

## Рентгеновская безлинзовая оптика и птихография

А.С. Бусаров,<sup>1,\*</sup> П.Ю. Глаголев,<sup>2,†</sup> Н.Л. Попов<sup>1,‡</sup><sup>1</sup>Физический институт им. П. Н. Лебедева Российской академии наук  
Россия, 119991, Москва, Ленинский проспект, д. 53<sup>2</sup>Национальный исследовательский университет МИЭТ

Россия, 124498, Москва, г. Зеленоград, площадь Шокина, дом 1

(Поступила в редакцию 10.12.2023; после доработки 08.02.2024; подписана в печать 12.02.2024)

Одной из задач современных оптических методов является наиболее полное описание исследуемых объектов и световых полей. Например, исследуемые материалы должны характеризоваться не только поглощением, но и преломлением, а световые поля за объектом и вблизи детектора — не только интенсивностью, но и фазой. Работа Гершберга и Сакстона 1972 г. была первой попыткой выполнить эту задачу без использования каких-либо оптических элементов, опираясь лишь на квадратичный детектор и компьютер, моделирующий распространение электромагнитных волн. Сегодня подобные безлинзовые методы получения изображений применяются в широком диапазоне длин волн — от терагерц до жёсткого рентгена. Цель настоящей работы — дать краткое введение в теорию безлинзовых методов применительно к рентгеновскому диапазону длин волн. Представлены также результаты экспериментов по безлинзовому построению изображений тест-объектов, выполненных недавно в ФИАНе с помощью лазеров.

PACS: 42.30.Rx, 42.30.-d, 41.50.+h, 07.85.Fv. УДК: 53.

Ключевые слова: безлинзовая оптика, птихография, томсоновские и комптоновские источники.

DOI: 10.55959/MSU0579-9392.79.2420206

## ВВЕДЕНИЕ

Восстановление фазы и птихография относятся к технологиям, уже хорошо освоенным в синхротронных исследованиях и в то же время труднодоступным для реализации с помощью рентгеновских трубок. Поэтому естественно ожидать, что появление томсоновских и комптоновских источников излучения позволит расширить область применения и географию безлинзовых рентгеновских методов получения изображений. Их главное предназначение — обойтись в эксперименте без рентгенооптических элементов (многослойных зеркал, зонных пластинок, преломляющих линз) в тех случаях, когда они становятся малоэффективными либо неприемлемо дорогими. Оптическая схема при этом содержит лишь источник (в идеале когерентный) для освещения объекта, квадратичный детектор, регистрирующий дифракционную картину, и компьютер (высокопроизводительный), реализующий алгоритм восстановления фазы светового поля на детекторе и за объектом (пример см. в разд. 3).

Для изложения теории метода удобно опираться на математический аппарат френелевской оптики и оптических преобразований [1, 2]. Обе книги неоднократно переводились на русский язык. Обобщение на наклонно освещаемые объекты дано

в недавней работе [3]. Основой метода является интеграл Френеля, который удовлетворяет параболическому волновому уравнению (см., например [4]), описывающему распространение света в свободном пространстве. В данной статье мы ограничимся таким подходом, поскольку он часто используется на практике, хотя и безусловно является приближённым как по отношению к уравнениям Максвелла, так и к скалярному уравнению Гельмгольца.

## 1. ВОЛНОВАЯ ОПТИКА. ИНТЕГРАЛ ФРЕНЕЛЯ И ПРЕОБРАЗОВАНИЕ ЛИНЗЫ

Для простоты ограничимся 2D-геометрией и параксиальным приближением, которое справедливо, если имеется преимущественное направление распространения света (например, ось  $z$ ). Световое поле описывается скалярной комплексной функцией  $u(x, z)$ , удовлетворяющей параболическому волновому уравнению:

$$(\partial_{xx} + 2ik\partial_z)u(x, z) = 0, \quad (1)$$

где  $k = 2\pi/\lambda$  — волновой вектор.

Уравнение (1) применяется к полю источника, распространяющемуся вдоль оси  $z$  после прохождения исследуемого объекта (см. рис. 1). Решение можно записать в виде интеграла Френеля:

$$u(x, z) = \sqrt{\frac{k}{2\pi iz}} \int_{-\infty}^{\infty} u_0(x') e^{i \frac{k(x-x')^2}{2z}} dx', \quad (2)$$

\* E-mail: [albusarov@mail.com](mailto:albusarov@mail.com)† E-mail: [glagolev@ckp-miet.ru](mailto:glagolev@ckp-miet.ru)‡ E-mail: [nlpopov@mail.ru](mailto:nlpopov@mail.ru)

где  $u_0(x)$  — поле в плоскости  $z = 0$ , обычно располагаемой вблизи объекта. Уравнение (2) описывает дифракцию поля источника на объекте. Далее, говоря «поле на объекте», мы будем подразумевать  $u_0(x)$ .

Формула (2) допускает обращение:

$$u_0(x) = \sqrt{\frac{k}{2\pi i(-z)}} \int_{-\infty}^{\infty} u(x', z) e^{-i\frac{k(x-x')^2}{2z}} dx', \quad (3)$$

что и решало бы задачу безлинзовой оптики, если бы детектор, регистрирующий дифрагированное поле в плоскости  $z = Z$ , измерял не только модуль, но и фазу светового поля. Однако это невозможно. Применяемые сегодня рентгеновские детекторы являются квадратичными и измеряют величину  $|u(x, Z)|$ .

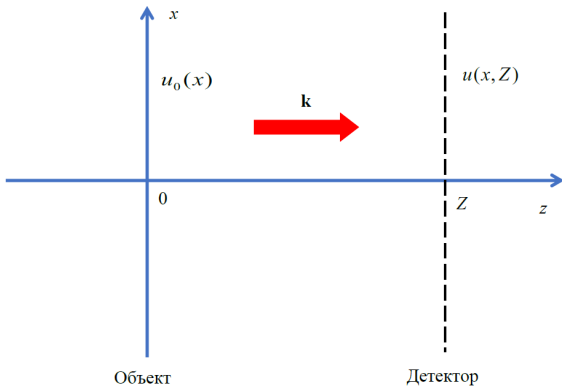


Рис. 1. Схематическое изображение распространения поля  $\mathbf{k}$  от объекта до детектора вдоль оси  $z$  в двумерной геометрии

Оптические системы позволяют обеспечить геометрическое подобие полей на объекте и детекторе. Суть дела поясняет рис. 2, показывающий идеальную оптическую систему — фазовый транспарант бесконечной апертуры, выполняющий роль линзы. Его действие заключается в умножении падающего на него поля на множитель  $\exp\{-ikx^2/2f\}$ , где  $f$  — фокусное расстояние. Можно показать с помощью (2) (см. [1, 2]), что поля в плоскости детектора  $b$  и объекта  $a$  связаны соотношением<sup>1</sup>:

$$u_b(x) = \frac{1}{\sqrt{M}} u_a\left(-\frac{x}{M}\right) e^{\frac{ikx^2}{2fM} - i\frac{\pi}{2}}, \quad (4)$$

$$M = \frac{b}{a}, \text{ причем } \frac{1}{a} + \frac{1}{b} = \frac{1}{f},$$

<sup>1</sup> Заметим, что формула (4) не содержит  $\mathbf{k}$ , то есть не зависит от длины волны  $\lambda$  и, следовательно, пренебрегает дифракционным пределом пространственного разрешения. Это связано с приближённым характером волнового уравнения (1) в отличие от соответствующего точного уравнения Гельмгольца, а также с тем, что моделирование фокусирующего элемента выполняется с помощью бесконечного фазового экрана. Кроме того, независимость (4) от  $\lambda$  указывает на существование аналога в геометрической оптике, в чём можно убедиться, сравнивая соответствующие разделы в [2] и [5].

выражающим полное подобие изображения и предмета (имеется ввиду подобие  $|u_a(x)|$  и  $|u_b(x)|$ ). Но так же, как и в случае (3), квадратичность детектора не даёт возможности установить фазу объекта. Это преодолевается методами фазовой микроскопии. Однако в рентгеновском диапазоне к настоящему времени большее распространение получили безлинзовые методы.

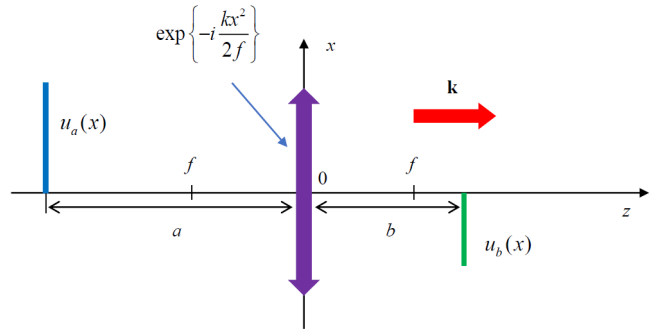


Рис. 2. Схематическое изображение идеальной оптической системы. После прохождения через фазовый экран, действующий как множитель  $\exp\{-ikx^2/2f\}$  и выполняющий роль линзы, поле на объекте  $u_a$  переходит в поле на детекторе  $u_b$

## 2. КОГЕРЕНТНАЯ ДИФРАКЦИОННАЯ МИКРОСКОПИЯ (CDI) И ПТИХОГРАФИЯ

Центральной задачей, лежащей в основе когерентной дифракционной микроскопии, является фазовая проблема. Фазовая проблема в ее первоначальном виде звучит так: требуется найти фазу произвольной комплексной функции, если известны две действительные функции — ее модуль и модуль ее фурье-образа. Применительно к оптике эта задача впервые была сформулирована и решена в работе [6]. В этой работе фазовая проблема сформулирована так: восстановить фазу волнового поля, создаваемого когерентным лазерным пучком, по измерениям его модуля в двух параллельных плоскостях: объекта и детектора (см. рис. 1). При этом предполагалось, что поля в этих плоскостях получают одно из другого с помощью преобразования Фурье, например так связаны поля, когда одна плоскость находится в дальней зоне распространения излучения относительно другой. В той же работе был предложен итеративный алгоритм, одной из составляющих которого является расчет распространения когерентного излучения от плоскости объекта к плоскости детектора, который сводился к быстрому преобразованию Фурье. Этот алгоритм носит сейчас название алгоритм Гершберга–Сакстона.

Эта работа вызвала интерес к данной теме и через 10 лет вышла статья [7], в которой опыт восстановления фазы был обобщен и появилась новая формулировка: определить фазу амплитуды на объекте по известному распределению ин-

тенсивности на детекторе и по априорно известной информации об объекте. Например, объект конечен и его размеры точно известны. В одномерном случае эта задача, по сути, не решается, но для двумерных объектов можно получить почти однозначное решение, особенно если они сложные и не содержат повторяющихся частей. Аналог алгоритма Гершберга–Сакстона применительно к формулировке с априорной информацией об объекте был назван алгоритмом снижения ошибки (ERROR-REDUCTION). В этой работе было показано, что алгоритм ERROR-REDUCTION — это, по сути, метод сопряженных градиентов для поиска локального минимума функции ошибки. Где функция ошибки — это энергия поля на множестве точек, не удовлетворяющем априорной информации об объекте. Например, за пределами объекта. Поэтому алгоритм ERROR-REDUCTION всегда сходится, но не обязательно к точному решению. Помочь преодолеть эту трудность был призван другой алгоритм — гибридный алгоритм ввода-вывода (НЮ), который позволяет гораздо лучше приблизиться к точному решению. Точное решение здесь определяется так: поле за пределами объекта равно нулю, а интенсивность на детекторе равна измеренной. Однако НЮ не гарантирует сходимости, поэтому было предложено комбинировать алгоритмы ERROR-REDUCTION и НЮ: после 30 итераций НЮ выполнять 10 итераций ERROR-REDUCTION. На рис. 3. показана блок-схема алгоритмов восстановления фазы ERROR-REDUCTION и НЮ.

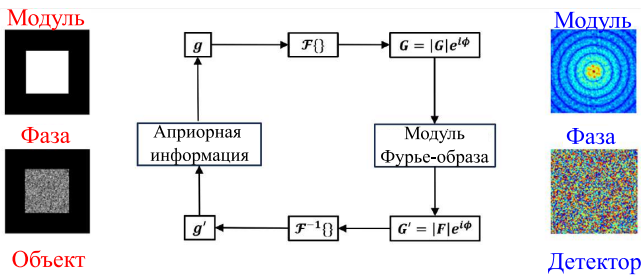


Рис. 3. Блок-схема алгоритмов восстановления фазы ERROR-REDUCTION и НЮ. Вложенный квадрат слева — границы, в которых задан объект.  $g$  — комплексное двумерное поле на объекте перед итерацией,  $g'$  — после применения ограничения на модуль в обратном пространстве. Разница в алгоритмах только в наложении априорной информации

Алгоритм выполняется итерациями до тех пор, пока не перестанет меняться комплексное поле на объекте  $g$  (обозначение как в оригинальной работе). Перед первой итерацией поле  $g$  выбирается случайно. Далее к  $g$  применяется преобразование Фурье  $G = F[g]$ , после чего модуль функции  $G$  заменяется значением, найденным из эксперимента  $|G| \rightarrow |F|$ . Полученная новая функция  $G'$  преобразуется в обратном порядке к  $g'$ . Далее различие между двумя алгоритмами состоит в том, что в ERROR-

REDUCTION ограничение на размер объекта задается прямо — функция  $g'$  приравнивается к нулю везде за пределами объекта, а в НЮ в точках за пределами объекта вычитается с некоторым коэффициентом значение  $g$ , найденное на предыдущей итерации. Внутри границ объекта функция не меняется в обоих алгоритмах. Вопрос однозначности найденной фазы решается применением оверсэмплинга. Суть его в том, чтобы оцифровывать распределение интенсивности с большей пространственной частотой, чем это необходимо по теореме Котельникова. Более подробно см. [8, 9]. Преобразование Фурье здесь используется, потому что к нему сводится расчет распространения когерентного излучения между объектом и детектором в ряде случаев, например, в случае дальней зоны (см. [10–12]). В дальней зоне поле описывается формулой:

$$u(x, z) = \frac{2\pi k}{iz} \frac{z^2}{z^2 + x^2} e^{ik\sqrt{z^2 + x^2}} \times F[u_0] \left\{ p = k \frac{x}{\sqrt{z^2 + x^2}} \right\}, \quad (5)$$

где запись  $F[u_0] \left\{ p = k \frac{x}{\sqrt{z^2 + x^2}} \right\}$  означает, что преобразование Фурье  $F[u_0]^2$  от функции  $u_0(x')$  берет в точке обратного пространства  $p = k \frac{x}{\sqrt{z^2 + x^2}}$ .

Работоспособность этих алгоритмов сохраняется, если вместо преобразования Фурье использовать точный расчет поля в ближней зоне волновым пропагатором. В качестве примера эффективности работы этих алгоритмов приведем эксперимент в оптической области спектра по восстановлению букв, составляющих слово «ФИАН», вырезанных в металлическом медальоне [13].

На рис. 4. показана схема эксперимента из этой работы, а на рис. 5 — результат восстановления (модуль и фаза). Здесь использовались границы объекта прямоугольной и трапециевидальной формы (чтобы ограничить букву «А»). Если положение, размер и ориентация границы буквы известны, то время расчета модуля и фазы составляло около 5 мин на персональном компьютере с 14-ядерным ЦП Intel(R) Core(TM) i9-7940X CPU 3.75GHz.

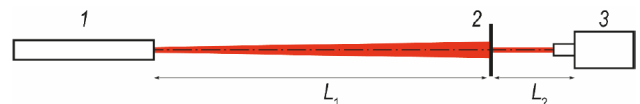


Рис. 4. Схема эксперимента: 1 — гелий-неоновый лазер, 2 — объект, 3 — КМОП-камера.  $L_1 = 2.95$  м,  $L_2 = 0.60$  м

Наконец, в 2004 г. вышла работа [14, 15] в которой была предложена еще одна формулировка

<sup>2</sup> В данной работе прямое и обратное преобразование Фурье вводятся следующим образом:  $F(p) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} f(x) e^{-ipx} dx$ ,  $f(x) = \int_{-\infty}^{\infty} F(p) e^{ipx} dp$ .

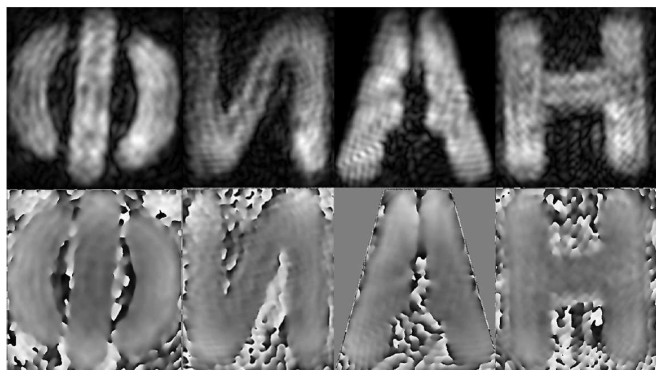


Рис. 5. Результат восстановления букв, верхний ряд — модуль, нижний — фаза

фазовой проблемы в оптике, названной птихографией. Суть этого подхода в представлении объ-

екта как комплексной функции  $O(x, y)$ , имеющей смысл коэффициента пропускания или отражения, который освещается другой комплексной функцией (пробной функцией)  $P(x, y)$ . Поле за объектом в этом случае равно  $u(x, y) = P(x, y)O(x - \xi, y - \eta)$ , где  $(\xi, \eta)$  смещение объекта в плоскости. Требуется найти  $O(x, y)$  и  $P(x, y)$  при условии, что сделано множество снимков объекта с разных положений  $(\xi_j, \eta_j)$  при неизменном источнике. При этом соседние снимки должны перекрываться минимум на 50%. В этом случае объект и освещающее поле восстанавливается однозначно. Соответствующий алгоритм был назван Ptychography Iterative Engine (PIE). Алгоритм PIE предполагает, что пробная функция  $P(x, y)$  априори известна, этот недостаток был устранен в новой версии алгоритма extended Ptychography Iterative Engine (ePIE) [16–18]. Алгоритм ePIE итеративный, на каждой его итерации происходит уточнение функций  $O(x, y)$  и  $P(x, y)$  по формулам:

$$O_{j+1}(x, y) = O_j(x, y) + \alpha \frac{P_j^*(x - \xi_j, y - \eta_j)}{|P_j(x - \xi_j, y - \eta_j)|_{\max}^2} (u'_j(x, y) - u_j(x, y)), \quad (6)$$

$$P_{j+1}(x, y) = P_j(x, y) + \beta \frac{O_j^*(x + \xi_j, y + \eta_j)}{|O_j(x - \xi_j, y - \eta_j)|_{\max}^2} (u'_j(x, y) - u_j(x, y)), \quad (7)$$

где  $\alpha$  и  $\beta$  — безразмерные коэффициенты, обычно равные единице,  $u_j(x, y)$  — поле на объекте,  $u'_j(x, y)$  — поле  $u_j(x, y)$  после применения к нему ограничения в обратном пространстве от соответствующей дифрактограммы. Начальные функции  $O_0(x, y)$  и  $P_0(x, y)$  берутся равными единице.

Птихография намного эффективней предыдущих алгоритмов и используется сейчас для различных приложений в широкой области спектра от терагерц до жёсткого рентгеновского излучения. Её пространственное разрешение не ограничивается апертурой объектива, как в обычной микроскопии, и в принципе приближается к дифракционному пределу  $\lambda/2$  (подробнее см. [19]). Однако она требует больше снимков, а следовательно, времени и общего числа фотонов. Это требование не выполняется для короткоживущих объектов, дающих мало фотонов, например искровых разрядов. Поэто-

му и более старые постановки задачи восстановления фазы до сих пор актуальны и применяются. Кроме того, птихография предполагает, что объект не имеет толщины, т. е. двумерный. Поэтому делаются попытки (см. [20]) обобщить этот подход для трехмерных объектов. То есть сделать что-то вроде томографии, но где бы определялся не коэффициент поглощения, а комплексный показатель преломления. По-видимому, это направление будет развиваться в ближайшее время.

Авторы благодарны И.А. Артюкову, А.В. Виноградову, М.В. Горбункову, Ю.Я. Масловой и Е.В. Паркевичу за полезные обсуждения.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российской Федерации в лице Министерства науки и высшего образования, соглашение № 075-15-2021-1350 от 5 октября 2021 г. (внутренний номер 15.СИН.21.0004).

- [1] Goodman J.W. // Introduction To Fourier Optics, McGraw-Hill, 1996.
- [2] Papoulis A. // Systems and Transforms With Applications in Optics, McGraw-Hill, 1986.
- [3] Бусаров А.С. // Методы волновой оптики для получения рентгеновских изображений наклонных объектов, Дисс. ... канд. физ.-мат. наук. М.: ФИАН, 2023. <https://lebedev.ru/ru/fian-dissertation-councils/posts.html>
- [4] Абрамочкин Е.Г., Волостников В.Г. // Современная оптика гауссовых пучков. М.: ФИЗМАТЛИТ,

2010.

- [5] Сувухин Д.В. // Общий курс физики. IV. Оптика. М.: ФИЗМАТЛИТ, 2005.
- [6] Gerchberg R.W., Saxton W.O. // Optik. **35**. 237 (1972).
- [7] Fienup J.R. // Appl. Opt. **21**, N 15 (1 August) (1982).
- [8] Bruck Yu.M., Sodin L.G. // Opt. Commun. **30**. 304 (1979).
- [9] Miao J., Sayre D., Chapman H. N. // J. Opt. Soc. Am. **A15**. 1662 (1998).
- [10] Lalor É.J. // Opt. Soc. Am. **58**, N 9. 1235 (1968).

- [11] *Onural L.J.* // *Opt. Soc. Am. A*, **28**, N 3. 290 (2011).
- [12] *Kim M.K.* in *Digital Holographic Microscopy* Springer Series in Optical Sciences. **162** (Springer, New York, NY, 2011)
- [13] *И.А. Артюков, А.В. Виноградов, М.В. Горбунков* и др. // КСФ ФИАН. 10, 11 (2023). (*Artyukov I.A., Vinogradov A.V., Gorbunkov M.V.* et al. // *Virtual Lens Method for Near-Field Phase Retrieval. Bulletin of the Lebedev Physics Institute*, **50(10)**. 414 (2023)).
- [14] *Faulkner H.M.L., Rodenburg J.M.* // *Phys. Rev. Lett.* **93**. 023903 (2004).
- [15] *Rodenburg J.M., Faulkner H.M.L.* // *Appl. Phys. Lett.* **85**. 4795 (2004).
- [16] *Maiden A.M., Rodenburg J.M.* // *Ultramicroscopy* **109**, N 10. 1256 (2009).
- [17] *Thibault P., Dierolf M., Menzel A.* et al. // *Science* **321**. 379 (2008).
- [18] *Thibault P., Dierolf M., Bunk O.* et al. // *Ultramicroscopy* **109**, N 4. 338 (2009).
- [19] *Попов Н.Л., Артюков И.А., Виноградов А.В., Протопопов В.В.* // УФН **190**, № 8. (2020). (*Popov N.L., Artyukov I.A.E., Vinogradov A.V., Protopopov V.V.* // *Physics-Uspokhi*, **63**, N 8. 766 (2020)).
- [20] *Gilles M.A., Nashed Y.S.G., Du M.* et al. // *Optica*. **5(9)**. 1078. (2018).

## X-ray lensless optics and ptychography

**A.S. Busarov<sup>1,a</sup>, P.Yu. Glagolev<sup>2,b</sup>, N.L. Popov<sup>1,c</sup>**

<sup>1</sup>*P.N. Lebedev Physical Institute of the Russian Academy of Sciences  
Moscow 119991, Russia*

<sup>2</sup>*National Research University of Electronic Technology  
Moscow 124498, Russia*

*E-mail: <sup>a</sup>albusarov@mail.com, <sup>b</sup>glagolev@ckp-miet.ru, <sup>c</sup>nlpopov@mail.ru*

One of the problems of modern optics is accurate and full description of the object and light fields. Thus, the optical properties of the materials should be characterized not only by their absorption, but also by the refraction, and the light fields near the object and detector — not only by the intensity, but also by the phase. The 1972 the work of Gershberg and Saxton was the first attempt to solve this problem in free space without optical elements, relying only on a quadratic detector and a computer simulation of the wave propagation. Today, such lensless imaging is used at different wavelengths, from terahertz to hard X-rays. The purpose of this work is to give a brief introduction to the theory of lensless imaging which can be applied to the X-ray region. The results of the corresponding experiments in invisible light using He-Ne laser and testing objects are also presented.

PACS: 42.30.Rx, 42.30.-d, 41.50.+h, 07.85.Fv.

*Keywords:* lensless optics, ptychography, Thomson and Compton sources.

*Received 10 December 2023.*

English version: *Moscow University Physics Bulletin*. 2024. **79**, No. 2. Pp. .

### Сведения об авторах

1. Бусаров Александр Сергеевич — мл. науч. сотрудник ; e-mail: [albusarov@mail.ru](mailto:albusarov@mail.ru).
2. Глаголев Петр Юрьевич — вед. инженер научно-исследовательской лаборатории «Рентгеновская литография» ЦКП «Микросистемная техника и электронная компонентная база» МИЭТ; e-mail: [glagolev@ckp-miet.ru](mailto:glagolev@ckp-miet.ru).
3. Попов Николай Леонидович — канд. физ.-мат. наук, науч. сотрудник; e-mail: [nlpopov@mail.ru](mailto:nlpopov@mail.ru).