

01;07

Обратная задача в методе рентгеновского фазового контраста

© В.А. Бушуев, А.А. Сергеев

Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова

Поступило в Редакцию 6 июля 1998 г.

Рассмотрена возможность решения обратной задачи восстановления внутреннего строения объекта по набору экспериментальных распределений, измеренных в рентгеновском пучке при различной ориентации объекта.

Метод рентгеновского фазового контраста (ФК) предназначен для получения изображения слабопоглощающих некристаллических объектов [1–3]. В основе метода лежит использование явления преломления рентгеновских лучей. Излучение, прошедшее через объект, отклоняется от своего первоначального направления на некоторые углы $\beta(x)$ и падает затем на монокристалл-анализатор, установленный в окрестности области брэгговского отражения. Так как для излучения с длиной волны $\lambda \leq 1 \text{ \AA}$, коэффициент преломления $n(x, z) = 1 - \delta(x, z)$ очень слабо отличается от единицы ($\delta \sim 10^{-6}$), то углы преломления $\beta \sim \delta$ составляют единицы и доли угловой секунды. Тем не менее такие малые отклонения могут приводить к весьма значительному контрасту изображения на фотопленке, помещенной в пучке, отраженном от анализатора. Это связано с тем, что угловая ширина кривых дифракционного отражения соизмерима с величиной $\beta(x)$.

Метод ФК позволяет повысить контраст изображения в десятки раз по сравнению с обычно используемыми абсорбционными методами. Особенно это важно для изучения внутренней структуры медико-биологи-

ческих объектов [3–6], в которых изменение коэффициента поглощения $\mu(x, z)$ в разных частях объекта составляет всего несколько процентов.

До сих пор в теории метода ФК анализировалась лишь прямая задача, т.е. расчет изображения (интенсивность дифракционного отражения $I(x)$) по заданным распределениям $\delta(x, z)$ и $\mu(x, z)$ [7–10]. В настоящей работе впервые рассмотрена возможность решения обратной задачи восстановления внутреннего строения объекта по набору экспериментальных распределений $I(x)$, измеренных при различных ориентациях объекта в рентгеновском пучке. Показано, что для достаточно крупных объектов, для которых справедливо приближение геометрической оптики, можно однозначно восстановить двумерное распределение $\delta(x, z)$, используя полный набор данных $I(x)$.

Распределение интенсивности в дифрагированном пучке определяется следующим интегральным соотношением [9,11,12]:

$$I(x) = \left| \int_0^{\infty} G(\xi) A(x/\gamma_0 - \xi) \exp(ik\gamma_0 \Delta\theta \xi) d\xi \right|^2, \quad (1)$$

где $A(x) = \exp(-\sigma + i\Phi)$ — амплитуда волны, прошедшей через объект,

$$\sigma(x) = 0.5 \int_{-\infty}^{\infty} \mu(x, z) dz, \quad \Phi(x) = -k \int_{-\infty}^{\infty} \delta(x, z) dz,$$

$$G(\xi) = (k\gamma_0/2\pi) \int_{-\infty}^{\infty} R(\alpha) \exp(-ik\gamma_0 \alpha \xi) d\alpha.$$

Здесь $\Phi(x)$ — изменение фазы волны, распространяющейся вдоль оси z ; $k = 2\pi/\lambda$; $G(\xi)$ — функция Грина задачи брэгговской дифракции ограниченных волновых пакетов [11]; $R(\alpha)$ — амплитудный коэффициент отражения плоской волны, падающей на монокристалл с угловой отстройкой α от угла Брэгга θ_B ; $\Delta\theta$ — фиксированный угол поворота анализатора; $\gamma_0 = \sin(\theta_B + \psi)$, ψ — угол наклона отражающих плоскостей к поверхности анализатора. Зависимость фазы $\Phi(x)$ от поперечной координаты приводит к преломлению на углы $\beta(x) = (1/k)d\Phi(x)/dx$.

Характеристики объекта μ и δ входят достаточно сложным образом в интеграл (1), поэтому их реконструкция по измеренной интенсивности

$I(x)$ представляет собой в общем случае сложную задачу. Ситуация значительно упрощается, если выполняется приближение геометрической оптики задачи брэгговской дифракции. В этом случае можно показать [9,12], что

$$I(x) = I_a(x)P(\Delta\theta - \beta), \quad (2)$$

где $I_a(x) = \exp[-2\sigma(x)]$ — интенсивность абсорбционного изображения, $P(\alpha) = |R(\alpha)|^2$ — кривая дифракционного отражения от анализатора. Соотношение (2) справедливо, если поперечный размер объекта $r \gg \Delta\xi = \lambda/\pi\gamma_0\Delta\theta_B$ и градиент углов преломления $d\beta/dx \ll \Delta\theta_B/\Delta\xi$, где $\Delta\theta_B = 2C|\chi_h|/b^{1/2} \sin 2\theta_B$ — ширина кривой дифракционного отражения, C — фактор поляризации, χ_h — фурье-компонента поляризуемости кристалла, $b = \gamma_0/\gamma_h$, $\gamma_h = \sin(\theta_B - \psi)$. Типичные значения $\Delta\xi$ составляют 5–30 μm . В этом приближении изображение (2) определяется интенсивностью локального (в той же точке x) отражения рентгеновского луча, падающего на анализатор с угловой отстройкой $\Delta\theta - \beta(x)$.

Решение обратной задачи можно разбить на три этапа: 1) определение углов преломления $\beta(x)$ по измеренной интенсивности $I(x)$; 2) вычисление функции $F(x, z) = -\partial\delta(x, z)/\partial x$ в линейном интеграле

$$\beta(x) = \int_{-\infty}^{\infty} F(x, z) dz; \quad (3)$$

3) восстановление искомого распределения $\delta(x, z)$ по функции $F(x, z)$.

На первом этапе воспользуемся тем, что на практике в качестве анализатора используются кристаллы кремния с известной структурой. Поэтому можно считать, что известны как амплитуда, так и фаза отражения $R = |R| \exp(i\eta)$. В итоге получим, что углы преломления $\beta(x)$ следующим образом связаны с измеряемой в эксперименте функцией $J(x) = I(x)/I_a(x)$:

$$\beta(x) = \Delta\theta - [2Y(x)C\chi_h b^{1/2} - i\chi_{0i}(1+b)]/2b \sin 2\theta_B, \quad (4)$$

где

$$Y(x) = [1 + J(x) \exp(i2\eta)]/[2J^{1/2}(x) \exp(i\eta)].$$

Для иллюстрации справедливости такого восстановления на рис. 1 приведены результаты численного эксперимента по решению прямой и

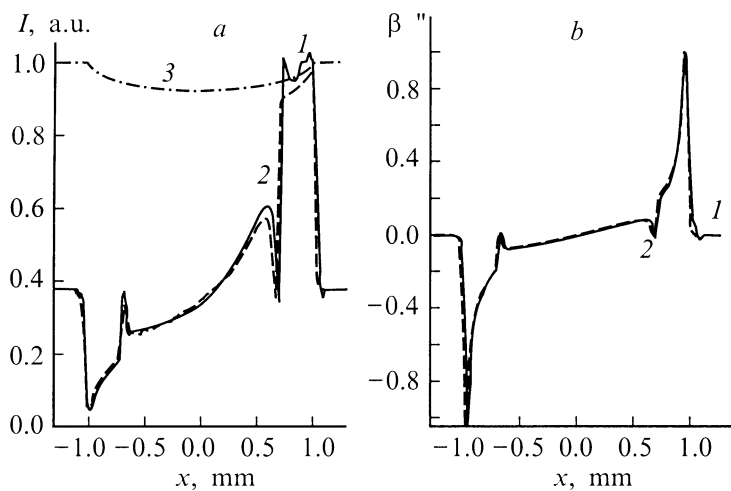


Рис. 1. Сравнение результатов решения обратной задачи восстановления углов преломления $\beta(x)$ с прямым расчетом. Интенсивности изображений (а): 1 — точное решение, 2 — приближение геометрической оптики, 3 — абсорбционное изображение; распределения $\beta(x)$ (б): 1 — решение обратной задачи, 2 — прямой расчет. Излучение $\text{AgK}\alpha$, симметричное отражение $\text{Si}(220)$, $\Delta\theta_B = 1.7''$, $\Delta\theta = 0.95''$.

обратной задач нахождения углов преломления $\beta(x)$. В качестве объекта выбран полистироловый капилляр $(\text{C}_8\text{H}_8)_n$ с радиусом 1 mm и толщиной стенки 0.3 mm, заполненный этиловым спиртом $\text{C}_2\text{H}_6\text{O}$. Коэффициенты δ и μ составляют $0.477 \cdot 10^{-6}$, 0.38 cm^{-1} и $0.376 \cdot 10^{-6}$, 0.37 cm^{-1} для полистирола и спирта соответственно ($\lambda = 0.559 \text{ \AA}$) [7]. Толщина переходного слоя на обеих границах раздела принята равной $10 \mu\text{m}$. На рис. 1, а приведены результаты прямого расчета интенсивности ФК $I(x)$ в рамках строгой волновой теории (1) (кривая 1) и приближения геометрической оптики (2) (кривая 2). Для сравнения приведена также кривая абсорбционного изображения 3. Видно, что абсорбционный контраст составляет всего 5%, что много меньше контраста на кривых 1 и 2. Кроме того, в отличие от ФК-изображений 1 и 2, на кривой 3 совершенно не видна граница раздела спирт–полиэтилен. Результат

точного расчета (кривая 1) затем использовался как экспериментально измеренное распределение $I(x)$, из которого определялась функция $\beta(x)$ (4). Из рис. 1, *b* видно, что результаты такого восстановления углов преломления $\beta(x)$ (кривая 1) практически не отличаются от функции $\beta(x)$, вычисленной напрямую по заданным распределениям $\delta(x, z)$ и $\mu(x, z)$ (кривая 2). Следует отметить, что результаты решения обратной задачи для $\beta(x)$ не зависят от угла отстройки анализатора $\Delta\theta$.

На втором этапе вначале вычисляется фурье-образ $\beta(k)$, определенной выше функции $\beta(x)$:

$$\beta(k) = \int_{-\infty}^{\infty} \beta(x) \exp(-ikx) dx. \quad (6)$$

Заметим, что в общем случае функции $\Phi(x)$ и $\beta(x)$ зависят еще от угла поворота φ системы координат (x', z') , жестко связанной с объектом, по отношению к лабораторной системе (x, z) . При этом уравнение линии, вдоль которой проводится интегрирование при вычислении Φ в (1), имеет вид $x = x' \cos \varphi + z' \sin \varphi$. Функция $\beta(k, \varphi)$ является двумерным фурье-образом функции $F(x, z)$ в (3). Затем вычисляется функция $S(x, \varphi)$ согласно следующему правилу:

$$S(x, \varphi) = (1/4\pi^2) \int_{-\infty}^{\infty} \beta(k, \varphi) |k| \exp(ikx) \cos \varphi dk. \quad (7)$$

Легко показать, что функцию $F(x, z)$ в интеграле (3) можно определить, если проинтегрировать $S(x, \varphi)$ (7) по всем углам φ в интервале от 0 до π :

$$F(x', z') = \int_0^{\pi} S(x' \cos \varphi + z' \sin \varphi, \varphi) d\varphi.$$

Третий заключительный этап позволяет точно восстановить искомое двумерное распределение:

$$\delta(x, z) = - \int_{-\infty}^x F(x', z) dx'. \quad (8)$$

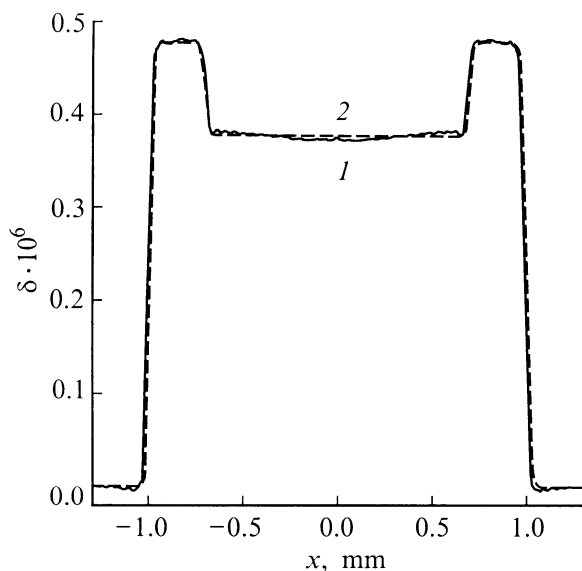


Рис. 2. Распределения декремента преломления капилляра $\delta(x, 0)$: 1 — результат решения обратной задачи, 2 — исходное модельное распределение.

На рис. 2 сплошная кривая 1 показывает распределение $\delta(x, 0)$, восстановленное с помощью соотношений (6)–(8), где в качестве $\beta(x)$ бралась кривая 1 на рис. 1, *b*. Штриховая кривая 2 показывает исходное модельное распределение в сечении капилляра $z = 0$. Видно, что совпадение достаточно хорошее. Небольшие расхождения связаны с тем, что в малых окрестностях вблизи границ капилляра приближение геометрической оптики (2) для $I(x)$ отличается от точного результата (1).

Итак, мы получили, что в случае полного набора данных $I(x, \varphi)$ можно точно восстановить внутреннюю структуру объекта $\delta(x, z)$. На практике функция $I(x, \varphi)$ известна лишь для конечного числа точек x и φ , поэтому реконструкция изображений по ограниченному данным требует применения более сложных алгоритмов [13], разработанных в компьютерной томографии.

Список литературы

- [1] *Ingal V.N., Beliaevskaya E.A.* // J. Phys. D. 1995. V. 28. N 10. P. 2314–2317.
- [2] *Davis T.J., Gureyev T.E., Gao D.* et al. // Phys. Rev. Lett. 1995. V. 74. N 16. P. 3173–3176.
- [3] *Ингал В.Н., Беляевская Е.А.* // ЖТФ. 1997. Т. 67. В. 1. С. 68–77.
- [4] *Ingal V.N., Beliaevskaya E.A.* // Physica Medica. 1996. V. 12. N 2. P. 75–81.
- [5] *Ingal V.N., Beliaevskaya E.A.* // Surface Investigation. 1997. V. 12. N 3. P. 441–450.
- [6] *Ingal V.N., Beliaevskaya E.A.* // Nuovo Cimento D. 1997. V. 19. N 2–4. P. 553–560.
- [7] *Бушуев В.А., Ингал В.Н., Беляевская Е.А.* // Кристаллография. 1996. Т. 41. № 5. С. 808–816.
- [8] *Bushuev V.A., Beliaevskaya E.A., Ingal V.N.* // Nuovo Cimento D. 1997. V. 19. N 2–4. P. 513–520.
- [9] *Бушуев В.А., Ингал В.Н., Беляевская Е.А.* // Кристаллография. 1998. Т. 43. № 4. С. 630–639.
- [10] *Bushuev V.A., Kone A.* // Surface Investigation. 1998. V. 13. N 10.
- [11] *Afanas'ev A.M., Kohn Y.G.* // Acta Cryst. A. 1971. V. 27. N 5. P. 421–430.
- [12] *Gureyev T.E., Wilkins S.W.* // Nuovo Cimento D. V. 19. T. 97. N 2–4. P. 545–552.
- [13] *Swindel B., Webb S.* // The Physics of Medical Imaging / Ed. S. Webb. Adam. Hilger. Bristol and Philadelphia, 1988. V. 1. P. 138–171. (Пер.: Физика визуализации изображений в медицине / Под ред. С. Уэбба. М.: Мир, 1991. Т. 1. 457 с.).