

近场条件下 X 射线位相衬度成像方法及其模拟

章迪, 李政, 黄志峰, 禹爱民, 康克军

(清华大学工程物理系, 北京 100084)

摘要:近场条件下的类同轴法位相衬度成像具有边缘突出效应,其强度分布与相位分布的拉普拉斯算子有直接关系。在近场成像过程中,成像距离决定了成像质量的好坏。本工作通过一维模拟几种具有特定几何构型样品的菲涅耳衍射图样,得到近场条件下最适宜的成像距离,并通过二维模拟验证了此结论。

关键词:位相衬度成像;菲涅耳衍射;传播函数

中图分类号:O434.12

文献标识码:A

文章编号:1000-6931(2007)01-0036-05

X-ray Phase Contrast Imaging and Simulation in Near Field

ZHANG Di, LI Zheng, HUANG Zhi-feng, YU Ai-min, KANG Ke-jun

(Department of Engineering Physics, Tsinghua University, Beijing 100084, China)

Abstract: Near field in-line phase contrast has obvious effect on the boundary of different parts. Its intensity distribution is directly related with the Laplace form of phase distribution. In near field imaging, detecting distance makes a significant role. The Fresnel diffraction one dimension image on several different samples was simulated, and the best detecting distance was obtained. On the above basis, two dimension samples were simulated and the conclusion was verified.

Key words: phase contrast; Fresnel diffraction; transmission function

传统的 X 射线成像方法基于 X 射线与物体发生作用时所产生的衰减效应,通过探测穿过物体的 X 射线能量与强度,来获得物体内部的密度及厚度分布信息。自 20 世纪以来,这种手段在医学诊断、工业探伤以及安全检测等方面得到了广泛应用。由于物体对 X 射线的吸收起关键作用,这种方法又可称为 X 射线吸收成像法。由于原理上的局限,X 射线吸收成像法对大的低频物体中的局部高频部分成像效果

不佳^[1]。与此相反,利用 X 射线相位效应的相位衬度成像方法对物体的高频特征极其敏感,对弱吸收物体的成像又非常有效,在生物软组织以及高分子材料的探测等方面有广泛应用前景。近年来,关于 X 射线相位衬度成像的讨论越来越多。Bonse 和 Hart^[2]最早提出利用晶体干涉仪来实现相位成像,并由后人得到了良好结果^[3]。利用晶体衍射效应的衍射增强法随之受到了广泛关注,并在信息分离方面获得了

较好结果^[4,5]。借助菲涅耳衍射的类同轴法因其条件简单、不需要光学设备而在上世纪 90 年代中期成为研究热点^[6],并在同步光源与微焦点源上进行了各种实验^[7-9]。

1 类同轴法位相衬度成像原理

1.1 菲涅耳衍射

物理光学中的惠更斯-菲涅耳原理决定了光波在空间中传播状况。X 射线本质上也是一种电磁波,只不过其波长较可见光短 2~3 个数量级^[10],因此,菲涅耳-基尔霍夫波函数公式在此仍然适用。如果认为波长比这里所涉及的尺度小很多,那么,由 Q 点(图 1)^[11]发出的光波在 P 点的波函数为:

$$f_P = \frac{i}{2\lambda} \int \frac{\exp(ikr_Q)}{r_Q} \frac{\exp(ikr)}{r} (\cos \alpha - \cos \theta) dS \quad (1)$$

式(1)和图(1)中:积分在包含 P 点的任一个封闭曲面 S 上进行; λ 为波长; $k=2\pi/\lambda$ 为波矢;向量 n 为曲面被积点的垂线;向量 r 由曲面被积点指向 P 点, r 为它的标量;向量 r_Q 由 Q 点指向曲面被积点, r_Q 为它的标量; α 、 θ 分别为向量 n 与 r 、 n 与 r_Q 的夹角。

式(1)描述的虽是真空中波函数的传播,但通常情形下,空间有物体存在,此时,积分曲面可认为是光波在物体上的出射面。定义物体的传播函数 $q(X, Y)$,描述物体对波函数状态的影响。

假设平面波 $\exp(ikz)$ 照射物体。物平面的横纵坐标为 (X, Y) ;像平面的横纵坐标为 (x, y) 。物平面与像平面均与入射波垂直(图 2)。那么,由式(1)可以得到,在像平面上,波函数为:

$$f_P = \frac{i}{2\lambda} \int \exp(ikr_Q) \cdot q(X, Y) \frac{\exp(ikr)}{r} (\cos \alpha - \cos \theta) dS \quad (2)$$

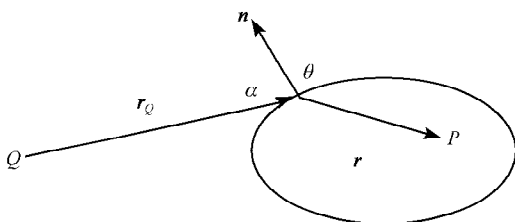


图 1 菲涅耳-基尔霍夫公式示意图

Fig. 1 Sketch of Fresnel-K formula

式(2)中的积分符号内的前 3 项可分别理解为 X 射线由波源到物体入射面的传播、X 射线在物体内部的传播以及 X 射线从出射面到观察点的传播,最后 1 项为方向因子。

1.2 传播函数

对大多数物体, X 射线与之作用将发生吸收以及各种散射效应,对 X 射线的幅度和相位均产生影响。因此,一般意义上物体的传播函数可写为:

$$q(X, Y) = \exp(i\varphi(X, Y) - \mu(X, Y)) \quad (3)$$

式中: φ 为 X 射线的相移; μ 为衰减系数。

此时, $|q(X, Y)|^2 = \exp(-2\mu(X, Y))$ 。可以看到,物体对 X 射线的幅度和相位均产生了影响。

所谓纯相位物体,是假想中只改变光波的相位而不改变它的幅度的物体。当物体非常薄,以至于穿过物体 X 射线横向的折射可忽略不计时,可将物体近似视为纯相位物体来考虑。此时的传播函数为:

$$q(X, Y) = \exp(i\varphi(X, Y)) \quad (4)$$

此时, $|q(X, Y)|^2 = 1$,物体对 X 射线的强度没有影响。在这里, φ 与物体的厚度和材料的折射率有关。

然而,对很多物体而言,把它们视为纯相位物体是合理的近似,例如一些薄的生物样品和高分子材料^[11]。

1.3 类同轴法位相衬度成像的边缘增强效应

类同轴法位相衬度直接成像可以突出物体内部不同成分或不同折射率的分界面,使得边缘观察变得更加可行。对此现象的现有解释均是通过对菲涅耳积分公式作傅里叶变换,再经一系列推导与近似而得到^[9,12]。下面以一维情况为例,直接根据傅里叶变换的性质得到类同

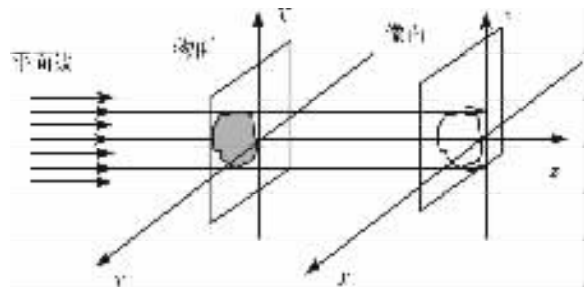


图 2 成像示意图

Fig. 2 Sketch of imaging

轴法相衬成像强度与 φ 的二阶导数的关系。

按照式(2),当出射面为平面时, $\cos \theta = 1$; 在小角近似的条件下,又有 $\cos \alpha = 1$ 。认为平面波均匀地到达入射面,则有:

$$f(x, y) = \frac{i}{\lambda} \iint q(X, Y) \frac{\exp(ikr)}{r} dXdY \quad (5)$$

其中: $r = \sqrt{(x-X)^2 + (y-Y)^2 + z^2}$, z 为像面与物面间距。

式(5)中的 r 可用 z 来代替,在一般成像过程中, z 比物体的尺寸大很多; 对 $\exp(ikr)$ 指数,则不能简单地用 z 来代替 r ,因为指数部分反映的是相位的变化,距离 r 的微小变化 Δr ,将引起相位的明显变化,有:

$$\Delta\varphi = k\Delta r = 2\pi \frac{\Delta r}{\lambda}$$

也就是说,距离 r 改变 1 个光波长,则将造成相位产生 2π 变化^[13]。

对 r 取一阶泰勒展开,在一维近似情况下,有^[11]:

$$f(x) = \left(\frac{i}{\lambda z}\right)^{1/2} \exp(ikz) \int q(X) \cdot \exp\left(\frac{-ik(x-X)^2}{2z}\right) \cdot dX \quad (6)$$

根据卷积与傅里叶变换的定义,有:

$$f(x) = \exp(ikz) \cdot$$

$$\int Q(u) \exp(-2\pi iux) \exp(i\pi z u^2) du$$

式中: $Q(u)$ 为 $q(X)$ 的傅里叶变换; u 是物体本身的频率。

在此,如果 $i\pi z \lambda u^2$ 很小,则有一阶泰勒近似, $\exp(i\pi z \lambda u^2) \approx 1 + i\pi z \lambda u^2$, 进而,有:

$$f(x) = \exp(ikz) \exp(i\varphi(x)) \left(1 + \frac{z\lambda}{4\pi} \varphi''(x) + \frac{iz\lambda}{4\pi} \varphi'(x)^2\right)$$

取 $z\lambda$ 的一阶近似,有:

$$I = |\varphi(x)|^2 \approx 1 + \frac{z\lambda}{2\pi} \varphi''(x) \quad (7)$$

由此可以看出,当 $z\lambda$ 很小时,像面的光强反映的是物体传播函数相位项的二阶导数,因此,对边缘效应有所增强。

1.4 物体的频率

在类同轴法位相衬度成像中,存在一最佳相位距离 $z = \frac{1}{2\lambda u^2}$ 。在此位置成像,强度中的

吸收项为 0,且相位项最大,工作点处于 CTF 函数的第 1 个峰值上^[9,12]。类同轴位相衬度成像的边缘效应在近场成像的条件下才能凸显出来。而且,对 1 个一般的物体而言,它的内部结构的频率范围很宽,不同的频率具有不同的最佳相位距离,无法取得统一。所以,此最佳距离只具有理论上的参考价值。

假想 1 个出射面为平面的物体具有单一的频率,且传播函数完全由实数构成,即 $q(X) = \cos(2\pi X/a)$, 式中, a 为物体的空间周期。根据(6)式,则有:

$$f(x) = \exp(ikz/2\pi) \cos(2\pi X/a) \cdot \exp(i\pi z \lambda / a^2)$$

其强度为:

$$I(x) = \cos^2(2\pi X/a)$$

可以看到,强度与 z 无关,即在任何一个像面上探测,强度分布均与出射面处的完全相同。

对 1 个一般的物体,有:

$$q(X) = \sum_h A_h \exp(2\pi i h X/a)$$

式中: A_h 为第 h 个频率分量的幅度; 第 h 个频率分量的频率为 h/a 。

此时,有:

$$f(x) = \exp(ikz) \sum_h A_h \cos(2\pi i h x/a) \cdot \exp(i\pi z \lambda h^2 / a^2) \quad (8)$$

像面上的波函数依然是一周期性的分布,且分布周期与物体的频率周期相同。但存在一与成像距离 z 有关的因子,这就使得在不同的像面上所得到的强度分布是有差别的。在实际操作中,近场条件下最佳的成像距离显得十分关键。

2 模拟及分析

模拟条件如下: X 射线为波长 0.1 nm 的硬 X 射线,物体频率恒定为 0.1 μm 。在此条件下,理论上的最佳成像距离 $z_0 = 1/2\lambda u^2 = 0.5 \text{ m}$ 。

假设 3 个模型,分别对它们进行一维模拟。所谓一维模拟,即将另外一个维度上模型的长度设定为无限长。这样的考虑是波函数的一维情况。根据式(6)可得知任意成像平面上的波函数。3 个模型的截面示于图 3。

图 4 示出在不同成像距离上对图 3 模型的模拟结果。

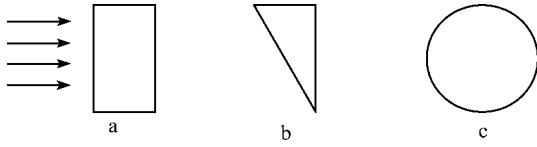


图 3 模型的截面示意图

Fig. 3 Sketch of section of models

- a——矩形截面, $600\ \mu\text{m} \times 300\ \mu\text{m}$;
- b——直角三角形截面, 直角边分别为 $600\ \mu\text{m}$ 和 $300\ \mu\text{m}$;
- c——圆形截面, 半径 $600\ \mu\text{m}$

在模拟过程中, 将 x 轴上 $0 \sim 1\ 200\ \mu\text{m}$ 范围分为 128 个像素点。图 4 中, 横坐标表示空间中的 x 轴位置取值, 其单位为像素点; 纵坐标表示成像平面上归一化后的光强。

从 3 个模型不同成像距离之间的对比可得: 当 $z > z_b$ 时, 强度函数抖动比较大, 这是由空间传播干涉效应的叠加所致, 这个范围属于

全息成像范围, 不是近场成像所研究的内容, 因此, 得到的强度分布无规则; z 在 $z_b/10$ 附近时, 强度分布变得平滑, 其与相位的二阶导数所成规律已在 3 个模型中体现出来, 在矩形和圆模型中, 两边界处有明显幅度变化, 中间部分较为平缓, 三角形模型的上端边界有明显幅度变化, 向下端的方向上随着宽度越来越短, 强度分布趋于平缓, 下端因宽度渐变为 0, 所得到的强度分布已无明显的幅度差异; z 比 $z_b/10$ 小较多时, 曲线分布亦不符合相位的分布情况。因此, 在近场条件下, 以在 $z_b/10$ 处作为像面时的成像效果较为明显。

图 5 示出在 $z = z_b/10$ 处矩形的二维模拟。其中, 矩形条的长度不再为无穷大, 而是 $600\ \mu\text{m}$, 其它条件与一维情况一致。

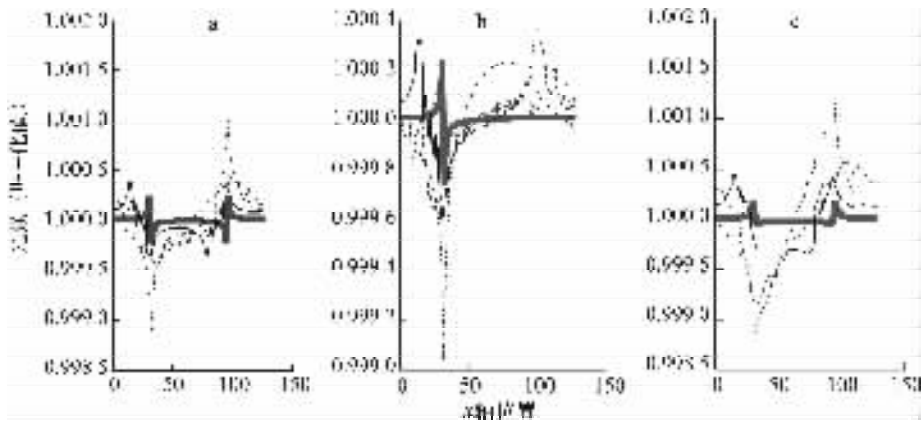


图 4 一维模拟结果

Fig. 4 One dimension simulation result

- a——矩形截面; b——三角形截面; c——圆截面
- 点划线—— $z_b/20$; 粗实线—— $z_b/10$; 短虚线—— $z_b/5$; 细实线—— z_b ; 长虚线—— $10z_b$

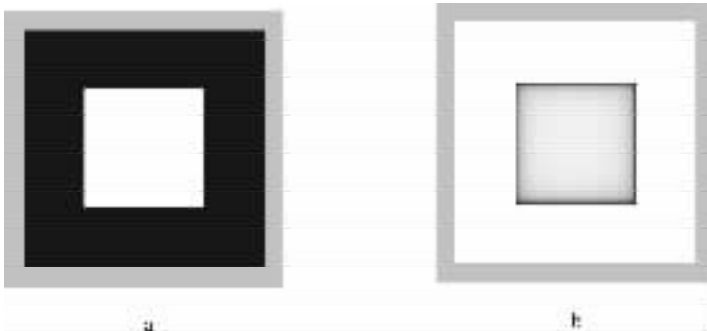


图 5 矩形的二维模拟结果

Fig. 5 Two dimension simulation results of rectangle

- a——原始相位; b——强度分布

由图 5 可清晰观察到在此像面上强度分布对相位分布的边缘突出效应,而这正是近场条件下类同轴法位相衬度成像的显著特性。因此,可以判断,此像面是近场成像较为理想的位置。

3 结论

本工作阐述了类同轴法位相衬度成像原理,从新的角度探讨了强度分布与相位分布二阶导数的关系,并对物体频率在类同轴位相衬度成像中的影响进行了讨论。对近场条件平面波情况下成像距离的确定进行了数值模拟,并从模拟结果得到了效果比较理想的成像位置。下一步工作是求寻此位置的理论基础,并在实际操作中常用的微焦点光源环境下对此理论进行衡量与校正,得到成像位置、波长分布等因素对成像质量的综合影响。

参考文献:

- [1] MAYO S C, DAVIS T J, GUREYEV T E, et al. X-ray phase-contrast microscopy and microtomography[J]. *Opt Soc Am*, 2003, 11:2 289-2 302.
- [2] BONSE U, HART M. An X-ray interferometer [J]. *Appl Phys Lett*, 1965, 6:155-157.
- [3] MOMOSE A, TAKEDA T, ITAI Y. Phase-contrast X-ray computed tomography for observing biological specimens and organic materials [J]. *Rev Sci Instrum*, 1995, 66:1 434-1 436.
- [4] CHAPMAN D, THOMLINSON W, ARFELLI F, et al. Mammography imaging studies using a laue crystal analyzer[J/CD]. *Rev Sci Instrum*, 1996, 67.
- [5] CHAPMAN D, THOMLINSON W, JOHNSTON R E, et al. Diffraction enhanced X-ray imaging [J]. *Phys Med Biol*, 1997, 42: 2 015-2 025.
- [6] SNIGIREV A, SNIGIREVA I, KOHN V, et al. On the possibility of X-ray phase contrast microimaging by coherent high-energy synchrotron radiation[J]. *Rev Sci Instrum*, 1995, 66:5 486-5 492.
- [7] WILKINS S W, GUREYEV T E, GAO D, et al. Phase-contrast imaging using hard X-rays [J]. *Nature*, 1996, 384:335-338.
- [8] CLOETENS P, BARRETT R, BARUCHEL J, et al. Phase objects in synchrotron radiation hard X-ray imaging[J]. *J Phys D: Appl Phys*, 1996, 29:133-146.
- [9] MAYO S C, MILLER P R, WILKINS S W, et al. Quantitative X-ray projection microscopy: Phase-contrast and multi-spectral imaging[J]. *J Microscopy*, 2002, 207:79-96.
- [10] DAVID A. Soft X-rays and extreme ultraviolet radiation: Principles and applications [M]. Cambridge: Cambridge University, 1999:1-2.
- [11] JOHN M C. Diffraction physics[M]. 3rd ed. Amsterdam:North Holland, 1995: 11-17.
- [12] POGANY A, GAO D, WILKINS S W. Contrast and resolution in imaging with a microfocus X-ray source [J]. *Rev Sci Instrum*, 1997, 68: 2 774-2 782.
- [13] GUREYEV T E, WILKINS S W. On X-ray phase imaging with a point source[J]. *J Opt Soc Am*, 1998, A15: 579-585.
- [14] 雷肇棣. 物理光学导论[M]. 成都:电子科技大学出版社,1993:173-174.
- [15] 程静,韩申生,邵雯雯,等. 部分相干 X 射线相位成像研究[J]. *光学学报*,1999,19:596-603. CHENG Jing, HAN Shensheng, SHAO Wenwen, et al. Study of partial coherent X-ray phase imaging[J]. *Acta Optica Sinica*, 1999, 19:596-603(in Chinese).