

Применение компьютерного моделирования для расчета размера эффективного фокусного пятна микрофокусной рентгеновской трубки

А.А. Манушкин¹, А.В. Степанов¹, Е.Ю. Усачев¹,

Н.Н. Потрахов², В.Б. Бессонов², Д.К. Кострин², К.К. Гук²

¹ООО «Диагностика-М», Москва

²Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет «ЛЭТИ» им. В.И. Ульянова (Ленина), Санкт-Петербург

Аннотация: В статье рассматривается решение актуальной задачи расчета размера эффективного фокусного пятна микрофокусной рентгеновской трубки с применением методов компьютерного моделирования. Принцип функционирования используемого авторами способа расчета заключается в сравнении полученных с использованием тестируемых микрофокусных рентгеновских трубок интерференционных изображений с промоделированными интерференционными картинками, сформированными с помощью разработанного программного обеспечения путем численного решения волнового уравнения. В работе представлены результаты моделирования профилей фазового контраста для двух типов тестовых объектов – лески из капрона и проволоки из алюминия. Рассмотренный способ определения размеров фокусного пятна отличается хорошей чувствительностью и позволяет эффективно и с высокой точностью производить расчет для всех типов микрофокусных рентгеновских трубок.

Ключевые слова: компьютерное моделирование, рентгеновская трубка, микрофокусный источник, фокусное пятно, неразрушающий контроль.

Введение

В настоящее время микрофокусная радиография находит все более широкое применение в различных областях науки, техники и медицины [1, 2]. Применительно к задачам дефектоскопии и контроля изделий электроники с интегральными схемами актуально использование рентгеновских трубок с анодным напряжением выше 150 кВ с микронными и субмикронными размерами фокуса.

Развитие микрофокусной радиографии применительно к исследованию высокотехнологичных объектов микроэлектроники и новых материалов потребовало разработки средств тестирования рентгеновских источников.

Размер фокусного пятна является важнейшим параметром, определяющим величину геометрической нерезкости и, следовательно, качество изображения объектов контроля.

В странах Европейского Союза действует стандарт EN 12543 «Неразрушающий контроль. Характеристики фокусных пятен в промышленных рентгеновских системах для использования в области неразрушающего контроля». Обобщенные данные многочисленных зарубежных измерений микрофокусных пятен, приведенные в [1], и результаты соответствующих экспериментальных исследований, полученные авторами работы, показали, что достоверность и разброс полученных значений измерений, выполненных в соответствии с вышеуказанными стандартами, являются неудовлетворительными.

В основе стандартных способов измерения размеров эффективного фокусного пятна рентгеновских трубок микронных размеров лежит поглощение рентгеновского излучения в тестовых объектах, изготовленных из материалов, сильно поглощающих рентгеновское излучение.

Помимо поглощения, рентгеновские лучи при взаимодействии с объектом испытывают преломление на его границах, которое приводит к формированию фазового контраста [3, 4]. Это преломление можно регистрировать при использовании высококогерентных рентгеновских источников синхротронного излучения [5, 6] или микрофокусных рентгеновских трубок [7, 8] в виде интерференционных картин на границах раздела объектов. Величина фазового контраста критична к размеру фокуса рентгеновской трубки [9, 10].

Задачей данной работы является исследование возможности фазоконтрастного метода тестирования микрофокусных трубок в рамках классических принципов волновой оптики с целью дать практические рекомендации для разработки тестовых объектов, методики их использования и разработки сопутствующего программного обеспечения, применяемого для моделирования интерференционных картин путем численного решения волнового уравнения.

Теоретические основы и математические расчеты

Используемая на практике геометрия съемки тестового объекта фазоконтрастным методом показана на рис. 1.

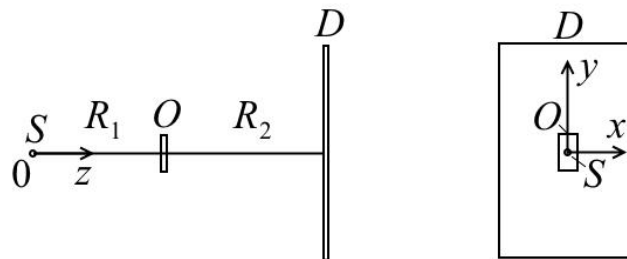


Рис. 1. – Геометрия фазоконтрастной съемки тестового объекта: S – микрофокусный источник, O – тестовый объект, D – двумерный детектор

Для численного расчета фазоконтрастного изображения модельного объекта [11, 12] использовались методы Фурье-оптики, основанные на разложении волнового поля по плоским компонентам [13].

Рассмотрим волновое уравнение для амплитуды $A(\mathbf{r}, t)$ монохроматической волны, свободно распространяющейся в пространстве: $\Delta A - (1/v^2)(d^2A/dt^2) = 0$, где Δ – оператор Лапласа, $A(\mathbf{r}, t)$ – функция пространственных координат и времени, описывающая волновое поле, v – скорость распространения волнового поля. Для стационарного поля монохроматического излучения $A(\mathbf{r}, t) = A(\mathbf{r})\exp(i\omega t)$, волновое уравнение упрощается до линейного однородного уравнения Гельмгольца: $\Delta A - k^2A = 0$, где $k = \omega/v$. В вакууме $v = c$ и $k = 2\pi/\lambda$, где λ – длина волны распространяющегося излучения.

Плоские волны вида $A_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \exp(i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}))$, где \mathbf{k} – волновой вектор, являются точными решениями волнового уравнения и образуют базис функций, из которых можно сконструировать искомое решение уравнения Гельмгольца $A(\mathbf{r}) = \int a(\mathbf{k}) \exp(i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})) dS_{\mathbf{k}}$, где $dS_{\mathbf{k}}$ – элемент площади поверхности сферы радиуса k , в которой сосредоточены волновые векторы плоских волн. При условии, что $|\mathbf{k}| = k$, каждое возможное направление

$\mathbf{k} = (k_x, k_y, k_z)$ распространения плоской волны задается ее проекциями k_x и k_y на плоскость xy . Положим в данном выражении $z = 0$, тогда эта формула переписывается в виде: $A(x, y, z = 0) = \int a(k_x, k_y) \exp(i(k_x x + k_y y)) dk_x dk_y$.

Таким образом, волновое поле в свободном пространстве представляется в виде суммы плосковолновых компонент, с коэффициентами разложения $a(k_x, k_y)$ определяемыми Фурье-разложением поля в плоскости. При падении на объект плоской волны происходит набег фазы волнового фронта и искривление фронта волны, и появление плосковолновых компонент рассеянной волны, распространяющихся параксиально под различными углами α когерентного рассеяния. При распространении излучения от плоскости $z = 0$ до плоскости z детектирования изображения каждая плосковолновая компонента получает дополнительный фазовый множитель $\exp(ik_z z)$, где $k_z = \sqrt{k^2 - k_x^2} \approx k(1 - (k_x^2/2k^2)) \approx k(1 - (\alpha^2/2))$.

Интерференция падающей и рассеянной под углом α волн формирует интерференционные полосы размером dx :

$$dx = \lambda / (2 \sin \alpha). \quad (1)$$

В угловом спектре когерентно рассеянной плоской волны доминируют плосковолновые компоненты с малыми углами рассеяния. Компоненты с большими углами рассеяния, имеющие меньшую амплитуду, формируются на краях объекта, где набег фазы в объекте становится малым. Соответственно, при конечном разрешении детектора, для наблюдения сильного фазового контраста с более широкими интерференционными полосами следует удалять детектор от объекта, если геометрическая нерезкость мала. При приближении детектора к объекту формируются более узкие интерференционные полосы с меньшим контрастом.

В координатном представлении параксиальное распространение волны в свободном пространстве от объекта с координатой $z = 0$ до детектора с $z = R$

выражается в виде свертки амплитуды исходной $A(x', z = 0)$ с френелевским пропагатором:

$$A(x, z = R) = \int A(x', z = 0) \exp(-i(x - x')^2 / (2R)) dx'. \quad (2)$$

Области интегрирования по dx' можно разбить на зоны Френеля с индексами m . В случае падающей плоской волны радиусы d_m первых зон Френеля с небольшими индексами для расстояния R от объекта до точки наблюдения выражаются известной формулой:

$$d_m \approx \sqrt{\lambda R m}, \quad m = 1, 2, 3, \dots \quad (3)$$

Для сферической волны на объекте с расстояниями R_1 и R_2 справедлива формула с эффективным дифракционным расстоянием R (формула линзы):

$$1/R_1 + 1/R_2 = 1/R. \quad (4)$$

Таким образом, в параксиальном приближении расчет дифракции объекта на сферической волне от точечного источника с геометрическими параметрами R_1 и R_2 эквивалентен расчету дифракции объекта на плоской волне [14]. Точный численный расчет фазоконтрастного изображения от точечного источника по формуле (2) в прямоугольных координатах представляет определенные трудности из-за необходимости представления высокочастотной модуляции сферического волнового поля на большой апертуре. Используемая в данной работе программа для расчета одномерного профиля изображений модельных объектов на основе быстрого преобразованием Фурье использовала большие объемы оперативной памяти, а расчет на настольном компьютере с графическим процессором NVIDIA RTX 2080 длился около минуты. Приведение расчета контраста от точечного источника к плосковолновому случаю упрощает и существенно ускоряет вычисления и дает возможность их реализации на мобильных платформах.

При $R_2 \rightarrow \infty$ увеличение R достигает предельной величины R_1 . Соответственно, достигает предельного значения размер первой зоны

Френеля и величина фазового контраста, которая зависит в основном от разницы набега фазы на краях этой зоны. Определим максимальный размер фокусного пятна, который для цилиндра дает около 50 % максимального контраста от точечного источника. Если R_1 и R_2 – расстояния от источника до объекта и от объекта до детектора, то фактор увеличения размера источника $f = 1 + R_2/R_1$ дает геометрическую нерезкость $S = r(1 + R_2/R_1)$.

Возможность геометрического увеличения интерференционных полос без потери контраста дает возможность применять усиливающие экраны и электронные средства регистрации вместо рентгеновских пленок. Чтобы наблюдать сильный фазовый контраст, необходимо, чтобы ширина интерференционной полосы $dx = \lambda/\sin\alpha$ была соизмерима с геометрической нерезкостью. Условие противоположности фаз прямой и рассеянной волны выражается формулой:

$$k\alpha^2 R = \pi. \quad (5)$$

Из уравнений (1) и (5), с учетом $R \cong R_1$ при $R_2/R_1 \gg 1$ получается максимальный диаметр d фокального пятна источника, при котором контраст близок к контрасту от точечного источника:

$$d \approx \sqrt{2} dx = \sqrt{\lambda R_1}. \quad (6)$$

На рис. 2 показаны профили интенсивности $I(x)$ для идеального точечного источника и источника с конечным размером, которые демонстрируют условие сильного контраста по формуле (6). Данному выражению соответствует величина диаметра фокусного пятна в 1 мкм, при которой величина фазового контраста достигает 50 % от контраста для источника с нулевым размером фокусного пятна.

При использовании рентгенооптических преобразователей с ограниченным динамическим диапазоном или фотопленок с нелинейным откликом трудно количественно оценить величину контраста. Размер фокуса легче оценить путем измерения ширины главного интерференционного

максимума, которая, как видно из рис. 2, для фокусного расстояния $d = 2$ мкм, увеличится вдвое.

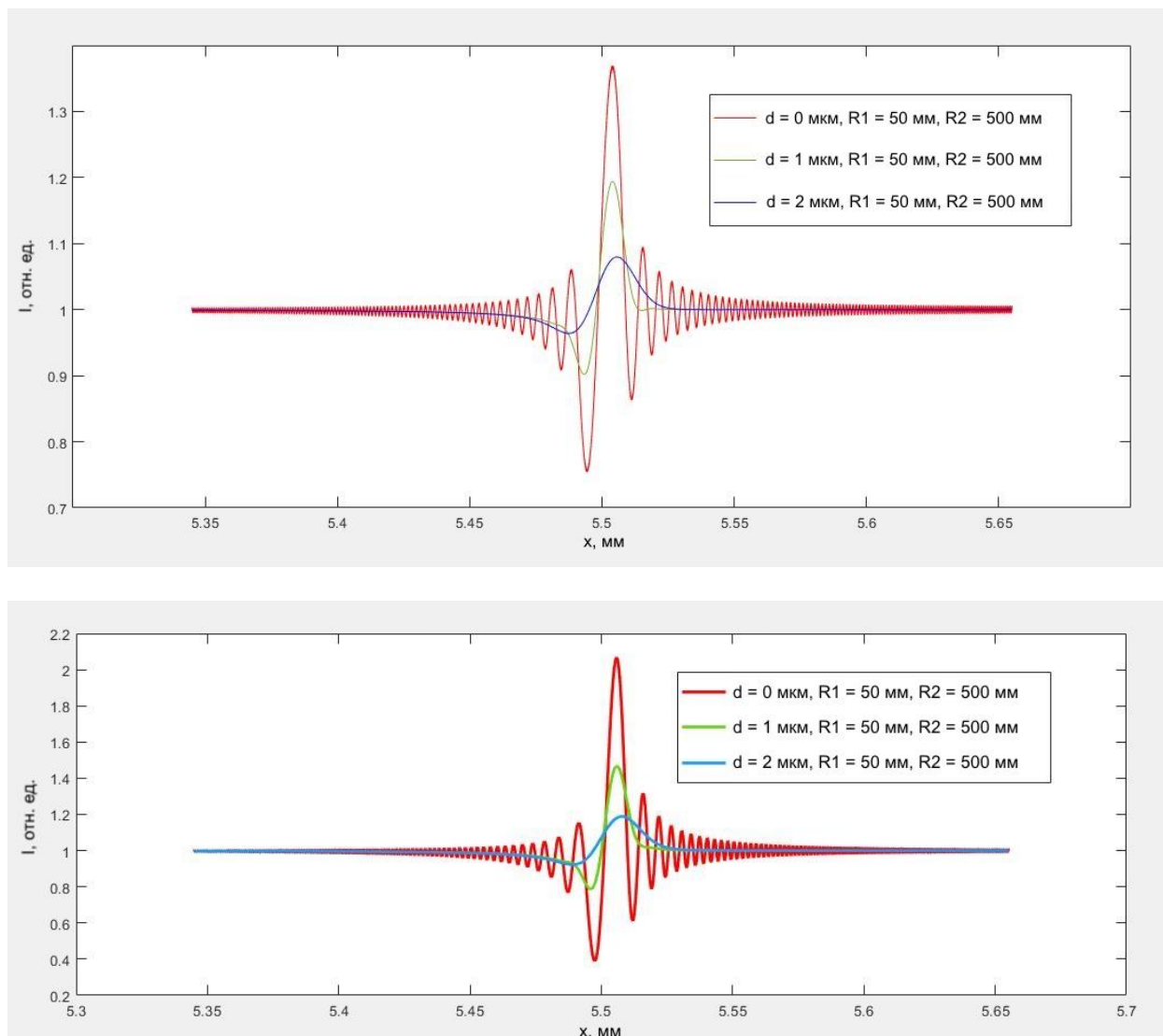


Рис. 2. – Рассчитанные профили интенсивности фазоконтрастного изображения края капроновой лески (вверху) и алюминиевой проволоки (внизу) диаметром 1 мм при энергии излучения 60 кэВ для точечного источника и для фокусных пятен размером 1 и 2 мкм

Представленные на рис. 2 модельные расчеты для проволоки из алюминия, с примерно в 2.7 раза большим показателем преломления, чем у капрона, показывают возможность увеличения в 2 раза фазового контраста и, соответственно, возможность в 4 раза увеличить отношение сигнал/шум.

Если необходимо проверить предполагаемую величину r фокусного пятна рентгеновского источника, то для этого следует выбрать минимальное расстояние R_1 от источника до тестового объекта согласно формуле (6). Например, для диаметра пятна 1 мкм и энергии 60 кэВ необходимо выбрать расстояние R_1 порядка 50 мм (см. рис. 1). Расстояние R_2 выбирается исходя из выбора геометрического увеличения для данного разрешения детектора.

Рассмотрим формирование микрофокусных изображений на фазомодулирующих дифракционных решетках, представляющих собой набор периодических структур из нескольких вольфрамовых полосок с разной шириной от 0.4 мкм и толщиной до 10 мкм, достаточной для глубокой фазовой модуляции рентгеновского излучения. Эти решетки аналогичны тестам, предназначенным для определения размеров фокуса рентгеновских трубок. Производитель JMA (Japan) описывает полоски как вольфрамовые поглощающие рентген толщиной 1 мкм. Расчетное абсорбционное ослабление на 1 мкм вольфрама для энергий от 60 до 30 кэВ составляет величину от 1 до 4 %. Тесты аналогичной конструкции применялись для тестирования разрешающей способности сцинтилляторов [15].

Формирование изображений дифракционной решетки удобно анализировать в импульсном представлении на основе уравнения (4) и формулы (3), в которой dx обозначает полупериод дифракционной решетки. Из формулы (6) получаем ближайшее эффективное расстояние R на котором от плоской падающей волны формируются Фурье-изображения дифракционной решетки с максимальным контрастом (эффект Тальбота) [13]: $R = (dx^2n)/(2\lambda)$, $n = 1, 2, 3, \dots$. В геометрии точечного источника Фурье-изображения будут увеличены в $(1 + R_2/R_1)$ раз и будут наблюдаться на расстояниях, определяемых соотношением [13]:

$$1/R_1 + 1/R_2 = (2\lambda)/(dx^2n). \quad (15)$$

Фурье-изображения получаются на последовательно увеличивающихся интервалах вплоть до максимально положительного значения n , за которым величина $(dx^2n)/(2\lambda)$ будет больше R_1 . Для $\lambda = 0.021$ нм ($E = 60$ кэВ) и $dx = 1$ мкм получается $dx^2/(2\lambda) = 23.8$ мм. Эта величина определяет максимальное расстояние R_1 при котором выполняется условие (7).

При ограниченном разрешении цифрового матричного детектора с размером пикселя более 100 мкм возникает необходимость приближения теста к фокусу источника. При этом фазовый контраст, определяемый разностью максимальной и минимальной значений интенсивности падает, но остается еще больше расчетного значения абсорбционного, равного 4 %.

На рис. 3 показаны профили для нескольких размеров фокусных пятен, при параметрах $R_1 = 8$ мм, $R_2 = 640$ мм и $dx = 1$ мкм.

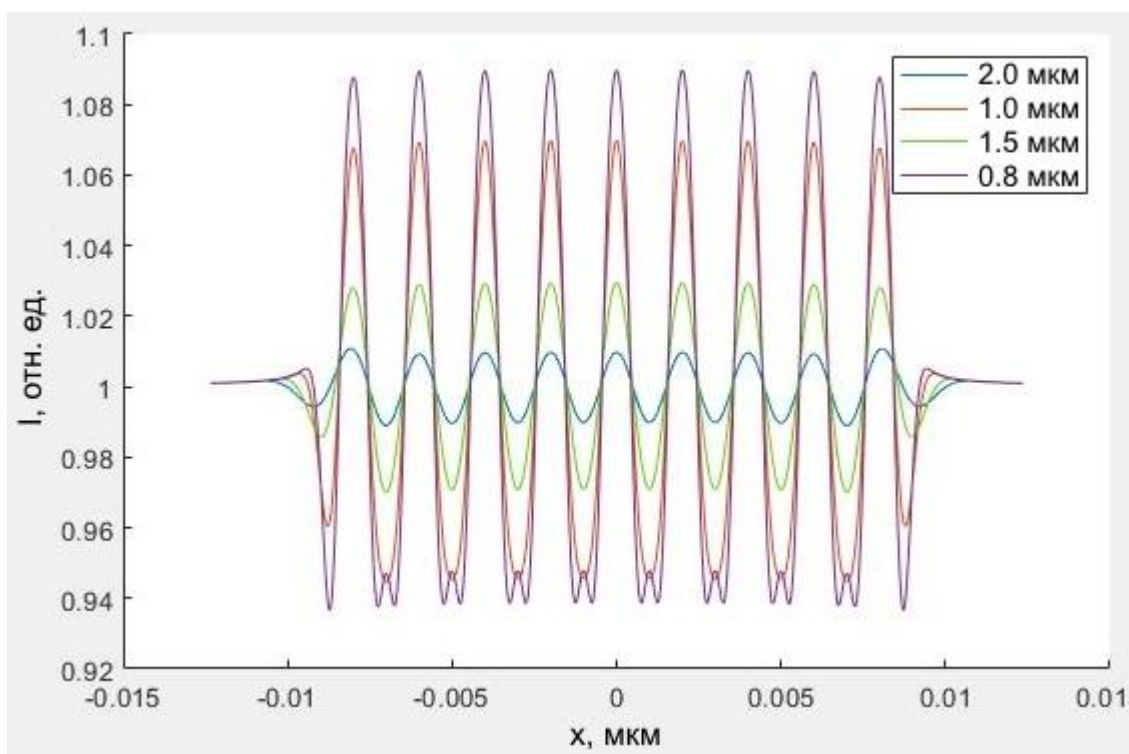


Рис. 3. – Рассчитанные изображения дифракционной решетки для разных размеров фокального пятна. Энергия излучения $E = 60$ кэВ, глубина модуляции фазы решетки $\pi/2$

Из вышеизложенного, можно сделать вывод что контраст изображения теста зависит от размера фокуса и от степени трансформации фазовой модуляции решетки в амплитудную, определяемую геометрией съемки. При надлежащем выборе параметра R_1 в режиме предельного преобразования фазовой модуляции в амплитудную, контраст главным образом зависит от размера фокуса.

Рассмотрим теперь формирование фазового контраста тормозным излучением рентгеновской трубки. Глубина фазовой модуляции рентгеновской дифракционной решетки $\delta\varphi$ определяется набегом фазы, который определяется декрементом показателя преломления δn и толщиной модулирующего слоя t : $\delta\varphi = 2\pi\delta n t/\lambda$. В рентгеновской области электромагнитного спектра декремент показателя преломления одноэлементного вещества определяется сечением упругого рассеяния рентгеновского излучения на атоме и плотностью вещества: $\delta n = (Nr_e\lambda^2)/(2\pi)$, где N – электронная плотность, r_e – классический радиус электрона.

Для вольфрама декремент показателя преломления равен $8.59 \cdot 10^{-7}$ для 60 кэВ. Таким образом, чтобы получить набег фазы $\pi/2$ нужно 6 мкм вольфрама. Для получения глубокой фазовой модуляции с пространственной частотой 1 мкм можно использовать высокотехнологичные методы формирования высокоаспектных микроструктур на основе жидкостного плазменного или плазмохимического травления кремния, применяемые в настоящее время для создания рентгенооптических элементов Талбот–Лауэ интерферометров [16].

Заключение

Рассмотренный метод определения фокусного пятна микрофокусных рентгеновских трубок с использованием простых макроскопических тестовых объектов и компьютерного моделирования эталонных

фазомодулирующих периодических микроструктур отличается высокой чувствительностью к параметрам микрофокусных трубок в диапазоне от нескольких микрометров до нанофокусных размеров. В работе показано, что для определения оптимальной геометрии съемки и правильной интерпретации изображений тестовых объектов целесообразно применять программное обеспечение, реализующее численное решение волнового уравнения для формирования интерференционных картин.

Благодарность за финансовую поддержку работы

Работа проводится при финансовой поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации (по Соглашению с Минобрнауки России от «09» февраля 2023 г. №075-11-2023-006, идентификатор государственного контракта 000000S407523Q6V0002).

Литература

1. Староверов Н.Е. Метод автоматизированного контроля электронных компонентов на микрофокусных рентгеновских снимках // Известия вузов России. Радиоэлектроника. 2021. Т. 24. № 4. С. 27–36.
2. Потрахов Н.Н., Грязнов А.Ю., Жамова К.К. и др. Микрофокусная рентгенография в медицине: физико-технические особенности и современные средства рентгенодиагностики // Биотехносфера. 2015. № 5(41). С. 55–63.
3. Лидер В.В. Рентгеновские методы осевого фазового контраста и осевой голографии // Заводская лаборатория. Диагностика материалов. 2015. Т. 81. № 12. С. 32–40.
4. Nugent K.A., Paganin D., Gureyev T.E. A phase odyssey // Physics Today. 2001. Vol. 54. № 8. pp. 27–32.

5. Snigirev A., Snigireva I., Kohn V. et al. On the possibilities of X-ray phase contrast microimaging by coherent high-energy synchrotron radiation // Review of Scientific Instruments. 1995. Vol. 66. № 12. pp. 5486–5492.

6. Cloetens P., Barrett R., Baruchel J. et al. Phase objects in synchrotron radiation hard X-ray imaging // Journal of Physics D: Applied Physics. 1996. Vol. 29. № 1. pp. 133–146.

7. Davis T.J., Gao D., Gureyev T.E. et al. Phase-contrast imaging of weakly absorbing materials using hard X-rays // Nature. 1995. Vol. 373. pp. 595–598.

8. Грязнов А.Ю. О возможности получения фазоконтрастных изображений на микрофокусных источниках рентгеновского излучения // Биотехносфера. 2010. № 1(7). С. 30–32.

9. Shovkun V.Ya., Kumakhov M.A. Phase contrast imaging with micro focus X-ray tube // Proceedings of SPIE. 2006. Vol. 5943. p. 594315.

10. Шовкун В.Я. Разработка фазоконтрастного маммографа в схеме “in-line holography” // Медицинская физика. 2007. № 2(34). С. 25–34.

11. Hertz H.M., Bertilson M., Chubarova E. et al. Laboratory X-ray micro imaging: Sources, optics, systems and applications // Journal of Physics Conference Series. 2009. Vol. 186, № 1. p. 012027.

12. Bavendiek K., Ewert U., Riedo A. et al. New measurement methods of focal spot size and shape of X-ray tubes in digital radiological applications in comparison to current standards // Proceedings of the 18th World Conference on Nondestructive Testing. 2012. p. 346.

13. Goodman J.W. Introduction to Fourier optics. Greenwood Village: Roberts and Company Publishers, 2005. 491 p.

14. Cowley J.M. Diffraction physics. Amsterdam: North Holland Publishing, 1995. 488 p.

15. Shao W., He T., Wang L. et al. Capillary manganese halide needle-like array scintillator with isolated light crosstalk for micro-X-ray imaging // *Advanced Materials*. 2024. Vol. 36. № 21. p. e2312053.

16. Pfeiffer F., Bech M., Bunk O. et al. X-ray dark-field and phase-contrast imaging using a grating interferometer // *Journal of Applied Physics*. 2009. Vol. 105. № 10. p. 102006.

References

1. Staroverov N.E. *Izvestiya vuzov Rossii. Radioelektronika*. 2021. Vol. 24. № 4. pp. 27–36.

2. Potrakhov N.N., Gryaznov A.Yu., Zhamova K.K. et al. *Biotekhnosfera*. 2015. № 5(41). pp. 55–63.

3. Lider V.V. *Zavodskaya laboratoriya. Diagnostika materialov*. 2015. Vol. 81. № 12. pp. 32–40.

4. Nugent K.A., Paganin D., Gureyev T.E. *Physics Today*. 2001. Vol. 54. № 8. P. 27–32.

5. Snigirev A., Snigireva I., Kohn V. et al. *Review of Scientific Instruments*. 1995. Vol. 66. № 12. pp. 5486–5492.

6. Cloetens P., Barrett R., Baruchel J. et al. *Journal of Physics D: Applied Physics*. 1996. Vol. 29. № 1. pp. 133–146.

7. Davis T.J., Gao D., Gureyev T.E. et al. *Nature*. 1995. Vol. 373. pp. 595–598.

8. Gryaznov A.Yu. *Biotekhnosfera*. 2010. № 1(7). pp. 30–32.

9. Shovkun V.Ya., Kumakhov M.A. *Proceedings of SPIE*. 2006. Vol. 5943. p. 594315.

10. Shovkun V.Ya. *Meditinskaya fizika*. 2007. № 2(34). pp. 25–34.

11. Hertz H.M., Bertilson M., Chubarova E. et al. *Journal of Physics Conference Series*. 2009. Vol. 186, № 1. p. 012027.

12. Bavendiek K., Ewert U., Riedo A. et al. *Proceedings of the 18th World Conference on Nondestructive Testing*. 2012. p. 346.



13. Goodman J.W. Introduction to Fourier optics. Greenwood Village: Roberts and Company Publishers, 2005. 491 p.

14. Cowley J.M. Diffraction physics. Amsterdam: North Holland Publishing, 1995. 488 p.

15. Shao W., He T., Wang L. et al. Advanced Materials. 2024. Vol. 36. № 21. p. e2312053.

16. Pfeiffer F., Bech M., Bunk O. et al. Journal of Applied Physics. 2009. Vol. 105. № 10. p. 102006.

Дата поступления: 18.09.2024

Дата публикации: 31.10.2024