

氏 名 伊 藤 和 輝

学位（専攻分野） 博士(工学)

学 位 記 番 号 総研大甲第309号

学位授与の日付 平成10年3月24日

学位授与の要件 数物科学研究科 放射光科学専攻

学位規則第4条第1項該当

学 位 論 文 題 目 Development of Software for Evaluation and
Calibration of CCD-based X-ray Detectors

論 文 審 査 委 員 主 査 教 授 大隅 一政
教 授 飯田 厚夫
教 授 松下 正
助 教 授 河田 洋
助 教 授 野村 昌治
助 教 授 雨宮 慶幸（東京大学）

論文内容の要旨

イメージンテンシファイヤーとCCDを組み合わせたCCD型X線検出器を開発し、その性能評価および画像歪み、感度の不均一性の補正を行うためのソフトウェアを開発した。

性能評価については、検出量子効率(DQE)という指標を導入し、イメージングプレート(IP)とCCD型X線検出器の感度について議論し、比較を行った。DQEは感度をSN比の観点から定義した量である。これを用いることで積分型、パルス型X線検出器を問わずに統一的にX線検出器の感度について議論することが可能である。しかし、IPやCCD型X線検出器のような二次元X線検出器では、画素間の相関によって見かけ上、DQEが真の値より大きく評価される。本論文では、検出器中でのX線エネルギーの分配をモンテカルロ・シミュレーションによって計算し、その結果による補正を加えることによって正しいDQEを得る方法を開発した。また、これをIPとCCD型X線検出器に適用し、CCD型X線検出器の感度がIPのそれより高いことを定量的に示した。

このCCD型X線検出器には、大きな画像歪みと感度の不均一性が存在する。これは、イメージンテンシファイヤーの入射面の凸形状や静電レンズの収差およびその外部磁場による影響などに起因する。また、この画像歪みによる画素サイズの不均一性や蛍光体の塗りムラなどが原因になって感度の不均一性を引き起こす。本論文では、画像歪みの補正プログラムを作成し、画像歪みの補正法について他の研究と比較する。さらに、画像歪み、感度の均一性ともに非常に優れているイメージングプレートを基準として感度の不均一性の補正を行う方法を提案し、その結果について議論する。

1. X線テレビの開発の歴史

イメージングプレート(IP)は、広ダイナミックレンジ、高感度、高空間分解能などの優れた性能を有する二次元X線検出器であり、現在の放射光を用いたX線回折実験に広く用いられている。しかし、IPは実時間測定を行うことができない。そこでIPと同等の性能を有し、かつ時間分割や実時間X線回折実験を行うことができる二次元X線検出器の開発が望まれていた。古くは橋爪らやU. W. Arndtらによって、シンチレーターと可視光イメージンテンシファイヤーとテレビ撮像管を組み合わせたシステム(X線テレビ)が開発されたが、IPの登場によって一時期下火になった。しかし、近年の半導体技術の進歩によって電荷結合素子(CCD:Charge Coupled Device)が登場することで再びX線テレビに対する関心が高まり、1990年から高エネルギー物理学研究所放射光実験施設の雨宮らによってCCDとシンチレーターと可視光イメージンテンシファイヤーを組み合わせた、高感度かつ時間分割、実時間測定が可能な二次元X線検出器の開発が行われた。入射したX線はシンチレーターによって可視光に変換され、イメージンテンシファイヤーによって強度の増倍と像の縮小が行われた後、リレーレンズによってカップリングされたCCDによってデジタル画像に変換される。この検出器の特徴は時間分割、実時間測定用に、高い感度を達成するためにイメージンテンシファイヤーを用いた点である。また1992年から、医用イメージンテンシファイヤーの窓材をアルミニウムからベリリウムに置き換えた低エネルギーX線用イメージンテンシファイヤーの開発が同様に雨宮らによって行

われてきた。このベリリウム窓 X 線インテンシファイヤーは、低エネルギーの X 線 (> 5 keV) にも高い感度を有し、ベリリウム窓に直接 CsI:Na 結晶を針状に成長させることによって高空間分解能を達成することができた。また、同じ時期に我々と独立にヨーロッパシンクロトロン放射光施設 (ESRF: European Synchrotron Radiation Facility) の J. P. Moyらによっても同様な低エネルギー X 線用イメージインテンシファイヤーの開発が行われていた。しかし彼らの X 線イメージインテンシファイヤーは、シンチレーターを支持するためのベリリウムと、窓材用のベリリウムの 2 枚のベリリウムを用いている点が雨宮らのものとは異なる。

2. 性能評価

X 線検出器の性能の評価項目としては、(1) 空間分解能、(2) 変換係数または量子効率、(3) 雑音特性、(4) 検出量子効率 (DQE)、(5) ダイナミックレンジ、(6) 感度直線性、(7) 画像歪み、(8) 感度均一性、(9) 安定性、が挙げられる。

本研究では二次元 X 線検出器の検出量子効率 (Detective Quantum Efficiency, DQE) の測定法について研究を行った。X 線検出器の量子効率 (Quantum Efficiency: QE) について、パルス型 X 線検出器の QE は検出器の吸収率だけで決まるが、積分型 X 線検出器の QE は、検出器出力が量子数ではないため、これを定義できない。そこで、積分型 X 線検出器の場合、SN 比の観点から DQE を用いて感度を議論する必要がある。DQE は、次のように定義される量であり、

$$DQE = \frac{(q_o / \delta q_o)^2}{(q_i / \delta q_i)^2} \quad \text{————— (1) 式}$$

ここで、 q_i は検出器に入射した X 線光子数、 δq_i はそのゆらぎであり、また、 q_o はその時の検出器の出力、 δq_o はそのゆらぎである。また、積分型検出器の出力 SN 比を、それと等価な、ポアソン統計に従うパルス型検出器の出力パルス数に換算した量子数である雑音等価量子数 (Noise Equivalent Quanta, NEQ) を次のように定義する。

$$NEQ = \left[\frac{q_o}{\delta q_o} \right] \quad \text{————— (2) 式}$$

(2) 式を (1) 式に代入し、入射光子数がポアソン統計に従うとすると、

$$NEQ = q_i \cdot DQE \quad \text{————— (3) 式}$$

が得られる。(3) 式は、検出器で測定された q_i 個の X 線光子の SN 比は、 $q_i / \sqrt{q_i} = \sqrt{q_i}$ ではなく、 \sqrt{NEQ} になることを示している。 $\sqrt{NEQ} < \sqrt{q_i}$ であることから入射 X 線光子数の SN 比よりも検出器の出力の SN 比が小さくなることを意味している。

しかし、上記のように定義される DQE を無補正で計算すると 1 を越えてしまう。これは二次元 X 線検出器には装置関数による画素間の相関があり、画素をそれぞれ独立に取り扱うことが出来ないからである。そこで我々は、二次元 X 線検出器の画素間の相関を計算機でシミュレートし、これをもとに実験データを補正することによって、真の DQE を実験的に求める測定法を開発した。この DQE 測定法を IP とイメージインテンシファイヤーと CCD を組み合わせた検出器に適用し、両者の感度を定量的に比較した。その結果、イメージインテンシファイヤーと CCD を組み合わせた検出器の方が感度の面で IP より優れていることを明らかにした。

3. 画像歪みおよび感度の不均一性の補正

イメージインテンシファイヤーを用いたX線検出器には、イメージインテンシファイヤーの入射窓の凸型形状および外部磁場の影響などによって大きな画像歪みが生じる。また、画像歪みにともなう画素サイズのムラやシンチレーターの塗りムラなどに起因する感度の不均一性が存在する。これらの複雑な画像歪みや感度の不均一性をソフトウェアを用いて補正することについて、1980年代後半にR. DurbinらやW. Kabsch、D. J. Thomasによって、彼らがそれぞれ開発した特定の検出器専用のソフトウェアが開発された。また、シンクロトロン放射光以外の分野では、医学分野において、PET (Positron-emission tomography) 用のカメラの画像歪みの補正法やX線イメージインテンシファイヤーを用いたCT (Computed tomography) の画像補正がある。また、観測天文学やリモート・センシングの分野でも画像歪み補正の研究が行われている。

X線結晶学では、回折点（または線）の位置と強度の定量的な情報が必要であり、画像歪み補正と同等に感度不均一補正も重要である。本論文では、X線結晶学への応用を行うためのCCD型X線検出器の補正法について論考する。

3. 1. 画像歪み

二次元X線検出器の画像歪みについて一般論が展開されるようになったのは1992年のM. Stantonらからである。画像歪みの補正法の基本的な部分は彼らのまとめた論文で議論されているが、歪みを除去（補正）する部分の詳細については実現できていなかった。1994年にESRFのA. P. Hammersleyらによって、前述のJ. P. Moyらの開発したCCD型X線検出器とMarr ResearchのIP読みとり装置の画像歪みの補正法が詳細に検討された。このソフトウェアはFIT2Dという名前で公開されており、ERSFでは日常的に使われるに至っている。本論文において、画像歪みの除去ソフトウェアの開発を行った。二次元X線検出器の画像歪みの基本的な補正法は、M. Stantonらによって提案されている。まず画像歪みを計算する必要があるが、そのためには基準点が必要である。正方格子状に穴のあいたマスクを用いて露光し、実際のマスクの穴の位置との差を画像歪みとする。画像歪みの情報はマスクの穴の位置の上でのみ定義されているので、これから、各画素での画像歪みの量を補間によって求める。各画素ごとの歪み量を補間によって計算するが、画像上の基準点は画像歪みによって格子点からずれているので近似が難しくなる。画像歪みは滑らかであるという仮定をし、二次元スプライン関数を用いて補間する事を考えた場合、スプライン関数の操作点が格子点上にないためにスプライン関数を構成することが出来ない。そこで、フィッティング・スプライン補間のルーチンを自作した。また、画像歪みを除去（補正）する部分については各画素をサブピクセルに分割して、サブピクセルごとに歪みを除去する方法を検討し、これを用いた場合に不連続のない画像歪みの除去が行えることを確認した。

3. 2. 感度の不均一性

上記の二編の論文中では画像歪みの補正については論じられたものの、感度の不均一性の補正については詳しく論じられなかった。感度の不均一性を補正する方法としては、一つには放射性同位体を用いて均一なX線照射を行い、補正することが考えられる。しかし、200ミリ径の面積の均一なX線を作り出すことは非常に困難であり、また特定の波長以外の

補正を行うことが出来ない。画像歪みや感度の不均一性の補正は、実際の実験と同一の環境下で行わなければ精密な補正を行うことは出来ない。1990年にD. J. Thomasによって蛍光X線を用いた感度補正が提案されているが、これもある特定の波長しか使えず、また検出器上では強度分布を持ち、かつ非常に強度が弱いので実用的ではなかった。この問題は1995年にA. P. Hammerslyらによって詳細に検討され、彼らはアモルファスからの蛍光X線を用い、かつその強度分布が点対称であることを仮定し、感度の不均一性の補正を行う方法を提案した。検出器上でのX線強度分布は、シンチレーション・カウンタを用いて一次的に走査し、それを動径方向で等しいとして補正を行った。また1996年にはJ. P. Moyら同じESRFのグループによってリチウムガラス中にストロンチウムを添加した散乱体からの蛍光X線を用いての感度の不均一性の補正法についての研究が報告されている。しかし、蛍光X線を使う限り、特定の波長以外で感度の不均一性の補正を行うことは出来ない。そこで本論文では、画像歪みがCCD型X線検出器に比べて非常に小さく、感度の均一性に優れたイメージングプレートを基準とする感度の不均一性の補正法を提案する。また、X線源についてはガラス状カーボンからの散乱を用いることで、実際に実験に使用する波長で感度の不均一性を補正することが可能になる。これは本検出器を多波長異常分散法などに適用するとき大きな威力を発揮するものと期待される。

(論文審査結果)

伊藤 和輝君の博士論文の内容は、1) CCD 型 X 線検出器の諸性能の定量評価法の開発、
2) CCD 型 X 線検出器の画像歪みと感度不均一性の補正法の研究である。

これまでシンクロトン放射の大強度 X 線を利用した X 線回折実験ではイメージングプレート (IP) が広く用いられてきたが、実時間測定ができないという欠点があった。この欠点を補う 2 次元 X 線検出器として、X 線イメージインテンシファイヤーと CCD を組み合わせた CCD 型 X 線検出器が開発された。この CCD 型 X 線検出器の定量的な性能評価を、空間分解能、検出量子効率 (DQE)、ダイナミックレンジ、X 線強度レンジ、画像歪み、感度不均一性、時間応答特性、安定性について行った。X 線検出器の感度を定量的に議論するために、感度の概念を信号対雑音比の観点から一般化した DQE という指標を導入した。DQE を用いて、X 線検出器の感度を統一的に議論することが可能になる。二次元 X 線検出器では、画素間の相関によって見かけ上、DQE が真の値よりも大きく評価されることを明らかにした。この画素間の相関の効果をモンテカルロ・シミュレーションによって推定し、測定結果に補正を加えることによって正確な DQE を測定する手法を開発し、二次元 X 線検出器の DQE 測定法を確立した。この手法を用いて、IP と CCD 型 X 線検出器の感度を比較し、CCD 型 X 線検出器の感度が IP よりも高いことを定量的に示した。

この CCD 型 X 線検出器には大きな画像歪みと感度の不均一性が存在する。これは X 線イメージインテンシファイヤーの入射面の凸型形状や静電レンズの収差、およびその外部磁場による影響などに起因する。また、この画像歪みによる画素サイズの不均一性や、蛍光体の塗りムラ、入射窓による吸収、蛍光体への斜め入射などが原因となって感度不均一性を引き起こす。これらは X 線イメージインテンシファイヤーを用いた検出器の欠点とされてきた。まず、CCD 型 X 線検出器の画像歪みの補正を行うソフトウェアの開発を行った。この補正によって、補正前には約 13% であった画素サイズの不均一性を補正後には約 1% に低減させることに成功した。

また、二次元 X 線検出器の感度不均一性の補正において、画像歪みに起因する感度不均一性の補正は画素を点ではなく面として取り扱う必要があり、画素値の再分配を精度良く行うことが重要である。この画素値の再分配を高精度にしかも効率よく行う方法を提案し、それに基づくソフトウェアの開発を行った。次に、感度不均一性の補正については、大面積の均一な X 線照射を必要としない、IP を基準とした補正法を開発した。この補正法は、実験と同一の条件下 (波長、試料-検出器距離、外部環境) で補正を行うことができるという点で従来の方法に比べて優れている。これらのソフトウェアを用いて X 線溶液散乱の強度分布が適正に補正できることを示した。また、感度不均一性は、従来、X 線強度分布には依存しないと考えられていたが、実際には僅かであるが依存することを明らかにし、この種の検出器を用いて X 線強度の定量実験を行う際の新たな問題点を提起した。

以上の研究は、数物科学研究科放射光科学専攻の博士学位論文としての内容に値し、専門的にも総合的にも独創性の高い優秀な研究業績であると判断した。