



Implementação de Algoritmos para Tomografia de Campo Escuro por Varredura.

André Martins Chagas e Silva, Universidade Estadual de Campinas(UNICAMP)

Orientador: Carlos Sato Baraldi Dias

Laboratório Nacional de Luz Síncrotron (LNLS), CNPEM

14 de outubro de 2020

1 Introdução

A fim de fazer bom uso do progresso nas linhas de luz, como é o caso da linha CARNAÚBA do projeto Sirius [7] e trazer compreensão sobre a recuperação de fase de materiais em técnicas de microscopia como a STXM (*Scanning Transmission X-ray Microscopy*), este projeto têm por ênfase implementar um algoritmo para obtenção de imagens por contraste de absorção e de fase [8]. O algoritmo escolhido envolve primeiramente uma modelagem quanto a interação dos raios-X seguido do ajuste dos dados ao modelo. Neste sentido, além das imagens de amplitude a fase, a abordagem estudada também permite gerar uma imagem relacionada ao resíduo do ajuste.

1.1 *Scanning Transmission X-ray Microscopy (STXM)*

A microscopia STXM é uma técnica de microscopia que se baseia em escanear a amostra com uma iluminação focalizada explorando a absorção dos raios-X como mecanismos de contraste. A imagem se forma quando um feixe de raios-X focalizado [1] varre a amostra, este é absorvido pela amostra, e então o sinal transmitido é detectado [6] como ilustrado na figura 1. Neste caso, podemos observar que a resolução espacial da técnica de STXM é definida como o tamanho do feixe focalizado que ilumina a amostra [3]¹.

1.2 CARNAUBA

A CARNAÚBA (Coherent x-Ray Nanoprobe Beamline) é a linha de luz de varredura por nanoprobe planejada para a nova fonte de luz Síncrotron, projeto SIRIUS, no LNLS (Laboratório Nacional de Luz Síncrotron), Campinas, Brasil. Ela irá operar dentro da faixa de *Tender X-Ray* (2 keV a 15 keV) [7], o que faz com que uma amostra composta por elementos leves tenha pouco contraste por absorção. Logo é de interesse para a linha de luz e sua comunidade de usuários o desenvolvimento de métodos para o imageamento por contraste de fase.

¹Assume-se neste caso que o passo de varredura é adequado ao tamanho de foco

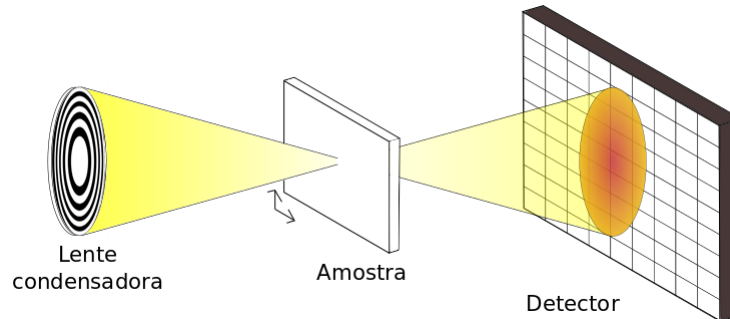


Figura 1: Esquema de um modelo de microscopia por varredura de raios-X, em que a amostra é deslocada em relação ao feixe para analisar os diferentes padrões no detector, obtendo informação para realizar o contraste de fase.

1.3 Difração de Fraunhofer

As características da linha CARNAÚBA permitem que seja adotado um regime de propagação para o feixe transmitido conhecido como regime distante, ou regime de Fraunhofer. Para que este regime esteja presente é necessário que a iluminação seja suficientemente pequena ou que a distância entre amostra/detector seja suficientemente grande numa relação descrita pelo número de Fresnel [4] N_F :

$$N_F = \frac{A^2}{N\lambda} \ll 1 \quad (1)$$

Em que A é o raio da abertura da iluminação, L é a distância entre amostra e detector e λ é o comprimento de onda da luz. Como a CARNAÚBA tem tanto uma distância considerável, de 1 m, quanto uma iluminação pequena, de ≈ 100 nm, para qualquer energia de trabalho da linha a relação é satisfeita.

Nestas condições, a frente de onda que chega no detector é relacionada com aquela no plano focal pela transformada de Fourier [5].

1.4 Tomografia

Quando tratamos de recuperação de fase descrita pelo algoritmo escolhido [8], a recuperação é feita para uma imagem bidimensional de projeção da amostra. Neste sentido faz-se necessário uso da técnica de tomografia, do grego *tomos*, que significa fatia, e *grafo*, que significa escrever. Esta técnica visa reconstruir fatias do volume total processando-se várias projeções obtidas em diferentes ângulos, conforme descrito na literatura [2]. Exemplo de algoritmo para esta técnica é o FBP (*Filtered Back Projection*), que será o método utilizado neste projeto.

2 Metodologia

2.1 Propagação e Detecção

Todos os cálculos são feitos visando o regime distante, que nos garante que o padrão de espalhamento se dá pela transformada de Fourier da função de onda de saída da amostra. Definindo a função de iluminação como $P(\mathbf{r})$ e a função de transmissão da amostra $T(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{1m})$ com o termo de translação devido a varredura, tem-se que a intensidade do padrão de espalhamento se dará pela equação 2:



$$I_{lm}(\mathbf{k}') = |D_{lm}(\mathbf{k}')|^2 = |\mathcal{F}[\psi(\mathbf{r})]|^2 = \left| \frac{1}{2\pi} \int \int P(\mathbf{r})T(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{lm})e^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}} d^2\mathbf{r} \right|^2 \quad (2)$$

$$\mathbf{k}' = \frac{2\pi}{\lambda L} \mathbf{r}' \quad (3)$$

Em que λ é o comprimento da onda de saída, L é a distância entre a amostra e o detector e \mathbf{r}' são as coordenadas no plano do detector.

2.2 Aproximação da Função de Transmissão

Considerando o modelo simplificado da função de transmissão, temos a seguinte equação:

$$T(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{lm}) = a(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{lm})e^{i\phi(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{lm})} \quad (4)$$

Expandindo as funções de absorção e de fase usando a expansão de Taylor de acordo com as aproximações, isto é, para ordem zero na absorção (constante) e primeira ordem em fase (linear), obtemos a seguinte relação para a transmissão da amostra:

$$T(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{lm}) = a_{lm}e^{i\phi(-\mathbf{r}_{lm}) + \mathbf{g}_{lm}\mathbf{r}} \quad (5)$$

Em que $a_{lm} = a(-\mathbf{r}_{lm})$ e $\mathbf{g}_{lm} = \nabla\phi(-\mathbf{r}_{lm})$

2.3 Propagação com Função de Transmissão Aproximada

Utilizando dos resultados das duas seções anteriores, das equações 2 e 5 resulta:

$$I_{lm}(\mathbf{k}') = a_{lm}^2 I_R(\mathbf{k}' - \mathbf{g}_{lm}) \quad (6)$$

Assim, a intensidade medida na presença da amostra se relaciona com a intensidade sem a amostra $I_R(\mathbf{k}')$ por uma translação definida por \mathbf{g}_{lm} e uma queda na intensidade definida por a_{lm}

2.4 Resíduo de Mínimos Quadrados

Com a intensidade medida a partir das aproximações assumidas é possível definir um resíduo entre a intensidade medida no detector com a presença da amostra e a intensidade obtida pelas aproximações, definida pela equação 6, que é dependente da intensidade medida sem a amostra:

$$R_{lm} = \int \int \left| \mathcal{F}^{-1}[I_{lm}(\mathbf{k}')] - a_{lm}^2 \mathcal{F}^{-1}[I_R(\mathbf{k}')e^{i\mathbf{g}_{lm}\mathbf{r}}] \right|^2 d^2\mathbf{r} \quad (7)$$

Obtendo por fim a equação 7, que descreve um resíduo a ser minimizado em termos dos coeficientes a_{lm} referente a absorção e \mathbf{g}_{lm} referente ao gradiente da fase, ou seja, a derivada.

2.5 Reconstrução tomográfica

Para a reconstrução do volume é necessário realizar uma aquisição tomográfica. Isto é feito pela aquisição de projeções para diversos ângulos de rotação da amostra. A aquisição tomográfica foi simulada pela rotação do modelo e o cálculo das projeções como descrito anteriormente. Já a reconstrução foi feita utilizando-se a função *iradon*, a qual é uma implementação do algoritmo de *Filtred Back Projection* na linguagem MatLab®.



O algoritmo que simula o procedimento de aquisição pode ser ilustrado pelo seguinte esquema na figura 2.

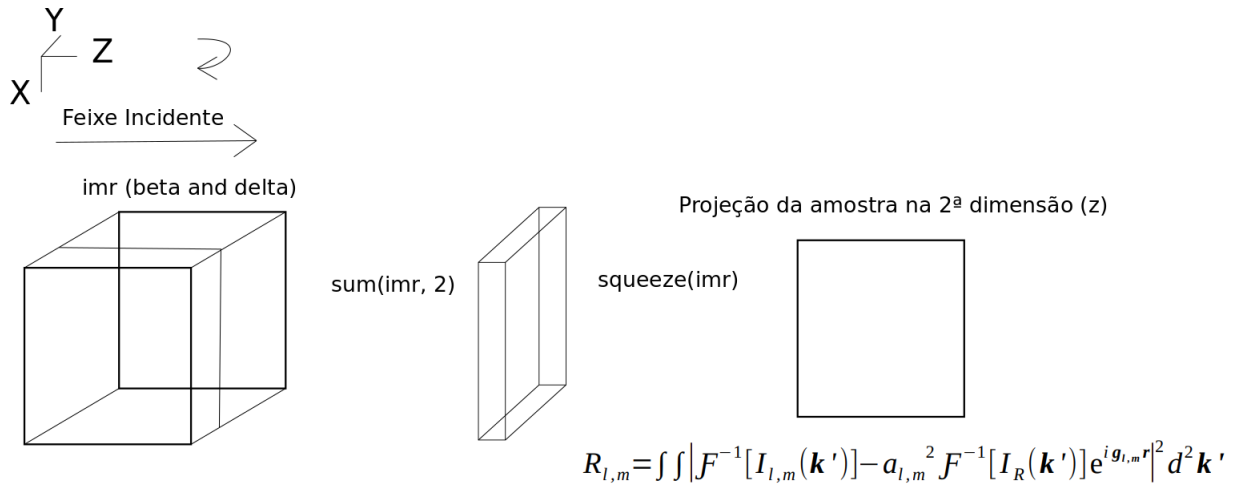


Figura 2: Algoritmo de aquisição dos dados tomográficos

3 Resultados

Com o método descrito na seção 2.5 a reconstrução tomográfica foi feita para o seguinte modelo, que descreve β e δ , coeficientes que representam absorção e fase, respectivamente.

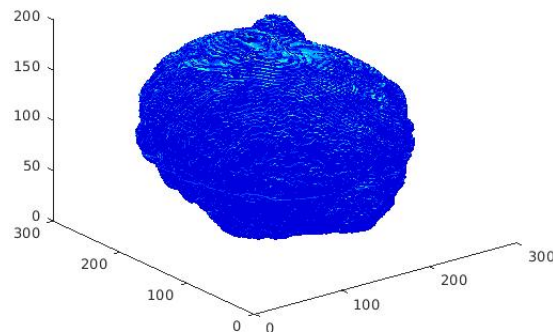


Figura 3: Modelo Levedura

O modelo tridimensional de $276 \times 276 \times 208$ voxels descrito possui voxels de lado igual a $2 \text{ nm} (t)$, com β variando de 0 a $4.0420E - 9$ e δ variando de 0 a $3.4654E - 6$. A iluminação que varre esta amostra é uma iluminação quadrada 5×5 (s_{probe}) normalizada com unidade de pixel igual a unidade da amostra e com energia igual a 12 keV .

Com todas as fatias reconstruídas, um último recurso de visualização foi o de plotar no espaço tridimensional as fatias empilhadas, gerando uma imagem 3D que representa a reconstrução tomográfica, como mostrado na figura 4.

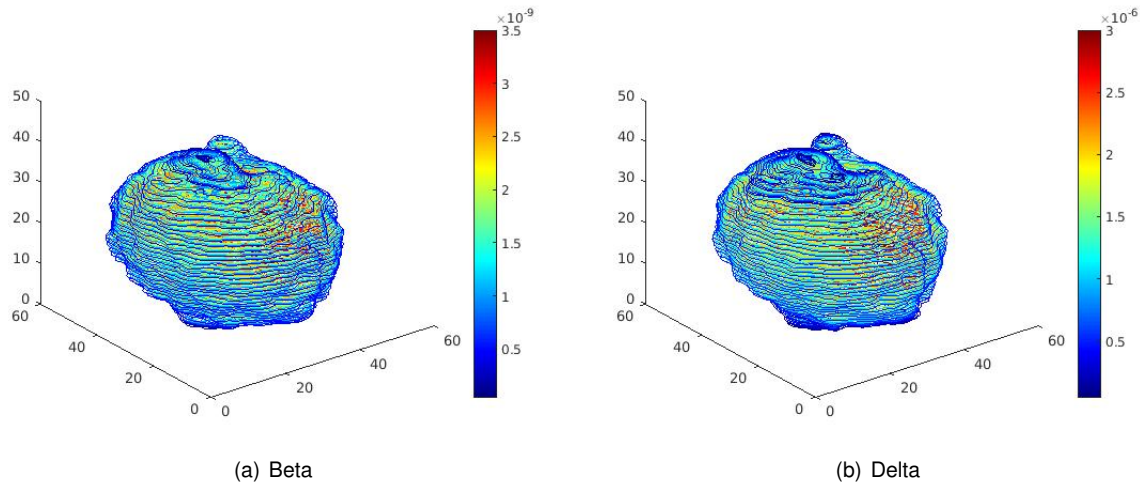


Figura 4: Volume Reconstruído

4 Referências

- [1] Hornberger, B. et al. “Differential phase contrast with a segmented detector in a scanning X-ray microprobe”. Em: *Journal of Synchrotron Radiation* (2008), pp. 355–362. DOI: 10.1107/S0909049508008509.
- [2] Jiang, H. et al. “Quantitative 3D imaging of whole, unstained cells by using X-ray diffraction microscopy”. Em: *PNAS* (2010). DOI: 10.1073/pnas.1000156107.
- [3] Menzel, A. et al. “Hard X-ray scanning transmission microscopy with a 2D pixel array detector”. Em: *Journal of Physics* (2009). DOI: 10.1088/1742-6596/186/1/012054.
- [4] Nussenzveig, H. Moysés. *Curso de Física Básica 4: Ótica, Relatividade, Física Quântica*. 2014.
- [5] Salditt, Tim, Egner, Alexander e Luke, D. Russell. *Nanoscale Photonic Imaging*. Springer, 2020. ISBN: 978-3-030-34413-9.
- [6] Smit, E. et al. “In-situ Scanning Transmission X-ray Microscopy of catalytic materials under reaction conditions”. Em: *Journal of Physics* (2009). DOI: 10.1088/1742-6596/190/1/012161.
- [7] Tolentino, H. et al. “CARNAÚBA: The Coherent X-Ray Nanoprobe Beamline for the Brazilian Synchrotron SI-RIUS/LNLS.” Em: *Journal of Physics* (2016). DOI: 10.1088/1742-6596/849/1/012057.
- [8] Yan, H. et al. “Quantitative x-ray phase imaging at the nanoscale by multilayer Laue lenses.” Em: *Scientific Reports* 3.1307 (2013). DOI: 10.1038/srep01307.

5 Agradecimentos

Agradeço ao CNPq pelo auxílio fornecido por intermédio da bolsa, fomentando o desenvolvimento acadêmico de estudantes das mais diversas áreas. Agradeço à minha família e amigos, pelo suporte e incentivo, à toda equipe e colegas do CNPEM e ao meu orientador, pelo ambiente de aprendizagem propiciado com a didática necessária para conduzir os projetos.