

**Spektroskopische und strukturelle
Untersuchungen gewebeähnlicher Substanzen
mit der gepulsten photothermischen
Radiometrie**

Vom Fachbereich Physik der Universität Hannover
zur Erlangung des Grades

Doktor der Naturwissenschaften
– Dr. rer. nat. –

genehmigte Dissertation

von Dipl. Phys. Christoph Schmitz
geboren am 16. Juli 1968 in Bonn

1998

Referent: Prof. Dr. W. ERTMER
Korreferent: Prof. Dr. A. TÜNNERMANN
Tag der Promotion: 16. Juli 1998

Zusammenfassung

OBGLEICH der medizinische Einsatz des Lasers viele neue Behandlungsmethoden eröffnet hat und in einigen Fällen bereits den Status eines Routineeingriffs erlangen konnte, verlaufen noch viele Anwendungen aus klinischer Sicht unbefriedigend. Grund dafür ist die mangelnde Kontrolle, die der Operateur auf die sehr schnell und oft unterhalb der Geweboberfläche ablaufenden Vorgänge der Licht-Gewebe-Wechselwirkung hat. Aktuelle Bestrebungen zielen daher auf die Entwicklung von Meßmethoden zur Beurteilung des Gewebezustandes im Verlauf der Behandlung. Daraus ergibt sich dann die Möglichkeit der Echtzeit-Überwachung des Behandlungsstatus und einer dosimetrischen Kontrolle der Therapie.

In der vorliegenden Arbeit wurde ein Verfahren untersucht, welches die Bestimmung optischer Gewebeparameter und deren räumlicher Variation zu solchen Zwecken ermöglicht. Diese Methode der *gepulsten photothermischen Radiometrie* (engl. pulsed photothermal radiometry, kurz PPTR) beruht auf dem zeitaufgelösten Nachweis der Wärmestrahlung, die eine zu untersuchende Probe – z. B. Gewebe – infolge der instantanen Aufheizung durch einen kurzen Laserpulses emittiert. Deren zeitlicher Intensitätsverlauf hängt in charakteristischer Weise von der Lichtverteilung und somit den optischen Probeeigenschaften ab. Die besondere Eignung der Methode ergibt sich aus dem berührungslosen Meßverfahren, welches zudem keine spezielle Probenpräparation beansprucht. Da die Messung mit Energiedosen unterhalb der Schädigungsschwelle betrieben werden kann, ergibt sich somit die Möglichkeit eines zerstörungsfreien, nicht invasiven Verfahrens zur Gewebeuntersuchung.

Im Rahmen der Arbeit erfolgte eine eingehende theoretische Beschreibung der Meßsignale, wie sie für verschiedene praxisrelevante Anwendungsfälle zu erwarten sind. Dabei wurden die entsprechenden Gewebeeigenschaften durch idealisierte Geometrien angenähert. Dies schloß die Simulation von Meßsignalen an optisch homogenen Proben und an Schichtstrukturen ein. Dies geschah unter dem kritischen Vergleich verschiedener, zur Beschreibung der Lichtausbreitung in streuenden Medien benutzter Lösungen der Strahlungstransportgleichung. Des weiteren wurde die lateral orts aufgelöste Messung an einer einzelnen Ader modelliert und die Möglichkeit zur Interpretation hinsichtlich deren Lage in umgebenden Gewebe demonstriert.

Diese theoretischen Voraussagen wurden sämtlich mit Messungen an entsprechend

präparierten Modellsubstanzen verglichen. Für den Fall des homogenen Absorbers konnte die Bestimmung der optischen Probeneigenschaften mit Hilfe eines numerischen Auswertungs-Verfahrens demonstriert werden. Im Fall homogener Proben mit nicht vernachlässigbarer Streuung ergab sich die sehr gute Übereinstimmung der theoretischen Vorhersagen mit dem Experiment. Gleiches gilt für Zweischichtproben. Im Fall der Realisierung eines *in vitro*-Adermodells konnten die theoretischen Ergebnisse ebenfalls quantitativ bestätigt werden. Des Weiteren wurde der photothermische Nachweis einer Flüssigkeitsströmung in einer aderähnlichen Struktur demonstriert.

Schlagwörter: photothermische Radiometrie; Gewebeoptik; on-line-Dosimetrie

Abstract

ALTHOUGH the medical use of lasers has led to a vast variety of new therapeutic approaches, many of these applications still are unsatisfactory from a clinical point of view. This is mainly caused by difficult to control laser-tissue interactions, which occur on a very short time scale beneath the tissue surface. These interactions are, in general, dependent on tissue optical properties. Therefore, it is of great interest to determine and monitor the optical properties and their changes directly during treatment. Successful monitoring would allow to control dosimetry and hence improved therapy.

In this thesis, a method for determining optical parameters and their spatial variation in tissue-like media was tested. This method, called pulsed photothermal radiometry (PPTR), is based upon the time-resolved detection of the IR thermal radiation that is emitted by a sample as a consequence of instantaneously heating it with a short laser pulse. The temporal shape of this signal strongly depends on the light distribution and hence the optical properties of the target. This is a non contact method which allows the investigation of bulk materials without any sample preparation. Using pulse energies below the threshold of thermal tissue damage yields a non destructive inspection technique. This makes the method suitable for non invasive in vivo investigations and therefore very promising for online tissue spectroscopy and dosimetry.

One subject of the thesis was the theoretical modelling of PPTR signals for various optical properties of both homogenous and inhomogenous samples. For this purpose, some interesting morphologies were modeled by idealized geometries. For homogenous absorbing media the analytical description of light distribution was implemented into a nonlinear fitting algorithm. In the case of additional scattering, Monte Carlo simulations were used for signal modeling. Furthermore, various diffusion calculations were tested to obtain a useful analytical treatment. The influence of spatial variations of the optical properties on the signal were simulated to evaluate the ability of localizing morphological substructures. This also included investigations of one-dimensional, layered geometries and blood capillary-like structures.

All theoretical treatments of PPTR signals were compared to experimental data obtained from tissue phantoms with well defined physical properties. In the case of pure absorbing samples the absorption coefficient could be determined by applying a nonlinear fitting algorithm. For additional scattering the simulated signals agreed well with

the measurements. For inhomogenous media the determination of layer thickness was shown. Using an in vitro model of a blood capillary, an IR thermal imaging technique was investigated to yield size, depth, and lateral position of the capillary. The obtained signals have been shown to be in a well agreement with calculations. Moreover this, PPTR was used to detect absorber flow inside the capillary.

Keywords: photothermal radiometry; tissue optics; on-line-dosimetry

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Lichttransport in absorbierenden und streuenden Medien	7
2.1	Elektrodynamische Beschreibung	8
2.1.1	Lichtausbreitung in Materie	8
2.1.2	MIE-Theorie	9
2.2	Strahlungstransporttheorie	13
2.2.1	Strahlungsmeßtechnische Größen	13
2.2.2	Die Strahlungstransportgleichung	16
2.3	Diffuse Lichtausbreitung	18
2.3.1	Diffusionsgleichung	19
2.3.2	Randbedingungen	21
2.3.3	Gültigkeit der Diffusionsnäherung	23
2.3.4	Lösungen	23
3	Wärmetransport in biologischem Gewebe	27
3.1	Thermische Wirkung von Licht auf Gewebe	28
3.2	Energietransport durch Wärmeleitung	30
3.2.1	Die Wärmeleitungsgleichungen	31
3.2.2	Lösungen der Wärmediffusionsgleichung	32
3.2.3	Behandlung der Randbedingungen	34
3.3	Energietransport durch Wärmestrahlung	36
3.4	Wärmeübertrag durch Materialtransport	38
4	Photothermische Radiometrie	41
4.1	Entstehung des photothermischen Signals	43
4.2	Eindimensionale Behandlung homogener Proben	50
4.2.1	Reine Absorption	51
4.2.2	Absorption und Streuung	54
4.3	Eindimensionale Schichtproben	57
4.4	Mehrdimensionale Strukturen	61

5	Experimentelle Realisierung	67
5.1	Detektion infraroter Wärmestrahlung	67
5.1.1	Infrarotdetektoren	68
5.1.2	Kenngößen zur Beschreibung der Detektoren	70
5.1.3	Meßtechnische Signalaufbereitung	74
5.2	Aufbau des Experimentes	77
5.2.1	Bestrahlungsquelle	78
5.2.2	Detektionsoptik	79
5.3	Gewebephantome	80
5.3.1	Präparation von Modellsubstanzen	81
5.3.2	Modellierung optischer Eigenschaften	82
5.3.3	<i>In vitro</i> -Modell eines Blutgefäßes	84
6	Experimentelle Ergebnisse	89
6.1	Bestimmung optischer Eigenschaften homogener Proben	90
6.1.1	Absorptionsmessungen	90
6.1.2	Messung der Lichtstreuung	94
6.2	Untersuchung geschichteter Systeme	98
6.3	Messungen am <i>in vitro</i> -Modell eines Blutgefäßes	101
6.3.1	Lokalisierung einer Kapillare	101
6.3.2	Durchflußmessungen	104
7	Bewertung und Ausblick	107
A	Liste der verwandten Symbole	117
B	GREENSche Funktionen in der Wärmediffusionsgleichung	121
C	Randbedingungen der Diffusionsgleichung	123
D	Darstellung der Signale mittels der Errorfunktion	125
D.1	Eigenschaften der Errorfunktion	125
D.2	Lösung im Fall des homogenen Absorbers	126
D.3	Lösung im Fall homogenen absorbierender Schichten	127
E	Liste der Veröffentlichungen	129
F	Lebenslauf und Bildungsweg	131

Kapitel 1

Einleitung

DIE biologische Wirkung elektromagnetischer Strahlung des infraroten (IR) bis ultravioletten (UV) Spektralbereiches, z. B. in der Photosynthese oder der Vitamin D-Produktion, ist seit langem bekannt. Ebenso weiß man schon lange von der gewebschädigenden Wirkung, die von intensivem UV-Licht ausgehen kann. Beispiele sind der Sonnenbrand und die Schneeblindheit als Folgen zu intensiver UV-Bestrahlung oder die Häufung von Katarakt-Erkrankungen („grauer Star“) bei Glasbläsern aufgrund starker UV- und IR-Strahlung.

Daher gab es schon früh Versuche, die physiologischen Auswirkungen der Lichtenergie zu therapeutischen Zwecken zu nutzen. Bereits zur Jahrhundertwende beschrieb RAAB [Tap 00] die photochemische Aktivierung eines Medikamentes im Sonnenlicht. Eine frühe Anwendung der thermischen Wirkung des Lichtes gelang MEYER-SCHWICKERATH [Mey 88], indem er die Sonnenstrahlung auf die Netzhaut seiner Patienten fokussierte. Durch die Erzeugung kleinster Brandnarben konnte er somit eine fortschreitende Netzhautablösung aufhalten.

Ein weites Spektrum klinischer Anwendung hat sich jedoch erst mit der Entwicklung des Lasers eröffnet. Mit diesem stand erstmals eine Strahlquelle hoher spektraler Leistungsdichte und räumlicher Kohärenz zur Verfügung. Diese Eigenschaften in Verbindung mit der Fähigkeit zur Erzeugung kurzer Pulse hoher Spitzenintensität erst boten die Möglichkeit zu einer Vielzahl von Mechanismen der Gewebearbeitung.

Der therapeutische Einsatz des Lasers nutzt meist die lokale Aufheizung biologischen Gewebes aufgrund der Umsetzung elektromagnetischer Energie in Wärme infolge Strahlungsabsorption. Die hierbei auftretende gewebschädigende Wirkung durch Verdampfen des Wasseranteils oder irreversibler Änderungen von Eiweißstrukturen wird genutzt, um krankhaftes Gewebe zu zerstören oder zu entfernen. Dabei erschließen sich durch die Wahl der Wellenlänge, der Betrachtungsdauer und der Intensität eine Vielzahl von Bearbeitungsmechanismen. Diese reichen von der Denaturierung der Eiweiße (*Koagulation*) über das Verdampfen und Verkohlen (*Vaporisation, Karbonisierung*) bis

hin zum explosionsartigen Abtrag (*Photoablation*) von Gewebe. Dabei variieren die Wechselwirkungszeiten im Bereich von $(1 \dots 10^{-8})$ s, die Flächenenergiedichte liegt bei $(10^{-1} \dots 10^3)$ Jcm⁻².

Die Motivation des therapeutischen Laserseinsatzes liegt oft in dem Wunsch nach einer schonenden und präzisen Gewebearbeitung. Dabei gestattet die gute Fokussierbarkeit der Strahlungsenergie eine hervorragende Lokalisierung des Behandlungsareals. Weiterhin läßt sich die starke Variation der optischen Eindringtiefe in Abhängigkeit von der Wellenlänge zur Festlegung des Wechselwirkungs-Volumens ausnutzen. Eine weitere herausragende Eigenschaft der Lasertherapie besteht in der Möglichkeit einer selektiven Gewebeschädigung. Dazu nutzt man Kontraste im Absorptionsverhalten verschiedener Gewebearten, die auf die spezifische Knüpfung einer Vielzahl von Chromophoren an bestimmte Organ- und Gewebefunktionen zurückzuführen sind. Somit läßt sich durch die Wahl einer geeigneten Behandlungswellenlänge die Deponierung der Strahlungsenergie auf ein bestimmtes pathologisches Zielgewebe einschränken.

Jedoch birgt der therapeutische Lasereinsatz auch Risiken im Vergleich zu klassischen Behandlungsmethoden. Die Schädigungsmechanismen laufen meist auf sehr kurzen Zeitskalen ab (unterhalb von ms), die eine Beobachtung der Entwicklung des Schädigungsgrades und die Reaktion darauf seitens des Operateurs verhindern. Auch entziehen sich viele Vorgänge ganz dessen Blickfeld, da sie unterhalb der Gewebeoberfläche oder verdeckt durch Abtragungsprodukte von statten gehen. Schließlich fehlt das taktile Vermögen, welches dem Chirurg im Fall konventioneller Operationstechniken eine Kontrolle über die Behandlung gibt. Somit mangelt es an objektiven Kriterien, welche die Beurteilung des Schädigungsgrades während des Eingriffs gestatten. Dies verhindert die Anpassung der Bestrahlungsparameter in Abhängigkeit vom Behandlungsstatus, so daß die Gefahr einer Fehldosierung besteht.

Um dieses Risiko zu minimieren und einen bestmöglichen Behandlungserfolg zu sichern, bedient man sich experimenteller und theoretischer Untersuchungen zur Laser-Gewebe-Wechselwirkung. Solche Betrachtungen zur biologischen Wirksamkeit der eingebrachten Strahlungsenergie in Abhängigkeit deren Dosis, zeitlichen und räumlichen Verlaufes werden allgemein als *Dosimetrie* bezeichnet.

Dies beinhaltet die Beurteilung der physikalischen Wirkung der in das Gewebe eingebrachten Lichtenergie. Unter Kenntnis daraus resultierender biologischer und chemischer Änderungen lassen sich Schädigungspotentiale und somit dosimetrische Kenngrößen ableiten. Da es sich bei den meisten Gewebearten um inhomogene Medien in bezug auf ihre optischen Eigenschaften handelt, muß zum anderen der Einfluß des Gewebes auf die Lichtausbreitung betrachtet werden. Dieser – oft als Gewebeoptik bezeichnete – Wissenschaftszweig untersucht die räumliche Verteilung der deponierten Lichtenergie im Gewebe in Abhängigkeit der vorliegenden optischen Eigenschaften. Die experimentelle Bestimmung dieser Größen ist Gegenstand der *Gewebespektroskopie* und kann nur

mithilfe von *a priori* Annahmen über die Lichtausbreitung erfolgen. Hier besteht der Wunsch nach nicht invasiven *in vivo*-Meßverfahren, um einen möglichst geringen, die Ergebnisse verfälschenden, Einfluß auf des zu vermessende Gewebe auszuüben.

Trotz entsprechender dosimetrischer Untersuchungen im Vorfeld einer Anwendung lassen sich Unsicherheiten einer Laserbehandlung nicht ausschließen. Dies liegt einerseits daran, daß dem Arzt ein gewisser Spielraum bei der Wahl der Behandlungsparameter, z. B. der Bestrahlungsdauer, bleiben muß. Vor allem jedoch gibt es selbst bei gleichen Krankheitsbildern individuell schwankende Ausprägungen. Somit kann ein allgemeingültig optimaler Satz an Behandlungsparametern oft nicht angegeben werden. Aus diesem Grund beruht die Behandlungssteuerung durch den Arzt für viele Anwendungen auf Erfahrungswerten. Häufig wird auch die richtige Bestrahlungsdosis durch Ausprobieren geringer Dosen und deren langsame Steigerung ermittelt. Diese Unsicherheit in der Anwendung stellt ein Behandlungsrisiko dar. Auch bleiben die erzielten Resultate oft hinter den Möglichkeiten einer Lasertherapie zurück, da deren Potential nicht ausgeschöpft wird.

Einen Ansatz zur technischen Lösung der genannten Probleme stellt die *Echtzeit-Dosimetrie* und eine damit betriebene *Echtzeit-Behandlungskontrolle* dar. Das Prinzip der Echtzeit-Dosimetrie besteht in der Charakterisierung optischer und physiologischer Eigenschaften des zu behandelnden Gewebes unmittelbar vor und während der Behandlung und einer darauf basierenden Entwicklung optimierter Bestrahlungsmodalitäten. Die Echtzeit-Behandlungskontrolle schafft einen rückkoppelnden Mechanismus, welcher diese zur Regelung des Lasers nutzt. Somit ergibt sich ein automatisiertes Bestrahlungssystem, welches im Idealfall pathologisches Gewebe selbsttätig ortet und eine Behandlung mit optimierten Parametern durchführt. In diesem Zusammenhang spricht man vom oft vom „intelligenten“ Laser.

Die Wahl der Bestrahlungsparameter hängt wesentlich von den optischen Eigenschaften einer Läsion und deren räumlicher Ausdehnung ab. Somit sind dies die wichtigsten Zielgrößen für dosimetrische Messungen. Dies motiviert den Einsatz optischer Diagnoseverfahren zur Gewebecharakterisierung mit dem Ziel einer Echtzeit-Dosimetrie.

Im Rahmen der vorliegenden Arbeit wurde eine Meßmethode untersucht, welche sich in besonderer Weise zur Realisierung einer Echtzeit-Behandlungskontrolle oberflächennaher Anwendungen eignet. Sie basiert auf der zeitaufgelösten Messung der von der Gewebeoberfläche emittierten Wärmestrahlung nach Einstrahlung eines Laserpulses. Diese Methode der *gepulsten photothermischen Radiometrie* (engl. pulsed photothermal radiometrie, kurz PPTR) ist aus folgenden Gründen sehr attraktiv für dosimetrische Messungen:

- Die Methode arbeitet berührungsfrei und daher sehr flexibel.

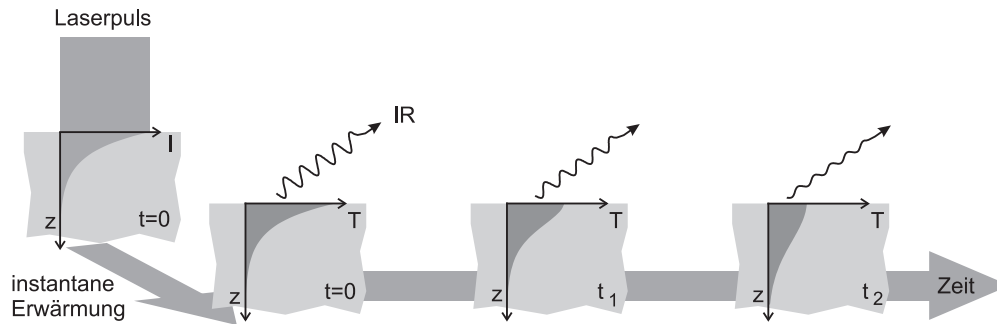


Abbildung 1.1: Skizze zum Meßprinzip der gepulsten photothermischen Radiometrie. z : Proben­tiefe; I : Lichtintensität; T : Temperatur; t : Zeit ($0 < t_1 < t_2$); IR: von der Probenoberfläche emittierte Wärmestrahlung

- In vielen Fällen kann der Behandlungslaser als Strahlquelle für die Diagnose eingesetzt werden.
- Die Messung kann mit Strahlungs­dosen unterhalb der Zerstörschwelle erfolgen.

Das Prinzip einer PPTR-Messung an einem homogenen Medium ist in Abb. 1.1 dargestellt. Ein auf die Probe auftreffender Laserpuls führt zu einer instantanen Erwärmung des bestrahlten Volumens. Dabei ist die räumliche Temperaturverteilung proportional dem Profil der deponierten Lichtenergie und wird somit durch die optischen Eigenschaften der Probe bestimmt. In der Folge führt Wärmediffusion zu einem Temperaturausgleich in der Probe und somit zu einer raumzeitlichen Temperaturänderung, die durch die Form der Anfangstemperaturverteilung bestimmt wird. Dies kann als zeitliche Änderung der Oberflächentemperatur über die Messung der von dort emittierten Wärmestrahlung registriert werden.

Da dieses Signal in charakteristischer Weise von der Lichtverteilung im Gewebe abhängt, eröffnet sich die Möglichkeit einer Bestimmung der optischen Eigenschaften und deren räumlicher Variation. Dies kann zur *in vivo*-Gewebespektroskopie und der Lokalisierung optischer Inhomogenitäten genutzt werden. Somit ist mit dieser Methode die Möglichkeit der Charakterisierung des bestrahlten Gewebes hinsichtlich einer Dosimetrie gegeben.

Vorraussetzung für die Interpretation der Messungen ist die theoretische Formulierung der Signalentstehung. Diese umfaßt folgende Schritte:

- Die Beschreibung der Lichtausbreitung im Gewebe in Abhängigkeit von dessen optischen Eigenschaften.
- Die Behandlung der Umsetzung von Licht- in Wärmeenergie und daraufhin einsetzender Wärmediffusionsprozesse.

- Die Beschreibung des Einflusses auf den zeitlichen Verlauf der von der Oberfläche emittierten Wärmestrahlung.

Diese Vorgehensweise findet sich in der Struktur der vorliegenden Arbeit wieder.

Kapitel 2 behandelt Möglichkeiten der Beschreibung des Lichttransportes in biologischem Gewebe. Dieses stellt sich i. a. als stark lichtstreuendes Medium dar, so daß der Behandlung dieses Einflusses auf die Lichtausbreitung eine besondere Bedeutung zukommt. Zuerst erfolgt eine Zusammenfassung der wichtigsten Ergebnisse der Ausbreitung elektromagnetischer Wellen in Materie. Es zeigt sich jedoch, daß dies keine geeignete Behandlung des Problems darstellt und stattdessen die Beschreibung in Form einer Transporttheorie im Teilchenbild zu bevorzugen ist. Für diese werden verschiedene Lösungsmöglichkeiten diskutiert und hinsichtlich ihrer Eigenschaften verglichen.

In Kapitel 3 werden zuerst grundlegende Betrachtungen zu den thermischen Eigenschaften biologischen Gewebes gemacht. Im Anschluß daran werden die verschiedenen Mechanismen des Wärmetransportes behandelt. Dies geschieht hinsichtlich der Eigenheiten biologischen Gewebes. Besondere Beachtung wird dabei der Formulierung und Lösung der Wärmediffusionsgleichung geschenkt, weil die Wärmediffusion einen wichtigen Einfluß auf die Entstehung des PPTR-Signals nimmt.

In Kapitel 4 werden schließlich die vorangegangenen Ergebnisse genutzt, um den Verlauf des photothermischen Signals in Abhängigkeit verschiedener physikalischer Gewebeeigenschaften herzuleiten. Dabei werden Signalformen für verschiedene praxisrelevante Probleme entwickelt und hinsichtlich einer Auswertung beurteilt.

Kapitel 5 behandelt die Realisierung der im Rahmen der Arbeit durchgeführten Experimente. Dies umfaßt die Beschreibung des verwandten Detektionssystems, der verwandten Strahlquelle und der Modellsubstanzen, die im Rahmen der Arbeit untersucht wurden.

In Kapitel 6 werden die Ergebnisse der durchgeführten Experimente präsentiert. Dabei werden sämtliche vorher theoretisch beschriebenen Probengeometrien realisiert, so daß ein Vergleich von Theorie und Experiment ermöglicht wird.

Kapitel 7 enthält die Bewertung der in dieser Arbeit erlangten Ergebnisse und gibt einen Ausblick auf zukünftige Anwendungen.

Kapitel 2

Lichttransport in absorbierenden und streuenden Medien

DIE in der vorliegenden Arbeit untersuchte Diagnosemethode nutzt den Einfluß biologischen Gewebes auf die Lichtausbreitung zur Gewinnung physiologischer Informationen. Die theoretische Behandlung der Meßsignale und damit ihre Auswertung erschließt sich daher erst durch die quantitative Beschreibung der Lichtverteilung in Abhängigkeit von den optischen Eigenschaften der untersuchten Medien.

Neben der Absorption durch eine Vielzahl von Chromophoren zeigt sich in biologischem Gewebe eine im allgemeinen durch Vielfachstreuung dominierte Lichtausbreitung. Dies ist auf die Vielzahl optischer Grenzflächen auf zellulärer und subzellulärer Ebene zurückzuführen. Aus diesem Grund behandelt die Gewebeoptik Modelle des Lichttransport in absorbierenden und streuenden Medien.

In diesem Kapitel werden zuerst einige Ergebnisse der Elektrodynamik in dielektrischen Medien dargestellt und deren Anwendung auf die elementare Beschreibung optischer Streuvorgänge im Rahmen der MIE-Theorie umrissen.

Im Anschluß werden wichtige radiometrische Größen eingeführt und die Quantifizierung optischer Eigenschaften absorbierender und streuender Medien mittels makroskopischer Parameter behandelt. Auf diesen Grundlagen wird dann die Strahlungstransportgleichung hergeleitet.

Abschließend wird eingehend die Möglichkeit einer Näherung der Strahlungstransportgleichung in Form einer Diffusionsgleichung für Licht behandelt. In diesem Zusammenhang wird der Gültigkeitsbereich dieser Näherung diskutiert. Weiterhin werden verschiedene analytische Lösungen zur Beschreibung der Lichtausbreitung auf Grundlage der Diffusionsgleichung vergleichend dargelegt.

2.1 Elektrodynamische Beschreibung

Viele im Rahmen der Arbeit betrachtete physikalische Zusammenhänge betreffen Phänomene der Erzeugung und Ausbreitung elektromagnetischer Strahlung. Seitens der Bestrahlungsquellen liegt diese im sichtbaren und nahinfraroten Wellenlängenbereich ($\sim 400 \dots 1200 \text{ nm}$), die Bestimmung der Zielgrößen erfolgt durch die Messung mittel- bis ferninfraroter Wärmestrahlung ($\sim 7 \dots 16 \mu\text{m}$).

In diesem Abschnitt werden einige aus der elektromagnetischen Beschreibung der Lichtausbreitung in Materie folgende Zusammenhänge dargelegt. Diese liefern grundsätzliche Ergebnisse für das Verhalten von Licht an optischen Grenzflächen. Neben den Brechungs- und Reflexionsgesetzen sind dies auch elementare Beschreibungen der Streuung ebener Wellen an dielektrischen Partikeln. Obwohl – wie in 2.2 dargelegt werden wird – die Behandlung der Lichtausbreitung im Gewebe in dieser allgemeinen Theorie nicht möglich ist, basieren die Modelle der Gewebeoptik letztlich auf den Erkenntnissen fundamentaler elektrodynamischer Betrachtungen.

Die Beschreibung der elektrodynamischen Grundlagen in diesem Abschnitt folgt [Nol 90], die Behandlung der Lichtstreuung entspricht dem Formalismus in [Hul 57]

2.1.1 Lichtausbreitung in Materie

Im folgenden wird ein *homogenes isotropes Dielektrikum* betrachtet. Es gilt

$$\rho_{\text{frei}} = 0; \quad j_{\text{frei}} = 0; \quad \sigma = 0 \quad (2.1)$$

mit der Dichte freier Ladungsträger ρ_{frei} , der freien Stromdichte j_{frei} und der Leitfähigkeit σ . Die Modifikation der elektromagnetischen Felder durch die Polarisierbarkeit und Magnetisierung der Materie wird durch die Materialgleichungen

$$\mathbf{B} = \mu_r \mu_0 \mathbf{H} \quad \mathbf{D} = \epsilon_r \epsilon_0 \mathbf{E} \quad (2.2)$$

beschrieben. Hierbei bezeichnet \mathbf{B} die magnetische Induktion, \mathbf{H} das Magnetfeld, \mathbf{D} die dielektrische Verschiebung und \mathbf{E} das elektrische Feld. Die Verknüpfung der magnetischen Größen erfolgt mittels der magnetischen Feldkonstanten (μ_0) und der relativen Permeabilität (μ_r), wovon letztere in guter Näherung für die meisten Medien gleich Eins gesetzt werden kann. Die elektrischen Größen hängen über die elektrische Feldkonstante (ϵ_0) und die relative (ϵ_r) Dielektrizitätszahl zusammen.

Die MAXWELL-Gleichungen lauten somit:

$$\nabla \mathbf{E} = 0; \quad \nabla \mathbf{B} = 0, \quad (2.3)$$

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\dot{\mathbf{B}}; \quad \nabla \times \mathbf{B} = \epsilon_r \epsilon_0 \mu_0 \dot{\mathbf{E}}. \quad (2.4)$$

Dieses System linearer, partieller, homogener Differentialgleichungen erster Ordnung für die Felder \mathbf{E} und \mathbf{B} läßt sich exakt entkoppeln und führt auf die *homogene Wellengleichung*, die für alle Komponenten der Felder gilt

$$\Delta\Psi(\mathbf{r},t) - \frac{1}{u^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \Psi(\mathbf{r},t) = 0. \quad (2.5)$$

mit einer skalaren Funktion $\Psi(\mathbf{r},t)$. Dabei wurde die Konstante

$$u = \frac{1}{\sqrt{\epsilon_r \epsilon_0 \mu_0}} = \frac{c}{\sqrt{\epsilon_r}} = \frac{c}{n} \quad (2.6)$$

eingeführt. Sie entspricht der Ausbreitungsgeschwindigkeit der Welle im Medium und ist gegenüber der Vakuum-Lichtgeschwindigkeit c um den Faktor n , den Brechungsindex, verringert. In den Größen u bzw. n manifestiert sich unmittelbar die Wechselwirkung elektromagnetischer Strahlung mit Materie.

Eine spezielle Lösung von (2.5) wird durch ebene Wellen gebildet, deren Ausbreitungsrichtung o. B. d. A. entlang der z -Achse in kartesischen Koordinaten liegen soll

$$\begin{aligned} \mathbf{E} &= (E_x \mathbf{e}_x + E_y \mathbf{e}_y) e^{i(kz - \omega t)} \\ \mathbf{B} &= \frac{1}{u} (E_y \mathbf{e}_x + E_x \mathbf{e}_y) e^{i(kz - \omega t)}. \end{aligned} \quad (2.7)$$

Mit der Wellenzahl $k = 2\pi/\lambda$, der Wellenlänge λ und der Kreisfrequenz ω . Man kann bekanntermaßen zeigen, daß für elektromagnetische Wellen der \mathbf{E} -Feldvektor senkrecht auf dem \mathbf{B} -Feldvektor und beide senkrecht zur Ausbreitungsrichtung stehen, so daß es sich um transversale Wellen handelt. Sie sind durch Kenntnis des \mathbf{E} -Feldes (oder des \mathbf{B} -Feldes) und des Wellenvektors bestimmt. Entsprechend der Orientierung des \mathbf{E} -Feldvektors der Welle definiert man ihren *Polarisationszustand*.

Im Rahmen der Arbeit ist die Betrachtung der durch Strahlung transportierten Energie bzw. Leistung von großer Bedeutung. In der elektromagnetischen Beschreibung ergeben sich die Energieflußdichte $\mathbf{S}(\mathbf{r},t)$ (POYNTING-Vektor) und die Energiedichte $w(\mathbf{r},t)$ zu

$$\begin{aligned} \mathbf{S}(\mathbf{r},t) &= \mathbf{E}(\mathbf{r},t) \times \mathbf{H}(\mathbf{r},t) \\ w(\mathbf{r},t) &= \frac{1}{2} \epsilon_r \epsilon_0 \mathbf{E}^2(\mathbf{r},t) - \frac{1}{2} \mu_0 \mathbf{H}^2(\mathbf{r},t) \end{aligned} \quad (2.8)$$

Diese erfüllen die POYNTINGSche Beziehung, welche die Erhaltung der Energie darstellt

$$\frac{\partial w}{\partial t} + \nabla \mathbf{S} = 0 \quad (2.9)$$

2.1.2 MIE-Theorie

Bislang wurden homogene Medien behandelt. Oft müssen jedoch auch optisch inhomogene Systeme, d. h. Übergänge zwischen verschiedenen Dielektrika behandelt werden.

Solche optische Inhomogenitäten auf mikroskopischer Ebene stellen meist den dominierenden Einfluß auf die Lichtausbreitung im Gewebe dar, verglichen mit anderen Konsequenzen, die sich durch die Anwesenheit von Materie ergeben, wie z. B. Absorption, inelastische Streuung oder nichtlineare Effekte. In der Tat wird sich aufgrund dieser Vielzahl von Grenzschichten und ihrer komplexen Geometrie die Behandlung der Lichtausbreitung in Gewebe mit Hilfe des bisher besprochenen Formalismus als unmöglich erweisen (s. Abschn. 2.2).

Ungeachtet dessen soll auf die Behandlung der Randbedingungen für elektromagnetische Felder an optischen Grenzschichten eingegangen werden. Dies führt auf der einen Seite zu fundamentalen Erkenntnissen, die auch in der Modellbildung und Lösung der Strahlungstransportgleichung Anwendung finden. Zum anderen lassen sich, wie im Fall der MIE-Theorie, idealisierte Bedingungen beschreiben, die bei entsprechender experimenteller Realisierung auch praktische Relevanz erlangen.

Um das Verhalten elektromagnetischer Wellen an optischen Inhomogenitäten beschreiben zu können, müssen die sich dort ergebenden Randbedingungen diskutiert werden. Dazu werden die Tangential- und Normalkomponenten der Felder beim Übergang zwischen ungeladenen Isolatoren (Indizes 1,2) betrachtet. Aus (2.3) ergibt sich für die Normalkomponenten

$$\hat{n} \cdot (\mathbf{D}_2 - \mathbf{D}_1) = 0; \quad \hat{n} \cdot (\mathbf{B}_2 - \mathbf{B}_1) = 0, \quad (2.10)$$

für die Tangentialkomponenten folgt aus (2.4)

$$\hat{n} \times (\mathbf{E}_2 - \mathbf{E}_1) = 0; \quad \hat{n} \times (\mathbf{H}_2 - \mathbf{H}_1) = 0. \quad (2.11)$$

Mit diesen Stetigkeitsforderungen lassen sich z. B. das Reflexionsgesetz, das Brechungsgesetz (SNELLIUS) und die FRESNEL-Formeln herleiten.

Auch die Phänomene der *Lichtstreuung*, wie sie im Rahmen der Gewebeoptik von größter Bedeutung sind, lassen sich prinzipiell mit Hilfe der Gleichungen (2.5), (2.10), (2.11) behandeln. Analytische Lösungen können jedoch nur in wenigen Spezialfällen angegeben werden.

Der wichtigste Fall ist die Streuung einer ebenen Welle an einer dielektrischen Kugel (Radius a , Brechungsindex n_1) in einem umgebenden Dielektrikum (Brechungsindex n_2). Dieses Problem wurde von MIE [Mie 08] gelöst und findet beispielsweise Anwendung in der Beschreibung der Lichtstreuung an Aerosolen, Gasblasen in Flüssigkeiten.

In der Gewebeoptik dient die MIE-Theorie der Entwicklung von Streustandards und optischen Gewebemodellen. Dazu bringt man sphärische Streukörper bekannter physikalischer Eigenschaften (meist Glas oder Polystyrol) in eine flüssige oder feste Umgebung ein und schafft somit die Möglichkeit der theoretischen Beschreibung. Anhand dieser idealisierten Proben (auch als Gewebephantome bezeichnet) lassen sich dann Lichtausbreitungsmodelle sowie experimentelle Methoden untersuchen.

Im Rahmen der vorliegenden Arbeit wird eine Fettemulsion, deren Streueigenschaften mit Hilfe der MIE-Theorie berechnet werden können, zur Darstellung definierter Streueigenschaften für die Verifizierung der Signaltheorie benutzt. Daher sollen im folgenden die Grundzüge dieser theoretischen Beschreibung dargelegt werden.

Der wesentliche Schritt zur Behandlung der Streuung einer ebenen Welle an einer Kugel ist die Darstellung der beteiligten Felder mittels Kugelfunktionen. Diese Teilwellen sind im einzelnen die

- einlaufende Welle,
- auslaufende (gestreute) Welle,
- Welle im Inneren der Kugel.

Sie können mittels folgender Lösungen der Wellengleichung (2.5) dargestellt werden [Hul 57]

$$\left. \begin{array}{l} u(\mathbf{r}, t) = \cos(\phi) \\ v(\mathbf{r}, t) = \sin(\phi) \end{array} \right\} e^{i\omega t} \sum_{n=1}^{\infty} \left\{ \begin{array}{l} u_n \\ v_n \end{array} \right\} \frac{2n+1}{n(n+1)} (-i)^n P_n^1(\cos\theta) z_n(kr) \quad (2.12)$$

wobei u und v die Lösungen für verschiedene Polarisationszustände darstellen. $P_n^1(\cos\theta)$ sind die Legendre-Polynome, $z_n(kr)$ sind sphärische Besselfunktionen. Letztere werden für jede der drei Teilwellen durch das jeweils asymptotische Verhalten bestimmt. Die Entwicklungskoeffizienten u_n, v_n sind für die einlaufende Welle identisch Eins, so daß sich die vollständige Lösung des Problems durch die Bestimmung der Koeffizienten für die gestreute Welle ($-a_n, -b_n$) und die Welle im Kugellinneren (nc_n, nd_n) ergibt. Diese erfolgt mit der Stetigkeitsbetrachtung (2.11) der Tangentialkomponenten dieser Felder auf der Kugeloberfläche.

Letztendlich ergeben sich mit Hilfe der Koeffizienten a_n, b_n Entwicklungen der Fernfeldlösungen ($r > \lambda$) für die Tangentialkomponenten der gestreuten Welle E_ϕ, E_θ . Dabei hängen a_n und b_n von folgenden Parametern ab:

$$x = ka = \frac{2\pi a}{\lambda}; \quad y = \frac{n_1}{n_2} ka = mx \quad (2.13)$$

Dies entspricht der bekannten Tatsache, daß die Streucharakteristik vom Verhältnis der Größe des Streuzentrums zur Wellenlänge und vom Verhältnis m der Brechungsindizes abhängt.

Als ein wichtiges Ergebnis der MIE-Theorie läßt sich mittels dieser Lösungen der mikroskopische *Streuquerschnitt* berechnen:

$$\sigma_s = \frac{2\pi a^2}{x^2} \sum_{n=1}^{\infty} (2n+1) (|a_n^2| + |b_n^2|). \quad (2.14)$$

Weiterhin kann die Intensität des gestreuten Lichtes in Abhängigkeit des Streuwinkels beschrieben werden. Auf eine Darstellung dieser unter 2.2.1 weiter beschriebenen

Streuphasenfunktion soll an dieser Stelle verzichtet werden. Die Behandlung der MIE-Theorie ist im Rahmen der Elektrodynamik exakt, jedoch werden in der Anwendung oft Näherungen gemacht, um handhabbare Lösungen zu erhalten.

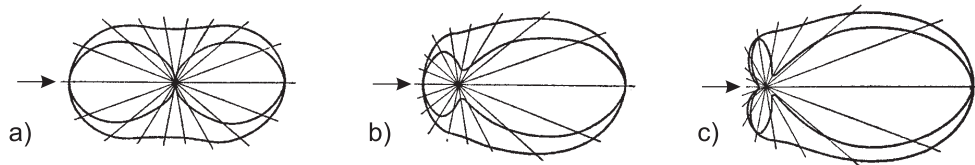


Abbildung 2.1: Polardiagramme für die Streuung linear polarisierten Lichtes an sphärischen Partikeln (aus [Bor 65]). **a):** $x \rightarrow 0$; **b):** $x = 0,9$; **c):** $x = 1$;

Aus der MIE-Theorie lassen sich typische Streueigenschaften von Streumedien allgemein ableiten. Im Fall kleiner Streuzentren ($x \ll 1$) entspricht die Lösung dem Abstrahlverhalten einzelner Dipole (RAYLEIGH-Streuung) und zeigt eine symmetrisch verteilte Streuwahrscheinlichkeit in Vor- und Rückwärtsrichtung mit einer minimalen Streuintensität senkrecht zur Einstrahlrichtung (Abb. 2.1 a)). Mit zunehmender Größe des Streuzentrums im Vergleich zur Wellenlänge ($x \approx 1$) steigt der Anteil vorwärts gestreuten Lichtes an. Dieses Verhalten ist als *MIE-Effekt* bekannt (Abb. 2.1 b) und c)). Aufgrund der meist im Vergleich zur eingestrahnten Wellenlänge großen Streuzentren biologischen Gewebes ergibt sich hier eine stark vorwärtsgerichtete Streuung. Der Grenzübergang ($x \gg 1$) liefert Ergebnisse der geometrischen Optik und führt zu komplexen Streumustern mit einer Vielzahl von Maxima und Minima [Bor 65].

Die an einem einzelnen Streuzentrum gewonnenen Erkenntnisse der MIE-Theorie lassen sich im Fall unabhängiger Ereignisse, d. h. Abstand der Streuer $> \lambda$, auf ein Ensemble von Streuzentren verallgemeinern (s. Abschnitt 2.2.1). Im Fall unterschiedlicher Streuer ergeben sich die gemittelten optischen Eigenschaften des Ensembles aus der Superposition der Einzelereignisse.

2.2 Strahlungstransporttheorie

Die konsequente Behandlung der Lichtausbreitung im Gewebe, die in den meisten Fällen durch Vielfachstreuung charakterisiert wird, ist mit Methoden der klassischen Elektrodynamik auf *mikroskopischer* Ebene jedoch nicht möglich. Dies begründet sich zum einen in der Tatsache, daß die Lichtstreuung in Gewebe an Brechungsindexschwankungen zellulärer und subzellulärer Strukturen stattfindet. Eine exakte elektrodynamische Rechnung, welche die Beschreibung dieser unregelmäßigen Geometrien und der entsprechenden Randbedingungen fordert, würde zu komplex (s. Abb. 2.2). Zum anderen ergibt sich ein prinzipielles, unüberwindbares Problem: Diese Eigenschaften auf zellulärer und subzellulärer Ebene *sind nicht bekannt*.

Es zeigt sich jedoch, daß der Lichttransport in befriedigender Weise durch *makroskopische* Parameter charakterisiert werden kann, die aus einer Mittelung der optischen Einflüsse auf mikroskopischer – d. h. zellulärer – Ebene über ein mesoskopisches Volumen hervorgehen. Demnach betrachtet man biologisches Gewebe als *inhomogenes* Medium in bezug auf organische Substrukturen (Adern, Gewebeschichten, Tumoren etc.), setzt diese jedoch als optisch *homogen* voraus.

Im folgenden Abschnitt wird unter Verwendung dieser Größen die Behandlung der Lichtausbreitung in absorbierenden und streuenden Medien in Form einer Transporttheorie eingeführt. Dies beinhaltet die Vernachlässigung der Welleneigenschaften des Lichts und Beschränkung der Wechselwirkungen auf Absorption und elastische Stöße. Abschließend wird eine wichtige Methode der numerischen Behandlung dieser Theorie, die *Monte Carlo Simulation*, vorgestellt.

2.2.1 Strahlungsmeßtechnische Größen

Zuerst sollen die wichtigsten strahlungsmeßtechnischen Größen eingeführt werden. Diese sind im allgemeinen zeitabhängig. Alle in dieser Arbeit behandelten Phänomene des Lichttransports finden jedoch auf Zeitskalen statt, die eine Behandlung des Lichtfeldes als stationär zulassen. Die Ausführungen folgen der Darstellung in [Wel 95] und entsprechen der internationalen Norm für Strahlungsgrößen [ISO 80]. Alle Größen werden, wie dies in der Gewebeoptik üblich ist, in cgs-Einheiten angegeben.

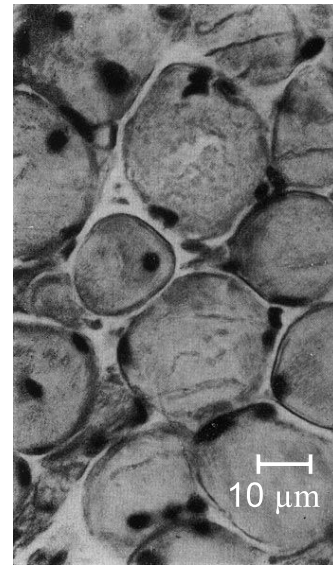


Abbildung 2.2: Diese mikroskopische Aufnahme von Muskelzellen illustriert die komplexen optischen Randbedingungen in biologischem Gewebe und die daraus resultierenden prinzipiellen Schwierigkeiten einer elektrodynamischen Beschreibung der Lichtausbreitung (aus [Saj 83]).

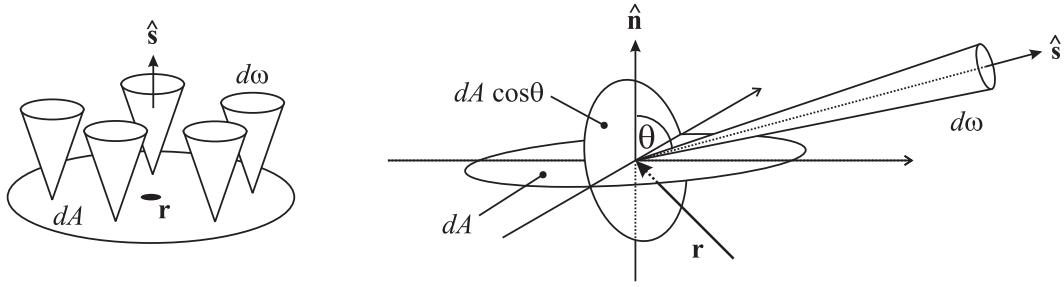


Abbildung 2.3: Illustrationen zum Begriff der Strahldichte $L(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{s}})$. **links:** Jeder Punkt des betrachteten Flächenelementes trägt zur Strahldichte in die Richtung $\hat{\mathbf{s}}$ bei. **rechts:** Allgemein ist der Normalenvektor $\hat{\mathbf{n}}$ des betrachteten Flächenelementes dA nicht parallel zu $\hat{\mathbf{s}}$, so daß der Photonenfluß durch die Projektion von dA auf eine Fläche senkrecht zu $\hat{\mathbf{s}}$ betrachtet werden muß.

Im Photonenbild ergibt sich die durch Strahlung transportierte Energie E [J] aus der übertragenen Photonenzahl multipliziert mit der Energie eines einzelnen Lichtquants $h\nu$ (h : PLANCKSches Wirkungsquantum; ν : Lichtfrequenz). Die zeitliche Ableitung dE/dt [W] ergibt die Strahlungsleistung.

$N(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{s}})$ bezeichne die Anzahl der Photonen in einem Volumenelement um den Ort \mathbf{r} , welche sich pro Raumwinkeleinheit entlang der Richtung $\hat{\mathbf{s}}$ ausbreiten. Dann ergibt sich die pro Zeit durch eine infinitesimale Fläche dA in den infinitesimalen Raumwinkel $d\omega$ entlang der Richtung $\hat{\mathbf{s}}$ übertragene Energie zu

$$\dot{E}(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{s}}) = N(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{s}}) dA d\omega c h \nu \quad [\text{Js}^{-1} = \text{W}] \quad (2.15)$$

mit der Vakuum-Lichtgeschwindigkeit c . Die grundlegende photometrische Größe, die *Strahldichte* (engl. radiance) $L(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{s}})$ ergibt sich aus $N(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{s}})$ als

$$L(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{s}}) = N(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{s}}) c h \nu \quad [\text{W cm}^{-2} \text{sr}^{-1}] \quad (2.16)$$

und bezeichnet die Strahlungsleistung pro Raumwinkeleinheit in eine Richtung $\hat{\mathbf{s}}$ pro Fläche senkrecht zu $\hat{\mathbf{s}}$. Abb. 2.3 skizziert diesen Zusammenhang.

Weitere wichtige Größen sind die *Bestrahlungsstärke* (engl. fluence Rate)

$$\Phi(\mathbf{r}) = \int_{4\pi} L(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{s}}) d\omega \quad [\text{W cm}^{-2}], \quad (2.17)$$

welche die gesamte Strahlungsleistung pro Fläche im Punkt \mathbf{r} beschreibt, und der *Strahlungsflußvektor* (engl. net flux vector)

$$\mathbf{F}(\mathbf{r}) = \int_{4\pi} L(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{s}}) \hat{\mathbf{s}} d\omega \quad [\text{W cm}^{-2}]. \quad (2.18)$$

Dies ist eine Größe zur Quantifizierung des Nettobetrag und der Richtung des Gesamtenergieflusses. Von praktischer Bedeutung ist außerdem die *Intensität* $I(\mathbf{r})$ der Strahlung

(engl. irradiance). Sie ist definiert als die Strahlungsenergie, die pro Zeit durch eine Fläche im Punkt \mathbf{r} tritt, normiert auf diese Fläche. Mit Hilfe der Intensität wird die Leistung von kollimierten Lichtquellen und die auf eine Probe eingestrahlte Lichtmenge quantifiziert, ihre Einheit ist ebenfalls $[\text{W cm}^{-2}]$.

Aus der Definition wird klar, daß diese Größe nicht geeignet ist, um die Strahlungsleistung in einem Punkt eines Mediums anzugeben, wenn der allgemeine Fall einer Photonpropagation in jede Raumrichtung beschrieben werden soll. Aus diesem Grund wird die Bestrahlungstärke $\Phi(\mathbf{r})$ die relevante Größe bei der Behandlung durch Vielfachstreuung dominierter Lichtpropagation in Abschnitt 2.3 sein.

Bislang wurden photometrische, d. h. das Strahlungsfeld charakterisierende Größen behandelt. Nun sollen die Parameter eingeführt werden, die den Einfluß der Materie auf das Strahlungsfeld im Rahmen der Strahlungstransportgleichung quantifizieren.

Der *Absorptionskoeffizient* μ_a $[\text{cm}^{-1}]$ beschreibt die Abschwächung der Intensität pro Weglänge durch Absorptionsprozesse und führt zu dem LAMBERT-BEERSchen Gesetz der Absorption für homogene Medien [Dem 91]

$$\frac{dI(z)}{dz} = -\mu_a I(z) \quad (2.19)$$

mit der Intensität I eines kollimierten Strahles entlang der Ausbreitungsrichtung z .

Nach zeitlicher Integration dieser Gleichung ergibt sich die im Absorber pro Weglänge deponierte Energie zu $\mu_a \int I(z) dt$ $[\text{J cm}^{-1}]$; die Erweiterung auf drei Dimensionen im isotropen Medium erfolgt analog und führt zur *Energiedichte* $W(\mathbf{r})$

$$W(\mathbf{r}) = \mu_a \iint L(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{s}}) d\omega dt = \mu_a \int \Phi(\mathbf{r}) dt = \mu_a Q(\mathbf{r}) \quad [\text{J cm}^{-3}] \quad (2.20)$$

mit der Flächenenergiedichte $Q(\mathbf{r})$ $[\text{J cm}^{-2}]$. Der Absorptionskoeffizient ergibt sich aus den mikroskopischen Größen als Produkt des Absorptionsquerschnitts σ_a $[\text{cm}^2]$ und der Volumendichte N_a $[\text{cm}^{-3}]$ der Absorber [Ish 97].

Die Lichtstreuung in einem homogenen, isotropen Medium wird durch zwei Parameter charakterisiert. Ähnlich dem Absorptionskoeffizienten gibt der *Streukoeffizient* μ_s $[\text{cm}^{-1}]$ die mittlere Anzahl der Streueignisse pro Weglänge an. Für den Fall einer eindimensionalen Lichtausbreitung und der Annahme, daß Photonen nach einem Streuprozess der weiteren Strahlausbreitung verloren sind, ergibt sich ein Zusammenhang analog zu (2.19). Der Streukoeffizient ergibt sich als Produkt des mikroskopischen Streuquerschnitts σ_s $[\text{cm}^2]$ und der Volumendichte N_s $[\text{cm}^{-3}]$ der Streuzentren [Ish 97]. Die Angabe der Wahrscheinlichkeit für ein Streueignis reicht zur vollständigen Beschreibung eines Streuvorgangs nicht aus; da ein Photon nach der Wechselwirkung – im Gegensatz zur Absorption – dem Strahltransport weiterhin zur Verfügung steht, muß zusätzlich eine Angabe über seine weitere Propagation gemacht werden. Da im allgemeinen in der Gewebeoptik nur elastische Stöße betrachtet werden, betrifft dies nicht

die Energie, sondern nur den Impuls, d. h. die Richtung des gestreuten Photons. Die Wahrscheinlichkeit für die Streuung eines Teilchens aus der Richtung $\hat{\mathbf{s}}$ in eine Richtung $\hat{\mathbf{s}}'$ wird beschrieben durch die sog. *Streuphasenfunktion* $p(\hat{\mathbf{s}}, \hat{\mathbf{s}}')$. Diese ist normiert

$$\int_{4\pi} p(\hat{\mathbf{s}}, \hat{\mathbf{s}}') d\omega = 1. \quad (2.21)$$

Üblicherweise macht man die Annahme, daß p keine azimutale Abhängigkeit aufweist: $p(\hat{\mathbf{s}}, \hat{\mathbf{s}}') = p(\hat{\mathbf{s}} \cdot \hat{\mathbf{s}}')$.

2.2.2 Die Strahlungstransportgleichung

Mit Hilfe der bislang eingeführten Größen kann nun die *Strahlungstransportgleichung* formuliert werden. Sie behandelt den Energietransfer in einem Medium im Teilchenbild unter der Berücksichtigung von Absorptionsprozessen und elastischen Stößen der Teilchen mit diesem Medium in Form einer Bilanzgleichung. Sie wurde ursprünglich von BOLTZMANN aufgestellt, und wurde benutzt, um die Ausbreitung von Neutronen in Festkörpern zu beschreiben [Dav 57]. Ebenso kann sie auf die Lichtausbreitung in streuenden und absorbierenden Medien angewandt werden, wenn Welleneigenschaften zu vernachlässigen sind, also nur Intensitäten betrachtet werden. In diesem Zusammenhang wurde sie erstmals von CHANDRASEKHAR zur Beschreibung der Lichtausbreitung in interstellaren Gasen benutzt [Cha 60]. Die stationäre Strahlungstransportgleichung lautet

$$\hat{\mathbf{s}} \cdot \nabla L(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{s}}) = -\mu_t L(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{s}}) + \mu_s \int_{4\pi} p(\hat{\mathbf{s}}, \hat{\mathbf{s}}') L(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{s}}') d\omega + S_o(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{s}}). \quad (2.22)$$

Dabei bezeichnet $\mu_t := \mu_a + \mu_s$ den *Abschwächungskoeffizienten* und $S_o(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{s}})$ [$\text{W cm}^{-3} \text{sr}^{-1}$] einen optischen Quellterm. Die Bedeutung der einzelnen Terme ergibt sich durch das Wesen der Formel als Bilanzgleichung für den Energietransport. Die linke Seite beschreibt die Änderung der Strahldichte in einem Punkt \mathbf{r} entlang der Ausbreitungsrichtung $\hat{\mathbf{s}}$, die rechte Seite behandelt die Effekte, die diese Änderung bewirken.

Der erste Term der rechten Seite beschreibt die Abschwächung durch Absorption und Streuung aus der Ausbreitungsrichtung $\hat{\mathbf{s}}$ heraus, mit dem zweiten Term wird die Verstärkung durch Streueignisse aus einer beliebigen Richtung $\hat{\mathbf{s}}'$ nach $\hat{\mathbf{s}}$ berücksichtigt. Der letzte Term steht für die Verstärkung durch Lichtquellen im Medium. Das können einerseits Fluoreszenzlicht oder invasive Lichtquellen (z. B. Glasfasern) sein. Meistens wird dieser Term genutzt, um die äußere Lichteinstrahlung auf das Medium durch eine interne Quellverteilung darzustellen.

Unter den angenommenen Voraussetzungen bzgl. der optischen Eigenschaften biologischen Gewebes (s. Abschn. 2.2) und den Einschränkungen, die dem oben geschilderten Modell der Lichtausbreitung auferlegt wurden, stellt die Strahlungstransportglei-

chung eine exakte Formulierung des Lichttransports in biologischem Gewebe dar. Analytische (nichttriviale) Lösungen der Gleichung sind jedoch nur für Spezialfälle anzugeben. So reduziert sich (2.22) unter der Annahme rein vorwärtsgerichteter Streuung, d. h. $p(\hat{s}, \hat{s}') = \delta(1 - \hat{s} \cdot \hat{s}')$, auf (2.19) unter der Ersetzung von μ_a durch μ_t . Auch die Behandlung eindimensionalen Lichttransports gelingt analytisch, die Ergebnisse finden ihre Bedeutung hauptsächlich in der *in vitro* Gewebespektroskopie an scheibenförmigen Proben oder in der Dosimetrie für Anwendungen mit im Vergleich zur Eindringtiefe sehr ausgedehnten Einstrahlgeometrien.

In vielen Fällen der Therapie, Dosimetrie oder Diagnostik entspricht dies jedoch nicht den durch die Probengeometrie oder die Einstrahlform gegebenen Randbedingungen. Eine Beschreibung des Lichttransports mithilfe der Strahlungstransportgleichung kann dann nur numerisch erfolgen oder durch weitere vereinfachende Annahmen, die letztlich eine analytische Behandlung des Problems gestatten.

Eine oftmals verwandte Möglichkeit der numerischen Auswertung der Strahlungstransportgleichung ist die *Monte Carlo Simulation*, ein statistisches Verfahren, bei dem die Bewegung jedes einzelnen Photons simuliert wird. Dazu werden mögliche Wege eines Photons mittels eines Zufallsgenerators unter Annahme bestimmter Wechselwirkungs-Wahrscheinlichkeiten für Absorption, Streuung und das Verhalten an Grenzschichten erwürfelt. Diese ergeben sich für die Wechselwirkungsquerschnitte entsprechend dem Abschwächungsgesetz (2.19), für die Streuphasenfunktion wird meist eine empirische Verteilungen zugrundegelegt. Die Randbedingungen für (2.22) ergeben sich für jedes Photon durch die Wahrscheinlichkeit des Übergang in ein angrenzendes Medium. Diese bestimmt sich aus den FRESNELSchen Formeln der Reflexion und somit aus dem Brechungsindexsprung an der Grenzschicht. Die Richtung der weiteren Ausbreitung errechnet sich aus dem SNELLIUS-Gesetz der Lichtbrechung [Spa 96].

Die Ortsauflösung der Methode wird durch die Diskretisierung des betrachteten Mediums in kleinere Volumina („Voxel“) bestimmt. Durch Speichern der Anzahl der Absorptionsprozesse in jedem Voxel ergibt sich eine orts aufgelöste Verteilung der absorbierten Lichtenergie. Im stationären Fall kann nach (2.20) und (2.17) die mittlere Bestrahlungsstärke errechnet werden. Die Möglichkeit, jedem Volumenelement einen eigenen optischen Parametersatz zuzuschreiben, gestattet die Modellierung sehr komplexer Strukturen und der dadurch gegebenen Randbedingungen. So können Aderverläufe, Tumore, Schichtstrukturen oder besondere Probengeometrien berücksichtigt werden. Dies und die Möglichkeit, sehr flexibel unterschiedliche Einstrahlgeometrien modellieren zu können, machen die Monte Carlo Simulation zur Methode der Wahl, wenn komplexe Randbedingungen vorliegen und/oder die Lichtverteilung mit der höchstmöglichen Genauigkeit bestimmt werden soll.

Die Ergebnisse sind exakt im Rahmen der Annahmen, die zu Gleichung (2.22) führen, der Gültigkeit der Wechselwirkungsmodelle (insbesondere der Streuphasenfunkti-

on) und der Diskretisierung der Randbedingungen. Weiterhin kann durch Modifikation die Lichtausbreitung auch zeit- und polarisationsaufgelöst behandelt werden. Dies macht die Monte Carlo Simulation zum Vergleichs-Standard für Verfahren zur Berechnung der Lichtausbreitung im Gewebe.

Da es sich jedoch um ein statistisches Lösungsverfahren handelt, wird eine hinreichende Genauigkeit erst durch die Simulation hoher Photonenzahlen erreicht. Insbesondere für die on-line-Dosimetrie und die Inversionsrechnungen der optischen Tomographie führt dies zu nicht akzeptablen Rechenzeiten.

In der vorliegenden Arbeit wurde eine Monte Carlo Simulation von [Jac 95, Wan 92] benutzt, um eindimensionale Lichtverteilungen und daraus hervorgehend PPTR-Signale über einen weiten Bereich optischer Parameter zu berechnen. Diese Ergebnisse wurden zugrunde gelegt, um die Tauglichkeit verschiedener anderer Lichtausbreitungsmodelle zu beurteilen.

2.3 Diffuse Lichtausbreitung

Im vorangegangenen Abschnitt wurde bereits ein Nachteil der Monte Carlo Simulation, die lange Rechenzeit, geschildert. Außerdem bietet eine numerische Behandlung nicht die Einsicht in physikalische Zusammenhänge, die analytische Ausdrücke gewähren, wie z. B. das Verhalten von Lösungen für bestimmte Grenzfälle, die Herleitung von Analogien zu anderen Fragestellungen oder die Verallgemeinerung auf verwandte Probleme. Dies sind alles Gründe, die den Bedarf nach einer analytischen Lösung der Strahlungstransportgleichung motivieren. Da diese allgemein nicht angegeben werden kann, muß man Näherungsansätze betrachten und prüfen, unter welchen Voraussetzungen diese eine hinreichend gute Beschreibung der Realität liefern.

Im Rahmen der Diffusionstheorie wird unter der Annahme einer gegenüber der Absorption stark dominierenden Streuung eine Näherungslösung der Strahlungstransportgleichung entwickelt, die formal einer Diffusionsgleichung entspricht. Da diese Näherung für viele Gewebearten insbesondere im nahen Infrarot erfüllt ist und wegen ihrer relativ einfachen Struktur stellt die Diffusionstheorie die wichtigste analytische Behandlungsweise der Lichtausbreitung im Gewebe dar. Für viele Geometrien kann die Diffusionsgleichung analytisch gelöst werden und bietet die erwünschte physikalische Einsicht in Fragestellungen der Gewebeoptik. In jedem Fall ist ihre numerische Lösung weniger rechenintensiv als die Monte Carlo Simulation. Nachteil der Diffusionstheorie ist ihre eingeschränkte Gültigkeit.

In den folgenden Abschnitten wird zunächst die Diffusionsnäherung erläutert und ihre Anwendung in der Strahlungstransportgleichung zur Herleitung der Diffusionsgleichung dargelegt. Im Anschluß daran wird auf die Behandlung spezieller Randbedingungen eingegangen. Danach werden Kriterien zur Gültigkeit der Annahmen, die

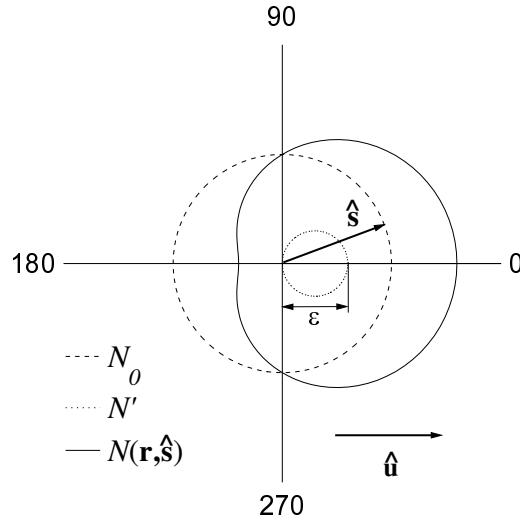


Abbildung 2.4: Illustration der Diffusionsnäherung. Die Winkelangaben beziehen sich auf den Vektor des Nettoflusses $\hat{\mathbf{u}}$. Zur besseren Darstellung wurde $\varepsilon = 0,6$ gewählt (s. Text).

zur Diffusionsnäherung führen, behandelt. Zum Abschluß werden analytische Lösungen der Diffusionsgleichung verschiedener Autoren präsentiert und mit Monte Carlo Rechnungen verglichen.

2.3.1 Diffusionsgleichung

Die grundlegende Idee der Diffusionstheorie liegt in einer *a priori* Annahme über die Form der Strahldichte $L(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{s}})$. Aufgrund der dominierenden Streuung und dem daraus resultierenden Vagabundieren der Photonen über große Volumina betrachtet man diese zunächst als isotrop in jedem Punkt des Mediums [Sta 95]

$$N(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{s}}) = \frac{1}{4\pi} N_0 \quad \Rightarrow \quad L(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{s}}) = L_0(\mathbf{r}). \quad (2.23)$$

Diese Annahme ist unrealistisch, da sie keine Lichtfeldgradienten und keinen Strahlungsfluß zuläßt (2.18). Dem trägt man Rechnung durch den Zusatz eines Korrekturterms $N'(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{s}})$, der eine Netto-Photonenbewegung entlang der Richtung $\hat{\mathbf{u}}$ beschreibt

$$N'(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{s}}) = \frac{1}{4\pi} N_0 \varepsilon(\mathbf{r}) \hat{\mathbf{s}} \cdot \hat{\mathbf{u}}. \quad (2.24)$$

Dabei stellt der Faktor $\varepsilon(\mathbf{r}) \ll 1$ das Verhältnis des Störterms zum isotropen Anteils dar. Mit diesem Zusatz ergibt sich

$$N(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{s}}) = \frac{1}{4\pi} N_0 (1 + \varepsilon(\mathbf{r}) \hat{\mathbf{s}} \cdot \hat{\mathbf{u}}). \quad (2.25)$$

Dieser Ansatz führt mit (2.17) und (2.18) zu folgender Form der Strahldichte, der sog. *Diffusionsnäherung* (s. Abb. 2.4)

$$L(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{s}}) = L_0(\mathbf{r}) + \frac{3}{4\pi} \mathbf{F}(\mathbf{r}) \cdot \hat{\mathbf{s}}. \quad (2.26)$$

Dabei bedeutet $L_0(\mathbf{r})$ eine richtungsunabhängige, also isotrope Strahldichte. Der zweite Term liefert den geforderten Lichtfluß, der Faktor $3/(4\pi)$ ergibt sich als Normierungskonstante aus der Integration bei der Herleitung dieses Ausdruckes.

Nun soll die Auswirkung dieser Näherung auf die Strahlungstransportgleichung (2.22) behandelt werden. Dabei soll der Fall einer kollimierten Lichteinstrahlung betrachtet werden, andere Quellterme werden nicht berücksichtigt.

Die Strahldichte $L(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{s}})$ wird aufgespalten in einen ungestreuten („primärer“) und einen gestreuten („Streu-“)Anteil

$$L(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{s}}) = L_p(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{s}}) + L_s(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{s}}). \quad (2.27)$$

Zu $L_p(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{s}})$ tragen die Photonen bei, die weder gestreut noch absorbiert worden sind, ihre Ausbreitung wird beschrieben durch

$$\hat{\mathbf{s}} \cdot \nabla L_p(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{s}}) = \frac{\partial L_p(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{s}})}{\partial s} = -\mu_t L_p(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{s}}). \quad (2.28)$$

Einsetzen von (2.27) in (2.22) und Anwenden von (2.28) führt zur Strahlungstransportgleichung für den gestreuten Anteil

$$\hat{\mathbf{s}} \cdot \nabla L_s(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{s}}) = -\mu_t L_s(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{s}}) + \mu_s \int_{4\pi} p(\hat{\mathbf{s}}, \hat{\mathbf{s}}') L_s(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{s}}') d\omega + \mu_s p(\hat{\mathbf{s}}, \hat{\mathbf{s}}_0) E(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{s}}_0). \quad (2.29)$$

Dabei wurde das ungestreute Licht angesetzt als $L_p(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{s}}) = E(\mathbf{r})\delta(1 - \hat{\mathbf{s}} \cdot \hat{\mathbf{s}}_0)$, was einer kollimierten Einstrahlung entlang $\hat{\mathbf{s}}_0$ entspricht. Der Vergleich von (2.29) mit (2.22) zeigt, daß die aus dem kollimierten Strahl herausgestreuten Photonen in der Strahlungstransportgleichung als Quellterm für den gestreuten Lichtanteil wirken.

$L_p(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{s}})$ ist bestimmt durch (2.28), so daß noch (2.29) gelöst werden muß, um $L_s(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{s}})$ und somit die Form der gesamten Strahldichte $L(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{s}})$ zu erhalten. Dies geschieht im folgenden unter der Diffusionsnäherung von (2.29).

Durch die Integration dieser Gleichung über den vollen Raumwinkel ergibt sich folgende Kontinuitätsgleichung für den Strahlungsfluß $\mathbf{F}(\mathbf{r})$

$$\nabla \cdot \mathbf{F}(\mathbf{r}) = -\mu_a \Phi_s(\mathbf{r}) + \mu_s E(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{s}}_0), \quad (2.30)$$

der Index von Φ_s deutet an, daß es sich um die Bestrahlungsstärke des gestreuten Lichtanteils gemäß (2.17) und (2.26) handelt. Diese Gleichung ist exakt, es wurde noch keine Näherung eingeführt. Setzt man die Diffusionsnäherung (2.26) in (2.29) ein, multipliziert mit $\hat{\mathbf{s}}$ und integriert wiederum über den vollen Raumwinkel, erhält man

$$\mathbf{F}(\mathbf{r}) = -\frac{1}{3\mu_{tr}} \nabla \Phi_s(\mathbf{r}) + \frac{\mu_s g}{\mu_{tr}} E(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{s}}_0) \hat{\mathbf{s}}_0. \quad (2.31)$$

Hier wurden einige wichtige Größen eingeführt. Der *Anisotropiefaktor* g ergibt sich aus der Mittelung der auf die Ausbreitungsrichtung projizierten Streuwinkelwahrscheinlichkeiten

$$g = \int_{4\pi} p(\cos \Theta) \cos \Theta d\omega. \quad (2.32)$$

Damit verliert man in der Diffusionstheorie die Beschreibung der Winkelverteilung $p(\hat{\mathbf{s}} \cdot \hat{\mathbf{s}}') = p(\cos \Theta)$ für ein Streueignis, statt dessen betrachtet man nur noch eine mittlere Streucharakteristik mit folgender Interpretation:

$g > 0$	→	Dominante Vorwärtsstreuung
$g = 0$	→	Gleichwahrscheinliche Vorwärts- wie Rückwärtsstreuung
$g < 0$	→	Dominante Rückwärtsstreuung.

Mittels dieses Parameters und μ_s läßt sich eine weitere wichtige Größe bilden, der *reduzierte Streukoeffizient*

$$\mu'_s = \mu_s(1 - g) \quad [\text{cm}^{-1}]. \quad (2.33)$$

Man erhält somit einen Parameter, welcher der Streuwahrscheinlichkeit und -charakteristik Rechnung trägt. Man wertet gewissermaßen den Effekt eines Streueignisses auf die Lichtausbreitung; seltene Ereignisse mit symmetrischer Streuverteilung ($g \rightarrow 0$) können im Rahmen dieser Beschreibung nicht von häufigen Streuvorgängen nahezu in Vorwärtsrichtung ($g \rightarrow 1$) unterschieden werden. Damit ergibt sich der *Transportkoeffizient* zu

$$\mu_{tr} = \mu_a + \mu'_s \quad [\text{cm}^{-1}]. \quad (2.34)$$

Aus den Gleichungen (2.30) und (2.31) ergibt sich die *stationäre Diffusionsgleichung* für den Lichttransport

$$D\nabla^2\Phi_s(\mathbf{r}) = \mu_a\Phi_s(\mathbf{r}) + S_D(\mathbf{r}) \quad (2.35)$$

mit der *Diffusionskonstanten* $D = 1/3\mu_{tr}$ und einem Quellterm $S_D(\mathbf{r})$ [W cm^{-3}].

An dieser Stelle soll auf einige formale Analogien der diffusen Lichtausbreitung zu der Beschreibung anderer physikalischer Diffusionsprozesse wie der Wärmediffusion in Kapitel 3 hingewiesen werden. Die Kontinuitätsgleichung (2.30) entspricht (3.6) bis auf den Absorptionsterm und das Fehlen einer Zeitabhängigkeit, welche sich bei der Betrachtung nichtstationären Lichttransportes ergibt. Diese Gleichung ist exakt im Rahmen der Strahlungstransportgleichung. Gleichung (2.31) unterscheidet sich von (3.3) durch einen Quellterm und entspricht dem FICKSchen Gesetz der Teilchendiffusion. Sie ergibt sich durch die Diffusionsnäherung (2.26). Durch die formale Ähnlichkeit zwischen der Licht- und der Wärmediffusionsgleichung ergeben sich für beide Probleme analoge Methoden zur Lösung und der Behandlung der Randbedingungen.

2.3.2 Randbedingungen

Es gilt, die Diffusionsgleichung (2.35) für den gestreuten (= diffusen) Lichtanteil zu lösen.

Die notwendigen Randbedingungen ergeben sich aus Betrachtungen des Lichtflusses an Grenzschichten, im folgenden sei dies die Grenze des streuenden Mediums (z. B.

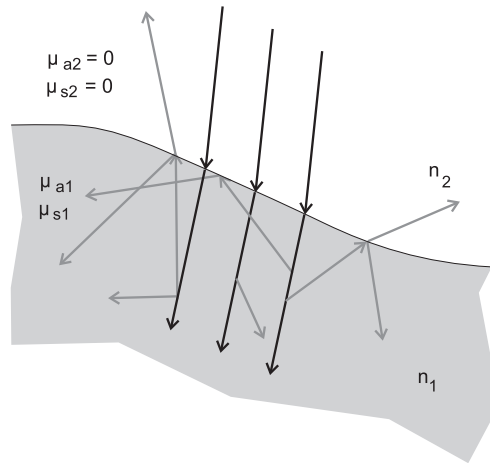


Abbildung 2.5: Illustration der Randbedingung eines streuenden Mediums ($\mu_{a1}; \mu_{s1}$) zu einer klaren Umgebung ($\mu_{a2}; \mu_{s2}$), dargestellt ist der Fall $n_1 > n_2$. (schwarz: primärer Lichtanteil; grau: diffuser Lichtanteil)

Gewebe, Modellsubstanz ($\mu_{a1}; \mu_{s1}$) zu einer klaren Umgebung wie z. B. Luft oder Wasser ($\mu_{a2} = \mu_{s2} = 0$). Unter der Voraussetzung, daß sich in der Umgebung keine diffusen Lichtquellen befinden, tritt von außen kein diffuser Strahlungsfluß in das Medium. Somit besteht an der Grenzfläche ein diffuser Lichtfluß in das Medium nur aufgrund der FRESNEL-Reflexion eines Teils der aus dem Medium heraustretenden Photonen (s. Abb. 2.5 und Anh. C). Daraus resultiert folgende DIRICHLET-NEUMANN Randbedingung (Anh. C):

$$\Phi(\mathbf{r}) = 2AD \frac{\partial \Phi(\mathbf{r})}{\partial \hat{n}} \quad \mathbf{r} \text{ auf der Grenzfläche} \quad (2.36)$$

mit $A = \frac{1+r_{eff}}{1-r_{eff}}$, wobei sich die *effektive Reflektivität* r_{eff} folgendermaßen definiert:

$$F_{n+}(\mathbf{r}) = r_{eff} F_{n-}(\mathbf{r}). \quad (2.37)$$

Hier bezeichnen $F_{n+}(\mathbf{r})$ und $F_{n-}(\mathbf{r})$ die Strahlungsenergie-Flüsse in das Medium resp. aus diesem heraus. r_{eff} hängt von den Brechungsindizes der angrenzenden Medien ab und wird im Fall derer Anpassung zu Null, was die vereinfachte Randbedingung

$$\Phi(\mathbf{r}) = 2D \frac{\partial \Phi(\mathbf{r})}{\partial \hat{n}} \quad \mathbf{r} \text{ auf der Grenzfläche} \quad (2.38)$$

zur Folge hat. Im Falle unterschiedlicher Brechungsindizes kann r_{eff} und somit A unter *a priori*-Annahmen über das Lichtfeld in Abhängigkeit vom Brechungsindexsprung an der Oberfläche berechnet werden. Dies wurde von einigen Autoren in der Vergangenheit für verschiedenen Näherungen der FRESNEL-Funktion $R(|\hat{s} \cdot \hat{n}|)$ analytisch und für die exakte Form numerisch durchgeführt [Kei 93, Sta 95, Gro 83]. Typische Werte für den Übergang Gewebe ($n=1,4$) zu Luft liegen bei $r_{eff} \sim 0,5$ [Sta 95].

2.3.3 Gültigkeit der Diffusionsnäherung

Die Diffusionsnäherung (2.26) beschreibt eine Lichtverteilung, die in jedem Punkt durch eine im wesentlichen isotrope Bestrahlungsstärke gekennzeichnet ist. Dies ist bei der Betrachtung von Lichtfeldern mit nicht zu starken Gradienten der Bestrahlungsstärke gut erfüllt. Im folgenden soll diese Bedingung näher quantifiziert werden.

Die Terme in Gleichung (2.26) können aufgefaßt werden als die nullte und erste Ordnung der Multipolentwicklung der Strahldichte $L(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{s}})$ nach Kugelflächenfunktionen [Kei 93]. Man kann zeigen, daß der Abbruch dieser Entwicklung nach dem Dipolterm für den Fall

$$\frac{\mu_a}{\mu_s} \ll 1 - g^2 \quad (2.39)$$

gerechtfertigt ist [Fur 80]. Es gibt verschiedene Ausprägungen dieses Kriteriums, im allgemeinen fordert man, daß $\mu_a \ll \mu_s$ oder die *Albedo* $a := \frac{\mu_s}{\mu_t} \approx 1$ sein soll.

Die befriedigende Beschreibung des Lichtfeldes durch (2.26) ist außerdem in Frage gestellt in der Nähe von Einstrahlungspunkten und im Fall räumlicher Diskontinuitäten der optischen Eigenschaften. Für ersteres gilt, daß die Lichtverteilung ab einer Entfernung von etwa einer reduzierten freien Weglänge $\text{MFP}' := \frac{1}{\mu_a + \mu_s}$ (engl. mean free path) vom Einstrahlungspunkt aus diffus erfolgt, weil bereits genügend Streuprozesse stattgefunden haben [Kei 93].

Der zweite Fall tritt vor allem an der Grenze eines streuenden Mediums zu einer klaren Umgebung auf. Hier führt ein Nettofluß aus dem Medium heraus zu lokal stark variierenden Lichtfeldern, die nicht die Diffusionsnäherung erfüllen. Diese Diskontinuität ist umso größer, je besser der Brechungsindex der Umgebung an den des Streumediums angepaßt ist (Bsp. Gewebe – Wasser). Günstigere Verhältnisse liegen im Fall eines Brechungsindexsprung an der Oberfläche vor (z. B. Gewebe – Luft). Hier führt die Reflexion eines Teils der diffusen Photonen zu einer Glättung des Lichtverlaufs in Oberflächennähe, so daß in diesem Fall eine bessere Beschreibung der Lichtverteilung auf Grundlage der Diffusionstheorie möglich ist.

Die Gültigkeit der Diffusionsnäherung für eine Gewebe-Luft-Grenze und die Tauglichkeit zur Beschreibung von PPTR-Signalen an streuenden Medien wird Gegenstand der Untersuchungen in Kapitel 4 sein.

2.3.4 Lösungen

Im folgenden werden einige analytische Lösungen der eindimensionalen Diffusionsgleichung im halbunendlich ausgedehnten Medium für kollimierte Einstrahlung längs der z -Achse gegeben; die Grenze des Mediums befindet sich bei $z = 0$. Diese werden in Kapitel 4 bei der gepulsten photothermischen Radiometrie an streuenden Proben zur Anwendung gelangen. Es handelt sich dabei um die Ergebnisse der Arbeiten verschied-

dener Autoren, die im wesentlichen präsentiert werden sollen und auf deren Herleitung verzichtet wird.

Der Quellterm aufgrund einer kollimierten Einstrahlung läßt sich gemäß den Überlegungen in Abschnitt 2.3.1 schreiben als

$$S_D(z) \propto \mu_s I_0 e^{-\mu_t z}. \quad (2.40)$$

Hier bezeichnet I_0 die Intensität bei $z = 0$.

Star [Sta 95] formuliert die Kontinuitätsgleichung (2.30) und das FICKSche Gesetz (2.31) sowie den Quellterm (2.40) mit Hilfe der Hemisphärenflüsse $F_{n\pm}$ (s. Anh. C). Dies führt zu einem System gekoppelter linearer Differentialgleichungen, die mit der ebenfalls in Teilflüssen ausgedrückten Randbedingung (C.8)

$$F_{n+} = r_{eff} F_{n-} \quad (2.41)$$

folgendermaßen gelöst werden:

$$\Phi(z) = \frac{5 - r_{eff}}{1 - r_{eff} + 2\frac{\mu_a}{\mu_{eff}}(1 + r_{eff})} e^{-\mu_{eff} z} - 2e^{-\mu_t z}. \quad (2.42)$$

Dabei ergibt sich der *effektive Abschwächungskoeffizient* zu

$$\mu_{eff} = \sqrt{3\mu_a\mu_{tr}}. \quad (2.43)$$

Ein exponentielles Verhalten mit μ_{eff} ist typisch für eine Lösung der Diffusionsgleichung. Es bestimmt den Verlauf der Bestrahlungsdichte ab der Entfernung etwa eines MFP' vom Einstrahlungspunkt. Man definiert die optische Eindringtiefe als $\delta := 1/\mu_{eff}$.

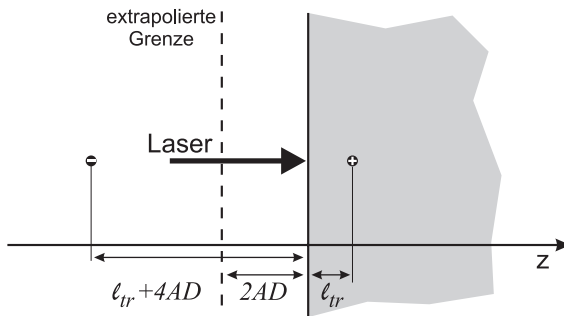


Abbildung 2.6: Illustration der Behandlung der Randbedingung mit Spiegelladungen. Dargestellt sind der positive (+) und negative (-) Quellterm, welche für $\Phi = 0$ an der Stelle $z = 2AD$ sorgen (nach [Ora 96]).

Eine weitere Möglichkeit, die Diffusionsgleichung für ein halbunendliches Medium zu lösen, besteht in der Methode der Spiegelladungen (siehe auch Abschnitt 3.2.3). Dazu wird die exponentiell abklingende Quellverteilung einer kollimierten Einstrahlung (2.40) durch eine Punktquelle in der Tiefe eines MFP' = $1/\mu_{tr} := \ell_{tr}$ angenähert. Die Lösung der Diffusionsgleichung in drei Dimensionen für eine Punktquelle zeigt folgendes Verhalten:

$$\Phi(\mathbf{r}) \sim \frac{e^{-\mu_{eff} r}}{r}. \quad (2.44)$$

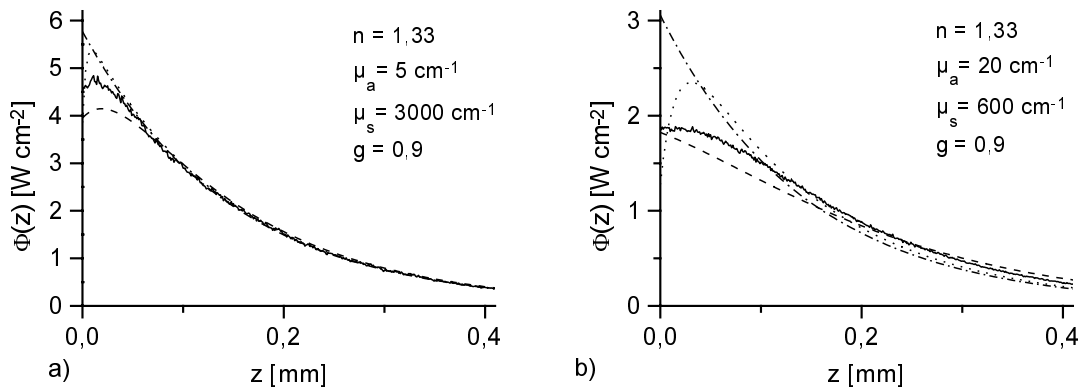


Abbildung 2.7: Vergleich verschiedener Modelle zur Lichtausbreitung: Diffusionstheorie entsprechend [Sta 95] \cdots , [Pra 92] $---$, [Ora 96] $-\cdot-\cdot-$; Monte Carlo Simulation von [Wan 92] $—$. Die eingestrahelte Intensität beträgt jeweils 1 W cm^{-2} .

Mit Hilfe der Superposition von Lösungen weiterer positiver oder negativer Punktladungen kann somit die Randbedingung (C.8) eines auf der Oberfläche vorgegebenen Flusses realisiert werden [Has 94] (dieses Problem entspricht dem Fall der „Strahlungsrandbedingung“ (3.17) für die Wärmeleitungsgleichung).

Eine stark vereinfachte Randbedingung bildet die Forderung, daß die Bestrahlungsstärke an der Oberfläche verschwindet. Dies läßt sich leicht mit einer negativen Punktladung, die an $z = 0$ gespiegelt zur Quelle angebracht wird, realisieren. Dies ist jedoch offensichtlich eine unphysikalische Lösung. Daher extrapoliert man die Fläche verschwindender Bestrahlungsstärke soweit in eine größere Entfernung von der Probenoberfläche, bis dort der geforderte Fluß herrscht. Dies geschieht durch die Verlagerung der Spiegelladung von $z = -\ell_{tr}$ nach $z = -(\ell_{tr} + 4AD)$ (s. Abb. 2.6). Daraus ergibt sich nach Integration über die gesamte Fläche die Lösung für den eindimensionalen Fall [Ora 96]:

$$\Phi(z) = E_0 \frac{3\mu'_s}{2\mu_{tr}} \left(e^{-\mu_{eff}\ell_{tr}} - e^{-\mu_{eff}(\ell_{tr}+4AD)} \right) e^{-\mu_{eff}z} \quad (2.45)$$

Diese Lösungen sollen nun in bezug auf ihre Genauigkeit bei der Beschreibung des Lichttransports in streuenden Medien verglichen werden.

Abb. 2.7 zeigt die Ergebnisse einer Monte Carlo Simulation für zwei verschiedene Sätze optischer Parameter eines bestrahlten Mediums mit Luft als Umgebung. Im Vergleich zu dieser im Sinne von (2.22) exakten Darstellung sind verschiedene Diffusionsrechnungen, die beiden bereits behandelten und eine Lösung nach [Pra 92] dargestellt.

Die Monte Carlo Ergebnisse zeigen ein für die Gewebeoptik charakteristisches Phänomen: am Einstrahlort kommt es zu einer Überhöhung der Bestrahlungsstärke um ein Vielfaches. Dies ist mit der erhöhten Aufenthaltswahrscheinlichkeit der Photonen nahe der Oberfläche durch Vielfachstreuung zu erklären. Der hier vorliegende Fall des Brechungsindexsprungs zur Umgebung verstärkt diesen Effekt [Kei 93].

Beide Lichtverteilungen zeigen etwa die gleiche optische Eindringtiefe im Bereich 0,16 mm, jedoch ist für Abb. 2.7 a) das Kriterium (2.39) für die Gültigkeit der Diffusi-

onsnäherung im Gegensatz zu b) deutlich erfüllt. Aus diesem Grund läßt sich die Lichtverteilung in a) gut im Bereich $z > \text{MFP}' = 0,033$ mm durch den exponentiellen Verlauf der Diffusionsrechnungen beschreiben. Im Fall b) sind größere Diskrepanzen, auch für $z > \text{MFP}' = 0,125$ mm, zu erkennen, so daß hier die nur unzureichende Beschreibung der Lichtverteilung mit Hilfe der Diffusionstheorie zu erkennen ist.

Vom Standpunkt der gepulsten photothermischen Radiometrie ist die Beschreibung des Lichtfeldes nahe der Oberfläche sehr wichtig, da dieser Anteil wegen der Oberflächen-Detektion den Hauptbeitrag zum photothermischen Signal liefert. Da hier jedoch einerseits eine starke Diskontinuität in den optischen Eigenschaften vorliegt und andererseits der Einstrahlort liegt, werden die Diffusionsrechnungen sehr erschwert. Der Bereich der größten Diskrepanzen reicht bis in die Tiefe etwa eines MFP' . Dies entspricht ist in a) etwa $1/4$, in b) fast $2/3$ der optischen Eindringtiefe. Die verschiedenen Lösungen der Diffusionsgleichungen zeigen starke qualitative Unterschiede in der Nähe der Grenzfläche, was auf die jeweilige Behandlung der Randbedingung zurückzuführen ist. Jedoch ergibt sich, vor allem in a), für alle Lösungen offenbar eine richtige *Skalierung* und dementsprechend ein sehr ähnliches Verhalten im Fernfeld.

Die Diskussion der Anwendbarkeit dieser verschiedenen Lichtausbreitungsmodelle für die Signalbeschreibung bei der gepulsten photothermischen Radiometrie an streuenden Medien wird in Abschnitt 4.2.2 erfolgen.

Kapitel 3

Wärmetransport in biologischem Gewebe

ANGESICHTS der wichtigen Rolle thermischer Wirkmechanismen in der Gewebebearbeitung kommt deren Modellierung eine besondere Bedeutung für das Verständnis der Licht-Gewebe-Wechselwirkung zu. Theoretische Untersuchungen, die der hohen Bandbreite der Bestrahlungsparameter und der Mannigfaltigkeit der Wirkmechanismen Rechnung tragen, beinhalten die Formulierung thermo- und hydrodynamischer Modelle, in die das absorbierte Licht als energetischer Quellterm eingeht. Dies erfolgt unter Berücksichtigung der Randbedingungen, thermisch-mechanischer Gewebeeigenschaften und des raumzeitlichen Verhaltens des Quellterms. Im Vergleich mit dem Experiment können somit Erkenntnisse über Art und Maß der Gewebeschädigung und ihrer Abhängigkeit von Gewebeart und Bestrahlungsparameter gewonnen werden.

Umgekehrt läßt die Beurteilung der mechanischen und thermischen Auswirkungen von Lichteinstrahlung Rückschlüsse auf das raumzeitliche Verhalten der Quelle zu. Voraussetzung ist die Verfügbarkeit obengenannter thermo- und hydrodynamischer Modelle. Bei Strahlungsdosen unterhalb der Zerstörquelle kann dies zur nicht invasiven Gewebeuntersuchung genutzt werden. Die in der vorliegenden Arbeit behandelte Methode der gepulsten photothermischen Radiometrie nutzt die zeitaufgelöste Messung der Gewebeoberflächentemperatur nach Einstrahlung eines Lichtpulses zur Bestimmung der optischen Eigenschaften der Probe.

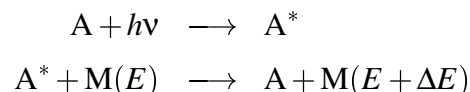
In diesem Kapitel werden die für die Beschreibung dieser Methode und Auswertung der experimentellen Ergebnisse grundlegenden thermodynamischen Zusammenhänge formuliert. Dazu werden zuerst die thermischen Wirkungen von Licht auf Gewebe beschrieben. In diesem Zusammenhang werden auch die thermischen Eigenschaften biologischen Gewebes diskutiert. Im Anschluß daran wird der Energietransport im Gewebe durch Wärmeleitung behandelt. Besonderes Gewicht wird hier auf die Lösungsform der Wärmediffusionsgleichung unter Beachtung der Randbedingungen für Gewebegrenzen

gelegt. Danach werden die Charakteristika der Wärmestrahlung behandelt, da diese die Meßgröße in den Experimenten der vorliegenden Arbeit liefert. Abschließend erfolgt die Diskussion des Einflusses konvektiver Wärmeübertragung auf die thermischen Gewebeeigenschaften.

3.1 Thermische Wirkung von Licht auf Gewebe

Anwendungen der thermischen Wirkungen von Licht auf Gewebe erstrecken sich über einen weiten Wellenlängenbereich vom Sichtbaren (VIS) bis ins ferne Infrarot (FIR). Dies ist in den Absorptionseigenschaften der verschiedenen Gewebebestandteile begründet [Bou 86]. So absorbieren eine Vielzahl im Zellverband vorliegender organischer Moleküle im Bereich des sichtbaren Spektrums, die wichtigsten sind der Blutfarbstoff Hämoglobin und das Melanin. Wasser zeigt im mittleren und fernen Infrarot eine starke Absorption. Da Wasser in den meisten Gewebearten mit einem Anteil von bis zu 70..90 % vertreten ist [Duc 90], stellt es hier das Hauptchromophor dar und dominiert in diesem Wellenlängenbereich die optischen Eigenschaften biologischen Weichgewebes. Im UV-Bereich ergibt sich ebenfalls eine starke Absorption sowohl durch organische Moleküle, vor allem der Proteine, als auch Wasser; jedoch beruht die Wirkung von Licht auf Gewebe hier nicht rein auf thermischen Effekten.

Die Umwandlung elektromagnetischer Energie in Wärme erfolgt über zwei Schritte: Zuerst erfährt ein Molekül im Grundzustand A die Anregung eines Vibrations-Rotations- (IR) oder eines elektronischen Übergangs (VIS) in einen angeregten Zustand A^* um einen Energiebetrag $h\nu$ unter Absorption eines Photons. Danach erfolgt die Relaxation durch einen inelastischen Stoß mit einem Partner aus dem umgebenden Medium M, dessen kinetische Energie E um einen Betrag $\Delta E = h\nu - E_a$ erhöht wird. Dabei steht E_a für die Energieverluste durch alternative Relaxationskanäle wie z. B. Strahlungsübergänge. Das Reaktionsschema läßt sich folgendermaßen darstellen:



Aufgrund der großen Anzahl von Vibrationszuständen, über die die Relaxation ablaufen kann und eines großen Stoßquerschnitts für diesen Vorgang verläuft die Thermalisierung sehr rasch und effizient. So liegen Relaxationszeiten für die Vibrationszustände von Wasser unterhalb von ns [Olm 97].

Die in dieser Arbeit behandelte Meßmethode der gepulsten photothermischen Radiometrie soll die Möglichkeit einer zerstörungsfreien Gewebeuntersuchung bieten. Dementsprechend fordert man möglichst geringfügige Temperaturerhöhungen des bestrahlten Areals. Dies wird jedoch limitiert durch die rauschbegrenzte Temperaturentauflösung des Detektionssystems. Demnach ergeben sich optimale Meßbedingungen

durch eine möglichst starke Gewebeerwärmung, welche jedoch unterhalb der Zerstörungsschwelle bleiben muß.

Unmittelbare, irreversible Gewebeschädigungen sind im Bereich einer Temperaturerhöhung von 100 °C zu erwarten, da hier Verdampfungsprozesse von Wasser zu chemischen (z. B. Karbonisierung) und mechanischen Schäden (Ablation) im Gewebe führen können. Die verschiedenartigen Schädigungsmechanismen finden über einen weiten Bereich von Wechselwirkungszeiten (ns...s) statt. Temperaturen um 100 °C gilt es daher in jedem Fall zu vermeiden.

Schädigungen deutlich unterhalb dieses Temperaturbereiches bis etwa 60 °C finden auf längeren Zeitskalen (Minuten) statt und werden durch thermisch induzierte Änderungen der Eiweißstrukturen dominiert. Noch niedrigere Temperaturen bis etwa 45 °C rufen auf Minuten- bis Stunden-Zeitskalen Schädigungen hervor, die teilweise reversibel sind [Pea 95].

Die Pulsdauern bei PPTR-Messungen an Gewebe liegen im μs -Bereich, so daß Gewebeschädigungen selbst für Energiedosen, die eine Erwärmung bis in die Gegend von 60 °C hervorrufen, nicht zu erwarten sind. Auch eine kritische Erhöhung der mittleren Gewebetemperatur bei der Applikation mehrere Pulse ist nicht zu befürchten, da die zu untersuchende Region vor jeder Pulseinstrahlung thermisch relaxieren muß, um die Messung nicht zu verfälschen.

In der Arbeit wurden deutlich geringere Dosen als zerstörungsfrei betrachtet. So wurden Experimente als klinisch relevant eingestuft, bei denen maximale Temperaturerhöhungen um 10 °C nicht überschritten wurden.

In den folgenden Abschnitten werden die verschiedenen Wärmetransportmechanismen für den Fall eines isotropen, homogenen Mediums mit temperaturunabhängigen Eigenschaften formuliert. Wie gut dies für biologisches Gewebe bzgl. der Anwendung dieser Erkenntnisse im Rahmen dieser Arbeit erfüllt ist, soll nun vorab diskutiert werden.

Für die meisten Gewebetypen sind thermische Eigenschaften und deren Temperaturabhängigkeit bekannt. Die Daten stützen sich auf *in vitro*-Untersuchungen an Proben vom Menschen und verschiedenen Säugetierarten [Val 95]. Die Ergebnisse liefern vor allem zwei wichtige Aussagen:

1. Die thermischen Eigenschaften der verschiedenen Gewebearten werden im wesentlichen vom Wasseranteil bestimmt. Hierauf weist die Tatsache hin, daß für verschiedene Weichgewebearten die Werte für die Wärmeleitfähigkeit innerhalb $\pm 5\%$ um einen Mittelwert von $\lambda = 0,00486 \text{ W cm}^{-1} \text{ K}^{-1}$ schwanken und die Wärmediffusionskonstante im Mittel $\kappa = 0,00132 \text{ cm}^2 \text{ s}^{-1} \pm 7\%$ beträgt (für Wasser gilt bei 37 °C: $\lambda = 0,00623 \text{ W cm}^{-1} \text{ K}^{-1}$; $\kappa = 0,00146 \text{ cm}^2 \text{ s}^{-1}$) [Val 95]. Größere Abweichungen zeigen stark fetthaltige Gewebe, Epidermis, Lungengewebe und Knochen. Des weiteren zeigen empirisch gefundene Zusammenhänge

zwischen Wärmekapazität und -leitfähigkeit und den Wasser-, Fett- und Proteinanteilen eines Gewebes die deutliche Dominanz (Faktor 2...4) des Einflusses des Wassergehalts [Coo 71].

2. Die thermischen Eigenschaften der verschiedenen Gewebe zeigen im Bereich von $(3...45)^\circ\text{C}$ nur eine schwache relative Änderung mit der Temperatur. Sie liegt für die Wärmeleitfähigkeit λ bei $3 \cdot 10^{-3} \text{ K}^{-1}$ und für die Wärmediffusivität κ bei $4 \cdot 10^{-2} \text{ K}^{-1}$ [Val 95].

Aus diesen empirischen Ergebnissen lassen sich folgende Erkenntnisse gewinnen:

- Die meisten Arten menschlichen Weichgewebes lassen sich hinsichtlich ihrer thermischen Eigenschaften sehr gut mit wasserhaltigen Proben (Gelatine, Agar-gel, etc.) modellieren.
- Für den Fall geringer Temperaturänderungen können die thermischen Gewebeparameter als temperaturunabhängig angesehen werden.
- Hinsichtlich der Isotropie der thermischen Gewebeeigenschaften läßt sich aus obigen Daten keine Aussage gewinnen, da diese nicht richtungsabhängig bestimmt wurden. In der amorphen Substanz biologischen Gewebes kann eine Anisotropie möglicherweise durch Schicht- oder Faserstrukturen (z. B. Muskeln) erzeugt werden. Da jedoch die thermischen Eigenschaften durch Wasser maßgeblich bestimmt werden, erscheint die Annahme isotroper Materialeigenschaften insbesondere für Weichgewebe amorpher Struktur gut erfüllt.
- Der komplexe Aufbau von Gewebe und Organen steht zunächst im Widerspruch zu der Forderung eines homogenen Mediums. Diese bezieht sich jedoch nur auf die thermischen Eigenschaften. Aufgrund der ähnlichen thermischen Eigenschaften der meisten Gewebesorten können Einflüsse durch Wärmeübergänge zwischen diesen vernachlässigt und das Medium „Gewebe“ als thermisch homogen betrachtet werden.

3.2 Energietransport durch Wärmeleitung

Die Wärmeleitung stellt im Bereich thermischer Lichteinwirkung auf Gewebe den dominierenden Mechanismus der Wärmeübertragung dar. In den im Rahmen dieser Arbeit durchgeführten Experimenten nutzt man den Prozeß der Wärmediffusion aus, um Informationen bzgl. optischer Eigenschaften aus tieferliegenden Gewebebereichen an die Oberfläche zu übertragen.

Die zum Verständnis dieses Verfahrens und der Interpretation der Ergebnisse notwendige Beschreibung der Wärmediffusion soll daher in diesem Abschnitt ausführlich

behandelt werden. Im folgenden werden die zugrundeliegenden Gleichungen sowie Lösungsmethoden für die in dieser Arbeit relevanten Problemstellungen entwickelt.

3.2.1 Die Wärmeleitungsgleichungen

Der Begriff der *Wärmeleitung* ist mit der Vorstellung der Übertragung einer Wärmemenge in Form eines *Wärmestroms* verknüpft. Der Wärmestrom $I_q(z)$ [W cm^{-2}] bezeichnet die Wärmemenge $q(z)$ [J], die in einer bestimmten Zeit durch eine Fläche A senkrecht zur Ausbreitungsrichtung z übertragen wird. Dies erfolgt gemäß dem 2. Hauptsatz der Wärmelehre von höheren zu niederen Temperaturen. Der Wärmestrom ist umso stärker, je größer die Temperaturdifferenz und je kürzer die Übertragungsstrecke ist. Damit ergibt sich im stationären Fall in einer Dimension

$$I_q(z) = j(z)A = \frac{dq(z)}{dt} = -\lambda \cdot A \frac{dT(z)}{dz}. \quad (3.1)$$

Die Proportionalitätskonstante λ [$\text{W cm}^{-1}\text{K}^{-1}$] heißt *Wärmeleitfähigkeit*, $j(z)$ [W cm^{-2}] bezeichnet den Betrag der Wärmestromdichte und $T(z)$ [K] die Temperatur am Ort z . In einem Medium mit thermisch isotropen Eigenschaften kann dies einfach auf drei Dimensionen erweitert werden:

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}) = -\lambda \nabla T(\mathbf{r}). \quad (3.2)$$

Das ist die von FOURIER 1822 formulierte *1. Wärmeleitungsgleichung* [Kne 82].

Weiterhin ergibt sich aus der Energieerhaltung folgende Kontinuitätsgleichung

$$\rho c_q \frac{\partial T(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + \nabla \mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = 0. \quad (3.3)$$

Sie besagt, daß eine Temperaturänderung in einem Wärmequellen-freien Volumen immer mit einem Wärmestrom aus diesem heraus verbunden ist. Dabei ist ρ [g cm^{-3}] die spezifische Dichte und c_q [$\text{J g}^{-1}\text{K}^{-1}$] die spezifische Wärmekapazität. Dieser Zusammenhang gilt an jedem Ort unabhängig von Isotropie oder Homogenität des Mediums. Aus (3.2) und (3.3) folgt dann im Falle eines homogenen Mediums mit temperaturunabhängigen Eigenschaften die *2. Wärmeleitungsgleichung* oder *Wärmediffusionsgleichung*, welche die zeitliche und räumliche Entwicklung einer Temperaturstörung beschreibt:

$$\frac{\partial T(\mathbf{r}, t)}{\partial t} - \kappa \nabla^2 T(\mathbf{r}, t) = 0. \quad (3.4)$$

mit der *Wärmediffusionskonstanten* (Temperaturleitfähigkeit)

$$\kappa := \frac{\lambda}{\rho c_q} \quad [\text{cm}^2\text{s}^{-1}] \quad (3.5)$$

Im Fall einer intrinsischen Quelle der Volumen-Wärmeleistung $S(\mathbf{r}, t)$ [W cm^{-3}], also der Produktion der Wärmemenge $q(\mathbf{r}, t)$ pro Zeit und Volumen im Punkt \mathbf{r} , wird (3.3) zu

$$\rho c_q \frac{\partial T(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + \nabla \mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = S(\mathbf{r}, t) = \frac{dq}{dV}. \quad (3.6)$$

Dies führt dann zur inhomogenen Wärmediffusionsgleichung

$$\frac{\partial T(\mathbf{r}, t)}{\partial t} - \kappa \nabla^2 T(\mathbf{r}, t) = \frac{S(\mathbf{r}, t)}{\rho c_q}. \quad (3.7)$$

Wichtige Anwendungen dieser Gleichung bestehen in der Behandlung von Wärmediffusion aufgrund Wärmeproduktion in einem Medium z. B. durch radioaktiven Zerfall, elektrische Aufheizung oder, wie im Rahmen dieser Arbeit, durch Absorption elektromagnetischer Strahlung.

3.2.2 Lösungen der Wärmediffusionsgleichung

Zunächst sollen anhand der homogenen eindimensionalen Wärmediffusionsgleichung die Eigenschaften der Lösung sowie die Anfangs- und Randbedingungen diskutiert werden. Die Ausführung folgen im wesentlichen [Car 59]

Man betrachtet ein unendlich ausgedehntes Medium, in dem die Temperaturentbreitung nur in z -Richtung erfolgt und Flächen gleicher Temperatur parallel zu $z = 0$ verlaufen. Es gilt

$$\frac{\partial T(z, t)}{\partial t} - \kappa \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} = 0. \quad (3.8)$$

Eine spezielle Lösung von (3.8) für $t > \tau > 0$ ist gegeben durch

$$T(z, t) = \frac{q'}{2\rho c_q \sqrt{\pi\kappa(t-\tau)}} \exp\left(-\frac{(z-z')^2}{4\kappa(t-\tau)}\right). \quad (3.9)$$

mit den Eigenschaften

$$\begin{aligned} T(z, t) &\rightarrow 0 && \text{für } t \rightarrow \tau, z \neq z' \text{ aber fest} \\ T(z, t) &\rightarrow \infty && \text{für } t \rightarrow \tau, z = z' \\ \int_{-\infty}^{\infty} T(z, t) dz &= \frac{q'}{\rho c_q} && \text{für } t \geq \tau. \end{aligned}$$

Damit kann (3.9) interpretiert werden als die Lösung von (3.8) für die Flächenwärmeenergiedichte q' [J cm^{-2}], die zur Zeit $t = \tau$ in der Ebene $z = z'$ freigesetzt wird (*eindimensionaler Wärmepol*, s. Abb 3.1). Auf den Fall des unendlich ausgedehnten Mediums in drei Dimensionen übertragen ergibt sich analog

$$T(\mathbf{r}, t) = \frac{q}{8\rho c_q (\pi\kappa(t-\tau))^{\frac{3}{2}}} \exp\left[-\frac{(x-x')^2 + (y-y')^2 + (z-z')^2}{4\kappa(t-\tau)}\right]. \quad (3.10)$$

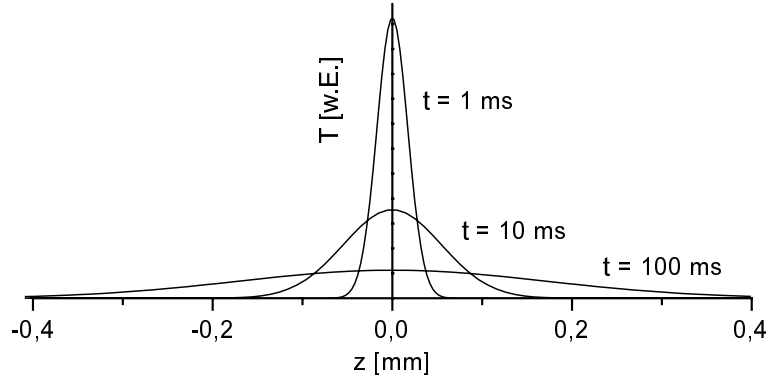


Abbildung 3.1: Raumzeitliches Verhalten des eindimensionalen Wärmepols. Die physikalischen Eigenschaften entsprechen denen von Wasser.

Dies ist die Temperaturverteilung aufgrund der Wärmemenge q im Punkt \mathbf{r}' zur Zeit τ , also die Lösung der inhomogenen Gleichung (3.7) mit dem Quellterm $S(\mathbf{r}', \tau) = q \cdot \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \cdot \delta(t - \tau)$. Dabei kann

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t, \tau) = \frac{1}{8(\pi\kappa(t - \tau))^{\frac{3}{2}}} \exp \left[-\frac{(x - x')^2 + (y - y')^2 + (z - z')^2}{4\kappa(t - \tau)} \right] \quad (3.11)$$

als die GREENSche Funktion der Wärmediffusionsgleichung im unendlich ausgedehnten Medium aufgefaßt werden.

Sie erlangt große Bedeutung in der Darstellung von Lösungen der inhomogenen Wärmediffusionsgleichung (3.7) für raumzeitlich variierende Wärmequellen der Form

$$S(\mathbf{r}, t) = S_0 \cdot f(\mathbf{r})g(t). \quad (3.12)$$

Dabei ist S_0 die durchschnittliche Volumen-Wärmeleistung, $f(\mathbf{r})$ die räumliche Verteilung und $g(t)$ der zeitliche Verlauf des Quellterms. Falls weiterhin auf der Oberfläche ∂V_0 des betrachteten Volumens V_0 die Temperatur $\vartheta(\mathbf{r}', \tau)$ vorgegeben ist, kann man mit Hilfe der GREENSchen Identitäten zeigen (s. Anh. B), daß die Lösung gegeben ist durch

$$T(\mathbf{r}, t) = \frac{S_0}{\rho c q} \int_{-\infty}^t d\tau \int_{V_0} dV' f(\mathbf{r}')g(\tau)G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t, \tau) - \kappa \int_{-\infty}^t d\tau \int_{\partial V_0} dA' \vartheta(\mathbf{r}', \tau) \frac{\partial}{\partial n} G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t, \tau). \quad (3.13)$$

Dabei erstreckt sich das erste Integral über das betrachtete Volumen V_0 , das zweite Integral wird längs des Randes dieses Volumens ∂V_0 ausgewertet. Hier bedeutet $\partial/\partial n$ die Ableitung nach der Oberflächennormalen des Randes ∂V_0 . Auf diese Weise kann, bei für das Problem gegebener GREENSfunktion, die Lösung $T(\mathbf{r}, t)$ aus der Quellverteilung und der Randtemperatur berechnet werden.

Insbesondere ergibt sich die Lösung der inhomogenen Wärmediffusionsgleichung für den Fall einer verschwindenden Normalenableitung der GREENSchen Funktion zu

$$T(\mathbf{r}, t) = \frac{S_0}{\rho c_q} \int_{-\infty}^t d\tau \int_{V_0} dV' f(\mathbf{r}') g(\tau) G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t, \tau). \quad (3.14)$$

Diese Gleichung wird im weiteren Verlauf sehr wichtig sein, da die in der vorliegenden Arbeit behandelten Probleme der Wärmeleitung sämtlich in dieser Form gelöst werden können. Diese Lösung kann gedeutet werden als die Superposition der Temperaturfelder zeitlich und räumlich gewichteter Punkt-Wärmequellen.

3.2.3 Behandlung der Randbedingungen

Im folgenden wird beispielhaft die Formulierung von Randbedingungen und die Herleitung geeigneter GREENScher Funktionen für spezielle Probleme demonstriert. Dabei wird der wichtige Spezialfall der verlustfreien Oberfläche behandelt.

Formulierung der Randbedingungen

Beispiele von Randbedingungen für Probleme der Wärmediffusion sind beispielsweise an einer Oberfläche vorgegebene Temperatur, vorgegebener Wärmefluß, linearer und nichtlinearer Wärmetransport. Im folgenden soll die Randbedingung des sog. *linearen Wärmetransportes* über eine Grenzfläche beschrieben werden.

Der Wärmefluß über die Oberfläche des betrachteten Volumens in ein angrenzendes Medium wird angesetzt als *proportional* zur Temperaturdifferenz zwischen der Volumenoberfläche und der Umgebung (daher die Bezeichnung dieser Randbedingung)

$$j = H(T_a - T_i) \quad (3.15)$$

mit T_a, T_i der Außen- resp. Innentemperatur und der *Oberflächen-Wärmeleitfähigkeit* H [$\text{W K}^{-1} \text{cm}^{-2}$]. j ist wiederum die Wärmestromdichte. Für isotherme Oberflächen gilt ähnlich zu (3.1)

$$j = -\lambda \frac{\partial T}{\partial n}. \quad (3.16)$$

mit der Normalenableitung $\partial/\partial n$. Die Randbedingung eines vorgegebenen Flusses über eine Oberfläche kann damit formuliert werden:

$$\lambda \frac{\partial T}{\partial n} + H(T_a - T_i) = 0. \quad (3.17)$$

Der Ansatz einer linearen Abhängigkeit der Oberflächenverluste von der Temperaturdifferenz beschreibt lediglich Prozesse der Wärmeleitung. Verluste durch Wärmestrahlung werden nicht berücksichtigt. Diese folgen einer T^4 -Abhängigkeit und dominieren mit zunehmender Temperaturdifferenz (s. Abschn. 3.3).

Eine besonders einfache Form der Lösung der Wärmediffusionsgleichung ergibt sich für die Annahme einer perfekt isolierenden Oberfläche, also eines verschwindenden Flusses durch diese. Entsprechend obiger Gleichungen ist diese Näherung gut erfüllt, falls

1. Die Oberflächen-Wärmeleitfähigkeit sehr gering ist.
2. Der Temperaturgradient nahe der Oberfläche gering ist.

Bei der theoretischen Beschreibung von PPTR-Signale wird diese Annahme vernachlässigbaren Wärmetransportes über die Oberfläche gemacht. Die Gültigkeit dieser Näherung wird im Rahmen des Kapitels 4 diskutiert.

Herleitung der GREENschen Funktion

Die Randbedingung einer isolierenden Oberfläche soll nun für den eindimensionalen Halbraum behandelt werden. Die Wahl dieser einfache Geometrie bietet einerseits eine einfache Darstellung der prinzipiellen Vorgehensweise, andererseits handelt es sich um einen wichtigen Anwendungsfall. Im folgenden soll gezeigt werden, wie die GREENsche Funktion des Problems mit Hilfe der Spiegelladungsmethode hergeleitet werden kann.

Die Lösung der Wärmediffusionsgleichung für den eindimensionalen Wärmepol wurde bereits in Abschnitt 3.2.1 behandelt (Gleichung (3.9)), sie entspricht (bis auf den Faktor $q/(\rho c_q)$) der GREENfunktion im unendlich ausgedehnten Medium in einer Dimension. Die geforderte Randbedingung des verschwindenden Wärmeverlustes über die Oberfläche bedeutet die Annahme einer verschwindenden Oberflächen-Wärmeleitfähigkeit $H \rightarrow 0$ und lautet entsprechend (3.17)

$$\left. \frac{\partial T}{\partial z} \right|_{z=0} = 0. \quad (3.18)$$

Diese Bedingungen der verschwindenden Ableitung an der Oberfläche ist für folgende Lösung der Wärmediffusionsgleichung für alle Zeiten t erfüllt:

$$T(z, z', t, \tau) = \frac{q'}{2\rho c_q \sqrt{\pi\kappa(t-\tau)}} \left(e^{-\frac{(z-z')^2}{4\kappa(t-\tau)}} + e^{-\frac{(z+z')^2}{4\kappa(t-\tau)}} \right). \quad (3.19)$$

Sie kann aufgefaßt werden als das Temperaturfeld, das sich im unendlich ausgedehnten Medium durch zwei Ebenen in $z = -z'$ und $z = z'$, belegt mit der Wärmeenergiedichte q' zur Zeit $t = \tau$, ergibt. Dies entspricht zwei spiegelsymmetrisch zur Oberfläche angeordneten eindimensionalen Wärmepolen (Abb. 3.2). Somit ist klar, daß die Überlagerung der Temperaturfelder zu einer in $z = 0$ symmetrischen Temperaturverteilung führt. Folglich verschwindet dort die Ableitung und 3.18 ist erfüllt.

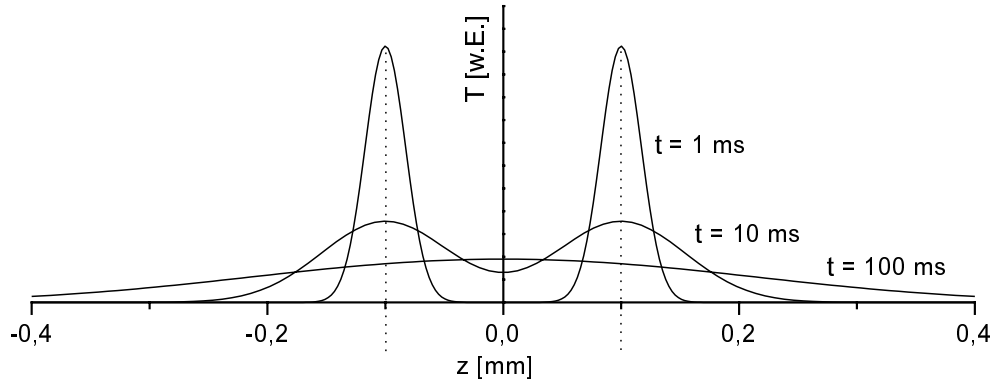


Abbildung 3.2: Illustration zur Modellierung der Randbedingung einer isolierenden Oberfläche bei $z = 0$ mit Hilfe der Spiegelladungsmethode. Die Wärmequellen liegen bei $z = \pm 0,1$ mm

Dieser Ausdruck löst daher die eindimensionale Wärmediffusionsgleichung für $z \geq 0$ und erfüllt die geforderte Randbedingung. Die GREENfunktion lautet daher:

$$G(z, z', t, \tau) = \frac{1}{2\sqrt{\pi\kappa(t-\tau)}} \left(e^{-\frac{(z-z')^2}{4\kappa(t-\tau)}} + e^{-\frac{(z+z')^2}{4\kappa(t-\tau)}} \right). \quad (3.20)$$

Unter Verwendung von (3.13) kann nun mit Hilfe dieser Funktion die Lösung der inhomogenen Wärmediffusionsgleichung für beliebige Quellterme $S(\mathbf{r}, t)$ angegeben werden.

Wegen der Konstellation spiegelbildlich angeordneter Wärmequellen führt dieses Verfahren die Bezeichnung „Spiegelladungsmethode“. Diese ist vor allem aus der Theorie elektrostatischer Potentiale bekannt, wird aber auch in der Gewebeoptik zur Realisierung von Randbedingungen für die Lichtausbreitung im Gewebe benutzt [Has 94]. Zum Modellieren der Randbedingungen können auch negative Quellen (Senken) oder kontinuierlich verlaufende Quellverteilungen zum Einsatz gelangen.

3.3 Energietransport durch Wärmestrahlung

Jeder Körper befindet sich im ständigen Austausch elektromagnetischer Strahlung mit seiner Umgebung. Dabei hängt die Intensität und spektrale Verteilung der von ihm emittierten Strahlung im Idealfall nur von seiner Temperatur ab. Bei einem realen Strahler beobachtet man demgegenüber eine spektral abhängige Verringerung der emittierten Intensität unter Einfluß von Material und Oberflächenbeschaffenheit. Das Verhältnis dieser Intensität $I(\lambda, T)$ zu der eines schwarzen Strahlers ($I_{\text{BB}}(\lambda, T)$) der gleichen Temperatur T bei einer Wellenlänge λ heißt *Emissionsvermögen* $\varepsilon(\lambda, T)$. Nach KIRCHHOFF gilt [BSW 74]

$$\frac{I(\lambda, T)}{I_{\text{BB}}(\lambda, T)} =: \varepsilon(\lambda, T) = \alpha(\lambda, T) \quad (3.21)$$

dabei bezeichnet $\alpha(\lambda, T)$ den *Absorptionsgrad* eines Körpers der Temperatur T . Dieser definiert sich als der Anteil eines auf den Körper auftreffenden Strahlungsflusses bei der Wellenlänge λ , welcher von diesem absorbiert wird. Entsprechend definiert man den *Reflexionsgrad* $\rho(\lambda, T)$ als den zurückgeworfenen und den *Transmissionsgrad* $\tau(\lambda, T)$ als den hindurchtretenden Anteil der Strahlung. Aus der Energieerhaltung folgt [Kuc 91]

$$\rho(\lambda, T) + \alpha(\lambda, T) + \tau(\lambda, T) = 1. \quad (3.22)$$

Da für einen idealen Strahler gilt $\epsilon(\lambda) = 1 = \alpha(\lambda)$, folgt für diesen auch $\rho(\lambda, T) = \tau(\lambda, T) = 0$. Wegen der verschwindenden Reflektivität in diesem Fall spricht man daher von einem *schwarzen Strahler* und von *Schwarzkörperstrahlung*.

Die von einem schwarzen Strahler über den gesamten Wellenlängenbereich aufsummierte abgestrahlte Intensität ist somit nur von dessen Temperatur abhängig. Diesen Zusammenhang beschreibt das STEFAN-BOLTZMANN Gesetz [BSW 74]

$$I(T) = \sigma T^4 \quad [\text{W cm}^{-2}] \quad (3.23)$$

mit der STEFAN-BOLTZMANN-Konstanten [BSW 74] $\sigma = 5,67 \cdot 10^{-8} \text{ W cm}^{-2} \text{ K}^{-4}$.

Die Lage des Intensitätsmaximums im Spektrum der Schwarzkörperstrahlung wird durch das WIENSche Verschiebungsgesetz beschrieben:

$$\lambda_{\max} \cdot T = 2898 \mu\text{m K} . \quad (3.24)$$

Die Erklärung der spektralen Intensitätsverteilung der Schwarzkörperstrahlung gelang 1900 durch MAX PLANCK [Pla 59] unter der Annahme, daß der Energieaustausch durch Strahlung der Frequenz ν nur in *Quanten* der Größe $\Delta E = h\nu$ erfolgt. Die PLANCKsche Strahlungsformel lautet

$$dL(\lambda, T) = \frac{2hc^2}{\lambda^5} \cdot \frac{1}{e^{\frac{hc}{\lambda kT}} - 1} d\lambda \quad (3.25)$$

mit der im Wellenlängenbereich $[\lambda; \lambda + d\lambda]$ abgegebenen Strahldichte $L(\lambda, T)$, der Vakuum-Lichtgeschwindigkeit c und dem PLANCKschen Wirkungsquantum $h = 6,626 \cdot 10^{-34} \text{ Js}$.

Gegenstand der vorliegenden Arbeit ist die Interpretation des zeitlichen Verlaufs der Strahlungsintensität nach Aufheizen eines gewebeähnlichen Mediums durch einen Laserpuls. Daher ist die abgestrahlte Intensität $I(T, t)$ gemäß (3.23) die eigentliche Meßgröße unseres Experiments.

Gleichung (3.23) bildet folgende Randbedingung für oberflächennahe Wärmeleitprozesse

$$\lambda \frac{\partial T}{\partial n} = \sigma(T_i^4 - T_a^4) . \quad (3.26)$$

Für den Fall, daß $T_i - T_a \ll T_i$, kann die rechte Seite linearisiert werden und (3.26) geht näherungsweise in Randbedingung (3.17) über mit $H = 4\sigma T_a^3$. Aus diesem Grund wird (3.17) manchmal als „Strahlungs-Randbedingung“ bezeichnet [Car 59].

3.4 Wärmeübertrag durch Materialtransport

Dieses als *Konvektion* bezeichnete Phänomen tritt dann auf, wenn die in einem Volumenelement gespeicherte Wärmemenge aufgrund des Materiestroms in einem fließenden Medium (Gas oder Flüssigkeit) transportiert wird. Man unterscheidet zwischen *erzwungener Konvektion* durch eine extern angetriebene Strömung und dem Fall einer selbständig einsetzenden Strömung aufgrund lokaler Erwärmung und damit verbundene Dichteänderung, welche einen Auftrieb bewirkt (*freie Konvektion*).

Von Interesse ist meist die Temperaturentwicklung in einem Körper, welcher sich in Kontakt mit einem strömenden Medium befindet. Experimente haben gezeigt, daß sich der Wärmestrom über die Grenzfläche zu einem Fluid im Fall erzwungener Konvektion zu einer Form gemäß (3.15) ergibt, wobei H außer von den Materialeigenschaften der beteiligten Substanzen auch von der Strömungsgeschwindigkeit und der Form der Oberfläche abhängt. Für natürliche Konvektion ergibt sich experimentell ein Wärmestrom, der nicht linear von der Temperaturdifferenz zwischen Körper und Fluid abhängt, sondern von der Form $j = H(T_a - T_i)^{5/4}$ ist [Car 59].

Bei der Betrachtung von Wärmeleitprozessen biologischen Gewebes tritt der Fall freier Konvektion hauptsächlich an der Grenze Haut – Luft auf und kann bei der Behandlung photothermischer Signale vernachlässigt werden. Freie Konvektion im Gewebeinnern wird durch die Zellstruktur und eine relativ hohe Viskosität der meisten Körperflüssigkeiten unterdrückt. Der wichtigste Mechanismus konvektiven Wärmetransports im Gewebe ist die erzwungene Konvektion aufgrund der Durchblutung, im Falle lasermedizinischer Anwendungen bedeutet das den Einfluß des Blutstromes auf optisch induzierte thermische Prozesse.

Die Modellierung des Wärmetransports in Gewebe unter Einbeziehung der Durchblutung ist wegen der komplexen Randbedingungen sehr schwierig und kann nur numerisch behandelt werden. So müssen Anzahl der Blutgefäße in einem Gewebivolumen, ihre Lage, Größe und Form berücksichtigt werden. Weiterhin ist der Blutstrom i. a. nicht konstant, sondern durch den Pulsschlag moduliert.

Ein stark vereinfachendes Modell liefert jedoch auch analytische Lösungen: Ein zusätzlich eingeführter negativer Quellterm modelliert einen konstanten Wärmeverlust:

$$\frac{\partial T(\mathbf{r}, t)}{\partial t} - \kappa \nabla^2 T(\mathbf{r}, t) = \frac{S(t, \mathbf{r})}{\rho c_q} - wT . \quad (3.27)$$

Dies entspricht der Vorstellung, daß in jedem Punkt des Mediums erwärmte Materie durch solche bei Ausgangstemperatur mit einer Rate w [s^{-1}] ersetzt wird. Somit wird dem Volumen an jedem Punkt die Wärmeleistung $\rho c_q w T$ entzogen.

Diese vereinfachte Vorstellung schätzt den maximalen Wärmeverlust aufgrund der Durchblutung ab. In diesem Modell entsprechen Dichte und Wärmekapazität von Blut dem des umgebenden Gewebes. Im Vergleich zum „echten“ Gewebe ergibt sich die Rate

w aus dem Verhältnis des Blutstromes im Gewebe zu dessen Gesamtvolumen.

Unter Transformation der Variablen

$$T(\mathbf{r}, t) = D(\mathbf{r}, t) \exp(-wt) \quad (3.28)$$

wird Gleichung (3.27) zu

$$\frac{\partial D(\mathbf{r}, t)}{\partial t} - \kappa \nabla^2 D(\mathbf{r}, t) = \frac{S(t, \mathbf{r})}{\rho c_q} \exp(wt) . \quad (3.29)$$

Diese entspricht in ihrer Struktur der inhomogenen Wärmediffusionsgleichung so daß sich die Lösung analog zu (3.13) mit einem zusätzlichen Faktor $\exp(wt)$ ergibt [Roi 95].

Kapitel 4

Photothermische Radiometrie

THERMISCHE Meßverfahren nutzen die Wärmeleitung im Prüfmedium, um Aussagen über deren Zusammensetzung oder Aufbau zu erhalten. Üblicherweise wird eine Probe lokal erwärmt und die Temperaturentwicklung an einer oder mehreren Stellen gemessen. Dabei standen zunächst die Erfassung *thermischer* Eigenschaften wie die Wärmeleitfähigkeit oder die Wärmediffusionskonstante im Vordergrund [Par 61, Sch 68].

Neben dem primären Interesse an diesen Größen können solche Messungen darüberhinaus eingesetzt werden, um eine Materialerkennung bzw. -beurteilung durchzuführen, oder um Schadstellen, wie z. B. Risse oder Schichtablösungen, durch veränderte Wärmeleitwerte aufzuspüren [Bus 82, Leu 88]. Bei solchen Inspektionen steht fast immer der Wunsch nach einem nichtinvasiven und schnellen Verfahren im Vordergrund, welches zudem keine spezielle Probenpräparation beansprucht. Sowohl die lokale Erwärmung der Probe als auch die die Temperaturmessung kann z. B. elektrisch erfolgen (Thermoelemente, Thermistoren). Auf diese Weise wurden viele Experimente zur Bestimmung thermischer Gewebeeigenschaften *in vivo* und *in vitro* durchgeführt [Vol 85].

Vorteile gegenüber diesen Verfahren schafft in vieler Hinsicht die Aufheizung des Prüfstücks durch Lichtbestrahlung, i. a. als *photothermische* Methoden bezeichnet. Die lokale Erwärmung einer Probe aufgrund der Absorption eingestrahlt Lichtes ermöglicht einerseits eine sehr gute Dosimetrie, d. h. die genaue Kenntnis der im Medium in Wärme umgesetzten Energie. Weiterhin läßt sich durch Fokussierung und optische Abbildungen eine wohldefinierte Geometrie der Wärmequelle erreichen. Und schließlich kann sehr einfach eine zeitliche Intensitätsmodulation realisiert werden. Somit werden harmonische Anregungen in einem weiten Frequenzbereich sowie Pulsanregungen nahezu beliebigen Tastverhältnisses möglich. Neben dem Einsatz intensitätsstarker Lampen und Blitzlichter werden inzwischen vielfach Laserquellen eingesetzt.

Außer der Information über thermische Eigenschaften der Probe trägt das Signal auch Prägungen durch Merkmale der Wärmequelle wie deren zeitlicher Verlauf, räumliche Ausdehnungen und Geometrie (s. Abb. 4.1). Letztere werden bei photothermischen

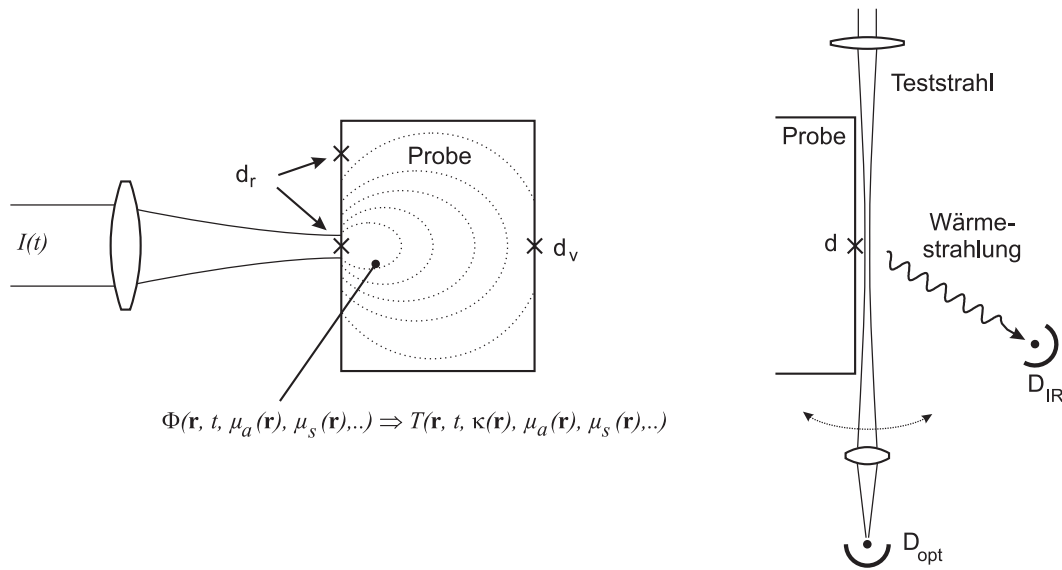


Abbildung 4.1: Schematische Darstellung des photothermischen Meßprinzipes. In der linken Skizze sind verschiedene Varianten der Detektionsgeometrie angedeutet („Rückwärts“- (d_r) und „Vorwärts“-Messung (d_v)). Rechts sind zwei prinzipielle optische Detektionsmethoden skizziert: Zum einen die Ausnutzung des Mirage-Effektes, d. h. die Ablenkung eines Teststrahles durch die Erwärmung des umgebenden Mediums und die dadurch bedingte Brechungsindexänderung; zum zweiten der direkte Nachweis der Wärmestrahlung mit entsprechenden Detektoren (*photothermische Radiometrie*). D_{opt} : Detektor für Teststrahl; D_{IR} : Wärmestrahlungsdetektor

Messungen durch die Bestrahlungsmodalitäten, vor allem aber durch die optischen Eigenschaften der Probe bestimmt. Die Interpretation photothermischer Signale gestattet mithin neben der Messung thermischer Größen auch die Untersuchung hinsichtlich *optischer* Materialparameter mit den o. g. Vorzügen der Methode.

Erfolgt außerdem die Temperaturmessung durch direkte Detektion der Wärmestrahlung, spricht man von Methoden der *photothermischen Radiometrie*. Diese und andere optische Verfahren zur Temperaturbestimmung ermöglichen eine berührungsfreie und schnelle Messung. Dabei können auch kleine Volumina aufgrund der Vermeidung parasitärer Wärmekapazitäten vermessen werden. Weiterhin bieten optische Detektionsmethoden die Möglichkeit des Einsatzes orts aufgelöster Systeme wie Kameras oder Scanner und die Nutzung abbildender Optiken z. B. für die Mikroskopie oder Makroaufnahmen.

Neben der Erforschung des Einsatzes der photothermischen Radiometrie in der zerstörungsfreien und kontaktlosen Materialprüfung (Beschichtungen, Lacke [Leu 84]; Nuklearanlagen [Tam 85]) fanden auch schon früh Untersuchungen zur Vermessung von pulverförmigen Substanzen [Nor 79] sowie zur Spektroskopie biologischer Materialien [Nor 81] statt.

Untersuchungen zur medizinischen Anwendung photothermischer Meßverfahren *in vivo* erfolgten bspw. in der Gewebespektroskopie [Lon 87], der Schichtdickenmessung

an Feuermalen [Jac 93, Lon 87a, Mil 96] und Messungen des Wassergehaltes der Haut [Xia 96]. Weiterhin demonstrieren vielfältige Untersuchungen an gewebeähnlichen Proben die Möglichkeiten der gepulsten photothermischen Radiometrie zur Bestimmung optischer Eigenschaften [Pra 92] und der Lokalisierung von Substrukturen [Smi 97].

Neben den o. g. Vorteilen, die photothermische Meßmethoden bieten, ergibt sich in der Lasermedizin eine besonders elegante Anwendung; es gilt, ohnehin ablaufende optisch induzierte thermische Prozesse zu nutzen, und sie einer Interpretation, z. B. bezüglich optischer Gewebeeigenschaften, zugänglich zu machen. Eine große Herausforderung stellt die Echtzeit-Behandlungskontrolle bei lasermedizinischen Anwendungen dar. Die Nutzung während der Behandlung entstehender photothermischer Signale zur medizinischen Dosimetrie bildet den Hintergrund der vorliegenden Arbeit.

In diesem Kapitel sollen die theoretischen Grundlagen der Entstehung photothermischer Signale erarbeitet werden. Dabei erfolgt die Quantifizierung des Einflusses optischer und thermischer Materialeigenschaften auf das Meßsignal mit Hilfe der bisher geschaffenen Formalismen zur Licht- und Wärmeausbreitung. Dies geschieht im Hinblick auf numerische Algorithmen zur Signalauswertung, die im Rahmen der Arbeit entwickelt wurden.

Nach einer allgemeinen Theorie des photothermischen Signals folgt die Behandlung verschiedener Einsatzmöglichkeiten speziell der gepulsten photothermischen Radiometrie.

Dabei soll zuerst der einfachste Fall eines optisch homogenen Mediums und des eindimensionalen Licht- und Wärmetransportes betrachtet werden. Anhand dieses einfachen Beispiels, welches in vielen Fällen zur Anwendung gelangt, wird auch die Implementierung verschiedener Lichtausbreitungs-Modelle demonstriert. Diese werden in bezug auf ihre Tauglichkeit zur Beschreibung photothermischer Messungen an Gewebe verglichen und beurteilt.

Eine Ausweitung der Theorie wird dann zeigen, wie auch strukturelle Untersuchungen, d. h. die photothermische Detektion optischer Inhomogenitäten gelingt. Dazu werden zuerst die Signale relativ einfacher Schichtproben beschrieben. Im Anschluß daran folgt die photothermische Behandlung komplexer mehrdimensionaler Strukturen.

4.1 Entstehung des photothermischen Signals

Die theoretische Beschreibung des photothermischen Signals läßt sich in drei Teilschritte untergliedern:

Die Erzeugung einer lokalen Erwärmung durch Absorption eingestrahlt Lichts, deren Form durch den Lichttransport in der Probe bestimmt wird; die räumliche Ausbreitung der Wärmequelle durch Mechanismen der Wärmeübertragung, die durch die thermischen Probeneigenschaften geprägt werden; sowie eine Intensitätsänderung der

von der Probe abgestrahlten Wärmestrahlung, wenn der Wärmetransport bis zu der betrachteten Region erfolgt ist. Diese phänomenologische Beschreibung soll nun exakt formuliert werden.

Die in einer bestrahlten Probe durch Absorptionsprozesse deponierte Energie pro Volumen ist gegeben durch die Energiedichte $W(\mathbf{r})$. Wenn die Strahlungsenergie zu einem Teil β in Wärmeenergie umgesetzt wird, führt dies an der Stelle \mathbf{r} zu einer Temperaturerhöhung um den Betrag

$$T(\mathbf{r}) = \beta \frac{W(\mathbf{r})}{\rho c_q}. \quad (4.1)$$

Wegen der sehr effizienten Umsetzung von Strahlungs- in Wärmeenergie liegt β in der Nähe von Eins [Vit 95a]. Als wesentlicher dissipativer Prozeß wirkt hier der Energieverlust von etwa 10...15 % durch die Generierung thermoelastischer Drücke [Loh 98].

Dabei ergibt sich $W(\mathbf{r})$ gemäß (2.20). Der dort implizit angesetzte Fall einer zeitlich konstanten Strahldichte soll nun auf eine Intensitätsmodulation der Strahlquelle ausgedehnt werden. Es werden nur Modulationsfrequenzen betrachtet, bei denen das Lichtfeld zu jeder Zeit als stationär angesehen werden kann, also eine Beschreibung mit Gleichung (2.22) gerechtfertigt ist. Für typische zu vermessende Gewebeparameter ($\mu_a > 1/\text{cm}$) liegen diese Frequenzen unterhalb 30 MHz, spätere Betrachtungen werden zeigen, daß die Signal-Frequenzanteile bei der photothermischen Radiometrie an Gewebe diese Grenze deutlich unterschreiten.

Die pro Zeit und Volumen eingebrachte Wärmemenge in einem Punkt \mathbf{r} zu einer Zeit t aufgrund der Absorption von Licht zeitlich variierender Intensität kann dann geschrieben werden als

$$S(\mathbf{r}, t) = \beta \mu_a g(t) \Phi(\mathbf{r}). \quad (4.2)$$

Dabei beschreibt die Funktion $g(t)$ den zeitlichen Intensitätsverlauf der Bestrahlungsstärke. Setzt man diesen Ausdruck als Quellterm in (3.7) ein, so erhält man folgende Gleichung, welche die Wärmediffusion aufgrund einer optisch induzierten Wärmequelle beschreibt

$$\frac{\partial T(\mathbf{r}, t)}{\partial t} - \kappa \nabla^2 T(\mathbf{r}, t) = \frac{\beta \mu_a g(t) \Phi(\mathbf{r})}{\rho c_q}. \quad (4.3)$$

Dabei sei $T(\mathbf{r}, t)$ im weiteren als die raumzeitliche Temperaturerhöhung der Probe gegenüber der ungestörten Temperatur T_0 vor der Bestrahlung zu verstehen, sie führt gemäß (3.23) zu einer zeitlichen Intensitätsänderung der thermischen Strahlung am Ort \mathbf{r} , deren Detektion das photothermische Signal liefert.

Im folgenden betrachten wir die Strahlungsleistung im Punkt \mathbf{r}_d . Diese ergibt sich durch Beiträge aus dem gesamten Probenvolumen, wobei jedoch eine Abschwächung durch eventuelle Strahlungsabsorption bei der Ausbreitung in der Probe berücksichtigt werden muß. Somit ergibt sich die Intensität in \mathbf{r}_d zu

$$I_d(t) = \epsilon \sigma \int_{V_0} \mu_{IR}(\mathbf{r}) e^{-\int_{\mathbf{r}}^{\mathbf{r}_d} \mu_{IR}(\mathbf{s}) d\mathbf{s}} \left(T_0 + T(\mathbf{r}, t) \right)^4 dV. \quad (4.4)$$

Der Koeffizient der Wärmestrahlungsabsorption in der Probe $\mu_{IR}(\mathbf{r})$ [cm^{-1}] und die Emissivität ε sind über den Detektions-Wellenlängenbereich gemittelte Größen. Im Argument der Exponentialfunktion steht das Integral entlang des Weges von \mathbf{r} nach \mathbf{r}_d . Diese Formulierung berücksichtigt den allgemeinen Fall einer Ortsabhängigkeit von $\mu_{IR}(\mathbf{r})$.

Die photothermisch erzeugte Temperaturerhöhung der Probe ist oft sehr gering verglichen mit der Gleichgewichtstemperatur T_0 . Dies gilt insbesondere in der medizinischen Diagnostik, wo eine thermische Schädigung des Gewebes vermieden werden soll. Hier beträgt T bis zu einigen K, T_0 liegt bei etwa 300 K.

Für den Fall $T \ll T_0$ kann die T^4 -Abhängigkeit des Strahlungsgesetzes in (4.4) durch das erste Glied der Taylorentwicklung um T_0 ersetzt werden und man erhält

$$I_d(t) \approx 4\varepsilon\sigma T_0^3 \int_{V_0} \mu_{IR}(\mathbf{r}) e^{-\int_{\mathbf{r}}^{\mathbf{r}_d} \mu_{IR}(s) ds} T(\mathbf{r}, t) dV. \quad (4.5)$$

Da $T(\mathbf{r}, t)$ durch die inhomogene Wärmediffusionsgleichung (4.3) gegeben ist, kann die in Abschnitt 3.2.2 mit Hilfe der GREENSchen Funktion hergeleitete Lösung (3.13) benutzt werden, um das Detektorsignal in \mathbf{r}_d zu berechnen:

$$\begin{aligned} U_{PTR}(t) = & 4C\varepsilon\sigma T_0^3 \int_{V_0} dV \mu_{IR}(\mathbf{r}) e^{-\int_{\mathbf{r}}^{\mathbf{r}_d} \mu_{IR}(s) ds} \\ & \times \left[\frac{\beta\mu_a}{\rho c_q} \int_{-\infty}^t d\tau \int_{V_0} dV' g(\tau) \Phi(\mathbf{r}') G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t, \tau) \right. \\ & \left. - \kappa \int_{-\infty}^t d\tau \int_{\partial V_0} dA' \vartheta(\mathbf{r}', \tau) \frac{\partial}{\partial n} G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t, \tau) \right]. \quad (4.6) \end{aligned}$$

Die Konstante C beinhaltet die Detektionsempfindlichkeit, die sich aus den Detektoreigenschaften sowie durch experimentelle Randbedingungen (Abbildungsoptik, Geometrie des Experimentes, etc.) ergibt.

Diese Gleichung stellt die allgemeine Beschreibung eines photothermischen Signals dar. Hier wird die Verknüpfung der Lichtverteilung – und damit der optischen Eigenschaften – über die Wärmediffusion mit dem zeitlichen Verhalten der Wärmestrahlung deutlich. Eine eingehende Diskussion des Verhaltens der Lösung erfolgt im Rahmen spezieller Anwendungsfälle.

Zunächst sollen einige grundsätzliche vereinfachende Annahmen gemacht werden. Wir betrachten im weiteren ein halbumendliches, thermisch homogenes Medium, über dessen Rand kein Wärmeverlust stattfindet (3.18). Für diese Randbedingung wurde die GREENSche Funktion im eindimensionalen Fall bereits in (3.20) angegeben, sie ergibt sich mit der Spiegelladungsmethode aus der Superposition zweier räumlich und zeitlich punktförmiger Wärmequellen. Die Herleitung der GREENSchen Funktion für die Randbedingung einer verlustfreien Oberfläche erfolgt in drei Dimensionen durch die spiegelbildliche Anordnung zweier Wärmequellen der Form (3.10). Diese liegen symmetrisch

zur x - y -Ebene auf einer Linie senkrecht zu dieser Ebene:

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t, \tau) = \frac{1}{8(\pi\kappa(t-\tau))^{\frac{3}{2}}} \left(e^{-\frac{(x-x')^2+(y-y')^2+(z-z')^2}{4\kappa(t-\tau)}} + e^{-\frac{(x-x')^2+(y-y')^2+(z+z')^2}{4\kappa(t-\tau)}} \right). \quad (4.7)$$

Weiterhin sei μ_{IR} konstant im betrachteten Volumen. Da $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t, \tau)$ zu allen Zeiten die Bedingung einer verschwindenden Ableitung an der Oberfläche erfüllt, fällt der letzte Term in (4.6) weg. Damit ergibt sich das Signal gemäß (3.14) zu

$$U_{PTR}(t) = K \frac{\mu_a \mu_{IR}}{8\rho c_q (\pi\kappa)^{\frac{3}{2}}} \int_{V_0} dV e^{-\mu_{IR}|r-r_d|} \int_{-\infty}^t d\tau \int_{V_0} dV' g(\tau) \Phi(\mathbf{r}') \\ \times \frac{1}{(t-\tau)^{\frac{3}{2}}} e^{-\frac{(x-x')^2+(y-y')^2}{4\kappa(t-\tau)}} \left[e^{-\frac{(z-z')^2}{4\kappa(t-\tau)}} + e^{-\frac{(z+z')^2}{4\kappa(t-\tau)}} \right]. \quad (4.8)$$

In K sind alle experimentspezifischen Größen zu einer Kalibrations-Konstanten zusammengefaßt. Mit dieser Form für das photothermische Signal werden alle im Rahmen dieser Arbeit untersuchten Probleme behandelt werden.

Die Rechtfertigung der Randbedingung vernachlässigbarer Oberflächenverluste (3.18) ergibt sich bei Betrachtung typischer Werte für die Oberflächen-Wärmeleitfähigkeit H , die Wärmediffusionskonstante λ und Temperaturgradienten nahe der Oberfläche, wie sie im Rahmen medizinischer Anwendungen zu erwarten sind. H liegt im Bereich von $10^{-3} \text{ W cm}^{-2}$ [Gro 61]. Dieser Wert gilt für den Fall freier Konvektion eines Gases an einer festen Grenzfläche. Dies stellt eine obere Abschätzung dar, da das Einsetzen einer konvektiven Strömung bei einer PPTR-Messung aufgrund der geringen Temperaturerhöhungen und der betrachteten Zeitskalen unwahrscheinlich erscheint. Die Wärmeleitfähigkeit λ wird als die von Wasser angenommen, $\lambda = 5,7 \cdot 10^{-3} \text{ W cm}^{-1} \text{ K}^{-1}$. Betrachtet wird eine Temperaturerhöhung um 5 K an der Oberfläche und eine optische Eindringtiefe im mm-Bereich.

Damit ergibt sich an der Oberfläche ein Wärmefluß von einigen 100 mW cm^{-2} in die Probe verglichen mit einem Wert im Bereich einiger mW cm^{-2} für den Verlust durch Wärmeleitung in die Umgebung. Somit ist die Annahme einer isolierenden Oberfläche gut erfüllt. Der Energieverlust durch Wärmestrahlung an der Oberfläche beträgt nach (3.23) etwa $0,1 \text{ mW cm}^{-2}$ und ist somit ebenfalls vernachlässigbar.

Der zeitliche Intensitätsverlauf $g(t)$ der Bestrahlung bestimmt wesentlich die Signalform. Die meisten Experimente verwenden entweder eine *harmonische* Anregung geringer Intensität oder eine *gepulste* Einstrahlung relativ hoher Spitzenleistung. Seltener Fälle sind die quasi kontinuierliche Bestrahlungen über mehrere Sekunden [Sch 68] oder das schnelle laterale Abtasten einer Probe mit einem cw-Laserstrahl („flying spot camera“) [Fav 94].

Im folgenden wird der Fall einer harmonischen Anregung skizziert und die Lösung für eine gepulste Anregung ausführlich dargestellt.

Harmonischer Quellterm

Dies beschreibt den Fall einer Bestrahlung der mit der Frequenz ω harmonisch modulierten Intensität

$$I(t) = I_0 \cdot (1 + e^{i\omega t}) \quad (4.9)$$

Dies geschieht optomechanisch (Chopper, Scanner), mithilfe akustooptischer Modulatoren oder einer direkten Modulation der Strahlquelle. Die Lösung der Wärmediffusionsgleichung im unendlichen Medium für eine harmonisch modulierte Punktquelle der mittleren Leistung \dot{q} im Ursprung ist nach (3.11) und (3.13) gegeben durch

$$\begin{aligned} T(\mathbf{r}, t) &= \frac{\dot{q}}{8\rho c_q (\pi\kappa)^{\frac{3}{2}}} \int_{-\infty}^t d\tau \int_{V_0} dV' \frac{\delta(\mathbf{r})}{(t-\tau)^{\frac{3}{2}}} e^{\left(i\omega\tau - \frac{(x-x')^2 + (y-y')^2 + (z-z')^2}{4\kappa(t-\tau)} \right)} \\ &= \frac{\dot{q}}{4\rho c_q \pi\kappa} \cdot \frac{1}{r} e^{(-kr + i(\omega t - kr))} \end{aligned} \quad (4.10)$$

$$\text{mit } k = \sqrt{\frac{\omega}{2\kappa}}.$$

Mit (4.6) lassen sich entsprechende Lösungen für den Fall einer ausgedehnten harmonischen Wärmequelle und anderer Randbedingungen angeben, worauf an dieser Stelle verzichtet werden soll (siehe bspw. [Imh 94]). Die wesentlichen Merkmale lassen sich jedoch anhand von (4.10) erkennen.

Die Lösung stellt eine gedämpfte Kugelwelle der Wellenlänge $\Lambda = 2\pi/k$ dar, ihre Eindringtiefe beträgt $1/k = \Lambda/(2\pi)$. Demnach wird diese thermische Welle über die Ausbreitungsstrecke einer Wellenlänge auf das $e^{-2\pi} = 0,002$ -fache ihrer Anfangsamplitude abgeschwächt. Durch die Möglichkeit eines sehr schmalbandigen, also rauscharmen, Nachweises mit Hilfe von Heterodyn-Verfahren läßt sich die thermische Welle trotz dieser starken Dämpfung über mehrere Wellenlängen nachweisen. Die Meßgrößen sind Amplitude und Phase der Welle. Aus deren Änderung bei Ausbreitung in einem Medium kann man z. B. Fehlstellen im Material detektieren, Schichtdicken und Materialeigenschaften bestimmen.

Eine besonders wichtige Eigenschaft dieser Messung ist die Möglichkeit, über die Modulationsfrequenz die Eindringtiefe der thermischen Welle und somit das Meßvolumen zu beeinflussen. Verwandte Modulationsfrequenzen liegen im Hz-Bereich bei medizinischen Anwendungen [Pla 91] bis in den 10 MHz-Bereich bei der Vermessung von Metall- und Halbleiterschichten von der Dicke einiger μm [Wag 94].

Gleichung (4.10) stellt den Anteil der Lösung für den harmonischen Term der Quellfunktion (4.9) dar. Der konstante Anteil führt zu einem stetigen Anstieg der Proben temperatur, liefert jedoch wegen des phasenempfindlichen Nachweises keinen Beitrag zum Meßsignal. Die Probenaufheizung muß jedoch bezüglich der Änderung physikalischer Probeneigenschaften oder sogar einer thermischen Schädigung beachtet werden.

Gepulste Anregung

Einen alternativen Ansatz bildet die Applikation eines Lichtpulses. Diese Methode ist Gegenstand der vorliegenden Arbeit und soll daher ausführlich behandelt werden. Eine transiente Anregung kann im Fall hinreichend kurzer Pulsdauern durch einen Verlauf der eingestrahnten Intensität gemäß

$$I(t) = Q_0 \cdot \delta(t) \quad (4.11)$$

beschrieben werden mit der Pulsenergie Q_0 . Die Bestrahlungsstärke in der Probe zeigt eine entsprechende Zeitabhängigkeit $\Phi(\mathbf{r})g(t) =: \Phi(\mathbf{r}, t) = Q(\mathbf{r}) \cdot \delta(t)$. Die Bedingung eines hinreichend kurzen Pulses wird am Ende dieses Abschnitts quantifiziert.

Das Signal für ein PPTR-Experiment ergibt sich mit dieser Einstrahlung entsprechend (4.8). Der Ort \mathbf{r}_d der betrachteten Wärmestrahlungsintensität soll nun in der Grenzfläche des Halbraumes liegen, da im Experiment die Strahlung über die Probenoberfläche gemessen wird. Dort mißt man

$$\begin{aligned} U(t) &= K \frac{\mu_a \mu_{IR}}{8\rho c_q (\pi\kappa)^{\frac{3}{2}}} \int_{V_0} dV e^{-\mu_{IR}|r-r_d|} \int_{-\infty}^t d\tau \int_{V_0} dV' \delta(\tau) Q(\mathbf{r}') \\ &\quad \times \frac{1}{(t-\tau)^{\frac{3}{2}}} e^{-\frac{(x-x')^2+(y-y')^2}{4\kappa(t-\tau)}} \left[e^{-\frac{(z-z')^2}{4\kappa(t-\tau)}} + e^{-\frac{(z+z')^2}{4\kappa(t-\tau)}} \right] \\ &= K \frac{\mu_a \mu_{IR}}{8\rho c_q (\pi\kappa t)^{\frac{3}{2}}} \int_{V_0} dV e^{-\mu_{IR}\sqrt{(x-x_d)^2+(y-y_d)^2+(z-z_d)^2}} \int_{V_0} dV' Q(\mathbf{r}') \\ &\quad \times e^{-\frac{1}{4\kappa}((x-x')^2+(y-y')^2)} \left[e^{-\frac{(z-z')^2}{4\kappa}} + e^{-\frac{(z+z')^2}{4\kappa}} \right] \end{aligned} \quad (4.12)$$

Dabei erfolgte bei der Umformung die Auswertung des Zeitintegrals über die $\delta(\tau)$ -Funktion. Im letzten Ausdruck liefert das zweite Integral die zeit- und ortsabhängige Temperaturverteilung in der Probe nach Einstrahlung eines Lichtpulses, das erste Integral wichtet die entsprechenden Signalanteile mit der Abschwächung längs ihrer Ausbreitung in der Probe. Der wesentliche Anteil der gemessenen Strahlung stammt somit aus einem Bereich der Tiefe $1/\mu_{IR}$ um \mathbf{r}_d .

Diese Formulierung gilt für die Detektion der Wärmestrahlung in \mathbf{r}_d über den gesamten Halbraum. Im Experiment erfolgt der Nachweis jedoch über die Abbildung der Probenoberfläche auf einen Detektor mit einem Öffnungswinkel von wenigen Grad zur Senkrechten, so daß nur ein kleiner Raumwinkel erfaßt wird (s. Abschn. 5.2.2). Aus diesem Grund liefern die lateralen Komponenten der Wärmestrahlung nur einen kleinen Beitrag zum Signal, der im folgenden vernachlässigt wird:

$$\begin{aligned}
U(t) \approx & K \frac{\mu_a \mu_{IR}}{8\rho c_q (\pi \kappa t)^{\frac{3}{2}}} \int_{V_0} dz e^{-\mu_{IR}|z-z_d|} \int_{V_0} dV' Q(\mathbf{r}') \\
& \times e^{-\frac{1}{4\kappa t}((x_d-x')^2+(y_d-y')^2)} \left[e^{-\frac{(z-z')^2}{4\kappa t}} + e^{-\frac{(z+z')^2}{4\kappa t}} \right].
\end{aligned} \tag{4.13}$$

Aufgrund der Randbedingung einer verschwindenden Ableitung an der Probenoberfläche bildet sich mit fortschreitender Zeit in deren Nähe ein immer schwächerer Temperaturgradient aus. Für große Werte von μ_{IR} kann die Temperaturverteilung als konstant über die zum Signal beitragenden Schichtdicke angenommen werden und durch den Wert am Detektionsort \mathbf{z}_d ersetzt werden. Dann kann das erste Integral gelöst werden und man erhält

$$\begin{aligned}
U(t) \approx & K \frac{\mu_a}{8\rho c_q (\pi \kappa t)^{\frac{3}{2}}} \int_{V_0} dV' Q(\mathbf{r}') \\
& \times e^{-\frac{1}{4\kappa t}((x_d-x')^2+(y_d-y')^2)} \left[e^{-\frac{(z_d-z')^2}{4\kappa t}} + e^{-\frac{(z_d+z')^2}{4\kappa t}} \right] \\
& = K \cdot T(\mathbf{r}_d, t).
\end{aligned} \tag{4.14}$$

Ein Vergleich mit (3.14) zeigt, daß das verbleibende Integral der Lösung der Wärmediffusionsgleichung unter den gegebenen Randbedingungen entspricht. Daraus ergibt sich das wichtige Ergebnis, daß das photothermische Signal für große Werte von μ_{IR} und/oder große Zeiten näherungsweise durch die *zeitliche Temperaturentwicklung am Detektionsort* beschrieben wird.

Dies ist identisch mit der Näherung $\mu_{IR} \rightarrow \infty$, also der Annahme eines nur an der Oberfläche abstrahlenden Mediums, wie sie üblicherweise formuliert wird. In diesem Rahmen wird für eine optisch homogen absorbierende Probe die Voraussetzung $\mu_a \ll \mu_{IR}$ gefordert [Tam 83]. Die Betrachtung des Temperaturgradienten über den Bereich der Wärmestrahlungs-Eindringtiefe gestattet eine differenziertere Diskussion der Näherung. Insbesondere gelingt die Abschätzung einer Zeit, ab der das Signal um einen geforderten Betrag von der exakten Lösung abweicht.

An dieser Stelle soll diskutiert werden, unter welcher Bedingung der zeitliche Verlauf eines Lichtpulses mit (4.11) beschrieben, dieser also als unendlich kurz angenommen werden darf. Bei diesem Grenzfall, im allgemeinen als „thermal confinement“ bezeichnet, tritt keine zeitliche Verbreiterung des Signals durch die Laserpulsdauer auf. Dies ist dann gegeben, wenn der Laserpuls kurz ist im Vergleich zu der Zeit t_{conf} , in der ein signifikanter Anteil der Energie durch Wärmediffusion aus dem bestrahlten Volumen transportiert werden kann. Die charakteristische Entfernung hierfür, die Eindring-

tiefe des Lichtes ℓ_{pen} wird verglichen mit der Strecke, nach der das Temperaturfeld eines Wärmepols auf das $1/e$ -fache abgeklungen ist:

$$\begin{aligned} \sqrt{4\kappa t} &\ll \ell_{pen} \\ \Rightarrow t_{conf} &\ll \frac{\ell_{pen}^2}{4\kappa}. \end{aligned} \quad (4.15)$$

Für den Fall nicht zu vernachlässigender Pulsdauern muß der zeitliche Pulsverlauf in (4.8) berücksichtigt werden (s. z. B. [Leu 84]), Betrachtungen in Kapitel 5 werden jedoch zeigen, daß Bedingung (4.15) für die im Rahmen der Arbeit verwandten Strahlquellen und Proben gut erfüllt ist.

Gleichung (4.14) beschreibt das PPTR-Experiment wegen der Näherungen (4.5) und der Vernachlässigung einer endlichen Wärmestrahlungsabsorption als zeitaufgelöste Messung der Oberflächentemperatur nach Einstrahlung eines kurzen Lichtpulses. Alle Rechnungen zur Signalmodellierung oder -auswertung, die im Rahmen dieser Arbeit gemacht wurden, beruhen auf der numerischen Integration von (4.14).

4.2 Eindimensionale Behandlung homogener Proben

Die eindimensionale Behandlung sowohl des Licht- als auch des Wärmetransportes an optisch homogenen Proben im Rahmen der gepulsten photothermischen Radiometrie stellt einen wichtigen Spezialfall dar, der seine Bedeutung z. B. in der Bestimmung optischer Parameter erlangt.

Im folgenden sollen die experimentellen Voraussetzungen für die Rechtfertigung dieser Annahmen diskutiert und die Auswirkungen auf die Formulierung des Problems dargelegt werden. Mit der Herleitung und Diskussion der Lösungen für rein absorbierende Medien und Proben mit zusätzlich streuenden Eigenschaften werden die Grundlagen für die im Rahmen der Arbeit gemachten spektroskopischen Untersuchungen geschaffen.

Die Probe erfülle die Geometrie eines unendlichen Halbraumes in kartesischen Koordinaten mit der Oberfläche in $z = 0$. Ein Laserstrahl werde entlang der z -Achse eingestrahlt, es werde die Strahlung aus dem Oberflächenareal A_d um den Ursprung detektiert. Die eindimensionale Beschreibung der Bestrahlungsdichte $\Phi(\mathbf{r}) = \Phi(z)$ in der Probe ist für einen reinen Absorber entlang der Strahlachse exakt mit dem LAMBERT-BEERSchen Gesetz (2.19) gegeben. Im Falle signifikanter Lichtstreuung kommt es zu Anteilen von Φ in x - und y -Richtung, so daß ein einfacher Zusammenhang wie oben nicht gilt. Im Grenzfall einer unendlich ausgedehnten Einstrahlung findet jedoch ein Lichttransport allein in z -Richtung statt. Für reale Umstände eines endlichen Strahlprofils gilt dies auch in guter Näherung entlang der Achse im Zentrum der Einstrahlung,

falls die Bedingung eines – verglichen mit der optischen Eindringtiefe ℓ_{pen} – breiten Strahldurchmessers $2w$ erfüllt ist [Kei 89].

Für die eindimensionale Beschreibung des durch Wärmediffusion in der Probe gegebenen PPTR-Signals gilt eine ähnliche Bedingung. Die betrachtete Fläche sollte kleiner sein als die laterale Ausdehnung der Wärmequelle. Auf diese Weise ist gewährleistet, daß nur Wärmeleitung entlang z das Signal beeinflusst und Randeffekte vernachlässigt werden können.

Allgemein läßt sich feststellen, daß eine eindimensionale thermo-optische Beschreibung des Experimentes möglich ist, falls gilt:

$$\ell_{pen} < 2w > \mathcal{O}A_d \quad (4.16)$$

($\mathcal{O}A_d$: laterale Ausdehnung der Detektionsfläche). Im Fall einer eindimensionalen Abhängigkeit der Lichtverteilung $Q(\mathbf{r}) = Q_0 f(z)$ kann das zweite Integral in (4.12) über x und y ausgeführt werden, so daß sich die Lösung schreiben läßt als

$$U(t) = K \frac{\mu_a \mu_{IR}}{2\rho c_q \sqrt{\pi \kappa t}} \int_0^\infty dz e^{-\mu_{IR} z} \int_0^\infty dz' Q(z') \left[e^{-\frac{(z-z')^2}{4\kappa t}} + e^{-\frac{(z+z')^2}{4\kappa t}} \right] \quad (4.17)$$

$$\approx K \frac{\mu_a}{\rho c_q \sqrt{\pi \kappa t}} \int_0^\infty dz' Q(z') e^{-\frac{z'^2}{4\kappa t}} = K \cdot T(z=0, t) \quad (4.18)$$

Diese Art der Lösung soll nun für verschiedene Formen der Lichtausbreitung diskutiert werden.

4.2.1 Reine Absorption

Für den homogenen Absorber gilt $Q(z) = Q_0 \exp(-\mu_a z)$ mit der Pulsenergie Q_0 pro Fläche in der Probe bei $z=0$. Damit läßt sich (4.17) in Form der *Fehlerfunktion* $\text{erf}(x)$ ausdrücken [Leu 84] (siehe Anhang D):

$$U(t) = \frac{K Q_0 \mu_a \mu_{IR}}{\rho c_q (\mu_{IR}^2 - \mu_a^2)} \left[\mu_{IR} e^{\mu_a^2 \kappa t} \text{erfc} \left(\sqrt{\mu_a^2 \kappa t} \right) - \mu_a e^{\mu_{IR}^2 \kappa t} \text{erfc} \left(\sqrt{\mu_{IR}^2 \kappa t} \right) \right] \quad (4.19)$$

$$\approx K Q_0 \frac{\mu_a}{\rho c_q} e^{\mu_a^2 \kappa t} \text{erfc} \left(\sqrt{\mu_a^2 \kappa t} \right) \quad (4.20)$$

$$\begin{aligned} \text{mit} \quad & \text{erfc}(x) = 1 - \text{erf}(x) \\ \text{und} \quad & \text{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-\xi^2} d\xi. \end{aligned}$$

Die Näherungslösungen (4.18), (4.20) entsprechen der Annahme $\mu_{IR} \rightarrow \infty$ und demonstrieren jeweils die stark vereinfachte Signalbeschreibung.

Die Fehlerfunktion besitzt die gleiche Form wie Lösungen der Wärmediffusionsgleichung für eine Punktquelle, daher werden Lösungen der Wärmediffusionsgleichung oft mittels der Fehlerfunktion formuliert [Car 59]. Ebenso hat es sich durchgesetzt, das PPTR-Signal für analytische Ansätze der Lichtausbreitung in einer Dimension mit Hilfe der Fehlerfunktion zu beschreiben [Pra 92, Lon 87, Vit 95]. Das ist oft möglich, da sowohl im Fall eines Absorbers als auch unter der Betrachtung von Lichtdiffusion in einer Dimension nur weitere Exponentialterme im Lösungsintegral auftauchen. Dieses kann dann über Variablentransformation in eine Form ähnlich (4.19) gebracht werden.

Trotz dieses analytischen Ausdruckes muß bei der Darstellung des Signals aber letztendlich immer auf eine numerische Berechnung von $\text{erf}(x)$ zurückgegriffen werden, bspw. mittels Reihenentwicklung [Pre 92] oder anderer Näherungsformeln [Abr 70]. Da diese mitunter problematisch in bezug auf Konvergenz, Rechenzeit und numerische Genauigkeit sind, ist es oft sinnvoll, das Integral in einer Lösungsform gemäß (4.17) numerisch auszuwerten. Dies entbindet vor allem von der Einschränkung, eine analytische Darstellung der Lichtverteilung kennen zu müssen. Anhand der Lösungen (4.19) läßt sich jedoch gut das Verhalten an homogenen Absorbern gemessener PPTR-Signale diskutieren.

Wie die Betrachtung von $U(0) = \frac{KQ_0}{\rho c_q} \frac{\mu_a \mu_{IR}}{\mu_a + \mu_{IR}}$ zeigt, hängt die Signalthöhe von der relativen Größe der Absorptionskoeffizienten ab. Für den Fall $\mu_a \ll \mu_{IR}$ ist $U(0)$ proportional der Absorption der Anregungswellenlänge. Weiterhin läßt sich das Verhalten der Lösung studieren, indem man eine Entwicklung des Ausdruckes $e^{x^2} \text{erfc}(x)$ für kleine oder große Argumente vornimmt [Car 59, Leu 84]. Daraus folgt

$$U(t) \approx \frac{KQ_0}{\rho c_q} \frac{\mu_a \mu_{IR}}{\mu_{IR}^2 - \mu_a^2} (1 - \mu_a \mu_{IR} \kappa t) \quad \text{für } t \ll (\mu^2 \kappa)^{-1} \quad (4.21)$$

$$U(t) \approx \frac{KQ_0}{\rho c_q \sqrt{\pi \kappa t}} \quad \text{für } t \gg (\mu^2 \kappa)^{-1} \quad (4.22)$$

mit $\mu = \max(\mu_a, \mu_{IR})$. Für kurze Zeiten hängt die Signalthöhe von den optischen Parametern μ_a, μ_{IR} ab und zeigt einen linearen Abfall mit der Zeit („optisches Limit“). Für große Zeiten hingegen wird der Signalverlauf nur noch durch Wärmediffusionsprozesse bestimmt und fällt sehr langsam mit $t^{-1/2}$ („thermisches Limit“) [Imh 94].

In Abb. 4.2 sollen einige der bisher behandelten Charakteristika photothermischer Signale verdeutlicht werden. Abb. 4.2 a) zeigt die modellierte Temperaturentwicklung in einer Probe der Absorption $\mu_a = 100 \text{ cm}^{-1}$ zu verschiedenen Zeiten nach Einstrahlung eines Laserpulses. Dabei wurden die Probeneigenschaften als die von Wasser angenommen ($\kappa = 0,00143 \text{ cm}^2 \text{ s}^{-1}$, $\mu_{IR} = 1200 \text{ cm}^{-1}$).

Deutlich erkennt man den Einfluß der Randbedingung einer verschwindenden Ableitung an der Oberfläche für $t > 0$. Der schraffierte Bereich deutet das zum PPTR-Signal beitragende Probenvolumen entsprechend (4.12) an. Man sieht, daß selbst im Falle einer

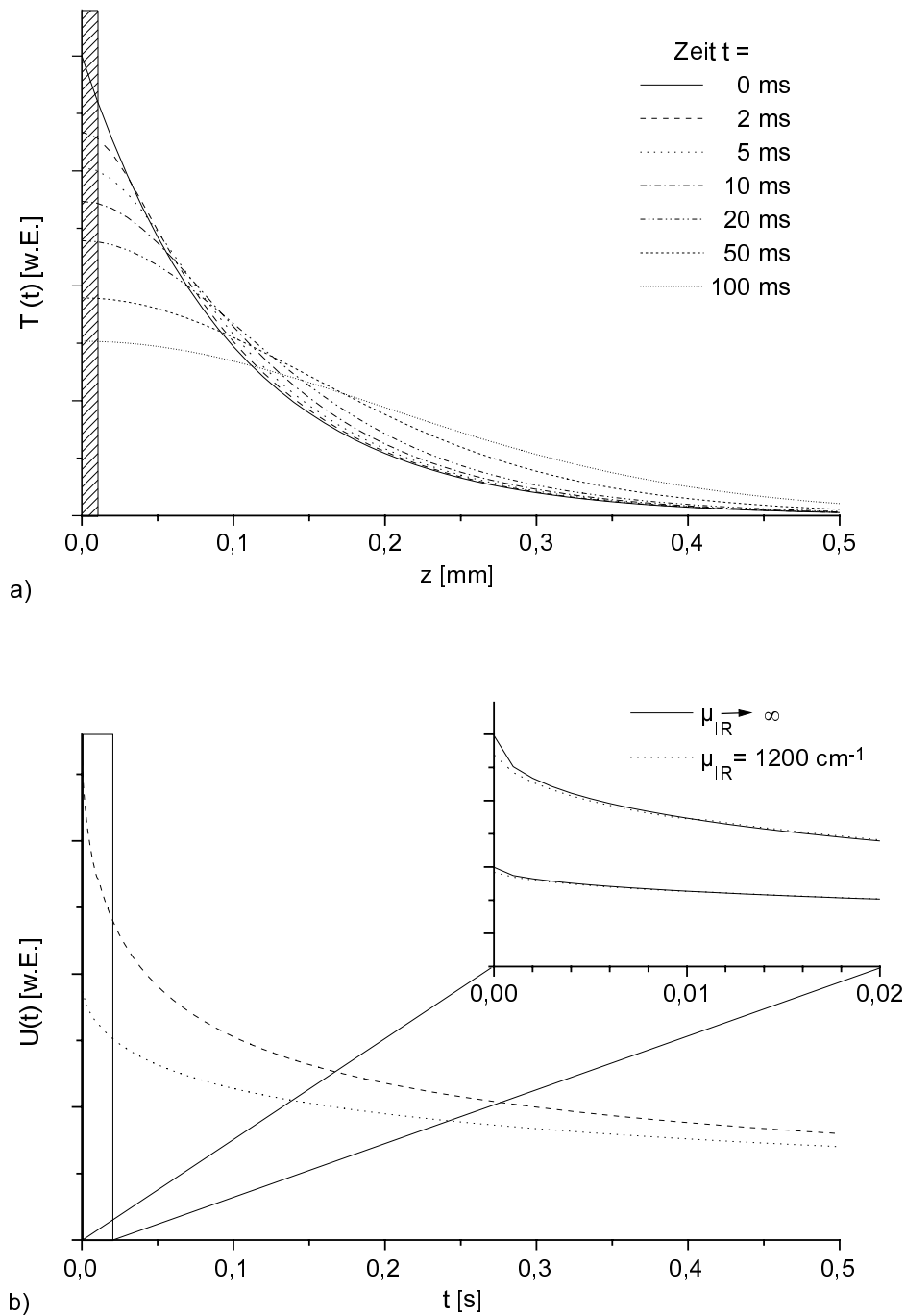


Abbildung 4.2: **a)** Temperaturprofile für verschiedene Zeiten in einer absorbierenden Probe ($\mu_a = 100 \text{ cm}^{-1}$, $\kappa = 0,00143 \text{ cm}^2\text{s}^{-1}$). Schraffiert: Bereich detektierter Wärmestrahlung. **b)** Berechnete PPTR-Signale für $\mu_a = 100 \text{ cm}^{-1}$ (---) und $\mu_a = 50 \text{ cm}^{-1}$ (···). Einschub: Vergleich zur Lösung unter der Näherung $\mu_{IR} \rightarrow \infty$.

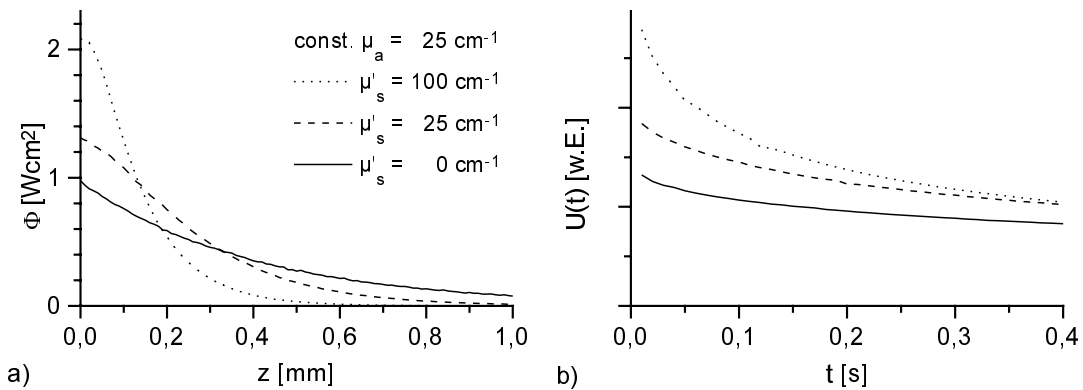


Abbildung 4.3: a) Eindimensionale Lichtverteilungen, berechnet mittels Monte Carlo Simulation für variierende Streueigenschaften bei konstanter Absorption (normiert auf die Einstrahlleistung $I_0 = 1 \text{ W cm}^{-2}$). b) Die entsprechenden, mittels (4.18) modellierten PPTR-Signale.

relativ hohen Absorption für die Anregungswellenlänge und des dadurch hervorgerufenen steilen Temperaturgradienten der Temperaturverlauf in diesem Bereich schon für kurze Zeiten (hier: etwa $t > 10 \text{ ms}$) als nahezu konstant angesehen werden kann.

In Abb. 4.2 b) sind mit 4.19 berechnete PPTR-Signale für $\mu_a = 50 \text{ cm}^{-1}$ und $\mu_a = 100 \text{ cm}^{-1}$ dargestellt. Der Einschub in 4.2 b) zeigt eine Ausschnittsvergrößerung der Signale in den ersten 20 ms und im Vergleich dazu die mit (4.20) berechneten Näherungslösungen. Abweichungen sind in dieser Darstellung nur für den Signalanfang, vor allem für den stärkeren Absorber, zu erkennen. Entsprechend den Temperaturkurven in a) wird hier der Signalverlauf für Zeiten $t > 10 \text{ ms}$ durch die Näherungslösung sehr gut wiedergegeben.

4.2.2 Absorption und Streuung

Im folgenden soll die Auswirkung zusätzlicher Lichtstreuung in der Probe behandelt werden. Abb. 4.3 zeigt anhand einiger mit der Methode der Monte Carlo Simulation berechneter Signalverläufe den qualitativen Effekt zunehmender Streueigenschaften bei gleichbleibender Absorption.

Man erkennt bei den PPTR-Signalen in Abb. 4.3 b) die für zunehmende Streueigenschaften erhöhte Amplitude. Ein Vergleich mit den entsprechenden Lichtverteilungen in Abb. 4.3 a) zeigt, daß dies auf die in 2.3.4 behandelte Intensitätsüberhöhung an der Oberfläche und die somit verstärkte Deponierung von Lichtenergie in diesem Bereich zurückzuführen ist. Weiterhin ist zu erkennen, daß die steileren Lichtfeldgradienten bei signifikanter Streuung zu einem schnelleren Signalabfall für kurze Zeiten führen.

Um gemessene PPTR-Signale dieser Art bezüglich der optischen Probeneigenschaften quantitativ auswerten zu können, ist eine detaillierte Untersuchung ihrer theoretischen Darstellung – vor allem in Hinblick auf die Implementierung der Lichtverteilung – erforderlich.

Auch im Fall nicht zu vernachlässigender Lichtstreuung in der Probe erfolgt die Signalbehandlung mit (4.17). Jedoch kann im Gegensatz zu rein absorbierenden Medien keine exakte analytische Lösung für $Q(z)$ angegeben werden. Verschiedene Möglichkeiten der näherungsweise Beschreibung des eindimensionalen Lichttransports in streuenden Medien mittels Diffusionstheorie wurden bereits in 2.3.4 behandelt und mit der „exakten“ Methode der Monte Carlo Simulation verglichen. Die Diffusionsrechnungen bieten den Vorteil einer einfachen analytischen Lösung, beschreiben die tatsächliche Lichtverteilung jedoch nur näherungsweise und liefern befriedigende Ergebnisse vor allem in großen Tiefen und im Fall stark dominierender Streuung.

Für die Auswertung von PPTR-Signalen zur Bestimmung optischer Eigenschaften an gewebeähnlichen Medien ist jedoch in vielen Fällen eine analytische Behandlung, z. B. im Rahmen eines Fitalgorithmus, wünschenswert. Im folgenden soll die Tauglichkeit der in Abschnitt 2.3.4 verwandten Diffusionsrechnungen zur Berechnung von PPTR-Signalen an trüben Medien beurteilt werden (Abb.4.4). Als Standard zur Beschreibung der Lichtausbreitung dienen wiederum die auf Monte Carlo Simulationen basierenden Rechnungen.

Die Berechnung der PPTR-Signale erfolgte durch numerische Auswertung des Integrals (4.18) mit den Datensätzen der Lichtverteilungen als Quellverteilung $Q(z)$ (Probeigenschaften wie unter 4.2.1). Diese Behandlung benötigt keine analytische Darstellung von $Q(z)$ und läßt sich somit sehr flexibel für beliebige Lichtausbreitungsmodelle einsetzen.

Der Vergleich zeigt, daß im Falle dominierender Lichtstreuung (Abb. 4.4 a)) offensichtlich eine befriedigende Beschreibung des Signals mittels Diffusionsrechnung erreicht wird. Dabei liefern die Rechenansätze verschiedener Autoren ähnliche Ergebnisse.

Im Gegensatz dazu zeigt der Vergleich mittels Diffusionstheorie und Monte Carlo Simulation gerechneter PPTR-Signale im Fall b) deutliche Diskrepanzen. Hier erkennt man deutlich die Sensitivität des PPTR-Signals auf oberflächennahe Merkmale in der Lichtverteilung. Aufgrund der stark variierenden und qualitativ schlechten Beschreibung der Lichtverteilung über einen relativ großen Bereich mittels Diffusionstheorie im Fall b) kommt es hier zu einer nicht befriedigenden Modellierung des Signals. Die beste Übereinstimmung zeigt die Behandlung nach [Pra92], vor allem, da hier die Signalthöhe $U(t \rightarrow 0)$ gut wiedergegeben wird.

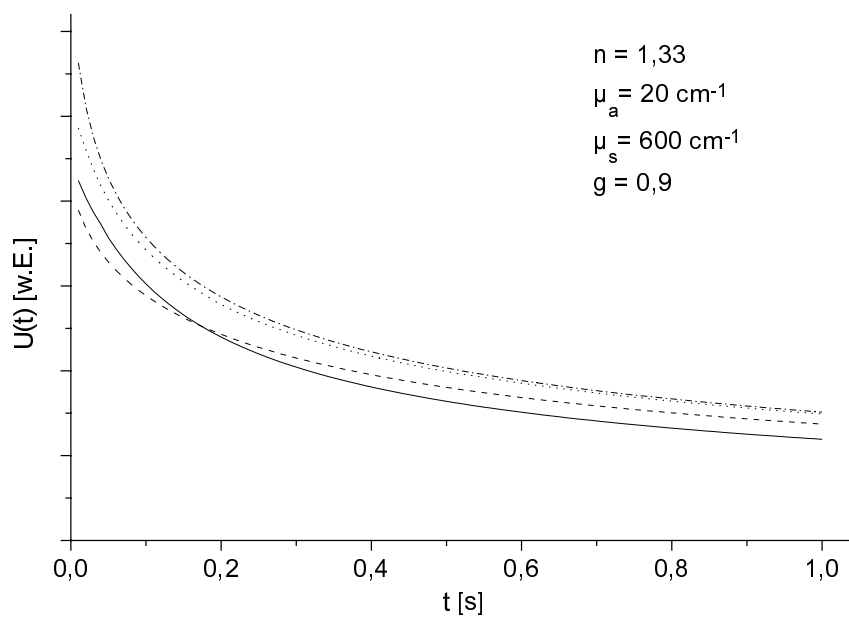
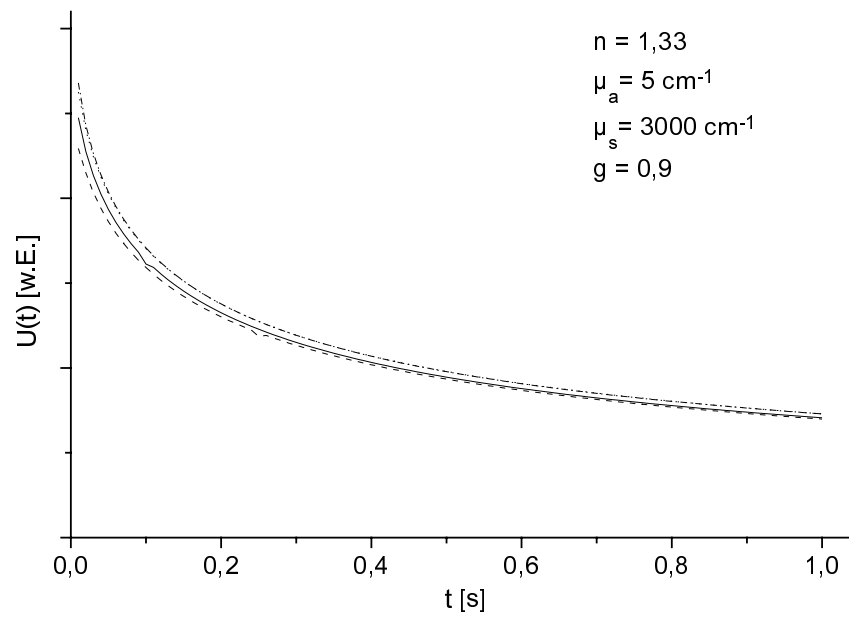


Abbildung 4.4: Simulierte PPTR-Signale für verschiedene Lichtausbreitungsmodelle: Diffusionstheorie entsprechend [Sta 95] \cdots , [Pra 92] $---$, [Ora 96] $- \cdot - \cdot -$; Monte Carlo Simulation von [Wan 92] $—$.

4.3 Eindimensionale Schichtproben

Die gepulste photothermische Radiometrie zur Profilierung geschichteter Systeme wurde zuerst an laminierten und lackierten Werkstoffen demonstriert. Dabei interessierte man sich vornehmlich für die Messung von Dicken auf ein Substrat aufgebracht Schichten und deren thermische Eigenschaften [Tam 83, Leu 84, Cie 84].

Viele medizinische Fragestellungen sind mit der Charakterisierung von Schichtstrukturen hinsichtlich ihrer Lage, Dicke und optischer Eigenschaften verknüpft, so daß auch hier Anwendungen der Tiefenprofilierung mittels gepulster photothermischer Radiometrie Gegenstand intensiver Forschung sind. Im Vordergrund steht dabei die Lokalisierung von Inhomogenitäten in der Haut. So untersuchte [Lon 87a] bereits an subdermalen Blutungen aufgenommene PPTR-Signale.

Das Interesse an dermatologischen Anwendungen begründet sich zum einen in der Tatsache, daß PPTR-Signale sehr oberflächensensitiv sind. Weiterhin werden in der Dermatologie Läsionen behandelt, die sich vor allem durch einen optischen Kontrast vom restlichen Gewebe abheben (z. B. vaskuläre Veränderungen, Tätowierungen). So sind diese einer optischen Diagnose besonders zugänglich. Nichtzuletzt stellt die Dermatologie eine Disziplin dar, in der häufig und mit großem Erfolg Laserbehandlungen (insbesondere gepulst) durchgeführt werden, so daß hier ein hohes Anwendungspotential dieser Strahlquellen für optische Diagnosezwecke liegt.

Insbesondere die Dosimetrie einer Laserbehandlung von Feuermalen wird mit großem Interesse verfolgt. Die Therapie dieses großflächigen übermäßig stark ausgeprägten Blutgeflechtes in etwa $50 \dots 500 \mu\text{m}$ Tiefe mit dem Laser ist außerordentlich erfolgreich, wenn die Wahl der Bestrahlungsdosis richtig erfolgt. Zu geringe Dosen führen zu keiner Änderung, wohingegen es bei zu starker Dosierung zum sog. Popkorn-Effekt, einer thermisch induzierten Aufblähung durch Verdampfungsprozesse kommen kann. Dies führt zu Narbenbildung und verringert den Behandlungserfolg. Einfluß auf den Behandlungsverlauf nehmen Tiefe und Dicke der Aderschicht, jedoch auch die optischen Eigenschaften des umliegenden Gewebes. Diese können lokal stark schwanken und variieren sehr stark von Patient zu Patient.

Eine vielversprechende Methode zur Dosimetrie ist die gepulste photothermische Radiometrie, da sie die durch die selektive Aufheizung der Adern hervorgerufene Wärmestrahlung nutzt, um prinzipiell an jeder zu behandelnden Stelle berührungsfrei das pathologische Gewebe zu charakterisieren. Ein Feuermal wird meist durch ein eindimensionales Schichtmodell beschrieben und stellt somit ein typisches Beispiel für die in diesem Abschnitt behandelten Geometrien dar [Nel 92, Jac 93, Mil 96, Sat 97].

Im folgenden soll exemplarisch das Signal für ein einfaches Schichtsystem diskutiert werden. Die Probengeometrie entspreche der unter (4.2), bestehe jedoch aus zwei Schichten, von denen die obere (Index 1) die Dicke d habe, die untere (Index 2) unend-

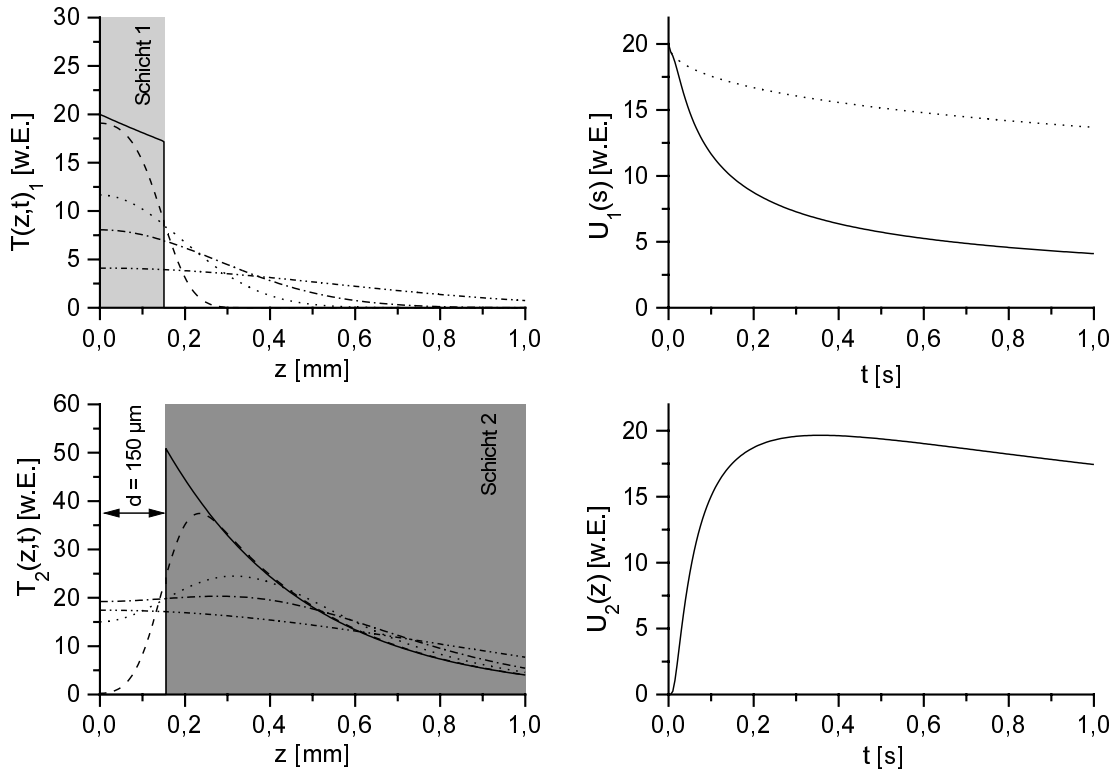


Abbildung 4.5: PPTR an absorbierenden Schichten: **a)** Berechnete Temperaturprofile für verschiedene Zeiten nach der gepulsten Bestrahlung einer absorbierenden Schicht ($\mu_{a1} = 10 \text{ cm}^{-1}$) auf einem transparenten Substrat gleicher thermischer Eigenschaften ($\kappa = 0,00143 \text{ cm}^2 \text{ s}^{-1}$). **b)** Das zu a) gehörige modellierte PPTR-Signal (Rechnungen nach (D.14)). **c)** Temperaturprofile für verschiedene Zeiten nach der gepulsten Bestrahlung einer absorbierenden Schicht ($\mu_{a2} = 30 \text{ cm}^{-1}$) unter einer transparenten Lage gleicher thermischer Eigenschaften ($\kappa = 0,00143 \text{ cm}^2 \text{ s}^{-1}$). **d)** Zu c) gehöriges modelliertes PPTR-Signal (Rechnungen nach (D.15)).

lich ausgedehnt sei. Bis auf die unterschiedlichen optischen Parameter dieser Schichten sei die Probe in allen anderen Eigenschaften homogen. Für den Fall reiner Absorber kann die Signalform entsprechend (4.17) geschrieben werden als

$$\begin{aligned}
 U(t) &= KQ_0 \frac{\mu_a \mu_{IR}}{2\rho c_q \sqrt{\pi \kappa t}} \int_0^\infty dz e^{-\mu_{IR} z} \\
 &\times \left[\int_0^d dz' e^{-\mu_{a1} z'} \left[e^{-\frac{(z-z')^2}{4\kappa t}} + e^{-\frac{(z+z')^2}{4\kappa t}} \right] \right. \\
 &\quad \left. + \int_d^\infty dz' e^{-\mu_{a2}(z'-d)} \left[e^{-\frac{(z-z')^2}{4\kappa t}} + e^{-\frac{(z+z')^2}{4\kappa t}} \right] \right].
 \end{aligned} \tag{4.23}$$

Die Implementierung des Quellterms erfolgte hier durch die abschnittsweise Definition der Lichtverteilung, diese kann entsprechend auf Mehrschichtmodelle ausgeweitet werden.

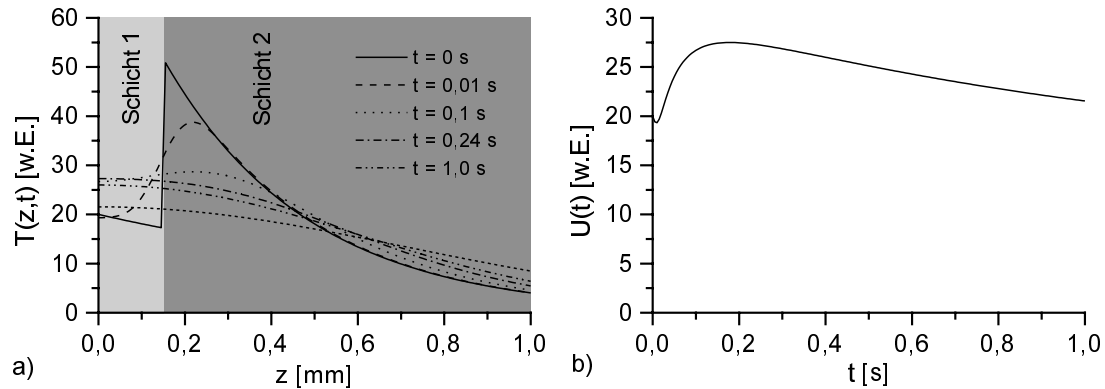


Abbildung 4.6: Ergebnisse der Modellierungen an einer Zweischicht-Struktur. Die physikalischen Eigenschaften entsprechen Abb. 4.5 a) für Schicht 1 und Abb. 4.5 c) für Schicht 2. **a)** Temperaturprofile in der Probe zu verschiedenen Zeiten. **b)** Das entsprechende PPTR-Signal. Rechnungen gemäß (D.14) bzw. (D.15).

Auch hier kann die Lösung mit Hilfe der Fehlerfunktion formuliert werden. Das führt jedoch zu sehr unübersichtlichen Formen, weshalb an dieser Stelle darauf verzichtet und statt dessen auf Anhang D verwiesen werden soll.

Abb. 4.5 a...d) zeigt exemplarisch Ergebnisse dieser Rechnungen im Fall $\kappa = 0.00143 \text{ cm}^2\text{s}$ und $\mu_{IR} \rightarrow \infty$. In Graph a) sind die zeitabhängigen Temperaturprofile $T_1(z, t)$ für eine absorbierende Schicht ($d = 150 \mu\text{m}$; $\mu_{a1} = 10 \text{ cm}^{-1}$) auf einem transparenten Substrat dargestellt (D.14). Die resultierende Oberflächentemperatur $T_1(z = 0, t)$ in Graph b) zeigt einen Verlauf, der dem des halbumendlichen Absorbers (Grenzfall $d \rightarrow \infty$, gestrichelt dargestellt) qualitativ ähnelt, wegen des steilen Temperaturgradienten in der Probe jedoch deutlich rascher abfällt. Graph c) zeigt die Temperaturentwicklung $T_2(z, t)$ im umgekehrten Fall (D.15), einer transparenten Schicht ($d = 150 \mu\text{m}$) auf einem absorbierenden Substrat ($\mu_{a2} = 30 \text{ cm}^{-1}$). Man erkennt, daß die zerfließende Wärmequelle mit zunehmender Zeit erst zu einer Steigerung der Oberflächentemperatur führt, welche nach dem Erreichen eines Maximums durch weitere Wärmediffusion ins Probeninnere wieder abnimmt. Dieser Verlauf ist in d) dargestellt.

Die Zeit, bei der das Signalmaximum auftritt, hängt charakteristisch von d ab und steigt mit zunehmender Tiefe der absorbierenden Schicht. Die Diskussion dieses Zusammenhangs und die Auswertung solcher Signale hinsichtlich der Probeneigenschaften wird anhand der Demonstration entsprechender Messungen in Abschnitt 6.2 erfolgen.

Der allgemeine Fall zweier absorbierender Schichten ergibt sich durch die Superposition der Temperaturfelder ($T(z, t) = T_1(z, t) + T_2(z, t)$). Dies ist für den Fall einer schwach absorbierenden Schicht ($d = 150 \mu\text{m}$; $\mu_{a1} = 10 \text{ cm}^{-1}$) auf einem Substrat ($\mu_{a2} = 30 \text{ cm}^{-1}$) in Abb. 4.6 dargestellt. Graph a) zeigt wiederum die Temperaturprofile $T(z, t)$, in b) ist das Signal ($U(t) \sim T(z = 0, t)$) gezeigt. Auch hier ist wegen der stärkeren Absorption der unteren Schicht ein zeitverzögertes Signalmaximum zu erkennen.

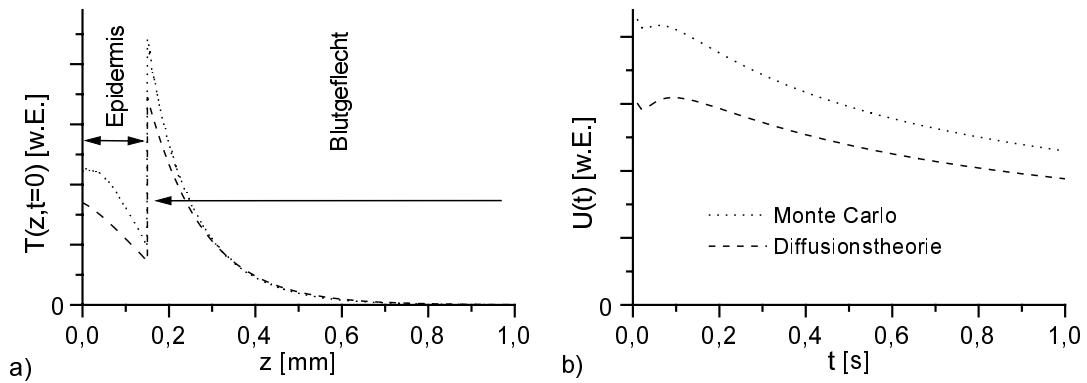


Abbildung 4.7: PPTR an streuenden und absorbierenden Schichten am Beispiel eines einfachen Modells für ein Feuermal. Die obere Schicht modelliert schwach pigmentierte Epidermis ($\mu_{a1} = 8 \text{ cm}^{-1}$; $\mu'_{s1} = 102 \text{ cm}^{-1}$), die untere das pathologische Blutgeflecht ($\mu_{a2} = 38 \text{ cm}^{-1}$; $\mu'_{s2} = 45 \text{ cm}^{-1}$). In bezug auf die restlichen Eigenschaften sei die Probe homogen ($n=1,37$; $\kappa = 0,00108 \text{ cm}^2\text{s}^{-1}$; $\mu_{IR} \rightarrow \infty$), Werte bei $\lambda = 577 \text{ nm}$ nach [Vit 95]. In **a)** ist das Profil der deponierten Lichtenergie gezeigt; Monte Carlo Simulation (\cdots) von [Wan 92], Diffusionstheorie ($-\cdot-\cdot-$) nach [Vit 95]. **b)** Vergleich der mit unter a) gezeigten Energieverteilungen gemäß (4.18) simulierten PPTR-Signale.

Aufgrund der in der oberen Schicht deponierten Wärme ist jedoch ($U(0) \neq 0$).

Ähnliche Formulierungen findet man auch für Schichtsysteme unter Berücksichtigung der Lichtstreuung mittels Diffusionstheorie. Dafür muß die Diffusionsgleichung in den einzelnen Schichten gelöst werden unter Berücksichtigung der Randbedingungen an den Schichtgrenzen. Dies geschieht meist unter Annahme eines über die gesamte Probe konstanten Brechungsindex mittels Anschlußbedingungen für die diffusen Hemi-sphärenflüsse [Vit 95].

Als Beispiel einer solchen Rechnung soll die vereinfachte Darstellung eines Feuermals durch eine Zweischicht-Geometrie demonstriert werden. Dabei entspricht die obere Schicht mit einer Dicke von $150 \mu\text{m}$ in ihren optischen Eigenschaften einer wenig pigmentierten Epidermis, die untere modelliert das Adergeflecht mit den Parametern einer Dermis mit 10 % Blutgehalt (Werte bei $\lambda = 577 \text{ nm}$). Der Brechungsindex wird mit $n = 1,37$ angesetzt, die Wärmediffusivität mit $\kappa = 0,00108 \text{ cm}^2\text{s}^{-1}$ (Werte aus [Vit 95]).

Abb. 4.7 zeigt die mit Diffusionstheorie berechnete Temperaturverteilung zu $t = 0$ im Vergleich zu einer Monte Carlo Simulation. Man erkennt die Probleme, die sich bei der Behandlung solch heterogener Strukturen mittels Diffusionstheorie ergeben. Grund hierfür ist (trotz der in Schicht 1 dominanten Streuung) die Anwesenheit zweier Grenzschichten, die eine Störung des diffusen Lichtfeldes bedingen und somit schwierig zu handhaben sind.

Diese Schwierigkeiten spiegeln sich in den mit dieser Lichtverteilung simulierten PPTR-Signalen wider. Man erkennt auch hier deutliche Abweichungen der verschiedenen Behandlungsmethoden. Der qualitative Verlauf des Signals wird mittels Diffusionsrechnungen zwar wiedergegeben, jedoch ergibt sich ein etwas verlagertes Signalma-

ximum und ein starker Offset des Signals durch die Überbewertung des Lichtflusses in Oberflächennähe.

4.4 Mehrdimensionale Strukturen

Die Modellierung vaskulärer Veränderungen in der Haut mittels eindimensionaler Schichten führt zu einer einfach handhabbaren Signalbeschreibung, setzt jedoch eine Morphologie der Läsion voraus, die nicht immer erfüllt ist. Mit Hilfe von Monte Carlo Simulationen durchgeführte theoretische Untersuchungen der thermischen Schädigungen an einzelnen oder gruppierten oberflächennahen Gefäßen haben weiterhin gezeigt, daß die Größe der Adern, ihre Form und Lage entscheidenden Einfluß auf die Therapie nehmen [Pfe 97, Ver 93, Gab 97]. Vor diesem Hintergrund gibt es Bestrebungen, photothermische Signale mehrdimensionaler Strukturen, vor allem Adern, zu untersuchen.

In [Smi 97] wird ein numerisches Inversionsverfahren genutzt, um aus dem zeitaufgelösten Wärmebild der Oberfläche die Tiefe und den Verlauf einzelner Adern zu bestimmen. Dies geschieht ohne *a priori* Annahmen über optische Parameter oder Lichtverteilung, was zu sehr langen Rechenzeiten (~ 5 Stunden) führt. Im Rahmen dieser Arbeit wurde ein anderer Ansatz gewählt, PPTR-Signale aderähnlicher Strukturen auszuwerten. Dazu wurde das analytisch formulierte Modell einer unendlich langen absorbierenden Ader in einer transparenten Umgebung entwickelt (Abb. 4.8). Diese Vereinfachung gestattet zum einen die Reduktion des Problems auf zwei Dimensionen und zum anderen die einfache Implementierung der Lichtverteilung. Weiterhin läßt sich ein solches Modell relativ leicht experimentell verifizieren.

Die allgemeine dreidimensionale Beschreibung eines photothermischen Signals unter Vernachlässigung der endlichen Wärmestrahlungsabsorption wurde bereits in (4.14) gegeben. Dies soll nun auf den Fall des in Abb. 4.8 skizzierten Adermodells angewandt werden. Die Ader sei dargestellt durch einen entlang der y -Richtung liegenden unendlich langen Zylinder des Radius a an der Stelle $z = z_a, x = 0$. Dieser wird als homogener Absorber, beschrieben mit μ_a , in einer transparenten Umgebung angesetzt. Die optischen Eigenschaften modellieren somit in sehr starker Vereinfachung die hauptsächliche Lichtabsorption der Behandlungswellenlänge in den Blutgefäßen. In den restlichen physikalischen Eigenschaften sei das Modell homogen, diese entsprechen denen der Probe in Abschnitt 4.2.

Bei der kollimierten unendlich breiten Einstrahlung eines Lasers entlang der z -Achse kann das Integral in (4.14) über y ausgeführt werden, so daß sich das Signal schreiben läßt

$$U(x, t) = \frac{Q_0 K \mu_a}{2\pi \rho c_q k t} \int_{-a}^a dx' \int_{z_a - \sqrt{a^2 - x'^2}}^{z_a + \sqrt{a^2 - x'^2}} e^{-\mu_a z'} e^{-\frac{(x-x')^2 + z'^2}{4kt}} dz'. \quad (4.24)$$

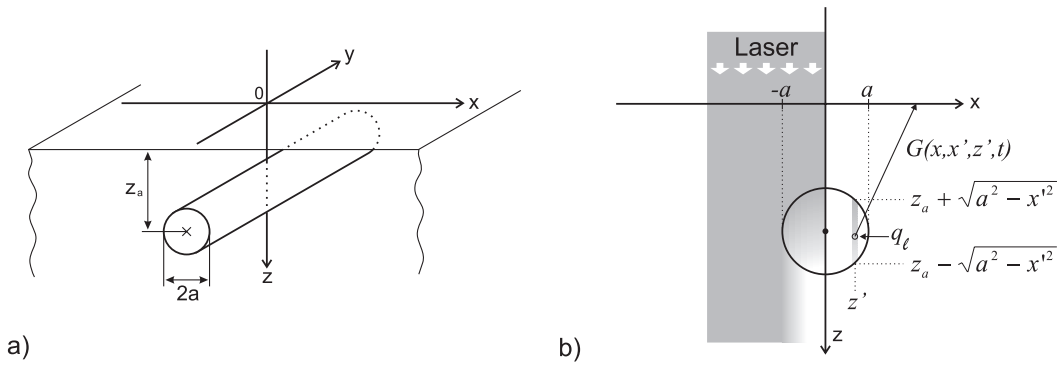


Abbildung 4.8: Modellierung eines oberflächennahen Blutgefäßes im umgebenden Gewebe. **a)** Skizze der Geometrie: Die Ader wird durch einen unendlich langen Zylinder des Radius a modelliert, der in der Tiefe z_a parallel zur Gewebeoberfläche verläuft. **b)** Reduktion des Problems auf zwei Dimensionen unter Annahme einer unendlich breiten Lasereinstrahlung. Links der z -Achse ist die Bestrahlungsgeometrie und die Lichtverteilung in der Probe aufgrund des homogen absorbierenden Zylinders verdeutlicht. Rechts der z -Achse ist schematisch die Entwicklung der Lösung (4.24) aus dieser Anordnung gezeigt. (q_ℓ : Ort der linienförmigen Wärmequelle; $G(x, x', z', t)$ symbolisiert die Auswirkung von q_ℓ auf die Oberflächentemperatur in einem Punkt.)

Die letzte Exponentialfunktion entspricht somit der GREENSchen Funktion für eine linienförmige Wärmequelle im unendlichen Halbraum mit der Grenzfläche bei $z = 0$ unter den genannten Randbedingungen. Die Lösung ergibt sich demnach aus der Superposition der Beiträge dieser Quellen (in Abb. 4.8 als q_ℓ angedeutet) über den Aderquerschnitt. Wegen der durch die Einstrahlgeometrie bedingte Abhängigkeit der Quellstärke in z -Richtung erfolgt die Integration in kartesischen Koordinaten mit den angegebenen Grenzen.

Abb. 4.9 zeigt ein mit (4.24) berechnetes Signal, welches als die Darstellung der Zeitentwicklung eines eindimensionalen Wärmebildes angesehen werden kann. An dieser Stelle soll zunächst ein qualitative Diskussion dieses Ergebnisses folgen.

Man erkennt für feste x , ähnlich wie bei geschichteten Proben, ein zeitverzögertes Signalmaximum, da Wärme nur im Absorber erzeugt wird und erst nach deren Diffusion an die Oberfläche dort ein Signal detektiert werden kann. Die Zeitverzögerung nimmt für steigende Werte von x zu. Weiterhin befindet sich das Signalmaximum in laterale Richtung für alle Zeiten $t > 0$ über der Ader bei ($x = 0$).

Wichtige Charakteristika hinsichtlich der Auswertung eines solchen Signals sind die Signalamplitude, die zeitliche Signalentwicklung (insb. bei $x = 0$), und die laterale Signalvariation. Die Untersuchung der Abhängigkeit dieser Meßgrößen von den Eigenschaften In Abschnitt (6.3) werden diese Zusammenhänge experimentell verifiziert.

In Abb. 4.10 a) ist die Zeit t_{max} des Signalmaximums bei $x = 0$ gegenüber der Tiefe der Aderoberkante ($z_a - a$) für verschiedene Werte der Absorption μ_a und des Radius a aufgetragen. Die Signalverzögerung steigt mit zunehmender Adertiefe und -radius. Der

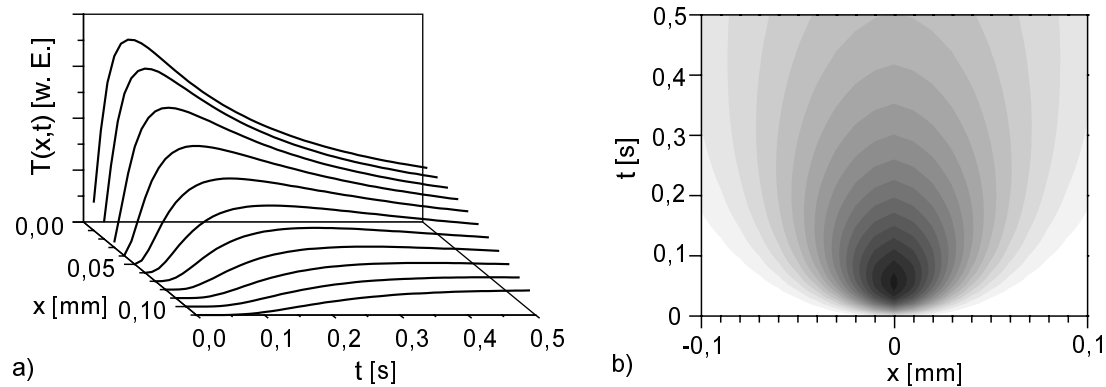


Abbildung 4.9: Simulation eines orts- und zeitaufgelösten PPTR-Signals für das in 4.4 geschilderte Adermodell. Verwandte Parameter: $z_a = 0,2$ mm; $a = 90$ μ m; $\mu_a = 120$ cm^{-1} . **a)** Darstellung des zeitlichen Temperaturverlaufs direkt über der Ader ($x = 0$) und an einigen seitlich versetzten Punkten ($x = (0,01 \dots 0,1)$ mm). **b)** Graustufendarstellung des Temperaturprofils. Ähnlich einer Streackamera-Aufnahme ist eine räumliche gegen eine zeitliche Dimension aufgetragen.

erste Zusammenhang ist unmittelbar einsichtig und ergibt sich durch die längere Diffusionsstrecke für tiefliegende Wärmequellen. Die zweite Tatsache resultiert aus dem Umstand, daß eine verbreiterte Wärmequelle für einen zentral über ihr liegenden Beobachtungsort zusätzliche Beiträge im Signal liefert, die aufgrund ihres lateralen Abstandes wiederum eine Zeitverzögerung erfahren und insgesamt für ein späteres Erreichen des Signalmaximums sorgen.

Die mit zunehmender Absorption sinkenden Werte für t_{max} lassen sich dadurch erklären, daß die Tiefenausdehnung der Wärmequelle abnimmt und die Energie somit näher der Oberfläche deponiert wird.

Das laterale Signalprofil zur Zeit t_{max} besitzt einen gaußförmigen Verlauf. Abb.4.10 b) zeigt die Abhängigkeit der $1/e^2$ -Breite dieses Profils von den Probeneigenschaften. Die Zunahme der Breite zu größeren Adertiefen ist wieder mit der wachsenden Diffusionsstrecke und der damit verbundenen verbreiterten Temperaturverteilung zu erklären. Die Verbreiterung des Profils für zunehmende laterale Aderausdehnung ist unmittelbar einsichtig. Der Einfluß der optischen Eigenschaften wirkt sich ähnlich wie in a) aus. Die Verschmierung der Wärmequelle über einen weiten Bereich mit sinkender Absorption sorgt hier für ein breiteres Temperaturprofil.

Sowohl in bezug auf die Zeitverzögerung des Maximums als auch auf die Breite zeigt sich das Signalverhalten somit qualitativ ähnlich. Das erschwert die Auswertung hinsichtlich der Lage der Ader, ihrer Tiefe und Ausdehnung.

Ein weiteres Kriterium stellt die Signalthöhe zur Zeit t_{max} in Abhängigkeit der Probeneigenschaften dar. Dieses Verhalten ist in Abb.4.10 c) dargestellt. Hier zeigt sich insbesondere die starke Abnahme des Signals mit zunehmender Adertiefe.

Abb. 4.11 zeigt schließlich Simulationen von PPTR-Signalen, wie sie sich bei $x = 0$

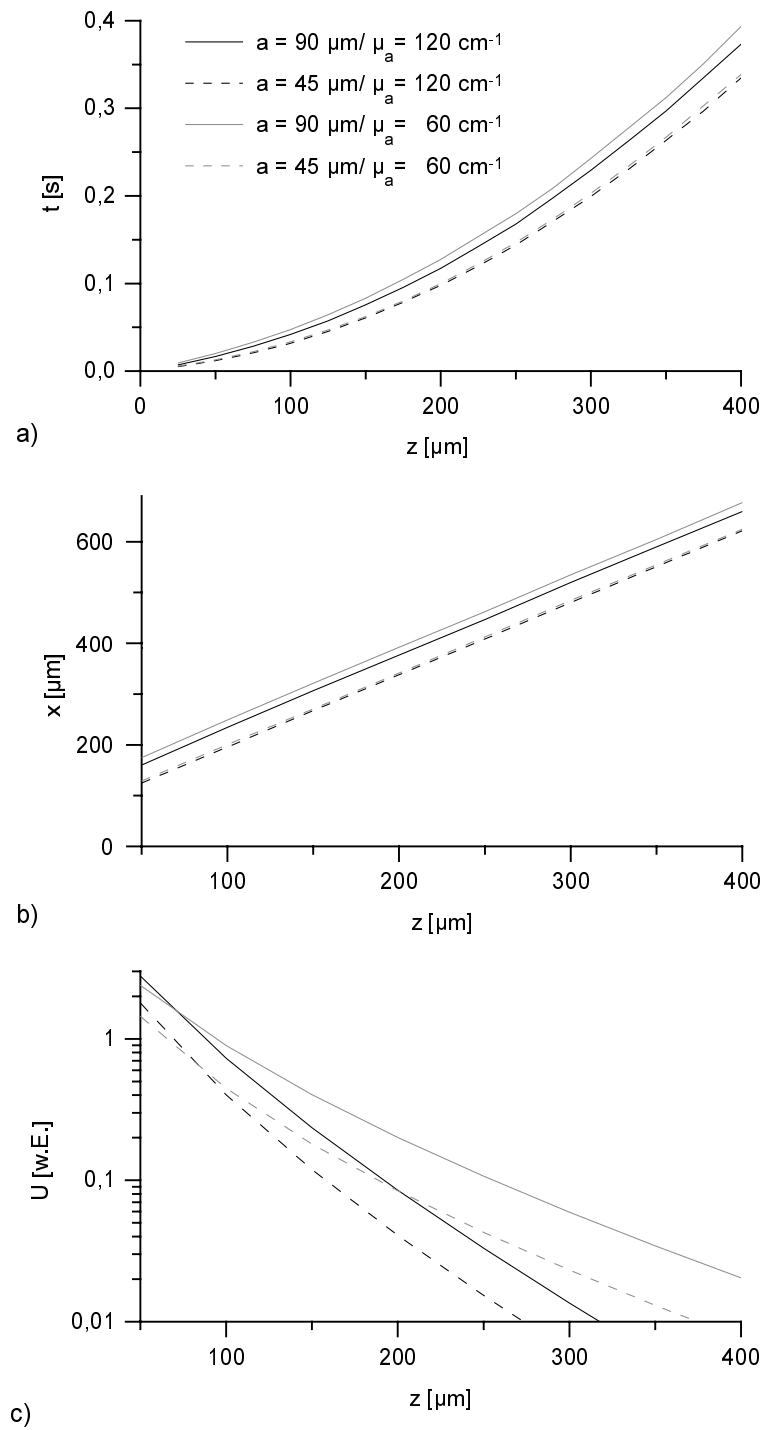


Abbildung 4.10: Charakteristika der orts- und zeitaufgelösten Messung eines PPTR-Signals am zweidimensionalen Adermodell bzgl. Adertiefe, -radius und Absorption. **a)** Abhängigkeit der Zeitverzögerung t_{max} des Signalmaximums von der Adertiefe, gezeigt für verschiedene Werte von a und μ_a (siehe Legende). **b)** Darstellung der lateralen Ausdehnung der Temperaturverteilung an der Probenoberfläche zum Zeitpunkt t_{max} . Die Daten repräsentieren die $1/e^2$ -Breite jeweils an die Signale angepaßter Gaußfunktionen. Parameter wie unter a). **c)** Abnahme der Signalamplitude mit zunehmender Adertiefe in halblogarithmischer Darstellung (Parameter entspr. a) und b)).

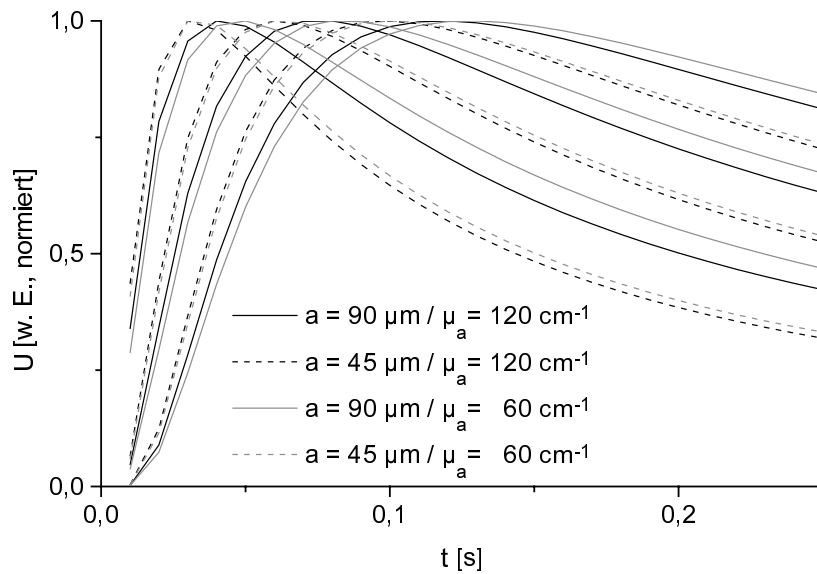


Abbildung 4.11: Simulation der zeitabhängigen Oberflächentemperatur in $x = 0$ für verschiedene Probeneigenschaften. Signale gleicher Darstellung zeigen variierende Adertiefen von $[100; 150; 200] \mu\text{m}$ (jeweils v. l. n. r)

für verschiedene Probenparameter ergeben. Zum Vergleich wurden die Kurven auf ihre Maxima normiert. Man erkennt – abgesehen von den bereits diskutierten systematischen Zusammenhängen bestimmter Signaleigenschaften von der Probenbeschaffenheit – die individuell unterschiedlichen Signalverläufe. Vielfache numerische Untersuchungen im Rahmen der vorliegenden Arbeit haben ergeben, daß eine eindeutige Zuordnung eines Satzes von Probenparametern zu einer entsprechenden Messung möglich ist. Im Experiment wird dem jedoch eine Limitierung durch das Signalrauschen sowie ein endliches Detektionsareal auferlegt.

Kapitel 5

Experimentelle Realisierung

BISLANG wurden die theoretischen Grundlagen der gepulsten photothermischen Radiometrie erarbeitet, wie sie für das Verständnis der Methode, d. h. insbesondere für die Signalmodellierung und -auswertung von essentieller Bedeutung sind. In diesem Kapitel sollen Details der experimentellen Realisierung einer photothermischen Messung behandelt und die in der vorliegenden Arbeit benutzten experimentellen Aufbauten vorgestellt werden.

Zuerst werden die Grundprinzipien der Detektion infraroter Strahlung behandelt. Neben der Beschreibung verschiedener Detektorarten werden auch wichtige meßtechnische Kenngrößen zur Beschreibung der Detektorleistungen eingeführt und die elektronische Signalaufbereitung erläutert.

Mit diesen Grundlagen wird dann der Aufbau der in dieser Arbeit durchgeführten Experimente behandelt. In diesem Zusammenhang wird das verwandte Lasersystem vorgestellt und optische Details der Bestrahlung und der Detektionsoptik erklärt.

Abschließend wird die Präparation der im Rahmen der Arbeit verwandten Modellsubstanzen beschrieben.

5.1 Detektion infraroter Wärmestrahlung

Die Detektion infraroter Strahlung, insbesondere im mittleren und langwelligen Bereich, fordert die Beachtung einiger Besonderheiten, die bei einem Nachweis für optische Frequenzen im sichtbaren Bereich nicht auftreten. Diese ergeben sich durch die geringen nachzuweisenden Photonenenergien, Störungen durch Hintergrundstrahlung und thermisches Detektorrauschen sowie Schwierigkeiten, abbildende und strahlführende Systemen zu realisieren.

5.1.1 Infrarotdetektoren

Infrarotdetektion bezeichnet die Messung elektromagnetischer Strahlung in einem Wellenlängenbereich, der sich oberhalb der Empfindlichkeitsgrenze des Auges (760 nm) bis zum Mikrowellenbereich (1 mm) erstreckt und in *nahes* (NIR: 760 nm...2,5 μm), *mittleres* (MIR: 2,5 μm ...25 μm) und *fern* (FIR: 25 μm ...1 mm) Infrarot unterteilt wird. Dazu existieren verschiedene Verfahren, die sich vor allem in ihrer Wellenlängenabhängigkeit, Empfindlichkeit und Ansprechzeit unterscheiden.

Eine grundsätzliche Möglichkeit der Detektion infraroter Strahlung besteht im Nachweis ihrer Wärmewirkung (*Thermodetektoren*). Dazu zählt beispielsweise die Messung der Temperaturänderung durch Strahlungsabsorption in einer Probe mittels verschiedener thermometrischer Verfahren. So läßt sich der temperaturabhängige Widerstand eines Leiters oder Halbleiters zur Bestimmung der auf diesen auftreffenden Strahlungsleistung nutzen (*Bolometer*). Bei *thermoelektrischen Detektoren* hingegen wird die temperaturabhängige Spannung, die an einem der Strahlung ausgesetzten Thermoelement anliegt, gemessen. Der Vorteil dieser Detektortypen liegt in ihrem einfachen Aufbau und einer weitgehend spektral unabhängigen Empfindlichkeit. Diese wird oft durch Beschichtungen mit einem über einen weiten Wellenlängenbereich schwarzen Medium (Ruß, Glasstaub) erhöht. Ihr Nachteil besteht in der Beschränkung der Empfindlichkeit und Ansprechzeit durch die Wärmekapazität des strahlungsabsorbierenden Mediums. Eine weitere Methode des Nachweises einer durch Strahlungsabsorption verursachten Temperaturänderung ist die Ausnutzung des *pyroelektrischen* Effektes. Das ist die Eigenschaft einiger piezoelektrischer Materialien, auf Temperaturänderung mit einer Ladungstrennung zu reagieren, die in Form einer elektrischen Spannung nachgewiesen werden kann. Pyroelektrische Detektoren reagieren nur auf zeitliche Änderungen des Strahlungsflusses. Durch entsprechende Beschichtungen läßt sich auch hier eine weitgehend spektral unabhängige Empfindlichkeit erreichen. Sie finden z. B. Einsatz in der Pulsenergiebestimmung von Strahlquellen und in Bewegungsmeldern. Typische Empfindlichkeiten von Thermodetektoren liegen im Bereich bis $D^* \approx 10^9 \text{ cm Hz}^{1/2} \text{ W}$, Anstiegszeiten bei etwa 1 ms (zu den Größen s. Abschn. 5.1.2). Damit sind diese Detektorarten jedoch für medizinisch-diagnostische Anwendungen der photothermischen Radiometrie ungeeignet, weil sie für die nachzuweisenden Intensitäten zu unempfindlich sind [Wol 96].

Höhere Empfindlichkeiten (und schnellere Ansprechzeiten) lassen sich mit *Photodetektoren* erreichen. Hier sind Empfindlichkeiten im Bereich bis $D^* \approx 10^{13} \text{ cm Hz}^{1/2} \text{ W}$ bei Anstiegszeiten unter 1 μs möglich. Sie nutzen den photoelektrischen Effekt an Halbleitern, d. h. die Anregung sog. Photoelektronen aus dem Valenz- ins Leitungsband durch die Energie eingestrahelter Photonen. Da dies ein Quanteneffekt ist, muß die Pho-

tonenenergie mindestens der Bandlücke E_{gap} entsprechen:

$$h\nu \geq E_{gap}. \quad (5.1)$$

Die Bandlücke ist vom verwandten Halbleitermaterial abhängig und kann in weiten Grenzen variieren. Auf diese Weise können Photodetektoren spektraler Empfindlichkeiten bis in den FIR-Bereich ($40\ \mu\text{m}$) realisiert werden (s. Abb. 5.1.1) [EGG 95]. Bei Photonen höherer Energie wird die Energiedifferenz $h\nu - E_{gap}$ in Form von Wärme auf den Halbleiter übertragen. Mehrphotonenanregung kann bei den zu detektierenden Intensitäten ausgeschlossen werden. Somit ist die generierte Anzahl an Ladungsträgerpaaren n_q proportional der Menge eingestrahelter Photonen n_{ph} , also der einfallenden Strahlungsintensität. Das Verhältnis

$$\eta = \frac{n_{ph}}{n_q} \quad (5.2)$$

wird als *Quanteneffizienz* des Detektors bezeichnet, sie beträgt für Photodetektoren etwa $\eta \approx 0,5$ [Han 97].

Damit wird die Messung einer Strahlungsleistung auf die Bestimmung der in einem Halbleiter erzeugten Ladungsträgerdichte zurückgeführt. Diese kann auf zwei Wegen erfolgen. Bei *photoleitenden* Detektoren mißt man die Leitfähigkeit des Halbleiters, welche sich proportional mit der Ladungsträgerdichte ändert. Im Falle eines *photovoltaischen* Nachweises besitzt der Detektor einen PN-Übergang, über den ein sich einstellender Ladungsträgerstrom nachgewiesen werden kann, welcher wiederum von der Anzahl erzeugter Ladungsträger abhängt.

Außer durch den Photoeffekt kann auch die thermische Anregung von Elektronen aus dem Valenz- ins Leitungsband erfolgen. Dies geschieht gemäß

der BOLTZMANN-Statistik mit einer Wahrscheinlichkeit $\sim \exp(-E_{gap}/(kT))$, nimmt also mit steigender Detektortemperatur und zu geringeren Bandlücken hin exponentiell zu. Diese statistisch generierten Ladungsträger bilden einen Rauschuntergrund, der

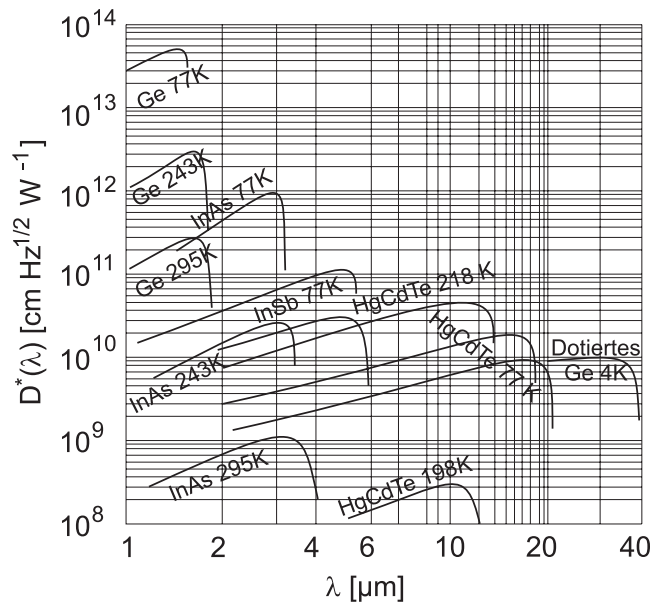


Abbildung 5.1: Darstellung der spektralen Empfindlichkeiten verschiedener zur IR-Detektion eingesetzter Halbleiter.

die Meßempfindlichkeit limitiert und daher möglichst gut unterdrückt werden muß. Insbesondere bei hochempfindlichen Messungen und zu großen Wellenlängen hin ist wegen der dafür erforderlichen geringen Bandlücke eine Kühlung des Detektors unumgänglich. Dies geschieht entweder über ein- oderer mehrstufige PELTIER-Elemente (bis 200 K), STIRLING-Kühler (77 K) oder mittels verflüssigter Gase (Stickstoff: 77 K; Helium: 4 K) [EGG 95]. Neben der Unterdrückung der thermisch angeregten Ladungsträger im Halbleiter wird weiterhin die Kühlung einer den Detektor umgebenden Metallabschirmung gewährleistet, welche eine Fensteröffnung für die zu messende Strahlung besitzt. Auf diese Weise werden Störeinflüsse durch Wärmestrahlung, die von der Umgebung des Detektors (z. B. dem Gehäuse) ausgeht, minimiert.

5.1.2 Kenngrößen zur Beschreibung der Detektoren

Im folgenden werden die Begriffe erläutert, mit denen Detektorleistungen spezifiziert werden. Da es üblich ist, diese Größen mit englischen Begriffen zu bezeichnen, werden diese neben den deutschen Bezeichnungen genannt (nach[EGG 95]).

Die Empfindlichkeit eines Detektors wird durch die *Empfindlichkeit (responsivity)* R bestimmt. Diese Größe beschreibt die Signalamplitude, die eine bestimmte Strahlungsintensität auf dem Detektor erzeugt. Ihre Einheit ist, je nach Art des Detektors, $[V W^{-1}]$ (photoleitend) oder $[A W^{-1}]$ (photovoltaisch). Im Rahmen der Arbeit wurde die Spannung an einem photoleitenden Detektor gemessen, in diesem Fall gilt

$$R(\lambda) = \frac{U(\lambda)}{I A_D G_A} \quad [V W^{-1}] \quad (5.3)$$

mit der gemessenen Spannung $U(\lambda)$ [V], der Strahlungsintensität I $[W cm^{-1}]$, der bestrahlten Detektorfläche A_D $[cm^2]$ und der Wellenlänge λ $[\mu m]$. Da man meist ein komplettes Detektionssystem, bestehend aus dem eigentlichen Detektor und einem Meßverstärker, spezifiziert, erscheint zusätzlich dessen Verstärkungsfaktor G_A in diesem Ausdruck. Für die gemessene Spannung gilt (s. 5.2)

$$U \propto n_q = \eta n_{ph}, \quad (5.4)$$

für die eingestrahelte Intensität

$$I \propto n_{ph} h\nu = n_{ph} \frac{hc}{\lambda}. \quad (5.5)$$

Damit folgt für $R(\lambda)$:

$$R(\lambda) \propto \frac{\lambda}{hc}. \quad (5.6)$$

Daher steigt der Wert von $R(\lambda)$ bei konstantem Photonenfluß zu größeren Wellenlängen an, erreicht ein Maximum im Bereich der größten detektierbare Wellenlänge und fällt jenseits dieser Nachweisgrenze steil ab. Die Wellenlänge der größten Empfindlichkeit

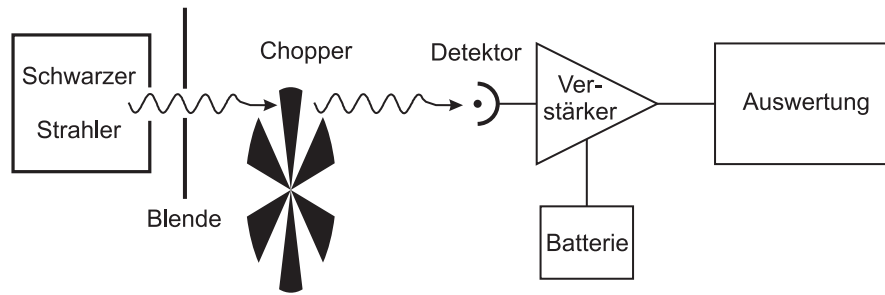


Abbildung 5.2: Schematische Anordnung zur Messung der Wärmestrahlung eines Schwarzen Körpers, wie sie zur Spezifikation von IR-Detektoren durchgeführt wird.

wird als *Peak-Wellenlänge* λ_p bezeichnet, der Maximalwert für $R_{\lambda_p} = R(\lambda_p)$ als *Spitzenempfindlichkeit* (*peak responsivity*). Die *Cutoff-Wellenlänge* λ_c definiert sich durch den Abfall der Empfindlichkeit auf 20 % der Spitzenempfindlichkeit.

Diese idealisierte Beschreibung vernachlässigt evtl. Einflüsse auf $R(\lambda)$ und λ_p , wie z. B. die wellenlängenabhängige Transmission des Detektorfensters. Trotzdem kann der charakteristische Verlauf typischer Empfindlichkeits-Kurven auf diese Weise erklärt werden.

Weil Detektoren für den FIR-Bereich meist zur Detektion thermischer Signale benutzt werden, wird außerdem die *Schwarzkörper-Empfindlichkeit* (*blackbody responsivity*) $R_{BB,T}$ angegeben. Dies ist eine sehr nützliche Größe, da IR-Detektoren meist mit Hilfe eines einfachen Experimentes spezifiziert werden, bei dem die Intensität eines schwarzen Strahlers unter definierten Versuchsbedingungen gemessen wird (s. Abb. 5.2). Die so gemessene Größe ergibt sich zu

$$R_{BB,T} = \frac{U}{I_{BB,T} A_D G_A} \quad [\text{V W}^{-1}] \quad (5.7)$$

mit der spektral integrierten Intensität $I_{BB,T}$, der durch den schwarzen Strahler der Temperatur T emittierten Strahlung am Ort des Detektors und der Meßspannung U . Diese Größe sagt bereits sehr viel über die Charakteristik eines Halbleiter-Detektors aus, da die Wellenlängenabhängigkeit der Empfindlichkeit im wesentlichen durch die oben geschilderten Zusammenhänge gegeben sind und sich für verschiedene Detektoren ähnlich verhalten. Spitzen- und Schwarzkörper-Empfindlichkeit sind durch folgende Beziehung miteinander verknüpft

$$R_{\lambda_p} = G(T) R_{BB,T} \quad (5.8)$$

$R_{BB,T}$ läßt sich ausdrücken als das Integral über die einfallende spektrale Leistungsdichte eines Schwarzkörperstrahlers gewichtet mit der jeweiligen wellenlängenabhängigen Empfindlichkeit normiert auf die gesamte emittierte Intensität

$$R_{BB,T} = \frac{1}{I_{BB,T}} \int_0^{\infty} L(\lambda, T) R(\lambda) d\lambda \quad (5.9)$$

Damit ergibt sich

$$G(T) = \frac{I_{BB,T} R_{\lambda_p}}{\int_0^\infty L(\lambda, T) R(\lambda) d\lambda} \quad (5.10)$$

Neben der Empfindlichkeit bestimmt das Rauschen eines Detektionssystems dessen Leistungsfähigkeit. Als „Rauschen“ werden statistische Signalfluktuations bezeichnet, die aufgrund vielfältiger Ursachen in *allen* Komponenten einer Meßanordnung entstehen. Diese können bspw. in der Erfassung von Hintergrundereignissen (Streulicht, thermischer Hintergrund, etc.) oder Störungen bei der Signalübertragung liegen. Sie liefern Änderungen des Meßsignals, die keine Korrelation mit der Meßgröße zeigen und somit keine verwertbare Information tragen. Aus der stochastischen Natur solcher Ereignisse ergeben sich folgende wichtige Eigenschaften:

1. Die Rauschamplitude beträgt im zeitlichen Mittel 0 ($\overline{U_n(t)} = 0$).
2. Rauschbeiträge ergeben sich über den gesamten Bereich der Übertragungsbandbreite.
3. Die Rauschleistung sinkt mit zunehmender Anzahl N von Signalmittelungen wie $1/\sqrt{N}$.

Aus diesen Punkten ergeben sich wichtige Konsequenzen zur Rauschminimierung.

Entsprechend Punkt 1 kann der Beitrag einer Rauschquelle nicht durch eine zeitlich gemittelte Angabe der Amplitude erfolgen. Statt dessen betrachtet man das zeitliche Mittel des Amplitudenquadrates $\overline{U_n^2(t)}$ [Yar 91]. Dies entspricht der Quantifizierung des Rauschens durch seine *Leistung*. Sie hat die Einheit $[V^2]$ (photoleitend) bzw. $[A^2]$ (photovoltaisch).

Man definiert die *spektrale Rauschleistung* als den Beitrag, den eine Rauschquelle bei einer Frequenz innerhalb der Bandbreite von 1 Hz liefert in $[V^2 \text{ Hz}^{-1}]$. Der spektrale Rauschbeitrag zur Signalamplitude U_{rms} ergibt sich als Wurzel dieses Ausdruckes und führt die Einheit $[V \text{ Hz}^{-1/2}]$. Gemäß Punkt 2 läßt sich der Einfluß des Rauschens auf das Signal minimieren, indem die Detektionsbandbreite so gering wie möglich gehalten wird, ohne wichtige spektrale Signalanteile zu unterdrücken.

Aus Punkt 3 folgt, daß sich die statistischen Signalfluktuations durch Signalmitteilung wirksam vermindern lassen. Dies führt mit zunehmender Anzahl von Mittelungen zu immer geringerem Gewinn bei der Verbesserung des Signal-zu-Rauschverhältnisses. In der Praxis kann dies wegen der Einhaltung realistischer Meßzeiten nicht beliebig fortgesetzt werden. Vor allem setzt jedoch die Zunahme des Einflusses von Langzeit-Driften der Meßdauer eine prinzipielle Grenze. Diese werden meist durch temperaturabhängige Schwankungen in der Nachweiselektronik hervorgerufen, im speziellen Fall der gepulsten photothermischen Radiometrie dominieren Schwankungen der Umgebungstemperaturen auf Sekunden- bis Minuten-Zeitskalen diesen Einfluß. Die in dieser Arbeit

gezeigten Signale entstanden üblicherweise durch Mittelung über 4 bis 16 Einzelmessungen.

Ein Hauptleistungsmerkmal eines Detektionssystems besteht in der Angabe des geringstmöglichen nachzuweisenden Signals. Diese wird mit der wichtigen Größe der *rauschäquivalenten Leistung* (*noise equivalent power*) NEP_λ [$\text{W Hz}^{-1/2}$] quantifiziert. Diese verknüpft die Empfindlichkeit eines Detektionssystems mit dessen Rauschen entsprechend

$$NEP_\lambda = \frac{U_{rms}}{R(\lambda)} \quad [\text{W Hz}^{-1/2}]. \quad (5.11)$$

Diese Größe kann gedeutet werden als die Strahlleistung, die in dem betrachteten Frequenzbereich ein Signal-zu-Rausch-Verhältnis von Eins produziert. Dahinter steht die Annahme, daß die minimal detektierbare Strahlungsleistung ein Signal produzieren muß, welches ungefähr gleich der Rauschamplitude ist. Aus der Definition von NEP_λ ergeben sich als Möglichkeiten einer Verbesserung der Nachweisgrenze die *Steigerung der Empfindlichkeit* (Nachweisoptik, Signalverstärkung, etc.) und die *Verminderung von Rauscheinflüssen* (Bandbreitenbegrenzung, Signalmittelung, hochwertige Elektronik, Abschirmung, etc.).

Das Rauschspektrum photoleitender Detektoren zeigt typischerweise ein starkes $1/f$ -Verhalten für niedrige Frequenzen $f \leq 1$ kHz und nimmt oberhalb dieser Eckfrequenz einen konstanten Wert an. Aus diesem Grund empfiehlt es sich, die zu messenden Signale mit Frequenzen in diesem Bereich zu modulieren.

Die rauschäquivalente Leistung ist die wichtigste Kennzahl zur Quantifizierung der Fähigkeit eines Detektors, schwache Signale nachweisen zu können. Im Bereich der IR- bzw. Wärmestrahlungsdetektion ist es jedoch üblich, diese Detektoreigenschaft mit einer anderen Größe, der *Güte* oder *Detektivität* D^* [$\text{cm Hz}^{1/2} \text{W}^{-1}$] (*Detectivity* „*D-Star*“) zu beschreiben [Wol 96]:

$$D^*(\lambda) = \frac{\sqrt{A_D}}{NEP_\lambda} \quad [\text{cm Hz}^{1/2} \text{W}^{-1}]. \quad (5.12)$$

Diese Größe wird definiert, um ein Vergleichskriterium zwischen verschiedenen Detektortypen zu bieten. Da die Empfindlichkeit auch von der Detektorfläche A_D abhängt, wird NEP_λ auf die Kantenlänge der aktiven Fläche $\sqrt{A_D}$ bezogen und dieser Ausdruck invertiert. Dadurch ergibt sich eine Größe, deren Werte mit der Qualität der Detektoren zunimmt (im Gegensatz zu NEP_λ). Meist wird die *peak detectivity* $D_{\lambda_p}^*$ angegeben. Für die Spezifizierung des Detektors mit einem schwarzen Strahler der Temperatur T ergibt sich dann gemäß (5.10) (HgCdTe).

$$D_{BB,T}^* = \frac{D_{\lambda_p}^*}{G(T)} \quad [\text{cm Hz}^{1/2} \text{W}^{-1}]. \quad (5.13)$$

Der in dieser Arbeit zur Anwendung gelangte Detektor ist ein photoleitender Typ der Firma EG&G JUDSON aus Quecksilber-Cadmium-Tellurid. Die Bandlücke dieses

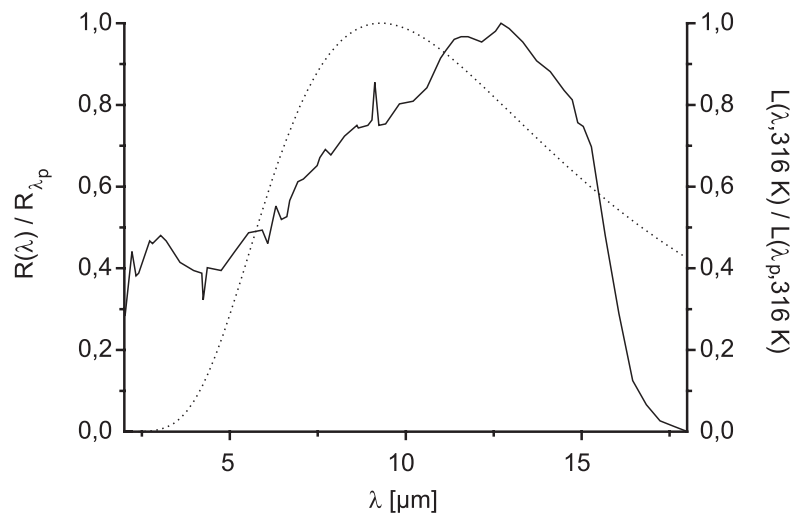


Abbildung 5.3: Spektrale Empfindlichkeit des verwandten Detektors ($\cdot \cdot \cdot$) im Vergleich zur spektralen Leistungsdichte eines schwarzen Strahlers bei 316 K ($—$)

Halbleitermaterials läßt sich sehr einfach durch die Zusammensetzung der Legierung einstellen, so daß es in einem weiten Wellenlängenbereich zwischen $2 \dots 20 \mu\text{m}$ eingesetzt werden kann. Die maximale Empfindlichkeit des eingesetzten Detektors liegt bei etwa $13 \mu\text{m}$, das entspricht einer Bandlücke von $E_{\text{gap}} \approx 0,8 \text{ eV}$. Die Kühlung erfolgt durch flüssigen Stickstoff, der in ein in das Gehäuse integriertes Dewar gefüllt wird. Eine Stickstofffüllung ermöglicht etwa $6 \dots 8$ -stündigen Betrieb. Die wellenlängenabhängige relative Empfindlichkeit $R(\lambda)$ des Detektors, bezogen auf R_{λ_p} , ist in Abb. 5.3 dargestellt (Herstellerangaben) Der Vergleich mit der relativen spektralen Strahlungsdichte eines schwarzen Strahlers bei 316 K zeigt die gute Überdeckung dieser Spektren. Die vom Hersteller angegebenen Spezifikationen des Detektors sind in Tab. 5.1 aufgelistet.

5.1.3 Meßtechnische Signalaufbereitung

Zur Messung einer Änderung der Detektorleitfähigkeit wird dieser von einem konstanten Bias-Strom durchflossen und die über dem Detektor abfallende Spannung registriert. Eine Beschaltung, wie sie üblicherweise zu diesem Zweck realisiert wird, ist links in Abb. 5.4 gezeigt.

Wichtig bei dieser Beschaltung des Detektors (R_d) ist der Koppelkondensator C, der in Verbindung mit dem Eingangswiderstand des nachfolgenden Verstärkers als Hochpaß wirkt. Somit wird die Untergrund-Gleichspannung, die am Detektor aufgrund der Hintergrundstrahlung ständig anliegt, abgeblockt (AC-gekoppelte Messung) und eine Übersteuerung der nachfolgenden Verstärkerstufe ($G_A \sim 10^2 \dots 10^4$) verhindert. Die Grenzfrequenz liegt typischerweise im Bereich einiger Hz, so daß nur entsprechend höher-

Tabelle 5.1: Technische Daten des verwandten Detektors (Herstellerangaben).

Modell-Nr.: J15D16 – M204 – S02M – 60		
Parameter	Symbol	Wert
Aktive Fläche	A_d	$2 \times 2 \text{ mm}^2$
Cutoff-Wellenlänge	λ_c	$16,3 \mu\text{m}$
Peak-Wellenlänge	λ_p	$13 \mu\text{m}$
Spitzendetektivität	D^*	$3,28 \cdot 10^{10} \text{ cm Hz}^{1/2} \text{ W}^{-1}$
SK ^{*)} -Empfindlichkeit	$R_{BB,500\text{K}}$	$5,79 \cdot 10^2 \text{ V/W}$
Rauschen	U_n	$8,2 \text{ nV Hz}^{-1/2}$
Anstiegszeit	τ_d	$0,3 \mu\text{s}$
Testkonditionen		
Bias-Strom	I_{Bias}	$31,00 \text{ mA}$
Bias-Spannung	U_{Bias}	$3,875 \text{ V}$
SK ^{*)} -Temperatur	T	500 K
Hintergrund-Temp.	T_{bg}	295 K
Chopper-Frequenz		$1,0 \text{ kHz}$
Meßverstärker		PA-100 [EGG 95]

^{*)}Schwarzkörper

frequente Signalanteile gemessen werden können. Dies stellt für viele Anwendungen keine Einschränkung dar, da sich allein aufgrund des Rauschverhaltens des Detektors der Einsatz einer Strahlmodulation empfiehlt. Bei transienten Ereignissen ergibt sich die Möglichkeit eines Nachweises für Anstiegszeiten unterhalb einiger 10 ms.

Theoretische Modellierungen wie in Kapitel 4 zeigen jedoch, daß PPTR-Signale an biologischem Gewebe auf Zeitskalen im Bereich einiger 100 ms betrachtet werden müssen. Aus diesem Grund wurde ein Meßverstärker verwandt (EGG&JUDSON, PA-300), welcher die elektrische Kompensation des Untergrundanteiles und somit die Verstärkung und Übertragung niederfrequenter Signalanteile gestattet. Das Prinzip beruht auf der Wirkungsweise einer WHEATSTONEschen Brückenschaltung, in deren Meßzweig sich der Detektor (R_d) befindet (s. Abb. 5.4). Über den zweiten Widerstand in diesem Zweig (R_{bias}) wird der Bias-Strom bestimmt. Mit einem regelbaren Widerstand (R_{set}) im Abgleichzweig kann die Meßbrücke abgeglichen werden, so daß die aufgrund der Hintergrundstrahlung am Detektor abfallende Gleichspannung kompensiert wird. Bei Änderung der Strahlungsleistung auf dem Detektor ändert sich dessen Widerstand, so daß der Abgleich gestört ist, und zwischen den Punkten P1 und P2 ein dieser Änderung proportionaler Strom gemessen werden kann.

Der Nachteil einer solchen Verstärkerkonfiguration besteht darin, daß niederfrequente Driften des Hintergrundes im Sekunden- bis Minutenbereich ebenfalls übertra-

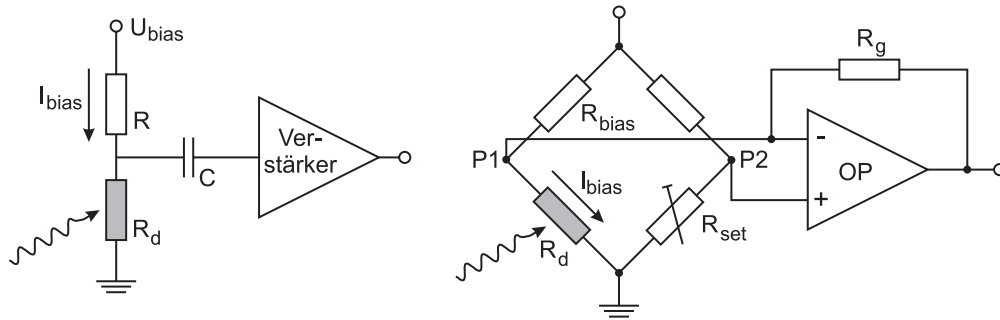


Abbildung 5.4: Elektronische Beschaltung photoleitender Detektoren. **Links:** Einfache Realisierung des Bias-Stromes (AC-gekoppelt). **Rechts:** DC-gekoppelte Messung mit WHEATSTONEScher Brücke.

gen werden, welche den Signalverlauf stören können. Außerdem muß zwischen einzelnen Messungen des öfteren eine Kompensation des Hintergrundes erfolgen.

Der Brückenstrom wird mit einem als Transimpedanzwandler geschalteten rauscharmen Operationsverstärker gemessen. Die Transimpedanz ist durch den Widerstand R_g gegeben, und beträgt 1...100 kV/A. Zu größeren Werten von R_g hin verringert sich die Einstellzeitzeit des Verstärkers und somit die Detektionsbandbreite. Die experimentellen Ergebnisse und Signalsimulationen zeigen jedoch, daß Zeitauflösungen im ms-Bereich völlig ausreichend sind. Die Anstiegszeit des Verstärkers liegt selbst für die höchsten eingesetzten Transimpedanzen im Bereich $5 \mu\text{s}$ [Han 97].

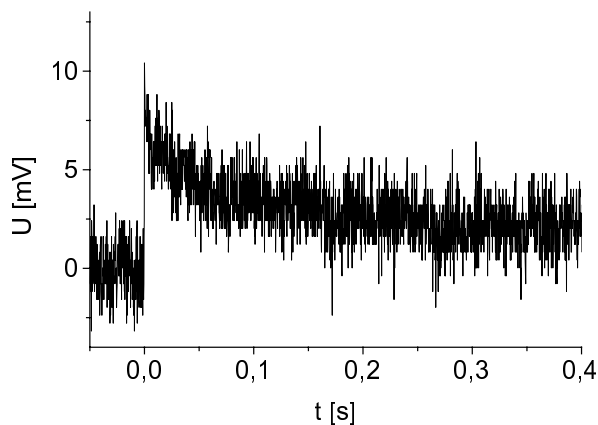


Abbildung 5.5: Einzelschußaufnahme an einer homogen absorbierenden Probe ($\mu_a = 7 \text{ cm}^{-1}$; $Q_0 = 100 \text{ mJ cm}^{-2}$)

Um weitere Rauschanteile zu unterdrücken und die Güte des Detektionssystems auszuschöpfen, empfiehlt es sich, die Elektronik nur mit hochwertigen, rauscharmen Netzgeräten, besser noch mit Batterien zu betreiben.

Eine theoretische Abschätzung der Nachweisempfindlichkeit und Kalibrierung des Detektionssystems ist schwierig, da die Messungen zur Spezifikation seitens des Herstellers mit einem anderen als dem von uns verwandten Meßverstärker

erfolgt. Außerdem entsprechen die Testbedingungen einer Anordnung gemäß Abb. 5.2 und weichen somit sehr stark von den experimentellen Gegebenheiten der im Rahmen der Arbeit durchgeführten Messungen ab. Da weiterhin der Einfluß der verwandten

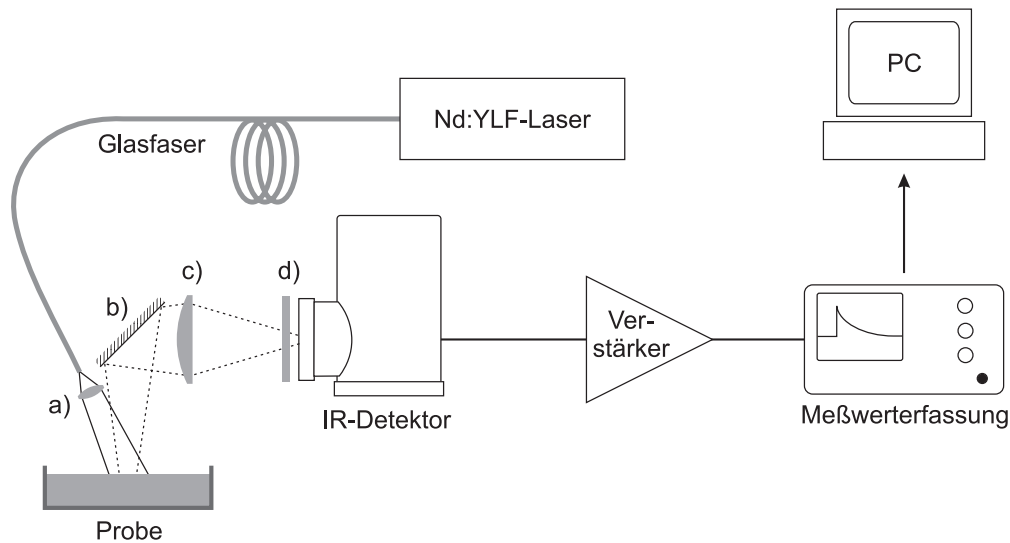


Abbildung 5.6: Schematische Darstellung des experimentellen Aufbaus für PPTR-Messungen an eindimensionalen Probengeometrien. a) Faserauskoppler; b) Goldspiegel; c) ZnSe-Linse; d) Kantenfilter.

Detektionsoptik schwierig abzuschätzen ist, wurde die Nachweisempfindlichkeit des verwandten PPTR-Aufbaus experimentell bestimmt.

Abb. 5.5 zeigt eine Einzelschußmessung an einem homogenen Absorber (0,1 %-ige Tuscheverdünnung entspr. $\mu_a = 7 \text{ cm}^{-1}$, s. Abschn. 6.1), aufgenommen mit einer Flächen-Energiedichte von $Q_0 = 100 \text{ mJ cm}^{-2}$. Mit (4.1) ergibt sich eine Temperaturerhöhung an der Probenoberfläche von 0,17 K. Bei einer gemessenen Signalamplitude von etwa 8 mV entspricht dies einer Nachweisempfindlichkeit von 47 mV K^{-1} .

Die statistische Auswertung der Streuung der Meßpunkte im Zeitintervall $[0,4; 0,5] \text{ s}$ liefert eine Standardabweichung von $U_{rms} = 1,2 \text{ mV}$. Somit ergibt sich eine rauschbegrenzte Auflösung minimaler Temperaturschwankungen von 26 mK. Dies ist in sehr guter Übereinstimmung mit der in [Han 97] gemachten theoretischen Abschätzung der rauschbegrenzten Temperaturmessung.

5.2 Aufbau des Experimentes

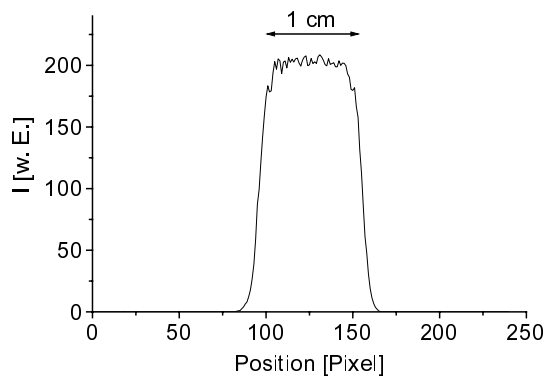
Der grundlegende Aufbau der im Rahmen der Arbeit durchgeführten Experimente ist in Abb. 5.6 skizziert. Die Bestrahlung der Probe erfolgt mittels eines gepulsten Lasers über eine Glasfaser mit Auskoppeloptik. Ein Teil der von der Probe ausgehenden Wärmestrahlung wird über einen Umlenkspiegel und eine Linse auf den Detektor fokussiert. Die Datenaufnahme erfolgt mit einem Speicheroszilloskop, die Auswertung und Darstellung mittels PC. Die einzelnen Komponenten des Experimentes werden in den folgenden Abschnitten behandelt und ihre Eigenschaften näher spezifiziert.

Tabelle 5.2: Zusammenstellung der wichtigsten Parameter des verwandten Bestrahlungslasers.

Parameter	Symbol	Wert
Wellenlänge	λ	1052 nm
Pulsdauer	τ	150 μ s
Pulswiederholrate	T_{rep}	(0,2...20) Hz
Pulsenergie	E	< 240 mJ
Pulsenergie-schwankungen	ΔE	<5 %

5.2.1 Bestrahlungsquelle

Als Strahlquelle dient ein Blitzlampen-gepumpter im freilaufenden Pulsmodus betriebener Nd:YLF-Festkörperlaser, welcher im Laser Zentrum Hannover aufgebaut wurde. In Tab. 5.2 sind die wichtigsten technischen Daten aufgelistet.

**Abbildung 5.7:** CCD-Aufnahme des Strahlprofils in 3 cm Entfernung vom Faserauskoppler

Dieses System wurde wegen seiner sehr guten Eignung zur Durchführung grundlegender PPTR-Experimente ausgewählt. Der Laser zeichnet sich durch eine kompakte Bauform, einen störunanfälligen Betrieb und der Möglichkeit zur Erzeugung hoher Pulsenergien geringer Schwankungen aus. Die Pulsdauer erfüllt die Bedingung des thermal confinement für optische Eindringtiefen bis hinunter in den 10μ m-Bereich. Ein Nachteil des Systems besteht in der festen Wellenlänge. Für grundlegende Untersuchungen stellt dies jedoch keine Einschränkung dar, wenn realistische Gewebeparameter mittels geeigneter Modellsubstanzen modelliert werden können (s. Abschnitt 5.3).

Die Applikation des Lichtpulses erfolgte über eine Multimode-Lichtleitfaser (Quarz/Quarz; Kern- $\varnothing = 1,2$ mm) des Herstellers CERAMOPTEC GMBH BONN. Dies erlaubt eine sehr flexible und einfache Handhabung. In Verbindung mit einer asphärischen Auskoppeloptik (THORLABS), welche das Faserende auf die Probe abbildet, wird außerdem eine Homogenisierung der Strahlquelle und ein räumlich sehr gleichmäßiges Bestrahlungsprofil erreicht (Abb.5.7). Der große Faserquerschnitt ermöglicht die problemlose Einkopplung des Lasers, wodurch gute Übertragungseffizienzen von > 80 % erreicht werden konnten.

Typische Bestrahlungsflächen für den Fall der Realisierung einer eindimensionalen Meßgeometrie lagen im Bereich $0,5 \text{ cm}^2$ bei einer eingestrahnten Pulsenergie von etwa 160 mJ.

5.2.2 Detektionsoptik

Die von der Probenoberfläche ausgehende Wärmestrahlung wird über einen planen Goldreflektor umgelenkt und mit einer unvergüteten ZnSe-Plankonvexlinse der Brennweite 35 mm (bei $10,6 \mu\text{m}$) auf den Detektor fokussiert. Ein Kantenfilter unmittelbar vor dem Detektorfenster verhindert das Auftreffen von Wellenlängen unterhalb etwa $7 \mu\text{m}$, wodurch störende Streustrahlung unterdrückt wird. Die wellenlängenabhängige Transmission des Kantenfilters ist in Abb. 5.8 dargestellt. Man erkennt jenseits der Transmissionsgrenze eine Modulation im Frequenzgang und ein Absinken der Transmission für $\lambda > 14 \mu\text{m}$ aufgrund der optischen Filterbeschichtung. Damit ergibt sich der Bereich nachzuweisender Wellenlängen zu $\sim 7 \dots 16 \mu\text{m}$.

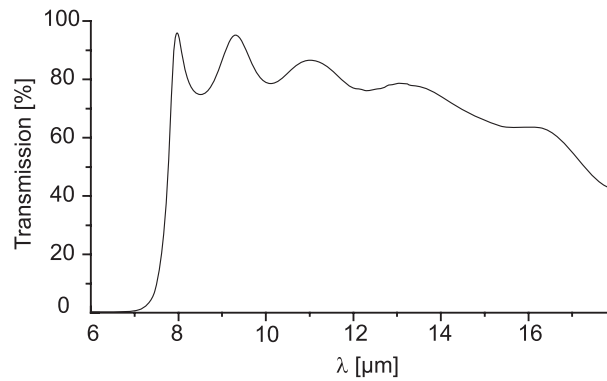


Abbildung 5.8: Wellenlängenabhängige Transmission des verwandten Kantenfilters.

Der Goldreflektor wurde eingesetzt, um eine Bestrahlung der Probe von oben zu ermöglichen. Dies gestattet den Einsatz flüssiger Proben. Der Einfluß des Reflektors auf die Detektion läßt sich vernachlässigen, da Gold im betrachteten Bereich eine fast wellenlängenunabhängige Reflektivität von nahezu 100 % besitzt [Wol 96].

Die Linse zeigt aufgrund ihres hohen Brechungsindex von 2,4 (bei $\lambda = 11 \mu\text{m}$) starke *Fresnel*-Reflexion an ihren Grenzflächen, so daß die Transmission relevanter Wellenlängen nur etwa 70 % beträgt. Aufgrund der sehr breitbandigen Detektion über etwa eine Oktave des Spektrums und der starken Dispersion des Linsenmaterials in diesem Bereich kommt es außerdem zu chromatischen Abbildungsfehlern. Diese beruhen auf der wellenlängenabhängigen Änderung der Brennweite, die für paraxiale Strahlen gegeben ist durch [Wol 96]

$$f_{\lambda} = \frac{r}{n_{\lambda} - 1} \quad (5.14)$$

mit der Brennweite f_{λ} , dem Brechungsindex n_{λ} – beide Größen in Abhängigkeit von λ – und der Linsenkrümmung r [Wol 96]. Der Brechungsindex von ZnSe variiert über den detektierten Wellenlängenbereich von $n_{7 \mu\text{m}} = 2,4218$ bis $n_{17 \mu\text{m}} = 2,3448$.

Mit der Herstellerangabe der Linsenbrennweite bei $\lambda = 10,6 \mu\text{m}$ ergibt sich eine Variation der Brennweite zwischen $f_{7 \mu\text{m}} = 34,6 \text{ mm}$ und $f_{17 \mu\text{m}} = 36,6 \text{ mm}$. Diese starken

Farbfehler limitieren die Ortsauflösung des Detektionssystems. Erfahrungsgemäß läßt sich der Detektor nicht auf kleinere Flächen als etwa 1 mm Kantenlänge abbilden.

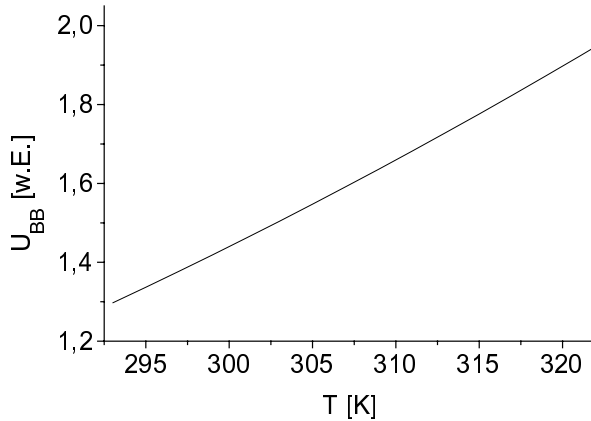


Abbildung 5.9: Berechnete Abhängigkeit des Detektorsignals von der Proben­temperatur unter Berücksichtigung der spektralen Detektorempfindlichkeit und Filtertransmission

Als praktikable Anordnung der optischen Elemente hinsichtlich des Platzbedarfs und eines ausreichenden Probenzugangs erwies sich ein Abstand Detektor – Linse von 60 mm. Das entspricht einer um den Faktor 1,5 vergrößerten Abbildung des Detektors auf eine quadratische Fläche der Kantenlänge 3 mm. Dies erlaubt die Einhaltung der in Abschnitt 4.16 formulierten Bedingung einer eindimensionalen Geometrie bei ausreichenden Flächenenergiedichten.

Abschließend soll demon­striert werden, daß die unter (4.5) gemachte Annahme einer linearen Variation des Detektorsignals mit der Proben­temperatur über den relevanten Temperaturbereich gerechtfertigt ist. Abb. 5.9 zeigt das berechnete Detektorsignal, das von einem schwarzen Strahler in dem Temperaturbereich 293...323 K erzeugt wird. Berücksichtigt ist sowohl die spektrale Variation der Detektorempfindlichkeit als auch die Abhängigkeit der Transmission des Kantenfilters von der Wellenlänge. Man erkennt den nahezu linearen Verlauf.

5.3 Gewebephantome

Als *Gewebephantome* werden allgemein Modellsubstanzen bezeichnet, mit denen sich physikalische Gewebeeigenschaften in definierter Weise simulieren lassen, um diagnostische oder therapeutische Verfahren zu testen. Im Bereich der Lasermedizin gilt dies primär für optische Eigenschaften, jedoch müssen auch oft Anforderungen an andere Verhaltensweisen der Probe erfüllt werden.

So ergeben sich im Fall der gepulsten photothermischen Radiometrie Ansprüche an thermische Eigenschaften der zu untersuchenden Substanzen, vor allem der Wärmedif­fusivität κ und Wärmestrahlungsabsorption μ_{IR} . Diese sollten Werte ähnlich biologischen Weichgewebes aufweisen, um die Erzeugung realistischer Signale in Amplitude und zeitlichem Verlauf zu ermöglichen. Somit können Möglichkeiten und Probleme einer Anwendung hinsichtlich Meßtechnik und Interpretation bestmöglich abgeschätzt

werden.

Des Weiteren werden einige generelle Forderungen an Gewebephantome gestellt. So sollten diese innerhalb enger Grenzen *reproduzierbar* herzustellen sein. Das bedeutet insbesondere, daß möglichst leicht verfügbare, geringen Schwankungen unterworfenen Materialien Einsatz finden. Wünschenswert sind weiterhin eine kostengünstige Beschaffung und der Einsatz nicht toxischer Materialien.

5.3.1 Präparation von Modellsubstanzen

Da die thermischen Eigenschaften von Weichgewebe weitestgehend durch den hohen Wassergehalt bestimmt werden (s. Abschn. 3.1), lassen sich o. g. Forderungen durch den Einsatz von Gewebephantomen auf Wasserbasis erfüllen.

Dies realisiert man im einfachsten Fall durch Einbringen von Absorptions- und/oder Streumedienn bestimmter Anteile in Wasser. Solche flüssigen Gewebephantome haben den Vorteil, daß sie leicht und in großen Mengen herzustellen sind und daß sie unter Verschluss ohne Änderungen ihrer Eigenschaften aufbewahrt werden können. Eine Einschränkung des letztgenannten Sachverhaltes ergibt sich durch die Verwendung organischer Streumedienn (s. u.). Weiterhin bieten sich solche Phantome für invasive Messungen an, um bspw. die Lichtverteilung mittels isotroper Detektoren im Medium zu vermessen [Kei 93].

Ein Nachteil flüssiger Modellsubstanzen ist die Einschränkung ihrer Nutzung auf die Modellierung homogener Medien, so daß Schichten oder komplexere Strukturen nur in Verbindung mit festen Medien hergestellt werden können. Weiterhin schränken sie die Flexibilität im Experiment ein, da sie nicht in beliebiger Position gehalten werden können.

Als eine Möglichkeit der Realisierung fester Phantome mit den eingangs geforderten Eigenschaften werden häufig Gel-artige Proben aus Gelatine oder Agargel hohen Wasseranteils (70...90 %) verwandt. Dies bietet den Vorteil einer mehr oder weniger festen Konsistenz, welche die Herstellung spezieller Geometrien (z. B. Schichten) und eine flexible Handhabung im Experiment gestattet. Außerdem zeigt ein solches Gel durch die organischen Anteile weitere gewebeähnliche Eigenschaften wie z. B. mechanische Verhaltensweisen.

Nachteile einer Präparation solcher Proben bestehen in ihrer geringen Haltbarkeit, da sie einen guten Nährboden für Mikroorganismen darstellen. Aus diesem Grunde werden manchmal Formalin oder Penicillin zugesetzt, um ein Verderben des Materials hinauszuzögern [Wag 97].

Gravierender als diese Einflüsse über einen Zeitraum von Tagen sind jedoch kurzfristige Veränderungen der Probeneigenschaften aufgrund von Austrocknungsprozessen. Da diese primär in Oberflächennähe stattfinden, reagieren PPTR-Messungen besonders

sensitiv auf derartige Einflüsse. So kommt es vor allem dort zu einer Konzentrationerhöhung der Wechselwirkungszentren für Absorption und Streuung und somit zu einem Anstieg der optischen Koeffizienten. Dies kann schon innerhalb einiger 10 min zu signifikanten Änderungen des Signals führen [Sch 96]. Dieser Einfluß läßt sich durch luftdichte, gekühlte Lagerung vor einer Messung minimieren.

Aufgrund der kurz- und langfristigen Veränderungen der Probeneigenschaften sind vergleichende Messungen mit verschiedenen Verfahren an derselben Probe schwierig zu beurteilen, wenn diese nicht simultan durchgeführt werden können. Vergleichsmessungen, welche längere Transportwege mit sich bringen, sind generell nicht möglich.

Die im Rahmen der Arbeit durchgeführten experimentellen Untersuchungen wurden sowohl an flüssigen als auch gelierten Phantomen auf Wasserbasis gemacht. Flüssige Proben wurden wegen ihrer Vorteile bzgl. der Konstanz und Reproduzierbarkeit ihrer optischen Eigenschaften für die spektroskopischen Untersuchungen an homogenen Geometrien verwandt. Für die Realisierung von Schichtproben wurde handelsübliche Speisegelatine eingesetzt.

5.3.2 Modellierung optischer Eigenschaften

Absorption

Die Realisierung der gewünschten Absorptionseigenschaften einer Probe auf Wasserbasis läßt sich relativ leicht bewerkstelligen, indem ein wasserlöslicher Farbstoff in der gewünschten Konzentration eingebracht wird. Im UV-Bereich findet z. B. K_2CrO_4 Verwendung [Ora 97], im sichtbaren Spektralbereich können verschiedene kommerziell erhältliche und spezifizierte organische Farbstoffe eingesetzt werden. Auch hat sich hier schwarzer Tinte als brauchbar erwiesen [Han 97]. Im NIR-Bereich bei etwa $\lambda = 1\mu m$ finden sich jedoch keine praktikablen Farbstoffe. Polare, d. h. wasserlösliche Farbstoffe zeigen in diesem Bereich keine signifikante Absorption [Bra 94], dies gilt auch für Tinte. Die Absorption einiger Kupfersalze wurde auch untersucht [Kir 96], es zeigt sich jedoch daß $CuSO_4$ ebenfalls zu schwache absorbiert, um einen weiten Wertebereich von μ_a realisieren zu können. $CuCl_2$ absorbiert in ausreichendem Maße, ist jedoch chemisch sehr aggressiv, führt zu Eintrübungen in Gelatine und verhindert deren Gelierung.

Als praktikabel erwies sich die Verwendung schwarzer Zeichentusche (ROTRING TT17), die im Gegensatz zu Tinte eine Suspension von Farbpigmenten darstellt, welche auch im $1\mu m$ -Bereich starke Absorption zeigen. Als nachteilig erwies sich eine relativ starke parasitäre Lichtstreuung durch diese Partikel, so daß es sich nicht um einen reinen Absorber handelt. In Ermangelung von Alternativen wurden die Proben jedoch mit diesem Material eingefärbt. Die Diskussion der optischen Eigenschaften erfolgt in Abschnitt 4.2.1.

Streuung

Entsprechend Abschnitt 2.2.1 ist ein Streuereignis durch den Streuquerschnitt und die Streuphasenfunktion beschrieben, so daß diese Größen in einem Gewebephantom modelliert werden müssen, um realistische Streueigenschaften von Gewebe zu simulieren. Da Einzelereignisse im Gewebe i. a. nicht aufgelöst werden und zur Beschreibung der Lichtausbreitung die gemittelten Größen μ_s und g herangezogen werden, reicht es aus, diese in definierter Weise nachzubilden.

Dies geschieht im Idealfall durch Erzeugen einer bestimmten Teilchendichte von Streuzentren bekannten Streuquerschnitts und Anisotropieeigenschaften im Gewebephantom, was wiederum die Verfügbarkeit solch definierter Streuer voraussetzt. Dieser Fall ist gegeben, wenn sog. Mikrosphären – Glas- oder Latexkugeln einer Größe im μm -Bereich – in einem Medium, beispielsweise Wasser, suspendiert werden. Unter Kenntnis ihrer genauen Größe und der beteiligten Brechungsindizes lassen sich die optischen Eigenschaften eines solchen Mediums mittels MIE-Theorie berechnen (s. Abschn.2.1.2). So lassen sich Präzisionsphantome herstellen, wenn die optischen Eigenschaften der eingesetzten Materialien in engen Toleranzgrenzen bekannt sind. Solche Phantome werden unter großem Aufwand für Standardisierungszwecke entwickelt [Suk 95]. Hier muß sowohl die Probenpräparation wie auch die Berechnung der Eigenschaften sehr sorgfältig geschehen, wenn man die Möglichkeiten dieser Phantome ausschöpfen möchte.

Eine weniger aufwendige und zudem kostengünstige Möglichkeit bietet der Einsatz von INTRALIPIDTM (IL), einer Fettemulsion des Herstellers PHARMACIA&UPJOHN zur intravenösen Ernährung, welche in zwei Konzentrationen erhältlich ist, die sich gemäß Tab. 5.3 zusammensetzen. (Firmenangaben)

Tabelle 5.3: Bestandteile des als Streumedium eingesetzten INTRALIPIDTM.

Bestandteil	in IL 10 [g l ⁻¹]	in IL 20 [g l ⁻¹]
Soyabohnenöl	100	200
Phospholipid (Lecithin)	12	12
Glycerin	22,5	22,5

Der Emulgator Lecithin schließt Tröpfchen von Soyabohnenöl in Form einlagiger Membranen ein, so daß eine stabile Emulsion entsteht, welche starke Lichtstreuung zeigt. Aufgrund der Anforderungen an ein solches Medikament bzgl. der Produktschwankung, insbesondere der Tröpfchengröße, besitzt IL reproduzierbare optische Eigenschaften, die in verschiedenen Publikationen experimentell ermittelt, aber auch rechnerisch nachvollzogen wurden [vSt 91, Kei 93]. Dazu wurden unter der Annahme einer

Größenverteilung der Fettröpfchen und deren sphärischer Form MIE-Berechnungen auf Grundlage des bekanntem Brechungsindex von Soyabohnenöl und Wasser angestellt. Die Ergebnisse betragen für IL 10 im unverdünnten Zustand [vSt 91]:

$\mu_a[\text{cm}^{-1}]$	$\mu_s[\text{cm}^{-1}]$	g	$\mu'_s[\text{cm}^{-1}]$
0,0	141,7	0,489	72,9

Diese Werte entsprechen an die Ergebnisse bei verschiedenen Wellenlängen angepaßten Funktionen gemäß

$$\mu_s(\lambda) = 0,016\lambda^{-2,4}; \quad g(\lambda) = 1.1 - 0,58\lambda \quad \lambda \text{ in } [\mu\text{m}] \quad (5.15)$$

Zur Durchführung der Streumessungen im Rahmen dieser Arbeit wurden seitens PHARMACIA&UPJOHN Labormuster von IL 20 zur Verfügung gestellt. Unter der Annahme des gleichen Herstellungsverfahrens und derselben Ansprüche an das Medikament hinsichtlich der Tröpfchengröße lassen sich die Ergebnisse für IL 20 entsprechend skalieren:

$\mu_a[\text{cm}^{-1}]$	$\mu_s[\text{cm}^{-1}]$	g	$\mu'_s[\text{cm}^{-1}]$
0,0	283,4	0,489	145,8

5.3.3 *In vitro*-Modell eines Blutgefäßes

In Abschnitt 4.4 wurde der Formalismus zur Signalbeschreibung der gepulsten photothermischen Radiometrie an einer absorbierenden zylinderförmigen Inhomogenität in klarer Umgebung als vereinfachtes Modell einer Ader vorgestellt. Nun soll die experimentelle Realisierung eines entsprechenden Gewebephantoms beschrieben werden (s. auch [Obe 98]).

Als zylindrischer Absorber wurde ein mit verdünnter Tusche gefülltes *Markröhrchen* eingesetzt, wie es üblicherweise in der Pulverdiffraktometrie nach DEBYE-SCHERRER Verwendung findet. Im Rahmen der Arbeit wurde ein Exemplar des Außendurchmessers $200\mu\text{m}$, einer Wandstärke von $10\mu\text{m}$ und einer Länge von 80mm eingesetzt (HILGENBERG, Glas Nr. 10). Dieses durchläuft ein Probengefäß rechteckigen Grundrisses der Abmessungen $(80 \times 100 \times 15)\text{mm}^3$ parallel zum Boden in einer Höhe von 10mm (Abb. 5.10). Die Durchführung durch die Seitenwände dieses Gefäßes wurde mit jeweils einer Injektionskanüle realisiert, in die das Markröhrchen eingeklebt wurde. Dies sorgt für eine Stabilisierung und erlaubt den einfachen Anschluß von Injektionsspritzen zur Befüllung der Kapillare.

Der Durchfluß der Absorberflüssigkeit durch die Kapillare wird durch den Anschluß eines Flüssigkeitsreservoirs über Infusionsschläuche bewerkstelligt. Durch die Variation der Höhe des Reservoirs kann der Druck und somit die Fließgeschwindigkeit in der Kapillare reguliert werden.

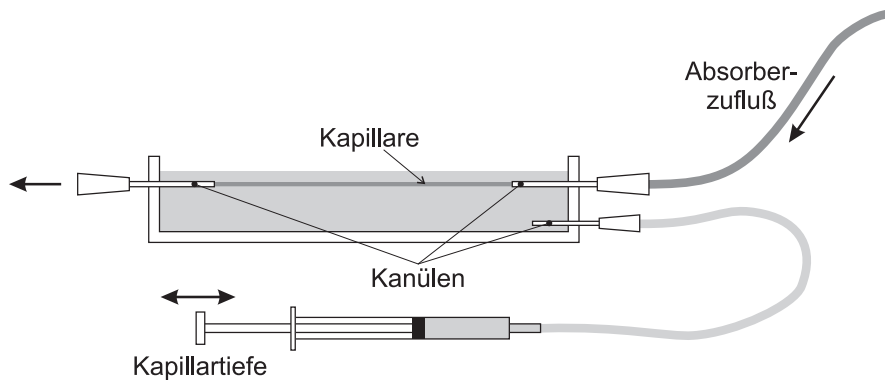


Abbildung 5.10: Schematische Darstellung des *in vitro*-Adermodells.

Das umgebende Medium kann mittels einer flüssigen Modells substanz im Probengefäß realisiert werden. Im Rahmen der Arbeit wurde reines Wasser verwendet, das Konzept erlaubt ebenso eine einfache Realisierung endlicher Streu- und Absorptionseigenschaften in der Umgebung der Kapillare.

Ein wichtiger Parameter ist die Tiefe, in der sich die Kapillare unter der Wasseroberfläche befindet. Diese wird über den Füllstand im Becken mittels über Infusionsschläuche angeschlossener Injektionsspritzen reguliert. Durch einen Spiegelhalter kann das Becken leicht gekippt werden, so daß die Kapillare parallel zur Wasseroberfläche ausgerichtet werden kann. Wegen der Oberflächenspannung des Wassers muß sich die Kapillarenoberkante in einer Mindesttiefe unter der Wasseroberfläche befinden, da sich diese sonst nicht schließt, bzw. über der Kapillare eine Erhebung bildet. Die Messung der Kapillartiefe mit Hilfe eines unabhängigen Messverfahrens erwies sich aufgrund der kleinen und empfindlichen Struktur als nicht durchführbar. Somit konnte nicht die absolute Lage der Kapillare in der Tiefe bestimmt werden, sondern lediglich relative Tiefenänderungen angegeben werden.

Im folgenden soll die Möglichkeit der Durchführung von Messungen am Adermodell diskutiert werden, wie sie in Abschnitt 4.4 berechnet worden waren. Die dort simulierten Signale entsprechen einer Messung der zeitlich und in einer Richtung orts aufgelösten Oberflächen-Temperaturentwicklung nach Einstrahlung eines lateral „unendlich“ ausgedehnten Laserpulses. Eine solche Anordnung fordert die Temperaturmessung an sehr kleinen – im Idealfall *punktförmigen* – Oberflächenarealen. „Sehr klein“ bedeutet in diesem Zusammenhang klein gegenüber der räumlichen Ausdehnung des betrachteten Temperaturfeldes an der Probenoberfläche. Wie Simulationen zeigen (s. Abb. 4.9), liegt diese in der Größenordnung des Kapillardurchmessers, also im Bereich einiger $100\mu\text{m}$. Somit ergibt sich die Forderung einer detektierten Fläche einer Kantenlänge unter $100\mu\text{m}$. Eine solche Auflösung kann im Falle photothermischer Messverfahren durch die verkleinerte Abbildung des Detektors in die Ebene der Probenoberfläche erreicht werden. Wegen der begrenzten Abbildungseigenschaften der verwandten

Detektionsoptik, insbesondere der chromatischen und geometrischen Aberrationen, sind dieser Steigerung der Ortsauflösung Grenzen gesetzt.

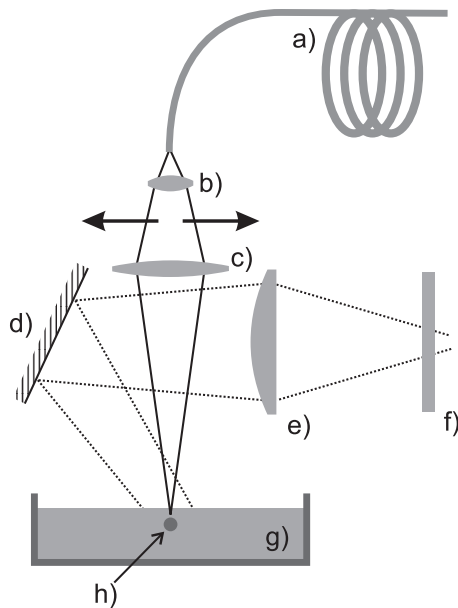


Abbildung 5.11: Experimenteller Aufbau zur lateralen Ortung der Absorber-gefüllten Glaskapillare im Adermodell. a) Glasfaser; b) Auskoppler; c) Fokussierlinse; d) Goldspiegel; e) ZnSe-Linse; f) Kantenfilter; g) Umgebungsmedium; h) Kapillare

Bei dem im Rahmen der Arbeit zur Verfügung stehenden Detektor handelt es sich um einen großflächigen Typ mit einer empfindlichen Fläche der Größe 2×2 mm von quadratischer Form. In Verbindung mit der eingesetzten einfachen Detektionsoptik läßt sich diese auf ein minimales Areal etwa der Kantenlänge 1 mm abbilden. Daraus ist ersichtlich, daß dieses Detektionssystem nicht für eine solche Messung geeignet ist (s. Abschn. 5.2.2).

Aus diesem Grund wurde statt der Vorgehensweise einer unendlich ausgedehnten Einstrahlung bei punktförmiger Temperaturdetektion ein dazu konträrer Ansatz gewählt. Dabei erfolgt die laterale Auflösung durch die *Fokussierung des Lasers* und die Verschiebung des Bestrahlungspunktes quer zur Kapillare bei *integraler Detektion* der Oberflächen-Temperaturänderung. Für diesen Fall sollte die räumliche Ausdehnung der Lasereinstrahlung klein sein gegenüber dem Kapillardurchmesser, um ein gute Ortsauflösung zu erreichen.

Dieses Vorgehen wurde experimentell durch eine zusätzliche Fokussierlinse hinter der Faserauskopplung und die Möglichkeit der lateralen Verschiebung der Bestrahlungsoptik realisiert (Abb. 5.11). Die Fleckgröße $2w$ des Laserstrahls in der Tiefe der Kapillare betrug etwa 1 mm. Das entspricht zwar nicht dem Idealfall $w \ll a$, läßt jedoch eine laterale Ortung der Kapillare zu.

Dieses Vorgehen wurde experimentell durch eine zusätzliche Fokussierlinse hinter der Faserauskopplung und die Möglichkeit der lateralen Verschiebung der Bestrahlungsoptik realisiert (Abb. 5.11). Die Fleckgröße $2w$ des Laserstrahls in der Tiefe der Kapillare betrug etwa 1 mm. Das entspricht zwar nicht dem Idealfall $w \ll a$, läßt jedoch eine laterale Ortung der Kapillare zu.

Die Nachteile dieses Verfahrens werden im Vergleich mit der Methode der ortsaufgelösten Temperaturmessung klar:

- Lichtstreuung in der Probe kann zur Aufweitung des Bestrahlungsprofils und somit zur Reduktion der Ortsauflösung führen.
- Es existiert kein zur Verwendung von Wärmekameras analoges Verfahren, welches einen Einzelschuß-Betrieb ermöglicht.
- Wegen der Mittelung über Strukturen des Temperaturfeldes gehen für die Signalinterpretation wichtige Informationen verloren.

- Eine zweidimensionale Geometrie ist nicht mehr gegeben.

Insgesamt läßt sich festhalten, daß diese Meßanordnung gewählt wurde, um mit den zur Verfügung stehenden Mitteln die Möglichkeit orts aufgelöster PPTR-Messungen zu demonstrieren. Quantitative Behandlungen dieser Ergebnisse sind insbesondere wegen der Verletzung der Annahme einer zweidimensionalen Geometrie nicht möglich. Für weitergehende quantitative Untersuchungen oder eventuelle Anwendungen ist somit ein Detektionssystem hoher Ortsauflösung und die Einhaltung der in 4.4 behandelten Meßgeometrie notwendig.

Kapitel 6

Experimentelle Ergebnisse

BISLANG wurden die theoretischen Grundlagen der Entstehung photothermischer Signale behandelt sowie die Details der experimentellen Realisierung entsprechender Messungen im Rahmen der Arbeit dargestellt.

Basierend auf diesen Grundlagen soll in diesem Kapitel die Auswertung der durchgeführten Experimente erfolgen. Neben der Darstellung und der Diskussion der Meßsignale soll insbesondere auf die Möglichkeit ihrer Interpretation hinsichtlich optischer Probeneigenschaften eingegangen werden. Diese stützt sich auf die in Kapitel 4 hergeleiteten Signalformen für verschiedene Meßgeometrien und Probeneigenschaften. Die dort behandelten Fälle finden sich sämtlich in den experimentellen Ergebnissen wieder.

Zuerst wird der einfachste Fall homogen absorbierender Proben behandelt. In diesem Zusammenhang wird die Auswertung der Signale mit Hilfe eines im Rahmen der Arbeit entwickelten Fit-Programms untersucht.

Im Anschluß daran erfolgt die Auswertung von Messungen an homogen absorbierenden und streuenden Proben. Neben der quantitativen Auswertung der optischen Eigenschaften wird der Einsatz verschiedener Lichtausbreitungsmodelle kritisch beleuchtet.

Im Rahmen der experimentellen Untersuchung optisch inhomogener Proben werden sowohl einfache Schichtsysteme als auch komplexe zweidimensionale Strukturen am Beispiel des bereits beschriebenen *in vitro*-Adermodells behandelt.

6.1 Bestimmung optischer Eigenschaften homogener Proben

Die Behandlung homogener Proben stellt die denkbar einfachste Geometrie dar, erlangt jedoch große Bedeutung in der Bestimmung optischer Materialeigenschaften. Weiterhin lassen sich an entsprechend präparierten Modellsubstanzen das Signalverhalten sowie die Auswertung photothermischer Messungen quantitativ beurteilen.

Im folgenden wird zunächst der Fall eines reinen Absorbers behandelt. Neben der quantitativen Auswertung der Messungen wird untersucht, inwiefern die verwandte Probe diesem Idealfall entspricht.

Danach werden Proben mit zusätzlicher Lichtstreuung untersucht. Die Signale werden quantitativ ausgewertet und verschiedene Modelle zur Beschreibung der Lichtausbreitung verglichen.

6.1.1 Absorptionsmessungen

Zuerst soll die Möglichkeit der Bestimmung von Absorptionskoeffizienten mit photothermischen Meßmethoden demonstriert werden. Abb. 6.1 a) zeigt an verdünnter Tusche aufgenommene PPTR-Signale im Vergleich mit entsprechend (4.20) berechneten Kurven. Man erkennt die sehr gute Übereinstimmung der theoretischen mit den gemessenen Werten über einen weiten Bereich verschiedener Absorptionskoeffizienten.

Die berechneten Signalformen wurden mittels eines im Rahmen der Arbeit entwickelten nichtlinearen Fitprogramms an die Meßwerte angepaßt. Dieses basiert auf einem LEVENBERG-MARQUARDT-Algorithmus und minimiert die Abweichung eines theoretischen Kurvenverlaufs von einer gemessenen Datenmenge unter unabhängiger Variation verschiedener den Kurvenverlauf bestimmender Parameter [Pre 92]. In diesem Fall waren dies der Skalierungsfaktor K des Signals und der Absorptionskoeffizient μ_a . Die Zahlenwerte dieser Parameter für die angepaßten Kurven sind in Tab. 6.1 zusammengefaßt. Abb 6.1 b) zeigt den Vergleich einer angepaßten Kurve mit den Berechnungen für zwei Absorptionswerte, die jeweils etwa 10 % ober- bzw. unterhalb des ermittelten Absorptionskoeffizienten liegen. Diese Darstellung verdeutlicht die in bezug auf die Absorption sehr spezifische und somit mit hoher Genauigkeit auszuwertende Signalform.

Das Ergebnis der so bestimmten Absorptionskoeffizienten ist in Abb. 6.2 a) dargestellt. Es ergeben sich mit zunehmender Tuschekonzentration linear ansteigende Werte für die Absorption. Eine Ausgleichsgerade durch den Nullpunkt liefert den Wert $\mu_a = 69,1 \text{ cm}^{-1}C^{-1}$ für die Abhängigkeit des Absorptionskoeffizienten von der Tuschenkonzentration C in der Probe, angegeben in [(ml Tusche/ml Probe) \times 100 %].

Im Vergleich dazu sind Ergebnisse optischer Transmissionsmessungen zur Be-

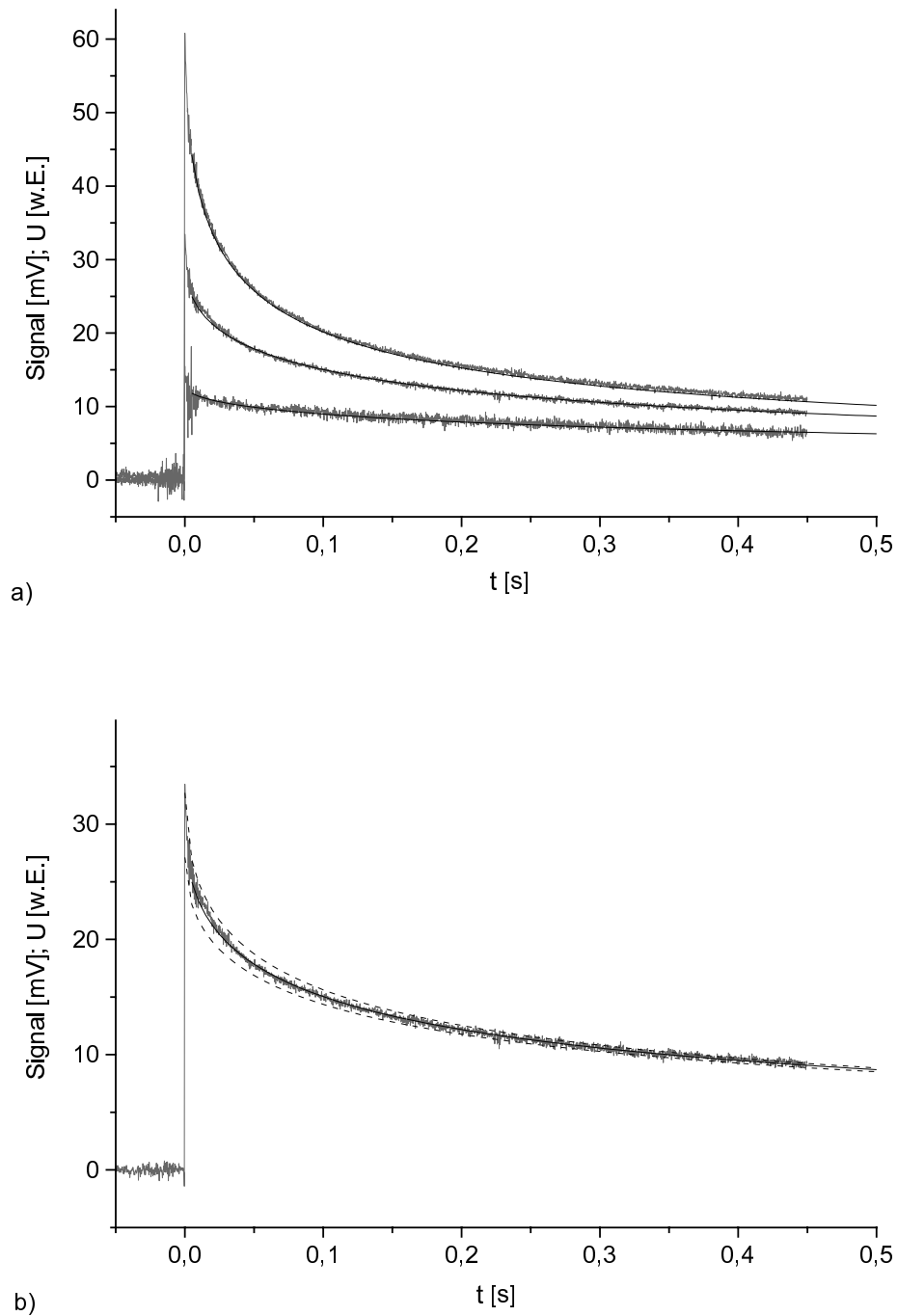


Abbildung 6.1: Darstellung einiger an homogen absorbierenden Proben aufgenommener PPTR-Signale. **a)** Signale (grau) für drei verschiedene Konzentrationen C mit Wasser verdünnter Tusche mit den zur Absorptionsbestimmung angepaßten theoretischen Kurven (schwarz). Die Konzentrationen und ermittelten Absorptionskoeffizienten der dargestellten Signale betragen (von unten nach oben): 0,5 % ($\mu_a = 29,1 \text{ cm}^{-1}$); 1 % ($\mu_a = 65,1 \text{ cm}^{-1}$); 2 % ($\mu_a = 122,9 \text{ cm}^{-1}$). **b)** Vergleich eines mit Hilfe des Fitprogramms angepaßten theoretischen Signalverlaufs ($C = 1\%$; $\mu_a = 65,1 \text{ cm}^{-1}$) mit den Kurven für eine um etwa 10 % größere ($\mu_a = 70 \text{ cm}^{-1}$) bzw. geringere ($\mu_a = 60 \text{ cm}^{-1}$) Absorption.

Tabelle 6.1: Werte der Fitparameter für die an die an die PPTR-Messungen angepaßten Kurven.

C [%]	μ_a [cm^{-1}]	K [-]
0,5	29,9	0,0018
1	65,1	0,0019
2	122,9	0,0021
3	207,4	0,0019
4	263,2	0,0019
10	606,0	0,0018

stimmung der Absorption gezeigt. Auch hier erkennt man die lineare Abhängigkeit von der Konzentration, jedoch beträgt die Steigung der Ausgleichsgeraden hier $\mu_a = 49,0 \text{ cm}^{-1} \text{ C}^{-1}$. Dies deutet auf eine systematische Abweichung zwischen den Ergebnissen der beiden Meßverfahren hin.

Die Erklärung liegt in den optischen Eigenschaften der verwandten Probe. Da es sich bei Zeichentusche nicht um eine Lösung, sondern vielmehr um die Suspension feinsten Farbpigmente handelt, zeigt diese signifikante Lichtstreuung. Untersuchungen von [Mad 92] zeigen, daß die Albedo für eine Wellenlänge von $\lambda = 600 \text{ nm}$ etwa $a = 0,3$ beträgt und der Streukoeffizient somit etwa dem halben Absorptionskoeffizienten entspricht. Die Anisotropie wird mit $g = 0,7$ angegeben. Da entsprechende Angaben für Wellenlängen um $1 \mu\text{m}$ nicht verfügbar sind, soll der Effekt nicht zu vernachlässigender Streuung beispielhaft anhand der Werte für $\lambda = 600 \text{ nm}$ diskutiert werden.

Abb. 6.2 zeigt eine mittels Monte Carlo Simulation berechnete Lichtverteilung für entsprechende optische Parameter ($\mu_a = 40 \text{ cm}^{-1}$; $a = 1/3$; $g = 0,7$). Man erkennt, daß das Profil der Bestrahlungsstärke ein nahezu exponentielles Verhalten zeigt. Der Verlauf ist steiler als im Falle reiner Absorption. Ein entsprechender Fit liefert einen Exponentialkoeffizienten von $\mu_d = 43,2 \text{ cm}^{-1}$, welcher den Absorptionskoeffizienten um nahezu 10 % überschreitet. Bei μ_d handelt es sich um eine heuristisch eingeführte Hilfsgröße, welche die Dämpfung der Bestrahlungsstärke aufgrund von Absorption *und* Streuung quantifiziert. Man beachte, daß μ_d nur für Spezialfälle analytisch dargestellt werden kann. Im Falle diffuser Lichtausbreitung ist $\mu_d = \mu_{\text{eff}}$, bei der Betrachtung des ungestreuten Lichtanteils gilt $\mu_d = \mu_t$.

Wegen der nahezu exponentiellen Form des Lichtfeldes gelingt trotz nicht zu vernachlässigender Streuung die Anpassung theoretischer Kurven an die PPTR-Messungen mit einem Fit-Algorithmus, dem das Modell eines exponentiellen Lichtabfalls in der Probe aufgrund reiner Absorption zugrundeliegt. Die so ermittelten Datenpunkte in Abb. 6.2 entsprechen somit *nicht* den Absorptionskoeffizienten, sondern den oben eingeführten Dämpfungskoeffizienten μ_d .

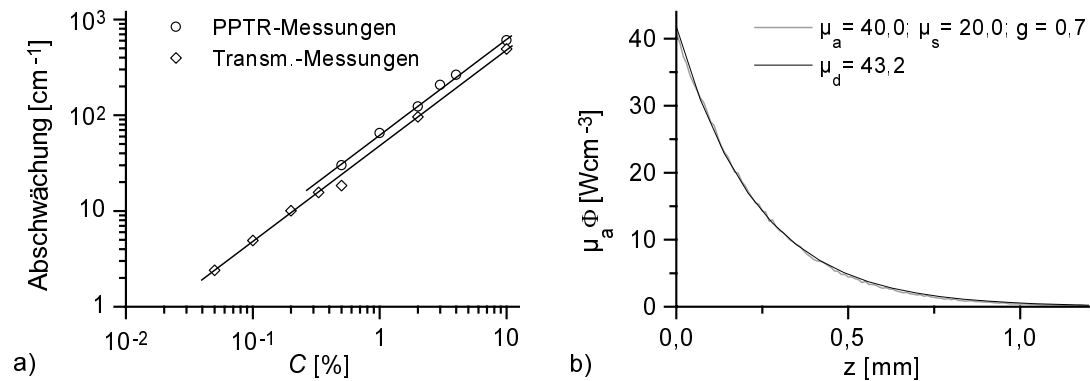


Abbildung 6.2: **a)** Mittels PPTR-Messungen an verdünnter Tusche bestimmte Absorptionskoeffizienten in Abhängigkeit von der Tuschenkonzentration C . Dargestellt sind die Fit-Ergebnisse (\circ) sowie die Ergebnisse der optischen Transmissionsmessungen (\diamond). **b)** Mittels Monte Carlo Simulation berechnete Lichtverteilung für eine Tuscheverdünnung der Absorption $\mu_a = 40,0 \text{ cm}^{-1}$. Gezeigt ist weiterhin ein Exponentialfit (grau) mit $\mu_d = 43,2 \text{ cm}^{-1}$.

Aus diesen Erkenntnissen wird klar, daß die Streueigenschaften von Tusche nicht vernachlässigt werden können und die Probe somit nicht dem Anspruch eines rein absorbierenden Mediums genügt. Im Bereich der von uns verwandten Wellenlänge steht jedoch kein anderes Probenmaterial zu Verfügung, welches wasserlöslich ist und eine ähnlich starke Absorption aufweist.

Vor dem Hintergrund der Notwendigkeit, Tusche als Absorber verwenden zu müssen, erscheint die gesonderte Kenntnis der Absorptions- und Streueigenschaften dieses Materials als essentiell.

Im Fall einer bekannten Albedo und nicht zu starker Lichtstreuung (etwa $\mu'_s \leq \mu_a$) kann die Absorption der Probe durch eine einfache Korrektur des Fitergebnisses erfolgen. Da das Verhältnis μ_a/μ_d für verschiedene Tintenkonzentrationen konstant ist, ergibt sich der Absorptionskoeffizient zu $\mu_a = r_{a:d} \cdot \mu_{d,fit}$. Dabei bezeichne $r_{a:d}$ das mittels Monte Carlo Simulation ermittelte Verhältnis μ_a/μ_d und $\mu_{d,fit}$ sei der Dämpfungskoeffizient, der sich durch die Auswertung der PPTR-Signale mit Hilfe des Fit-Programms ergibt. Mit den oben beispielhaft angeführten Zahlenwerten für a und g erhalte man einen Korrekturfaktor von $r_{a:d} = 0,93$ für den Absorptionswert. Dieser Wert bedeutet eine Näherung des wirklichen Absorptionskoeffizienten in der Probe, die umso genauer ist, je besser die Lichtverteilung einer Exponentialfunktion entspricht. Im Falle stärkerer Streueigenschaften kann eine quantitative Untersuchung der Probe nur mit Hilfe entsprechender Streuung berücksichtigender Lichtausbreitungsmodelle gelingen.

Da die Albedo der Probe in dem verwandten Wellenlängenbereich nicht bekannt war, kann eine Korrektur des Ergebnisses der Absorptionsmessungen an dieser Stelle nicht erfolgen. Eine detaillierte Diskussion der Absorptions- und Streueigenschaften der verwandten Tusche findet sich im folgenden Abschnitt.

Im Falle der optischen Transmissionsmessungen kann eine entsprechende Bewer-

tung der Ergebnisse nicht getroffen werden. Da diese Messungen eine einfach zu realisierende Kontrollmöglichkeit zu den PPTR-Experimenten darstellen sollten, wurden hier keine spezielle Meßgeometrie eingehalten, die eine qualitative oder quantitative Behandlung des Einflusses von Lichtstreuung auf das Ergebnis zuließe. Auch wurde auf weiterführende Experimente zur separaten Bestimmung von Streu- und Absorptionseigenschaften von Tusche mit Hilfe rein optischer Methoden im Rahmen der Arbeit verzichtet.

6.1.2 Messung der Lichtstreuung

In diesem Abschnitt soll der Einfluß von Lichtstreuung auf das Signal quantitativ untersucht werden. Als Modellsubstanz diente wiederum verdünnte Tusche. Im vorangegangenen Abschnitt wurde bereits auf deren nicht zu vernachlässigende Streuung hingewiesen, so daß die Bestimmung der optischen Eigenschaften von Tusche in den Rahmen dieses Abschnitts fällt.

Weiterhin wurde die Lichtstreuung in der Probe durch den Zusatz eines Streumediums bekannter optischer Eigenschaften variiert. Auf diese Weise konnte ein weites Spektrum von Albedo-Werten der Probe von etwa 0,22...0,06 untersucht werden. Als Streumedium fand INTRALIPID 20 % (IL 20) Verwendung, einer in Abschnitt 5.3.2 näher beschriebenen Fettemulsion zur parentalen Ernährung.

Abb. 6.3 zeigt an derartigen Proben aufgenommene PPTR-Signale und entsprechend (4.18) angepaßte theoretische Kurven. Dabei wurden die Lichtverteilungen mittels Monte Carlo Simulationen berechnet, um eine möglichst exakte Beschreibung des Lichtfeldes zu erlangen.

Die Anpassung der theoretischen Kurven geschah in diesem Fall nicht mittels eines Fit-Programms, sondern durch den Vergleich für verschiedene Parametersätze simulierter Signale mit den Messergebnissen. Dieser Weg wurde eingeschlagen wegen der schwierigen Implementierung von mittels Monte Carlo Simulation berechneter Lichtverteilungen in ein Fitprogramm und der sich damit ergebenden langen Rechenzeiten. Auf die Modellierung mittels Monte Carlo Simulation sollte jedoch nicht verzichtet werden, denn gerade für die grundlegenden Untersuchungen über die Möglichkeit photothermischer Messungen an streuenden Medien ist eine möglichst genaue und allgemeine Beschreibung der Lichtausbreitung wünschenswert, weil so ein großer Bereich von optischen Probeeigenschaften untersucht werden kann.

Die Vorgehensweise bei der Interpretation der Messungen soll im folgenden erläutert werden. Zunächst ergab die Auswertung des Signals für eine etwa $C=0,5\%$ ige Tuscheverdünnung ohne IL 20-Anteil mit Hilfe des unter 4.2.1 beschriebenen Fitprogramms $\mu_{d,fit} = 44,0 \text{ cm}^{-1}$. Weiterhin gilt für IL 20 bei $\lambda = 1052 \text{ nm}$ (s. Abschn. 5.3.2):

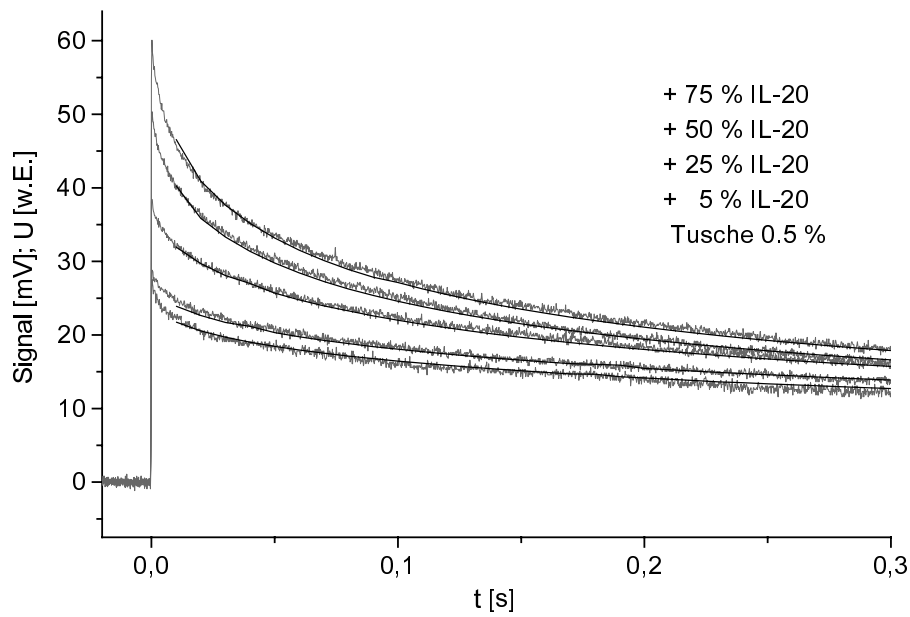


Abbildung 6.3: Darstellung einiger an Proben aus Tusche und INTRALIPID 20 (IL 20) durchgeführten PPTR-Messungen (grau) mit den dazugehörigen bestangepaßten theoretischen Signalverläufen (schwarz). Die Proben hatten einen $C = 0,5$ %-igen Tuschegehalt und variierende Anteile IL 20 ($C_{IL} = (0 \dots 75) \%$).

$\mu_a[\text{cm}^{-1}C_{IL}^{-1}]$	$\mu_s[\text{cm}^{-1}C_{IL}^{-1}]$	g
0,0	2,8	0,489

mit der IL 20-Konzentration C_{IL} in $[(\text{ml IL 20}/\text{ml Probe}) \times 100 \%]$.

Nun wurden Parametersätze hypothetischer Werte für die optischen Eigenschaften der Tusche ($\mu_{a,T}; \mu_{s,T}; g_T$) erstellt, die eine Lichtverteilung mit $\mu_d \approx 44,0 \text{ cm}^{-1}$ ergeben. Dies wurde mittels Exponentialfits an die entsprechenden Monte Carlo Simulationen überprüft.

Die alleinige Forderung eines bestimmten Wertes für den Abfall des Lichtfeldes in der Probe legt deren optischen Eigenschaften noch nicht fest, da dieser mit unendlich vielen Kombinationen der Parameter μ_a , μ_s und g angenähert werden kann. Entsprechend führen beliebig viele Kombinationen von Streu- und Absorptionseigenschaften zu Signalmodellierungen, die durch entsprechende Skalierung mit der Messung innerhalb des Rauschens in Übereinstimmung gebracht werden können.

Erst eine weitere Bedingung, wie die Forderung eines Wertes für die Bestrahlungsstärke – resp. Energiedichte – an der Oberfläche, legt den Parametersatz fest. Dabei bleibt immer noch g bzw. μ_s unbestimmt, da bei der Betrachtung von Vielfachstreuung nur die Größe $\mu'_s = (1 - g)\mu_s$ Einfluß nimmt. Dies entspricht gemäß (4.18) der Bedingung einer vorgegebenen Signalamplitude. Dieses Kriterium fordert jedoch die Kalibrierung des Experimentes, d. h. die Kenntnis des Faktors K in (4.18). Da dieser

i. a. nicht bekannt ist, bzw. erst über Messungen an definierten Proben ermittelt werden muß, wurde eine weitere Möglichkeit genutzt, um die Auswahl des besten Parametersatzes aus der Mannigfaltigkeit möglicher optischer Eigenschaften zu treffen.

Dies geschah durch die Untersuchung der Signale bei definierter Steigerung der Streueigenschaften durch Ersetzen eines Teils des Wassergehaltes in der Probe mit IL 20. Zu diesem Zweck wurden die optischen Eigenschaften der Probe entsprechend dem Tusche- und IL 20-Gehalt berechnet:

$$\mu_a = C \cdot \mu_{a,T}; \quad \mu_s = C \cdot \mu_{s,T} + C_{IL} \cdot \mu_{s,IL}; \quad g = \frac{C \cdot \mu_{s,T} \cdot g_T + C_{IL} \cdot \mu_{s,IL} \cdot g_{IL}}{\mu_a}.$$

Auf diesem Wege ließ sich ein Satz optischer Parameter bestimmen, der die an verdünnter Tusche mit variierendem IL 20-Zusatz ($C_{IL} = (0 \dots 95)\%$) aufgenommene Signale zufriedenstellend beschreibt (siehe Abb. 6.3). Die so erhaltenen Werte betragen:

$\mu_d[\text{cm}^{-1}\text{C}^{-1}]$	$\mu_{a,T}[\text{cm}^{-1}\text{C}^{-1}]$	$\mu'_{s,T}[\text{cm}^{-1}\text{C}^{-1}]$
88,0	44,0	88,0

Dabei wurde $g_T = 0,55$ gesetzt, dies liegt unterhalb des von [Mad 92] angegebenen Wertes bei $\lambda = 600 \text{ nm}$, was aufgrund des MIE-Effektes sinnvoll erscheint. Damit ergibt sich $\mu_{s,T} = 160 \text{ cm}^{-1}$. Obwohl diese Werte nicht durch Messungen manifestiert sind, sollen sie in weiteren Rechnungen *pro forma* verwandt werden.

Man erkennt die starke Lichtstreuung der verwandten Tusche, aufgrund derer eine Interpretation der Signale unter Annahme reiner Absorption in Abschnitt 4.2.1 nicht möglich war. Daß die Lichtverteilung dennoch gut durch einen exponentiellen Abfall repräsentiert wird, zeigt Abb. 6.5 b).

Bislang wurden ausschließlich Monte Carlo Simulationen angewandt, um durch eine möglichst exakte und flexible Behandlung der Lichtausbreitung die bestmögliche Bestimmung der optischen Probeneigenschaften zu ermöglichen. Im folgenden soll untersucht werden, inwiefern analytische Diffusionsrechnungen geeignet sind, die an streuenden Medien gemessenen PPTR-Signale zu beschreiben.

Das im Falle der stärksten Streuung ($C_{IL} = 95\%$) aufgenommene Signal ist in Abb. 6.4 dargestellt. Die optischen Probeneigenschaften betragen in diesem Fall $\mu_a = 22,0 \text{ cm}^{-1}$; $\mu_s = 346 \text{ cm}^{-1}$; $g = 0,51$. Somit ist Bedingung (2.39) einer dominanten Lichtstreuung erfüllt, so daß die Lichtausbreitung mit Hilfe der Diffusionstheorie beschrieben werden kann. Neben dem mit Hilfe einer Monte Carlo Rechnung simulierten Signal sind drei weitere Signalmodellierungen für obigen Parametersatz dargestellt. Diese wurden jeweils mit den verschiedenen in Abschnitt 2.3.4 vorgestellten Diffusionslösungen zur Lichtausbreitung berechnet. Zur Skalierung dieser Ergebnisse wurde der Faktor zugrundegelegt, der sich für die Monte Carlo-gestützten Rechnungen ergab.

Man erkennt die zufriedenstellende Signalbeschreibung zumindest für die Rechnungen nach [Pra 92, Sta 95]. Die Modellierung nach [Ora 96] zeigt eine starke Verschiebung des Signals zu hohen Werten.

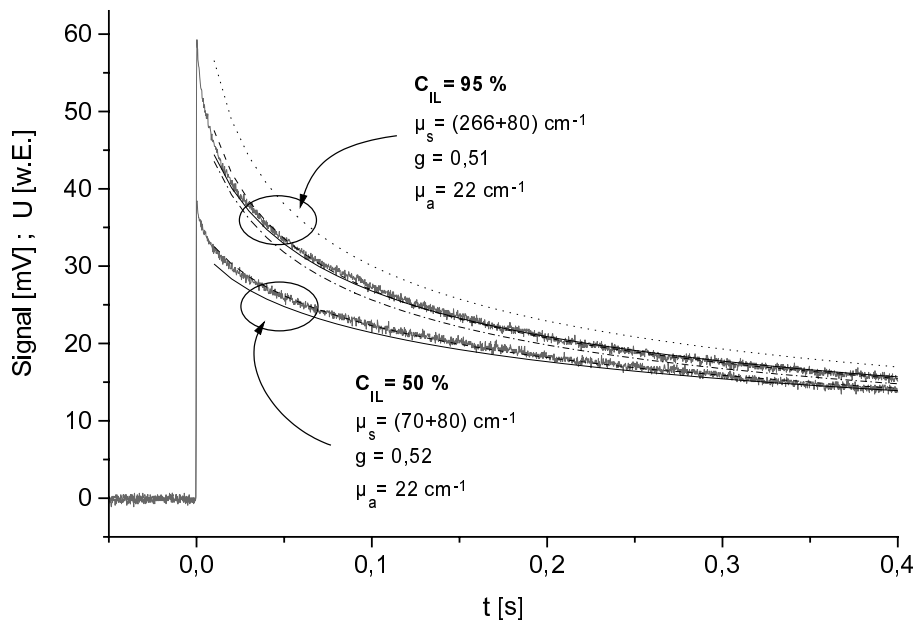


Abbildung 6.4: Vergleich theoretischer Signalverläufe, die auf unterschiedlichen Berechnungen der Lichtausbreitung beruhen, hinsichtlich der Beschreibung von PPTR-Messungen an streuenden Proben. Zum Vergleich sind wiederum die auf Monte Carlo Simulation basierenden Modellrechnungen dargestellt. Die den Rechnungen zugrunde liegenden Parametersätze sind angegeben.

Diese Resultate lassen sich qualitativ durch Betrachtung der verschiedenen Lösungen der Diffusionsgleichung im Vergleich mit der Monte Carlo Simulation verstehen (Abb. 6.5 a)). Die Rechnungen entsprechend [Pra 92, Sta 95] repräsentieren die aus der Monte Carlo Simulation resultierende Lichtverteilung gut und führen auch in Oberflächennähe zu akzeptablen Ergebnissen.

Die Lösung von [Ora 96] hingegen ist von einfacherer Struktur und liefert *per se* die Beschreibung des Lichtfeldes nur für Werte $z > \text{MFP}'$. Der Grund liegt in der hier gemachten Näherung, daß die Lichteinstrahlung durch eine punktförmige Lichtquelle in der Tiefe $z = \text{MFP}'$ ersetzt wird. Somit ergibt sich eine Lösung proportional zu $\exp(-\mu_{eff}z)$. Durch die Formulierung der Spiegelladungsmethode wird diese Lösung auf die richtigen Werte der Bestrahlungsstärke für Tiefen $z > \text{MFP}'$ skaliert. Somit ergeben sich systematisch zu hohe Werte für die Bestrahlungsstärke im Bereich $0 < z < \text{MFP}'$, welche dem simulierten PPTR-Signal einen Offset aufprägen.

Weiterhin ist in Abb. 6.4 noch einmal die Messung im Falle eines 50 %-igen IL 20-Anteils der Probe mit zwei entsprechenden simulierten Signalverläufen dargestellt. Dabei handelt es sich um die bereits in Abb. 6.3 gezeigte Rechnung mittels Monte Carlo Simulation und um eine Simulation auf Grundlage der Diffusionslösung nach [Pra 92]. Die optischen Probeneigenschaften betragen $\mu_a = 22,0 \text{ cm}^{-1}$; $\mu_s = 150 \text{ cm}^{-1}$; $g = 0,52$.

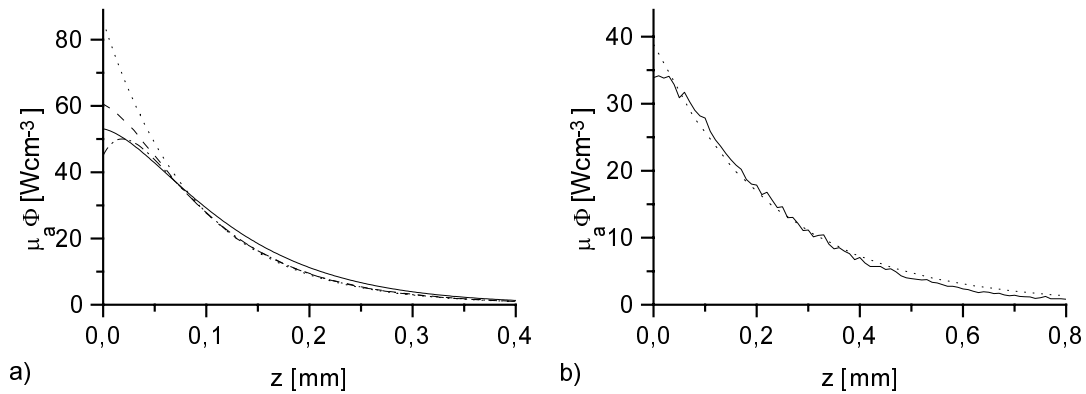


Abbildung 6.5: a) Vergleich verschiedener Berechnungen der Lichtausbreitung für eine Probe mit den optischen Eigenschaften $\mu_a = 22,0 \text{ cm}^{-1}$; $\mu_s = 346,0 \text{ cm}^{-1}$; $g = 0,51$. Neben der Monte Carlo Simulation nach [Wan 92] (- - -) sind die bereits in 2.3.4 behandelten Diffusionslösungen nach [Pra 92] (—), [Sta 95] (- · - ·) und [Ora 96] (· · ·) dargestellt. b) Simulation der Lichtausbreitung in 0,5 %-iger Tuscheverdünnung entsprechend den ermittelten optischen Parametern und ein daran angepaßter Exponentialverlauf.

Die in (2.39) formulierte Bedingung für die Gültigkeit der Diffusionstheorie ist in diesem Falle nicht mehr erfüllt ($\mu_a/\mu_s \approx 3(1 - g^2)$), so daß die Verwendung von Diffusionslösungen zur Signalbeschreibung fraglich erscheint.

Man erkennt dennoch auch hier eine gute Annäherung des Signals, so daß die Berechnung der Lichtverteilung nach [Pra 92] gut geeignet scheint, um photothermische Signale – selbst im Bereich relativ geringer Streuung – zu modellieren. Sie bietet daher die attraktivste Möglichkeit der Einarbeitung einer analytischen Beschreibung der Lichtausbreitung in Medien nicht vernachlässigbarer Streuung in ein Fitprogramm.

6.2 Untersuchung geschichteter Systeme

In diesem Abschnitt sollen die Möglichkeiten photothermischer Messungen an Schichtsystemen diskutiert werden, wie sie für die Untersuchung flächig ausgedehnter Strukturen – z. B. einem Feuermal – von Interesse sind.

Abb 6.6 zeigt die Messungen an einem mit Tusche eingefärbten Gelatinesubstrat mit aufgetragenen transparenten Schichten variierender Dicke. Zum Vergleich ist ein am Substrat ohne Beschichtung aufgenommenes Signal dargestellt. Der Fit liefert $\mu_{a,T} = 87 \text{ cm}^{-1}$ und $\mu'_{s,T} = 174 \text{ cm}^{-1}$. Bei den Schichten handelt es sich um verschiedene Anzahlen von Lagen mit Wasser getränkten Papiervlieses. Dabei bildet das Papier eine Matrix, mit deren Hilfe sich ein Wasserfilm bestimmter Dicke auf dem Substrat fixieren läßt. Diese Art der Probenpräparation wurde gewählt, da es aufgrund der Oberflächenspannung nicht möglich war, reines Wasser in einer definierten Schichtdicke im Bereich einiger $100 \mu\text{m}$ auf das Substrat aufzubringen. Auch die Herstellung solch dün-

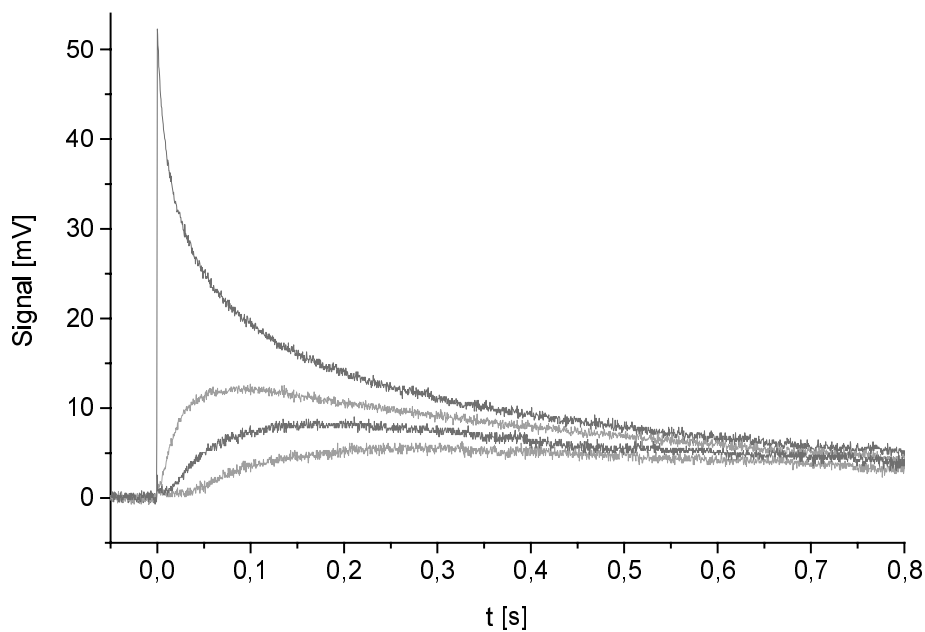


Abbildung 6.6: PPTR-Messungen an Schichtproben, bestehend aus einem Substrat mit Tusche eingefärbter Gelatine und darauf aufgetragenen Schichten wassergetränkter Papiere variierender Dicke. Die Signale wurden (von unten nach oben) an Schichtdicken von $150\ \mu\text{m}$, $100\ \mu\text{m}$ und $50\ \mu\text{m}$ aufgenommen. Das oberste Signal wurde zum Vergleich am Substrat ohne aufgetragene Schicht aufgenommen. Der Fit liefert $\mu_d = 174\ \text{cm}^{-1}$, das entspricht $\mu_{a,T} = 87\ \text{cm}^{-1}$ und $\mu'_{s,T} = 174\ \text{cm}^{-1}$

ner Gelatineschichten erwies sich als nicht praktikabel.

Die gewählte Art der Realisierung von Schichtproben birgt jedoch auch Nachteile: Zum einen handelt es sich um thermisch inhomogene Proben, deren Eigenschaften in der oberen Schicht zudem nur grob abgeschätzt werden können. Neben der Unsicherheit bzgl. der thermischen Eigenschaften führt die unregelmäßige Struktur von Papier auch zu Unsicherheiten in der Schichtdicke bzw. der Oberflächenbeschaffenheit. Weiterhin lassen sich die optischen Eigenschaften der oberen Schicht nicht quantifizieren. Es konnte lediglich durch Messungen an reinem Papier gezeigt werden, daß dieses kein PPTR-Signal erzeugt und somit keine signifikante Lichtabsorption im verwandten Wellenlängenbereich aufweist. Somit stellt die Streuung den dominierenden Einfluß auf den Lichttransport in dieser Schicht dar.

Man erkennt in Abb 6.6 mit zunehmender Schichtdicke eine stärkere Verzögerung des Signalmaximums unter gleichzeitiger Abschwächung der Signalamplitude. Für große Zeiten streben die Signale einem gemeinsamen Verlauf zu, welcher dem der Messung am Substrat ohne aufgetragene Schicht entspricht. Wegen der Unsicherheiten bzgl. der physikalischen Eigenschaften der oberen Schicht ist eine quantitative Auswertung dieser Messungen nicht möglich. Somit ist diese Messung als Machbarkeitsstudie zur

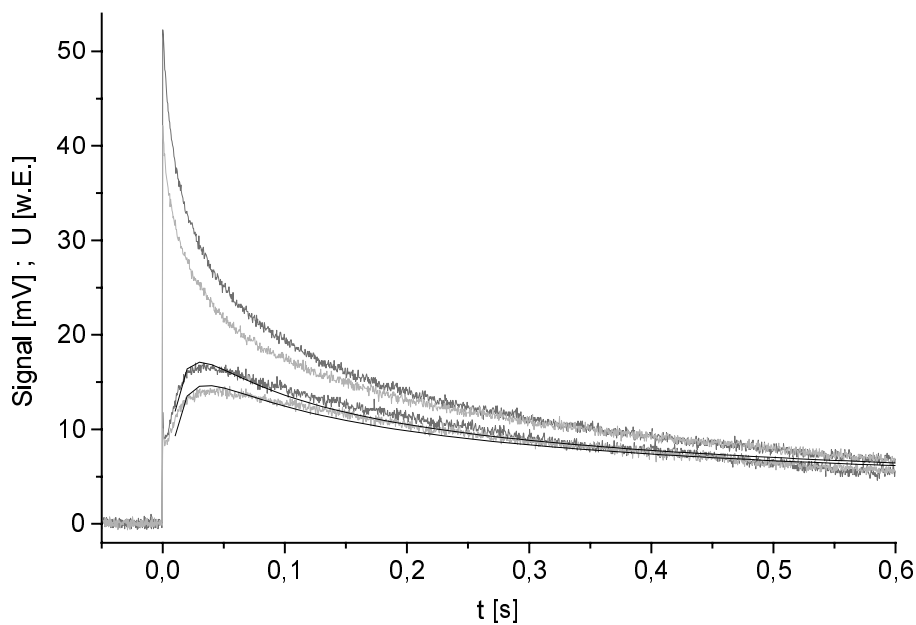


Abbildung 6.7: Messungen an Schichtsystemen aus Gelatinesubstrat und darauf aufgelegten Mikroskop-Deckgläsern der Dicke $130\ \mu\text{m}$. Dargestellt sind Signale für zwei unterschiedliche stark eingefärbte Substrate. Hellgrau: $\mu_a = 60\ \text{cm}^{-1}$ und $\mu_s = 216\ \text{cm}^{-1}$; Dunkelgrau: $\mu_a = 90\ \text{cm}^{-1}$ und $\mu_s = 326\ \text{cm}^{-1}$. Die theoretisch modellierten Signale sind schwarz dargestellt.

Detektion stark absorbierender Proben unterhalb streuender Schichten zu werten.

Quantitativ verwertbare Messungen lieferte eine Probenkonstellation, bei der ein Mikroskop-Deckgläschen auf das Gelatinesubstrat aufgebracht wurde. Hier kann man von bekannten optischen ($\mu_a = 0$; $\mu_s = 0$) und thermischen ($\kappa = 0,0051\ \text{cm}^2\text{s}^{-1}$, [Lon 87]) Eigenschaften ausgehen. Zwar handelt es sich auch hier um eine thermisch nicht homogene Probe, jedoch werden der Signalanstieg und die Lage des Maximums gut repräsentiert, wenn das Signal entsprechend Gleichung (D.15) mit $\kappa = 0,0051\ \text{cm}^2\text{s}^{-1}$ modelliert wird (siehe Abb 6.7). Der Signalabfall wird zu steil im Vergleich zur Messung wiedergegeben, was auf den zu großen Wert von κ , bezogen auf das Substrat, zurückzuführen ist.

Diese Messungen wurden für zwei verschieden starke Tuschkonzentrationen im Substrat durchgeführt. Man erkennt, daß die Signalamplitude von den optischen Eigenschaften des Substrats abhängig ist, die Lage des Signalmaximums hiervon jedoch unbeeinflusst bleibt.

6.3 Messungen am *in vitro*-Modell eines Blutgefäßes

Abschließend sollen PPTR-Messungen einer Probe präsentiert werden, die optische Inhomogenitäten in zwei Dimensionen aufweist. Dabei handelt es sich um das in Abschnitt 5.3.3 beschriebene Gewebemodell, mit Hilfe dessen die in Abschnitt 4.4 entwickelte idealisierte Geometrie zur Beschreibung photothermischer Messungen an einem Blutgefäß experimentell realisiert werden kann.

Dabei werden zunächst anhand orts aufgelöster PPTR-Messungen wichtige Signalcharakteristika demonstriert, die eine Lokalisation der betrachteten Inhomogenität in lateraler Richtung als auch in der Tiefe zulassen. In einem weiteren Experiment wird die Möglichkeit des photothermischen Nachweises eines Flüssigkeitsstromes in dem Adermodell präsentiert.

6.3.1 Lokalisierung einer Kapillare

Abb. 6.8 zeigt die Ergebnisse zweier PPTR-Messungen am Adermodell in Form von Graustufenbildern ähnlich dem in Abb. 4.9 b). Die Messungen erfolgten durch kollimierte Lasereinstrahlung bei integraler Detektion des PPTR-Signals und Variation des Einstrahlpunktes quer zum Verlauf der Kapillare. Der laterale Abstand zwischen Einstrahlort und Lage der Kapillare ist auf der x -Achse aufgetragen (s. Skizze Abb. 4.8). Die mit verdünnter Tusche ($\mu_d = 120 \text{ cm}^{-1}$) gefüllte Kapillare hatte einen Radius von $a = 90 \mu\text{m}$ und befand sich in einer Umgebung aus reinem Wasser. Die gezeigten Messungen entsprechen zwei verschiedenen Kapillartiefen: Im oberen Bild befindet sich die Kapillare so nah wie möglich an der Wasseroberfläche, ohne diese durch Kapillarkräfte zu beeinflussen; im unteren Bild liegt sie einige $10 \mu\text{m}$ tiefer.

Die Grauwerte repräsentieren die Höhe des gemessenen Signals und somit die Oberflächentemperatur, so daß die Bilder die zeitliche und räumliche Variation des Temperaturfeldes an der Probenoberfläche darstellen. Aus Gründen der besseren Darstellung wurde eine Graustufen-Skala verwandt, die keinen monotonen Zusammenhang zwischen Signalthöhe und Grauwert zeigt (siehe Legende). Beide Bilder sind in der gleichen Skalierung dargestellt. Man erkennt deutlich ein räumliches Temperaturmaximum im Bereich $x = 0$ einer Breite, die in der Größenordnung des Kapillardurchmessers liegt. Die x -Skala repräsentiert die Einstellungen der im Experiment verwandten Verschiebvorrichtung. Man sieht eine durch leichte Dejustage geringfügig gegen $x = 0$ verschobene Lage der Kapillare x_K . Im unteren Bild beobachtet man einen flacheren Signalanstieg und ein etwas späteres Maximum bei geringerer Signalamplitude. Außerdem ist das Temperaturfeld gegenüber der Messung im oberen Bild räumlich verbreitert.

Diese Zusammenhänge werden besonders in einer Schnittdarstellungen der Graustu-

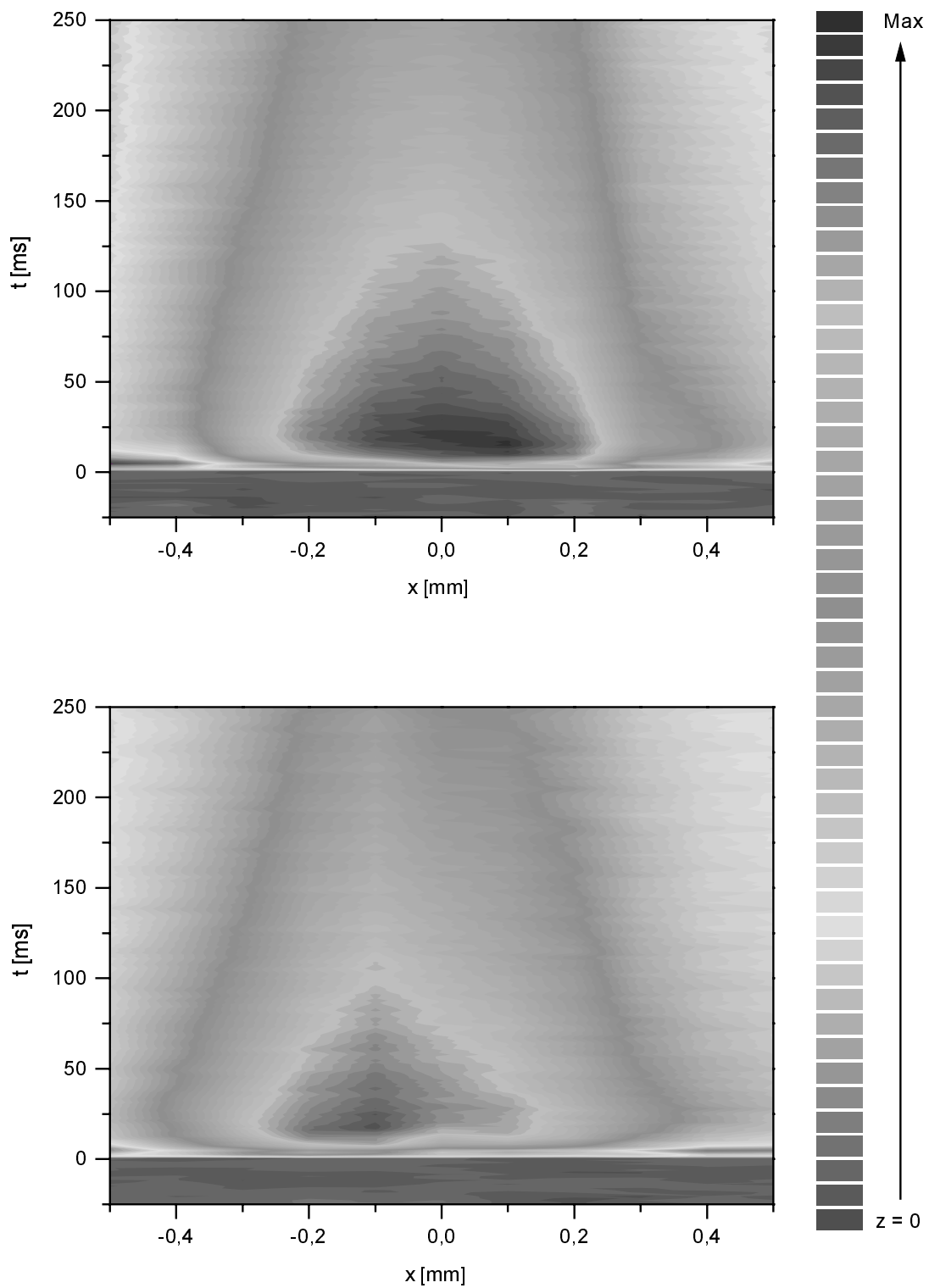


Abbildung 6.8: Graustufenbilder orts- und zeitaufgelöster Messungen am Adermodell für zwei verschiedene Kapillartiefen. Die Bilder besitzen die gleiche Skalierung, das untere entspricht der tieferliegenden Kapillare. Verwandte Probenparameter: $a = 90\mu\text{m}$; $\mu_a = 120\text{ cm}^{-1}$; Kapillartiefen siehe Text (Bezeichnungen gem. Abb. 4.8).

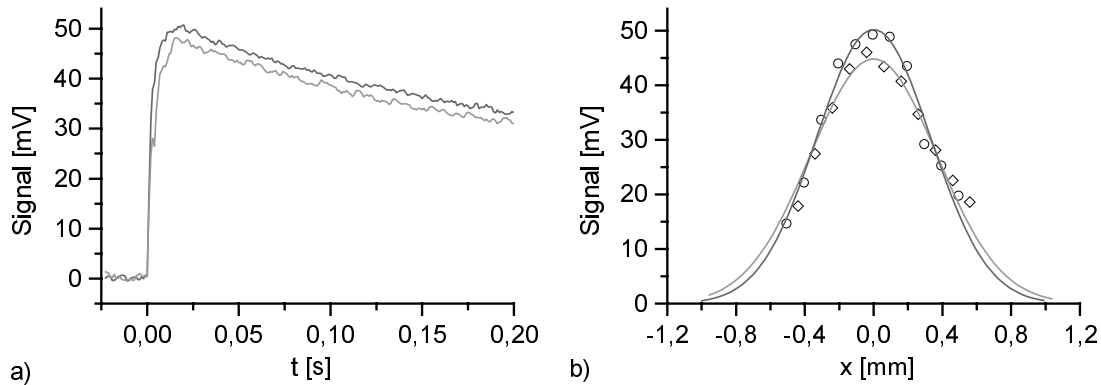


Abbildung 6.9: Schnittdarstellungen orts- und zeitaufgelöster Oberflächen-Temperaturmessungen am Adermodell. **a)** PPTR-Signale für x_K . Zu erkennen ist der langsamere Signalanstieg und die geringere Signalthöhe im Fall der tieferliegenden Ader (grau). **b)** Signalhöhe zur Zeit t_{max} in lateraler Variation bzgl. der Kapillarachse mit angepaßten Gaußkurven. Die Darstellungen wurden des besseren Vergleiches halber so verschoben, daß sie symmetrisch zu $x = 0$ liegen. Im Fall der tieferliegenden Kapillare (\diamond ; Fit in grau) ergibt sich eine größere Halbwertsbreite verglichen mit dem der weniger tief liegenden Kapillare (\circ ; Fit in schwarz)

fenbilder entlang der Achsen $x = x_K$ und $t = t_{max}$ deutlich. Der Schnitt entlang $x = x_K$ entspricht der Lasereinstrahlung bei der lateralen Position der Kapillare (Abb. 6.9 a.) Man erkennt die von der Kapillartiefe abhängige Anstiegszeit und Amplitude des PPTR-Signals. Aufgrund von Signalfluktuationen ist die stärkere Zeitverzögerung des Signalmaximums für den Fall der tieferliegenden Kapillare schlecht zu erkennen, jedoch läßt der im Vergleich zur anderen Messung langsame Signalanstieg auf eine solche schließen.

Abb. 6.9 b) zeigt die Signalhöhe für verschiedene laterale Positionen zur Zeit des Signalmaximums t_{max} bei x_K . Hier ist sowohl die geringere Signalamplitude als auch die größere laterale Ausdehnung der Temperaturverteilung mit zunehmend tiefer liegender Kapillare zu erkennen.

Abb. 6.10 zeigt die Ergebnisse weiterer Experimente zum Einfluß der Kapillartiefe auf das PPTR-Signal bei x_K . Hier wurde die Dicke der Wasserschicht über der Kapillare ausgehend von der geringstmöglichen Stärke in $25\mu\text{m}$ -Schritten erhöht. Man erkennt wieder die mit zunehmender Tiefe der Kapillare sinkende Signalthöhe und die steigende Verzögerung des Signalmaximums. Dies demonstriert die Sensitivität des Meßverfahrens auf Tiefenänderungen im Bereich $10\mu\text{m}$.

All die in diesem Abschnitt gezeigten Messergebnisse sind in qualitativer Übereinstimmung mit den Voraussagen der in Abschnitt 4.4 getätigten theoretischen Betrachtungen. Jedoch kann der dort entwickelte Formalismus nicht zur quantitativen Auswertung der hier präsentierten Messungen herangezogen werden. Grund dafür ist die Ortsauflösung des im Rahmen der Arbeit zu Verfügung stehenden Detektionssystems, mit dem die räumliche Charakterisierung eines Temperaturfeldes, wie sie mit (4.24) be-

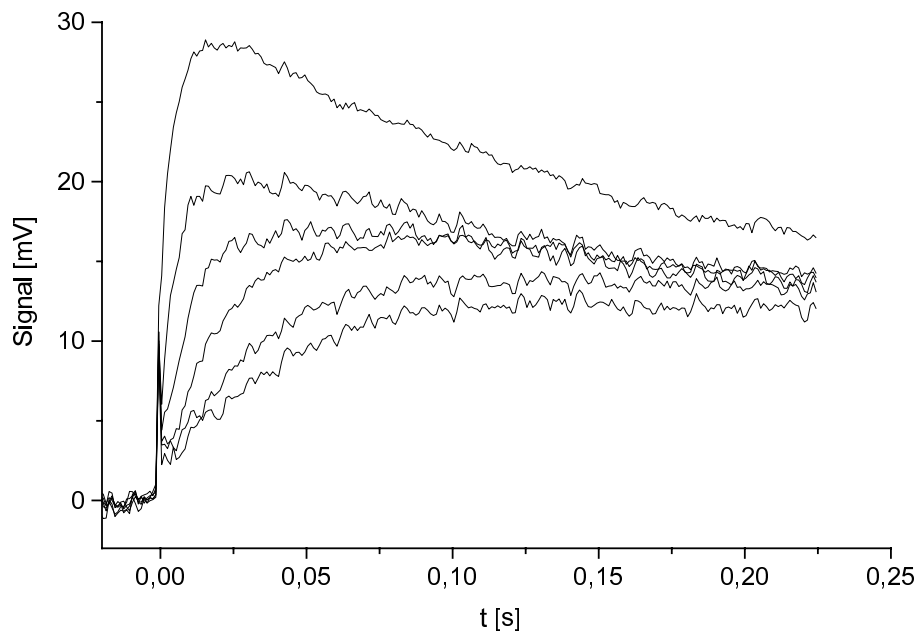


Abbildung 6.10: PPTR-Messungen am Adermodell mit fokussiertem Laserstrahl in $x = 0$ für verschiedene Kapillartiefen. Die Tiefe der Kapillare nimmt für die dargestellten Signale von oben nach unten um jeweils $25 \mu\text{m}$ zu.

geschrieben wird, nicht möglich ist (s. Abschn. 5.2.2). Daher mußte die Lokalisierung einer Blutgefäß-ähnlichen Struktur mit räumlich integraler Detektion und dem Abtasten der Probe mit einem kollimierten Laserstrahl erfolgen. Insbesondere wegen der dadurch bedingten Aufhebung einer zweidimensionalen Geometrie lassen sich die Rechnungen in Abschnitt 4.4 nicht anwenden. Insgesamt läßt sich festhalten, daß diese Meßanordnung gewählt wurde, um mit den zur Verfügung stehenden Mitteln die Möglichkeit ortsaufgelöster PPTR-Messungen zu demonstrieren und typische Einflüsse auf die Signale zu zeigen. Die Möglichkeit der quantitativen Tiefenmessung wird jedoch im folgenden Abschnitt demonstriert.

6.3.2 Durchflußmessungen

Bisher wurden die Möglichkeiten diskutiert, die die gepulste photothermische Radiometrie zur Bestimmung physikalischer – insbesondere optischer – Eigenschaften und deren räumlicher Variation bietet. Dabei wurde vom Fall des Wärmetransportes in der Probe allein durch Wärmediffusion ausgegangen. In biologischem Gewebe spielt jedoch auch konvektive Wärmeübertragung, vor allem aufgrund der Durchblutung, eine wichtige Rolle. Im folgenden soll mit Experimenten am Adermodell die Auswirkung eines Materialflusses im betrachteten Probevolumen auf das PPTR-Signal gezeigt werden. Dieser zusätzliche Einfluß auf die Signalform verspricht eine Nutzung zur Quantifizie-

nung weiterer, dynamischer Eigenschaften biologischer Proben.

Abb. 6.11 zeigt die Ergebnisse solcher Messungen. Das Adermodell entspricht in seiner Konstellation dem unter 6.3.1 beschriebenen ($a = 90\mu\text{m}$; $\mu_a = 120\text{cm}^{-1}$), die Bestrahlung erfolgt am Ort der Kapillare bei x_K .

Der obere Graph zeigt eine Messung für eine Fließgeschwindigkeit des Absorbers von 69cm s^{-1} (dunkelgrau) und im Vergleich dazu ein Signal für in der Kapillare ruhenden Absorber (hellgrau). Man erkennt deutlich den schnellen Signalabfall durch die zusätzliche Wärmeabfuhr in der Probe aufgrund des Materialflusses. Es zeigt sich jedoch ein weiterer interessanter Effekt: Das Signalmaximum wird zu einem früheren Zeitpunkt erreicht. Da die Wärmequelle den beobachteten Bereich schnell verläßt und unmittelbar darauf durch kühleres Material ersetzt wird, kommt es vor Erreichen des Temperaturmaximums an der Oberfläche dort wieder zu einer Abkühlung. Als Resultat verschiebt sich das Signalmaximum zu kürzeren Zeiten hin.

Im unteren Graphen wurde eine geringere Flußgeschwindigkeit von etwa 3cm s^{-1} realisiert (dunkelgrau). Dies entspricht dem Blutfluß, der in einer der Kapillare vergleichbaren Ader vorherrscht [Sdt 87]. Auch hier sind die bereits angesprochenen Signalcharakteristika zu erkennen.

Wiederum ist zum Vergleich eine Messung mit in der Kapillare ruhendem Absorber gezeigt (hellgrau). Da die Messung hier, wie auch im Fall fließenden Absorbers, mit einem im Vergleich zur detektierten Fläche breiten Strahlprofil aufgenommen wurde, ist die zweidimensionale Behandlung des Problems gerechtfertigt. Dies ermöglicht die numerische Auswertung des Signals gemäß (4.24). Dabei muß wegen der ebenfalls breiten Detektion eine laterale Integration entlang der x -Richtung über alle Signalbeiträge ausgeführt werden.

Die Modellrechnungen sind für den o.g. Parametersatz und drei verschiedene Kapillartiefen ($z_a = [130; 140; 150]\mu\text{m}$) aufgetragen. Man erkennt die hervorragende Übereinstimmung des Meßsignals mit der Simulation für $z_a = 140\mu\text{m}$. Weiterhin ist die deutlich schlechtere Anpassung für die um $10\mu\text{m}$ abweichenden Kapillartiefen zu sehen.

Dies demonstriert die Möglichkeit, mit Hilfe der gepulsten photothermischen Radiometrie aderähnliche Strukturen mit einer Tiefenauflösung $< 10\mu\text{m}$ zu orten.

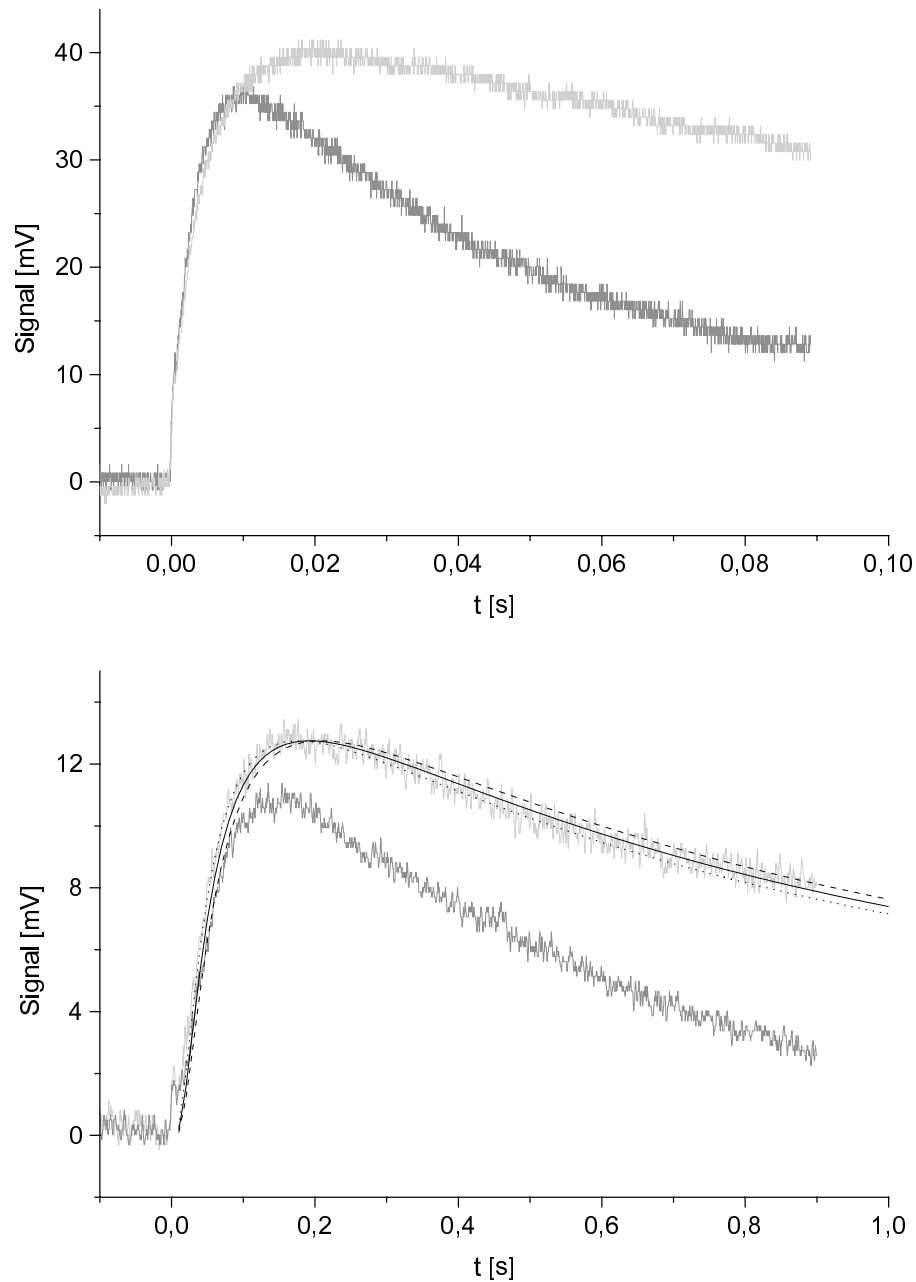


Abbildung 6.11: Durchflußmessungen am Adermodell. Dargestellt sind jeweils PPTR-Signale, die an fließendem Absorber gemessen wurden (dunkelgrau) im Vergleich zu Messungen am ruhenden Absorber (hellgrau). **Oben:** Fließgeschwindigkeit 63 cm s^{-1} . **Unten:** Fließgeschwindigkeit $3,9 \text{ cm s}^{-1}$. Zusätzlich sind simulierte Signale für variierte Kapillartiefen im Fall eines ruhenden Absorbers gezeigt (v. o. n. u. $z_a = [130; 140; 150] \mu\text{m}$).

Kapitel 7

Bewertung und Ausblick

GEGENSTAND der vorliegenden Arbeit waren theoretische und experimentelle Studien zur gepulsten photothermischen Radiometrie als Möglichkeit einer nichtinvasiven Technik der Gewebeuntersuchung. Dies geschah im Hinblick auf dosimetrische Anwendungen wie der *in vivo*-Gewebespektroskopie und der Echtzeit-Behandlungskontrolle.

Im Fall reiner Absorption konnte die für diesen Fall gültige Signalbeschreibung in ein numerisches Verfahren zur Anpassung theoretischer Werte an die experimentellen Resultate implementiert werden. Es wurde eine Anpassung innerhalb einer Toleranz von $\pm 10\%$ über einen Wertebereich der Absorption von $\mu_a \approx (30 \dots 600) \text{ cm}^{-1}$ demonstriert. Die Rauschgrenze zur Auswertung von PPTR-Signalen mit dem verwandten experimentellen Aufbau lag bei etwa $\mu_a \approx 7 \text{ cm}^{-1}$ im Einzelschußbetrieb.

Die Behandlung zusätzlicher Lichtstreuung in Experiment und Theorie demonstrierte die Sensibilität der Signale auf eine korrekte Beschreibung der Lichtverteilung in Oberflächennähe. Es zeigte sich, daß die Diffusionslösung nach [Pra 92] geeignet ist, PPTR-Signale für einen weiten Bereich optischer Eigenschaften zu beschreiben. Dies wurde für $\mu'_s \approx (70 \dots 170) \text{ cm}^{-1}$ bei einer konstanten Absorption von $\mu_a = 22 \text{ cm}^{-1}$ experimentell bestätigt.

Als Ergebnis läßt sich festhalten, daß die gepulste photothermische Radiometrie geeignet ist, optische Parameter homogener Proben über einen weiten Bereich zu vermessen. Dabei gelingt eine befriedigende Beschreibung der Signale mittels analytischer Methoden zur Beschreibung der Lichtausbreitung. Dies erleichtert eine numerisch robuste und schnelle Auswertung solcher Messungen, wie sie für den Fall reiner Absorption bereits mittels eines LEVENBERG-MARQUARDT-Algorithmus demonstriert wurde. In der weiteren Anwendung müssen neben der Implementierung eines Modells zur Lichtausbreitung in streuenden Medien die *in vivo*-Messungen mit klinisch relevanten Wellenlängen erfolgen.

Im Fall geschichteter Proben wurde die Signalmodellierung für verschiedene Konstellationen optischer Eigenschaften durchgeführt. Für eine transparente Schicht auf ei-

nem absorbierenden Substrat konnten diese im Experiment quantitativ bestätigt werden. Dies war möglich bis zu einer Dicke der oberen Schicht von $130\mu\text{m}$. Anhand von Rechnungen für ein Zweischichtmodell eines Feuermals mit realistischen Gewebeparametern bei der Wellenlänge $\lambda = 577\text{ nm}$ wurde gezeigt, daß in diesem Fall aufgrund der starken Lichtfeldgradienten eine befriedigende Beschreibung der Signale nur mittels Monte Carlo Simulation möglich ist.

Eine Ausweitung der Möglichkeiten photothermischer Messungen zur Lokalisierung optischer Inhomogenitäten in zwei Dimensionen gelang an einem idealisierten Modell einer Ader. Anhand von Simulationen wurde gezeigt, daß die orts aufgelöste PPTR-Messung nach Einstrahlung eines aufgeweiteten Laserstrahls die Ortung der Ader in laterale Richtung sowie in der Tiefe zuläßt. Dies konnte anhand der experimentellen Realisierung eines *in vitro*-Adermodells quantitativ überprüft werden. Dabei konnte die laterale Position einer Kapillare des Durchmessers $200\mu\text{m}$ mit einer Unsicherheit von einigen $10\mu\text{m}$ bestimmt werden. Weiterhin wurde die Tiefenbestimmung einer Kapillare in $140\mu\text{m}$ Tiefe mit einer Unsicherheit im $10\mu\text{m}$ -Bereich demonstriert.

Schließlich gelang der Einsatz der gepulsten photothermischen Radiometrie zum Nachweis dynamischer Prozesse. Der konvektive Wärmetransport bei einem Flüssigkeitsstrom in der Kapillare des Adermodells kann als Einfluß auf den Signalverlauf nachgewiesen werden. So konnte ein Flüssigkeitsstrom von etwa $100\mu\text{l s}^{-1}$ bei einer Tiefe von $150\mu\text{m}$ unter der Oberfläche nachgewiesen werden.

Mit dem Adermodell wurde die Möglichkeit der theoretischen und experimentellen Untersuchungen der Auswirkungen mehrdimensionaler Inhomogenitäten auf das PPTR-Signal geschaffen. Dabei unterscheiden sich die hier beschriebenen Studien wesentlich von anderen Ansätzen zur Behandlung der PPTR an einzelnen Aderstrukturen.

So berechnet [Gab 97] ausgehend von einer dreidimensionalen Monte Carlo Simulation für einzelne Adern die zeitliche Temperaturentwicklung in einem Punkt der Gewebeoberfläche. Demgegenüber wurde in der vorliegenden Arbeit ein analytisches Modell gewählt. Neben dem Vorteil des Einblicks in die Struktur der Lösung kann so eine orts aufgelöste Berechnung des PPTR-Signals innerhalb kurzer Zeit erfolgen.

In [Smi 97] wird die Berechnung der dreidimensionalen Position von Blutgefäßen im Gewebe aus einer zeitlichen Sequenz von IR-Aufnahmen der Gewebeoberfläche nach Einstrahlung eines Laserpulses beschrieben. Dies folgt mittels eines numerischen Rekonstruktionsverfahrens, welches keinerlei Modellbildung oder vorab-Annahmen über die Probengeometrie enthält. Dieses Verfahren ist somit sehr flexibel. Jedoch liegen die Rechenzeiten im Bereich von 5 Stunden. Im Gegensatz dazu lassen die Untersuchungen im Rahmen der vorliegenden Arbeit auf Grundlage einer analytischen Formulierung des Signals den Schluß zu, daß sich hiermit die Möglichkeit einer sehr einfachen und schnellen Auswertung orts aufgelöster Messungen hinsichtlich Lage, Größe und optischer Eigenschaften ergibt.

Weiterführende Untersuchungen der orts aufgelösten PPTR-Messungen an aderähnlichen Strukturen können nur mit der Realisierung einer höheren räumlichen Detektorauflösung erfolgen. Dies ermöglicht eine quantitative Signalauswertung. Das Anwendungspotential der orts aufgelösten gepulsten photothermischen Radiometrie liegt dort, wo pathologische Strukturen nicht mehr in befriedigender Näherung als Schichtstrukturen zu beschreiben sind. In der Echtzeit-Behandlungskontrolle ergeben sich Anwendungen beim Veröden einzelner Gefäße mit dem Laser zur Behandlung vaskulärer Änderungen der Haut wie z. B. Feuermal, Teleangiektasie und Blutschwamm. Auch das Verhindern von Sickerblutungen beim Er:YAG-Skin resurfacing durch orts aufgelöste Messung der verbleibenden Hautschichtdicke ist hier zu nennen.

Weitere Anwendungsfelder bieten sich durch die Detektion geringer Flüssigkeitsströme mit Hilfe der gepulsten photothermischen Radiometrie. Somit ist ein Einsatz zur nichtinvasiven Messung der Mikrovaskularisierung, etwa in der Neurochirurgie, denkbar.

Literaturverzeichnis

- [Abr 70] Abramowitz M, Stegun IA, *Handbook of Mathematical Functions*, Dover, New York 299 (1970)
- [Bor 65] Born M, Wolf E, *Principles of Optics*, Pergamon Press, 3.Aufl (1965)
- [Bou 86] Boulnois J-L, *Photophysical Processes in recent medical laser developments: a review*, Las. Med. Sci. 1, 47 (1986)
- [Bra 94] Brackmann U, *Lambdachrome Laser Dyes*, Lambda Physik Göttingen (Hrsg.) (1994)
- [BSW 74] Bergmann L, Schaefer C, *Lehrbuch der Experimentalphysik*, Bd. 1: Mechanik Akustik Wärme, Gobrecht H (Hrsg.), Walter de Gruyter, Berlin 9. Aufl. (1974)
- [Bus 82] Busse G, *Optoacoustic and photothermal inspection techniques*, Appl. Opt. 21/1, 107 (1982)
- [Car 59] Carslaw HS, Jaeger JC, *Conduction of heat in solids* Clarendon Press, Oxford, 2. Aufl. (1959)
- [Cha 60] Chandrasekhar, *Radiative transfer*, Dover, New York (1960)
- [Cie 84] Cielo P, *Pulsed photothermal evaluation of layered materials*, J. Appl. Phys 56/1, 230 (1984)
- [Coo 71] Cooper TE, Trezek GJ, *Correlation of thermal properties of some human tissues with water content*, Aerosp. Med. 42, 24 (1971)
- [Dav 57] Davison B, *Neutron transport theory*, Clarendon Press, Oxford (1957)
- [Dem 91] Demtröder W, *Laserspektroskopie*, Springer, 2. Aufl. (1991)
- [Duc 90] Duck FA, *Physical properties of tissue*, Academic Press (1990)
- [EGG 95] EG&G Judson Optoelectronics, *Infrared Detectors 1995*, Katalog (1995)
- [Ert 97] Ertmer W, *pers. Mitteilung* (1997)
- [Fav 94] Favro LD, Kuo PK, Thomas RL, *Real-time thermal wave imaging*, in: Non Destructive Evaluation, Mandelis A (Hrsg.), Englewood Cliff: Prentice Hall, 23 (1994)
- [Fur 80] Furutsu k, *Diffusion equation derived from space-time transport equation*, J. Opt. Soc. Am. 70, 360 (1980)

- [Gab 97] Gabay S, Lucassen GW, Verkruyse W, van Gemert MJC, *Modelling the assessment of port wine stain parameters from skin surface temperature following a diagnostic laser pulse*, Las. Surg. Med. 20, 179 (1997)
- [Gro 61] Gröber H, Erk S, Grigull U, *Die Grundgesetze der Wärmeübertragung* Springer Verlag, 3. Aufl. (1961)
- [Gro 83] Groenhuis RA, Storzaker DR, *Scattering and absorption of turbid materials determined from reflection measurements. 1: Theory*, Appl. Opt. 22, 2456 (1983)
- [Han 97] Hantzko T, *Bestimmung optischer Eigenschaften gewebeähnlicher Proben mittels gepulster photothermischer Radiometrie* Diplomarbeit, unveröff., Universität Hannover (1997)
- [Has 94] Haskell RC, Svaasand LO, Tsong-Tseh Tsay, Ti-Chen Feng, McAdams MS, Tromberg BJ, *Boundary conditions for the diffusion equation in radiative transfer*, J. Opt. Soc. Am. 11/10, 2727 (1994)
- [Hul 57] v.d. Hulst HC, *Light scattering by small particles*, New York: John Wiley & Sons; London : Chapman & Hall, (1957)
- [Imh 94] Imhoff RE, Zhang B, Birch DJS, *Photothermal Radiometry for NDE*, in: Non Destructive Evaluation, Mandelis A (Hrsg.), Englewood Cliff: Prentice Hall, 186 (1994)
- [Ish 97] Ishimaru A, *Wave propagation and scattering in random media*, Oxford University Press, (1997)
- [ISO 80] International Organisation for Standardization, *Quantities and units of light and related electromagnetic radiations*, International Standard ISO 31/6, 2. Aufl. (1980)
- [Jac 93] Jacques SL, Nelson JS, Wright WH, Milner TE, *Pulsed photothermal radiometry of port-wine-stain lesions*, App. Opt. 32/13, 2439 (1993)
- [Jac 95] Jacques SL, Wang L, *Monte Carlo modeling of light transport in tissue*, in: Optical-thermal response of laser-irradiated Tissue, Welch A J, van Gemert M J C (Hrsg.), Plenum Press, 73 (1995)
- [Kei 89] Keijzer M, Jaques SL, Prahl SA, Welch AJ, *Light distribution in artery tissue: Monte Carlo simulations for finite-diameter laser beams*, Las. Surg. Med. 9, 148 (1989)
- [Kei 93] Keijzer M, *Light transport for medical treatments*, Dissertation, Technische Universität Delft, Niederlande (1993)
- [Kir 96] Kirschner M, *Messung optischer Eigenschaften von gewebeähnlichen Substanzen mittels laserinduzierter akustischer Transienten*, Diplomarbeit, unveröff., Karl-Franzens-Universität Graz, Österreich (1996)
- [Kne 82] Kneubühl FK, *Repititorium der Physik*, Teubner, Stuttgart (1982)
- [Kuc 91] Kuchlin H, *Taschenbuch der Physik*, Fachbuchverlab Leipzig-Köln (1991)
- [Leu 84] Leung W P, Tam AC, *Thermal diffusivity in thin films measured by noncontact single-ended pulsed-laser-induced thermal radiometry*, Opt. Lett. 9/3, 94 (1984)

- [Leu 88] Leung W P, Tam AC, *Thermal conduction at a contact interface measured by pulsed photothermal radiometry*, J. Appl. Phys. 63/9, 1845 (1988)
- [Loh 98] Lohmann S, *Optoakustischen Tomographie mit laserinduziertem Ultraschall in der medizinischen Diagnostik*, Dissertation, unveröff., Universität Hannover (1998)
- [Lon 87] Long FH, Deutsch TF, *Pulsed photothermal radiometry of human artery*, IEEE J. Quant. Electr. QE-23, 1821 (1987)
- [Lon 87a] Long FH, Deutsch TF, *Pulsed photothermal Radiometrie for depth profiling of layered media*, Appl. Phys. Lett. 51/25, 2076 (1987)
- [Mad 92] Madsen SJ, Patterson MS, Wilson BC, *The use of india ink as an optical absorber in tissue-simulating phantoms*, Phys. Med. Biol. 37/4, 985 (1992)
- [Mey 88] Meyer-Schwickerath G, *Aus den Kindertagen der Lichtkoagulation*, in: Laser in der Ophthalmologie, Wollensak J (Hrsg.), Enke-Verlag, Stuttgart (1988)
- [Mie 08] Mie G, *Beiträge zur Optik trüber Medien, speziell kolloidaler Metallösungen*, Ann. d. Phys. 25/3, 377 (1908)
- [Mil 96] Milner TE, Smithies DJ, Goodman DM, Lau A, Nelson JS *Depth determination of chromophores in human skin by pulsed photothermal radiometry*, Appl. Optics 35/19, 3379 (1996)
- [Nel 92] Nelson JS, Jaques SL, Wright WH, *Determination of thermal and physical properties of port wine stain lesions using pulsed photothermal radiometry*, Proc. SPIE 1643, 287 (1992)
- [Nol 90] Nolting W, *Grundkurs: Theoretische Physik Band 3: Elektrodynamik*, Ulmen: Zimmermann-Neufang (1990)
- [Nor 79] Nordal SO, Kanstad PE, *Photothermal radiometry*, Phys. Scr. 20, 659 (1979)
- [Nor 81] Nordal SO, Kanstad PE, *Visible-light spectroscopy by photothermal radiometry using an incoherent source*, Appl. phys. lett. 38/7, 486 (1981)
- [Obe 98] Oberheide U, *Gewebedifferenzierung mit der gepulsten photothermischen Radiometrie in der medizinischen Diagnostik*, Diplomarbeit, unveröff., Universität Hannover (1998)
- [Olm 97] Olmes A, *Modellierung der IR-Photoablation biologischer Weichgewebe*, Dissertation, unveröff., Universität Hannover (1997)
- [Ora 96] Oraevsky A, Esenaliev R, Tittel FK, Ostermeyer M, Wang L, Jaques SL, *Laser opto-acoustic imaging of turbid media: determination of optical properties by comparison with diffusion theory and Monte Carlo simulation*, Proc. SPIE 2681, (1996)
- [Ora 97] Oraevsky A, Jaques SL, Tittel FK, *Measurement of tissue optical properties by time-resolved detection of laser-induced transient stress*, Appl. Opt. 36/1, 402 (1997)
- [Par 61] Parker WJ, Jenkins RJ, Butler CP, Abbott GL, *Flash method of determining thermal diffusivity, Heat capacity, and thermal conductivity*. J. Appl. Phys. 32, 1679 (1961)

- [Pea 95] Pearce J, Thomsen S, *Rate process analysis of thermal damage*, in: Optical-thermal response of laser-irradiated Tissue, Welch AJ, van Gemert MJC (Hrsg.), Plenum Press, 561 (1995)
- [Pfe 97] Pfefer TJ, Barton JK, Chan EK, Ducros MG, Sorg BS, Milner TE, Nelson JS, Welch AJ, *Adaptable three dimensional Monte Carlo Simulation of imaged blood vessels in skin*, Proc. SPIE 2975, 2 (1997)
- [Pla 91] Plamann C, *Entwicklung eines photothermischen Spektrometers mit Mirage-Effekt-Detektor zur in vivo-Messung der Lichtabsorption in menschlicher Haut*, Diplomarbeit, unveröff., Georg-August-Universität Göttingen (1991)
- [Pla 59] Plank M, *The theory of heat radiation*, Dover Publications, New York (1959)
- [Pra 92] Prahl SA, Vitkin IA, Bruggemann U, Wilson BC Anderson RR, *Determination of optical properties of turbid media using pulsed photothermal radiometry*, Phys. Med. Biol. 37, 1203 (1992)
- [Pre 92] Press WH, Flannery BP, Teukolsky SA, Vetterlin WT, *Numerical Recipes in C: The Art of Scientific Computing*, Cambridge University Press, 2. Aufl. (1986)
- [Roi 95] Roider J, Birngruber R, *Solution of the heat conduction equation*, in: Optical-thermal response of laser-irradiated Tissue, Welch AJ, van Gemert MJC (Hrsg.), Plenum Press, 385 (1995)
- [Saj 83] Sajonski HS, Smollich A, *Zelle und Gewebe*, S. Hirzel Verlag Leipzig, 6. Aufl. 219 (1983)
- [Sat 97] Sathyam US, Prahl SA, *Limitations in measurement of subsurface temperatures using pulsed photothermal radiometry*, J. Biomed. Opt. 2/3, 251 (1997)
- [Sch 68] Schultz AW, *An infrared transient method for determining the thermal inertia, conductivity, and diffusivity of solids*, Appl. Opt. 7/9, 1845 (1968)
- [Sch 96] Schmitz C, Hantzko T, Lohmann S, Lubatschowski H, Ertmer W, *Pulsed photothermal radiometric investigations of optical and thermal properties*, Proc. Spie 2923, 12 (1996)
- [Sdt 87] Schmidt RF, *Physiologie des Menschen*, Thews G (Hrsg.), Springer, 23. Aufl., 501 ff. (1987)
- [Smi 97] Smithies DJ, Milner TE, Nelson JS, *Three dimensional tomographic reconstruction of simulated and in vivo sub-surface chromophores*, Proc. SPIE 2975, 14 (1997)
- [Spa 96] Spaniol S, *Gewebeoptische Untersuchungen zur Photodynamischen Therapie von Tumoren*, Dissertation, unveröff., Universität Bonn (1996)
- [Sta 95] Star WM, *Diffusion theory of light transport*, in: Optical-thermal response of laser-irradiated Tissue, Welch AJ, van Gemert MJC (Hrsg.), Plenum Press, 131 (1995)
- [vSt 91] van Staveren HJ, Moes CJM, van Marle J, Prahl SA, van Gemert MJC, *Light scattering in Intralipid-10 % in the wavelength range of 400-1100 nm*, Appl. Opt. 30/31, 4507 (1995)

- [Suk 95] Sukowski U, Schubert F, Grosenick D, Rinneberg H, *Diffusely scattering phantoms for optical tomography*, Proc. SPIE 2626, 12 (1995)
- [Tam 83] Tam AC, *Remote sensing applications of pulsed photothermal radiometry*, Appl. Phys. Lett. 43(4), 333 (1983)
- [Tam 85] Tam AC, *Pulsed photothermal radiometry for noncontact spectroscopy, material testing, and inspection measurements*, Infrared Phys. 25(1/2), 305 (1985)
- [Tap 00] Tappeiner H, *über die Wirkung fluoreszierender Stoffe auf Infusorien nach Versuchen von O. Raab*, Münch. Med. Wochenschr. 50, 5 (1900)
- [Val 95] Valvano JW, *Tissue thermal properties and perfusion*, in: Optical-thermal response of laser-irradiated Tissue, Welch AJ, van Gemert MJC (Hrsg.), Plenum Press, 445 (1995)
- [Ver 93] Verkruyse W, Pickering JW, Beek JF, Keijzer M, van Gemert JC, *Modelling the effect of wavelength on the pulsed dye laser treatment of port wine stains*, Appl. Opt. 32/4, 939 (1993)
- [Vit 95] Vitkin IA, Wilson BC, Anderson RR, *Analysis of layered scattering materials by pulsed photothermal radiometry: applications to photon propagation in tissue*, Appl. Opt. 34/16, 2973 (1995)
- [Vit 95a] Vitkin IA, Wilson BC, Anderson RR *Pulsed photothermal radiometry studies in tissue optics*, in: Optical-thermal response of laser-irradiated Tissue, Welch A J, van Gemert M J C (Hrsg.), Plenum Press, 535 (1995)
- [Vol 85] Volvano JW, Cochran JR, Diller KR, *Thermal conductivity and diffusivity of biomaterials measured with self-heating thermistors*, Int. J. Thermophysics 6, 301 (1985)
- [Wag 94] Wagner M, Geiler H-D, Kowalski P, *Zerstörungsfreies Messen und Prüfen mit optisch angeregten thermischen Wellen*, Laser und Optoelektronik 26/1, 63 (1994)
- [Wag 97] Wagnières G, Cheng S, Zellweger M, Utke N, Braichotte D, Ballini J-P, van den Bergh H, *An optical phantom with tissue-like properties in the visible for use in PDT and fluorescence spectroscopy*, Phys. Med. Biol 42, 1415 (1997)
- [Wan 92] Wang LH, Jacques SL *Monte Carlo modeling of light transport in multi-layered tissues in Standard C*, University of Texas / M.D. Anderson Cancer Center (1992), Software erhältlich über ftp (laser.mda.uth.tmc.edu) und email (lihong@laser.mda.uth.tmc.edu)
- [Wel 95] Welch AJ, van Gemert MJC, Star W, Wilson BC, *Definitions and overview of tissue optics*, in: Optical-thermal response of laser-irradiated Tissue, Welch A J, van Gemert M J C (Hrsg.), Plenum Press, 131 (1995)
- [Wol 96] Wolfe WL, *Introduction to infrared design*, Tutorial texts in optical engineering TT24, Shea DCO (Hrsg.), (1996)
- [Yar 91] Yariv A, *Optical electronics*, Saunders College Publishing, 4. Aufl. (1991)
- [Xia 96] Xiao P, Imhof RE, *Opto-thermal skin water concentration gradient measurement*, Proc. SPIE 2681, 31 (1996)

Anhang A

Liste der verwandten Symbole

Im folgenden werden die wichtigsten verwandten Symbole mit ihrer Bedeutung und der physikalischen Einheit aufgeführt. Die Reihenfolge entspricht im wesentlichen der ihrer Einführung in der Arbeit. Mehrfach-Verwendungen ließen sich nicht immer vermeiden, jedoch sind die Größen im allgemeinen durch ihre funktionale Abhängigkeit zu unterscheiden. Weiterhin sollte sich die Bedeutung aus dem Zusammenhang ergeben.

Kapitel 2 Lichttransport in absorbierenden und streuenden Medien

Symbol	Größe	Einheit	Seite
$E(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{s}})$	Strahlungsenergie	[J]	14
ν	Frequenz	[Hz]	14
h	PLANCKSches Wirkungsquantum	[J s]	
c	Vakuum-Lichtgeschwindigkeit	[cm s ⁻¹]	
$N(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{s}})$	Photonenfluß	[cm ⁻² sr ⁻¹]	14
$N_0(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{s}})$	Photonenstromdichte	[cm ⁻²]	19
$N'(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{s}})$	anisotroper Photonenfluß	[cm ⁻² sr ⁻¹]	19
$d\omega$	Raumwinkelement	[sr]	
dA	Flächenelement	[cm ²]	
dV	Volumenelement	[cm ³]	
V_0	betrachtetes Volumen	[cm ³]	
∂V_0	Rand von V_0	[cm ²]	
t	Zeit	[s]	
$L(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{s}})$	Strahldichte	[W cm ⁻² sr ⁻¹]	14
$L_0(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{s}})$	isotrope Strahldichte	[W cm ⁻² sr ⁻¹]	14
$L_p(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{s}})$	ungestreuter Anteil von L	[W cm ⁻² sr ⁻¹]	20
$L_s(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{s}})$	gestreuter (diffuser) Anteil von L	[W cm ⁻² sr ⁻¹]	20
$\Phi(\mathbf{r})$	Bestrahlungsstärke	[W cm ⁻²]	14
$\Phi_s(\mathbf{r})$	gestreuter (diffuser) Anteil von Φ	[W cm ⁻²]	20
$\mathbf{F}(\mathbf{r})$	Strahlungsflußvektor	[W cm ⁻²]	14
$F(\mathbf{r})\pm$	Hemisphärenflüsse	[W cm ⁻²]	22, 123
$I(\mathbf{r})$	Intensität	[W cm ⁻²]	14
$W(\mathbf{r})$	Energiedichte	[J cm ⁻³]	15

Symbol	Größe	Einheit	Seite
$Q(\mathbf{r})$	Flächen-Energiedichte	[J cm ⁻²]	15
$S_o(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{s}})$	optischer Quellterm	[W cm ⁻³ sr ⁻¹]	16
$S_D(\mathbf{r})$	Quellterm d. Diffusionsgleichung	[W cm ⁻³]	21
σ_a	Absorptionsquerschnitt	[cm ²]	15
N_a	Absorberdichte	[cm ⁻³]	15
σ_s	Streuquerschnitt	[cm ²]	15
N_s	Streuzentrendichte	[cm ⁻³]	15
$p(\mathbf{s} \cdot \hat{\mathbf{s}})$	Streuphasenfunktion	[sr ⁻¹]	16
g	Anisotropiefaktor	[1]	20
μ_a	Absorptionskoeffizient	[cm ⁻¹]	15
μ_s	Streukoeffizient	[cm ⁻¹]	15
$\mu'_s = \mu_s(1 - g)$	reduzierter Streukoeffizient	[cm ⁻¹]	21
$\mu_t = \mu_a + \mu_s$	Exinktionskoeffizient	[cm ⁻¹]	16
$\mu_{tr} = \mu_a + \mu'_s$	Transportkoeffizient	[cm ⁻¹]	21
$\mu_{eff} = 1/\sqrt{3\mu_a\mu_{tr}}$	Abschwächungskoeffizient	[cm ⁻¹]	24
$a = \mu_s/\mu_t$	Albedo	[1]	23
$MFP' = \ell_{tr} = 1/\mu_{tr}$	reduzierte freie Weglänge	[cm]	23
$D = 1/(3\mu_{tr})$	Diffusionskonstante	[cm]	21
$\delta = 1/\mu_{eff}$	Eindringtiefe (nach Dif.theorie)	[cm]	24
ℓ_{pen}	allg. opt. Eindringtiefe	[cm]	24
n	optischer Brechungsindex	[1]	9
$R(\hat{\mathbf{s}} \cdot \hat{\mathbf{n}})$	FRESNEL-Funktion	[1]	124
r_{eff}	effektive Reflektivität	[1]	22
$A = \frac{1+r_{eff}}{1-r_{eff}}$	Anpassungsfaktor	[1]	22, 124

Kapitel 3 Wärmetransport in biologischem Gewebe

Symbol	Größe	Einheit	Seite
$q(\mathbf{r})$	Wärmemenge	[J]	31
$q'(z')$	Flächen-Wärmenergiedichte	[J cm ⁻²]	32
$I_q(\mathbf{r})$	Wärmestrom	[W]	31
$\mathbf{j}(\mathbf{r}, t)$	Wärmestromdichte	[W cm ⁻²]	31
$S(\mathbf{r}, t)$	thermischer Quellterm	[W cm ⁻³]	32
$T(\mathbf{r}, t)$	Temperatur	[K]	31
λ	Wärmeleitfähigkeit	[W cm ⁻¹ K ⁻¹]	31
ρ	spezifische Dichte	[g cm ⁻³]	31
c_q	spez. Wärmekapazität	[J g ⁻¹ K ⁻¹]	31
$\kappa = \lambda/(\rho c)$	Wärmediffusionskonstante	[cm ² s ⁻¹]	31
H	Oberflächen-Wärmeleitfähigkeit	[W cm ⁻² K ⁻¹]	34

Symbol	Größe	Einheit	Seite
λ	Wellenlänge	$[\mu\text{m}]$	
$I_{BB}(\lambda, T)$	spektrale Intensität der SK-Strahlung	$[\text{W cm}^{-2}]$	36
$I(\lambda, T)$	spektrale Wärmestrahlungs-Intensität	$[\text{W cm}^{-2}]$	36
$I(T)$	gesamte Wärmestrahlungs-Intensität	$[\text{W cm}^{-2}]$	37
$I_d(t)$	in \mathbf{r}_d detektierter Anteil von $I(T)$	$[\text{W cm}^{-2}]$	44
$\varepsilon(\lambda, T)$	Emissionsvermögen	[1]	36
$\alpha(\lambda, T)$	Absorptionsgrad	[1]	37
$\rho(\lambda, T)$	Reflexionsgrad	[1]	37
$\tau(\lambda, T)$	Transmissionsgrad	[1]	37
σ	STEFAN-BOLTZMANN-Konstante	$[\text{W cm}^{-2}\text{K}^{-4}]$	37
$L(\lambda, T)$	Wärmestrahldichte	$[\text{W cm}^{-2}\text{sr}^{-1}]$	37

Kapitel 4 Photothermische Radiometrie

Symbol	Größe	Einheit	Seite
$U(t)$	modelliertes PPTR-Signal	[-]	48
μ_{IR}	mittlere Wärmestrahlungsabsorption	$[\text{cm}^{-1}]$	44
C	Experimentelle Nachweiseffizienz	[-]	45
K	Kalibrationskonstante	[-]	46
w	Strahlradius	[cm]	51
A_d	Detektionsfläche	$[\text{cm}^{-2}]$	51

Kapitel 5 Experimentelle Realisierung

Symbol	Größe	Einheit	Seite
η	Photodetektor-Quanteneffizienz	[1]	69
E_{gap}	Energieabstand der Bandlücke	[eV]	69
$U(\lambda)$	Meßsignal	[-]	70
$R(\lambda)$	Empfindlichkeit	$[\text{V W}^{-1}]$	70
λ_p	Peakwellenlänge	$[\mu\text{m}]$	71
R_{λ_p}	Spitzenempfindlichkeit	$[\text{V W}^{-1}]$	71
R_{BB}	SK-Empfindlichkeit	$[\text{V W}^{-1}]$	71
$G(T)$	Überhöhung von R_{λ_p} gegenüber R_{BB}	[1]	71
$U_n(t)$	Signalrausch-Amplitude	[V]	72
U_{rms}	spektraler Rauschbeitrag	$[\text{V Hz}^{-1/2}]$	72
NEP_λ	Rauschäquivalente Strahlleistung	$[\text{W Hz}^{-1/2}]$	73
$D^*(\lambda)$	Detektivität	$[\text{cm W}^{-1}\text{Hz}^{1/2}]$	73
$D_{\lambda_p}^* = D^*(\lambda_p)$	Spitzendetektivität	$[\text{cm W}^{-1}\text{Hz}^{1/2}]$	73
$D_{BB,T}^*$	SK-Detektivität	$[\text{cm W}^{-1}\text{Hz}^{1/2}]$	73

Symbol	Größe	Einheit	Seite
τ	Pulsdauer	[μs]	78
T_{rep}	Pulswiederholrate	[Hz]	78
E	Pulsenergie	[mJ]	78
C	Konzentration der Tuscheverdünnung	[%]	90
C_{IL}	Konzentration der IL 20-Verdünnung	[%]	95
μ_d	heuristischer Dämpfungskoeffizient	[cm^{-1}]	92
a	Kapillarradius	[μm]	61
z_a	Tiefe Kapillarmitte	[μm]	61
x_K	laterale Kapillarposition	[mm]	101
t_{max}	Zeit des Signalmaximums	[s]	62

Anhang B

GREENSche Funktionen in der Wärmediffusionsgleichung

Im weiteren folgen wir der Argumentation von [Car 59] 354 ff., erweitern die dortigen Ausführungen für eine instantane, räumlich ausgedehnte Wärmequelle zum Zeitpunkt $t = 0$ auf den Fall einer orts- und zeitabhängigen Quelle.

Wir betrachten als GREENfunktion die Temperatur $u(\mathbf{r}, t)$, die eine Punktquelle der Stärke 1 zur Zeit $t = \tau$ am Ort $\mathbf{r} = \mathbf{r}'$ in einem unendlich ausgedehnten Medium mit der Anfangstemperatur 0 erzeugt. Diese Lösung kann geschrieben werden:

$$u(x, y, z, x', y', z', t - \tau) \quad (t > \tau). \quad (\text{B.1})$$

u erfüllt die Wärmediffusionsgleichung

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \kappa \nabla^2 u \quad (t > \tau). \quad (\text{B.2})$$

Weil u nur in der Form $t - \tau$ von der Zeit abhängt, gilt ebenso

$$\frac{\partial u}{\partial \tau} + \kappa \nabla^2 u = 0 \quad (\tau < t). \quad (\text{B.3})$$

Weiterhin gilt $\lim_{t \rightarrow \tau} (u) = 0$ überall außer in (x', y', z') . Die Lösung ist von der Form

$$\frac{1}{8(\pi\kappa(t - \tau))^{\frac{3}{2}}} e^{-\frac{(x-x')(y-y')(z-z')}{4\kappa(t-\tau)}}. \quad (\text{B.4})$$

Sei nun v die Temperatur zur Zeit t in einem Medium mit vorgegebener Temperatur $\vartheta(\mathbf{r}, t)$ an der Oberfläche ∂V_0 und intrinsischer Wärmequelle $S(\mathbf{r}, t)$. Dann erfüllt v die Gleichungen

$$\begin{aligned} \frac{\partial v}{\partial t} - \kappa \nabla^2 v &= \frac{S}{\rho c_q} & (t > 0) \\ v &= \vartheta(\mathbf{r}, t) & \text{auf } \partial V_0, t > 0. \end{aligned}$$

Da τ innerhalb des Zeitintervalls $[0 \dots t]$ liegt, gilt ebenso

$$\begin{aligned} \frac{\partial v}{\partial \tau} - \kappa \nabla^2 v &= \frac{S}{\rho c_q} & (\tau < t) \\ v &= \vartheta(\mathbf{r}, \tau) & \text{auf } \partial V_0. \end{aligned}$$

Es gilt:

$$\frac{\partial}{\partial \tau}(uv) = u \frac{\partial v}{\partial \tau} + v \frac{\partial u}{\partial \tau} = \kappa(u \nabla^2 v - v \nabla^2 u) + u \frac{S}{\rho c_q} \quad (\text{B.5})$$

und somit

$$\int_{-\infty}^{t-\varepsilon} d\tau \int_{V_0} dV \frac{\partial}{\partial \tau}(uv) = \int_{-\infty}^{t-\varepsilon} d\tau \int_{V_0} dV u \frac{S}{\rho c_q} + \kappa(u \nabla^2 v - v \nabla^2 u) \quad (\text{B.6})$$

Tauschen der Integration auf der linken Seite und Anwendung des GREENSchen Satzes auf der rechten Seite ergibt

$$\begin{aligned} & \int_{V_0} dV (uv)_{\tau=t-\varepsilon} - \int_{V_0} dV (uv)_{\tau \rightarrow -\infty} \\ &= \int_{-\infty}^{t-\varepsilon} d\tau \int_{V_0} dV u \frac{S}{\rho c_q} + \kappa \int_{-\infty}^{t-\varepsilon} d\tau \int_{\partial V_0} dA \left[u \frac{\partial v}{\partial n} - v \frac{\partial u}{\partial n} \right] \\ &= \int_{-\infty}^{t-\varepsilon} d\tau \int_{V_0} dV u \frac{S}{\rho c_q} - \kappa \int_{-\infty}^{t-\varepsilon} d\tau \int_{\partial V_0} dA v \frac{\partial u}{\partial n} \end{aligned}$$

mit $\partial/\partial n$ der Ableitung entlang der Oberflächennormalen von ∂V_0 und unter Ausnutzung, daß $u \equiv 0$ auf ∂V_0 .

Der erste Term der linken Seite wird bei Integration über ein Volumen, daß (x', y', z') enthält wegen (B.4) zu $v(\mathbf{r}', t)$; der zweite Term verschwindet für $\tau \rightarrow -\infty$, da $v(\mathbf{r}, \tau \rightarrow -\infty)$ endlich, jedoch $u(\mathbf{r}, \tau \rightarrow -\infty) = 0$.

Damit ergibt sich schließlich die Lösung der Wärmediffusionsgleichung für einen Quellterm $S(\mathbf{r}, t)$ und eine vorgegebene Randtemperatur $\vartheta(\mathbf{r}, \tau)$ zu

$$v(\mathbf{r}', t) = \int_{-\infty}^{t-\varepsilon} d\tau \int_{V_0} dV u \frac{S(\mathbf{r}, t)}{\rho c_q} - \kappa \int_{-\infty}^{t-\varepsilon} d\tau \int_{\partial V_0} dA \vartheta(\mathbf{r}, \tau) \frac{\partial u}{\partial n}. \quad (\text{B.7})$$

Anhang C

Randbedingungen der Diffusionsgleichung

Der in Abschnitt 2.2.1 eingeführte Strahlungsflußvektor läßt sich als Summe aller elementarer Strahlungsflußvektoren $L(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{s}}) \cdot \hat{\mathbf{s}}$ deuten.

$$\mathbf{F}(\mathbf{r}) = \int_{4\pi} L(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{s}}) \hat{\mathbf{s}} d\omega. \quad (\text{C.1})$$

Weil in der Diffusionsnäherung höhere Ordnungen zur Beschreibung der Strahldichte vernachlässigt werden, stellt diese Größe die einzige Quantifizierung der Stärke des Energietransportes und seiner Richtung dar.

Die Randbedingungen für die Diffusionstheorie ergeben sich aus Betrachtungen der Energieerhaltung an Grenzflächen des Mediums für ein- und austretende Anteile des *diffusen* Strahlungsflusses. Der gesamte Strahlungsfluß durch ein Flächenelement $d\mathbf{A} = \hat{\mathbf{n}} dA$ ergibt sich zu $\mathbf{F}(\mathbf{r}) \cdot \hat{\mathbf{n}}$ (s. Abb. C). Die Hemisphärenflüsse beschreiben den ein- und austretenden Energiefluß über eine Grenzfläche und sind definiert durch [Sta 95]:

$$F_{n\pm}(\mathbf{r}) = \pm \int_{\hat{\mathbf{s}} \cdot \hat{\mathbf{n}} \gtrless 0} L(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{s}}) (\hat{\mathbf{s}} \cdot \hat{\mathbf{n}}) d\omega. \quad (\text{C.2})$$

Dabei beschreibt F_{n+} den Anteil des Gesamtflusses entlang des Normalenvektors, F_{n-} den entgegengerichteten Anteil. Mit (2.26) ergeben sich für den Strahlungsfluß und die Bestrahlungsstärke

$$F_n(\mathbf{r}) := \mathbf{F}(\mathbf{r}) \cdot \hat{\mathbf{n}} = F_{n+}(\mathbf{r}) - F_{n-}(\mathbf{r}) \quad (\text{C.3})$$

$$\Phi(\mathbf{r}) = 4\pi L_0(\mathbf{r}) = 2(F_{n+}(\mathbf{r}) + F_{n-}(\mathbf{r})). \quad (\text{C.4})$$

Zur Formulierung der Randbedingung der Diffusionsgleichung betrachtet man die Hemisphärenflüsse an der Grenzfläche des streuenden Mediums zu seiner Umgebung.

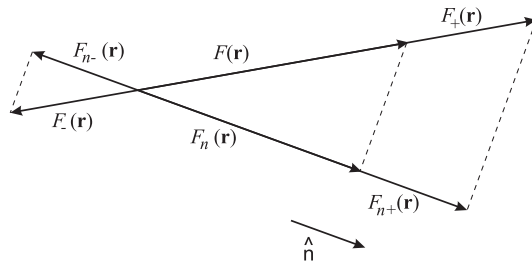


Abbildung C.1: Illustration des Zusammenhangs zwischen dem gesamten Strahlungsfluß und seinen Komponenten, den Hemisphärenflüssen (nach [Sta 95]).

Dieses sei im folgenden nicht streuend und habe den gleichen Brechungsindex. Weiterhin sollen sich in der Umgebung keine diffusen Lichtquellen befinden.

Die Flächennormale weise *in* das Medium hinein, so daß $F_{n+}(\mathbf{r})$ den Anteil des diffusen Lichtes beschreibt, der in das Medium eintritt (\mathbf{r} auf der Oberfläche). Wegen der gemachten Voraussetzung ist der hineingerichtete diffuse Lichtfluß auf der Oberfläche gleich Null: $F_{n+}(\mathbf{r}) = 0$. Daraus folgt mit (C.4):

$$\Phi(\mathbf{r}) = 2F_{n-}(\mathbf{r}). \quad (\text{C.5})$$

Dies ergibt mit dem FICKSchen Gesetz der Diffusion (2.31) folgende Randbedingung für die *homogene* Diffusionsgleichung [Sta 95]:

$$\Phi(\mathbf{r}) - 2D \frac{\partial}{\partial n} \Phi(\mathbf{r}) = 0. \quad (\text{C.6})$$

Im Falle nicht Brechungsindex-angepaßter Medien müssen die Einflüsse von FRESNEL-Reflexionen an der Oberfläche beachtet werden. Dann gibt es einen in das Medium gerichteten diffusen Lichtanteil. Dieser wird gebildet durch die diffusen Photonen, die beim Austritt aus dem Medium an der Grenze reflektiert werden. Damit ergibt sich:

$$\int_{\hat{\mathbf{s}} \cdot \hat{\mathbf{n}} > 0} L(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{s}}) (\hat{\mathbf{s}} \cdot \hat{\mathbf{n}}) d\omega = - \int_{\hat{\mathbf{s}} \cdot \hat{\mathbf{n}} < 0} L(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{s}}) R(|\hat{\mathbf{s}} \cdot \hat{\mathbf{n}}|) (\hat{\mathbf{s}} \cdot \hat{\mathbf{n}}) d\omega. \quad (\text{C.7})$$

Dabei ist $R(|\hat{\mathbf{s}} \cdot \hat{\mathbf{n}}|)$ die Funktion der winkelabhängigen FRESNEL-Reflexion. Man kann zeigen, daß die Reflexion nur die Komponente des Flußvektors parallel zu $\hat{\mathbf{n}}$ beeinflusst, die dazu senkrechte Komponente ist stetig. Daher kann (C.7) geschrieben werden als

$$F_{n+}(\mathbf{r}) = r_{\text{eff}} F_{n-}(\mathbf{r}) \quad (\text{C.8})$$

mit der effektiven Reflektivität r_{eff} . Mit (C.4) und (2.31) ergibt sich die Randbedingung [Has 94]

$$\Phi(\mathbf{r}) - 2AD \frac{\partial}{\partial n} \Phi(\mathbf{r}) = 0 \quad (\text{C.9})$$

mit $A = \frac{1+r_{\text{eff}}}{1-r_{\text{eff}}}$. Gemäß (C.2) kann r_{eff} folgendermaßen berechnet werden:

$$r_{\text{eff}} = \frac{- \int_{\hat{\mathbf{s}} \cdot \hat{\mathbf{n}} < 0} L(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{s}}) R(|\hat{\mathbf{s}} \cdot \hat{\mathbf{n}}|) (\hat{\mathbf{s}} \cdot \hat{\mathbf{n}}) d\omega}{\int_{\hat{\mathbf{s}} \cdot \hat{\mathbf{n}} > 0} L(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{s}}) (\hat{\mathbf{s}} \cdot \hat{\mathbf{n}}) d\omega}. \quad (\text{C.10})$$

Dabei werden meist vereinfachende Annahmen bzgl. $R(|\hat{\mathbf{s}} \cdot \hat{\mathbf{n}}|)$ und die Form von $L(\mathbf{r}, \hat{\mathbf{s}})$ gemacht [Sta 95].

Anhang D

Darstellung der Signale mittels der Errorfunktion

Im folgenden sollen die wichtigsten Eigenschaften der *Fehlerfunktion* oder *Errorfunktion* $\text{erf}(x)$ referiert und ihre Anwendung zur Lösung der Wärmediffusionsgleichung und der Formulierung von PPTR-Signalen gezeigt werden.

D.1 Eigenschaften der Errorfunktion

Die Errorfunktion ist folgendermaßen definiert:

$$\text{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-\xi^2} d\xi \quad (\text{D.1})$$

Die eindimensionale homogene Wärmediffusionsgleichung 3.8 wird formal gelöst durch den Ausdruck

$$\frac{1}{\sqrt{t}} e^{-\frac{z^2}{4\kappa t}}. \quad (\text{D.2})$$

Ebenso stellt folgendes Integral über diesen Term eine Lösung der Gleichung dar [Car 59]:

$$\int_0^z \frac{1}{\sqrt{t}} e^{-\frac{z'^2}{4\kappa t}} dz'. \quad (\text{D.3})$$

Nach Variablentransformation kann man dies schreiben als

$$A \text{erf}\left(\frac{z}{2\sqrt{\kappa t}}\right) \quad (\text{D.4})$$

mit einer beliebigen Konstanten A . Somit läßt sich eine Lösung von (3.8) mit Hilfe der Fehlerfunktion darstellen. Diese besitzt folgende Eigenschaften:

$$\text{erf}(0) = 0; \quad \text{erf}(\infty) = 1; \quad \text{erf}(-x) = -\text{erf}(x). \quad (\text{D.5})$$

Weiterhin definiert man die *komplementäre Fehlerfunktion* gemäß

$$\text{erfc}(x) = 1 - \text{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_x^\infty e^{-\xi^2} d\xi. \quad (\text{D.6})$$

D.2 Lösung im Fall des homogenen Absorbers

Das PPTR-Signal an einer eindimensionalen, homogenen Probe wird durch (4.17) beschrieben. Im Falle eines homogen absorbierenden Mediums läßt sich die Lichtverteilung exakt durch $Q(z) = Q_0 \exp(-\mu_a z)$ darstellen. Die Lösung ist also von der Form

$$U(t) = K \frac{\mu_a \mu_{IR}}{2\rho c_q \sqrt{\pi \kappa t}} \int_0^\infty e^{-\mu_{IR} z} dz \int_0^\infty Q_0 e^{-\mu_a z'} \left[e^{-\frac{(z-z')^2}{4\kappa t}} + e^{-\frac{(z+z')^2}{4\kappa t}} \right] dz'. \quad (D.7)$$

Dabei stellt das zweite Integral die zeitabhängige Lösung der eindimensionalen Wärme-diffusionsgleichung unter der Randbedingung (3.18) bei gegebener Anfangstemperatur durch Absorption eines kurzen Pulses elektromagnetischer Strahlung dar (vgl. (4.5)):

$$T(z, t) = \frac{Q_0 \mu_a}{2\rho c_q \sqrt{\pi \kappa t}} \left[\int_0^\infty e^{-\mu_a z'} e^{-\frac{(z-z')^2}{4\kappa t}} dz' + \int_0^\infty e^{-\mu_a z'} e^{-\frac{(z+z')^2}{4\kappa t}} dz' \right]. \quad (D.8)$$

Durch Variablentransformation lassen sich diese Integrale mithilfe der Fehlerfunktion ausdrücken [Leu 84]

$$T(z, t) = \frac{Q_0 \mu_a}{2\rho c_q} e^{\mu_a^2 \kappa t} \times \left[\left(1 + \operatorname{erf} \left(\frac{z - 2\mu_a \kappa t}{2\sqrt{\kappa t}} \right) \right) e^{-\mu_a z} + \left(1 - \operatorname{erf} \left(\frac{z + 2\mu_a \kappa t}{2\sqrt{\kappa t}} \right) \right) e^{\mu_a z} \right] \quad (D.9)$$

Einsetzen von (D.9) in (D.7) und Ausnutzung der Beziehungen

$$\frac{d}{du} \operatorname{erf}(qu) = \frac{2q}{\sqrt{\pi}} e^{-q^2 u^2} \quad (D.10)$$

zum Lösen des Integrals von der Art $\int_0^x \exp(-pu) \operatorname{erf}(qu) du$ mittels partieller Integration führt zur Lösung

$$U(t) = \frac{K Q_0 \mu_a \mu_{IR}}{\rho c_q (\mu_{IR}^2 - \mu_a^2)} \left[\mu_{IR} e^{\mu_a^2 \kappa t} \operatorname{erfc} \left(\sqrt{\mu_a^2 \kappa t} \right) - \mu_a e^{\mu_{IR}^2 \kappa t} \operatorname{erfc} \left(\sqrt{\mu_{IR}^2 \kappa t} \right) \right] \quad (D.11)$$

Nach Näherung (4.14) ergibt sich das Signal im Falle $\mu_{IR} \rightarrow \infty$ als proportional zur zeitlichen Temperaturentwicklung am Detektionsort, mit $z = 0$ in (D.9) ergibt sich sofort

$$U(t) \approx K Q_0 \frac{\mu_a}{\rho c_q} e^{\mu_a^2 \kappa t} \operatorname{erfc} \left(\sqrt{\mu_a^2 \kappa t} \right) \quad (D.12)$$

Dieses Ergebnis erhält man auch mit $\mu_{IR} \rightarrow \infty$ in (D.11).

D.3 Lösung im Fall homogenen absorbierender Schichten

Die Temperaturverteilung ergibt sich in der unter (4.3) beschriebenen Zweischicht-Geometrie zu

$$T(z, 0) = \begin{cases} \frac{\mu_{a1} Q_0}{\rho c_q} e^{-\mu_{a1} z} & \text{für } 0 \leq z < d \\ \frac{\mu_{a2} Q_0}{\rho c_q} e^{-\mu_{a1} d} e^{-\mu_{a2} z} & \text{für } d \leq z \end{cases}, \quad (\text{D.13})$$

eingesetzt in (4.17) führt dies zu (4.23). Die Integrale der Temperaturentwicklung $T_1(z, t)$, $T_2(z, t)$ für die einzelnen Schichten können analog zu (D.2) mit Hilfe der Fehlerfunktion ausgedrückt werden. Dabei reicht es, eine Schicht zu behandeln, das andere Integral ergibt sich aus $T(z, t) = T_1(z, t) + T_2(z, t)$ mit $\mu_{a1} = \mu_{a2}$. Dies führt zu

$$T_1(z, t) = \frac{Q_0 \mu_{a1}}{2 \rho c_q} e^{\mu_{a1}^2 \kappa t} \left[\left(\operatorname{erf} \left(\frac{d - z + 2\mu_{a1} \kappa t}{2\sqrt{\kappa t}} \right) + \operatorname{erf} \left(\frac{z - 2\mu_{a1} \kappa t}{2\sqrt{\kappa t}} \right) \right) e^{-\mu_{a1} z} + \left(\operatorname{erf} \left(\frac{d + z + 2\mu_{a1} \kappa t}{2\sqrt{\kappa t}} \right) - \operatorname{erf} \left(\frac{z + 2\mu_{a1} \kappa t}{2\sqrt{\kappa t}} \right) \right) e^{\mu_{a1} z} \right] \quad (\text{D.14})$$

und

$$T_2(z, t) = \frac{Q_0 \mu_{a2}}{2 \rho c_q} e^{\mu_{a2}^2 \kappa t} e^{\mu_{a2} z} \left[\left(1 - \operatorname{erf} \left(\frac{d - z + 2\mu_{a2} \kappa t}{2\sqrt{\kappa t}} \right) \right) e^{-\mu_{a2} z} + \left(1 - \operatorname{erf} \left(\frac{d + z + 2\mu_{a2} \kappa t}{2\sqrt{\kappa t}} \right) \right) e^{\mu_{a2} z} \right]. \quad (\text{D.15})$$

Man erkennt, daß diese Lösungen im Grenzfall $d \rightarrow \infty$ bzw. $d \rightarrow 0$ in (D.9) übergehen. Die in der vorliegenden Arbeit berechneten Temperaturprofile an absorbierenden Schichten wurden mit (D.14) und (D.15) berechnet. Die simulierten PPTR-Signale entsprechen $K \cdot T_{1,2}(0, t)$.

Die Lösungen unter Beachtung von μ_{IR} lauten

$$U_1(t) = \frac{K Q_0 \mu_{a1} \mu_{IR}}{\rho c_q (\mu_{IR}^2 - \mu_{a1}^2)} \times \left[\mu_{IR} e^{\mu_{a1}^2 \kappa t} \left(\operatorname{erf} \left(\sqrt{\mu_{a1}^2 \kappa t} + \frac{d}{2\sqrt{\kappa t}} \right) - \operatorname{erf} \left(\sqrt{\mu_{a1}^2 \kappa t} \right) \right) - \mu_{a1} e^{\mu_{IR}^2 \kappa t} \operatorname{erfc} \left(\sqrt{\mu_{IR}^2 \kappa t} \right) + \frac{1}{2} \left((\mu_{a1} - \mu_{IR}) e^{-(\mu_{a1} + \mu_{IR})d} + (\mu_{a1} + \mu_{IR}) e^{-(\mu_{a1} - \mu_{IR})d} \right) e^{\mu_{a1}^2 \kappa t} \times \operatorname{erfc} \left(\sqrt{\mu_{IR}^2 \kappa t} + \frac{d}{2\sqrt{\kappa t}} \right) \right] \quad (\text{D.16})$$

$$\begin{aligned}
U_2(t) &= \frac{KQ_0\mu_{a2}\mu_{IR}}{\rho c_q(\mu_{IR}^2 - \mu_{a2}^2)} \\
&\times \left[\mu_{IR}e^{\mu_{a2}^2\kappa t} \left(\operatorname{erfc}\left(\sqrt{\mu_{a2}^2\kappa t} + \frac{d}{2\sqrt{\kappa t}}\right) \right) \right. \\
&\quad - \mu_{a2}e^{\mu_{IR}^2\kappa t} \operatorname{erfc}\left(\sqrt{\mu_{IR}^2\kappa t}\right) \\
&\quad - \frac{1}{2} \left((\mu_{a2} - \mu_{IR})e^{-(\mu_{a2} + \mu_{IR})d} + (\mu_{a2} + \mu_{IR})e^{-(\mu_{a2} - \mu_{IR})d} \right) e^{\mu_{a2}^2\kappa t} \\
&\quad \left. \times \operatorname{erfc}\left(\sqrt{\mu_{IR}^2\kappa t} + \frac{d}{2\sqrt{\kappa t}}\right) \right]
\end{aligned}
\tag{D.17}$$

Ähnliche Ausdrücke ergeben sich bei der Implementierung eindimensionaler Diffusionsrechnungen zur Lichtausbreitung, da die entsprechenden Lösungen immer ein exponentielles Verhalten beschreiben (s. Abschn. 2.3.4) [Pra 92, Vit 95].

Anhang E

Liste der Veröffentlichungen

Spaniol S, Zwank B, Abraham V, Schmitz C, Schmidt S, Krebs D, Ertmer W
Estimation of optical properties of tumor tissue with a Ti:Sapphire laser,
Proc. SPIE (1994)

Spaniol S, Schmitz C, Abraham V, Ashraf N, Neuberger W, Ertmer W
Diffusing fibre tips for high-power medical laser application,
in: *Laser in der Medizin 1995*, Waidelich (Hrsg.), Springer (1995), 526-529

Schmitz C, Spaniol S, Abraham V, Ashraf N, Neuberger W, Ertmer W
Diffusing fibre tips for high-power medical laser applications,
Proc. SPIE 2631, 166-172 (1995)

Lohmann S, Ruff C, Lubatschowski H, Schmitz C, Ertmer W
Photoacoustic determination of optical parameters of biological tissues
Proc. SPIE 2923, 2-11 (1996)

Schmitz C, Hantzko T, Lohmann S, Lubatschowski H, Ertmer W
Pulsed photothermal radiometric investigations of optical and thermal properties,
Proc. SPIE 2923, 12-19 (1996)

Lohmann S, Ruff C, Schmitz C, Lubatschowski H, Ertmer W
Photoacoustic determination of optical parameters of biological tissue,
Lasers in Medical science 12, 357-363 (1997)

Lohmann S, Zacher M, Schmitz C, Lubatschowski H, Ertmer W
Characterization of tissue-like media using the photoacoustic method,
Proc. SPIE 3195, 79-87 (1997)

Schmitz C, Oberheide U, Lohmann S, Lubatschowski H, Ertmer W
Pulsed photothermal radiometry investigations of absorbing and scattering media,
Proc. SPIE 3195, 94-101 (1997)

Anhang F

Lebenslauf und Bildungsweg

Persönliche Daten:

Name: Christoph Schmitz
Geburtsdatum: 16.Juli 1968 in Bonn
Staatsangehörigkeit: deutsch
Familienstand: ledig

Ausbildung:

06/1988 Abitur am Vinzenz-Pallotti-Kolleg Rheinbach
07/1988 - 09/1989 Grundwehrdienst Mannheim und Rheinbach
10/1989 - 10/1993 Physikstudium an der
Rheinischen Friedrich-Wilhelms-Universität zu Bonn
11/1993 - 01/1995 Diplomarbeit am
Institut für Angewandte Physik der Universität Bonn
02/1995 - 07/1998 Doktorarbeit am
Institut für Quantenoptik der Universität Hannover
und am Laser Zentrum Hannover e.V.
16/07/1998 Promotion

Beruflicher Werdegang:

02/1995 - 11/1997 Wissenschaftlicher Mitarbeiter am
Institut für Quantenoptik der Universität Hannover
12/1997 - 07/1998 Wissenschaftlicher Mitarbeiter am
Laser Zentrum Hannover e.V.

Danke!

An dieser Stelle seien all die genannt, denen ich glaube, für diese Arbeit vieles verdankt zu haben.

Besonderer Dank gilt meinem Doktorvater PROF. DR. WOLFGANG ERTMER für das Vertrauen, mir die Durchführung dieser Promotion in seiner Arbeitsgruppe zu ermöglichen. Seine Übersicht und vielen konstruktive Vorschläge („Das Bessere ist der Feind des Guten“ [Ert 97]) waren stets wertvolle Hilfe.

Bei PROF. DR. ANDREAS TÜNNERMANN möchte ich mich für die – trotz der räumlichen Entfernung – bereitwillige Übernahme des Korreferates und des Prüfungsbeisitzes bedanken.

Herzlicher Dank gilt DR. HOLGER LUBATSCHOWSKI für viele wertvolle Ratschläge und die lehrreichen Einblicke in naturwissenschaftliches Management.

Als Doktorand ist man auf die Hilfe der Diplomanden, die am gleichen Experiment arbeiten, angewiesen. Sie tragen maßgeblich zum Erfolg bei, daher gebührt ihnen besonderer Dank. THOMAS HANTZKO leistete Pionierarbeiten. Er half, Startschwierigkeiten zu meistern und Kinderkrankheiten des Experimentes zu bekämpfen.

UWE OBERHEIDE zeigte außergewöhnliches Engagement und Überblick, so daß sein selbstständiges Arbeiten mir eine große Hilfe war. Viele Resultate gehen auf seine sorgfältige experimentelle Arbeit zurück.

Ein dickes **Danke!** auch an meinen Freund, Mitbewohner und langjährigen Kollegen STEFAN LOHMANN. Mit ihm verband mich stets neben dem Interesse an den vielen Facetten unserer Arbeit das Studium der „life sciences“ in Kultur, Sport und Gesellschaft.

Bei DR. STEFAN SPANIOL als „meinem“ ehemaligen Doktoranden möchte ich mich bedanken, weil er meinen Werdegang in der Gruppe mit prägte und mich bis heute ein sehr positives Verhältnis mit ihm verbindet.

Bei ihm und der CERAMOPTEC GMBH BONN möchte ich mich für das unbürokratische zur Verfügung stellen von Glasfaser-Technologie zu Forschungszwecken bedanken.

Danke! auch an VOLKHARD ABRAHAM, der die PPTR in der Arbeitsgruppe aus der Taufe hob und wichtige Vorarbeit leistete.

DR. ARTUR HÖGELE sei an dieser Stelle für die Realisierung des Nd:YLF-Lasers gedankt, den er während seiner letzten Tage in der Arbeitsgruppe noch in bester Mc Gyver-Manier aus den Beständen der Abteilung Laserentwicklung zauberte.

Dem A. OLMES danke ich für die Einsicht, wie sich konsequentes Projektmanagement einsetzen läßt, und welche menschlichen Qualitäten dies oft voraussetzt.

GERHARD HÖRBE gebührt Dank für viele fruchtbare Diskussionen physikalischer, vor allem aber auch nicht-physikalischer Inhalte. Er hat mir die Augen für die Relevanz einer Rechtschreibreform geöffnet.

In CARSTEN ZIOLEK habe ich einen kompetenten Ansprechpartner in allen Fragen elektronischen Schaltungsdesigns und der Orientierung im Raum der Betriebsparameter unseres Nd:YLF-Lasers kennengelernt.

MARTIN OSTERMEYER möchte ich danken, da er, obwohl er nur einen Teil seiner Arbeit in unserer Gruppe leistete, wie kaum ein anderer technisches und gewebeoptisches Know-How einbrachte, welches manchen innovativen Impuls gab. Dies in Verbindung mit einem Wust von Post-it's und seinem einsamen Posten an der Apple-Front untermauerten seinen Ruf als echten „Nerd“.

Weiterhin möchte ich mich bei den Medi-Diplomanden SEBASTIAN BARTEL, MARTIN BRAND, MAIKE BUSEMANN, HANS-GEORG FRANKE, NICOLE HEUER-WARBOLD, ALEXANDER HEISTERKAMP, THOMAS KLEINE-BESTEN, CHRISTINE RUFF, MARTIN RAIBLE, FRANK SIMMERT und MICHAEL ZACHER bedanken. Die Zusammenarbeit mit ihnen hat mir große Freude bereitet und brachte viele wertvolle Erfahrungen.

Frau I. KRÄMER und Frau M. GRIESE möchte für die Hilfe danken, die sie im Institutsalltag bieten.

RUDI GAUL danke ich für seinen aufopfernden Einsatz im Kampf dem Verwaltungskrieg und seiner Fähigkeit, im entscheidenden Moment ein Erfrischungsgetränk und einen Grill für seine Mannen zu organisieren.

Herrn L. HEIDEKRÜGER und seiner Crew danke ich für die kompetente, zuverlässige und zügige Anfertigung all der kleinen und großen Spezialteile (am besten aus VA!), die der Physiker so braucht. ...und trotzdem immer ein munteres Wort auf den Lippen!

Schließlich danke ich Herrn F. F. KACHLER von der Firma PHARMACIA&UPJOHN für die unbürokratische und kostenlose Überlassung einer Probe INTRALIPID 20, von der die Arbeitsgruppe wohl jahrelang wird zehren können.

Ein ganz großes Dankeschön an meine Familie, in der ich immer einen starken Rückhalt finde. Insbesondere meinen Eltern sei herzlich gedankt.

...und natürlich Barbara für ihre Geduld.