

蛍光X線と計算機ゴーストイメージングを組み合わせて化学マッピングを高速化

サリー・コール・ジョンソン

研究者は蛍光X線計測と計算機ゴーストマッピングを組み合わせて、レンズを不要とする化学元素マッピングの作成方法を新たに開発した。

イスラエルのバル＝イラン大 (Bar-Ilan University) の研究グループは、最近、レンズを使わない高解像度の化学元素マッピングのイメージング手法を開発した⁽¹⁾。この手法は蛍光X線 (XRF) と計算機ゴーストイメージングをベースにしており、現在よりも大きな対象物を高解像度で化学マッピングできると期待されている (図1)。

XRFは、X線源で励起されたサンプルから放出される蛍光を測定し、サンプル内の化学元素を特定する。計算機ゴーストイメージングでは2本のビームを相互に関連づける。1本は試料を直接測定せずにリファレンスとなるよ

うランダムなパターンを符号化したもので、もう1本は試料と相互作用するビームである。

研究者は、計算機ゴーストイメージング手法に手を加えた。透過される電磁波ではなく放出蛍光を測定するのである。これにより、各化学元素に固有の発光スペクトルから元素を同定できるようになる。

化学マッピング

研究チームのリーダーのシャロン・シュワルツ准教授 (Sharon Schwartz) は、「化学マッピングの目的は、検査したサンプル内の元素の空間分布を読み取ることだ」と述べる。「化学マッピングでは、ビームを集光して小さなスポットでサンプルを走査し、サンプル内のすべてのスポットから発光を得るためにレンズを使う。しかし、我々はレンズを使わない。その代わりに、強度分布が一様ではない入力ビームを使う」。

レンズを使わないために、シュワルツ准教授らは、不均一な厚みのマスクを採用した。これにより、透過率が不均一となり、不均一な強度分布ができる。「重要なのは、サンプルの位置で強度がどのように変化するのか正確に把握することだ」とシュワルツ准教授は言う。「放出される蛍光は、化学元素の局所的な強度と分布に依存する。そして検出器は、その両方に比例する強度を測定する」。

元素の空間分布を再構築するために、研究者らは異なる強度パターンに対する処理を繰り返す。圧縮センシングという計算手法を用いて、再構築を高速化した。そして、すべての元素の空間分布を組み合わせて、化学元素マップを作成した (図2)。

研究グループによると、圧縮センシングと人工知能 (AI) アルゴリズムによって測定時間を短縮し、標準的な手法と比較して化学マッピングの処理をより効率よく行うことができるという。

博士課程の学生であるイシャイ・クラン氏 (Yishay Klein) は、「我々の手法では、サンプルに多くのパターンのX線を照射し、それぞれのパターンに対するサンプルの反応を測定する」と述べる。「圧縮センシングやAIを用いることで、既知のパターンと、それに対応する蛍光測定値から、対象物を再構成できる」。

この手法で鍵を握るのは、必要とされるパターン数が、画像内のピクセル数よりも少ないことであると、クラン氏は言う。つまり、ビームを集光してサンプルをラスタ走査する標準的な手法よりも測定時間を大幅に短縮できるということだ。

画像の再構築では、各化学元素について個別に行われる。サンプルからの蛍光シグナルには、各元素からの輝線が含まれており、元素の指紋として利用できるのである (図3)。

同氏は、「光子エネルギー分解検出器を用いると、対象物内部の各元素の反応を分離できる。そして圧縮センシ



図1 X線計算機ゴースト蛍光実験システムで作業をするイシャイ・クラン氏とオー・セフィ氏 (Or Sefi)。(提供:バル＝イラン大)

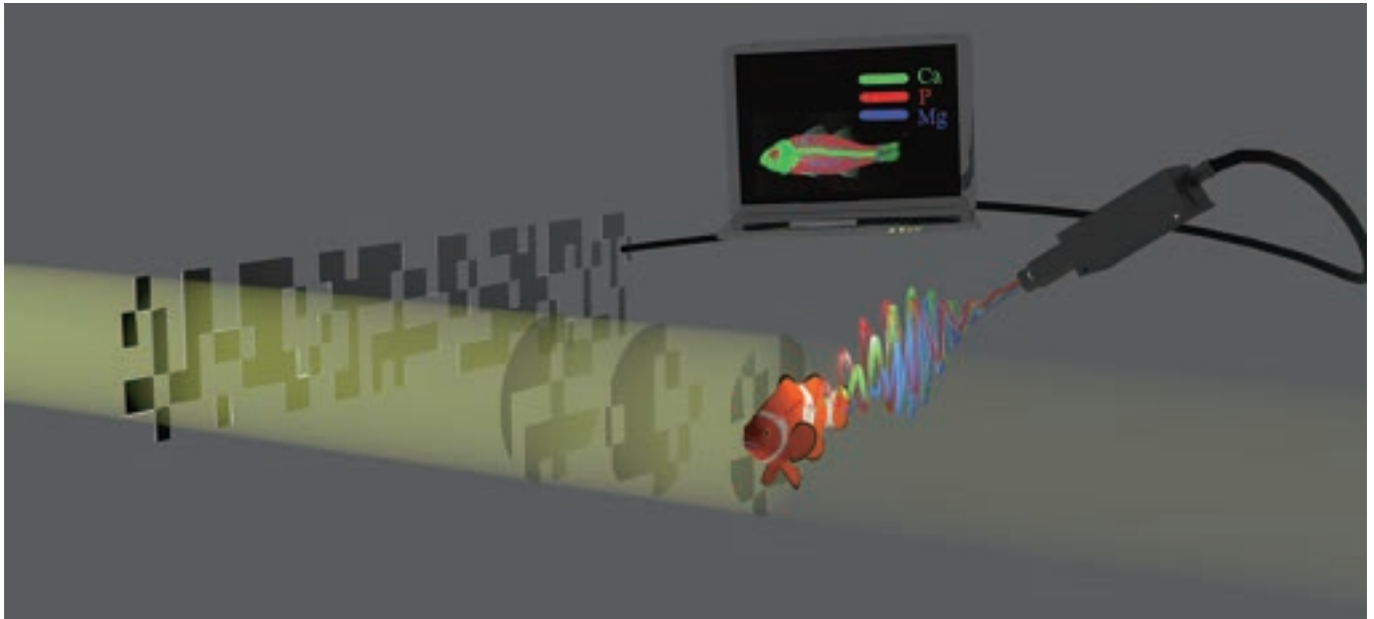


図2 計算機ゴーストイメージングと蛍光X線計測を組み合わせることで、高解像度で効率高い方法で化学元素マップを作成する。

ングやAIによって、各元素の2次元イメージを再構築できる」と述べる。「最後のステップでは、各元素について得られた画像を1つのカラー画像に合成し、それぞれのカラーが化学成分を表すようになる」。

空間分解能は、研究者の手法をどう検証するのだろうか。標準的なXRF手法では、「空間分解能は、サンプルに当たる集光ビームの幅にすぎない」と克蘭氏は述べる。「X線領域での集光は難しく、分解能は強く制限される。我々の研究では、集光を必要としない。その代わりに、X線ビームを空間的に変調するマスクの最小の特徴によって分解能が決まる」。

この手法をテストするため、研究者は、鉄とコバルトからなる対象物の化学マップを作成した。この圧縮センシングアルゴリズムは、標準的な走査ベースの手法と比較して、走査回数をほぼ10分の1に減らすことができた。

約40 μ mの分解能も実証できた。X線リソグラフィーなどの最先端技術を用いることで、より小さな形状を作り

出し、分解能をさらに向上できる可能性がある。

障害を克服する

研究者が直面した2つの最大の課題は、システムのノイズと、マスク素材の探索だった。

克蘭氏は、「最も困難なのは、システムのノイズへの対処だ」と振り返る。「我々がイメージングした元素の1つが鉄である。鉄は、ネジやホルダーなどシステムのほぼすべての構成部品に含まれている、ありふれたものだ。検出される鉄の蛍光には、対象物からのシグナルだけでなく、他の部品からの蛍光も含まれている。さらに、対象物から放出されるさまざまな光子エネルギーの間には、光子自身と、入力ビームの光子エネルギーとの間に、いくつかの重複がある。

光学レジームとは異なり、少なくとも些細な部品としての空間光変調器はない。研究者は、入力照射を変調できるマスクを実装しなければならなかった。

同氏は、「ビームに十分な変調を与

え、高分解能を維持できるマスクを探すことは困難だった」と話す。「分解能は、強度パターンを引き起こすマスクの形状によって決まるのが基本だからである。しかし、機械的に、変調深度を決める厚さと、分解能を決定する左右面の特徴との間にはトレードオフがある。幸いなことに、我々の実験の分解能と変調の要件に適合する、サンプルでロバストなマスクを発見できた。単純な紙やすりが、マスクとして非常に有用であることがわかった」。

想定される応用例

シュワルツ准教授によると、レンズや集光の必要がないため、今回の手法を用いることで人間の組織に対して「目隠し」しながら特定の元素を検出できるという。レンズが実用的でないX線エネルギーで行われる医療画像処理では、この手法によるベネフィットがあるかもしれない。「組織のコントラストを高めたり、有用な画像を得るために必要なX線量を減らしたりすることで、医療画像の品質が向上する」

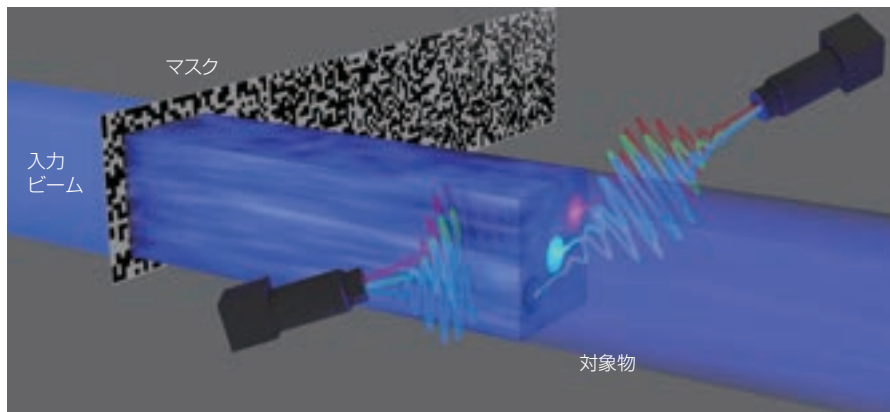


図3 研究グループの実験設定による画像再構築の概要。

ことにも役立つだろうと、シュワルツ准教授は話す。

XRFには幅広い用途があり、X線イメージングがより簡便かつ迅速に行えるようになるため、「材料検査や非破

壊的イメージングなどの従来の用途から文化遺産への応用まで、多くの用途が見込まれる」と、シュワルツ准教授は述べる。「さらに新しい方向性には、医療画像や国土安全保障を目的とした

新しいモダリティが含まれる」。

この手法の最もクールな側面は、「サンプルで扱いやすいことである」と、同准教授は強調する。

また、クラン氏は、紙やすりのような単純で安価なデバイスをマスクとして利用することで、測定時間の大幅な改善と空間分解能の潜在的な向上を実証できたことを指摘する。これにより、XRFイメージングの利点を医療画像のような分野に解放できるのである。

さらに研究者は、この技術を3Dイメージングに拡張することを計画している。

参考文献

(1) Y. Klein, O. Sefi, H. Schwartz, and S. Schwartz, Optica, 9, 1, 63-70 (2022).

LFWJ

光産業技術マンスリーセミナー



Optoelectronics Industry and Technology Development Association

プログラム (10~11月)

No. / 開催日	講演テーマ / 講師
第473回 10月25日(火) 15:30-17:30	「IOWN実現に向けたIII-V/Si光集積デバイスの研究開発」 講師：松尾 慎治 氏 (日本電信電話株式会社)
第474回 11月15日(火) 15:30-17:30	「量子雑音マスキングによる暗号化光ファイバ通信システム」 講師：谷澤 健 氏 (玉川大学)

- 会場 オンライン開催 (Webex)
- 定員 各90名
- 参加費 光協会賛助会員：1,500円 (1回につき・税込み) / 一般参加：3,000円 (1回につき・税込み)
大学・公的機関：無料 (学生・院生含む)
※銀行振込でお支払いください。
- 申込方法 オンライン申込 >>> <http://www.oitda.or.jp/main/monthly-j.html>
- 申込締切 定員になり次第締め切ります。なお、締め切った場合には Web 上にその旨を掲載します。

問い合わせ先

一般財団法人光産業技術振興協会マンスリーセミナー担当 瀬戸山・村谷
〒112-0014 東京都文京区関口1-20-10 住友江戸川橋駅前ビル7F TEL:03-5225-6431 FAX: 03-5225-6435
E-mail: mly@oitda.or.jp URL: <http://www.oitda.or.jp/>