



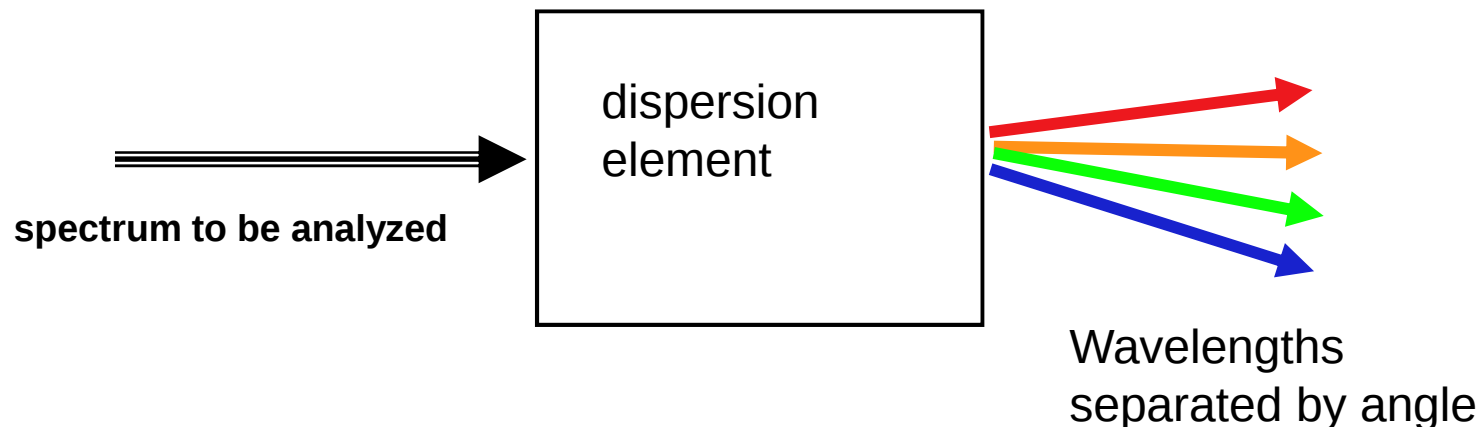
Φασματοσκοπία Ανάκλασης και Διάχυσης

**(Reflectance and Diffuse
Spectroscopy)**

Φασματοσκοπία (Spectroscopy)



- **Τι είναι; Ελληνική λέξη:**
 - spectro = χρώμα + scope = βλέπω / παρατηρώ
= μέτρηση των χρωμάτων του φωτός
- **Τι μπορούμε να μάθουμε από τη φασματοσκοπία;**
 - Ενεργειακά επίπεδα τόμων και μορίων
 - Θεμελιώδεις διαδικασίες
 - Τα μοριακά συστατικά των ιστών
- **Όταν μετρηθεί η ποσότητα κάθε χρώματος, η μέτρηση ονομάζεται "φάσμα".**



Το Πρίσμα του Νεύτωνα



Διασπορά (Dispersion) με Πρίσμα



- $n=n(\lambda)$

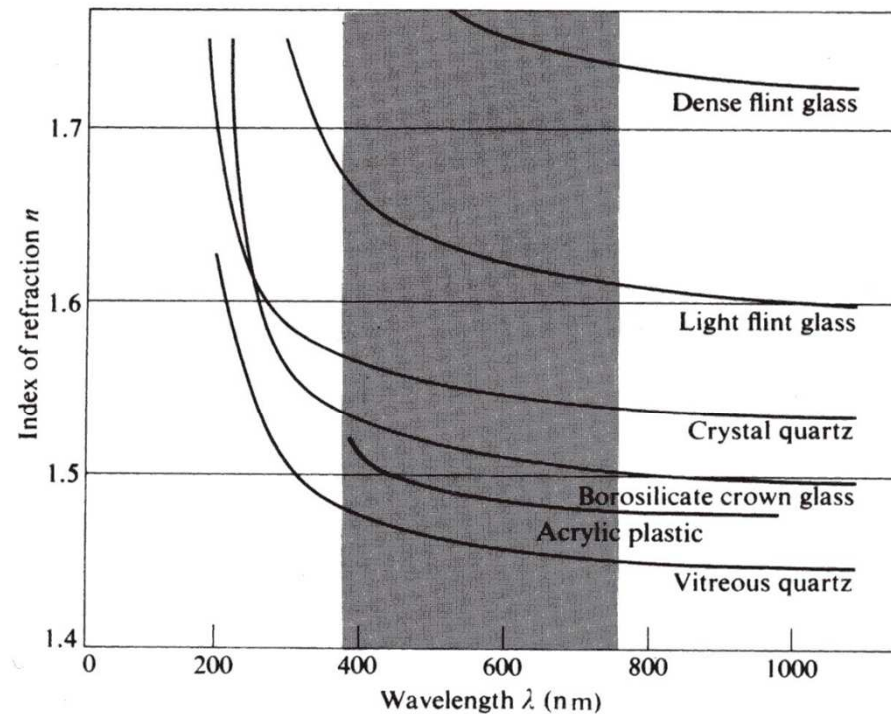
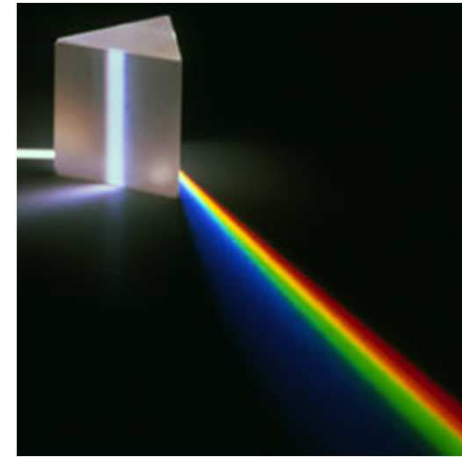
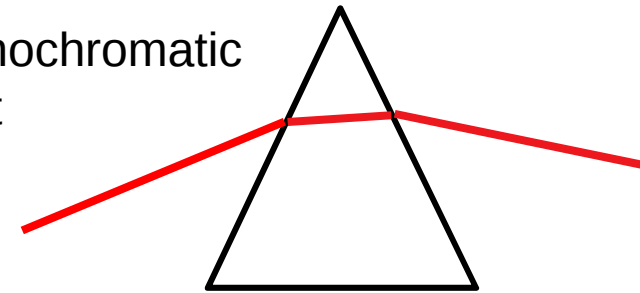


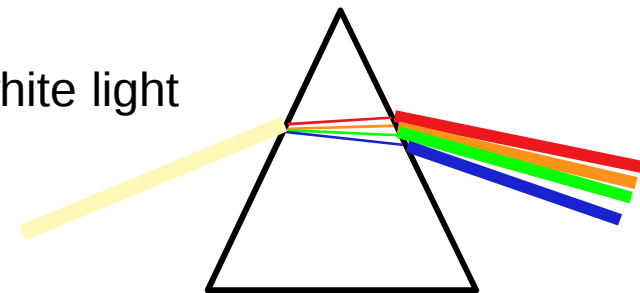
Figure 3.40 The wavelength dependence of the index of refraction for various materials.



monochromatic
light



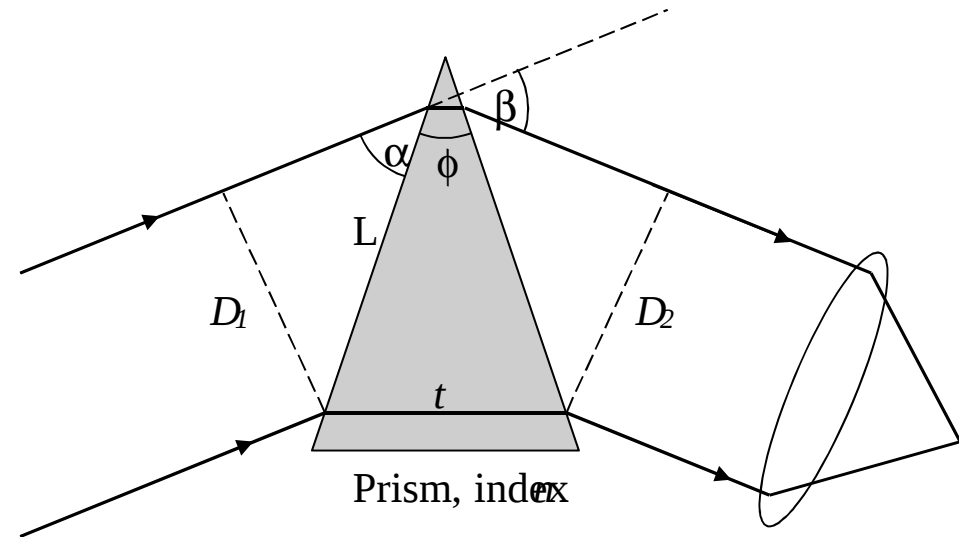
white light



Διασπορά (Dispersion) με Πρίσμα



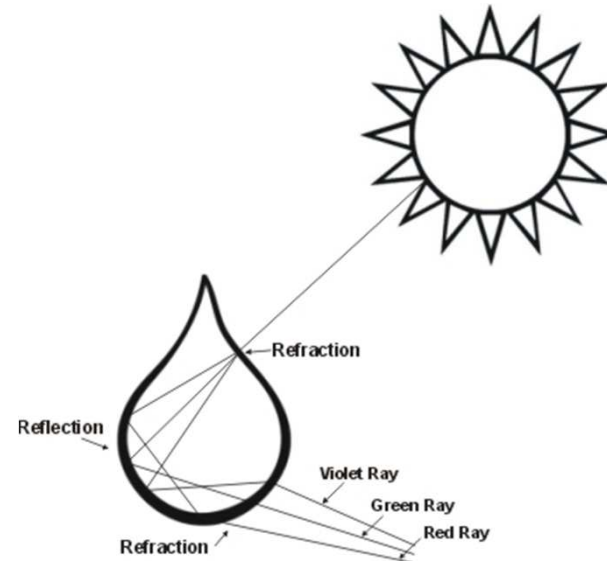
- Διακριτική Ικανότητα (Resolving Power) $R_{prism} = \frac{\lambda}{\delta\lambda} = t \frac{dn}{d\lambda}$
- Φασματική Ευκρίνεια (Spectral Resolution) $\delta\lambda = \frac{\lambda}{R}$
- Χρήσιμα μόνο όπου απαιτείται χαμηλή διακριτική ικανότητα.
- Πλεονεκτήματα:
 - Απλό (αλλά το υλικό πρέπει να είναι υψηλής ποιότητας)
 - Επικάλυψη πολλαπλών τάξεων (order) δεν είναι πρόβλημα - μόνο μία τάξη
- Μειονεκτήματα:
 - Δεν είναι δυνατή ψηλή διακριτική ικανότητα
 - Διακριτική ικανότητα και ευκρίνεια μπορεί να διαφέρουν έντονα με λ



Ουράνια Τόξα (Rainbows)



- **Πως δημιουργούνται τα ουράνια τόξα;**
 - Διασπορά από σταγονίδια βροχής
 - Γωνία μεταξύ προσπίπτουσας και εξερχόμενης ακτίνας
 - 42 μοίρες για το κόκκινο
 - 40 μοίρες για το μωβ
 - Σχηματίζεται μια κυκλική στεφάνη από χρώματα στον ουρανό → ουράνιο τόξο!
- **Δευτεροταγή (Secondary) ουράνια τόξα**
 - Διπλή ανάκλαση του ηλιακού φωτός μέσα στο σταγονίδιο
 - Εμφανίζονται σε γωνίες 50–53 μοίρες
 - Τα σταγονίδια πρέπει να έχουν το κατάλληλο μέγεθος για να γίνει αυτό
- **Μπορεί να παρουσιαστούν και ουράνια τόξα ανωτέρων τάξεων**

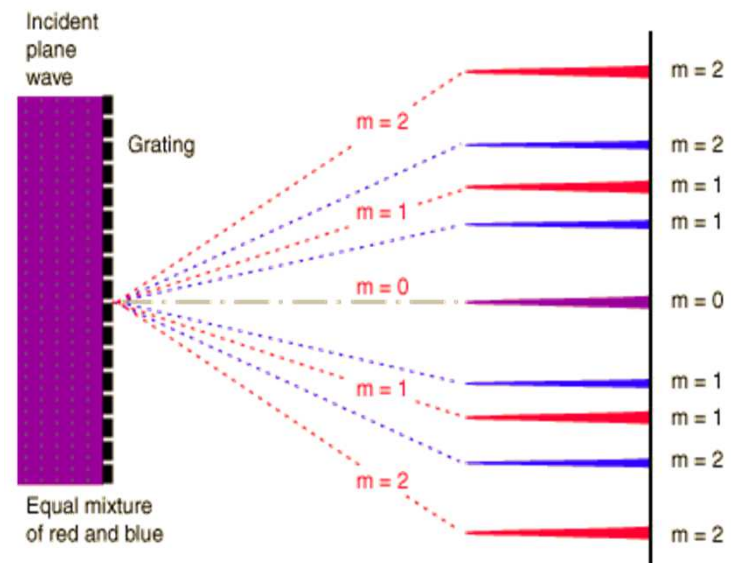
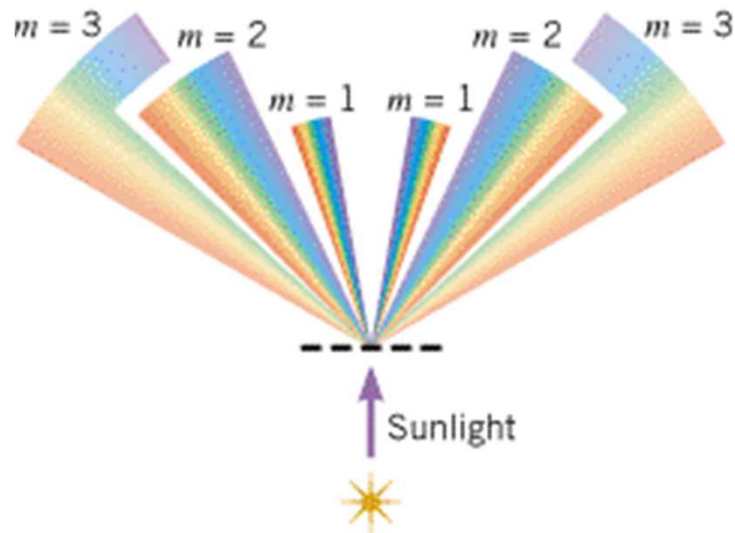
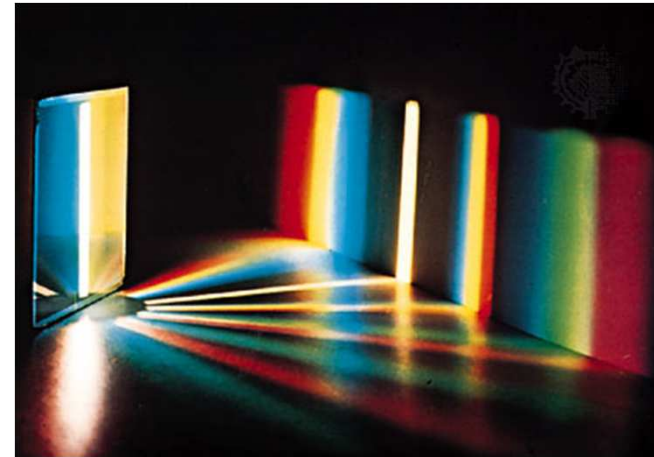


Διασπορά με Πλέγμα (Grating)



- **Περιθλαστικό Πλέγμα (Diffraction grating)**

- Ένα οπτικό στοιχείο το οποίο διαχωρίζει το πολυχρωματικό φως σε μια συνεχή σειρά μονοχρωματικών ακτίνων

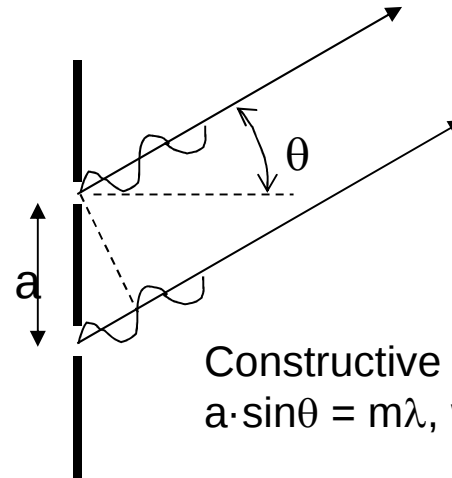


Διασπορά με Πλέγμα (Grating)

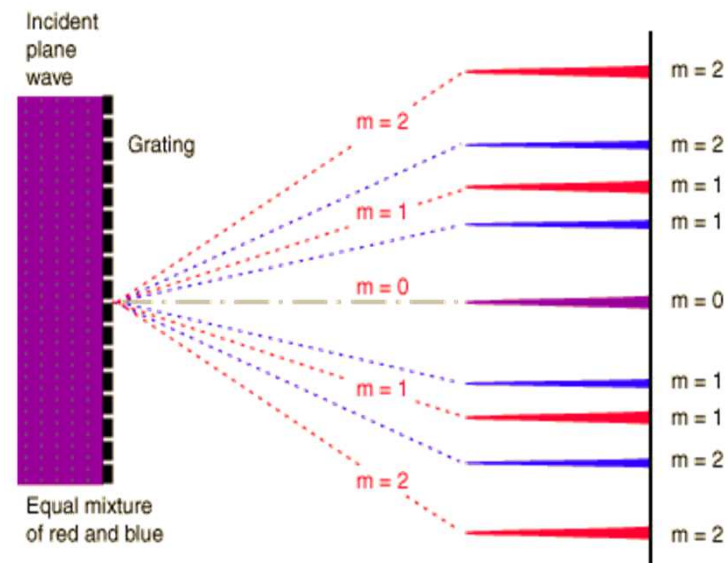


- **Διάταξη πολλαπλών σχισμών (Multi-slit arrangement)**

- Διαχωρίζει τα μήκη κύματος με ψηλή ευκρίνεια και αποδοτικότητα λόγω της περίθλασης (diffraction)
- Η διακριτική ικανότητα προέρχεται από τη συμβολή (interference) του φωτός



Constructive interference when $a \cdot \sin \theta = m\lambda$, where m is an integer



Διασπορά με Πλέγμα (Grating)



- **Περίθλαση (Diffraction)**

$$\frac{m\lambda}{\Lambda} = \sin(a) + \sin(b)$$

- **Γωνία Littrow ($\alpha=\beta$)**

$$\frac{m\lambda}{2\Lambda} = \sin(a)$$

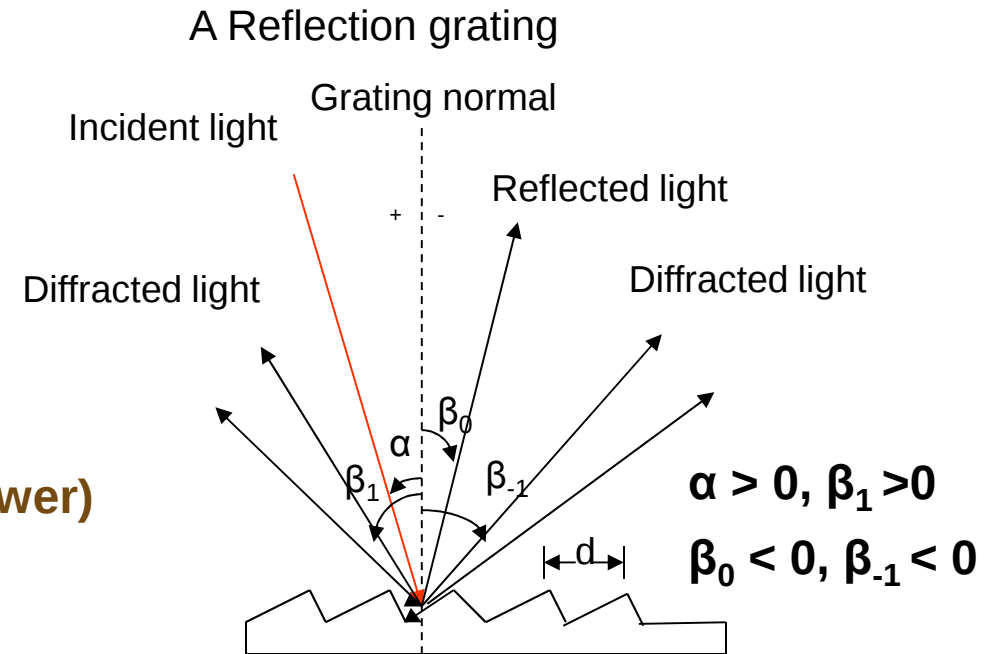
- **Διακριτική Ικανότητα (Resolving Power)**

$$R = \frac{\lambda_o}{\delta\lambda} = mN_{lines} = \frac{mD_a}{\Lambda}$$

- **Φασματική Ευκρίνεια (Spectral Resolution)**

$$\delta\lambda = \frac{\lambda_o \Lambda}{mD_a}$$

- **Η αποδοτικότητα (Efficiency) μειώνεται με τη Λ και τη m**

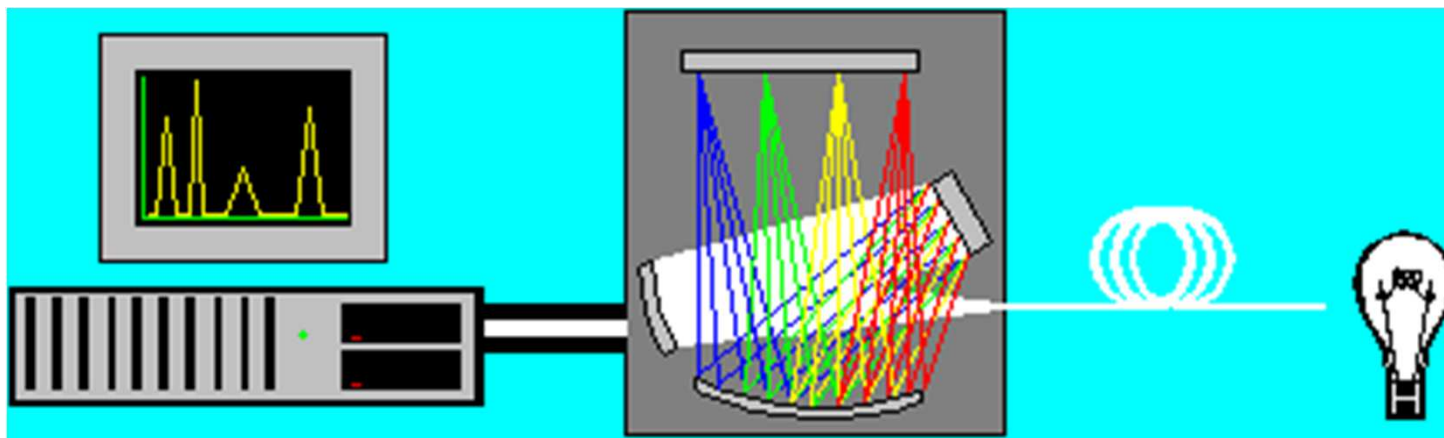


- m : the diffraction order (an integer),
- λ : the wavelength
- $\Lambda = 1/d$ is the period of grooves
- α : incident angle
- β : diffracted angle
- D_a : aperture diameter (i.e. diameter of grating illuminated)

Ανατομία ενός φασματογράφου



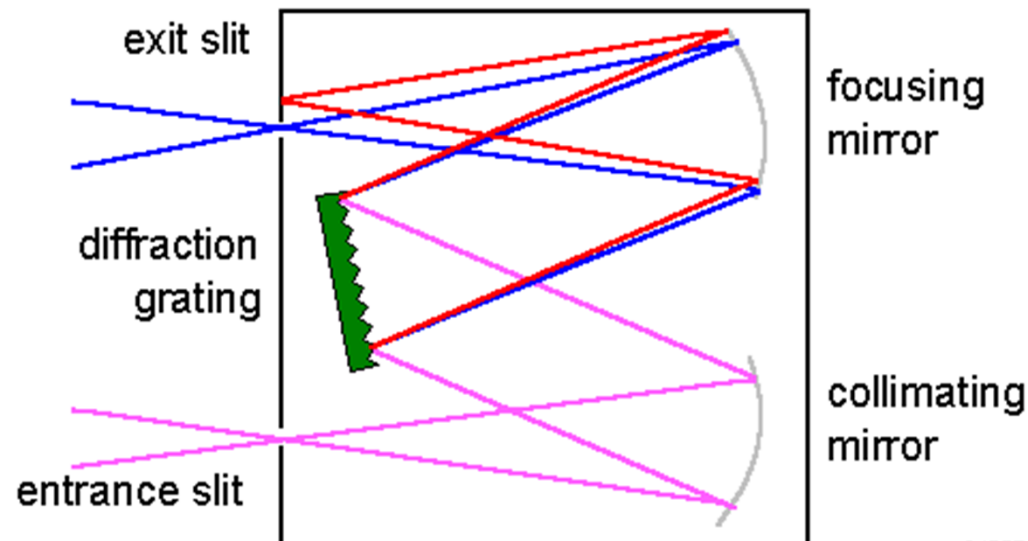
- **Φασματογράφος (Spectrometer)**
 - Συσκευή μέτρησης φάσματος του φωτός
 - Συνήθως με πλέγμα
- **Το πλάτος της σχισμής (slit), w , καθορίζει:**
 - Διακριτική ικανότητα ($w \downarrow$, $R \uparrow$)
 - Διαπέραση (Throughput) $\rightarrow$ SNR ($w \downarrow$, $I \downarrow$)
- **Ως εκ τούτου υπάρχει πάντα μια συμβιβαστική αντιστάθμιση (trade-off) μεταξύ ευκρίνειας και SNR**



Ανατομία ενός φασματογράφου



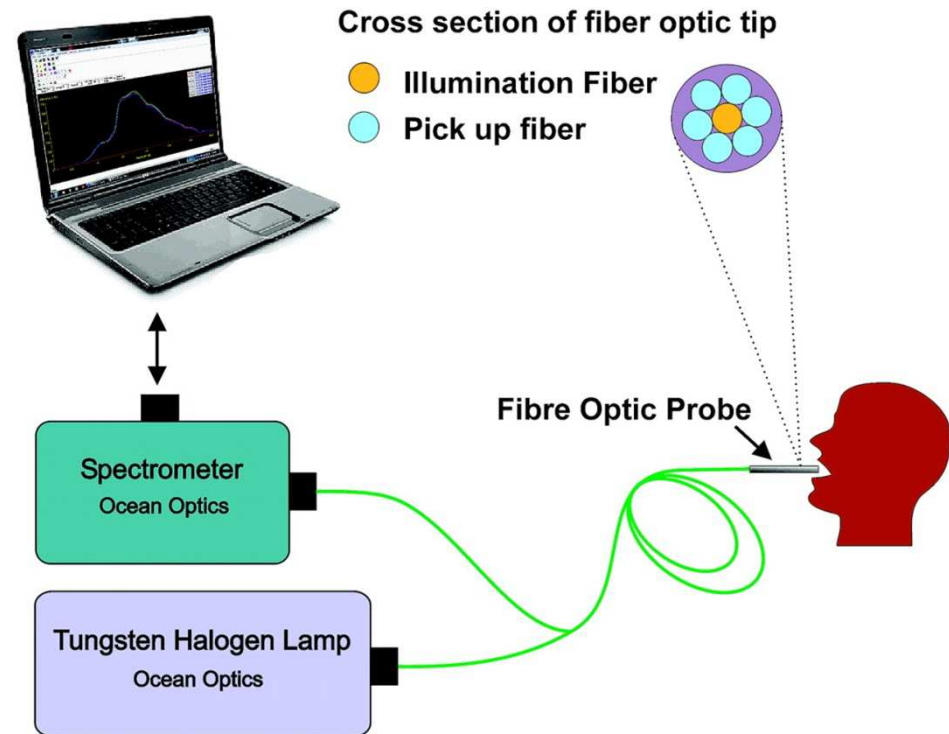
- **Μονοχρωμάτορας (Monochromator)**
 - Παρόμοιος με φασματογράφο αλλά με σχισμή εξόδου
 - Χρησιμοποιείται για να πάρουμε στενό φάσμα → Προσεγγίζει το ένα μήκος κύματος καθώς η σχισμή γίνεται μικρότερη
- **Το πλάτος της σχισμής (slit), w , καθορίζει:**
 - Διακριτική ικανότητα ($w \downarrow$, $R \uparrow$)
 - Διαπέραση (Throughput) → SNR ($w \downarrow$, $I \downarrow$)
- **Ως εκ τούτου υπάρχει πάντα μια συμβιβαστική αντιστάθμιση (trade-off) μεταξύ ευκρίνειας και SNR**



Φασματοσκοπία Ανάκλασης (Reflectance Spectroscopy)



- **Μετρά**
 - Αλλαγές στο φάσμα της πηγής
- **Αποτέλεσμα**
 - Ελαστικής Σκέδαση (Elastic Scattering)
 - Mie και Rayleigh
 - Απορρόφησης (Absorption)
 - Διάφοροι απορροφητές στους ιστούς
- **Εξοπλισμός (Instrumentation)**
 - Ενός σημείου (Single point)
 - Απεικόνισης (Imaging)
 - Πολλές οπτικές ίνες → φασματογράφος απεικόνισης
 - Περιορισμένη χωρική (spatial) ευκρίνεια
 - Κάμερα με μεταβαλλόμενα φίλτρα
 - Περιορισμένη φασματική ευκρίνεια
- **Εφαρμογές**
 - Π.χ. παλμικό οξύμετρο



Φασματοσκοπία Ανάκλασης (Reflectance Spectroscopy)



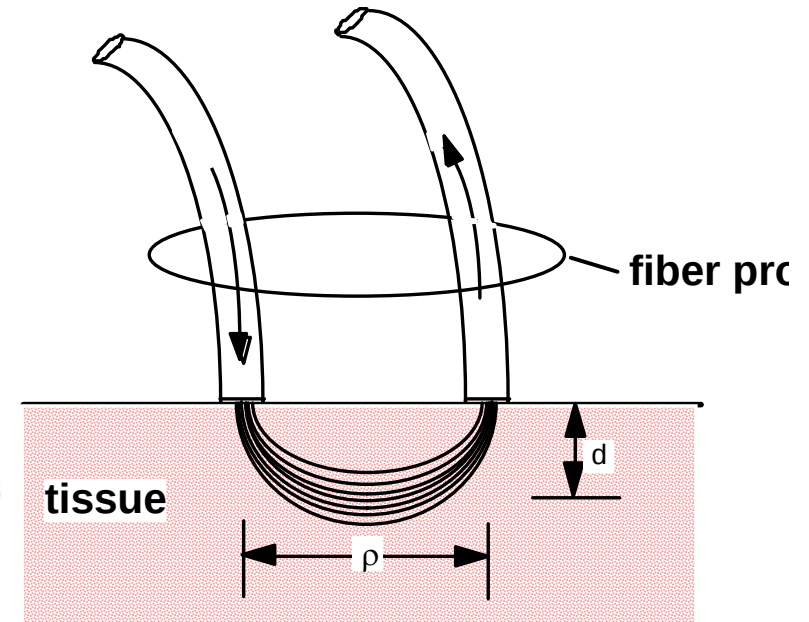
$$I(\rho) = I_0 \left[\frac{1}{\mu_t'} \left(\mu_{\text{eff}} + \frac{1}{r_1} \right) \frac{\exp(-\mu_{\text{eff}} r_1)}{r_1^2} + \left(\frac{1}{\mu_t'} + 2z_b \right) \left(\mu_{\text{eff}} + \frac{1}{r_2} \right) \frac{\exp(-\mu_{\text{eff}} r_2)}{r_2^2} \right],$$

where

$$r_1 = \left[\left(\frac{1}{\mu_t'} \right)^2 + \rho^2 \right]^{1/2}, \quad r_2 = \left[\left(\frac{1}{\mu_t'} + 2z_b \right)^2 + \rho^2 \right]^{1/2}$$

$$\mu_{\text{eff}} = \sqrt{\frac{\mu_a}{D}}, \quad \mu_t' = \mu_a + \mu_s' \text{ and } z_b = 2AD,$$

($D=1/\mu_t'$) and A relates to internal reflection.)



Mourant, etc., and Bigio, Appl. Optics 36, No.4, p.949 (1997)

Το Παλμικό Οξύμετρο (Pulse Oximeter)

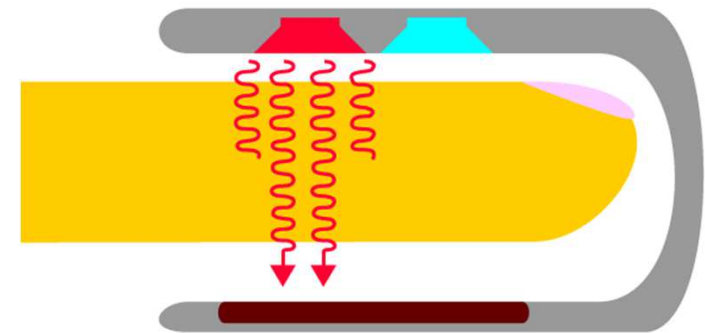
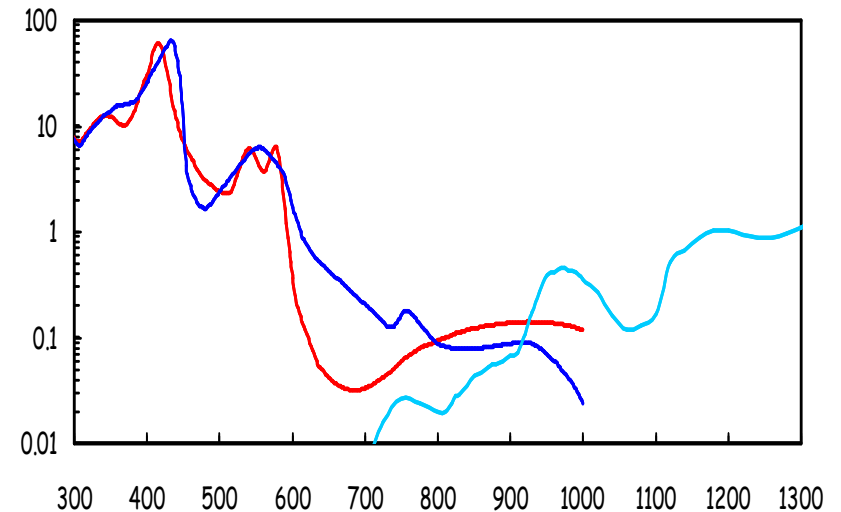
- **Λειτουργία:** Μέτρηση κορεσμού αρτηριακού αίματος
- **Πλεονεκτήματα:**
 - Μη επεμβατικό
 - Εξαιρετικά φορητό
 - Συνεχής παρακολούθηση
 - Φτηνό
 - Αξιόπιστο



Το Παλμικό Οξύμετρο (Pulse Oximeter)

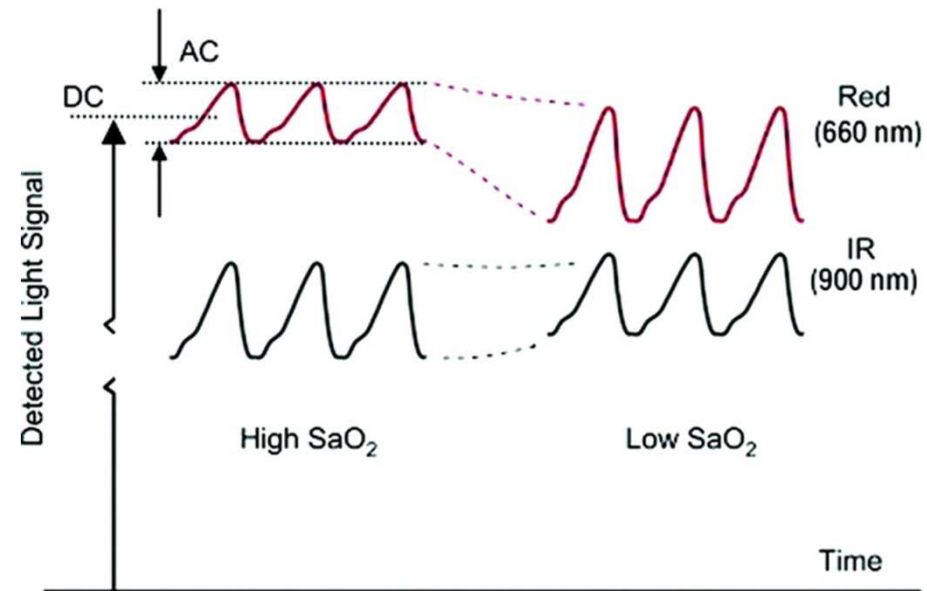
- **Πώς:**

- Φωτισμός με 2 μήκη κύματος
- Αμφίπλευρα του ισοσβεστικού σημείου (π.χ. 650 και 805 nm)
- Ισοσβεστικό σημείο: μήκος κύματος όπου διασταυρώνονται τα φάσματα Hb και HbO₂.
- Μέτρηση του σήματος που μεταδίδεται μέσα από το δάχτυλο



Το Παλμικό Οξύμετρο (Pulse Oximeter)

- Απομονώνεται το μεταβαλλόμενο σήμα λόγω της παλμικής ροής (αρτηριακό αίμα)
- Υποθέτουμε ότι το σήμα είναι ανάλογο του συντελεστή απορρόφησης
 - Παίρνουμε τα δύο μα
 - Υπολογίζουμε τις συγκεντρώσεις (δύο μετρήσεις, δύο άγνωστοι)
- Βαθμονόμηση του οργάνου με συσχέτιση του ανιχνευόμενου σήματος με μετρήσεις αρτηριακού κορεσμού από τα δείγματα αίματος



$$\mu_a^{\lambda_1} = \ln 10 * \left\{ \varepsilon_{HbO_2}^{\lambda_1} [HbO_2] + \varepsilon_{Hb}^{\lambda_1} [Hb] \right\}$$

$$\mu_a^{\lambda_2} = \ln 10 * \left\{ \varepsilon_{HbO_2}^{\lambda_2} [HbO_2] + \varepsilon_{Hb}^{\lambda_2} [Hb] \right\}$$

$$\text{Arterial O}_2 \text{ saturation} = \frac{[HbO_2]}{[HbO_2] + [Hb]} * 100\%$$

ε is the extinction coefficient

Το Παλμικό Οξύμετρο (Pulse Oximeter)

- **Περιορισμοί:**

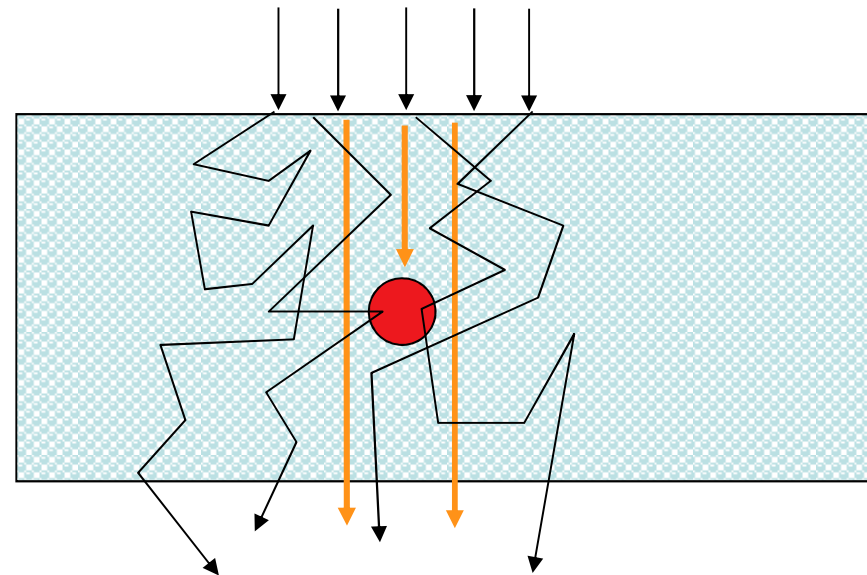
- Αξιόπιστο όταν ο κορεσμός O_2 είναι πάνω από 70%
- Δεν είναι πολύ αξιόπιστο όταν η ροή επιβραδύνεται
- Μπορεί να επηρεαστεί από την κίνηση και τις διαφοροποιήσεις στο φωτισμό του δωματίου
- Δεν παρέχει ένδειξη του επίπεδου οξυγόνωσης του ιστού



Θολά Υλικά (Turbid Media)



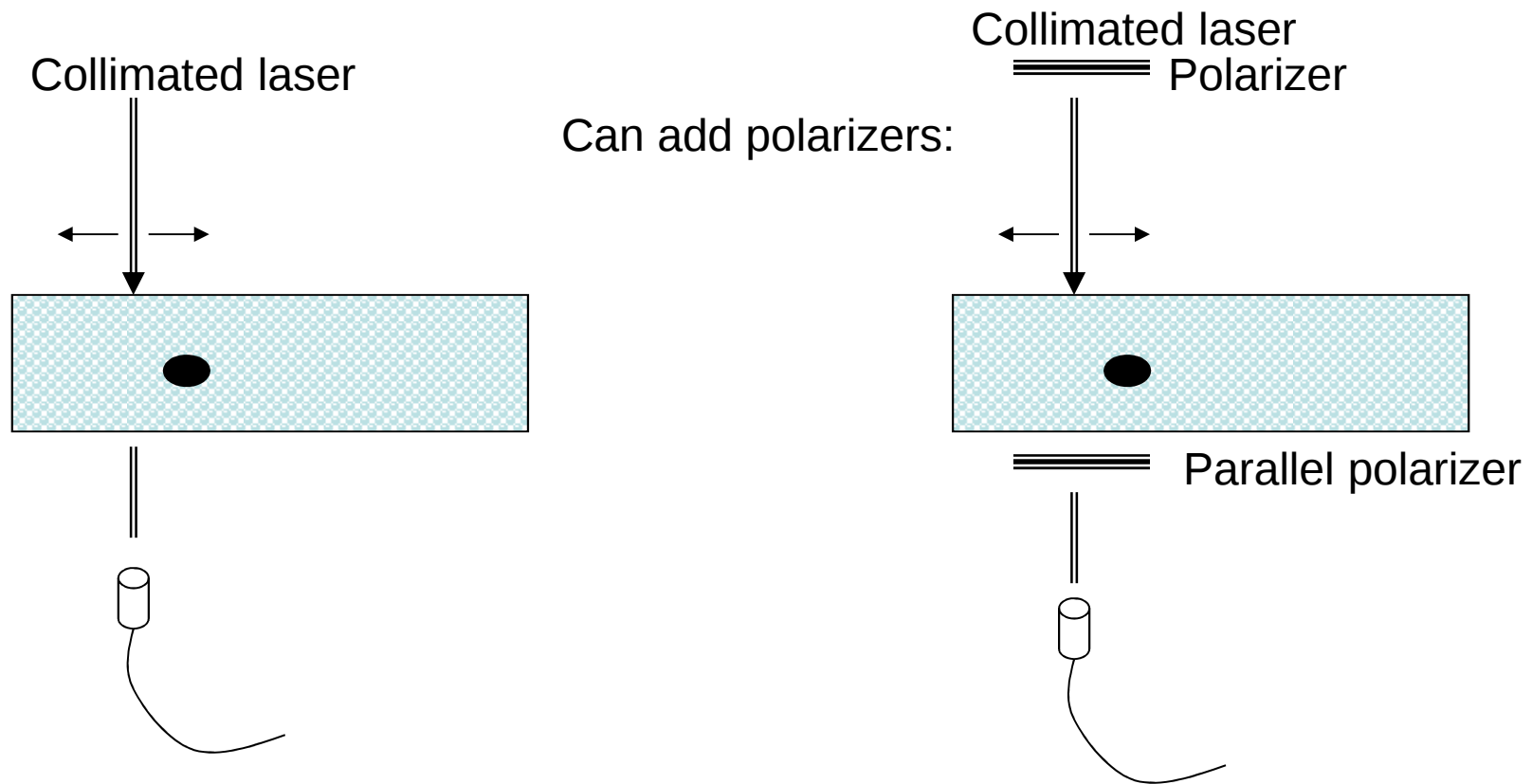
- Πως μπορούμε να απεικονίσουμε αντικείμενα σε θολά υλικά;
 - Με διάφορα κόλπα !!
- Μέθοδοι που ανιχνεύουν μόνο τα φωτόνια που δεν σκεδάστηκαν
 - Δημιουργούν μια προβολή (όπως π.χ. οι ακτινογραφίες)
- Πιθανές μέθοδοι
 - Παραλληλισμένος φωτισμός (Collimated Illumination)
 - Χρήση πολωτών
 - Εντοπισμός “snake” φωτονίων



Θολά Υλικά (Turbid Media)



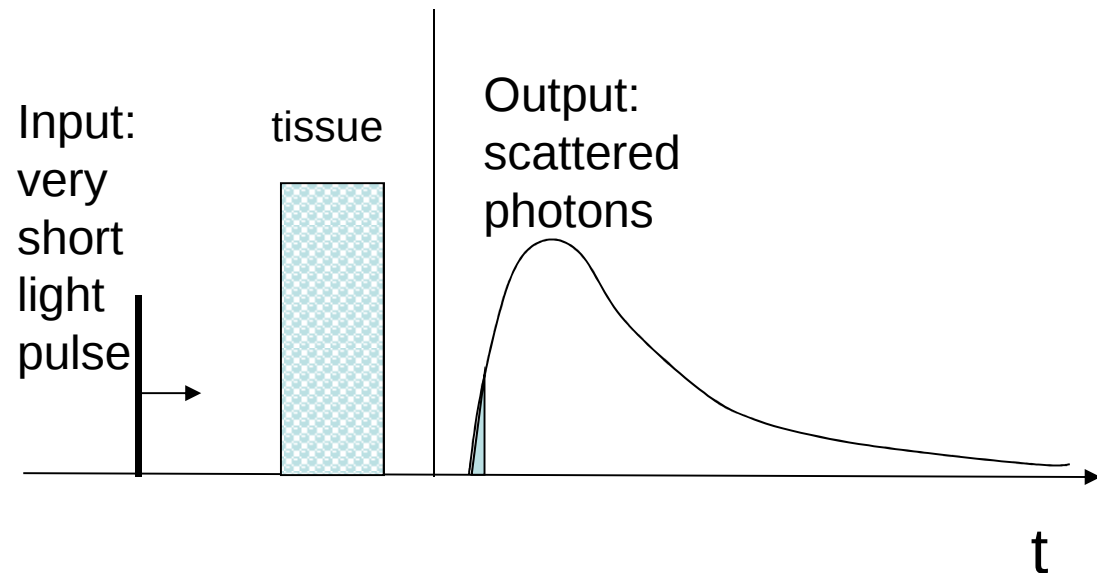
- Παραλληλισμένος Φωτισμός



Θολά Υλικά (Turbid Media)



- Τα φωτόνια τα οποία φτάνουν πρώτα έχουν ακολουθήσει τη πιο ευθεία διαδρομή
 - Απεικόνιση μόνο με αυτά τα πρώτα φωτόνια
- Μέθοδοι
- The earliest arriving photons have traveled the straightest path
 - Can we select only the earliest photons?
- Μέθοδοι Χρονισμού (Time gating methods)
 - Π.χ.
 - Streak camera
 - Coherence gates
 - κλπ

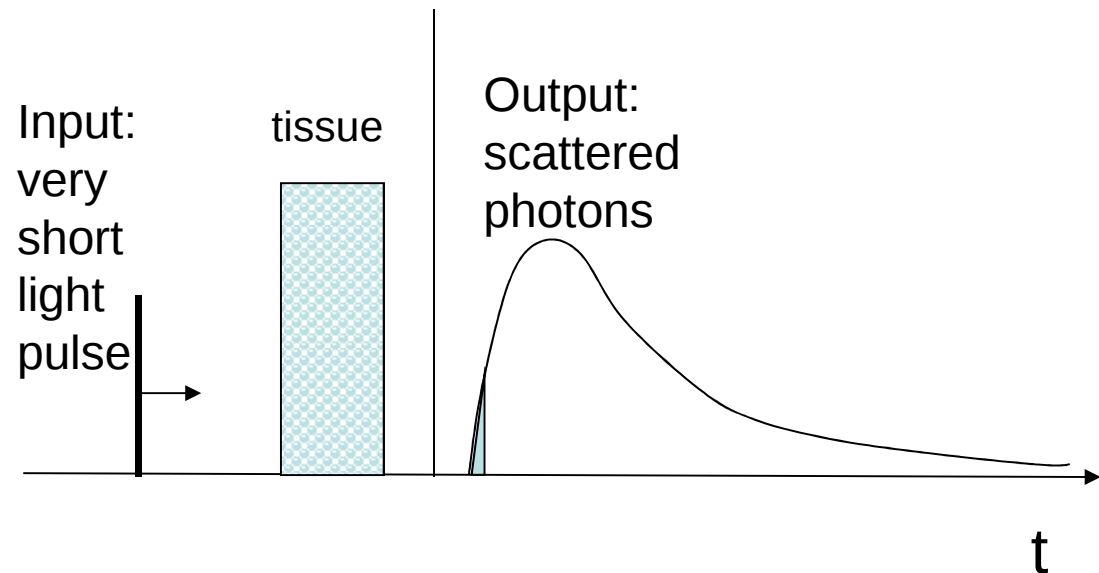


Θολά Υλικά (Turbid Media)



- Υπάρχουν όμως αρκετά μη σκεδασμένα φωτόνια;

- Ο νόμος του Beer μας λέει πόσα φωτόνια παραμένουν μη-σκεδασμένα μετά από μια απόσταση μέσα στον ιστό
- Τυπική τιμή για πολλούς ιστούς: $\mu_s' \sim 10 \text{ cm}^{-1}$
- $\Rightarrow$ για οπτική μαστογραφία υπάρχουν μόνο ελάχιστα φωτόνια



$$I_U = I_0 e^{-\mu_s' L}$$

$$I_U = I_0 e^{-10 \times 10} = 3.7 \times 10^{-44}$$

Θολά Υλικά (Turbid Media)



Πως μπορούμε να απεικονίσουμε με σκεδασμένο φως;

- **Ευθύ (“forward”) πρόβλημα**

- Αν ξέρουμε πως/πόσο φως μπαίνει και τι/που είναι το κρυμμένο αντικείμενο, μπορούμε να υπολογίσουμε πως/πόσο φως βγαίνει σε διάφορα σημεία της επιφάνειας;

- **Αντίστροφο (“inverse”) πρόβλημα**

- Αν ξέρουμε πως/πόσο φως μπαίνει και ξέρουμε πως/πόσο φως βγαίνει σε διάφορα σημεία της επιφάνειας, μπορούμε να καταλάβουμε τι/που είναι το κρυμμένο αντικείμενο;

- **Μέθοδοι**

- Monte Carlo
- Προσέγγιση Διάχυσης (Diffusion Approximation)
- Πεδίο Χρόνου (Time Domain) ή Πεδίο Συχνότητας (Frequency domain)

Θολά Υλικά (Turbid Media)



Πως μπορούμε να λύσουμε το αντίστροφο πρόβλημα;

• Πολλές φορές γίνεται σαν επαναλήψεις ευθέων υπολογισμών:

1. Κάνουμε αρχικές υποθέσεις σχετικά με τις οπτικές ιδιότητες του περιβάλλοντος ιστού
2. Κάνουμε μια πρώτη υπόθεση για τον τόπο, το μέγεθος και τις οπτικές ιδιότητες του αντικειμένου.
3. Λύνουμε το ευθύ (forward) πρόβλημα διάδοσης και συγκρίνουμε τα αποτελέσματα με τις μετρήσεις
4. Ξανα-εκτιμούμε τις ιδιότητες του αντικειμένου με βάση τις διαφορές και υπολογίζουμε εκ νέου το πρόβλημα προς τα εμπρός
5. Επαναλαμβάνουμε πολλές φορές!

Οπτική Τομογραφία Διάχυσης (Diffuse Optical tomography - DOT)



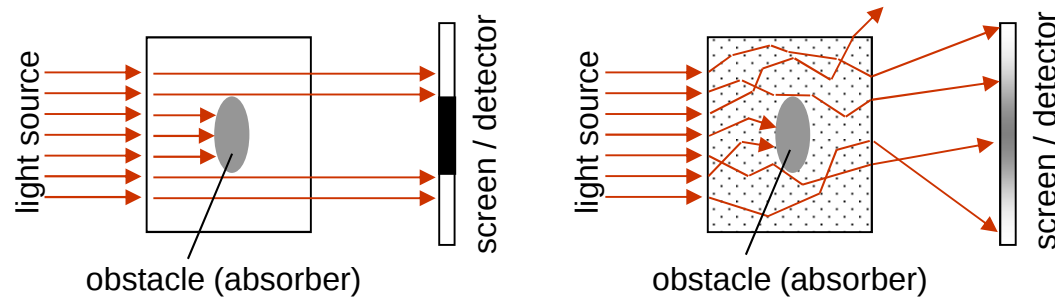
- Χρόνος Ανακάλυψης: ~1988
- Είδος Ακτινοβολίας: Υπέρυθρη (μη ιονίζουσα)
- Ενέργεια/μήκος κύματος: ~1 eV / 600–1000 nm
- Αρχή Απεικόνισης: Αλληλεπίδραση του φωτός με τον ιστό (απορρόφηση, ελαστική σκέδαση)
- Όγκος Απεικόνισης: ~10³ cm³
- Ευκρίνεια: Χαμηλή (~1cm)
- Εφαρμογές: Αιμάτωση, Λειτουργική απεικόνιση

Οπτική Τομογραφία Διάχυσης (Diffuse Optical tomography - DOT)

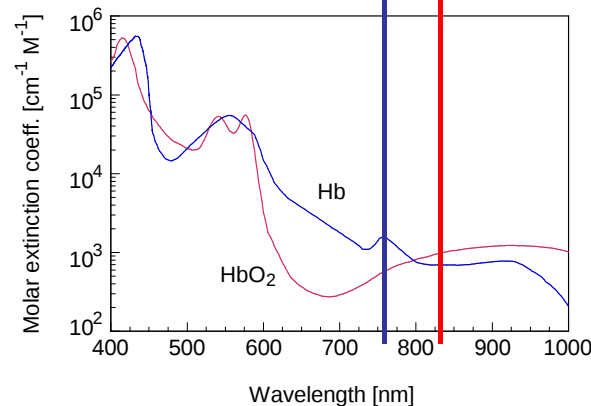


• Αρχές DOT

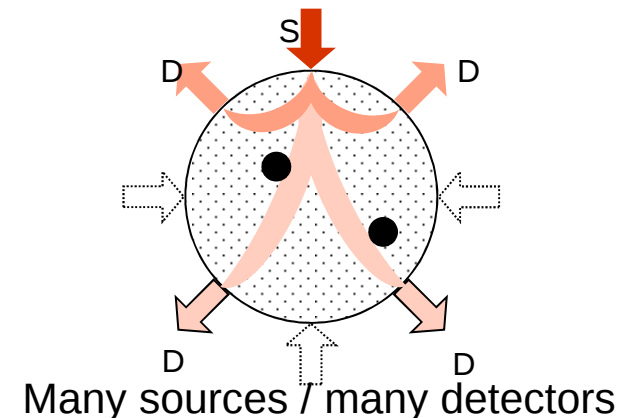
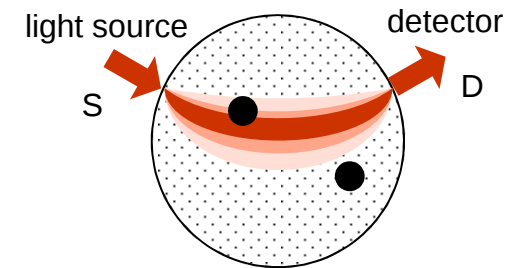
- Κυριαρχεί η σκέδαση
- Πολλαπλές πηγές – πολλαπλοί ανιχνευτές → λύση αντίστροφου (inverse) προβλήματος
- Λειτουργική απεικόνιση (αιμοδυναμική)
- Μειωμένη βάθος διείσδυσης (~cm), χαμηλή ευκρίνεια. (mm-cm)
- Οικονομική μέθοδος, μη-ιονίζουσα ακτινοβολία



Clear medium



Scattering medium



Many sources / many detectors

Οπτική Τομογραφία Διάχυσης (Diffuse Optical tomography - DOT)

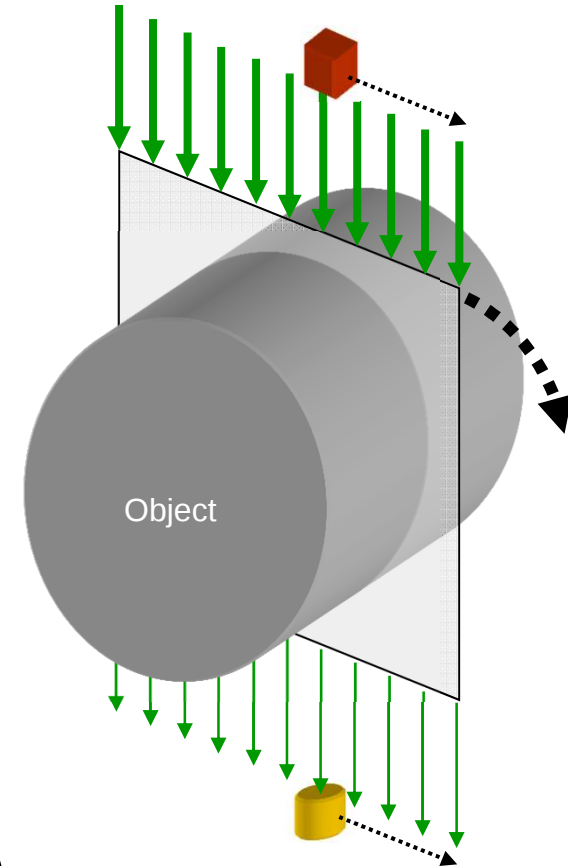
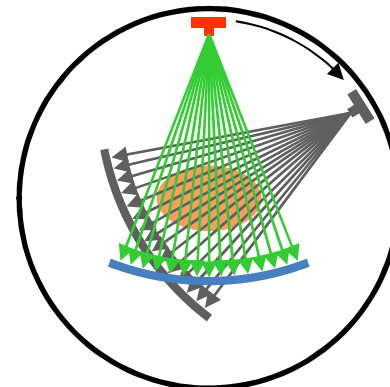
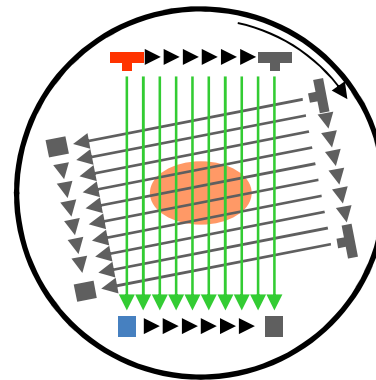


- **DOT και CT**

- Οι ομοιότητες είναι επιφανειακές

- **Ουσιαστικές Διαφορές**

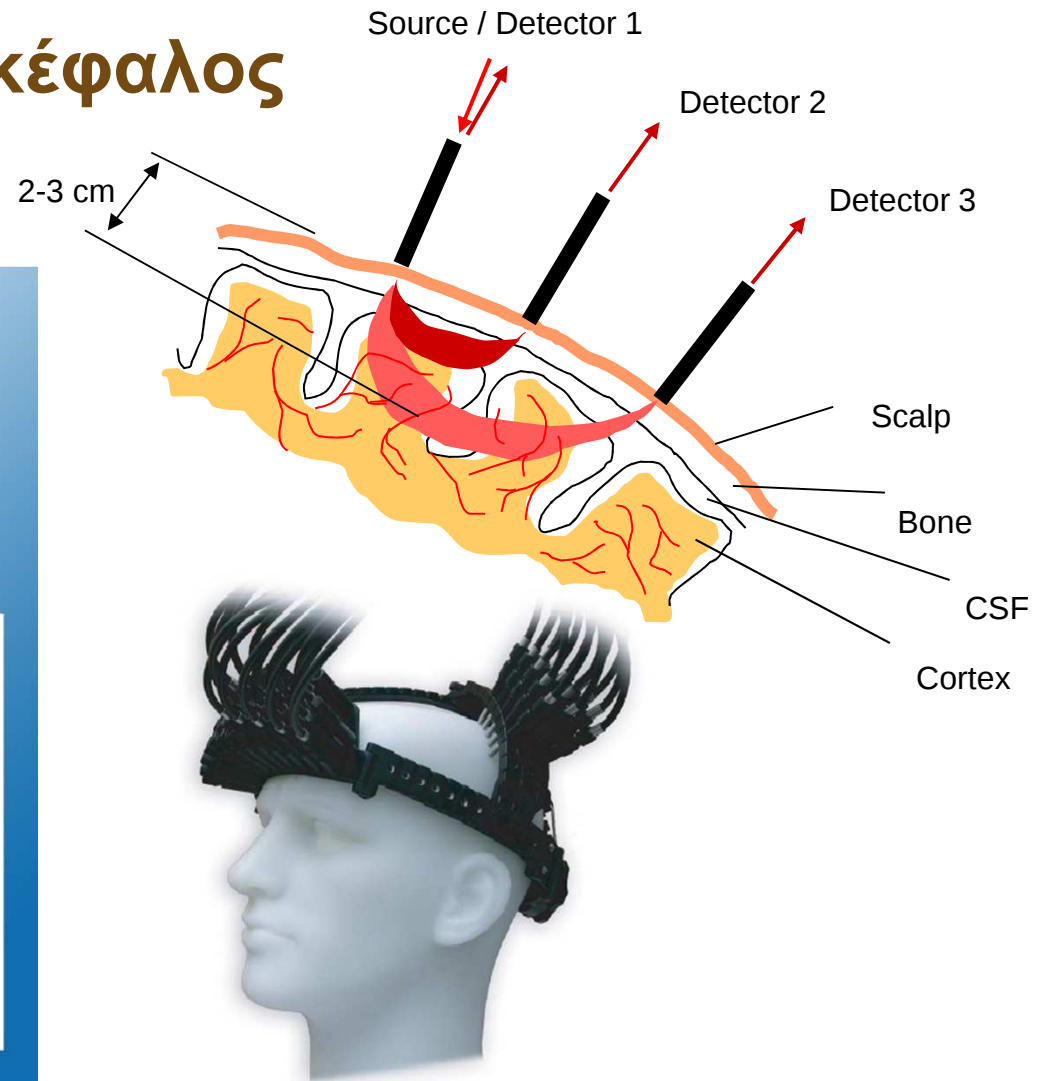
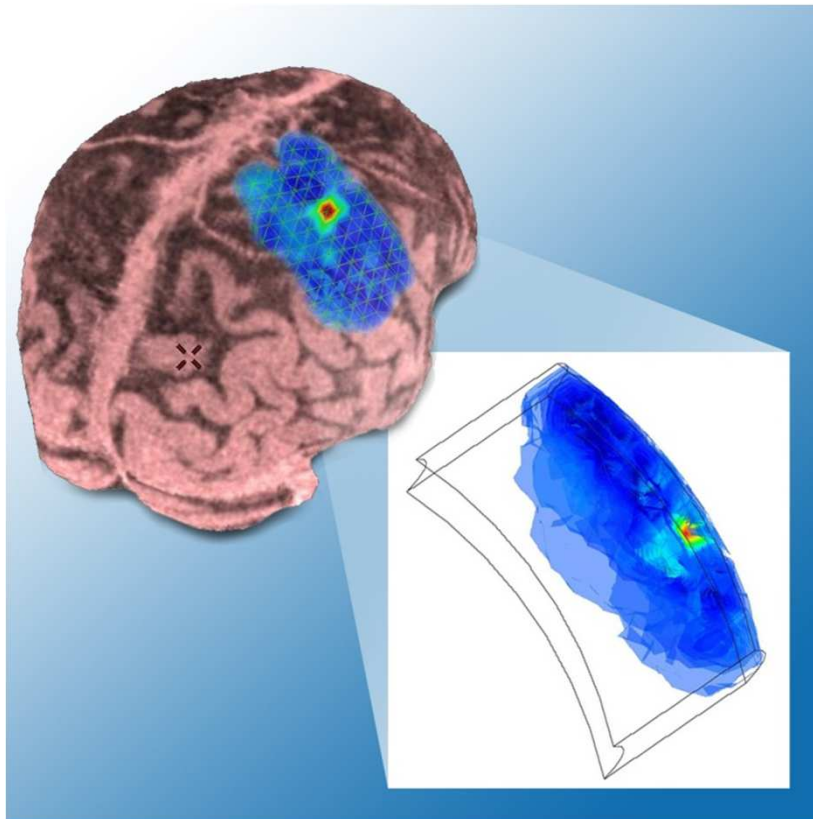
- Ακτίνες X
- Συστοιχίες ανιχνευτών
- Υπολογιστική ανακατασκευή 2D τομών/
3D ογκομετρικών εικόνων
- Δεν υπάρχει σκέδαση
μόνο απορρόφηση!



Οπτική Τομογραφία Διάχυσης (Diffuse Optical tomography - DOT)



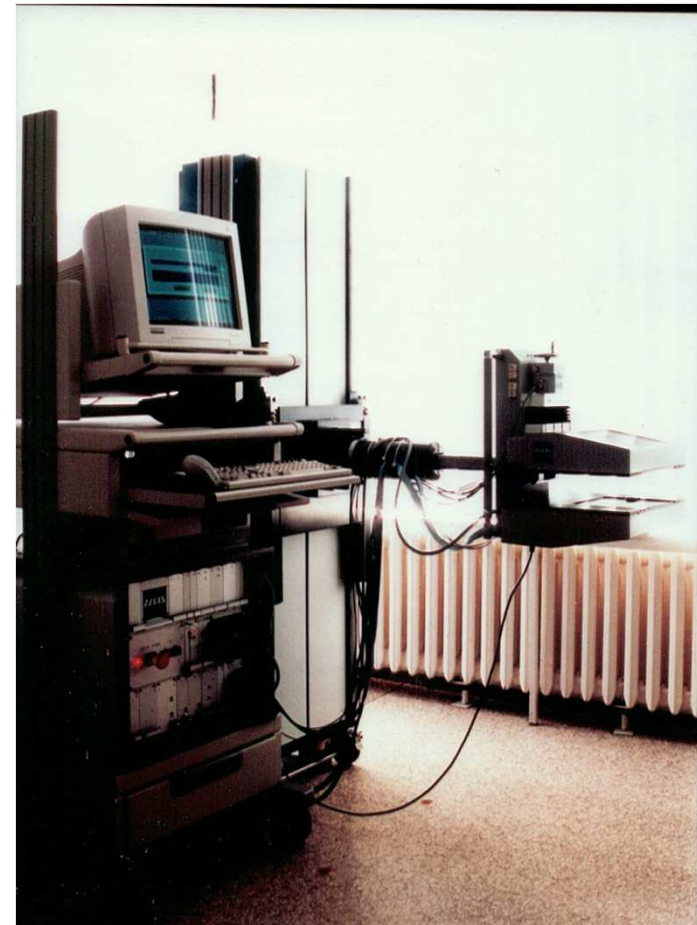
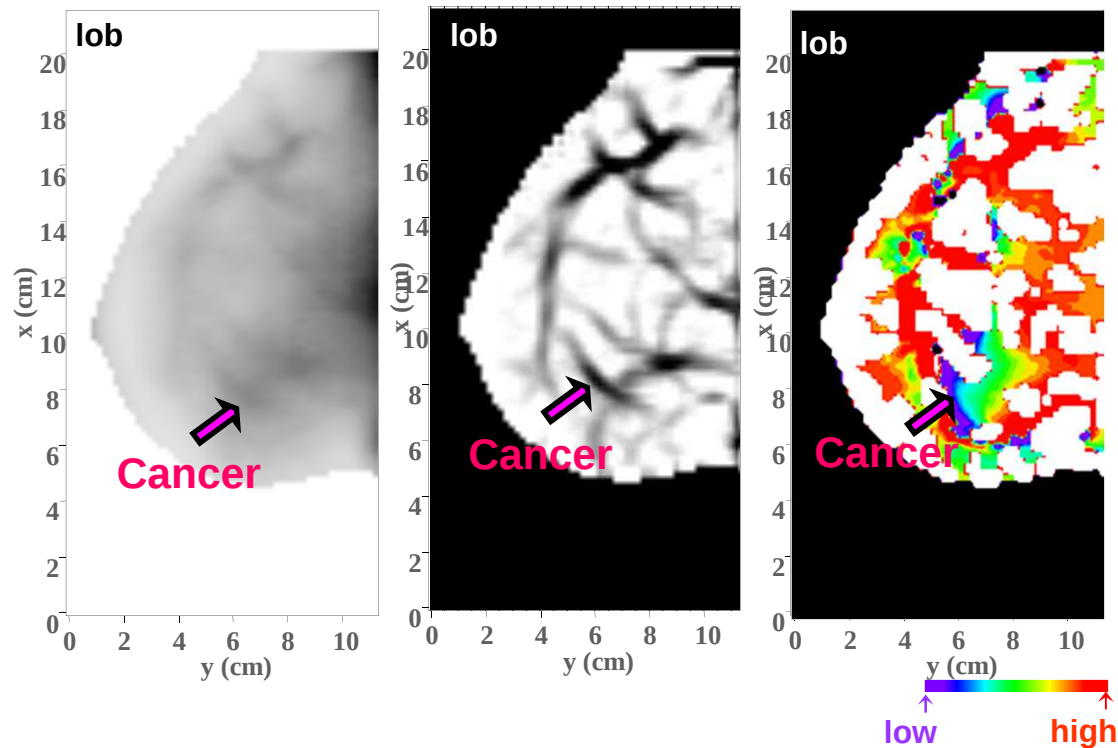
- Εφαρμογές DOT - Εγκέφαλος



Οπτική Τομογραφία Διάχυσης (Diffuse Optical tomography - DOT)



- Εφαρμογές DOT - μαστός



Ατομική φασματοσκοπία (Atomic spectroscopy)



- **Ατομική φασματοσκοπία (Atomic spectroscopy)**
 - Δεν έχει πολύ σημασία για ιατρικές εφαρμογές.
 - Φλόγες, ηλεκτρικές εκκενώσεις (ειδικά σε αέρια)
 - Ωστόσο, μία μέθοδος μπορεί να αποδειχθεί χρήσιμη → Φασματοσκοπία πλάσματος επαγόμενη από laser (Laser induced breakdown spectroscopy - LIBS)
- **LIBS**
 - Φασματοσκοπία ατομικής εκπομπής
 - Εξαιρετικά ενεργητικοί παλμοί λέιζερ εστιάζονται για να σχηματίσουν πλάσμα
 - Εκπέμπει φως σε χαρακτηριστικές συχνότητες
 - LIBS στην επιφάνεια του δέρματος θα μπορούσε να χρησιμοποιηθεί για την ανίχνευση μόλυνσης από βαρέα μέταλλα

