

Abstract der Diplomarbeit

„Rekonstruktionsverfahren zur schichtaufgelösten Röntgendiffraktometrie durch Entfaltung unter Verwendung von Regularisierungsmethoden“

von
Simon Schlesinger

Zur zerstörungsfreien Untersuchung kristallographischer Eigenschaften einer Probe haben sich zahlreiche röntgenbasierte Methoden etabliert. Speziell das Verfahren der energie-dispersiven Röntgenbeugung (EDXRD) wird sowohl in Transmissions- als auch in Reflektionsgeometrie verwendet, um Strukturanalysen bei kurzen Messzeiten ortsaufgelöst durchführen zu können. Zusätzlich erlaubt die Messung in Transmissionsrichtung die Untersuchung ausgedehnter Objekte; so findet beispielsweise dieses Verfahren im sicherheitstechnischen Bereich bei der Gepäckkontrolle zur materialspezifischen Gefahrstofferkennung an Flughäfen Anwendung.

Eine erfolgreiche Durchführung der Materialidentifikation bzw. Strukturanalyse mittels EDXRD setzt eine Minimierung von Teilvolumeneffekten, aufgrund mangelnder Ortsauflösung, in den resultierenden Röntgendiffraktogrammen voraus.

Derartige Effekte treten bevorzugt in Tiefenrichtung des Objekts auf, da die aus der Streugeometrie resultierende vertikale Tiefenauflösung (entlang des Primärstrahls) um mehrere Größenordnungen geringer sein kann als die laterale Auflösung.

Im Rahmen dieser Arbeit gelang es ein Verfahren zu entwickeln, welches es erlaubt, durch Mehrfachmessungen in verschiedenen Objektpositionen die vertikale Auflösung rekonstruktiv um einen Faktor 5-10 zu verbessern und somit Teilvolumeneffekte signifikant zu verringern.

Die Rekonstruktion des Tiefenprofils entspricht mathematisch einer Entfaltung und bedarf der Lösung eines schlechtgestellten inversen Problems. Dazu wurde, basierend auf Ergebnissen vorangegangener Arbeiten, erstmalig ein Algorithmus implementiert, der das iterierte Tikhonov Regularisierungsverfahren unter Minimierung bezüglich der 1-Norm, mit Methoden der Bildverarbeitung kombiniert. Zusätzliche Informationen, das zu untersuchende Objekt betreffend, lassen sich auf diese Art gezielt in den Algorithmus implementieren und verbessern die Rekonstruktionsgüte deutlich. Getestet und validiert wurde der Algorithmus mit Hilfe von simulierten und gemessenen Daten.

Die erzielten Ergebnisse werden im Juli 2012 auf der internationalen IEEE Konferenz zu bildgebenden Systemen und -Techniken vorgestellt und publiziert.

Das allgemeine Prinzip des Rekonstruktionsverfahrens kann darüber hinaus als Basis zur Verbesserung anderer Messmethoden dienen. Gegenstand aktueller Forschung ist es, die Methode zur Steigerung der Ortsauflösung bildgebender Systeme zu verwenden oder die erforderliche Messzeit durch das rekonstruktive Verfahren zu verringern.

Die Vorteile dieser Technik sind vielseitig. Im Bereich der Röntgenstreubildgebung ließe sich zum Beispiel bei medizinischer Nutzung durch die Erhöhung des Kontrastes eine differenziertere Diagnostik ermöglichen. Industrielle Anwendungen können von Energie- und Kostenersparnissen aufgrund höherer Durchsatzraten profitieren.