

Фазово-контрастные изображения дефектов электронной плотности в кристаллах в синхротронном излучении

Т.С. Аргунова¹, В.Г. Кон²

¹ ФТИ им. А.Ф. Иоффе РАН, 194021 Россия, г. С.-Петербург, ул. Политехническая, 26

² НИЦ «Курчатовский институт», 123182 Россия, г. Москва, пл. Курчатова, 1

Изображения микро-неоднородностей в кристаллах получают в когерентном синхротронном излучении (СИ) методом фазово-контрастного изображения (ФКИ) [1]. При этом локальное изменение фазы, связанное с изменением электронной плотности в кристалле, преобразуется в распределение интенсивности на некотором расстоянии от образца. Интенсивность измеряется высоко-разрешающим детектором. Однако неоднородность пучка СИ и малая величина отношения полезного сигнала к статистическому шуму снижают качество экспериментальных результатов. Кроме того, детекторы имеют темновой шум и битые пиксели. Аномально яркие пиксели на изображениях могут быть также вызваны прямым попаданием СИ на ПЗС-матрицу в процессе рассеяния.

Для устранения из экспериментальных данных нежелательных эффектов, которые возникают в процессе сбора данных, разрабатываются специальные компьютерные программы. В частности, известна коммерческая программа, оптимизирующая качество изображений, измеренных на малом расстоянии от образца методом томографии [2]. Метод томографии хорошо подходит для объектов с относительно большими размерами, когда за счет быстрого изменения фазы осцилляции интенсивности имеют малый период и легко усредняются, а изменение модуля волновой функции обусловлено поглощением.

Напротив, ФКИ слабопоглощающих объектов с малыми размерами: микропор, включений, и т.д., содержат осцилляции интенсивности с большим периодом, связанные с измерением фазы. В этом случае для получения информации о реальном изменении толщины кристалла необходимо решать обратную задачу. Соответственно оптимизация качества ФКИ остается актуальной проблемой.

В настоящей работе предложен оригинальный подход к обработке ФКИ, полученных на источнике СИ 3-го поколения «Pohang Light Source», Республика Корея. Интенсивность измерялась детектором Orca-Fusion (Hamamatsu Photonics, Japan) на матрице 2304×2304 пикселей с эффективным размером пикселя ≤ 1 мкм. Детектор записывал данные измерений в файлы формата tiff, 16 бит. Обработка данных выполнялась по авторским программам, написанным на языке программирования VKACL. Интерпретатор этого языка, комплекс программ и документацию для работы можно бесплатно получить в интернете [3].

Программа преобразует 16-битные числа tiff-файла в стандартную числовую матрицу и проводит подготовительный анализ. Обработка изображения выполняется с помощью математических операций с матрицами. К ним относятся: деление матрицы изображения на матрицу фона, и усреднение элементов полученной матрицы с целью снижения статистического шума и выравнивания фона. Также возможно выделение одномерного массива из двумерного; усиление контраста и т.д. Программа выполняет 16 операций, но это число может быть увеличено в будущем при возникновении новых идей для разработки.

Следует отметить, что в результате применения операции деления матриц к изображению кристалла, не содержащего структурных неоднородностей, должен получиться однородный фон. На самом деле фон получается неровным из-за статистического шума пучка. Шум удается резко уменьшить по амплитуде при усреднении экспериментальной матрицы методом расчета свертки с локализованной функцией разного типа. Функция Гаусса и функция, отличная от нуля в квадрате заданного размера, позволяют уменьшить амплитуду коротковолнового шума, но длинноволновый шум остается.

Принципиально новой является операция выравнивания фона и снижения шума, основанная на свойстве ФКИ не изменять интегральную интенсивность. Она хорошо работает в тех случаях, когда контраст от объектов существенно больше шума, а размеры объектов малы по сравнению с размерами, на которых падающий пучок изменяется заметным образом. При этом все изображение разделяется на блоки, и в каждом из них проводится нормировка на единичное среднее значение.

В докладе представлены примеры применения программы к экспериментальным данным, полученным при изучении реальных кристаллов. В частности, рассмотрены микронеоднородности в CVD-алмазах и структурные характеристики биосенсоров на основе композиций графен/SiC. Проведено сравнение результатов обработки ФКИ с данными методов, использующих электронное и ионное излучение.

1. Т.С. Аргунова, В.Г. Кон. УФН, (2019), 189, 643–658.
2. J. Vlassenbroeck, M. Dierick, B. Masschaele, *et al.* NIM A, (2007), 580, 442–445.
3. В.Г. Кон. Сайт компьютерной программы VKACL. 2026. <https://kohnvict.ucoz.ru/vkac/ACLnews.htm>