

## **ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ИЗЛУЧЕНИЯ И ЧАСТИЦ С КОНДЕНСИРОВАННЫМ ВЕЩЕСТВОМ**

PACS numbers: 07.85.Jy, 31.15.xr, 61.05.cc, 87.57.cj, 87.59.-e

### **Теоретическая трёхосевая модель динамического рассеяния и формирования изображений некристаллических объектов**

Б. В. Шелудченко, В. Б. Молодкин, С. В. Лизунова, С. И. Олиховский,  
Е. Н. Кисловский, А. Ю. Гаевский, В. В. Лизунов, А. И. Низкова,  
Т. П. Владимирова, В. В. Молодкин, Е. В. Фузик, А. В. Гошкодеря,  
А. А. Белоцкая, Г. О. Велиховский, А. А. Музыченко, Р. В. Лехняк

*Институт металлофизики им. Г. В. Курдюмова НАН Украины,  
бульв. Акад. Вернадского, 36,  
03680, ГСП, Киев-142, Украина*

В работе построена теоретическая трёхосевая модель динамического рассеяния и формирования изображений некристаллических (медико-биологических) объектов с учётом эффектов многократности рассеяния, как в объекте (в частности, эффекта преломления, описываемого только в рамках динамической теории), так и в монокристаллах монохроматора и анализатора, для которых также учтена возможность присутствия и при этом как однородно, так и неоднородно распределённых микродефектов и макродеформаций. Показана возможность существенного повышения информативности медицинской диагностики на основе использования созданной модели.

В роботі побудовано теоретичну тривісну модель динамічного розсіяння та формування зображень некристалічних (медично-біологічних) об'єктів з урахуванням ефектів багатократності розсіяння, як в об'єкті (зокрема, ефекту заломлення, який описується виключно в межах динамічної теорії), так і в монокристалах монохроматора і аналізатора, для яких також враховано можливість наявності і при цьому як однорідно, так і неоднорідно розподілених мікродефектів та макродеформацій. Показано можливість істотного підвищення інформативності медичної діагностики на основі використання створеної моделі.

Theoretical three-axis model of dynamical scattering and image formation of noncrystalline (biomedical) objects is developed with regards for multiple scattering effects in both the object (in particular, refraction effect described within the framework of the dynamical theory only) and single crystals of monochromator and analyser. The possibility of presence of both the homogeneously distributed microdefects and macrodistortions and the inhomogeneously ones is

taken into account. The possibility of significant enhancement of information capability of medical diagnostics based on the developed model is shown.

**Ключевые слова:** некристаллические объекты, преломление рентгеновских лучей, дисперсионный механизм, динамическая теория.

*(Получено 28 марта 2014 г.)*

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Существует возможность [1–15], обусловленная эффектами многократного (динамического) рассеяния, наблюдения и резкого повышения чувствительности и контрастности изображений медико-биологических объектов за счёт использования вместо явления поглощения явления преломления рентгеновских лучей (РЛ). Превышение коэффициентом преломления РЛ на три порядка величины коэффициента поглощения позволяет предел чувствительности к некристаллическим слабопоглощающим медико-биологическим объектам довести от их размеров  $\geq 5$  мм, обеспечивающих необходимый контраст интенсивности изображений при диагностике на основе использования поглощения, до размеров  $\geq 5$  мкм при использовании преломления. Однако кинематическая теория (приближение однократного рассеяния) не учитывает преломления лучей, которое является результатом дисперсионной перестройки нулевого для волновой функции приближения теории возмущений за счёт процессов многократности рассеяния от волны, проходящей без преломления, в преломлённую волну [16, 17]. Кроме того, предельно малые углы преломления лучей (десятые доли угловых секунд) затрудняют возможность формирования и обнаружения их вклада в изображения. По этой причине неоднородное пространственно-угловое распределение рентгеновского излучения за объектом, сформированное процессами многократного рассеяния, которые самосогласуют поглощение, преломление и экстинкцию слабо-расходящегося монохроматического пучка в объекте [17], исследуется хорошо известными методиками высокоразрешающей (также благодаря использованию эффектов многократности рассеяния) рентгеновской динамической дифрактометрии с помощью монокристаллов анализатора и монохроматора. Это обусловлено тем, что только такие динамически рассеивающие монокристаллы могут иметь полуширины кривых отражения порядка десятых долей угловых секунд, необходимые для выделения вклада преломлённого на такие углы луча.

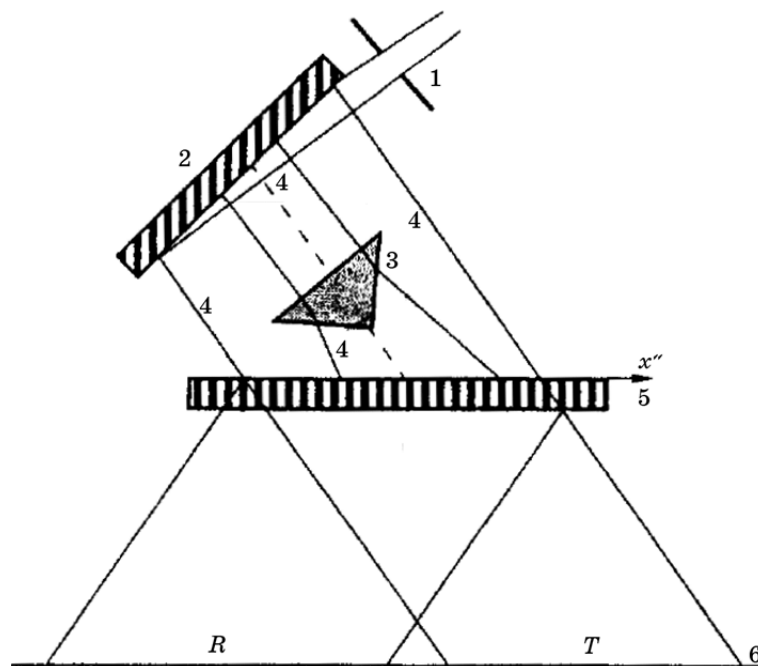
С целью обеспечения возможности выполнения обязательно необходимого строго динамического рассмотрения на всех этапах рассеяния, как в медико-биологических объектах, так и в кристаллах монохроматора и анализатора, в настоящей работе построена такая

самосогласованно учитывающая все эффекты многократности рассеяния теоретическая трёхосевая модель динамического рассеяния и формирования изображений некристаллических объектов.

## 2. СХЕМА ЭКСПЕРИМЕНТА И ПРИБЛИЖЕНИЯ МОДЕЛИ

Интенсивность рассеянного излучения, которое формируется, например, трёхосевая прибором (ТОП), зависит как от координат  $x$ ,  $y$  в плоскости, перпендикулярной лучу, так и от двух углов  $\Delta\theta$  и  $\Delta\theta'$ , которые задают отклонение кристаллов соответственно монохроматора и анализатора, а именно их точных отражающих (брэгговских) положений по отношению к ориентации, когда направления выходящего из монохроматора и входящего в анализатор лучей совпадают при их точных брэгговских отражениях.

Плоскость экрана ( $x''$ ,  $y''$ ) можно разбить на области двух типов: области типа I будут содержать вдоль всего пути луча в объекте только здоровую ткань ( $n_1$ ) (или вакуум) и области типа II, которые содержат и злокачественную опухоль ( $n_2$ ), например, в виде призмы (рис. 1).



**Рис. 1.** Схема эксперимента с призмой: 1 — щель, 2 — кристалл-монохроматор, 3 — объект, 4 — здоровая ткань (или вакуум), 5 — кристалл-анализатор, 6 — фотопластинка [10].

Для обеспечения возможности применения в содержащей опухоль произвольной формы области II плосковолнового (как наиболее простого) варианта динамической теории рассеяния [17–19] целесообразно проходящий в этой области поток излучения разбить на микропучки с поперечными размерами порядка нескольких микрон. Это позволит, с одной стороны, не выходить за дифракционный предел с запасом более чем на порядок величины (см. работы Дж. Айса по микропучковой дифрактометрии, например, [20]). А с другой, входные в объект и выходные поверхности для микропучков заменить приближённо плоскостями с заданными их ориентациями относительно направления пучка.

При этом вдоль направления пучка (см. рис. 2) удобно выбирать ось  $z$ , а сами микропучки маркировать координатами  $x$ ,  $y$  с учётом выбранной микронной точности ( $\Delta x$  и  $\Delta y$ ). Предлагаемую в настоящей работе теоретическую модель разбиения пучка можно рассматривать как обобщение известного из динамической теории рассеяния электронов «колонкового приближения» на случай динамической теории рассеяния рентгеновских лучей и нейтронов, что, однако, возможно только для некристаллических объектов, когда изменения направлений рассеянных (преломлённых) лучей достаточно малы, т.к. брэгговская дифракция, характеризующаяся малыми углами Брэгга только в случае рассеяния электронов, теперь отсут-

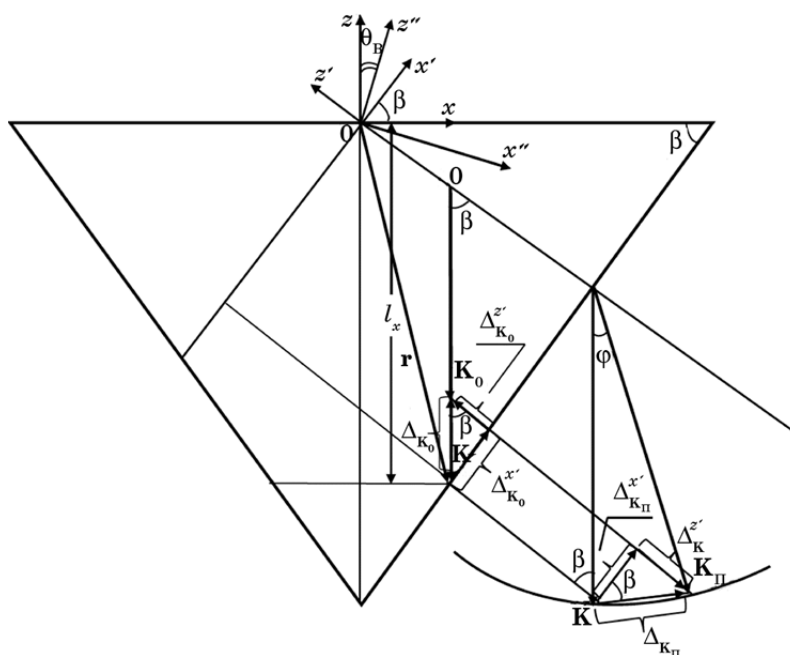


Рис. 2. Схема формирования преломлённого луча.

ствуется принципиально.

### 3. ТЕОРИЯ МНОГОКРАТНОГО РАССЕЯНИЯ В НЕКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ОБЪЕКТАХ

Таким образом, дальнейшее рассмотрение сводится к построению на основе использования результатов работы [17] теории многократного рассеяния излучений в каждой из полученных указанным образом колонок объекта исследования, т.е. для каждого из микропучков отдельно.

При этом ограничимся сначала рассмотрением самого простого случая, когда  $V(\mathbf{r}) = V_0 = \text{const}$ ,  $V_0 = V_0^r + iV_0^i$ . Тогда уравнение Шредингера:

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

будет в импульсном представлении иметь следующий вид:

$$[K^2 - K_0^2]\Psi_{K_0} = V_0\Psi_{K_0}. \quad (1)$$

Для бесконечных объектов может быть найдено точное решение в виде преломлённой волны. В случае конечных объектов целесообразно строить теорию возмущений (ТВ). При этом кинематическое рассмотрение даёт

1) в случае  $V_0 = 0$   $\Psi = \Psi^0 = \Psi_{K_0}^0 e^{-iK_0 r} = \Psi_K e^{-iK r}$ , где  $\Psi_K$  и  $K$  — соответственно, амплитуда и волновой вектор падающей на объект волны;

2) при  $V_0 \neq 0$ :

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

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

Как видно, в рамках кинематического рассмотрения уравнение (1) преобразуется в формулу (2), и теория возмущений ограничивается только первым приближением и при этом исключительно для амплитуд волновых функций, а их волновые векторы заданы. Таким образом, кинематическое приближение сводится к учёту только однократного рассеяния и преломление лучей не описывает.

При учёте многократности рассеяния, в отличие от кинематического рассмотрения, где выражение (2) есть формула для определения волновой функции более высоких порядков теории возмущений через более низкие, в динамической теории  $\Psi'$  заменяют искомым  $\Psi^0$  и выражение (2) переходит снова в (1) и становится уравнением для неизвестных  $\Psi^0$  и  $K_0$ . При  $V_0 = 0$  решения уравнения Шредингера (1)

в динамическом и кинематическом случаях совпадают. Однако при  $V_0 \neq 0$  за счёт многократности рассеяния аналогично «коллективизации состояний» нулевое приближение для амплитуд существенно перестраивается, а поправку получает волновой вектор (см. (1)), т.е. аналогично «снятию вырождения» в отличие от кинематического подхода, где влияние структуры осуществляется через поправку к амплитуде рассеяния, в динамическом случае структура влияет на волновой вектор волновой функции, что названо авторами [17–19] дисперсионным механизмом. При этом обычная (для идеального кристалла) динамическая ТВ (вырожденный или почти вырожденный случай) ограничивается рассмотрением только нулевого приближения для амплитуд волновых функций и разложением по малому параметру для волновых векторов, т.е. учётом изменения закона дисперсии для сильных волн и поправок к нему за счёт многократности рассеяния слабых волн (Бете, 1928 г.).

Динамическая теория в кристаллах с дефектами [18, 19] основана на комбинированной ТВ [21, 22]. А именно, это есть: нулевое приближение для амплитуд «сильных» брэгговских волн (но двухволновое с учётом многократности рассеяния на периодической части потенциала, которая и приводит к изменению закона дисперсии и перестройке нулевого приближения); первое для амплитуд диффузных волн (по флуктуационной части потенциала, но с перестройкой за счёт периодической (с учётом многократности)) и второе (по флуктуационной части) для волновых векторов (поправки к дисперсионному механизму влияния периодической части, которые учитывают впервые предсказанный авторами в [23] и учтённый также в [17] эффект экстинкции за счёт диффузного рассеяния).

В случае некристаллических объектов для отыскания решений в виде суммы проходящей и преломлённой волн следует искать разложения по малому параметру, как волновых векторов, так и амплитуд волновых функций, хотя ни слабых, ни диффузных волн может и не быть, которые традиционно необходимо было рассматривать только в рамках ТВ. Для объектов достаточно больших размеров может быть получено точное решение только для одной преломлённой волны без описания в явном виде в рамках ТВ ранних стадий процессов формирования преломлённой волны из падающей при малых глубинах проникновения лучей.

При этом:

$$\text{для } z > 0: \Psi^0(\mathbf{r}) = \Psi_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{K}\mathbf{r}};$$

$$\text{для } z < 0: \Psi_{\mathbf{k}_0}(\mathbf{r}) = \Psi_{\mathbf{k}_0} e^{-i\mathbf{K}_0\mathbf{r}}, [\mathbf{K}^2 - \mathbf{K}_0^2]\Psi_{\mathbf{k}_0} = V_0\Psi_{\mathbf{k}_0}.$$

Следует отметить, что здесь и ниже рассмотрение проводится с учётом сначала только главного (дисперсионного) механизма влияния характеристик объекта ( $V_0$ ) на картину многократного рассеяния, а именно, влияния только за счёт изменения закона диспер-

сии, описывающего преломление волны, т.е. изменение её волнового вектора и, следовательно, фазы. При этом не учитываются малые (пропорциональные коэффициенту преломления) поправки к амплитуде волновой функции, обусловленные как учётом зеркально отражённой на граничной поверхности волны, так и уточнениями, связанными с отличием граничных условий для нормальных производных от волновых функций от граничных условий для самих функций.

В рамках отмеченных ограничений с использованием граничных условий на входной поверхности  $z = 0$  для волновых векторов получим (см. рис. 2):

$$\begin{aligned} \mathbf{K}^2 - V_0 &= \mathbf{K}_0^2, \quad \Psi_{\mathbf{K}_0} \neq 0, \quad \mathbf{K}_0(x, y) = \mathbf{K}(x, y) = \mathbf{0}, \quad K^2 = K_z^2, \\ K_z^2 - V_0 &= (K_{0z})^2 = K_z^2(1 - \delta)^2, \\ \delta &= V_0 / 2K_z^2, \quad \mathbf{K}_0 = \mathbf{K} + \frac{V_0 \mathbf{e}_z}{2K_z} = \mathbf{K} + K\delta \mathbf{e}_z, \end{aligned}$$

где  $\mathbf{e}_z$  — единичный вектор вдоль оси  $z$ .

Граничные условия для амплитуд волновых функций на входной поверхности дают:

$$\Psi_{\mathbf{K}_0} \exp\left(-i\left(\mathbf{K}\mathbf{r} + \frac{V_0 z}{2K_z}\right)\right)\Bigg|_{z=0} = \Psi_{\mathbf{K}} e^{-i\mathbf{K}\mathbf{r}}\Bigg|_{z=0}, \quad \Psi_{\mathbf{K}_0} = \Psi_{\mathbf{K}}.$$

Тогда для волновой функции, описывающей преломлённую волну внутри некристаллического объекта ( $z < 0$ ), получим следующее выражение:

$$\Psi_{\mathbf{K}_0}(\mathbf{r}) = \Psi_{\mathbf{K}} \exp\left[-i\left(\mathbf{K}\mathbf{r} + \frac{V_0 z}{2K_z}\right)\right]. \quad (3)$$

Для отыскания выражения для волновой функции, описывающей преломлённый луч после его выхода из некристаллического объекта в вакуум, рассмотрим граничные условия на поверхности выхода лучей из объекта ( $z = -l_x$ , где  $l_x$  — толщина объекта вдоль  $z$  для заданного  $x$ ) в случае, когда объект имеет форму равнобедренной призмы с основанием  $2a$  и острым углом  $\beta$  при основании, как и в работе [10] (см. рис. 1 и 2).

Найдём тангенциальные (в плоскости рис. 1 и 2,  $y = 0$ ) и нормальные по отношению к плоскости выхода составляющие волновых векторов  $\mathbf{K}$ ,  $\mathbf{K}_0$ ,  $\mathbf{K}_\Pi$ , где  $\mathbf{K}$  — волновой вектор падающей,  $\mathbf{K}_0$  — преломлённой в объекте и  $\mathbf{K}_\Pi$  — преломлённой после выхода в вакуум волн. При этом  $\mathbf{K}_0 = \mathbf{K} + \Delta_{\mathbf{K}_0}$  и  $\mathbf{K}_\Pi = \mathbf{K} + \Delta_{\mathbf{K}_\Pi}$ .

Как видно из рисунка 2,

$$\begin{aligned} K^{x'} \mathbf{e}_{x'} &= -K \cos(90 - \beta) \mathbf{e}_{x'} = -K \sin \beta \mathbf{e}_{x'}, \\ K_0^{x'} \mathbf{e}_{x'} &= -K_0 \sin \beta \mathbf{e}_{x'} = -K(1 - \delta) \sin \beta \mathbf{e}_{x'}, \\ \Delta_{K_0}^{x'} &= (K_0^{x'} - K^{x'}) \mathbf{e}_{x'} = K\delta \sin \beta \mathbf{e}_{x'}. \end{aligned}$$

При этом тангенциальные составляющие волновых векторов  $\mathbf{K}_0$  и  $\mathbf{K}_\Pi$  преломлённой волны соответственно до и после её выхода в вакуум должны быть равны между собой, в то же время возникающая при этом разность нормальных составляющих векторов  $\mathbf{K}_\Pi$  и  $\mathbf{K}$ , модули которых равны, а тангенциальные составляющие различны, оказывается равной:

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

Тогда для волновой функции  $\Psi_{K_\Pi}(\mathbf{r}')$  для преломлённой волны в вакууме получим:

$$\begin{aligned} \Psi_{K_\Pi}(\mathbf{r}') &= \Psi_{K_\Pi} \exp[-i(\mathbf{K}\mathbf{r}' + \Delta_{K_\Pi}^{x'} x' + \Delta_{K_\Pi}^z z')] = \\ &= \Psi_{K_\Pi} \exp[-i(\mathbf{K}\mathbf{r}' + K\delta \sin \beta x' - K\delta \sin \beta \operatorname{tg} \beta z')], \end{aligned} \quad (4)$$

где  $\Psi_{K_\Pi}$  необходимо найти из граничных условий для волновых функций на поверхности выхода.

Следует отметить, что решение (4) найдено в новой системе координат  $\{z', x'\}$ , которая получена поворотом старой (исходной)  $\{z, x\}$  на угол  $\beta$  (см. рис. 2)

$$\begin{aligned} l_x &= (a - x) \operatorname{tg} \beta, \mathbf{r} = x \mathbf{e}_x - l_x \mathbf{e}_z, y = 0, \mathbf{r} = \{x, 0, -l_x\} \text{ (на поверхности выхода),} \\ \mathbf{r}' &= \mathbf{r} = x \mathbf{e}_x - l_x \mathbf{e}_z = x' \mathbf{e}_{x'} + z' \mathbf{e}_{z'}, \end{aligned}$$

где  $\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_z, \mathbf{e}_{x'}, \mathbf{e}_{z'}$  — единичные векторы вдоль соответствующих осей координат.

В системе координат  $\{z, x\}$  формула (4) приобретает вид:

$$\Psi_{K_\Pi}(\mathbf{r}) = \Psi_{K_\Pi} \exp[-i(\mathbf{K}\mathbf{r} + \Delta_{K_\Pi}^x x + \Delta_{K_\Pi}^z z)] = \Psi_{K_\Pi} \exp[-i(\mathbf{K}\mathbf{r} + K\delta \operatorname{tg} \beta x)], \quad (5)$$

где  $\Delta_{K_\Pi}^x = K\delta \operatorname{tg} \beta$ ,  $\Delta_{K_\Pi}^z = 0$  (см. рис. 2).

Как видно из рис. 2, угол поворота  $\varphi$  вектора  $\mathbf{K}_\Pi$  по отношению к вектору  $\mathbf{K}$  равен:

$$\varphi = \left( K\delta \sin \beta \frac{1}{\cos \beta} \right) / K = \delta \operatorname{tg} \beta. \quad (6)$$

Следует отметить, что формула (6) справедлива для  $x > 0$ , а в случае  $x < 0$  формула (6) приобретает вид:



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

Для отыскания амплитуды  $\Psi_{\mathbf{K}_{\Pi}}$  из граничных условий на границе выхода излучения из объекта целесообразно волновую функцию для преломлённой волны внутри объекта (3) представить в новой системе координат  $\{\mathbf{r}'\} \sim \{x', z'\}$ .

При этом получим:

$$\begin{aligned} \Psi_{\mathbf{K}_0}(\mathbf{r}') &= \Psi_{\mathbf{K}} \exp[-i(K_x x' + K_z z' + K \delta e_z \mathbf{r}')] = \\ &= \Psi_{\mathbf{K}} \exp[-iK(-\sin \beta x' - \cos \beta z' + \delta \sin \beta x' + \delta \cos \beta z')] = \\ &= \Psi_{\mathbf{K}} \exp[iK(1 - \delta)(x' \sin \beta + z' \cos \beta)] = \\ &= \Psi_{\mathbf{K}} \exp[-i(\mathbf{K} \mathbf{r}' + K \delta (x' \sin \beta + z' \cos \beta))]. \end{aligned} \quad (7)$$

Граничные условия для амплитуд на границе выхода имеют вид:

$$\Psi_{\mathbf{K}_0}(\mathbf{r}') \Big|_{z' = -(a-x) \sin \beta} = \Psi_{\mathbf{K}_{\Pi}}(\mathbf{r}') \Big|_{z' = -(a-x) \sin \beta}. \quad (8)$$

Тогда

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

$$\Psi_{\mathbf{K}_{\Pi}} = \Psi_{\mathbf{K}} \exp[-iK \delta (x' \sin \beta - (a-x) \sin \beta \cos \beta - \sin \beta x' + \sin \beta \operatorname{tg} \beta (a-x) \sin \beta)]$$

или

$$\begin{aligned} \Psi_{\mathbf{K}_{\Pi}} &= \Psi_{\mathbf{K}} \exp[-i(a-x) \sin \beta (\Delta_{\mathbf{K}_{\Pi}}^{z'} - \Delta_{\mathbf{K}_0}^{z'})] = \\ &= \Psi_{\mathbf{K}} \exp[iK \delta (a-x) \sin \beta \cos \beta (1 + \operatorname{tg}^2 \beta)], \end{aligned}$$

где  $\Delta_{\mathbf{K}_0}^{z'} = K \delta \cos \beta$ , а  $\Delta_{\mathbf{K}_{\Pi}}^{z'} = -K \delta \sin \beta \operatorname{tg} \beta$  (см. рис. 2).

Подставляя найденные выражения для  $\Psi_{\mathbf{K}_{\Pi}}$  в формулу (5), получим:

$$\Psi_{\mathbf{K}_{\Pi}}(\mathbf{r}) = \Psi_{\mathbf{K}} e^{-i\mathbf{K} \mathbf{r}} \exp[-iK \delta (x \operatorname{tg} \beta - (a-x) \sin \beta \cos \beta (1 + \operatorname{tg}^2 \beta))] = \Psi_{\mathbf{K}} e^{-i\mathbf{K} \mathbf{r}} e^{\Phi}, \quad (9)$$

где дополнительная фаза за счёт преломления  $\Phi = -iK \delta [x \operatorname{tg} \beta - (a-x) \sin \beta \cos \beta (1 + \operatorname{tg}^2 \beta)] = -iK \delta [x \operatorname{tg} \beta - l_x]$ . Здесь  $l_x = (a-x) \operatorname{tg} \beta$ , множитель  $\exp[-iK \delta x \operatorname{tg} \beta]$  описывает поворот луча по отношению к падающему на угол  $\varphi$  (см. (6)), а  $\mathbf{K} \mathbf{r} = Kz$ , при выборе направления оси  $z$  параллельным  $\mathbf{K}$ . При этом также:

$$\Psi_{\mathbf{K}_{\Pi}}(\mathbf{r}) = \Psi_{\mathbf{K}} e^{-i\mathbf{K}_{\Pi} \mathbf{r}} \exp(iK l_x \delta) = \Psi_{\mathbf{K}} e^{-i\mathbf{K}_{\Pi} \mathbf{r}} e^{\Phi_{\Pi}}, \quad (10)$$

где  $\Phi_{\Pi} = iK \delta l_x$ ,  $|\mathbf{K}_{\Pi}| = |\mathbf{K}|$ , а направление вектора  $\mathbf{K}_{\Pi}$  отличается от

направления  $\mathbf{K}$  на угол  $\varphi$ .

В случае плоскопараллельной формы объекта  $\beta = 0$ , и тогда в области  $\Pi$  с учётом поглощения и выбора системы координат ( $z \parallel \mathbf{K}$ ) выражение (9) для волновой функции выходящего после преломления луча приобретает следующий вид:

$$\Psi_{\mathbf{K}\Pi}(\mathbf{r}) = \Psi_{\mathbf{K}} e^{-iKz} e^{-\mu_2 l_x}, \quad (11)$$

где  $\mu_2$  — коэффициент поглощения в объекте, а  $l_x$  — его толщина вдоль оси  $z$  для координаты входа луча  $x$ .

Полученные результаты обосновывают строго формулы, предложенные в [10] эвристически в наиболее простом случае. Однако построенная в настоящей работе теоретическая модель позволяет обобщить эти результаты на практически все необходимые случаи в отличие от модели [10].

Следует отметить, что решения (9) и (10) получены в системе координат  $\{x, y, z\}$ , связанной с монохроматором, т.е. с первой осью трёхосевой схемы, где  $z$  выбрано перпендикулярным поверхности монохроматора (см. рис. 1, 2). Для удобства дальнейшего использования решения (9), (10) целесообразно представить также и в системах координат  $\{x', y', z'\}$  и  $\{x'', y'', z''\}$ , которые связаны соответственно с объектом (вторая ось) и с анализатором (третья ось), а их базисные векторы  $\mathbf{e}_{z'}$  и  $\mathbf{e}_{z''}$  направлены соответственно перпендикулярно поверхности выхода лучей из объекта и поверхности анализатора (см. рис. 1, 2).

Подставляя в (4) выражение для  $\Psi_{\mathbf{K}\Pi}$ , получим:

$$\Psi_{\mathbf{K}\Pi}(\mathbf{r}') = \Psi_{\mathbf{K}} e^{-iK r'} \exp\{iK\delta[l_x - x' \sin \beta + z' \sin \beta \operatorname{tg} \beta]\} \quad (12)$$

или

$$\Psi_{\mathbf{K}\Pi}(\mathbf{r}') = \Psi_{\mathbf{K}} e^{-iK_{\Pi} r'} \exp\{iK\delta[l_x + x \operatorname{tg} \beta - x' \sin \beta + z' \sin \beta \operatorname{tg} \beta]\}. \quad (13)$$

При этом

$$\Psi_{\mathbf{K}\Pi}(\mathbf{r}'') = \Psi_{\mathbf{K}} e^{-iK r''} \exp\{iK\delta[l_x - \operatorname{tg} \beta (x'' \cos \theta_B + z'' \sin \theta_B)]\} \quad (14)$$

или

$$\Psi_{\mathbf{K}\Pi}(\mathbf{r}'') = \Psi_{\mathbf{K}} e^{-iK_{\Pi} r''} \exp\{iK\delta[l_x + \operatorname{tg} \beta (x - x'' \cos \theta_B - z'' \sin \theta_B)]\}. \quad (15)$$

#### 4. ТРЕХОСЕВАЯ МОДЕЛЬ МНОГОКРАТНОГО РАССЕЯНИЯ И ФОРМИРОВАНИЯ ИЗОБРАЖЕНИЙ НЕКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ОБЪЕКТОВ

При использовании, например, бездисперсионной схемы ТОП

$(n, 0, n)$ , с геометрией дифракции по Брэггу в монохроматоре и по Лауэ в анализаторе, отражательные способности системы для областей I и II с учётом поглощения и возможности наличия дефектов в монохроматоре и анализаторе можно записать в виде:

$$R_i(\Delta\theta) = \int R_M(\mathbf{x})R_A(\mathbf{x} - \Delta\theta - \varphi_i)R_{об}(\mathbf{x}, \varphi_i, \mu_i, l_x, \Phi_i) d\mathbf{x} \quad (i = I, II), \quad (16)$$

где

$$\begin{aligned} R_M(\mathbf{x}) &= b_M^{-1}R_{coh}^M(b_M^{-1}\mathbf{x}) + \int r_{dif}^M(\mathbf{x}', \mathbf{x})d\mathbf{x}', \\ R_A(\mathbf{x}, \Delta\theta) &= R_{coh}^A(\mathbf{x} - \Delta\theta - \varphi_i(x, y)) + R_{dif}^A(\mathbf{x} - \Delta\theta - \varphi_i(x, y)), \\ r_{dif}(\mathbf{x}', \mathbf{x}) &= r_{dif}(\mathbf{k}) = \frac{1}{k} \int dk_y R_{dif}(\mathbf{k}), \\ R_{dif}(\mathbf{k}) &= \frac{\langle |f(\mathbf{k}', \mathbf{k})|^2 \rangle}{\gamma_0 S |E_0|^2}, \quad R_{dif}(x) = \int d\Omega_{\mathbf{k}'} R_{dif}(\mathbf{k}). \end{aligned}$$

Отражательная способность объекта  $R_{об}(x, \varphi_i, \mu_i, l_x, \Phi_i)$  определяется с использованием полученных в разд. 3 формул (9), (10), (12)–(15).

При этом факторы поглощения  $e^{-\mu_i}$  и преломления  $e^{-\Phi_i}$  определяются в общем случае неоднородных объектов с использованием следующих формул:

$$\begin{aligned} \mu_1^{x_1 y_1} &= \int \mu_1(\mathbf{r}) dS_1^I, & \Phi_1^{x_1 y_1} &= -\int ik\delta_1(\mathbf{r}) dS_1^I, \\ \mu_1^{x_{II} y_{II}} &= \int \mu_1(\mathbf{r}) dS_1^{II}, & \Phi_1^{x_{II} y_{II}} &= -\int ik\delta_1(\mathbf{r}) dS_1^{II}, \\ \mu_2^{x_{II} y_{II}} &= \int \mu_2(\mathbf{r}) dS_2^{II}, & \Phi_2^{x_{II} y_{II}} &= -\int ik\delta_2(\mathbf{r}) dS_2^{II}. \end{aligned}$$

Угол поворота преломлённого луча  $\varphi_i$  определяется формулой (6) для рассмотренного случая нормального падения луча на объект в форме призмы (рис. 1 и 2).

В общем случае объекта произвольной формы  $\varphi$  зависит от  $x$  и  $y$  и определяется соответствующими им углами поворота входной и выходной поверхностей «колонки» (микроручка) по отношению к направлению луча. Этими углами  $\varphi(x, y)$ , по существу, описываются искажения фронта плоских волн в наборе микроручков.

Более детальные выражения для  $R_M$  и  $R_A$ , связывающие их с характеристиками дефектов, приведены в [18, 19].

В простом случае однородных  $\delta_1(\mathbf{r})$  и  $\delta_2(\mathbf{r})$ ,  $\mu_1(\mathbf{r})$  и  $\mu_2(\mathbf{r})$ , используя результаты динамической теории рассеяния в некристаллических объектах [17], а также результаты, полученные в настоящей работе и в работе [10], легко найти:

$$\mu_1^{x_1 y_1} = \mu_1 z^{x_1 y_1}, \quad \Phi_1^{x_1 y_1} = -ik\delta_1 z^{x_1 y_1},$$

$$\begin{aligned}\mu_1^{x_{\Pi}y_{\Pi}} &= \mu_1(z^{x_{\Pi}y_{\Pi}} - t^{x_{\Pi}y_{\Pi}}), & \Phi_1^{x_{\Pi}y_{\Pi}} &= -ik\delta_1(z^{x_{\Pi}y_{\Pi}} - t^{x_{\Pi}y_{\Pi}}), \\ \mu_2^{x_{\Pi}y_{\Pi}} &= \mu_2 t^{x_{\Pi}y_{\Pi}}, & \Phi_2^{x_{\Pi}y_{\Pi}} &= -ik\delta_2 t^{x_{\Pi}y_{\Pi}}, & t^{x_{\Pi}y_{\Pi}} &= l_x.\end{aligned}$$

Ограничимся в дальнейшем случае, когда в качестве простейшего модельного объекта, как и в работе [10], рассмотрена равнобедренная призма с основанием  $2a$  и острым углом  $\beta$  при основании. Рентгеновский пучок падает перпендикулярно основанию. В области  $|x''| \leq a/\gamma$ , где  $\gamma = \cos\theta_B$ , фактор ослабления в призме  $\mu_S = \mu_2' l_2$ , фаза  $\Phi_2 = -ik\delta_2 l_2$ , а  $l_2(x'') = (a - \gamma x'') \operatorname{tg}\beta$ . В области I ( $|x''| > a/\gamma$ )  $\mu_1 = \mu_1 l_1$ ,  $\Phi_1 = -ik\delta_1 l_1$ . Суммарный фактор ослабления луча в области II  $\mu_{\Pi} = \mu_2 l_2 + \mu_1 l_1$ , а фаза  $\Phi_{\Pi} = -ik[\delta_2 l_2 + \delta_1 l_1]$ . Здесь  $l_1(x, y)$  — длина лучей вне призмы, а  $l_2(x, y)$  — внутри неё.

В случае, рассмотренном в работе [10], когда объект в виде призмы находится в вакууме, вне призмы ( $|x''| > a/\gamma$ )  $\mu_1 = 0$ ,  $\Phi_1 = 0$ ,  $\delta_1 = 0$ ,  $l_1 = 0$ . В результате преломления пучок кроме проходящего луча расщепляется ещё на два, которые отклоняются на угол  $\varphi_2^1 = (k\gamma)^{-1} (d\Phi_2/dx'') = \delta \operatorname{tg}\beta$  [10] в области  $0 < x'' < a/\gamma$  и  $\varphi_2^2 = -\delta \operatorname{tg}\beta$  при  $-a/\gamma < x'' < 0$  (см. рис. 2 и работы [10, 17]). В соответствии с рис. 1 и 2:

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

При этом (см. рис. 1 и 2)  $x'' = x/\gamma$ . Если кристалл-анализатор повернут на некоторый угол  $\Delta\theta$ , то изображение призмы будет определяться величинами  $R_A$  в точках  $\Delta\theta \pm |\varphi| = \Delta\theta \pm \delta \operatorname{tg}\beta$ .

В случае, когда кристаллы монохроматора и анализатора не содержат дефектов и являются идеальными, эта теория описывает результаты, полученные в [10]. Однако, в отличие от [10], этот подход не только обеспечил возможность строгого учёта эффектов многократности рассеяния в самом объекте, но позволил описать также и случаи, когда в кристаллах монохроматора и анализатора присутствуют искажения.

В результате в построенной теории количественно адекватно учтены оба основных механизма формирования контраста изображения. Первый из них отвечает за формирование преломлённого в объекте луча, а второй за различные усиления этих преломлённого и основного лучей кристаллом-анализатором. При этом именно первый механизм непосредственно несёт искомую информацию о форме и размерах злокачественной опухоли. Если ограничиться, как в [10], случаем, когда и монохроматор и анализатор являются идеально совершенными кристаллами, то полученные здесь для этого случая формулы позволяют легко решить обратную задачу по определению из измеренных величин  $R_I$  и  $R_{\Pi}$  искомых параметров опухоли. Действительно, как видно из формул, при заранее уста-

новленных (или, как правило, известных) величинах  $\delta_1$  и  $\delta_2$ ,  $\mu_1$  и  $\mu_2$  и при известных отражательных способностях идеальных монокристаллов монохроматора и анализатора, единственным неизвестным параметром оказывается толщина опухоли  $t^{xy}$  или угол у основания призмы. Они легко могут быть определены с использованием полученных выше формул.

Из построенной здесь теоретической модели также следует, что такая обратная задача принципиально становится неразрешимой в случаях отсутствия адекватного учёта (при количественном описании вклада второго из указанных механизмов) наличия в монокристаллах монохроматора и анализатора искажений, которые в модели [10] не учитывались. Однако эта модель [10] и не позволяла выполнить такой учёт, так как основана на приближенной динамической теории Такаги, которая применима только для идеальных или слабоизогнутых кристаллов, но не для кристаллов с микродефектами.

В тоже время в работах [18, 19] в рамках строгой динамической теории показано, что микродефекты могут (за счёт установленного дисперсионного механизма их влияния) на порядки величины изменять отражательные способности динамически рассеивающих кристаллов, а пренебрежение этим может полностью нивелировать адекватность медицинской диагностики на основе явления преломления.

Построенная в настоящей работе модель позволяет адекватно учесть наличие и влияние всех дефектов и их распределений в монокристаллах монохроматора и анализатора на второй механизм формирования изображений, который обеспечивает различные усиления лучей, преломлённых в злокачественной опухоли и в здоровой ткани. Только настоящая модель может позволить сделать указанные усиления надёжно контролируруемыми, без чего метод теряет свои уникальные возможности.

## 5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом, в работе построена теоретическая трёхосевая модель формирования на основе многократного рассеяния изображений медико-биологических объектов с обусловленными, проявляющейся в таких случаях, дисперсионной природой влияния на картину рассеяния структуры объектов уникальными чувствительностью и информативностью благодаря использованию возникающего, исключительно за счёт многократности рассеяния явления преломления лучей в отличие от традиционной диагностики, использующей их поглощение. При этом показана существенная роль впервые самосогласованно учтённых в построенной модели эффектов многократности рассеяния, как в объекте, так и в монокристаллах монохроматора и анализатора. Впервые учтено также оказав-

шееся значительным влиянием на изображение объекта однородно и неоднородно распределённых микродефектов и макродеформаций в монокристаллах монокроматора и анализатора.

## ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. З. Г. Пинскер, *Динамическое рассеяние рентгеновских лучей в идеальных кристаллах* (Москва: Наука: 1974).
2. E. Forster, K. Goets, and P. Zaumseil, *Kristall und Technik*, **15**, No. 8: 937 (1980).
3. В. А. Соменков, А. К. Ткалич, С. Ш. Шильштейн, *Журнал технической физики*, **61**, вып. 11: 197 (1991).
4. V. N. Ingal and E. A. Beliaevskaya, *J. Phys. D*, **28**, No. 10: 2314 (1995).
5. В. Н. Ингал, Е. А. Беляевская, *Журнал технической физики*, **66**, вып. 3: 344 (1996).
6. T. J. Davis, D. Gao, T. E. Gureyev, A. W. Stevenson, and S. W. Wilkins, *Nature*, **373**: 595 (1995).
7. D. Gao, T. J. Davis, and S. W. Wilkins, *Aust. J. Phys.*, **48**, No. 1: 103 (1995).
8. T. J. Davis, T. E. Gureyev, D. Gao, A. W. Stevenson, and S. W. Wilkins, *Phys. Rev. Lett.*, **74**, No. 16: 3173 (1995).
9. A. Snigirev, I. Snigireva, V. Kohn, S. Kuznetsov, and I. Schelokov, *Rev. Sci. Instrum.*, **66**, No. 12: 5486 (1995).
10. В. А. Бушуев, В. Н. Ингал, Е. А. Беляевская, *Кристаллография*, № 5: 808 (1996).
11. К. М. Подурец, В. А. Соменков, С. Ш. Шильштейн, *Журнал технической физики*, **59**, вып. 6: 115 (1989).
12. В. Н. Ингал, Е. А. Беляевская, *Журнал технической физики*, **63**, вып. 6: 137 (1993).
13. З. Г. Пинскер, *Рентгеновская кристаллооптика* (Москва: Наука: 1982).
14. В. Н. Ингал, Е. А. Беляевская, В. А. Бушуев, *Способ фазовой рентгенографии объектов и устройство для его осуществления (варианты)*, Патент Российской Федерации № 2115943 (G03B42/02, G01N23/04) (Опубл. 20 июля 1998).
15. M. Ando, H. Sugiyama, A. Maksimenko, W. Pattanasiriwisawa, K. Hyodo, and Zh. Xiaowei, *Jpn. J. Appl. Phys.*, **40**, No. 8A: L844 (2001).
16. К. Кумар, *Теория возмущений и проблема многих тел для атомного ядра* (Москва: Мир: 1964).
17. С. В. Лизунова, В. Б. Молодкин, Б. В. Шелудченко и др., *Металлофиз. новейшие технол.*, **35**, № 11: 1585 (2013).
18. В. Б. Молодкин, М. В. Ковальчук, И. М. Карнаухова и др., *Основы интегральной многопараметрической диффузодинамической дифрактометрии* (Нальчик: Кабардино-Балкарский университет: 2013).
19. В. Б. Молодкин, М. В. Ковальчук, И. М. Карнаухова и др., *Основы динамической высокоразрешающей дифрактометрии функциональных материалов* (Нальчик: Кабардино-Балкарский университет: 2013).
20. R. Varabash, G. E. Ice, B. C. Larson, G. M. Pharr, K.-S. Chung, and W. Yang, *Appl. Phys. Lett.*, **79**, Iss. 6: 749 (2001).
21. V. V. Molodkin, *Phys. Metals*, **3**, No. 3: 573 (1981).
22. V. V. Molodkin, *Phys. Metals*, **3**, No. 4: 615 (1981).
23. В. Б. Молодкин, Е. А. Тихонова, *Физ. мет. металловед.*, **24**, № 3: 385 (1967).

## REFERENCES

1. Z. G. Pinsker, *Dinamicheskoe Rasseyanie Rentgenovskikh Luchey v Ideal'nykh Kristallakh* (Moscow: Nauka: 1974) (in Russian).
2. E. Forster, K. Goets, and P. Zaumseil, *Kristall und Technik*, **15**, No. 8: 937 (1980).
3. V. A. Somenkov, A. K. Tkalich, and S. Sh. Shil'shteyn, *Zhurnal Tekhnicheskoi Fiziki*, **61**, Iss. 11: 197 (1991) (in Russian).
4. V. N. Ingal and E. A. Beliaevskaya, *J. Phys. D*, **28**, No. 10: 2314 (1995).
5. V. N. Ingal and E. A. Beliaevskaya, *Zhurnal Tekhnicheskoi Fiziki*, **66**, Iss. 3: 344 (1996) (in Russian).
6. T. J. Davis, D. Gao, T. E. Gureyev, A. W. Stevenson, and S. W. Wilkins, *Nature*, **373**: 595 (1995).
7. D. Gao, T. J. Davis, and S. W. Wilkins, *Aust. J. Phys.*, **48**, No. 1: 103 (1995).
8. T. J. Davis, T. E. Gureyev, D. Gao, A. W. Stevenson, and S. W. Wilkins, *Phys. Rev. Lett.*, **74**, No. 16: 3173 (1995).
9. A. Snigirev, I. Snigireva, V. Kohn, S. Kuznetsov, and I. Shchelokov, *Rev. Sci. Instrum.*, **66**, No. 12: 5486 (1995).
10. V. A. Bushuev, V. N. Ingal, and E. A. Beliaevskaya, *Kristallografiya*, No. 5: 808 (1996) (in Russian).
11. K. M. Podurets, V. A. Somenkov, and S. Sh. Shil'shteyn, *Zhurnal Tekhnicheskoi Fiziki*, **59**, Iss. 6: 115 (1989) (in Russian).
12. V. N. Ingal and E. A. Beliaevskaya, *Zhurnal Tekhnicheskoi Fiziki*, **63**, Iss. 6: 137 (1993) (in Russian).
13. Z. G. Pinsker, *Rentgenovskaya Kristallografiya* (Moscow: Nauka: 1982) (in Russian).
14. V. N. Ingal, E. A. Beliaevskaya, and V. A. Bushuev, *Sposob Fazovoy Rentgenografii Ob'ektov i Ustroystvo dlya Ego Osushchestvleniya (Varianty)*, Patent of the Russian Federation No. 2115943 (G03B42/02, G01N23/04) (Published July 20, 1998) (in Russian).
15. M. Ando, H. Sugiyama, A. Maksimenko, W. Pattanasiriwisawa, K. Hyodo, and Zh. Xiaowei, *Jpn. J. Appl. Phys.*, **40**, No. 8A: L844 (2001).
16. K. Kumar, *Teoriya Vozmushcheniy i Problema Mnogikh Tel dlya Atomnogo Yadra* (Moscow: Mir: 1964) (Russian translation).
17. S. V. Lizunova, V. B. Molodkin, B. V. Sheludchenko et al., *Metallofiz. Noveishie Tekhnol.*, **35**, No. 11: 1585 (2013) (in Russian).
18. V. B. Molodkin, M. V. Koval'chuk, I. M. Karnaukhov et al., *Osnovy Integral'noy Mnogoparametricheskoy Diffuznodinamicheskoy Difraktometrii* (Nal'chik: Kabardino-Balkarskiy Universitet: 2013) (in Russian).
19. V. B. Molodkin, M. V. Koval'chuk, I. M. Karnaukhov et al., *Osnovy Dinamicheskoy Vysokorazreshayushchey Difraktometrii Funktsional'nykh Materialov* (Nal'chik: Kabardino-Balkarskiy Universitet: 2013) (in Russian).
20. R. Barabash, G. E. Ice, B. C. Larson, G. M. Pharr, K.-S. Chung, and W. Yang, *Appl. Phys. Lett.*, **79**, Iss. 6: 749 (2001).
21. V. B. Molodkin, *Phys. Metals*, **3**, No. 3: 573 (1981).
22. V. B. Molodkin, *Phys. Metals*, **3**, No. 4: 615 (1981).
23. V. B. Molodkin and E. A. Tikhonova, *Fiz. Met. Metalloved.*, **24**, No. 3: 385 (1967) (in Russian).