

文章编号: 0253-2239(2007)11-2091-5

碘化汞材料固有空间分辨的蒙特卡罗模拟研究*

桂建保^{1,2} 郭金川² 杨勤劳² 刘鑫^{1,2} 牛憨笨²

(¹ 华中科技大学光电子科学与工程学院, 武汉 430074)
(² 深圳大学光电工程学院, 深圳 518060)

摘要: 采用蒙特卡罗方法模拟了直接转换 X 射线探测材料 HgI₂ 在医用 X 射线范围的固有空间分辨性能, 模拟基于最新版本的 EGSnrc 模拟软件的用户代码 DOSRZnrc, 模拟了 HgI₂ 材料对无限小锥束入射 X 射线的调制传递函数(MTF)。考虑到荧光光子和散射光子重吸收, 高速电子射程扩展以及离轴 X 射线入射对空间分辨力的影响, 把模拟结果和文献解析方法获得的结果做了对比, 两者符合较好。模拟结果表明, 初级高速电子射程和入射角度对材料固有空间分辨力影响很大, 材料分辨对入射 X 光子能量很敏感, 高能时分辨力特性急剧变差, 而对材料厚度很不敏感。相对于非晶硒(α -Se), HgI₂ 材料具有更好的固有空间分辨力, 尤其在 50 keV 能量以上时。在 $f_{\text{MTF}} = 0.5$ 时, 能量为 20 keV, 50 keV 和 100 keV 的 X 射线入射, HgI₂ 和非晶 Se 固有空间分辨力分别为 390 lp/mm, 170 lp/mm, 52 lp/mm 和 390 lp/mm, 80 lp/mm, 22 lp/mm。

关键词: X 射线光学; 医学 X 射线成像探测器; 蒙特卡罗方法; 碘化汞(HgI₂); 调制传递函数

中图分类号: O434.12 文献标识码: A

Inherent Spatial Resolution of Mercuric Iodide by Monte Carlo Simulation

Gui Jianbao^{1,2} Guo Jinchuan² Yang Qinlao² Liu Xin^{1,2} Niu Hanben²

(¹ Institute of Optoelectronics Science and Engineering, Huazhong University of Science and Technology, Wuhan 430074)
(² Institute of Optoelectronics Engineering, Shenzhen University, Shenzhen 518060)

Abstract: Mercuric iodide (HgI₂), as a semiconductor detecting material directly absorbing X-ray, its inherent spatial resolution has been investigated for the medical diagnosis X-ray energy. The Monte-Carlo simulation is performed with an infinitesimal pencil-beam of X-ray incident on the HgI₂ slab to determine its modulation transfer function(MTF). The simulation is based on the user code DOSRZnrc of the latest version of the EGSnrc, and these effects on HgI₂ spatial resolution by the reabsorptions of fluorescence and scattered photons, expanded ranges of fast photoelectrons and off-axis incident angle, are considered and the simulated results accord with the literature analytic results well. The simulation results show that the ranges of primary fast photoelectrons and off-axis incident angle can affect the spatial resolution of the material greatly and the spatial resolution is sensitive to the incident X-ray energy since the modulation transfer function (MTF) decreases greatly with the increasing of X-ray energy, which however depends hardly on the thickness of the film. Compared with amorphous Se, HgI₂ has a higher inherent spatial resolution, especially for above 50 keV X-ray energy. When $f_{\text{MTF}} = 0.5$, for X-ray photon energy of 20 keV, 50 keV and 100 keV, the inherent spatial resolutions of HgI₂ and amorphous Se are 390 lp/mm, 170 lp/mm, 52 lp/mm and 390 lp/mm, 80 lp/mm, 22 lp/mm, respectively.

Key words: X-ray optics; medical X-ray imaging detector; Monte-Carlo method; mercuric iodide (HgI₂); modulation transfer function

* 国家自然科学基金重点项目(60532090)资助课题。

作者简介: 桂建保(1978—),男,江西南昌人,博士研究生,主要从事光电材料和 X 射线成像技术等方面的研究。

E-mail: gjbstar@163.com; sbgjb@szu.edu.cn

导师简介: 牛憨笨(1940—),男,山西壶关人,中国工程院院士,博士生导师,主要从事变像管超快诊断技术、微光夜视技术和生物医学成像技术等方面的研究。E-mail: hbniu@szu.edu.cn

收稿日期: 2007-03-05; 收到修改稿日期: 2007-05-08

1 引 言

近年来,一种硬 X 射线的成像手段,X 射线相位衬度成像技术越来越受到人们的重视,成为国际上研究的一大热点^[1~3]。相位衬度成像是通过记录 X 射线穿过物体后相位的改变量而成像的一种技术。在吸收衬度很难探测的情况下仍有可能观察到相位的衬度,这为乳腺癌和其它癌症的早期诊断提供了一条途径。然而,这一技术的实现有赖于大面积高分辨的数字化 X 射线图像探测器。一般的胶片成像不能实时成像并且数字化后信息丢失严重,而 X 射线 CCD 相机,成像面积非常有限,所以研制新的大面积高分辨的数字 X 射线探测器尤为重要。

多晶 HgI_2 能够采用物理气相沉积(PVD)和丝网印刷的方法大面积制作,成本低,并且具有高的探测灵敏度和低的暗电流和长期工作的稳定性,近年来被认为是一种最理想的 X 射线探测候选材料^[4~6]。

Que 等^[7]用解析方法较详细地研究过非晶 Se 的固有空间分辨;Sakellaris^[8]用蒙特卡罗方法模拟了 X 射线和非晶 Se 作用产生初级电子的角度,空间和能谱分布。文献[9,10]用蒙特卡罗方法模拟了条带电极空间分辨特性;Kawrakow^[11,12]利用 EGSnrc 代码系统模拟了 X 射线与光电转化材料作用的能量吸收空间分布;文献[13,14]研究了背散射对空间分辨的影响,国内相关研究文献有[16~19]。随着计算机技术的发展,出现了许多专用于高能粒子在物质中传输的蒙特卡罗模拟软件^[20]。

本文利用 EGSnrc 代码系统模拟了 HgI_2 材料的固有空间分辨特性,并和目前使用最为普遍的非晶 Se 材料分辨性能做了对比。通过蒙特卡罗模拟,为探测材料的选择提供了依据,可以知道粒子与物质的详细作用过程,也为探测器的优化设计和性能评价提供了一种简便、有效的途径。

2 模拟方法与模型

采用 EGSnrc 软件的用户代码 DOSRZnrc 进行模拟。该代码库用于模拟高能光子、电子在圆柱体内混合传输过程,统计在每个小的体单元(Voxel)上的吸收剂量,从而获得整个材料的吸收剂量分布(能量分布)。假定一无限小面积的锥束 X 射线入射到探测材料上,根据模拟获得的剂量分布图即可算出点扩展函数(PSF),进行傅立叶变换即可知道材料的调制传递函数(MTF)。点扩展函数计算公式可表示为

$$f_{\text{PSF}}(r) = \frac{D_r(r)}{2\pi r \int D_r(r) dr} = \frac{\int D_z(z, r) dz}{2\pi r \iint D_z(z, r) dz dr}, \quad (1)$$

其中 D_z 表示深度为 z , 半径为 r 的圆环薄片吸收剂量,即每个体单元的吸收剂量, D_r 表示半径为 r 的圆柱壳层(整个材料厚度上)的吸收剂量,除以 $2\pi r$ 是为了规一化到单位面积。

光学传递函数(OTF)是点扩展函数(PSF)的二维傅里叶变换。在这里 $f_{\text{PSF}}(r)$ 为圆对称函数,而一般圆对称函数 $g(r)$ 的傅里叶变换具有形式:

$$G(v) = \Gamma^2[g(r)] = 2\pi \int_0^{\infty} g(r) J_0(2\pi vr) r dr, \quad (2)$$

式中 v 为径向频率, J_0 为第一类零阶贝赛尔函数。所以有

$$f_{\text{OTF}}(v) = \Gamma^2[f_{\text{PSF}}(r)] = 2\pi \int f_{\text{PSF}}(r) J_0(2\pi vr) r dr, \quad (3)$$

f_{OTF} 是正的实函数,故调制传递函数

$$f_{\text{MTF}}(v) = |f_{\text{OTF}}(v)| = f_{\text{OTF}} = 2\pi \int f_{\text{PSF}}(r) J_0(2\pi vr) r dr. \quad (4)$$

模拟假设 X 射线为单能,X 射线与物质作用过程包括光电效应、相干散射和非相干散射。空间分辨弥散考虑三方面因素:1) X 射线斜入射导致作用点横向漂移;2) 次级光子(荧光光子和散射光子)重吸收造成扩展;3) 高速电子射程产生二次电子弥散。而不考虑产生的二次电子在向电极迁移过程中的扩散效应,空间电荷效应和电极表面电荷不均匀引起的静电效应^[7]的次要影响。

3 模拟结果与讨论

考虑 50 keV 的无限小锥束 X 射线光子正入射到 500 μm 厚非晶 Se 上由二次光子重吸收和初始高速光电子射程的扩展引起的调制传递函数 f_{MTF} , 结果如图 1 所示。

图 1(a)是仅由二次光子,包括荧光光子和相干与非相干散射光子重吸收扩展引起的调制传递函数。蒙特卡罗模拟条件为入射光子数 10^5 个,几何体是高度 500 μm ,直径 40 μm 的圆柱,径向方向被分成 1 μm 厚同心壳层,高度方向被分成 10 μm 厚片层(以下关于非晶 Se 的模拟,如无特别说明,条件同此)。X 射线沿轴线入射,入射直径远小于 1 μm ,可视为面积无限小。追踪发射的荧光和散射光子直

到它们离开几何体或能量低于光子作用截止能 (PCUT), 为了排除初级高速电子射程扩展的影响, 这里设置电子作用截止能 $E_{\text{ECUT}} = 50 \text{ keV}$, 使得高速电子传输不发生扩展。光子作用截止能应小于 Se 的 K 吸收限 $E_K = 12.7 \text{ keV}$ 。设 $E_{\text{PCUT}} = 5 \text{ keV}$ 。由图可以看出, 二次光子重吸收的调制传递函数值较高, 这是因为它们和初级作用光子相比, 能量比例很小的缘故。用解析方法计算^[7], 50 keV 光子入射到 $500 \mu\text{m}$ 非晶 Se 上, K_α, K_β 荧光和非相干散射, 相干散射能量比例分别为: $\rho_\alpha = 0.105, \rho_\beta = 0.018, \rho_{\text{inc}} = 0.021, \rho_{\text{co}} = 0.030$ 。模拟结果和解析计算结果存在差异主要是因为蒙特卡罗方法考虑了次级光子的多次散射、重吸收过程, 而解析方法只考虑初级光子作用过程。图 1(b) 是能量为 37 keV 的高速电子入射引起的调制传递函数。因为光电吸收产生的初级高速电子的能量等于入射 X 光子能量与发生光电效应的电子壳层吸收限之差。若光子能量大于 K 吸收限, K 电子壳层发生光电效应的概率绝对占优, 可以认为光电子能量等于入射光子能量与 K 吸收之差, 非晶 Se 的 K 吸收限为 12.7 keV, 故初级高速电子能量为 $50 - 12.7 \approx 37 \text{ keV}$ 。对于非相干散

射, 反冲电子能量

$$E_e = E - E_\theta = E - \frac{E}{1 + E(1 - \cos \theta)/m_e c^2}, \quad (5)$$

在 $\theta = 180^\circ$ 时, $(E_e)_{\text{max}} = 8.3 \text{ keV}$, 对于相干散射, 无电子产生。以占能量比例最大的 K 壳层吸收产生高速电子 37 keV 作为模拟入射电子能量。可以看到次级电子弥散对调制传递函数的影响比次级光子重吸收大得多, 这是因为高速电子的能量所占比例几乎到了 90%, 远大于次级光子的重吸收能量。解析计算结果和蒙特卡罗模拟结果差别偏大的原因可能是^[7], 参量 σ 是根据 Ge 原子推算保守地取 $\sigma = 0.5R_{\text{CSDA}}$, R_{CSDA} 是连续慢化电子射程, 如果取 $\sigma = 0.4R_{\text{CSDA}}$, 则两者差别大为减小。两者存在差别的原因是 EGSnrc 在蒙特卡罗模拟中, 高能电子传输考虑了弹性散射, 非弹性散射和韧致辐射等复杂的作用过程, 而解析结果仅仅简单认为电荷分布服从高斯分布。图 1(c) 是同时考虑次级光子重吸收和初始高速光电子射程扩展引起的调制传递函数, 可以看出模拟和解析方法获得结果两者曲线形状基本一致, 数值上差别也不大。解析方法和蒙特卡罗模拟方法两者结果吻合还是较好的。

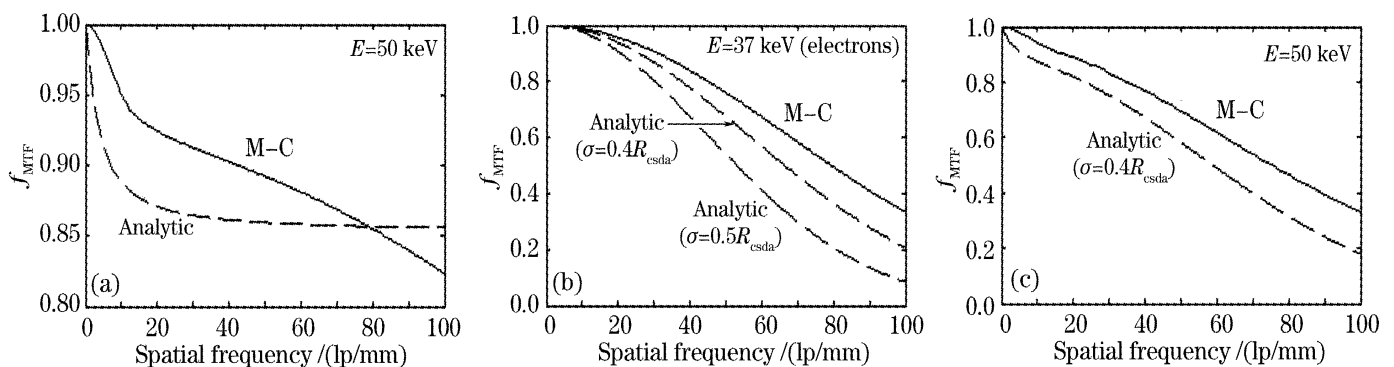


图 1 二次光子重吸收和初始高速光电子射程扩展引起的调制传递函数。(a) 仅考虑二次光子重吸收, (b) 仅考虑初级高速光电子射程, (c) 同时考虑二次光子重吸收和初级高速光电子射程 (实线为蒙特卡罗模拟结果, 虚线为解析公式计算结果)

Fig. 1 Modulation transfer function curves due to the reabsorption of secondary photons and the range of primary photoelectrons. (a) Considering only the reabsorption of secondary photons, (b) considering only the range of primary photoelectrons, (c) considering the two factors simultaneously (solid line, Monte-Carlo simulation results; dashed line, computed results according to analytic formulas)

图 2(a) 是光子能量 E 分别为 20 keV, 50 keV 和 100 keV 的无限小锥束 X 射线光子正入射到 $300 \mu\text{m}$ 厚 HgI_2 上, 由二次光子重吸收和初始高速光电子射程扩展引起的调制传递函数模拟曲线。模拟条件为 $E_{\text{PCUT}} = 5 \text{ keV}, E_{\text{ECUT}} = 5 \text{ keV}$, 光子数 10^5 个 (以下关于 HgI_2 的模拟如无特别说明都同此条件)。可以看出随入射光子能量的增加, 分辨特性急剧变差。这主要是因为随入射 X 射线能量增加, 产

生的初级高速电子能量也增加, 导致高速电子射程增加, 所以扩展加大, 分辨力下降。

图 2(b) 为在不同膜厚时, 能量为 50 keV 的无限小锥束 X 射线光子正入射到 HgI_2 上由二次光子重吸收和初始高速光电子射程引起的调制传递函数模拟曲线。可以看出, 不同于入射光子能量依赖性, HgI_2 的分辨力对膜厚很不敏感, 这主要是因为高速电子射程扩展几乎与膜厚无关的原因。

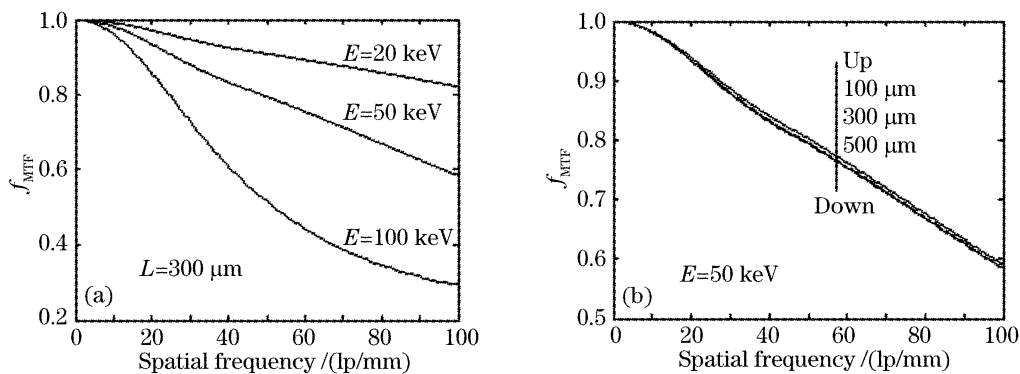


图 2 在不同能量(a),不同厚度(b)时 HgI_2 上由二次光子重吸收和初始高速光电子射程引起的调制传递函数
Fig. 2 Modulation transfer function curves due to the reabsorption of secondary photons and range of primary fast photoelectrons HgI_2 detector for (a) different photons energy, (b) different crystal thickness

实际应用中经常遇到 X 射线不是正入射到探测器上,而是离轴 X 射线入射(斜入射),离轴角决定于 X 射线源,成像物体和探测器的相互位置关系。离轴入射常见的一个应用领域是乳腺成像。因为乳腺成像同时要求高的空间分辨力和高的图像衬比度,这就要求 X 射线能量不能太高(18 ~ 25 keV),并且探测器距离不能太远,导致大的离轴角。一般乳腺成像中,离轴入射角最大可以到 12° ,下面的模拟将以这个角度为上限。图 3 示出了

20 keV 和 50 keV 的 X 射线光子,以不同角度入射到 HgI_2 探测器上的调制传递函数曲线。可以看出角度对调制传递函数的影响很大,而且这种影响不均匀,随着入射角度的加大,开始时影响很大,尤其在能量较高时,一个较小的入射角可以导致调制传递函数减小很大,之后影响程度慢慢变小。

为了对非晶 Se 和 HgI_2 两种材料的固有空间分辨能力做个比较,在图 4 示出了两种材料在三种典型 X 射线能量下调制传递函数曲线。

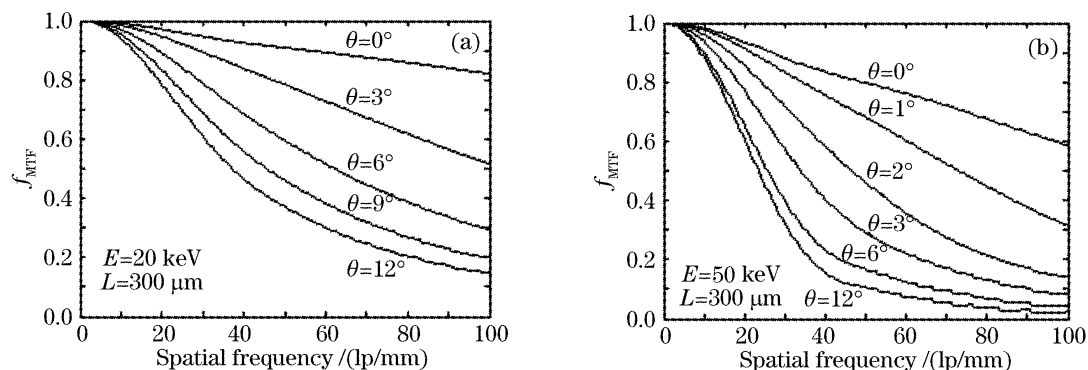


图 3 不同角度入射 HgI_2 上的调制传递函数曲线(考虑了次级光子重吸收和二次电子弥散)。(a) 20 keV, (b) 50 keV
Fig. Modulation transfer function curves due to the reabsorption of secondary photons and secondary electron dispersion on HgI_2 detector for different oblique angles and X-ray photon energy. (a) 20 keV, (b) 50 keV

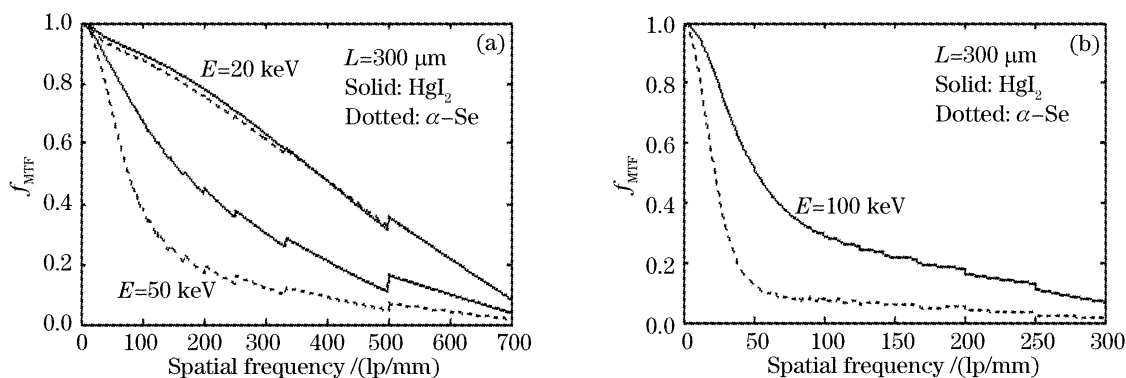


图 4 三种不同能量 X 射线光子,正入射 HgI_2 和非晶 Se 上的调制传递函数曲线。(a) 20 keV, 50 keV, (b) 100 keV
Fig. 5 Modulation transfer function curves for three different energy X-ray perpendicularly incident on HgI_2 and Se detector. (a) 20 keV, 50 keV, (b) 100 keV

可以看出在 20 keV 能量时,两者几乎完全重合,随着入射能量加大,差距越来越大,非晶 Se 分辨性能急剧变差。这是因为 HgI_2 是高原子序数,高密度材料,比非晶 Se 的光子和电子阻止能力都要强很多,所以在较高 X 射线能量入射时,分辨率降低没有非晶 Se 那么剧烈。这也说明了在 20 keV 以上 X 射线领域,寻找 HgI_2 , PbI_2 , CdTe 这些高 Z 序数探测材料的意义。在 $f_{\text{MTF}} = 0.5$ 时,对于能量为 20 keV, 50 keV 和 100 keV 的 X 射线入射, HgI_2 和非晶 Se 固有空间分辨分别为 390 lp/mm, 170 lp/mm, 52 lp/mm 和 390 lp/mm, 80 lp/mm, 22 lp/mm。可以看出,在 50 keV 能量以下时,不管是 HgI_2 还是非晶 Se,材料本身的固有分辨力都远大于目前探测器的分辨力水平(一般都低于 20 lp/mm),在 50 keV 能量以上时,非晶 Se 固有分辨力偏低,对器件分辨力会有所影响, HgI_2 仍有较好的固有分辨力。提高探测器分辨力最重要的是要发展高分辨力的读出技术,材料选择有时更有意义的是考虑探测灵敏度,从这点上说, HgI_2 也是一种优良探测材料。

4 结 论

采用蒙特卡罗方法模拟了直接转换 X 射线探测材料 HgI_2 的固有空间分辨性能,模拟结果表明,初级高速电子射程(导致二次电子弥散)和 X 射线离轴入射(导致初级光子作用点横向漂移)是影响材料固有空间分辨力的主要因素。而二次光子的重吸收由于它所占能量比例很小,对分辨力影响不是很大。材料固有分辨力对入射 X 光子能量很敏感,高能时分辨特性急剧变差,对材料厚度很不敏感。 HgI_2 材料具有比非晶 Se 更高的固有空间分辨性能,尤其在 50 keV 以上 X 射线入射时,更为明显。

参 考 文 献

- 1 T. J. Davis, D. Gao, T. E. Gureyev *et al.*. Phase-contrast imaging of weakly absorbing materials using hard X-rays[J]. *Nature*, 1995, **373**(6515): 595~598
- 2 Atsushi Momose, Tohoru Takeda, Yyji Itai *et al.*. Phase-contrast X-ray computed tomography for observing biological soft tissues[J]. *Nature Med.*, 1996, **2**: 473~475
- 3 Franz Pfeiffer, Timm Weitkamp, Oliver Bunk *et al.*. Phase retrieval and differential phase-contrast imaging with low-brilliance X-ray sources[J]. *Nature Physics*, 2006, **2**: 258~261
- 4 Neal E. Hartsough, Jan S. Iwanczyk, Bradley E. Patt *et al.*. Imaging performance of mercuric iodide polycrystalline films[J]. *IEEE Transactions on Nuclear Science*, 2004, **51**(4): 1812~1816
- 5 Robert A. Street, Marcelo Mulato, Steve E. Ready *et al.*. High resolution X-ray image sensors based on HgI_2 [C]. *Proc. SPIE*, 2000, **4142**: 189~196
- 6 G. Zentai, M. Schieber, L. Partain *et al.*. Large area mercuric

- iodide and lead iodide X-ray detectors for medical and non-destructive industrial imaging[J]. *J. Crystal Growth*, 2005, **275**: 1327~1331
- 7 W. Que, J. A. Rowlands. X-ray imaging using amorphous selenium; Inherent spatial resolution[J]. *Med. Phys.*, 1995, **22**(4): 365~374
- 8 T. Sakellaris, G. Spyrou, G. Tzanakos *et al.*. Monte Carlo simulation of primary electron production inside an a-selenium detector for X-ray mammography; physics[J]. *Phys. Med. Biol.*, 2005, **50**: 3717~3738
- 9 M. Hoheisela, J. Gierschb, P. Bernhardt. Intrinsic spatial resolution of semiconductor X-ray detectors; a simulation study[J]. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A*, 2004, **531**: 75~81
- 10 G. Rossi, M. Sanchez del Rio, P. Fajardo *et al.*. Monte Carlo simulation of the X-ray response of a germanium microstrip detector with energy and position resolution[J]. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A*, 1999, **432**: 130~137
- 11 I. Kawrakow, D. W. O. Rogers. The EGSnrc code system; Monte Carlo simulation of electron and photon transport[R]. *Technical Report PIRS-701*, National Research Council of Canada, Ottawa, 2000
- 12 I. Kawrakow. Accurate condensed history Monte Carlo simulation of electron transport. I; EGSnrc, the new EGS4 version[J]. *Med. Phys.*, 2000, **27**(3): 485~498
- 13 M. Hoheisela, A. Korn, J. Giersch. Influence of backscattering on the spatial resolution of semiconductor X-ray detectors[J]. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A*, 2005, **546**: 252~257
- 14 Alexander Korn, Juergen Gierscha, Martin Hoheisel. Simulation of internal backscatter effects on MTF and SNR of pixelated photon-counting detectors[C]. *Proc. SPIE*, 2005, **5745**: 292~298
- 15 Wei Biao, Zhou Mi, Feng Peng *et al.*. Study on CsI(Tl) scintillating crystal for X-ray high-resolution detection with Monte Carlo method[J]. *Acta Optica Sinica*, 2006, **26**(9): 1429~1434 (in Chinese)
- 魏彪,周密,冯鹏等. X光高分辨探测用 CsI(Tl)晶体的蒙特卡罗模拟研究[J]. *光学学报*, 2006, **26**(9): 1429~1434
- 16 Shao Junming, Lu Hongnian, Cai Hui. A piont spread function model for X-ray imaging[J]. *Acta Optica Sinica*, 2005, **25**(8): 1148~1152 (in Chinese)
- 邵军明,路宏年,蔡慧. X射线成像的一种点扩展函数模型[J]. *光学学报*, 2005, **25**(8): 1148~1152
- 17 Guo Jinchuan, Niu Hanben, Zhou Bin. Influence of conglutination of CsI: Na columns on the resolution properties[J]. *Acta Photonica Sinica*, 2001, **30**(10): 1214~1217(in Chinese)
- 郭金川,牛憨笨,周彬. 晶柱粘连对 CsI: Na 转换屏分辨特性的影响[J]. *光子学报*, 2001, **30**(10): 1214~1217
- 18 Mu Weibing, Chen Panxun. Simulative calculation of the dose enhancement factor of W-SiO₂ and Ta-SiO₂ interface[J]. *High Power Laser and Particle Beams*, 2001, **13**(1): 15~18 (in Chinese)
- 牟维兵,陈盘训. X射线在重金属-二氧化硅界面的剂量增强的模拟计算[J]. *强激光与粒子束*, 2001, **13**(1): 15~18
- 19 Ren Shaojun, Shang Wenbin, Jin Wei *et al.*. Primary study of Monte Carlo simulation on CdZnTe nuclear detector[J]. *High Energy Physics and Nuclear Physics*, 2004, **28**(2): 191~195 (in Chinese)
- 任少军,桑文斌,金玮等. CdZnTe 核探测器的蒙特卡罗模拟的初步研究[J]. *高能物理与核物理*, 2004, **28**(2): 191~195
- 20 B. Kirk, A. Haghigat, R. Jeraj *et al.*. SU-FF-T-378: Radiation transport software for medical physics studies[J]. *Med. Phys.*, 2006, **33**(6): 2132~2133