



Facultad de Matemática, Astronomía y Física
Universidad Nacional de Córdoba

Trabajo Especial de Licenciatura en Física

Algoritmos y análisis de imágenes no convencionales de rayos X: Contraste de fase y absorción

Cuello, Eliana Marysel
Director: Tirao, Germán

21 de Junio de 2011

AGRADECIMIENTOS

Quisiera agradecer a las personas que hicieron posible que este trabajo y todo lo que representa, por ser el último paso en mi carrera de grado, fuera realizado. En primer lugar (siempre) a mis padres, Pedro y Evarista, porque gracias a su esfuerzo, apoyo y confianza hoy puedo estar escribiendo estas palabras. A mis hermanos Lorena, Luis y Paola por acompañarme siempre. A mi director, Dr. Germán Tirao, con quien fue un gusto haber trabajado quiero agradecerle especialmente por todo lo aprendido y por la ayuda brindada en los momentos más complejos. Por último agradecer a mis amigos, los de siempre y los de no hace tanto, simplemente por estar.

Clasificación

42.25.Fx Diffraction and scattering

42.25.Gy Edge and boundary effects; reflection and refraction

42.30.Rx Phase retrieval

42.30.Va Image forming and processing

Palabras claves

Imágenes de rayos X

Contraste de fase

Imágenes basadas en un analizador - ABI

Resumen

En este trabajo se estudian diferentes algoritmos de reconstrucción de imágenes basadas en un analizador de rayos X, con el objeto de separar los efectos de absorción, refracción y dispersión a ultra bajo ángulo, como producto de la interacción del haz con la muestra.

Se implementaron estos métodos sobre imágenes medidas en el Laboratorio Nacional de Luz Sincrotrón de Campinas, Brasil, de una muestra especialmente diseñada para realzar los efectos de interacción anteriormente mencionados. Se analizaron los resultados cualitativa y cuantitativamente, mostrando que dependiendo del efecto realizado, existe un método más eficiente respecto de los otros.

ÍNDICE

1. INTRODUCCIÓN Y OBJETIVOS	1
1.1 Interacción de la radiación con la materia.....	1
1.2 Imágenes convencionales y no convencionales.....	2
1.3 Métodos de imágenes no convencionales por contraste de fase.....	5
1.4 Objetivos y esquema de trabajo	9
2. INSTRUMENTACIÓN Y ÓPTICA DE RAYOS X	10
2.1 Cristales	10
2.1.1 Asimetría.....	11
2.1.2 Curvas de reflectividad y transmitancia.....	12
2.1.3 Monocromador	14
2.1.4 Armónicos	16
2.2 Fuentes de rayos X.....	17
2.2.1 Radiación de Sincrotrón	17
2.2.2 Radiación de un tubo convencional de rayos X	19
2.3 Sistemas de detección.....	20
3 MÉTODOS DE IMÁGENES BASADAS EN UN ANALIZADOR	21
3.1 Efectos en las imágenes reconstruidas	21
3.2 ABI: diferentes geometrías del analizador.....	23
3.2.1 ABI utilizando un cristal analizador en geometría de Laue.....	23
3.2.2 ABI utilizando un cristal analizador en geometría de Bragg	24
4. ABI EN GEOMETRÍA DE BRAGG	27
4.1 Aproximaciones	27
4.2 Algoritmos de extracción de imágenes.....	28
4.2.1 Imágenes realzadas por difracción (DEI)	29
4.2.2 Algoritmo extendido de Imágenes realzadas por difracción (E-DEI)	31
4.2.3 Radiografía de imágenes múltiples (MIR)	33
4.2.4 Método generalizado de imágenes realzadas por difracción (G-DEI)	37

5. RESULTADOS Y DISCUSIONES	40
5.1 Condiciones experimentales.....	40
5.2 Análisis cualitativo.....	42
5.2.1 Absorción.....	42
5.2.2 Refracción.....	44
5.2.3 Dispersión.....	47
5.3 Análisis cuantitativo.....	48
5.3.1 Valores de desviación angular	48
5.3.2 Cociente señal ruido SNR.....	49
6. CONCLUSIONES	52
ANEXO	53
REFERENCIAS	57

Capítulo 1

INTRODUCCIÓN Y OBJETIVOS

Las imágenes obtenidas utilizando rayos X son, desde su descubrimiento a fines del siglo XIX, de gran interés en numerosos ámbitos como el industrial, biológico o en medicina donde resultan ser una importante herramienta para diagnóstico. El interés radica en que éstas permiten revelar características de la estructura interna de la muestra. Las técnicas de obtención de imágenes fueron evolucionando desde sus comienzos hasta llegar a la posibilidad concreta de pasar de imágenes planas a reconstrucciones en 3D y 4D.

Sin embargo cuando la muestra a la cual se desea tomar una imagen está compuesta de elementos livianos (baja absorción) o bien no presenta significativas variaciones en la densidad de las estructuras que la componen, en estos casos una imagen basada en absorción como lo son las obtenidas convencionalmente, no brinda suficiente información sobre el interior de la muestra. Poder diferenciar estas estructuras es de principal importancia en imágenes de rayos X en todo tipo de ámbitos, pero en particular en imágenes médicas donde las estructuras podrían estar asociadas con patologías como el cáncer. Es por este motivo que nuevas técnicas para la obtención de imágenes fueron y están siendo continuamente desarrolladas, acompañadas por el desarrollo tanto de nuevas fuentes de rayos X, como de instrumental necesario y técnicas de procesamientos matemáticos.

Se diferencian, de un modo general, dos tipos de técnicas de imágenes de rayos X: las técnicas convencionales y las no convencionales, entre éstas últimas se pueden nombrar las técnicas de contraste de fase, las de micro-fluorescencia o imágenes por dispersión. La diferencia está dada en la característica de radiación emergente (luego de interactuar con la muestra) que se utilice como fuente de contraste. Para un mejor entendimiento hay que empezar por considerar los mecanismos de interacción entre la radiación y la materia.

1.1 *Interacción de la radiación con la materia*

La radiación que incide a un objeto interactúa de diversas formas con los átomos del mismo. En el rango de energía de decenas de keV, para radiación de rayos X, los efectos de interacción que predominan son los siguientes: el efecto fotoeléctrico, la dispersión elástica o Rayleigh y la dispersión inelástica o Compton. El efecto fotoeléctrico consiste en la absorción de un fotón incidente por un electrón atómico ligado y en la emisión de éste último fuera del átomo. La dispersión elástica (Rayleigh) es el resultado de la interacción de un fotón con electrones ligados de un átomo dando como resultado la desviación del fotón sin pérdida de energía desde su dirección de incidencia. La dispersión inelástica (Compton) se debe a la interacción de un fotón con un electrón considerado en reposo y libre (válido para fotones muy energéticos) que da como resultado un electrón eyectado en cierta dirección y un fotón con una dirección diferente a la de incidencia y con distinta energía [1].

La probabilidad de ocurrencia de cada efecto está dada por la sección eficaz del mismo que depende, principalmente, del número atómico Z de la muestra, de la energía incidente E y del ángulo de dispersión [1]. La región donde cada efecto es predominante se observa en la figura 1.1 (donde se incluye la producción de pares que es un efecto de interés para altas energías). La sección eficaz Rayleigh en primera aproximación es de la forma $\sigma_R \propto \frac{Z^2}{E^2}$.

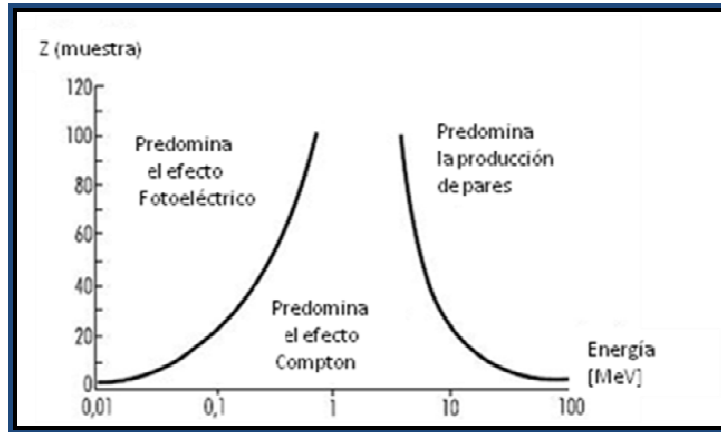


Figura 1.1: Regiones donde los efectos fotoeléctrico, Compton y de producción de pares son predominante, en función de la energía de la radiación incidente y del número atómico de la muestra.

El haz emergente de la muestra como resultado de su interacción con la misma es entonces atenuado y dispersado. La dispersión se traduce en desviaciones del haz desde su dirección de incidencia (este efecto se explicará con detalle más adelante en el texto). Por otro lado la atenuación del haz está descrita por el coeficiente de atenuación lineal μ (que tiene como unidades 1/longitud) y relaciona la intensidad que ingresa al material con la que emerge del mismo de la siguiente manera:

$$I = I_0 \exp(-\mu z)$$

donde I_0 es la radiación incidente y z es el longitud atravesada por el haz dentro de la muestra. μ depende de la energía y del material. En la práctica resulta más conveniente trabajar con el coeficiente de atenuación másico definido como $\mu_m = \mu / \rho$ donde ρ es la densidad del material ya que el coeficiente así definido es una propiedad de cada elemento y es independiente de la densidad y del estado físico del material (gas, líquido o sólido). Se define a μ_m como la suma de los coeficientes másicos de los efectos más probables, de la siguiente manera:

$$\mu_m = \sigma + \sigma_R + \tau + \dots$$

donde σ , σ_R y τ son los coeficientes másicos de dispersión Compton, Rayleigh y efecto fotoeléctrico respectivamente.

1.2 Imágenes convencionales y no convencionales

En la técnica de imágenes convencionales de rayos X, la fuente de contraste es la diferencia en la atenuación del haz incidente entre las distintas regiones de la muestra. Éste efecto se explicó en la sección anterior. La imagen obtenida, entonces, es un mapa de la variación del coeficiente de atenuación μ , que de acuerdo con el rango de energías utilizado normalmente, está dominado por la absorción fotoeléctrica.

Cuando la muestra está compuesta de elementos livianos (baja absorción) o cuando la variación en la densidad de las estructuras que la componen es despreciable, en estos casos una imagen basada en absorción no brinda suficiente información sobre el interior de la muestra.

Con el fin de poder extraer información relevante de las imágenes de rayos X de este tipo de muestras es que se procedió al estudio de otros aspectos del haz emergente que pudieran ser utilizados como fuentes de contraste para mejorar así la calidad de la imagen. Las técnicas de imágenes por contraste de fase son algunos de los resultados de dichos estudios. En ellas se obtiene como fuente de contraste además de la atenuación a la modulación en la fase del haz transmitido, producida al atravesar el objeto. Estos dos efectos, atenuación y modulación de fase pueden ser descriptos en términos del índice de refracción complejo del medio.

El índice de refracción n está dado por la relación de Maxwell (en el marco de la teoría electromagnética de la luz) que puede expresarse de la siguiente manera [2]:

$$n = \sqrt{\frac{\varepsilon}{\varepsilon_0}}$$

donde ε es la constante dieléctrica del medio y ε_0 la del vacío, que están relacionadas con la susceptibilidad dieléctrica χ de la forma: $\varepsilon = \varepsilon_0(1 + \chi)$, por lo tanto $n = (1 + \chi)^{1/2}$, para rayos X el valor de la susceptibilidad es pequeño [2] por lo que se puede aproximar $n = 1 + \frac{\chi}{2}$ donde χ es un valor complejo. Se expresa a n , entonces, de la siguiente manera:

$$n = 1 - \delta + i\beta$$

donde $\delta = \lambda^2 n_e \frac{r_e}{2\pi} \propto E^{-2}$, $\beta = \mu \frac{\lambda}{4\pi} \propto E^{-4}$, λ es la longitud de onda de la radiación incidente, n_e es la densidad electrónica de la muestra, r_e el radio clásico del electrón y μ es el coeficiente de atenuación lineal de la muestra.

Considerando la radiación incidente como una onda plana desplazándose en la dirección z , de la forma $\vec{E} = \vec{E}_0 \exp[i(kz - \omega t)]$ donde k es el modulo del vector de onda $|\vec{k}| = 2\pi/\lambda$ y ω es la frecuencia temporal de la oscilación, la onda emergente difiere de la incidente como consecuencia de la interacción con la muestra, como se muestra en la figura 1.2.

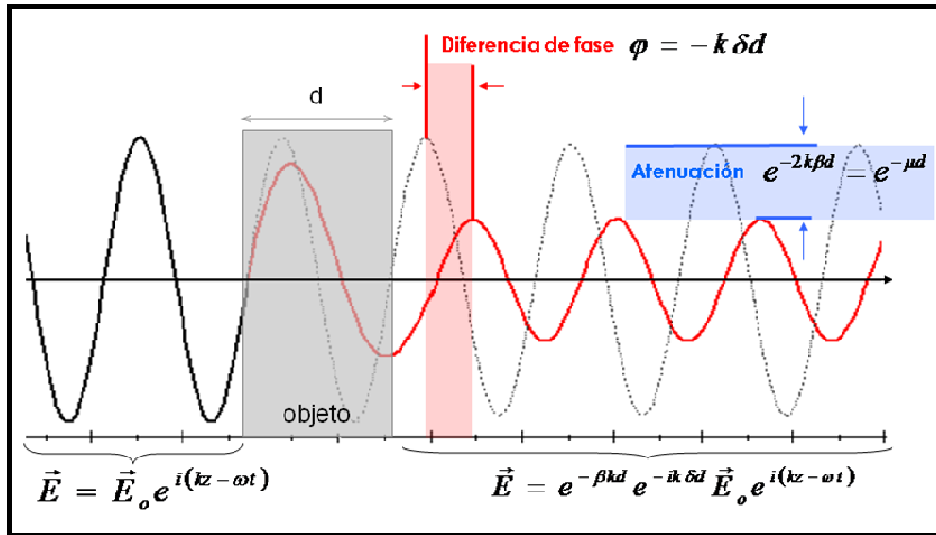


Figura 1.2: Variación en una onda plana incidente como consecuencia de la interacción con un objeto.

La amplitud de la onda plana emergente puede expresarse de la forma:

$$\vec{E}_A = \vec{E}_0 \exp[-\beta kd] \exp[-ik\delta d]$$

donde d es el espesor de la muestra. A partir de esta expresión, puede observarse que el parámetro δ presente en la parte real del índice de refracción corresponde al corrimiento de fase debido a la refracción y la parte imaginaria β a la absorción. Dado que la intensidad medida en el detector $I \propto |\vec{E}|^2 = |\vec{E}_A|^2$ es independiente de la fase de la amplitud $\varphi = -k\delta d$, los cambios producidos por refracción no son, en principio, función directa de la intensidad del haz emergente, a diferencia de las variaciones en absorción.

Para muestras que son débilmente absorbentes los métodos alternativos no convencionales desarrollados con el fin de mejorar las fuentes de contraste para imágenes de rayos X están relacionados con la fase de la amplitud $\varphi = -k\delta d$, que de un modo más completo se expresa (para ondas propagándose en la dirección z) como [3]:

$$\varphi(x, y) = -\frac{2\pi}{\lambda} \int \delta(x, y, z) dz$$

Dado que δ es mayor que β y sufre mayores variaciones en el régimen de los rayos X duros (en este régimen es aproximadamente tres órdenes de magnitud mayor que β para elementos de bajo número atómico y por ejemplo, δ es del orden de 10^{-7} para tejidos biológicos a 50 keV) se pensó en relacionar los cambios en la fase con las variaciones en las intensidades medidas para así aprovecharlos como fuente de contraste. Con este propósito existen tres métodos desarrollados para obtener imágenes aprovechando el contraste producido por atenuación y cambios de fase, éstos son: interferometría, propagación e imágenes basadas en un analizador o realizadas por difracción. A continuación se describen cada uno de ellos, mostrando sus ventajas y desventajas, como así también los requerimientos experimentales, tales como las características del haz incidente y de la instrumentación necesaria.

1.3 Métodos de imágenes no convencionales por contraste de fase

El método de *interferometría*, se basa en obtener una imagen por técnicas de interferencia y a partir de un procesamiento matemático, representando así un mapa de fase del haz que emerge de la muestra.

El primer interferómetro de rayos X fue presentado en 1965 por Bonse y Hart [4] y se basa en los mismos principios fundamentales de los interferómetros ópticos, en los cuales un haz coherente es dividido en dos y luego al ser combinados nuevamente dan lugar a un patrón de interferencia producto del corrimiento de fase entre los mismos [2]. Esta diferencia de fase puede ser producida por una diferencia en el camino óptico recorrido por los haces, como consecuencia de haber atravesado regiones con diferentes índices de refracción.

Uno de los interferómetros más utilizados es el que se muestra en la figura 1.3, comúnmente llamado LLL dado que está compuesto por tres cristales en geometría de Laue (ésta se explicara luego en el capítulo 2). Sin embargo hay numerosos arreglos diferentes, utilizando cristales en geometría de Bragg, o más de tres cristales [2,5].

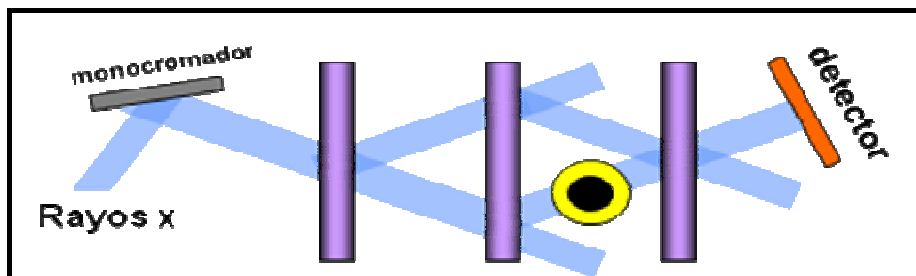


Figura 1.3: Set up instrumental del método de interferometría para un interferómetro LLL.

En el interferómetro LLL un haz monocromático es dividido en dos por el primer cristal y luego al atravesar el segundo los haces difractados convergen hacia el analizador. La muestra se

coloca frente a uno de los haces que convergen de manera que la diferencia de fase se deba a los cambios en el índice de refracción de la misma, para esto se necesita que la muestra tenga un espesor uniforme. Se miden imágenes de patrones de difracción que son el resultado de la interferencia de las ondas que pasan a través del objeto con aquellas no perturbadas de referencia.

La imagen de fase se calcula utilizando un algoritmo que combina diferentes patrones obtenidos al introducir frente al haz de referencia un objeto de características conocidas (llamado en inglés *phase shifter*), que introducirá un corrimiento de fase controlado [6] que es diferente para cada patrón (por ejemplo si el *phase shifter* tiene un espesor variable y si se lo enfrenta al haz variando este espesor ya es una forma de controlar el desfasaje). Con esta fase variable controlada, se obtiene un barrido en todo el intervalo de fases necesario para la reconstrucción de la imagen.

Este método presenta la ventaja de que la imagen obtenida es un mapa de fase, al contrario que en los métodos que se describen a continuación donde lo que se obtiene es el gradiente de la fase en las técnicas basadas en un analizador o el Laplaciano de la misma en el método de propagación. Por este motivo en regiones de una muestra donde no se introduzcan cambios considerables en la fase del haz transmitido, sólo el método de interferometría proporciona información relevante en la imagen obtenida.

La principal desventaja del método es la gran dificultad desde el punto de vista experimental ya que la fuente debe ser intensa, monocromática, coherente espacial y longitudinalmente, además de que el sistema debe estar aislado de vibraciones (la estabilidad que debe alcanzar es del orden de la longitud de onda utilizada) [7].

Takeda et al. [8], utilizan la técnica con el fin de estudiar muestras biológicas y comparar los resultados de las imágenes con los obtenidos con una resonancia magnéticas, arrojando mejor resultado la reconstruida por interferencia.

En el método de *propagación - PBI (propagation based imaging)* la modulación de la intensidad se debe a la difracción de las ondas en el proceso de propagación, difracción de Fresnel o bien de Fraunhofer. La muestra es irradiada con un haz no necesariamente monocromático pero si transversalmente coherente. La variación en el espesor o en el índice de refracción de la muestra provocan un cambio en el frente de onda del haz emergente que produce, al combinarse con las ondas que no fueron desviadas, un patrón de interferencia en regiones de la imagen que están asociados con los bordes de las estructuras internas de la muestra y que dan como resultado los bordes realzados en la imagen obtenida.

Si el detector se coloca directamente detrás de la muestra, se obtiene la imagen por absorción convencional, pero para distancias mayores de separación entre la muestra y el detector, el efecto de las desviaciones en el haz se hace presente realzando los bordes. La imagen no requiere procesamiento y está asociada con el Laplaciano del cambio de fase del haz producido al atravesar la muestra [3]. Cuando la separación es muy grande la imagen puede degradarse debido a que se pierden los efectos típicos de interferencia.

El setup usual de este método es el que se observa en la figura 1.4. La principal ventaja del método es que no requiere de ningún instrumento óptico, fuera del necesario para conformar el

haz si es que éste lo requiriera, además de que la imagen mejorada que se obtiene no requiere de ningún tipo de procesamiento.

Como desventaja se puede nombrar el hecho de necesitar un haz espacialmente coherente, lo que limita las fuentes a utilizar. Por ejemplo la radiación de sincrotrón posee naturalmente una alta coherencia espacial por lo que resulta óptima para utilizarse en este método. En la actualidad, esta técnica se desarrolla ampliamente en los sincrotrones de 3^{ra} generación, como el Spring-8 en Japón. Con respecto a trabajos actuales en los que se utiliza el método se pueden mencionar dos, el publicado en esta año por Burvall et al. [9], donde se presenta una comparación entre las técnicas de reconstrucción de fase utilizadas en tomografías utilizando el método de propagación. En otro trabajo reciente, no publicado aún, presentado por Kneip et al. [10] se presenta la implementación de un instrumento alternativo de radiación de sincrotrón, utilizado para medir imágenes con este método.

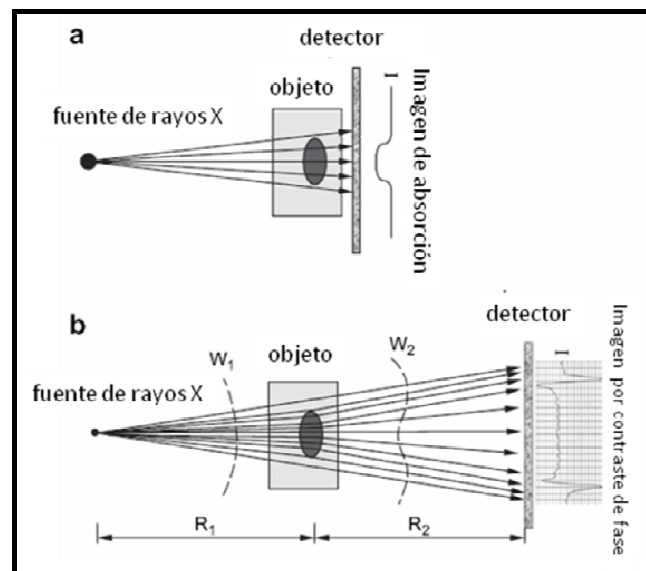


Figura 1.4: Método de propagación. a) Si la separación entre la muestra y el detector es muy pequeña, la imagen obtenida es la convencional de rayos X. b) Si la separación es mayor los efectos de difracción se hacen presentes.

En el método de *imágenes basadas en un analizador* (también llamado ABI por su nombre en inglés *analyser based imaging*) se emplea un cristal analizador colocado entre la muestra y el detector con el fin de estudiar la distribución angular, en el plano de difracción del cristal, del haz de rayos X emergente de la muestra. Esto es posible gracias a la función reflectividad y/o de transmitancia del mismo (ver capítulo 2) que modula la intensidad del haz que se refleja en función del ángulo de incidencia, lo que lo hace sensible a las pequeñas desviaciones del haz. Esto condiciona al haz que incide en la muestra, requiriendo que sea paralelo, monocromático y longitudinalmente coherente [11] para que las desviaciones del haz emergente de la muestra se deban exclusivamente a características de la misma y pueda ser difractado por el cristal. Con este método se reconstruyen tres imágenes que representan independientemente los efectos que sufre el haz al atravesar la muestra: absorción, refracción y dispersión. La imagen

de absorción es en primera aproximación un mapa del coeficiente de absorción de la muestra, la imagen de refracción realiza los bordes de la imagen donde hay un cambio en el índice de refracción (regiones heterogéneas de la muestra) y la imagen de dispersión permite distinguir las pequeñas estructuras que pasan desapercibidas cuando todos los efectos son considerados a la vez.

Existen en la literatura numerosos algoritmos para reconstruir las imágenes paramétricas. Todos ellos utilizan imágenes obtenidas en diferentes condiciones dependiendo de la geometría del cristal analizador. El setup utilizado en este método es el que se observa en la figura 1.5 que luego será descrito con mayor detenimiento.

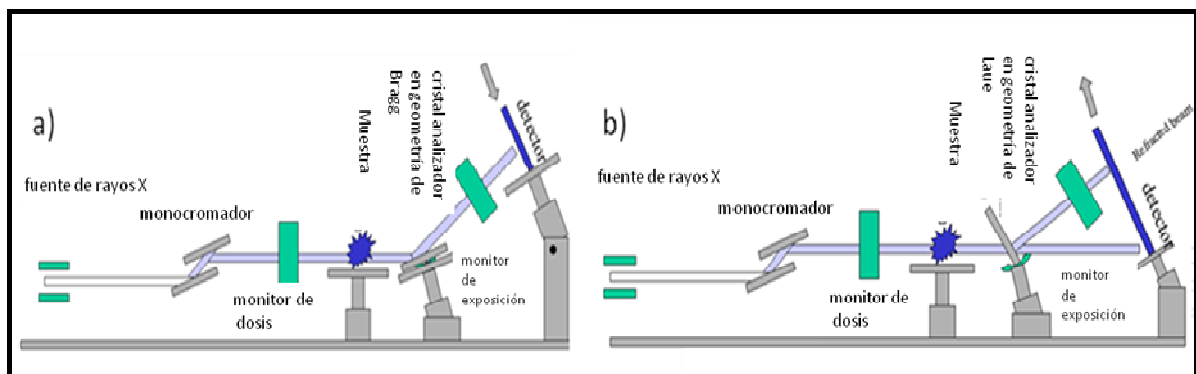


Figura 1. 5: Setup experimental del método ABI: a) cristal analizador en geometría de Bragg. b) cristal analizador en geometría de Laue.

La diferencia entre el setup a) y b) de la figura anterior es la geometría del cristal analizador: geometría de reflexión o de Bragg y de transmisión o de Laue, respectivamente. Cada una proporciona una forma diferente de obtener las imágenes necesarias para la reconstrucción. Por ejemplo, cuando se utiliza geometría de Bragg se considera *un* haz emergente del cristal (para cristales gruesos) para cierta posición angular del analizador, así las imágenes se obtendrán para distintas posiciones angulares del mismo, mientras que en geometría de Laue los haces emergentes son dos, que pueden utilizarse para obtener dos imágenes simultáneamente, aunque para éste último caso el cristal debe ser considerablemente más fino (del orden de cientos de micrómetros) lo que trae dificultades en lo concerniente a la manipulación. En el capítulo 2, se describe con más detalles ambas geometrías de difracción.

Para dar un ejemplo de las implementaciones actuales del método, se hace referencia al trabajo publicado en el año 2010 por Coan et al. [12] donde se estudia la viabilidad de la aplicación del método con un cristal en geometría de Bragg, en estudios biomédicos, con muestras vivas dentro del marco del estudio de la detección de osteoartritis.

Si bien los principios físicos de las técnicas ya se conocían desde fines del siglo XX, sólo el desarrollo y la puesta en funcionamiento de las fuentes de sincrotrón de tercera generación facilitaron que los métodos fueran implementados experimentalmente con mayor profundidad, sumado a las mejoras en la instrumentación en óptica de rayos X. Gracias a ese primer impulso y a pesar de las grandes diferencias que hay entre la radiación emitida por este tipo de

fuentes y un tubo convencional de rayos X, principalmente en el brillo y coherencia, resulta de interés la posibilidad de independizar los métodos de la fuente de sincrotrón con el fin de poder desarrollar experimentos en laboratorios con fuentes convencionales, dado que uno de los principales objetivos es el de implementar los métodos en un ámbito clínico. Existen en la literatura trabajos sobre diseños experimentales y el desarrollo de fuentes alternativas que permitirían implementar los métodos en el laboratorio con buenos resultados [13,14].

Un estudio más profundo de estas técnicas ha llevado a nuevos avances, como por ejemplo obtener imágenes por combinación de técnicas o también el poder reconstruir imágenes tridimensionales de alta resolución, es decir tomografías [9,15-17].

1.4 *Objetivos y esquema de trabajo*

El objetivo del presente trabajo es estudiar el método de imágenes basadas en un analizador (ABI), y sus diferentes algoritmos matemáticos de reconstrucción, a partir de imágenes obtenidas en el Laboratorio Nacional de Luz Sincrotrón (LNLS) de Brasil, empleando una muestra especialmente diseñada a los efectos de realzar los efectos físicos de cada una de las imágenes paramétricas que se obtendrán con esta técnica.

En el siguiente capítulo se describen los principales elementos ópticos que componen el setup experimental necesario para la implementación de este método. Se mencionan los conceptos principales de óptica de rayos X involucrados, como así también de las fuentes utilizadas y sistemas de detección.

En el capítulo 3 se describe con mayor profundidad el método de imágenes basadas en un analizador (ABI) con sus dos posibilidades de implementación dependiendo de la geometría del cristal. En el capítulo 4, se presentan los principales algoritmos utilizados para reconstruir las imágenes paramétricas de absorción, refracción y dispersión a ultra bajo ángulo (USAXS), y la aproximación de óptica geométrica sobre la cual se basan los mismos.

En el capítulo 5 se comparan cualitativa y cuantitativamente los resultados de estos algoritmos, aplicados a las imágenes obtenidas, a través de la implementación de éstos en softwares adecuados (MatLab y Origin). Se analizaron las ventajas y desventajas de cada uno de ellos en cuanto a sus resultados. Por último, se presentan las conclusiones finales en el capítulo 6.

Capítulo 2

INSTRUMENTACIÓN Y ÓPTICA DE RAYOS X

Como ya se mencionó el desarrollo de estas técnicas de imágenes por rayos X basadas en el contraste de fase, tuvo lugar gracias al avance en las fuentes de radiación y en la instrumentación necesaria de óptica de rayos X.

Los métodos de imágenes por contraste de fase poseen un setup experimental dedicado y específico, según sea la técnica utilizada. La conformación del haz incidente sobre la muestra es el punto central, puesto que los requerimientos sobre su divergencia angular, monocromaticidad y coherencia deben ser cumplidos para el éxito de la técnica. Además, el proceso de conformación depende fuertemente de la fuente de rayos X y la instrumentación utilizada, donde ésta última puede ser muy variada y compleja, incluyendo, dependiendo del caso, espejos de rayos X, cristales, colimadores, filtros, monitores de intensidad, etc. Por último, el sistema de adquisición de la imagen es otro elemento de importancia, influyendo éste en la resolución espacial y cuantificación (resolución en niveles de grises) de la imagen.

A continuación se describen los principales elementos utilizados.

2.1 Cristales

Los cristales utilizados en óptica de rayos X son estructuras sólidas periódicas de átomos o moléculas, que debido a su arreglo ordenado poseen la propiedad, entre otras, de difractar al haz incidente, siempre que el mismo posea una longitud de onda del orden del espaciado entre los planos del cristal. Para la longitud de onda de la energía de rayos X, esto se cumple para una gran cantidad de materiales. La utilización de cristales tiene como objetivo la modificación del haz incidente. Existen dos geometrías en que se pueden disponer un cristal para que interactúe con el haz; la geometría de reflexión o de Bragg, donde el haz incidente y difractado están del mismo lado de la superficie del cristal y la de transmisión o geometría de Laue, para la cual el haz incidente y el difractado están regiones opuestas a la superficie. En la figura 2.1 se muestran ambas geometrías, donde se indica a los haces incidente y transmitido como \vec{k}_0 (vector de onda que indica la dirección de incidencia) y el haz difractado como \vec{k}_G . Se señalan además a los ángulos γ_0 y γ_G que forman el haz transmitido y difractado con la normal a la superficie (se le llama reflejado al haz que fue difractado y transmitido al que conserva la dirección incidente).

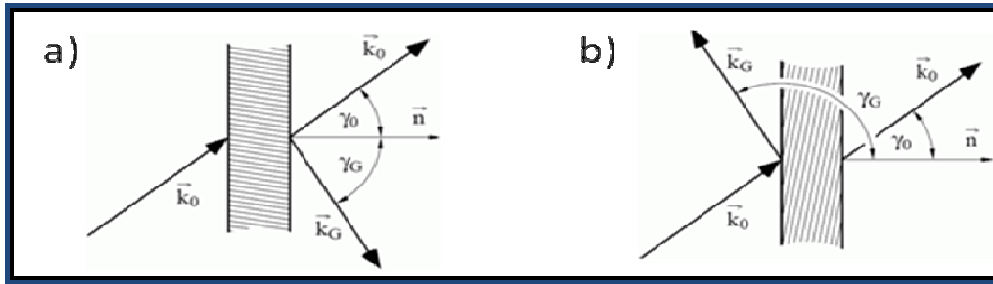


Figura 2.1: a) Geometría de Laue; b) Geometría de Bragg. Las líneas dentro del área del cristal grafican la disposición de los planos de difracción.

El fenómeno de la difracción de Rayos X consiste básicamente en un proceso de interferencia constructiva de ondas de rayos X que se produce en determinadas direcciones del espacio, modificando la trayectoria del haz incidente. Esta interferencia ocurre cuando la diferencia de camino óptico recorrido por las ondas es múltiplo entero de la longitud de onda de la radiación incidente. La difracción en los planos del cristal está descrita por la ley de Bragg que se expresa de la siguiente manera:

$$2d_{hkl}\text{sen}\theta_B = n\lambda \quad (2.1)$$

donde n es un número entero, λ es la longitud de onda de la radiación incidente, d_{hkl} es la separación entre los planos de difracción considerados (hkl) y θ_B es el ángulo entre éstos y la radiación incidente. Es decir, dada la separación entre ciertos planos de interés existirá (en principio) para una longitud de onda deseada un valor de θ_B para el cual el cristal difractará sólo en esa energía. La difracción tendrá lugar en el plano definido por la normal a los planos que difracten, la dirección del haz incidente y del reflejado (o difractado). Además de un haz difractado existe un haz transmitido que conserva la dirección del haz incidente.

2.1.1 Asimetría

Una de las características que define a un cristal es la orientación de los planos de difracción de interés respecto a la superficie, esta característica se denomina asimetría (γ), y es definida como la razón entre el coseno del ángulo que forma la dirección de la normal de la superficie del cristal con la del haz difractado (γ_G) y el coseno del ángulo entre la normal del cristal con la dirección del haz incidente (γ_0) (ver figura 2.1), es decir:

$$\gamma = \frac{\cos(\gamma_G)}{\cos(\gamma_0)}$$

La asimetría será positiva para la geometría de Laue y negativo para la de Bragg. Para un cristal simétrico, $|\gamma| = 1$, es decir, en este caso particular los planos de difracción estarán paralelos a la superficie en el caso de geometría de Bragg y perpendiculares a la misma para

geometría de Laue. La asimetría de un cristal es una característica de importancia ya que influirá en las propiedades del mismo. Por ejemplo, la sección transversal del haz difractado para geometría de Bragg depende fuertemente de la asimetría que presente el cristal difractor [2], en la figura 2.2 se observa esta propiedad para tres casos diferentes, donde claramente se observa esta variación.

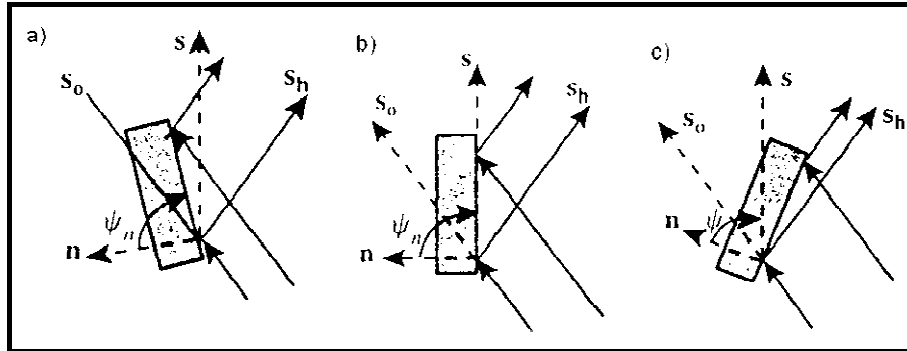


Figura 2.2: Variaciones del tamaño transversal del haz difractado en función de la asimetría del cristal.

2.1.2 Curvas de reflectividad y transmitancia

Un cristal además de poder modificar la sección transversal del haz, influye en su distribución angular y, por lo tanto, en su divergencia por medio de su función de reflectividad y/o de transmitancia.

La reflectividad o transmitancia de un cristal describe como varía el cociente entre la intensidad reflejada o transmitida por unidad de área y de tiempo y la intensidad incidente, como función del ángulo de incidencia del haz sobre el cristal. Estas funciones también son conocidas como *Rocking Curve* (RC). El máximo de la RC del haz difractado no se cumple para $\theta = \theta_B$, ángulo para el cual se cumple la condición de Bragg (ver ecuación (2.1)), sino que por efectos de refracción en el cristal, según la teoría dinámica de difracción [2], se cumple para $\theta_B + \Delta\theta_{hs}$, donde este corrimiento depende de la asimetría de la forma:

$$\Delta\theta_{hs} = \frac{-\chi_0(1-1/\gamma)}{2\text{sen}(2\theta_B)},$$

donde χ_0 es la susceptibilidad dieléctrica del medio.

Para cristales en geometría de Bragg las curvas de reflectividad y transmitancia varían con el espesor. El caso de mayor interés es el de cristales gruesos ya que serán utilizados como monocromadores de rayos X. Se los define como gruesos respecto a la distancia de extinción Λ_B , relacionada con la distancia para la cual la intensidad del haz transmitido cae a 1/e del valor incidente (para Si(333) y una energía de 10,7keV, $\Lambda_B = 20 \mu\text{m}$). Por lo tanto en lo que sigue describiremos las propiedades de la función de reflectividad. La forma de la RC, (es decir la función reflectividad del cristal) es asimétrica, debido a los efectos de la absorción

anómala (la absorción a bajos ángulos es distinta que a ángulos mayores). En la figura 2.3 se muestra la reflectividad para el caso de un cristal de Si para distintos planos de difracción y diferente energía y se muestra el corrimiento del máximo respecto a θ_B . El ancho de la RC a mitad de altura (FWHM o ancho de Darwin $2\delta_{hs}$ o $\Delta\theta_D$) se expresa como:

$$2\delta_{hs} = \frac{2R\lambda^2}{\pi V \sin(2\theta_B)} \frac{1}{\sqrt{|\gamma|}} |C| \sqrt{F_h F_{\bar{h}}}$$

El ancho de Darwin aumenta con la longitud de onda de la radiación incidente y con el factor de estructura F_h , dependiente del material y de la dirección cristalina h , además, se observa que depende del coeficiente de asimetría γ , de la polarización de la radiación incidente C ($C = \cos(2\theta_B)$ para polarización π , es decir el campo eléctrico es paralelo al plano de difracción y $C=1$ para polarización σ , el campo eléctrico perpendicular al plano de difracción) y del volumen de la celda unidad V . R es el radio clásico del electrón.

La expresión para la intensidad reflejada por un cristal grueso y perfecto es la siguiente [2]:

$$I_h = \left| \frac{\chi_h}{\chi_{\bar{h}}} \right| \left| \eta \pm \sqrt{\eta^2 - 1} \right|^2$$

donde $\chi_h = -\frac{R\lambda^2 F_h}{\pi V}$ es la componente de Fourier de la susceptibilidad dieléctrica para la reflexión (hkl) y $\eta = \frac{\Delta\theta \sin(2\theta_B) + \chi_0(1-\gamma)/2}{\sqrt{|\gamma|} |C| \sqrt{\chi_h \chi_{\bar{h}}}}$ es el parámetro de desviación. Estos resultados son propios de la Teoría Dinámica de la difracción.

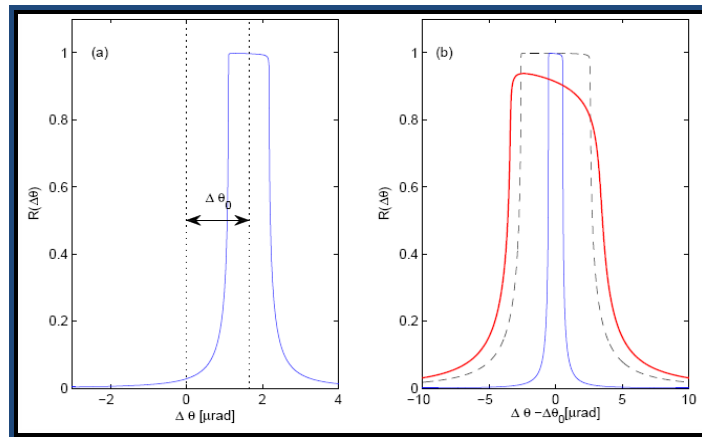


Figura 2.3: Curvas de reflectividad para Si(333) a 50 keV. a) Desviación desde el ángulo de Bragg por efectos de refracción en una cantidad $\Delta\theta_0$. b) Curvas de reflectividad centradas en $\theta_B + \Delta\theta_0$ para: Si(333) a 50 keV (curva de menor ancho), Si(111) a 50 keV (línea de puntos) y Si(333) a 10 keV (curva más ancha).

En el caso de geometría de Laue (ver figura 2.1-a), el comportamiento de la difracción es similar al caso Bragg cuando el cristal tiene un espesor mucho mayor que Λ_L (distancia de extinción, comúnmente llamada Pendellösung), con la salvedad de que se tiene también un haz transmitido. Por otro lado, si el cristal es fino comparado con el valor de Λ_L la intensidad reflejada y la transmitida, son funciones oscilatorias del espesor del cristal. Para un cristal de silicio (220) y una energía incidente correspondiente a Cu- α , es decir $E=7.9\text{keV}$, $\Lambda_L = 15.26\mu\text{m}$ [2]. Las formas de las RCs se muestran en la figura 2.4, donde se puede observar que las oscilaciones son complementarias, cuando la reflectividad es máxima la transmitancia es mínima y viceversa.

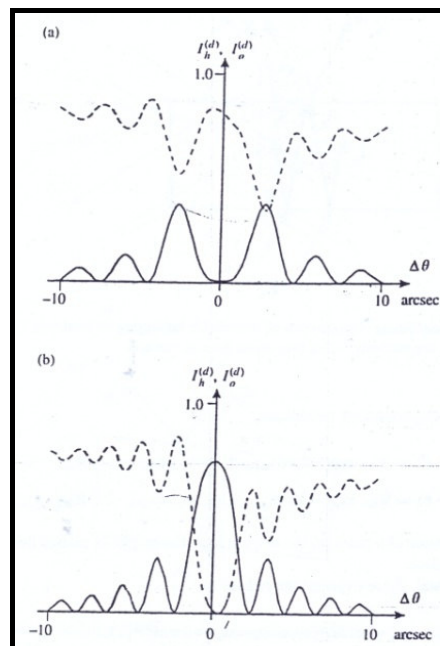


Figura 2.4: Intensidad difractada (curva sólida) y transmitida (curva de puntos) para distintos espesores de un cristal de Si(220) para una energía de 7.9 keV: a) $t/\Lambda_L = 1.0$. b) $t/\Lambda_L = 1.5$, donde t es el espesor del cristal.

2.1.3 Monocromador

Los cristales en geometría de Bragg son comúnmente utilizados para monocromatizar el haz. A diferencia del caso ideal expresado con la ley de Bragg, no existe un único ángulo de difracción sino que la relación se cumple para un rango de ángulos alrededor de θ_B , con una aceptación angular dada por el ancho de Darwin, esto es expresado en la RC del cristal y trae como consecuencia que no sólo una longitud de onda sea difractada, sino que exista una banda de energía (alrededor de la energía para la que se calculó inicialmente la ley de Bragg) que cumplirá la condición. Dado un haz policromático incidente sobre un cristal plano, la banda de energía difractada será: $\Delta\lambda = 2d_{hkl} \cos\theta_B \Delta\theta = \lambda \cot\theta_B \Delta\theta$ (se obtiene de diferenciar la relación de Bragg), donde $\Delta\theta$ es la divergencia del haz difractado. Esta divergencia se define como $\Delta\theta = \sqrt{\Omega^2 + (2\delta_{hs})^2}$, donde Ω es la divergencia natural del haz incidente y $2\delta_{hs}$ el

ancho de Darwin de la RC del cristal. $\Delta\theta$ dependerá estrechamente de la aceptación angular de la RC del cristal.

La monocromatización puede obtenerse usando un arreglo de cristales, el cual presenta ciertas ventajas, como por ejemplo independizarse de la divergencia natural de haz incidente. Existen dos geometrías básicas para tales arreglos: geometría no dispersiva o paralela (+,-) y dispersiva o antiparalela (+,+). Estos arreglos se observan en la figura 2.5.

En la geometría dispersiva la disposición de los cristales es tal que el sistema actúa como un filtro a la divergencia del haz incidente de modo que si consideramos cristales idénticos y simétricos sólo se reflejará un haz cuya divergencia será la del FWHM de la RC de los cristales, dando como consecuencia un haz cuya banda en energía es estrecha y una notoria reducción de intensidad en el haz difractado.

En geometría no dispersiva, para cristales idénticos y simétricos no se modifica marcadamente la divergencia del haz, que dependerá de la aceptación de la RC, pero se obtiene la ventaja de tener un haz emergente paralelo al incidente. Si los cristales no son iguales o no son simétricos o están levemente fuera del paralelismo, se obtienen simetrías como la llamada “ligeramente dispersiva”. Con este tipo de geometría se modifica el haz emergente (en divergencia, intensidad y ancho en energía) [2].

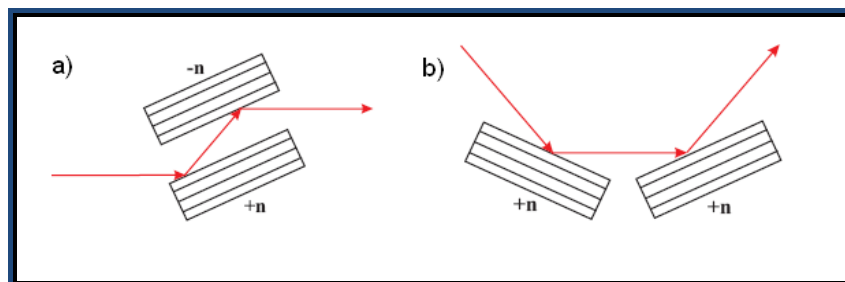


Figura 2.5: Arreglo de dos cristales: a) Geometría no dispersiva (+,-), b) Geometría dispersiva (+,+).

Consideremos el arreglo de los dos cristales (en cualquier geometría), el haz incidente se reflejará en el primer cristal y luego en el segundo, si se hace girar al segundo cristal respecto al primero, se obtendrá la curva de reflectividad del sistema, que es la convolución de las RC de los cristales independientes. En el caso de dos cristales en geometría no dispersiva, la RC resultante es simétrica y su forma se asemeja a la de una Gaussiana, mientras que en el caso de dos cristales en geometría dispersiva, la RC del sistema muestra una ligera asimetría dependiendo de la absorción intrínseca del cristal, manteniendo una semejanza con la forma Gaussiana. En la figura 2.6 se comparan las formas de las RCs para las dos geometrías para el caso de cristales con distinta absorción, con la intrínseca de un cristal en geometría de Bragg.

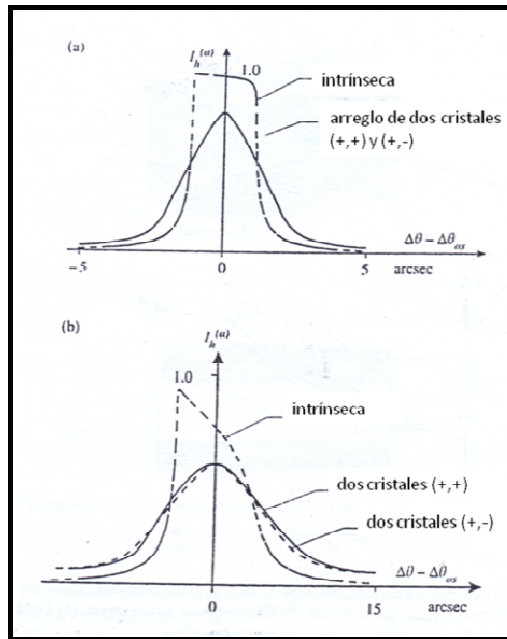


Figura 2.6: Intensidad difractada para un cristal (curva intrínseca) y para arreglos de dos cristales en geometría dispersiva (+,+) y no dispersiva (+,-) para distintos cristales y energía. a) Cristal de Si(220) a una energía de 17.4 keV. b) Cristal de Ge(220) a una energía de 12.4keV.

2.1.4 Armónicos

La radiación incidente a un cristal podría ser difractada por otros planos que no sean los de interés, provocando que otras energías, con sus respectivas curvas de aceptación sean difractadas por el monocromador, éstas se denominan armónicos.

Consideremos nuevamente la ley de Bragg: $2d_{hkl} \text{sen} \theta_B = n\lambda$; la separación entre planos cuyos índices de Miller sean (mh, mk, ml) se puede expresar de la siguiente manera:

$$d_{mh, mk, ml} = \frac{d_{hkl}}{m}$$

La longitud de onda para la cual se cumplirá la ley de Bragg para estos planos y para el ángulo θ_B será la siguiente:

$$2d_{mh, mk, ml} \text{sen} \theta_B = n\lambda'$$

$$2 \frac{d_{hkl}}{m} \text{sen} \theta_B = n\lambda' = n \frac{\lambda}{m} \Rightarrow \lambda' = \frac{\lambda}{m}$$

Comparando con la ecuación original (el ángulo θ_B es el mismo);

$$2 \text{sen} \theta_B = n \frac{\lambda}{d_{hkl}} = n \frac{\lambda}{m d_{mh, mk, ml}} = n \frac{\lambda / m}{d_{mh, mk, ml}}$$

Es decir, para $n=1$ (por ejemplo), la relación de Bragg para el ángulo θ_B obtenido para el plano de difracción y la longitud de onda de interés también se cumple para las reflexiones en el plano $d_{mh,mk,ml}$ de la longitud de onda λ/m (energías mayores), generando los armónicos. Estos armónicos pueden suprimirse colocando filtros adecuados o utilizando como monocromador un arreglo de dos cristales enfrentados, levemente desalineados perdiendo así la geometría no dispersiva (modificando la energía del haz emergente). La presencia de los armónicos es perjudicial si la fuente de rayos X que se está utilizando emite radiación con las energías adecuadas, como es el caso de la radiación sincrotrón. En estos casos, generalmente, se usa otro dispositivo óptico para evitar la presencia de los armónicos: un espejo (colocado antes del monocromador) que funciona en reflexión total cuya reflectividad disminuye considerablemente para energías altas, impidiendo que lleguen al cristal en primer lugar, por ejemplo para un espejo de platino con un ángulo de incidencia de la radiación de 0.15° , la reflectividad es prácticamente 0 para energías superiores a los 32 KeV.

Los cristales más utilizados son fabricados de silicio ya que alcanzan altos grados de pureza y se comportan como cristales perfectos, además de ser monetariamente accesibles. También se utilizan cristales de germanio o de aleaciones como GaAs.

2.2 Fuentes de rayos X

Desde el punto de vista de la adquisición de imágenes es importante que la fuente pueda generar el flujo de fotones suficiente, en un cierto rango de energía, que permita el uso de elementos ópticos con el fin de seleccionar la energía adecuada para optimizar la calidad de la imagen sin que la intensidad se vea fuertemente afectada, evitando tener que aumentar el tiempo de exposición de la muestra y en consecuencia la dosis depositada si la aplicación es en el ámbito médico. Las fuentes de rayos X comúnmente utilizadas para imágenes son radiación sincrotrón y tubo convencional de R-X o microfocos.

2.2.1 Radiación de Sincrotrón

La radiación de sincrotrón proviene de la aceleración de electrones en una órbita cerrada y consiste de un espectro continuo que barre energías que van desde el infrarrojo hasta los rayos X duros. Este tipo de fuentes da lugar a un alto flujo de fotones emergentes con una divergencia del orden o menor a 1 mrad en la dirección vertical y en la horizontal depende de las características del sincrotrón y de cómo se genera el haz de fotones (para onduladores < 1 mrad, para wigglers ~ 10 mrad y para dipolos magnéticos ~ 100 mrad) [18]. La radiación es linealmente polarizada en el plano de la órbita de los electrones y polarizada elípticamente fuera de este plano. Dado que los electrones en el anillo de almacenamiento están agrupados, la radiación emitida tiene una estructura temporal de pulsos, la duración de cada pulso es de menos de 1ns y el tiempo entre dos de ellos va desde unos pocos a decenas de ns [2]. Los espectros típicos de los distintos tipos de sincrotrón son los que se observan en la figura 2.7.

Una característica y requerimiento importante que debe cumplir un haz de rayos X para permitir desarrollar y aplicar las técnicas no convencionales de imágenes de rayos X es la coherencia.

La coherencia espacial o transversal describe cómo están correlacionadas las fases en dos puntos distintos de un frente de onda. La longitud de coherencia transversal ésta dada por la siguiente relación $l_T = \lambda \frac{L_0}{d}$, donde L_0 es la distancia desde la fuente al objeto y d es el tamaño de la fuente. Debido al pequeño tamaño de la misma y a las largas distancias entre la fuente y la muestra, en los sincrotrones de tercera generación se alcanza una alta coherencia espacial ($l_T=11\mu\text{m}$ para $\lambda=0.1\text{nm}$ en el sincrotrón *Photon Factory* ubicado en Japón para el cual $L_0=100\text{m}$). Por otro lado, también puede definirse la coherencia longitudinal o temporal, la cual hace referencia a la longitud que pueden tener las diferencias de camino entre dos haces de modo de crear un patrón de interferencia. Si a la radiación incidente se la considera como paquetes de onda de longitud finita (relacionada con su energía, una onda monocromática tiene una extensión infinita) la interferencia tendrá lugar si la diferencia de camino recorrido por ambos paquetes es menor que la longitud de coherencia dada por $l_l = \frac{\lambda_0^2}{\Delta\lambda}$. Es decir la coherencia longitudinal ésta relacionada con la monocromaticidad del haz.

Debido a la gran intensidad y el amplio ancho de banda, utilizando el adecuado sistema de cristales y dispositivos ópticos es posible conformar adecuadamente el haz, definiendo correctamente su grado de monocromaticidad, divergencia y tamaño, para su aplicación favorable en técnicas de imágenes no convencionales, obteniendo además haces con intensidades resultantes suficientes para realizar los experimentos.

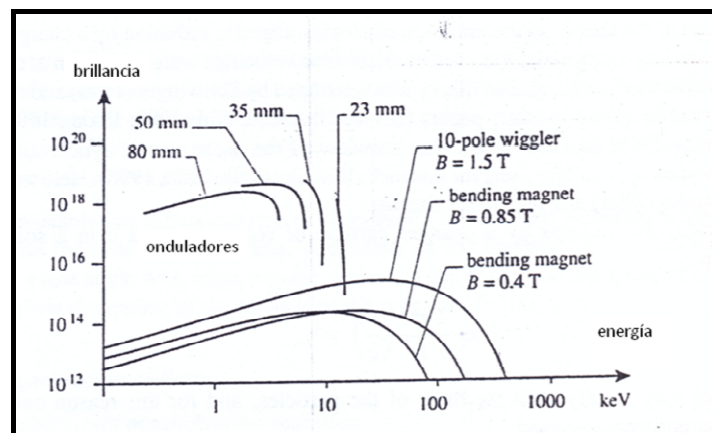


Figura 2.7: Comparación entre los espectros típicos de los distintos tipos de sincrotrón. La brillantez ésta dada en fotones/(s.mm².mrad².(0.1%ancho de banda)).

2.2.2 Radiación de un tubo convencional de rayos X

El tubo convencional de rayos X es la fuente de radiación más utilizada. En este caso los electrones inciden sobre un blanco (ánodo) emitiendo radiación a causa de su desaceleración, además de interactuar con el material provocando excitaciones en átomos del mismo que

pueden producir radiación característica al desexcitarse. Así el espectro consiste de un continuo (*Bremsstrahlung*) sobre el que cual se superponen picos correspondientes a la radiación característica del material del ánodo. La energía máxima de los fotones dependerá de la energía máxima de los electrones que inciden en el blanco. La radiación es no polarizada e incoherente. El flujo de fotones es mucho menor al del sincrotrón y la radiación no es colimada por lo tanto sólo una fracción de la misma podría ser utilizada para los experimentos de imágenes no convencionales. Un espectro típico de un tubo de rayos X se muestra en la figura 2.8. En la Figura 2.9 se compara la brillantez de las diferentes fuentes de radiación, es decir el flujo de fotones por unidad de área, tiempo y energía, poniendo en evidencia la gran diferencia en la intensidad emergente de un tubo de rayos X y de una fuente de sincrotrón.

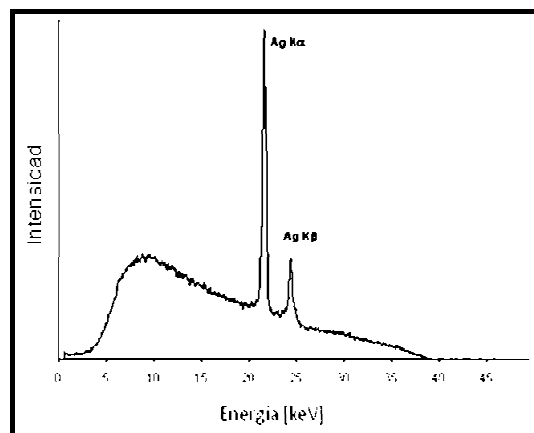


Figura 2.8: Espectro típico de un tubo de rayos X, para un ánodo de plata y un voltaje de 40kV.

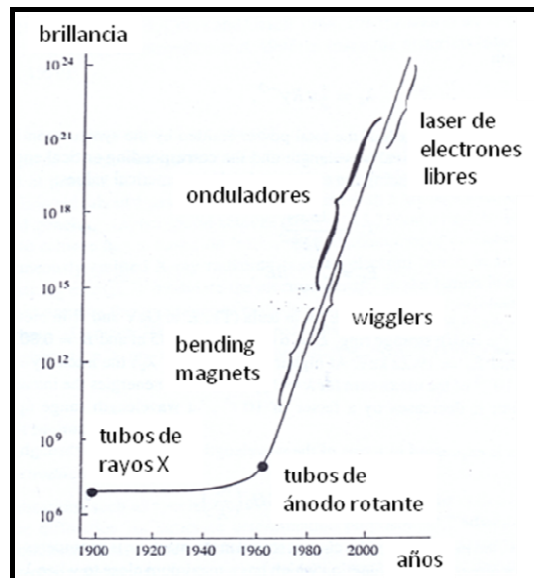


Figura 2.9: Comparación de la magnitud de la brillantez [fotones/(mm.s.mrad.(0.1% ancho de banda))] para distintas fuentes de rayos X, en función del tiempo en que fueron desarrollados.

2.3 Sistemas de detección

Los detectores que se utilizan generalmente son detectores bidimensionales. Dado que el tamaño del haz en general no cubre toda la muestra, las imágenes son adquiridas escaneando la muestra verticalmente por el haz, interponiéndola en la trayectoria del mismo. El detector se coloca perpendicular al haz emergente del cristal de manera de evitar posibles errores en la imagen, como deformaciones.

La elección del detector debe hacerse teniendo en cuenta su área total activa, resolución espacial y su rango dinámico. El área activa determinará el tamaño máximo de las muestras que podrán ser estudiadas. El tamaño del pixel del detector, es un factor importante en la resolución espacial de la imagen obtenida, limitando el menor tamaño de detalle posible a ser observado. Y por último, el rango dinámico determinará la banda en energía adecuada de trabajo, para evitar distorsiones en la intensidad colectada en la imagen debido a diferencias considerables en la eficiencia de detección.

En la actualidad existen diversos tipos de detectores aptos para su aplicación en técnicas de imágenes, se pueden nombrar los detectores de estado sólido, placa de imágenes y placas fluorescentes, entre otros. La diferencia principal entre éstos, se encuentra en el principio físico utilizado para la adquisición de la imagen. Según sea el proceso físico utilizado para registrar la radiación incidente y sus características particulares de construcción, se definirán su rango dinámico, curva de eficiencia, resolución temporal y en energía, proporcionalidad en su respuesta, bajo ruido de fondo, entre otras características fundamentales de un detector.

De acuerdo a lo mencionado anteriormente, la resolución espacial del detector es un factor determinante en la resolución final de la imagen. Además, ésta debe estar en concordancia con la dimensión de los detalles de la muestra que se desea registrar. En general, y para aplicaciones biológicas, estas resoluciones son del orden de las decenas de micrones cuadrados.

Capítulo 3

MÉTODOS DE IMÁGENES BASADAS EN UN ANALIZADOR

El método de imágenes basadas en un analizador (ABI), es un método no convencional de imágenes de rayos X por medio del cual, a diferencia de los otros métodos de reconstrucción de imágenes por contraste de fase, se pueden obtener de forma separada imágenes representativas de cada uno de los tres principales efectos que sufre un haz al atravesar un objeto; éstos son absorción, refracción y dispersión a ultra bajo ángulo (USAXS). Para obtener estas imágenes realizando cada uno de estos efectos, el método utiliza algoritmos de reconstrucción que combinan imágenes adquiridas bajo diferentes condiciones experimentales.

El setup experimental general se corresponde con el que se mostro en la figura 1.5, indicando sus componentes principales: una fuente de radiación de rayos X, un monocromador (en general de dos cristales), un cristal analizador ubicado posterior a la muestra y un detector. La radiación incidente sobre la muestra, la cual se ubica entre el monocromador y el analizador, debe ser monocromática, paralela y longitudinalmente coherente. Su intensidad está modulada por la reflectividad o transmitancia del sistema, que es la convolución de la RC de los cristales que conforman el haz sobre la muestra.

El cristal analizador puede ser utilizado en geometría de Laue o de Bragg, y es el que determina y define la condición en que se medirán las imágenes necesarias para la reconstrucción. Para diferentes posiciones angulares del cristal analizador, éste actúa como un filtro angular de la radiación transmitida a través del objeto, dado que sólo los haces que viajan en una estrecha ventana angular cerca de la condición de Bragg, serán difractados.

A continuación se describen los efectos obtenidos en las imágenes reconstruidas y las condiciones en que pueden ser medidas las imágenes utilizadas para la reconstrucción, es decir, las formas en que puede utilizarse el método dependiendo de la geometría del cristal analizador.

3.1 Efectos en las imágenes reconstruidas

Como consecuencia de la interacción del haz con la muestra, la absorción es uno de los principales efectos, ésta es la fuente de contraste de las imágenes de rayos X convencionales. En el método ABI, además de la absorción en la muestra se detectan también efectos de extinción que hacen referencia a la pérdida de intensidad asociada con los haces que son desviados fuera de la aceptación angular del analizador (dada por su curva de reflectividad) y que contribuyen delineando los bordes correspondientes a las interfaces entre las estructuras internas de la muestra que poseen distinto coeficiente de refracción o donde las diferencias en el espesor son importantes. Esta capacidad del método ABI claramente se traduce en imágenes con mejor contraste que las obtenidas

por el método convencional, donde sólo se registra como efecto de interacción del haz con la muestra a la absorción.

Por otro lado, las variaciones locales en el espesor o en el índice de refracción de la muestra generan un gradiente de fase que se traduce en desviaciones del haz, asociadas con refracción. La relación entre los ángulos de desviación y el gradiente de la fase del haz emergente de la muestra en una dirección perpendicular a la de propagación está dada por la siguiente relación [19]:

$$\Delta\theta_z = \frac{\lambda}{2\pi} \frac{\partial\varphi}{\partial y}$$

donde λ es la longitud de onda de la radiación incidente, φ es la fase de la amplitud del haz emergente de la muestra y $\Delta\theta_z$ es la desviación del mismo desde su dirección de incidencia, en el plano de difracción del cristal (ver capítulo 2). Se considera que el haz incidente se propaga en la dirección z, con el plano yz paralelo al plano de difracción.

Una de las imágenes reconstruidas por el método ABI se basa en este efecto, asignándole a cada pixel de la imagen, la desviación sufrida por el haz asociado al mismo, la imagen es la de refracción. A los efectos anteriores revelados por este método, se le suma el de dispersión de los rayos X que tiene un rol importante en la generación de contraste; la dispersión originada por las pequeñas estructuras que no son resueltas por el detector.

Con la intención de adquirir una idea cualitativa de los efectos de la refracción y la dispersión considérese lo siguiente. Las desviaciones que puede sufrir el haz que llega al detector debido a estos efectos son pequeñas comparadas al tamaño de un pixel (el orden de las desviaciones permitidas viene dado por la aceptación angular de la RC del sistema) de modo que cualquier desviación que sufra una porción del haz que emerge de una pequeña área $\Delta x\Delta y$ en el plano del objeto centrada en el punto (x, y) no afecta su posición en el detector. Las desviaciones mayores serán rechazadas por el cristal analizador por lo que contribuyen al contraste por extinción. Se considera, entonces, que la interferencia entre pixeles adyacentes es despreciable [20]. Si el tamaño del pixel del detector es lo suficientemente pequeño comparado con las estructuras que componen al objeto, se dice que las mismas son resueltas por el detector (esto dependerá del tamaño del pixel) y las desviaciones que producen se asocian a refracción. Las estructuras finas, de dimensiones menores al tamaño del pixel y que no son detectadas separadamente, sólo contribuyen en dispersar el haz provocando un aumento en la divergencia angular del haz que llega al detector en cada pixel, como se puede observar en la figura 3.1.

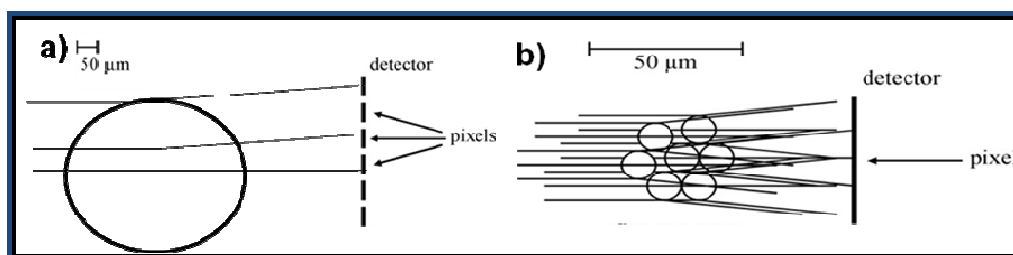


Figura 3.1: a) La dimensión del objeto frente al tamaño del pixel del detector permite que sea resuelto por el mismo. b) Los objetos no llegan a ser resueltos por el detector.

En el método ABI la dispersión en el rango de los miliradianes, la llamada dispersión a bajo ángulo (*small angle X-ray scattering*, SAXS), originada por estructuras del orden de los nanómetros, será rechazada por el analizador dando lugar al llamado contraste por extinción. La dispersión a ángulos menores (*ultra-small angle X-ray scattering*, USAXS) del orden de los microradianes, originada por estructuras del orden de los microradianes, se considera que caen dentro del rango de aceptación de la RC del sistema [21].

Por tanto, el contraste en las imágenes obtenidas por medio del método ABI, se debe a la detección selectiva de los efectos de absorción, refracción, SAXS y USAXS, resultando ser una técnica con una potencialidad enorme, resaltando regiones con leves diferencias en el coeficiente de absorción, pero con claras interfaces y/o estructuras. Este método proporciona una gran cantidad de información pero la interpretación puede resultar ambigua debido a la superposición de efectos. Para separarlos, con el fin de facilitar la visualización de los distintos rasgos o bien para cuantificarlos, se han propuesto distintos algoritmos matemáticos que se basan en la combinación de dos o más imágenes adquiridas.

3.2 ABI: diferentes geometrías del analizador

El cristal analizador puede ser utilizado en dos geometrías: transmisión (Laue) o reflexión (Bragg).

3.2.1 ABI utilizando un cristal analizador en geometría de Laue

El método ABI utilizando esta clase de cristal analizador fue presentado por primera vez por Ingal y Beliaevskaya en 1995 [22] donde se observó que el efecto del cristal en las imágenes medidas era el de realzar los bordes, dejando en evidencia estructuras de la muestra que no eran apreciadas en la radiografía convencional. El setup utilizado por los autores se muestra en la figura 3.2, donde la fuente utilizada en aquel primer experimento fue un tubo de rayos X con un tamaño de foco de 0.4mmx0.8mm y ánodos de Mo y Ag. El monocromador utilizado consistía en dos cristales en geometría de Bragg asimétricos de modo de reducir la divergencia angular del haz y su ancho de energía. Cuando se utiliza el cristal analizador en geometría de Laue, el haz incidente se divide en dos, un haz transmitido y otro difractado, cada uno tiene asociado una distribución angular llamada transmitancia o reflectividad (véase el capítulo 2).

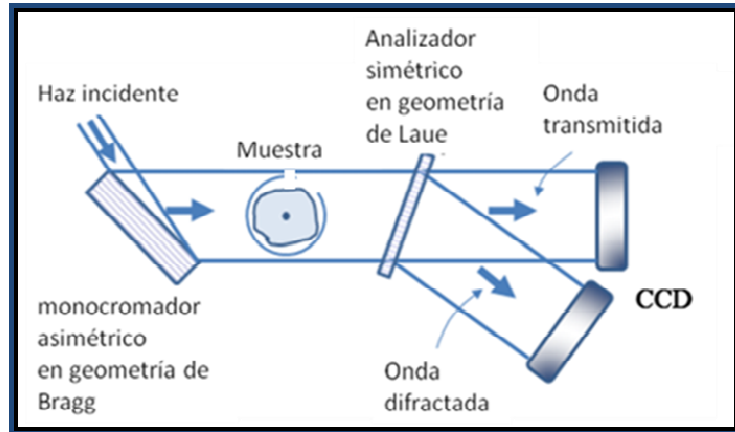


Figura 3.2: Setup experimental para el método ABI con un cristal analizador en geometría de Laue.

Para una posición fija del cristal se miden dos imágenes simultáneamente, una para cada haz emergente y mediante la utilización de algoritmos adecuados que combinan ambas imágenes, se reconstruyen dos imágenes independientes, correspondientes una a *absorción aparente* (se le llama de esta forma ya que está afectada también por dispersión y extinción) y otra de refracción [23]. Recientemente, Kitchen et al. [19] presentaron algoritmos a través de los cuales también se obtiene una tercera imagen correspondiente a efectos de dispersión de la muestra.

Una de las principales diferencias entre utilizar un setup experimental con el cristal analizador en geometría de Laue o usarlo en Bragg es que los algoritmos de reconstrucción de las imágenes para este último involucran adquirir varias imágenes para diferentes posiciones angulares relativas del cristal analizador (como se verá a continuación). En cambio cuando el cristal analizador se dispone en geometría de Laue, las imágenes paramétricas de absorción aparente y refracción pueden ser obtenidas procesando únicamente las dos imágenes adquiridas simultáneamente, la difractada y la transmitida, trayendo como consecuencia menor dosis depositada en la muestra dado que sólo una irradiación es necesaria.

3.2.2 ABI utilizando un cristal analizador en geometría de Bragg

El método ABI utilizando un cristal analizador en geometría de Bragg fue presentado por primera vez por Chapman et al. en 1997 [24]. El setup típicamente utilizado se muestra en la figura 3.3.

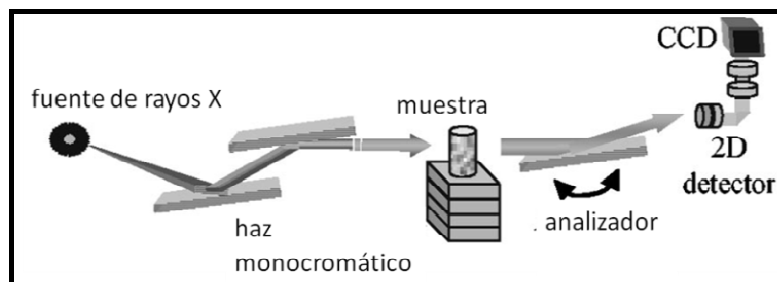


Figura 3.3: Setup experimental para el método ABI utilizando un cristal en geometría de Bragg.

En este caso, las imágenes adquiridas, que luego se combinarán para obtener las paramétricas, se toman en distintas posiciones angulares del cristal analizador. Estas posiciones angulares se determinan respecto a su RC. Por ejemplo, observando la figura 3.4, el cristal estará posicionado en el ángulo correspondiente al punto 2 en la RC si el haz que incide al cristal y que no ha sufrido ninguna desviación al atravesar la muestra es difractado con un valor de intensidad igual a la mitad de la incidente, dado que en esa posición la reflectividad del sistema cae a 0.5 de su valor máximo. Los haces que incidan con ángulos menores serán difractados con mayor intensidad que aquellos que lo hagan a mayor ángulo, así estas variaciones se verán reflejadas en la imagen tomada. Para cada posición angular del analizador se obtendrá una imagen con un contraste diferente dado por la modulación en el haz impuesta por la RC.

Por otro lado, dado que el cristal analizador en geometría de Bragg invierte la imagen, se dispone el detector de manera que escanee el haz en dirección opuesta a la de la muestra para evitar regiones borrosas debido a superposiciones. Esta forma de tomar la imagen se denomina *line scan mode*.

Resulta conveniente recordar que el plano de difracción de un cristal está bien definido, en este caso depende del plano en que se hace girar al analizador, es decir el cristal sólo es sensible a las desviaciones en un solo plano. Esto trae como consecuencia que en las imágenes medidas y por ende en las reconstruidas los efectos sean realizados en una dirección, como se observa en la figura 3.5. En esta figura se muestran las imágenes medidas con el método ABI con un cristal analizador en geometría de Bragg, en las posiciones del analizador indicadas en la parte superior de la figura. Estas imágenes, que no están procesadas mezclan todos los efectos, absorción, refracción y dispersión, pero a pesar de eso presentan un marcado delineamiento de los bordes. En la primera y tercera imagen, la intensidad del haz incidente está modulada de forma asimétrica debido a las pendientes de la RC, por ejemplo, en la imagen de la derecha desviaciones del haz en ángulos de igual cantidad pero direcciones opuestas serán atenuados de diferente forma. El haz que incida al analizador con un ángulo mayor que aquel al que está posicionado el analizador será más atenuado que aquel para el cual no hubo desviación y éste más atenuado que aquel que se desvió en igual cantidad que el primero pero en dirección opuesta. Este efecto es el que produce que los bordes sean remarcados dando una sensación de imagen tridimensional. En la imagen de la izquierda sucede exactamente lo contrario y ese es el motivo por el cual las regiones que aparecen "iluminadas" en la imagen de la derecha aparezcan ahora opacas en la de la izquierda.

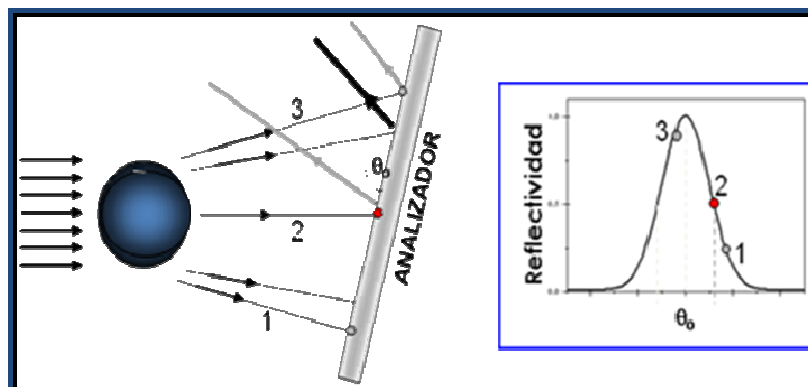


Figura 3.4: Esquema de la desviación sufrida por los haces que emergen de la muestra, incidiendo con distintos ángulos sobre el analizador y su correspondiente ubicación en la RC del sistema.

En la imagen del centro, correspondiente al máximo de difracción la atenuación es simétrica, es decir, ángulos de refracción iguales pero en direcciones opuestas serán igualmente atenuados. Por otro lado el haz que no fue desviado por la muestra será difractado prácticamente sin ser atenuado por el cristal, estos haces que no contienen información referida a refracción tienen más peso en la imagen que los que fueron desviados, el efecto de atenuación en la muestra es prioritario en esta imagen, dominando éste la fuente de contraste.

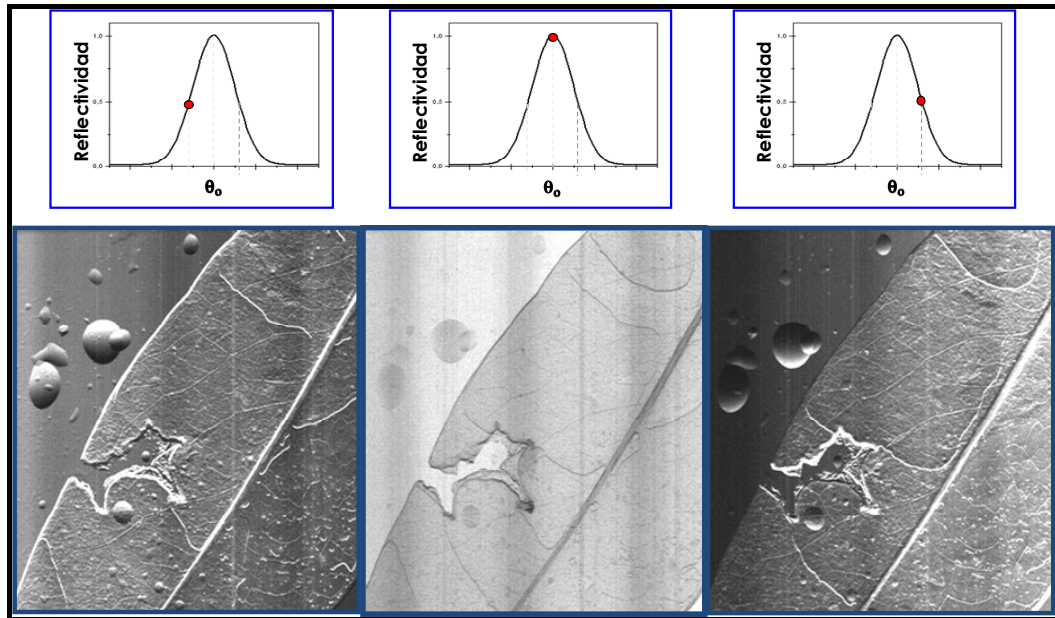


Figura 3.5: Imágenes medidas en distintas posiciones del cristal analizador para una energía de incidencia de 10keV. El tiempo de exposición para cada imagen fue de 85 seg. Las imágenes fueron tomadas en el sincrotrón LNLS de Campinas, Brasil. Las dimensiones de las imágenes son $(2.2 \times 2.4)\text{cm}^2$

Capítulo 4

ABI EN GEOMETRÍA DE BRAGG

Técnicas de reconstrucción de imágenes

Existen en la literatura diferentes algoritmos matemáticos desarrollados para procesar las imágenes obtenidas con el método ABI, en particular para el caso de un analizador en geometría de Bragg. El objetivo de estos métodos es extraer la información contenida en las imágenes de forma separada en dos o tres imágenes independientes de absorción, refracción y dispersión. La imagen de absorción es prácticamente un mapa del coeficiente de absorción (μ) de la muestra (cuando el espesor no varía significativamente) al que se le suma contraste por efectos de extinción, mientras que en la imagen de refracción se realzan los bordes de la imagen asociados a un cambio en el índice de refracción, densidad o de espesor en la muestra (regiones heterogéneas del objeto) y la imagen de dispersión realza la imagen de pequeñas estructuras que pasan desapercibidas cuando todos los efectos son considerados a la vez.

Los algoritmos hacen uso de diferentes aproximaciones, dependiendo del caso a estudiar, que imponen restricciones sobre la muestra, sobre el sistema de imagen o sobre ambos. A continuación se mencionan las principales aproximaciones utilizadas en el método ABI y luego se presentan en detalle algunos de los algoritmos de extracción.

4.1 Aproximaciones

Los métodos matemáticos desarrollados para extraer la información presente en las imágenes medidas, hacen uso de diferentes aproximaciones para su implementación imponiendo restricciones sobre el sistema. Cuando la absorción producida por el objeto es despreciable, es decir $\mu \ll 1$ y la variación en la fase es débil o bien varía lentamente (por ejemplo en el caso en que no haya una diferencia marcada en las estructuras de la muestra, sino que la variación entre una y otra sea gradual) la aproximación que puede utilizarse es la de objeto débil (o en inglés *weak-object*). Nesterets et al. [25] propusieron en 2004 un método de extracción de imágenes basado en esta aproximación. Dado que la mayoría de las muestras macroscópicas no cumplen con este requerimiento [19], existen otros métodos alternativos. Uno de ellos es el propuesto por Paganin et al. en 2004 [26] que requiere que la función transferencia del sistema pueda ser linealizada en el espacio de Fourier. La función de transferencia del sistema, $r(\theta)$, se relaciona con la RC del cristal analizador de la forma $R(\theta) = |r(\theta)|^2$, la cual sólo podrá ser linealizada cuando el gradiente de la fase producida por la interacción con el objeto es del orden del ancho de la RC [19].

El método de aproximación más sencillo por sólo requerir la medición de la RC del sistema además de obtener las imágenes, es el basado en óptica geométrica [27,28] (GOA por sus siglas en inglés,

geometrical optics approximation). En el régimen de validez de GOA se expresa a la intensidad detectada (I) como el producto de la intensidad transmitida por el objeto (I_R) y la función de reflectividad (o la de transmisión dependiendo de la geometría del cristal y del haz emergente considerado) del analizador, es decir, I se expresa de la siguiente manera [27]:

$$I(x, y; \theta) = I_R(x, y)R(\theta + \Delta\theta_z) \quad (4.1)$$

donde $\Delta\theta_z$ es la desviación del haz desde su dirección de incidencia en el plano de difracción del cristal (en el presente trabajo el plano de difracción se considera paralelo al plano yz, donde z es la dirección de propagación de la radiación incidente) y θ es la posición del analizador.

Esta aproximación es válida si la fase de la onda incidente al cristal analizador es una función que varía suavemente en la escala de la longitud de extinción del mismo o equivalentemente es válido si se cumple la condición $N_T \gg 1$ donde N_T es llamado número de Takagi [29] definido como:

$$N_T = (h/\lambda)^2 |r(\theta)/r''(\theta)|.$$

donde $r(\theta)$ es el coeficiente de reflexión de amplitud del analizador como función del ángulo de desviación desde el ángulo de Bragg, λ es la longitud de onda de la radiación incidente y h es la dimensión del rasgo más pequeño de la muestra o el límite de resolución del sistema de imagen, el valor que sea mayor. Para el caso en que la posición del cristal analizador sea cercana a la del ángulo de Bragg se puede expresar a N_T de la forma [29]:

$$N_T = [h/(\Lambda_x \text{sen}(\theta_1))]^2$$

donde θ_1 es el ángulo que forma el haz con la superficie del cristal y Λ_x es una longitud característica

definida como $\Lambda_x = \frac{\lambda \text{sen}(2\theta_B)}{2\pi C |\chi_{hr}| (\gamma_G \gamma_h)^{1/2}}$ (ver Cap. 2 para la definición de cada uno de estos

parámetros). Para un cristal semi-infinito no absorbente de Si(333) en reflexión de Bragg a una energía de incidencia de 20keV, el valor que se obtiene para el número de Takagi es $N_T \cong 158$ [30].

La aproximación de óptica geométrica falla en regiones de la muestra donde se produzcan grandes variaciones en el gradiente de la fase [27], como también lo hacen las aproximaciones anteriores.

4.2 Algoritmos de extracción de imágenes

En esta sección, se describen cinco de las técnicas de reconstrucción de imágenes más utilizadas en el método de imágenes ABI con un cristal analizador en geometría de Bragg. Todas ellas se basan en el método de aproximación de óptica geométrica. Cada técnica brinda algoritmos para reconstruir las

imágenes paramétricas que hacen uso de cierta cantidad de imágenes obtenidas en distintas posiciones del cristal analizador. No todas fueron desarrolladas para obtener las 3 imágenes paramétricas.

4.2.1 Imágenes realzadas por difracción (DEI, Diffraction Enhanced X-ray Imaging):

Fue presentado en 1997 por Chapman et al. [24] y fue el primer trabajo que describió una forma de extraer imágenes paramétricas utilizando ABI con un analizador en geometría de Bragg. El método utiliza un algoritmo sencillo para extraer dos imágenes independientes; una debida a efectos de refracción y otra de *absorción aparente*, a partir de la adquisición de dos imágenes en distintas posiciones angulares del analizador. La imagen de absorción lleva ese nombre ya que combina los efectos de absorción, extinción y dispersión a ultra bajo ángulo.

Se considera que la intensidad, I_R , que llega al analizador con ángulos dentro del rango de aceptación del sistema, es aquella fracción del haz emergente de la muestra que sólo ha sido afectada por refracción y atenuada por absorción y extinción. La dispersión a ultra bajo ángulo, al no ser tenida en cuenta como efecto separado, contribuye de un modo negativo en la imagen, reduciendo su resolución y contraste.

Las imágenes son tomadas en posiciones angulares del analizador correspondientes a $\theta = \pm \frac{\Delta\theta_D}{2}$,

donde $\Delta\theta_D$ es el ancho de Darwin de la RC. Estos ángulos corresponden a valores de reflectividad del sistema igual a la mitad del valor máximo y se ubican en la región donde la pendiente de la RC varía lentamente y se tiene la máxima variación en reflectividad para una pequeña variación angular. Esta situación se refleja en la figura 4.1.

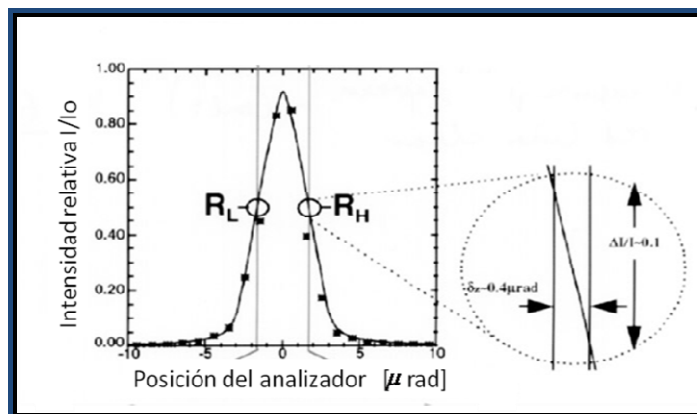


Figura 4.1: RC del sistema y posiciones de las imágenes requeridas en la técnica DEI.

En la aproximación de óptica geométrica la intensidad (I) difractada por el analizador está relacionada con la emergente de la muestra (I_R) y con el ángulo de desviación ($\Delta\theta_Z$) de la forma

dada por la ec. (4.1). Para las posiciones seleccionadas del analizador y para cualquier desviación $\Delta\theta_z$ del haz con respecto a ese valor (desviaciones provocadas por refracción) la relación (4.1) se expresa de la siguiente manera:

$$I = I_R R\left(\theta_B \pm \frac{\Delta\theta_D}{2} + \Delta\theta_z\right) \quad (4.2)$$

Para valores $\Delta\theta_z$ pequeños y si se define $\theta_0 = \theta_B \pm \frac{\Delta\theta_D}{2}$, la RC como un desarrollo en series de Taylor hasta primer orden en θ_0 se expresa como:

$$R(\theta_0 + \Delta\theta_z) = R(\theta_0) + \frac{dR}{d\theta}(\theta_0)\Delta\theta_z$$

Luego, usando la ec. (4.2) y este desarrollo de R, se puede expresar la intensidad de dos imágenes obtenidas en cada una de las posiciones angulares θ_0 como:

$$I_L = I_R \left(R(\theta_L) + \frac{dR}{d\theta}(\theta_L)\Delta\theta_z \right)$$

$$I_H = I_R \left(R(\theta_H) + \frac{dR}{d\theta}(\theta_H)\Delta\theta_z \right)$$

donde θ_0 toma los valores $\theta_{H,L} = \theta_B \pm \frac{\Delta\theta_D}{2}$. Se puede tratar a las ecuaciones anteriores como un sistema de ecuaciones con dos incógnitas y así resolverlo para obtener el valor de I_R y $\Delta\theta_z$ independientemente para cada pixel y reconstruir las respectivas imágenes paramétricas de absorción aparente y refracción. Las soluciones del sistema de ecuaciones (ver anexo) son las siguientes:

$$I_R = \frac{I_L \left(\frac{dR}{d\theta} \right) (\theta_H) - I_H \left(\frac{dR}{d\theta} \right) (\theta_L)}{R(\theta_L) \left(\frac{dR}{d\theta} \right) (\theta_H) - R(\theta_H) \left(\frac{dR}{d\theta} \right) (\theta_L)}$$

$$\Delta\theta_z = \frac{I_H R(\theta_L) - I_L R(\theta_H)}{I_L \left(\frac{dR}{d\theta} \right) (\theta_H) - I_H \left(\frac{dR}{d\theta} \right) (\theta_L)}$$

Estas ecuaciones representan los algoritmos utilizados para reconstruir las imágenes y son validas para cada pixel del detector ya que I_L y I_H son los valores del mismo en cada una de la imágenes medidas y $\Delta\theta_z$ y I_R serán sus valores para cada una de las imágenes reconstruidas. El método tiene como ventaja el poco tiempo en la adquisición de imágenes y como consecuencia una menor deposición de dosis, pero dado que no se tiene en cuenta la dispersión a ultra bajo ángulo los campos de aplicabilidad son limitados ya que muchas muestras en especial biológicas pueden generar una cantidad no despreciable de USAXS. En este caso no se separa este efecto de los otros dos lo cual puede bajar la calidad de las imágenes. Además si los ángulos de refracción son del orden del FWHM de la RC (ancho a mitad de altura) o mayores, la aproximación de primer orden en el desarrollo de Taylor no es suficientemente buena para reproducir la RC del sistema llevando a que los resultados obtenidos no son muy buenos comparados con resultados teóricos [28].

4.2.2 Algoritmo extendido de Imágenes realizadas por difracción (E-DEI, Extended DEI):

Presentado en 2008 por Hu et al. [31]. El método (que aquí se denominará de esta manera para seguir la nomenclatura dada en [28]) es similar a DEI, exceptuando que en este caso en lugar de aproximar a la RC del sistema con un desarrollo de Taylor a primer orden, se realiza una aproximación por medio de un ajuste Gaussiano. Esta aproximación trae consecuencias en la imagen de refracción, que como se puede ver del algoritmo de reconstrucción obtenido con la técnica anterior, es una imagen del corrimiento del haz. Con este método se resuelve la restricción impuesta en la técnica anterior por la aproximación a primer orden de la RC que limitaba el valor calculado en cada pixel de la desviación del haz en el mismo, obteniéndose un rango de valores calculados de ángulos de refracción más grande, aumentando la calidad de la imagen reconstruida.

La expresión para obtener los valores en cada pixel de la imagen de refracción en el algoritmo DEI, es valida para ángulos de refracción pequeños (esto se vio reflejado en considerar el desarrollo de Taylor de la RC sólo hasta primer orden) por lo que puede llevar a errores en el calculo de ángulos mayores. Para ilustrar este hecho se considero lo siguiente: teniendo en cuenta la forma de la RC del sistema $R(\theta)$ (ver figura 2.6) resulta natural aproximarla utilizando un ajuste Gaussiano, por lo tanto se la puede expresar de la siguiente manera:

$$R(\theta) = A \exp\left(\frac{-\theta^2}{2\sigma^2}\right)$$

donde $\Delta\theta_D = 2\sigma(2\ln 2)^{1/2}$ y A es el área de la RC. Si se utiliza esta expresión para $R(\theta)$ en el algoritmo DEI de la imagen de refracción considerando que se cumple lo siguiente:

$$R(\theta_L) = R(\theta_H) \text{ y } \left(\frac{dR}{d\theta}\right)(\theta_L) = -\left(\frac{dR}{d\theta}\right)(\theta_H)$$

se obtiene finalmente la siguiente expresión para el valor en cada pixel de la imagen de refracción:

$$\Delta\theta_z = \frac{\Delta\theta_D}{4 \ln 2} \frac{I_L - I_H}{I_L + I_H}$$

El máximo valor de refracción que puede ser calculado es $|\Delta\theta_z| = \frac{\Delta\theta_D}{4 \ln 2}$.

Si ahora considerando un caso más general donde a la reflectividad del sistema simplemente se la aproxima por una función Gaussiana, sin hacer uso de aproximaciones de Taylor, ésta puede expresarse como:

$$R(\theta_0 + \Delta\theta_z) = A \exp\left(\frac{-(\theta_0 + \Delta\theta_z)^2}{2\sigma^2}\right)$$

Utilizando la expresión (4.1) las intensidades de las imágenes medidas en $\theta_0 = \theta_B \pm \frac{\Delta\theta_D}{2}$, es decir en θ_H y θ_L respectivamente, estarán dadas por las siguientes relaciones:

$$I_L = I_R A \exp\left(\frac{-(\theta_L + \Delta\theta_z)^2}{2\sigma^2}\right)$$

$$I_H = I_R A \exp\left(\frac{-(\theta_H + \Delta\theta_z)^2}{2\sigma^2}\right)$$

Si se utilizan las dos ecuaciones para despejar $\Delta\theta_z$ en función de las imágenes medidas (ver Anexo), se obtiene la siguiente expresión para las desviaciones por refracción:

$$\Delta\theta_z = \frac{\Delta\theta_D}{8 \ln 2} \ln\left(\frac{I_L}{I_H}\right) \quad (4.3)$$

Al valor mínimo de intensidad en las imágenes medidas no se le debe asignar el valor 0 de modo de evitar divergencias, esto puede solucionarse modificando la escala de intensidades de las dos imágenes. De la última expresión se obtiene que el máximo valor del ángulo de refracción que puede ser calculado es $|\Delta\theta_z| \approx \Delta\theta_D$ para una escala de grises de 8 bits (256 niveles de grises) lo que representa el doble que en algoritmo DEI, y $|\Delta\theta_z| \approx 2\Delta\theta_D$ para una escala de 16 bits (65536 niveles de grises). La expresión (4.3) es el algoritmo utilizado para reconstruir la imagen por refracción con esta técnica.

Con este método se obtiene una imagen por refracción mejorada con respecto a la obtenida con DEI, dado que el rango de valores que se pueden calcular en cada pixel es mayor, dando una mejor calidad en la imagen. Sin embargo ésta es la única imagen reconstruida.

4.2.3 Radiografía de imágenes múltiples (MIR, Multiple-Image Radiography):

Pagot et al. [21] y Wernick et al. [20] presentaron independientemente, en el año 2003, dos métodos estadísticos donde se combinan varias imágenes (un número mayor o igual a 3) medidas en diferentes posiciones angulares del cristal analizador correspondientes a la RC del sistema. Estos métodos fueron los primeros en proponer algoritmos para obtener tres imágenes reconstruidas que brindan información sobre absorción, refracción y dispersión a ultra bajo ángulo respectivamente, a diferencia de los métodos anteriores donde solamente se obtenían como máximo dos imágenes, correspondientes a efectos de absorción aparente y refracción.

Estos métodos se basan en asumir que para cada pixel, la distribución angular de la intensidad difractada es la convolución del espectro angular del objeto con la RC del sistema imagen. Los puntos de esta distribución son los valores de intensidad del pixel en cada una de las imágenes medidas, por lo tanto son función de la posición angular del analizador. Las imágenes por refracción, por absorción y por dispersión pueden ser calculadas a partir de los momentos de orden 0, 1 y 2 de las RCs "referencia" (la del sistema, medida en cada pixel para distintas posiciones del cristal analizador sin la presencia de la muestra) y "objeto" (la distribución angular en cada pixel). En la figura 4.2 se puede observar cualitativamente estos efectos, que serán explicados con mayor detalle en la subsección siguiente.

En las subsecciones siguientes se presentan ambas técnicas de reconstrucción con sus correspondientes algoritmos para cada una de las imágenes de interés. Se identificarán como MIR_P y MIR_W, dependiendo de los autores.

- *MIR_P*

Tomando una serie de N imágenes ($N \geq 3$) en distintas posiciones angulares del analizador, el método hace uso de la RC del sistema medida para la serie de imágenes sin la presencia de la muestra y de la distribución angular de cada pixel en función de la posición del analizador. Esta última está definida por la intensidad registrada en el pixel para cada posición en que se tome una imagen. Sin la presencia de la muestra se puede considerar que para un haz homogéneo y uniforme cada pixel del detector registrará la misma distribución (la RC del sistema en cada pixel). Así en cada pixel se contará con dos distribuciones, cuyas formas son similares a la de una Gaussiana, una correspondiente al estado de referencia (sin el objeto) y la otra resultado de la presencia del mismo (que se llamará RC objeto y que es diferente para cada pixel). Las variaciones de la segunda respecto a la primera son las que nos brindan la información necesaria para reconstruir las imágenes de los efectos.

Se calcula para cada RC (referencia y objeto) de cada pixel los momentos de orden 0, 1 y 2, dados por:

$$M_i = \sum_{j=1..N} (\theta_j)^i \cdot R(\theta_j), \quad i = 0, 1, 2$$

donde $R(\theta_j)$ corresponde a la intensidad de la RC para la posición angular θ_j (posición angular que corresponde a la imagen j-ésima). Se obtiene entonces para cada función de distribución lo siguiente parámetros:

- El momento de orden cero M_0 es igual a la intensidad integrada.
- El momento de primer orden da la posición del centro de masa $\theta_0 = \frac{M_1}{M_0}$.
- Con el momento de segundo orden se deriva la desviación estándar (el ancho de la curva)

$$\sigma = \left(\frac{M_2}{M_0} - \theta_0^2 \right)^{1/2}.$$

Utilizando estos datos se calcula para cada pixel las siguientes cantidades que serán igual al valor del mismo en cada una de las imágenes reconstruidas.

- La absorción integrada $I_{abs} = \frac{M_{0,obj}}{M_{0,sist}}$.
- Refracción integrada $\Delta\theta_0 = \theta_{0,obj} - \theta_{0,ref}$, es el desplazamiento del centro de masa de la RC_{obj} con respecto a la RC_{sist} (es como el $\Delta\theta_z$ de los otros métodos).
- La dispersión a bajo ángulo (USAXS) $\sigma^2 = \sigma_{obj}^2 - \sigma_{sist}^2$.

Los valores anteriores se calculan para cada pixel del área efectiva del detector obteniendo así las imágenes paramétricas. La figura 4.2 representa cualitativamente como se pueden interpretar estos algoritmos. La imagen de absorción se obtiene de la atenuación de la distribución obtenida en cada pixel cuando el objeto está presente con respecto a la de referencia, mientras que la imagen de refracción se obtiene del corrimiento del centro de masa de la primera respecto a la segunda y la imagen de dispersión viene dada por el ensanchamiento relativo que sufrió la distribución como consecuencia de la dispersión en el haz difractado, provocada por las pequeñas estructuras en la muestra.

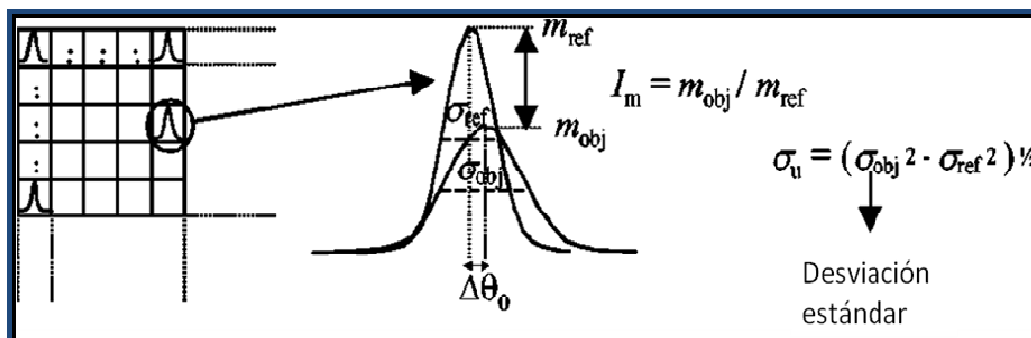


Figura 4.2: En cada pixel del detector la comparación de la RC local obtenida en función de la posición del analizador cuando el objeto está presente (RC objeto) y cuando no (RC de referencia), permite obtener información de absorción, refracción y dispersión del haz correspondiente a ese pixel.

- *MIR_W*

El espectro angular de intensidad del haz que atraviesa el objeto, antes de llegar al cristal analizador, se puede expresar como la convolución de la intensidad del haz que incide en el objeto (haz conformado con todos los elementos ópticos anteriores) $I_0'(\theta)$ con la función respuesta del objeto $f(\theta, \theta'; x, y)$, que representa el espectro angular de intensidad del haz transmitido que se mediría si el objeto fuera irradiado con un haz perfectamente colimado (por ejemplo un haz incidente cuyo espectro fuera $I_0'(\theta) = I_0 \delta(\theta)$ donde $\delta(\theta)$ es la función delta de Dirac). A partir de esta idea, se obtiene entonces que el espectro angular del haz que emerge de la muestra es de la siguiente forma:

$$I(\theta; x, y) = \int_{-\infty}^{\infty} I_0'(\theta') f(\theta - \theta'; x, y) d\theta' = I_0'(\theta) * f(\theta; x, y)$$

Esta ecuación indica que la intensidad medida I es la convolución entre la intensidad que incide sobre la muestra y su función respuesta. Así cuando se incluye al cristal analizador, la intensidad que llega al detector esta dada por:

$$g(\theta; x, y) = I_0'(\theta) * f(\theta; x, y) * R_A(\theta)$$

donde $R_A(\theta)$ es la RC del analizador. Conmutando las convoluciones se obtiene que:

$$g(\theta; x, y) = R(\theta) * f(\theta; x, y)$$

donde $R(\theta) = I_0'(\theta) * R_A(\theta)$ es la RC del sistema.

Ya que las imágenes están formadas por una grilla de pixeles (variables espaciales discretas), conviene realizar un cambio en la notación de la siguiente manera:

$$g(\theta; x, y) \rightarrow g_{m,n}(\theta) \rightarrow g_{m,n}[k]$$

donde k indica la k -ésima imagen (se discretiza la posición angular θ) y (m, n) barren toda el área efectiva del detector. Este cambio de variables se realiza en todas las funciones con esa dependencia.

En este método se propone además incluir ruido experimental, con la intención de evaluar resultados que permitan obtener algún tipo de conclusiones sobre datos que provengan de una fuente con un flujo limitado de fotones. Este ruido puede ser descrito como ruido de Poisson, así la intensidad en cada pixel de las imágenes estará dado por:

$$g_{m,n}[k] \approx \text{Poisson}(R[k] * f_{m,n}[k]) \quad (4.4)$$

Los algoritmos de reconstrucción de las imágenes fueron desarrollados en función de la respuesta del objeto $f_{m,n}[k]$, por lo que deconvolucionar la ec. (4.4) para obtener la función para cada pixel es un punto importante en este método.

La función distribución de probabilidad de Poisson para la técnica puede expresarse de la siguiente manera:

$$p(\bar{g}|\bar{f}_{m,n}) = \prod_{k=1}^N \frac{(R[k] * f_{m,n}[k])^{g_{m,n}[k]} e^{-R[\theta] * f_{m,n}[\theta]}}{g_{m,n}[k]!} \quad (4.5)$$

donde $\bar{f}_{m,n}$ denota la distribución angular discreta de un pixel dado (es decir es un vector de N componentes, una por cada imagen, donde el valor de cada una es igual al valor que tiene el pixel en la imagen k-ésima) de la respuesta del objeto a la radiación incidente y \bar{g} hace referencia a las imágenes medidas. Utilizando el método máxima verosimilitud $f_{m,n}$ se obtiene como el valor que maximiza la relación (4.5) en cada pixel, es decir

$$\hat{f}_{m,n} = \arg \max p(\bar{g}|\bar{f}_{m,n})$$

donde arg representa el argumento. Este valor se obtiene de un proceso iterativo usando como algoritmo la siguiente iteración que es usada en imágenes de medicina nuclear.

$$\hat{f}_{m,n}^{(i+1)}[k] = \frac{\hat{f}_{m,n}^{(i)}[k]}{\sum_{k=1}^N R[k]} \left\{ R[k] * \left[\frac{g_{m,n}[k]}{R[k] * \hat{f}_{m,n}^{(i)}[k]} \right] \right\}$$

donde $\hat{f}_{m,n}^{(i)}[k]$ es la i-ésima estimación de $f_{m,n}[k]$. La primera convolución es en realidad una correlación cruzada pero dado que la RC es una función par se la puede reemplazar por una convolución.

Los algoritmos de las imágenes reconstruidas están en función de las siguientes cantidades:

$$T_{m,n} = \sum_{k=1}^N \hat{f}_{m,n}[k], \quad F_{m,n}[k] = \frac{\hat{f}_{m,n}[k]}{T_{m,n}}$$

La imagen por absorción contendrá además de la atenuación producida en la muestra, contraste producido por extinción. El algoritmo para esta imagen esta dado por:

$$I_R = -\ln T_{m,n}$$

La imagen por refracción se obtiene del corrimiento del centro de masa de la distribución angular $\hat{f}_{m,n}[k]$ (normalizada), cuando el objeto está presente, del valor obtenido cuando no está el objeto:

$$\Delta\theta_z = \sum_{k=1}^N \theta_k F_{m,n}[k]$$

donde θ_k es el valor del ángulo al que fue tomada la k-ésima imagen.

La imagen por dispersión se obtiene del ensanchamiento que sufre la distribución $\hat{f}_{m,n}[k]$, el cual está caracterizado por la divergencia angular del haz desde $\Delta\theta_z$, el ensanchamiento es calculado como el segundo momento de la distribución (normalizada):

$$\sigma^2 = \sum_{k=1}^N (\theta_k - \Delta\theta_z)^2 F_{m,n}[k]$$

Con estos métodos se obtienen, entonces, tres imágenes paramétricas que representan por separado los efectos de absorción, refracción y dispersión a ultra bajo ángulo. La imagen de absorción en este caso, sólo tiene en cuenta atenuación y extinción por lo que se espera presente mejor contraste que la obtenida con el método DEI.

La principal desventaja es el requerimiento de numerosas imágenes medidas para la reconstrucción, lo cual trae como consecuencia mayor tiempo de exposición de la muestra con un incremento en la dosis depositada. Por otro lado la precisión con que debe rotarse el cristal es sumamente importante ya que el ancho de la RC del sistema imagen es comúnmente del orden de las decenas de micrones. Uno de los resultados que se obtienen al utilizar estos métodos es que la calidad de la imagen aumenta con el número de imágenes medidas [21].

4.2.4 Método generalizado de imágenes realzadas por difracción (G-DEI, Generalized DEI):

Fue presentado en 2007 por Rigon et al. [32]. Con este método se obtienen tres imágenes reconstruidas correspondientes a: absorción, refracción y dispersión, al igual que los métodos MIR, pero combinando solamente 3 imágenes medidas en distintas posiciones angulares del cristal analizador. Lo cual trae como ventaja, en comparación con MIR, una reducción importante en el tiempo de adquisición y en la dosis depositada en la muestra.

Como en el caso de MIR se considera al objeto como una superposición de estructuras bien definidas (resueltas por el detector) a las que se asociarán las desviaciones del haz por refracción (ángulos $\Delta\theta_z$) y de estructuras menores (no resueltas por el detector) y que se asocian con la dispersión del haz (ángulos $\Delta\theta_s$) [33].

El haz que emerge desde el punto (x,y) del plano xy del objeto, es refractado en el plano vertical yz en un ángulo bien definido de refracción $\Delta\theta_z(x,y)$ con respecto a la dirección de incidencia z. Se considera además que la dispersión en el plano vertical producida por estructuras pequeñas (no resueltas por el detector) en el haz emergente asociado al punto (x,y) del plano del objeto está descrita por una densidad de probabilidad $f(\Delta\theta_s; x, y)$ y que cada pixel en el detector colecta todos estos fotones, por lo tanto se debe integrar en todo el rango de $\Delta\theta_s$. Teniendo en cuenta los

dos efectos mencionados, la intensidad que llega al detector cuando el analizador está ubicado en una posición angular θ_0 , está dada por la siguiente expresión:

$$I(\theta_0; x, y) = I_R(x, y) \int_{-\pi/2}^{\pi/2} R(\theta_0 + \Delta\theta_Z(x, y) + \Delta\theta_S) f(\Delta\theta_S; x, y) d(\Delta\theta_S)$$

Si $\Delta\theta_Z$ y $\Delta\theta_S$ son pequeños comparados con $\Delta\theta_D$ se puede desarrollar $R(\theta)$ en serie de Taylor hasta segundo orden alrededor de θ_0 y utilizando las propiedades de la distribución de probabilidad: normalización y valor medio nulo se puede expresar $I(\theta_0; x, y)$ (ver anexo) como:

$$I(\bar{\theta}; x, y) = I_R(x, y) \left[R(\bar{\theta}) + \frac{\partial R}{\partial \theta} \Big|_{\bar{\theta}} \Delta\theta_Z(x, y) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 R}{\partial \theta^2} \Big|_{\bar{\theta}} (\Delta\theta_Z(x, y))^2 + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 R}{\partial \theta^2} \Big|_{\bar{\theta}} \sigma_{\Delta\theta_S}^2(x, y) \right]$$

donde I_R representa la imagen por absorción, $\Delta\theta_Z$ la de refracción y $\sigma_{\Delta\theta_S}^2$ la imagen de dispersión.

Para tres posiciones angulares distintas del cristal analizador e indicando como R_i , \dot{R}_i y \ddot{R}_i al valor de la RC del sistema, sus derivadas primera y segunda, en la posición i-ésima, se obtiene un sistema de tres ecuaciones:

$$I_i = I_R \left[R_i + \dot{R}_i \Delta\theta_Z(x, y) + \frac{1}{2} \ddot{R}_i (\Delta\theta_Z(x, y))^2 + \frac{1}{2} \ddot{R}_i \sigma_{\Delta\theta_S}^2 \right] \quad i = 1, 2, 3$$

Resolviendo este sistema se obtienen los algoritmos para las imágenes por absorción, refracción y dispersión a ultra bajo ángulo:

$$I_R = \frac{\sum_{i,j,k=1}^3 \varepsilon_{i,j,k} I_i \dot{R}_j \ddot{R}_k}{\sum_{i,j,k=1}^3 \varepsilon_{i,j,k} R_i \dot{R}_j \ddot{R}_k} = \frac{I_1(\ddot{R}_2 \ddot{R}_3 - \ddot{R}_3 \ddot{R}_2) + I_2(\ddot{R}_3 \ddot{R}_1 - \ddot{R}_1 \ddot{R}_3) + I_3(\ddot{R}_1 \ddot{R}_2 - \ddot{R}_2 \ddot{R}_1)}{R_1(\ddot{R}_2 \ddot{R}_3 - \ddot{R}_3 \ddot{R}_2) + R_2(\ddot{R}_3 \ddot{R}_1 - \ddot{R}_1 \ddot{R}_3) + R_3(\ddot{R}_1 \ddot{R}_2 - \ddot{R}_2 \ddot{R}_1)}$$

$$\Delta\theta_R = \frac{-\sum_{i,j,k=1}^3 \varepsilon_{i,j,k} I_i \dot{R}_j \ddot{R}_k}{\sum_{i,j,k=1}^3 \varepsilon_{i,j,k} I_i \dot{R}_j \ddot{R}_k} = -\frac{I_1(\ddot{R}_2 \ddot{R}_3 - \ddot{R}_3 \ddot{R}_2) + I_2(\ddot{R}_3 \ddot{R}_1 - \ddot{R}_1 \ddot{R}_3) + I_3(\ddot{R}_1 \ddot{R}_2 - \ddot{R}_2 \ddot{R}_1)}{I_1(\ddot{R}_2 \ddot{R}_3 - \ddot{R}_3 \ddot{R}_2) + I_2(\ddot{R}_3 \ddot{R}_1 - \ddot{R}_1 \ddot{R}_3) + I_3(\ddot{R}_1 \ddot{R}_2 - \ddot{R}_2 \ddot{R}_1)}$$

$$\sigma_{\Delta\theta_S}^2 = \frac{2 \sum_{i,j,k=1}^3 \varepsilon_{i,j,k} I_i R_j \dot{R}_k}{\sum_{i,j,k=1}^3 \varepsilon_{i,j,k} I_i \dot{R}_j \ddot{R}_k} - \Delta\theta_R^2 = 2 \frac{I_1(R_2 \dot{R}_3 - R_3 \dot{R}_2) + I_2(R_3 \dot{R}_1 - R_1 \dot{R}_3) + I_3(R_1 \dot{R}_2 - R_2 \dot{R}_1)}{I_1(\dot{R}_2 \ddot{R}_3 - \dot{R}_3 \ddot{R}_2) + I_2(\dot{R}_3 \ddot{R}_1 - \dot{R}_1 \ddot{R}_3) + I_3(\dot{R}_1 \ddot{R}_2 - \dot{R}_2 \ddot{R}_1)} - \Delta\theta_R^2$$

El método tiene como ventaja que con sólo tres imágenes se reconstruyen las tres imágenes paramétricas, produciendo una menor deposición de dosis en la muestra. Además, como en el método MIR, no se impone una restricción sobre la posición en que deben ser tomadas imágenes

Capítulo 5

RESULTADOS y DISCUSIONES

Se compararon cuantitativa y cualitativamente los algoritmos descriptos en el capítulo anterior, es decir, los principales métodos de extracción de imágenes paramétricas para el método ABI utilizando un cristal analizador en geometría de Bragg.

5.1 Condiciones experimentales

La muestra preparada especialmente consiste en un tubo de acrílico C_3NH_3 cuyas dimensiones son: radio externo $R_1=3$ mm e interno $R_2=1.8$ mm, y 30 mm de largo, el cual se ubicó frente a una hoja de papel. A los lados del tubo, pegadas en el papel se colocaron dos recortes extras del mismo papel del fondo. En una esquina a modo de referencia se ubicó un aro metálico con una rejilla cuadrículada en su interior (ver figura 5.1). El cambio en el índice de refracción en la interfaz aire-acrílico provocará desviaciones en el haz por refracción. Por otro lado tanto el papel de soporte (el de fondo) como los recortes colocados a los lados del tubo producirán pequeñas desviaciones atribuidas a dispersión. El aro con la rejilla cumple la función de referencia en todas las imágenes.

Las imágenes fueron adquiridas en la línea de difracción de alta resolución D10A-XRD2 del Laboratorio Nacional de Luz de Sincrotrón (LNLS) de Campinas, Brasil. El setup experimental se muestra en la figura 5.2 y está compuesta por un espejo de rayos X, como primer objeto frente al haz utilizado para disminuir considerablemente la intensidad de fotones de altas energías, luego un pre-monocromador que consistía en dos cristales de Si(111) simétricos en geometría de Bragg ubicado de manera que la radiación emergente correspondiera a 10.7 keV. Luego una cámara de ionización que permitía controlar la intensidad del haz en esa posición. Estos elementos son propios de la instrumentación de la línea. El siguiente elemento, el monocromador como así también el analizador eran cristales simétricos de Si del tipo *channel cut* utilizados en geometría de Bragg, usando la difracción en el plano (333). Un *channel cut* está compuesto de dos cristales de silicio gruesos y paralelos construidos en el mismo bloque de material, es decir, que al no haber movimiento relativo entre ellos, los dos cristales actúan como un solo cristal en geometría de Bragg con la propiedad que el haz emergente, es paralelo al incidente. El primer *channel cut* fue utilizado para reducir la divergencia vertical del haz monocromatizado por el pre-monocromador, mientras que el segundo, actúa como analizador del haz que interactuó con la muestra. El ancho de la RC del sistema, es decir la transmitancia para distintas posiciones del analizador, fue de 105 μ rad. Las dimensiones del haz en la posición de la muestra eran de 25 mm de ancho y 2 mm de alto. Las imágenes se tomaron escaneando la muestra de modo que ésta era lentamente atravesada en la trayectoria del haz al igual que el detector, esto fue posible utilizando un traslador lineal de alta precisión con una resolución de 1 μ m. Como detector se utilizó una cámara CCD de conversión directa, refrigerada con agua. Su área activa está definida con (1242 x 1152) pixel² de (22.5 x 22.5) μ m² cada uno, que fue colocada perpendicular al haz emergente del analizador.

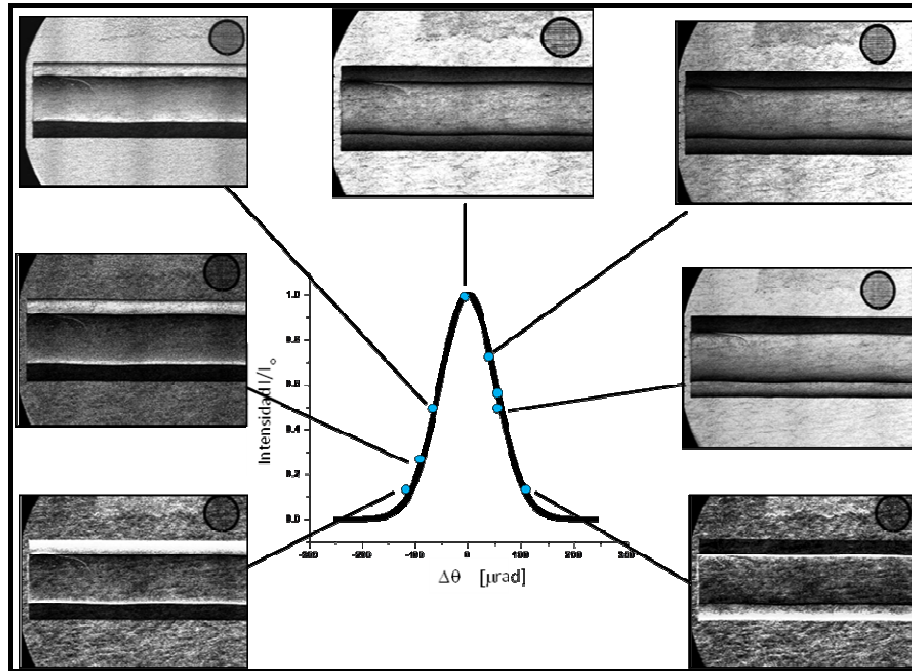


Figura 5.1: Imágenes medidas en distintas posiciones angulares del cristal analizador. Posiciones que se corresponden con las indicadas en la RC. Tiempo de exposición: 85 s. $E_0=10.7$ keV

Se tomaron 8 imágenes en distintas posiciones del cristal analizador. En la figura 5.1, a modo de ejemplo, se muestran 7 de las imágenes medidas y la posición aproximada en la RC del sistema a la que fueron tomadas. El tiempo de exposición de cada una de las imágenes fue de 85s.

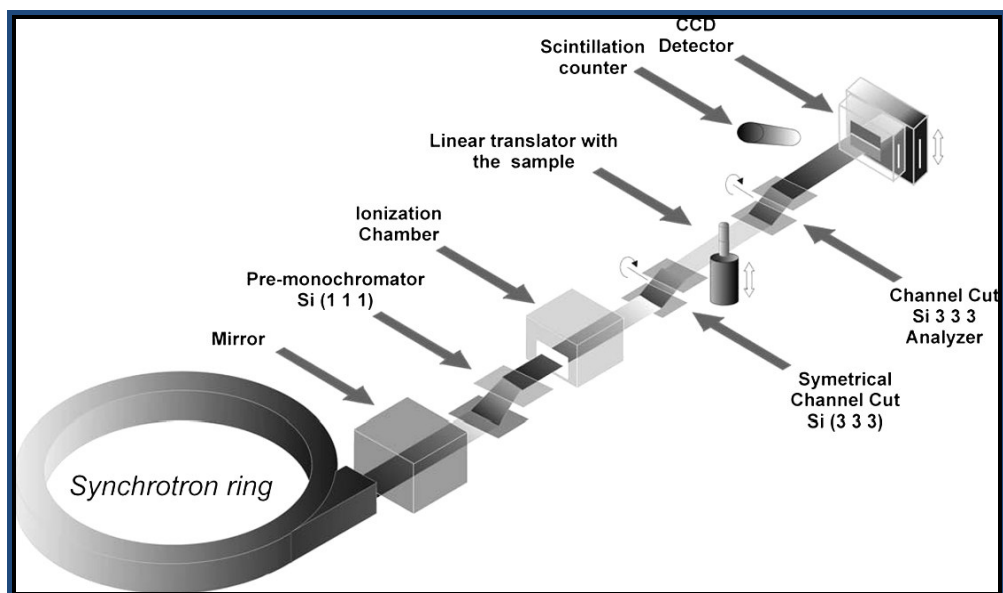


Figura 5.2: Setup experimental utilizado para la implementación del método ABI con un cristal analizador en geometría de Bragg.

A partir de los algoritmos de reconstrucción descritos en el capítulo anterior, y su implementación en el software MATLAB, se procesaron estas imágenes obteniéndose las imágenes propuestas por cada técnica. En resumen, las imágenes reconstruidas para cada técnica fueron las siguientes:

	Absorción	Refracción	Dispersión
DEI	x	x	-
E-DEI	-	x	-
MIR_W	x	x	x
MIR_P	x	x	x
G-DEI	x	x	x

Tabla 5.1: Imágenes reconstruidas para cada técnicas.

Para los algoritmos de DEI y E-DEI se utilizaron las mismas imágenes para su comparación posterior. En este caso corresponden a las posiciones angulares del analizador para las cuales el valor de la RC es igual a la mitad de su valor máximo. Para la técnica G-DEI se utilizaron también estas mismas imágenes más la correspondiente al máximo de la RC. En los métodos Mir_P y Mir_W se reconstruyeron las imágenes para distintas cantidades de imágenes medidas, es decir en cada caso se obtuvieron los resultados para un conjunto 3, 5 y 8 imágenes. En esta última técnica se consideró la implementación del algoritmo con 10 iteraciones.

5.2 Análisis cualitativo

5.2.1 ABSORCION

Las imágenes reconstruidas de absorción aparente se observan en la figura 5.3, donde para ambas técnicas MIR se comparan las imágenes obtenidas para 8 imágenes de entrada. Téngase presente que esta imagen tiene información sobre absorción y extinción, independientemente de las técnicas utilizadas. Notar además que no hay imagen reconstruida para la técnica E-DEI (ver tabla 5.1), dado que los autores sólo presentaron un algoritmo para la imagen de refracción.

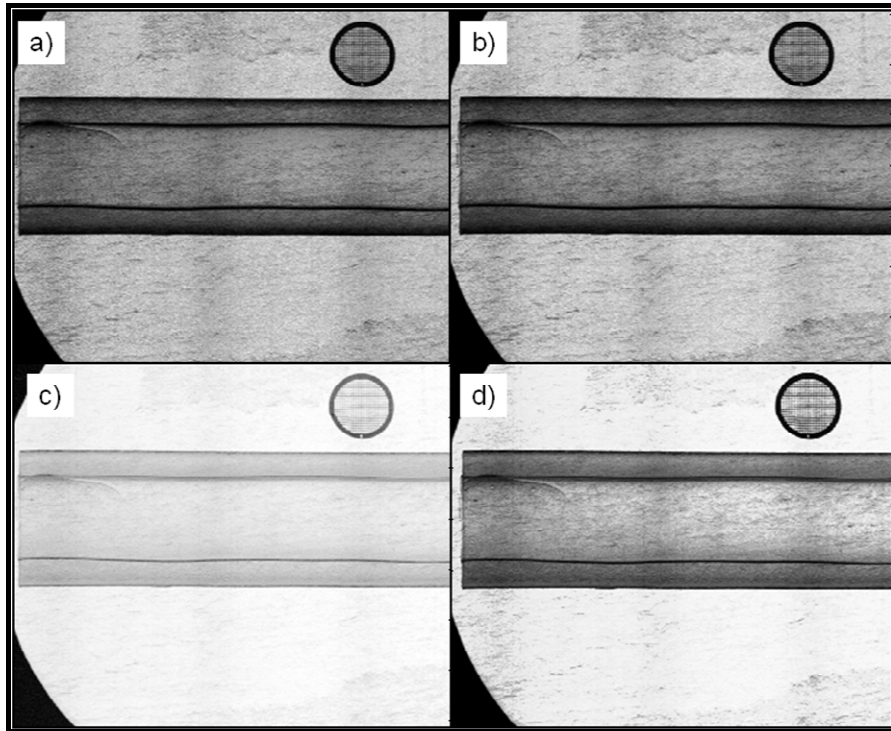


Figura 5.3: Imágenes reconstruidas de absorción aparente calculadas para las distintas técnicas consideradas. a) DEI, b) G-DEI, c) MIR_W y d) MIR_P.

Con la técnica MIR_W se obtiene una imagen inversa respecto a la de las otras técnicas. Con la intención de compararla con las demás, ésta se invirtió, sin introducir esta transformación cambios en el análisis.

Se observa en todas las imágenes que los bordes del tubo correspondientes a los radios interior y exterior donde se ubican las interfaces entre el tubo y el ambiente, aparecen bien delineados, este efecto es el que produce el contraste por extinción. Por otro lado se pone de manifiesto en las imágenes, por medio de líneas oscuras verticales, las inhomogeneidades en el haz incidente debido a efectos de la óptica precedente (espejo y monocromador sagital en estado “plano”, el pre-monocromador). Este efecto que pudo pasar desapercibido en la mayoría de las imágenes medidas, se vio realzado en la reconstrucción de estas imágenes. Se observa además que tanto en la imagen obtenida con la técnica DEI, G-DEI y en menos proporción en la de MIR_P, el papel de fondo tanto como los recortes incluidos, presentan un leve contraste. Este efecto que si bien puede ocurrir en las regiones del papel con distinto espesor, no es esperado que presente señales de la microestructura del mismo, esto quiere decir que en estas técnicas la dispersión es un efecto presente en estas imágenes reconstruidas. En la imagen proporcionada por la técnica MIR_W el efecto anterior no es muy notorio, pero también está presente. Con respecto a esta imagen se puede observar, además, que al aro de referencia no ofrece una atenuación total (dado que no presenta un color negro sino más bien un tono oscuro de gris, esto se confirmó verificando que en esa región el valor de intensidad era diferente a la del mínimo) este hecho tendrá consecuencias observables en la imagen de refracción.

Con la intención de comparar los resultados obtenidos con un valor teórico se realizó el perfil teórico de absorción para el tubo de acrílico a la energía del haz incidente (éste sólo considera el tubo y no el papel de fondo) y se la comparó con el perfil obtenido de la imagen reconstruida de absorción del método MIR_P (para 8 imágenes de entrada). El perfil de la imagen es obtenido a la mitad de la escala horizontal, promediando 15 píxeles (~ 0.4 mm). En la figura 5.4 se presentan los resultados, donde además se agregó la imagen del tubo para facilitar la comprensión de los mismos. Se observa que el comportamiento general descrito por los perfiles es similar, exceptuando en las regiones correspondientes a las interfaces donde el perfil de la imagen presenta un abrupto decrecimiento el cual se traduce en un borde delineado. En las regiones entre los radios interior y exterior se observa un comportamiento diferente en cada extremo, en el de la izquierda el perfil sigue (excepto los decrecimientos) el comportamiento teórico, sin embargo en el de la derecha el comportamiento teórico es opuesto a observado en el perfil. Este hecho se traduce en una disminución en la intensidad del borde derecho de la imagen en la figura 5.4 (que corresponde al borde inferior de la figura 5.1-d)), este efecto de absorción desigual de un lado y del otro es un defecto de la imagen producida por los otros efectos de los que evidentemente no se logra independizar por completo.

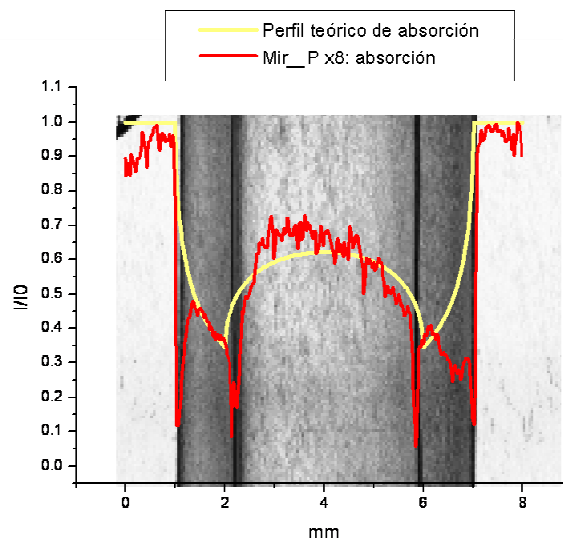


Figura 5.4: Comparación entre los perfiles teórico y calculada de la imagen reconstruida de absorción aparente de la técnica MIR_P x8.

5.2.2 REFRACCIÓN

Las imágenes de refracción reconstruidas con cada una de las técnicas se presentan en la figura 5.5, donde las correspondientes a la técnica MIR_P y MIR_W son el inverso de las imágenes originales mostradas para facilitar la comparación entre los técnicas. Se observa en las imágenes que en las regiones de la interfaz (a diferencia que en las imágenes de absorción) los bordes realzados dan un efecto tridimensional a las imágenes. Se pueden observar detalles como ser los defectos interiores del tubo, con mayor nitidez que en las imágenes de absorción. Se puede observar también que en las técnicas MIR el fondo y el interior del tubo muestran señales de la presencia del papel, mientras que en los resultados obtenidos con DEI, E-DEI y G-DEI el papel del fondo no logra distinguirse pero se puede observar que se destacan la superposición de papeles resaltando sus bordes. Esto indica que

en las imágenes de refracción obtenidas por las técnicas MIR el efecto de dispersión está levemente considerado.

Se puede apreciar claramente en estas imágenes, a diferencia de las imágenes reconstruidas por absorción o dispersión, que el método ABI tiene sensibilidad a las desviaciones del haz en la dirección paralela al plano de difracción, lo cual fue mencionado anteriormente en la descripción teórica de ABI. En la figura 5.5, puede observarse este hecho en el extremo del tubo donde la dirección vertical no es resaltada.

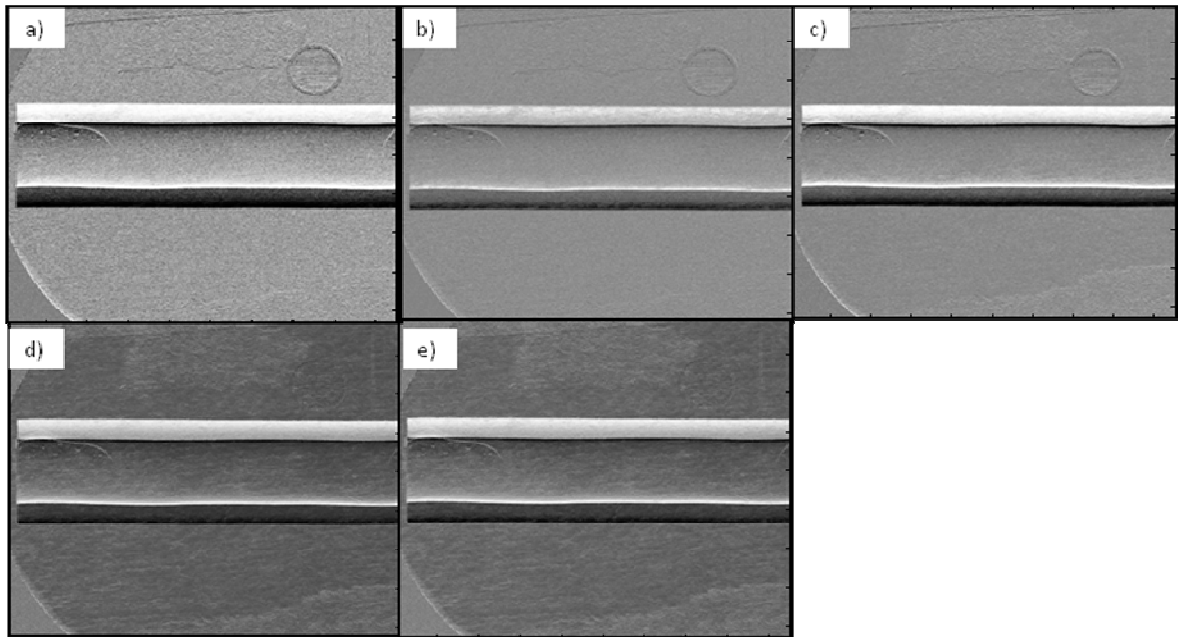


Figura 5.5: Imágenes paramétricas de refracción calculadas para las distintas técnicas consideradas. a) DEI, b) E-DEI, c) G-DEI, d) MIR_W y e) MIR_P.

En la figura 5.6 se presentan los perfiles de cada una de las imágenes anteriores. Estos fueron obtenidos, a la mitad de la escala horizontal promediando 15 píxeles (~ 0.4 mm). La longitud de los mismos abarca la región del tubo y 1mm a los lados de los bordes exteriores. Se observa claramente la diferencia de intensidad en la pared del tubo (región entre los radios interno y externo) superior e inferior de las imágenes. Se observa de los perfiles que las técnicas MIR delinean los bordes de una forma más marcada que las otras técnicas. Además puede observarse que las técnicas DEI y G-DEI presentan perfiles muy similares, excepto que en el primero la imagen presenta mayor ruido.

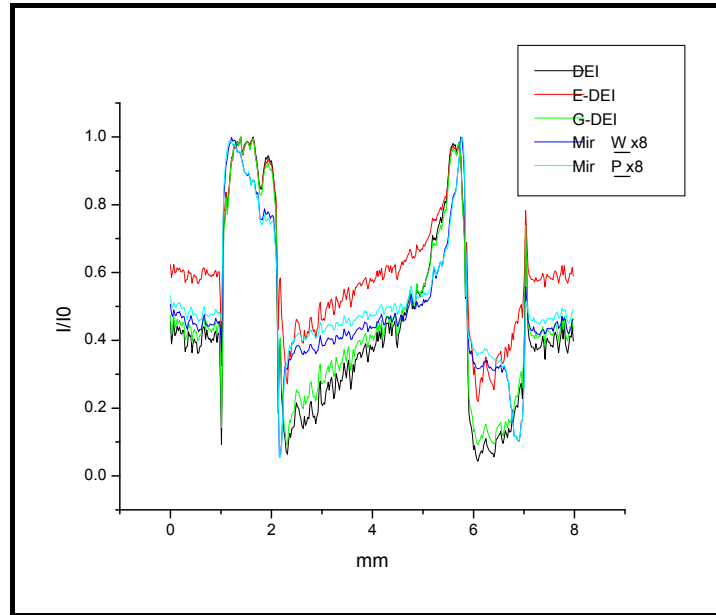


Figura 5.6: Perfiles obtenidos correspondientes al centro del tubo, perpendicular al mismo, de todas las imágenes reconstruidas de refracción.

En la figura 5.7, se presenta, a modo de ejemplo, la imagen ampliada de refracción obtenida con la técnica G-DEI para destacar lo siguiente: puede apreciarse claramente la presencia del aro de referencia. Como se mencionó en la subsección anterior el aro no ofrece una atenuación total, de modo que el haz es refractado en su interior dando lugar a una estructura realzada en la imagen de refracción como se observa ya en la figura 5.5. Se pueden apreciar también los defectos internos del tubo, dos rajaduras y burbujas. Se observa también que el recorte de papel aparece como una estructura realzada respecto del fondo, si bien no está resuelta como el tubo o el aro. Estos detalles observados pueden verse también en las otras imágenes por refracción de las otras técnicas.

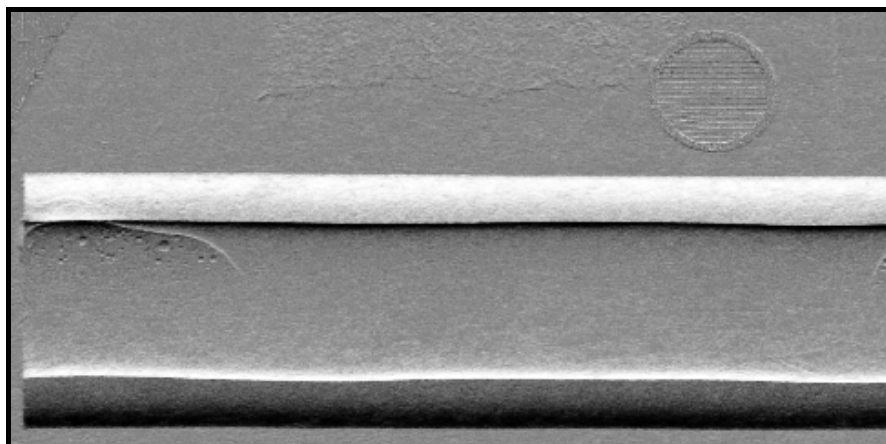


Figura 5.7: Imagen de refracción obtenida con la técnica G-DEI.

5.2.3 DISPERSIÓN

Las imágenes reconstruidas de dispersión con cada una de las técnicas se presentan en la figura 5.8. En las mismas se observa que el papel del fondo y el de los recortes son altamente favorecidos en estas imágenes aunque el tubo y el aro son también estructuras reconocibles. En ninguna de las imágenes mostradas anteriormente las estructuras del fondo (papel mas recortes de papel superpuestos) fueron realizadas como con estas imágenes por dispersión. A pesar de que se obtuvo lo esperado, dado que las pequeñas estructuras como son las que aparecen como rayas de fondo, que no son más que las fibras del papel, son evidentes en la imagen, también efectos de refracción son apreciables en las regiones de interfaz. La imagen obtenida con G-DEI, si bien presenta realizados los efectos de dispersión introducidos por el papel, muestra un efecto no esperado en la región de la pared del tubo. Posiblemente esto se deba a deficiencias en los algoritmos de la técnica.

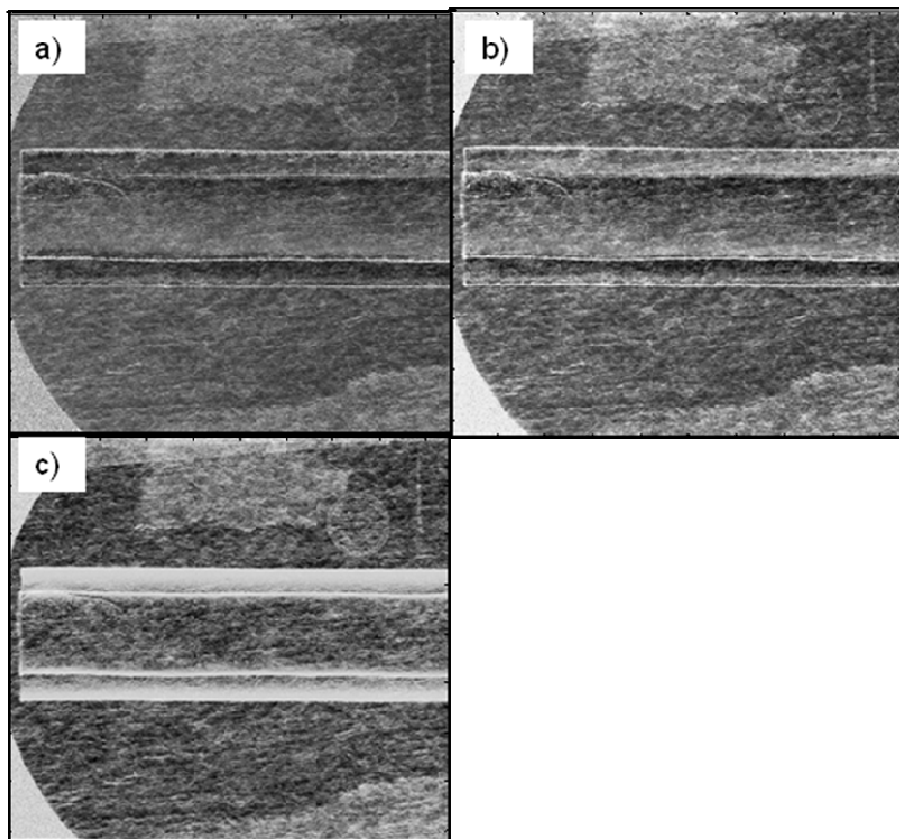


Figura 5.8: Imágenes paramétricas de dispersión calculadas para las distintas técnicas consideradas. a) MIR_W, b) MIR_PI, c) G-DEI.

En la figura 5.9 se muestran dos perfiles para la imagen de dispersión obtenida con la técnica MIR_P para 8 imágenes medidas. El perfil correspondiente a la figura 5.9a) recorre toda la imagen verticalmente, mientras que el perfil b) muestra la región correspondiente al tubo. Se observa en las posiciones correspondientes a las interfaces (tubo-ambiente, externa e internamente) un pico de intensidad claramente diferenciado del fondo, que se traduce a bordes delineados del tubo como se observan en la figura 5.8. Esto representa efectos de refracción que están incluidos, como se mencionó anteriormente. Comparando estos perfiles con los obtenidos para las imágenes de

absorción y refracción, se observa que éstos, si bien reflejan la presencia de refracción, no manifiestan un comportamiento como el observado para absorción, por lo tanto se puede decir que esta imagen no está afectada por absorción aunque no logra independizarse totalmente de los efectos de refracción.

Cabe observar también el incremento de la intensidad en los bordes del perfil a). Esto se debe a que el perfil incluye las zonas de la muestra donde el fondo está compuesto por papeles superpuestos, aumentando así efectos de dispersión.

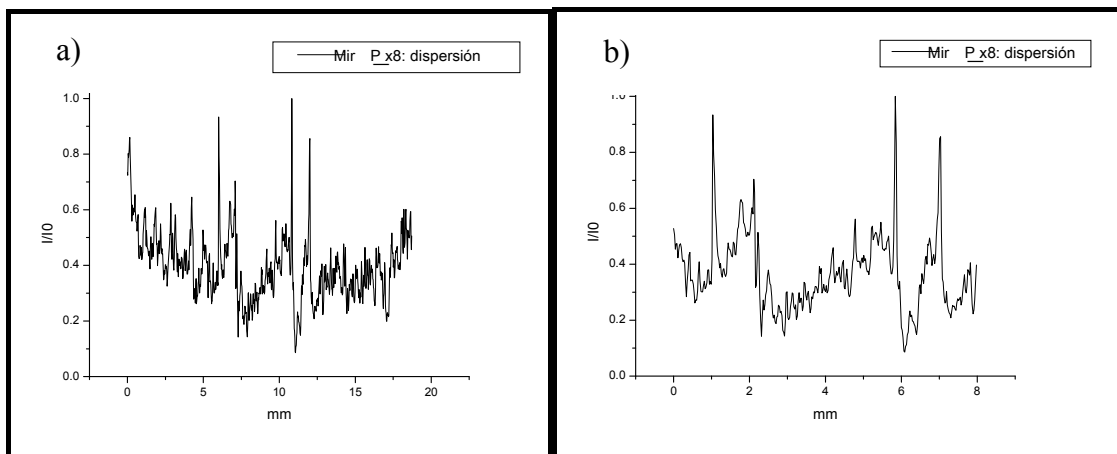


Figura 5.9: Perfiles de la imagen de dispersión reconstruida con la técnica MIR_P x8. a) El perfil recorre verticalmente toda la extensión de la imagen. b) El perfil recorre la región del tubo, más 1mm de cada lado.

5.3 Análisis cuantitativo

Con el fin de cuantificar los efectos comentados en la sección anterior, se presenta una comparación entre los valores máximos y mínimos de las desviaciones angulares de los haces transmitidos (producidos por efectos de refracción y dispersión), obtenidos de las imágenes. Además se realizará sobre cada imagen paramétrica el cálculo para obtener la señal sobre ruido (SNR), uno de los parámetros importantes que caracteriza calidad de una imagen. También se evalúan las técnicas MIR para distinta cantidad de imágenes medidas y se comparan las tres técnicas con las que se obtienen las tres imágenes paramétricas para igual número de imágenes medidas. Por último, en los métodos iterativos (MIR) se estudió el efecto del número de iteraciones en las imágenes reconstruidas.

5.3.1 Valores de desviación angular

Obteniendo el valor máximo y mínimo de intensidad de cada imagen de refracción se obtiene un valor aproximado del rango de las desviaciones del haz emergente de la muestra. Este valor es diferente para cada técnica. Los resultados obtenidos se presentan en la tabla 5.2.

	Máximo	Mínimo	Rango
DEI	-43.7	43.2	86.9
E-DEI	-84.9	76.5	161.4
G-DEI	-58.0	58.0	116.0
MIR_W	-96.9	53.0	149.9
MIR_P	-101.4	45.1	146.5

Tabla 5.2: Valores de las desviaciones angulares [μrad], obtenidas de las imágenes de refracción.

Se realizó un histograma de intensidades para estas imágenes con el fin de comprobar, que en el rango de desviaciones angulares de cada técnica, esta distribución abarque todos los valores intermedios del rango, es decir que los valores máximos y mínimos no correspondan a valores aislados y que representen así errores locales. En la tabla 5.2, puede observarse también que las técnicas MIR y E-DEI ofrecen un rango de ángulos mayor al de las otras técnicas. Además el rango de las técnicas MIR está influenciado por la posición angular del analizador en la cual se adquiriendo las imágenes usadas para las reconstrucciones.

5.3.2 Cociente señal ruido - SNR

Se puede definir el valor de SNR de la siguiente manera [21]:

$$SNR_{area} = \frac{\langle I_{obj} \rangle - \langle I_{fondo} \rangle}{\sqrt{S_{obj}^2 + S_{fondo}^2}}$$

donde $\langle I_i \rangle$ representa el valor medio de intensidad del área de interés, y $S_i^2 = \langle I_i^2 \rangle - \langle I_i \rangle^2$ es la varianza de las intensidades en la misma área. El valor de SNR puede ser positivo o negativo, y cuanto más grande sea su valor absoluto mejor será diferenciado el objeto en la imagen con respecto al fondo. Se calculó la señal sobre ruido para distintas áreas de las imágenes, las cuales están indicadas en la figura 5.10.

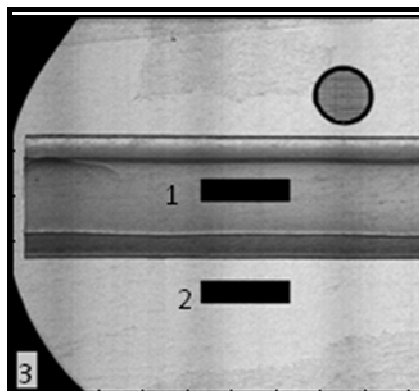


Figura 5.10: Áreas utilizadas en el cálculo de señal sobre ruido (SNR): 1) objeto, 2) papel y 3) fondo.

Los valores de SNR calculados se presentan en la tabla 5.3, donde se muestran todos los datos, correspondientes a todas las imágenes y técnicas, son incluidos para facilitar la comparación. En el caso de absorción se observa que el valor más alto (valor absoluto) se alcanza para la imagen reconstruida con el método MIR_W. Los valores obtenidos con las otras técnicas presentan muy poca dispersión y son aproximadamente un orden de magnitud menor. Para el caso de refracción y dispersión los valores más altos se obtienen con las técnicas MIR, con una leve mejoría para la técnica MIR_P.

Cabe destacar, que las técnicas MIR ofrecen mayor $|SNR|$ en todos los casos, hecho que se atribuye a estos métodos involucran mayor cantidad de imágenes medidas (de entrada).

MÉTODO	ABSORCIÓN		REFRACCIÓN		DISPERSIÓN	
	objeto-fondo	papel-fondo	objeto-fondo	papel-fondo	objeto-fondo	papel-fondo
DEI	0.21	0.29	-0.03	-0.03	-	-
E-DEI	-	-	-0.07	-0.06	-	-
G-DEI	0.20	0.27	-0.04	-0.03	-0.02	-0.02
MIR_W	-2.26	-3.05	0.15	0.15	-0.09	-0.09
MIR_P	0.22	0.23	0.16	0.17	-0.13	-0.14

Tabla 5.3: Comparación del valor de SNR entre los métodos MIR_W, MIR_P para distinta cantidad de imágenes de entrada.

El siguiente análisis de SNR se efectuó sobre las imágenes obtenidas con las técnicas MIR para distintas cantidades de imágenes involucradas en los cálculos. Los resultados obtenidos para todas las imágenes paramétricas en cada configuración son los que se presentan en la tabla 5.4. Se observa que en la comparación de la SNR objeto-fondo, el comportamiento es definido y claro: a mayor cantidad de imágenes, mayor valor de $|SNR|$. Este comportamiento no se cumple siempre: observar el cálculo de SNR las regiones papel-fondo, en los casos de MIR_W y dispersión, y MIR_P y absorción. Desde el punto de vista global, se puede afirmar las imágenes mejoran su calidad con un mayor número de imágenes medidas en distintas posiciones angulares del analizador.

MÉTODO	ABSORCIÓN		REFRACCIÓN		DISPERSIÓN	
	objeto-fondo	papel-fondo	objeto-fondo	objeto-fondo	papel-fondo	objeto-fondo
MIR_W x3	-1.47	-1.90	0.03	0.02	-0.03	-0.03
MIR_W x5	-1.94	-2.48	0.11	0.11	-0.09	-0.12
MIR_W x8	-2.26	-3.05	0.15	0.15	-0.09	-0.09
MIR_P x3	0.17	0.24	0.04	0.03	-0.03	-0.03
MIR_P x5	0.20	0.21	0.11	0.10	-0.10	-0.12
MIR_P x8	0.22	0.23	0.16	0.17	-0.13	-0.14

Tabla 5.4: Comparación del valor de SNR entre los métodos MIR_W, MIR_P para distinta cantidad de imágenes de entrada.

Para las técnicas que permiten reconstruir las tres imágenes, es decir para MIR_P, MIR_W y G-DEI, se calculó el valor de SNR, considerando igual número de imágenes medidas, es decir 3 imágenes, definido por G-DEI. El objetivo de esta comparación es estudiar el comportamiento de las tres técnicas, a pesar de que con este número de imágenes medidas MIR no alcanza su mejor rendimiento. Se puede observar, a partir de los valores de SNR presentados en la tabla 5.5, que para absorción el valor más alto de $|SNR|$ se alcanza con la técnica MIR_W mientras que para refracción y dispersión las tres técnicas proporcionan valores absolutos muy similares. Se puede afirmar entonces que exceptuando para la imagen de absorción donde la diferencia es bien marcada, en las restantes los tres métodos proporcionan imágenes cuya SNR es similar en los tres casos.

MÉTODOS	ABSORCIÓN		REFRACCIÓN		DISPERSIÓN	
	objeto-fondo	papel-fondo	objeto-fondo	objeto-fondo	papel-fondo	objeto-fondo
MIR_W x3	-1.3	-1.9	0.03	0.02	-0.03	-0.03
MIR_P x3	0.2	0.2	0.04	0.03	-0.03	-0.03
G-DEI	0.2	0.3	-0.04	-0.03	-0.02	-0.02

Tabla 5.5: Comparación del valor de SNR entre los métodos MIR_W, MIR_P y G-DEI para tres imágenes de entrada.

Por último se calculó la dependencia de las imágenes obtenidas con la técnica MIR_W para distintos valores de iteraciones, desde 0 a 100 considerando las 8 imágenes medidas. Para imágenes reconstruidas con 10 iteraciones y con 100 iteraciones, se obtuvo que las diferencias cualitativas no eran apreciables y que las variaciones relativas de intensidad son del orden del 0.4%, mientras que la diferencia en el tiempo de cálculo era de una hora y media aproximadamente para una computadora de escritorio típica. Con esto se quiere justificar la elección de 10 iteraciones en los algoritmos de la técnica MIR_W.

Capítulo 6

CONCLUSIONES

Se estudio el método de imágenes basadas en un analizador, implementando 5 de sus algoritmos de reconstrucción más utilizados, a imágenes medidas en una muestra diseñada para realzar los efectos físicos que se espera tengan cada una de las imágenes reconstruidas. Estos algoritmos que se basan en la aproximación geométrica, son válidos en el trabajo realizado ya que para los valores de las desviaciones calculados el valor del número de Takagi siempre es mayor que la unidad.

Se compararon cualitativa y cuantitativamente las imágenes reconstruidas entre todas las técnicas consideradas y se obtuvo que si bien las imágenes paramétricas realzan en mayor medida uno de los efectos, no son completamente independiente de los demás. Además, entre las técnicas utilizadas las MIR proporcionan valores de SNR y desviaciones mayores, por lo tanto proporcionan mejor calidad de imagen. En una comparación entre ellas, se observa que excepto en la imagen de absorción, la técnica MIR_P posee valores ligeramente mayores que los obtenidos con MIR_W, mientras que el tiempo de cálculo es similar para ambos, considerando un número de 10 iteraciones en el algoritmo MIR_W. Se evaluó la diferencia en las imágenes reconstruidas para MIR_W en función del número de iteraciones y no se encontró en una diferencia de 90 iteraciones una diferencia en la intensidad de las imágenes mayor al 0.4%, mientras que en tiempo de cálculo la diferencia es cercana a una hora.

Por otro lado se observó que a medida que aumenta la cantidad de imágenes medidas en estas técnicas la calidad de las imágenes obtenidas es mejor. Resultaría interesante estudiar si hay algún valor óptimo de cantidad de imágenes medidas y de iteraciones.

Por otro lado los resultados obtenidos con las técnicas DEI y E-DEI a pesar de ser los más sencillos proporcionan buenos resultados cualitativos y cuantitativos del orden de los resultados obtenidos con las restantes técnicas.

Por último se concluye que el método de imágenes basadas en un analizador es una poderosa técnica de imágenes de rayos X, para ser implementada en todo tipo de ámbitos como el industrial o médico. Cabe destacar que actualmente se siguen proponiendo mejoras para el setup experimental, y en la posibilidad de utilizar fuentes convencionales.

ANEXOS

- **Deducción de los algoritmos del método DEI**

Las intensidades de las dos imágenes medidas en el detector se expresan como:

$$I_L = I_R \left(R(\theta_L) + \frac{dR}{d\theta}(\theta_L) \Delta\theta_Z \right) \quad (1.1)$$

$$I_H = I_R \left(R(\theta_H) + \frac{dR}{d\theta}(\theta_H) \Delta\theta_Z \right) \quad (1.2)$$

- *Refracción $\Delta\theta_Z$.*

De las relaciones anteriores se obtiene lo siguiente

$$I_R = \frac{I_L}{\left(R(\theta_L) + \frac{dR}{d\theta}(\theta_L) \Delta\theta_Z \right)} = \frac{I_H}{\left(R(\theta_H) + \frac{dR}{d\theta}(\theta_H) \Delta\theta_Z \right)}$$

\Rightarrow

$$I_L \left(R(\theta_H) + \frac{dR}{d\theta}(\theta_H) \Delta\theta_Z \right) = I_H \left(R(\theta_L) + \frac{dR}{d\theta}(\theta_L) \Delta\theta_Z \right)$$

$$I_L R(\theta_H) + I_L \frac{dR}{d\theta}(\theta_H) \Delta\theta_Z = I_H R(\theta_L) + I_H \frac{dR}{d\theta}(\theta_L) \Delta\theta_Z$$

$$I_L \frac{dR}{d\theta}(\theta_H) \Delta\theta_Z - I_H \frac{dR}{d\theta}(\theta_L) \Delta\theta_Z = I_H R(\theta_L) - I_L R(\theta_H)$$

\Rightarrow

$$\Delta\theta_Z = \frac{I_H R(\theta_L) - I_L R(\theta_H)}{I_L \left(\frac{dR}{d\theta} \right)(\theta_H) - I_H \left(\frac{dR}{d\theta} \right)(\theta_L)}$$

Éste es el algoritmo presentado en el capítulo 4, con el cual se obtiene la imagen de refracción para este método.

- Absorción aparente I_R .

De las relaciones (1.1) y (1.2) se obtiene lo siguiente:

$$\Delta\theta_Z = \left(\frac{I_L}{I_R} - R(\theta_L) \right) \frac{1}{\frac{dR}{d\theta}(\theta_L)} = \left(\frac{I_H}{I_R} - R(\theta_H) \right) \frac{1}{\frac{dR}{d\theta}(\theta_H)}$$

\Rightarrow

$$\frac{I_L}{I_R} \frac{1}{\frac{dR}{d\theta}(\theta_L)} - R(\theta_L) \frac{1}{\frac{dR}{d\theta}(\theta_L)} = \frac{I_H}{I_R} \frac{1}{\frac{dR}{d\theta}(\theta_H)} - R(\theta_H) \frac{1}{\frac{dR}{d\theta}(\theta_H)}$$

$$\frac{I_L}{I_R} \frac{1}{\frac{dR}{d\theta}(\theta_L)} - \frac{I_H}{I_R} \frac{1}{\frac{dR}{d\theta}(\theta_H)} = R(\theta_L) \frac{1}{\frac{dR}{d\theta}(\theta_L)} - R(\theta_H) \frac{1}{\frac{dR}{d\theta}(\theta_H)}$$

$$\frac{1}{I_R} \left(\frac{I_L \frac{dR}{d\theta}(\theta_H) - I_H \frac{dR}{d\theta}(\theta_L)}{\frac{dR}{d\theta}(\theta_L) \frac{dR}{d\theta}(\theta_H)} \right) = \frac{R(\theta_L) \frac{dR}{d\theta}(\theta_H) - R(\theta_H) \frac{dR}{d\theta}(\theta_L)}{\frac{dR}{d\theta}(\theta_L) \frac{dR}{d\theta}(\theta_H)}$$

\Rightarrow

$$I_R = \frac{I_L \left(\frac{dR}{d\theta} \right) (\theta_H) - I_H \left(\frac{dR}{d\theta} \right) (\theta_L)}{R(\theta_L) \left(\frac{dR}{d\theta} \right) (\theta_H) - R(\theta_H) \left(\frac{dR}{d\theta} \right) (\theta_L)}$$

Este es el algoritmo con el cual se obtiene la imagen de absorción.

• Deducción del algoritmo del método E-DEI

Las intensidades de las dos imágenes medidas en el detector se expresan como:

$$I_L = I_R A \exp\left(\frac{-(\theta_L + \Delta\theta_Z)^2}{2\sigma^2} \right) \quad (2.1)$$

$$I_H = I_R A \exp\left(\frac{-(\theta_H + \Delta\theta_Z)^2}{2\sigma^2} \right) \quad (2.2)$$

Donde $\Delta\theta_D = 2\sigma(2\ln 2)^{1/2}$ y A es el área de la RC y $\theta_{H,L} = \theta_B \pm \frac{\Delta\theta_D}{2}$

- Refracción $\Delta\theta_Z$.

De las ecuaciones (2.1) y (2.2) se obtiene que:

$$\frac{I_L}{I_H} = \exp\left(\frac{-(\theta_L + \Delta\theta_Z)^2}{2\sigma^2} + \frac{(\theta_H + \Delta\theta_Z)^2}{2\sigma^2}\right)$$

\Rightarrow

$$\ln\left(\frac{I_L}{I_H}\right)2\sigma^2 = -(\theta_L + \Delta\theta_Z)^2 + (\theta_H + \Delta\theta_Z)^2 = -\theta_L^2 - 2\theta_L\Delta\theta_Z - \Delta\theta_Z^2 + \theta_H^2 + 2\theta_H\Delta\theta_Z + \Delta\theta_Z^2$$

$$\ln\left(\frac{I_L}{I_H}\right)2\sigma^2 = \theta_H^2 - \theta_L^2 + 2\Delta\theta_Z(\theta_H - \theta_L)$$

Donde

$$\theta_H - \theta_L = \theta_B + \frac{\Delta\theta_D}{2} - \theta_B + \frac{\Delta\theta_D}{2} = \Delta\theta_D$$

$$\theta_H + \theta_L = \theta_B + \frac{\Delta\theta_D}{2} + \theta_B - \frac{\Delta\theta_D}{2} = 2\theta_B$$

Por lo tanto:

$$\ln\left(\frac{I_L}{I_H}\right)2\sigma^2 = 2\theta_B\Delta\theta_D + 2\Delta\theta_Z\Delta\theta_D = 2\Delta\theta_D(\theta_B + \Delta\theta_Z)$$

$$\ln\left(\frac{I_L}{I_H}\right)2\frac{\Delta\theta_D^2}{4(2\ln 2)}\frac{1}{2\Delta\theta_D} = (\theta_B + \Delta\theta_Z)$$

$$\Rightarrow \Delta\theta_Z = \ln\left(\frac{I_L}{I_H}\right)\frac{\Delta\theta_D}{8\ln 2} - \theta_B$$

Así con respecto a θ_B

$$\Delta\theta_Z = \ln\left(\frac{I_L}{I_H}\right)\frac{\Delta\theta_D}{8\ln 2}$$

Este es algoritmo utilizado para reconstruir la imagen de refracción.

- **Método G-DEI**

La intensidad que llega al detector cuando el analizador esta ubicado en una posición angular θ_0 , esta dada por la siguiente expresión:

$$I(\theta_0; x, y) = I_R(x, y) \int R(\theta_0 + \Delta\theta_Z(x, y) + \Delta\theta_S) f(\Delta\theta_S; x, y) d(\Delta\theta_S) \quad (3.1)$$

Si $\Delta\theta_Z$ y $\Delta\theta_S$ son pequeños comparados con $\Delta\theta_D$ se puede desarrollar $R(\theta)$ en serie de Taylor hasta segundo orden alrededor de θ_0 :

$$\begin{aligned} R(\theta_0 + \Delta\theta_Z(x, y) + \Delta\theta_S) &= R(\theta_0) + \left. \frac{\partial R}{\partial \theta} \right|_{\theta_0} (\Delta\theta_Z(x, y) + \Delta\theta_S) + \frac{1}{2} \left. \frac{\partial^2 R}{\partial \theta^2} \right|_{\theta_0} (\Delta\theta_Z(x, y) + \Delta\theta_S)^2 \\ &= R(\theta_0) + \left. \frac{\partial R}{\partial \theta} \right|_{\theta_0} \Delta\theta_Z(x, y) + \left. \frac{\partial R}{\partial \theta} \right|_{\theta_0} \Delta\theta_S + \frac{1}{2} \left. \frac{\partial^2 R}{\partial \theta^2} \right|_{\theta_0} (\Delta\theta_Z(x, y))^2 + \left. \frac{\partial^2 R}{\partial \theta^2} \right|_{\theta_0} \Delta\theta_Z(x, y) \Delta\theta_S + \frac{1}{2} \left. \frac{\partial^2 R}{\partial \theta^2} \right|_{\theta_0} (\Delta\theta_S)^2 \end{aligned}$$

Se asume que la densidad de probabilidad $f(\Delta\theta_S; x, y)$ es simétrica y cumple las siguientes propiedades:

$$\begin{aligned} \int f(\Delta\theta_S; x, y) d(\Delta\theta_S) &= 1 \\ \int \Delta\theta_S f(\Delta\theta_S; x, y) d(\Delta\theta_S) &= 0 \\ \int (\Delta\theta_S)^2 f(\Delta\theta_S; x, y) d(\Delta\theta_S) &= \sigma_{\Delta\theta_S}^2(x, y) \end{aligned}$$

$$\text{Así: } \int R(\theta_0 + \Delta\theta_Z(x, y) + \Delta\theta_S) f(\Delta\theta_S; x, y) d(\Delta\theta_S) =$$

$$\begin{aligned} &= \left(R(\theta_0) + \left. \frac{\partial R}{\partial \theta} \right|_{\theta_0} \Delta\theta_Z(x, y) + \frac{1}{2} \left. \frac{\partial^2 R}{\partial \theta^2} \right|_{\theta_0} (\Delta\theta_Z(x, y))^2 \right) \int f(\Delta\theta_S; x, y) d(\Delta\theta_S) + \\ &+ \left(\left. \frac{\partial R}{\partial \theta} \right|_{\theta_0} + \left. \frac{\partial^2 R}{\partial \theta^2} \right|_{\theta_0} \Delta\theta_Z(x, y) \right) \int \Delta\theta_S f(\Delta\theta_S; x, y) d(\Delta\theta_S) + \frac{1}{2} \left. \frac{\partial^2 R}{\partial \theta^2} \right|_{\theta_0} \int (\Delta\theta_S)^2 f(\Delta\theta_S; x, y) d(\Delta\theta_S) \\ &= R(\theta_0) + \left. \frac{\partial R}{\partial \theta} \right|_{\theta_0} \Delta\theta_Z(x, y) + \frac{1}{2} \left. \frac{\partial^2 R}{\partial \theta^2} \right|_{\theta_0} (\Delta\theta_Z(x, y))^2 + \frac{1}{2} \left. \frac{\partial^2 R}{\partial \theta^2} \right|_{\theta_0} \sigma_{\Delta\theta_S}^2 \end{aligned}$$

$$\Rightarrow I(\theta_0; x, y) = I_R(x, y) \left[R(\theta_0) + \left. \frac{\partial R}{\partial \theta} \right|_{\theta_0} \Delta\theta_Z(x, y) + \frac{1}{2} \left. \frac{\partial^2 R}{\partial \theta^2} \right|_{\theta_0} (\Delta\theta_Z(x, y))^2 + \frac{1}{2} \left. \frac{\partial^2 R}{\partial \theta^2} \right|_{\theta_0} \sigma_{\Delta\theta_S}^2(x, y) \right]$$

REFERENCIAS

- [1] Robley D. Evans. *The atomic Nucleus*. Mc Graw Hill, Bombay (1955).
- [2] A. Authier. *Dynamical Theory of X-ray Diffraction*. 2001, Oxford university Press, New York, USA.
- [3] S. W. Wilkins, T. E. Gureyev, D. Gao, A. Pogany & A. W. Stevenson. *Phase-contrast imaging using polychromatic hard X-ray*. Nature, vol 384, p335-338, (1996).
- [4] U. Bonse and M. Hart. *An X-ray interferometer*. Applied Physics Letters, vol 6, No 8, p155-156 (1965).
- [5] A. Momose. *Phase-sensitive imaging and phase tomography using X-ray interferometers*. Optics Express, Vol. 11, No. 19, p2303-2314 (2003).
- [6] A. Momose, T. Takeda, Y. Itai, A. Yoneyama and K. Hirano. *Phase-Contrast Tomographic Imaging Using an X-ray Interferometer*. Journal of Synchrotron Radiation, vol 5, p309-314 (1998).
- [7] A. Momose. *Demonstration of phase-contrast X-ray computed tomography using an X-ray interferometer*. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research, A 352, p622-628 (1995).
- [8] J.T. Takeda, J Wu, T.T. Liwn, A. Yoneyama, K. Hyodo. Y. Matsuda, K. Kose. *Interferometer-based phase-contrast X-ray computed tomography of colon cancer specimens: comparative study with 4.74-T magnetic resonance imaging and optical microscopy*. Comput Assist Tomogr. 2007 Mar-Apr;31(2):214-7.
- [9] A. Burvall, U. Lundström, A.C. Takman, Daniel H. Larsson and Hans M. Hertz. *Phase retrieval in X-ray phase-contrast imaging suitable for tomography*. Optics Express, vol. 19, No 11, p10359-10376 (2011).
- [10] S. Kneip, C. McGuffey, F. Dollar, M. Bloom, V. Chvykov, G. Kalintchenko, K. Krushelnick, A. Maksimchuk, S. Mangles, T. Matsuoka, Z. Najmudin, C. Palmer, J. Schreiber, W. Schumaker, A.G.R. Thomas, V. Yanovsky. *X-ray phase contrast imaging of biological specimens with tabletop synchrotron radiation*. Nature Precedings : hdl:10101/npre.2011.5946.1 : Posted 12 May 2011.
- [11] M. K, D. Paganin, K. Uesugi, B. Allison, R. Lewis, S. Hooper and K. Pavlov. *X-ray phase, absorption and scatter retrieval using two or more phase contrast images*. Optics Express, Vol. 18, No.19, p19994-200212 (2010).
- [12] P. Coan, A. Wagner, A. Bravin, P. Diemoz, J. Keyriläinen and J. Mollenhauer. *In vivo x-ray phase contrast analyzer-based imaging for longitudinal osteoarthritis studies in guinea pigs*. Physics in Medicine and Biology, 55, p 7649–7662 (2010).
- [13] I. Nesch, D. Fogarty, T. Tzvetkov, B. Reinhart, A. Walus, G. Kheiashvili, C. Muehleman and Dean Chapman. *The desing and application of an in-laboratory diffraction-enhanced X-ray imaging instrument*. Review of scientific instruments, 80, 093702 (2009).
- [14] H. Yamada. *Novel X-ray source based on a tabletop synchrotron and its unique features*. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B, 199 p509–516 (2003).
- [15] J. Brankov, M. Wernick, Y. Yang, J. Li, C. Muehlman, Z. Zhong, M. Anastasio. *A computed tomography implementation of multiple-image radiography*. Medical Physics 33, 278 (2006).
- [16] P. Diemoz, A. Bravin, C. Glaser and P. Coan. *Comparison of analyzer-based imaging computed*

tomography extraction algorithms and application to bone-cartilage Imaging. Physics in Medicine and Biology, 55 p7663-7679 (2010).

[17] Coan P, Pagot E, Fiedler S, Cloetens P, Baruchel J, Bravin A. *Phase-contrast X-ray imaging combining free space propagation and Bragg diffraction*. J Synchrotron Radiat. 12, 241 (2005).

[18] Heikki Suhonen. *Scattering and Refraction as Contrast Mechanisms in X-Ray Imaging*. Report Series in Physics, academic dissertation, (2008).

[19] M. Kitchen, K. Pavlov, K. Siu, R. Menk, G. Tromba and R. A. Lewis. *Analyser-based phase contrast image reconstruction using geometrical optics*. Physics in Medicine and Biology, 52, p4171-4187, (2007).

[20] M. Wernick, O. Wirjadi, D. Chapman, Z. Zhong, N. Galatsanos, Y. Yang, J. Brankov, O. Oltulu, M. Anastasio and C. Muehleman. *Multiple-image radiography*. Phys. Med. Biol. 48, p3875–3895 (2003).

[21] E. Pagot, P. Cloetens, S. Fiedler, A. Bravin, P. Coan, J. Baruchel, J. Hätwig and W. Thomlinson. *A method to extract quantitative information in analyzer-based x-ray phase contrast Imaging*. Applied Physics Letters, vol 82, No 20 (2003).

[22] V. Ingal and E. Beliaevskaya. *X-ray plane-wave topography observation of the phase contrast from a non-crystalline object*. J. Phys. D Appl. Phys. 28 p2314-2317. (1995).

[23] D. Chapman, W. Thomlinson, F. Arfelli, N. Gmür, Z. Zhong, R. Menk, R. E. Johnson, D. Washburn, E. Pisano and D. Sayers. *Mammography imaging studies using a Laue crystal analyzer*. Rev. Sci. Instrum. 67, 3360 (1996).

[24] D. Chapman, W. Thomlinson, R. Johnston, D. Washburn, E. Pisano, N. Gmür, Z. Zhong, R. Menk, F. Arfelli and D. Sayers. *Diffraction enhanced x-ray imaging*. Phys. Med. Biol. 42, p 2015–2025 (1997)

[25] Ya. Nesterets, T. Gureyev, D. Paganin, K. Pavlov and S. Wilkins. *Quantitative diffraction-enhanced x-ray imaging of weak objects*. J. Phys. D: Appl. Phys. 37, p1262–1274 (2004).

[26] D. Paganin, T. Gureyev and K. Pavlov, R. Lewis, M. Kitchen. *Phase retrieval using coherent imaging systems with linear transfer functions*. Optics Communications p 234 87–105 (2004).

[27] Ya. Nesterets, P. Coan, T. Gureyev, A. Bravin, P. Cloetens and S. Wilkins. *On qualitative and quantitative analysis in analyzer-based imaging*. Acta Cryst. A62, p296-308 (2006).

[28] P. Diemoz, P. Coan, C. Glaser and A. Bravin. *Absorption, refraction and scattering in analyzer-based imaging: comparison of different algorithms*. Optics Express, vol. 18, No 4 (2010).

[29] K. Pavlov, T. Gureyev, D. Paganin, Ya. Nesterets, M. Morgan and R. Lewis. *Linear systems with slowly varying transfer functions and their application to x-ray phase contrast Imaging*. J. Phys. D: Appl. Phys 37, p2746–2750 (2004).

[30] V. Bushuev, V. Ingal and E. Beliaevskaya. *Wave theory of X-ray phase contrast radiography*. Crystallography Reports, vol 43, No 4 (1998).

[31] C. Hu, L. Zhang, Hui Li and S.Luo1. *Comparison of refraction information extraction methods in diffraction enhanced Imaging*. Optics Express, vol. 16, No. 21 (2008).

[32] L. Rigon, F. Arfelli, R. Menk. *Three-image diffraction enhanced imaging algorithm to extract absorption, refraction, and ultrasmall-angle scattering*. Applied Physics Letters, vol 90, 114102 (2007).

[33] L. Rigon, H. Besch, F. Arfelli, R. Menk, G. Heitner and H. Plochow-Besch. *A new DEI algorithm capable of investigating sub-pixel structures*. J. Phys. D: Appl. Phys, vol 36, p107–112 (2003).
