

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

POSGRADO EN CIENCIAS FÍSICAS

"Caracterización óptica de materiales para su uso como fantomas ópticos"

TESIS

QUE PARA OBTENER EL GRADO DE:

MAESTRO EN CIENCIAS (FÍSICA MÉDICA)

PRESENTA:

Eduardo Ortiz Rascón

DIRECTOR DE TESIS: Dr. Neil Charles Bruce Davidson

MIEMBRO DE COMITÉ TUTOR: Dr. Rufino Díaz Uribe MIEMBRO DE COMITÉ TUTOR: Dr. Luis Benítez Bribiésca



MÉXICO, D.F.

2010



Universidad Nacional Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas Tesis Digitales Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS © PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

Agradecimientos

Mi más sincero agradecimiento al Dr. Neil C. Bruce por todo su apoyo a lo largo de mis estudios de maestría.

A los miembros del Comité Tutor: Dr. Luis Benítez Bribiesca y Dr. Rufino Díaz Uribe, por su valiosa colaboración, disposición e interés en la revisión y discusión de este trabajo.

A los miembros del Sínodo: Dr. Neil C. Bruce, Dr. Luis Benítez Bribiesca, Dr. Roberto Ortega Martínez, Dr. José Ocotlán Flores Flores y M. en C. César Ruiz, por sus señalamientos y aportaciones, así como sugerencias para mejorar este trabajo.

Al Dr. José Ocotlán Flores Flores y al Dr. Roberto Sato Berrú por su entusiasta colaboración en la preparación de los materiales.

A los miembros del personal del Taller de Óptica del CCADET por su valiosa colaboración en la fabricación de los recipientes. Así como al personal administrativo de este Centro y del Posgrado en Ciencias Físicas.

Al Instituto de Ciencia y Tecnología del Distrito Federal y al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología, por el apoyo económico brindado para la realización de mis estudios de maestría.

A todos mis amigos con los que he tenido el privilegio de compartir nuestra estancia en la Ciudad de México y particularmente en la UNAM.

A mis padres y a mi familia por su siempre invaluable e incondicional apoyo. Gracias.

Índice

1.	Intr	roducción	3			
2.	Teo 2.1. 2.2.	ría de transporte Ecuación de transporte	7 7 9			
3.	todo de imágenes Muestra semi-infinita	15 15 17 18				
4.	For	mación de imágenes	20			
	 4.1. 4.2. 4.3. 4.4. 4.5. 	Transformada de Fourier y función delta de Dirac Sistemas lineales Sistemas con luz coherente e incoherente 4.3.1. Formación de imágenes de objetos inmersos en medios densos Gensos Formación de imágenes con luz incoherente Función de ensanchamiento de línea (LSF)	20 21 23 25 25 26			
	4.6.	Resolución espacial	28 28 28 29			
5.	Exp 5.1. 5.2. 5.3.	Perimento Medición de los parámetros ópticos de las muestras Medición de la resolución del sistema 5.2.1. Modalidad en conteo de fotones 5.2.2. Medición de la función de respuesta a un borde Fabricación de las muestras 5.3.1. Cálculo de la densidad de esparcidores	31 33 33 36 37 38			
6.	\mathbf{Res}	Resultados				
	6.1.	 Parámetros ópticos de las muestras	42 43			
		Caracterización de la disolución de esferas con diametro				

promedio de 429nmpara $\lambda=820~nm$

46

		6.1.3.	Caracterización de la disolución de esferas con diámetro				
			promedio de 168 nm para $\lambda = 632,8 nm$	49			
		6.1.4.	Caracterización de la disolución de esferas con diámetro				
			promedio de 168 nm para $\lambda = 820 nm$	51			
		6.1.5.	Resumen de resultados para la caracterización	54			
	6.2.	Cálcul	o de los parámetros mediante la teoría de Mie	57			
	6.3.	Resolución del sistema					
		6.3.1.	Resolución en la disolución de esferas con diámetro prome-				
			dio de 429 nm para $\lambda = 632,8 \ nm$	58			
		6.3.2.	Resolución en la disolución de esferas con diámetro prome-				
			dio de 429 nm para $\lambda = 820 nm$	58			
		6.3.3.	Resolución en la disolución de esferas con diámetro prome-				
			dio de 168 nm para $\lambda = 632,8 nm$	62			
		6.3.4.	Resolución en la disolución de esferas con diámetro prome-				
			dio de 168 nm para $\lambda = 820 nm$	62			
		6.3.5.	Resumen de resultados para la resolución $\ . \ . \ . \ .$	62			
7.	Disc	Discusión y Conclusiones					
	7.1.	Parám	etros ópticos	65			
	7.2.	2. Resolución					
	7.3. Trabajo a futuro						

1. Introducción

El cáncer de mama es actualmente el cáncer de mayor mortalidad entre las mujeres del mundo así como el que se presenta con mayor frecuencia. El panorama epidemiológico de esta patología muestra que el cáncer mamario ha pasado a ser un problema de salud pública. Reducir la mortalidad requiere, entonces, mejorar la detección temprana y las estrategias de tratamiento [Brandan, 2006]. Actualmente entre los procedimientos de detección, la mamografía, que conlleva el uso de rayos X, es la única técnica que puede ofrecer una detección suficientemente oportuna. Esta detección oportuna del cáncer de mama es un factor determinante en el pronóstico de cura de la paciente.

El objetivo de este trabajo es estudiar la factibilidad de desarrollar un material con propiedades ópticas similares a las del tejido mamario, que podrá ser utilizado en el estudio del esparcimiento de luz como herramienta para detectar cáncer de mama. Se caracterizan dos diferentes sustancias, utilizando dos diferentes longitudes de onda, y se discute su viabilidad para ser utilizados como fantomas ópticos de tejido mamario.

Aunque el desarrollo de técnicas ópticas de imagen cada vez más sofisticadas ha ido de la mano de los rápidos avances en la tecnología óptica, hasta recientemente la investigación de imágenes de tejido ha estado parcialmente obstaculizada por la carencia de maniquís de tejido equivalentes apropiados. Una gran variedad de materiales ha sido propuesta, desde emulsiones acuosas de Intralipid y polímeros hasta sustancias más variables, tales como leche y queso [M. Firbank, 1993]. Estas sustancias han sido usadas de manera limitada debido a que sus propiedades ópticas son desconocidas o inestables en períodos de tiempo prolongados.

En este trabajo se desarrolla un maniquí con propiedades de absorción y esparcimiento mejor definidas, empleando un método estándar para la fabricación de los esparcidores dentro del mismo, a partir de materiales accesibles en un laboratorio químico convencional; y adicionalmente se estudia la formación de imágenes en este medio y se determina la resolución alcanzada acorde a diferentes criterios, empleando longitudes de onda de $\lambda = 632,8 nm$ y $\lambda = 820 nm$. Se utilizan disoluciones de nanopartículas de dióxido de silicio buscando obtener parámetros ópticos semejantes a los del tejido mamario, éstos son: el coeficiente de esparcimiento de transporte μ'_s , y el coeficiente de absorción μ_a , cuyos valores para el tejido mamario reportados en la literatura para longitudes de onda cercanas a los 800 nm se encuentran en los rangos: $\mu'_s = 0,7 - 1,4 mm^{-1}$ y $\mu_a = 0,02 - 0,07 mm^{-1}$ [J. C. Hebden, 1995]. Estas partículas son esféricas, con un diámetro promedio controlado de 168 nm y 429 nm.

La luz presenta la ventaja sobre los rayos X de que es radiación no ionizante, y por lo tanto no existe el mismo riesgo al realizar un estudio de diagnóstico. Este hecho permite el uso de esta técnica como método de prueba masivo para el diagnóstico de personas, sin la preocupación de las dosis debidas a la radiación ionizante a la que se exponen las pacientes. Adicionalmente, la percepción del riesgo de inducción de cáncer por la toma de una imagen con rayos X es un factor importante en el momento en que la paciente decide realizarse el estudio,



Figura 1: Formación de imágenes en medios densos usando rayos X y luz.

esta percepción se vería eliminada al utilizar radiación no ionizante para la toma de imágenes médicas.

La limitación en la dosis a la cual se puede exponer a un paciente es un factor importante en la utilización de los rayos X, mientras que la radiación óptica no es invasiva a potencias bajas, por lo que se reduce esta limitación. Sin embargo, debido al esparcimiento de la luz en tejidos, no se puede formar una imagen como las imágenes de sombra de rayos X, sino que en este caso las imágenes son manchas con poca definición (resolución) y hay que procesar estas imágenes para extraer la información útil para la formación de la imagen. En la Figura (1) podemos apreciar el efecto que tiene el esparcimiento de la luz en el tejido sobre la sombra de un objeto embebido en éste, de esta manera vemos que la imagen proyectada tiene una mayor resolución entre menos se esparza la luz [N. C. Bruce, 2009].

Cuando se ilumina el tejido mamario con un pulso corto de luz infrarroja, el esparcimiento ensancha significativamente la distribución temporal de la luz transmitida. Las mediciones de los fotones que llegan más rápido al detector, mismos que son los que han viajado las trayectorias más cortas entre la fuente y el detector, pueden usarse para generar imágenes con una resolución espacial significativamente mejor, estos fotones tendrían una trayectoria similar a aquella de la radiación ionizante, es decir, serán los que menos se hayan esparcido, y por lo tanto, con éstos podremos formar imágenes sombra. En la Figura (2) se puede apreciar la diferencia entre utilizar luz continua para iluminar el tejido y utilizar un pulso de luz con un detector de pulsos cortos; los fotones en el pulso incidente pueden esparcirse con diferentes trayectorias, sin embargo, los fotones que tengan la trayectoria más corta (trayectoria gris) serán aquellos que podrán



Figura 2: Diferencia entre el uso de luz continua y pulsada.

ser detectados para formar la imagen.

El reciente interés en las técnicas ópticas para formar imágenes a través de medios con alto grado de esparcimiento ha sido motivado en parte por el deseo de una alternativa a la mamografía de rayos X más efectiva, más segura y menos costosa. Un método exitoso de imagen debe distinguir tumores del tejido sano que los rodea cuando éstos aún son de tamaño pequeño (menor de 1 cm) antes de que ocurra la metástasis y el tratamiento se dificulte. A pesar de la resolución submilimétrica, la mamografía con rayos X está lejos de ser infalible, y falla para identificar un pequeño porcentaje de los tumores durante los diagnósticos de rutina, con una sensibilidad del 78.57% y especificidad del 87.5%[Paredes, 1995]. Los métodos ópticos ofrecen la posibilidad de diferenciar entre tejidos debido a sus diferentes absorciones y esparcimientos en longitudes de onda en el cercano infrarrojo, mismos que son indistinguibles con los rayos X. Los intentos para obtener imágenes de diagnóstico de la mama humana con iluminación continua han revelado una alta transmisión de radiación en el cercano infrarrojo a niveles de exposición seguros, con alto contraste entre los tejidos sanos de la mama y algunos tipos de tumores. Aun así, el excesivo esparcimiento de luz en la mama limita severamente la resolución espacial, y consecuentemente no se considera que los métodos de iluminación con luz continua tengan utilidad clínica como método de diagnóstico.

Los avances tecnológicos en la detección ultra-rápida han estimulado la investigación de técnicas resueltas en tiempo para mejorar la resolución espacial de las imágenes obtenidas a través de medios altamente esparcidores. Se han explorado numerosas aproximaciones con varios grados de éxito [D. Grosenick, 2003]. Muchos de los métodos propuestos involucran algún tipo de detección temporal de luz transmitida, de tal manera que las imágenes son generadas por aquellos fotones con las trayectorias más cortas a través del medio. Se ha demostrado la detección de fotones que no se han esparcido con técnicas coherentes para medios que no esparcen demasiado. Para medios que están más relacionados con el tejido humano, la mayoría de los métodos han involucrado iluminar el objeto con un pulso corto de luz y ampliar la señal producida por los fotones que llegan más rápido, o bien, medir la distribución temporal directamente. Las imágenes que se obtienen a través de objetos que producen mucho esparcimiento han sido presentadas en función del período temporal Δt sobre el cuál se integró la luz transmitida. Se encuentra, tal como se espera, que la mejor resolución espacial se obtiene con los fotones con tiempos de vuelo más cortos. La relación entre la resolución espacial y Δt ha sido investigada experimental y teóricamente. Sin embargo, un inconveniente significativo de los métodos de captura temporal de fotones es que la mayoría de la luz transmitida es descartada. Estos estudios y otros basados en simulaciones de Monte Carlo sugieren que la escasez de fotones detectados con tiempos de vuelo cortos (menores que $300 \ ps$) probablemente limite la resolución espacial de las imágenes de mama obtenidas mediante captura temporal a aproximadamente 1 cm, lo cual está aún lejos del desenvolvimiento requerido en un sistema clínico para diagnóstico de rutina [J. C. Hebden, 1995].

2. Teoría de transporte

La caracterización óptica de los materiales suceptibles de ser utilizados como maniquís de tejido mamario se lleva a cabo mediante dos diferentes métodos: se utiliza la teoría de transporte radiativo y la aproximación de difusión; y por otra parte, se compararán los resultados obtenidos a partir de cálculos de esparcimiento mediante la teoría de esparcimiento de Mie. La teoría de difusión es el modelado del transporte de fotones debido al movimiento de éstos a través de gradientes de concentración. La teoría de difusión es apropiada en medios en los que domina el esparcimiento sobre la absorción, de tal manera que los fotones sufrirán varios eventos de esparcimiento antes de sufrir un evento de absorción. En este capítulo veremos esta aproximación.

Históricamente se han desarrollado dos diferentes teorías para tratar los problemas de esparcimiento múltiple. Una puede ser llamada teoría analítica y la otra teoría de transporte. En la teoría analítica, se comienza con las ecuaciones diferenciales básicas tales como las ecuaciones de Maxwell o la ecuación de onda, se introducen las características de esparcimiento y absorción de las partículas, y se obtienen las ecuaciones diferenciales o integrales para las cantidades estadísticas, tales como varianzas y funciones de correlación. Esto es matemáticamente riguroso en el sentido de que, en principio, se pueden incluir todos los efectos de esparcimiento múltiple, difracción e interferencia. Sin embargo, en la práctica, es imposible obtener una formulación que incluya completamente todos estos efectos, y las varias teorías que existen y dan resultados útiles, son todas aproximadas, cada una siendo útil para un rango específico de parámetros.

La teoría de transporte, también llamada teoría de transferencia de radiación, fue iniciada por Schuster en 1903. La ecuación diferencial básica es llamada la ecuación de transferencia o ecuación de transporte. La formulación es flexible y capaz de tratar con muchos fenómenos físicos. Ha sido exitosamente empleada en problemas de visibilidad atmosférica y bajo el agua, biología marina, óptica de papeles y emulsiones fotográficas, así como para la propagación de energía radiante en las atmósferas de planetas, estrellas y galaxias [A. Ishimaru, 1997].

2.1. Ecuación de transporte

En esta sección derivaremos la ecuación de transporte siguiendo un método similar al utilizado en la literatura [A. Ishimaru, 1997]. Sea $I(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{s}})$ la intensidad específica de la radiación dentro de un medio. La intensidad específica es la densidad de flujo de potencia en una banda pequeña de frecuencia y en un rango pequeño de ángulo sólido en la posición \mathbf{r} y en la dirección $\hat{\mathbf{s}}$, donde el gorro representa siempre un vector unitario. Las unidades de la intensidad específica son $Wm^{-2}sr^{-1}Hz^{-1}$. La intensidad específica nos permitirá establecer una ecuación para describir el comportamiento de la potencia de la radiación dentro del medio. Existen varias contribuciones al cambio de la intensidad específica que se deberán tomar en cuenta:

I) Una reducción de la intensidad específica por absorción y esparcimiento. Considerando un elemento de corte transversal unitario y largo ds, en donde hay ρds partículas, donde ρ es la densidad de partículas, el cambio en la intensidad específica en la dirección del eje de este elemento de volumen será:

$$dI(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{s}}) = -\rho \, ds \, \left(\sigma_a + \sigma_s\right) \, I(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{s}}) = -\rho \, ds \, \sigma_t \, I(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{s}}) \tag{1}$$

en donde $\sigma_t = \sigma_a + \sigma_s$, con σ_a la sección transversal de absorción, σ_s la sección transversal de esparcimiento y σ_t la sección transversal total de atenuación.

II) Un aumento en la intensidad específica en la dirección $\hat{\mathbf{s}}$ debido al esparcimiento de la intensidad específica en todas las direcciones $\hat{\mathbf{s}}'$ a la dirección $\hat{\mathbf{s}}$. Si consideramos la intensidad específica en un ángulo sólido $d\omega$ y en la dirección $\hat{\mathbf{s}}'$, tendremos que la densidad del flujo de potencia en esta dirección es $I(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{s}}') d\omega$ y el cambio en la intensidad específica en una unidad de ángulo sólido en la dirección $\hat{\mathbf{s}}$ es

$$dI(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{s}}', \hat{\mathbf{s}}) = \rho \ ds \left| f(\hat{\mathbf{s}}', \hat{\mathbf{s}}) \right|^2 \ I(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{s}}') \ d\omega \tag{2}$$

donde $|f(\hat{\mathbf{s}}', \hat{\mathbf{s}})|$ es la amplitud de esparcimiento, ésta nos indica la amplitud y fase de una onda esparcida por una partícula en la dirección $\hat{\mathbf{s}}$, dada una onda incidente en la dirección $\hat{\mathbf{s}}'$. Para tomar en cuenta la contribución de todas las direcciones incidentes $\hat{\mathbf{s}}'$ se debe integrar esta ecuación para obtener el cambio total en la intensidad específica:

$$dI(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{s}}) = \int_{4\pi} \rho \, ds \left| f(\hat{\mathbf{s}}', \hat{\mathbf{s}}) \right|^2 \, I(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{s}}') \, d\omega \tag{3}$$

donde la integral se realiza sobre todas las direcciones de incidencia $\hat{\mathbf{s}}'$.

III) Un aumento en la intensidad específica debido a fuentes dentro del volumen ds. Si escribimos la contribución a la intensidad específica en la dirección $\hat{\mathbf{s}}$ por unidad de volumen como $\varepsilon(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{s}})$, el cambio en la intensidad específica será:

$$dI(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{s}}) = \varepsilon(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{s}}) ds \tag{4}$$

De esta manera, tenemos que el cambio total a la intensidad específica se obtiene de la suma de las contribuciones anteriores, por lo que se puede escribir como:

$$\frac{dI(\mathbf{r},\hat{\mathbf{s}})}{ds} = -\rho \ \sigma_t \ I(\mathbf{r},\hat{\mathbf{s}}) \ + \ \frac{\rho \ \sigma_t}{4\pi} \int_{4\pi} p(\hat{\mathbf{s}}',\hat{\mathbf{s}}) \ I(\mathbf{r},\hat{\mathbf{s}}') \ d\omega \ + \ \varepsilon(\mathbf{r},\hat{\mathbf{s}})$$
(5)

en donde se ha utilizado la función de fase [A. Ishimaru, 1997]: $p(\hat{\mathbf{s}}', \hat{\mathbf{s}}) = \frac{4\pi}{\sigma_t} |f(\hat{\mathbf{s}}', \hat{\mathbf{s}})|^2$.

La intensidad específica se acostumbra dividir en dos partes, la intensidad incidente reducida $I_{ri}(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{s}})$, y la intensidad difusa $I_d(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{s}})$. Al entrar los fotones en un volumen que contiene muchas partículas, el flujo incidente disminuye y se incrementa de acuerdo con las ecuaciones (1) y (3). La parte del flujo que decrece debido al esparcimiento y absorción conforme a la ecuación (1) es la intensidad incidente reducida:

$$\frac{dI_{ri}(\mathbf{r},\hat{\mathbf{s}})}{ds} = -\rho \ \sigma_t \ I_{ri}\left(\mathbf{r},\hat{\mathbf{s}}\right) \tag{6}$$

Mientras que la intensidad difusa $I_d(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{s}})$ es la intensidad que se genera dentro del medio y satisface la ecuación:

$$\frac{dI_d(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{s}})}{ds} = -\rho \ \sigma_t \ I_d(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{s}}) \ + \ \frac{\rho \ \sigma_t}{4\pi} \int_{4\pi} p(\hat{\mathbf{s}}', \hat{\mathbf{s}}) \ I_d(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{s}}') \ d\omega \ + \ \varepsilon(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{s}}) \ + \ \varepsilon_{ri}(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{s}})$$
(7)

en donde

$$\varepsilon_{ri}(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{s}}) = \frac{\rho \,\sigma_t}{4\pi} \int_{4\pi} p(\hat{\mathbf{s}}', \hat{\mathbf{s}}) \, I_{ri}(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{s}}') \, d\omega \tag{8}$$

es la fuente equivalente y describe la contribución de la intensidad incidente que se convierte en intensidad difusa. Así, la intensidad específica total se escribe como:

$$I(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{s}}) = I_{ri}(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{s}}) + I_d(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{s}})$$
(9)

Aquí, como la intensidad difusa se genera solo dentro del medio, no hay contribución de esta intensidad desde fuera del medio hacia dentro.

2.2. Aproximación de Difusión

Debido a la dificultad para encontrar soluciones a la ecuación (7), es necesario aproximar la ecuación para casos más específicos. Una de las aproximaciones más útiles es la aproximación de difusión. Esta aproximación requiere que exista gran esparcimiento de luz, o bien, que la intensidad difusa interactúe con muchas partículas en el medio. Esto nos permite suponer que la intensidad difusa sea aproximadamente isotrópica. La intensidad difusa no puede ser totalmente isotrópica porque en ese caso no exisitiría una propagación de la potencia en el medio. De esta manera, podemos escribir:

$$I_d(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{s}}) \approx U_d(\mathbf{r}) + c \mathbf{F}_d(\mathbf{r}) \cdot \hat{\mathbf{s}}$$
(10)

en donde $U_d(\mathbf{r})$ es el promedio de la intensidad difusa:

$$U_d(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\pi} \int_{4\pi} I_d(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{s}}) \, d\omega \tag{11}$$



Figura 3: Intensidad difusa $I_d({\bf r}, \hat{\bf s})$ para la aproximación de difusión.

y $\mathbf{F}_{\mathbf{d}}(\mathbf{r})$ es el flujo difusivo:

$$\mathbf{F}_{\mathbf{d}}(\mathbf{r}) = \int_{4\pi} I_d(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{s}}) \, \hat{\mathbf{s}} \, d\omega = F_{\mathbf{d}}(\mathbf{r}) \, \hat{\mathbf{s}}_f \tag{12}$$

en donde $\hat{\mathbf{s}}_f$ es la dirección de propagación del flujo difusivo (ver Figura 3). Mientras que la constante c de la ecuación (10) se puede calcular observando que:

$$F_{\mathbf{d}}(\mathbf{r}) = \mathbf{F}_{\mathbf{d}}(\mathbf{r}) \cdot \hat{\mathbf{s}}_{f} = \int_{4\pi} I_{d}(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{s}}) \, \hat{\mathbf{s}} \, \cdot \hat{\mathbf{s}}_{f} \, d\omega \tag{13}$$

Así, sustituyendo la ecuación (10) en la ecuación (13) tenemos:

$$F_{\mathbf{d}}(\mathbf{r}) = \int_{4\pi} [U_d(\mathbf{r}) + c\mathbf{F}_{\mathbf{d}}(\mathbf{r}) \cdot \hat{\mathbf{s}}] \, \hat{\mathbf{s}} \cdot \hat{\mathbf{s}}_f \, d\omega \qquad (14)$$

$$= \int_{4\pi} U_d(\mathbf{r}) \, \hat{\mathbf{s}} \cdot \hat{\mathbf{s}}_f \, d\omega + c \int_{4\pi} [\mathbf{F}_{\mathbf{d}}(\mathbf{r}) \cdot \hat{\mathbf{s}}] \, \hat{\mathbf{s}} \cdot \hat{\mathbf{s}}_f \, d\omega$$

$$= U_d(\mathbf{r}) \int_{4\pi} \hat{\mathbf{s}} \cdot \hat{\mathbf{s}}_f \, d\omega + c \int_{4\pi} F_{\mathbf{d}}(\mathbf{r}) \, (\hat{\mathbf{s}} \cdot \hat{\mathbf{s}}_f)^2 \, d\omega$$

$$= U_d(\mathbf{r}) \int_{4\pi} \cos\theta \, d\omega + cF_{\mathbf{d}}(\mathbf{r}) \int_{4\pi} \cos^2\theta \, d\omega$$

$$= cF_{\mathbf{d}}(\mathbf{r}) \int_{4\pi} \cos^2\theta \, d\omega$$

en donde θ es el ángulo entre las direcciones $\hat{\mathbf{s}}$ y $\hat{\mathbf{s}}_f$. Así, el valor final de la integral es el volumen de una esfera de radio unitario, i.e. $4\pi/3$, por lo tanto la ecuación (10) queda de la siguiente manera:

$$I_{d}(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{s}}) \approx U_{d}(\mathbf{r}) + \frac{3}{4\pi} \mathbf{F}_{\mathbf{d}}(\mathbf{r}) \cdot \hat{\mathbf{s}}$$
(15)

Ahora procedemos a obtener una ecuación de difusión para la intensidad específica descrita en la ecuación anterior. Comenzamos con la ecuación (7), integrándola sobre todas las direcciones, obteniendo:

$$\int_{4\pi} \frac{dI_d(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{s}})}{ds} d\omega = -\rho \sigma_t \int_{4\pi} I_d(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{s}}) d\omega + \int_{4\pi} \varepsilon(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{s}}) d\omega$$
(16)
+
$$\int_{4\pi} \varepsilon_{ri}(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{s}}) d\omega + \frac{\rho \sigma_t}{4\pi} \int_{4\pi} \int_{4\pi} p(\hat{\mathbf{s}}', \hat{\mathbf{s}}) I_d(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{s}}') d\omega d\omega$$

Utilizando la definición del flujo difusivo dada por la ecuación (13), el término al lado izquierdo de la ecuación (16) se puede reescribir como:

$$\int_{4\pi} \frac{dI_d(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{s}})}{ds} d\omega = \int_{4\pi} \nabla \cdot \left[I_d(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{s}}) \right] \hat{\mathbf{s}} \, d\omega = \nabla \cdot \int_{4\pi} I_d(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{s}}) \hat{\mathbf{s}} \, d\omega = \nabla \cdot \mathbf{F}_d\left(\mathbf{r}\right)$$
(17)

Ahora, tomando el primer término del lado derecho de la ecuación (16) y sustituyendo (11), se obtiene:

$$-\rho \sigma_t \int_{4\pi} I_d(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{s}}) \ d\omega = -4\pi\rho \ \sigma_t \ U_d(\mathbf{r})$$
(18)

Mientras que utilizando la siguiente definición:

$$W_0 = \frac{1}{4\pi} \int_{4\pi} p(\hat{\mathbf{s}}', \hat{\mathbf{s}}) \ d\omega = \frac{\sigma_s}{\sigma_t}$$
(19)

donde a W_0 se le llama albedo, tenemos que el segundo término del lado derecho de la ecuación (16) nos queda como:

$$\frac{\rho \,\sigma_t}{4\pi} \int_{4\pi} \int_{4\pi} p(\hat{\mathbf{s}}', \hat{\mathbf{s}}) \, I_d(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{s}}') \, d\omega \, d\omega = 4\pi \rho \sigma_s U_d(\mathbf{r}) \tag{20}$$

Mediante un procedimiento similar, para el último término del lado derecho de la ecuación (16) se tiene que:

$$\int_{4\pi} \varepsilon_{ri}(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{s}}) \ d\omega = 4\pi \rho \sigma_s U_{ri}(\mathbf{r})$$
(21)

 ${\rm en}~{\rm donde}$

$$U_{ri}(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\pi} \int_{4\pi} I_{ri}(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{s}}) \, d\omega$$
(22)

De los resultados de las ecuaciones (17), (18), (20) y (21) tenemos que la ecuación (16) queda como:

$$\nabla \cdot \mathbf{F}_{\mathbf{d}}(\mathbf{r}) = -4\pi\rho\sigma_{t}U_{d}(\mathbf{r}) + 4\pi\rho\sigma_{s}U_{d}(\mathbf{r}) + \int_{4\pi}\varepsilon(\mathbf{r},\hat{\mathbf{s}})d\omega \qquad (23)$$
$$+4\pi\rho\sigma_{s}U_{ri}(\mathbf{r})$$
$$= -4\pi\rho\sigma_{a}U_{d}(\mathbf{r}) + 4\pi\rho\sigma_{s}U_{ri}(\mathbf{r}) + \int_{4\pi}\varepsilon(\mathbf{r},\hat{\mathbf{s}})d\omega$$

Por otro lado, utilizando la relación:

$$\frac{dI_d(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{s}})}{ds} = \hat{\mathbf{s}} \cdot \nabla I_d(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{s}})$$
(24)

y sustituyendo la ecuación (15) en (7), utilizando (12) se obtiene:

$$\hat{\mathbf{s}} \cdot \nabla U_d \left(\mathbf{r} \right) + \frac{3}{4\pi} \hat{\mathbf{s}} \cdot \nabla \left[F_{\mathbf{d}} \left(\mathbf{r} \right) \left(\hat{\mathbf{s}}_f \cdot \hat{\mathbf{s}} \right) \right] = -\rho \ \sigma_t U_d \left(\mathbf{r} \right)$$

$$- \frac{3}{4\pi} \rho \ \sigma_t F_{\mathbf{d}} \left(\mathbf{r} \right) \left(\hat{\mathbf{s}}_f \cdot \hat{\mathbf{s}} \right) + \frac{\rho \ \sigma_t}{4\pi} U_d \left(\mathbf{r} \right) \int_{4\pi} p(\hat{\mathbf{s}}', \hat{\mathbf{s}}) d\omega$$

$$+ \frac{3\rho \sigma_t}{\left(4\pi\right)^2} F_{\mathbf{d}} \left(\mathbf{r} \right) \int_{4\pi} p(\hat{\mathbf{s}}', \hat{\mathbf{s}}) \left(\hat{\mathbf{s}}_f \cdot \hat{\mathbf{s}} \right) d\omega + \varepsilon(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{s}}) + \ \varepsilon_{ri}(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{s}})$$

$$(25)$$

Se puede reescribir la ecuación (25) como:

$$\hat{\mathbf{s}} \cdot \nabla U_d \left(\mathbf{r} \right) + \frac{3}{4\pi} \hat{\mathbf{s}} \cdot \nabla \left[F_{\mathbf{d}} \left(\mathbf{r} \right) \left(\hat{\mathbf{s}}_f \cdot \hat{\mathbf{s}} \right) \right] = -\rho \ \sigma_t U_d \left(\mathbf{r} \right)$$

$$- \frac{3}{4\pi} \rho \ \sigma_t F_{\mathbf{d}} \left(\mathbf{r} \right) \left(\hat{\mathbf{s}}_f \cdot \hat{\mathbf{s}} \right) + \rho \sigma_s U_d \left(\mathbf{r} \right) + \frac{3\rho \sigma_t}{4\pi} F_{\mathbf{d}} \left(\mathbf{r} \right) \ p_1$$

$$+ \varepsilon \left(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{s}} \right) + \varepsilon_{ri} \left(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{s}} \right)$$

$$(26)$$

en donde:

$$p_1 = \frac{1}{4\pi} \int_{4\pi} p(\hat{\mathbf{s}}', \hat{\mathbf{s}}) \left(\hat{\mathbf{s}}_f \cdot \hat{\mathbf{s}} \right) d\omega$$
(27)

representa el balance entre la radiación esparcida en diferentes direcciones, esto es, el esparcimiento promedio hacia adelante $(\hat{\mathbf{s}}_f \cdot \hat{\mathbf{s}} > 0)$ menos el esparcimiento hacia atrás $(\hat{\mathbf{s}}_f \cdot \hat{\mathbf{s}} < 0)$ de una sola partícula. Se acostumbra escribir esta cantidad en términos del promedio del coseno del ángulo de esparcimiento, que está dado por:

$$g = \frac{\int_{4\pi} p(\hat{\mathbf{s}}', \hat{\mathbf{s}}) \left(\hat{\mathbf{s}}_f \cdot \hat{\mathbf{s}}\right) d\omega}{\int_{4\pi} p(\hat{\mathbf{s}}', \hat{\mathbf{s}}) d\omega} = p_1 \frac{\sigma_t}{\sigma_s}$$
(28)

Multiplicando la ecuación (26) por $\hat{\mathbf{s}}$ e integrando sobre 4π obtenemos:

$$\int_{4\pi} \left[\hat{\mathbf{s}} \cdot \nabla U_d \left(\mathbf{r} \right) \right] \hat{\mathbf{s}} d\omega + \frac{3}{4\pi} \int_{4\pi} \left\{ \hat{\mathbf{s}} \cdot \nabla \left[F_{\mathbf{d}} \left(\mathbf{r} \right) \left(\hat{\mathbf{s}}_f \cdot \hat{\mathbf{s}} \right) \right] \right\} \hat{\mathbf{s}} d\omega =$$
(29)
$$-\rho \ \sigma_t U_d \left(\mathbf{r} \right) \int_{4\pi} \hat{\mathbf{s}} d\omega - \frac{3}{4\pi} \rho \ \sigma_t F_{\mathbf{d}} \left(\mathbf{r} \right) \int_{4\pi} \hat{\mathbf{s}} \left(\hat{\mathbf{s}}_f \cdot \hat{\mathbf{s}} \right) d\omega + \rho \sigma_s U_d \left(\mathbf{r} \right) \int_{4\pi} \hat{\mathbf{s}} d\omega + \frac{3\rho \sigma_t}{4\pi} F_{\mathbf{d}} \left(\mathbf{r} \right) \ p_1 \int_{4\pi} \hat{\mathbf{s}} d\omega + \int_{4\pi} \varepsilon(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{s}}) \hat{\mathbf{s}} d\omega + \int_{4\pi} \varepsilon_{ri}(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{s}}) \hat{\mathbf{s}} d\omega$$

Mientras que utilizando las siguientes relaciones, válidas para cualquier vector ${\bf A}:$

$$\int_{4\pi} \hat{\mathbf{s}} (\mathbf{A} \cdot \hat{\mathbf{s}}) d\omega = \frac{4\pi}{3} \mathbf{A} \qquad \qquad \int_{4\pi} \hat{\mathbf{s}} \left[\nabla \left(\mathbf{A} \cdot \hat{\mathbf{s}} \right) \cdot \hat{\mathbf{s}} \right] = 0 \qquad (30)$$

tenemos que la ecuación (29) toma la siguiente forma:

$$\nabla U_d\left(\mathbf{r}\right) = -\frac{3}{4\pi}\rho\sigma_t(1-p_1)\mathbf{F}_{\mathbf{d}}\left(\mathbf{r}\right) + \frac{3}{4\pi}\int_{4\pi}\varepsilon(\mathbf{r},\hat{\mathbf{s}})\hat{\mathbf{s}}d\omega + \frac{3}{4\pi}\int_{4\pi}\varepsilon_{ri}(\mathbf{r},\hat{\mathbf{s}})\hat{\mathbf{s}}d\omega \quad (31)$$

A la cantidad $\sigma_t(1-p_1)$ se le llama sección transversal de transporte σ_{tr} . Ésta nos indica que si el esparcimiento es anisotrópico, la sección transversal total de atenuación será reducida por un factor de $(1-p_1)$ del caso isotrópico. La sección transversal de transporte también se escribe como:

$$\sigma_{tr} = \sigma_t (1 - p_1) = \sigma_s (1 - g) + \sigma_a. \tag{32}$$

De esta manera, tenemos que, si suponemos que no hay fuentes en la posición de observación y que la intensidad incidente reducida es igual a cero en esa posición, la ecuación (31) se simplifica a:

$$\mathbf{F}_{\mathbf{d}}\left(\mathbf{r}\right) = -4\pi D\nabla U_{d}\left(\mathbf{r}\right) \tag{33}$$

donde D es el coeficiente de difusión:

$$D = \frac{1}{3\rho\sigma_{tr}} \tag{34}$$

La ecuación (33) se conoce como Ley de Fick, ésta relaciona la intensidad difusa promedio con el flujo difusivo en la posición de observación.

Calculando el gradiente de la ecuación (31) y sustituyendo $\nabla \cdot \mathbf{F}_{\mathbf{d}}(\mathbf{r})$ a partir de la ecuación (23) obtenemos:

$$\nabla^{2} U_{d}(\mathbf{r}) - \kappa_{d}^{2} U_{d}(\mathbf{r}) = -3\rho\sigma_{s}\rho\sigma_{tr}U_{ri}(\mathbf{r}) - \frac{3}{4\pi}\rho\sigma_{tr}E(\mathbf{r})$$

$$+ \frac{3}{4\pi}\nabla\cdot\int_{4\pi}\varepsilon(\mathbf{r},\hat{\mathbf{s}})\hat{\mathbf{s}}d\omega + \frac{3}{4\pi}\nabla\cdot\int_{4\pi}\varepsilon_{ri}(\mathbf{r},\hat{\mathbf{s}})\hat{\mathbf{s}}d\omega$$
(35)

donde:

$$\kappa_d^2 = 3\rho\sigma_a\rho\sigma_{tr}$$
 y $E(\mathbf{r}) = \int_{4\pi} \varepsilon(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{s}}) \, d\omega$ (36)

La ecuación (35) es la ecuación fundamental de difusión para la intensidad difusa promedio $U_d(\mathbf{r})$, y junto con las condiciones de frontera apropiadas, constituye la descripción matemática completa de la aproximación de difusión. Una vez que se ha encontrado la intensidad de difusión, el flujo $\mathbf{F}_{\mathbf{d}}(\mathbf{r})$ puede ser calculado a partir de la ecuación (31).

Si una fuente puntual está localizada en \mathbf{r}_0 e irradia la potencia total S_0 (W/Hz) uniformemente en todas las direcciones, tenemos que la fuente queda expresada como:

$$\varepsilon(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{s}}) = \frac{S_0}{4\pi} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r_0}) \quad W \ m^{-3} \ sr^{-1} \ Hz^{-1}$$
(37)

Por lo tanto, la ecuación (35) quedará como:

$$\nabla^2 U_d(\mathbf{r}) - \kappa_d^2 U_d(\mathbf{r}) = -\frac{3}{4\pi} \rho \sigma_{tr} S_0 \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r_0})$$
(38)

cuya solución está dada por:

$$U_d\left(\mathbf{r}\right) = \frac{e^{-\kappa_d r}}{4\pi r} \left[\frac{3}{4\pi}\rho\sigma_{tr}\right] = \frac{S_0}{\left(4\pi\right)^2 D} \frac{e^{-\kappa_d r}}{r}$$
(39)

donde r es la distancia entre \mathbf{r}_0 y \mathbf{r} , esto es, $r = |\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|$. La ecuación (39) tiene la forma de la función de Green para el problema de una fuente puntual. Una vez que se ha encontrado la solución para la intensidad difusa promedio, el flujo de intensidad difusa se puede calcular mediante la Ley de Fick mostrada en la ecuación (33), quedando como:

$$\mathbf{F}_{\mathbf{d}}\left(\mathbf{r}\right) = -4\pi D\nabla U_{d}\left(\mathbf{r}\right) = -\frac{\partial}{\partial r} \left[\frac{e^{-\kappa_{d} r}}{4\pi r}\right] S_{0}\hat{\mathbf{r}} = \left[\frac{\kappa_{d}}{4\pi r} + \frac{1}{4\pi r^{2}}\right] e^{-\kappa_{d} r} S_{0}\hat{\mathbf{r}}.$$
(40)

De la ecuación anterior podemos observar que en auscencia de esparcimiento, $\kappa_d = 0$ y por lo tanto el flujo total $4\pi r^2 F_d$ a través de la superficie esférica descrita por r es independiente de r y es igual a la potencia total S_0 , tal como se requiere por el principio de conservación de la energía.



Figura 4: Geometría para el cálculo de $\mathbf{F}_{\mathbf{d}}(\mathbf{r})$ para un medio semi-infinito homogéneo. Se supone que el haz luminoso incidente crea una fuente isotrópica de fotones a una profundidad z_0 , indicada por el círculo negro. La condición de frontera $U_d(\mathbf{r}) = 0$ cuando z = 0, puede ser satisfecha sumando una fuente negativa, indicada con el círculo blanco.

3. Método de imágenes

En este capítulo veremos un procedimiento, similar al usado en problemas típicos de electrostática clásica, para calcular los parámetros de absorción y esparcimiento en los materiales que se proponen para ser utilizados como fantomas ópticos de tejido humano.

3.1. Muestra semi-infinita

En esta sección se indicará el procedimiento para calcular el flujo difuso de luz $\mathbf{F}_{\mathbf{d}}(\mathbf{r})$ dado por la ecuación (40) para un medio semi-infinito. Consideremos al vector de posición \mathbf{r} en coordenadas cartesianas $|\mathbf{r}| = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$, en un medio semi-infinito, esto es, un medio tal que $-\infty < x < \infty$, $-\infty < y < \infty$, $0 \le z < \infty$ (ver Figura 4). Para simplificar la notación, consideremos el coeficiente de esparcimiento $\mu_s = \rho \sigma_s$, el coeficiente de esparcimiento de transporte $\mu'_s = \mu_s(1-g)$, el coeficiente de absorción $\mu_a = \rho \sigma_a$ y el coeficiente de transporte $\mu_{tr} = \rho \sigma_{tr}$.

Para este medio suponemos que la luz incidente se puede considerar como una fuente de luz difusa en la posición $z = z_0$, donde z_0 es la distancia promedio que penetrará la luz en el medio antes de interactuar con el mismo por primera vez; esto es, todos los fotones incidentes son esparcidos inicialmente a una profundidad:

$$z_0 = \frac{1}{\mu_s(1-g)} = \frac{1}{\mu'_s} \tag{41}$$

Para resolver este caso se requiere también de una condición de frontera para la superficie del medio, en la literatura se reporta una buena aproximación [M. S. Patterson, 1989] que consiste en fijar el valor de la intensidad difusa promedio igual a cero sobre la frontera del medio, esto se debe a que dentro del medio habrá luz esparcida en todas las direcciones, mientras que fuera de éste no hay esparcimiento, por lo tanto, muy cerca de la frontera la intensidad difusa promedio tendrá que ser necesariamente cero. Así, imponemos la condición de frontera:

$$U_d(\mathbf{r}) = 0 \quad \text{cuando} \ z = 0 \tag{42}$$

El método de imágenes nos sirve para lograr la condición impuesta por la ecuación (42) mediante la presencia de una fuente negativa de la misma amplitud que la fuente en z_0 , pero ubicada en la posición $z = -z_0$. Así, de la ecuación (39) y considerando lo anteriormente expuesto, tenemos que el promedio de la intensidad difusa en este medio es:

$$U_d(\mathbf{r}) = \frac{S_0}{\left(4\pi\right)^2 D} \left[\frac{e^{-\kappa_d |\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|}}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|} - \frac{e^{-\kappa_d |\mathbf{r} + \mathbf{r}_0|}}{|\mathbf{r} + \mathbf{r}_0|} \right]$$
(43)

donde $\mathbf{r}_0 = (0, 0, z_0)$ es el vector de posición de la fuente de luz difusa, $\kappa_d = \sqrt{3\mu_a\mu_{tr}}, D = (3\mu_{tr})^{-1}$ y S_0 es la potencia total irradiada en todas direcciones.

Consideremos el flujo difusivo de fotones $\mathbf{F}_{\mathbf{d}}(\mathbf{r})$ en una posición $\mathbf{r}_d = (x, y, z_d) = x\hat{\imath} + y\hat{\jmath} + z_d\hat{\mathbf{k}}$, éste estará dado por la Ley de Fick dada en la ecuación (33): $\mathbf{F}_{\mathbf{d}}(\mathbf{r}) = -4\pi D\nabla U_d(\mathbf{r})$ calculado en \mathbf{r}_d .

Calculando las derivadas parciales del operador $\nabla = (\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z}) = \nabla_x \hat{\imath} + \nabla_y \hat{\jmath} + \nabla_z \hat{\mathbf{k}}$, tenemos que al aplicarlo a la intensidad difusa promedio $U_d(\mathbf{r})$ se obtiene, para la derivada con respecto a x:

$$\nabla_{x}U_{d}(\mathbf{r}) = \frac{S_{0}x}{(4\pi)^{2}D} \left\{ \frac{e^{-\kappa_{d}}\sqrt{x^{2}+y^{2}+(z_{d}-z_{0})^{2}}}{x^{2}+y^{2}+(z_{d}-z_{0})^{2}} \left[-\kappa_{d} - \frac{1}{\sqrt{x^{2}+y^{2}+(z_{d}-z_{0})^{2}}} - \frac{e^{-\kappa_{d}}\sqrt{x^{2}+y^{2}+(z_{d}+z_{0})^{2}}}{x^{2}+y^{2}+(z_{d}+z_{0})^{2}} \left[-\kappa_{d} - \frac{1}{\sqrt{x^{2}+y^{2}+(z_{d}+z_{0})^{2}}} \right] \right\}$$

mientras que para la derivada con respecto a y tenemos:

$$\nabla_{y}U_{d}(\mathbf{r}) = \frac{S_{0}y}{(4\pi)^{2}D} \left\{ \frac{e^{-\kappa_{d}}\sqrt{x^{2}+y^{2}+(z_{d}-z_{0})^{2}}}{x^{2}+y^{2}+(z_{d}-z_{0})^{2}} \left[-\kappa_{d} - \frac{1}{\sqrt{x^{2}+y^{2}+(z_{d}-z_{0})^{2}}} - \frac{e^{-\kappa_{d}}\sqrt{x^{2}+y^{2}+(z_{d}+z_{0})^{2}}}{x^{2}+y^{2}+(z_{d}+z_{0})^{2}} \left[-\kappa_{d} - \frac{1}{\sqrt{x^{2}+y^{2}+(z_{d}+z_{0})^{2}}} \right] \right\}$$

Por último, para la derivada con respecto a z tenemos:

$$\nabla_{z} U_{d} (\mathbf{r}) = \frac{S_{0}(z_{d} - z_{0})}{(4\pi)^{2} D} \left\{ \frac{e^{-\kappa_{d}} \sqrt{x^{2} + y^{2} + (z_{d} - z_{0})^{2}}}{x^{2} + y^{2} + (z_{d} - z_{0})^{2}} \left[-\kappa_{d} - \frac{1}{\sqrt{x^{2} + y^{2} + (z_{d} - z_{0})^{2}}} - \frac{e^{-\kappa_{d}} \sqrt{x^{2} + y^{2} + (z_{d} + z_{0})^{2}}}{x^{2} + y^{2} + (z_{d} + z_{0})^{2}} \left[-\kappa_{d} - \frac{1}{\sqrt{x^{2} + y^{2} + (z_{d} + z_{0})^{2}}} \right] \right\}$$

Para el caso de reflexión en el medio, esto es, en $z_d = 0$, tenemos que las derivadas $\nabla_x U_d(\mathbf{r}) = \nabla_y U_d(\mathbf{r}) = 0$, mientras que para la derivada con respecto a z, tenemos que al valuarla en el plano $z_d = 0$, obtenemos:

$$\nabla_z U_d \left(\mathbf{r} \right) = \frac{z_0 S_0}{8\pi^2 D} \frac{e^{-\kappa_d \sqrt{x^2 + y^2 + z_0^2}}}{x^2 + y^2 + z_0^2} \left[\kappa_d + \frac{1}{\sqrt{x^2 + y^2 + z_0^2}} \right]$$
(44)

Por lo tanto, el flujo difusivo de fotones $\mathbf{F}_{\mathbf{d}}(\mathbf{r}_d)$ nos queda como:

$$\mathbf{F}_{\mathbf{d}}(\mathbf{r}_{d}) = -\frac{z_{0}S_{0}}{2\pi} \frac{e^{-\kappa_{d}}\sqrt{x^{2}+y^{2}+z_{0}^{2}}}{x^{2}+y^{2}+z_{0}^{2}} \left[\kappa_{d} + \frac{1}{\sqrt{x^{2}+y^{2}+z_{0}^{2}}}\right] \hat{\mathbf{k}}$$
(45)

3.2. Muestra de tamaño finito en z

Veremos ahora el caso para un bloque de material que tiene una de sus caras en el plano z = 0 y otra cara en el plano z = d (ver Figura 5), se deberá entonces satisfacer la condición de frontera de que la intensidad difusiva promedio sea cero en z = 0 y en z = d, donde d será el espesor del bloque, esto es:

$$U_d(\mathbf{r}) = 0$$
 cuando $z = 0$ y en $z = d$ (46)

Esta condición se logra también mediante el método de imágenes, considerando una configuración consistente en una serie infinita de pares de fuentes, una positiva y una negativa sucesivamente. Así, la intensidad difusiva promedio, o fluencia difusiva estará dada para este medio por:

$$U_{d}(\mathbf{r}) = \frac{S_{0}}{(4\pi)^{2} D} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left[\frac{e^{-\kappa_{d} |\mathbf{r} - \mathbf{r}_{n0}^{+}|}}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_{n0}^{+}|} - \frac{e^{-\kappa_{d} |\mathbf{r} - \mathbf{r}_{n0}^{-}|}}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_{n0}^{-}|} \right]$$
(47)

donde $\mathbf{r}_{n0}^+ = (0, 0, nd + z_0)$ y $\mathbf{r}_{n0}^- = (0, 0, nd - z_0)$ y *n* es un número entero tal que: $-\infty < n < \infty$. Aplicando nuevamente la ley de Fick (Ec. 33), observando en el plano z = d, observamos que nuevamente los componentes en dirección \hat{i} y



Figura 5: Geometría para el cálculo de $\mathbf{F}_{\mathbf{d}}(\mathbf{r})$ para un medio finito en z. El bloque de material (representado por el área sombreada) se puede analizar incluyendo una serie infinita de fuentes imagen. Las fuentes negras tienen amplitud positiva y las blancas tienen amplitud negativa.

en dirección \hat{j} son iguales a cero y el único componente que contribuye al flujo difusivo de fotones es el término en dirección $\hat{\mathbf{k}}$ de la siguiente manera:

$$\mathbf{F_d}(\mathbf{r}_d) = \frac{S_0}{2\pi} \sum_{n \text{ impar}} \left\{ (nd - z_0) \frac{e^{-\kappa_d \sqrt{x^2 + y^2 + (nd - z_0)^2}}}{x^2 + y^2 + (nd - z_0)^2} \left[\kappa_d + \frac{1}{\sqrt{x^2 + y^2 + (nd - z_0)^2}} \right] - (nd + z_0) \frac{e^{-\kappa_d \sqrt{x^2 + y^2 + (nd + z_0)^2}}}{x^2 + y^2 + (nd + z_0)^2} \left[\kappa_d + \frac{1}{\sqrt{x^2 + y^2 + (nd + z_0)^2}} \right] \mathbf{\hat{k}} \quad (48)$$

Esta ecuación será utilizada para realizar los ajustes a nuestros datos experimentales, y a partir éstos se obtendrán los coeficientes de esparcimiento y de absorción contenidos en $\kappa_d = \sqrt{3\mu_a\mu_{tr}}$, consideraremos que las condiciones para la aproximación de difusión se cumplen en estas circunstancias.

3.3. Muestras finitas

Los materiales caracterizados en este trabajo estaban limitados experimentalmente en todos los ejes, por ejemplo, para el eje x se deberán considerar fuentes adicionales en esta dirección. Debemos considerar entonces condiciones de frontera adicionales a las impuestas anteriormente, así, la fluencia difusiva deberá ser igual a cero en las fronteras $x = \pm a$. Estas condiciones de frontera se pueden implementar mediante el método de imágenes incluyendo fuentes de fotones adicionales en los planos $x = \pm ma$, en donde m es un entero. En esta situación la fluencia en el medio estará dada por:

$$U_d(\mathbf{r}) = \frac{S_0}{\left(4\pi\right)^2 D} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left[\frac{e^{-\kappa_d |\mathbf{r} + \mathbf{r}_m - \mathbf{r}_{n0}^+|}}{|\mathbf{r} + \mathbf{r}_m - \mathbf{r}_{n0}^+|} - \frac{e^{-\kappa_d |\mathbf{r} + \mathbf{r}_m - \mathbf{r}_{n0}^-|}}{|\mathbf{r} + \mathbf{r}_m - \mathbf{r}_{n0}^-|} \right]$$
(49)

en donde $\mathbf{r}_m = (2ma, 0, 0)$. Aplicando la ley de Fick, tenemos que el flujo de fotones estará dado por [Gonzalez, 2007]:

$$\mathbf{F}_{\mathbf{d}}(\mathbf{r}_{d}) = \frac{S_{0}}{2\pi} \sum_{m=-\infty n}^{\infty} \sum_{n \text{ impar}} \left\{ (nd-z_{0}) \frac{e^{-\kappa_{d}} \sqrt{(x-2ma)^{2}+y^{2}+(nd-z_{0})^{2}}}{(x-2ma)^{2}+y^{2}+(nd-z_{0})^{2}} \left[\kappa_{d} + \frac{1}{\sqrt{(x-2ma)^{2}+y^{2}+(nd-z_{0})^{2}}} \right] - (nd+z_{0}) \frac{e^{-\kappa_{d}} \sqrt{x^{2}+y^{2}+(nd+z_{0})^{2}}}{(x-2ma)^{2}+y^{2}+(nd+z_{0})^{2}} \left[\kappa_{d} + \frac{1}{\sqrt{(x-2ma)^{2}+y^{2}+(nd+z_{0})^{2}}} \right] \mathbf{\hat{k}}$$
(50)

4. Formación de imágenes

En este capítulo se utiliza la teoría de la óptica de Fourier en el problema de la formación de imágenes. Particularmente se presta atención a la definición de la función de ensanchamiento de línea (Line spread function; LSF).

4.1. Transformada de Fourier y función delta de Dirac

La transformada de Fourier de una función g(x, y) se represtenta por $\mathfrak{F}{g(x, y)}$ y está definida como:

$$\mathfrak{F}[g(x,y)] = G(x,y) = \iint_{-\infty}^{+\infty} g(x,y) e^{-i2\pi(f_x x + f_y y)} dx dy \tag{51}$$

La transformada es una función de valores complejos de dos variables independientes f_x y f_y , a las que se le llaman generalmente frecuencias. De manera similar, la transformada inversa de Fourier de una función $G(f_x, f_y)$ estará representada por $\mathfrak{F}^{-1}[G(f_x, f_y)]$ y estará definida por:

$$\mathfrak{F}^{-1}\left[G(f_x, f_y)\right] = \iint_{-\infty}^{+\infty} G(f_x, f_y) e^{i2\pi(f_x x + f_y y)} df_x df_y \tag{52}$$

Las condiciones de existencia de la transformada de Fourier para una función g(x, y) son: g debe ser integrable sobre el plano infinito (x, y); g debe tener sólo un número finito de discontinuidades y un número finito de máximos y mínimos en cualquier rectángulo finito; por último, g no debe tener discontinuidades infinitas. Sin embargo, el análisis de sistemas físicos en ocasiones requiere utilizar funciones matemáticas idealizadas que pudieran violar una de las condiciones anteriores [J. W. Goodman, 1996]. Por ejemplo, en ocasiones es conveniente representar un pulso muy intenso que ocurre en un breve instante de tiempo o en un punto en el espacio mediante la función delta de Dirac $\delta(x, y)$, definida como:

$$\delta(x,y) = \lim_{N \to \infty} N^2 e^{-N^2 \pi (x^2 + y^2)}$$
(53)

La ecuación (53) representa un pulso muy intenso localizado en el origen. Si el pulso se encuentra desplazado del origen a una posición (x_0, y_0) la función delta de Dirac toma la siguiente forma:

$$\delta(x - x_0, y - y_0) = \lim_{N \to \infty} N^2 e^{-N^2 \pi \left[(x - x_0)^2 + (y - y_0)^2 \right]}$$
(54)

Un aspecto importante de la función delta de Dirac es el hecho de que cualquier función f(x, y) se puede reescribir en términos de la función delta como:

$$f(x,y) = \iint_{-\infty}^{+\infty} f(x',y')\delta(x-x',y-y')dx'dy'$$
(55)

4.2. Sistemas lineales

Cualquier sistema físico tiene la propiedad de transformar una señal de entrada $f_e(x_e, y_e)$, obteniendo como resultado una señal de salida $f_s(x_s, y_s)$. Se puede representar al sistema como un operador matemático S, este operador se podrá aplicar sobre funciones de entrada para obtener funciones de salida. De este modo las dos funciones estarán relacionadas de la siguiente manera:

$$f_s(x_s, y_s) = S\left[f_e(x_e, y_e)\right] \tag{56}$$

Se dice que un sistema es lineal si se cumple para todas las funciones de entrada $f_1 ext{ y } f_2$, y las constantes complejas $a ext{ y } b$, la siguiente propiedad de superposición:

$$S[af_1(x,y) + bf_2(x,y)] = aS[f_1(x,y)] + bS[f_2(x,y)]$$
(57)

Si reescribimos la función de entrada $f_e(x_e, y_e)$ como en la ecuación (55), tenemos:

$$f_e(x_e, y_e) = \iint_{-\infty}^{+\infty} f_e(x', y') \delta(x_e - x', y_e - y') dx' dy'$$

sustituimos la ecuación anterior en la ecuación (56) y suponiendo un sistema lineal representado por el operador S, obtenemos:

$$f_s(x_s, y_s) = \iint_{-\infty}^{+\infty} f_e(x', y') S\left[\delta(x_e - x', y_e - y')\right] dx' dy'$$
(58)

Notemos que $S[\delta(x_e - x', y_e - y')]$ es una función que denota la respuesta del sistema en el punto (x_s, y_s) del espacio de salida a una función δ localizada en las coordenadas (x', y') del espacio de entrada. A esta función se le simboliza con la letra h, esto es:

$$h(x_s, y_s; x', y') = S[\delta(x_e - x', y_e - y')]$$
(59)

La función h recibe el nombre de respuesta al impulso" (en óptica es llamada PSF por las siglas de "Point Spread Function") del sistema. La entrada y la salida del sistema se relacionan entonces por:

$$f_s(x_s, y_s) = \iint_{-\infty}^{+\infty} f_e(x', y') h(x_s, y_s; x', y') \, dx' dy'$$
(60)

A esta expresión se le llama integral de superposición, y nos muestra que un sistema lineal está completamente caracterizado por su respuesta a impulsos unitarios. Para especificar completamente la salida del sistema, generalmente se deben conocer las respuetas a impulsos localizados en todos los puntos posibles del plano de entrada.

Dentro de los sistemas lineales existe una categoría de éstos llamados invariantes. Estos sistemas lineales pueden ser invariantes en el tiempo o en el espacio. Se dice que una red eléctrica es invariante en el tiempo si su respuesta al impulso $h(t; \tau)$ (esto es, su respuesta en el tiempo t a una excitación de un impulso unitario aplicada en un tiempo τ) depende sólo de la diferencia temporal $(t - \tau)$. Las redes eléctricas compuestas de resistencias, capacitores e inductores son invariantes temporalmente debido a que sus características no cambian en el tiempo [J. W. Goodman, 1996].

Similarmente, un sistema lineal para formar imágenes es invariante en el espacio (o bien, isoplanático) si su respuesta al impulso $h(x_s, y_s; x', y')$ depende sólo de las distancias $(x_s - x')$ y $(y_s - y')$ (esto es, las distancias x e y entre el punto de excitación y el punto de respuesta). Para este tipo de sistema podemos escribir:

$$h(x_s, y_s; x', y') = h(x_s - x'; y_s - y')$$
(61)

Así, para un sistema isoplanático la integral de superposición dada por la ecuación (60) toma la siguiente forma:

$$f_s(x_s, y_s) = \iint_{-\infty}^{+\infty} f_e(x', y') h(x_s - x'; y_s - y') dx' dy'$$
(62)

Esta ecuación tiene la forma de una convolución bidimensional de la función del objeto $f_e(x', y')$ con la respuesta al impulso del sistema $h(x_s - x'; y_s - y')$. Una notación conveniente para referirnos a una relación de convolución tal como la mostrada en la ecuación (62), así, esta ecuación se escribe simbolicamente como:

$$f_s = f_e \otimes h \tag{63}$$

donde \otimes representa la convolución de la función f_e con la función h.

La convolución resulta ser particularmente útil en el caso de los sistemas isoplanáticos, dado que tanto las entradas como las salidas están relacionadas de una manera simple si consideramos el teorema de convolución derivado de la teoría de Fourier. Aplicando la transformada de Fourier a ambos lados de la ecuación (62) y utilizando el teorema mencionado, tenemos que los espectros $F_s(f_x, f_y)$ y $F_e(f_x, f_y)$ de la salida y entrada del sistema estarán relacionados por la ecuación:

$$F_{s}(f_{x}, f_{y}) = H(f_{x}, f_{y})F_{e}(f_{x}, f_{y})$$
(64)

donde H es la transformada de Fourier de la respuesta al impulso:

$$H(f_{x}, f_{y}) \equiv \mathfrak{F}[h(x', y')] = \iint_{-\infty}^{+\infty} h(x', y') e^{-i2\pi(f_{x}x' + f_{y}y')} dx' dy'$$
(65)

A la función $H(f_x, f_y)$ se le conoce como función de transferencia del sistema, ésta indica los efectos del sistema en el dominio de la frecuencia. Nótese que la ecuación (64) reduce la complejidad de las operaciones de la ecuación (62) por la secuencia frecuentemente más sencilla de calcular las transformadas de Fourier, multiplicarlas y calcular la transformada inversa de Fourier.

4.3. Sistemas con luz coherente e incoherente

En esta sección trataremos la formación de imágenes utilizando luz completamente coherente o completamente incoherente. Si tenemos un sistema lineal e isoplanático, podemos escribir la salida del sistema U(x, y) como la convolución de la función de respuesta al impulso h(x, y) y la entrada del sistema $U_e(x, y)$, esto es:

$$U(x,y) = \iint_{-\infty}^{+\infty} U_e(x',y')h(x-x';y-y')\,dx'dy'$$
(66)

Mientras que la intensidad I(x,y) para este sistema está dada por:

$$I(x.y) = \left\langle \left| U(x,y) \right|^2 \right\rangle \tag{67}$$

donde el símbolo $\langle \rangle$ representa el promedio temporal. Sustituyendo la ecuación (66) en (67) obtenemos:

$$I(x.y) = \left\langle \iiint_{-\infty}^{+\infty} h(x - x'; y - y') h^*(x - x''; y - y'') \right. (68) \\ U_e(x', y') U_e^*(x'', y'') dx' dy' dx'' dy'' \right\rangle$$

donde el asterisco representa el complejo conjugado de la función. La función de respuesta al impulso h(x - x'; y - y') no varía temporalmente, por lo tanto la ecuación (68) queda como:

$$I(x.y) = \iiint_{-\infty}^{+\infty} h(x - x'; y - y') h^*(x - x''; y - y'')$$

$$\langle U_e(x', y') U_e^*(x'', y'') \rangle dx' dy' dx'' dy''$$
(69)

La diferencia entre luz coherente e incoherente se encuentra en el término $\langle U_e(x',y')U_e^*(x'',y'')\rangle$, para luz coherente espacialmente la fase varía como el término armónico $e^{i(kr-\omega t)}$, en donde $r = \sqrt{x^2 + y^2}$, de manera que podemos escribir el promedio para luz coherente como:

$$\langle U_e(x',y')U_e^*(x'',y'')\rangle_{co} = U'_e U''^*_e \langle e^{-i\omega t}e^{i\omega t}\rangle = U'_e U''^*_e$$
(70)

donde $U'_e = e^{ikr'}$ y $U''_e = e^{-ikr''}$.

Para luz incoherente espacialmente, la relación entre las fases en dos posiciones diferentes es aleatoria. Por lo tanto, el promedio será diferente de cero sólo cuando la posición (x', y') = (x'', y''). Utilizando la relación (67) tenemos entonces que el promedio será:

$$\langle U_e(x',y')U_e^*(x'',y'')\rangle_{in} = \langle U_e(x',y')U_e^*(x',y')\rangle\,\delta(x'-x'',y'-y'')$$
(71)
= $I_e(x',y')\delta(x'-x'',y'-y'')$

en donde $\delta()$ indica la función delta de Dirac. Sustituyendo la ecuación (70) en la ecuación (69) obtenemos:

$$I(x.y)_{co} = \iiint_{-\infty}^{+\infty} h(x - x'; y - y') h^*(x - x''; y - y'')$$
(72)
$$U'_e U''_e dx' dy' dx'' dy''$$
$$= \left| \iint_{-\infty}^{+\infty} h(x - x'; y - y') U_e(x', y') dx' dy' \right|^2$$

lo que indica que:

$$U(x,y) = \iint_{-\infty}^{+\infty} h(x - x'; y - y') U_e(x', y') dx' dy'$$
(73)

Esto nos indica que, para luz coherente, la formación de imágenes es lineal en amplitud.

Para luz incoherente espacialmente, sustituyendo la ecuación (71) en la ecuación (69), tenemos:

$$I(x.y)_{in} = \iiint_{-\infty}^{+\infty} h(x - x'; y - y') h^*(x - x''; y - y'')$$
(74)
$$I_e(x', y') \delta(x' - x'', y' - y'') dx' dy' dx'' dy''$$

$$= \iint_{-\infty}^{+\infty} |h(x - x'; y - y')|^2 I_e(x', y') dx' dy'$$

lo que nos indica que la formación de imágenes con luz incoherente espacialmente es lineal en intensidad.

De acuerdo con la notación mencionada anteriormente, las ecuaciones (73) y (74) quedan respectivamente como:

$$U(x,y) = h (x - x'; y - y') \otimes U_e(x', y')$$
$$I(x.y)_{in} = |h (x - x'; y - y')|^2 \otimes |U_e(x', y')|^2$$

Consideremos un caso especial de la convolución, sea $g(x, y) = f(x', y') \otimes f^*(x - x', y - y')$, por lo tanto g estará definida como:

$$g(x,y) = \iint_{-\infty}^{+\infty} f(x',y') f^*(x-x',y-y') dx' dy'$$
(75)

A la ecuación (75) se le conoce como autocorrelación de la función f y se representa como f * f. De las propiedades de la transformada de Fourier se puede demostrar que:

$$\mathfrak{F}[f*f] = |F|^2 \tag{76}$$

donde F es la transformada de Fourier de la función f. Esto es, la transformada de Fourier de la autocorrelación de una función es igual al módulo al cuadrado de la transformada de Fourier de dicha función. Lo anterior nos permite escribir, considerando $H(f_x, f_y) \equiv \mathfrak{F}[h(x', y')]$ y $\mathfrak{U}_e(f_x, f_y) = \mathfrak{F}[U_e(x', y')]$, y de acuerdo a la ecuación (72) para luz coherente:

$$\mathfrak{F}[I(x.y)_{co}] = H\mathfrak{U}_e * H\mathfrak{U}_e \tag{77}$$

Mientras que para luz incoherente, considerando la ecuación (74) tenemos:

$$\mathfrak{F}[I(x.y)_{in}] = (H * H)(\mathfrak{U}_e * \mathfrak{U}_e) \tag{78}$$

Comparando las ecuaciones (77) y (78) se observa que puede haber una diferencia entre los dos tipos de iluminación y que la formación de la imagen dependerá fuertemente de la distribución de intensidad así como de la distribución de fase a través del objeto.

4.3.1. Formación de imágenes de objetos inmersos en medios densos

En el problema de esparcimiento de luz en volúmenes con luz coherente existen dos regímenes de interés. El primero supone que hay muy poco esparcimiento de luz, de manera que el coeficiente de esparcimiento es del mismo orden que el inverso del tamaño de la muestra, y la luz esparcida sigue siendo coherente, al igual que la luz incidente. El segundo régimen es el que nos interesa para este trabajo, consideremos el caso en el que existe mucho esparcimiento de luz en la muestra, esto es, el coeficiente de esparcimiento μ_s es mucho más grande que el inverso del tamaño de la muestra L, i.e., $\mu_s \gg 1/L$. En este caso hay muchas interacciones entre la luz y el medio. Así, si nos localizamos en un punto en el plano de salida de la muestra tendremos contribuciones de fotones que habrán pasado por diferentes caminos dentro de la muestra, esto significa que en cada punto habrá una suma de contribuciones con diferentes fases, por lo que la luz saliente es incoherente espacialmente. Por esta razón, en lo sucesivo sólo consideraremos el caso de la contribución de luz incoherente.

4.4. Formación de imágenes con luz incoherente

Para el caso de luz incoherente debemos considerar las intensidades, reescribiendo la ecuación (74) tenemos:

$$I(x.y) = \iint_{-\infty}^{+\infty} |h(x - x'; y - y')|^2 I_e(x', y') dx' dy$$
$$|h(x - x'; y - y')|^2 \otimes I_e(x', y')$$

Sea la función de esparcimiento de un punto (PSF): $q(x-x', y-y') = |h(x - x'; y - y')|^2$, así obtenemos:

$$I(x.y) = I_e(x', y') \otimes q(x - x', y - y')$$
(79)

tomando la transformada de Fourier de esta ecuación tenemos:

$$\mathfrak{F}[I(x,y)] = \mathfrak{F}[I_e(x',y') \otimes q(x-x',y-y')] = \mathfrak{F}[I_e(x',y')] \mathfrak{F}[q(x-x',y-y')]$$
(80)
(80)

Ahora, considerando $q = hh^*$, y $\mathfrak{F}[q(x - x', y - y')] = Q(f_x.f_y)$:

$$Q = \mathfrak{F}[q] = \mathfrak{F}[hh^*] = \mathfrak{F}[h] \otimes \mathfrak{F}[h^*]$$
(81)

La función $\mathfrak{F}[h]$ la definimos en la ecuación (65) como: $H(f_x, f_y) \equiv \mathfrak{F}[h(x', y')]$, mientras que la función $\mathfrak{F}[h^*]$ se puede simplificar notando que:

$$\mathfrak{F}[h^*] = \iint_{-\infty}^{+\infty} h^*(x',y') e^{-i2\pi(f_x x' + f_y y')} dx' dy'$$

$$= \left[\iint_{-\infty}^{+\infty} h(x',y') e^{i2\pi(f_x x' + f_y y')} dx' dy' \right]^*$$

$$= \left\{ \iint_{-\infty}^{+\infty} h(x',y') e^{-i2\pi[(-f_x)x' + (-f_y)y']} dx' dy' \right\}^*$$

$$= H^*(-f_x,-f_y)$$
(82)

De esta manera, tenemos que la ecuación (81) queda como:

$$Q(f_x.f_y) = H(f_x,f_y) \otimes H^*(-f_x,-f_y)$$
(83)

4.5. Función de ensanchamiento de línea (LSF)

Regularmente los sistemas ópticos con luz incoherente se caracterizan en términos de líneas por unidad de distancia. Es decir, se necesita considerar a los objetos lineales y no puntuales. Un objeto con una intensidad lineal se puede describir como una función delta $I_e(x, y) = \delta(y)$. Como vimos en la ecuación (79) la imagen de este objeto es la convolución del objeto con la PSF del sistema, esto es:

$$I(x.y) = \iint_{-\infty}^{+\infty} q(x - x'; y - y') I_e(x', y') dx' dy'$$

$$= \iint_{-\infty}^{+\infty} q(x - x'; y - y') \delta(y') dx' dy'$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty} q(x - x'; y) dx'$$
(84)

Esta función representa la imagen de una línea, función de ensanchamiento de línea, o bien, la función de esparcimiento de una línea (Line Spread Function; LSF). Esta función es la integral en una dirección de la función de ensanchamiento de punto (PSF). Tomando nuestro plano de observación en x = 0, y suponiendo una PSF simétrica en x, obtenemos la definición de LSF, l(y):

$$l(y) = \int_{-\infty}^{+\infty} q(x, y) \, dx \tag{85}$$

Así, si tenemos un objeto que se puede formar con la suma de líneas de transmisión de intensidad, i.e.:

$$I_o(x,y) = f(y) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(y-y')\,\delta(y')dy'$$

la imagen también se puede formar con una suma de líneas y está dada por:

$$I_e(x,y) = l(y) \otimes f(y) \tag{86}$$

Tomando la transformada de Fourier de la ecuación (86), obtenemos:

$$\mathfrak{F}[I_e(x,y)] = \mathfrak{F}[l(y)] \ \mathfrak{F}[f(y)]$$

A $\mathfrak{F}[l(y)] \equiv L(v)$ se le conoce como función de transferencia óptica unidimensional (1D Optical Transfer Function; 1D OTF). La 1D OTF es en general una función compleja:

$$L(v) = M(v)e^{i\Phi(v)}$$

en donde M(v) es la función de transferencia de modulación (Modulation Transfer Function; MTF) y $\Phi(v)$ es la función de transferencia de fase (Phase Transfer Function; PTF).

En muchas ocasiones resulta más conveniente usar la función de ensanchamiento de borde (Edge Spread Function; ESF). En sistemas reales de formación de imágenes la señal detectada por la imagen de una línea como objeto resultaría ser muy pequeña, o bien, estaría concentrada en una región muy pequeña del detector. En estos casos el ruido en la imagen es muy alto, o bien, la imagen detectada sería difícil de interpretar y por lo tanto la LSF no sería útil; siendo más conveniente medir la imagen de un borde. La imagen del borde e(y)estará dada por la integral de las imágenes de las líneas, esto es, la integral de la LSF en diferentes posiciones:

$$e(y) = \int_{-\infty}^{y_0} l(y - y')dy'$$
(87)

en donde y_0 es la posición del borde.

4.6. Resolución espacial

La resolución espacial, en términos generales, es la distancia mínima a la cual se pueden distinguir las imágenes de dos fuentes puntuales de igual irradiancia. Existen varios criterios para definir la resolución espacial de un sistema óptico. Las diferentes propuestas se emplean dependiendo de la conveniencia para cada sistema. Los criterios más conocidos son el de Rayleigh y el de Sparrow. En este trabajo se utilizarán los criterios propuestos por Bentzen, Hebden y Sparrow por ser los más convenientes para nuestros fines. Posteriormente se presentarán las diferencias numéricas entre estos criterios aplicándolos a nuestros resultados experimentales.

4.6.1. Criterio de Bentzen

Bentzen propuso un método para estimar la resolución espacial que se basa en la suposición de que la función de ensanchamiento de línea del sistema se puede aproximar como una función gaussiana. Esta suposición ha mostrado ser una buena aproximación en la práctica. Así:

$$LSF(y) = l(y) = \frac{C_1}{\sigma\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(y-m)^2}{2\sigma^2}}$$
(88)

en donde C_1 es una constante de normalización, σ es el ancho de la LSF, m es la posición central de la función. Bentzen supone que el límite de resolución, R_B , está dado por el ancho total en la mitad del máximo (Full Width at Half Maximum; FWHM) de la función gaussiana que describe la LSF, tal como se observa en la Figura (6), esto es, $R_B = 2(y - m)$.Así, podemos calcular R_B considerando:

$$e^{-\frac{\left(\frac{R_B}{2}\right)^2}{2\sigma^2}} = \frac{1}{2}$$

Obteniendo:

$$R_B = 2\sigma \sqrt{2\ln(2)} \approx 2,355\sigma \tag{89}$$

4.6.2. Criterio de Hebden

El criterio de Hebden supone que el límite de resolución, R_H , está dado por el valor en el que la función de transferencia de modulación, 1D MTF, cae al 10 % de su valor máximo. Así, si la LSF es una gaussiana, la transformada de Fourier de la LSF que es la MTF, también es una gaussiana:

$$MTF(v) = C_1 e^{-2\pi^2 \sigma^2 v^2}$$

y cae al 10 % de su valor máximo cuando:

$$e^{-2\pi^2\sigma^2\left(\frac{1}{R_H}\right)^2} = \frac{1}{10}$$

Por lo tanto:

$$R_H = \frac{\pi \sigma \sqrt{2}}{\sqrt{\ln(10)}} \approx 2,93\sigma \tag{90}$$



Figura 6: Punto propuesto por Bentzen para calcular el límite de la resolución en la mitad del máximo de la LSF.

4.6.3. Criterio de Sparrow

El límite de resolución espacial propuesto por Sparrow requiere que la intensidad en la imagen total sea uniforme en la región comprendida entre las imágenes de dos líneas. Matemáticamente esta condición que da satisfecha cuando la segunda derivada de la imagen total es igual a cero en la parte intermedia de las dos imágenes. Así, tenemos dos funciones gaussianas de ancho σ y separación Δ , esto es:

$$I(y) = e^{-\frac{y^2}{2\sigma^2}} + e^{-\frac{(y-\Delta)^2}{2\sigma^2}}$$
(91)

La resolución $R_S = \Delta$ se obtiene cuando se satisface la condición:

$$\frac{d^2I(y)}{dy^2} = 0\tag{92}$$

Calculando la segunda derivada de la ecuación (91) obtenemos:

$$\frac{d^2 I(y)}{dy^2} = \frac{1}{\sigma^4} \left\{ e^{-\frac{y^2 + \Delta^2}{2\sigma^2}} \left[e^{\frac{\Delta^2}{2\sigma^2}} \left(y^2 - \Delta^2 \right) + e^{\frac{y\Delta}{\sigma^2}} \left(y^2 - 2y\Delta + \Delta^2 - \sigma^2 \right) \right] \right\}$$
(93)

Evaluando la ecuación (93) en $y = \Delta/2 = R_S/2$ y considerando la condición de la ecuación (92), tenemos:

$$\frac{d^2 I(y)}{dy^2} = \frac{1}{2\sigma^4} \left(R_S^2 - 4\sigma^2 \right) e^{-\frac{R_S^2}{8\sigma^2}} = 0 \tag{94}$$

La ecuación (94) se cumple cuando $R_S = \infty$, caso que no es de nuestro interés; y cuando $R_S = 2\sigma$ que es la solución buscada. Así, tenemos que de acuerdo al criterio de Sparrow la resolución estará dada por:

$$R_S = 2\sigma \tag{95}$$

Comparando los criterios de resolución de Bentzen, Hebden y Sparrow, dados por las ecuaciónes (89), (90) y (95) respectivamente, observamos que el valor numérico más pequeño se obtiene del criterio de Sparrow ($R_S = 2\sigma$), siguiéndole en orden creciente el del criterio de Bentzen (2,35 σ) y por último el del criterio de Hebden (2,93 σ). En la práctica, determinar cuál de estos valores de resolución corresponde más cercanamente a la realidad depende de muchos factores, uno de los más importantes es el ruido en la medición, esto ocasionaría que se tenga que aumentar la separación entre las dos imágenes para distinguirlas. En este trabajo se discutirán las resoluciones obtenidas considerando los tres criterios expuestos.

5. Experimento

En este capítulo se muestra el método para la fabricación de las nancesferas de dióxido de silicio y dióxido de titanio, la fabricación de los recipientes; así como los cálculos para obtener la densidad de esferas en la disolución y las suposiciones hechas para esto. Se indican los arreglos experimentales implementados, tanto para la medición de las propiedades ópticas de las muestras como para encontrar el límite de la resolución del sistema. Se discute la manera de operar del detector y el ruido implícito en las lecturas de éste.

5.1. Medición de los parámetros ópticos de las muestras

El arreglo experimental para la medición de los parámetros ópticos que caracterizan a las muestras se muestra en la Figura (7). De acuerdo con esta figura, el haz de un láser se hace pasar por un polarizador Kenko para disminuir su intensidad (sólo en caso de ser necesario) y posteriormente incide sobre el medio denso que nos interese caracterizar. La muestra se coloca en un recipiente rectangular de acrílico con lados planos y transparentes como el que se observa en la Figura (8). Haciendo contacto con la cara posterior del recipiente se coloca una estructura metálica cilíndrica acoplada a una mesa deslizable mediante un tornillo micrométrico. Dentro de la estructura metálica se introduce una fibra óptica que recibe la luz esparcida por la muestra y la dirige a un tubo fotomultiplicador, la señal eléctrica producida por éste es enviada a un amplificador/discriminador y posteriormente es almacenada en una computadora en donde los datos pueden analizados.

Se utilizaron dos diferentes láseres para realizar las mediciones: el primero es un láser de He-Ne, JDS Uniphase 1125P, con una potencia de 5 mW emitiendo con una longitud de onda $\lambda = 632,8 nm$ (luz roja), el segundo es un láser diodo, Imatronic LDL175, que emite a una longitud de onda $\lambda = 820 nm$ (infrarrojo) con una potencia de 3 mW. Los recipientes empleados para contener las muestras tienen diferentes espesores, d: 25, 50 y 75 mm, mientras que su longitud y altura son respectivamente 140 mm y 95 mm para todos los recipientes, la variable h en la Figura (8) varía de acuerdo a la cantidad de muestra vertida en el recipiente, ésta debe ser lo suficientemente grande comparada con la altura a la que se coloca la fibra óptica, y de esta manera evitar mediciones cerca de la superficie; el acrílico utilizado en su fabricación tiene un espesor de 2 mm.

Se caracterizaron varias sustancias, sin embargo, las muestras más confiables consistieron en disoluciones de nanoesferas de dióxido de silicio (SiO_2) de 429 y 168 nm, más adelante se discute el procedimiento para la fabricación de estas nanoesferas así como sus propiedades. Se utilizaron diversas monturas para alinear la fibra óptica con el láser, entre ellas la mesa deslizable, un tornillo micrométrico acoplado a ésta la desplaza en pasos de 1 mm, en esta configuración la muestra permanece estable y solamente se mueve la fibra óptica a lo largo de una línea transversal que pasa por el centro de la cara posterior de la muestra, esta línea cubre 40 mm que resulta ser significativamente menor que el tamaño de la muestra, esto con el fin de evitar mediciones cerca de los



Figura 7: Esquema del montaje experimental utilizado para la caracterización de la muestra.



Figura 8: Esquema de los recipientes utilizados para contener las muestras. La variable d representa el grosor del recipiente, mientras que h indica la altura máxima de la muestra dentro del recipiente.

bordes de la misma. Para el conteo de fotones por unidad de tiempo se utilizó el modelo *CT1 Counter Timer, Thorn*, que consiste en un tubo fotomultiplicador conectado a una fuente de potencia, Hamamatsu C3830, amplificador, Thorn Emi Electron Tubes AD1, y tarjeta de adquisición para realizar el conteo en la computadora utilizando el programa *Thorn EMI Photon Counter 1.1a.* El montaje experimental se realizó sobre una mesa óptica Vibraplane Kinetic Systems 500599.

5.2. Medición de la resolución del sistema

El arreglo experimental para la medición de la resolución del sistema se muestra en la Figura (9). Este arreglo es similar al utilizado para caracterizar las muestras, sin embargo, en este caso se añadió un módulo de control de movimiento Newport ESP300, conectado a una mesa deslizable electrónica Newport ILS100CC, en este caso la fibra óptica permanece fija alineada con el haz del láser y la muestra se mueve transversalmente en pasos de un milímetro, o menos si es necesario. En la muestra se introduce una pieza metálica negra, con un tamaño de 50 mm \times 110 mm y un espesor de 1 mm, que cumple la función de un borde, a ésta se le llama máscara, la máscara se sumerge en la disolución de nancesferas de manera que quede perpendicular a la base del recipiente, sujetándola con una montura diseñada para ese propósito; la máscara se colocó a diferentes distancias entre las dos paredes del recipiente. El rango de movimiento de la muestra colocada sobre la mesa deslizable es de 90 mm, sin embargo, para evitar efectos indeseables producidos por los bordes del recipiente, el barrido se realizó sólo sobre los 50 mm centrales. El resto de los componentes del arreglo son idénticos a los utilizados para la caracterización de las muestras: la fibra óptica conduce la luz al tubo fotomultiplicador, éste la transforma en una señal eléctrica que posteriormente se amplifica y se almacena en la computadora.

5.2.1. Modalidad en conteo de fotones

Para realizar el conteo de fotones el modelo *CT1 Counter Timer, Thorn,* utiliza un tubo fotomultiplicador conectado a una fuente de poder y un amplificador/discriminador conectado a una computadora. El tubo fotomultiplicador (Photo Multiplier Tube; PMT) tiene dos funciones, primero convierte los fotones a una señal eléctrica, y posteriormente amplifica esa señal, produciendo un pulso eléctrico con una amplitud suficiente para su medición. Un tubo fotomultiplicador consiste en un tubo de vidro al vacío que contiene un fotocátodo, varios electrodos llamados dínodos y un ánodo. El fotocátodo es un electrodo muy delgado, localizado justo detrás de la ventana de entrada del PMT, que emite electrones cuando es impactado por un fotón, mediante efecto fotoeléctrico; este efecto consiste en la emisión de electrones cuando la luz choca con una superficie, para escapar de una superficie, el electrón debe absorber energía suficiente de la radiación incidente para superar la atracción de los iones positivos del material de la superficie. La fuente de poder de alto voltaje provee


Figura 9: Montaje experimental para medir la resolución espacial del sistema.

un voltaje que se fijó en -1250 V, y una serie de resistencias dividen el voltaje en incrementos iguales. Así, el primer dínodo tiene un voltaje de alrededor de 100 V con respecto al fotocátodo, los dínodos sucesivos tienen voltajes que se van incrementando aproximadamente a razón de 100 V por dínodo. Los electrones emitidos por el fotocátodo son atraidos hacia el primer dínodo y son acelerados a energías cinéticas iguales a la diferencia de potencial entre el fotocátodo y el primer dínodo. Cuando estos electrones se impactan en el primer dínodo, alrededor de cinco electrones son desprendidos por cada uno de éstos. Este proceso continúa a través de la cadena de dínodos, con el número de electrones siendo multiplicado por un factor de 5 en cada etapa, si el tubo tiene 10 dínodos tendremos una amplificación total de 5¹⁰ $\approx 10^7$ [J. T. Bushberg, 2002]. La amplificación se puede variar ajustando el voltaje aplicado al PMT, sin embargo, en nuestro sistema éste permaneció fijo, y si era necesario disminuir o aumentar la señal, se modificaba el tiempo de integración del PMT, o bien, se atenuaba la intensidad del láser mediante un polarizador.

El PMT que se utilizó en nuestros montajes experimentales tiene una muy buena respuesta para longitudes de onda en el visible, disminuyendo drásticamente para longitudes de onda en el infrarrojo, a esto se debe el decremento en la señal detectada cuando se utiliza el láser diodo con $\lambda = 820 nm$. La eficiencia cuántica del fotocátodo del PMT utilizado en estos experimentos para dicha longitud de onda es menor al 1%, mientras que para el visible es aproximadamente diez veces mayor [Hamamatsu, 1994].

Existen dos propiedades especialmente importantes en un PMT: la correlación precisa de los fotoelectrones emitidos con el nivel de luz incidente, y la disminución del ruido en la amplificación de cada fotoelectrón discreto emitido. Sin embargo, debido a que ambas propiedades están sujetas a probabilidades estadísticas en el proceso físico involucrado, tendremos variaciones acordes con la estadística de Poisson en: el flujo de fotones dado por el nivel de luz en la entrada del PMT, el número resultante de fotoelectrones, y la amplificación de cada fotoelectrón a través de los dínodos del PMT.

Cuando la ganacia del fotomultiplicador es alta, la señal de un solo fotoelectrón puede ser detectada fácilmente como un pulso eléctrico, la tasa de pulsos corresponde al flujo de luz incidente tan precisamente como lo permiten las limitaciones estadísticas. El uso del PMT en esta modalidad es conocido como conteo de fotones. Usualmente se acopla al amplificador un discriminador para mejorar la señal al descartar señales pequeñas y dejando pasar sólo las más significativas. Si el flujo de fotones es muy alto, el PMT no tiene tiempo de recuperarse después de haber amplificado al fotoelectrón anterior, y por lo tanto no detectará correctamente al siguiente. Por esta razón se incluyó en el arreglo experimental un polarizador para limitar el flujo de fotones cuando se consideró apropiado. Mientras que en el caso contrario, al tener señales muy bajas, principalmente al utilizar el láser infrarrojo, se retiraba el polarizador y se aumentaba el tiempo de integración del PMT.

Ruido de fotones En la teoría de probabilidad y estadística, la distribución de Poisson es una distribución de probabilidad discreta. Ésta expresa la probabilidad de un número de eventos ocurriendo en un tiempo fijo si éstos ocurren con una tasa media conocida y son independientes del tiempo desde el último evento. La producción de fotones está gobernada por las leyes de la física cuántica, lo que nos limita a hablar de un número promedio de fotones dentro de una ventana de observación dada. Así, la distribución de Poisson resulta ser útil para describir este fenómeno. La distribución de probabilidad para p fotones en una ventana de observación con una duración de T segundos está dada por:

$$P_p = \frac{(\phi T)^p e^{-\phi T}}{p!} \tag{96}$$

donde ϕ es la tasa de intensidad medida en fotones por segundo. Incluso si no hubiera otras fuentes de ruido en el sistema, las fluctuaciones estadísticas asociadas con el conteo de fotones sobre el intervalo finito de tiempo T pueden darnos un cociente de señal a ruido (Signal to Noise Ratio; SNR) finito, esto es, el ruido es diferente de cero. Considerando el valor promedio, Λ , y la desviación estándar, σ , para la distribución de probabilidad de Poisson, tenemos:

$$\Lambda = \phi T \qquad \qquad \mathbf{y} \qquad \qquad \boldsymbol{\sigma} = \sqrt{\phi} T \qquad \qquad (97)$$

Y por lo tanto, el cociente de señal a ruido quedará como:

$$SNR \equiv \frac{\Lambda}{\sigma} = \frac{\phi T}{\sqrt{\phi T}} = \sqrt{\phi T}$$
 (98)

Así, el cociente de señal a ruido mejora como la raíz cuadrada de la señal.

5.2.2. Medición de la función de respuesta a un borde

Como se mencionó anteriormente, la función de esparcimiento de una línea, LSF, se puede escribir como una función gaussiana como se mostró en la ecuación (88):

$$LSF(y) = l(y) = \frac{C_1}{\sigma\sqrt{2\pi}}e^{-\frac{(y-m)^2}{2\sigma^2}}$$

en donde C_1 es una constante de normalización, σ es el ancho de la LSF, y m es la posición central de la función. La LSF no es fácilmente mensurable, por lo tanto, es mejor medir la función de ensanchamiento de un borde, ESF, dada por la ecuación (87), que al aplicarla a la ecuación (88) obtenemos:

$$ESF(y-y_0) = \int_{-\infty}^{y_0} LSF(y-y')dy' = \frac{C_1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{y_0} e^{-\frac{(y-y')^2}{2\sigma^2}}dy'$$
(99)

en donde y_0 es la posición del borde. Haciendo uso de la función error, $\operatorname{erf}(x)$, dada por:

$$\operatorname{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-t^2} dt$$
 (100)

y considerando la paridad de la función gaussiana, la ecuación (99) se puede reescribir como:

$$ESF(y - y_0) = C_1 + C_1 \operatorname{erf}\left(\frac{y - y_0}{\sigma\sqrt{2}}\right) + C_2$$
 (101)

en donde se ha utilizado la propiedad de la función de error: $\operatorname{erf}(\infty) = 1$, mientras que C_2 es una constante de integración. Para que el valor máximo de la ESF sea igual a $C_1 + C_2$ y el valor mínimo igual a C_2 redefinimos la constante C_1 , obteniendo:

$$ESF(y - y_0) = \frac{C_1}{2} + \frac{C_1}{2} \operatorname{erf}\left(\frac{y - y_0}{\sigma\sqrt{2}}\right) + C_2$$
(102)

Así, mediante el uso del programa *Origin*, se ajustan los datos obtenidos a partir del montaje experimental mostrado en la Figura (9), a la ecuación (102). Los resultados se muestran en el siguiente capítulo.



Figura 10: Micrografía, mediante microscopía electrónica de transmisión, de la morfología de las nanoesferas de dióxido de silicio con $\phi = 429 \ nm$.

5.3. Fabricación de las muestras

El propósito de elaborar un maniquí a partir de esferas nanométricas (nanoesferas) corresponde a la posibilidad de comparar los resultados obtenidos mediante la teoría de esparcimiento de Mie con los que se obtienen de la aproximación de difusión a la ecuación de transporte.

En la literatura se reportan varios procesos para la elaboración de nanoesferas de dióxido de silicio [T. S. Deng, 2009], [S. K. Park, 2002], [K. S. Rao, 2005]; partícularmente nuestras disoluciones de nanoesferas se realizaron mediante el método de Stöber [W. Stöber, 1968]. Se elaboraron nanoesferas de dióxido de silicio con dos diámetros promedio diferentes, $\phi = 168 \ nm \ y \ \phi = 429 \ nm$. Para la elaboración de las nancesferas con $\phi = 429 \ nm$ el procedimiento fue el siguiente: Se vertieron en un vaso de precipitado 800 ml de etanol anhídrico (C_2H_6O) , 200 ml de agua tridestilada (H_2O) , la mezcla se mantiene en agitación, se le agregan 60 ml de hidróxido de amonio (NH_4OH) y por último 30 ml de tetraóxido de silicio, TEOS $(C_8H_{20}O_4Si)$, la mezcla permaneció en agitación durante 24 horas, se mantienen tapada durante aproximadamente una hora y posteriormente se detapa para permitir que se libere el amonio. A continuación la muestra se almacenó y se tomó una muestra para efectuar mediciones de tamaño así como morfológicas. Para la elaboración de las nanoesferas con $\phi = 168 \ nm$ se siguió el mismo procedimiento, sólo que las cantidades de etanol anhídrico y agua tridestilada en esta ocasión fueron de 600 ml y 400 ml respectivamente. Los reactivos utilizados son fabricados por la compañía Sigma-Aldrich, Chemie Steinheim. Una vez almacenado se obtuvieron 841 ml de la disolución de nanoesferas con $\phi = 429 \ nm$, y 785 ml de la disolución de nanoesferas con $\phi = 168 \ nm$.

La Figura (10) muestra la morfología de las nanopartículas que se obtu-



Figura 11: Distribución de tamaño para las nancesferas de dióxido de silicio con un diámetro $\phi = 429 \ nm$. El eje de las abscisas representa el tamaño en nanómetros, mientras que el de las ordenadas muestra la intensidad en porcentaje.

vieron mediante este método, corresponden a mediciones hechas utilizando un microscopio electrónico de transmisión para las nanoesferas con $\phi = 429 \ nm$. Las Figuras (11) y (12) muestran la distribución de tamaños utilizando el equipo Zetasizer Nano particle and molecular characterization system, que permite la medición del diámetro promedio de las partículas esparcidoras de luz mediante una técnica llamada espectroscopía por correlación fotónica (PCS por sus siglas en inglés). De esta figura observamos que los diámetros promedio para las nanoesferas de dióxido de silicio son $\phi = 428,7 \ nm \approx 429 \ nm$ y $\phi = 168,4 \ nm \approx 168 \ nm$.

5.3.1. Cálculo de la densidad de esparcidores

Para obtener el coeficiente de esparcimiento mediante la teoría de Mie, ser requiere conocer con precisión la densidad de esparcidores esféricos en la disolución. Para realizar el cálculo de la densidad es necesario hacer una serie de suposiciones que no necesariamente resultan ser válidas, y por lo tanto introducen un error considerable en el cálculo teórico de los coeficientes de esparcimiento; la primera de estas suposiciones es que todo el silicio de la molécula de TEOS formará tetraedros de dióxido de silicio como el que se muestra en la Figura (13), y que estos tetraedros formarán a su vez solamente esferas con un tamaño definido.

Así, consideremos la mezcla de TEOS disuelto en el alcohol, la densidad del TEOS es de $\rho_{TEOS} = 0.933 \frac{g}{ml}$.La disolución fue hecha agregando 60 ml de



Figura 12: Distribución de tamaño para las nancesferas de dióxido de silicio con un diámetro $\phi = 168 \ nm$. El eje de las abscisas representa el tamaño en nanómetros, mientras que el de las ordenadas muestra la intensidad en porcentaje.



Figura 13: Estructura molecular del dióxido de silicio.

TEOS, por lo tanto tendremos:

$$M_{TEOS} = \left(0,933 \; \frac{g}{ml}\right) (60 \; ml) = 55,98 \; g$$

donde M_{TEOS} es la masa total de TEOS. Requerimos conocer la cantidad total de moles de TEOS en la disolución, este valor se obtiene de:

moles de
$$TEOS = \frac{M_{TEOS}}{PM_{TEOS}} = \frac{55,98 \ g}{208,33 \frac{g}{mol}} = 0,26871 \ moles \ de \ TEOS$$

donde $PM_{TEOS} = 208,33 \frac{g}{mol}$ es el peso molecular del tetraóxido de silicio. Estos moles se encuentran disueltos en 1060 ml. Así, tenemos una concentración de TEOS, [TEOS], igual a:

$$[TEOS] = \frac{0.26871 \ mol}{1,060 \ l} = 0.2535 \frac{mol}{l}$$

y por lo tanto, la concentración de moléculas de TEOS estará dada por:

$$[Mol\acute{e}culas \ de \ TEOS] = \left(0,2535\frac{mol}{l}\right)N_A = 1,527 \times 10^{23}\frac{mol\acute{e}culas}{l}$$

donde $N_A = 6,022 \times 10^{23} \frac{mol \acute{e} culas}{mol}$ es el número de Avogadro [R. Chang, 1999]. Ahora debemos considerar el volumen de las esferas de dióxido de silicio,

Ahora debemos considerar el volumen de las esteras de dióxido de silicio, como se observa de la Figura (11), el diámetro promedio de estas esferas fue de $\phi = 428,7 nm$, por lo tanto, el volumen de estas esferas V_{esf} , será:

$$V_{esf} = \frac{4}{3}\pi r^3 = \frac{4}{3}\pi \left(\frac{428,7 \ nm}{2}\right)^3 = 4,1253 \times 10^7 \ nm^3$$

Como se mencionó anteriormente, las esferas de dióxido de silico se forman a partir de tetraedros de este mismo material que se van aglutinando para formarlas, el volumen de cada uno de estos tetraedros V_{tet} , se calcula a partir de la fórmula para el volumen de un tetraedro, considerando la longitud de enlace para el dióxido de silicio: $l_e = 0,262 \ nm$ como la arista del tetraedro [W. Vogel, 1985], tenemos:

$$V_{tet} = \frac{\sqrt{2}}{12} l_e^3 = \frac{\sqrt{2}}{12} (0.262 \ nm)^3 = 2.119 \times 10^{-3} \ nm^3$$

Si dividimos el volumen de una esfera V_{esf} entre el volumen de cada tetraedro V_{tet} , de los que está conformada la esfera, obtenemos el número de tetraedros que forman cada esfera, N_{tet} :

$$N_{tet} = \frac{4,125 \times 10^7 nm^3}{2,119 \times 10^{-3} nm^3} = 1,946 \times 10^{10} \frac{tetraedros}{esfera}$$

Así, recordando que a cada tetraedro corresponde una molécula de SiO_2 , tenemos que la cantidad de esferas de dióxido de silicio en un litro estará dada por:

$$Esferas \ por \ litro = \frac{1,527 \times 10^{23} \frac{mol \acute{e} culas}{l}}{1,946 \times 10^{10} \frac{mol \acute{e} culas}{esferas}} = 7,843 \times 10^{12} \frac{esferas}{l}$$

Como se mencionó anteriormente, al envasar el volumen total fue de 841 ml, esto se debe a la evaporación del agua y el alcohol disueltos en la disolución, por lo tanto tendremos un total de $(7,843 \times 10^{12} \frac{esferas}{l})(1,06 l) = 8,314 \times 10^{12} esferas$, que ahora se encuentran diluidas en 841 ml, esto es, la densidad de esferas ρ_{esf} , en nuestra disolución final estará dada por:

$$\rho_{esf} = \frac{8,314 \times 10^{12} \ esferas}{0,841 \ dm^3} = 9,886 \times 10^{12} \ \frac{esferas}{dm^3} = 9,886 \times 10^{-3} \ \frac{esferas}{\mu m^3}$$
(103)

Mediante un cálculo similar se obtiene que para las esferas con diámetro $\phi = 168 \ nm$ tendremos una densidad de esferas dada por:

$$\rho_{esf} = 2,865 \times 10^{13} \ \frac{esferas}{dm^3}.$$
 (104)

6. Resultados

En este capítulo se muestran los resultados obtenidos a partir de los arreglos experimentales mostrados en el capítulo anterior. En la primera sección se presentan los resultados para la caracterización de las disoluciones de nanoesferas, y posteriormente se reportan los resultados para la medición de la función de ensanchamiento de borde para el sistema.

6.1. Parámetros ópticos de las muestras

Para calcular los parámetros de esparcimiento de transporte, $\mu'_s = (1-g)\mu_s$ y de absorción, μ_a , a partir del montaje experimental discutido anteriormente, mostrado en la Figura (7), se debe realizar el ajuste de los datos obtenidos considerando una muestra finita en z, esto se justifica debido a que el tamaño del recipiente en dirección x y en y es considerablemente mayor que el tamaño en dirección z, así, los datos se deberán ajustar a la ecuación (48):

$$\begin{aligned} \mathbf{F_d}\left(\mathbf{r}_d\right) &= \frac{S_0}{2\pi} \sum_{n \text{ impar}} \left\{ (nd-z_0) \frac{e^{-\kappa_d \sqrt{x^2 + y^2 + (nd-z_0)^2}}}{x^2 + y^2 + (nd-z_0)^2} \left[\kappa_d + \frac{1}{\sqrt{x^2 + y^2 + (nd-z_0)^2}} \right] \\ &- (nd+z_0) \frac{e^{-\kappa_d \sqrt{x^2 + y^2 + (nd+z_0)^2}}}{x^2 + y^2 + (nd+z_0)^2} \left[\kappa_d + \frac{1}{\sqrt{x^2 + y^2 + (nd+z_0)^2}} \right] \right\} \mathbf{\hat{k}} \end{aligned}$$

Se ha mostrado que es suficiente considerar los primeros dos términos de la sumatoria anterior: n = 1, 3, esto es, la diferencia entre considerar sólo los los primero términos y considerar n = 1, 3, 5 es despreciable ([Gonzalez, 2007]). Por lo tanto los ajustes se realizarán utilizando sólo estos dos primero términos. El programa que se utilizó para este propósito es *Origin*, este programa permite realizar un ajustes no lineales considerando varios parámetros, en nuestro caso estos parámetros son los coeficientes de esparcimiento de transporte, $\mu'_s = (1 - g)\mu_s$ y el de absorción, μ_a ; un parámetro de normalización a, la posición central del haz x_0 , y el espesor de la muestra d, este último permanecerá fijo durante el ajuste, ya que es el único valor que conocemos con suficiente precisión.

Para la caracterización de los materiales se consideraron dos longitudes de onda diferentes, $\lambda = 632,8 \ nm$ correspondiente a luz roja, y $\lambda = 820 \ nm$, en el infrarrojo. Se reportan los resultados para la caracterización de dos diferentes disoluciones de nanoesferas de dióxido de silicio, los diámetros, ϕ , de estas esferas son: $\phi = 429 \ nm$ y $\phi = 168 \ nm$. La concentración de nanoesferas en las disoluciones permaneció estable durante las mediciones. Se reporta la caracterización de las disoluciones utilizando tres diferentes recipientes, con espesores $d = 25 \ mm$, 50 mm y 75 mm. La correspondencia entre los valores de los coeficientes de absorción y esparcimiento de transporte para diferentes espesores nos dará más certeza sobre la confiabilidad de la aproximación de difusión en el cálculo de los mismos. Al final de esta sección se presenta una tabla condensando los resultados.



Figura 14: Patrón de esparcimiento para el recipiente con espesor d=25~mm.Los resultados del ajuste son: $\mu_s'=17,28~mm^{-1}$ y $\mu_a=2,096\times 10^{-3}~mm^{-1}.$

6.1.1. Caracterización de la disolución de esferas con diámetro promedio de 429 nm para $\lambda = 632,8$ nm

Recipiente de 25 mm Se presentan los resultados de la caracterización de materiales para una longitud de onda de $\lambda = 632,8$ nm (rojo). Se reportan los resultados para la disolución de nancesferas de dióxido de silicio con un diámetro $\phi = 429$ nm, vertida en cada uno de los tres recipientes. Las Figuras (14) y (15) muestran los patrones de esparcimiento obtenidos para el recipiente de espesor d = 25 mm. Los cuadros representan los datos experimentales y la línea continua muestra el ajuste correspondiente.

Recipiente de 50 mm Las Figuras (16) y (17) muestran los patrones de esparcimiento obtenidos para el recipiente de espesor d = 50 mm. Los cuadros representan los datos experimentales y la línea continua muestra el ajuste correspondiente. Los resultados son para la disolución de nancesferas de dióxido de silicio con un diámetro $\phi = 429$ nm.

Recipiente de 75 mm Las Figuras (18) y (19) muestran los patrones de esparcimiento obtenidos para el recipiente de espesor d = 75 mm. Los cuadros representan los datos experimentales y la línea continua muestra el ajuste correspondiente. Resultados para la disolución de nanoesferas de dióxido de silicio con un diámetro $\phi = 429$ nm.

6.1.2.



Figura 15: Patrón de esparcimiento para el recipiente con espesor d=25~mm.Los resultados del ajuste son: $\mu_s'=18,25~mm^{-1}$ y $\mu_a=2,783\times 10^{-3}~mm^{-1}.$



Figura 16: Patrón de esparcimiento para el recipiente con espesor d=50~mm, $\phi=429~nm.$ Los resultados del ajuste son: $\mu_s'=17,14~mm^{-1}$ y $\mu_a=3,052\times10^{-3}~mm^{-1}.$



Figura 17: Patrón de esparcimiento para el recipiente con espesor d=50~mm.Los resultados del ajuste son: $\mu_s'=17,44~mm^{-1}$ y $\mu_a=3,121\times 10^{-3}~mm^{-1}.$



Figura 18: Patrón de esparcimiento para el recipiente con espesor d=75~mm, $\phi=429~nm.$ Los resultados del ajuste son: $\mu_s'=8,305~mm^{-1}$ y $\mu_a=8,326\times10^{-4}~mm^{-1}.$



Figura 19: Patrón de esparcimiento para el recipiente con espesor d=75~mm, $\phi=429~nm.$ Los resultados del ajuste son: $\mu_s'=8,563~mm^{-1}$ y $\mu_a=8,912\times10^{-4}~mm^{-1}.$

Caracterización de la disolución de esferas con diámetro promedio de 429 nm para $\lambda = 820 nm$

Recipiente de 25 mm Se muestran los resultados de la caracterización de materiales para una longitud de onda de $\lambda = 820 nm$, esta longitud de onda corresponde al inrarrojo cercano. Se reportan los resultados para la disolución de nanoesferas de dióxido de silicio con un diámetro $\phi = 429 nm$, vertida en cada uno de los tres recipientes. Las Figuras (20), (21) y (22) muestran los patrones de esparcimiento obtenidos para el recipiente de espesor d = 25 mm, utilizando tiempos de integración de 1, 10 y 20 s respectivamente. Los cuadros representan los datos experimentales y la línea continua muestra el ajuste correspondiente.

Recipiente de 50 mm Se muestran los resultados de la caracterización de materiales para una longitud de onda de $\lambda = 820 nm$. Se reportan los resultados para la disolución de nancesferas de dióxido de silicio con un diámetro $\phi = 429 nm$. Las Figuras (23) y (24) muestran los patrones de esparcimiento obtenidos para el recipiente de espesor d = 50 mm. Los cuadros negros representan los datos experimentales y la línea continua muestra el ajuste correspondiente.



Figura 20: Patrón de esparcimiento para la solución de esferas con diámetro promedio ϕ = 429 nm, λ = 820 nm, y utilizando el recipiente con espesor d = 25 mm. Tiempo de integración t = 1 s. Los resultados del ajuste son: $\mu'_s = 7,212 \times 10^{-2} mm^{-1}$ y $\mu_a = 2,164 \times 10^{-3} mm^{-1}$.



Figura 21: Patrón de esparcimiento para la solución de esferas con diámetro promedio ϕ = 429 nm, λ = 820 nm, y utilizando el recipiente con espesor d = 25 mm. Tiempo de integración t = 10 s. Los resultados del ajuste son: $\mu_s' = 6,922 \times 10^{-2} mm^{-1}$ y $\mu_a = 2,240 \times 10^{-3} mm^{-1}$.



Figura 22: Patrón de esparcimiento para la solución de esferas con diámetro promedio ϕ = 429 nm, λ = 820 nm, y utilizando el recipiente con espesor d = 25 mm. Tiempo de integración t = 20 s. Los resultados del ajuste son: $\mu_s' = 6,949 \times 10^{-2} mm^{-1}$ y $\mu_a = 2,295 \times 10^{-3} mm^{-1}$.



Figura 23: Patrón de esparcimiento para la solución de esferas con diámetro promedio ϕ = 429 nm, λ = 820 nm, y utilizando el recipiente con espesor d = 50 mm. Los resultados del ajuste son: μ_s' = 5,087 mm^{-1} y μ_a = 3,407 \times 10⁻⁶ mm^{-1}.



Figura 24: Patrón de esparcimiento para la solución de esferas con diámetro promedio ϕ = 429 nm, λ = 820 nm, y utilizando el recipiente con espesor d = 50 mm. Los resultados del ajuste son: μ_s' = 5,062 mm^{-1} y μ_a = 3,477 \times 10⁻⁶ mm^{-1}.

Recipiente de 75 mm Se muestran los resultados de la caracterización de materiales para una longitud de onda de $\lambda = 820 nm$. Se reportan los resultados para la disolución de nancesferas de dióxido de silicio con un diámetro $\phi = 429 nm$. Las Figuras (23) y (24) muestran los patrones de esparcimiento obtenidos para el recipiente de espesor d = 75 mm. Los cuadros negros representan los datos experimentales y la línea continua muestra el ajuste correspondiente.

6.1.3. Caracterización de la disolución de esferas con diámetro promedio de 168 nm para $\lambda = 632,8$ nm

Recipiente de 25 mm Se presentan los resultados de la caracterización de materiales para una longitud de onda de $\lambda = 632,8 nm$ (rojo). Se reportan los resultados para la disolución de nancesferas de dióxido de silicio con un diámetro $\phi = 168 nm$, vertida en cada uno de los tres recipientes. La Figura (27) muestra el patrón de esparcimiento obtenido para el recipiente de espesor d = 25 mm. Para este recipiente el haz láser rojo pasa directamente a través de la muestra, esto es, el esparcimiento dentro de la disolución de esferas es despreciable; por lo tanto, en este caso el ajuste a la aproximación de difusión no es válido.

Recipiente de 50 mm Se presentan los resultados de la caracterización de materiales para una longitud de onda de $\lambda = 632,8 nm$ (rojo). Se reportan los resultados para la disolución de nancesferas de dióxido de silicio con un



Figura 25: Patrón de esparcimiento para la solución de esferas con diámetro promedio $\phi = 429 \ nm, \ \lambda = 820 \ nm, \ y$ utilizando el recipiente con espesor $d = 75 \ mm.$ Los resultados del ajuste son: $\mu'_s = 3,709 \ mm^{-1}$ y $\mu_a = 1,239 \times 10^{-6} \ mm^{-1}.$



Figura 26: Patrón de esparcimiento para la solución de esferas con diámetro promedio ϕ = 429 nm, λ = 820 nm, y utilizando el recipiente con espesor d = 75 mm. Los resultados del ajuste son: μ_s' = 3,488 mm^{-1} y μ_a = 3,697 \times 10⁻⁵ mm^{-1}.



Figura 27: Patrón de esparcimiento para la solución de esferas con diámetro promedio $\phi = 168 \ nm, \ \lambda = 632,8 \ nm$, y utilizando el recipiente con espesor $d = 25 \ mm$. La aproximación de difusión no es válida en este caso.

diámetro $\phi = 168 \ nm$, vertida en el recipiente de 50 mm. Las Figuras (28) y (29) muestran los patrones de esparcimiento obtenidos para el recipiente de espesor $d = 50 \ mm$. Los cuadros negros representan los datos experimentales y la línea continua muestra el ajuste correspondiente.

Recipiente de 75 mm Se presentan los resultados de la caracterización de materiales para una longitud de onda de $\lambda = 632,8$ nm (rojo). Se reportan los resultados para la disolución de nancesferas de dióxido de silicio con un diámetro $\phi = 168$ nm, vertida en el recipiente de 75 mm. Las Figuras (30) y (31) muestran los patrones de espacimiento obtenidos para el recipiente de espesor d = 75 mm. Los cuadros negros representan los datos experimentales y la línea continua muestra el ajuste correspondiente.

6.1.4. Caracterización de la disolución de esferas con diámetro promedio de 168 nm para $\lambda = 820$ nm

Recipiente de 25 mm Se presentan los resultados de la caracterización de materiales para una longitud de onda de $\lambda = 820 nm$ (infrarrojo cercano). Se reportan los resultados para la disolución de nanoesferas de dióxido de silicio con un diámetro $\phi = 168 nm$, vertida en cada uno de los tres recipientes. La Figura (32) muestra el patrón de esparcimiento obtenido para el recipiente de espesor d = 25 mm. Para este recipiente el haz láser infrarrojo pasa directamente a través de la muestra provocando saturación en el detector y las consecuentes lecturas erróneas para los puntos centrales del patrón de esparcimiento, esto es,



Figura 28: Patrón de esparcimiento para la solución de esferas con diámetro promedio ϕ = 168 nm, λ = 632,8 nm, y utilizando el recipiente con espesor d = 50 mm. Los resultados del ajuste son: μ'_s = 6,954 mm^{-1} y μ_a = 2,633 \times 10⁻³ mm^{-1}.



Figura 29: Patrón de esparcimiento para la solución de esferas con diámetro promedio $\phi = 168 \ nm, \ \lambda = 632,8 \ nm, \ y$ utilizando el recipiente con espesor $d = 50 \ mm.$ Los resultados del ajuste son: $\mu'_s = 6,642 \ mm^{-1}$ y $\mu_a = 2,873 \times 10^{-3} \ mm^{-1}.$



Figura 30: Patrón de esparcimiento para la solución de esferas con diámetro promedio ϕ = 168 nm, λ = 632,8 nm, y utilizando el recipiente con espesor d = 75 mm. Los resultados del ajuste son: μ'_s = 4,649 mm⁻¹ y μ_a = 1,541 \times 10⁻³ mm⁻¹.



Figura 31: Patrón de esparcimiento para la solución de esferas con diámetro promedio ϕ = 168 nm, λ = 632,8 nm, y utilizando el recipiente con espesor d = 75 mm. Los resultados del ajuste son: μ_s' = 5,093 mm^{-1} y μ_a = 1,708 \times 10⁻³ mm^{-1}.



Figura 32: Patrón de esparcimiento para la solución de esferas con diámetro promedio $\phi = 168 \ nm, \ \lambda = 820 \ nm$, y utilizando el recipiente con espesor $d = 25 \ mm$. Los puntos centrales indican saturación en el detector. La aproximación de difusión no es válida en este caso.

el esparcimiento dentro de la disolución de esferas es despreciable; por lo tanto, en este caso el ajuste a la aproximación de difusión no es válido.

Recipiente de 50 mm La Figura (33) muestra el patrón de esparcimiento para una longitud de onda de $\lambda = 820 nm$ (infrarrojo cercano) de la disolución esferas de dióxido de silicio con diámetro promedio $\phi = 168 nm$, contenida en el recipiente de espesor d = 50 mm. Para este recipiente el haz láser infrarrojo pasa directamente a través de la muestra, por lo tanto, en este caso el ajuste a la aproximación de difusión no es válido.

Recipiente de 75 mm Las Figuras (34) y (35) muestra el patrón de esparcimiento para una longitud de onda de $\lambda = 820 nm$ (infrarrojo cercano) de la disolución esferas de dióxido de silicio con diámetro promedio $\phi = 168 nm$, contenida en el recipiente de espesor d = 75 mm.

6.1.5. Resumen de resultados para la caracterización

Los resultados presentados en las secciones anteriores, para $\phi = 429 \ nm$, se condensan en el Cuadro (105):



Figura 33: Patrón de esparcimiento para la solución de esferas con diámetro promedio $\phi = 168 \ nm, \ \lambda = 820 \ nm$, y utilizando el recipiente con espesor $d = 50 \ mm$. La aproximación de difusión no es válida en este caso.



Figura 34: Patrón de esparcimiento para la solución de esferas con diámetro promedio ϕ = 168 nm, λ = 820 nm, y utilizando el recipiente con espesor d = 75 mm. Los resultados del ajuste son: μ_s' = 3,277 mm^{-1} y μ_a = 3,105 \times 10⁻⁴ mm^{-1}.



Figura 35: Patrón de esparcimiento para la solución de esferas con diámetro promedio ϕ = 168 nm, λ = 820 nm, y utilizando el recipiente con espesor d = 75 mm. Los resultados del ajuste son: μ_s' = 3,184 mm^{-1} y μ_a = 3,027 \times 10⁻⁴ mm^{-1}.

$\lambda \; [\mathrm{nm}]$	d [mm]	$\mu_s' ~ [\mathrm{mm}^{-1}]$	$\mu_a ~ [\mathrm{mm}^{-1}]$
632,8	25	17,28	$2,096 imes 10^{-3}$
632,8	25	18,25	$2,783\times10^{-3}$
632,8	50	17,14	$3,052 \times 10^{-3}$
632,8	50	17,44	$3,121 \times 10^{-3}$
632,8	75	8,305	$8,326 \times 10^{-4}$
632,8	75	8,563	$8,912 \times 10^{-4}$
820	25	$7,212 \times 10^{-2}$	$2,164 \times 10^{-3}$
820	25	$6,922 \times 10^{-2}$	$2,240 \times 10^{-3}$
820	25	$6,949 \times 10^{-2}$	$2,295 \times 10^{-3}$
820	50	5,087	$3,407 \times 10^{-6}$
820	50	5,062	$3,477 \times 10^{-6}$
820	75	3,709	$1,239 \times 10^{-6}$
820	75	3,488	$3,697 \times 10^{-5}$

(105)

Los resultados correpondientes a la nancesferas con un diámetro promedio $\phi = 168 \ nm$, se presentan en el Cuadro (106):

λ [nm]	d [mm]	$\mid \mu_{s}^{\prime} \; [\mathrm{mm}^{-1}] \mid$	$\mu_a \; [\mathrm{mm}^{-1}]$
632,8	25	No aplica	No aplica
632,8	50	6,954	$2,633 \times 10^{-3}$
632,8	50	6,642	$2,873 \times 10^{-3}$
632,8	75	4,649	$1,541 \times 10^{-3}$
632,8	75	5,093	$1,708 \times 10^{-3}$
820	25	No aplica	No aplica
820	50	No aplica	No aplica
820	75	3,277	$3,105 \times 10^{-4}$
820	75	3,184	$3,027 \times 10^{-4}$

(106)

6.2. Cálculo de los parámetros mediante la teoría de Mie

El propósito de tener partículas esféricas con diámetro controlado es la capacidad de poder comparar los resultados obtenidos mediante la aproximación de difusión, con los resultados obtenidos a partir de la teoría de esparcimiento de Mie. Para realizar estos cálculos se empleó un programa implementado por Scott Prahl [S. Prahl, 2007], en el que a partir del conocimiento del diámetro de las esferas ϕ , la longitud de onda de la luz incidente λ , el índice de refracción del medio en el que se encuentran disueltas las esferas n_m , el índice de refracción de la esfera n_{esf} y la concentración de esferas ρ_{esf} en la disolución, se puede obtener el coeficiente de esparcimiento de transporte μ'_s , así como otros parámetros.

Para realizar estos cálculos se consideraron los dos diámetros promedio de las esferas utilizadas, esto es
, $\phi=168~nm$ y $\phi=429~nm$; las dos longitudes de onda de la luz incidente,
 $\lambda=632,8~nm$ y $\lambda=820~nm$; el índice de refracción para el alcohol et
ílico, $n_m=1,361;$ el índice de refracción de las esferas de dióxido de silicio,
 $n_{esf}=1,48;$ y las densidades de esferas en la disolución dadas por las ecuaciones (103) y (104), i.e.,
 $\rho_{esf}=9,886\times10^{-3}~esf/\mu m^3\approx10^{-2}~esf/\mu m^3$ y $\rho_{esf}=2,865\times10^{-2}~esf/\mu m^3$. La parte compleja del índice de refracción del dióxido de silicio no se consideró en estos cálculos. A partir de los datos mencionados se obtienen los resultados reportados en el Cuadro (107).

$\phi \; [m nm]$	$\lambda [{ m nm}]$	$ ho_{esf} ~ [\mu \mathrm{m}^{-3}]$	g	$\mu_s ~ [\mathrm{mm}^{-1}]$	$\mu_{s}^{\prime} ~ [\mathrm{mm}^{-1}]$
429	632,8	10^{-2}	0,7795	0,1602	0,03532
429	820	10^{-2}	0,7071	0,08339	0,02443
168	632,8	$2,865 \times 10^{-2}$	0,2214	$6,094 \times 10^{-3}$	$4,744 \times 10^{-3}$
168	820	$2,865 \times 10^{-2}$	0,1299	$2,566 \times 10^{-3}$	$2,233 \times 10^{-3}$
					(107)

6.3. Resolución del sistema

Para medir la resolución del sistema se consideraron dos longitudes de onda diferentes, $\lambda = 632.8~nm$ correspondiente a luz roja, y $\lambda = 820~nm$, en el infrarrojo. Se reportan los resultados para la resolución utilizando dos diferentes disoluciones de nanoesferas de dióxido de silicio, los diámetros de estas esferas son: $\phi = 429 \ nm \ y \ \phi = 168 \ nm$. La concentración de nanoesferas en las disoluciones permaneció estable durante las mediciones. Para las mediciones de resolución se utilizó solamente el recipiente con un espesor $d = 50 \ mm \ y$ la máscara de 50 $mm \ \times \ 110 \ mm$ con espesor de 1 mm, que cumple la función de borde. Al final de esta sección se presenta una tabla condensando los resultados de acuerdo al criterio de resolución escogido.

Como se mencionó anteriormente, la función que modela el comportamiento de la función de ensanchamiento de borde está dada por la ecuación (102):

$$ESF(y - y_0) = \frac{C_1}{2} + \frac{C_1}{2} \operatorname{erf}\left(\frac{y - y_0}{\sigma\sqrt{2}}\right) + C_2$$

en donde C_1 es una constante de normalización, σ es el ancho de la LSF, e y_0 es la posición del borde que coincide con la posición central de la función; el valor máximo de la ESF es igual a $C_1 + C_2$ y el valor mínimo igual a la constante de integración C_2 . Así, mediante el uso del programa Origin, se ajustan los datos obtenidos a partir del montaje experimental mostrado en la Figura (9), al desarrollo de la ecuación (102). Para el caso de la disolución de nanoesferas con $\phi = 168 \ nm$ iluminada con $\lambda = 632,8 \ nm$, la máscara se colocó a diferentes distancias entre las dos paredes del recipiente; para el resto de los experimentos la máscara estuvo colocada a la mitad de las dos caras paralelas del recipiente sobre las que incide y se detecta la luz. El barrido se realizó sobre los 50 mm centrales, esto es, 25 mm hacia ambos lados de la posición en la que incide el haz.

6.3.1. Resolución en la disolución de esferas con diámetro promedio de 429 nm para $\lambda = 632,8$ nm

Las Figuras (36) y (37) muestran los datos experimentales para la función de ensanchamiento de borde para la disolución de nancesferas con $\phi = 429 \ mm$ iluminada con una longitud de onda $\lambda = 632,8 \ nm$, la línea continua muestra la función de ajuste.

6.3.2. Resolución en la disolución de esferas con diámetro promedio de 429 nm para $\lambda = 820$ nm

Las Figuras (38) y (39) muestran los datos experimentales para la función de ensanchamiento de borde para las disolución de nanoesferas con $\phi = 429 \ mm$ iluminada con una longitud de onda $\lambda = 820 \ nm$, considerando los 50 datos centrales y posteriormente el total de 90 datos, en este caso la máscara se coloca a la mitad entre ambas caras paralelas del recipiente. La línea continua muestra la función de ajuste a la ecuación (102).Las Figuras (40) y (41) muestran los resultados para las mediciones realizadas colocando la máscara a 10 mm de la cara del recipiente donde incide directamente la luz del láser y a 10 mm de la cara donde se coloca al detector respectivamente.



Figura 36: Patrón de la función de ensanchamiento de borde para la solución de esferas con diámetro promedio $\phi = 429 \ nm$, con una longitud de onda $\lambda = 632,8 \ nm$. Los resultados del ajuste son: $C_1 = -3229 \pm 27, C_2 = 3196 \pm 16, \sigma = 8,286 \ mm \pm 0,187 \ mm \ e \ y_0 = 1,452 \pm 0,134.$



Figura 37: Patrón de la función de ensanchamiento de borde para la solución de esferas con diámetro promedio $\phi = 429 \ nm$, con una longitud de onda $\lambda = 632,8 \ nm$. Los resultados del ajuste son: $C_1 = -33572 \pm 283, C_2 = 32782 \pm 146, \sigma = 9,483 \ mm \pm 0,185 \ mm \ e \ y_0 = 2,685 \pm 0,129.$



Figura 38: Patrón de la función de ensanchamiento de borde para la solución de esferas con diámetro promedio $\phi = 429 \ nm$, con una longitud de onda $\lambda = 820 \ nm$, considerando los 50 valores centrales. Los resultados del ajuste son: $C_1 = -1846 \pm 377, C_2 = 1245 \pm 10, 53, \sigma = 16,09 \ mm \pm 1,956 \ mm \ e \ y_0 = 23,55 \pm 3,84.$



Figura 39: Patrón de la función de ensanchamiento de borde para la solución de esferas con diámetro promedio $\phi = 429 \ nm$, con una longitud de onda $\lambda = 820 \ nm$, considerando los 50 valores centrales. Los resultados del ajuste son: $C_1 = -1208 \pm 14,66, C_2 = 1212 \pm 5,33, \sigma = 11,39 \ mm \pm 0,361 \ mm \ e \ y_0 = 16,77 \pm 0,728.$



Figura 40: Patrón de la función de ensanchamiento de borde para la solución de esferas con diámetro promedio $\phi = 429 \ nm$, con una longitud de onda $\lambda = 820 \ nm$, la máscara se encuentra cerca de la cara en donde incide el haz láser. Los resultados del ajuste son: $C_1 = -4484 \pm 71$, $C_2 = 4444 \pm 31$, $\sigma = 8,867 \ mm \pm 0,324 \ mm \ e \ y_0 = 4,885 \pm 0,236$.



Figura 41: Patrón de la función de ensanchamiento de borde para la solución de esferas con diámetro promedio $\phi = 429 \ nm$, con una longitud de onda $\lambda = 820 \ nm$, la máscara se encuentra cerca de la cara en donde se coloca el detector. Los resultados del ajuste son: $C_1 = -5365 \pm 77$, $C_2 = 5202 \pm 33$, $\sigma = 9,295 \ mm \pm 0,297 \ mm \in y_0 = 4,934 \pm 0,215$.



Figura 42: Patrón de la función de ensanchamiento de borde para la solución de esferas con diámetro promedio $\phi = 168 \ nm$, con una longitud de onda $\lambda = 632,8 \ nm$. Los resultados del ajuste son: $C_1 = -9286 \pm 91$, $C_2 = 9198 \pm 40$, $\sigma = 9,944 \ mm \pm 0,203 \ mm \ e \ y_0 = 4,777 \pm 0,147$.

6.3.3. Resolución en la disolución de esferas con diámetro promedio de 168 nm para $\lambda = 632,8$ nm

Las Figuras (42) y (43) muestran los datos experimentales para la función de ensanchamiento de borde para las disolución de nancesferas con $\phi = 168 \ mm$ iluminada con una longitud de onda $\lambda = 632,8 \ nm$, la máscara se colocó a la mitad de las dos caras paralelas en las que incide el haz y se coloca el detector. La línea continua muestra la función de ajuste a la ecuación (102).

6.3.4. Resolución en la disolución de esferas con diámetro promedio de 168 nm para $\lambda = 820$ nm

La Figura (44) muestra los datos experimentales para la función de ensanchamiento de borde para la disolución de nancesferas con $\phi = 168 \ mm$ iluminada con una longitud de onda $\lambda = 820 \ nm$, la línea continua muestra la función de ajuste a la ecuación (102).

6.3.5. Resumen de resultados para la resolución

En el Cuadro (108) se muestran los resultados para los límites de resolución alcanzada en los sistemas mediante los criterios descritos anteriormente, i.e., Bentzen, Hebden y Sparrow, descritos por las las ecuaciónes (89), (90) y (95) respectivamente [J. R. Taylor, 1997].



Figura 43: Patrón de la función de ensanchamiento de borde para la solución de esferas con diámetro promedio $\phi = 168 \ nm$, con una longitud de onda $\lambda = 632,8 \ nm$. Los resultados del ajuste son: $C_1 = -8412 \pm 77$, $C_2 = 8386 \pm 39$, $\sigma = 8,464 \ mm \pm 0,193 \ mm \ e \ y_0 = 3,380 \pm 0,139$.



Figura 44: Patrón de la función de ensanchamiento de borde para la solución de esferas con diámetro promedio $\phi = 168 \ nm$, con una longitud de onda $\lambda = 820 \ nm$. Los resultados del ajuste son: $C_1 = -8302 \pm 174,6$, $C_2 = 8379 \pm 97$, $\sigma = 0,8089 \ mm \pm 0,0987 \ mm$, e $y_0 = 17,57 \pm 0,0599$.

ϕ [nm]	$\lambda \ [nm]$	$\sigma ~\mathrm{[mm]}$	\mathbf{R}_B	\mathbf{R}_{H}	\mathbf{R}_{S}
429	632,8	$8,\!29\pm0,19$	$19,51 \pm 0,44$	$24{,}28\pm0{,}55$	$16{,}57\pm0{,}37$
429	632,8	$9,\!48\pm0,19$	$22,33 \pm 0,44$	$27,\!79\pm0,\!54$	$18,\!97\pm0,\!37$
429	820	$16,09 \pm 1,96$	$37,89 \pm 4,61$	$47,\!14\pm5,\!73$	$32{,}18\pm3{,}91$
429	820	$11,\!39\pm0,36$	$26,82 \pm 0,85$	$33{,}37\pm1{,}06$	$22,78 \pm 0,72$
429	820	$8,\!87\pm0,32$	$20,88 \pm 0,76$	$25{,}98\pm0{,}95$	$17,73 \pm 0,65$
429	820	$9,\!29\pm0,30$	$21,89 \pm 0,70$	$27{,}23\pm0{,}87$	$18{,}59\pm0{,}59$
168	632,8	$9,94\pm0,20$	$23,42 \pm 0,48$	$29{,}14\pm0{,}59$	$19{,}89\pm0{,}41$
168	632,8	$8,46 \pm 0,19$	$19,93 \pm 0,45$	$24{,}80\pm0{,}57$	$16,93 \pm 0,39$
168	820	$0,81 \pm 0,09$	$1,91 \pm 0,23$	$2,\!37\pm0,\!29$	$1,62 \pm 0,20$
					(108)

(108) En el siguiente capítulo se analizan los resultados mostrados en esta sección.

7. Discusión y Conclusiones

7.1. Parámetros ópticos

Al analizar los datos expuestos en los cuadros (105), (106) y (107) observamos una clara discrepancia entre los resultados teóricos predichos por la teoría de esparcimiento de Mie y aquellos obtenidos mediante la aproximación de difusión. Esto se puede deber a varias razones, entre las que destacan las suposiciones hechas para el cálculo de la densidad de esferas en la disolución, así, habría que considerar el factor de empaquetamiento de estas esferas, esto es, qué tan porosas son estas esferas; así como la parte compleja del índice de refracción del dióxido de silicio. Estas suposiciones comprometen los resultados para la densidad de esferas ρ_{esf} , así como la suposición de que todos los tetraedros de dióxido de silicio formarán esferas.

También entre los resultados de la caracterización óptica obtenidos mediante la aproximación de difusión se observan discrepancias para diferentes espesores, sin embargo, estas son menores que las que se tienen al comparar con los resultados de la teoría de esparcimiento de Mie. Al observar los resultados para la caracterización de las nanoesferas de dióxido de silicio con un diámetro $\phi = 429 \ nm$, iluminadas con $\lambda = 632.8 \ nm$, podemos notar que para los espesores d = 25 mm y d = 50 mm se tienen resultados muy similares, disminuyendo aproximadamente a la mitad el valor del coeficiente de esparcimiento de transporte μ'_s al utilizar el recipiente con espesor $d = 75 \ mm$. La correspondencia entre los valores obtenidos para diferentes espesores es indicativo de que el ajuste a la aproximación de difusión puede ser útil en algunos casos. Al aumentar el espesor del recipiente tenemos que la luz incidiente puede convertirse en luz difusa más facilmente, sin embargo, este aumento de espesor también disminuye la señal detectada y hay que aumentar el tiempo de exposición para tener lecturas menos ruidosas, ya que, como se vio anteriormente el cociente SNR es dependiente directamente del número de fotones detectados. Similarmente, para este tamaño de esferas, encontramos que al utilizar luz infrarroja, $\lambda = 820 \ nm$, los resultados de μ_s' son parcialmente consistentes para los envases con espesores d = 50 mm y d = 75 mm, mientras que son bastante diferentes del envase con espesor $d = 25 \ mm$, esto se puede deber a que para este último caso la luz detectada no es completamente difusa y aún se tiene contribución de la luz incidente.

Para las nancesferas con diámetro $\phi = 168 \ nm$ se observa una disminución en el coeficiente de esparcimiento de transporte con respecto a la que se tenía para las nancesferas más grandes en ambas longitudes de onda. El esparcimiento en este caso es tan poco, que experimentalmente se logra observar el haz de luz atravesando la muestra en el caso del láser rojo (para el envase con $d = 25 \ mm$), mientras que para el infrarrojo se puede detectar la luz incidente atravesando la muestra a través de una tarjeta centelladora diseñada con ese propósito. Aún así, se observa correspondencia en cuanto al orden de magnitud entre los valores obtenidos para los dos recipientes con espesores $d = 50 \ mm$ y $d = 75 \ mm$ cuando utilizamos el láser rojo. Para el láser infrarrojo sólo se puede realizar el ajuste a la aproximación de difusión sobre los resultados obtenidos para el recipiente con espesor d = 75 mm.

Los parámetros ópticos para tejido mamario reportados en la literatura se encuentran en los rangos $\mu'_s = 0.7 - 1.4 \ mm^{-1}$ y $\mu_a = 0.02 - 0.07 \ mm^{-1}$ [H. Key, 1991], [V. G. Peters, 1990]. Para lograr estos coeficientes se puede diluir la muestra que ya se tiene; esto es disminuir la densidad de esparcidores en el material, esto se puede lograr con las muestras que ya se tienen preparadas, diluyéndolas en más alcohol. Para modificar los coeficientes de absorción μ_a , se pueden agregar tintes a nuestra disolución de nanoesferas.

Actualmente se utilizan materiales poco estables y/o reproducibles como estándares ópticos. El desarrollo de una técnica de fabricación de maniquís que pueda ser reproducida a partir de materiales estandarizados, permitirá elaborar un patrón más eficiente que los que actualmente se utilizan. Los reactivos que utilizamos para la fabricación de nuestros materiales, así como el método que seguimos pueden ser implementados en otros laboratorios, y por lo tanto tienen el potencial de ser una herramienta bastante útil para comparar resultados entre diferentes sistemas ópticos.

7.2. Resolución

Se compararon los tres criterios de resolución espacial expuestos en el Cuadro (108). Se encuentra que el criterio de Sparrow da el menor valor posible entre estos tres. La mejor resolución se logra para la disolución de nanoesferas con diámetro promedio $\phi = 168 \ nm$, utilizando luz con longitud de onda $\lambda = 820 \ nm$. Mientras que la peor resolución se da a esta misma longitud de onda cuando se utilizan las nanoesferas con diámetro promedio $\phi = 129 \ nm$. La longitud de onda $\lambda = 820 \ nm$ resulta ser de especial interés debido a que en esta región hay un mínimo de absorción en la sangre y por lo tanto permitiría mayor penetración de la radiación en el tejido, permitiendo obtener imágenes de inclusiones a mayor profundidad en el mismo.

7.3. Trabajo a futuro

La consistencia entre los resultados obtenidos para diferentes espesores puede ser mejorada utilizando pulsos cortos de luz, en el CCADET ya se cuenta con un detector de pulsos cortos que en trabajos futuros será empleado en la caracterización de estos mismos materiales. Así mismo, existen algunos experimentos que nos permitirían conocer el factor de empaquetamiento para las esferas de dióxido de silicio, y así conocer con mayor precisión la densidad de esferas en la disolución; también se deberá considerar esto para trabajos futuros.

El siguiente paso en la medición de la resolución espacial será utilizar máscaras de diferentes materiales y observar el cambio en el límite de resolución conforme se colocan máscaras con menor o mayor contraste con el medio que la que hemos utilizado, esto nos daría mayor certeza sobre la eficacia del procedimiento implementado para medir la resolución a partir de la función de ensanchamiento de borde. Así mismo, sería conveniente repetir los experimentos para la medición de la resolución espacial utilizando pulsos cortos de luz. En la literatura se reportan algunos instrumentos ya desarrollados con aplicaciones clínicas demostradas [D. Grosenick, 2003]. Como trabajo a futuro se pretende mejorar la resolución en dichas técnicas aprovechando los conocimientos adquiridos en la elaboración de este trabajo, así como utilizar los materiales caracterizados como fantomas ópticos de tejido mamario para realizar las primeras pruebas con este sistema.

Referencias

[Gonzalez, 2007]	J. González Carrera, " <i>Caracterización del esparcimien-</i> to de la luz en teflón". Tesis de Licenciatura, Facultad de Ciencias, UNAM, 2007.
[Brandan, 2006]	M. E. Brandan Siques y Y. Villaseñor Navarro, "Detec- ción del Cáncer de Mama: Estado de la Mamografía en México", Cancerología 1, 147-162 (2006).
[Paredes, 1995]	Paredes López Adrián, Agüero Barona Juan. "Sensibil- idad, especificidad y valor predictivo del examen físico y de la mamografía en el diagnóstico preoperatorio de cáncer de mama", Rev. Inst. Nal. Cancerol. Méx, 41 (2) : 89-92 (1995).
[J. C. Hebden, 1995]	Jeremy C. Hebden, David J. Hall, Michael Firbank, and David T. Delpy, "Time-resolved optical imaging of a solid tissue-equivalent phantom" Appl. Opt. 34 , 8038- 8047 (1995).
[M. Firbank, 1993]	M. Firbank and D. T. Delpy, "A design for a stable and reproducible phantom for use in near-infrared imaging and spectroscopy", Phys. Med. Biol. 38 , 847-853 (1993).
[N. C. Bruce, 2009]	Neil C. Bruce, <i>"Mammography using laser light puls-</i> es", Póster de la Semana de la Ciencia y la Innovación. ICyT, DF. 2009.
[A. Ishimaru, 1997]	A. Ishimaru, "Wave Propagation and Scattering in Random Media", IEEE Press, Oxford University Press (1997).
[M. S. Patterson, 1989]	M. S. Patterson, B. Chance and B. C. Wilson, "Time resolved reflectance and transmittance for the non-invasive measurement of tissue optical properties", Appl. Opt. 28, 2331-2336 (1989).
[J. W. Goodman, 1996]	J. W. Goodman, "Introduction to Fourier Optics", Second Edition. McGraw-Hill, Boston (1996).
[J. T. Bushberg, 2002]	J. T. Bushberg, J. A. Seibert, E. M. Leidholdt, J. M. Boone, <i>"The Essential Physics of Medical Imag-ing"</i> , Second Edition, Lippincott Williams & Wilkins, Philadelphia (2002).
[Hamamatsu, 1994]	Hamamatsu Photonics K.K., Electron Tube Cen- ter, " <i>Photomultiplier Tubes</i> ", Cat. No. TPMO0002E01 (1994).

[T. S. Deng, 2009]	Tian-Song Deng, Qi-Feng Zhang, Jun-Yan Zhang, Xin Shen, Kong-Tao Zhu, Jin-Lei Wu, "One-step synthesis of highly monodisperse hybrid silica spheres in aqueous solution", Journal of Colloid and Interface Science 329 , 292-299 (2009).
[S. K. Park, 2002]	Sung Kyoo Park, Ki Do Kim, Hee Taik Kim, "Preparation of silica nanoparticles: determination of the optimal synthesis conditions for small and uniform particles", Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects 197 , 7–17 (2002).
[K. S. Rao, 2005]	Kota Sreenivasa Rao, Khalil El-Hami, Tsutomu Ko- daki, Kazumi Matsushige,Keisuke Makino, "A novel method for synthesis of silica nanoparticles", Journal of Colloid and Interface Science 289 , 125–131 (2005).
[W. Stöber, 1968]	Werner Stöber, Arthur Fink and Ernst Bohn, "Con- trolled growth of monodisperse silica spheres in the mi- cron size range", Journal of Colloid and Interface Sci- ence 26 , 62–69 (1968).
[R. Chang, 1999]	Raymond Chang, " <i>Química</i> ", Sexta Edición, McGraw- Hill Interamericana Editores, México, DF (1999).
[W. Vogel, 1985]	W. Vogel, "Chemistry of Glass", The American Ceramic Society, Columbus, Ohio (1985).
[J. R. Taylor, 1997]	John R. Taylor, "An Introduction to Error Analysis", Second Edition, University Science Books, Sausalito, California (1997).
[S. Prahl, 2007]	Scott Prahl, "Mie Scattering Calculator", http://omlc.ogi.edu/calc/mie_calc.html, Oregon Medical Laser Center (2007).
[V. G. Peters, 1990]	V. G. Peters, D. R. Wyman, M. S. Patterson, and G. L. Frank, "Optical properties of normal and diseased human breast tissues in the visible and near infrared", Phys. Med. Biol. 35 , 1317-1334 (1990).
[H. Key, 1991]	H. Key, E. R. Davies, P. C. Jackson, and P. N. T. Wells, "Optical attenuation characteristics of breast tissues at visible and near-infrared wavelengths", Phys. Med. Biol. 36 , 579-590 (1991).
[D. Grosenick, 2003]	Dirk Grosenick, K. Thomas Moesta, Heidrun Wabnitz, Jörg Mucke, Christian Stroszczynski, Rainer Macdon- ald, Peter M. Schlag, and Herbert Rinneberg, "Time- domain optical mammography: initial clinical results on
detection and characterization of breast tumors", Appl. Opt. 42, 3170-3186 (2003).