

屈折イメージングの計算 DFI 空間分解能評価のための

九州工業大学・大学院工学研究院
九州工業大学・大学院工学研究府
九州工業大学・大学院工学研究府
九州大学シンクロトロン光利用研究センター
東京理科大学・総合研究機構, 基礎工学研究科

鈴木芳文
○金 歌
椎葉 圭
近浦吉則
安藤正海

Calculation of X-ray Refraction Dark-Field Imaging --- discussion for Spatial Resolution

Y. Suzuki^{a*}, G. Jin^{a○}, K. Shiiba^a, Y. Chikaura^b, M. Ando^c

^aFac. of Eng., Kyushu Institute of Technology, Tobata-ku, Kitakyushushi 804-8550

^bResearch Center for Synchrotron Light Applications, Kyushu University, Kasuga, Fukuoka 816-8580

^cRIST, Tokyo Univ. of Science, Nodashi, Chiba 278-8510

*e-mail: ysuzuki@xe-lab.kyutech.ac.jp

X-ray optics for XDFI (X-ray Dark-Field Imaging) and BFI (Bright-field imaging) have been proposed and applied to visualize X-ray refraction effects yielded in biomedical objects¹⁾. In order to clarify the spatial resolution due to a crystal analyzer in Laue geometry, a program based on the Takagi-Taupin equation was modified to be used for carrying out simulations to evaluate the spatial resolution of images coming into a Laue angular analyzer (LAA). The calculation was done with a perfect plane wave for diffraction wave-fields, which corresponded to both DFI and BFI, under the conditions of 35 keV and a diffraction index 440 for 160 and 480 μm -thick LAAs, adding to refraction effects.

1. はじめに

XDFI (X線 Dark-Field Imaging)のためのX線の光学およびBFI (Bright-field imaging)は、バイオ医療へ大きく期待されているX線の屈折像を視覚化するために提案され、適用されました。

ラウエ法(透過モード)での光学配置の幾何学では、シリコン単結晶のナライザーにより空間分解能を明らかにするために、高木方程式に基づいたプログラムをラウエ角度のアナライザー(LAA)によるイメージの空間分解能を評価するためにシミュレーションを実行した。

屈折像の計算に関しては、35 keVおよび回折の条件の下で、回折波動場(それらはDFIとBFIの両方に相当した)完全平面波で行った、160および480 μm の厚さで440の回折指数のもとで主として行った。

後半には、今までの研究が試料はX線を完全に吸収する試料を想定しており、吸収像としてのモデルでシミュレーションであったが、吸収が無く屈折・透過する試料を想定する屈折像に焦点を当てたことを述べる。屈折媒体に入射したX線は試料のエッジでわずかに屈折する。具体的に数値解を求め、X線干渉計の底面においてどのような強度分布を有するかをプログラムによるシミュレーションを行った。屈折像での空間分解能を定め、吸収像と屈折像を比較する。

2. 実験方法

プログラムは、我々のグループの今までの研究成果としてタカギ-タウパンの式をアップルボーインの近似式を利用して作成されたものを使用した。言語にはC言語を用いている。

格子定数、面間隔、ブラッグ角、原子散乱因子、構造因子、電気感受率である。次にこれらの値を用いて、タカギ-タウパンの式をプログラム化させてあ

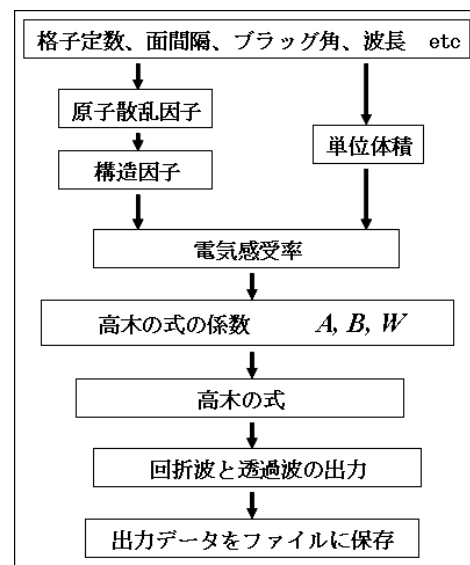


Fig. 1

る。また、C言語には用いることのできない複素関数については、扱いやすくするために関数マクロを設定してある。図1に計算プロセスを示す。

右図のような円形の屈折率媒質を X 線が通過すると、赤い線で示すような軌跡を X 線は通過する。

円形媒質の中心から点 x の位置で入射する X 線のフィルター (LAA) もしくは検出器に入射する角度 θ_m は

$$\begin{aligned} \theta_{in} &= 2\Delta\theta_1 \\ &= 2\left(\sin^{-1}\left(\frac{\sin\theta_1}{1-\delta}\right) - \theta_1\right) \end{aligned}$$

(1)

なので、 x の位置からからずれる量 Δx は、

$$\begin{aligned} \Delta x &= \{d - r \cos(2\theta_2 - \theta_1)\} \tan \theta_{in} \\ &\quad + r \{\sin(2\theta_2 - \theta_1) - \sin \theta_1\} \end{aligned}$$

(2)

と表せる。

ここで用いた法則は、スネルの法則である。X 線特有の媒質の屈折率は 1 よりわずかに小さい。式で表すと、 $n_2 = 1$

$-\delta$ ($\delta = 5.8 \times 10^{-7}$ この数値は 35 keV の水の値を用いた。)である。図2では、その角度の大きさおよびその位置を誇張して図示している。

以降、4つのパラメータ (①円形媒質 (2次元) の半径 r 、②試料の中心から検出器もしくは LAA までの距離 (カメラ長) d 、③LAA の厚さ (160 μm と 480 μm)、④2個の媒質間の距離 D) を変化させ、屈折像がどのように変化するか (現れるか) を調べた。これは、実際の実験において、どのような条件が望ましいかについても一定の指針を与える。

式(2)に基づいて、検出器の位置での X 線強度分布を計算した結果 (半径 $r = 100 \mu\text{m}$ 、カメラ長 $d = 10 \text{ cm}$) が、図3である。これは、今までの屈折像の実験結果 (境界付近で暗明 (黒白) と現れる) と定性的には一致する。ただ、計算結果から気づかされることは、103 μm 付近に現れる不連続は、全反射

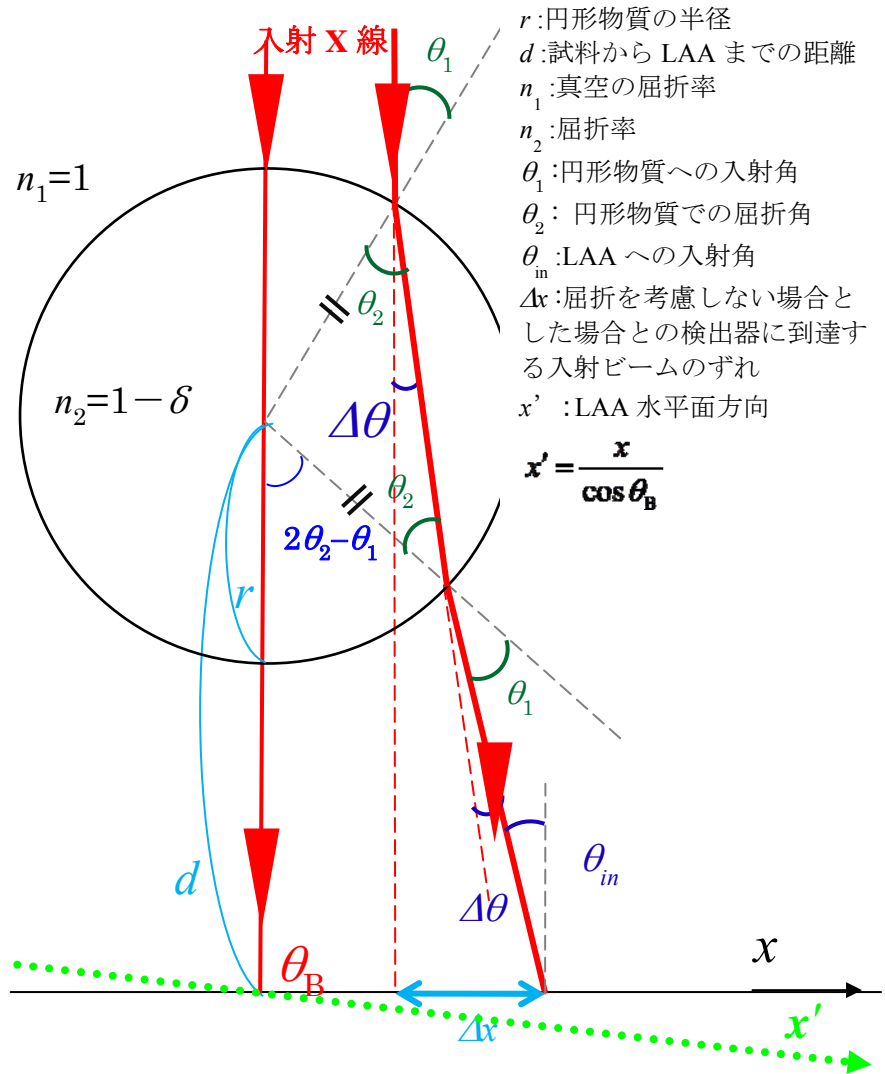


Fig. 2

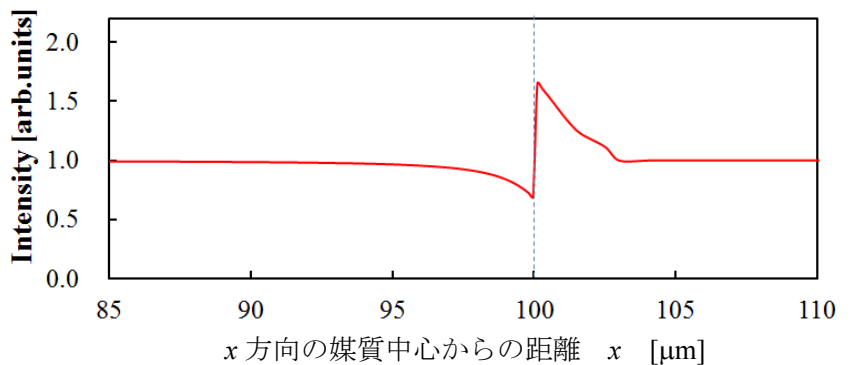


Fig. 3

臨界角によるものであること、及び 100 μm (境界、エッジ) 前後の強度分布は平面波の強度のみならず屈折に伴いある角度 ($\Delta\theta$) で曲げられた光を含んでいることである。

その $\Delta\theta$ がエッジ付近でどのような値をもつかを計算した結果を示したのが、図4である。95 μm (境界、エッジの手前) まではほぼ 0 に近い値を有する

が、それ以降は急激に大きくなり 5 arcsec 程度になる。図 3 の計算結果をもたらしたエッジ付近の強度中には、 $\Delta\theta = 0$ arcsec (直進光) と数秒程度ずれた光が含まれている。

屈折率媒質のみを通過した光の強度分布を計算した結果を図 5 に示す。強度分布の計算は、単位長さ当たりの強度で表している。図 3 の計算結果は、図 5 の計算結果と屈折率媒質を通過しない光を足し合わせたものになっている。

以上の結果は、カメラ長 $d = 10$ cm での屈折像で、LAA を通していない場合である。また、得られた内容は当たり前と言え、当たりの結果ではあるが、角度のずれが何秒である等の定量的情報を与えていることに大きな意義があると考えている。

- ① 円形媒質 (2次元) の半径 r
(100 μm , 50 μm , 20 μm , 10 μm)
をパラメータとして計算した結果 (まず試料から LAA までの距離 d は 10 cm に固定し、LAA の厚さ 160 μm)

図 6 は、半径 100 μm のときの BFI の LAA 底面に現れる強度分布を示している。

図 7 は、コントラスト画像だけ並べてまとめている。半径を小さくしてゆくと、BFI の場合はエッジが少しずつ鋭くなり、エッジから頂点までの距離は短くなるのが分かった。半径を 10 μm まで小さくしても、エッジが確認できる。コントラストが明るいところは試料エッジからズレがあり、暗いところはほぼエッジ位置上にあるため、コントラストが明るいところよりも暗いところを見た方が正確に試料のエッジ位置を把握できるということが分かった。(10 μm 以下の計算もすべきで、現在行うように予定している。)

図 8 は、半径 100 μm のときの DFI の LAA 底面に現れる強度分布を示している。エッジがコントラストとして、BFI と比べるとより鮮明に見える。コントラスト画像だけ並べてまとめると図 9 のようになる。以上より、半径 r を小さくしてゆくと、DFI の場合もエッジが少しずつ鋭くなり、エッジから頂点までの距離は短くなり、また、半径を 10 μm まで小さくしても、エッジが確

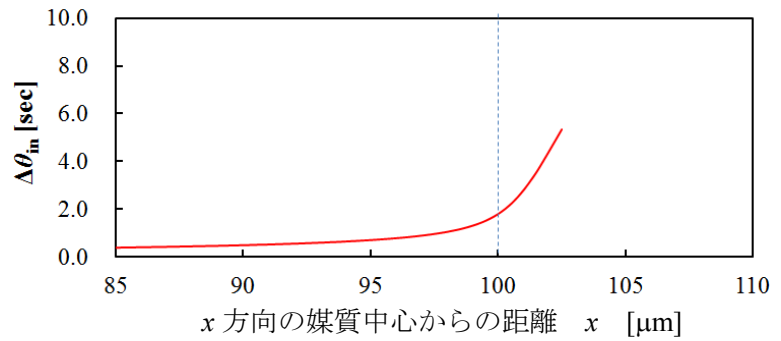


Fig. 4

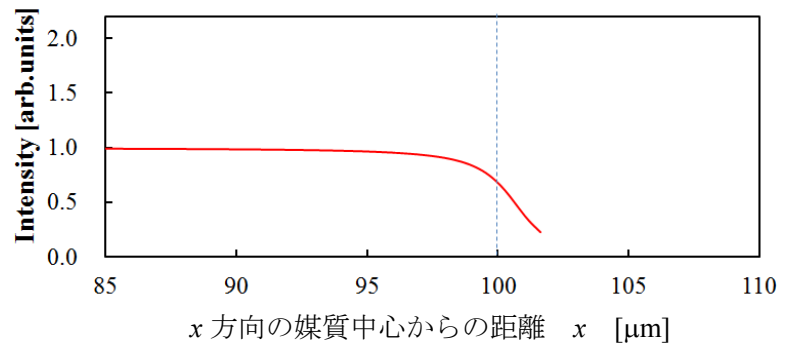


Fig. 5

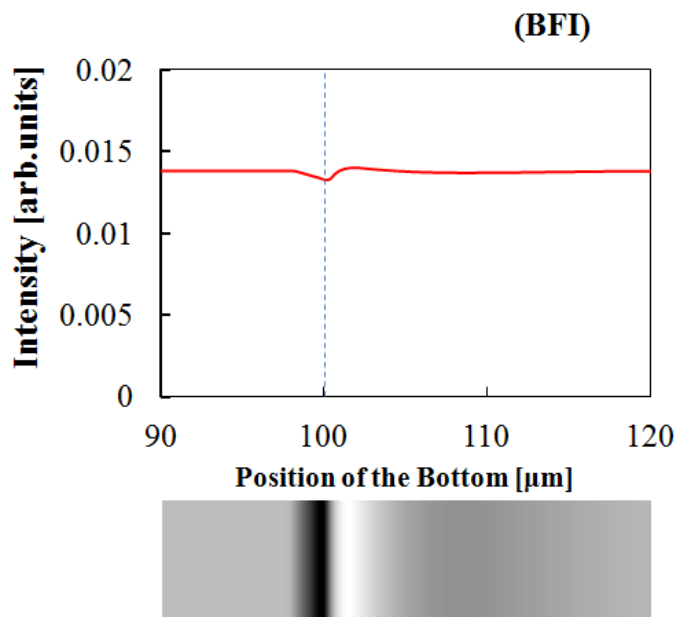


Fig. 6

認できることが分かった。(10 μm 以下の計算もすべきで、現在行うように予定している。)

② 試料の中心から LAA までの距離 (カメラ長) d (5 cm、10 cm、50 cm)、をパラメータとし

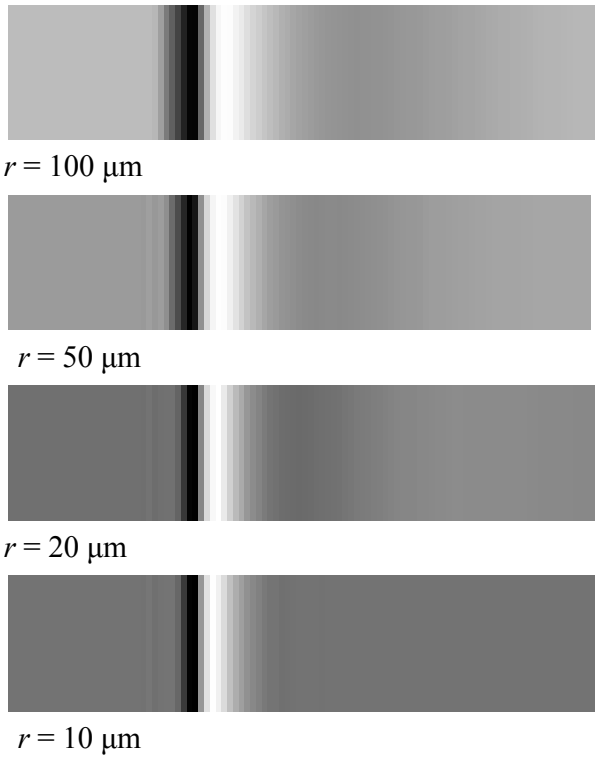


Fig. 7

で計算した結果 (円形媒質の半径 r は100 μm に固定し、LAA の厚さ160 μm)

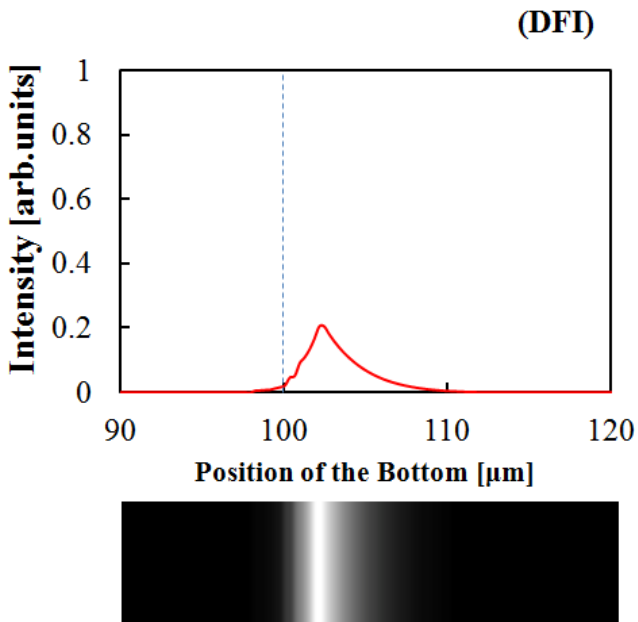


Fig. 8

試料の半径を 50 μm に固定し、試料から LAA

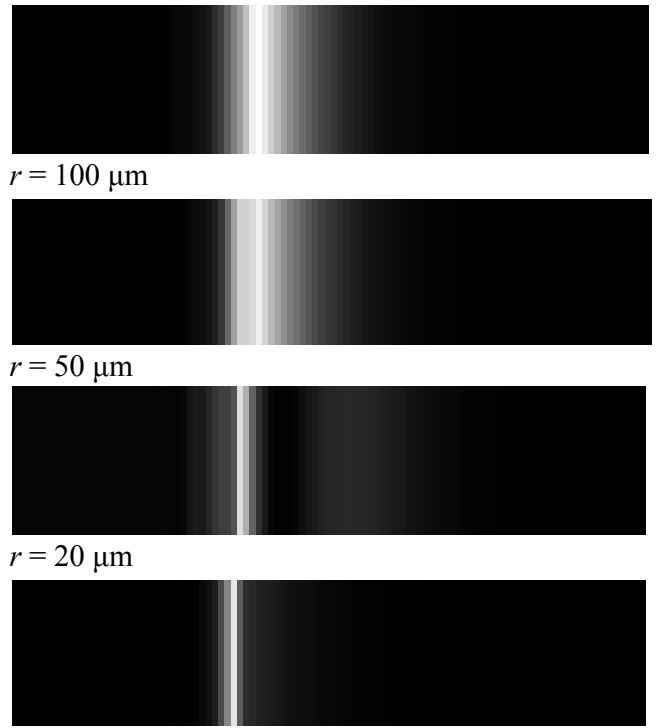


Fig. 9

その代表例として試料から LAA までの距離 d を 5 cm の BFI の計算結果を示す。

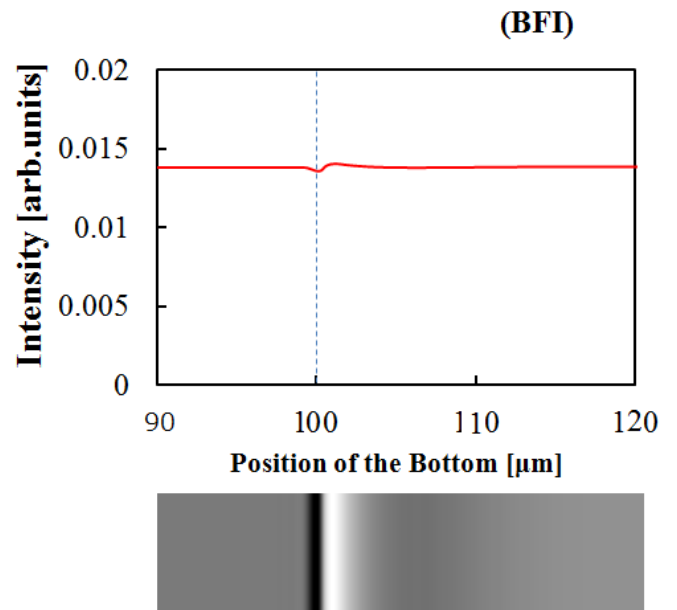


Fig. 10

図11 にコントラスト画像だけ並べてまとめた結

果を示す。この計算結果より、試料から LAA までの距離 d を大きくしてゆくとエッジの鋭さがなくなり、エッジから頂点までの距離は長くなることが分かった。距離 d を変えると、エッジの見え方が大きく変化していることが分かる。

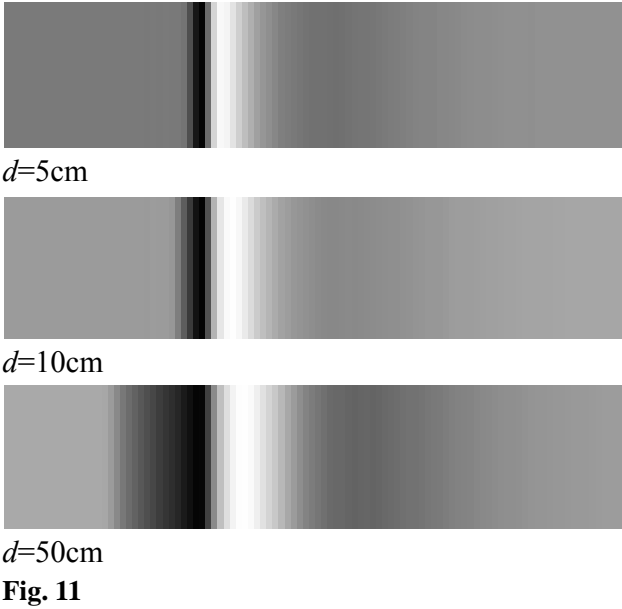


図 12 に DFI の計算結果の代表例として、試料から LAA までの距離 d を 5 cm の示す。

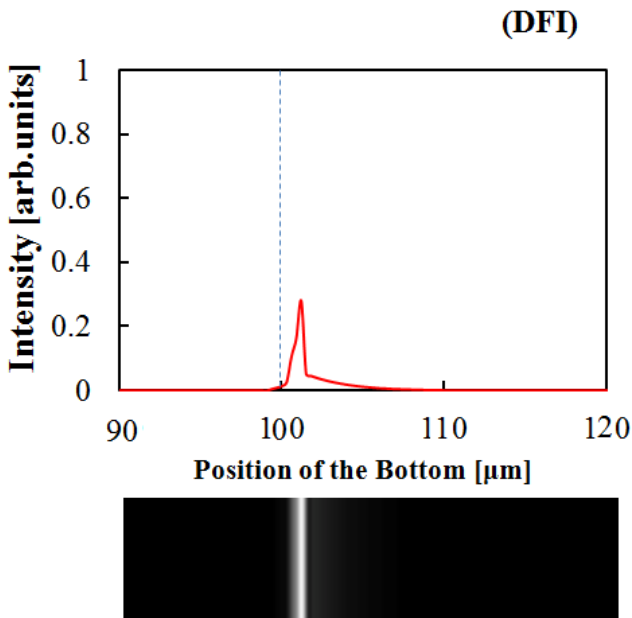


図 13 にコントラスト画像だけ並べてまとめた結果を示す。この計算結果より、試料から LAA までの距離 d を大きくして行く

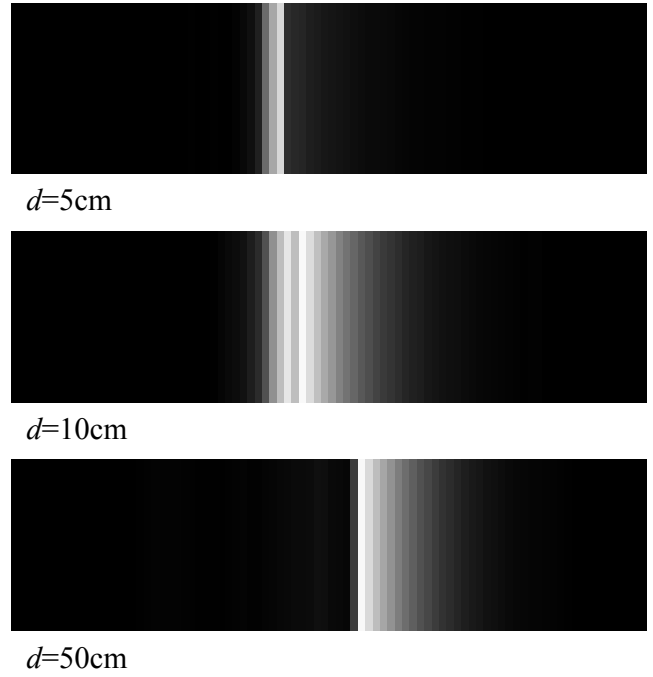


Fig. 13

と BFI と同様にエッジの鋭さがなくなり、試料エッジからのズレは大きくなることが分かったが、特に試料エッジからのズレの変化は顕著であった。

- ③ LAA の厚さ(160 μm と 480 μm)をパラメータとして計算した結果 (円形媒質の半径 r は 50 μm に、試料から LAA までの距離 d を 10 cm に固定)

コントラスト画像だけ並べると図 14 のようになる。

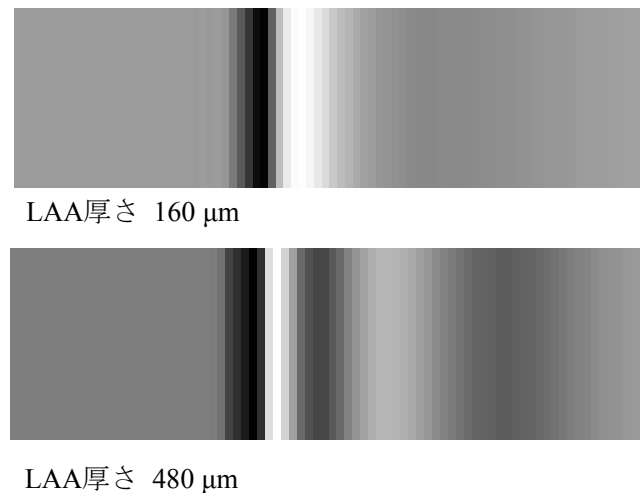


Fig. 14

LAA の厚さを 160 μm から 480 μm の3倍に厚くしてもコントラスト画像が取れるが、LAA 厚さ 480 μm の方は エッジ部分での上下が小さく、コントラ

ストが捉えづらいと考えられる。また、エッジのコントラストは LAA の厚さが $160\ \mu\text{m}$ のときより $480\ \mu\text{m}$ のときの方が試料エッジに近づいていることが分かる。

④ 2 個の媒質間の距離 D (屈折像の空間分解能の決定)

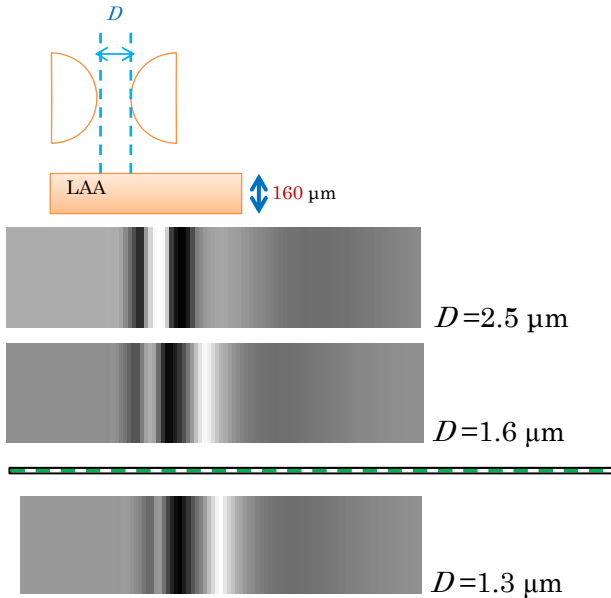


Fig. 15

計算プロセスとしては、試料が2つあり、そのエッジが距離 D だけ離れている場合を考える (前回の完全吸収媒体と同じように分解能を求めるように

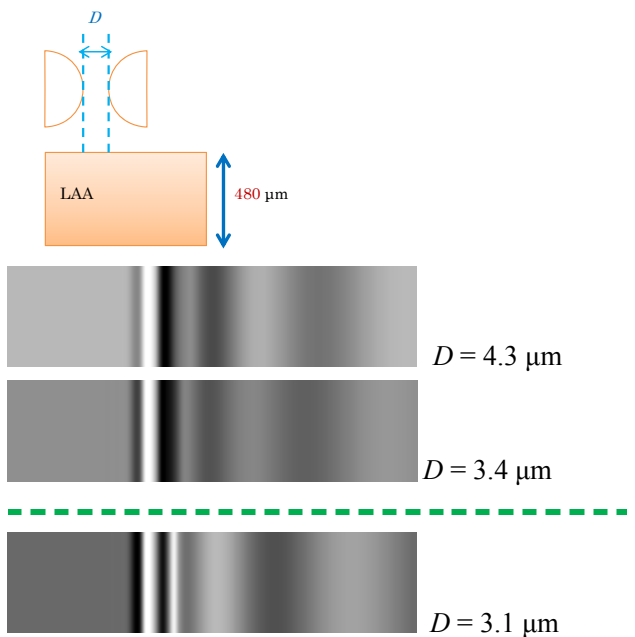


Fig. 16

した)。試料半径は $50\ \mu\text{m}$ 、LAAの厚さは $160\ \mu\text{m}$ に

固定し、試料から LAA までの距離 d が $10\ \text{cm}$ 、エッジの距離 D を少しずつ近づけながらシミュレーションを行い、空間分解能を決定する。LAAの厚さ

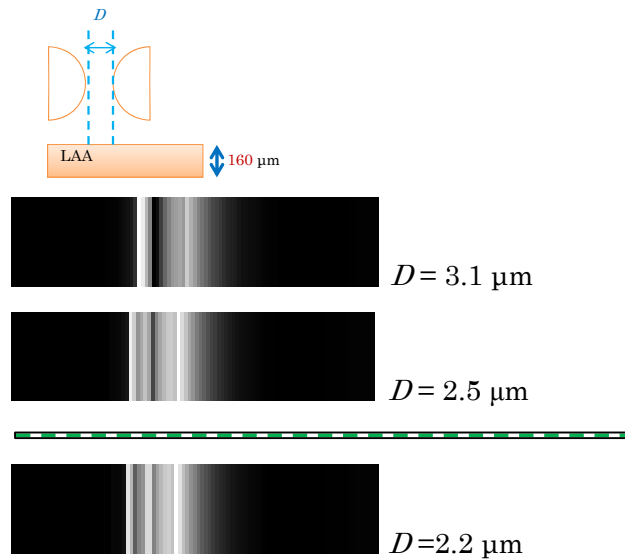


Fig. 17

は $480\ \mu\text{m}$ にした場合も同様のプロセスで空間分解能を決めた。

試料間距離 D を変えたときの BFI のコントラスト画像 (LAA までの距離 d が $10\ \text{cm}$) のときのコントラスト画像だけ並べると図 17 のようになる。

$D=1.6\ \mu\text{m}$ のときは分解できているが、 $D=1.3\ \mu\text{m}$ のときは分解できていない。以上より、LAA までの距離 d が $10\ \text{cm}$ のときの空間分解能は $1.6\ \mu\text{m}$ であると決定した。

試料間距離を変えたときの BFI のコントラスト画像 (LAA までの距離 d が $5\ \text{cm}$) LAA の厚さ $480\ \mu\text{m}$ のときのコントラスト画像だけ並べると図 17 のようになる。

試料間距離 $D=3.4\ \mu\text{m}$ のときは黒い線が 2本はっきり見えているので分解できているとし、 $D=3.1\ \mu\text{m}$ のときは図の右側の黒い線の右側に明るさのピークがあるので分解できていないとした。

試料間距離を変えたときの DFI のコントラスト画像 (LAA までの距離 d が $10\ \text{cm}$) LAA の厚さ $160\ \mu\text{m}$ のときのコントラスト画像だけ並べると図 18 のようになる。

図17の結果より空間分解能は $2.5\ \mu\text{m}$ であると決定した。

試料間距離を変えたときの DFI のコントラスト画像 (LAA までの距離 d が $10\ \text{cm}$) LAA の厚さ $480\ \mu\text{m}$ のときのコントラスト画像だけ並べると図18 のようになる。

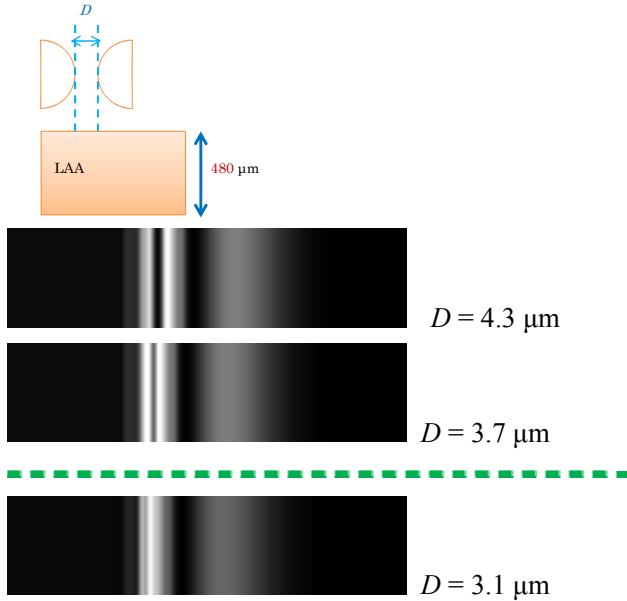


Fig. 18

$D = 3.7 \mu\text{m}$ のときはエッジ間の暗い領域が 1本の黒い線として現れているが、 $D = 3.1 \mu\text{m}$ のときはそれが見えづらくなっているため、分解できていないとした。以上より、LAA の厚さ $480 \mu\text{m}$ の場合、BFI の空間分解能は $3.4 \mu\text{m}$ 、DFI の空間分解能は $3.7 \mu\text{m}$ とした。

表1 試料から LAA までの距離を変えたときの屈折像の空間分解能

	試料から LAA までの距離 d [cm]	空間分解能 [μm]
BFI	5	1.9
DFI	5	3.1
BFI	10	1.6
DFI	10	2.5

屈折像の空間分解能を、試料を 2 つにしてそのエッジ間の距離から定めた場合、表1 のようになった。試料から LAA までの距離 d を大きくした方が空間分解能は高く、また、空間分解能のみを評価すると、DFI より BFI の方がより高くなっていた。ただし、コントラスト等の評価を加えると、再吟味の

必要ありと感じている。

表2 LAAの厚さを変えたときの屈折像の空間分解能

	LAA 厚さ $160 \mu\text{m}$	LAA 厚さ $480 \mu\text{m}$
BFI	2.5 μm	3.4 μm
DFI	3.1 μm	3.7 μm

LAA の厚さを $160 \mu\text{m}$ から $480 \mu\text{m}$ にして空間分解能を求めると、表2 のようになった。

これをまとめて、吸収像の、LAA厚さ-空間分解能のグラフ（安藤先生グループの研究成果）にプロットすると、図19 のようになる。

屈折像の空間分解能は、吸収像の厚さ依存による空間分解能のプロット線より、下になる計算結果を得るより高い空間分解能が得られた。吸収像より屈折像の方が、エッジが見えやすいため、分解できているかどうかの判断がしやすいため、このように高い分解能が得られたと考える。

今回の結果は、完全屈折率媒質での計算結果であった。

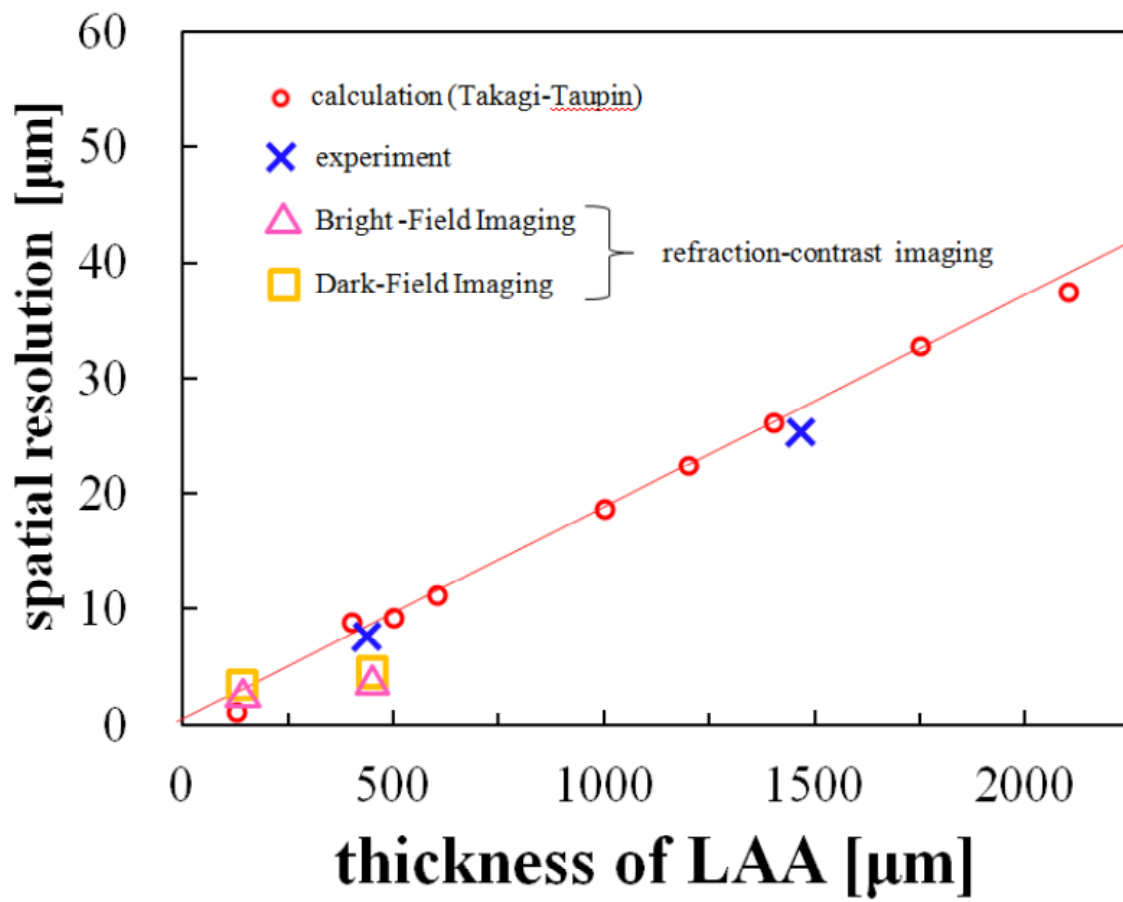


Fig. 19