

衍射增强成像原理*

朱佩平^{1)†} 袁清习^{1)‡} 黄万霞^{1)‡} 王越^{1)‡} 舒航^{1)‡} 吴白玉^{1)‡‡} 洗鼎昌¹⁾

1) 中国科学院高能物理研究所同步辐射室, 北京 100049)

2) 国家纳米科学中心协作实验室, 北京 100049)

(2005 年 3 月 29 日收到, 2005 年 6 月 1 日收到修改稿)

研究了衍射增强成像过程中 X 射线与样品和晶体的相互作用, 重点分析了小角散射对衍射增强成像的影响, 为衍射增强成像方程补充了小角散射噪声项, 建立了更普遍的衍射增强成像方程. 根据新的衍射增强成像方程, 推导出峰位像和腰位像的吸收衬度、消光衬度和折射衬度的数学表达, 并讨论了两种合成像(表现吸收像和折射像)的衬度问题.

关键词: 相位衬度成像, 同步辐射, 晶体衍射, X 射线照相术

PACC: 2920L, 6114F, 8170J

1. 引言

自从 Chapman^[1] 1997 年提出衍射增强成像 (diffraction enhanced imaging, DEI) 的命名和简单数学描述之后, 衍射增强成像方法被广泛接受, 成为三种主要的相位衬度投影成像方法^[2-17]之一. 与传统的吸收衬度成像相比, 衍射增强成像可以通过一种或几种衬度的结合更清楚地显示样品的内部结构. 在衍射增强成像过程中, 对成像衬度有贡献的相互作用主要有三种, 它们是吸收、小角散射和折射, 分别得到吸收衬度、消光衬度和折射衬度. 虽然 Chapman 在讨论衍射增强成像过程中, 考虑了吸收、小角散射和折射三种相互作用, 但是他却没有给出吸收衬度和消光衬度的数学表达. 此外, Chapman^[1] 只考虑了分析晶体滤除小角散射获得消光衬度, 而忽略了分析晶体反射小角散射引起的噪声. 本文拟对这些问题展开讨论, 并解决这些问题. 这对深刻认识衍射增强成像的物理过程, 将衍射增强成像应用于医学、生物和材料体系具有重要意义.

本文描述了衍射增强成像的基本装置, 简述前人提出的衍射增强成像的基本原理; 分析描述 X 射线和单色器晶体、样品之间的相互作用, 建立了更普

遍的衍射增强成像方程, 并利用该方程讨论了摇摆曲线峰位成像、腰位成像、表现吸收像和折射像.

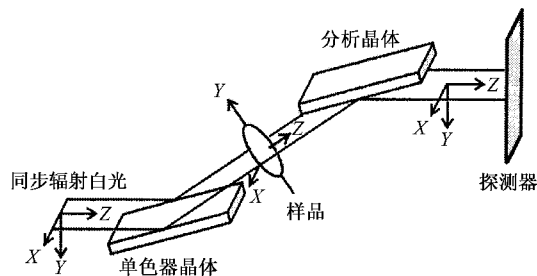


图 1 衍射增强成像基本光路

2. 衍射增强成像基本装置

完整晶体是构成衍射增强成像装置的关键元件, 虽然不同的衍射增强成像装置所用的晶体数目不同, 但是起关键作用的是位于样品前后的两块晶体, 其他晶体的作用是准直、消除高次谐波, 减小热膨胀的影响. 为简明起见, 本文将基于两块晶体衍射增强成像装置讨论衍射增强成像原理. 衍射增强成像基本光路如图 1 所示, 它由同步辐射光源、单色器晶体、样品转台、分析晶体以及探测器(像平面)五个主要部分组成. 设晶体转轴平行于 X 轴, Y 轴位于子

* 国家自然科学基金重大项目(批准号: 10490194), 中国科学院高能物理所知识创新经费资助的课题.

† E-mail: zhupp@ihep.ac.cn

‡ E-mail: wuzy@ihep.ac.cn

午面内,光束沿 Z 轴传播.不放置样品时,衍射增强成像光路与通常使用的双晶单色器光路完全相同.

白光 X 射线照射在单色器晶体上,单色器晶体对白光为波长滤波器,只有满足布拉格方程

$$2d\sin(\theta \pm \Delta\theta) = \lambda \pm \Delta\lambda \quad (1)$$

的波长才能被单色器晶体反射.当分析晶体与单色器晶体平行时,由于分析晶体的布拉格角与单色器晶体相同,所以能被单色器晶体反射的光就一定能被分析晶体反射.根据晶体衍射动力学,完整晶体对单色光是通光角宽为达尔文宽度的角度滤波器,在此角宽内反射率几乎为 100%,在此角宽外反射率近似为 0.图 2 描述双晶单色器产生单色光的原理.

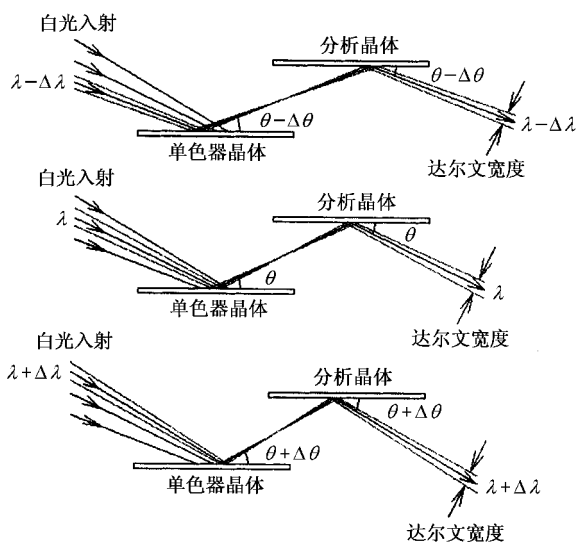


图 2 两块平行的完整晶体产生单色光的原理

由图 2 可知,参与衍射增强成像不仅只有一个方向和一个波长,而是在一定角宽内,波长随角度而变的一窄带光谱,带宽 $\Delta\lambda$ 由光源对单色器晶体的张角(即白光入射角宽度) $\Delta\theta$ 决定,即

$$\Delta\lambda = \text{tg}\theta \cdot \lambda \cdot \Delta\theta. \quad (2)$$

虽然参与衍射增强成像的光是一个角度谱,但是衍射增强成像原理是建立在一个单色分量基础之上的,其特征是采用完整晶体作为单色光的角度滤波器,单色光的通光角宽度为达尔文宽度.由于不同单色光分量各自独立传播,互不相干,且位于不同角度上,所以只须研究清楚一个单色分量的衍射增强成像过程,然后将各单色分量的贡献在成像面进行叠加.

根据布拉格方程,改变白光 X 射线在单色器晶体上的入射角,可以选择单色光的波长.固定单色器

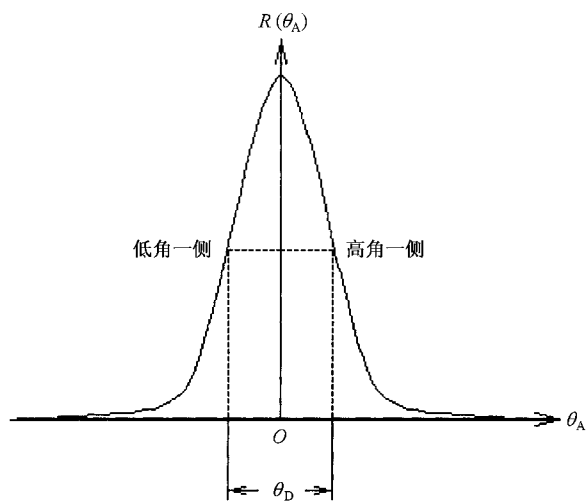


图 3 摇摆曲线, θ_D 为达尔文宽度

晶体转动分析晶体,可以测得反射率随分析晶体转角变化的摇摆曲线.通过理论计算,也可以得到摇摆曲线,它是单色器晶体反射率与分析晶体反射率的互相关.当分析晶体和单色器晶体完全相同时,互相关化为自相关.完整晶体对单色光的反射率近似为达尔文宽度的矩形函数,而矩形函数的自相关是一三角形函数.两块晶体摇摆曲线的半高宽与单块晶体反射率函数的达尔文宽度近似相等.图 3 是在北京同步辐射装置 X 射线形貌成像站测得的能量为 8keV 的摇摆曲线,其达尔文宽度约为 40—50mrad.

3. 前人对衍射增强成像的基本描述

当样品放入单色器晶体和分析晶体之间时,样品与单色 X 射线发生吸收,小角散射和折射等相互作用,经过分析晶体滤波后,光强在像平面上的衬度与多种因素有关.样品吸收主要是指光电效应,X 射线光子被电子吸收造成光强衰减.样品的小角散射也是造成光强衰减的因素,其作用机理为,小角散射将角宽度为达尔文宽度的单色入射光转变为角宽度为毫弧度量级的散射分布^[18,19],分析晶体将落在接收角外的大部分小角散射滤除.因为样品的折射,引起从样品出射的 X 射线偏离原入射方向,所以调整分析晶体角度,可以增强或抑制某一方向的折射.由此可知,衍射增强成像的衬度来源主要有三个:1) 样品对 X 射线的吸收;2) 分析晶体滤除样品的小角散射;3) 分析晶体对样品折射的增强和抑制.由于晶体反射只对子午面内的入射角度变化敏感,而对弧矢

面内的入射角度变化不敏感^[20],所以只须考虑样品在子午面内的小角散射角度和折射角度,而不必考虑弧矢面内的小角散射角度和折射角度.综合三种衬度机理,Chapman^[11]提出衍射增强成像方程为

$$K(\theta_A) = I_M R(\theta_A + \theta_y), \quad (3)$$

其中 $K(\theta_A)$ 为成像面上光强, θ_A 为分析晶体与单色器晶体的夹角, θ_y 为样品在子午面内的折射角, $\theta_A + \theta_y$ 为折射光线相对于分析晶体布拉格角的偏离量, $R(\theta)$ 是两块晶体的反射率,即双晶摇摆曲线, I_M 为经过样品吸收和小角散射衰减的光强(参考(20)式和(23)式,可知 $I_M = I_0 \exp(-\mu t - \chi t)$,其中 I_0 为入射光强, μ 和 χ 分别为线性吸收和消光系数, t 为样品厚度).

当把分析晶体调谐到与单色器晶体平行的角度时,穿过样品沿入射方向出射的 X 射线将以布拉格角入射到分析晶体上,因而分析晶体将以最大的反射率反射这部分 X 射线;对于偏离入射方向出射的 X 射线,分析晶体将根据偏离角度,以相应的反射率反射这部分 X 射线,反射率与偏离角度之间的关系由摇摆曲线决定.由于此时分析晶体和单色器晶体之间的夹角为零,沿入射方向出射的 X 射线在分析晶体上可获得峰值反射率,与摇摆曲线峰位相对应,所以此种晶体排列方式称为峰位成像方式.在峰位成像时,有 $\theta_A = 0$, $R(0) \approx 1$, $\frac{dR(0)}{d\theta} = 0$, $\frac{d^2R(0)}{d\theta^2} < 0$.将(3)式做泰勒展开,得

$$K(0) = I_M R(\theta_y) \approx I_M \left[1 - \frac{1}{2} \left| \frac{d^2R(0)}{d\theta^2} \right| \theta_y^2 \right]. \quad (4)$$

峰位成像衬度来源于三种光强衰减机理:1)吸收引起光强衰减,得到吸收衬度(隐含在 I_M 中);2)分析晶体滤除小角散射引起光强衰减,得到消光衬度(隐含在 I_M 中);3)折射偏离布拉格角导致反射率降低引起光强衰减,得到折射衰减衬度.

当分析晶体失谐至摇摆曲线半高宽时,穿过样品沿入射方向出射的 X 射线,将偏离分析晶体的布拉格角半个达尔文宽度,分析晶体将以约 50% 的反射率反射这部分 X 射线.由于此时分析晶体和单色器晶体之间的夹角为半个达尔文宽度,沿入射方向出射的 X 射线可在分析晶体上获得约 50% 的反射率,与摇摆曲线腰位相对应,所以此种晶体排列方式称为腰位成像方式.在腰位成像时,有 $\theta_A = \mp \theta_D/2$,

$R\left(\mp \frac{\theta_D}{2}\right) \approx \frac{1}{2} \frac{dR}{d\theta}\left(\mp \frac{\theta_D}{2}\right) \approx \pm \frac{1}{\theta_D}$.从图 3 可知,在摇摆曲线腰位(半高宽处),为线性区域,成像光束的反射率与折射角成正比.将 $\theta_A = \mp \theta_D/2$ 代入(1)式,并做泰勒展开,得

$$I = I_M R\left(\mp \frac{\theta_D}{2} + \theta_y\right) \approx I_M \left[R\left(\mp \frac{\theta_D}{2}\right) + \frac{dR}{d\theta}\left(\mp \frac{\theta_D}{2}\right) \theta_y \right]. \quad (5)$$

腰位成像中,成像衬度也来源于三个方面:1)吸收引起光强衰减,得到吸收衬度(隐含在 I_M 中);2)分析晶体滤除小角散射引起光强衰减,得到消光衬度(隐含在 I_M 中);3)分析晶体对样品折射的增强和抑制,得到与折射角成正比的衬度.

将腰位成像时,摇摆曲线半高宽对应的低角坐标 $\theta_L = -\theta_D/2$ 和高角坐标 $\theta_H = \theta_D/2$ 代入(5)式,分别得到低角成像公式为

$$I\left(-\frac{\theta_D}{2}\right) = I_M \left[R\left(-\frac{\theta_D}{2}\right) + \frac{dR}{d\theta}\left(-\frac{\theta_D}{2}\right) \theta_y \right] \approx I_M \left[\frac{1}{2} + \frac{\theta_y}{\theta_D} \right], \quad (6)$$

和高角成像公式为

$$I\left(\frac{\theta_D}{2}\right) = I_M \left[R\left(\frac{\theta_D}{2}\right) + \frac{dR}{d\theta}\left(\frac{\theta_D}{2}\right) \theta_y \right] = I_M \left[\frac{1}{2} - \frac{\theta_y}{\theta_D} \right]. \quad (7)$$

将低角像和高角像相加得到 Chapman^[11]命名的表观吸收像 I_M ,

$$I_M = I\left(-\frac{\theta_D}{2}\right) + I\left(\frac{\theta_D}{2}\right); \quad (8)$$

将低角像和高角像相减并移项后,得到 Chapman^[11]命名的折射像 θ_y ,

$$\theta_y = \frac{\theta_D}{2} \frac{I\left(-\frac{\theta_D}{2}\right) - I\left(\frac{\theta_D}{2}\right)}{I\left(-\frac{\theta_D}{2}\right) + I\left(\frac{\theta_D}{2}\right)}. \quad (9)$$

表观吸收像和折射像是低角像和高角像基于像素对像素的运算结果.

至此,我们简述了 Chapman 提出的衍射增强成像的基本原理.从中可以体会到 Chapman 对衍射增强成像的数学描述简单明了.因此自从 Chapman 用简单数学描述了衍射增强成像方法,并将其命名为 DEI 后,衍射增强成像方法便被广泛接受,并迅速成为 X 射线成像领域中的研究热点.然而不足的是,Chapman 一方面没有给出衍射增强成像中吸收衬度

和消光衬度的数学表达,另一方面只考虑了分析晶体滤除接收角外的小角散射,而忽略了分析晶体在接收角内反射小角散射的影响.下节将对这些问题进行分析和讨论.

4. X 射线和样品的相互作用

首先分析入射单色 X 射线光束中某一方向 X 射线和样品的相互作用,然后考虑入射单色 X 射线光束和样品的相互作用.

当单一方向单色 X 射线照射样品一个面积元(与像平面上一个像素对应)时, X 射线与样品发生吸收,小角散射和折射三种主要相互作用.吸收发生在光电吸收和康普顿散射两种过程之中,在衍射增强成像中,光电吸收作用远大于康普顿散射作用.在光电吸收过程中,光子将能量全部交给电子,光强会因吸收而减弱.在康普顿散射过程中,散射波长大于入射波长,分析晶体会将其全部滤除.小角散射是样品面积元内部密度不均匀引起的相干散射,其简化的物理图像是一根入射光线变为一个前向散射光锥,散射角宽约比达尔文宽度高两个数量级.由于小角散射的作用,一方面造成沿入射方向出射的 X 射线光强减弱,另一方面造成散射本底噪声.折射是样品内部相邻面积元之间的密度不均匀引起的光线偏转.折射只改变光线方向,不会引起光线分叉,因而一根折射光线与一根入射光线对应.同时考虑入射 X 射线与样品的三种相互作用,则从样品一个面积元出射的 X 射线光强角分布 $dI_E/d\theta$ 包括两部分^[21, 22],一部分为经过吸收和小角散射衰减以单一方向出射的折射光强(包括折射角为零的情况)角分布 $dI_R/d\theta$,另一部分为以散射光锥形式分布的小角散射光强角分布 $dI_S/d\theta$,即

$$\frac{dI_E}{d\theta} = \frac{dI_R}{d\theta} + \frac{dI_S}{d\theta}. \quad (10)$$

首先研究折射光强的变化规律.当 X 射线在穿透一薄层 dt' 介质时,吸收和散射引起的折射光强减小量为

$$\begin{aligned} dI_R &= -I_R\mu dt' - I_R\sigma\rho dt' \\ &= -I_R\mu dt' - I_R\chi dt', \end{aligned} \quad (11)$$

其中 μ 为线性吸收系数, σ 为单位体积的有效散射截面, ρ 为样品密度, $\chi = \sigma\rho$ 为消光系数.对(11)式两边从 0 到 t 积分, t 为样品厚度,得折射光强为

$$I_R(t) = I_0 \exp(-\mu t - \chi t). \quad (12)$$

考虑到折射光只有一个方向,折射光在子午面内的角分布为

$$\frac{dI_R}{d\theta} = I_0 \exp(-\mu t - \chi t) \delta(\theta - \theta_y), \quad (13)$$

其中 θ_y 为折射角.

再研究小角散射光强的变化规律. X 射线在深度为 t' 处穿透一薄层 dt' 介质时,在样品内部产生的小角散射光强增加量为

$$\begin{aligned} dI'_S(t) &= I_R(t') \chi dt' \\ &= I_0 \exp(-\mu t' - \chi t') \chi dt'. \end{aligned} \quad (14)$$

对于 X 射线而言,二次和二次以上的散射非常弱,可以忽略不计,因而有一次散射近似.根据这个近似,一次散射光子在从样品出射前,只须计算样品对其的吸收,而不必考虑二次和二次以上散射.一次散射的光子在出射前,还有一段剩余路程要走,因为是前向散射,所以这段剩余路程约等于 $t - t'$.考虑了剩余路程的吸收后,从样品出射后的小角散射光强增量为

$$\begin{aligned} dI_S &= \exp[-\mu(t - t')] dI'_S(t) \\ &= I_0 \exp(-\mu t) \exp(-\chi t') \chi dt'. \end{aligned} \quad (15)$$

对(15)式两边从 0 到 t 积分,得到从样品出射后的小角散射光强为

$$I_S(t) = I_0 \exp(-\mu t) [1 - \exp(-\chi t)]. \quad (16)$$

假设小角散射分布为高斯分布,并考虑到散射是以折射光线为中心分布的,则小角散射光在子午面内的角分布为

$$\begin{aligned} \frac{dI_S}{d\theta} &= I_0 \exp(-\mu t) \frac{1 - \exp(-\chi t)}{\sqrt{2\pi\omega_s}} \\ &\times \exp\left(-\frac{(\theta - \theta_y)^2}{2\omega_s^2}\right), \end{aligned} \quad (17)$$

其中 $2\omega_s$ 为小角散射分布宽度.

根据(13)式和(17)式,当单一方向 X 射线照射样品一个面积元时,从样品一个面积元出射的 X 射线光强角分布为

$$\begin{aligned} \frac{dI_E(\theta)}{d\theta} &= I_0 \exp(-\mu t - \chi t) \delta(\theta - \theta_y) \\ &+ I_0 \exp(-\mu t) \frac{1 - \exp(-\chi t)}{\sqrt{2\pi\omega_s}} \\ &\times \exp\left(-\frac{(\theta - \theta_y)^2}{2\omega_s^2}\right). \end{aligned} \quad (18)$$

单色器晶体是完整晶体,完整晶体对入射白光 X 射线束中某一单色分量的 X 射线,是通光角宽为

达尔文宽度的角度滤波器,在达尔文宽度内反射光强均匀分布,而在达尔文宽度外光强几乎为零.因此在衍射增强成像中,入射到样品一个面积元上的光是角宽为达尔文宽度的单色光,得到从此面积元出射的 X 射线光强角分布为

$$\frac{dI_D(\theta)}{d\theta} = \frac{dI_E(\theta)}{d\theta} * r_M(\theta), \quad (19)$$

上式中 $r_M(\theta)$ 为单色器晶体的反射率,也是入射单色 X 射线光束的角分布函数.(19)式是对光强卷积而不是对光振幅卷积,表明衍射增强成像是非相干成像.其根据为,对于一个面积元而言,入射光束中不同方向的光线来自光源不同发光点,它们之间是不可能相干的.下节将根据(19)式推导出更普遍的衍射增强成像方程.

5. 考虑小角散射噪声的衍射增强成像过程分析

5.1. 建立更普遍的衍射增强成像方程

根据(19)式,样品出射光经过分析晶体反射,到达探测器的光强角分布为

$$\begin{aligned} \tilde{I}(\theta_A) &= \frac{dI_D(\theta_A)}{d\theta} \otimes r_A(\theta_A) \\ &= \frac{dI_E(\theta_A)}{d\theta} * r_M(\theta_A) \otimes r_A(\theta_A) \\ &= I_0 \exp(-\mu t - \chi t) R(\theta_A + \theta_y) \\ &\quad + I_0 \exp(-\mu t) [1 - \exp(-\chi t)] \\ &\quad \times \frac{\theta_D}{2} \\ &\quad \times \sqrt{\left[\omega_s^2 + \left(\frac{\theta_D}{2} \right)^2 \right]} \\ &\quad \times \exp \left\{ -\frac{(\theta_A + \theta_y)^2}{2 \left[\omega_s^2 + \left(\frac{\theta_D}{2} \right)^2 \right]} \right\}, \quad (20) \end{aligned}$$

其中 θ_A 为分析晶体与单色器晶体的夹角, $r_A(\theta_A)$ 是分析晶体的反射率, $R(\theta_A)$ 为两块晶体的摇摆曲线,即

$$R(\theta_A) = r_M(\theta_A) \otimes r_A(\theta_A). \quad (21)$$

(20)式中 $\tilde{I}(\theta_A)$ 上的波浪线,表示与(3)式中 $I(\theta_A)$ 的区别,下同.因为摇摆曲线与高斯曲线形状类似,所以(20)式最后一步将摇摆曲线近似看作角宽为达尔文宽度 θ_D 的高斯曲线,得

$$\begin{aligned} &\frac{1}{\sqrt{2\pi\omega_s}} \exp\left(-\frac{\theta_A^2}{2\omega_s^2}\right) * R(\theta_A) \\ &\approx \frac{1}{\sqrt{2\pi\omega_s}} \exp\left(-\frac{\theta_A^2}{2\omega_s^2}\right) * \exp\left[-\frac{\theta_A^2}{2\left(\frac{\theta_D}{2}\right)^2}\right] \\ &= \frac{\theta_D}{2} \exp\left\{-\frac{(\theta_A + \theta_y)^2}{2\left[\omega_s^2 + \left(\frac{\theta_D}{2}\right)^2\right]}\right\}. \quad (22) \end{aligned}$$

一般而言, $\omega_s \gg \theta_D$, 因此(20)式可以简化为

$$\begin{aligned} \tilde{I}(\theta_A) &= I_0 \exp(-\mu t - \chi t) R(\theta_A + \theta_y) \\ &\quad + I_0 \frac{\theta_D}{2\omega_s} \exp(-\mu t) [1 - \exp(-\chi t)]. \quad (23) \end{aligned}$$

(20)式和(23)式便是更普遍的衍射增强成像方程.和(3)式比较,可知(20)式和(23)式右边第一项对应于 Chapman^[1]提出的衍射增强成像方程,而(20)式和(23)式右边第二项则是 Chapman^[1]忽略的,分析晶体在接收角内反射的小角散射引起的本底噪声.

第三节已经介绍过,在衍射增强成像中,有两种基本的成像方式:峰位成像和腰位成像;两种合成像:表观吸收像和折射像.下面根据(23)式分别讨论这四种像的特点.

5.2. 峰位成像

峰位成像时,双晶平行,即 $\theta_A = 0$.根据(23)式,考虑了小角散射本底噪声的峰位成像方程为

$$\begin{aligned} \tilde{I}(0) &= I_0 \exp(-\mu t - \chi t) R(\theta_y) \\ &\quad + I_0 \frac{\theta_D}{2\omega_s} \exp(-\mu t) [1 - \exp(-\chi t)]. \quad (24) \end{aligned}$$

从上式可知,折射角为零的光线的反射率位于摇摆曲线峰位,反射率最大;折射角不为零的光,其反射率随折射角增大而迅速下降.小角散射分为两部分,位于分析晶体接收角内的部分可以到达成像面,引起本底噪声,而位于分析晶体接收角外的部分被滤除,得到消光衬度.由于小角散射为毫弧度量级,摇摆曲线宽度为几十微弧度,所以除了在分析晶体接收角内的小角散射能到达探测器外,在分析晶体接收角外的大部分小角散射被滤除.在摇摆曲线峰位,一阶导数为零,将 $R(\theta)$ 做二级泰勒展开.考虑到 μ 和 χ 是小量,可略去交叉项,并将 $R(0) \approx 1, \frac{dR(0)}{d\theta}$

$= 0, \frac{d^2 R(0)}{d\theta^2} < 0$ 代入,有

$$\tilde{I}(0) \approx I_0 \exp(-\mu t - \chi t) \left[R(0) + \frac{1}{2} \frac{d^2 R(0)}{d\theta^2} \theta_y^2 \right]$$

$$\begin{aligned}
& + I_0 \frac{\theta_D}{2\omega_s} \exp(-\mu t) [1 - \exp(-\chi t)] \\
& \approx I_0 (1 - \mu t - \chi t) \left[1 - \frac{1}{2} \left| \frac{d^2 R(0)}{d\theta^2} \right| \theta_y^2 \right] \\
& + I_0 \frac{\theta_D}{2\omega_s} (1 - \mu t) [1 - (1 - \chi t)] \\
& \approx I_0 \left[1 - \mu t - \chi t - \frac{1}{2} \left| \frac{d^2 R(0)}{d\theta^2} \right| \theta_y^2 \right] + I_0 \frac{\theta_D}{2\omega_s} \chi t \\
& = I_0 \left[1 + \frac{\theta_D}{2\omega_s} \chi t - \mu t - \chi t - \frac{1}{2} \left| \frac{d^2 R(0)}{d\theta^2} \right| \theta_y^2 \right] \\
& = I_0 \left(1 + \frac{\theta_D}{2\omega_s} \chi t \right) \left[1 - \frac{\mu t + \chi t + \frac{1}{2} \left| \frac{d^2 R(0)}{d\theta^2} \right| \theta_y^2}{1 + \frac{\theta_D}{2\omega_s} \chi t} \right]. \quad (25)
\end{aligned}$$

由(25)式得到吸收衬度、消光衬度和折射衰减衬度分别为

$$\frac{-\mu t}{1 + \frac{\theta_D}{2\omega_s} \chi t}, \quad \frac{-\chi t}{1 + \frac{\theta_D}{2\omega_s} \chi t} \quad \text{和} \quad \frac{-\frac{1}{2} \left| \frac{d^2 R(0)}{d\theta^2} \right| \theta_y^2}{1 + \frac{\theta_D}{2\omega_s} \chi t}.$$

在此需要对消光衬度和折射衰减衬度的形成过程做些说明. 消光衬度的形成由两个过程组成: 入射光先经过样品散射形成散射光锥, 然后分析晶体将大于接收角的散射光滤除. 生物组织常规吸收成像衬度之所以不高的一个重要原因是, 小角散射引起本底噪声导致衬度下降. 峰位成像能利用分析晶体滤除大部分小角散射得到消光衬度, 只有在分析晶体接收角内的小角散射才能引起本底噪声. 这就是峰位成像看似吸收成像, 却比常规吸收成像清晰得多的原因所在. 虽然吸收衬度和消光衬度的微观机理不同, 但是它们都能得到透射光的投影像, 宏观效果类似, 描述它们的数学方法类似. 在峰位, $\frac{d^2 R(\theta_B)}{d\theta^2} < 0$, 不论折射角是正还是负, 总是引起光强衰减. 这和腰位成像不同, 见下节.

5.3. 腰位成像

腰位成像时, $\theta_A = \mp \frac{\theta_D}{2}$. 根据(23)式, 腰位成像方程为

$$\begin{aligned}
\tilde{I}\left(\mp \frac{\theta_D}{2}\right) & = I_0 \exp(-\mu t - \chi t) R\left(\mp \frac{\theta_D}{2} + \theta_y\right) \\
& + I_0 \frac{\theta_D}{2\omega_s} \exp(-\mu t) [1 - \exp(-\chi t)] \quad (26)
\end{aligned}$$

在摇摆曲线腰部, 主要为线性区, 将 $R\left(\mp \frac{\theta_D}{2} + \theta_y\right)$ 在 $\mp \frac{\theta_D}{2}$ 处做一级泰勒展开. 考虑到 μ 和 χ 是小量, 可略去交叉项, 并将 $R\left(\mp \frac{\theta_D}{2}\right) \approx 0.5$, $\frac{dR}{d\theta}\left(\mp \frac{\theta_D}{2}\right) \approx \pm \frac{1}{\theta_D}$ 代入, 有

$$\begin{aligned}
& \tilde{I}\left(\mp \frac{\theta_D}{2}\right) \\
& \approx I_0 \exp(-\mu t - \chi t) \left[R\left(\mp \frac{\theta_D}{2}\right) + \frac{dR}{d\theta}\left(\mp \frac{\theta_D}{2}\right) \theta_y \right] \\
& + I_0 \frac{\theta_D}{2\omega_s} \exp(-\mu t) [1 - \exp(-\chi t)] \\
& \approx I_0 (1 - \mu t - \chi t) \left[0.5 \pm \frac{\theta_y}{\theta_D} \right] + I_0 \frac{\theta_D}{2\omega_s} \chi t \\
& \approx 0.5 I_0 \left(1 + \frac{\theta_D}{\omega_s} \chi t - \mu t - \chi t \pm \frac{2\theta_y}{\theta_D} \right) \\
& = 0.5 I_0 \left(1 + \frac{\theta_D}{\omega_s} \chi t \right) \left(1 + \frac{-\mu t - \chi t \pm \frac{2\theta_y}{\theta_D}}{1 + \frac{\theta_D}{\omega_s} \chi t} \right). \quad (27)
\end{aligned}$$

由(27)式得到吸收衬度、消光衬度和折射衬度分别为

$$\frac{-\mu t}{1 + \frac{\theta_D}{\omega_s} \chi t}, \quad \frac{-\chi t}{1 + \frac{\theta_D}{\omega_s} \chi t} \quad \text{和} \quad \frac{\pm \frac{2\theta_y}{\theta_D}}{1 + \frac{\theta_D}{\omega_s} \chi t}.$$

(27)式只在摇摆曲线的线性区域有效, 即(27)式成立的条件是 $|\theta_y| \leq \frac{\theta_D}{2}$. 从(27)式可以看到, 腰位成像时, 小角散射的本底噪声比峰位成像时严重.

5.4. 两次曝光合成像

仿照(8)式, 将从(26)式推导出的低角像和高角像相加, 得到考虑了小角散射本底噪声的表观吸收像为

$$\begin{aligned}
& \tilde{I}\left(-\frac{\theta_D}{2}\right) + \tilde{I}\left(\frac{\theta_D}{2}\right) \\
& = I_0 \exp(-\mu t - \chi t) \left[\left(0.5 + \frac{\theta_y}{\theta_D}\right) + \left(0.5 - \frac{\theta_y}{\theta_D}\right) \right] \\
& + I_0 \frac{\theta_D}{\omega_s} \exp(-\mu t) [1 - \exp(-\chi t)] \\
& = I_0 \exp(-\mu t - \chi t) \\
& + I_0 \frac{\theta_D}{\omega_s} \exp(-\mu t) [1 - \exp(-\chi t)] \\
& \approx I_0 (1 - \mu t - \chi t) + I_0 \frac{\theta_D}{\omega_s} \chi t
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 &= I_0 \left(1 + \frac{\theta_D}{\omega_s} \chi t - \mu t - \chi t \right) \\
 &= I_0 \left(1 + \frac{\theta_D}{\omega_s} \chi t \right) \left(1 + \frac{-\mu t - \chi t}{1 + \frac{\theta_D}{\omega_s} \chi t} \right). \quad (28)
 \end{aligned}$$

由(28)式得到吸收衬度和消光衬度分别为 $\frac{-\mu t}{1 + \frac{\theta_D}{\omega_s} \chi t}$

和 $\frac{-\chi t}{1 + \frac{\theta_D}{\omega_s} \chi t}$. 将表观吸收像和峰位成像进行比较,可

知峰位成像除了可以获得更高的吸收衬度和消光衬度之外,还有表观吸收像没有的折射衰减衬度.

仿照(9)式,将从(26)式推导出的低角像和高角像相减并移项,得到实际的折射像为

$$\frac{\theta_D}{2} \frac{\tilde{I}\left(-\frac{\theta_D}{2}\right) - \tilde{I}\left(\frac{\theta_D}{2}\right)}{\tilde{I}\left(-\frac{\theta_D}{2}\right) + \tilde{I}\left(\frac{\theta_D}{2}\right)} = \frac{\theta_y}{1 + \frac{\theta_D}{\omega_s} \chi t}. \quad (29)$$

将(29)式与(9)式相比,可知两者差别不大.

根据衬度的常规定义,可以从(27)式得到腰位像折射衬度的数学表达,却不能从(29)式得到折射像衬度的数学表达.衬度的常规定义是光强变化与平均光强的比值,这种衬度定义对折射像失效,原因是折射像的平均光强为零.折射像与低角像和高角像相减得到的合成像成正比,在两像之差中,折射引起的光强变化相反,而平均光强相同,所以折射引起的光强变化在相减中加倍,而平均光强在相减中为零.文献[23]提出用信噪比来定义折射像的衬度.根据这个定义,小角散射的本底噪声不会影响降低折射像的衬度,其原因小角散射引起的本底噪声在低角像和高角像相减中为零.

6. 讨 论

6.1. 折射和小角散射的区分

在本文中(参考(18)式),折射定义为相邻面积元之间的密度不均匀引起的相干散射,其对应的物理图像是单一方向光线入射在样品上,虽然相邻面积元的出射光线方向有可能不同,但是每个面积元的出射光线只有一个方向;小角散射定义为面积元内部的密度不均匀引起的相干散射,其对应的物理图像是单一方向光线入射在一个面积元上,出射光线有多个方向.根据以上定义和描述可知,在衍射增

强成像中折射和小角散射的区分不是绝对的而是相对的,两者在一定条件下可以相互转化.当成像分辨率降低时,样品的面积元增大,一部分折射转化为小角散射,而当成像分辨率提高时,样品的面积元减小,一部分小角散射转化为折射.再进一步思考,可知(18)式的数学描述有局限性.例如,当入射光线方向为一,出射光线方向大于一而小于二时,出射光线既不完全是折射也不完全是小角散射,或者说部分属于折射,部分属于小角散射.不过这种归属不清楚的光线只占很少一部分,从整体上讲,(18)式的数学描述还是足够精确的.

6.2. 样品的出射光束和分析晶体的接收角

物点是样品面积元的抽象.在讨论空间分辨和角度分辨时,用物点替代面积元,可以使问题简化.在衍射增强成像过程中,单色器晶体的接收角决定入射样品单色光束的角宽.经过一个物点折射,入射光束中每条光线的折射角都相同,在样品的任一点,其折射光束角宽与入射光束角宽相同.经过一个物点的散射,一条入射光线变成一个散射光锥,散射光锥的角宽远大于入射光束角宽.对于折射光束而言,因为折射光束角宽与分析晶体接收角宽相等,所以当折射光束角和分析晶体接收角完全重合时,折射光束可以获得最高反射率,当折射光束角和分析晶体接收角部分重合时,折射光束获得部分反射率.对于小角散射来说,因为散射光的角分布远大于分析晶体接收角宽,所以不论分析晶体的角度如何调整,分析晶体总会接收到达尔文宽度的小角散射,并将其反射到探测器.根据腰位成像方程(26)式,可知在低角成像时,分析晶体角度为 $\theta_A = -\frac{\theta_D}{2}$,当光束折射角度为 $\theta_y = \frac{\theta_D}{2}$ 时,折射光束角和分析晶体接收角完全重合,可获得最高的折射衬度;在高角成像时,分析晶体角度为 $\theta_A = \frac{\theta_D}{2}$,当光束折射角度为 $\theta_y = -\frac{\theta_D}{2}$ 时,折射光束角和分析晶体接收角完全重合,可获得最高的折射衬度.图4是衍射增强成像中,入射光束,折射光束和分析晶体接收角关系示意图.在图4的情况下,折射光束顺时针偏转时,折射角增量为正,反之为负.

表观吸收像是低角像和高角像之和.在图4(b)中可以发现,只要折射光束在角度范围 $(-\theta_D, \theta_D)$

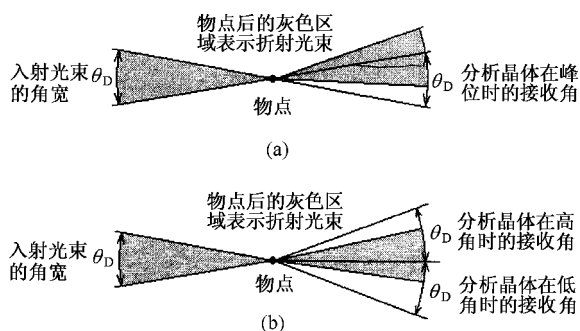


图 4 衍射增强成像中,入射光束,折射光束和分析晶体接收角关系示意图。(a)峰位成像 (b)高角像和低角像

之内(即折射角在角度范围 $(-\frac{\theta_D}{2}, \frac{\theta_D}{2})$ 之内),则分析晶体在低角的反射率与在高角的反射率之和约为100%。对于任一散射光锥,分析晶体在低角和高角的接收角宽之和为 $2\theta_D$,只要散射角宽 $2\omega_s$ 远大于 $2\theta_D$,总会有比例为 $\frac{\theta_D}{\omega_s}$ 的小角散射被分析晶体反射到探测器。在这可以体会到表观吸收像属于吸收像的原因所在,当折射光束在角度范围 $(-\theta_D, \theta_D)$ 之内时,表观吸收像的衬度与折射角,分析晶体接收角无关,这和常规吸收像相同。表观吸收像和常规吸收像不同之处在于,分析晶体将角度范围 $(-\theta_D, \theta_D)$ 外的小角散射滤除,获得消光衬度,只有角度范围 $(-\theta_D, \theta_D)$ 内的小角散射被分析晶体反射到探测器,引起本底噪声,而在常规吸收像中几乎全部小角散射都能到达探测器,引起本底噪声,没有消光衬度。

和表观吸收像相比,峰位像更具优势。峰位像只须曝一次光,而表观吸收像需要分别拍摄低角像和高角像。在峰位像中,虽然吸收引起的光强衰减和表观吸收像相同,但是由于小角散射引起的本底噪声仅是表观吸收像的二分之一,所以峰位像可以获得更低的背景强度和更高的消光衬度和吸收衬度。除此之外,还可从图4(a)中发现,只要折射角不为零,分析晶体的反射率就会减小,就会有折射引起的衰减衬度。

折射像是低角像和高角像之差除以低角像和高角像之和,在相除的操作中,吸收和散射滤除的影响消除,因而折射像的主要性质由折射角决定。在图4(b)中可以发现,对于任一折射光束,只要折射光束在角度范围 $(-\theta_D, \theta_D)$ 之内,则折射光束与分析晶体低接收角的重合部分和与高接收角的重合部分之差正比于折射角。因此,折射像可以获得与折射角成正比的衬度。对于任一散射光锥,分析晶体对小角散射的反射率在低接收角为正,在高接收角为负。这相当于给像斑的低角区域和高角区域分别加上和减去相同的量,这除了引起像斑向低角方向位移以外,不会降低成像衬度。因此,小角散射对折射像没有影响。

7. 结 论

本文为衍射增强成像方程补充了分析晶体反射的小角散射本底噪声项,建立了更普遍的衍射增强成像方程。根据此方程推导出峰位像和腰位像的吸收衬度,消光衬度和折射衬度的数学表达,并讨论了两种合成像(表观吸收像和折射像)的衬度问题,结论是:

1. 衍射增强成像中的峰位成像和腰位成像,是吸收衬度,消光衬度和折射衬度的叠加,分析晶体反射小角散射本底噪声导致三种衬度降低。
2. 表观吸收像是由低角像和高角像相加而成,在相加中小角散射本底噪声加倍,导致本底强度增高,引起衬度降低。将表观吸收像和峰位像相比,峰位像除了可以获得比表观吸收像更高的吸收和消光衬度之外,还有表观吸收像没有的折射衰减衬度。
3. 折射像是由低角像和高角像相减移项而成,小角散射本底噪声在相减中消失,小角散射本底噪声不会降低成像衬度,仅会引起像斑向低角方向位移。
4. 在忽略了小角散射引起的本底噪声后,本文提出的衍射增强成像方程近似为前人提出的衍射增强成像方程。

限于篇幅,本文在讨论衍射增强成像时,只考虑摇摆曲线的局部的影响,而没有讨论整个摇摆曲线对成像的影响,作者拟在以后的论文中对此问题展开讨论。



- [1] Chapman L D , Thomlinson W C , Johnston R E , Washburn D , Pisano E , Gmur N , Zhong Z , Menk R , Arfelli F , Sayers D 1997 *Phys. Med. Biol.* **42** 2015
- [2] Davis T J , Gao D , Gureyev T E , Stevenson A W , Wilkins S W 1995 *Nature* **373** 595
- [3] Wilkins S W , Gureyev T E , Gao D , Pogany A , Stevenson A W 1996 *Nature* **384** 335
- [4] Momose A , Takeda T , Itai Y , Hirano K 1996 *Nature Medicine* **2** 473
- [5] Hirano K , Momose A 1996 *Phys. Rev. Lett.* **76** 3735
- [6] Margaritondo G , Tromba G 1999 *J. Appl. Phys.* **85** 3406
- [7] Hwu Y , Hsieh H , Lu M J , Tsai W L , Lin H M , Goh W C , Je J H , Kim C K , Noh D Y , Youn H S , Tromba G , Margaritondo G 1999 *J. Appl. Phys.* **86** 4613
- [8] Gao D , Pogany A , Stevenson A W , Gureyev T E , Wilkins S W , Mai Z 2000 *Acta Phys. Sin.* **49** 2357 (in Chinese) [高大超、Pogany A、Stevenson A W、Gureyev T E、Wilkins S W、麦振洪 2000 *物理学报* **49** 2357]
- [9] Dilmanian F A , Zhong Z , Ren B , Wu X Y , Chapman L D , Oriant I , Thomlinson W C 2000 *Phys. Med. Biol.* **45** 933
- [10] Tsai W L , Hsu P C , Hwu Y , Chen C H , Je J H L W , Grosio A , Margaritondo G 2002 *Nature* **417** 139
- [11] Huang W X , Tian Y L , Zhu P P , Mai Z H , Hu X F 2002 *Acta Phys. Sin.* **51** 1040 (in Chinese) [黄万霞、田玉莲、朱佩平、麦振洪、胡小方 2002 *物理学报* **51** 1040]
- [12] Tian Y L , Xiao T R , Zhu P P , Huang W X , Li G , Yuan Q X , Chen M 2004 *Nuclear Technology* **27** 417 (in Chinese) [田玉莲、肖体乔、朱佩平、黄万霞、黎刚、袁清习、陈敏 2004 *核技术* **27** 417]
- [13] Yuan Q X , Tian Y L , Zhu P P , Huang W X , Wang J Y , Hu T D , Jiang X M , Wu Z Y 2004 *Nuclear Technology* **27** 725 (in Chinese) [袁清习、田玉莲、朱佩平、黄万霞、王越、胡天斗、姜晓明、吴自玉 2004 *核技术* **27** 725]
- [14] Zhu P P , Wang J Y , Yuan Q X , Tian Y L , Huang W X , Li G , Hu T D , Jiang X M , Wu Z Y 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 58 (in Chinese) [朱佩平、王越、袁清习、田玉莲、黄万霞、黎刚、胡天斗、姜晓明、吴自玉 2005 *物理学报* **54** 58]
- [15] Huang W X , Yuan Q X , Tian Y L , Zhu P P , Jiang X M , Wang J Y 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 677 (in Chinese) [黄万霞、袁清习、田玉莲、朱佩平、姜晓明、王越 2005 *物理学报* **54** 677]
- [16] Zhu H , Xie H , Gao H , Chen J , Li R , Xu Z 2005 *Chin. Phys.* **14** 796
- [17] Liu C , Zhang Y , Zhang X , Yang W , Peng W , Shi D , Zhu P , Tian Y , Huang W 2005 *Med. Sci. Monit.* **11** MT33
- [18] Guinier A , Fournet G , 1955 *Small-Angle Scattering of X-rays* (translated by C. B. Walker) (J. Wiley & Sons : New York)
- [19] Glatter O , Kratoch O 1982 *Small Angle X-ray Scattering* (New York : Academic Press)
- [20] James R W 1982 *The Optical Principles of the Diffraction of X-rays* (Ox Bow Press)
- [21] Oltulu O , Zhong Z , Hasnah M , Wernick M N , Chapman D 2003 *J. Phys. D : Appl. Phys.* **36** 2152
- [22] Oltulu O 2003 *Ph. D. Thesis* (UMI Number : 3087854) (Illinois Institute of Technology)
- [23] Kiss M , Sayers D , Zhong Z 2003 *Phys. Med. Biol.* **48** 325

Principles of X-ray diffraction enhanced imaging^{*}

Zhu Pei-Ping^{1)‡} Yuan Qing-Xi^{1)‡} Huang Wan-Xia^{1)‡} Wang Jun-Yue^{1)‡}
Shu Hang^{1)‡} Wu Zi-Yu^{1)‡} Xian Ding-Chang¹⁾

¹ *Beijing Synchrotron Radiation Facility, Institute of High Energy Physics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, China*

² *National Center for Nano Science and Technology, Beijing 100049, China*

(Received 29 March 2005 ; revised manuscript received 1 June 2005)

Abstract

The interactions between X-ray and the sample and crystals were investigated, and the influence of small angle scattering on images was emphatically analyzed in diffraction enhanced imaging in this paper. Not only were the additional noise term caused by small angle scattering introduced, and more general DEI equation established, but also expressions of absorption contrast, extinction contrast and refraction contrast were given for the peak image and the middle slope image. With the new DEI equation, the contrasts of two kinds of resultant images (apparent absorption image and refraction image) were discussed.

Keywords : phase contrast imaging, synchrotron radiation, crystal diffraction, radiography

PACC : 2920L, 6114F, 8170J

^{*} Project supported by the Key Important Project of the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 10490194) and the Knowledge Innovation Fund of IHEP

[†] E-mail : zhupp@ihep.ac.cn

[‡] E-mail : wuzy@ihep.ac.cn