

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

ВЕЛІХОВСЬКИЙ ГЛІБ ОЛЕГОВИЧ



УДК 539.26:548.4

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

01.04.07 – фізика твердого тіла

Автореферат  
дисертації на здобуття наукового ступеня  
кандидата фізико-математичних наук

КИЇВ – 2019

Дисертацією є рукопис.

Роботу виконано у відділі фізики багатопараметричної структурної діагностики Інституту металофізики ім. Г. В. Курдюмова НАН України.

**Науковий керівник:** доктор фізико-математичних наук  
**Лізунов Вячеслав Вячеславович**,  
Інститут металофізики  
ім. Г. В. Курдюмова НАН України,  
завідувач відділу фізики багатопараметричної  
структурної діагностики

**Офіційні опоненти:** член-кореспондент НАН України,  
доктор фізико-математичних наук, професор  
**Кладько Василь Петрович**,  
Інститут напівпровідників  
ім. В. Є. Лашкарьова НАН України,  
завідувач відділу структурного і елементного  
аналізу матеріалів і систем  
доктор фізико-математичних наук, професор  
**Криворучко Володимир Миколайович**,  
Донецький фізико-технічний інститут  
ім. О. О. Галкина НАН України,  
заступник директора з наукової роботи

Захист відбудеться «2» липня 2019 р. о 14:00 годині на засіданні спеціалізованої вченої ради Д26.168.02 при Інституті металофізики ім. Г. В. Курдюмова НАН України за адресою: 03142, м. Київ, бульвар Акад. Вернадського, 36.

З дисертацією можна ознайомитися у науковій бібліотеці Інституту металофізики ім. Г. В. Курдюмова НАН України за адресою: 03142, м. Київ, бульвар Акад. Вернадського, 36.

Автореферат розіслано «31» травня 2019 року.

Вчений секретар  
спеціалізованої вченої ради Д26.168.02  
доктор фізико-математичних наук

Т. М. Радченко

## ЗАГАЛЬНА ХАРАКТЕРИСТИКА РОБОТИ

### **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 подальшій 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 унеможливорює 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 багат шарових 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 випромінювання з багат шаровими

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 вирішувалися 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 випромінювання та формування фазоконтрастних зображень багат шарових некристалічних об'єктів довільної форми у тривісній 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 випромінювання із некристалічною речовиною у багат шарових структурах та природа впливу ефектів багатократності розсіювання на формування тривісним 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 розсіювання та формування зображень багатошарових 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 багатошарових некристалічних об'єктів довільної форми та проведено врахування не лише динамічного розсіювання у шарах, а також і багатократності перерозсіювання між шарами. При цьому встановлено можливості та особливості суттєвого впливу на картину розсіювання 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 розсіювання, 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 розсіювання 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 багатошарових 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 [1–11], 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 [1–4]; на основі загальновіомої 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 [5, 6]; проведено аналіз впливу параметрів кристалів в межах тривісьового методу побудови фазоваріаційних зображень [7–9]; розроблено алгоритми та проведено розрахунки профілів інтенсивності і обґрунтовано працездатність моделі та запропоновано і проведено чисельний експеримент по розв'язанню оберненої задачі розсіювання [10, 11].

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.



## ОСНОВНИЙ ЗМІСТ ДИСЕРТАЦІЇ

У вступі наведено обґрунтування актуальності тематики та встановлено мету і задачі дослідження. Визначено об'єкт і предмет дослідження та вказано методи, що використовувалися у роботі. Також у вступі представлено дані про апробацію і відповідно наукову новизну отриманих результатів та подано загальну інформацію про структуру, обсяг і зміст роботи, публікації.

У першому розділі **“Способи неруйнівної діагностики некристалічних об'єктів”** проведено аналіз сучасних методів неруйнівної діагностики некристалічних об'єктів. Зокрема, відмічено, що для найбільш поширених методів, які використовують рентгенівське випромінення та для більшості досліджуваних матеріалів, в тому числі і некристалічних, коефіцієнт, що відповідає за заломлення променів суттєво більший за коефіцієнт, що описує поглинання. Оскільки контраст зображення виникає за рахунок різниці відповідних коефіцієнтів у різних частинах об'єкту, то чутливість методів, заснованих на заломленні, принципово набагато вища, ніж при використанні явища поглинання. При цьому, охарактеризовано необхідність при скануванні об'єктів високоенергетичним випроміненням враховувати всі, що впливають на формування зображення об'єктів, ефекти взаємодії променів із речовиною як у елементах оптичної схеми установки, так і в самому досліджуваному об'єкті. З огляду на це розглянуто основні та найбільш розвинені методи отримання фазоконтрастних зображень, що враховують як поглинання, так і заломлення променів.

В результаті аналізу фазоконтрастних методів з огляду на технічні вимоги, зокрема, такі, як відношення сигнал-шум, можливість масштабування та інші аспекти, 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 призводить до зміщення робочої точки по кривій відбивання кристала-аналізатора. Якщо кут заломлення достатньо великий, частина випромінення не потрапить на детектор. У випадку менших кутів заломлення будуть утворюватися області із суттєво

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.

В другому розділі **“Теоретичні основи тривісьового методу формування фазоконтрастних зображень”** викладено теоретичні засади для подальшого опису процесів розсіяння рентгенівського випромінення у різних елементах оптичної схеми.

На початку розділу обґрунтовується використання так-званого колонкового розбиття, що дає змогу описувати процеси у складних об'єктах довільної форми з використанням певного набору теоретичних спрощень, але без обмеження коректності результатів, та дозволяє встановити межі застосовності розвиненої таким чином теорії. В рамках колонкового підходу об'єкт умовно розбивається на малі паралельні області (колонки), кожна з яких в свою чергу розбивається на окремі шари. В рамках окремої колонки поверхні розділу між шарами вважаються плоскими, а речовина в середині шару в середньому однорідною.

Для обраного фазоконтрастного методу, а саме схеми з кристалом-аналізатором, визначальними елементами оптичної схеми є відповідно кристали монохроматора і аналізатора. При цьому досліджуваний об'єкт може складатися з різних речовин і мати складну будову. З огляду на це в другому розділі представлено модель опису рефракції у тривісьовій схемі побудови фазоконтрастних зображень та проведено аналітичний опис процесів заломлення випромінення для визначальної складової багатошарових систем, а саме для двошарових систем, що утворені шарами кристалічної та/або аморфної речовини.

Зокрема, розглянуто простий випадок аморфної плоско-паралельної однорідної пластини. Далі проведено узагальнення теорії на випадок двошарової системи. В рамках динамічного підходу отримано вираз для амплітуди хвилі після проходження двошарової системи, що містить інформацію про обидва шари. При цьому вказано, яким шляхом можна отримати узагальнені вирази для багатошарової системи.

З метою вичерпного описання та подальшого врахування всіх можливих ефектів у кристалах монохроматора і аналізатора представлено аналіз процесу заломлення на монокристалічній плоскопаралельній пластині. При цьому отримано вираз для коефіцієнту проходження хвилі, що описує когерентне розсіювання в кристалі та ефект екстинкції. Окремо вказано шляхи до врахування статистично розподілених дефектів кристалів та відповідно описання дифузного розсіювання. При цьому розглянуто граничні переходи, в межах яких результат динамічної теорії зводиться до відповідного результату кінематичної теорії розсіювання. Після цього отримано розв'язок для системи з монокристалічного та аморфного плоскопаралельних шарів. Зокрема, показано, що в такому випадку вплив аморфного шару на відбивну здатність кристала зводиться до поглинання.

Додатково проведено аналіз розсіювання на двошаровій кристалічній системі двома різними методами: методом підсумовування амплітуд та методом граничних умов. Метод підсумовування амплітуд явно враховує багатократне перерозсіювання відбитого випромінення між двома шарами як ітеративний процес. Спрямувавши порядок врахованих перерозсіювань до нескінченності, отримано вирази для повних коефіцієнтів відбивання і проходження даної системи. Встановлено аналітичний зв'язок між окремими множниками та трьома відповідними механізмами — фотоелектричним поглинанням, екстинкцією та багатократним перерозсіюванням:

$$E_{\text{ext}} = E_a E_e E_m = \exp\left(\frac{-iKd_k \chi_{0k}}{2\gamma}\right) \eta_{d2} \left(1 + \frac{(r_{\text{Hk}}^0)^2 e^{-2iA_k y_k}}{\zeta_k}\right) \left(1 - \frac{\eta_{d2} r_{\text{Hk}}^0 r_{\text{Hd}}^0}{\zeta_k \eta_{k2}}\right)^{-1},$$

де  $E_{\text{ext}}$  — амплітуда заломленої хвилі,  $E_a$ ,  $E_e$ ,  $E_m$  — множники, що описують поглинання, екстинкцію та перерозсіювання,  $K$  — модуль хвильового вектора,  $d_k$  — товщина шару, який розсіює кінематично,  $\chi_{0k}$  — сприйнятливість,  $r_{\text{Hk,d}}^0$  — коефіцієнти відбивання для шарів, які розсіюють кінематично та динамічно,  $A_k = \pi d_k / \Lambda$ ,  $\Lambda$  — глибина екстинкції. При цьому:

$$\gamma = \left( \frac{1}{\gamma_0} + \frac{1}{|\gamma_{\mathbf{H}}|} \right)^{-1}, \zeta = \sqrt{\frac{\chi_{\mathbf{H}}}{\chi_{-\mathbf{H}}}}, \eta_{nj} = \exp \left( iK \frac{\alpha_n}{\gamma_{\mathbf{H}}} t_j \right), y_k = -(\alpha + \alpha_0) \sqrt{b} / \sigma,$$

$$\alpha = \Delta\theta \sin 2\theta_{\text{В}}, \alpha_0 = \frac{\chi_0}{2} (1 + 1/b), b = \frac{\gamma_0}{|\gamma_{\mathbf{H}}|}, \sigma^2 = C^2 \chi_{\mathbf{H}} \chi_{-\mathbf{H}},$$

$\gamma_i = K_i/K = \sin\theta_i$  — направляючі синуси променів,  $\lambda$  — довжина хвилі випромінювання,  $t_j$  — глибина проходження променя в речовину,  $\Delta\theta$  — відхилення променя від точного бреггівського положення,  $\theta_{\text{В}}$  — кут Бреґга,  $C$  — поляризаційний коефіцієнт.

Окремо продемонстровано еквівалентність результатів, отриманих методом підсумовування амплітуд та методом граничних умов, що свідчить про повноту і можливість використання останнього в якості основного у подальшому аналізі.

У розділі **“Формування зображення некристалічних багатошарових об’єктів довільної форми”** проведено розгляд розсіяння випромінювання у некристалічних об’єктах довільної форми та з багатьма шарами і представлено чисельні розрахунки для простих модельних систем на основі створеної теорії.

Слід зазначити, що для випадку високоенергетичного випромінювання рівняння, що описують процес рефракції при переході в імпульсний простір (що широко використовується в роботі) будуть мати однаковий вигляд з точністю до позначень для випадків як рентгенівського, так і інших типів випромінювання, наприклад нейтронів. Через це починаючи з даного розділу для зручності викладки проводяться із використанням хвильової функції.

На початку розділу отримано вираз, що пов’язує потенціал взаємодії речовини і випромінювання з хвильовою функцією після розсіяння. При цьому показано перехід до відомих формул Френеля для коефіцієнтів проходження та відбиття. Показано також, що зручною величиною при описанні процесу розсіяння є коефіцієнт акомодатії випромінювання.

З метою детального послідовного розвинення теорії розглянуто випадок одношарового об’єкту з нормальним падінням на першу (вхідну) поверхню та відповідно падінням під певним кутом, що пов’язаний з формою об’єкта на другу (вихідну) поверхню. В рамках динамічного підходу отримано вираз для

залежності хвильової функції випромінення після виходу з об'єкта від таких його параметрів, як товщина, кут між поверхнями та потенціал взаємодії з речовиною. Згодом продемонстровано зміни, що виникають при довільному куті падіння на вхідну поверхню. В рамках цього розгляду встановлено принципи формування рефрагованого променя та відповідного кута рефракції.

Після цього детально описано тривісьову модель формування зображень в рамках методу з кристалом-аналізатором. Дана модель використовує вирази для відбивних здатностей монохроматора і аналізатора та рівняння, що описують розсіювання всередині досліджуваного некристалічного об'єкта. В рамках даного методу визначальними величинами є поглинання та кут рефракції, що безпосередньо пов'язані з такими характеристиками об'єкта як форма (кути нахилу), товщина і склад (параметри речовини) досліджуваного об'єкта.

Для подальшого узагальнення розглянуто та досліджено випадок багат шарового об'єкту. Дане узагальнення проводиться у вигляді ітеративної процедури поступового розгляду процесу розсіювання на кожному шарі в межах кожної колонки. При цьому встановлюється кількісний зв'язок між необхідними спрощеннями та межами застосовності теорії, що дає перевагу над іншими моделями, які одразу використовують грубі наближення та не розглядають випадки, коли наближення не виконуються.

В рамках описаного підходу отримано прості вирази для кута рефракції і зміни фази хвильової функції для багат шарового некристалічного об'єкту довільної форми за умови однорідного складу та відносно гладкої поверхні (масштаби неоднорідностей більші за розміри колонок).

Зокрема з урахуванням можливих наближень остаточний кут рефракції може бути представлений у вигляді

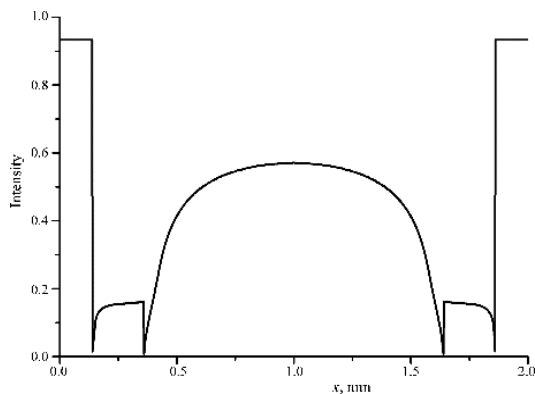
$$\varphi = -\sum_{i=1}^m \Delta_i \tan(\alpha_i),$$

а вираз для описання рефрагової хвилі

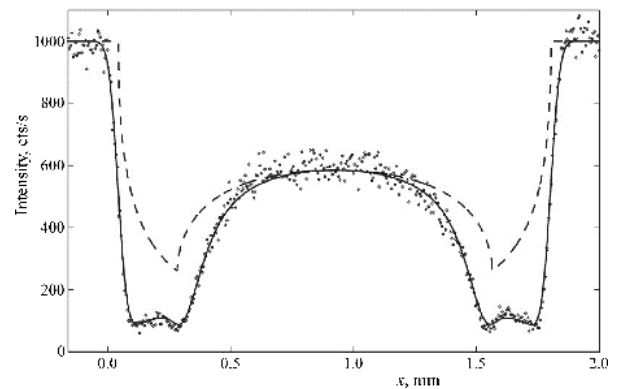
$$\Psi_{\mathbf{K}_m} = \Psi_{\mathbf{K}_0} e^{i\mathbf{K}_m \mathbf{r}} e^{i\mathbf{K}_0 \left( \sum_{i=1}^m l_i \Delta_i \right)},$$

містить інформацію про склад і структуру усіх шарів некристалічного об'єкта. Тут  $\varphi$  — кут рефракції,  $\Delta_i = (V_{i-1} - V_i) / 2K_0^2$  та  $\alpha_i$  — відповідно коефіцієнт акомодатії та кут падіння на поверхню  $i$ -го шару,  $\mathbf{K}_i$  — хвильовий вектор у цьому шарі,  $l_i$  — товщина шару, а  $V_i$  — потенціал взаємодії речовини із випроміненням.

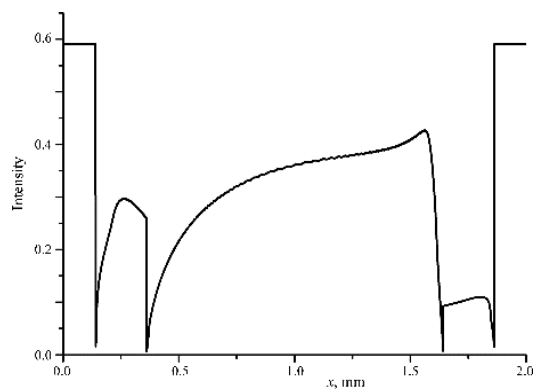
Для підтвердження адекватності розробленого підходу було проведено розрахунки із застосуванням даної теорії для ряду модельних об'єктів, зокрема, капронового дроту, акрилового стержня, капілярів із поліетилену і боросилікатного скла як порожніх, так і наповнених метиловим спиртом. Вибір модельних об'єктів був обумовлений наявністю для них експериментальних профілів інтенсивності, виміряних раніше іншими авторами. На рисунках 1, 2 представлено результати розрахунків для порожнього скляного капіляру із зовнішнім радіусом 0,88 мм і внутрішнім радіусом 0,64 мм та акрилового стержня радіусом 5 мм. При цьому розраховані інтенсивності були нормовані на інтенсивність скануючого пучка.



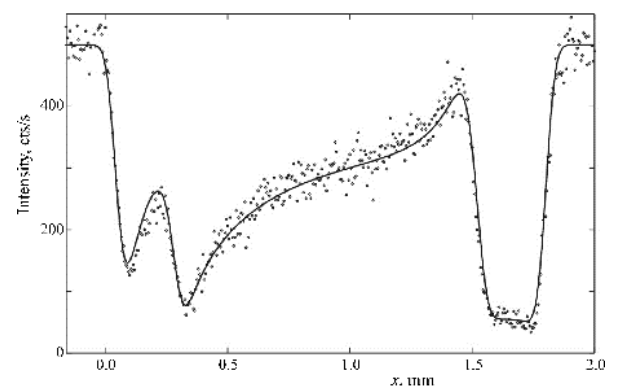
а



б



в



г

Рис. 1. Теоретичні розрахунки в рамках даного метода (а, в) та опорні результати (б, г) для скляного капіляру. Зсув аналізатора: 0 (а, б),  $-0.7''$  (в, г).

Таким чином, розраховані в рамках запропонованої теоретичної моделі профілі інтенсивності добре узгоджуються із експериментальними даними для модельних об'єктів. Отже, розроблена модель надає можливість для аналітичного опису отриманих фазоконтрастних зображень. Разом з тим, для визначення характеристик некристалічних об'єктів та вирішення оберненої задачі діагностики необхідно врахування певних додаткових інструментальних факторів, пов'язаних із експериментальною схемою вимірювання.

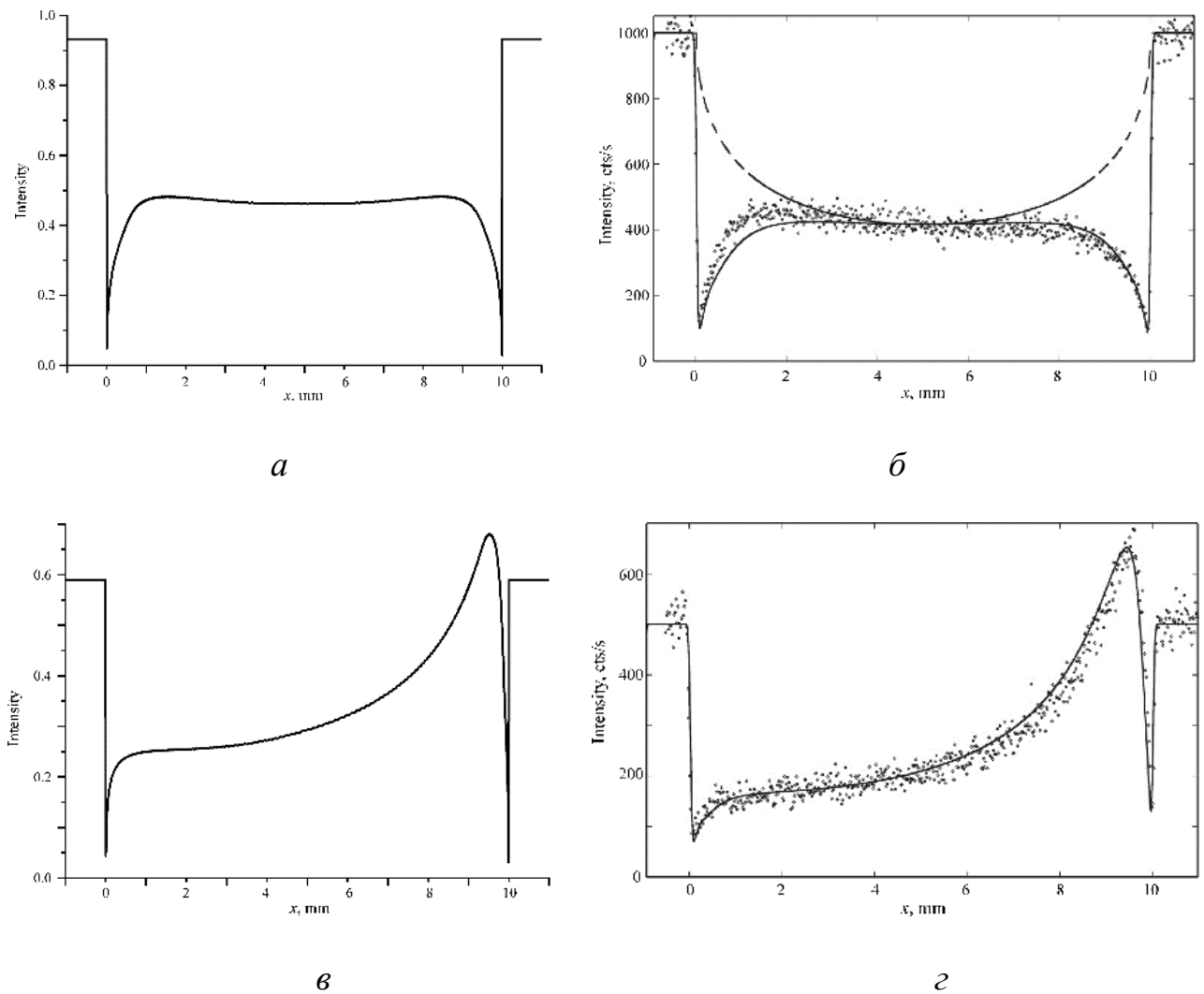


Рис. 2. Теоретичні розрахунки в рамках даного методу (а, в) та результати із роботи [32](б, г) профілів інтенсивності акрилового стержня. Зсув аналізатора відповідно: 0 (а, б),  $-0.7''$  (в, г).

У розділі “Вплив інструментальних факторів при розв’язку прямої і оберненої задач розсіювання” на основі використання розвиненої теорії було

визначено вплив на фазоконтрастні зображення неоднорідностей досліджуваного об'єкта і певних інструментальних факторів, а також продемонстровано можливість розв'язання оберненої задачі діагностики некристалічних об'єктів із урахуванням вищезазначених аспектів.

Так, в даному розділі було розглянуто вплив на формування профілей інтенсивності параметрів монохроматора і аналізатора. Показано, що для достатньо однорідних об'єктів вплив оптичної схеми на зображення об'єкту можна характеризувати згорнутими кривими, які описують залежність результуючої інтенсивності від кута зміщення аналізатора відносно монохроматора без об'єкта. Продemonстровано, що шляхом відповідного вибору кристалів монохроматора і аналізатора можна сформувати згорнуту криву з необхідними наперед заданими параметрами.

Крім того, показано суттєвий вплив неоднорідностей поверхні та складу об'єкта менших за розміри колонки, на процес формування зображення некристалічних об'єктів. Описано вплив масштабів оптичної схеми, а саме відстані між досліджуваним об'єктом і детектором на криву розсіюння і відповідно зображення, що обумовлює необхідність врахування відповідних факторів для отримання точного зображення.

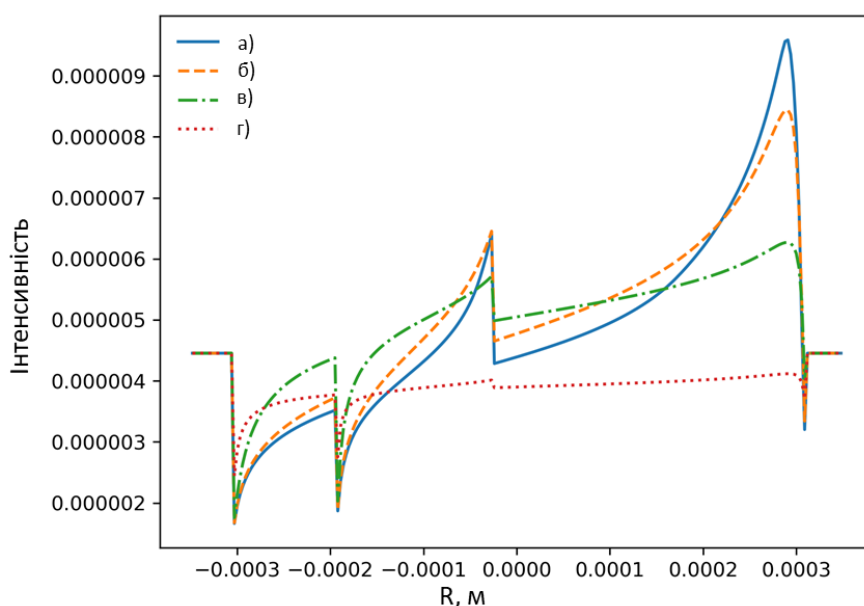


Рис. 3. Профілі інтенсивності при різному розмитті пучка: за відсутності розмиття (а), розмиття за Гауссом із півшириною 0.75" (б), 2" (в), 5" (г).



На рисунку 3 представлено профілі інтенсивності напівциліндра із боросилікатного скла радіусом 0,31 мм з округлим виступом радіусом 0,1 мм на поверхні, розраховані при різному розмитті пучка, що демонструють вплив мікронеоднорідностей на картину розсіяння. Наведені результати показують, що за наявності розмиття пучків відбувається суттєве згладжування піків та загальне зменшення інтенсивності після виходу з аналізатора. Врахування цього ефекту необхідне для коректного визначення параметрів некристалічного об'єкта.

На рисунку 4 продемонстровано вплив відстані між тим самим об'єктом і аналізатором на результуючий профіль інтенсивності. При достатньо великих відстанях між об'єктом та аналізатором внесок перерозподілу випромінення між колонками стає суттєвим. Отже, зміщуючи кристал-аналізатор відносно об'єкта можна цілеспрямовано змінювати форму профілю інтенсивності та, в результаті, покращити контрастність зображень.

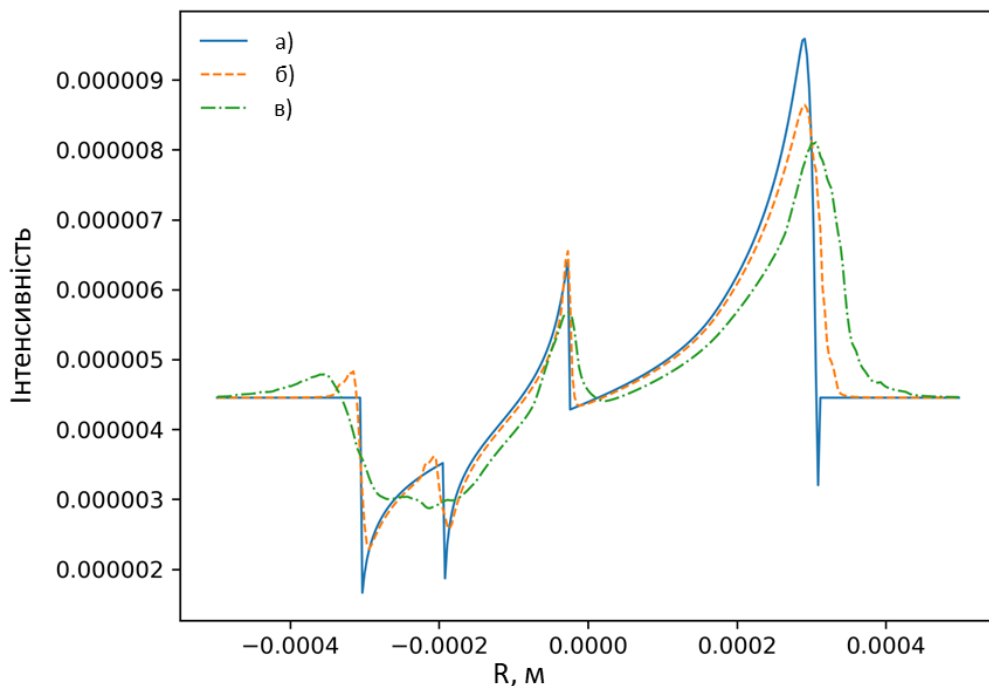


Рис. 4. Профілі інтенсивності при різних відстанях між об'єктом і аналізатором: 0 м (а), 1 м (б) та 5 м (в).

Профілі інтенсивності, наведені на рисунку 5, демонструють сумарний вплив двох факторів: розмиття пучка та вплив відстані до аналізатора. Навіть окремо один від одного ці фактори впливають на картину розсіяння, а разом їх

вплив стає ще більш суттєвим, що обумовлює неможливість нехтування навіть слабковираженими факторами.

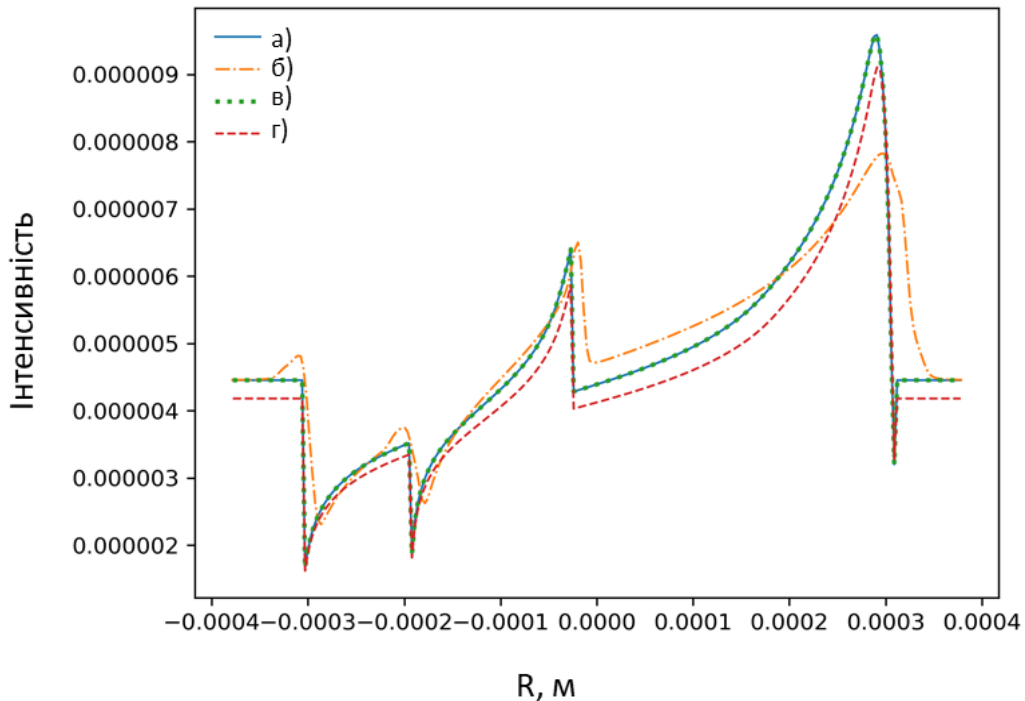


Рис. 5. Профілі розсіяння при відсутності перерозсіювання і нульовій відстані (а, в) та при перерозсіюванні 0.75 секунд і відстані 1 метр (б, г). Розрахунки проведено з використанням кривої гойдання (а, б) та методом послідовного розсіяння на кожному шарі (в, г).

Наприкінці розділу коротко описано розв'язок оберненої задачі розсіювання. Показано можливі шляхи відтворення характеристик об'єкта із різних спостережуваних величин. При цьому представлено результати чисельного експерименту із відтворенням форми простого модельного об'єкта у вигляді напівциліндра з виступом (рис. 6).

У процесі відтворення форми порівняно підходи із використанням інформації окремо про товщину колонки, кут нахилу поверхні і обидві характеристики разом. Показано, що суттєва похибка виникає в області кутів, близьких до 90 градусів, що відповідає описаним критеріям застосовності запропонованої теорії. Розраховані криві порівнювалися з вхідними даними, що підтвердило точність і можливість застосування моделі.

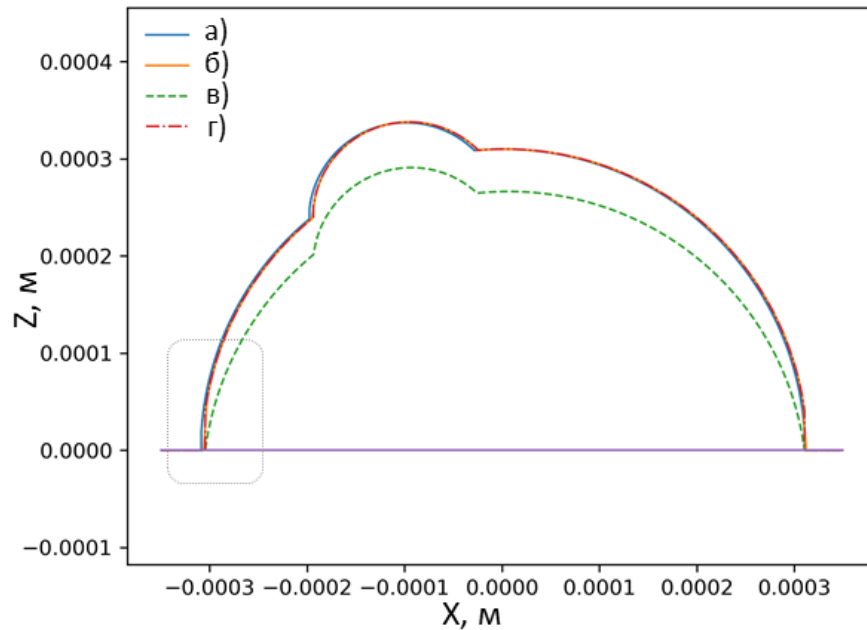


Рис. 6. Форма поверхні досліджуваного об'єкта: оригінальний контур (вхідні дані) (а), відновлення за товщиною (б), відновлення за кутом нахилу поверхні (в), комбіноване відновлення за кутом і товщиною (г).

### Основні результати та висновки

В роботі створено теоретичні основи для опису процесів заломлення рентгенівського випромінювання у багатошарових некристалічних об'єктах довільної форми, а також розроблено і апробовано підходи на основі запропонованої теоретичної моделі, що дозволяють усунути недоліки та покращити існуючі методи діагностики некристалічних об'єктів. Зокрема:

1. Вперше побудовано теоретичну тривісьову модель динамічного розсіювання та формування зображень багатошарових 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 багатошарових 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 випромінювання, і при цьому дозволяє достатньо повно описувати структурні особливості об'єктів.

Вперше враховано у явному вигляді процеси багатократного перерозсіювання між шарами багатошарових 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 випромінювання забезпечив можливість використовувати запропонований квантово-механічний формалізм безвідносно до природи скануючого випромінювання (рентгенівське випромінювання, 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 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 розсіювання, та відповідно кутами рефракції, змінами фаз, коефіцієнтами екстинкції. На цій основі розроблено принципи фазоваріаційної діагностики неоднорідних багатошарових некристалічних об'єктів.

Зокрема показано, що опис процесу взаємодії випромінювання 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 тривісгової 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 розсіювання. 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 розсіювання 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.

### **Список опублікованих праць 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., 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 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., and 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., Pavlenko, O., and Davydova Yu. (2019). Solving Direct and Inverse Scattering Problems for Heterogeneous Non-Crystalline Objects in Analyzer-Based Imaging, *Металлофиз. новейшие технол.*, 41(3), 375–388.

### 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 зі спеціальності 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 багатошарових некристалічних об'єктів довільної форми, а саме створенню теоретичних основ для опису процесів рефракції та формування в рамках тривісгової схеми фазоконтрастних зображень таких об'єктів.

В рамках квантово-механічного підходу при застосуванні колонкового розбиття розроблено модель, що описує вплив параметрів як зовнішньої поверхні об'єкта, так і поверхонь розділу між речовинами всередині нього, та власне самих речовин і розмірів та форми об'єкта на зміну характеристик скануючого променя.

На основі побудованої моделі та отриманих аналітичних формул запропоновано фазоваріаційний метод розв'язку оберненої задачі розсіювання. При цьому забезпечено можливість вирішення проблеми захисту від паразитного впливу інструментальних факторів на зображення та чисельним експериментом підтверджено працездатність розробленого підходу у діагностиці багатошарових некристалічних об'єктів.

**Ключові слова:** рентгенографія, динамічне розсіювання, фазоваріаційне зображення, рефракція, некристалічний об'єкт, обернена задача розсіювання, тривісгова схема.

## 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, National Academy of Sciences of Ukraine, Kyiv, 2019.

The dissertation is devoted to the development of methods of X-ray diagnostics of the internal structure of multi-layered non-crystalline objects of arbitrary shape, namely the creation of theoretical bases for describing the processes of refraction and forming of phase-contrast images of such objects within the triple-axis scheme.



Within the quantum-mechanical approach, using a column approximation, there was developed a model, which describes the influence of parameters of both the outer surface of the object and the surfaces between the substances inside it, and actually the substances themselves as well as the size and the shape of the object on the change of the characteristics of the scanning beam.

Based on the constructed model and the obtained analytical formulas, a phase variational method for solving the inverse scattering problem was proposed. This method provides the possibility to solve the problem of protection against the parasitic influence of instrumental factors on the image. The numerical experiment confirmed the efficiency of the developed approach in the diagnostics of multilayer non-crystalline objects.

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

## АННОТАЦИЯ

**Велиховский Г. О. Динамическая теория рассеяния в некристаллических многослойных объектах произвольной формы. — Квалификационная научная работа на правах рукописи.**

Диссертация на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.07 – физика твердого тела. — Институт металлофизики им. Г. В. Курдюмова НАН Украины, Киев, 2019

Диссертационная работа посвящена развитию методов рентгенографического исследования внутренней структуры многослойных некристаллических объектов произвольной формы.

В работе созданы теоретические основы для описания процессов преломления рентгеновского излучения в таких неоднородных некристаллических объектах, показано корректность полученных решений и их связь с результатами динамической теории рассеяния в кристаллах.

В частности, в рамках квантово-механического подхода при использовании колонкового разбиения создана модель, позволившая описать влияние

параметров сложного некристаллического объекта на характеристики картины рассеяния. При этом установлена связь между параметрами как внешней поверхности объекта, так и поверхностей раздела между веществами внутри него, составом объекта, его размерами и формой, и такими наблюдаемыми величинами как углы преломления, размытие (уширение) пучка и поглощение.

На основе построенной модели и полученных аналитических формул описаны особенности трёхосевой схемы построения фазоконтрастных изображений с учетом влияния различных инструментальных факторов, таких как дефекты в кристаллах монохроматора и анализатора, микронеоднородности объекта, масштабы системы и др. Для сравнения результатов, получаемых в рамках созданной модели, с известными экспериментальными данными, а также с ранее созданными упрощенными теоретическими подходами, проведен ряд расчетов, в рамках которых подтверждена корректность и работоспособность предложенной модели.

В результате предложен фазовариационный метод решения обратной задачи рассеяния с учетом ранее описанного влияния характеристик объекта и инструментальных факторов на картину рассеяния. Проведен численный эксперимент, в рамках которого ввиду возможных особенностей эксперимента показано несколько различных способов восстановления изначальной формы объекта на основе различных измеряемых величин, чем продемонстрировано возможности применения и практическую ценность созданной модели.

**Ключевые слова:** рентгенография, фазовариационное изображение, рефракция, некристаллический объект, обратная задача рассеяния, трёхосевая схема.