

【ノート】

【令和4年度 先端技術等調査研究事業】

金属材料における高分解能X線CT分析に関する研究

伊藤 桂介、遠藤 崇正、曾根 宏

材料開発・分析技術部

X線CT(X-ray Computed Tomography)は、X線のもつ高い透過能力を生かし、対象物質の内部を非破壊で三次元的に観察する手法である。X線さえ透過すれば試料形状や材質によらず実施可能という汎用性の高さから、分野を問わず製造業全般において広範な活用がなされている。本課題では、金属材料にX線CT分析を適用する際の最も大きな障害であるビームハードニングアーチファクトについて、数値シミュレーションソフトウェアの作成による定量的な検討を実施した。

キーワード: X線CT、ビームハードニング、アーチファクト

1 緒言

宮城県産業技術総合センターで実施している企業支援において、X線CT分析による非破壊分析の需要は多い。現在、特性の異なる複数の装置(マイクロフォーカスX線CT装置、卓上型高速X線CT装置、サブミクロン三次元X線顕微鏡)を活用し、対象試料の組成や大きさによって適宜使い分けることで、食品産業から素材メーカー、機械部品メーカーに至るまで、広範な県内企業への技術支援を行っている。これらの中で対応難易度が高い企業ニーズとして、金属材料の高分解能分析が挙げられる。これは、X線の透過率が低い金属材料においては撮影に際して種々のアーチファクト(偽像)が発生するため、試料形状を「ありのまま」で撮影することが非常に難しいためである。なかでも、ビームハードニングアーチファクトと呼ばれる現象はX線装置の特性と試料の組成(形状・組成)の組み合わせによる複合的な現象であり、実験前の事前予測が非常に難しい状況にあった。そこで本稿では、数値シミュレーションソフトウェアの作成による定量的な検討を試みた。

2 金属材料のX線CT分析における課題

2.1 X線CT分析の基本

まず、X線CT分析の基本的な手順について簡単に述べる。何らかの手段により発生させたX線を対象物に照射し、透過したX線を検出器により検出し、画像(投影像)を得る。この投影像を試料の全方位から撮影し、それらに数学的アルゴリズムに基づいた画像再構築と呼

ばれる処理を施すことで、三次元的データへと変換する。

この三次元データは一般に、三次元空間を細かい立方体(ボクセル)に分割し、個々のボクセルごとに、X線の吸収量に対応した数値を持たせたものとなる。X線の吸収量は、対象物質を構成する元素の種類と密度及び使用しているX線のエネルギーによって一意に決まる値であるため、物体の形状だけにとどまらず、部位ごとの組成の違いまで定量的に確認できるのがX線CTの最大の利点といえる。

2.2 金属材料におけるX線CT測定

前項のとおり、理論上は優れた定量性をもつX線CTであるが、現実の測定においては、アーチファクトと呼ばれる偽像が生じることが知られている。実験装置の構成や対象物質の形状・組成によって多様なアーチファクトが存在するが、金属材料の撮影において顕著に現れるビームハードニングアーチファクトと呼ばれる現象が存在する。これは(i)撮影に使用するX線が有限のスペクトルを持っていること、(ii)物質中でのX線の減衰がエネルギー依存性を持つこと、という2つの条件により、入射光と透過光のスペクトルが変化することによって生じる。

このことにより得られるX線画像の定量性が崩れるとともに、微細な構造の再現性を著しく低下させるのがアーチファクトであり、高分解能撮影においても多大な障害となる現象である。このアーチファクトは、実験装置(X線発生装置、検出装置)だけではなく、試料の組成や形状によって現れ方が大きく変わる複合的な現象であり、ユーザーへの事前の情報提供、たとえばアーチファクトを避けるための方策(試料形状の加工など)を提案する

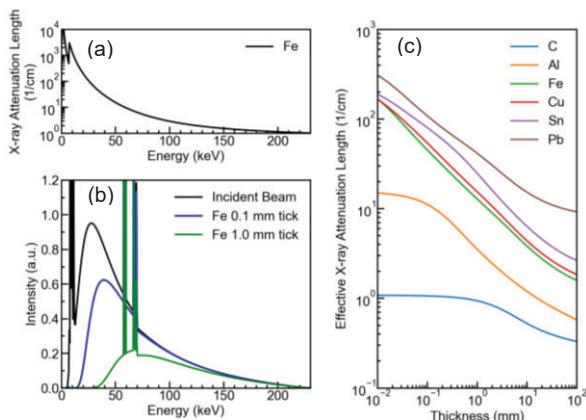


図1(a)鉄の線吸収係数スペクトル、(b)X線エネルギースペクトル、(c)試料厚みと実効的な線吸収係数

ことが非常に難しい状況にあった。そこで、Pythonと各種オープンソースライブラリを用いた数値シミュレーションソフトウェアを作成し、定量的な検討環境を構築した。

2.3 ビームハードニングアーチファクト

いま、エネルギー ω keVのX線が単一組成で厚み d cmの物質を透過する状況を考える。あるエネルギー ω keVの透過X線の強度 $I(\omega)$ には、入射X線の強度を $I_0(\omega)$ 、物質の線吸収係数を μ cm⁻¹としたとき、下記の関係が成り立つ。

$$I(\omega) = I_0(\omega) \exp\{-\mu(\omega)d\}$$

図1(a)は、鉄元素の線吸収係数スペクトルである。吸収端と呼ばれる急峻な構造の付近を除き、高エネルギーにいくほど小さな値をとる、すなわちX線の透過率が高くなる。このことによって、入射X線と透過X線のスペクトル形状には変化が生じる。図1(b)に、鉄を透過することで生じるスペクトル変化のシミュレーションを示す。黒線は、宮城県産業技術総合センターのマイクロフォーカスX線CT装置を最高加速電圧(225kV)で運用した際のX線スペクトルを、オープンソースのSpekPyツールキット¹⁾を用いてシミュレーションしたものである。また、青線及び黒線で示すスペクトルは、それぞれ0.1 mm及び1 mmの厚みの鉄フィルターを透過した際に得られる透過スペクトルのシミュレーション結果である²⁾。鉄フィルターを透過することで、スペクトルの重率が高エネルギーへと顕著にシフトする様子が見て取れる。

このスペクトルの形状変化によって、実効的な透過率 T_{eff} に厚み依存性が生じる。すなわち、一般的なX線イメージング撮像素子では受光側でのエネルギー分解を行わない(もしくはバンド幅が非常に広い)ため、実験的

に得られるX線強度は全エネルギー領域にわたる積分値となり、実効的な線吸収係数 μ_{eff} を定義すれば、下記の式で表すことができる。

$$\begin{aligned} T_{eff}(\omega) &= \int f(\omega) \exp\{-\mu(\omega)d\} d\omega \\ &= \exp\{-\mu_{eff}d\} \end{aligned}$$

ここで $f(\omega)$ は検出器の感度特性である。この式をもとに、簡単のため全エネルギーにわたってフラットな感度特性を仮定した際の試料厚みと実効的な線吸収係数の関係を、いくつかの元素においてシミュレーションしたのが図1(c)である。どの元素についても、基本的に試料厚みが増えるにつれて線吸収係数が減少する、すなわち試料厚みと透過率との間の定量性が成り立たなくなっていることがわかる。元素番号が大きい元素ほど線吸収係数の厚み依存性は顕著であり、たとえば鉄については、厚み10 μmと1 mmとで実効的な線吸収係数が一桁以上異なる。この現象により、本来同じ組成であれば同じ明るさに写るはずのものが、試料の薄肉部分と厚肉部分で全く異なる明るさに写り、組成や構造の分析能力を著しく低下させることとなる。これらの検討の過程で作成したシミュレーションソフトウェアをベースとして、単一組成だけでなく複合組成への対応などの拡張を行った。その結果、ユーザーが持ち込む多種多様な試料について、ビームハードニングアーチファクト発生に関する事前検討・情報提供が可能となった。

3 結言

金属材料におけるX線CT撮影において、高分解能撮影の妨げとなっているビームハードニングアーチファクトについて、X線のスペクトルを考慮した数値シミュレーションを行うことで、アーチファクトの程度や元素依存性を定量的に検討した。また、作成したソフトウェアを活用することで、技術支援現場における適切な情報提供を行える体制を整えた。

参考文献

- 1) G. Poludniowski , Artur Omar, Robert Bujila, Pedro Andreo , “Technical Note: SpekPy v2.0—a software toolkit for modeling x-ray tube spectra”, Medical Physics **48**, 3630 (2021).
- 2) M. Newville, “Larch: an analysis package for XAFS and related spectroscopies”, Journal of Physics: Conference Series **430**, 012007 (2013).