

X 射线傅里叶关联成像中的康普顿散射噪声研究 (特邀)

李晴宇^{1,2}, 谈志杰¹, 喻虹^{1,3}, 韩申生^{1,3}

1. 中国科学院上海光学精密机械研究所量子光学重点实验室, 上海 201800;
2. 中国科学院大学, 北京 100049;
3. 国科大杭州高等研究院, 浙江杭州 310024)

摘要: 傅里叶变换关联成像 (FGI) 是利用光场的高阶关联特性提取样品傅里叶信息的成像方法, 对光源空间相干性要求较低, 从而为小型化高分辨 X 射线显微提供了新的技术途径。然而在实际应用中往往要求有限光通量以减小样品辐射损伤, 同时 X 射线与样品发生相互作用时康普顿散射的存在也会降低信噪比。针对以上问题, 模拟研究了光通量有限条件下的 X 射线 FGI, 结果表明在探测面光通量 0.1 phs/pixel 条件下仍然能够获得样品的振幅和相位信息, 并且利用 Geant4 蒙特卡洛程序模拟分析了金单质、硅单质和血红蛋白三种样品所产生的康普顿散射噪声对 FGI 成像结果的影响, 结果显示相比于传统的 X 射线衍射成像, 计入康普顿散射噪声后的 FGI 仍具有良好的抗噪性。

关键词: X 射线成像; 傅里叶变换关联成像; 康普顿散射; 蒙特卡洛模拟

中图分类号: O436 **文献标志码:** A **DOI:** 10.3788/IRLA20210734

Research on Compton scattering noise in the X-ray Fourier-transform ghost imaging (*Invited*)

Li Qingyu^{1,2}, Tan Zhijie¹, Yu Hong^{1,3}, Han Shensheng^{1,3}

1. Key Laboratory for Quantum Optics, Shanghai Institute of Optics and Fine Mechanics, Chinese Academy of Sciences, Shanghai 201800, China;
2. University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, China;
3. Hangzhou Institute for Advanced Study, University of Chinese Academy of Sciences, Hangzhou 310024, China)

Abstract: Fourier-transform ghost imaging (FGI) is an imaging method which exploits the high-order correlation characteristics of optical fields to extract the Fourier information of samples. Due to its low requirement for the coherence of the light source, it provides a new technical approach for miniaturizing and high-resolution X-ray microscopy. However, in practice, limited X-ray flux is often required to reduce radiation damage to the sample, and the existence of Compton scattering will reduce the signal-to-noise ratio when X-ray photons interact with the sample. To solve these problems, X-ray FGI with limited flux was studied by simulation. The results showed that when the detection flux was 0.1 PHS/ pixel, the amplitude and phase information of the sample could still be obtained. The Geant4 Monte Carlo simulation program was adopted to analyze the influence of Compton scattering noise generated by the gold, silicon and hemoglobin samples in X-ray FGI. The results indicated that FGI could achieve better Compton scattering noise resistance than traditional X-ray diffraction

收稿日期:2021-10-08; 修订日期:2021-10-27

基金项目:国家自然科学基金(11627811); 国家重点研发计划(2017YFB0503303)

作者简介:李晴宇,女,博士生,研究方向为 X 射线关联成像技术。

导师简介:喻虹,女,研究员,博士生导师,主要从事 X 射线关联成像方面的研究。

imaging.

Key words: X-ray imaging; Fourier-transform ghost imaging; Compton scattering; Monte Carlo simulation

0 引言

X 射线是一种波长短, 穿透性强的电磁波, 由于其独特性质而常被用于成像领域, 成为观察物质结构的有力工具^[1-3]。传统 X 射线成像技术基于光场的一阶关联特性, 通过探测光场的强度分布直接获取样品的相位和振幅信息, 例如 X 射线吸收成像, X 射线相衬成像^[4-6], X 射线相干衍射成像 (Coherent diffraction imaging, CDI)^[7-9] 等。这些方法往往在低通量下获得的图像质量较低, 而长时间暴露在高通量下会对样品尤其是生物组织造成辐射损伤。此外, 传统成像方法通过直接探测获取样品信息, 因而更容易受到噪声的影响。不同于传统成像方法, X 射线关联成像^[10-12] 基于光场的高阶关联特性和 X 射线的特有性质获取样品结构的特征信息。其中, X 射线傅里叶变换关联成像 (Fourier-transform ghost imaging, FGI) 从辐射场散斑分布中提取样品的傅里叶衍射谱, 其极限分辨率仅受限于 X 射线的波长, 由于对 X 射线源的空间相干性要求较低, 从而为小型化高分辨 X 射线显微提供了新的技术途径^[13]。2016 年, Yu 等完成了 X 射线傅里叶变换关联成像实验演示^[10]。之后该小组从光源非单色性^[14]、非局域编码^[15] 等角度进一步优化了 X 射线傅里叶关联成像系统并取得了显著成果, 展示了 X 射线 FGI 在高分辨显微成像中的应用潜力。考虑到传统 X 射线显微成像中存在低通量下成像效果较差、易受噪声影响等问题, 因而有必要建立合理有效的成像模型、进行不同光通量下多种样品的 FGI 过程模拟分析, 从而确定 FGI 系统的成像性能。

实际上, X 射线成像过程中包含随机噪声、椒盐噪声等多种噪声, 外界噪声的存在引起了图像质量不同程度的降低。除外界噪声的影响外, 成像过程中 X 射线与样品的相互作用也是噪声的来源之一。X 射线与物质的相互作用主要包括吸收、相干散射和非相干散射等。其中相干散射形成 X 射线成像信号, 而非相干散射主要为康普顿散射^[16], 是图像中低能背景的主要来源。在 X 射线成像中, 康普顿散射是一种由样品引起的散射噪声, 尤其在含有轻质元素样品的

实验系统中, 康普顿散射带来的影响更加显著。已有研究表明, 对于外界噪声, 关联成像能够展现出优良的抗噪性^[17]。然而对于样品引起的康普顿散射噪声, X 射线 FGI 是否仍然具备优越的抗噪性的问题尚未明确。针对该问题, 文中对于康普顿散射噪声对 X 射线 FGI 的影响进行分析。GEometry ANd Tracking 4 (Geant4)^[18] 是由欧洲核子中心基于 C++ 开发的蒙特卡罗模拟平台, 能够模拟辐射粒子与物质相互作用的多种物理过程, 利用 Geant4 可以获取 FGI 成像过程中的康普顿散射噪声分布, 从而对不同样品 FGI 过程中的康普顿噪声影响进行分析。

文中基于傅里叶关联成像基本原理, 模拟波长 1 nm 和 0.1 nm 两种能量的 X 射线在 0.1 phs/pixel、1 phs/pixel 及 10 phs/pixel 三种光通量下的 X 射线傅里叶关联成像, 采用结构相似度 (Structural Similarity, SSIM) 作为评价指标衡量不同光通量下的仿真结果, 通过比较 FGI 和 CDI 的结果, 阐明 FGI 在弱光条件下能够获得优于 CDI 的成像质量。并且, 利用 Geant4 程序模拟计算得到了金单质、硅单质和血红蛋白三种样品的康普顿散射噪声分布, 对计入康普顿散射噪声后的 FGI 成像结果进行分析, 研究了不同光通量下 FGI 系统的抗噪性能。

1 理论方法

1.1 傅里叶变换关联成像基本原理

理论上关联成像可以利用空间非相干光进行成像, 然而在实际应用中, 小型 X 射线源的相干时间非常短, 甚至小于皮秒量级, 远小于现有 X 射线探测器的时间分辨率。为了能够记录下辐射场的涨落, 通常采用赝热光源^[19-20], 即采用散射屏, 通过记录受到调制形成的 X 射线散斑场来实现 X 射线关联成像^[12,21-22]。

X 射线傅里叶变换关联成像通过计算参考光路和探测光路光强涨落之间的强度关联来得到样品的傅里叶变换衍射谱, 其基本原理如图 1 所示。空间相干光经过散射屏后得到赝热光场, 再通过分束器分为两束, 一束光传播距离 d_1 后穿过样品, 由样品后面距

离 d_2 处的单像素探测器 D_i 接收, 这一路称为探测光路; 另一路光传播距离 d 后其光强直接被面阵探测器 D_r 接收, 这一路称为参考光路。

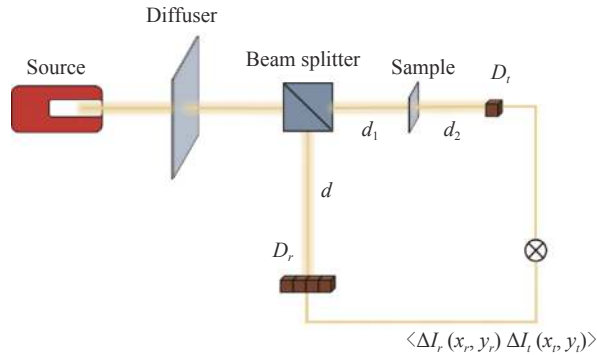


图 1 傅里叶变换关联成像原理图

Fig.1 Schematic of Fourier-transform ghost imaging (FGI)

参考光路和探测光路在探测平面的空间光强分布分别为 $I_r(x_r, y_r)$ 和 $I_i(x_i, y_i)$, 对两路光进行关联运算, 当满足 $d = d_1 + d_2$ 时, 有

$$\langle \Delta I_r(x_r, y_r) \Delta I_i(x_i, y_i) \rangle \propto \left| f \left[\frac{-2\pi(x_r - x_i)}{\lambda d_2}, \frac{-2\pi(y_r - y_i)}{\lambda d_2} \right] \right|^2 \quad (1)$$

式中: $\langle \rangle$ 表示系综平均; λ 为波长; $f(\cdot)$ 为样品透过率函数的傅里叶变换。从上式中可以看出, 通过关联计算后能够得到样品透过率函数的傅里叶变换的模方, 从而可以获取样品结构信息。

1.2 Geant4 仿真模拟方法

X 射线与样品间的相互作用主要包括吸收、康普顿散射及瑞利散射等物理过程。结合 Geant4 程序特点, 对以上物理过程的模拟流程如图 2 所示, 包括输入参数、运行处理和数据读取三个部分。输入参数模块主要分为: (1) 设定 X 射线源属性, 包括光子能量、数目及出射方向等, 并对光子出射的位置坐标进行随机抽样; (2) 按照 FGI 实验系统设计样品参数, 主要为几何结构与材料的设定; (3) 调用 Geant4 中吸收、康普顿散射及瑞利散射等物理过程。在完成参数输入后, 由运行处理模块对光子行为进行分批处理, 主要包括运行、事件、轨迹、步骤。一次运行可包含多个事件, 每个事件由若干粒子轨迹组成, 粒子轨迹又分为多个步骤, 每个步骤代表一次物理作用过程, 通过这样层层嵌套的结构实现对所有光子行为的分批处理。最后由数据读取模块对光子空间坐标、能量、物

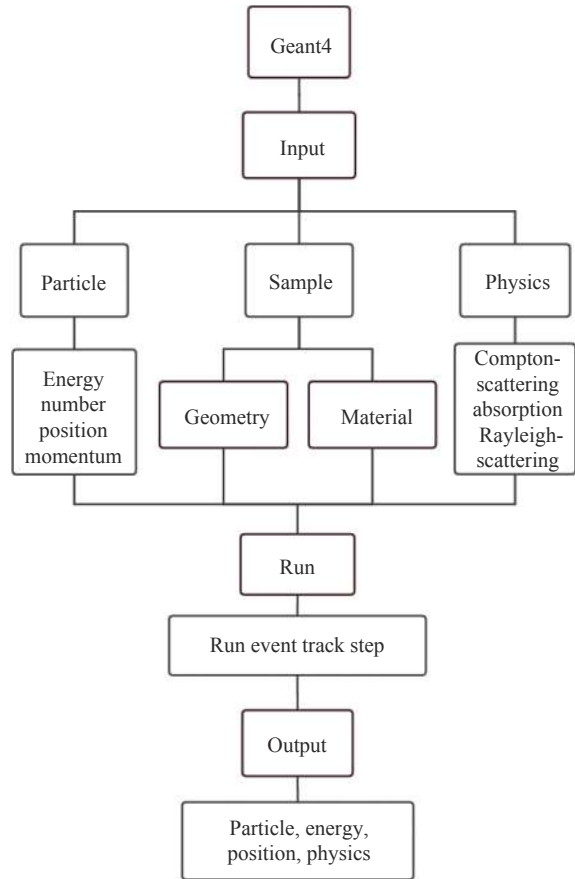


图 2 Geant4 仿真模拟流程图

Fig.2 Flow chart of the Geant4 simulation

理过程等信息进行输出^[23-25]。

Geant4 对物理过程的模拟是基于相互作用截面公式和蒙特卡洛抽样方法来实现的。在 X 射线被样品吸收的过程中, 吸收截面可以表示为^[26]:

$$\sigma(Z, E_\gamma) = \frac{a(Z, E_\gamma)}{E_\gamma} + \frac{b(Z, E_\gamma)}{E_\gamma^2} + \frac{c(Z, E_\gamma)}{E_\gamma^3} + \frac{d(Z, E_\gamma)}{E_\gamma^4} \quad (2)$$

式中: Z 为原子序数; E_γ 为光子能量; a 、 b 、 c 和 d 为最小二乘法的拟合系数。

在瑞利散射过程中, 光子的能量大小不会改变, 仅在传播方向上发生改变, 原子的瑞利散射截面可以近似的表示为^[27]:

$$\sigma(E) = \pi r_e^2 \int_{-1}^1 \frac{1 + \cos^2\theta}{2} [F(q, Z)]^2 d\cos\theta \quad (3)$$

式中: $F(q, Z)$ 为原子形状因子, $q = 2 \frac{E}{c} \sin\left(\frac{\theta}{2}\right)$ 。利用蒙特卡洛方法进行抽样后即可获得瑞利散射角度信息。

在康普顿散射过程中, 光子能量有所减小, 同时传播方向也发生改变, 仿真采用数据点拟合得到散射

截面经验公式^[28]:

$$\sigma(Z, E_\gamma) = \left[P_1(Z) \frac{\log(1 + 2X)}{X} + \frac{P_2(Z) + P_3(Z)X + P_4(Z)X^2}{1 + aX + bX^2 + cX^3} \right] \quad (4)$$

式中: m 为电子质量; $X = E_\gamma/mc^2$; $P_i(Z) = Z(d_i + e_iZ + f_iZ^2)$, 参数 a 、 b 、 c 、 d 、 e 和 f 在计算每个原子的散射截面时由 Geant4 调用其具体数值。同样, 利用蒙特卡洛方法进行抽样后可以得到康普顿散射光子的能量及散射角信息。

2 仿真结果

2.1 不同光通量 X 射线 FGI 仿真结果

为了研究在不同光通量下 X 射线 FGI 的成像效果, 首先考虑在理想环境下对 X 射线 FGI 进行模拟。仿真实验的成像光路如图 1 所示, 散射屏与样品之间的距离为 10 cm, 样品与探测器之间的距离为 30 cm。

对 X 射线波长为 1 nm 和 0.1 nm 两种情况分别进行模拟。采用双缝样品, 对于波长 0.1 nm 的 X 射线, 设置样品缝宽 10 nm, 双缝间距 25 nm; 对于波长 1 nm 的 X 射线, 设置样品缝宽 100 nm, 双缝间距 250 nm。模拟中, 探测器尺寸为 5 mm × 5 mm, 面阵大小为 256 × 256, 设置探测面光通量分别 0.1 phs/pixel、1 phs/pixel 和 10 phs/pixel 进行成像模拟, 并根据公式 (1) 对得到的探测面光子数分布进行关联运算。

仿真结果如图 3 所示, 图 3(a) 和 (b) 分别是波长为 1 nm 与 0.1 nm 的 X 射线 FGI 结果。从图中可以看出, 随着光子数的降低, 归一化二阶关联函数峰值不断降低。探测面光通量为 10 phs/pixel 时, 峰值在 2 附近, 与理论结果一致; 当光通量降低为 1 phs/pixel 时, 峰值为 1.6 附近; 而当探测面光通量进一步降低到 0.1 phs/pixel, 峰值约为 1.1。强度关联成像中的归一

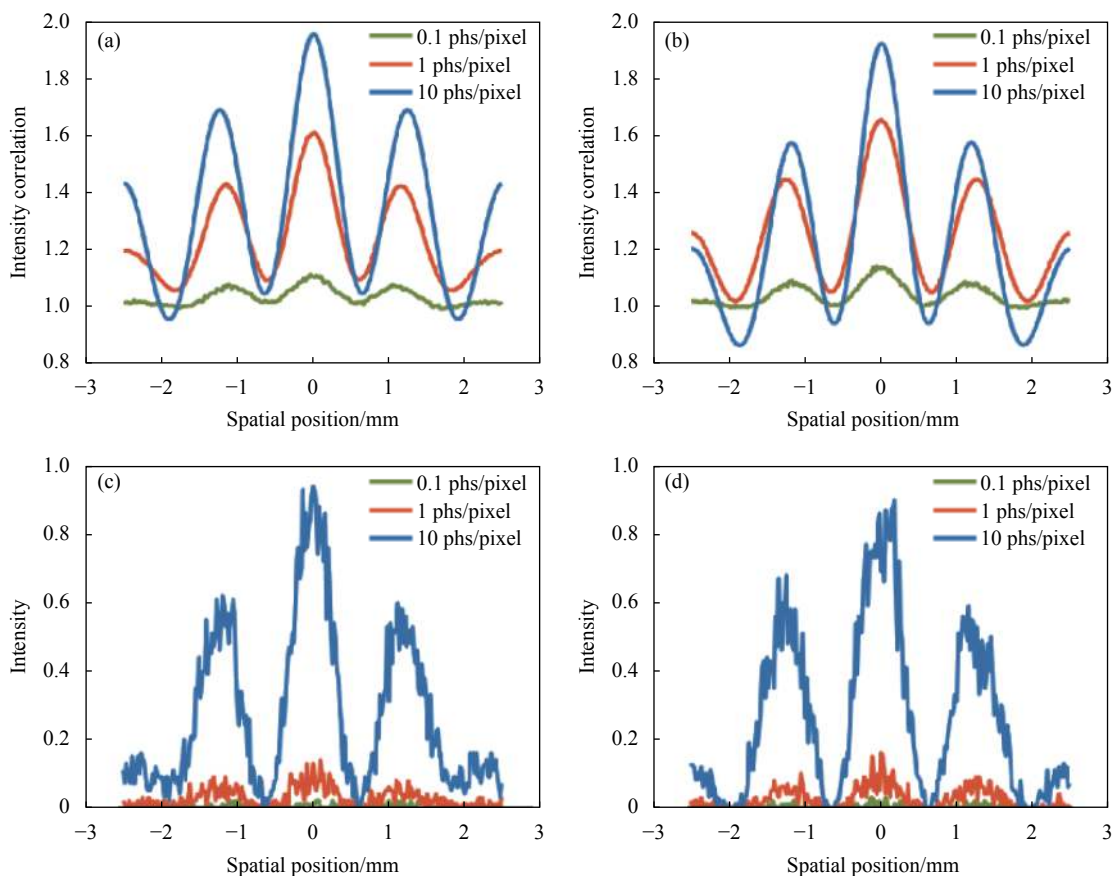


图 3 不同光通量下 FGI 与 CDI 仿真结果。(a) 波长 1 nm X 射线 FGI 结果; (b) 波长 0.1 nm X 射线 FGI 结果; (c) 波长 1 nm X 射线 CDI 结果; (d) 波长 0.1 nm X 射线 CDI 结果

Fig.3 FGI and CDI simulation results at different X-ray flux. (a) X-ray FGI results with 1 nm wavelength; (b) X-ray FGI results with 0.1 nm wavelength; (c) X-ray CDI results with 1 nm wavelength; (d) X-ray CDI results with 0.1 nm wavelength

化二阶关联函数的峰值表示图像的可见度^[29],结果表明随着光通量的减少, X 射线傅里叶关联成像所得到的样品傅里叶衍射谱可见度逐渐降低。结构相似度(SSIM) 可用来衡量关联计算结果与样品衍射谱理论值的差异,其定义如下:

$$SSIM(X, Y) = \frac{(2\mu_X\mu_Y + c_1)(2\sigma_{XY} + c_2)}{(\mu_X^2 + \mu_Y^2 + c_1)(\sigma_X^2 + \sigma_Y^2 + c_2)} \quad (5)$$

式中: X 和 Y 为给定的两幅图像; μ_X 和 μ_Y 分别为两幅图像的平均值; σ_X 和 σ_Y 为对应图像的标准差; σ_{XY} 是两幅图的协方差, $c_1 = (0.01L)^2$; $c_2 = (0.03L)^2$; L 为像素值动态范围。关联计算结果和样品衍射谱理论值的结构相似度如表 1 所示,可见随着光通量的增加, SSIM 数值明显增加,说明仿真数据逐步接近衍射谱理论值,成像质量逐步提升。

表 1 X 射线 FGI 和 CDI 的 SSIM 对比

Tab.1 SSIM comparison of X-ray FGI and CDI

Imaging methods	1 nm FGI			1 nm CDI		
X-ray flux/phs·pixel ⁻¹	0.1	1	10	0.1	1	10
SSIM	0.14	0.53	0.64	0.04	0.15	0.41
Imaging methods	0.1 nm FGI			0.1 nm CDI		
X-ray flux/phs·pixel ⁻¹	0.1	1	10	0.1	1	10
SSIM	0.32	0.67	0.68	0.12	0.28	0.65

作为比较,对应光通量下的相干衍射成像仿真结果如图 3(c) 和 (d) 所示。相比于 FGI 的结果而言,其图像不够平滑。这是由于 CDI 直接探测并记录衍射谱的光子数分布,在弱光条件下受到散粒噪声的影响较大,因而导致 CDI 仿真结果不够平滑。同样地, CDI 得到的傅里叶衍射谱的质量随着光子数的减少而逐渐降低,在 10 phs/pixel 以及 1 phs/pixel 的光通量下,可以从图 3 中看出衍射峰的分布,如图中的蓝线和红线所示;但当光通量进一步降低至 0.1 phs/pixel,此时的衍射峰已经难以分辨。计算相干衍射成像仿真结果与衍射谱理论值的结构相似度 SSIM,结果如表 1 所示。对比可知,在弱光条件下 FGI 能够获得优于 CDI 的成像质量。

2.2 Geant4 获取康普顿散射分布

第 2.1 节中理想化的成像模拟忽略了噪声对成像结果的影响,在实际 X 射线成像系统中, X 射线与样品之间发生的康普顿散射会引起低能背底,从而降低图像质量。下面利用 Geant4 仿真平台模拟 X 射线与样品间的相互作用以获取康普顿散射噪声分布。

在 Geant4 中,仿真参数设置主要包括对光源,物理过程与几何模型的设定。光源设置为波长 0.1 nm 和 1 nm 的 X 射线。物理过程即 X 射线与样品之间的相互作用过程,包括吸收、瑞利散射和康普顿散射等。几何模型主要为散射屏和双缝样品。散射屏结

构为多孔金膜,小孔排列方式为随机分布。样品为双缝结构,参数设置与 2.1 节相同,样品的填充材料分别选择金单质、硅单质及血红蛋白,其中金通常用来制作标准测试样品,而硅是主要的半导体材料,蛋白质是最常见的生物成分,包含了大量的 C、H、O 等轻质元素。康普顿散射主要发生在 X 射线与原子核外电子的能量交换中,轻质元素原子核束缚能力较低,理论上更容易发生康普顿散射,即原子序数越小,康普顿散射概率越大^[30]。基于上述原因,文中选择金单质、硅单质及血红蛋白三种代表性样品来产生 X 射线 FGI 实验系统中不同信噪比的散射噪声。

基于以上的参数设置对 X 射线与样品的相互作用过程进行模拟,并记录下每个光子的位置和能量信息,多光子数据叠加后可形成康普顿散射光分布,即康普顿散射噪声分布。图 4(a)~(c) 依次为波长 1 nm 的 X 射线系统中,样品金单质、硅单质和血红蛋白与 X 射线发生相互作用后得到的探测面散射噪声分布。由图可知,康普顿散射光分布整体呈现辐射状,中间密集,向外逐渐衰减。对比不同样品的散射光分布可以看到,血红蛋白和硅单质与 X 射线相互作用产生的康普顿散射光子数明显多于金单质,即同一射线源下血红蛋白和硅单质产生的散射噪声影响更大。图 4(d)~(f) 是波长 0.1 nm 的 X 射线系统中,样品金、硅、血红蛋白的探测面散射噪声分布。对比两种

不同能量 X 射线的散射噪声分布可知, 能量高的 X 射线系统中散射光子数明显多于能量低的 X 射线系统, 即硬 X 射线 FGI 中的散射噪声大于软 X 射线。

X 射线 FGI 系统中的信号光子由相干散射产生, 非相干散射产生散射噪声光子, 因而信噪比可以表示为相干散射光子数与非相干散射光子数的比值, 即 $SNR = \log(N_c/N_i)$, 其中相干散射主要指瑞利散射, 非

相干散射主要指康普顿散射。图 5(a)~(c) 依次为样品金单质、硅单质及血红蛋白发生相干散射光子数 N_c 、非相干散射光子数 N_i 及信噪比随光子能量变化的曲线图。从图中可以看出, 随着 X 射线能量的增加, 相干散射光子数下降, 而非相干散射光子数, 即康普顿散射光子数显著上升, 信噪比迅速降低, 尤其是生物样品信噪比下降到仅 0.13 左右。结果表明随着 X 射

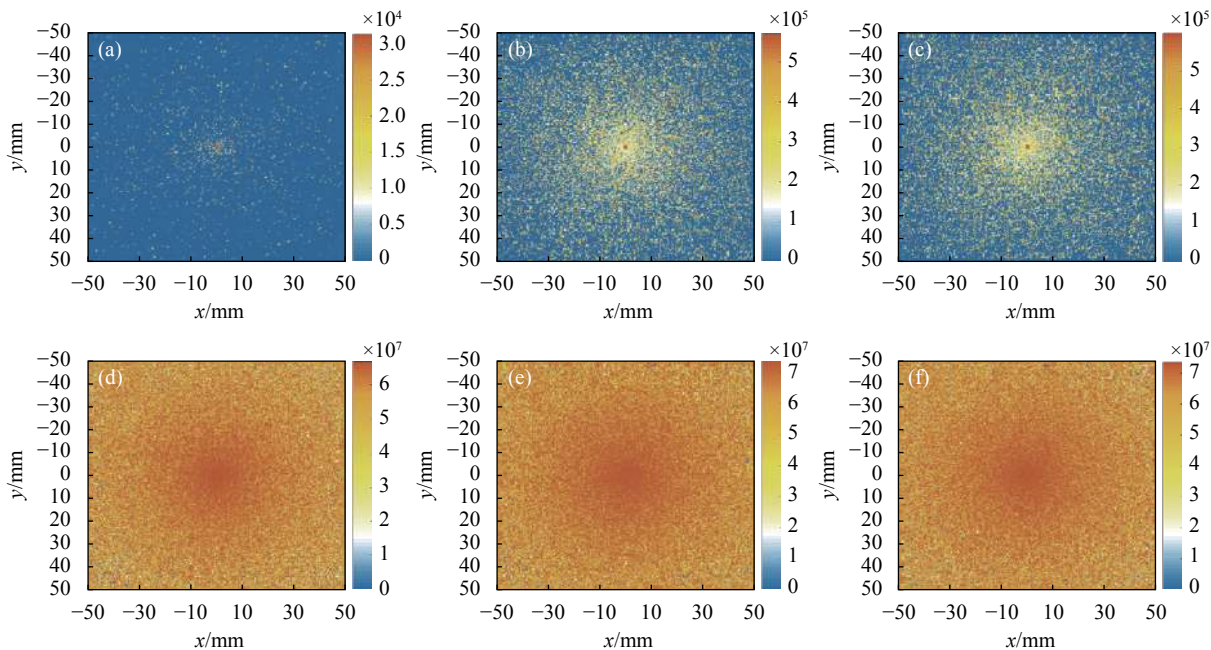


图 4 不同光子能量下的样品康普顿散射光分布。(a)~(c) 为金、硅、血红蛋白在波长 1 nm 的 X 射线系统中的散射光分布; (d)~(f) 为金、硅、血红蛋白在波长 0.1 nm 的 X 射线系统中的散射光分布

Fig.4 Compton scattering distribution of samples at different photon energies. (a)-(c) Scattering distribution of Au, Si, Hemoglobin in the X-ray system with 1 nm wavelength, respectively; (d)-(f) Scattering distribution of Au, Si, Hemoglobin in the X-ray system with 0.1 nm wavelength, respectively

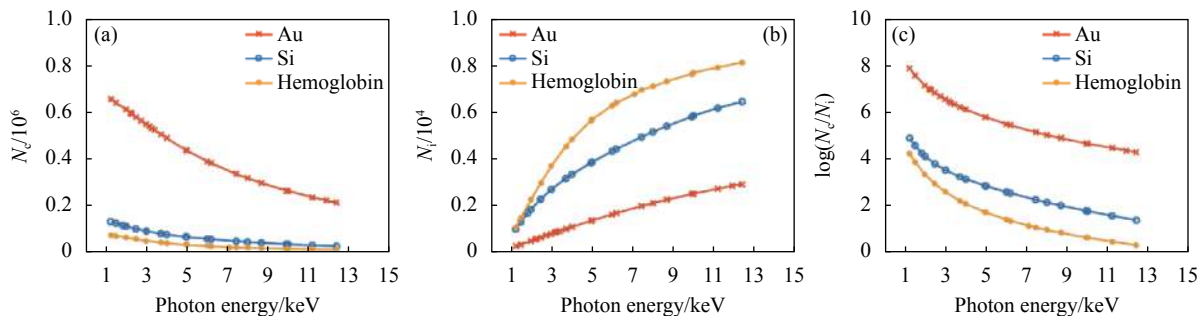


图 5 不同光子能量下三种样品的散射结果。(a)、(b) 金、硅、血红蛋白样品的相干散射光子数及康普顿散射光子数随光子能量变化曲线; (c) 相干散射和康普顿散射光子数的比值随光子能量变化曲线

Fig.5 Scattering results of three samples at different photon energies. (a), (b) Curves of the coherent scattering photon number and the Compton scattering photon number of Au, Si, Hemoglobin samples varying with the photon energy; (c) Curves of the ratio of the coherent scattering photon number to the Compton scattering photon number varying with the photon energy

线能量的增加,康普顿散射噪声对成像系统的影响会逐渐增加,同时血红蛋白等生物样品相比于金和硅更容易发生康普顿散射,对成像结果的影响更加显著。

2.3 计入康普顿散射后的 FGI 结果

基于第 2.2 节的仿真分析可知,硬 X 射线 FGI 系统相比软 X 射线包含更多的散射噪声,而生物样品相对其他金属或半导体样品更容易引起康普顿散射噪声。考虑康普顿散射的作用,在第 2.1 节的基础上加入康普顿散射噪声,通过对含有噪声的散斑场进行强度关联运算,分析康普顿散射噪声对成像的影响,结果如图 6 和图 7 所示。

图 6 为波长 0.1 nm 的 X 射线 FGI 仿真结果。图 6 (a)、(b) 和 (c) 依次是探测面平均光通量为 0.1 phs/pixel、1 phs/pixel 及 10 phs/pixel 时的关联计算结果,可以看出康普顿散射噪声导致了图像质量的下降,主要体现在归一化关联函数峰值的降低。从图中可以看出,生物样品的散射噪声导致归一化二阶关联函数峰值下降了大约 37.5%,硅单质引起的峰值下降约 18.75%,而金单质的散射噪声较弱,对成像几乎没有影响。在傅里叶关联成像中,归一化二阶关联函数的峰值反映了样品衍射谱的可见度,因此康普顿散射

噪声主要引起衍射谱可见度发生不同程度的降低,从而降低图像质量。计算对应的结构相似度 SSIM,结果如表 2 所示。计入康普顿散射噪声后,结构相似度 SSIM 整体数值低于不计噪声的 FGI 模拟结果;在考虑到不同样品散射噪声影响后,低通量仍然是引起成像质量下降的主要因素,而散射噪声进一步降低了衍射谱的可见度。

作为对比,对相应光通量下的 CDI 成像进行模拟,图 6(d)、(e) 和 (f) 依次为波长 0.1 nm 的 X 射线在探测面平均光通量为 0.1 phs/pixel、1 phs/pixel 及 10 phs/pixel 时的 CDI 成像结果。结果表明在低通量下 CDI 更容易受到噪声的影响,当探测面光通量为 0.1 phs/pixel 时,衍射峰的结构已经难以辨认。计算 CDI 结果相应的结构相似度 SSIM,由表 2 数据可知,在低通量并计入散射噪声影响时,FGI 的成像效果更好。

在相同条件下模拟波长 1 nm 的 X 射线的 FGI 和 CDI 成像过程,结果如图 7 所示。对比波长 1 nm 和 0.1 nm 的 X 射线模拟结果可知,软 X 射线受到样品散射噪声的影响较小,图像对比度较高,这一结果与 2.2 节得出的结论是一致的。将波长 1 nm 的 X 射线

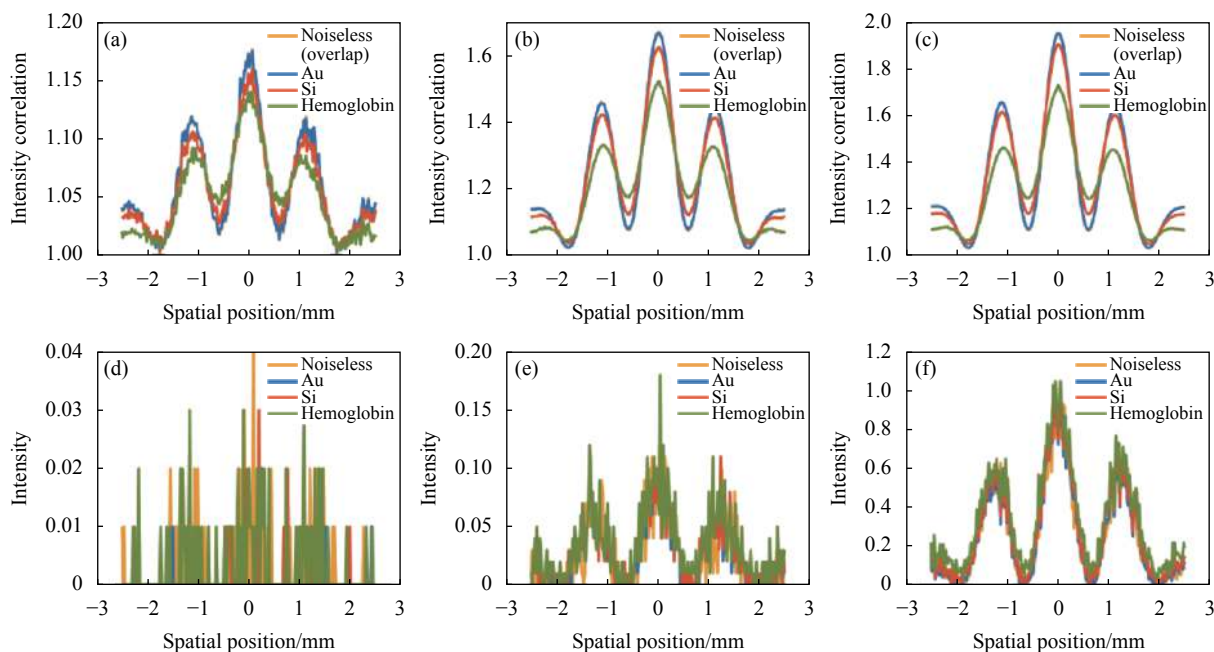


图 6 波长 0.1 nm 的 X 射线 FGI 与 CDI 模拟结果。(a)、(b)、(c) X 射线 FGI 结果,探测面光通量依次为 0.1, 1, 10 phs/pixel; (d)、(e)、(f) X 射线 CDI 结果,探测面光通量依次为 0.1, 1, 10 phs/pixel

Fig.6 X-ray FGI and CDI results with 0.1 nm wavelength at different flux. (a), (b), (c) X-ray FGI results with detecting flux of 0.1, 1, 10 phs/pixel, respectively; (d), (e), (f) X-ray CDI results with detecting flux of 0.1, 1, 10 phs/pixel, respectively

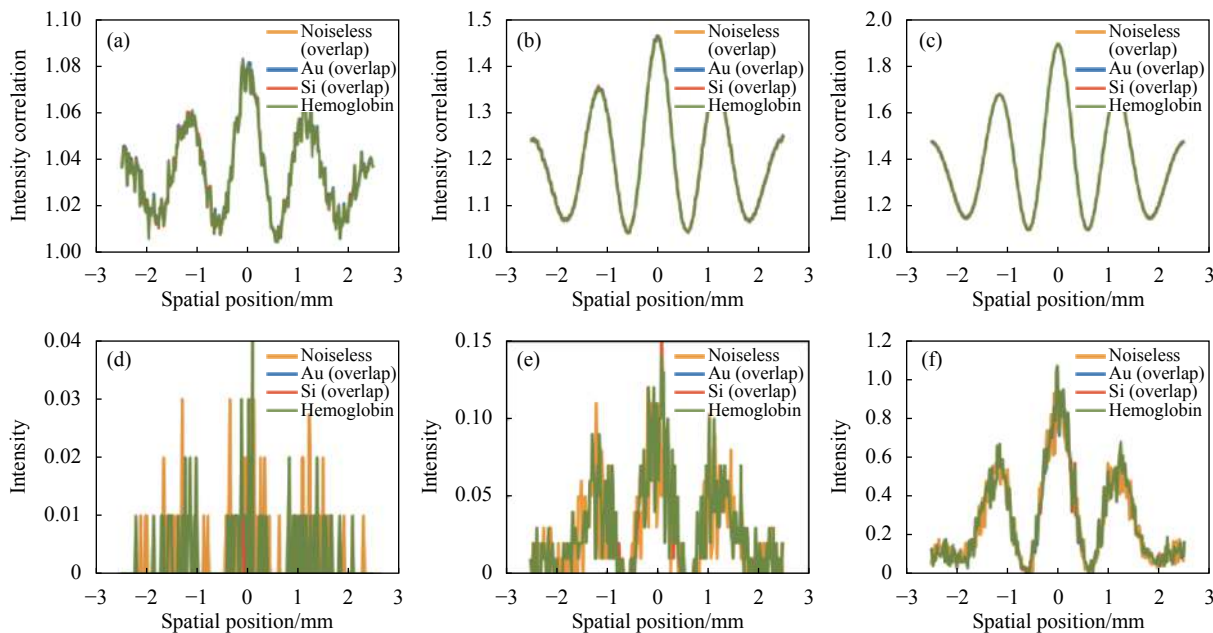


图 7 波长 1 nm 的 X 射线 FGI 与 CDI 模拟结果。(a)、(b)、(c) 为 X 射线 FGI 结果, 探测面光通量依次为 0.1, 1, 10 phs/pixel; (d)、(e)、(f) 为 X 射线 CDI 结果, 探测面光通量依次为 0.1, 1, 10 phs/pixel

Fig.7 X-ray FGI and CDI results with 1 nm wavelength at different flux. (a), (b), (c) X-ray FGI results with detecting flux of 0.1, 1, 10 phs/pixel, respectively; (d), (e), (f) X-ray CDI results with detecting flux of 0.1, 1, 10 phs/pixel, respectively

表 2 计入康普顿散射噪声时 X 射线 FGI 和 CDI 的 SSIM 对比

Tab.2 SSIM comparison of X-ray FGI and CDI with Compton scattering noise

Imaging methods		0.1 nm FGI			0.1 nm CDI		
SSIM	X-ray flux/phs·pixel ⁻¹	0.1	1	10	0.1	1	10
	Noiseless	0.32	0.67	0.68	0.12	0.29	0.65
	Au	0.32	0.67	0.68	0.12	0.29	0.65
	Si	0.28	0.64	0.67	0.11	0.27	0.50
	Hemoglobin	0.23	0.53	0.61	0.10	0.20	0.32

FGI 和 CDI 的成像结果进行对比, 仍然能够得到在低通量及散射噪声的影响下 FGI 成像质量更好的结论。

以上内容模拟了不同光通量下模拟波长 1 nm 和 0.1 nm 的 X 射线 FGI 系统, 并与 CDI 对应结果进行了比较。从结果中可以看到, 在 0.1 phs/pixel 的低通量条件下, 计入康普顿散射噪声的 FGI 仍能展现出较为清晰的衍射峰结构, 体现了 FGI 优良的抗噪性能。

3 结论

文中基于已有的 FGI 成像理论, 模拟研究了光通量对 X 射线 FGI 的影响, 结果表明在探测面光通量 0.1 phs/pixel 条件下 X 射线 FGI 仍然能够获得样品衍射谱。在此基础上, 利用 Geant4 蒙特卡洛程序模拟

了金单质、硅单质和血红蛋白三种样品所产生的康普顿散射噪声, 并分析了其对 X 射线 FGI 结果的影响。模拟结果显示在低通量条件下康普顿散射噪声会降低样品衍射谱的可见度, 但 X 射线 FGI 仍然能够获得优于传统 X 射线衍射成像技术的图像质量。这对于利用小型 X 射线源实现纳米分辨 X 射线显微成像应用具有重要意义, 未来有望应用于半导体器件、高性能材料、生物细胞低剂量显微分析等多领域中。

参考文献:

[1] Shi Y G. A glimpse of structural biology through x-ray crystallography [J]. *Cell*, 2014, 159(5): 995-1014.
 [2] Kosynkin D V, Higginbotham A L, Simitskii A. Longitudinal

- unzipping of carbon nanotubesto form graphene nanoribbons [J]. *Nature*, 2009, 458(7240): 872-876.
- [3] Fleury B, Cortes-Huerto R, Taché O, et al. Gold nanoparticle internal structure and symmetry probed by unified small-angle x-ray scattering and x-ray diffraction coupled with molecular dynamics analysis [J]. *Nano Letters*, 2015, 15(9): 6088-6094.
- [4] Davis T J, Gureyev T E, Stevenson A W. Phase-contrast imaging of weakly absorbing materials using hard X-rays [J]. *Nature*, 1995, 373(6515): 595-598.
- [5] Zamir A, Diemoz P C, Vittoria F A, et al. Edge illumination x-ray phase tomography of multi-material samples using a single-image phase retrieval algorithm [J]. *Optics Express*, 2017, 25(10): 11984.
- [6] Endrizzi M. X-ray phase-contrast imaging [J]. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A*, 2018, 878: 88-98.
- [7] Miao J W, Charalambous P, Kirz J, et al. Extending the methodology of x-ray crystallography to allow imaging of micrometre-sized non-crystalline specimens [J]. *Nature*, 1999, 400(6742): 342-344.
- [8] Thibault P, Dierolf M, Menzel A, et al. High-resolution scanning X-ray diffraction microscopy [J]. *Science*, 2008, 321(5887): 379-382.
- [9] Sidorenko P, Cohen O, Idorenko P A S, et al. Single-shot ptychography [J]. *Optica*, 2016, 3(1): 9-14.
- [10] Yu H, Lu R H, Han S S, et al. Fourier-transform ghost imaging with hard X rays [J]. *Physical Review Letters*, 2016, 117(11): 113901.
- [11] Pelliccia D, Rack A, Scheel M, et al. Experimental x-ray ghost imaging [J]. *Physical Review Letters*, 2016, 117(11): 113902.
- [12] Zhang A X, He Y H, Wu L A, et al. Tabletop X-ray ghost imaging with ultra-low radiation [J]. *Optica*, 2018, 5(4): 374-377.
- [13] Cheng J, Han S S. Incoherent coincidence imaging and its applicability in X-ray diffraction [J]. *Physical Review Letters*, 2004, 92(9): 093903.
- [14] Tan Z J, Yu H, Yang S C, et al. Fourier-transform ghost imaging with polychromatic light [J]. *Journal of Modern Optics*, 2020, 67(14): 1247-1253.
- [15] Tan Z J, Yu H, Lu R H, et al. Non-locally coded Fourier-transform ghost imaging [J]. *Optics Express*, 2019, 27(3): 2937-2948.
- [16] Wu Z H, Zhao G Q, Lu F Q. Experimental Methods for Nuclear Physics[M]. Beijing: Atomic Energy Press, 1996. (in Chinese)
- [17] Meyers R E, Deacon K S, Shih Y. Turbulence-free ghost imaging [J]. *Applied Physics Letters*, 2011, 98(11): 041801.
- [18] Agostinelli S, Allison J, Amako K. GEANT4: A simulation toolkit [J]. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. A*, 2003, 506: 250-303.
- [19] Tian N, Guo Q, Wang A, et al. Fluorescence ghost imaging with pseudothermal light [J]. *Optics Letters*, 2011, 36(16): 3302-3304.
- [20] Chen M. Ghost imaging based on sparse array pseudothermal light system [J]. *Acta Optica Sinica*, 2012, 32(5): 503001-503419. (in Chinese)
- [21] Schneider R, Mehringer T, Mercurio G, et al. Quantum imaging with incoherently scattered light from a free-electron laser [J]. *Nature Physics*, 2018, 14(2): 126-129.
- [22] Kim Y Y, Gelisio L, Mercurio G, et al. Ghost imaging at an XUV free-electron laser [J]. *Physical Review A*, 2020, 101(1): 013820.
- [23] Physics Society of High Energy. Geant4 User Documentation[EB/OL].(2021-12-10)https://geant4.web.cern.ch/support/user_documentation.
- [24] Allison J, Amako K, Apostolakis J. Recent developments in Geant4 [J]. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A*, 2016, 835: 186-225.
- [25] Allison J, Amako K, Apostolakis J. Geant4 developments and applications [J]. *IEEE Transactions on Nuclear Science*, 2006, 53(1): 270-278.
- [26] Biggs F, Lighthill R. Analytical approximations for x-ray cross sections III[R]. New Mexico: Sandia Laboratory, 1988.
- [27] Born M. Atomic Physics[M]. Glasgow: Blackie and Sons Ltd, 1969.
- [28] Hubbell J H, Gimm H A. Pair, triplet, and total atomic cross sections (and mass attenuation coefficients) for 1 MeV - 100 GeV photons in elements Z=1 to 100 [J]. *Journal of Physical and Chemical Reference Data*, 1980, 9(4): 1023-1148.
- [29] Liu H L, Cheng J, Han S S. Ghost imaging in Fourier space [J]. *Journal of Applied Physics*, 2007, 102(10): 103102.
- [30] Lu X T, Jiang D X, Ye Y L. Nuclear Physics[M]. Beijing: Atomic Energy Press, 2000. (in Chinese)