

К разработке численных методов для применений когерентного излучения в исследованиях внутренней структуры предметов (часть I)

А.С.Бусаров, А.В.Виноградов, Н.Л.Попов, И.А.Артюков

Рассматривается задача отыскания пространственного распределения комплексной диэлектрической проницаемости объекта произвольной формы. Построен алгоритм решения этой задачи путём обработки фазовых дифракционных картин, полученных при последовательном облучении объекта гауссовыми пучками. Формально речь идёт о коэффициентной обратной задаче для трёхмерного параболического волнового уравнения или эквивалентной ей обратной задаче квантовой теории рассеяния для частицы, движущейся в двумерном потенциале, зависящем от времени. Для решения последней используется разложение волновой функции системы по функциям гауссовых пучков, распространяющихся в свободном пространстве. Главными достоинствами подхода являются прямое определение коэффициента преломления наряду с поглощением, а также отказ от вращения или движения образца и источника излучения; его дальнейшее развитие может привести к появлению качественно нового неразрушающего метода исследования и контроля материалов и образцов.

Ключевые слова: когерентная микроскопия, 3D изображения, гауссовы пучки, структурированный свет.

1. Введение

Основным неразрушающим методом исследования внутренней структуры различных объектов является томография. Просвечивающим агентом могут быть как волны, так и частицы. Современный обзор состояния рентгеновской микротомографии содержится в работе [1]. Наш подход при выполнении некоторых условий применим к зондированию объекта (предмета) электромагнитным излучением любого диапазона. Он позволяет преодолеть два ограничения современной томографии. Во-первых, исследуемые материалы характеризуются только коэффициентом поглощения, а наличие преломления не учитывается. В то же время преломление играет определяющую или важную роль во многих физических процессах, с которыми мы сталкиваемся в жизни, технологиях и науке. Например, его обязательно нужно учитывать в микроскопии мягких тканей живых организмов или жидких кристаллов. Во-вторых, не говоря о поправках, в томографии в основном используется лучевая трактовка электромагнитного излучения, что означает пренебрежение дифракцией. Легко представить себе явления и процессы, когда такой подход окажется неудовлетворительным. При написании работы мы ориентировались на возможные применения в экспериментах с рентгеновским и лазерным излучением. Для облегчения чтения основного материала некоторые сведения из теории параболического волнового уравнения (ПВУ) и гауссовых пучков помещены в Приложение.

А.С.Бусаров, А.В.Виноградов, Н.Л.Попов, И.А.Артюков. Физический институт им. П.Н.Лебедева РАН, Россия, 119991 Москва, Ленинский просп., 53; e-mail: albusarov@mail.ru

Поступила в редакцию 29 августа 2024 г., после доработки – 4 октября 2024 г.

2. Прямая задача

Пусть исследуемый объект $V(x, z)$ облучается последовательно гауссовыми пучками $\varphi_l(x, z)$, $l = 1, 2, \dots$, распространяющимися вдоль оси z , а x обозначает совокупность поперечных координат. Поле пучка $u_l(x, z)$ при распространении от входной апертуры ($z = -Z$) к детектору ($z = Z$) (рис. 1) подчиняется уравнению [2]

$$ik \frac{\partial u_l(x, z)}{\partial z} = \left[-\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x, z) \right] u_l(x, z), \quad (1)$$

$$u_l(x, -Z) = \varphi_l(x, -Z), \quad -Z < z < Z,$$

где k – волновое число. Представим $u_l(x, z)$ в виде ряда по функциям гауссовых пучков:

$$u_l(x, z) = \sum_m c_{ml}(z) \varphi_m(x, z), \quad (2)$$

$$\int \varphi_m^*(x, z) \varphi_n(x, z) dx = \delta_{mn},$$

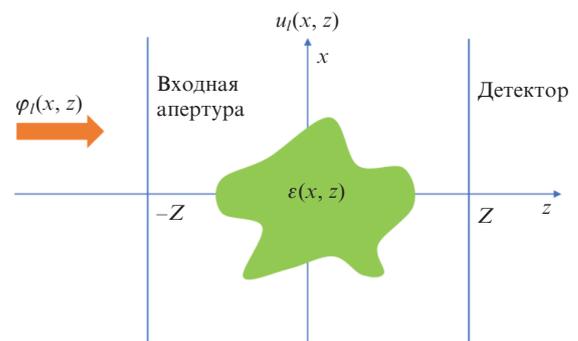


Рис. 1. Рассеяние гауссова пучка $\varphi_l(x, z)$ на финитном амплитудно-фазовом объекте: $u_l(x, z)$ – волновое поле, удовлетворяющее уравнению (1); $\epsilon(x, z)$ – комплексная диэлектрическая проницаемость.

$$c_{ml}(z) = \int \varphi_m^*(x, z) u_l(x, z) dx, \quad (3)$$

$$c_{ml}(z = -Z) = \delta_{ml}, \quad m, l, n = 1, 2, \dots$$

Подставляя (2) в (1), легко убедиться, что коэффициенты $c_{ml}(z)$ удовлетворяют системе уравнений

$$ik\dot{c}_{ml}(z) = \sum_n V_{mn}(z) c_{nl}(z), \quad (4)$$

$$V_{mn}(z) = \int \varphi_m^*(x, z) V(x, z) \varphi_n(x, z) dx, \quad c_{ml}(z = -Z) = \delta_{ml}. \quad (5)$$

Система уравнений (4), (5) – основа моделирования прямой задачи: распространение когерентного излучения при наличии возмущения диэлектрической проницаемости

$$\varepsilon(x, z) = 1 - \frac{2}{k^2} V(x, z). \quad (6)$$

Она позволяет найти поле на детекторе, расположенном при $z = Z$, для любого из падающих гауссовых пучков $\varphi_l(x, z)$ (подробнее см. [3]). Наряду с системой уравнений (4), (5) удобно рассматривать и случай $Z = \infty$.

Система уравнений (4), (5) часто используется в теории атомных столкновений, в атомной и молекулярной физике и химии. Она описывает переходы под действием возмущения, зависящего от времени t (роль которого играет продольная координата $z = (\hbar k/\mu)t$, μ – приведённая масса частицы), а совокупность поперечных координат x представляет конфигурационное пространство [4]. В случае $Z = \infty$ система (4), (5) приобретает вид

$$ik\dot{c}_{ml}(z) = \sum_n V_{mn}(z) c_{nl}(z), \quad (7)$$

$$V_{mn}(z) = \int \varphi_m^*(x, z) V(x, z) \varphi_n(x, z) dx, \quad c_{ml}(-\infty) = \delta_{ml}. \quad (8)$$

При этом коэффициенты $c_{ml}(\infty)$ имеют смысл амплитуд квантовых переходов $m \rightarrow l$ под действием зависящего от «времени» возмущения $V(x, z)$, затухающего при $z \rightarrow \pm\infty$.

Таким образом, системы, вообще говоря, бесконечно-го числа уравнений (4)–(6) (или (7), (8)) сводят прямую задачу прохождения волны через объёмный предмет (1) к обыкновенным дифференциальным уравнениям для амплитуд вероятностей $c_{ml}(z)$. При этом взаимодействие $V(x, z)$ (диэлектрическая проницаемость $\varepsilon(x, z)$) предполагается известным. Нас же в данной работе интересует нахождение потенциала взаимодействия $V(x, z)$, т.е. обратная задача. Как для её решения использовать те же уравнения?

Прежде чем отвечать на этот вопрос, запишем (7), (8) в матричном виде:

$$ik\dot{C}(z) = V(z)C(z), \quad C(z) = \{c_{ml}(z)\}, \quad V(z) = \{V_{mn}(z)\}. \quad (9)$$

Отсюда ясно, что в матричном представлении прямая задача для уравнения (1) сводится к нахождению из уравнения (9) матрицы $C(z)$ при заданном начальном условии $C(-\infty)$. Для любой конечной размерности матриц M существует единственное такое решение, и оно имеет вид [5]

$$C(z) = S(z)C(-\infty), \quad (10)$$

где матрица $S(z)$ удовлетворяет уравнению (9) с начальным условием $S(-\infty) = I$ (здесь I – единичная матрица). Матрицу $S(z)$ в данной работе будем называть матрицей рассеяния. Ниже матричные соотношения (9) и (10) будут использоваться для решения обратной задачи, т.е. определения потенциала $V(x, z)$.

По форме уравнение (9) соответствует уравнениям нестационарной теории возмущений для потенциала $V(x, z)$, зависящего от времени t . Отличительная особенность – соответствующая квантовая система обладает вырожденными уровнями, поскольку матрица $\{V_{mn}(z)\}$ не содержит осциллирующих множителей (см. (5)).

3. Обратная задача. Дискретизация

Переходя к решению обратной задачи, преобразуем матричное уравнение (9) прямой задачи. Для этого подобно волновой функции $u_l(x, z)$ (см. (2)) представим возмущение $V(x, z)$ в ряд по-другому, вообще говоря, не удовлетворяющему (1), полному набору функций $\psi_j(x, z)$:

$$V(x, z) = \sum_j v_j(z) \psi_j(x, z), \quad (11)$$

$$v_j(z) = \int \psi_j^*(x, z) V(x, z) dx.$$

Здесь матрица возмущений принимает вид линейной комбинации известных матриц с коэффициентами $v_j(z)$, к нахождению которых и сводится теперь обратная задача, т.е. определение потенциала $V(x, z)$. С учётом этого запишем ещё раз уравнения прямой задачи (9):

$$ik\dot{C}(z) = V(z)C(z), \quad (12)$$

$$V(z) = \sum_j v_j(z) B^j(z), \quad C(-Z) = I,$$

$$C(z) = \{c_{ml}(z)\}, \quad B^j(z) = \{B_{mn}^j(z)\}, \quad (13)$$

$$B_{mn}^j(z) = \int \varphi_m^*(x, z) \psi_j(x, z) \varphi_n(x, z) dx,$$

где I – единичная матрица. В отличие от уравнения (9), матрица возмущений в (12) является линейной комбинацией табулируемых матриц $B^j(z)$. Действительно, их элементы $B_{mn}^j(z)$ – суть интегралы от произведения трёх специальных или табулируемых функций.

Решением уравнения (12) является матрица $C(Z)$, которая согласно (2) даёт распределение поля за объектом. В обратной задаче распределение поля за объектом $C(Z)$ предполагается известным (измеряется детектором). Чтобы использовать это для нахождения $v_j(z)$, построим приближённое решение уравнений (12), (13), заменив их ступенчатыми функциями с узлами z_s :

$$v_j(z) = v_j(z_s), \quad z_{s-1} < z < z_s, \quad z_s = -Z + sh, \quad (14)$$

$$s = 1, 2, \dots, S = 2Z/h, \quad z_0 = -Z, \quad z_S = Z,$$

где h и S – шаг дискретизации и число узлов. С полученным таким образом потенциалом (11) решение уравнения (12) может быть записано точно [5]. В частности, на поверхности приёмника, если она совпадает с выходной поверхностью объекта, решение имеет вид

$$C(Z) = \prod_{1 \leq s \leq S} \exp \left[-\frac{i\hbar}{k} \sum_{j=1}^J v_j(z_s) B^j(z_s) \right]. \quad (15)$$

Аналогично квантовой механике матрицы в формуле (15) перемножаются в следующем порядке:

$$\prod_{1 \leq s \leq S} A(s) = A(S) \cdot \dots \cdot A(2) \cdot A(1).$$

Уравнение (15) можно считать уравнением объёмной визуализации. В несколько иной форме оно было получено в работе [3]. Из него, рассчитав по показаниям приёмника матрицу $C(Z)$, можно найти коэффициенты $v_j(z_s)$, что, согласно (11), даёт распределение потенциала $V(x, z_s)$ в S плоскостях дискретизации (срезах). Это и есть решение обратной задачи. Максимальное число срезов, очевидно, определяется выражением

$$S = \frac{M^2}{J}. \quad (16)$$

При превышении этой величины число неизвестных в (15) будет превышать число уравнений.

4. Заключение

Таким образом, предлагается схема решения задач дифракции на финитных объектах (предметах). С её помощью получено уравнение (15), на основе которого могут быть предложены алгоритмы определения внутренней структуры предмета произвольной формы.

В экспериментальной реализации имеется в виду последовательное просвечивание исследуемого объекта гауссовыми пучками. В отличие от томографии, вращения источника излучения или объекта не требуется.

Возможность, наряду с поглощением, определить пространственное распределение показателя преломления важно для сколь-нибудь удовлетворительной характеристики оптических свойств материала [6]. В частности, в рентгеновском диапазоне, несмотря на малое отличие показателя преломления от единицы, его знание крайне необходимо для разработки рентгенооптических элементов [7], а также используется для описания элементного и молекулярного состава вещества [8–11].

Математической основой предложенного метода является использование трёх разложений (рядов): 1) разложение электромагнитной волны по полному набору гауссовых пучков (функций); 2) разложение диэлектрической проницаемости по произвольному полному набору функций от поперечных координат; 3) ряд, связанный с дискретизацией в продольном направлении, задающий набор срезов – вертикальных плоскостей, в которых отыскивается распределение диэлектрической проницаемости исследуемого объекта. Важно, что после обрыва этих рядов получается система уравнений, не имеющая, по крайней мере явных, противоречий с физикой. В частности, при любых значениях чисел M , J , S и вещественном возмущении соответствующая физическая система оказывается консервативной. Подобные приближённые методы считаются предпочтительными, поскольку их использование, как правило, приводит к повышению точности результатов.

Следует отметить, что в данной работе подразумевается регистрация прошедшего излучения фазовым детектором, т. е. по амплитуде и фазе. На практике это возможно пока только в терагерцевом и следующих за ним длин-

новолновых диапазонах. В ИК и более коротковолновых диапазонах имеются только квадратичные детекторы. Поэтому для практической реализации предложенного подхода к безлинзовой визуализации трёхмерных объектов потребуется разработка специальных численных методов восстановления фазы. Такие методы применительно к двумерным объектам появились в начале 1970-х гг. Их развитию способствовал прогресс вычислительной техники и математики. К настоящему времени методы восстановления фазы широко используются во многих областях научных исследований в спектральных диапазонах от инфракрасного до рентгеновского [12, 13]. В частности, в работе [12] описывается комплекс программ восстановления фазы, находящийся в открытом доступе. Каждая из них имеет свою область применимости в соответствии с выбранным приближением к волновому уравнению (ПВУ либо уравнению Гельмгольца). В нашем случае, по крайней мере в идеале (при большом числе удерживаемых в разложениях по m , j и s членов), речь идёт о точном решении ПВУ. Это несомненно даёт преимущества, но может обернуться и трудностями [5].

Наиболее важными направлениями в развитии представленного здесь подхода, на наш взгляд, являются исследование сходимости трёх упомянутых разложений, а также разработка методов восстановления фазы, что открывает возможность практических применений в видимом и рентгеновском диапазонах. В следующей работе планируется представить результаты численных экспериментов по определению объёмного распределения диэлектрической проницаемости $\varepsilon(x, z)$.

Авторы признательны М.В.Горбункову, В.С.Лисице, А.В.Попову, Ю.В.Сенатскому и Р.М.Фещенко за обсуждение вопросов, затронутых в работе.

Приложение. Параболическое волновое уравнение и гауссовы пучки

Параболическое волновое уравнение (ПВУ) в математической физике не входит в классификацию уравнений с частными производными второго порядка. В электродинамику оно было введено в работах М.А.Леонтовича и др. [14–16] как приближение к уравнениям электромагнитного поля*. Ещё раньше оно появилось как уравнение Шрёдингера для случая движения частицы в двумерном потенциале $V(x, y, t)$, зависящем от времени. Таким образом, будучи приближением к уравнениям электромагнитного поля, ПВУ является строгой математической моделью для количественного описания другого физического процесса. Видимо, именно благодаря этому ПВУ выгодно отличается от иных приближённых методов электродинамики и часто используется во многих её разделах и прикладных задачах. По той же причине возникает идея эвристического применения методов квантовой механики для исследования проблем электродинамики, включая и выходящие за общепринятые рамки применимости ПВУ.

Возвращаясь к теме данной работы – уравнения для численной визуализации 3D объектов и разработка методов их решения, при выводе уравнения объёмной визуализации (15) мы использовали соотношение, справедливое для любой пары решений ПВУ:

* Точнее, к уравнению Гельмгольца для фурье-компонент поля.

$$\frac{d}{dz} \int u_1^*(x, z) u_2(x, z) dx = 0. \quad (\text{П1})$$

Оно выполняется также и в квантовой механике и означает, что если в качестве начального состояния квантовой системы выбираются функции из полного набора, то в процессе эволюции они будут оставаться полным набором. Формулу (П1) с помощью алгебраических преобразований легко получить из уравнения (1), разд.2.

Теория гауссовых пучков, как собственных решений ПВУ, ввиду обширных применений продолжает развиваться (см. [17, 18]). Между тем обозначения, применяемые авторами, могут весьма различаться. Поэтому приведём здесь формулы для гауссовых пучков, образующих ортонормированную систему, как это подразумевалось выше в статье. Они описываются тремя параметрами: волновое число $k = 2\pi/\lambda$ (λ – длина волны), радиус (полуширина) перетяжки пучка ρ_0 и длина Рэлея z_R [19]. Эти параметры связаны соотношением

$$z_R = k\rho_0^2, \quad (\text{П2})$$

и, следовательно, любые два из них могут использоваться для полного описания гауссова пучка.

В случае двух измерений волновая функция имеет вид

$$\begin{aligned} \varphi_n(x, z) = & \frac{1}{\sqrt{\rho(z)}} \exp \left[-i \left(n + \frac{1}{2} \right) \arctg \left(\frac{z}{z_R} \right) + i \frac{kx^2}{2R(z)} \right] \\ & \times \varphi_n^{\text{norm}} \left(\frac{x}{\rho(z)} \right), \end{aligned} \quad (\text{П3})$$

где

$$\rho(z) = \rho_0 \sqrt{1 + \left(\frac{z}{z_R} \right)^2}, \quad R(z) = z \left(1 + \left(\frac{z}{z_R} \right)^2 \right), \quad (\text{П4})$$

$$\varphi_n^{\text{norm}}(t) = \frac{1}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi}}} \varphi_n(t), \quad (\text{П5})$$

$$\varphi_n(t) = \exp \left(-\frac{t^2}{2} \right) H_n(t), \quad n \geq 0.$$

Здесь $\varphi_n(t)$ – функции Эрмита, $\varphi_n^{\text{norm}}(t)$ – нормированные функции Эрмита [20] (образуют полный набор вещественных функций, получающийся из полного набора (П3) при $z = 0$) и $H_n(t)$ – многочлены Эрмита [20, 21]:

$$H_n(t) = (-1)^n \exp(t^2) \frac{d^n}{dt^n} \exp(-t^2), \quad n \geq 0, \quad (\text{П6})$$

$$H_0(t) = 1, \quad H_1(t) = 2t, \quad H_2(t) = 4t^2 - 2, \dots$$

Трёхмерный эрмит-гауссов пучок получается как произведение соответствующих двумерных пучков (П3):

$$\begin{aligned} \varphi_{n_1, n_2}(x, y, z) = & \frac{1}{\rho(z)} \exp \left[-i(n_1 + n_2 + 1) \arctg \left(\frac{z}{z_R} \right) + i \frac{kr^2}{2R(z)} \right] \\ & \times \varphi_{n_1}^{\text{norm}} \left(\frac{x}{\rho(z)} \right) \varphi_{n_2}^{\text{norm}} \left(\frac{y}{\rho(z)} \right), \end{aligned} \quad (\text{П7})$$

где $r = \sqrt{x^2 + y^2}$.

1. Бузмаков А.В. Докт. дисс. (Ин-т кристаллографии им. А.В.Шубникова РАН, Москва, 2023).
2. Levy M. *Parabolic Methods for Electromagnetic Wave Propagation* (IET, 2000).
3. Artyukov I.A., Busarov A.S., Popov N.L., Vinogradov A.V. *J. Russ. Laser Res.*, **45** (3), 278 (2024).
4. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. *Квантовая механика* (М.: Наука, 1988) [Landau L.D., Lifshitz E.M. *Quantum Mechanics: Non-Relativistic Theory* (Amsterdam: Elsevier, 2013, vol. 3)].
5. Bellman R. *Introduction to Matrix Analysis* (New York: McGraw-Hill, 1960, ch. 10).
6. Palik E.D. *Handbook of Optical Constants of Solids* (Academic Press, 1998, vol. 3).
7. Attwood D. *Soft X-Rays and Extreme Ultraviolet Radiation: Principles and Applications* (Cambridge University Press, 2000).
8. Watanabe M., Sato S., Monro I., Lodha G.S. *A Guide to Synchrotron Radiation Science* (New Delhi: Narosa Publishing House, 2016).
9. Михайлов И.Ф., Батурин А.А., Михайлов А.И. *Рентгеновские методы анализа состава материалов* (Харьков: Изд-во Харьковского ун-та, 2016).
10. Фетисов Г.В. *Синхротронное излучение. Методы исследования структуры веществ* (М.: Литрес, 2022).
11. Фетисов Г.В. *УФН*, **190** (1), 2 (2020).
12. Lohse L.M., Robisch A.L., Töpperwien M., Maretzke S., Krenkel M., Hagemann J., Salditt T. *J. Synchrotron Rad.*, **27** (3), 852 (2020).
13. Huhn S., Lohse L.M., Lucht J., Salditt T. *Opt. Express*, **30** (18), 32871 (2022).
14. Леонтович М.А. *Изв. АН СССР. Сер. физич.*, **8**, 16 (1944).
15. Леонтович М.А., Фок В.А. *ЖЭТФ*, **16**, 557 (1946).
16. Левин М.Л., Рыгов С.Ж., Шафранов В.Д. *УФН*, **139** (4), 667 (1983).
17. Абрамочкин Е.Г., Волостников В.Г. *Современная оптика гауссовых пучков* (М.: Физматлит, 2010).
18. Wu F., Luo Y., Cui Z. *Photonics*, **10**, 1041 (2023).
19. Ахманов С.А., Никитин С.Ю. *Физическая оптика* (М.: Изд-во МГУ, 2004).
20. Смирнов В.И. *Курс высшей математики* (М.: Наука, 1974, т. 3, ч. 2).
21. Бейтмен Г., Эрдейи А. *Высшие трансцендентные функции* (М.: Наука, 1966, т. 2).