вирішуються наступні задачі:

- Проведення аналізу природи та принципів формування зображення у сучасних методах діагностики некристалічних об'єктів із визначенням методу, що дає можливість найбільш повною мірою встановити характеристики об'єктів;
- Розробка статистичної динамічної теоретичної моделі та забезпечення на її основі адекватного опису ефектів багатократності розсіювання випромінення та формування фазоконтрастних зображень багатошарових некристалічних об'єктів довільної форми у тривісьовій схемі.
- Встановлення якісних та кількісних показників впливу параметрів устаткування і умов експерименту та особливостей об'єкта на картину розсіювання (із визначенням меж застосовності побудованої теорії) та встановлення відповідних оптимальних умов для реалізації фазоваріаційних принципів діагностики.
- Проведення числових розрахунків для перевірки адекватності та точності розробленої моделі та забезпечення можливості розв'язку відповідної оберненої задачі розсіювання.

Об'єкт досліджень:

фазоконтрастні зображення некристалічних об'єктів складної будови.

Предмет досліджень:

особливості взаємодії випромінення із некристалічною речовиною у багатошарових структурах та природа впливу ефектів багатократності розсіювання на формування тривісьовим способом фазоконтрастних зображень об'єктів.

Методи досліджень:

методи теоретичної фізики; методи обчислювальної фізики та комп'ютерного моделювання.

Наукова новизна результатів, що виносяться на захист:

1. Вперше побудовано теоретичну тривісьову модель динамічного розсіяння та формування зображень багатошарових некристалічних об'єктів довільної форми з урахуванням ефектів багатократності розсіяння як у об'єкті, так і в монокристалах монохроматора і аналізатора.

Зокрема, обґрунтовано і адаптовано колонкове наближення для опису формування топографічних зображень багатошарових некристалічних об'єктів довільної форми та проведено врахування не лише динамічного розсіяння у шарах, а також і багатократності перерозсіяння між шарами. При цьому встановлено можливості та особливості суттєвого впливу на картину розсіяння як параметрів самого багатошарового некристалічного об'єкта, так і паразитного впливу однорідно та неоднорідно розподілених дефектів у кристалах монохроматора і аналізатора.

2. Вперше з використанням побудованої моделі аналітично встановлено взаємозв'язок характеристик досліджуваного некристалічного багатошарового об'єкта, а саме форми, розмірів, коефіцієнтів заломлення і поглинання для шарів кожної колонки, тобто параметрів неоднорідностей структури об'єкта, зі спостережуваними експериментально параметрами картини розсіяння, та відповідно кутами рефракції, змінами фаз, коефіцієнтами екстинкції. На цій основі розроблено принципи фазоваріаційної діагностики неоднорідних багатошарових некристалічних об'єктів.

3. В результаті на основі побудованої тривісьової моделі та отриманих аналітичних формул запропоновано фазоваріаційний метод розв'язку оберненої задачі розсіяння для таких об'єктів. При цьому забезпечено можливість вирішення проблеми захисту від паразитного впливу інструментальних факторів на зображення та чисельним експериментом підтверджено працездатність та

ефективність розробленого підходу у діагностиці багат шарових некристалічних об'єктів.

Практичне значення одержаних результатів.

У роботі створено фізичні основи діагностики з якісно новими функціональними можливостями для некристалічних багат шарових об'єктів та цим забезпечено перспективи подальшої розробки і широкого практичного використання найбільш високочутливого та інформативного фазоваріаційного підходу до діагностики параметрів структури та характеристик складних (багатопараметричних) некристалічних, зокрема медико-біологічних об'єктів, в тому числі на мікроскопічних масштабах.

При цьому розроблена модель дозволяє враховувати різноманітні інструментальні фактори, що підвищує чутливість та інформативність порівняно з розповсюдженими методами діагностики та дозволяє уникнути паразитного впливу цих факторів на картину розсіювання і як наслідок унеможлиблює хибну діагностику.

Особистий внесок здобувача.

З робіт, виконаних у співавторстві [85-88, 90, 108-110, 117, 118], до дисертації включено лише результати, одержані особисто здобувачем. Безпосередньо здобувач здійснював пошук і аналіз літератури, ставив задачі та генерував і апробовував ідеї їх розв'язання, розробляв фізичні моделі, виводив формули та розв'язував рівняння, імплементував аналітичні та чисельні математичні моделі.

Зокрема, дисертантом проведено аналіз загальновідомих підходів та визначено передумови до створення теоретичної моделі в рамках методів побудови фазоконтрастних зображень [90, 108-110]; на основі загальновідової динамічної теорії розсіювання у кристалах проведено ряд узагальнень на випадок некристалічного об'єкта багат шарової структури, обґрунтовано різні шляхи до розв'язку задачі розсіювання, зокрема щодо врахування багатократності перерозсіювання між шарами, та можливі спрощення і наближення [85, 107]; проведено аналіз впливу параметрів кристалів в межах тривісьового методу побудови фазоваріаційних зображень [86-

88]; розроблено алгоритми та проведено розрахунки профілів інтенсивності з метою перевірки працездатності моделі та запропоновано і проведено чисельний експеримент по розв'язанню оберненої задачі розсіювання [117, 118].

Дисертант складав тези, готував усні та стендові доповіді для апробації одержаних результатів на наукових конференціях, на яких виступав переважно особисто, а також безпосередньо писав статті та відповідав на зауваження і запитання рецензентів публікацій.

Апробація результатів дисертації.

Основні результати дисертації було представлено на наступних міжнародних наукових конференціях: Ukrainian-German Symposium on Physics and Chemistry of Nanostructures and on Nanobiotechnology (2015), V International conference 'Nanotechnology and nanomaterials' (2017), 8th International Conference 'Physics of Liquid Matter: Modern Problem' (2018). Крім того, результати роботи обговорювалися на наукових семінарах Інституту металофізики ім. Г. В. Курдюмова НАН України.

Публікації

За матеріалами дисертаційної роботи опубліковано 10 статей у фахових наукових журналах та отримано 1 патент України [1–11]. Крім того, дисертаційні результати стисло містяться ще й у 3 тезах, опублікованих в збірниках матеріалів вищезазначених конференцій.

Структура та об'єм роботи

Дисертаційна робота складається з анотації, вступу, огляду літератури, трьох оригінальних розділів, загальних висновків, переліку використаних джерел, що містить 121 найменування, та одного додатку. Робота написана на 140 сторінках та містить 33 рисунки

РОЗДІЛ 1

СПОСОБИ НЕРУЙНІВНОЇ ДІАГНОСТИКИ НЕКРИСТАЛІЧНИХ ОБ'ЄКТІВ

1.1. Вступ

Використання рентгенівських променів для встановлення внутрішньої структури об'єктів швидко поширилося по всьому світу незабаром після відкриття Вільгельма Конрада Рентгена 1895 року. На сьогодні рентгенівська радіографія є стандартним методом діагностики у багатьох галузях і дисциплінах, від медицини та систем безпеки до інженерії матеріалів, включаючи контроль якості в промисловості.

Не зважаючи на багаторічний прогрес та численні технічні вдосконалення, фундаментальний принцип, покладений в основу переважної більшості діагностичного обладнання, залишався незмінним: контраст зображення породжується відмінностями в поглинанні рентгенівських променів у зразку. Це забезпечує хороші результати, коли існує відносно сильне поглинання, але призводить до поганої якості зображення, коли розміри зразка малі або зразок поглинає слабо. Останнє часто спостерігається для об'єктів, що складаються з легких елементів, та особливо проявляється для медико-біологічних об'єктів. Однак, саме для медичної діагностики необхідно отримувати контрастні зображення об'єктів надзвичайно малих розмірів (порядку мікрометрів), що неможливо реалізувати на основі використання явища поглинання.

Найбільш суттєве покращення роздільної здатності та інформативності діагностики можна отримати завдяки використанню інших фізичних принципів, а саме на вимірюванні зміни фази електромагнітної хвилі при проходженні через об'єкт, який характеризується комплексним коефіцієнтом заломлення:

$$n = 1 - \delta + i\beta \quad (1.1)$$

де δ — реальна частина коефіцієнту заломлення, що визначає зміну фаз, β — уявна частина коефіцієнта заломлення, яка визначає поглинання. Вираз для інтенсивності зображення, побудованого на використанні поглинання має вигляд:

$$I = I_0 e^{-(\beta_o - \beta_b)T} \quad (1.2)$$

де I_0 - інтенсивність джерела, β_o і β_b - уявні частини коефіцієнта заломлення об'єкта та зовнішньої речовини відповідно, T - товщина об'єкта. Для рентгенівського випромінювання та медико-біологічних речовин $\delta \gg \beta$, а контраст залежить від різниці β_o і β_b , що відповідно ще менша. Саме цим пояснюються значні переваги методів, що використовують заломлення.

Слід зазначити, що для високоенергетичного випромінювання реальна частина коефіцієнта заломлення все ще $\delta \ll 1$. Внаслідок цього кут рефракції, що описує відхилення променя після проходження через об'єкт можна наближено записати у вигляді

$$\gamma = \frac{1}{K} \frac{\partial \phi}{\partial x} \quad (1.3)$$

де K - хвильовий вектор випромінювання, $\frac{\partial \phi}{\partial x}$ - власне градієнт фази.

Вперше принцип отримання фазоконтрастного зображення об'єктів був описаний у 1942 році Церніке [1], за що у 1953 році він отримав Нобелівську премію. В подальшому практичне застосування цього відкриття протягом тривалого часу обмежувалось оптичною мікроскопією з причини відсутності когерентних джерел рентгенівського випромінювання з високою яскравістю, а також через відсутність відповідних елементів рентгенівської оптики.

Прорив у застосуванні фазового контрасту в рентгенівському діапазоні в 70-х роках минулого століття розпочався після побудови джерел синхротронного випромінювання і пов'язаного з цим створення елементів рентгенівської оптики та позиційно-чутливих детекторів рентгенівського випромінювання. За цей час з використанням синхротронного випромінювання експериментально і теоретично продемонстровано величезні можливості застосування фазового контрасту як в медицині, так і в інших галузях. Нажаль, висока вартість та складність джерел синхротронного випромінювання стає на заваді їх широкого застосування. Ця обставина стимулювала інтенсивні дослідження і розробки більш дешевих компактних джерел когерентного рентгенівського випромінювання з використанням мікрофокусних рентгенівських трубок з рідкометалевим струменем [2], компактних

прискорювачів протонів [3], а також плазмових джерел з високою яскравістю [4]. Поряд з цим на лабораторних джерелах здійснювалось випробування різних схем реалізації фазового контрасту. Далі буде коротко викладено основні відомості про найбільш перспективні методи отримання фазоконтрастних зображень та проведено їх порівняльний аналіз.

1.2. Методи фазового контрасту

На сьогодні не існує остаточної класифікації методів фазового контрасту. Спираючись на роботу [5] можна виділити наступні методи: рентгенівські інтерферометри Бонзе–Харта на основі кристалів та на основі ґраток, ґраткова інтерферометрія Талбота, метод вільного поширення, схема з аналізатором, метод освітлення краю та інші.

1.2.1 Рентгенівська кристалічна інтерферометрія

Вперше цей метод реалізували Бонзе і Харт у 1965 році [6]. В подальшому рентгенівська кристалічна інтерферометрія отримала розвиток в роботах [7, 8]. В англomовній літературі цей метод найчастіше називається Crystal interferometry.

Розглянемо оптичну схему та принцип дії рентгенівського кристалічного інтерферометра [6, 9–18]. Інтерферометр складається з джерела рентгенівського випромінювання, трьох кристалічних пластин, що традиційно використовуються у геометрії Лауе, та іноді у геометрії Брегга, зразка та детектора (див. рис. 1).

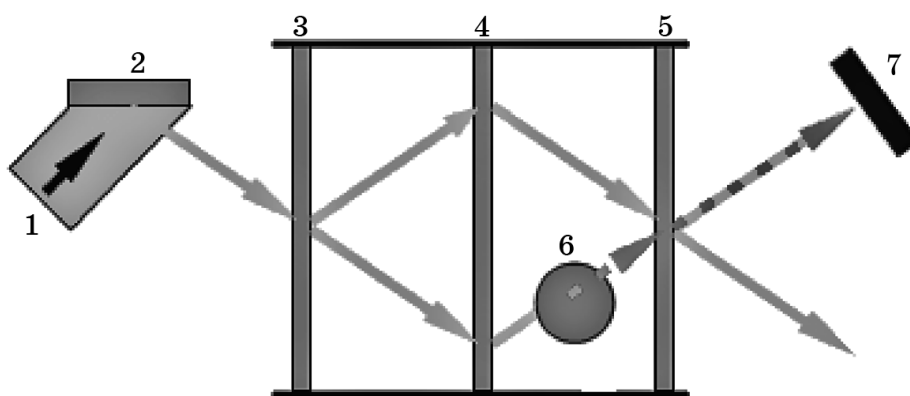


Рис. 1.1 Схема кристалічного інтерферометра [19]: 1 — рентгенівське випромінювання, 2 — монохроматор, 3–5 — кристали, 6 — зразок, 7 — детектор.

Кристалічні пластини перпендикулярні площині рисунка 1.1, яка збігається з площиною падіння рентгенівських променів на ці пластини. Пластини орієнтовані так, що вектор **b** оберненої ґратки для кожної з них лежить у площині падіння та паралельний поверхні кожної пластини.

Рентгенівський пучок з хвильовим вектором **k** (рис. 1.1), що падає на першу кристалічну пластину (3), по-перше, заломлюється, практично без зміни напрямку та величини хвильового вектора, а по-друге, зазнає дифракційного розсіяння з хвильовим вектором **k'**. Отже, на виході першого кристалу формуються пучки **k** та **k'**, які падають на другий кристал (4). Заломлені на другому кристалі частини цих пучків відхиляються вбік і не розглядаються, інтерес становлять пучки (які можна розглядати як продовження і відповідно називати **k** та **k'**), дифраговані на другому кристалі під кутом θ . Ці дифраговані пучки сходяться на третьому кристалі-аналізаторі (5). При цьому пучок **k'** попередньо проходить через деякий зразок (6). Що ж до пучка **k**, то він не зазнає зовнішнього впливу та відіграє роль опорного пучка. Детектор розташовано так, що на нього потрапляють заломлена частина перетвореного проходженням через зразок пучка **k'** та дифрагована частина пучка **k**, яка, власне, і відіграє роль опорного пучка. Ці частини вказаних пучків інтерферують між собою, утворюючи голографічне зображення об'єкта. Дана голограма реєструється детектором. Слід відмітити, що промені, які проходять крізь зразок, в жорсткому рентгенівському діапазоні не зазнають скільки-небудь помітного поглинання, але змінюється їх фаза, причому по-різному для різних променів. Виникаючий фазовий контраст реалізується на основі інтерференційної картини, так званої голограми.

Цей метод найбільш чутливий до зсуву фази порівняно з іншими методами фазового контрасту, тому має високу роздільну здатність. Серед недоліків суттєвими є високі вимоги до монохроматичності ($\Delta E/E \sim 10^{-4}$) та кутової розбіжності ($\Delta\alpha/\alpha \sim 10^{-4}$) рентгенівського випромінювання, через що метод потребує потужного когерентного джерела, як наприклад синхротронне випромінювання. При цьому метод має високу чутливість до механічних та температурних нестабільностей та потребує

точного юстування кристалів, а відновлення зображення об'єкту ускладнено [5]. Інша проблема пов'язана з тим, що при заломленні на об'єкті виникають зміни у напрямку поширення скануючого променя і внаслідок високої чутливості до кута падіння на кристал та значного коефіцієнта підсилення це призводить до розмиття зображення. Для зменшення цього ефекту та відповідно підвищення роздільної здатності замість геометрії Лауе кристали розміщують у геометрії Бреґга [14]. Окремо слід відмітити те, що існують значні складнощі практичного характеру при отриманні зображень великих за розміром об'єктів, оскільки досліджувані об'єкти повинні розміщуватись між добре відюстованими кристалами. Так, наприклад, в роботі [15] дається оцінка, що розміри досліджуваного об'єкту не можуть перевищувати $5 \times 5 \text{ см}^2$, якщо використовувати кристал зі стороною 6 дюймів.

Не зважаючи на вказані недоліки даний метод отримав розвиток в роботах [7–18], в яких описано способи отримання високого контрасту для медико-біологічних об'єктів, шляхи розрахунку фазового фронту із профілів розсіювання та методи томографії на основі кристалічного інтерферометра.

1.2.2 Гратковий інтерферометр Бонзе-Харта

Вперше цей метод реалізував Вен Хан у 2013 році [20]. В англomовній літературі він також називається Grating Bonse–Hart (interferometry). Принципова схема у цьому методі схожа із кристалічним інтерферометром, оскільки обидва базуються на розщепленні вхідного пучка і подальшій інтерференції “опорного” променя і того, що проходить крізь об'єкт. Проте певні елементи оптичної схеми та, відповідно, принципи відрізняються, що впливає на особливості застосування методу.

Найпростіша конфігурація інтерферометра складається з трьох ідентичних рівновіддалених фазових дифракційних ґраток періоду P , розташованих в паралельних площинах (див. рис. 1.2) [20, 21]. Вхідний промінь формується щілинами в декілька десятків мікрометрів таким чином, щоб поперечна довжина когерентності була більша за період ґратки. Падаючий промінь дифрагує на першій ґратці та розділяється на два промені, які додатково дифрагують на другій

дифракційній ґратці і формують чотири промені. Два з чотирьох променів зливаються на третій ґратці, потім кожен дифрагує на третій ґратці (суцільні стрілки). Передбачається, що багатократно дифраговані промені поширюються на такому достатньому віддаленні, щоб різні порядки дифракції розділялися на камері. Існує пара дифрагованих променів, які разом поширюються з третьої ґратки на камеру. Якщо ґратки трохи зміщені одна відносно одної, промені інтерферують один з одним, в результаті чого утворюються інтерференційні смуги інтенсивності [19].

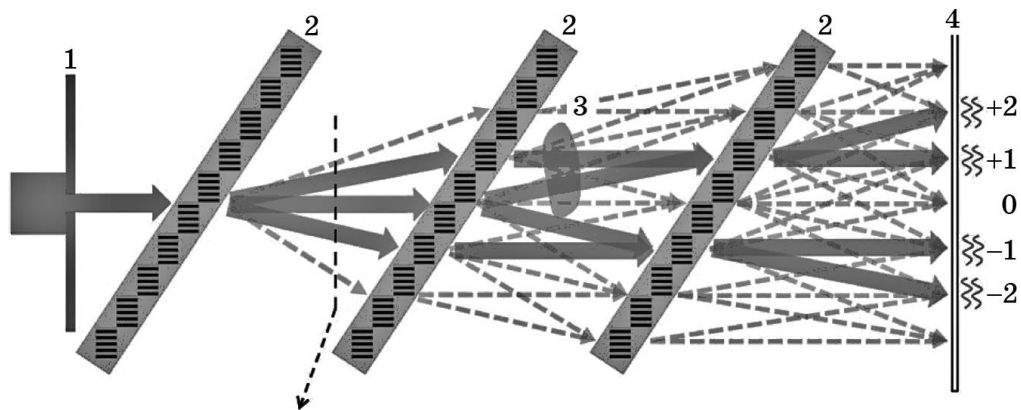


Рис. 1.2 Найпростіша конфігурація інтерферометра на основі ґраток [21]: 1 — вхідна щілина, 2 — дифракційні ґратки, 3 — зразок, 4 — детектор.

Ключовою особливістю системи є те, що різниця фаз між симетричною парою траєкторій визначається відносним положенням ліній дифракційної ґратки і не залежить від довжини хвилі та кута падіння [22]. Таким чином, інтерференційна картина від різних довжин хвиль та кутів падіння має фазову синхронізацію. Ця можливість дозволяє використовувати в інтерферометрі широкосмугові та протяжні джерела.

Відображуваний предмет знаходиться біля центральної ґратки. Зразки, розміри яких менші, ніж висота вхідної щілини, можуть вписатися в один з двох інтерферуючих пучків, інший пучок в цьому випадку виступає в якості опорної фази. Ця конфігурація вимірює абсолютний фазовий зсув, обумовлений зразком. Для одержання фазоконтрастних зображень виконується фазовий степінг [23–25].

Інтерферометр на основі ґраток більш чутливий за інші методи фазового контрасту, окрім кристалічного інтерферометра. Головною перевагою цього методу за кристалічний інтерферометр є те, що в ньому можна використовувати джерела

рентгенівського випромінювання з меншою інтенсивністю. Основним недоліком методу є мале вертикальне поле зору, обумовлене використанням щілин, що необхідні для відділення дифракційних періодів ґраток інтерферометра. Цю проблему можна подолати шляхом виготовлення великої кількості близькорозташованих вертикальних щілин. Також метод дуже чутливий до нестабільностей розташування ґраток [20].

Остаточно внаслідок особливостей оптичної схеми, з урахуванням переваг і недоліків, як кристалічний так і ґратковий інтерферометри Бонзе-Харта мають суттєві проблеми з масштабуванням та поступаються іншим методам фазового контрасту.

1.2.3 Ґраткова інтерферометрія (інтерферометрія Талбота)

В основі методу покладено ефект, який відкрив Генрі Фокс Талбот у 1836 році, який полягає у тому, що періодичний хвильовий фронт повторює себе на деякій відстані, яку називають довжиною Талбота. Для утворення такого фронту необхідно використати просторово когерентне джерело направлене на періодичну структуру, наприклад на дифракційну ґратку. В результаті цього інтерференційна картина на відстані Талбота буде точно відтворювати структуру дифракційної ґратки, що було названо “само-відображенням” (self-image) [26]. Історично інтерферометр Талбота був відкритий та досліджений для видимого світла, проте згодом було з’ясовано, що він добре підходить і для жорсткого рентгенівського випромінювання [27]. Вперше використання ефекту Талбота для реалізації методу фазового контрасту запропонував Клаузер у 1998 році [28]. В англійській літературі цей метод називається Grating-based imaging (важливо не плутати з ґратковим інтерферометром Бонзе-Харта).

Розглянемо оптичну схему та принцип дії інтерферометра Талбота. В основі методу лежить застосування дифракційного інтерферометра, який незначну зміну хвильового фронту, викликану наявністю зразка, перетворює у зсув інтерференційної картини на детекторі [29].

Фазова ґратка (2) (рис. 1.3) при освітленні просторово-когерентним

випроміненням (1) створює на відстані Талбота інтерференційну картину “самовідображення”. При розташуванні поблизу ґратки об’єкта (5) виникає зміна фаз випромінення, внаслідок чого з’являється зміна інтерференційної картини, що може бути зафіксована детектором. Для роботи інтерферометра необхідна тільки фазова ґратка, яка встановлена на відстані довжини Талбота від детектора, але в такому випадку для реєстрації змін у інтерференційній картині необхідно мати детектор із надзвичайно великою роздільною здатністю та застосовувати джерело високої інтенсивності. Для спрощення аналізу інтерференційної картини прямо перед детектором розміщують другу ґратку із тим самим періодом, що і в першій [24].

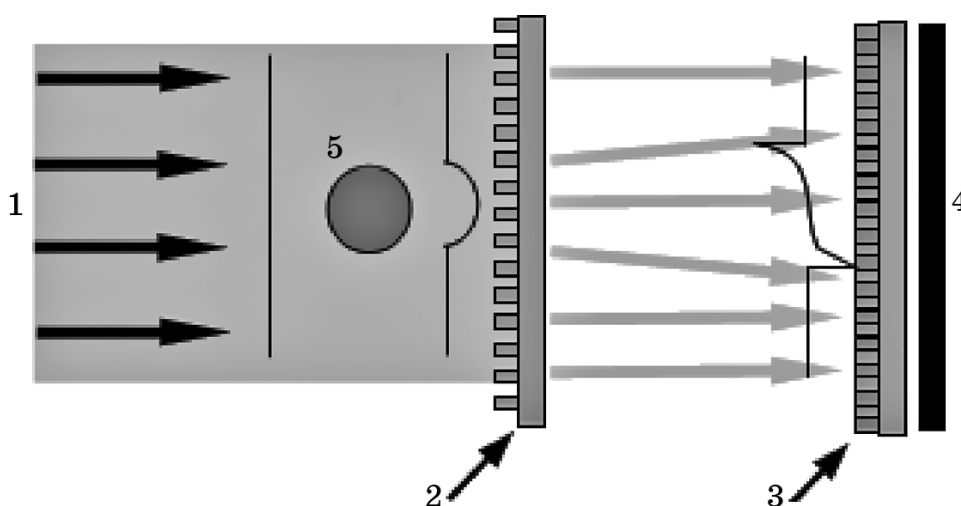


Рис. 1.3 Схематичне зображення дифракційного інтерферометра, що складається з джерела рентгенівського випромінювання (1), яке генерує паралельний пучок рентгенівських променів; фазової ґратки (2); аналізуючої ґратки (3) та детектора (4) [19].

Для подальшого покращення роздільної здатності використовують різні способи отримання додаткової інформації із інтерференційної картини. Одним з таких способів є отримання картин муару: аналізуючу ґратку повертають навколо оптичної осі системи на малий кут, внаслідок чого виникає набір періодичних рисок, але із значно більшим періодом, ніж у інтерференційної ґратки (рис. 1.4). Таким чином для фіксації змін у картині муару достатньо детектора із значно меншою роздільною здатністю, ніж для первинної інтерференційної картини. При цьому провівши Фур’є аналіз картин муару можливо відновити інформацію про

зсув фаз та поглинання у досліджуваному об'єкті [30].

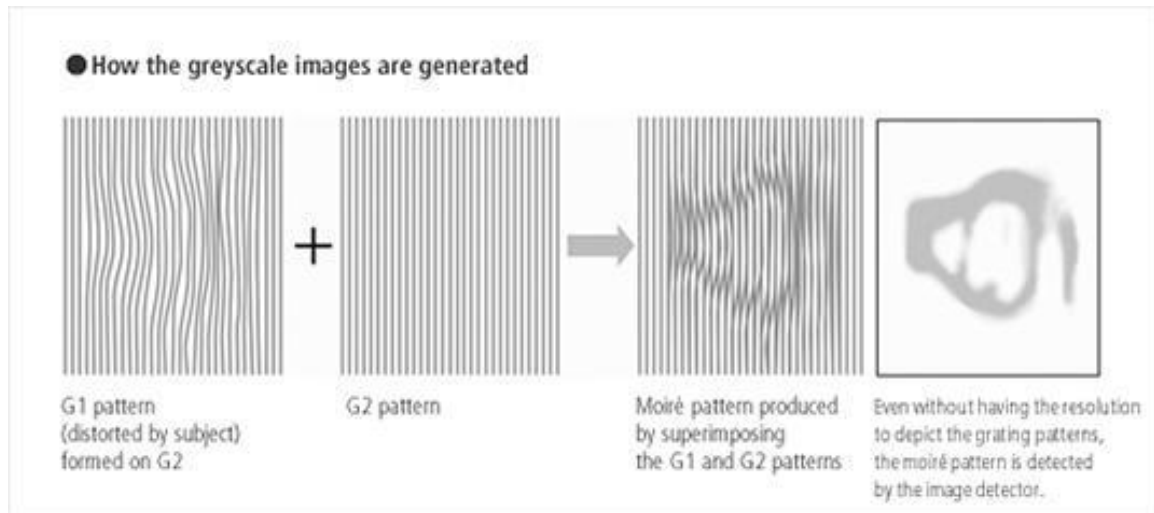


Рис. 1.4 Принцип формування зображення на основі аналізу Муару.

Іншим способом є так званий фазовий степпінг: одну із ґраток зсувають перпендикулярно осі інтерферометра, що викликає зміни задетектованої інтенсивності у кожному пікселі. Після цього із набору інтенсивностей при різних зсувах ґратки за допомогою рядів Фур'є відтворюють інформацію про зсув фази [25]. Задля того, щоб уникнути проблем, пов'язаних із механічним зсувом ґратки використовують так званий електронний фазовий степпінг: за допомогою електромагнітного поля відхиляють пучок електронів у джерелі, що дозволяє зсунути точку виходу випромінення і фактично відповідає зсуву ґратки (рис. 1.5) [31]. Маючи можливість визначити поглинання та зсуви фаз (що залежать від коефіцієнта заломлення) досліджуваний об'єкт сканують з різних напрямів, після чого відтворюють його форму за допомогою методів томографії.

Важливою особливістю методу є можливість реєстрації надмалих кутів рефракції при розсіянні на мікроскопічних неоднорідностях речовини. Це дозволяє отримати додаткову інформацію в рамках методу темного поля, аналогічно до методу із кристалом аналізатором (про який далі буде докладніше)[32].

Перевагами цього методу є висока чутливість до градієнту фази та можливість використання лабораторних джерел рентгенівського випромінювання з розмірами фокальної плями $0,8 \times 0,4$ мм та монохроматичністю $\Delta E/E \sim 1$ [33]. Серед недоліків необхідно відмітити чутливість тільки до одного компонента градієнта фази, що

обумовлює необхідність повороту зразка чи системи ґраток для отримання повної інформації про досліджуваний зразок. Це в свою чергу накладає обмеження на параметри системи детектування, що може бути використана при проведенні вимірювань. Оскільки просторова роздільна здатність обмежується періодом ґратки, то цей метод потребує використання ґраток з мікронним періодом і великим аспектним відношенням, які необхідно точно юстувати [5]. Але з іншого боку, зменшення періоду ґратки призводить до ослаблення ефекту Талбота [27, 34]. Також часто для послаблення ефектів на краю зразка його занурюють у ванну з рідиною, у якості якої може бути використаний парафін, що призводить до погіршення контрасту отриманого зображення [35].

Electronic Phase Stepping

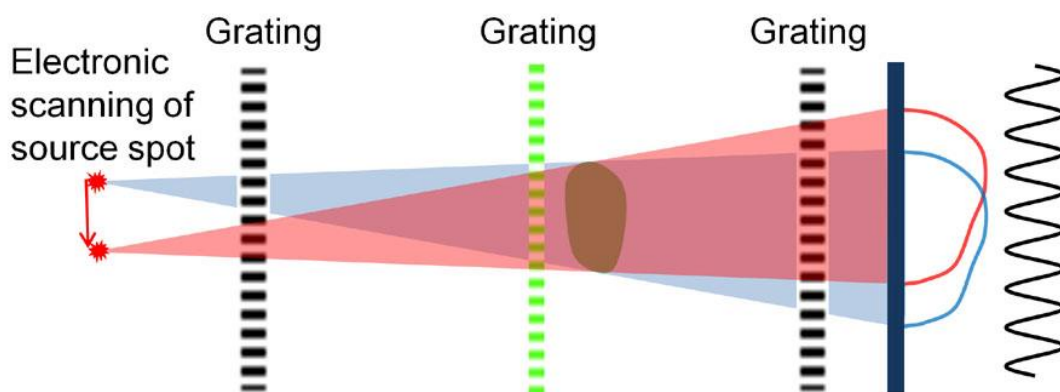


Рис. 1.5. Зміщення позиції джерела випромінювання

Ще одним суттєвим недоліком є необхідність високої просторової когерентності випромінювання. Через це зазвичай використовують синхротрони, але існує ряд підходів, що дозволяють досягти достатніх характеристик випромінювання використовуючи менш потужні джерела [25, 36].

Для розрахунків залежності інтенсивності від різних параметрів та відповідно для оцінок чутливості даного метода зручно використовувати певну функцію G , що описує залежність детектованої інтенсивності від кута рефракції, аналогічно до кривої гойдання у методі з аналізатором. Найбільша пікова інтенсивність і відповідно найбільша чутливість інтерферометра на основі ґраток спостерігається поблизу максимуму першої похідної функції G , тобто пропорційна куту рефракції.

Відповідно важливим при застосуванні методу є правильний вибір геометрії та точність розташування ґраток [37]. Окремо слід зазначити, що відношення сигналу до шуму пропорційне оберненому квадрату енергії випромінення [38]. Внаслідок цього при наявності високоенергетичних джерел застосування цього методу стає менш доречним в порівнянні з такими методами як ABI.

1.2.4 Метод вільного поширення

Вперше цей метод запропонувала група Снегірьова на джерелі синхротронного випромінювання ESRF [39], в подальшому метод отримав розвиток в роботах [40–44]. В англomовній літературі він відомий під назвою Propagation-based imaging, або рідше In-line holography.

Розглянемо оптичну схему та принцип дії установки. Установка складається (рис. 1.6) з джерела рентгенівського випромінення, досліджуваного об'єкту та детектора. Інших елементів у схемі немає. Головна відмінність методу від звичайної рентгенографії полягає в тому, що детектор встановлюється не одразу за зразком, а на деякій відстані. В результаті цього випромінення, заломлене зразком, може інтерферувати із опорним пучком [39]. Утворена таким чином інтерференційна картина безпосередньо фіксується детектором, як зображення об'єкта. Головною перевагою даного методу є простота установки і, як наслідок, послаблення певних технічних вимог.

Для реалізації методу потрібне джерело з високою просторовою когерентністю. Для цього використовують або точкові джерела (сферична хвиля), або віддалені джерела (квазі-плоска хвиля). При цьому вимоги до монохроматичності досить слабкі. Оскільки монохроматичність може складати $\Delta E/E \approx 1$, то метод може бути використаний не тільки із синхротронним джерелом, але й з поліхроматичними лабораторними джерелами, що забезпечують достатню просторову когерентність, такими як мікрофокусні рентгенівські трубки [40]. При цьому відношення сигналу до шуму в даному методі обернено пропорційне квадрату енергії випромінення [38] внаслідок чого при роботі з синхротронним випроміненням перевага надається іншим методам, як наприклад ABI.

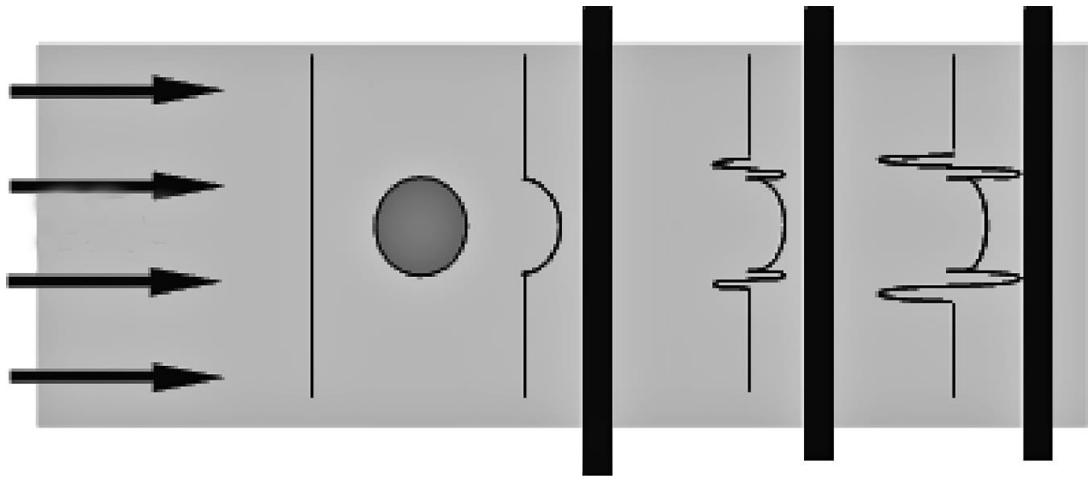


Рис. 1.6 Схема методу із джерелом квазі-плоских хвиль [19].

За допомогою просторово-когерентного випромінювання на середніх дистанціях між зразком і детектором (порядку 1 м) утворюється інтерференційна картина з френелівських смуг, тобто інтерференційні смуги виникають при вільному поширенні в режимі дифракції Френеля, що передбачає правомірність використання дифракційної формули Кірхгофа для ближнього поля.

На відміну від кристалічної інтерферометрії та АВІ контраст на картині залежить від лапласіана хвильового фронту. Це означає, що метод є більш чутливим до різких змін показника заломлення, що веде до більш сильного виділення поверхонь і структурних границь зразка в порівнянні з традиційною рентгенограмою [40], але цей метод дає більш низький контраст порівняно з іншими методами фазового контрасту [5]. Таким чином метод може зокрема бути використаний як суттєве доповнення до стандартної рентгенографії на поглинання.

Оскільки перед потраплянням на детектор промінь проходить досить значну відстань, з'являється ряд додаткових важливих ефектів. По перше відхилене під значним кутом внаслідок комптонівського розсіювання випромінювання не буде потрапляти на детектор, що суттєво знижує відповідний шум порівняно з традиційною рентгенограмою [38]. По друге в залежності від конкретної відстані можна розглядати окремі “режими” формування зображень [45]. Так зокрема при нульовій відстані фактично отримується звичайний рентгенівський знімок. При збільшенні відстані виникають вузькі смуги високого контрасту біля границь

об'єкта. А при подальшому збільшенні відстані контрастні області починають розмиватись із збільшенням товщини, але зменшенням чіткості. Таким чином регулюючи відстань можна досягати максимальної видимості неоднорідностей конкретного масштабу (рис. 1.7).

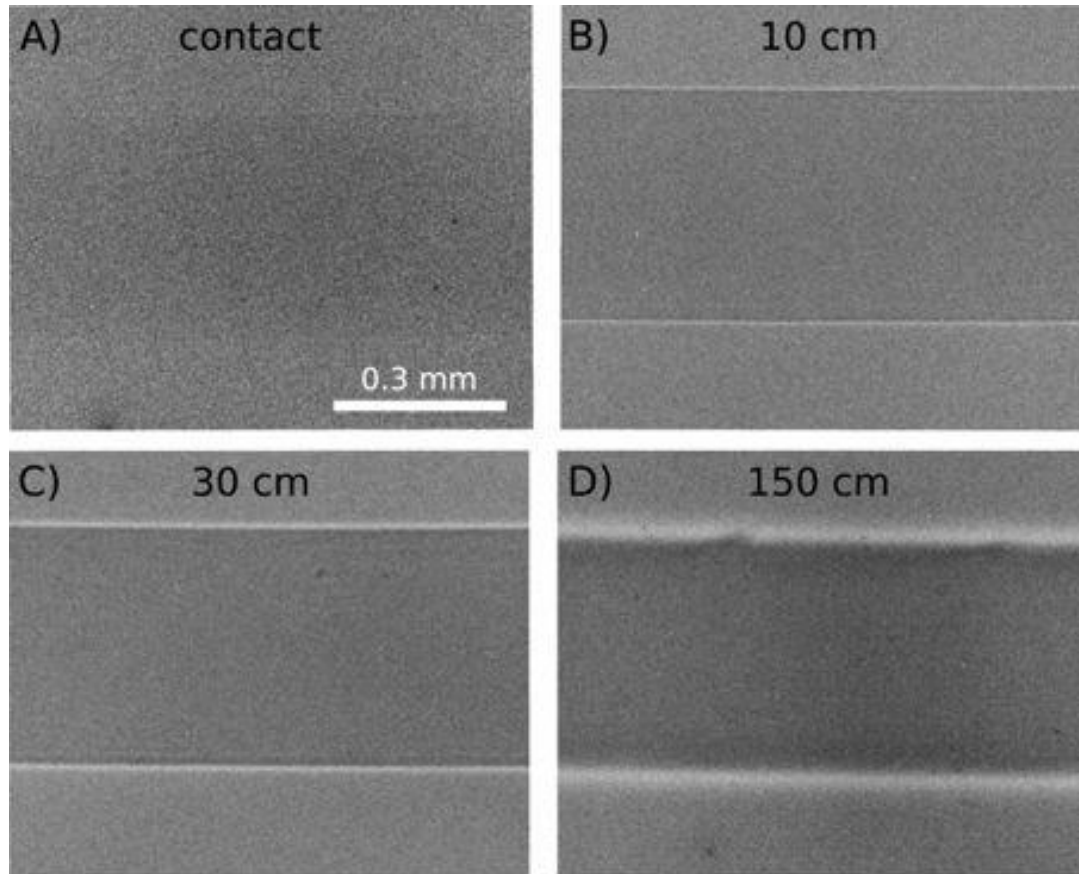


Рис. 1.7 Зображення нейлонового волокна при різних відстанях між об'єктом і детектором.

Додатково, маючи інформацію про зміни фази на поверхнях, можливо відтворити просторовий розподіл показника заломлення і відповідно форму об'єкта [46].

Недоліком методу є те, що для розділення інтерференційних смуг потрібний детектор з високою роздільною здатністю. Це накладає обмеження на поле зору або потребує устаткування великих розмірів. При цьому, внаслідок відсутності у оптичній схемі додаткових елементів, просторова роздільна здатність методу відносно велика і обмежена лише ступенем просторової когерентності джерела. Важливою перевагою методу є можливість одержувати двовимірні зображення та легко інтерпретувати отримані дані [5], оскільки на картину впливають всі

компоненти фазового фронту, на відміну від методів із виділеною площиною заломлення, як наприклад АВІ чи інтерферометрія Талбота.

1.2.5 Схема з кристалом-аналізатором (АВІ)

Створення цього методу припадає на кінець 20-го сторіччя. Вперше цей метод реалізував Девіс у 1995 році і в англomовній літературі він широко відомий як Analyser-based imaging (АВІ). Одночасно з ним на теренах Радянського союзу відповідними розробками займалися Інгал і Беляєвська [47, 48]. Метод був високо оцінений і швидко набув подальшого розвитку [5, 49–52].

Розглянемо оптичну схему та принцип дії установки. Вона в більшості випадків складається з монохроматора (одного або декількох кристалів, який також слугує для колімації пучка), розташованого перед зразком, власне зразка, та аналізатора (кристала, частіше в геометрії Брегга), розташованого між зразком і детектором (див. рис. 1.8). При цьому кути орієнтації всіх трьох елементів вимірюються із високою точністю за допомогою чутливого гоніометра.

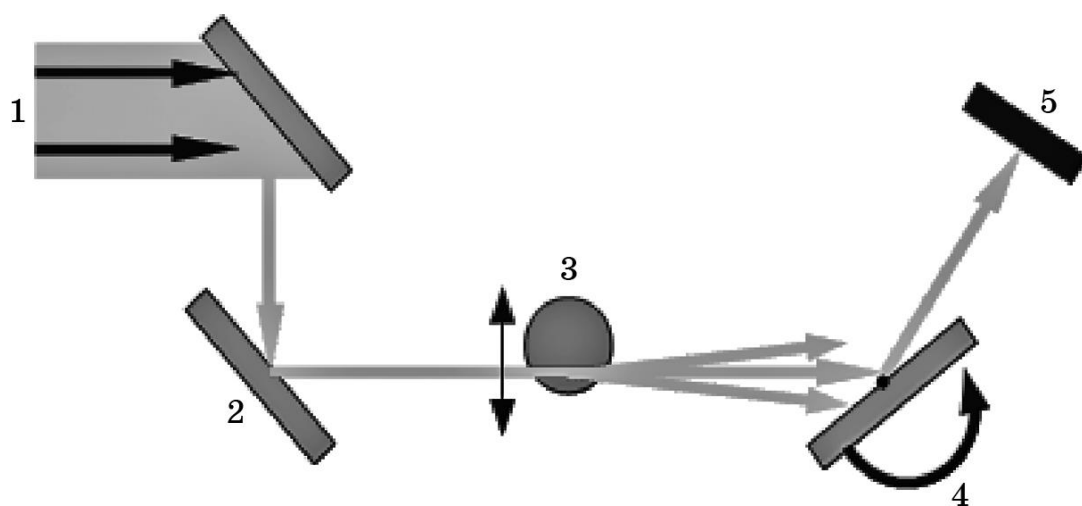


Рис. 1.8 Схема установки АВІ [19]: 1 — рентгенівське випромінювання, 2 — монохроматор, 3 — зразок, 4 — кристал-аналізатор, 5 — детектор.

Кристал-аналізатор виконує роль кутового фільтру для випромінювання, яке проходить крізь зразок. Тільки дуже вузький діапазон кутів між поверхнею кристалу й падаючими на нього рентгенівськими променями задовольняє умові Брегга, тому

коли рентгенівські промені мають кути падіння за межами цього діапазону, вони не будуть відбиватися від поверхні кристалу, і, таким чином, не будуть давати внесок у результуючий сигнал на детекторі. Інакше рентгенівські промені будуть відбиті від поверхні кристалу залежно від кута падіння. Залежність інтенсивності відбитого випромінення від кута падіння називається кривою гойдання (в англійській термінології *rocking curve*) і визначає інтенсивність на детекторі, коли аналізуючий кристал повільно повертають без зразка на установці. Фактично така схема потребує скануючого променя у вигляді ідеальної плоскої хвилі. Проте на практиці монохроматор і аналізатор представляють собою реальні кристали. Беручи до уваги, що джерело має значно ширший кутовий розподіл інтенсивності, ніж крива відбивання монохроматора можна вважати, що на монохроматор падає сферична хвиля. Тоді кутовий розподіл скануючого випромінення буде наближено співпадати з кривою відбиття монохроматора. При цьому для джерел, що мають вузький поперечний переріз пучка перед аналізатором ставлять додатковий кристал, що розширює пучок.

Типовий кутовий аксептанс звичайно лежить у діапазоні від декількох до десятків мікрорадіан і пов'язаний з напівшириною кривої гойдання кристала. Коли аналізатор ідеально юстований з монохроматором таким чином, що установка працює на піку кривої гойдання, зображення на детекторі має найбільше відношення сигнал-шум для даного методу [51], оскільки відсутнє розмиття, викликане розсіяними фотонами. Якщо ж між аналізатором і монохроматором наявний певний кут, то промені, заломлені в зразку в один бік будуть ослаблюватись, а промені, заломлені в інший бік (по суті кути заломлення із різним знаком), будуть мати більшу інтенсивність, порівняно з фоном. Таким чином, контраст зображення ґрунтується на відмінності кутів виходу заломлених в зразку променів. При цьому кут зміщення аналізатора зазвичай обирають посередині правого або лівого схилу кривої гойдання, в області найбільшого її градієнту. Кількісну інформацію про зміну фази одержують шляхом фіксації декількох зображень у різних ділянках кривої гойдання.

Зображення, отримане за допомогою цього методу, легко якісно інтерпретувати.

Крім того метод чутливий до розмиття скануючого променя (а як результат і кривої гойдання) на мікроскопічних неоднорідностях в об'єкті. Це дає змогу отримувати інформацію про субпіксельну структуру (в англійських джерелах це називають Ultra-Small Angle X-ray Scattering, скорочено USAXS) застосовуючи так званий метод темного поля (рис. 1.9) [53, 54].

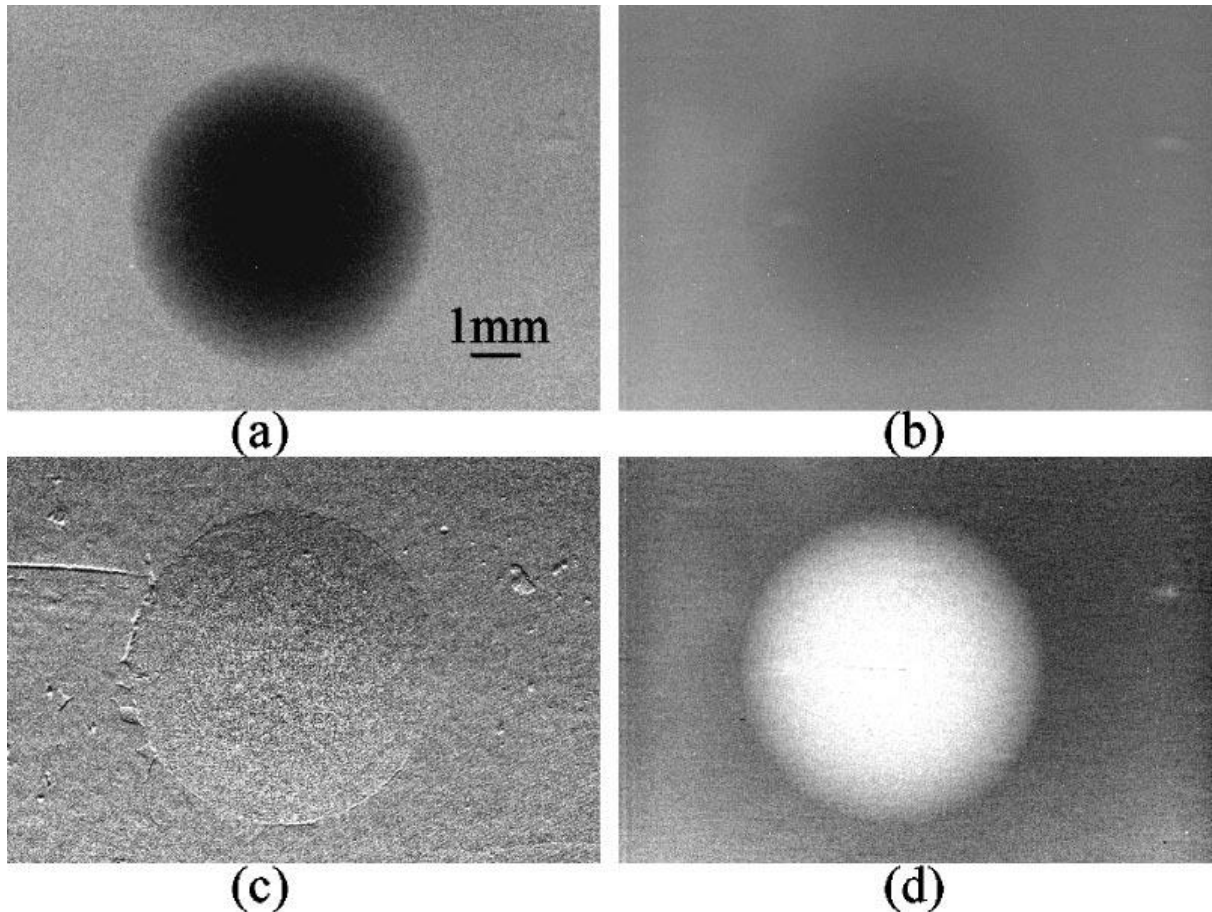


Рис. 1.9 Максимальне поглинання (а), інтегральне поглинання (b), інтегральне заломлення (с) та USAXS зображення (с)

Оскільки вимірюється не сама фаза, а перша похідна фазового фронту, то цей метод менш чутливий до плавних змін характеристик, ніж рентгенівська кристалічна інтерферометрія, але більш чутливий порівняно з методом вільного поширення. Цей метод звичайно надає фазову інформацію тільки в напрямку дифракції, але є нечутливим у площині, перпендикулярній до площини дифракції. Така чутливість тільки до одного компонента фазового градієнта може призводити до неоднозначностей у визначенні фази. Звичайно цей метод вимагає застосування монохроматичного й висококолімованого випромінювання з $\Delta\lambda/\lambda \sim 10^{-4}$ [5].

Для цього методу вимоги до стабільності кристалів менші, ніж для рентгенівської кристалічної інтерферометрії, але установка вимагає застосування досконалого кристала-аналізатора, кут нахилу якого необхідно дуже точно змінювати. Крім того, обмеження на паралельність пучка також обмежує поле зору. Тут так само, як і в рентгенівській кристалічній інтерферометрії, основним обмеженням просторової роздільної здатності є «розмивання» в аналізуючому кристалі, викликане ефектами динамічної дифракції. Але можна послабити цю проблему, використовуючи підхід ковзного падіння для кристалу.

Теоретичні розрахунки та відповідні експерименти [37, 38] показують, що відношення сигналу до шуму в даному методі пропорційне оберненій енергії випромінення, що робить його більш доцільним при застосуванні високоенергетичних джерел випромінення. При цьому повне ігнорування комптонівського розсіювання (в результаті наявності кристала-аналізатора) дозволяє додатково виключити шуми, присутні в методах, в основі яких лежить поглинання.

Метод із кристалом-аналізатором внаслідок вище зазначених особливостей має більшу чутливість в порівнянні з ґратковою інтерферометрією і методом вільного поширення, особливо для випадку високоенергетичних джерел [37]. Попри це суттєвою проблемою методу залишаються високі вимоги до кристалів (зокрема до кристала аналізатора) та необхідність вкрай точного вимірювання положення елементів оптичної схеми.

Слід зазначити, що більшість існуючих на сьогодні підходів використовують наближення геометричної оптики при описанні заломлення випромінення у досліджуваному об'єкті і навіть кристалах монохроматора та аналізатора. Таких підхід справедливий лише для плавних полів зміщень і отже не підходить для опису рентгенівської дифракції на кристалах з мікродефектами та некристалічних об'єктів із неоднорідностями мікроскопічного масштабу. Таким чином створення строгої теорії, яка б описувала заломлення із врахуванням ефектів багатократного розсіювання як в некристалічних об'єктах так і в кристалах монохроматора і аналізатора є важливим кроком у вдосконаленні фазоконтрастних методів, і зокрема ABI.

1.2.6 Метод освітлення краю

Вперше цей метод запропонувала група Оліво на джерелі синхротронного випромінювання Elettra [55], в подальшому метод дифракції на краю отримав розвиток в роботах [56–63]. В англomовній літературі він називається Edge-illumination.

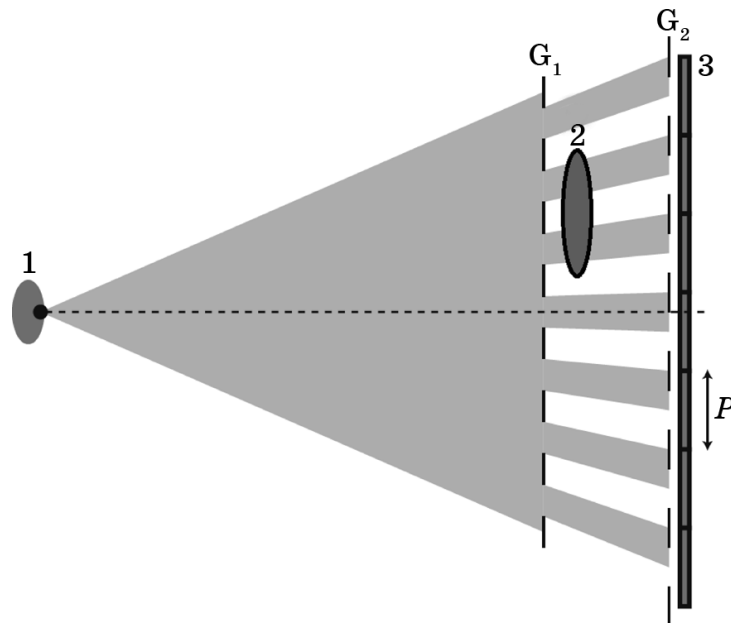


Рис. 1.10 Схема методу: джерело (1), зразок (2), детектор (3), маски (G_1 та G_2), пікселі детектора (P) [57].

Оптична схема методу (рис. 1.10) складається з джерела, маски G_1 , за якою розташований досліджуваний об'єкт, маски G_2 та детектора. Маска G_1 (іноді називається “кодованою апертурою”) формує із одного пучка від джерела набір окремих пучків, розділених промітками тіні. Маска G_2 розташована прямо перед детектором на межі освітлених та не освітлених ділянок, при чому саму маску G_2 можна замінити на спеціальний детектор із сліпими зонами. В результаті рефракції випромінювання на об'єкті в залежності від кута рефракції певні “відкриті” зони на детекторі стають більш або менш освітленими (рис. 1.11). Залежність інтенсивності від кута рефракції (перша похідна фазового фронту) дуже схожа на криву гойдання в АВІ[55].

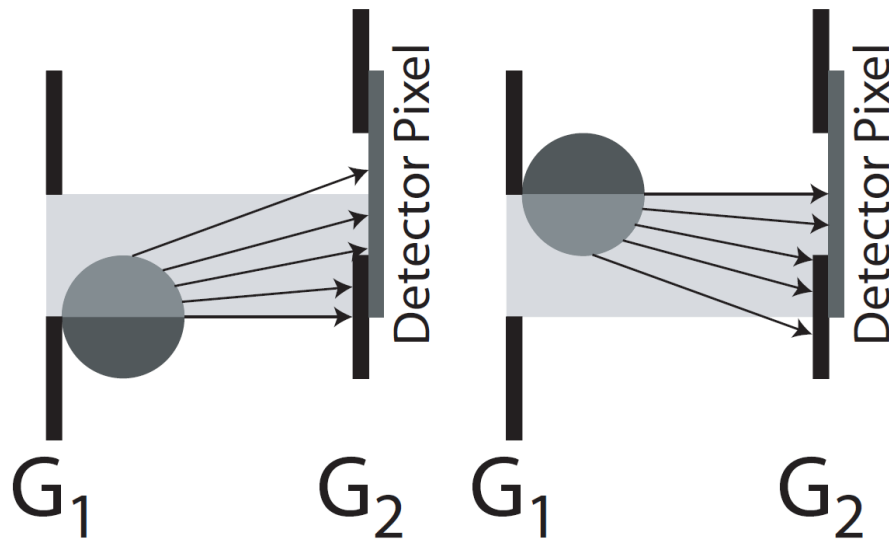


Рис. 1.11 принцип утворення контрасту.

Додатково для отримання субпіксельної інформації можна проводити сканування зразка шляхом зсуву зразка в напрямі, поперечному до щілин маски [57]. Також для отримання інформації по двом компонентам рефракції можливо використовувати маски з отворами специфічної форми, наприклад L-подібні [64].

Оскільки в оптичній схемі відсутні кристали та при цьому не застосовується механізм інтерференції, даний метод має відносно слабкі вимоги до джерела випромінювання. Зокрема, джерело може мати широкий спектр, що в свою чергу усуває можливі артефакти внаслідок дифракції на апертурах маски. При цьому залишається вимогу до розмірів джерела, оскільки при достатньо великій відстані між першою маскою і детектором не повинно виникати перекриття окремих променів. Так, розмір фокальної плями — до 100 мкм [63], однак він не повинен перевищувати розміри пікселя детектора [56], але пучок може мати високу розбіжність. Не дивлячись на те, що завдяки слабким вимогам в якості джерела можуть застосовуватись різноманітні типи джерел рентгеновського випромінювання без значних втрат інтенсивності, які часто виникають внаслідок необхідності забезпечити вимоги методів рентгеновського фазового контрасту до джерела, втрата інтенсивності все ж таки відбувається у зв'язку з необхідністю використання апертур.

В методі дифракції на краю період апертури набагато більший, ніж період дифракційних ґраток (в 50 разів), що застосовуються в інтерферометрії Талбота [61].

Це робить процес виготовлення масок відносно простим, зокрема немає необхідності застосовувати методи рентгенівської літографії, тощо. Також даний має невисокі вимоги до точності юстування апертур — порядку декількох мікрметрів [61], і як наслідок він досить стійкий до вібрацій порівняно з іншими методами.

Завдяки простій оптичній схемі метод досить легко масштабувати для сканування об'єктів великих розмірів, проте в такому випадку зростають вимоги до джерела [58, 59]. Безпосередньо чутливість методу залишається порівнянною з інтерферометрією Талбота [57].

Слід зазначити, що в якості компонент оптичних схем для отримання фазоконтрастних зображень часто застосовуються досконалі монокристали, оскільки зазвичай вони мають досить вузьку криву відбивання. Це дозволяє отримати скануючий промінь з потрібними характеристиками, побудувати інтерференційну картину чи в інший спосіб провести аналіз результатів розсіяння.

Відповідно важливою задачею на шляху до створення методів запису та інтерпретації фазоконтрастних зображень високої роздільної здатності є отримання точного опису процесів розсіяння у кристалах з урахуванням неоднорідностей їх структури, мікродефектів, тощо. Це дає змогу аналітично отримати криві кутової залежності розсіяної інтенсивності і як наслідок спрощує юстування обладнання та зменшує імовірність помилок при діагностиці складних об'єктів.

Для опису процесів взаємодії випромінювання із реальними монокристалами в Інституті металофізики ім. Г. В. Курдюмова НАН України було створено статистичну теорію розсіяння випромінень. Зокрема, ще в 1960-их роках М. А. Кривоглазом [65, 66]. було створено кінематичну теорію розсіяння у неідеальних кристалах. Її поява сформувала цілий теоретичний напрям та обумовила подальші досягнення у даній сфері. Згодом співробітниками ІМФ (В. Б. Молодкін із співавторами) було розроблено динамічну теорію розсіяння у кристалах з мікродефектами. [67-79]

Використання результатів вищевказаних теорії не тільки дозволило враховувати особливості розсіяння випромінювання монокристалами, але й стало

основою для подальшого узагальнення теорії для некристалічних речовин і вдосконалення відповідних фазоваріаційних принципів та методів діагностики.

1.3. Висновки

В даному розділі зроблено короткий огляд методів отримання та інтерпретації фазоконтрастних зображень некристалічних об'єктів. В рамках проведеного порівняльного аналізу переваг та недоліків описано найбільш перспективні області їх застосування та показано, що на сьогодні не існує єдиного методу, який переважав би за своїми функціональними можливостями решту.

При цьому, частина методів попри високу чутливість мають дуже жорсткі вимоги до елементів схеми. Зокрема, інтерферометри Бонзе–Харта вимагають надзвичайно високої точності юстування приладів, і, при цьому, погано масштабуються для дослідження великих об'єктів. Навпаки, метод вільного поширення має дуже просту оптичну схему, але не завжди дозволяє отримати зображення необхідної контрастності, крім цього цей метод потребує джерела випромінення з високою просторовою когерентністю.

В результаті, для подальших досліджень та розвитку було обрано схему з кристалом-аналізатором, яка є відносно простою та дозволяє отримати висококонтрастні зображення. Це пов'язано із використанням кристала-аналізатора який має вузьку криву відбивання. Рефракція у некристалічному об'єкті приводить до зміщення робочої точки по кривій відбивання кристала-аналізатора. Якщо кут заломлення достатньо великий, ця частина випромінення не потрапить на детектор. У випадку менших кутів заломлення будуть утворюватися області із збільшеною або зменшеною інтенсивністю порівняно із випадком, коли некристалічний об'єкт відсутній. Таким чином, АВІ-метод дозволяє отримати зображення, контраст якого утворюється внаслідок заломлення випромінення у некристалічному об'єкті.

При цьому для правильного аналітичного опису АВІ-зображень необхідно врахування ефектів багатократності розсіяння у кристалах аналізатора та монохроматора, а також у самому об'єкті. Більшість існуючих на сьогодні підходів базуються на наближенні геометричної оптики для розрахунку заломлення

випромінення у некристалічному об'єкті та навіть у кристалі-аналізаторі. Такий підхід справедливий лише для плавних полів зміщень і, отже, не може бути кількісно правильним при описі рентгенівської дифракції на кристалі-аналізаторі з мікродефектами. Крім того, наближення геометричної оптики для некристалічного об'єкту добре працює для великих однорідних об'єктів з гладкими границями, але може бути некоректним в інших випадках.

Таким чином, існує необхідність створення строгої теорії, яка б враховувала ефекти багатократного (динамічного) розсіювання як в некристалічному об'єкті, так і в кристалах аналізатора і монохроматора, що дозволить більш точно описати процес формування фазоваріаційних зображень і як наслідок покращити якість діагностики.

РОЗДІЛ 2

ТЕОРЕТИЧНІ ОСНОВИ ТРИВІСЬОВОГО МЕТОДУ ФОРМУВАННЯ ФАЗОКОНТРАСТНИХ ЗОБРАЖЕНЬ

2.1. Вступ

Як відмічалось у попередньому розділі при створенні методів інтерпретації фазоконтрастних зображень значну увагу слід зосередити на дослідженні взаємодії високоенергетичного випромінення із монокристалами. Це пов'язано, з одного боку, з тим, що монокристали часто використовуються як елементи оптичних схем для отримання фазоконтрастних зображень; з іншого боку, відповідні теорії, що описують розсіяння випромінення монокристалами, можуть бути узагальнені на випадок некристалічних об'єктів.

При цьому для кожної галузі досліджень існує набір вимог, що визначають можливість застосування того чи іншого діагностичного методу та накладають умови на обладнання на енергію випромінення. Так, наприклад, при дослідженні археологічних знахідок доза та жорсткість випромінення мало-важливі, проте хімічна обробка (зокрема, введення контрастних речовин) зазвичай неможлива. У галузі матеріалознавства теж досить слабкі вимоги до дози і жорсткості випромінення, але потрібно досліджувати об'єкти, розміри яких змінюються у широкому діапазоні. Для медичної діагностики навпаки — важливо використовувати малі дози опромінення. Для сфери безпеки (сканери в аеропортах, тощо) критично важливим є малий час отримання інформації та широкий діапазон розмірів об'єктів. При цьому незалежно від галузі спільним залишаються те, що досліджувані об'єкти мають складну, наперед невизначену форму та можуть складатися з багатьох різних речовин. З огляду на вказану складність структури об'єкта доцільним є описання процесів розсіяння у простих випадках із подальшим узагальненням теорії. Зокрема, повний розгляд процесів розсіяння у одно- і двошарових об'єктах, що складаються з кристалічних і аморфних (некристалічних) речовин, які є визначальними складовими багатошарових систем, дозволяє визначити подальший шлях до описання реальних об'єктів.

Слід зазначити, що при діагностиці кристалічних об'єктів дифракційні методи досліджень багат шарових структур [80, 81] мають цілу низку важливих з точки зору практики переваг у порівнянні з іншими методами. Дифракційні методи є не руйнуючими, що принципово важливо у випадках, коли руйнування (стравлення) може призвести до перерозподілу чи зникнення деформацій вихідного зразка, що унеможлиблює відтворення початкової структури. Також дифракційні методи високоінформативні і дозволяють виявляти надзвичайно малі деформації (коли відносна зміна відстані між відбиваючими площинами кристала має величину порядку 10^{-5} – 10^{-6} [82]) і дефекти невеликих розмірів та концентрацій [83, 84]. Крім того, за наявності коректної теоретичної моделі можна адаптувати її до таких експериментальних схем, які дозволяють проводити експресну діагностику без втрати якості [83, 84].

В даному розділі описано створену модель, що повністю враховує ефекти багатократності розсіювання у когерентній складовій інтенсивності для двошарової системи із кристалічним і аморфним шарами [85–88].

2.2. Вихідні положення моделі

2.2.1. Колонкове розбиття

Реальний досліджуваний об'єкт зазвичай являє собою багат шарову некристалічну систему довільної форми. Для діагностики застосовується високоенергетичне випромінювання (рентгенівське, гамма-випромінювання, нейтрони чи електрони), що відносно слабо взаємодіє з некристалічною речовиною. Після взаємодії із речовиною, скануючий промінь відхиляється від початкового напрямку на малий кут розсіювання (порядка десятих долей кутової секунди). Виходячи з малості кута відхилення для опису складної форми досліджуваних об'єктів доцільно застосовувати так-зване колонкове наближення (як, наприклад, у [89]).

Колонкове наближення полягає у тому, що об'єкт умовно розбивається на набір колонок, паралельних до падаючого променя. В межах кожної колонки поверхні між окремими шарами наближено вважаються плоскими та нахиленими на певний кут (рис. 2.1). Речовина при цьому вважається однорідною в межах кожного

окремого шару, що дає можливість вважати потенціал взаємодії випромінювання із речовиною сталим. Систему координат зручно вибрати прив'язаною до падаючого променя. Для простоти вважаючи процес розсіюння, без обмеження загальності, незалежним від координати Y , далі будемо розглядати заломлення в площині XoZ , що паралельна площині заломлення в аналізаторі.

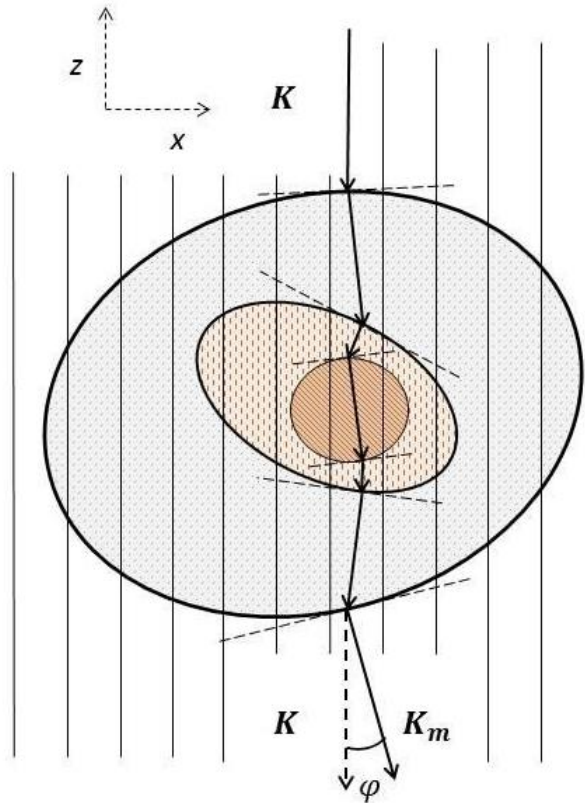


Рис. 2.1. Колонкове розбиття: об'єкт розділяють на декілька окремих колонок, паралельних до падаючого променя.

Оскільки процеси в межах колонок незалежні, подальші теоретичні викладки наводяться для кожної окремої колонки. Набір всіх колонок описує загальну повну картину розсіюння як функцію координати X , що відповідає певній колонці і точці зображення об'єкта на екрані.

2.2.2. Тривісьова схема

В попередньому розділі було обґрунтовано створення моделі в рамках фазоконтрастного методу з кристалом аналізатором. Спираючись на оптичну схему цього методу можна записати вираз для вальної здатності всієї системи у наступному вигляді [72]:

$$R(\Delta\theta, x) = \int R_M(\xi) R_A(\xi - \Delta\theta - \varphi) R_{obj}(\xi) d\xi$$

де $\varphi = \varphi(x)$ – кут рефракції, x – положення колонки, $\Delta\theta$ – кут відхилення аналізатора від точного Бреґгівського положення. Для повного описання процесу утворення зображень у подібній системі і відповідно для подальшого розв’язку оберненої задачі необхідно мати аналітичні вирази для відбивальних здатностей монохроматора і аналізатора та, власне, самого об’єкта.

В переважній більшості робіт монохроматор і аналізатор вважаються ідеальними кристалами. Проте урахування усіх можливих особливостей їх структури (наявні дефекти, викривлення, порушений шар, тощо) як буде згодом показано є необхідною умовою для проведення високоточної діагностики та усунення хибних результатів, що можуть бути спричинені особливістю кристалів, а не досліджуваного об’єкта.

Отже, при описанні розсіювання у кристалах монохроматора і аналізатора потрібно застосовувати строгу динамічну теорію розсіювання випромінення у кристалах з дефектами. Водночас слід враховувати те, що кристали самі по собі можуть складатись з декількох шарів та/або мати пошкоджену поверхню. В даному розділі буде продемонстровано особливості процесів розсіювання у композитних структурах.

З іншого боку для описання заломлення у багатошаровому некристалічному об’єкті також потрібна строга динамічна теорія. Для створення відповідної моделі, що встановить зв’язок між характеристиками об’єкта та відбивальною здатністю, і відповідно особливостями картини розсіювання, в цьому та наступному розділах буде проведено узагальнення динамічного підходу на випадок некристалічних речовин та показано його адекватність при побудові подальшого аналізу.

2.3. Розсіювання в аморфному поглинаючому шарі

Розглянемо розсіювання випромінення в аморфній плоско-паралельній пластині (рис. 2.2). Будемо вважати, що сприйнятливість в аморфному шарі є в середньому

постійною. Інтенсивність хвилі, що пройшла крізь шар з постійною сприйнятливістю можна записати у вигляді:

$$I = I_0 e^{-\mu_0 l_{am}} \quad (2.1)$$

де I_0 — інтенсивність падаючого з вакууму на шар випромінювання, μ_0 — коефіцієнт фотоелектричного поглинання, $l_{am} = t_{am}/\gamma_0$ — довжина шляху променю в аморфному шарі, $t_{am} = t_2 - t_1$ — товщина шару, $\gamma_0 = K_n/K = \sin\theta_a$, θ_a — кут падіння хвилі на аморфну пластину.

Однак для розгляду амплітуд в багат шаровій системі необхідно мати вираз не для інтенсивності, а для амплітуди хвилі на обох поверхнях аморфного шару. Представимо сприйнятливість аморфного шару $\chi_a(\mathbf{r})$ і амплітуду індукції в ньому $\mathbf{D}_a(\mathbf{r})$ у вигляді інтегралів Фур'є:

$$\chi_a(\mathbf{r}) = \int_{\Omega} d\mathbf{k} \chi_{ka} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} \quad (2.2)$$

$$\mathbf{D}_a(\mathbf{r}) = \int_{\Omega} d\mathbf{k} \mathbf{D}_{ka} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} \quad (2.3)$$

де $\chi_{ka} = (2\pi)^{-3} \int_V d\mathbf{r} \chi_a(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}$, $\mathbf{D}_{ka} = (2\pi)^{-3} \int_V d\mathbf{r} \mathbf{D}_a(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}$ V , Ω — об'єми прямого і оберненого просторів, відповідно. Для вирішення задачі розсіяння рентгенівських променів в середовищі розглянемо рівняння для амплітуд:

$$\Delta \mathbf{D}_a(\mathbf{r}) + K^2 \mathbf{D}_a(\mathbf{r}) + \text{rot rot} (\chi_a(\mathbf{r}) \mathbf{D}_a(\mathbf{r})) = 0 \quad (2.4)$$

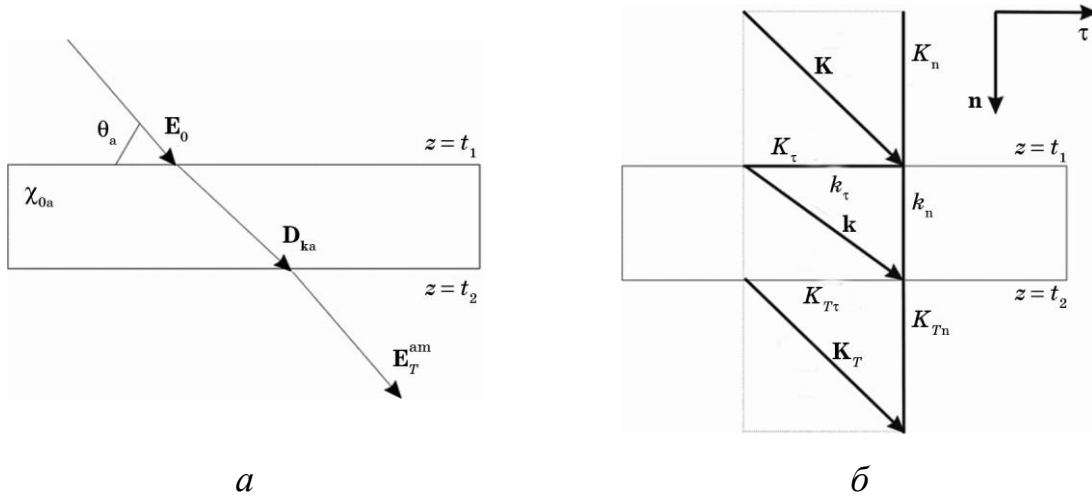


Рис. 2.2 Схема розсіяння в плоско-паралельній аморфній пластині (а) і схема відповідних хвильових векторів (б).

де $K = 2\pi/\lambda$ — модуль хвильового вектору падаючої хвилі у вакуумі, λ — довжина хвилі падаючого випромінення. Підставивши (2.2) і (2.3) в (2.4) отримаємо:

$$(K^2 - k^2)\mathbf{D}_{\mathbf{k}a} - \int_{\Omega} d\mathbf{q} \chi_{\mathbf{q}a} (\mathbf{k} \times \mathbf{k} \times \mathbf{D}_{\mathbf{k}-\mathbf{q}a}) = 0 \quad (2.5)$$

Обмежившись розглядом лише когерентної складової розсіяння, покладемо, що в аморфному шарі $\chi_a(\mathbf{r}) = \chi_{0a} = \text{const}$ і для компоненти Фур'є $\chi_{\mathbf{q}a}$ отримаємо:

$$\chi_{\mathbf{q}a} = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_V d\mathbf{r} \chi_a(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} = \frac{\chi_{0a}}{(2\pi)^3} \int_V d\mathbf{r} e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} = \chi_{0a} \delta(\mathbf{q})$$

Таким чином, для кожного стану поляризації з (2.5) отримаємо:

$$(K^2 - k^2)D_{\mathbf{k}a} + \chi_{0a} k^2 D_{\mathbf{k}a} = 0 \quad (2.6)$$

У випадку $D_{\mathbf{k}a} \neq 0$ з (2.6) отримаємо:

$$(K^2 - k^2) + \chi_{0a} k^2 = 0 \quad (2.7)$$

Рівняння (2.7) є дисперсійним рівнянням для визначення хвильових векторів \mathbf{k} в середовищі. Враховуючи, що для рентгенівських променів $|\chi_{0a}| \ll 1$, з (2.7) можна отримати:

$$k = K(1 + \chi_{0a}/2). \quad (2.8)$$

Константа χ_{0a} в (2.8) є комплексною, її можна представити у вигляді:

$$\chi_{0a} = \chi_{0ra} + i\chi_{0ia} \quad (2.9)$$

Слід зазначити, що $\chi_{0ra}, \chi_{0ia} < 0$.

Для знаходження амплітуди хвилі (у вакуумі), що пройшла крізь шар, скористаємось відповідними граничними умовами:

$$D_{\mathbf{k}a} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} = E_0 e^{-i\mathbf{K}\mathbf{r}}|_{z=t_1} \quad (2.10)$$

$$E_T^{am} e^{-i\mathbf{K}\mathbf{r}} = D_{\mathbf{k}a} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}}|_{z=t_2} \quad (2.11)$$

Розкладемо хвильові вектори в вакуумі і в пластині на тангенціальну і нормальну складові:

$$\mathbf{K} = K_\tau \mathbf{e}_\tau + K_n \mathbf{e}_n \quad (2.12)$$

$$\mathbf{k} = k_\tau \mathbf{e}_\tau + k_n \mathbf{e}_n \quad (2.13)$$

Оскільки тангенціальні компоненти хвильових векторів на поверхні мають співпадати (див. рис.2.2, б), то

$$\mathbf{K} = \mathbf{k} + (K_n - k_n) \mathbf{e}_n \quad (2.14)$$

З (8) можна отримати:

$$K_n - k_n \approx -K \frac{\chi_{0a}}{2\gamma_0} \quad (2.15)$$

Підставляючи (2.15) в (2.14), отримаємо взаємозв'язок хвильових векторів в середовищі і вакуумі:

$$\mathbf{K} = \mathbf{K}_T = \mathbf{k} - K \frac{\chi_{0a}}{2\gamma_0} \mathbf{n} \quad (2.16)$$

Рівність $\mathbf{K} = \mathbf{K}_T$ впливає з того, що $|\mathbf{K}| = |\mathbf{K}_T|$ і $K_\tau = K_{T\tau}$. Підставивши (2.16) в (2.10) та (2.11), отримаємо:

$$D_{ka} = E_0 e^{iK(\chi_{0a}/2\gamma_0)t_1} \quad (2.17)$$

$$E_T^{am} = D_{ka} e^{-iK(\chi_{0a}/2\gamma_0)t_2} \quad (2.18)$$

Враховуючи (2.9) і (2.17), для (2.18) остаточно отримаємо:

$$E_T^{am} = E_0 e^{-iK t_{am} \chi_{0a}/(2\gamma_0)} = E_0 e^{-iK(\chi_{0a}/2\gamma_0)t_{am}} e^{-(\mu_{0a}/2\gamma_0)t_{am}} \quad (2.19)$$

де $\mu_{0a} = K |\chi_{0i a}|$. Як видно з (2.19), для інтенсивності $|E_T^{am}|^2$ отримаємо (2.1). Отже, використовуючи загальний динамічний підхід, що базується на розв'язку рівняння (2.4), можна отримати не лише (2.1), а також класичний результат, який враховує заломлення і поглинання в плоско-паралельній аморфній однорідній пластині.

2.4. Розсіяння в двошаровій аморфній системі

Розглянемо розсіяння в системі, що складається з двох аморфних шарів а і b (рис. 2.3). Інтенсивність випромінювання, що пройшло крізь таку систему, можна записати аналогічно до (2.1). Однак у випадку, коли на кристалічній підкладці знаходяться два аморфні шари, або один шар з неоднорідним за глибиною розподілом сприйнятливості, необхідно мати вираз для амплітуди хвилі, що пройшла через кілька аморфних шарів. Крім того, результати розгляду такої системи можуть бути використані для узагальнення моделі розсіяння в некристалічних об'єктах на випадки неоднорідного за глибиною потенціалу.

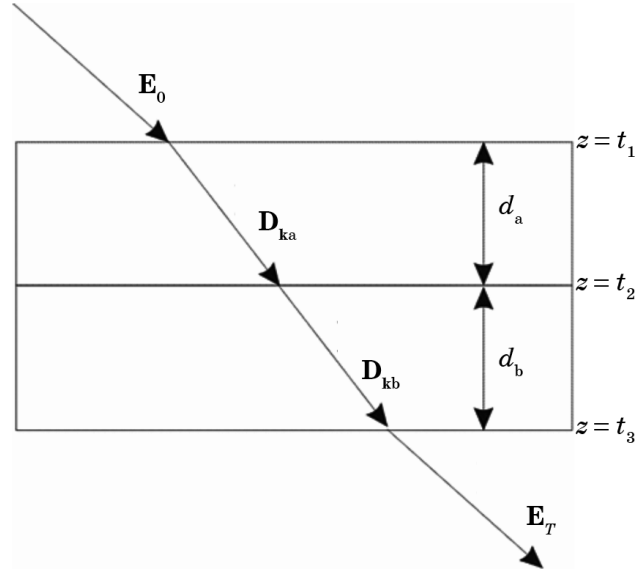


Рис. 2.3 Схема розсіяння в двошаровій аморфній системі.

Розв'язуючи рівняння (2.4) в кожному шарі двошарової системи можна отримати дисперсійні рівняння подібні до (2.7), куди входить сприйнятливість відповідного шару. З урахуванням рівності тангенціальних компонент хвильових векторів на межах шарів, а також використовуючи дисперсійні рівняння, аналогічно до попереднього розгляду можна отримати наступний взаємозв'язок між хвильовими векторами падаючої і заломленої в шарі а хвиль:

$$\mathbf{K} = \mathbf{k}_a - K \frac{\chi_{0a}}{2\gamma_0} \mathbf{n}. \quad (2.20)$$

Зв'язок між хвильовим вектором \mathbf{K}_T хвилі, що пройшла крізь двошарову систему, та хвильовим вектором в шарі b, з урахуванням принципу взаємності можна отримати шляхом, аналогічним до отримання (2.20):

$$\mathbf{K}_T = \mathbf{k}_b - K \frac{\chi_{0b}}{2\gamma_0} \mathbf{n}. \quad (2.21)$$

Враховуючи, що аналогічно до (2.16) $\mathbf{K} = \mathbf{K}_T$, для хвильових векторів в шарах а та b матимемо:

$$\mathbf{k}_a - K \frac{\chi_{0a}}{2\gamma_0} \mathbf{n} = \mathbf{k}_b - K \frac{\chi_{0b}}{2\gamma_0} \mathbf{n}. \quad (2.22)$$

Запишемо відповідні граничні умови (див. рис. 2.3):

$$D_{ka} e^{-ik_a r} = E_0 e^{-iKr} \big|_{z=t_1} \quad (2.23)$$

$$D_{kb}e^{-ik_br} = D_{ka}e^{-ik_ar}|_{z=t_2} \quad (2.24)$$

$$E_T e^{-iK_T r} = D_{kb}e^{-ik_br}|_{z=t_3} \quad (2.25)$$

Підставляючи (2.20) в (2.23), отримаємо:

$$D_{ka} = E_0 e^{iK(\chi_{0a}/2\gamma_0)t_1} \quad (2.26)$$

З (2.24) з урахуванням (2.22) матимемо:

$$D_{kb} = D_{ka} \exp\left(iK\left(\frac{\chi_{0b}}{2\gamma_0} - \frac{\chi_{0a}}{2\gamma_0}\right)t_2\right). \quad (2.27)$$

Підставляючи (2.21), (2.26) і (2.27) в (2.25), для амплітуди хвилі, що пройшла двошарову аморфну систему отримаємо:

$$E_T = E_0 \exp\left(-iK\frac{\chi_{0a}}{2\gamma_0}d_a\right) \exp\left(-iK\frac{\chi_{0b}}{2\gamma_0}d_b\right), \quad (2.28)$$

де $d_a = t_2 - t_1$, $d_b = t_3 - t_2$ — товщини відповідних шарів.

Отриманий результат легко узагальнити на випадок системи, що складається з N аморфних шарів:

$$E_T^{(N)} = E_0 \exp\left(-i\frac{K}{2\gamma_0}\sum_{j=1}^N \chi_{0j}d_j\right). \quad (2.29)$$

З (29) граничним переходом $d_j \rightarrow 0$ можна отримати вираз для неперервного за глибиною неоднорідного розподілу сприйнятливості $\chi_{0a}(z)$:

$$E_T^{(N)} = E_0 \exp\left(-i\frac{K}{2\gamma_0}\int_0^{t_{am}} \chi_{0a}(z)dz\right) \quad (2.30)$$

2.5. Розсіяння в монокристалічній плоско-паралельній пластині

Для подальшого розгляду розсіяння в двошаровій системі, що включає в себе один (або кілька) кристалічних шарів необхідно привести основні результати динамічної теорії когерентного розсіяння в плоско-паралельній пластині.

Амплітуди хвиль в кристалі можна знайти з основної системи динамічних рівнянь для випадку двохвильової дифракції [88]:

$$\begin{cases} (-2\varepsilon_0 + \chi_0)D_0 + C\chi_{-H}D_H = 0, \\ C\chi_H D_0 + (-2\varepsilon_H + \chi_0)D_H = 0, \end{cases} \quad (2.31)$$

де $D_0, D_{\mathbf{H}}$ — амплітуди прямої і дифрагованої хвиль, $\chi_0, \chi_{\mathbf{H}}$ — Фур'є-компоненти сприйнятливості кристалу, C — поляризаційний множник ($C = 1, \cos(2\theta_B)$ для σ - та π -поляризації, відповідно, θ_B — кут Бреґга), $\varepsilon_0, \varepsilon_{\mathbf{H}}$ — помилки збудження.

З умови існування нетривіального розв'язку системи рівнянь (2.31) можна отримати наступне дисперсійне рівняння для знаходження помилок збудження:

$$(-2\varepsilon_0 + \chi_0)(-2\varepsilon_{\mathbf{H}} + \chi_0) - C^2 \chi_{\mathbf{H}} \chi_{-\mathbf{H}} = 0. \quad (2.32)$$

Враховуючи, що

$$\varepsilon_{\mathbf{H}} = \varepsilon_0 \gamma_{\mathbf{H}} / \gamma_0 - \alpha, \quad (2.33)$$

де γ_0 і $\gamma_{\mathbf{H}}$ — направляючі косинуси падаючого і дифрагованого променів відповідно,

$$\alpha = \Delta\theta \sin(2\theta_B), \quad (2.34)$$

$\Delta\theta$ — кутове відхилення напрямку падаючої хвилі від напрямку, що точно задовольняє умові Вульфа–Бреґга, з (2.32) можна отримати:

$$\varepsilon_0^\delta = \gamma_0 \Delta_\delta, \quad (2.35)$$

$$\Delta_\delta = \frac{\chi_0}{2\gamma_0} + \frac{\lambda}{2\Lambda} \left[y + (-1)^\delta \sqrt{y^2 - 1} \right], \quad (2.36)$$

де довжина екстинкції

$$\Lambda = \lambda \sqrt{\gamma_0 |\gamma_{\mathbf{H}}|} / \sigma, \quad (2.37)$$

$$y = -(\alpha + \alpha_0) \sqrt{b} / \sigma, \quad (2.38)$$

$$\sigma^2 = C^2 \chi_{\mathbf{H}} \chi_{-\mathbf{H}}, \quad \alpha_0 = (\chi_0 / 2)(1 + 1/b), \quad b = \gamma_0 / |\gamma_{\mathbf{H}}|, \quad \delta = 1, 2.$$

Враховуючи (2.33), (2.35) і (2.36), з будь-якого з рівнянь системи (2.31) можна отримати:

$$D_{\mathbf{H}}^\delta = c_\delta D_0^\delta, \quad (2.39)$$

$$c_\delta = \sqrt{b\zeta} (y + (-1)^\delta \sqrt{y^2 - 1}), \quad (2.40)$$

де $\zeta = (\chi_{\mathbf{H}} / \chi_{-\mathbf{H}})^{1/2}$.

Для знаходження амплітуд D_0^δ , D_0^δ , $D_H^\delta D_H^\delta$ необхідно використати граничні умови, які пов'язують між собою амплітуди хвиль в кристалі і вакуумі (в геометрії дифракції за Бреггом):

$$\sum_{\delta} D_0^\delta e^{-i\mathbf{K}_0^\delta \mathbf{r}} = E_0 e^{-i\mathbf{K} \mathbf{r}}|_{z=t_1} \quad (2.41)$$

$$\sum_{\delta} D_H^\delta e^{-i\mathbf{K}_H^\delta \mathbf{r}} = 0|_{z=t_2} \quad (2.42)$$

Хвильові вектори прямої і дифрагованої хвиль в кристалі пов'язані з відповідними хвильовими векторами падаючої і дифрагованої хвиль у вакуумі співвідношеннями:

$$\mathbf{K}_0^\delta = \mathbf{K} + K(\varepsilon_0^\delta / \gamma_0) \mathbf{n} = \mathbf{K} + K \Delta_\delta \mathbf{n}, \quad (2.43)$$

де \mathbf{n} — внутрішня нормаль до поверхні кристалу,

$$\mathbf{K}_H^\delta = \mathbf{K}'_H + K(\varepsilon_H^\delta / \gamma_H) \mathbf{n} = \mathbf{K}'_H + K(\Delta_\delta - \alpha / \gamma_H) \mathbf{n}, \quad (2.44)$$

де \mathbf{K}'_H — хвильовий вектор дифрагованої хвилі у вакуумі. З урахуванням (2.39), (2.43) і (2.44) з (2.41) і (2.42) матимемо:

$$\begin{cases} D_0^{(1)} e^{-iK \Delta_1 t_1} + D_0^{(2)} e^{-iK \Delta_2 t_1} = E_0, \\ c_1 D_0^{(1)} e^{-iK \Delta_1 t_2} + c_2 D_0^{(2)} e^{-iK \Delta_2 t_2} = 0. \end{cases} \quad (2.45)$$

З системи рівнянь (45) для амплітуд $D_0^{(1)}$ і $D_0^{(2)}$ можна отримати:

$$D_0^\delta = (-1)^\delta E_0 \frac{c_\delta e^{-iK \Delta_\delta d}}{c_1 e^{-iK \Delta_1 d} - c_2 e^{-iK \Delta_2 d}} e^{iK \Delta_\delta t_1} \quad (2.46)$$

$\delta \neq \delta'$, $d = t_2 - t_1$. Для знаходження амплітуди дифрагованої хвилі у вакуумі необхідно використати відповідну граничну умову:

$$\sum_{\delta} D_H^\delta e^{-i\mathbf{K}_H^\delta \mathbf{r}} = E_s e^{-i\mathbf{K}'_H \mathbf{r}}|_{z=t_1} \quad (2.47)$$

звідки, з урахуванням (2.39) і (2.44):

$$E_s = \eta(t_1) \sum_{\delta} c_\delta D_0^\delta e^{-iK \Delta_\delta t_1} = E_0 \eta(t_1) b \zeta \frac{e^{-iK \Delta_1 d} - e^{-iK \Delta_2 d}}{c_1 e^{-iK \Delta_1 d} - c_2 e^{-iK \Delta_2 d}}, \quad (2.48)$$

де

$$\eta(t_1) = \exp(iK \alpha t_1 / \gamma_H). \quad (2.49)$$

Для амплітудного коефіцієнта відбивання можна записати:

$$r_{\mathbf{H}}(t_1) = \frac{E_s}{\sqrt{b}E_0} = \eta(t_1)\sqrt{b}\zeta \frac{e^{-iK\Delta_1 d} - e^{-iK\Delta_2 d}}{c_1 e^{-iK\Delta_1 d} - c_2 e^{-iK\Delta_2 d}}. \quad (2.50)$$

В наближенні напівнескінченного кристалу формула (2.50) набуде вигляду:

$$r_{\mathbf{H}}(t_1) = \eta(t_1)(y - \operatorname{sgn}(\operatorname{Re}(y))\sqrt{y^2 - 1}). \quad (2.51)$$

Відбивальну здатність можна обчислити за допомогою виразу:

$$R_{\text{coh}}(\Delta\theta) = |r_{\mathbf{H}}(t_1)|^2. \quad (2.52)$$

Використовуючи граничну умову для хвилі, що пройшла крізь плоско-паралельну пластину

$$\sum_{\delta} D_0^{\delta} e^{-i\mathbf{K}_0^{\delta} \mathbf{r}} = E_T e^{-i\mathbf{K} \mathbf{r}}|_{z=t_2}$$

з урахуванням (2.43) і (2.46) можна отримати вираз для коефіцієнта проходження:

$$r_0 = \frac{E_T}{E_0} = e^{-iK(\Delta_1 + \Delta_2)d} \frac{c_1 - c_2}{c_1 e^{-iK\Delta_1 d} - c_2 e^{-iK\Delta_2 d}}. \quad (2.53)$$

Для врахування статистично розподілених дефектів необхідно у формулах (2.31)–(2.53) зробити заміни [90]:

$$C\chi_{\mathbf{H}} \rightarrow CE\chi_{\mathbf{H}} + \Delta\chi_{\mathbf{H}0},$$

$$C\chi_{-\mathbf{H}} \rightarrow CE\chi_{-\mathbf{H}} + \Delta\chi_{0\mathbf{H}},$$

$$\chi_0 \rightarrow \chi_0 + \Delta\chi_{00},$$

де $\Delta\chi_{00}$, $\Delta\chi_{0\mathbf{H}}$ і $\Delta\chi_{\mathbf{H}0}$ — дисперсійні поправки до сприйнятливостей за рахунок дифузного розсіювання при наявності в кристалі дефектів. Можна покласти $\Delta\chi_{00} \approx -i\mu_{\text{ds}}/K$, $\Delta\chi_{0\mathbf{H}} = \Delta\chi_{\mathbf{H}0} \approx 0$, де μ_{ds} — коефіцієнт екстинкції за рахунок дифузного розсіювання, E — фактор Кривоглаза (статичний фактор Дебая–Валлера) [78].

При цьому слід відмітити, що у випадку кристала з дефектами, крім когерентного розсіювання (2.52) з врахуванням екстинкції (μ_{ds}), також необхідно враховувати безпосередній внесок від самого дифузного розсіювання у відбивальну здатність (ці результати будуть представлені в окремій роботі).

Розглянемо кінематичне наближення ($d \ll \Lambda$) виразів (2.50) і (2.53). Отримаємо асимптотичне значення виразу (2.48) при $t \rightarrow 0$. В такому випадку при $|y| \gg 1$ $c_1 \rightarrow 0$, $c_2 \rightarrow 2y(b\zeta)^{1/2}$, і в результаті вираз (2.49) зводиться до:

$$E_{\text{H}}^{\text{kin}} = E_0 \eta(t_1) \sqrt{b\zeta} \frac{1 - e^{2iA_k y}}{2y}, \quad (2.54)$$

$A_k = \pi d / \Lambda$. У випадку $|y| \sim 1$ у (2.48) можна провести розклад експонент за малим параметром d . Розклавши вказаний вираз з точністю до другого порядку малості d^2 , отримаємо:

$$E_{\text{H}}^{\text{kin}} = -E_0 \eta(t_1) \frac{\sqrt{b\zeta}}{2y} \left(2iA_k y + \frac{(2iA_k y)^2}{2} \right). \quad (2.55)$$

Враховуючи, що при $x \rightarrow 0$ $e^x - 1 \approx x + x^2/2$, вираз (2.55) зводиться до (2.54). Отже, у всьому діапазоні зміни y вираз для динамічної амплітуди дифрагрованої хвилі (2.48) зводиться до кінематичної амплітуди дифрагрованої хвилі з врахуванням поглинання і заломлення (2.54) при граничному переході $d \rightarrow 0$.

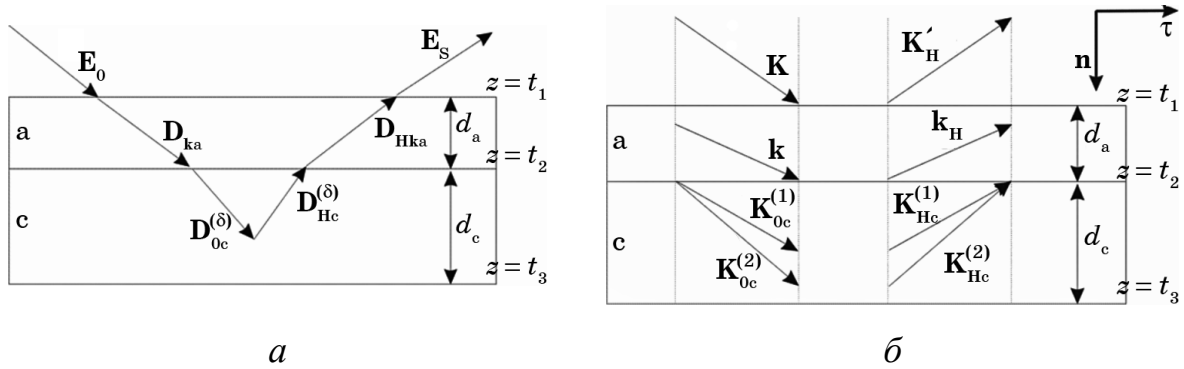


Рис. 2.4. Дифракція в двошаровій системі з аморфним і кристалічним шарами: схема для амплітуд (а), схема для хвильових векторів (б).

Вираз (2.53) при $|y| \gg 1$ зводиться до (2.19). При $|y| \sim 1$ і $d \rightarrow 0$ (2.53) в першому порядку малості по d зводиться до (2.19), тоді як в другому порядку по d з'являється екстинкційний доданок. Однак такий доданок неправильно поширювати на весь кутовий діапазон, оскільки він діє лише поблизу кута Брегга. Тому, у виразі (2.53) можна розкласти в ряд лише експоненти, що містять Δ_1 , тоді як показники експонент з Δ_2 будуть немалими при $|y| \gg 1$, і їх неможна розкласти в ряд по d . Враховуючи сказане, для врахування впливу ефектів екстинкції на пряму хвилю за рахунок

перетікання частини інтенсивності в дифрагований промінь доцільно користуватись загальним виразом (2.53).

2.6. Розсіяння в двошаровій системі з аморфним і кристалічним шарами

Розглянемо розсіяння в двошаровій системі, що складається з поверхневого аморфного шару і монокристалічної підкладки (див. рис. 2.4).

Запишемо граничну умову на вхідній поверхні:

$$D_{ka} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} = E_0 e^{-i\mathbf{K}\mathbf{r}} \Big|_{z=t_1}. \quad (2.56)$$

Зв'язок між хвильовими векторами в вакуумі і в середовищі визначається виразом (2.16). Підставляючи (2.16) в (2.56), отримаємо (2.17).

Запишемо граничну умову для падаючої хвилі на межі між аморфним шаром і кристалом:

$$\sum_{\delta} D_{0c}^{(\delta)} e^{-i\mathbf{K}_{c0}^{(\delta)}\mathbf{r}} = D_{ka} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} \Big|_{z=t_2} \quad (2.57)$$

Зв'язок між хвильовими векторами падаючої з аморфного шару хвилі \mathbf{k} і хвилі в кристалі $\mathbf{K}_{c0}^{(\delta)}$ можна отримати наступним чином. Нехай на аморфний шар з вакууму падає хвиля \mathbf{K} , тоді її зв'язок з хвильовим вектором \mathbf{k} в аморфному шарі визначатиметься виразом (2.16). Нехай хвиля з таким самим хвильовим вектором у вакуумі \mathbf{K} падає на монокристалічну пластину. Тоді зв'язок хвильового вектору \mathbf{K} в вакуумі і хвильових векторів в кристалі $\mathbf{K}_0^{(\delta)}$ буде визначатись виразом (2.43). Прирівнюючи (2.16) і (2.43), отримаємо:

$$\mathbf{K}_{0c}^{(\delta)} = \mathbf{k} - K(\Delta_a - \Delta_{c0})\mathbf{n}, \quad (2.58)$$

де $\Delta_a = \chi_{0a}/(2\gamma_0)$.

Гранична умова для дифрагованої в кристалічному шарі хвилі на вихідній поверхні має вигляд:

$$\sum_{\delta} D_{hc}^{(\delta)} e^{-i\mathbf{K}_{hc}^{(\delta)}\mathbf{r}} = \mathbf{0} \Big|_{z=t_3} \quad (2.59)$$

Зв'язок між хвильовими векторами дифрагованої хвилі в кристалі і відповідної хвилі у вакуумі, згідно до (2.44), можна записати у вигляді:

$$\mathbf{K}_{\text{сн}}^{(\delta)} = \mathbf{K}_{\text{н}} + K \Delta_{\text{сн}} \mathbf{n} - (K \alpha_{\text{с}} / \gamma_{\text{н}}) \mathbf{n}. \quad (2.60)$$

Підставляючи (2.58) в (2.57) і (2.60) в (2.59), з урахуванням (2.17) і (2.39) отримаємо:

$$\begin{cases} D_{0\text{с}}^{(1)} e^{-iK \Delta_{\text{с1}} t_2} + D_{0\text{с}}^{(2)} e^{-iK \Delta_{\text{с2}} t_2} = E_0 e^{-iK \Delta_{\text{а}} d_{\text{а}}}, \\ c_1 D_{0\text{с}}^{(1)} e^{-iK \Delta_{\text{с1}} t_3} + c_2 D_{0\text{с}}^{(2)} e^{-iK \Delta_{\text{с2}} t_3} = 0. \end{cases} \quad (2.61)$$

Розв'язуючи систему (61) відносно $D_{0\text{с}}^{(1)}$ і $D_{0\text{с}}^{(2)}$, отримаємо:

$$D_{0\text{с}}^{(\delta)} = (-1)^{\delta} E_0 e^{-iK \Delta_{\text{а}} d_{\text{а}}} \frac{c_{\delta} e^{-iK \Delta_{\text{с}\delta} d_{\text{с}}}}{c_1 e^{-iK \Delta_{\text{с1}} d_{\text{с}}} - c_2 e^{-iK \Delta_{\text{с2}} d_{\text{с}}}} e^{iK \Delta_{\text{с}\delta} t_2} \quad (2.62)$$

Запишемо граничну умову для дифрагованої хвилі на межі аморфного і кристалічного шарів:

$$D_{\text{нка}} e^{-ik_{\text{н}} r} = \sum_{\delta} D_{\text{нс}}^{(\delta)} e^{-iK_{\text{нс}}^{(\delta)} r} \big|_{z=t_2} \quad (2.63)$$

Використовуючи принцип взаємності, для взаємозв'язку хвильових векторів дифрагованих хвиль у вакуумі і в аморфному шарі, аналогічно до отримання (2.16), матимемо:

$$\mathbf{K}_{\text{н}} = \mathbf{k}_{\text{н}} - K \Delta_{\text{ан}} \mathbf{n}, \quad (2.64)$$

де $\Delta_{\text{ан}} = \chi_{0\text{а}} / (2\gamma_{\text{н}})$. Підставляючи (2.64) в (2.60), отримаємо зв'язок між хвильовими векторами дифрагованих хвиль у кристалі і аморфному шарі:

$$\mathbf{K}_{\text{сн}}^{(\delta)} = \mathbf{k}_{\text{н}} - K (\Delta_{\text{ан}} - \Delta_{\text{сн}}) \mathbf{n} - (K \alpha_{\text{с}} / \gamma_{\text{н}}) \mathbf{n}. \quad (2.65)$$

Підставляючи (2.65) в (2.63), з урахуванням (2.39) і (2.62) отримаємо:

$$D_{\text{нка}} = \eta_{\text{с2}} e^{iK \Delta_{\text{ан}} t_2} \sum_{\delta} c_{\delta} D_{0\text{с}}^{(\delta)} e^{-iK \Delta_{\text{с}\delta} t_2}, \quad (2.66)$$

де тут і далі

$$\eta_{nj} = \exp(iK (\alpha_{\text{н}} / \gamma_{\text{н}}) t_j). \quad (2.67)$$

Розглянемо граничну умову для дифрагованої хвилі на вхідній поверхні двошарової системи:

$$E_s e^{-i\mathbf{K}_H \mathbf{r}} = D_{Hka} e^{-i\mathbf{K}_H \mathbf{r}} \Big|_{z=t_1}. \quad (2.68)$$

Підставляючи (2.64) в (2.68), з урахуванням (2.66) отримаємо:

$$r_{Hac}(t_2) = \frac{E_s}{\sqrt{b}E_0} = r_{Hc}(t_2) \exp\left(-iK \frac{\chi_{0a}}{2\gamma}\right), \quad (2.69)$$

Де $\frac{1}{\gamma} = \frac{1}{\gamma_0} + \frac{1}{|\gamma_H|}$, $r_{Hc}(t_2)$ дається виразом (2.50). Таким чином, вплив аморфного шару на поверхні на відбивальну здатність кристала зводиться лише до поглинання.

2.7. Дифракція в двошаровій кристалічній системі. Метод підсумовування амплітуд

На рисунку 2.5 показана схема дифракції в двошаровій кристалічній системі. Падаюча з вакууму плоска хвиля з амплітудою E_0 потрапляє в шар k. В кристалічному шарі k хвиля дифрагує з утворенням прямого променя $E_{0k}^{(1)}$, що далі проходить в шар d, і відбитого променя $E_{Hk}^{(1)}$, який виходить у вакуум з амплітудою E_{H1} . Хвиля $E_{0k}^{(1)}$ дифрагує в шарі d з утворенням прямої $E_{0d}^{(1)}$ і відбитої $E_{Hd}^{(1)}$ хвиль. Хвиля $E_{Hd}^{(1)}$ потрапляє в шар k і знов дифрагує з утворенням відповідно прямої $E_{0k}^{(2)}$ і відбитої $E_{Hk}^{(2)}$ хвиль. Пряма хвиля утворює на поверхні хвилю з амплітудою E_{H2} . Дифрагована в шарі k хвиля $E_{0k}^{(2)}$ знов потрапляє в шар d, і вказаний процес перерозсіювання між шарами повторюється.

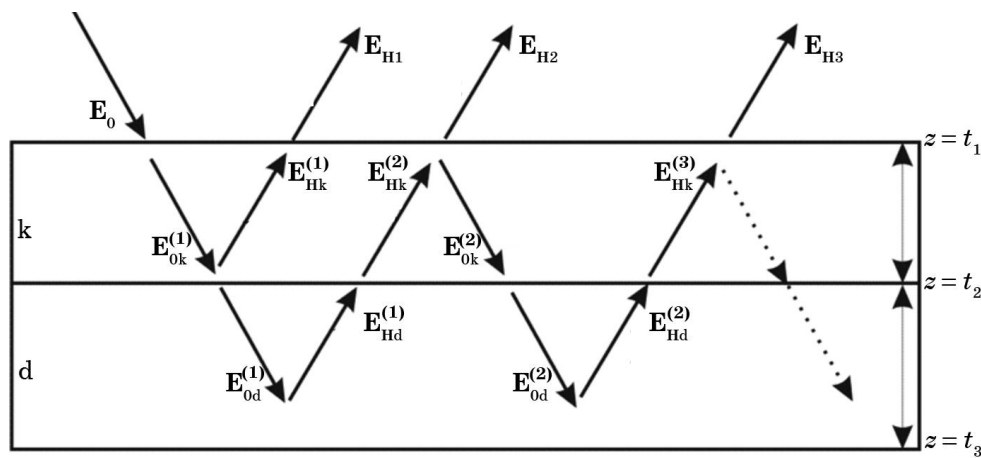


Рис. 2.5. Схема багатократного перерозсіювання при дифракції в двошаровій системі з кристалічними шарами k і d.

У випадку, коли шар k розсіює кінематично, можна враховувати лише процес однократного перерозсіювання, оскільки амплітуда хвилі, розсіяної в шарі k , мала в порівнянні з розсіяною в шарі d . Тоді вираз для результуючої хвилі в вакуумі зводиться до появи екстинкційного множника при амплітуді розсіяваної в шарі d хвилі. Однак, коли розсіювання в шарі k носить динамічний характер, врахування однократного перерозсіювання між шарами недостатньо. В такому випадку слід враховувати повну багатократність перерозсіювання між шарами.

Амплітуда хвилі $\mathbf{E}_{0k}^{(1)}$, що пройшла крізь шар k (див. рис. 2.5):

$$E_{0k}^{(1)} = E_0 r_{0k}. \quad (2.70)$$

Введемо позначення

$$\check{r}_{\mathbf{H}k} = \sqrt{b} r_{\mathbf{H}k}, \tilde{r}_{\mathbf{H}d} = \sqrt{b} r_{\mathbf{H}d}. \quad (2.71)$$

Амплітуда дифрагрованої в шарі d хвилі:

$$E_{\mathbf{H}d}^{(1)} = E_{0k}^{(1)} \tilde{r}_{\mathbf{H}d}(t_2) = E_0 r_{0k} \tilde{r}_{\mathbf{H}d}(t_2) \quad (2.72)$$

Амплітуда хвилі, що пройшла крізь шар d :

$$E_{0d}^{(1)} = r_{0d} E_{0k}^{(1)} = r_{0k} r_{0d} E_0 = E_{\tau 1}. \quad (2.73)$$

Для амплітуди $\mathbf{E}_{\mathbf{H}k}^{(2)}$ необхідно користуватись виразом, аналогічним до (2.53), однак з врахуванням того, що у вказаному випадку вектор дифракції змінюються з \mathbf{H} на $-\mathbf{H}$. Позначимо таку амплітуду як $r_{0k}^{(-)}$, тоді для $\mathbf{E}_{\mathbf{H}k}^{(2)}$ отримаємо:

$$E_{\mathbf{H}k}^{(2)} = E_{\mathbf{H}d}^{(1)} r_{0k}^{(-)} = E_0 r_{0k} \tilde{r}_{\mathbf{H}d}(t_2) r_{0k}^{(-)} = E_{\mathbf{H}2} \quad (2.74)$$

Для дифрагрованої в шарі k хвилі можна записати:

$$E_{\mathbf{H}k}^{(1)} = E_0 \tilde{r}_{\mathbf{H}k}(t_1) = E_{\mathbf{H}1} \quad (2.75)$$

Таким чином, для дифрагрованої хвилі у вакуумі, з урахуванням описаних вище амплітуд, з (2.74) і (2.75) отримаємо:

$$E_{\mathbf{H}}^{(2)} = E_{\mathbf{H}1} + E_{\mathbf{H}2} = E_0 (\tilde{r}_{\mathbf{H}k}(t_1) + r_{0k} \tilde{r}_{\mathbf{H}d}(t_2) r_{0k}^{(-)}) \quad (2.76)$$

Розглянемо хвилю $\mathbf{E}_{0k}^{(2)}$:

$$E_{0k}^{(2)} = E_{\mathbf{H}d}^{(1)} \tilde{r}_{\mathbf{H}k}^{(-)}(t_2) = E_0 r_{0k} \tilde{r}_{\mathbf{H}d}(t_2) \tilde{r}_{\mathbf{H}k}^{(-)}(t_2) \quad (2.77)$$

де $\tilde{r}_{\mathbf{H}k}^{(-)} = \sqrt{b^{(-)}} r_{\mathbf{H}k}^{(-)} = (b)^{-1/2} r_{\mathbf{H}k}^{(-)}$

Для амплітуди $\mathbf{E}_{\text{Hd}}^{(2)}$ можна отримати:

$$E_{\text{Hd}}^{(2)} = E_{\text{ok}}^{(2)} \tilde{r}_{\text{Hd}}(t_2) = E_0 r_{\text{ok}} \tilde{r}_{\text{Hd}}(t_2) \tilde{r}_{\text{Hk}}^{(-)}(t_2) \tilde{r}_{\text{Hd}}(t_2) \quad (2.78)$$

Відповідно для $\mathbf{E}_{\text{od}}^{(2)}$ і $\mathbf{E}_{\text{od}}^{(3)}$ матимемо:

$$E_{\text{od}}^{(2)} = E_{\text{ok}}^{(2)} r_{\text{od}} = E_0 r_{\text{ok}} r_{\text{od}}(t_2) \tilde{r}_{\text{Hk}}^{(-)}(t_2) \tilde{r}_{\text{Hd}}(t_2) = E_{T2} \quad (2.79)$$

$$E_{\text{od}}^{(3)} = E_{\text{ok}}^{(3)} r_{\text{od}} = E_0 r_{\text{ok}} r_{\text{od}}(t_2) \tilde{r}_{\text{Hk}}^{(-)}(t_2) \tilde{r}_{\text{Hd}}(t_2) \tilde{r}_{\text{Hk}}^{(-)}(t_2) \tilde{r}_{\text{Hd}}(t_2) = E_{T3} \quad (2.80)$$

Хвиля $E_{\text{Hk}}^{(3)}$ має вигляд:

$$E_{\text{Hk}}^{(3)} = E_{\text{Hd}}^{(2)} r_{\text{ok}}^{(-)} = E_0 r_{\text{ok}} \tilde{r}_{\text{Hd}}(t_2) \tilde{r}_{\text{Hk}}^{(-)}(t_2) \tilde{r}_{\text{Hd}}(t_2) r_{\text{ok}}^{(-)} = E_{H3} \quad (2.81)$$

Таким чином, для трьох дифрагованих хвиль у вакуумі, згідно до (2.76) і (2.81) можна отримати:

$$\begin{aligned} E_{\text{H}}^{(3)} = E_{\text{H1}} + E_{\text{H2}} + E_{\text{H2}} = & E_0 (\tilde{r}_{\text{Hk}}(t_1) + r_{\text{ok}} \tilde{r}_{\text{Hd}}(t_2) r_{\text{ok}}^{(-)} + \\ & + r_{\text{ok}} \tilde{r}_{\text{Hd}}(t_2) \tilde{r}_{\text{Hk}}^{(-)}(t_2) \tilde{r}_{\text{Hd}}(t_2) r_{\text{ok}}^{(-)}) \end{aligned} \quad (2.82)$$

Для трьох хвиль, що пройшли крізь двошарову систему, згідно до (2.73), (2.79), (2.80) матимемо:

$$E_T^{(3)} = E_{T1} + E_{T2} + E_{T2} = E_0 r_{\text{ok}} r_{\text{od}} (1 + \tilde{r}_{\text{Hd}}(t_2) \tilde{r}_{\text{Hk}}^{(-)}(t_2) + (\tilde{r}_{\text{Hd}}(t_2) \tilde{r}_{\text{Hk}}^{(-)}(t_2))^2)$$

Продовжуючи враховувати перерозсіювання більших порядків, для n -го хвильового поля можна отримати:

$$E_N^{(n)} = E_0 (\tilde{r}_{\text{Hk}}(t_1) + r_{\text{ok}} (\tilde{r}_{\text{Hd}}(t_2) \sum_{i=1}^{n-1} (\tilde{r}_{\text{Hd}}(t_2) \tilde{r}_{\text{Hk}}^{(-)}(t_2))^{i-1}) r_{\text{ok}}^{(-)}) \quad (2.83)$$

$$E_T^{(n)} = E_0 r_{\text{ok}} r_{\text{od}} (1 + \sum_{i=1}^{n-1} (\tilde{r}_{\text{Hd}}(t_2) \tilde{r}_{\text{Hk}}^{(-)}(t_2))^i) \quad (2.84)$$

Враховуючи повну багатократність перерозсіювання між шарами ($n \rightarrow \infty$), підсумовуючи в (83) і (84) геометричні прогресії можна отримати:

$$E_H^{(\infty)} = E_0 (\tilde{r}_{\text{Hk}}(t_1) + \frac{r_{\text{ok}} \tilde{r}_{\text{Hd}}(t_2) r_{\text{ok}}^{(-)}}{1 - \tilde{r}_{\text{Hd}}(t_2) \tilde{r}_{\text{Hk}}^{(-)}(t_2)}) \quad (2.85)$$

$$E_T^{(\infty)} = E_0 \frac{r_{\text{ok}} r_{\text{od}}}{1 - \tilde{r}_{\text{Hd}}(t_2) \tilde{r}_{\text{Hk}}^{(-)}(t_2)} \quad (2.86)$$

Амплітудний коефіцієнт відбивання для розглянутої двошарової системи:

$$r_{\text{H}}^{(n)} = E_{\text{H}}^{(n)} / (\sqrt{b} E_0). \quad (2.87)$$

З урахуванням (2.85) для (2.87) отримаємо:

$$r_{\mathbf{H}}^{(\infty)} = E_{\mathbf{H}}^{(\infty)} / (\sqrt{b}E_0) = r_{\mathbf{Hd}}(t_2)E_{\text{ext}} + r_{\mathbf{Hk}}(t_1), \quad (2.88)$$

де

$$E_{\text{ext}} = \frac{r_{0k}r_{0k}^{(-)}}{1 - r_{\mathbf{Hd}}(t_2)r_{\mathbf{Hk}}^{(-)}(t_2)}. \quad (2.89)$$

Знайдемо зв'язок між амплітудними коефіцієнтами відбивання і проходження з від'ємним вектором дифракції і відповідними коефіцієнтами з додатним вектором дифракції. Враховуючи що

$$\mathbf{n}^{(-)} = -\mathbf{n}, \mathbf{K}_0^{(-)} = \mathbf{K}_{\mathbf{H}}, \mathbf{K}_{\mathbf{H}}^{(-)} = \mathbf{K}_0, \alpha_k^{(-)} = b\alpha_k, \zeta_k^{(-)} = 1/\zeta_k, \quad (2.90)$$

отримаємо:

$$\begin{aligned} \gamma_0^{(-)} &= \frac{\mathbf{K}_0^{(-)}\mathbf{n}^{(-)}}{K} = -\frac{\mathbf{K}_{\mathbf{H}}\mathbf{n}}{K} = -\gamma_{\mathbf{H}}, \gamma_{\mathbf{H}}^{(-)} = \frac{\mathbf{K}_{\mathbf{H}}^{(-)}\mathbf{n}^{(-)}}{K} = -\frac{\mathbf{K}_0\mathbf{n}}{K} = -\gamma_0, \\ b^{(-)} &= 1/b, y_k^{(-)} = y_k, c_{\delta k}^{(-)} = c_{\delta k} / (b\zeta_k), \Delta_{\delta k}^{(-)} = \Delta_{\delta k} - \frac{\chi_0}{2} \left(\frac{1}{\gamma_0} + \frac{1}{\gamma_{\mathbf{H}}} \right), \\ t_i^{(-)} &= \mathbf{r}\mathbf{n}^{(-)} \Big|_{z=t_i} = -t_i, d_k^{(-)} = t_1^{(-)} - t_2^{(-)} = t_2 - t_1 = d_k. \end{aligned} \quad (2.91)$$

Таким чином, для амплітудних коефіцієнтів отримаємо:

$$r_{\mathbf{Hk}}^{(-)} = \frac{r_{\mathbf{Hk}}^0}{\zeta_k \eta_{k2}}, r_{0k}^{(-)} = r_{0k} \exp \left(iK \frac{\chi_0}{2} \left(\frac{1}{\gamma_0} + \frac{1}{\gamma_{\mathbf{H}}} \right) d_k \right), \quad (2.92)$$

а вираз (2.88) можна записати у вигляді:

$$r_{\mathbf{H}}^{(\infty)} = \eta_{k1} \frac{r_{\mathbf{Hk}}^0 + (\eta_{d2}/\eta_{k2})r_{\mathbf{Hd}}^0(r_{0k}^2 e^{2i\rho_k} - (r_{\mathbf{Hk}}^0)^2 / \zeta_k)}{1 - (\eta_{d2}/(\zeta_k \eta_{k2}))r_{\mathbf{Hk}}^0 r_{\mathbf{Hd}}^0}, \quad (2.93)$$

$$\rho_k = \frac{K}{2} \left[\frac{\chi_{0k}}{2} \left(\frac{1}{\gamma_0} + \frac{1}{\gamma_{\mathbf{H}}} \right) + \frac{\alpha_k}{\gamma_{\mathbf{H}}} \right] d_k, r_{\mathbf{Hk}}^0 = r_{\mathbf{Hk}}(0),$$

і відбивальна здатність $r_{\mathbf{Hk}}(t)$ шару L визначається виразом (2.50).

Множник E_{ext} в (2.88) описує вплив шару k на дифракцію в шарі d . При цьому, якщо шар k досить тонкий ($d_k \ll \Lambda$) і для $r_{\mathbf{Hk}}$ можна використати вираз (2.54), то вираз (2.89), з урахуванням співвідношення між амплітудними коефіцієнтами відбивання і проходження (2.106), можна записати у вигляді:

$$E_{\text{ext}} = E_a E_e E_m, E_a = \exp(-iK d_k \chi_{0k} / (2\gamma)), \quad (2.94)$$

$$E_e = \eta_{d2} (1 + (r_{\mathbf{Hk}}^0)^2 e^{-2iA_k y_k} / \zeta_k), E_m = \frac{1}{1 - (\eta_{d2} / (\zeta_k \eta_{k2})) r_{\mathbf{Hk}}^0 r_{\mathbf{Hd}}^0}.$$

Отже, вплив шару k на дифракцію в шарі d відбувається через три механізми, відображені множниками у виразі (2.94). Перший множник E_a відповідає за фотоелектричне поглинання в шарі k , другий множник E_e описує екстинкцію за рахунок дифракції в шарі k хвилі, падаючої на шар d . Третій множник, як видно із (2.83) і (2.85), описує повну багатократність перерозсіяння між шарами d і k .

На рисунку 2.6 показано кутові залежності диференціальної відбивальної здатності в двошаровій кристалічній системі, в якій шар k відрізняється від шару d малою нормальною деформацією. Розрахунки проведено для рефлексу (440), випромінювання MoK_α , товщина деформованого шару $t_k = 2$ мкм, добавка до кутової змінної за рахунок нормальної деформації $\alpha_d - \alpha_k = 5 \cdot 10^{-6}$. Як видно, вплив описаних вище механізмів екстинкції і багатократності перерозсіяння є суттєвим. При цьому, при збільшенні величини деформації такий вплив зменшується, і навпаки.

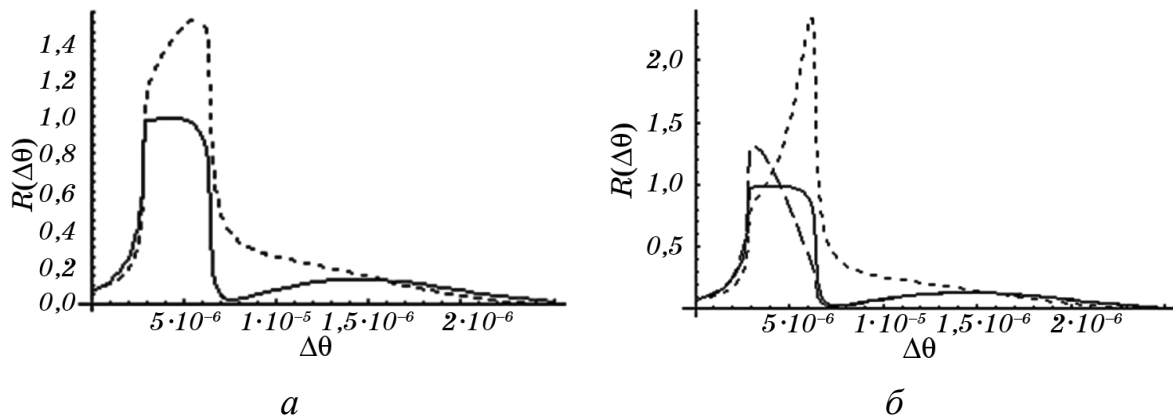


Рис. 2.6. Диференціальна відбивальна здатність двошарової кристалічної системи з малою нормальною деформацією в першому шарі: відбивальна здатність з урахуванням всіх механізмів розсіяння в двошаровій системі (суцільна лінія), відбивальна здатність з урахуванням лише поглинання в першому шарі (пунктирна лінія) (а); відбивальна здатність з урахуванням всіх механізмів розсіяння в двошаровій системі (суцільна лінія), без врахування багатократного перерозсіяння між шарами (широкий пунктир), без врахування екстинкції (дрібний пунктир) (б).

2.8. Дифракція в двошаровій кристалічній системі. Метод граничних умов

Запишемо граничні умови для амплітуд (див. рисунок 2.7) на межах розділу шарів:

$$\sum_{\delta} D_{0k}^{\delta} e^{-i\mathbf{K}_{0k}^{\delta} \mathbf{r}} = E_0 e^{-i\mathbf{K} \mathbf{r}} \Big|_{z=t_1}, \quad (2.95)$$

$$E_s e^{-i\mathbf{K}_H \mathbf{r}} = \sum_{\delta} D_{Hk}^{\delta} e^{-i\mathbf{K}_{Hk}^{\delta} \mathbf{r}} \Big|_{z=t_1}, \quad (2.96)$$

$$\sum_{\delta} D_{0d}^{\delta} e^{-i\mathbf{K}_{0d}^{\delta} \mathbf{r}} = \sum_{\delta} D_{0k}^{\delta} e^{-i\mathbf{K}_{0k}^{\delta} \mathbf{r}} \Big|_{z=t_2}, \quad (2.97)$$

$$\sum_{\delta} D_{Hk}^{\delta} e^{-i\mathbf{K}_{Hk}^{\delta} \mathbf{r}} = \sum_{\delta} D_{Hd}^{\delta} e^{-i\mathbf{K}_{Hd}^{\delta} \mathbf{r}} \Big|_{z=t_2}, \quad (2.98)$$

$$\sum_{\delta} D_{Hd}^{\delta} e^{-i\mathbf{K}_{Hd}^{\delta} \mathbf{r}} = 0 \Big|_{z=t_3}. \quad (2.99)$$

Тут і далі індексами k і d будемо позначати величини відповідно в першому і другому шарах.

З граничних умов (2.95) і (2.97)–(2.99) можна записати наступну систему рівнянь для визначення амплітуд $D_{0k}^{(1)}$, $D_{0k}^{(2)}$, $D_{0d}^{(1)}$ і $D_{0d}^{(2)}$:

$$\begin{cases} D_{0k}^{(1)} e^{-iK \Delta_{k1} t_1} + D_{0k}^{(2)} e^{-iK \Delta_{k2} t_1} = E_0, \\ D_{0d}^{(1)} e^{-iK \Delta_{d1} t_2} + D_{0d}^{(2)} e^{-iK \Delta_{d2} t_2} = D_{0k}^{(1)} e^{-iK \Delta_{k1} t_2} + D_{0k}^{(2)} e^{-iK \Delta_{k2} t_2}, \\ \eta_{k2} (c_{k1} D_{0k}^{(1)} e^{-iK \Delta_{k1} t_2} + c_{k2} D_{0k}^{(2)} e^{-iK \Delta_{k2} t_2}) = \eta_{d2} (c_{d1} D_{0d}^{(1)} e^{-iK \Delta_{d1} t_2} + c_{d2} D_{0d}^{(2)} e^{-iK \Delta_{d2} t_2}), \\ c_{d1} D_{0d}^{(1)} e^{-iK \Delta_{d1} t_3} + c_{d2} D_{0d}^{(2)} e^{-iK \Delta_{d2} t_3} = 0. \end{cases} \quad (2.100)$$

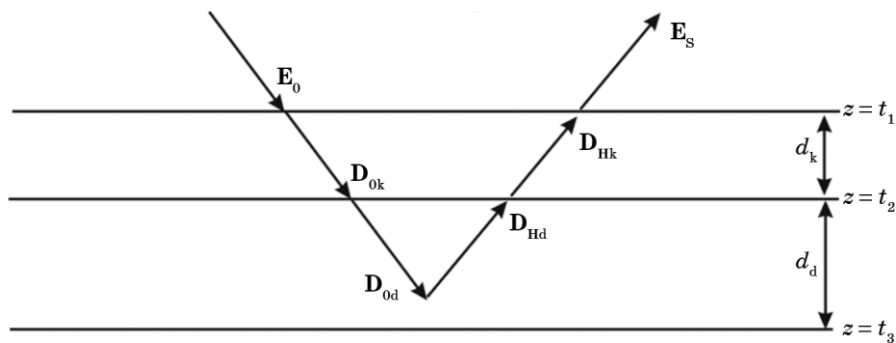


Рис. 2.7. Амплітуди хвильового поля в двошаровій кристалічній системі.

Введемо для скорочення записів позначення:

$$e_{k\delta n} = e^{-iK \Delta_{k\delta} t_n}, e_{d\delta n} = e^{-iK \Delta_{d\delta} t_n}.$$

Тоді систему рівнянь (2.100) можна записати у вигляді:

$$\begin{pmatrix} e_{k11} & e_{k21} & 0 & 0 \\ e_{k12} & e_{k22} & -e_{d12} & -e_{d22} \\ \eta_{k2} c_{k1} e_{k12} & \eta_{k2} c_{k2} e_{k22} & -\eta_{d2} c_{d1} e_{d12} & -\eta_{d2} c_{d2} e_{d22} \\ 0 & 0 & c_{d1} e_{d13} & c_{d2} e_{d23} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} D_{0k}^{(1)} \\ D_{0k}^{(2)} \\ D_{0d}^{(1)} \\ D_{0d}^{(1)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} E_0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (2.101)$$

З (2.101) для $D_{0k}^{(1)}$ і $D_{0k}^{(2)}$ можна отримати:

$$D_{0k}^{(1)} = E_0 \frac{e_{k2k}}{e_{k11}} \frac{(\eta_{d2} \sqrt{b} r_{\mathbf{Hd}}^0 - c_{k2} \eta_{k2})}{(c_{k1} e_{k1k} - c_{k2} e_{k2k})(\eta_{k2} - (\eta_{d2} / \zeta_k) r_{\mathbf{Hk}}^0 r_{\mathbf{Hd}}^0)}, \quad (2.102)$$

$$D_{0k}^{(2)} = E_0 \frac{e_{k1k}}{e_{k21}} \frac{c_{k1} \eta_{k2} - \eta_{d2} \sqrt{b} r_{\mathbf{Hd}}^0}{(c_{k1} e_{k1k} - c_{k2} e_{k2k})(\eta_{k2} - (\eta_{d2} / \zeta_k) r_{\mathbf{Hk}}^0 r_{\mathbf{Hd}}^0)}, \quad (2.103)$$

де

$$e_{d\delta d} = \frac{e_{d\delta 3}}{e_{d\delta 2}} = e^{-iK \Delta_{d\delta} (t_3 - t_2)} = e^{-iK \Delta_{d\delta} d_d}, e_{k\delta k} = \frac{e_{k\delta 2}}{e_{k\delta 1}} = e^{-iK \Delta_{k\delta} (t_2 - t_1)} = e^{-iK \Delta_{k\delta} d_k},$$

d_k і d_d — товщини шарів k і d відповідно.

Тепер використаємо граничну умову (2.96), з якої, з урахуванням (2.39) і (2.44) можна отримати:

$$E_S = \eta_{k1} c_{k1} D_{0k}^{(1)} e^{-iK \Delta_{k1} t_1} + \eta_{k1} c_{k2} D_{0k}^{(2)} e^{-iK \Delta_{k2} t_1}. \quad (2.104)$$

Підставляючи (2.102) і (2.103) в (2.104), отримаємо:

$$r_{\mathbf{H}} = \frac{E_S}{\sqrt{b} E_0} = \eta_{k1} \frac{r_{\mathbf{Hk}}^0 + r_{\mathbf{Hd}}^0 (\eta_{d2} / \eta_{k2}) (1 - 2y_k r_{\mathbf{Hk}}^0 / \sqrt{\zeta_k})}{1 - (\eta_{d2} / (\zeta_k \eta_{k2})) r_{\mathbf{Hk}}^0 r_{\mathbf{Hd}}^0}. \quad (2.105)$$

Враховуючи справедливість рівності

$$r_{0k}^2 e^{2i\rho_k} = (r_{\mathbf{Hk}}^0)^2 / \zeta_k - 2y_k r_{\mathbf{Hk}}^0 / \sqrt{\zeta_k} + 1, \quad (2.106)$$

вираз (2.105) зводиться до (2.93).

В результаті показано, що розвинутий підхід із застосуванням граничних умов дійсно враховує процеси багатократного перерозсіювання випромінення як в рамках окремого шару речовини, так і між декількома шарами. Таким чином даний

підхід є повним і достатнім для описання заломлення у багатошаровому некристалічному об'єкті.

2.9. Висновки

Аналіз механізмів формування статистичної динамічної картини бреггівського розсіювання в рамках побудованої моделі, для випадку двошарових кристалічних систем з аморфним поверхневим шаром, показав наступне.

Теоретичні моделі, які описують розсіювання у системі шарів шляхом складання амплітуд дифрагованих окремо, наприклад, у кінематично та динамічно розсіюючих шарах хвиль, можуть використовуватись лише у випадках, коли товщина кінематично розсіюючого шару складає лише декілька відсотків від довжини екстинкції. При цьому, коли вказана товщина досягає або перевищує десятки відсотків від довжини екстинкції, суттєвими стають ефекти екстинкції за рахунок кінематичної дифракції у першому шарі того променя, що проходить у другий шар, а також ефекти багатократності перерозсіювання між шарами.

В останньому випадку необхідно використовувати статистичну динамічну модель, яка враховує відмічені ефекти шляхом розв'язання загального хвильового рівняння для рентгенівських хвиль в середовищі з використанням відповідних граничних умов як на поверхні двошарової системи, так і на межі розділу шарів.

При цьому зазначена модель при зростанні товщини першого шару до величин, рівних або більших довжини екстинкції, описує ефекти повного подавлення екстинкцією як променя, що проходив при менших товщинах у другий шар в області кутів бреггівської дифракції, так і ефектів багатократного перерозсіювання між шарами, якщо бреггівські кути розсіювання у шарах однакові, а дефекти у шарах відсутні, тобто в такому випадку працює лише перший шар.

РОЗДІЛ 3

ФОРМУВАННЯ ЗОБРАЖЕННЯ НЕКРИСТАЛІЧНИХ БАГАТОШАРОВИХ ОБ'ЄКТІВ ДОВІЛЬНОЇ ФОРМИ

3.1. Вступ

Рентгенівська радіографія для отримання зображень некристалічних об'єктів традиційно використовує явище поглинання випромінювання. Однак у тому випадку, коли досліджуваний зразок має малий коефіцієнт поглинання, отримати інформативне зображення стає дуже складно. Якщо натомість використовувати явище заломлення, то можна отримати зображення із суттєво більшим контрастом і, як наслідок, отримати набагато більше інформації про об'єкт ([91–93]).

Фазоконтрастні методи отримання зображень представляють зсув фази випромінювання, що проходить через некристалічний об'єкт, у вигляді зміни інтенсивності зображення. Як було показано в першій главі тривісний метод з використанням кристала-аналізатора (ABI) є одним із найбільш чутливих та інформативних завдяки високій кутовій чутливості та вибірковості по відношенню до розсіяного випромінювання. Фазоконтрастний метод з використанням кристала-аналізатора вперше було представлено у роботах [47, 54, 94, 95].

Для кількісної інтерпретації зображень зазвичай використовують три основних підходи [96]. В першому підході для описання змін інтенсивності використовуються розклад в ряд Тейлора поблизу робочих точок кривої гойдання аналізатора ([97, 98]). Другий підхід полягає у підборі функціональних форм для апроксимації виміряних кривих гойдання [99–101]. Ці функції мають бути достатньо гнучкою і включати в себе параметри, що відповідають різним характеристикам об'єкта. Третій підхід називається радіографія на основі багатьох зображень (MIR — multiple-image radiography). У MIR крива гойдання параметризується на основі декількох вимірювань поблизу різних робочих точок без безпосередньої підгонки кривої. Крива гойдання об'єкта (отримана за наявності досліджуваного зразка) порівнюється з опорними кривими гойдання (отриманими

без зразка) піксель за пікселем, а величини поглинання, заломлення і розсіювання отримуються із різниці між кривими гойдання [53, 102, 103].

Слід відмітити, що більшість поширених підходів базується на наближенні геометричної оптики для розсіювання у некристалічному об'єкті і навіть у кристалі-аналізаторі. В той же час застосовується і більш строга теорія для опису дифракції випромінення у кристалі-аналізаторі, яка базується на використанні функцій точкових джерел [99, 104, 105]. Однак для опису дифракції рентгенівського випромінення у кристалі-аналізаторі ця теорія застосовує формули, що базуються на наближеннях, аналогічних зробленим у роботі [106], де формули виводились із хвильового рівняння із відкинутими другими похідними амплітуд хвильових полів у кристалах. Таке наближення застосовне лише для плавних полів зміщення і, як наслідок, не може бути кількісно вірним при описанні рентгенівської дифракції на кристалах із мікродефектами. У даній роботі запропоновано якісно новий підхід, що базується на детальній теорії багатократного (динамічного) розсіювання у некристалічних об'єктах та у кристалах монохроматора і аналізатора [90, 107–110].

Подальший опис процесу формування зображень багат шарових некристалічних об'єктів потребує встановлення аналітичного зв'язку між окремими параметрами його складу та форми та відповідними величинами, що спостерігаються на експерименті.

Такий аналіз зручно проводити у термінології хвильових векторів і граничних умов, що, як було, показано враховує ефекти багатократного розсіювання, але водночас необхідно отримати результат у достатньо простій формі для подальшого розв'язку оберненої задачі і при цьому він повинен зберігати усі переваги над широко-розповсюдженими спрощеними підходами.

У даному розділі встановлено зв'язок між параметрами структури багат шарового некристалічного об'єкта із відповідними спостережуваними величинами і наведено ряд модельних експериментів, що обґрунтовують працездатність створеної моделі.

3.2. Теорія багатократного розсіювання в некристалічних об'єктах довільної форми.

Слід зазначити, що в рамках підходу, що застосовується в даній роботі, розв'язки в основі яких лежать рівняння Максвелла з точністю до позначень збігаються до розв'язків на основі рівнянь Шредінгера. Таким чином дана теорія без обмеження загальності може бути застосована як для діагностики з використанням рентгенівського випромінювання, так і, наприклад, при використанні джерела швидких нейтронів. Внаслідок цього подальші викладки наводяться в термінології квантової механіки.

Потенціал V некристалічного об'єкта, який з огляду на те, що в роботі розглядається поглинання, є комплексним, запишемо у вигляді:

$$\begin{aligned} V(\mathbf{r}) &= \sum_{\mathbf{r}', \alpha} C_{\mathbf{r}'}^{\alpha} V^{\alpha}(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \\ V(\mathbf{r}) &= \bar{V}(\mathbf{r}) + (V(\mathbf{r}) - \bar{V}(\mathbf{r})); \\ \bar{V}(\mathbf{r}) &= \sum_{\mathbf{r}', \alpha} C_0^{\alpha} V^{\alpha}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = V_0 \end{aligned} \quad (3.1)$$

де \mathbf{r}' — радіус-вектор, проведений із початку координат в центр одного із атомів сорта α ; $C_{\mathbf{r}'}^{\alpha} = 1$, якщо в точці \mathbf{r}' знаходиться центр атома сорта α , і $C_{\mathbf{r}'}^{\alpha} = 0$, якщо в точці \mathbf{r}' знаходиться центр атома сорта $\alpha' \neq \alpha$ або у цю точку не потрапляє жоден із центрів атомів; V^{α} — потенціал взаємодії випромінювання з атомами сорта α , центри яких знаходяться в точках \mathbf{r}' (залежність V^{α} від структури та складу оточення не враховується).

Фур'є розклад величини $C_{\mathbf{r}'}^{\alpha} - C_0^{\alpha}$, де C_0^{α} — середня концентрація атомів сорта α , має вигляд: $C_{\mathbf{r}'}^{\alpha} - C_0^{\alpha} = \sum_{\mathbf{k}} C_{\mathbf{k}}^{\alpha} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}'}$,

де \mathbf{k} задовольняє умовам циклічності, а $C_{\mathbf{k}}^{\alpha} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{r}'=1}^N (C_{\mathbf{r}'}^{\alpha} - C_0^{\alpha}) e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}'}$.

Нехай:

$$V(\mathbf{r}) = V^r(\mathbf{r}) + iV^i(\mathbf{r}), \quad (3.2)$$

де $V^r(\mathbf{r})$ — дійсна, а $V^i(\mathbf{r})$ — уявна частина потенціала $V(\mathbf{r})$.

Запишемо потенціал у вигляді:

$$V^f(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}} V_{\mathbf{k}}^f e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}}, \quad (3.3)$$

$\mathbf{k}/2\pi$ пробігає всі значення, що задовольняють умовам циклічності. Вираз (3.3) може описати розклад у ряд Фур'є або окремо дійсної частини $V^r(\mathbf{r})$ потенціала, тоді індекс f замінюємо на r , або уявної частини, тоді $f = i$, чи всього потенціала $V(\mathbf{r})$, тоді індекс відсутній. Із (3.3) ясно, що

$$V_{\mathbf{k}} = V_{\mathbf{k}}^r + iV_{\mathbf{k}}^i, \quad (3.4)$$

де $V_{\mathbf{k}}$ — \mathbf{k} -та компонента Фур'є від $V(\mathbf{r})$, а $V_{\mathbf{k}}^r$ і $V_{\mathbf{k}}^i$ — аналогічні компоненти відповідно від $V^r(\mathbf{r})$ і $V^i(\mathbf{r})$. При цьому для кожної із вказаних компонент справедливо

$$\begin{aligned} V_{\mathbf{k}}^f &= \sum_{\mathbf{r}', \alpha} C_{\mathbf{r}'}^{\alpha} V_{\mathbf{k}}^{f\alpha} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}'} = \sum_{\mathbf{r}', \alpha} [C_0^{\alpha} + (C_{\mathbf{r}'}^{\alpha} - C_0^{\alpha})] V_{\mathbf{k}}^{f\alpha} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}'} = \\ &= V_0^f + \sum_{\mathbf{r}', \alpha} \sum_{\mathbf{k}'} C_{\mathbf{k}'}^{\alpha} V_{\mathbf{k}}^{f\alpha} e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\mathbf{r}'} = V_0^f + \sum_{\alpha} C_{\mathbf{k}}^{\alpha} V_{\mathbf{k}}^{f\alpha} \end{aligned} \quad (3.5)$$

$$V_{\mathbf{k}}^{f\alpha} = \frac{1}{v} \int_v V^{f\alpha}(\mathbf{r}') e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}'} d\mathbf{r}', \quad (3.6)$$

де v — об'єм об'єкта.

Розв'язок Ψ рівняння Шредінгера для даної задачі слід шукати у вигляді

$$\Psi(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}} \Psi_{\mathbf{K}_0+\mathbf{k}} e^{-i(\mathbf{K}_0+\mathbf{k})\mathbf{r}}, \quad (3.7)$$

де \mathbf{K}_0 — хвильовий вектор хвилі, що проходить через об'єкт; $\Psi_{\mathbf{K}_0+\mathbf{k}}$ — амплітуди хвиль із хвильовими векторами $\mathbf{K}_0+\mathbf{k}$.

Якщо рівняння Шредінгера записати у вигляді

$$\Delta\Psi + (K^2 - V)\Psi = 0, \quad (3.8)$$

де $K^2 = 2mE/\hbar^2$; E — енергія падаючих частинок (наприклад, електронів); m — їх маса; \hbar — стала Планка, поділена на 2π ; V — помножена на $2m/\hbar^2$ потенціальна енергія взаємодії частинок з об'єктом (3.1), то, підставляючи у нього вирази (3.3), (3.5) і (3.7), можна, помноживши рівняння (3.8) на $e^{i(\mathbf{K}_0+\mathbf{k})\mathbf{r}}$, проінтегрувавши його по всьому об'єму і використовуючи при цьому ортонормування плоских хвиль $e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}$, отримати систему основних рівнянь динамічної теорії:

$$[K^2 - (\mathbf{K}_0 + \mathbf{k})^2] \Psi_{\mathbf{K}_0+\mathbf{k}} = \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}'} \Psi_{\mathbf{K}_0+\mathbf{k}-\mathbf{k}'}, \quad (3.9)$$

де \mathbf{k} пробігає всі можливі значення.

При $\mathbf{k} = 0$ рівняння (3.9) визначає амплітуду проходячої ($\Psi_{\mathbf{k}_0}$) хвилі через амплітуди всіх інших хвиль. У загальному випадку набір рівнянь (3.9) виражає амплітуди кожної із хвиль через амплітуди решти хвиль. Так, систему (3.9) зручно представити у вигляді

$$[(\mathbf{K})^2 - \mathbf{K}_0^2] \Psi_{\mathbf{K}_0} = \sum_{\mathbf{k}} V_{\mathbf{k}} \Psi_{\mathbf{K}_0 - \mathbf{k}}, \quad (3.10)$$

$$\Psi_{\mathbf{K}_0 - \mathbf{k}} = \frac{\sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}'} \Psi_{\mathbf{K}_0 - \mathbf{k} - \mathbf{k}'}}{[\mathbf{K}^2 - (\mathbf{K}_0 - \mathbf{k})^2]}. \quad (3.11)$$

Отримана нескінченна система основних рівнянь (3.9) (чи (3.10) і (3.11)), може бути розв'язана наближено у рамках теорії збурень для неперервного спектру, якщо використовувати у якості малого параметра відношення потенціальної енергії взаємодії випромінювання з об'єктом до кінетичної енергії налітаючих частинок, тобто параметр динамічної теорії розсіювання.

При нульовому наближенні теорії збурень із (3.10, 3.11) отримаємо: $[\mathbf{K}^2 - \mathbf{K}_0^{02}] \Psi_{\mathbf{K}_0}^0 = 0$. Рівність нулю виразу у квадратних дужках визначає закон дисперсії для проходячої хвилі у нульовому наближенні, тобто $(\mathbf{K}_0^0)^2 = \mathbf{K}^2$ із урахуванням граничних умов $\Psi^0(\mathbf{r}) = \Psi_{\mathbf{K}_0}^0 e^{-i\mathbf{K}\mathbf{r}}$, де $\Psi_{\mathbf{K}_0}^0$ рівно амплітуді падаючої плоскої хвилі $\tilde{\Psi}$.

У першому наближенні теорії збурень, але в нульовому для амплітуд із (3.10, 3.11) отримаємо: $[\mathbf{K}^2 - (\mathbf{K}'_0)^2] \Psi_{\mathbf{K}'_0}^0 = V_0 \Psi_{\mathbf{K}'_0}^0$, тобто $(\mathbf{K}'_0)^2 = \mathbf{K}^2 - V_0 = (\kappa)^2$ (закон дисперсії для заломленої хвилі).

З урахуванням граничних умов $(K'_{0z})^2 = K_z^2 - V_0$; $K'_{0z} = K_z + \Delta K'_{0z}$; $2K_z \Delta K'_{0z} = -V_0$; $\Delta K'_{0z} = -V_0/2K_z$, тобто $\mathbf{K}'_0 = \mathbf{K} - \frac{V_0}{2K_z} \mathbf{e}_z = \mathbf{K}_\Pi$, де \mathbf{K}_Π - хвильовий вектор заломленої хвилі. Тоді $\Psi'(\mathbf{r}) = \Psi_{\mathbf{K}_\Pi}^0 e^{-i(\mathbf{K}\mathbf{r} - \frac{V_0^r}{2K_z} z)} e^{-\frac{V_0^i}{2K_z} z}$. Таким чином, перше наближення враховує заломлення і поглинання. Це і є дисперсійний механізм формування картини динамічного розсіювання, який не враховується при кінематичному розгляді.

При цьому $\Psi(\mathbf{r}) = \Psi^0(\mathbf{r}) + \Psi'(\mathbf{r}) = \Psi_{K_0}^0 e^{-iK_0 r} + \Psi_{K_\Pi}^0 e^{-iK'_0 r}$, де $\Psi_{K_0}^0$ і $\Psi_{K_\Pi}^0$ необхідно шукати із граничних умов, які дадуть $\Psi_{K_0}^0 + \Psi_{K_\Pi}^0 = \tilde{\Psi}$ у першому наближенні теорії збурень (у нульовому для амплітуд).

Крім цього, при $V(\mathbf{r}) = V_0$, як і у загальному випадку $V(\mathbf{r}) \neq \text{const}$, у першому наближенні теорії збурень з'являється також додаткова складова (перше наближення для амплітуд) $\Psi'_{K_0+k} e^{-i(K_0+k)r}$, де Ψ'_{K_0+k} (див. (3.11), при $\mathbf{k}' = -\mathbf{k}$, $\mathbf{K}_0 = K_0^0$) має вигляд:

$$\Psi'_{K_0+k} = V_k \frac{\Psi_{K_0}^0}{[K^2 - (K_0^0 + k)^2]}. \quad (3.12)$$

Так як тепер інтенсивність визначається квадратом також і хвильових функцій (3.12), то їх врахування вимагає у свою чергу врахування дисперсійних складових другого порядку і в рівнянні для амплітуд нульового наближення (3.10).

Для врахування впливу слабких хвиль на сильні промені з точністю до квадратичних по V членів необхідно в рівняння (3.10) підставити вираз для Ψ_{K_0-k} , використовуючи замість (3.11):

$$\Psi'_{K_0-k} = V_{-k} \frac{\Psi_{K_0}^0}{[K^2 - (K - k)^2]}. \quad (3.13)$$

Вирази (3.12) і (3.13) являють собою перше наближення для амплітуд слабких хвиль. Воно враховує вплив сильної хвилі на задану Ψ_{K_0-k} хвилю. Для того, щоб врахувати з точністю до квадратичних по V членів вплив на задану хвилю всіх інших (крім сильної) хвиль, необхідно в праву частину (3.11) підставити (3.13). Якщо тепер отриманий таким чином вираз для Ψ_{K_0-k} підставити в рівняння (3.10), то отримаємо кубічні по V поправки до коефіцієнтів рівняння для сильних хвиль, обумовлені слабкими хвилями. Продовжуючи вказану ітеративну процедуру, можливо розглянути вплив слабких хвиль на сильну із точністю до членів будь-якого порядку по V . Тоді після першої ітерації, якщо в (3.10) підставити (3.13), для сильних хвиль у всьому наближенні теорії збурень (у нульовому для амплітуд, тобто вклад забезпечує тільки динамічний дисперсійний механізм) отримаємо:

$$[K^2 - (K_0'')^2 - \Delta V_0] \Psi_{K_0''}^0 = 0, \quad (3.14)$$

$$[K^2 - (K_{II}'')^2 - V_0 - \Delta V_0] \Psi_{K_{II}''}^0 = 0 \quad (3.15)$$

де

$$\Delta V_0 = \sum_k \frac{V_k V_{-k}}{[K^2 - (K-k)^2]}. \quad (3.16)$$

або

$$\Delta V_0 = \sum_k \frac{V_k V_{-k}}{[\kappa^2 - (K-k)^2]} \quad (3.17)$$

При $V(\mathbf{r}) = V_0$ (3.16) переходить у:

$$\Delta V_0 = \frac{V_0^2}{K^2 - (K_0^0)^2}, \quad (3.18)$$

а (3.17) в

$$\Delta V_0 = \frac{-V_0^2}{V_0^r + iV_0^i} = \frac{-V_0^2(V_0^r - iV_0^i)}{(V_0^r)^2 + (V_0^i)^2} = -V_0^r + iV_0^i \quad (3.19)$$

з перевищенням точності за рахунок переходу від теорії збурень по Релею–Шредінгеру до теорії збурень по Бріллюену–Вігнеру.

Амплітуди хвиль знаходяться із граничних умов на верхній в границі ($z = 0$) розділу між вакуумом і об'єктом. Точка перетину променя з цією границею застосовується у якості початку відліку по осі z , яка направлена вертикально вниз. Граничні умови мають вигляд:

$$\begin{aligned} \tilde{\Psi}(\mathbf{r})|_{z=0} &= \Psi(\mathbf{r})|_{z=0}, \\ \frac{d\tilde{\Psi}(\mathbf{r})}{dz}\Big|_{z=0} &= \frac{d\Psi(\mathbf{r})}{dz}\Big|_{z=0}, \end{aligned} \quad (3.20)$$

де $\tilde{\Psi}(\mathbf{r})$ і $\Psi(\mathbf{r})$ — хвильові функції, відповідно, у вакуумі і в об'єкті.

У випадку $V(\mathbf{r}) = \text{const} = V_0$ рівняння для проходячої і заломленої хвиль з урахуванням їх екстинкції і поглинання можуть бути представленні у вигляді (3.14), (3.15).

Нехай вісь z співпадає з нормаллю до границі розділу (площина $z = 0$), і для визначеності будемо вважати, що монохроматична рентгенівська хвиля $\Psi<(\mathbf{r})$ розповсюджується із оптично менш густого середовища ($z < 0$) в більш густе

середовище ($z > 0$). Падаючу та ту, що пройшла через границю розділу хвилі запишемо у вигляді (використовуючи інші, більш зручні позначення):

$$\Psi_{<}(\mathbf{r}) = \Psi_K e^{-iKz}, \Psi_{>}(\mathbf{r}) = \Psi_{K_0} e^{-iK_0 z}.$$

Представимо вектори \mathbf{r} , \mathbf{K} і \mathbf{K}_0 у вигляді суми тангенціальних і нормальних компонент:

$$\mathbf{r} = \mathbf{\rho} + z\mathbf{e}_z, \mathbf{K} = \mathbf{\kappa} + K_z\mathbf{e}_z, \mathbf{K}_0 = \mathbf{\kappa}_0 + K_{0z}\mathbf{e}_z.$$

При цьому для тангенса кута падіння променя (α) отримаємо:

$$\operatorname{tg}\alpha = \kappa/K_z.$$

Введемо коефіцієнти відбиття R і заломлення T , через які виразимо $\Psi_{<}(\mathbf{r})$ і $\Psi_{>}(\mathbf{r})$:

$$\Psi_{<}(\mathbf{r}) = \Psi_K e^{-i\mathbf{\kappa}\mathbf{\rho}} (e^{iK_z z} + R \cdot e^{-iK_z z}),$$

$$\Psi_{>}(\mathbf{r}) = \Psi_K e^{-i\mathbf{\kappa}_0\mathbf{\rho}} T e^{iK_{0z} z}.$$

Із умов неперервності хвильових функцій і їх похідних по z на границі розділу знаходимо

$$\mathbf{\kappa} = \mathbf{\kappa}_0, 1 + R = T, K_z(1 - R) = K_{0z}T,$$

що, звісно, приводить до формул Френеля:

$$R = \frac{K_z - K_{0z}}{K_z + K_{0z}},$$

$$T = \frac{2K_z}{K_z + K_{0z}}.$$

Однак, при цьому закон дисперсії з урахуванням екстинкційних поправок ΔV_0 має вигляд:

$$K^2 - (V_0 + \Delta V_0) = K_0^2 \text{ або } K_z^2 - (V_0 + \Delta V_0) = K_{0z}^2.$$

Співвідношення між нормальними компонентами хвильових векторів запишеться через коефіцієнт акомодатії Δ ($\ll 1$):

$$K_{0z} = K_z(1 - \Delta),$$

$$\Delta \approx \frac{V_0 + \Delta V_0}{2K_z^2}.$$

Для амплітуд відбитої и проходячої хвиль отримаємо відповідно, $\Psi_K \cdot \frac{1}{2}\Delta$ і $\Psi_K(1 + \Delta/2)$. В результаті хвильова функція, що описує заломлену хвилю всередині некристалічного об'єкта, виражається як:

$$\Psi_>(\mathbf{r}, z) = \Psi_K \left(1 + \frac{V_0 + \Delta V_0}{4K_z^2} \right) \exp \left[-i \left(\mathbf{K}\mathbf{r} - \frac{(V_0 + \Delta V_0)z}{2K_z} \right) \right]. \quad (3.21)$$

У подальшому обмежимося розгляданням найбільш простого випадку, коли $V(\mathbf{r}) = V_0 = \text{const}$, $V_0 = V_0^r + iV_0^i$. Тоді рівняння Шредінгера

$$\Delta\Psi + (K^2 - V)\Psi = 0$$

Буде в імпульсному представленні мати наступний вигляд

$$[K^2 - K_0^2]\Psi_{K_0} = V_0\Psi_{K_0}. \quad (3.22)$$

Для нескінченних об'єктів може бути знайдений точний розв'язок у вигляді заломленої хвилі. У випадку скінченних об'єктів доцільно створити теорію збурень. При цьому кінематичний розгляд дає:

$$1) \text{ у випадку } V_0 = 0; \Psi = \Psi^0 = \Psi_{K_0}^0 e^{-iK_0 r} = \Psi_K e^{-iK r},$$

де Ψ_K і \mathbf{K} відповідно амплітуда і хвильовий вектор падаючої на об'єкт хвилі.

і

$$2) \text{ при } V_0 \neq 0$$

$$[K^2 - K_0^2]\Psi'_{K_0} = V_0\Psi_{K_0}^0, \quad (3.23)$$

$$\Psi = \Psi^0 + \Psi' = \Psi_{K_0}^0 e^{-iK_0 r} + \frac{V_0}{K^2 - K_0^2} \Psi_{K_0}^0 e^{-iK_0 r},$$

$$\Psi_{K_0}^0 = \Psi_K.$$

Як видно, у рамках кінематичного розгляду рівняння (3.22) перетворюється у формулу у (3.23) і теорія збурень обмежується тільки першим наближенням і при цьому виключно для амплітуд хвильових функцій, а їх хвильові вектори задані. Таким чином, кінематичне наближення зводиться до врахування тільки однократного розсіювання і заломлення променів не описує.

При врахуванні багатократності розсіювання, на відміну від кінематичного розгляду, де вираз (3.23) є формула для визначення хвильової функції більш високих порядків теорії збурень через більш низьке, в динамічній теорії Ψ'_{K_0} і $\Psi_{K_0}^0$

замінюють на шукане Ψ_{K_0} і вираз (3.23) переходить знов у (3.22) і стає рівнянням для невідомих Ψ_{K_0} і K_0 . При $V_0 = 0$ розв'язки рівняння Шредінгера (3.22) в динамічному і кінематичному випадках співпадають. Однак, при $V_0 \neq 0$ за рахунок багатократності розсіювання аналогічно “колективізації станів” нульове наближення для амплітуд суттєво перебудовується, а поправку отримує хвильовий вектор (див. (3.22)), тобто аналогічно “зняттю виродження” на відміну від кінематичного підходу, де вплив структури здійснюється через поправку до амплітуди розсіювання, в динамічному випадку структура впливає на хвильовий вектор хвильової функції, що названо авторами робіт [83, 84, 111, 112] дисперсійним механізмом. При цьому звичайна (для ідеального кристалу) динамічна теорія збурень (вироджений або майже вироджений випадки) обмежується розгляданням тільки нульового наближення для амплітуд хвильових функцій і розкладанням за малим параметром для хвильових векторів, тобто урахуванням зміни закона дисперсії для сильних хвиль і поправок до нього за рахунок багатократності розсіювання слабких хвиль.

Динамічна теорія у кристалах з дефектами [83, 84] основана на комбінованій теорії збурень [113, 114]. Зокрема це: нульове наближення для амплітуд “сильних” бреггівських хвиль (але двоухвильове з урахуванням багатократності розсіювання на періодичній частині потенціала, яка призводить до зміни закона дисперсії і перебудови нульового наближення); перше для амплітуд дифузних хвиль (по флуктуаційній частині потенціалу, але з перебудовою за рахунок періодичної з урахуванням многократності) і друге (по флуктуаційній частині) для хвильових векторів (поправки до дисперсійного механізму впливу періодичної частини, які враховують вперше отриманий в [67] і враховані також в [111] ефект екстинкції за рахунок дифузного розсіювання).

У випадку некристалічних об'єктів для знаходження розв'язків у вигляді суми проходячої і заломленої хвиль слід шукати розкладання по малому параметру як хвильових векторів, так і амплітуд хвильових функцій, які традиційно необхідно було розглядати в рамках теорії збурень, хоча ні слабких, ні дифузних хвиль може і не бути (3.1)–(3.21). Для об'єктів достатньо великих розмірів може бути отримано

точний розв'язок тільки для однієї заломленої хвилі без описання в якому вигляді в рамках теорії збурень раніх стадій процесів формування заломленої хвилі із падаючої при малих глибинах проникнення променів.

При цьому (див. рис. 3.1):

$$\text{для } z > 0 \quad \Psi^0(\mathbf{r}) = \Psi_K e^{-iKz};$$

$$\text{для } z < 0 \quad \Psi_{K_0}(\mathbf{r}) = \Psi_{K_0} e^{-iK_0 z}, [K^2 - K_0^2] \Psi_{K_0} = V_0 \Psi_{K_0}.$$

Слід відмітити, що тут і нижче розгляд проводиться з урахуванням насамперед тільки головного (дисперсійного) механізму впливу характеристик об'єкта (V_0) на картину багатократного розсіювання, а саме, вплив тільки за рахунок зміни закона дисперсії, що описує заломлення хвилі, тобто зміну її хвильового вектора і, як наслідок, фази. При цьому на відміну від (3.21) не враховуються малі (пропорційні коефіцієнту заломлення) поправки до амплітуди хвильової функції, обумовлені як урахуванням дзеркально відбитої на граничній поверхні хвилі, так і уточненнями, що пов'язані з відмінністю граничних умов для нормальних похідних від хвильових функцій від граничних умов для самих функцій.

3.2.1. Випадок нормального падіння променя

В рамках відмічених обмежень з використанням граничних умов на вхідній поверхні $z = 0$ для хвильових векторів отримаємо (див. рис. 3.1):

$$\mathbf{K}^2 - V_0 = \mathbf{K}_0^2, \Psi_{K_0} \neq 0, \mathbf{K}_0(x, y) = \mathbf{K}(x, y) = 0, K^2 = K_z^2.$$

$$K_z^2 - V_0 = (K_{0z})^2 = K_z^2 (1 - \delta)^2,$$

$$\delta = V_0 / 2K_z^2, \quad \mathbf{K}_0 = \mathbf{K} + \frac{V_0 \mathbf{e}_z}{2K_z} = \mathbf{K} + K\delta \mathbf{e}_z,$$

де \mathbf{e}_z — одиничний вектор вздовж осі z , а δ - по суті більш зручне перепозначення для акомодатії.

Граничні умови для амплітуд хвильових функцій на вхідній поверхні дають:

$$\Psi_{K_0} \exp\left(-i\left(\mathbf{K}\mathbf{r} + \frac{V_0 z}{2K_z}\right)\right)\Big|_{z=0} = \Psi_K e^{-iKz}\Big|_{z=0}, \quad \Psi_{K_0} = \Psi_K.$$

Тоді для хвильової функції, що описує заломлену хвилю всередині некристалічного об'єкта ($z < 0$), отримаємо наступний вираз:

$$\Psi_{K_0}(\mathbf{r}) = \Psi_K \exp \left[-i \left(\mathbf{K} \mathbf{r} + \frac{V_0 z}{2K_z} \right) \right] = \Psi_K \exp [-i K_z z (1 - \delta)], \quad (3.24)$$

де $K_z = K$.

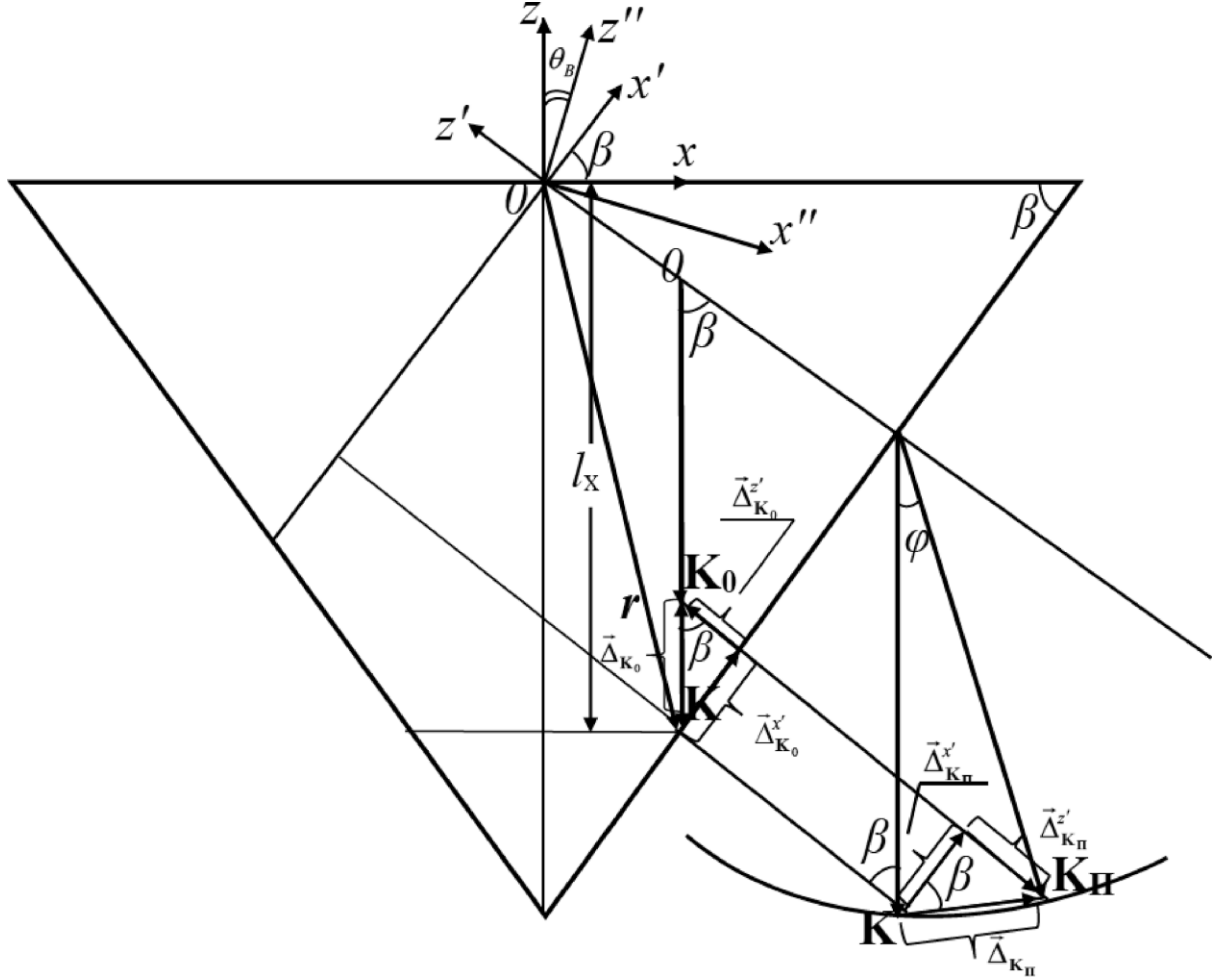


Рис. 3.1. Схема формування заломленого променя.

Для знаходження виразу для хвильової функції, що описує заломлений промінь після його виходу із некристалічного об'єкта у вакуум, розглянемо граничні умови на поверхні виходу променів із об'єкта ($z = -l_x$, де l_x — товщина об'єкта вздовж z для заданого x) у випадку, коли об'єкт має форму рівнобедреної призми з основою $2a$ і гострим кутом β при основі, як і в роботі [115] (рис. 3.1).

Знайдемо тангенційну (у площині рисунків 3 і 4, $y = 0$) і нормальну по відношенню до площини виходу складову хвильових векторів \mathbf{K} , \mathbf{K}_0 , \mathbf{K}_{II} , де \mathbf{K} — хвильовий вектор падаючої, \mathbf{K}_0 — заломлений в об'єкті і \mathbf{K}_{II} — заломлений після вихода у вакуум хвиль. При цьому $\mathbf{K}_0 = \mathbf{K} + \Delta_{K_0}$ і $\mathbf{K}_{II} = \mathbf{K} + \Delta_{K_{II}}$.

Як видно з рисунка 4:

$$K^{x'} \mathbf{e}_{x'} = -K \cos(90 - \beta) \mathbf{e}_{x'} = -K \sin \beta \mathbf{e}_{x'},$$

$$K_0^{x'} \mathbf{e}_{x'} = -K_0 \sin \beta \mathbf{e}_{x'} = -K(1 - \delta) \sin \beta \mathbf{e}_{x'},$$

$$\Delta_{K_0}^{x'} = (K_0^{x'} - K^{x'}) \mathbf{e}_{x'} = K \delta \sin \beta \mathbf{e}_{x'}.$$

При цьому тангенційні складові хвильових векторів \mathbf{K}_0 і \mathbf{K}_Π заломленої хвилі відповідно до і після її виходу у вакуум повинні бути рівні між собою. У той самий час різниця нормальних складових векторів \mathbf{K}_Π і \mathbf{K} , модулі яких рівні, а тангенціальні складові різні, буде дорівнювати

$$\Delta_{K_\Pi}^{z'} = (K_\Pi^{z'} - K^{z'}) \mathbf{e}_{z'} = -K \delta \sin \beta \operatorname{tg} \beta \mathbf{e}_{z'}.$$

Тоді для хвильової функції $\Psi_{\mathbf{K}_\Pi}(\mathbf{r}')$ заломленої хвилі у вакуумі отримаємо

$$\begin{aligned} \Psi_{K_\Pi}(\mathbf{r}') &= \Psi_{K_\Pi} \exp[-i(\mathbf{K}\mathbf{r}' + \Delta_{K_\Pi}^{x'} x' + \Delta_{K_\Pi}^{z'} z')] = \\ &= \Psi_{K_\Pi} \exp[-i(\mathbf{K}\mathbf{r}' + K \delta \sin \beta x' - K \delta \sin \beta \operatorname{tg} \beta z')], \end{aligned} \quad (3.25)$$

де Ψ_{K_Π} необхідно знайти з граничних умов для хвильових функцій на поверхні виходу.

Слід відмітити, що розв'язок (3.25), знайдено в новій системі координат $\{z', x'\}$, яка отримана поворотом старої (початкової) $\{z, x\}$ на кут β (див. рис. 3.1)

$l_x = (a - x) \operatorname{tg} \beta$, $\mathbf{r} = x \mathbf{e}_x - l_x \mathbf{e}_z$, $y = 0$, $\mathbf{r} = \{x, 0, -l_x\}$ (на поверхні виходу),

$$\mathbf{r}' = \mathbf{r} = x \mathbf{e}_x - l_x \mathbf{e}_z = x' \mathbf{e}_{x'} + z' \mathbf{e}_{z'},$$

де $\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_z, \mathbf{e}_{x'}, \mathbf{e}_{z'}$ — одиничні вектори вздовж відповідних осей координат.

В системі координат $\{z, x\}$ формула (3.25) набуває вигляду:

$$\begin{aligned} \Psi_{K_\Pi}(\mathbf{r}) &= \Psi_{K_\Pi} \exp[-i(\mathbf{K}\mathbf{r} + \Delta_{K_\Pi}^x x + \Delta_{K_\Pi}^z z)] = \\ &= \Psi_{K_\Pi} \exp[-i(\mathbf{K}\mathbf{r} + K \delta \operatorname{tg} \beta x)] = \Psi_{K_\Pi} e^{-iK_\Pi r}, \end{aligned} \quad (3.26)$$

де $\Delta_{K_\Pi}^x = K \delta \operatorname{tg} \beta$, $\Delta_{K_\Pi}^z = 0$ (див. рис. 3.1).

Як видно з рис. 3.1 кут повороту φ вектора \mathbf{K}_Π по відношенню до вектора \mathbf{K} рівний:

$$\varphi = \left(K \delta \sin \beta \frac{1}{\cos \beta} \right) / K = \delta \operatorname{tg} \beta. \quad (3.27)$$

Слід зазначити, що формула (3.27) справедлива для $x > 0$, а у випадку $x < 0$ формула (3.27) набуває вигляду:

$$\varphi = -\delta \operatorname{tg} \beta.$$

Для знаходження амплітуди $\Psi_{K\Pi}$ із граничних умов на межі виходу із об'єкта доцільно хвильову функцію для заломленої хвилі всередині об'єкта (3.24) представити у новій системі координат $\{\mathbf{r}'\} \sim \{x', z'\}$.

При цьому отримаємо:

$$\begin{aligned}\Psi_{K_0}(\mathbf{r}') &= \Psi_K \exp[-i(K_x x' + K_z z' + K\delta \mathbf{e}_z \mathbf{r}')] = \\ &= \Psi_K \exp[-iK(-\sin \beta x' - \cos \beta z' + \delta \sin \beta x' + \delta \cos \beta z')] = \\ &= \Psi_K \exp[iK(1 - \delta)(x' \sin \beta + z' \cos \beta)] = \\ &= \Psi_K \exp[-i(\mathbf{K}\mathbf{r}' + K\delta(x' \sin \beta + z' \cos \beta))].\end{aligned}\quad (3.28)$$

Граничні умови для амплітуд на границі виходу мають вигляд:

$$\Psi_{K_0}(\mathbf{r}')|_{z' = -(a-x) \sin \beta} = \Psi_{K\Pi}(\mathbf{r}')|_{z' = -(a-x) \sin \beta}. \quad (3.29)$$

Тоді:

$$\begin{aligned}\Psi_{K\Pi} \exp[-i(\mathbf{K}\mathbf{r}' + K \sin \beta \delta(x' - z' \operatorname{tg} \beta))]|_{z' = -(a-x) \sin \beta} &= \\ = \Psi_K \exp[-i(\mathbf{K}\mathbf{r}' + K\delta(x' \sin \beta + z' \cos \beta))]|_{z' = -(a-x) \sin \beta}; \\ \Psi_{K\Pi} &= \Psi_K \exp[-iK\delta(x' \sin \beta - (a-x) \sin \beta \cos \beta - \sin \beta x' - \\ &\quad - \sin \beta \operatorname{tg} \beta (a-x) \sin \beta)]\end{aligned}$$

або

$$\begin{aligned}\Psi_{K\Pi} &= \Psi_K \exp[-i(a-x) \sin \beta (\Delta_{K\Pi}^{z'} - \Delta_{K_0}^{z'})] = \\ &= \Psi_K \exp[iK\delta(a-x) \sin \beta \cos \beta (1 + \operatorname{tg}^2 \beta)] = \Psi_K e^{iK\delta l_x},\end{aligned}$$

де $\Delta_{K_0}^{z'} = K\delta \cos \beta$, а $\Delta_{K\Pi}^{z'} = -K\delta \sin \beta \operatorname{tg} \beta$ (див. рис. 3.1).

Підставляючи знайдені вирази для $\Psi_{K\Pi}$ в формулу (3.26) отримаємо:

$$\begin{aligned}\Psi_{K\Pi}(\mathbf{r}) &= \Psi_K e^{-iK\mathbf{r}} \exp[-iK\delta(x \operatorname{tg} \beta - \\ &\quad - (a-x) \sin \beta \cos \beta (1 + \operatorname{tg}^2 \beta))] = \Psi_K e^{-iK\mathbf{r}} e^{\Phi},\end{aligned}\quad (3.30)$$

де додаткова фаза за рахунок заломлення $\Phi = -iK\delta[x \operatorname{tg} \beta - (a-x) \sin \beta \cos \beta (1 + \operatorname{tg}^2 \beta)] = -iK\delta[x \operatorname{tg} \beta - l_x]$. Тут $l_x = (a-x) \operatorname{tg} \beta$, а множник $\exp[-iK\delta x \operatorname{tg} \beta]$ описує поворот променя по відношенню до падаючого на кут φ (див. (3.27)), і $\mathbf{K}\mathbf{r} = Kz$, при виборі напрямку осі z паралельним \mathbf{K} . При цьому також

$$\Psi_{K\Pi}(\mathbf{r}) = \Psi_K e^{-iK\Pi r} \exp[iK l_x \delta] = \Psi_K e^{-iK\Pi r} e^{\Phi\Pi}, \quad (3.31)$$

де $\Phi_{\Pi} = iK\delta l_x$, $|K_{\Pi}| = |K|$, а напрямок вектора \mathbf{K}_{Π} відрізняється від напрямка \mathbf{K} на кут φ .

У випадку плоскопаралельної форми об'єкта $\beta = 0$ і тоді в області Π з урахуванням поглинання і вибором системи координат ($z \parallel \mathbf{K}$) вираз (3.30) для хвильової функції променя, що виходить після заломлення набуває вигляду:

$$\Psi_{K_{\Pi}}(\mathbf{r}) = \Psi_K e^{-iKz} e^{-\mu_2 l_x}, \quad (3.32)$$

де μ_2 — коефіцієнт поглинання в об'єкті, а l_x — його товщина вздовж осі z для координати входу променя x .

Отриманий результат показує, що у випадку плоскопаралельної форми об'єкта механізм формування контрасту за рахунок заломлення не працює, так як у цьому випадку кут повороту φ і фази Φ і Φ_{Π} виявляються рівними нулю.

Отримані результати строго обґрунтовують формули, що евристично для найбільш простого випадку запропоновані у [115]. Однак побудована у даній роботі теоретична модель дозволяє узагальнити ці результати на практично всі необхідні випадки на відміну від моделі [115].

Слід відмітити, що розв'язки (3.30) і (3.31) отримані в системі координат $\{x, y, z\}$, що пов'язана з монохроматором, тобто із першою віссю трьохосової системи, де z вибрано перпендикулярним поверхні монохроматора (див. рис. 1.8, 3.1). Для зручності подальшого використання розв'язки (3.30), (3.31) доцільно представити також в системах координат $\{x', y', z'\}$ і $\{x'', y'', z''\}$, які пов'язані відповідно із об'єктом (друга вісь) і з аналізатором (третя вісь), а їх базисні вектори \mathbf{e}_z і \mathbf{e}_z направлені відповідно перпендикулярно поверхні виходу променів із об'єкта і поверхні аналізатора (див. рис. 1.8, 3.1).

Підставляючи у (3.25) вирази для $\Psi_{K_{\Pi}}$, отримаємо

$$\Psi_{K_{\Pi}}(\mathbf{r}') = \Psi_K e^{-iK r'} \exp\{iK\delta[l_x - x' \sin \beta + z' \sin \beta \operatorname{tg} \beta]\}, \quad (3.33)$$

або

$$\Psi_{K_{\Pi}}(\mathbf{r}') = \Psi_K e^{-iK_{\Pi} r'} \exp\{iK\delta[l_x + x \operatorname{tg} \beta - x' \sin \beta + z' \sin \beta \operatorname{tg} \beta]\}. \quad (3.34)$$

При цьому

$$\Psi_{K_{\Pi}}(\mathbf{r}'') = \Psi_K e^{-iK r''} \exp\{iK\delta[l_x - \operatorname{tg} \beta (x'' \cos \theta_B + z'' \sin \theta_B)]\}, \quad (3.35)$$

або

$$\Psi_{K_{\Pi}}(\mathbf{r}'') = \Psi_K e^{-iK_{\Pi} r''} \exp\{iK\delta[l_x + \operatorname{tg}\beta(x - x'' \cos \theta_B - z'' \sin \theta_B)]\}. \quad (3.36)$$

3.2.2. Випадок довільного кута α_1 падіння променя на поверхню об'єкта

Тут:

$$\Delta_{K_0} = K\delta, \quad \Delta_{K_0}^z = K\delta \cos(\alpha_1 + \alpha_2), \quad \Delta_{K_0}^x = K\delta \sin(\alpha_1 + \alpha_2) = \Delta_{K_{\Pi}}^x.$$

Тоді:

$$\Delta_{K_{\Pi}} = \Delta_{K_{\Pi}}^x / \cos \alpha_2 = K\delta \sin(\alpha_1 + \alpha_2) / \cos \alpha_2,$$

$$\Delta_{K_{\Pi}}^z = -K\delta \sin(\alpha_1 + \alpha_2) \operatorname{tg} \alpha_2.$$

При цьому:

$$K_0^2 - K^2 = -V_0, \quad (\mathbf{K} + K\delta \mathbf{e}_{z'})^2 - K^2 = -V_0, \quad 2K^2\delta \cos(\pi - \alpha_1) = -V_0, \quad \delta = \frac{V_0}{2K^2 \cos \alpha_1}$$

або іншим способом

$$(K - K\delta \cos \alpha_1)^2 - K^2 = -V_0, \quad -2K^2\delta \cos \alpha_1 = -V_0,$$

і тоді знов отримуємо

$$\delta = \frac{V_0}{2K^2 \cos \alpha_1}.$$

Як слідує із рис. 3.2, кут повороту φ заломленого променя у вакуумі рівен:

$$\varphi = \Delta_{K_{\Pi}}/K = \frac{K\delta \sin(\alpha_1 + \alpha_2)}{K \cos \alpha_2} = \frac{V_0 \sin(\alpha_1 + \alpha_2)}{2K^2 \cos \alpha_1 \cos \alpha_2}. \quad (3.37)$$

Слід відмітити, що всі кути на рис. 3.2 відраховуються від напрямку осі z проти годинникової стрілки. При цьому формула (3.37) отримана вже з урахуванням знаків кутів.

Граничні умови для амплітуд хвильових функцій на вхідній поверхні дають:

$$\Psi_{K_0} \exp\left(-i(\mathbf{K}\mathbf{r}' + \frac{V_0 z'}{2K_{z'}})\right) \Big|_{z'=0} = \Psi_K e^{-iKz'} \Big|_{z'=0}, \quad \Psi_{K_0} = \Psi_K,$$

де $K_{z'} = K \cos \alpha_1$.

Тоді для хвильової функції, що описує заломлену хвилю всередині некристалічного об'єкта ($z' < 0$), отримаємо наступний вираз:

$$\Psi_{K_0}(\mathbf{r}') = \Psi_K \exp\left[-i\left(\mathbf{K}\mathbf{r}' + \frac{V_0 z'}{2K_{z'}}\right)\right] = \Psi_K \exp[-i(\mathbf{K}\mathbf{r}' + K\delta z')]. \quad (3.38)$$

Для того, щоб знайти вираз для хвильової функції, яка описує заломлений промінь після виходу з некристалічного об'єкта у вакуум, розглянемо граничні умови на поверхні виходу променів з об'єкта.

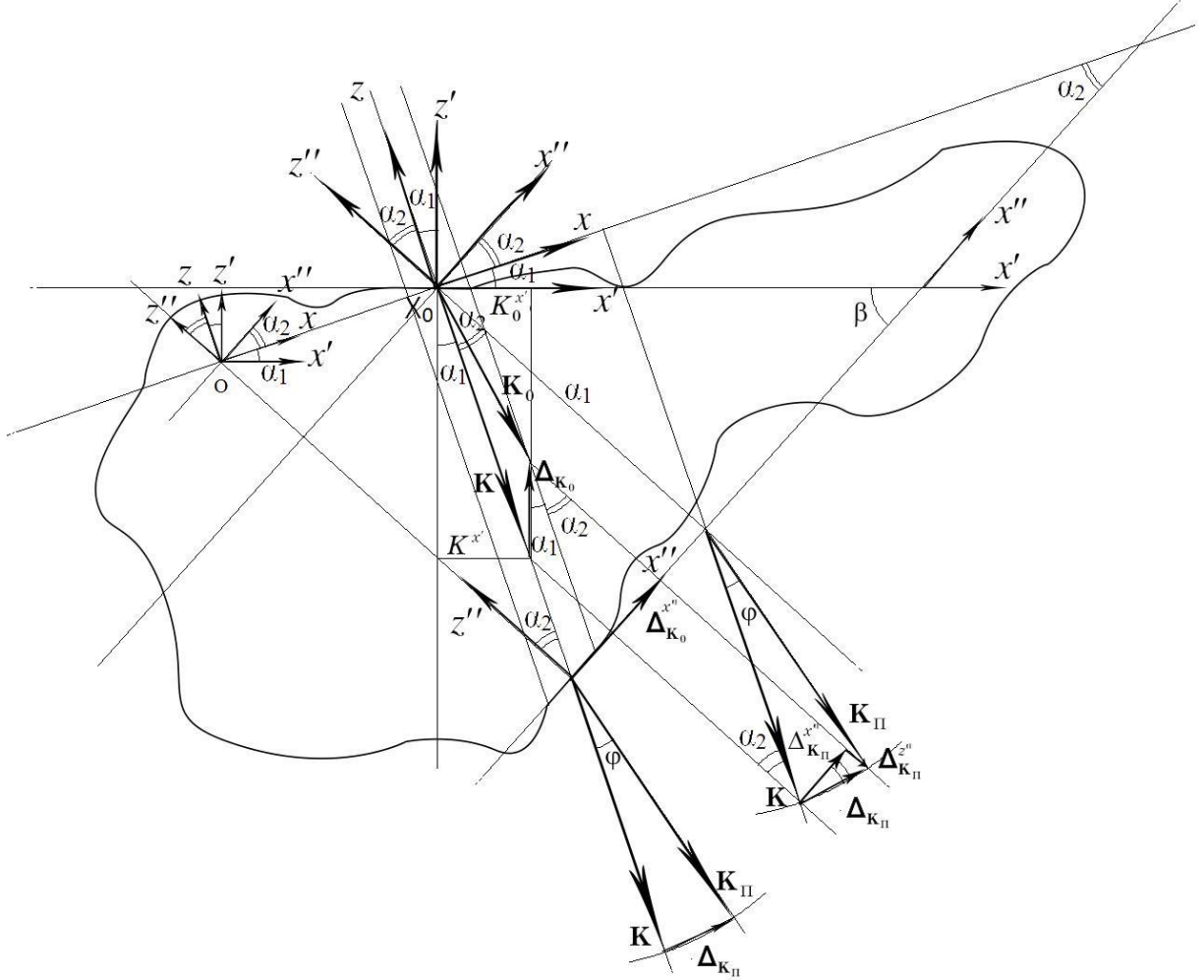


Рис. 3.2 Схема загального випадку формування заломленого променя.

Тоді для хвильової функції $\Psi_{K_{\Pi}}(\mathbf{r}'')$ заломленої хвилі у вакуумі отримаємо

$$\begin{aligned} \Psi_{K_{\Pi}}(\mathbf{r}'') &= \Psi_{K_{\Pi}} \exp[-i(\mathbf{K}\mathbf{r}'' + \Delta_{K_{\Pi}}^{x''}x'' + \Delta_{K_{\Pi}}^{z''}z'')] = \\ &= \Psi_{K_{\Pi}} \exp[-i(\mathbf{K}\mathbf{r}'' + K\delta \sin(\alpha_1 + \alpha_2)x'' - K\delta \sin(\alpha_1 + \alpha_2)\text{tg}\alpha_2 z'')], \end{aligned} \quad (3.39)$$

де $\Psi_{K_{\Pi}}$ необхідно знайти з граничних умов для хвильової функції на поверхні виходу.

Слід відмітити, що розв'язок (3.39) знайдено в новій системі координат $\{z'', x''\}$, яка отримана шляхом повороту старої (вихідної) $\{z, x\}$ на кут α_2 (див. рис. 3.2).

В системі координат $\{z, x\}$ формула (3.39) набуває вигляду:

$$\begin{aligned}\Psi_{K_{II}}(\mathbf{r}) &= \Psi_{K_{II}} \exp[-i(\mathbf{K}\mathbf{r} + \Delta_{K_{II}}^x x + \Delta_{K_{II}}^z z)] = \\ &= \Psi_{K_{II}} \exp[-i(\mathbf{K}\mathbf{r} + K\delta \frac{\sin(\alpha_1 + \alpha_2)}{\cos \alpha_2} x)],\end{aligned}\quad (3.40)$$

де $\Delta_{K_{II}}^x = K\delta \sin(\alpha_1 + \alpha_2)/\cos \alpha_2$, $\Delta_{K_{II}}^z = 0$, $\mathbf{K}\mathbf{r} = Kz$ (див. рис. 3.2).

Для знаходження амплітуди $\Psi_{K_{II}}$ з граничних умов на межі виходу випромінювання з об'єкта доцільно виразити хвильову функцію для заломленої хвилі всередині об'єкта (3.38) в новій системі координат $\{\mathbf{r}''\} \sim \{x'', z''\}$.

При цьому отримаємо:

$$\begin{aligned}\Psi_{K_0}(\mathbf{r}'') &= \Psi_K \exp[-i(K_x'' x'' + K_z'' z'' + \Delta_{K_0}^x x'' + \Delta_{K_0}^z z'')] = \\ &= \Psi_K \exp[-iK(-\sin \alpha_2 x'' - \cos \alpha_2 z'' + \delta \sin(\alpha_1 + \alpha_2)x'' + \delta \cos(\alpha_1 + \alpha_2)z'')] = \\ &= \Psi_K \exp[-i(\mathbf{K}\mathbf{r}'' + K\delta(x'' \sin(\alpha_1 + \alpha_2) + z'' \cos(\alpha_1 + \alpha_2)))].\end{aligned}\quad (3.41)$$

Граничні умови для амплітуд на межі виходу мають вигляд:

$$\Psi_{K_0}(\mathbf{r}'')|_{z''=-l_{x_0} \cos \alpha_2} = \Psi_{K_{II}}(\mathbf{r}'')|_{z''=-l_{x_0} \cos \alpha_2}, \quad (3.42)$$

де l_{x_0} — товщина об'єкта вздовж z для заданого $x = x_0$.

Тоді:

$$\begin{aligned}&\Psi_{K_{II}} \exp[-i(\mathbf{K}\mathbf{r}'' + K \sin(\alpha_1 + \alpha_2)\delta(x'' - z'' \operatorname{tg} \alpha_2))]|_{z''=-l_{x_0} \cos \alpha_2} = \\ &= \Psi_K \exp[-i(\mathbf{K}\mathbf{r}'' + K\delta(x'' \sin(\alpha_1 + \alpha_2) + z'' \cos(\alpha_1 + \alpha_2)))]|_{z''=-l_{x_0} \cos \alpha_2}; \\ &\Psi_{K_{II}} = \Psi_K \exp[-iK\delta(x'' \sin(\alpha_1 + \alpha_2) - l_{x_0} \cos \alpha_2 \cos(\alpha_1 + \alpha_2) - \\ &\quad - \sin(\alpha_1 + \alpha_2)x'' - \sin(\alpha_1 + \alpha_2)\operatorname{tg} \alpha_2 l_{x_0} \cos \alpha_2)]\end{aligned}$$

або

$$\begin{aligned}\Psi_{K_{II}} &= \Psi_K \exp[-il_{x_0} \cos \alpha_2 (\Delta_{K_{II}}^z - \Delta_{K_0}^z)] = \\ &= \Psi_K \exp[iK\delta l_{x_0} \cos \alpha_2 \cos(\alpha_1 + \alpha_2)(1 + \operatorname{tg} \alpha_2 \operatorname{tg}(\alpha_1 + \alpha_2))],\end{aligned}$$

де $\Delta_{K_0}^z = K\delta \cos(\alpha_1 + \alpha_2)$, а $\Delta_{K_{II}}^z = -K\delta \sin(\alpha_1 + \alpha_2)\operatorname{tg} \alpha_2$ (див. рис. 3.2).

Підставивши знайдені вирази для $\Psi_{K_{II}}$ у формулу (3.40) отримаємо:

$$\Psi_{K_{II}}(\mathbf{r}) = \Psi_K e^{-iKz} \exp[-iK\delta \left(x \frac{\sin(\alpha_1 + \alpha_2)}{\cos \alpha_2} - l_{x_0} \cos \alpha_2 \cos(\alpha_1 + \alpha_2) \right) \times$$

$$\times (1 + \operatorname{tg} \alpha_2 \operatorname{tg}(\alpha_1 + \alpha_2)) = \Psi_K e^{-iKr} e^\Phi, \quad (3.43)$$

де додаткова фаза за рахунок заломлення:

$$\Phi = -iK\delta[x \sin(\alpha_1 + \alpha_2)/\cos \alpha_2 - l_{x_0} \cos \alpha_2 \cos(\alpha_1 + \alpha_2)(1 + \operatorname{tg} \alpha_2 \operatorname{tg}(\alpha_1 + \alpha_2))]$$

Тут множник $\exp[-iK\delta x \sin(\alpha_1 + \alpha_2)/\cos \alpha_2]$ описує поворот променя по відношенню до падаючого на кут φ (см. (3.36)), а $Kr = Kz$, при виборі напрямку осі z паралельним до \mathbf{K} . При цьому також:

$$\begin{aligned} \Psi_{K_{\Pi}}(\mathbf{r}) &= \Psi_K e^{-iK_{\Pi}r} \exp\{-i[l_{x_0} \cos \alpha_2 (\Delta_{K_{\Pi}}^z - \Delta_{K_0}^z)]\} = \\ &= \Psi_K e^{-iK_{\Pi}r} \exp[i l_{x_0} \cos \alpha_2 K \delta \{\sin(\alpha_1 + \alpha_2) \operatorname{tg} \alpha_2 + \cos(\alpha_1 + \alpha_2)\}], \end{aligned} \quad (3.44)$$

де $\mathbf{K}_{\Pi} = K\mathbf{e}_z + \Delta_{K_{\Pi}}\mathbf{e}_x$ і $|\mathbf{K}_{\Pi}| = |\mathbf{K}|$, а напрямки векторів \mathbf{K}_{Π} і \mathbf{K} відрізняються на кут φ .

3.3. Тривісьова модель формування зображень некристалічних об'єктів

У попередніх розділах було представлено теорію взаємодії випромінення із кристалами та некристалічними об'єктами. При цьому зображення, що формується у АВІ методі є результатом поступового проходження променя через кристал (або декілька кристалів) монохроматор, некристалічний досліджуваний об'єкт та кристал аналізатор, що потребує більш детального опису розрахунку відбивальних здатностей відповідних елементів оптичної схеми.

При використанні, для прикладу, бездисперсійної тривісьової схеми з геометрією дифракції за Бреггом в монохроматорі та за Лауе в аналізаторі відбивальні здатності системи для областей I і II з урахуванням поглинання і можливої присутності дефектів у монохроматорі і аналізаторі можна записати у вигляді:

$$R_i(\Delta\theta) = \int R_M(\kappa) R_A(\kappa - \Delta\theta - \varphi_i) R_{об}(\kappa, \varphi_i, \mu_i, l_x, \Phi_i) d\kappa \quad (i = I, II), \quad (3.45)$$

де:

$$\begin{aligned} R_M(\kappa) &= b_M^{-1} R_{coh}^M(b_M^{-1}\kappa) + \int r_{dif}^M(\kappa', \kappa) d\kappa', \\ R_A(\kappa, \Delta\theta) &= R_{coh}^A(\kappa - \Delta\theta - \varphi_i(x, y)) + R_{dif}^A(\kappa - \Delta\theta - \varphi_i(x, y)), \\ r_{dif}(\kappa', \kappa) &= r_{dif}(\mathbf{k}) = \frac{1}{k} \int dk_y R_{dif}(\mathbf{k}), \end{aligned}$$

$$R_{\text{dif}}(\mathbf{k}) = \frac{\langle |f(\mathbf{k}', \mathbf{k})|^2 \rangle}{\gamma_0 S |E_0|^2},$$

$$R_{\text{dif}}(x) = \int d\Omega_{\mathbf{k}} R_{\text{dif}}(\mathbf{k}).$$

Відбивальна здатність об'єкта $R_{\text{об}}(x, \varphi_i, \mu_i, l_i, \Phi_i)$ визначається із використанням отриманих у розділі 3 формул (3.30), (3.31), (3.33)–(3.36), (3.43), (3.44).

При цьому фактори поглинання $e^{-\mu_i}$ і заломлення $e^{-\Phi_i}$ визначаються в загальному випадку неоднорідних об'єктів використовуючи наступні формули:

$$\mu_1^{x_I y_I} = \int \mu_1(\mathbf{r}) dS_1^I, \Phi_1^{x_I y_I} = - \int ik \delta_1(\mathbf{r}) dS_1^I,$$

$$\mu_1^{x_{II} y_{II}} = \int \mu_1(\mathbf{r}) dS_1^{II}, \Phi_1^{x_{II} y_{II}} = - \int ik \delta_1(\mathbf{r}) dS_1^{II},$$

$$\mu_2^{x_{II} y_{II}} = \int \mu_2(\mathbf{r}) dS_2^{II}, \Phi_2^{x_{II} y_{II}} = - \int ik \delta_2(\mathbf{r}) dS_2^{II}.$$

Кут повороту заломленого променя φ_i визначається формулою (3.27) для розглянутого випадку нормального падіння променя на об'єкт у формі призми (рис. 3.1).

В загальному випадку об'єкта довільної форми φ залежить від x та y і визначається відповідними їм кутами повороту вхідної і вихідної поверхонь колонки по відношенню до напрямку променя (див. (3.37)). Цими кутами $\varphi(x, y)$ і фазами Φ або Φ_{II} по суті описуються зміни фронту плоских хвиль в наборі колонок.

Більш детально вирази для R_M і R_A , що встановлюють зв'язок з характеристиками дефектів наведено у [83, 84].

В простому випадку однорідних $\delta_1(\mathbf{r})$ і $\delta_2(\mathbf{r})$, $\mu_1(\mathbf{r})$ і $\mu_2(\mathbf{r})$, використовуються результати динамічної теорії розсіювання в некристалічних об'єктах [111, 112], а також результати, отримані в даній роботі та в роботі [115], легко знайти:

$$\mu_1^{x_I y_I} = \mu_1 z^{x_I y_I}, \Phi_1^{x_I y_I} = -ik \delta_1 z^{x_I y_I},$$

$$\mu_1^{x_{II} y_{II}} = \mu_1 (z^{x_{II} y_{II}} - t^{x_{II} y_{II}}), \Phi_1^{x_{II} y_{II}} = -ik \delta_1 (z^{x_{II} y_{II}} - t^{x_{II} y_{II}}),$$

$$\mu_2^{x_{II} y_{II}} = \mu_2 t^{x_{II} y_{II}}, \Phi_2^{x_{II} y_{II}} = -ik \delta_2 t^{x_{II} y_{II}}, \text{ де } t^{x_{II} y_{II}} = l_x$$

В подальшому обмежимося випадком, коли в якості найпростішого модельного об'єкта, як і в роботі [115], розглянута рівнобедрена призма з основою

$2a$ і гострим кутом β при основі. Рентгенівський пучок падає перпендикулярно до основи призми. В області $|x''| \leq a/\gamma$, де $\gamma = \cos\theta_B$, фактор ослаблення у призмі $\mu_s = \mu_2' l_2$, фаза $\Phi_2 = -ik\delta_2 l_2$, де $l_2(x'') = (a - \gamma x'')\text{tg}\beta$. В області I ($|x''| > a/\gamma$) $\mu_1 = \mu_1 l_1$, $\Phi_1 = -ik\delta_1 l_1$. Сумарний фактор ослаблення променя в області II $\mu_{II} = \mu_2 l_2 + \mu_1 l_1$, а фаза $\Phi_{II} = -ik[\delta_2 l_2 + \delta_1 l_1]$. Тут $l_1(x, y)$ — довжина променів поза призмою, а $l_2(x, y)$ — всередині.

У випадку, розглянутому в роботі [115], коли об'єкт у вигляді призми знаходиться у вакуумі, ззовні призми ($|x''| > a/\gamma$) $\mu_1 = 0$, $\Phi_1 = 0$, $\delta_1 = 0$, $l_1 = 0$. В результаті заломлення пучок окрім променя, що проходить, розщеплюється ще на два променя, які відхиляються на кут $\varphi_2^1 = (k\gamma)^{-1}(d\Phi_2/dx'') = \delta\text{tg}\beta$ [115] в області $0 < x'' < a/\gamma$ і $\varphi_2^2 = -\delta\text{tg}\beta$ при $-a/\gamma < x'' < 0$ (див. роботи [115, 112]). У відповідності до рис. 3.1.

$$\varphi^\mp = \frac{\Delta K}{K} \text{tg}\beta = \mp \delta \text{tg}\beta.$$

При цьому $x'' = x/\gamma$. Якщо кристал-аналізатор повернутий на певний кут $\Delta\theta$, то зображення призми буде визначатися величинами R_A в точках $\Delta\theta \pm |\varphi| = \Delta\theta \pm \delta\text{tg}\beta$.

У випадку, коли кристали монохроматора і аналізатора не мають дефектів і являються ідеальними, ця теорія описує результати, отримані в [115]. Проте на відміну від [115] даний підхід не лише забезпечує можливість строгого врахування ефектів багатократності розсіювання в самому об'єкті, але дозволяє описати випадки із спотвореннями в монохроматорі і аналізаторі.

В результаті побудованої теорії якісно враховані обидва основних механізми формування контрасту зображення. Перший відповідає за формування заломленого в об'єкті та повернутого в результаті відмінних на вході і виході граничних умов променя, а також за зміну його фази. Другий - за відмінні підсилення заломленого і опорного променів кристалом-аналізатором. При цьому саме перший механізм безпосередньо несе шукану інформацію про форму і розміри. Якщо обмежитись як і в [115] випадком, коли і монохроматор і аналізатор це ідеальні досконалі кристали, то отримані в даному розділі формули дозволяють легко розв'язати обернену задачу

по відтворенню із вимірених величин R_I та R_{II} шуканих параметрів об'єкта. В дійсності, як видно із формул при наперед визначених (як правило загальновідомих) величинах δ_1 , δ_2 , μ_1 і μ_2 та при відомих відбивальних здатностях монокристалів монохроматора і аналізатора єдиними параметрами залишаються товщина t^y та кут при основі призми, які можуть бути встановлені із застосуванням отриманих формул.

Із побудованої моделі також випливає, що таку обернену задачу принципово неможливо точно розв'язати за відсутності адекватного врахування (кількісного опису вкладу другого із вищезазначених механізмів) спотворень у кристалах аналізатора і монохроматора, що у моделі в [115] не враховувались.

Проте модель, описана у [115] і не дозволяла врахувати це, оскільки заснована на наближенні динамічної теорії Такагі, яка придатна до застосування лише для ідеальних слабковигнутих кристалів, але без мікродефектів.

У роботах [83-84] в рамках строгої динамічної теорії показано, що мікродефекти можуть (за рахунок встановленого дисперсійного механізму їх впливу) на порядки величини змінювати відбивальні здатності кристалів із динамічним розсіюванням, а нехтування цього факту може повністю нівелювати адекватність діагностики на основі заломлення.

3.4. Ітеративна процедура узагальнення

Результати попереднього розділу стосувались взаємодії випромінювання із простим (одношаровим) некристалічним об'єктом. В даному розділі представлено ітеративну процедуру узагальнення одержаних результатів на випадок багат шарового об'єкту із довільною кількістю шарів.

3.4.1. Граничні умови

Розглянемо сканування багат шарового об'єкта потоком високо-енергетичних нейтронів. Тоді можна записати рівняння Шредінгера:

$$\Delta\Psi + (K_0^2 - V)\Psi = 0 \quad (3.46)$$

Можна показати, що у випадку рентгенівського випромінення рівняння Максвелла в імпульсному просторі будуть мати той самий вигляд (з точністю до позначень) що і рівняння Шредінгера.

Розв'язок рівняння в імпульсному просторі можна записати у вигляді:

$$\Psi(\mathbf{r}) = \int \Psi_{K_n} e^{iK_n \mathbf{r}} dK_n \quad (3.47)$$

Тоді рівняння (3.46) для i -го шару набуде вигляду

$$[K_0^2 - K_i^2] \Psi_{K_i} = V_i \Psi_{K_i}, \quad (3.48)$$

де V_i це потенціал взаємодії між речовиною і випроміненням, K_x, K_y, K_z можуть змінюватись в діапазоні $\{-\infty, +\infty\}$.

Коли зовнішнє середовище це повітря, потенціал його взаємодії із випроміненням дуже малий, тому наближено можна записати $V_0 = 0$. Кожна має кут нахилу α_i до осі 'x'. Цей кут рівний куту між напрямком падаючого променя \mathbf{K}_0 і внутрішньою нормаллю відповідної площини \mathbf{e}_i (рис.3.3). Кути відкладаються проти годинникової стрілки, тому α_i менше нуля.

Позначимо хвильовий вектор падаючого променя \mathbf{K}_0 , а певний промінь після заломлення відповідно \mathbf{K}_i . Тоді кут падіння променя \mathbf{K}_{i-1} на i -ту поверхню буде рівний $(\varphi_{i-1} + \alpha_i)$, де φ_{i-1} це кут між променями \mathbf{K}_{i-1} і \mathbf{K}_0 . Він включає зміну напрямку хвильового вектора на всіх попередніх кроках рефракції і для першої площини рівний нулю. Після заломлення хвильовий вектор буде відхилений від попереднього напрямку на кут γ_i . Індекс i показує відповідну речовину і отже потенціал взаємодії, та визначає номер поверхні та кута α_i . Слід зазначити, що всі розрахунки залишаються вірними для негативних кутів. Знаки кутів γ_i автоматично впливають із різниці потенціалів $V_i - V_{i-1}$ на межі розділу двох речовин.

Межові умови для хвильового вектора при проходженні через першу поверхню можна записати як:

$$K_0^2 - K_1^2 = V_1 \quad (3.49)$$

$$K_0^2 - K_1^2 = V_1 \quad (3.50)$$

$$K_{1\perp} = K_{0\perp} + \Delta K_1, \quad (3.51)$$

де індекси \perp і \parallel позначають відповідно перпендикулярні і паралельні до площини між шарами компоненти векторів.

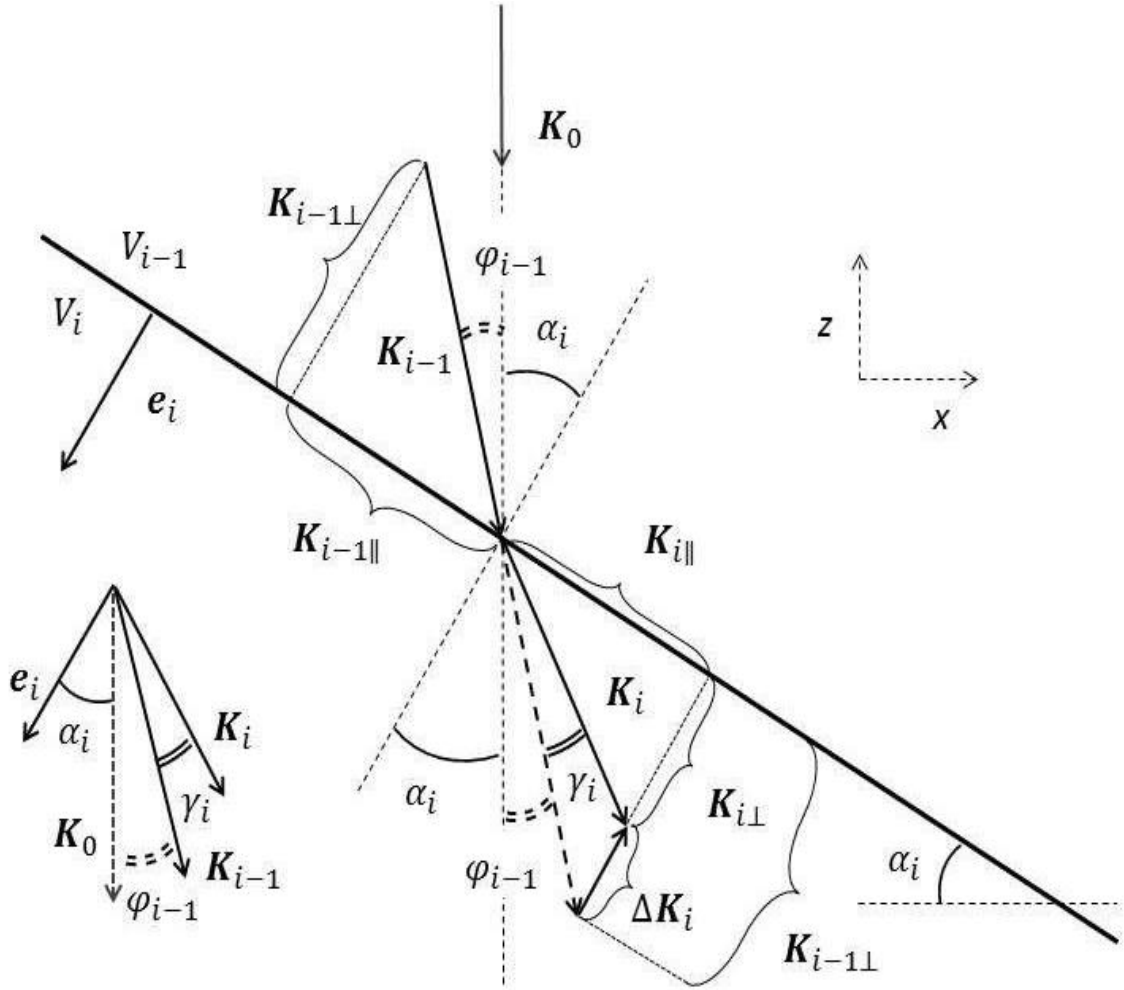


Рис. 3.3. Межові умови, заломлення на площині.

Розв'язок рівнянь (3.49)–(3.51) близький до того, що описано в [90]. Узагальнення рівнянь для багат шарового випадку із врахуванням граничних умов для кожної наступної поверхні можна отримати наступним чином:

$$K_i^2 - K_{i+1}^2 = V_{i+1} - V_i \quad (3.52)$$

$$K_{i+1\parallel} = K_{i\parallel} \quad (3.53)$$

$$K_{i+1\perp} = K_{i\perp} + \Delta K_{i+1} \quad (3.54)$$

$$K_{i+1} = K_i + K_0 \delta_{i+1} e_{i+1} \quad (3.55)$$

$$K_{i+1}^2 = K_i^2 + K_0^2 \delta_{i+1}^2 + 2K_0 \delta_{i+1} K_i \cos(\alpha_{i+1} + \varphi_i), \quad (3.56)$$

де \mathbf{e}_i це вектор нормалі до поверхні, δ_i - малий коефіцієнт. Далі із (3.52) можна отримати:

$$K_{i+1}^2 = K_i^2 + (V_i - V_{i+1}) \approx K_i^2 \left(1 + \frac{(V_i - V_{i+1})}{2K_i^2} \right)^2 \approx K_i^2 (1 + \Delta_{i+1})^2 \quad (3.57)$$

$$K_{i+1} \approx K_i (1 + \Delta_{i+1}), \quad (3.58)$$

де $\Delta_{i+1} = \frac{V_i - V_{i+1}}{2K_0^2} \approx \frac{V_i - V_{i+1}}{2K_i^2}$ це так-званий коефіцієнт акомодатії ($\Delta_i \ll 1$).

Порівнюючи (3.56) та (3.57) і зважаючи на те, що $V_i, V_{i+1}, V_i - V_{i+1} \ll K_i^2, K_{i+1}^2$ та відхилення φ_i променя дуже мале, можна отримати:

$$\delta_{i+1} \approx \frac{V_i - V_{i+1}}{2K_0^2 \cos(\alpha_{i+1} + \varphi_i)} \approx \frac{\Delta_{i+1}}{\cos \alpha_{i+1}}. \quad (3.59)$$

Остаточно рекурентна формула для i -го хвильового вектора буде мати вигляд:

$$\mathbf{K}_{i+1} \approx \mathbf{K}_i + \frac{V_i - V_{i+1}}{2K_0 \cos \alpha_{i+1}} \mathbf{e}_{i+1} = \mathbf{K}_i + \Delta_{i+1} \frac{K_0}{\cos \alpha_{i+1}} \mathbf{e}_{i+1} \quad (3.60)$$

$$K_{i+1} \approx K_i (1 + \Delta_{i+1}). \quad (3.61)$$

3.4.2. Кут рефракції

Результати попереднього параграфа добре описують зміни розсіяного хвильового вектора, але на практиці вони не дуже зручні для використання при аналізі картини розсіяння. В дійсності спостережуваною на експерименті величиною є кут рефракції φ (тобто кут відхилення променя після виходу з об'єкта від початкового напрямку). Промінь заломлюється на кожному шарі речовини, змінюючи свій напрям на кут γ_i . Після кожного заломлення промінь \mathbf{K}_i буде відхилений від початкового напрямку \mathbf{K}_0 на кут $\varphi_i = \gamma_1 + \gamma_2 + \dots + \gamma_i$, і остаточно, після виходу з об'єкта, коли $i=m$ (де m це повна кількість шарів для даної колонки): $\varphi = \varphi_m = \sum_{i=1}^m \gamma_i$. Розглянемо випадок коли хвильовий вектор рефрагує по черзі на двох поверхнях (рис. 3.4).

Із граничних умов (3.53), беручи до уваги, що $\varphi_0 = \gamma_0 = 0$ можна записати:

$$K_0 \sin \alpha_1 = K_1 \sin(\alpha_1 + \gamma_1) \quad (3.62)$$

$$\gamma_1 = \arcsin\left(\frac{K_0}{K_1} \sin \alpha_1\right) - \alpha_1. \quad (3.63)$$

Оскільки $\varphi_1 = \gamma_1$, то для другої поверхні можна отримати:

$$K_1 \sin(\alpha_2 + \gamma_1) = K_2 \sin(\alpha_2 + \gamma_1 + \gamma_2), \quad (3.64)$$

$$\gamma_2 = \arcsin\left(\frac{K_1}{K_2} \sin(\alpha_2 + \gamma_1)\right) - (\alpha_2 + \gamma_1), \quad (3.65)$$

$$\varphi_2 = \gamma_1 + \gamma_2 = \arcsin\left(\frac{K_1}{K_2} \sin(\alpha_2 + \gamma_1)\right) - \alpha_2. \quad (3.66)$$

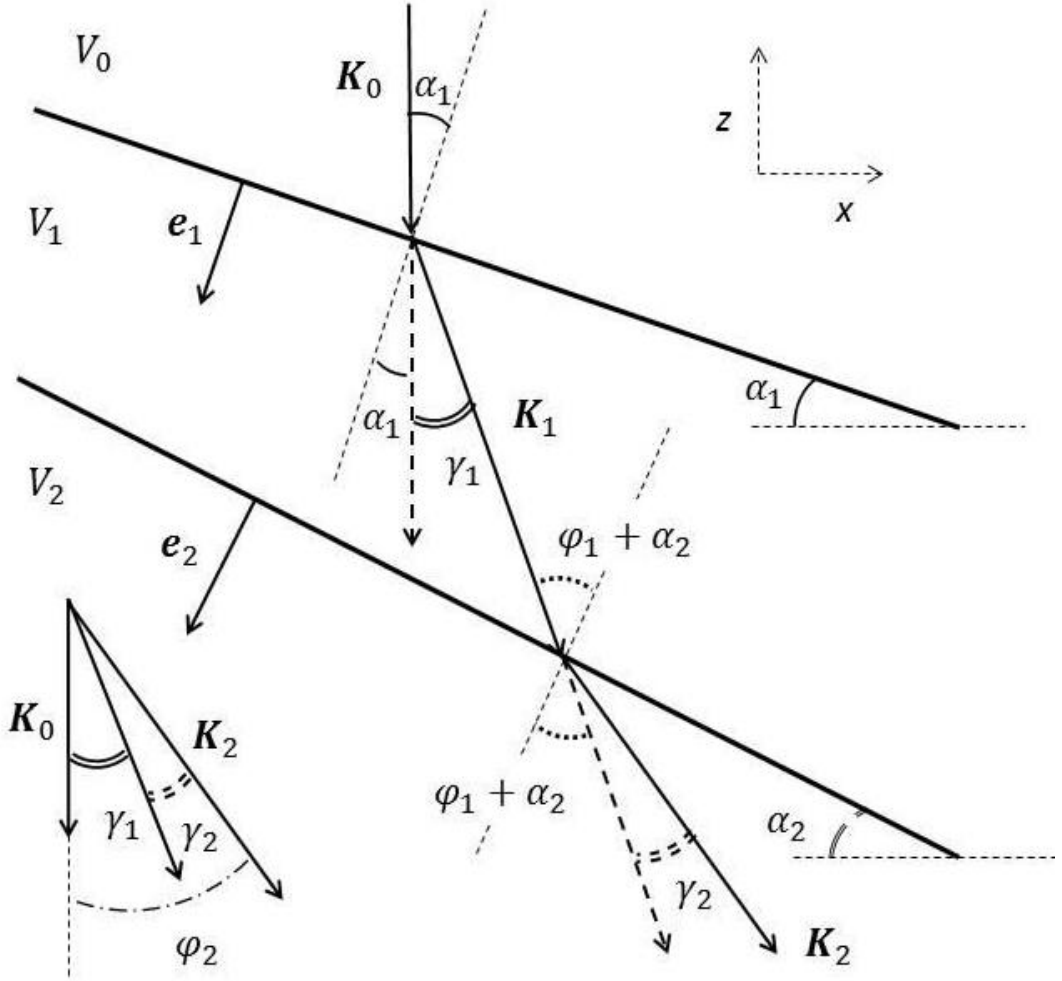


Рис. 3.4 Відхилення хвильового вектора при проходженні через кілька шарів.

Зважаючи, що K_i це промінь, що падає на $(i+1)$ -шу поверхню можна отримати:

$$K_i \sin(\alpha_{i+1} + \varphi_i) = K_{i+1} \sin(\alpha_{i+1} + \varphi_i + \gamma_{i+1}). \quad (3.67)$$

Коли $i+1=m$, то:

$$K_{m-1} \sin(\alpha_m + \varphi_{m-1}) = K_0 \sin(\alpha_m + \varphi_{m-1} + \gamma_m). \quad (3.68)$$

Оскільки зміна хвильового вектора та кут відхилення дуже малі, у відповідності до (3.61) і (3.62) можна записати:

$$K_i \sin(\alpha_{i+1} + \varphi_i) \approx K_i(1 + \Delta_{i+1})[\sin(\alpha_{i+1} + \varphi_i) + \gamma_{i+1} \cos(\alpha_{i+1} + \varphi_i)], \quad (3.69)$$

$$\gamma_{i+1} \approx -\Delta_{i+1} \tan(\alpha_{i+1} + \varphi_i) \quad (3.70)$$

Чисельний аналіз показує, що наближений вираз (3.70) залишається справедливим (для реальних речовин і випромінення) для діапазона кутів α_i , що визначається виразом:

$$|\alpha_i| \ll \arctan\left(\frac{1}{\Delta_i}\right). \quad (3.71)$$

Використовуючи наближену формулу (3.70), можна отримати рекурентні співвідношення для i -ї поверхні:

$$\gamma_i \approx -\Delta_i \tan(\alpha_i), \quad (3.72)$$

$$\varphi_i \approx \gamma_i + \varphi_{i-1}. \quad (3.73)$$

Таким чином можна записати наближений вираз для кута рефракції скануючого променя, що проходить через об'єкт, який складається з m шарів у наступному вигляді:

$$\varphi = \varphi_m \approx -\sum_{i=1}^m \Delta_i \tan(\alpha_i). \quad (3.74)$$

Необхідно відмітити, що область застосування даного виразу обмежується кутами нахилу поверхонь α_i , які не занадто близькі до $\pi/2$. Коли ці умова не виконується потрібно розглядати випадок ковзної геометрії розсіювання. Також результуючий кут рефракції теж повинен залишатися малим, оскільки великі кути унеможливають використання колонкового розбиття.

3.4.3. Зміна фази

Вираз для кута рефракції скануючого променя, отриманий у попередньому параграфі не містить залежності від розмірів об'єкта. Для визначення розмірних характеристик (товщина кожного шару в межах однієї колонки) можна використати той факт, що в наслідок зміни модуля хвильового вектора при проходженні кожного шару виникає певна зміна (набіг) фази Φ_i . Вона відповідає різниці між фазами поточного хвильового вектора та незміненого (опорного) вектора, який пройшов би той самий шлях.

Після виходу з об'єкта амплітуда хвильового вектора (для прожнього розсіювання без поглинання) буде рівна \mathbf{K}_0 , але хвильовий вектор буде відхилений від початкового напрямку на кут φ . Позначимо рефрагований хвильовий вектор K'_0 , а товщину i -го шару позначимо l_i . Оскільки кут відхилення φ_i дуже малий, можна вважати, що для кожної поверхні між шарами для обох хвильових векторів (падаючого і рефрагованого) визначальним буде саме кут нахилу поверхні, наближено однаковий для обох векторів. Таким чином нормальні складові цих векторів в свою чергу теж будуть досить близькими.

Розглянемо промінь, що проходить через один шар речовини. На “вхідній” поверхні можна записати:

$$\Psi_{K_0} e^{iK_0 r} \Big|_{r=0} = \Psi_{K_1} e^{iK_1 r} \Big|_{r=0}, \quad (3.75)$$

$$\Psi_{K_0} = \Psi_{K_1}. \quad (3.76)$$

Після проходження через цей шар, коли $r = l_1$, набіг фази буде визначатись як:

$$\Phi_1 = l_1(|\mathbf{K}_1| - |\mathbf{K}_0|) \approx l_1[K_0(1 + \Delta_1) - K_0] = K_0 l_1 \Delta_1. \quad (3.77)$$

Вираз для хвильової функції після виходу з одного шару можна отримати у вигляді:

$$\Psi_{K'_0} e^{iK'_0 r + iK_0 l_1 \Delta_1}, \quad (3.78)$$

де K'_0 рівний (за модулем) до падаючого променя, але відхилений на певний кут.

Оскільки вираз (3.78) відрізняється від початкового лише перенормуванням амплітуди та набігом фази, то дану процедуру можна продовжити на всі наступні шари речовини, отримуючи для кожного шару відповідний набіг фази, що буде містити інформацію про його товщину.

Остаточно після виходу із об'єкта (проходження m шарів) будемо мати наступний вираз для хвильової функції рефрагованого променя:

$$\Psi_{K''_0} e^{iK''_0 r} e^{iK_0(l_1 \tilde{\Delta}_1 + l_2 \tilde{\Delta}_2 + \dots + l_m \tilde{\Delta}_m)}, \quad (3.79)$$

де $\tilde{\Delta}_i = \frac{V_0 - V_i}{2K_0^2}$ і K''_0 рівний за модулем до K_0 , але відхилений на кут рефракції.

Формула (3.79) містить інформацію про усі геометричні параметри об'єкта. Враховуючи це можна отримати вираз для відбивальної здатності зразка, що в свою чергу дозволяє побудувати профілі розсіяння.

Використовуючи вирази (3.74) і (3.79) провівши інтегрування по кутах можна розрахувати остаточний профіль відбивання об'єкта, що складається з N шарів з урахуванням внеску від параметрів кожного окремого шару кожної колонки:

$$R_{obj}^{\Sigma}(x, \xi, \mu_i, l_i, \alpha_i), (i = 1, 2, \dots N) \quad (3.80)$$

де x – координата на екрані, ξ – кутова змінна, μ_i – параметри речовини об'єкта, l_i , α_i – відповідно товщини шарів та кути нахилу поверхонь.

Остаточно маючи вирази для відбивальної здатності у всіх елементах оптичної схеми повну відбивальну здатність системи відповідно до виразу, наведеного на початку другого розділу можна отримати у вигляді:

$$R(\Delta\theta, x) = \int R_M(\xi) R_A(\xi - \Delta\theta - \varphi) R_{obj}^{\Sigma}(x, \xi, \mu_i, l_i, \alpha_i) d\xi, \quad (3.81)$$

Оскільки даний вираз пов'язує багато параметрів, то для знаходження невідомих величин із картини розсіяння, тобто для розв'язку оберненої задачі, необхідно визначити відповідну процедуру проведення вимірів для побудови системи рівнянь, яка буде враховувати всі необхідні характеристики та особливості запропонованої теорії. Таку процедуру описано у наступному розділі.

3.5. Чисельні розрахунки та результати

Представлену модель для некристалічних об'єктів було використано для дослідження декількох модельних об'єктів: капронового (полікапронамід $[-\text{NH}(\text{CH}_2)_5\text{CO}-]_n$) дроту, поліетиленового $(\text{C}_2\text{H}_4)_n$ капіляру, акрилового $(\text{C}_5\text{O}_2\text{H}_8)_n$ стержня та капіляру з боросилікатного скла. Вибір модельних об'єктів був обумовлений наявністю для них експериментальних профілів інтенсивності, виміряних раніше іншими авторами. Розрахунки проводились для фазоконтрастної схеми при різних експериментальних умовах. Розраховані інтенсивності на рис. 3.5-

3.9 нормовані на інтенсивність скануючого променя за відсутності некристалічного об'єкта та при нульовому зміщенні аналізатора.

На рис. 3.5-3.7 показано результати розрахунків для капронового дроту та поліетиленового капіляра (порожнього та наповненого метиловим спиртом) при використанні випромінювання $\text{AgK}_{\alpha 1}$ з рефлексом аналізатора (422) та зміщенням 0 і - 0.4 кутові секунди.

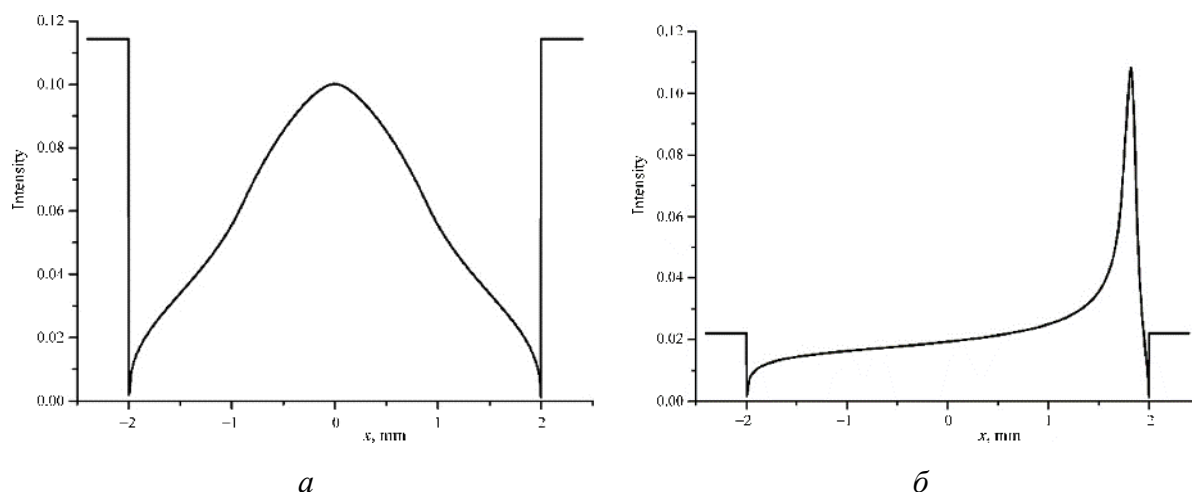


Рис. 3.5 Теоретичні розрахунки профілів інтенсивності капронового дроту радіуса 2 мм. Зсув аналізатора відповідно: 0 (а), $-0.4''$ (б).

На рис. 3.5 наведено криві інтенсивності для капронового дроту радіуса 2 міліметри при двох різних зміщеннях аналізатора.

На рис. 3.6 представлено порівняння розрахунків в рамках даної моделі та результатів, отриманих у роботі [115] для порожнього поліетиленового капляру із зовнішнім радіусом 2 міліметри та внутрішнім радіусом 1.6 міліметри. Теоретичні розрахунки проведено за припущення, що поверхня об'єкта досить гладка. Внаслідок цього поблизу границь об'єкта криві мають дельта-подібні піки і дуже різкі ями. Це спричинено тим, що тангенс кута падіння прямує до нескінченності і відтак глибина ям обмежується лише величиною крока інтегрування в межах розрахунків. Однак для реальних об'єктів поверхня, будучи далекою від ідеальної, має випадкові викривлення, через що глибина ям внаслідок розмиття обмежена скінченною величиною.

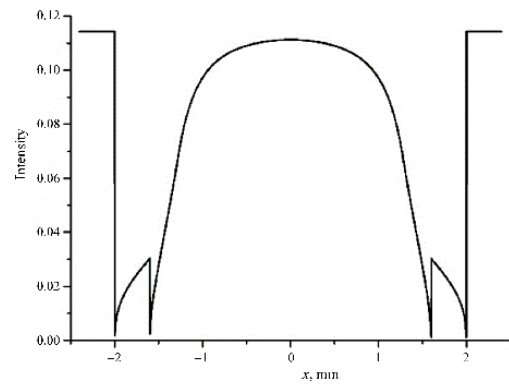
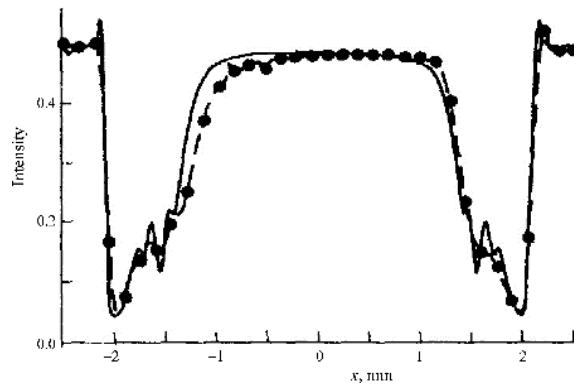
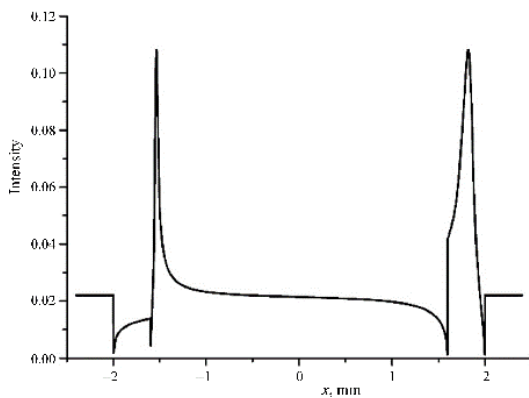
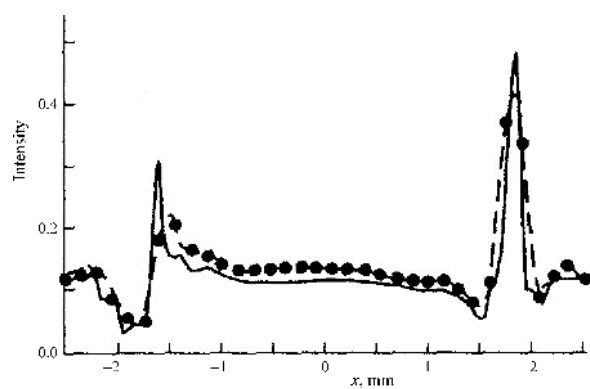
*a**б**в**г*

Рис. 3.6 Теоретичні розрахунки в рамках даного методу (а, в) та результати роботи [115] (б, г) для порожнього поліетиленового капіляра. Зсув аналізатора відповідно: 0 (а, б), $-0.4''$ (в, г).

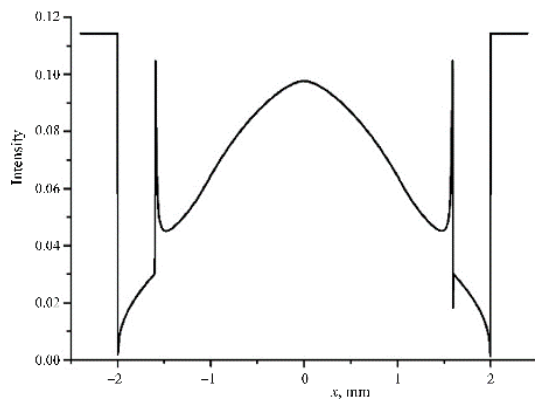
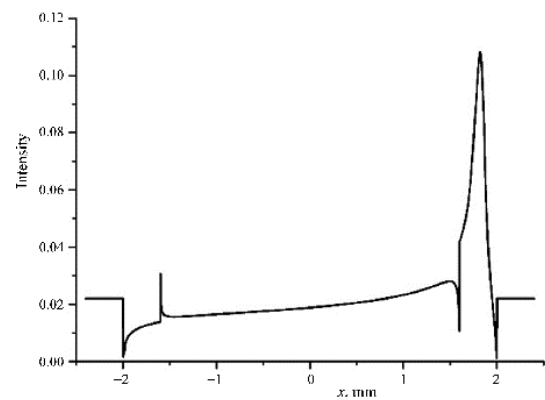
*a**б*

Рис. 3.7 Теоретичні розрахунки для поліетиленового капіляра, заповненого метиловим спиртом. Зсув аналізатора відповідно: 0 (а), $-0.4''$ (б).

На рис. 3.7 представлено теоретичні розрахунки для вищеприведеного капіляра, заповненого метиловим спиртом. Додавання другого матеріалу (спирту) з його власними показниками заломлення та поглинання поступово змінює профілі

інтенсивності. Однак слід відмітити, що результуючі криві (за формою) є суперпозицією кривих, наведених на рис. 3.5 та 3.6.

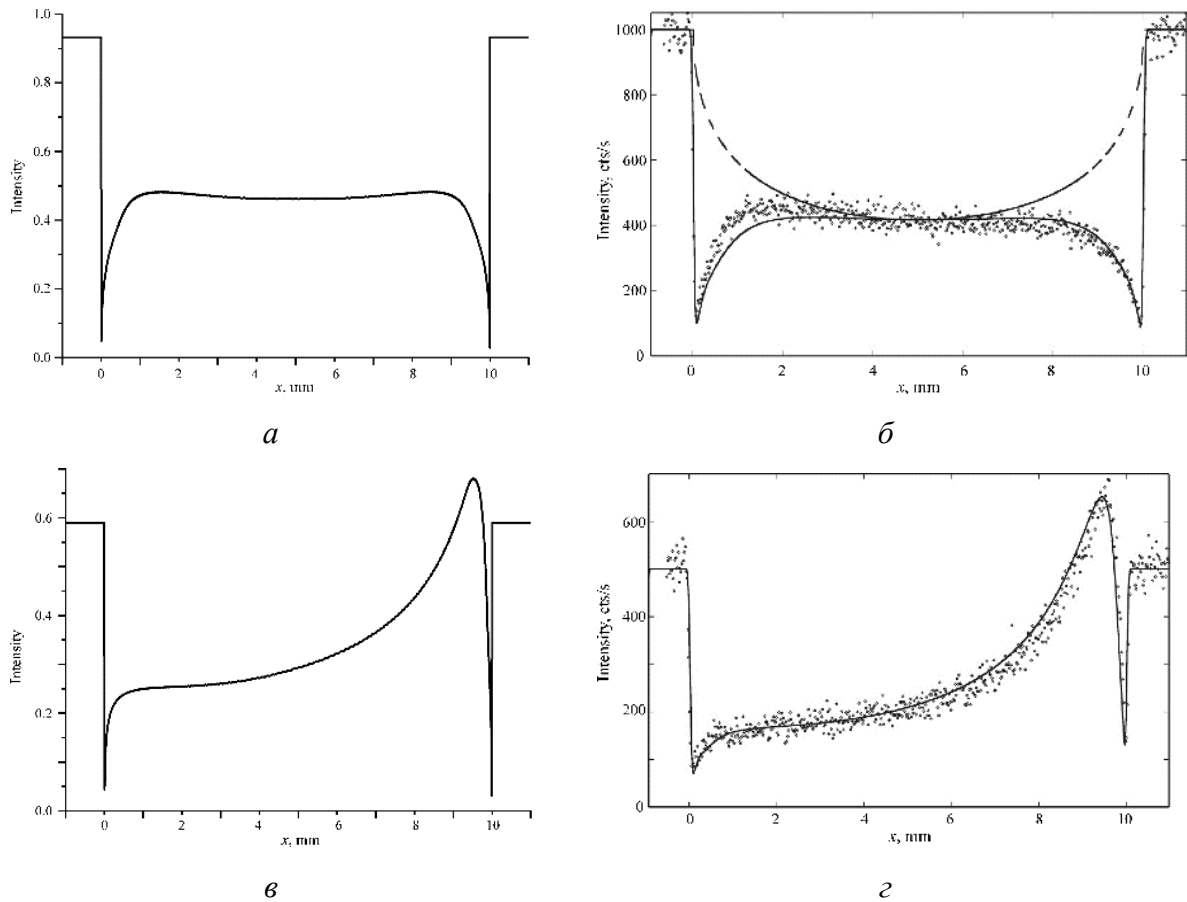


Рис. 3.8 Теоретичні розрахунки в рамках даного методу (а, в) та результати із роботи [79](б, г) профілів інтенсивності акрилового стержня. Зсув аналізатора відповідно: 0 (а, б), $-0.7''$ (в, г).

На рис. 3.8 та 3.9 продемонстровано теоретично розраховані криві та відповідні результати, отримані в роботі [116] для акрилового стержня радіусом 5 міліметрів та скляного капіляра із зовнішнім радіусом 0.88 міліметра та внутрішнім радіусом 0.64 міліметра. Наведені результати із [116] являють собою і експериментальні дані (точки) і відповідні розрахунки (суцільні лінії). В рамках розрахунків розподіл інтенсивності рентгенівського променя було замінено гістограмою з елементів шириною 1 міліметр. Для кожного елементу інтенсивність розраховувалась відповідно до поглинання та заломлення, при цьому використовувалася згладжена крива заломлення у [116] (рис. 3.8, б, d та рис. 3.9, б, d) і точно розрахована із

відбивальної здатності монохроматора і аналізатора у даній роботі (рис. 3.8, а, с та рис. 3.9, а, с). В даному випадку використовувалося випромінювання $\text{MoK}\alpha 1$ з рефлексом (333) у кристалі аналізаторі.

Так само, як і на рис. 3.5-3.7 “гострота” теоретичних кривих визначалася лише величиною кроку при розрахунках, в той час як експериментальні дані включають відхилення і розмиття, спричинені неідеальністю поверхні та речовини.

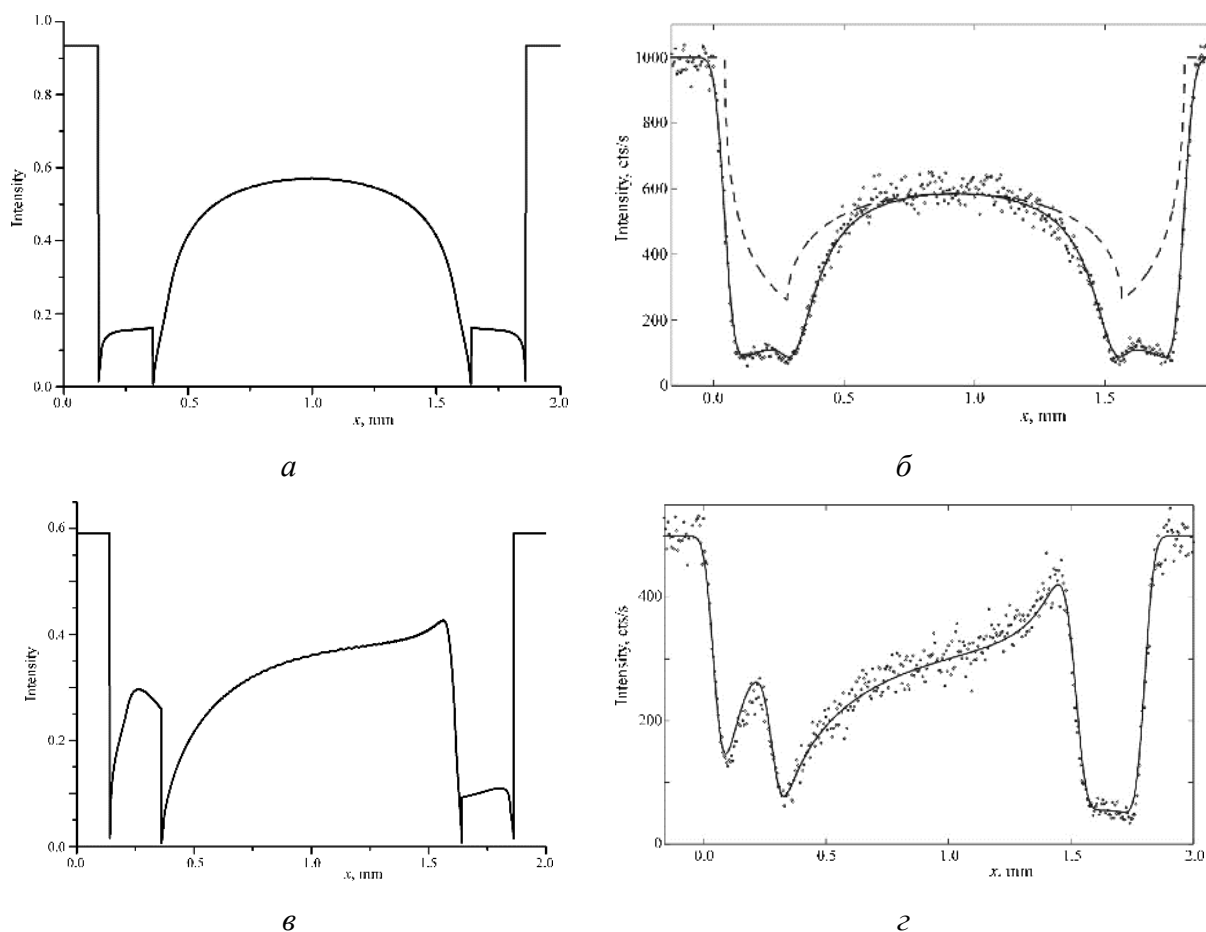


Рис. 3.9 Теоретичні розрахунки в рамках даного метода (а, в) та результати із [79](б, г) для скляного капіляру. Зсув аналізатора: 0 (а, б), $-0.7''$ (в, г).

3.6. Висновки

Описана у попередньому розділі теоретична модель дозволяє провести узагальнення описання процесу взаємодії випромінювання із речовиною на випадок некристалічних об'єктів із довільною кількістю шарів речовини. Отриманий в рамках такого узагальнення розв'язок зберігає інформацію про параметри структури об'єкта і може бути застосований при описанні процесу формування фазоваріаційних зображень.

Запропонована тривісьова схема при використанні вищезазначених результатів дозволяє визначити вплив як особливостей кристалів монохроматора і аналізатора (включно із мікродефектами), так і всіх параметрів некристалічного об'єкта на картину розсіяння. При цьому аналітичні вирази можуть використовувати ряд наближень для переходу до більш простих граничних випадків і разом з тим зберігають інформативність отриманих результатів.

Криві інтенсивності, отримані для модельних об'єктів добре узгоджуються з загальновідомими результатами, при цьому використаний підхід для опису процесів рефракції може бути застосовний і для більш складних об'єктів.

РОЗДІЛ 4

ВПЛИВ ІНСТРУМЕНТАЛЬНИХ ФАКТОРІВ ПРИ РОЗВ'ЯЗКУ ПРЯМОЇ І ОБЕРНЕНОЇ ЗАДАЧ РОЗСІЯННЯ

4.1. Вступ

Тривіський спосіб побудови зображень, тобто АВІ, базується на використанні кристалів монохроматора і аналізатора, розташованих на гоніометрах з високою роздільною здатністю. При цьому монохроматор формує однорідний у нормальній до напрямку розповсюдження площині скануючий промінь із відомим кутовим розподілом інтенсивності. В результаті взаємодії із досліджуваним об'єктом промінь заломлюється на малі кути та локально змінює свої параметри (напрямок та величину хвильового вектора, амплітуду хвилі, кутовий розподіл інтенсивності) в залежності від характеру локалізації неоднорідностей об'єкта. Для описання макроскопічних неоднорідностей об'єкт умовно розбивають на колонки та їх шари, а вводючи різні параметри флуктуацій описують мікроскопічні неоднорідності.

За останні роки опубліковано багато робіт, присвячених розвитку та застосуванням АВІ-методу (див., наприклад, роботи [53, 96–102, 103-105]). Однак теоретичні обґрунтування більшості з вказаних робіт засновані на цілому ряді наближень, що спрощує розрахунки, але при цьому не дозволяє врахувати вплив великого набору параметрів системи на зображення, що в свою чергу суттєво обмежує чутливість та, особливо, інформативність методу.

В даному розділі базуючись на раніше описаних результатах цієї роботи проведено аналіз наближень, що використовуються у спрощених схемах розрахунку та враховано вплив додаткових параметрів як самого об'єкта, так і певних елементів устаткування, з метою покращення інформативності фазоваріаційної діагностики та зменшення інструментальних похибок при вимірюванні. За допомогою розрахунків показано суттєвий вплив і відповідно необхідність врахування описаних ефектів та остаточно шляхом чисельного експерименту підтверджено можливість розв'язку оберненої задачі розсіяння при

використанні запропонованого підходу. Відповідні результати було представлено у роботах [117-118].

4.2. Вплив неоднорідностей об'єкту та інструментальних факторів на розподіл інтенсивності

Всі подальші розрахунки проведено в рамках моделі, запропонованої в роботах [90, 107] та описаної в попередніх розділах.

Дана модель дозволяє врахувати вплив ефектів багатократності розсіювання як в монокристалах монохроматора і аналізатора, так і в некристалічному об'єкті, що дає змогу встановити безпосередньо аналітичний зв'язок між характеристиками некристалічного об'єкту і параметрами рентгенівської картини, що його зображує.

Ключовим наближенням використаної теоретичної моделі є так зване колонкове наближення. В рамках нього простір умовно розбивається на достатньо вузькі колонки, паралельні до скануючого променя. Розмір колонки не повинен бути меншим за дифракційний ліміт, але повинен бути достатньо малим, щоб в рамках однієї колонки поверхню досліджуваного об'єкта можна було наближено вважати плоскою. Таке припущення очевидно справедливе для об'єктів з достатньо гладкою поверхнею, але не у випадку посіченої поверхні з великою кількістю неоднорідностей. Для описання такого випадку в даному розділі описаний підхід, в рамках якого поверхня вважається плавною на трохи більшому масштабі, але при цьому присутні параметризовані усереднені флуктуації форми поверхні. В такому випадку форма об'єкту буде наближено описуватись орієнтацією введених площин.

Слід відмітити, що зміни форми та властивостей речовини в залежності від координат в оберненому просторі утворюють так звані просторові частоти. Відповідно більш різкі зміни та щільно розташовані мікроскопічні неоднорідності відповідають високим просторовим частотам, а плавні зміни характеристик та гладкі поверхні відповідно низьким просторовим частотам.

З іншого боку мінімальний розмір колонки обмежений припущенням про неперекриття випромінення колонок, тобто про те, що за рахунок достатньо вузького кутового розподілу інтенсивності скануючого променя та малих кутів

рефракції інтенсивність не буде перерозподілятися між колонками. Це автоматично виконується для об'єктів мікроскопічного розміру, на дослідження яких і спрямована дана робота. Далі буде показано, що ефект перерозподілу у ряді випадків можна досить легко врахувати та оцінити можливу похибку на якість зображення.

Іншим обмеженням мінімальної товщини колонки є умова однорідності речовини як за товщиною колонки, так і в межах кожного її шару. Аналогічно до врахування точної форми поверхні зміни властивостей речовини з малою просторовою частотою можна описати як набір окремих шарів із сталими властивостями речовини, а зміни з високою просторовою частотою вводяться як усереднені (в рамках кожного шару) флуктуації. При цьому беручи потенціал взаємодії випромінення із речовиною досліджуваного об'єкта постійним на достатньому масштабі (в порівнянні із довжиною хвилі), можливо використовувати таку величину як показник заломлення.

На практиці в результаті усереднення кожна колонка відповідає окремій точці (пікселю) на детекторі. Відповідно характерний масштаб пов'язаний з роздільною здатністю устаткування.

Використання даної моделі забезпечує можливість вирішення оберненої задачі та встановлення характеристик досліджуваного некристалічного об'єкту.

4.2.1. Вплив кривих відбивання монохроматора та аналізатора на розподіл інтенсивності

Для формування квазімонохроматичного хвильового фронту з малим кутом розбіжності (порядку долей кутових секунд) використовується кристал-монохроматор. У якості кристалів-монохроматорів використовуються майже досконалі монокристали з вузькою кривою відбивання. При цьому важливо, щоб скануючий промінь був однорідним в площині, перпендикулярній до напрямку поширення, та достатньо широким, щоб освітлювати весь об'єкт. Для цього у випадках, коли джерело випромінення має занадто вузький пучок, до монохроматора додають кристал із несиметричним відбиттям, що збільшує

поперечний розмір (ширину) пучка. Після заломлення у об'єкті пучок потрапляє на аналізатор — ще один майже ідеальний монокристал із відповідною вузькою кривою відбивання. Після цього детектор вимірює результуючу інтенсивність променя. В деяких інших методах побудови фазоконтрастних зображень в оптичній схемі присутні елементи, що виконують роль близьку до кристала-аналізатора. Зокрема маски у методі освітлення краю дають дуже схожий результат і частину теорії. Використання кристалів має більше переваг з огляду на кутову роздільну здатність, хоча при цьому ускладнюються технічні вимоги до юстування і точності обладнання. З іншого боку використання масок або ґраток зазвичай накладає більш слабкі вимоги до обладнання, але разом з тим дає гіршу роздільну здатність.

Вимірює детектором інтенсивність дорівнює згортці кутового розподілу інтенсивності променя перед аналізатором та кривої розсіювання аналізатора з урахуванням кута рефракції та можливого зміщення орієнтації аналізатора відносно монохроматора. У тому випадку, коли об'єкт можна наближено вважати однорідним, тобто знехтувати мікронеоднорідностями, розподіл інтенсивності після проходження через кожен колонку об'єкту залишиться майже незмінним, але буде зсунутий на кут рефракції та із зменшенням за рахунок поглинання амплітуд хвиль відповідно.

Часто буває зручним визначити залежність результуючої інтенсивності від кута зміщення аналізатора відносно монохроматора без об'єкта. Дані криві іноді називають кривими гойдання (ан. *Rocking curves*), і хоча насправді термін “крива гойдання” історично вводився з іншим змістом, розрахунки кривих дуже подібні, особливо якщо вважати монохроматор як частину джерела, що просто дає певний незмінний пучок. Використання таких кривих, які далі будемо називати згорнутими кривими, дозволяє в ряді випадків суттєво спростити розрахунки для однорідних об'єктів. По-перше, їх використання дозволяє окремо розглядати поширення випромінювання в досліджуваному об'єкті та в кристалах аналізатора і монохроматора. При цьому, для опису проходження променя крізь некристалічний об'єкт часто використовують наближення геометричної оптики та закон заломлення Снелла. По-друге, вказана крива містить всю інформацію, необхідну

для визначення кута рефракції. Тому, попередньо розрахувавши або безпосередньо вимірявши її, можна значно пришвидшити обробку експериментальних результатів. Так, підбираючи монокристали із різними кривими відбивання, можна цілеспрямовано підбирати криву з формою, необхідною для дослідження об'єкту певних форм і складу.

Проте, якщо об'єкт має суттєві неоднорідності, що спотворюють розподіл інтенсивності, розсіяної об'єктом, застосування описаного підходу може призводити до значних похибок. У такому випадку необхідно послідовно розглянути взаємодію пучка з монохроматором, об'єктом (або окремими його шарами) та аналізатором для кожної колонки. Зокрема, для багат шарових об'єктів зручно замість кривих кутового розподілу інтенсивності розглядати набір “мікропучків” для кожного кута поширення променя. Таким чином, обчислення інтегралів згортки для кожного шару можна замінити розрахунками перерозподілу інтенсивностей між “мікропучками” та фінальної одноразової згортки з кривою відбивання кристала аналізатора. Це дозволяє суттєво спростити розрахунки, зменшивши складність методу з $O(N^M)$ до $O(MN^2)$, де N — кількість кроків інтегрування для кожного шару, M — кількість шарів.

На рисунку 4.1 наведено згорнуті криві для випромінювання $MoK_{\alpha 1}$ ($\lambda = 0,07$ нм) для двох ідеальних кристалів кремнію; кристал № 1 товщиною 5,4 мм, відбивання (111), кристал № 2 — 21,6 мм, відбивання (333).

Проведені розрахунки демонструють, що шляхом відповідного вибору кристалів монохроматора і аналізатора можна сформувати згорнуту криву з необхідними наперед заданими параметрами. Так, зокрема, використання геометрії дифракції за Бреггом для кристалів монохроматора і аналізатора дозволяє отримати згорнуту криву із гострим піком та, водночас, малий кут нахилу на половині висоти кривої і плавне згасання. В той час послідовне використання геометрії дифракції за Бреггом для кристалу монохроматора і геометрії дифракції за Лауе для кристалу аналізатора забезпечують більш гладкий пік, але при цьому більший кут нахилу на половині висоти кривої і більш різке згасання. Отже, за рахунок вибору товщин кристалів та геометрії дифракції можна регулювати ширину згорнутої кривої на

половині висоти та її амплітуду. Наприклад, для матеріалів, що заломлюють слабо, доцільно використовувати згорнуті криві із більшим кутом нахилу, які забезпечують кращий контраст, а для матеріалів, що заломлюють випромінення більш сильно, потрібно вибрати більш широкі криві, що забезпечить виділення сигналу із шуму.

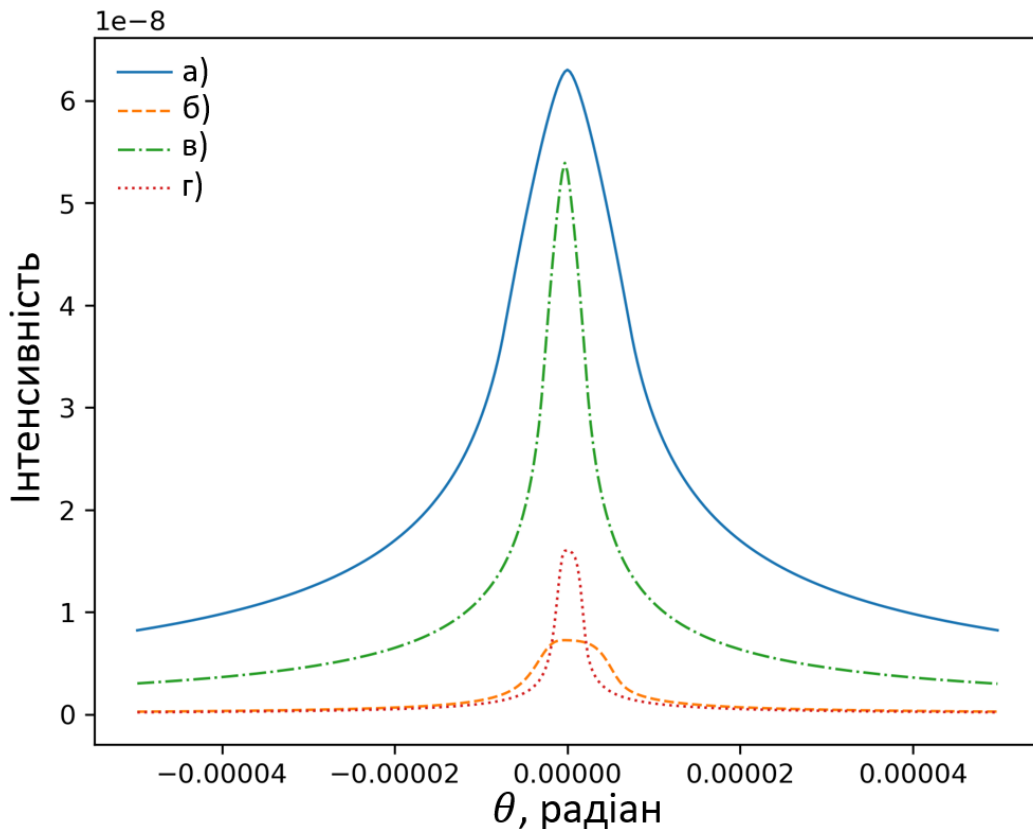


Рис. 4.1 Згорнуті криві, побудовані для різних пар кристалів монохроматор–аналізатор: монохроматором вибирався кристал № 1 (1, 2) та кристал № 2 (3, 4) у геометрії дифракції за Бреггом, аналізатором вибирався кристал № 1 (1, 2) та кристал № 2 (3, 4) у геометрії дифракції за Бреггом (1, 3) та за Лауе (2, 4).

4.2.2. Вплив неоднорідностей поверхні об’єкта на розподіл інтенсивності

У тому випадку, коли поверхня об’єкта має вигнуту або “посічену” форму в додаток до апроксимації площиною, що дає загальний кут заломлення променя, необхідно якимось чином врахувати обумовлені такою неоднорідністю зміни кутового розподілу інтенсивності випромінення. Простим евристичним способом зробити це є використання припущення, що після потрапляння на таку поверхню

кожний мікропучок буде перерозсіяний з новим кутовим розподілом інтенсивності. Профіль, що застосовується для опису такого перерозподілу може бути заздалегідь розрахований чи поміряний для кожного матеріалу.

Результуючий після перерозсіювання кутовий розподіл інтенсивності буде рівний специфічній згортці початкового розподілу та профіля розсіювання поверхні, де інтегрування проводиться таким чином, що початкова інтенсивність, що припадає на одиничний кут буде перерозподілена (за кутами) відповідно до властивостей поверхні об'єкта та речовини (згортка по допоміжній змінній).

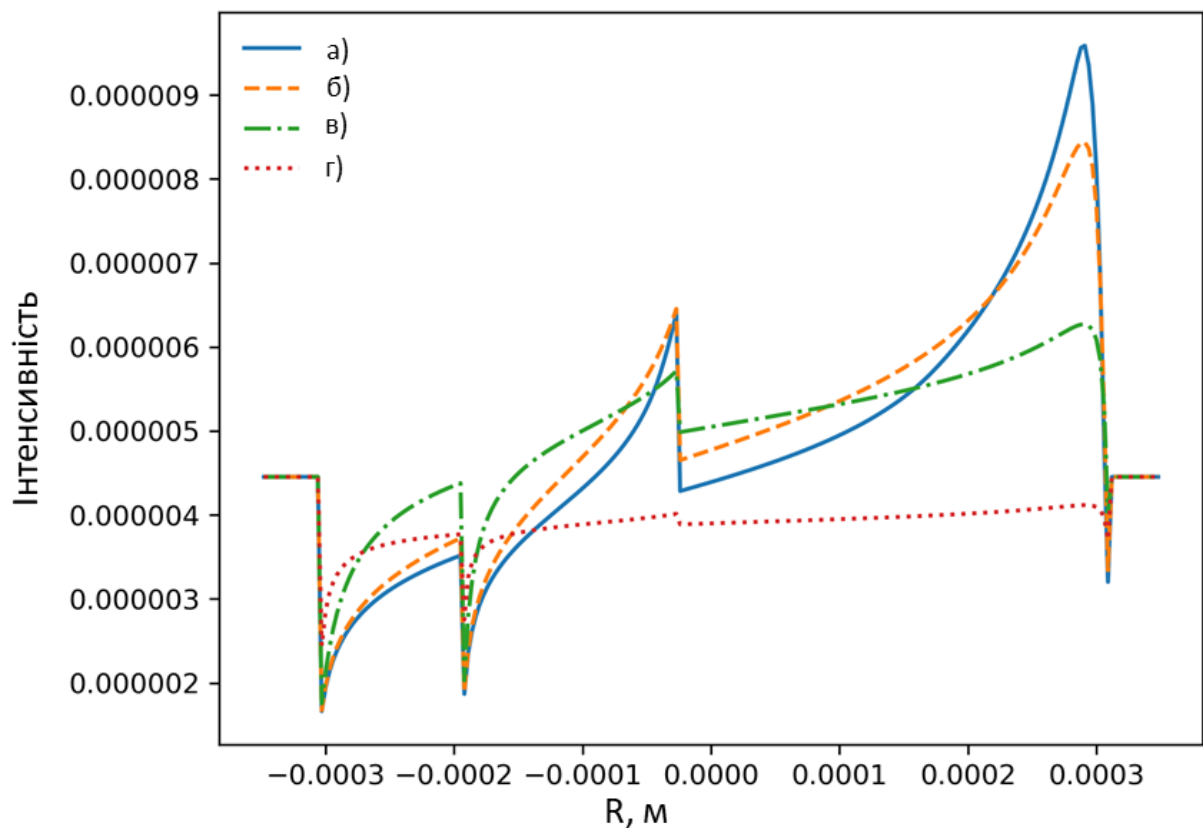


Рис. 4.2. Профілі інтенсивності при різному розмитті пучка: за відсутності розмиття (а), розмиття за Гауссом із півшириною 0.75" (б), 2" (в), 5" (г).

Графіки, представлені на рисунку 4.2, демонструють вплив зміни профіля скануючого пучка за рахунок розсіювання на неоднорідностях поверхні (тобто спотворення при падінні) на інтенсивність випромінювання. Розрахунки проведено для напівциліндра із боросилікатного скла радіусом 0,31 мм з округлим виступом на поверхні. Радіус виступу дорівнював 0,1 мм. Для врахування розсіювання

випромінення на неоднорідностях поверхні вважалось, що плоска хвиля, яка падає на поверхню об'єкта, розмивається за Гауссовим розподілом.

Отримані результати показують, що за наявності розмиття відбувається суттєве згладжування піків та загальне зменшення інтенсивності після виходу з аналізатора. Врахування цього ефекту необхідне для коректного визначення параметрів некристалічного об'єкта.

4.2.3. Вплив флуктуацій складу об'єкта на розподіл інтенсивності

При проходженні через досліджуваний об'єкт кожен із мікропроменів може у кожному шарі крім заломлення поглинатись та перерозсіюватись на мікронеоднорідностях складу. При цьому обидва ефекти будуть залежати від товщини відповідного шару. Поглинання враховується як експоненційне зменшення інтенсивності мікропучків послідовно в кожному шарі з використанням відповідного коефіцієнта поглинання. В той же час необхідно розрахувати обумовлену розсіянням на мікронеоднорідностях складу зміну профіля інтенсивності, тобто дифузне розсіяння.

Розглянемо випадок, коли характерні розміри мікронеоднорідностей значно менші за розміри колонки та/або шару, а кількість таких мікронеоднорідностей достатньо велика. Для врахування впливу мікронеоднорідностей зручно розбити колонку на однорідні малі об'єми, такі, що розподіл неоднорідностей буде все ще рівномірним в рамках кожного введеного об'єму. Закони розсіяння випромінення для різних типів мікроефектів кристалів було встановлено М. О. Кривоглазом (див. [119]). Однак, для випадку, що розглядається, коли розміри і тип мікронеоднорідностей можуть бути різними, результуюча зміна хвильового вектора (після виходу з колонки) при розсіянні на мікронеоднорідностях буде випадковою величиною. Тоді, згідно із законом великих чисел результуючий профіль розсіяння буде гаусіаном.

Зокрема, для згортки двох гаусіанів маємо:

$$\int g(u - x_0, w_1)g(x - u, w_2)du = g(x - x_0, w_1 + w_2)$$

де w_1, w_2 — відповідно квадрати дисперсій. Отже, в результаті згортки гаусіанів отримаємо гаусіан, квадрат дисперсій якого дорівнює сумі квадратів дисперсій вихідних гаусіанів.

Результат взаємодії променя із цілою колонкою буде описуватись N згортками, що описують послідовне розсіяння на N елементарних об'ємах. Оскільки, при зроблених наближеннях можна вважати, що крива розсіяння одного елементарного об'єму описується нормальним розподілом, отримаємо:

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \int \dots \int du_1 \dots du_N g_1(u_1 - x_0, w_1) g_2(u_2 - u_1, w_2) \dots g_N(u_N - x, w_N) \\ = g(x_0 - x, W)$$

де g_i — крива розсіяння окремого елементарного об'єму,

$W = \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{i=1}^N w_i \rightarrow \int dw$ — сумарне розмиття для всієї колонки.

Таким чином для випадку розсіяння на великій кількості мікронеоднорідностей результуючий профіль розсіяння можна розрахувати як гаусіан із відповідним квадратом напівширини. Відповідне розмиття можна розрахувати із параметрів речовини та товщини шару об'єкта, і для рівномірно розподілених неоднорідностей воно буде рівне

$$W = kl,$$

де k — питоме розмиття даної речовини.

Остаточно кутовий розподіл інтенсивності у промені буде дорівнювати згортці інтенсивності падаючого променя із кривою розсіяння колонки.

При цьому зміни кутів орієнтації дифузно розсіяних на мікронеоднорідностях (флуктуаціях) складу променів у випадку, коли розподіл домішок випадковий та внесок середньоквадратичних флуктуацій складу малий, можуть суттєво перевищувати кути заломлення і в таких випадках для дифузного розсіяння колонкове наближення не є придатним, тобто з'являється необхідність врахувати додатково взаємне перерозсіяння дифузних хвиль між різними колонками. Крім того, в кожній окремій колонці та в кожному її певному шарі розсіяні дифузні хвилі з певними хвильовими векторами багатократно перерозсіюються з усіма

розсіяними з іншими хвильовими векторами дифузними хвилями, як і заломлена хвиля та хвиля, що падає у відповідних колонці та шарі. Всі ці ефекти було названо ефектами екстинкції за рахунок дифузного розсіяння та більш детально розглянуто у роботі [112].

Таким чином, вказані ефекти дифузного розсіяння обмежуються у цій роботі лише розглядом розсіяння на флуктуаціях атомних амплітуд розсіяння та можуть бути при необхідності врахованими у відповідності з [119], але у більшості випадків їх внески однакові для всіх шарів колонок та практично не впливають на топографічні зображення некристалічних об'єктів. Експериментально непряме вимірювання остаточного профіля інтенсивності можна здійснити, вимірявши залежність повної інтенсивності на виході аналізатора від кута зміщення аналізатора відносно монохроматора $I(x)$ та розв'язавши відповідне рівняння:

$$I(x) = \int f(y)R(x-y)dy,$$

де f — невідомий профіль інтенсивності, R — профіль відбивання аналізатора.

Якщо R наближається до дельта-функції, то розрахунок профіля інтенсивності променя стає тривіальним. Цього можна досягти, підбираючи кристали так, щоб аналізатор мав дуже вузьку криву відбивання, а монохроматор — відносно широку.

4.2.4. Вплив масштабних параметрів системи на розподіл інтенсивності

Реалізація АВІ-методу, як і ряду інших фазоконтрасних методів потребує рознесення об'єкту та кристала-аналізатора на деяку відстань. Вказана відстань може бути досить значною, тому частина інтенсивності мікропучків, незважаючи на малі кути заломлення, може перейти до сусідніх колонок.

На рисунку 4.3 наведено профілі інтенсивності, розраховані для боросилікатного напівциліндра радіусом 0,31 мм, при різній відстані від напівциліндра до аналізатора.

Можна бачити, що при достатньо великих відстанях між об'єктом та аналізатором внесок перерозподілу випромінення між колонками стає суттєвим. Експериментально вплив зміни відстані між об'єктом і аналізатором досліджувався у роботі [112] та теоретично у роботах [105, 120]. Результати [112] було покладено

в основу “гібридного” методу побудови зображень. Було показано, що виміряні профілі суттєво відрізняються від традиційних АВІ-профілів, коли відстань між об’єктом і аналізатором мала. Отже, зміною шляхом зміни положення кристала аналізатора відносно об’єкта можна цілеспрямовано змінювати форму профілю інтенсивності та, в результаті, покращити контрастність зображень.

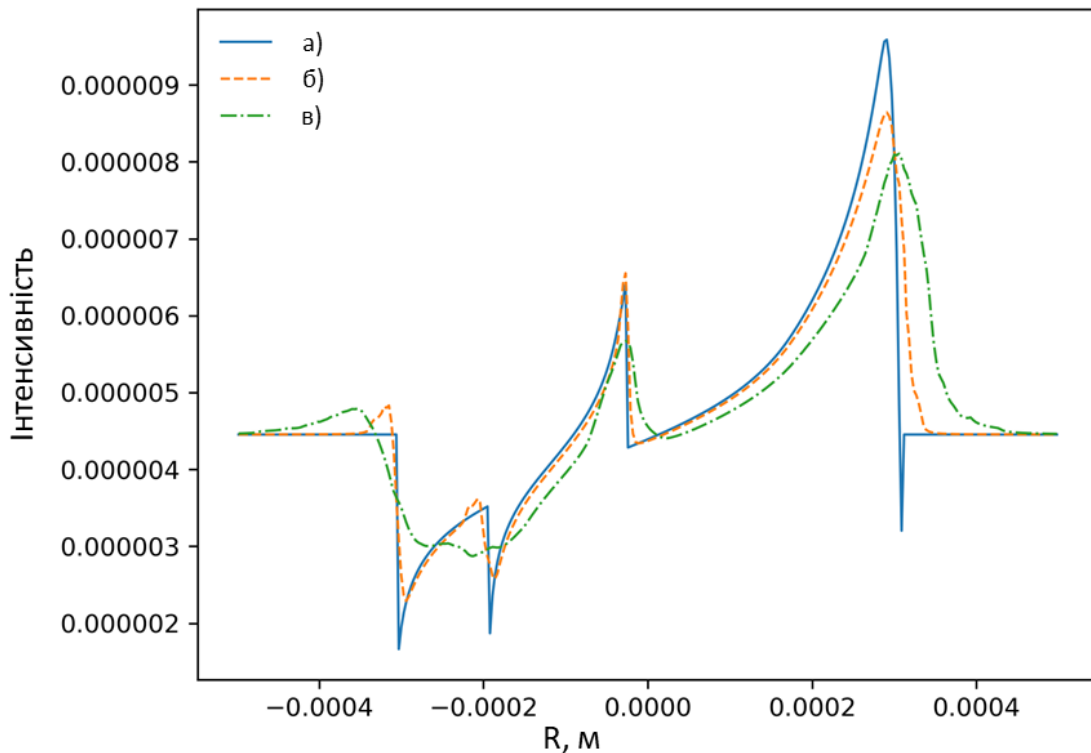


Рис. 4.3 Профілі інтенсивності при різних відстанях між об’єктом і аналізатором: 0 м (а), 1 м (б) та 5 м (в).

Графіки, представлені на рисунку 4.4, демонструють різницю між інтенсивностями, розрахованими за допомогою згорнутої кривої та безпосередньо із покроковою зміною скануючого пучка на кожному шарі. Розрахунки проведено для боросилікатного напівциліндра.

Для однорідної речовини та за нульової відстані між об’єктом і аналізатором профілі інтенсивності, розраховані через згорнуту криву та шляхом покрокового врахування розсіювання на кожному шарі (повного методу), повністю співпадають. Разом з тим, при наявності мікронеоднорідностей та при ненульовій відстані між об’єктом і аналізатором, що призводить до перерозподілу інтенсивності між

колонками, криві, розраховані цими двома методами, починають суттєво відрізнятись. В той час, як профіль, розрахований повним методом має згладжені піки і ями та “засвіти” у вигляді більшої за фонову інтенсивності поблизу границь об’єкта, профіль, розрахований за допомогою згорнутої кривої має такі ж як і в однорідному випадку характерні піки та ями, але відрізняється за амплітудою, а спостережувані експериментально “засвіти” біля границь об’єкта відсутні. При цьому характер зміни амплітуд є різним для двох методів розрахунку. Отже, при розгляді неоднорідних некристалічних об’єктів необхідно покроково враховувати розсіювання на кожному шарі.

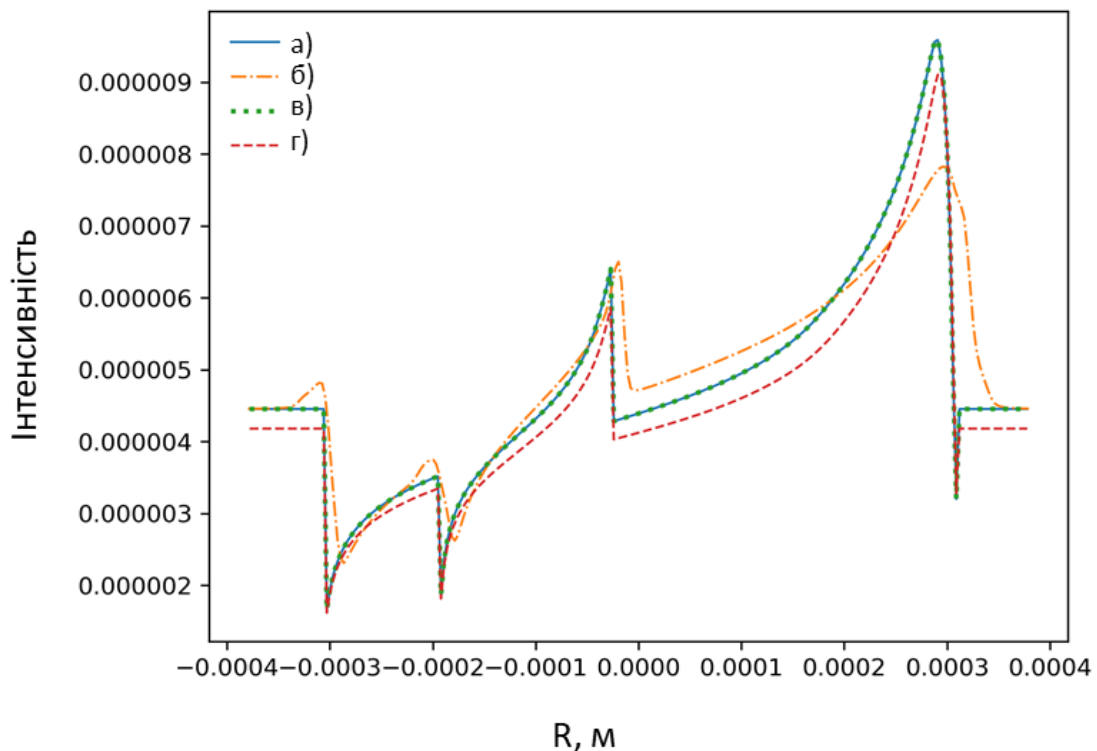


Рис. 4.4 Профілі розсіювання при відсутності перерозсіювання і нульовій відстані (а, в) та при перерозсіюванні 0.75 секунд і відстані 1 метр (б, г). Розрахунки проведено з використанням кривої гойдання (а, б) та методом послідовного розсіювання на кожному шарі (в, г).

4.3. Розв’язання оберненої задачі

Основною задачею будь-якого діагностичного методу є визначення параметрів досліджуваного об’єкту на основі використання вимірних експериментальних даних. В даному розділі представлено загальну схему та приклад відтворення

форми простого модельного об'єкту шляхом обробки теоретично розрахованих (модельних) профілів інтенсивності.

В якості модельного об'єкта було вибрано напівциліндр із невеликим округлим виступом на поверхні. Кожна колонка, що утворюється при розбиванні такого об'єкта, має дві невідомі характеристики — товщину та кут нахилу вхідної поверхні. Наявність додаткового спотворення поверхні у вигляді округлого виступу дозволяє показати вплив неоднорідностей поверхні різного масштабу на результати. Для простоти мікроскопічні неоднорідності вважались відсутніми.

4.3.1. Знаходження геометричних параметрів об'єкта

Важливою особливістю запропонованої моделі є можливість точного аналітичного визначення кута рефракції. Для цього, вимірявши або розрахувавши згорнуту криву, проводять декілька вимірювань інтенсивності при різних значеннях кута зміщення аналізатора та із системи рівнянь, виключаючи поглинання, розраховують кут рефракції:

$$I_1 = Af_1(\varphi),$$

$$I_2 = Af_2(\varphi),$$

де $f_1(\varphi) = f(\varphi + \Delta\varphi_1)$ і $f_2(\varphi) = f(\varphi + \Delta\varphi_2)$ відповідно, а f — безпосередньо згорнута крива.

Шляхом ділення першого рівняння на друге, отримуємо рівняння на кут рефракції

$$I_2 f_1(\varphi) = I_1 f_2(\varphi).$$

Слід зазначити, що розв'язок рівняння для кута рефракції залежить безпосередньо від форми згорнутої кривої і кутових зміщень, тому слід наперед визначати максимально можливі для даного об'єкта кути рефракції та використовувати такі кристали монохроматора і аналізатора, щоб рівняння для φ мало однозначний розв'язок.

Далі, розрахувавши кут рефракції та знаючи показник заломлення речовини n , можна визначити кут нахилу поверхні об'єкта α за формулою:

$$\varphi = \Delta n \tan(\alpha),$$

де Δn — зміна показника заломлення при переході з одного шару до іншого.

Для багатошарових об'єктів розрахунок форми поверхні значно ускладнюється, оскільки сумарний кут рефракції буде лінійною комбінацією вкладів від кожної поверхні:

$$\varphi = \sum \Delta n_i \tan(\alpha_i).$$

Більш детально цей випадок розглянуто у роботі [107].

Іншим, крім кутів, параметром об'єкта є його товщина в кожній колонці. Попередньо розрахувавши кут рефракції, або у випадку, коли він не вносить вклад в результуючу інтенсивність (наприклад, в схемі без використання кристала-аналізатора) можна розрахувати зменшення інтенсивності променя за рахунок поглинання після проходження крізь об'єкт та визначити його товщину із співвідношень:

$$A = I_1 / f_1(\varphi) = I_2 / f_2(\varphi) = e^{-\mu L},$$

$$L = -\ln(A) / \mu.$$

Розрахувавши товщину об'єкта і кут нахилу поверхні в кожній колонці, можна відтворити форму його поверхні.

Для визначення товщини об'єкта замість поглинання можна використовувати інформацію про розмиття профіля в наслідок USAXS. В такому випадку замість формул $[L(A)]$ використовується інформація про розмиття кутового розподілу інтенсивності. Використовуючи Гаусове наближення профіля розмиття, в результаті розкладу кривої розсіяння в ряд Тейлора коефіцієнт при другій похідній буде містити квадрат дисперсії відповідного гаусіана, тобто параметр розмиття. Далі знаючи коефіцієнт питомого розмиття для речовини із $[W = kl]$ можна отримати товщину колонки [121].

4.3.2. Реконструкція форми об'єкту

Для кожного матеріалу в залежності від характеру його взаємодії із випроміненням доцільно вибрати певний геометричний параметр, за яким проводити відтворення форми об'єкту. Більш зручним для реконструкції форми параметром є саме товщина об'єкта, але у випадку слабопоглинаючих речовин із

відсутністю мікронеоднорідностей похибка при розрахунку товщини може бути занадто великою. У такому випадку для реконструкції форми доцільно використовувати кут нахилу поверхні, що можна знайти із кута рефракції. Однак у цьому випадку метод стає неточним для кутів близьких до 90 градусів.

Графіки, наведені на рис. 4.5, демонструють результати відтворення форми напівциліндра, що спираються на розрахунки форми за товщинами і за кутами нахилу. Розрахунки було проведено для нульової відстані між аналізатором і об'єктом та за відсутності перерозсіяння.

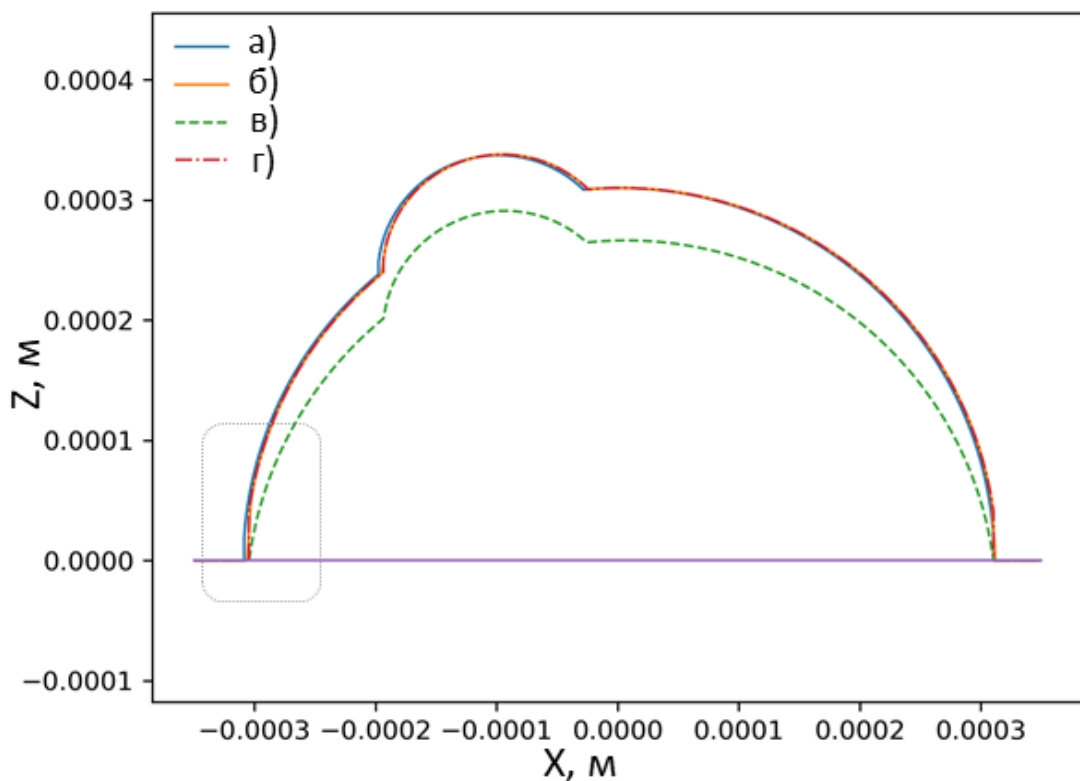


Рис. 4.5 Форма поверхні досліджуваного об'єкта: оригінальний контур (вхідні дані) (а), відновлення за товщиною (б), відновлення за кутом нахилу поверхні (в), комбіноване відновлення за кутом і товщиною (г).

Рис. 4.6 демонструє, що найбільша похибка виникає в ділянках, де кут падіння наближається до 90 градусів. Це відбувається внаслідок одразу причин. По перше перестає працювати використане наближення для кута рефракції. По друге навіть для поверхонь із малими нерівностями неможливо застосовувати наближення площиною та, відповідно, усереднений кут падіння. По третє при ковзній геометрії

важко (а для суттєво нерівних поверхонь майже неможливо) ввести таке поняття як товщина шару, оскільки промінь по суті багато разів переходить між областями, в яких знаходяться різні речовини.

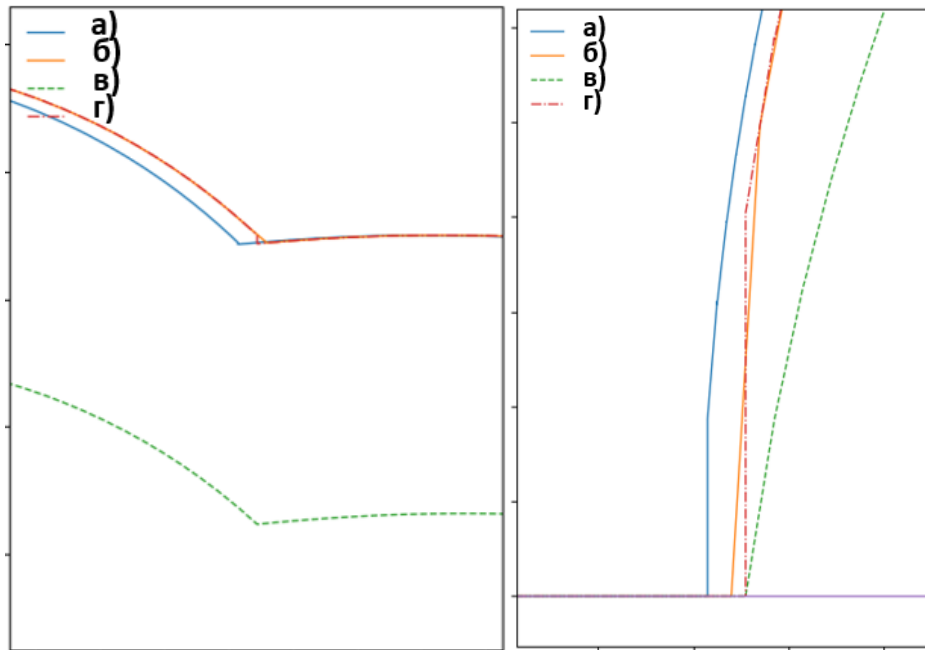


Рис. 4.6 Ті ж криві, що й на рис. 4.5 в збільшеному масштабі поблизу краю виступу (ліворуч) та біля границі об'єкта (праворуч).

Розрахунки показують, що найбільш точно форму напівциліндра вдається відновити використавши одночасно товщину і кути нахилу, а отже при врахуванні впливу на профіль інтенсивності одночасно як поглинання, так і заломлення.

4.4. Висновки

В даному розділі розглянуто особливості використання АВІ-способу формування зображень некристалічних об'єктів, пов'язані із впливом на зображення різномасштабних неоднорідностей як об'єкта, так і кристалів монохроматора та аналізатора. Як було показано, картина розсіяння суттєво залежить від ефектів багатократності розсіяння в усіх елементах тривісьової схеми. При цьому значний вплив на зображення мають такі інструментальні фактори як відстані між елементами обладнання, що обумовлює необхідність їх врахування.

Використання запропонованого теоретичного підходу, в рамках якого строго описується розсіяння випромінення як в кристалах монохроматора і аналізатора, так і в об'єкті, надає можливість розв'язання оберненої задачі, та, в результаті, визначення характеристик некристалічного об'єкту. Результати розрахунків, проведених для модельного об'єкту підтверджують можливість та демонструють особливості реконструкції форми об'єкта за набором профілів інтенсивності.

ОСНОВНІ РЕЗУЛЬТАТИ ТА ВИСНОВКИ

В роботі створено теоретичні основи для опису процесів заломлення рентгенівського випромінення у багат шарових некристалічних об'єктах довільної форми, а також розроблено і апробовано підходи на основі запропонованої теоретичної моделі, що дозволять усунути недоліки та покращити існуючі методи діагностики некристалічних об'єктів. Зокрема:

1. Вперше побудовано теоретичну тривісьову модель динамічного розсіювання та формування зображень багат шарових некристалічних об'єктів довільної форми з урахуванням ефектів багатократності розсіювання як у об'єкті, так і в монокристалах монохроматора і аналізатора.

Зокрема, обґрунтовано і адаптовано колонкове наближення для опису формування топографічних зображень багат шарових некристалічних об'єктів довільної форми. При цьому встановлено можливості та особливості суттєвого впливу на картину розсіювання як параметрів самого некристалічного об'єкта, так і однорідно та неоднорідно розподілених дефектів у кристалах монохроматора і аналізатора та інших інструментальних факторів.

Показано, що колонкове розбиття є необхідним для аналітичного опису розсіювання у об'єктах довільної форми та є застосовним для більшості некристалічних об'єктів внаслідок малості кутів рефракції високоенергетичного випромінення, і при цьому дозволяє достатньо повно описувати структурні особливості об'єктів.

Вперше враховано у явному вигляді процеси багатократного перерозсіювання між шарами багат шарових об'єктів. При цьому продемонстровано можливість використання квантово-механічного підходу із застосуванням граничних умов для опису цих процесів багатократного перерозсіювання між шарами. Даний результат разом із доведенням еквівалентності з точністю до перепозначень основних рівнянь динамічної теорії розсіювання для різних типів випромінення забезпечив можливість використовувати запропонований квантово-механічний формалізм безвідносно до природи скануючого випромінення (рентгенівське випромінення, електрони або

нейтрони) та став фундаментом для подальшого розвитку теорії для некристалічних об'єктів.

2. Вперше з використанням побудованої моделі аналітично встановлено взаємозв'язок характеристик досліджуваного некристалічного багат шарового об'єкта, а саме форми, розмірів, коефіцієнтів заломлення і поглинання для шарів кожної колонки, тобто параметрів неоднорідностей структури об'єкта, зі спостережуваними експериментально параметрами картини розсіяння, та відповідно кутами рефракції, змінами фаз, коефіцієнтами екстинкції. На цій основі розроблено принципи фазоваріаційної діагностики неоднорідних багат шарових некристалічних об'єктів.

Зокрема показано, що опис процесу взаємодії випромінення із некристалічним об'єктом в рамках запропонованого квантово-механічного підходу дозволяє враховувати зміни параметрів скануючого пучка при послідовній взаємодії з кожним структурним елементом (шаром, дефектом, тощо) для всіх вузлів тривісьової схеми та, як наслідок, дозволяє відокремити інформацію про вплив саме тих частин оптичної схеми, що досліджуються. При цьому на відміну від існуючих спрощених моделей даний підхід дозволяє на кожному кроці оцінити межі застосовності моделі та встановити критерії коректності отриманих результатів.

3. В результаті на основі побудованої тривісьової моделі та отриманих аналітичних формул запропоновано та реалізовано фазоваріаційний метод розв'язку оберненої задачі розсіяння. При цьому забезпечено можливість вирішення проблеми захисту від паразитного впливу інструментальних факторів на зображення та чисельним експериментом підтверджено працездатність та ефективність розробленого підходу у діагностиці багат шарових некристалічних об'єктів.

Зокрема, продемонстровано вплив окремих інструментальних факторів тривісьової схеми, таких як відстань між кристалом-аналізатором і об'єктом, наявність неоднорідностей в різних елементах оптичної схеми та ін., і показано, що навіть при невеликому внеску від окремих факторів, при наявності одночасно декількох із них внаслідок взаємного впливу картина розсіяння може набути

значних змін. Це обумовлює необхідність для коректного розв'язання задачі розсіювання врахування усіх чинників, що впливають на формування профіля інтенсивності.

При цьому показано, що використання фазоваріаційного підходу в процесі розв'язку оберненої задачі розсіювання дозволяє при аналізі спостережуваних величин виділити параметри, пов'язані відповідно з окремими характеристиками некристалічного об'єкта, такими як товщина, форма чи склад речовини, та як наслідок використати найбільш інформативні і при цьому найменш спотворені величини для відтворення форми об'єкта.

ПЕРЕЛІК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

1. Zernike, F. (1942). Phase contrast, a new method for the microscopic observation of transparent objects. *Physica*, 9(7), 686-698.
2. Hemberg, O., Otendal, M., & Hertz, H. (2003). Liquid-metal-jet anode electron-impact x-ray source. *Applied Physics Letters*, 83(7), 1483-1485.
3. Сторижко, В., Дрозденко, А., Мирошніченко, В., & Пономарев, А. (2006). In International Conference Current Problems in Nuclear Physics and Atomic Energy NPAE (p. 745). Kyiv.
4. Turcu, I., Ross, I., Trenda, P., Wharton, C., Meldrum, R., & Daido, H. et al. (2015). In SPIE 1994 (p. 243).
5. Nesterets, Y., & Wilkins, S. (2008). Phase-contrast imaging using a scanning-doublegrating configuration. *Optics Express*, 16(8), 5849.
6. Bonse, U., & Hart, M. (1965). An X-ray Interferometer. *Applied Physics Letters*, 6(8), 155-156.
7. Ando, M., & Hosoya, S. (1972). In 6th International Conference of X-ray Optics and Microanalysis (p. 63). Tokyo: University of Tokyo Press.
8. Momose, A. (1995). Demonstration of phase-contrast X-ray computed tomography using an X-ray interferometer. *Nuclear Instruments And Methods In Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors And Associated Equipment*, 352(3), 622-628.
9. Momose, A. (2005). Recent Advances in X-ray Phase Imaging. *Japanese Journal Of Applied Physics*, 44(9A), 6355-6367.

10. Momose, A., Takeda, T., Itai, Y., Yoneyama, A., & Hirano, K. (1998). Phase-Contrast Tomographic Imaging Using an X-ray Interferometer. *Journal Of Synchrotron Radiation*, 5(3), 309-314.
11. Ghiglia, D., & Pritt, M. (1998). Two-dimensional phase unwrapping. New York, N.Y.: Wiley.
12. Takeda, M., Ina, H., & Kobayashi, S. (1982). Fourier-transform method of fringe-pattern analysis for computer-based topography and interferometry. *Journal Of The Optical Society Of America*, 72(1), 156.
13. Yoneyama, A., Takeda, T., Tsuchiya, Y., Wu, J., Lwin, T., & Hyodo, K. (2005). Coherence-contrast x-ray imaging based on x-ray interferometry. *Applied Optics*, 44(16), 3258.
14. Koyama, I., Yoshikawa, H., & Momose, A. (2003). Simulation study of phase-contrast X-ray imaging with a triple Laue-case and a triple Bragg-case interferometers. *Journal De Physique IV (Proceedings)*, 104, 563-566.
15. Momose, A., Takeda, T., Yoneyama, A., Koyama, I., & Itai, Y. (2001). Phase-Contrast X-Ray Imaging Using an X-Ray Interferometer for Biological Imaging. *Analytical Sciences*, 17, Supplement Issue: i527
16. Momose, A., Takeda, T., Yoneyama, A., Koyama, I., & Itai, Y. (2001). Wide-area phase-contrast X-ray imaging using large X-ray interferometers. *Nuclear Instruments And Methods In Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors And Associated Equipment*, 467-468, 917-920.
17. Yoneyama, A., Amino, N., Mori, M., Kudoh, M., Takeda, T., Hyodo, K., & Hirai, Y. (2006). Non-invasive and Time-Resolved Observation of Tumors Implanted in Living Mice by Using Phase-Contrast X-ray Computed Tomography. *Japanese Journal Of Applied Physics*, 45(3A), 1864-1868.

18. Momose, A. (2003). Phase-sensitive imaging and phase tomography using X-ray interferometers. *Optics Express*, 11(19), 2303.
19. Phase-contrast X-ray imaging. Retrieved from http://en.wikipedia.org/wiki/Phase-contrast_X-ray_imaging
20. Wen, H., Gomella, A., Patel, A., Lynch, S., Morgan, N., & Anderson, S. et al. (2013). Subnanoradian X-ray phase-contrast imaging using a far-field interferometer of nanometric phase gratings. *Nature Communications*, 4(1).
21. Wen, H., Gomella, A., Patel, A., Wolfe, D., Lynch, S., Xiao, X., & Morgan, N. (2014). Boosting phase contrast with a grating Bonse-Hart interferometer of 200 nanometre grating period. *Philosophical Transactions Of The Royal Society A: Mathematical, Physical And Engineering Sciences*, 372(2010), 20130028-20130028.
22. Kemble, C., Auxier, J., Lynch, S., Bennett, E., Morgan, N., & Wen, H. (2010). Grazing angle Mach-Zehnder interferometer using reflective phase gratings and a polychromatic, un-collimated light source. *Optics Express*, 18(26), 27481
23. Momose, A., & Fukuda, J. (1995). Phase-contrast radiographs of nonstained rat cerebellar specimen. *Medical Physics*, 22(4), 375-379.
24. Momose, A., Kawamoto, S., Koyama, I., Hamaishi, Y., Takai, K., & Suzuki, Y. (2003). Demonstration of X-Ray Talbot Interferometry. *Japanese Journal Of Applied Physics*, 42(Part 2, No. 7B), L866-L868.
25. Weitkamp, T., Diaz, A., David, C., Pfeiffer, F., Stampanoni, M., Cloetens, P., & Ziegler, E. (2005). X-ray phase imaging with a grating interferometer. *Optics Express*, 13(16), 6296.

26. Talbot, H. (1836). LXXVI. Facts relating to optical science. No. IV. *The London, Edinburgh, And Dublin Philosophical Magazine And Journal Of Science*, 9(56), 401-407.
27. Cloetens, P., Guigay, J., De Martino, C., Baruchel, J., & Schlenker, M. (1997). Fractional Talbot imaging of phase gratings with hard x rays. *Optics Letters*, 22(14), 1059.
28. Clauser, J. (1998). Ultrahigh Resolution Interferometric X-ray Imaging. U.S. patent No. 5812629
29. Bech, M. (2009). *X-ray Imaging with a Grating Interferometer* (Ph.D). Copenhagen: Niels Bohr Institute, University of Copenhagen..
30. Bevins, N., Zambelli, J., Li, K., Qi, Z., & Chen, G. (2011). Multicontrast x-ray computed tomography imaging using Talbot-Lau interferometry without phase stepping. *Medical Physics*, 39(1), 424-428.
31. Miao, H., Chen, L., Bennett, E., Adamo, N., Gomella, A., & DeLuca, A. et al. (2013). Motionless phase stepping in X-ray phase contrast imaging with a compact source. *Proceedings Of The National Academy Of Sciences*, 110(48), 19268-19272.
32. Pfeiffer, F., Bech, M., Bunk, O., Kraft, P., Eikenberry, E., & Brönnimann, C. et al. (2008). Hard-X-ray dark-field imaging using a grating interferometer. *Nature Materials*, 7(2), 134-137.
33. Kottler, C., David, C., Pfeiffer, F., & Bunk, O. (2007). A two-directional approach for grating based differential phase contrast imaging using hard x-rays. *Optics Express*, 15(3), 1175.
34. Berry, M., & Klein, S. (1996). Integer, fractional and fractal Talbot effects. *Journal Of Modern Optics*, 43(10), 2139-2164.

35. Zhou, T., Lundström, U., Thüring, T., Rutishauser, S., Larsson, D., & Stampanoni, M. et al. (2013). Comparison of two x-ray phase-contrast imaging methods with a microfocus source. *Optics Express*, 21(25), 30183.
36. Pfeiffer, F., Weitkamp, T., Bunk, O., & David, C. (2006). Phase retrieval and differential phase-contrast imaging with low-brilliance X-ray sources. *Nature Physics*, 2(4), 258-261.
37. Diemoz, P., Bravin, A., Langer, M., & Coan, P. (2012). Analytical and experimental determination of signal-to-noise ratio and figure of merit in three phase-contrast imaging techniques. *Optics Express*, 20(25), 27670.
38. Diemoz, P., Bravin, A., & Coan, P. (2012). Theoretical comparison of three X-ray phase-contrast imaging techniques: propagation-based imaging, analyzer-based imaging and grating interferometry. *Optics Express*, 20(3), 2789.
39. Snigirev, A., Snigireva, I., Kohn, V., Kuznetsov, S., & Schelokov, I. (1995). On the possibilities of x-ray phase contrast microimaging by coherent high-energy synchrotron radiation. *Review Of Scientific Instruments*, 66(12), 5486-5492
40. Wilkins, S., Gureyev, T., Gao, D., Pogany, A., & Stevenson, A. (1996). Phase-contrast imaging using polychromatic hard X-rays. *Nature*, 384(6607), 335-338.
41. Lundström, U., Larsson, D., Burvall, A., Takman, P., Scott, L., Brismar, H., & Hertz, H. (2012). X-ray phase contrast for CO₂microangiography. *Physics In Medicine And Biology*, 57(9), 2603-2617
42. Cloetens, P., Ludwig, W., Baruchel, J., Guigay, J., Pernot-Rejmánková, P., & Salomé-Pateyron, M. et al. (1999). Hard x-ray phase imaging using simple propagation of a coherent synchrotron radiation beam. *Journal Of Physics D: Applied Physics*, 32(10A), A145-A151.

43. Tafforeau, P., Boistel, R., Boller, E., Bravin, A., Brunet, M., & Chaimanee, Y. et al. (2006). Applications of X-ray synchrotron microtomography for non-destructive 3D studies of paleontological specimens. *Applied Physics A*, 83(2), 195-202.
44. Larsson, D., Lundström, U., Westermarck, U., Arsenian Henriksson, M., Burvall, A., & Hertz, H. (2013). First application of liquid-metal-jet sources for small-animal imaging: High-resolution CT and phase-contrast tumor demarcation. *Medical Physics*, 40(2), 021909.
45. Gradl, R., Dierolf, M., Hehn, L., Günther, B., Yildirim, A., & Gleich, B. et al. (2017). Propagation-based Phase-Contrast X-ray Imaging at a Compact Light Source. *Scientific Reports*, 7(1).
46. Cloetens, P., Ludwig, W., Baruchel, J., Van Dyck, D., Van Landuyt, J., Guigay, J., & Schlenker, M. (1999). Holotomography: Quantitative phase tomography with micrometer resolution using hard synchrotron radiation x rays. *Applied Physics Letters*, 75(19), 2912-2914.
47. Ingal, V., & Beliaevskaya, E. (1995). X-ray plane-wave topography observation of the phase contrast from a non-crystalline object. *Journal Of Physics D: Applied Physics*, 28(11), 2314-2317.
48. Davis, T., Gao, D., Gureyev, T., Stevenson, A., & Wilkins, S. (1995). Phase-contrast imaging of weakly absorbing materials using hard X-rays. *Nature*, 373(6515), 595-598.
49. Бушуев, В., & Сергеев, А. (1998). Новые возможности метода фазового контраста для рентгеновской диагностики атеросклероза. *Письма В ЖТФ*, 24(21), 55.
50. Бушуев, В., & Сергеев, А. (1999). Обратная задача в методе рентгеновского фазового контраста. *Письма В ЖТФ*, 25(3), 1-7.

51. Петраков, А. (2003). Рентгеновский метод фазового контраста и демонстрация применения его для исследования кровеносных сосудов на модельном объекте. *ЖТФ*, 73(5), 84.
52. Muehleman, C., Fogarty, D., Reinhart, B., Tzvetkov, T., Li, J., & Nesch, I. (2010). In-laboratory diffraction-enhanced X-ray imaging for articular cartilage. *Clinical Anatomy*, 23(5), 530-538
53. Pagot, E., Cloetens, P., Fiedler, S., Bravin, A., Coan, P., & Baruchel, J. et al. (2003). A method to extract quantitative information in analyzer-based x-ray phase contrast imaging. *Applied Physics Letters*, 82(20), 3421-3423.
54. Ando, M., Sugiyama, H., Maksimenko, A., Pattanasiriwisawa, W., Hyodo, K., & Zhang. (2001). A New Optics for Dark-Field Imaging in X-Ray Region 'Owl'. *Japanese Journal Of Applied Physics*, 40(Part 2, No. 8A), L844-L846
55. Olivo, A., Arfelli, F., Cantatore, G., Longo, R., Menk, R., & Pani, S. et al. (2001). An innovative digital imaging set-up allowing a low-dose approach to phase contrast applications in the medical field. *Medical Physics*, 28(8), 1610-1619.
56. Munro, P., Ignatyev, K., Speller, R., & Olivo, A. (2010). Source size and temporal coherence requirements of coded aperture type x-ray phase contrast imaging systems. *Optics Express*, 18(19), 19681.
57. Munro, P., Hagen, C., Szafraniec, M., & Olivo, A. (2013). A simplified approach to quantitative coded aperture X-ray phase imaging. *Optics Express*, 21(9), 11187.
58. Munro, P., Ignatyev, K., Speller, R., & Olivo, A. (2012). Phase and absorption retrieval using incoherent X-ray sources. *Proceedings Of The National Academy Of Sciences*, 109(35), 13922-13927.

59. Ignatyev, K., Munro, P., Chana, D., Speller, R., & Olivo, A. (2011). A New Generation of X-ray Baggage Scanners Based on a Different Physical Principle. *Materials*, 4(10), 1846-1860.
60. Marenzana, M., Hagen, C., Borges, P., Endrizzi, M., Szafraniec, M., Ignatyev, K., & Olivo, A. (2012). Visualization of small lesions in rat cartilage by means of laboratory-based x-ray phase contrast imaging. *Physics In Medicine And Biology*, 57(24), 8173-8184.
61. Endrizzi, M., Diemoz, P., Munro, P., Hagen, C., Szafraniec, M., & Millard, T. et al. (2013). Applications of a non-interferometric x-ray phase contrast imaging method with both synchrotron and conventional sources. *Journal Of Instrumentation*, 8(05), C05008-C05008.
62. Olivo, A., Ignatyev, K., Munro, P., & Speller, R. (2011). Noninterferometric phase-contrast images obtained with incoherent x-ray sources. *Applied Optics*, 50(12), 1765.
63. Olivo, A., & Speller, R. (2007). Modelling of a novel x-ray phase contrast imaging technique based on coded apertures. *Physics In Medicine And Biology*, 52(22), 6555-6573.
64. Olivo, A., Bohndiek, S., Griffiths, J., Konstantinidis, A., & Speller, R. (2009). A non-free-space propagation x-ray phase contrast imaging method sensitive to phase effects in two directions simultaneously. *Applied Physics Letters*, 94(4), 044108.
65. Кривоглаз, М. (1967). *Теория рассеяния рентгеновских лучей и тепловых нейтронов реальными кристаллами*. Москва: Наука.
66. Krivoglaz, M. (1996). *X-ray and neutron diffraction in nonideal crystals*. Berlin: Springer.

67. Молодкин, В., & Тихонова, Е. (1967). Влияние диффузного рассеяния на эффект Бормана. *ФММ*, 24(3), 385.
68. Молодкин, В. (1968). Динамическая теория рассеяния в неупорядоченных сплавах. *ФММ*, 25(3), 410.
69. Молодкин, В. (1969). Динамическая теория диффузного рассеяния электронов слабо искаженными кристаллами. *ФММ*, 27(4), 582.
70. Молодкин, В. (1980). Классификация дефектов кристалла по их влиянию на дифракцию излучений в рамках динамической теории рассеяния. I. Когерентное рассеяние (обзор). *Металлофизика*, 2(1), 3.
71. Gudzenko, G., Molodkin, V., & Novitskii, V. (1983). Dynamical Diffraction in Alloys. *Physica Status Solidi (A)*, 77(1), 115-120.
72. Даценко, Л., Молодкин, В., & Осинковский, М. (1988). *Динамическое рассеяние рентгеновских лучей реальными кристаллами* (р. 198). Киев: Наукова думка.
73. Molodkin, V., Olikhovskii, S., Kislovskii, E., Krivitsky, V., Len', E., & Pervak, E. et al. (2001). Double-crystal x-ray diffractometry of single crystals with microdefects. *Journal Of Physics D: Applied Physics*, 34(10A), A82-A86.
74. Molodkin, V., Olikhovskii, S., Kislovskii, E., Len, E., & Pervak, E. (2001). Bragg Diffraction of X-Rays by Single Crystals with Large Microdefects I. Generalized Dynamical Theory. *Physica Status Solidi (B)*, 227(2), 429-447.
75. Olikhovskii, S., Molodkin, V., Kislovskii, E., Len, E., & Pervak, E. (2002). Bragg Diffraction of X-Rays by Single Crystals with Large Microdefects. *Physica Status Solidi (B)*, 231(1), 199-212.

76. Kislovskii, E., Olikhovskii, S., Molodkin, V., Nemoshkalenko, V., Krivitsky, V., & Len, E. et al. (2002). Bragg Diffraction of X-Rays by Single Crystals with Large Microdefects. *Physica Status Solidi (B)*, 231(1), 213-221.
77. Молодкин, В., Низкова, А., Шпак, А., Мачулин, В., Кладько, В., & Прокопенко, И. и др. (2005). *Дифрактометрия наноразмерных дефектов и гетерослоев кристаллов* (р. 312). Киев: Академперіодика.
78. Molodkin, V., Olikhovskii, S., Kislovskii, E., Vladimirova, T., Skakunova, E., Seredenko, R., & Sheludchenko, B. (2008). Dynamical theoretical model of the high-resolution double-crystal x-ray diffractometry of imperfect single crystals with microdefects. *Physical Review B*, 78(22).
79. Molodkin, V., Kovalchuk, M., Shpak, A., Olikhovskii, S., Kyslovskyy, Y., & Nizkova, A. et al. (2009). Dynamical Bragg and Diffuse Scattering Effects and Implications for Diffractometry in the Twenty-First Century. In R. Barabash, G. Ice & E. Turchi, *Diffuse Scattering and the Fundamental Properties of Materials* (pp. 391-434). New Jersey: Momentum Press.
80. Fewster, P. (1996). X-ray analysis of thin films and multilayers. *Reports On Progress In Physics*, 59(11), 1339-1407.
81. Pietsch, U., Holy, V., & Baumbach, T. (2004). *High-Resolution X-Ray Scattering. From Thin Films to Lateral Nanostructures*. New York: Springer-Verlag.
82. Afanasev, A., Kovalchuk, M., Kovev, E., & Kohn, V. (1977). X-ray diffraction in a perfect crystal with disturbed surface layer. *Physica Status Solidi (A)*, 42(1), 415-422.
83. Молодкин, В., Ковальчук, М., Карнаухов, И., Мачулин, В., Сторишко, В., & Мухамеджанов, Э. и др. (2013). *Основы динамической*

высокоразрешающей дирактометрии функциональных материалов.
Нальчик: Кабардино-Балкарский университет.

84. Молодкин, В., Ковальчук, М., Карнаухов, И., Сторишко, В., Лизунова, С., & Дмитриев, С. и др. (2013). *Основы интегральной многопараметрической диффузодинамической дифрактометрии.* Нальчик: Кабардино-Балкарский университет.
85. Дмитрієв, С., Лізунова, С., Толмачов, М., Шелудченко, Б., Скакунова, О., & Молодкін, В. и др. (2017). Статистична теоретична модель динамічної бреггівської дифракції в двошаровій кристалічній системі з аморфним поверхневим шаром. *Металлофиз. Новейшие Технол.*, 39(12), 1587–1610.
86. Дмитрієв, С., Молодкін, В., Толмачов, М., Скакунова, О., Лізунова, С., & Лехняк, Р. и др. (2017). Ефекти повної багатократності дифузного розсіяння в кристалах з дефектами другого класу за Кривоглазом. *Металлофиз. Новейшие Технол.*, 39(1), 1-9.
87. Скапа, Л., Лизунов, В., Молодкин, В., Лень, Е., Шелудченко, Б., & Лизунова, С. и др. (2015). Дисперсионные эффекты взаимосвязанности зависимостей от различных условий дифракции картины рассеяния и колоссального усиления этих зависимостей и их структурной чувствительности и информативности. *Металлофиз. Новейшие Технол.*, 37(11), 1567–1582.
88. Дмитриев, С., Лехняк, Р., Молодкин, В., Лизунов, В., Скапа, Л., & Скакунова, Е. и др. (2015). Теория динамического фактора Кривоглаза–Дебая–Валлера. *Металлофиз. Новейшие Технол.*, 37(9), 1169–1181.
89. Пинскер, З. (1982). *Рентгеновская кристаллооптика.* Москва: Наука.
90. Шелудченко, Б., Молодкин, В., Лизунова, С., Олиховский, С., Кисловский, Е., & Гаевский, А. и др. (2014). Теоретическая трёхосевая

модель динамического рассеяния и формирования изображений некристаллических объектов. *Металлофиз. Новейшие Технол.*, 36(4), 559-573.

91. Wilkins, S., Nesterets, Y., Gureyev, T., Mayo, S., Pogany, A., & Stevenson, A. (2014). On the evolution and relative merits of hard X-ray phase-contrast imaging methods. *Philosophical Transactions Of The Royal Society A: Mathematical, Physical And Engineering Sciences*, 372(2010), 20130021-20130021.
92. Olivo, A. , Castelli, E. (2014). X-ray phase contrast imaging: From synchrotrons to conventional sources. *Riv. Del Nuovo Cim.*, 37 (9) 467–508
93. Endrizzi, M. (2018). X-ray phase-contrast imaging. *Nuclear Instruments And Methods In Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors And Associated Equipment*, 878, 88-98.
94. Goetz, K., Kalashnikov, M., Mikhaïlov, Y., Sklizkov, G., Fedotov, S., Foerster, E., & Zaumseil, P. (1979). Measurements of the parameters of shell targets for laser thermonuclear fusion using an x-ray schlieren method. *Soviet Journal Of Quantum Electronics*, 9(5), 607-610.
95. Förster, E., Goetz, K., & Zaumseil, P. (1980). Double crystal diffractometry for the characterization of targets for laser fusion experiments. *Kristall Und Technik*, 15(8), 937-945.
96. Suortti, P., Keyriläinen, J., & Thomlinson, W. (2013). Analyser-based x-ray imaging for biomedical research. *Journal Of Physics D: Applied Physics*, 46(49), 494002.
97. Chapman, D., Thomlinson, W., Johnston, R., Washburn, D., Pisano, E., & Gmür, N. et al. (1997). Diffraction enhanced x-ray imaging. *Physics In Medicine And Biology*, 42(11), 2015-2025.

98. Dilmanian, F., Zhong, Z., Ren, B., Wu, X., Chapman, L., Orion, I., & Thomlinson, W. (2000). Computed tomography of x-ray index of refraction using the diffraction enhanced imaging method. *Physics In Medicine And Biology*, 45(4), 933-946.
99. Nesterets, Y., Coan, P., Gureyev, T., Bravin, A., Cloetens, P., & Wilkins, S. (2006). On qualitative and quantitative analysis in analyser-based imaging. *Acta Crystallographica Section A Foundations Of Crystallography*, 62(4), 296-308.
100. Suhonen, H., Fernández, M., Bravin, A., Keyriläinen, J., & Suortti, P. (2007). Refraction and scattering of X-rays in analyzer-based imaging. *Journal Of Synchrotron Radiation*, 14(6), 512-521.
101. Kitchen, M., Pavlov, K., Siu, K., Menk, R., Tromba, G., & Lewis, R. (2007). Analyser-based phase contrast image reconstruction using geometrical optics. *Physics In Medicine And Biology*, 52(14), 4171-4187.
102. Oltulu, O., Zhong, Z., Hasnah, M., Wernick, M., & Chapman, D. (2003). Extraction of extinction, refraction and absorption properties in diffraction enhanced imaging. *Journal Of Physics D: Applied Physics*, 36(17), 2152-2156.
103. Wernick, M., Wirjadi, O., Chapman, D., Zhong, Z., Galatsanos, N., & Yang, Y. et al. (2003). Multiple-image radiography. *Physics In Medicine And Biology*, 48(23), 3875-3895.
104. Nesterets, Y., Gureyev, T., Paganin, D., Pavlov, K., & Wilkins, S. (2004). Quantitative diffraction-enhanced x-ray imaging of weak objects. *Journal Of Physics D: Applied Physics*, 37(8), 1262-1274.
105. Nesterets, Y., Gureyev, T., Pavlov, K., Paganin, D., & Wilkins, S. (2006). Combined analyser-based and propagation-based phase-contrast imaging of weak objects. *Optics Communications*, 259(1), 19-31.

106. Afanas'ev, A., & Kohn, V. (1971). Dynamical theory of X-ray diffraction in crystals with defects. *Acta Crystallographica Section A*, 27(5), 421-430.
107. Molodkin, V., Velikhovskii, G., Lizunova, S., Lizunov, V., Sheludchenko, B., & Kislovskii, E. et al. (2016). Quantum-mechanical model for phase-contrast imaging of non-crystalline objects. *Materialwissenschaft Und Werkstofftechnik*, 47(2-3), 246-253.
108. Патон, Б., Молодкін, В., Карнаухов, І., Неклюдов, І., Сторіжко, В., & Горбик, П. та ін. (2016). Спосіб фазової рентгенографії некристалічного об'єкта довільних форми і розмірів. Патент України на винахід № 111437
109. Молодкін, В., Сторіжко, В., Лізунова, С., Шелудченко, Б., Лізунов, В., & Толмачов, М. та ін. (2015). Нові можливості створення фазоконтрастних томографів для медицини. *Наносистеми, Наноматеріали, Нанотехнології*, 13(3), 469-502.
110. Лизунова, С., Шелудченко, Б., Молодкин, В., Толмачёв, Н., Айс, Д., & Барабаш, Р. и др. (2017). Аналитическая модель формирования фазоконтрастных изображений неоднородных некристаллических объектов произвольной формы. *Металлофиз. Новейшие Технол.*, 39(2), 143–162.
111. Кумар, К. (1964). *Теория возмущений и проблема многих тел для атомного ядра*. Москва: Мир.
112. Лизунова, С., Молодкин, В., Шелудченко, Б., & Лизунов, В. (2013). Теория многократного (динамического) рассеяния в некристаллических объектах. *Металлофиз. Новейшие Технол.*, 35(11), 1585-1593.
113. Molodkin, V. (1981). *Phys. Metals.*, 3(3), 573.
114. Molodkin, V. (1981). *Phys. Metals.*, 3(4), 615.

115. Бушуев, В., Ингал, В., & Беляевская, Е. (1996). Динамическая теория формирования изображения некристаллических объектов в методе фазодисперсионной интроскопии. *Кристаллография*, 41(5), 808-816.
116. Keyriläinen, J., Fernández, M., & Suortti, P. (2002). Refraction contrast in X-ray imaging. *Nuclear Instruments And Methods In Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors And Associated Equipment*, 488(1-2), 419-427.
117. Molodkin, V., Velikhovskiy, G., Lizunova, S., & Lizunov, V. (2019). Dynamical diffraction model for phase-contrast analyzer-based imaging. *Optics Communications*, 439, 1-7.
118. Velikhovskiy, G., Molodkin, V., Lizunov, V., Vladimirova, T., Lizunova, S., Vasilik, Ya. et. al. (2019). Solving Direct and Inverse Scattering Problems for Heterogeneous Non-Crystalline Objects in Analyzer-Based Imaging, *Металлофиз. новейшие технол.*, 3, 1001–1003
119. Klimanek, P. (1996). X-Ray and Neutron Diffraction in Nonideal Crystals. *Zeitschrift Für Kristallographie - Crystalline Materials*, 211(8).
120. Pavlov, K., Gureyev, T., Paganin, D., Nesterets, Y., Morgan, M., & Lewis, R. (2004). Linear systems with slowly varying transfer functions and their application to x-ray phase-contrast imaging. *Journal Of Physics D: Applied Physics*, 37(19), 2746-2750.
121. Rigon, L., Besch, H., Arfelli, F., Menk, R., Heitner, G., & Plochow-Besch, H. (2003). A new DEI algorithm capable of investigating sub-pixel structures. *Journal Of Physics D: Applied Physics*, 36(10A), A107-A112.

Додаток 1

Список публікацій за темою дисертації

1. Шелудченко, Б., Молодкин, В., Лизунова, С., Олиховский, С., Кисловский, Е., Гаевский, А., Лизунов, В., Низкова, А., Владимирова, Т., Молодкин, В., Фузик, Е., Гошкодеря, А., Белоцкая, А., **Велиховский, Г.**, Музыченко, А. и Лехняк, Р. (2014) Теоретическая трехосевая модель динамического рассеяния и формирования изображений некристаллических объектов. *Металлофиз. новейшие технол.* 36 (4), 561–575.
2. Патон, Б., Молодкін, В., Карнаухов, І., Неклюдов, І., Сторіжко, В., Горбик, П., Низкова, Г., Оліховський, С., Гаєвський, О., Лізунова, С., Шелудченко, Б., Лізунов, В., Третьак, О., Репецкий, С., Толмачов, М., Шевченко, А., Фузік, К., Молодкін, В., **Веліховський, Г.** (2016) *Спосіб фазової рентгенографії некристалічного об'єкта довільних форми і розмірів*, Патент України на винахід № 111437
3. Молодкін, В., Сторіжко, В., Лізунова, С., Шелудченко, Б., Лізунов, В., Толмачов, М., Кисловський, Є., Оліховський, С., Вершинський, С., Денисенко, В., Фузік, К., **Веліховський, Г.**, Лехняк, Р., Лень, Є., Скапа, Л., Бровчук, С. (2015) Нові можливості створення фазоконтрастних томографів для медицини, *Наносистеми, наноматеріали, нанотехнології*. 13(3), 469–502.
4. Лизунова, С., Шелудченко, Б., Молодкин, В., Толмачёв, Н., Айс, Дж., Барабаш, Р., Сторижко, В., Лизунов, В., Фузик, Е., **Велиховский, Г.**, Молодкин, В., Дмитриев, С., Скапа, Л. (2017) Аналитическая модель формирования фазоконтрастных изображений неоднородных некристаллических объектов произвольной формы, *Металлофиз. новейшие технол.*, 39(2), 143–162.

5. Molodkin V., **Velikhovskii, G.**, Lizunova, S., Lizunov, V., Sheludchenko, B., Kislovskii, E., Vasilik, Ya., Skakunova, O., Dmitriev, S., Fuzik, K. And Lekhnyak, R. (2016). Quantum-Mechanical Model for Phase-Contrast Imaging of Non-Crystalline Objects, *Materialwissenschaft und Werkstofftechnik [Materials Science and Engineering Technology]*, 47(2–3), 246–253.
6. Дмитрієв, С., Лізунова, С., Толмачов, М., Шелудченко, Б., Скакунова, О., Молодкін, В., Лізунов, В., Голентус, І., Карпов, А., Войток, О., Почекуєв, В., Репецький, С., Вишивана, І., Скапа, Л., Барабаш, О., **Веліховський, Г.** (2017) Статистична теоретична модель динамічної бреггівської дифракції в двошаровій кристалічній системі з аморфним поверхневим шаром, *Металлофиз. новейшие технол.*, 39(12), 1587–1610.
7. Дмитрієв, С., Молодкін, В., Толмачов, М., Скакунова, О., Лізунова, С., Лехняк, Р., Фузик, К., **Веліховський, Г.**, Васькевич, О., Лізунов, В., Катасонов, А., Голентус, І., Оліховський, С., Скапа, Л., Молодкін, В. (2017) Ефекти повної багатократності дифузного розсіяння в кристалах з дефектами другого класу за Кривоглазом, *Металлофиз. новейшие технол.*, 39(1), 1–9.
8. Скапа, Л., Лизунов, В., Молодкин, В., Лень, Е., Шелудченко, Б., Лизунова, С., Скакунова, Е., Толмачев, Н., Дмитриев, С., Лехняк, Р., **Велиховский, Г.**, Молодкин, В., Заболотный, И., Фузик, Е., Васькевич, О. (2015) Дисперсионные эффекты взаимосвязанности зависимостей от различных условий дифракции картины рассеяния и колоссального усиления этих зависимостей и их структурной чувствительности и информативности, *Металлофиз. новейшие технол.* 37(11), 1567–1582.
9. Дмитриев, С., Лехняк, Р., Молодкин, В., Лизунов, В., Скапа, Л., Скакунова, Е., Лизунова, С., Олиховский, С., Лень, Е., Толмачев, Н., Шелудченко, Б., Фузик, Е., **Велиховский Г.** (2015) Теория динамического фактора Кривоглаза–Дебая–Валлера, *Металлофиз. новейшие технол.* 37(9), 1169–1181.

10. Molodkin, V., **Velikhovskiy, G.**, Lizunova, S., & Lizunov, V. (2019). Dynamical diffraction model for phase-contrast analyzer-based imaging. *Optics Communications*, 439, 1–7
11. **Velikhovskiy, G.**, Molodkin, V., Lizunov, V., Vladimirova, T., Lizunova, S., Vasilik, Ya., Kulish, M. and Pavlenko, O. (2019). Solving Direct and Inverse Scattering Problems for Heterogeneous Non-Crystalline Objects in Analyzer-Based Imaging, *Металлофиз. новейшие технол.*, 41(3), 1001–1003.