

**ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ**

*Σχολή Μηχανολόγων Μηχανικών*

*Τομέας Πυρηνικής Τεχνολογίας*

**ΔΙΕΡΕΥΝΗΣΗ ΤΗΣ ΔΥΝΑΤΟΤΗΤΑΣ ΣΥΓΚΡΟΤΗΣΗΣ ΔΙΑΤΑΞΗΣ XRF  
ΜΕ ΧΡΗΣΗ ΜΗΧΑΝΗΣ ΑΚΤΙΝΩΝ-X 200 kV**

ΔΙΠΛΩΜΑΤΙΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ του

**ΣΥΜΕΩΝ Ζ. ΓΡΙΒΑ**

Σπουδαστή της Σχολής  
Μηχανολόγων Μηχανικών ΕΜΠ

Επίβλεψη: Αν. Καθηγητής Μ.Ι. Αναγνωστάκης

ΑΘΗΝΑ 2018

# ΠΕΡΙΛΗΨΗ

---

Η τεχνική του φθορισμού ακτίνων-Χ χρησιμοποιείται σήμερα ευρέως για την γρήγορη, οικονομική και μη καταστροφική στοιχειακή ανάλυση δειγμάτων περιβαλλοντικού και όχι μόνο ενδιαφέροντος. Παρά τη διάδοση αυτής της τεχνικής, είναι λίγες σχετικά οι προσπάθειες εφαρμογής της με τη διέγερση των χαρακτηριστικών γραμμών της σειράς K των βαρύτερων στοιχείων. Ένα όφελος αυτής της διέγερσης είναι η ανίχνευση χαρακτηριστικών ακτίνων στο φάσμα του χρησιμοποιούμενου ανιχνευτή, σε μία περιοχή απαλλαγμένη σε μεγάλο βαθμό από παρεμβολές χαρακτηριστικών ακτίνων άλλων στοιχείων.

Ως στόχος, λοιπόν, αυτής της ΔΕ τέθηκε η διερεύνηση της δυνατότητας συγκρότησης μίας τέτοιας διάταξης στο Εργαστήριο Πυρηνικής Τεχνολογίας του ΕΜΠ (ΕΠΤ-ΕΜΠ). Για το σκοπό αυτό, αποφασίστηκε η χρήση συνιστωσών που ήταν ήδη διαθέσιμες στο εργαστήριο. Αξιοποιήθηκαν μία μηχανή ακτίνων-Χ, που εξυπηρετεί τους σκοπούς της βιομηχανικής ραδιογραφίας, μέγιστης ενέργειας εκπεμπόμενων φωτονίων 200 keV, καθώς και δύο ημιαγωγοί ανιχνευτές, που ανταποκρίνονται στις ανάγκες ανίχνευσης της εφαρμογής. Ο ένας, τύπου BEGe (Broad Energy Germanium detector), χρησιμοποιήθηκε με στόχο την ανίχνευση ουρανίου, ενώ ο άλλος, τύπου Si-PIN, με στόχο την ανίχνευση στοιχείων σπανίων γαιών.

Για τη διερεύνηση, χρησιμοποιήθηκαν κατά βάση τεχνικές προσομοίωσης Monte-Carlo. Οι προσομοιώσεις στόχευαν στη μοντελοποίηση της διάταξης και την ανάλυση της επίδρασης διάφορων λειτουργικών, γεωμετρικών ή εξωγενών παραμέτρων στα αποτελέσματα της ακτινοβολήσης. Τα αποτελέσματα έδειξαν εξάρτηση της ανιχνευσιμότητας του στοιχείου ενδιαφέροντος από τη διέγερση του δείγματος, αλλά και από παράγοντες όπως η συγκέντρωση του στοιχείου, οι γωνίες μεταξύ των διαφόρων στοιχείων της διάταξης, ο χρησιμοποιούμενος κατευθυντής δέσμης, οι διαστάσεις του δείγματος, ο περιβάλλον χώρος της διάταξης και η κωνικότητα της δέσμης διέγερσης. Σημαντικό ρόλο φάνηκε να παίζει επίσης η γραμμική πόλωση της διεγείρουσας ακτινοβολίας, που μπορεί να επιτευχθεί με τη συγκρότηση γεωμετρίας τριών διαστάσεων. Ακόμα, επιτεύχθηκε η σχετική απλοποίηση του μοντέλου του ανιχνευτή Si-PIN, που εξυπηρετεί την επιτάχυνση των προσομοιώσεων, χωρίς να έχει επιπτώσεις στην ακρίβεια των ποιοτικών αποτελεσμάτων.

Παράλληλα, έγινε προσπάθεια συγκρότησης της διάταξης στο ΕΠΤ-ΕΜΠ και διεξαγωγή δοκιμαστικών μετρήσεων. Αρχικά, ως κύριοι στόχοι ορίστηκαν η μείωση της υψηλής ροής φωτονίων προς τον ανιχνευτή, ο περιορισμός των σκεδάσεων και η δημιουργία κατάλληλου φάσματος διέγερσης των δειγμάτων. Τα αποτελέσματα των ακτινοβολήσεων, αν και σε πρώιμο στάδιο, παρέχουν αισιοδοξία, καθώς επιτεύχθηκε η ανίχνευση δείγματος από χρυσό. Σίγουρα υπάρχουν προκλήσεις που πρέπει να ξεπεραστούν, ώστε να καταστεί η διάταξη λειτουργική μελλοντικά, ως προς την ανίχνευση των ακόμη βαρύτερων στοιχείων και τον προσδιορισμό της στοιχειακής ανάλυσης πραγματικών δειγμάτων. Τα συμπεράσματα, που προέκυψαν από τις προσομοιώσεις που διενεργήθηκαν, αναμένεται να φανούν χρήσιμα στην προσπάθεια αυτή.

# ABSTRACT

---

The X-ray fluorescence (XRF) technique is widely in use today for a fast, cheap, non-destructive elemental analysis of samples of environmental or other interest. In spite of the diffusion of this method, there have been made relatively few attempts to implement it for the excitation of the K-series characteristic lines of heavy elements. A benefit that can arise from such an excitation is the detection of characteristic X-rays in the spectrum of the detector, found in an energy range that is, to a great extent, free from interference by other elements' characteristic lines.

The goal that was set for this diploma thesis was to investigate the capability to assemble an XRF array to perform this test, in the Nuclear Energy Department of the National Technical University of Athens (NED-NTUA). For this purpose, it was decided to use components that were at that moment available in the laboratory. In particular, an X-ray tube of 200 kV maximum high voltage, mainly used for industrial radiography purposes, along with two semiconductor detectors, that meet the requirements set, were utilised. One of the detectors, a Broad Energy Germanium detector (BEGe), was used to detect uranium, while the other one, a Si-PIN detector, to detect rare earth elements (REE).

For this investigation were used, in essence, Monte-Carlo simulation techniques. The simulations' goals were the XRF array modelling and the analysis of the effect of various operational, geometrical or extrinsic parameters in the results of the method. The outcome showed a dependency of the detectability of the element of interest on the sample excitation, as well as on other factors, for instance on the element concentration, the angle between various array elements, the beam collimator, the sample dimensions, the surrounding area and the conical beam aperture. Furthermore, the linear polarization of the exciting radiation, that can be achieved through two successive perpendicular reflections in space (triaxial geometry), exhibited a possibly significant impact on the results. Moreover, a simplification of the Si-PIN detector model was accomplished, achieving simulation acceleration, without important adverse effects in the precision of the quantitative results.

Concurrently, the attempt to assemble the XRF array in the NED-NTUA was carried out, alongside test measurements. Most importantly, the main goals were set to be the reduction of high photon flux towards the detector, the decrease in scattered photons and the formation of a suitable excitation spectrum to irradiate the samples. Even though still in an early stage, the experimental results, are promising, as the detection of a gold sample has been successful. There are definitely challenges to cope with, in order for the array to become operational in the future and to be used for the detection of even heavier elements and for the elemental characterization of real samples. The conclusions that emerged from the simulations are expected to be of use in this effort.

# ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΑ

---

1	Εισαγωγή	1
2	Ακτίνες-Χ και η τεχνική ΧRF	3
2.1	Εισαγωγή	3
2.2	Η ανακάλυψη των ακτίνων-Χ	3
2.3	Η φύση των ακτίνων-Χ	4
2.4	Οι ιδιότητες των ακτίνων-Χ	5
2.5	Η προέλευση των ακτίνων-Χ	5
2.5.1	Η ακτινοβολία πέδησης (bremsstrahlung)	6
2.5.2	Χαρακτηριστική ακτινοβολία (characteristic radiation)	6
2.6	Αλληλεπιδράσεις φωτονίων με την ύλη	12
2.6.1	Το φωτοηλεκτρικό φαινόμενο	13
2.6.2	Η ελαστική σκέδαση	14
2.6.3	Η μη-ελαστική σκέδαση	14
2.7	Εξασθένιση της ακτινοβολίας στην ύλη	17
2.8	Εφαρμογές των ακτίνων-Χ	19
2.9	Η φασματοσκοπία φθορισμού ακτίνων-Χ	20
2.9.1	Είδη ΧRF	20
2.9.2	Η πηγή των ακτίνων-Χ	22
2.9.3	Οι ραδιενεργές πηγές	27
2.9.4	Η ακτινοβολία του συγχρότρου	28
2.9.5	Η ανίχνευση της ακτινοβολίας	29
2.9.6	Άλλες συνιστώσες της διάταξης	43
2.9.7	Το φάσμα	48
2.10	Η ανίχνευση των χαρακτηριστικών γραμμών Κ του ουρανίου	49
2.11	Η ανίχνευση των χαρακτηριστικών γραμμών Κ των σπανίων γαιών	52
2.12	Η πειραματική διάταξη του ΕΠΤ-ΕΜΠ	55
2.12.1	Η μηχανή ακτίνων-Χ	55
2.12.2	Ο ανιχνευτής BEGe	55
2.12.3	Ο ανιχνευτής Si-PIN	56
3	Η Προσομοίωση Monte-Carlo και ο Κώδικας PENELOPE	59

3.1	Monte-Carlo	59
3.2	Ο κώδικας PENELOPE	60
3.2.1	Ο κώδικας χρήστη PENMAIN	61
3.3	Αβεβαιότητα των αποτελεσμάτων της προσομοίωσης	68
3.4	Υπολογισμός βοηθητικών μεγεθών	68
3.5	Ο στατιστικός έλεγχος U-test	70
3.6	Κριτήρια ολοκλήρωσης της προσομοίωσης	71
3.7	Η διάρκεια της προσομοίωσης	71
3.8	Συσχέτιση εξαρτημένων μεγεθών	72
	Σχήματα του 3 <sup>ου</sup> Κεφαλαίου	73
4	Η Προσομοίωση της Διάταξης XRF	81
4.1	Εισαγωγή	81
4.2	Η μοντελοποίηση των επιμέρους στοιχείων της διάταξης	81
4.2.1	Μοντελοποίηση του ανιχνευτή BEGe	81
4.2.2	Μοντελοποίηση του ανιχνευτή Si-PIN	82
4.2.3	Το φάσμα διέγερσης	85
4.2.4	Τα δείγματα	85
4.3	Προσομοίωση της διάταξης XRF για ανίχνευση του ουρανίου	87
4.3.1	Η διεγείρουσα ακτινοβολία	87
4.3.2	Ακτινοβόληση με διαφορετικές διεγέρσεις σε μία απλοποιημένη διάταξη XRF	90
4.3.3	Ανίχνευση ουρανίου για διάφορα επίπεδα συγκέντρωσης	92
4.3.4	Επίδραση της γεωμετρίας των κατευθυντών δέσμης	95
4.3.5	Η επίδραση των σκεδαστών	107
4.3.6	Η επίδραση της γωνίας τοποθέτησης του δείγματος	111
4.3.7	Η επίδραση της γωνίας μεταξύ πηγής-δείγματος-ανιχνευτή	114
4.3.8	Η επίδραση του πάχους του δείγματος	120
4.3.9	Η επίδραση του φαινομένου της πόλωσης στη γεωμετρία τριών αξόνων	123
4.3.10	Η επίδραση της διαμέτρου του δείγματος	128
4.3.11	Η επίδραση της κωνικότητας της πρωτογενούς δέσμης	130
4.4	Προσομοίωση της διάταξης XRF για την ανίχνευση σπανίων γαιών	134
4.4.1	Η διεγείρουσα ακτινοβολία	134
4.4.2	Η επίδραση των υλικών κατασκευής του περιβλήματος	135
4.4.3	Η επίδραση του εσωτερικού κατευθυντή δέσμης	137
4.4.4	Ακτινοβόληση με διαφορετικά φάσματα	139

4.4.5	Επίδραση του φαινομένου της πόλωσης στη γεωμετρία των τριών αξόνων -----	141
4.5	Ανακεφαλαίωση και συμπεράσματα από τις προσομοιώσεις-----	143
	Σχήματα του 4 <sup>ου</sup> Κεφαλαίου-----	145
5	Ακτινοβολήσεις στη διάταξη XRF -----	155
5.1	Εισαγωγή -----	155
5.2	Η προετοιμασία του ανιχνευτή -----	155
5.3	Η συγκρότηση της πειραματικής διάταξης-----	157
6	Επίλογος-----	165
6.1	Σύνοψη-----	165
6.2	Συμπεράσματα-----	166
6.3	Μελλοντικά βήματα -----	167
	Παράρτημα Α-----	171
	Παράρτημα Β-----	179
	Παράρτημα Γ -----	181
	Παράρτημα Δ-----	183
	Παράρτημα Ε -----	185
	Παράρτημα ΣΤ-----	189
	Βιβλιογραφία-----	191



# 1 ΕΙΣΑΓΩΓΗ

---

Η παρούσα διπλωματική εργασία (ΔΕ) ασχολείται με θέματα τα οποία εμπíπτουν στη μελέτη της τεχνικής φθορισμού ακτίνων-Χ (X-ray fluorescence analysis - XRF), μίας ευρύτατα χρησιμοποιούμενης τεχνικής χαρακτηρισμού υλικών που χρησιμοποιείται και στο Εργαστήριο Πυρηνικής Τεχνολογίας του Εθνικού Μετσόβιου Πολυτεχνείου (ΕΠΤ-ΕΜΠ). Συγκεκριμένα, διερευνάται η δυνατότητα συγκρότησης μίας διάταξης XRF, που χρησιμοποιεί ως πηγή ακτίνων-Χ μία μηχανή βιομηχανικής ραδιογραφίας. Τα φωτόνια που παράγονται από την πηγή έχουν ενέργειες έως 200 keV, γεγονός που επιτρέπει τη διέγερση της εσωτερικής στιβάδας, ακόμα και των πιο βαρέων στοιχείων. Η εργασία αναπτύχθηκε με δύο άξονες, την ανίχνευση ουρανίου και την ανίχνευση σπάνιων γαιών.

Για τους σκοπούς αυτής της ΔΕ, έγινε χρήση τόσο υπολογιστικών, όσο και πειραματικών μεθόδων. Οι υπολογιστικές μέθοδοι είναι ουσιαστικά προσομοιώσεις που εκτελέστηκαν με χρήση του κώδικα Monte-Carlo PENELOPE. Έχουν ως στόχο τον προσδιορισμό διάφορων παραμέτρων της διάταξης, τον τρόπο που αυτές επιδρούν στα αποτελέσματα και την εξαγωγή κυρίως ποιοτικών συμπερασμάτων, ως προς τη βελτιστοποίηση της πειραματικής διάταξης. Τα πειράματα που εκτελέστηκαν περιορίστηκαν σε ένα πιο βασικό επίπεδο, χωρίς να υπάρχει η δυνατότητα επαλήθευσης των συμπερασμάτων που προέκυψαν από την προσομοίωση.

Η διάρθρωση της ΔΕ σε 6 κεφάλαια είναι η εξής:

Στο κεφάλαιο 2, παρουσιάζεται η γενική θεωρία που περιβάλλει την τεχνική XRF. Αρχικά, παρουσιάζονται οι ακτίνες-Χ, η φύση, οι ιδιότητές τους και ο τρόπος με τον οποίο αλληλεπιδρούν με την ύλη. Στη συνέχεια αναλύονται οι διάφορες συνιστώσες που συνθέτουν μία διάταξη XRF. Επιπρόσθετα, γίνεται μία βιβλιογραφική ανασκόπηση της ανίχνευσης ουρανίου και σπάνιων γαιών με την τεχνική της XRF. Το κεφάλαιο κλείνει με την αναλυτική περιγραφή των συνιστωσών της διάταξης XRF του ΕΠΤ-ΕΜΠ, της οποίας η συγκρότηση διερευνάται στην παρούσα ΔΕ.

Στο κεφάλαιο 3, παρουσιάζεται ο κώδικας PENELOPE, που χρησιμοποιήθηκε για τη διενέργεια των προσομοιώσεων. Αρχικά, το κεφάλαιο ασχολείται γενικά με τις μεθόδους Monte-Carlo, καθώς και αυτές που χρησιμοποιούνται για την προσομοίωση της διέλευσης φωτονίων μέσα από την ύλη. Αναλύεται ο κώδικας PENELOPE, τα βασικά χαρακτηριστικά που τον απαρτίζουν και ο τρόπος εκτέλεσης προσομοιώσεων και λήψης αποτελεσμάτων. Στη συνέχεια, παρουσιάζονται ο τρόπος επεξεργασίας των αποτελεσμάτων, ο χειρισμός των αβεβαιοτήτων που προκύπτουν από τη στοχαστική διαδικασία της προσομοίωσης, τα στατιστικά τεστ και η αξιολόγηση της επίδρασης κάθε συνιστώσας φάσμα φθορισμού προς ανίχνευση.

Στο κεφάλαιο 4, δίνονται τα αποτελέσματα των προσομοιώσεων με χρήση του κώδικα PENELOPE. Το πρώτο μέρος του κεφαλαίου είναι αφιερωμένο στη μοντελοποίηση των ανιχνευτών του ΕΠΤ-ΕΜΠ και της διεγείρουσας ακτινοβολίας από την πηγή βιομηχανικής ραδιογραφίας. Το δεύτερο μέρος του κεφαλαίου ασχολείται με τη διάταξη με στόχο την ανίχνευση των χαρακτηριστικών γραμμών K του ουρανίου. Το τρίτο μέρος του κεφαλαίου εξετάζει τη διάταξη ανίχνευσης χαρακτηριστικών ακτίνων K των στοιχείων σπάνιων γαιών. Τα σημαντικότερα συμπεράσματα που προκύπτουν από τις προσομοιώσεις, σε σχέση με την επίδραση των διάφορων συνιστωσών στο φάσμα των ανιχνευτών συνοψίζονται σε μία ενότητα στο τέλος του κεφαλαίου.



Στο κεφάλαιο 5, γίνεται παρουσίαση της πειραματική διαδικασίας στο πλαίσιο της ΔΕ, με απώτερο στόχο την ανίχνευση ουρανίου. Αρχικά, δίνονται τα βήματα που απαιτήθηκαν, ως προετοιμασία για την έναρξη των πειραμάτων. Το κύριο μέρος του κεφαλαίου εστιάζεται στις διαδοχικές προσπάθειες που έγιναν με σκοπό τη διαρκή βελτίωση του φάσματος του ανιχνευτή ΒΕGe.

Στο κεφάλαιο 6, που αποτελεί τον επίλογο, παρουσιάζεται μία ανασκόπηση της μελέτης. Παρουσιάζονται τα κυριότερα συμπεράσματα που προέκυψαν στη διάρκεια εκπόνησής της ΔΕ και οι δυσκολίες που αντιμετωπίστηκαν. Τέλος, προτείνονται ιδέες για μελλοντική συνέχιση της διερεύνησης στα πλαίσια κάποιας άλλης, ίσως, ΔΕ στο ΕΠΤ-ΕΜΠ.

Η ΔΕ ολοκληρώνεται με 6 παραρτήματα:

Στο Παράρτημα Α, δίνεται ένας πλήρης κατάλογος των ενεργειών των πιο σημαντικών χαρακτηριστικών ακτίνων-Χ και των αιχμών απορρόφησης των σειρών Κ, L και Μ των χημικών στοιχείων με ατομικούς αριθμούς από 4 έως 103.

Στο Παράρτημα Β, παρουσιάζεται η αντιστοίχιση της ονοματολογίας των κυριότερων χαρακτηριστικών ακτίνων-Χ των σειρών Κ, L και Μ κατά Siegbahn και κατά IUPAC.

Στο Παράρτημα Γ, παρατίθεται το πιστοποιητικό του ανιχνευτή ΒΕGe της εταιρίας Canberra, που χρησιμοποιήθηκε τόσο για τις προσομοιώσεις που σχετίζονταν με την ανίχνευση ουρανίου, όσο και για την πειραματική διερεύνηση.

Στο Παράρτημα Δ, παρατίθεται το πιστοποιητικό του ανιχνευτή Si-PIN XR-100CR της εταιρείας Amptek, που χρησιμοποιήθηκε για τις προσομοιώσεις για τη διάταξη ανίχνευσης σπανίων γαιών.

Στο Παράρτημα Ε, παρέχεται ένα αρχείο εισόδου \*.in για το πρόγραμμα PENELOPE, με όλες τις διαθέσιμες δυνατότητες. Επίσης, δίνονται οι εξηγήσεις των εντολών και των μεταβλητών σε πίνακα.

Στο Παράρτημα ΣΤ, δίνονται οι πίνακες που περιέχουν τους συντελεστές των εξισώσεων των καμπυλών συσχέτισης των σχημάτων του κεφαλαίου 4.

## 2 ΑΚΤΙΝΕΣ-Χ ΚΑΙ Η ΤΕΧΝΙΚΗ ΧRF

---

### 2.1 Εισαγωγή

Το κεφάλαιο αυτό εστιάζεται στις ακτίνες-Χ. Αρχικά, γίνεται μία ιστορική ανασκόπηση της ανακάλυψης των ακτίνων-Χ από το Γερμανό φυσικό Wilhelm Röntgen. Στη συνέχεια, περιγράφονται η φύση και οι ιδιότητες των ακτίνων-Χ, καθώς και οι τρόποι με τους οποίους παράγονται. Επίσης, δίνονται οι αλληλεπιδράσεις τους με την ύλη, οι οποίες επιτρέπουν την ανάπτυξη των διαφόρων εφαρμογών που παρουσιάζονται συνοπτικά. Έμφαση δίνεται στην τεχνική του φθορισμού ακτίνων-Χ (X-Ray Fluorescence - XRF), η οποία παρουσιάζεται αναλυτικά, μαζί με τις συνιστώσες που απαρτίζουν μία σχετική διάταξη. Στο τέλος του κεφαλαίου περιγράφονται οι συνιστώσες της διάταξης φθορισμού, που συγκροτήθηκε στα πλαίσια της παρούσας ΔΕ στο ΕΠΤ-ΕΜΠ.

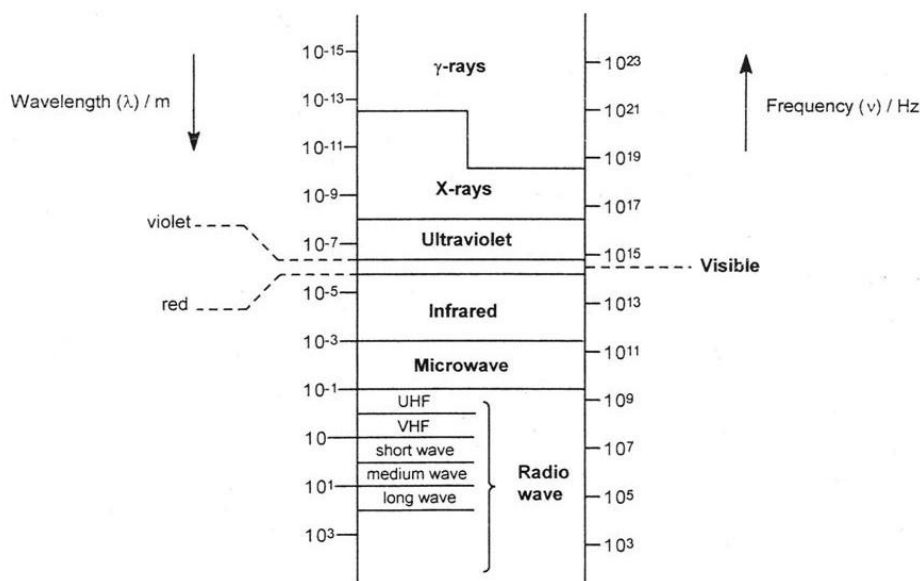
### 2.2 Η ανακάλυψη των ακτίνων-Χ

Στις 8 Νοεμβρίου 1895, ο Γερμανός φυσικός και καθηγητής στο πανεπιστήμιο του Würzburg, Wilhelm Conrad Röntgen (1845-1923), προχώρησε σε μία σημαντική ανακάλυψη. Κατά τη διάρκεια του 1895, ο Röntgen μελετούσε τις επιδράσεις, που είχαν στο εξωτερικό περιβάλλον ηλεκτρικές εκκενώσεις μέσα σε σωλήνες κενού (vacuum tubes). Συγκεκριμένα, μελετούσε μία δέσμη ηλεκτρονίων, όταν αυτή προσέπιπτε σε μεταλλικό στόχο σε συνθήκες κενού. Στις αρχές Νοεμβρίου, επαναλαμβάνοντας τα πειράματα του με ένα σωλήνα τύπου Lenard, ο οποίος είχε ένα λεπτό παράθυρο αλουμινίου, πρόσθεσε ένα κάλυμμα από χαρτόνι μπροστά από το παράθυρο. Γνώριζε πως το κάλυμμα αυτό απέτρεπε το φως από το να βγει έξω από το σωλήνα, αλλά παρατήρησε πως αόρατες ακτίνες προκάλεσαν εκπομπή ακτινοβολίας (φθορισμό) σε ένα χαρτόνι βαμμένο με άλας λευκοχρυσοκυανιούχου βαρίου (platinocyanide barium  $Ba[Pt(CN)_4]$ ). Ο Röntgen κατάλαβε πως το ίδιο θα συνέβαινε και με τους σωλήνες τύπου Hittorf-Crookes, των οποίων τα τοιχώματα ήταν πολύ πιο λεπτά από αυτούς τύπου Lenard.

Σε επόμενο πείραμα κατασκεύασε ένα μαύρο κάλυμμα ίδιο με αυτό που είχε χρησιμοποιήσει στα πρώτα πειράματα, κάλυψε με αυτό το σωλήνα τύπου Hittorf-Crookes και συνέδεσε στα ηλεκτρόδια της καθόδου πηνίο Ruhmkorff έτσι ώστε να δημιουργηθεί το ηλεκτροστατικό πεδίο. Στη συνέχεια, αφού πρώτα έλεγξε την αδιαφάνεια του καλύμματος ξεκίνησε το πείραμα σε σκοτεινό δωμάτιο. Καθώς προκλήθηκε η ηλεκτρική εκκένωση παρατήρησε μία μικρή λάμψη στο κάλυμμα με το  $Ba[Pt(CN)_4]$ , το οποίο βρισκόταν δίπλα από το σωλήνα καθώς ακόμα δεν το χρησιμοποιούσε. Έτσι κατάλαβε πως πρόκειται για ένα νέο είδος ακτινοβολίας, η οποία διαπερνούσε διάφορα υλικά. Λόγω της άγνωστης φύσης και προέλευσης της ακτινοβολίας αυτής, έδωσε το όνομα ακτίνες-Χ. Αργότερα, ονομάστηκαν και ακτίνες Röntgen προς τιμήν του. Για την ανακάλυψη του αυτή, τιμήθηκε με το Νόμπελ Φυσικής το 1901.

## 2.3 Η φύση των ακτίνων-Χ

Όπως είναι γνωστό σήμερα οι ακτίνες-Χ, σύμφωνα με την κβαντική θεωρία, μπορούν να θεωρηθούν είτε ως ηλεκτρομαγνητικά κύματα που χαρακτηρίζονται από το μήκος κύματός τους, είτε ως δέσμες φωτονίων που χαρακτηρίζονται από την ενέργεια τους. Και οι δύο αυτές όψεις είναι σωστές, αλλά κάθε μία μπορεί να χρησιμοποιηθεί, για να περιγράψει ορισμένα φαινόμενα πιο εύκολα. Συγκροτούν το ηλεκτρομαγνητικό φάσμα, μαζί με τα ραδιοκύματα, τα μικροκύματα, το υπέρυθρο φάσμα, το ορατό φως, το υπεριώδες φάσμα και τις ακτίνες-γ.



Σχήμα 2.1: Το ηλεκτρομαγνητικό φάσμα

Η ηλεκτρομαγνητική ακτινοβολία είναι η εκπομπή στο χώρο ηλεκτρομαγνητικής ενέργειας υπό τη μορφή κυμάτων. Τα ηλεκτρομαγνητικά κύματα είναι συγχρονισμένα ηλεκτρικά και μαγνητικά πεδία, που ταλαντώνονται κάθετα μεταξύ τους και κάθετα στη διεύθυνση διάδοσής τους και διαδίδονται στο κενό με την ταχύτητα του φωτός  $c$ .

Τα χαρακτηριστικά μεγέθη ενός ηλεκτρομαγνητικού κύματος είναι το μήκος κύματος  $\lambda$ , η συχνότητα  $\nu$  και η ενέργεια  $E$  και συνδέονται με τη σχέση:

$$\nu = \frac{c}{\lambda} = \frac{E}{h} \Rightarrow E = \frac{h \cdot c}{\lambda} \quad (2.1)$$

όπου  $c = 2.99792458 \cdot 10^8 \text{ m/s}$  η ταχύτητα του φωτός στο κενό και  $h = 6.626068 \cdot 10^{-34} \text{ Js}$  η σταθερά του Planck.

Τα μήκη κύματος των ακτίνων-Χ βρίσκονται κατά βάση στην κλίμακα από 0.01 έως 10 nm, που αντιστοιχούν σε ενέργεια φωτονίων από 0.125 έως 125 keV. Όπως φαίνεται στο φάσμα της ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας, οι περιοχές των ακτίνων-Χ και των ακτίνων-γ επικαλύπτονται.

Αρχικά, οι ακτίνες-Χ που παράγονταν από τις μηχανές παραγωγής ακτίνων-Χ είχαν μεγαλύτερο μήκος κύματος και, συνεπώς, μικρότερη ενέργεια, σε σχέση με τις ακτίνες-γ που εκπέμπονταν από ραδιενεργούς πυρήνες. Για αυτό το λόγο, το μήκος κύματος ήταν επαρκές κριτήριο σε παλαιότερη βιβλιογραφία για τη διάκριση μεταξύ -Χ και -γ. Ωστόσο, η πρόοδος, που σημειώθηκε σταδιακά στο

σχεδιασμό των σωλήνων ακτίνων-Χ, επέτρεψε την παραγωγή ακτίνων-Χ μικρότερου μήκους κύματος. Επίσης, ανακαλύφθηκαν και ραδιενεργοί πυρήνες, που εκπέμπουν ακτίνες-γ μεγαλύτερου μήκους κύματος. Άρα η διάκριση με βάση το μήκος κύματος δεν είναι πλέον ικανοποιητική.

Σήμερα οι ακτίνες-Χ και  $\gamma$  διακρίνονται με βάση την προέλευση τους. Ακτίνες-Χ ονομάζονται εκείνες, που προέρχονται από αποδιέγερση ατόμων και πέδηση ηλεκτρονίων από φορτισμένα σωματίδια. Αντίθετα, ακτίνες-γ ονομάζονται εκείνες, που προέρχονται από αποδιέγερση του πυρήνα ενός ατόμου.

Οι ακτίνες-Χ, ανάλογα με την ενέργειά τους, διακρίνονται σε «μαλακές» και «σκληρές» ακτίνες-Χ. Αυτές που έχουν ενέργεια μεγαλύτερη από 10 keV χαρακτηρίζονται ως «σκληρές», ενώ οι άλλες ως «μαλακές». Τα όρια αυτά είναι ενδεικτικά και όχι αυστηρά και ουσιαστικά θέτουν ένα διαχωρισμό μεταξύ των πιο διαπεραστικών «σκληρών» και των λιγότερο διαπεραστικών «μαλακών» ακτίνων-Χ.

## 2.4 Οι ιδιότητες των ακτίνων-Χ

Οι ακτίνες-Χ έχουν ορισμένες ιδιότητες λόγω της φύσης τους. Συγκεκριμένα, οι ακτίνες-Χ (Van Grieken and Markowicz, 2002):

- Είναι αόρατες
- Είναι ηλεκτρικά ουδέτερες
- Δεν έχουν μάζα
- Κινούνται στο κενό με την ταχύτητα του φωτός
- Δεν εστιάζονται οπτικά
- Σχηματίζουν πολυενεργειακές δέσμες
- Κινούνται σε ευθύγραμμη διεύθυνση
- Προκαλούν φθορισμό σε ορισμένες ουσίες
- Προκαλούν χημικές αλλαγές
- Αλληλεπιδρούν με τα άτομα της ύλης προκαλώντας ιονισμού
- Απορροφούνται ή σκεδάζονται από την ύλη
- Παράγουν δευτερογενή ακτινοβολία αλληλεπιδρώντας με την ύλη

## 2.5 Η προέλευση των ακτίνων-Χ

Οι ακτίνες-Χ παράγονται με δύο φυσικούς μηχανισμούς:

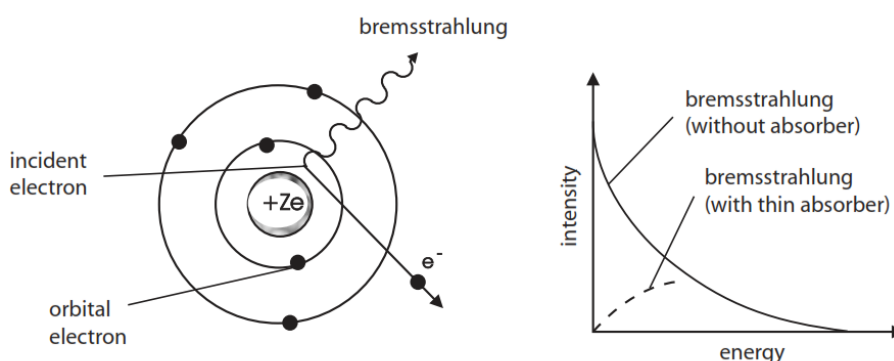
- **Ακτινοβολία πέδησης:** εκπομπή φωτονίων, που προκύπτουν από την επιβράδυνση (πέδηση) φορτισμένων σωματιδίων κατά την αλληλεπίδρασή τους με την ύλη
- **Χαρακτηριστική ακτινοβολία:** εκπομπή φωτονίων, που προκύπτουν από την αποδιέγερση ενός διεγερμένου ή ιονισμένου ατόμου

## 2.5.1 Η ακτινοβολία πέδησης (bremsstrahlung)

Όταν ένα φορτισμένο σωματίδιο υψηλής ενέργειας προσπίπτει σε ένα υλικό, μπορεί να εκτραπεί από την πορεία του ή να επιβραδυνθεί λόγω των ισχυρών δυνάμεων Coulomb, που δέχεται από τα φορτισμένα σωματίδια της ύλης, τυπικά ηλεκτρόνια ή ατομικούς πυρήνες. Το κινούμενο σωματίδιο χάνει κινητική ενέργεια και αποκλίνει από την αρχική του τροχιά (κάμψη). Αυτή η απώλεια κινητικής ενέργειας μετατρέπεται σε ένα ίσης ενέργειας φωτόνιο, ικανοποιώντας την αρχή διατήρησης της ενέργειας. Τα παραγόμενα φωτόνια συνιστούν την ακτινοβολία πέδησης (*braking radiation – bremsstrahlung*) ή αλλιώς την λευκή ακτινοβολία (*white radiation*). Η ακτινοβολία πέδησης είναι συνεχής ακτινοβολία (*continuous radiation – continuum*) και παρουσιάζει μέγιστη ενέργεια για πλήρη μετατροπή της αρχικής κινητικής ενέργειας του σωματιδίου σε φωτόνιο, δηλαδή όταν το σωματίδιο σταματήσει πλήρως.

Γενικά, ακτινοβολία πέδησης είναι οποιαδήποτε ακτινοβολία παράγεται λόγω της επιβράδυνσης ενός φορτισμένου σωματιδίου και περιλαμβάνει την ακτινοβολία από σύγχροτρο, την ακτινοβολία από κύκλοτρο και την εκπομπή ηλεκτρονίων και ποζιτρονίων κατά τη διάσπαση  $\beta^+$ . Παρ' όλα αυτά, ο όρος συνήθως χρησιμοποιείται με την λιγότερο ευρεία έννοια της ακτινοβολίας από ηλεκτρόνια, που επιβραδύνονται στην ύλη.

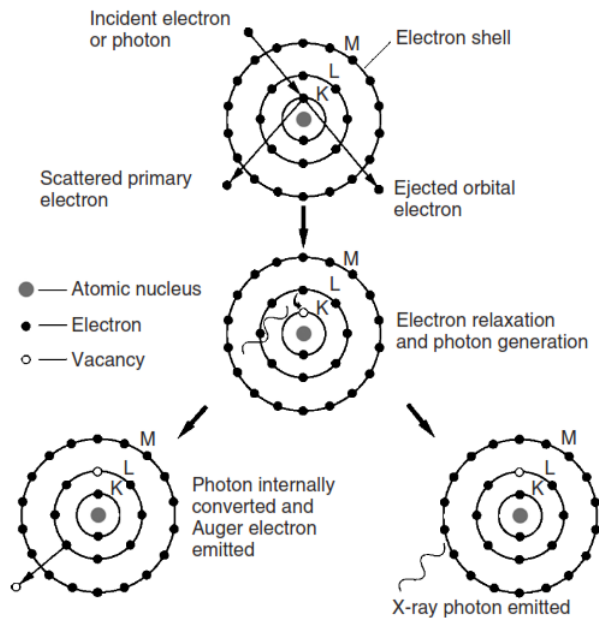
Ένα τυπικό φάσμα συνεχούς ακτινοβολίας λόγω πέδησης παρουσιάζεται στο σχήμα 2.2.



Σχήμα 2.2: Δημιουργία ακτινοβολίας πέδησης (αριστερά) και συνεχές φάσμα (δεξιά) (Zschornack, 2007)

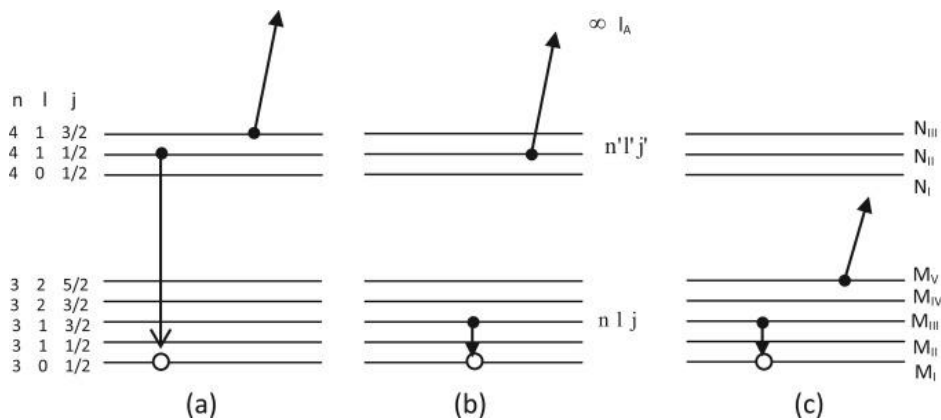
## 2.5.2 Χαρακτηριστική ακτινοβολία (characteristic radiation)

Όταν ένα φορτισμένο σωματίδιο ή ένα φωτόνιο αλληλεπιδρά με ένα ηλεκτρόνιο των εσωτερικών στιβάδων ενός ατόμου, η ενέργεια του σωματιδίου μπορεί να είναι αρκετά υψηλή ώστε να απομακρύνει το ηλεκτρόνιο από τη θέση του στο άτομο. Το ηλεκτρόνιο που απομακρύνεται διαφεύγει από το άτομο ως «ελεύθερο» ηλεκτρόνιο και το άτομο ιονίζεται. Καθώς ο ιονισμός αποτελεί μία διεγερμένη κατάσταση, το άτομο θα επιστρέψει γρήγορα στην κανονική του κατάσταση, αφού πρώτα καλύψει το κενό που δημιουργήθηκε με ένα από τα ηλεκτρόνια των εξωτερικών στιβάδων. Ταυτόχρονα, η διαφορά των ενεργειακών σταθμών μεταξύ ενός εσωτερικού και ενός εξωτερικού ηλεκτρονίου θα δημιουργήσει είτε μία ακτίνα-Χ (*χαρακτηριστική ακτινοβολία-Χ*) ή ένα χαρακτηριστικής ενέργειας ελεύθερο ηλεκτρόνιο που εκπέμπεται από το άτομο. Αυτό το ηλεκτρόνιο ονομάζεται *ηλεκτρόνιο Auger* (Leng, 2013).



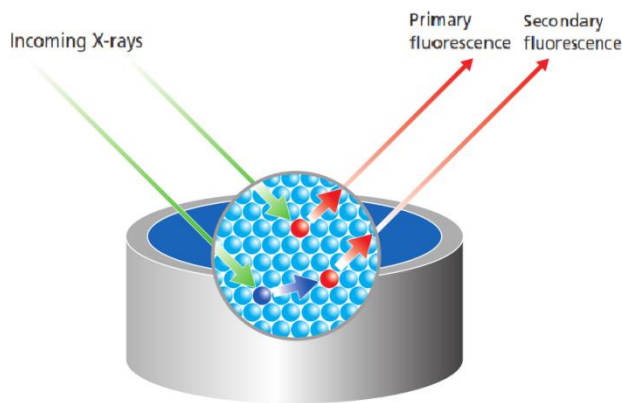
Σχήμα 2.3: Αποδιέγερση ατόμου με εκπομπή ηλεκτρονίου Auger ή χαρακτηριστικής ακτινοβολίας (Leng, 2013)

Μία υποπερίπτωση του φαινομένου Auger είναι το φαινόμενο γνωστό ως *μετάβαση Coster-Kronig* (*Coster-Kronig transition*), κατά την οποία το ηλεκτρόνιο που καλύπτει το κενό ανήκει στην ίδια στιβάδα ηλεκτρονίων με το κενό. Εάν επιπλέον το εκπεμπόμενο ηλεκτρόνιο ανήκει στην ίδια στιβάδα τότε πρόκειται για μία *υπερμετάβαση Coster-Kronig* (*super Coster-Kronig transition*).



Σχήμα 2.4: (a) Φαινόμενο Auger, (b) Μετάβαση Coster-Kronig, (c) Υπερ-μετάβαση Coster-Kronig (Shehla and Puri, 2016)

Τόσο η χαρακτηριστική ακτινοβολία-Χ, όσο και τα ηλεκτρόνια Auger μπορούν να χρησιμοποιηθούν για να προσδιοριστεί η στοιχειακή ανάλυση ενός δείγματος. Στην παρούσα ΔΕ θα ασχοληθούμε με τη χαρακτηριστική ακτινοβολία-Χ, η οποία αλλιώς χαρακτηρίζεται *φθορίζουσα ακτινοβολία* (*fluorescent radiation*). Το φαινόμενο της παραγωγής χαρακτηριστικής ακτινοβολίας, ως αποτέλεσμα του φωτοηλεκτρικού φαινομένου ονομάζεται πρωτογενής φθορισμός ή απλά *φθορισμός* (*fluorescence*). Όταν τα φωτόνια που προσκρούσουν στο στόχο μεταφέρουν στο άτομο αρκετή ενέργεια ώστε αυτό με τη σειρά του κατά την εκπομπή φωτονίων να οδηγήσει στο φθορισμό γειτονικών του ατόμων έχουμε *δευτερογενή φθορισμό* (*secondary fluorescence*).



Σχήμα 2.5: Πρωτεύων και δευτερεύων φθορισμός (Brouwer, 2003)

Η ενέργεια των χαρακτηριστικών ακτίνων-Χ ισούται με τη διαφορά των ενεργειακών σταθμών των ηλεκτρονίων δύο διαφορετικών στιβάδων. Είναι πλήρως ορισμένη και εξαρτάται από τον ατομικό αριθμό  $Z$ . Για παράδειγμα, η ενέργεια της ακτίνας-Χ  $K_{\alpha}$  είναι η διαφορά της ενέργειας σύνδεσης ενός ηλεκτρονίου της στιβάδας  $K$  με τον ατομικό πυρήνα και ενός της  $L$  με τον πυρήνα. Με αυτό τον τρόπο μπορούμε να αναγνωρίσουμε ένα χημικό στοιχείο από τις χαρακτηριστικές ακτίνες-Χ που εκπέμπει.

Όταν ηλεκτρόνια απομακρύνονται από τις εσωτερικές στιβάδες του ατόμου λόγω της αλληλεπίδρασης τους με σωματίδια υψηλής ενέργειας, υπάρχουν πολλοί πιθανοί τρόποι, με τους οποίους τα ηλεκτρόνια των πιο εξωτερικών στιβάδων μπορούν να καλύψουν τα κενά που δημιουργούνται, όμως αυτές οι μεταβάσεις σε ένα άτομο περιορίζονται και περιγράφονται από ορισμένους κανόνες. Αυτοί ονομάζονται *κανόνες επιλογής* ή *κανόνες μετάβασης* (*selection/transition rules*).

*Κανόνες μετάβασης* (Leng, 2013):

Κάθε ηλεκτρόνιο σε ένα άτομο προσδιορίζεται από τέσσερις *κβαντικούς αριθμούς*:  $n$ ,  $l$ ,  $m$ ,  $s$ . Ο *βασικός κβαντικός αριθμός*  $n$  καθορίζει τη στιβάδα, για παράδειγμα  $n=1$  για τη στιβάδα  $K$ ,  $n=2$  για τη στιβάδα  $L$  κ.ο.κ. Ο *αζιμουθιακός κβαντικός αριθμός*  $l$  καθορίζει τον αριθμό των υποστιβάδων, λαμβάνοντας όλες τις τιμές από  $0$  έως  $(n-1)$ . Ο *μαγνητικός κβαντικός αριθμός*  $m$  καθορίζει το πλήθος των ενεργειακών καταστάσεων σε κάθε υποστιβάδα, λαμβάνοντας τιμές από  $-l$  έως  $+l$ . Ο *κβαντικός αριθμός του σπιν* (*spin*), η ιδιοστροφορμή του ηλεκτρονίου, λαμβάνει τις τιμές  $-1/2$  και  $+1/2$ . Οι κβαντικοί αριθμοί των ηλεκτρονίων των στιβάδων  $K$ ,  $L$  και  $M$  δίνονται παρακάτω (πίνακας 2.1). Στον ίδιο πίνακα δίνεται επίσης ο *κβαντικός αριθμός ολικής στροφορμής*  $j=(l+s)$ . Δύο ηλεκτρόνια στο ίδιο άτομο δεν γίνεται να έχουν το ίδιο σύνολο κβαντικών αριθμών ( $n$ ,  $l$ ,  $m$ ,  $s$ ). Οι κανόνες μετάβασης των ηλεκτρονίων μεταξύ δύο στιβάδων είναι οι εξής:

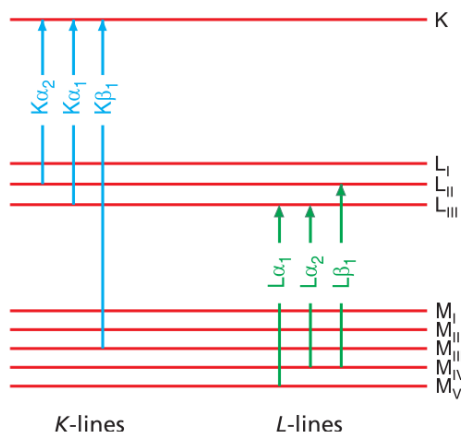
- η μεταβολή του  $n$  να είναι τουλάχιστον  $1$  ( $\Delta n \geq 1$ )
- η μεταβολή του  $l$  να είναι ακριβώς  $1$  ( $\Delta l = \pm 1$ )
- η μεταβολή του  $j$  να είναι είτε  $0$  είτε  $1$  ( $\Delta j = \pm 1$  ή  $0$ )

Πίνακας 2.1: Ηλεκτρονιακή δομή και κβαντικοί αριθμοί στις στιβάδες K, L, M (Leng, 2013)

Στιβάδα	$n$	$l$	$m$	$s$	Τροχιακά	$J$
<b>K</b>	1	0	0	$\pm\frac{1}{2}$	1s	$\frac{1}{2}$
	2	0	0	$\pm\frac{1}{2}$	2s	$\frac{1}{2}$
<b>L</b>	2	1	1	$\pm\frac{1}{2}$	2p	$\frac{1}{2}, \frac{3}{2}$
	2	1	0	$\pm\frac{1}{2}$		
	2	1	-1	$\pm\frac{1}{2}$		
<b>M</b>	3	0	0	$\pm\frac{1}{2}$	3s	$\frac{1}{2}$
	3	1	1	$\pm\frac{1}{2}$	3p	$\frac{1}{2}, \frac{3}{2}$
	3	1	1	$\pm\frac{1}{2}$		
	3	1	-1	$\pm\frac{1}{2}$		
	3	2	2	$\pm\frac{1}{2}$	3d	$\frac{3}{2}, \frac{5}{2}$
	3	2	1	$\pm\frac{1}{2}$		
	3	2	0	$\pm\frac{1}{2}$		
3	2	-1	$\pm\frac{1}{2}$			
3	2	-2	$\pm\frac{1}{2}$			

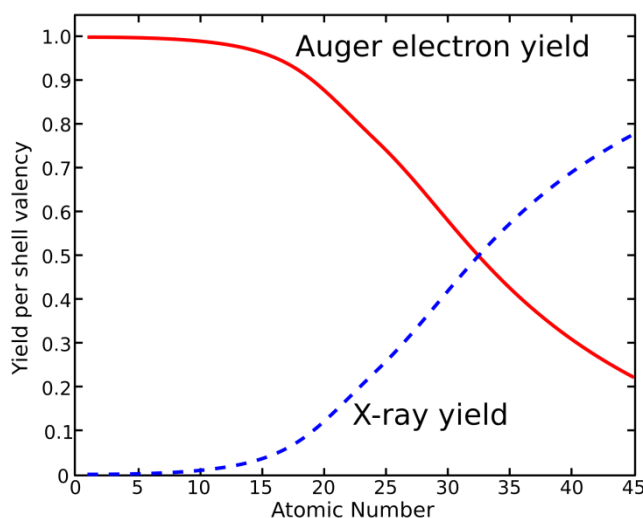
Οι χαρακτηριστικές ακτίνες-Χ διακρίνονται σε σειρές K, L, M, ανάλογα με τη θέση στην οποία βρίσκονται τα κενά των στιβάδων ηλεκτρονίων που συμπληρώνονται. Για παράδειγμα, η γραμμή K δηλώνει τη χαρακτηριστική ακτίνα-Χ όταν ένα από τα ηλεκτρόνια εξωτερικής στιβάδας μεταβαίνει στη στιβάδα K, ώστε να συμπληρώσει το κενό που έχει δημιουργηθεί εκεί. Σύμφωνα με τους κανόνες μετάβασης, ένα ηλεκτρόνιο δε γίνεται να μεταβεί από τη στιβάδα  $L_1$  στην K καθώς η μεταβολή του  $l$  θα ήταν 0, γεγονός που παραβαίνει το δεύτερο κανόνα. Για την περιγραφή των χαρακτηριστικών ακτίνων στη βιβλιογραφία χρησιμοποιούνται πιο συχνά οι συμβολισμοί κατά Siegbahn και κατά IUPAC (International Union of Pure and Applied Chemistry). Η ονοματολογία κατά Siegbahn έχει ως βάση τη σχετική ένταση κάθε γραμμής, ενώ η ονοματολογία της IUPAC είναι περιγραφική, δηλαδή ορίζει τις υποστιβάδες προέλευσης και μετάβασης. Για παράδειγμα, η χαρακτηριστική ακτίνα, που προκύπτει από την πλήρωση ενός κενού στη στιβάδα K από ηλεκτρόνιο της στιβάδας  $L_3$ , κατά Siegbahn ονομάζεται  $K_{\alpha 1}$  και κατά IUPAC ονομάζεται  $K-L_3$ . Ο πρώτος τρόπος έχει καθιερωθεί, παρότι ο δεύτερος είναι πιο εύχρηστος. Το σύνολο των πιο σημαντικών από τις δυνατές μεταβάσεις μαζί με τους χρησιμοποιούμενους συμβολισμούς κατά Siegbahn δίνονται στο σχήμα 2.6, ενώ ένας πιο πλήρης κατάλογος των δυνατών μεταβάσεων, με την ονοματολογία κατά Siegbahn και IUPAC, γίνεται στο παρατίθεται στο παράρτημα Β.





Σχήμα 2.6: Κατά Siegbahn ονοματολογία σημαντικότερων χαρακτηριστικών γραμμών

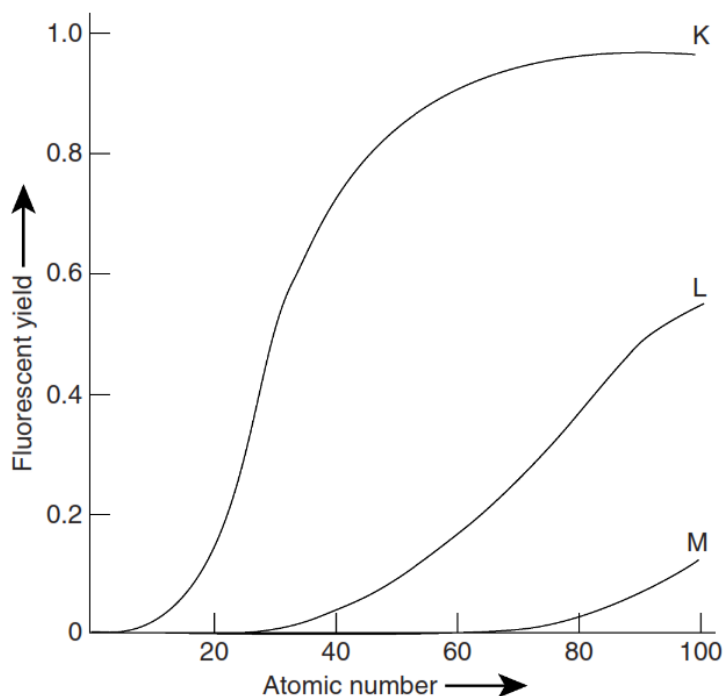
Η ικανότητα ενός ατόμου να παράγει χαρακτηριστική ακτινοβολία-Χ ποικίλλει όταν ακτινοβολείται από ακτίνες-Χ ή ηλεκτρόνια υψηλής ενέργειας. Αρχικά, η παραγωγή χαρακτηριστικών ακτίνων-Χ και ηλεκτρονίων Auger είναι μεταξύ τους ανταγωνιστικές διαδικασίες, όπως φαίνεται στο σχήμα 2.7. Κατά δεύτερον, ανταγωνιστικές είναι και οι εκπομπές ακτίνων-Χ των σειρών K, L και M. Μια παράμετρος που ονομάζεται *απόδοση φθορισμού (fluorescent yield)* χρησιμοποιείται για τη ποσοτικοποίηση της σχετικής παραγωγής ακτίνων-Χ. Στο σχήμα 2.8, φαίνεται η διακύμανση των αποδόσεων φθορισμού  $\omega$  στις σειρές K, L και M για ένα εύρος ατομικών αριθμών.



Σχήμα 2.7: Πιθανότητα αποδιέγερσης ατόμου με εκπομπή ηλεκτρονίου Auger ή με εκπομπή χαρακτηριστικής ακτινοβολίας

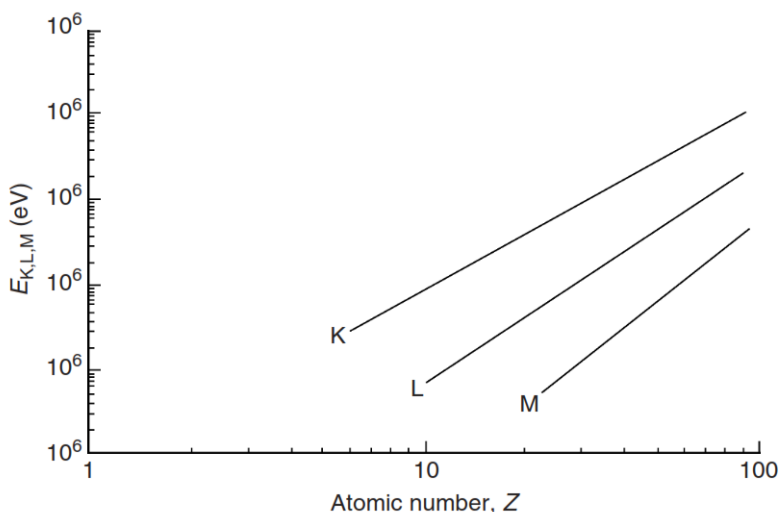
Για τα άτομα με ατομικό αριθμό μικρότερο του 4 (Be), η απόδοση φθορισμού είναι 0 και, για ατομικό αριθμό μικρότερο από 8 (O), είναι λιγότερο από 0.5%. Γενικά, η απόδοση φθορισμού αυξάνει με τον ατομικό αριθμό, όπως φαίνεται και στο σχήμα 2.8. Για το λόγο αυτό, υπάρχει ένα φυσικό μειονέκτημα στην ανίχνευση των χαρακτηριστικών ακτίνων-Χ των ελαφρών στοιχείων. Από το ίδιο σχήμα, είναι προφανές ότι η δημιουργία των ακτίνων-Χ της σειράς K είναι πιο αποδοτική, σε σχέση με τις σειρές L και M. Αυτό σημαίνει ότι η ένταση των γραμμών K θα είναι υψηλότερη από αυτή των γραμμών L και, αντίστοιχα, αυτή των γραμμών L υψηλότερη από εκείνη των γραμμών M.

Η απόδοση φθορισμού είναι μηδενική για τη σειρά L και για τη σειρά M για στοιχεία με ατομικούς αριθμούς μικρότερους από 20 (Ca) και 57 (La), αντίστοιχα.



Σχήμα 2.8: Απόδοση φθορισμού γραμμών K, L, M (Leng, 2013)

Μία άλλη διαφορά μεταξύ των γραμμών K, L και M είναι οι ενέργειές τους (ή ισοδύναμα τα μήκη κύματός τους). Η ενέργειες των γραμμών K είναι οι υψηλότερες και ακολουθούνται από τις L και τις M, όπως φαίνεται στο σχήμα 2.9. Ο πίνακας 2.2 παρέχει τις ενέργειες των γραμμών  $K_{\alpha 1}$ ,  $L_{\alpha 1}$ , και  $M_{\alpha 1}$  για επιλεγμένα στοιχεία. Στο παράρτημα A, στο τέλος της ΔΕ, δίνεται ο πλήρης κατάλογος των κυριότερων χαρακτηριστικών ακτίνων-X όλων των στοιχείων του περιοδικού πίνακα.

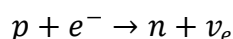


Σχήμα 2.9: Ενέργεια χαρακτηριστικών ακτίνων-X (Leng, 2013)

Πίνακας 2.2: Ενέργειες χαρακτηριστικών ακτίνων των σειρών K, L, M για ορισμένα στοιχεία που χρησιμοποιήθηκαν στη ΔΕ (Zschornack, 2007)

Ατομικός αριθμός	Στοιχείο	K <sub>α1</sub> [keV]	L <sub>α1</sub> [keV]	M <sub>α1</sub> [keV]
14	Si	1.740	-	-
32	Ge	9.887	1.218	-
82	Pb	74.97	12.62	2.345
92	U	98.44	17.22	3.171

Ένας άλλος μηχανισμός που οδηγεί σε δημιουργία κενού και κατά συνέπεια σε εκπομπή χαρακτηριστικής ακτινοβολίας είναι η *σύλληψη ηλεκτρονίου (electron capture - EC)*. Κατά τη διαδικασία αυτή, ένας πυρήνας πλούσιος σε πρωτόνια ενός ηλεκτρικά ουδέτερου ατόμου απορροφά ένα ηλεκτρόνιο της στιβάδας K ή της στιβάδας L. Με αυτόν τον τρόπο, ένα πρωτόνιο του πυρήνα μετατρέπεται σε νετρόνιο και ταυτόχρονα προκαλεί την εκπομπή ενός *νετρίνιο ηλεκτρονίου (electron neutrino)*:



Μετά τη σύλληψη του ηλεκτρονίου, ένα από τα εξωτερικά ασθενώς συνδεδεμένα ηλεκτρόνια του πυρήνα αντικαθιστά το ηλεκτρόνιο που συνελήφθη και παράγονται μία ή περισσότερες χαρακτηριστικές ακτίνες-X. Ο ατομικός αριθμός μειώνεται κατά 1, το πλήθος των νετρονίων αυξάνεται κατά 1 ενώ το ηλεκτρικό φορτίο συνήθως παραμένει ουδέτερο, παρόλο που σε ορισμένες περιπτώσεις μπορεί να δημιουργηθεί κατιόν λόγω εκπομπής επιπλέον ηλεκτρονίου Auger.

## 2.6 Αλληλεπιδράσεις φωτονίων με την ύλη

Οι αλληλεπιδράσεις των φωτονίων με άτομα ή με τα ηλεκτρόνια των ατόμων της ύλης οδηγούν σε αλλαγές της ενέργειας και της διεύθυνσης των σκεδαζόμενων φωτονίων. Ηλεκτρόνια των ατόμων μπορούν να εκπεμφθούν κατά την πλήρη ή τη μερική απορρόφηση του αρχικού φωτονίου. Εξαιρουμένων των φαινομένων συντονισμού σε συχνότητες που σχετίζονται με ατομικές ή πυρηνικές μεταβάσεις, οι κύριες ανταγωνιστικές και ενεργειακά εξαρτώμενες αλληλεπιδράσεις που συμβάλουν στη συνολική μικροσκοπική διατομή είναι:

- **Το φωτοηλεκτρικό φαινόμενο**, κατά το οποίο η αλληλεπίδραση γίνεται με ένα από τα ηλεκτρόνια του ατόμου και έχει ως αποτέλεσμα την πλήρη απορρόφηση του αρχικού φωτονίου.
- **Η ελαστική σκέδαση**, κατά την οποία ένα φωτόνιο αλληλεπιδρά με ένα από τα ηλεκτρόνια του ατόμου και σκεδάζεται σε μικρή γωνία σε σχέση με την αρχική χωρίς απώλειες ενέργειας.
- **Η μη ελαστική σκέδαση**, κατά την οποία λόγω της υψηλής ενέργειας του φωτονίου σε σχέση με την ενέργεια σύνδεσης του ηλεκτρονίου, το τελευταίο θεωρείται ως ελεύθερο.

- **Η δίδυμη γένεση**, στην οποία η ενέργεια του αρχικού φωτονίου είναι αρκετά υψηλή, ώστε να επιτρέπει τη υλοποίηση ενός ζεύγους ηλεκτρονίου-ποζιτρονίου.

Οι μηχανισμοί που παρουσιάζουν ενδιαφέρον σε αυτή τη ΔΕ είναι οι τρεις πρώτοι. Δε θα ασχοληθούμε με το μηχανισμό της δίδυμης γένεσης, καθώς οι ενέργειες που απαιτούνται για αυτή την αλληλεπίδραση είναι πολύ υψηλότερες από αυτές που χρησιμοποιούνται στη ΔΕ, για αυτό και δεν αναλύεται περαιτέρω στη συνέχεια.

### 2.6.1 Το φωτοηλεκτρικό φαινόμενο

Φωτόνια των οποίων η ενέργεια είναι μεγαλύτερη από την ενέργεια σύνδεσης των ηλεκτρονίων με τον πυρήνα του ατόμου είναι δυνατό να απορροφηθούν πλήρως κατά την αλληλεπίδραση τους με ένα άτομο, το οποίο στη συνέχεια εκπέμπει ένα ηλεκτρόνιο. Το φαινόμενο αυτό ονομάζεται *φωτοηλεκτρικό φαινόμενο* (*photoelectric effect*) και το εκπεμπόμενο ηλεκτρόνιο συχνά ονομάζεται *φωτοηλεκτρόνιο* (*photo electron*).

Αυτός ο μηχανισμός αλληλεπίδρασης αφορά κατά βάση τα ισχυρά συνδεδεμένα ηλεκτρόνια πυρήνων μέσου ή μεγάλου ατομικού αριθμού. Τα φωτοηλεκτρόνια αφού απορροφήσουν την ενέργεια του φωτονίου  $E_\gamma$ , εκπέμπονται από το άτομο με κινητική ενέργεια:

$$T = E_\gamma - BE \quad (2.2)$$

όπου  $BE$  (*Binding Energy*) η *ενέργεια σύνδεσης* του ηλεκτρονίου στο άτομο. Είναι ευκόλως κατανοητό ότι όταν η ενέργεια του φωτονίου είναι μικρότερη από την ενέργεια σύνδεσης του ηλεκτρονίου, τότε δεν είναι δυνατή η πραγματοποίηση του φαινομένου. Επίσης, όσο μεγαλύτερη είναι η ενέργεια του φωτονίου σε σχέση με την ενέργεια σύνδεσης του ηλεκτρονίου, τόσο μικρότερη είναι η πιθανότητα πραγματοποίησης του φαινομένου. Για αυτό το λόγο, οι καμπύλες απορρόφησης παρουσιάζουν αιχμές απορρόφησης στα σημεία όπου η ενέργεια του εισερχόμενου φωτονίου συμπίπτει με τις ενέργειες σύνδεσης των διαφόρων στιβάδων (K, L, M, ...), όπως φαίνεται στο σχήμα 2.15. Οι στιβάδες ηλεκτρονίων που αποτελούνται από υποστιβάδες, δηλαδή όλες εκτός από την K, παρουσιάζουν μικρές διακυμάνσεις της ενέργειας σύνδεσης σε κάθε υποστιβάδα.

Η ενέργεια σύνδεσης εξαρτάται από τον ατομικό αριθμό  $Z$  και από τη στιβάδα στην οποία ανήκει το ηλεκτρόνιο: μειώνεται προς τις εξωτερικές στιβάδες, όπως είναι εμφανές από τις προσεγγιστικές σχέσεις του Rydberg για τις στιβάδες K, L, M, αντίστοιχα (Leroy and Rancoita, 2004):

$$BE(K) \approx Ry(Z - 1)^2 \quad (2.3)$$

$$BE(L) \approx Ry(Z - 5)^2 \quad (2.4)$$

$$BE(M) \approx Ry(Z - 13)^2 \quad (2.5)$$

όπου  $Ry=13.61$  eV η *ενέργεια Rydberg*.

Οι σχέσεις αυτές έχουν αποκλίσεις της τάξης  $\pm(3-7)\%$  για τις ενέργειες της στιβάδας K και της τάξης  $\pm 10\%$  για τις ενέργειες των στιβάδων L από τις ακριβείς τιμές που παρατίθενται στο παράρτημα Α.

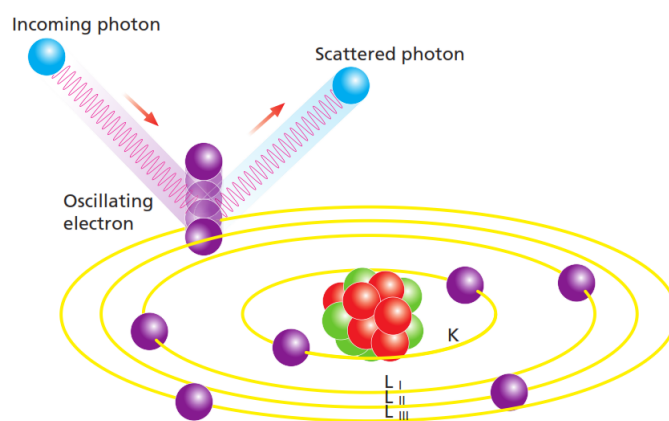
Μετά την αλληλεπίδραση, το άτομο βρίσκεται να είναι ιονισμένο, με αποτέλεσμα τη μετάπτωση ηλεκτρονίου από ανώτερη στιβάδα, ώστε να καλυφθεί το κενό και στη συνέχεια εκπέμπεται χαρακτηριστική ακτινοβολία-Χ, όπως περιγράφηκε σε προηγούμενη ενότητα.

## 2.6.2 Η ελαστική σκέδαση

Σκέδαση είναι ο μηχανισμός αλληλεπίδρασης ενός φωτονίου με ένα περιφερειακό ηλεκτρόνιο ατόμου. Όταν δεν υπάρχει απώλεια ενέργειας του φωτονίου κατά τη διάρκεια της σκέδασης, τότε αυτή ονομάζεται *ελαστική σκέδαση (coherent scattering)* ή *σκέδαση Rayleigh (Rayleigh scattering)*. Καθώς δεν υπάρχει απώλεια ενέργειας, το φωτόνιο που στην πραγματικότητα απορροφάται και επανεκπέμπεται διατηρεί το ίδιο μήκος κύματος.

$$\lambda_{inc} = \lambda_{scat} \Rightarrow E_{inc} = E_{scat} \quad (2.6)$$

Η ελαστική σκέδαση δεν οδηγεί σε ιονισμό του ατόμου και επηρεάζει μόνο τη διεύθυνση του σκεδαζόμενου φωτονίου που αποκλίνει συνήθως λίγο από εκείνη του προσπίπτοντος φωτονίου. Αυτός ο μηχανισμός αλληλεπίδρασης είναι πιο πιθανός για φωτόνια χαμηλής ενέργειας (<10keV), που προσπίπτουν σε στόχους υψηλού ατομικού αριθμού  $Z$ .



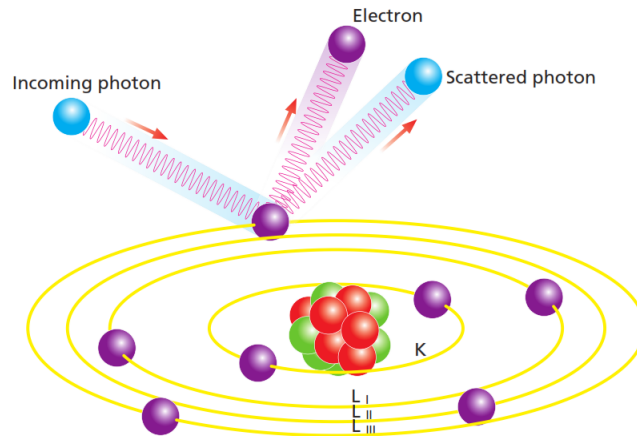
Σχήμα 2.10: Σκέδαση Rayleigh (Brouwer, 2003)

## 2.6.3 Η μη-ελαστική σκέδαση

Η σκέδαση που οδηγεί σε απώλειες ενέργειας για το σκεδαζόμενο φωτόνιο ονομάζεται *μη ελαστική σκέδαση (incoherent scattering)* ή *σκέδαση Compton (Compton scattering)*. Η απώλεια ενέργειας του φωτονίου ισούται με την ενέργεια που λαμβάνει το συμμετέχον ηλεκτρόνιο, ώστε να διαφύγει από το άτομο και να αποκτήσει κάποια κινητική ενέργεια. Το διαφεύγον ηλεκτρόνιο ονομάζεται *ηλεκτρόνιο Compton*. Στην πράξη θεωρείται ότι όλη αυτή η ενέργεια μετατρέπεται σε κινητική ενέργεια, καθώς τα περιφερειακά ηλεκτρόνια είναι ασθενώς συνδεδεμένα στο άτομο και θεωρούνται ως «ελεύθερα». Δηλαδή:

$$T = E_{inc} - E_{scat} \quad (2.7)$$

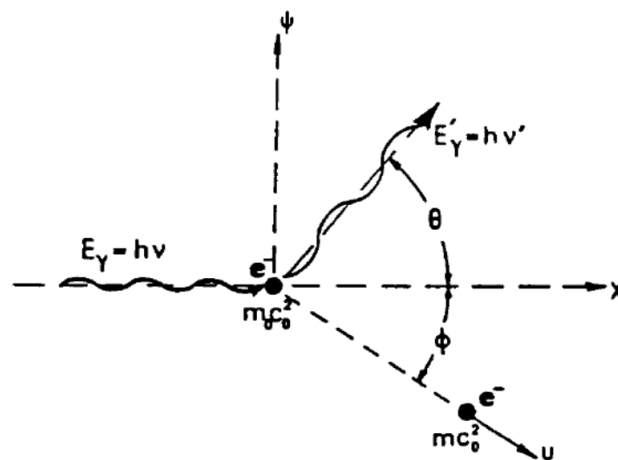
Αυτός ο μηχανισμός αλληλεπίδρασης αρχίζει να παρατηρείται και να γίνεται διαρκώς πιο σημαντικός, καθώς η ενέργεια του φωτονίου αυξάνεται και πλησιάζει την τιμή 1.022 MeV.



Σχήμα 2.11: Σκέδαση Compton (Brouwer, 2003)

Κατά το φαινόμενο Compton, πέρα από την απώλεια ενέργειας παρατηρείται και αλλαγή της τροχιάς του φωτονίου η οποία εξαρτάται τόσο από την ενέργεια του προσπίπτοντος φωτονίου, όσο και από την τροχιά του διαφεύγοντος ηλεκτρονίου. Όλα τα σχετικά μεγέθη υπολογίζονται με χρήση των αρχών διατήρησης της ενέργειας και της ορμής ως εξής (Λεωνίδου, 1984):

Η ενέργεια του προσπίπτοντος φωτονίου είναι  $E_\gamma = h\nu$ , ενώ του σκεδαζόμενου είναι  $E_{\gamma'} = h\nu'$ , όπου  $\nu$  και  $\nu'$  οι συχνότητες του προσπίπτοντος και του σκεδαζόμενου φωτονίου αντίστοιχα. Το μέτρο της ορμής των φωτονίων θα είναι αντίστοιχα  $h\nu/c$  και  $h\nu'/c$ .



Σχήμα 2.12: Χαρακτηριστικά μεγέθη σκέδασης Compton (Λεωνίδου, 1984)

Αν η μάζα ηρεμίας του ηλεκτρονίου είναι  $m_0$ , τότε η μάζα του όταν κινείται είναι:

$$m = m_0 \left( 1 - \frac{v^2}{c^2} \right)^{-1/2} \quad (2.8)$$

και η ορμή του ηλεκτρονίου είναι μέτρου:

$$p = m v \quad (2.9)$$

ενώ η κινητική του ενέργεια:

$$T = h\nu - h\nu' \quad (2.10)$$

Από την αρχή διατήρησης της ορμής και της ενέργειας, εκτελώντας τις πράξεις προκύπτουν τα παρακάτω συμπεράσματα:

1. Η μετατόπιση του μήκους κύματος του φωτονίου είναι αύξουσα συνάρτηση της γωνίας σκέδασης  $\vartheta$  και είναι (Λεωνίδου, 1984):

$$\Delta\lambda = \lambda' - \lambda = \frac{h}{m_0c} (1 - \cos \theta) \quad (2.11)$$

Η σταθερά  $\Lambda_C = h/m_0c$  ονομάζεται μήκος κύματος Compton, έχει τιμή  $0.02426 \text{ \AA}$  και αντιστοιχεί σε σκέδαση φωτονίου υπό γωνία  $\theta = 90^\circ$ . Η μέγιστη μετατόπιση του μήκους κύματος αντιστοιχεί σε οπισθοσκέδαση και ισούται με  $2\Lambda_C$ .

2. Η ενέργεια του σκεδαζόμενου φωτονίου είναι (Λεωνίδου, 1984):

$$E_\gamma' = h\nu' = \frac{E_\gamma}{1 + \alpha(1 - \cos \theta)} \quad (2.12)$$

όπου: 
$$\alpha = \frac{E_\gamma}{m_0c_0} \quad (2.13)$$

Κατά την οπισθοσκέδαση, όταν δηλαδή  $\theta = 180^\circ$ , η ενέργεια του σκεδαζόμενου φωτονίου είναι (Λεωνίδου, 1984):

$$E_\gamma'_{min} = \frac{E_\gamma}{1 + 2\alpha} \quad (2.14)$$

3. Η κινητική ενέργεια  $T$  του ηλεκτρονίου θα είναι (Λεωνίδου, 1984):

$$T = \frac{E_\gamma \alpha (1 - \cos \theta)}{1 + \alpha(1 - \cos \theta)} \quad (2.15)$$

4. Η γωνίες σκέδασης του ηλεκτρονίου  $\varphi$  και του φωτονίου  $\vartheta$  συσχετίζονται (Λεωνίδου, 1984):

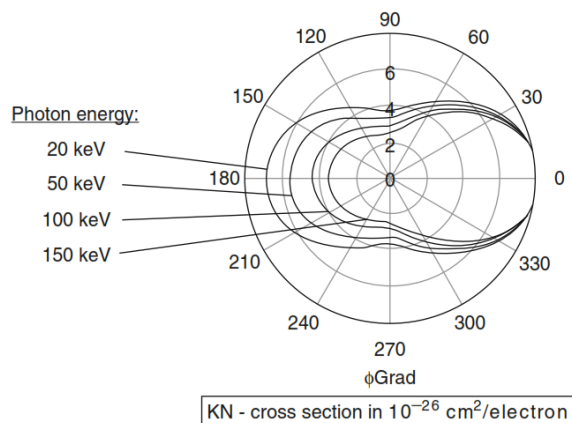
$$\cot \varphi = (1 + \alpha) \tan(\theta/2) \quad (2.16)$$

Οι Klein και Nishina υπολόγισαν θεωρητικά την πιθανότητα  $d(e\sigma)$  να προκύψει σε σκέδαση Compton φωτόνιο με διεύθυνση εντός της στοιχειώδους στερεάς γωνίας  $d\Omega$ , που περιλαμβάνεται μεταξύ των κωνικών επιφανειών με ημιγωνίες κορυφής  $\vartheta$  και  $\vartheta+d\vartheta$ , αντίστοιχα. Το μέγεθος αυτό, γνωστό ως διαφορική μικροσκοπική ενεργή διατομή<sup>1</sup> ανά ηλεκτρόνιο για το φαινόμενο Compton, δίνεται σε  $cm^2$  ανά ηλεκτρόνιο από τη σχέση (Klein and Nishina, 1929):

$$d(e\sigma) = \frac{e^4}{2m_0^2c_0^2} \left[ \frac{1}{1 + \alpha(1 - \cos \theta)} \right]^2 \left[ 1 + \cos^2 \theta + \frac{\alpha^2(1 - \cos \theta)^2}{1 + \alpha(1 - \cos \theta)} \right] d\Omega \quad (2.17)$$

Ολοκλήρωση της σχέσης (2.17) από  $\vartheta=0^\circ$  έως  $\vartheta=180^\circ$  δίνει τη μικροσκοπική ενεργή διατομή του φαινομένου Compton ανά ηλεκτρόνιο  $e\sigma$ . Ο μερικός γραμμικός συντελεστής του φαινομένου Compton που παρουσιάζεται στην παράγραφο 2.7 δίνεται από το γινόμενο του  $e\sigma$  επί την πυκνότητα ηλεκτρονίων του στόχου.

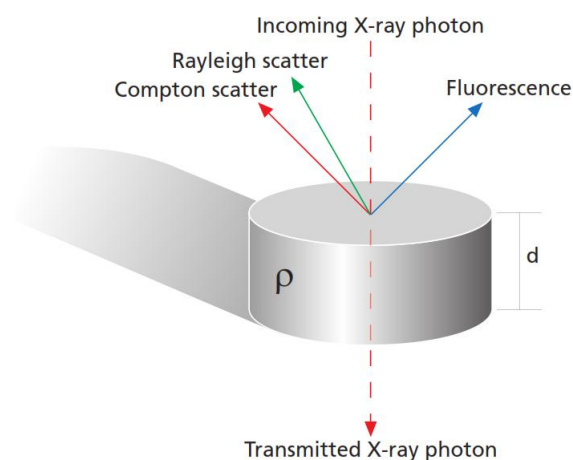
<sup>1</sup>Γενικά η ενεργός διατομή είναι μία επιφάνεια που χρησιμοποιείται για την ποσοτικοποίηση της πιθανότητας πραγματοποίησης μίας συγκεκριμένης αλληλεπίδρασης μεταξύ ενός προσπίπτοντος «σώματος» (εν προκειμένω φωτονίου) και ενός «στόχου» (εν προκειμένω ηλεκτρονίου). Μονάδα της είναι το barn για το οποίο ισχύει:  $1 \text{ barn} = 10^{-28} m^2$ .



Σχήμα 2.13: Γωνιακή κατανομή σκεδαζόμενου φωτονίου κατά το φαινόμενο Compton (Aichinger et al., 2012)

## 2.7 Εξασθένιση της ακτινοβολίας στην ύλη

Οι μηχανισμοί αλληλεπίδρασης των ακτίνων-Χ που αναλύθηκαν στην προηγούμενη ενότητα οδηγούν στην εξασθένιση μίας δέσμης ακτίνων-Χ κατά τη διέλευση αυτής μέσα από την ύλη. Η εξασθένιση αυτή οφείλεται στην απορρόφηση της ακτινοβολίας είτε άμεσα, όπως κατά το φωτοηλεκτρικό φαινόμενο, είτε έμμεσα όπως κατά τις διαδοχικές αποθέσεις ενέργειας κατά τις σκεδάσεις Compton στο υλικό.



Σχήμα 2.14: Μηχανισμοί εξασθένισης ακτινοβολίας στην ύλη (Brouwer, 2003)

Το γεγονός αυτό επιτρέπει τη διατύπωση ενός απλού νόμου που περιγράφει την εξασθένιση μίας μονοενεργειακής παράλληλης δέσμης φωτονίων κατά τη διέλευση της από έναν απορροφητή. Ο νόμος της εξασθένισης είναι:

$$I(x) = I_0 \exp(-\mu x) \quad (2.18)$$

όπου  $I$  [φωτ  $\text{cm}^{-2} \text{s}^{-1}$ ] το πλήθος των εισερχόμενων φωτονίων στον απορροφητή τα οποία φτάνουν παρθενικά (χωρίς αλληλεπίδραση με το υλικό) σε βάθος  $x$  [cm],  $I_0$  [φωτ  $\text{cm}^{-2} \text{s}^{-1}$ ] το αρχικό πλήθος φωτονίων της δέσμης,  $\mu$  [ $\text{cm}^{-1}$ ] ο ολικός γραμμικός συντελεστής εξασθένισης που εξαρτάται από το



υλικό του απορροφητή, την πυκνότητά του, αλλά και από την αρχική ενέργεια των φωτονίων της δέσμης.

Η σχέση (2.18) μπορεί να λάβει και την πιο εύχρηστη μορφή:

$$I(x) = I_0 \exp(-\mu_m \rho x) \quad (2.19)$$

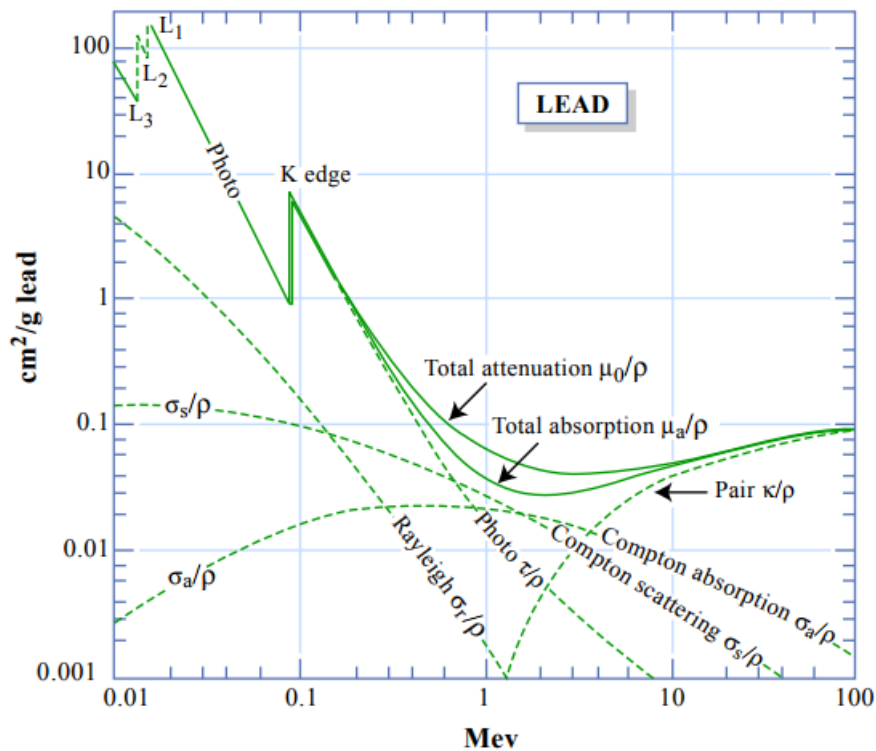
όπου σε αυτή την περίπτωση ο συντελεστής  $\mu_m = \mu/\rho$  [ $\text{cm}^2/\text{g}$ ] ονομάζεται ολικός μαζικός συντελεστής εξασθένισης και  $\rho$  [ $\text{g}/\text{cm}^3$ ] είναι η πυκνότητα του υλικού. Η μορφή αυτή της σχέσης της εξασθένισης, είναι πιο βολική καθώς ο συντελεστής  $\mu_m$  είναι ανεξάρτητος της πυκνότητας, γεγονός που επιτρέπει την πιο εύκολη πινακοποίηση των τιμών του για τα διάφορα υλικά και τις διάφορες ενέργειες.

Ο συντελεστής  $\mu$  αποτελεί το άθροισμα τεσσάρων μερικών γραμμικών συντελεστών εξασθένισης, που καθένας αφορά έναν από τους μηχανισμούς αλληλεπίδρασης που αναφέρθηκαν στην προηγούμενη ενότητα, δηλαδή το φωτοηλεκτρικό φαινόμενο ( $\tau$ ), την ελαστική σκέδαση ( $\sigma_s$ ), τη σκέδαση Compton ( $\sigma$ ) και τη δίδυμη γένεση ( $\kappa$ ), η οποία όμως δεν είναι σημαντική για την παρούσα ΔΕ.

$$\mu = \tau + \sigma_s + \sigma + \kappa \quad (2.20)$$

Αντίστοιχα, ο μαζικός συντελεστής εξασθένισης  $\mu_m$  είναι το άθροισμα των τεσσάρων αντιστοίχων μερικών μαζικών συντελεστών εξασθένισης:

$$\mu_m = \tau_m + \sigma_{sm} + \sigma_m + \kappa_m \quad (2.21)$$



Σχήμα 2.15: Ολικός και μερικοί μαζικοί συντελεστές εξασθένισης για το μόλυβδο σε ενέργειες από 10 keV έως 100 MeV (Evans, 1955)

## 2.8 Εφαρμογές των ακτίνων-Χ

Οι εφαρμογές των ακτίνων-Χ σε διάφορα επιστημονικά πεδία τις καθιστούν ιδιαίτερα σημαντικές και για το λόγο αυτό είναι αντικείμενο μελέτης πολλών επιστημόνων (Jenkins, 1999). Στη συνέχεια ακολουθεί μία συνοπτική περιγραφή των σημαντικότερων εφαρμογών:

### *Φθορισμός ακτίνων-Χ:*

Κατά την τεχνική αυτή χρησιμοποιούνται ακτίνες-Χ για τη διέγερση των ατόμων ενός δείγματος, τα οποία στη συνέχεια εκπέμπουν χαρακτηριστική ακτινοβολία-Χ. Ανίχνευση αυτής της ακτινοβολίας οδηγεί σε ποιοτικό ή/και ποσοτικό προσδιορισμό της σύστασης του δείγματος. Αυτή η τεχνική είναι πολύ σημαντική για τους σκοπούς της παρούσας ΔΕ και για αυτό το λόγο αναλύεται περαιτέρω στα επόμενα κεφάλαια.

### *Κρυσταλλογραφία:*

Εκμεταλλεόμενοι την ιδιότητα της περίθλασης των ακτίνων-Χ, μπορούμε να εξάγουμε συμπεράσματα για την κρυσταλλική δομή των υλικών.

### *Διαγνωστική ραδιολογία:*

Η ιδιότητα των ακτίνων-Χ να απορροφώνται με διαφορετικό ρυθμό από διαφορετικά υλικά βρίσκει εφαρμογή στην ιατρική, όπου επιτρέπουν τη δημιουργία ακτινογραφιών και τομογραφιών.

### *Θεραπευτική ραδιολογία:*

Οι ακτίνες-Χ επίσης χρησιμοποιούνται με στόχο τη θεραπεία, όπως για την ακτινοβόληση όγκων.

### *Βιομηχανία:*

Στη βιομηχανία οι ακτίνες-Χ βρίσκουν χρήση στο μη καταστροφικό έλεγχο υλικών, όπως συγκολλήσεων, χυτών ή ελασμάτων με τη μέθοδο της ραδιογραφίας. Επίσης, μπορούν να χρησιμοποιηθούν σε μετρητές (πχ στάθμης υγρών σε δεξαμενές, πάχους μεταλλικών φύλλων κλπ).

### *Αστρονομία:*

Ο κλάδος της αστρονομίας ακτίνων-Χ επιτρέπει τις τελευταίες δεκαετίες την εξερεύνηση του διαστήματος σε μεγαλύτερη έκταση, κάτι που δεν ήταν δυνατό με τις δυνατότητες της οπτικής αστρονομίας και της ραδιοαστρονομίας. Οι ακτίνες-Χ που παράγονται από τα διάφορα ουράνια σώματα ανιχνεύονται και αποκαλύπτουν εξωτικά μέρη του σύμπαντος.

### *Ηλεκτρονική:*

Οι «μαλακές» ακτίνες-Χ χρησιμοποιούνται για την εκτύπωση μικροηλεκτρονικών κυκλωμάτων με τη μέθοδο της λιθογραφίας.

### *Ασφάλεια:*

Χρήση ακτίνων-Χ γίνεται στους σαρωτές αποσκευών, δεμάτων, οχημάτων κ.ο.κ. σε αεροδρόμια, τελωνεία, δημόσια κτήρια και γενικά όπου απαιτείται υψηλή ασφάλεια για την ταχεία και μη επεμβατική επιθεώρηση του περιεχομένου των διάφορων αντικειμένων.

Τέχνη:

Οι ακτίνες-Χ έχουν φανεί χρήσιμες πολλές φορές επιτυγχάνοντας τον έλεγχο προϋπαρχόντων στρωμάτων σε πίνακες ή περιεχομένων δοχείων αρχαιολογικού ενδιαφέροντος που δεν είναι δυνατό να ανοιχτούν και να εξεταστούν. (Dik *et al.*, 2008)

## 2.9 Η φασματοσκοπία φθορισμού ακτίνων-Χ

Το φαινόμενο του φθορισμού που αναλύθηκε στην παράγραφο 2.5.2 μπορεί να χρησιμοποιηθεί έτσι, ώστε να επιτευχθεί ο προσδιορισμός της συγκέντρωσης των χημικών στοιχείων ενός δείγματος, μέσω της ανίχνευσης των χαρακτηριστικών ακτίνων-Χ που εκπέμπονται από το δείγμα, μετά την διέγερση του με κάποια μορφή ακτινοβολίας. Όταν η διέγερση αυτή γίνεται με ακτίνες-Χ έχουμε την τεχνική *XRF* (*X-Ray Fluorescence*), ενώ όταν χρησιμοποιούνται σωματίδια έχουμε την τεχνική *PIXE* (*Particle Induced X-Ray Emission*). Στα πλαίσια της παρούσας ΔΕ, έγινε χρήση μόνο της μεθόδου *XRF* και για αυτό το λόγο αναλύεται μόνο αυτή στη συνέχεια.

### 2.9.1 Είδη *XRF*

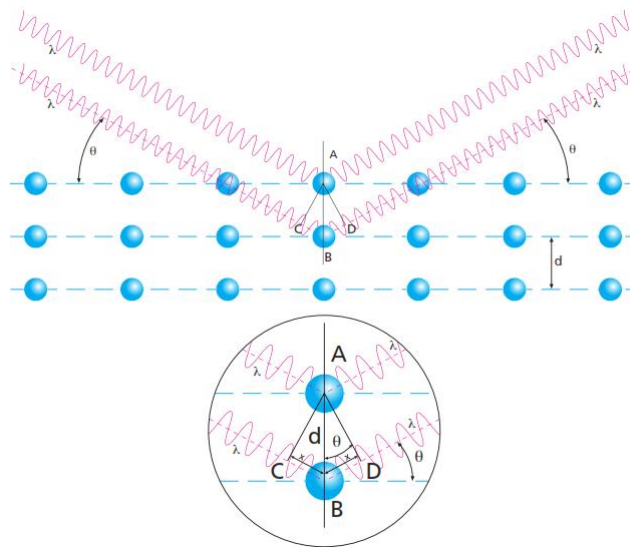
Η χαρακτηριστική ακτινοβολία η οποία εκπέμπεται από το υλικό που διεγείρεται μπορεί να αναλυθεί είτε ως προς την ενέργεια είτε ως προς το μήκος κύματος. Καθ' αυτόν τον τρόπο υπάρχουν δύο τύποι *XRF*:

- *EDXRF* ή *EDS* (*Energy-Dispersive Spectrometry – φασματοσκοπία ενεργειακής κατανομής των ακτίνων-Χ*): Οι δευτερογενείς ακτίνες-Χ που παράγονται κατά το φθορισμό ανιχνεύονται από κατάλληλο ανιχνευτή στον παράγεται σήμα ανάλογο της ενέργειας της προσπίπτουσας ακτινοβολίας. Το σήμα αυτό επεξεργάζεται η διάταξη συλλογής και ανάλυσης δεδομένων. Αποτέλεσμα αυτής της διαδικασίας είναι η παραγωγή ενός φάσματος ενεργειών.
- *WDXRF* ή *WDS* (*Wavelength-Dispersive Spectrometry – φασματοσκοπία κατανομής του μήκους κύματος ακτίνων-Χ*): Η μέθοδος αυτή βασίζεται στο φυσικό διαχωρισμό των ακτίνων-Χ σύμφωνα με το μήκος κύματός τους. Αυτό επιτυγχάνεται με τη χρήση κρυστάλλων που περιθλούν τις ακτίνες, σύμφωνα με το νόμο του Bragg<sup>2</sup>, σε διάφορες διευθύνσεις, ανάλογα με το μήκος κύματός τους. Η βηματικά μεταβαλλόμενη γεωμετρία της διάταξης επιτρέπει την ανίχνευση της έντασης ενός μήκους κύματος σε κάθε μέτρηση και η σύνθεση όλων των μετρήσεων συνθέτει ένα φάσμα.

Σε σύγκριση με την *EDXRF*, η *WDXRF* παρουσιάζει καλύτερη διακριτική ικανότητα, καθώς και είναι πιο ευαίσθητη στην ανίχνευση ιχνοστοιχείων. Επίσης, είναι απαλλαγμένη από προβλήματα όπως οι αιχμές διαφυγής που θα αναλυθούν σε επόμενο κεφάλαιο και η ανάγκη ψύξης του χρησιμοποιούμενου ανιχνευτή με υγρό άζωτο. Παρ' όλα αυτά, υστερεί σε άλλους τομείς όπως για παράδειγμα η ταχύτητα δειγματοληψίας, το κόστος, η υψηλή εξάρτηση από τη γεωμετρία του δείγματος και η ύπαρξη κινούμενων μηχανικών τμημάτων.

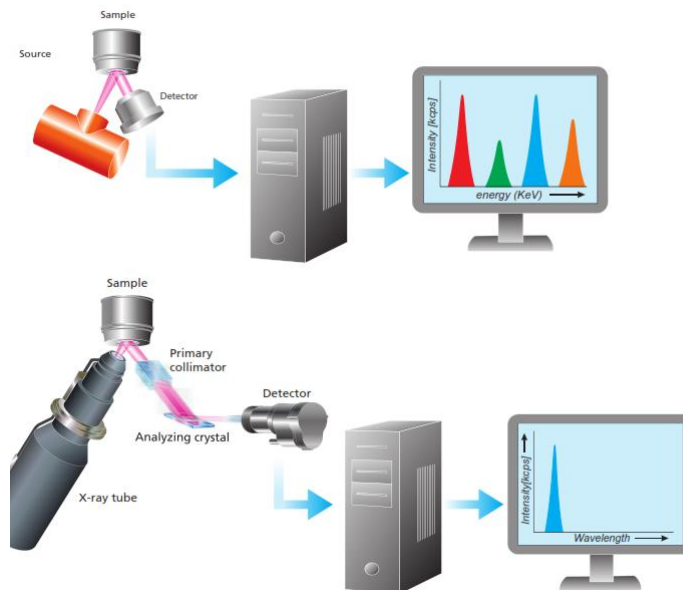
---

<sup>2</sup> Ο νόμος του Bragg περιγράφεται από την εξίσωση:  $n\lambda = 2d \sin \theta$ , όπου  $n$  θετικός ακέραιος,  $\lambda$  το μήκος κύματος της προσπίπτουσας ακτινοβολίας,  $d$  η απόσταση μεταξύ δύο διαδοχικών επιπέδων του κρυσταλλικού πλέγματος και  $\theta$  η γωνία πρόσπτωσης της ακτινοβολίας (σχήμα 2.16).



Σχήμα 2.16: Σχηματική απεικόνιση της περίθλασης και του νόμου του Bragg (Brouwer, 2003)

Το σχήμα 2.17 παρουσιάζει σχηματικά τις βασικές δομικές ομοιότητες και διαφορές μεταξύ των δύο μεθόδων. Για τους σκοπούς αυτής της ΔΕ επιλέχθηκε η μέθοδος EDXRF και για το λόγο αυτό στο εξής θα αποκαλείται απλώς XRF.



Σχήμα 2.17: Δομικές διαφορές μεταξύ EDXRF και WDXRF (Brouwer, 2003)

Γενικά, η τεχνική XRF μπορεί να χρησιμοποιηθεί για τον ποιοτικό, αλλά και τον ποσοτικό προσδιορισμό της συγκέντρωσης των χημικών στοιχείων σε ένα δείγμα. Είναι, επιπλέον, μία οικονομική και μη καταστροφική μέθοδος που δεν αλλοιώνει με κανένα τρόπο το εξεταζόμενο δείγμα και δεν το καθιστά ραδιενεργό. Μπορεί να χρησιμοποιηθεί τόσο για στερεά, όσο και για υγρά δείγματα, για ραδιενεργά ή μη στοιχεία, όμως δεν μπορεί να επιτύχει ισοτοπική ανάλυση όπως η τεχνική της γ-φασματοσκοπίας, παρά μόνο στοιχειακή ανάλυση.

Μία διάταξη XRF αποτελείται από τρία βασικά τμήματα: τη διάταξη παραγωγής της διεγείρουσας ακτινοβολίας (μηχανή ακτίνων-Χ, ραδιοϊσότοπο ή ακτινοβολία συγχρότρου), την

ανιχνευτική διάταξη και το σύστημα συλλογής και ανάλυσης δεδομένων. Επίσης υπάρχουν κι άλλες συνιστώσες που ολοκληρώνουν μία διάταξη XRF, όπως η διάταξη συγκράτησης του δείγματος, δευτερεύοντες στόχοι και φίλτρα.

## 2.9.2 Η πηγή των ακτίνων-Χ

Η πηγή των ακτίνων-Χ παράγει τις πρωτεύουσες ακτίνες-Χ, οι οποίες θα διεγείρουν τα άτομα του δείγματος. Η πιο συχνά χρησιμοποιούμενη πηγή ακτίνων-Χ είναι η *λυχνία* ή *μηχανή ακτίνων-Χ* (*X-ray tube*). Μέσα σε μία τέτοια πηγή εκπέμπονται ηλεκτρόνια από την κάθοδο και επιταχύνονται προς την άνοδο. Η επιτάχυνση αυτή οφείλεται στο ηλεκτρικό πεδίο που δημιουργείται από την υψηλή τάση, που εφαρμόζεται μεταξύ της ανόδου και της καθόδου της λυχνίας.

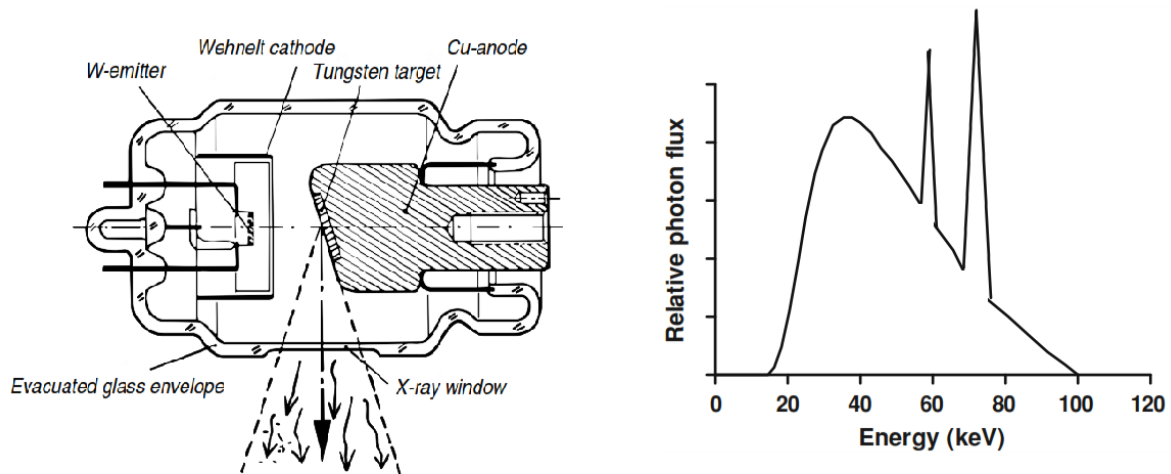
Τα ηλεκτρόνια, που έχουν επιταχυνθεί λόγω του ηλεκτρικού πεδίου, προσπίπτουν στην άνοδο και αλληλεπιδρούν με το υλικό της. Η ελαστική σκέδαση των ηλεκτρονίων αποτελεί κυρίαρχο φαινόμενο, όμως δεν επιφέρει καμία αλλαγή στην ενέργεια των πρωτογενών ηλεκτρονίων. Οι μη ελαστικές σκεδάσεις, που πραγματοποιούνται όμως σε μικρότερο ρυθμό, είναι εκείνες που επιφέρουν ελάττωση της κινητικής ενέργειας των ηλεκτρονίων και συνακόλουθη μεταφορά ενέργειας στα ηλεκτρόνια των ατόμων της ανόδου. Οι συγκρούσεις των πρωτογενών ηλεκτρονίων με τα ατομικά ηλεκτρόνια έχουν συχνά ως αποτέλεσμα τον ιονισμό του ατόμου και ως αποτέλεσμα την εκπομπή χαρακτηριστικής ακτινοβολίας, σύμφωνα με το μηχανισμό που αναλύθηκε στην παράγραφο 2.5.2. Η αλληλεπίδραση αυτή έχει ως συνέπεια τη δημιουργία των χαρακτηριστικών *αιχμών* (*peaks*) ή αλλιώς του *γραμμικού φάσματος* (*linear spectrum*) στο παραγόμενο φάσμα της μηχανής ακτίνων-Χ.

Σημαντική αλληλεπίδραση των πρωτογενών ηλεκτρονίων είναι και η επιβράδυνση τους λόγω των ισχυρών δυνάμεων Coulomb που δέχονται κατά τη διέλευσή τους κοντά από τους πυρήνες των ατόμων της ύλης, σύμφωνα με τη διαδικασία που περιγράφηκε στο κεφάλαιο 2.5.1. Η κινητική ενέργεια που χάνεται λόγω αυτής της επιβράδυνσης μετατρέπεται σε φωτόνια πέδησης. Αυτό το φαινόμενο έχει ως συνέπεια τη δημιουργία του *συνεχούς φάσματος* (*continuous spectrum*) των ακτίνων-Χ. Το συνεχές φάσμα των ακτίνων-Χ εκτείνεται μέχρι τη μέγιστη δυνατή ενέργεια, που αντιστοιχεί σε πλήρη ακινητοποίηση των πρωτογενών ηλεκτρονίων, δηλαδή σε ολική μετατροπή της κινητικής τους ενέργειας σε φωτόνιο ίσης ενέργειας μετά από τη σύγκρουση με έναν πυρήνα. Η πιθανότητα αυτής της αλληλεπίδρασης είναι μικρή, αλλά αυξάνεται όσο αυξάνεται η απόσταση ηλεκτρονίου-πυρήνα και συνεπώς αυξάνεται η πιθανότητα εκπομπής φωτονίων χαμηλότερης ενέργειας.

Η επαλληλία του γραμμικού και του συνεχούς φάσματος δίνει το φάσμα εξόδου μίας μηχανής ακτίνων-Χ. Η μορφή του φάσματος αυτού εξαρτάται από την υψηλή τάση της μηχανής, από την ένταση του ρεύματος που διατρέχει το ηλεκτρόδιο της καθόδου, καθώς και από το υλικό της ανόδου. Το φάσμα είναι ουσιαστικά το πλήθος των φωτονίων που παράγονται ως συνάρτηση της ενέργειας αυτών των φωτονίων. Παρουσιάζεται σε ένα διάγραμμα όπου ο κατακόρυφος άξονας εκφράζει την πυκνότητα εκπομπής ή, αλλιώς, *ένταση* (*intensity*) σε [φωτόνια/eV] και ο οριζόντιος εκφράζει την ενέργεια του φωτονίου σε [eV] ή [keV]<sup>3</sup>

<sup>3</sup> Το ηλεκτρονιοβόλτ (*electronvolt*) είναι μονάδα μέτρησης της ενέργειας. Ένα eV ισούται με  $1.6 \cdot 10^{-19} \text{ J}$ . Εξ ορισμού είναι ίσο με το ποσό της ενέργειας που αποκτά ένα ηλεκτρόνιο επιταχυνόμενο από ηλεκτρικό πεδίο μέτρου 1 V στο κενό.

Σε μία μηχανή ακτίνων-Χ τα ηλεκτρόνια που εκπέμπονται από την κάθοδο επιταχύνονται από το πεδίο που δημιουργείται λόγω της εφαρμοζόμενης υψηλής τάσης. Για παράδειγμα, μία υψηλή τάση 50 keV δίνει στα ηλεκτρόνια κινητική ενέργεια 50 keV που σημαίνει κατ' επέκταση ότι μπορούν να παραχθούν ακτίνες-Χ λόγω πέδησης ενέργειας 50 keV κατά μέγιστο. Στο σχήμα 2.18 (δεξιά), παρουσιάζεται ένα τυπικό φάσμα εξόδου μηχανής ακτίνων-Χ με άνοδο βολφραμίου για υψηλή τάση 100 kV. Η μέγιστη δυνατή ενέργεια των φωτονίων είναι 100 keV, αλλά χαμηλότερες ενέργειες είναι πιο πιθανές. Οι πολύ χαμηλές ενέργειες (κάτω από 20 keV) απορροφώνται από το υλικό της ανόδου και από το περίβλημα της μηχανής και δεν εμφανίζονται στο φάσμα. Διακρίνονται επίσης δύο κορυφές χαρακτηριστικών ακτίνων-Χ του βολφραμίου.



Σχήμα 2.18: Τυπική μορφή μηχανής ακτίνων-Χ (αριστερά) (Beckhoff et al., 2006) και φάσμα μηχανής ακτίνων-Χ με άνοδο από W και υψηλή τάση 100 keV (δεξιά).

### 2.9.2.1 Η λειτουργία της μηχανής ακτίνων-Χ

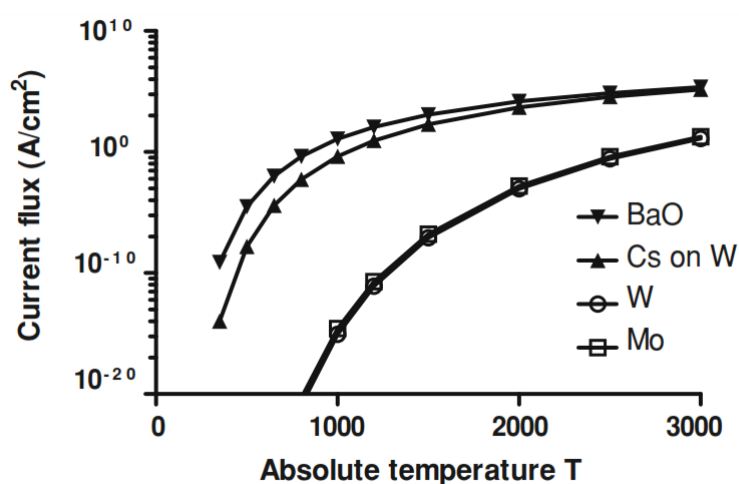
Οι σύγχρονες μηχανές ακτίνων-Χ περιέχουν μία άνοδο και μία κάθοδο τοποθετημένες μέσα σε θάλαμο υψηλού κενού. Για την επίτευξη του κενού ο θάλαμος της μηχανής είναι αεροστεγώς σφραγισμένος ή υπάρχει συνεχής άντληση αέρα από αυτόν. Η κάθοδος αποτελείται από ένα νήμα, το οποίο όταν θερμαίνεται εκπέμπει ελεύθερα ηλεκτρόνια. Τα ηλεκτρόνια αυτά επιταχύνονται και κατευθύνονται προς την άνοδο λόγω της διαφοράς δυναμικού. Φτάνοντας στην άνοδο αλληλεπιδρούν με το υλικό της και παράγονται οι επιθυμητές ακτίνες-Χ, οι οποίες εξέρχονται από τη μηχανή ακτίνων-Χ από ένα ειδικά διαμορφωμένο παράθυρο στο περίβλημα της μηχανής, που εξυπηρετεί τόσο τη διατήρηση του κενού, όσο και την απομόνωση της υψηλής τάσης.

### 2.9.2.2 Η κάθοδος

Η κάθοδος της μηχανής χρησιμεύει στην εκπομπή ελεύθερων ηλεκτρονίων από ένα ηλεκτρόδιο. Στην ουσία πρόκειται για ένα μεταλλικό νήμα που διαρρέεται από ρεύμα και θερμαίνεται, έτσι ώστε να επιτευχθεί το φαινόμενο της θερμιονικής εκπομπής (thermionic emission). Το φαινόμενο αυτό εξαρτάται σε μεγάλο βαθμό από τη θερμοκρασία και η ροή  $S$  των ηλεκτρονίων [ηλεκτρόνια ανά μονάδα επιφάνειας της καθόδου] και περιγράφεται από την εξίσωση του Richardson (Haidekker, 2015):

$$S = A_R T^2 \exp\left(-\frac{E_A}{kT}\right) \quad (2.22)$$

όπου  $A_R$  είναι η σταθερά του Richardson,  $E_A$  είναι το έργο εξαγωγής,  $k$  η σταθερά του Boltzmann και  $T$  η απόλυτη θερμοκρασία του υλικού. Τα  $A_R$  και  $E_A$  είναι σταθερές του υλικού της καθόδου. Για να επιτευχθεί αξιόλογη ροή ηλεκτρονίων, είναι επιθυμητές θερμοκρασίες της τάξης των 1800–2000 K. Ορισμένα υλικά κατασκευής καθόδων, όπως το οξείδιο του βαρίου και το βολφράμιο με επικάλυψη καισίου έχουν χαμηλότερο έργο εξαγωγής και για αυτό απαιτούν χαμηλότερες θερμοκρασίες για την επιδιωκόμενη ροή. Ο πίνακας 2.3 παρέχει τις τιμές του έργου εξαγωγής και της σταθεράς Richardson για ορισμένα υλικά, ενώ το σχήμα 2.19 παρουσιάζει την ένταση του ρεύματος ηλεκτρονίων ως συνάρτηση της θερμοκρασίας για τα ίδια υλικά.

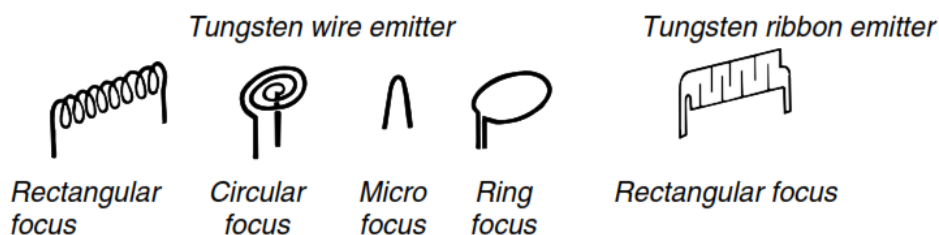


Σχήμα 2.19: Ένταση ρεύματος ηλεκτρονίων συναρτήσει της θερμοκρασίας για υλικά κατασκευής του ηλεκτροδίου της καθόδου (Haidekker, 2015)

Το ειδικά διαμορφωμένο ηλεκτρόδιο της καθόδου ονομάζεται ηλεκτρόδιο Wehnelt και επιτρέπει την εστίαση των ηλεκτρονίων σε ένα σημείο της ανόδου που ονομάζεται *σημείο εστίασης* (*focal spot*). Ανάλογα με το επιθυμητό σχήμα του σημείου εστίασης υπάρχουν νήματα με διάφορες μορφές που μπορεί να χρησιμοποιηθούν, όπως σπειροειδή, κυκλικά, ελικοειδή ή απλά ελάσματα. Συνήθως κατασκευάζονται από βολφράμιο (W) λόγω των καλών μηχανικών και θερμικών του ιδιοτήτων.

Πίνακας 2.3: Σταθερά Richardson και έργο εξαγωγής για υλικά κατασκευής του ηλεκτροδίου της καθόδου (Haidekker, 2015)

Υλικό καθόδου	$E_A$ (eV)	$A_A$ (A / cm <sup>2</sup> K <sup>2</sup> )
W	4.53	60
Mo	4.43	55
Cs on W	1.36	3.2
BaO	0.99	1.18



Σχήμα 2.20: Σχεδιασμός ηλεκτροδίου καθόδου μηχανής ακτίνων-Χ (Beckhoff et al., 2006)

### 2.9.2.3 Η άνοδος

Η άνοδος είναι συνήθως φτιαγμένη από χαλκό και περιέχει ένα μικρό στόχο από υλικό υψηλού  $Z$ . Ο χαλκός χρησιμοποιείται λόγω της υψηλής του θερμικής αγωγιμότητας, ενώ ο στόχος είναι συνήθως από βολφράμιο (W), μολυβδαίνιο (Mo) ή ρόδιο (Rh), υλικά που χαρακτηρίζονται από υψηλό σημείο τήξης. Η απαγωγή θερμότητας είναι σημαντική, καθώς μόνο ένα μικρό μέρος της κινητικής ενέργειας της δέσμης ηλεκτρονίων εκπέμπεται ως φωτόνια. Οι μηχανές ακτίνων-Χ έχουν πολύ μικρό βαθμό απόδοσης, που είναι προσεγγιστικά (Haidekker, 2015):

$$\eta = kUZ \quad (2.23)$$

όπου  $k=1.1 \cdot 10^{-9}$ ,  $U$  η υψηλή τάση και  $Z$  ο ατομικός αριθμός του στόχου της ανόδου. Τυπικά, περίπου το 1% της ενέργειας εκπέμπεται ως ακτίνες-Χ και το υπόλοιπο 99% μετατρέπεται σε θερμότητα. Για το λόγο αυτό μηχανές ακτίνων-Χ σχεδιασμένες για συνεχή λειτουργία χρησιμοποιούν *περιστρεφόμενες ανόδους (rotating anode)*. Η άνοδος σε αυτή την περίπτωση είναι ένας δακτύλιος που κινείται με τη βοήθεια ενός ηλεκτροκινητήρα. Η περιστρεφόμενη άνοδος παρουσιάζει πολύ μικρότερη τοπική θέρμανση σε σχέση με την ακίνητη άνοδο, καθώς το θερμικό φορτίο κατανέμεται σε μεγαλύτερη επιφάνεια. Η τεχνολογία της περιστρεφόμενης ανόδου σε συνδυασμό με επιπλέον ψύξη με υγρό ψυκτικό, όπως λάδι ή νερό, επιτρέπουν στη μηχανή να επιτύχει υψηλότερες τιμές ισχύος χωρίς κίνδυνο τήξης της ανόδου (Beckhoff et al., 2006).

### 2.9.2.4 Το κέλυφος

Οι συνιστώσες της μηχανής ακτίνων-Χ περικλείονται από ένα κέλυφος, το οποίο εξυπηρετεί δύο σκοπούς: τη διατήρηση του κενού και την ηλεκτρική μόνωση. Το πιο διαδεδομένο υλικό κατασκευής του κελύφους είναι το γυαλί και συγκεκριμένα τα βοριοπυριτικά γυαλιά (borosilicate glass). Παρά την υψηλή τους αντίσταση, την καλή διηλεκτρική αντοχή και την ικανότητα αντοχής σε θερμοκρασιακές αλλαγές, τα γυάλινα κελύφη επηρεάζονται από το πρόβλημα των μεταλλικών επικαθίσεων λόγω της εξάτμισης των υλικών της ανόδου και της καθόδου. Αυτό το φαινόμενο αντιμετωπίζεται αντικαθιστώντας το μεσαίο τμήμα του κελύφους από μεταλλικό υλικό, με σκοπό να δημιουργηθεί ένα ηλεκτρικό δυναμικό. Επίσης, διαδεδομένες είναι οι μηχανές που αποτελούνται από κέλυφος μεταλλικό και κεραμικό ταυτόχρονα. Αυτά τα κελύφη έχουν τα πλεονεκτήματα των μεταλλικών-γυάλινων κελυφών και, επιπρόσθετα, το κεραμικό υλικό εξασφαλίζει καλύτερη ηλεκτρική μόνωση της μηχανής. Ακόμα, τα κεραμικά υλικά είναι καλύτερα κατεργάσιμα σε σύγκριση με το γυαλί και μπορούν να υποστούν μηχανικές κατεργασίες κοπής, γεγονός που επιτρέπει μεγαλύτερη ελευθερία σχεδιασμού του θαλάμου κενού, αφού μπορούν να συνδεθούν πιο εύκολα με το μεταλλικό τμήμα του κελύφους και να συνδυαστούν σε πολύπλοκες γεωμετρίες (Beckhoff et al., 2006).

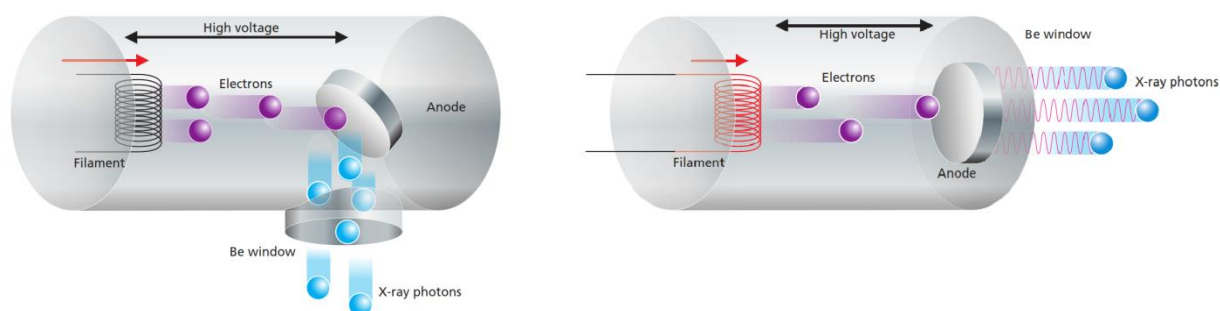


### 2.9.2.5 Το περίβλημα

Οι μηχανές ακτίνων-Χ περικλείονται από ένα περίβλημα που εξασφαλίζει την ασφαλή τους λειτουργία. Το περίβλημα της μηχανής ακτίνων-Χ εξυπηρετεί τη μόνωση της υψηλής τάσης στη μηχανή, χρησιμεύει στην ψύξη της μηχανής, αποτρέπει την κατάρρευση της μηχανής από την επίδραση του υψηλού κενού στο εσωτερικό της και κυρίως προστατεύει από τη διαρροή ακτινοβολίας (Beckhoff *et al.*, 2006).

### 2.9.2.6 Το παράθυρο

Ένα τμήμα του κελύφους της μηχανής ακτίνων-Χ κατασκευάζεται από υλικό τέτοιο, ώστε να επιτρέπει την απρόσκοπτη εκπομπή των ακτίνων-Χ προς την επιθυμητή διεύθυνση, με την ελάχιστη δυνατή απορρόφηση, διατηρώντας παράλληλα την ηλεκτρική μόνωση και τη διατήρηση του κενού. Το παράθυρο αυτό, στις εφαρμογές φασματοσκοπίας XRF, κατασκευάζεται κατά κανόνα από βηρύλλιο, λόγω του χαμηλού ατομικού αριθμού ( $Z=4$ ) και της συνακόλουθα χαμηλής απορρόφησης της ακτινοβολίας-Χ. Ελαχιστοποίηση της απόστασης μεταξύ της ανόδου της μηχανής και του παραθύρου οδηγεί σε μεγιστοποίηση της έντασης της παραγόμενης ακτινοβολίας. Όμως αυτό μπορεί να επιτευχθεί μέχρι ένα σημείο, καθώς πολύ μικρή απόσταση θα είχε ως συνέπεια τη σύγκρουση σκεδαζόμενων ηλεκτρονίων από την άνοδο με το παράθυρο με αποτέλεσμα τη θέρμανση του. Η γωνία μεταξύ της επιφάνειας του στόχου και της κάθετης στο παράθυρο επιφάνειας (γωνία ανόδου) είναι συνήθως  $15-20^\circ$  και η γωνία του κώνου της παραγόμενης δέσμης ακτίνων-Χ μπορεί να φτάσει τις  $30-40^\circ$ . Το παράθυρο μπορεί να είναι τοποθετημένο με τους τρόπους που φαίνονται στο σχήμα 2.21. (Beckhoff *et al.*, 2006)



Σχήμα 2.21: Γεωμετρία side-window (αριστερά) και end-window (δεξιά) (Brouwer, 2003)

### 2.9.2.7 Η ρύθμιση του παραγόμενου φάσματος

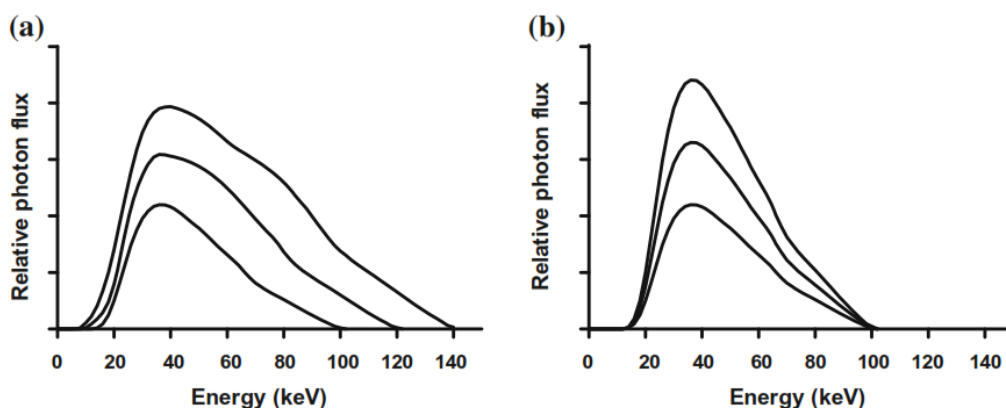
Σε μία μηχανή ακτίνων-Χ υπάρχουν δύο δυνατότητες ρύθμισης της εκπεμπόμενης ακτινοβολίας:

**Η υψηλή τάση:** Αυξάνοντας την τάση μεταξύ της ανόδου και της καθόδου, επιτυγχάνεται αύξηση της μέγιστης δυνατής ενέργειας των φωτονίων, αλλά και αύξηση των συνολικών φωτονίων που εκπέμπονται. Μία εμπειρική σχέση μεταξύ της υψηλής τάσης και του πλήθους των φωτονίων που εξέρχονται από τη μηχανή είναι (Haidekker, 2015):

$$N = k \cdot Z \cdot U^m \quad (2.24)$$

όπου  $k$  είναι μία σταθερά αναλογίας που εξαρτάται από τη μηχανή,  $Z$  ο ατομικός αριθμός του υλικού του στόχου και  $m$  μία σταθερά που εξαρτάται από το υλικό, συνήθως περίπου ίση με 2.

**Το ρεύμα της μηχανής:** Μεταβάλλοντας το ρεύμα που διαρρέει το νήμα της καθόδου, επηρεάζεται ταυτόχρονα και η θερμοκρασία της καθόδου και έτσι μπορεί να ελεγχθεί η εκπομπή ηλεκτρονίων. Παρότι η αύξηση του ρεύματος ηλεκτρονίων μεταξύ ανόδου-καθόδου οδηγεί σε ανάλογη αύξηση της ροής ακτίνων-Χ, δεν επιδρά στο εύρος της ενέργειας των παραγόμενων φωτονίων. Στο σχήμα 2.22, παρουσιάζονται ποιοτικά οι μεταβολές στη σχετική ροή φωτονίων στο συνεχές φάσμα που εκπέμπεται από μία μηχανή ακτίνων-Χ (οι χαρακτηριστικές του στόχου έχουν παραλειφθεί), (a) όταν μεταβάλλεται η υψηλή τάση της μηχανής (από 100 σε 120 και 140 keV) και (b) όταν μεταβάλλεται το ρεύμα που διαρρέει την κάθοδο (αύξηση κατά 20 και 50%).



Σχήμα 2.22: Ποιοτική αναπαράσταση επίδρασης στο παραγόμενο φάσμα μεταβολής (a) της υψηλής τάσης και (b) του ρεύματος μηχανής ακτίνων-Χ (παραλείπονται οι χαρακτηριστικές ακτίνες-Χ του υλικού της ανόδου) (Haidekker, 2015)

### 2.9.3 Οι ραδιενεργές πηγές

Η διέγερση του δείγματος στην τεχνική του φθορισμού ακτίνων-Χ μπορεί να γίνει και με χρήση ραδιοϊσοτόπων. Τα ισότοπα που χρησιμοποιούνται κατά κανόνα παράγουν γ-ακτινοβολία. Υπάρχει όμως και η περίπτωση χρήσης ισωτόπων που αποδιεγείρονται εκπέμποντας χαρακτηριστικές ακτίνες-Χ, σύμφωνα με το μηχανισμό της σύλληψης ηλεκτρονίου, όπως περιγράφηκε στην ενότητα 2.5.2.

Η ανεξαρτησία των ραδιενεργών διασπάσεων από εξωτερικούς παράγοντες και κυρίως η μη απαίτηση παροχής ηλεκτρικού ρεύματος είναι τα χαρακτηριστικά που έχουν οδηγήσει στη χρήση ραδιοϊσοτόπων σε εφαρμογές XRF κατά καιρούς. Άλλα πλεονεκτήματα αυτής της μεθόδου διέγερσης είναι οι μικρές διαστάσεις των πηγών και το σχετικά μικρό κόστος κτήσης τους. Όμως, παρουσιάζουν και ορισμένα μειονεκτήματα σε σχέση με τις μηχανές ακτίνων-Χ, όπως η ανάγκη για συνεχή θωράκιση και ασφαλή φύλαξη, η περιορισμένη ένταση της ακτινοβολίας και ο χρόνος υποδιπλασιασμού της πηγής.

Η ενέργεια των φωτονίων-γ ή -Χ που εκπέμπονται από ραδιενεργές πηγές για εφαρμογές XRF είναι πάντα γραμμική. Σε περιπτώσεις που χρησιμοποιούνται β-ραδιενεργές πηγές, όμως, μπορεί σε συνδυασμό με ένα στόχο να υπάρξει παραγωγή ακτινοβολίας πέδησης λόγω της αλληλεπίδρασης των σωματιδίων β με το υλικό του στόχου και κατ' επέκταση παραγωγή συνεχούς φάσματος διεγείρουσας ακτινοβολίας.

Η επιλογή της πηγής ακτινοβολίας για τα διάφορα στοιχεία που επιδιώκεται να ανιχνευθούν με την τεχνική XRF εξαρτάται από την ενέργεια της παραγόμενης ακτινοβολίας. Τα άτομα μπορούν να

διεγερθούν από φωτόνια που έχουν ενέργειες υψηλότερες από την ενέργεια σύνδεσης των ηλεκτρονίων στην κάθε στιβάδα. Από την άλλη πλευρά, η διεγείρουσα ενέργεια δε θα πρέπει να είναι υπερβολικά υψηλότερη, καθώς τότε μειώνεται η πιθανότητα του φωτοηλεκτρικού φαινομένου. Για κάθε πηγή υπάρχει ένα σύνολο στοιχείων τα οποία διεγείρει με βέλτιστο τρόπο. Ως παράδειγμα, ο πίνακας 2.4 παρουσιάζει δύο ισότοπα που χρησιμοποιούνται ως πηγές για εφαρμογές XRF, τη μέθοδο διάσπασής τους, τα εκπεμπόμενα φωτόνια και τα στοιχεία που μπορούν να διεγείρουν. Στα πλαίσια της παρούσας ΔΕ δεν γίνεται χρήση ραδιενεργών πηγών για τη διεγερση των δειγμάτων και για το λόγο αυτό δε θα υπάρξει περαιτέρω ανάλυση αυτής της μεθόδου.

Πίνακας 2.4: Ραδιοϊσότοπα ως πηγές φωτονίων-γ και -X (Beckhoff et al., 2006)

Πηγή	Χρόνος ημιζωής	Είδος διάσπασης	Ενέργεια σωματιδίου	Ακτίνες-γ		Χαρακτηριστικές ακτίνες-X		Εύρος στοιχείων	
				E (keV)	Yield (%)	E (keV)	Yield (%)	K	L
<sup>57</sup> Co	271.8 d	EC	-	14.41	9.16	Fe K <sub>α2</sub>	6.39	16.4	Yb-U
				122.06	85.60	Fe K <sub>α1</sub>	6.40	32.6	
				136.47	10.68	Fe K <sub>β3</sub>	7.06	2.0	
						Fe K <sub>α1</sub>	7.06	3.9	
<sup>241</sup> Am	432.2 γ	α	5.485 MeV	26.34	2.40	Np L <sub>α2</sub>	13.76	1.1	Zn-Nd W-U
			5.422 MeV	33.20	0.13	Np L <sub>α1</sub>	13.95	9.6	
			5.388 MeV	59.51	35.90	Np L <sub>β2</sub>	16.82	2.5	
						Np L <sub>β1</sub>	17.75	5.7	
						Np L <sub>β3</sub>	17.99	1.4	
						Np L <sub>γ1</sub>	20.78	1.4	

## 2.9.4 Η ακτινοβολία του συγχρότρου

Όταν ηλεκτρόνια ή άλλα φορτισμένα σωματίδια, που κινούνται με σχετικιστικές ταχύτητες, υποχρεώνονται να διαγράψουν καμπύλη τροχιά υπό την επίδραση μαγνητικών πεδίων, εκπέμπουν ηλεκτρομαγνητική ακτινοβολία κατά τη διεύθυνση της κίνησής τους, η οποία είναι γνωστή ως ακτινοβολία συγχρότρου (*synchrotron radiation – SR*). Τα βασικά χαρακτηριστικά της ακτινοβολίας συγχρότρου είναι: (Mobilio, Boscherini and Meneghini, 2015)

- μεγάλη ένταση (intensity)
- υψηλή «φωτεινότητα» (brilliance<sup>4</sup>) της πηγής, λόγω της μικρής διατομής δέσμης ηλεκτρονίων και του υψηλού βαθμού εστίασης της ακτινοβολίας
- ευρύ και συνεχές φάσμα ενεργειών
- φυσική εστίαση (angular collimation)
- υψηλός βαθμός πόλωσης
- παλμική εκπομπή

<sup>4</sup>Ορίζεται  $brilliance = \frac{photons}{sec \cdot mrad^2 \cdot mm^2 \cdot 0.1\%BW}$ . Όσο υψηλότερο είναι το μέγεθος αυτό, τόσο περισσότερα φωτόνια συγκεκριμένης ενέργειας και κατεύθυνσης συγκεντρώνονται σε ένα σημείο στη μονάδα του χρόνου.

- υψηλή σταθερότητα

Από την ανακάλυψή της το 1947, έχει αποτελέσει αντικείμενο μελέτης πολλών επιστημόνων, λόγω των σημαντικών εφαρμογών της, ενώ από τη δεκαετία του '70 υπάρχουν εγκαταστάσεις αφιερωμένες εξολοκλήρου στην ακτινοβολία συγχρότρου. Μία από τις εφαρμογές της είναι η τεχνική XRF, η οποία ονομάζεται *SR-XRF (Synchrotron Radiation X-Ray Fluorescence)*. Είναι ιδανική μορφή ακτινοβολίας για εφαρμογές XRF και ακόμα περισσότερο για  $\mu$ XRF (micro-XRF), λόγω της υψηλής φωτεινότητας και μικρής διατομής της παραγόμενης δέσμης. Η τεχνική αυτή δίνει λύση σε προβλήματα ετερογένειας, που είναι πολύ έντονα σε in-situ αναλύσεις περιβαλλοντικών δειγμάτων, καθώς μπορεί να προσφέρει χωρική ανάλυση της τάξης μερικών  $\mu\text{m}$ . (Mobilio, Boscherini and Meneghini, 2015).

Ίσως το πιο σημαντικό χαρακτηριστικό που καθιστά την ακτινοβολία συγχρότρου εξαιρετικά χρήσιμη είναι η φυσική της πόλωση. Λόγω του τρόπου παραγωγής της είναι σε μεγάλο βαθμό γραμμικά πολωμένη, κάτι που μπορεί να οδηγήσει σε σημαντική μείωση του συνεχούς υποστρώματος (background – BG), σύμφωνα με το μηχανισμό που περιγράφεται στην ενότητα 2.9.6.4. Η μείωση του υποστρώματος οδηγεί σε μείωση του κατώτατου ορίου ανίχνευσης και του χρόνου ανάλυσης του δείγματος (Ari Ide-Ektessabi, 2007). Σήμερα η ακτινοβολία συγχρότρου χρησιμοποιείται σε εφαρμογές XRF, είτε ως φάσμα είτε σε συνδυασμό με μονοχρωματικούς κρυστάλλους, όπως οι κρύσταλλοι Bragg, (βλ. ενότητα 2.9.1), σε γεωλογικές εφαρμογές (Liu *et al.*, 2016), στην τέχνη (Dik *et al.*, 2008), στη βιολογία (Ari Ide-Ektessabi, 2007) και την αρχαιολογία (Lanzirotti *et al.*, 2014).

## 2.9.5 Η ανίχνευση της ακτινοβολίας

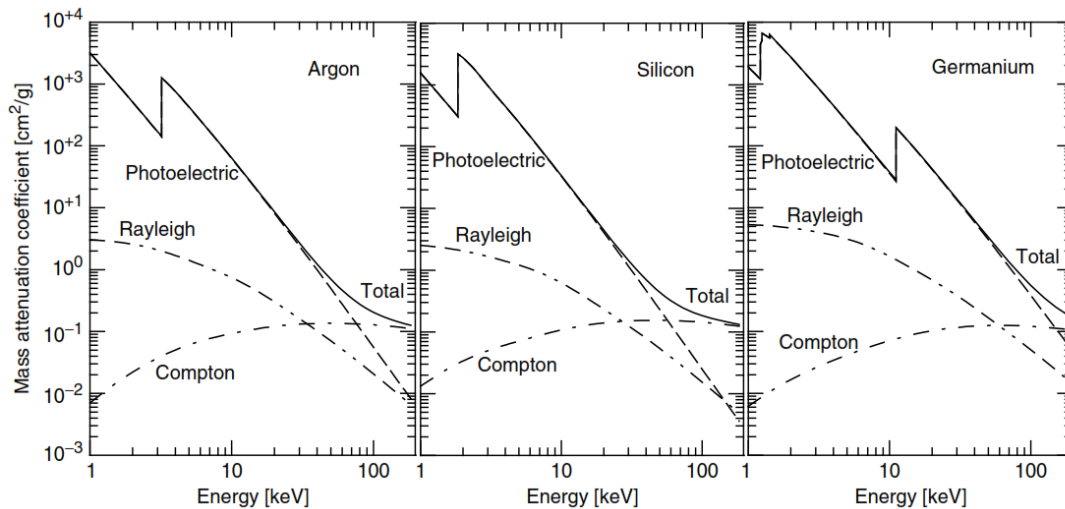
Ένας ανιχνευτής ακτινοβολίας-X χρησιμοποιείται για την μετατροπή της ενέργειας, η οποία απελευθερώνεται από ένα φωτόνιο στο υλικό του ανιχνευτή, σε ένα ηλεκτρικό σήμα. Η ανάγνωση και η επεξεργασία του σήματος αυτού με χρήση μίας σειράς ηλεκτρονικών χρησιμοποιείται για τη μέτρηση της ενέργειας που απελευθερώθηκε από το φωτόνιο και τη στιγμή που συνέβη αυτό το γεγονός.

### 2.9.5.1 Βασικές ιδιότητες ανιχνευτών

Η αλληλεπίδραση των ακτίνων-X στον ανιχνευτή κυρίως καθορίζεται από το φωτοηλεκτρικό φαινόμενο και τις σκεδάσεις Compton και Rayleigh. Για τα περισσότερα υλικά ανιχνευτών, το φωτοηλεκτρικό φαινόμενο κυριαρχεί για ενέργειες φωτονίων έως 100keV. Ο συντελεστής φωτοηλεκτρικής απορρόφησης μπορεί να προσεγγιστεί ως  $const \cdot Z^n / E^{3.5}$ , ( $n \cong 4 - 5$ ). Αυτή η σχέση εξηγεί την υψηλή απόδοση των ανιχνευτών υψηλού ατομικού αριθμού<sup>5</sup>. Η σκέδαση Compton παίζει σημαντικό ρόλο στην απορρόφηση ακτινοβολίας σε υψηλές ενέργειες (> 100 keV) και αυξάνει γραμμικά με το Z. Η πιθανότητα της σκέδασης Rayleigh δεν υπερβαίνει συνήθως το 10–20% της ολικής πιθανότητας απορρόφησης και είναι υψηλότερη από την πιθανότητα της σκέδασης Compton για ενέργειες μέχρι 20–50 keV, ανάλογα με τον ατομικό αριθμό. Στο σχήμα 2.23 δίνεται η

<sup>5</sup> Οι ανιχνευτές Ge, λόγω του μεγαλύτερου ατομικού τους αριθμού ( $Z=32$ ), χρησιμοποιούνται σε ευρύτερη ενεργειακή περιοχή από τους ανιχνευτές Si ( $Z=14$ ), οι οποίοι ενδείκνυνται για ανίχνευση φωτονίων χαμηλών ενεργειών (Low Energy Photon Spectrometry, LEPS), όπως είναι η πλειονότητα των ακτίνων-X.

σχετική συνεισφορά των τριών φαινομένων απορρόφησης με τη μορφή των μαζικών συντελεστών απορρόφησης συναρτήσει της ενέργειας φωτονίων, για τρία τυπικά υλικά ανιχνευτών: Ar, Si, Ge.



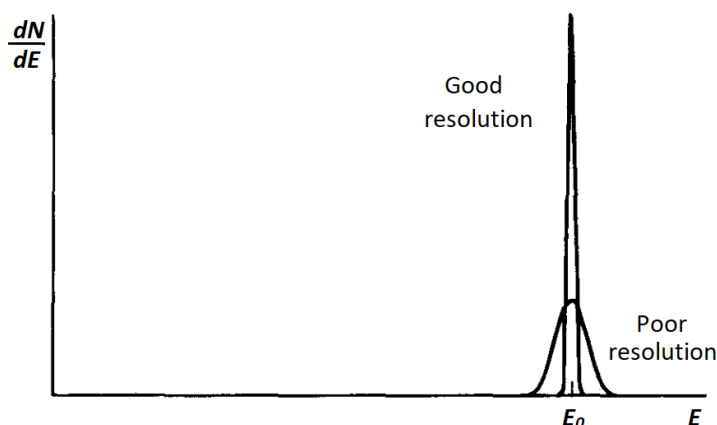
Σχήμα 2.23: Μερικοί και ολικοί μαζικοί συντελεστές εξασθένισης για Ar, Si, Ge (Beckhoff et al., 2006)

### 2.9.5.2 Διακριτική ικανότητα (resolution)

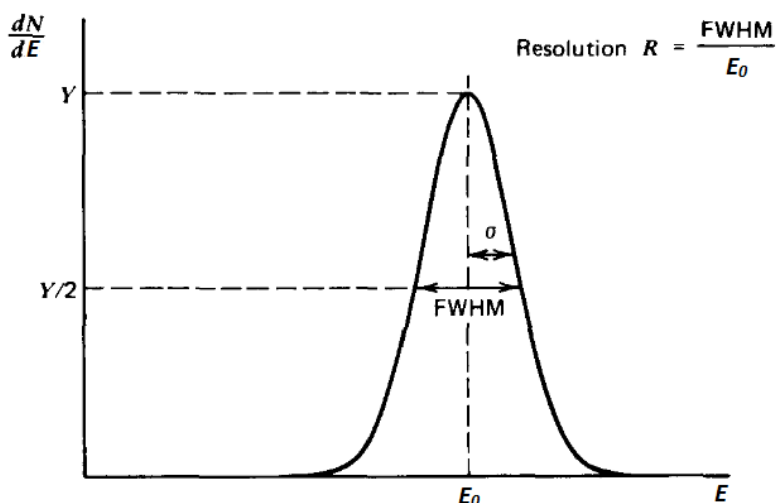
Στις εφαρμογές της φασματοσκοπίας των ακτίνων-Χ, ο σκοπός των ανιχνευτών ακτινοβολίας είναι ο προσδιορισμός της ενεργειακής κατανομής της προσπίπτουσας ακτινοβολίας. Μία σημαντική ιδιότητα ενός ανιχνευτή σε εφαρμογές φασματοσκοπίας μπορεί να εξεταστεί παρατηρώντας την απόκριση του σε μία μονοενεργειακή διέγερση. Στο σχήμα 2.24, φαίνεται η κατανομή ύψους παλμού που θα μπορούσε να ληφθεί από ένα ανιχνευτή με μονοενεργειακή διέγερση. Η κατανομή αυτή ονομάζεται συνάρτηση απόκρισης του ανιχνευτή για την ενέργεια που χρησιμοποιήθηκε. Η καμπύλη με το μεγαλύτερο ύψος απεικονίζει μία πιθανή συνάρτηση απόκρισης σε δέσμη φωτονίων με ενέργεια  $E_0$ . Η δεύτερη καμπύλη απεικονίζει την απόκριση ενός ανιχνευτή χειρότερης διακριτικής ικανότητας. Το εμβαδόν κάτω από τις δύο καμπύλες είναι ίσο και στις δύο περιπτώσεις, με την προϋπόθεση ότι ο αριθμός των μετρούμενων παλμών είναι ο ίδιος. Παρότι και οι δύο κατανομές έχουν την ίδια μέση τιμή  $E_0$ , το εύρος κατανομής για τον ανιχνευτή με τη χειρότερη διακριτική ικανότητα είναι μεγαλύτερο. Αυτό το εύρος αντικατοπτρίζει το βαθμό της κύμανσης που καταγράφηκε από παλμό σε παλμό, παρότι αποτέθηκε το ίδιο ποσό ενέργειας στον ανιχνευτή. Αν αυτή η κύμανση ελαττωθεί, τότε και το πλάτος της αντίστοιχης κατανομής θα ελαττωθεί και θα πάρει τη μορφή μίας οξείας ακμής ή μίας μαθηματικής συνάρτησης δέλτα. Η ικανότητα ενός ανιχνευτή να εκτιμά με ακρίβεια την προσπίπτουσα ακτινοβολία προφανώς βελτιώνεται καθώς η συνάρτηση απόκρισης αποκτά όλο και μικρότερο πλάτος.

Ένας ορισμός της διακριτικής ικανότητας (energy resolution) του ανιχνευτή δίνεται με τη βοήθεια της καμπύλης στο σχήμα 2.25. Παρουσιάζεται η κατανομή ύψους παλμού για έναν υποθετικό ανιχνευτή, υπό την προϋπόθεση ότι καταγράφεται μονοενεργειακή δέσμη φωτονίων. Η διακριτική ικανότητα (energy resolution) συνήθως εκφράζεται ως το εύρος ημίσειας ύψους της κατανομής (Full-Width-at-Half-Maximum, *FWHM*). Ο ορισμός αυτός υποθέτει ως αμελητέα οποιοδήποτε συνεχές υπόστρωμα (*background, BG*) ή συνεχή ακτινοβολία πάνω στα οποία η κορυφή έχει υπερτεθεί. Η διακριτική ικανότητα  $R$  του ανιχνευτή εκφράζεται συχνά και ως το *FWHM* δια τη θέση της κορυφής  $E_0$ , άρα είναι ένα αδιάστατο κλάσμα που συμβατικά εκφράζεται ως ποσοστό. Πρέπει να καταστεί σαφές ότι όσο μικρότερο είναι το  $R$ , τόσο καλύτερη είναι η ικανότητα

ενός ανιχνευτή να διακρίνει μεταξύ δύο παραπλήσιων ενεργειών. Ένας εμπειρικός κανόνας είναι ότι δύο ενέργειες μπορούν να διακριθούν αν και οριακά, όταν απέχουν κατ' ελάχιστο ένα  $FWHM$ .



Σχήμα 2.24: Κατανομή ύψους παλμού για ανιχνευτή με καλή (good) και κακή (poor) διακριτική ικανότητα (Knoll, 2000)



Σχήμα 2.25: Κατανομή ύψους παλμού και εύρος ημίσειας ύψους (Knoll, 2000)

Υπάρχει ένα πλήθος πιθανών πηγών κύμανσης στην απόκριση ενός ανιχνευτή που οδηγούν σε χειρότερη διακριτική ικανότητα. Αυτές περιλαμβάνουν οποιαδήποτε μεταβολή στα χαρακτηριστικά του ανιχνευτή κατά τη διάρκεια της μέτρησης, πηγές θορύβου στα όργανα μέτρησης και στατιστικός θόρυβος που προκύπτει από τη διακριτή φύση του ίδιου του μετρούμενου σήματος. Η τρίτη πηγή είναι κατά μία έννοια η πιο σημαντική, καθώς αντιπροσωπεύει ένα ελάχιστο της κύμανσης που θα είναι πάντα παρόν στο σήμα του ανιχνευτή, όσο και να βελτιωθεί το υπόλοιπο σύστημα. Στις περισσότερες εφαρμογές, ο στατιστικός θόρυβος είναι η κύρια πηγή κύμανσης στο σήμα και θέτει ένα σημαντικό όριο στη διακριτική ικανότητα του ανιχνευτή. Ο στατιστικός θόρυβος προκύπτει από το γεγονός ότι ένα φορτίο  $Q$  που παράγεται μέσα στον ανιχνευτή από ένα κβάντο (quantum) ακτινοβολίας δεν είναι μία συνεχής μεταβλητή, αλλά αναπαριστά ένα διακριτό πλήθος φορτίων. Για παράδειγμα, σε ένα θάλαμο ιονισμού τα φορτία είναι τα ζεύγη ιόντων που παράγονται από την κίνηση του φορτισμένου σωματιδίου μέσα στο θάλαμο, ενώ σε έναν ανιχνευτή σπινθηρισμού είναι τα ηλεκτρόνια που συλλέγονται στην κάθοδο του φωτοπολλαπλασιαστή. Σε κάθε περίπτωση, το πλήθος των φορτίων είναι κβαντισμένο και υπόκειται σε τυχαία κύμανση από

γεγονός σε γεγονός, ακόμη και αν ακριβώς το ίδιο ποσό ενέργειας αποτίθεται στον ανιχνευτή. Μπορεί να γίνει μία εκτίμηση του μεγέθους της εγγενούς κύμανσης υποθέτοντας ότι η διαμόρφωση κάθε φορτίου είναι μια διαδικασία Poisson. Υπό αυτή την προϋπόθεση, αν ένα συνολικό πλήθος φορτίων  $N$  παράγεται κατά μέσο όρο, τότε μία τυπική απόκλιση ίση με  $\sqrt{N}$  θα χαρακτηρίζει τις εγγενείς στατιστικές κυμάνσεις. Αν αυτή αποτελεί τη μοναδική πηγή αβεβαιότητας στο σήμα, η συνάρτηση απόκρισης θα είναι μία κατανομή Gauss, αφού το πλήθος  $N$  είναι τυπικά ένας μεγάλος αριθμός. Σε αυτή την περίπτωση, η εξίσωση Gauss μίας τέτοιας κατανομής είναι (Knoll, 2000):

$$G(E) = \frac{A}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{(E - E_0)^2}{2\sigma^2}\right) \quad (2.25)$$

Οι παράμετροι  $E_0$  και  $A$  αποτελούν το κεντροειδές και την επιφάνεια της κατανομής, αντίστοιχα. Η παράμετρος πλάτους συσχετίζεται με το FWHM οποιασδήποτε κατανομής Gauss μέσω της σχέσης (Knoll, 2000):

$$FWHM = 2.35\sigma \quad (2.26)$$

Η απόκριση πολλών ανιχνευτών είναι κατά προσέγγιση γραμμική, οπότε το μέσο πλάτος παλμού είναι  $E_0 = K \cdot N$ , όπου  $K$  σταθερά αναλογίας. Η τυπική απόκλιση  $\sigma$  της κατανομής είναι τότε  $\sigma = K\sqrt{N}$ . Έτσι μπορούμε να υπολογίσουμε μία οριακή διακριτική ικανότητα που οφείλεται μόνο σε στατιστικό θόρυβο (Knoll, 2000):

$$R|_{Poisson \text{ limit}} = \frac{FWHM}{E_0} = \frac{2.35K\sqrt{N}}{KN} = \frac{2.35}{\sqrt{N}} \quad (2.27)$$

Αυτή η οριακή τιμή του  $R$  εξαρτάται μόνο από το πλήθος των φορτίων και βελτιώνεται καθώς το πλήθος των μετρούμενων φορτίων αυξάνεται. Ένας ιδανικός ανιχνευτής θα είχε όσο το δυνατό περισσότερα παραγόμενα φορτία ανά γεγονός (προσπίπτον φωτόνιο ή σωματίδιο), έτσι ώστε να επιτευχθεί η μικρότερη δυνατή στατιστική κύμανση. Η μεγάλη διάδοση και χρήση των ημιαγωγών ανιχνευτών οφείλεται σε μεγάλο βαθμό στο γεγονός ότι σε αυτούς τους ανιχνευτές δημιουργείται ένα πολύ μεγάλο πλήθος φορτίων ανά μονάδα αποτιθέμενης ενέργειας της προσπίπτουσας ακτινοβολίας.

Μελέτες της διακριτικής ικανότητας ανιχνευτών ακτινοβολίας έχουν δείξει ότι μπορούν να επιτευχθούν τιμές του  $R$  που είναι χαμηλότερες κατά 3 ή 4 φορές σε σχέση με το θεωρητικό ελάχιστο που παρουσιάστηκε πιο πάνω. Αυτά τα αποτελέσματα δείχνουν ότι οι διεργασίες που οδηγούν στην παραγωγή του κάθε φορτίου δεν είναι ανεξάρτητες και άρα το συνολικό πλήθος των παραγόμενων φορτίων δεν μπορεί να περιγραφεί από απλή στατιστική Poisson. Ο παράγοντας του Fano έχει εισαχθεί σε μία προσπάθεια να ποσοτικοποιηθεί η απόκλιση των παρατηρούμενων στατιστικών διακυμάνσεων στο πλήθος των φορτίων, σε σχέση με την καθαρή στατιστική Poisson και ορίζεται ως (Knoll, 2000):

$$F = \frac{\text{παρατηρούμενη διακύμανση του } N}{\text{προβλεπόμενη διακύμανση Poisson (= } N)} \quad (2.28)$$

Επειδή η διακύμανση δίνεται από το  $\sigma^2$ , η ισοδύναμη έκφραση της (2.27) είναι (Knoll, 2000):

$$R|_{\text{Statistical limit}} = \frac{2.35K\sqrt{N}\sqrt{F}}{KN} = 2.35 \sqrt{\frac{F}{N}} \quad (2.29)$$

Παρότι ο παράγοντας  $F$  είναι πολύ μικρότερος της μονάδας για τους ημιαγωγούς και τους αναλογικούς ανιχνευτές, άλλοι τύποι ανιχνευτών όπως οι σπινθηρισμού παρουσιάζουν οριακή διακριτική ικανότητα σε συμφωνία με τη στατιστική Poisson και ο παράγοντας σε αυτές τις περιπτώσεις είναι ίσος με τη μονάδα.

Οποιαδήποτε άλλη πηγή κύμανσης στο σήμα του ανιχνευτή συνδυάζεται με την εγγενή στατιστική κύμανση από τον ανιχνευτή για να δώσει τη συνολική διακριτική ικανότητα του μετρητικού συστήματος. Μερικές φορές είναι δυνατό να μετρηθεί η συνεισφορά της κάθε συνιστώσας στο συνολικό FWHM. Για παράδειγμα, αν ο ανιχνευτής αντικατασταθεί με μία γεννήτρια σταθερών παλμών, η μετρούμενη απόκριση του υπόλοιπου συστήματος θα παρουσιάζει κύμανση κυρίως λόγω ηλεκτρονικού θορύβου. Αν υπάρχουν πολλές πηγές κύμανσης και καθεμία είναι συμμετρική και ανεξάρτητη από τις άλλες, η στατιστική προβλέπει ότι η συνολική συνάρτηση απόκρισης θα τείνει πάντα προς την κατανομή Gauss, ακόμα και αν οι μεμονωμένες πηγές χαρακτηρίζονται από κατανομές άλλης μορφής. Ως εκ τούτου η σχέση (2.25) της κατανομής Gauss αντιπροσωπεύει τη συνάρτηση απόκρισης των συστημάτων ανιχνευτών στα οποία πολλοί διαφορετικοί παράγοντες μπορεί να συνεισφέρουν στην ολική διακριτική ικανότητα. Τότε το ολικό FWHM θα είναι το άθροισμα τετραγώνων των επιμέρους FWHM των συνιστωσών του συστήματος (Knoll, 2000):

$$(FWHM)_{\text{overall}}^2 = (FWHM)_{\text{statistical}}^2 + (FWHM)_{\text{noise}}^2 + (FWHM)_{\text{drift}}^2 + \dots \quad (2.30)$$

Σε κάθε περίπτωση, η διακριτική ικανότητα του συστήματος ανίχνευσης θα πρέπει να επιτρέπει την ικανοποιητική αναγνώριση των χαρακτηριστικών γραμμών στο φάσμα. Αυτό είναι απαραίτητο, για παράδειγμα, στον ποιοτικό/ποσοτικό προσδιορισμό των στοιχείων που περιέχονται σε ένα δείγμα με τη χρήση της μεθόδου ανάλυσης XRF.

### 2.9.5.3 Η απόδοση του ανιχνευτή

Όλοι οι ανιχνευτές ακτινοβολίας καταρχήν παράγουν έναν παλμό εξόδου, ένα σήμα, για κάθε κβάντο ακτινοβολίας που αλληλεπιδρά στον ενεργό τους όγκο. Για ακτινοβολία φορτισμένων σωματιδίων, η αλληλεπίδραση με τη μορφή του ιονισμού ή της διέγερσης συμβαίνει σχεδόν άμεσα, με την είσοδο του σωματιδίου στον ενεργό όγκο. Ήδη αφού θα έχει κινηθεί κατά ένα μικρό κλάσμα της εμβέλειάς του, ένα σωματίδιο συνήθως θα έχει δημιουργήσει αρκετά ζεύγη ιόντων διασφαλίζοντας ότι ο παραγόμενος παλμός θα είναι αρκετά μεγάλος για να καταγραφεί. Έτσι, είναι συνήθως εύκολο να οργανωθεί μία διάταξη στην οποία ο ανιχνευτής θα καταγράφει κάθε σωματίδιο  $\alpha$  ή  $\beta$  που εισέρχεται στον ενεργό του όγκο. Υπό αυτές τις προϋποθέσεις, ο ανιχνευτής λέγεται πως έχει απόδοση μέτρησης (*counting efficiency*) ή απόδοση ανίχνευσης (*detection efficiency*) 100%.

Από την άλλη πλευρά, οι ακτινοβολίες που δε μεταφέρουν φορτίο, όπως είναι τα φωτόνια, πρέπει να υποβληθούν σε άλλου είδους αλληλεπιδράσεις στον ανιχνευτή πριν η ανίχνευσή τους καταστεί δυνατή. Επειδή αυτές οι μορφές ακτινοβολίας μπορούν να διανύσουν μεγάλη απόσταση μεταξύ δύο διαδοχικών αλληλεπιδράσεων, οι ανιχνευτές είναι συχνά λιγότερο αποδοτικοί. Είναι αναγκαίο να υπάρχει μία όσο γίνεται καλύτερη εκτίμηση για την απόδοση του ανιχνευτή, ώστε να



συσχετιστούν το πλήθος των παλμών που μετράται με το πλήθος των φωτονίων που προσπίπτουν σε αυτόν.

Μία σειρά από ορισμούς της απόδοσης απαντώνται στη βιβλιογραφία. Δύο τέτοιοι ορισμοί είναι: η απόλυτη απόδοση (*absolute*) και η εσωτερική απόδοση (*intrinsic*). Η απόλυτη απόδοση ορίζεται ως (Knoll, 2000):

$$\eta_{abs} = \frac{\text{πλήθος καταγραφόμενων γεγονότων}}{\text{πλήθος επεμπόμενων από την πηγή φωτονίων}} \quad (2.31)$$

και εξαρτάται όχι μόνο από τις ιδιότητες του ανιχνευτή, αλλά και από τη γεωμετρία της μετρητικής διάταξης (κυρίως από τη γεωμετρία της πηγής και την απόσταση πηγής-ανιχνευτή). Η εσωτερική απόδοση ορίζεται ως (Knoll, 2000; Beckhoff *et al.*, 2006):

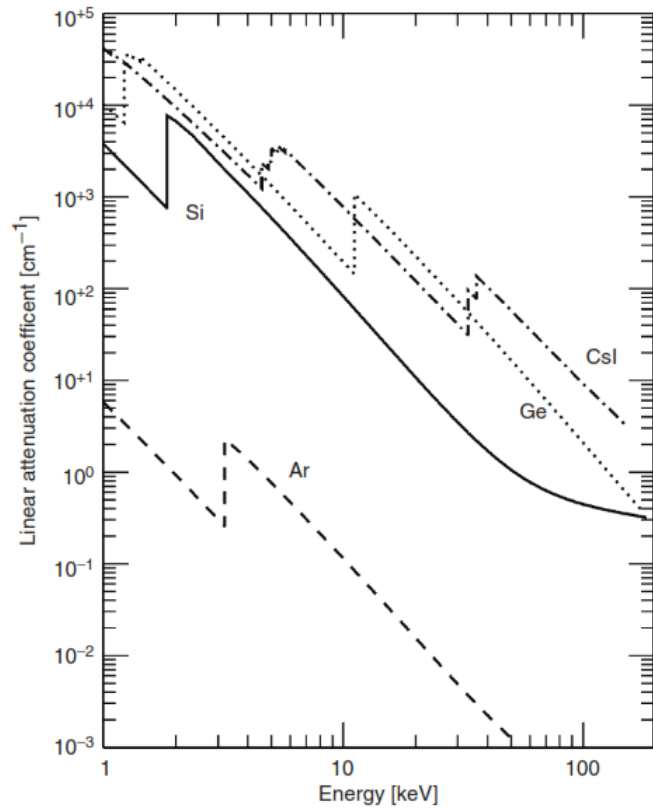
$$\eta_{int} = \frac{\text{πλήθος καταγραφόμενων γεγονότων}}{\text{πλήθος προσπίπτοντων στον ανιχνευτή φωτονίων}} \quad (2.32)$$

όπου δεν λαμβάνεται υπόψη η γεωμετρική απόδοση του ανιχνευτή (*geometric efficiency*)  $\eta_{geo}$  που αποτελεί το κλάσμα των φωτονίων που παράγονται, τα οποία εισέρχονται στον ενεργό όγκο του ανιχνευτή. Οι δύο αποδόσεις συνδέονται από την απλή σχέση (Beckhoff *et al.*, 2006):

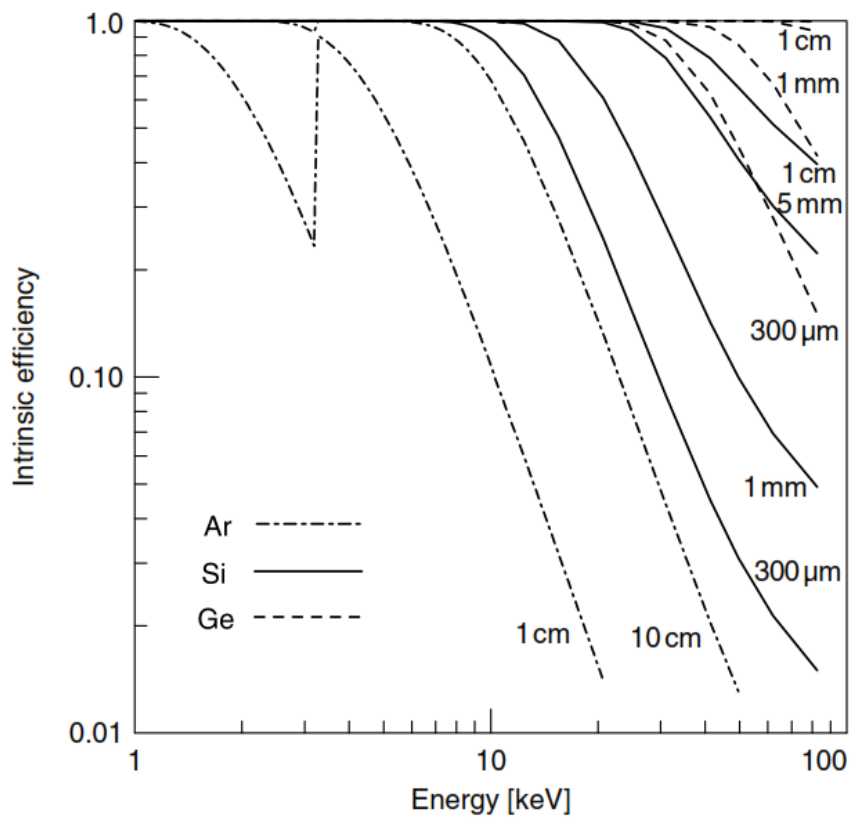
$$\eta_{int} = \eta_{abs} \eta_{geo} = \eta_{abs} 4\pi/\Omega \quad (2.33)$$

όπου  $\Omega$  είναι η στερεά γωνία του ανιχνευτή όπως αυτός φαίνεται από τη θέση της πηγής. Η εσωτερική απόδοση εξαρτάται κατά βάση από το υλικό του ανιχνευτή, την ενέργεια της ακτινοβολίας και το πάχος του ανιχνευτή στη διεύθυνση της προσπίπτουσας ακτινοβολίας. Επίσης, παραμένει μία μικρή εξάρτηση από την απόσταση πηγής-ανιχνευτή, καθώς η μέση απόσταση που διανύει η ακτινοβολία στον ανιχνευτή μεταβάλλεται ελαφρώς ανάλογα με την απόσταση αυτή. Για το λόγο αυτό, είναι πιο βολική η πινακοποίηση τιμών της εσωτερικής παρά της απόλυτης απόδοσης, επειδή η γεωμετρική εξάρτηση της πρώτης είναι πολύ μικρότερη.

Καθώς η ικανότητα των φωτονίων να διανύσουν μία απόσταση μέσα στον ανιχνευτή πριν αλληλεπιδράσουν με αυτόν και εντέλει ανιχνευθούν εξαρτάται από τον ολικό γραμμικό συντελεστή εξασθένησης  $\mu$ , γίνεται κατανοητό πόσο μεγάλη σημασία για την ανίχνευση των φωτονίων έχει η τιμή του  $\mu$  του υλικού του ανιχνευτή. Στο σχήμα 2.26 που ακολουθεί, ο γραμμικός συντελεστής εξασθένησης δίνεται συναρτήσει της ενέργειας για ορισμένα κοινά υλικά κατασκευής ανιχνευτών. Σε αυτό το σχήμα φαίνεται πως υλικά υψηλού ατομικού αριθμού όπως το Ge ή το CsI έχουν μεγαλύτερες ικανότητες απορρόφησης σε σύγκριση με πιο ελαφρά στοιχεία όπως το Si ή το Ar. Για δεδομένο υλικό ανιχνευτή, η εσωτερική απόδοση εξαρτάται επίσης από το πάχος του ενεργού όγκου του ανιχνευτή, σύμφωνα με τη σχέση (2.32). Αυτή η εξάρτηση παρουσιάζεται στο σχήμα 2.27 για ανιχνευτές Ge, Si και Ar.

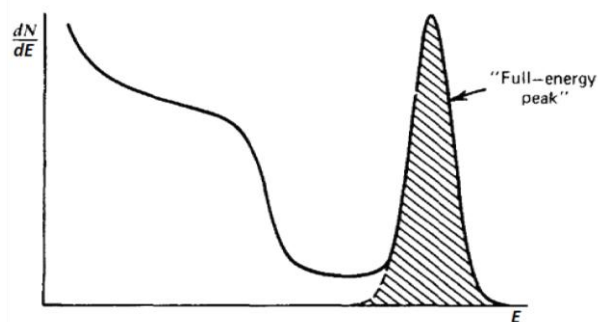


Σχήμα 2.26: Γραμμικός συντελεστής εξασθένισης φωτονίων σε τυπικά υλικά ανιχνευτών (Beckhoff et al., 2006)



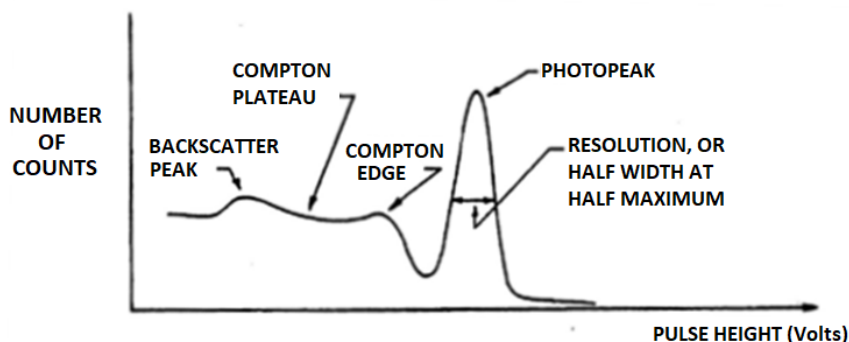
Σχήμα 2.27: Εσωτερική απόδοση ανιχνευτών Ar, Si, Ge συναρτήσει της ενέργειας των φωτονίων (Beckhoff et al., 2006)

Η απόδοση μία ανιχνευτικής διάταξης μπορεί να κατηγοριοποιηθεί σύμφωνα με τη φύση των γεγονότων που καταγράφονται. Αν καταγράφονται όλοι οι παλμοί που παράγονται στον ανιχνευτή, τότε ορίζεται η ολική απόδοση (*total efficiency*). Σε αυτή την περίπτωση, όλες οι αλληλεπιδράσεις, ανεξάρτητα από το πόσο μικρή είναι η ενέργεια που αποτίθεται στον ανιχνευτή, καταγράφονται. Σε ένα υποθετικό φάσμα όπως αυτό του σχήμα 2.28, όλο το εμβαδό κάτω από την καμπύλη του ενεργειακού φάσματος αντιστοιχεί στην καταμέτρηση του συνολικού πλήθους των παλμών που καταγράφονται, ανεξάρτητα από το ύψος τους και καταμετρούνται στον ορισμό της ολικής απόδοσης. Αντίθετα, η απόδοση φωτοκορυφής (*photopeak efficiency*) αντιστοιχεί στο κλάσμα των φωτονίων που αλληλεπιδρούν με τον ανιχνευτή με φωτοηλεκτρικό φαινόμενο, τα οποία αποθέτουν όλη τους την ενέργεια στον ενεργό του όγκο. Τα γεγονότα που αποθέτουν μόνο ένα μέρος της ενέργειάς τους στον ανιχνευτή (λόγω φαινομένου Compton ή φαινομένων διαφυγής) δε συμμετέχουν στην κορυφή πλήρους ενέργειας στο παραγόμενο φάσμα.



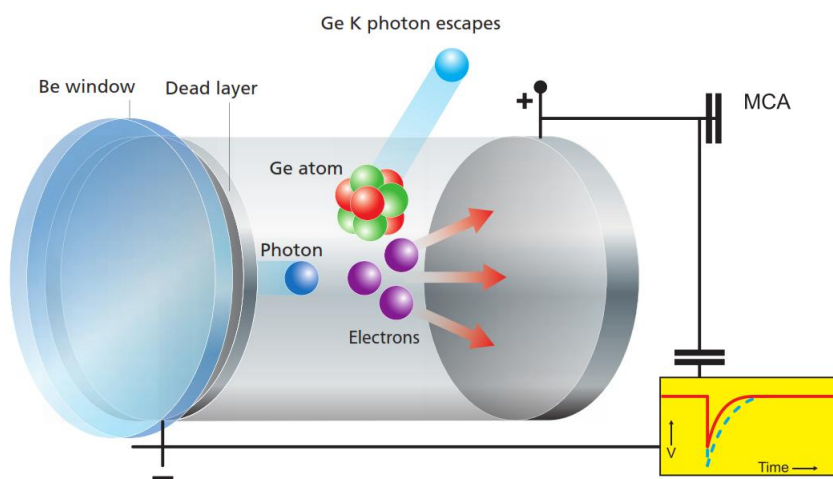
Σχήμα 2.28: Φάσμα (συνεχής γραμμή) και φωτοκορυφή (γραμμοσκιασμένη περιοχή) (Knoll, 2000)

Για ενέργειες φωτονίων μέχρι 100 keV, το φωτοηλεκτρικό φαινόμενο κυριαρχεί σε σχέση με τη σκέδαση Compton και επιπλέον, η πιθανότητα της εν συνεχεία αλληλεπίδρασης του σκεδαζόμενου φωτονίου με φωτοηλεκτρικό φαινόμενο στον ανιχνευτή είναι επίσης αρκετά υψηλή. Όταν απομονωθεί από τις άλλες συνιστώσες του υποστρώματος στη φασματοσκοπία XRF, το υπόστρωμα λόγω σκέδασης Compton εκτείνεται σε ενεργειακή περιοχή από 0 έως  $\frac{2E\alpha}{1+2\alpha}$ , όπου το  $\alpha$  δίνεται από τη σχέση (2.13). Το άνω όριο (Compton edge) αυτής της περιοχής αντιστοιχεί στην ενέργεια του σκεδαζόμενου ηλεκτρονίου Compton κατά την οπισθοσκέδαση του φωτονίου (κατά  $180^\circ$ ), όπως προκύπτει από τη σχέση (2.15). Από τη σχέση των Klein-Nishina (Klein and Nishina, 1929), λόγω της γωνιακής εξάρτησης της διαφορικής ενεργού διατομής, η οπισθοσκέδαση έχει αυξημένη πιθανότητα. Επίσης, υπάρχει η πιθανότητα σκέδασης Compton ενός φωτονίου εκτός του ανιχνευτή και η ανίχνευση τελικά μόνο του σκεδασμένου φωτονίου και όχι του ηλεκτρονίου. Σε αυτή την περίπτωση δημιουργείται ένα υπόστρωμα από την ενέργεια  $\frac{E}{1+2\alpha}$  έως τη φωτοκορυφή ενέργειας  $E$ . Το κάτω άκρο του διαστήματος αυτού είναι η ενέργεια του φωτονίου μετά από την οπισθοσκέδαση του (*backscatter peak*). Για τους ίδιους λόγους για τους οποίους δημιουργείται η αιχμή Compton (Compton edge), η πιθανότητα της αιχμής οπισθοσκέδασης (*backscatter peak*) είναι ενισχυμένη σε σχέση με το υπόλοιπο συνεχές φάσμα. Λόγω αυτών των μηχανισμών το φάσμα μία μονοενεργειακής πηγής αποκτά μία μορφή παρόμοια με το σχήμα 2.29.

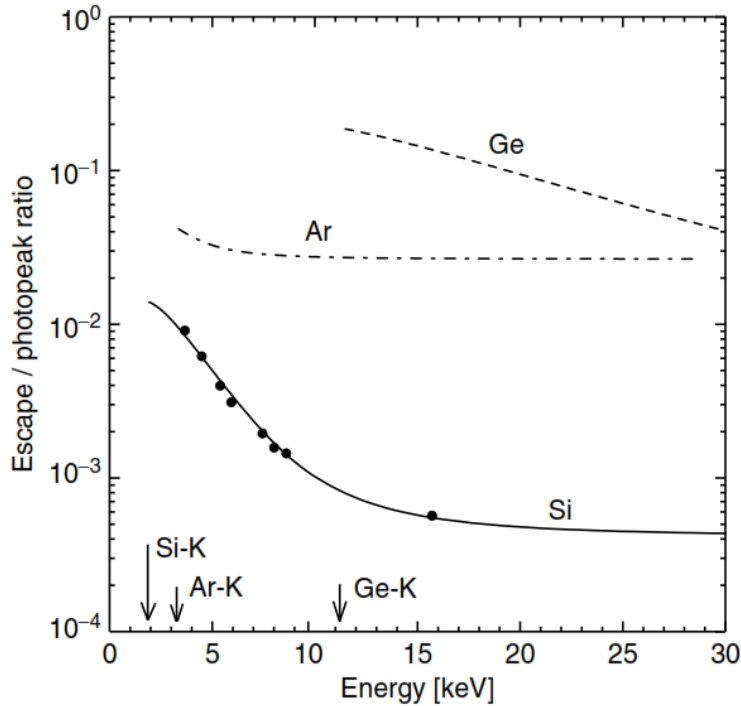


Σχήμα 2.29: Φαινόμενα που μειώνουν την απόδοση φωτοκορυφής

Ένας δεύτερος περιορισμός για την απόδοση φωτοκορυφής προκύπτει από το φαινόμενο της διαφυγής. Όταν ένα εξωτερικό ηλεκτρόνιο καλύπτει το κενό που έχει παραχθεί ως αποτέλεσμα του φωτοηλεκτρικού φαινομένου, παράγεται χαρακτηριστική ακτινοβολία, όπως αναλύθηκε σε προηγούμενη παράγραφο. Η παραγόμενη χαρακτηριστική ακτίνα-Χ, έχει σημαντική πιθανότητα να απορροφηθεί εκ νέου και να οδηγήσει σε πλήρη απορρόφηση του αρχικού προσπίπτοντος φωτονίου. Παρ' όλα αυτά, όταν η εισερχόμενη ακτίνα-Χ αλληλεπιδρά κοντά στην επιφάνεια του ανιχνευτή, υπάρχει μη αμελητέα πιθανότητα η παραγόμενη χαρακτηριστική ακτίνα-Χ να διαφύγει από τον ανιχνευτή χωρίς να αλληλεπιδράσει. Το αποτέλεσμα αυτού του φαινομένου είναι η παρουσία μίας αιχμής διαφυγής (escape peak) στο φάσμα, η ενέργεια της οποίας είναι ίση με τη διαφορά μεταξύ της ενέργειας του πρωτογενούς φωτονίου και εκείνης του διαφυγόντος φωτονίου. Τυπικές τιμές για τις ενέργειες των διαφευγόντων φωτονίων είναι 1,74 keV για το Si ( $K_{\alpha}$ ) και 9,9 keV ( $K_{\alpha}$ ) και 11 keV ( $K_{\beta}$ ) για το Ge. Το φαινόμενο της διαφυγής μειώνει το πλήθος των αρχικών φωτονίων που προσμετρώνται στην κορυφή πλήρους ενεργειακής απορρόφησης, ανάλογα με το υλικό του ανιχνευτή, αλλά και την ενέργεια των αρχικών φωτονίων. Στο σχήμα 2.31, παρουσιάζεται ο λόγος μεταξύ αιχμής διαφυγής και κορυφής πλήρους ενεργειακής απορρόφησης για διάφορους ανιχνευτές και για ενέργειες έως 30 keV.



Σχήμα 2.30: Σχηματική αναπαράσταση φαινομένου διαφυγής (Brouwer, 2003)



Σχήμα 2.31: Λόγος ύψους αιχμής διαφυγής προς ύψος φωτοκορυφής για ενέργειες έως 30 keV σε ανιχνευτές Ar, Si και Ge (Beckhoff et al., 2006)

Η απόδοση φωτοκορυφής είναι αυτή που συνήθως ενδιαφέρει σε κάθε περίπτωση. Ένας ανιχνευτής με γνωστή την απόδοση φωτοκορυφής μπορεί να χρησιμοποιηθεί για τον προσδιορισμό της απόλυτης ραδιενέργειας μίας πηγής ή γενικά για την ποσοτικοποίηση της έντασης της ακτινοβολίας από οποιαδήποτε πηγή.

#### 2.9.5.4 Ημιαγωγοί ανιχνευτές

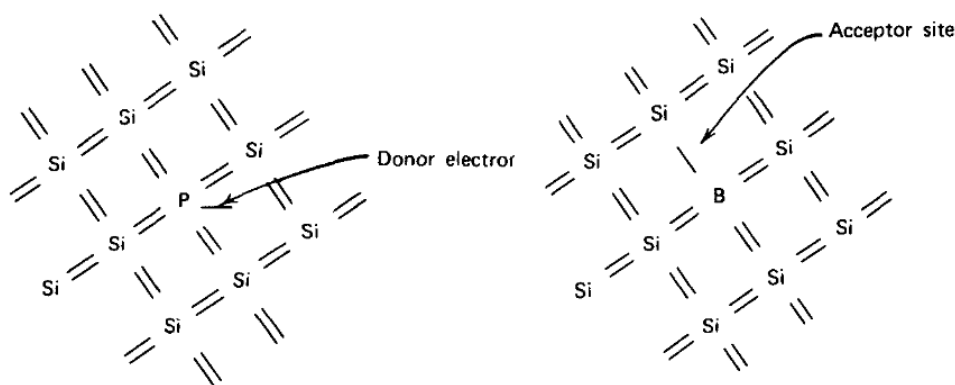
Ημιαγωγοί ονομάζονται οι ανιχνευτές που κατασκευάζονται από ημιαγωγό υλικό, συνήθως γερμάνιο (Ge) ή πυρίτιο (Si). Οι κρύσταλλοι αυτών των ανιχνευτών δεν είναι ποτέ απολύτως καθαροί, περιέχουν ορισμένες μικρές προσμίξεις ατόμων άλλων υλικών που ονομάζονται και *ακαθαρσίες (impurities)*. Τα άτομα των προσμίξεων καταλαμβάνουν ορισμένες θέσεις μέσα στην κρυσταλλική δομή, με αποτέλεσμα την τροποποίηση κάποιων ιδιοτήτων του ημιαγωγού. Σε πολλές περιπτώσεις επιβάλλεται να προστίθενται ορισμένες προσμίξεις, προκειμένου να επιτευχθούν οι επιθυμητές ιδιότητες του υλικού. Οι ημιαγωγοί χωρίζονται σε δύο τύπους ανάλογα με τις προσμίξεις που έχουν υποστεί: τύπου n και τύπου p. (Knoll, 2000)

Οι κρύσταλλοι τύπου n δημιουργούνται με την πρόσμιξη πεντασθενών στοιχείων στην κρυσταλλική δομή του Si ή του Ge, τα οποία αποτελούν τετρασθενή στοιχεία και γι' αυτό δημιουργούν δεσμούς με τέσσερα πλησιέστερα άτομα. Μία μικρή συγκέντρωση πρόσμιξης (της τάξης μερικών ppm) είτε ως απομένουσας ποσότητας μετά τη διαδικασία καθαρισμού, είτε λόγω της εκούσιας προσθήκης της, αντικαθιστά τα άτομα του ημιαγωγού στοιχείου στη δομή. Επειδή το προστιθέμενο στοιχείο περιβάλλεται από 5 ηλεκτρόνια σθένους, υπάρχει ένα επιπλέον ηλεκτρόνιο σθένους όταν σχηματιστούν όλοι οι ομοιοπολικοί δεσμοί. Το επιπλέον ηλεκτρόνιο παραμένει πολύ ασθενώς συνδεδεμένο στην πρόσμιξη. Επομένως, απαιτείται πολύ λίγη ενέργεια για να το απομακρύνει και να δημιουργήσει ένα ελεύθερο ηλεκτρόνιο χωρίς αντίστοιχη οπή. Αυτού του

είδους οι προσμίξεις χαρακτηρίζονται ως δότες ηλεκτρονίων, καθώς προσφέρουν ηλεκτρόνια στη ζώνη αγωγιμότητας (*conduction band*). Επειδή δεν αποτελούν μέρος της κανονικής δομής, τα επιπλέον ηλεκτρόνια λόγω προσμίξεων-δοτών μπορούν να λάβουν θέση στο *απαγορευμένο ενεργειακό χάσμα* (*forbidden energy gap*).

Οι κρύσταλλοι τύπου p δημιουργούνται με την πρόσμιξη τρισθενών στοιχείων στην κρυσταλλική δομή του ημιαγωγού υλικού. Αντίστοιχα με τα πεντασθενή στοιχεία, τα τρισθενή όταν καταλαμβάνουν μία θέση στην κρυσταλλική δομή δεν μπορούν να δημιουργήσουν όλους τους ομοιοπολικούς δεσμούς με τα γειτονικά άτομα του ημιαγωγού στοιχείου και ένας δεσμός παραμένει ακόρεστος. Το κενό αναπαριστά μία οπή παρόμοια με αυτή που δημιουργείται όταν ένα κανονικό ηλεκτρόνιο σθένους διεγείρεται στη ζώνη αγωγιμότητας, αλλά τα ενεργειακά χαρακτηριστικά του είναι λίγο διαφορετικά. Όταν ένα ηλεκτρόνιο καταλαμβάνει την κενή θέση, συμμετέχει σε έναν ομοιοπολικό δεσμό που δεν είναι πανομοιότυπος με τους υπόλοιπους του κρυστάλλου επειδή ένα από τα δύο συμμετέχοντα άτομα στο δεσμό αποτελεί τρισθενή πρόσμιξη. Το ηλεκτρόνιο που καταλαμβάνει τη θέση, αν και είναι δεσμευμένο, είναι ασθενέστερα συνδεδεμένο σε σχέση με ένα τυπικό ηλεκτρόνιο σθένους. Κατά συνέπεια, αυτές οι προσμίξεις-αποδέκτες δημιουργούν επίσης οπές στο απαγορευμένο ενεργειακό κενό. Σε αυτή την περίπτωση, τα επίπεδα των αποδεκτών βρίσκονται κοντά στον πυθμένα του χάσματος και στη ζώνη σθένους (*valence band*), επειδή οι ενέργειες τους είναι αρκετά κοντινές με εκείνες των οπών που καταλαμβάνονται από κανονικά ηλεκτρόνια σθένους.

Θεωρητικά, σε έναν ενδογενή ημιαγωγό (*intrinsic semiconductor*), δηλαδή σε έναν ημιαγωγό απόλυτα καθαρό, όλα τα ηλεκτρόνια στη ζώνη αγωγιμότητας και όλες οι οπές στη ζώνη σθένους θα προκαλούνταν από θερμική διέγερση (απουσία ιοντίζουσας ακτινοβολίας). Επειδή υπό αυτές τις συνθήκες κάθε ηλεκτρόνιο θα πρέπει να αφήνει πίσω μία οπή, το πλήθος των ηλεκτρονίων στη ζώνη αγωγιμότητας θα πρέπει να είναι ακριβώς ίσο με το πλήθος των οπών στη ζώνη σθένους. Οι ιδιότητες του ενδογενούς ημιαγωγού μπορούν να περιγραφούν θεωρητικά, αλλά στην πράξη είναι αδύνατο να επιτευχθούν. Οι ηλεκτρικές ιδιότητες των πραγματικών υλικών κυριαρχούνται από τα πολύ χαμηλά επίπεδα των προσμίξεων που απομένουν, κάτι που ισχύει ακόμα και για το Si και το Ge που είναι διαθέσιμα στις υψηλότερες δυνατές καθαρότητες.



Σχήμα 2.32: Αναπαράσταση μίας πρόσμιξης-δότη φωσφόρου (αριστερά) και μίας πρόσμιξης-αποδέκτη βορίου (δεξιά) σε μία κρυσταλλική δομή πυριτίου (Knoll, 2000)

Η επαφή δύο ημιαγωγών τύπου n και p οδηγεί στη δημιουργία μίας διόδου p-n. Οι φορείς εκατέρωθεν της επαφής αλληλοεξουδετερώνονται και δημιουργούν δύο τμήματα στα οποία δεν υπάρχουν διαθέσιμα ελεύθερα φορτία. Στον ημιαγωγό-n δημιουργείται ένα τμήμα με θετικά μόνο

ίοντα, ενώ στον ημιαγωγό-p ένα τμήμα με αρνητικά μόνο ιόντα, χωρίς οπές. Τα δύο αυτά τμήματα συνιστούν την περιοχή αντιστάθμισης (depletion region) της ένωσης p-n, όπου το υλικό χάνει τοπικά την ηλεκτρική του ουδετερότητα και οι πλευρές της ένωσης φορτίζονται με αντίθετα ηλεκτρικά φορτία, με αποτέλεσμα την εμφάνιση μίας διαφοράς δυναμικού, της οποίας το ηλεκτροστατικό πεδίο εμποδίζει την περαιτέρω διάχυση των φορέων προς το απέναντι τμήμα της ένωσης. Η περιοχή αντιστάθμισης είναι εκείνη η περιοχή του ημιαγωγού, που χρησιμεύει στην ανίχνευση της προσπίπτουσας ακτινοβολίας. Προϋπόθεση για αυτό αποτελεί η ψύξη του κρυστάλλου, με στόχο την εξάλειψη των φορέων λόγω θερμικών διεγέρσεων και την ανίχνευση των παραγόμενων φορέων που οφείλονται μόνο στην απόθεση της ενέργειας της ακτινοβολίας. Αν επιπλέον η ένωση πολωθεί *ανάστροφα* (*reverse biasing*), δηλαδή αν ο θετικός πόλος μίας εξωτερικής πηγής συνδεθεί με το τμήμα n της επαφής, τότε η ένωση μπορεί να λειτουργήσει ικανοποιητικά ως ανιχνευτής. Σε περίπτωση που δεν εφαρμοστεί η ανάστροφη πόλωση, η περιοχή θα λειτουργεί και πάλι ως ανιχνευτής αλλά με μη ικανοποιητική απόδοση. Η τάση επαφής περίπου 1 V που σχηματίζεται αυθόρμητα στην επαφή δεν είναι ικανή να δημιουργήσει αρκετά μεγάλο ηλεκτρικό πεδίο για να εξαναγκάσει τους φορείς να κινηθούν γρήγορα. Για το λόγο αυτό, φορτία μπορεί να μη γίνονται αντιληπτά ως αποτέλεσμα εγκλωβισμού και επανασύνδεσης. Με την εφαρμογή της ανάστροφης πόλωσης επιτυγχάνεται η επέκταση της περιοχής αντιστάθμισης και κατά συνέπεια του όγκου στον οποίο συλλέγονται φορείς που παρήχθησαν από την ακτινοβολία.

#### 2.9.5.5 Οι ανιχνευτές HPGe και ο ανιχνευτής BEGe

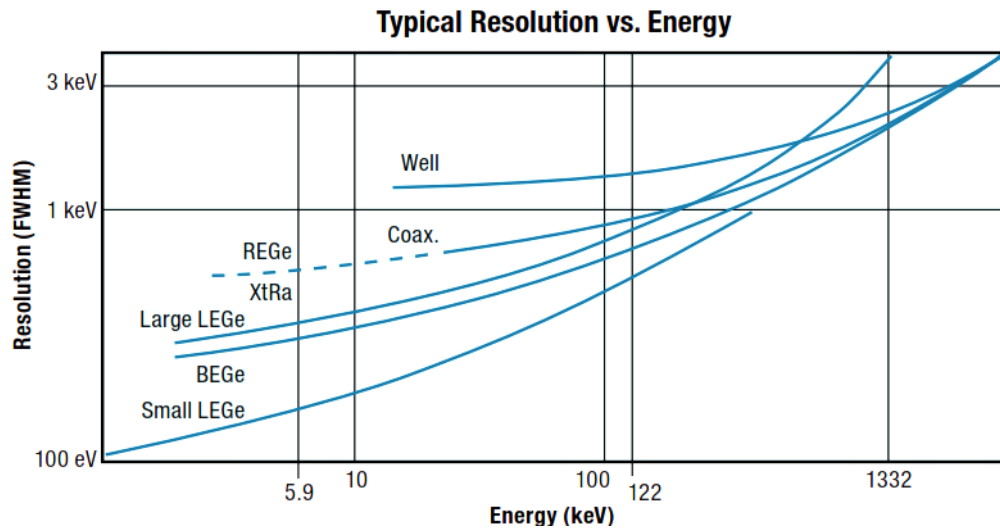
Οι ανιχνευτές *υπερκαθαρού γερμανίου* (*High-Purity Ge detectors*), όπως όλοι οι ανιχνευτές Ge, έχουν δομή p-i-n. Υπάρχουν δύο τύποι ανιχνευτών HPGe: αυτοί που είναι κατασκευασμένοι από Ge τύπου p και αυτοί που είναι φτιαγμένοι από Ge τύπου n. Κατά την κατασκευή του ανιχνευτή, η αντιστάθμιση των προσμίξεων του αρχικού κρυστάλλου γίνεται με επαφές τύπου p και n, για τους κρυστάλλους n και p, αντίστοιχα. Σε κάθε περίπτωση, οι ανιχνευτές χωρίζονται σε δύο κύριες περιοχές:

- Την *ενεργό ή ενδογενή περιοχή* (*intrinsic region/active volume*) στην οποία λαμβάνει χώρα η παραγωγή του σήματος, το οποίο οδηγεί στην ανίχνευση της ακτινοβολίας. Στην περιοχή αυτή έχει γίνει πλήρης αντιστάθμιση των προσμίξεων.
- Την *ανενεργό ή νεκρή περιοχή* (*dead layer/inactive layer*), στην οποία δεν έχει γίνει αντιστάθμιση των προσμίξεων. Αυτή η περιοχή δε συμβάλλει στην ανίχνευση των φωτονίων.

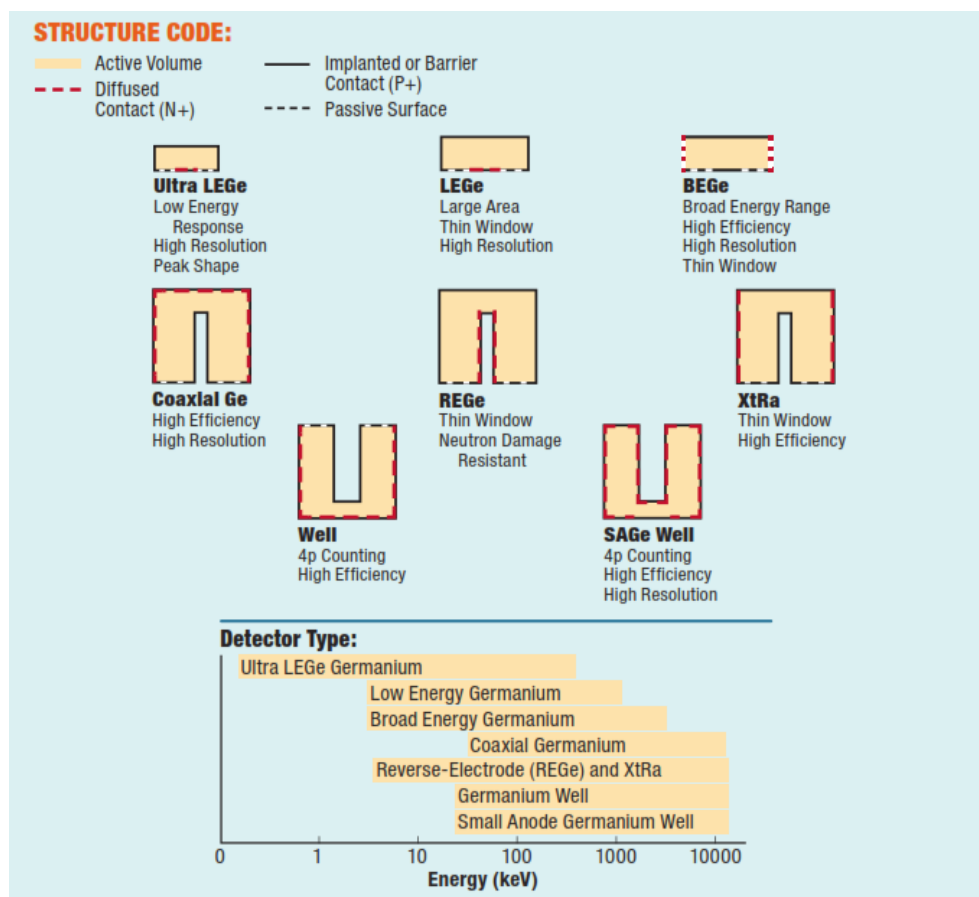
Οι ανιχνευτές HPGe, , όπως αναφέρθηκε στην προηγούμενη ενότητα, απαιτούν ψύξη κατά τη λειτουργία τους για την εξάλειψη των θερμικών διεγέρσεων και του συνακόλουθου υψηλού ρεύματος διαρροής που παρουσιάζεται σε θερμοκρασία περιβάλλοντος. Αυτό επιτυγχάνεται με κατάλληλα μονωμένα δοχεία υγρού αζώτου που προσαρμόζονται στους ανιχνευτές, τα οποία τους ψύχουν σε θερμοκρασία 77 K. Σε αυτή τη θερμοκρασία, ο θερμικός θόρυβος δεν είναι ικανός να αλλοιώσει την εξαιρετική διακριτική ικανότητα των συγκεκριμένων ανιχνευτών.

Μία υποκατηγορία των ανιχνευτών *υπερκαθαρού γερμανίου* (*High-Purity Ge detectors*) αποτελούν οι *ανιχνευτές γερμανίου ευρείας ενεργειακής περιοχής* (*Broad Energy Ge detectors*). Ο σχεδιασμός αυτής της υποκατηγορίας ανιχνευτών είναι τέτοιος, ώστε οι BEGe να επιτυγχάνουν υψηλή διακριτική ικανότητα (σχήμα 2.33) σε μεγάλο ενεργειακό εύρος ανίχνευσης, από 3 keV έως 3 MeV (σχήμα 2.34), διατηρώντας παράλληλα υψηλότερη απόδοση από τους υπόλοιπους ανιχνευτές

Ge (σχήμα 2.35). Στα σχήματα που ακολουθούν παρουσιάζονται γραφικά τα πλεονεκτήματα του ανιχνευτή BEGe σε σχέση με τους άλλους ανιχνευτές HPGe.

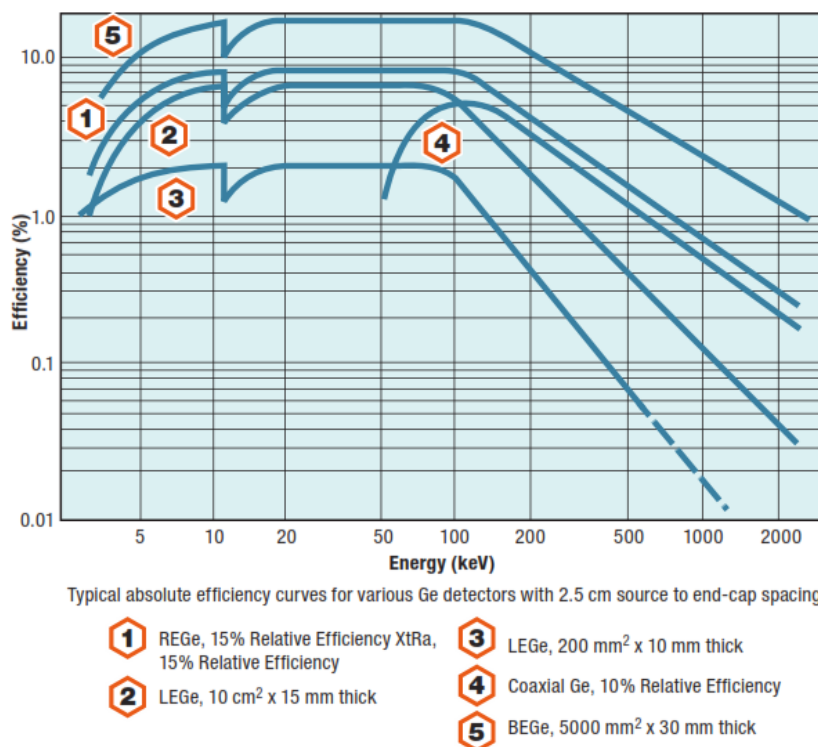


Σχήμα 2.33: Διακριτική ικανότητα ανιχνευτών HPGe σε εύρος ενεργειών (Canberra Industries, 2016)



Σχήμα 2.34: Δομικές διαφορές ανιχνευτών HPGe και ενεργειακό εύρος ανίχνευσης ακτινοβολίας (Canberra Industries, 2016)





Σχήμα 2.35: Απόδοση ανιχνευτών HPGe σε εύρος ενεργειών (Canberra Industries, 2016)

#### 2.9.5.6 Φορητοί ανιχνευτές Si PIN

Αν και το πυρίτιο (Si) έχει σχετικά χαμηλό ατομικό αριθμό ( $Z=14$ ), η φωτοηλεκτρική απορρόφηση των προσπίπτοντων φωτονίων είναι κυρίαρχος μηχανισμός εξασθένισης στην περιοχή των ακτίνων-Χ μέχρι 20 keV. Σε αυτό τον τύπο ανιχνευτών χρησιμοποιείται μία ενδογενής περιοχή  $i$  υψηλής αντίστασης με επαφές  $p$  και  $n$  εκατέρωθεν της περιοχής, ώστε να μειωθεί το ρεύμα διαρροής σε επίπεδα χαμηλότερα από αυτά που παρατηρούνται σε μία απλή δίοδο. Ένα πάχος της τάξης των 300  $\mu\text{m}$  είναι αρκετό για να προσφέρει ικανοποιητική ανίχνευση έως 30 keV. Το μικρό σχετικά πλήθος των ζευγών ηλεκτρονίων-οπών που δημιουργούνται από τα φωτόνια χαμηλών ενεργειών απαιτεί την ελαχιστοποίηση των επιπέδων θορύβου του ανιχνευτή. Για το λόγο αυτό, αυτές οι δίοδοι ψύχονται επιπλέον για να μειώσουν το ρεύμα διαρροής σε αμελητέα επίπεδα. Η ψύξη μέχρι τους  $-30^\circ\text{C}$ , ή και σε ακόμα χαμηλότερες θερμοκρασίες σε ορισμένους ανιχνευτές, γίνεται με τη χρήση θερμοηλεκτρικού ψύκτη Peltier, χωρίς να υπάρχει ανάγκη για ψύξη με υγρό άζωτο. Οι δίοδοι  $p$ - $i$ - $n$  βρίσκουν εφαρμογή στη μέτρηση ακτινοβολίας από το φθορισμό ακτίνων-Χ και διατίθενται με διακριτική ικανότητα χαμηλότερη από 250 eV FWHM μετρούμενο στην ακτίνα-Χ ενέργειας 5.9 eV. Τέλος, διαθέτουν παράθυρο από βηρύλλιο (Be), για την ελάχιστη δυνατή απορρόφηση των φωτονίων χαμηλής ενέργειας.



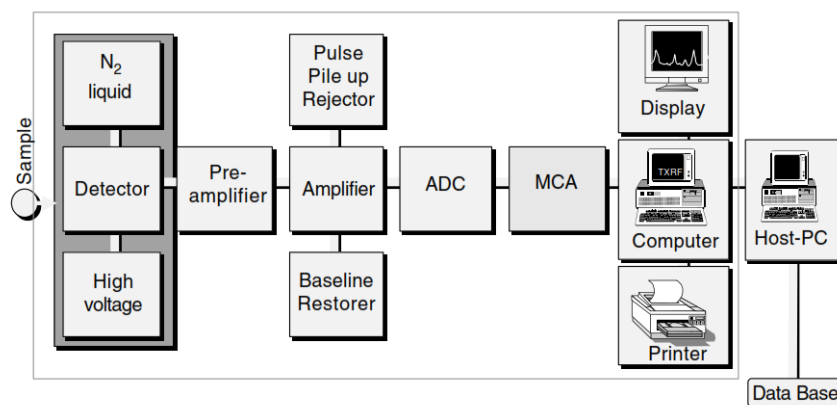
Σχήμα 2.36: Ανιχνευτής Si PIN

### 2.9.5.7 Τα ηλεκτρονικά της ανιχνευτικής διάταξης

Η καταγραφή και η επεξεργασία των ηλεκτρικών σημάτων που παράγονται μέσα στον ανιχνευτή κατά την ανίχνευση ενός φωτονίου γίνεται με τη βοήθεια μίας σειράς από ηλεκτρονικά συστήματα. Τα σημαντικότερα από αυτά εν γένει είναι:

- Το *τροφοδοτικό υψηλής τάσης*, που παρέχει την απαραίτητη τάση στον ανιχνευτή.
- Ο *προενισχυτής (preamplifier)*, που λαμβάνει το ασθενές ηλεκτρικό σήμα από τον ανιχνευτή. Το σήμα ενισχύεται και μεταβιβάζεται στον κυρίως ενισχυτή.
- Ο *ενισχυτής (amplifier)*, που ενισχύει και διαμορφώνει το σήμα ώστε να αποκτήσει την κατάλληλη μορφή για την περαιτέρω επεξεργασία.
- Ο *διαχωριστής ύψους παλμών*, που απορρίπτει όσους παλμούς, που είναι εκτός των προκαθορισμένων ορίων.
- Ο *καταμετρητής*, που χρησιμοποιείται για την καταγραφή των παλμών που προέρχονται από το διαχωριστή.
- Ο *αναλογοψηφιακός μετατροπέας (Analog-to-Digital Converter - ADC)*, που μετατρέπει το αναλογικό σήμα από τον ενισχυτή σε ψηφιακό.
- Ο *πολυκαναλικός αναλυτής (Multi-Channel Analyzer - MCA)*, που καταγράφει την ψηφιακή πληροφορία που προκύπτει μετά τη μετατροπή στον ADC. Μπορεί να διαθέτει όμως και ενσωματωμένο ADC. Επικοινωνεί με τον Η/Υ για τη μεταφορά, την αποθήκευση και την απεικόνιση του φάσματος, μέσω κατάλληλων λογισμικών.

Σημειώνεται πως τα παραπάνω είναι τα ηλεκτρονικά που περιέχονται σε έναν τυπικό ανιχνευτή. Δε διαθέτουν, παρ' όλα αυτά, όλοι οι ανιχνευτές τις ίδιες συνιστώσες. Για παράδειγμα, ο φορητός ανιχνευτής BEGe δε διαθέτει ούτε διαχωριστή ύψους παλμών, ούτε καταμετρητή, καθώς δεν είναι απαραίτητα για την ανίχνευση και καταγραφή των σημάτων.



Σχήμα 2.37: Σύστημα ανίχνευσης, καταγραφής και επεξεργασίας σήματος τυπικού ανιχνευτή (Beckhoff et al., 2006)

### 2.9.6 Άλλες συνιστώσες της διάταξης

Πέρα από τη διάταξη παραγωγής της διεγείρουσας ακτινοβολίας και την ανιχνευτική και μετρητική διάταξη, ένα σύστημα φασματοσκοπίας XRF διαθέτει ορισμένες επιπλέον συνιστώσες, οι οποίες είναι δυνατό να επιδρούν και να ρυθμίζουν την πρωτογενή και τη φθορίζουσα ακτινοβολία.

### 2.9.6.1 Οι κατευθυντές δέσμης

Οι *κατευθυντές δέσμης* ή *collimators* χρησιμοποιούνται ώστε να προσδώσουν στην παραγόμενη από τη μηχανή ακτίνων-Χ δέσμη την επιθυμητή διεύθυνση. Ουσιαστικά, περιορίζουν την κωνικότητα της δέσμης φωτονίων μετά το παράθυρο της μηχανής. Η χρήση των *collimators* εξυπηρετεί την αποκοπή ακτινοβολίας που λόγω της διεύθυνσης της δεν εξυπηρετεί στην ακτινοβόληση του δείγματος, αλλά ενδεχομένως θα φτάσει απευθείας ή μετά από σκεδάσεις στον ανιχνευτή. Οι κατευθυντές τοποθετούνται κατά βάση στην έξοδο της μηχανής ακτίνων-Χ. Σε περίπτωση χρήσης δευτερεύοντος στόχου (βλ. ενότητα 2.9.6.4) υπάρχει και η δυνατότητα τοποθέτησης μεταξύ στόχου και δείγματος.

#### 2.9.6.1.1 Οι μάσκες

Οι *μάσκες* (*masks*) είναι μία υποκατηγορία *collimators* που τοποθετούνται μεταξύ δείγματος και ανιχνευτή, έτσι ώστε ο ανιχνευτής να «βλέπει» μόνο το δείγμα. Είναι δηλαδή ένα είδος θωράκισης του ανιχνευτή από ακτινοβολία που τον προσεγγίζει από άλλες διευθύνσεις.

### 2.9.6.2 Τα φίλτρα

Τα *φίλτρα* (*filters*) είναι φύλλα κατάλληλου υλικού που τοποθετούνται μεταξύ της μηχανής ακτίνων-Χ και του δείγματος προς ακτινοβόληση. Σκοπός των φίλτρων είναι η αποκοπή ανεπιθύμητων φωτονίων που αυξάνουν για παράδειγμα το υπόστρωμα και δυσχεραίνουν την επιτυχή αναγνώριση των κορυφών υπό εξέταση. Επίσης, τα φίλτρα μειώνουν τη συνολική ροή φωτονίων, κάτι που μπορεί να φανεί χρήσιμο στην περίπτωση που υπάρχει η ανάγκη μικρότερης απόθεσης ενέργειας στον ανιχνευτή ή αποκοπής φωτονίων συγκεκριμένων ενεργειών (συνήθως των χαμηλών).

Τα φίλτρα ακτινοβολούνται όπως είναι λογικό από την πρωτεύουσα ακτινοβολία. Αυτό οδηγεί πολλές φορές σε παραγωγή χαρακτηριστικής ακτινοβολίας από το ίδιο το υλικό του φίλτρου. Αυτή η ιδιότητα τους χρησιμοποιείται συχνά, ιδιαίτερα με χρήση φίλτρων ίδιου υλικού με την άνοδο της μηχανής ακτίνων-Χ, με σκοπό την παραγωγή σχεδόν μονοενεργειακών δεσμών φωτονίων.

### 2.9.6.3 Οι σκεδαστές

#### 2.9.6.3.1 Η ατμόσφαιρα λειτουργίας

Διατάξεις XRF που στοχεύουν στην ανίχνευση πολύ χαμηλής ενέργειας φωτονίων, λειτουργώντας σε περιβάλλον ατμοσφαιρικού αέρα, μπορεί να μην είναι δυνατό να επιτύχουν το σκοπό τους, λόγω της εξασθένησης αλλά και της σκέδασης της ακτινοβολίας στον αέρα. Για το λόγο αυτό, συχνά χρησιμοποιούνται διατάξεις σε περιβάλλον υψηλού κενού ή σε περιβάλλον ηλίου ( $He_2$ ).

#### 2.9.6.3.2 Ο περιβάλλον χώρος

Τα διάφορα αντικείμενα ή δομικά στοιχεία του χώρου (όπως οι τοίχοι), όπου γίνεται το πείραμα, μπορούν να λειτουργήσουν ως σκεδαστές της ακτινοβολίας. Αυτό σημαίνει ότι η ακτινοβολία μπορεί να φτάσει στον ανιχνευτή μέσω μίας μη επιθυμητής οδού, δημιουργώντας θόρυβο στο φάσμα, δυσχεραίνοντας την ποιότητα του και μειώνοντας την ικανότητα της αποτελεσματικής ανάλυσης του δείγματος.

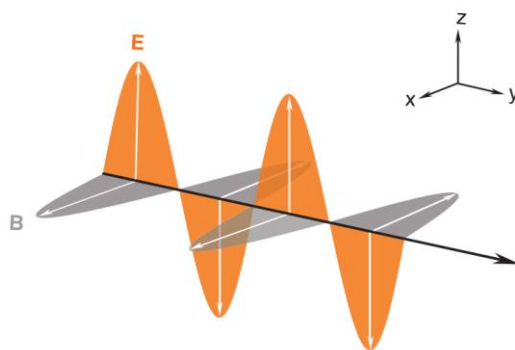
### 2.9.6.3.3 Η θωράκιση

Η θωράκιση, δηλαδή τα υλικά που χρησιμοποιούνται για να προστατέψουν τους παρακείμενους χώρους από διαρρέουσα ακτινοβολία κατά τη λειτουργία της μηχανής ακτίνων-Χ, αλλά και, αντίστροφα, για να προστατέψουν τη διάταξη από περιβαλλοντικές ή άλλες παρεμβολές, μπορούν να λειτουργήσουν ως σκεδαστές. Η θωράκιση σε διατάξεις που κάνουν χρήση φωτονίων υψηλότερης ενέργειας, πρέπει να είναι μεγαλύτερη. Ιδανικά, η θωράκιση θα πρέπει να αποτελείται από φύλλα υλικών με διαδοχικά μικρότερους ατομικούς αριθμούς, ώστε να μειώνεται το υπόστρωμα που δημιουργείται από τη σκεδαζόμενη ακτινοβολία και να απορροφούνται οι παραγόμενες χαρακτηριστικές ακτίνες των ίδιων των υλικών της θωράκισης. Για παράδειγμα, ένα συνδυασμός που προτείνεται στη βιβλιογραφία είναι μόλυβδος, κασίτερος, χαλκός, αλουμίνιο, πλεξιγκλάς. (Hofmann, Hoffmann and Lieser, 1987)

### 2.9.6.4 Ο δευτερεύων στόχος και η πόλωση

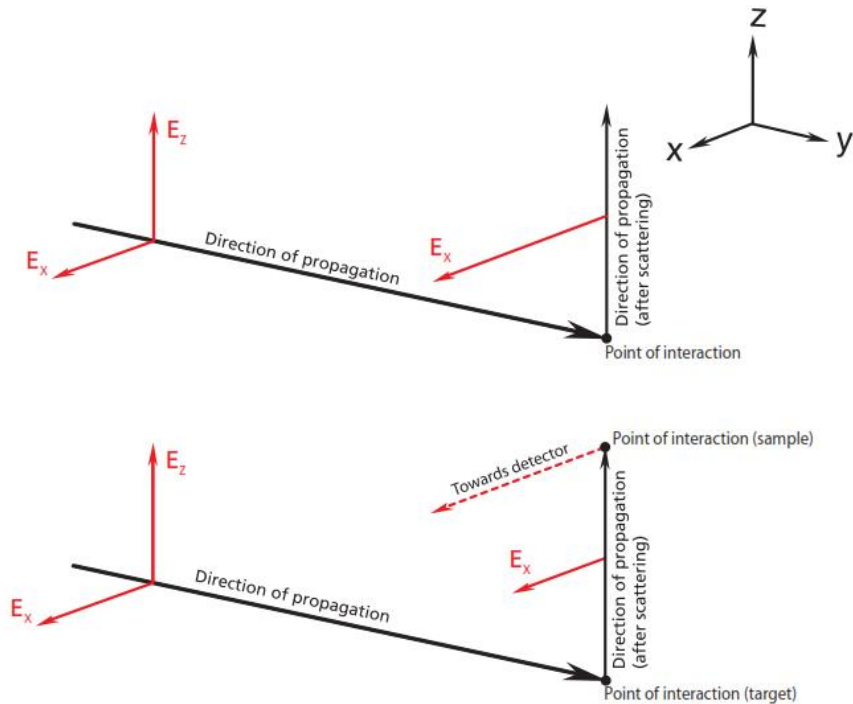
Ο δευτερεύων στόχος μπορεί να τοποθετείται μεταξύ της μηχανής ακτίνων-Χ και του δείγματος. Τα πρωτογενή φωτόνια ακτινοβολούν το στόχο, ο οποίος στη συνέχεια εκπέμπει χαρακτηριστική ακτινοβολία που διεγείρει το προς ανάλυση δείγμα. Με αυτόν τον τρόπο επιτυγχάνεται η εκπομπή μίας σχεδόν μονοχρωματικής διεγείρουσας ακτινοβολίας, όμως υπάρχει ταυτόχρονα μεγάλη απώλεια ενέργειας. Εκτός από την εκπομπή χαρακτηριστικής ακτινοβολίας υπάρχει και σκεδαζόμενη ακτινοβολία που φτάνει στον ανιχνευτή, που συνιστά ανεπιθύμητο υπόστρωμα στο φάσμα. Λόγω αυτού του υποστρώματος είναι συχνά δύσκολη η ανίχνευση κορυφών χαμηλής έντασης.

Σε αυτό το σημείο είναι σκόπιμο να γίνει μία παρένθεση σε σχέση με την πόλωση της φωτονιακής ακτινοβολίας. Όπως αναφέρθηκε ήδη στην ενότητα 2.3, οι ακτίνες-Χ είναι μία μορφή ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας και διαθέτουν τις ιδιότητες αυτής. Διαθέτουν, λοιπόν, μία ηλεκτρική και μία μαγνητική συνιστώσα,  $E$  και  $B$  αντίστοιχα, που ταλαντώνονται κάθετα μεταξύ τους και κάθετα στη διεύθυνση διάδοσης της ακτινοβολίας. Στη συνέχεια θα γίνει η ανάλυση της πόλωσης της ηλεκτρικής συνιστώσας του κύματος, όμως τα ίδια ισχύουν και για τη μαγνητική.



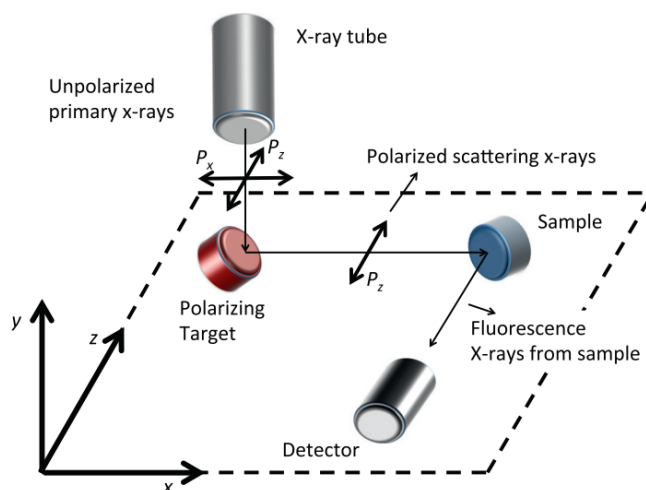
Σχήμα 2.38: Γραμμικά πολωμένο ηλεκτρομαγνητικό κύμα (Brouwer, 2003)

Η ακτινοβολία χαρακτηρίζεται ως γραμμικά πολωμένη, αν το ηλεκτρικό πεδίο της ταλαντώνεται σε ένα επίπεδο, όπως φαίνεται στο σχήμα 2.38. Αν το ηλεκτρικό πεδίο δεν έχει συγκεκριμένη διεύθυνση ταλάντωσης, τότε τα κύματα ονομάζονται μη-πολωμένα.

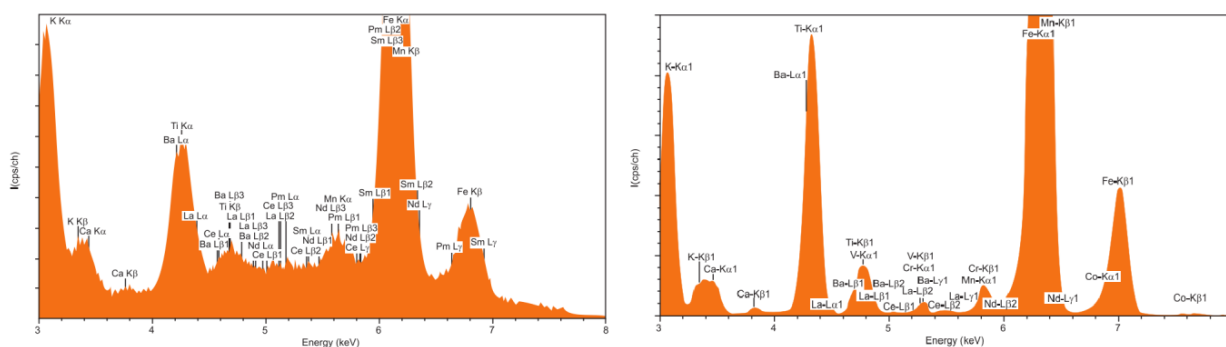


Σχήμα 2.39: Πόλωση ηλεκτρομαγνητικού κύματος μετά από μία (πάνω) και δύο (κάτω) κατακόρυφες σκεδάσεις (Brouwer, 2003)

Ένα ηλεκτρικό πεδίο  $E$  προσανατολισμένο σε οποιαδήποτε διεύθυνση μπορεί πάντα να αναλυθεί σε δύο κάθετες μεταξύ τους διευθύνσεις. Αν μη-πολωμένη ακτινοβολία σκεδαστεί από ένα δείγμα σε γωνία  $90^\circ$ , η σκεδαζόμενη ακτινοβολία θα πολωθεί ως προς μία διεύθυνση. Στο σχήμα 2.39 φαίνεται πως η κάθετη ηλεκτρική συνιστώσα δεν μπορεί να σκεδαστεί, καθώς κάτι τέτοιο θα είχε ως αποτέλεσμα αυτή να είναι παράλληλη με τη διεύθυνση διάδοσης του ηλεκτρομαγνητικού κύματος. Αυτό που απομένει είναι μόνο η οριζόντια συνιστώσα, άρα οι σκεδαζόμενες ακτίνες- $X$  είναι οριζόντια πολωμένες. Το σχήμα 2.39 δείχνει τι συμβαίνει αν οι ακτίνες- $X$  σκεδαστούν εκ νέου, αυτή τη φορά σε διεύθυνση κάθετη στην προηγούμενη διεύθυνση. Στη δεύτερη σκέδαση, η οριζόντια συνιστώσα δεν μπορεί να ανακλαστεί, καθώς θα ήταν παράλληλη με τη διεύθυνση διάδοσης του κύματος. Από την πρωτογενή ακτινοβολία, μετά δύο κάθετες μεταξύ τους σκεδάσεις και κάθετες προς την αρχική διεύθυνση διάδοσης του κύματος, δεν έχει απομείνει τίποτα. Αυτή η ιδιότητα μπορεί να χρησιμοποιηθεί στην τεχνική XRF, ώστε να εξαλειφθεί το υπόστρωμα που δημιουργείται από τις διαδοχικές σκεδάσεις, στην περίπτωση που η διάταξη περιλαμβάνει δευτερεύοντα στόχο. Μία τέτοια διάταξη για φασματοσκοπία XRF παρουσιάζεται στο σχήμα 2.40. Τα πλεονεκτήματα της χρήσης δευτερεύοντος στόχου, σε συνδυασμό με την συγκεκριμένη γεωμετρία της διάταξης γίνονται εύκολα αντιληπτά με τη σύγκριση των δύο φασμάτων στο σχήμα 2.41.



Σχήμα 2.40: Αναπαράσταση διάταξης XRF σε γεωμετρία τριών αξόνων. Ο στόχος, το δείγμα και ο ανιχνευτής βρίσκονται στο οριζόντιο επίπεδο ενώ η μηχανή ακτίνων-Χ βρίσκεται πάνω από το στόχο. (Amaro et al., 2017)



Σχήμα 2.41: Φάσματα με γεωμετρία δύο αξόνων και άμεση ακτινοβολία δείγματος (αριστερά) και με γεωμετρία τριών αξόνων και έμμεση ακτινοβολία δείγματος με χρήση δευτερεύοντος στόχου (δεξιά) (Brouwer, 2003)

#### 2.9.6.4.1 Οι φθορίζοντες στόχοι

Οι φθορίζοντες στόχοι (fluorescent targets) αξιοποιούν το φωτοηλεκτρικό φαινόμενο, που κυριαρχεί σε σύγκριση με τις σκεδάσεις. Οι χαρακτηριστικές ακτίνες-Χ που παράγονται από το δευτερεύοντα στόχο ακτινοβολούν το δείγμα και θα πρέπει να είναι μεγαλύτερης ενέργειας σε σχέση με την ενέργεια σύνδεσης των ηλεκτρονίων των στοιχείων που επιθυμούμε να ανιχνεύσουμε.

#### 2.9.6.4.2 Οι στόχοι Barkla

Αυτού του είδους οι στόχοι αξιοποιούν τις σκεδάσεις της ακτινοβολίας, που κυριαρχούν σε σύγκριση με το φωτοηλεκτρικό φαινόμενο. Κατασκευάζονται από ελαφρά στοιχεία ή ενώσεις, όπως το οξείδιο του αργιλίου  $Al_2O_3$  και το καρβίδιο του βορίου  $B_4C$ , επειδή σε αυτά ευνοούνται οι σκεδάσεις. Οι στόχοι Barkla είναι χρήσιμοι στην ανίχνευση ενός μεγάλου εύρους στοιχείων, από το Na, έως το U (Brumme, Heckel and Irmer, 1990; Heckel and Schramm, 1997).

#### 2.9.6.4.3 Οι στόχοι Bragg

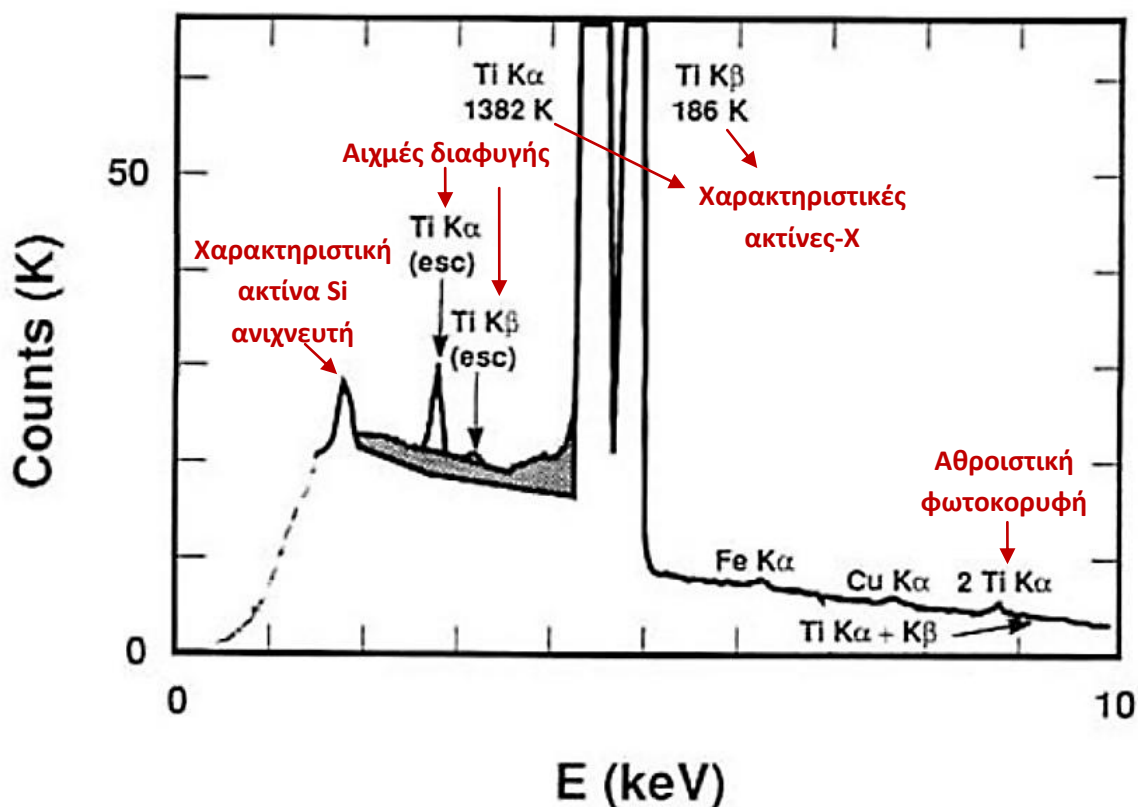
Πρόκειται ουσιαστικά για κρυστάλλους που ανακλούν μία μόνο ενέργεια (ένα μήκος κύματος) σε μία συγκεκριμένη κατεύθυνση, σύμφωνα με το νόμο του Bragg, όπως οι κρύσταλλοι που περιγράφηκαν στην ενότητα 2.9, οι οποίοι χρησιμοποιούνται στην WDXRF. Με αυτόν τον τρόπο είναι δυνατή η επιλογή μίας μόνο ενέργειας με την οποία θα ακτινοβοληθεί το δείγμα. Έτσι

επιτυγχάνεται μείωση του background και βελτίωση των ορίων ανίχνευσης της διάταξης (Heckel and Schramm, 1997).

## 2.9.7 Το φάσμα

Το φάσμα που προκύπτει κατά την εφαρμογή της τεχνικής XRF αποτελείται από διάφορες συνιστώσες, άλλες χρήσιμες (χαρακτηριστικές κορυφές συνιστωσών δείγματος) και άλλες ανεπιθύμητες (χαρακτηριστικές κορυφές στοιχείων θωράκισης και περιβάλλοντος χώρου, συνεχές Compton, αιχμές διαφυγής κλπ). Στο άξονα των τεταγμένων καταγράφεται η ένταση (counts per channel) ως συνάρτηση της ενέργειας του ανιχνευόμενου φωτονίου. Στη συνέχεια γίνεται μία παρουσίαση κάποιων συνιστωσών του φάσματος, που βοηθούν στην κατανόηση των φασμάτων που θα ακολουθήσουν στα επόμενα κεφάλαια της ΔΕ. Δεν είναι βέβαια απαραίτητο ότι όλες αυτές οι συνιστώσες θα είναι εμφανείς σε οποιοδήποτε φάσμα.

- *Χαρακτηριστικές ακτίνες-Χ*: Είναι κατά κανόνα το χρήσιμο στοιχείο του φάσματος για την τεχνική XRF. Οι κορυφές αυτές είναι ανάλογες σε μέγεθος με τη συγκέντρωση του αντίστοιχου στοιχείου στο εξεταζόμενο δείγμα. Μπορεί, όμως, κάποιες χαρακτηριστικές ακτίνες που προέρχονται από άλλα στοιχεία του χώρου ή του ανιχνευτή να είναι παρούσες στο φάσμα και να αποτελούν ανεπιθύμητη παρεμβολή (θόρυβο). (σχήμα 2.42)
- *Αιχμή Compton*: Όπως περιγράφηκε στην ενότητα 2.9.5.3, είναι η ενέργεια του ανιχνευόμενου ηλεκτρονίου, όταν μετά από οπισθοσκέδαση φωτονίου συγκεκριμένης ενέργειας στο υλικό του ανιχνευτή, αυτό διαφύγει το χωρίς να καταγραφεί. (σχήμα 2.29)
- *Αιχμή οπισθοσκέδασης*: Όπως περιγράφηκε στην ενότητα 2.9.5.3, είναι η ενέργεια των οπισθοσκεδαζόμενων φωτονίων στο περιβάλλον του ανιχνευτή που καταλήγουν να καταγραφούν. (σχήμα 2.29)
- *Αιχμές διαφυγής*: Δημιουργούνται λόγω του φωτοηλεκτρικού φαινομένου στο υλικό του ανιχνευτή. Απέχουν από τις αιχμές ελαστικής σκέδασης, την αιχμή Compton και τις χαρακτηριστικές αιχμές του δείγματος, όσο η ενέργεια της χαρακτηριστικής ακτίνας του υλικού του ανιχνευτή. (σχήμα 2.42)
- *Αθροιστικές φωτοκορυφές*: Πρόκειται για αιχμές που σχηματίζονται εξαιτίας των φωτονίων που προσπίπτουν στον ανιχνευτή συγχρόνως (ως προς τη χρονική διάκριση των ηλεκτρονικών του ανιχνευτή). Εμφανίζεται, λοιπόν, στο φάσμα καταγραφή με ενέργεια ίση με το άθροισμα των ενεργειών των δύο αρχικών φωτονίων. Το φαινόμενο αυτό εντείνεται με την αύξηση του ρυθμού καταγραφής φωτονίων στον ανιχνευτή (count rate) και του νεκρού χρόνου (dead time) του ανιχνευτή. (σχήμα 2.42)



Σχήμα 2.42: Φάσμα από εφαρμογή XRF με δείγμα από Ti και ανιχνευτή Si. Σημειώνονται οι χαρακτηριστικές ακτίνες, οι αιχμές διαφυγής και μία αθροιστική φωτοκορυφή. (Goldstein et al., 2003)

## 2.10 Η ανίχνευση των χαρακτηριστικών γραμμών K του ουρανίου

Από τους στόχους της ΔΕ ήταν η διερεύνηση της δυνατότητας ανίχνευσης του ουρανίου με την τεχνική XRF. Ο προσδιορισμός του ουρανίου, τόσο ποιοτικός, όσο και ποσοτικός, μπορεί να είναι πολύ χρήσιμος στην ανάλυση δειγμάτων περιβαλλοντικής σημασίας, όπως χώματος, τέφρας από την καύση ορυκτών καυσίμων ή άλλων παραπροϊόντων βιομηχανικών διεργασιών. Επίσης, χρήσιμος είναι ο προσδιορισμός της ποσότητας του ουρανίου και άλλων υπερουράνιων στοιχείων, σε εγκαταστάσεις πυρηνικού ενδιαφέροντος (εγκαταστάσεις απόθεσης, επεξεργασίας και ανακύκλωσης ραδιενεργών αποβλήτων). Η χρήση της τεχνικής XRF είναι ευρέως διαδεδομένη για τέτοιου είδους αναλύσεις, όπου κατά κανόνα χρησιμοποιούνται οι χαρακτηριστικές γραμμές L του ουρανίου στην ενεργειακή περιοχή 13-18 keV.

Παρά το γεγονός ότι η μέθοδος της ανίχνευσης του ουρανίου με τη χρήση της XRF είναι μία αξιόπιστη, μη-καταστροφική, γρήγορη και οικονομική διαδικασία, η επιλογή της διέγερσης των γραμμών L παρουσιάζει και ορισμένα μειονεκτήματα. Το κυριότερο από αυτά είναι ότι οι γραμμές L του ουρανίου βρίσκονται σε μία ενεργειακή περιοχή με πολλές παρεμβολές (*interferences*), δηλαδή αλληλεπικαλύψεις με χαρακτηριστικές γραμμές K άλλων στοιχείων χαμηλότερου Z (ενδεικτικά αναφέρεται ότι η κύρια παρεμβολή για την κορυφή U-L<sub>α</sub> προέρχεται από το ρουβίδιο, ενώ για την U-L<sub>β1</sub> από το μολυβδαίνιο). Επιπλέον, οι γραμμές L λόγω της χαμηλότερης ενέργειας τους,



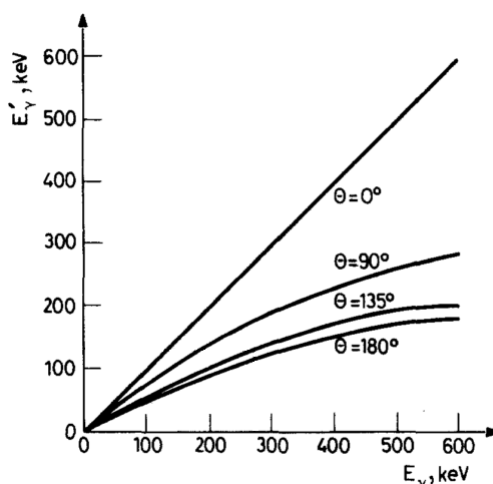
παρουσιάζουν σημαντική εξασθένηση και αυτοαπορρόφηση στο δείγμα και συνεπώς του παρέχουν πληροφορίες για ένα μικρό επιφανειακό τμήμα του δείγματος. Ακόμα, σε εφαρμογές in-situ, όπου τα δείγματα δεν μεταφέρονται σε εργαστηριακό περιβάλλον, ούτε υφίστανται επεξεργασία, αλλά για παράδειγμα ρέουν σε αγωγούς ή βρίσκονται σε δοχεία για την αποφυγή ραδιενεργού ρύπανσης, τυχόν επικαθίσεις στα τοιχώματα μπορούν να αποτελέσουν εμπόδιο για την επιτυχή αναγνώριση των επιθυμητών ισοτόπων, λόγω της περιορισμένης διείσδυσης. Η απόδοση φθορισμού της σειράς L είναι μεν υψηλή, αλλά απέχει κατά πολύ από τα επίπεδα της σειράς K.

Η εφαρμογή της τεχνικής XRF με αξιοποίηση των χαρακτηριστικών ακτίνων K του ουρανίου ( $K_{\alpha 2}$  @ 94.665 keV,  $K_{\alpha 1}$  @ 98.439 keV,  $K_{\beta 3}$  @ 110.42 keV,  $K_{\beta 1}$  @ 111.30 keV και  $K_{\beta 2}$  @ 114.56 keV), ξεπερνά αυτά τα προβλήματα. Η ενεργειακή περιοχή των γραμμών K αποτελεί μία περιοχή με ελάχιστες παρεμβολές και οι χαρακτηριστικές ακτίνες-X έχουν πολύ μεγαλύτερη διαπερατότητα, ενώ ταυτόχρονα η απόδοση φθορισμού για μεγάλα Z είναι σχεδόν ίση με τη μονάδα. Παρ' όλα αυτά, η υψηλή τάση των μηχανών ακτίνων-X που χρησιμοποιούνται στις κοινές φασματομετρικές διατάξεις XRF είναι συνήθως πολύ χαμηλότερη από την απαιτούμενη για τη διέγερση της στιβάδας K βαρέων στοιχείων (αιχμή K ουρανίου: 115.6 keV). Είναι αναγκαίο λοιπόν να χρησιμοποιηθεί διεγείρουσα ακτινοβολία υψηλότερης ενέργειας. Αυτές οι ενέργειες μπορούν να παραχθούν από μηχανές ακτίνων-X που προορίζονται υπό κανονικές συνθήκες για άλλες χρήσεις, όπως η βιομηχανική ραδιογραφία, ή από ραδιοϊσότοπα όπως αυτά που περιγράφηκαν στην ενότητα 2.9.3 και εκπέμπουν τις επιθυμητές ενέργειες φωτονίων. Και οι δύο μέθοδοι διέγερσης διαθέτουν πλεονεκτήματα και μειονεκτήματα.

Η διέγερση των δειγμάτων με τη χρήση ραδιοϊσοτόπων αποτελεί μία άλλη αξιόπιστη λύση, καθώς τα φωτόνια που παράγονται είναι ανεξάρτητα από εξωτερικούς παράγοντες και την παροχή ηλεκτρικού ρεύματος. Η μονοενεργειακή φύση των φωτονίων που παράγονται είναι ένα πολύ σημαντικό πλεονέκτημα, καθώς επιλέγεται έτσι ώστε να μη δημιουργεί παρεμβολές με την περιοχή ενδιαφέροντος. Βέβαια, ανάλογα με το χρησιμοποιούμενο ισότοπο, μπορεί να απαιτείται η ανανέωση του ανά τακτά διαστήματα, σε περίπτωση που ο χρόνος ημιζωής του είναι μικρός. Επίσης, η χρήση τέτοιων πηγών δημιουργεί την ανάγκη επαρκούς θωράκισής τους, που εξαρτάται σε μεγάλο βαθμό από τη ραδιενέργεια της πηγής, η οποία συνήθως είναι υψηλή ώστε να επιτυγχάνονται υψηλές ροές φωτονίων.

Οι πηγές που χρησιμοποιούνται για την τεχνική της XRF στην ενεργειακή περιοχή του ουρανίου και των υπερουράνιων στοιχείων, με βάση τις αιχμές απορρόφησης των στιβάδων K αυτών των στοιχείων, θα ήταν λογικό να είναι ισότοπα που διασπώμενα θα παρήγαγαν φωτόνια ενέργειας λίγο πιο υψηλής από αυτές τις αιχμές (π.χ. για το ουράνιο: 115.6 keV), όπως το κοβάλτιο-57 ( $^{57}\text{Co}$ ), που εκπέμπει χαρακτηριστικές ακτίνες στα 122.06 και 136.47 keV. Όμως μία τέτοια διέγερση επιφέρει παράλληλα την αύξηση του υποστρώματος λόγω φαινομένου Compton στην περιοχή ενδιαφέροντος. Αντίθετα, χρησιμοποιώντας ισότοπα που παράγουν φωτόνια στα επίπεδα άνω των 180 keV ή ακόμα και άνω των 300 keV, επιτυγχάνουμε τη μετατόπιση του συνεχούς υποστρώματος Compton σε μεγαλύτερες ενέργειες από τις χαρακτηριστικές των στοιχείων των οποίων είναι επιθυμητή η ανίχνευση, όπως φαίνεται στο σχήμα 2.43), αν και η ενεργός διατομή του φθορισμού είναι πολύ χαμηλότερη. Ευρέως διαδεδομένα ισότοπα για τέτοια χρήση είναι ιδιαίτερα το βάριο-133 ( $^{133}\text{Ba}$ ), το ιρίδιο-192 ( $^{192}\text{Ir}$ ) ή ακόμη και το κάισιο-137 ( $^{137}\text{Cs}$ ). Κάθε ισότοπο διαθέτει διαφορετικά χαρακτηριστικά που το καθιστούν περισσότερο ή λιγότερο ελκυστικό ως πηγή για εφαρμογές XRF, όπως: ενέργεια παραγόμενων φωτονίων, χρόνος ημιζωής, ραδιενέργεια πηγής,

απαιτούμενη θωράκιση και κόστος κτήσης (Andrew and Taylor, 1981; Hofmann, Hoffmann and Lieser, 1987).



Σχήμα 2.43: Ενέργεια σκεδαζόμενων φωτονίων λόγω φαινομένου Compton στο δείγμα, ως συνάρτηση της γωνίας σκέδασης και της ενέργειας πρωτογενών φωτονίων (Hofmann, Hoffmann and Lieser, 1987).

Η χρήση ισχυρής πηγής ακτίνων-Χ παρουσιάζει πλεονεκτήματα έναντι της εναλλακτικής των ραδιοϊσοτόπων. Το κυριότερο από αυτά είναι ότι η μηχανή ακτίνων-Χ δεν απαιτεί συνεχή θωράκιση, αλλά μόνο κατά τη λειτουργία της. Επίσης, είναι εύκολη η ρύθμιση της έντασης της παραγόμενης ακτινοβολίας, καθώς και της μέγιστης ενέργειας των παραγόμενων φωτονίων. Όπως σε κάθε μηχανή ακτίνων-Χ το φάσμα διέγερσης δεν είναι μονοενεργειακό, αλλά μία επαλληλία συνεχούς και γραμμικού φάσματος. Περιλαμβάνει, λοιπόν, όχι μόνο τις επιθυμητές ενέργειες φωτονίων, αλλά και άλλες ενέργειες που δημιουργούν παρεμβολές στις περιοχές ενδιαφέροντος και δυσχεραίνουν την επιτυχή ανίχνευση. Χρήση κατάλληλων φίλτρων μπορεί να προσδώσει στο φάσμα την επιθυμητή μορφή, αλλά πάντα με επιπτώσεις στην ένταση της διεγείρουσας δέσμης.

Στη βιβλιογραφία, έχουν υπάρξει προσπάθειες ποιοτικού και ποσοτικού προσδιορισμού ουρανίου, μέσω της διέγερσης και ανίχνευσης των χαρακτηριστικών ακτίνων K. Οι περισσότερες προσπάθειες χρησιμοποιούν ως πηγή διέγερσης ραδιοϊσότοπα, λόγω της μονοενεργειακής φύσης των φωτονίων που εκπέμπουν (Hofmann, Hoffmann and Lieser, 1987; Pilz *et al.*, 1987; Pilz, Hoffmann and Lieser, 1989), άλλα δεν είναι λίγες οι φορές που έχουν χρησιμοποιηθεί διατάξεις με μηχανές ακτίνων-Χ υψηλής ενέργειας (Andrew and Taylor, 1981; Robertson and Feather, 2004). Επίσης, ο συνδυασμός της τεχνικής XRF με άλλες μεθόδους, όπως είναι η εξασθένιση των ακτίνων-Χ στην περιοχή της αιχμής απορρόφησης K του ουρανίου (115.6 keV), έχει εξετασθεί στοχεύοντας στη βελτίωση της ακρίβειας των αποτελεσμάτων, συνδυάζοντας τα πλεονεκτήματα των δύο μεθόδων (Ottmar *et al.*, 1986).

Η επιλογή της μέγιστης ενέργειας των παραγόμενων ακτίνων-Χ από τη μηχανή, αντίστοιχα με την επιλογή των ραδιοϊσοτόπων με βάση τις ενέργειες των φωτονίων που εκπέμπουν, είναι μία δύσκολη διαδικασία. Η ικανοποιητική απορρόφηση των φωτονίων κοντά στην αιχμή K και η ικανοποιητική μετατόπιση του συνεχούς Compton, ώστε οι χαρακτηριστικές ακτίνες-Χ του ουρανίου στο παραγόμενο φάσμα να είναι και ισχυρές και απαλλαγμένες από έντονο υπόστρωμα, είναι δύο παράγοντες ανταγωνιστικοί μεταξύ τους. Η εύρεση μίας βέλτιστης τιμής της υψηλής τάσης είναι συχνά μία επίπονη διαδικασία, που εξαρτάται παράλληλα και από πολλούς άλλους παράγοντες. Μερικοί από αυτούς είναι τα διαθέσιμα φίλτρα για τη διαμόρφωση του φάσματος

διέγερσης, η γωνίες μεταξύ πηγής, ανιχνευτή και δείγματος, η χρήση ή μη δευτερευόντων στόχων και οι δυνατότητες των διαθέσιμων μηχανών ακτίνων-Χ.

## 2.11 Η ανίχνευση των χαρακτηριστικών γραμμών Κ των σπανίων γαιών

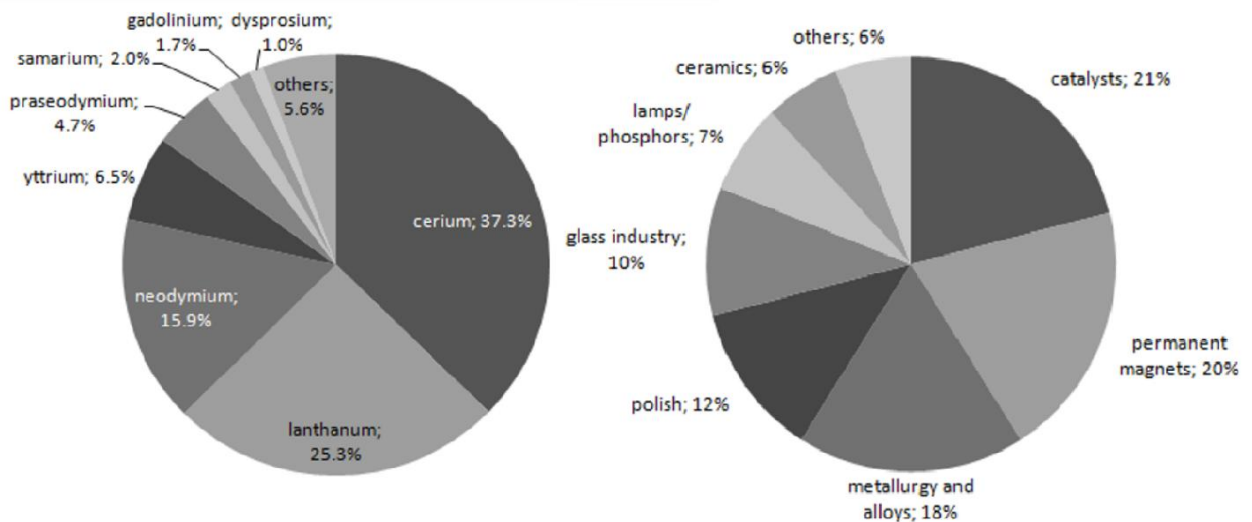
Οι σπάνιες γαίες (*Rare Earth Elements – REE*) είναι ένα σύνολο δεκαεπτά μεταλλικών στοιχείων του περιοδικού πίνακα: των δεκαπέντε λανθανίδων, του σκάνδιου (Sc) και του ύττριου (Y). Ο πίνακας 2.5 παρέχει μία λίστα όλων των σπάνιων γαιών. Τα στοιχεία αυτά είναι απαραίτητα σε διάφορους τομείς της βιομηχανίας σήμερα. Μερικές από τις πιο διαδεδομένες χρήσεις τους είναι οι εξής: (Brumme, 2014)

- μόνιμοι μαγνήτες για ηλεκτροκινητήρες οχημάτων και ανεμογεννήτριες (Nd, Pr, Dy, Tb)
- λαμπτήρες και τηλεοράσεις νέας τεχνολογίας (Eu, Tb, Y)
- επαναφορτιζόμενες μπαταρίες (La)
- καταλύτες (Ce)

Πίνακας 2.5: Κατάλογος σπάνιων γαιών

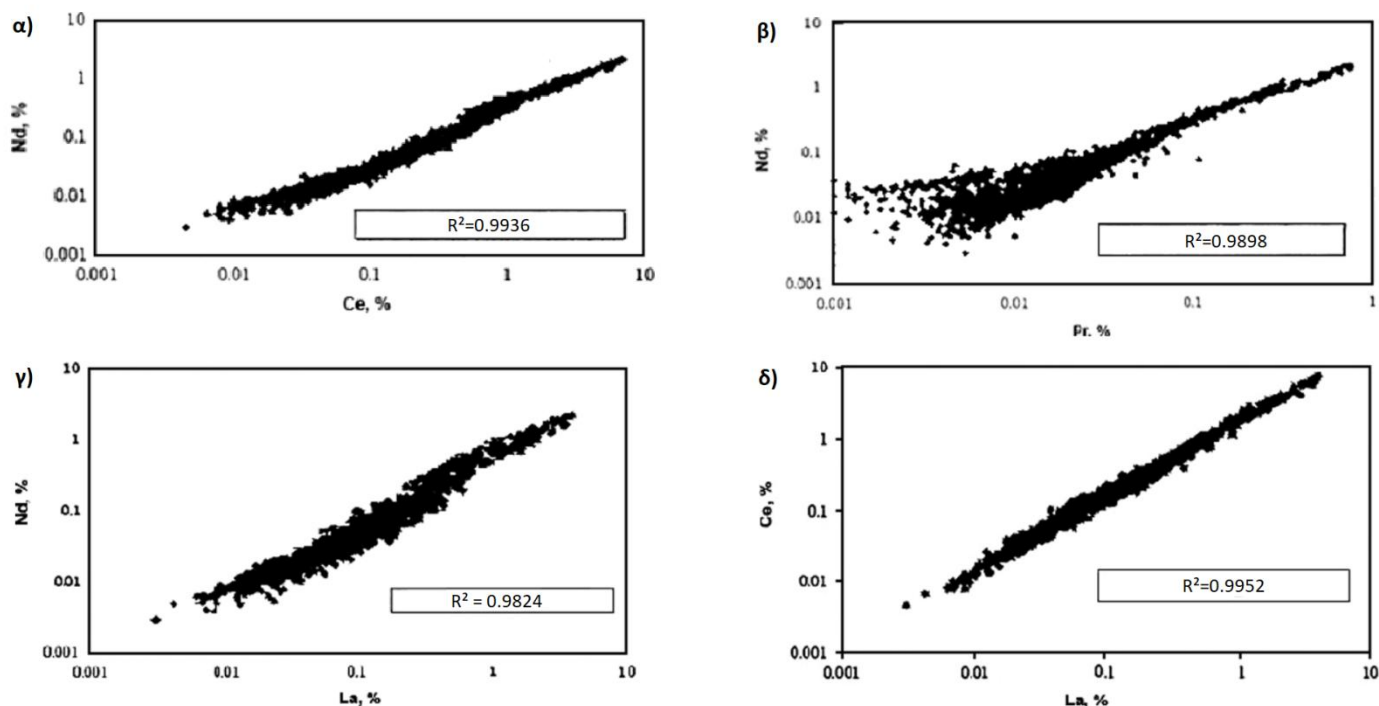
Όνομα στοιχείου	Ατομικός αριθμός και συμβολισμός	Όνομα στοιχείου	Ατομικός αριθμός και συμβολισμός
Λανθάνιο	<sup>57</sup> La	Δυσπρόσιο	<sup>66</sup> Dy
Δημήτριο	<sup>58</sup> Ce	Χόλμιο	<sup>67</sup> Ho
Πρασεοδύμιο	<sup>59</sup> Pr	Έρβιο	<sup>68</sup> Er
Νεοδύμιο	<sup>60</sup> Nd	Θούλιο	<sup>69</sup> Tm
Προμήθιο	<sup>61</sup> Pm	Υττέρβιο	<sup>70</sup> Yb
Σαμάριο	<sup>62</sup> Sm	Λουτήτιο	<sup>71</sup> Lu
Ευρώπιο	<sup>63</sup> Eu	Σκάνδιο	<sup>21</sup> Sc
Γαδολίνιο	<sup>64</sup> Gd	Ύττριο	<sup>39</sup> Y
Τέρβιο	<sup>65</sup> Tb		

Στο σχήμα 2.44 (αριστερά), παρουσιάζονται οι πλέον χρησιμοποιηθείσες σπάνιες γαίες το 2010 στη βιομηχανία. Τα στοιχεία που κυριαρχούν είναι το δημήτριο (37.3%), το λανθάνιο (25.3%), το νεοδύμιο (15.9%) και το ύττριο (6.5%). Οι υπόλοιπες σπάνιες γαίες κατέχουν ένα σχετικά μικρό ποσοστό (συνολικά 15.2%) της συνολικής παραγωγής. Αυτός είναι ο κύριος λόγος – μαζί με τη σχετικά μεγάλη συγκέντρωση των προαναφερθέντων στοιχείων στο φλοιό της γης – για τον οποίον στα πλαίσια της ΔΕ διερευνάται η δυνατότητα ανίχνευσής τους.



Σχήμα 2.44: Εκτιμώμενη παραγωγή REE το 2010 (αριστερά) και κατανάλωση REE από τους διάφορους τομείς τη βιομηχανίας το 2008 (δεξιά) (Brumme, 2014)

Για την ανίχνευση και τον ποσοτικό προσδιορισμό των σπάνιων γαιών, εκτός των συμβατικών χημικών μεθόδων, υπάρχουν και αρκετές άλλες μέθοδοι, όπως η ανάλυση νετρονικής ενεργοποίησης, η ατομική απορρόφηση και η φασματοσκοπία XRF. Οι χημικές μέθοδοι για την ανίχνευση συγκεκριμένων στοιχείων είναι εν γένει χρονοβόρες, καθώς οι χημικές ιδιότητες των σπάνιων γαιών είναι παρόμοιες μεταξύ τους. Επιπλέον, ως επί το πλείστον οι διάφορες σπάνιες γαίες βρίσκονται μαζί σε ορυκτά (βλ. σχήμα 2.45). Η μέθοδος της ατομικής απορρόφησης χρησιμοποιείται για τον προσδιορισμό των REE, αλλά απαιτεί τη διάλυση των ορυκτών δειγμάτων και δεν είναι ευαίσθητη σε δύο από τα πιο διαδεδομένα στοιχεία: το λανθάνιο και το δημήτριο, ενώ επιπλέον είναι πολύ χρονοβόρα (Kirkbright and Sargent, 1974). Η μέθοδος της νετρονικής ενεργοποίησης έχει πλεονεκτήματα, ως προς τον ταχύ και ταυτόχρονο προσδιορισμό διαφόρων στοιχείων, όμως τα κύρια μειονεκτήματά της είναι ότι η ανάλυση είναι ακριβή και απαιτεί χρονοβόρες διαδικασίες προετοιμασίας (LaBrecque, Beusen and van Grieken, 1986).



Σχήμα 2.45: Συσχέτιση των συγκεντρώσεων των (α) Ce-Nd, (β) Pr-Nd, (γ) La-Nd, (δ) La-Ce σε πετρώματα (Zuzaan, Gansukh and Bolortuya, 2010)

Η ανάλυση με τη μέθοδο EDXRF είναι απλή, δεν απαιτεί περίπλοκη προεργασία, είναι σχετικά φθηνή και παρουσιάζει επαρκή ακρίβεια (LaBrecque, Parker and Adames, 1980; Hoffmann, 1986). Για τη διέγερση των δειγμάτων έχουν χρησιμοποιηθεί κυρίως ραδιοϊσότοπα (LaBrecque, Parker and Adames, 1980; LaBrecque, Beusen and van Grieken, 1986; Leenanuran and Ratanalert, 1989; Bhagavathy *et al.*, 1991; Marco Parra *et al.*, 1993; Zuzaan, Gansukh and Bolortuya, 2010), αλλά και ακτινοβολία συγχρότρου (Baryshev *et al.*, 1987) και συμβατικές μηχανές ακτίνων-Χ, με ή χωρίς χρήση δευτερεύοντος στόχου (Jaworowski *et al.*, 1968; Stephens and Calder, 2004). Οι περισσότερες προσπάθειες επικεντρώνονται στην ανίχνευση των γραμμών K των σπάνιων γαιών, επειδή σε σύγκριση με τις γραμμές L βρίσκονται σε μία ενεργειακή περιοχή με λιγότερες παρεμβολές από άλλα στοιχεία και κατανέμονται πιο αραιά, έχοντας έτσι μειωμένες απαιτήσεις ως προς τη διακριτική ικανότητα της ανιχνευτικής διάταξης.

Πίνακας 2.6: Στοιχεία που δημιουργούν παρεμβολές στην ανίχνευση των La, Ce και Nd λόγω της ενέργειας των χαρακτηριστικών τους ακτίνων (Zuzaan, Gansukh and Bolortuya, 2010)

Στοιχείο	Ενέργεια $K_{\alpha 2}$ , $K_{\alpha 1}$ [keV]	Στοιχείο παρεμβολής	Ενέργεια [keV]
La	33.03	I- $K_{\beta 2}$	33.02
	33.44		
Ce	34.28	Cs- $K_{\beta 1}$	34.98
	34.72		
Nd	36.84	Ba- $K_{\beta 2}$	37.25
	37.36	La- $K_{\beta 1}$	37.80

## 2.12 Η πειραματική διάταξη του ΕΠΤ-ΕΜΠ

Η πειραματική διάταξη που θα χρησιμοποιηθεί στα πλαίσια της ΔΕ στηρίχθηκε σε εξοπλισμό που είναι διαθέσιμος στο ΕΠΤ-ΕΜΠ. Για τη διέγερση των δειγμάτων επιλέχθηκε η χρήση της πηγής ακτίνων-Χ υψηλής ενέργειας που χρησιμοποιείται για βιομηχανικής ραδιογραφίας, ενώ για την ανίχνευση των χαρακτηριστικών ακτίνων του ουρανίου και των σπανίων γαιών χρησιμοποιήθηκαν ο ανιχνευτής BEGe και ο φορητός ανιχνευτής Si, αντίστοιχα.

### 2.12.1 Η μηχανή ακτίνων-Χ

Η μηχανή ακτίνων-Χ που διαθέτει το ΕΠΤ-ΕΜΠ, η οποία χρησιμοποιείται για τις ανάγκες της βιομηχανικής ραδιογραφίας είναι μοντέλο SEIFERT ERESKO 42 MF3.1 της εταιρείας General Electric (GE). Διαθέτει στόχο ανόδου από βολφράμιο (W) και μπορεί να επιτύχει συνεχή Υψηλή Τάση 200kV. Το παράθυρο της μηχανής είναι από Be, ενώ δίνεται η δυνατότητα να καλυφθεί από κάλυμμα (τάπα) κατασκευασμένο από βολφράμιο, όταν η μηχανή προθερμαίνεται για την αποφυγή άσκοπης ακτινοβολήσης του χώρου. Το ρεύμα της μηχανής μπορεί να λάβει τιμές από 0.5 mA έως 10 mA, ενώ η μέγιστη ισχύς που μπορεί να παραχθεί είναι 900 W (4.5 mA/200 kV). Η εκπεμπόμενη δέσμη ακτίνων-Χ έχει κωνικότητα  $40^{\circ} \times 60^{\circ}$ , στα επίπεδα παράλληλα και κάθετα στη μηχανή, αντίστοιχα. Η χρήση της μηχανής αυτής είναι καταρχήν βιομηχανική, όμως η υψηλή ενέργεια των φωτονίων που παράγει, μπορεί να φανεί χρήσιμη σε άλλα πεδία, όπως η φασματοσκοπία XRF υψηλών ενεργειών.



Σχήμα 2.46: Η μηχανή ακτίνων-Χ SEIFERT ERESKO MF3.1 της GE

### 2.12.2 Ο ανιχνευτής BEGe

Ο ανιχνευτής BEGe (Broad Energy Germanium detector) που διαθέτει το ΕΠΤ-ΕΜΠ για τις ανάγκες in-situ φασματοσκοπίας είναι μοντέλο BE3825 της εταιρείας Canberra Industries, με σειριακό αριθμό (s/n) b04070. Αποτελεί επίπεδο ανιχνευτή με ενεργό επιφάνεια  $3800 \text{ mm}^2$ , ενεργό διάμετρο 70 mm και πάχος 25 mm. Το σχήμα του οδηγεί σε υψηλή απόδοση για φωτόνια ενέργειας έως 1 MeV για τυπικές γεωμετρίες δειγμάτων. Το παράθυρο του ανιχνευτή είναι κατασκευασμένο από ανθρακονήματα και έχει πάχος 0.5 mm. Το παράθυρο του συγκεκριμένου ανιχνευτή δεν είναι

κατασκευασμένο από Be, καθώς έχει δοθεί προτεραιότητα στη στιβαρότητα και την αντοχή του συστήματος, σε σχέση με την αξιοποίηση των δυνατοτήτων ανίχνευσης πολύ χαμηλών ενεργειών, λόγω της χρήσης του ανιχνευτή σε in-situ εφαρμογές. Παρ' όλα αυτά το παράθυρο από ανθρακονήματα προσφέρει πολύ χαμηλή εξασθένιση της ακτινοβολίας και σε ενέργειες χαμηλότερες των 10 keV. Το πιστοποιητικό του κατασκευαστή του ανιχνευτή BEGe που χρησιμοποιήθηκε στα πλαίσια της ΔΕ περιλαμβάνεται στο παράρτημα Γ.

Στα πλαίσια προγενέστερης ΔΕ που εκπονήθηκε στο ΕΠΤ-ΕΜΠ, προσδιορίστηκαν τα γεωμετρικά χαρακτηριστικά του ανιχνευτή και πιο συγκεκριμένα η νεκρή περιοχή (dead layer) του στη μετωπική (front), στην οπίσθια (back) και στην παράπλευρη (side) επιφάνεια (Αγραφιώτης, 2009).



Σχήμα 2.47: Ο ανιχνευτής BEGe του ΕΠΤ-ΕΜΠ

### 2.12.3 Ο ανιχνευτής Si-PIN

Ο ανιχνευτής Si-PIN που διαθέτει το ΕΠΤ-ΕΜΠ είναι μοντέλο XR-100CR της εταιρείας AMPTEK, με σειριακό αριθμό (s/n) 2194. Η ενεργός επιφάνεια του ανιχνευτή είναι 13 mm<sup>2</sup>, ενώ το πάχος του είναι 500 μm. Διαθέτει παράθυρο από βηρύλλιο πάχους 0.5 mil = 12.7 μm. Ακόμα, περιέχει εσωτερικό κατευθυντή δέσμης (*internal collimator*) με διάμετρο 3.76 mm και πάχος 700 μm. Το collimator κατασκευάζεται από υλικό πολλών στρώσεων (*multilayer collimator*). Αποκόπτει αποδοτικά τις ακτίνες-X που κατευθύνονται προς τα άκρα του ενεργού όγκου του ανιχνευτή, όπου η ποιότητα ανίχνευσης είναι κακή και μπορεί να δημιουργηθεί θόρυβος λόγω μερικής ανίχνευσης φορτίων, χρησιμοποιώντας μία βάση από βολφράμιο και διαδοχικές στρώσεις από χαμηλότερου ατομικού αριθμού στοιχεία. Συγκεκριμένα η βάση από βολφράμιο (W) καλύπτεται από μία πρώτη στρώση από χρώμιο (Cr), μία δεύτερη από τιτάνιο (Ti) και μία τρίτη από αλουμίνιο (Al). Με τον τρόπο αυτό ο κατευθυντής επιτρέπει σε ένα περιορισμένο όγκο του ανιχνευτή να δεχθεί φωτόνια προς ανίχνευση.

Ο ανιχνευτής Amptek XR-100CR είναι ένας φορητός ανιχνευτής με καλές επιδόσεις, αξιόπιστος, χαμηλού κόστους κτήσης και χωρίς απαιτούμενες διαδικασίες συντήρησης. Σε σύγκριση με άλλους

ημιαγωγούς ανιχνευτές πυριτίου, όπως για παράδειγμα ο σταθερός SiLi, που μπορεί να χρησιμοποιηθούν για τους ίδιους σκοπούς, υστερεί ως προς την απόδοση και τη διακριτική ικανότητα. Ψύχεται από θερμοηλεκτρικό ψύκτη, που αξιοποιεί το φαινόμενο Peltier, στους  $-55\text{ }^{\circ}\text{C}$ , μειώνοντας τον ηλεκτρικό θόρυβο χωρίς την ανάγκη χρήσης υγρού αζώτου. Ο ψύκτης συνδέεται με τον κρύσταλλο του ανιχνευτή μέσω ενός δίσκου, που ονομάζεται υπόστρωμα (substrate). Η ψύξη με τη μέθοδο αυτή είναι σημαντική, καθώς επιτρέπει καλές επιδόσεις και παράλληλα μικρό μέγεθος ανιχνευτή και συμπαγή κατασκευή. Για βέλτιστη ψύξη μέσα στο περίβλημα του ανιχνευτή υπάρχει κενό. Ο προενισχυτής περικλείεται σε ένα μεταλλικό κουτί διαστάσεων  $3 \times 1.75 \times 1.125\text{ in}$ , που συνδέεται άμεσα με τον ανιχνευτή ή με μία προέκταση. Για να διευκολυνθεί η διαδικασία της δημιουργίας φορέων φορτίου κατά την πρόσπτωση ακτινοβολίας, εφαρμόζεται τάση 100-200V, ανάλογα με το πάχος του όγκου ανίχνευσης. Αυτή η τάση είναι υψηλή για χρήση σε θερμοκρασία περιβάλλοντος, καθώς θα οδηγήσει σε αυξημένο ρεύμα διαρροής. Η ψύξη όμως του ανιχνευτή, διατηρεί το ρεύμα διαρροής σε αποδεκτά επίπεδα και επιτρέπει την εφαρμογή της τάσης.



Σχήμα 2.48: Ο ανιχνευτής Si-PIN του ΕΠΤ-ΕΜΠ





# 3 Η ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΗ MONTE-CARLO ΚΑΙ Ο ΚΩΔΙΚΑΣ PENELOPE

---

## 3.1 Monte-Carlo

Από τους βασικούς στόχους της ΔΕ είναι η προσομοίωση της λειτουργίας μίας διάταξης XRF η οποία συγκροτείται από συνιστώσες που διατίθενται στο ΕΠΤ-ΕΜΠ και η προσπάθεια βελτιστοποίησης του σχεδιασμού μίας τέτοιας διάταξης. Για την προσομοίωση αυτή χρησιμοποιήθηκε η τεχνική Monte-Carlo, η οποία παρουσιάζεται συνοπτικά στη συνέχεια.

Το όνομα Monte-Carlo χρησιμοποιήθηκε τη δεκαετία του 1940 από επιστήμονες που εργάζονταν στο πρόγραμμα πυρηνικών όπλων του εργαστηρίου του Los Alamos για να ορίσει μία κατηγορία αριθμητικών μεθόδων που βασίζονται στη χρήση τυχαίων αριθμών. Οι μέθοδοι Monte-Carlo είναι μία κατηγορία υπολογιστικών αλγορίθμων που βασίζονται σε επαναλαμβανόμενες τυχαίες δειγματοληψίες, ώστε να οδηγήσουν σε αριθμητικά αποτελέσματα. Η βασική ιδέα είναι η χρήση της τυχειότητας για την επίλυση προβλημάτων που μπορεί να είναι ακόμα και καταρχήν ντετερμινιστικά. Σήμερα, οι μέθοδοι Monte-Carlo χρησιμοποιούνται ευρέως για να επιλύσουν περίπλοκα φυσικά και μαθηματικά προβλήματα, ιδιαίτερα όσα περιλαμβάνουν πολλαπλές ανεξάρτητες μεταβλητές, για την επίλυση των οποίων οι συμβατικές αριθμητικές μέθοδοι θα απαιτούσαν πολύ μεγάλες ποσότητες μνήμης και υπολογιστικού χρόνου.

Βασικό στοιχείο της μεθόδου Monte-Carlo είναι η γεννήτρια τυχαίων αριθμών. Μία γεννήτρια τυχαίων αριθμών είναι μία υπολογιστική ή φυσική μέθοδος που παράγει αριθμούς, οι οποίοι δεν ακολουθούν κάποιο σειριακό μοτίβο και κατανέμονται τυχαία. Από πολύ παλιά, έχουν εφαρμοστεί διάφοροι τρόποι για τη δημιουργία τυχαίων γεγονότων-αριθμών, όπως ζάρια, νομίσματα, τροχοί ρουλέτας και κάρτες. Αυτές οι φυσικές μέθοδοι δεν είναι πρακτικές, όταν απαιτείται ένα μεγάλο πλήθος τυχαίων αριθμών. Αντίθετα, χρησιμοποιούνται μαθηματικοί αλγόριθμοι που είναι ικανοί να παράγουν μία πολύ μεγάλη ροή τυχαίων αριθμών.

Στην προσομοίωση Monte-Carlo της μεταφοράς και αλληλεπίδρασης της ακτινοβολίας (φωτονίου ή σωματιδίου), η ιστορία (πορεία) ενός σωματιδίου αντιμετωπίζεται ως μία τυχαία ακολουθία από ελεύθερες κινήσεις του σωματιδίου. Η κάθε κίνηση τελειώνει με μία αλληλεπίδραση, όπου το σωματίδιο αλλάζει κατεύθυνση κίνησης, χάνει ένα μέρος της ενέργειας του ή/και παράγει δευτερεύοντα σωματίδια. Η προσομοίωση μίας δεδομένης πειραματικής διάταξης αποτελείται από την αριθμητική δημιουργία τυχαίων ιστοριών. Για την προσομοίωση αυτών των ιστοριών είναι αναγκαίος ο ορισμός ενός μοντέλου αλληλεπίδρασης (*interaction model*), δηλαδή ένα σύνολο από διαφορικές ενεργές διατομές (*differential cross sections – DCS*) για τους σχετικούς μηχανισμούς αλληλεπίδρασης. Οι DCS καθορίζουν τη *συνάρτηση κατανομής πιθανότητας* (*probability density function – PDF*) των τυχαίων μεταβλητών που χαρακτηρίζουν μία ιστορία: ελεύθερη διαδρομή μεταξύ διαδοχικών γεγονότων αλληλεπίδρασης, είδος αλληλεπίδρασης που συμβαίνει, απώλεια ενέργειας και γωνιακή εκτροπή μετά από ένα γεγονός, αρχική κατάσταση δευτερεύοντος παραγόμενου σωματιδίου. Όταν αυτές είναι γνωστές οι PDF για τις παραπάνω μεταβλητές, μπορούν να δημιουργηθούν τυχαίες ιστορίες, χρησιμοποιώντας κατάλληλες μεθόδους

τυχαίας δειγματοληψίας. Αν το πλήθος των ιστοριών που δημιουργήθηκαν είναι ικανά μεγάλο, τότε μπορεί να ληφθεί αξιόπιστη ποσοτική πληροφορία σε σχέση με τη διαδικασία μετακίνησης του φωτονίου ή του σωματιδίου υπολογίζοντας τις μέσες τιμές για τις ιστορίες που προσομοιώθηκαν.

Το βασικό μειονέκτημα της μεθόδου Monte-Carlo έγκειται στην τυχαία φύση της. Όλα τα αποτελέσματα επηρεάζονται από στατιστικές αβεβαιότητες, που μπορούν να μειωθούν αυξάνοντας το πλήθος των ιστοριών και κατά συνέπεια του υπολογιστικού χρόνου. Υπό ειδικές συνθήκες, οι στατιστικές αβεβαιότητες μπορούν να ελαττωθούν χρησιμοποιώντας τεχνικές μείωσης διακύμανσης (Salvat, Fernández-Varea and Sempau, 2011; Thomopoulos, 2013).

Σήμερα για την προσομοίωση της μετάδοσης ακτινοβολίας στην ύλη και την αλληλεπίδρασή της με αυτή χρησιμοποιούνται διάφορα υπολογιστικά πακέτα. Ορισμένα ευρέως χρησιμοποιούμενα πακέτα είναι το Geant4: (Agostinelli *et al.*, 2003), το MCSHAPE: (Scot *et al.*, 2007; Scot and Fernandez, 2015), το MCNP: (Briesmeister, 2000; Trojek and Echák, 2007) και το PENELOPE: (Salvat, Fernández-Varea and Sempau, 2011), τα οποία, εν γένει, έχουν παρόμοιες δυνατότητες. Το τελευταίο είναι αυτό που χρησιμοποιήθηκε στην παρούσα ΔΕ για την εκτέλεση των προσομοιώσεων και για αυτό, αναλύεται περαιτέρω στη συνέχεια.

## 3.2 Ο κώδικας PENELOPE

Ο κώδικας PENELOPE (Penetration and ENergy Loss of Positrons and Electrons) αναπτύχθηκε από τους Francesc Salvat, Jose Maria Fernandez-Varea και Josep Sempau στο Πανεπιστήμιο της Βαρκελώνης το 1996. Έχουν δημοσιευτεί αρκετές εκδόσεις με βελτιώσεις του κώδικα (2000, 01, 03, 05, 06, 08, 11 και 14). Η έκδοση του 2011 του κώδικα είναι αυτή που χρησιμοποιείται στο ΕΠΤ-ΕΜΠ. Είναι ένας υπολογιστικός κώδικας σε γλώσσα FORTRAN που πραγματοποιεί προσομοίωση Monte-Carlo συζευγμένης μετακίνησης ηλεκτρονίων-φωτονίων, σε τυχαία υλικά για ένα μεγάλο εύρος ενεργειών, από μερικές εκατοντάδες eV έως περίπου 1 GeV. Ο κώδικας προσομοιώνει και φωτόνια, παρότι δεν αναφέρεται στο όνομά του, καθώς η πρώτη έκδοση του είχε δυνατότητες προσομοίωσης μόνο ηλεκτρονίων και ποζιτρονίων (Salvat, Fernández-Varea and Sempau, 2011).

Ο κώδικας PENELOPE χωρίζεται σε δύο τμήματα. Το πρώτο είναι αυτό που δημιουργεί τις ιστορίες των φωτονίων (ή σωματιδίων) και προσομοιώνει τις αλληλεπιδράσεις τους με τα υλικά της γεωμετρίας που έχει δημιουργηθεί. Αποτελείται από τα προγράμματα *penelope.f*, *penvared.f*, *timer.f*, *pengeom.f*. Σε αυτό το τμήμα ο χρήστης επεμβαίνει μόνο αν είναι επιθυμητή η τροποποίηση των φυσικών νόμων που διέπουν την προσομοίωση. Το δεύτερο τμήμα του κώδικα είναι αυτό στο οποίο περιγράφεται το προς επίλυση πρόβλημα. Ονομάζεται κώδικας χρήστη (*user code*) και συγγράφεται από το χρήστη, αλλά παρέχονται και ορισμένοι κώδικες χρήστη με το πακέτο PENELOPE, προς διευκόλυνση.

Ο κώδικας PENELOPE διανέμεται ως ένα συμπιεσμένο αρχείο .zip που ονομάζεται *penelope.zip*, το οποίο περιέχει, μεταξύ άλλων, τους εξής πηγαίους κώδικες FORTRAN:

- *penelope.f*: βασικό πακέτο υπορουτινών για την προσομοίωση συζευγμένης μετακίνησης ηλεκτρονίων-φωτονίων σε μέσο χωρίς όρια
- *rita.f*: υπορουτίνες για τυχαία δειγματοληψία από διακριτές και συνεχείς κατανομές πιθανότητας μίας μεταβλητής

- *pengeom.f*: πακέτο υπορουτινών για τον εντοπισμό των σωματιδίων σε τετραγωνικές (quadric) γεωμετρίες πολλών σωμάτων
- *penvared.f*: υπορουτίνες μείωσης διακύμανσης (διαχωρισμός, ρωσική ρουλέτα, εξαναγκασμένη αλληλεπίδραση κλπ)
- *timer.f*: υπορουτίνες χρονισμού, που βασίζονται σε εσωτερικές διαδικασίες της FORTRAN 95 (λειτουργούν και με μερικούς μεταγλωττιστές (compilers) της FORTRAN 77 και 90)
- *material.f*: το κύριο πρόγραμμα για τη δημιουργία των αρχείων δεδομένων των υλικών

και τους εξής κώδικες χρήστη:

- *pencyl.f*: το κύριο πρόγραμμα για την προσομοίωση της κίνησης σωματιδίων και φωτονίων σε σύνθετες κυλινδρικές γεωμετρίες
- *penmain.f*: το κύριο πρόγραμμα για την προσομοίωση της κίνησης σωματιδίων και φωτονίων σε σύνθετες τετραγωνικές (quadric) γεωμετρίες

Για την απόκτηση των εκτελέσιμων αρχείων *material.exe*, *pencyl.exe* και *penmain.exe* απαιτείται η μεταγλώττιση (compilation) των κύριων προγραμμάτων και η σύνδεσή τους με τους αντίστοιχους πηγαίους κώδικες:

- *material.exe*: *material.f*, *penelope.f*, *rita.f*
- *pencyl.exe*: *pencyl.f*, *penelope.f*, *rita.f*, *penvared.f*, *timer.f*
- *penmain.exe*: *penmain.f*, *penelope.f*, *rita.f*, *pengeom.f*, *penvared.f*, *timer.f*

Στην παρούσα ΔΕ δε χρησιμοποιήθηκε το εκτελέσιμο πρόγραμμα *pencyl*, το οποίο αναφέρεται αποκλειστικά σε κυλινδρικές γεωμετρίες, παρά μόνο το εκτελέσιμο *penmain*.

### 3.2.1 Ο κώδικας χρήστη PENMAIN

Ο κώδικας χρήστη *penmain* είναι ένα γενικό κύριο πρόγραμμα που εκτελεί προσομοιώσεις της μετακίνησης ηλεκτρονίων-φωτονίων σε πολύπλοκες δομές υλικών. Είναι σχεδιασμένος να επιτρέπει στο χρήστη να χρησιμοποιεί τον κώδικα PENELOPE, χωρίς να είναι αναγκαίο να γράφει το δικό του κύριο πρόγραμμα. Η γεωμετρία του συστήματος υλικών περιγράφεται από το πακέτο PENGEOM, που μπορεί να χειριστεί πολύ αποδοτικά περίπλοκες γεωμετρίες. Η λειτουργία του κώδικα *penmain* ελέγχεται πλήρως από το αρχείο εισόδου. Αν και είναι αδύνατο να καλυφθούν όλες οι πιθανές περιπτώσεις με ένα «κλειστό» πρόγραμμα, ο *penmain* είναι αρκετά ευέλικτος, ώστε να επιλύει ένα ευρύ πεδίο πρακτικών προβλημάτων. Επίσης είναι δυνατό να τροποποιηθεί κατάλληλα από το χρήστη, με στόχο να προσαρμοστεί καλύτερα στις συνθήκες ενός προβλήματος. (Salvat, Fernández-Varea and Sempau, 2011)

Ως προεπιλογή, ο κώδικας *penmain* υποθέτει ότι τα πρωτογενή σωματίδια ενός δεδομένου τύπου εκπέμπονται από μία σημειακή ή μία κατανεμημένη πηγή, είτε με σταθερή αρχική ενέργεια, είτε με ένα φάσμα ενεργειών που καθορίζεται από ενεργειακό φάσμα που εισάγεται στο αρχείο δεδομένων. Η αρχική κατεύθυνση των πρωτογενών σωματιδίων κατανέμεται ομοιόμορφα σε κωνικές ή πυραμιδοειδείς δέσμες. Εναλλακτικά, το πρόγραμμα μπορεί να δεχτεί ως είσοδο τις μεταβλητές αρχικής κατάστασης «πρωτογενών» σωματιδίων από προϋπολογισμένα αρχεία *rsf* (phase-space files). Τα αρχεία *rsf* είναι μία συλλογή δεδομένων που προσδιορίζουν τη θέση των σωματιδίων, την κατεύθυνση, την ενέργεια, τον τύπο και τις επιπλέον μεταβλητές για κάθε σωματίδιο που διασχίζει ένα επίπεδο που έχει οριστεί ως επίπεδο φάσης-χώρου. Αυτή η επιλογή

είναι χρήσιμη στο διαχωρισμό των προσομοιώσεων πολύπλοκων προβλημάτων σε διαδοχικά στάδια.

Ο κώδικας `renmain` παρέχει καθολικά αποτελέσματα προσομοίωσης, όπως είναι η ενέργεια και η γωνιακή κατανομή των σωματιδίων που προκύπτουν από το σύστημα υλικών, η μέση αποτιθέμενη ενέργεια σε κάθε σώμα κ.λπ. Για τη δημιουργία πιο συγκεκριμένων πληροφοριών, ο χρήστης μπορεί να ορίσει *ανιχνευτές διέλευσης* (*impact detectors – ImpDet*) και *ανιχνευτές απόθεσης ενέργειας* (*energy deposition detectors – EnDDet*). Οι ανιχνευτές αυτοί αναλύονται περισσότερο στην ενότητα 3.2.1.4.

Κατά την εκτέλεση του `renmain.exe`, σχετικά δεδομένα εισόδου καταγράφονται σε ένα αρχείο που ονομάζεται `renmain.dat`. Το αρχείο εξόδου `renmain-res.dat` περιέχει μία αναφορά στη συνολική προσομοίωση και ορισμένα συνοπτικά αποτελέσματα. Οι υπολογισμένες συνεχείς κατανομές (ιστογράμματα) καταγράφονται σε διαφορετικά αρχεία, τα οποία είναι της μορφής `*.dat`. Αυτά τα αρχεία προκύπτουν σε κατάλληλη διαμόρφωση για χάραξη με το πρόγραμμα `gnuplot` και παρουσιάζονται πιο λεπτομερώς σε επόμενη ενότητα.

### 3.2.1.1 Το αρχείο εισόδου `*.in`

Το αρχείο εισόδου (`input file, *.in`) είναι το αρχείο στο οποίο καθορίζονται όλες οι σημαντικές παράμετροι της προσομοίωσης. Σε αυτό δηλώνονται το είδος και η ενέργεια της πρωτογενούς ακτινοβολίας, η πηγή και η διεύθυνση της διεγείρουσας δέσμης, το αρχείο γεωμετρίας, τα υλικά της γεωμετρίας, οι ανιχνευτές που χρησιμοποιούνται και άλλα περισσότερο ή λιγότερο σημαντικά στοιχεία για την προσομοίωση. Ένα αρχείο εισόδου με τις βασικές συνιστώσες που χρησιμοποιήθηκαν κατά τις προσομοιώσεις σε αυτή τη ΔΕ παρουσιάζεται στο σχήμα 3.2, στο τέλος του κεφαλαίου. Ο πίνακας 3.2, επίσης στο τέλος του κεφαλαίου, παρέχει τις εξηγήσεις σε σχέση με τις εντολές και τις μεταβλητές εισόδου. Ένα πλήρες αρχείο εισόδου με όλες τις δυνατές συνιστώσες που είναι διαθέσιμες παρουσιάζεται στο παράρτημα Ε.

### 3.2.1.2 Τα αρχεία υλικού `*.mat`

Ο κώδικας `PENELOPE` διαβάζει τις απαιτούμενες πληροφορίες για κάθε υλικό (πίνακες φυσικών ιδιοτήτων, ενεργές διατομές αλληλεπιδράσεων, δεδομένα χαλάρωσης κλπ) από ένα αρχείο εισαγωγής δεδομένων υλικού. Αυτό ονομάζεται αρχείο υλικού (`material data file, *.mat`). Τα αρχεία υλικών των σωμάτων που περιλαμβάνονται στην εκάστοτε προσομοίωση δηλώνονται στο αρχείο εισόδου.

### 3.2.1.3 Το αρχείο γεωμετρίας `*.geo`

Το αρχείο γεωμετρίας (`geometry file, *.geo`) είναι ένα αρχείο κειμένου στο οποίο περιγράφεται η γεωμετρία του προβλήματος σε μορφή ASCII. Αυτό αποτελείται από μία σειρά από τμήματα (`blocks`) τα οποία ορίζουν τα διαφορετικά στοιχεία, δηλαδή τις επιφάνειες (`surfaces`), τα σώματα (`bodies`) και τις διατάξεις (`modules`). Συγκεκριμένα, ορίζονται οι επιφάνειες που χρησιμοποιούνται στην οριοθέτηση των σωμάτων, τα οποία με τη σειρά τους χρησιμοποιούνται για τη συγκρότηση διατάξεων.

Το αρχείο `*.geo` αποτελείται από παραγράφους, κάθε μία από τις οποίες αναφέρεται σε ένα δομικό στοιχείο της γεωμετρίας. Κάθε παράγραφος αρχίζει και τελειώνει με μία γραμμή γεμάτη με

«0» που τη διαχωρίζει από τις υπόλοιπες. Η σύνταξη κάθε παραγράφου είναι αυστηρή και πρέπει να αρχίζει με μία από τις εξής συμβολοσειρές 8 χαρακτήρων<sup>6</sup>: SURFACE\_, BODY\_\_\_\_, MODULE\_\_, CLONE\_\_\_\_, INCLUDE\_, END\_\_\_\_. Οι κενοί χαρακτήρες εκφράζονται με το σύμβολο «\_» και είναι απαραίτητοι για τη σωστή λειτουργία του προγράμματος. Κάθε στοιχείο προσδιορίζεται από μία αλφαριθμητική συμβολοσειρά (όνομα) 4 χαρακτήρων «( A4)» η οποία έχει ισχύ μόνο στο αρχείο γεωμετρίας. Στη συνέχεια, στις υπορουτίνες PENGEOM τα γεωμετρικά στοιχεία λαμβάνουν μία αύξουσα αρίθμηση και για το λόγο αυτό είναι συχνά πιο βολική η χρήση εξαρχής αυτού του συμβολισμού για την αποφυγή σύγχυσης.

Οι αριθμητικές ποσότητες λαμβάνουν συγκεκριμένη μορφοποίηση και οι μονάδες που χρησιμοποιούνται είναι cm για τις αποστάσεις και μοίρες ή rad για τις γωνίες.

Στην παρούσα ΔΕ δεν έγινε χρήση των στοιχείων CLONE\_\_\_\_ και INCLUDE\_ και για το λόγο αυτό δεν αναλύονται περαιτέρω. Το στοιχείο END\_\_\_\_ χρησιμοποιείται ως τελευταία σειρά του αρχείου και υποδηλώνει τη λήξη της ανάγνωσης του αρχείου γεωμετρίας. Στη συνέχεια παρουσιάζονται οι έννοιες: επιφάνεια (SURFACE), σώμα (BODY) και οι διάταξη (MODULE) που χρησιμοποιούνται για την περιγραφή της γεωμετρίας ενός προβλήματος και ο τρόπος με τον οποίο ορίζονται.

### 3.2.1.3.1 Επιφάνεια (SURFACE)

Ο προσδιορισμός των επιφανειών μπορεί να γίνει με δύο τρόπους: με τον αναλυτικό (implicit) και τον συμπυκνόμενο (reduced). Όλες οι επιφάνειες είναι τετραγωνικής μορφής, δηλαδή περιγράφονται από μία εξίσωση της μορφής:

$$F(\vec{r}) = A_{xx}x^2 + A_{xy}xy + A_{xz}xz + A_{yy}y^2 + A_{yz}yz + A_{zz}z^2 + A_x x + A_y y + A_z z + A_0 = 0 \quad (3.1)$$

η οποία συχνά λαμβάνει τη συμπυκνόμενη μορφή:

$$F_{red}(\vec{r}) = I_1 x^2 + I_2 y^2 + I_3 z^2 + I_4 z + I_5 = 0 \quad (3.2)$$

όπου οι συντελεστές-δείκτες (indices) λαμβάνουν μόνο τις τιμές -1, 0 ή 1. Αν και η εξίσωση (3.1) περιλαμβάνει 10 παραμέτρους, η μεταφορά στην αρχή των αξόνων, ακολουθούμενη από την περιστροφή σε κανονικό προσανατολισμό και την κανονικοποίηση των υπόλοιπων παραμέτρων, μεταμορφώνουν μία πραγματική τετραγωνική (quadric) επιφάνεια σε μία από 11 πιθανές συμπυκνμένες μορφές. Η εξίσωση (3.2) και ο πίνακας 3.1 δίνουν αυτές τις επιφάνειες.

Πίνακας 3.1: Συμπυκνμένη μορφή τετραγωνικών επιφανειών

Reduced form	Indices					Quadric
$z - 1 = 0$	0	0	0	1	-1	επίπεδο
$z^2 - 1 = 0$	0	0	1	0	-1	ζεύγος παράλληλων επιπέδων
$x^2 + y^2 + z^2 - 1 = 0$	1	1	1	0	-1	σφαίρα
$x^2 + y^2 - 1 = 0$	1	1	0	0	-1	κύλινδρος
$x^2 - y^2 - 1 = 0$	1	-1	0	0	-1	υπερβολικός κύλινδρος

<sup>6</sup> Λέξεις-κλειδιά που χρησιμοποιούνται για να δηλώσουν τις διάφορες εντολές ή παραμέτρους στον ορισμό της γεωμετρίας γράφονται με διαφορετική γραμματοσειρά, π.χ. X-SCALE.

Reduced form	Indices					Quadric
$x^2 + y^2 - z^2 = 0$	1	1	-1	0	0	κώνος
$x^2 + y^2 - z^2 - 1 = 0$	1	1	-1	0	-1	μονόχωνο υπερβολοειδές
$x^2 + y^2 - z^2 + 1 = 0$	1	1	-1	0	1	δίχωνο υπερβολοειδές
$x^2 + y^2 - z = 0$	1	1	0	-1	0	παραβολοειδές
$x^2 - z = 0$	1	0	0	-1	0	παραβολικός κύλινδρος
$x^2 - y^2 - z = 0$	1	-1	0	-1	0	υπερβολικό παραβολοειδές

Ο ορισμός μίας επιφάνειας με την αναλυτική μορφή γίνεται με τη δήλωση των 10 παραμέτρων A, με τον τρόπο που φαίνεται στο σχήμα 3.3, στο τέλος του κεφαλαίου. Για λόγους ευκολίας, απουσία δήλωσης μίας παραμέτρου σημαίνει το μηδενισμό της, οπότε είναι αναγκαίο να περιλαμβάνονται μόνο οι μη μηδενικές παράμετροι.

Ο ορισμός μίας επιφάνειας με τη συμπυκνωμένη μορφή εκτός από τους δείκτες (indices) που αναφέρθηκαν παραπάνω, μπορεί να λάβει κάποιες προαιρετικές παραμέτρους που εξυπηρετούν τη δημιουργία κλίμακας (scaling) σε κάθε άξονα, την μετακίνησή της στις τρεις διευθύνσεις και την περιστροφή της. Αυτές οι παράμετροι είναι:

- κλίμακα: X-SCALE, Y-SCALE, Z-SCALE
- μετακίνηση: X-SHIFT, Y-SHIFT, Z-SHIFT
- περιστροφή: OMEGA, THETA, PHI

Οι παράμετροι μπορούν να χρησιμοποιηθούν με οποιαδήποτε σειρά, ενώ σε περίπτωση που δε χρησιμοποιηθούν λαμβάνουν τις προεπιλεγμένες (default) τιμές τους που φαίνονται στα δεξιά άκρα των αντίστοιχων γραμμών στο σχήμα 3.3, στο τέλος του κεφαλαίου.

Οι παράμετροι κλίμακας X-SCALE= $a_x$ , Y-SCALE= $a_y$ , Z-SCALE= $a_z$ , επιδρούν ως εξής στην εξίσωση της επιφάνειας:

$$F_{red,sc}(\vec{r}) = I_1 \left( \frac{x}{a_x} \right)^2 + I_2 \left( \frac{y}{a_y} \right)^2 + I_3 \left( \frac{z}{a_z} \right)^2 + I_4 \left( \frac{z}{a_z} \right) + I_5 = 0 \quad (3.3)$$

ενώ οι παράμετροι περιστροφής είναι οι γωνίες Euler: OMEGA= $\omega$ , THETA= $\theta$ , PHI= $\varphi$ , που μεταμορφώνουν ένα επίπεδο κάθετο στον άξονα z σε επίπεδο κάθετο στη διεύθυνση με πολική και αζιμουθιακή γωνία,  $\theta$  και  $\varphi$ , αντίστοιχα. Η πρώτη γωνία Euler,  $\omega$ , δεν έχει επίδραση όταν η αρχική επιφάνεια είναι συμμετρική ως προς τον άξονα z.

Οι παράμετροι μετακίνησης και περιστροφής μπορούν να χρησιμοποιηθούν και στην αναλυτική μορφή, με τη διαφορά ότι πρέπει να διαχωρίζονται από τις παραμέτρους A με μία σειρά από «1».

### 3.2.1.3.2 Σώμα (BODY)

Ο προσδιορισμός των σωμάτων (bodies) γίνεται με τη χρήση των ήδη ορισμένων επιφανειών, σωμάτων και modules. Ο δείκτης κάθε υλικού (2<sup>η</sup> γραμμή) πρέπει να συμφωνεί με τη σύμβαση που υιοθετήθηκε στον κώδικα PENELOPE (ο αριθμός του υλικού εξαρτάται από τη σειρά του στη λίστα εισόδου). Κενοί εσωτερικοί όγκοι περιγράφονται ως σώματα με υλικό «MATERIAL( 0)».

Απαιτείται μία γραμμή, για τον ορισμό κάθε οριακής επιφάνειας, με έναν πλευρικό δείκτη (side pointer), κάθε σώματος και κάθε module. Οι οριακές επιφάνειες μπορούν να εισαχθούν με οποιαδήποτε σειρά. Ο πλευρικός δείκτης λαμβάνει τις τιμές -1 και +1 και υποδηλώνει προς ποια από τις δύο πλευρές της επιφάνειας εκτείνεται το σώμα. Το σχήμα 3.4 στο τέλος του κεφαλαίου, παρέχει τον τρόπο ορισμού σώματος στο αρχείο γεωμετρίας.

#### 3.2.1.3.3 Διάταξη (MODULE)

Ο προσδιορισμός των modules γίνεται με τη χρήση των ήδη ορισμένων επιφανειών, σωμάτων και modules. Το module χρησιμεύει για να οριστεί μία περιοχή, εκτός των όγκων που περικλείουν τα σώματα ή τα υπο-modules που περιέχονται σε αυτό, οι κοιλότητες της οποίας είναι γεμάτες με κάποιο υλικό (π.χ. αέρα, νερό, κενό). Το υλικό αυτό ορίζεται στη δεύτερη γραμμή της ενότητας. Οι κοιλότητες θεωρούνται ως ένα ενιαίο σώμα, το οποίο λαμβάνει το όνομα του module.

Οι οριακές επιφάνειες πρέπει να ορίζουν έναν ενιαίο όγκο. Όλα τα εσωτερικά σώματα και υπο-modules πρέπει να δηλώνονται και δεν μπορούν να εκτείνονται εκτός των ορίων, ούτε να αλληλεπικαλύπτονται με τα άλλα σώματα και υπο-modules.

Η μετακίνηση και η περιστροφή είναι προαιρετικές και εφαρμόζονται σε όλα τα στοιχεία που περιέχονται στο module. Μία σειρά από «1» δηλώνει το τέλος του ορισμού των στοιχείων και την αρχή των παραμέτρων μετασχηματισμού. Το σχήμα 3.4 στο τέλος του κεφαλαίου, παρέχει τον τρόπο ορισμού module στο αρχείο γεωμετρίας.

Χρησιμοποιώντας τα βοηθητικά προγράμματα gview2d και gview3d είναι δυνατή η απεικόνιση της γεωμετρίας που περιγράφεται στα αρχεία \*.geo σε μορφή δύο ή τριών διαστάσεων, αντίστοιχα. Τα προγράμματα αυτά περιλαμβάνονται στο πακέτο του κώδικα PENELOPE.

#### 3.2.1.4 Οι εικονικοί ανιχνευτές

Όπως αναφέρθηκε στην ενότητα 3.2.1, ο κώδικας renmain παρέχει καθολικά αποτελέσματα προσομοίωσης, όπως είναι η ενέργεια και η γωνιακή κατανομή των σωματιδίων που προκύπτουν από το σύστημα υλικών, η μέση αποτιθέμενη ενέργεια σε κάθε σώμα κ.λπ. Για τη δημιουργία πιο συγκεκριμένων πληροφοριών, ο χρήστης μπορεί να ορίσει εικονικούς ανιχνευτές. Κάθε ανιχνευτής αποτελείται από ένα σύνολο ενεργών σωμάτων, τα οποία πρέπει πρώτα να έχουν οριστεί ως μέρη της γεωμετρίας. Οι ανιχνευτές που χρησιμοποιούνται στα πλαίσια της ΔΕ είναι:

- *Ανιχνευτής διέλευσης (Impact Detector – ImpDet)*: Το φάσμα εξόδου ενός impact detector είναι η κατανομή ενέργειας των σωματιδίων που έχουν εισέλθει σε οποιοδήποτε από τα ενεργά σώματα που τον απαρτίζουν, ερχόμενα από άλλο σώμα που δεν είναι μέρος του ανιχνευτή. Προαιρετικά, για κάθε impact detector το πρόγραμμα μπορεί να δημιουργήσει ένα αρχείο psf, όπου καταγράφονται οι μεταβλητές των καταστάσεων των σωματιδίων στην είσοδο του ανιχνευτή. Είναι επίσης δυνατό να υπολογιστεί η μέση κατανομή της ροής σε σχέση με την ενέργεια των σωματιδίων στον όγκο κάθε impact detector.
- *Ανιχνευτής απόθεσης ενέργειας (Energy-Deposition Detectors – EnDDet)*: Ο energy-deposition detector λειτουργεί ως πραγματικός ανιχνευτής, με την έννοια ότι καταγράφει την ενέργεια που αποθέτουν τα φωτόνια ή τα σωματίδια που αλληλεπιδρούν με το υλικό του. Η αποτιθέμενη ενέργεια ανάλογα με το μέγεθός της καταγράφεται στο αντίστοιχο ενεργειακό παράθυρο (bin) του ανιχνευτή.



Οι ανιχνευτές όπως έχει ήδη αναφερθεί αποτελούν μέρη της γεωμετρίας που προσομοιώνεται και κατά συνέπεια πρέπει να ορίζονται ως σώματα στο αρχείο γεωμετρίας και στο αρχείο εισόδου. Μπορούν να χρησιμοποιηθούν έως 25 impact και 25 energy-deposition detectors ταυτόχρονα σε μία προσομοίωση.

Στον κώδικα *renmain* ορίζεται και ένα ακόμα είδος εικονικών ανιχνευτών, οι ανιχνευτές δόσης (dose enclosure – DE). Αυτοί οι ανιχνευτές καταγράφουν την αποτιθέμενη ενέργεια, άρα και τη δόση, σε μία περιοχή της γεωμετρίας. Ο ανιχνευτής δόσης διαφέρει από τους άλλους δύο, καθώς δεν ορίζεται ως μέρος της γεωμετρίας, παρά μόνο στο αρχείο εισόδου. Είναι ουσιαστικά ένα ορθογώνιο παραλληλεπίπεδο πλέγμα, σε κάθε δομικό στοιχείο του οποίου καταγράφεται η δόση. Μπορεί να περικλείει περισσότερα από ένα σώματα, ή να αποτελεί μόνο μέρος ενός σώματος. Η συνολική δόση που αποτίθεται στον ανιχνευτή μπορεί να υπολογιστεί εύκολα από τις επιμέρους δόσεις στο εσωτερικό του. Οι ανιχνευτές αυτοί δε χρησιμοποιήθηκαν στις προσομοιώσεις αυτής της ΔΕ.

### 3.2.1.5 Τα αρχεία εξόδου \*.dat

Τα αρχεία εξόδου (output/data files, \*.dat) είναι αρχεία που προκύπτουν είτε ως προεπιλογή, είτε μετά από απαίτηση του χρήστη, κάθε φορά που το πρόγραμμα αποθηκεύει τα αποτελέσματά του στον προκαθορισμένο χρόνο (dumping period, βλ. σχήμα 3.2). Τα αρχεία εξόδου που ενδιαφέρουν στις προσομοιώσεις που εκτελέστηκαν είναι:

- *dump.dmp*: Στο αρχείο αυτό αποθηκεύονται σε τακτά χρονικά διαστήματα, που ορίζονται από το χρήστη, όλα τα αποτελέσματα της προσομοίωσης. Εξυπηρετεί την συνέχιση των προσομοιώσεων από το σημείο που έχουν σταματήσει, σε περίπτωση που αυτή διακοπεί. Επιτρέπει επίσης την επανέναρξη προσομοιώσεων που είναι επιθυμητό να αποκτήσουν καλύτερη στατιστική.
- *renmain.dat*: Το αρχείο αυτό περιέχει όλα τα δεδομένα εισόδου του προγράμματος, όπως αυτά δόθηκαν στο αρχείο εισόδου.
- *material.dat*: Το αρχείο αυτό επιτρέπει την επισκόπηση των υλικών που χρησιμοποιήθηκαν, τη σύστασή τους και ορισμένες ιδιότητες τους σε σχέση με την προσομοίωση.
- *geometry.rep*: Η γεωμετρία που έχει εισαχθεί μέσω του αρχείου \*.geo περιλαμβάνεται στο αρχείο αυτό, με την προσθήκη του ιεραρχικού δέντρου της γεωμετρίας και μίας εκτίμησης της ταχύτητας της προσομοίωσης με βάση την πολυπλοκότητα της γεωμετρίας.
- *renmain-res.dat*: Στο αρχείο αυτό παρουσιάζονται γενικά αποτελέσματα της προσομοίωσης που σχετίζονται με το χρόνο της προσομοίωσης, τις επαναλήψεις, την αποτιθέμενη ενέργεια, την απόδοση των ανιχνευτών και άλλα γενικά στοιχεία.
- *spc-impdet-##.dat*: Στο αρχείο αυτό περιγράφεται η κατανομή της ενέργειας των σωματιδίων που εισέρχονται μέσα στον ανιχνευτή διέλευσης (impact detector), στον οποίο αναφέρεται το αρχείο. Η πρώτη στήλη αναφέρεται στην ενέργεια (σε eV), η δεύτερη στην πιθανότητα ύπαρξης σωματιδίου με την αντίστοιχη ενέργεια ανίχνευσης (σε  $1/(eV \cdot particle)$ ), ενώ η τρίτη στην αβεβαιότητα της πιθανότητας σε επίπεδο 3σ.
- *spc-enddet-##.dat*: Στο αρχείο αυτό περιγράφεται η κατανομή της αποτιθέμενης ενέργειας των σωματιδίων που εισέρχονται μέσα στον ανιχνευτή απόθεσης ενέργειας (Energy Deposition Detector), στον οποίο αναφέρεται το αρχείο. Η πρώτη στήλη αναφέρεται στην

ενέργεια (σε eV), η δεύτερη στην πιθανότητα ύπαρξης σωματιδίου με την αντίστοιχη ενέργεια ανίχνευσης (σε  $1/(eV \cdot \text{particle})$ ), ενώ η τρίτη στην αβεβαιότητα της πιθανότητας σε επίπεδο  $3\sigma$ .

- *psf-impdet-##.dat*: Το αρχείο αυτό περιέχει τις τιμές των διάφορων μεταβλητών των σωματιδίων τη στιγμή που εισέρχονται στον ανιχνευτή διέλευσης, στον οποίο αναφέρεται το αρχείο. Το αρχείο αυτό δημιουργείται μόνο όταν η μεταβλητή εισόδου στο αρχείο \*.in έχει τιμές -1 ή 1. Οι μεταβλητές που αναφέρονται είναι: το είδος του σωματιδίου KPAR, η ενέργεια E, οι συντεταγμένες της θέσης X, Y, Z, τα συνημίτονα κατεύθυνσης U, V, W, ο παράγοντας βαρύτητας WGHT, το διάνυσμα ILB και ο αριθμός προσαύξησης της ιστορίας NSHI. Η χρησιμότητα του αρχείου αυτού είναι μεγάλη ειδικά σε περίπλοκες προσομοιώσεις, καθώς δίνει τη δυνατότητα του κατακερματισμού της προσομοίωσης σε τμήματα, που αξιοποιούν διαδοχικά τα αποτελέσματα των προηγούμενων τμημάτων, και επιτρέπει τη μείωση του υπολογιστικού χρόνου.

### 3.2.1.6 Δημιουργία αρχείων υλικών

Το αρχείο υλικού (βλ. 3.2.1.2) δημιουργείται μέσω του βοηθητικού προγράμματος material.exe, το οποίο εξάγει δεδομένα ατομικών αλληλεπιδράσεων του κάθε στοιχείου από σχετική βάση δεδομένων. Οι βασικές πληροφορίες σχετικά με το επιθυμητό υλικό παρέχονται από το χρήστη μέσω του πληκτρολογίου. Οι απαραίτητες πληροφορίες είναι: α) η χημική σύσταση και β) η πυκνότητα μάζας. Προαιρετικά ο χρήστης μπορεί να επέμβει και σε άλλα στοιχεία, τα οποία δημιουργούνται αυτόματα από το πρόγραμμα για κάθε υλικό, όπως η μέση ενέργεια διέγερσης.

Εναλλακτικά, για ένα σύνολο 280 έτοιμων υλικών, το πρόγραμμα material.exe μπορεί να διαβάζει δεδομένα απευθείας από το αρχείο rdcompres.rep. Το αρχείο αυτό περιέχει δεδομένα σύστασης, πυκνότητες μάζας και μέσες ενέργειες διέγερσης για 280 υλικά και σε συνδυασμό με άλλα 994 αρχεία ASCII που περιέχουν δεδομένα σχετικά με τις ενεργές διατομές και τη φύση των αλληλεπιδράσεων και περιέχονται στον ίδιο φάκελο (pendbase folder) καθιστούν δυνατή τη δημιουργία των αρχείων \*.mat. Το πρόγραμμα material.exe κατά την εκτέλεση του πρέπει να βρίσκεται στον ίδιο φάκελο με τον pendbase, ώστε να αντλεί τα απαραίτητα στοιχεία. Τα πρώτα 99 υλικά είναι τα στοιχεία με  $Z=1-99$ , σε αύξουσα σειρά ατομικών αριθμών. Τα υλικά από το 100 έως το 280 είναι ενώσεις και μείγματα σε αλφαβητική σειρά. Το PENELOPE δε χειρίζεται στοιχεία με  $Z>99$ . Τα αέρια χαρακτηρίζονται υποθέτοντας πίεση 1 atm και θερμοκρασία 20 °C. Ο κατάλογος των υλικών δίνεται στο σχήμα 3.5, στο τέλος του παρόντος κεφαλαίου.

### 3.2.1.7 Η παρουσίαση των αποτελεσμάτων

Κάθε αρχείο δεδομένων εξόδου έχει μία επικεφαλίδα που περιγράφει το περιεχόμενό του και βρίσκεται σε κατάλληλη μορφοποίηση για απεικόνιση, με τη χρήση ενός προγράμματος χάραξης διαγραμμάτων. Στην παρούσα ΔΕ η απεικόνιση έγινε με το πρόγραμμα gnuplot, το οποίο είναι μικρό σε μέγεθος, διαθέσιμο για διάφορα λειτουργικά συστήματα και διατίθεται δωρεάν. Στο πακέτο PENELOPE περιλαμβάνονται και ορισμένα βοηθητικά scripts για το gnuplot με κατάληξη \*.gnu που απλοποιούν τη διαδικασία χάραξης των διαγραμμάτων, τα οποία επίσης μπορούν να τροποποιηθούν κατάλληλα σε περίπτωση που αυτό είναι απαραίτητο.

Η απεικόνιση της γεωμετρίας έγινε, όπως αναφέρθηκε και στην ενότητα 3.2.1.3, με τη βοήθεια των προγραμμάτων gview2d και gview3d.

### 3.3 Αβεβαιότητα των αποτελεσμάτων της προσομοίωσης

Με στόχο την εκτίμηση της ακρίβειας η οποία συνοδεύει τα φάσματα που παράγονται από την προσομοίωση, χρησιμοποιούνται οι τιμές της απόλυτης αβεβαιότητας, που δίνεται στο αρχείο src-enddet-##.dat. Στην 1<sup>η</sup> στήλη του συγκεκριμένου αρχείου δίνεται το κέντρο του κάθε καναλιού του ανιχνευτή (σε eV), στη 2<sup>η</sup> η τιμή της συνάρτησης πυκνότητας πιθανότητας (PDF) για το ενεργειακό παράθυρο (σε 1/(eV\*particle)), ενώ στην 3<sup>η</sup> στήλη παρατίθεται η αντίστοιχη τιμή της απόλυτης στατιστικής αβεβαιότητας σε επίπεδο 3σ. Για την απόκτηση της απόλυτης ή σχετικής αβεβαιότητας σε επίπεδο 1σ είναι απαραίτητες οι παρακάτω μετατροπές, αντίστοιχα:

$$\text{Απόλυτη Αβεβαιότητα } 1\sigma = \frac{1}{3} \cdot 3^{\text{η στήλη}} \quad (3.1)$$

$$\text{Σχετική Αβεβαιότητα } 1\sigma(\%) = \frac{1}{3} \cdot \frac{3^{\text{η στήλη}}}{2^{\text{η στήλη}}} \cdot 100 \quad (3.2)$$

Σημειώνεται ότι στη συνέχεια της ΔΕ, όλες οι αναφερόμενες αβεβαιότητες δίνονται σε επίπεδο 1σ, εκτός αν αναφέρεται ρητά ότι πρόκειται για διαφορετικό επίπεδο. Το ίδιο ισχύει και στα διαγράμματα, όπου οι γραμμές αβεβαιότητων δίνονται επίσης σε επίπεδο 1σ.

### 3.4 Υπολογισμός βοηθητικών μεγεθών

Για τη σύγκριση των προσομοιώσεων ως προς το συνεχές υπόστρωμα του φάσματος που παράγεται και την δυνατότητα ανίχνευσης των επιθυμητών στοιχείων, εκτός από το ύψος των κορυφών που αντιστοιχούν στις χαρακτηριστικές ακτίνες-Χ κάθε στοιχείου που ενδιαφέρει, χρησιμοποιήθηκαν δύο βοηθητικά μεγέθη. Το πρώτο είναι το καθαρό ύψος της κορυφής, δηλαδή η διαφορά μεταξύ του ύψους της κορυφής και του συνεχούς υποστρώματος στη γύρω περιοχή και το δεύτερο είναι ο λόγος του ύψους της κορυφής προς το υπόστρωμα, που αποτελεί σημαντικό μέγεθος για την ανιχνευσιμότητα ενός στοιχείου.

*σχήμα 3.1: απεικόνιση των βοηθητικών μεγεθών σε ένα τυπικό φάσμα xrf με ουρανιούχο δείγμα*

Επισημαίνεται ότι το μέγεθος εκείνο που προσδιορίζει με ακρίβεια την ανιχνευσιμότητα μίας κορυφής, ώστε να καταστεί ανιχνεύσιμο και το αντίστοιχο στοιχείο με στατιστική βεβαιότητα, είναι το όριο ανίχνευσης (*limit of detection*). Όμως, από τη στιγμή που στα αποτελέσματα των προσομοιώσεων δεν έγινε διεύρυνση των κορυφών (*peak broadening*)<sup>7</sup>, ανάλογα με τη διακριτική ικανότητα των ανιχνευτών, δεν είχε νόημα η διερεύνηση του ορίου ανίχνευσης κάθε σεναρίου.

Για τον υπολογισμό του καθαρού ύψους και του λόγου, είναι απαραίτητος ο προσδιορισμός του υποστρώματος στην περιοχή της κορυφής. Αυτό έγινε με χρήση δύο καναλιών εκατέρωθεν της κορυφής, υπολογίζοντας τη μέση τιμή τους ως εξής:

<sup>7</sup> Το φάσμα που παράγεται από την προσομοίωση είναι το φάσμα της αποτιθέμενης στον ανιχνευτή ενέργειας και όχι το φάσμα το οποίο λαμβάνεται στην έξοδο της ανιχνευτικής διάταξης και τη διαμόρφωση του οποίου παίζει σημαντικό ρόλο η διακριτική ικανότητα του ανιχνευτή.

$$BG \left[ \sigma_{\varepsilon} \frac{1}{eV \cdot particle} \right] = \frac{BG_1 + BG_2}{2} \quad (3.3)$$

ενώ η αντίστοιχη αβεβαιότητα δίνεται από τον τύπο

$$\sigma_{BG} \left[ \sigma_{\varepsilon} \frac{1}{eV \cdot particle} \right] = \frac{1}{2} \sqrt{\sigma_{BG1}^2 + \sigma_{BG2}^2} \quad (3.4)$$

Το καθαρό ύψος κορυφής υπολογίζεται ως:

$$Καθαρό \ ύψος \left[ \sigma_{\varepsilon} \frac{1}{eV \cdot particle} \right] = \Upsilon\psi\sigma\varsigma - BG \quad (3.5)$$

με την αντίστοιχη αβεβαιότητα:

$$\sigma_{KY} \left[ \sigma_{\varepsilon} \frac{1}{eV \cdot particle} \right] = \sqrt{\sigma_{\psi\psi}^2 + \sigma_{BG}^2} \quad (3.6)$$

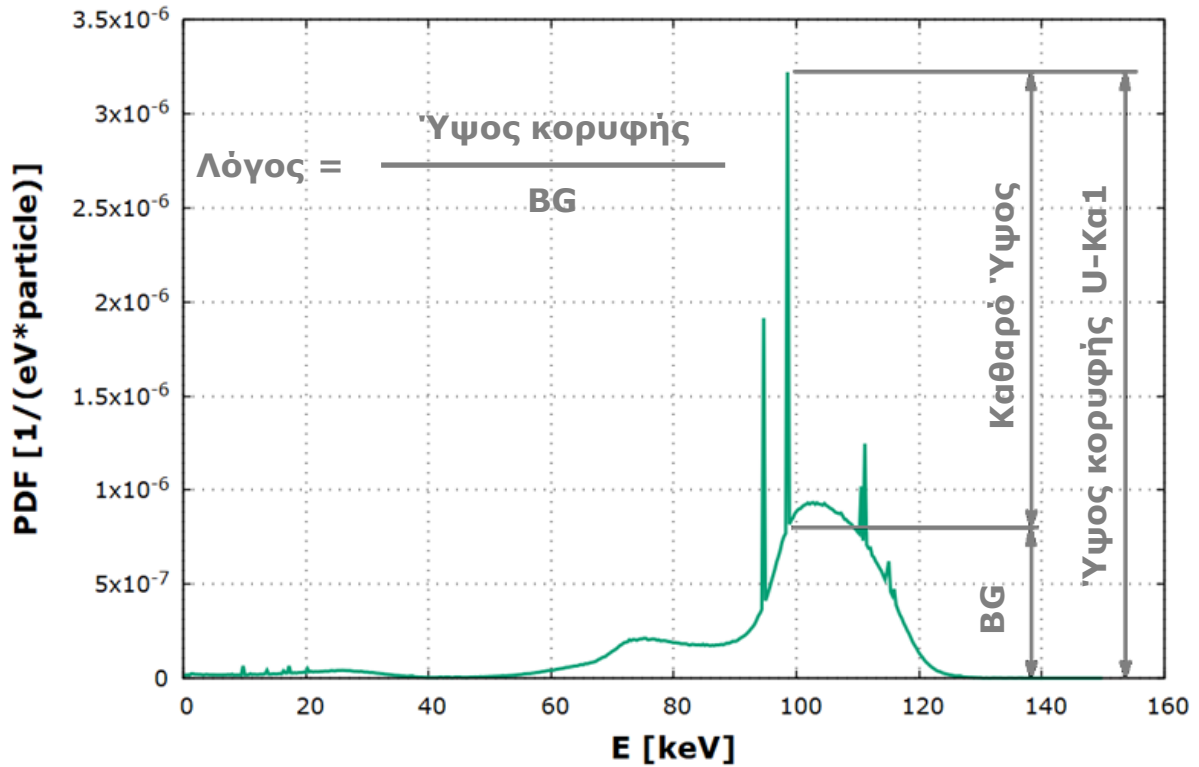
Τέλος, ο λόγος είναι:

$$Λόγος = \frac{\Upsilon\psi\sigma\varsigma}{BG} \quad (3.7)$$

με την αντίστοιχη αβεβαιότητα από τη σχέση:

$$\sigma_{\text{λογ}} = \text{Λόγος} \cdot \sqrt{\left( \frac{\sigma_{\psi\psi}}{\Upsilon\psi\sigma\varsigma} \right)^2 + \left( \frac{\sigma_{BG}}{BG} \right)^2} \quad (3.8)$$

Μπορεί να θεωρηθεί ότι το πλήθος των γεγονότων που καταγράφονται σε κάθε ενεργειακό παράθυρο του ανιχνευτή ακολουθεί μία διωνυμική κατανομή, με πλήθος δοκιμών ίσο με το πλήθος των επαναλήψεων της προσομοίωσης, καθώς υπάρχουν δύο πιθανά αποτελέσματα: καταγραφή (επιτυχία) και μη-καταγραφή (αποτυχία). Η τυπική απόκλιση της διωνυμικής κατανομής σε κάθε ενεργειακό παράθυρο εξαρτάται από το πλήθος των επαναλήψεων και από την πιθανότητα επιτυχίας, δηλαδή την πιθανότητα καταγραφής γεγονότος. Αυτή η πιθανότητα εξαρτάται από του διάφορους παράγοντες της διάταξης που προσομοιώνεται και διαφέρει από ενεργειακό παράθυρο σε ενεργειακό παράθυρο. Για το λόγο αυτό μπορούμε να θεωρήσουμε ότι οι αβεβαιότητες κάθε καναλιού είναι ανεξάρτητες μεταξύ τους.



Σχήμα 3.1: Απεικόνιση των βοηθητικών μεγεθών σε ένα τυπικό φάσμα XRF με ουρανιούχο δείγμα

Στη συνέχεια της ΔΕ για σύγκριση των διαφόρων φασμάτων θα χρησιμοποιηθούν τα παρακάτω κριτήρια σύγκρισης:

**Κριτήριο Α:** ύψος της κορυφής ενδιαφέροντος (σε  $1/(eV \cdot particle)$ ),

**Κριτήριο Β:** το καθαρό ύψος της κορυφής ενδιαφέροντος (σε  $1/(eV \cdot particle)$ )

**Κριτήριο Γ:** ο λόγος του ύψους κορυφής προς το υπόστρωμα (αδιάστατο).

### 3.5 Ο στατιστικός έλεγχος U-test

Στη συνέχεια της ΔΕ, προκειμένου να ελεγχθεί αν δύο τιμές διαφέρουν στατιστικά σημαντικά, χρησιμοποιείται ο στατιστικός έλεγχος, γνωστός ως "U-test". Η τιμή U δίνεται από τον τύπο:

$$U = \frac{|x_1 - x_2|}{\sqrt{[\delta(x_1)]^2 + [\delta(x_2)]^2}} \quad (3.9)$$

όπου  $x_1, x_2$  οι τιμές του μεγέθους  $x$  και  $\delta(x_1), \delta(x_2)$  οι απόλυτες αβεβαιότητες των τιμών  $x_1$  και  $x_2$ , αντίστοιχα.

Τιμή  $U \leq 1.95$  σημαίνει ότι, με βαθμό εμπιστοσύνης 95%, οι δύο τιμές δε διαφέρουν στατιστικά. Αντίθετα, τιμή  $U \geq 2.58$  υποδεικνύει στατιστικά σημαντική διαφορά μεταξύ των τιμών  $x_1$  και  $x_2$ , με βαθμό εμπιστοσύνης 99%. Για ενδιάμεσες τιμές της παραμέτρου U δεν προκύπτουν ασφαλή συμπεράσματα.

Στη συνέχεια της ΔΕ, συγκεκριμένα στο κεφάλαιο 4, έγινε εκτενής χρήση του U-test με στόχο να διαπιστωθεί πότε το καθαρό ύψος ή ο λόγος ύψους κορυφής προς το υπόστρωμα μεταβάλλεται στατιστικά σημαντικά. Με τον τρόπο αυτό είναι δυνατό να προσδιοριστεί η επίδραση που είχαν οι διάφορες αλλαγές στη συγκρότηση και τη γεωμετρία της διάταξη XRF που προσομοιώθηκε, στην ανιχνευσιμότητα των στοιχείων που ενδιαφέρουν.

### 3.6 Κριτήρια ολοκλήρωσης της προσομοίωσης

Οι προσομοιώσεις με το πακέτο λογισμικού PENELOPE λαμβάνουν ως συνθήκη τερματισμού τόσο ένα χρονικό όριο, όσο και ένα επιθυμητό πλήθος ιστοριών (showers). Ως χρονική συνθήκη τερματισμού τέθηκε το πολύ υψηλό όριο των  $2 \cdot 10^9$  δευτερολέπτων, αποκλείοντας ουσιαστικά την περίπτωση λήξης της προσομοίωσης πριν την επίτευξη του προκαθορισμένου πλήθους επαναλήψεων.

Το μέγιστο πλήθος ιστοριών έχει τεθεί σε όλες τις προσομοιώσεις στις  $2 \cdot 10^9$  επαναλήψεις, όμως είναι δυνατός και ο χειροκίνητος τερματισμός, όποτε αυτό κρίνεται απαραίτητο. Έτσι, ανάλογα με τις ανάγκες και τα αποτελέσματα σε κάθε περίπτωση, συχνά οι προσομοιώσεις διακόπτονται νωρίτερα, όταν επιτυγχάνεται η επιθυμητή στατιστική στο φάσμα των εικονικών ανιχνευτών. Ιδανικά, οι προσομοιώσεις διακόπτονται όταν η σχετική αβεβαιότητα στην κορυφή  $K_{\alpha 1}$  των στοιχείων που ενδιαφέρουν είναι μικρότερη από 1%. Αυτό, πολλές φορές, δεν είναι δυνατό, είτε λόγω του μικρού πλήθους καταγραφόμενων γεγονότων, ακόμα και με το μέγιστο αριθμό προσομοιωμένων ιστοριών, είτε λόγω του περιορισμένου διαθέσιμου χρόνου για την εκτέλεση των προσομοιώσεων. Σε μερικές περιπτώσεις, όπως στις προσομοιώσεις της διάταξης ανίχνευσης των σπανίων γαιών, επιλέχθηκε η επιμήκυνση έως τις  $2.5 \cdot 10^9$  επαναλήψεις, καθώς τα γεγονότα που καταγράφονται στον ανιχνευτή είναι εξαιρετικά λίγα και η ταχύτητα αυτών των προσομοιώσεων το επιτρέπει.

### 3.7 Η διάρκεια της προσομοίωσης

Η διάρκεια των προσομοιώσεων εξαρτάται από δύο κυρίως παράγοντες. Ο πρώτος και σημαντικότερος είναι η ταχύτητα της προσομοίωσης, ενώ ο δεύτερος είναι ο νεκρός χρόνος της υπολογιστικής διαδικασίας.

Η ταχύτητα μίας προσομοίωσης είναι συνάρτηση πολλών μεταβλητών. Η γεωμετρία της προσομοίωσης παίζει πολύ σημαντικό ρόλο, τόσο μέσω του πλήθους σωμάτων και υλικών, όσο και μέσω της αποδοτικής ή μη ιεράρχησης των σωμάτων σε modules και υπο-modules. Επίσης, την ταχύτητα επηρεάζει το πλήθος των ανιχνευτών διέλευσης, απόθεσης ενέργειας και δόσης. Τέλος, οι παράμετροι της προσομοίωσης που σχετίζονται με τα υλικά, όπως ενέργειες απορρόφησης EABS(1:3,M) στο αρχείο εισόδου, πρέπει να επιλέγονται πολύ προσεκτικά. Αν είναι πολύ μικρές μπορεί να οδηγήσουν σε πολύ χρονοβόρες προσομοιώσεις, ενώ στην περίπτωση που είναι πολύ μεγάλες μπορεί να παραποιήσουν σημαντικές πληροφορίες στα αποτελέσματα.

Από την άλλη πλευρά, ο νεκρός χρόνος είναι ένα πρόβλημα στο οποίο ο χρήστης δεν μπορεί να παρέμβει σημαντικά. Ορίζεται ως η διαφορά μεταξύ του συνολικού χρόνου που «τρέχει» ο κώδικας

PENELOPE και του χρόνου που στην πραγματικότητα γίνεται προσομοίωση ιστοριών (ο χρόνος που καταγράφεται στο αρχείο `penmain-res.dat`). Το κλάσμα του νεκρού χρόνου μπορεί να φτάσει πολύ υψηλά ποσοστά του συνολικού χρόνου της τάξης του 80%. Δύο παράγοντες που παρατηρήθηκε πως επηρεάζουν το νεκρό χρόνο, είναι το χρονικό βήμα αποθήκευσης των αποτελεσμάτων την προσομοίωσης και ο φόρτος του υπολογιστικού συστήματος στο οποίο εκτελούνται οι προσομοιώσεις. Ο πρώτος παράγοντας επιδρά λίγο, καθώς το πρόγραμμα σταματά την διαδικασία προσομοίωσης, προκειμένου να καταγράψει τα αποτελέσματα στα αντίστοιχα αρχεία εξόδου και να δημιουργήσει το αρχείο `*.dmp` που επιτρέπει τη διακοπή και την επανεκκίνηση της προσομοίωσης. Μία αύξηση του χρονικού βήματος κατά 400% επιφέρει μείωση του νεκρού χρόνου κατά 1-2%. Πάντως πρέπει στο σημείο αυτό να επισημανθεί ότι η επιλογή μικρού χρονικού βήματος αποθήκευσης έχει ως αποτέλεσμα και τη δημιουργία πολύ μεγάλων αρχείων. Ο φόρτος του υπολογιστικού συστήματος δεν μπόρεσε να εκτιμηθεί πως ακριβώς επηρεάζει το νεκρό χρόνο, αφού είναι κάτι που δεν εξαρτάται από ένα μόνο χρήστη και μεταβάλλεται με τρόπο που δεν μπορεί να προβλεφθεί, ούτε να ποσοτικοποιηθεί.

### 3.8 Συσχέτιση εξαρτημένων μεγεθών

Για την επεξεργασία των αποτελεσμάτων των προσομοιώσεων χρειάστηκε σε αρκετές περιπτώσεις να γίνει συσχέτιση μεταξύ δύο μεγεθών. Για παράδειγμα, συσχέτιστηκαν οι τιμές των κριτηρίων σημαντικότητας Β ή Γ με τον τρόπο που μεταβάλλονται ορισμένες παράμετροι της διάταξης που προσομοιώνεται. Η συσχέτιση των μεγεθών έγινε με την προσαρμογή κατάλληλων συναρτήσεων στα δεδομένα που προέκυψαν από τις προσομοιώσεις. Οι καμπύλες αναδρομής αρχικά υπολογίστηκαν σε κάθε περίπτωση με δύο τρόπους: με και χωρίς συντελεστές βαρύτητας, ανάλογα με τη σχετική αβεβαιότητα κάθε σημείου, που προέκυψε από την προσομοίωση. Μετά από σύγκριση μεταξύ των δύο μεθόδων κρίθηκε πως, λόγω της παραπλήσιας αβεβαιότητας των διαφόρων σημείων και της ποιοτικής φύσης της διερεύνησης, δεν υπήρχε σημαντική διαφορά η οποία να δικαιολογεί την παρουσίαση και των δύο. Επιλέχθηκε, τελικά, η παρουσίαση μόνο της μεθόδου χωρίς συντελεστές βαρύτητας.

Σε κάθε περίπτωση ο υπολογισμός της καμπύλης αναδρομής χωρίς τη χρήση συντελεστών βαρύτητας έγινε με τη μέθοδο των ελαχίστων τετραγώνων. Ως μέτρο αξιολόγησης της ποιότητας της προσαρμογής κάθε καμπύλης στα δεδομένα σημεία χρησιμοποιήθηκε ο *συντελεστής πολλαπλού προσδιορισμού*, που ορίζεται ως το πηλίκο:

$$R^2 = \frac{\sum(\hat{y}_i - \bar{y})^2}{\sum(y_i - \bar{y})^2} \quad (3.10)$$

όπου  $\sum(\hat{y}_i - \bar{y})^2$  : το άθροισμα των τετραγώνων των αποκλίσεων περί τη μέση τιμή εξαιτίας της προσαρμογής ή διακύμανση του εκτιμώμενου μεγέθους  $y$  περί τη μέση τιμή του ή ερμηνεύσιμη διακύμανση και  $\sum(y_i - \bar{y})^2$  : το άθροισμα των τετραγώνων των αποκλίσεων του μετρούμενου μεγέθους  $y$  περί τη μέση τιμή ή συνολική διακύμανση του  $y$  περί τη μέση τιμή του.

Το  $R^2$  λαμβάνει τιμές από 0 έως 1 και είναι ένας δείκτης, του πόσο καλά η καμπύλη αναδρομής προσαρμόζεται στα πειραματικά σημεία. Είναι φανερό ότι όταν  $R^2=1$  η μη ερμηνεύσιμη διακύμανση είναι μηδενική, δηλαδή όλα τα πειραματικά σημεία κείνται επί της καμπύλης αναδρομής.

## Σχήματα του 3<sup>ου</sup> Κεφαλαίου

```
TITLE Title of the job, up to 65 characters.
.
>>>>>>> Source definition.
SKPAR KPAR [Primary particles: 1=electron, 2=photon, 3=positron]
SENERG SE0 [Initial energy (monoenergetic sources only)]
SPECTR Ei,Pi [E bin: lower-end and total probability]
SPOSIT SX0,SY0,SZ0 [Coordinates of the source]
SCONE THETA,PHI,ALPHA [Conical beam; angles in deg]
.
>>>>>>> Material data and simulation parameters.
MFNAME mat-filename.ext [Material file, up to 20 chars]
MSIMPA EABS(1:3),C1,C2,WCC,WCR [EABS(1:3),C1,C2,WCC,WCR]
.
>>>>>>> Geometry definition file.
GEOMFN geo-filename.ext [Geometry file, up to 20 chars]
.
>>>>>>> Impact detectors (up to 25 different detectors).
IPSF=0; no psf is created.
IPSF=1; the psf is created.
IDCUT=0; tracking is discontinued at the detector entrance.
IDCUT=1; the detector does not affect the tracking.
IDCUT=2; the detector does not affect tracking, the energy
distribution of particle fluence (averaged over the
volume of the detector) is calculated.
IMPDET EL,EU,NBE,IPSF,IDCUT [E-window, no. of bins, IPSF, IDCUT]
IDBODY KB [Active body; one line for each body]
IDKPAR KPAR [Kind of detected particles, one line each]
.
>>>>>>> Energy-deposition detectors (up to 25).
ENDETC EL,EU,NBE [Energy window and number of bins]
EDBODY KB [Active body; one line for each body]
.
>>>>>>> Job properties
RESUME dump1.dmp [Resume from this dump file, 20 chars]
DUMPTO dump2.dmp [Generate this dump file, 20 chars]
DUMPP DUMPP [Dumping period, in sec]
.
NSIMSH DSHN [Desired number of simulated showers]
TIME TIMEA [Allotted simulation time, in sec]
.
END [Ends the reading of input data]
```

Σχήμα 3.2: Αρχείο εισόδου



```

00000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000
SURFACE ( A4) reduced form
INDICES=( I2,I2,I2,I2,I2)
X-SCALE=( E22.15 , I4) (DEFAULT=1.0)
Y-SCALE=( E22.15 , I4) (DEFAULT=1.0)
Z-SCALE=( E22.15 , I4) (DEFAULT=1.0)
OMEGA=( E22.15 , I4) DEG (DEFAULT=0.0)
THETA=( E22.15 , I4) DEG (DEFAULT=0.0)
PHI=( E22.15 , I4) RAD (DEFAULT=0.0)
X-SHIFT=( E22.15 , I4) (DEFAULT=0.0)
Y-SHIFT=( E22.15 , I4) (DEFAULT=0.0)
Z-SHIFT=( E22.15 , I4) (DEFAULT=0.0)
00000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000
SURFACE ( A4) implicit form
INDICES=( 0, 0, 0, 0, 0)
AXX=( E22.15 , I4) (DEFAULT=0.0)
AXY=( E22.15 , I4) (DEFAULT=0.0)
AXZ=( E22.15 , I4) (DEFAULT=0.0)
AYY=( E22.15 , I4) (DEFAULT=0.0)
AYZ=( E22.15 , I4) (DEFAULT=0.0)
AZZ=( E22.15 , I4) (DEFAULT=0.0)
AX=( E22.15 , I4) (DEFAULT=0.0)
AY=( E22.15 , I4) (DEFAULT=0.0)
AZ=( E22.15 , I4) (DEFAULT=0.0)
AO=( E22.15 , I4) (DEFAULT=0.0)
111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111
OMEGA=( E22.15 , I4) DEG (DEFAULT=0.0)
THETA=( E22.15 , I4) DEG (DEFAULT=0.0)
PHI=( E22.15 , I4) RAD (DEFAULT=0.0)
X-SHIFT=( E22.15 , I4) (DEFAULT=0.0)
Y-SHIFT=( E22.15 , I4) (DEFAULT=0.0)
Z-SHIFT=( E22.15 , I4) (DEFAULT=0.0)
00000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000

```

Σχήμα 3.3: Ορισμός της επιφάνειας στο αρχείο γεωμετρίας με την αναλυτική (implicit) και τη συμπυκνωμένη μορφή (reduced)



*** ELEMENTS (id. number = atomic number):			
1	Hydrogen	34	Selenium
2	Helium	35	Bromine
3	Lithium	36	Krypton
4	Beryllium	37	Rubidium
5	Boron	38	Strontium
6	Amorphous carbon	39	Yttrium
7	Nitrogen	40	Zirconium
8	Oxygen	41	Niobium
9	Fluorine	42	Molybdenum
10	Neon	43	Technetium
11	Sodium	44	Ruthenium
12	Magnesium	45	Rhodium
13	Aluminum	46	Palladium
14	Silicon	47	Silver
15	Phosphorus	48	Cadmium
16	Sulfur	49	Indium
17	Chlorine	50	Tin
18	Argon	51	Antimony
19	Potassium	52	Tellurium
20	Calcium	53	Iodine
21	Scandium	54	Xenon
22	Titanium	55	Cesium
23	Vanadium	56	Barium
24	Chromium	57	Lanthanum
25	Manganese	58	Cerium
26	Iron	59	Praseodymium
27	Cobalt	60	Neodymium
28	Nickel	61	Promethium
29	Copper	62	Samarium
30	Zinc	63	Europium
31	Gallium	64	Gadolinium
32	Germanium	65	Terbium
33	Arsenic	66	Dysprosium
67	Holmium		
68	Erbium		
69	Thulium		
70	Ytterbium		
71	Lutetium		
72	Hafnium		
73	Tantalum		
74	Tungsten		
75	Rhenium		
76	Osmium		
77	Iridium		
78	Platinum		
79	Gold		
80	Mercury		
81	Thallium		
82	Lead		
83	Bismuth		
84	Polonium		
85	Astatine		
86	Radon		
87	Francium		
88	Radium		
89	Actinium		
90	Thorium		
91	Protactinium		
92	Uranium		
93	Neptunium		
94	Plutonium		
95	Americium		
96	Curium		
97	Berkelium		
98	Californium		
99	Einsteinium		
*** COMPOUNDS AND MIXTURES (in alphabetical order):			
100	Acetone		
101	Acetylene		
102	Adenine		
103	Adipose tissue (ICRP)		
104	Air, dry (near sea level)		
105	Alanine		
106	Aluminum oxide		
107	Amber		
108	Ammonia		
109	Aniline		
110	Anthracene		
111	B-100 bone-equivalent plastic		
112	Bakelite		
113	Barium fluoride		
114	Barium sulfate		
115	Benzene		

Σχήμα 3.5: Κατάλογος έτοιμων υλικών

116	Beryllium oxide
117	Bismuth germanium oxide
118	Blood (ICRP)
119	Bone, compact (ICRU)
120	Bone, cortical (ICRP)
121	Boron carbide
122	Boron oxide
123	Brain (ICRP)
124	Butane
125	N-butyl alcohol
126	C-552 air-equivalent plastic
127	Cadmium telluride
128	Cadmium tungstate
129	Calcium carbonate
130	Calcium fluoride
131	Calcium oxide
132	Calcium sulfate
133	Calcium tungstate
134	Carbon dioxide
135	Carbon tetrachloride
136	Cellulose acetate, cellophane
137	Cellulose acetate butyrate
138	Cellulose nitrate
139	Ceric sulfate dosimeter solution
140	Cesium fluoride
141	Cesium iodide
142	Chlorobenzene
143	Chloroform
144	Concrete, portland
145	Cyclohexane
146	1,2-dichlorobenzene
147	Dichlorodiethyl ether
148	1,2-dichloroethane
149	Diethyl ether
150	N,n-dimethyl formamide
151	Dimethyl sulfoxide
152	Ethane
153	Ethyl alcohol
154	Ethyl cellulose
155	Ethylene
156	Eye lens (ICRP)
157	Ferric oxide
158	Ferroboration
159	Ferrous oxide
160	Ferrous sulfate dosimeter solution
161	Freon-12
162	Freon-12b2
163	Freon-13
164	Freon-13b1
165	Freon-13i1
166	Gadolinium oxysulfide
167	Gallium arsenide
168	Gel in photographic emulsion
169	Pyrex glass
170	Glass, lead

Σχήμα 3.5 (συνέχεια): Κατάλογος έτοιμων υλικών

171	Glass, plate
172	Glucose
173	Glutamine
174	Glycerol
175	Graphite
176	Guanine
177	Gypsum, plaster of Paris
178	N-heptane
179	N-hexane
180	Kapton polyimide film
181	Lanthanum oxybromide
182	Lanthanum oxysulfide
183	Lead oxide
184	Lithium amide
185	Lithium carbonate
186	Lithium fluoride
187	Lithium hydride
188	Lithium iodide
189	Lithium oxide
190	Lithium tetraborate
191	Lung (ICRP)
192	M3 wax
193	Magnesium carbonate
194	Magnesium fluoride
195	Magnesium oxide
196	Magnesium tetraborate
197	Mercuric iodide
198	Methane
199	Methanol
200	Mixed wax
201	Ms20 tissue substitute
202	Muscle, skeletal (ICRP)
203	Muscle, striated (ICRU)
204	Muscle-equivalent liquid, with sucrose
205	Muscle-equivalent liquid, without sucrose
206	Naphthalene
207	Nitrobenzene
208	Nitrous oxide
209	Nylon, du Pont elvamide 8062
210	Nylon, type 6 and type 6/6
211	Nylon, type 6/10
212	Nylon, type 11 (rilsan)
213	Octane, liquid
214	Paraffin wax
215	N-pentane
216	Photographic emulsion
217	Plastic scintillator (vinyltoluene based)
218	Plutonium dioxide
219	Polyacrylonitrile
220	Polycarbonate (makrolon, lexan)
221	Polychlorostyrene
222	Polyethylene
223	Polyethylene terephthalate (mylar)
224	Polymethyl methacrylate (lucite, perspex, plexiglass)
225	Polyoxymethylene

Σχήμα 3.5 (συνέχεια): Κατάλογος έτοιμων υλικών

226	Polypropylene
227	Polystyrene
228	Polytetrafluoroethylene (teflon)
229	Polytrifluorochloroethylene
230	Polyvinyl acetate
231	Polyvinyl alcohol
232	Polyvinyl butyral
233	Polyvinyl chloride
234	Polyvinylidene chloride (saran)
235	Polyvinylidene fluoride
236	Polyvinyl pyrrolidone
237	Potassium iodide
238	Potassium oxide
239	Propane
240	Propane, liquid
241	N-propyl alcohol
242	Pyridine
243	Rubber, butyl
244	Rubber, natural
245	Rubber, neoprene
246	Silicon dioxide
247	Silver bromide
248	Silver chloride
249	Silver halides in photographic emulsion
250	Silver iodide
251	Skin (ICRP)
252	Sodium carbonate
253	Sodium iodide
254	Sodium monoxide
255	Sodium nitrate
256	Stilbene
257	Sucrose
258	Terphenyl
259	Testes (ICRP)
260	Tetrachloroethylene
261	Thallium chloride
262	Tissue, soft (ICRP)
263	Tissue, soft (ICRU four-component)
264	Tissue-equivalent gas (methane based)
265	Tissue-equivalent gas (propane based)
266	Tissue-equivalent plastic (A-150)
267	Titanium dioxide
268	Toluene
269	Trichloroethylene
270	Triethyl phosphate
271	Tungsten hexafluoride
272	Uranium dicarbide
273	Uranium monocarbide
274	Uranium oxide
275	Urea
276	Valine
277	Viton fluoroelastomer
278	Water, liquid
279	Water vapor
280	Xylene

Σχήμα 3.5 (συνέχεια): Κατάλογος έτοιμων υλικών

Πίνακας 3.2: Εντολές αρχείου εισόδου

TITLE	Ο τίτλος της προσομοίωσης
SKPAR	Είδος πρωτογενών σωματιδίων (1=ηλεκτρόνια, 2=φωτόνια ή 3= ποζιτρόνια)
SENERG	Αρχική ενέργεια SEO για μονοενεργειακές πηγές
SPECTR	Για πηγές με συνεχές ενεργειακό φάσμα, κάθε γραμμή SPECTR δίνει το κάτω άκρο (Ei) της κάθε κλάσης του φάσματος και τη αντίστοιχη σχετική πιθανότητα (Pi), ολοκληρωμένη στην κλάση. Το άνω άκρο του φάσματος ορίζεται με μία γραμμή, με Ei το άνω ενεργειακό άκρο και με αρνητική τιμή Pi.
SPOSIT	Για εξωτερικές πηγές, οι συντεταγμένες του κέντρου του όγκου της πηγής
SCONE	Κωνική δέσμη πηγής. Πολική και αζιμουθιακή γωνία της κατεύθυνσης του άξονα της δέσμης, THETA και PHI, και ημιγωνία κώνου, ALPHA, σε μοίρες.
MFNAME	Το όνομα του αρχείου *.mat που αντιστοιχεί στο κάθε υλικό της προσομοίωσης.
MSIMPA	Οι τιμές των παραμέτρων προσομοίωσης για το αντίστοιχο υλικό: ενέργειες απορρόφησης EABS(1:3,M), παράμετροι ελαστικής σκέδασης C1(M) και C2(M) και απώλειες ενέργειας αποκοπής για ανελαστικές σκεδάσεις και εκπομπή ακτινοβολίας πέδησης WCC(M) και WCR(M).  Προεπιλογές: EABS(1,M)=EABS(3,M)=0.01*EPMAX, EABS(2,M)=0.001*EPMAX, C1(M)=C2(M)=0.1, WCC(M)=EABS(1,M), WCR(M)=EABS(2,M)
GEOMFN	Το όνομα του αρχείου που περιγράφει τη γεωμετρία του προβλήματος (*.geo)
IMPDET	Ορίζει τη δημιουργία ενός νέου ανιχνευτή διέλευσης. Τα EL και EU είναι το άνω και κάτω όριο του ενεργειακού εύρους που καλύπτεται από τον ανιχνευτή. NBE είναι ο αριθμός των καναλιών στα οποία διαιρείται η περιοχή EU-EL. Η μεταβλητή IPSF χρησιμεύει για την ενεργοποίηση της δημιουργίας αρχείου psf
IDBODY	Ενεργό σώμα του ανιχνευτή διέλευσης
IDKPAR	Είδος ανιχνευόμενων σωματιδίων (1=ηλεκτρόνια, 2=φωτόνια ή 3= ποζιτρόνια)
ENDETC	Ορίζει τη δημιουργία ενός νέου ανιχνευτή απόθεσης ενέργειας. Τα EL και EU είναι το άνω και κάτω όριο του ενεργειακού εύρους που καλύπτεται από τον ανιχνευτή. NBE είναι ο αριθμός των καναλιών στα οποία διαιρείται η περιοχή EU-EL
EDBODY	Ενεργό σώμα του ανιχνευτή απόθεσης ενέργειας
RESUME	Το πρόγραμμα διαβάζει το αρχείο dump1.dmp και συνεχίζει την προσομοίωση από το σημείο που είχε μείνει.
DUMPTO	Δημιουργία αρχείου dump2.dmp, μετά το πέρας της προσομοίωσης. Αυτό επιτρέπει τη συνέχιση της προσομοίωσης για τη βελτίωση της στατιστικής.
DUMPP	Όταν το DUMPTO είναι ενεργοποιημένο, τα αποτελέσματα της προσομοίωσης καταγράφονται στο αρχείο *.dmp κάθε DUMPP sec.
NSIMSH	Επιθυμητό πλήθος ιστοριών
TIME	Ανώτατος χρόνος προσομοίωσης, σε sec
END	Τελειώνει η ανάγνωση του αρχείου εισόδου

# 4 Η ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΗ ΤΗΣ ΔΙΑΤΑΞΗΣ XRF

## 4.1 Εισαγωγή

Το κεφάλαιο αυτό αφορά στα αποτελέσματα των προσομοιώσεων με τη χρήση του κώδικα PENELOPE. Το πρώτο μέρος του κεφαλαίου είναι αφιερωμένο στην παρουσίαση των στοιχείων της διάταξης XRF που προσομοιώθηκε. Στο δεύτερο μέρος του κεφαλαίου παρουσιάζονται οι προσομοιώσεις που αποσκοπούν στον προσδιορισμό διάφορων παραμέτρων της διάταξης για την ανίχνευση του ουρανίου. Αντίστοιχα, στο τρίτο μέρος του κεφαλαίου παρουσιάζονται εκείνες που αφορούν τη διάταξη ανίχνευσης των σπανίων γαιών. Ορισμένες παράμετροι, όπως για παράδειγμα οι σκεδαστές, η γωνία τοποθέτησης του δείγματος και η γωνία μεταξύ πηγής-δείγματος-ανιχνευτή, επιδρούν με παρόμοιο τρόπο και στις δύο διατάξεις και για το λόγο αυτό κρίθηκε σκόπιμο να μην επαναληφθούν οι προσομοιώσεις για λόγους οικονομίας χρόνου. Παράλληλα, άλλες παράμετροι, όπως η διεγείρουσα ακτινοβολία ή ορισμένα χαρακτηριστικά των ανιχνευτών, επηρεάζουν τις διατάξεις με τέτοιο τρόπο, που είναι δύσκολη η εξαγωγή χρήσιμων συμπερασμάτων, χωρίς την διενέργεια προσομοιώσεων προσαρμοσμένων στις εκάστοτε συνθήκες. Τέλος, γίνεται μία ανακεφαλαίωση παρουσιάζοντας συνοπτικά τα συμπεράσματα που προέκυψαν σε αυτό το κεφάλαιο.

## 4.2 Η μοντελοποίηση των επιμέρους στοιχείων της διάταξης

### 4.2.1 Μοντελοποίηση του ανιχνευτή BEGe

Η μοντελοποίηση του ανιχνευτή BEGe έγινε με μεγάλη ακρίβεια, χάρη στη βοήθεια προηγούμενης ΔΕ (Αγραφιώτης, 2009) στο ΕΠΤ-ΕΜΠ, στην οποία προσδιορίστηκε η νεκρή περιοχή (dead layer) στη μετωπική (front), στην οπίσθια (back) και στην παράπλευρη (side) επιφάνεια του ανιχνευτή.

Πίνακας 4.1: Dead layer ανιχνευτή BEGe ΕΠΤ-ΕΜΠ (Αγραφιώτης, 2009)

dead layer	μm
front	50
back	1500
side	420

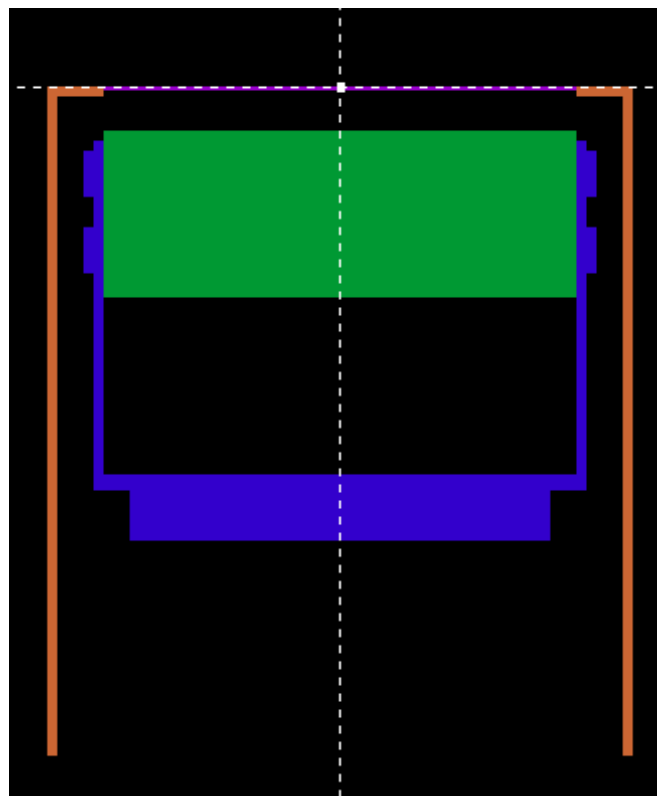
Το παράθυρο από ανθρακονήματα του ανιχνευτή που τον καθιστά πιο ανθεκτικό και κατάλληλο για in-situ εφαρμογές, μοντελοποιήθηκε εσκεμμένα ως παράθυρο βηρυλλίου, έτσι ώστε να υπάρχει εικόνα ακόμα και για τα πολύ χαμηλής ενέργειας φωτόνια τα οποία προκύπτουν κατά τις προσομοιώσεις. Παράλληλα, η χρήση ενός πιο διαπερατού παραθύρου στις προσομοιώσεις δεν



επέφερε αλλαγές στην ανίχνευση των φωτονίων υψηλότερης ενέργειας, οπότε δεν επηρέασε με κάποιον τρόπο το φάσμα του ανιχνευτή στις ενεργειακές περιοχές που μας ενδιαφέρουν στα πλαίσια αυτής της ΔΕ.

Επιπλέον, ο ανιχνευτής BEGe μοντελοποιήθηκε χωρίς το προστατευτικό κάλυμμα από πολυπροπυλένιο που χρησιμοποιείται σε εφαρμογές in-situ γ-φασματοσκοπίας, καθώς η χρήση του καλύμματος αποκόπτει φωτόνια χαμηλών ενεργειών. Ιδιαίτερα σε περιβάλλον εργαστηρίου με ελεγχόμενες συνθήκες και περιορισμένους κινδύνους, η χρήση του καλύμματος δεν είναι απαραίτητη και μπορεί να αποφευχθεί, οδηγώντας με τον τρόπο αυτό σε υψηλότερη απόδοση ανίχνευσης για τα φωτόνια χαμηλών ενεργειών.

Όπως φαίνεται και στο σχήμα 4.1 παρακάτω, μόνο το τμήμα του ανιχνευτή γύρω από τον κρύσταλλο Ge μοντελοποιήθηκε. Το υπόλοιπο τμήμα του κρουστάτη για λόγους ευκολίας σχεδίασης, αλλά και οικονομίας χρόνου προσομοιώσεων έχει παραλειφθεί. Τα υπόλοιπα χαρακτηριστικά του ανιχνευτή και οι διαστάσεις του λήφθηκαν, όπως δίνονται από τον κατασκευαστή στο πιστοποιητικό του ανιχνευτή, που παρουσιάζεται στο παράρτημα Γ.



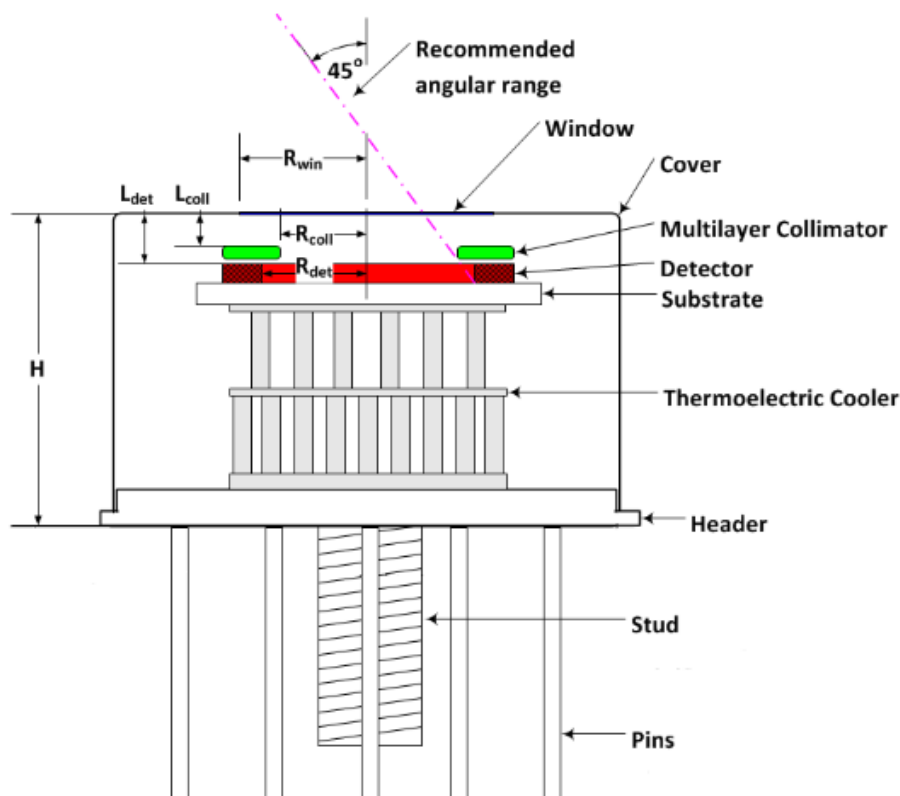
Σχήμα 4.1: Απεικόνιση μοντέλου ανιχνευτή BEGe (τα χρώματα υποδηλώνουν διαφορετικά υλικά)

#### 4.2.2 Μοντελοποίηση του ανιχνευτή Si-PIN

Η μοντελοποίηση του φορητού ανιχνευτή AMPTEK XR-100CR έγινε με βάση τα σχέδια του ανιχνευτή που παρέχονται από την κατασκευάστρια εταιρία, τα οποία παρατίθενται στο παράρτημα Δ. Μία λεπτομέρεια των σχεδίων παρατίθεται στο σχήμα 4.2, για την διευκόλυνση της αντιστοίχισης μεταξύ του πραγματικού ανιχνευτή και του μοντέλου που δημιουργήθηκε.

Ο θερμοηλεκτρικός ψύκτης (*thermoelectric cooler*) του ανιχνευτή δεν προσομοιώθηκε. Το υπόστρωμα (*substrate*) από αλουμίνιο, στο οποίο στερεώνεται ο κρύσταλλος πυριτίου, θεωρήθηκε

ότι είναι επαρκές για τη μοντελοποίηση των σκεδάσεων όσων φωτονίων διαπεράσουν το Si. Προσθήκη και του συστήματος ψύξης στο αρχείο γεωμετρίας, θα οδηγούσε σε πολύπλοκη γεωμετρία και μειωμένη ταχύτητα της προσομοίωσης, χωρίς να έχει ανάλογη επίδραση στην ακρίβεια και την αξιοπιστία του φάσματος του εικονικού ανιχνευτή.

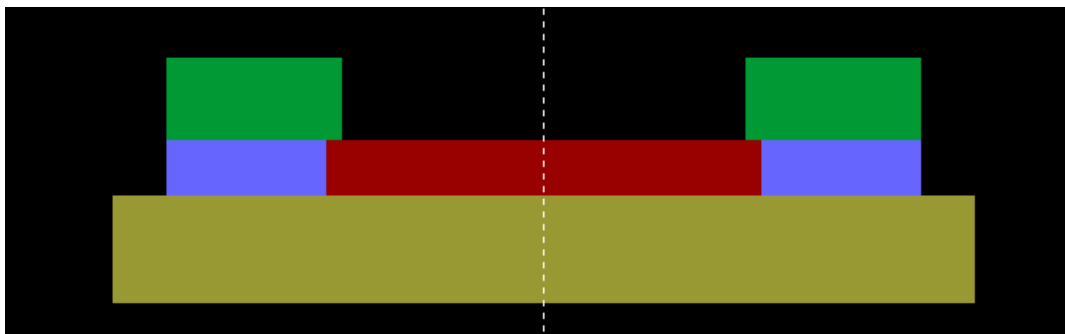


Σχήμα 4.2: Λεπτομέρεια από το φυλλάδιο του κατασκευαστή του ανιχνευτή XR-100CR

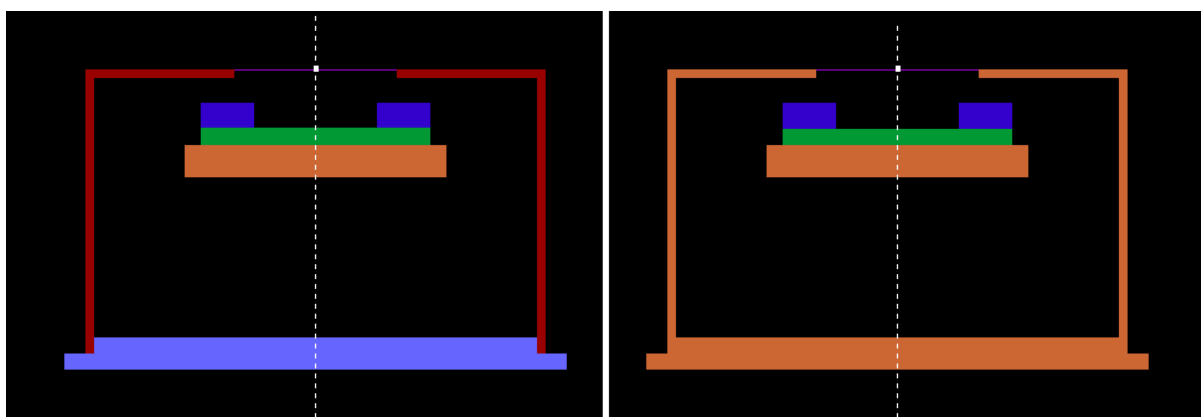
Ο ανιχνευτής, όπως αναφέρθηκε στο κεφάλαιο 2.12.3, είναι εφοδιασμένος με εσωτερικό κατευθυντή που αποτελείται από διαδοχικές στρώσεις υλικών (multilayer) και στόχος του είναι η αποκοπή των φωτονίων που κατευθύνονται προς τα όρια του ενεργού όγκου του ανιχνευτή. Η μοντελοποίηση του έγινε ως ένα σώμα από καθαρό W, επειδή δεν ήταν γνωστά τα πάχη των διαφόρων στρωμάτων στο εσωτερικό του και το βολφράμιο, που αποτελεί εξάλλου το βασικό συστατικό του κατευθυντή, είναι ένα υλικό που επαρκεί για να αποκόψει το μεγαλύτερο μέρος των ενεργειών που ενδιαφέρουν. Η παραδοχή αυτή συντέλεσε επίσης στην επιτάχυνση της προσομοίωσης, λόγω του περιορισμού του πλήθους των σωμάτων και των υλικών που χρησιμοποιήθηκαν. Ως συνέπεια της παραδοχής, στο παραγόμενο φάσμα ενδέχεται να υπάρχουν χαρακτηριστικές γραμμές του W της σειράς L ( $L_{\alpha 1}$  @ 8.40 keV,  $L_{\alpha 2}$  @ 8.34 keV,  $L_{\beta 1}$  @ 9.67 keV). Χαρακτηριστικές ακτίνες της σειράς K δεν αναμένεται να εμφανιστούν στο φάσμα, καθώς στις εφαρμογές που θα χρησιμοποιηθεί ο συγκεκριμένος ανιχνευτής η διέγερση θα γίνει με φωτόνια ενέργειας μικρότερης από την αιχμή απορρόφησης K του W (69.517 keV). Επιπλέον, αυτός ο κατευθυντής δέσμης στην πραγματικότητα έχει μεγάλη σημασία για τη μείωση του θορύβου στο παραγόμενο φάσμα, όμως στις προσομοιώσεις δεν επηρεάζει τη μορφή του φάσματος σε μεγάλο βαθμό, ίσως και καθόλου. Αυτό συμβαίνει διότι, σε συμφωνία με τα σχέδια του κατασκευαστή, ο κρύσταλλος του ανιχνευτή έχει οριστεί ως δύο διαφορετικά σώματα στο αρχείο γεωμετρίας, από τα οποία μόνο το ένα αποτελεί το ενεργό μέρος του ανιχνευτή και συμβάλλει στην καταγραφή των

φωτονίων που προσπίπτουν, ενώ το άλλο αποτελεί τη νεκρή ζώνη. Στο σχήμα 4.3 φαίνονται η ενεργός περιοχή (κόκκινο χρώμα) και η νεκρή ζώνη που την περιβάλλει (γαλάζιο χρώμα). Η επίδραση του κατευθυντή σε μία προσομοίωση περιορίζεται σε μία μικρή μείωση των καταγραφόμενων φωτονίων. Στην ενότητα 4.4.3, παρακάτω παρουσιάζονται τα αποτελέσματα των προσομοιώσεων που εξετάζουν τον ισχυρισμό αυτό.

Το κάλυμμα (*cover*) του ανιχνευτή είναι κατασκευασμένο από νικέλιο (Ni), ενώ το καπάκι (*header*) του από ένα κράμα Fe-Ni-Co (Konar) σε συγκεντρώσεις κατά μάζα 54%, 29% και 17%, αντίστοιχα. Η αρχική μοντελοποίηση του ανιχνευτή φαίνεται στα αριστερά στο σχήμα 4.4. Τα υλικά του περιβλήματος εκπέμπουν χαρακτηριστικές ακτίνες K στην ενεργειακή περιοχή 6.4-8.3 keV, σε ενέργειες δηλαδή που δεν επηρεάζουν την περιοχή ενδιαφέροντος στις συγκεκριμένες εφαρμογές. Για το λόγο αυτό αποφασίστηκε η αντικατάσταση του περιβλήματος με καθαρό Al (σχήμα 4.4, δεξιά), ώστε να περιοριστούν το πλήθος των υλικών και το πλήθος των σωμάτων και να επιταχυνθεί η διαδικασία της προσομοίωσης. Όταν η ενεργειακή περιοχή έως 10keV είναι σημαντική για κάποια εφαρμογή, είναι σαφές ότι η μοντελοποίηση δεν μπορεί να απλοποιηθεί με τους παραπάνω τρόπους. Τόσο ο εσωτερικός κατευθυντής δέσμης, όσο και το περίβλημα του ανιχνευτή πρέπει να μοντελοποιηθούν με τη μεγαλύτερη δυνατή ακρίβεια. Ειδικά στην περίπτωση του πρώτου, για τον οποίο δεν είναι γνωστά τα πάχη των στρώσεων, παρά μόνο τα υλικά τους, ίσως υπάρξει ανάγκη πειραματικού προσδιορισμού τους.



Σχήμα 4.3: Απεικόνιση εσωτερικού μέρους ανιχνευτή Si-PIN, όπου τα διαφορετικά χρώματα υποδηλώνουν διαφορετικά σώματα (κόκκινο: ενεργός όγκος Si, γαλάζιο: νεκρή περιοχή Si, πράσινο: ML collimator, κίτρινο: υπόστρωμα Al)



Σχήμα 4.4: Απεικόνιση 2 μοντέλων ανιχνευτή Si-PIN, όπου τα διαφορετικά χρώματα υποδηλώνουν διαφορετικά υλικά (πράσινο: Si, μπλε: W, πορτοκαλί: Al, μωβ: Be, κόκκινο: Ni, γαλάζιο: κράμα Konar)

### 4.2.3 Το φάσμα διέγερσης

Η διεγείρουσα ακτινοβολία προσομοιώθηκε τόσο ως μονοενεργειακή για την εξαγωγή αρχικών ποιοτικών συμπερασμάτων για μία ιδανική περίπτωση, όσο και ως πολυενεργειακό φάσμα εξόδου από μηχανή ακτίνων-Χ.

Σε ότι αφορά τις πολυενεργειακές διεγείρουσες ακτινοβολίες, στα πλαίσια προηγούμενων ΔΕ στο ΕΠΤ-ΕΜΠ (Χαυλής, 2011) είχε γίνει σύγκριση φασμάτων που προέκυψαν από πακέτο λογισμικού και φασμάτων που είχαν προκύψει από την προσομοίωση της διάταξης παραγωγής ακτίνων-Χ. Οι διαφορές μεταξύ των φασμάτων δεν ήταν σημαντικές και για το λόγο αυτό αποφασίστηκε και σε αυτή τη ΔΕ να χρησιμοποιηθούν φάσματα από πακέτο λογισμικού και συγκεκριμένα από το λογισμικό SpekCalc. Όπως μάλιστα επαληθεύθηκε, όταν ως είσοδος χρησιμοποιείται φάσμα χωρίς φίλτρα από το λογισμικό SpekCalc, τα φάσματα τα οποία καταγράφονται από τους εικονικούς ανιχνευτές, μετά από φίλτρα, συμφωνούν ικανοποιητικά με τα φάσματα που καταγράφουν οι εικονικοί ανιχνευτές χωρίς τη χρήση φίλτρων, όταν ως είσοδος χρησιμοποιείται φάσμα το οποίο έχει προκύψει από το λογισμικό SpekCalc με χρήση φίλτρων. Στην πορεία της ΔΕ χρησιμοποιήθηκαν τόσο έτοιμα φάσματα από το πρόγραμμα SpekCalc όσο και προσομοιωμένα φάσματα.

### 4.2.4 Τα δείγματα

Για τις προσομοιώσεις έγινε χρήση δύο κατηγοριών δειγμάτων: δείγματα που περιέχουν ουράνιο και δείγματα που περιέχουν σπάνιες γαίες.

#### 4.2.4.1 Ουρανούχα δείγματα

Τα δείγματα που χρησιμοποιήθηκαν σε όσες προσομοιώσεις είχαν ως στόχο την ανίχνευση ουρανίου, αποτελούνται από διοξείδιο του πυριτίου ( $\text{SiO}_2$ ) με συγκεκριμένες περιεκτικότητες ουρανίου. Το  $\text{SiO}_2$  επελέγη διότι είναι ένα από τα κύρια συστατικά του χώματος και της ιπτάμενης τέφρας. Άλλα υλικά που επίσης αποτελούν κύρια συστατικά του χώματος και της ιπτάμενης τέφρας, όπως οξείδια του αργιλίου, του ασβεστίου και του σιδήρου δεν χρησιμοποιήθηκαν για λόγους απλότητας και διότι κρίθηκε ότι η αυτοαπορρόφηση στο δείγμα που εισάγεται από τη χρήση του διοξειδίου του πυριτίου είναι επαρκής. Για τη δημιουργία του αρχείου υλικού του δείγματος (\*.mat) απαιτείται η εισαγωγή των ατομικών αριθμών των στοιχείων που το απαρτίζουν και των αντίστοιχων κατά μάζα συγκεντρώσεων τους. Στην περίπτωση των ουρανούχων δειγμάτων που χρησιμοποιήθηκαν απαιτήθηκαν 3 στοιχεία: Ο με  $Z=8$ , Si με  $Z=14$  και U με  $Z=92$ . Επίσης για την πυκνότητα των δειγμάτων χρησιμοποιήθηκε μία τυπική πυκνότητα  $\text{SiO}_2$ ,  $2.648 \text{ kg/km}^3$ .

Τα δείγματα που δημιουργήθηκαν είναι συνολικά 6 και παρουσιάζονται παρακάτω (πίνακας 4.2). Για τον προσδιορισμό των κατά μάζα συγκεντρώσεων των συνιστωσών τους χρησιμοποιήθηκαν διαφορετικές αρχικές “απαιτήσεις”. Για παράδειγμα, άλλα δείγματα δημιουργήθηκαν έτσι ώστε να έχουν ορισμένη συγκέντρωση ουρανίου και άλλα ώστε να έχουν συγκεκριμένη ραδιενέργεια ανά μονάδα μάζας (Bq U-238/kg). Τα μεγέθη και οι σχέσεις που φάνηκαν χρήσιμες στη διαδικασία των σχετικών υπολογισμών παρουσιάζονται στη συνέχεια.

- Οι ατομικές μάζες των στοιχείων είναι  $M_O=15.999 \text{ kg/kmol}$ ,  $M_{Si}=28.085 \text{ kg/kmol}$  και  $M_U=238.028 \text{ kg/kmol}$ , ενώ η μοριακή μάζα του  $\text{SiO}_2$  προκύπτει  $M_{\text{SiO}_2}=20.028 \text{ kg/kmol}$ .

- Οι κατά μάζα  $y_i$  [(kg i)/(kg sample)] και οι γραμμομοριακές  $x_i$  [(kg i)/(kg sample)] περιεκτικότητες των συστατικών στο δείγμα συνδέονται με τη σχέση:

$$y_i = x_i \frac{M_i}{M} \quad (4.1)$$

- Η φυσική ισοτοπική σύσταση του ουρανίου λήφθηκε: 99.28% U-238, 0.7145% U-235 και 0.0055% U-234.
- Οι σταθερές διάσπασης των τριών ισοτόπων είναι  $4.919 \cdot 10^{-18} \text{ s}^{-1}$ ,  $3.122 \cdot 10^{-17} \text{ s}^{-1}$  και  $8.953 \cdot 10^{-14} \text{ s}^{-1}$ , αντίστοιχα.
- Η ραδιενέργεια του ουρανίου ανά μονάδα μάζας δείγματος είναι  $A_U = \lambda \cdot N_U$ , όπου  $A_U$  [(Bq U)/(kg sample)],  $\lambda$  [ $\text{s}^{-1}$ ] και  $N_U$  [(U atoms)/(kg sample)], για το οποίο ισχύει  $N_U = \frac{y_U N_A}{M_U}$ , όπου  $N_A = 6.022 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1}$  ο αριθμός Avogadro.

Πίνακας 4.2: Δείγματα  $\text{SiO}_2$ -U που δημιουργήθηκαν για τις προσομοιώσεις. Δίνεται η “απαίτηση” που τέθηκε για κάθε υλικό για το λόγο που οδήγησε στη δημιουργία του

<b>α/α</b>	<b>Y<sub>o</sub></b> [kg O/kg sample]	<b>Y<sub>si</sub></b> [kg Si/kg sample]	<b>Y<sub>u</sub></b> [kg U/kg sample]	<b>Απαίτηση</b>
<b>1</b>	$5.272377 \cdot 10^{-1}$	$4.627623 \cdot 10^{-1}$	$1.000000 \cdot 10^{-2}$	$y_U = 10000 \text{ ppm}$
<b>2</b>	$5.304700 \cdot 10^{-1}$	$4.655995 \cdot 10^{-1}$	$3.930500 \cdot 10^{-3}$	$A_U \approx 50 \text{ kBq U-238/kg}$
<b>3</b>	$5.319310 \cdot 10^{-1}$	$4.668818 \cdot 10^{-1}$	$1.187204 \cdot 10^{-3}$	$x_U = 100 \text{ mol U/mol}$
<b>4</b>	$5.325003 \cdot 10^{-1}$	$4.673815 \cdot 10^{-1}$	$1.182095 \cdot 10^{-4}$	$A_U \approx 1.5 \text{ kBq U-238/kg}$
<b>5</b>	$5.322970 \cdot 10^{-1}$	$4.672030 \cdot 10^{-1}$	$5.000000 \cdot 10^{-4}$	$y_U = 500 \text{ ppm}$
<b>6</b>	$5.324568 \cdot 10^{-1}$	$4.673432 \cdot 10^{-1}$	$2.000000 \cdot 10^{-4}$	$y_U = 200 \text{ ppm}$

#### 4.2.4.2 Δείγματα σπανίων γαιών

Για τις προσομοιώσεις που έγιναν με σκοπό τη διέγερση και την ανίχνευση των σπανίων γαιών, δημιουργήθηκε άλλο αρχείο υλικού. Οι σπάνιες γαίες που χρησιμοποιήθηκαν ήταν οι εξής: ύτριο (Y), λανθάνιο (La), δημήτριο (Ce) και νεοδύμιο (Nd) με ατομικούς αριθμούς 39, 57, 58 και 60 αντίστοιχα. Οι λόγοι που επιλέχθηκαν αυτά τα στοιχεία είναι δύο: (α) η σχετικά μεγάλη συγκέντρωσή τους στο γήινο φλοιό και (β) η μεγάλη παραγωγή και κατανάλωση αυτών από τη βιομηχανία (βλ. ενότητα 2.11). Οι συγκεντρώσεις τους επιλέχθηκαν μέσα σε τυπικά όρια για την τέφρα στερεών ορυκτών καυσίμων και είναι 1000 ppm για το Y και 500 ppm για τα La, Ce και Nd (Bragg *et al.*, 2004). Αυτά τα ιχνοστοιχεία βρίσκονται σε μία μήτρα από  $\text{SiO}_2$  (διοξείδιο του πυριτίου),  $\text{Al}_2\text{O}_3$  (οξείδιο του αλουμινίου) και  $\text{CaO}$  (οξείδιο του ασβεστίου) στις ίδιες αναλογίες στο υλικό. Ο λόγος που δεν χρησιμοποιήθηκε εκ νέου μία μήτρα καθαρού  $\text{SiO}_2$  είναι γιατί στην περίπτωση αυτή όπου χρησιμοποιείται διέγερση χαμηλότερης ενέργειας, θα ήταν ενδιαφέρον να εξεταστεί και η επίδραση της διέγερσης των στοιχείων χαμηλού ατομικού αριθμού της μήτρας, όπως το Al, το Si και το Ca, χωρίς αυτή η αλλαγή να επηρεάζει σημαντικά με κάποιο τρόπο τα υπόλοιπα αποτελέσματα της προσομοίωσης.

Για τη δημιουργία του αρχείου \*.mat, το οποίο ονομάστηκε RE1.mat, υπολογίστηκαν τα κλάσματα μάζας για τα στοιχεία O, Al, Si, Ca για μία μήτρα χωρίς τις προσμίξεις, όπου

$\gamma_{\text{SiO}_2} = \gamma_{\text{Al}_2\text{O}_3} = \gamma_{\text{CaO}} = 1/3$  και μετά έγινε η κατάλληλη αναγωγή λαμβάνοντας υπόψη τις προκαθορισμένες περιεκτικότητες των σπάνιων γαιών.

Πίνακας 4.3: Οι κατά μάζα συγκεντρώσεις των συστατικών του δείγματος RE1, όπου  $\gamma_i = [\text{kg i/kg RE1}]$ .

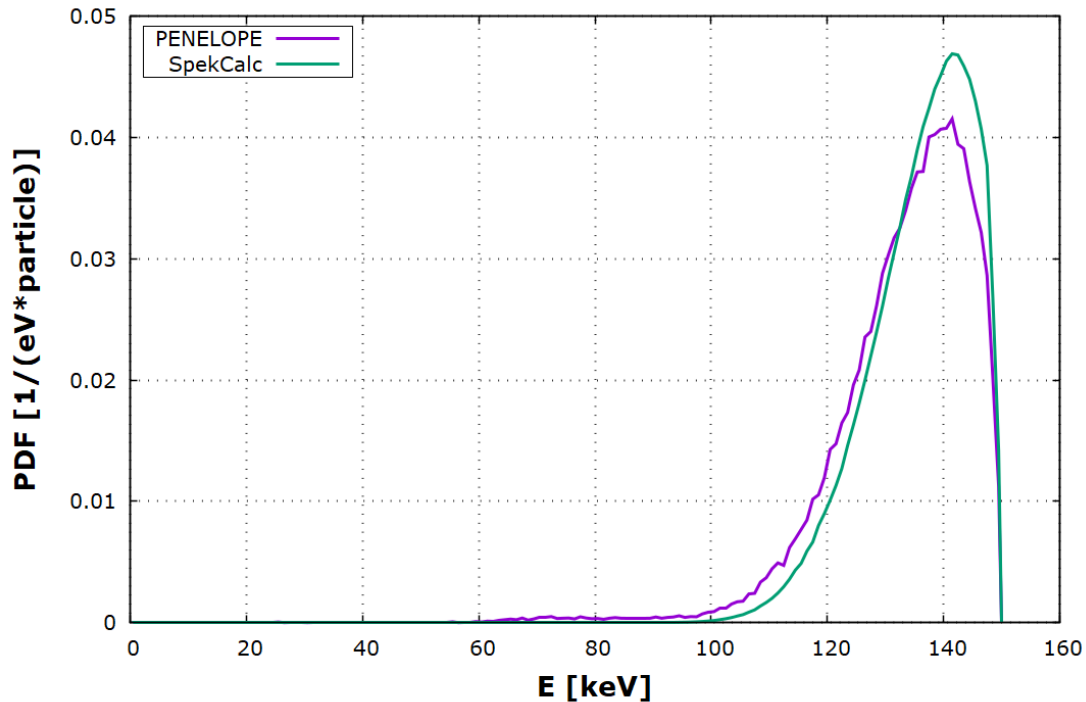
$\gamma_{\text{O}}$	$\gamma_{\text{Al}}$	$\gamma_{\text{Si}}$	$\gamma_{\text{Ca}}$	$\gamma_{\text{Y}}$	$\gamma_{\text{La}}$	$\gamma_{\text{Ce}}$	$\gamma_{\text{Nd}}$
0.4285	0.1760	0.1554	0.2376	0.0010	0.0005	0.0005	0.0005

## 4.3 Προσομοίωση της διάταξης XRF για ανίχνευση του ουρανίου

### 4.3.1 Η διεγείρουσα ακτινοβολία

Η διεγείρουσα ακτινοβολία σε μία διάταξη XRF ίσως αποτελεί την πιο σημαντική συνιστώσα της διάταξης. Προσθέτοντας φίλτρα στην έξοδο της μηχανής παραγωγής ακτίνων-Χ, το φάσμα εξόδου της μηχανής μπορεί να τροποποιηθεί σύμφωνα με τις ανάγκες κάθε πειράματος, έτσι ώστε να αξιοποιεί με τον καλύτερο τρόπο τα φυσικά χαρακτηριστικά του δείγματος. Θα ήταν επιθυμητό για την εφαρμογή της τεχνικής XRF σε μία ιδανική περίπτωση να διατίθεται η δυνατότητα μονοενεργειακών πηγών που θα διεγείρουν βέλτιστα το δείγμα, όμως κάτι τέτοιο δεν είναι πάντα εύκολο. Στην πραγματικότητα αυτό που επιδιώκεται με τη χρήση των φίλτρων είναι η αποκοπή των ενεργειών της πρωτογενούς δέσμης που δημιουργούν θόρυβο στο φάσμα, δηλαδή των φωτονίων που δεν είναι αρκετά υψηλής ενέργειας ώστε να διεγείρουν τα επιθυμητά στοιχεία και απλώς συνεισφέρουν στην αύξηση του υποστρώματος. Για παράδειγμα, το ουράνιο παρουσιάζει αιχμή απορρόφησης K (*K edge*) στα 115.6 keV, ενέργεια που αποτελεί κατώφλι για τη δημιουργία κενού στη στιβάδα ηλεκτρονίων K και τη συνακόλουθη παραγωγή χαρακτηριστικών ακτίνων K των οποίων επιδιώκεται η ανίχνευση. Συνεπώς, είναι κατανοητό πως το τμήμα του φάσματος με ενέργεια κάτω από 115.6 keV δε συμβάλλει στην ανίχνευση του ουρανίου, παρά μόνο αλληλεπιδρά με άλλους μηχανισμούς, δημιουργεί παρεμβολές στο φάσμα και αυξάνει το συνολικό ρυθμό καταγραφής φωτονίων (*count rate*).

Όπως αναφέρθηκε και στην ενότητα 4.2.3, τα φάσματα διέγερσης που χρησιμοποιήθηκαν για τις προσομοιώσεις κρίθηκε σκόπιμο να ληφθούν από το πρόγραμμα *SpekCalc*, αφού πρώτα επαληθευθεί η σύγκλιση των αποτελεσμάτων του προγράμματος με τα αποτελέσματα των προσομοιώσεων. Για την επαλήθευση, έγινε χρήση φάσματος μηχανής ακτίνων-Χ με άνοδο από W που εκτιμήθηκε από το πρόγραμμα *SpekCalc*, με φίλτρα 10 mm Sn και 10 mm Al. Από το ίδιο πρόγραμμα δημιουργήθηκε το αντίστοιχο φάσμα χωρίς φίλτρα, το οποίο χρησιμοποιήθηκε ως είσοδος στον κώδικα προσομοίωσης *PENELOPE*, και κάνοντας χρήση κατά την προσομοίωση των ίδιων φίλτρων. Στο σχήμα 4.5 γίνεται η σύγκριση μεταξύ των δύο φασμάτων, από όπου διαπιστώνεται ότι δεν υπάρχει σημαντική διαφορά.



Σχήμα 4.5: Φιλτραρισμένα φάσματα μηχανής ακτίνων-Χ με άνοδο W, ΥΤ 150 keV και φίλτρα 10 mm Sn και 10 mm Al, που προέκυψαν από το πρόγραμμα SpekCalc και από προσομοίωση με τον κώδικα PENELOPE

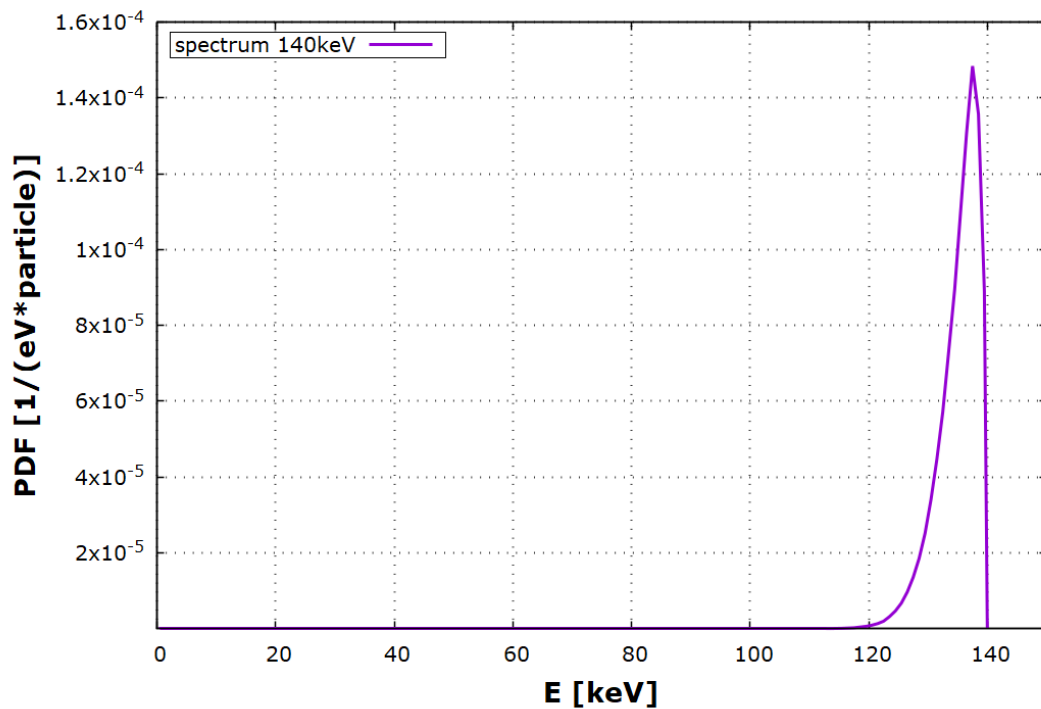
Για την περίπτωση της διέγερσης για ανίχνευση του ουρανίου χρησιμοποιήθηκαν οι παρακάτω διεγέρσεις:

- μονοενεργειακή πηγή ενέργειας 116, 125, 135, 150, 180 keV, που έγιναν με σκοπό την εξαγωγή προκαταρκτικών συμπερασμάτων,
- φάσματα ακτίνων-Χ με μέγιστη ενέργεια φωτονίων 140 keV και 200 keV.

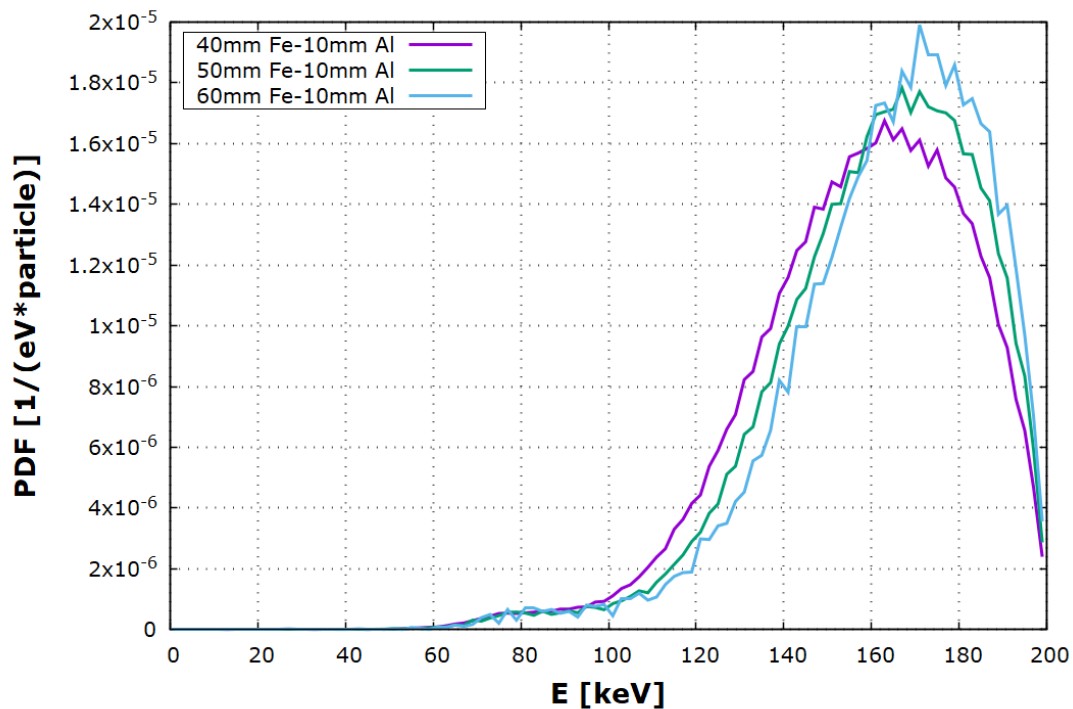
Στην περίπτωση του φάσματος των 140 keV χρησιμοποιήθηκαν κατάλληλα φίλτρα ώστε να επιτευχθεί ικανοποιητική μείωση του υποστρώματος στην ενεργειακή περιοχή 0-116 keV όπου αναμένεται να ανιχνεύονται οι K χαρακτηριστικές του ουρανίου (βλ. ενότητα 2.10). Τα φίλτρα που χρησιμοποιήθηκαν για τη δημιουργία του ήταν 15 mm κασσίτερου (Sn) και 30 mm αλουμίνιου (Al). Το προκύπτον φάσμα, που εκτείνεται κυρίως στην περιοχή 120-140keV, παρουσιάζεται στο σχήμα 4.6.

Η περίπτωση του φάσματος των 200 keV προέκυψε μετά την συγκρότηση της πειραματικής διάταξης στο ΕΠΤ-ΕΜΠ (βλ. κεφάλαιο 5) και τη διαπίστωση των αναγκών και των δυνατοτήτων της διάταξης. Τα 200 kV είναι η μέγιστη δυνατή υψηλή τάση που μπορεί να επιτύχει η πηγή ραδιογραφίας που χρησιμοποιήθηκε. Κατά την επιλογή της μέγιστης ενέργειας, αντιμετωπίστηκαν δύο διαφορετικά προβλήματα, ανταγωνιστικά μεταξύ τους. Το ένα ήταν η υψηλή ροή φωτονίων προς τον φορητό ανιχνευτή, ο οποίος λόγω του μεγάλου κρυστάλλου Ge που διαθέτει και της μεγάλης απόδοσης του, δεν είχε τη δυνατότητα να καταγράψει τόσο μεγάλες ροές φωτονίων. Το δεύτερο ήταν η δημιουργία φάσματος διέγερσης με κατάλληλη ενέργεια για τη διέγερση του ουρανίου. Τελικά, επιλέχθηκε να γίνει διέγερση με τη μέγιστη δυνατή ενέργεια, παρά την αυξημένη ροή φωτονίων, επειδή παράλληλα αποφασίστηκε να χρησιμοποιηθούν πολύ ισχυρά φίλτρα που θα περιορίζαν σημαντικά τη ροή των φωτονίων που κατευθύνονται προς το δείγμα και τον ανιχνευτή. Βασιζόμενοι στη διαθεσιμότητα των υλικών, επιλέχθηκε η δημιουργία φίλτρων από σίδηρο (Fe) και

αλουμίνιο (Al). Στο σχήμα 4.7, παρουσιάζονται τα αποτελέσματα των προσομοιώσεων με 3 διαφορετικά πάχη Fe και 10 mm Al. Κρίθηκε πως το βέλτιστο φάσμα για την εφαρμογή είναι αυτό που αντιστοιχεί στα 50 mm Fe και 10 mm Al, όμως για τις προσομοιώσεις που ακολούθησαν χρησιμοποιήθηκε το φάσμα με τα 40 mm Fe και 10 mm Al, λόγω ταχύτητας, μία παράμετρος ιδιαίτερα κρίσιμη στη φάση της διερεύνησης της συμπεριφοράς της διάταξης.



Σχήμα 4.6: Φάσμα 140 keV μηχανής ακτίνων-Χ ανόδου W, με φίλτρα 15 mm Sn και 30 mm Al

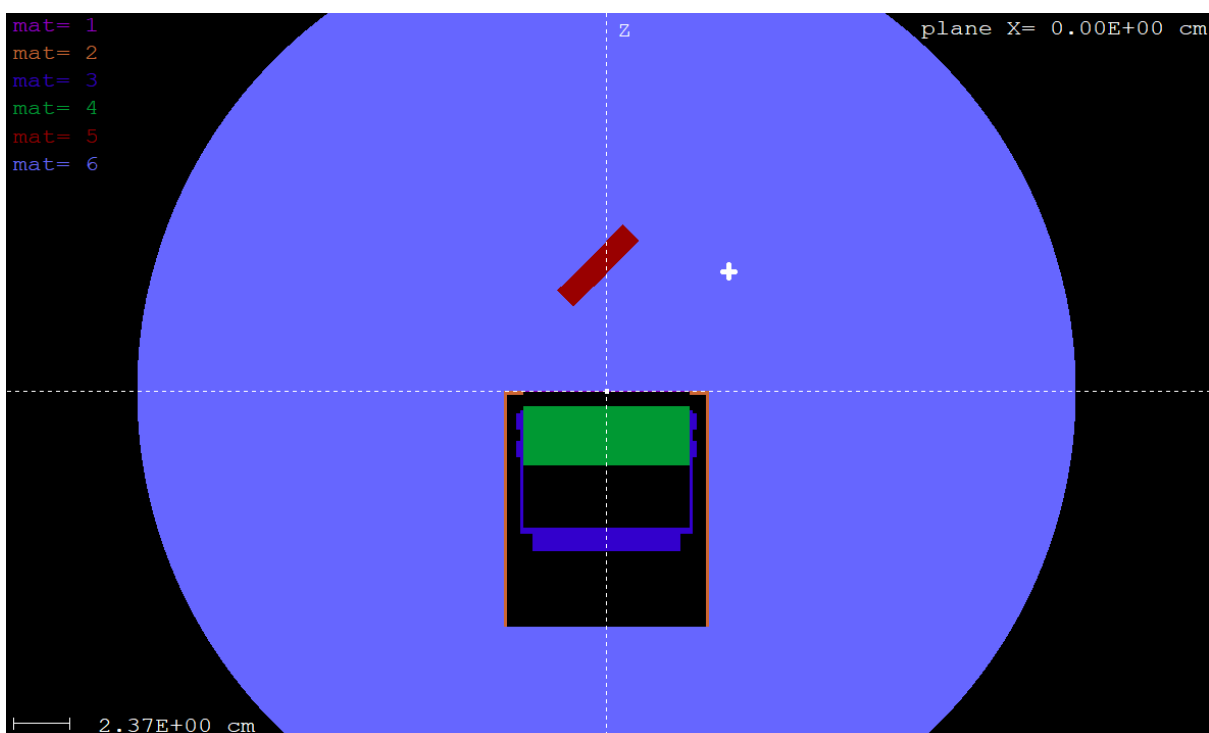


Σχήμα 4.7: Φάσματα 200 keV μηχανής ακτίνων-Χ, με φίλτρα 40 mm, 50 mm ή 60 mm Fe και 10 mm Al



### 4.3.2 Ακτινοβολήση με διαφορετικές διεγέρσεις σε μία απλοποιημένη διάταξη XRF

Για τον έλεγχο της αποτελεσματικότητας των διαφόρων τύπων διεγέρσεως και των διαφόρων ενεργειών έγινε μία σειρά από προσομοιώσεις ακτινοβολήσης πραγματικού στόχου σε μία απλοποιημένη διάταξη XRF. Η δέσμη ακτίνων-Χ επιλέχθηκε να έχει κωνικότητα  $10^\circ$  (ημιγωνία κώνου  $5^\circ$ ) και το δείγμα είναι κυλινδρικό ακτίνας 20 mm, πάχους 10 mm και συγκέντρωσης ουρανίου 500 ppm (δείγμα 5). Οι αποστάσεις πηγής-δείγματος και δείγματος ανιχνευτή έχουν οριστεί ίσες με 50 mm. Ο εικονικός ανιχνευτής απόθεσης ενέργειας συμπίπτει με τον ενεργό όγκο του κρυστάλλου του Ge του πραγματικού ανιχνευτή BEGe, κάτι που ισχύει σε όλες τις προσομοιώσεις. Για καλύτερη κατανόηση της γεωμετρίας, παρατίθεται μία απεικόνιση στο σχήμα 4.8, με τη βοήθεια του προγράμματος gview2d.exe.

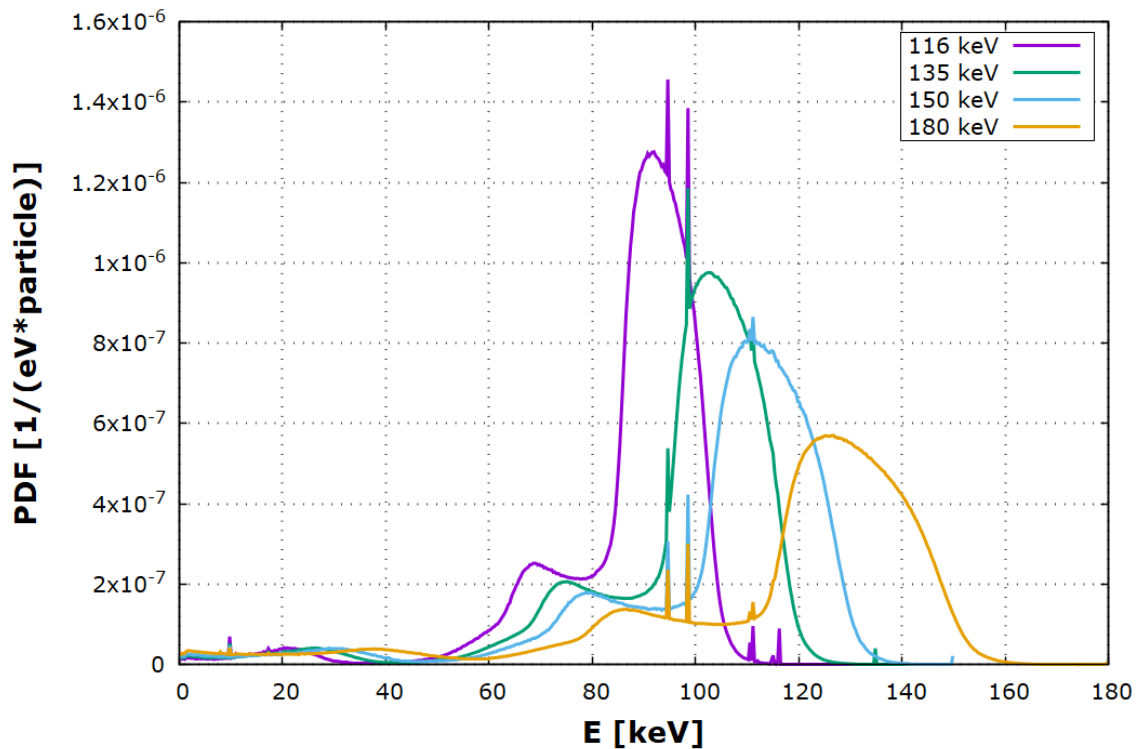


Σχήμα 4.8: Διάταξη που χρησιμοποιήθηκε για την προσομοίωση της επίδρασης της διεγείρουσας ακτινοβολίας. Τα υλικά είναι: 1-Be, 2-Al, 3-Cu, 4-Ge, 5-SiO<sub>2</sub>-U, 6-Dry air, near sea level. Το μαύρο αντιστοιχεί στο κενό και ο λευκός σταυρός στη θέση της πηγής

Στο σχήμα 4.9, παρουσιάζονται τα αποτελέσματα της ακτινοβολήσης με μονοενεργειακή δέσμη. Η μετατόπιση της διεγείρουσας προς υψηλότερες ενέργειες οδηγεί στη μετατόπιση και του συνεχούς υποστρώματος λόγω σκεδάσεων Compton, το οποίο παρουσιάζει κορυφή που αντιστοιχεί στην ενέργεια φωτονίου Compton που σκεδάζεται σε γωνία  $90^\circ$ . Επίσης, στο διάγραμμα εντοπίζεται μία κορυφή μικρότερου ύψους. Ενεργειακά, τουλάχιστον, η κορυφή αυτή αντιστοιχεί στην οπισθοσκέδαση των ήδη σκεδασθέντων φωτονίων σε γωνίες περίπου  $90^\circ$  (πίνακας 4.4), χωρίς όμως να μπορεί να αποδοθεί η κορυφή με βεβαιότητα στο μηχανισμό αυτό.

Παρότι σε όλες τις περιπτώσεις οι χαρακτηριστικές ακτίνες του ουρανίου είναι ανιχνεύσιμες, εκ του αποτελέσματος, οι υψηλότερες ενέργειες όπως τα 180 keV κρίνονται πιο κατάλληλες για τη συγκεκριμένη εφαρμογή. Σε αυτό συνηγορεί το ότι η διεγερση των γραμμών K του U απαιτεί φωτόνια ενέργειας τουλάχιστον 115.9 keV και για το λόγο αυτό δεν είναι δυνατή η μετατόπιση του

συνεχούς Compton σε χαμηλότερες ενέργειες από αυτές που φαίνονται στο σχήμα, όπου έχει χρησιμοποιηθεί η διέγερση ενέργειας 116 keV.



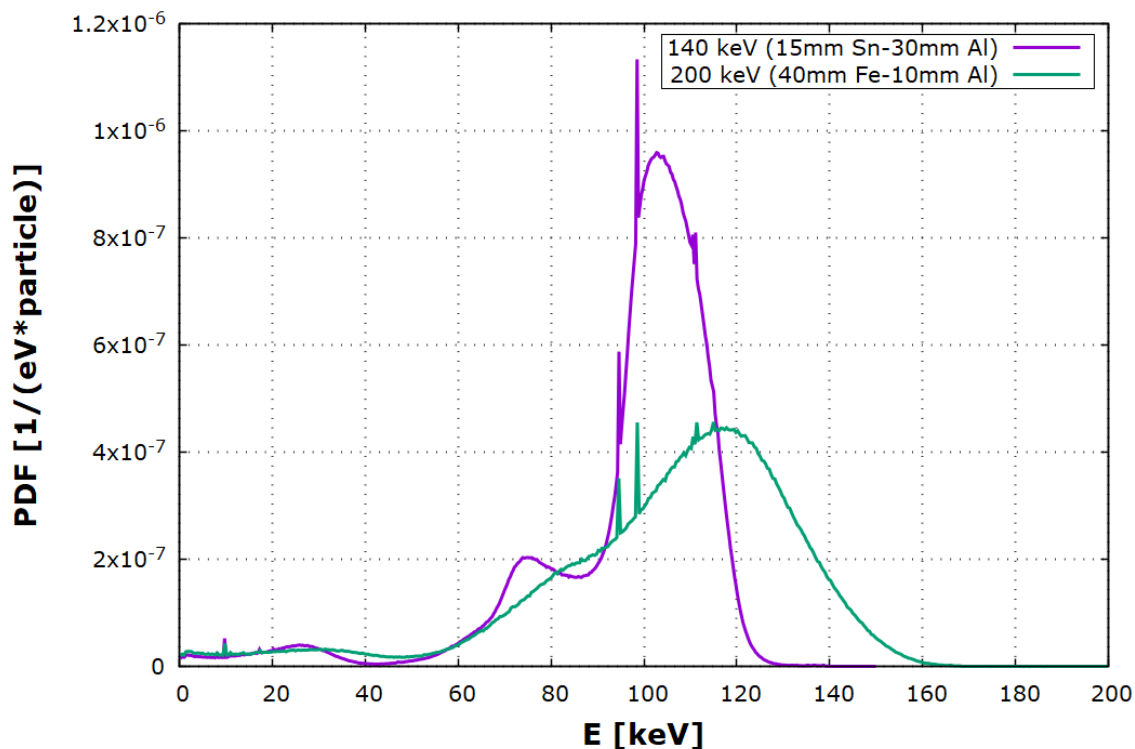
Σχήμα 4.9: Φάσματα ανιχνευτή απόθεσης ενέργειας για διαφορετικές μονοενεργειακές διεγέρσεις

Πίνακας 4.4: Ενέργεια αιχμών διαδοχικών σκεδάσεων σε γωνίες 90° και 180°

$E_{\gamma}$ [keV]	$E_{\gamma}'$ ( $\theta_1=90^\circ$ ) [keV]	$E_{\gamma}''$ ( $\theta_2=180^\circ$ ) [keV]
<b>116</b>	94.5	69.0
<b>135</b>	106.8	75.3
<b>150</b>	116.0	79.8
<b>180</b>	133.1	87.5

Στο σχήμα 4.10, παρατίθενται τα φάσματα που ανιχνεύονται για διέγερση με φάσμα ακτίνων-Χ. Το φάσμα των 140 keV, λόγω της πολύ οξείας, σχεδόν μονοενεργειακής μορφής του, παρέχει αποτελέσματα παρόμοια με αυτά της διέγερσης με μονοενεργειακή πηγή 135 keV. Αντίθετα, το φάσμα των 200 keV, που κατανέμεται σε μία ευρεία ενεργειακή περιοχή (110-200 keV), παρουσιάζει ένα πολύ πιο ομαλό υπόστρωμα, χωρίς απότομες μεταβολές, που παρουσιάζει μέγιστο περί την ενέργεια 160 keV που αντιστοιχεί στην ενέργεια των φωτονίων αρχικής ενέργειας (μέγιστη ένταση στο διεγείρον φάσμα) που σκεδάζονται σε γωνία 90°. Η ομαλότητα του υποστρώματος οφείλεται στην επαλληλία των συνεχών Compton για τις διάφορες ενέργειες των φωτονίων της αρχικής δέσμης. Είναι γενικά προτιμότερο για την ανάλυση του φάσματος, το φάσμα του ανιχνευτή να έχει ένα υψηλό, αλλά ομαλό υπόστρωμα, παρά να έχει χαμηλό υπόστρωμα με έντονες μεταβολές.

Για τη διερεύνηση των παραμέτρων της διάταξης ανίχνευσης ουρανίου στη συνέχεια του κεφαλαίου 4, έχει χρησιμοποιηθεί το φάσμα των 140 keV, χωρίς αυτό να επηρεάζει τα αποτελέσματα που είναι γενικά ποιοτικά. Όμως, όπως θα δούμε στο κεφάλαιο 5, κατά τη διεξαγωγή των πειραμάτων έχει χρησιμοποιηθεί το φάσμα με μέγιστη ενέργεια 200 keV.



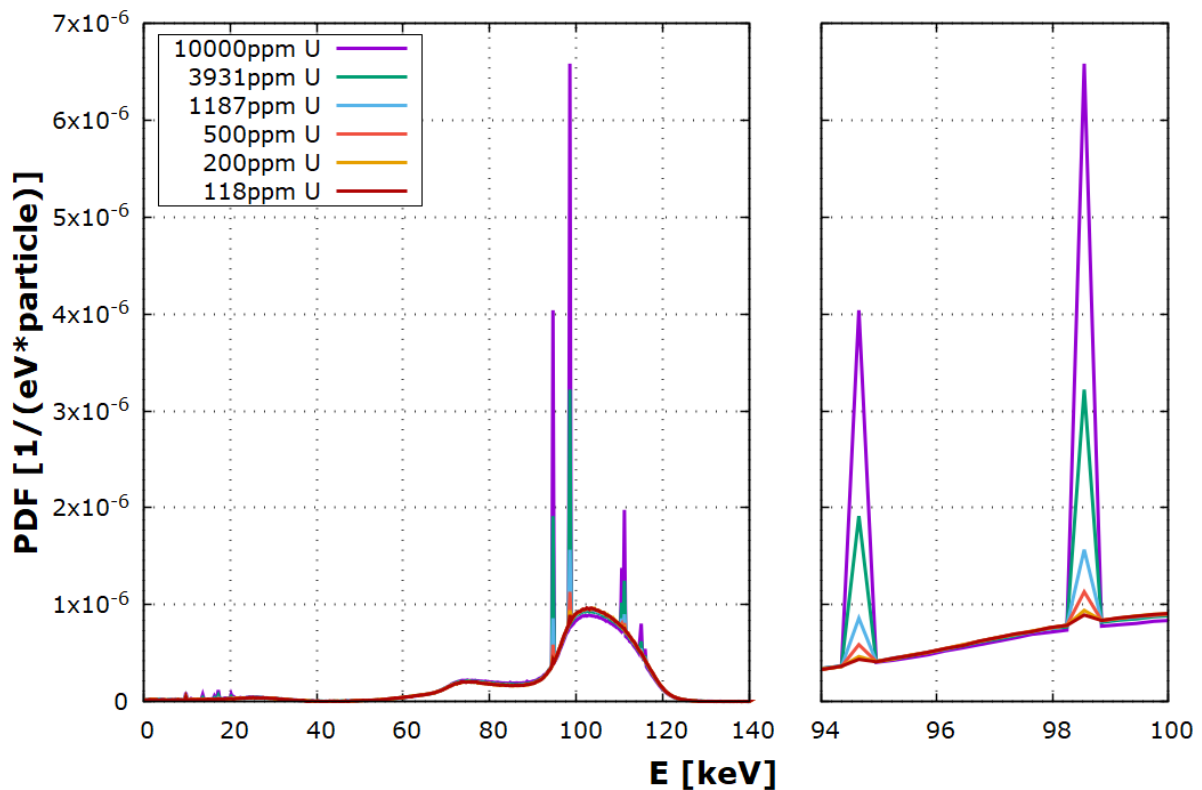
Σχήμα 4.10: Φάσματα εικονικού ανιχνευτή απόθεσης ενέργειας για διέγερση με φάσματα ακτίνων-Χ μέγιστης ενέργειας 140 και 200keV

### 4.3.3 Ανίχνευση ουρανίου για διάφορα επίπεδα συγκέντρωσης

Η ένταση των χαρακτηριστικών γραμμών του ουρανίου στο φάσμα του ανιχνευτή αναμένεται να αυξάνεται, όσο αυξάνεται η συγκέντρωση του συγκεκριμένου στοιχείου στο δείγμα. Η ελάχιστη ανιχνεύσιμη συγκέντρωση ουρανίου εξαρτάται βέβαια από τις υπόλοιπες παραμέτρους κάθε ανιχνευτικής διάταξης. Ακόμη και σε δείγματα με υψηλές συγκεντρώσεις ουρανίου μπορεί να μην είναι δυνατή η ανίχνευση του, λόγω κακής επιλογής άλλων συστατικών του πειράματος.

Στα πλαίσια της ΔΕ έγινε προσομοίωση υπό τις ίδιες κατά τα άλλα συνθήκες για τα 6 ουρανούχα δείγματα που παρουσιάστηκαν στην ενότητα 4.2.4.1 και για ένα δείγμα καθαρού  $\text{SiO}_2$ . Η διέγερση έγινε με το φάσμα 140 keV (σχήμα 4.6), με κωνική δέσμη ημιγωνίας ανοίγματος  $5^\circ$ . Σε αυτή τη φάση δεν χρησιμοποιήθηκαν κατευθυντές δέσμης, ούτε σκεδαστές, η γωνία του δείγματος ορίστηκε στις  $45^\circ$  και το πάχος του δείγματος στα 10 mm. Η γεωμετρία που χρησιμοποιήθηκε είναι ίδια με αυτή που παρουσιάστηκε στο σχήμα 4.8, παραπάνω. Τα αποτελέσματα των προσομοιώσεων αυτών καταγράφονται στο σχήμα 4.6, το οποίο είναι χρήσιμο για την εξαγωγή ποιοτικών συμπερασμάτων. Είναι εμφανές ότι υπάρχει συσχέτιση της συγκέντρωσης U και της έντασης των χαρακτηριστικών ακτίνων-Χ, καθώς και ότι το υπόστρωμα στο φάσμα παραμένει σχεδόν ανεπηρέαστο από τις αλλαγές στη σύσταση του δείγματος, το οποίο συνεχίζει να αποτελείται κατά το μεγαλύτερο μέρος από  $\text{SiO}_2$ . Δεν μπορούν όμως να προκύψουν ποσοτικά

συμπεράσματα από αυτό το διάγραμμα. Για την εξαγωγή όσο γίνεται ποσοτικών συμπερασμάτων, από τα αποτελέσματα των προσομοιώσεων σχηματίστηκαν οι πίνακες 4.5, 4.6 και 4.7.



Σχήμα 4.11: Φάσματα εικονικού ανιχνευτή απόδοσης ενέργειας για δείγματα διαφόρων συγκεντρώσεων ουρανίου

Σύμφωνα με όσα παρουσιάστηκαν στην ενότητα 3.4, ο πίνακας 4.5 παρουσιάζει:

- i. το κριτήριο σημαντικότητας A, δηλαδή τις τιμές της συνάρτησης πυκνότητας πιθανότητας στο ενεργειακό παράθυρο της κορυφής U-Ka1 (με κέντρο τα 98.55 keV) για τις διάφορες συγκεντρώσεις (ύψος κορυφής)
- ii. το κριτήριο B, δηλαδή τις ίδιες τιμές από τις οποίες όμως έχει αφαιρεθεί το υπόστρωμα στην περιοχή των κορυφών (καθαρό ύψος κορυφής)
- iii. το κριτήριο Γ, δηλαδή το λόγο μεταξύ του ύψους της κορυφής και του υποστρώματος

Οι πίνακες 4.6 και 4.7 που ακολουθούν δίνουν τις τιμές της μεταβλητής U για τη σύγκριση όλων των συγκεντρώσεων ανά δύο μεταξύ τους (U-test), ως προς τα κριτήρια σημαντικότητας B και Γ. Από τις τιμές U, οι οποίες είναι όλες υψηλότερες από το όριο 2.58, γίνεται αντιληπτό ότι όλα τα ζεύγη τιμών διαφέρουν στατιστικά σημαντικά, ότι δηλαδή μία μεταβολή της συγκέντρωσης του ουρανίου στο δείγμα, τουλάχιστον στο διάστημα που εξετάζεται επιφέρει όντως αλλαγές στις παραμέτρους του καταγραφόμενου φάσματος με επίπεδο εμπιστοσύνης 99%, κάτι που άλλωστε ήταν αναμενόμενο.

Για την οπτικοποίηση της εξάρτησης των κριτηρίων B και Γ, δημιουργήθηκαν το σχήμα 4.12 και το σχήμα 4.13, στα οποία γίνεται προσαρμογή γραμμικών συναρτήσεων στα αποτελέσματα των προσομοιώσεων, με τη μέθοδο των ελαχίστων τετραγώνων. Η προσαρμογή των γραμμικών συναρτήσεων στα δεδομένα είναι εκ πρώτης όψεως εξαιρετική. Οι εξισώσεις των καμπυλών

αναδρομής τόσο των σταθμισμένων (γαλάζια καμπύλη), όσο και των μη σταθμισμένων (διακεκομμένη μαύρη) για όλα τα σχετικά σχήματα του κεφαλαίου δίνονται στο Παράρτημα ΣΤ. Στο ίδιο παράρτημα περιέχονται επίσης οι συντελεστές πολλαπλού προσδιορισμού των μη σταθμισμένων καμπυλών αναδρομής.

Πίνακας 4.5: Τιμές των κριτηρίων σημαντικότητας A, B και Γ της κορυφής U-K<sub>α1</sub> από το αρχείο εξόδου του ανιχνευτή απόθεσης ενέργειας, για διάφορες συγκεντρώσεις U

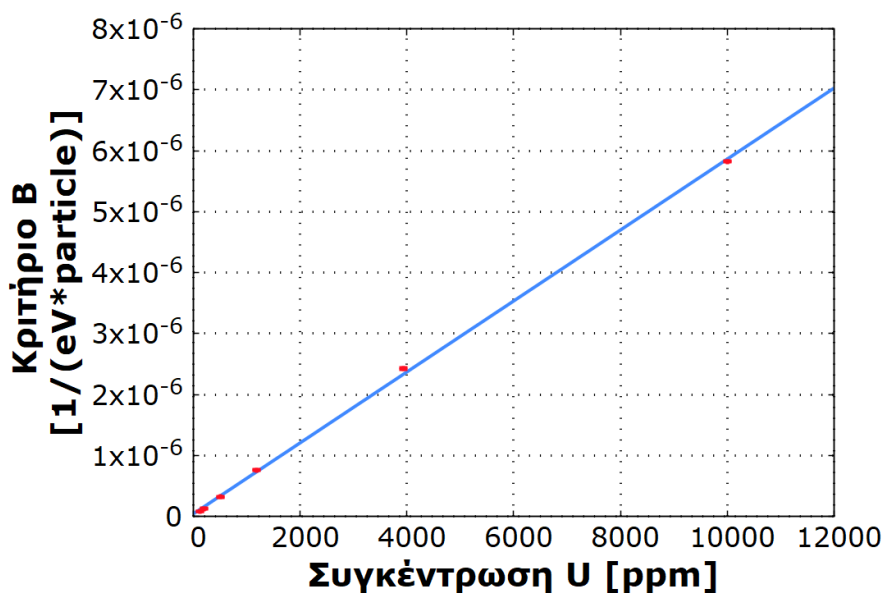
Συγκέντρωση U [ppm]	Κριτήριο A [1/(eV*particle)]	Κριτήριο B [1/(eV*particle)]	Κριτήριο Γ -
<b>10000</b>	6.58e-6 ± 0.16%	5.82e-6 ± 0.18%	8.68 ± 0.37%
<b>3931</b>	3.22e-6 ± 0.24%	2.43e-6 ± 0.33%	4.05 ± 0.41 %
<b>1187</b>	1.568e-6 ± 0.39%	7.58e-7 ± 0.90%	1.94 ± 0.54%
<b>500</b>	1.134e-6 ± 0.20%	3.20e-7 ± 0.83%	1.393 ± 0.26%
<b>200</b>	9.42e-7 ± 0.49%	1.29e-7 ± 4.28%	1.159 ± 0.62%
<b>118</b>	8.94e-7 ± 0.49%	8.2e-8 ± 6.49%	1.101 ± 0.62%

Πίνακας 4.6: U-test μεταξύ των τιμών του κριτηρίου B της κορυφής U-K<sub>α1</sub> από το αρχείο εξόδου του ανιχνευτή απόθεσης ενέργειας, για διάφορες συγκεντρώσεις U

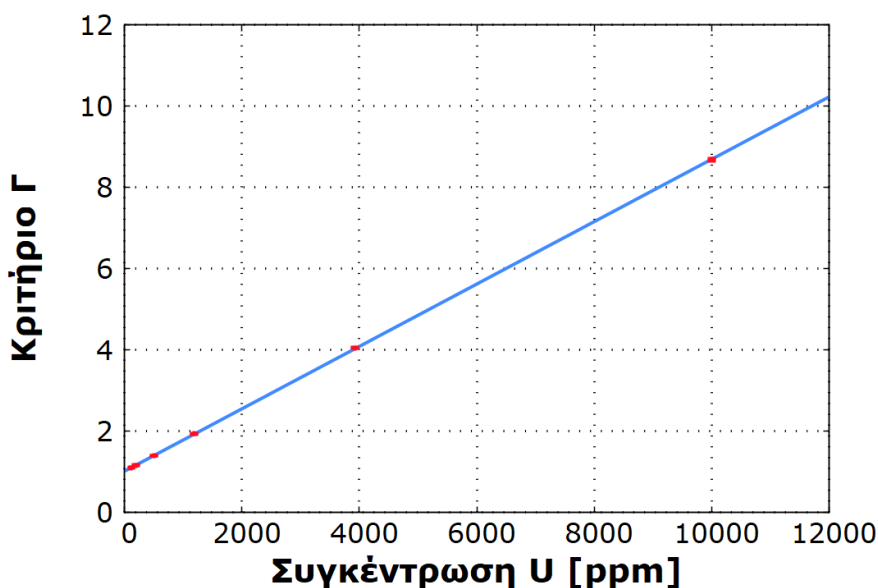
Κριτήριο B	10000	3931	1187	500	200	118
<b>10000</b>						
<b>3931</b>	252.949					
<b>1187</b>	397.886	158.015				
<b>500</b>	496.942	248.288	59.875			
<b>200</b>	471.048	235.098	71.668	31.182		
<b>118</b>	478.366	242.582	78.092	39.987	6.123	

Πίνακας 4.7: U-test μεταξύ των τιμών του κριτηρίου Γ της κορυφής U-K<sub>α1</sub> από το αρχείο εξόδου του ανιχνευτή απόθεσης ενέργειας για διάφορες συγκεντρώσεις U

Κριτήριο Γ	10000	3931	1187	500	200	118
<b>10000</b>						
<b>3931</b>	128.679					
<b>1187</b>	200.851	107.529				
<b>500</b>	226.993	156.075	48.676			
<b>200</b>	230.129	159.781	61.077	29.299		
<b>118</b>	232.433	164.212	66.645	38.000	5.859	



Σχήμα 4.12: Συσχέτιση (γραμμική) του κριτηρίου B της κορυφής U-K<sub>α1</sub> και της συγκέντρωσης του ουρανίου στο δείγμα



Σχήμα 4.13: Συσχέτιση (γραμμική) του κριτηρίου Γ της κορυφής U-K<sub>α1</sub> και της συγκέντρωσης του ουρανίου στο δείγμα

#### 4.3.4 Επίδραση της γεωμετρίας των κατευθυντών δέσμης

Οι κατευθυντές δέσμης είναι μία σημαντική συνιστώσα για κάθε διάταξη XRF. Χρησιμοποιούνται με στόχο τη μείωση της σκεδαζόμενης ακτινοβολίας και της άμεσης ακτινοβόλησης του ανιχνευτή από την πηγή ακτίνων-Χ. Η ενότητα αυτή εστιάζεται σε διάφορα χαρακτηριστικά των κατευθυντών δέσμης. Συγκεκριμένα εξετάζονται τα εξής:

- Υλικά κατασκευής κατευθυντή (τύπος 1: Pb και Al, τύπος 2: Pb, Cd, Cu και Al)
- Διάμετρος εσωτερικής οπής κατευθυντή

- Πάχος στρώσης του Pb, που είναι το κυρίαρχο υλικό που έχει και τη μεγαλύτερη συνεισφορά στην εξασθένιση της πρωτογενούς δέσμης
- Διαστρωμάτωση υλικών κατευθυντών από το εσωτερικό προς τα έξω: Al-Pb-Al και Pb-Al

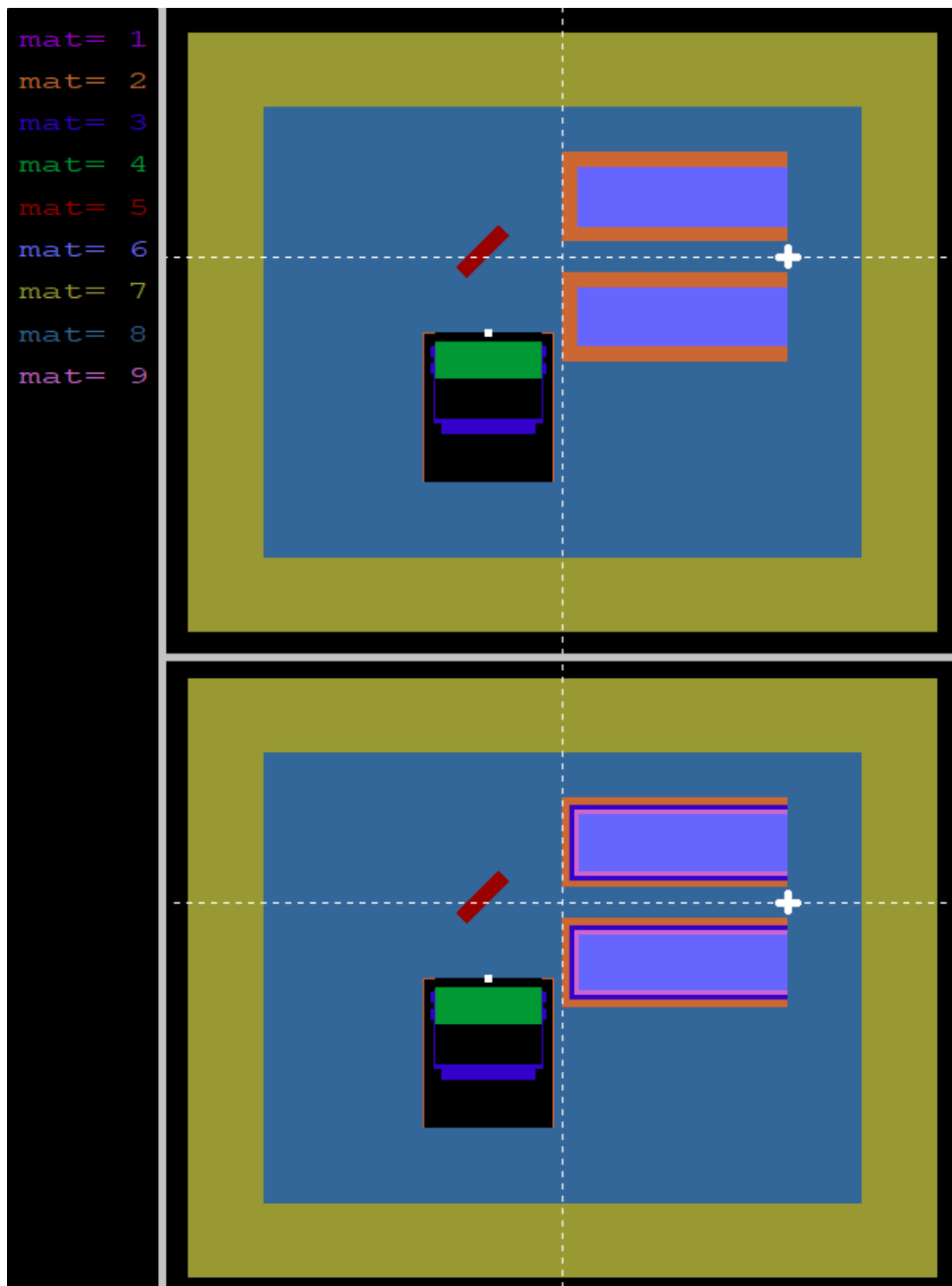
#### 4.3.4.1 Τα υλικά κατασκευής των κατευθυντών

Στην παρούσα ΔΕ χρησιμοποιήθηκαν δύο τύποι κατευθυντών. Ο πρώτος είναι ένας κατευθυντής από μόλυβδο (Pb) και αλουμίνιο (Al). Η χρήση Pb είναι μία αξιόπιστη λύση για τη μείωση της υψηλής ροής φωτονίων που παράγει η πηγή, η χρήση του Al αποσκοπεί στην αποκοπή των χαρακτηριστικών ακτίνων-Χ του Pb που είναι πολύ μεγάλης έντασης και κυριαρχούν στο φάσμα, κάτι που όμως αποδείχθηκε δύσκολο με τον κατευθυντή αυτόν. Για την αντιμετώπιση αυτού του προβλήματος δημιουργήθηκε ένας δεύτερος τύπος κατευθυντών, οι οποίοι αξιοποιούν ένα γνωστό συνδυασμό που είναι ευρέως χρησιμοποιούμενος σε θωρακίσεις ανιχνευτών (Vértes, 2011). Οι κατευθυντές με πυρήνα από Pb και διαδοχικές στρώσεις από κάδμιο (Cd), χαλκό (Cu) και Al, είναι πολύ αποδοτικοί λόγω του σταδιακά μειούμενου ατομικού αριθμού των υλικών των στρώσεων. Οι χαρακτηριστικές ακτίνες του Pb απορροφώνται αποτελεσματικά από το Cd, το οποίο με τη σειρά του εκπέμπει τις χαρακτηριστικές του ακτίνες, οι οποίες απορροφώνται από τον Cu. Τέλος οι γραμμές K του Cu είναι σχετικά χαμηλής ενέργειας ( $K_{\alpha}$  @ 8.0 keV και  $K_{\beta}$  @ 8.9 keV) και εξασθενούν στην τελευταία στρώση από Al, το οποίο παράγει χαρακτηριστική ακτινοβολία έως 1.5 keV, σε επίπεδα που δεν επηρεάζουν την περιοχή ενδιαφέροντος του φάσματος.

Η μορφή των δύο τύπων κατευθυντή, που αποτελούνται από ένα πυρήνα από Pb και στρώσεις υλικών διαδοχικά μειούμενου ατομικού αριθμού να περιβάλλουν κάθε προηγούμενη στρώση, και γενικά η γεωμετρία της διάταξης παρουσιάζονται στο σχήμα 4.14. Στο ίδιο σχήμα επίσης φαίνεται ένα περίβλημα από τσιμέντο το οποίο περιβάλλει τη διάταξη και το οποίο προσομοιώνει τα το δωμάτιο στο οποίο βρίσκεται η διάταξη και αποτελεί ένα σκεδαστή ακτινοβολίας, όπως περιγράφηκε στην ενότητα 2.9.6.3.2. Περισσότερες λεπτομέρειες για το στοιχείο αυτό παρέχονται στην ενότητα 4.3.5, που ακολουθεί.

Και για τους δύο τύπους κατευθυντών δέσμης πραγματοποιήθηκαν προσομοιώσεις χρησιμοποιώντας τα δείγματα τα οποία έχουν τη σχετικά υψηλή συγκέντρωση σε U (3931 ppm) προκειμένου να σχηματισθούν ικανοποιητικές αιχμές των ακτίνων-Χ του ουρανίου σε εύλογο χρονικό διάστημα. Επισημαίνεται ότι η προσομοίωση τόσο πολύπλοκης γεωμετρίας είναι γενικά πολύ αργή, λόγω του μεγάλου πλήθους υλικών και σωμάτων στο αρχείο γεωμετρίας. Επιπλέον, λόγω της μεγάλης κωνικότητας της δέσμης (ημιγωνία κώνου  $20^{\circ}$ ), από τα πρωτογενή φωτόνια μόνο ένα μικρό ποσοστό αλληλεπιδρά με το δείγμα. Το μεγαλύτερο μέρος των φωτονίων αλληλεπιδρά με τον κατευθυντή και απορροφάται ή σκεδάζεται σε αυτόν. Κατά συνέπεια, η ροή φωτονίων προς τον ανιχνευτή ήταν μικρή. Έτσι, για τη συλλογή επαρκούς πληροφορίας στις ενέργειες των χαρακτηριστικών κορυφών K του U ( $K_{\alpha 2}$  @ 94.66 keV,  $K_{\alpha 1}$  @ 98.44 keV,  $K_{\beta 3}$  @ 110.42 keV,  $K_{\beta 1}$  @ 111.30 keV και  $K_{\beta 2}$  @ 114.56 keV), ώστε να γίνει σύγκριση μεταξύ των διάφορων τύπων κατευθυντών, κρίθηκε απαραίτητη η χρήση δείγματος υψηλής συγκέντρωσης U.

Ως διεγείρουσα ακτινοβολία δεν επιλέχθηκε κάποια μονοενεργειακή διέγερση, αλλά το φάσμα των 140 keV (σχήμα 4.6). Αυτό έγινε γιατί είναι επιθυμητό να εξεταστεί η απόδοση των κατευθυντών δέσμης για φωτόνια διάφορων ενεργειών, τα οποία αλληλεπιδρούν ανάλογα με την ενέργεια τους με διαφορετικούς μηχανισμούς με τα υλικά κατασκευής των κατευθυντών.



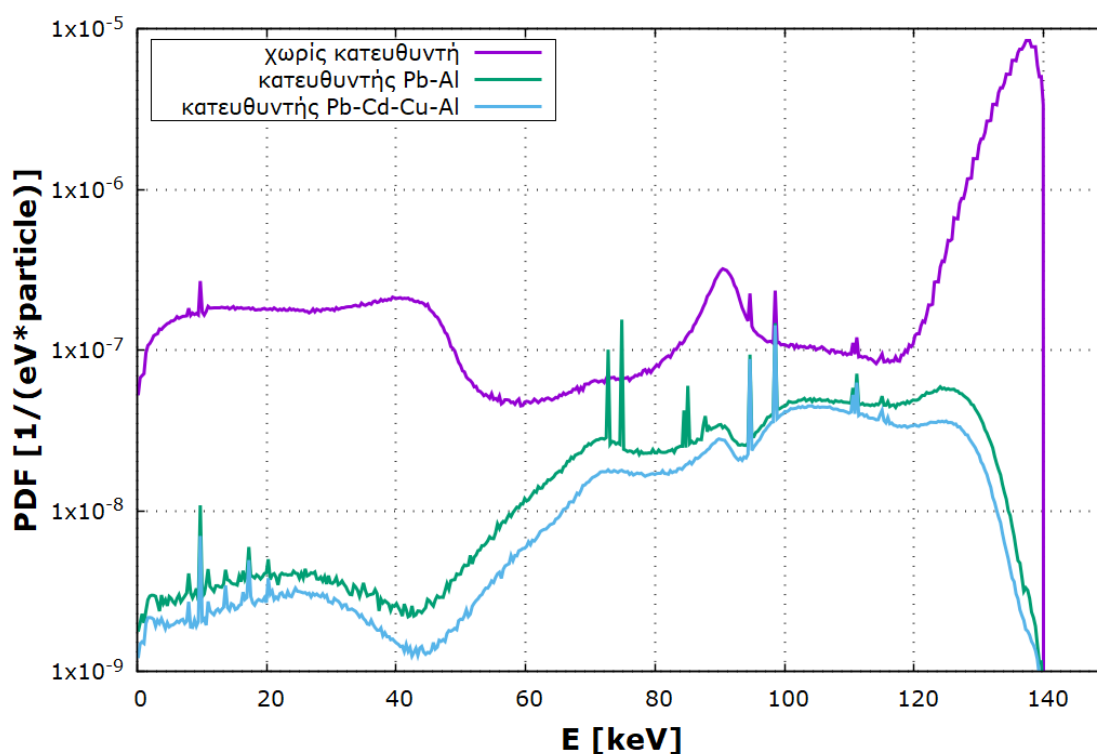
Σχήμα 4.14: Ολοκληρωμένη διάταξη που χρησιμοποιήθηκε για την προσομοίωση της επίδρασης των δύο τύπων κατευθυντών δέσμης. Τα υλικά είναι: 1-Be, 2-Al, 3-Cu, 4-Ge, 5-SiO<sub>2</sub>-U, 6-Pb, 7-Portland concrete, 8-Dry air, near sea level, 9-Cd. Το λευκό τετράγωνο αντιστοιχεί στην αρχή των αξόνων, το μαύρο στο κενό και ο λευκός σταυρός στη θέση της πηγής.

Στο σχήμα 4.15 όπου παρατίθενται τα αποτελέσματα της προσομοίωσης φαίνεται ο σημαντικός ρόλος του κατευθυντή δέσμης. Το φάσμα που αντιστοιχεί στην περίπτωση χωρίς κατευθυντή έχει πολλαπλάσιο ρυθμό καταγραφής γεγονότων, το οποίο οφείλεται τόσο στην απευθείας ακτινοβολία του ανιχνευτή από την πηγή (κορυφή στα 120-140 keV), όσο και στην ισχυρότερη σκεδαζόμενη ακτινοβολία στο χώρο. Παράλληλα, οι χαρακτηριστικές κορυφές του U



δεν παρουσιάζονται ενισχυμένες. Στους πίνακες και τα σχήματα που ακολουθούν, φαίνεται ποσοτικά πώς η παρουσία του κατευθυντή επηρεάζει την περιοχή της κορυφής  $K_{\alpha 1}$  του ουρανίου. Το U-test (πίνακας 4.9 και πίνακας 4.10) δείχνει ένα πολύ ενδιαφέρον χαρακτηριστικό των φασμάτων. Παρότι το κριτήριο σημαντικότητας B με τη χρήση των δύο τύπων κατευθυντών δεν παρουσιάζει σημαντική αλλαγή, το κριτήριο Γ εμφανίζεται βελτιωμένο στην περίπτωση της χρήσης του κατευθυντή πολλών στρώσεων (τύπος 2). Το γεγονός αυτό οφείλεται στη γενικότερη μείωση του υποστρώματος λόγω της αποδοτικής εξασθένησης της διεγείρουσας και της σκεδαζόμενης ακτινοβολίας από τα υλικά που χρησιμοποιηθήκαν.

Ένα άλλο πλεονέκτημα του δεύτερου τύπου κατευθυντών είναι ότι δεν παρουσιάζει χαρακτηριστικές ακτίνες του μολύβδου, που αποτελεί το κύριο στοιχείο του κατευθυντή, λόγω της διαστρωμάτωσης των υλικών του με τον τρόπο που εξηγήθηκε παραπάνω. Όμως, ο σχεδιασμός του μπορεί να χαρακτηριστεί εξεζητημένος και, καθώς δεν υπάρχει πάντοτε διαθεσιμότητα όλων των υλικών, αναλύθηκε περαιτέρω ο πρώτος τύπος κατευθυντών, με τον απλούστερο σχεδιασμό, καθότι θεωρήθηκε ρεαλιστικότερος στην κατασκευή. Σημειώνεται πως σε ορισμένες προσομοιώσεις, παρ' όλα αυτά, έχει χρησιμοποιηθεί ο δεύτερος τύπος κατευθυντή, ώστε να εξασφαλίζεται πιο αποδοτική αποκοπή φωτονίων και να μελετώνται οι ανεξάρτητα διάφορες παράμετροι της διάταξης με λιγότερες παρεμβολές από άλλους παράγοντες.



Σχήμα 4.15: Φάσματα εικονικού ανιχνευτή απόθεση ενέργειας για την περίπτωση απουσίας κατευθυντή δέσμης και τις περιπτώσεις χρήσης κατευθυντών τύπου Pb-Al και Pb-Cd-Cu-Al

Πίνακας 4.8: Τιμές των κριτηρίων σημαντικότητας A, B και Γ της κορυφής  $U-K_{\alpha 1}$  από το αρχείο εξόδου του ανιχνευτή απόθεση ενέργειας, για χρήση διαφορετικών κατευθυντών.

Τύπος	Κριτήριο A	Κριτήριο B	Κριτήριο Γ
κατευθυντή	[1/(eV*particle)]	[1/(eV*particle)]	-

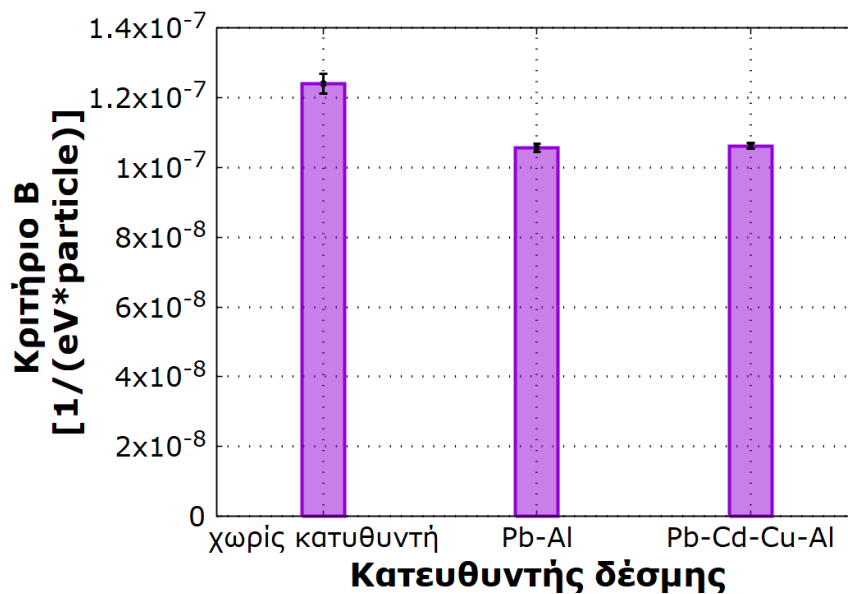
χωρίς κατευθυντή	$2.35e-7 \pm 1.09\%$	$1.24e-7 \pm 2.29\%$	$2.12 \pm 1.56\%$
κατευθυντής 1 <sup>ου</sup> τύπου	$1.47e-7 \pm 0.72\%$	$1.06e-7 \pm 1.07\%$	$3.53 \pm 1.19\%$
κατευθυντής 2 <sup>ου</sup> τύπου	$1.428e-7 \pm 0.49\%$	$1.062e-7 \pm 0.70\%$	$3.90 \pm 0.84\%$

Πίνακας 4.9: U-test μεταξύ των τιμών του κριτηρίου B της κορυφής U-K<sub>α1</sub> από το αρχείο εξόδου του ανιχνευτή απόθραυσσης ενέργειας για χρήση διαφορετικών κατευθυντών

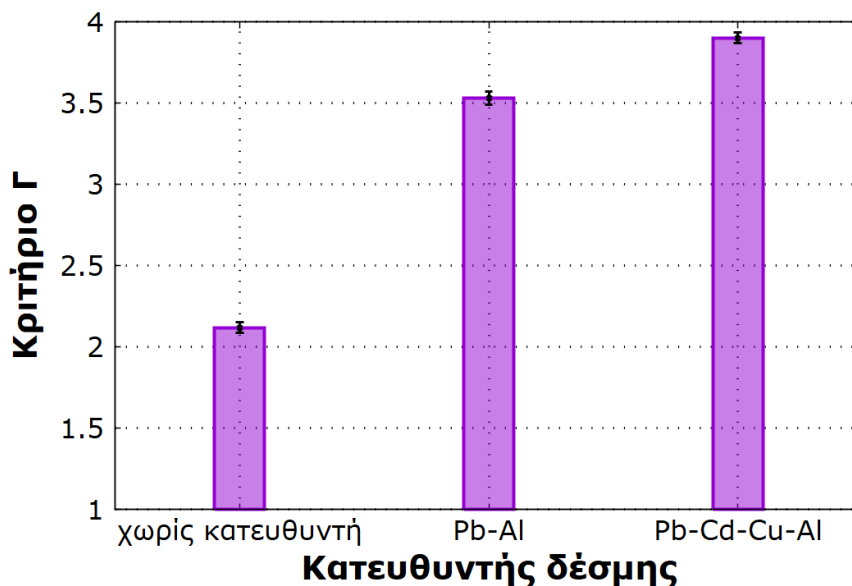
Κριτήριο B	χωρίς	1 <sup>ου</sup> τύπου	2 <sup>ου</sup> τύπου
χωρίς κατευθυντή			
κατευθυντής 1 <sup>ου</sup> τύπου	6.006		
κατευθυντής 2 <sup>ου</sup> τύπου	6.029	0.481	

Πίνακας 4.10: U-test μεταξύ των τιμών κριτηρίου Γ της κορυφής U-K<sub>α1</sub> από το αρχείο εξόδου του ανιχνευτή απόθραυσσης ενέργειας για χρήση διαφορετικών κατευθυντών

Κριτήριο Γ	χωρίς	1 <sup>ου</sup> τύπου	2 <sup>ου</sup> τύπου
χωρίς κατευθυντή			
κατευθυντής 1 <sup>ου</sup> τύπου	26.371		
κατευθυντής 2 <sup>ου</sup> τύπου	38.179	6.940	



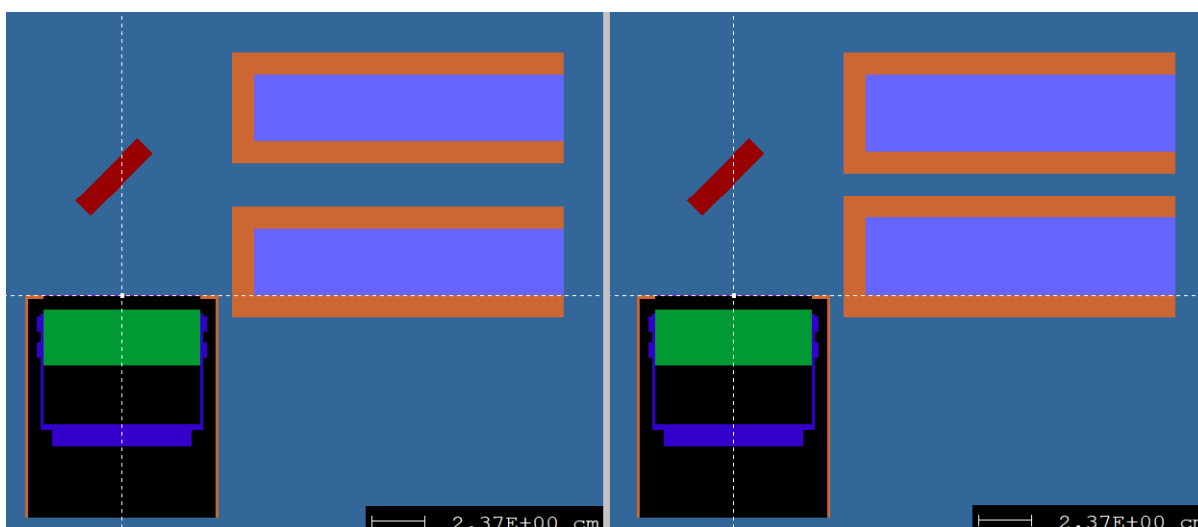
Σχήμα 4.16: Σχηματική απεικόνιση του κριτηρίου B της κορυφής U-K<sub>α1</sub> για χρήση διαφορετικών κατευθυντών



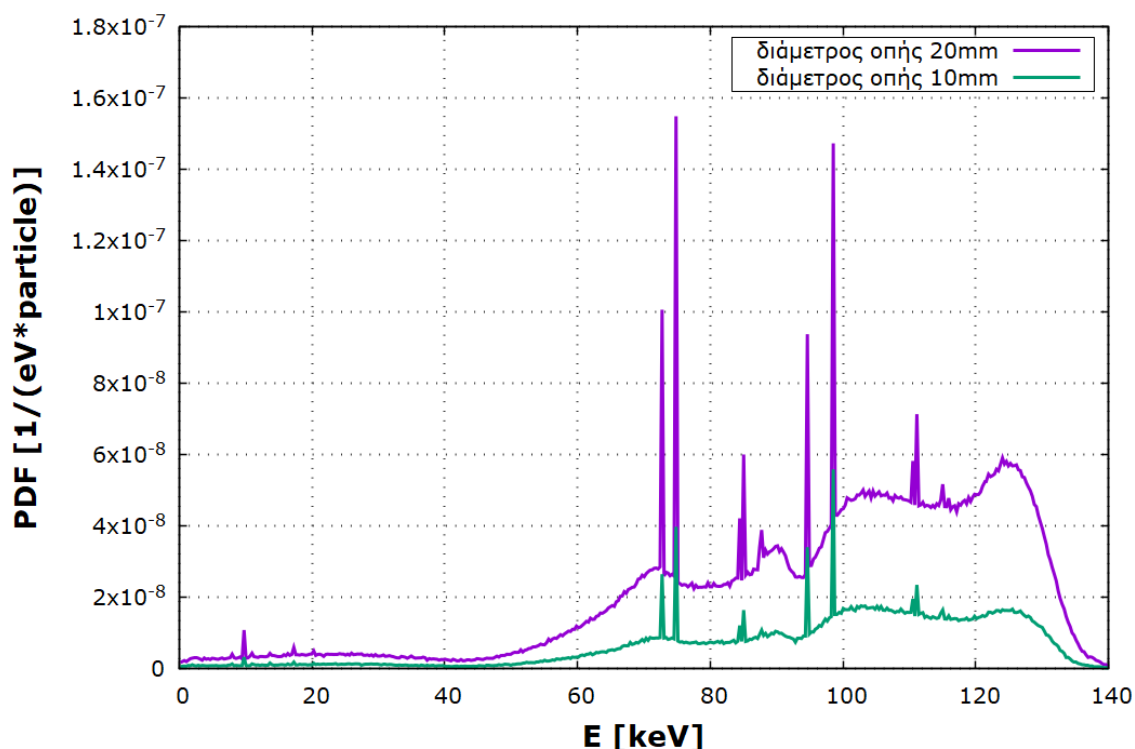
Σχήμα 4.17: Σχηματική απεικόνιση του κριτηρίου Γ της κορυφής  $U-K_{\alpha 1}$  για χρήση διαφορετικών κατευθυντών

#### 4.3.4.2 Επίδραση της εσωτερικής διαμέτρου του κατευθυντή δέσμης

Ως προς τη μελέτη των κατευθυντών του 1<sup>ου</sup> τύπου, αρχικά επιχειρήθηκε η μείωση της διαμέτρου της οπής του κατευθυντή, με στόχο τη δημιουργία μίας πιο στενής δέσμης διέγερσης του δείγματος (σχήμα 4.18). Η αλλαγή αυτή επέφερε μεγάλη μείωση στο ρυθμό καταγραφής γεγονότων στον ανιχνευτή, τόσο σε ό,τι αφορά το υπόστρωμα, όσο και σε ό,τι αφορά τις επιθυμητές χαρακτηριστικές κορυφές (σχήμα 4.19). Συνολικά το αποτέλεσμα κρίνεται δυνητικά θετικό, καθώς το κριτήριο Γ της κορυφής  $U-K_{\alpha 1}$  αυξήθηκε με τον περιορισμό των διαστάσεων της οπής, το U-test δεν παρέχει, όμως, κατηγορηματική απάντηση στο ερώτημα αν η αύξηση αυτή είναι στατιστικά σημαντική ή όχι (πίνακας 4.11).



Σχήμα 4.18: Λεπτομέρεια της διάταξης που χρησιμοποιήθηκε για την προσομοίωση της επίδρασης της διαμέτρου της εσωτερικής οπής του κατευθυντή δέσμης



Σχήμα 4.19: Φάσματα εικονικού ανιχνευτή απόθεσης ενέργειας για τη μείωση της διαμέτρου της οπής από 20 mm σε 10 mm των κατευθυντών τύπου Pb-Al

Πίνακας 4.11: Τιμές των κριτηρίων A, B και Γ της κορυφής U- $K_{\alpha 1}$  από το αρχείο εξόδου του ανιχνευτή απόθεσης ενέργειας, για δύο τιμές της διαμέτρου της οπής κατευθυντή και U-test

Διάμετρος οπής [mm]	Κριτήριο A [1/(eV*particle)]	Κριτήριο B [1/(eV*particle)]	Κριτήριο Γ -
20 mm	$1.47e-7 \pm 0.72\%$	$1.06e-7 \pm 1.07\%$	$3.53 \pm 1.19\%$
10 mm	$5.59e-8 \pm 1.19\%$	$4.09e-8 \pm 1.73\%$	$3.74 \pm 2.01\%$
U-test	73.349	48.585	2.421

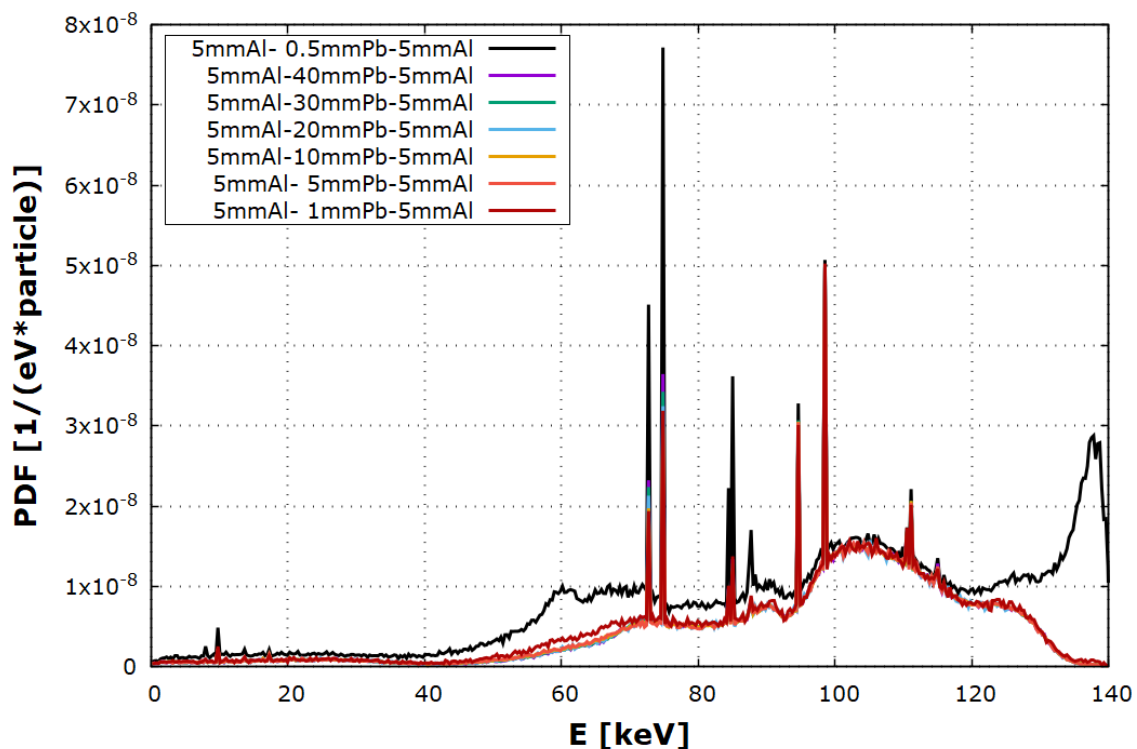
#### 4.3.4.3 Επίδραση του πάχους του Pb

Στη συνέχεια, εξετάστηκε η επίδραση της μείωσης του πάχους του πυρήνα από Pb στο φάσμα. Τα φάσματα που προέκυψαν (σχήμα 4.20), εκ πρώτης όψεως, δε δίνουν κάποια σημαντική πληροφορία. Με εξαίρεση τα πολύ μικρά πάχη Pb (1 mm και, κυρίως, 0.5 mm) που παρουσιάζουν αυξημένο υπόστρωμα, λόγω της ανεπαρκούς εξασθένησης της δέσμης στον κατευθυντή, τα υπόλοιπα πάχη δίνουν παρόμοια αποτελέσματα. Για την καλύτερη αξιολόγηση των αποτελεσμάτων δημιουργήθηκε μία σειρά από πίνακες και διαγράμματα, που σχετίζονται με το ύψος των πιο έντονων κορυφών ( $K_{\alpha 1}$ ) του U, αλλά και του Pb στα φάσματα (σχήμα 4.21). Όπως και στις προηγούμενες ενότητες, εξετάζεται η συσχέτιση των κριτηρίων B και Γ με χρήση του U-test.

Σε ότι αφορά το ουράνιο (πίνακας 4.12), σύμφωνα με το U-test, η τιμή του κριτηρίου B δεν εξαρτάται από το πάχος του Pb στον κατευθυντή (πίνακας 4.13) και το ίδιο ισχύει και το κριτήριο Γ,

με εξαίρεση το πάχος 0.5 mm, το οποίο παρουσιάζει στατιστικά σημαντικά μειωμένη τιμή του κριτηρίου Γ (πίνακας 4.14). Από την άλλη πλευρά, η κορυφή του μολύβδου ανταποκρίνεται διαφορετικά (πίνακας 4.15). Το κριτήριο Β είναι ως επί το πλείστον διαφορετικό για τα διάφορα πάχη. Εξαιρέσεις αποτελούν τα ζεύγη 1 με 20 mm και 5 με 10 mm, γεγονός που σε συνδυασμό με το αντίστοιχο διάγραμμα συνηγορεί στην ύπαρξη ενός ελαχίστου στο διάστημα [5,10] mm για το κριτήριο Β της κορυφής Pb-K<sub>α1</sub> (πίνακας 4.16, σχήμα 4.21). Παρόμοια εικόνα προκύπτει και από το U-test για το κριτήριο Γ, όπου και πάλι η εικόνα που προκύπτει δείχνει ένα ακρότατο στο εύρος [1,10] mm και εκατέρωθεν της περιοχής αυτής αύξησή του με μεγάλη κλίση προς τα μικρότερα πάχη και με μικρή κλίση προς τα μεγαλύτερα (πίνακας 4.17, σχήμα 4.22).

Οι παραπάνω παρατηρήσεις συγκλίνουν στο συμπέρασμα ότι υπάρχει ένα βέλτιστο πάχος που ικανοποιεί καλύτερα τις ανάγκες της συγκεκριμένης τουλάχιστον διάταξης. Η χρήση 5 mm Pb μπορεί να προσφέρει ταυτόχρονα τα οφέλη του σχετικά υψηλού κριτηρίου Β της κορυφής U-K<sub>α1</sub> και του χαμηλού κριτηρίου Γ της κορυφής Pb-K<sub>α1</sub>. Η ανιχνευσιμότητα, λοιπόν, για 5 mm Pb γίνεται η μέγιστη δυνατή. Παράλληλα, με το πάχος αυτό καθίσταται δυνατή η δημιουργία ενός αποδοτικού κατευθυντή δέσμης με περιορισμένο όγκο και μάζα.



Σχήμα 4.20: Φάσματα εικονικού ανιχνευτή απόθεσης ενέργειας για διαφορετικά πάχη στρώσης Pb σε κατευθυντές δέσμης Pb-Al

Πίνακας 4.12: Τιμές των κριτηρίων Α, Β και Γ της κορυφής U-K<sub>α1</sub> από το αρχείο εξόδου του ανιχνευτή απόθεσης ενέργειας, για διάφορα πάχη στρώσης Pb, στον κατευθυντή τύπου Pb-Al.

Πάχος στρώσης Pb [mm]	Κριτήριο Α [1/(eV*particle)]	Κριτήριο Β [1/(eV*particle)]	Κριτήριο Γ -
<b>0.5</b>	5.07e-8 ± 1.54%	3.64e-8 ± 2.28%	3.55 ± 2.56%
<b>1</b>	5.02e-8 ± 1.76%	3.78e-8 ± 2.48%	4.03 ± 3.06%

<b>5</b>	4.93e-8 ±1.16%	3.66e-8 ± 1.66%	3.90 ± 1.99%
<b>10</b>	4.98e-8 ±0.58%	3.71e-8 ± 0.83%	3.92 ± 1.00%
<b>20</b>	4.95e-8 ±1.41%	3.68e-8 ± 2.02%	3.89 ± 2.42%
<b>30</b>	4.98e-8 ±0.58%	3.70e-8 ± 0.83%	3.90 ± 0.99%
<b>40</b>	4.97e-8 ± 1.19%	3.70e-8 ± 1.69%	3.92 ± 2.04%

Πίνακας 4.13: U-test μεταξύ των τιμών του κριτηρίου B της κορυφής U-K<sub>α1</sub> από το αρχείο εξόδου του ανιχνευτή απόδοσης ενέργειας για διάφορα πάχη στρώσης Pb, στον κατευθυντή τύπου Pb-Al

<b>Κριτήριο B</b>	<b>0.5</b>	<b>1</b>	<b>5</b>	<b>10</b>	<b>20</b>	<b>30</b>	<b>40</b>
<b>0.5</b>							
<b>1</b>	1.090						
<b>5</b>	0.231	1.010					
<b>10</b>	0.745	0.416	0.621				
<b>20</b>	0.346	0.820	0.154	0.341			
<b>30</b>	0.701	0.755	0.564	0.089	0.294		
<b>40</b>	0.604	0.653	0.449	0.044	0.251	0.011	

Πίνακας 4.14: U-test μεταξύ των τιμών του κριτηρίου Γ της κορυφής U-K<sub>α1</sub> από το αρχείο εξόδου του ανιχνευτή απόδοσης ενέργειας για διάφορα πάχη στρώσης Pb, στον κατευθυντή τύπου Pb-Al

<b>Κριτήριο Γ</b>	<b>0.5</b>	<b>1</b>	<b>5</b>	<b>10</b>	<b>20</b>	<b>30</b>	<b>40</b>
<b>0.5</b>							
<b>1</b>	3.138						
<b>5</b>	2.929	0.894					
<b>10</b>	3.700	0.886	0.181				
<b>20</b>	2.603	0.900	0.077	0.246			
<b>30</b>	3.534	1.016	0.011	0.304	0.083		
<b>40</b>	3.046	0.758	0.169	0.035	0.229	0.223	

Πίνακας 4.15: Τιμές των κριτηρίων A, B και Γ της κορυφής Pb-K<sub>α1</sub> από το αρχείο εξόδου του ανιχνευτή απόδοσης ενέργειας, για διάφορα πάχη στρώσης Pb, στον κατευθυντή τύπου Pb-Al.

<b>Πάχος στρώσης Pb</b> [mm]	<b>Κριτήριο A</b> [1/(eV*particle)]	<b>Κριτήριο B</b> [1/(eV*particle)]	<b>Κριτήριο Γ</b> -
<b>0.5</b>	7.72e-8 ± 1.25%	6.89e-8 ± 1.43%	9.38 ± 2.97%
<b>1</b>	3.19e-8 ± 2.21%	2.62e-8 ± 2.80%	5.61 ± 4.31%
<b>5</b>	2.89e-8 ± 1.51%	2.36e-8 ± 1.94%	5.38 ± 2.91%

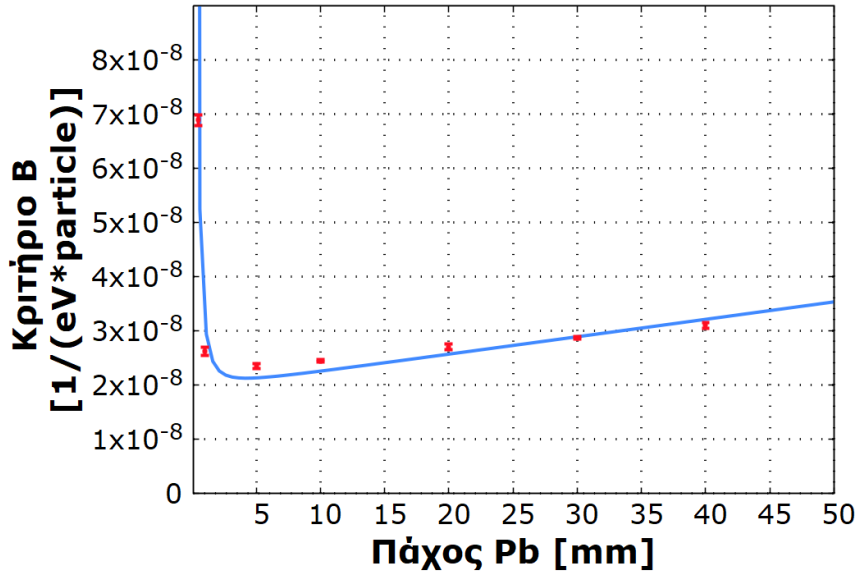
<b>10</b>	2.99e-8 ± 0.75%	2.45e-8 ± 0.95%	5.45 ± 1.44%
<b>20</b>	3.25e-8 ± 1.74%	2.71e-8 ± 2.17%	6.02 ± 3.49%
<b>30</b>	3.43e-8 ± 0.70%	2.87e-8 ± 0.87%	6.16 ± 1.41%
<b>40</b>	3.65e-8 ± 1.39%	3.10e-8 ± 1.69%	6.69 ± 2.89%

Πίνακας 4.16: U-test μεταξύ των τιμών του κριτηρίου B της κορυφής Pb-K<sub>α1</sub> από το αρχείο εξόδου του ανιχνευτή απόδοσης ενέργειας για διάφορα πάχη στρώσης Pb, στον κατευθυντή τύπου Pb-Al

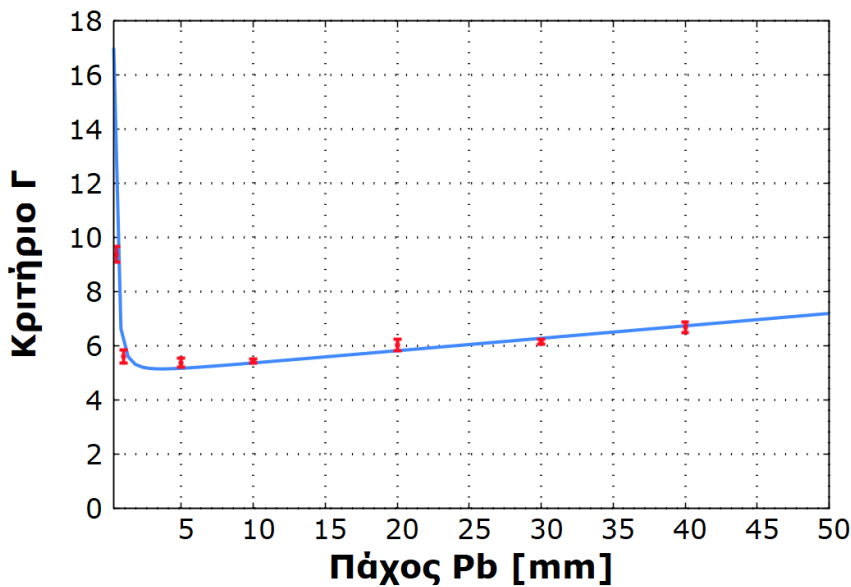
<b>Κριτήριο B</b>	<b>0.5</b>	<b>1</b>	<b>5</b>	<b>10</b>	<b>20</b>	<b>30</b>	<b>40</b>
<b>0.5</b>							
<b>1</b>	34.747						
<b>5</b>	41.745	3.056					
<b>10</b>	43.906	2.279	1.730				
<b>20</b>	36.464	0.912	4.701	4.131			
<b>30</b>	39.580	3.203	9.855	12.444	2.546		
<b>40</b>	33.961	5.325	10.712	11.440	5.010	4.003	

Πίνακας 4.17: U-test μεταξύ των τιμών του κριτηρίου Γ της κορυφής Pb-K<sub>α1</sub> από το αρχείο εξόδου του ανιχνευτή απόδοσης ενέργειας για διάφορα πάχη στρώσης Pb, στον κατευθυντή τύπου Pb-Al

<b>Κριτήριο Γ</b>	<b>0.5</b>	<b>1</b>	<b>5</b>	<b>10</b>	<b>20</b>	<b>30</b>	<b>40</b>
<b>0.5</b>							
<b>1</b>	10.214						
<b>5</b>	12.512	0.797					
<b>10</b>	13.563	0.621	0.408				
<b>20</b>	9.620	1.281	2.443	2.534			
<b>30</b>	11.031	2.137	4.351	6.038	0.609		
<b>40</b>	7.916	3.495	5.272	5.938	2.352	2.515	



Σχήμα 4.21: Συσχέτιση (μη γραμμική) του κριτηρίου B της κορυφής  $Pb-K_{\alpha 1}$  και του πάχους της στρώσης Pb του κατευθυντή τύπου Pb-Al, στο εύρος [0.5,40] mm



Σχήμα 4.22: Συσχέτιση (μη γραμμική) του κριτηρίου Γ της κορυφής  $Pb-K_{\alpha 1}$  και του πάχους της στρώσης Pb του κατευθυντή τύπου Pb-Al, στο εύρος [0.5,40] mm

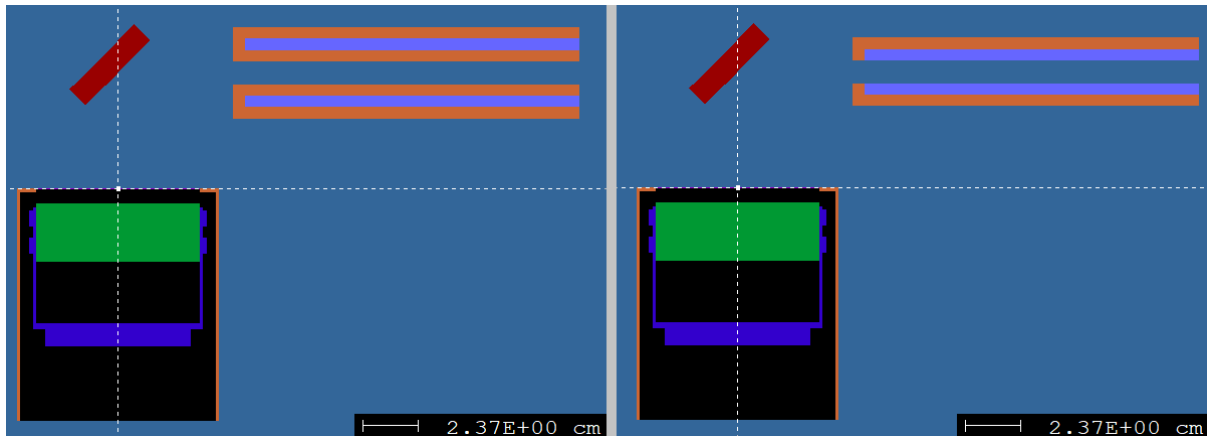
Τα δύο παραπάνω σχήματα παρουσιάζουν μία πολύ ενδιαφέρουσα μορφή. Ο λόγος για αυτό δεν είναι σαφής και ίσως χρειάζεται περαιτέρω διερεύνηση. Μία πιθανή εξήγηση είναι πως συνυπάρχουν δύο μηχανισμοί που επηρεάζουν τις χαρακτηριστικές του μολύβδου στο φάσμα. Ο πρώτος είναι ότι περισσότερος μόλυβδος οδηγεί σε μεγαλύτερη παραγωγή χαρακτηριστικών ακτίνων. Ο δεύτερος είναι η αυτοαπορρόφηση των χαρακτηριστικών ακτίνων του μολύβδου, η οποία ενισχύεται όσο μεγαλύτερη είναι η στρώση του μολύβδου στον κατευθυντή δέσμης. Κατά τα φαινόμενα, στα πολύ μικρά πάχη μολύβδου, λόγω χαμηλής αυτοαπορρόφησης, εκπέμπεται ένα πολύ μεγάλο ποσοστό των παραγόμενων χαρακτηριστικών ακτίνων, ενώ στα μεγάλα πάχη, παρά τη μεγαλύτερη αυτοαπορρόφηση, το πλήθος των χαρακτηριστικών είναι τόσο μεγάλο που υπάρχει αύξηση του πλήθους των εκπεμπόμενων ακτίνων. Σε μία τιμή του πάχους του μολύβδου υπάρχει



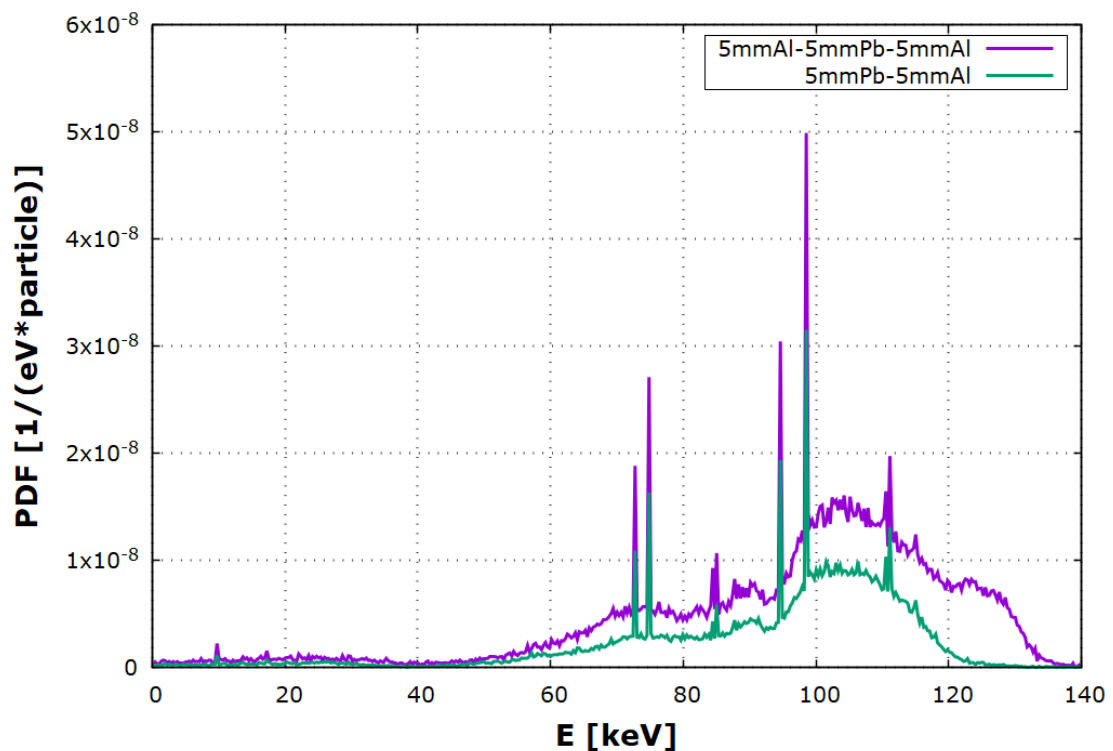
βέλτιστη συσχέτιση μεταξύ των δύο μηχανισμών, γεγονός που είναι ιδιαίτερα σημαντικό για το σχεδιασμό του κατευθυντή δέσμης.

#### 4.3.4.4 Η επίδραση του εσωτερικού στρώματος Al στον κατευθυντή δέσμης

Τέλος, επιχειρήθηκε η αφαίρεση του εσωτερικού στρώματος από Al, έτσι ώστε να μειωθεί η σκεδαζόμενη ακτινοβολία στα εσωτερικά τοιχώματα του κατευθυντή (σχήμα 4.23). Αυτή η ακτινοβολία μπορεί να φτάσει στον ανιχνευτή μέσω διαδοχικών σκεδάσεων, λόγω του χαμηλού Z του Al, με διάφορες «οδούς» που δε συμβάλλουν στο φθορισμό του δείγματος και δημιουργούν θόρυβο.



Σχήμα 4.23: Λεπτομέρεια της διάταξης που χρησιμοποιήθηκε για την προσομοίωση της επίδρασης της εσωτερικής στρώσης Al του κατευθυντή δέσμης τύπου Al-Pb



Σχήμα 4.24: Φάσματα εικονικού ανιχνευτή απόθεσης ενέργειας για τη περίπτωση ύπαρξης εσωτερικής στρώσης Al στους κατευθυντές δέσμης Pb-Al

Η εικόνα των φασμάτων στο παραπάνω σχήμα δείχνει μία γενική μείωση στο ρυθμό καταγραφής γεγονότων στον ανιχνευτή, με την αφαίρεση του εσωτερικού στρώματος αλουμινίου. Ο πίνακας 4.18, παρέχει τα μεγέθη σχετικά με την κορυφή  $K_{\alpha 1}$  του U. Δεν προκύπτει βελτίωση του κριτηρίου Γ, καθώς η τιμή του U-test υποδηλώνει ότι ο λόγος με επίπεδο εμπιστοσύνης 95% παρέμεινε ίδιος. Η πιο σημαντική διαφορά μεταξύ των δύο φασμάτων παρατηρείται στην περιοχή υψηλών ενεργειών 120-140 keV, όπου η αφαίρεση της εσωτερικής στρώσης Al, πρακτικά εκμηδενίζει το υπόστρωμα στην υπόψη ενεργειακή περιοχή.

Πίνακας 4.18: Τιμές των κριτηρίων A, B και Γ της κορυφής U- $K_{\alpha 1}$  από το αρχείο εξόδου του ανιχνευτή απόθραυσσης ενέργειας, για χρήση ή μη εσωτερικής στρώσης Al στον κατευθυντή τύπου Pb-Al και U-test

Εσωτερική στρώση Al	Κριτήριο A [1/(eV*particle)]	Κριτήριο B [1/(eV*particle)]	Κριτήριο Γ
με	4.99e-8 ± 1.66%	3.73e-8 ± 2.36%	3.96 ± 2.87%
χωρίς	3.15e-8 ± 2.01%	2.37e-8 ± 2.84%	4.03 ± 3.49%
U-test	17.620	12.262	0.387

#### 4.3.5 Η επίδραση των σκεδαστών

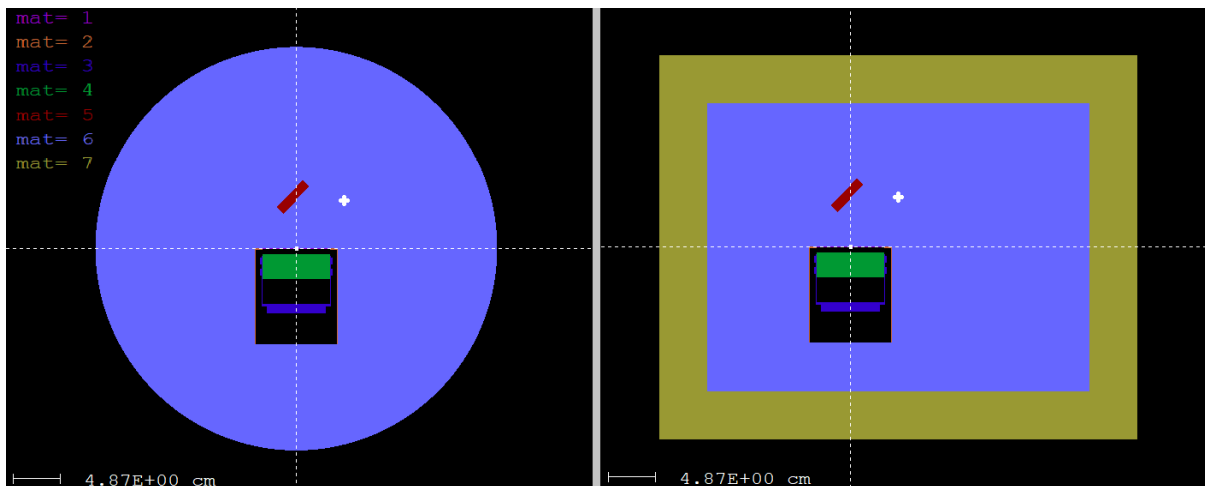
Τα αντικείμενα του περιβάλλοντος χώρου, τα δομικά υλικά, οι συνιστώσες της ίδιας της διάταξης, ακόμα και ο αέρας στο χώρο που εκτελείται η ακτινοβολήση του δείγματος, μπορούν να αποτελέσουν αιτίες σκεδάσεων. Ονομάζονται σκεδαστές και ενδεχομένως δυσχεραίνουν την ανίχνευση ιχνοστοιχείων στα δείγματα, καθώς δημιουργούν θόρυβο στο φάσμα.

Η επίδραση των σκεδαστών είναι εμφανής στο φάσμα, όχι μόνο λόγω του φαινομένου Compton, αλλά επίσης λόγω των χαρακτηριστικών ακτίνων-X των στοιχείων που περιέχουν. Όπως αναφέρθηκε στην ενότητα 2.9, η μέθοδος XRF στηρίζεται στην αναγνώριση των χαρακτηριστικών κορυφών του δείγματος και η παρουσία άλλων χαρακτηριστικών που δεν προέρχονται από το δείγμα μπορεί να περιορίσει την ικανότητα ανίχνευσης και να οδηγήσει σε λανθασμένα συμπεράσματα.

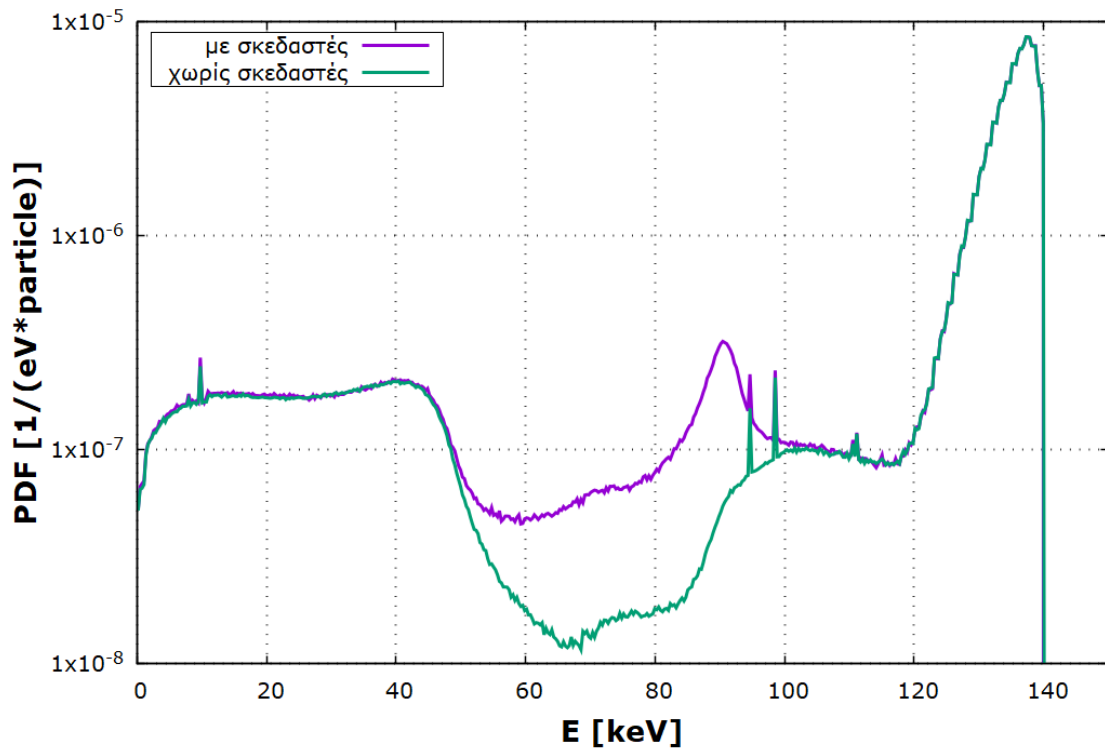
Η μοντελοποίηση των σκεδαστών στις προσομοιώσεις δεν έγινε με μεγάλη ακρίβεια, καθώς αυτό θα ήταν ιδιαίτερα χρονοβόρο και περίπλοκο. Οι σκεδαστές που χρησιμοποιήθηκαν είναι ο ατμοσφαιρικός αέρας και το σκυρόδεμα. Σε όλες τις προσομοιώσεις τα διάφορα στοιχεία της διάταξης περιέχονται σε μία σφαίρα από αέρα. Η μοντελοποίηση των δομικών υλικών για την δημιουργία περισσότερων σκεδάσεων γίνεται με τη χρήση 50 mm σκυροδέματος περιμετρικά της διάταξης προς όλες τις κατευθύνσεις. Τα δύο αυτά υλικά δημιουργήθηκαν με τη βοήθεια της βιβλιοθήκης υλικών του πακέτου PENELOPE και συγκεκριμένα είναι τα υπ' αριθμόν 104 (DRY AIR, NEAR SEA LEVEL) και 144 (PORTLAND CONCRETE).

Μελετήθηκαν ως προς την επίδραση διάφορες διατάξεις με διαφορετικής σύστασης δείγματα, με διαφορετική διέγερση, με ή χωρίς κατευθυντές δέσμης. Οπτικά, τα αποτελέσματα συγκλίνουν στο ίδιο αποτέλεσμα, ότι δηλαδή οι σκεδαστές μειώνουν την ποιότητα του παραγόμενου φάσματος και, για το λόγο αυτό, είναι απαραίτητη η λήψη μέτρων ώστε να περιοριστεί η σκεδαζόμενη ακτινοβολία και να προστατευτεί ο ανιχνευτής από αυτή την ανεπιθύμητη ακτινοβολία.

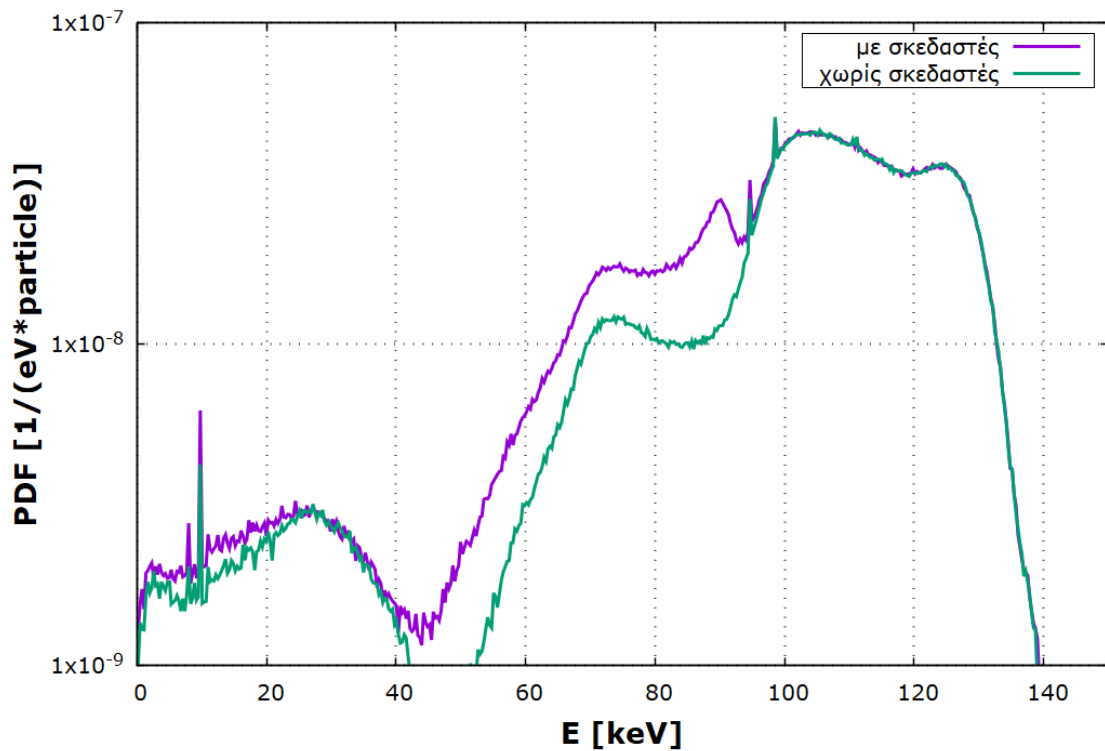
Στα σχήματα, 4.26 και 4.27 παρουσιάζονται τα αποτελέσματα δύο ζευγών προσομοιώσεων με και χωρίς σκεδαστές από σκυρόδεμα. Στην πρώτη περίπτωση εξετάζεται η διάταξη χωρίς κατευθυντή δέσμης, ενώ στη δεύτερη χρησιμοποιήθηκε ο δεύτερος τύπος κατευθυντή (Pb-Cd-Cu-Al) που αποκόπτει πολύ αποδοτικά τα φωτόνια που προσπίπτουν σε αυτόν. Και στις δύο περιπτώσεις, οι αλλαγές που επέφερε η προσθήκη των επιφανειών σκέδασης είναι παρόμοιες. Αυτό μας οδηγεί στο συμπέρασμα ότι αυτές οι αλλαγές οφείλονται κατά το μεγαλύτερο μέρος στον ίδιο μηχανισμό, στα φωτόνια, δηλαδή, που διαπερνούν το δείγμα-στόχο και προσκρούουν στον τοίχο από σκυρόδεμα ώστε να καταλήξουν σκεδαζόμενα τελικά στον ανιχνευτή. Σαφώς, όταν δε χρησιμοποιείται κατευθυντής τα σκεδαζόμενα από το σκυρόδεμα φωτόνια είναι περισσότερα, καθώς συμπεριλαμβάνονται σε αυτά και εκείνα που δεν κατευθύνονται προς το δείγμα, αλλά στην περιοχή γύρω από αυτό. Η ευρεία κορυφή περίπου στα 90 keV, που κυριαρχεί στα φάσματα με την προσθήκη του σκεδαστή, είναι αυτή που δημιουργείται λόγω της οπισθοσκέδασης των φωτονίων της διεγείρουσας δέσμης στους σκεδαστές. Από τη σχέση (2.12), για ενέργεια φωτονίου 137 keV (η κορυφή του φάσματος διέγερσης) και γωνία σκέδασης 180°, προκύπτει ενέργεια σκεδαζόμενου φωτονίου ίση με 89.2 keV, όπως φαίνεται και στο σχήμα 4.28.



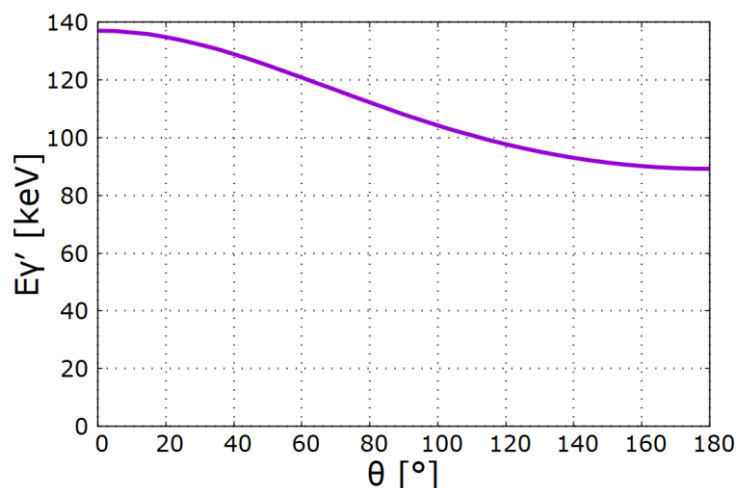
Σχήμα 4.25: Διατάξεις που χρησιμοποιήθηκαν για την προσομοίωση της επίδρασης των σκεδαστών από τα οικοδομικά υλικά (υλικό 7: Portland concrete)



Σχήμα 4.26: Φάσματα εικονικού ανιχνευτή απόθεσης ενέργειας για διάταξη χωρίς κατευθυντή δέσμης



Σχήμα 4.27: Φάσματα εικονικού ανιχνευτή απόθεσης ενέργειας για διάταξη με κατευθυντή δέσμης



Σχήμα 4.28: Ενέργεια σκεδαζόμενων φωτονίων λόγω φαινομένου Compton συναρτήσει της γωνίας σκέδασης  $\theta$  (ενέργεια πρωτογενών φωτονίων  $E_{\gamma}=137$  keV)

Πίνακας 4.19: Τιμές των κριτηρίων A, B και Γ της κορυφής  $U-K_{\alpha 1}$  από το αρχείο εξόδου του ανιχνευτή απόθεσης ενέργειας, για χρήση ή μη σκεδαστών, όταν δεν υπάρχει κατευθυντής δέσμης και U-test

Σκεδαστές χωρίς κατευθυντή	Κριτήριο A [1/(eV*particle)]	Κριτήριο B [1/(eV*particle)]	Κριτήριο Γ
χωρίς	$2.17e-7 \pm 0.90\%$	$1.26e-7 \pm 1.71\%$	$2.38 \pm 1.34\%$
με	$2.35e-7 \pm 1.09\%$	$1.24e-7 \pm 2.29\%$	$2.12 \pm 1.56\%$
U-test	5.399	0.601	5.731

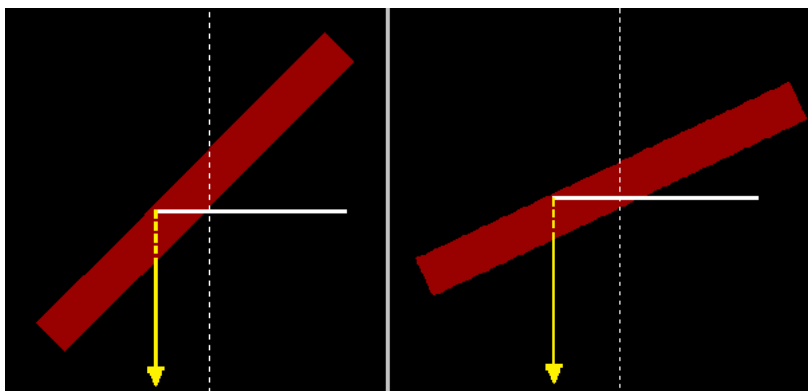
Πίνακας 4.20: Τιμές των κριτηρίων A, B και Γ της κορυφής  $U-K_{\alpha 1}$  από το αρχείο εξόδου του ανιχνευτή απόθεσης ενέργειας, για χρήση ή μη σκεδαστών, όταν υπάρχει κατευθυντής δέσμης και U-test

Σκεδαστές με κατευθυντή	Κριτήριο A [1/(eV*particle)]	Κριτήριο B [1/(eV*particle)]	Κριτήριο Γ
χωρίς	$5.09e-8 \pm 0.94\%$	$1.41e-8 \pm 3.96\%$	$1.38 \pm 1.22\%$
με	$5.07e-8 \pm 0.94\%$	$1.25e-8 \pm 4.49\%$	$1.33 \pm 1.21\%$
U-test	0.293	2.063	2.443

Οι δύο παραπάνω πίνακες δημιουργήθηκαν με στόχο την ποσοτικοποίηση των αλλαγών που επιφέρουν στο φάσμα οι σκεδαστές. Η χρήση του U-test επιτρέπει την αξιολόγηση της στατιστικής σημασίας των αλλαγών αυτών. Για το ενδεχόμενο παράλειψης του κατευθυντή δέσμης, τα αποτελέσματα είναι διαφωτιστικά: το κριτήριο B της κορυφής  $U-K_{\alpha 1}$  παραμένει ίδιο, ενώ το κριτήριο Γ μειώνεται με την προσθήκη των σκεδαστών (πίνακας 4.19). Καθίσταται έτσι πιο δύσκολη η ανίχνευση του ουρανίου. Στην περίπτωση χρήσης ενός αποδοτικού κατευθυντή δέσμης δεν είναι δυνατή η εξαγωγή ασφαλούς συμπεράσματος, αφού το U-test δεν οδηγεί σε αποτελέσματα που μπορούν με μεγάλη εμπιστοσύνη να αποφανθούν για τη μεταβολή των κριτηρίων B και Γ (πίνακας 4.20). Ακόμα και έτσι, προκύπτει ένα χρήσιμο συμπέρασμα, ότι η χρήση κατευθυντή δέσμης περιορίζει την αρνητική επίδραση των σκεδαστών στο φάσμα.

### 4.3.6 Η επίδραση της γωνίας τοποθέτησης του δείγματος

Η επίδραση της γωνίας τοποθέτησης του δείγματος είναι μία σημαντική παράμετρος της διάταξης. Όσο η γωνία τοποθέτησης του δείγματος μικραίνει, δηλαδή όσο το δείγμα στρέφεται προς τη μετωπική επιφάνεια του ανιχνευτή, τόσο μειώνεται και η ενδεχόμενη διαδρομή που θα πρέπει να διανύσει μέσα στο δείγμα ένα φωτόνιο που κατευθύνεται προς τον ανιχνευτή (σχήμα 4.29). Αυτό ισχύει για όλα τα δευτερογενή φωτόνια, είτε πρόκειται για χαρακτηριστική ακτινοβολία, είτε για σκεδαζόμενη, άρα αναμένεται συνολική αύξηση των φωτονίων που ανιχνεύονται από τον ανιχνευτή.



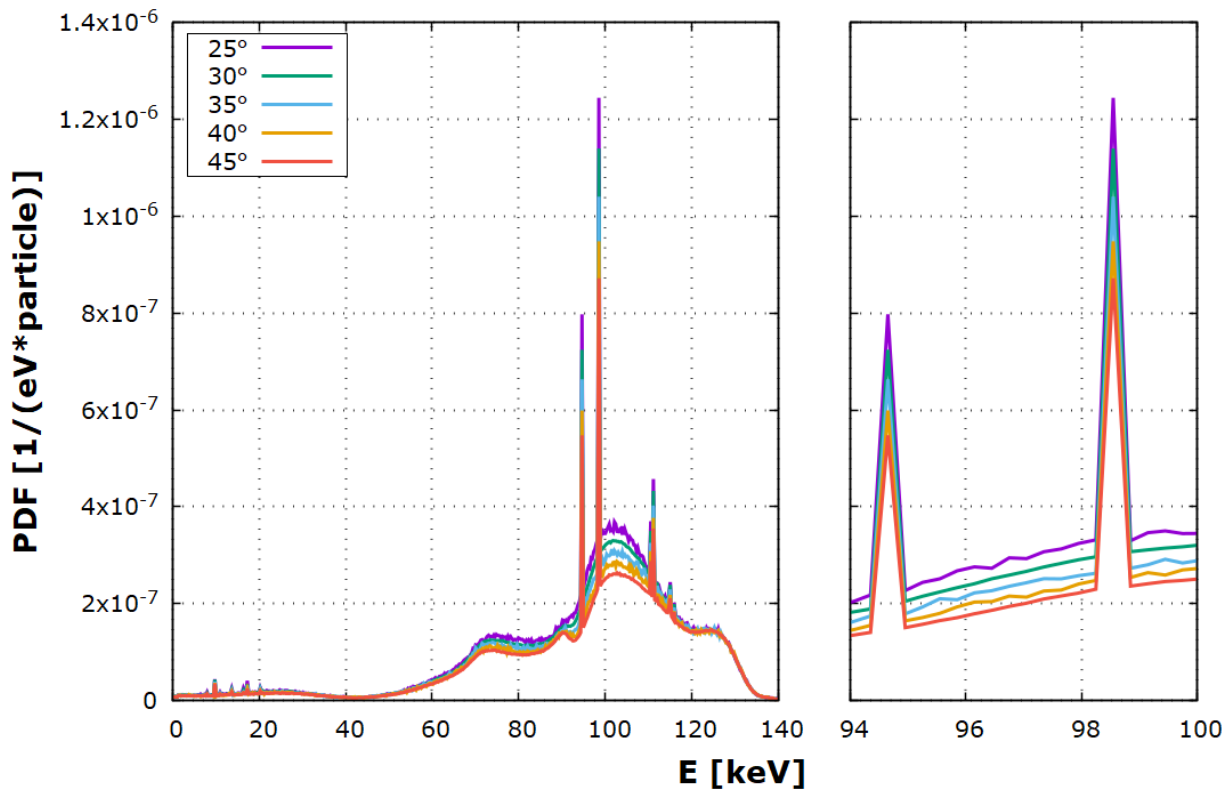
Σχήμα 4.29: Δείγματα με γωνία σχετικής τοποθέτησης ως προς τον ανιχνευτή 45° (αριστερά) και 25° (δεξιά). Τα προσπίπτοντα φωτόνια χαρακτηρίζονται με τη λευκή γραμμή, ενώ τα δευτερογενή με την κίτρινη (η διακεκομμένη γραμμή υποδηλώνει τη διαδρομή του δευτερογενούς φωτονίου μέσα στο σώμα)

Όμως, καθώς η προβαλλόμενη επιφάνεια του δείγματος επίσης μειώνεται, φτάνουν τελικά λιγότερα φωτόνια στο δείγμα με τη μείωση της γωνίας. Για τη διερεύνηση της πιθανότητας αυτής έγιναν παραπάνω από μία σειρές προσομοιώσεων με γωνίες που κυμαίνονται από 45° (default) έως και 25°. Στην πρώτη έγινε χρήση ενός δείγματος μεγάλης ακτίνας (50mm), έτσι ώστε η όλη η δέσμη που εξέρχεται από τον κατευθυντή δέσμης να ακτινοβολεί το δείγμα, ακόμα και για γωνία δείγματος 25°. Έτσι εξετάστηκε ο πρώτος ισχυρισμός, ότι θα υπάρξει αύξηση των φωτονίων, λόγω μείωσης της απόστασης που διανύουν τα δευτερογενή φωτόνια. Έπειτα διενεργήθηκαν προσομοιώσεις με μικρότερη ακτίνα δείγματος (15 mm), ώστε το δείγμα να περιλαμβάνεται εξολοκλήρου στη δέσμη και η προβαλλόμενη επιφάνεια που «βλέπει» η δέσμη να μικραίνει με τη μείωση της γωνίας του δείγματος.

Για την εκτέλεση των συγκεκριμένων προσομοιώσεων μειώθηκε η ημιγωνία της κωνικής δέσμης της πηγής από 20° (default) σε 5°. Έτσι επιτεύχθηκε σημαντική επιτάχυνση της υπολογιστικής διαδικασίας. Παράλληλα, δεν επηρεάστηκε πολύ το αποτέλεσμα της προσομοίωσης ως προς τα χαρακτηριστικά που μας ενδιαφέρουν, αφενός γιατί ο χρησιμοποιούμενος κατευθυντής δέσμης Pb-Cd-Cu-Al, όπως φάνηκε και στην ενότητα 4.3.4, αποκόπτει το μεγαλύτερο μέρος των φωτονίων που κατευθύνονται προς τον ανιχνευτή, αφετέρου επειδή δεν ενδιαφέρουν σε μεγάλο βαθμό τα σκεδαζόμενα φωτόνια και η απευθείας ακτινοβολήση του ανιχνευτή σε αυτή την περίπτωση. Μάλιστα στη δεύτερη σειρά προσομοιώσεων, για λόγους οικονομίας χρόνου, δε χρησιμοποιήθηκε κατευθυντής και επιτεύχθηκε επιτάχυνση κατά 322%.

Στο σχήμα 4.30, φαίνεται καθαρά η ενίσχυση των χαρακτηριστικών γραμμών του ουρανίου που επιθυμούμε να ανιχνεύσουμε, καθώς η γωνία του δείγματος μειώνεται. Παράλληλα παρατηρείται μία γενική αύξηση των μετρούμενων γεγονότων σε όλο το φάσμα, γεγονός που καθιστά δύσκολη

την αξιολόγηση των αποτελεσμάτων με τον τρόπο αυτό. Για το λόγο αυτό δημιουργήθηκαν οι πίνακες παρακάτω και το διάγραμμα που φαίνεται στο σχήμα 4.31, όπου παρουσιάζεται το κριτήριο σημαντικότητας Β της γραμμής  $U-K_{\alpha 1}$ . Από το στατιστικό τεστ U, προκύπτει το συμπέρασμα ότι η μείωση της γωνίας δείγματος οδηγεί μεν σε αύξηση των καθαρών καταγραφόμενων γεγονότων στο σχετικό ενεργειακό παράθυρο με επίπεδο εμπιστοσύνης 99%, αφήνει ανεπηρέαστο, όμως, το κριτήριο Γ της κορυφής (αν και υπάρχουν ορισμένα ζεύγη γωνιών για τα οποία το U-test δεν μπορεί να αποφανθεί με βεβαιότητα), που αποτελεί την πιο σημαντική συνιστώσα, όταν πρόκειται για ανίχνευση, ή μη, ιχνοστοιχείων στην XRF.



Σχήμα 4.30: Φάσματα εικονικού ανιχνευτή απόθεσης ενέργειας για διάφορες σχετικές γωνίες τοποθέτησης δείγματος ως προς τον ανιχνευτή (ακτίνα δείγματος 50 mm), με λεπτομέρεια στην περιοχή των  $K_{\alpha}$  του U.

Πίνακας 4.21: Τιμές των κριτηρίων A, B και Γ της κορυφής  $U-K_{\alpha 1}$  από το αρχείο εξόδου του ανιχνευτή απόθεσης ενέργειας, για διάφορες γωνίες τοποθέτησης δείγματος (ακτίνα δείγματος 50mm).

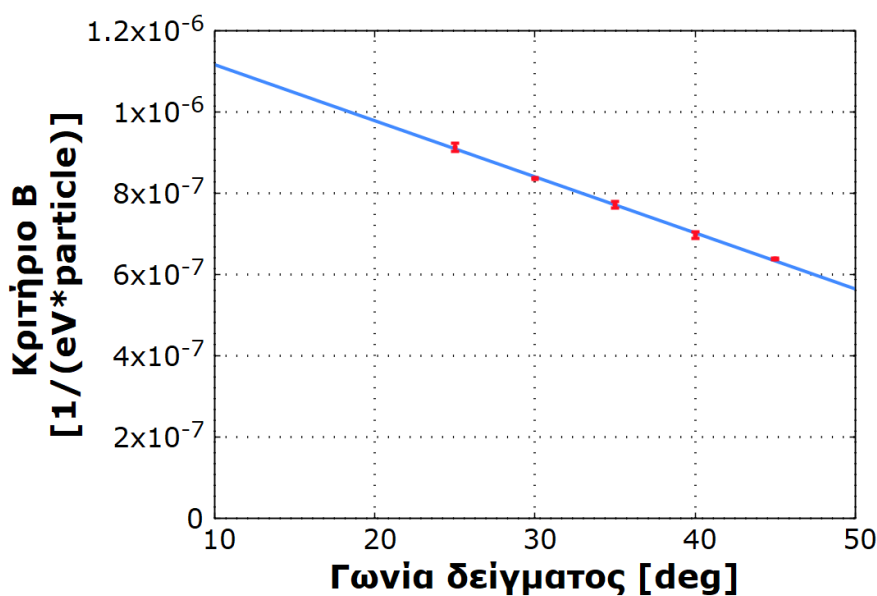
Γωνία δείγματος [deg]	Κριτήριο A [1/(eV*particle)]	Κριτήριο B [1/(eV*particle)]	Κριτήριο Γ -
25	$1.244e-6 \pm 0.73\%$	$9.13e-7 \pm 1.1\%$	$3.76 \pm 1.2\%$
30	$1.139e-6 \pm 0.17\%$	$8.37e-7 \pm 0.25\%$	$3.77 \pm 0.30\%$
35	$1.040e-6 \pm 0.81\%$	$7.72e-7 \pm 1.2\%$	$3.88 \pm 1.4\%$
40	$9.48e-7 \pm 0.80\%$	$6.97e-7 \pm 1.2\%$	$3.77 \pm 1.4\%$
45	$8.72e-7 \pm 0.20\%$	$6.39e-7 \pm 0.29$	$3.74 \pm 0.34\%$

Πίνακας 4.22: U-test μεταξύ των τιμών κριτηρίου B της κορυφής U-K<sub>α1</sub> από το αρχείο εξόδου του ανιχνευτή απόθεσης ενέργειας για διάφορες γωνίες τοποθέτησης δείγματος (ακτίνα δείγματος 50mm).

Κριτήριο B	25	30	35	40	45
25					
30	7.663				
35	10.728	7.121			
40	17.215	16.916	6.268		
45	27.901	70.517	14.649	7.063	

Πίνακας 4.23: U-test μεταξύ των τιμών του κριτηρίου Γ της κορυφής U-K<sub>α1</sub> από το αρχείο εξόδου του ανιχνευτή απόθεσης ενέργειας για διάφορες γωνίες τοποθέτησης δείγματος (ακτίνα δείγματος 50mm).

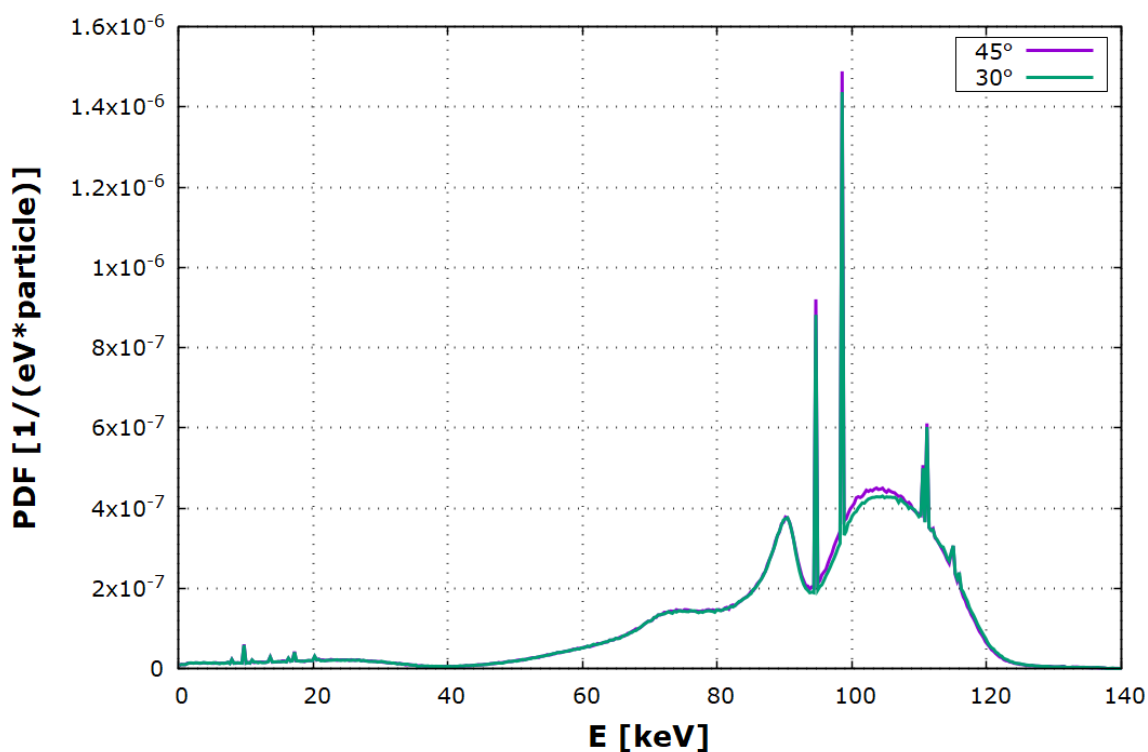
Κριτήριο Γ	25	30	35	40	45
25					
30	0.259				
35	1.689	1.963			
40	0.218	0.051	1.416		
45	0.431	1.961	2.553	0.682	



Σχήμα 4.31: Συσχέτιση (γραμμική) του κριτηρίου B της κορυφής U-K<sub>α1</sub> και της γωνίας τοποθέτησης δείγματος, στο εύρος [25°,45°] (ακτίνα δείγματος 50 mm)

Οι προσομοιώσεις των δειγμάτων με τη μικρότερη ακτίνα (15 mm) έδειξαν διαφορετικά αποτελέσματα. Σε αντίθεση με την περίπτωση των δειγμάτων μεγάλης επιφάνειας, υπάρχει καθαρή μείωση του ρυθμού καταγραφής γεγονότων στον ανιχνευτή, καθώς μειώνεται η γωνία του δείγματος. Και πάλι δεν είναι ευδιάκριτες στο σχήμα 4.32 οι συνέπειες αυτής της μείωσης αυτής, γι' αυτό παρουσιάζονται τα απαραίτητα μεγέθη στον πίνακα παρακάτω (πίνακας 4.24).





Σχήμα 4.32: Φάσματα εικονικού ανιχνευτή απόδοσης ενέργειας για σχετικές γωνίες τοποθέτησης δείγματος 30° και 45° ως προς τον ανιχνευτή (ακτίνα δείγματος 15 mm)

Πίνακας 4.24: Τιμές των κριτηρίων σημαντικότητας A, B και Γ της κορυφής U-K<sub>α1</sub> από το αρχείο εξόδου του ανιχνευτή απόδοσης ενέργειας, για δύο γωνίες τοποθέτησης δείγματος (ακτίνα δείγματος 15 mm) και U-test

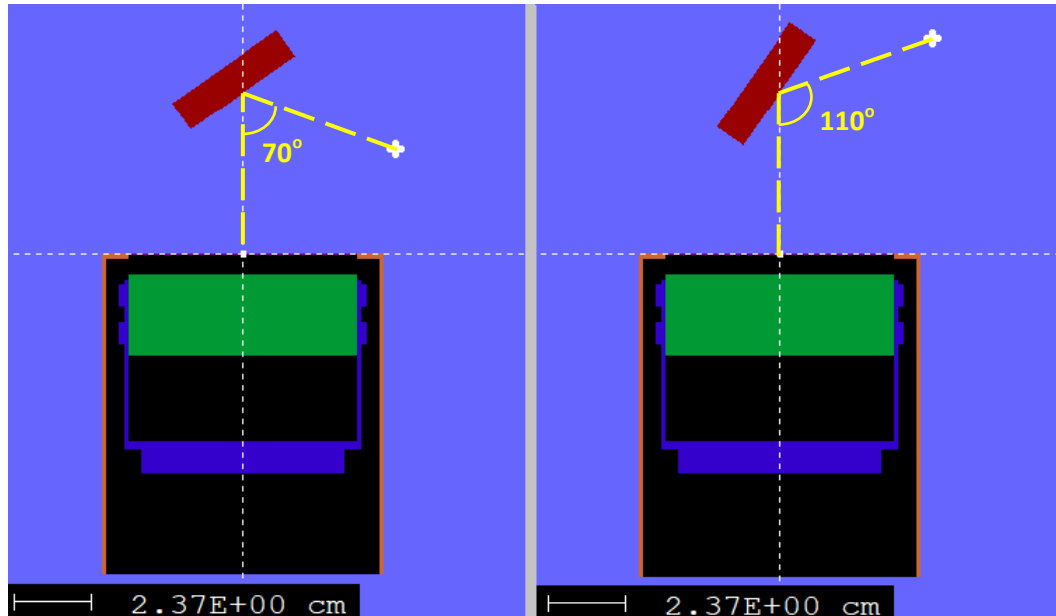
Γωνία δείγματος [deg]	Κριτήριο A [1/(eV*particle)]	Κριτήριο B [1/(eV*particle)]	Κριτήριο Γ -
45°	1.489e-6 ± 0.34%	1.142e-6 ± 0.47%	4.31 ± 0.60%
30°	1.437e-6 ± 0.35%	1.115e-6 ± 0.47%	4.46 ± 0.62%
U-test	7.287	3.599	3.962

Το κριτήριο B της κορυφής U-K<sub>α1</sub> ακολουθεί το ίδιο μοτίβο και ελαττώνεται με τη μείωση της γωνίας. Το κριτήριο Γ εμφανίζεται στατιστικά σημαντικά βελτιωμένο για τη μικρότερη από τις δύο γωνίες, δηλαδή τις 30°. Αυτό μας οδηγεί στο συμπέρασμα πως μία μείωση στη γωνία δείγματος μπορεί να έχει ευεργετική επίδραση στο φάσμα και να οδηγήσει σε πιο εύκολη ανίχνευση του ουρανίου.

#### 4.3.7 Η επίδραση της γωνίας μεταξύ πηγής-δείγματος-ανιχνευτή

Σε μία διάταξη XRF, όπου η πηγή, το δείγμα και ο ανιχνευτής βρίσκονται στο ίδιο επίπεδο η αλλαγή της γωνίας μεταξύ πηγής-δείγματος-ανιχνευτή (βλ. σχήμα 4.33) μπορεί να επιφέρει σημαντική αλλαγή στο φάσμα που ανιχνεύεται. Υπάρχει μία μικρή επίδραση που οφείλεται στο

μηχανισμό που περιγράφηκε στη ενότητα 0, όμως η μεγαλύτερη επίδραση οφείλεται στη φύση του φαινομένου Compton. Όπως έχει αναφερθεί στην ενότητα 2.6.3, το φαινόμενο Compton παρουσιάζει μεγάλη εξάρτηση από τη γωνία σκέδασης ως προς την ένταση της σκεδαζόμενης ακτινοβολίας, αλλά κυρίως ως προς την ενέργεια των σκεδαζόμενων φωτονίων σε συγκεκριμένες διευθύνσεις.



Σχήμα 4.33: Σχηματική απεικόνιση της μεταβολής της γωνίας πηγής-δείγματος-ανιχνευτή από  $70^\circ$  (αριστερά) σε  $110^\circ$  (δεξιά)

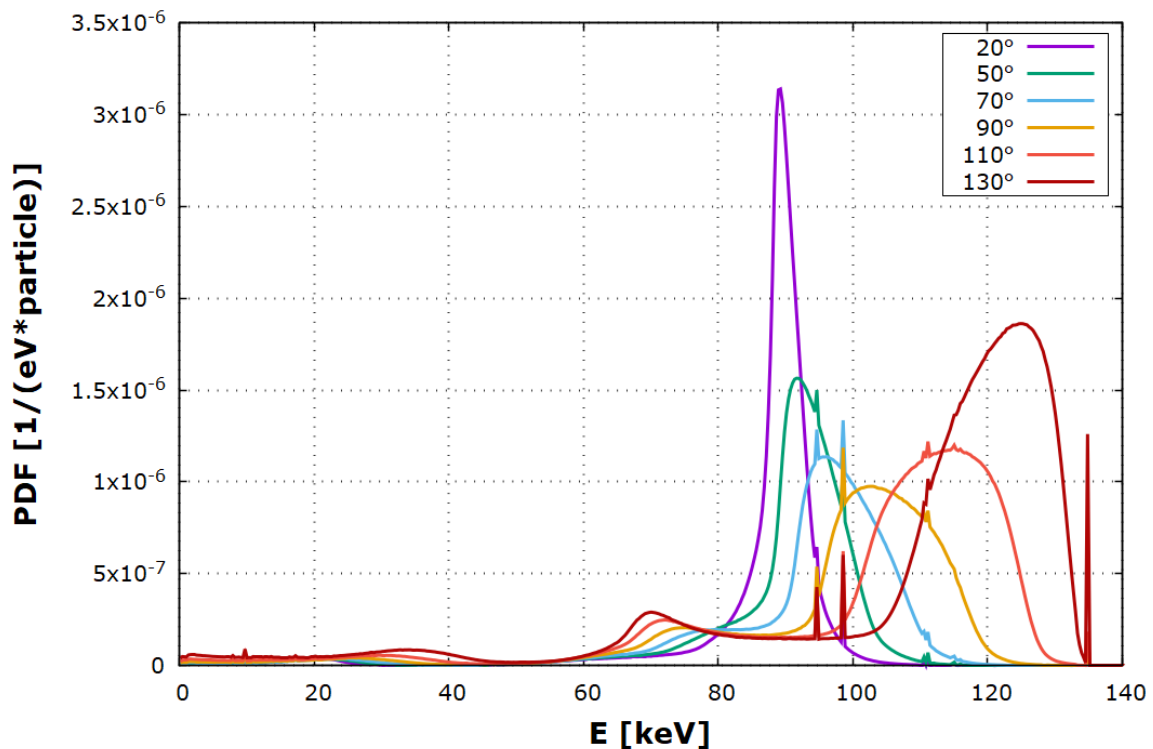
Σε μία διάταξη όπως αυτή που προσομοιώνεται, εξαιρουμένων των σκεδάσεων στον περιβάλλοντα χώρο, οι καταγραφόμενες σκεδάσεις οφείλονται σε μεγάλο βαθμό στο ίδιο το δείγμα. Με τη μεταβολή της γωνίας πηγής-δείγματος-ανιχνευτή, είναι δυνατή η μετατόπιση της επίδρασης του φαινομένου Compton στο παραγόμενο φάσμα προς μεγαλύτερες ή μικρότερες ενέργειες. Το φαινόμενο Compton είναι ο κυρίαρχος μηχανισμός αλληλεπίδρασης για φωτόνια ενέργειας άνω των 100 keV και υλικά χαμηλού Z, όπως είναι το μεγαλύτερο μέρος του δείγματος που χρησιμοποιήθηκε, άρα είναι επιτακτική η ανάγκη για καλύτερη διαχείριση των παρεμβολών του στο φάσμα. Η αύξηση της προεπιλεγμένης γωνίας ( $90^\circ$ ) οδηγεί σε μετατόπιση του φάσματος της σκεδαζόμενης ακτινοβολίας προς υψηλότερες ενέργειες, ενώ η μείωση της επιφέρει το αντίθετο αποτέλεσμα.

Στην διερεύνηση που έγινε στα πλαίσια της ΔΕ χρησιμοποιήθηκε το δείγμα 5, με συγκέντρωση 500 ppm U. Ο λόγος για τον οποίο επιλέχθηκε αυτό το δείγμα είναι πως είχε φανεί από προηγούμενες προσομοιώσεις ότι η συγκέντρωση ουρανίου του συγκεκριμένου δείγματος οδηγεί σε χαρακτηριστικές ακτίνες στο φάσμα συγκρίσιμου μεγέθους με το συνεχές υπόστρωμα Compton. Δεν έγινε χρήση κατευθυντή δέσμης, ούτε σκεδαστών, ενώ χρησιμοποιήθηκε μειωμένη ημιγωνία ανοίγματος της κωνικής δέσμης ( $5^\circ$ ), ώστε να επιτευχθεί σημαντική επιτάχυνση της προσομοίωσης.

Η προσομοίωση έγινε αρχικά για μονοενεργειακή πηγή φωτονίων ενέργειας 135keV. Τα συμπεράσματα που εξήχθησαν από αυτές τις προσομοιώσεις σαφώς ισχύουν και για την περίπτωση διέγερσης του δείγματος με φάσμα ενεργειών, το οποίο επαληθεύτηκε με δεύτερη σειρά προσομοιώσεων. Σε αυτή έγινε χρήση του φάσματος 140 keV με φίλτρα Sn (15 mm) και Al (30

mm), ενώ εξετάστηκαν μόνο οι γωνίες που φάνηκαν να βελτιώνουν την εικόνα του φάσματος στην πρώτη σειρά.

Τόσο στην πρώτη, όσο και στη δεύτερη σειρά προσομοιώσεων, εκτελέστηκε στατιστικό U-test για τις τιμές των κριτηρίων Β και Γ της κορυφής  $U-K_{\alpha 1}$ . Όλες οι τιμές του U-test έδειξαν πως όλα τα αποτελέσματα είναι στατιστικά διαφορετικά μεταξύ τους και για τη μονοενεργειακή και για την πολυενεργειακή διέγερση. Έγινε επίσης προσπάθεια προσδιορισμού μίας συνάρτησης που προσεγγίζει ικανοποιητικά τα σημεία της προσομοίωσης (σχήμα 4.35 και σχήμα 4.36).



Σχήμα 4.34: Φάσματα εικονικού ανιχνευτή απόδοσης ενέργειας για διάφορες γωνίες πηγής-δείγματος-ανιχνευτή, με μονοενεργειακή διέγερση 135 keV

Πίνακας 4.25: Τιμές των κριτηρίων σημαντικότητας Α, Β και Γ της κορυφής  $U-K_{\alpha 1}$  από το αρχείο εξόδου του ανιχνευτή απόδοσης ενέργειας, για διάφορες γωνίες πηγής-δείγματος-ανιχνευτή (μονοενεργειακή διέγερση)

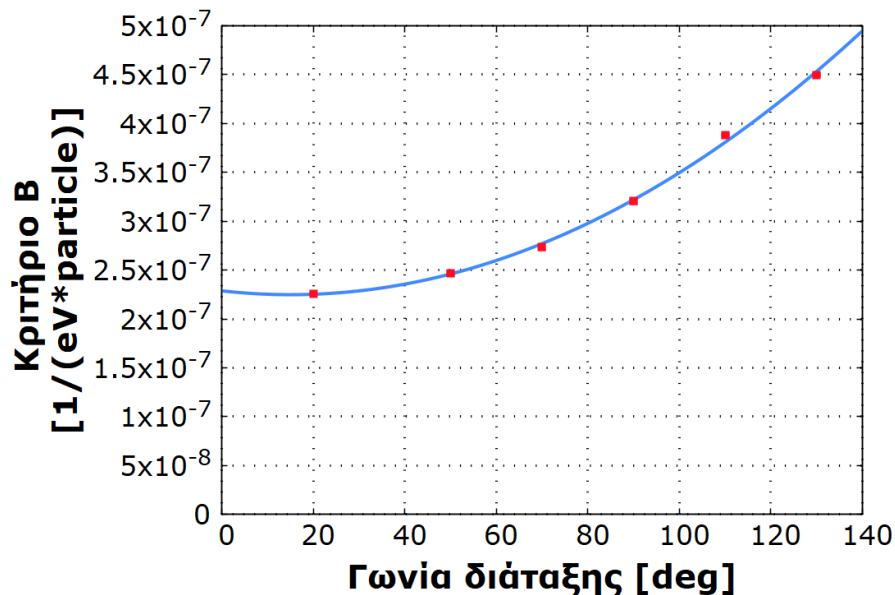
Γωνία διάταξης [deg]	Κριτήριο Α [1/(eV*particle)]	Κριτήριο Β [1/(eV*particle)]	Κριτήριο Γ -
20	3.425e-7 ± 0.25%	2.258e-7 ± 0.41%	2.94 ± 0.39%
50	1.073e-6 ± 0.15%	2.47e-7 ± 0.75%	1.299 ± 0.19%
70	1.335e-6 ± 0.13%	2.73e-7 ± 0.75%	1.257 ± 0.17%
90	1.186e-6 ± 0.14%	3.20e-7 ± 0.59%	1.370 ± 0.18%
110	6.23e-7 ± 0.19%	3.88e-7 ± 0.34%	2.652 ± 0.29%
130	6.02e-7 ± 0.21%	4.50e-7 ± 0.31%	3.95 ± 0.37%

Πίνακας 4.26: U-test μεταξύ των τιμών του κριτηρίου B της κορυφής U-K<sub>α1</sub> από το αρχείο εξόδου του ανιχνευτή απόδοσης ενέργειας για διάφορες γωνίες πηγής-δείγματος-ανιχνευτή (μονοενεργειακή διέγερση)

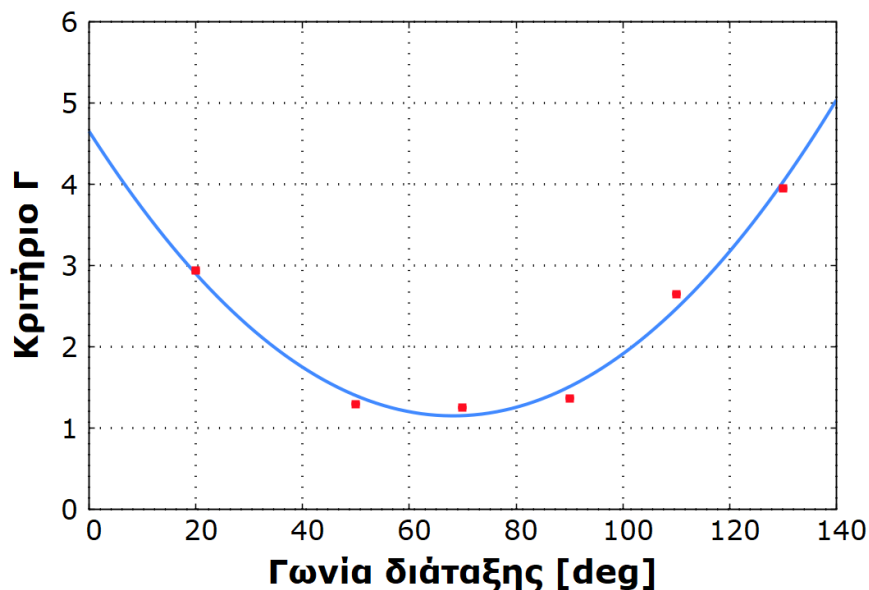
Κριτήριο B	20	50	70	90	110	130
20						
50	10.228					
70	21.142	9.597				
90	44.662	27.741	16.83			
110	100.907	62.375	47.142	29.240		
130	135.134	88.278	71.551	55.117	32.532	

Πίνακας 4.27: U-test μεταξύ των τιμών του κριτηρίου Γ της κορυφής U-K<sub>α1</sub> από το αρχείο εξόδου του ανιχνευτή απόδοσης ενέργειας για διάφορες γωνίες πηγής-δείγματος-ανιχνευτή (μονοενεργειακή διέγερση)

Κριτήριο Γ	20	50	70	90	110	130
20						
50	138.360					
70	142.693	12.980				
90	132.336	20.601	35.101			
110	20.350	165.373	172.532	156.645		
130	54.414	178.831	182.300	174.025	78.356	



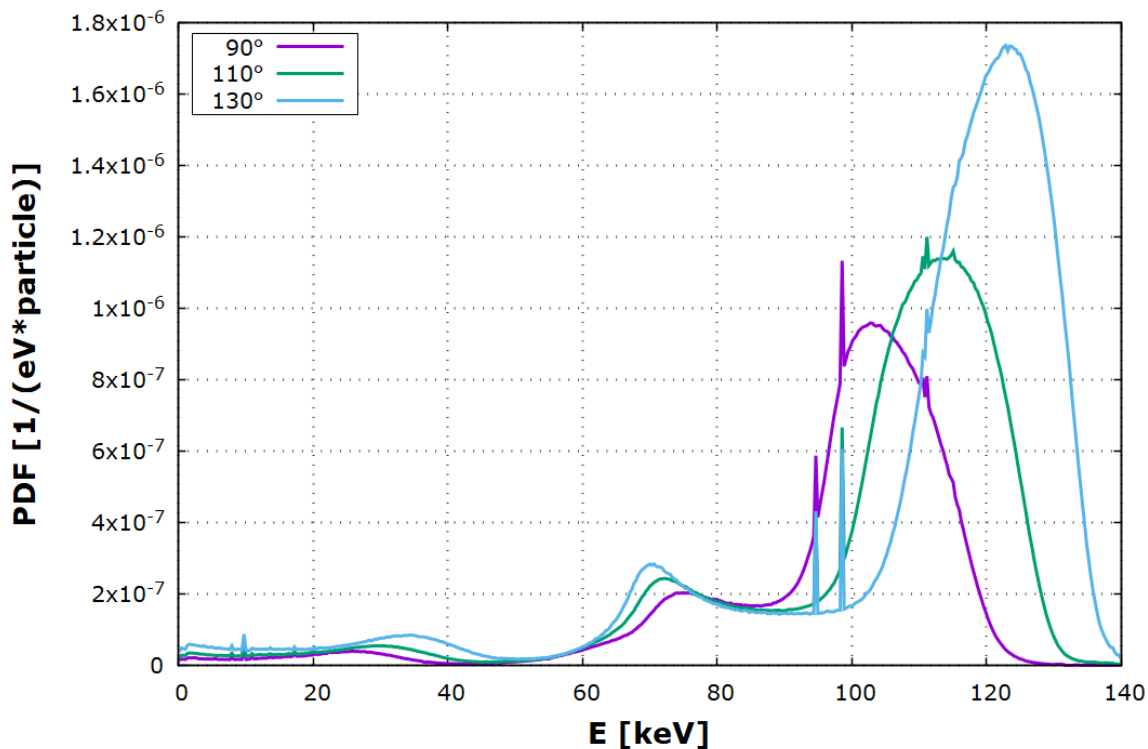
Σχήμα 4.35: Συσχέτιση (μη γραμμική) του κριτηρίου B της κορυφής U-K<sub>α1</sub> και της γωνίας πηγής-δείγματος-ανιχνευτή, στο εύρος [20°,130°] (μονοενεργειακή διέγερση).



Σχήμα 4.36: Συσχέτιση (μη γραμμική) του κριτηρίου  $\Gamma$  της κορυφής  $U-K_{\alpha 1}$  και της γωνίας πηγής-δείγματος-ανιχνευτή, στο εύρος  $[20^\circ, 130^\circ]$  (μονοενεργειακή διέγερση).

Η μετατόπιση του συνεχούς Compton προς μεγαλύτερες ενέργειες, βελτιώνει σημαντικά την εικόνα του φάσματος, καθώς δημιουργεί τις συνθήκες για χαμηλότερο και πιο ομαλό υπόστρωμα στην περιοχή των δύο πιο έντονων κορυφών της σειράς K του U ( $U-K_{\alpha 1}$  και  $U-K_{\alpha 2}$ ).

Στη συνέχεια παρουσιάζονται τα αποτελέσματα που προέκυψαν από την πολυενεργειακή διέγερση:



Σχήμα 4.37: Φάσματα εικονικού ανιχνευτή απόθραυσσης ενέργειας για γωνίες πηγής-δείγματος-ανιχνευτή  $90^\circ$ ,  $110^\circ$  και  $130^\circ$ , με διέγερση με το φάσμα 140 keV

Πίνακας 4.28: Τιμές των κριτηρίων σημαντικότητας A, B και Γ της κορυφής U-K<sub>α1</sub> από το αρχείο εξόδου του ανιχνευτή απόθεσης ενέργειας, για διάφορες γωνίες πηγής-δείγματος-ανιχνευτή (πολυενεργειακή διέγερση)

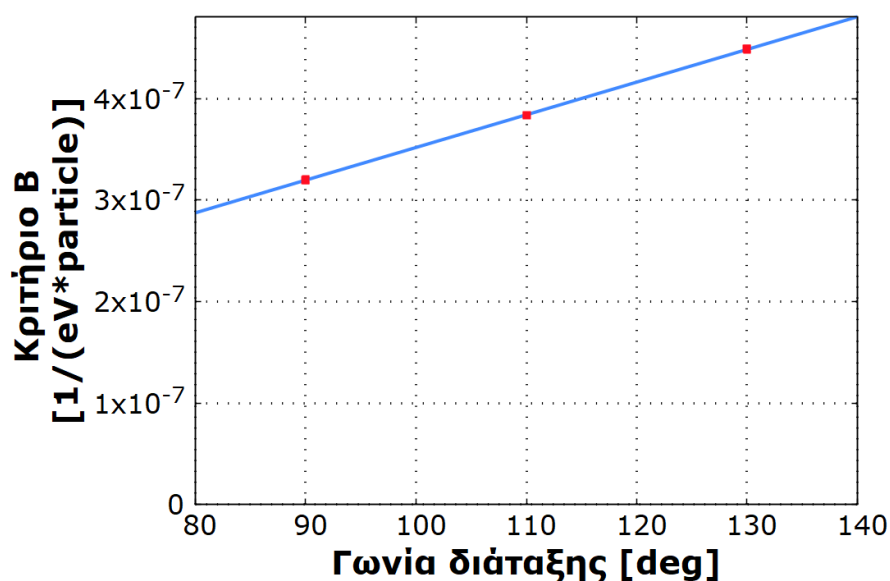
Γωνία διάταξης [deg]	Κριτήριο A [1/(eV*particle)]	Κριτήριο B [1/(eV*particle)]	Κριτήριο Γ -
90	1.134e-6 ± 0.20%	3.20e-7 ± 0.83%	1.393 ± 0.26 %
110	6.67e-7 ± 0.24%	3.83e-7 ± 0.45%	2.353 ± 0.35%
130	6.06e-7 ± 0.41%	4.49e-7 ± 0.59%	3.856 ± 0.70%

Πίνακας 4.29: U-test μεταξύ των τιμών του κριτηρίου B της κορυφής U-K<sub>α1</sub> από το αρχείο εξόδου του ανιχνευτή απόθεσης ενέργειας για διάφορες γωνίες πηγής-δείγματος-ανιχνευτή (πολυενεργειακή διέγερση)

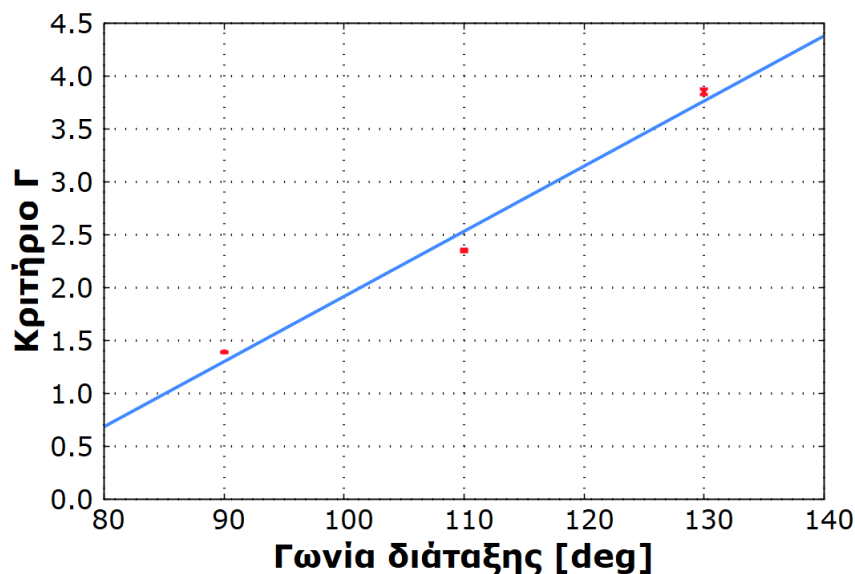
Κριτήριο B	90	110	130
90			
110	20.039		
130	34.383	20.594	

Πίνακας 4.30: U-test μεταξύ των τιμών του κριτηρίου Γ της κορυφής U-K<sub>α1</sub> από το αρχείο εξόδου του ανιχνευτή απόθεσης ενέργειας για διάφορες γωνίες πηγής-δείγματος-ανιχνευτή (πολυενεργειακή διέγερση)

Κριτήριο Γ	90	110	130
90			
110	106.646		
130	89.821	52.941	



Σχήμα 4.38: Συσχέτιση (γραμμική) του κριτηρίου B της κορυφής U-K<sub>α1</sub> και της γωνίας πηγής-δείγματος-ανιχνευτή, στο εύρος [90°,130°] (πολυενεργειακή διέγερση).



Σχήμα 4.39: Συσχέτιση (γραμμική) του κριτηρίου  $\Gamma$  της κορυφής  $U-K_{\alpha 1}$  και της γωνίας πηγής-δείγματος-ανιχνευτή, στο εύρος  $[90^\circ, 130^\circ]$  (πολυενεργειακή διέγερση).

Οι παρατηρήσεις που έγιναν για την περίπτωση χρήσης μονοενεργειακής δέσμης ισχύουν και στην περίπτωση του φάσματος. Η μετατόπιση του συνεχούς Compton είναι ανάλογη και βελτιώνει την εικόνα του φάσματος, καθώς η γωνία της διάταξης λαμβάνει μεγαλύτερες τιμές. Παρ' όλα αυτά, μεγάλη αύξηση της γωνίας της διάταξης μπορεί να οδηγήσει σε απευθείας ακτινοβολή του ανιχνευτή από την πηγή, στην κατακόρυφη αύξηση του ρυθμού καταγραφής γεγονότων και τον κορεσμό του ανιχνευτή, λόγω αθρόας εισροής φωτονίων σε αυτόν, αφού η πρωτογενής δέσμη της μηχανής ακτίνων-Χ έχει αναπόφευκτα μία κωνικότητα. Χρήση πολύ αποδοτικών κατευθυντών δέσμης ή, καλύτερα, χρήση διεγείρουσας ακτινοβολίας από σύγχροτρο επιτρέπουν την αύξηση της γωνίας της διάταξης σε γωνίες που προσεγγίζουν τις  $180^\circ$ , χωρίς να υπάρχει απευθείας ακτινοβολή του ανιχνευτή.

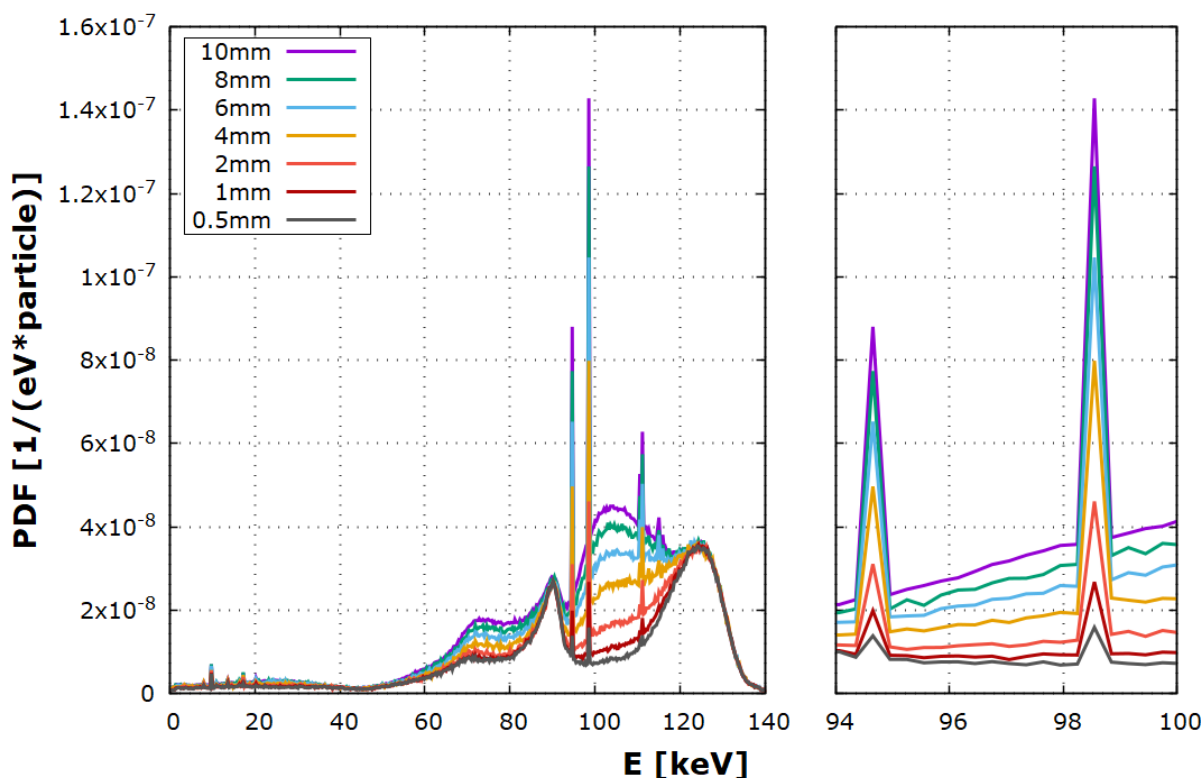
#### 4.3.8 Η επίδραση του πάχους του δείγματος

Το πάχος του δείγματος είναι μια παράμετρος που αναμένεται να επηρεάζει περισσότερο τα αποτελέσματα της μεθόδου XRF, όσο η ενέργεια των φωτονίων αυξάνεται. Τα φωτόνια υψηλότερης ενέργειας διεισδύουν και αλληλεπιδρούν σε μεγαλύτερα βάθη, έχουν δηλαδή μεγαλύτερη εμβέλεια. Σε στόχους μεγάλου πάχους τα φωτόνια που προσπίπτουν σε αυτούς έχουν μεγάλη πιθανότητα αλληλεπίδρασης. Αντίθετα σε στόχους μικρού πάχους είναι πολύ πιθανό ένα μεγάλο μέρος των προσπίπτοντων φωτονίων να εξέλθει από το δείγμα χωρίς αλληλεπίδραση. Έπειτα μπορεί να απορροφηθεί σε κάποιο άλλο σημείο του περιβάλλοντος χώρου ή να σκεδαστεί καταλήγοντας στον ανιχνευτή και δημιουργώντας θόρυβο στο φάσμα.

Στις προσομοιώσεις που έγιναν στα πλαίσια της ΔΕ, ως προεπιλογή, χρησιμοποιήθηκαν δείγματα κυλινδρικά με πάχος 10 mm. Αυτό το πάχος είναι σχετικά μεγάλο και ίσως στις πειραματικές εφαρμογές δεν υπάρχει η δυνατότητα χρήσης τόσο μεγάλων δειγμάτων. Για το λόγο αυτό, αποφασίστηκε η διενέργεια μίας σειράς προσομοιώσεων στις οποίες η μόνη μεταβλητή που τις διαφοροποιεί είναι το πάχος του δείγματος. Εκτός από την προεπιλογή των 10 mm, προσομοιώθηκαν δείγματα με πάχη 8 mm, 6 mm, 4 mm και 2 mm. Μεταγενέστερα, αποφασίστηκε

να δημιουργηθούν δύο επιπλέον προσομοιώσεις με πάχος 1 mm και 0.5 mm για τη μελέτη της συμπεριφοράς του συστήματος σε πολύ λεπτά δείγματα.

Η διέγερση των δειγμάτων έγινε με πολυενεργειακή δέσμη, καθώς το βάθος διείσδυσης στο δείγμα και επομένως η συμπεριφορά του συστήματος αλλάζει ανάλογα με την ενέργεια της προσπίπτουσας ακτινοβολίας. Χρησιμοποιήθηκε, λοιπόν, το φάσμα των 140 keV, σε συνδυασμό με τον κατευθυντή τύπου 2 (από Pb, Cd, Cu και Al), έτσι ώστε να περιοριστεί η απευθείας ή σκεδαζόμενη ακτινοβολία του ανιχνευτή από φωτόνια που δεν προσπίπτουν στο δείγμα-στόχο και να μελετηθεί κυρίως η επίδραση των φωτονίων που προσπίπτουν στο δείγμα.



Σχήμα 4.40: Φάσματα εικονικού ανιχνευτή απόθεσης ενέργειας για διάφορα πάχη δείγματος, με διέγερση με το φάσμα 140 keV

Πίνακας 4.31: Τιμές των κριτηρίων σημαντικότητας Α, Β και Γ της κορυφής U-K<sub>α1</sub> από το αρχείο εξόδου του ανιχνευτή απόθεσης ενέργειας, για διάφορα πάχη δείγματος

Πάχος δείγματος [mm]	Κριτήριο Α [1/(eV*particle)]	Κριτήριο Β [1/(eV*particle)]	Κριτήριο Γ -
0.5	1.59e-8 ± 2.30%	8.56e-9 ± 4.73%	2.17 ± 3.33%
1	2.68e-8 ± 1.76%	1.74e-8 ± 2.95%	2.84 ± 2.75%
2	4.61e-8 ± 1.90%	3.26e-8 ± 2.88%	2.41 ± 3.13%
4	7.98e-8 ± 1.53%	5.88e-8 ± 2.21%	3.79 ± 2.60%
6	1.04e-7 ± 1.17%	7.81e-8 ± 1.66%	3.95 ± 2.02%
8	1.26e-7 ± 1.12%	9.45e-8 ± 1.60%	3.95 ± 1.94%
10	1.428e-7 ± 0.49%	1.062e-7 ± 0.70%	3.90 ± 0.84%

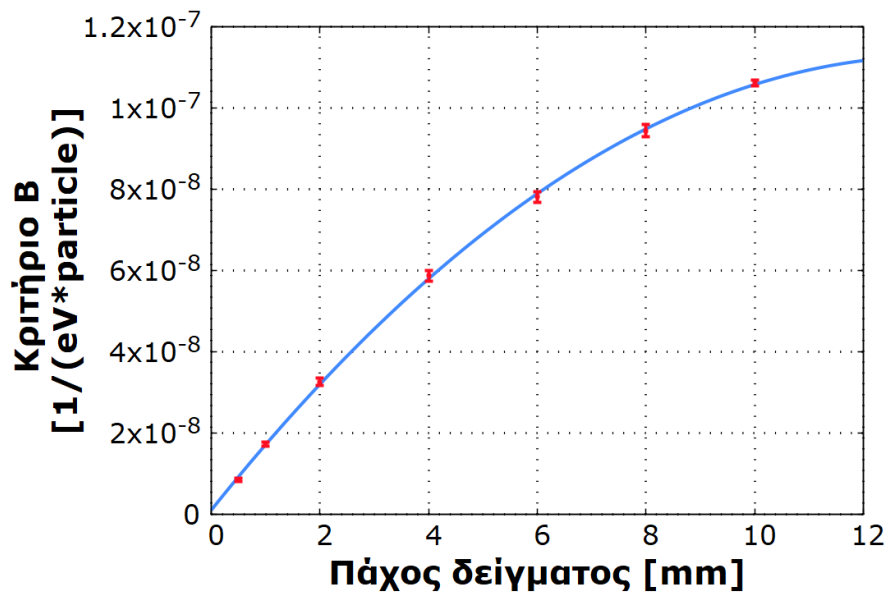


Πίνακας 4.32: U-test μεταξύ των τιμών του κριτηρίου B της κορυφής U-K<sub>α1</sub> από το αρχείο εξόδου του ανιχνευτή απόθεσης ενέργειας για διάφορα πάχη δείγματος

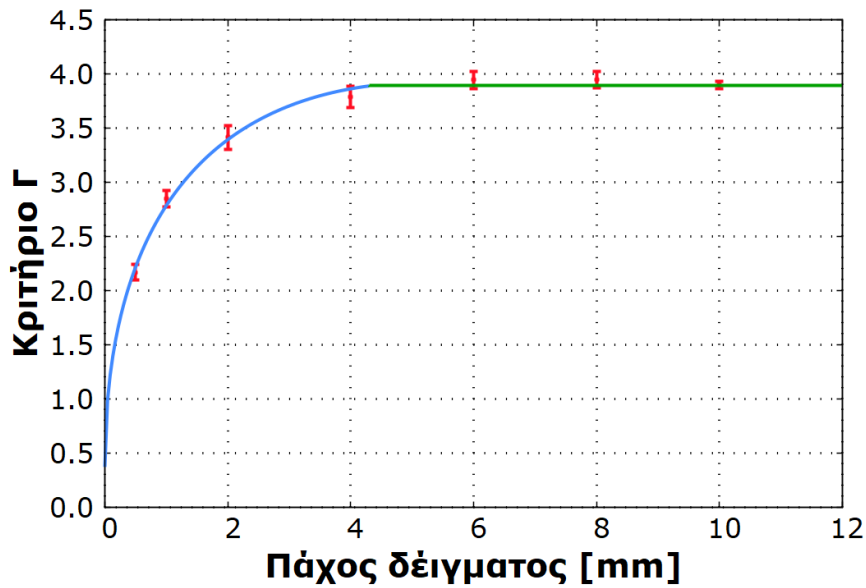
Κριτήριο B	0.5	1	2	4	6	8	10
0.5							
1	13.501						
2	23.523	14.244					
4	36.870	29.626	16.327				
6	51.140	43.522	28.419	10.527			
8	55.036	48.423	34.840	17.917	8.204		
10	115.345	98.424	61.493	31.658	18.762	6.9942	

Πίνακας 4.33: U-test μεταξύ των τιμών του κριτηρίου Γ της κορυφής U-K<sub>α1</sub> από το αρχείο εξόδου του ανιχνευτή απόθεσης ενέργειας για διάφορα πάχη δείγματος

Κριτήριο Γ	0.5	1	2	4	6	8	10
0.5							
1	6.359						
2	9.642	4.275					
4	13.238	7.483	2.592				
6	16.523	9.846	4.002	1.229			
8	16.891	10.049	4.060	1.250	0.001		
10	21.789	12.396	4.348	1.044	0.549	0.570	



Σχήμα 4.41: Συσχέτιση (μη γραμμική) του κριτηρίου B της κορυφής U-K<sub>α1</sub> και του πάχους του δείγματος στο εύρος [0.5,10] mm



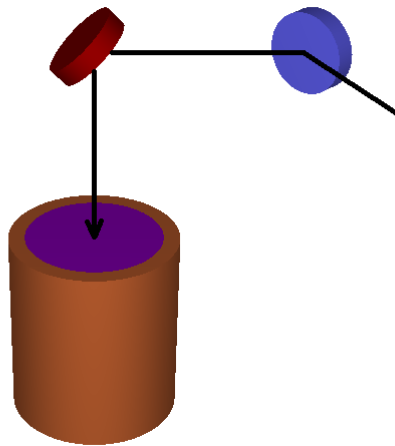
Σχήμα 4.42: Συσχέτιση (μη γραμμική) του κριτηρίου  $\Gamma$  της κορυφής  $U-K_{\alpha 1}$  και του πάχους του δείγματος στο εύρος  $[0.5,6]$  mm (γαλάζιο) και στο εύρος  $[4,10]$  mm (πράσινο).

Ως αποτέλεσμα της σειράς αυτών των προσομοιώσεων έγινε εμφανές ότι η συμπεριφορά του συστήματος παραμένει σχεδόν σταθερή για πάχη δείγματος από 4 mm έως 10 mm. Υπάρχει σαφώς μείωση στις τιμές των κριτηρίων σημαντικότητας A και B της κορυφής  $U-K_{\alpha 1}$ , καθώς μειώνεται το πάχος του δείγματος (πίνακες 4.31 και 4.32), όμως το κριτήριο  $\Gamma$  παραμένει αμετάβλητο (U-test, πίνακας 4.33). Αντίθετα, όταν πρόκειται για δείγματα πιο λεπτά (από 0.5 έως 2 mm) η κατάσταση αλλάζει. Η τιμή του κριτηρίου  $\Gamma$  ελαττώνεται απότομα και το ουράνιο γίνεται πιο δύσκολα ανιχνεύσιμο.

Αυτές οι παρατηρήσεις και τα δύο παραπάνω σχήματα οδηγούν στο συμπέρασμα πως το βέλτιστο πάχος δείγματος για τις συνθήκες υπό τις οποίες πραγματοποιήθηκε η συγκεκριμένη σειρά προσομοιώσεων είναι τα 4 mm. Αυτό το πάχος παρουσιάζει το πλεονέκτημα των ισχυρών χαρακτηριστικών αιχμών σε σύγκριση με το υπόστρωμα, χωρίς να απαιτεί μεγάλο όγκο δείγματος. Βέβαια, η χρήση δειγμάτων μεγαλύτερου πάχους σε κάθε περίπτωση ευνοεί το καθαρό ύψος των χαρακτηριστικών του U, που μπορεί να είναι χρήσιμο, όταν υπάρχουν άλλες παρεμβολές στο φάσμα, όπως χαρακτηριστικές κορυφές από άλλα στοιχεία παραπλήσιου ατομικού αριθμού.

#### 4.3.9 Η επίδραση του φαινομένου της πόλωσης στη γεωμετρία τριών αξόνων

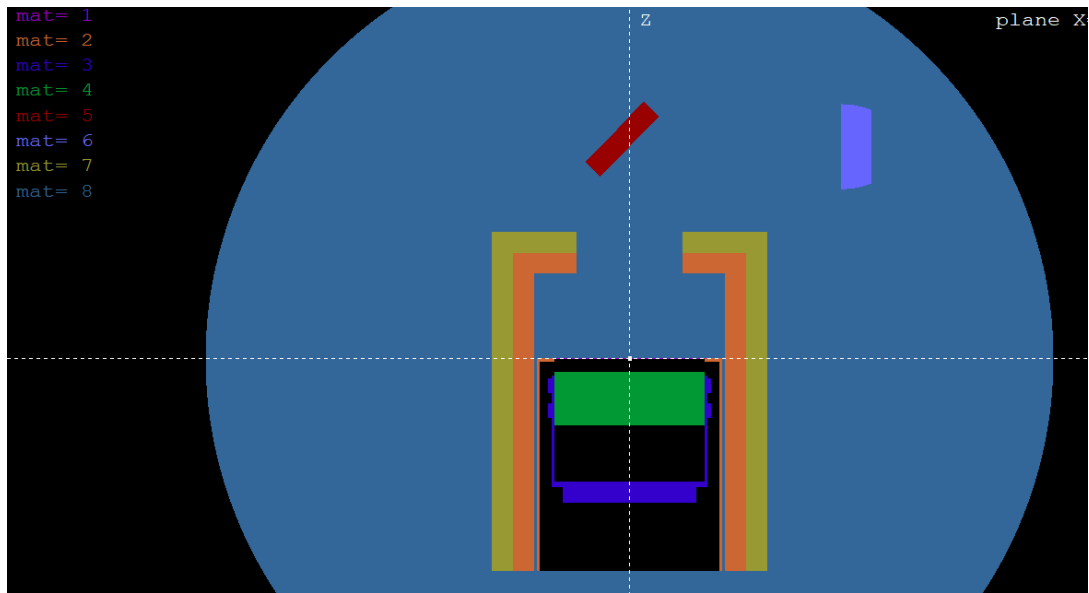
Στα πλαίσια των προσομοιώσεων, επιχειρήθηκε και η επαλήθευση της τεχνικής μείωσης του υποστρώματος μέσω δύο διαδοχικών κατακόρυφων σκεδάσεων σε γεωμετρία τριών αξόνων, που περιγράφηκε στην ενότητα 2.9.6.4. Για την επίτευξη αυτής της διερεύνησης δημιουργήθηκε η γεωμετρία του επόμενου σχήματος.



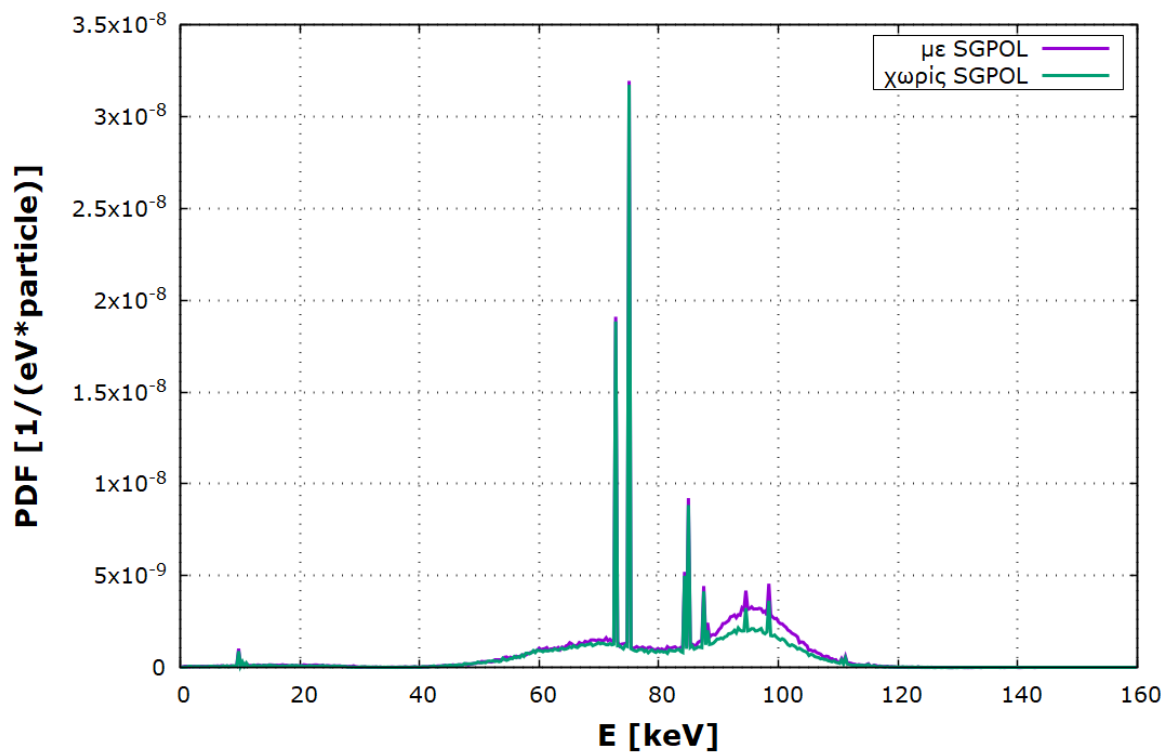
Σχήμα 4.43: Αποτύπωση 3d διάταξης για την προσομοίωση της επίδρασης των φαινομένων πόλωσης με το πρόγραμμα *gview3d.exe*

Το πρόγραμμα PENELOPE προσφέρει στο χρήστη τη δυνατότητα ενεργοποίησης της προσομοίωσης φαινομένων πόλωσης στις αλληλεπιδράσεις σκέδασης των φωτονίων, μέσω της χρήσης της γραμμής SGPOL στο αρχείο εισόδου. Η συγκεκριμένη γραμμή χαρακτηρίζεται από 3 μεταβλητές, τις SP1, SP2 και SP3, οι οποίες αποτελούν τις παραμέτρους Stokes των πρωτογενών φωτονίων και καθορίζουν το βαθμό της γραμμικής πόλωσης στη γωνία των  $45^\circ$ , της κυκλικής πόλωσης και της γραμμικής πόλωσης στη γωνία των  $0^\circ$ , αντίστοιχα. Σύμφωνα με το εγχειρίδιο χρήστη του PENELOPE, τα δευτερογενή φωτόνια εκπέμπονται χωρίς να είναι πολωμένα. Σε περίπτωση μη χρήσης της γραμμής SGPOL, η επίδραση της πόλωσης στις αλληλεπιδράσεις δεν προσομοιώνεται. Για το λόγο αυτό, εκτελέστηκαν προσομοιώσεις τόσο με, όσο και χωρίς τη γραμμή SGPOL, ώστε να συγκριθούν μεταξύ τους και να αποφανθούμε για την αποτελεσματικότητα της μεθόδου. Τα πρωτογενή φωτόνια που χρησιμοποιήθηκαν ορίστηκαν ως μη-πολωμένα.

Στην 3d γεωμετρία που παρουσιάστηκε παραπάνω προστέθηκε, επίσης, ένας κατευθυντής τύπου μάσκας (βλ. κεφάλαιο 2.9.6.1.1) από Pb και Al, τέτοιος ώστε να μην επιτρέπει στα σκεδαζόμενα φωτόνια από το δευτερεύοντα στόχο να ακτινοβολούν απευθείας τον ανιχνευτή, αλλά μόνο μέσω της ακτινοβόλησης του δείγματος που αναλύεται (σχήμα 4.44). Χρησιμοποιήθηκε το δείγμα 2, με υψηλή συγκέντρωση ουρανίου, ώστε να παραχθούν ευδιάκριτες χαρακτηριστικές γραμμές, που διευκολύνουν τη σύγκριση. Ο δευτερεύων στόχος είναι τύπου Barkla, δηλαδή είναι ένας στόχος από υλικό χαμηλού Z (συγκεκριμένα από  $Al_2O_3$ ), που ευνοεί τις μη ελαστικές σκεδάσεις Compton. Η ακτινοβόληση επιλέχθηκε, σε πρώτη φάση, να είναι μονοενεργειακή ενέργειας 160 keV, έτσι ώστε τα σκεδαζόμενα φωτόνια από το στόχο να έχουν αρκετή ενέργεια για τη διέγερση των γραμμών K του ουρανίου (για πρωτογενή φωτόνια ενέργειας  $E_\gamma=160$  keV και γωνίες σκέδασης από  $85^\circ$  έως  $95^\circ$ , τα δευτερογενή έχουν ενέργειες από 119.4 keV έως 124.4 keV). Τα αποτελέσματα των προσομοιώσεων με και χωρίς τη χρήση της SGPOL παρουσιάζονται στο σχήμα 4.45.



Σχήμα 4.44: Αποτύπωση διάταξης για την προσομοίωση της επίδρασης των φαινομένων πόλωσης με χρήση collimator τύπου μάσκας με το πρόγραμμα gview2d.exe, όπου τα υλικά είναι τα εξής: 1-Be, 2-Al, 3-Cu, 4-Ge, 5-SiO<sub>2</sub>-U, 6-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, 7-Pb, 8-Dry air, near sea level.

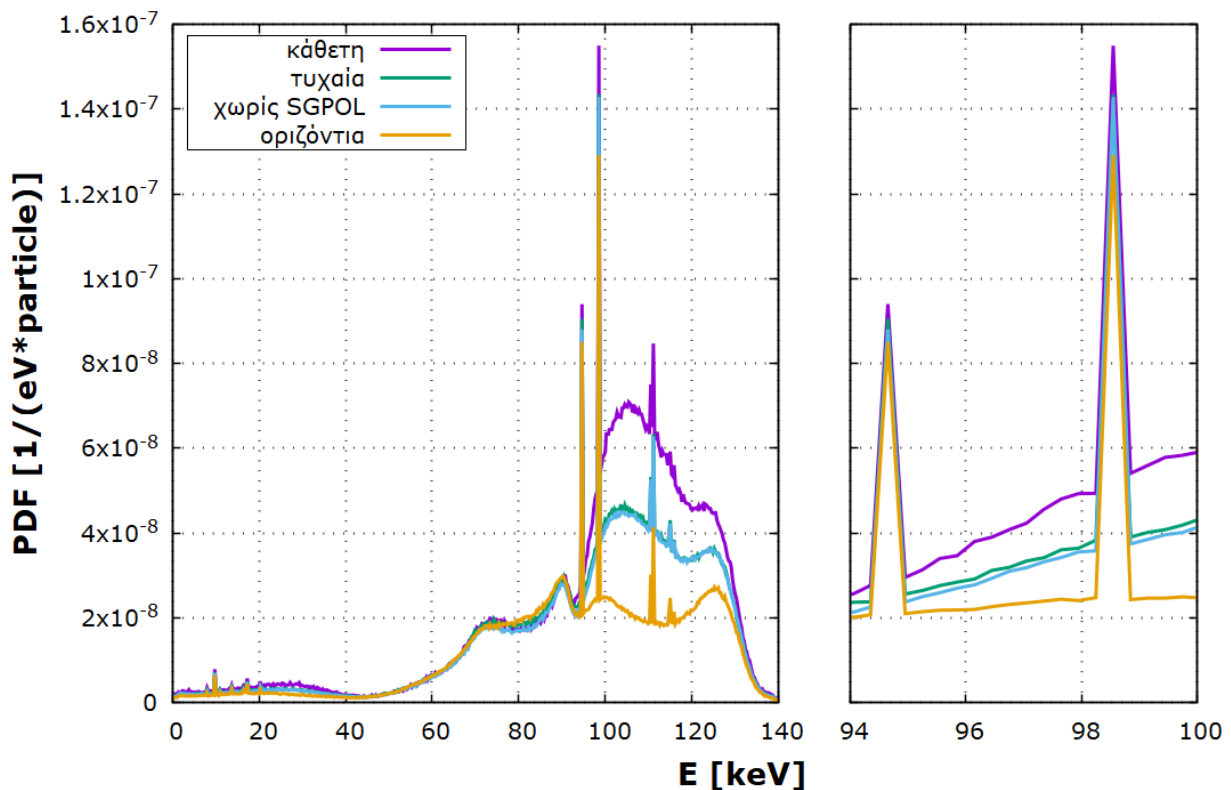


Σχήμα 4.45: Φάσματα εικονικού ανιχνευτή απόδοσης ενέργειας για τις περιπτώσεις ενεργοποίησης ή μη της προσομοίωσης φαινομένων σχετικών με την πόλωση των φωτονίων σε 3d γεωμετρία με χρήση δευτερεύοντος στόχου χαμηλού Z

Θα μπορούσαμε να παρατηρήσουμε ότι με χρήση της γραμμής SGPOL όχι μόνο δε μειώνεται το υπόστρωμα, αλλά αντιθέτως αυξάνεται ελάχιστα. Κάτι τέτοιο δεν μπορεί να ισχύει, καθώς πολλές θεωρητικές και πειραματικές μελέτες συνηγορούν στο αντίθετο ακριβώς. Είναι ένα στοιχείο που θα

πρέπει λοιπόν στο μέλλον να εξετασθεί περαιτέρω, καθώς δεν δίνονται στον κώδικα PENELOPE περισσότερες λεπτομέρειες για την ακριβή χρήση της<sup>8</sup>.

Προκειμένου να εξετασθεί η επίδραση της πόλωσης της ακτινοβολίας λόγω σκέδασης, αποφασίστηκε να διενεργηθούν προσομοιώσεις που παρακάμπτουν το δευτερεύοντα στόχο και έχουν ως διεγείρουσα, μία πολωμένη δέσμη. Τα αποτελέσματα αυτή τη φορά είναι τα αναμενόμενα (σχήμα 4.46). Όταν η πόλωση των πρωτογενών φωτονίων είναι η επιθυμητή, δηλαδή αυτή που επιδιώκεται μέσω της πρώτης σκέδασης στην προηγούμενη περίπτωση (horizontal) το υπόστρωμα στην περιοχή του συνεχούς Compton, λόγω της σκέδασης στο δείγμα, είναι θεαματικά χαμηλότερο σε σχέση με την χρήση μη-πολωμένης ακτινοβολίας. Αντίθετα, όταν τα φωτόνια είναι γραμμικά πολωμένα προς την άλλη διεύθυνση (vertical) το υπόστρωμα αυξάνεται εξίσου σημαντικά, γιατί κανένα από τα σκεδαζόμενα φωτόνια δεν απορροφάται. Οι παραπάνω παρατηρήσεις επιβεβαιώνονται από το U-test (πίνακας 4.35, πίνακας 4.36) και το σχήμα 4.47. Αυτό το αποτέλεσμα δείχνει ότι το πρόβλημα στην προηγούμενη περίπτωση βρίσκεται πιθανότατα στον τρόπο με τον οποίο γίνεται η προσομοίωση της πόλωσης των φωτονίων που παράγονται από τις σκεδάσεις στο δευτερεύοντα στόχο. Στο εγχειρίδιο χρήσης του PENELOPE δεν αναφέρεται ρητά ότι τα φωτόνια αυτά προκύπτουν πολωμένα, σύμφωνα με τους φυσικούς νόμους που διέπουν την αλληλεπίδραση αυτή. Ένας έλεγχος του πηγαίου κώδικα για τη διερεύνηση αυτού είναι απαραίτητος, αλλά ξεφεύγει από τα πλαίσια αυτής της ΔΕ.



Σχήμα 4.46: Φάσματα εικονικού ανιχνευτή απόθεσης ενέργειας για τις περιπτώσεις ενεργοποίησης ή μη της προσομοίωσης φαινομένων σχετικών με την πόλωση των φωτονίων σε γεωμετρία πηγής-δείγματος-ανιχνευτή με γωνία διάταξης 90° και χρήση πολωμένης και μη-πολωμένης διεγείρουσας ακτινοβολίας

<sup>8</sup> Στα πλαίσια της προσπάθειας αντιμετώπισης του προβλήματος αναζητήθηκε βοήθεια από τους συντάκτες του κώδικα PENELOPE, η οποία όμως μέχρι τη συγγραφή του κειμένου της ΔΕ δεν είχε αποδώσει καρπούς.

Πίνακας 4.34: Τιμές των κριτηρίων σημαντικότητας A, B και Γ της κορυφής U-K<sub>α1</sub> από το αρχείο εξόδου του ανιχνευτή απόθεσης ενέργειας, για διαφορετικές καταστάσεις πόλωσης της διεγείρουσας ακτινοβολίας

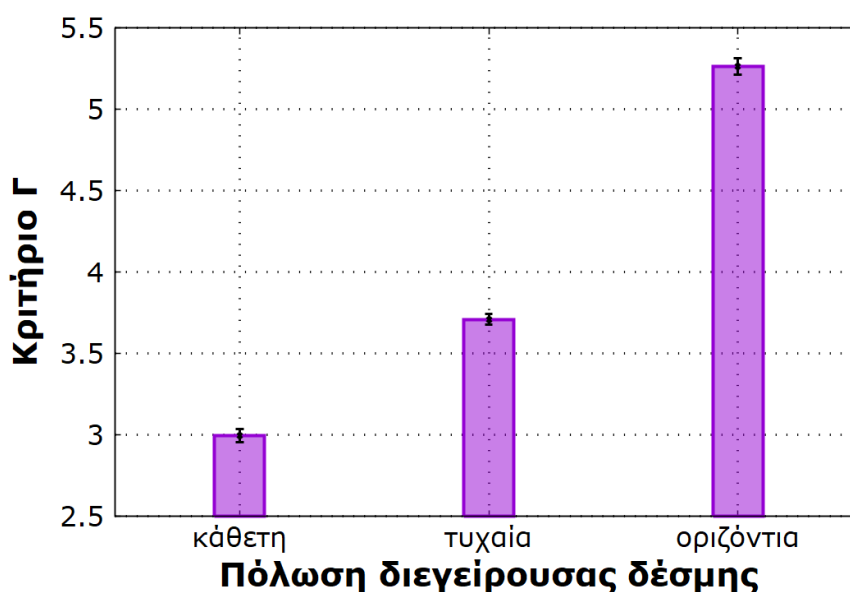
Πόλωση διεγείρουσας δέσμης	Κριτήριο A [1/(eV*particle)]	Κριτήριο B [1/(eV*particle)]	Κριτήριο Γ
κάθετη	1.55e-7 ± 0.83%	1.03e-7 ± 1.34%	3.00 ± 1.31%
τυχαία	1.435e-7 ± 0.51%	1.048e-7 ± 0.74%	3.710 ± 0.86%
οριζόντια	1.291e-7 ± 0.50%	1.046e-7 ± 0.64%	5.264 ± 0.94%

Πίνακας 4.35: U-test μεταξύ των τιμών του κριτηρίου B από το αρχείο εξόδου του ανιχνευτή απόθεσης ενέργειας για διαφορετικές καταστάσεις πόλωσης της διεγείρουσας ακτινοβολίας

Κριτήριο B	κάθετη	τυχαία	οριζόντια
κάθετη			
τυχαία	0.990		
οριζόντια	0.896	0.189	

Πίνακας 4.36: U-test μεταξύ των τιμών του κριτηρίου Γ από το αρχείο εξόδου του ανιχνευτή απόθεσης ενέργειας για διαφορετικές καταστάσεις πόλωσης της διεγείρουσας ακτινοβολίας

Κριτήριο Γ	κάθετη	τυχαία	οριζόντια
κάθετη			
τυχαία	14.136		
οριζόντια	35.806	26.313	



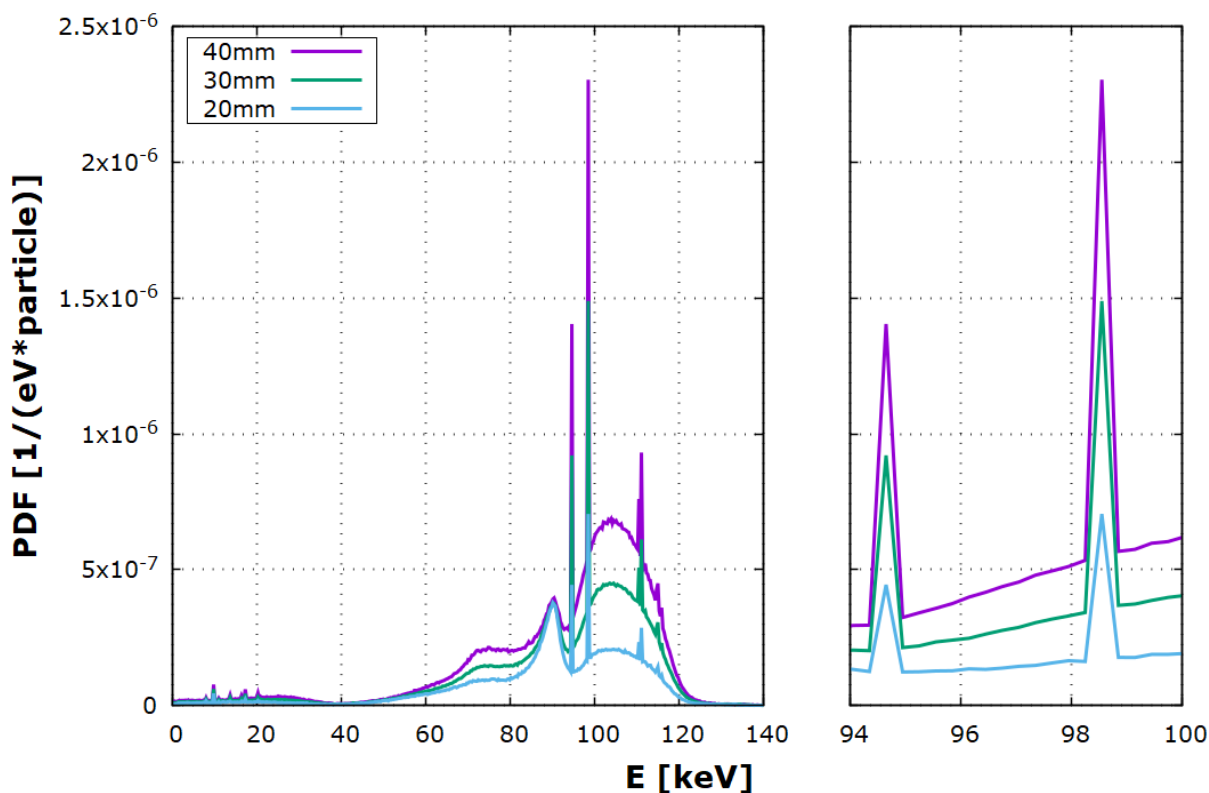
Σχήμα 4.47: Σχηματική απεικόνιση του κριτηρίου Γ για τρεις διαφορετικές καταστάσεις πόλωσης της διεγείρουσας ακτινοβολίας

### 4.3.10 Η επίδραση της διαμέτρου του δείγματος

Η διάμετρος του δείγματος, όπως και το πάχος, εξαρτώνται κυρίως από τη διαθέσιμη ποσότητα δείγματος. Είναι σίγουρα επιθυμητό να χρησιμοποιείται ένα δείγμα μεγάλης διαμέτρου, ώστε να ακτινοβολείται μεγαλύτερος όγκος υλικού (με προϋπόθεση να παραμένει σταθερό το πάχος). Αυτό συμβάλλει στην παρουσία πιο υψηλών χαρακτηριστικών αιχμών των στοιχείων προς ανίχνευση, αλλά και σε πιο αντιπροσωπευτικά αποτελέσματα, ελαττώνοντας την επίδραση οποιασδήποτε ανομοιογένειας στο δείγμα.

Τα αποτελέσματα που ακολουθούν λήφθηκαν από 3 προσομοιώσεις, υπό τις ίδιες συνθήκες, με μόνη διαφορά τη διάμετρο του δείγματος. Αυτή ορίστηκε τόση, ώστε η χρησιμοποιούμενη κωνική δέσμη με ημιγωνία κώνου 5 μοιρών να διεγείρει όλο το στόχο και στις 3 περιπτώσεις. Συγκεκριμένα επιλέχθηκαν διαμέτροι 20 mm, 30 mm και 40 mm. Ως υλικό του δείγματος, που δεν έχει μεγάλη σημασία για την εξαγωγή σχετικών, ποιοτικών συμπερασμάτων, επιλέχθηκε το δείγμα 2 με συγκέντρωση 3931 ppm U. Η μεγάλη αυτή περιεκτικότητα σε U οδηγεί σε ισχυρές χαρακτηριστικές στο φάσμα του εικονικού ανιχνευτή απόθεσης ενέργειας και σε καλύτερη στατιστική σε μικρότερους χρόνους προσομοίωσης.

Στο σχήμα 4.48 που ακολουθεί, φαίνεται πως η διάμετρος του δείγματος επιδρά τόσο στις χαρακτηριστικές κορυφές, όσο και στο υπόστρωμα που οφείλεται στις σκεδάσεις στο υλικό του δείγματος που αποτελείται κατά το μεγαλύτερο μέρος από  $\text{SiO}_2$ . Στη συνέχεια, οι πίνακες 4.37, 4.38 και 4.39 περιέχουν τα αποτελέσματα του U-test και το σχήμα 4.49 απεικονίζει την εξάρτηση του κριτηρίου B της γραμμής U- $K_{\alpha 1}$  από τη διάμετρο του δείγματος.



Σχήμα 4.48: Φάσματα εικονικού ανιχνευτή απόθεσης ενέργειας για τρεις διαφορετικές διαμέτρους του δείγματος και διέγερση με φάσμα 140 keV

Πίνακας 4.37: Τιμές των κριτηρίων σημαντικότητας A, B και Γ της κορυφής U-K<sub>α1</sub> από το αρχείο εξόδου του ανιχνευτή απόδοσης ενέργειας, για δείγματα διαφόρων διαμέτρων

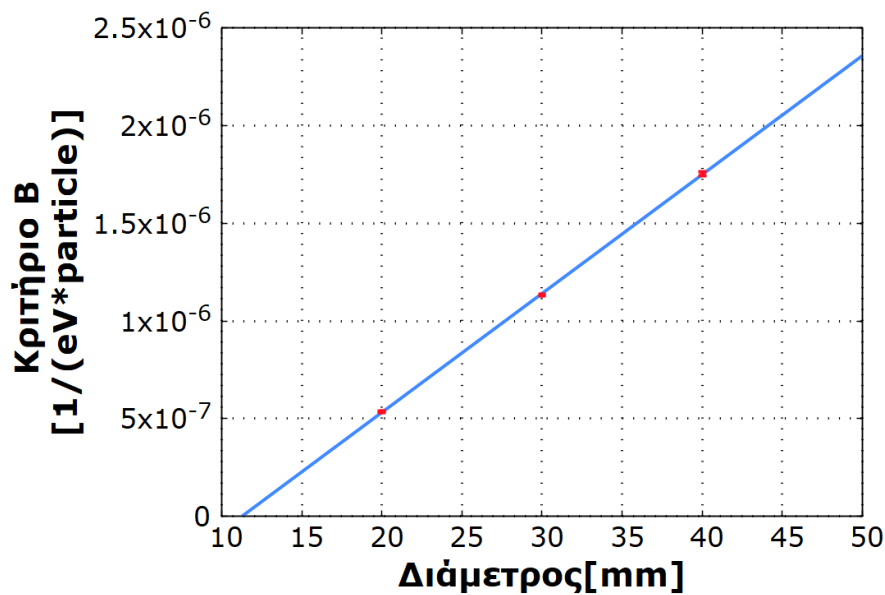
Διάμετρος δείγματος [mm]	Κριτήριο A [1/(eV*particle)]	Κριτήριο B [1/(eV*particle)]	Κριτήριο Γ
20	7.05e-7 ± 0.72%	5.36e-7 ± 1.00%	4.16 ± 1.26%
30	1.489e-6 ± 0.34%	1.133e-6 ± 0.48%	4.19 ± 0.60%
40	2.30e-6 ± 0.45%	1.75e-6 ± 0.62%	4.18 ± 0.78%

Πίνακας 4.38: U-test μεταξύ των τιμών του κριτηρίου B της κορυφής U-K<sub>α1</sub> από το αρχείο εξόδου του ανιχνευτή απόδοσης ενέργειας για δείγματα διαφόρων διαμέτρων

Κριτήριο B	20	30	40
20			
30	78.783		
40	100.448	51.021	

Πίνακας 4.39: U-test μεταξύ των τιμών του κριτηρίου Γ της κορυφής U-K<sub>α1</sub> από το αρχείο εξόδου του ανιχνευτή απόδοσης ενέργειας για δείγματα διαφόρων διαμέτρων

Κριτήριο Γ	20	30	40
20			
30	0.516		
40	0.360	0.186	



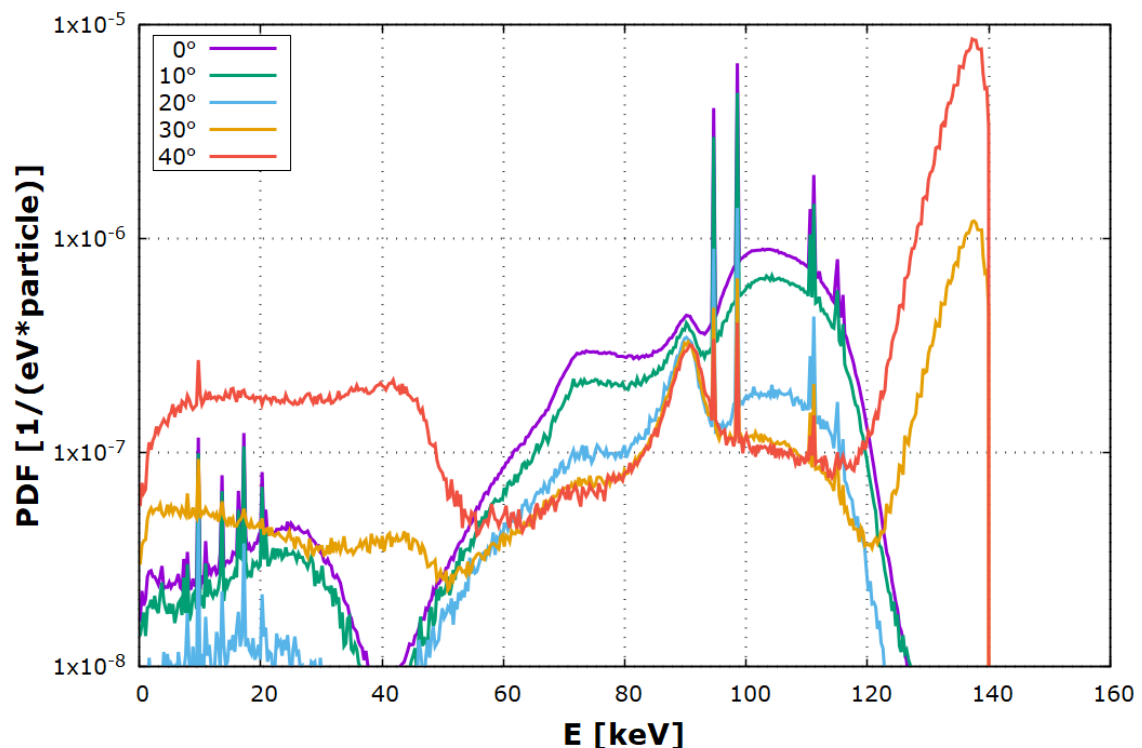
Σχήμα 4.49: Συσχέτιση (γραμμική) του κριτηρίου B της κορυφής U-K<sub>α1</sub> και της διαμέτρου του δείγματος, στο εύρος [20,40] mm



Από τα παραπάνω, γίνεται εμφανές πως παρά τη γραμμική αύξηση της τιμής του κριτηρίου B, η τιμή του κριτηρίου Γ παραμένει σταθερή για τις τρεις διαμέτρους. Αυτό σημαίνει ότι η δυνατότητα ανίχνευσης του ουρανίου παραμένει επίσης σταθερή και δεν επηρεάζεται στατιστικά σημαντικά από τη διάμετρο του δείγματος.

#### 4.3.11 Η επίδραση της κωνικότητας της πρωτογενούς δέσμης

Η κωνικότητα της διεγείρουσας δέσμης είναι μία παράμετρος που επηρεάζει σημαντικά τη μορφή του υποστρώματος στο φάσμα. Όταν η κωνικότητα είναι μικρή, το δείγμα ακτινοβολείται περισσότερο και υπάρχει λιγότερη ακτινοβολία που σκεδάζεται στο χώρο. Όμως η παράμετρος αυτή δεν μπορεί να ρυθμιστεί από το χρήστη. Είναι χαρακτηριστικό της μηχανής παραγωγής ακτίνων-Χ, οπότε η αλλαγή της μπορεί να επιτευχθεί μόνο με αντικατάσταση της μηχανής. Κατά κανόνα, οι μηχανές ακτίνων-Χ έχουν μεγάλη κωνικότητα, της τάξης των 40°, ενώ η μηχανή της βιομηχανικής ραδιογραφίας του ΕΠΤ-ΕΜΠ παράγει δέσμη με ελλειπτική διατομή και άνοιγμα δέσμης 40°x60°. Το πρόγραμμα PENELOPE δε δίνει τη δυνατότητα προσομοίωσης δέσμης με ελλειπτική διατομή, αν και με τροποποίηση του πηγαίου κώδικα `renmain.f` αυτό μπορεί να καταστεί δυνατό. Παρ' όλα αυτά, δεν έγινε η συγκεκριμένη τροποποίηση, καθώς θεωρήθηκε ότι δε θα επηρεάσει σημαντικά τα αποτελέσματα. Στις προσομοιώσεις που έγιναν χρησιμοποιήθηκαν 3 διαφορετικές γωνίες κωνικότητας, 40°, 30°, 20°, 10° και 0° (χρησιμοποιώντας στο αρχείο \*.in ημιγωνίες κώνου 20°, 15°, 10°, 5° και 0°, αντίστοιχα). Η πλήρως εστιασμένη δέσμη είναι μία δέσμη που προσεγγίζει αυτή που προκύπτει από ένα σύγχροτρο. Δεν έγινε χρήση κατευθυντών δέσμης, παρά μόνο σκεδαστών από ξηρό ατμοσφαιρικό αέρα και σκυρόδεμα (βλ. σχήμα 4.25).



Σχήμα 4.50: Φάσματα εικονικού ανιχνευτή απόθεση ενέργειας για διαφορετικές κωνικότητες διεγείρουσας δέσμης και διέγερση με φάσμα 140 keV, σε λογαριθμική κλίμακα

Οι πίνακες 4.41 και 4.42 που ακολουθούν δείχνουν το κατά πόσο οι τιμές των κριτηρίων σημαντικότητας Β και Γ της κορυφής U-K<sub>α1</sub> για τις διάφορες γωνίες κώνου έχουν μεταβληθεί στατιστικά σημαντικά. Η τιμή του κριτηρίου Β παρουσιάζει διαφοροποίηση με επίπεδο εμπιστοσύνης 99% σε κάθε ζεύγος γωνιών οι οποίες προσομοιώθηκαν. Αντίθετα, η τιμή του κριτηρίου Γ παραμένει στατιστικά ίδια για ένα ζεύγος γωνιών, τις 0° και 20°, το οποίο οφείλεται στην παρουσία ακρότατου μεταξύ των δύο σημείων και συγκεκριμένα στις 10°, όπως φαίνεται στο σχήμα 4.52. Οι συναρτήσεις που χρησιμοποιήθηκαν για την προσέγγιση των πειραματικών σημείων, μαζί με το συντελεστή πολλαπλού προσδιορισμού, δίνονται σε πίνακες στο Παράρτημα ΣΤ.

Πίνακας 4.40: Τιμές των κριτηρίων σημαντικότητας Α, Β και Γ της κορυφής U-K<sub>α1</sub> από το αρχείο εξόδου του ανιχνευτή απόθεσης ενέργειας, για διάφορες κωνικότητες δέσμης

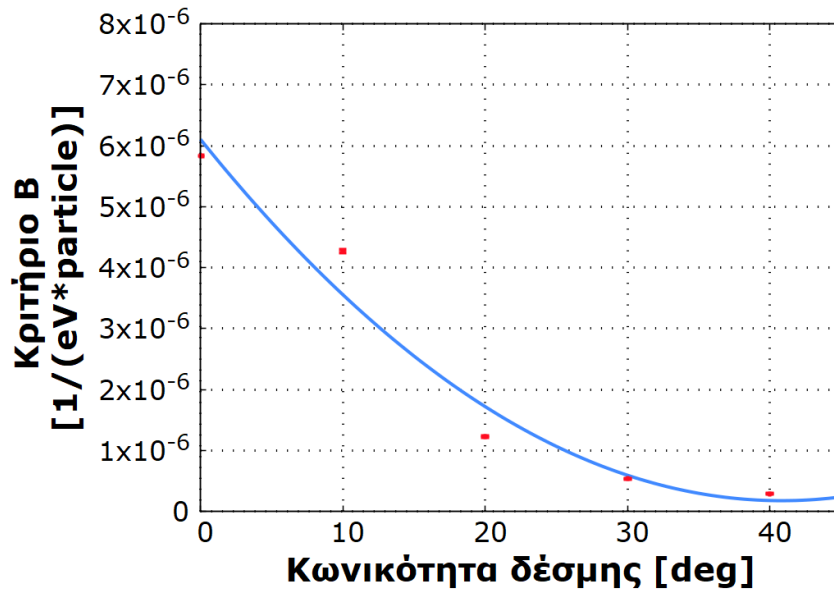
Κωνικότητα δέσμης [deg]	Κριτήριο Α [1/(eV*particle)]	Κριτήριο Β [1/(eV*particle)]	Κριτήριο Γ -
0°	6.60e-6 ± 0.17%	5.83e-6 ± 0.20%	8.59 ± 0.39%
10°	4.80e-6 ± 0.52%	4.27e-6 ± 0.60%	9.1 ± 1.23%
20°	1.39e-6 ± 1.30%	1.23e-6 ± 1.52%	8.4 ± 2.96%
30°	6.53e-7 ± 1.23%	5.35e-7 ± 1.57%	5.5 ± 2.38%
40°	4.1e-7 ± 2.61 %	2.9e-7 ± 3.88%	3.6 ± 4.35%

Πίνακας 4.41: U-test μεταξύ των τιμών του κριτηρίου Β της κορυφής U-K<sub>α1</sub> από το αρχείο εξόδου του ανιχνευτή απόθεσης ενέργειας για διάφορες κωνικότητες δέσμης

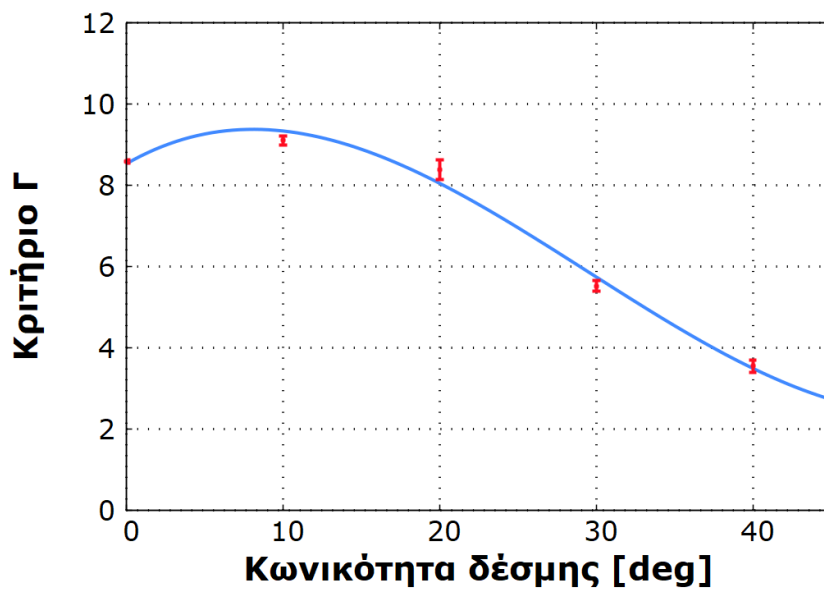
Κριτήριο Β	0°	10°	20°	30°	40°
0°					
10°	55.330				
20°	210.115	96.183			
30°	370.695	138.648	33.970		
40°	342.56	142.167	43.023	17.293	

Πίνακας 4.42: U-test μεταξύ των τιμών του κριτηρίου Γ της κορυφής U-K<sub>α1</sub> από το αρχείο εξόδου του ανιχνευτή απόθεσης ενέργειας για διάφορες κωνικότητες δέσμης

Κριτήριο Γ	0°	10°	20°	30°	40°
0°					
10°	4.497				
20°	0.794	2.660			
30°	22.564	20.797	10.216		
40°	31.822	29.145	16.549	9.690	



Σχήμα 4.51: Συσχέτιση (μη γραμμική) του κριτηρίου B της κορυφής U-K<sub>α1</sub> και της κωνικότητας της διεγείρουσας δέσμης, στο εύρος [0,40°]



Σχήμα 4.52: Συσχέτιση (μη γραμμική) του κριτηρίου Γ της κορυφής U-K<sub>α1</sub> και της κωνικότητας της διεγείρουσας δέσμης, στο εύρος [0,40°]

Η κωνικότητα της δέσμης καθορίζει σε μεγάλο βαθμό την ανιχνευσιμότητα του ουρανού, καθώς όσο μεγαλώνει η κωνικότητα, αυξάνονται οι σκεδάσεις στο χώρο γύρω από το δείγμα που ακτινοβολείται, ενώ υπάρχει και η πιθανότητα απευθείας ακτινοβολήσης του ανιχνευτή. Παρ' όλα αυτά, όπως φάνηκε, η μικρότερη γωνία δεν επιφέρει απαραίτητα το καλύτερο αποτέλεσμα, καθώς στις προσομοιώσεις προέκυψε υψηλότερη τιμή του κριτηρίου σημαντικότητας Γ για τη γωνία 10°.

Σίγουρα δεν είναι εφικτό να αντικαθιστάται η μηχανή ακτίνων-X, με γνώμονα την κωνικότητα της δέσμης. Όμως, αυτό το αποτέλεσμα βοηθά στην εξαγωγή ενός χρήσιμου συμπεράσματος σε σχέση με τους κατευθυντές δέσμης. Υποθέτοντας έναν αποδοτικό σχεδιασμό με τον οποίο εξασφαλίζεται πλήρης αποκοπή φωτονίων από τον κατευθυντή, υπολογίζεται η βέλτιστη γωνία κωνικότητας που μπορεί να έχει η δέσμη που εξέρχεται από την οπή του κατευθυντή. Στη

συγκεκριμένη προσομοίωση της διάταξης, η γωνία προσδιορίστηκε στις 10°. Για παράδειγμα, ένας κατευθυντής δέσμης μήκους 100 mm θα απαιτούσε μία σπή διαμέτρου περίπου 17.4 mm, ώστε να επιτευχθεί μέγιστη ανιχνευσιμότητα σε αυτή την περίπτωση.

Τέλος, η ύπαρξη μίας μεγαλύτερης κωνικότητας όπως οι 10°, παρέχει ένα ακόμη πλεονέκτημα σε σχέση με τη στενή δέσμη των 0°. Στις εφαρμογές XRF ο στόχος είναι συνήθως ο προσδιορισμός των στοιχείων όλου του δείγματος και όχι μόνο ενός τμήματος αυτού. Ο συνδυασμός ανομοιογένειας του δείγματος και πολύ στενής δέσμης μπορεί να οδηγήσει σε παραπλανητικά συμπεράσματα.

## 4.4 Προσομοίωση της διάταξης XRF για την ανίχνευση σπανίων γαιών

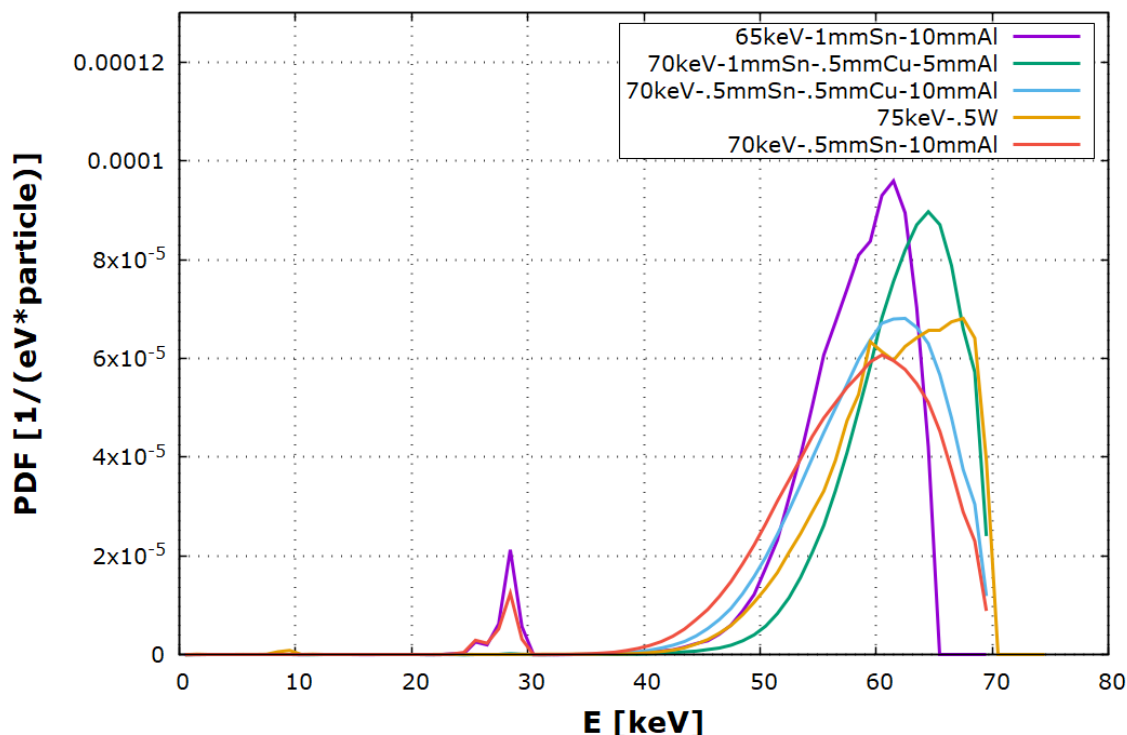
### 4.4.1 Η διεγείρουσα ακτινοβολία

Για τις σπάνιες γαίες η βέλτιστη διέγερση, όπως είναι προφανές, θα πρέπει να είναι διαφορετική από τη διέγερση του ουρανίου. Τα στοιχεία προς ανίχνευση που περιέχονται στο δείγμα, έχουν μικρότερο ατομικό αριθμό από το ουράνιο και για αυτό παρουσιάζουν τις αιχμές απορρόφησης K σε χαμηλότερα ενεργειακά επίπεδα. Όπως αναλύθηκε στην ενότητα 4.2.4.2, το δείγμα το οποίο πρόκειται να εξετασθεί περιέχει τις εξής σπάνιες γαίες: ύτριο (Y), λανθάνιο (La), δημήτριο (Ce) και νεοδύμιο (Nd) με K-edges στα 17.037, 38.894, 40.410 και 43.538 keV. Προκειμένου να εκπεμφθούν οι K γραμμές όλων των παραπάνω στοιχείων, είναι απαραίτητη η ακτινοβολήση του δείγματος με φωτόνια ενέργειας μεγαλύτερης των 43.538 keV.

Όπως και στην περίπτωση του ουρανίου, η διέγερση έγινε τόσο με μονοενεργειακές δέσμες, όσο και με φιλτραρισμένα φάσματα. Τα φίλτρα που χρησιμοποιήθηκαν κυρίως αποτελούνται από Sn, Cu και Al. Επίσης προσομοιώθηκαν και φίλτρα W τα οποία λόγω της ανόδου της μηχανής ακτίνων-X από W, συμβάλλουν στη δημιουργία μίας σχεδόν μονοενεργειακής διέγερσης. Στο σχήμα 4.53 παρουσιάζονται τα φάσματα που δημιουργήθηκαν μετά την προσομοίωση των φίλτρων με τη βοήθεια του κώδικα PENELOPE, χρησιμοποιώντας όμως έτοιμα φάσματα εξόδου για τη μηχανή ακτίνων-X, με άνοδο από W για υψηλές τάσεις 65, 70 και 75 keV, από το πρόγραμμα SpekCalc. Τα φίλτρα από Sn έχουν ως μειονέκτημα την δημιουργία χαρακτηριστικών ακτίνων K του Sn στο φάσμα διέγερσης ( $K_{\alpha 1}$  @ 25.271 keV,  $K_{\alpha 2}$  @ 25.044 keV και  $K_{\beta 1}$  @ 28.486 keV), οι οποίες παρ' όλα αυτά διεγείρουν με καλύτερο τρόπο τα άτομα του Y και δε παρουσιάζουν παρεμβολές στην ανίχνευση των χαρακτηριστικών γραμμών των σπανίων γαιών που περιέχονται στο δείγμα. Η χρήση Cu για την απορρόφηση των χαρακτηριστικών του Sn φαίνεται πως είναι πολύ αποδοτική, στο σχήμα 4.53. Από τα παρακάτω φάσματα, εκ πρώτης όψεως, καλύτερα αποτελέσματα αναμένεται ότι θα επιφέρει το φάσμα 2, λόγω της σχεδόν μονοενεργειακής μορφής του και της απουσίας φωτονίων στις ενέργειες έως 45 keV. Όμως θα γίνει μία διερεύνηση μέσω προσομοίωσης (ενότητα 4.4.4), ώστε να διαπιστωθεί αν ο ισχυρισμός αυτός είναι αληθής ή όχι.

Πίνακας 4.43: Φάσματα για τη διέγερση δειγμάτων REE

Φάσμα	Μέγιστη ενέργεια		Φίλτρα		
	[keV]	W [mm]	Sn [mm]	Cu [mm]	Al [mm]
1	65	0	1	0	10
2	70	0	1	0.5	5
3	70	0	0.5	0.5	10
4	70	0	0.5	0	10
5	75	0.5	0	0	0

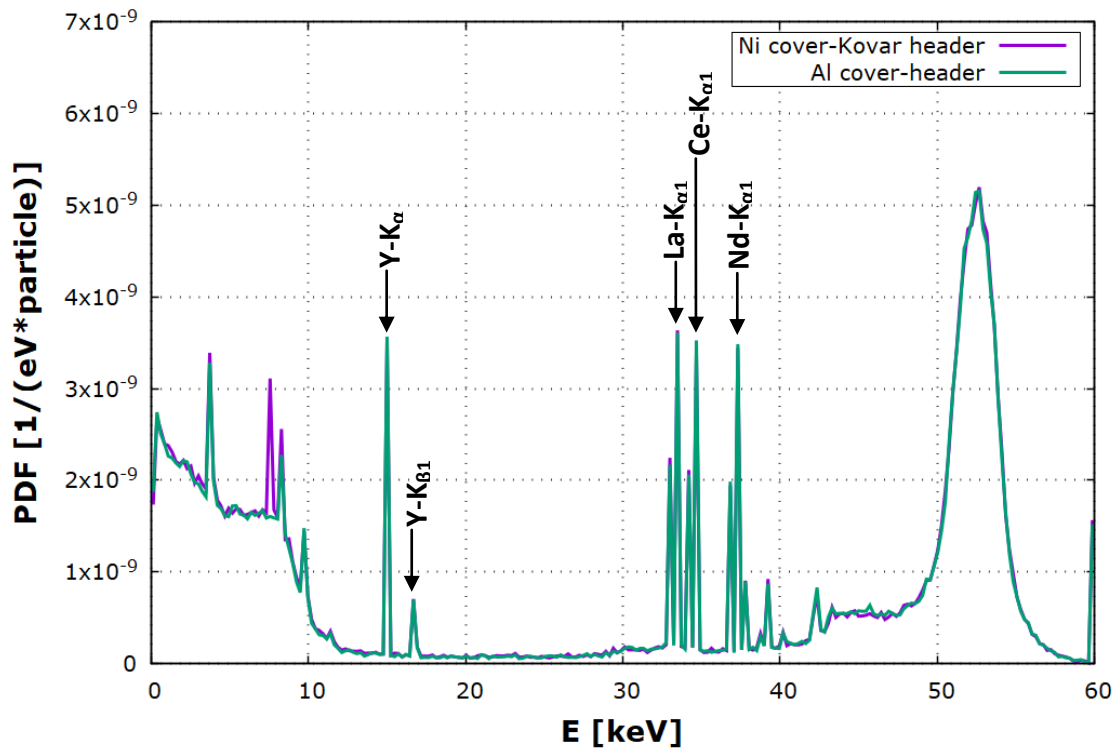


Σχήμα 4.53: Φάσματα για τη διέγερση δειγμάτων REE που προέκυψαν από την προσομοίωση φίλτρων με το PENELOPE, με χρήση έτοιμων αρχικών φασμάτων μηχανής ακτίνων-X, ανόδου W και YT 65 kV, 70 kV και 75 kV

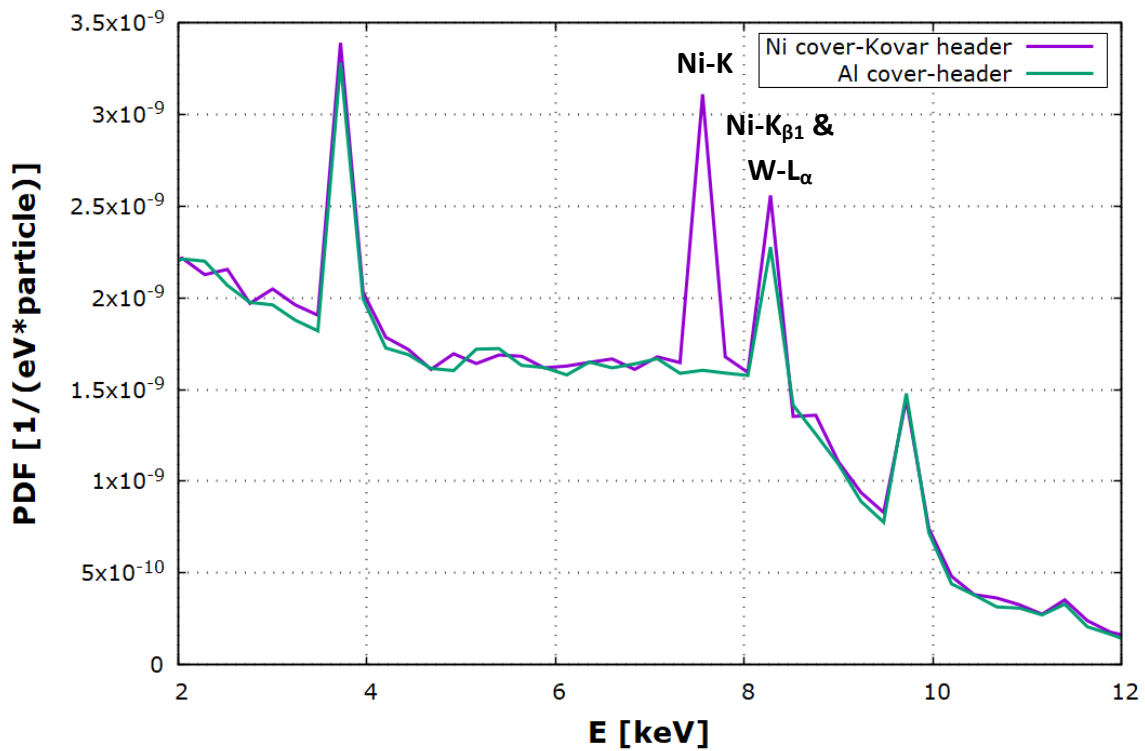
#### 4.4.2 Η επίδραση των υλικών κατασκευής του περιβλήματος

Ο ανιχνευτής Si-PIN της εταιρείας AMPTEK διαθέτει περίβλημα από Ni και κράμα Kovar (Fe-Ni-Co). Στην ενότητα 4.2.2, έγινε αναφορά στους λόγους για τους οποίους είναι επιθυμητή η αντικατάσταση κατά την προσομοίωση του περιβλήματος με καθαρό Al. Το σχήμα 4.54 παρουσιάζει τα φάσματα του ανιχνευτή για τα δύο περιβλήματα. Οι μόνες διαφορές είναι η χαρακτηριστική ακτίνα  $K_{\alpha}$  του Ni περίπου στα 7.5 keV και μία μικρή ενίσχυση της κορυφής  $L_{\alpha}$  του W, λόγω σύμπτωσης με τη γραμμή Ni- $K_{\beta 1}$  (σχήμα 4.55). Ο σίδηρος και το κοβάλτιο που περιέχονται στο καπάκι του ανιχνευτή δεν ανιχνεύονται, καθώς υπάρχει ένα στρώμα αλουμινίου που εμποδίζει τις χαρακτηριστικές τους ακτίνες να φτάσουν στον κρύσταλλο πυριτίου.

Όπως γίνεται εμφανές, η επίδραση των υλικών του περιβλήματος είναι περιορισμένη στο φάσμα του εικονικού ανιχνευτή. Επιπρόσθετα, οι κορυφές που παρουσιάζονται βρίσκονται σε μία περιοχή ενεργειών, όπου δεν υπάρχουν χαρακτηριστικές ακτίνες των στοιχείων που ενδιαφέρουν στις συγκεκριμένες εφαρμογές. Για τους λόγους αυτούς και για την επίτευξη της σχετικής επιτάχυνσης της υπολογιστικής διαδικασίας, στο εξής θα χρησιμοποιείται το μοντέλο του ανιχνευτή με περίβλημα από Al.



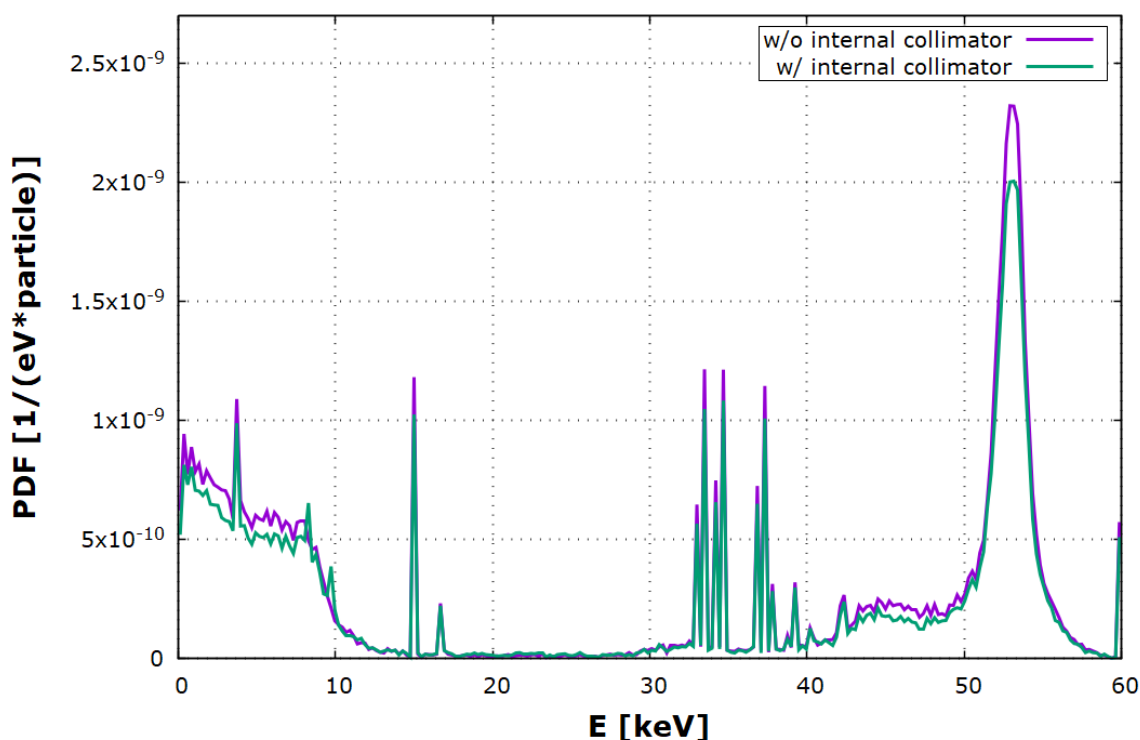
Σχήμα 4.54: Σύγκριση φασμάτων εικονικού ανιχνευτή απόθησης ενέργειας, με μονοενεργειακή διέγερση 65 keV, για το ακριβέστερο μοντέλο του ανιχνευτή (περίβλημα από Ni και Kovar) και για το πιο απλουστευμένο, αλλά ταχύτερο μοντέλο (περίβλημα από Al)



Σχήμα 4.55: Λεπτομέρεια του παραπάνω διαγράμματος, στην ενεργειακή περιοχή από 2 έως 12 keV

### 4.4.3 Η επίδραση του εσωτερικού κατευθυντή δέσμης

Στην ενότητα 4.2.2, έγινε μία αναφορά στον εσωτερικό κατευθυντή δέσμης του ανιχνευτή Si της εταιρίας AMPTEK. Εξετάστηκε, λοιπόν, η επίδραση του κατευθυντή στα αποτελέσματα των προσομοιώσεων, με σκοπό την επιβεβαίωση της άποψης ότι η αφαίρεσή του, θα οδηγήσει στα ίδια αποτελέσματα, αν όχι σε ελάχιστα μεγαλύτερες ροές φωτονίων. Πράγματι, τα φάσματα του ανιχνευτή φαίνονται στο σχήμα 4.56. Είναι εμφανές ότι το πλήθος των γεγονότων με τον εσωτερικό κατευθυντή είναι μειωμένο, με εξαίρεση τις ενέργειες 8.3 keV και 9.7 keV, στις οποίες υπάρχουν δύο μικρές κορυφές που οφείλονται στις χαρακτηριστικές ακτίνες της σειράς L του βολφραμίου, που αποτελεί το κύριο υλικό κατασκευής του κατευθυντή.



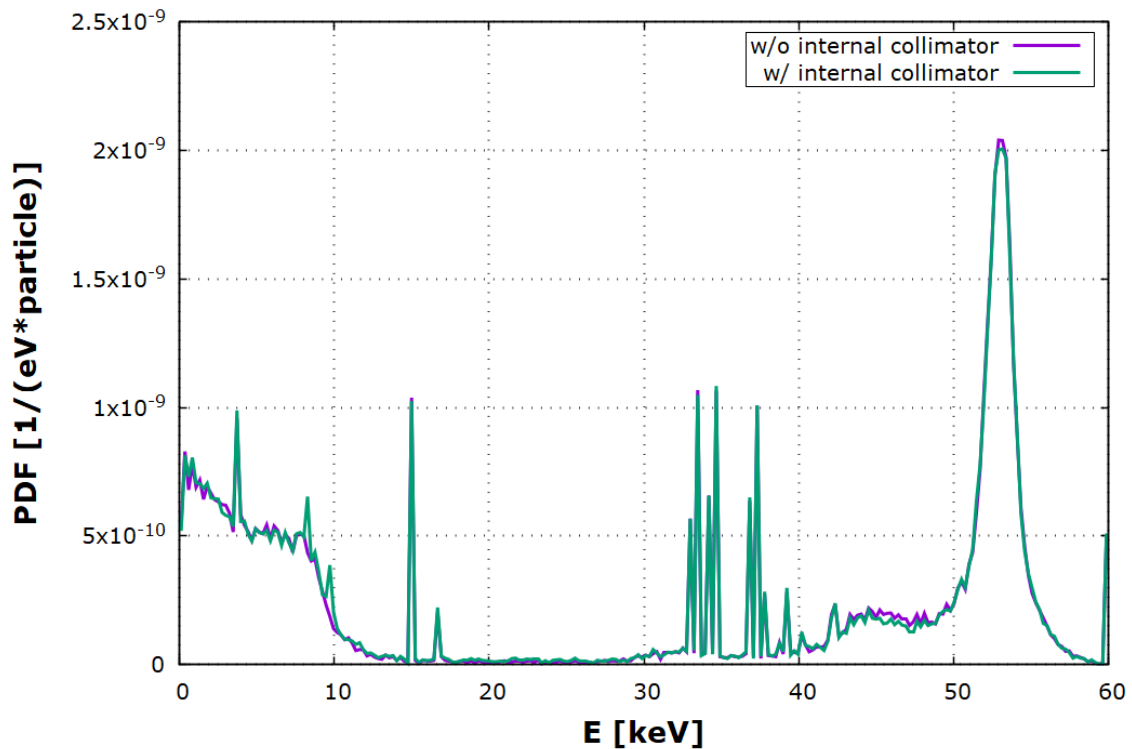
Σχήμα 4.56: Σύγκριση φασμάτων εικονικού ανιχνευτή απόθρεσης ενέργειας, με μονοενεργειακή διέγερση 65 keV, για το μοντέλο του ανιχνευτή με χρήση εσωτερικού κατευθυντή από W και για το απλουστευμένο μοντέλο χωρίς εσωτερικό κατευθυντή

Μία κανονικοποίηση των φασμάτων ως προς το συνολικό αριθμό γεγονότων (counts), εξαιρουμένων των δύο κορυφών λόγω του W αναμένεται να δώσει δύο όμοια φάσματα, στα όρια της στατιστικής αβεβαιότητας (σχήμα 4.57). Η αβεβαιότητα στη συγκεκριμένη περίπτωση είναι σχετικά μεγάλη, λόγω της χαμηλής απόδοσης του πολύ μικρών διαστάσεων ανιχνευτή και, συγκεκριμένα, υπάρχει μία αβεβαιότητα σε επίπεδο 1σ της τάξης του 4% στις χαρακτηριστικές αιχμές  $K_{\alpha 1}$  και της τάξης του 5% στις αιχμές  $K_{\alpha 2}$  των σπάνιων γαίων.

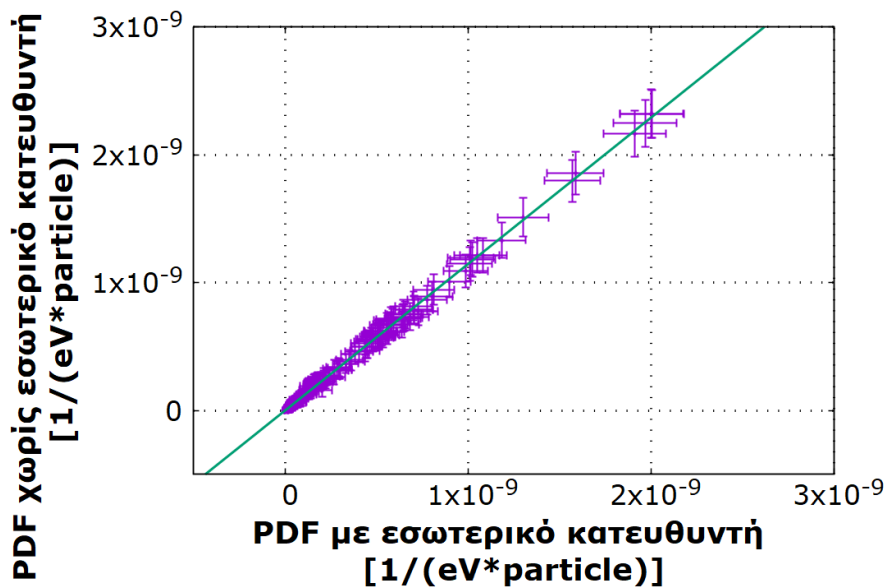
Το σχήμα 4.58 επιβεβαιώνει την υπόθεση της αύξησης των καταμετρούμενων φωτονίων στον ανιχνευτή, με ένα σταθερό συντελεστή αναλογίας μάλιστα. Η εξάρτηση μεταξύ των γεγονότων σε κάθε ενεργειακό παράθυρο για τις προσομοιώσεις με ή χωρίς εσωτερικό κατευθυντή είναι γραμμική. Για τη γραμμική παρεμβολή του σχήματος δε λήφθηκαν υπόψη τα δύο ενεργειακά



παράθυρα ενέργειας 8.28 keV και 9.72 keV, στα οποία σχηματίζονται οι κορυφές λόγω της χαρακτηριστικής ακτινοβολίας W-L $\alpha$  και W-L $\beta$ , αντίστοιχα.



Σχήμα 4.57: Σύγκριση φασμάτων εικονικού ανιχνευτή απόθεσης ενέργειας, με μονοενεργειακή διέγερση 65 keV, για το μοντέλο του ανιχνευτή με χρήση εσωτερικού κατευθυντή από W και για το απλουστευμένο μοντέλο χωρίς εσωτερικό κατευθυντή, με εξίσωση των συνολικών counts εξαιρουμένων των κορυφών του W



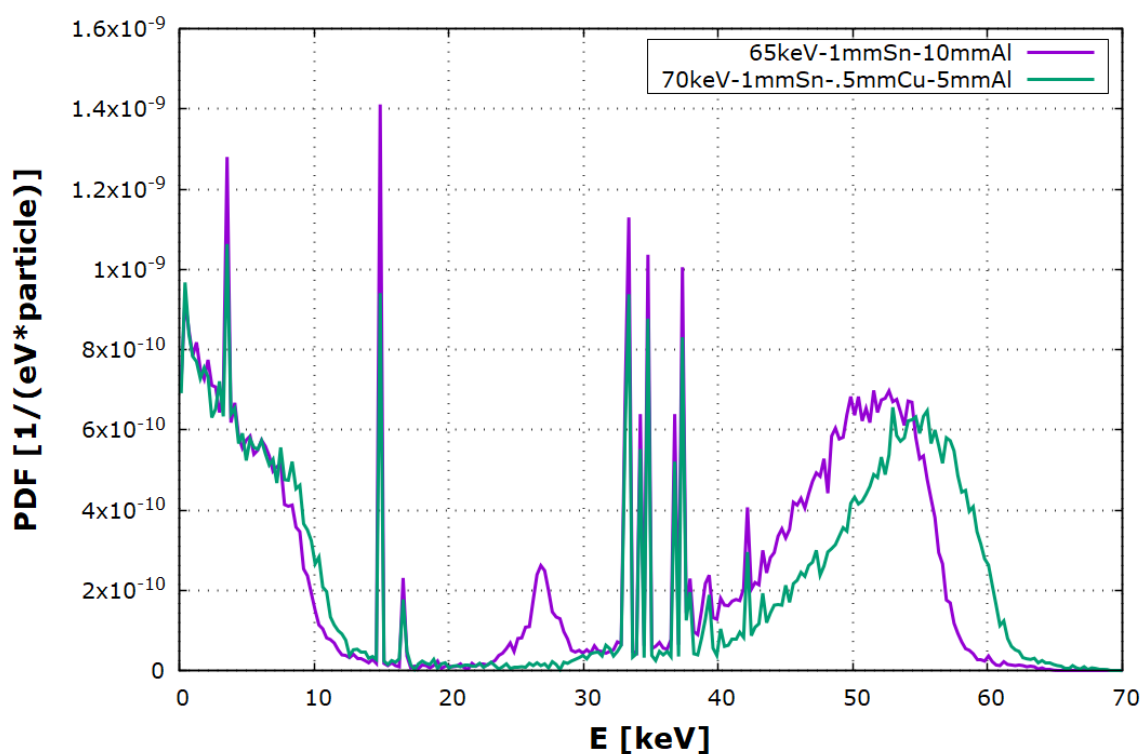
Σχήμα 4.58: Γραμμική συσχέτιση της συνάρτησης πυκνότητας πιθανότητας (pdf) ανίχνευσης για τις προσομοιώσεις χωρίς εσωτερικό κατευθυντή από W ως προς την αντίστοιχη συνάρτηση για τις προσομοιώσεις με εσωτερικό κατευθυντή, σε κάθε ενεργειακό παράθυρο (εκτός W-L).

#### 4.4.4 Ακτινοβόληση με διαφορετικά φάσματα

Από τα φάσματα που παρουσιάστηκαν στην ενότητα 4.4.1 παραπάνω, επιλέχθηκαν δύο για την ακτινοβόληση του δείγματος σπανίων γαιών και τη σύγκριση των αποτελεσμάτων τους. Χρησιμοποιήθηκαν ένα φάσμα με έντονες χαρακτηριστικές ακτίνες Sn και ένα στο οποίο οι συγκεκριμένες ακτίνες δεν υπάρχουν σε σημαντικό μέγεθος. Τα φάσματα αυτά παρουσιάζονται στον Πίνακα 4.44.

Πίνακας 4.44: Χρησιμοποιούμενα φάσματα διέγερσης του δείγματος RE1

Φάσμα	Μέγιστη ενέργεια		Φίλτρα		
	[keV]	Sn [mm]	Cu [mm]	Al [mm]	
1	65	1	0	10	
2	70	1	0.5	5	



Σχήμα 4.59: Φάσματα εικονικού ανιχνευτή απόθεσης ενέργειας για διαφορετικές πολυενεργειακές διεγέρσεις 65 και 70 keV

Τα δύο χρησιμοποιούμενα φάσματα υπερέχουν ή υστερούν σε διαφορετικούς τομείς και η επιλογή χρήσης τους τελικά εξαρτάται από την εφαρμογή. Όπως φαίνεται στο σχήμα 4.59, το φάσμα των 65 keV δημιουργεί πιο ισχυρή διέγερση των στοιχείων ενδιαφέροντος και συνεπώς συμβάλει σε ισχυρότερες χαρακτηριστικές ακτίνες στο φάσμα του ανιχνευτή. Ιδιαίτερα η κορυφές του υτρίου είναι σημαντικά ενισχυμένες, κυρίως λόγω της διέγερσης με την ισχυρή χαρακτηριστική ακτινοβολία του Sn, που περιέχεται στα φίλτρα.

Από την άλλη πλευρά, το φάσμα των 70 keV, αν και δεν διεγείρει τόσο έντονα τις σπάνιες γαίες του δείγματος, επιτυγχάνει μικρότερο background στην περιοχή των ενεργειακά υψηλότερων χαρακτηριστικών κορυφών. Επιπρόσθετα, δε διαθέτει την κορυφή λόγω Sn στην περιοχή 25-29 keV,

παρεμβολή που, ενώ για τα στοιχεία σπανίων γαιών δεν ενοχλεί, σε άλλες εφαρμογές με χρήση δειγμάτων που περιέχουν και άλλα στοιχεία (όπως για παράδειγμα το ιώδιο), θα μπορούσε να αποτελέσει σημαντικό πρόβλημα.

Στους πίνακες 4.45 και 4.46 φαίνονται τα αποτελέσματα του U-test για τα 4 στοιχεία που είναι επιθυμητό να ανιχνευθούν. Τα παρακάτω στοιχεία στηρίχθηκαν στις χαρακτηριστικές ακτίνες της σειράς  $K_{\alpha 1}$  των στοιχείων, με εξαίρεση το ύτριο, του οποίου οι γραμμές  $K_{\alpha 1}$  και  $K_{\alpha 2}$  καταγράφονται μαζί στο ίδιο ενεργειακό παράθυρο (energy bin) του ανιχνευτή. Αυτό συμβαίνει, διότι το ενεργειακό παράθυρο του ανιχνευτή στη συγκεκριμένη προσομοίωση έχει οριστεί στα 284 eV (71 keV καταναμημένα σε 250 ενεργειακά παράθυρα), ενώ οι δύο χαρακτηριστικές ακτίνες διαφέρουν μόνο κατά 75 eV.

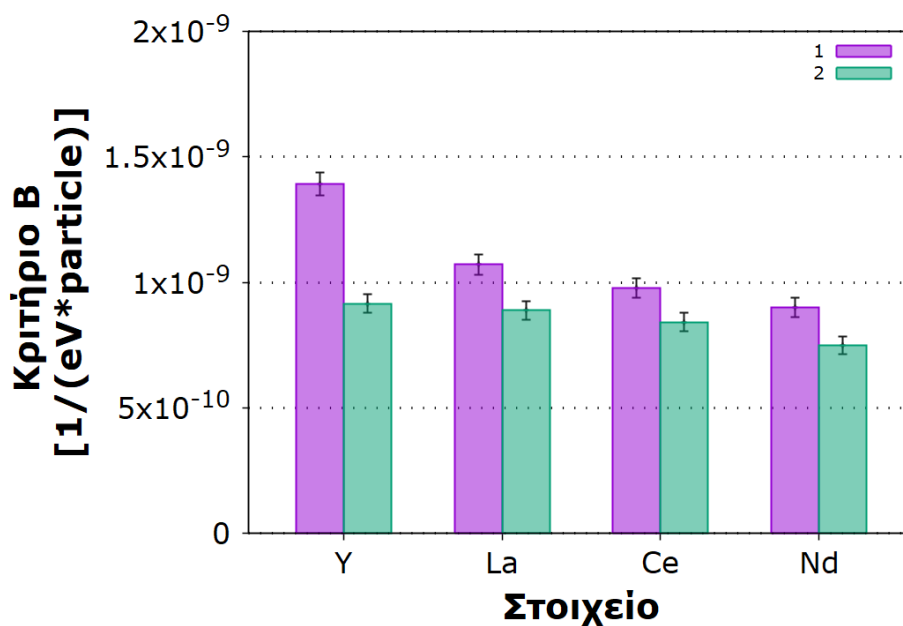
Η τιμή του κριτηρίου σημαντικότητας B των κορυφών  $K_{\alpha 1}$  των στοιχείων με βάση τα αποτελέσματα του U-test (πίνακας 4.45, σχήμα 4.60) είναι μικρότερη όταν χρησιμοποιείται το φάσμα 2 με μέγιστη ενέργεια 70keV. Αντίθετα, η τιμή του κριτηρίου Γ είναι ίδια στατιστικά για τις κορυφές των La, Ce και Nd, με βεβαιότητα της τάξης του 95%. Μόνο στην περίπτωση του Y, που κατά τα φαινόμενα ο λόγος είναι αυξημένος όταν υπάρχει η επίδραση των χαρακτηριστικών του Y στο διεγείρον φάσμα (φάσμα 1), το U-test δεν μπορεί να αποφανθεί με βεβαιότητα, αν αυτή η μεταβολή είναι όντως σημαντική ή οφείλεται σε στατιστικό θόρυβο. Για να γίνει αυτό απαιτείται συνέχιση των προσομοιώσεων για τη μείωση των σφαλμάτων των τιμών του κριτηρίου Γ, που μετά από  $2.5 \times 10^9$  επαναλήψεις έχουν αβεβαιότητες έως και 20%. Οι υψηλές αβεβαιότητες είναι βέβαια απόρροια και του πολύ χαμηλού υποστρώματος, που δεν επιτρέπει τη δημιουργία καλής στατιστικής στα ενεργειακά παράθυρα εκατέρωθεν της κορυφής  $K_{\alpha}$  του Y. Στη συγκεκριμένη περίπτωση θα πρέπει να εμπιστευτούμε τα αποτελέσματα του U-test για το κριτήριο σημαντικότητας B (πίνακας 4.45, σχήμα 4.60), που δεν επηρεάζονται τόσο πολύ από την κακή στατιστική του BG και να δεχτούμε ως καλύτερο το πρώτο σενάριο ακτινοβόλησης.

Πίνακας 4.45: Τιμές του κριτηρίου B των κορυφών  $K_{\alpha 1}$  των στοιχείων Y, La, Ce και Nd για διέγερση με τα φάσματα 1 και 2 και στατιστικό U-test

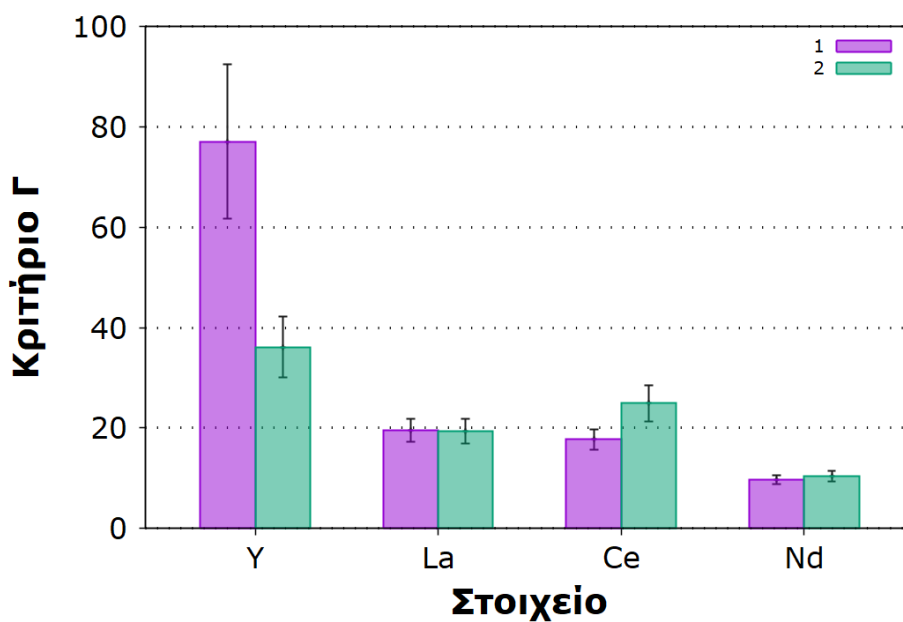
Κριτήριο B	φάσμα 1	φάσμα 2	U-test
Y	$1.39e-9 \pm 3.21\%$	$9.1e-10 \pm 4.01\%$	8.269
La	$1.07e-9 \pm 3.77\%$	$8.9e-10 \pm 4.14\%$	3.337
Ce	$9.8e-10 \pm 3.96\%$	$8.4e-10 \pm 4.22\%$	2.586
Nd	$9.0e-10 \pm 4.28\%$	$7.5e-10 \pm 4.67\%$	2.891

Πίνακας 4.46: Τιμές του κριτηρίου Γ των κορυφών  $K_{\alpha 1}$  των στοιχείων Y, La, Ce και Nd για διέγερση με τα φάσματα 1 και 2 και στατιστικό U-test

Κριτήριο Γ	φάσμα 1	φάσμα 2	U-test
Y	$7.7e+1 \pm 19.9\%$	$3.6e+1 \pm 16.9\%$	2.486
La	$2.0e+1 \pm 11.6\%$	$1.9e+1 \pm 12.6\%$	0.077
Ce	$1.8e+1 \pm 11.6\%$	$2.5e+1 \pm 14.7\%$	1.711
Nd	$9.6 \pm 9.03\%$	$1.0e+1 \pm 10.2\%$	0.512



Σχήμα 4.60: Σχηματική απεικόνιση της του κριτηρίου Β των κορυφών  $K_{\alpha 1}$  των στοιχείων Y, La, Ce και Nd για διέγερση με τα φάσματα 1 και 2

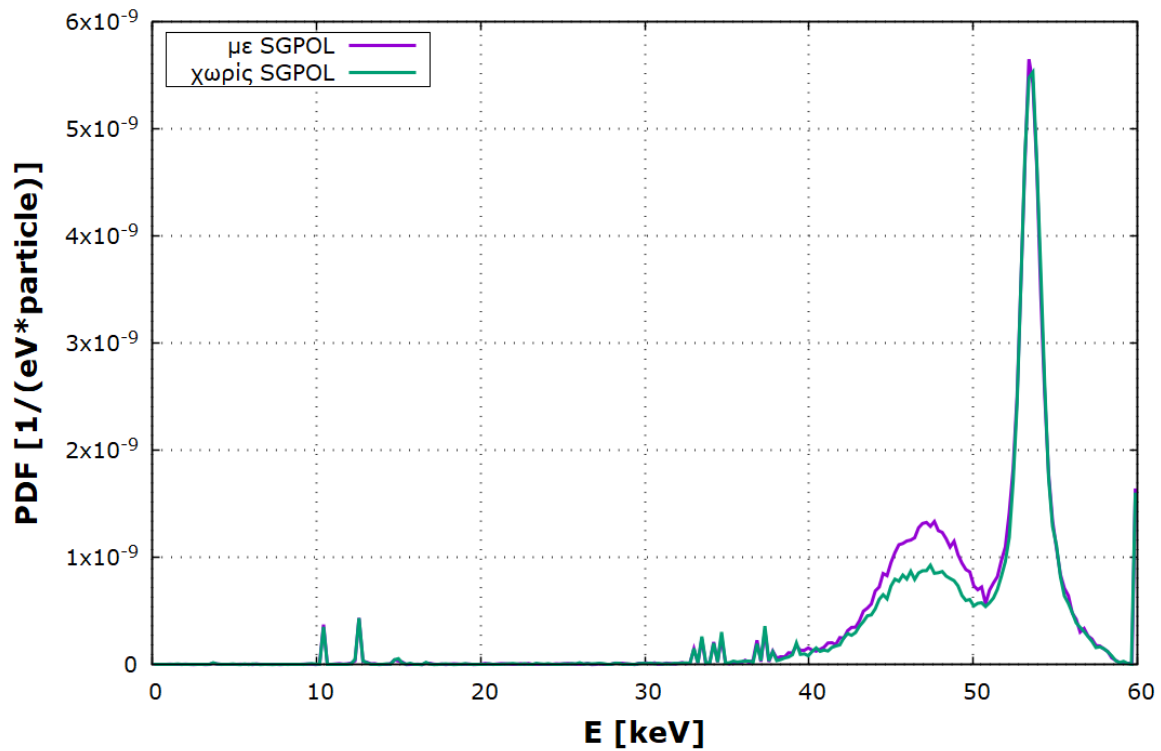


Σχήμα 4.61: Σχηματική απεικόνιση του κριτηρίου Γ των κορυφών  $K_{\alpha 1}$  των στοιχείων Y, La, Ce και Nd για διέγερση με τα φάσματα 1 και 2

#### 4.4.5 Επίδραση του φαινομένου της πόλωσης στη γεωμετρία των τριών αξόνων

Όπως και στο πρώτο μέρος του κεφαλαίου σε σχέση με τη διάταξη ανίχνευσης ουρανίου, διερευνήθηκε η δυνατότητα μείωσης του συνεχούς υποστρώματος λόγω φαινομένου Compton, μέσω των διαδοχικών, κάθετων μεταξύ τους και κάθετων στην αρχική διεύθυνση των φωτονίων,

σκεδάσεων, πριν η ακτινοβολία καταλήξει στον ανιχνευτή. Τα αποτελέσματα και αυτή τη φορά ήταν παρόμοια, οδηγώντας σε λίγο υψηλότερο υπόστρωμα στην περίπτωση ενεργοποίησης της προσομοίωσης των φαινομένων πόλωσης μέσω της γραμμής SGPOL στο αρχείο εισόδου. Καθώς ισχύουν τα ίδια όπως και στο κεφάλαιο 4.3.9, δεν υπάρχει λόγος επανάληψης των ίδιων συμπερασμάτων, παρά μόνο παρατίθενται τα αντίστοιχα φάσματα από τον ανιχνευτή διέλευσης ακτινοβολίας (λόγω καλύτερης στατιστικής) στο επόμενο σχήμα, για λόγους πληρότητας.



Σχήμα 4.62: Φάσματα εικονικού ανιχνευτή διέλευσης ακτινοβολίας για τις περιπτώσεις ενεργοποίησης ή μη της προσομοίωσης φαινομένων σχετικών με την πόλωση των φωτονίων σε 3D γεωμετρία με χρήση δευτερεύοντος στόχου χαμηλού Z

## 4.5 Ανακεφαλαίωση και συμπεράσματα από τις προσομοιώσεις

Παρακάτω παρέχονται εν συντομία παρατηρήσεις και συμπεράσματα που προέκυψαν από τα αποτελέσματα των προσομοιώσεων που παρουσιάστηκαν στις παραγράφους 4.3 και 4.4.

### *Διάταξη ανίχνευσης ουρανίου*

**Συγκέντρωση:** Η αύξηση της συγκέντρωσης (στο εύρος [118,10000] ppm επιφέρει αύξηση των τιμών των κριτηρίων σημαντικότητας Β και Γ και κατ' επέκταση βελτίωση της ανιχνευσιμότητας.

**Κατευθυντές:** Ο δεύτερος τύπος κατευθυντή (Pb-Cd-Cu-Al) συμβάλλει στην ανιχνευσιμότητα περισσότερο από τον πρώτο (Pb-Al), ο οποίος βελτιώνει επίσης την ανιχνευσιμότητα σε σύγκριση με την περίπτωση μη χρήσης κατευθυντή

**Οπή κατευθυντή:** Τα αποτελέσματα του στατιστικού U-test δεν μπόρεσαν να δώσουν μία σαφή εικόνα για τη μείωση της οπής του κατευθυντή, όμως ένα σημαντικό συμπέρασμα μπορεί να προκύψει από τις μεταγενέστερες προσομοιώσεις σε σχέση με την κωνικότητα της δέσμης

**Πάχος Pb κατευθυντή:** Η χρήση 5 mm Pb μπορεί να προσφέρει ταυτόχρονα τα οφέλη του σχετικά υψηλού κριτηρίου Β της κορυφής U-K<sub>α1</sub> και του χαμηλού κριτηρίου Γ της κορυφής Pb-K<sub>α1</sub>. Η ανιχνευσιμότητα, λοιπόν, για 5 mm Pb γίνεται η μέγιστη δυνατή.

**Εσωτερική στρώση Al κατευθυντή:** Η στρώση του Al επέφερε σημαντική αλλαγή μόνο στο κριτήριο σημαντικότητας Β, χωρίς να επηρεάζει με στατιστικά σημαντικό τρόπο το κριτήριο Γ και την ανιχνευσιμότητα του ουρανίου.

**Σκεδαστές:** Όταν χρησιμοποιείται αποδοτικός κατευθυντής δέσμης οι σκεδαστές δεν έχουν με στατιστική βεβαιότητα σημαντική επίδραση στην ανιχνευσιμότητα, κάτι που δεν ισχύει όταν δεν υπάρχει κατευθυντής δέσμης. Τότε, η παρουσία σκεδαστών μειώνει την τιμή του κριτηρίου Γ και γενικά την ποιότητα του φάσματος.

**Γωνία δείγματος:** Στις περιπτώσεις που το δείγμα είναι σχετικά μεγάλης διαμέτρου και όλη η δέσμη το ακτινοβολεί οι αλλαγές στο φάσμα με την περιστροφή του δείγματος δεν είναι σημαντικές. Αντίθετα, στην περίπτωση που πρόκειται για ένα μικρό δείγμα που περιέχεται στη δέσμη (όπως είναι και πιο πιθανό άλλωστε σε εφαρμογές XRF με μηχανές ακτίνων-X) μία μείωση της γωνίας επιδρά θετικά στην ανιχνευσιμότητα του στοιχείου (από 45° σε 30°)

**Γωνία διάταξης:** Η γωνία μεταξύ πηγής-δείγματος-ανιχνευτή έχει μεγάλη σημασία για το προκύπτον φάσμα, καθώς ανάλογα με αυτή μετακινείται το η μεγαλύτερη επίδραση του φαινομένου Compton προς μεγαλύτερες ή μικρότερες ενέργειες. Για ακτινοβολήση με το φάσμα των 140 keV, σε εύρος γωνιών [90°,130°] διαπιστώθηκε ότι οι μεγαλύτερες γωνίες παρουσιάζουν και μεγαλύτερη ανιχνευσιμότητα.

**Πάχος δείγματος:** Σύμφωνα με τις προσομοιώσεις που έγιναν σε ένα εύρος παχών [0.5,10] mm παρατηρήθηκε ότι ενώ η τιμές του κριτηρίου Β αυξάνονται με την αύξηση του πάχους δεν ισχύει το ίδιο για όλες τις τιμές του κριτηρίου Γ. Σε αυτό παρατηρείται αύξηση μέχρι το όριο των 4 mm και έπειτα παραμένει στατιστικά σημαντικά ίδια η τιμή του κριτηρίου Γ. Από άποψη οικονομίας υλικού, λοιπόν, είναι λογικό να μη χρησιμοποιούνται δείγματα πάχους μεγαλύτερου από 4 mm (για το συγκεκριμένο τύπο δειγμάτων).

**Πόλωση διεγείρουσας:** Αν και δεν ήταν δυνατή η λήψη ικανοποιητικών αποτελεσμάτων από την προσομοίωση της τριαξονικής γεωμετρίας, η διεγερση των δειγμάτων με γραμμικά πολωμένη δέσμη έδειξε σημαντική βελτίωση της ανιχνευσιμότητας, όταν η πόλωση είναι στην προτιμώμενη κατεύθυνση.

**Διάμετρος δείγματος:** Η αύξηση της διαμέτρου του δείγματος στο διάστημα [20,40] mm, επηρέασε θετικά μόνο την τιμή του κριτηρίου B, αφήνοντας ίδια την τιμή του κριτηρίου Γ.

**Κωνικότητα δέσμης:** Από τη διερεύνηση αυτή, όπως αναφέρθηκε και παραπάνω, προέκυψε ένα χρήσιμο συμπέρασμα σε σχέση με την οπή των κατευθυντών δέσμης. Φάνηκε πως υπάρχει μία βέλτιστη τιμή γωνίας ανοίγματος της κωνικής δέσμης διεγερσης του δείγματος που δεν είναι οι 0°, αλλά οι 10°.

#### *Διάταξη ανίχνευσης σπάνιων γαιών*

**Υλικά κατασκευής περιβλήματος:** Τα υλικά κατασκευής των δύο συνιστωσών του περιβλήματος έχουν περιορισμένη επίδραση στην ενεργειακή περιοχή κάτω από 10 keV στο φάσμα του ανιχνευτή. Αποφασίστηκε να αντικατασταθούν με καθαρό Al, ώστε να περιοριστεί το πλήθος των χρησιμοποιούμενων υλικών και να αυξηθεί η ταχύτητα της προσομοίωσης.

**Εσωτερικός κατευθυντής:** Ο εσωτερικός κατευθυντής από υλικό πολλών στρώσεων που μοντελοποιήθηκε ως σώμα από W, φάνηκε πως δεν επηρεάζει σημαντικά το φάσμα του ανιχνευτή με εξαίρεση τις χαρακτηριστικές γραμμές του W, παρά μόνο μειώνει το πλήθος των φωτονίων που καταγράφονται. Για την επιτάχυνση της διαδικασίας της προσομοίωσης είναι δυνατή η παράλειψη αυτού του στοιχείου, χωρίς απώλειες στην ακρίβεια των αποτελεσμάτων.

**Ακτινοβόληση με διαφορετικά φάσματα:** Το φάσμα με την παρουσία των χαρακτηριστικών γραμμών του Sn είχε καλύτερα αποτελέσματα, κυρίως ως προς το καθαρό ύψος των κορυφών των 4 στοιχείων που εξετάστηκαν.

**Πόλωση διεγείρουσας:** Όπως και στην περίπτωση της διάταξης ανίχνευσης ουρανίου η προσομοίωση δεν έδωσε ικανοποιητικά αποτελέσματα για την τριαξονική γεωμετρία, ώστε να προκύψουν χρήσιμα συμπεράσματα.

## Σχήματα του 4<sup>ου</sup> Κεφαλαίου

```
XXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXX
  BEGe Canberra modelling
  Material list:
    1: Beryllium
    2: Aluminium
    3: Copper
    4: Germanium
00000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000
SURFACE ( 1) Plane Z=0.00
INDICES=( 0, 0, 0, 1, 0)
00000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000
SURFACE ( 2) Plane Z=-0.05
INDICES=( 0, 0, 0, 1, 1)
Z-SCALE=(+5.000000000000000E-02, 0) (DEFAULT=1.0)
00000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000
SURFACE ( 3) Cylinder R=3.55
INDICES=( 1, 1, 0, 0, -1)
X-SCALE=(+3.550000000000000E+00, 0) (DEFAULT=1.0)
Y-SCALE=(+3.550000000000000E+00, 0) (DEFAULT=1.0)
00000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000
SURFACE ( 4) Plane Z=-0.15
INDICES=( 0, 0, 0, 1, 1)
Z-SCALE=(+1.500000000000000E-01, 0) (DEFAULT=1.0)
00000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000
SURFACE ( 5) Cylinder R=4.40
INDICES=( 1, 1, 0, 0, -1)
X-SCALE=(+4.400000000000000E+00, 0) (DEFAULT=1.0)
Y-SCALE=(+4.400000000000000E+00, 0) (DEFAULT=1.0)
00000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000
SURFACE ( 6) Plane Z=-10.00
INDICES=( 0, 0, 0, 1, 1)
Z-SCALE=(+1.000000000000000E+01, 0) (DEFAULT=1.0)
00000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000
SURFACE ( 7) Cylinder R=4.25
INDICES=( 1, 1, 0, 0, -1)
X-SCALE=(+4.250000000000000E+00, 0) (DEFAULT=1.0)
Y-SCALE=(+4.250000000000000E+00, 0) (DEFAULT=1.0)
00000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000
SURFACE ( 8) Plane Z=-0.80
```

Σχήμα 4.63: Αρχείο \*.geo που περιγράφει τη γεωμετρία του ανιχνευτή BEGe











```

XXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXX
  Amptek XR-100CR
  Material list:
    1: Beryllium
    2: Nickel
    3: Tungsten (ML collimator)
    4: Silicon
    5: Aluminium
    6: Kovar alloy
0000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000
SURFACE ( 1) Plane Z=0.00
INDICES=( 0, 0, 0, 1, 0)
0000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000
SURFACE ( 2) Plane Z=-0.00127 (1/2 mil)
INDICES=( 0, 0, 0, 1, 1)
Z-SCALE=(+1.270000000000000E-03, 0) (DEFAULT=1.0)
0000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000
SURFACE ( 3) Plane Z=-0.8636 (.34 in)
INDICES=( 0, 0, 0, 1, 1)
Z-SCALE=(+8.636000000000000E-01, 0) (DEFAULT=1.0)
0000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000
SURFACE ( 4) Plane Z=-0.1016 Lcoll (.04 in)
INDICES=( 0, 0, 0, 1, 1)
Z-SCALE=(+1.016000000000000E-01, 0) (DEFAULT=1.0)
0000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000
SURFACE ( 5) Plane Z=-0.1778 Ldet top (.07 in)
INDICES=( 0, 0, 0, 1, 1)
Z-SCALE=(+1.778000000000000E-01, 0) (DEFAULT=1.0)
0000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000
SURFACE ( 6) Plane Z=-0.2278 Ldet bot (500 um thickness)
INDICES=( 0, 0, 0, 1, 1)
Z-SCALE=(+2.278000000000000E-01, 0) (DEFAULT=1.0)
0000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000
SURFACE ( 7) Cylinder R=0.6985 Rcov out
INDICES=( 1, 1, 0, 0, -1)
X-SCALE=(+6.985000000000000E-01, 0) (DEFAULT=1.0)
Y-SCALE=(+6.985000000000000E-01, 0) (DEFAULT=1.0)
0000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000
SURFACE ( 8) Cylinder R=0.6731 Rcov in
INDICES=( 1, 1, 0, 0, -1)
X-SCALE=(+6.731000000000000E-01, 0) (DEFAULT=1.0)
Y-SCALE=(+6.731000000000000E-01, 0) (DEFAULT=1.0)
0000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000
SURFACE ( 9) Cylinder R=0.25 Rwin
INDICES=( 1, 1, 0, 0, -1)
X-SCALE=(+2.500000000000000E-01, 0) (DEFAULT=1.0)
Y-SCALE=(+2.500000000000000E-01, 0) (DEFAULT=1.0)

```

Σχήμα 4.64: Αρχείο \*.geo που περιγράφει τη γεωμετρία του ανιχνευτή XR-100CR



```

000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000
BODY ( 2) Ni Top
MATERIAL( 2)
SURFACE ( 1), SIDE POINTER=(-1)
SURFACE ( 18), SIDE POINTER=(+1)
SURFACE ( 9), SIDE POINTER=(+1)
SURFACE ( 7), SIDE POINTER=(-1)
000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000
BODY ( 3) Ni Side
MATERIAL( 2)
SURFACE ( 2), SIDE POINTER=(-1)
SURFACE ( 3), SIDE POINTER=(+1)
SURFACE ( 7), SIDE POINTER=(-1)
SURFACE ( 8), SIDE POINTER=(+1)
000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000
BODY ( 4) ML collimator (W)
MATERIAL( 3)
SURFACE ( 4), SIDE POINTER=(-1)
SURFACE ( 5), SIDE POINTER=(+1)
SURFACE ( 12), SIDE POINTER=(-1)
SURFACE ( 10), SIDE POINTER=(+1)
000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000
BODY ( 5) Si Detector
MATERIAL( 4)
SURFACE ( 5), SIDE POINTER=(-1)
SURFACE ( 6), SIDE POINTER=(+1)
SURFACE ( 11), SIDE POINTER=(-1)
000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000
BODY ( 6) Si Detector dead
MATERIAL( 4)
SURFACE ( 5), SIDE POINTER=(-1)
SURFACE ( 6), SIDE POINTER=(+1)
SURFACE ( 12), SIDE POINTER=(-1)
SURFACE ( 11), SIDE POINTER=(+1)
000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000
BODY ( 7) Al Substrate
MATERIAL( 5)
SURFACE ( 6), SIDE POINTER=(-1)
SURFACE ( 13), SIDE POINTER=(+1)
SURFACE ( 14), SIDE POINTER=(-1)
000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000
BODY ( 8) Kovar Header 1/2
MATERIAL( 6)
SURFACE ( 15), SIDE POINTER=(-1)
SURFACE ( 3), SIDE POINTER=(+1)
SURFACE ( 8), SIDE POINTER=(-1)
000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000

```

Σχήμα 4.64 (συνέχεια): Αρχείο \*.geo που περιγράφει τη γεωμετρία του ανιχνευτή XR-100CR







# 5 ΑΚΤΙΝΟΒΟΛΗΣΕΙΣ ΣΤΗ ΔΙΑΤΑΞΗ ΧRF

---

## 5.1 Εισαγωγή

Το κεφάλαιο αυτό παρουσιάζει τις προσπάθειες που έγιναν σε πειραματικό επίπεδο για τη συγκρότηση της διάταξης ΧRF, με χρήση του φορητού ανιχνευτή BEGe και της πηγής βιομηχανικής ραδιογραφίας. Αρχικά, παρουσιάζεται η προετοιμασία του ημιαγωγού ανιχνευτή. Έπειτα, αναλύεται η πειραματική διαδικασία, αλλά και η συλλογιστική πορεία, με τις οποίες σημειώθηκε η όποια πρόοδος στη συγκρότηση της διάταξης. Παράλληλα, παρουσιάζονται οι δυσκολίες και τα προβλήματα που αντιμετωπίστηκαν στην πορεία αυτή. Τέλος, παρουσιάζονται τα αποτελέσματα των πειραμάτων και τα συμπεράσματα που προέκυψαν από την μελέτη τους.

## 5.2 Η προετοιμασία του ανιχνευτή

Ο φορητός ανιχνευτής BEGe, πριν την έναρξη της πειραματικής διαδικασίας, βρισκόταν για μεγάλο χρονικό διάστημα εκτός χρήσης. Για το λόγο αυτό, ήταν απαραίτητη μία κατάλληλη προετοιμασία, ώστε να καταστεί έτοιμος για λειτουργία.

Το πρώτο και κυριότερο βήμα της προετοιμασίας του ανιχνευτή ήταν η ψύξη του. Ο φορητός ανιχνευτής δεν είναι απαραίτητο να ψύχεται όταν δε χρησιμοποιείται. Όμως, προκειμένου να λειτουργήσει είναι απαραίτητο να ψύχεται με υγρό άζωτο στους 77 K. Μετά την ψύξη του ο ανιχνευτής θεωρείται έτοιμος προς χρήση και είναι δυνατή η εφαρμογή σε αυτόν της υψηλής τάσης των 3.5 kV που προτείνει ο κατασκευαστής. Ο ανιχνευτής οφείλει σε μεγάλο βαθμό την φορητότητά του στο μικρών διαστάσεων δοχείο υγρού αζώτου που διαθέτει. Όμως, παράλληλα, ο μικρός διαθέσιμος όγκος καθιστά αναγκαίο τον ανεφοδιασμό του δύο φορές την εβδομάδα. Η διαδικασία αυτή συνεχίστηκε, λοιπόν, δύο φορές την εβδομάδα καθ' όλη τη διάρκεια των πειραμάτων που εκτελέστηκαν.

Το επόμενο βήμα της προετοιμασίας, ήταν ο έλεγχος της λειτουργίας του. Αυτό έγινε αρχικά, με ραδιενεργές πηγές  $^{137}\text{Cs}$  και  $^{241}\text{Am}$ , με στόχο τον έλεγχο της ενεργειακής βαθμονόμησης που είχε προσδιοριστεί την τελευταία φορά που χρησιμοποιήθηκε ο ανιχνευτής. Οι κορυφές των ισοτόπων αυτών στα 661.7 keV και 59.54 keV, αντίστοιχα, ανταποκρίθηκαν πλήρως στην ενεργειακή βαθμονόμηση που προϋπήρχε και για το λόγο αυτό δεν ήταν αναγκαία η επανάληψη της διαδικασίας για τον επαναπροσδιορισμό της.

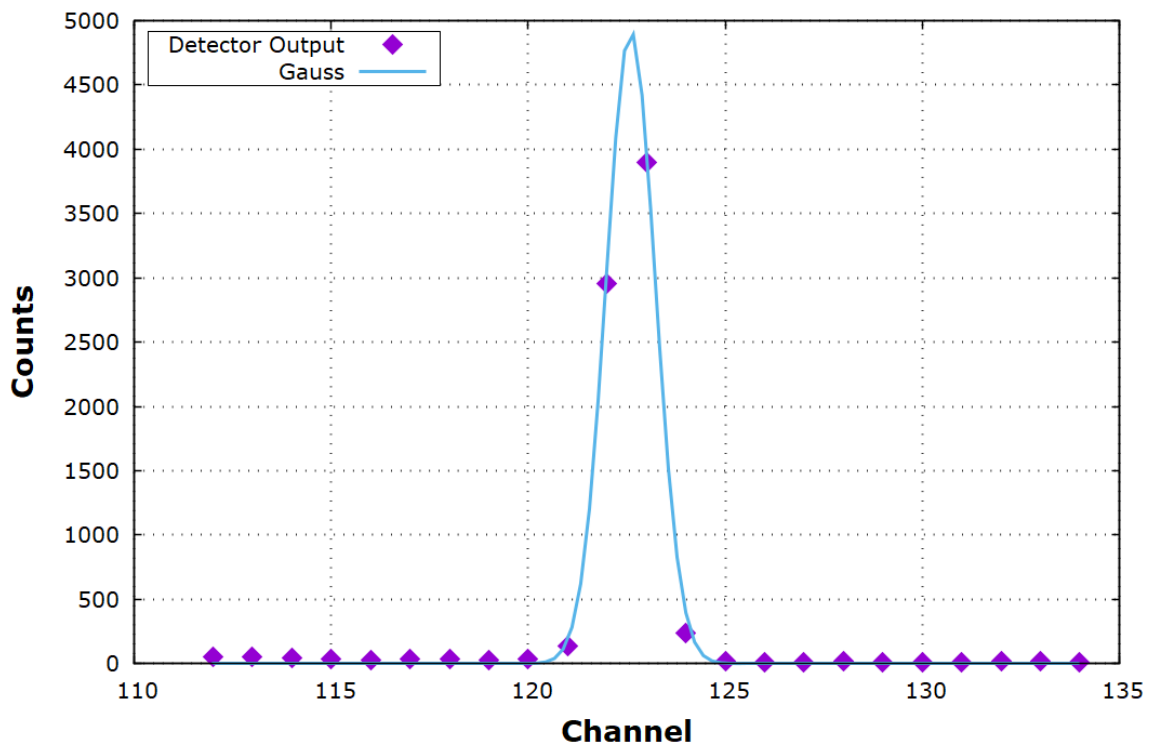
Στη συνέχεια, έγινε υπολογισμός του εύρους ημίσειας ύψους (FWHM) στο φάσμα για τις δύο προαναφερθείσες κορυφές. Για τον υπολογισμό αυτό, έγινε προσαρμογή κανονικής κατανομής Gauss, η μορφή της οποίας παρουσιάστηκε στη σχέση (2.25), στα πειραματικά δεδομένα. Η μετατροπή από εύρος καναλιών σε ενεργειακό εύρος, έγινε χρησιμοποιώντας ότι διατίθενται 4096 κανάλια στα οποία κατανέμονται οι ενέργειες από 0 έως 2 MeV. Τα αποτελέσματα παρουσιάζονται στα σχήματα και στον πίνακα που ακολουθούν.

Πίνακας 5.1: Συντελεστές κανονικής κατανομής

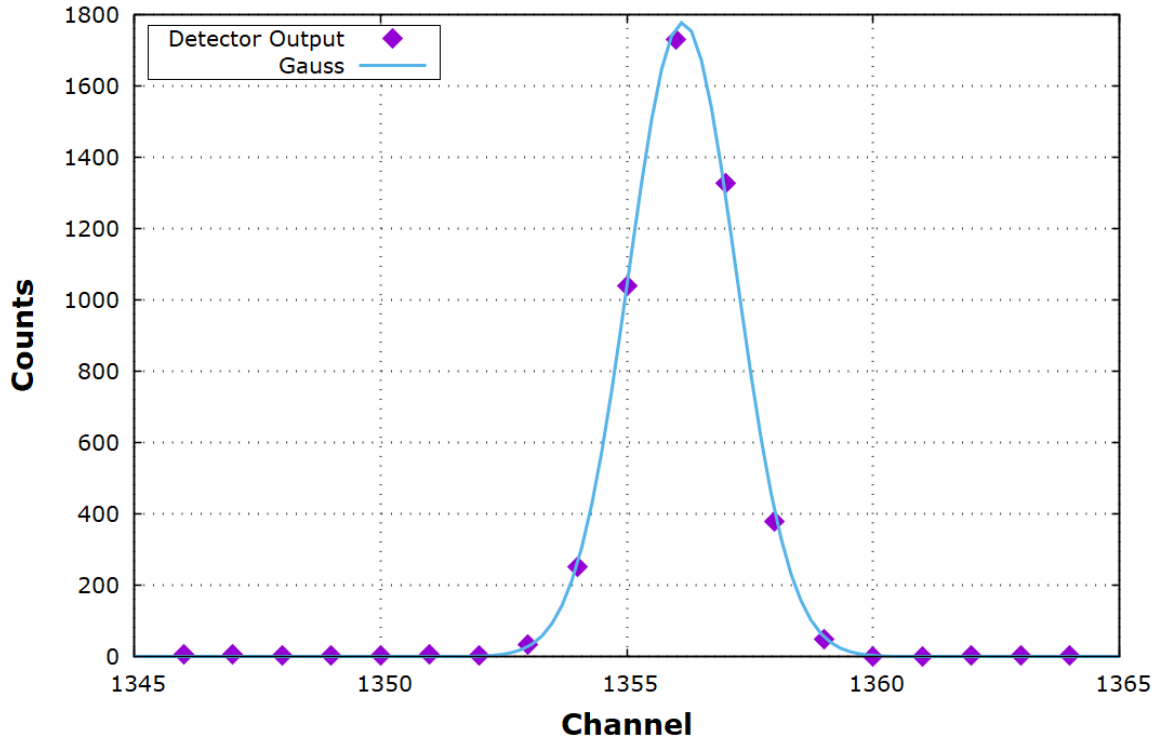
	Am-241	Cs-137
<b>A (counts)</b>	7684	4862
$\bar{x}$ (ch)	$122.601 \pm 0.008\%$	$1356.13 \pm 0.0009\%$
$\sigma$ (ch)	$0.62 \pm 2.01\%$	$1.031 \pm 0.84\%$

Πίνακας 5.2: Υπολογισμός FWHM σε εύρος καναλιών (ch) και σε ενεργειακό εύρος (keV)

FWHM	Am-241	Cs-137
ch	1.4778	2.5698
keV	0.7216	1.2548



Σχήμα 5.1: Φάσμα του ανιχνευτή BEGe στην περιοχή της κορυφής του  $^{241}\text{Am}$  (59.54 keV) και προσαρμογή κανονικής κατανομής



Σχήμα 5.2: Φάσμα του ανιχνευτή BGe στην περιοχή της κορυφής του  $^{137}\text{Cs}$  (661.7 keV) και προσαρμογή κανονικής κατανομής

Το τελευταίο βήμα της προετοιμασίας για τη διεξαγωγή πειραμάτων ήταν η συγκρότηση της διάταξης, συνδυάζοντας τα στοιχεία που την αποτελούν. Ο ανιχνευτής μεταφέρθηκε στο χώρο, όπου λαμβάνουν χώρα οι εφαρμογές της βιομηχανικής ραδιογραφίας. Οι λόγοι για τους οποίους προτιμήθηκε η μετακίνηση του ανιχνευτή, αντί της μηχανής ακτίνων-Χ, είναι δύο. Κατά βάση, η φορητότητά του το επιτρέπει και ο χώρος που βρίσκεται η μηχανή ακτίνων-Χ είναι κατάλληλα διαμορφωμένος από άποψη θωράκισης, ελέγχου, ασφάλειας και βοηθητικού εξοπλισμού για την ομαλή λειτουργία της συγκεκριμένης μηχανής και την διεξαγωγή πειραμάτων. Επίσης, όλα τα ηλεκτρονικά του ανιχνευτή είναι φορητά και μπόρεσαν να μεταφερθούν εύκολα στο χώρο αυτό. Μόνο ο Η/Υ, που χρησιμοποιείται για τη συλλογή δεδομένων, τον έλεγχο των μετρήσεων και την αποθήκευση των αποτελεσμάτων των πειραμάτων, τοποθετήθηκε σε σημείο εκτός του χώρου όπου γίνεται η ακτινοβολία, ώστε να είναι δυνατός ο χειρισμός του κατά τη διάρκεια των πειραματικών μετρήσεων, χωρίς την έκθεση του χειριστή του σε υψηλή δόση ακτινοβολίας.

Τέλος, καθ' όλη τη διάρκεια των πειραματικών μετρήσεων, διατηρήθηκε το προστατευτικό κάλυμμα που χρησιμοποιείται για την κάλυψη του παραθύρου του ανιχνευτή. Το υλικό αυτού (πολυστυρένιο) είναι χαμηλού Z και δεν προκαλεί κάποια ιδιαίτερη εξασθένιση στα φωτόνια ενέργειας μεγαλύτερης από μερικά keV.

### 5.3 Η συγκρότηση της πειραματικής διάταξης

Κατά τη συγκρότηση της πειραματικής διάταξης, λήφθηκε σοβαρά υπόψη η μεγάλη ροή φωτονίων της μηχανής ακτίνων-Χ. Σε συνδυασμό με την υψηλή απόδοση που παρουσιάζει, λόγω

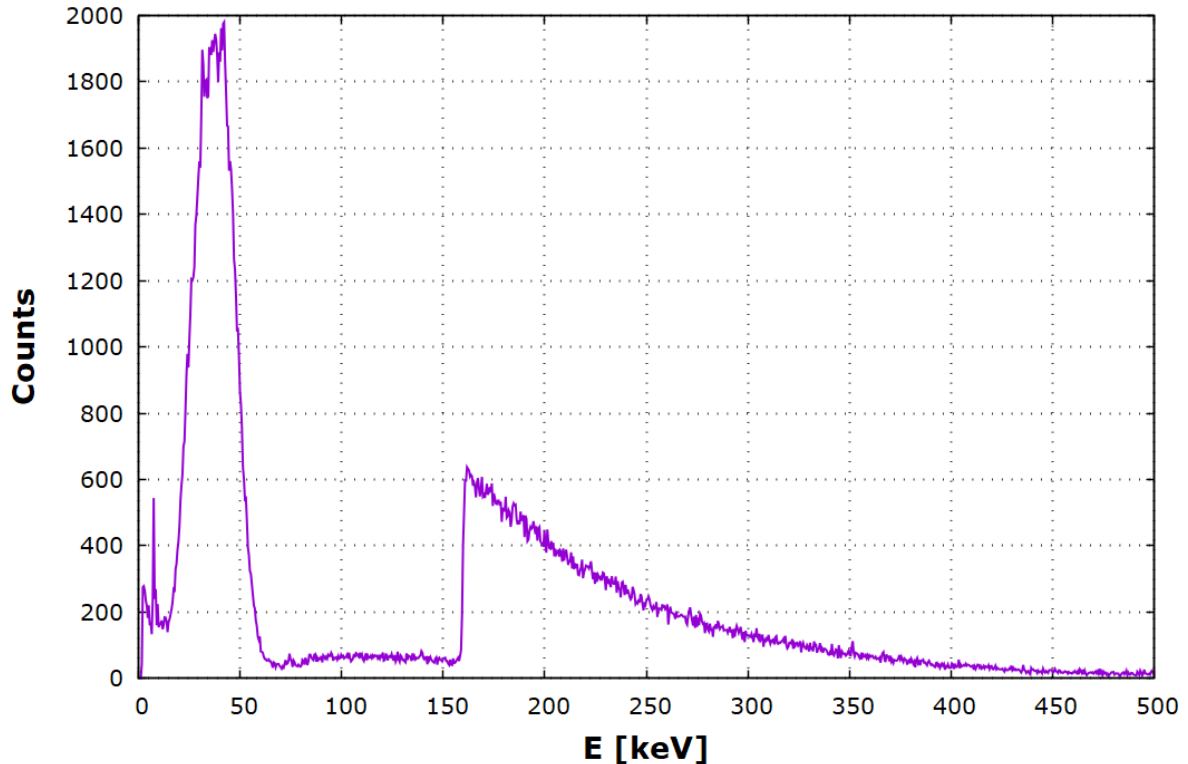
του μεγέθους του κρυστάλλου του, υπάρχει κίνδυνος κορεσμού ή, χειρότερα, ανεπανόρθωτης βλάβης του ανιχνευτή, σε περίπτωση που εκτεθεί χωρίς την απαραίτητη θωράκιση στη δέσμη της μηχανής βιομηχανικής ραδιογραφίας, ενώ βρίσκεται υπό τάση.

Για την προστασία του ανιχνευτή από μεγάλες ροές φωτονίων και τον έλεγχο της απόκρισής του, επιλέχθηκε να ξεκινήσουν διερευνητικά πειράματα με υψηλή τάση μηχανής 80 keV. Παράλληλα, το ρεύμα της μηχανής ορίστηκε στο ελάχιστο δυνατό, δηλαδή 0.5 mA. Ο ανιχνευτής αρχικά τοποθετήθηκε σε σημείο μακριά από την πηγή, με προσανατολισμό που δεν ευνοεί την απευθείας ακτινοβολία του. Το πρώτο πείραμα υπό αυτές τις συνθήκες έδειξε καταγραφή γεγονότων με αποδεκτό ρυθμό, στο φάσμα του ανιχνευτή. Από τη στιγμή που δεν υπήρξε κορεσμός, αποφασίστηκε η τοποθέτησή του σε μικρότερη απόσταση από την πηγή.

Για το σκοπό αυτό έγινε μεταφορά του ανιχνευτή σε μέτρια απόσταση από τη μηχανή (περίπου 1 m), τέτοια ώστε ο άξονας του να σχηματίζει γωνία  $90^\circ$  με τον άξονα της δέσμης φωτονίων, αφού προηγουμένως εξασφαλίστηκε ότι τα δύο στοιχεία βρίσκονται στο ίδιο επίπεδο. Χρησιμοποιήθηκαν επίσης τούβλα από Pb πάχους 50 mm εκατέρωθεν του ενεργού όγκου του ανιχνευτή για προστασία από την απευθείας ακτινοβολία της πηγής και εκτελέστηκε το επόμενο πείραμα. Αντίθετα με την προηγούμενη περίπτωση, η ροή φωτονίων ήταν εξαιρετικά υψηλή και ο ανιχνευτής αδυνατούσε να καταγράψει γεγονότα. Έγινε άμεση διακοπή της λειτουργίας της μηχανής υπό το φόβο πρόκλησης βλάβης στον ανιχνευτή.

Το επόμενο βήμα, με γνώμονα την προστασία του ανιχνευτή από τη μεγάλη ροή φωτονίων, ήταν η προσθήκη ενός πάνελ από Pb με μεγάλη επιφάνεια (περίπου 1m x 2m) και πάχος 5 mm μεταξύ πηγής και ανιχνευτή BEGe. Η επανάληψη του πειράματος με τις ίδιες κατά τα άλλα συνθήκες επέφερε, δυστυχώς τα ίδια αποτελέσματα. Η καταγραφή γεγονότων ήταν μηδενική λόγω κορεσμού και το πείραμα διακόπηκε άμεσα.

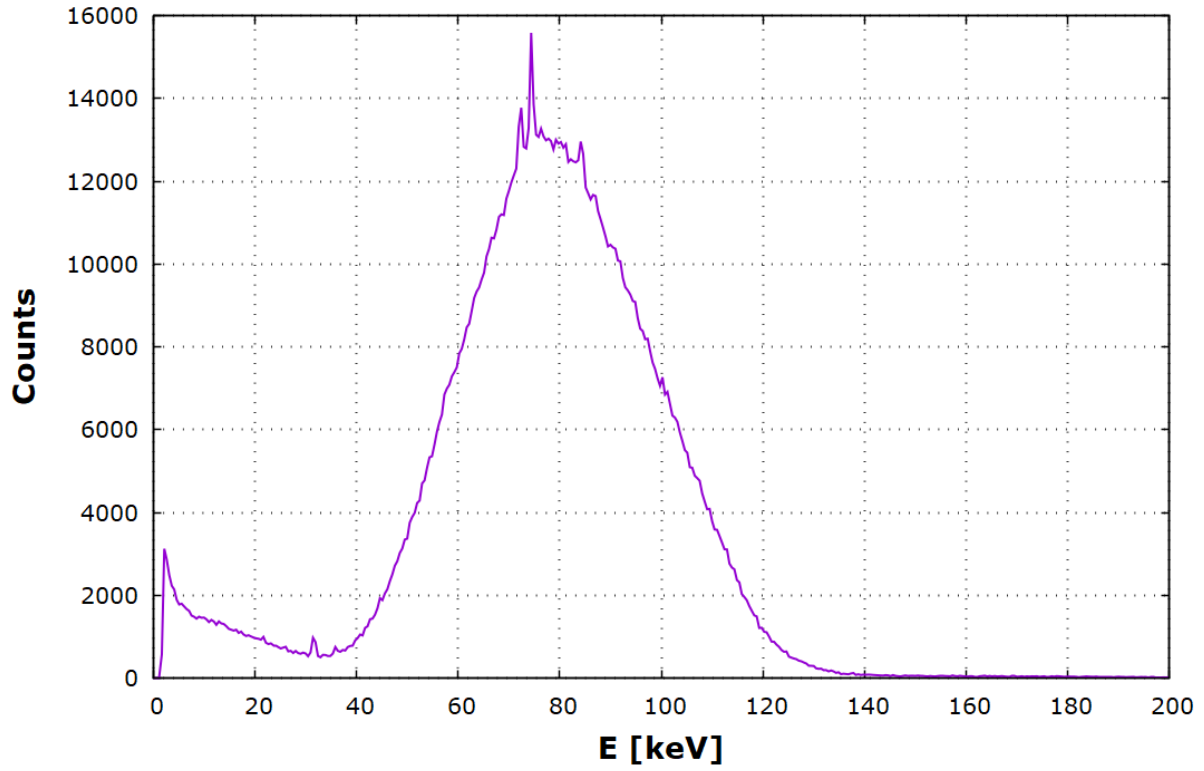
Συνεχίζοντας τις προσπάθειες για την ελάττωση της έκθεσης του ανιχνευτή σε ακτίνες-X, έγινε προσθήκη δεύτερου όμοιου πάνελ πάχους 5mm. Παράλληλα τοποθετήθηκε και ένα δείγμα στο σημείο τομής των αξόνων του ανιχνευτή και της δέσμης που εξέρχεται από το παράθυρο της μηχανής ακτίνων-X. Το δείγμα αποτελούσαν μερικά φύλλα δυσπροσίου (Dy), μίας εκ των σπανίων γαιών, που παρουσιάζει αιχμή απορρόφησης K (K edge) στα 53.761 keV που προσαρμόστηκαν σε πλακίδιο από πολυμερές υλικό. Η προσθήκη του δεύτερου πάνελ οδήγησε σε ανεκτές ροές φωτονίων προς τον ανιχνευτή. Στο πείραμα που εκτελέστηκε δεν παρατηρήθηκε κορεσμός, όπως στις προηγούμενες περιπτώσεις. Παρ' όλα αυτά, ο νεκρός χρόνος της καταγραφής γεγονότων στον ανιχνευτή ήταν ιδιαίτερα υψηλός και το φάσμα που προέκυψε χαρακτηρίζεται από μία απρόσμενη μορφή (σχήμα 5.3). Υπάρχει μία υψηλή και ευρεία κορυφή από 20 έως 60 keV που ακόμα και σε περίπτωση ύπαρξης χαρακτηριστικών γραμμών K του Dy, καθιστά τον προσδιορισμό τους δύσκολο. Αξιοσημείωτη και παράλληλα ανεξήγητη είναι και η απότομη αύξηση των καταγραφόμενων φωτονίων περί τα 160 keV και η σταδιακή τους μείωση προς μεγαλύτερες ενέργειες, που μπορεί ίσως να αποδοθεί μόνο σε φαινόμενα pile-up και καταγραφή πολλών ταυτόχρονων γεγονότων στον ανιχνευτή ως ένα. Όμως, ακόμα και σε αυτή την περίπτωση, η απότομη αύξηση στα 160 keV δεν μπορεί να αποδοθεί σε κάποιο γνωστό μηχανισμό.



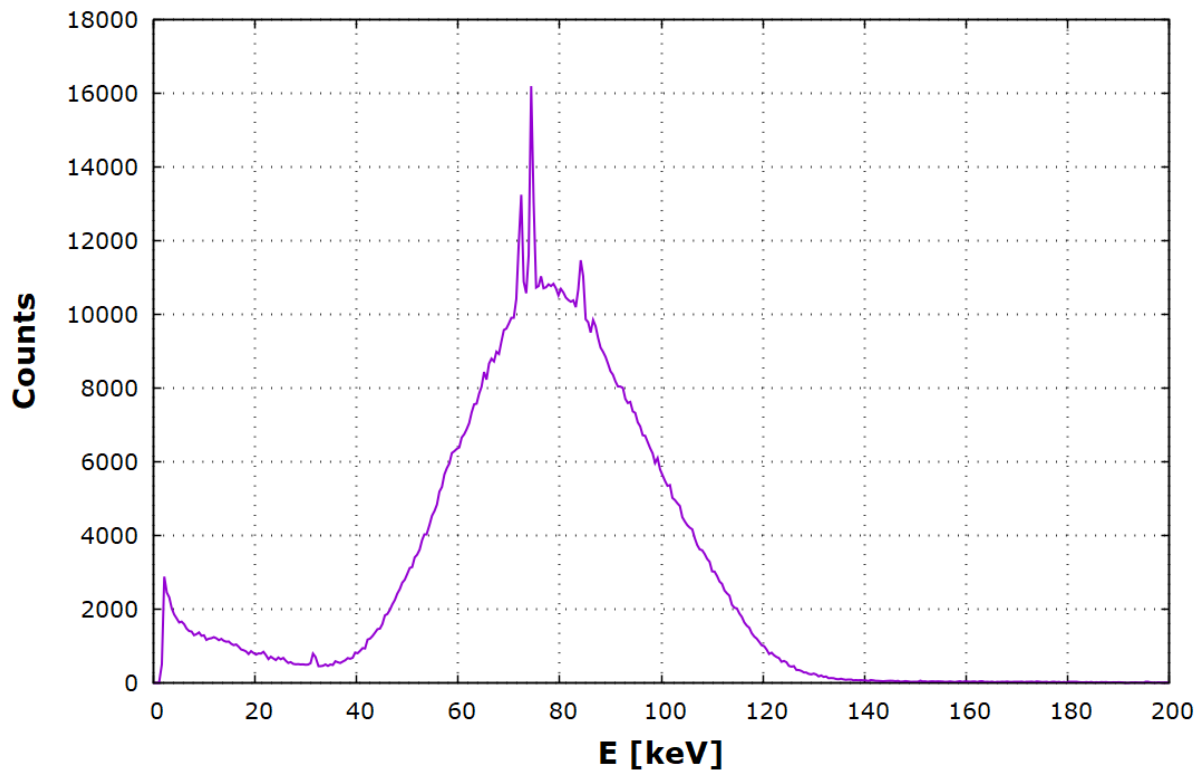
Σχήμα 5.3: Φάσμα BEGe για YT 80 keV, μέτρια απόσταση και 2 πάνελ Pb

Παρότι, κατέστη δυνατή η καταγραφή γεγονότων από τον BEGe χωρίς πρόβλημα, η μεγάλη τιμή του νεκρού χρόνου και η υποψία ότι η αξιοπερίεργη μορφή του φάσματος οφείλεται στη μεγάλη εισροή φωτονίων, οδήγησε σε μία ακόμη απόπειρα μείωσης της ακτινοβολίας του ανιχνευτή. Διατηρήθηκαν, λοιπόν, τα μπλοκ και τα πάνελ από Pb και η υψηλή τάση στα 80 keV και προστέθηκε στην έξοδο της μηχανής το κάλυμμα από W που χρησιμοποιείται για τη αποκοπή της ακτινοβολίας που εξέρχεται από το παράθυρο της μηχανής. Το κάλυμμα αποτελείται από 30 mm W και μικρή ποσότητα χάλυβα στη λαβή του, ενώ ο κύριος σκοπός του είναι η προστασία του περιβάλλοντος χώρου και όσων βρίσκονται εκεί στην περίπτωση μίας κατά λάθος ακτινοβολίας ή κατά την προθέρμανση της μηχανής. Το αποτέλεσμα της τοποθέτησης του καλύμματος ήταν άμεσο. Η αποκοπή των φωτονίων ήταν πράγματι εξαιρετικά αποδοτική και ο ανιχνευτής κατέγραψε φωτόνια που προέρχονταν μόνο από το φυσικό background.

Στη συνέχεια, επιχειρήθηκε αύξηση της υψηλής τάσης στα 200 keV και διατήρηση των τούβλων Pb, των πάνελ Pb και του καλύμματος W, ενέργειες που οδήγησαν στο φάσμα που παρουσιάζεται στο σχήμα 5.4. Η αφαίρεση του ενός από τα δύο πάνελ Pb, οδήγησε σε παρόμοια εικόνα (σχήμα 5.5). Στα δύο φάσματα που παρουσιάζονται στα σχήματα 5.4 και 5.5, διακρίνονται στις ενέργειες των 74.969, 72.804, 84.936 και 87.367 keV οι χαρακτηριστικές ακτίνες  $K_{\alpha 1}$ ,  $K_{\alpha 2}$ ,  $K_{\beta 1}$  και  $K_{\beta 2}$ , αντίστοιχα του Pb. Αυτές οι γραμμές οφείλονται στη θωράκιση που χρησιμοποιείται η οποία είναι εξ ολοκλήρου από Pb. Όπως αναλύθηκε στο κεφάλαιο 4.3.4, προκειμένου να μην υπάρχει παρουσία παρεμβολών λόγω Pb στο φάσμα, που δυσχεραίνουν την ανίχνευση άλλων στοιχείων, θα είναι απαραίτητη η χρήση άλλων στοιχείων σε στρώσεις με μειούμενο Z, ώστε απορροφήσουν αποδοτικά τις ακτίνες-X του μολύβδου.



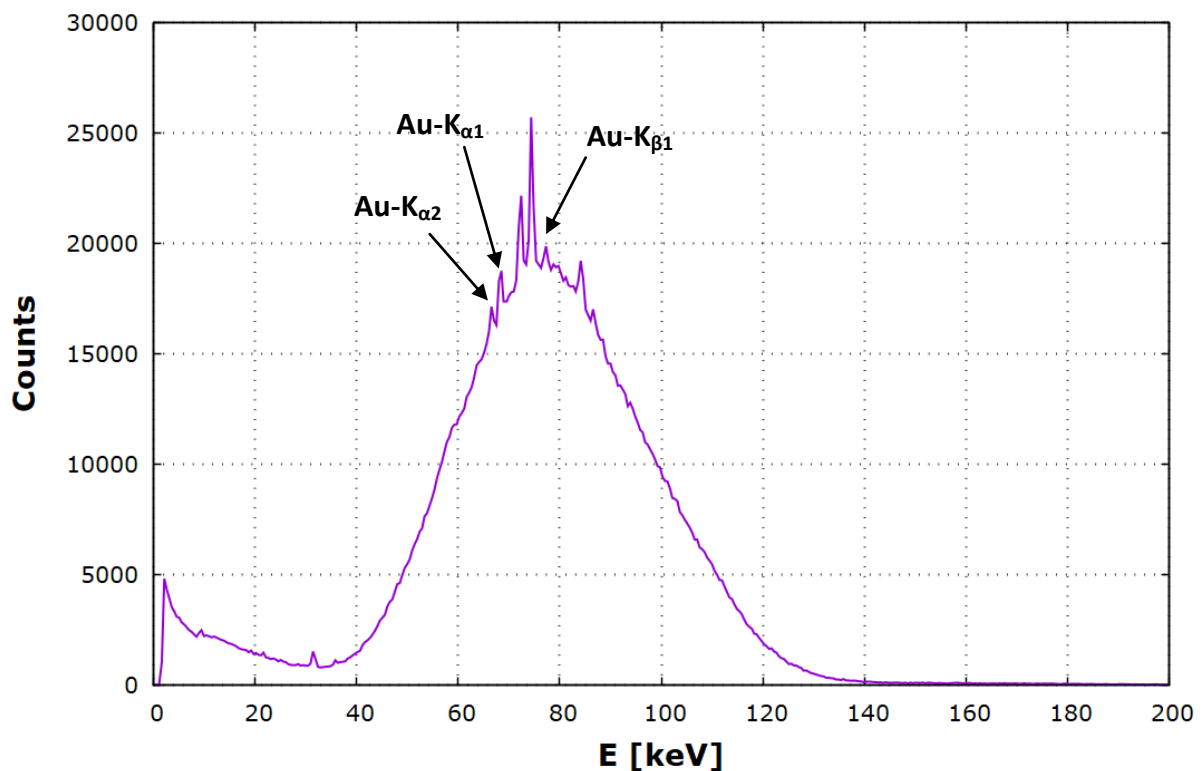
Σχήμα 5.4: Φάσμα του BEGe για Yt 200 keV, μέτρια απόσταση, 2 πάνελ Pb και κάλυμμα W



Σχήμα 5.5: Φάσμα BEGe για Yt 200 keV, μέτρια απόσταση, 1 πάνελ Pb και κάλυμμα W

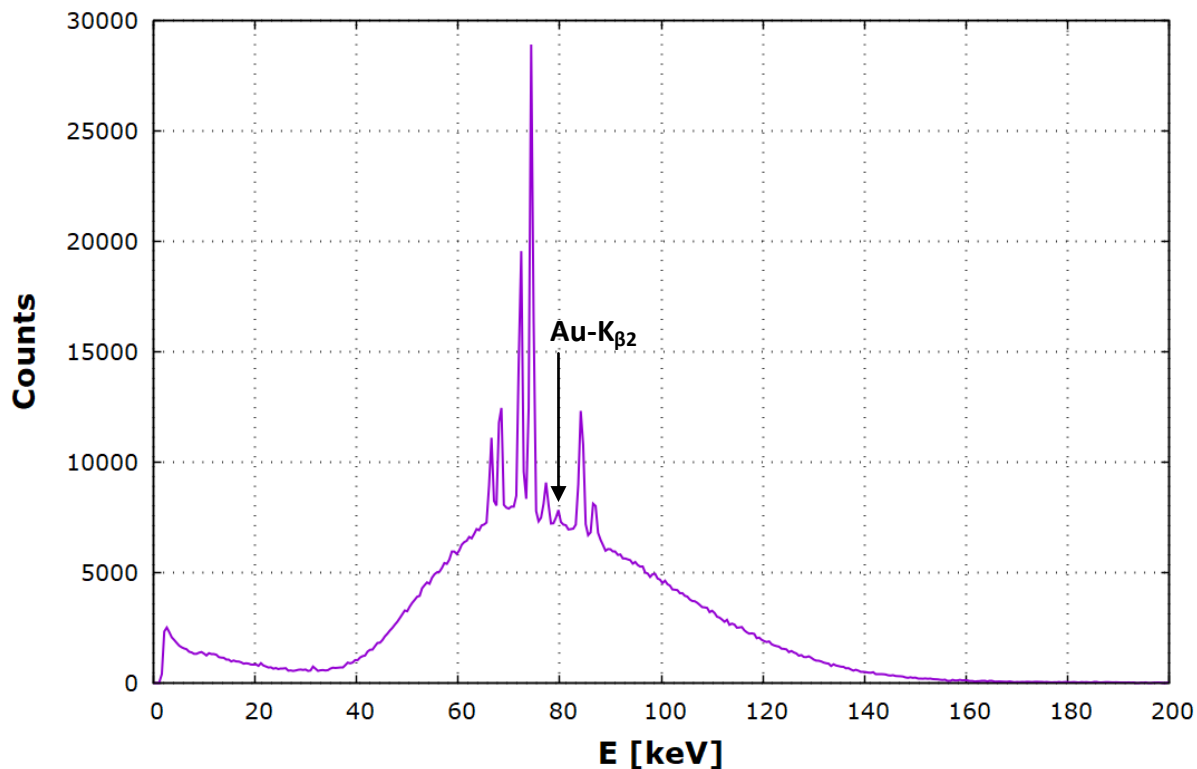
Παρότι το φάσμα δεν είναι το επιθυμητό, αποφασίστηκε να γίνει δοκιμή ακτινοβολήσης με προσθήκη δείγματος από καθαρό χρυσό (Au), που αποτελεί ένα μέταλλο μεγάλου Z ( $Z_{Au}=79$ ). Με αυτό τον τρόπο, θα εξεταζόταν η δυνατότητα της διάταξης να προσφέρει αποτελέσματα φθορισμού ακτίνων-X, ακόμα και σε αυτά τα πρώτα στάδια της συγκρότησής της. Στο σχήμα 5.6, φαίνονται τα αποτελέσματα αυτού του πειράματος, στα οποία είναι εμφανείς μερικές από τις χαρακτηριστικές κορυφές του Au ( $K_{\alpha 1}$ @ 68.804 keV,  $K_{\alpha 2}$ @ 66.990 keV,  $K_{\beta 1}$ @ 77.984 keV), πέρα από τις κορυφές του Pb. Παρά το περιορισμένο ύψος των κορυφών, σε σχέση με την ποσότητα Au που χρησιμοποιήθηκε, η παρουσία των γραμμών αυτών στο φάσμα αποτέλεσε ένα θετικό σημείο, καθώς με τη βελτιστοποίηση της διάταξης και κυρίως της διέγερσης, κατέστησε ρεαλιστικό το ενδεχόμενο ανίχνευσης ουρανίου.

Συνεχίζοντας τις ακτινοβολήσεις με χρήση του Au ως δείγμα, έγινε αφαίρεση και του δεύτερου πάνελ από Pb. Ταυτόχρονα, απομακρύνθηκε η μηχανή από τον ανιχνευτή και το δείγμα στη μέγιστη απόσταση που επιτρέπει ο χώρος του εργαστηρίου (περίπου 4m). Η ακτινοβολήση αυτή τη φορά έφερε ακόμα καλύτερα αποτελέσματα. Το φάσμα χαρακτηρίζεται από ένα πιο ομαλό υπόστρωμα, στο οποίο εντοπίζονται καλύτερα οι κορυφές του Au, αλλά και του Pb, λόγω της θωράκισης. Αυτή τη φορά, όχι μόνο οι γραμμές του Au είναι πιο εμφανείς, αλλά και διακρίνεται μία κορυφή επιπλέον. Η κορυφή αυτή είναι η Au- $K_{\beta 2}$ @ 80.182 keV (σχήμα 5.7).



Σχήμα 5.6: Φάσμα BEGe για ΥΤ 200 keV, μέγιστη απόσταση, 1 πάνελ Pb, κάλυμμα W και Au ως δείγμα.



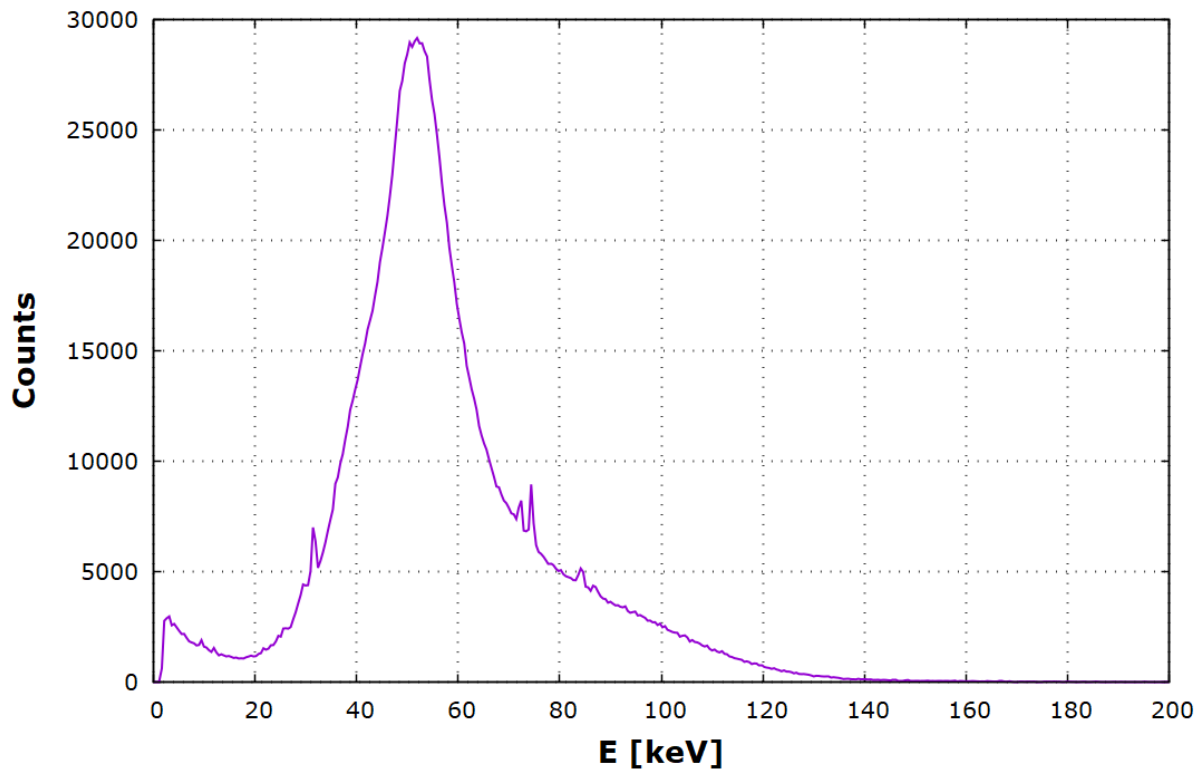


Σχήμα 5.7: Φάσμα BEGe για YT 200 keV, μέγιστη απόσταση, χωρίς πάνελ Pb, κάλυμμα W και Au ως δείγμα.

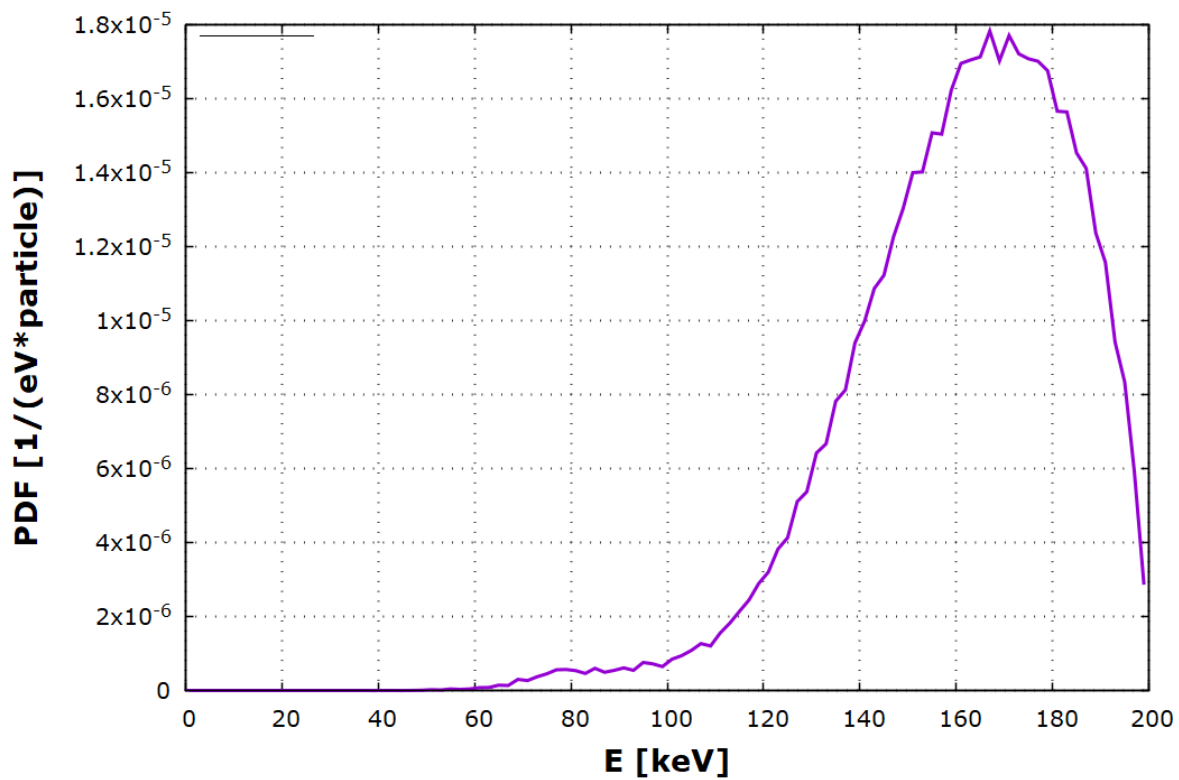
Από τη στιγμή που τα πειράματα με ακτινοβολία δειγμάτων Au έδειξαν ικανοποιητικά αποτελέσματα, αποφασίστηκε η εστίαση του ενδιαφέροντος στη δημιουργία φάσματος ικανοποιητικής μορφής, για τη διέγερση του U. Σε αυτή την κατεύθυνση, απομακρύνθηκε το δείγμα και, διατηρώντας τη μέγιστη απόσταση μεταξύ ανιχνευτή και πηγής, προστέθηκαν εκ νέου τα δύο πάνελ από Pb, αλλά αφαιρέθηκε το κάλυμμα από W από το παράθυρο της μηχανής. Τα αποτελέσματα του πειράματος παρουσιάζονται στο σχήμα 5.8. Από το πείραμα αυτό διαπιστώθηκε πως ο ανιχνευτής δέχεται μόνο σκεδαζόμενη ακτινοβολία. Όλα τα φωτόνια που κατευθύνονται προς τον ανιχνευτή αποκόπτονται από τα πάνελ και, κυρίως, από τα τούβλα Pb μεγάλου πάχους. Σε αυτό το συμπέρασμα συνηγορούν η ολική απουσία από το φάσμα φωτονίων ενέργειας μεγαλύτερης των 140 keV και η χαμηλή μέση ενέργεια των φωτονίων που καταγράφονται από τον ανιχνευτή (μικρότερη από 60 keV). Επισημαίνεται ότι για το σωστό σχεδιασμό της διάταξης και της ακτινοβολίας εν γένει, θα πρέπει να είναι γνωστό το φάσμα με το οποίο ακτινοβολούνται τα δείγματα, κάτι που δεν μπορεί να γίνει με τη χρήση του ανιχνευτή BEGe, λόγω του κινδύνου καταστροφής του, εξαιτίας της υψηλής εισροής φωτονίων σε μία ενδεχόμενη απευθείας, μετωπική ακτινοβολία.

Στο σημείο αυτό κρίθηκε ότι η συνέχιση των πειραμάτων στο πλαίσιο της ΔΕ θα μπορούσε να γίνει επιζήμια για την ανιχνευτική διάταξη και για το λόγο αυτό δεν συνεχίστηκαν τα πειράματα. Αποφασίστηκε όμως ότι στο μέλλον θα ήταν πολύ χρήσιμο να γίνει ένα πείραμα με απευθείας ακτινοβολία ανιχνευτή, ο οποίος θα καταγράψει με ικανοποιητική ακρίβεια το φάσμα της ακτινοβολίας στην οποία εκτίθεται το δείγμα. Για το σκοπό αυτό θα μπορούσε να χρησιμοποιηθεί ένας ανιχνευτής NaI.

Επιπρόσθετα, αποφασίστηκε ότι θα ήταν ιδιαίτερα χρήσιμο να κατασκευαστεί και να χρησιμοποιηθεί ένα φίλτρο από στρώματα Fe και Al για την αποκοπή των χαμηλής ενέργειας φωτονίων του φάσματος, που αυξάνουν το ρυθμό καταγραφής γεγονότων χωρίς να προσφέρουν βελτίωση της ικανότητας ανίχνευσης στη διάταξη. Ο προσδιορισμός του βέλτιστου πάχους της στρώσης Fe του φίλτρου, έγινε με τη βοήθεια προσομοιώσεων των βέλτιστων διαστάσεων. Αυτό έγινε έχοντας ως προϋπόθεση ότι το πάχος της στρώσης Al θα είναι 10 mm. Η διαδικασία με την οποία υπολογίστηκαν οι διαστάσεις του φίλτρου αναλύθηκε στην ενότητα 4.3.1· εδώ παρουσιάζεται μόνο το φάσμα που αναμένεται να ληφθεί μετά το φιλτράρισμα της πρωτογενούς ακτινοβολίας στη θέση του δείγματος, δηλαδή το φάσμα διέγερσης (σχήμα 5.9).



Σχήμα 5.8: Φάσμα BEGe για ΥΤ 200 keV, μέγιστη απόσταση, 2 πάνελ Pb



Σχήμα 5.9: Αναμενόμενο φάσμα διέγερσης με την προσθήκη φίλτρου από 50 mm Fe και 10 mm Al στην έξοδο της μηχανής βιομηχανικής ραδιογραφίας, για υψηλή τάση 200 kV

## 6 ΕΠΙΛΟΓΟΣ

---

Στο κεφάλαιο αυτό, το τελευταίο της εργασίας, γίνεται μία σύνοψη της ΔΕ και παρουσιάζονται τα συμπεράσματα που προέκυψαν από αυτή. Τέλος, παρατίθενται ορισμένες σκέψεις και προτάσεις για τη συνέχιση της διερεύνησης που διενεργήθηκε στα πλαίσια μελλοντικών εργασιών.

### 6.1 Σύνοψη

Η παρούσα ΔΕ ασχολήθηκε κατά κύριο λόγο με τη διερεύνηση της δυνατότητας συγκρότησης μίας διάταξης φθορισμού ακτίνων-Χ (XRF) με τη χρήση μίας μηχανής βιομηχανικής ραδιογραφίας, ικανής να παρέχει δέσμη φωτονίων μέγιστης ενέργειας 200 keV. Η εργασία αναπτύχθηκε με δύο άξονες: την ανίχνευση ουρανίου και την ανίχνευση σπάνιων γαιών. Η διάταξη και για τις δύο περιπτώσεις παραμένει η ίδια. Αλλάζει όμως η τιμή της υψηλής τάσης της μηχανής, καθώς και τα φίλτρα που θα πρέπει να χρησιμοποιηθούν σε κάθε εφαρμογή.

Για τους σκοπούς αυτής της ΔΕ, έγινε χρήση τόσο υπολογιστικών, όσο και πειραματικών μεθόδων. Οι υπολογιστικές μέθοδοι είναι προσομοιώσεις που εκτελέστηκαν με χρήση του κώδικα προσομοίωσης Monte-Carlo PENELOPE. Με τη βοήθεια αυτών, έγινε προσδιορισμός διάφορων παραμέτρων της διάταξης, του τρόπου που αυτές επιδρούν στα αποτελέσματα και εξήχθησαν κυρίως ποιοτικά συμπεράσματα, ως προς τη βελτιστοποίηση της πειραματικής διάταξης. Τα πειράματα που εκτελέστηκαν περιορίστηκαν σε ένα πιο βασικό επίπεδο, χωρίς να υπάρχει ακόμα η δυνατότητα επαλήθευσης των συμπερασμάτων που προέκυψαν από την προσομοίωση.

Στο 1<sup>ο</sup> Κεφάλαιο της ΔΕ έγινε μία σύντομη εισαγωγή και η περιγραφή των κύριων συνιστωσών της.

Στο 2<sup>ο</sup> Κεφάλαιο παρουσιάστηκε η γενική θεωρία πάνω στην οποία βασίζεται η τεχνική XRF. Αρχικά, παρουσιάστηκαν οι ακτίνες-Χ, η φύση, οι ιδιότητές τους και ο τρόπος με τον οποίο αλληλεπιδρούν με την ύλη. Στη συνέχεια, αναλύθηκαν οι διάφορες συνιστώσες που συνθέτουν μία διάταξη XRF. Επιπρόσθετα, έγινε μία βιβλιογραφική ανασκόπηση της ανίχνευσης ουρανίου και σπάνιων γαιών με την τεχνική της XRF. Στο τέλος του κεφαλαίου έγινε μία αναλυτική περιγραφή των συνιστωσών της διάταξης XRF του ΕΠΤ-ΕΜΠ, της οποίας η συγκρότηση διερευνάται στην παρούσα ΔΕ.

Στο 3<sup>ο</sup> Κεφάλαιο παρουσιάστηκε ο κώδικας PENELOPE, που χρησιμοποιήθηκε για τη διενέργεια των προσομοιώσεων. Αρχικά, το κεφάλαιο ασχολήθηκε γενικά με τις μεθόδους Monte-Carlo, καθώς και αυτές που χρησιμοποιούνται για την προσομοίωση της διέλευσης φωτονίων μέσα από την ύλη. Αναλύθηκε ο κώδικας PENELOPE, τα βασικά χαρακτηριστικά που τον απαρτίζουν και ο τρόπος εκτέλεσης προσομοιώσεων και λήψης αποτελεσμάτων. Στη συνέχεια, παρουσιάστηκε ο τρόπος επεξεργασίας των αποτελεσμάτων, ο χειρισμός των αβεβαιοτήτων που προκύπτουν από τη στοχαστική διαδικασία της προσομοίωσης, τα στατιστικά τεστ και η αξιολόγηση της επίδρασης κάθε συνιστώσας φάσμα φθορισμού προς ανίχνευση.

Στο 4<sup>ο</sup> Κεφάλαιο δόθηκαν τα αποτελέσματα των προσομοιώσεων με χρήση του κώδικα PENELOPE. Το πρώτο μέρος του κεφαλαίου αφιερώθηκε στη μοντελοποίηση των ανιχνευτών του

ΕΠΤ-ΕΜΠ και της διεγείρουσας ακτινοβολίας από την πηγή βιομηχανικής ραδιογραφίας. Το δεύτερο μέρος του κεφαλαίου ασχολήθηκε με τη διάταξη με στόχο την ανίχνευση των χαρακτηριστικών γραμμών K του ουρανίου. Διερευνήθηκε η επίδραση διάφορων παραμέτρων στο φάσμα του ανιχνευτή, όπως η διεγείρουσα ακτινοβολία, τα υλικά και τα γεωμετρικά χαρακτηριστικά του κατευθυντή, η γωνία της διάταξης, η γωνία, το πάχος, η διάμετρος του δείγματος και η κωνικότητα της δέσμης διέγερσης. Το τρίτο μέρος του κεφαλαίου εξέτασε τη διάταξη ανίχνευσης χαρακτηριστικών ακτίνων K των στοιχείων σπάνιων γαιών. Ειδική αναφορά έγινε επίσης στην προσπάθεια προσομοίωσης των φαινομένων πόλωσης σε μία διάταξη XRF σε γεωμετρία τριών αξόνων, με στόχο τη μείωση του υποστρώματος και τη βελτίωση της ανιχνευσιμότητας.

Στο 5<sup>ο</sup> Κεφάλαιο έγινε παρουσίαση της πειραματική διαδικασίας στο πλαίσιο της ΔΕ, με απώτερο στόχο την ανίχνευση ουρανίου. Αρχικά, δόθηκαν τα βήματα που απαιτήθηκαν, ως προετοιμασία για την έναρξη των πειραμάτων. Το κύριο μέρος του κεφαλαίου εστιάστηκε στις διαδοχικές προσπάθειες που έγιναν με σκοπό τη διαρκή βελτίωση του φάσματος του ανιχνευτή BEGe.

## 6.2 Συμπεράσματα

Το σημαντικότερο ερώτημα που τέθηκε σε αυτή τη ΔΕ αφορά τη δυνατότητα συγκρότησης μίας διάταξης XRF για τη διέγερση των χαρακτηριστικών γραμμών K βαρέων χημικών στοιχείων. Αυτό το ερώτημα φυσικά είναι προσαρμοσμένο στα ήδη διαθέσιμα μέσα που υπάρχουν στο ΕΠΤ-ΕΜΠ, όπως η πηγή βιομηχανικής ραδιογραφίας και οι φορητοί ανιχνευτές BEGe και Si-PIN. Οποιαδήποτε γενίκευσή του, λοιπόν, θα ήταν άστοχη.

Αρχικά, με τη βοήθεια των προσομοιώσεων και της μοντελοποίησης της διάταξης με σχετική λεπτομέρεια και σε λογικά πλαίσια, η ανίχνευση τόσο των χαρακτηριστικών του ουρανίου, όσο και των σπανίων γαιών κρίθηκε δυνατή. Κατά τη διάρκεια της πειραματικής διαδικασίας, παρουσιάστηκαν διάφορα προβλήματα, όπως αναλύθηκε στο κεφάλαιο 5, που δυσκόλεψαν τη λειτουργία της διάταξης με τον επιθυμητό τρόπο. Παρ' όλα αυτά, η ανίχνευση των χαρακτηριστικών ακτίνων του χρυσού (Au) στο φάσμα του ανιχνευτή BEGe είναι ένα στοιχείο που παρέχει αισιοδοξία για τη συνέχεια των πειραμάτων, με σκοπό την ανίχνευση του ουρανίου. Συνολικά, με τα αποτελέσματα έως τώρα και τα ενδεχόμενα μελλοντικά βήματα, θα μπορούσε να χαρακτηριστεί εφικτή η συγκρότηση μίας τέτοιας διάταξης στο ΕΠΤ-ΕΜΠ στο μέλλον, που θα λειτουργεί συμπληρωματικά προς την κύρια διάταξη XRF, η οποία βασίζεται σε μηχανή ακτίνων-Χ με μέγιστη ενέργεια διεγείρουσας ακτινοβολίας 50 keV, σε περιπτώσεις που είναι επιθυμητή η ανίχνευση στοιχείων με μεγάλο Z, από τις K χαρακτηριστικές ακτίνες-Χ που εκπέμπουν.

Στη συγκρότηση της διάταξης XRF που επιδιώκεται, από την έως τώρα διερεύνηση, ως σημαντικότερα κρίνονται τα εξής θέματα:

- η δημιουργία βέλτιστης ακτινοβολίας διέγερσης με χρήση κατάλληλα φίλτρα
- ο περιορισμός του πλήθους φωτονίων που φτάνουν στον ανιχνευτή, για τη μείωση του νεκρού χρόνου

- η μείωση των σκεδάσεων στον περιβάλλοντα χώρο με αποδοτική κατεύθυνση δέσμης (collimation) ή, τουλάχιστον, ένας καλύτερος χειρισμός των επιδράσεων των σκεδάσεων στο φάσμα του ανιχνευτή

Συμπληρωματικά μπορεί να βοηθήσει η αξιοποίηση των φαινομένων πόλωσης των φωτονίων, ιδιαίτερα σε γεωμετρία τριών αξόνων, με την προϋπόθεση ότι έχει επιλυθεί το πρόβλημα των ανεξέλεγκτων σκεδάσεων.

Σημαντικά συμπεράσματα προέκυψαν από τις προσομοιώσεις σε σχέση με τη μελλοντική λειτουργία της διάταξης. Μερικά από αυτά είναι:

- Η επιλογή των υλικών του κατευθυντή δέσμης με γνώμονα όχι μόνο τη γενική εξασθένιση της ακτινοβολίας, αλλά και την απορρόφηση των χαρακτηριστικών ακτίνων των υλικών του κατευθυντή είναι μεγάλης σημασίας.
- Η δημιουργία στενής δέσμης διέγερσης με τον κατευθυντή αμβλύνει σε μεγάλο βαθμό το πρόβλημα των σκεδάσεων στον περιβάλλοντα χώρο.
- Η γωνία δείγματος μπορεί να επιδράσει ευεργετικά στην ανιχνευσιμότητα των ιχνοστοιχείων που ενδιαφέρουν.
- Η σημασία της γωνίας μεταξύ πηγής-δείγματος-ανιχνευτή είναι υψηλή, καθώς βοηθά στην καλύτερη “διαχείριση” του φαινομένου Compton στο φάσμα του ανιχνευτή.
- Σε ό,τι αφορά το πάχος, όπως φαίνεται υπάρχει ένα όριο πάνω από το οποίο δεν βελτιώνεται η ανιχνευσιμότητα.
- Η διάμετρος του δείγματος δεν προσφέρει ουσιαστικά στην ανιχνευσιμότητα, άρα όταν πρόκειται για δείγμα με περιορισμένο διαθέσιμο όγκο είναι προτιμότερη η επιλογή μεγαλύτερου πάχους.
- Η απλοποίηση της μοντελοποίησης του ανιχνευτή Si-PIN ως προς τα υλικά κατασκευής του περιβλήματος και τον εσωτερικό multilayer ανιχνευτή μπορεί να επιταχύνει σημαντικά τη διαδικασία της προσομοίωσης, χωρίς αρνητικές συνέπειες, όταν η ενεργειακή περιοχή του φάσματος που μας ενδιαφέρει είναι άνω των 10 keV (όπως στην περίπτωση των σπανίων γαιών)
- Η χρήση Sn ως φίλτρο για τη διάταξη ανίχνευσης σπανίων γαιών και η συνακόλουθη παρουσία των χαρακτηριστικών ακτίνων-X του στο φάσμα διέγερσης μπορεί να φανεί ιδιαίτερα χρήσιμη, όταν περιέχεται το στοιχείο Y στο δείγμα.

Εν γένει, τα αποτελέσματα της ΔΕ είναι καταρχήν ενθαρρυντικά για τη δυνατότητα συγκρότησης μίας διάταξης για την ανίχνευση στοιχείων υψηλού Z, μέσω των K χαρακτηριστικών ακτίνων-X που εκπέμπουν, αλλά υπάρχουν πολλά βήματα τα οποία θα πρέπει να γίνουν προκειμένου η διάταξη αυτή να δώσει ικανοποιητικά αποτελέσματα σε όρους επαναληψιμότητας και ανιχνευσιμότητας των στοιχείων.

## 6.3 Μελλοντικά βήματα

Όπως φαίνεται από την προηγούμενη ενότητα, παρότι η ΔΕ κατέληξε σε κάποια σημαντικά και χρήσιμα συμπεράσματα, υπάρχουν ακόμη αρκετά σημεία που θα πρέπει να διερευνηθούν περαιτέρω στο μέλλον.

Άμεση προτεραιότητα στο μέλλον θα πρέπει να αποτελέσει η συνέχιση της πειραματικής διαδικασίας, με την εισαγωγή των φίλτρων που προσομοιώθηκαν, τον έλεγχο της διεγείρουσας ακτινοβολίας με τη βοήθεια του ανιχνευτή NaI και την εισαγωγή δειγμάτων βαρύτερων στοιχείων, κατά προτίμηση ουρανίου. Επίσης άλλα βήματα που θα ήταν ενδιαφέρον να γίνουν σε κάποια μελλοντική εργασία θα ήταν τα εξής:

- Η διερεύνηση του τρόπου με τον οποίο μπορούν να προσομοιωθούν πλήρως τα φαινόμενα που σχετίζονται με την πόλωση της φωτονιακής ακτινοβολίας, με χρήση του προγράμματος PENELOPE ή άλλου αντίστοιχου κώδικα προσομοίωσης (π.χ. Geant4).
- Η συγκρότηση διάταξης γεωμετρίας τριών αξόνων και πειραματική επαλήθευση της τεχνικής μείωσης υποστρώματος, με εκμετάλλευση των φαινομένων πόλωσης της ακτινοβολίας.
- Ο σχεδιασμός αποδοτικού κατευθυντή δέσμης, ο οποίος να προσαρμόζεται στις διαθέσιμες δυνατότητες στο ΕΠΤ-ΕΜΠ, με χρήση τεχνικών προσομοίωσης και η κατασκευή και ενσωμάτωση του κατευθυντή στη διάταξη XRF.
- Ο σχεδιασμός και η κατασκευή κατευθυντή δέσμης τύπου μάσκας που θα περιβάλλει τον ανιχνευτή, με στόχο τη μείωση της σκεδαζόμενης ακτινοβολίας που φτάνει στον ανιχνευτή.
- Η μελέτη της διαμόρφωσης του χώρου της βιομηχανικής ραδιογραφίας, όπου βρίσκεται εγκατεστημένη η διάταξη XRF, με τρόπο τέτοιο, ώστε να επιτυγχάνεται μείωση των σκεδάσεων που προκαλούν θόρυβο στο φάσμα του ανιχνευτή.
- Η χρήση πραγματικών δειγμάτων προς ακτινοβολήση στη διάταξη XRF (π.χ. ορυκτά ή δείγματα χώματος).
- Η μελέτη και η δημιουργία βοηθητικής διάταξης/μηχανισμού τοποθέτησης και συγκράτησης δείγματος με μεγαλύτερη ακρίβεια, που θα προσφέρει οφέλη σε ό,τι αφορά την επαναληψιμότητα των πειραμάτων.
- Η συγκρότηση, επιπλέον, της πειραματικής διάταξης ανίχνευσης REE με χρήση του ανιχνευτή Si-PIN.
- Η διερεύνηση χρήσης ραδιοϊσοτόπων ως εναλλακτική για τη μηχανή ακτίνων-Χ υψηλής ενέργειας. Εκτός από τα γενικά οφέλη που προσφέρουν τα ραδιοϊσότοπα, τα οποία αναλύθηκαν στην ενότητα 2.9.3, επιπλέον οι πηγές μπορούν να επιλεγθούν να είναι περιορισμένης ραδιενέργειας, εξαλείφοντας έτσι το ενδεχόμενο πρόκλησης βλάβης στον ανιχνευτή λόγω κορεσμού.
- Η δημιουργία, με τη βοήθεια προσομοίωσης και προηγούμενων εργασιών, καταλόγου βέλτιστου συνδυασμού διεγείρουσας ακτινοβολίας και φίλτρων, ανάλογα με τα στοιχεία που επιδιώκεται να ανιχνευτούν στο δείγμα, για περισσότερα στοιχεία εκτός του ουρανίου και των 4 σπανίων γαιών που μελετήθηκαν στην παρούσα ΔΕ.
- Η εφαρμογή διεύρυνσης των κορυφών (peak broadening) των φασμάτων που προκύπτουν από την προσομοίωση, σύμφωνα με τη διακριτική ικανότητα του χρησιμοποιούμενου ανιχνευτή, ώστε να καταστεί δυνατός ο ποσοτικός καθορισμός του ορίου ανίχνευσης (limit of detection) των ιχνοστοιχείων του δείγματος. Χωρίς την διεύρυνση της φωτοκορυφής, ώστε αυτή να προσομοιάζει σε πραγματική φωτοκορυφή του φάσματος δεν έχει νόημα η εκτίμηση του κατωτέρου επιπέδου ανίχνευσης του ανιχνευόμενου στοιχείου.
- Η εξαγωγή ποσοτικών συμπερασμάτων μέσω της προσομοίωσης είναι μία δύσκολη διαδικασία που θα πρέπει να ερευνηθεί στο μέλλον περισσότερο. Το πρώτο βήμα για αυτό είναι το peak broadening που αναφέρθηκε παραπάνω, είναι όμως απαραίτητη και η πιο

λεπτομερής μοντελοποίηση όλων των στοιχείων της διάταξης και του περιβάλλοντος χώρου.

Τέλος, ένα από τα σημαντικότερα προβλήματα που αντιμετωπίστηκαν στην προσπάθεια αυτή, αποτέλεσε η ταχύτητα των προσομοιώσεων. Πολλές φορές ήταν εξαιρετικά χρονοβόρες, απαιτώντας χρόνους της τάξης των πολλών ημερών για την επίτευξη ικανοποιητικής στατιστικής αποτελεσμάτων. Κρίνεται λοιπόν αναγκαία η μελλοντική μελέτη μεθόδων με τις οποίες μπορεί να επιταχυνθεί η διαδικασία της προσομοίωσης για την εξοικονόμηση χρήσιμου χρόνου.





# ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ Α

Πίνακας Α.1: Χαρακτηριστικές ακτίνες-Χ και αιχμές απορρόφησης για τη σειρά Κ σε keV

Atomic number and element	K-series					
	K edge	KN <sub>III</sub>	KM <sub>III</sub>	KM <sub>II</sub>	KL <sub>III</sub>	KL <sub>II</sub>
		Kβ <sub>2</sub>	Kβ <sub>1</sub>	Kβ <sub>3</sub>	Kα <sub>1</sub>	Kα <sub>2</sub>
Intensity	—	2–5	~20	~10	100	50–53
4Be	0.115					0.109
5B	0.188					0.183
6C	0.282					0.277
7N	0.397					0.393
8O	0.533					0.525
9F	0.692					0.677
10Ne	0.874			0.858		0.848
11Na	1.080			1.071		1.041
12Mg	1.309			1.302		1.253
13Al	1.562			1.557	1.487	1.486
14Si	1.840			1.836	1.740	1.739
15P	2.143			2.139	2.014	2.013
16S	2.471			2.464	2.308	2.307
17Cl	2.824			2.816	2.622	2.620
18Ar	3.203			3.19	2.958	2.956
19K	3.607			3.59	3.314	3.311
20Ca	4.034			4.013	3.692	3.688
21Sc	4.486			4.461	4.090	4.086
22Ti	4.965			4.932	4.511	4.505
23V	5.463			5.427	4.952	4.944
24Cr	5.987			5.947	5.415	5.405
25Mn	6.537			6.49	5.899	5.888
26Fe	7.112			7.058	6.404	6.391
27Co	7.712			7.649	6.930	6.915
28Ni	8.339			8.265	7.478	7.461
29Cu	8.993		8.905	8.903	8.048	8.028
30Zn	9.673	9.6581	9.572	9.567	8.639	8.616
31Ga	10.386	10.3661	10.271	10.261	9.252	9.231
32Ge	11.115	11.1011	10.983	10.978	9.887	9.856
33As	11.877	11.8641	11.727	11.721	10.544	10.509
34Se	12.666	12.6521	12.496	12.489	11.222	11.181
35Br	13.483	13.4701	13.292	13.285	11.924	11.878

Πίνακας Α.1(συνέχεια): Χαρακτηριστικές ακτίνες-Χ και αιχμές απορρόφησης για τη σειρά Κ σε keV

Atomic number and element	K-series					
	K	KN <sub>III</sub>	KM <sub>III</sub>	KM <sub>II</sub>	KL <sub>III</sub>	KL <sub>II</sub>
	edge	Kβ <sub>2</sub>	Kβ <sub>1</sub>	Kβ <sub>3</sub>	Kα <sub>1</sub>	Kα <sub>2</sub>
Intensity	—	2–5	~20	~10	100	50–53
36Kr	14.330	14.3151	14.113	14.105	12.650	12.598
37Rb	15.202	15.1851	14.962	14.952	13.396	13.336
38Sr	16.106	16.0851	15.836	15.826	14.166	14.098
39Y	17.037	17.0151	16.737	16.725	14.958	14.882
40Zr	17.997	17.9631	17.662	17.649	15.770	15.692
41Nb	18.985	18.9471	18.623	18.606	16.615	16.521
42Mo	20.002	19.960	19.608	19.590	17.479	17.374
43Tc	21.048	21.002	20.619	20.599	18.367	18.251
44Ru	22.123	22.072	21.656	21.637	19.279	19.150
45Rh	23.229	23.173	22.723	22.698	20.216	20.073
46Pd	24.365	24.303	23.819	23.792	21.178	21.021
47Ag	25.531	25.463	24.943	24.912	22.163	21.991
48Cd	26.727	26.653	26.095	26.061	23.173	22.985
49In	27.953	27.872	27.275	27.237	24.209	24.002
50Sn	29.211	29.122	28.491	28.439	25.272	25.044
51Sb	30.499	30.402	29.725	29.677	26.359	26.110
52Te	31.817	31.712	30.995	30.944	27.472	27.201
53I	33.168	33.054	32.295	32.239	28.612	28.317
54Xe	34.551	34.428	33.625	33.562	29.779	29.459
55Cs	35.966	35.833	34.985	34.918	30.973	30.625
56Ba	37.414	37.270	36.378	36.303	32.194	31.817
57La	38.894	38.739	37.802	37.721	33.442	33.034
58Ce	40.410	40.243	39.258	39.170	34.720	34.279
59Pr	41.958	41.778	40.748	40.653	36.026	35.550
60Nd	43.538	43.345	42.272	42.166	37.361	36.847
61Pm	45.152	44.947	43.825	43.713	38.725	38.171
62Sm	46.801	46.584	45.413	45.289	40.118	39.523
63Eu	48.486	48.256	47.036	46.902	41.542	40.902
64Gd	50.207	49.964	48.696	48.554	42.996	42.309
65Tb	51.965	51.709	50.382	50.228	44.481	43.744
66Dy	53.761	53.491	52.119	51.956	45.999	45.208
67Ho	55.593	55.308	53.878	53.707	47.547	46.699
68Er	57.464	57.164	55.681	55.491	49.128	48.221
69Tm	59.374	59.059	57.513	57.303	50.742	49.773
70Yb	61.322	60.991	59.374	59.157	52.389	51.354

Πίνακας Α.1(συνέχεια): Χαρακτηριστικές ακτίνες-Χ και αιχμές απορρόφησης για τη σειρά Κ σε keV

Atomic number and element	K-series					
	K	KN <sub>III</sub>	KM <sub>III</sub>	KM <sub>II</sub>	KL <sub>III</sub>	KL <sub>II</sub>
	edge	Kβ <sub>2</sub>	Kβ <sub>1</sub>	Kβ <sub>3</sub>	Kα <sub>1</sub>	Kα <sub>2</sub>
Intensity	—	2–5	~20	~10	100	50–53
71Lu	63.311	62.960	61.286	61.049	54.070	52.965
72Hf	65.345	64.973	63.236	62.979	55.790	54.611
73Ta	67.405	67.011	65.221	64.946	57.533	56.277
74W	69.517	69.100	67.244	66.951	59.318	57.982
75Re	71.670	71.230	69.309	68.994	61.140	59.718
76Os	73.869	73.404	71.416	71.077	63.001	61.487
77Ir	76.111	75.620	73.560	73.203	64.896	63.287
78Pt	78.400	77.883	75.751	75.364	66.832	65.123
79Au	80.729	80.182	77.985	77.580	68.804	66.990
80Hg	83.109	82.532	80.261	79.822	70.819	68.894
81Tl	83.532	84.924	82.575	82.384	72.872	70.832
82Pb	88.008	87.367	84.936	84.450	74.969	72.804
83Bi	90.540	89.866	87.354	86.831	77.118	74.815
84Po	93.113	92.403	89.801	89.250	79.301	76.863
85At	95.730	94.983	92.302	91.722	81.523	78.943
86Rn	98.402	97.617	94.866	94.246	83.793	81.065
87Fr	101.131	100.306	97.477	96.807	86.114	83.231
88Ra	103.909	103.039	100.130	99.432	88.476	85.434
89Ac	106.738	105.837	102.846	102.101	90.884	87.675
90Th	109.641	108.690	105.611	104.831	93.358	89.952
91Pa	112.599	111.606	108.435	107.606	95.883	92.287
92U	115.606	114.561	111.303	110.424	98.440	94.659
93Np	118.678	117.591	114.243	113.312	101.068	97.077
94Pu	121.818	120.703	117.261	116.277	103.761	99.552
95Am	125.027	123.891	120.360	119.317	106.523	102.083
96Cm	128.220	127.066	123.423	122.325	109.290	104.441
97Bk	131.590	130.355	126.663	125.443	112.138	107.205
98Cf	135.960	134.681	130.851	129.601	116.030	110.710
99Es	139.490	138.169	134.238	132.916	119.080	113.470
100Fm	143.090	141.724	137.693	136.347	122.190	116.280
101Md	146.780	145.370	141.234	139.761	125.390	119.170
102No	150.540	149.092	144.852	143.295	128.660	122.100
103Lw	154.380	152.900	148.670	146.920	132.020	125.100

Πίνακας Α.2: Χαρακτηριστικές ακτίνες-Χ και αιχμές απορρόφησης για τη σειρά L σε keV

Atomic number and element	L-series											
	L <sub>I</sub>	L <sub>II</sub> N <sub>III</sub>	L <sub>II</sub> M <sub>III</sub>	L <sub>II</sub> M <sub>II</sub>	L <sub>II</sub>	L <sub>II</sub> N <sub>IV</sub>	L <sub>II</sub> M <sub>IV</sub>	L <sub>III</sub>	L <sub>III</sub> N <sub>V</sub>	L <sub>III</sub> M <sub>V</sub>	L <sub>III</sub> M <sub>IV</sub>	L <sub>III</sub> M <sub>I</sub>
	edge	Lγ <sub>3</sub>	Lβ <sub>3</sub>	Lβ <sub>4</sub>	edge	Lγ <sub>1</sub>	Lβ <sub>1</sub>	edge	Lβ <sub>2</sub>	Lα <sub>1</sub>	Lα <sub>2</sub>	L <sub>I</sub>
Intensity	—	~5	50–35	20	—	~5	~50	—	~5	~90	10	20–5
4Be								0.006				
5B								0.005				
6C								0.005				
7N								0.004				
8O								0.008				
9F								0.015				
10Ne								0.026				
11Na								0.039				
12Mg	0.062							0.056				
13Al	0.087				0.076			0.075				
14Si	0.118				0.101			0.100				
15P	0.153				0.130			0.129				
16S	0.193				0.164			0.163				
17Cl	0.237				0.204			0.202				
18Ar	0.286				0.247			0.245				
19K	0.340				0.296			0.293				
20Ca	0.403				0.346			0.342				
21Sc	0.462				0.400	0.400	0.396		0.395		0.348	
22Ti	0.529				0.460	0.458	0.454		0.452		0.395	
23V	0.626		0.585		0.519	0.519	0.511		0.511		0.446	
24Cr	0.694		0.654		0.582	0.583	0.572		0.573		0.500	
25Mn	0.768		0.721		0.649	0.649	0.638		0.637		0.556	
26Fe	0.846		0.792		0.721	0.719	0.708		0.705		0.615	
27Co	0.929		0.87		0.797	0.791	0.782		0.776		0.678	
28Ni	1.016		0.941		0.878	0.869	0.861		0.852		0.743	
29Cu	1.109		1.023	1.019	0.965	0.950	0.945		0.93		0.811	
30Zn	1.208		1.107	1.102	1.057	1.035	1.034		1.012		0.884	
31Ga	1.316		1.197	1.191	1.155	1.125	1.134		1.098		0.957	
32Ge	1.426		1.294	1.289	1.259	1.218	1.228		1.188		1.036	
33As	1.536		1.386	1.380	1.368	1.316	1.333		1.282		1.120	
34Se	1.662		1.492	1.485	1.485	1.419	1.444		1.379		1.204	
35Br	1.791		1.600	1.593	1.605	1.523	1.559		1.48		1.294	

Πίνακας Α.2(συνέχεια): Χαρακτηριστικές ακτίνες-Χ και αιχμές απορρόφησης για τη σειρά L σε keV

Atomic number and element	L-series											
	L <sub>I</sub>	L <sub>II</sub> N <sub>III</sub>	L <sub>II</sub> M <sub>III</sub>	L <sub>II</sub> M <sub>II</sub>	L <sub>II</sub>	L <sub>II</sub> N <sub>IV</sub>	L <sub>II</sub> M <sub>IV</sub>	L <sub>III</sub>	L <sub>III</sub> N <sub>V</sub>	L <sub>III</sub> M <sub>V</sub>	L <sub>III</sub> M <sub>IV</sub>	L <sub>III</sub> M <sub>I</sub>
	edge	Lγ <sub>3</sub>	Lβ <sub>3</sub>	Lβ <sub>4</sub>	edge	Lγ <sub>1</sub>	Lβ <sub>1</sub>	edge	Lβ <sub>2</sub>	Lα <sub>1</sub>	Lα <sub>2</sub>	L <sub>I</sub>
Intensity	—	~5	50–35	20	—	~5	~50	—	~5	~90	10	20–5
36Kr	1.923		1.706	1.698	1.732		1.637	1.680		1.586		1.386
37Rb	2.067	2.0512	1.827	1.817	1.866		1.752	1.806		1.694	1.692	1.482
38Sr	2.217	2.1972	1.947	1.937	2.008		1.872	1.940		1.806	1.804	1.582
39Y	2.372	2.3472	2.072	2.060	2.155		1.996	2.079		1.923	1.920	1.685
40Zr	2.535	2.5032	2.200	2.187	2.305	2.292	2.118	2.227	2.215	2.043	2.040	1.792
41Nb	2.698	2.6602	2.336	2.319	2.464	2.449	2.257	2.370	2.357	2.166	2.163	1.902
42M	2.867	2.8252	2.473	2.455	2.628	2.611	2.396	2.523	2.508	2.295	2.291	2.016
43Tc	3.047	3.0012	2.618	2.598	2.797	2.778	2.537	2.681	2.664	2.424	2.421	2.131
44Ru	3.230	3.1792	2.763	2.744	2.973	2.952	2.683	2.844	2.825	2.556	2.554	2.253
45Rh	3.421	3.3652	2.915	2.890	3.156	3.132	2.835	3.013	2.992	2.698	2.692	2.377
46Pd	3.619	3.557	3.073	3.046	3.344	3.318	2.990	3.187	3.163	2.838	2.833	2.503
47Ag	3.822	3.754	3.234	3.203	3.540	3.511	3.151	3.368	3.342	2.985	2.979	2.634
48Cd	4.034	3.960	3.402	3.368	3.742	3.710	3.319	3.554	3.525	3.134	3.131	2.767
49In	4.250	4.169	3.572	3.534	3.951	3.915	3.487	3.744	3.712	3.288	3.280	2.905
50Sn	4.475	4.377	3.750	3.703	4.167	4.127	3.661	3.939	3.903	3.442	3.433	3.045
51Sb	4.706	4.609	3.932	3.884	4.389	4.345	3.843	4.140	4.101	3.604	3.594	3.189
52Te	4.942	4.837	4.120	4.069	4.616	4.568	4.030	4.345	4.302	3.770	3.759	3.336
53I	5.186	5.072	4.313	4.257	4.851	4.799	4.221	4.556	4.509	3.938	3.926	3.485
54Xe	5.442	5.319	4.516	4.453	5.092	5.035	4.415	4.772	4.720	4.110	4.095	3.625
55Cs	5.700	5.567	4.719	4.652	5.341	5.278	4.619	4.993	4.936	4.289	4.271	3.795
56Ba	5.964	5.820	4.928	4.853	5.597	5.529	4.827	5.220	5.158	4.470	4.450	3.954
57La	6.235	6.080	5.143	5.062	5.860	5.786	5.037	5.452	5.385	4.651	4.629	4.122
58Ce	6.516	6.349	5.364	5.276	6.131	6.051	5.261	5.690	5.617	4.839	4.820	4.289
59Pr	6.802	6.622	5.592	5.497	6.408	6.321	5.485	5.932	5.853	5.034	5.009	4.455
60Nd	7.095	6.902	5.829	5.723	6.69	6.597	5.722	6.177	6.091	5.231	5.208	4.633
61Pm	7.398	7.193	6.071	5.959	6.98	6.880	5.962	6.427	6.334	5.433	5.408	4.785
62Sm	7.707	7.490	6.319	6.195	7.27	7.169	6.205	6.683	6.582	5.635	5.610	4.995
63Eu	8.024	7.794	6.574	6.440	7.58	7.467	6.455	6.944	6.835	5.843	5.815	5.177
64Gd	8.343	8.100	6.832	6.690	7.88	7.772	6.713	7.211	7.034	6.058	6.026	5.362
65Tb	8.679	8.423	7.096	6.942	8.221	8.086	6.976	7.484	7.358	6.273	6.239	5.547
66Dy	9.013	8.743	7.37	7.20	8.553	8.409	7.249	7.762	7.627	6.496	6.458	5.743
67Ho	9.365	9.080	7.650	7.479	8.894	8.740	7.529	8.046	7.901	6.719	6.681	5.944
68Er	9.725	9.425	7.942	7.752	9.243	9.078	7.813	8.336	8.180	6.951	6.906	6.153
69Tm	10.097	9.782	8.236	8.026	9.601	9.426	8.103	8.632	8.465	7.181	7.134	6.342
70Yb	10.479	10.148	8.531	8.314	9.968	9.781	8.402	8.933	8.755	7.415	7.367	6.546

Πίνακας Α.2(συνέχεια): Χαρακτηριστικές ακτίνες-Χ και αιχμές απορρόφησης για τη σειρά L σε keV

Atomic number and element	L-series											
	L <sub>I</sub>	L <sub>II</sub> N <sub>III</sub>	L <sub>I</sub> M <sub>III</sub>	L <sub>I</sub> M <sub>II</sub>	L <sub>II</sub>	L <sub>II</sub> N <sub>IV</sub>	L <sub>II</sub> M <sub>IV</sub>	L <sub>III</sub>	L <sub>III</sub> N <sub>V</sub>	L <sub>III</sub> M <sub>V</sub>	L <sub>III</sub> M <sub>IV</sub>	L <sub>III</sub> M <sub>I</sub>
	edge	Lγ <sub>3</sub>	Lβ <sub>3</sub>	Lβ <sub>4</sub>	edge	Lγ <sub>1</sub>	Lβ <sub>1</sub>	edge	Lβ <sub>2</sub>	Lα <sub>1</sub>	Lα <sub>2</sub>	L <sub>I</sub>
Intensity	—	~5	50–35	20	—	~5	~50	—	~5	~90	10	20–5
71Lu	10.869	10.518	8.844	8.607	10.346	10.144	8.709	9.241	9.049	7.655	7.604	6.753
72Hf	11.262	10.890	9.153	8.896	10.734	10.517	9.016	9.555	9.348	7.891	7.837	6.960
73Ta	11.672	11.278	9.488	9.213	11.128	10.894	9.345	9.872	9.649	8.147	8.089	7.173
74W	12.092	11.675	9.819	9.526	11.535	11.284	9.671	10.199	9.959	8.396	8.335	7.388
75Re	12.522	12.082	10.161	9.846	11.952	11.682	10.006	10.530	10.273	8.651	8.584	7.604
76Os	12.968	12.503	10.515	10.176	12.382	12.092	10.349	10.868	10.592	8.905	8.835	7.822
77Ir	13.416	12.925	10.865	10.508	12.824	12.514	10.705	11.215	10.919	9.175	9.096	8.046
78Pt	13.880	13.363	11.231	10.844	13.277	12.944	11.073	11.568	11.251	9.439	9.364	8.271
79Au	14.353	13.806	11.609	11.204	13.739	13.383	11.432	11.925	11.585	9.705	9.618	8.494
80Hg	14.835	14.258	11.987	11.548	14.215	13.834	11.823	12.290	11.927	9.999	9.898	8.722
81Tl	15.344	14.736	13.387	12.196	14.700	14.293	12.217	12.660	12.272	10.271	10.117	8.953
82Pb	15.863	15.222	12.791	12.305	15.204	14.769	12.618	13.039	12.625	10.555	10.453	9.185
83Bi	16.391	15.717	13.205	12.682	15.725	15.261	13.031	13.422	12.981	10.836	10.728	9.421
84Po	16.940	16.230	13.628	13.077	16.250	15.756	13.452	13.812	13.342	11.131	11.014	9.664
85At	17.495	16.748	14.067	13.487	16.787	16.262	13.882	14.207	13.708	11.427	11.302	9.858
86Rn	18.047	17.262	14.511	13.891	17.337	16.777	14.323	14.609	14.079	11.727	11.595	10.085
87Fr	18.630	17.805	14.976	14.306	17.900	17.307	14.775	15.017	14.456	12.031	11.892	10.340
88Ra	19.222	18.352	15.443	14.745	18.475	17.848	15.238	15.433	14.839	12.340	12.196	10.622
89Ac	19.823	18.922	15.931	15.186	19.063	18.402	15.711	15.854	15.227	12.652	12.502	10.835
90Th	20.449	19.498	16.419	15.639	19.689	18.993	16.215	16.283	15.622	12.970	12.809	11.119
91Pa	21.088	20.095	16.924	16.095	20.312	19.581	16.715	16.716	16.022	13.300	13.119	11.366
92U	21.757	20.712	17.454	16.575	20.947	20.167	17.219	17.166	16.429	13.614	13.438	11.619
93Np	22.427	21.340	17.992	17.061	21.601	20.785	17.751	17.610	16.840	13.944	13.760	11.890
94Pu	23.097	21.982	18.540	17.556	22.266	21.417	18.293	18.057	17.256	14.279	14.084	12.124
95Am	23.773	22.637	19.106	18.063	22.944	22.065	18.852	18.504	17.676	14.617	14.412	12.384
96Cm	24.460	23.306	19.663	18.565	23.779		19.552	18.930		14.959	14.703	
97Bk	25.275	24.040	20.348	19.128	24.385		20.019	19.452		15.320	15.086	
98Cf	26.110	24.831	21.001	19.751	25.250		20.763	19.930		15.677	15.443	
99Es	26.900	25.579	21.648	20.326	26.020		21.390	20.410		16.036	15.780	
100Fm	27.700	26.334	22.303	20.957	26.810		22.044	20.900		16.402	16.134	
101Md	28.530	27.120	22.984	21.511	27.610		22.707	21.390		16.768	16.487	
102No	29.380	27.932	23.692	22.135	28.440		23.403	21.880		17.139	16.843	
103Lw	30.240	28.760	24.530	22.780	29.28		24.130	22.360		17.500	17.210	

Πίνακας Α.3: Χαρακτηριστικές ακτίνες-Χ και αιχμές απορρόφησης για τη σειρά Μ σε keV

Atomic number and element	M-series							
	M <sub>II</sub> N <sub>IV</sub>	M <sub>III</sub>	M <sub>III</sub> N <sub>V</sub>	M <sub>IV</sub>	M <sub>IV</sub> N <sub>VI</sub>	M <sub>V</sub>	M <sub>V</sub> N <sub>VII</sub>	M <sub>V</sub> N <sub>VI</sub>
		edge	M $\gamma$	edge	M $\beta$	edge	M $\alpha_1$	M $\alpha_2$
Intensity		—		—		—		
29Cu				0.015				
30Zn				0.022				
31Ga		0.115		0.030				
32Ge		0.132		0.041				
33As		0.150		0.052				
34Se		0.170		0.066				
35Br		0.191		0.082				
36Kr		0.217		0.095				
37Rb		0.240		0.114		0.112		
38Sr		0.270		0.136		0.134		
39Y		0.300		0.159		0.156		
40Zr		0.335	0.323	0.187		0.184		
41Nb		0.362	0.349	0.207		0.204		
42Mo		0.394	0.379	0.232		0.228		
43Tc		0.429	0.412	0.260		0.257		
44Ru		0.467	0.448	0.290		0.288		
45Rh		0.506	0.485	0.321		0.315		
46Pd		0.546	0.522	0.354		0.349		
47Ag		0.588	0.562	0.389		0.383		
48Cd		0.632	0.603	0.423		0.420		
49In		0.678	0.646	0.464		0.456		
50Sn		0.720	0.684	0.506		0.497		
51Sb		0.774	0.735	0.537		0.527		
52Te		0.822	0.779	0.583		0.572		
53I		0.873	0.826	0.631		0.619		
54Xe		0.926	0.874	0.678		0.672		
55Cs		0.981	0.924	0.740		0.726		
56Ba		1.036	0.974	0.796		0.781		
57La		1.092	1.025	0.854	0.854	0.833	0.833	
58Ce		1.152	1.079	0.902	0.902	0.883	0.883	
59Pr		1.210	1.131	0.951	0.950	0.931	0.929	
60Nd		1.266	1.180	1.000	0.997	0.978	0.978	
61Pm		1.327	1.234	1.052		1.027		
62Sm		1.388	1.287	1.106	1.100	1.081	1.081	
63Eu		1.450	1.341	1.161	1.153	1.131	1.131	
64Gd		1.511	1.334	1.217	1.209	1.185	1.185	
65Tb		1.583	1.457	1.275	1.266	1.241	1.24	
66Dy		1.642	1.507	1.333	1.325	1.295	1.293	



Πίνακας Α.3(συνέχεια): Χαρακτηριστικές ακτίνες-Χ και αιχμές απορρόφησης για τη σειρά Μ σε keV

Atomic number and element	M-series							
	M <sub>II</sub> N <sub>IV</sub>	M <sub>III</sub>	M <sub>III</sub> N <sub>V</sub>	M <sub>IV</sub>	M <sub>IV</sub> N <sub>VI</sub>	M <sub>V</sub>	M <sub>V</sub> N <sub>VII</sub>	M <sub>V</sub> N <sub>VI</sub>
		edge	M <sub>γ</sub>	edge	M <sub>β</sub>	edge	M <sub>α</sub> <sub>1</sub>	M <sub>α</sub> <sub>2</sub>
Intensity		—		—		—		
67Ho		1.715	1.570	1.392	1.383	1.351	1.348	
68Er		1.783	1.627	1.453	1.443	1.409	1.406	
69Tm		1.861	1.694	1.515	1.503	1.468	1.462	
70Yb		1.948	1.770	1.576	1.568	1.528	1.521	
71Lu		2.025	1.833	1.637	1.623	1.586	1.572	
72Hf		2.109	1.902	1.718	1.700	1.664	1.646	
73Ta		2.184	1.961	1.783	1.760	1.725	1.702	
74W		2.273	2.033	1.864	1.835	1.803	1.776	1.774
75Re		2.361	2.104	1.946	1.910	1.879	1.845	1.843
76Os		2.453	2.177	2.033	1.988	1.963	1.921	1.918
77Ir		2.551	2.255	2.119	2.062	2.040	1.988	1.983
78Pt		2.649	2.332	2.204	2.134	2.129	2.065	2.059
79Au		2.744	2.404	2.307	2.220	2.220	2.142	2.133
80Hg		2.848	2.485	2.392	2.285	2.291	2.195	2.184
81Tl	3.012	2.957	2.569	2.483	2.360	2.389	2.270	2.266
82Pb	3.125	3.072	2.658	2.586	2.442	2.484	2.345	2.340
83Bi	3.234	3.186	2.745	2.694	2.534	2.586	2.422	2.426
84Po	3.354	3.312	2.842	2.798	2.620	2.681	2.501	2.503
85At	3.475	3.428	2.929	2.905	2.707	2.780	2.581	2.582
86Rn	3.593	3.536	3.006	3.014	2.794	2.882	2.663	2.662
87Fr	3.724	3.654	3.093	3.125	2.881	2.986	2.746	2.742
88Ra	3.853	3.779	3.185	3.237	2.967	3.093	2.829	2.823
89Ac	3.981	3.892	3.265	3.352	3.054	3.202	2.913	2.904
90Th	4.118	4.030	3.369	3.474	3.145	3.313	2.996	2.984
91Pa	4.261	4.164	3.470	3.597	3.251	3.416	3.083	3.070
92U	4.401	4.303	3.566	3.728	3.337	3.552	3.171	3.161
93Np	4.543	4.435	3.665	3.850	3.435	3.666	3.262	3.251
94Pu	4.699	4.557	3.756	3.973	3.527	3.778	3.346	3.332
95Am		4.667	3.839	4.092		3.887		
96Cm		4.797		4.227		3.971		
97Bk		4.927		4.366		4.132		
98Cf		5.109		4.487		4.253		
99Es		5.252		4.630		4.374		
100Fm		5.397		4.766		4.498		
101Md		5.546		4.903		4.622		
102No		5.688		5.037		4.741		
103Lw		5.710		5.150		4.860		

## ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ Β

Πίνακας Β.1: Ονοματολογία χαρακτηριστικών ακτίνων-Χ κατά Siegbahn και κατά IUPAC (Jenkins, Gould and Gedcke, 1995)

Siegbahn	IUPAC	Siegbahn	IUPAC	Siegbahn	IUPAC	Siegbahn	IUPAC
Kα1	K-L3	Lα1	L3-M5	Ly1	L2-N4	Mα1	M5-N7
Kα2	K-L2	Lα2	L3-M4	Ly2	L1-N2	Mα2	M5-N6
Kβ1	K-M3	Lβ1	L2-M4	Ly3	L1-N3	Mβ1	M4-N6
Kβ2	K-N2,3	Lβ2	L3-N5	Ly4	L1-O3	Mγ1	M3-N5
Kβ3	K-M2	Lβ3	L1-M3	Ly'4	L1-O2	Mγ2	M3-N4
Kβ4	K-N4,5	Lβ4	L1-M2	Ly5	L2-N1	Mζ	M4,5-N2,3
Kβ5	K-M4,5	Lβ5	L3-O4,5	Ly6	L2-O4		
		Lβ6	L3-N1	Ly8	L2-O1		
		Lβ7	L3-O1	Lη	L2-M1		
		Lβ'7	L3-N6,7	Lℓ	L3-M1		
		Lβ9	L1-M5	Ls	L3-M3		
		Lβ10	L1-M4	Lt	L3-M2		
		Lβ15	L3-N4	Lu	L3-N6,7		
		Lβ17	L2-M3				



# ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ Γ



## DETECTOR SPECIFICATION AND PERFORMANCE DATA AFTER REPAIR

### Specifications

Detector Model BE3825 Serial number b 04070  
Cryostat Model 7935SL-7  
Preamplifier Model 2002CSL

Cryostat description or Drawing Number if special Multi Attitude cryostat, type 7935SL-7

### Physical Characteristics

Active Diameter 70 mm Distance from window (outside) 5 mm  
Active Area 3800 mm<sup>2</sup> Window thickness 0.5 mm  
Thickness 25 mm Window material Carbon Epoxy

### Electrical Characteristics

Depletion voltage (+)3000 Vdc  
Recommended bias voltage Vdc (+)3500 Vdc  
Reset rate at recommended bias 1 sec (PO preamp only)  
Preamplifier test point voltage at recommended bias -0.6 Vdc (RC preamp only)

### Resolution and Efficiency

With amp time constant of 4  $\mu$ s

Isotope	<sup>55</sup> Fe	<sup>57</sup> Co	<sup>60</sup> Co		
Energy (keV)	5.9	122	1332.5		
FWHM (eV)	440	658	1780		
FWTM (eV)		1204	3295		

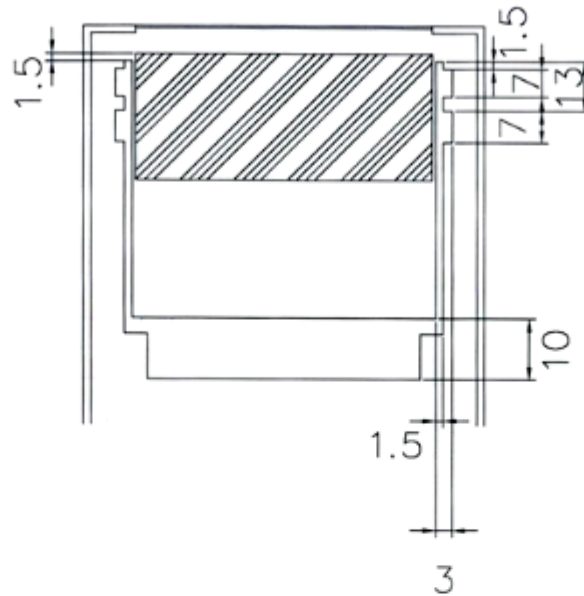
- Tests are performed following IEEE standard test ANSI/IEEE std325-1996
- Standard Canberra electronics used - See Germanium detector manual Section 7

Tested by :  Date : January 25, 2007

Approved by :  Date : January 25, 2007

*CANBERRA Semiconductor is an ISO 9000 certified company*

S/N 04070



### Ge Crystal Details

Entrance Window Thickness: 0.4  $\mu\text{m}$  eq. Ge.  
 Outer Electrode Thickness: 0.75 mm estimated  
 Crystal Diameter: 71 mm  
 Crystal Length: 25 mm

### Detector Chamber Material Details

Ge front to inside of endcap distance: 5 mm  
 Cryostat Window Material: Carbon Epoxy Thickness: 0.5 mm  
 Endcap Material: Al Thickness: 1.5 mm  
 Crystal Holder Material: Cu

CONFIDENTIAL

Unauthorized duplication of information  
 herein is strictly prohibited.

<b>INNER DRAWING 3800 BGe</b>			Appr.:
Date: 03/04/07		Doc: MCNPbe38	
MAT:		Auth.: Mar	
SCALE: not to scale	Ra:	Bestelnr: b 04070	
TOL:		Aantal:	

Σχήμα Γ.2: Πιστοποιητικό του ανιχνευτή BGe (συνέχεια)

# ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ Δ

MODEL XR-100T SPECIFICATIONS		MODEL PX2T POWER SUPPLY & SHAPING AMPLIFIER	
<b>GENERAL</b>		<b>GENERAL</b>	
Detector Type:	Si-PIN	Size:	6 X 6 X 3.5 inches (9.5 X 15.3 X 8.9 cm)
Detector Size:	2.4 X 2.8 mm (7 mm <sup>2</sup> )	Weight:	2.5 lbs (1.15 kg)
Silicon Thickness:	300 μm. See Figure 2.	Input AC power to the PX2T is provided through a Standard IEC 320 plug (110/250 VAC, 50-60 Hz). See Figure 1.	
Energy Resolution @ 5.9 keV, <sup>55</sup> Fe:	250 eV FWHM, typical	The four (4) DC Voltages needed to operate the XR-100T are supplied through a female 9-Pin D-Connector on the PX2T. The Pin list to this connector is given below. The multiconductor cable which connects the PX2T to the XR-100T is provided with the system.	
Background counts:	<3 x 10 <sup>-3</sup> /s, 2keV to 150keV	<b>9-PIN D-CONNECTOR ON THE PX2T</b>	
Detector Window:	Be, 1 mil thick (25 μm) See Figure 3.	Pin 1:	+8 Volt Preamp Power
Large Sensitive Preamplifier:	Amptek Model A250 with Current Divider Feedback	Pin 2:	-8 Volt Preamp Power
Case Size:	3.75 x 1.75 x 1.13 in (9.5 x 4.4 x 2.9 cm)	Pin 3:	0 to +3 Volt Cooler Power @ 0.7 A max.
Weight:	4.4 ounces (125 gm)	Pin 4:	+ 8 Volt Temperature Monitor Power
Total Power:	< 1 Watt	Pin 5:	+ H.V. Detector Bias, +110 Volt max.
<b>INPUTS</b>		Pin 6:	Ground and Case
1st Input:	1mV/keV, positive	Pin 7:	Cooler Power Return
Preamp Power:	± 8 Volts @ 25 mA	Pin 8:	Ground and Case
Detector Power:	+ 100 Volts @ 10 μA	Pin 9:	Ground and Case
Cooler Power:	Current = 0.7 A maximum Voltage = 2.1 Volt maximum	<b>PX2T SHAPING AMPLIFIER</b>	
<b>OUTPUTS</b>		Polarity:	Positive Unipolar
Preamplifier Sensitivity:	1 mV/keV	Shaping Time:	12 μs
Polarity:	Negative Signal Out (1 kΩ max. load)	Pulse Width:	22 μs. See Figure 4.
Temperature Monitor Sensitivity:	1 μA corresponds to 1 °K	Shaping Type:	7 pole "Triangular" with Base Line Restoration, Pileup Rejection and Rise Time Discrimination (RTD).
<b>OPTIONS</b>		Sensitivity:	0 to 1 V/keV (10 turn pot)
Other detector sizes (13 mm <sup>2</sup> Si-PIN), detector thickness (500 μm) and Beryllium windows (0.5 mil - 13 in) available on special order.		Gain:	0 to X1000
See also XR-100T-CZT specifications using Cadmium Telluride (CZT) detectors for high efficiency and high resolution Gamma-Ray detection (1.5 keV FWHM @ 122 keV, <sup>57</sup> Co.)		Output Impedance:	<1 Ω, +6.0 Volts into 500 Ω load
<b>CONNECTORS</b>		The output pulse produced by the PX2T Shaping Amplifier is optimum for most applications using the Si-PIN photodiode detectors, and can be connected directly to the input of a Multichannel Analyzer (MCA).	
Preamp Output:	BNC coaxial connector	<b>PX2T SIGNAL CONNECTIONS</b>	
Test Input:	BNC coaxial connector	Input from XR-100T:	Front panel BNC
Other connections:	6-Pin, LEMO connector with 5 ft cable	Output to MCA:	Front panel BNC
<b>9-PIN LEMO CONNECTOR ON THE XR-100T</b>		Pileup Rejection (PU):	Rear panel BNC, Positive TTL For the duration of this output gate, any detected pulse must be rejected by the MCA.
Pin 1:	Temperature Monitor	Input Count Rate (ICR):	Rear panel BNC, Positive TTL<2μs When connected to a counter, the ICR countrate corresponds to the total number of X-Rays events that strike the detector.
Pin 2:	+ H.V. Detector Bias, +110 Volt max.		
Pin 3:	-8 Volt Preamp Power		
Pin 4:	+8 Volt Preamp Power		
Pin 5:	Cooler Power Return		
Pin 6:	Cooler Power (0 to +2.1 Volt @ 0.7 A max.)		
Pin 7:	ASE: Ground and Shield		

Σχήμα Δ.1:Πιστοποιητικό του ανιχνευτή AMPTEK XR-100CR



# ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ Ε

```
TITLE Title of the job, up to 65 characters.
.
>>>>>>> Source definition.
SKPAR KPARP [Primary particles: 1=electron, 2=photon, 3=positron]
KPARP=0 activates a user-defined SOURCE model.
SENERG SE0 [Initial energy (monoenergetic sources only)]
SPECTR Ei,Pi [E bin: lower-end and total probability]
SGPOL SP1,SP2,SP3 [Stokes parameters for polarised photons]
SPOSIT SX0,SY0,SZ0 [Coordinates of the source]
SBOX SSX,SSY,SSZ [Source box dimensions]
SBODY KB [Active source body; one line for each body]
SCONE THETA,PHI,ALPHA [Conical beam; angles in deg]
SPYRAM THETAL,THETAU,PHIL,PHIU [Rectangular beam; angles in deg]
.
>>>>>>> Input phase-space file (psf).
IPSFN psf-filename.ext [Input psf name, up to 20 characters]
IPSPLI NSPLIT [Splitting number]
WGTWIN WGMIN,WGMAX [Weight window, RR & spl of psf particles]
EPMAX EPMAX [Maximum energy of particles in the psf]
.
>>>>>>> Material data and simulation parameters.
Up to MAXMAT materials; 2 lines for each material.
MFNAME mat-filename.ext [Material file, up to 20 chars]
MSIMPA EABS(1:3),C1,C2,WCC,WCR [EABS(1:3),C1,C2,WCC,WCR]
.
>>>>>>> Geometry and local simulation parameters.
GEOMFN geo-filename.ext [Geometry file, up to 20 chars]
DSMAX KB,DSMAX(KB) [KB, maximum step length in body KB]
EABSB KB,EABSB(1:3,KB) [KB, local absorption energies, EABSB(1:3)]
.
>>>>>>> Interaction forcing.
IFORCE KB,KPAR,ICOL,FORCER,WLOW,WHIG [KB,KPAR,ICOL,FORCER,WLOW,WHIG]
.
>>>>>>> Emerging particles. Energy and angular distributions.
NBE EL,EU,NBE [Energy window and no. of bins]
NBANGL NBTH,NBPH [Nos. of bins for the angles THETA and PHI]
.
>>>>>>> Impact detectors (up to 25 different detectors).
IPSF=0; no psf is created.
IPSF=1; a psf is created (for only one detector).
IDCUT=0; tracking is discontinued at the detector entrance.
```

Σχήμα Ε.1: Πλήρες αρχείο εισόδου



```

IDCUT=1; the detector does not affect the tracking.
IDCUT=2; the detector does not affect tracking, the energy
          distribution of particle fluence (averaged over the
          volume of the detector) is calculated.
IMPDET EL,EU,NBE,IPSF,IDCUT      [E-window, no. of bins, IPSF, IDCUT]
IDSPC  spc-impdet-##.dat         [Spectrum file name, 20 chars]
IDPSF  psf-impdet-##.dat         [Phase-space file name, 20 chars]
IDFLNC fln-impdet-##.dat         [Fluence spectrum file name, 20 chars]
IDBODY KB                        [Active body; one line for each body]
IDKPAR KPAR                      [Kind of detected particles, one line each]
.
>>>>>>> Energy-deposition detectors (up to 25).
ENDETC EL,EU,NBE                [Energy window and number of bins]
EDSPC  spc-enddet-##.dat         [Output spectrum file name, 20 chars]
EDBODY KB                        [Active body; one line for each body]
.
>>>>>>> Dose distribution.
GRIDX  XL,XU                    [X coordinates of the dose box vertices]
GRIDY  YL,YU                    [Y coordinates of the dose box vertices]
GRIDZ  ZL,ZU                    [Z coordinates of the dose box vertices]
GRIDBN NDBX,NDBY,NDBZ          [Numbers of bins]
.
>>>>>>> Job properties.
RESUME dump1.dmp                [Resume from this dump file, 20 chars]
DUMPTO dump2.dmp                [Generate this dump file, 20 chars]
DUMPP  DUMPP                    [Dumping period, in sec]
.
RSEED  ISEED1,ISEED2            [Seeds of the random-number generator]
NSIMSH DSHN                     [Desired number of simulated showers]
TIME   TIMEA                    [Allotted simulation time, in sec]
.
END                               [Ends the reading of input data]

```

Σχήμα E.1 (συνέχεια): Πλήρες αρχείο εισόδου

Πίνακας Ε.1: Εντολές πλήρους αρχείου εισόδου

TITLE	Ο τίτλος της προσομοίωσης
SKPAR	Είδος πρωτογενών σωματιδίων (1=ηλεκτρόνια, 2=φωτόνια ή 3= ποζιτρόνια)
SENERG	Αρχική ενέργεια SE0 για μονοενεργειακές πηγές
SPECTR	Για πηγές με συνεχές ενεργειακό φάσμα, κάθε γραμμή SPECTR δίνει το κάτω άκρο (Ei) της κάθε κλάσης του φάσματος και τη αντίστοιχη σχετική πιθανότητα (Pi), ολοκληρωμένη στην κλάση. Το άνω άκρο του φάσματος ορίζεται με μία γραμμή, με Ei το άνω ενεργειακό άκρο και με αρνητική τιμή Pi.
SPOSIT	Για εξωτερικές πηγές, οι συντεταγμένες του κέντρου του όγκου της πηγής
SBOX	Ομοιόμορφα κατανεμημένη πηγή στο ορθογώνιο παραλληλεπίπεδο με κέντρο το σημείο (SX0, SY0, SZ0) και πλευρές με μήκη SSX, SSY και SSZ.
SBODY	Πηγή-σώμα
SCONE	Κωνική δέσμη πηγής. Πολική και αζιμουθιακή γωνία της κατεύθυνσης του άξονα της δέσμης, THETA και PHI, και ημιγωνία κώνου, ALPHA, σε μοίρες.
SPYRAM	Πυραμιδοειδής δέσμη πηγής. Όρια πολικής γωνίας παραθύρου πηγής THETA1, THETA2 και αζιμουθιακής γωνίας PHIL, PHIU
IPSFN	Όνομα αρχείου εισόδου psf σε μορφή ASCII (αρχείο που έχει δημιουργηθεί σε προηγούμενη προσομοίωση, χρησιμοποιώντας ανιχνευτή διέλευσης ακτινοβολίας με IPSE=1)
IPSPLI	Αριθμός διαχωρισμού (splitting number). Κάθε σωματίδιο στο αρχείο psf χωρίζεται σε NSPLIT ισοδύναμα σωματίδια, με συντελεστή βάρους ίσο με WGHT/NSPLIT
WGTWIN	Παράθυρο συντελεστή βάρους. Τα σωματίδια του αρχείου psf με βάρη μικρότερα από WGMIN υποβάλλονται σε ρώσικη ρουλέτα (Russian roulette), ενώ αυτά με βάρη μεγαλύτερα από WGMAX διαχωρίζονται.
EPMAX	Μέγιστη ενέργεια (σε eV) των σωματιδίων στο αρχείο psf.
MFNAME	Το όνομα του αρχείου *.mat που αντιστοιχεί στο κάθε υλικό της προσομοίωσης.
MSIMPA	Οι τιμές των παραμέτρων προσομοίωσης για το αντίστοιχο υλικό: ενέργειες απορρόφησης EABS(1:3,M), παράμετροι ελαστικής σκέδασης C1(M) και C2(M) και απώλειες ενέργειας αποκοπής για ανελαστικές σκεδάσεις και εκπομπή ακτινοβολίας πέδησης WCC(M) και WCR(M).  Προεπιλογές: EABS(1,M)=EABS(3,M)=0.01*EPMAX, EABS(2,M)=0.001*EPMAX, C1(M)=C2(M)=0.1, WCC(M)=EABS(1,M), WCR(M)=EABS(2,M)
GEOMFN	Το όνομα του αρχείου που περιγράφει τη γεωμετρία του προβλήματος (*.geo)
DSMAX	Μέγιστο μήκος βήματος ηλεκτρονίων και ποζιτρονίων στο σώμα KB. Αυτή η παράμετρος είναι σημαντική μόνο για σώματα μικρού πάχους και πρέπει να έχει τιμή μία τάξης μεγέθους μικρότερη από το πάχος του σώματος.
EABSB	Τοπικές ενέργειες απορρόφησης σωματιδίων τύπου KPAR στο σώμα KB.
IFORCE	Ενεργοποιεί την εξαναγκασμένη αλληλεπίδραση του τύπου ICOL των σωματιδίων τύπου KPAR στο σώμα KB. Ο FORCER είναι ο παράγοντας εξαναγκασμού που πρέπει να είναι μεγαλύτερος της μονάδας. Τα WLOW και WHIG είναι τα όρια του παραθύρου συντελεστή βάρους, όπου εφαρμόζονται οι εξαναγκασμένες αλληλεπιδράσεις.

Πίνακας Ε.1 (συνέχεια): Εντολές πλήρους αρχείου εισόδου

NBE	Τα όρια EL και EU του διαστήματος, όπου η ενεργειακές κατανομές των σωματιδίων που αναδύονται καταγράφονται. Το πλήθος των ενεργειακών παραθύρων πρέπει να είναι κατά μέγιστο 1000.
NBANGL	Πλήθος παραθύρων για την πολική γωνία THETA και την αζιμουθιακή γωνία PHI, τα NBTH και NBPH, αντίστοιχα.
IMPDET	Ορίζει τη δημιουργία ενός νέου ανιχνευτή διέλευσης. Τα EL και EU είναι το άνω και κάτω όριο του ενεργειακού εύρους που καλύπτεται από τον ανιχνευτή. NBE είναι ο αριθμός των καναλιών στα οποία διαιρείται η περιοχή EU-EL. Η μεταβλητή IPSF χρησιμεύει για την ενεργοποίηση της δημιουργίας αρχείου psf
IDSPC	Όνομα του αρχείου εξόδου που περιέχει το ενεργειακό φάσμα του ανιχνευτή διέλευσης ακτινοβολίας (προεπιλογή: src-impdet-##.dat)
IDPSF	Όνομα του αρχείου εξόδου τύπου psf (προεπιλογή: psf-impdet-##.dat)
IDFLNC	Όνομα του αρχείου εξόδου που περιέχει την ενεργειακή κατανομή της ροής των σωματιδίων (προεπιλογή: src-impdet-##.dat). Το αρχείο δημιουργείται μόνο όταν IDCUT=2
IDBODY	Ενεργό σώμα του ανιχνευτή διέλευσης
IDKPAR	Είδος ανιχνευόμενων σωματιδίων (1=ηλεκτρόνια, 2=φωτόνια ή 3= ποζιτρόνια)
ENDETC	Ορίζει τη δημιουργία ενός νέου ανιχνευτή απόθεσης ενέργειας. Τα EL και EU είναι το άνω και κάτω όριο του ενεργειακού εύρους που καλύπτεται από τον ανιχνευτή. NBE είναι ο αριθμός των καναλιών στα οποία διαιρείται η περιοχή EU-EL
EDSPC	Όνομα του αρχείου εξόδου που περιέχει το ενεργειακό φάσμα του ανιχνευτή απόθεσης ενέργειας (προεπιλογή: src-enddet-##.dat)
EDBODY	Ενεργό σώμα του ανιχνευτή απόθεσης ενέργειας
GRIDX	Συντεταγμένες X των ορίων του ανιχνευτή δόσης
GRIDY	Συντεταγμένες Y των ορίων του ανιχνευτή δόσης
GRIDZ	Συντεταγμένες Z των ορίων του ανιχνευτή δόσης
GRIDBN	Πλήθος bins NDBX, NDBY και NDBZ στις διευθύνσεις X, Y και Z, αντίστοιχα. Μέγιστο πλήθος σε κάθε διεύθυνση 101 bins.
RESUME	Το πρόγραμμα διαβάζει το αρχείο dump1.dmp και συνεχίζει την προσομοίωση από το σημείο που είχε μείνει.
DUMPTO	Δημιουργία αρχείου dump2.dmp, μετά το πέρας της προσομοίωσης. Αυτό επιτρέπει τη συνέχιση της προσομοίωσης για τη βελτίωση της στατιστικής.
DUMPP	Όταν το DUMPTO είναι ενεργοποιημένο, τα αποτελέσματα της προσομοίωσης καταγράφονται στο αρχείο *.dmp κάθε DUMPP sec.
RSEED	Χρήσιμες μεταβλητές (seeds) για τη γεννήτρια τυχαίων αριθμών.
NSIMSH	Επιθυμητό πλήθος ιστοριών
TIME	Ανώτατος χρόνος προσομοίωσης, σε sec
END	Τελειώνει η ανάγνωση του αρχείου εισόδου

## ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ ΣΤ

Πίνακας ΣΤ.1: Συντελεστές εξίσωσης μη σταθμισμένης συσχέτισης κριτηρίων Β και Γ για τη γραμμή  $U-K_{\alpha 1}$  ως προς τη συγκέντρωση ουρανίου στο δείγμα (σχήμα 4.12, σχήμα 4.13)

$y = a + bx$	a	b	R <sup>2</sup>
Κριτήριο Β	4e-8 ± 65.6%	5.82e-10 ± 1.13%	0.9995
Κριτήριο Γ	1.014 ± 0.64%	7.67e-4 ± 0.19%	1.0000

Πίνακας ΣΤ.2: Συντελεστές εξίσωσης μη σταθμισμένης συσχέτισης κριτηρίων Β και Γ για τη γραμμή  $Pb-K_{\alpha 1}$  ως προς το πάχος της στρώσης Pb του κατευθυντή τύπου Al-Pb-Al (σχήμα 4.21, σχήμα 4.22)

$y = a + bx + c/x^2$	a	b	c	R <sup>2</sup>
Κριτήριο Β	1.92e-8 ± 6.51%	3.2e-10 ± 32.0%	1.2e-8 ± 8.78%	0.9728
Κριτήριο Γ	4.90 ± 4.11%	4.6e-2 ± 18.7%	1.09 ± 8.11%	0.9747

Πίνακας ΣΤ.3: Συντελεστές εξίσωσης μη σταθμισμένης συσχέτισης κριτηρίου Β για τη γραμμή  $U-K_{\alpha 1}$  ως προς τη γωνία τοποθέτησης δείγματος (σχήμα 4.31)

$y = a + bx$	a	b	R <sup>2</sup>
Κριτήριο Β	1.25e-6 ± 0.94%	-1.38e-8 ± 2.39%	0.9983

Πίνακας ΣΤ.4: Συντελεστές μη σταθμισμένης εξίσωσης συσχέτισης κριτηρίων Β και Γ για τη γραμμή  $U-K_{\alpha 1}$  ως προς τη γωνία πηγής-δείγματος-ανιχνευτή (μονοενεργειακή διέγερση) (σχήμα 4.35, σχήμα 4.36)

$y = a + bx + cx^2$	a	b	c	R <sup>2</sup>
Κριτήριο Β	2.28e-7 ± 3.94%	-5.2e-10 ± 51.5%	1.7e-11 ± 10.1%	0.9978
Κριτήριο Γ	4.6 ± 6.08%	-1.02e-1 ± 8.17%	7.5e-4 ± 7.23%	0.9868

Πίνακας ΣΤ.5: Συντελεστές εξίσωσης μη σταθμισμένης συσχέτισης κριτηρίων Β και Γ για τη γραμμή  $U-K_{\alpha 1}$  ως προς τη γωνία πηγής-δείγματος-ανιχνευτή (πολυενεργειακή διέγερση) (σχήμα 4.38, σχήμα 4.39)

$y = a + bx$	a	b	R <sup>2</sup>
Κριτήριο Β	3.0e-8 ± 10.1%	3.22e-9 ± 0.84%	0.9999
Κριτήριο Γ	-4.2 ± 20.59%	6.2e-2 ± 12.8%	0.9840

Πίνακας ΣΤ.6: Συντελεστές εξίσωσης μη σταθμισμένης συσχέτισης κριτηρίων B και Γ για τη γραμμή U-K<sub>α1</sub> ως προς το πάχος του δείγματος (σχήμα 4.41, σχήμα 4.42)

$y = a + bx + cx^2$	a	b	c	R <sup>2</sup>
Κριτήριο B	1.1e-9 ± 65.0%	1.67e-8 ± 2.18%	-6.3e-10 ± 5.59%	0.9997
$y = a + bx + cx^{0.5}$				
[0,5,6]: Κριτήριο Γ	0.4 ± 71.0%	-0.7 ± 17.9%	3.1 ± 12.4%	0.9940
[4,10]: Κριτήριο Γ	3.90 ± 0.94%	-	-	-

Πίνακας ΣΤ.7: Συντελεστές εξίσωσης συσχέτισης κριτηρίου B για τη γραμμή U-K<sub>α1</sub> ως προς τη διάμετρο του δείγματος (σχήμα 4.49)

$y = a + bx$	a	b	R <sup>2</sup>
Κριτήριο B	-6.9e-7 ± 2.84%	6.09e-8 ± 1.03%	0.9999

Πίνακας ΣΤ.8: Συντελεστές εξίσωσης συσχέτισης κριτηρίων B και Γ για τη γραμμή U-K<sub>α1</sub> ως προς την κωνικότητα της δέσμης (σχήμα 4.51, σχήμα 4.52)

$y = a + bx + cx^2 + dx^3$	a	b	c	d	R <sup>2</sup>
Κριτήριο B	6.1e-6 ± 10.0%	-2.9e-7 ± 25.0%	3.6e-9 ± 48.9%	-	0.9655
Κριτήριο Γ	8.53 ± 5.48%	0.22 ± 53.8%	-1.6e-2 ± 47.7%	1.8e-4 ± 69.3%	0.9903

Πίνακας ΣΤ.9: Συντελεστές εξίσωσης συσχέτισης της συνάρτησης πυκνότητας πιθανότητας (pdf) για τις προσομοιώσεις με και χωρίς εσωτερικό κατευθυντή από Wσε κάθε ενεργειακό παράθυρο (εκτός W-L) και ο αντίστοιχος συντελεστής πολλαπλού προσδιορισμού (σχήμα 4.58)

$y = a + bx$	a	b	R <sup>2</sup>
	-1.8e-12 ± 69.9%	1.146 ± 0.25%	0.9992

# ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

---

- Αγραφιώτης, Α. (2009) *Βαθμονόμηση απόδοσης φορητού ανιχνευτή (in-situ) BEGe στην ενεργειακή περιοχή 59 - 1596 keV για γεωμετρία επιφανειακής πηγής ραδιενέργειας, με τη μέθοδο προσομοίωσης Monte Carlo*. ΕΜΠ.
- Λεωνίδου, Δ. (1984) *Αλληλεπιδράσεις ακτινοβολιών & ύλης - Δοσιμετρία - Θωράκιση*. ΕΜΠ.
- Χαυλής, Σ. (2011) *Μελέτη της λειτουργίας διάταξης XRF με χρήση κώδικα προσομοίωσης Monte Carlo*. ΕΜΠ.
- Agostinelli, S. *et al.* (2003) 'Geant4—a simulation toolkit', *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A*, 506, pp. 250–303.
- Aichinger, H. *et al.* (2012) *Radiation Exposure and Image Quality in X-Ray Diagnostic Radiology*. 2nd edn. Springer.
- Amaro, P. *et al.* (2017) 'Validation of the Geant4 Monte Carlo package for X-ray fluorescence spectroscopy in triaxial geometry', *Spectrochimica Acta - Part B Atomic Spectroscopy*.
- Andrew, G. and Taylor, B. L. (1981) 'The measurement of Pu and U in reprocessing plant solutions by tube excited K X-ray fluorescence', *Journal of Radioanalytical Chemistry*. Kluwer Academic Publishers, 62(1–2), pp. 135–143.
- Ari Ide-Ektessabi (2007) *Applications of Synchrotron Radiation*. Springer (Biological and Medical Physics, Biomedical Engineering).
- Baryshev, V. B. *et al.* (1987) 'Determination of the concentrations and distributions of rare-earth elements in mineral and rock specimens using the VEPP-4 synchrotron radiation', *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*. North-Holland, 261(1–2), pp. 272–278.
- Beckhoff, B. *et al.* (eds) (2006) *Handbook of Practical X-Ray Fluorescence Analysis*. Springer.
- Bhagavathy, V. *et al.* (1991) 'Preconcentration of rare earth quinolin-8-ol complexes onto activated carbon and determination by first-order derivative x-ray fluorescence spectrometry', *Analytica Chimica Acta*.
- Bragg, L. J. *et al.* (2004) *Coal Quality (COALQUAL) Database: Version 2.0, USGS Open-file report 97-134*. Reston, Virginia, USA.
- Briesmeister, J. F. (2000) *MCNPTM – A General Monte Carlo N-Particle Transport Code*, Los Alamos National Laboratory.
- Brouwer, P. (2003) 'Theory of XRF'. PANalytical.
- Brumme, A. (2014) 'Market analysis of rare earth elements', in *Wind Energy Deployment and the Relevance of Rare Earths*. Wiesbaden: Springer Fachmedien Wiesbaden, pp. 17–48.
- Brumme, M., Heckel, J. and Irmer, K. (1990) 'Influence of Polarization of Exciting X-Radiation on Sensitivity of Energy Dispersive X-Ray Fluorescence Trace Analysis at Rocks and Soils', *Isotopenpraxis Isotopes in Environmental and Health Studies*. Taylor & Francis Group, 26(7), pp. 341–342.
- Canberra Industries (2016) *Germanium Detectors Data Sheet*. Available at: <http://www.canberra.com/products/detectors/pdf/Germanium-Det-SS-C39606.pdf> (Accessed: 27 November 2017).
- Dik, J. *et al.* (2008) 'Visualization of a Lost Painting by Vincent van Gogh Using Synchrotron Radiation

Based X-ray Fluorescence Elemental Mapping', *Analytical Chemistry*. American Chemical Society, 80(16), pp. 6436–6442.

Evans, R. D. (1955) 'The atomic nucleus'. McGraw-Hill.

Goldstein, J. I. *et al.* (2003) *Scanning Electron Microscopy and X-ray Microanalysis : Third Edition*. Springer US.

Van Grieken, R. E. and Markowicz, A. A. (2002) *Handbook of X-ray spectrometry*. 2nd edn. Marcel Dekker.

Haidekker, M. A. (2015) 'X-Ray Projection Imaging', in Iai, K. W. and Dewi, D. E. O. (eds) *Medical Imaging Technology*. Springer.

Heckel, J. and Schramm, R. (1997) 'Bragg and Barkla polarization in EDXRF'.

Hoffmann, P. (1986) 'Application of radionuclide sources for excitation in energy-dispersive X-ray fluorescence', *Fresenius' Journal of Analytical Chemistry*, 323(8), pp. 801–806.

Hofmann, T., Hoffmann, P. and Lieser, K. H. (1987) 'On-line determination of actinides by energy-dispersive XRF induced by gamma-emitting radionuclides', *Journal of Radioanalytical and Nuclear Chemistry, Articles*, 109(2), pp. 419–437.

Jaworowski, R. J. *et al.* (1968) 'Determination of trace rare earths by X-ray excited optical fluorescence', *Spectrochimica Acta Part B: Atomic Spectroscopy*. Elsevier, 23(11), pp. 751–763.

Jenkins, R. (1999) *X-ray fluorescence spectrometry*. 2nd edn. John Wiley & Sons.

Jenkins, R., Gould, R. W. and Gedcke, D. (1995) *Quantitative x-ray spectrometry*. M. Dekker.

Kirkbright, G. F. and Sargent, M. (1974) *Atomic absorption and fluorescence spectroscopy*. Academic Press.

Klein, O. and Nishina, Y. (1929) 'Über die Streuung von Strahlung durch freie Elektronen nach der neuen relativistischen Quantendynamik von Dirac', *Zeitschrift für Physik*, 52(11–12), pp. 853–868.

Knoll, G. F. (2000) *Radiation Detection and Measurement*. 3rd edn. John Wiley & Sons.

LaBrecque, J. J., Beusen, J. M. and van Grieken, R. E. (1986) 'Determination of barium, lanthanum, cerium and neodymium in lateritic materials by various energy-dispersive X-ray fluorescence techniques and neutron activation analysis', *X-Ray Spectrometry*. Wiley, 15(1), pp. 13–18.

LaBrecque, J. J., Parker, W. C. and Adames, D. (1980) 'Application of an americium-241 source for the determination of barium, lanthanum and cerium in lateritic material by X-ray fluorescence', *Journal of Radioanalytical Chemistry*. Kluwer Academic Publishers, 59(1), pp. 193–201.

Lanzirotti, A. *et al.* (2014) 'Assessing heavy metal exposure in Renaissance Europe using synchrotron microbeam techniques', *Journal of Archaeological Science*. Academic Press, 52, pp. 204–217.

Leenanupan, V. and Ratanalert, N. (1989) 'Determination of yttrium in xenotime ore by energy dispersive X-ray fluorescence spectrometry', *Journal of Radioanalytical and Nuclear Chemistry Articles*. Kluwer Academic Publishers, 131(2), pp. 385–390.

Leng, Y. (2013) 'X-Ray Spectroscopy for Elemental Analysis', in *Materials Characterization: Introduction to Microscopic and Spectroscopic Methods*. 2nd edn.

Leroy, C. and Rancoita, P.-G. (2004) *Principles of Radiation Interaction in Matter and Detection*. World Scientific.

Liu, J. *et al.* (2016) 'Size segregation behavior of heavy metals in superfine pulverized coal using synchrotron radiation-induced X-ray fluorescence', *Fuel*. Elsevier, 181, pp. 1081–1088.

Marco Parra, L. M. *et al.* (1993) 'Simultaneous Determination of Rare Earths by X-Ray Fluorescence

- Spectrometry Using a Fundamental Parameters Method', *X-RAY SPECTROMETRY*, 22, pp. 362–367.
- Mobilio, S., Boscherini, F. and Meneghini, C. (eds) (2015) *Synchrotron Radiation*. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg.
- Ottmar, H. *et al.* (1986) 'How to simplify the analytics for input-output accountability measurements in a reprocessing plant'. Kernforschungszentrum Karlsruhe.
- Pilz, N. *et al.* (1987) 'Determination of thorium and uranium in air filters by XRF analysis using excitation of K-lines by radionuclides', *Fresenius' Zeitschrift für analytische Chemie*, 329(5), pp. 581–583.
- Pilz, N., Hoffmann, P. and Lieser, K. H. (1989) 'In-line determination of heavy elements by gamma ray-induced energy-dispersive K-line XRF', *Journal of Radioanalytical and Nuclear Chemistry, Articles*, 130(1), pp. 141–153.
- Robertson, M. E. A. and Feather, C. E. (2004) 'Determination of gold, platinum and uranium in South African ores by high-energy XRF spectrometry', in *X-Ray Spectrometry*.
- Salvat, F., Fernández-Varea, J. and Sempau, J. (2011) 'PENELOPE-2011: A code system for Monte Carlo simulation of electron and photon transport', *Workshop Proceedings*, p. 384.
- Scot, V. *et al.* (2007) '3D extension of the Monte Carlo code MCSHAPE for photon–matter interactions in heterogeneous media', *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research, Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, 263, pp. 204–208.
- Scot, V. and Fernandez, J. E. (2015) 'The Monte Carlo code MCSHAPE: Main features and recent developments', *Spectrochimica Acta Part B: Atomic Spectroscopy*, 108, pp. 53–60.
- Shehla, S. and Puri, S. (2016) 'Physical parameters for proton induced K-, L-, and M-shell ionization processes', *Radiation Physics and Chemistry*, 127, pp. 194–203.
- Stephens, W. E. and Calder, A. (2004) 'Analysis of non-organic elements in plant foliage using polarised X-ray fluorescence spectrometry', *Analytica Chimica Acta*.
- Thomopoulos, N. T. (2013) *Essentials of Monte Carlo Simulation*. Springer.
- Trojek, T. and Echák, T. Č. (2007) 'Use of MCNP code in energy dispersive X-ray fluorescence'.
- Vértes, A. (2011) *Handbook of nuclear chemistry*. Springer.
- Zschornack, G. (2007) *Handbook of X-Ray Data*. Springer.
- Zuzaan, P., Gansukh, N. and Bolortuya, D. (2010) 'Radionuclide induced energy dispersive X-ray fluorescence for the determination of La, Ce, Pr and Nd and their content sums in the rare-earth ores', *X-Ray Spectrometry*.