

А.Ю. ОВЧАРЕНКО, О.А. ЛЕБЕДЬ

Інститут прикладної фізики НАН України

(Вул. Петропавлівська, 58, Суми 40000; e-mail: oartturr@gmail.com)

ВИЯВЛЕННЯ СТРУКТУРНИХ ОСОБЛИВОСТЕЙ ОБ'ЄКТІВ МЕТОДОМ РЕНТГЕНІВСЬКОГО ФАЗОВОГО КОНТРАСТУ

УДК 535.4; 53.072

Фазовий контраст знаходить широке застосування в усіх галузях, де потрібна візуалізація внутрішньої структури об'єктів за допомогою рентгенівського випромінювання. У роботі запропоновано новий підхід моделювання фазоконтрастного рентгенівського зображення методом вільного поширення на основі теорії Френеля-Кірхгофа. Розроблена проста розрахункова модель дозволяє визначити значення зміни інтенсивності на тривимірних моделях об'єктів макроскопічних розмірів довільної форми і, відповідно, умови спостереження контрастного зображення при відомих характеристиках детекторної системи та інтенсивності джерела випромінювання. Була показана можливість одержання чітких зображень об'єктів з малими показниками заломлення, визначення їх геометричних розмірів та товщини. Викладені у роботі підходи можуть бути корисні розробникам компактних пристроїв для виявлення структурних неоднорідностей всередині досліджуваних об'єктів неруйнівним методом.

Ключові слова: рентгенівський фазовий контраст, хвильовий фронт, дифракція рентгенівського випромінювання, когерентність, теорія дифракції Френеля-Кірхгофа.

1. Вступ

Контроль якості та надійності сучасних матеріалів і виробів є надзвичайно актуальною задачею у багатьох галузях промисловості та наукових досліджень. Особливе значення це набуває в енергетичній, транспортній та медичній сферах, де відмова виробу може призвести до техногенних катастроф і людських жертв. Складні технічні об'єкти часто мають внутрішні дефекти та неоднорідності структури прихованого характеру, які неможливо виявити традиційними методами контролю і які значно знижують надійність та ресурс конструкцій.

Цитування: Овчаренко А.Ю., Лебедь О.А. Виявлення структурних особливостей об'єктів методом рентгенівського фазового контрасту. *Укр. фіз. журн.* **69**, № 5, 293 (2024). Citation: Ovcharenko A., Lebed O. Detection of structural features of objects using X-ray phase contrast imaging method. *Ukr. J. Phys.* **69**, No. 5, 293 (2024). <https://doi.org/10.15407/ujpe69.5.293>.

ISSN 0372-400X. *Укр. фіз. журн.* 2024. Т. 69, № 5

Поряд з цим, рентгенівське випромінювання (РВ) слугує важливим діагностичним інструментом в галузі біології та медицини. Більшість традиційних методів медичної та промислової радіографії, томографії, мікроскопії як правило базуються на зміні коефіцієнта поглинання рентгенівських променів різними ділянками об'єкта внаслідок зміни його щільності, складу та товщини. Використання жорсткого РВ в томографії дає змогу запобігти його повному поглинанню та отримати інформацію про внутрішню структуру об'єктів більших розмірів неруйнівним методом. З цього випливає, що для зменшення дози опромінення необхідно розробляти методи на основі заломлення рентгенівських променів. Отже розробка принципів нових підходів до неруйнівного контролю є ключовим завданням науково-технічного прогресу та розвитку медицини.

Одним з найбільш перспективних методів у цій галузі вбачається фазова рентгенівська томогра-

фія, що ґрунтується на аналізі просторового розподілу фази когерентного випромінювання, яке проходить крізь досліджуваний об'єкт. На відміну від звичайної рентгенографії, вона забезпечує набагато вищу чутливість до внутрішніх неоднорідностей матеріалу на мікро- і субмікронному рівні, зокрема мікротріщин, пор тощо. Тому останнім часом фазова рентгенографія з успіхом застосовується в авіакосмічній промисловості та машинобудуванні для експрес-аналізу виробів і конструкцій [1, 2]. Вона також дедалі ширше входить в арсенал засобів медичної візуалізації завдяки високій контрастності м'яких тканин [3].

Рентгеновські промені володіють високою проникаючою здатністю для більшості матеріалів, тому за їх допомогою можна досліджувати внутрішню структуру об'єкта не руйнуючи його. У даний час традиційні методи базуються на різниці в здатності поглинання рентгеновських променів різних областей об'єкта дослідження внаслідок зміни його щільності, складу і товщини. Дане завдання істотно ускладнюється при дослідженні слабо поглинаючих об'єктів, якими, наприклад, є м'які біологічні тканини. Хоча рентгеновські промені глибоко проникають в такі матеріали, контраст їх зображень слабкий через малість градієнта коефіцієнта поглинання.

Дослідження біологічних об'єктів відносно великого розміру методами, що базуються на явищі поглинання, вимагають застосування жорсткого випромінювання, введення контрастних речовин і, відповідно, збільшення дози опромінення. Метод рентгеновського фазового контрасту (РФК) дозволяє з високою просторовою роздільною здатністю здійснювати візуалізацію внутрішньої будови слабо поглинаючих об'єктів з малими градієнтами щільності речовини. В основі цього методу лежить використання явища заломлення рентгеновських променів в об'єкті, яке призводить до зміни фазового фронту хвилі [3–10]. В результаті такої зміни фази рентгеновські промені відхиляються від свого первинного напрямку на малі кути, величина яких залежить від просторового розподілу щільності речовини в досліджуваному об'єкті. З погляду хвильової оптики фазоконтрастні зображення є результатом інтерференції падаючої хвилі з хвилями, які пройшли через зразок. Дослідження об'єктів методами на основі явища заломлення рентгеновських променів є актуальною задачею

для багатьох областей сучасної прикладної науки та медицини.

Контрастні зображення в рентгеновському випромінюванні розглядаються як перспективні технології в медицині, що підвищує контрастну роздільну здатність радіографічних методів [3, 8]. Ця технологія дозволить виконання функцій установок традиційної рентгеновської комп'ютерно-томографічної діагностики і скануючих систем ядерного магнітного резонансу. Методи РФК для застосувань в ранній діагностиці та медичній візуалізації в перспективі дозволяють вирішити основні проблеми в цьому напрямі: зменшення дози опромінення, підвищення роздільної здатності та контрастності для візуалізації м'яких тканин на ранніх стадіях захворювань.

У даній роботі розглянуто метод фазового контрасту на основі вільного поширення (propagation-based) як один з найбільш поширених способів отримання фазоконтрастних зображень. Вперше подібна схема застосована Габором в експерименті на електронному мікроскопі [11] і згодом була розвинена як метод фазового розмаїття в рентгеновському діапазоні [5, 12–18]. Важливою перевагою цього методу є простота його експериментальної реалізації, яка не вимагає використання складних рентгенооптичних елементів.

Проте повноцінне та ефективне застосування даного методу на практиці потребує значних удосконалень як апаратного забезпечення, так і фізико-математичних моделей, що описують процес формування фазового контрасту. Зокрема, гостро стоїть питання створення компактних установок фазової томографії шляхом оптимізації конструктивних параметрів та режимів роботи на основі моделювання фізичних процесів. На сьогодні цьому напрямку приділено недостатньо уваги, тому виникає низка ситуаційних проблем, що потребують вирішення.

2. Аналітична модель методу вільного поширення

Метод вільного поширення або метод лінійного фазового контрасту, реалізується в області дифракції Френеля [3–6, 18–23].

Внутрішні варіації товщини і показника заломлення РВ досліджуваного об'єкта призводять до зміни форми рентгеновського хвильового фронту

при проходженні через об'єкт. Коли детектор розташований безпосередньо за досліджуваним об'єктом, отримуємо звичайне абсорбційне рентгенівське зображення, а при значних відстанях від об'єкта формується фазовоконтрастне зображення в рентгенівських променях. Оптичні властивості об'єкта можуть бути охарактеризовані комплексним показником заломлення:

$$n = 1 - \delta + i\beta, \quad (1)$$

в якому безрозмірна величина β відповідає за опис поглинальних властивостей досліджуваного матеріалу (показник поглинання), а δ – за фазовий зсув хвильового фронту, спричинений проходженням променів крізь об'єкт. Фазовий зсув рентгенівської хвилі, що пройшла через зразок, залежить від варіацій декременту заломлення всередині зразка і від його товщини. У разі монохроматичного паралельного пучка, що поширюється вздовж осі z , зміна фази може бути записана в такій формі:

$$\varphi(x, y) = -\frac{2\pi}{\lambda} \int \delta(x, y, z) dz, \quad (2)$$

причому інтеграл розраховується по всій товщині об'єкта в напрямку поширення РВ.

У даній роботі для розрахунку фазовоконтрастних зображень за основу розрахункової моделі взято скалярну теорію дифракції Френеля–Кірхгофа. Це дає можливість врахувати еволюцію хвильового фронту на шляху “джерело – об'єкт” і “об'єкт – екран”.

На рис. 1 схематично показано хід променів від рентгенівського джерела до екрана через досліджуваний об'єкт. Даний підхід є достатньо загальним і підходить для проведення розрахунків дифракційних картин як від точкових джерел випромінювання, так і для протяжних. Крім того, є можливість проводити чисельний експеримент для об'єктів будь-якої геометричної форми від мезоскопічних до макроскопічних масштабів.

Для випадку рентгенівського пучка, що розповсюджується від точкового джерела, вираз для інтенсивності в площині детектора може бути записаний у вигляді [18, 24]

$$\psi(x_{scr}, y_{scr}) = \frac{1}{i\lambda} \int \int_{-\infty}^{\infty} \sqrt{I_0} \frac{\exp(ik(r+s))}{rs} \times$$

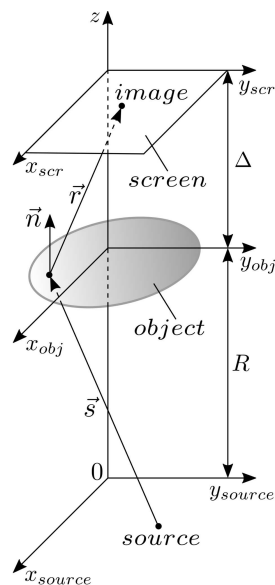


Рис. 1. Загальна схема розрахунку фазовоконтрастного зображення в теорії дифракції Френеля–Кірхгофа

$$\times \left[\frac{\cos(\mathbf{n}, \mathbf{r}) + \cos(\mathbf{n}, \mathbf{s})}{2} \right] \exp(i\varphi) dx_{obj} dy_{obj}, \quad (3)$$

$$s = \sqrt{(x_{obj} - x_{source})^2 + (y_{obj} - y_{source})^2 + R^2},$$

$$r = \sqrt{(x_{obj} - x_{scr})^2 + (y_{obj} - y_{scr})^2 + \Delta^2},$$

де \mathbf{s} та \mathbf{r} – вектори “джерело – об'єкт” і “об'єкт – екран” відповідно; λ – довжина хвилі випромінювання; \mathbf{n} – нормаль до площини об'єкта; φ – додатковий фазовий зсув, викликаний впливом об'єкта на вхідний хвильовий фронт.

3. Методика проведення досліджень

У даний час є дуже мала кількість робіт з комп'ютерного моделювання дифракції рентгенівського випромінювання на різних об'єктах, і це, на наш погляд, пояснюється декількома причинами. По-перше, подібного роду моделювання потребує наявності достатньо потужних обчислювальних ресурсів, оскільки правильне обчислення інтеграла по формулі (3) можна провести лише чисельними методами при розбитті площини об'єкта та площини екрана на дуже велику кількість точок і з використанням подвійної точності при розрахунках усіх величин, які входять у цю формулу. Це, в свою чергу, приводить до проблем обробки експериментальних даних в режимі реального часу. По-друге,

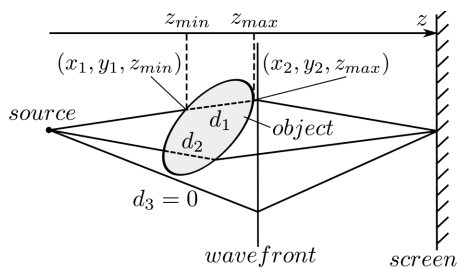


Рис. 2. Схема розрахунку товщин зразка та зсувів фаз рентгенівського випромінювання

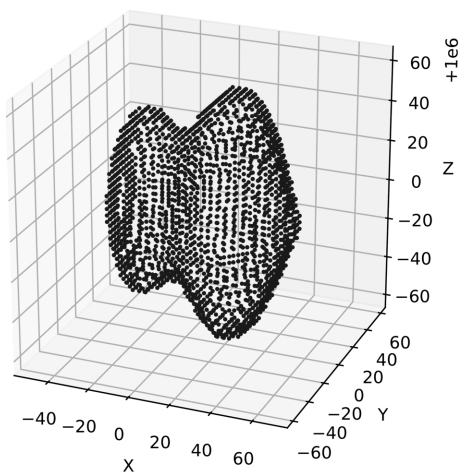


Рис. 3. Об'єкт дослідження з максимальним лінійним розміром близько 100 мкм

хоча вищезгадана модель є достатньо універсальною і не містить обмежень на розміри та геометричну форму досліджуваних об'єктів, досить важко проводити моделювання об'ємних об'єктів неправильної геометричної форми. У зв'язку з цим, як правило, моделювання проводиться для дуже простих об'єктів у припущенні, що їхні розміри набагато менші відстані від джерела до об'єкта і мають певну симетрію. Товщина об'єктів просто задавалась аналітично, що є суттєвим обмеженням при проведенні подібних досліджень.

Застосування скалярної теорії дифракції Френеля-Кірхгофа дозволило нам розробити підхід для моделювання дифракції рентгенівського випромінювання від моделей реальних тривимірних об'єктів будь-якої геометричної форми. На рис. 2 показана схема розрахунку товщин досліджуваних об'єктів та зсувів фаз рентгенівських хвиль, яку було реалізовано у нашій роботі. Для цьо-

го тривимірний об'єкт задавався як геометричне місце точок, яке формує його поверхню. Далі площина об'єкта розбивалася на велику кількість точок і до кожної з цих точок від джерела випромінювання проводилась пряма. За допомогою рівняння прямої та координат точок об'єкта визначались точки перетину (x_1, y_1, z_{min}) та (x_2, y_2, z_{max}) і розраховувалась товщина об'єкта $d_1 = \sqrt{(x_2 - x_1)^2 + (y_2 - y_1)^2 + (z_{max} - z_{min})^2}$ та зсув фази $\varphi = k\delta d_1$, де δ - показник заломлення.

4. Результати та їх обговорення

Представлене дослідження є частиною робіт із планування та проведення експериментів з рентгенівського фазового контрасту методом вільного поширення в рамках Асоційованої міжнародної лабораторії LIA/IRP IDEATE [25, 26].

Було розглянуто точкове джерело з довжиною хвилі $\lambda = 1,5 \cdot 10^{-4}$ мкм, що відповідає характеристичній лінії CuK_α . У ролі досліджуваного зразка ми вибрали об'єкт, показаний на рис. 3. Його максимальні геометричні розміри вздовж осей x , y та z відповідно дорівнювали 100 мкм, 80 мкм та 120 мкм, що відноситься до зразка макроскопічного розміру. Для одержання фазоконтрастного зображення досліджуваного зразка відстань від джерела до центра об'єкта становила $R = 1$ м, а від центра об'єкта до екрана - $\Delta = 2,7$ м. Кількість точок розбиття площини об'єкта та екрана були 845650 та 320400, відповідно. Таке розбиття хоча і є мінімалістичним, дозволяє одержати достатньо якісне зображення об'єкта, але при цьому потребує обчислення близько 10^{12} параметрів по формулі (3).

На рис. 4 показано зображення зразка та просторовий сигнал об'єкта для кута 0^0 у площині xy . Це дозволяє побачити контури об'єкта, якщо на нього дивитись вздовж осі z , та оцінити розміри зразка вздовж осей x та y .

Дійсно, якщо прийняти до уваги, що коефіцієнт збільшення M у нашому випадку дорівнює

$$M = 1 + \frac{\Delta}{R} = 3,7, \tag{4}$$

і визначити максимальний розмір об'єкта по графіку на рис. 4 як відстань між точками, де починаються і закінчуються відчутні осциляції у центральній частині графіка (це область розташування зразка), то одержимо такі результати.

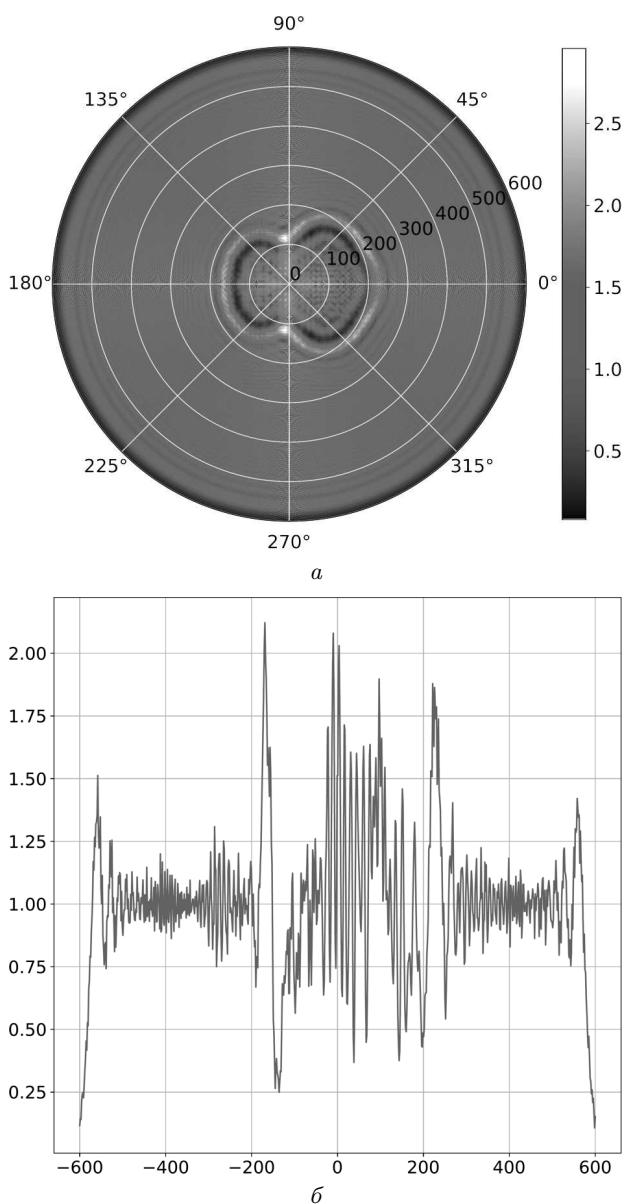


Рис. 4. Зображення зразка у площині $X0Y$ (а) та профіль сигналу об'єкта (б)

Осциляції починаються приблизно в точці $x_1 = -180$ мкм і закінчуються в точці $x_1 = 220$ мкм. Це означає, що максимальні розміри зображення досліджуваного об'єкта вздовж осі x приблизно дорівнюють 400 мкм, а отже з урахуванням коефіцієнта збільшення (див. формулу 4) реальний розмір об'єкта вздовж осі x дорівнює приблизно 108 мкм. Можна вважати, що цей наблизе-

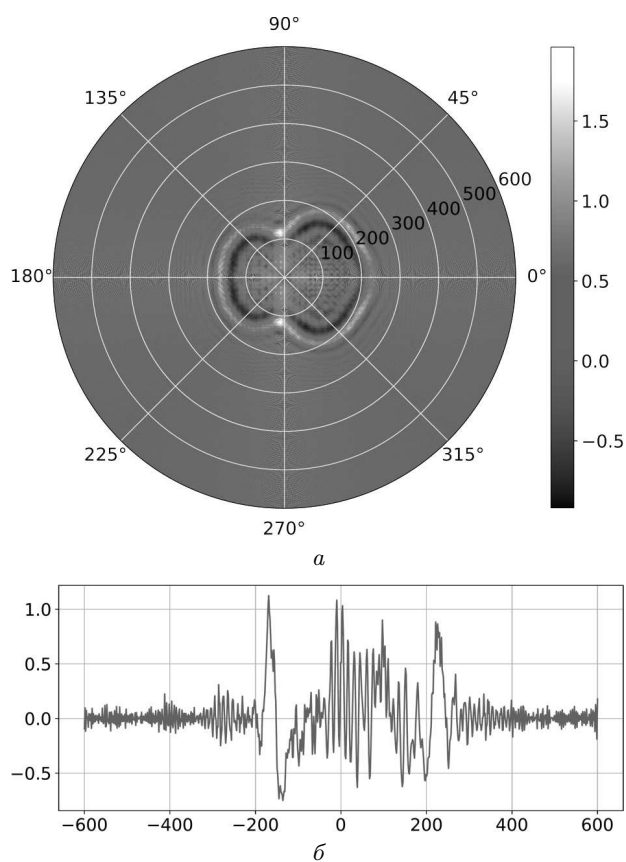


Рис. 5. Очищене від апертурної дифракції зображення об'єкта (а) та відносний профіль сигналу об'єкта (б)

ний розрахунок повністю узгоджується з реальним розміром досліджуваного об'єкта рівним 100 мкм вздовж осі x . Що стосується інформації про товщину досліджуваного зразка вздовж напрямку поширення РВ, то ми не можемо визначити цю інформацію безпосередньо з даних, показаних на рис. 4. Для вирішення цієї задачі необхідно побудувати зображення зразка та просторовий сигнал об'єкта, використовуючи відносну інтенсивність сигналу (різниця сигналів із зразком та за його відсутності) так, як це показано на рис. 5. Це дозволяє позбутися впливу дифракційних максимумів та мінімумів від країв апертури і зменшує осциляції, що дає можливість більш точно визначити контури досліджуваного об'єкта.

У наших дослідженнях ми вибрали зразок з малим показником заломлення $\delta = 10^{-6}$, що відповідає біологічним об'єктам. Для одержання більш точної інформації про геометричну форму та тов-

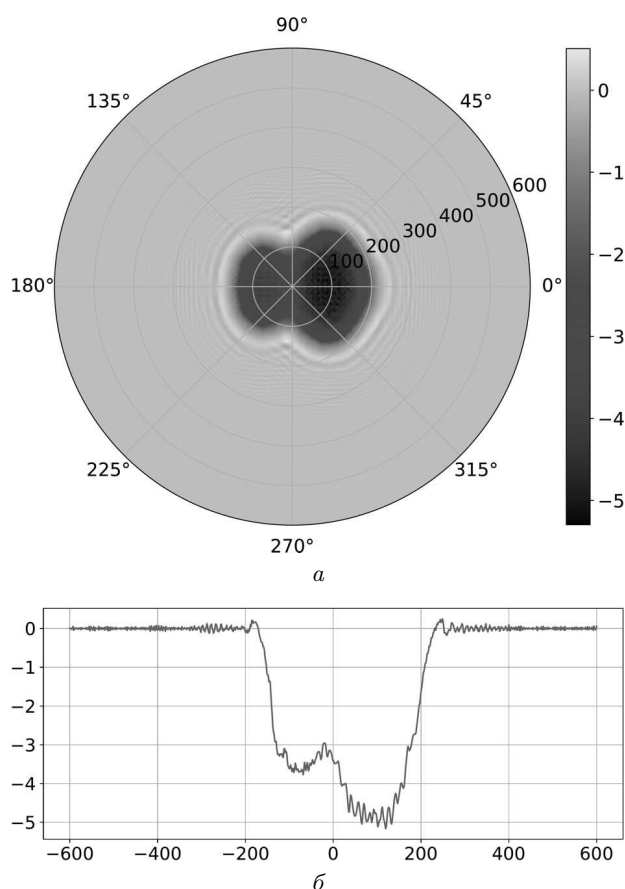


Рис. 6. Фазове зображення об'єкта (а) та його фазовий профіль (б)

щину досліджуваного об'єкта ми провели розрахунок фазового профілю та побудували зображення (рис. 6). Цей результат показує, що наші параметри моделювання дифракції рентгенівського випромінювання для вибраного зразка є коректними.

На основі розрахованих комплексних амплітуд попередніх зображень (з об'єктом та без нього) було знайдено значення фази рентгенівського випромінювання для кожного випадку та знайдено їх різницю. Таким чином було розраховано просторовий розподіл фазового зсуву рентгенівського випромінювання, спричиненого об'єктом. Слід зазначити, що детектори можуть реєструвати лише інтенсивність і не можуть реєструвати фазу рентгенівського випромінювання. Саме тому сукупність даних про інтенсивність і фазу випромінювання дає більш повну інформацію про досліджувані об'єкти. Співставляючи дані інтенсивності зображен-

ня у різних областях та графік фазового профілю з геометричною формою зразка (рис. 3), бачимо повну відповідність.

5. Висновки

У даній роботі нами був запропонований новий підхід моделювання дифракції рентгенівського випромінювання на тривимірних моделях об'єктів макроскопічних розмірів довільної форми, який дозволяє більш точно розраховувати товщину досліджуваних зразків у порівнянні з роботами інших авторів. Методом фазового рентгенівського контрасту була показана можливість одержання чітких зображень об'єктів з малими показниками заломлення, визначення їх геометричних розмірів та товщини. Викладені у даній роботі підходи можуть бути корисні розробникам компактних пристроїв для виявлення структурних неоднорідностей всередині досліджуваних об'єктів неруйнівним методом.

Робота підтримана в рамках державної науково-дослідної роботи № 0122U000417 та Асоційованої міжнародної лабораторії LIA/IRP IDEATE.

1. M. Endrizzi, X-ray phase-contrast imaging. *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. Sect. A* **878**, 88 (2018).
2. Y.S. Kashyap, P.S. Yadav, T. Roy, P.S. Sarkar, M. Shukla, A. Sinha. Laboratory-based X-ray phase-contrast imaging technique for material and medical science applications. *Appl. Radiat. Isot.* **66** (8), 1083 (2008).
3. A. Bravin, P. Coan, P. Suortti. X-ray phase-contrast imaging: from pre-clinical applications towards clinics. *Phys. Med. Biol.* **58** (1), R1 (2012).
4. T. Tuohimaa, M. Otendal, H.M. Hertz. Phase-contrast x-ray imaging with a liquid-metal-jet-anode microfocus source. *Appl. Phys. Lett.* **91** (7), 074104 (2007).
5. A. Snigirev, I. Snigireva, V. Kohn, S. Kuznetsov, I. Schelokov. On the possibilities of x-ray phase contrast microimaging by coherent high-energy synchrotron radiatio. *Rev. Sci. Instrum.* **66** (12), 5486 (1995).
6. K.A. Nugent, T.E. Gureyev, D.F. Cookson, D. Paganin, Z. Barnea. Quantitative phase imaging using hard X-rays. *Phys. Rev. Lett.* **77** (14), 2961 (1996).
7. R.A. Lewis. Medical phase contrast x-ray imaging: current status and future prospects. *Phys. Med. Biol.* **49** (16), 3573 (2004).
8. F. Arfelli, M. Assante, V. Bonvicini, A. Bravin, G. Cantatore, E. Castelli, L.D. Palma, M.D. Michiel, R. Longo, A. Olivo, S. Pani, D. Pontoni, P. Poropat, M. Prest, A. Rashevsky *et al.* Low-dose phase contrast x-ray medical imaging. *Phys. Med. Biol.* **43** (10), 2845 (1998).

9. S. Tao, C. He, X. Hao, C. Kuang, X. Liu. Principles of Different X-ray phase-contrast imaging: A review. *Appl. Sci.* **11** (7), 2971 (2021).
10. A. Momose. X-ray phase imaging reaching clinical uses. *Phys. Medica* **79**, 93 (2020).
11. D. Gabor. A new microscopic principle. *Nature* **161** (4098), 777 (1948).
12. S.W. Wilkins, T.E. Gureyev, D. Gao, A. Pogany, A.W. Stevenson. Phase-contrast imaging using polychromatic hard X-rays. *Nature* **384** (6607), 335 (1996).
13. A. Pogany, D. Gao, S.W. Wilkins. Contrast and resolution in imaging with a microfocus x-ray source. *Rev. Sci. Instrum.* **68** (7), 2774 (1997).
14. A. Peterzol, A. Olivo, L. Rigon, S. Pani, D. Dreossi. The effects of the imaging system on the validity limits of the ray-optical approach to phase contrast imaging. *Med. Phys.* **32** (12), 3617 (2005).
15. A. Burvall, U. Lundstrom, P. Takman, D. Larsson, H. Hertz. Phase retrieval in X-ray phase-contrast imaging suitable for tomography. *Opt. Express* **19**, 10359 (2011).
16. S.C. Mayo, A.W. Stevenson, S.W. Wilkins. In-line phase-contrast x-ray imaging and tomography for materials science. *Materials* **5** (12), 937 (2012).
17. A.J. Carroll, G.A. van Riessen, E. Balaur, I.P. Dolbnya, G.N. Tran, A.G. Peele. An iterative method for near-field Fresnel region polychromatic phase contrast imaging. *J. Opt.* **19** (7), 075003 (2017).
18. D. Paganin. *Coherent X-Ray Optics* (Oxford University Press, 2013) [ISBN 978-0-19-856728-8].
19. D.M. Paganin, D. Pelliccia. Tutorials on X-ray phase contrast imaging: Some fundamentals and some conjectures on future developments, arXiv:1902.00364.
20. D. Paganin, S.C. Mayo, T.E. Gureyev, P.R. Miller, S.W. Wilkins. Simultaneous phase and amplitude extraction from a single defocused image of a homogeneous object. *J. Microsc.* **206** (1), 33 (2002).
21. S.W. Wilkins, T.E. Gureyev, D. Gao, A. Pogany, A.W. Stevenson. Phase-contrast imaging using polychromatic hard X-rays, *Nature* **384** (6607), 335 (1996).
22. D. Paganin, K.A. Nugent. Noninterferometric phase imaging with partially coherent light. *Phys. Rev. Lett.* **80** (12), 2586 (1998).
23. P.C. Diemoz, A. Bravin, P. Coan. Theoretical comparison of three X-ray phase-contrast imaging techniques: Propagation-based imaging, analyzer-based imaging and grating interferometry. *Opt. Express* **20** (3), 2789 (2012).
24. A. Olivo, E. Castelli. X-ray phase contrast imaging: From synchrotrons to conventional sources. *Rivista del Nuovo Cimento* **37**, 467 (2014).
25. O.M. Buhay, A.A. Drozdenko, M.I. Zakharets, I.G. Ignat'ev, A.B. Kramchenkov, V.I. Miroshnichenko, A.G. Ponomarev, V.E. Storizhko. Current status of the IAP NASU accelerator-based analytical facility. *Physics Procedia* **66**, 166 (2015).
26. K. Dupraz *et al.* (The ThomX ICS source). *Physics Open* **5**, 100051 (2020).

Одержано 23.02.24

A. Ovcharenko, O. Lebed

DETECTION OF STRUCTURAL FEATURES OF OBJECTS USING X-RAY PHASE-CONTRAST IMAGING METHOD

Phase contrast is widely used everywhere, where the visualization of the internal structure of objects using X-rays is required. In this paper, a new approach based on the Fresnel–Kirchhoff theory has been proposed to model the X-ray phase-contrast image making use of the free-propagation method. A simple calculation model has been developed that allows the intensity variation on three-dimensional models of macroscopic objects with arbitrary shapes and, accordingly, the observation conditions for obtaining a contrast image in the case of known detector system characteristics and X-ray source intensity to be determined. The possibility of obtaining the clear images of objects with low refractive indices and determining their geometric dimensions and thickness is shown. The approaches described in this paper can be useful for developers of compact devices aimed at detecting structural inhomogeneities inside the studied objects with the help of non-destructive methods.

Keywords: X-ray phase-contrast imaging, wave front, X-ray diffraction, coherence, Fresnel–Kirchhoff diffraction theory.