

ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ

*Σχολή Μηχανολόγων Μηχανικών
Τομέας Πυρηνικής Τεχνολογίας*

**ΜΕΛΕΤΗ ΤΗΣ ΛΕΙΤΟΥΡΓΙΑΣ ΔΙΑΤΑΞΗΣ XRF
ΜΕ ΧΡΗΣΗ ΚΩΔΙΚΑ ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΗΣ MONTE-CARLO**

ΔΙΠΛΩΜΑΤΙΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ του
ΣΠΥΡΙΔΩΝΑ Σ. ΧΑΥΛΗ

Σπουδαστή της Σχολής
Μηχανολόγων Μηχανικών ΕΜΠ

Επίβλεψη: Επ. Καθηγητής Μ.Ι.Αναγνωστάκης
Συνεργασία: Π.Κ.Ρούνη – Κ.Λ.Καρφόπουλος

ΑΘΗΝΑ 2011

Πρόλογος

Η παρούσα διπλωματική εργασία αναπτύχθηκε στα πλαίσια του μαθήματος των Πυρηνικών Μετρητικών Συστημάτων & Αναλύσεων του τομέα Πυρηνικής Τεχνολογίας και αποτελεί το επιστέγασμα των προπτυχιακών μου σπουδών στη Σχολή Μηχανολόγων Μηχανικών του Εθνικού Μετσόβιου Πολυτεχνείου.

Πρωτίστως, θα ήθελα να ευχαριστήσω των επιβλέποντα καθηγητή μου, Επίκουρο Καθηγητή κ. Μάριο Αναγνωστάκη, για την ευκαιρία που μου έδωσε να ασχοληθώ με ένα αντικείμενο του ενδιαφέροντός μου, καθώς και για την αμέριστη συνεισφορά του καθ' όλη τη διάρκεια εκπόνησης της διπλωματικής μου εργασίας.

Ακολούθως, οφείλω να αναγνωρίσω τη σημαντική βοήθεια της διδάκτορος και μέλους ΕΤΕΠ κ. Παναγιώτας Ρούνη, καθώς και την πολύτιμη συμβολή του υποψήφιου διδάκτορα κ. Κωνσταντίνου Καρφόπουλου. Τόσο η συνεισφορά τους στην αντιμετώπιση οποιασδήποτε από τις δυσκολίες που ανέκυψαν, όσο και το αγαστό πνεύμα συνεργασίας αποτέλεσαν κινητήριο δύναμη στην προσπάθειά μου. Φυσικά, δεν πρόκειται να ξεχάσω και το λοιπό προσωπικό του εργαστηρίου, το οποίο ήταν πάντα πρόθυμο για βοήθεια.

Αυτή τη διπλωματική εργασία την αφιερώνω στην οικογένεια και τους στενότερους φίλους μου για την αστείρευτη συμπαράσταση τους σε όλη τη διάρκεια της φοίτησης μου στο ΕΜΠ, κάτι που με βοήθησε να ξεπεράσω οποιοδήποτε εμπόδιο και αν βρήκα μπροστά μου. Επίσης, δεν θα μπορούσα να ξεχάσω δύο άτομα που με στήριξαν και με στηρίζουν σε κάθε μου προσπάθεια, το Μελέτη και τη Θάλεια.

Κλείνοντας, θεωρώ ότι η εκπόνηση της διπλωματικής εργασίας στο συγκεκριμένο αντικείμενο δεν μου απέφερε μόνο επιστημονικές γνώσεις, αλλά και την ηθική ικανοποίηση της περάτωσης μιας σημαντικής πρόκλησης στα πλαίσια του ενδιαφέροντος μου.

Αθήνα, Ιούλιος 2011

Χαυλής Σπυρίδων

Περιεχόμενα

Κεφάλαιο 1: Εισαγωγή	1
Κεφάλαιο 2: Ακτίνες-X και η τεχνική φθορισμού των ακτίνων-X	5
2.1 Εισαγωγή.....	5
2.2 Ακτίνες-X.....	5
2.2.1 Ανακάλυψη των ακτίνων-X.....	5
2.2.2 Φύση και ιδιότητες των ακτίνων-X.....	7
2.2.2.1 Φύση των ακτίνων-X.....	7
2.2.2.2 Ιδιότητες των ακτίνων-X.....	9
2.2.3 Προέλευση των ακτίνων-X.....	10
2.2.3.1 Ακτινοβολία πέδησης (braking radiation).....	10
2.2.3.2 Χαρακτηριστική ακτινοβολία (characteristic radiation).....	11
2.2.3.3 Χαρακτηριστική ακτινοβολία λόγω σύλληψης ηλεκτρονίου (electron capture-EC).....	13
2.2.4 Οι αλληλεπιδράσεις των ακτίνων-X με την ύλη.....	13
2.2.4.1 Φωτοηλεκτρικό φαινόμενο.....	14
2.2.4.2 Ελαστική σκέδαση (Rayleigh scattering).....	15
2.2.4.3 Μη ελαστική σκέδαση (Compton scattering).....	16
2.2.4.4 Εξασθένηση των ακτίνων-X στην ύλη.....	17
2.2.5 Εφαρμογές των ακτίνων-X.....	18
2.3 Τεχνική φθορισμού των ακτίνων-X.....	19
2.3.1 Αρχή λειτουργίας της τεχνικής.....	19
2.4 Πηγές ακτίνων-X που χρησιμοποιούνται κατά τη διάρκεια της μεθόδου XRF.....	22

2.4.1 Μηχανές παραγωγής ακτίνων-X (X-rays tubes).....	22
2.4.1.1 Βασικές αρχές λειτουργίας και παραγόμενο φάσμα	22
2.4.1.2 Τεχνικά χαρακτηριστικά των μηχανών ακτίνων-X.....	25
2.4.2 Παραγωγή ακτίνων-X από ραδιοϊσότοπα (Radioisotope sources)...	34
2.4.3 Παραγωγή ακτίνων-X από σύγχροτρο (Synchrotron radiation sources)	36
2.5 Ανιχνευτική διάταξη της φθορίζουσας ακτινοβολίας	37
2.5.1 Αρχές λειτουργίας ανιχνευτικής διάταξης.....	37
2.5.2 Χαρακτηριστικά της ανιχνευτικής διάταξης.....	38
2.5.2.1 Διακριτική ικανότητα ανιχνευτή.....	38
2.5.2.2 Απόδοση ανιχνευτή.....	39
2.5.3 Ημιαγωγοί ανιχνευτές.....	40
2.5.4 Μετρητική διάταξη ανιχνευτή.....	41
2.6 Λοιπές συνιστώσες για τη ρύθμιση της παραγόμενης και της φθορίζουσας ακτινοβολίας στη διάταξη XRF	42
2.7 Το φάσμα φθορισμού που προκύπτει από την ανάλυση ενός δείγματος με την τεχνική XRF.....	43
2.8 Εφαρμογές ανάλυσης δειγμάτων με την τεχνική XRF.....	46
2.9 Η διάταξη XRF του ΕΠΤ-ΕΜΠ.....	47
2.9.1 Η μηχανή παραγωγής ακτίνων-X του ΕΜΠ-ΕΠΤ	47
2.9.2 Η ανιχνευτική διάταξη του ΕΠΤ-ΕΜΠ	49
2.9.2.1 Ο ανιχνευτής SiLi.....	49
2.9.2.2 Λοιπές συνιστώσες της ανιχνευτικής διάταξης XRF	50
2.9.3 Γεωμετρία της διάταξης XRF	51

Κεφάλαιο 3: Δημιουργία φάσματος μηχανής ακτίνων-X με την τεχνική της προσομοίωσης.....	54
3.1 Εισαγωγή.....	54
3.2 Η τεχνική προσομοίωσης με τη μέθοδο Monte-Carlo.....	54
3.3 Ο κώδικας PENELOPE	56
3.3.1 Ο κώδικας χρήστη PENMAIN.....	57
3.3.2 Τα αρχεία Δεδομένων	58
3.3.2.1 Το αρχείο υλικού.....	58
3.3.2.2 Το αρχείο γεωμετρίας.....	58
3.3.2.3 Το αρχείο εισόδου	59
3.3.3 Εικονικοί ανιχνευτές.....	60
3.4 Δημιουργία φάσματος μηχανής ακτίνων-X με την τεχνική της προσομοίωσης.....	61
3.4.1 Τροποποίηση του κώδικα χρήστη PENMAIN	61
3.4.2 Δημιουργία του αρχείου γεωμετρίας.....	62
3.4.3 Δημιουργία του αρχείου υλικών.....	63
3.4.4 Δημιουργία του αρχείου δεδομένων εισόδου	65
3.4.5 Εκτέλεση του κώδικα PENMAIN και παρουσίαση των αρχείων εξόδου	67
3.4.6 Αποτελέσματα προσομοιώσεων.....	68
3.5 Δημιουργία φάσματος ακτίνων-X βάσει ημι-εμπειρικών σχέσεων και έτοιμων πακέτων λογισμικού	70
3.5.1 Δημιουργία φάσματος ακτίνων-X βάσει ημι-εμπειρικών σχέσεων..	71
3.5.1.1 Ημι-εμπειρική σχέση για τη δημιουργία της ακτινοβολίας πέδησης.....	71
3.5.1.2 Ημι-εμπειρική σχέση για τη δημιουργία της χαρακτηριστικής ακτινοβολίας	73
3.5.1.3 Αποτελέσματα της εφαρμογής της ημι-εμπειρικής σχέσης	74

3.5.2 Δημιουργία φάσματος ακτίνων-X από προγράμματα που διατίθενται στο διαδίκτυο.....	75
3.6 Σύγκριση φασμάτων ακτίνων-X.....	77
ΠΙΝΑΚΕΣ ΚΑΙ ΣΧΗΜΑΤΑ ΚΕΦΑΛΑΙΟΥ 3.....	79
Κεφάλαιο 4: Προσομοίωση της διάταξης XRF του ΕΠΤ-ΕΜΠ.....	99
4.1 Εισαγωγή.....	99
4.2 Σχεδιασμός της προσομοίωσης της τεχνικής XRF με τη μέθοδο Monte-Carlo	100
4.3 Επιλογή της γωνίας εξόδου της δέσμης.....	102
4.3.1 Δημιουργία αρχείου γεωμετρίας	103
4.3.2 Δημιουργία αρχείου υλικού	105
4.3.3 Δημιουργία αρχείου εισόδου.....	106
4.3.4 Αποτελέσματα της προσομοίωσης.....	107
4.3.5 Συμπεράσματα για την επιλογή γωνίας εξόδου της δέσμης.....	108
4.4 Επιλογή των ενεργειών αποκοπής φωτονίων και ηλεκτρονίων με σκοπό την αύξηση της ταχύτητας προσομοίωσης.....	114
4.4.1 Δημιουργία αρχείου γεωμετρίας	114
4.4.2 Δημιουργία αρχείου υλικού	116
4.4.3 Δημιουργία αρχείων εισόδου	119
4.4.4 Εκτέλεση προσομοιώσεων και αποτελέσματα	121
ΠΙΝΑΚΕΣ ΚΕΦΑΛΑΙΟΥ 4.....	124

Κεφάλαιο 5: Μελέτη της διάταξης XRF του ΕΠΤ-ΕΜΠ με τη μέθοδο της προσομοίωσης Monte-Carlo.....	138
5.1 Εισαγωγή.....	138
5.2 Προσομοίωση ενός απλού σεναρίου ακτινοβολήσης.....	139
5.2.1 Δημιουργία των αρχείων δεδομένων για την εκτέλεση της προσομοίωσης.....	140
5.2.2 Αποτελέσματα της προσομοίωσης.....	142
5.2.3 Ανάλυση των φασμάτων φθορισμού που προκύπτουν από την προσομοίωση με λογισμικό ανάλυσης φασμάτων φθορισμού.....	146
5.2.3.1 Το λογισμικό ανάλυσης φασμάτων XRF, WinQXAS.....	146
5.2.3.2 Μετατροπή του φάσματος της προσομοίωσης σε φάσμα του πραγματικού ανιχνευτή και ανάλυση με το πρόγραμμα WinQXAS.....	147
5.2.4 Σχολιασμός των αποτελεσμάτων της προσομοίωσης.....	149
5.3 Ανάλυση πραγματικού δείγματος με προσομοίωση και σύγκριση με πειραματικά αποτελέσματα.....	151
5.3.1 Δημιουργία υπολογιστικού φάσματος προσομοίωσης.....	151
5.3.1.1 Δημιουργία των αρχείων δεδομένων της προσομοίωσης.....	151
5.3.1.2 Αποτελέσματα της προσομοίωσης.....	153
5.3.2 Πειραματική διαδικασία τεχνικής XRF.....	156
5.3.2.1 Πειραματική διαδικασία.....	156
5.3.2.2 Αποτελέσματα πειράματος.....	157
5.3.3 Ανάλυση του «ρεαλιστικού» και του πειραματικού φάσματος με το πρόγραμμα WinQXAS.....	158
5.3.4 Συμπεράσματα που προκύπτουν από τη σύγκριση πειραματικού φάσματος και φάσματος προσομοίωσης.....	158

5.4 Μελέτη της επίδρασης της γωνίας τοποθέτησης του δείγματος ως προς τη δέσμη των ακτίνων-X	161
5.4.1 Δημιουργία αρχείων δεδομένων.....	163
5.4.2 Τα αρχεία εξόδου της προσομοίωσης.....	164
5.4.3 Αποτελέσματα και σχολιασμός των προσομοιώσεων για γωνίες κλίσης του δείγματος 30° & 45° και για διάφορες ενέργειες φάσματος ακτίνων-X.....	165
5.4.4 Αποτελέσματα και σχολιασμός προσομοιώσεων για γωνίες κλίσεως του δείγματος 25°-50° και για ενέργεια φάσματος ακτίνων-X 30keV ...	171
ΠΙΝΑΚΕΣ ΚΑΙ ΣΧΗΜΑΤΑ ΚΕΦΑΛΑΙΟΥ 5.....	175
Κεφάλαιο 6: Επίλογος.....	190
6.1 Σύνοψη της ΔΕ και εξαγόμενα συμπεράσματα.....	190
6.2 Μελλοντικά βήματα.....	194
ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ Ι.....	196
ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ ΙΙ.....	199
ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ ΙΙΙ.....	203
ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ ΙV.....	211
Βιβλιογραφία.....	216

Κεφάλαιο 1: Εισαγωγή

Η παρούσα Διπλωματική Εργασία (ΔΕ) ασχολείται με θέματα τα οποία εμπίπτουν στη μελέτη της τεχνικής φθορισμού των ακτίνων-X (X-Ray Fluorescence analysis-XRF), μίας ευρύτατα χρησιμοποιούμενης τεχνικής, η οποία χρησιμοποιείται και στο Εργαστήριο Πυρηνικής Τεχνολογίας του Τομέα Πυρηνικής Τεχνολογίας του ΕΜΠ (ΕΠΤ-ΕΜΠ). Στόχος της παρούσας ΔΕ είναι η μελέτη της τεχνικής XRF, μέσω υπολογιστικής προσομοίωσης, με χρήση του κώδικα Monte-Carlo PENELOPE. Καθώς τα τελευταία χρόνια γίνονται προσπάθειες βελτιστοποίησης της τεχνικής που εφαρμόζεται στο ΕΠΤ-ΕΜΠ, η παρούσα ΔΕ θα μπορούσε να αποτελέσει εφαλτήριο στη περαιτέρω ανάπτυξη της.

Η παρούσα ΔΕ παρουσιάζει την πρώτη προσπάθεια που γίνεται στο ΕΠΤ-ΕΜΠ με στόχο τη χρήση του κώδικα PENELOPE, ώστε να μελετηθεί και να προσομοιωθεί η τεχνική XRF. Για το λόγο αυτό, αλλά και λόγω της σημαντικής δυσκολίας που υπάρχει για την πραγματοποίηση πειραμάτων με φωτόνια πολύ χαμηλών ενεργειών – από ~ 3 έως $\sim 50\text{keV}$ - τα αποτελέσματα των οποίων να μπορούν να συγκριθούν με αυτά της προσομοίωσης, στα πλαίσια της ΔΕ δίνεται έμφαση στα ποιοτικά αποτελέσματα και συμπεράσματα και όχι τόσο στη σύγκριση των αποτελεσμάτων προσομοίωσης και πειράματος. Τα αποτελέσματα αυτά μπορούν να χρησιμοποιηθούν για τη μελέτη της επίδρασης των διαφόρων παραμέτρων της τεχνικής XRF (π.χ. της γωνία προσβολής του στόχου από τη δέσμη ακτίνων-X). Επιπλέον, οι προσομοιώσεις που παρουσιάζονται στη ΔΕ μπορούν να χρησιμοποιηθούν ως ένα εργαλείο για την εποπτική διδασκαλία της τεχνικής.

Η διπλωματική εργασία διαρθρώνεται σε 6 Κεφάλαια τα οποία παρουσιάζονται περιληπτικά παρακάτω:

Αρχικά, στο **2^ο Κεφάλαιο**, το οποίο αποτελεί και το θεωρητικό τμήμα της ΔΕ, γίνεται μία εισαγωγή στις ακτίνες-X και την τεχνική XRF, ενώ περιγράφεται και η διάταξη XRF που βρίσκεται εγκατεστημένη στο ΕΠΤ-ΕΜΠ. Όσον αφορά τις ακτίνες-X, περιγράφονται τα πειράματα που οδήγησαν στην ανακάλυψή τους από τον Wilhelm Conrad Röntgen. Στη συνέχεια δίδονται κατά σειρά στοιχεία για τη φύση των ακτίνων-X καθώς και τις ιδιότητές τους, την προέλευσή και τις αλληλεπιδράσεις τους με την ύλη και τέλος ορισμένες

σημαντικές εφαρμογές τους. Το Κεφάλαιο συνεχίζεται με την ανάλυση της τεχνικής XRF και κυρίως της αρχής λειτουργίας της μεθόδου και την ανάλυση των κυριότερων συνιστωσών μίας διάταξης XRF (οι πηγές παραγωγής ακτίνων-X και η ανιχνευτική διάταξη), ενώ αναφέρονται και οι λοιπές συνιστώσες. Ακολούθως, αναλύεται το φάσμα της φθορίζουσας ακτινοβολίας. Το Κεφάλαιο κλείνει με την αναλυτική περιγραφή της διάταξης XRF του ΕΠΤ-ΕΜΠ και την καταγραφή των γεωμετρικών χαρακτηριστικών της διάταξης, όπως προκύπτουν από τη Διδακτορική Διατριβή (ΔΔ) [Π. Ρούνη, 2006].

Στο **3^ο Κεφάλαιο**, παρουσιάζεται η διαδικασία δημιουργίας φάσματος μηχανής ακτίνων-X μέσω προσομοίωσης. Η προσομοίωση πραγματοποιείται με χρήση του κώδικα Monte-Carlo PENELOPE, ο οποίος αναπτύχθηκε στο Πανεπιστήμιο της Βαρκελώνης το 2005. Αρχικά, γίνεται μία σύντομη περιγραφή στη λογική που ακολουθούν οι κώδικες Monte-Carlo και εν συνεχεία περιγράφεται η λειτουργία του κώδικα PENELOPE, οι δυνατότητες του και ο τρόπος αξιοποίησης των αποτελεσμάτων του, για την αντιμετώπιση των θεμάτων που πραγματεύεται η παρούσα ΔΕ. Ακολουθεί η περιγραφή της διαδικασίας δημιουργίας του φάσματος μηχανής ακτίνων-X που ακολουθήθηκε στα πλαίσια της ΔΕ. Το φάσμα που προκύπτει από την προσομοίωση συγκρίνεται ως προς τη μορφή του με φάσματα τα οποία παράγονται από θεωρητικό μοντέλο της βιβλιογραφίας, το οποίο και παρουσιάζεται. Τέλος, γίνεται αναφορά σε εμπορικά πακέτα λογισμικού, τα οποία παράγουν φάσμα μηχανής ακτίνων-X, βασιζόμενα σε ημι-εμπειρικά μοντέλα ή σε προσομοίωση.

Στο **4^ο Κεφάλαιο** παρουσιάζεται ο σχεδιασμός του προβλήματος, ώστε να είναι εφικτή η προσομοίωση μίας διάταξης XRF. Αρχικά, πραγματοποιείται ο διαχωρισμός του προβλήματος σε δύο τμήματα. Το πρώτο αφορά στη δημιουργία του φάσματος της μηχανής και το δεύτερο στη δημιουργία του φάσματος της φθορίζουσας ακτινοβολίας η οποία εκπέμπεται από στόχο, ο οποίος προσβάλλεται από το φάσμα της μηχανής. Μέσω της υπολογιστικής προσομοίωσης παράγονται μία σειρά από φάσματα ακτίνων-X τα οποία παράγονται από τη μηχανή ακτίνων-X του ΕΠΤ-ΕΜΠ για τα σενάρια ακτινοβόλησης που συνήθως χρησιμοποιούνται. Στο δεύτερο αυτό τμήμα γίνεται η θεώρηση πως η πηγή ακτίνων-X είναι μία σημειακή πηγή που εκπέμπει τα φάσματα που προέκυψαν από την προσομοίωση που έγινε στο πρώτο τμήμα. Εν συνεχεία, πραγματοποιούνται ορισμένες

δοκιμαστικές προσομοιώσεις με σκοπό τη βελτίωση της στατιστικής των αποτελεσμάτων και την αύξηση της ταχύτητας της προσομοίωσης.

Στο **5^ο Κεφάλαιο** μελετάται η τεχνική XRF βάσει προσομοίωσης με τις παραδοχές που έγιναν στα προηγούμενα κεφάλαια. Το φάσμα της μηχανής προσβάλλει ένα δείγμα που πλησιάζει τόσο σε γεωμετρικά χαρακτηριστικά όσο και σε σύσταση στα δείγματα που συνήθως αναλύονται στο ΕΠΤ-ΕΜΠ. Ως υλικό δείγματος επιλέγεται ένα τυπικό μείγμα στοιχείων που προσομοιώνει δείγμα χώματος. Αρχικά, πραγματοποιούνται προσομοιώσεις ενός απλού σεναρίου ακτινοβόλησης, το οποίο βασίζεται σε πειραματικά σενάρια που έχουν περατωθεί σε παλαιότερες ΔΕ στο ΕΠΤ-ΕΜΠ. Ακολούθως, πραγματοποιείται προσομοίωση ενός σεναρίου πραγματικής ακτινοβόλησης και επιχειρείται ποιοτική σύγκριση μεταξύ του φάσματος φθορίζουσας ακτινοβολίας της προσομοίωσης με το πειραματικό φάσμα που ελήφθη στο πλαίσιο της παρούσας ΔΕ. Επιπλέον, παράγεται φάσμα φθορισμού για πρότυπο βαθμονόμησης που διατίθεται στο ΕΠΤ-ΕΜΠ και τα αποτελέσματα της προσομοίωσης συγκρίνονται ποιοτικά με τα αντίστοιχα πειραματικά. Τέλος, πραγματοποιούνται προσομοιώσεις με στόχο τη μελέτη της επίδρασης που έχει στο φάσμα φθορισμού του δείγματος η γωνία τοποθέτησης του δείγματος σε σχέση με τη δέσμη των ακτίνων-X.

Στο **6^ο Κεφάλαιο**, που είναι και τελευταίο της ΔΕ, παρουσιάζεται μία σύνοψη της εργασίας καθώς και τα συμπεράσματα τα οποία προέκυψαν από τη συγκεκριμένη μελέτη. Τέλος, αναφέρονται μελλοντικές ιδέες για το πώς μπορούν τα αποτελέσματα και συμπεράσματα της ΔΕ να αξιοποιηθούν και να επεκταθούν.

Η ΔΕ ολοκληρώνεται με τέσσερα (4) παραρτήματα, τα οποία παρουσιάζονται παρακάτω:

Στο **Παράρτημα I** δίνεται ένας πίνακας με τις χαρακτηριστικές ακτίνες-X όλων των στοιχείων και τις αντίστοιχες ονομασίες τους.

Στο **Παράρτημα II** δίνεται ο πίνακας με όλα τα υλικά (χημικά στοιχεία, χημικές ενώσεις και μίγματα) τα οποία υπάρχουν στη βάση δεδομένων του προγράμματος PENELOPE, μαζί με τους αντίστοιχους κωδικούς τους.

Στο **Παράρτημα III** παρουσιάζονται δύο βοηθητικά προγράμματα, τα οποία χρησιμοποιήθηκαν στο πλαίσιο της παρούσας ΔΕ. Πρόκειται για τα: i) το πρόγραμμα gnview, που αποτελεί απεικονιστικό πρόγραμμα που δίνει τη δυνατότητα στο χρήστη να ελέγχει τη γεωμετρία που έχει κατασκευάσει και την οποία θα χρησιμοποιεί κατά την υπολογιστική προσομοίωση, και ii) το πρόγραμμα gnplot, μέσω του οποίου είναι δυνατή η κατασκευή τρισδιάστατων διαγραμμάτων.

Στο **Παράρτημα IV** δίνεται το πιστοποιητικό αναφοράς του πρότυπου υλικού Fly ash 1633b, το οποίο προσομοιώθηκε κατά στο πλαίσιο της παρούσας ΔΕ.

Κεφάλαιο 2: Ακτίνες-X και η τεχνική φθορισμού των ακτίνων-X

2.1 Εισαγωγή

Το κεφάλαιο αυτό περιλαμβάνει μία εισαγωγή στις ακτίνες-X, καθώς και της μεθόδου ανάλυσης με την τεχνική του φθορισμού των ακτίνων-X. Αρχικά, γίνεται μία ιστορική αναδρομή στην εποχή που ανακαλύφθηκαν οι ακτίνες-X από τον Wilhelm Conrad Röntgen. Στη συνέχεια περιγράφεται η φύση των ακτίνων-X, αναφέρονται οι ιδιότητες τους, όπως αυτές είναι γνωστές στον άνθρωπο τη σημερινή εποχή και περιγράφονται οι μηχανισμοί παραγωγής τους. Ακολούθως, περιγράφονται συνοπτικά οι μηχανισμοί απορρόφησης των ακτίνων-X και εφαρμογές αυτών των φαινομένων σε διάφορους τομείς. Στο δεύτερο τμήμα του κεφαλαίου αυτού αναλύεται η μέθοδος φθορισμού των ακτίνων-X και τα διαφορετικά είδη της, παρουσιάζονται οι βασικές συνιστώσες μίας διάταξης φθορισμού των ακτίνων-X και τέλος, περιγράφεται η διάταξη φθορισμού των ακτίνων-X, η οποία λειτουργεί στο ΕΠΤ-ΕΜΠ.

2.2 Ακτίνες-X

2.2.1 Ανακάλυψη των ακτίνων-X

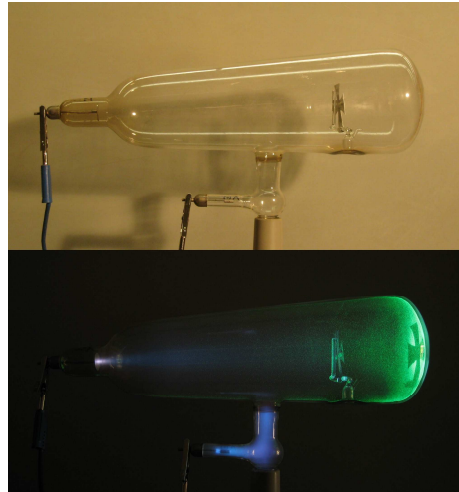
Το 1895 ο Γερμανός φυσικός Wilhelm Conrad Röntgen (1845-1923) (Σχήμα 2.1) προχώρησε σε μία σημαντική ανακάλυψη, η οποία έμελλε να αποτελέσει το θεμέλιο για πολλές σημερινές επιστήμες. Κατά τη διάρκεια του 1895 ο Röntgen μελετούσε τις επιδράσεις που είχαν στο εξωτερικό περιβάλλον, ηλεκτρικές εκκενώσεις μέσα σε σωλήνες κενού (vacuum tubes)¹. Συγκεκριμένα, μελετούσε μία δέσμη ηλεκτρονίων όταν αυτή έπεφτε σε μεταλλικό στόχο σε συνθήκες κενού. Στις αρχές του 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. Ήξερε πως το κάλυμμα αυτό

¹ Πρόκειται για συσκευές που ήταν σχεδιασμένες από τους Heinrich Hertz, Johann Hittorf, William Crookes, Nikola Tesla και Phillip von Lenard.

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 λευκόχρυσου-κυανιούχου βαρίου (platinocyanide barium, $\text{BaPt}(\text{CN})_4$). Ο Röntgen κατάλαβε πως το ίδιο θα συνέβαινε και με τους σωλήνες τύπου Hittorf- Crookes (Σχήμα 2.2), των οποίων τα τοιχώματα ήταν πολύ πιο λεπτά από αυτούς τύπου Lenard.



Σχήμα 2.1 Wilhelm Conrad Röntgen



Σχήμα 2.2 Σωλήνας Hittorf-Crookes

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 λευκόχρυσου-κυανιούχο βάριο, το οποίο βρισκόταν δίπλα από το σωλήνα καθώς ακόμη δεν το χρησιμοποιούσε. Έτσι κατάλαβε πως πρόκειται για ένα νέο είδος ακτινοβολίας, η οποία διαπερνούσε αρκετά υλικά. Λόγω της άγνωστης φύσης της ακτινοβολίας αυτής, έδωσε το όνομα ακτίνες-X. Αργότερα ονομάστηκαν και ακτίνες Röntgen προς τιμήν του. Η πρώτη ραδιογραφία που έβγαλε ήταν του χεριού της συζύγου του, Anna Bertha (Σχήμα 2.3).



Σχήμα 2.3 Ραδιογραφία του χεριού της Anna Bertha



Σχήμα 2.4 Οπτική αναπαράσταση των ακτίνων-X που εκπέμπονται από το νεφέλωμα Cat's Eye

2.2.2 Φύση και ιδιότητες των ακτίνων-X

Από την στιγμή της ανακάλυψης της νέας - για την εποχή - ακτινοβολίας έως και σήμερα έχουν πραγματοποιηθεί μία σειρά από πειράματα και πολλές μελέτες με απώτερο στόχο την ταυτοποίηση αυτής της «άγνωστης» ακτινοβολίας. Για να επιτευχθεί η ταυτοποίηση των ακτίνων-X είναι απαραίτητη τόσο η γνώση για τη φύση τους, όσο και η καταγραφή των ιδιοτήτων τους. Στις παραγράφους που ακολουθούν (§2.2.2.1 και §2.2.2.2) δίδονται οι απαραίτητες πληροφορίες για την πλήρη κατανόηση των ακτίνων-X. Οπτικά, οι ακτίνες-X γίνονται αντιληπτές κυρίως στο διάστημα στα κέντρα γαλαξιών ή σε νεφελώματα (Βλ. Σχήμα 2.4).

2.2.2.1 Φύση των ακτίνων-X

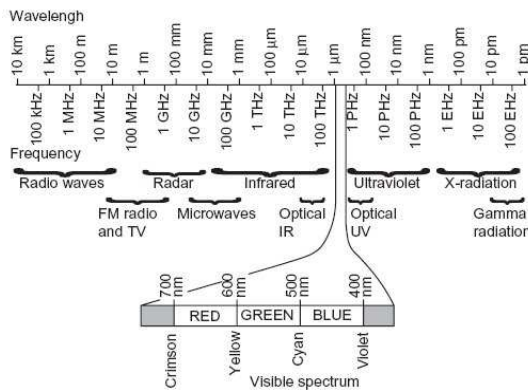
Σήμερα, γνωρίζουμε πως οι ακτίνες-X είναι ηλεκτρομαγνητική ακτινοβολία και μαζί με τα ραδιοκύματα, τα μικροκύματα, το υπέρυθρο φάσμα, το ορατό φάσμα και το υπεριώδες φάσμα καθώς και τις ακτίνες-γ, συγκροτούν το ηλεκτρομαγνητικό φάσμα (Σχήμα 2.5). Η ηλεκτρομαγνητική ακτινοβολία (EMR-electromagnetic radiation) είναι το φαινόμενο της δημιουργίας δύο συγχρονισμένων ταλαντούμενων πεδίων (ένα ηλεκτρικό και ένα μαγνητικό), τα οποία ταλαντώνονται σε κάθετα επίπεδα μεταξύ τους και κάθετα προς την διεύθυνση διάδοσής τους (Σχήμα 2.6). Χαρακτηριστικά της ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας είναι το μήκος κύματος (λ), η συχνότητα (f) και η ενέργεια (E). Τα τρία αυτά μεγέθη συνδέονται με τη σχέση:

$$f = \frac{c}{\lambda} = \frac{E}{h} \Leftrightarrow E = \frac{h \cdot c}{\lambda} \quad (2.1)$$

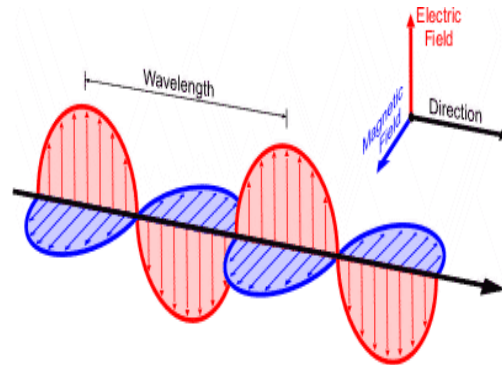
Όπου:

$c = 299,792,458 \text{ m/s}$, ταχύτητα του φωτός στο κενό

$h = 6.626068 \cdot 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$, σταθερά του Planck



Σχήμα 2.5 Το ηλεκτρομαγνητικό φάσμα



Σχήμα 2.6 Το ηλεκτρομαγνητικό κύμα

Οι ακτίνες- X έχουν αρκετά μικρό μήκος κύματος και επομένως υψηλές συχνότητες και ενέργεια (βλ. σχέση 2.1). Το μήκος κύματος τους κυμαίνεται από 10^{-9} - 10^{-12} m ($0,01$ - 10\AA) και η συχνότητά τους από $3 \cdot 10^{16}$ - $3 \cdot 10^{19}$ Hz. Όπως φαίνεται και στο Σχήμα 2.5, η ενεργειακή περιοχή των ακτίνων- X και η ενεργειακή περιοχή των ακτίνων- γ επικαλύπτονται και η διάκρισή τους βάσει του ηλεκτρομαγνητικού φάσματος είναι αδύνατη.

Γενικότερα, ο διαχωρισμός των ακτίνων- X και - γ έχει αλλάξει τις τελευταίες δεκαετίες. Αρχικά, οι ακτίνες- X που εκπέμπονταν από τους σωλήνες ακτίνων- X (X-ray tubes) είχαν μεγαλύτερο μήκος κύματος (μικρότερη ενέργεια) από αυτές που εκπέμπονταν από ραδιενεργούς πυρήνες (ακτίνες- γ). Λόγω αυτού του γεγονότος στην παλαιότερη βιβλιογραφία ο διαχωρισμός γίνεται βάσει του μήκους κύματος, με τις ακτίνες που έχουν μήκος κύματος μικρότερο από 10^{-11} m να χαρακτηρίζονται ως ακτίνες- γ . Ωστόσο, αυτό το όριο διαχωρισμού των ακτίνων- X με τις ακτίνες- γ είναι πλέον παρωχημένο, διότι, αφενός κατασκευάστηκαν μηχανές (π.χ. γραμμικοί επιταχυντές) με δυνατότητα παραγωγής ακτίνων- X με μικρότερα μήκη κύματος (υψηλότερη ενέργεια) και αφετέρου ανακαλύφθηκαν ραδιενεργοί πυρήνες που εκπέμπουν ακτίνες- γ μεγαλύτερου μήκους κύματος (χαμηλότερης ενέργειας). Για αυτό το λόγο, ο διαχωρισμός σήμερα γίνεται βάσει της προέλευσης των

φωτονίων: ακτίνες- X θεωρούνται τα φωτόνια που εκπέμπονται κατά την αποδιέγερση ατόμων και την πέδηση ηλεκτρονίων από τον πυρήνα ατόμων, ενώ ακτίνες- γ τα φωτόνια που εκπέμπονται κατά την αποδιέγερση του πυρήνα.

Οι ακτίνες- X ανάλογα με την ενέργεια τους χαρακτηρίζονται ως μαλακές ή σκληρές². Ακτίνες- X με ενέργεια από 0.12 έως 12 keV (λ : 10 - 0.10 nm) ονομάζονται «μαλακές», ενώ αυτές με ενέργεια από 12 έως 120 keV (λ : 0.10 - 0.010 nm) ονομάζονται «σκληρές».

2.2.2.2 Ιδιότητες των ακτίνων- X

Οι ακτίνες- X έχουν ένα σύνολο ιδιοτήτων λόγω της φύσης τους, όπως αυτή αναφέρθηκε παραπάνω αλλά και λόγω της προέλευσής τους. Γενικά, οι ακτίνες- X [3]:

- Είναι αόρατες.
- Είναι ηλεκτρικά ουδέτερες. Αυτό σημαίνει πως δεν μπορούν να επιταχυνθούν ούτε και να αλλάξουν κατεύθυνση από ένα ηλεκτρικό ή μαγνητικό πεδίο.
- Δεν έχουν μάζα.
- Στο κενό κινούνται με την ταχύτητα του φωτός καθώς είναι φωτόνια.
- Δεν εστιάζονται οπτικά.
- Σχηματίζουν πολυενεργειακές ή ετερογενείς δέσμες.
- Κινούνται σε ευθύγραμμη διεύθυνση.
- Προκαλούν φθορισμό σε ορισμένες ουσίες.
- Προκαλούν χημικές αλλαγές που γίνονται αντιληπτές στο ραδιογραφικό ή στο φωτογραφικό φιλμ.
- Αλληλεπιδρούν με τα άτομα των υλικών στα οποία προσπίπτουν, προκαλώντας ιονισμούς, δηλαδή μετατρέπουν τα άτομα σε ιόντα. Για αυτό οι ακτίνες- X χαρακτηρίζονται ως ιοντίζουσες ή ιονίζουσες ακτινοβολίες (όπως οι ακτίνες- γ και η ακτινοβολία - α και - β).
- Απορροφούνται ή σκεδάζονται από τους ιστούς του ανθρώπινου σώματος και γενικότερα από τα υλικά στα οποία προσπίπτουν.
- Παράγουν δευτερογενή ακτινοβολία αλληλεπιδρώντας με την ύλη.
- Μπορούν να προκαλέσουν χημικές και βιολογικές αλλαγές σε ζωντανούς ιστούς.

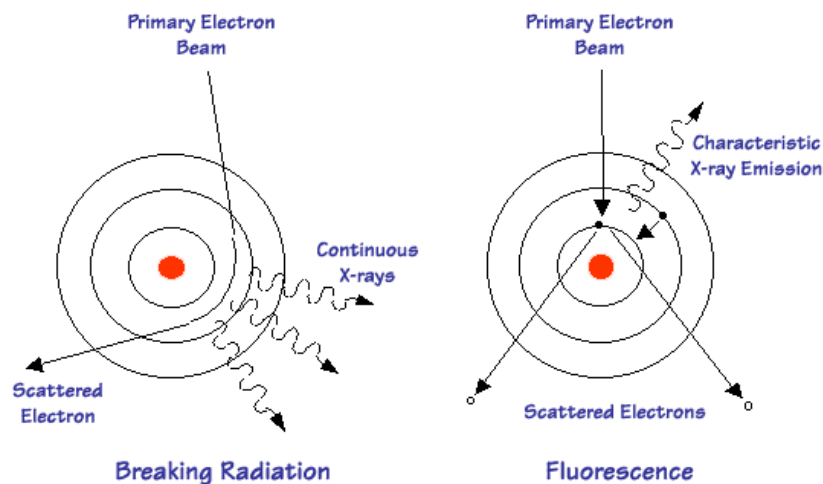
² Ως «μαλακές» θεωρούνται οι ακτίνες- X που έχουν μικρή διαπερατότητα, ενώ ως «σκληρές» αυτές που έχουν μεγαλύτερη διαπερατότητα.

2.2.3 Προέλευση των ακτίνων-X

Σήμερα γνωρίζουμε ότι οι ακτίνες-X παράγονται από δύο μηχανισμούς (Σχήμα 2.7):

- εκπομπή φωτονίων που προκύπτουν από την επιβράδυνση (πέδηση) ηλεκτρονίων, όταν αυτά προσεγγίσουν τον πυρήνα ενός ατόμου (ακτινοβολία πέδησης), ή
- εκπομπή φωτονίων λόγω αποδιέγερσης ενός διεγερμένου ή ιονισμένου ατόμου (χαρακτηριστική ακτινοβολία).

Η εκπομπή χαρακτηριστικής ακτινοβολίας θα μπορούσε επίσης να προκύψει και ως αποτέλεσμα ενός τύπου ραδιενεργού διάσπασης που είναι γνωστή ως σύλληψη ηλεκτρονίου (electron capture, EC), κατά τον οποίο ένα ηλεκτρόνιο της πλησιέστερης στον πυρήνα του ατόμου στιβάδας συλλαμβάνεται από τον πυρήνα του ατόμου του, με αποτέλεσμα τον ιονισμό του ατόμου. Ως επακόλουθο του ιονισμού εκπέμπεται χαρακτηριστική ακτινοβολία-X του ατόμου.



Σχήμα 2.7 Η ακτινοβολία πέδησης (αριστερά) και οι χαρακτηριστική ακτινοβολία (δεξιά)

2.2.3.1 Ακτινοβολία πέδησης (braking radiation)

Όταν ένα ηλεκτρόνιο βρεθεί πολύ κοντά στον πυρήνα ενός ατόμου, είναι δυνατόν να χάσει μέρος ή και ολόκληρη την κινητική του ενέργεια. Το ηλεκτρόνιο επιβραδύνεται καθώς δέχεται ισχυρές ηλεκτρικές δυνάμεις Coulomb από τον θετικά φορτισμένο πυρήνα και αυτό προκαλεί την μείωση της κινητικής του ενέργειας και αλλαγή της ευθύγραμμης πορείας του (κάμψη). Σύμφωνα με το αρχή της διατήρησης της ενέργειας, η κινητική ενέργεια που χάνει το ηλεκτρόνιο μετατρέπεται σε φωτόνιο ίσης ενέργειας. Γενικότερα ισχύει:

$$E_{\text{φωτονίου}} = \Delta E_{\text{κινητική ηλεκτρονίου}} \Leftrightarrow h \cdot f = E_{\text{κιν(αρχική)}} - E_{\text{κιν(τελική)}} \quad (2.2)$$

Τα παραγόμενα φωτόνια συνιστούν τη λεγόμενη *ακτινοβολία πέδησης (braking radiation)* ή *λευκή ακτινοβολία (white radiation)*. Το πόσο κοντά στον πυρήνα θα πλησιάσει το εισερχόμενο ηλεκτρόνιο θα καθορίσει και το ποσό της κινητικής του ενέργειας που θα χάσει (δηλαδή την ενέργεια του εκπεμπόμενου φωτονίου), εφόσον η ελκτική δύναμη Coulomb αυξάνει αντιστρόφως ανάλογα με το τετράγωνο της απόστασης των φορτίων. Όταν το ηλεκτρόνιο χάσει ολόκληρη την κινητική του ενέργεια, τότε εκπέμπεται ακτίνα-X με τη μέγιστη ενέργεια [1].

Επειδή τα φωτόνια που προκύπτουν από την παραπάνω διαδικασία μπορούν να έχουν οποιαδήποτε ενέργεια, από 0 keV έως την ενέργεια του αρχικού ηλεκτρονίου, η ακτινοβολία αυτή ονομάζεται και *συνεχής ακτινοβολία (continuum radiation)*.

2.2.3.2 Χαρακτηριστική ακτινοβολία (characteristic radiation)

Όταν ένα φορτισμένο σωματίδιο ή ένα φωτόνιο αλληλεπιδράσει με ένα ηλεκτρόνιο του ατόμου, έχοντας ενέργεια μεγαλύτερη από την ενέργεια σύνδεσης (binding energy) του ηλεκτρονίου, είναι πολύ πιθανό το ηλεκτρόνιο του ατόμου να φύγει από την θέση του, πηγαίνοντας σε άλλη στιβάδα (διέγερση του ατόμου) ή ακόμη και να διαφύγει από το άτομο (ιονισμός του ατόμου). Σε κάθε περίπτωση το άτομο βρίσκεται σε κατάσταση αστάθειας και επιστρέφει στη αρχική του κατάσταση με μία από τις δύο παρακάτω διαδικασίες, που έχουν ως κοινό σημείο τη μεταφορά ηλεκτρονίου από μία από τις εξωτερικές στιβάδες ώστε να καλυφθεί το κενό.

Η πρώτη πιθανή διαδικασία ακολουθείται από εκπομπή ακτίνας-X. Η ενεργειακή διαφορά μεταξύ της αρχικής και τελικής ενέργειας του μεταφερομένου ηλεκτρονίου είναι η ενέργεια του παραγόμενου φωτονίου. Η ακτινοβολία που παράγεται από αυτή τη διαδικασία ονομάζεται *χαρακτηριστική ακτινοβολία (characteristic radiation)* καθώς η τιμή της ενέργειας του φωτονίου είναι άμεσα εξαρτώμενη των ενεργειών των στιβάδων του εκάστοτε ατόμου. Η διαδικασία αυτή ονομάζεται *φθορισμός (fluorescence)*.

Για κάθε στοιχείο του περιοδικού πίνακα υπάρχουν μία σειρά από χαρακτηριστικές ακτίνες-X. Αυτό γίνεται ευκόλως αντιληπτό βάσει των δυνατών ηλεκτρονιακών μεταβάσεων μέσα στο εκάστοτε άτομο, δηλαδή ανάλογα από ποια στιβάδα σε ποια θα μεταπέσει ένα ηλεκτρόνιο, εκπέμπεται και μία χαρακτηριστική ακτίνα συγκεκριμένης ενέργειας. Κάθε

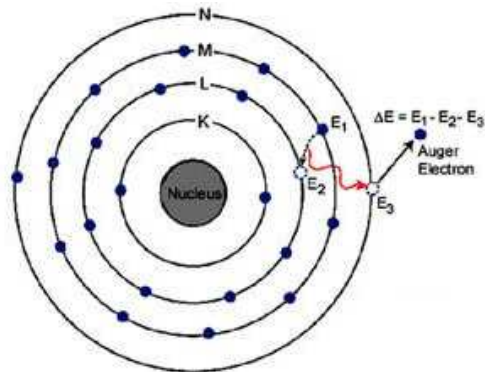
τροχιά (στιβάδα) χαρακτηρίζεται από ένα κβαντικό αριθμό n και ένα γράμμα. Για παράδειγμα, η κοντινότερη στον πυρήνα τροχιά χαρακτηρίζεται από τον κβαντικό αριθμό $n=1$ και το γράμμα K , η επόμενη από τον $n=2$ και το γράμμα L κ.ο.κ.

Οι μεταπτώσεις ηλεκτρονίων που καταλήγουν στη στιβάδα K συνοδεύονται από χαρακτηριστικές ακτίνες- X που ονομάζονται K ακτίνες (ή γραμμές), αυτές που καταλήγουν στη στιβάδα L ονομάζονται L γραμμές και ομοίως συμβαίνει με τις υπόλοιπες στιβάδες. Εάν το ηλεκτρόνιο μεταπέσει από τη στιβάδα L στην K οι χαρακτηριστική ονομάζεται K_{α} , αν η μετάπτωση γίνει από την M στην K , ονομάζεται K_{β} κ.ο.κ. Γνωρίζοντας πως οι περισσότερες ενεργειακές στάθμες (στιβάδες) περιέχουν υποστάθμες (υποστιβάδες), η ονομασία μίας χαρακτηριστικής ακτίνας- X , που εκπέμπεται όταν ένα ηλεκτρόνιο μεταπέσει από την πρώτη υποστιβάδα της στιβάδας L στην K είναι $K_{\alpha 1}$. Με αυτόν τον τρόπο κάθε χαρακτηριστική ακτίνα- X έχει ένα συγκεκριμένο όνομα.

Οι ακτίνες K ενός στοιχείου έχουν μεγαλύτερη ενέργεια από τις ακτίνες L , οι οποίες με τη σειρά τους έχουν μεγαλύτερη ενέργεια από τις M κ.ο.κ. Μέσα σε μία ομάδα ακτίνων, για παράδειγμα ανάμεσα στις L , η L_{α} είναι μικρότερης ενέργειας από την L_{β} . Ομοίως, η $L_{\alpha 1}$ είναι μικρότερης ενέργειας από τη $L_{\alpha 2}$ κ.ο.κ.

Η δεύτερη πιθανή διαδικασία αποδιέγερσης του ατόμου δεν απαιτεί την παραγωγή φωτονίου, αλλά η αποδιέγερση γίνεται με εκπομπή άλλου ηλεκτρονίου από το άτομο. Δηλαδή, η ενεργειακή διαφορά μεταξύ των δύο στιβάδων μεταφέρεται σε ένα ασθενέστερα συνδεδεμένο ηλεκτρόνιο του ατόμου το οποίο και εκπέμπεται, όπως φαίνεται στο Σχήμα 2.8. Το φαινόμενο είναι γνωστό ως *φαινόμενο Auger (Auger effect)*, και τα εκπεμπόμενα ηλεκτρόνια λέγονται *ηλεκτρόνια Auger (Auger electrons)* [8]. Γενικά, η πιθανότητα να πραγματοποιηθεί το φαινόμενο Auger αυξάνεται, καθώς μειώνεται η διαφορά των ενεργειών των δύο στιβάδων. Η πιθανότητα μεγιστοποιείται για άτομα χαμηλού ατομικού αριθμού Z [3].

Σε ορισμένες περιπτώσεις στοιχείων συγκεκριμένων περιοχών του περιοδικού πίνακα είναι δυνατόν να συμβεί ένα άλλο φαινόμενο γνωστό ως *μετάβαση Coster-Kronig (Coster-Kronig transition)*. Εδώ έχουμε συμπλήρωση του κενού που αφήνει το ηλεκτρόνιο από ένα ηλεκτρόνιο διαφορετικής υποστιβάδας (της ίδιας στιβάδας) με υψηλότερη ενέργεια.

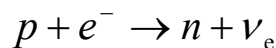


Σχήμα 2.8 Το φαινόμενο Auger

Εάν το ηλεκτρόνιο που εκπεμφθεί ανήκει επίσης στην ίδια υποστιβάδα η μετάβαση αναφέρεται ως υπερ-μετάβαση *Coster-Kronig* (*super Coster-Kronig transition*), [7].

2.2.3.3 Χαρακτηριστική ακτινοβολία λόγω σύλληψης ηλεκτρονίου (electron capture-EC)

Η σύλληψη ηλεκτρονίου είναι ένας ανταγωνιστικός μηχανισμός της διάσπασης β^+ και πραγματοποιείται σε ασταθείς πυρήνες μεγάλου αριθμού πρωτονίων (υψηλού ατομικού αριθμού Z). Ειδικότερα, όταν η επιπλέον ενέργεια ενός πυρήνα είναι μικρότερη από 1.022MeV, τότε ο κυρίαρχος μηχανισμός είναι η σύλληψη ηλεκτρονίου. Σε αυτή την περίπτωση, ένα πρωτόνιο του πυρήνα απορροφά ένα ηλεκτρόνιο της στιβάδας K ή της στιβάδας L (σπανιότερα) παράγοντας ένα νετρόνιο και ένα νεutrino του ηλεκτρονίου (electron neutrino). Ο μηχανισμός φαίνεται σχηματικά παρακάτω [8]:



Το άτομο μετά τη σύλληψη του ηλεκτρονίου από τον πυρήνα είναι διεγερμένο καθώς υπάρχει κενό σε μία από τις εσωτερικές στιβάδες. Όταν το άτομο αποδιεγερθεί, με συμπλήρωση της στιβάδας από ένα ηλεκτρόνιο εξωτερικής στιβάδας, τότε εκπέμπεται είτε χαρακτηριστική ακτίνα-X είτε ηλεκτρόνιο Auger [3] (βλ. §2.2.3.2).

2.2.4 Οι αλληλεπιδράσεις των ακτίνων-X με την ύλη

Οι ακτίνες-X, πραγματοποιούν με την ύλη τις ίδιες αλληλεπιδράσεις που πραγματοποιούν και τα φωτόνια-γ:

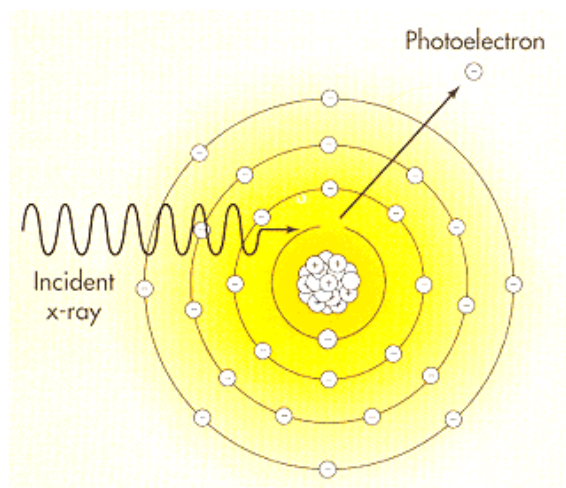
- Φωτοηλεκτρικό φαινόμενο
- Ελαστική σκέδαση
- Μη ελαστική σκέδαση

Τονίζεται, πως η αλληλεπίδραση της Δίδυμης Γένεσης δεν αναφέρεται παραπάνω, καθώς απαιτεί ενέργεια φωτονίων υψηλότερη από 1.022MeV, η οποία είναι πολύ υψηλότερη από τις ενέργειες τις χαρακτηριστικής ακτινοβολίας-X αλλά και τις ενέργειες που συνήθως λειτουργούν οι μηχανές ακτίνων-X. Προφανώς σε εφαρμογές υψηλών ενεργειών, όπως σε ακτίνες-X που παράγονται σε ιατρικούς επιταχυντές η Δίδυμη Γένεση είναι μία αλληλεπίδραση η οποία μπορεί να είναι πολύ σημαντική.

2.2.4.1 Φωτοηλεκτρικό φαινόμενο

Το φωτοηλεκτρικό φαινόμενο (Σχήμα 2.9) είναι η αλληλεπίδραση ενός φωτονίου (*incident X-ray*) με ηλεκτρόνιο ισχυρά συνδεδεμένο στο άτομο, δηλαδή ηλεκτρόνιο εσωτερικής στιβάδας (συνήθως της στιβάδας K). Η αλληλεπίδραση αυτή έχει ως αποτέλεσμα την εκπομπή του ηλεκτρονίου από το άτομο. Το ηλεκτρόνιο αυτό συνήθως ονομάζεται φωτοηλεκτρόνιο (*photoelectron*). Εάν η ενέργεια του φωτονίου είναι E_γ και η ενέργεια του ηλεκτρονίου είναι E_σ , τότε το φωτοηλεκτρόνιο θα έχει κινητική ενέργεια:

$$T = E_\gamma - E_\sigma \quad (2.4)$$

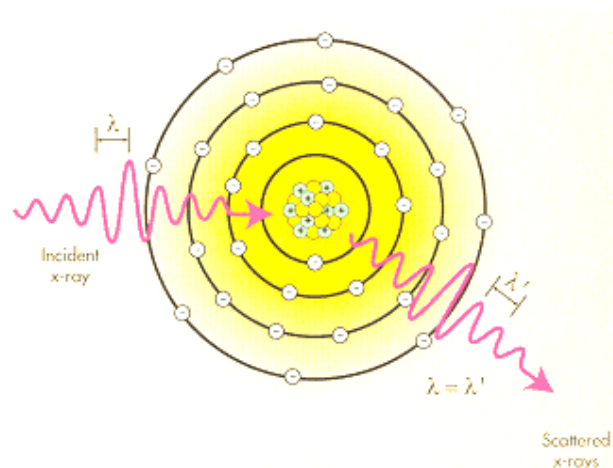


Σχήμα 2.9 Το φωτοηλεκτρικό φαινόμενο

Όσο μεγαλύτερη είναι η ενέργεια του φωτονίου σε σχέση με την ενέργεια σύνδεσης του ηλεκτρονίου, τόσο μικρότερη είναι η πιθανότητα πραγματοποίησης του φαινομένου. Γενικότερα, όταν η ενέργεια του φωτονίου είναι μεγαλύτερη από την ενέργεια σύνδεσης μίας στιβάδας, αλλά παραπλήσια της, τότε το φωτόνιο θα αλληλεπιδράσει με ηλεκτρόνιο αυτής της στιβάδας. Μετά την αλληλεπίδραση το άτομο βρίσκεται να είναι ιονισμένο, με αποτέλεσμα τη μεταφορά ενός ηλεκτρονίου από εξωτερική στιβάδα ώστε να καλυφθεί το κενό και συνεπώς ακολουθεί και εκπομπή και χαρακτηριστικής ακτινοβολίας-X.

2.2.4.2 Ελαστική σκέδαση (Rayleigh scattering)

Η ελαστική σκέδαση (Σχήμα 2.10) είναι μία αλληλεπίδραση κατά την οποία τα φωτόνια σκεδάζονται από τα εξωτερικά ηλεκτρόνια του ατόμου κατά τη διάρκεια της οποίας το άτομο δεν ιονίζεται. Η ενέργεια απορροφάται από το άτομο και επανεκπέμπεται, με τη μορφή φωτονίου της ίδιας ενέργειας με το αρχικό και παραπλήσιας διεύθυνσης.



Σχήμα 2.10 Ελαστική σκέδαση φωτονίου

Η ελαστική σκέδαση, που ονομάζεται και σκέδαση Rayleigh έχει αξιόλογη πιθανότητα εμφάνισης για φωτόνια χαμηλής ενέργειας (<10 keV [9]) που προσπίπτουν σε υλικό υψηλού ατομικού αριθμού Z [3]. Η σχέση που συνδέει τις ενέργειες του σκεδαζόμενου (*scattered*) και του προσπίπτοντος (*incident*) φωτονίου E_s και E_i αντίστοιχα είναι :

$$E_s = E_i \quad (2.5)$$

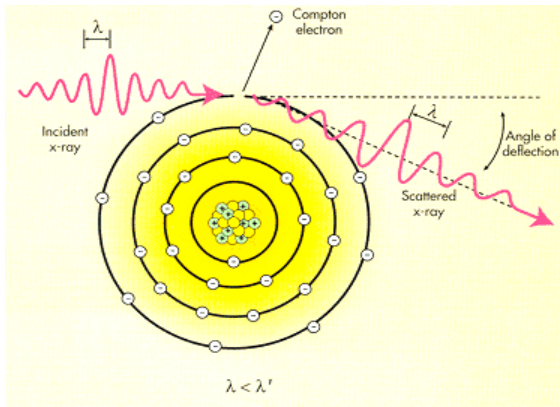
Πρέπει να επισημανθεί ότι, για τις χαρακτηριστικές ακτίνες-X πολλών υλικών, καθώς και για ένα μεγάλο μέρος του φάσματος των ακτίνων-X που εκπέμπονται από μία μηχανή ακτίνων-X, το φαινόμενο αυτό μπορεί να έχει ιδιαίτερη σημασία.

2.2.4.3 Μη ελαστική σκέδαση (Compton scattering)

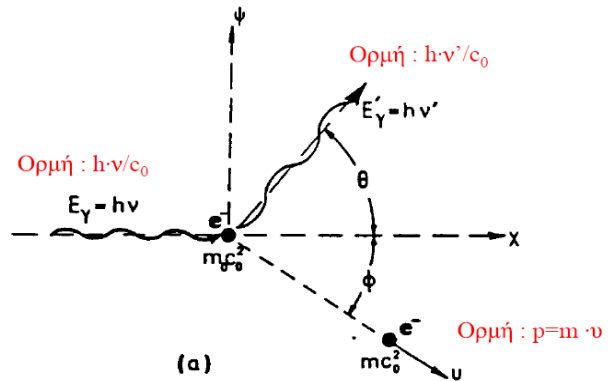
Η σκέδαση Compton (Σχήμα 2.11 & 2.12) ή μη ελαστική σκέδαση, είναι η αλληλεπίδραση ενός φωτονίου με ένα περιφερειακό ηλεκτρόνιο (ασθενώς συνδεδεμένο με το άτομο). Αν E_i και E_s οι ενέργειες του προσπίπτοντος και του σκεδαζόμενου φωτονίου αντίστοιχα, τότε το ηλεκτρόνιο διαφεύγει από το άτομο έχοντας κινητική ενέργεια:

$$T = E_i - E_s \quad (2.6)$$

Το διαφεύγων ηλεκτρόνιο ονομάζεται συνήθως *ηλεκτρόνιο Compton*.



Σχήμα 2.11 Σκέδαση Compton



Σχήμα 2.12 Σκέδαση Compton και χαρακτηριστικά μεγέθη

Κατά τη σκέδαση Compton το σκεδαζόμενο φωτόνιο έχει διαφορετική ενέργεια από το προσπίπτον. Για χαμηλές ενέργειες φωτονίων (έως λίγες δεκάδες keV) η γωνία των σκεδαζόμενων φωτονίων είναι περί τις 90° , ενώ για πολύ υψηλές ενέργειες, τα σκεδαζόμενα φωτόνια έχουν κατά το πλείστον διεύθυνση παρόμοια με αυτή των προσπιπτόντων [3].

Κατά το φαινόμενο Compton ισχύουν οι αρχές διατήρησης της ορμής και της ενέργειας, από τις οποίες προκύπτουν οι ενέργειες του σκεδαζόμενου φωτονίου και του ηλεκτρονίου Compton, όπως αυτές φαίνονται παρακάτω [9]:

- Ενέργεια σκεδαζόμενου φωτονίου:

$$E'_\gamma = h \cdot \nu' = \frac{E_\gamma}{1 + \alpha \cdot (1 - \cos\theta)} \quad (2.7)$$

όπου $\alpha = \frac{h \cdot \nu}{m_0 \cdot c_0^2}$

- Κινητική ενέργεια σκεδαζόμενου ηλεκτρονίου:

$$T = E_{\gamma} \cdot \frac{\alpha \cdot (1 - \cos \theta)}{1 + \alpha \cdot (1 - \cos \theta)} \quad (2.8)$$

- Σχέση γωνιών θ και φ :

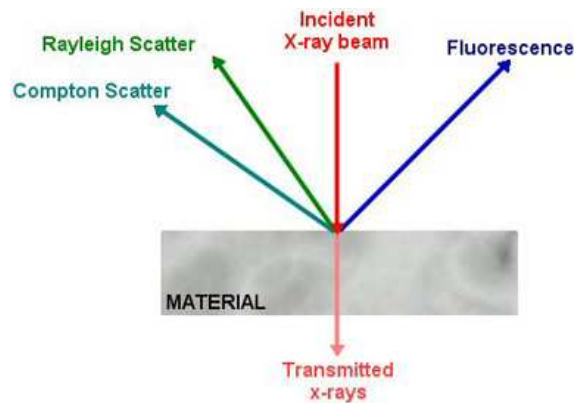
$$\cot \varphi = \frac{(1 - \cos \theta) \cdot (1 + \alpha)}{\sin \theta} = (1 + \alpha) \cdot \tan \left(\frac{\theta}{2} \right) \quad (2.9)$$

Όπως φαίνεται από τη σχέση (2.7), η ενέργεια του σκεδαζόμενου φωτονίου γίνεται ελάχιστη όταν ο όρος $1 - \cos \theta$ γίνει μέγιστος, δηλαδή για $\theta = 180^\circ$. Σε αυτή την περίπτωση το φαινόμενο λέγεται *οπισθοσκέδαση*, καθώς τα σκεδαζόμενα φωτόνια έχουν αντίθετη κατεύθυνση με αυτή των προσπιπόντων. Επομένως, κατά το φαινόμενο της οπισθοσκέδασης τα σκεδαζόμενα φωτόνια έχουν τη μικρότερη δυνατή ενέργεια, η οποία δίδεται από τη σχέση:

$$E'_{\gamma, \max} = \frac{E_{\gamma}}{1 + 2 \cdot \alpha} \quad (2.10)$$

2.2.4.4 Εξασθένηση των ακτίνων-X στην ύλη

Όπως αναφέρθηκε στις παραπάνω παραγράφους, ένα φωτόνιο (π.χ. μία ακτίνα-X) καθώς διεισδύει μέσα σε ένα υλικό αλληλεπιδρά με αυτό με μία σειρά από μηχανισμούς, με συνέπεια την απορρόφησή της από το υλικό άμεσα ή έμμεσα. Άμεσα αλληλεπιδρούν με το υλικό τα φωτόνια όταν υφίστανται φωτοηλεκτρικό φαινόμενο, ενώ έμμεσα δια μέσου συνεχόμενων σκεδάσεων Compton, έως ότου το παρθενικό φωτόνιο να χάσει όλη την ενέργεια του μέσα στο υλικό (βλ. Σχήμα 2.13).



Σχήμα 2.13 Διέλευση ακτίνων-X διά μέσου απορροφητή σε σχήμα πλάκας

Το φαινόμενο κατά το οποίο μία δέσμη η οποία προσπίπτει σε ένα υλικό εξέρχεται από αυτό με μειωμένο αριθμό φωτονίων λέγεται εξασθένιση της δέσμης. Για μία παράλληλη δέσμη μονοενεργειακών φωτονίων διατυπώνεται ο απλός νόμος της εξασθένισης:

$$I(x) = I_0 \cdot e^{-\mu \cdot x} \quad (2.11)$$

όπου:

I(x): το πλήθος των φωτονίων που φθάνουν ανεπηρέαστα (παρθενικά) σε βάθος x μέσα στο υλικό (φωτόνια $\text{cm}^{-2} \text{s}^{-1}$).

I₀ : αρχικό πλήθος παρθενικών φωτονίων (φωτόνια $\text{cm}^{-2} \text{s}^{-1}$).

μ: ο ολικός γραμμικός συντελεστής εξασθένισης των φωτονίων που εξαρτάται από το υλικό του απορροφητή και την ενέργεια των φωτονίων.

Ο συντελεστής μ αναλύεται σε τέσσερις συνιστώσες, οι οποίες αναφέρονται στους τέσσερις μηχανισμούς εξασθένισης δηλαδή το φωτοηλεκτρικό φαινόμενο (τ), τη σκέδαση Compton (σ), την ελαστική σκέδαση (σ_s) και τη δίδυμη γένεση (κ):

$$\mu = \tau + \sigma + \sigma_s + \kappa \quad (2.12)$$

2.2.5 Εφαρμογές των ακτίνων-X

Σήμερα, οι ακτίνες-X χρησιμοποιούνται σε μία πλειάδα εφαρμογών, κάτι που τις καθιστά αναπόσπαστο κομμάτι της καθημερινότητας των ανθρώπων. Παρακάτω παρουσιάζονται ορισμένες χρήσεις των ακτίνων-X σε διάφορους τομείς:

- Διαγνωστική και θεραπευτική ραδιολογία: οι ακτίνες-X χρησιμοποιούνται, είτε για διάγνωση (π.χ. ακτινογραφίες & τομογραφίες), είτε για θεραπεία (π.χ. ακτινοβόληση όγκων).
- Κρυσταλλογραφία: δέσμη ακτίνων-X περνώντας μέσα από την πυκνή διάταξη του πλέγματος των ατόμων ενός κρυσταλλικού υλικού μπορεί να δώσει πληροφορίες σχετικά με την κρυσταλλική δομή του υλικού.
- Αστρονομία: οι ακτίνες-X χρησιμοποιούνται στον παρατηρητικό κλάδο της αστρονομίας, ο οποίος ασχολείται με την εκπομπή ακτίνων-X από ουράνια σώματα.
- Μικροσκοπική ανάλυση: σε αυτή την τεχνική χρησιμοποιούνται «μαλακές» ακτίνες-X, έτσι ώστε να παραχθούν εικόνες των πολύ μικρών αντικειμένων.
- Φθορισμός των ακτίνων-X: οι ακτίνες-X χρησιμοποιούνται για τη διέγερση των ατόμων ενός υλικού προκειμένου, μέσω φθορισμού να εκπεμφθούν οι χαρακτηριστικές ακτίνες-X των ατόμων.
- Βιομηχανική ραδιογραφία: εδώ χρησιμοποιούνται ακτίνες-X για να εξετασθούν μεταλλικές κατασκευές, συγκολλήσεις κλπ.
- Τέχνη: πολλές φορές έργα τέχνης εκτίθενται σε δέσμη ακτίνων-X με σκοπό να αποκαλυφθεί τι υπάρχει κάτω από επιφανειακό στρώμα χρώματος, ή να προσδιορισθούν ίχνη χρώματος, αόρατα στο μάτι.
- Σαρωτές αποσκευών και οχημάτων: οι ακτίνες-X χρησιμοποιούνται για την επιθεώρηση του εσωτερικού των αποσκευών ή και οχημάτων.

2.3 Τεχνική φθορισμού των ακτίνων-X

Στις παραγράφους που ακολουθούν, παρουσιάζεται με λεπτομέρεια μία από τις παραπάνω εφαρμογές των ακτίνων-X, η τεχνική φθορισμού των ακτίνων-X που αποτελεί και το επίκεντρο της παρούσης ΔΕ.

2.3.1 Αρχή λειτουργίας της τεχνικής

Η τεχνική φθορισμού των ακτίνων-X (**X-Ray Fluorescence, XRF**) είναι μία αναλυτική τεχνική, η οποία στηρίζεται στο φθορισμό των ακτίνων-X. Ο φθορισμός των ακτίνων-X είναι

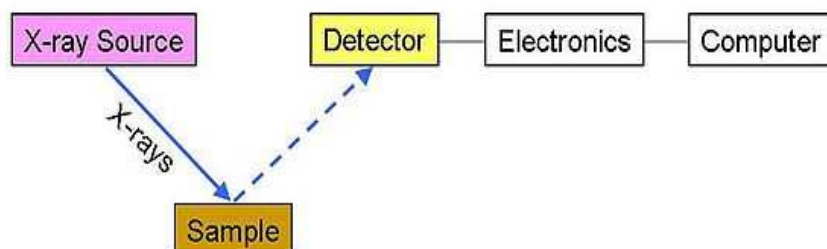
το φαινόμενο κατά το οποίο άτομα που βρίσκονται σε κατάσταση διέγερσης ή ιονισμού, λόγω προηγούμενης αλληλεπίδρασής τους με σωματίδιο ή φωτόνιο επαρκούς ενέργειας, αποδιεγείρονται εκπέμποντας ακτίνες-X χαρακτηριστικής ενέργειας. Αυτή η χαρακτηριστική ακτινοβολία ονομάζεται και *φθορίζουσα*. Οι χαρακτηριστικές ακτίνες-X έχουν συγκεκριμένες ενέργειες για κάθε άτομο (βλ. §2.2.2.3.) και για αυτό αποτελούν την «ταυτότητα» των στοιχείων. Η χαρακτηριστική αυτή ακτινοβολία μπορεί να οδηγήσει στον προσδιορισμό των στοιχείων που υπάρχουν στο αναλυόμενο δείγμα.

Ανάλογα με το είδος της ακτινοβολίας που προκαλεί τη διέγερση των ατόμων του δείγματος, οι τεχνικές φθορισμού διακρίνονται σε [5]:

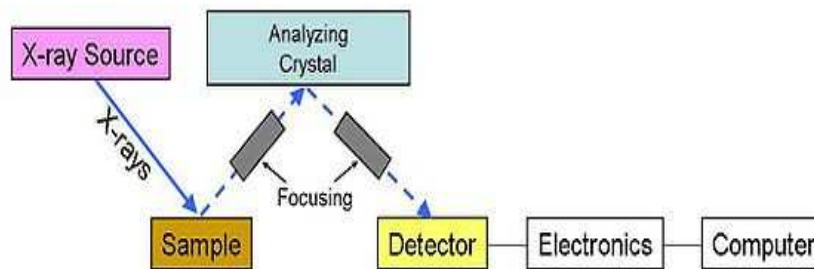
- *XRF (X-ray fluorescence)*, όταν η διεγείρουσα ακτινοβολία είναι ακτίνες-X.
- *PIXE (Particle induced X-ray emission)*, όταν η διεγείρουσα ακτινοβολία είναι φορτισμένα σωματίδια, συνήθως δέσμη σωματιδίων από επιταχυντή.

Επιπροσθέτως, η μέθοδος XRF χωρίζεται σε δύο υποκατηγορίες ανάλογα με το αν ανιχνεύονται χαρακτηριστικές ενέργειες ή χαρακτηριστικά μήκη κύματος της ακτινοβολίας [5]:

- Η μέθοδος *EDXRF (Energy Dispersive XRF)*, στην οποία γίνεται καταγραφή και ανάλυση της ενέργειας των χαρακτηριστικών ακτίνων-X. Η τεχνική αυτή στηρίζεται στην αρχή διαχωρισμού και ανίχνευσης των χαρακτηριστικών ενεργειών των ακτίνων-X (βλ. Σχήμα 2.14).
- Η μέθοδος *WDXRF (Wavelength Dispersive XRF)*, στην οποία γίνεται καταγραφή και ανάλυση του μήκους κύματος των φθορίζουσών ακτινοβολιών. Αυτή η τεχνική στηρίζεται στην περίθλαση των ακτίνων-X πάνω σε ειδικό κρύσταλλο και έτσι υπολογίζεται το μήκος κύματος των ακτίνων-X (βλ. Σχήμα 2.15).



Σχήμα 2.14 Μονογραμμικό διάγραμμα της διάταξης της μεθόδου EDXRF



Σχήμα 2.15 Μονογραμμικό διάγραμμα της διάταξης της μεθόδου WDXRF

Η παρούσα ΔΕ περιορίζεται στη μέθοδο EDXRF, που για λόγους απλότητας στη συνέχεια θα αναφέρεται απλά ως XRF.

Σύμφωνα με τα παραπάνω, η τεχνική φθορισμού των ακτίνων-X οδηγεί στον ποσοτικό ή/και τον ποιοτικό προσδιορισμό των στοιχείων ή ιχνοστοιχείων που βρίσκονται στο προς ανάλυση δείγμα. Ο ποιοτικός (qualitative) προσδιορισμός επιτυγχάνεται με την ανάλυση του φάσματος των εκπεμπόμενων από το δείγμα ακτίνων-X και την απόδοση των σχηματιζόμενων φωτοκορυφών στις αντίστοιχες χαρακτηριστικές ενέργειες, οι οποίες εν συνεχεία οδηγούν σε συγκεκριμένα χημικά στοιχεία. Ο ποσοτικός (quantitative) προσδιορισμός επιτυγχάνεται με κατάλληλες βαθμονομήσεις και με χρήση πρότυπων υλικών αναφοράς και καταλήγει στον προσδιορισμό των συγκεντρώσεων των στοιχείων που καταρχήν ανιχνεύθηκαν ποιοτικά στο δείγμα.

Η τεχνική XRF ανήκει στις μη καταστροφικές μεθόδους ανάλυσης δειγμάτων, αφού το δείγμα δεν υφίσταται καμία αλλαγή στη χημική και ισοτοπική του σύσταση και δεν καθίσταται ραδιενεργό μετά το πέρας της ανάλυσης. Επίσης, είναι μια προσιτή μέθοδος από οικονομικής απόψεως, λόγω του σχετικά χαμηλού κόστους απόκτησης του απαιτούμενου εξοπλισμού. Ανάλογα με την διαθέσιμη τεχνολογία επιτυγχάνονται επίπεδα ανίχνευσης της τάξης μερικών ppm ή και ακόμα και χαμηλότερα. Τέλος, με την τεχνική XRF αναλύονται τόσο στερεά όσο και υγρά δείγματα. Οι βασικές συνιστώσες από τις οποίες αποτελείται μία διάταξη XRF είναι:

- Η διάταξη παραγωγής της διεγείρουσας ακτινοβολίας-X
- Η ανιχνευτική διάταξη της φθορίζουσας ακτινοβολίας

- Η διάταξη συγκράτησης του δείγματος
- Η διάταξη συλλογής και επεξεργασίας δεδομένων και αποτελεσμάτων

2.4 Πηγές ακτίνων-X που χρησιμοποιούνται κατά τη διάρκεια της μεθόδου XRF

Κατά την εφαρμογή της τεχνικής XRF για την παραγωγή της διεγείρουσας ακτινοβολίας είναι δυνατόν να χρησιμοποιούνται είτε μηχανές ακτίνων-X ή ραδιενεργές πηγές οι οποίες εκπέμπουν φωτόνια είτε εκπεμπόμενη ακτινοβολία από σύγχροτον.

2.4.1 Μηχανές παραγωγής ακτίνων-X (X-rays tubes)

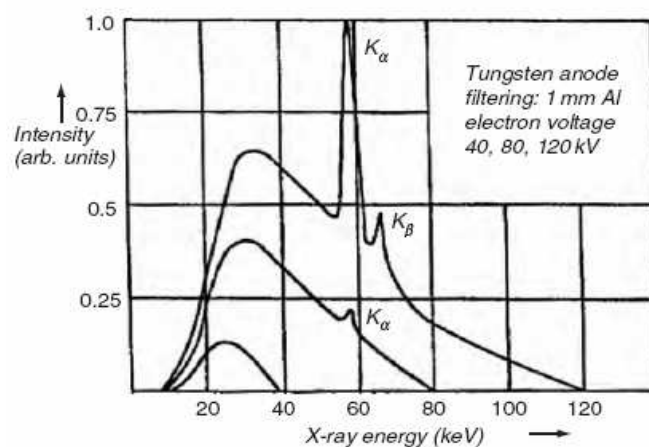
2.4.1.1 Βασικές αρχές λειτουργίας και παραγόμενο φάσμα

Η λειτουργία των μηχανών ακτίνων-X στηρίζεται στις διάφορες αλληλεπιδράσεις των ηλεκτρονίων με την ύλη. Μέσα σε μία μηχανή ακτίνων-X εκπέμπονται ηλεκτρόνια από την κάθοδο και επιταχύνονται προς την άνοδο. Η επιτάχυνση της δέσμης των ηλεκτρονίων επιτυγχάνεται λόγω του ηλεκτρικού πεδίου που δημιουργείται μεταξύ της ανόδου και της καθόδου. Τα ηλεκτρόνια προσπίπτουν στην άνοδο, αντιδρούν με τα άτομα του υλικού της και χάνουν ενέργεια μέσω μίας σειράς αλληλεπιδράσεων.

Καταρχήν, τα εκπεμπόμενα ηλεκτρόνια μπορούν να υποστούν ελαστική ή μη-ελαστική σκέδαση από τον πυρήνα των ατόμων της ανόδου ή οπισθοσκέδαση. Η ελαστική σκέδαση, η οποία δεν συνδέεται με ενεργειακές απώλειες, κυριαρχεί της μη-ελαστικής. Μόνο ένα σχετικά μικρό ποσοστό των εκπεμπόμενων ηλεκτρονίων πραγματοποιεί μη-ελαστικές σκεδάσεις. Κατά τις μη-ελαστικές σκεδάσεις που γίνονται με τα ηλεκτρόνια των ατόμων της ανόδου, μεταφέρεται σε αυτά ενέργεια. Οι συνηθέστερες μη-ελαστικές σκεδάσεις είναι οι συγκρούσεις με τα περιφερειακά ηλεκτρόνια, που συνοδεύονται από μικρή ενεργειακή απώλεια ανά σύγκρουση. Ωστόσο, μερικές φορές οι συγκρούσεις έχουν ως αποτέλεσμα ιονισμό των ατόμων της ανόδου. Σε αυτή την περίπτωση, όπως προαναφέρθηκε στην §2.2.3.2, ένα ηλεκτρόνιο μιας άλλης στιβάδας συμπληρώνει το κενό, κάτι που έχει ως

συνέπεια την εκπομπή μίας ή περισσότερων ακτίνων-X³. Αυτή η αλληλεπίδραση δημιουργεί τις χαρακτηριστικές αιχμές, ή γραμμικό φάσμα (*linear spectrum*) στο παραγόμενο φάσμα (Σχήμα 2.16).

Μία άλλη σημαντική αλληλεπίδραση συμβαίνει όταν τα ηλεκτρόνια επιβραδύνονται από το ισχυρό ηλεκτροστατικό πεδίο του πυρήνα, χάνοντας βαθμιαία την ενέργειά τους η οποία εκπέμπεται υπό τη μορφή ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας. Αυτή η διαδικασία δίνει το συνεχές φάσμα (*continuous spectrum*) των ακτίνων-X, που είναι γνωστό ως ακτινοβολία πέδησης (βλ. §2.2.3.1).



Σχήμα 2.16 Τυπικό παραγόμενο φάσμα από μηχανή ακτίνων-X με άνοδο βολφραμίου [2]

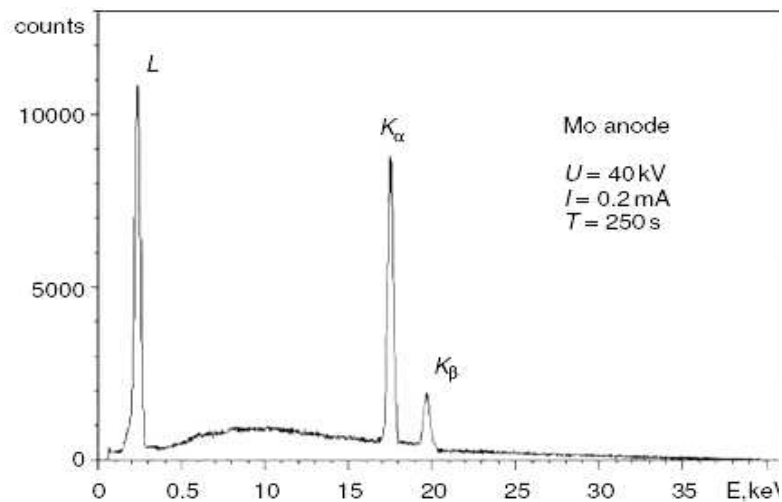
Κάθε φάσμα είναι μία επαλληλία του συνεχούς και του γραμμικού φάσματος. Η μορφή του φάσματος, δηλαδή η πυκνότητα εκπομπής (ένταση-intensity) των φωτονίων συγκεκριμένης ενέργειας και η μέγιστη ενέργεια του συνεχούς φάσματος εξαρτώνται από την τιμή της υψηλής τάσης (YT) U και τη θερμοκρασία, ενώ η θέση των διακριτών αιχμών εξαρτάται από το υλικό της ανόδου. Για κάθε αιχμή υπάρχει ένα κατώφλι ενέργειας διέγερσης, που είναι ίσο με την ενέργεια σύνδεσης της στιβάδας που κενώθηκε. Συνεπώς, για να εμφανιστεί μία αιχμή στο φάσμα πρέπει η διαφορά δυναμικού σε kV να υπερβαίνει αυτό το κατώφλι σε (keV)⁴. Τα πλήθος των ακτίνων-X που καταγράφονται κάτω από τις αντίστοιχες αιχμές είναι ανάλογο της διαφοράς δυναμικού της μηχανής. Στο Σχήμα 2.16

³ Καθώς ηλεκτρόνιο εξώτερης στιβάδας σπεύδει να γεμίσει το κενό που δημιουργήθηκε σε εσωτερη στιβάδα, δημιουργείται κενό στο ηλεκτρόνιο της εξώτερης, το οποίο θα πληρωθεί από ηλεκτρόνιο άλλης στιβάδας κ.ο.κ. Ως αποτέλεσμα, ανάλογο από τη στιβάδα που αρχικά κενώθηκε, είναι δυνατή η εκπομπή περισσότερων της μίας ακτίνων-X.

⁴ Ένα (eV) είναι η ενέργεια κινητική ενέργεια που αποκτά ένα ηλεκτρόνιο (e) όταν επιταχύνεται στο κενό εξαιτίας ηλεκτρικού πεδίου με διαφορά δυναμικού ίση με 1 V.

δίνεται ένα τυπικό φάσμα μηχανής ακτίνων-X με άνοδο βολφραμίου (W, tungsten) για διάφορες τιμές διαφοράς δυναμικού. Τονίζεται πως η τάση της μηχανής, δηλαδή η διαφορά δυναμικού που εφαρμόζεται μεταξύ ανόδου και καθόδου της μηχανής, έχει άμεση επίδραση στην μέγιστη ενέργεια των εκπεμπόμενων φωτονίων.

Το σχετικά μικρό πλήθος φωτονίων του συνεχούς φάσματος στις χαμηλές ενέργειες, οφείλεται κυρίως στην αυτοαπορρόφηση των χαμηλής ενέργειας ακτίνων-X που εκπέμπονται από την άνοδο, αλλά και στην απορρόφηση των ακτίνων-X στο παράθυρο εξόδου της μηχανής και στον αέρα. Μερικές μηχανές ακτίνων-X (π.χ. σε ιατρικές εφαρμογές) διαθέτουν ενσωματωμένα ειδικά φίλτρα για το φιλτράρισμα ακτίνων-X. Το πραγματικό παραγόμενο φάσμα από αυτές της μηχανές μπορεί να μετρηθεί στο κενό από μηχανές ανοικτού τύπου, δηλαδή χωρίς φίλτρα και παράθυρο. Η κατανομή του φάσματος εκτείνεται έως τις χαμηλές ενέργειες και μπορεί να περιέχει μεγάλης πυκνότητας χαρακτηριστικές σε αυτήν την περιοχή (βλ. Σχήμα 2.17) οι οποίες οφείλονται στις L ακτίνες-X της ανόδου.



Σχήμα 2.17 Τυπικό φάσμα μηχανής ακτίνων-X με άνοδο μολυβδαινίου, χωρίς το παράθυρο βηρυλλίου [2]

Η απόδοση των μηχανών ακτίνων-X είναι εν γένει πολύ χαμηλή. Η ολική ισχύς $P(kW)$ ακτινοβολήσης μπορεί να εκτιμηθεί από την παρακάτω σχέση [2]:

$$P = C \cdot Z \cdot I \cdot U^2 \quad (2.12)$$

όπου:

Z : ο ατομικός αριθμός του υλικού της ανόδου,

I : η ένταση του ρεύματος της ανόδου (A),

U : η υψηλή τάση (kV) και

C : σταθερά με τιμή περίπου $10^{-6} (kV^{-1})$.

Ο συντελεστής απόδοσης η της μηχανής εκτιμάται από τη σχέση[2]:

$$\eta \equiv \frac{P}{I \cdot U} \approx 10^{-6} \cdot Z \cdot U \quad (2.13)$$

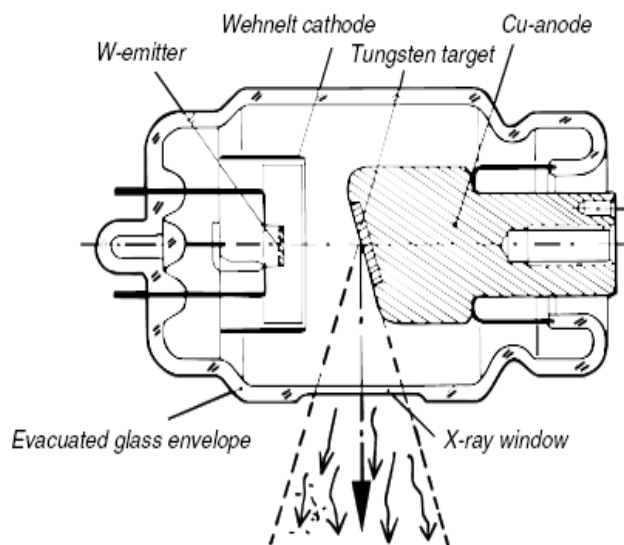
Πρακτικά, η απόδοση αυτών των μηχανών είναι της τάξης του 0,1-1% – το υπόλοιπο της ισχύος μετατρέπεται σε θερμότητα στην άνοδο. Η ηλεκτρική ισχύς των μηχανών ακτίνων-X μπορεί να φθάσει από μερικές δεκάδες W για συνεχή λειτουργία και έως 100kW σε παλμική λειτουργία (π.χ. διαγνωστική ιατρική εφαρμογή), καθιστώντας την ψύξη της ανόδου ένα σοβαρό τεχνικό πρόβλημα.

2.4.1.2 Τεχνικά χαρακτηριστικά των μηχανών ακτίνων-X

Στην παράγραφο αυτή δίνονται στοιχεία σχετικά με τα γενικά τεχνικά χαρακτηριστικά μία μηχανής ακτίνων-X. Αυτό κρίνεται απαραίτητο, καθώς για την προσομοίωση της μηχανής, η οποία θα παρουσιασθεί σε επόμενα κεφάλαια, πρέπει να είναι γνωστά, όσο γίνεται με μεγαλύτερη ακρίβεια τα γεωμετρικά χαρακτηριστικά της.

A. Γενικός σχεδιασμός

Οι σύγχρονες μηχανές ακτίνων-X περιέχουν μία κάθοδο και μία άνοδο, τοποθετημένες μέσα σε θάλαμο υψηλού κενού ($<10^{-6}$ Torr). Οι μηχανές είναι, είτε αεροστεγώς σφραγισμένες, είτε υπάρχει συνεχής άντληση του αέρα για διατήρηση υψηλού κενού. Η κάθοδος αποτελείται από θερμαινόμενο νήμα (συνήθως από βολφράμιο) και ελέγχει την εκπομπή των ηλεκτρονίων, ενώ η άνοδος αποτελείται από μέταλλο, συνήθως υψηλού Z (για παράδειγμα μολυβδαίνιο ή βολφράμιο). Οι περισσότερες μηχανές ακτίνων-X έχουν σχεδιασμό, όμοιο με αυτόν που φαίνεται στο Σχήμα 2.18.



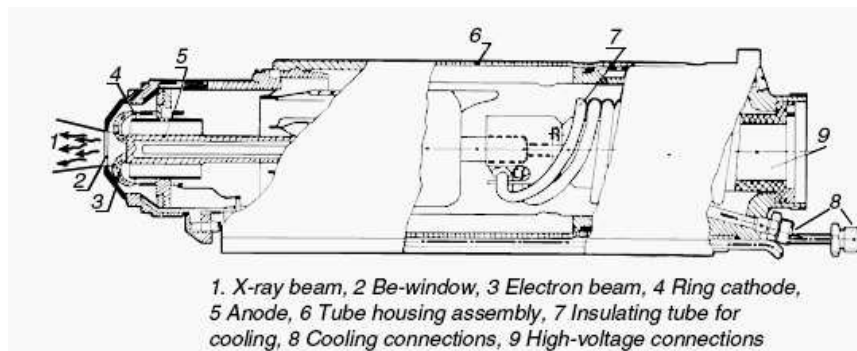
Σχήμα 2.18 Μηχανή παραγωγής ακτίνων-X για οδοντιατρικές εφαρμογές [2]

Η εκπομπή των ηλεκτρονίων γίνεται από την κάθοδο, όπου υπάρχει ειδικά διαμορφωμένο ηλεκτρόδιο, γνωστό ως *ηλεκτρόδιο Wehnelt* (λόγω του Γερμανού φυσικού A. Wehnelt που το εισήγαγε το 1908), το οποίο επιτρέπει την εστίαση των ηλεκτρονίων σε ένα σημείο της ανόδου, που καλείται *εστιακό σημείο (focal spot)*. Ο στόχος (άνοδος) είναι ένας λεπτός δίσκος από βολφράμιο ή μία πλάκα από άλλο υλικό υψηλού Z, ενσωματωμένη σε χαλκό, διότι το στοιχείο του χαλκού έχει πολύ καλή ικανότητα απαγωγής της παραγόμενης θερμότητας. Τα εκπεμπόμενα ηλεκτρόνια επιταχύνονται από ένα ηλεκτροστατικό πεδίο, το οποίο δημιουργείται μεταξύ ανόδου και καθόδου. Πρακτικά, το πεδίο αυτό συνήθως δημιουργείται, εφαρμόζοντας στην κάθοδο αρνητικό δυναμικό, με την άνοδο να διατηρείται γειωμένη. Το περίβλημα της μηχανής εξυπηρετεί στη διατήρηση του κενού αλλά και στην απομόνωση της υψηλής τάσης. Οι ακτίνες-X οι οποίες παράγονται κατά την προσβολή της ανόδου από τη δέσμη των ηλεκτρονίων, εκπέμπονται προς όλες τις κατευθύνσεις, ωστόσο η έξοδός τους από τη μηχανή επιτρέπεται μόνον δια μέσου μίας ειδικής διαμόρφωσης που καλείται *παραθύρο της μηχανής*. Γενικά, υπάρχουν δύο διαφορετικοί τύποι μηχανών, όσο αφορά τη θέση του παραθύρου:

- Γεωμετρία πλαϊνού παραθύρου (side-window). Η θέση του παραθύρου είναι τέτοια ώστε η δέσμη ακτίνων-X να βγαίνει κάθετα προς τον κύριο άξονα της μηχανής. Ειδικά για τις ιατρικές εφαρμογές, με αυτού του τύπου τις μηχανές το παράθυρο εξόδου είναι

μέρος του γυάλινου κελύφους, όπως φαίνεται στο Σχήμα 2.18. Σε μηχανές που χρησιμοποιούνται στην τεχνική XRF το παράθυρο εξόδου είναι συνήθως κατασκευασμένο από ένα λεπτό φιλμ βηρυλλίου για να ελαχιστοποιηθεί η απορρόφηση των ακτίνων-X χαμηλής ενέργειας. Η δέσμη των ηλεκτρονίων που προσβάλλει την άνοδο σχηματίζει με την επιφάνεια της ανόδου γωνία της τάξης των 15-20° και η γωνία της εξερχόμενης δέσμης μπορεί να φτάνει τις 30-40°. Στις μηχανές πλαϊνού παραθύρου είναι εφικτή η κατασκευή γεωμετρίας διπλής ανόδου (*dual-anode geometry*). Για το σκοπό αυτό, ένα λεπτό στρώμα από ένα ελαφρύτερο υλικό καλύπτει το βαρύ υλικό της ανόδου (π.χ. ρήνιο πάνω σε βολφράμιο). Στις μηχανές διπλής ανόδου, ανάλογα με την τιμή της υψηλής τάσης παρατηρούνται δύο τύποι φασμάτων. Ο πρώτος τύπος παρατηρείται όταν η υψηλή τάση είναι χαμηλή, επομένως τόσο η ενέργεια των ηλεκτρονίων όσο και η διεισδυτικότητά τους είναι χαμηλή. Συνεπώς, οι ακτίνες-X παράγονται από το ανώτερο στρώμα της ανόδου, όπου βρίσκεται το ελαφρύ στοιχείο. Για μεγαλύτερες τιμές της υψηλής τάσης τα ηλεκτρόνια διεισδύουν σε μεγαλύτερο βάθος και εκπέμπεται κυρίως το φάσμα των ακτίνων-X του δεύτερου υλικού, το οποίο κυριαρχεί έναντι του ελαφρύτερου.

- Γεωμετρία *end-window*. Η κάθοδος έχει σχήμα δακτυλίου και το παράθυρο εξόδου είναι παράλληλο με τον κύριο άξονα της μηχανής. Η γωνία εκπομπής των ακτίνων-X, ως προς την επιφάνεια της ανόδου είναι ~90° (Σχήμα 2.19). Γενικά, αυτή η γεωμετρία επιτρέπει μικρότερες αποστάσεις μεταξύ ανόδου και παραθύρου και μεταξύ ανόδου και δείγματος. Εκτός αυτού, η κάθοδος και το παράθυρο είναι συνήθως γειωμένα ενώ στην άνοδο δημιουργείται ένα υψηλό θετικό δυναμικό. Αυτό έχει ως αποτέλεσμα να περιορίζεται ο βομβαρδισμός του παραθύρου από σκεδαζόμενα στην άνοδο ηλεκτρόνια. Πλεονέκτημα της γεωμετρίας αυτής είναι ότι η αυτό-απορρόφηση των εκπεμπόμενων ακτίνων-X μειώνεται λόγω της μεγάλης γωνίας εκπομπής (σχεδόν κάθετα προς την άνοδο). Αυτός ο παράγοντας κατατάσσει αυτού του τύπου τις μηχανές εξαιρετικά ελκυστικές για εφαρμογές χαμηλών ενεργειών. Επιπροσθέτως, το φάσμα εκπομπής των μηχανών αυτών παρουσιάζει μικρότερη ανισοτροπία, από το φάσμα των μηχανών τύπου *side-window*. Από την άλλη πλευρά, οι αρκετά μικρές αποστάσεις μεταξύ ανόδου και καθόδου περιορίζει τη χρήση τους σε μία οριακή τιμή υψηλής τάσης, που συνήθως δεν ξεπερνάει τα 60kV.



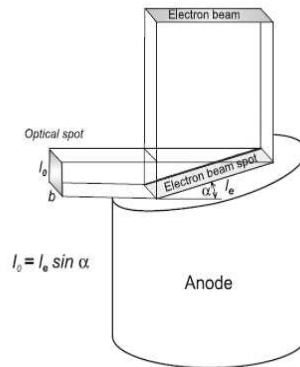
Σχήμα 2.19 Μηχανή ακτίνων-X με οριζόντιο παραθύρου για ανάλυση φθορισμού [2]

Εκτός από μηχανές με σταθερή άνοδο, υπάρχουν και μηχανές στις οποίες ο στόχος είναι ένα λεπτό στρώμα υλικού που βρίσκεται πάνω στην εσωτερική πλευρά του παραθύρου, το οποίο είναι κατασκευασμένο από βηρύλλιο (*transmission anode*). Η δέσμη ηλεκτρονίων προσβάλλει το στόχο με κατάλληλη γωνία και τα εκπεμπόμενα φωτόνια διαπερνούν το στόχο και το παράθυρο και εξέρχονται από τη μηχανή. Συνήθως, το συνεχές φάσμα από μία τέτοια άνοδο παρουσιάζεται αρκετά φιλτραρισμένο, λόγω της απορρόφησης της ακτινοβολίας πέδησης στον στόχο, ειδικότερα σε χαμηλές ενέργειες, αλλά και πάνω από την αιχμή απορρόφησης, για το λόγο αυτό οι μηχανές αυτού του τύπου θεωρείται πως έχουν «φυσικό» φιλτράρισμα. Η χαμηλή συνεισφορά του συνεχούς φάσματος οδηγεί στη μείωση του υποστρώματος και συνεπώς στη βελτίωση των ορίων ανίχνευσης κατά την ανάλυση με την τεχνική XRF. Τέτοιες μηχανές ανήκουν στην κατηγορία μηχανών χαμηλής ισχύος, καθώς η πολύ λεπτή άνοδος δεν αντέχει σε μεγάλα θερμικά φορτία.

Η μεγάλη διάχυση της θερμότητας στην άνοδο είναι το μεγαλύτερο πρόβλημα, όσο αφορά την επίτευξη μικρών εστιακών σημείων για υψηλή ισχύς μηχανής. Με την πρώτη ματιά, η επίτευξη μικρών εστιακών σημείων μπορεί να επιτευχθεί μόνο με μείωση της ισχύος. Για να αντιμετωπιστεί μερικώς αυτό το πρόβλημα, υπάρχουν δύο βασικές μέθοδοι. Η πρώτη βασίζεται στο γεγονός ότι, το μέγεθος του οπτικού εστιακού σημείου⁵ διαφέρει από το μέγεθος του ηλεκτρονικού εστιακού σημείου στην άνοδο (Σχήμα 2.20). Όταν η γωνία της ανόδου φτάνει τις 6° , τότε το μήκος του οπτικού σημείου είναι περίπου δέκα φορές μικρότερο από το πραγματικό μήκος του ηλεκτρονικού εστιακού σημείου της ανόδου. Στις

⁵ Παρόλο που η πηγή ακτίνων-X αναφέρεται ως «σημείο» στην πραγματικότητα πρόκειται για μία πολύ μικρή επιφάνεια, με διαστάσεις που καθορίζονται από τα χαρακτηριστικά της ανόδου και της καθόδου.

περισσότερες εφαρμογές (π.χ. ιατρική απεικόνιση) το σημείο που είναι σημαντικό είναι το οπτικό.

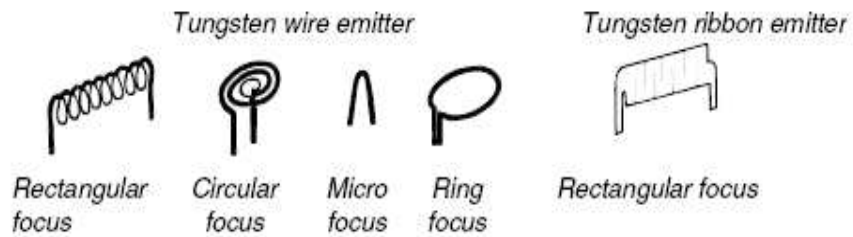


Σχήμα 2.20 Οπτικό και ηλεκτρονικό εστιακό σημείο για συγκεκριμένη γωνία ανόδου[2]

Για να επιτευχθεί ακόμη καλύτερη διάχυση της θερμότητας, κατασκευάστηκαν και χρησιμοποιούνται μηχανές περιστρεφόμενης ανόδου (*rotate anode*). Σε αυτή την περίπτωση, η άνοδος είναι ένας δίσκος εβρισκόμενος πάνω σε ένα ρότορα με ένα σύστημα εδράνων, ώστε να καθίσταται δυνατή η περιστροφή του. Ο στάτορας βρίσκεται έξω από το κέλυφος της μηχανής οδηγεί το ρότορα μέσω ενός περιστρεφόμενου πεδίου. Ο στόχος περιστρέφεται και «βομβαρδίζεται» από τη δέσμη των ηλεκτρονίων, αλλά λόγω της περιστροφής, κάθε στιγμή τα ηλεκτρόνια προσπίπτουν σε διαφορετικό σημείο της ανόδου, με αποτέλεσμα τα θερμικά φορτία να διαχέονται σε όλο και μεγαλύτερη περιοχή. Μηχανές με περιστρεφόμενη άνοδο και με επιπλέον ψύξη (με λάδι ή νερό) μπορούν να φτάσουν σε υψηλές τιμές ισχύος.

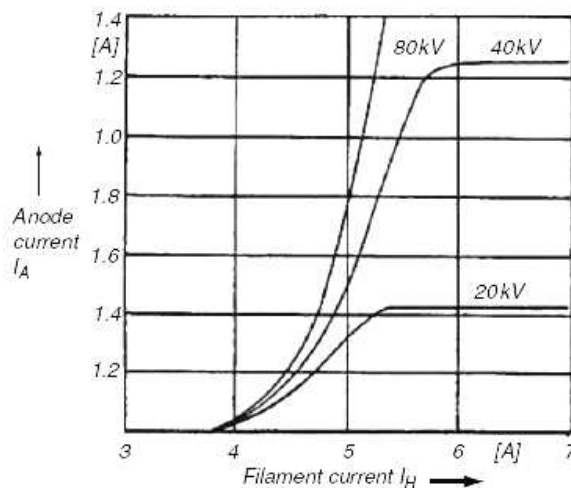
B. Τεχνολογία και σχεδιασμός της καθόδου

Γενικά, η εκπομπή των ηλεκτρονίων ελέγχεται από την θερμοκρασία της καθόδου, η οποία με τη σειρά της εξαρτάται από την τιμή της έντασης του ρεύματος στην κάθοδο. Όπως προαναφέρθηκε η κάθοδος είναι συνήθως ένα νήμα, για την κατασκευή του οποίου χρησιμοποιείται συνήθως σύρμα ή έλασμα βολφραμίου. Ανάλογα με το επιθυμητό σχήμα του σημείου εστίασης χρησιμοποιούνται σύρματα με διάφορες μορφές όπως σπειροειδή, κυκλικά, ελικοειδή ή απλά ελάσματα (βλ. Σχήμα 2.21).



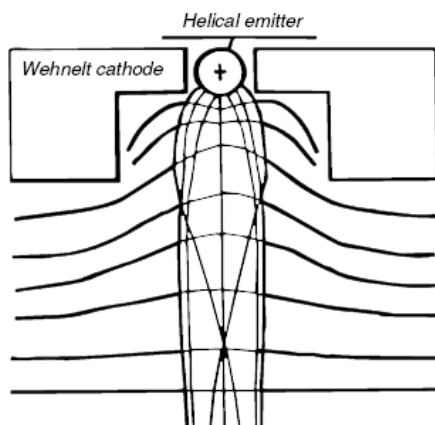
Σχήμα 2.21 Διάφοροι τύποι νημάτων καθόδου

Η τροφοδοσία του νήματος γίνεται μέσα σε συγκεκριμένα όρια, όπως φαίνεται στο Σχήμα 2.22. Για χαμηλές τιμές της έντασης του ηλεκτρικού ρεύματος στο νήμα δεν υπάρχει θερμοϊονική εκπομπή ηλεκτρονίων, ενώ για υψηλές τιμές παρατηρείται κορεσμός.



Σχήμα 2.22 Ένταση του ηλεκτρικού ρεύματος μεταξύ ανόδου-καθόδου, συναρτήσει της έντασης του ηλεκτρικού ρεύματος στο νήμα (κάθοδος) για διάφορες τιμές της υψηλής τάσης.

Το σημείο κορεσμού εξαρτάται από την τιμή της υψηλής τάσης που εφαρμόζεται, καθώς αυτή επιδρά στο φαινόμενο του σχηματισμού φορτίου χώρου γύρω από το νήμα (space charge). Σε ακραία σενάρια φόρτισης, η θερμοκρασία στην κάθοδο μπορεί να φτάσει τους 2500°C. Σε αυτή τη θερμοκρασία, καθώς είναι πιθανό το φαινόμενο της εξάτμισης του υλικού της καθόδου, ο χρήσιμος χρόνος λειτουργίας της είναι συνήθως περιορισμένος. Για τον έλεγχο και την εστίαση της δέσμης ηλεκτρονίων που εκπέμπονται από την κάθοδο και για το σχηματισμό του επιθυμητού-κατάλληλου εστιακού σημείου, χρησιμοποιείται το ηλεκτρόδιο Wehnelt (Σχήμα 2.23).

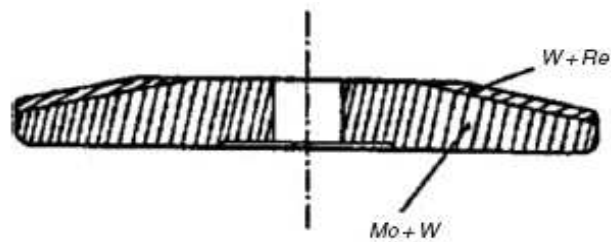


Σχήμα 2.23 Σχηματική σχεδίαση καθόδου με ηλεκτρόδια Wehnelt

Γ. Τεχνολογία και σχεδιασμός της ανόδου

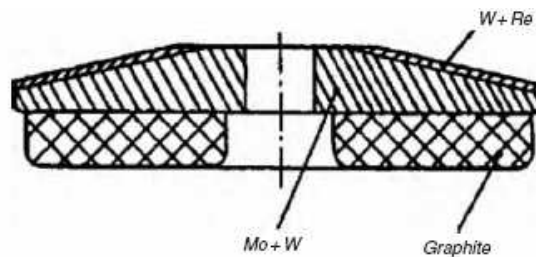
Όπως αναφέρθηκε παραπάνω, μία τυπική άνοδος απαρτίζεται συνήθως από ένα λεπτό στόχο εμφυτευμένο μέσα σε ένα ογκώδη χάλκινο σώμα (βλ. Σχήμα 2.18). Τα πιο συνηθισμένα υλικά του στόχου είναι ο χαλκός, το μολυβδαίνιο και το βολφράμιο. Επίσης, χρησιμοποιούνται και υλικά όπως ο σίδηρος, το μαγνήσιο, το αλουμίνιο, το χρώμιο, το νικέλιο, το ρόδιο και ο άργυρος. Η κατασκευή των περιστρεφόμενων ανόδων είναι πολύ πιο πολύπλοκη, καθώς κατασκευάζονται με τεχνικές κονιομεταλλουργίας (powder metallurgy). Ένα μειονέκτημα της τεχνολογίας των ανόδων είναι η φθορά που παρουσιάζεται στην επιφάνεια του υλικού λόγω υψηλών θερμικών και μηχανικών καταπονήσεων. Αυτό το φαινόμενο οδηγεί σε μία μεγάλη μείωση του αριθμού των παραγόμενων ακτίνων-Χ, καθώς και σε μηχανικές παραμορφώσεις, οι οποίες μπορούν να καταστρέψουν την άνοδο. Αυτό συμβαίνει καθώς η θερμική χωρητικότητα των υλικών από τα οποία κατασκευάζεται η άνοδος, έχει σχετικά μικρή τιμή και αυτό συνεπάγεται υψηλές θερμοκρασίες για σχετικά μικρά θερμικά φορτία.

Μία βελτιωμένη τεχνολογία βασίζεται σε ένα σύνθετο υλικό που αποτελείται από τρία (3) υλικά: Ρήνιο, Βολφράμιο, Μολυβδαίνιο (**R**henium, **T**ungsten, **M**olybdenum-**RTM**). Μία σχηματική τομή μίας ανόδου από υλικό RTM φαίνεται στην Σχήμα 2.24. Αυτό βελτιώνει αποτελεσματικά τις ελαστικές ιδιότητες της ανόδου και μειώνει σημαντικά τη φθορά. Επιπλέον, με προσμίξεις μικρού ποσοστού τιτανίου και ζirkονίου μέσα στο σώμα από μολυβδαίνιο ή βολφράμιο, επιτυγχάνεται ο διπλασιασμός της θερμοχωρητικότητας της ανόδου.



Σχήμα 2.24 Άνοδος από υλικό RTM

Μία βέλτιστη λύση για τον έλεγχο της απαγωγής θερμικής ακτινοβολίας μπορεί να επιτευχθεί με μία άνοδο περιβαλλόμενη από σώμα γραφίτη (Σχήμα 2.25). Με αυτές τις ανόδους (*Calorex anodes*), παράγονται μηχανές οι οποίες λειτουργούν σε μία μέση θερμική ισχύ των 4kW.



Σχήμα 2.25 Άνοδος Calorex

Α. Κέλυφος της μηχανής (vacuum envelope)

Οι επιμέρους συνιστώσες της μηχανής ακτίνων-Χ τοποθετούνται μέσα σε ένα κέλυφος, το οποίο εξυπηρετεί δύο σκοπούς: τη διατήρηση του κενού και την ηλεκτρική μόνωση. Τα πιο διαδεδομένα υλικά για την κατασκευή του κελύφους είναι το γυαλί, τα μέταλλα και τα κεραμικά:

- Γυάλινο κέλυφος. Το πιο διαδεδομένο από τα παραπάνω υλικά είναι το γυαλί. Οι κύριες απαιτήσεις από τον τύπο γυαλιού είναι η υψηλή αντίσταση, η καλή διηλεκτρική αντοχή και η ικανότητα αντοχής σε θερμοκρασιακές αλλαγές. Αυτές οι απαιτήσεις απαντώνται σε γυαλιά από βόριο-πυριτικά άλατα, που επιπλέον επιτρέπουν τη διέλευση των κατάλληλων ηλεκτρικών επαφών. Ένα ακόμη πλεονέκτημα αυτού του τύπου κελύφους είναι ότι είναι λείο και εύκολο να καθαριστεί. Έτσι, επιτυγχάνεται με ευκολία η μόνωση μεταξύ ανόδου και καθόδου.

- Μεταλλικό-γυάλινο κέλυφος. Ένα πρόβλημα που παρουσιάζεται στις μηχανές ακτίνων-Χ είναι πως η άνοδος και η κάθοδος έχουν την τάση να εξατμίσουν το υλικό κατασκευής τους, λόγω των πολύ υψηλών θερμοκρασιών που αναπτύσσονται. Το λεπτό μεταλλικό στρώμα το οποίο αποτίθεται στο κέλυφος της μηχανής, ως αποτέλεσμα της εξάτμισης-συμπύκνωσης, επηρεάζει αρνητικά τη διηλεκτρική αντοχή του κελύφους. Για να αποφευχθεί αυτό το φαινόμενο και για να αυξηθεί η διάρκεια ζωής της μηχανής, το μεσαίο κομμάτι του γυάλινου κελύφους κατασκευάζεται από μέταλλο ώστε να δημιουργηθεί ένα περιορισμένο ηλεκτρικό δυναμικό. Επίσης, ένα μέρος των δευτερογενών ηλεκτρονίων που εκπέμπονται από την άνοδο μπορεί να απορροφηθεί δια μέσου αυτού του μεταλλικού τμήματος. Με αυτόν τον τρόπο μειώνεται το πλήθος των ηλεκτρονίων τα οποία προσβάλλουν την άνοδο σε σημεία εκτός focal spot, εκπέμποντας ακτίνες-Χ (*extra focal radiation*).
- Μεταλλικό-κεραμικό κέλυφος. Οι μεταλλικές-κεραμικές μηχανές χρησιμοποιούνται από τη δεκαετία του 1960. Το χαρακτηριστικό τους έγκειται στη χρησιμοποίηση κεραμικού υλικού έναντι του γυαλιού, ώστε να επιτευχθεί καλύτερη ηλεκτρική μόνωση της μηχανής. Αυτές οι μηχανές έχουν πολλά πλεονεκτήματα έναντι των τυπικών μηχανών με κάλυμμα από γυαλί: η επεξεργασία των κεραμικών είναι ευκολότερη, μπορούν να κατασκευασθούν με μεγάλη ακρίβεια, κάτι που επιτρέπει μεγαλύτερη ελευθερία στο σχεδιασμό του θαλάμου κενού, τα μεταλλικά μέρη μπορούν να συνδεθούν εύκολα με τον κεραμικό μονωτή και η επιφανειακή αγωγιμότητα των κεραμικών είναι μικρή. Τέλος, στα πλεονεκτήματα των μηχανών αυτών περιλαμβάνονται η σχετικά μικρή μάζα και η μεγαλύτερη διάρκεια ζωής.

E. Περίβλημα της μηχανής (tube housing assembly)

Οι μηχανές ακτίνων-Χ είναι ερμητικά κλεισμένες μέσα σε ένα προστατευτικό περίβλημα ώστε να εξασφαλίζεται η ομαλή λειτουργία τους. Το εξωτερικό-προστατευτικό περίβλημα εξυπηρετεί εκτός των άλλων και τις παρακάτω σημαντικές λειτουργίες: μόνωση της υψηλής τάσης, ψύξη και προστασία από την ακτινοβολία. Σήμερα, είναι διαδεδομένα δύο είδη σχεδιασμού:

- απλή συναρμολόγηση, η οποία περιλαμβάνει τη μηχανή ακτίνων-Χ και μερικά στοιχεία ελέγχου και

- ενιαία συναρμολόγηση, όπου η μηχανή ακτίνων-X είναι ενσωματωμένη με μία ηλεκτρική γεννήτρια υψηλής τάσης.

Όσον αφορά την ισχύ τους, οι σύγχρονες μηχανές ακτίνων-X χωρίζονται σε τρεις (3) κατηγορίες :

- Χαμηλής ισχύος (< 1kW)
- Υψηλής ισχύος (1-5kW)
- Υψηλής ισχύος με περιστρεφόμενη άνοδο (>5kW)

Η σημερινή τάση για την πρόοδο των μηχανών ακτίνων-X οδηγεί, αφενός στην ανάπτυξη συμπαγών κατασκευών χαμηλής ισχύος με μικρό εστιακό σημείο και αφετέρου στην ανάπτυξη μηχανών αρκετά μεγάλης ισχύος με περιστρεφόμενη άνοδο (π.χ. για ιατρικές εφαρμογές ή για μη καταστροφικούς ελέγχους). Η υψηλή τάση που χρειάζονται οι μηχανές ακτίνων-X αυτού του τύπου παρέχεται από ειδικά τροφοδοτικά υψηλής τάσης, μέσω των οποίων ρυθμίζεται η τάση λειτουργίας των μηχανών ακτίνων-X.

2.4.2 Παραγωγή ακτίνων-X από ραδιοϊσότοπα (Radioisotope sources)

Στην τεχνική XRF, αντί για μηχανή ακτίνων-X, χρησιμοποιούνται συχνά και ραδιενεργές πηγές φωτονίων (γ ή X). Στις ραδιενεργές πηγές, το ραδιενεργό υλικό είναι σφραγισμένο σε μία ή περισσότερες κάψουλες. Το υλικό που χρησιμοποιείται για το σφράγισμα (επίστρωση) έχει τέτοια στεγανότητα και αντοχή ώστε να μην καθίσταται δυνατή η διαρροή ραδιενεργού υλικού, κατά τη χρήση αλλά και κατά την αποθήκευση της. Ο τύπος του υλικού επίστρωσης εξαρτάται από την παραγόμενη ακτινοβολία, τις χημικές ιδιότητες του ραδιενεργού ισότοπου και από τις συνθήκες της εκάστοτε εφαρμογής.

Οι κυριότερες πηγές που χρησιμοποιούνται στην ανάλυση με XRF είναι γ -ραδιενεργά ισότοπα. Σε ορισμένες περιπτώσεις πηγών χρησιμοποιούνται και ισότοπα που δίνουν β -διασπάσεις, όπου, σε συνδυασμό με δευτερογενείς στόχους παράγεται και εκπέμπεται ακτινοβολία πέδησης. Κατά το παρελθόν επιχειρήθηκε και η χρήση πηγών σωματιδίων α και β για απευθείας ακτινοβολήση, αλλά τα αποτελέσματα ήταν ανεπιτυχή.

Τα πλεονεκτήματα της χρήσης ραδιοϊσοτόπων ως πηγή ακτίνων-X κατά την εφαρμογή της XRF, που τις καθιστούν απαραίτητες σε πολλές βιομηχανικές εφαρμογές είναι: η υψηλή

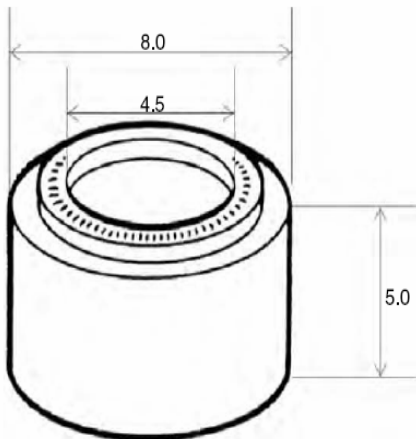
σταθερότητα του ρυθμού ραδιενεργού διάσπασης, η ανεξαρτησία από εξωτερικούς παράγοντες - όπως για παράδειγμα η θερμοκρασία - και η μη απαίτηση ηλεκτρικής ισχύος. Ο σχετικά χαμηλός ρυθμός εκπομπής φωτονίων, αλλά και το σχετικά μικρό κόστος είναι ορισμένα πρόσθετα πλεονεκτήματα. Η χρησιμοποίηση ραδιενεργών πηγών για την παραγωγή ακτίνων-X έχει οδηγήσει σε μία πλειάδα εφαρμογών, ειδικά σε συσκευές χειρός και φορητές συσκευές, όπως είναι οι συσκευές προσδιορισμού του τύπου μεταλλικών κραμάτων.

Μερικά παραδείγματα πηγών που χρησιμοποιούνται ως πηγές πρωτογενούς (διεγείρουσας) ακτινοβολίας στην XRF και των ενεργειών που παρέχουν είναι : ^{55}Fe (5.9keV), ^{244}Cm (14.3keV & 18.3keV), ^{109}Cd (22keV & 88keV), ^{241}Am (59.5keV), ^{57}Co (122.06 & 136keV). Ως πηγή ακτινοβολίας πέδησης χρησιμοποιείται η ισοτοπική πηγή ^{32}P .

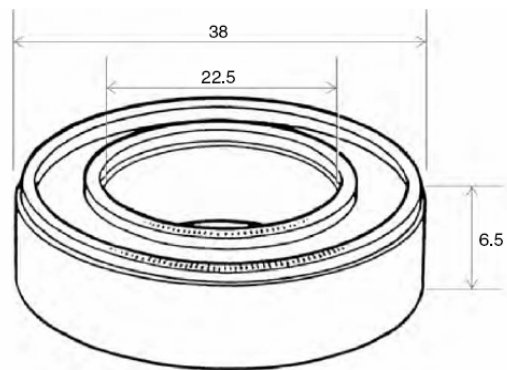
Τα κυριότερα χαρακτηριστικά μίας ραδιενεργού πηγής είναι:

- ο τύπος της ραδιενεργού διάσπασης,
- η ραδιενέργεια της πηγής,
- ο χρόνος υποδιπλασιασμού της πηγής
- η ενέργεια της εκπεμπόμενης ακτινοβολίας. Το φάσμα της ενέργειας των ακτίνων - γ ή - X που εκπέμπεται από ραδιενεργές πηγές μπορεί να είναι γραμμικό ή συνεχές. Το γραμμικό φάσμα είναι τυπικό των πηγών, αν η πυρηνική διάσπαση ακολουθείται από εκπομπή ακτίνων - γ ή - X . Το συνεχές φάσμα συναντάται στις πηγές που εκπέμπουν ακτινοβολία πέδησης. Η μορφή του συνεχούς ενεργειακού φάσματος εξαρτάται από το φάσμα των εκπεμπόμενων από την πηγή σωματιδίων- β και το υλικό του στόχου. Η μέγιστη ενέργεια του φάσματος της ακτινοβολίας πέδησης εξαρτάται από τη μέγιστη ενέργεια των σωματιδίων- β .
- οι ιδιότητες που σχετίζονται με κατασκευαστικά χαρακτηριστικά της πηγής, όπως ο τύπος της πηγής, οι διαστάσεις, το σχήμα και ο τύπος της επίστρωσης κτλ. Ειδικότερα, ο τύπος της επίστρωσης επηρεάζει τη μορφή του φάσματος, καθώς επιστρώσεις μεγάλου πάχους ή επιστρώσεις με υλικό υψηλού ατομικού αριθμού (Z) απορροφούν τις ακτινοβολία χαμηλής ενέργειας που εκπέμπεται από την πηγή.

Οι ραδιενεργές πηγές κατασκευάζονται με πολλές τεχνικές. Για παράδειγμα, για την πηγή ^{55}Fe , το ραδιενεργό υλικό αποτίθεται με ηλεκτροαπόθεση πάνω σε ένα μεταλλικό δακτύλιο και σφραγίζεται με συγκόλληση καλύμματος από ανοξείδωτο χάλυβα, που έχει ένα παράθυρο βηρυλλίου. Άλλες πηγές, όπως το ^{238}Pu , το ^{244}Cm και το ^{241}Am , είναι ενσωματωμένες σε κεραμικό σμάλτο, σφραγισμένες από κάλυμμα ανοξείδωτου χάλυβα, με ή χωρίς παράθυρο βηρυλλίου. Στις παρακάτω εικόνες φαίνονται δύο τύποι πηγών που χρησιμοποιούνται στην XRF.



Σχήμα 2.26 Τυπική δισκοειδής πηγή



Σχήμα 2.27 Τυπική δακτυλιοειδής πηγή

2.4.3 Παραγωγή ακτίνων-X από σύγχροτρο (Synchrotron radiation sources)

Η ακτινοβολία που παράγεται από σύγχροτρο παρατηρήθηκε για πρώτη φορά το 1947 από σε έναν επιταχυντή της General Electric - προηγμένου για την εποχή του - γνωστό ως σύγχροτρο ηλεκτρονίων. Αρχικά, η παραγόμενη ακτινοβολία από το σύγχροτρο θεωρήθηκε άχρηστη και μάλιστα ενοχλητική, αλλά στη δεκαετία του 1950 κατέστη σαφές πως αυτή η πηγή ακτινοβολίας θα μπορούσε να γίνει μία πολύ χρήσιμη πηγή παραγωγής ακτίνων-X με δυναμικές εφαρμογές στις επιστήμες των υλικών.

Έχει παρατηρηθεί πως όταν ηλεκτρόνια ή ποζιτρόνια που κινούνται με σχετικιστική ταχύτητα, δηλαδή με ταχύτητα κοντινή σε αυτή του φωτός και βρεθούν σε ένα μαγνητικό πεδίο, η τροχιά τους γίνεται κυκλική και ως συνέπεια της επιβράδυνσης αυτής των ηλεκτρονίων εκπέμπεται ακτινοβολία-X σε διεύθυνση εφαπτόμενη στην τροχιά των ηλεκτρονίων.

Σήμερα, η ακτινοβολία που παράγεται από τα σύχνοτρα είναι πολύ χρήσιμη και χρησιμοποιείται ευρέως σε φυσικούς, χημικούς και βιολογικούς τομείς. Ο κύριος λόγος που την καθιστά τόσο χρήσιμη είναι οι μοναδικές της ιδιότητες [6]:

- Μεγάλη δυνατότητα ρύθμισης της ενέργειας των ακτίνων-X.
- Δυνατότητα υψηλής ροής φωτονίων: Η ένταση της παραγόμενης δέσμης είναι πολύ μεγάλη, έως και 10,000 φορές μεγαλύτερη από αυτή που παράγεται από μία μηχανή ακτίνων-X.
- Υψηλή κατευθυντικότητα, που είναι απαραίτητη για τη μικροανάλυση, επιτρέποντας τον προσδιορισμό μεταλλικών ιχνοστοιχείων που περιέχονται για παράδειγμα σε ένα βιολογικό δείγμα.
- Παλμική εκπομπή: Τα φωτόνια εκπέμπονται σε παλμούς. Αυτό το γνώρισμα καθιστά δυνατές τις επιλεγμένες ανά χρονικά διαστήματα μετρήσεις.
- Η ακτινοβολία έχει επιλεκτική, διακριτή, γραμμική ή κυκλική πόλωση.

2.5 Ανιχνευτική διάταξη της φθορίζουσας ακτινοβολίας

2.5.1 Αρχές λειτουργίας ανιχνευτικής διάταξης

Η ανίχνευση των ακτίνων-X πραγματοποιείται με τη χρήση ανιχνευτικής διάταξης, η οποία αποτελείται από τον ανιχνευτή και τη μετρητική διάταξη. Ο ανιχνευτής μετατρέπει την ακτινοβολία σε ηλεκτρικό σήμα και εν συνεχεία το παραγόμενο σήμα καταγράφεται και επεξεργάζεται από τη μετρητική διάταξη. Η αρχή λειτουργίας του ανιχνευτή βασίζεται στην αλληλεπίδραση της φθορίζουσας ακτινοβολίας με το υλικό του ανιχνευτή (λεγόμενος ενεργός όγκος) με συνέπεια την παραγωγή φορέων ηλεκτρικού φορτίου, το είδος των οποίων εξαρτάται από το είδος του ανιχνευτή. Ένας τύπος φορτίων είναι τα ιόντα και τα ηλεκτρόνια που παράγονται από τον ιονισμό του υλικού του ανιχνευτή. Στη συνέχεια δημιουργείται ένας παλμός φορτίου, οποίος μετατρέπεται συνήθως σε παλμό τάσης. Για τα συστήματα ανίχνευσης τύπου παλμών, κάθε παλμός αντιστοιχεί στην αλληλεπίδραση ενός φωτονίου με τον ανιχνευτή. Το μέγεθος του σήματος συνήθως είναι ανάλογο της αποτιθέμενης ενέργειας του φωτονίου ή του σωματιδίου στον ανιχνευτή. Ακολουθεί περαιτέρω επεξεργασία του

σήματος, το οποίο καταγράφεται υπό την μορφή γεγονότων (counts) στα αντίστοιχα κανάλια του ενεργειακού φάσματος. Οι κυριότεροι τύποι ανιχνευτών ιοντίζουσας ακτινοβολίας είναι:

- Ανιχνευτές με αέριο (θάλαμοι ιονισμού, αναλογικοί ανιχνευτές, Geiger-Müller)
- Ανιχνευτές σπινθηρισμού
- Ανιχνευτές ημιαγωγοί

Οι πλέον κατάλληλοι ανιχνευτές για την εφαρμογές XRF είναι οι ημιαγωγοί ανιχνευτές, και μάλιστα οι ανιχνευτές τύπου SiLi που λειτουργούν στην περιοχή ανίχνευσης χαμηλών ενεργειών (περιοχή χαρακτηριστικών ακτίνων-X των στοιχείων χαμηλού Z) με εξαιρετική διακριτική ικανότητα.

2.5.2 Χαρακτηριστικά της ανιχνευτικής διάταξης

Τα κυριότερα χαρακτηριστικά μίας ανιχνευτικής διάταξης είναι:

- Η διακριτική ικανότητα, η οποία χαρακτηρίζει την ικανότητα της ανιχνευτικής διάταξης να διακρίνει μεταξύ σωματιδίων ή φωτονίων με παραπλήσιες ενέργειες.
- Η απόδοση, η οποία αποτελεί ένα μέτρο της ικανότητας της διάταξης να απορροφά σωματίδια ή φωτόνια, άρα και να τα ανιχνεύει.

Επισημαίνεται πως μολονότι τα χαρακτηριστικά αυτά αναφέρονται στην ανιχνευτική διάταξη ως σύνολο, η σημαντικότερη συνιστώσα που καθορίζει τα πιο πάνω χαρακτηριστικά είναι ο ανιχνευτής.

2.5.2.1 Διακριτική ικανότητα ανιχνευτή

Η διακριτική ικανότητα είναι ένα μέτρο του πλάτους μίας απλής κορυφής, η οποία δημιουργείται από την πλήρη απορρόφηση σωματιδίων ή φωτονίων ορισμένης ενέργειας. Το πλάτος εκφράζεται:

- στο μισό του ύψους της κορυφής, το οποίο μετράται πάνω από το υπόστρωμα (*Full Width Half Maximum-FWHM*)
- στο ένα δέκατο (1/10) του ύψους της κορυφής πάνω από το υπόστρωμα (*Full Width at 0.1 (one Tenth) Maximum-FW1.M ή FW1M*).

Για μία κορυφή που ακολουθεί κανονική κατανομή (Gauss), όπως είναι με ικανοποιητική προσέγγιση οι φωτοκορυφές που σχηματίζονται κατά τη φασματοσκοπία των ακτίνων-X, ισχύει [12] :

$$\text{FWHM}=2.355 \cdot \sigma \text{ και } \text{FWHM} \approx 1.81 \cdot \sigma$$

Η υψηλή διακριτική ικανότητα επιτρέπει την ανίχνευση και ταυτοποίηση σωματιδίων και φωτονίων με παραπλήσιες ενέργειες. Η διακριτική ικανότητα στους ημιαγωγούς ανιχνευτές εκφράζεται σε μονάδες ενέργειας για μία ορισμένη τιμή ενέργειας.

2.5.2.2 Απόδοση ανιχνευτή

Ο όρος απόδοση ανιχνευτή για φωτόνια συγκεκριμένης ενέργειας, χρησιμοποιείται με πολλούς διαφορετικούς τρόπους και έχει διαφορετική σημασία κάθε φορά:

- Απόλυτη απόδοση: ισούται με το λόγο του πλήθους των καταγραφόμενων από τον ανιχνευτή γεγονότων, προς το συνολικό πλήθος φωτονίων που εκπέμφθηκαν από την πηγή. Εξαρτάται από τη γεωμετρία πηγής-ανιχνευτή.
- Εσωτερική απόδοση: ισούται με το λόγο του πλήθους των καταγραφόμενων από τον ανιχνευτή γεγονότων, προς το συνολικό πλήθος φωτονίων που προσπίπτουν στον ανιχνευτή. Είναι σχεδόν πάντα ανεξάρτητη της γεωμετρίας πηγής-ανιχνευτή
- Απόδοση φωτοκορυφής: ισούται με το λόγο του πλήθους των φωτονίων που καταγράφονται κάτω από τη φωτοκορυφή, δηλαδή αυτά που υφίστανται πλήρη απορρόφηση, προς το συνολικό πλήθος των φωτονίων, της συγκεκριμένης ενέργειας, που εκπέμπονται από την πηγή. Τα όρια μία φωτοκορυφής συνήθως λαμβάνονται μεταξύ [12]:

$$\text{κεντροειδές} \pm 1.5 \cdot \text{FWHM} \quad \text{ή ισοδύναμα} \quad \text{κεντροειδές} \pm 3.5 \cdot \sigma$$

Η απόδοση, εξαρτάται από τον ανιχνευτή, τη γεωμετρία πηγής-ανιχνευτή και την ενέργεια των φωτονίων. Η εκτίμηση της γίνεται πειραματικά και είναι απαραίτητη για τον ποσοτικό προσδιορισμό των ραδιενεργών ισοτόπων.

- Σχετική απόδοση: είναι η απόδοση ενός ανιχνευτή σε σχέση με την απόδοση ενός πρότυπου ανιχνευτή NaI, για συγκεκριμένη ενέργεια και γεωμετρία πηγής-ανιχνευτή: συγκεκριμένα πρόκειται για σημειακή πηγή ^{60}Co , τοποθετημένη κατά τον άξονα του ανιχνευτή σε απόσταση 25cm.

2.5.3 Ημιαγωγοί ανιχνευτές

Ημιαγωγοί είναι οι ανιχνευτές που κατασκευάζονται από ημιαγωγό υλικό, γερμάνιο (Ge) ή πυρίτιο (Si). Σε αντίθεση με τους ιδανικούς ημιαγωγούς, στην πράξη οι πραγματικοί ημιαγωγοί έχουν μικρές προσμίξεις διάφορων στοιχείων, τα οποία καθορίζουν σε μεγάλο βαθμό τις ηλεκτρικές ιδιότητες του ημιαγωγού. Οι προσμίξεις βρίσκονται στο υλικό είτε ως απομένουσες προσμίξεις μετά από το πέρας της διαδικασίας καθαρισμού, είτε διότι προστίθενται στο υλικό με σκοπό να καθορίσουν τις ιδιότητές του. Οι ημιαγωγοί ανιχνευτές χωρίζονται σε 2 τύπους ανάλογα με τον αριθμό ηλεκτρονίων σθένους του ατόμου του στοιχείου της πρόσμιξης:

- Πρόσμιξη πεντασθενούς στοιχείου, όπως για παράδειγμα ο φωσφόρος (P). Τότε ο ημιαγωγός καλείται τύπου n (n-type semiconductor) και έχει περίσσεια ηλεκτρονίων, άρα αρνητικό φορτίο.
- Πρόσμιξη τρισθενούς στοιχείου, όπως για παράδειγμα το βόριο (B). Τότε ο ημιαγωγός καλείται τύπου p (p-type semiconductor) και έχει έλλειμμα ηλεκτρονίων (υπάρχουν οι λεγόμενες οπές), άρα θετικό φορτίο.

Σε έναν ημιαγωγό ανιχνευτή οι φορείς είναι τα ηλεκτρόνια και οι οπές οφείλονται στη θερμική διέγερση, στην ύπαρξη προσμίξεων στο υλικό και τέλος, στην αλληλεπίδραση ακτινοβολίας και υλικού. Επειδή, οι πρώτες δύο παράμετροι μπορούν να ελεγχθούν, (πχ. αν το υλικό ψύχεται η παράμετρος της θερμικής διέγερσης αγνοείται), το ημιαγωγό υλικό δύναται να χρησιμοποιηθεί για ανίχνευση ιοντίζουσας ακτινοβολίας.

Η λειτουργία των ημιαγωγών ανιχνευτών στηρίζεται στις εξαιρετικές ιδιότητες, οι οποίες εμφανίζονται κατά την επαφή δύο ημιαγωγών υλικών τύπου n και τύπου p. Με την επαφή των δύο υλικών διαφορετικού τύπου οι φορείς μετακινούνται δημιουργώντας μια θετικά φορτισμένη περιοχή (p region), μία αρνητικά φορτισμένη περιοχή (n region) και μία περιοχή μέσα στην οποία υπάρχει αντιστάθμιση φορτίου (depletion region). Η περιοχή αντιστάθμισης του φορτίου είναι αυτή που χρησιμοποιείται για την ανίχνευση της ακτινοβολίας, με απαραίτητη προϋπόθεση την ψύξη του κρυστάλλου, ώστε να μην εμφανίζονται φορείς λόγω θερμικών διεγέρσεων, ούτως ώστε οι μόνοι ελεύθεροι φορείς να είναι αυτοί που παράγονται λόγω απόθεσης ενέργειας από την ακτινοβολία. Αν η περιοχή

depletion πολωθεί ανάστροφα, τότε οι φορείς που συλλέγονται οδηγούν στη δημιουργία ηλεκτρικού σήματος ανάλογο με την αποτιθέμενη ενέργεια.

Η επαφή των δύο περιοχών p και n (semiconductor junction), ακόμα και χωρίς πόλωση μπορεί να λειτουργήσει ως ανιχνευτής ακτινοβολίας, αλλά με πολύ χαμηλή απόδοση. Σε περίπτωση ανάστροφης πόλωσης, δηλαδή αν η πλευρά p είναι η αρνητική σε σχέση με την n, τότε το εύρος της περιοχής αντιστάθμισης φορτίου μεγαλώνει, αυξάνοντας την απόδοση του ανιχνευτή, κάτι που είναι μοναδικό χαρακτηριστικό των ημιαγωγών ανιχνευτών.

Οι ημιαγωγοί ανιχνευτές χωρίζονται στις παρακάτω κατηγορίες:

- Diffused junction diodes
- Surface barrier detectors
- Ion implantation detectors
- Lithium drifted detectors (GeLi & SiLi)
- High purity germanium detectors

2.5.4 Μετρητική διάταξη ανιχνευτή

Μια μετρητική διάταξη με ημιαγωγό ανιχνευτή αποτελείται από τα επιμέρους ηλεκτρονικά συστήματα (πυρηνικά ηλεκτρονικά), τα οποία είναι υπεύθυνα για την καταγραφή και επεξεργασία του ηλεκτρικού σήματος που δημιουργείται κατά την ανίχνευση της ακτινοβολίας:

- Τροφοδοτικό υψηλής τάσης (High Voltage power supply): απαραίτητο για την τροφοδοσία του ανιχνευτή.
- Προενισχυτής (preamplifier): ενισχύει το χαμηλό ηλεκτρικό σήμα του ανιχνευτή πριν τον κυρίως ενισχυτή. Συνήθως, είναι ενσωματωμένος με τον ανιχνευτή για να επιτευχθεί μείωση του ηλεκτρονικού θορύβου και αποτελεί τη μονάδα προσαρμογής μεταξύ ανιχνευτή (υψηλή αντίσταση) και καλωδίων (χαμηλή αντίσταση).
- Ενισχυτής (amplifier): Πρόκειται για ενισχυτή τύπου παλμών, ο οποίος ενισχύει και διαμορφώνει το ηλεκτρικό σήμα στην έξοδο του προενισχυτή, ώστε να αποκτήσει κατάλληλη μορφή για την εν συνεχεία επεξεργασία του σήματος.
- Διαχωριστής ύψους παλμών: δέχεται τους αναλογικούς παλμούς από τον ενισχυτή, απορρίπτοντας όσους είναι εκτός των ορίων που έχουν τεθεί.

- Καταμετρητής: χρησιμοποιείται για την καταγραφή των παλμών που προέρχονται από τον διαχωριστή.
- Αναλογοψηφιακός μετατροπέας (ADC): δέχεται το αναλογικό σήμα από τον ενισχυτή και το μετατρέπει σε ψηφιακό σήμα.
- Πολυκαναλικός αναλυτής: Καταγράφει την ψηφιακή πληροφορία που προκύπτει μετά τη μετατροπή σε ψηφιακή. Συχνά η μονάδα αυτή διαθέτει ενσωματωμένο ADC. Επικοινωνεί με H/Y για μεταφορά τη αποθήκευση και απεικόνιση του φάσματος, μέσω κατάλληλων λογισμικών.
- Μονάδα NIM-BIN: στη μονάδα αυτή συνδέονται όλες οι υπόλοιπες μονάδες.

2.6 Λοιπές συνιστώσες για τη ρύθμιση της παραγόμενης και της φθορίζουσας ακτινοβολίας στη διάταξη XRF

Κατά την εφαρμογή της τεχνικής XRF, πέραν της πηγής πρωτογενούς-διεγείρουσας ακτινοβολίας και της ανιχνευτικής διάταξης, χρησιμοποιούνται και άλλες συνιστώσες, με στόχο τη ρύθμιση της δέσμης της ακτινοβολίας-X, αλλά και του παραγόμενου φάσματος φθορισμού. Στη συνέχεια παρατίθεται ένας κατάλογος από τις συνηθέστερα χρησιμοποιούμενες συνιστώσες:

- Φίλτρα πηγής: παρεμβάλλονται μεταξύ της πηγής ακτίνων-X και του δείγματος, ούτως ώστε, είτε να μειωθεί το υπόστρωμα (φίλτρα απορρόφησης), είτε να μειωθεί το υπόστρωμα και ταυτοχρόνως να βελτιωθεί ο φθορισμός (φίλτρα φθορισμού).
- Φίλτρα ανιχνευτή: παρεμβάλλονται μεταξύ του ανιχνευτή και της δέσμης των φθορίζουσών ακτίνων-X, με σκοπό την απορρόφηση ανεπιθύμητων φωτονίων. Αυτά είναι σκεδαζόμενα φωτόνια αρκετά χαμηλής ενέργειας που συσσωρεύονται ως υπόστρωμα στην αρχή του φάσματος. Η τεχνική αυτή αποσκοπεί στη μείωση του ρυθμού καταγραφής φωτονίων στην ανιχνευτική διάταξη, εφόσον υπάρχει τέτοια ανάγκη. Επισημαίνεται, ότι με τα φίλτρα αυτά κόβονται και ακτίνες-X πολύ χαμηλής ενέργειας που ενδεχομένως να είναι χρήσιμες.
- Κατευθυντής δέσμης (collimator): τοποθετείται είτε στην έξοδο της μηχανής ακτίνων-X (συνηθέστερα) είτε πριν τον ανιχνευτή (σπανιότερα), ώστε να περιορίζει τη γωνία

της δέσμης, με σκοπό να αποκόπτεται μεγάλος αριθμός σκεδαζόμενων φωτονίων, τα οποία ενδεχομένως να κατευθυνθούν προς τον ανιχνευτή.

- Δευτερογενής στόχος: όταν διεγείρεται με δέσμη ακτίνων-X λειτουργεί ως πηγή ακτίνων-X, εκπέμποντας φωτόνια χαρακτηριστικών ενεργειών του υλικού από το οποίο αποτελείται. Τα φωτόνια αυτά εν συνεχεία αποτελούν τη διεγείρουσα ακτινοβολία. Οι γωνίες τοποθέτησης μηχανής-δευτερογενούς στόχου-δείγματος-ανιχνευτή επιλέγονται με τρόπο τέτοιο, ώστε να φτάνουν στο δείγμα μόνο οι χαρακτηριστικές ακτίνες-X του υλικού του δευτερογενούς στόχου. Αν και απαιτούνται μεγάλες τιμές έντασης ρεύματος της μηχανής ακτίνων-X, η ποιότητα του φάσματος που καταγράφεται από τον ανιχνευτή είναι καλύτερη.
- Ατμόσφαιρα λειτουργίας: υπάρχουν διατάξεις XRF όπου το δείγμα τοποθετείται στο κενό (στερεά ή πεπιεσμένα δείγματα pellets) καθώς και διατάξεις όπου το δείγμα τοποθετείται σε περιβάλλον He₂ (για υγρά δείγματα ή δείγματα σε σκόνη). Οι διατάξεις υπό κενό ή πληρωμένες με He₂ χρησιμοποιούνται για ανίχνευση φωτονίων πολύ χαμηλών ενεργειών, διότι ο αέρας είναι σημαντικός παράγοντας εξασθένησης για αυτά τα φωτόνια.

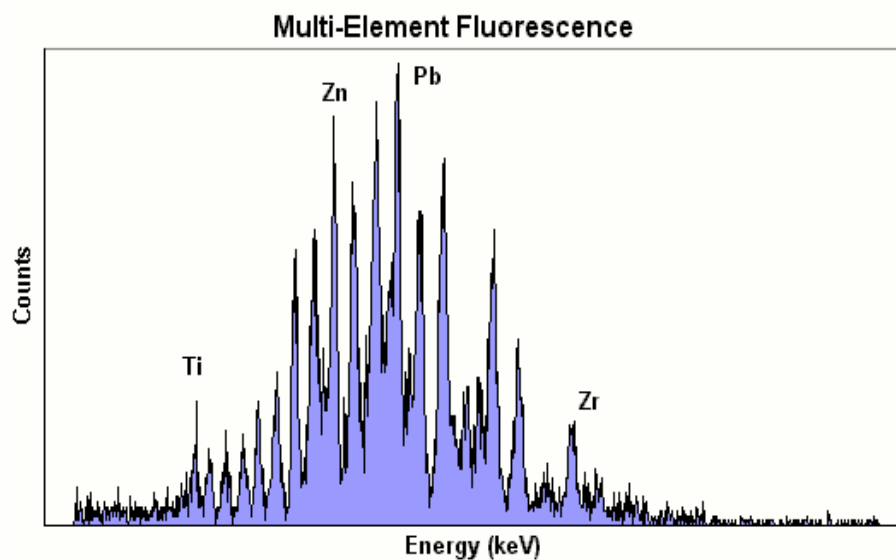
2.7 Το φάσμα φθορισμού που προκύπτει από την ανάλυση ενός δείγματος με την τεχνική XRF

Το ενεργειακό φάσμα το οποίο συλλέγεται κατά τη διαδικασία ανάλυσης δείγματος με την τεχνική XRF είναι αρκετά περίπλοκο και για αυτό απαιτείται η λεπτομερής ανάλυσή του. Οι ακτίνες-X που φτάνουν στον ανιχνευτή είναι δυνατόν να αποθέσουν ολόκληρη ή μέρος της ενέργειάς τους σε αυτόν. Γενικά, ένα φάσμα XRF (βλ. Σχήμα 2.28) περιέχει φωτοκορυφές που αντιστοιχούν σε:

- Αιχμές που οφείλονται σε χαρακτηριστικές ακτίνες-X των στοιχείων του δείγματος που αναλύεται. Πρόκειται για τη χρήσιμη ακτινοβολία, η οποία αξιοποιείται για την εν συνεχεία ανάλυση.
- Αιχμές μη-ελαστικής σκέδασης των χαρακτηριστικών ακτίνων-X των στοιχείων του δείγματος.

- Αιχμές από τις χαρακτηριστικές ακτίνες-X του υλικού της ανόδου της μηχανής, οι οποίες σκεδάζονται ελαστικά ή και μη-ελαστικά στο δείγμα.
- Αιχμές διαφυγής (escape peaks) και
- Αθροιστικές φωτοκορυφές των παραπάνω (ενδεχομένως)

Επιπλέον πρέπει να αναφερθεί ότι στο φάσμα καταγράφονται και όλα εκείνα τα φωτόνια του συνεχούς φάσματος της μηχανής, τα οποία, έχοντας προηγουμένως υποστεί σκέδαση φτάνουν στον ανιχνευτή, συνεισφέροντας στην ένταση του συνεχούς υποστρώματος του αναλυόμενου φάσματος.



Σχήμα 2.28 Φάσμα φθορισμού ακτίνων-X από δείγμα που περιέχει πολλά στοιχεία

Προφανώς οι αιχμές που έχουν το μεγαλύτερο ενδιαφέρον είναι οι αιχμές που οφείλονται σε ακτίνες-X χαρακτηριστικές του υλικού του δείγματος. Οι υπόλοιπες αιχμές απλώς δυσχεραίνουν την ανάλυση του φάσματος. Στη συνέχεια αναλύονται περισσότερο ορισμένες από τις αιχμές του φάσματος, οι οποίες παρουσιάζουν ενδιαφέρον κατά την ανάλυσή του:

- **Αιχμές ελαστικής και μη-ελαστικής σκέδασης:** Πρόκειται για φωτοκορυφές που οφείλονται σε ελαστικές και μη-ελαστικές σκεδάσεις των εκπεμπόμενων από την πηγή ακτίνων-X. Στην περίπτωση της ελαστικής σκέδασης (Rayleigh scattering) τα φωτόνια αλληλεπιδρούν με τα εξωτερικά ηλεκτρόνια ενός ατόμου και αλλάζει μόνο η διεύθυνση τους (βλ. §2.2.4.2), ενώ στην περίπτωση της ανελαστικής σκέδασης (Compton scattering) τα φωτόνια αλληλεπιδρούν με τα ηλεκτρόνια ενός ατόμου αλλάζοντας

διεύθυνση που συνοδεύεται και από απώλεια και ενέργειας (βλ. §2.2.4.3). Για κάθε μία αιχμή ελαστικής σκέδασης που ανιχνεύεται στο φάσμα, ανιχνεύεται και η αντίστοιχη αιχμή μη-ελαστικής σκέδασης, προς την πλευρά των χαμηλότερων ενεργειών. Η σχετική ένταση αλλά και η σχετική θέση των αιχμών αυτών εξαρτάται σημαντικά από τις γωνίες πηγής-δείγματος-ανιχνευτή της διάταξης XRF. Ιδιαίτερο ενδιαφέρον παρουσιάζουν οι αιχμές ελαστικής και μη-ελαστικής σκέδασης των χαρακτηριστικών ακτίνων-X της ανόδου της μηχανής ακτίνων-X.

- **Αιχμές διαφυγής (escape peaks):** Οι αιχμές διαφυγής παρουσιάζονται όταν κατά την αλληλεπίδραση ενός φωτονίου ενέργειας E_1 με τον ανιχνευτή, παράγεται χαρακτηριστική ακτίνα-X του υλικού του ανιχνευτή ενέργειας E_2 , η οποία διαφεύγει από τον ανιχνευτή και δεν ανιχνεύεται. Το φαινόμενο αυτό έχει ως συνέπεια την εμφάνιση μίας αιχμής στο φάσμα με ενέργεια $E_1 - E_2$. Επομένως, για κάθε φωτοκορυφή που ανιχνεύεται στο φάσμα, ενδέχεται να ανιχνεύεται και η αντίστοιχη αιχμή διαφυγής. Για την περίπτωση των ανιχνευτών με βάση το πυρίτιο, η χαρακτηριστική ακτίνα-X του Si έχει ενέργεια 1.74keV (K_α). Τις περισσότερες φορές η αιχμή διαφυγής δεν είναι διακριτή στο παραγόμενο φάσμα, καθώς, λόγω μικρής έντασης «χάνεται» στο συνεχές υπόστρωμα.
- **Αθροιστικές φωτοκορυφές:** Οι αθροιστικές φωτοκορυφές προκύπτουν όταν προσβάλουν τον ανιχνευτή δύο ακτίνες-X συγχρόνως, έτσι ώστε ο ανιχνευτής δεν έχει τη δυνατότητα να τις διακρίνει ως δύο ξεχωριστά γεγονότα. Στην περίπτωση αυτή καταγράφεται μία ακτίνα-X με ενέργεια ίση με το άθροισμα των ενεργειών των δύο φωτονίων. Το φαινόμενο αυτό έχει ιδιαίτερη σημασία για υψηλούς ρυθμούς (count rate) εκπομπής φωτονίων.

Εκτός από τις παραπάνω φωτοκορυφές μπορεί να υπάρχουν και άλλες επιδράσεις στο παραγόμενο φάσμα φθορισμού:

- **Αλληλοεπικάλυψη φωτοκορυφών (spectral interferences):** πρόκειται για φωτοκορυφές οι οποίες αλληλεπικαλύπτονται (περισσότερα από ένα στοιχεία εκπέμπουν χαρακτηριστικές ακτίνες-X σε παραπλήσιες ή και τις ίδιες ενέργειες. Η αλληλοεπικάλυψη φωτοκορυφών σε μερικές περιπτώσεις μπορεί να αντιμετωπισθεί με χρήση ανιχνευτή υψηλής διακριτικής ικανότητας, συχνά όμως δεν είναι δυνατή η

απόδοση των φωτοκορυφών στο ένα ή στο άλλο στοιχείο παρά μόνο με χρήση εξειδικευμένου λογισμικού.

- **Επίδραση από το υλικό του δείγματος:** εδώ υπάρχουν δύο πιθανές επιδράσεις στο φάσμα:
 - **Αυτοαπορρόφηση:** το υλικό του δείγματος απορροφά ή σκεδάζει (ελαστικά ή μη ελαστικά) τις ακτίνες- X του στοιχείου που ενδιαφέρει. Το φαινόμενο της αυτοαπορρόφησης εξαρτάται σημαντικά από την ενέργεια των ακτίνων- X , τη σύσταση και την πυκνότητα του υλικού
 - **Επαύξηση:** χαρακτηριστικές ακτίνες- X που παράγονται από ένα στοιχείο του δείγματος μπορεί να έχουν κατάλληλη ενέργεια ώστε να ευνοήσουν φθορισμό και εκπομπή επιπλέον ακτίνων- X του στοιχείου που ενδιαφέρει. Συνέπεια του φαινομένου αυτού είναι ότι το πλήθος των χαρακτηριστικών ακτίνων- X του στοιχείου που ενδιαφέρει εξαρτάται σημαντικά από τη συγκέντρωση των υπόλοιπων στοιχείων στο δείγμα.
- **Επίδραση από το περιβάλλον:** τα ελαφρά στοιχεία, δηλαδή στοιχεία με χαμηλό ατομικό αριθμό (π.χ. Na ή Cl) εκπέμπουν χαρακτηριστικές ακτίνες- X χαμηλής ενέργειας, οι οποίες εξασθενούν σημαντικά στον αέρα. Για να αντιμετωπιστεί το πρόβλημα είτε δημιουργείται κενό μεταξύ δείγματος και ανιχνευτή, είτε ο χώρος πληρούται με αέριο μικρότερης πυκνότητας, όπως He_2 .

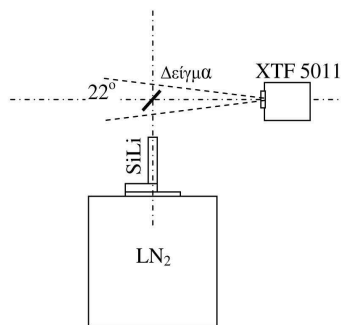
2.8 Εφαρμογές ανάλυσης δειγμάτων με την τεχνική XRF

Καθώς η τεχνική XRF είναι μία μη καταστρεπτική μέθοδος, φθηνότερη συγκριτικά σε σχέση με άλλες μεθόδους και αρκετά γρήγορη χρησιμοποιείται σε πολλούς τομείς, όπως:

- Στις επιστήμες της βιολογίας
- Στην εγκληματολογία
- Στην επιστήμη των υλικών
- Στην ανάλυση αρχαιολογικών δειγμάτων
- Στη χημική ανάλυση δειγμάτων
- Στην ανάλυση ορυκτών
- Σε βιομηχανικές εφαρμογές

2.9 Η διάταξη XRF του ΕΠΤ-ΕΜΠ

Στην παράγραφο αυτή περιγράφονται συνοπτικά οι συνιστώσες της διάταξης XRF του ΕΠΤ-ΕΜΠ. Επισημαίνεται πως περιγράφονται μόνο οι σημαντικότερες συνιστώσες, οι οποίες είναι απαραίτητες για την κατασκευή της γεωμετρίας της διάταξης στα πλαίσια της παρούσας ΔΕ. Στο παρακάτω Σχήμα (μονογραμμικό διάγραμμα, Σχήμα 2.29) φαίνεται η γεωμετρία της διάταξης XRF του ΕΠΤ-ΕΜΠ.

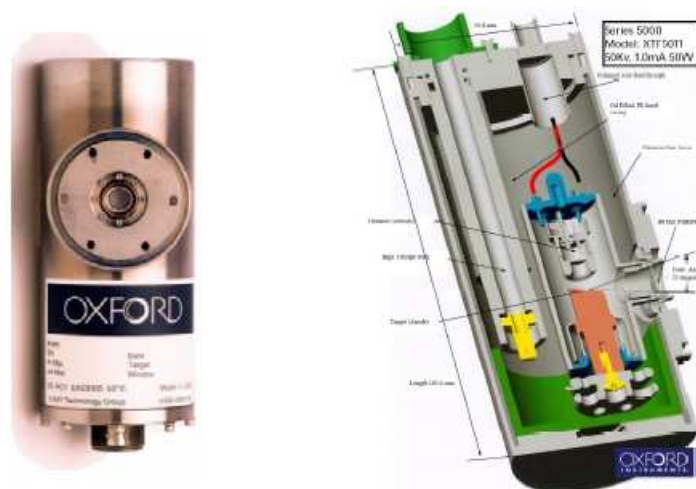


Σχήμα 2.29 Γεωμετρία διάταξης XRF του ΕΠΤ-ΕΜΠ [16]

2.9.1 Η μηχανή παραγωγής ακτίνων-X του ΕΜΠ-ΕΠΤ

Για την παραγωγή ακτίνων-X χρησιμοποιείται θάλαμος ακτίνων-X, πλαϊνού παράθυρου (side window), μοντέλο XTF5011 της εταιρείας Oxford, μέγιστης ισχύος 50 W με ρυθμιζόμενη τάση λειτουργίας στα 4-50 kV και ρεύμα λειτουργίας στα 0-1 mA. Η άνοδος της μηχανής είναι κατασκευασμένη από μολυβδαίνιο Mo και η κάθοδος διαθέτει θερμαινόμενο νήμα από βολφράμιο W. Το σημείο εστίασης (focal spot) της μηχανής ακτίνων-X έχει διαστάσεις 150x70μm. Το πλαϊνό παράθυρο είναι κατασκευασμένο από βηρύλλιο, πάχους 0.010" (0.254 mm). Οι εκπεμπόμενες ακτίνες-X εξέρχονται υπό την μορφή κωνικής δέσμης, γωνίας 22°. (Σχήμα 2.30).

Για την απαγωγή της θερμότητας που παράγεται στον σωλήνα ακτίνων-X, στην άνοδο και τη θερμαινόμενη κάθοδο (θερμοϊονική εκπομπή), ο σωλήνας περιβάλλεται από θάλαμο που πληρούται με ειδικό ψυκτικό έλαιο της κατασκευάστριας εταιρείας. Σύμφωνα με τον κατασκευαστή, η θερμοκρασία του θαλάμου δεν θα πρέπει να υπερβεί τους 55°C. Προς αυτή την κατεύθυνση συμβάλλει η συνεχής παρακολούθηση της θερμοκρασίας μέσω ενός ενσωματωμένου εκ κατασκευής θερμοστοιχείου, καθώς και ενός πρόσθετου θερμοστοιχείου τύπου K, το οποίο είναι επικολλημένο εξωτερικά (βλ. παρακάτω θερμοστοιχείο).



Σχήμα 2.30 Ο θάλαμος ακτίνων-X XTF5011 της εταιρίας Oxford Co.

Η μηχανή ακτίνων-X θωρακίζεται από ανοξείδωτο ατσάλινο κύλινδρο με στρώμα μόλυβδου, οδηγώντας σε ρυθμό έκθεσης λόγω διαρρέουσας ακτινοβολίας μικρότερο των 0.25mR/hr σε απόσταση 2". Ο θάλαμος ακτίνων-X, ο θάλαμος ψυκτικού ελαίου και η κυλινδρική θωράκιση αποτελούν ένα ενιαίο εκ κατασκευής σύστημα, όπως παρέχεται από την Oxford Industries (βλ. Σχήμα 2.30).

Για την παροχή της υψηλής τάσης της μηχανής χρησιμοποιείται τροφοδοτικό της εταιρείας Spellman, μοντέλο XPM50P50x2372, με δυνατότητα ρύθμισης της τάσης λειτουργίας στην περιοχή 4-50(49.8) kV και του ρεύματος λειτουργίας στην περιοχή 0-1 mA (μέγιστη ισχύς 50W).

Θερμοστοιχείο: Θερμοστοιχείο τύπου K είναι επικολημένο εξωτερικά, επί της μεταλλικής θωράκισης, για την παρακολούθηση της εξωτερικής θερμοκρασίας του θαλάμου. Η ένδειξη παρακολουθείται από τον χώρο του χειρισμού της διάταξης με ηλεκτρονικό θερμόμετρο της εταιρείας Fluke (ειδικό για τύπου K θερμοστοιχεία), με το οποίο είναι συνδεδεμένο. Συνιστάται η εξωτερική θερμοκρασία του θαλάμου να μην υπερβαίνει τους 35°C.

Μονάδα χειρισμού της μηχανής ακτίνων-X: Για τον έλεγχο εξ αποστάσεως της μηχανής ακτίνων-X έχει κατασκευασθεί ειδικό χειριστήριο που επιτρέπει λειτουργίες όπως ο έλεγχος του τροφοδοτικού υψηλής τάσης (καθορίζεται η τάση και η ένταση) και η άμεση διακοπή της

λειτουργίας σε περίπτωση έκτακτης ανάγκης. Επιπλέον, συνδέεται με δύο λαμπτήρες ερυθρού χρώματος που ανάβουν κατά την λειτουργία του θαλάμου ακτίνων-X για να ειδοποιούν τον χειριστή και το υπόλοιπο προσωπικό να μην εισέλθουν στον χώρο ακτινοβόλησης. Ο ένας λαμπτήρας είναι ορατός από τον χώρο παρακολούθησης και ο άλλος ορατός για αυτούς που θελήσουν να εισέλθουν εντός του χώρου της διάταξης XRF. Επίσης από τον χώρο του χειριστηρίου παρακολουθείται η θερμοκρασία της μηχανής μέσω του εξωτερικά επικολλημένου θερμοστοιχείου τύπου K.

2.9.2 Η ανιχνευτική διάταξη του ΕΠΤ-ΕΜΠ

2.9.2.1 Ο ανιχνευτής SiLi

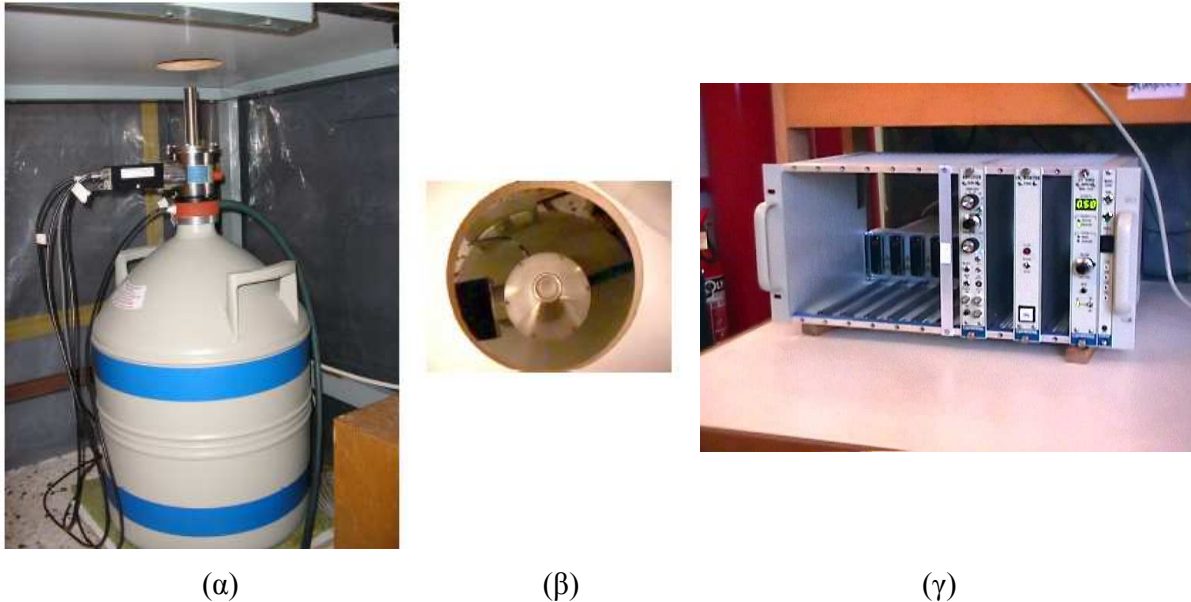
Ο ανιχνευτής SiLi (Lithium drifted Si detector) που διαθέτει το ΕΠΤ-ΕΜΠ για τις ανάγκες της διάταξης φθορισμού ακτίνων-X είναι μοντέλο SSL80160 της εταιρείας Canberra Industries, με σειριακό αριθμό (serial number-s/n) 1199903. Αποτελεί επίπεδο ανιχνευτή (ενεργού) εμβαδού 80 mm² με πάχος 5 mm και (ενεργό) διάμετρο 10.1 mm. Είναι κατασκευασμένος από κρύσταλλο πυριτίου (Si) p-τύπου υψηλής ειδικής αντίστασης, στον οποίο έχει διαμορφωθεί μια δίοδος p-i-n ως αποτέλεσμα μονόπλευρης διάχυσης ιόντων λιθίου (Li) n-τύπου μέσα στον κρύσταλλο.

Η αντιστάθμιση των προσμίξεων δημιουργεί μια εσωτερική περιοχή, γνωστή ως depletion region, που διαθέτει αυξημένη ευαισθησία στην ανίχνευση φωτονιακών ακτινοβολιών, X ή γ, μέσω της συλλογής των παραγόμενων λόγω αλληλεπίδρασης ηλεκτρικών φορέων. Ο ανιχνευτής SiLi είναι απαραίτητο να ψύχεται σε περιβάλλον υγρού αζώτου μόνον όταν βρίσκεται υπό υψηλή τάση. Οι χαμηλές θερμοκρασίες καταστέλλουν τη δημιουργία ηλεκτρικών φορέων λόγω θερμικής διέγερσης στο κρύσταλλο, μειώνοντας το ρεύμα διαρροής και τον ηλεκτρονικό θόρυβο. Ο ανιχνευτής SiLi τροφοδοτείται με ανάστροφη τάση πόλωσης -500 V, όπως προτείνεται από τον κατασκευαστή. Επιπλέον, σύμφωνα με τις προδιαγραφές του κατασκευαστή, απαιτούνται συνθήκες χώρου όπου λειτουργεί η διάταξη με θερμοκρασία 5-40°C και σχετική υγρασία <95% χωρίς συμπύκνωση.

Ο ανιχνευτής SiLi έχει εξαιρετική διακριτική ικανότητα, με εύρος ημίσειας ύψους (FWHM) 160eV στην φωτοκορυφή 5.9 keV του ⁵⁵Fe, ενώ σε συνδυασμό με την ικανότητα αποδοτικής ανίχνευσης φωτονίων πολύ χαμηλών ενεργειών (στην περιοχή ενεργειών μερικών δεκάδων keV), τον καθιστούν κατάλληλο για εφαρμογές XRF.

2.9.2.2 Λοιπές συνιστώσες της ανιχνευτικής διάταξης XRF

Ο ανιχνευτής SiLi συμπληρώνεται από τις λοιπές συνιστώσες της ανιχνευτικής διάταξης (βλ. Σχήμα 2.31):



Σχήμα 2.31 (α) Ο ανιχνευτής SiLi, με τον προενισχυτή, τον κρυοστάτη και το δοχείο υγρού αζώτου, (β) το παράθυρο Be του ανιχνευτή και (γ) ο ενισχυτής ύψους παλμών (αριστερά), ο ελεγκτής στάθμης αζώτου (μέσο) και το τροφοδοτικό υψηλής τάσης του ανιχνευτή (δεξιά) βρίσκονται τοποθετημένα στις ειδικές υποδοχές της συσκευής NIM-BIM

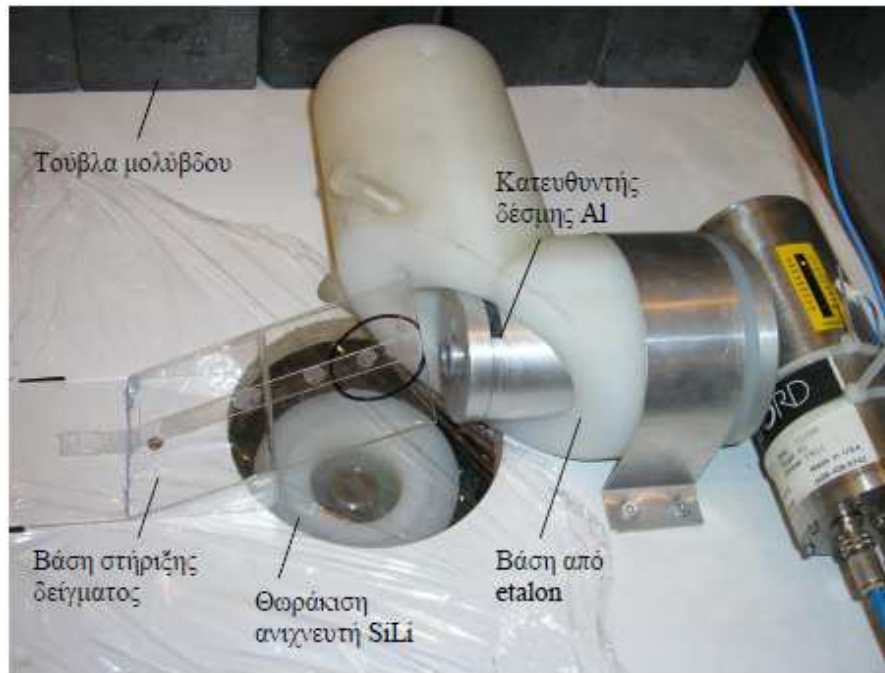
- Κρυοστάτης: Πρόκειται για το μοντέλο 7500 της εταιρίας Canberra Industries ο οποίος περιβάλλει τον ανιχνευτή και εξασφαλίζει την ψύξη του. Διαθέτει παράθυρο βηρυλλίου (Be) με πάχος 0.025mm, που επιτρέπει τη διέλευση των φωτονίων χαμηλών ενεργειών στον ανιχνευτή. Στον κρυοστάτη είναι ενσωματωμένος ο προενισχυτής της διάταξης, μοντέλο 2008 της εταιρείας Canberra Industries. Με τη θέση του προενισχυτή επιτυγχάνεται ψύξη αλλά και για ακόμη μεγαλύτερη μείωση του ηλεκτρονικού θορύβου.
- Δοχείο υγρού αζώτου: Χρησιμοποιείται για την ψύξη του ανιχνευτή. Το υγρό άζωτο έχει ρυθμό κατανάλωσης μικρότερο από 1.8 λίτρα ανά ημέρα, σύμφωνα με τον κατασκευαστή και πληρούται κάθε εβδομάδα.
- Μονάδα NIM-BIN: Πρόκειται για το μοντέλο 2000 της Canberra Industries.

- Τροφοδοτικό υψηλής τάσης (HV Power supply): Πρόκειται για το μοντέλο 3102 της Canberra Industries το οποίο χρησιμοποιείται για την τροφοδοσία του ανιχνευτή με ανάστροφη πόλωση των -500V.
- Ενισχυτής ύψους παλμών: Πρόκειται για το μοντέλο 2025 της Canberra Industries που χρησιμοποιείται για την ενίσχυση και διαμόρφωση του σήματος του προενισχυτή.
- Φορητός πολυκαναλικός αναλυτής: Πρόκειται για το μοντέλο Rocket MCA8000A της εταιρίας Amptek Industries. Συνδέεται με Η/Υ μέσω απλής σειριακής θήρας. Τροφοδοτείται με ηλεκτρικό ρεύμα από το δίκτυο ή από 2 μπαταρίες των 1.5V. Διαθέτει μνήμη 16000 καναλιών.
- Προσωπικός Η/Υ: Χρησιμοποιείται για τη συλλογή και επεξεργασία του φάσματος του πολυκαναλικού αναλυτή.

2.9.3 Γεωμετρία της διάταξης XRF

Στην παράγραφο αυτή περιγράφεται η γεωμετρία ανάλυσης της διάταξης XRF του ΕΠΤ-ΕΜΠ. Πάνω σε ένα σταθερό εργαστηριακό τραπέζι βρίσκεται εγκατεστημένη η μηχανή ακτίνων-X, έτσι ώστε η εξερχόμενη δέσμη να έχει διεύθυνση κάθετη προς τον ανιχνευτή. Ο ανιχνευτής συνδέεται με το δοχείο υγρού αζώτου συγκροτώντας μία αρκετά στιβαρή και ογκώδη κατασκευή και για αυτό τοποθετείται στο δάπεδο, με το παράθυρο του ανιχνευτή εστραμμένο προς τα πάνω. Το προς ανάλυση δείγμα τοποθετείται υπό κλίση 30° προς το επίπεδο του τραπεζιού, σε τέτοια θέση ώστε αυτό να ακτινοβολείται από τη δέσμη της μηχανής ακτίνων-X και η φθορίζουσα ακτινοβολία από το δείγμα να φτάνει στον ανιχνευτή μέσω μιας οπής του τραπεζιού, διαμέτρου 13cm. Το δείγμα απέχει 10cm από τον ανιχνευτή και 15.5cm από την έξοδο της μηχανής ακτίνων-X. Η συγκρότηση της διάταξης παρουσιάζεται στο Σχήμα 2.32 [ΔΔ, Ρούνη Π., 2008].

Για την ανάλυση περιβαλλοντικών δειγμάτων, το δείγμα παρασκευάζεται σε μορφή δισκίων (pellets) διαστάσεων $\Phi 38 \times 7 \text{mm}$ με χρήση υδραυλικής πρέσας μέσα σε κυλινδρικά κύαθια αλουμινίου, [ΔΔ, Ρούνη Π., 2008].



Σχήμα 2.32 Γεωμετρία διάταξης XRF του EPT-EMPI

Στη συνέχεια αναφέρονται οι λοιπές συνιστώσες της διάταξης XRF:

- Βάση στήριξης του δείγματος (holder): είναι κατασκευασμένη από plexiglass και επιτρέπει την τοποθέτηση του δείγματος με σταθερότητα υπό γωνία 30° . Το δείγμα τοποθετείται έτσι ώστε η ελεύθερή του επιφάνεια να δέχεται τη δέσμη ακτίνων-X από τη μηχανή και συγχρόνως ακτίνες-X που εκπέμπονται από το δείγμα να είναι δυνατόν να κατευθυνθούν προς στον ανιχνευτή.
- Κατευθυντής δέσμης (collimator): Χρησιμοποιείται προκειμένου να περιορίζεται το πλήθος των φωτονίων που δεν προσβάλουν το δείγμα, αλλά μετά από σκέδαση στον περιβάλλοντα χώρο μπορεί να φτάσουν στον ανιχνευτή συνεισφέροντας στο συνεχές υπόστρωμα. Αποτελείται από δύο κυλίνδρους έναν εξωτερικό από αλουμίνιο και έναν εσωτερικό από plexiglass. Ο κύλινδρος αλουμινίου έχει μήκος 7.5cm, εξωτερική διάμετρο 25mm και εσωτερική 20mm και τοποθετείται μπροστά από την έξοδο της μηχανής ακτίνων-X. Στο εσωτερικό του περιέχεται ο δακτύλιος από plexiglass εξωτερικής διαμέτρου 20mm και εσωτερικής 15mm. Το μήκος του είναι 7.5cm (βλ. Σχήμα 2.32). Ο εσωτερικός δακτύλιος από plexiglass χρησιμοποιείται για αποκοπή των χαρακτηριστικών ακτίνων-X των προσμίξεων του αλουμινίου. Υπάρχουν δύο

ανοίγματα στη μία άκρη του κατευθυντή για να είναι δυνατή η τοποθέτηση φίλτρων, [ΔΕ Βαλμαντώνης, 2009].

- Φίλτρα: Πρόκειται φίλτρα αλουμινίου(Al) υψηλής καθαρότητας πάχους 0.3mm και φίλτρα PVC πάχους 0.1mm, τα οποία χρησιμοποιούνται για την αποκοπή των φωτονίων χαμηλών ενεργειών του συνεχούς φάσματος της μηχανής με στόχο τη μείωση του συνεχούς φάσματος του δείγματος στην περιοχή χαμηλών ενεργειών. Τα φίλτρα PVC χρησιμοποιούνται για την εξασθένηση των χαρακτηριστικών από τις προσμίξεις που υπάρχουν στα φίλτρα αλουμινίου.
- Θωράκιση ανιχνευτή και κατευθυντή δέσμης: περιβάλλει τον ανιχνευτή θωρακίζοντας τον από ανεπιθύμητη ακτινοβολία κυρίως λόγω σκεδάσεων των ακτίνων-X. Η θωράκιση είναι κατασκευασμένη από συνθετικό υλικό etalon.
- Βάση μηχανής ακτίνων-X: στηρίζει τη μηχανή και τον κατευθυντή δέσμης σταθερά πάνω στο τραπέζι. Είναι κατασκευασμένη από συνθετικό υλικό etalon.
- Σύστημα προστασίας του ανιχνευτή: πολυμερής μεμβράνη η οποία τοποθετείται πάνω στο παράθυρο του ανιχνευτή με σκοπό την αποφυγή της ρύπανσής του, δακτύλιος από etalon που φέρει πλέγμα για προστασία του παραθύρου του ανιχνευτή, καπάκι από etalon για να προστατεύεται ο ανιχνευτής όταν δεν χρησιμοποιείται και τέλος, καπάκι προστασίας από πολυστηρένιο πάχους 1mm το οποίο τοποθετείται όταν ο ανιχνευτής δεν πρόκειται να χρησιμοποιηθεί για μεγάλο χρονικό διάστημα.
- Θωράκιση όλης της διάταξης: πρόκειται για τούβλα μόλυβδου ευρισκόμενα στο πλάι της πηγής δημιουργώντας έναν τοίχο πάχους 5cm, ύψους 20cm και μήκους 30cm ώστε να υπάρχει επιπλέον προστασία των χειριστών της διάταξης. Σημειώνεται ότι η όλη διάταξη της πηγής ακτίνων-X και του ανιχνευτή (εκτός από τα ηλεκτρονικά) βρίσκεται σε ειδικά διαμορφωμένο και θωρακισμένο χώρο με πλάκες γραφίτη πάχους ~15cm).

Οι διαστάσεις και οι επιπλέον κατασκευαστικές λεπτομέρειες καταγράφονται αναλυτικά στη ΔΔ [Ρούνη Π., 2008].

Κεφάλαιο 3: Δημιουργία φάσματος μηχανής ακτίνων-X με την τεχνική της προσομοίωσης

3.1 Εισαγωγή

Στο Κεφάλαιο αυτό παρουσιάζεται η διαδικασία που ακολουθήθηκε στο πλαίσιο της παρούσας ΔΕ με σκοπό τη δημιουργία φάσματος μηχανής ακτίνων-X, με βάση την τεχνική της προσομοίωσης με τη μέθοδο Monte-Carlo. Καθώς βασικός στόχος της παρούσας ΔΕ είναι η προσομοίωση της τεχνικής XRF όπως αυτή πραγματοποιείται στο ΕΠΤ-ΕΜΠ, είναι απαραίτητη προεργασία η δημιουργία του φάσματος των ακτίνων-X που προσπίπτουν στο στόχο προκαλώντας φθορισμό. Η γεωμετρία της μηχανής που προσομοιώθηκε είναι όσο το δυνατόν πλησιέστερη⁶ στη γεωμετρία της μηχανής που χρησιμοποιείται στο ΕΠΤ-ΕΜΠ.

Αρχικά, γίνεται μία σύντομη αναφορά στην τεχνική των προσομοιώσεων με τη μέθοδο Monte-Carlo. Στη συνέχεια περιγράφεται ο κώδικας PENELOPE που χρησιμοποιήθηκε στη ΔΕ. Συγκεκριμένα, γίνεται αναφορά στα επιμέρους τμήματα του κώδικα και κυρίως στον κώδικα χρήστη (PENMAIN) που χρησιμοποιείται. Επίσης, περιγράφονται τα βήματα που ακολουθούνται κατά την προσομοίωση. Ακολούθως, περιγράφεται αναλυτικά η διαδικασία που ακολουθείται με στόχο τη δημιουργία φάσματος μηχανής ακτίνων-X και παρουσιάζονται τα φάσματα που δημιουργήθηκαν με προσομοίωση. Τέλος, για να είναι εφικτή η σύγκριση των φασμάτων της προσομοίωσης με άλλα πραγματικά-πειραματικά, παρατίθεται ένα θεωρητικό μοντέλο δημιουργίας φασμάτων ακτίνων-X το οποίο και αναλύεται.

3.2 Η τεχνική προσομοίωσης με τη μέθοδο Monte-Carlo

Η μέθοδος Monte-Carlo είναι μία τεχνική κατά την οποία χρησιμοποιούνται τυχαίοι αριθμοί και τεχνικές της στατιστικής για να επιτευχθεί η επίλυση μαθηματικών και φυσικών

⁶ Καθώς δεν ήταν διαθέσιμα με λεπτομέρεια όλα τα γεωμετρικά χαρακτηριστικά της μηχανής ακτίνων-X.

προβλημάτων. Βασίζεται σε τεχνικές τυχαίες δειγματοληψίας και στην ουσία η προσομοίωση είναι ένα «παιχνίδι τύχης» ανάλογο με το προς επίλυση πρόβλημα. Τα «παιχνίδια τύχης» σχεδιάζονται έτσι ώστε να καταγράφονται κάθε φορά τα αποτελέσματα που παρουσιάζουν ενδιαφέρον. Το πλήθος των επαναλήψεων του παιχνιδιού τύχης καθορίζει την ακρίβεια με την οποία εκτιμάται η πραγματική τιμή του μεγέθους ή των μεγεθών τα οποία καλείται να προσδιορίσει η προσομοίωση.

Το όνομα Monte-Carlo δόθηκε στην υπόψη τεχνική προσομοίωσης από τους S. Ulam και N. Metropolis που ανέπτυξαν αρχικά αυτή τη μέθοδο, ενόσω εργάζονταν σε ένα πυρηνικό πρόγραμμα στο Los Alamos, λόγω των πολλών καζίνων που υπάρχουν στην πόλη του Monte-Carlo, μιας και η ιδέα πίσω από αυτή τη μέθοδο είναι ένα «παιχνίδι τύχης» με πολλές επαναλήψεις. Η τεχνική των προσομοιώσεων με τη μέθοδο Monte-Carlo πήρε μεγάλη ώθηση με την εφεύρεση των ηλεκτρονικών υπολογιστών, καθώς ήταν πλέον δυνατή η εκτέλεση τεράστιου πλήθους υπολογισμών σε μικρό χρονικό διάστημα.

Ένας αλγόριθμος Monte-Carlo αποτελείται από τέσσερα κύρια στοιχεία:

- τη γεννήτρια τυχαίων αριθμών,
- τους κανόνες δειγματοληψίας,
- τη συνάρτηση κατανομής της πιθανότητας (probability distribution function-PDF) του μεγέθους που πρόκειται να εκτιμηθεί,
- τη μεθοδολογία εκτίμησης του σφάλματος του αποτελέσματος.

Η μέθοδος Monte-Carlo χρησιμοποιείται συνήθως όταν το μοντέλο του προβλήματος είναι περίπλοκο, μη γραμμικό ή περιέχει πολλές άγνωστες παραμέτρους. Ένα τέτοιο πρόβλημα είναι οι αλληλεπιδράσεις της ακτινοβολίας (σωματιδιακής ή φωτονιακής) με την ύλη. Στη βάση της τεχνικής Monte-Carlo για τις αλληλεπιδράσεις της ακτινοβολίας υπάρχει η έννοια της ιστορίας σωματιδίου ή φωτονίου.

Η ιστορία ενός σωματιδίου ή φωτονίου είναι μία ακολουθία τυχαίων γεγονότων, που περιγράφουν την μετακίνηση του σωματιδίου ή φωτονίου. Το κάθε επιμέρους γεγονός τελειώνει με μία αλληλεπίδραση του σωματιδίου ή φωτονίου, η οποία δύναται να οδηγήσει σε αλλαγή της πορείας του ή/και της ενέργειάς του και σε μερικές περιπτώσεις σε εκπομπή

δευτερογενούς σωματιδίου ή φωτονίου. Ως αρχή της ιστορίας θεωρείται η στιγμή που το σωματίδιο ή φωτόνιο εκπέμπεται από την πηγή. Η ιστορία τελειώνει όταν η ενέργεια του σωματιδίου ή φωτονίου γίνει χαμηλότερη από ένα προκαθορισμένο όριο, ή όταν το σωματίδιο/φωτόνιο εξέρχεται από μια προκαθορισμένη περιοχή ενδιαφέροντας χωρίς να υπάρχει πιθανότητα να επανέλθει σε αυτή. Αυτό γίνεται ούτως ώστε να μη δημιουργούνται μακρές σε χρονική διάρκεια ιστορίες. Κάθε φορά που το πρόγραμμα ολοκληρώνει μία ιστορία, επιστρέφει στην αρχή παρακολουθώντας ένα νέο σωματίδιο ή φωτόνιο. Γενικά, όσο αυξάνει το πλήθος των ιστοριών, τόσο αυξάνει και η ακρίβεια των αποτελεσμάτων του προγράμματος.

3.3 Ο κώδικας PENELOPE

Ο κώδικας PENELOPE είναι ένας υπολογιστικός κώδικας προσομοίωσης βασιζόμενος στη μέθοδο Monte Carlo. Αναπτύχθηκε στο Πανεπιστήμιο της Βαρκελώνης το 1996 από τους F. Salvat, J.M. Fernandez-Varea και J. Sempau. Έως σήμερα έχουν υπάρξει και άλλες εκδόσεις του κώδικα, το 2003, το 2007 και το 2011. Το όνομα του κώδικα προέρχεται από τα αρχικά των λέξεων **PE**Netration and **E**nergy **LO**ss of **P**ositrons and **E**lectrons. Στο όνομα του κώδικα δεν γίνεται αναφορά στα φωτόνια, καθώς αρχικά ο κώδικας είχε τη δυνατότητα προσομοίωσης μόνο σωματιδίων-β (ηλεκτρόνια και ποζιτρόνια), εντούτοις σήμερα είναι δυνατή η προσομοίωση και φωτονίων. Ο κώδικας είναι γραμμένος σε γλώσσα προγραμματισμού FORTRAN. Με τον κώδικα PENELOPE είναι εφικτή η προσομοίωση των αλληλεπιδράσεων φωτονίων και σωματιδίων-β με την ύλη σε διάφορες γεωμετρίες, αποτελούμενες από διάφορα υλικά. Ο αλγόριθμος βασίζεται στην τεχνική της τυχαίας δειγματοληψίας. Ο κώδικας αυτός θεωρείται σήμερα ως ο ακριβέστερος κώδικας προσομοίωσης φωτονίων, ειδικότερα φωτονίων χαμηλών ενεργειών (ακτίνες-X).

Ο κώδικας αποτελείται από δύο κύρια τμήματα. Το πρώτο τμήμα πραγματοποιεί την προσομοίωση δημιουργώντας τις ιστορίες των φωτονίων ή σωματιδίων και πραγματοποιεί τις αλληλεπιδράσεις τις ακτινοβολίας με τα διάφορα υλικά της εκάστοτε γεωμετρίας. Αυτό το τμήμα αποτελείται από τα προγράμματα *penelope.f*, *penvared.f*, *timer.f*, *pengeom.f*. Σε

αυτό το τμήμα κανονικά δεν επεμβαίνει ο χρήστης του κώδικα, εκτός και αν θέλει να τροποποιήσει τους φυσικούς νόμους που διέπουν την προσομοίωση. Το δεύτερο τμήμα του κώδικα είναι αυτό στο οποίο περιγράφεται το προς επίλυση πρόβλημα. Το τμήμα αυτό του προγράμματος, το οποίο επικοινωνεί με το πρώτο τμήμα που πραγματοποιεί την προσομοίωση για την επίλυση του προβλήματος, ονομάζεται *κώδικας χρήστη (user code)* και είναι αυτό που συγγράφεται από το χρήστη. Για τη διευκόλυνση των χρηστών του κώδικα παρέχονται μαζί με το πακέτο PENELOPE ορισμένοι κώδικες χρήστη, κατάλληλοι για την επίλυση συγκεκριμένων προβλημάτων. Η έκδοση του κώδικα που χρησιμοποιήθηκε στα πλαίσια της παρούσας ΔΕ περιέχει τους εξής κώδικες χρήστη:

- PENSLAB, για την προσομοίωση ακτινοβολίας διερχόμενη από επίπεδη πλάκα συγκεκριμένου υλικού
- PENCYL, για την προσομοίωση ακτινοβολίας διερχόμενη από σύνθετες κυλινδρικές γεωμετρίες
- PENMAIN, για την προσομοίωση ακτινοβολίας διερχόμενη από σύνθετες γεωμετρίες, και για αυτό χρησιμοποιείται στις περισσότερες εφαρμογές

Στις προσομοιώσεις που λαμβάνουν χώρα στην παρούσα ΔΕ χρησιμοποιήθηκε ο κώδικας χρήστη PENMAIN, ο οποίος αναλύεται παρακάτω.

3.3.1 Ο κώδικας χρήστη PENMAIN

Ο κώδικας χρήστη PENMAIN αποτελεί μια γενική μορφή κώδικα χρήστη και μπορεί να χρησιμοποιηθεί για την επίλυση πολύπλοκων προβλημάτων προσομοίωσης ακτινοβολίας, σωματιδίων $-\beta$ ή φωτονίων, που διέρχονται από συνθέτες κατασκευές. Επειδή ο κώδικας χρήστη είναι διαθέσιμος μαζί με τον κώδικα PENELOPE σε πηγαία μορφή, είναι δυνατή η τροποποίηση του, ανάλογα με το πρόβλημα. Στα πλαίσια αυτής της ΔΕ ο κώδικας χρήστη τροποποιήθηκε μερικώς, όπως αναλύεται στην §3.4.1. Ο κώδικας χρήστη επιτρέπει την επικοινωνία του χρήστη με το κυρίως πρόγραμμα, το οποίο επιτυγχάνεται με τα αρχεία δεδομένων που συγγράφονται από τον χρήστη. Κατά την εκτέλεση του προγράμματος δημιουργούνται πολλά αρχεία εξόδου στα οποία καταγράφονται οι πληροφορίες που αφορούν στη διάδοση της ακτινοβολίας διαμέσου των σωμάτων, όπως η αποτιθέμενη ενέργεια σε ένα σώμα, η κατανομή της δόσης σε μία περιοχή κ.α.

Οι πληροφορίες που αφορούν στην αλληλεπίδραση των σωματιδίων-β ή των φωτονίων με την ύλη καταγράφονται από τρεις εικονικούς ανιχνευτές. Ανάλογα με το είδος του εικονικού ανιχνευτή προκύπτουν και τα αντίστοιχα αρχεία εξόδου.

3.3.2 Τα αρχεία Δεδομένων

Για την πραγματοποίηση της προσομοίωσης απαιτείται καταρχήν η περιγραφή του προς επίλυση προβλήματος. Η περιγραφή του προβλήματος γίνεται βάσει αρχείων δεδομένων, τα οποία έχουν συγκεκριμένη μορφή. Τα αρχεία δεδομένων που έπρεπε να δημιουργηθούν στο πλαίσιο της παρούσας ΔΕ για την πραγματοποίηση της προσομοίωσης, που θα οδηγούσε στη δημιουργία ενός φάσματος μηχανής ακτίνων-Χ, είναι: το αρχείο υλικού, το αρχείο γεωμετρίας και το αρχείο εισόδου.

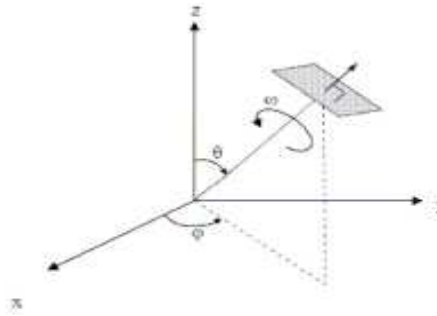
3.3.2.1 Το αρχείο υλικού

Στο αρχείο υλικού, το οποίο πρέπει να έχει την τυπική ονομασία ***.mat**, ορίζονται τα υλικά από τα οποία αποτελούνται τα αντικείμενα (διατάξεις, κατασκευές, δείγματα κλπ) που συνιστούν τη γεωμετρία του προβλήματος. Το αρχείο αυτό δεν συγγράφεται από τον χρήστη αλλά προκύπτει μέσω ενός προγράμματος δημιουργίας αρχείων υλικών, το οποίο διατίθεται με τον κώδικα PENELOPE, μέσω της διαδικασίας που αναλύεται στην παράγραφο 3.4.3. Το πρόγραμμα παρέχει στο χρήστη τη δυνατότητα επιλογής υλικών από ένα κατάλογο, καθώς και να κατασκευάσει επιπρόσθετα υλικά ορίζοντας διάφορες παραμέτρους, όπως η πυκνότητα, η κατά βάρος σύσταση και άλλα, ανάλογα με τις απαιτήσεις του επιλυόμενου προβλήματος. Στο Παράρτημα II παρατίθεται ο πλήρης κατάλογος των έτοιμων υλικών που παρέχονται στη βάση δεδομένων του κώδικα.

3.3.2.2 Το αρχείο γεωμετρίας

Στο αρχείο γεωμετρίας, το οποίο πρέπει να έχει την τυπική ονομασία ***.geo**, περιγράφεται η γεωμετρία του προβλήματος. Το αρχείο κατασκευάζεται από το χρήστη σε μορφή ASCII. Δια μέσου αυτού του αρχείου είναι δυνατή η κατασκευή των αντικειμένων/συνιστωσών (bodies) της χρησιμοποιούμενης πειραματικής διάταξης με χρήση μία σειράς από διαθέσιμες επιφάνειες. Επίσης, υπάρχει η δυνατότητα ομαδοποίησης των αντικειμένων για την συγκρότηση ολοκληρωμένων διατάξεων (modules). Βέβαια, για την κατασκευή και αναπαράσταση όλων αυτών των γεωμετριών είναι απαραίτητος ο

προσδιορισμός των κατάλληλων επιφανειών (surfaces). Υπάρχουν δύο δυνατότητες για την περιγραφή της γεωμετρίας επιφανειών, υπό αναλυτική μορφή και υπό συμπτυγμένη (reduced) μορφή [19]. Επίσης, είναι δυνατή η περιστροφή αντικειμένων της γεωμετρίας, ως προς τις τρεις γωνίες του ορθοκανονικού συστήματος (βλ. Σχήμα 3.1).



Σχήμα 3.1 Οι γωνίες περιστροφής της γεωμετρίας

Ένα αντικείμενο μπορεί να περιστραφεί με δύο τρόπους: (α) εάν οριστεί ως module και (β) αν έχει οριστεί ως σώμα (body) και έχουν περιστραφεί όλες οι επιφάνειες από τις οποίες αποτελείται. Στα πλαίσια της παρούσας ΔΕ χρησιμοποιήθηκαν και οι δύο τρόποι περιστροφής αντικειμένων. Αξίζει να σημειωθεί ότι όταν χρησιμοποιείται η συμπτυγμένη μορφή έκφρασης της γεωμετρίας, για να είναι εφικτή η περιστροφή ενός αντικειμένου ως προς τον οριζόντιο άξονα (άξονας y και αντίστοιχη γωνία θ) πρέπει να οριστεί και η γωνία φ ίση με 90° . Αυτό είναι μία διαπίστωση η οποία προέκυψε κατά τη διάρκεια εκπόνησης της παρούσας ΔΕ, όπου απαιτήθηκε η περιστροφή πολλών σωμάτων. Συνοψίζοντας, για να περιστραφεί ένα σώμα ως προς τον άξονα y πρέπει να οριστούν οι παράμετροι $\text{PHI} = 90^\circ$ και $\text{THETA} =$ επιθυμητή τιμή, στην επιφάνεια ή το module αντίστοιχα.

3.3.2.3 Το αρχείο εισόδου

Στο αρχείο εισόδου, το οποίο πρέπει να έχει την τυπική ονομασία *.in, καθορίζονται μία σειρά από σημαντικές παράμετροι για την προσομοίωση όπως το είδος και η ενέργεια της ακτινοβολίας, σε ποια αρχεία περιέχονται τα γεωμετρικά χαρακτηριστικά και τα υλικά της διάταξης, ποιοι και πόσοι ανιχνευτές θα χρησιμοποιηθούν κτλ. Το αρχείο εισόδου του κώδικα PENMAIN έχει τη μορφή που παρουσιάζεται στον Πίνακα 3.1 στο τέλος του Κεφαλαίου, όπου παρατίθεται το Πρότυπο Αρχείο Εισόδου. Το περιεχόμενο κάθε μιας από

τις ζητούμενες παραμέτρους παρουσιάζεται αναλυτικά στον Πίνακα 3.2 στο τέλος του παρόντος Κεφαλαίου.

3.3.3 Εικονικοί ανιχνευτές

Ο κώδικας PENELOPE για την καταγραφή των πληροφοριών που είναι χρήσιμες για την επίλυση ενός προβλήματος χρησιμοποιεί εικονικούς ανιχνευτές. Ένας εικονικός ανιχνευτής δεν είναι τίποτα άλλο από ένα τμήμα προγράμματος, το οποίο ελέγχει ορισμένα χαρακτηριστικά της ακτινοβολίας που διέρχεται μέσα από καθορισμένα γεωμετρικά όρια και καταγράφει ορισμένες πληροφορίες σε ειδικούς καταμετρητές. Οι εικονικοί ανιχνευτές που χρησιμοποιεί ο κώδικας χρήστη PENMAIN είναι:

- **Ανιχνευτής αλληλεπίδρασης (Impact Detector-ID):** Ο ανιχνευτής αλληλεπίδρασης καταγράφει τις ενέργειες των σωματιδίων ή φωτονίων που εισέρχονται σε αυτόν, χωρίς να είναι απαραίτητη η απόθεση ενέργειας μέσα σε αυτόν. Ο ανιχνευτής αλληλεπίδρασης ορίζεται στο αρχείο εισόδου, αλλά είναι απαραίτητος ο ορισμός του και στο αρχείο γεωμετρίας, καθώς αποτελεί μέρος της γεωμετρίας της κατασκευής. Στον κώδικα μπορούν να χρησιμοποιηθούν έως και 5 τέτοιοι ανιχνευτές.
- **Ανιχνευτής αποτιθέμενης ενέργειας (Energy Deposition Detector-ENDDET):** Ο ανιχνευτής αποτιθέμενης ενέργειας καταγράφει την ενέργεια που αποθέτουν τα σωματίδια β ή τα φωτόνια που αλληλεπιδρούν με αυτόν. Διαθέτει ενεργειακά παράθυρα (κανάλια) και κάθε φορά που ένα σωματίδιο ή φωτόνιο αλληλεπιδράσει με αυτόν αποθέτοντας μία ποσότητα ενέργειας αυτή καταγράφεται στο αντίστοιχο κανάλι. Με αυτόν τον τρόπο προκύπτει η κατανομή της αποτιθέμενης ενέργειας υπό μορφή φάσματος. Ο ανιχνευτής αποτιθέμενης ενέργειας ορίζεται στο αρχείο εισόδου, αποτελεί όμως μέρος της κατασκευής της γεωμετρίας, οπότε πρέπει να ορίζεται και στο αρχείο γεωμετρίας. Μπορούν να ορισθούν έως 5 ανιχνευτές αποτιθέμενης ενέργειας.
- **Ανιχνευτής δόσης (Dose Enclosure-DE):** Ο ανιχνευτής δόσης καταγράφει την αποτιθέμενη ενέργεια (και εντέλει τη δόση) που εναποτίθεται σε μία περιοχή της προς μελέτη κατασκευής. Ο ανιχνευτής δόσης ορίζεται μόνο στο αρχείο εισόδου, καθώς δεν αποτελεί τμήμα της εκάστοτε γεωμετρίας. Ο ανιχνευτής δόσης είναι ένα ορθογώνιο παραλληλεπίπεδο πλέγμα, μέσα στο οποίο γίνεται η καταγραφή της δόσης. Στην πραγματικότητα πρόκειται για ενέργεια που αποτίθεται αθροιστικά από κάθε σωματίδιο

ή φωτόνιο σε κάθε τμήμα του πλέγματος. Στη συνέχεια με εύκολους μαθηματικούς υπολογισμούς, υπολογίζεται η δόση.

3.4 Δημιουργία φάσματος μηχανής ακτίνων-X με την τεχνική της προσομοίωσης

Στην παράγραφο που ακολουθεί παρουσιάζεται η προσπάθεια που έγινε στην παρούσα ΔΕ με στόχο τη δημιουργία φασμάτων μηχανής ακτίνων-X, για διάφορες τιμές της υψηλής τάσης της μηχανής. Η δημιουργία φασμάτων ακτίνων-X πραγματοποιείται με χρήση του κώδικα PENELOPE και βάση των όσων αναφέρθηκαν παραπάνω. Αρχικά, τροποποιήθηκε ο κώδικας χρήστη PENMAIN και εν συνεχεία δημιουργήθηκαν τα αρχεία δεδομένων για την εκάστοτε προσομοίωση. Στο πλαίσιο της παρούσας ΔΕ επιλέχθηκε να δημιουργηθούν φάσματα ακτίνων-X για τάσεις μηχανής: 15, 20, 25, 30, 35, 40, 45 και 50 Volt. Οι τιμές αυτές επελέγησαν καθώς είναι τυπικές τιμές της υψηλής τάσης που χρησιμοποιούνται στην διάταξη XRF του ΕΠΤ-ΕΜΠ.

Για τη δημιουργία εκτελέσιμων προγραμμάτων σε FORTRAN 77, χρησιμοποιήθηκε ο μεταγλωττιστής g77. Για να είναι δυνατή η χρήση του μεταγλωττιστή απαιτείται η εκτέλεση ενός προγράμματος τύπου batch. Στην παρούσα ΔΕ χρησιμοποιήθηκε το πρόγραμμα psetup.bat, το οποίο παρέχεται ελεύθερα μαζί με το μεταγλωττιστή από την ιστοσελίδα <http://www.geocities.com/Athens/Olympus/5564> και εκτελείται με την εντολή:

psetup

Όλες οι εντολές δίδονται σε παράθυρο εντολών των Windows (command prompt).

3.4.1 Τροποποίηση του κώδικα χρήστη PENMAIN

Όπως αναφέρθηκε, στο πλαίσιο της παρούσας ΔΕ έγιναν οι απαραίτητες τροποποιήσεις του κώδικα χρήστη PENMAIN. Καταρχήν διεγράφησαν τα σημεία του κώδικα που αναφέρονται στη δημιουργία αρχείων εξόδου τα οποία δεν είναι απαραίτητα για την παρούσα ΔΕ. Σύμφωνα με παλαιότερη ΔΕ [11] με την εκτέλεση του κώδικα PENMAIN δημιουργούνται πολλά αρχεία εξόδου. Επομένως, κρίθηκε απαραίτητη η διαγραφή των

γραμμών του κώδικα που αναφέρονται στη δημιουργία των αρχείων αυτών, με απώτερο σκοπό την οικονομία χρόνου καταγραφής των σημαντικών για τις συγκεκριμένες προσομοιώσεις αρχείων εξόδου και επιπροσθέτως, την οικονομία του χώρου αποθήκευσης.

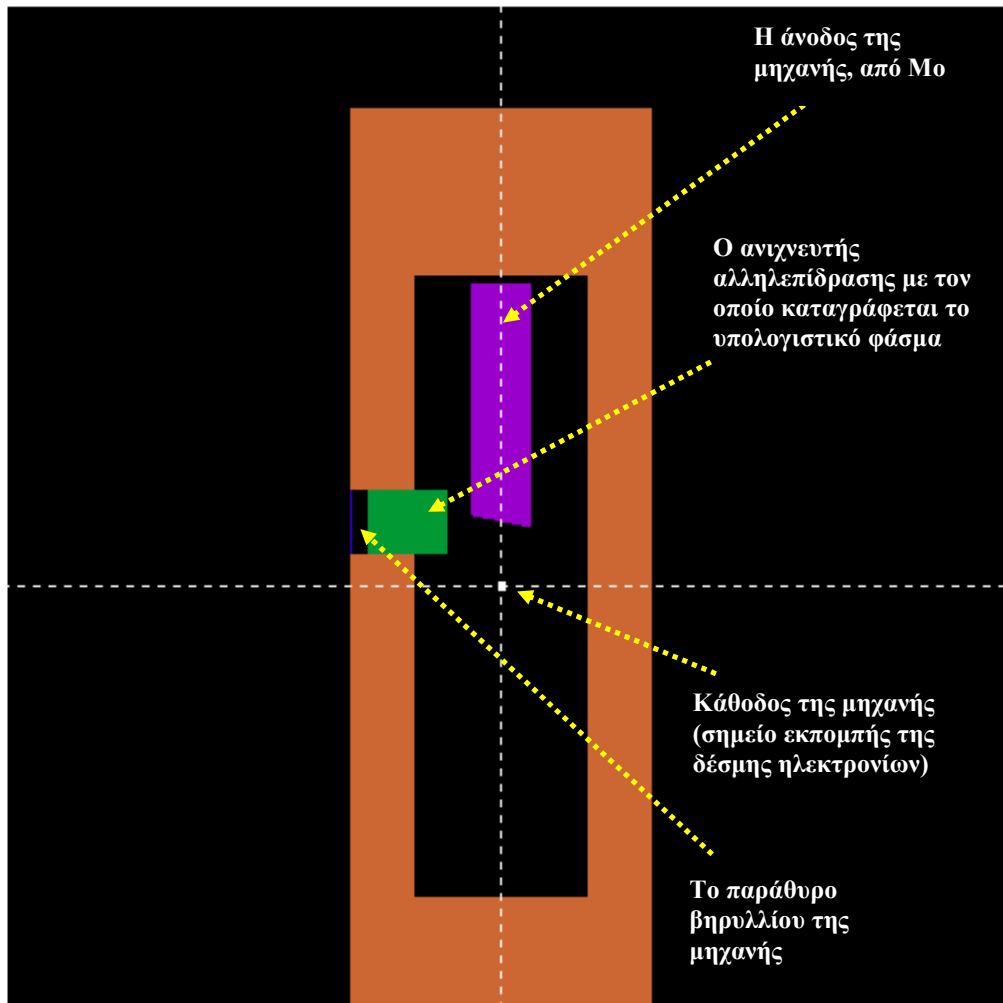
Η δεύτερη τροποποίηση αφορά στο μέγιστο αριθμό καναλιών των εικονικών ανιχνευτών αλληλεπίδρασης και αποτιθέμενης ενέργειας. Στον πηγαίο κώδικα η μέγιστη τιμή είναι τα 1000 κανάλια. Στην παρούσα ΔΕ, αποφασίστηκε να χρησιμοποιηθούν 1024 κανάλια, όσα δηλαδή χρησιμοποιούνται και στη διάταξη XRF του ΕΠΤ-ΕΜΠ. Για το λόγο αυτό οι παράμετροι NIDCM και EDCM του κώδικα χρήστη, που καθορίζουν το μέγιστο πλήθος των καναλιών στον ανιχνευτή αλληλεπίδρασης και αποτιθέμενης ενέργειας αντίστοιχα, έλαβαν την τιμή 10000 αντί της default τιμής 1000. Το τροποποιημένο πρόγραμμα χρήστη ονομάζεται *penmain_fast_10000.f*.

3.4.2 Δημιουργία του αρχείου γεωμετρίας

Αρχικά, δημιουργήθηκε το αρχείο γεωμετρίας *tube_spc_inside_v2.geo*⁷ βάσει των όσων αναφέρονται στην §3.3.3.2 για τη δημιουργία αρχείων γεωμετρίας. Στο αρχείο αυτό περιγράφεται η γεωμετρία που αντιστοιχεί στη μηχανή ακτίνων-X του ΕΠΤ-ΕΜΠ. Για λόγους απλότητας η μηχανή αποτελείται μόνον από την άνοδο, τη θωράκιση και το παράθυρο της μηχανής. Για την καταγραφή του ενεργειακού φάσματος των φωτονίων που εκπέμπονται από την άνοδο χρησιμοποιείται ανιχνευτής αλληλεπίδρασης. Ο ανιχνευτής ορίζεται ως ένα module και όχι ως ένα σώμα καθώς ήταν επιθυμητή η περιστροφή του κατά 90°. Ο αρχικός σχεδιασμός του προβλήματος προέβλεπε τοποθέτηση του ανιχνευτή εκτός της μηχανής, προκειμένου να καταγράφεται το φάσμα που εξέρχεται από αυτήν. Για λόγους οικονομίας χρόνου προσομοίωσης, αποφασίστηκε αρχικά να τοποθετηθεί ο ανιχνευτής μέσα στην κατασκευή που αντιστοιχεί στη μηχανή των ακτίνων-X. Στο Σχήμα 3.2 φαίνεται η γεωμετρία της μηχανής ακτίνων-X, όπου διακρίνεται και ο ανιχνευτής φωτονίων (με πράσινο χρώμα), όπως προκύπτει με χρήση του προγράμματος *gview2d*⁸.

⁷ Το αρχείο παρατίθεται στον Πίνακα 3.3 στο τέλος του Κεφαλαίου

⁸ Στο Παράρτημα ΙΙΙ παρατίθεται το πρόγραμμα *gview2d*



Σχήμα 3.2 Απεικόνιση του αρχείου γεωμετρίας *tube_spc_inside_v2.geo* με το πρόγραμμα *gview2d*

3.4.3 Δημιουργία του αρχείου υλικών

Το αρχείο υλικών όπως αναφέρθηκε (βλ. §3.3.1.2) δεν δημιουργείται από το χρήστη, αλλά από ένα πρόγραμμα του κώδικα PENELOPE που ονομάζεται **material.f**. Το εκτελέσιμο αρχείο δημιουργείται με την εντολή:

```
g77 -O material.f -o material.exe
```

και εκτελείται με την εντολή:

```
material.exe
```

Για να τρέξει το πρόγραμμα πρέπει το εκτελέσιμο αρχείο να βρίσκεται στο φάκελο όπου περιέχονται οι βάσεις δεδομένων των υλικών του κώδικα PENELOPE. Το πρόγραμμα *material* παρέχει τη δυνατότητα επιλογής έτοιμων υλικών από μία λίστα υλικών (Παράρτημα II) ή τη δημιουργία ενός υλικού με εισαγωγή των συστατικών του από ένα παράθυρο διαλόγου:

Select one option (1 or 2):

1: Enter composition data from the keyboard

2: Read them from the file pdcompos.p05fn

Για τη δημιουργία των υλικών της κατασκευής της εφαρμογής της παρούσας ΔΕ ακολουθήθηκε η επιλογή ‘Δημιουργία έτοιμων υλικών’, δηλαδή η επιλογή ‘1’. Στη συνέχεια ζητείται από το χρήστη ο καθορισμός του αριθμού που αντιστοιχεί στο υλικό :

‘Enter material identification number ...’

Για τα στοιχεία του περιοδικού πίνακα η αρίθμηση είναι με βάση τον ατομικό αριθμό, ενώ για τα μίγματα ακολουθείται αλφαβητική σειρά όπως φαίνεται στο Παράρτημα II.

Η διάταξη που αντιστοιχεί στη μηχανή ακτίνων-X αποτελείται από την άνοδο, τη θωράκιση και το παράθυρο βηρυλλίου. Καθώς, βασικός στόχος της παρούσας ΔΕ είναι η σύγκριση φασμάτων φθορισμού που έχουν προκύψει από την προσομοίωση με πραγματικά / πειραματικά η άνοδος κατασκευάζεται από μολυβδαίνιο και το παράθυρο από βηρύλλιο, όπως η μηχανή ακτίνων-X του ΕΠΤ-ΕΜΠ. Η θωράκιση για λόγους απλότητας αποτελείται από ένα υλικό, το αλουμίνιο. Καθώς, το φάσμα ανιχνεύεται μέσα στη μηχανή ακόμη και να καταγραφούν φωτόνια που έχουν αλληλεπιδράσει με τη θωράκιση της μηχανής, πρόκειται για φωτόνια εξαιρετικά μικρής ενέργειας, τα οποία θα «κοπούν» από το παράθυρο της μηχανής. Για αυτό το λόγο και ενόσω είναι γνωστό πως η θωράκιση αποτελείται από μόλυβδο και ατσάλι, επιλέχθηκε η απλούστευση των υλικών με τη χρησιμοποίηση του αλουμινίου ως υλικό θωράκισης. Τέλος, το υλικό του ανιχνευτή επιλέχθηκε να είναι το πυρίτιο, ούτως ώστε να προσομοιώνει τον πραγματικό ανιχνευτή της διάταξης του ΕΠΤ-ΕΜΠ. Επομένως, τα υλικά που χρησιμοποιούνται για την περιγραφή της διάταξης που

αντιστοιχεί στη μηχανή ακτίνων-X είναι κατά σειρά⁹: Μολυβδαίνιο Mo (42), Αλουμίνιο Al (13), Βηρύλλιο Be (4) και Πυρίτιο Si (14). Τονίζεται, πως η χρησιμοποίηση συγκεκριμένου υλικού του ανιχνευτή γίνεται για λόγους πληρότητας και δεν επιφέρει καμία αλλαγή στο φάσμα που καταγράφεται, καθώς έχει ορισθεί ανιχνευτής αλληλεπίδρασης. Επαναλαμβάνοντας αυτή τη διαδικασία τόσες φορές όσες και τα υλικά, δημιουργούνται τα αρχεία *molybdenum.mat*, *aluminum.mat*, *beryllium.mat* και *silicon.mat*. Τέλος, είναι απαραίτητη η ενοποίηση των επιμέρους αρχείων υλικού σε ένα αρχείο, με όνομα *tube.mat*. Αυτό πραγματοποιείται με την εκτέλεση της εντολής:

copy molybdenum.mat + aluminum.mat + beryllium.mat + silicon.mat tube.mat

Η σειρά με την οποία αναγράφονται τα επιμέρους αρχεία υλικών στο ενοποιημένο αρχείο παίζει σημαντικό ρόλο, διότι σε κάθε υλικό αποδίδεται ένας αύξων αριθμός ο οποίος χρησιμοποιείται στο αρχείο γεωμετρίας αλλά και στο αρχείο εισόδου. Οπότε, με τις παραπάνω εντολές αποδίδονται στα υλικά μολυβδαίνιο, αλουμίνιο, βηρύλλιο και πυρίτιο οι αριθμοί 1, 2, 3 και 4 αντιστοίχως.

3.4.4 Δημιουργία του αρχείου δεδομένων εισόδου

Τελευταίο βήμα πριν την έναρξη τις προσομοίωσης είναι η δημιουργία του αρχείου εισόδου. Βάσει των όσων προαναφέρθηκαν στην §3.3.1.2 δημιουργήθηκε το αρχείο εισόδου *src_inside.in*, το οποίο παρατίθεται στον Πίνακα 3.4, στο τέλος του Κεφαλαίου. Για την ακρίβεια, δημιουργήθηκαν 8 αρχεία με την ίδια ονομασία, με μόνη διαφορά μεταξύ τους, την τιμή της ενέργειας των ηλεκτρονίων, που καθορίζουν και τη μέγιστη τιμή ενέργειας ακτίνων-X του φάσματος. Η ενέργεια (σε eV) των ηλεκτρονίων ορίζεται μέσω της παραμέτρου SENERG, η οποία λαμβάνει τις τιμές: 1.5e4, 2.0e4, 2.5e4, 3.0e4, 3.5e4, 4.0e4, 4.5e4 και 5.0e4 για την προσομοίωσης ηλεκτρονίων μέγιστης ενέργειας 15, 20, 25, 30, 35, 40, 45 & 50keV αντίστοιχα.

Στη συνέχεια ορίστηκαν οι παράμετροι EABS(M,1), EABS(M,2) και EABS(M,3), οι οποίες αφορούν την ενέργεια αποκοπής (cut-off energy) των ηλεκτρονίων, φωτονίων και

⁹ Στην παρένθεση αναγράφονται οι μαζικοί αριθμοί των στοιχείων, που αποτελούν και τους κωδικούς αριθμούς των αντίστοιχων υλικών.

ποζιτρονίων αντίστοιχα. Κατά τη διάρκεια της προσομοίωσης, μόλις η ενέργεια ενός σωματιδίου ή ενός φωτονίου μειωθεί κάτω από την τιμή των παραμέτρων EABS, σε οποιοδήποτε σημείο της γεωμετρίας, ο κώδικας σταματάει να παρακολουθεί την πορεία της ιστορίας του σωματιδίου/φωτονίου, θεωρώντας πως όλη η ενέργεια της ακτινοβολίας αποτέθηκε στο σημείο αυτό. Στα πλαίσια της παρούσας προσομοίωσης δεν χρησιμοποιήθηκαν οι συνιστώμενες από τον οδηγό του προγράμματος τιμές της παραμέτρου EABS, αλλά επελέγησαν άλλες τιμές, με γνώμονα την αύξηση της ταχύτητας της προσομοίωσης. Επιπροσθέτως, οι παράμετροι αυτές έμειναν σταθερές για όλες τις τιμές της αρχικής ενέργειας των ηλεκτρονίων που προσομοιώθηκαν.

Για τη δημιουργία φάσματος ακτίνων-X, ιδιαίτερο ενδιαφέρον παρουσιάζει η παράμετρος WCR, διότι καθορίζει την ενέργεια αποκοπής για την ακτινοβολία πέδησης. Η ακτινοβολία πέδησης αποτελεί μία από τις δύο συνιστώσες του παραγόμενου φάσματος. Η τιμή που χρησιμοποιήθηκε είναι τα 1000eV, διότι αφενός οδηγεί σε μεγαλύτερες ταχύτητες προσομοίωσης και αφετέρου ακτινοβολία πέδησης κάτω από 1000eV δεν παρουσιάζει κανένα ενδιαφέρον στα πλαίσια της παρούσας ΔΕ.

Στη συνέχεια ορίζεται ο εικονικός ανιχνευτής, ώστε να καταγραφούν τα δεδομένα του παραγόμενου φάσματος. Ο εικονικός ανιχνευτής που χρησιμοποιήθηκε είναι ένας ανιχνευτής αλληλεπίδρασης, γιατί ο στόχος των κάτωθι προσομοιώσεων είναι η δημιουργία φάσματος μηχανής ακτίνων-X και επομένως η καταγραφή των φωτονίων που εκπέμπονται από την άνοδο και κατευθύνονται προς το παράθυρο της μηχανής και όχι των ακτίνων-X που αποθέτουν ενέργεια σε συγκεκριμένη θέση του συστήματος. Υπενθυμίζεται πως ο ανιχνευτής αλληλεπίδρασης βρίσκεται τοποθετημένος στην είσοδο του πλαϊνού παραθύρου. Το ενεργειακό παράθυρο του ανιχνευτή καθορίστηκε από 110 έως 63000eV, εύρος το οποίο αντιστοιχεί στην ενεργειακή περιοχή στην οποία είναι ρυθμισμένη η διάταξη XRF του ΕΠΤ-ΕΜΠ, ενώ η περιοχή αυτή χωρίστηκε σε 256 κανάλια. Αρχικά ο σχεδιασμός προέβλεπε να χρησιμοποιηθούν 1024 κανάλια, αλλά παρατηρήθηκε πως με λιγότερα κανάλια, (π.χ. 256 κανάλια) επιτυγχάνονται αποτελέσματα καλύτερης στατιστικής για τον ίδιο χρόνο

προσομοίωσης¹⁰. Άλλωστε, όπως θα φανεί και παρακάτω, το προκύπτον φάσμα της μηχανής ακτίνων-X, θα χρησιμοποιηθεί εν συνεχεία για να ακτινοβοληθεί ο στόχος (δείγμα) και στη φάση αυτή εκτιμήθηκε ότι η λεπτομερής γνώση της μορφής του φάσματος των ακτίνων-X της μηχανής δεν θα έχει σημαντική επίδραση τελικά στο φάσμα φθορισμού του δείγματος.

3.4.5 Εκτέλεση του κώδικα PENMAIN και παρουσίαση των αρχείων εξόδου

Για την εκτέλεση του κώδικα PENMAIN, καταρχήν δημιουργείται το εκτελέσιμο αρχείο του κώδικα PENMAIN με την εντολή:

```
g77 -O penmain_fast_10000.f -o spc_inside.exe
```

Στη συνέχεια τα αρχεία υλικών, γεωμετρίας και εισόδου τοποθετούνται στον ίδιο φάκελο με το εκτελέσιμο αρχείο. Τότε εκτελείται το πρόγραμμα `spc_inside.exe` με την εντολή :

```
spc_inside.exe < spc_inside.in
```

Με την ολοκλήρωση της εκτέλεσης του προγράμματος έχουν δημιουργηθεί μία σειρά από αρχεία εξόδου: *penmain.dat*, *pm_material.dat*, *dump1.dat*, *pm_spc_impdet_1.dat*, *pengeom_tree.rep* και *pm_geometry.rep*. Αναλυτικές πληροφορίες για κάθε αρχείο αναγράφονται σε προηγούμενη ΔΕ [N. Αθανασίου, 2006]. Από τα αρχεία αυτά, για τη δημιουργία του φάσματος ενδιαφέρουν στα πλαίσια της ΔΕ τα εξής:

- **penmain.dat**, στο οποίο καταγράφονται οι βασικές παράμετροι της προσομοίωσης και το οποίο αποτελείται από 2 τμήματα, το *Input data file* και το *Results* (Πίνακας 3.5 στο τέλος του Κεφαλαίου). Στο πρώτο μέρος καταγράφονται τα σημαντικότερα δεδομένα της προσομοίωσης. Αρχικά καταγράφεται ο τίτλος της προσομοίωσης, όπως αυτός δόθηκε στο αρχείο εισόδου και εν συνεχεία η ημερομηνία και η ώρα έναρξης της προσομοίωσης. Στη συνέχεια καταγράφονται τα δεδομένα της προσομοίωσης, όπως αυτά ορίστηκαν στο αρχείο εισόδου, δηλαδή η περιγραφή της πηγής ακτινοβολίας, οι παράμετροι των υλικών κατασκευής και η ονομασία του αρχείου υλικού που χρησιμοποιήθηκε στην προσομοίωση και το όνομα του αρχείου γεωμετρίας της κατασκευής. Στο δεύτερο τμήμα καταγράφονται τα αποτελέσματα της προσομοίωσης, όπως το συνολικό πλήθος των σωματιδίων ή φωτονίων που προσομοιώθηκαν, η

¹⁰ Στην περίπτωση των 256 καναλιών, σε ένα κανάλι αποθηκεύεται περίπου τετραπλάσιο πλήθος γεγονότων, από αυτά που αποθηκεύονται όταν τα κανάλια είναι 1024, με προφανή βελτίωση της στατιστικής.

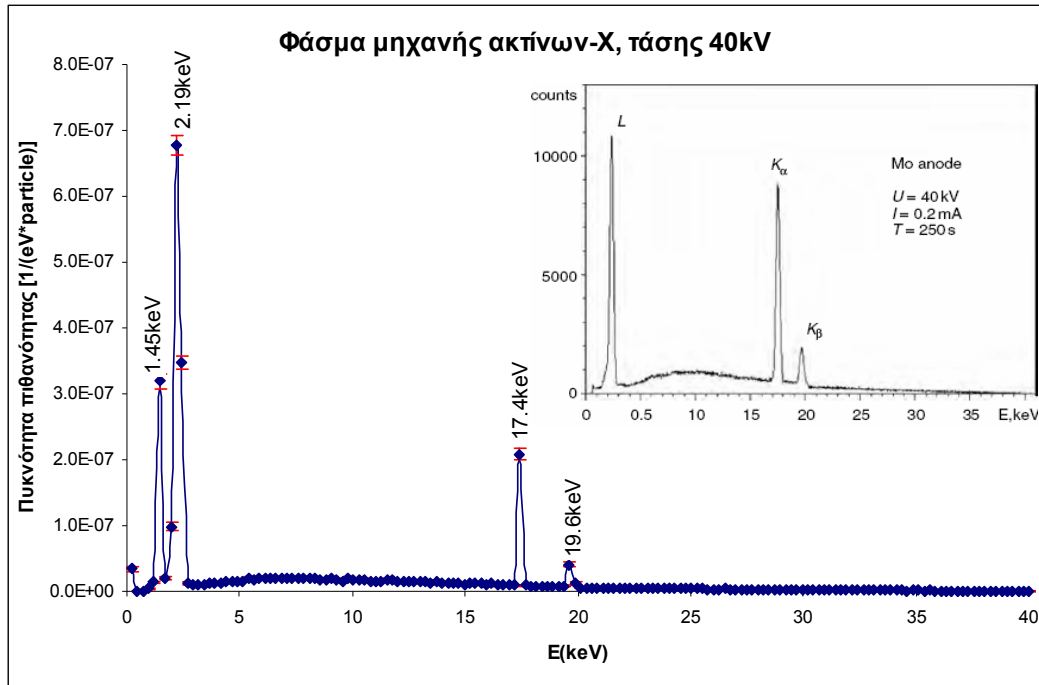
διάρκεια και η ταχύτητα της προσομοίωσης, ο αριθμός των σωματιδίων ή φωτονίων που οπισθοσκεδάστηκαν ή απορροφήθηκαν, η μέση τιμή της αποτιθέμενης ενέργειας σε κάθε σώμα (body) της κατασκευής και τέλος, η μέση τιμή της ενέργειας που καταγράφηκε από τον ανιχνευτή αλληλεπίδρασης.

- **pm_spc_impdet_1.dat**, στο οποίο καταγράφεται το ενεργειακό φάσμα των φωτονίων που διήλθαν από το αντικείμενο που αποτελεί τον ανιχνευτή αλληλεπίδρασης, ανεξάρτητα από το αν εναπόθεσαν ενέργεια σε αυτόν. Το αρχείο εξόδου του ανιχνευτή αλληλεπίδρασης αποτελείται από 3 στήλες. Στην πρώτη καταγράφεται η ενέργεια E (σε eV) του μέσου του ενεργειακού καναλιού. Στη δεύτερη στήλη καταγράφεται η συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας $(\text{eV}\cdot\text{particle})^{-1}$ της ενεργειακής περιοχής που αντιστοιχεί σε ενέργεια E . Ουσιαστικά, πρόκειται για την πιθανότητα να υπάρξει σωματίδιο/φωτόνιο που θα διέλθει από τον ανιχνευτή με ενέργεια που βρίσκεται στο εύρος του αντίστοιχου ενεργειακού καναλιού. Η τρίτη στήλη παρουσιάζει την αβεβαιότητα της συνάρτησης πυκνότητας πιθανότητας, σε επίπεδο εμπιστοσύνης 3σ. Τμήμα του αρχείου εξόδου του ανιχνευτή αλληλεπίδρασης παρατίθεται στον Πίνακα 3.6 στο τέλος του Κεφαλαίου.

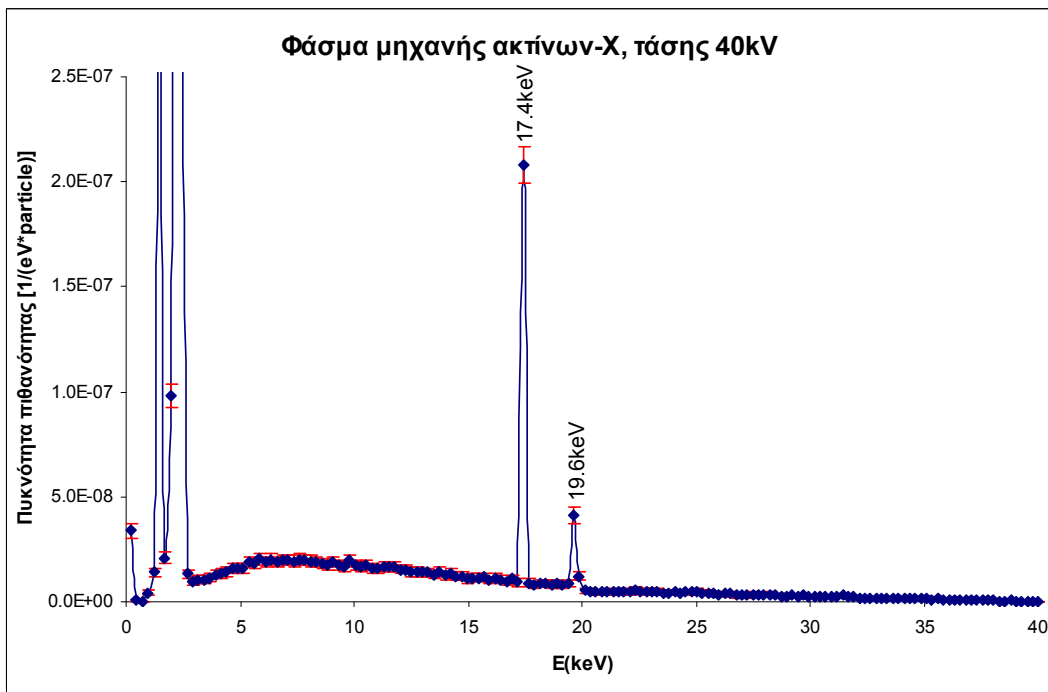
3.4.6 Αποτελέσματα προσομοιώσεων

Πραγματοποιήθηκαν συνολικά 8 προσομοιώσεις για τις ενέργειες ηλεκτρονίων: 15, 20, 25, 30, 35, 40, 45 & 50keV αντίστοιχα. Κάθε μία προσομοίωση είχε διάρκεια περίπου 60 ώρες και συνολικό πλήθος ιστοριών (ηλεκτρονίων) περίπου $1\cdot 10^8$. Με την ολοκλήρωση της εκτέλεσης των προσομοιώσεων προκύπτουν τα αντίστοιχα φάσματα, όπου τα σφάλματα (error bars) στα διαγράμματα αντιστοιχούν στην αβεβαιότητα σε επίπεδο 3σ, δηλαδή στην τρίτη στήλη του αρχείου εξόδου *pm_spc_impdet_1.dat*. Η στατιστική των αποτελεσμάτων κρίθηκε αποδεκτή στο πλαίσιο της παρούσας ΔΕ. Η ανάγκη για προσομοιώσεις τόσο μεγάλης διάρκειας είναι φυσική συνέπεια του γεγονότος ότι η διαδικασία παραγωγής ακτινοβολίας-X στη μηχανή ακτίνων-X έχει πολύ χαμηλή απόδοση, καθώς το μεγαλύτερο ποσοστό της ενέργειας των ηλεκτρονίων τελικά μετατρέπεται σε θερμότητα στην άνοδο. Στα Σχήματα 3.3 και 3.4 δίδεται ενδεικτικά το φάσμα που προέκυψε από την προσομοίωση για ενέργεια ηλεκτρονίων 40keV. Η μόνη διαφορά των δύο φασμάτων είναι η κλίμακα των τεταγμένων. Στο τέλος του Κεφαλαίου παρατίθενται και τα φάσματα για τις υπόλοιπες

ενέργειες ηλεκτρονίων (Σχήματα 3.5–3.11). Για λόγους σύγκρισης, στο Σχήμα 3.3 ενσωματώνεται και το Σχήμα 2.17 (που έχει παρουσιαστεί και σχολιασθεί στο Κεφάλαιο 2).



Σχήμα 3.3 Φάσμα ακτίνων-Χ που προέκυψε από την προσομοίωση για ηλεκτρόνια ενέργειας 40keV



Σχήμα 3.4 Φάσμα ακτίνων-Χ που προέκυψε από την προσομοίωση για ηλεκτρόνια ενέργειας 40keV¹¹

¹¹ Πρόκειται για το φάσμα του σχήματος 3.3 με αλλαγή της κλίμακας των τεταγμένων.

Το φάσμα για ενέργεια ηλεκτρονίων 40 keV που δημιουργήθηκε από την προσομοίωση έχει την τυπική μορφή (βλ. Σχήμα 3.4) των φασμάτων μηχανής με άνοδο μολυβδαινίου της βιβλιογραφίας και συμβαδίζει με τα όσα προαναφέρθηκαν για το φάσμα της μηχανής ακτίνων-X (βλ. §2.4.1). Δηλαδή, αποτελείται από ένα συνεχές φάσμα και τις χαρακτηριστικές του Mo (K_{α} @ 17.4keV, K_{β} @ 19.6keV). Υπενθυμίζεται, πως το προσομοιωμένο φάσμα καταγράφηκε μέσα στη μηχανή ακτίνων-X, δηλαδή πριν από το παράθυρο βηρυλλίου και για αυτό εμφανίζονται και οι χαρακτηριστικές L (L_{α} @ 2.29keV, L_{β} @ 2.46keV, L_{γ} @ 2.62keV) του Mo, όπως φαίνεται στο Σχήμα 3.3. Επιπροσθέτως, εμφανίζεται και μία φωτοκορυφή στα 1.45keV, η οποία αντιστοιχεί στις χαρακτηριστικές K του αλουμινίου (K_{α} @ 1.49keV, K_{β} @ 1.55keV), οι οποίες φαίνονται ως μία φωτοκορυφή λόγω του εύρους του κάθε καναλιού. Οι ακτίνες-X αυτές αποκόπτονται σε μεγάλο βαθμό από το παράθυρο βηρυλλίου της μηχανής και για το λόγο αυτό δεν καταγράφονται στο φάσμα της μηχανής. Η μικρή απόκλιση της ενέργειας που αποδίδεται στις χαρακτηριστικές σε σχέση με τις τιμές της βιβλιογραφίας οφείλεται στο πεπερασμένο ενεργειακό εύρος των καναλιών που χρησιμοποιούνται¹².

3.5 Δημιουργία φάσματος ακτίνων-X βάσει ημι-εμπειρικών σχέσεων και έτοιμων πακέτων λογισμικού

Εκτός από την τεχνική της προσομοίωσης Monte-Carlo που αναλύθηκε στις προηγούμενες παραγράφους, υπάρχουν και άλλοι εναλλακτικοί τρόποι δημιουργίας φάσματος ακτίνων-X, οι οποίοι παρουσιάζονται στις παραγράφους που ακολουθούν, όχι μόνο για λόγους πληρότητας, αλλά και προκειμένου να χρησιμοποιηθούν ως αναφορά για τα αποτελέσματα των προσομοιώσεων που έγιναν στο πλαίσιο της παρούσας ΔΕ. Σύμφωνα με βιβλιογραφικές πηγές [13], ένα φάσμα ακτίνων-X μπορεί να δημιουργηθεί είτε από ημι-εμπειρικές σχέσεις, είτε μέσω εξειδικευμένων πακέτων λογισμικού τα οποία διατίθενται στο διαδίκτυο. Η βάση των πακέτων αυτών λογισμικού είναι συνήθως η προσομοίωση Monte-Carlo. Στο πλαίσιο της ΔΕ εξετάστηκαν και οι δύο παραπάνω τρόποι δημιουργίας φάσματος ακτίνων-X.

¹² Το εύρος του ενεργειακού παραθύρου που χρησιμοποιείται είναι: 63000eV/256 κανάλια = 246eV

3.5.1 Δημιουργία φάσματος ακτίνων-X βάσει ημι-εμπειρικών σχέσεων

Το θεωρητικό μοντέλο που αναλύεται στην παράγραφο αυτή αναπτύχθηκε από τους D. M. Tucker et al. το 1990 και περιγράφεται στην εργασία με τίτλο “*Molybdenum target X-ray spectra: A semiempirical model*” [13]. Αυτή η εργασία αποτέλεσε σταθμό στη δημιουργία φάσματος ακτίνων-X που εκπέμπονται από στόχο μολυβδαινίου Mo. Σήμερα πολλά πακέτα λογισμικού και κώδικες δημιουργίας φάσματος ακτίνων-X βασίζονται σε αυτό το μοντέλο. Τα πλεονεκτήματα που έχει αυτό το θεωρητικό μοντέλο είναι κυρίως δύο. Πρώτον, η δημιουργία χαρακτηριστικής ακτινοβολίας και ακτινοβολίας πέδησης υπολογίζεται σε ποικίλα βάθη μέσα στο στόχο και δεύτερον, οι βέλτιστες παράμετροι της προσομοίωσης καθορίζονται από πειράματα, χρησιμοποιώντας την τεχνική των μη γραμμικών ελάχιστων τετραγώνων. Τα τεχνικά χαρακτηριστικά και τα υλικά από τα οποία αποτελείται η προς μελέτη μηχανή παρατίθενται στον Πίνακα 3.7:

Πίνακας 3.7. Τεχνικά χαρακτηριστικά της μηχανής ακτίνων-X

Θάλαμος	Machlett Dynamax M64
Στόχος (άνοδος)	Molybdenum
Γωνία ανόδου	13.0°
Εσωτερικό φίλτράρισμα	0.70mm Al στα 35kV _{cp}
Πάχος γυαλιού	1.11mm
Πάχος λαδιού ψύξης	3.06mm
Πάχος Lexan	2.42mm

3.5.1.1 Ημι-εμπειρική σχέση για τη δημιουργία της ακτινοβολίας πέδησης

Το θεωρητικό μοντέλο για τη δημιουργία ακτινοβολίας πέδησης από ηλεκτρόνια που προσπίπτουν σε στόχο από μολυβδαίνιο δίνεται από τη σχέση [13]:

$$N(E)dE = \left(\frac{\sigma_o \cdot Z^2}{A} \right) \cdot \left(\frac{dE}{E} \right) \times \int_{T-E}^{T_o} \left[B \cdot \left(\frac{T + m_o \cdot c^2}{T} \right) \cdot F(E, T, T_o) \times \left(\frac{1}{\rho} \cdot \frac{dT}{dx} \right)^{-1} \right] dT \quad (3.1)$$

όπου:

$\sigma_0 = \alpha \cdot r_e$ και

α : σταθερά fine structure ίση με $7.297 \cdot 10^{-3}$

r_e : η κλασική ακτίνα του ηλεκτρονίου ίση με $2.82 \cdot 10^{-15} \text{m}$

$N(E)dE$: ο αριθμός των φωτονίων που παράγονται με ενέργεια μεταξύ E και $E+dE$

Z : ο ατομικός αριθμός του υλικού της ανόδου

A : η ατομική μάζα των ατόμων της ανόδου

E : η ενέργεια των φωτονίων

T_0 : η κινητική ενέργεια των παρθενικών ηλεκτρονίων που παράγονται από την κάθοδο

T : η ενέργεια των ηλεκτρονίων αφού έχουν αλληλεπιδράσει με το υλικό της ανόδου

B : συνάρτηση που εξαρτάται από το Z και το T

m_0 : η μάζα αδρανείας του ηλεκτρονίου ίση με $9.109 \cdot 10^{-31} \text{kg}$

c : η ταχύτητα του φωτός στο κενό

$(1/\rho)(dT/dx)$: η μαζική ισχύς πέδησης του υλικού του στόχου

$F(E, T, T_0)$: συνάρτηση που εξαρτάται από τα φωτόνια που διαφεύγουν του στόχου χωρίς να αλληλεπιδράσουν με το υλικό.

Η συνάρτηση $F(E, T, T_0)$ είναι μία συνάρτηση εξαρτημένη από τα φωτόνια που διαφεύγουν του στόχου χωρίς να αλληλεπιδράσουν με το υλικό του και εκφράζεται από τη σχέση [13]:

$$F(E, T, T_0) = \exp \left[\frac{-\mu(E) \cdot (T_0^2 - T^2)}{\rho \cdot C \cdot \sin(\theta + \varphi)} \right] \quad (3.2)$$

όπου:

$\mu(E)$: ο ολικός γραμμικός συντελεστής εξασθένησης του υλικού της ανόδου για την ενέργεια E ,

ρ : η πυκνότητα του υλικού,

θ : η γωνία κλίσης της ανόδου (Σχήμα 3.12) και

φ : η γωνία εκπομπής των φωτονίων ως προς τον κάθετο άξονα της ανόδου (Σχήμα 3.12) και

C : η σταθερά Thomson-Whiddington που υπολογίζεται εμπειρικά από την παρακάτω σχέση:

$$\begin{aligned} C &= 753.3 \cdot T_0 + 20000 & T_0 < 30 \text{ kV}_{cp} \\ C &= 519.6 \cdot T_0 + 27000 & T_0 \geq 30 \text{ kV}_{cp} \end{aligned} \quad (3.3)$$

Ο μαζικός συντελεστής εξασθένησης μ/ρ υπολογίζεται από τη σχέση:

$$\mu/\rho(u) = a_1 + a_2 \cdot u^{-1.6} + a_3 \cdot u^{-2.7} + a_4 \cdot u^{-3.5} + a_5 \cdot u^{-4.5} \quad (3.4)$$

όπου $u = E/100$ (σε keV) και a_i είναι οι παράμετροι που χρησιμοποιούνται για τον υπολογισμό του μαζικού συντελεστή μ/ρ . Οι τιμές των συντελεστών a_i εξαρτάται από το είδος του υλικού.

Η μαζική ισχύς πέδησης του μολυβδαινίου υπολογίζεται από τη σχέση:

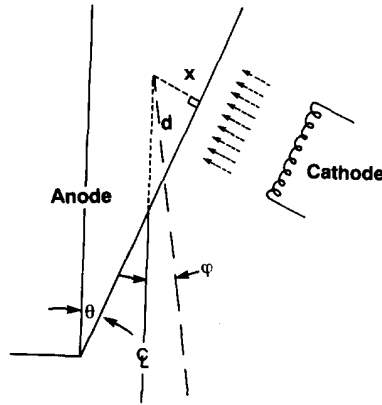
$$\left(\frac{1}{\rho} \cdot \frac{d\Gamma}{dx} \right) = A_{msp} + B_{msp} \cdot \exp(-T \cdot C_{msp}) \quad (3.5)$$

Η συνάρτηση B της εξίσωσης 3.1 λαμβάνει τις παρακάτω τιμές :

$$\text{για } E \leq T\alpha: \quad B = [A_o + A_1 \cdot T_o] \cdot \left[1 + B_1 \cdot \left(\frac{E}{T} \right) + B_2 \cdot \left(\frac{E}{T} \right)^2 + B_3 \cdot \left(\frac{E}{T} \right)^3 + B_4 \cdot \left(\frac{E}{T} \right)^4 \right] \quad (3.6)$$

$$\text{για } E > T\alpha: \quad B=0$$

όπου A_o - B_4 παράμετροι του μοντέλου και E , T , T_o τα μεγέθη όπως προαναφέρθηκαν (βλ. Πίνακες 8-12).



Σχήμα 3.12 Η γεωμετρία της ανόδου και η γωνίες θ και φ

3.5.1.2 Ημι-εμπειρική σχέση για τη δημιουργία της χαρακτηριστικής ακτινοβολίας

Το θεωρητικό μοντέλο για τη δημιουργία χαρακτηριστικών ακτίνων-X, οι οποίες εκπέμπονται όταν ηλεκτρόνια προσπίπτουν σε στόχο από Mo δίνεται παρακάτω [13]:

$$N(E_i) = A_k \cdot \left[\left(\frac{T_o}{E_k} \right) - 1 \right]^{n_k} \cdot f(E_i) \times \int_{x=0}^R \left\{ P \left(\frac{x}{R} \right) \cdot \exp \left[\frac{-\mu(E_i) \cdot x}{\sin(\theta + \varphi)} \right] \right\} dx \quad (3.7)$$

όπου:

A_k, n_k : παράμετροι του μοντέλου

$N(E_i)$: ο αριθμός των χαρακτηριστικών φωτονίων ενέργειας E_i

E_k : η ενέργεια σύνδεσης των ηλεκτρονίων της Κ-στιβάδας

R : η απόσταση στην οποία η μέση κινητική ενέργεια των ηλεκτρονίων ισούται με την ενέργεια σύνδεσης των ηλεκτρονίων των ατόμων του υλικού της ανόδου

x : η απόσταση στην οποία φθάνει το ηλεκτρόνιο μέσα στο υλικό της ανόδου

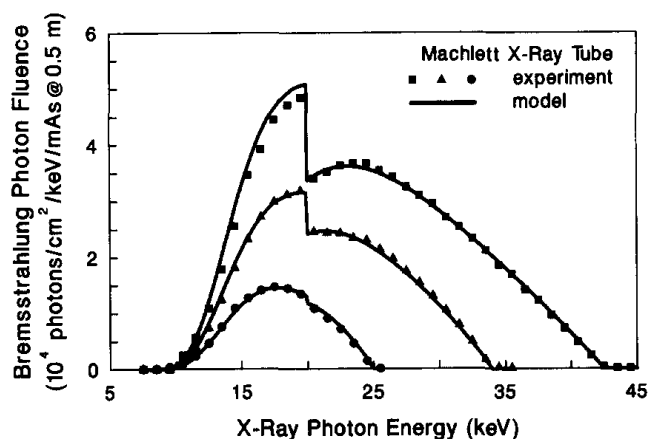
$f(E_i)$: πιθανότητα εκπομπής χαρακτηριστικής ακτίνας-X με ενέργεια E_i

$P(x/R)$: ισούται με $1.5[1-(x/R)^2]$, όταν $x < R$ και είναι 0 όταν $x > R$

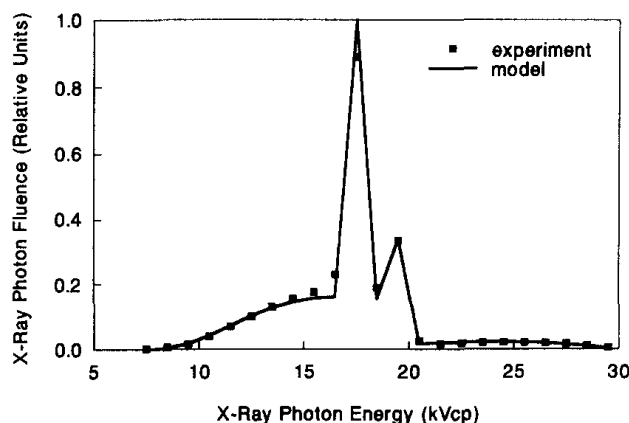
Οι πίνακες με τις αριθμητικές τιμές των παραμέτρων που χρησιμοποιούνται στις παραπάνω σχέσεις δίδονται στους Πίνακες 8-12 στο τέλος του Κεφαλαίου.

3.5.1.3 Αποτελέσματα της εφαρμογής της ημι-εμπειρικής σχέσης

Με βάση τις ημι-εμπειρικές σχέσεις που παρουσιάστηκαν προηγουμένως, και με τη βοήθεια μαθηματικών προγραμμάτων (π.χ. MathCAD) έχουν παραχθεί στα πλαίσια της εργασίας [13] τα φάσματα της συνεχούς ακτινοβολίας και της συνολικής ακτινοβολίας της συγκεκριμένης μηχανής, τα οποία παρουσιάζονται στα Σχήματα 3.13 και 3.14. Στο πλαίσιο της παρούσας ΔΕ δεν κρίθηκε σκόπιμη η χρήση των παραπάνω εμπειρικών σχέσεων για τον προσδιορισμό του φάσματος της μηχανής-X του ΕΠΤ-ΕΜΠ, για την οποία άλλωστε δεν ήταν διαθέσιμα και όλα τα απαραίτητα δεδομένα.



Σχήμα 3.13 Σύγκριση πειραματικού φάσματος ακτινοβολίας πέδησης με το φάσμα που υπολογίστηκε με βάση την ημι-εμπειρική σχέση για ενέργειες 25, 34 και 42.5keV, [13]



Σχήμα 3.14 Σύγκριση πειραματικού φάσματος με το φάσμα που υπολογίστηκε με βάση την ημιεμπειρική σχέση για ενέργεια 30keV, [13]

Σε αυτό το σημείο επισημαίνεται πως υπάρχουν και άλλα θεωρητικά μοντέλα που ασχολούνται με τη δημιουργία φάσματος. Ενδεικτικά αναφέρονται οι σχετικές εργασίες:

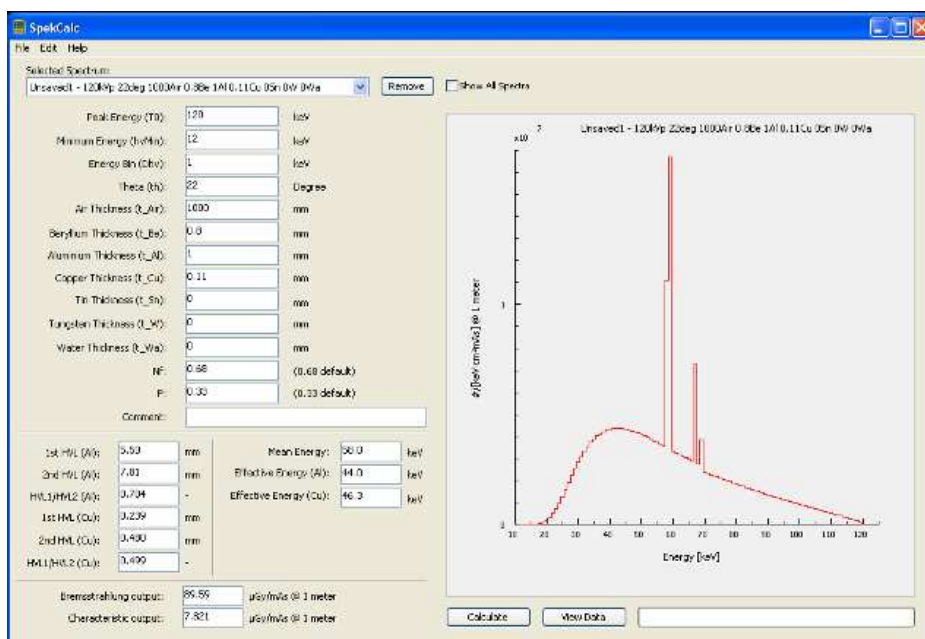
- *Computation of Bremsstrahlung X-ray Spectra and Comparison with Spectra Measured with a Ge(Li) Detector*, των R. Birch και M. Marshall [14] και
- *Bremsstrahlung Intensity and Spectrum-Theoretical Deduction and Discussion*, των D. Tan και B. Heaton [15].

3.5.2 Δημιουργία φάσματος ακτίνων-X από προγράμματα που διατίθενται στο διαδίκτυο

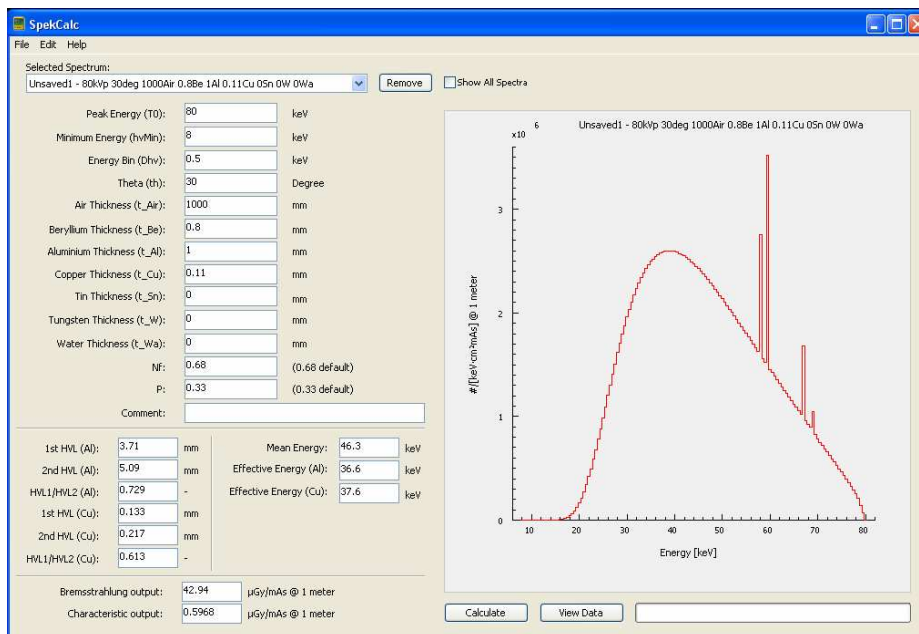
Εκτός από τους κώδικες προσομοίωσης Monte-Carlo, όπως είναι οι κώδικες PENELOPE, FLUKA, EGS4, ITS και ο MCNP4C, οι οποίοι μπορούν να χρησιμοποιηθούν, με κατάλληλο προγραμματισμό και σχεδιασμό της κατάλληλης γεωμετρίας, για τη δημιουργία φασμάτων από μηχανές ακτίνων-X, διατίθενται σήμερα στο διαδίκτυο και προγράμματα τα οποία μπορούν να χρησιμοποιηθούν απευθείας από το χρήστη για τη δημιουργία φασμάτων ακτίνων-X. Τα προγράμματα αυτά βασίζονται:

- Είτε σε μεγάλο όγκο δεδομένα τα οποία έχουν παραχθεί με τη μέθοδο προσομοίωσης Monte-Carlo για διάφορα σενάρια γεωμετρίας και υλικών. Για κάθε σενάριο παράγεται το σχετικό φάσμα ακτίνων-X. Ανάλογα με τις επιλογές του χρήστη ανακαλείται το σχετικό φάσμα ακτίνων-X από βάση δεδομένων.
- Είτε σε ημι-εμπειρικό μοντέλο, όπως αυτό που παρουσιάστηκε προηγουμένως.

Σε κάθε περίπτωση ο χρήστης επιλέγει τις βασικές παραμέτρους της προσομοίωσης, όπως την αρχική ενέργεια φωτονίων, το πάχος και το υλικό των φίλτρων, το υλικό της ανόδου κ.α. Με αυτό τον τρόπο, η δημιουργία του φάσματος, είτε με τη μέθοδο Monte-Carlo, είτε με βάση ημι-εμπειρικά μοντέλα είναι ταχύτερη. Μειονέκτημα των προγραμμάτων αυτών είναι ότι οι επιλογές του χρήστη είναι περιορισμένες. Τα προγράμματα αυτά τις περισσότερες φορές αφορούν στην προσομοίωση μηχανών με άνοδο βολφραμίου, καθώς αυτού του τύπου μηχανές είναι και οι συνηθέστερα χρησιμοποιούμενες. Στα Σχήματα 3.15 και 3.16 παρουσιάζονται φάσματα που έχουν προκύψει με χρήση του λογισμικού SpekCalc 1.0. Το συγκεκριμένο λογισμικό δημιουργίας φάσματος ακτίνων-X διατίθεται χωρίς χρέωση από την ιστοσελίδα http://www.icr.ac.uk/research/research_sections/physics/3544.shtml. Με το συγκεκριμένο πρόγραμμα παράγονται μόνο φάσματα από άνοδο βολφραμίου.



Σχήμα 3.15 Φάσμα μηχανής ακτίνων-X, με άνοδο W και μέγιστη τάση λειτουργίας μηχανής 120kV



Σχήμα 3.16 Φάσμα μηχανής ακτίνων-X, με άνοδο W και μέγιστη τάση λειτουργίας μηχανής 80kV

Περισσότερες πληροφορίες για το πρόγραμμα SpekCalcV 1.0 δίνονται στο αρχείο READ ME.txt, το οποίο παρέχεται στο χρήστη ελεύθερα, μαζί με το πρόγραμμα. Πρέπει να επισημανθεί πάντως ότι δεν βρέθηκαν προγράμματα λογισμικού που να δημιουργούν φάσματα ακτίνων-X από στόχο μολυβδαινίου.

3.6 Σύγκριση φασμάτων ακτίνων-X

Όπως αναφέρθηκε στην §3.4.5 τα φάσματα της μηχανής των ακτίνων-X, που δημιουργήθηκαν με την προσομοίωση στο πλαίσιο της παρούσας ΔΕ φαίνονται στα Σχήματα 3.3-3.11. Στο Σχήμα 3.14 δίνεται το φάσμα ακτίνων-X από μηχανή με άνοδο Mo για μέγιστη ενέργεια 30keV με βάσει το ημι-εμπειρικό μοντέλο, το οποίο είναι άμεσα συγκρίσιμο με το φάσμα του Σχήματος 3.8 που προέκυψε από την προσομοίωση Monte-Carlo. Η σύγκριση των δύο φασμάτων οδηγεί στο συμπέρασμα ότι:

- Τα δύο φάσματα είναι όμοια όσον αφορά στη μορφή τους.

- Το προσομοιωμένο φάσμα είναι λεπτομερέστερο. Ένας λόγος γι' αυτό είναι ότι το φάσμα λήφθηκε μέσα στο θάλαμο. Εν αντιθέσει, το ημι-εμπειρικό μοντέλο δημιουργεί το φάσμα αφού οι ακτίνες έχουν διέλθει από το παράθυρο της μηχανής.
- Οι χαρακτηριστικές ακτίνες-X, του Mo, K_{α} (17.4keV) και K_{β} (19.6keV), καταγράφονται στα φάσματα και των δύο περιπτώσεων.
- Η μορφή του συνεχούς φάσματος, που οφείλεται στην ακτινοβολία πέδησης, είναι συγκρίσιμη στα φάσματα και των δύο περιπτώσεων. Οι μικρές διαφορές που παρουσιάζουν θα πρέπει να αποδίδονται είτε σε απλοποιήσεις του ημι-εμπειρικού μοντέλου είτε στις επιλογές των παραμέτρων EABS (cut-off energies) του αρχείου εισόδου της προσομοίωσης, δηλαδή των ενεργειών αποκοπής ηλεκτρονίων & φωτονίων.

Εν κατακλείδι, τα φάσματα που δημιουργούνται μέσω προσομοίωσης με τον κώδικα PENELOPE, φαίνεται να προσεγγίζουν σε πολύ μεγάλο βαθμό, τόσο τα πραγματικά φάσματα, όπως αυτά δίνονται στη βιβλιογραφία (Σχήμα 3.3), όσο και το φάσμα που προκύπτει βάσει του ημι-εμπειρικού μοντέλου. Αυτά τα φάσματα προσομοίωσης είναι αυτά που θα χρησιμοποιηθούν στη συνέχεια της εργασίας, προκειμένου να προσδιορισθούν τα φάσματα φθορισμού της διάταξης XRF του ΕΠΤ-ΕΜΠ.

ΠΙΝΑΚΕΣ ΚΑΙ ΣΧΗΜΑΤΑ ΚΕΦΑΛΑΙΟΥ 3

Πίνακας 3.1. Πρότυπο αρχείο εισόδου *.in

	TITLE	Title of the job, up to 120 characters.
	>>>>>>>	Source definition.
SKPAR	KPARP	[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]
SDIREC	STHETA,SPHI	[Beam axis direction angles, in deg]
SAPERT	SALPHA	[Beam aperture, in deg]
	>>>>>>>	Input phase-space file (psf).
IPSFN	psf_filename.ext	[Input psf name, 20 characters]
IPSPLI	NSPLIT	[Splitting number]
EPMAX	EPMAX	[Maximum energy of particles in the psf]
	>>>>>>>	Material data and simulation parameters.
NMAT	NMAT	[Number of different materials, .le.10]
SIMPAR	M,EABS(1:3,M),C1,C2,WCC,WCR	[Sim. parameters for material M]
PFNAME	mat_filename.ext	[Material definition file, 20 chars]
	>>>>>>>	Geometry definition file.
GEOMFN	geo_filename.ext	[Geometry definition file, 20 chars]
DSMAX	IBODY,DSMAX(IBODY)	[IB, maximum step length (cm) in body IB]
	>>>>>>>	Interaction forcing.
IFORCE	KB,KPAR,ICOL,FORCER,WLOW,WHIG	[Interaction forcing]
	>>>>>>>	Emerging particles. Energy and angular distributions.
NBE	EMIN,EMAX,NBE	[E-interval and no. of energy bins]
NBTH	NBTH	[No. of bins for the polar angle THETA]
NBPH	NBPH	[No. of bins for the azimuthal angle PHI]
	>>>>>>>	Impact detectors (up to 5 different detectors).
IMPDET	EDIL,EDIU,NCHI,IPSF	[Energy window, no. of channels and IPSF]
IDPSF	pm_psf_impdet_#.dat	[Output psf file name, 20 chars]
IDSPC	pm_spc_impdet_#.dat	[Output 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 5).
ENDDDET	EDEL,EDEU,NCHE	[Energy window and number of channels]
EDSPC	pm_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 enclosure vertices]
GRIDY	YL,YU	[Y coordinates of the enclosure vertices]
GRIDZ	ZL,ZU	[Z coordinates of the enclosure vertices]
GRIDBN	NX,NY,NZ	[Numbers of bins]
	>>>>>>>	Job properties.
RESUME	dumpfile_1.dat	[Resume from this dump file, 20 chars]
DUMPTO	dumpfile_2.dat	[Generate this dump file, 20 chars]
DUMPP	DUMPP	[Dumping period, in sec]
NSIMSH	DSHN	[Desired number of simulated showers]

Πίνακας 3.2. Παράμετροι του Προτύπου Αρχείου Εισόδου του κώδικα PENMAIN

Σημειώνεται ότι οι παράμετροι που καθορίζουν την ενέργεια των σωματιδίων ή των φωτονίων έχουν μονάδα μέτρησης το eV, οι παράμετροι που καθορίζουν το χρόνο το second και τέλος οι παράμετροι που αφορούν μήκος το cm.

TITLE:	ορίζει τον τίτλο της εκάστοτε εργασίας (μπορεί να περιέχει αριθμούς και γράμματα, έως 120 χαρακτήρες).
>>>>>>>> Ορισμός πηγής (source definition)	
SKPAR:	ορίζει το είδος της πρωτεύουσας ακτινοβολίας (1 για ηλεκτρόνια, 2 για φωτόνια και 3 για ποζιτρόνια)
SENERG:	για μονοενεργειακή πηγή, ορίζει την ενέργεια των σωματιδίων ή φωτονίων
SPECTR:	για πηγή με συνεχές ή διακριτό φάσμα, ορίζει το φάσμα ενεργειών μέσω δύο μεταβλητών, των E_i και P_i . Η πρώτη ορίζει την ενέργεια της ακτινοβολίας και συγκεκριμένα το κάτω όριο του ενεργειακού καναλιού και η δεύτερη την πιθανότητα P_i εκπομπής σωματιδίου με ενέργεια στο κανάλι $[E_i, E_{i+1}]$. Μπορούν να εισαχθούν έως και 200 γραμμές SPECTR. Το ανώτερο όριο του φάσματος έχει ενέργεια ίση με τη μεγαλύτερη ενέργεια του φάσματος και πιθανότητα με αρνητική τιμή.
SPOSIT:	ορίζει τις συντεταγμένες της σημειακής πηγής σε καρτεσιανό σύστημα
SDIREC:	ορίζει την πολική και την αζιμουθιακή γωνία (σε μοίρες) των αξόνων κατεύθυνσης της δέσμης
SAPERT:	ορίζει την ημιγωνία (σε μοίρες) ανοίγματος της δέσμης. Δηλαδή εάν η μεταβλητή SALPHA λάβει την τιμή 90° αυτό σημαίνει πως η γωνία ανοίγματος είναι 180° .
>>>>>>>> Εισαγωγή αρχείου psf (Input phase-space file)	
Με το αρχείο psf ορίζονται οι αρχικές μεταβλητές κατάστασης της εκπεμπόμενης ακτινοβολίας. Όταν υπάρχει αυτή η σειρά εντολών, οι εντολές ορισμού της πηγής αγνοούνται.	
IPSFN:	ζητάει το όνομα του αρχείου εισόδου psf. Το όνομα μπορεί να περιέχει έως και 20 χαρακτήρες και να διαβαστούν έως και 100 τέτοια αρχεία, με τη σειρά που έχουν τοποθετηθεί. Το αρχείο psf είναι γραμμένο ASCII μορφή, περιέχοντας πληροφορίες για την αρχική κατάσταση της ακτινοβολίας και τον καθορισμό της πηγής όπως αναφέρθηκαν παραπάνω. Υπάρχουν επίσης και επιπλέον πληροφορίες όπως τα συνημίτονα κατεύθυνσης (U, V, W), το βάρος των σωματιδίων (WGHT), κάποιες μεταβλητές διόρθωσης και τη μεταβλητή NSHI, δηλαδή τη μεταβλητή αυξανόμενης ιστορίας σωματιδίου ή φωτονίου. Η μεταβλητή αυτή αντιπροσωπεύει τη διαφορά του αριθμού των ιστοριών του παρόντος σωματιδίου ή φωτονίου με τον αριθμό των ιστοριών του προηγούμενου στο psf αρχείο.
IPSPLI:	αριθμός διαχωρισμού. Κάθε σωματίδιο στο psf αρχείο χωρίζεται σε NSPLIT σωματίδια βάρους WGHT/NSPLIT.

Πίνακας 3.2 (συνέχεια). Παράμετροι του Προτύπου Αρχείου Εισόδου του κώδικα PENMAIN

EPMAX:	ορίζει τη μέγιστη ενέργεια της ακτινοβολίας στο psf αρχείο. Η ενέργεια αυτή αποτελεί το άνω όριο στο ενεργειακό διάστημα των πινάκων της προσομοίωσης. Για να περιορισθούν τα λάθη λόγω γραμμικής παρεμβολής, η μεταβλητή EPMAX δεν πρέπει να παίρνει τιμές κατά πολύ μεγαλύτερες από τη μέγιστη ενέργεια που όντως εμφανίζεται στην προσομοίωση. Αν ο κώδικας βρει ένα σωματίδιο ή φωτόνιο με ενέργεια μεγαλύτερη της EPMAX τότε σταματάει η προσομοίωση.
	>>>>>>> <i>Δεδομένα υλικού και παράμετροι της προσομοίωσης (Material data and simulations parameters)</i>
NMAT_:	ορίζει τον αριθμό των διαφορετικών υλικών. Το πρόγραμμα επιτρέπει τη χρήση έως και 10 διαφορετικών υλικών, εκτός και αν αλλαχθεί η μεταβλητή MAXMAT στον πηγαίο κώδικα.
SIMPAR:	ορίζει μία σειρά από παραμέτρους προσομοίωσης στο M υλικό. Οι παράμετροι EABS(1:3, M) ορίζουν τις ενέργειες απορρόφησης για τα 3 είδη ακτινοβολίας (ηλεκτρόνια, φωτόνια και ποζιτρόνια), οι παράμετροι C1(M), C2(M) αφορούν στις ελαστικές σκεδάσεις και οι παράμετροι WCC(M) και WCR(M) είναι οι ενέργειες αποκοπής (cut-off energies) για τις μη ελαστικές σκεδάσεις και την ακτινοβολία πέδησης αντίστοιχα. Στο εγχειρίδιο του κώδικα PENELOPE συνίστανται οι παρακάτω τιμές: <ul style="list-style-type: none"> • EABS(1,M)=EABS(3,M)=0.01*EPMAX • EABS(2,M)=0.001*EPMAX • C1(M)=C2(M)=0.1 • WCC=EABS(1,M) • WCR=EABS(2,M)
PFNAME:	το όνομα του αρχείου υλικού (επιτρέπεται να έχει έως και 20 χαρακτήρες)
	>>>>>>> <i>Προσδιορισμός αρχείου γεωμετρίας (Geometry definition file)</i>
GEOMFN :	το όνομα του αρχείου γεωμετρίας (επιτρέπεται να έχει έως 20 χαρακτήρες).
DSMAX:	ορίζει το μέγιστο επιτρεπτό βήμα μήκους των ηλεκτρονίων ή των ποζιτρονίων στο σώμα γεωμετρίας IB. Η παράμετρος αυτή είναι σημαντική για λεπτά σώματα καθώς εξασφαλίζει τη διαδρομή τουλάχιστον 20 σωματιδίων στο σώμα. Συνίσταται να λαμβάνει την τιμή του ενός δέκατου του πάχους το σώματος ή λιγότερο.

Πίνακας 3.2 (συνέχεια). Παράμετροι του Προτύπου Αρχείου Εισόδου του κώδικα PENMAIN

<i>>>>>>>>> Εξαναγκασμένη αλληλεπίδραση (Interaction forcing)</i>	
IFORCE:	ενεργοποιεί αλληλεπίδραση τύπου ICOL από σωματίδια ή φωτόνια KPAR μέσα στο σώμα KB. Ο παράγοντας εξαναγκασμού FORCER πρέπει να είναι μεγαλύτερος της μονάδας όταν εφαρμόζεται η εξαναγκασμένη αλληλεπίδραση. Αν η παράμετρος αυτή λάβει αρνητική τιμή (-FN) τότε το σωματίδιο ή το φωτόνιο θα πρέπει να αλληλεπιδρά περίπου +FN φορές σε ένα μήκος διαδρομής ίσο με την εμβέλεια του σωματιδίου ή φωτονίου ενέργειας EPMAX, κάτι πολύ χρήσιμο για τη δημιουργία φάσματος ακτίνων-X από ακατέργαστο δείγμα. Οι παράμετροι WLOW και WHIG είναι το κάτω και άνω όριο αντίστοιχα του παράγοντα βαρύτητας, όταν πραγματοποιείται εξαναγκασμένη αλληλεπίδραση. Προσοχή: ο επηρεασμός της απόδοσης της προσομοίωσης είναι δύσκολο να προβλεφθεί και για αυτό χρειάζονται κάποιες δοκιμαστικές προσομοιώσεις με διαφορετικές τιμές FORCER.
<i>>>>>>>>> Ενεργειακή και γωνιακή κατανομή των εκπεμπόμενων σωματιδίων/φωτονίων (Energy and angular distribution of emerging particles)</i>	
NBE:	ορίζει το κάτω και το άνω όριο EMIN και EMAX αντίστοιχα, της ενέργειας των εξερχόμενων από πλάκα φωτονίων ή σωματιδίων που θα καταγράφεται.. Η παράμετρος NBE καθορίζει τον αριθμό των καναλιών στα οποία διαιρείται η περιοχή EMIN έως EMAX
NBTH:	ορίζει τον αριθμό των καναλιών που καταγράφεται η πολική γωνία εξόδου (THETA) των σωματιδίων από την πλάκα NBPH: ορίζει τον αριθμό των καναλιών που καταγράφεται η αζιμουθιακή γωνία εξόδου (PHI) των σωματιδίων από την πλάκα
<i>>>>>>>>> Εικονικός ανιχνευτής αλληλεπίδρασης (Impact detector)</i>	
IMPDET:	ορίζει τον ανιχνευτή αλληλεπίδρασης. Υπάρχει δυνατότητα ορισμού έως και 5 τέτοιων ανιχνευτών. Συγκεκριμένα οι παράμετροι EDIL και EDIU καθορίζουν το κάτω και το άνω όριο του παράθυρου της ενέργειας που ανιχνεύεται, η παράμετρος NCHI καθορίζει τον αριθμό των καναλιών που διαμερίζεται η ενεργειακή περιοχή του ανιχνευτή, ο αριθμός των οποίων μπορεί να είναι έως και 1000 και η παράμετρος IPSF καθαρίζει τη δημιουργία ή όχι αρχείου psf. Η παράμετρος IPSF μπορεί να πάρει τις τιμές 0, όπου το αρχείο δεν δημιουργείται, 1 όπου το αρχείο δημιουργείται και επιπλέον
IDPSF:	καθορίζει το όνομα του psf αρχείου(το όνομα δεν πρέπει να ξεπερνά τους 20 χαρακτήρες) τα σωματίδια ή φωτόνια που μπαίνουν στον ανιχνευτή συνεχίζουν κανονικά τη διάδοσή τους και τέλος την τιμή -1, όπου το αρχείο psf δημιουργείται αλλά η προσομοίωση της εισερχόμενης ακτινοβολίας σταματάει όταν αυτή διέλθει στο σώμα του ανιχνευτή.

Πίνακας 3.2 (συνέχεια). Παράμετροι του Προτύπου Αρχείου Εισόδου του κώδικα PENMAIN

IDSPC:	καθορίζει το όνομα του αρχείου εξόδου, που περιέχει το ενεργειακό φάσμα του ανιχνευτή. Καθορισμένο όνομα από το πρόγραμμα είναι το <i>pm_spc_impdet_#.dat</i> , όπου # αντιπροσωπεύει τον αύξοντα αριθμό των ανιχνευτών.
IDBODY:	ορίζει πιο σώμα της γεωμετρίας θα αντιπροσωπεύει τον ανιχνευτή
IDKPAR:	καθορίζει τον τύπο σωματιδίων που θα ανιχνεύονται στον ανιχνευτή, λαμβάνοντας τις τιμές 1, 2 ή 3 για ηλεκτρόνια, φωτόνια ή ποζιτρόνια αντίστοιχα.
>>>>>>> <i>Εικονικός ανιχνευτής αποτιθέμενης ενέργειας (Energy deposition detector)</i>	
ENDDET:	ορίζει τον ανιχνευτή αλληλεπίδρασης. Μπορούν να ορισθούν έως και 5 διαφορετικοί ανιχνευτές. Οι παράμετροι EDEL και EDEU καθορίζουν το κάτω και το άνω όριο αντίστοιχα του ενεργειακού εύρους του ανιχνευτή. Η παράμετρος NCHE καθορίζει τον αριθμό των καναλιών του ανιχνευτή, όπου ο αριθμός τους μπορεί να φτάσει και τα 1000.
EDSPC:	καθορίζει το όνομα του αρχείου εξόδου, στο οποίο καταγράφεται το ενεργειακό φάσμα του ανιχνευτή. Καθορισμένο όνομα από το πρόγραμμα είναι το <i>pm_spc_enddet_#.dat</i> , όπου # αντιπροσωπεύει τον αύξοντα αριθμό των ανιχνευτών.
EDBODY :	ορίζει το σώμα της γεωμετρίας που θα αποτελέσει το ενεργό σώμα του ανιχνευτή.
>>>>>>> <i>Εικονικός ανιχνευτής δόσης (Dose distribution)</i>	
GRIDX:	ορίζει τις συντεταγμένες του πλέγματος στον άξονα X, μέσω των μεταβλητών XL, XU
GRIDY:	ορίζει τις συντεταγμένες του πλέγματος στον άξονα Y, μέσω των μεταβλητών με τις μεταβλητές YL, YU
GRIDZ:	ορίζει τις συντεταγμένες του πλέγματος στον άξονα Z, μέσω των μεταβλητών ZL, ZU
GRIDBN:	ορίζει την πυκνότητα του πλέγματος, δηλαδή τα επίπεδα στα οποία θα διαιρεθεί ο ανιχνευτής κατά X, Y, Z, δια μέσω των παραμέτρων NX, NY και NZ.
>>>>>>> <i>Χαρακτηριστικές ιδιότητες προσομοίωσης (job properties)</i>	
RESUME:	η εντολή που δίνεται στο πρόγραμμα για να διαβάσει το αρχείο dump, το οποίο δημιουργείται με την παρακάτω εντολή DUMPTO, ούτως ώστε να συνεχιστεί η προσομοίωση από το σημείο στο οποίο είχε σταματήσει ή μείνει.
DUMPTO :	η εντολή για τη δημιουργία αρχείου dump κατά το τέλος της προσομοίωσης. Αυτό επιτρέπει τη συνέχισή της, εάν επιθυμείται η βελτίωση των αποτελεσμάτων της.

Πίνακας 3.2 (συνέχεια). Παράμετροι του Προτύπου Αρχείου Εισόδου του κώδικα PENMAIN

DUMPP:	καθορίζει τη χρονική περίοδο καταγραφής των αποτελεσμάτων της προσομοίωσης στα αρχεία εξόδου και στο αρχείο dump.
NSIMSH:	καθορίζει το πλήθος των ιστοριών που θα προσομοιωθούν.
RSEED:	ορισμός των τιμών εκκίνησης της γεννήτριας τυχαίων αριθμών
TIME:	καθορίζει τον ολικό χρόνο που θα διαρκέσει η προσομοίωση.

Πίνακας 3.3. Το αρχείο γεωμετρίας *tube_spc_v2.geo*

```

XXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXX
Materials: 1.- Molybdenum
           2.- Aluminium
           3.- Beryllium
           4.- Silicon

C
C ****  creation of x-rays
C
000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000
SURFACE ( 1)  Plane Z=0
INDICES=( 0, 0, 0, 1, 0)
Z-SHIFT=( 0.8000000000000000E+00, 0)
OMEGA=( 0.0000000000000000E+01, 0) DEG
THETA=( 1.1000000000000000E+01, 0) DEG
PHI=( 9.0000000000000000E+01, 0) DEG
000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000
SURFACE ( 2)  Plane Z=2.3
INDICES=( 0, 0, 0, 1,-1)
Z-SCALE=( 2.3000000000000000E+00, 0)
Z-SHIFT=( 1.5000000000000000E+00, 0)
000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000
SURFACE ( 3)  Cylinder R=0.4
INDICES=( 1, 1, 0, 0,-1)
X-SCALE=( 0.4000000000000000E-00, 0)
Y-SCALE=( 0.4000000000000000E-00, 0)
Y-SHIFT=(-0.0000000000000000E-00, 0)
000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000
SURFACE ( 4)  Plane Z=-4
INDICES=( 0, 0, 0, 1, 1)
Z-SCALE=( 4.0000000000000000E+00, 0)
000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000
SURFACE ( 5)  Plane Z=4
INDICES=( 0, 0, 0, 1,-1)
Z-SCALE=( 4.0000000000000000E+00, 0)
000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000
SURFACE ( 6)  Cylinder R=1.20
INDICES=( 1, 1, 0, 0,-1)
X-SCALE=( 1.2000000000000000E-00, 0)
Y-SCALE=( 1.2000000000000000E-00, 0)
000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000
SURFACE ( 7)  Cylinder R=1.10
INDICES=( 1, 1, 0, 0,-1)
X-SCALE=( 1.1000000000000000E-00, 0)
Y-SCALE=( 1.1000000000000000E-00, 0)
000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000
SURFACE ( 8)  Plane Z=-3.90
INDICES=( 0, 0, 0, 1, 1)
Z-SCALE=( 3.9000000000000000E+00, 0)
000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000
SURFACE ( 9)  Plane Z=3.90
INDICES=( 0, 0, 0, 1,-1)
Z-SCALE=( 3.9000000000000000E+00, 0)
000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000
SURFACE ( 10) Plane Z=0.0001
INDICES=( 0, 0, 0, 1,-1)
Z-SCALE=( 0.0001000000000000E+00, 0)
000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000
SURFACE ( 11) Plane Z=0.8
INDICES=( 0, 0, 0, 1,-1)
Z-SCALE=( 0.8000000000000000E+00, 0)
000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000
...

```

...
SURFACE (12) Cylinder R=0.5
INDICES=(1, 1, 0, 0,-1)
X-SCALE=(0.5000000000000000E-00, 0)
Y-SCALE=(0.5000000000000000E-00, 0)
00
SURFACE (13) Cylinder R=0.4
INDICES=(1, 1, 0, 0,-1)
X-SCALE=(0.4000000000000000E-00, 0)
Y-SCALE=(0.4000000000000000E-00, 0)
00
SURFACE (14) Plane Z=-6
INDICES=(0, 0, 0, 1, 1)
Z-SCALE=(6.0000000000000000E+00, 0)
00
SURFACE (15) Plane Z=6
INDICES=(0, 0, 0, 1,-1)
Z-SCALE=(6.0000000000000000E+00, 0)
00
SURFACE (16) Cylinder R=1.9
INDICES=(1, 1, 0, 0,-1)
X-SCALE=(1.9000000000000000E-00, 0)
Y-SCALE=(1.9000000000000000E-00, 0)
00
SURFACE (17) Cylinder R=1.8
INDICES=(1, 1, 0, 0,-1)
X-SCALE=(1.8000000000000000E-00, 0)
Y-SCALE=(1.8000000000000000E-00, 0)
00
SURFACE (18) Plane Z=-4.0001
INDICES=(0, 0, 0, 1, 1)
Z-SCALE=(4.0001000000000000E+00, 0)
00
SURFACE (19) Plane Z=4.0001
INDICES=(0, 0, 0, 1,-1)
Z-SCALE=(4.0001000000000000E+00, 0)
00
SURFACE (20) Plane Z=1.1
INDICES=(0, 0, 0, 1,-1)
Z-SCALE=(1.1000000000000000E+00, 0)
OMEGA=(0.0000000000000000E+01, 0) DEG
THETA=(9.0000000000000000E+01, 0) DEG
PHI=(9.0000000000000000E+01, 0) DEG
00
SURFACE (21) Plane Z=1.9
INDICES=(0, 0, 0, 1,-1)
Z-SCALE=(1.9000000000000000E+00, 0)
OMEGA=(0.0000000000000000E+01, 0) DEG
THETA=(9.0000000000000000E+01, 0) DEG
PHI=(9.0000000000000000E+01, 0) DEG
00
SURFACE (22) Cylinder R=1.3
INDICES=(1, 1, 0, 0,-1)
X-SCALE=(1.3000000000000000E-00, 0)
Y-SCALE=(1.3000000000000000E-00, 0)
OMEGA=(0.0000000000000000E+01, 0) DEG
THETA=(9.0000000000000000E+01, 0) DEG
PHI=(9.0000000000000000E+01, 0) DEG
00
SURFACE (23) Plane Z=0.0001
INDICES=(0, 0, 0, 1, 1)
Z-SCALE=(1.0000000000000000E-04, 0)
00
SURFACE (24) Cylinder R=0.4
INDICES=(1, 1, 0, 0,-1)
X-SCALE=(0.4000000000000000E-00, 0)
Y-SCALE=(0.4000000000000000E-00, 0)
00
...

Πίνακας 3.4. Αρχείο εισόδου *spc_inside.in*

```
TITLE Creation of X-ray spectrum inside the tube

>>>>>>> Source definition.
SKPAR 1 [Primary particles: 1=electron, 2=photon, 3=positron]
SENERG 2.5e4 [Initial energy (monoenergetic sources only)]
SPOSIT 0.0 0.0 0.0 [Coordinates of the source]
SDIREC 0.0 0.0 [Beam axis direction angles, in deg]

>>>>>>> Material data and simulation parameters.
NMAT 4 [Number of different materials, .1e.10]
SIMPAR 1 1.0e2 1.0e1 1.0e2 0.1 0.1 5e3 1e3 [M,EABS,C1,C2,WCC,WCR]
SIMPAR 2 1.0e4 1.0e3 1.0e4 0.2 0.2 5e3 1e3 [M,EABS,C1,C2,WCC,WCR]
SIMPAR 3 1.0e3 1.0e2 1.0e3 0.1 0.1 5e3 1e3 [M,EABS,C1,C2,WCC,WCR]
SIMPAR 4 1.0e2 1.0e1 1.0e2 0.2 0.2 5e3 1e3 [M,EABS,C1,C2,WCC,WCR]
PFNAME tube.mat [Material definition file, 20 chars]

>>>>>>> Geometry definition file.
GEOMFN tube_spc_v2.geo [Geometry definition file, 20 chars]

>>>>>>> Impact detectors (up to 5 different detectors).
IMPDET 1e2 6.3e4 256 0 [Energy window, no. of channels and IPSF]
IDBODY 12 [Active body; one line for each active body]
IDKPAR 2 [Kind of detected particles, one line each]

>>>>>>> Job properties
RESUME dump1.dat [Resume from this dump file, 20 chars]
DUMPTO dump1.dat [Generate this dump file, 20 chars]
DUMPP 7200 [Dumping period, in sec]

NSIMSH 2.0e9 [Desired number of simulated showers]
TIME 2.0e9 [Allotted simulation time, in sec]
```

Πίνακας 3.5. Το αρχείο εξόδου penmain.dat

```
*****
** Program PENMAIN. Input data file. **
*****

Date and time: 19th Dec 2010. 16:10:52

X-ray spectrum

-----
>>>>> Source description.
Primary particles: electrons
Initial energy = 2.000000E+04 eV
Coordinates of centre:   SX0 = 0.000000E+00 cm
                        SY0 = 0.000000E+00 cm
                        SZ0 = 0.000000E+00 cm
Beam direction angles:  THETA = 0.000000E+00 deg
                        PHI   = 0.000000E+00 deg
Beam aperture:         ALPHA = 0.000000E+00 deg

-----
>>>>> Material data and simulation parameters.
Number of different materials = 4

**** 1st material
Electron absorption energy = 1.000000E+02 eV
Photon absorption energy = 1.000000E+02 eV
Positron absorption energy = 1.000000E+02 eV
Electron-positron simulation parameters:
  C1 = 1.000000E-01,   C2 = 1.000000E-01
WCC = 5.000000E+03 eV, WCR = 1.000000E+03 eV

**** 2nd material
Electron absorption energy = 1.000000E+04 eV
Photon absorption energy = 1.000000E+03 eV
Positron absorption energy = 1.000000E+04 eV
Electron-positron simulation parameters:
  C1 = 2.000000E-01,   C2 = 2.000000E-01
WCC = 5.000000E+03 eV, WCR = 1.000000E+03 eV

**** 3rd material
Electron absorption energy = 1.000000E+03 eV
Photon absorption energy = 1.000000E+02 eV
Positron absorption energy = 1.000000E+03 eV
Electron-positron simulation parameters:
  C1 = 1.000000E-01,   C2 = 1.000000E-01
WCC = 5.000000E+03 eV, WCR = 1.000000E+03 eV

**** 4th material
Electron absorption energy = 1.000000E+02 eV
Photon absorption energy = 1.000000E+02 eV
Positron absorption energy = 1.000000E+02 eV
Electron-positron simulation parameters:
  C1 = 2.000000E-01,   C2 = 2.000000E-01
WCC = 5.000000E+03 eV, WCR = 1.000000E+03 eV

PENELOPE's material definition file: tube.mat
...

```

```

...
>>> SUMGA. Gauss adaptive-bipartition quadrature.
XL = 3.831186849557E+01, XU = 4.216965034286E+01, TOL = 1.0E-10
NCALLS = 11020, SUMGA = 6.6997893679403E+00, ERR = 9.3E-04
Number of open subintervals = 256
WARNING: the required accuracy has not been attained.

>>> SUMGA. Gauss adaptive-bipartition quadrature.
XL = 1.333521432163E+00, XU = 1.467799267622E+00, TOL = 1.0E-10
NCALLS = 11020, SUMGA = 3.7420419009500E-01, ERR = 9.8E-04
Number of open subintervals = 256
WARNING: the required accuracy has not been attained.

>>> SUMGA. Gauss adaptive-bipartition quadrature.
XL = 1.467799267622E+00, XU = 1.615598098440E+00, TOL = 1.0E-10
NCALLS = 11820, SUMGA = 4.4114806090386E-01, ERR = 7.2E-06
Number of open subintervals = 256
WARNING: the required accuracy has not been attained.

PENGEOM's geometry definition file: tube_spc_v2.geo

-----
>>>>> Maximum allowed step lengths of electrons and positrons.
* Body = 1, DSMAX = 1.000000E+20 cm
* Body = 2, DSMAX = 1.000000E+20 cm
* Body = 3, DSMAX = 1.000000E+20 cm
* Body = 4, DSMAX = 1.000000E+20 cm
* Body = 5, DSMAX = 1.000000E+20 cm
* Body = 6, DSMAX = 1.000000E+20 cm
* Body = 7, DSMAX = 1.000000E+20 cm
* Body = 8, DSMAX = 1.000000E+20 cm
* Body = 9, DSMAX = 1.000000E+20 cm
* Body = 10, DSMAX = 1.000000E+20 cm
* Body = 11, DSMAX = 1.000000E+20 cm
* Body = 12, DSMAX = 1.000000E+20 cm
* Body = 13, DSMAX = 1.000000E+20 cm

-----
>>>>> Energy and angular distributions of emerging particles.
E: NBE = ***, EMIN = 0.000000E+00 eV, EMAX = 2.000000E+04 eV
Theta: NBTH = 90
Phi: NBPH = 60

-----
>>>>> Impact detector # 1
Energy window = ( 1.00000E+02, 6.30000E+04) eV, no. of channels =
256
Output energy spectrum: pm_spc_impdet_1.dat
Active body = 12
Detected particles = photons

-----
>>>>> Job characteristics.
Resume simulation from previous dump file: dump1.dat
Write final counter values on the dump file: dump1.dat
Dumping period: DUMPP = 1.000000E+04

Number of showers to be simulated = 2.000000E+09
Computation time available = 2.000000E+09 sec

-----
Simulation has been resumed from dump file: dump1.dat
...

```

...

** Program PENMAIN. Results. **

Simulation time 1.593977E+05 sec
Simulation speed 7.258589E+02 showers/sec

Simulated primary showers 1.157002E+08

Transmitted primary particles 0.000000E+00
Backscattered primary particles 0.000000E+00
Absorbed primary particles 1.157002E+08

Fractional transmission 0.000000E+00 +- 0.0E+00
Fractional backscattering 0.000000E+00 +- 0.0E+00
Fractional absorption 1.000000E+00 +- 1.8E-12

Secondary-particle generation probabilities:

	electrons	photons	positrons
transmitted	0.000000E+00 +- 0.0E+00	0.000000E+00 +- 0.0E+00	0.000000E+00 +- 0.0E+00
backscattered	0.000000E+00 +- 0.0E+00	0.000000E+00 +- 0.0E+00	0.000000E+00 +- 0.0E+00
absorbed	1.030439E+01 +- 1.9E-03	1.244468E-02 +- 3.1E-05	0.000000E+00 +- 0.0E+00

Average deposited energies (bodies):

Body 1	5.413254E-01 +- 2.3E-02 eV	(effic. = 3.07E-02)
Body 2	1.449074E+04 +- 2.1E+00 eV	(effic. = 2.66E+03)
Body 3	4.571903E+03 +- 2.0E+00 eV	(effic. = 2.99E+02)
Body 4	4.551440E+02 +- 7.2E-01 eV	(effic. = 2.28E+01)
Body 5	3.582953E+00 +- 6.0E-02 eV	(effic. = 2.01E-01)
Body 6	0.000000E+00 +- 0.0E+00 eV	(effic. = 0.00E+00)
Body 7	4.670861E-03 +- 2.4E-03 eV	(effic. = 2.11E-04)
Body 8	2.649889E-04 +- 5.6E-04 eV	(effic. = 1.24E-05)
Body 9	2.006140E+01 +- 1.5E-01 eV	(effic. = 1.02E+00)
Body 10	0.000000E+00 +- 0.0E+00 eV	(effic. = 0.00E+00)
Body 11	1.301354E-01 +- 1.3E-02 eV	(effic. = 5.90E-03)
Body 12	4.578885E+02 +- 7.3E-01 eV	(effic. = 2.22E+01)

Average incoming energies (impact detectors):

Detector # 1	...	1.557829E+00 +- 2.9E-02 eV	(effic. = 1.59E-01)
--------------	-----	----------------------------	---------------------

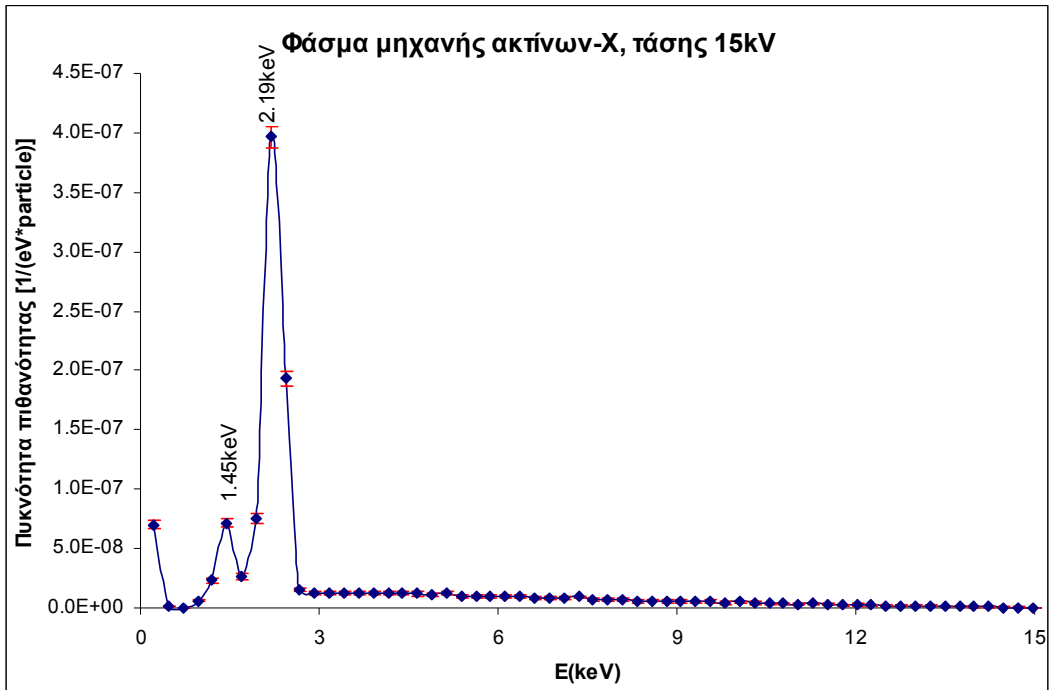
Last random seeds = 1405899397 , 1793951915

--

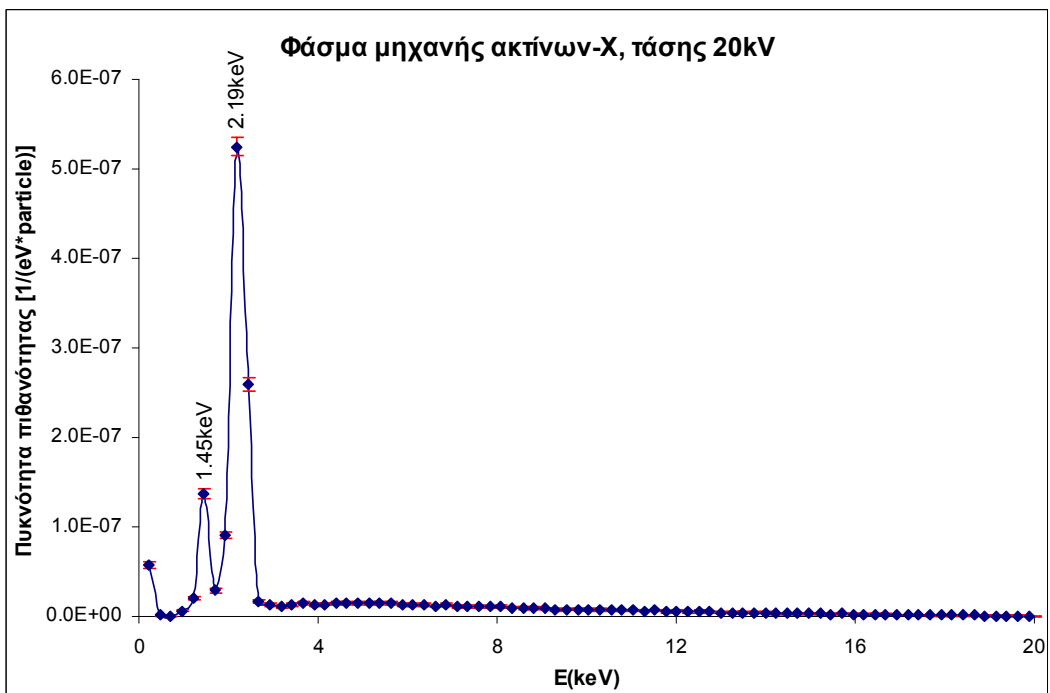
Πίνακας 3.6. Απόσπασμα του αρχείου εξόδου pm_spc_impdet_1.dat

```
# Results from PENMAIN. Output from impact detector # 1
# 1st column: particle energy (ev).
# 2nd column: probability density (1/(ev*particle)).
# 3rd column: statistical uncertainty (3 sigma).

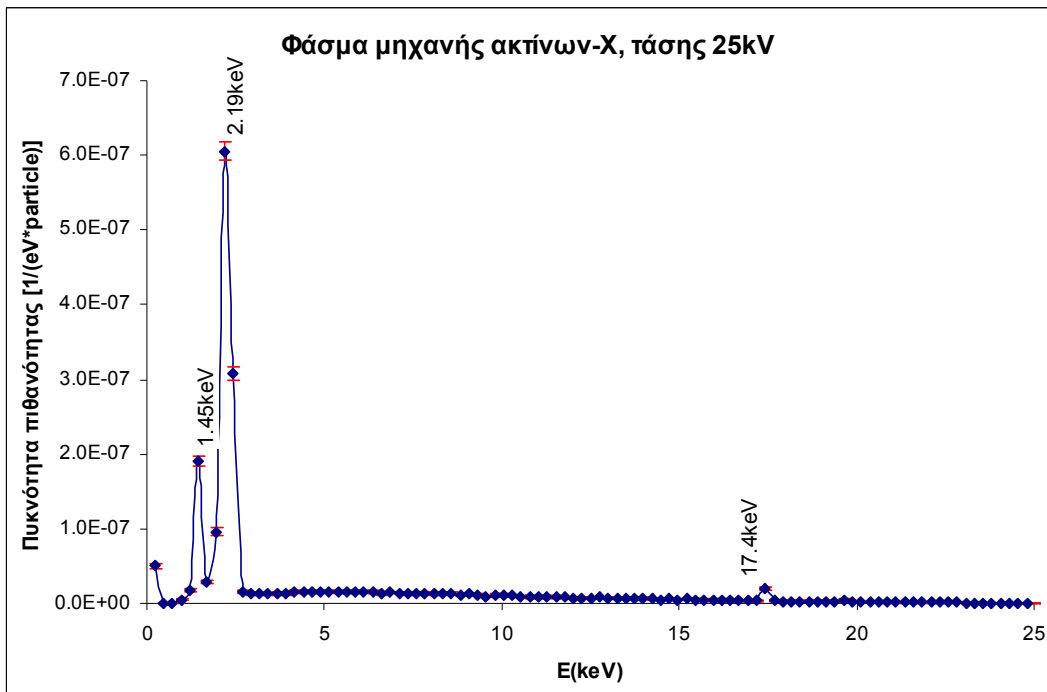
2.228516E+02  1.000000E-35  1.000000E-35
4.685547E+02  1.000000E-35  1.000000E-35
7.142579E+02  1.000000E-35  1.000000E-35
9.599610E+02  1.000000E-35  1.000000E-35
1.205664E+03  8.760686E-08  2.628178E-07
1.451367E+03  1.000000E-35  1.000000E-35
1.697070E+03  1.000000E-35  1.000000E-35
1.942774E+03  8.760686E-08  2.628178E-07
...          ...          ...
```



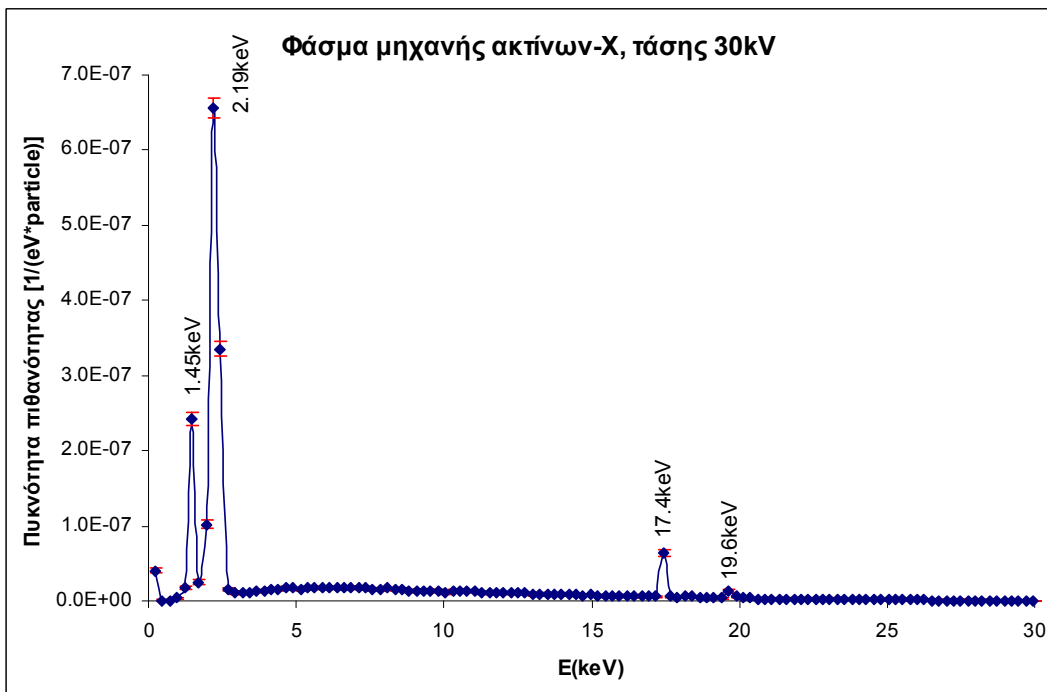
Σχήμα 3.5 Φάσμα ακτίνων-Χ με τη μέθοδο Monte-Carlo ενέργειας 15keV



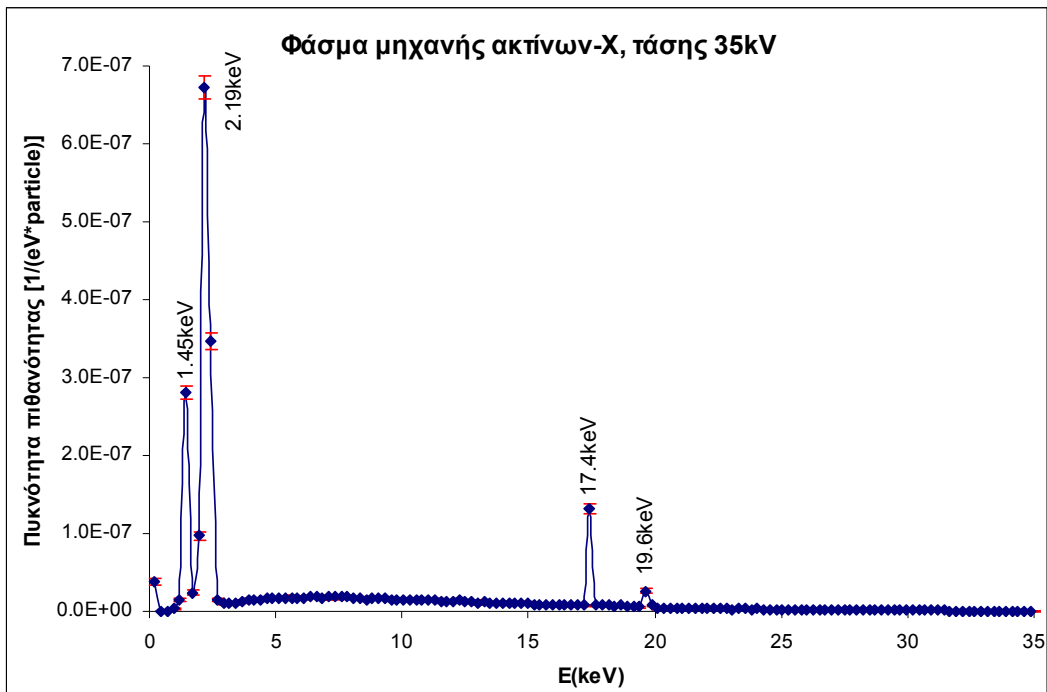
Σχήμα 3.6 Φάσμα ακτίνων-Χ με τη μέθοδο Monte-Carlo ενέργειας 20keV



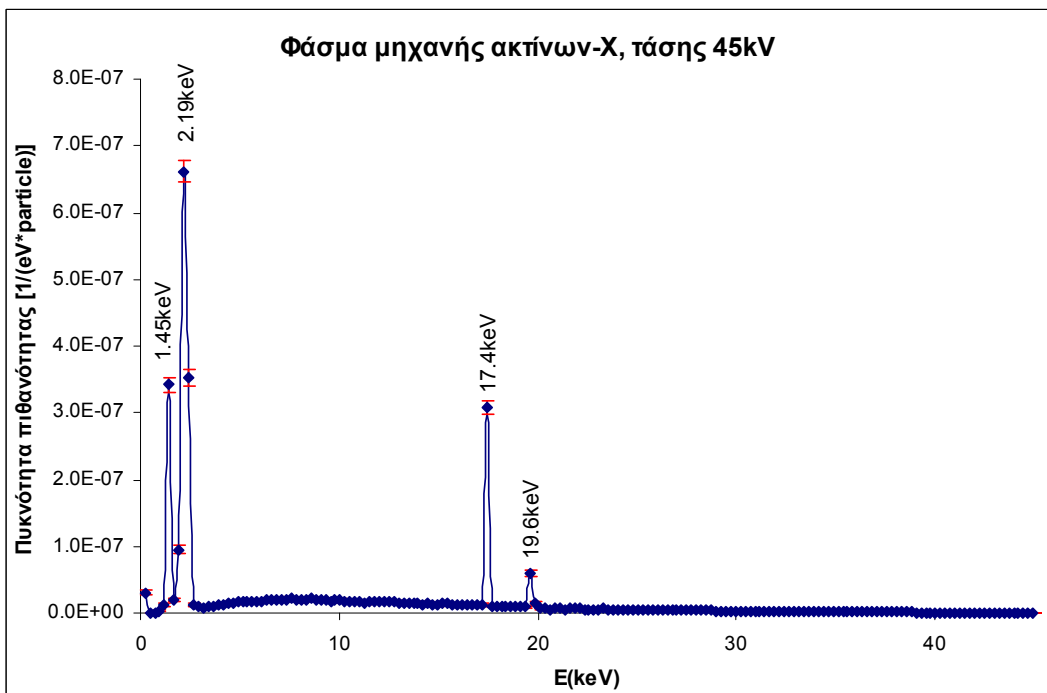
Σχήμα 3.7 Φάσμα ακτίνων-X με τη μέθοδο Monte-Carlo ενέργειας 25keV



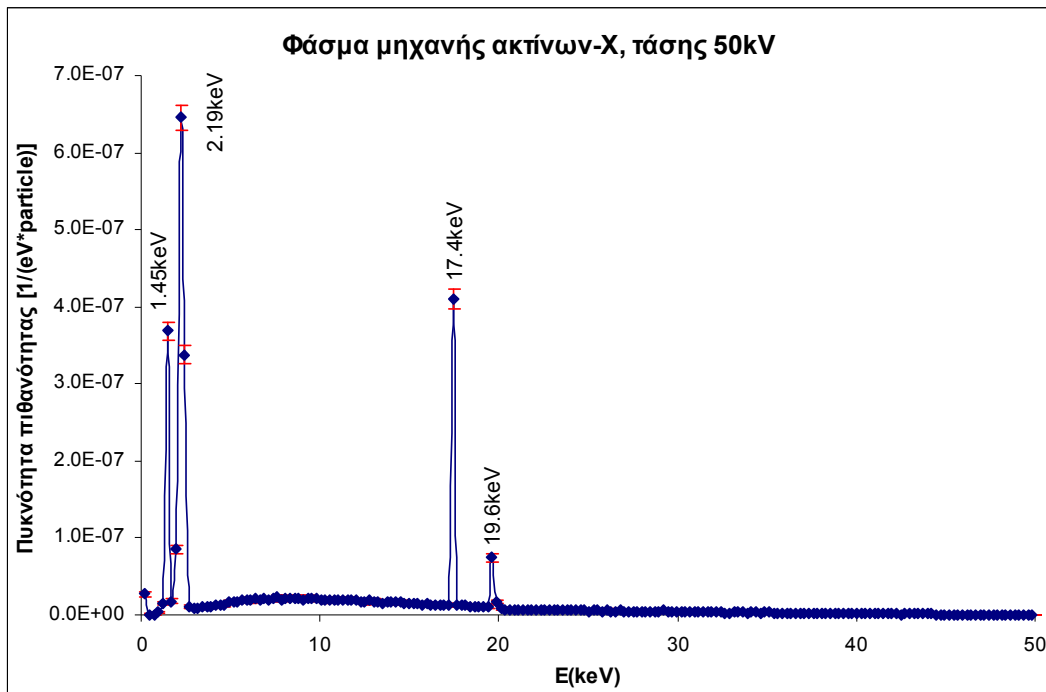
Σχήμα 3.8 Φάσμα ακτίνων-X με τη μέθοδο Monte-Carlo ενέργειας 30keV



Σχήμα 3.9 Φάσμα ακτίνων-Χ με τη μέθοδο Monte-Carlo ενέργειας 35keV



Σχήμα 3.10 Φάσμα ακτίνων-Χ με τη μέθοδο Monte-Carlo ενέργειας 45keV



Σχήμα 3.11 Φάσμα ακτίνων-X με τη μέθοδο Monte-Carlo ενέργειας 50keV

Πίνακας 3.8. Τιμές παραμέτρων α_i για τον υπολογισμό του μαζικού συντελεστή εξασθένισης στα υλικά που ενδιαφέρουν

Material/element	α_1	α_2	α_3	α_4	α_5
Aluminium	1.734E-2	-1.918E-3	3.133E-3	4.457E-4	-9.447E-6
Molybdenum, $E \leq E_k$	3.191E-2	-5.600E-3	1.719E-2	1.212E-4	-7.339E-6
Molybdenum, $E > E_k$	6.467E-3	1.594E-3	8.755E-2	1.544E-2	-2.269E-3
Air	1.447E-2	1.182E-3	1.547E-4	1.367E-4	-2.227E-6
Oil	1.639E-2	1.535E-3	-2.089E-4	8.824E-5	-1.547E-6
Lexan	1.618E-2	9.496E-4	6.199E-7	9.035E-5	-1.453E-6
Pyrex	1.529E-2	-6.603E-5	1.722E-3	3.207E-4	-6.727E-6

Πίνακας 3.9. Τιμές παραμέτρων για τον υπολογισμό του μαζικής ισχύος πέδησης

A_{msp}	B_{msp}	C_{msp}
245.808 keV m ² kg ⁻¹	1415.51 keV m ² kg ⁻¹	4.983·10 ⁻² keV ⁻¹

Πίνακας 3.10. Τιμές παραμέτρων για τον υπολογισμό του συντελεστή B

A_0	A_1
$3.033 \cdot 10^{-2}$ photons/electron	$-7.494 \cdot 10^{-5}$ photons/(electron keV)

B_1	B_2	B_3	B_4
-4.238	7.799	-6.739	2.313

Πίνακας 3.11. Τιμές παραμέτρων για τον υπολογισμό του μοντέλου της χαρακτηριστικής ακτινοβολίας

A_K	n_K
$7.773 \cdot 10^{-4}$ photons/electron	1.613

Πίνακας 3.12. Χαρακτηριστικές ακτίνες-X (K & L) του μολυβδαινίου

K x-ray	Energy (keV)
$K_{\alpha 1}$	17.479
$K_{\alpha 2}$	17.374
$K_{\beta 1}$	19.607
$K_{\beta 2}$	19.965
L x-ray	Energy (keV)
$L_{\alpha 1}$	2.293
$L_{\alpha 2}$	2.290
$L_{\beta 1}$	2.395
$L_{\beta 2}$	2.518
$L_{\gamma 1}$	2.623

Κεφάλαιο 4: Προσομοίωση της διάταξης XRF του ΕΠΤ-ΕΜΠ

4.1 Εισαγωγή

Στο παρόν Κεφάλαιο, παρουσιάζεται η μεθοδολογία που ακολουθήθηκε στα πλαίσια της ΔΕ, προκειμένου να καταστεί δυνατή η προσομοίωση της διάταξης XRF του ΕΠΤ-ΕΜΠ. Αρχικά, σχεδιάζεται όσο ακριβέστερα γίνεται η γεωμετρία της διάταξης. Η όλη μεθοδολογία της προσομοίωσης διαιρείται σε δύο τμήματα. Στο πρώτο τμήμα, το οποίο έχει ήδη παρουσιαστεί σε προηγούμενο Κεφάλαιο (βλ. Κεφάλαιο 3), επιχειρείται η δημιουργία του φάσματος ακτίνων-Χ που παράγεται στη μηχανή. Συγκεκριμένα, παρήχθη μία σειρά από φάσματα, τυπικά για τη μηχανή και για τα σενάρια ακτινοβολίας που χρησιμοποιούνται στο ΕΠΤ-ΕΜΠ. Στο δεύτερο τμήμα της προσομοίωσης - το οποίο παρουσιάζεται στο Κεφάλαιο αυτό - χρησιμοποιούνται τα φάσματα της μηχανής ακτίνων-Χ, ως έξοδος της μηχανής και προσομοιώνεται η ακτινοβολία φθορισμού που εκπέμπεται από ένα δείγμα το οποίο ακτινοβολείται με τα φάσματα αυτά.

Μετά την προσομοίωση ολόκληρης της διάταξης φθορισμού, από τη στιγμή της εκπομπής των ηλεκτρονίων από την κάθοδο της μηχανής, έως την καταγραφή του φάσματος φθορισμού στον ανιχνευτή, ακολουθεί μία εφαρμογή. Ως εφαρμογή επελέγη η διερεύνηση της επίδρασης της γωνίας προσβολής του δείγματος από τη δέσμη των ακτίνων-Χ, στο φάσμα φθορισμού. Η γωνία προσβολής επιδρά, τόσο στην επιφάνεια του δείγματος που προσβάλλεται από την ακτινοβολία της μηχανής, όσο και στο μήκος της διαδρομής που πρέπει να διανύσουν τα φωτόνια φθορισμού που εκπέμπονται μέσα στο δείγμα, κινούμενα με κατεύθυνση προς τον ανιχνευτή. Είναι προφανές από τα παραπάνω, ότι η γωνία προσβολής επιδρά στο πλήθος των φωτονίων φθορισμού που φτάνουν στον ανιχνευτή και στη στατιστική της αντίστοιχης αιχμής που σχηματίζεται.

Τέλος, αφού δημιουργηθεί το αρχείο γεωμετρίας ολόκληρης της διάταξης XRF, πραγματοποιούνται προσομοιώσεις με σκοπό την αύξηση του ρυθμού δημιουργίας ιστοριών, δηλαδή της βελτίωσης της ταχύτητας προσομοίωσης. Αυτό κρίθηκε απαραίτητο καθώς, η

διαδικασία προσομοίωσης αποδείχθηκε ότι ήταν ιδιαίτερα χρονοβόρα. Για το σκοπό αυτό χρησιμοποιούνται αρχεία εισόδου στα οποία διαφέρουν οι ενέργειες αποκοπής (cut-off energies) στα επιμέρους υλικά της γεωμετρίας.

4.2 Σχεδιασμός της προσομοίωσης της τεχνικής XRF με τη μέθοδο Monte-Carlo

Η παρούσα ΔΕ έχει ως απώτερο στόχο την προσομοίωση της τεχνικής XRF, όπως αυτή πραγματοποιείται στο ΕΠΤ-ΕΜΠ. Η τεχνική XRF είναι μία πολύ ακριβής και γρήγορη μέθοδος ποιοτικού και ποσοτικού προσδιορισμού ιχνοστοιχείων σε ένα δείγμα. Προκειμένου να υλοποιηθεί η προσομοίωσή της απαιτείται πολύς υπολογιστικός χρόνος, καθώς μία μηχανή ακτίνων-Χ έχει πολύ χαμηλό βαθμό απόδοσης. Συγκεκριμένα, ένα πολύ μικρό ποσοστό της ενέργειας των ηλεκτρονίων που κινούνται από την άνοδο προς την κάθοδο μετατρέπεται σε ενέργεια ακτίνων-Χ, ενώ τα συντριπτικά μεγαλύτερο ποσοστό μετατρέπεται τελικά σε θερμική ενέργεια. Σε όρους σωματιδίων αυτό σημαίνει ότι απαιτείται να προσομοιωθεί τεράστιο πλήθος ηλεκτρονίων, προκειμένου να καταγραφούν τελικά στο φάσμα φθορισμού μερικές χαρακτηριστικές ακτίνες-Χ φθορισμού του υλικού του δείγματος. Ενδεικτικά αναφέρεται ότι, για τη διάταξη XRF του ΕΠΤ-ΕΜΠ, με ρεύμα ηλεκτρονίων της μηχανής 200 μA ($12.5 \cdot 10^{14}$ ηλεκτρόνια/sec) ο ρυθμός καταγραφής ακτίνων-Χ στο φάσμα φθορισμού είναι της τάξης των μερικών δεκάδων ή λίγων εκατοντάδων cps (counts per second). Επομένως, απαιτείται η προσομοίωση τεράστιου πλήθους ιστοριών ηλεκτρονίων προκειμένου να δημιουργηθεί στον ανιχνευτή ένα φάσμα φθορίζουσας ακτινοβολίας, με αποδεκτή στατιστική. Στα πλαίσια της ΔΕ αποφασίσθηκε η προσομοίωση της τεχνικής XRF να διαιρεθεί σε δύο, ανεξάρτητα μεταξύ τους, τμήματα:

- Η δημιουργία του φάσματος των ακτίνων-Χ της πηγής
- Η δημιουργία φάσματος της φθορίζουσας ακτινοβολίας

Το πρώτο τμήμα περατώθηκε στο πλαίσιο του 3^{ου} Κεφαλαίου της ΔΕ, και έτσι δημιουργήθηκαν 8 διαφορετικά φάσματα μηχανής ακτίνων-Χ, για τάση λειτουργίας 15, 20,

25, 30, 35, 40, 45 και 50 kV αντίστοιχα. Υπενθυμίζεται πως οι παραπάνω τιμές επελέγησαν να αντιστοιχούν στις συνήθως χρησιμοποιούμενες τιμές της τάσης στη διάταξη XRF του ΕΠΤ-ΕΜΠ.

Το δεύτερο τμήμα περατώνεται στο 4^ο και το 5^ο Κεφάλαιο. Κατά το δεύτερο τμήμα της προσομοίωσης, θεωρείται σημειακή πηγή ακτίνων-X, η οποία βρίσκεται μέσα στη μηχανή ακτίνων-X, και συγκεκριμένα στη θέση στην οποία ήταν τοποθετημένος ο ανιχνευτής αλληλεπίδρασης του πρώτου τμήματος (βλ. §3.4), δηλαδή πίσω από το παράθυρο βηρυλλίου της μηχανής. Η σημειακή αυτή πηγή εκπέμπει ένα από τα φάσματα ακτίνων-X που προηγουμένως δημιουργήθηκαν, με καθορισμένη γωνία εκπομπής (που αντιστοιχεί στη γωνία εξόδου της μηχανής). Με τον τρόπο αυτό αποφεύγεται η επανάληψη κάθε φορά του πολύ χρονοβόρου τμήματος της προσομοίωσης που είναι η παραγωγή της ακτινοβολίας-X από την αλληλεπίδραση των ηλεκτρονίων με την άνοδο¹³. Στη συνέχεια, θεωρείται ότι η ακτίνες-X διέρχονται από το παράθυρο βηρυλλίου της μηχανής, εν συνεχεία από τον κατευθυντή δέσμης (collimator) και προσπίπτει πάνω στο δείγμα που έχει τοποθετηθεί σε ορισμένη απόσταση και υπό συγκεκριμένη γωνία κλήσης με τον άξονα της δέσμης ακτίνων-X. Η ακτινοβολία φθορισμού του δείγματος, αλλά και η σκεδαζόμενη στο δείγμα ακτινοβολία καταγράφεται τελικά από τον ανιχνευτή της διάταξης. Τονίζεται, πως κατά την προσομοίωση έγινε προσπάθεια ώστε όλες οι διαστάσεις και οι αποστάσεις να ληφθούν κατά το δυνατόν ίσες προς τις αντίστοιχες της διάταξης XRF του ΕΠΤ-ΕΜΠ, οι οποίες δίνονται στην παράγραφο 2.9. Σε όσες περιπτώσεις, στη συνέχεια της ΔΕ, δεν χρησιμοποιήθηκαν οι πραγματικές διατάξεις της διάταξης, αυτό θα αναφέρεται ρητά. Πρέπει να σημειωθεί πως για λόγους ευκολίας, η γεωμετρία που σχεδιάστηκε για να προσομοιώνει την πραγματική διάταξη XRF, είναι στραμμένη κατά 90°, σε σχέση με την πραγματική.

Αρχικά, και πριν την έναρξη των προσομοιώσεων του δεύτερου τμήματος της διάταξης XRF, πραγματοποιούνται ορισμένες δοκιμαστικές προσομοιώσεις για τη διερεύνηση της επίδρασης διαφόρων παραμέτρων της προσομοίωσης στην ταχύτητα της προσομοίωσης, με

¹³ Η προσέγγιση αυτή βασίζεται στην παραδοχή ότι το ενεργειακό φάσμα των ακτίνων-X είναι ανεξάρτητο της γωνίας που εκπέμπονται τα φωτόνια από την άνοδο μέσα στον κώνο των ακτίνων-X, κάτι που δεν είναι απόλυτα ακριβές.

στόχο την επίτευξη όσο το δυνατόν υψηλότερης ταχύτητας προσομοίωσης, χωρίς έκπτωση στην ακρίβεια. Συγκεκριμένα διερευνήθηκαν οι παρακάτω παράμετροι:

- Η γωνία εξόδου της δέσμης των ακτίνων-X από τη μηχανή ακτίνων-X. Προκειμένου να επιτευχθεί βελτίωση της ταχύτητας της προσομοίωσης, θα πρέπει να περιορισθεί κατά το δυνατόν η προσομοίωση των ακτίνων-X οι οποίες δεν είναι δυνατόν να συμβάλουν στη δημιουργία φάσματος φθορισμού.
- Επιλογή των ενεργειών αποκοπής (cut-off energy) της προσομοίωσης. Η ενέργεια αποκοπής φωτονίων & ηλεκτρονίων έχει καθοριστικό ρόλο στην ταχύτητα προσομοίωσης [20].

4.3 Επιλογή της γωνίας εξόδου της δέσμης

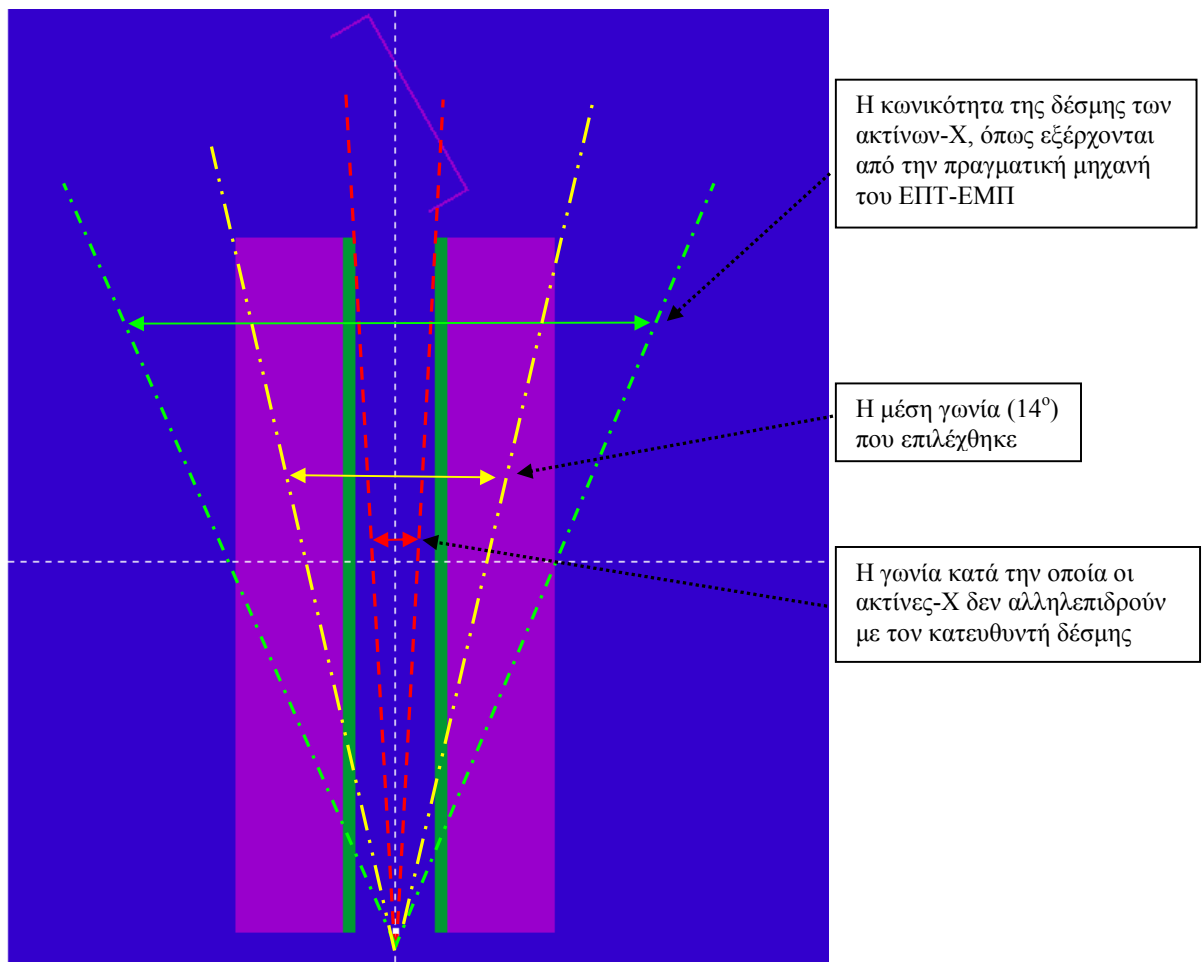
Όπως περιγράφεται στην παράγραφο 2.10.1 η γωνία εξόδου της δέσμης ακτίνων-X από τη μηχανή, όπως δίδεται από τον κατασκευαστή είναι 22° . Στην έξοδο της μηχανής χρησιμοποιείται κατευθυντής δέσμης (§2.10.3), με σκοπό τον περιορισμό της κωνικότητας της δέσμης που προσπίπτει στο προς ανάλυση δείγμα. Στο Σχήμα 4.1 φαίνεται το τμήμα της διάταξης XRF του ΕΠΤ-ΕΜΠ που περιλαμβάνει τον κατευθυντή δέσμης και το δείγμα. Είναι προφανές ότι ο κατευθυντής δέσμης περιορίζει δραστικά το πλήθος των φωτονίων τα οποία φτάνουν τελικά στο δείγμα, μέσα σε μία πολύ μικρότερη γωνία. Το ερώτημα που τίθεται είναι: Αξίζει τον κόπο να προσομοιώνονται φωτόνια μέσα σε μία στερεά γωνία 22° , όταν ένα μεγάλο ποσοστό τους δεν θα φτάσει ποτέ στο δείγμα, ή μήπως είναι καλύτερο να προσομοιώνονται φωτόνια σε μία μικρότερη στερεά γωνία, κάτι το οποίο θα επιταχύνει την προσομοίωση; Ένα συναφές ερώτημα που προκύπτει είναι: Επιδρά η στερεά γωνία μέσα στην οποία επιλέγεται να γίνεται η εκπομπή των φωτονίων στο φάσμα των ακτίνων-X που φτάνουν στο δείγμα, λόγω των σκεδάσεων που γίνονται μέσα στον κατευθυντή δέσμης; Αν δηλαδή χρησιμοποιηθεί μικρότερη από 22° στερεά γωνία, για λόγους επιτάχυνσης, το φάσμα της ακτινοβολίας-X που φτάνει στο δείγμα θα είναι αντίστοιχο με το φάσμα για στερεά γωνία, που πραγματικά εκπέμπει η πηγή;

Οι προσομοιώσεις που πραγματοποιούνται στην παρούσα παράγραφο έχουν ως στόχο την εκλογή μικρότερης της πραγματικής γωνίας εξόδου, ούτως ώστε να βελτιωθεί σημαντικά η στατιστική του φάσματος που φτάνει στο δείγμα χωρίς να υποστεί αλλοίωση η μορφή του. Συγκεκριμένα, ελέγχθηκαν οι παρακάτω γωνίες:

- γωνία 22°. Πρόκειται για την πραγματική γωνία εξόδου της μηχανής ακτίνων-X που προσομοιώνεται.
- γωνία 6.6°. Πρόκειται για τη γωνία που σχηματίζεται από τον κατευθυντή. Ακτίνες-X που εκπέμπονται μέσα τη στερεά αυτή γωνία δεν θα αλληλεπιδρούσαν καθόλου με το υλικού του collimator. Η γωνία αυτή υπολογίστηκε βάσει απλής τριγωνομετρικής σχέσης.
- γωνία 14°. Πρόκειται για μία ενδιάμεση των δύο παραπάνω γωνία.

4.3.1 Δημιουργία αρχείου γεωμετρίας

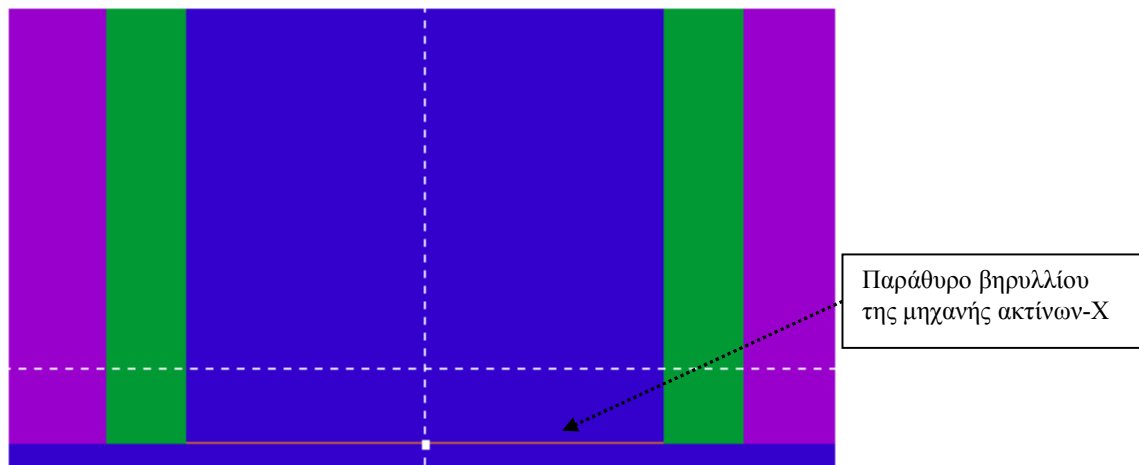
Για τη εξέταση των τριών σεναρίων της §4.3 δημιουργήθηκε το αρχείο γεωμετρίας *sensor_simple.geo*, το οποίο περιλαμβάνει τον κατευθυντή δέσμης και τη θήκη του δείγματος. Η δομή του αρχείου αυτού παρουσιάζεται στον Πίνακα 4.1 στο τέλος του παρόντος Κεφαλαίου. Σημειώνεται ότι κατά την προσομοίωση ο κατευθυντής δέσμης (collimator) λήφθηκε με μήκος 13cm και όχι 7.5cm που είναι η πραγματική του διάσταση, προκειμένου να ληφθεί υπόψη και η διαμόρφωση (φλάντζα) στην έξοδο της μηχανής. Εκτιμάται ότι η απλούστευση αυτή της γεωμετρίας δεν εισάγει σημαντική ανακρίβεια στα αποτελέσματα της προσομοίωσης, ενώ κάνει και τη γεωμετρία απλούστερη. Οι υπόλοιπες διαστάσεις, καθώς και η απόσταση ανιχνευτή-δείγματος είναι αυτές που αναφέρονται στο Κεφάλαιο 2 (βλ. §2.10.3). Στο Σχήμα 4.2 παρουσιάζεται μεγέθυνση του Σχήματος 4.1 όπου διακρίνεται και το παράθυρο βηρυλλίου (που αντιστοιχεί στο παράθυρο της μηχανής) πάχους 0.254cm, ενώ στον Πίνακα 4.2 δίδεται η αντιστοίχιση χρωμάτων των Σχημάτων 4.1 & 4.2 με τα υλικά από τα οποία αποτελείται η προς μελέτη γεωμετρία. Όπως προαναφέρθηκε, η γεωμετρία της κατασκευής που απεικονίζεται στο Σχήμα 4.1 περιγράφεται στο αρχείο γεωμετρίας *sensor_simple.geo*.



Σχήμα 4.1 Τμήμα της διάταξης XRF του ΕΙΤ-ΕΜΠ όπου παρουσιάζεται ο κατευθυντής δέσμης και η θέση του δείγματος

Πίνακας 4.2. Αντιστοίχιση χρωμάτων-υλικών των Σχημάτων 4.1 & 4.2

Υλικό	Χρώμα
Αλουμίνιο	Μωβ
Plexiglass	Πράσινο
Αέρας	Μπλε



Σχήμα 4.2 Λεπτομέρεια του Σχήματος 4.1, όπου παρουσιάζεται το παράθυρο βηρυλλίου της μηχανής ακτίνων-X

4.3.2 Δημιουργία αρχείου υλικού

Το αρχείο υλικού που χρησιμοποιήθηκε έχει την ονομασία *ylika.mat* και δημιουργήθηκε βάσει των βημάτων που αναφέρθηκαν στην παράγραφο 3.4.3. Τα επιμέρους υλικά του αρχείου είναι: το αλουμίνιο, από το οποίο αποτελούνται ο κατευθυντής δέσμης και το δοχείο υλικού, το plexiglass, υλικό από το οποίο αποτελείται ο εσωτερικός δακτύλιος του κατευθυντή δέσμης, το βηρύλλιο, που αποτελεί το παράθυρο της μηχανής και τέλος, ο αέρας που αποτελεί το περιβάλλον λειτουργίας. Τα αρχεία υλικού του αλουμινίου και του αέρα έχουν δημιουργηθεί στην §3.4.3. Το αρχείο υλικού του plexiglass, δημιουργείται από τη βάση δεδομένων του προγράμματος, επιλέγοντας '2' στην πρώτη ερώτηση (στο πρώτο παράθυρο διαλόγου) και στην επόμενη ερώτηση τον αντίστοιχο κωδικό. Τέλος, γίνεται ενοποίηση των δύο αυτών αρχείων σε ένα κοινό αρχείο με την εντολή:

copy aluminium.mat beryllium.mat air.mat plexiglass.mat ylika.mat

Επισημαίνεται πως για απλούστευση των αρχείων γεωμετρίας και υλικού, ως υλικό του δείγματος χρησιμοποιείται ο αέρας (δηλαδή η διάταξη είναι σαν να έχει τοποθετηθεί το δοχείο δείγματος άδειο, καθώς σε αυτές τις προσομοιώσεις δεν παρουσιάζει ενδιαφέρον ο φθορισμός των ακτίνων-X του δείγματος και επιπροσθέτως αυξάνει η ταχύτητα της προσομοίωσης. Για τον παραπάνω λόγο χρησιμοποιείται ανιχνευτής αλληλεπίδρασης, διότι σε αυτή τη φάση το ενδιαφέρον εστιάζεται στη μορφή του φάσματος των ακτίνων-X που προσπίπτουν στο προς ανάλυση δείγμα και όχι αυτών που απορροφώνται σε αυτό.

4.3.3 Δημιουργία αρχείου εισόδου

Το τελευταίο βήμα πριν την έναρξη των προσομοιώσεων είναι η δημιουργία του αρχείου εισόδου. Για την ακρίβεια δημιουργήθηκαν 3 αρχεία εισόδου με μόνη διαφορά την παράμετρο SAPERT, η οποία αφορά στην γωνία εξόδου της δέσμης φωτονίων και η οποία έλαβε τις τιμές 6.6° , 14° και 22° για να δοκιμαστούν τα τρία σενάρια που αναφέρθηκαν στην §4.3 αντίστοιχα. Το αρχείο εισόδου ονομάζεται *beam_aperture.in* και παρουσιάζεται στον Πίνακα 4.3 στο τέλος του παρόντος Κεφαλαίου. Για τις δοκιμές αυτές επιλέχθηκε τάση τροφοδοσίας της μηχανής ακτίνων-X στα 50kV, (η μεγαλύτερη δυνατή για τη διάταξη του ΕΠΤ-ΕΜΠ) καθώς αυτή είναι και η δυσμενέστερη περίπτωση, όσον αφορά στη διαπερατότητα του κατευθυντή δέσμης από τις ακτίνες-X και την παραγωγή σκεδαζόμενης ακτινοβολίας μέσα σε αυτόν, η οποία ενδεχομένως θα φτάσει στο δείγμα.

Όπως προαναφέρθηκε στο Κεφάλαιο 3, για να εισαχθεί ένα φάσμα στο αρχείο εισόδου απαιτείται να έχει συγκεκριμένη μορφή. Δηλαδή, κάθε γραμμή περιέχει τη λέξη SPECTR, μετά την ενέργεια E_i και τέλος την πιθανότητα P_i να εκπεμφθεί φωτόνιο ενέργειας από E_i έως E_{i+1} . Στα πλαίσια της ΔΕ δημιουργήθηκε ένα μικρό πρόγραμμα σε γλώσσα FORTRAN, το οποίο μετατρέπει τα αρχεία φασμάτων της μορφής *spc_impdet_#.dat* που παρήχθησαν κατά τις προσομοιώσεις του προηγούμενου Κεφαλαίου, σε μορφή κατάλληλη για να ενταχθεί το φάσμα στα αρχεία εισόδου του κώδικα PENMAIN. Το πρόγραμμα αυτό παρατίθεται στον Πίνακα 4.4 στο τέλος του παρόντος Κεφαλαίου.

Κατά τις προσομοιώσεις που έγιναν οι παράμετροι EABS(M, 1:3), C1, C2, WCC και WCR έλαβαν τιμές σύμφωνα με το εγχειρίδιο του προγράμματος (βλ. §3.3.3.3). Επίσης τονίζεται ότι στο αρχείο εισόδου, ως ανιχνευτής αλληλεπίδρασης ορίστηκε το αντικείμενο (body) της γεωμετρίας '6', δηλαδή το σώμα που αντιπροσωπεύει το δείγμα (βλ. Πίνακα 4.1), ώστε να συγκριθούν τα φάσματα που φτάνουν στο δείγμα για τις 3 γωνίες δέσμης αντίστοιχα. Υπενθυμίζεται ότι βάσει των αντίστοιχων παραμέτρων που χρησιμοποιούνται στη διάταξη XRF του ΕΠΤ-ΕΜΠ, ο ανιχνευτής αλληλεπίδρασης ορίστηκε να έχει ενεργειακό παράθυρο 0.110keV έως 63keV, το οποίο χωρίζεται σε 1024 ενεργειακά κανάλια. Επιπροσθέτως, ορίστηκε και ένας ανιχνευτής δόσης, ο οποίος τοποθετείται μετά την έξοδο της δέσμης από τον κατευθυντή, προκειμένου να διερευνηθεί η γωνία και η ένταση της

δέσμης ακτίνων-X που εξέρχονται από τον κατευθυντή δέσμης. Αυτό είναι μία σημαντική πληροφορία, η οποία θα μπορούσε ενδεχομένως να είναι χρήσιμη για την επανασχεδίαση στοιχείων της διάταξης, όπως π.χ. του κατευθυντή δέσμης, ή για την επιλογή διαφορετικής γωνίας του δείγματος ως προς τη δέσμη των ακτίνων-X. Υπενθυμίζεται (βλ. §3.3.3), πως ο ανιχνευτής δόσης είναι ένα ορθογώνιο παραλληλόγραμμο πλέγμα και ορίζεται μόνο στο αρχείο εισόδου (*.in). Στην προκειμένη περίπτωση οι διαστάσεις του ανιχνευτή δόσης είναι: πάχος 1cm (κατά τον άξονα z που συμπίπτει με τη διεύθυνση της δέσμης των ακτίνων-X), πλάτος 6 cm και μήκος 6 cm. Το πλέγμα καθορίζεται σε 100x100x1 κατά τους άξονες x, y, z αντίστοιχα.

4.3.4 Αποτελέσματα της προσομοίωσης

Αρχικά, δημιουργείται το εκτελέσιμο πρόγραμμα *beam_aperture.exe*, το οποίο εκτελείται με την εντολή:

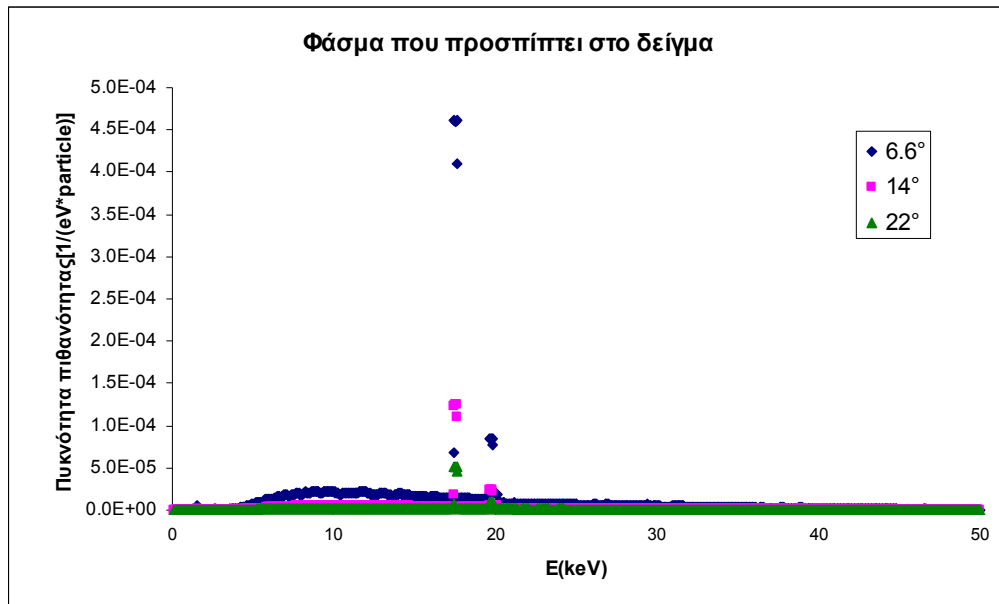
```
beam_aperture.exe < beam_aperture.in
```

Το αρχείο εκτελέστηκε τρεις φορές, μία για κάθε γωνία εξόδου της δέσμης (22°, 14°, 6.6°). Και οι τρεις προσομοιώσεις έτρεξαν για το ίδιο χρονικό διάστημα, το οποίο ορίστηκε στο αρχείο εισόδου ίσο με $1.83 \cdot 10^5$ sec, δηλαδή 51 ώρες περίπου. Τα αρχεία εξόδου που προκύπτουν μετά το πέρας της προσομοίωσης για κάθε γωνία δέσμης και παρουσιάζουν ενδιαφέρον είναι τα : *penmain.dat*, *pm_spc_impdet_1.dat* και το *pm_2d_dose_1.dat*. Τα πρώτα δύο αρχεία έχουν αναλυθεί στην παράγραφο 3.4.5. Το αρχείο *pm_2d_dose_1.dat* (Πίνακας 4.5 στο τέλος του Κεφαλαίου) προκύπτει από τον ανιχνευτή δόσης. Γενικά, τα αρχεία της μορφής *pm_2d_dose_#.dat* μπορεί να είναι παραπάνω του ενός (ένα για κάθε επίπεδο z) αλλά στα πλαίσια της ΔΕ επελέγη μόνο ένα επίπεδο z, όποτε προέκυψε ένα αρχείο, με την ονομασία *pm_2d_dose_1.dat*. Αναφορικά με το περιεχόμενο του αρχείου αυτού πρέπει να επισημανθεί ότι οι παράμετροι I1, I2 και I3 αποτελούν τους δείκτες στο καρτεσιανό σύστημα των δομικών στοιχείων. Το I1 αφορά στον άξονα x, το I2 στον άξονα y και το I3 στον άξονα z. Συνδυάζοντας τις 3 τιμές λοιπόν, προκύπτει ένα δομικό στοιχείο. Οι στήλες 4-6 του αρχείου περιλαμβάνουν τις τιμές των συντεταγμένων I1, I2 και I3 στους 3 άξονες, ενώ η στήλη 7 την απορροφώμενη δόση (σε eV/g) και η στήλη 8 τη στατιστική αβεβαιότητα της σε επίπεδο 3σ. Τέλος, ένα σημείο που χρειάζεται ιδιαίτερη προσοχή είναι

ότι η απορροφώμενη δόση που απεικονίζεται στη στήλη 7 είναι ανηγμένη ανά φωτόνιο που προσομοιώθηκε (ανά ιστορία).

4.3.5 Συμπεράσματα για την επιλογή γωνίας εξόδου της δέσμης

Από τα αποτελέσματα των αρχείων εξόδου του ανιχνευτή αλληλεπίδρασης για κάθε γωνία από τις τρεις γωνίες εξόδου της δέσμης (22° , 14° , 6.6°) κατασκευάζεται το παρακάτω διάγραμμα του Σχήματος 4.3, όπου φαίνονται τα τρία αντίστοιχα φάσματα. Όπως προαναφέρθηκε παραπάνω (βλ. §4.3) οι προσομοιώσεις πραγματοποιούνται με σταθερή παράμετρο το χρόνο προσομοίωσης.



Σχήμα 4.3 Το καταγραφόμενο φάσμα που φτάνει στη θέση που αντιπροσωπεύει το δείγμα της διάταξης XRF, για τις τρεις (3) γωνίες της εξερχόμενης δέσμης

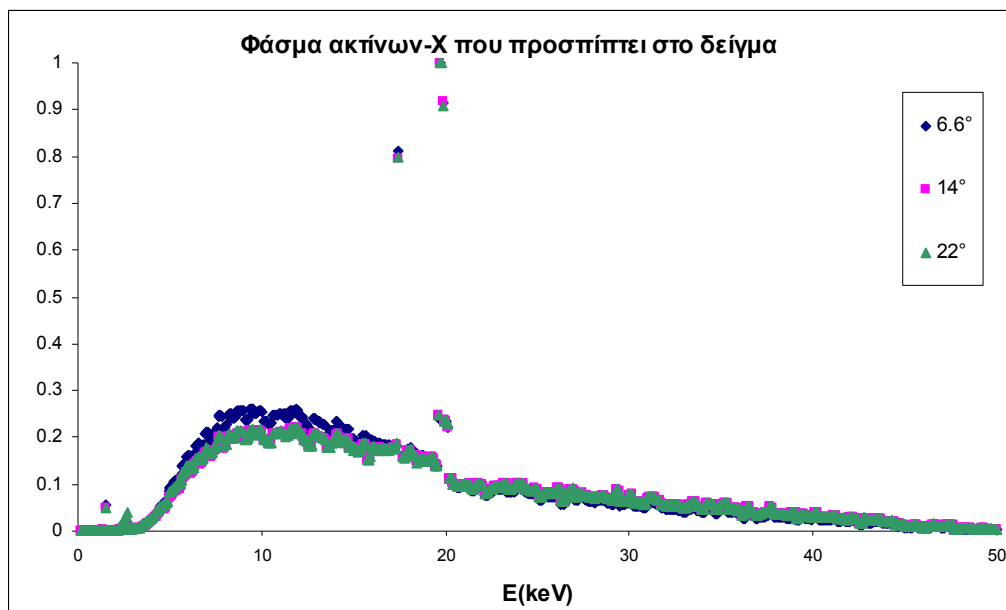
Από το παραπάνω Σχήμα, γίνεται αμέσως αντιληπτό πως η βασική διαφορά των τριών φασμάτων που καταφθάνουν στο δείγμα είναι η μεγάλη απόκλιση όσων αφορά το πλήθος των καταγραφόμενων φωτονίων. Ειδικότερα στις φωτοκορυφές που εμφανίζονται στο φάσμα (@ 17.4 keV και 19.7 keV) η απόκλιση των φασμάτων με γωνία δέσμης 14° και 22° είναι αρκετά μεγάλη σε σχέση με αυτό που προέκυψε από τη δέσμη κωνικότητας 6.6° . Στον Πίνακα 4.6 παρατίθενται οι τιμές της πυκνότητας πιθανότητας για τις χαρακτηριστικές αιχμές του Mo για τις τρεις γωνίες της δέσμης.

Πίνακας 4.6 Πυκνότητα πιθανότητας των φωτοκορυφών 17.4 και 19.7 keV συναρτήσει των τριών γωνιών της δέσμης

Γωνία δέσμης(°)	Αριθμός καταγραφόμενων γεγονότων (counts)	
	Φωτοκορυφές	
	17.4 keV	19.7 keV
6.6	6.830	8.430
14	1.890	2.385
22	0.783	0.982

Το συμπέρασμα αυτό είναι απόλυτα αναμενόμενο, καθώς η γωνία 6.6° επιλέχθηκε κατά τέτοιο τρόπο ώστε να μην αλληλεπιδρά η δέσμη με τον κατευθυντή (collimator), επομένως το μεγαλύτερο ποσοστό φωτονίων που εκπέμπονται κατευθύνονται προς το δείγμα (και τον ανιχνευτή δόσης), με εξαίρεση τις οποίες αλληλεπιδράσεις πάνω στο παράθυρο βηρυλλίου της μηχανής. Αντίθετα, για γωνία 22°, ένα μεγάλο ποσοστό φωτονίων αλληλεπιδρούν με τον κατευθυντή δέσμης και εν τέλει δεν φτάνουν στο δείγμα.

Ένα θέμα που τίθεται βέβαια είναι το κατά πόσον η μορφή του φάσματος που προκύπτει για τις τρεις γωνίες είναι η ίδια. Για παράδειγμα, στην περίπτωση της γωνίας 22°, όπου υπάρχουν πολλές σκεδάσεις των φωτονίων στον κατευθυντή δέσμης, θα ήταν δυνατόν το συνεχές φάσμα να παρουσιάζει διαφορετική μορφή από ότι στις άλλες γωνίες. Για να είναι δυνατή η σύγκριση των φασμάτων σε ένα κοινό διάγραμμα πραγματοποιείται κανονικοποίηση στον άξονα των y . Δηλαδή, στον άξονα των τεταγμένων παρουσιάζονται οι τιμές της συνάρτησης πυκνότητας πιθανότητας ανηγμένες στην τιμή της pdf, η οποία εμφανίζεται στην φωτοκορυφή 19.7keV για κάθε περίπτωση αντίστοιχα. Το αντίστοιχο διάγραμμα του Σχήματος 4.3, αλλά με κανονικοποιημένο τον άξονα που αναφέρεται στην πυκνότητα πιθανότητας (άξονας y) φαίνεται στο Σχήμα 4.4.



Σχήμα 4.4 Το φάσμα που φτάνει στο δείγμα για τις 3 διαφορετικές γωνίες εκπομπής των ακτίνων-X, με κανονικοποίηση των τιμών του κατακόρυφου άξονα ως προς την τιμή της pdf στα 19.7keV

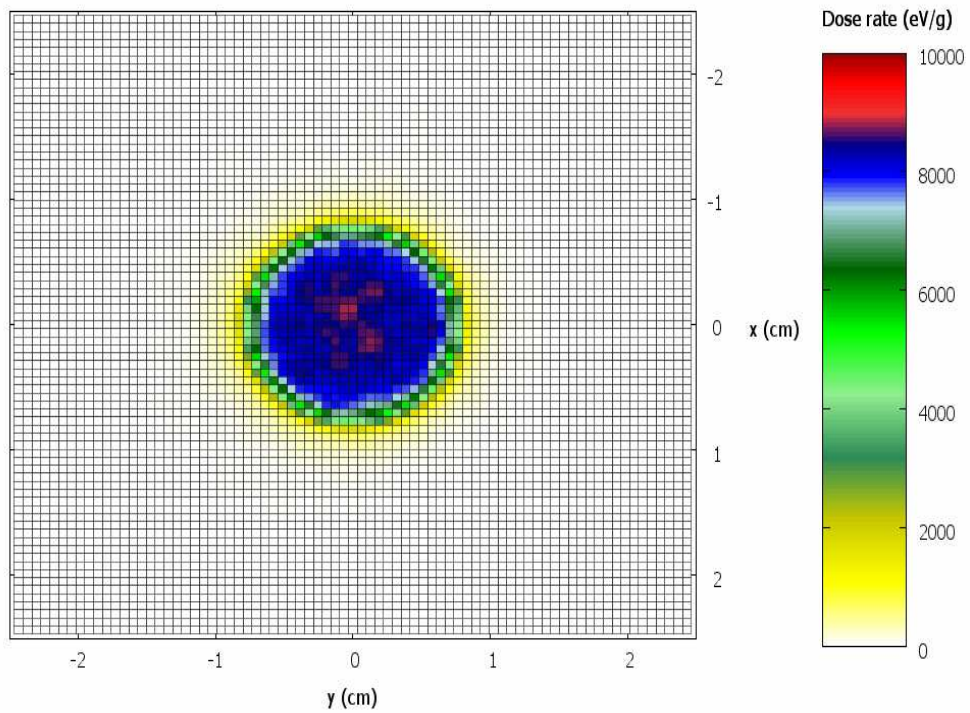
Σύμφωνα με το διάγραμμα του Σχήματος 4.4, το φάσμα των φωτονίων που φθάνουν στο δείγμα για την ελάχιστη γωνία (6.6°) διαφέρει σε μικρό βαθμό σε σχέση με το αντίστοιχο φάσμα για τη γωνία των 14° και 22° , σε ότι αφορά στην ενεργειακή περιοχή πριν από τις χαρακτηριστικές αιχμές του Mo (περιοχή $\sim 4 - \sim 17\text{keV}$). Φαίνεται δηλαδή να υπάρχουν ελαφρώς περισσότερα φωτόνια με ενέργειες λίγο χαμηλότερες από τις χαρακτηριστικές του Mo. Αντιθέτως, τα φάσματα για γωνία δέσμης 14° και 22° δεν φαίνεται να παρουσιάζουν σημαντικές διαφορές και τα καταγραφόμενα φάσματα έχουν ίδια μορφή.

Από τα αρχεία αποτελεσμάτων διαπιστώνεται ότι η σχετική αβεβαιότητα αυξάνει καθώς αυξάνει η γωνία της δέσμης. Για παράδειγμα η μέγιστη σχετική αβεβαιότητα στην προσομοίωση με γωνία δέσμης ίση με την πραγματική (22°) είναι 70.4%, για γωνία δέσμης 14° είναι 44.6% και τέλος, για στερεά γωνία δέσμης 6.6° η μέγιστη σχετική αβεβαιότητα είναι 21.2%. Όλες αυτές οι τιμές τις μέγιστης αβεβαιότητας αφορούν στην περιοχή περί τη μέγιστη ενέργεια του φάσματος (50keV). Η αύξηση της αβεβαιότητας είναι αναμενόμενη και οφείλεται στο μικρότερο πλήθος φωτονίων που καταγράφονται για υψηλότερη γωνία εξόδου. Αντίστοιχα, η σχετική αβεβαιότητα της αιχμής στα 17.4 keV για τις τρεις γωνίες της δέσμης των ακτίνων-X φαίνονται στον παρακάτω Πίνακα 4.7.

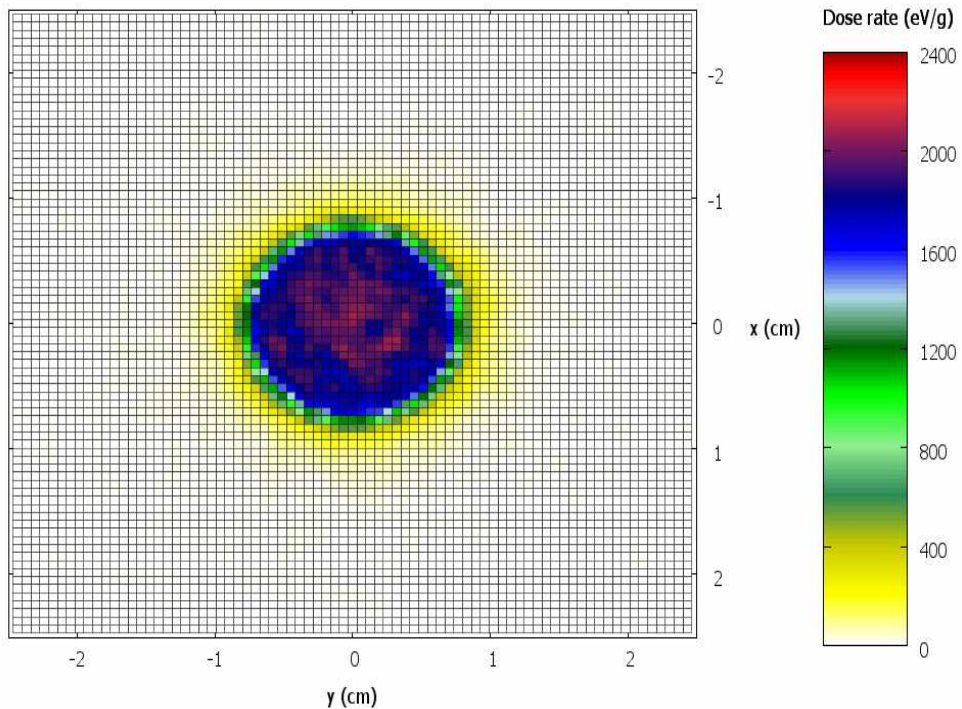
Πίνακας 4.7. Σχετική αβεβαιότητα της αιχμής των 17.4 keV του φάσματος

Γωνία δέσμης	Σχετική αβεβαιότητα
6.6°	0.5%
14°	0.8%
22°	1.3%

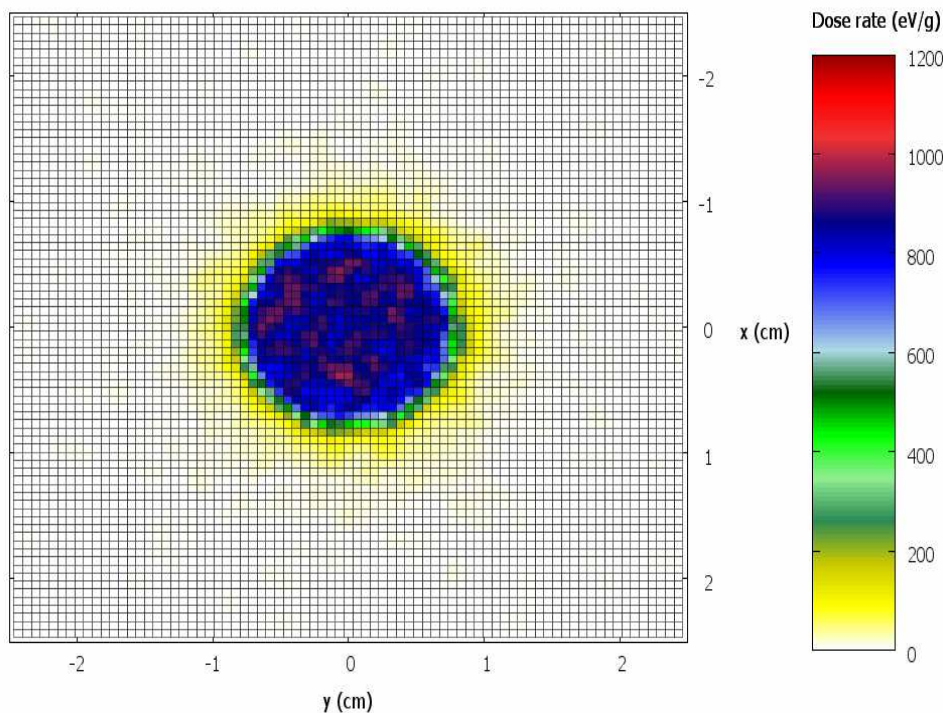
Όσον αφορά στα αποτελέσματα που κατεγράφησαν από τον ανιχνευτή δόσης, στη συνέχεια παρουσιάζονται στα Σχήματα 4.5, 4.6 & 4.7 τα διαγράμματα που απεικονίζουν την κατανομή της δόσης σε επίπεδο κάθετο στη δέσμη, τοποθετημένο ακριβώς πριν τη θέση του δείγματος. Το διάγραμμα απεικονίζεται με χρήση του προγράμματος gnuplot (βλ. Παράρτημα ΙΙΙ). Από τα Σχήματα αυτά διαπιστώνεται ότι η δέσμη η οποία εξέρχεται από τον κατευθυντή έχει κατά προσέγγιση τις ίδιες διαστάσεις, ανεξάρτητα από την αρχική γωνία της δέσμης, κάτι που αποδεικνύει ότι ο κατευθυντής δέσμης λειτουργεί αποτελεσματικά και ότι τα φωτόνια που εξέρχονται υπό γωνία μεγαλύτερη των 6.6° μπορούν να θεωρηθούν αμελητέα. Το συμπέρασμα αυτό είναι σημαντικό για την τοποθέτηση του δείγματος απέναντι από τον κατευθυντή. Όπως αναμενόταν, η μεγαλύτερη τιμή του ρυθμού δόσης καταγράφεται για την ελάχιστη γωνία δέσμης. Όπως προαναφέρθηκε, το γεγονός πως ο ρυθμός της δόσης μειώνεται με την αύξηση της γωνίας της κωνικότητας της δέσμης είναι απολύτως φυσιολογικό και αναμενόμενο.



Σχήμα 4.5 Κατανομή της δόσης (eV/g) λόγω της δέσμης ακτίνων-X της μηχανής με κωνικότητα δέσμης 6.6°



Σχήμα 4.6 Κατανομή της δόσης (eV/g) λόγω της δέσμης ακτίνων-X της μηχανής με κωνικότητα δέσμης 14°



Σχήμα 4.7 Κατανομή της δόσης (eV/g) λόγω της δέσμης ακτίνων-X της μηχανής με κωνικότητα δέσμης 22°

Με βάσει τα παραπάνω συμπεράσματα που εξάγονται από τη μελέτη των Σχημάτων 4.3-4.7, είναι σαφές πως εκλέγοντας τις 14° ως γωνία κωνικότητας της δέσμης, υπάρχει σημαντική αύξηση αριθμού φωτονίων που προσπίπτουν στο δείγμα, χωρίς ωστόσο να υπάρχει σημαντική αλλοίωση του φάσματος των ακτίνων-X που εξέρχονται από τον κατευθυντή. Συνοψίζοντας, είναι πλέον αντιληπτό πως με τη μείωση της γωνίας της κωνικότητας της δέσμης επιτυγχάνεται η δημιουργία «πλουσιότερου» φάσματος που προσπίπτει στο δείγμα και συνεπώς του φάσματος που αναμένεται να καταγραφεί από τον ανιχνευτή της διάταξης, που αποτελεί και έναν από τους βασικούς στόχους της παρούσας ΔΕ. Φυσικά, η γωνία 14° επελέγη κατά κάποιο τρόπο τυχαία, ως μία γωνία μεταξύ των 6.6° και 22°, η οποία αποδείχθηκε τελικά ότι δίνει τα ικανοποιητικότερα αποτελέσματα. Θα είχε ενδιαφέρον να πραγματοποιηθεί ενδελεχής διερεύνηση και για άλλες γωνίες, προκειμένου να βρεθεί η πραγματικά βέλτιστη γωνία. Πάντως, στα πλαίσια της ΔΕ αυτό που πρωτίστως ενδιέφερε ήταν η διερεύνηση των δυνατοτήτων που μπορεί να παρέχει η προσομοίωση Monte-Carlo για τη βελτιστοποίηση μίας διάταξης XRF, και όχι αυτή καθαυτή η βελτιστοποίηση της διάταξης.

Ένα άλλο ενδιαφέρον θέμα το οποίο θα μπορούσε να διερευνηθεί είναι το κατά πόσον θα μπορούσε να τοποθετηθεί ο ανιχνευτής πιο κοντά στο δείγμα με στόχο την αύξηση της απόδοσης ανίχνευσης, δεδομένου ότι όπως φαίνεται από το Σχήμα 4.7 είναι ελάχιστα τα φωτόνια τα οποία διαπερνούν τον κατευθυντή δέσμης και θα μπορούσαν να φτάσουν στον ανιχνευτή.

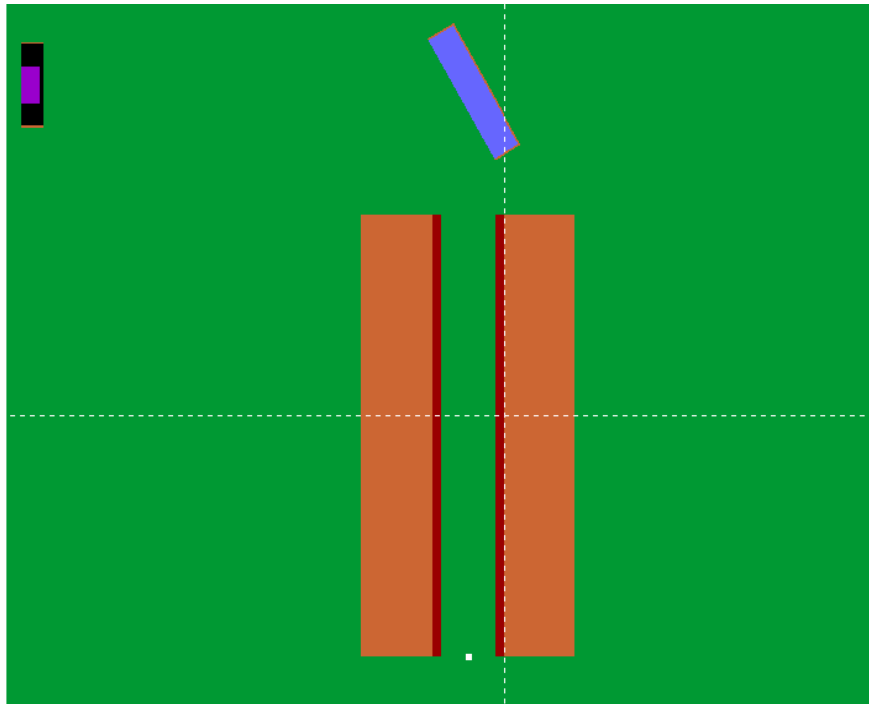
4.4 Επιλογή των ενεργειών αποκοπής φωτονίων και ηλεκτρονίων με σκοπό την αύξηση της ταχύτητας προσομοίωσης

Το επόμενο βήμα πριν την έναρξη της διαδικασίας προσομοίωσης της τεχνικής XRF είναι η σωστή επιλογή των ενεργειών αποκοπής (cut-off energies) των φωτονίων και των ηλεκτρονίων, οι οποίες ορίζονται στο αρχείο εισόδου, με απώτερο σκοπό την αύξηση της ταχύτητας της προσομοίωσης χωρίς να αλλοιωθούν τα αποτελέσματα. Τονίζεται πως η κατάλληλη επιλογή των ενεργειών αποκοπής είναι μία πολύ σημαντική παράμετρος, η οποία επηρεάζει την ταχύτητα της προσομοίωσης. Πολύ χαμηλές τιμές οδηγούν σε πολύ μακρές ιστορίες και εν τέλει χαμηλή ταχύτητα προσομοίωσης. Στις παραγράφους που ακολουθούν παρουσιάζονται τα αρχεία εισόδου και τα αποτελέσματα των προσομοιώσεων που έγιναν με στόχο τη μελέτη της επίδρασης των ενεργειών αποκοπής. Οι προσομοιώσεις που έγιναν με στόχο τη μελέτη της επίδρασης των ενεργειών αποκοπής αποφασίστηκε να γίνουν για τη συνολική γεωμετρία του συστήματος, δηλαδή για γεωμετρία που περιλαμβάνει και τον ανιχνευτή ακτινοβολίας. Αυτό έγινε διότι αυτό που τελικά ενδιαφέρει είναι η επίδραση των ενεργειών αποκοπής στο φάσμα των ακτίνων-X που συλλέγεται στον ανιχνευτή. Άλλωστε, η επιλογή των ενεργειών αποκοπής μπορεί να έχει σημαντική επίδραση στην ανίχνευση ή όχι στο φάσμα αποτιθέμενης ενέργειας στον ανιχνευτή χαρακτηριστικών ακτίνων-X χαμηλών ενεργειών.

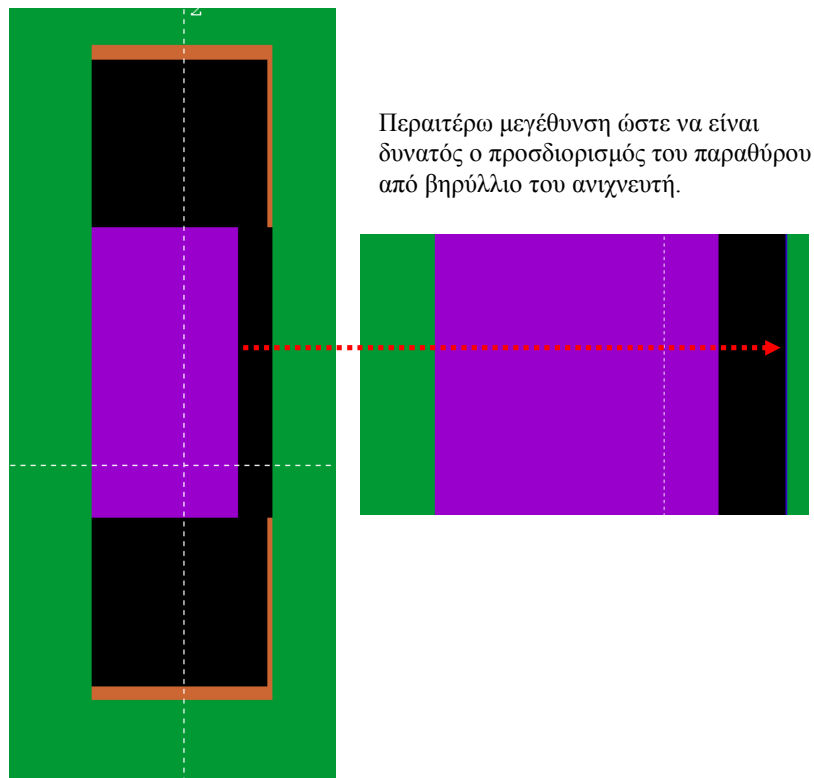
4.4.1 Δημιουργία αρχείου γεωμετρίας

Το αρχείο γεωμετρίας που δημιουργήθηκε και αντιστοιχεί στη διάταξη της XRF, όπως αυτή έχει συγκροτηθεί στο ΕΠΤ-ΕΜΠ, ονομάζεται *sensor_final.geo* (Πίνακας 4.8 στο τέλος του παρόντος Κεφαλαίου). Πρόκειται ουσιαστικά για συμπλήρωση του αρχείου

sensor_simple.geo, στο οποίο προστέθηκαν επιπλέον το υλικό του δείγματος και ο ανιχνευτής φωτονίων (SiLi). Το σώμα (body) '1' του αρχείου γεωμετρίας αποτελεί τον ενεργό όγκο του ανιχνευτή. Ο ανιχνευτής της διάταξης XRF του ΕΠΤ-ΕΜΠ αντιστοιχεί στο αρχείο γεωμετρίας στο module 8. Επισημαίνεται πως ο ανιχνευτής ορίζεται ως μία ομάδα σωμάτων για δύο λόγους: (α) γιατί είναι επιθυμητή η στροφή του κατά 90° ως προς τον άξονα των z και (β) διότι ανάμεσα στη θωράκιση του ανιχνευτή και του ενεργού όγκου υπάρχει κενό. Ως γνωστό για να πληρωθεί ένας όγκος με οποιοδήποτε υλικό χρησιμοποιείται η ομάδα σωμάτων (module). Υπενθυμίζεται πως οι διαστάσεις του ανιχνευτή, όπως και των υπόλοιπων συνιστωσών της διάταξης δίνονται στην παράγραφο 2.10.3. Στο Σχήμα 4.8 φαίνεται συνολικά η διάταξη που περιγράφεται στο αρχείο γεωμετρίας *sensor_final.geo*. Στο Σχήμα 4.9 απεικονίζεται ο ανιχνευτής SiLi, ενώ με το κόκκινο βέλος παρουσιάζεται το παράθυρο Be του εν λόγω ανιχνευτή.



Σχήμα 4.8 Απεικόνιση της διάταξης XRF του ΕΠΤ-ΕΜΠ με το πρόγραμμα gview2d (αρχείο γεωμετρίας *sensor_final.geo*)



Σχήμα 4.9 Λεπτομέρεια του ανιχνευτή SiLi του ΕΠΤ-ΕΜΠ

4.4.2 Δημιουργία αρχείου υλικού

Μετά το αρχείο γεωμετρίας δημιουργήθηκε το αρχείο υλικού *ylika2.mat* στο οποίο περιλαμβάνονται όλα τα υλικά της διάταξης. Αυτό το αρχείο αποτελείται από:

- i. 6 επιμέρους υλικά που υπάρχουν στη βάση δεδομένων του κώδικα PENELOPE: πυρίτιο¹⁴, αλουμίνιο, βηρύλλιο, αέρας, plexiglass και
- ii. το υλικό του δείγματος, το οποίο δεν υπάρχει στη βάση δεδομένων του προγράμματος PENELOPE, αλλά δημιουργήθηκε και περιγράφεται σε αρχείο με ονομασία *digma_xrf.mat*, όπως περιγράφεται στη συνέχεια.

¹⁴ Πρόκειται για το υλικό του ανιχνευτή SiLi. Το υλικό Li αντιστάθμισης του ανιχνευτή σε πρώτη προσέγγιση αγνοήθηκε.

Το υλικό του δείγματος δημιουργήθηκε με σκοπό να προσομοιωθεί το υλικό ενός δείγματος χώματος που περιέχει γνωστή ποσότητα ορισμένων στοιχείων και ιχνοστοιχείων. Έτσι ως υλικό του δείγματος επελέγη το διοξείδιο του πυριτίου SiO₂ με προσμίξεις: μολύβδου (Pb), χαλκού (Cu), τιτανίου (Ti) και αρσενικού (As). Το υλικό SiO₂ επελέγη καθώς η σύστασή του είναι παραπλήσια με τη σύσταση περιβαλλοντικών υλικών όπως το χώμα και η άμμος. Η πυκνότητα για το συγκεκριμένο υλικό ορίστηκε 1.4gr/cm³ για να προσομοιάζει την συνήθη πυκνότητα των δειγμάτων που αναλύονται στη διάταξη XRF του ΕΠΤ-ΕΜΠ [16]. Όσον αφορά στις προσμίξεις, αυτές επελέγησαν να είναι στοιχεία τα οποία, αφενός μεν ανιχνεύονται σε περιβαλλοντικά δείγματα που αναλύονται στο ΕΠΤ-ΕΜΠ, αφετέρου δε εκπέμπουν χαρακτηριστικές ακτίνες-X που καλύπτουν μία ενεργειακή περιοχή ~ 4-14 keV που παρουσιάζει ιδιαίτερο ενδιαφέρον κατά τις αναλύσεις στο ΕΠΤ-ΕΜΠ. Η αναλογία για κάθε ένα από τα στοιχεία των προσμίξεων επελέγη να είναι 1000 ppm.

Το αρχείο *digma_xrf.mat* το οποίο περιέχει τα υλικά του δείγματος δημιουργήθηκε με το πρόγραμμα material.exe με τη διαδικασία που περιγράφεται παρακάτω:
Αφού εκτελεστεί το πρόγραμμα εμφανίζεται το παρακάτω παράθυρο διαλόγου:

Select one option (1 or 2):

1: Enter composition data from the keyboard

2: Read them from the file pdcompos.p05fn

Για τη δημιουργία ενός υλικού που δεν υπάρχει στη βάση δεδομένων του προγράμματος επιλέγεται η πρώτη επιλογή '1'. Στη συνέχεια ζητείται το όνομα του υλικού:

Enter material name, for your information (no more than 60 characters) ...

Οπότε πληκτρολογείται το όνομα του υλικού που στη συγκεκριμένη περίπτωση είναι: *digma_xrf*. Ακολούθως, το πρόγραμμα ζητάει από το χρήστη το πλήθος των στοιχείων του υλικού:

Chemical formula:

Number of elements in the molecule ...

Το μείγμα που δημιουργείται αποτελείται από 6 στοιχεία, όπως προαναφέρθηκε. Το επόμενο βήμα για τη δημιουργία ενός νέου υλικού είναι η επιλογή της στοιχειομετρικής αναλογίας ή της κατά βάρος αναλογίας των στοιχείων στο μείγμα.

Select one option (1 or 2)

1: Enter chemical (stoichiometric) formula

2: Enter fraction by weight of each element

Στη συγκεκριμένη εφαρμογή, χρησιμοποιείται η κατά βάρος αναλογία των στοιχείων στο δείγμα, οπότε για κάθε στοιχείο το πρόγραμμα ζητάει από το χρήστη την εισαγωγή του ατομικού αριθμού και της αναλογίας του στο μείγμα κατά βάρος. Το υλικό του δείγματος που χρησιμοποιείται είναι μείγμα SiO_2 με ιχνοστοιχεία σε αναλογία 1000ppm (0.1%w/w).

Weight fractions ...

Enter atomic number and fraction by weight of the first element ...

Εν συνεχεία, ο χρήστης εισάγει την πυκνότητα του υλικού:

Enter mass density (g/cm**3)

Η πυκνότητα για το συγκεκριμένο υλικό ορίστηκε 1.4gr/cm^3 . Τέλος, πληκτρολογείται το όνομα του εξαγόμενου αρχείου υλικού:

PENELOPE'S material data file is being created.

Enter path + name for this file (up to 80 characters)...

Οπότε στη συγκεκριμένη περίπτωση εισάγεται το όνομα *digma_xrf.mat*. Υπενθυμίζεται πως τα αρχεία υλικών για το αλουμίνιο, το πυρίτιο, το βηρύλλιο, τον αέρα και το plexiglass έχουν δημιουργηθεί σε παραγράφους του 3^{ου} & 4^{ου} Κεφαλαίου (βλ. §3.4.3 και §4.3.2).

Τέλος, το αρχείο *ylika2.mat* που περιλαμβάνει όλα τα υλικά της πειραματικής διάταξης, συμπεριλαμβανομένου του δείγματος, δημιουργείται με την εντολή:

```
copy silicon.mat aluminium.mat beryllium.mat air.mat plexiglass.mat digma_xrf.mat  
ylika2.mat
```

Υπενθυμίζεται ότι η σειρά με την οποία εισάγονται τα αρχεία των επιμέρους υλικών έχει σημασία, καθώς σε κάθε ένα από αυτά αποδίδεται ένας αύξων αριθμός, ο οποίος χρησιμοποιήθηκε προηγουμένως στο αρχείο γεωμετρίας *sensor_final.geo*.

4.4.3 Δημιουργία αρχείων εισόδου

Το τελευταίο αρχείο που δημιουργείται είναι το αρχείο εισόδου το οποίο ονομάζεται *sensor.in*. Για την ακρίβεια δημιουργούνται τέσσερα αρχεία εισόδου με διαφορετικές ενέργειες αποκοπής αντίστοιχα (βλ. Πίνακας 4.9). Η αρχική επιλογή των ενεργειών αποκοπής, όπως συνιστάται από το εγχειρίδιο του κώδικα PENELOPE [10], πρέπει να ορίζεται ως το 10% της μέγιστης ενέργειας των προσομοιωμένων σωματιδίων/φωτονίων, ενώ η αντίστοιχη ενέργεια αποκοπής για τα φωτόνια το 1%. Στην παρούσα ΔΕ επιλέχθηκαν αρχικές ενέργειες αποκοπής τα 100 και 10 eV αντίστοιχα. Εν συνεχεία αυξάνονται ανάλογα με το υλικό και το κατά πόσο παρουσιάζει ενδιαφέρον η παρακολούθηση ενός φωτονίου μέσα σε ένα υλικό από το οποίο δεν θα εξέλθει. Για παράδειγμα, δεν ενδιαφέρει η παρακολούθηση μέχρι χαμηλής ενέργειας ενός φωτονίου το οποίο αλληλεπιδρά μέσα τον κατευθυντή δέσμης, αλλά ενδιαφέρει η παρακολούθησή του όταν πρόκειται να εξέλθει από το δείγμα και μπορεί να κατευθυνθεί προς τον ανιχνευτή, ή όταν αλληλεπιδρά με τον ανιχνευτή, οπότε μπορεί να προκύψει αιχμής διαφυγής.

Όσον αφορά στην ακτινοβολία που προσομοιώνεται, επελέγη αυτή να είναι το ενεργειακό φάσμα ακτίνων-X που προκύπτει από την μηχανή ακτίνων-X για τη μέγιστη ενέργεια ηλεκτρονίων 50keV. Η επιλογή αυτή έγινε γιατί στην περίπτωση αυτή η ταχύτητα προσομοίωσης είναι χαμηλότερη (βλ. §4.3). Όσον αφορά στην γεωμετρία της πηγής των ακτίνων-X, επελέγη μία σημειακή πηγή τοποθετημένη μέσα από το παράθυρο βηρυλλίου της μηχανής ακτίνων-X, που εκπέμπει με γωνία εκπομπής 14°, όπως προέκυψε σε προηγούμενη παράγραφο (βλ. §4.2).

Στο αρχείο εισόδου ορίστηκαν και τρεις εικονικοί ανιχνευτές: δύο ανιχνευτές αλληλεπίδρασης και ένας αποτιθέμενης ενέργειας, με την εξής λογική:

- Ένας εικονικός ανιχνευτής αλληλεπίδρασης στη θέση που βρίσκεται το δείγμα, ώστε να καταγραφεί το ενεργειακό φάσμα των φωτονίων που φτάνουν στο δείγμα
- Ένας εικονικός ανιχνευτής αλληλεπίδρασης στη θέση που βρίσκεται ο ανιχνευτής, προκειμένου να καταγραφεί το φάσμα των φωτονίων που φτάνουν στον ανιχνευτή
- Ένας εικονικός ανιχνευτής αποτιθέμενης ενέργειας στη θέση του ανιχνευτή προκειμένου να καταγραφεί τι φάσμα των φωτονίων που ανιχνεύονται από τον ανιχνευτή.

Όλοι οι εικονικοί ανιχνευτές έχουν παράθυρο ενέργειας από 110eV έως 63000eV, και 1024 κανάλια. Το ενεργειακό παράθυρο των ανιχνευτών και το πλήθος των καναλιών ορίστηκαν βάσει των πραγματικών τιμών που χρησιμοποιούνται στην πειραματική διαδικασία της XRF στο ΕΠΤ-ΕΜΠ.

Πραγματοποιήθηκαν τέσσερις δοκιμαστικές προσομοιώσεις και τα αρχεία εισόδου ονομάστηκαν *sensor_v1.in*, *sensor_v2.in*, *sensor_v3.in* και *sensor_v4.in* αντίστοιχα. Στον παρακάτω Πίνακα 4.9 δίνονται συνοπτικά οι τιμές των ενεργειών αποκοπής και στους Πίνακες 4.10 - 4.13 στο τέλος του παρόντος Κεφαλαίου, δίνονται τα τμήματα των αρχείων εισόδου όπου δηλώνονται οι αντίστοιχες ενέργειες αποκοπής.

Πίνακας 4.9. Ενέργειες αποκοπής (cut-off energies) στα διάφορα υλικά της γεωμετρίας

Αρχείο εισόδου <i>sensor_v1.in</i>	Ενέργειες αποκοπής (eV)		
	Ηλεκτρόνια	Φωτόνια	Ποζιτρόνια
Πυρίτιο	1.0e2	1.0e1	1.0e2
Αλουμίνιο	1.0e2	1.0e1	1.0e2
Βηρύλλιο	1.0e2	1.0e1	1.0e2
Αέρας	1.0e2	1.0e1	1.0e2
Plexiglass	1.0e2	1.0e1	1.0e2
Δείγμα	1.0e2	1.0e1	1.0e2
Αρχείο εισόδου <i>sensor_v2.in</i>	Ενέργειες αποκοπής (eV)		
	Ηλεκτρόνια	Φωτόνια	Ποζιτρόνια
Πυρίτιο	1.0e3	1.0e2	1.0e3
Αλουμίνιο	1.0e3	3.0e2	1.0e3
Βηρύλλιο	1.0e3	1.0e2	1.0e3
Αέρας	1.0e3	3.0e2	1.0e3
Plexiglass	1.0e3	3.0e2	1.0e3
Δείγμα	1.0e3	3.0e2	1.0e3
Αρχείο εισόδου <i>sensor_v3.in</i>	Ενέργειες αποκοπής (eV)		
	Ηλεκτρόνια	Φωτόνια	Ποζιτρόνια
Πυρίτιο	1.0e3	1.0e2	1.0e3
Αλουμίνιο	1.0e3	5.0e2	1.0e3
Βηρύλλιο	1.0e3	1.0e2	1.0e3
Αέρας	1.0e3	5.0e2	1.0e3
Plexiglass	1.0e3	5.0e2	1.0e3
Δείγμα	1.0e3	5.0e2	1.0e3
Αρχείο εισόδου <i>sensor_v4.in</i>	Ενέργειες αποκοπής (eV)		
	Ηλεκτρόνια	Φωτόνια	Ποζιτρόνια
Πυρίτιο	5.0e3	1.0e2	5.0e3
Αλουμίνιο	5.0e3	5.0e3	5.0e3
Βηρύλλιο	5.0e3	1.0e2	5.0e3
Αέρας	5.0e3	5.0e2	5.0e3
Plexiglass	5.0e3	5.0e3	5.0e3
Δείγμα	5.0e3	5.0e2	5.0e3

4.4.4 Εκτέλεση προσομοιώσεων και αποτελέσματα

Πριν την έναρξη των προσομοιώσεων μετονομάζεται, για λόγους συνέχειας και ευκολότερης κατανομής των αρχείων της παρούσας ΔΕ, το εκτελέσιμο αρχείο που χρησιμοποιείται στις προηγούμενες προσομοιώσεις σε *main_process.exe*, το οποίο εκτελείται για τα τέσσερα διαφορετικά αρχεία εισόδου με τις παρακάτω εντολές αντίστοιχα:

main_process.exe < sensor_v1.in

main_process.exe < sensor_v2.in

main_process.exe < sensor_v3.in

main_process.exe < sensor_v4.in

Η προσομοίωση επιλέχθηκε να έχει χρονική διάρκεια 600s, καθώς, όπως έχει παρατηρηθεί από όλα τα αρχεία εξόδου *penmain.dat*, η ταχύτητα προσομοίωσης παραμένει σχεδόν σταθερή καθ' όλη τη διάρκεια προσομοίωσης. Παρακάτω (Πίνακας 4.14) παρατίθενται οι ταχύτητες προσομοίωσης για κάθε ένα αρχείο εισόδου:

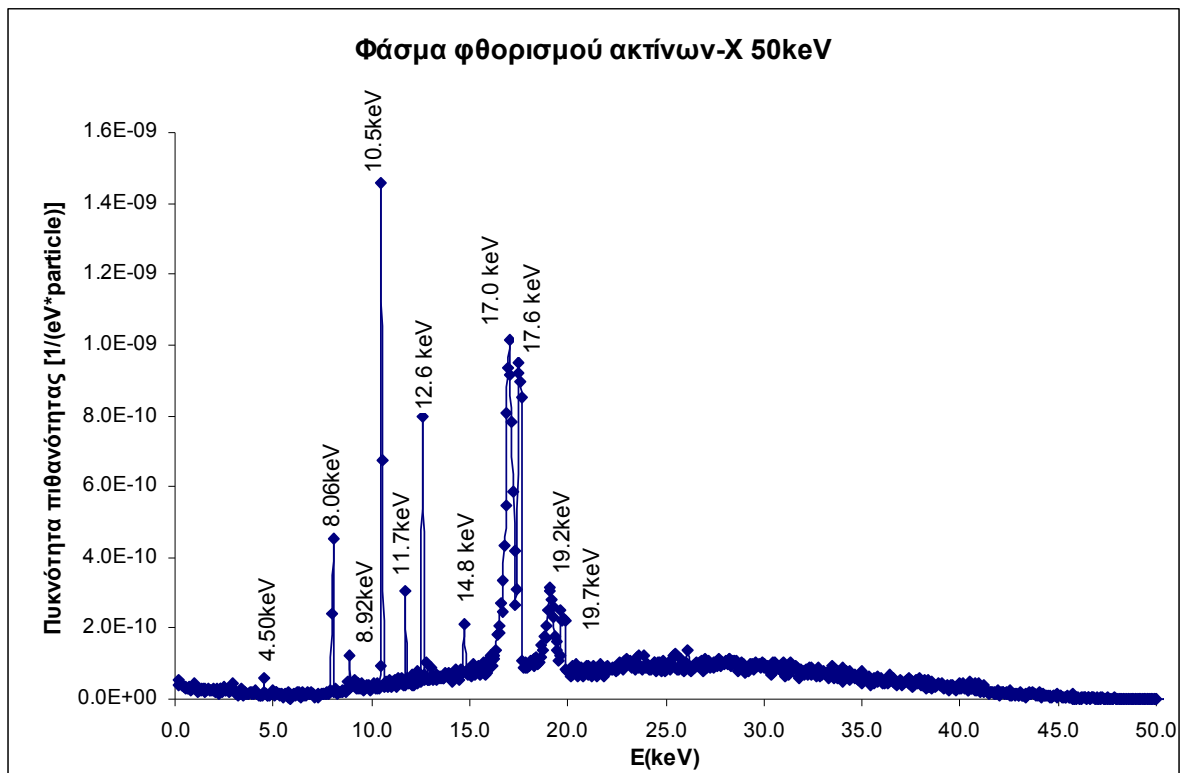
Πίνακας 4.14. Ταχύτητες προσομοίωσης για τις τέσσερις διαφορετικές εκλογές ενεργειών αποκοπής

Αρχείο εισόδου	Ταχύτητα προσομοίωσης (showers/sec)
<i>sensor_v1.in</i>	9.00E+02
<i>sensor_v2.in</i>	1.44E+03
<i>sensor_v3.in</i>	1.79E+03
<i>sensor_v4.in</i>	3.56E+03

Όπως φαίνεται από τα αποτελέσματα του Πίνακα 4.14 η ταχύτητα προσομοίωσης για τις τιμές αποκοπής του αρχείου *sensor_v4.in* είναι περίπου τέσσερις (4) φορές μεγαλύτερη από την ταχύτητα προσομοίωσης που προκύπτει όταν χρησιμοποιούνται οι ενέργειες αποκοπής του αρχείου *sensor_v1.in*. Τονίζεται, πως οι ενέργειες αποκοπής αυξήθηκαν κατά πολύ σε υλικά, μέσα στα οποία όταν διεισδύσει κάποιο φωτόνιο, η παρακολούθηση της «ιστορίας» του δεν παρουσιάζει κανένα ενδιαφέρον στο πλαίσιο της παρούσας ΔΕ, και επίσης δεν υπάρχει η πιθανότητα να αλλοιώσει τα αποτελέσματα της προσομοίωσης σε τέτοιο βαθμό ώστε αυτά να μην θεωρούνται αποδεκτά για την επίτευξη του στόχου της

εργασίας αυτής. Συνεπώς, οι τιμές ενέργειας αποκοπής του αρχείου *sensor_v4.in* μπορούν να οδηγήσουν σε ικανοποιητικά αποτελέσματα με αρκετά μεγάλη επιτάχυνση της διαδικασίας προσομοίωσης.

Στο Σχήμα 4.10 παρατίθεται ένα τυπικό φάσμα προσομοίωσης (υπολογιστικό φάσμα) του φθορισμού του δείγματος, όπου διακρίνονται οι χαρακτηριστικές ακτίνες-X των ιχνοστοιχείων τα οποία περιέχονται στο δείγμα. Ακριβέστερα, διακρίνονται φωτοκορυφές του τιτανίου (Ti) στα 4.50keV, του χαλκού (Cu) στα 8.06 & 8.92keV, του αρσενικού (As) στα 10.50 & 11.70keV, του μόλυβδου (Pb) στα 10.50, 12.60 & 14.80keV και του μολυβδαινίου (Mo) (υλικό της ανόδου της μηχανής) στα 17.0¹⁵, 17.60 & 19.20¹⁶ και 19.70keV



Σχήμα 4.10 Τυπικό φάσμα προσομοίωσης του φθορισμού του δείγματος, με διεγείρουσα ακτινοβολία μέγιστης ενέργειας 50keV

Εν κατακλείδι, στο παρόν Κεφάλαιο σχεδιάστηκε η ολοκληρωμένη (αν και απλοποιημένη) γεωμετρία της διάταξης XRF του ΕΠΤ-ΕΜΠ και επετεύχθη η προσομοίωση της λειτουργίας της, από την εκπομπή των ηλεκτρονίων από την κάθοδο της μηχανής

¹⁵ Αιχμή μη-ελαστικής σκέδασης των χαρακτηριστικών ακτίνων-X του Mo ενέργειας 17.6keV

¹⁶ Αιχμή μη-ελαστικής σκέδασης των χαρακτηριστικών ακτίνων-X του Mo ενέργειας 19.7keV

ακτίνων- X , έως τη συλλογή του φάσματος φθορισμού από τον ανιχνευτή της διάταξης. Απεδείχθη λοιπόν ότι είναι δυνατή η πραγματοποίηση αυτού του είδους προσομοίωση. Πρέπει να επισημανθεί ότι, καθώς τα προγράμματα προσομοίωσης της αλληλεπίδρασης ακτινοβολίας με την ύλη, όπως είναι ο κώδικας PENELOPE, είναι συνήθως προσανατολισμένα για την προσομοίωση φωτονίων και σωματιδίων υψηλότερων ενεργειών, δεν ήταν καθόλου δεδομένο ότι θα ήταν δυνατή η προσομοίωση φωτονίων τόσο χαμηλής ενέργειας, όσο είναι οι ακτίνες- X που ανιχνεύονται στο φάσμα του Σχήματος 4.10.

Στα πλαίσια του Κεφαλαίου αυτού, δοκιμάστηκαν επιπλέον και διάφορες τεχνικές για την επιτάχυνση της διαδικασίας προσομοίωσης και αποδείχθηκε ότι αυτό μπορεί να επιτευχθεί με μείωση της γωνίας της εξερχόμενης δέσμης από 22° σε 14° (επιτάχυνση κατά ~ 2 φορές) και κατάλληλη επιλογή των ενεργειών αποκοπής της προσομοίωσης (επιτάχυνση κατά ~ 4 φορές).


```
...  
BODY      ( 3)   Be window(collimator's)  
MATERIAL(  2)  
SURFACE (  1), SIDE POINTER=(+1)  
SURFACE (  6), SIDE POINTER=(-1)  
SURFACE (  5), SIDE POINTER=(-1)  
000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000  
BODY      ( 4)   8iki digmatos  
MATERIAL(  1)  
SURFACE (  7), SIDE POINTER=(+1)  
SURFACE (  8), SIDE POINTER=(-1)  
SURFACE (  9), SIDE POINTER=(-1)  
000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000  
BODY      ( 5)   8iki digmatos  
MATERIAL(  1)  
SURFACE (  7), SIDE POINTER=(-1)  
SURFACE ( 11), SIDE POINTER=(+1)  
SURFACE (  9), SIDE POINTER=(-1)  
SURFACE ( 10), SIDE POINTER=(+1)  
000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000  
BODY      ( 6)   digma  
MATERIAL(  3)  
BODY      ( 5)  
SURFACE ( 11), SIDE POINTER=(+1)  
SURFACE (  7), SIDE POINTER=(-1)  
SURFACE ( 10), SIDE POINTER=(-1)  
000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000  
MODULE (  7)   air  
MATERIAL(  3)  
BODY      ( 1)  
BODY      ( 2)  
BODY      ( 3)  
BODY      ( 4)  
BODY      ( 5)  
BODY      ( 6)  
000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000  
END      000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000
```

Πίνακας 4.3. Αρχείο εισόδου beam_aperture.in

```
TITLE Simulation with X-ray spectrum from Mo anode

>>>>>>> Source definition.
SKPAR 2 [Primary particles: 1=electron, 2=photon,
3=positron]
SPECTR 2.2285e2 2.7012e-8
SPECTR 4.6855e2 6.0218e-10
SPECTR 7.1426e2 0.0
SPECTR 9.5996e2 3.8281e-9
SPECTR 1.2057e3 1.4151e-8
SPECTR 1.4514e3 3.6914e-7
SPECTR 1.6971e3 1.7893e-8
SPECTR 1.9428e3 8.5036e-8
SPECTR 2.1885e3 6.4588e-7
SPECTR 2.4342e3 3.3752e-7
SPECTR 2.6799e3 1.1226e-8
SPECTR 2.9256e3 9.0757e-9
SPECTR 3.1713e3 8.2584e-9
SPECTR 3.4170e3 9.8499e-9
SPECTR 3.6627e3 1.0796e-8
SPECTR 3.9084e3 1.1398e-8
SPECTR 4.1541e3 1.2302e-8
SPECTR 4.3998e3 1.3592e-8
SPECTR 4.6455e3 1.2818e-8
SPECTR 4.8912e3 1.6560e-8
SPECTR 5.1369e3 1.6861e-8
SPECTR 5.3826e3 1.6517e-8
SPECTR 5.6283e3 1.8969e-8
SPECTR 5.8740e3 2.0001e-8
SPECTR 6.1197e3 1.8495e-8
SPECTR 6.3654e3 2.0689e-8
SPECTR 6.6111e3 1.9227e-8
SPECTR 6.8568e3 2.1506e-8
SPECTR 7.1025e3 1.9571e-8
SPECTR 7.3482e3 2.0646e-8
SPECTR 7.5939e3 2.3227e-8
SPECTR 7.8396e3 2.0345e-8
SPECTR 8.0854e3 2.2539e-8
SPECTR 8.3311e3 2.1420e-8
SPECTR 8.5768e3 2.2367e-8
SPECTR 8.8225e3 2.2238e-8
SPECTR 9.0682e3 2.0173e-8
SPECTR 9.3139e3 2.1850e-8
SPECTR 9.5596e3 2.0947e-8
SPECTR 9.8053e3 2.1248e-8
SPECTR 1.0051e4 1.9227e-8
SPECTR 1.0297e4 1.8409e-8
SPECTR 1.0542e4 2.0044e-8
SPECTR 1.0788e4 2.0044e-8
SPECTR 1.1034e4 1.9829e-8
SPECTR 1.1279e4 1.9227e-8
SPECTR 1.1525e4 2.0345e-8
SPECTR 1.1771e4 2.0388e-8
SPECTR 1.2017e4 1.9012e-8
SPECTR 1.2262e4 1.7721e-8
SPECTR 1.2508e4 1.6302e-8
SPECTR 1.2754e4 1.8495e-8
SPECTR 1.2999e4 1.7936e-8
SPECTR 1.3245e4 1.7506e-8
SPECTR 1.3491e4 1.5571e-8
SPECTR 1.3737e4 1.6431e-8
SPECTR 1.3982e4 1.7721e-8
SPECTR 1.4228e4 1.6216e-8
...

```

```

...
SPECTR 1.4474e4      1.6517e-8
SPECTR 1.4719e4      1.5011e-8
SPECTR 1.4965e4      1.4538e-8
SPECTR 1.5211e4      1.4194e-8
SPECTR 1.5456e4      1.5270e-8
SPECTR 1.5702e4      1.2474e-8
SPECTR 1.5948e4      1.4323e-8
SPECTR 1.6194e4      1.3678e-8
SPECTR 1.6439e4      1.3377e-8
SPECTR 1.6685e4      1.3248e-8
SPECTR 1.6931e4      1.3248e-8
SPECTR 1.7176e4      1.3377e-8
SPECTR 1.7422e4      4.1077e-7
SPECTR 1.7668e4      1.2130e-8
SPECTR 1.7913e4      1.3119e-8
SPECTR 1.8159e4      1.2388e-8
SPECTR 1.8405e4      1.1183e-8
SPECTR 1.8651e4      1.1785e-8
SPECTR 1.8896e4      1.1140e-8
SPECTR 1.9142e4      1.1484e-8
SPECTR 1.9388e4      1.0194e-8
SPECTR 1.9633e4      7.4670e-8
SPECTR 1.9879e4      1.7420e-8
SPECTR 2.0125e4      8.1724e-9
SPECTR 2.0371e4      7.1831e-9
SPECTR 2.0616e4      6.8820e-9
SPECTR 2.0862e4      7.1401e-9
SPECTR 2.1108e4      7.1831e-9
SPECTR 2.1353e4      6.2799e-9
SPECTR 2.1599e4      7.0971e-9
SPECTR 2.1845e4      6.8820e-9
SPECTR 2.2090e4      5.6347e-9
SPECTR 2.2336e4      6.0648e-9
SPECTR 2.2582e4      6.7100e-9
SPECTR 2.2828e4      6.5379e-9
SPECTR 2.3073e4      7.0111e-9
SPECTR 2.3319e4      6.1508e-9
SPECTR 2.3565e4      6.1508e-9
SPECTR 2.3810e4      6.9251e-9
SPECTR 2.4056e4      6.8820e-9
SPECTR 2.4302e4      5.9358e-9
SPECTR 2.4547e4      5.8067e-9
SPECTR 2.4793e4      5.9788e-9
SPECTR 2.5039e4      4.7744e-9
SPECTR 2.5285e4      5.4196e-9
SPECTR 2.5530e4      5.3766e-9
SPECTR 2.5776e4      5.2906e-9
SPECTR 2.6022e4      6.0218e-9
SPECTR 2.6267e4      4.1722e-9
SPECTR 2.6513e4      5.2476e-9
SPECTR 2.6759e4      5.8067e-9
SPECTR 2.7004e4      4.6884e-9
SPECTR 2.7250e4      5.2476e-9
SPECTR 2.7496e4      4.9465e-9
SPECTR 2.7742e4      4.6024e-9
SPECTR 2.7987e4      4.4733e-9
SPECTR 2.8233e4      4.7314e-9
SPECTR 2.8479e4      4.7314e-9
SPECTR 2.8724e4      4.3443e-9
SPECTR 2.8970e4      4.1722e-9
SPECTR 2.9216e4      5.5486e-9
SPECTR 2.9462e4      3.9572e-9
SPECTR 2.9707e4      4.2152e-9
...

```



```

...
SPECTR 2.9953e4      4.9035e-9
SPECTR 3.0199e4      3.7421e-9
SPECTR 3.0444e4      3.8711e-9
SPECTR 3.0690e4      3.6131e-9
SPECTR 3.0936e4      4.3873e-9
SPECTR 3.1181e4      4.4733e-9
SPECTR 3.1427e4      4.1292e-9
SPECTR 3.1673e4      3.5270e-9
SPECTR 3.1919e4      3.3980e-9
SPECTR 3.2164e4      3.3550e-9
SPECTR 3.2410e4      3.3550e-9
SPECTR 3.2656e4      3.1399e-9
SPECTR 3.2901e4      2.9679e-9
SPECTR 3.3147e4      3.3980e-9
SPECTR 3.3393e4      3.8281e-9
SPECTR 3.3638e4      3.2260e-9
SPECTR 3.3884e4      2.8388e-9
SPECTR 3.4130e4      3.5270e-9
SPECTR 3.4376e4      3.4410e-9
SPECTR 3.4621e4      2.7528e-9
SPECTR 3.4867e4      3.3550e-9
SPECTR 3.5113e4      3.6131e-9
SPECTR 3.5358e4      2.7958e-9
SPECTR 3.5604e4      3.0109e-9
SPECTR 3.5850e4      2.6668e-9
SPECTR 3.6096e4      2.0216e-9
SPECTR 3.6341e4      3.0969e-9
SPECTR 3.6587e4      2.3227e-9
SPECTR 3.6833e4      2.0216e-9
SPECTR 3.7078e4      2.1936e-9
SPECTR 3.7324e4      2.3227e-9
SPECTR 3.7570e4      3.0539e-9
SPECTR 3.7815e4      2.1506e-9
SPECTR 3.8061e4      2.1076e-9
SPECTR 3.8307e4      2.1076e-9
SPECTR 3.8553e4      1.8926e-9
SPECTR 3.8798e4      2.4087e-9
SPECTR 3.9044e4      1.6345e-9
SPECTR 3.9290e4      2.1076e-9
SPECTR 3.9535e4      1.9786e-9
SPECTR 3.9781e4      1.8065e-9
SPECTR 4.0027e4      2.3227e-9
SPECTR 4.0272e4      1.7205e-9
SPECTR 4.0518e4      1.7205e-9
SPECTR 4.0764e4      1.7205e-9
SPECTR 4.1010e4      1.8926e-9
SPECTR 4.1255e4      1.4624e-9
SPECTR 4.1501e4      1.5915e-9
SPECTR 4.1747e4      1.3764e-9
SPECTR 4.1992e4      1.7205e-9
SPECTR 4.2238e4      1.4624e-9
SPECTR 4.2484e4      1.0323e-9
SPECTR 4.2730e4      1.5485e-9
SPECTR 4.2975e4      1.2904e-9
SPECTR 4.3221e4      1.4624e-9
SPECTR 4.3467e4      1.5054e-9
SPECTR 4.3712e4      1.2044e-9
SPECTR 4.3958e4      1.1183e-9
SPECTR 4.4204e4      1.2044e-9
SPECTR 4.4449e4      8.6025e-10
SPECTR 4.4695e4      8.1724e-10
SPECTR 4.4941e4      6.0218e-10
...

```

```

...
SPECTR 4.5187e4      6.0218e-10
SPECTR 4.5432e4      7.7423e-10
SPECTR 4.5678e4      5.5917e-10
SPECTR 4.5924e4      4.7314e-10
SPECTR 4.6169e4      5.5917e-10
SPECTR 4.6415e4      8.1724e-10
SPECTR 4.6661e4      6.4519e-10
SPECTR 4.6906e4      5.1615e-10
SPECTR 4.7152e4      7.7423e-10
SPECTR 4.7398e4      6.8820e-10
SPECTR 4.7644e4      2.5808e-10
SPECTR 4.7889e4      3.0109e-10
SPECTR 4.8135e4      3.4410e-10
SPECTR 4.8381e4      3.4410e-10
SPECTR 4.8626e4      2.1506e-10
SPECTR 4.8872e4      1.2904e-10
SPECTR 4.9118e4      4.3013e-10
SPECTR 4.9363e4      2.5808e-10
SPECTR 4.9609e4      2.5808e-10
SPECTR 4.9855e4      2.1506e-10
SPECTR 5.0101e4      -0.0
SPOSIT 0.0 0.0 0.0      [Coordinates of the source]
SDIREC 0.0 0.0      [Beam axis direction angles, in deg]
SAPERT 3.3      [Beam aperture, in deg]

>>>>>>> Material data and simulation parameters.
NMAT 4      [Number of different materials, .1e.10]
SIMPAR 1 1.0e2 1.0e1 1.0e2 0.1 0.1 5e3 1e3      [M,EABS,C1,C2,WCC,WCR]
SIMPAR 2 1.0e2 1.0e1 1.0e2 0.1 0.1 5e3 1e3      [M,EABS,C1,C2,WCC,WCR]
SIMPAR 3 1.0e2 1.0e1 1.0e2 0.1 0.1 5e3 1e3      [M,EABS,C1,C2,WCC,WCR]
SIMPAR 4 1.0e2 1.0e1 1.0e2 0.1 0.1 5e3 1e3      [M,EABS,C1,C2,WCC,WCR]
PFNAME ylika.mat      [Material definition file, 20 chars]

>>>>>>> Geometry definition file.
GEOMFN sensor_simple.geo      [Geometry definition file, 20 chars]

>>>>>>> Impact detectors (up to 5 different detectors).
IMPDET 1.1e2 6.3e4 1024 0      [Energy window, no. of channels and IPSF]
IDBODY 6      [Active body; one line for each active body]

>>>>>>> Dose distribution.
GRIDX -3.2,3.2      [X coordinates of the enclosure vertices]
GRIDY -3.2,3.2      [Y coordinates of the enclosure vertices]
GRIDZ 13,14      [Z coordinates of the enclosure vertices]
GRIDBN 100,100,1      [Numbers of bins]

>>>>>>> Job properties
RESUME dump1.dat      [Resume from this dump file, 20 chars]
DUMPTO dump1.dat      [Generate this dump file, 20 chars]
DUMPP 10800      [Dumping period, in sec]

NSIMSH 1.0e9      [Desired number of simulated showers]
TIME 1.83e5      [Allotted simulation time, in sec]

```

Πίνακας 4.4. Πρόγραμμα spectrum_in για τη δημιουργία φασμάτων σε μορφή κατάλληλη ώστε να διαβάζονται από το αρχείο εισόδου

```

program spectrum_in
open(5, file= 'pm_soc_impdet_1.dat')
open(6, file= 'output.dat')
do 100 I=1,256
  read(5,20) a1,a2,a3
  format(3x,3(e12.6,2x))
  write(6,25) a1,a2
  format('SPECTR',1x,e12.6,5x,e12.6,5x)
CONTINUE
end

```

Πίνακας 4.5. Τμήμα αρχείου εξόδου του ανιχνευτή δόσης pm_2d_dose_1.dat

```

# Results from PENMAIN. 3D dose distribution.
# Plane # 1 Z= 1.35000E+01 cm
# columns 1 to 3: I1, I2, I3
# columns 4-6: x, y, z (cm).
# 7th column: dose (eV/g).
# 8th column: statistical uncertainty (3 sigma).

```

1	1	1	-3.16800E+00	-3.16800E+00	1.35000E+01	1.00000E-35	1.0E-35
1	2	1	-3.16800E+00	-3.10400E+00	1.35000E+01	1.00000E-35	1.0E-35
1	3	1	-3.16800E+00	-3.04000E+00	1.35000E+01	1.00000E-35	1.0E-35
1	4	1	-3.16800E+00	-2.97600E+00	1.35000E+01	1.00000E-35	1.0E-35
1	5	1	-3.16800E+00	-2.91200E+00	1.35000E+01	1.00000E-35	1.0E-35
1	6	1	-3.16800E+00	-2.84800E+00	1.35000E+01	1.00000E-35	1.0E-35
1	7	1	-3.16800E+00	-2.78400E+00	1.35000E+01	1.00000E-35	1.0E-35
1	8	1	-3.16800E+00	-2.72000E+00	1.35000E+01	1.00000E-35	1.0E-35
1	9	1	-3.16800E+00	-2.65600E+00	1.35000E+01	1.00000E-35	1.0E-35
1	10	1	-3.16800E+00	-2.59200E+00	1.35000E+01	1.00000E-35	1.0E-35
1	11	1	-3.16800E+00	-2.52800E+00	1.35000E+01	1.00000E-35	1.0E-35
1	12	1	-3.16800E+00	-2.46400E+00	1.35000E+01	1.00000E-35	1.0E-35
1	13	1	-3.16800E+00	-2.40000E+00	1.35000E+01	1.00000E-35	1.0E-35
1	14	1	-3.16800E+00	-2.33600E+00	1.35000E+01	1.00000E-35	1.0E-35
1	15	1	-3.16800E+00	-2.27200E+00	1.35000E+01	1.00000E-35	1.0E-35
1	16	1	-3.16800E+00	-2.20800E+00	1.35000E+01	1.00000E-35	1.0E-35

...

Πίνακας 4.8. Αρχείο γεωμετρίας sensor_final.geo

```
XXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXX
A simple model of our XRF disposition...

Materials: 1.- Silicon
           2.- Aluminium
           3.- Beryllium
           4.- Air
           5.- Plexiglass
           6.- digma_xrf

C
C **** X-rays.
C
0000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000
SURFACE ( 1)  Plane Z=0
INDICES=( 0, 0, 0, 1, 0)
0000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000
SURFACE ( 2)  Plane Z=0.5
INDICES=( 0, 0, 0, 1,-1)
Z-SCALE=( 0.5000000000000000E+00, 0)
0000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000
SURFACE ( 3)  Plane Z=0.58
INDICES=( 0, 0, 0, 1,-1)
Z-SCALE=( 0.5800000000000000E+00, 0)
0000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000
SURFACE ( 4)  Plane Z=0.60
INDICES=( 0, 0, 0, 1,-1)
Z-SCALE=( 0.6000000000000000E+00, 0)
0000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000
SURFACE ( 5)  Plane Z=0.62
INDICES=( 0, 0, 0, 1,-1)
Z-SCALE=( 0.6200000000000000E+00, 0)
0000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000
SURFACE ( 6)  Plane Z=0.70
INDICES=( 0, 0, 0, 1,-1)
Z-SCALE=( 0.7000000000000000E+00, 0)
0000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000
SURFACE ( 7)  Cylinder R=0.51
INDICES=( 1, 1, 0, 0,-1)
X-SCALE=( 0.5100000000000000E-00, 0)
Y-SCALE=( 0.5100000000000000E-00, 0)
0000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000
SURFACE ( 8)  Cylinder R=1.1
INDICES=( 1, 1, 0, 0,-1)
X-SCALE=( 1.1000000000000000E-00, 0)
Y-SCALE=( 1.1000000000000000E-00, 0)
0000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000
SURFACE ( 9)  Cylinder R=1.15
INDICES=( 1, 1, 0, 0,-1)
X-SCALE=( 1.1500000000000000E-00, 0)
Y-SCALE=( 1.1500000000000000E-00, 0)
0000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000
SURFACE ( 10) Plane Z=0.6175
INDICES=( 0, 0, 0, 1,-1)
Z-SCALE=( 0.6175000000000000E-00, 0)
0000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000
...

```

```
...
SURFACE ( 11)   Cylinder R=1.2
INDICES=( 1, 1, 0, 0,-1)
X-SCALE=( 1.2000000000000000E-00,  0)
Y-SCALE=( 1.2000000000000000E-00,  0)
000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000
SURFACE ( 12)   Cylinder R=0.3
INDICES=( 1, 1, 0, 0,-1)
X-SCALE=( 0.1000000000000000E-00,  0)
Y-SCALE=( 0.1000000000000000E-00,  0)
000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000
SURFACE ( 13)   Plane Z=0.0001
INDICES=( 0, 0, 0, 1, 1)
Z-SCALE=( 1.0000000000000000E-04,  0)
000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000
SURFACE ( 14)   Plane Z=12
INDICES=( 0, 0, 0, 1,-1)
Z-SCALE=( 1.2000000000000000E+01,  0)
000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000
SURFACE ( 15)   Cylinder R=3
INDICES=( 1, 1, 0, 0,-1)
X-SCALE=( 3.0000000000000000E-00,  0)
Y-SCALE=( 3.0000000000000000E-00,  0)
000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000
SURFACE ( 16)   Cylinder R=1
INDICES=( 1, 1, 0, 0,-1)
X-SCALE=( 1.0000000000000000E-00,  0)
Y-SCALE=( 1.0000000000000000E-00,  0)
000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000
SURFACE ( 17)   Cylinder R=0.75
INDICES=( 1, 1, 0, 0,-1)
X-SCALE=( 0.7500000000000000E-00,  0)
Y-SCALE=( 0.7500000000000000E-00,  0)
000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000
SURFACE ( 18)   Plane Z=0.005
INDICES=( 0, 0, 0, 1,-1)
Z-SCALE=( 0.5000000000000000E-02,  0)
000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000
SURFACE ( 19)   Plane Z=0
INDICES=( 0, 0, 0, 1, 0)
  OMEGA=( 0.0000000000000000E+01,  0) DEG
  THETA=( 6.0000000000000000E+01,  0) DEG
  PHI=( 9.0000000000000000E+01,  0) DEG
Y-SHIFT=( 0.5000000000000000E+00,  0)
Z-SHIFT=( 1.5500000000000000E+01,  0)
000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000
SURFACE ( 20)   Plane Z=0.05
INDICES=( 0, 0, 0, 1,-1)
Z-SCALE=( 0.0500000000000000E+00,  0)
  OMEGA=( 0.0000000000000000E+01,  0) DEG
  THETA=( 6.0000000000000000E+01,  0) DEG
  PHI=( 9.0000000000000000E+01,  0) DEG
Y-SHIFT=( 0.5000000000000000E+00,  0)
Z-SHIFT=( 1.5500000000000000E+01,  0)
000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000
...
```

```
...
SURFACE ( 21) Cylinder R=1.9
INDICES=( 1, 1, 0, 0,-1)
X-SCALE=( 1.9000000000000000E-00, 0)
Y-SCALE=( 1.9000000000000000E-00, 0)
  OMEGA=( 0.0000000000000000E+01, 0) DEG
  THETA=( 6.0000000000000000E+01, 0) DEG
  PHI=( 9.0000000000000000E+01, 0) DEG
Y-SHIFT=( 0.5000000000000000E+00, 0)
Z-SHIFT=( 1.5500000000000000E+01, 0)
000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000
SURFACE ( 22) Cylinder R=1.85
INDICES=( 1, 1, 0, 0,-1)
X-SCALE=( 1.8500000000000000E-00, 0)
Y-SCALE=( 1.8500000000000000E-00, 0)
  OMEGA=( 0.0000000000000000E+01, 0) DEG
  THETA=( 6.0000000000000000E+01, 0) DEG
  PHI=( 9.0000000000000000E+01, 0) DEG
Y-SHIFT=( 0.5000000000000000E+00, 0)
Z-SHIFT=( 1.5500000000000000E+01, 0)
000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000
SURFACE ( 23) Plane Z=-0.8
INDICES=( 0, 0, 0, 1, 1)
Z-SCALE=( 0.8000000000000000E+00, 0)
  OMEGA=( 0.0000000000000000E+01, 0) DEG
  THETA=( 6.0000000000000000E+01, 0) DEG
  PHI=( 9.0000000000000000E+01, 0) DEG
Y-SHIFT=( 0.5000000000000000E+00, 0)
Z-SHIFT=( 1.5500000000000000E+01, 0)
000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000
BODY ( 1) detector
MATERIAL( 1)
SURFACE ( 1), SIDE POINTER=(+1)
SURFACE ( 2), SIDE POINTER=(-1)
SURFACE ( 7), SIDE POINTER=(-1)
000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000
BODY ( 2) Be window(detector's)
MATERIAL( 3)
SURFACE ( 10), SIDE POINTER=(+1)
SURFACE ( 5), SIDE POINTER=(-1)
SURFACE ( 7), SIDE POINTER=(-1)
000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000
BODY ( 3) Al shield side(detector's)
MATERIAL( 2)
SURFACE ( 1), SIDE POINTER=(+1)
SURFACE ( 5), SIDE POINTER=(-1)
SURFACE ( 8), SIDE POINTER=(+1)
SURFACE ( 9), SIDE POINTER=(-1)
000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000
BODY ( 4) Al shield up(detector's)
MATERIAL( 2)
SURFACE ( 4), SIDE POINTER=(+1)
SURFACE ( 5), SIDE POINTER=(-1)
SURFACE ( 7), SIDE POINTER=(+1)
SURFACE ( 9), SIDE POINTER=(-1)
000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000
...
```



```

...
BODY      ( 11)  digma
MATERIAL(   6)
BODY      ( 10)
SURFACE  ( 23), SIDE POINTER=(+1)
SURFACE  ( 19), SIDE POINTER=(-1)
SURFACE  ( 22), SIDE POINTER=(-1)
000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000
MODULE   ( 12)   air
MATERIAL(   4)
MODULE   (  8)
BODY     (  5)
BODY     (  6)
BODY     (  7)
BODY     (  9)
BODY     ( 10)
BODY     ( 11)
000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000
END      000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000

```


Πίνακας 4.10. Απόσπασμα του αρχείου sensor_v1.in

```
>>>>>>> Material data and simulation parameters.
NMAT      6 [Number of different materials, .1e.10]
SIMPARG 1 1.0e2 1.0e1 1.0e2 0.1 0.1 5e3 1e3 [M,EABS,C1,C2,WCC,WCR]
SIMPARG 2 1.0e2 1.0e1 1.0e2 0.1 0.1 5e3 1e3 [M,EABS,C1,C2,WCC,WCR]
SIMPARG 3 1.0e2 1.0e1 1.0e2 0.1 0.1 5e3 1e3 [M,EABS,C1,C2,WCC,WCR]
SIMPARG 4 1.0e2 1.0e1 1.0e2 0.1 0.1 5e3 1e3 [M,EABS,C1,C2,WCC,WCR]
SIMPARG 5 1.0e2 1.0e1 1.0e2 0.1 0.1 5e3 1e3 [M,EABS,C1,C2,WCC,WCR]
SIMPARG 6 1.0e2 1.0e1 1.0e2 0.1 0.1 5e3 1e3 [M,EABS,C1,C2,WCC,WCR]
PFNAME    ylika2.mat [Material definition file, 20 chars]
```

Πίνακας 4.11. Απόσπασμα του αρχείου sensor_v2.in

```
>>>>>>> Material data and simulation parameters.
NMAT      6 [Number of different materials, .1e.10]
SIMPARG 1 1.0e3 1.0e2 1.0e3 0.1 0.1 5e3 1e3 [M,EABS,C1,C2,WCC,WCR]
SIMPARG 2 1.0e3 3.0e2 1.0e3 0.1 0.1 5e3 1e3 [M,EABS,C1,C2,WCC,WCR]
SIMPARG 3 1.0e3 1.0e2 1.0e3 0.1 0.1 5e3 1e3 [M,EABS,C1,C2,WCC,WCR]
SIMPARG 4 1.0e3 3.0e2 1.0e3 0.1 0.1 5e3 1e3 [M,EABS,C1,C2,WCC,WCR]
SIMPARG 5 1.0e3 3.0e2 1.0e3 0.1 0.1 5e3 1e3 [M,EABS,C1,C2,WCC,WCR]
SIMPARG 6 1.0e3 3.0e2 1.0e3 0.1 0.1 5e3 1e3 [M,EABS,C1,C2,WCC,WCR]
PFNAME    ylika2.mat [Material definition file, 20 chars]
```

Πίνακας 4.12. Απόσπασμα του αρχείου sensor_v3.in

```
>>>>>>> Material data and simulation parameters.
NMAT      6 [Number of different materials, .1e.10]
SIMPARG 1 1.0e3 1.0e2 1.0e3 0.1 0.1 5e3 1e3 [M,EABS,C1,C2,WCC,WCR]
SIMPARG 2 1.0e3 5.0e2 1.0e3 0.1 0.1 5e3 1e3 [M,EABS,C1,C2,WCC,WCR]
SIMPARG 3 1.0e3 1.0e2 1.0e3 0.1 0.1 5e3 1e3 [M,EABS,C1,C2,WCC,WCR]
SIMPARG 4 1.0e3 5.0e2 1.0e3 0.1 0.1 5e3 1e3 [M,EABS,C1,C2,WCC,WCR]
SIMPARG 5 1.0e3 5.0e2 1.0e3 0.1 0.1 5e3 1e3 [M,EABS,C1,C2,WCC,WCR]
SIMPARG 6 1.0e3 5.0e2 1.0e3 0.1 0.1 5e3 1e3 [M,EABS,C1,C2,WCC,WCR]
PFNAME    ylika2.mat [Material definition file, 20 chars]
```

Πίνακας 4.13. Απόσπασμα του αρχείου sensor_v4.in

```
>>>>>>> Material data and simulation parameters.
NMAT      6 [Number of different materials, .1e.10]
SIMPARG 1 5.0e3 1.0e2 5.0e3 0.2 0.2 5e3 5e3 [M,EABS,C1,C2,WCC,WCR]
SIMPARG 2 5.0e3 5.0e3 5.0e3 0.2 0.2 5e3 5e3 [M,EABS,C1,C2,WCC,WCR]
SIMPARG 3 5.0e3 1.0e2 5.0e3 0.2 0.2 5e3 5e3 [M,EABS,C1,C2,WCC,WCR]
SIMPARG 4 5.0e3 5.0e2 5.0e3 0.2 0.2 5e3 5e3 [M,EABS,C1,C2,WCC,WCR]
SIMPARG 5 5.0e3 5.0e3 5.0e3 0.2 0.2 5e3 5e3 [M,EABS,C1,C2,WCC,WCR]
SIMPARG 6 5.0e3 5.0e2 5.0e3 0.2 0.2 5e3 5e3 [M,EABS,C1,C2,WCC,WCR]
PFNAME    ylika2.mat [Material definition file, 20 chars]
```

Κεφάλαιο 5: Μελέτη της διάταξης XRF του ΕΠΤ-ΕΜΠ με τη μέθοδο της προσομοίωσης Monte-Carlo

5.1 Εισαγωγή

Στο προηγούμενο Κεφάλαιο παρουσιάστηκε η διερεύνηση της δυνατότητας προσομοίωσης της διάταξης XRF του ΕΠΤ-ΕΜΠ με χρήση του κώδικα PENELOPE. Αφού έγιναν μία σειρά από παραδοχές-απλοποιήσεις της διάταξης και επιλέχθηκαν σημαντικές παράμετροι της προσομοίωσης, η προσομοίωση της διάταξης XRF μπορούσε να περάσει στο στάδιο της υλοποίησης. Οπότε, στο παρόν Κεφάλαιο παρουσιάζεται η προσπάθεια που έγινε στο πλαίσιο της παρούσας ΔΕ με σκοπό την προσομοίωση της τεχνικής XRF, όπως αυτή υλοποιείται στο ΕΠΤ-ΕΜΠ. Αρχικά, προσομοιώνεται ένα απλό σενάριο ακτινοβολήσης ενός απλοποιημένου δείγματος, με χρήση ορισμένων παραμέτρων που χρησιμοποιούνται κατά την πειραματική διαδικασία. Επιπλέον, επιχειρείται και η ποιοτική σύγκριση φασμάτων προσομοίωσης με πραγματικά φάσματα φθορισμού, τα οποία ελήφθησαν με όσο το δυνατόν παραπλήσιες συνθήκες στα πλαίσια της παρούσας ΔΕ του ΕΠΤ-ΕΜΠ.

Με την τεχνική της προσομοίωσης ως εργαλείο, μπορούν να μελετηθούν οι επιδράσεις διαφόρων παραμέτρων της γεωμετρίας της διάταξης στο τελικό αποτέλεσμα, που είναι το συλλεγόμενο φάσμα, χωρίς να χρειάζεται να κατασκευαστεί νέα διάταξη ή να πραγματοποιηθεί μεγάλος όγκος πειραμάτων. Μπορεί έτσι να μελετηθεί η επίδραση των διαστάσεων του κατευθυντή της δέσμης, της χρήσης φίλτρων, της αλλαγής γωνιών μεταξύ της δέσμης και του δείγματος, της απόστασης δείγματος από τον ανιχνευτή, της σύστασης του δείγματος, να εξετασθεί η χρήση δευτερογενούς στόχου κλπ. Επιπλέον μπορεί να εξετασθεί η επίδραση των συνθηκών λειτουργίας της διάταξης, όπως είναι η υψηλή τάση, η χρήση φίλτρων κλπ. Με αυτό το σκεπτικό, στο πλαίσιο της παρούσας ΔΕ έγιναν προσομοιώσεις με στόχο τη μελέτη μίας εκ των παραμέτρων, της επίδρασης της γωνίας τοποθέτησης του δείγματος, σε σχέση με τη δέσμη των ακτίνων-Χ. Συγκεκριμένα, επελέγησαν μία σειρά από γωνίες, από 25° έως 50° με βήμα 5°, με στόχο τον ποιοτικό έλεγχο

της επίδρασης της γωνίας τοποθέτησης του δείγματος στο συλλεγόμενο φάσμα και τον εντοπισμό της βέλτιστης γωνίας τοποθέτησης του δείγματος. Αρχικά, η μελέτη έγινε μόνο για τις γωνίες τοποθέτησης του δείγματος 30° και 45° , για τις οποίες υπάρχουν διαθέσιμα και πειραματικά αποτελέσματα στο ΕΠΤ-ΕΜΠ, και επομένως μπορεί να γίνει ποιοτική σύγκριση μεταξύ πειραματικών και υπολογιστικών αποτελεσμάτων. Η μελέτη αυτή έγινε για μία σειρά τιμών της υψηλής τάσης. Τα αποτελέσματα της προσομοίωσης συμφωνούν με την τάση που δείχνουν τα αντίστοιχα πειραματικά παλαιότερων ΔΕ και ΔΔ που έχουν εκπονηθεί στο ΕΠΤ-ΕΜΠ. Ακολούθως, έγινε προσομοίωση για γωνίες τοποθέτησης του δείγματος από 25° έως 50° και για ορισμένη τιμή της υψηλής τάσης. Όλες οι υπόλοιπες γεωμετρικές παράμετροι παραμένουν όπως περιγράφηκαν στα Κεφάλαια 3 & 4.

5.2 Προσομοίωση ενός απλού σεναρίου ακτινοβόλησης

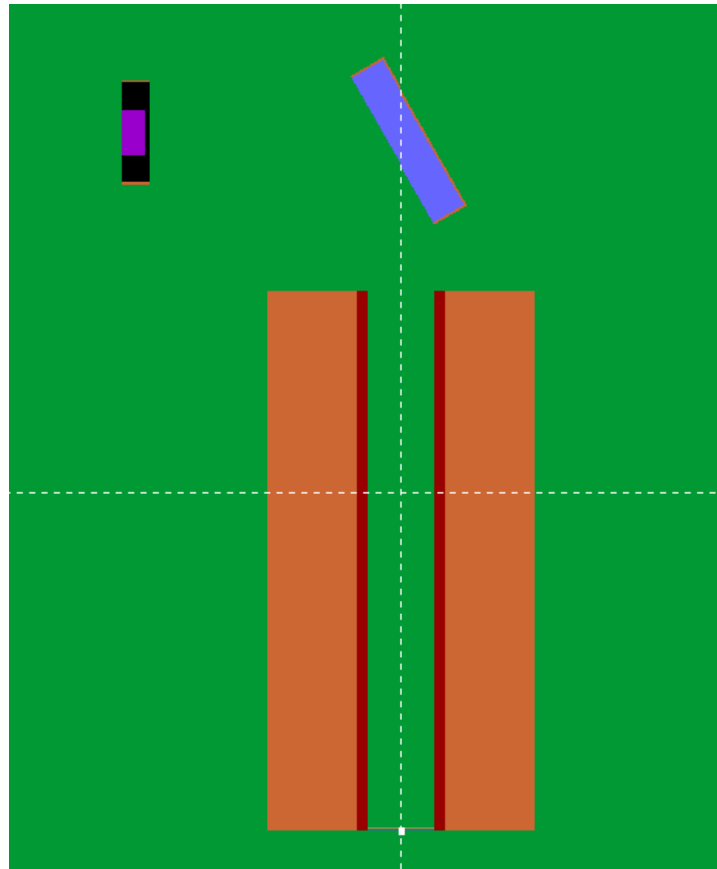
Στην παράγραφο που ακολουθεί παρουσιάζεται η προσπάθεια που έγινε στο πλαίσιο της παρούσας ΔΕ με σκοπό τη δημιουργία φασμάτων φθορισμού για ένα απλό σενάριο ακτινοβόλησης.

Η παρούσα ΔΕ επικεντρώθηκε αρχικά στην προσομοίωση ενός απλού σεναρίου ακτινοβόλησης, το οποίο περιλάμβανε: λειτουργία της μηχανής υπό υψηλή τάση 15kV και χρήση φίλτρων στον κατευθυντή της δέσμης ακτίνων-X (4 φίλτρα από υλικό PVC και 1 φίλτρο από αλουμίνιο). Πρόκειται για σενάριο ακτινοβόλησης το οποίο είχε χρησιμοποιηθεί στα πλαίσια παλαιότερης ΔΕ (N. Βαλμαντώνης, 2009) [17]. Το φίλτρο αλουμινίου τοποθετείται για την αποκοπή των ακτίνων-X χαμηλής ενέργειας και τα φίλτρα PVC, τα οποία τοποθετούνται μετά το φίλτρο αλουμινίου, έχουν ως σκοπό την αποκοπή της πιθανής χαρακτηριστικής ακτινοβολίας που ενδέχεται να εκπέμπεται λόγω φθορισμού των ακτίνων-X από προσμίξεις που βρίσκονται στο φίλτρο του αλουμινίου, αλλά και τις χαρακτηριστικές του Al ($\sim 1.4\text{keV}$). Στο πειραματικό αυτό σενάριο το δείγμα είναι τοποθετημένο υπό κλίση 30° και το ίδιο ακολουθείται και στην αναπαραγωγή του με προσομοίωση.

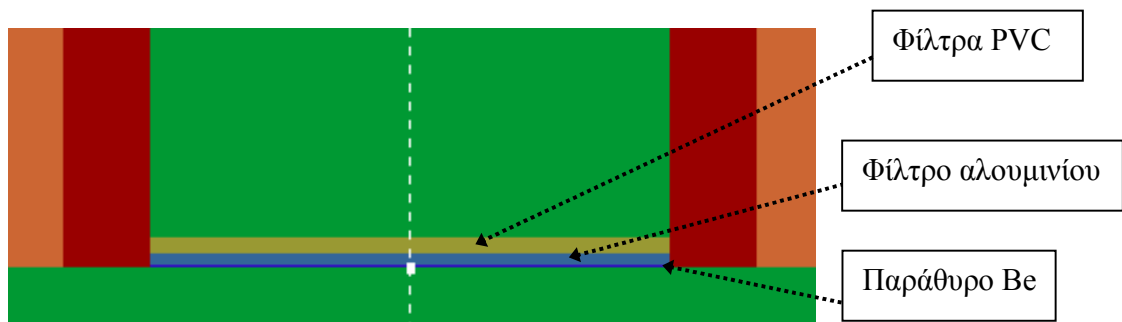
5.2.1 Δημιουργία των αρχείων δεδομένων για την εκτέλεση της προσομοίωσης

Αρχικά, δημιουργείται το αρχείο γεωμετρίας, το οποίο ονομάζεται *sensor_filters.geo*. Ως βάση του παρόντος αρχείου χρησιμοποιήθηκε το αρχείο γεωμετρίας *sensor_final.geo* (βλ. §4.4.1), με δύο διαφοροποιήσεις σε σχέση με αυτό που χρησιμοποιήθηκε κατά τη διαδικασία εκτέλεσης των προσομοιώσεων της παραγράφου 4.4.4. Η πρώτη διαφοροποίηση των δύο αρχείων έγκειται στην πρόσθεση των απαιτούμενων φίλτρων. Επομένως, στο αρχείο γεωμετρίας που δημιουργήθηκε για την περάτωση των προσομοιώσεων εισήχθησαν δύο επιπλέον σώματα (bodies), όπου το σώμα '12' αντιστοιχεί στο φίλτρο αλουμινίου και το σώμα '13' στα φίλτρα PVC. Οι διαστάσεις τους είναι ίσες με αυτές που δίνονται στην §2.10.3. Επισημαίνεται πως τα φίλτρα τοποθετήθηκαν, για λόγους απλοποίησης της γεωμετρίας, αμέσως μετά το παράθυρο βηρυλλίου της μηχανής (στην πραγματικότητα μεσολαβεί απόσταση περί τα 2cm).

Η δεύτερη διαφοροποίηση των δύο αρχείων έγκειται στον ορισμό της απόστασης του ανιχνευτή από το δείγμα. Σε αυτό το σημείο κρίθηκε σκόπιμο να μειωθεί η απόσταση του ανιχνευτή από το δείγμα στο μισό, για οικονομία χρόνου προσομοίωσης. Η μείωση της απόστασης οδήγησε σε αποτελέσματα, σχετικά ικανοποιητικής στατιστικής με σημαντική μείωση του απαιτούμενου χρόνου προσομοίωσης. Το αρχείο γεωμετρίας *sensor_filters.geo* παρουσιάζεται στον Πίνακα 5.1 και απεικονίζεται με τη βοήθεια του προγράμματος *gview2d*, στο Σχήμα 5.1. Στο Σχήμα 5.2 φαίνεται σε μεγέθυνση η βάση του κατευθυντή δέσμης, όπου διακρίνονται και τα φίλτρα που τοποθετήθηκαν.



Σχήμα 5.1 Απεικόνιση του αρχείου γεωμετρίας sensor_filters.geo



Σχήμα 5.2 Απεικόνιση των φίλτρων της γεωμετρίας

Ακολούθως, δημιουργείται το αρχείο των υλικών, με όνομα *ylika3.mat*. Πρόκειται για το αρχείο υλικών *ylika2.mat* που δημιουργήθηκε στην παράγραφο 4.4.2, με την προσθήκη δύο επιπλέον υλικών: του PVC με κωδικό '233' και του αλουμινίου με κωδικό '13'. Τονίζεται πως το υλικό αλουμίνιο ορίστηκε δεύτερη φορά, διότι από αυτό το υλικό αποτελούνται και άλλα αντικείμενα της γεωμετρίας εκτός του φίλτρου και υπενθυμίζεται πως οι ενέργειες αποκοπής για κάθε υλικό της γεωμετρίας μπορούν να διαφέρουν. Κρίθηκε

λοιπόν σκόπιμο να δηλωθεί ξανά το Al ως υλικό. Έτσι με στόχο την αύξηση της ταχύτητας προσομοίωσης, στα υλικά στα οποία δεν παρουσιάζει ενδιαφέρον η συνέχιση μίας ιστορίας (π.χ. θωράκιση ανιχνευτή, collimator που είναι κατασκευασμένα από Al) ορίζεται υψηλό cut-off energy ώστε να σταματά ο κώδικας την παρακολούθηση ενός φωτόνια και να ξεκινάει μία καινούργια ιστορία ενός άλλου. Όμως, το φίλτρο αλουμινίου είναι ζωτικής σημασίας καθώς περνάνε μέσα από αυτό όλα τα χρήσιμα φωτόνια, οπότε αποφασίσθηκε για το υλικό αυτό να χρησιμοποιηθούν χαμηλές τιμές για τις ενέργειες αποκοπής.

Τέλος, δημιουργείται το αρχείο εισόδου *sensor_filters.in*. Αρχικά, ορίζεται το φάσμα των ακτίνων-X, που στη προκειμένη περίπτωση είναι μέγιστης ενέργειας 15keV. Το φάσμα αυτό δημιουργήθηκε στο Κεφάλαιο 3. Επειδή, στην προσομοίωση που έγινε με σκοπό τη δημιουργία του φάσματος, το ενεργειακό παράθυρο [0.11-63keV] του χρησιμοποιούμενου ανιχνευτή αλληλεπίδρασης χωρίστηκε σε 256 κανάλια, το φάσμα που προέκυψε καταγράφεται σε πολύ λίγα κανάλια. Επομένως, καθώς το εξαγόμενο φάσμα της μηχανής ακτίνων-X εισάγεται στη συνέχεια ως εκπεμπόμενη ακτινοβολία στο αρχείο εισόδου της προσομοίωσης της τεχνικής XRF, η προσομοίωση γίνεται με φάσμα ακτίνων-X εύρους καναλιού αρκετά μεγάλο, κάτι που οδηγεί ασαφή συμπεράσματα. Για αυτό το λόγο, αποφασίστηκε να δημιουργηθεί το φάσμα των 15 keV (βλ. Κεφάλαιο 3), με την ενεργειακή περιοχή του ανιχνευτή αλληλεπίδρασης να χωρίζεται σε 1024 κανάλια. Οι υπόλοιποι συντελεστές που ορίζονται στο αρχείο εισόδου είναι ίδιες με αυτές του αντίστοιχου αρχείου εισόδου που χρησιμοποιήθηκε κατά τη διάρκεια των προσομοιώσεων (βλ. §4.4.3). Η μόνη διαφορά με το αρχείο εισόδου που δημιουργήθηκε στην παράγραφο 4.4.3 είναι ο ορισμός των δύο (2) επιπλέον υλικών με τις αντίστοιχες ενέργειες αποκοπής, όπως αυτές φαίνονται στο τμήμα του αρχείου *sensor_filters.in* που φαίνεται στον Πίνακα 5.2, ο οποίος παρατίθεται στο τέλος του κεφαλαίου. Με έντονα ψηφία ξεχωρίζουν τα επιπρόσθετα υλικά, με ενέργεια αποκοπής ίση με αυτή του υλικού 3 (παράθυρο βηρυλλίου).

5.2.2 Αποτελέσματα της προσομοίωσης

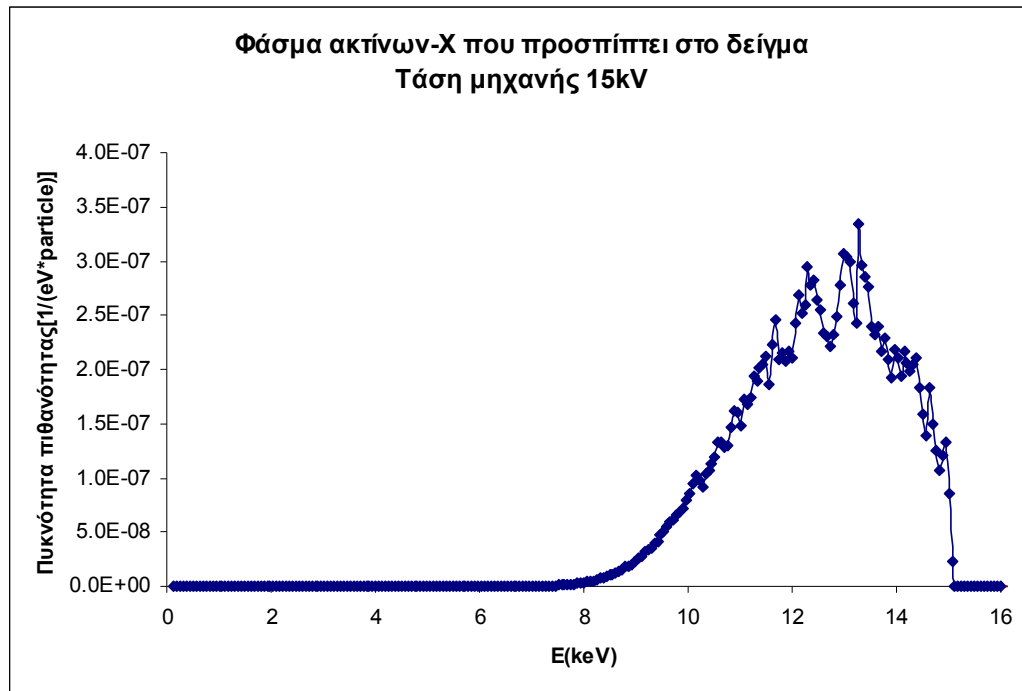
Η διαδικασία προσομοίωσης που ακολουθήθηκε είναι η ίδια με αυτή που περιγράφεται στην §4.4.4, με το ίδιο εκτελέσιμο αρχείο *main_process.exe*. Προσομοιώθηκαν $2.1 \cdot 10^{10}$ φωτόνια με διάρκεια προσομοίωσης περί τις 60 ώρες. Υπενθυμίζεται πως το υλικό που

χρησιμοποιείται ως δείγμα είναι ένα μίγμα αποτελούμενο από διοξείδιο του πυριτίου (SiO_2) με ιχνοστοιχεία τιτανίου (Ti), μόλυβδου (Pb), αρσενικού (As) και χαλκού (Cu). Επισημαίνεται ότι, τα πραγματικά δείγματα που αναλύονται πειραματικά στη διάταξη XRF του ΕΠΤ-ΕΜΠ περιέχουν αυτά τα στοιχεία μαζί με αρκετά άλλα, σε συγκεντρώσεις πολύ διαφορετικές μεταξύ τους.

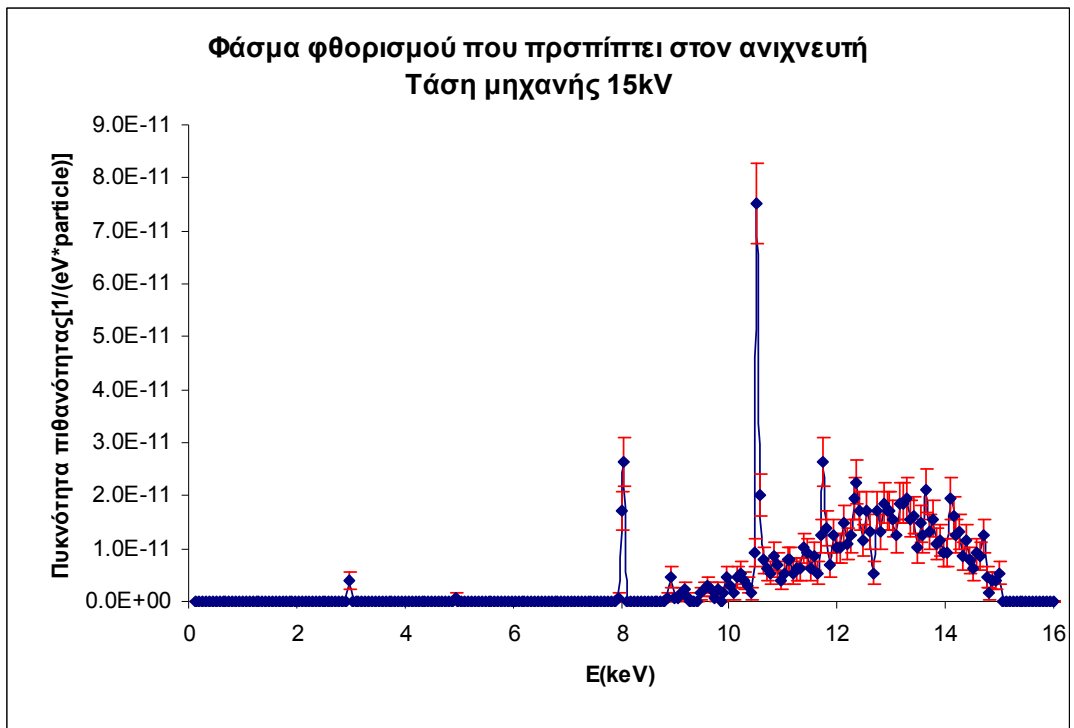
Τα αποτελέσματα των αρχείων εξόδου των τριών εικονικών ανιχνευτών που χρησιμοποιήθηκαν εισάγονται σε πρόγραμμα Excel και σχεδιάζονται τα αντίστοιχα διαγράμματα, τα οποία δείχνουν το φάσμα των ακτίνων-X που προσπίπτει στο δείγμα (Σχήμα 5.3), το φάσμα που προσπίπτει στον ενεργό όγκο του ανιχνευτή (Σχήμα 5.4) και το φάσμα της ενέργειας που αποτίθεται στον ανιχνευτή (Σχήμα 5.5), δηλαδή το φάσμα της φθορίζουσας ακτινοβολίας που καταγράφεται από τον ανιχνευτή. Στο Σχήμα 5.5 ξεχωρίζουν οι χαρακτηριστικές ακτίνες-X των ιχνοστοιχείων του δείγματος και συνεπώς είναι δυνατός ο ποιοτικός προσδιορισμός των ιχνοστοιχείων του δείγματος, που έδωσε με την τεχνική της προσομοίωσης, αυτό το φάσμα. Τα σφάλματα που παρουσιάζεται στο γράφημα αναφέρονται σε επίπεδο εμπιστοσύνης 1σ. Από τα παραπάνω Σχήματα μπορούν να προκύψουν και τα εξής σημαντικά συμπεράσματα, πέραν της δυνατότητας ανίχνευσης των ιχνοστοιχείων τα οποία υπάρχουν στο δείγμα, η οποία θα εξετασθεί στη συνέχεια:

- Το φάσμα της ακτινοβολίας που φθάνει στον ανιχνευτή είναι πολύ ασθενέστερο από το φάσμα που φθάνει στο δείγμα, κάτι που φυσικά είναι αναμενόμενο αλλά γεννά προβληματισμό στο κατά πόσον θα έπρεπε ο ανιχνευτής να πλησιάσει περισσότερο στο δείγμα. Άλλωστε όπως προκύπτει και με τη χρήση των ανιχνευτών δόσης που περιγράφεται στο προηγούμενο Κεφάλαιο, η δέσμη η οποία εξέρχεται από τον κατευθυντή δέσμης είναι αρκετά εστιασμένη και δεν φαίνεται να υπάρχει πρόβλημα να εκτεθεί ο ανιχνευτής σε απευθείας δέσμη, αν πλησιάσει περισσότερο στο δείγμα. Πρέπει να επισημανθεί ότι ήδη η προσομοίωση αυτή έχει γίνει με τον ανιχνευτή τοποθετημένο στη μισή απόσταση από την πραγματική, προκειμένου να επιτευχθεί καλύτερη στατιστική σε εύλογο χρόνο.
- Το φάσμα της ακτινοβολίας που ανιχνεύεται από τον ανιχνευτή SiLi (όπως προκύπτει από τον ανιχνευτή αποτιθέμενης ενέργειας) δεν παρουσιάζει σημαντική διαφορά από το φάσμα της ακτινοβολίας που φθάνει στον ανιχνευτή SiLi (όπως προκύπτει από τον

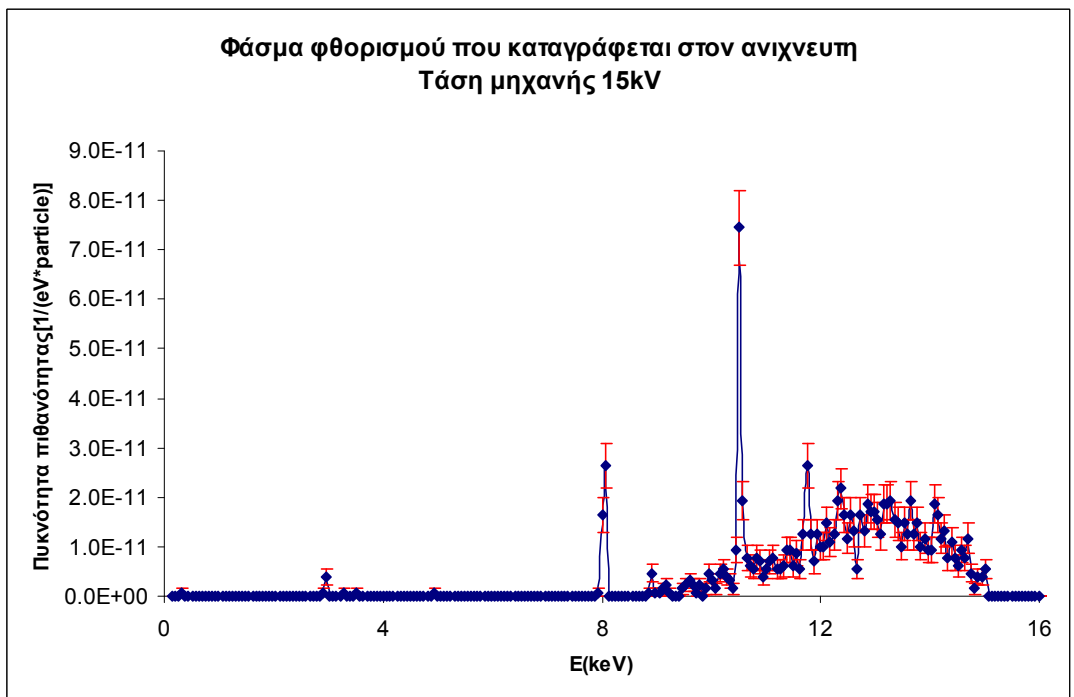
ανιχνευτή αλληλεπίδρασης). Δηλαδή όσα φωτόνια φτάνουν στον ανιχνευτή ανιχνεύονται από αυτόν. Αυτό είναι κάτι που θα μπορούσε κανείς να αναμένει, καθώς φωτόνια τόσο χαμηλής ενέργειας όπως οι ακτίνες-X φθορισμού πραγματοποιούν κυρίως φωτοηλεκτρικό φαινόμενο (βλ. §2.2.4.1) και κατά συνέπεια απορροφώνται πλήρως στον ανιχνευτή.



Σχήμα 5.3 Το φάσμα φθορισμού που φθάνει στο δείγμα για τάση μηχανής 15kV



Σχήμα 5.4 Το φάσμα φθορισμού που φθάνει στον ανιχνευτή για τάση μηχανής 15kV



Σχήμα 5.5 Το φάσμα φθορισμού που καταγράφεται από τον ανιχνευτή για τάση μηχανής 15kV

5.2.3 Ανάλυση των φασμάτων φθορισμού που προκύπτουν από την προσομοίωση με λογισμικό ανάλυσης φασμάτων φθορισμού

Στις επόμενες παραγράφους παρουσιάζεται η προσπάθεια που έγινε στα πλαίσια της παρούσας ΔΕ για την αναγνώριση από το πρόγραμμα WinQXAS, του φάσματος φθορισμού που καταγράφεται στον ανιχνευτή με την προσομοίωση, ώστε να είναι εφικτή η ανάλυσή του από WinQXAS, όπως αναλύονται τα πειραματικά φάσματα. Το πρόγραμμα WinQXAS χρησιμοποιείται στο ΕΠΤ-ΕΜΠ για την ανάλυση των φασμάτων που προέρχονται από πειράματα XRF, με σκοπό την ποιοτική και ποσοτική ανάλυση δειγμάτων που έχουν υποστεί φθορισμό. Θα προηγηθεί, για λόγους πληρότητας, συνοπτική παρουσίαση του προγράμματος WinQXAS, που αναλυτικά έχει περιγραφεί σε προηγούμενη ΔΕ [18].

5.2.3.1 Το λογισμικό ανάλυσης φασμάτων XRF, WinQXAS

Το λογισμικό ανάλυσης φασμάτων WinQXAS (Quantitative X-ray Analysis System for Windows), αναπτύχθηκε στην αρχική του μορφή (QXAS) υπό την αιγίδα του ΙΑΕΑ (ΔΟΑΕ) από ομάδα με επικεφαλής τον καθηγητή Dr. P. Van Espen, του Πανεπιστημίου Antwerp κατά την περίοδο 1987-1994. Η τελική έκδοση είναι αποτέλεσμα περαιτέρω βελτιώσεων και ελέγχων στα Εργαστήρια του ΙΑΕΑ στο Seibersdorf. Παρέχεται ελεύθερα από την ιστοσελίδα της ΙΑΕΑ, <http://www.iaea.or.at/programmes/ripc/physics/faznic/winqxas.htm>. Ο κώδικας είναι γραμμένος σε γλώσσα προγραμματισμού C++ εκτός από ορισμένες υπορουτίνες ανάλυσης που συντάσσονται σε γλώσσα FORTRAN. Μέσα στα βασικά χαρακτηριστικά και δυνατότητες του προγράμματος WinQXAS περιλαμβάνονται [18]:

- Ανάλυση του φάσματος με προσαρμογή κατάλληλων μαθηματικών συναρτήσεων που βασίζονται στη μη γραμμική μέθοδο των ελάχιστων τετραγώνων. Για την επίτευξη του στόχου αυτού υπάρχει ενσωματωμένο στον κώδικα το πρόγραμμα AXIL (Analysis of X-ray spectra by Iterative Least-squares fitting)
- Δυνατότητα ενεργειακής βαθμονόμησης και βαθμονόμησης της διακριτικής ικανότητας του ανιχνευτή της διάταξης
- Κατάστρωση μοντέλου προσαρμογής φάσματος (model) στο οποίο γίνεται καθορισμός ενός μεγάλου πλήθους παραμέτρων, όπως για παράδειγμα οι πειραματικές συνθήκες ακτινοβόλησης, ο τύπος του ανιχνευτή κτλ.

- Υπολογισμός της επιφάνειας και του σφάλματος της φωτοκορυφής που αντιστοιχεί στο εκάστοτε στοιχείο, του αντίστοιχου υποστρώματος όπως και του δείκτη ποιότητας της φωτοκορυφής, χ^2
- Ποσοτικές αναλύσεις δειγμάτων ύστερα από την δημιουργία κατάλληλου μοντέλου
- Δυνατότητα ανάλυσης πολλαπλών φωτοκορυφών
- Χρήση ενσωματωμένων βιβλιοθηκών χαρακτηριστικών αιχμών για κάθε στοιχείο ενδιαφέροντος, με δυνατότητα παρέμβασης

5.2.3.2 Μετατροπή του φάσματος της προσομοίωσης σε φάσμα του πραγματικού ανιχνευτή και ανάλυση με το πρόγραμμα WinQXAS

Για την εισαγωγή ενός φάσματος φθορίζουσας ακτινοβολίας-X, από προσομοίωση, στο πρόγραμμα WinQXAS είναι απαραίτητη η μετατροπή του σε μορφή ανάλογη με αυτή που έχει ένα φάσμα το οποίο συλλέγεται από πολυκαναλικό αναλυτή συνδεδεμένο με τον πραγματικό ανιχνευτή. Κατά την προσομοίωση, η καταγραφή φωτονίων συγκεκριμένης ενέργειας από έναν εικονικό ανιχνευτή πραγματοποιείται σε ένα ενεργειακό παράθυρο. Αντίθετα, στον πραγματικό ανιχνευτή παράγεται φωτοκορυφή της οποίας το κεντροειδές ορίζει την ενέργεια που αποτίθεται, το πλάτος της αντιστοιχεί στη διακριτική ικανότητα του ανιχνευτή και η επιφάνειά της στο πλήθος των φωτονίων που αποθέτουν το συγκεκριμένο ποσό ενέργειας στον ανιχνευτή. Για την μετατροπή είναι λοιπόν απαραίτητο να ληφθεί υπόψη η πεπερασμένη διακριτική ικανότητα του πραγματικού ανιχνευτή.

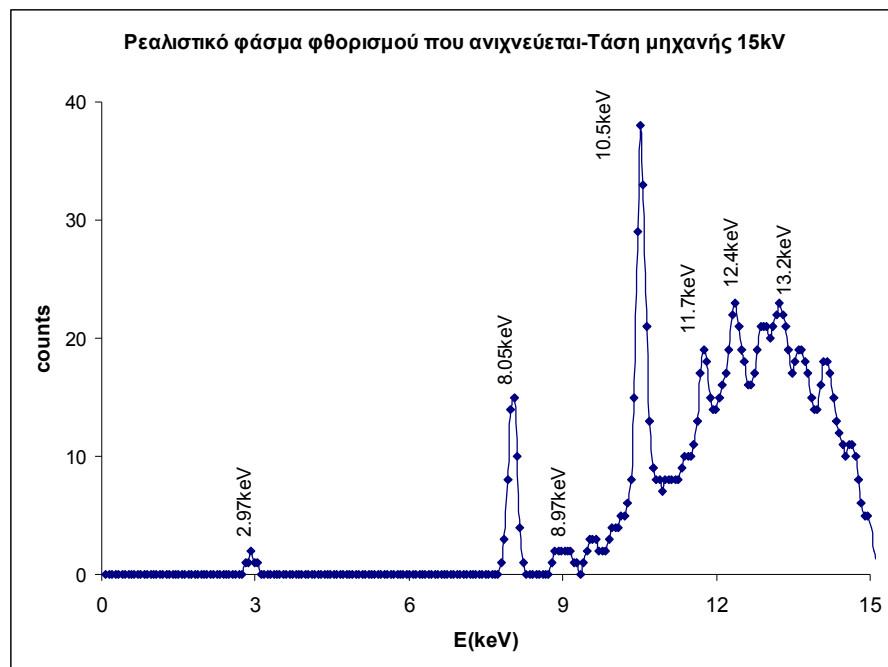
Η μετατροπή των ενεργειακών φασμάτων αποτιθέμενης ενέργειας των αντίστοιχων εικονικών ανιχνευτών του προγράμματος PENELOPE σε «ρεαλιστικά» φάσματα πραγματοποιείται με το πρόγραμμα *trspec*. Το πρόγραμμα αυτό, είναι γραμμένο σε γλώσσα προγραμματισμού FORTRAN και αναπτύχθηκε στα πλαίσια της υπό εκπόνηση ΔΔ [Κ. Καρφόπουλος] για αντίστοιχα φάσματα γ-φασματοσκοπίας. Εφαρμογή αυτού του προγράμματος στα φάσματα της προσομοίωσης τα μετατρέπει σε «ρεαλιστικά» φάσματα δηλαδή σε συγκρίσιμα με τα αντίστοιχα από πειραματική διαδικασία φάσματα.

Με την εκτέλεση του προγράμματος *trspec* το περιεχόμενο κάθε καναλιού του υπολογιστικού φάσματος, αρχικά μετατρέπεται σε πλήθος φωτονίων που αποθέτουν ενέργεια εντός των ορίων του ενεργειακού παραθύρου (counts) και εν συνεχεία, η πληροφορία αυτή κατανέμεται στα γειτονικά ενεργειακά παράθυρα υπό κανονική κατανομή. Το περιεχόμενο

κάθε ενεργειακού παραθύρου διαμορφώνεται τελικά με την υπέρθεση των κανονικών κατανομών των γειτονικών ενεργειακών παραθύρων του φάσματος.

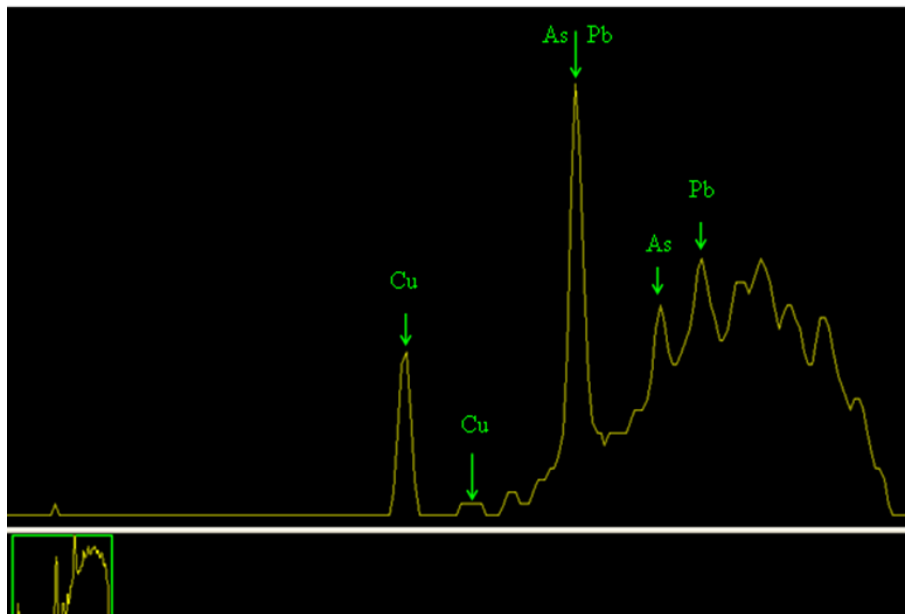
Για την εκτέλεση του προγράμματος απαιτείται το αρχείο αποτελεσμάτων του εικονικού ανιχνευτή *pm_spc_enddet_1.dat* καθώς και δεδομένα του προσομοιούμενου προβλήματος που αφορούν στο πλήθος των ιστοριών που προσομοιώθηκαν, στο εύρος ημίσειας ύψους (fwhm) του πραγματικού ανιχνευτή και τέλος στην ελάχιστη ενέργεια του φάσματος προσομοίωσης, σε keV. Μετά την εκτέλεση του προγράμματος, λαμβάνεται αρχείο εξόδου στο οποίο καταγράφεται το περιεχόμενο του κάθε ενεργειακού καναλιού όπως προκύπτει από την υπέρθεση των κανονικών κατανομών που αντιστοιχούν σε όλα τα ενεργειακά κανάλια του φάσματος.

Σημειώνεται ότι το πρόγραμμα *trspec* χρησιμοποιεί σταθερή τιμή για το μέγεθος εύρος ημίσειας ύψους του ανιχνευτή που προσομοιώνει. Για τις ανάγκες της παρούσας ΔΕ χρησιμοποιήθηκε η τιμή 0.180 keV. Στο Σχήμα 5.6 παρουσιάζεται γραφική απεικόνιση ενός ρεαλιστικού φάσματος το οποίο έχει παραχθεί με το πρόγραμμα *trspec*. Αφορά σε φάσμα φθορισμού που ανιχνεύεται από τον εικονικό ανιχνευτή κατά την προσομοίωση της διάταξης XRF του ΕΠΤ-ΕΜΠ, για τάση λειτουργίας μηχανής 15kV.



Σχήμα 5.6 Το «ρεαλιστικό» φάσμα φθορισμού που ανιχνεύεται από τον ανιχνευτή της διάταξης-Τάση λειτουργίας μηχανής 15kV

Στη συνέχεια γίνεται κατάλληλη τροποποίηση του παραγόμενου «ρεαλιστικού» φάσματος ώστε να γίνει φάσμα της μορφής IAEA spectrum (*.spe) και εν συνεχεία το προκύπτον φάσμα εισάγεται στο πρόγραμμα WinQXAS [18]. Τέλος, πραγματοποιείται η ενεργειακή βαθμονόμηση και η βαθμονόμηση fwhm μέσω του προγράμματος WinQXAS [18], καθώς είναι γνωστή η σύσταση του δείγματος και επομένως οι ενέργειες στις οποίες αναμένεται να υπάρχουν χαρακτηριστικές ακτίνες-X. Στο Σχήμα 5.7 φαίνεται το «ρεαλιστικό» φάσμα, το οποίο έχει προκύψει από την προσομοίωση, μετά τη μετατροπή του σε «ρεαλιστικό» και την εισαγωγή του στο πρόγραμμα WinQXAS.



Σχήμα 5.7 Απεικόνιση του «ρεαλιστικού» φάσματος με χρήση του προγράμματος WinQXAS

5.2.4 Σχολιασμός των αποτελεσμάτων της προσομοίωσης

Στην παράγραφο που ακολουθεί σχολιάζεται το «ρεαλιστικό» φάσμα που δημιουργήθηκε στα πλαίσια της παρούσας ΔΕ (βλ. Σχήμα 5.6 & Σχήμα 5.7). Γενικά, το φάσμα που προέκυψε από την προσομοίωση έχει τη μορφή που αναμενόταν, βάσει των φασμάτων φθορισμού που έχουν δημιουργηθεί πειραματικά στο ΕΠΤ-ΕΜΠ. Ειδικά στην περιοχή χαμηλών ενεργειών, η χρήση των φίλτρων έχει ως αποτέλεσμα την αποκοπή του υποστρώματος, όπως ακριβώς συμβαίνει και στα πειραματικά φάσματα. Πιο αναλυτικά,

βάσει της σύστασης του δείγματος, πράγματι φαίνονται οι φωτοκορυφές των στοιχείων που έχουν εισαχθεί στο υλικό που αντιπροσωπεύει το δείγμα και είναι:

- Φωτοκορυφή στα 2.97 keV (πολύ ασθενής), η οποία οφείλεται στις χαρακτηριστικές ενέργειες L του μολυβδαινίου (Mo)
- Φωτοκορυφές στα 8.06 & 8.92 keV, οι οποίες αποτελούν τις χαρακτηριστικές K_{α} και K_{β} ακτίνες-X του χαλκού (Cu) ($K_{\alpha 1}$ @ 8.047 και $K_{\alpha 2}$ @ 8.027 keV / $K_{\beta 1}$ @ 8.904 και $K_{\beta 2}$ @ 8.976 keV)
- Φωτοκορυφές στα 10.5 & 11.7 keV, οι οποίες αποτελούν τις χαρακτηριστικές K_{α} και K_{β} ακτίνες-X του αρσενικού (As) ($K_{\alpha 1}$ @ 10.543 και $K_{\alpha 2}$ @ 10.507 keV / $K_{\beta 1}$ @ 11.725 και $K_{\beta 2}$ @ 11.863 keV)
- Φωτοκορυφές στα 10.5, 12.6 keV, οι οποίες αποτελούν τις χαρακτηριστικές L_{α} , L_{β} και L_{γ} ακτίνες-X του μόλυβδου (Pb) αντίστοιχα ($L_{\alpha 1}$ @ 10.448 και $L_{\alpha 2}$ @ 10.549 keV / $L_{\beta 1}$ @ 12.611 και $L_{\beta 2}$ @ 12.620 keV)

Τονίζεται, πως η φωτοκορυφή που παρατηρείται στην ενέργεια 10.5keV, αποτελεί φωτοκορυφή αλληλοεπικάλυψης του αρσενικού (K_{α}) και του μόλυβδου (L_{α}). Αυτό που έχει ενδιαφέρον είναι ότι στο φάσμα της προσομοίωσης δεν εμφανίζεται η φωτοκορυφή του τιτανίου (K_{α} @ 4.5keV και K_{β} @ 4.9keV), παρόλο που ως υλικό έχει περιληφθεί κατά την περιγραφή του υλικού του δείγματος. Η απουσία των αιχμών του τιτανίου δεν μπόρεσε να ερμηνευθεί στα πλαίσια της ΔΕ.

Συνοψίζοντας τα παραπάνω προκύπτει πως η ακολουθούμενη διαδικασία προσομοίωσης του φθορισμού ενός απλού δείγματος με ακτίνες-X, κάτω από ένα ρεαλιστικό σενάριο ακτινοβόλησης, όπως αυτά που χρησιμοποιούνται στο ΕΠΤ-ΕΜΠ είναι δυνατή και μπορεί να λειτουργήσει πιλοτικά για την προσομοίωση πιο πολύπλοκων δειγμάτων αλλά και μελέτη γεωμετρικών χαρακτηριστικών της διάταξης.

5.3 Ανάλυση πραγματικού δείγματος με προσομοίωση και σύγκριση με πειραματικά αποτελέσματα

Στις παραγράφους που ακολουθούν, περιγράφεται και αναλύεται η διαδικασία της προσομοίωσης της τεχνικής XRF, με βάση ένα πραγματικό δείγμα (δείγμα αναφοράς από λιγνιτική ιπτάμενη τέφρα (NIST Fly ash 1633b, βλ. Παράρτημα IV). Τα αποτελέσματα της προσομοίωσης συγκρίνονται με αποτελέσματα πειράματος που διεξήχθη στα πλαίσια της ΔΕ, με συνθήκες όσο το δυνατόν πιο κοντά σε αυτές της προσομοίωσης. Τονίζεται, πως και στα πλαίσια αυτής της εφαρμογής έγιναν ορισμένες παραδοχές με σκοπό τη βελτίωση της στατιστικής των αποτελεσμάτων σε εύλογο χρονικό διάστημα. Σκοπός της παρούσας παραγράφου είναι η εξαγωγή συμπερασμάτων όσων αφορά στην προσομοίωση της τεχνικής XRF, σε σχέση με αντίστοιχα πειράματα για την ανάλυση πραγματικών δειγμάτων.

Αποφασίστηκε, η προσομοίωση να πραγματοποιηθεί με φάσμα μηχανής ακτίνων-X τάσης 30kV, με 4 φίλτρα από υλικό PVC, συνολικού πάχους 0.04cm στον κατευθυντή της δέσμης ακτίνων-X. Τα φίλτρα αλουμινίου παραλήφθηκαν, καθώς καθιστούν πολύ αργή την προσομοίωση. Με αυτό τον τρόπο τα αποτελέσματα προκύπτουν σε συντομότερο χρόνο, αν και ακόμα και σε αυτή την περίπτωση η προσομοίωση της τεχνικής XRF είναι αρκετά χρονοβόρα.

5.3.1 Δημιουργία υπολογιστικού φάσματος προσομοίωσης

Στις παραγράφους που ακολουθούν περιγράφεται η διαδικασία της προσομοίωσης που ακολουθήθηκε, με σκοπό την εξαγωγή ενός υπολογιστικού φάσματος φθορισμού. Αρχικά, περιγράφεται η διαδικασία δημιουργίας των αρχείων δεδομένων (αρχείο γεωμετρίας, υλικού και εισόδου) του προγράμματος και αναφέρονται οι παραδοχές που έγιναν. Στη συνέχεια δίνονται τα εξαγόμενα από την προσομοίωση αποτελέσματα καθώς και τα συμπεράσματα που προκύπτουν από αυτά.

5.3.1.1 Δημιουργία των αρχείων δεδομένων της προσομοίωσης

Σε αυτή την παράγραφο περιγράφεται η δημιουργία των αρχείων δεδομένων του προγράμματος PENELOPE. Αρχικά, δημιουργείται το αρχείο γεωμετρίας, στο οποίο περιγράφεται η γεωμετρία του επιλυόμενου προβλήματος. Το αρχείο γεωμετρίας λαμβάνει

την ονομασία *sensor_filters2.geo*, ως συνέχεια του αρχείου γεωμετρίας που δημιουργήθηκε στην §5.2.1. Η διαφοροποίηση σε σχέση με το αρχείο *sensor_filters.geo* (βλ. §5.2.1) έγκειται στο γεγονός πως αφαιρείται το σώμα της γεωμετρίας που αντιστοιχεί το φίλτρο του αλουμινίου. Το υπόλοιπο αρχείο είναι ίδιο με το προϋπάρχον, όπως επίσης και η απόσταση ανιχνευτή-δείγματος που και εδώ τοποθετείται στο μισό της πραγματική – αποτελώντας και τη σημαντικότερη παραδοχή της εφαρμογής αυτής. Η μείωση της απόστασης οδήγησε σε αποτελέσματα, σχετικά ικανοποιητικής στατιστικής με σημαντική μείωση του απαιτούμενου χρόνου προσομοίωσης.

Ακολούθως, δημιουργείται το αρχείο υλικού *ylika4.mat*. Το αρχείο υλικού προκύπτει από την ενοποίηση των επιμέρους αρχείων υλικού που έχουν δημιουργηθεί σε προηγούμενα στάδια της παρούσης ΔΕ. Αυτά είναι τα αρχεία υλικού *aluminum.mat*, *beryllium.mat*, *air.mat*, *plexiglass.mat* & *PVC.mat*. Το αρχείο υλικού που αντιστοιχεί στο δείγμα προσομοίωσης ονομάστηκε *CNFA21.mat*, το οποίο δεν υπάρχει στη βάση δεδομένων του προγράμματος (βλ. Παράρτημα II) και δημιουργήθηκε βάσει της ποσοτικής ανάλυσης του δείγματος αναφοράς CNFA21 από ιπτάμενη τέφρα που παρασκευάστηκε στο πλαίσιο της ΔΔ [Ρούνη Π., 2008].

Το δείγμα αναφοράς CNFA21 αποτελείται από το υλικό αναφοράς (CRM) λιγνιτικής Ιπτάμενης Τέφρας (NIST Fly Ash 1633b) σε ποσοστό 76% με προσθήκη κυτταρίνης σε ποσοστό (24%) ως συνδετικό υλικό. Η δημιουργία του παραπάνω υλικού βασίστηκε στην κατά μάζα σύσταση (% w/w) των στοιχείων από τα οποία αποτελείται (βλ. Παράρτημα IV). Τονίζεται πως, τα περισσότερα στοιχεία στο δείγμα εμφανίζονται με τη μορφή οξειδίων και για αυτό το λόγο υπολογίζεται και η κατά μάζα σύσταση του οξυγόνου. Η κυτταρίνη εισάγεται ως κατά μάζα σύσταση των στοιχείων από τα οποία αποτελείται. Η κυτταρίνη (cellulose) είναι οργανική ένωση με χημικό τύπο $C_6H_{10}O_5$ [22]. Η μάζα του υλικού είναι 12.9761g και η πυκνότητα του υλικού είναι $1.635g/cm^3$ [16]. Παρακάτω δίνεται ο Πίνακας 5.3, στον οποίο φαίνονται τα σημαντικότερα στοιχεία και ιχνοστοιχεία από τα οποία αποτελείται το υλικό CNFA21, όπως προκύπτει από το πιστοποιητικό του υλικού, τα οποία ελήφθησαν υπόψη κατά την προσομοίωση. Στον Πίνακα δεν περιλαμβάνεται το οξυγόνο. Στο Παράρτημα IV παρατίθεται πλήρης κατάλογος των στοιχείων & ιχνοστοιχείων του δείγματος.

Πίνακας 5.3 Ποσοτική ανάλυση του δείγματος αναφοράς CNFA21

Στοιχείο	Μάζα(mg)	Σφάλμα (mg) (σε επίπεδο 95%)	Στοιχείο	Μάζα(mg)	Σφάλμα (mg) (σε επίπεδο 95%)
Al	1472.2	26.4	As	1.332	0.0254
Ca	147.7	0.6	Cr	1.939	0.0460
Fe	761.0	22.5	Cu	1.103	0.0254
Mg	47.1	0.8	Pb	0.667	0.0108
K	190.7	2.9	Mn	1.289	0.0166
Si	2251.8	7.8	Ni	1.180	0.0176
Na	19.7	0.3	Sr	10.183	0.1369
S	20.3	0.1	V	2.893	0.0352
Ti	77.4	1.4			

Με βάση τα παραπάνω στοιχεία του πίνακα 5.3, προσομοιώνεται το υλικό που αντιστοιχεί στο υλικό του δείγματος με τον τρόπο που έχει αναλυτικά περιγραφεί στην παράγραφο 4.4.2. Τα αρχεία των επιμέρους υλικών ενοποιούνται και δημιουργείται το αρχείο υλικού της αυτής προσομοίωσης με ονομασία *ylika4.mat*. Τέλος, δημιουργείται το αρχείο εισόδου με ονομασία *sensor.in*. Στο αρχείο εισόδου εισάγεται το υπολογιστικό φάσμα μηχανής ακτίνων-X μέγιστης ενέργειας 30keV, το οποίο δημιουργήθηκε στο Κεφάλαιο 3. Ακολούθως, καταγράφεται ο αριθμός των υλικών (7) και στη συνέχεια αναγράφονται οι αντίστοιχες των υλικών ενέργειες αποκοπής, οι οποίες είναι ίσες με αυτές που επιλέχθηκαν κατά τη διερεύνηση τους στην §4.4.2. Εν συνέχεια ορίζονται τα αρχεία υλικών και γεωμετρίας (με ονομασίες *sensor_filters2.geo* & *ylika4.mat* αντιστοίχως). Όπως στη διαδικασία των προηγούμενων προσομοιώσεων της τεχνικής XRF, ορίζονται τρεις (3) εικονικοί ανιχνευτές, δύο (2) ανιχνευτές αλληλεπίδρασης και ένας (1) ανιχνευτής αποτιθέμενης ενέργειας. Ο ένας ανιχνευτής αλληλεπίδρασης αντιστοιχεί στο σώμα της γεωμετρίας που αντιστοιχεί στο δείγμα, ώστε να ελέγχεται το φάσμα που φτάνει στο δείγμα, ο δεύτερος ανιχνευτής αλληλεπίδρασης και ο ανιχνευτής αποτιθέμενης ενέργειας αντιστοιχούν στον ενεργό όγκο του ανιχνευτή SiLi της διάταξης XRF, ώστε να υπολογίζεται, τόσο το φάσμα των φωτονίων που εισέρχονται στον ενεργό όγκο του ανιχνευτή, όσο και το φάσμα της αποτιθέμενης στον ανιχνευτή ενέργειας.

5.3.1.2 Αποτελέσματα της προσομοίωσης

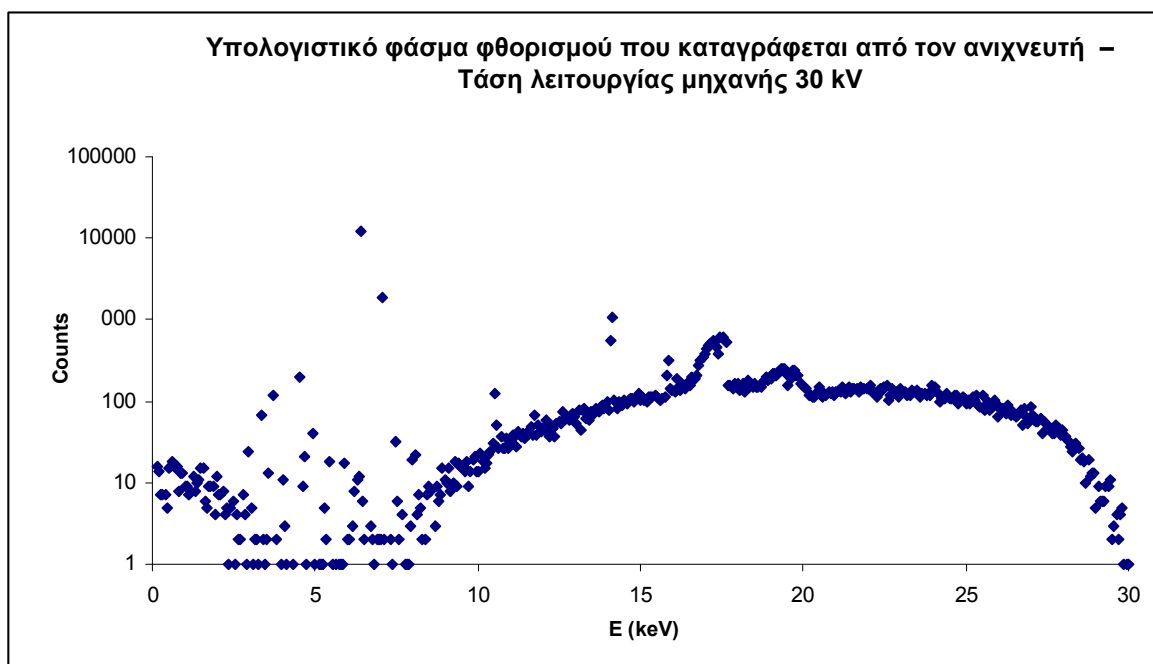
Η προσομοίωση εκτελείται με το εκτελέσιμο πρόγραμμα *main_process.exe*, όπως και οι προηγούμενες προσομοιώσεις (βλ. §4.4.2 και §5.2.2). Συνολικά, προσομοιώθηκαν $1.158 \cdot 10^{10}$

φωτόνια και η προσομοίωση διήρκησε 94 ώρες. Στο Σχήμα 5.8 φαίνεται το φάσμα φθορισμού όπως αυτό προκύπτει από τα αποτελέσματα του αρχείου εξόδου του ανιχνευτή αποτιθέμενης ενέργειας. Στο Σχήμα 5.9, φαίνεται το «ρεαλιστικό» φάσμα που προέκυψε από τη μετατροπή του αρχικού φάσματος με το πρόγραμμα *trspec*, ώστε να λαμβάνεται υπόψη η διακριτική ικανότητα του πραγματικού ανιχνευτή (βλ. §5.2.3.1). Επισημαίνεται, πως ο άξονας των τεταγμένων είναι σε λογαριθμική κλίμακα με σκοπό να γίνονται οπτικά αντιληπτές όσο το δυνατόν περισσότερες φωτοκορυφές.

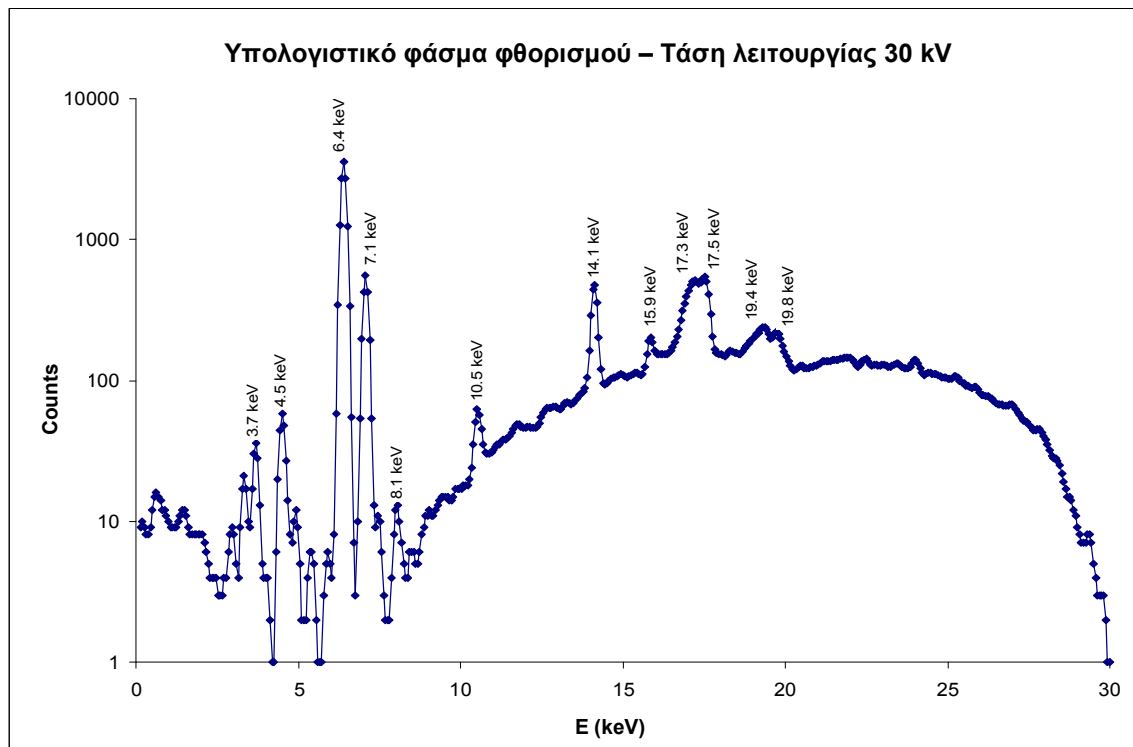
Όπως γίνεται αντιληπτό παρατηρώντας το διάγραμμα του Σχήματος 5.9, η προσομοίωση της τεχνικής XRF οδηγεί σε ασφαλή συμπεράσματα όσον αφορά την ποιοτική σύσταση του δείγματος, στο οποίο ανιχνεύονται τα περισσότερα από τα ιχνοστοιχεία που υπάρχουν στο δείγμα. Βέβαια, δεν αναμενόταν να φανούν οι φωτοκορυφές όλων των στοιχείων που περιέχονται στο δείγμα, καθώς σε πολλές περιπτώσεις υπάρχουν επικαλύψεις από γειτονικές φωτοκορυφές, οπότε θα χρειαζόταν ειδικό λογισμικό για την ανάλυσή τους. Μία άλλη περίπτωση στοιχείων ή ιχνοστοιχείων που δεν ανιχνεύονται είναι τα Si και Al τα οποία εκπέμπουν ακτίνες-X πολύ χαμηλής ενέργειας οι οποίες δεν είναι δυνατόν να ανιχνευθούν με την υπόψη διάταξη. Στο Σχήμα 5.9 διακρίνονται οι φωτοκορυφές των περισσότερων στοιχείων και ιχνοστοιχείων που περιέχονται στο δείγμα. Προφανώς και δεν ανιχνεύονται όλες οι πιθανές φωτοκορυφές καθώς επιλέχθηκε μία συγκεκριμένη τάση μηχανής. Για την ακρίβεια ανιχνεύονται οι εξής φωτοκορυφές:

- Φωτοκορυφή στα 3.70keV, η οποία αποτελεί τη χαρακτηριστική του ασβεστίου (Ca) ($K_{\alpha 1}$ @ 3.691 και $K_{\alpha 2}$ @ 3.688keV)
- Φωτοκορυφή στα 4.50keV, η οποία αποτελεί τη χαρακτηριστική του τιτανίου (Ti) ($K_{\beta 1}$ @ 4.510keV)
- Φωτοκορυφή στα 6.43keV η οποία αποτελείται από τις χαρακτηριστικές του σιδήρου (Fe) ($K_{\alpha 1}$ @ 6.403keV) και του μαγγανίου (Mn) ($K_{\beta 1}$ @ 6.490keV)
- Φωτοκορυφή στα 7.02keV, που αποτελεί τη χαρακτηριστική του σιδήρου (Fe) ($K_{\beta 1}$ @ 7.057keV)
- Φωτοκορυφή στα 7.97keV, η οποία είναι η χαρακτηριστική του χαλκού (Cu) ($K_{\alpha 1}$ @ 8.047 και $K_{\alpha 2}$ @ 8.027keV)

- Φωτοκορυφή στα 10.45keV, η οποία είναι φωτοκορυφή αλληλοεπικάλυψης του μόλυβδου (Pb) ($L_{\alpha 1}$ @ 10.549 και $L_{\alpha 2}$ @ 10.448) και του αρσενικού (As) ($K_{\alpha 1}$ @ 10.543 και $K_{\alpha 1}$ @ 10.507keV)
- Φωτοκορυφή στα 12.80keV, η οποία είναι η χαρακτηριστική του μόλυβδου (Pb) ($L_{\beta 1}$ @ 12.620 και $L_{\beta 2}$ @ 12.611keV)
- Φωτοκορυφές στα 14.01 και 15.67 keV, που αντιστοιχεί στη χαρακτηριστική του στροδίου (Sr) ($K_{\alpha 1}$ @ 14.164 και $K_{\alpha 2}$ @ 14.097keV / $K_{\beta 1}$ @ 16.083 και $K_{\beta 2}$ @ 15.834keV)
- Φωτοκορυφές στα 17.5 και 19.7 keV, οι οποίες οφείλονται στις ακτίνες-X του μολυβδαινίου (Mo) που φθάνουν με ελαστικές κρούσεις στον ανιχνευτή με χαρακτηριστικές ενέργειες $K_{\alpha 1}$ @ 17.478, $K_{\alpha 2}$ @ 17.373 keV, $K_{\beta 1}$ @ 19.607 και $K_{\beta 2}$ @ 19.964 keV)
- Φωτοκορυφές στα 17.0 και 19.2 keV, οι οποίες οφείλονται στις παραπάνω ακτίνες-X του μολυβδαινίου (Mo) που όμως φθάνουν στον ανιχνευτή με ανελαστικές κρούσεις



Σχήμα 5.8 Το φάσμα φθορισμού των ακτίνων-X όπως προκύπτει από την προσομοίωση για τάση μηχανής 30kV



Σχήμα 5.9 Το «ρεαλιστικό» φάσμα φθορισμού του υλικού CNFA21 για τάση μηχανής 30kV

5.3.2 Πειραματική διαδικασία τεχνικής XRF

Στην παράγραφο αυτή περιγράφεται η διαδικασία που ακολουθήθηκε με σκοπό την προσομοίωση φάσματος XRF όσο το δυνατόν πιο κοντά σε αντίστοιχο πειραματικό φάσμα όπως αυτό προκύπτει από ακτινοβόληση πραγματικού δείγματος. Αρχικά, περιγράφεται η πειραματική λήψη του φάσματος και στη συνέχεια δίνονται τα αποτελέσματα του πειράματος με σκοπό την σύγκρισή τους με αυτά που προέκυψαν από την προσομοίωση.

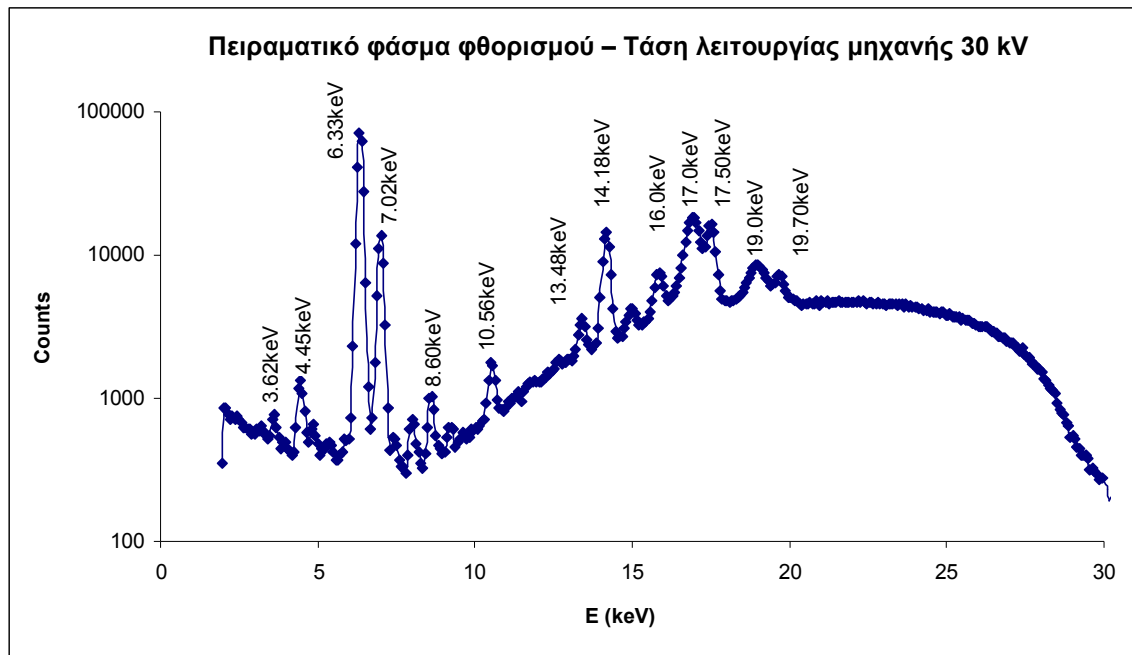
5.3.2.1 Πειραματική διαδικασία

Το εν λόγω πείραμα πραγματοποιήθηκε στο ΕΠΤ-ΕΜΠ, στο θάλαμο που βρίσκεται η διάταξη XRF (υπόγειο κτηρίου 'Κ'). Αρχικά, τοποθετήθηκαν τέσσερα (4) φίλτρα PVC συνολικού πάχους 0.04cm στην ειδική εσοχή του κατευθυντή δέσμης. Ακολούθως, τοποθετήθηκε ο κατευθυντής δέσμης στην έξοδο (παράθυρο) της μηχανής ακτίνων-X. Στη συνέχεια, τοποθετήθηκε στην ειδική βάση συγκράτησης του δείγματος, το δείγμα αναφοράς CNFA21. Τέλος, τέθηκε σε λειτουργία η μηχανή αφού πρώτα επιλέχθηκε το σενάριο ακτινοβόλησης με τάση 30kV (ένταση ρεύματος μεταξύ ανόδου και καθόδου 20μΑ). Ως

χρόνος ακτινοβολήσης επιλέχθηκε κατά το σύνηθες σε αυτές τις αναλύσεις 1000 δευτερόλεπτα (s).

5.3.2.2 Αποτελέσματα πειράματος

Μετά το πέρας των 1000s τα αποτελέσματα του πειράματος αναπαρίστανται γραφικά με τη βοήθεια του προγράμματος Excel στο Σχήμα 5.10 που ακολουθεί. Για λόγους σύγκρισης με το υπολογιστικό, το πειραματικό φάσμα αναπαρίσταται σε διάγραμμα με λογαριθμική κλίμακα στον άξονα των τεταγμένων. Παρατηρώντας το Σχήμα 5.10, γίνεται αντιληπτό πως δεν καταγράφεται καμία κρούση στην ενεργειακή περιοχή 0-2keV, λόγω σχετικής επιλογής που έχει γίνει στο λογισμικό συλλογής του φάσματος να μην γίνεται καταγραφή στα 30 πρώτα κανάλια.



Σχήμα 5.10 Το πειραματικό φάσμα φθορισμού του υλικού CNFA21-Τάση μηχανής 30kV

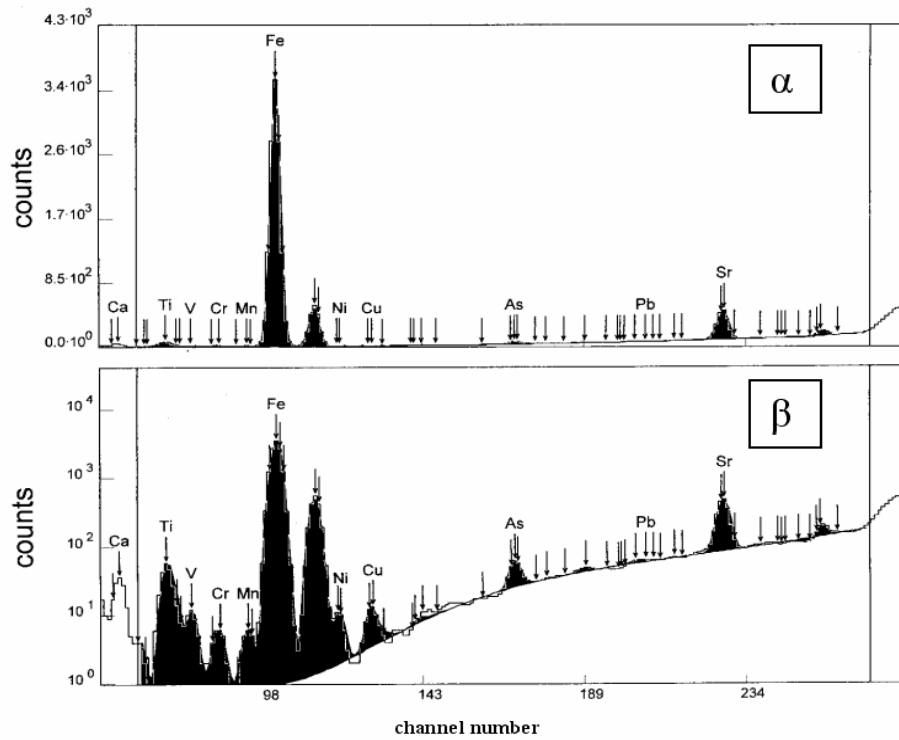
Παρατηρώντας και συγκρίνοντας τα Σχήματα 5.9 & 5.10 διαπιστώνεται ότι εν γένει οι φωτοκορυφές οι οποίες αναλύονται είναι στις περισσότερες περιπτώσεις οι ίδιες, αν και δεν πρέπει να παραβλέπεται το γεγονός ότι στην προσομοίωση δεν έχουν περιληφθεί όλα τα ιχνοστοιχεία του δείγματος. Καθώς δεν είναι και τόσο εύκολη η σύγκριση των δύο πολύπλοκων φασμάτων, αποφασίστηκε η εισαγωγή τους σε κατάλληλο πρόγραμμα ανάλυσης φασμάτων φθορισμού, όπου παρέχεται μεγαλύτερη ευκολία σύγκρισης των φασμάτων.

5.3.3 Ανάλυση του «ρεαλιστικού» και του πειραματικού φάσματος με το πρόγραμμα WinQXAS

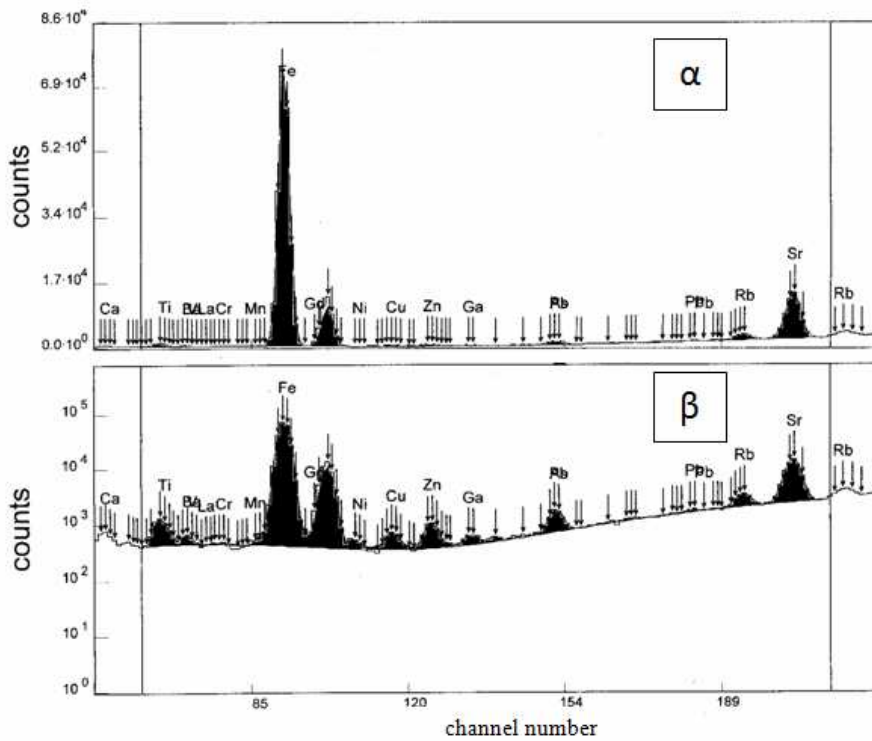
Κατά τη διάρκεια εκπόνησης της παρούσας ΔΕ έγινε σχολαστική προσπάθεια, με στόχο την εισαγωγή των «ρεαλιστικών» φασμάτων φθορισμού που προέκυψαν από προσομοίωση στο πρόγραμμα WinQXAS. Αυτή η προσπάθεια έγινε με γνώμονα την επίτευξη άμεσης σύγκρισης των φασμάτων της προσομοίωσης με αυτά που προκύπτουν πειραματικά. Επισημαίνεται ότι το πρόγραμμα WinQXAS έχει τη δυνατότητα ανάλυσης πολλαπλών φωτοκορυφών και προσδιορισμού ιχνοστοιχείων τα οποία δύσκολα μπορούν να εντοπισθούν αλλιώς. Η πλήρης διαδικασία έχει αναλυτικά περιγραφεί στην §5.2.3 Στα Σχήματα 5.11 & 5.12 που ακολουθούν φαίνονται σε (α) γραμμική και (β) λογαριθμική κλίμακα οι εικόνες των φασμάτων, όπως αυτές λαμβάνονται από το λογισμικό WinQXAS για το «ρεαλιστικό» φάσμα προσομοίωσης και το πειραματικό φάσμα αντίστοιχα.

5.3.4 Συμπεράσματα που προκύπτουν από τη σύγκριση πειραματικού φάσματος και φάσματος προσομοίωσης

Στην παράγραφο αυτή καταγράφονται όλα τα συμπεράσματα που εξάγονται από τη μελέτη των φασμάτων φθορισμού που προκύπτουν πειραματική και μέσω προσομοίωσης. Ποιοτικά τα δύο φάσματα (Σχήμα 5.11 & 5.12) έχουν την ίδια εν γένει μορφή. Δηλαδή, και στα δύο φάσματα είναι ευδιάκριτες οι φωτοκορυφές των στοιχείων που εμπεριέχονται στο δείγμα. Ειδικότερα, οι φωτοκορυφές του σιδήρου (Fe), και του στροντίου (Sr) που βρίσκονται σε σχετικά υψηλή συγκέντρωση στο δείγμα, αλλά και του τιτανίου (Ti), του χαλκού (Cu), το βαναδίου (V) και του χρωμίου (Cr). Για άλλα ιχνοστοιχεία, όπως ο μόλυβδος (Pb) και το αρσενικό (As) υπάρχει δυσκολία στην ανάλυση των πολλαπλών φωτοκορυφών που ανιχνεύονται στο φάσμα.



Σχήμα 5.11 Το «ρεαλιστικό» φάσμα φθορισμού σε (α) γραμμική κλίμακα και (β) λογαριθμική κλίμακα



Σχήμα 5.12 Το πειραματικό φάσμα φθορισμού σε γραμμική (α) και λογαριθμική (β) κλίμακα

Διαφορά παρουσιάζεται μεταξύ των δύο φασμάτων κυρίως ως προς το συνεχές υπόστρωμα στην περιοχή χαμηλών ενεργειών. Η διαφορά αυτή φαίνεται έντονα σε λογαριθμική κλίμακα. Πάντως, πρέπει να επισημανθεί ότι κατά την προσομοίωση δεν περιελήφθησαν στο υλικό του δείγματος όλα τα στοιχεία και ιχνοστοιχεία του δείγματος, παρά μόνο τα σημαντικότερα. Προφανώς, για το πειραματικό φάσμα τα ιχνοστοιχεία τα οποία δεν περιελήφθησαν στην προσομοίωση εκπέμπουν και τις δικές τους χαρακτηριστικές οι οποίες ανιχνεύονται από τον ανιχνευτή. Το μεγάλο πλήθος των χαρακτηριστικών από τα ιχνοστοιχεία αυτά, οι οποίες είναι παραπλήσιες ενέργειας και δεν μπορούν να διακριθούν από τον ανιχνευτή, έχει ως συνέπεια τη δημιουργία «συνεχούς» συνιστώσας, η οποία διαπιστώνεται μεν στο πειραματικό φάσμα, αλλά όχι στο φάσμα που προκύπτει από την προσομοίωση. Προκύπτει έτσι το σημαντικό συμπέρασμα ότι πρέπει να γίνεται όσο το δυνατόν λεπτομερέστερη περιγραφή του υλικού του δείγματος κατά την προσομοίωση.

Αν και το φάσμα που λήφθηκε με την προσομοίωση παρουσιάζει την ίδια μορφή με το πειραματικό, δηλαδή πρόκειται για φάσματα ποιοτικά συγκρίσιμα, εντούτοις τα φάσματα διαφέρουν ποσοτικά, κάτι που σημαίνει πως καταγράφεται διαφορετικός αριθμός κρούσεων στο ίδιο κανάλι. Αυτό είναι φυσικό, καθώς τα mA·s του πειράματος δεν είναι ίσα με το πλήθος των ιστοριών ηλεκτρονίων που προσομοιώθηκαν. Στα πλαίσια της ΔΕ έγινε προσπάθεια να γίνει αναγωγή των δύο φασμάτων στις ίδιες συνθήκες, δηλαδή το πλήθος των ιστοριών που προσομοιώθηκαν να αντιστοιχεί στα mA·s του πειράματος, αλλά και πάλι υπήρχε μεγάλη διαφορά – κατά τάξεις μεγέθους – μεταξύ των ποσοτικών αποτελεσμάτων προσομοίωσης και πειράματος. Αυτό αποδίδεται σε μία σειρά από λόγους:

- i. Κατά την προσομοίωση η απόσταση του ανιχνευτή από το δείγμα ήταν η μισή της πραγματικής για λόγους επιτάχυνσης της διαδικασίας προσομοίωσης.
- ii. Κατά την προσομοίωση δεν ελήφθη υπόψη το deal layer του ανιχνευτή, καθώς και τις μεταλλικής επαφής από χρυσό, τα οποία δεν ήταν γνωστά. Για τις χαμηλές ενέργειες των ακτίνων-X, τα πάχη αυτά, όσο μικρά και αν είναι, μπορεί να είναι καθοριστικά. Επιπλέον, είναι εξαιρετικά δύσκολο να προσδιορισθεί πειραματικά αυτό το πάχος με φωτόνια τόσο χαμηλών ενεργειών.
- iii. Κατά την προσομοίωση δεν ελήφθη υπόψη το λεπτό φύλλο από συνθετικό υλικό που προστατεύει τον ανιχνευτή από ρύπανση, καθώς και ο πλέγμα που έχει κατασκευαστεί για μηχανική προστασία.

- iv. Κατά την προσομοίωση έγινε η παραδοχή ότι όλο το ρεύμα προσπίπτει ακριβώς πάνω στο focal spot της ανόδου, κάτι το οποίο δεν είναι βέβαιο.
- v. Κατά την προσπάθεια αναγωγής των mA·s σε ιστορίες προσομοίωσης θεωρήθηκε ότι η ένδειξη του ρεύματος της μηχανής (μA) ήταν ακριβής.
- vi. Κατά την προσομοίωση θεωρήθηκε ότι το πάχος παραθύρου του βηρυλλίου, τόσο της μηχανής ακτίνων-X, όσο και του ανιχνευτή είχαν ακριβώς στις ονομαστικές τιμές τους.
- vii. Κατά την προσομοίωση, το υλικό του δείγματος δεν ήταν με ακρίβεια γνωστό και για το λόγο αυτό θεωρήθηκε ότι πολλά από τα στοιχεία του δείγματος περιέχονται υπό τη μορφή οξειδίων (π.χ. Al_2O_3 , SiO_2 κλπ). Οποιαδήποτε διαφορά στη σύσταση και την πυκνότητα του δείγματος προφανώς εισάγει αβεβαιότητα στο αποτέλεσμα της προσομοίωσης.

Είναι λοιπόν φανερό, ότι παρόλο που τα ποιοτικά αποτελέσματα της προσομοίωσης έχουν ικανοποιητική σύγκλιση με τα πειραματικά, και παρόλο που στα πλαίσια της ΔΕ έγινε προσπάθεια για σχετικά ακριβή περιγραφή της διάταξης XRF που προσομοιώθηκε, η προσομοίωση απέχει πολύ από το να δώσει ποσοτικά αποτελέσματα που να συγκλίνουν ικανοποιητικά με τα αντίστοιχα πειραματικά.

Δεν είναι σαφές αν αυτό οφείλεται σε αδυναμία του κώδικα προσομοίωσης, στους λόγους που εκτέθηκαν παραπάνω, ή σε λανθασμένες επιλογές που έγιναν κατά τη διάρκεια της προσομοίωσης. Πάντως το συγκεκριμένο θέμα θα είχε ενδιαφέρον να διερευνηθεί περισσότερο.

5.4 Μελέτη της επίδρασης της γωνίας τοποθέτησης του δείγματος ως προς τη δέσμη των ακτίνων-X

Όπως έχει αναφερθεί στόχος της παρούσας ΔΕ είναι η προσομοίωση της τεχνικής XRF, όπως αυτή πραγματοποιείται στο ΕΠΤ-ΕΜΠ, με χρήση του κώδικα PENELOPE. Μετά την εξοικείωση με τον κώδικα και την προσομοίωση βασικών στοιχείων της διάταξης (φάσμα μηχανής ακτίνων-X, διερεύνηση των συνιστωσών της διάταξης) ακολούθησε η εκτέλεση

προσομοιώσεων για την δημιουργία φασμάτων φθορισμού που προκύπτουν από την ανάλυση δειγμάτων, κατά τη γεωμετρία ανάλυσης που έχει υιοθετηθεί στη διάταξη ακτίνων-X του ΕΠΤ-ΕΜΠ. Καθώς η διαδικασία κρίθηκε πως λειτουργεί σε αποδεκτά πλαίσια, αποφασίστηκε η διερεύνηση της επίδρασης μίας συνιστώσας της διάταξης XRF και συγκεκριμένα της γωνίας τοποθέτησης του δείγματος ως προς τη δέσμη των ακτίνων-X, στην απόδοση ανίχνευσης των φωτονίων φθορισμού. Η διαδικασία για το σχεδιασμό και την εκτέλεση αυτών των προσομοιώσεων παρουσιάζεται αναλυτικά στην παρούσα παράγραφο.

Καταρχήν, κρίνεται ωφέλιμο να υπενθυμιστούν οι παραδοχές που έγιναν προκειμένου να καταστεί δυνατή η ταχύτερη επίλυση του προβλήματος. Αρχικά, η τεχνική XRF προσομοιώνεται σε δύο βήματα: στο πρώτο βήμα δημιουργείται το φάσμα της μηχανής ακτίνων-X (βλ. Κεφαλαίο 3) και στο δεύτερο γίνεται η θεώρηση πως το υπολογιστικό φάσμα των ακτίνων-X εκπέμπεται από σημειακή πηγή, η οποία τοποθετείται μέσα στη μηχανή, δηλαδή πίσω από το παράθυρο βηρυλλίου. Καθώς το φάσμα της μηχανής δημιουργείται μέσα στη μηχανή, στο αρχείο γεωμετρίας που χρησιμοποιείται (*sensor_final.geo*) το παράθυρο βηρυλλίου κατασκευάζεται στην αρχή του κατευθυντή δέσμης, ούτως ώστε να προσομοιώνεται η πραγματική διάταξη. Για λόγους απλοποίησης ο κατευθυντής δέσμης και η έξοδος της μηχανής (φλάντζα) προσομοιώνονται ως ενιαίο σύνολο και συγκεκριμένα ως κατευθυντής δέσμης μεγαλύτερου μήκους από τον πραγματικό.

Όσον αφορά στο δείγμα, αυτό θεωρείται ότι τοποθετείται υπό κλίση ως προς την διεύθυνση των ακτίνων-X που εκπέμπονται από τη μηχανή. Στο ΕΠΤ-ΕΜΠ υπήρχε μεγάλο ενδιαφέρον για τη μελέτη της γωνίας τοποθέτησης του δείγματος, σε σχέση με τη δέσμη των ακτίνων-X, όσον αφορά την επίδρασή της στο συλλεγόμενο φάσμα ακτίνων-X φθορισμού από τον ανιχνευτή. Για αυτό το λόγο εκτελέστηκαν αρχικά προσομοιώσεις για διαφορετικές κλίσεις του δείγματος, και συγκεκριμένα για κλίσεις 30° και 45° , για τις οποίες υπήρχαν διαθέσιμα πειραματικά αποτελέσματα από παλαιότερη ΔΔ [Ρούνη Π, 2008]. Οι προσομοιώσεις αυτές έγιναν για μία σειρά από μέγιστες τιμές της ενέργειας του φάσματος, και συγκεκριμένα για τις ενέργειες που συνήθως χρησιμοποιούνται στα πειράματα που γίνονται στη διάταξη του ΕΠΤ-ΕΜΠ, συγκεκριμένα: 15, 20, 25, 30, 35, 40, 45 και 50 keV. Επιπροσθέτως, έγινε και διερεύνηση της επίδρασης της κλίσης του δείγματος για μία ενέργεια ακτίνων-X αλλά για μία σειρά γωνιών τοποθέτησης του δείγματος για το απλό

σενάριο ακτινοβολήσης που αναλύθηκε στην §5.2 και συγκεκριμένα για τις γωνίες: 25°, 30°, 35°, 40°, 45° και 50°.

5.4.1 Δημιουργία αρχείων δεδομένων

Τα αρχεία δεδομένων που χρησιμοποιούνται για την εκτέλεση της προσομοίωσης της διάταξης XRF είναι το *sensor_final.geo*, το *sensor_v4.in* και το *ylika2.mat*, τα οποία δημιουργήθηκαν στην παράγραφο 4.4. Η μόνη διαφορά έγκειται στο αρχείο γεωμετρίας όσον αφορά στην γωνία τοποθέτησης του δείγματος. Στο αρχείο *sensor_final.geo* το δείγμα τοποθετείται υπό γωνία 30°, ενώ στη συνέχεια εκτελέστηκε και άλλη προσομοίωση με νέο αρχείο γεωμετρίας *sensor_finall.geo* στο οποίο το δείγμα βρίσκεται υπό γωνία 45°. Η μοναδική διαφορά των 2 αρχείων είναι η τιμή της γωνίας THETA. Οπότε, στο αρχείο *sensor_final.geo* οι επιφάνειες από τις οποίες ορίζεται το δείγμα και το δοχείο δείγματος στρέφονται κατά 60°, ενώ στο αρχείο *sensor_finall.geo* ως προς 45°. Υπενθυμίζεται ότι η γεωμετρία που προσομοιώνει την διάταξη XRF είναι περιστρεμμένη κατά 90° ως προς τον οριζόντιο άξονα σε σχέση με την πραγματική του ΕΠΤ-ΕΜΠ (βλ. §4.2). Επομένως, εάν είναι επιθυμητή η στρέψη ενός αντικειμένου ως προς τον οριζόντιο άξονα πρέπει να εισαχθεί στο αρχείο γεωμετρίας η συμπληρωματική γωνία της επιθυμητής. Ο χρήστης έχει δύο επιλογές για να περιστρέψει ένα εικονικό αντικείμενο, όπως το δείγμα. Σύμφωνα με τον πρώτο τρόπο ακολουθείται η περιστροφή των επιφανειών από τις οποίες αποτελείται ένα αντικείμενο, ενώ σύμφωνα με το δεύτερο ορίζεται μία ομάδα αντικειμένων (module) η οποία και περιστρέφεται ως σύνολο. Για την περιστροφή του δοχείου στο οποίο περιέχεται το προς εξέταση δείγμα ακολουθήθηκε ο πρώτος τρόπος. Τα διαφοροποιημένα τμήματα των δύο αρχείων γεωμετρίας που χρησιμοποιήθηκαν για γωνία 30° και 45° τοποθέτησης του δείγματος, φαίνονται στους Πίνακες 5.4 και 5.5 αντίστοιχα, οι οποίοι δίνονται στο τέλος του παρόντος Κεφαλαίου. Η έντονη (bold) γραμματοσειρά δείχνει την αριθμητική τιμή της παραμέτρου THETA.

Ακολούθως, απαιτείται η δημιουργία του αρχείου υλικού. Για την ακρίβεια χρησιμοποιείται το αρχείο υλικού *ylika2.mat*, του οποίου η δημιουργία έχει περιγραφεί αναλυτικά στην παράγραφο 4.4.2. Υπενθυμίζεται, πως το υλικό που χρησιμοποιείται και αντιπροσωπεύει το δείγμα (*digma_xrf.mat*), αποτελεί μία απλοποιημένη μορφή τυπικού

δείγματος χώματος, αποτελούμενο από διοξείδιο του πυριτίου (SiO₂), με ιχνοστοιχεία τεσσάρων (4) χημικών στοιχείων, ποσοτικής σύστασης 1000ppm έκαστος: τιτάνιο (Ti), χαλκός (Cu), αρσενικό (As) και μόλυβδος (Pb). Η πυκνότητα υλικού επιλέχθηκε να λάβει την τιμή 1.4g/cm³. Η σχετικά υψηλή συγκέντρωση των ιχνοστοιχείων 1000ppm επελέγη προκρινόμενου να υπάρχει υψηλός ρυθμός εκπομπής ακτινοβολίας φθορισμού και να επιταχυνθεί η διαδικασία.

Αφού δημιουργήθηκαν τα δύο αρχεία γεωμετρίας και το αρχείο υλικού, το τελευταίο βήμα πριν την έναρξη της προσομοίωσης είναι η δημιουργία των αρχείων εισόδου. Τα αρχεία εισόδου έχουν τιμές ενέργειας αποκοπής όπως αυτές επιλέχθηκαν στην παράγραφο 4.4. Στη συνέχεια, με το πρόγραμμα που παρουσιάστηκε στην παράγραφο 4.4 δημιουργούνται τα φάσματα εισαγωγής στο αρχείο εισόδου με τη συγκεκριμένη δομή. Έτσι, δημιουργούνται 8 αρχεία εισόδου, για κάθε τιμή μέγιστης ενέργειας του εκάστοτε φάσματος, δηλαδή 15, 20, 25, 30, 35, 40, 45 και 50 keV. Τα αρχεία ονομάζονται *sensor_v4_15.in*, *sensor_v4_20.in*, *sensor_v4_25.in*, *sensor_v4_30.in*, *sensor_v4_35.in*, *sensor_v4_40.in*, *sensor_v4_45.in* και *sensor_v4_50.in* αντίστοιχα. Σε κάθε αρχείο εισόδου ορίζονται 3 εικονικοί ανιχνευτές: ο ένας ανιχνευτής αλληλεπίδρασης αντιστοιχεί στο δείγμα, ώστε να ελέγχεται το φάσμα που φτάνει στο δείγμα, ο δεύτερος ανιχνευτής αλληλεπίδρασης και ο ανιχνευτής αποτιθέμενης ενέργειας αντιστοιχούν στον ενεργό όγκο του ανιχνευτή SiLi της διάταξης XRF, ώστε να υπολογίζεται, τόσο το φάσμα των φωτονίων που εισέρχονται στον ενεργό όγκο του ανιχνευτή, όσο και το φάσμα της αποτιθέμενης στον ανιχνευτή ενέργειας.

5.4.2 Τα αρχεία εξόδου της προσομοίωσης

Χρησιμοποιώντας το εκτελέσιμο αρχείο *main_process.exe* που δημιουργήθηκε στη διαδικασία της παραγράφου 4.4, πραγματοποιούνται οι προσομοιώσεις για κάθε ενέργεια και για τις δύο γωνίες τοποθέτησης του δείγματος. Οι προσομοιώσεις ξεκινούν με την εντολή:

`main_process.exe < sensor_v4_#.in`

Το σύμβολο # αντιπροσωπεύει τον αριθμό 15, 20, 25, 30, 35, 40, 45 και 50, που αντιστοιχεί στη μέγιστη ενέργεια του φάσματος της μηχανής ακτίνων-X, που αντιστοιχεί σε κάθε ένα από τα σενάρια που δημιουργήθηκαν στο 3^ο Κεφάλαιο. Σημειώνεται ότι για να

πραγματοποιηθούν σωστά οι προσομοιώσεις με το δείγμα τοποθετημένο υπό κλίση 45° πρέπει να γίνει αλλαγή στο όνομα του αρχείου γεωμετρίας, στο αρχείο εισόδου, από *sensor_final.geo* σε *sensor_finall.geo*.

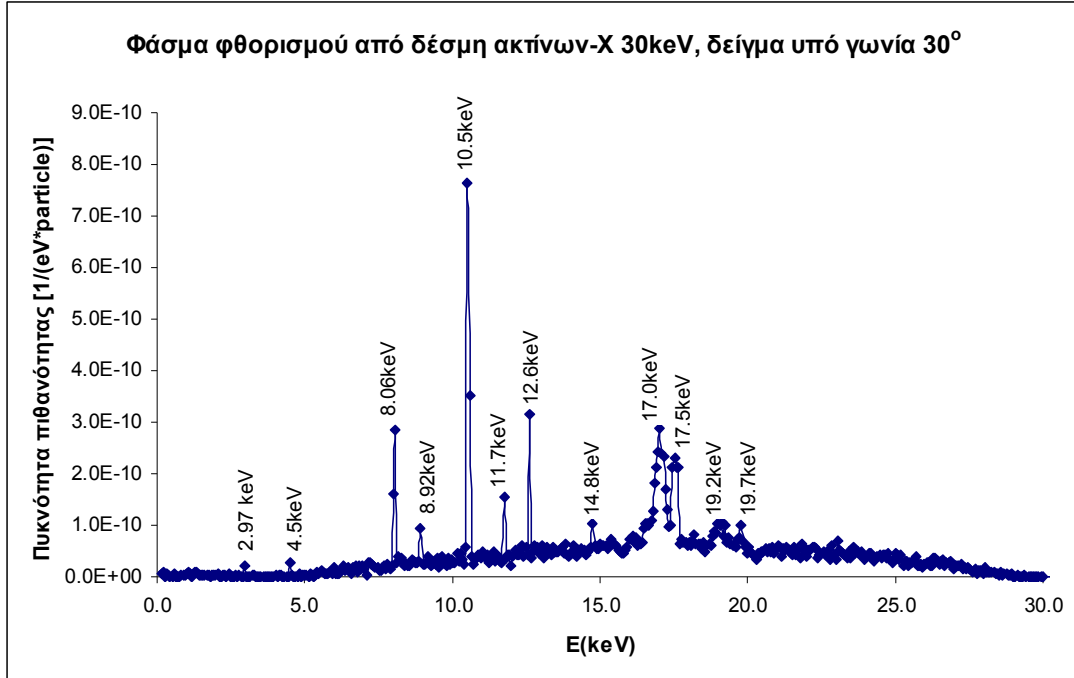
Τα αρχεία εξόδου που προκύπτουν από τις παραπάνω προσομοιώσεις και τα οποία παρουσιάζουν ενδιαφέρον για τους στόχους της παρούσας ΔΕ είναι τα αρχεία εξόδου των τριών εικονικών ανιχνευτών *pm_spc_enddet_1.dat*, *pm_spc_impdet_1.dat* και *pm_spc_impdet_2.dat* καθώς και το γενικό αρχείο εξόδου *penmain.dat*. Τα αρχεία εξόδου των ανιχνευτών αλληλεπίδρασης περιέχουν το φάσμα των ακτίνων-X, που εισέρχονται στα αντικείμενα τα οποία ορίστηκαν ως ανιχνευτές αλληλεπίδρασης, ενώ αυτό του ανιχνευτή αποτιθέμενης ενέργειας περιέχει το φάσμα των ακτίνων-X που αποθέτουν την ενέργειά τους στο αντικείμενο του ανιχνευτή. Η δομή των αρχείων του ανιχνευτή αλληλεπίδρασης και αποτιθέμενης ενέργειας είναι η ίδια, όπως περιγράφεται στην §3.4.5.

5.4.3 Αποτελέσματα και σχολιασμός των προσομοιώσεων για γωνίες κλίσης του δείγματος 30° & 45° και για διάφορες ενέργειες φάσματος ακτίνων-X

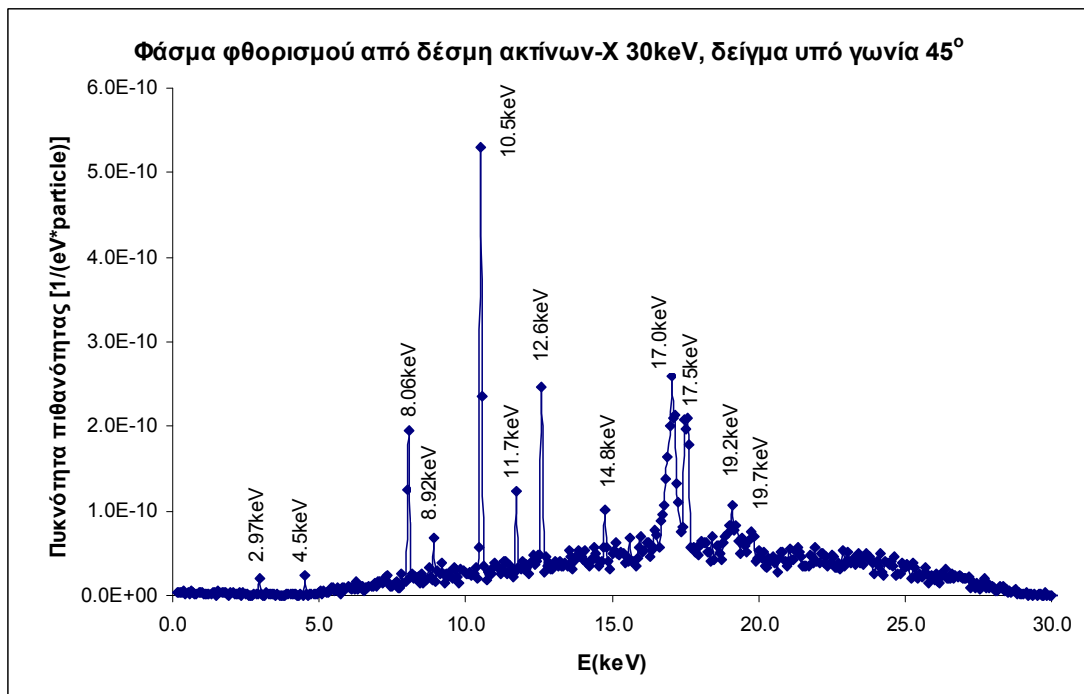
Αρχικά πραγματοποιήθηκαν δεκαέξι (16) προσομοιώσεις, οκτώ (8) με το δείγμα τοποθετημένο υπό κλίση 30° και άλλες τόσες με το δείγμα τοποθετημένο υπό κλίση 45°. Οι προσομοιώσεις ξεκίνησαν από αυτές τις γωνίες γιατί σε αυτές τις γεωμετρίες υπήρχαν διαθέσιμα πειραματικά δεδομένα, οπότε υπήρχε η δυνατότητα σύγκρισης. Όριο για τον τερματισμό των προσομοιώσεων αρχικά ορίστηκε ο συνολικός αριθμός ιστοριών, και συγκεκριμένα $1 \cdot 10^{10}$ ιστορίες. Ο συνολικός χρόνος διάρκειας των προσομοιώσεων ποικίλλει ανάλογα με την μέγιστη ενέργεια του φάσματος της μηχανής, με μία μέση τιμή περί τις 8 ημέρες. Λόγω του μεγάλου χρόνου διάρκειας της προσομοίωσης αποφασίστηκε οι προσομοιώσεις να τερματίζονται όταν το φάσμα που καταγράφεται στον ανιχνευτή αποτιθέμενης ενέργειας έχει ικανοποιητική στατιστική αποτελεσμάτων. Ο χρόνος διάρκειας της προσομοίωσης είναι μεγάλος διότι, το εκάστοτε φωτόνιο αλληλεπιδρά με πολλά υλικά της πολύπλοκης γεωμετρίας μέχρι να φτάσει στον ανιχνευτή.

Στα Σχήματα που ακολουθούν (Σχήμα 5.13 & 5.14) παρατίθεται το φάσμα φθορισμού που προκύπτει για μέγιστη ενέργεια της μηχανής ακτίνων-X 30 keV, με το δείγμα τοποθετημένο υπό κλίση 30° και 45° αντίστοιχα. Στο τέλος του Κεφαλαίου παρατίθενται τα

Σχήματα 5.13-5.28, με τα φάσματα για τις γωνίες δείγματος 30° και 45° και για τα υπόλοιπα σενάρια (με μέγιστες ενέργειες 15keV, 20keV, 25keV, 35keV, 40keV, 45keV και 50keV).



Σχήμα 5.13 Το φάσμα φθορισμού που καταγράφεται από τον ανιχνευτή αποτιθέμενης ενέργειας για τάση λειτουργίας της μηχανής 30kVolt, δείγμα υπό κλίση 30°



Σχήμα 5.14 Το φάσμα φθορισμού που καταγράφεται από τον ανιχνευτή αποτιθέμενης ενέργειας για τάση λειτουργίας της μηχανής 30kVolt, μα υπό κλίση 45°

Στα Σχήματα αυτά έχουν σημειωθεί οι φωτοκορυφές που σχηματίζονται λόγω του φθορισμού των ακτίνων-X στο δείγμα. Υπενθυμίζεται πως το υλικό που αντιστοιχεί στο δείγμα είναι ένα μείγμα διοξειδίου του πυριτίου (SiO_2) με ιχνοστοιχεία τιτανίου (Ti), χαλκού (Cu), αρσενικού (As) και μόλυβδου (Pb). Συγκεκριμένα παρατηρούνται οι φωτοκορυφές:

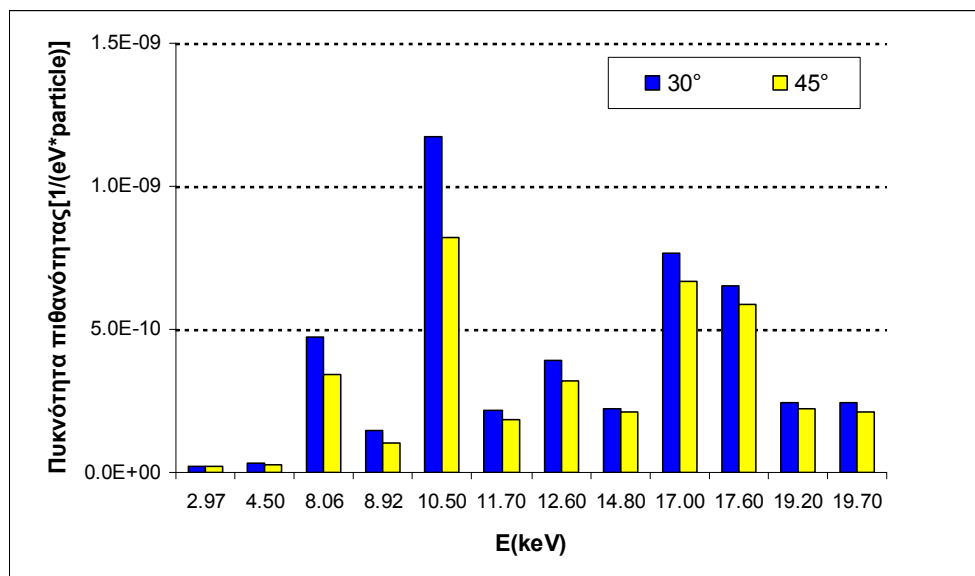
- Φωτοκορυφή στα 2.97 keV (πολύ ασθενής), η οποία οφείλεται πιθανότατα στις χαρακτηριστικές ακτίνες L του μολυβδαινίου
- Φωτοκορυφή στα 4.5 keV, η οποία αποτελεί τη χαρακτηριστική ακτίνα-X του τιτανίου ($K_{\alpha 1}$ @ 4.510 και $K_{\alpha 2}$ @ 4.504 keV)
- Φωτοκορυφές στα 8.06 & 8.92 keV, οι οποίες αποτελούν τις χαρακτηριστικές K_{α} και K_{β} ακτίνες-X του χαλκού ($K_{\alpha 1}$ @ 8.047 και $K_{\alpha 2}$ @ 8.027 keV / $K_{\beta 1}$ @ 8.904 και $K_{\beta 2}$ @ 8.976 keV)
- Φωτοκορυφές στα 10.5 & 11.7 keV, οι οποίες αποτελούν τις χαρακτηριστικές K_{α} και K_{β} ακτίνες-X του αρσενικού ($K_{\alpha 1}$ @ 10.543 και $K_{\alpha 2}$ @ 10.507 keV / $K_{\beta 1}$ @ 11.725 και $K_{\beta 2}$ @ 11.863 keV)
- Φωτοκορυφές στα 10.5, 12.6 & 14.8 keV, οι οποίες αποτελούν τις χαρακτηριστικές L_{α} , L_{β} και L_{γ} ακτίνες-X του μόλυβδου αντίστοιχα ($L_{\alpha 1}$ @ 10.448 και $L_{\alpha 2}$ @ 10.549 keV / $L_{\beta 1}$ @ 12.611 και $L_{\beta 2}$ @ 12.620 keV / $L_{\gamma 1}$ @ 10.448)
- Φωτοκορυφές στα 17.5 και 19.7 keV, οι οποίες οφείλονται στις ακτίνες-X του μολυβδαινίου που φθάνουν με ελαστικές κρούσεις στον ανιχνευτή με χαρακτηριστικές ενέργειες $K_{\alpha 1}$ @ 17.478, $K_{\alpha 2}$ @ 17.373 keV, $K_{\beta 1}$ @ 19.607 και $K_{\beta 2}$ @ 19.964 keV)
- Φωτοκορυφές στα 17.0 και 19.2 keV, οι οποίες οφείλονται στις παραπάνω ακτίνες-X του μολυβδαινίου που όμως φθάνουν στον ανιχνευτή με ανελαστικές κρούσεις

Από τα παραπάνω εξάγεται το συμπέρασμα πως όλα τα ιχνοστοιχεία τα οποία περιέχονται στο δείγμα ανιχνεύονται κατά την προσομοίωση. Σημαντικό ενδιαφέρον παρουσιάζει η φωτοκορυφή που σχηματίζεται στα 10.5 keV. Όπως γίνεται εύκολα αντιληπτό η φωτοκορυφή αυτή είναι η ισχυρότερη σε κάθε φάσμα, ανεξάρτητα από την υψηλή τάση της μηχανής, ή τη γωνία κλίσης του δείγματος. Η φωτοκορυφή αυτή αποτελεί φωτοκορυφή αλληλοεπικάλυψης (βλ. §2.7) των χαρακτηριστικών του αρσενικού (K_{α}) και του μόλυβδου (L_{α}). Επιπροσθέτως, παρατηρούνται οι χαρακτηριστικές ακτίνες-X του υλικού του στόχου με απόλυτη λεπτομέρεια, όσων αφορά τις αθροιστικές κορυφές των $K_{\alpha 1}$ - $K_{\alpha 2}$ και $K_{\beta 1}$ - $K_{\beta 2}$, οι

οποίες δε διαχωρίζονται στα φάσματα της βιβλιογραφίας. Με αυτόν τον τρόπο η προσομοίωση μπορεί να οδηγήσει σε λεπτομερειακά αποτελέσματα όταν μία ακτίνα εκπέμπεται βάσει μετάπτωσης ηλεκτρονίων της ίδιας στιβάδας αλλά διαφορετικών υποστιβάδων.

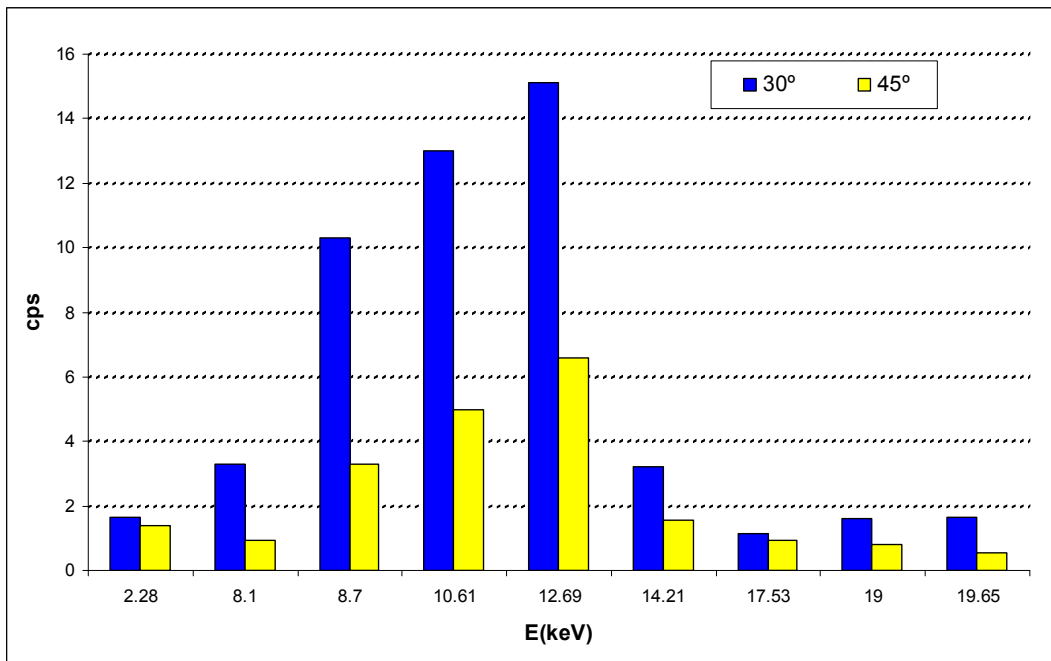
Από τα Σχήματα 5.13-5.28 εξάγονται ορισμένα συμπεράσματα όσον αφορά την υπό μελέτη διάταξη:

- Η διάταξη, καθώς και ο σχεδιασμός του προβλήματος της προσομοίωσης της τεχνικής XRF οδηγούν σε σωστά - ποιοτικά καταρχήν- αποτελέσματα. Αυτό γίνεται κατανοητό καθώς σε όλα τα Σχήματα εμφανίζονται οι φωτοκορυφές όλων των χαρακτηριστικών ακτίνων-X των ιχνοστοιχείων, τα οποία περιέχονται μέσα στο δείγμα.
- Συγκρίνοντας τα φάσματα της φθορίζουσας ακτινοβολίας που προκύπτουν τοποθετώντας το δείγμα υπό γωνία 30 και 45 μοιρών, για την ίδια τάση λειτουργίας της μηχανής και για το ίδιο πλήθος ιστοριών προκύπτει ότι η γωνία τοποθέτησης 30° οδηγεί σε καταγραφή μεγαλύτερου πλήθους ακτίνων φθορισμού, που σημαίνει ότι αυτή η γεωμετρία ανίχνευσης είναι αποδοτικότερη. Στο Σχήμα 5.29 που ακολουθεί γίνεται αντιληπτή η επίδραση της γωνίας τοποθέτησης του δείγματος για τάση λειτουργίας της μηχανής 30kV. Στον Πίνακα 5.6 φαίνονται οι λόγοι των συναρτήσεων πυκνότητας πιθανότητας των 30° προς αυτών των 45°.



Σχήμα 5.29 Επίδραση της γωνίας τοποθέτησης του δείγματος για 30kV- από φάσματα προσομοίωσης

Το συμπέρασμα αυτό επιβεβαιώνεται από τα πειραματικά αποτελέσματα τα οποία έχουν προκύψει για τις δύο αυτές γωνίες κλίσης στα πλαίσια ΔΔ του ΕΠΤ [Ρούνη Π, 2008], στα οποία βασίστηκε και η υιοθέτηση της γωνίας των 30° στην κατασκευή της διάταξης XRF. Το αντίστοιχο ραβδόγραμμα που προέκυψε από τα αποτελέσματα της ΔΔ φαίνεται στο Σχήμα 5.30. Τονίζεται, πως από το πειραματικό διάγραμμα εξάγονται μόνο ποιοτικά συμπεράσματα όσο αφορά τα αποτελέσματα της προσομοίωσης¹⁷.



Σχήμα 5.30 Επίδραση της γωνίας τοποθέτησης του δείγματος-Τάση λειτουργίας 30kV-πειραματικό φάσμα ΔΔ [Ρούνη Π., 2008]

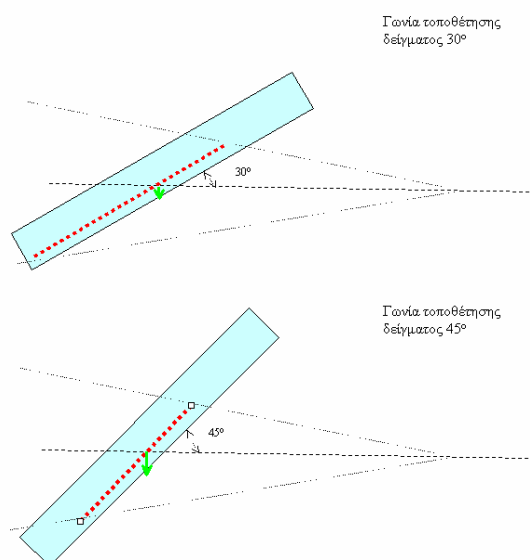
Στον Πίνακα 5.6 που ακολουθεί καταγράφονται οι λόγοι των συναρτήσεων πυκνότητας πιθανότητας των 30° προς αυτές των 45°, σε συνάρτηση με την τάση λειτουργίας της μηχανής ακτίνων-Χ. Όπως γίνεται αντιληπτό, η επίδραση της γωνίας τοποθέτησης του δείγματος δεν είναι ίδια για όλες τις ενέργειες φωτονίων. Πάντως, με εξαίρεση τις πολύ χαμηλές ενέργειες (2.97 & 4.5keV), όπου δεν είναι δυνατόν να προκύψουν συμπεράσματα, κυρίως λόγω μικρού πλήθους φωτονίων που καταγράφονται αλλά και κακής στατιστικής, φαίνεται ότι η επίδραση της γωνίας είναι λιγότερο σημαντική για τις υψηλότερες ενέργειες φωτονίων.

¹⁷ Η παράθεση των πειραματικών δεδομένων της ΔΔ [16] αποσκοπεί μόνο στην ταύτιση των τάσεων, δηλαδή και τα δύο διαγράμματα επιβεβαιώνουν πως αποδοτικότερη είναι η γωνία 30°.

Πίνακας 5.6 Επίδραση της γωνίας τοποθέτησης του δείγματος για διάφορες τάσεις μηχανής ακτίνων-X

E(keV)	Λόγος $\text{pdf}_{30^\circ} / \text{pdf}_{45^\circ}$							
	Τάση μηχανής (kV)							
	15	20	25	30	35	40	45	50
2.97	0.929	0.469	1.133	1.105	1.345	1.045	1.103	1.184
4.50	2.123	2.190	1.477	1.243	1.513	1.960	0.679	1.329
8.06	1.410	1.367	1.458	1.378	1.352	1.423	1.503	1.501
8.92	1.022	1.437	1.174	1.436	1.433	1.131	1.420	1.252
10.50	1.210	1.329	1.416	1.428	1.304	1.425	1.496	1.505
11.70	–	1.093	1.249	1.163	1.840	1.186	1.294	1.244
12.60	–	1.049	1.372	1.221	1.438	1.413	1.428	1.349
14.80	–	–	1.120	1.042	1.179	1.368	1.340	1.328
17.60	–	–	1.086	1.119	1.132	1.223	1.195	1.216
19.70	–	–	1.250	1.178	1.236	1.172	1.151	1.237

Το συμπέρασμα που εξάγεται από τις παραπάνω προσομοιώσεις, ότι δηλαδή καθώς μειώνεται η γωνία τοποθέτησης του δείγματος, τόσο αυξάνει η απόδοση ανίχνευσης των ακτίνων-X φθορισμού, εξηγείται από το Σχήμα 5.31: για γωνία κλίσης δείγματος 30° προσβάλλεται από τη δέσμη των ακτίνων-X μεγαλύτερη επιφάνεια του δείγματος (κόκκινη γραμμή), σε σχέση με γωνία 45° , κάτι που ευνοεί τον εντονότερο φθορισμό. Επιπλέον, για γωνία κλίσης δείγματος 30° , οι ακτίνες-X χαμηλών ενεργειών οι οποίες εκπέμπονται από το δείγμα με κατεύθυνση τον ανιχνευτή (πράσινο βέλος), πρέπει να διαπεράσουν μικρότερο πάχος υλικού του δείγματος, σε σχέση με γωνία κλίσης 45° , οπότε έχουν μεγαλύτερη πιθανότητα να μην απορροφηθούν στο δείγμα και εν τέλει να ανιχνευθούν.



Σχήμα 5.31 Επίδραση της γωνίας τοποθέτησης του δείγματος

- Στα φάσματα προσομοίωσης και για τιμές της υψηλής τάσης που υπερβαίνουν τα 25kV είναι ευδιάκριτες και οι χαρακτηριστικές ακτίνες-X, οι οποίες οφείλονται στο υλικό της ανόδου (μολυβδαίνιο). Για την ακρίβεια σχηματίζονται φωτοκορυφές στα 17.4 keV (K_{α}) και 19.7 keV (K_{β}) που οφείλονται στην ελαστική σκέδαση των χαρακτηριστικών ακτίνων-X του Mo, καθώς και οι αιχμές μη ελαστικής σκέδασης – με εμφανώς μεγαλύτερο εύρος, στις ενέργειες ~17.0 keV και ~19.2 keV.

5.4.4 Αποτελέσματα και σχολιασμός προσομοιώσεων για γωνίες κλίσεως του δείγματος 25°-50° και για ενέργεια φάσματος ακτίνων-X 15keV

Αφού, όπως συμπεραίνεται από την παραπάνω διαδικασία (βλ. §5.4.3), η ακολουθούμενη διαδικασία προσομοίωσης οδηγεί σε ποιοτικά συγκρίσιμα αποτελέσματα με αυτά των πειραμάτων, μπορεί να χρησιμοποιηθεί ως εργαλείο για την μελέτη της επίδρασης διαφόρων παραμέτρων της διάταξης ακτίνων-X του ΕΠΤ-ΕΜΠ στην ανάλυση δειγμάτων.

Στο πλαίσιο της παρούσας ΔΕ μελετήθηκε ενδεικτικά η επίδραση της γωνίας τοποθέτησης του δείγματος ως προς τη δέσμη ακτίνων-X. Έτσι, πραγματοποιήθηκαν περαιτέρω προσομοιώσεις με το δείγμα τοποθετημένο υπό κλίσεις 25°, 35°, 40°, 45° και 50°, με στόχο να προκύψουν συμπεράσματα όσον αφορά τη βέλτιστη γωνία τοποθέτησης του δείγματος, χωρίς την ανάγκη ειδικών κατασκευών και πειραμάτων. Επιπλέον, αποφασίστηκε να μελετηθεί το απλό σενάριο ακτινοβολήσης λόγω της υψηλής συγκέντρωσης σε ιχνοστοιχεία του απλοποιημένου δείγματος.

Τα αρχεία εισόδου των προσομοιώσεων είναι ίδια με αυτά που δημιουργήθηκαν στην παράγραφο 5.2.1. Για την περιστροφή του δείγματος ακολουθείται η τεχνική που περιγράφεται στην παράγραφο 5.4.1. Υπενθυμίζεται πως για την επίτευξη της επιθυμητής γωνίας περιστροφής ορίζουμε στο αρχείο γεωμετρίας τη συμπληρωματική της γωνία. Για παράδειγμα, για περιστροφή του δείγματος κατά 50°, στο αρχείο γεωμετρίας η γωνία ΘΗΤΑ λαμβάνει την τιμή 40°. Για λόγους απλότητας, το όνομα του αρχείου γεωμετρίας διατηρήθηκε το ίδιο (*sensor_filters.geo*) και επιπροσθέτως στα αρχικά σχόλια του αρχείου αναγράφεται η κλίση του δείγματος σε μοίρες, έτσι ώστε να αποφευχθούν τα λάθη. Εν

κατακλείδι, τα τρία αρχεία δεδομένων των προσομοιώσεων είναι τα *sensor_filters.geo*, *ylika3.mat* και *sensor_filters.in*.

Καθώς η προσομοίωση που περιγράφεται στην παράγραφο 5.2.2 παρουσιάζει αρκετά ικανοποιητική στατιστική αποτελεσμάτων, επιλέχθηκε να σταματούν οι προσομοιώσεις όταν ο αριθμός ιστοριών φτάσει τα $2.1 \cdot 10^{10}$ φωτόνια. Με αυτό τον τρόπο είναι εφικτή η σύγκριση των φασμάτων που προκύπτουν από τον ανιχνευτή αποτιθέμενης ενέργειας κάθε μίας προσομοίωσης. Στο Σχήμα 5.32 παρουσιάζονται συνοπτικά τα αποτελέσματα όλων των προσομοιώσεων για ορισμένες από τις φωτοκορυφές του φάσματος (8.06 keV (Cu- K_{α}), 10.6 keV (As- K_{α} & Pb- L_{α})). Στον άξονα των τεταγμένων του γραφήματος τοποθετούνται οι τιμές των κρούσεων κάθε φωτοκορυφής, δηλαδή ο αριθμός των φωτονίων από τα οποία αποτελείται η κάθε φωτοκορυφή. Για να γίνει αυτό, θα πρέπει πρώτα να υπολογισθεί το πλήθος των φωτονίων $particles(E)$ που έχουν καταγραφεί σε κάθε ενεργειακό διαμέρισμα (bin) του αρχείου *pm_spc_enddet_1.dat* που αντιστοιχεί σε ενέργεια E , σύμφωνα με τη σχέση 5.1 [19]:

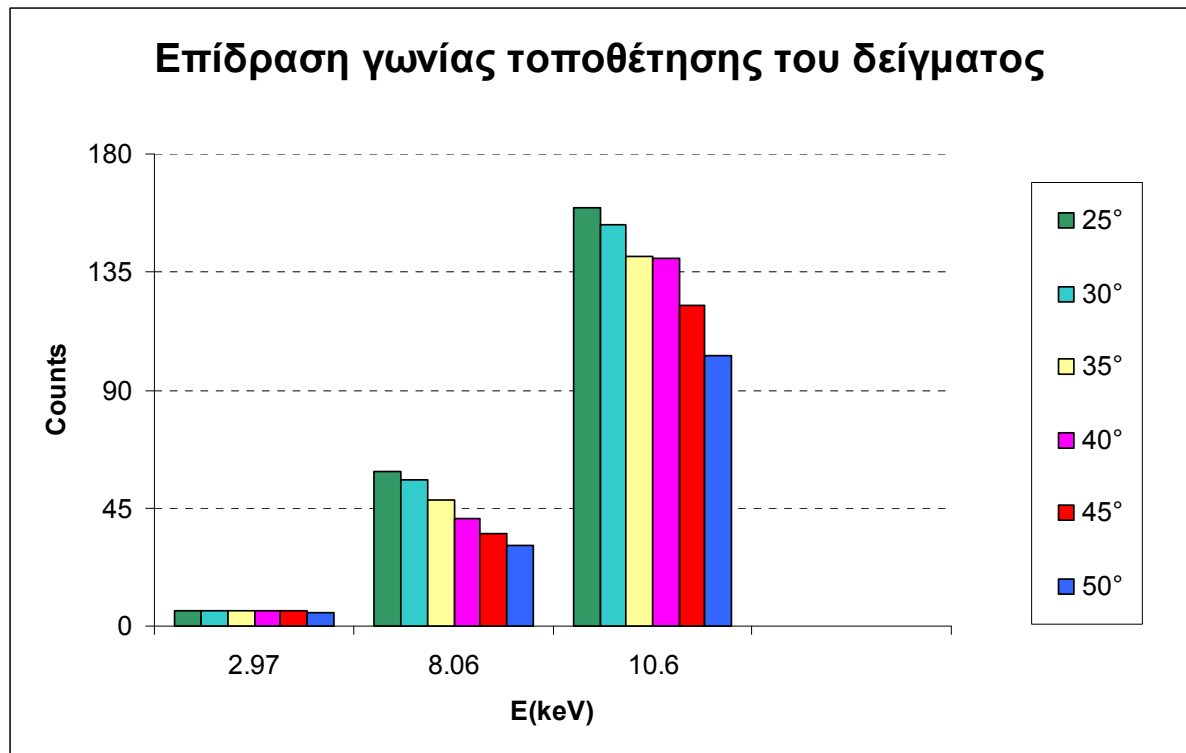
$$particles(E) = pdf(E) \cdot dE \cdot tot_part \quad (5.1)$$

όπου:

pdf(E): η συνάρτηση πυκνότητας πιθανότητας ($1/(eV \cdot particle)$) της ενεργειακής περιοχής που αντιστοιχεί σε ενέργεια E (η δεύτερη στήλη του αρχείου *pm_spc_enddet_1.dat*).

dE: εύρος ενεργειακού καναλιού (bin). Το εύρος αυτό καθορίζεται έμμεσα από το χρήστη, στο αρχείο δεδομένων. Μπορεί εύκολα να προκύψει και από το αρχείο *pm_spc_enddet_1.dat* με απλή αφαίρεση της ενέργειας δύο διαδοχικών σειρών.

tot_part: το συνολικό πλήθος των φωτονίων, που ισοδυναμεί με το πλήθος των ιστοριών που προσομοιώθηκαν



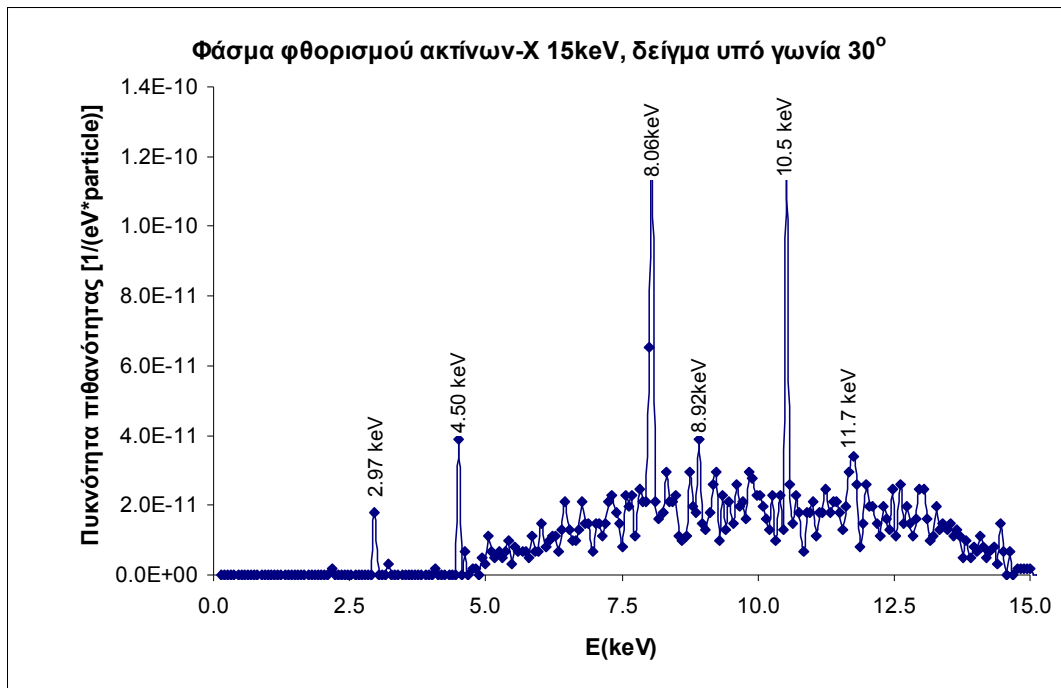
Σχήμα 5.32 Διάγραμμα των κρούσεων των σημαντικών φωτοκορυφών, σε σχέση με τη γωνία τοποθέτησης του δείγματος

Βάσει του γραφήματος του Σχήματος 5.32 φαίνεται πως όσο μεγαλώνει η γωνία τοποθέτησης του δείγματος τόσο λιγότερα είναι τα counts από τα οποία αποτελείται κάθε φωτοκορυφή. Αυτό γίνεται πολύ φανερό στις φωτοκορυφές των 8.06 keV (Cu-K_α) και των 10.6 keV (As-K_α & Pb-L_α). Για τη φωτοκορυφή στα 2.97 keV (Mo-L) δεν φαίνεται να υπάρχει επίδραση της γωνίας τοποθέτησης του δείγματος, κάτι το οποίο θα μπορούσε ενδεχομένως να αποδοθεί σε κάποιο βαθμό στο μικρό πλήθος γεγονότων που καταγράφονται σε αυτή τη φωτοκορυφή, που συνεπάγεται και κακή στατιστική. Ένας άλλος λόγος για τον οποίο φαίνεται να μην υπάρχει επίδραση της γωνίας, θα μπορούσε να είναι το γεγονός ότι, τα πολύ χαμηλής ενέργειας φωτόνια αυτά, προέρχονται από την επιφάνεια του δείγματος και συνεπώς η αλλαγή της γωνίας δεν επιδρά στο μήκος της διαδρομής που θα πρέπει να διαπεράσουν μέσα στο δείγμα.

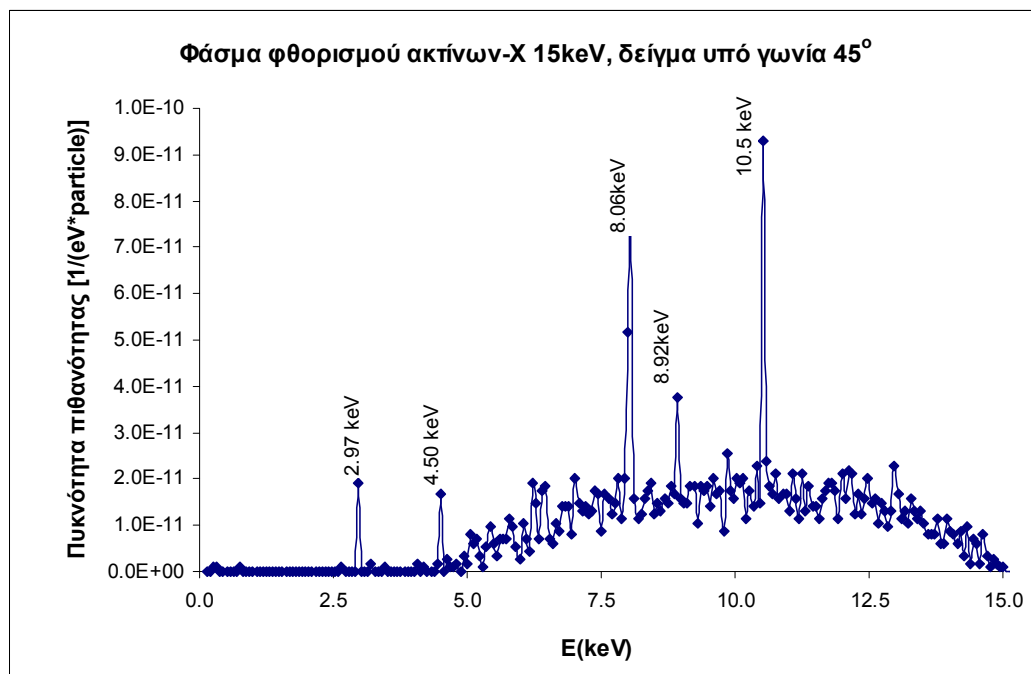
Συνεπώς, σύμφωνα με τις προσομοιώσεις που έγιναν στο πλαίσιο της παρούσας ΔΕ, όσο μικρότερη είναι η γωνία τοποθέτησης του δείγματος σε σχέση με τη διεύθυνση της δέσμης ακτίνων-Χ, τόσο μεγαλύτερος είναι ο ρυθμός που τα φωτόνια συλλέγονται στον ανιχνευτή. Αυτό το συμπέρασμα συμφωνεί με τα πειραματικά αποτελέσματα, για γωνίες

κλίσης δείγματος, 30° και για 45° ως προς τη δέσμη ακτίνων-X, που είχαν προκύψει στο πλαίσιο ΔΔ [16] για την ίδια διάταξη. Η γωνία 25° φαίνεται ότι είναι και η οριακή γωνία με την οποία μπορεί να ακτινοβοληθεί το δείγμα για καθαρά γεωμετρικούς λόγους.

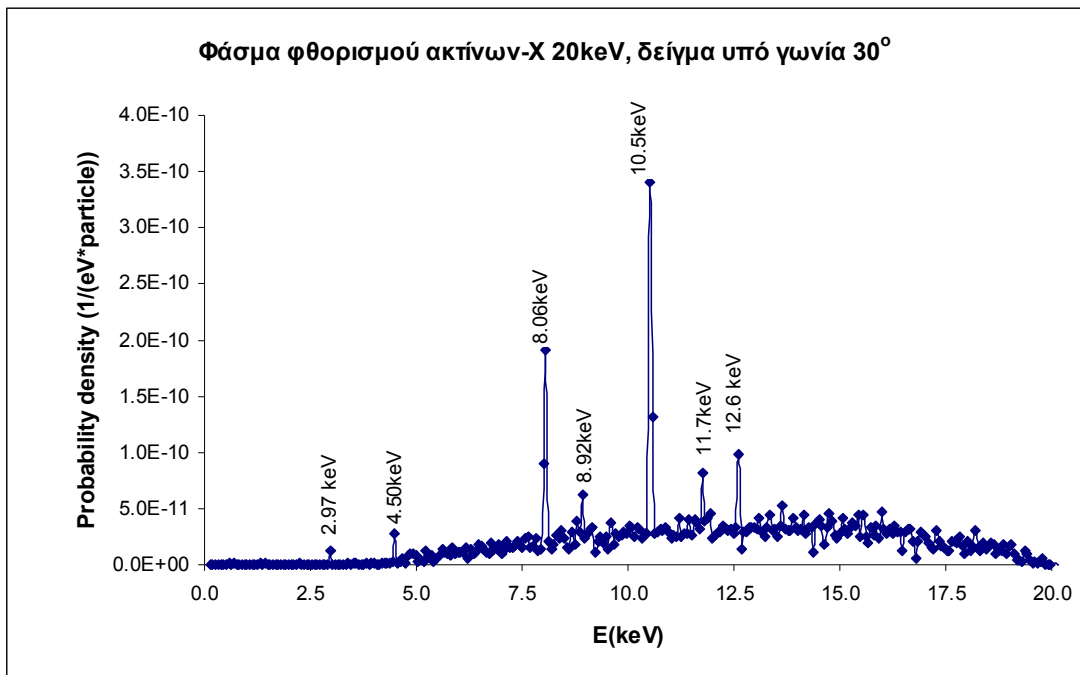
ΠΙΝΑΚΕΣ ΚΑΙ ΣΧΗΜΑΤΑ ΚΕΦΑΛΑΙΟΥ 5



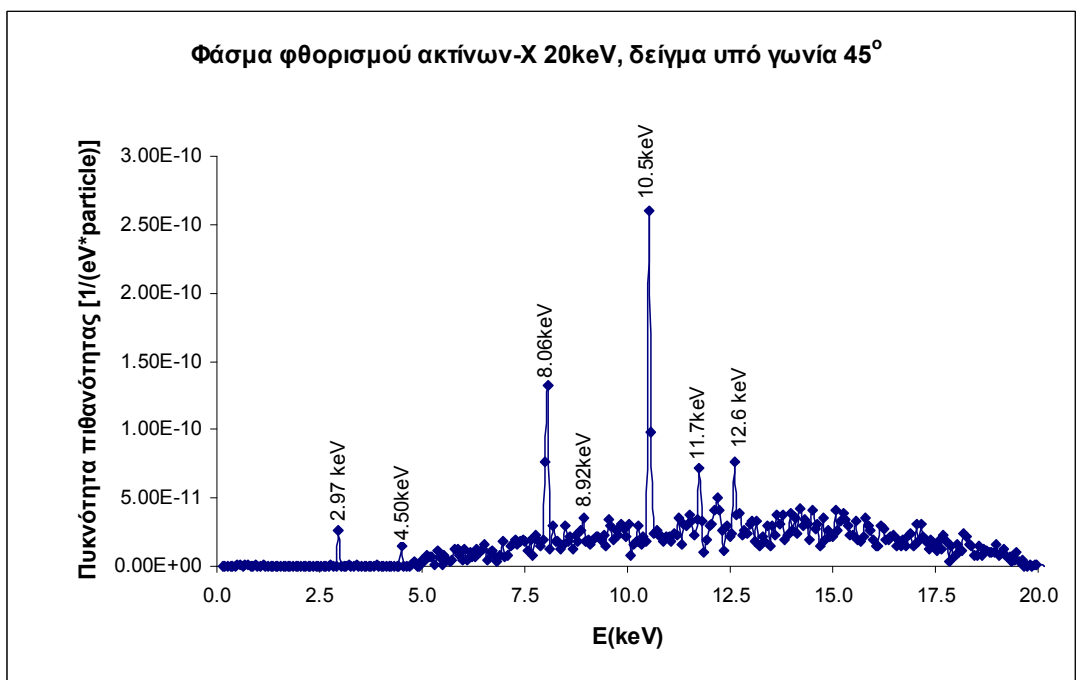
Σχήμα 5.15 Το φάσμα φθορισμού που καταγράφεται από τον ανιχνευτή αποτιθέμενης ενέργειας για τάση λειτουργίας της μηχανής 15kVolt, δείγμα υπό κλίση 30°



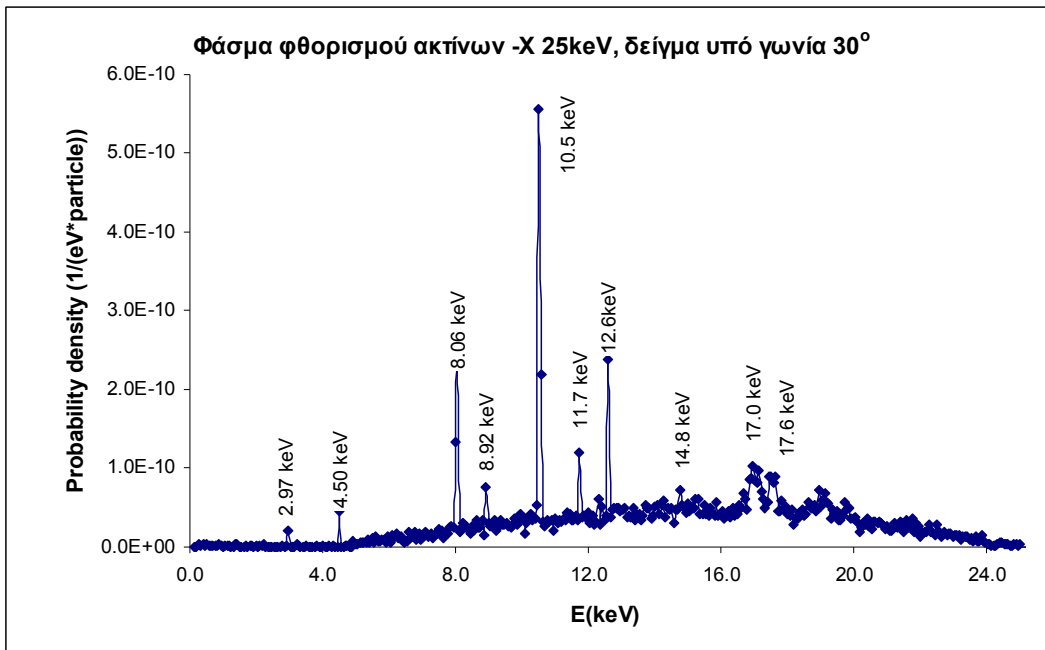
Σχήμα 5.16 Το φάσμα φθορισμού που καταγράφεται από τον ανιχνευτή αποτιθέμενης ενέργειας για τάση λειτουργίας της μηχανής 15kVolt, δείγμα υπό κλίση 45°



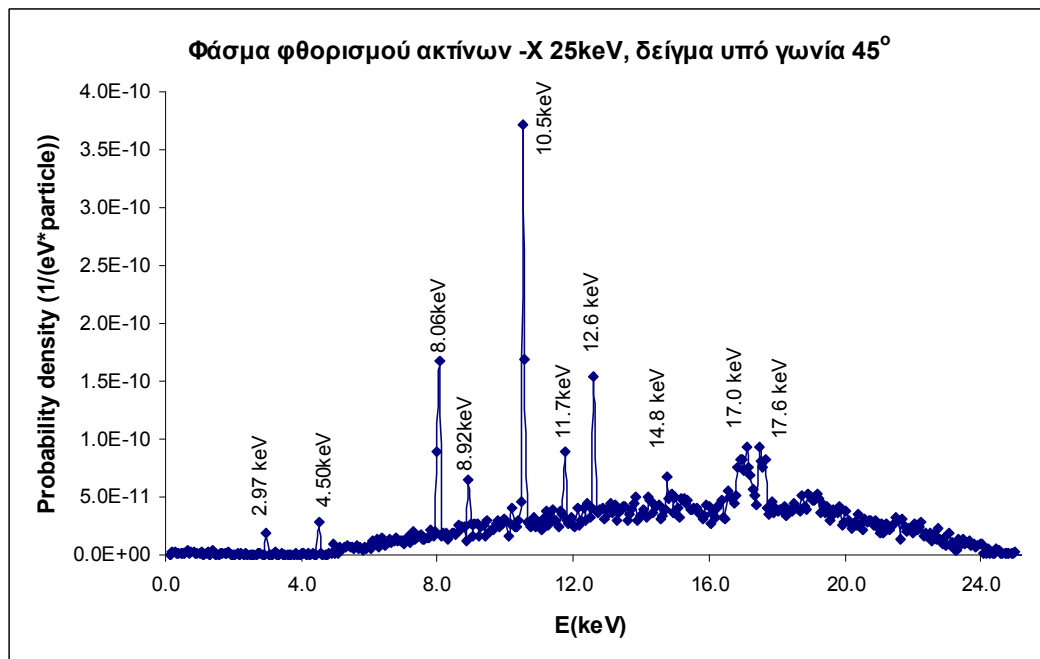
Σχήμα 5.17 Το φάσμα φθορισμού που καταγράφεται από τον ανιχνευτή αποτιθέμενης ενέργειας για τάση λειτουργίας της μηχανής 20kVolt, δείγμα υπό κλίση 30°



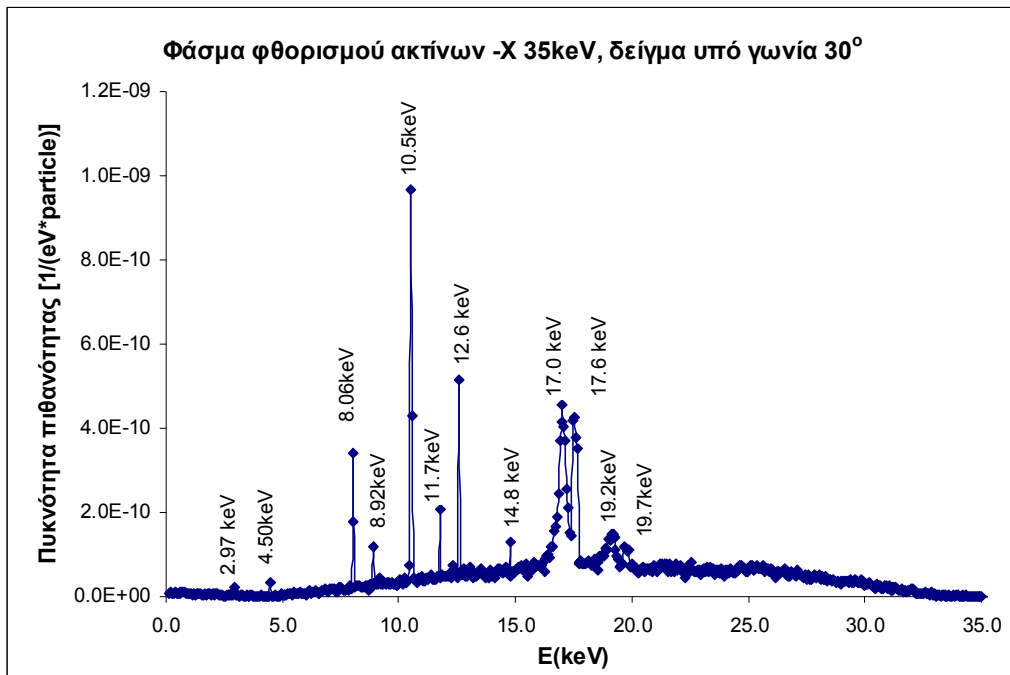
Σχήμα 5.18 Το φάσμα φθορισμού που καταγράφεται από τον ανιχνευτή αποτιθέμενης ενέργειας για τάση λειτουργίας της μηχανής 20kVolt, δείγμα υπό κλίση 45°



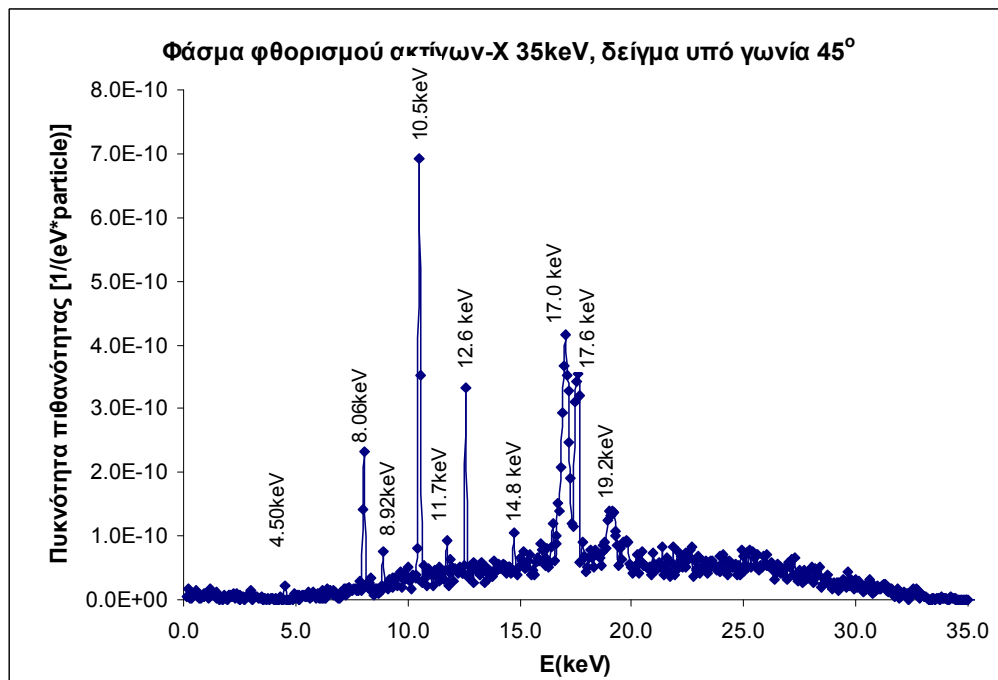
Σχήμα 5.19 Το φάσμα φθορισμού που καταγράφεται από τον ανιχνευτή αποτιθέμενης ενέργειας για τάση λειτουργίας της μηχανής 25kVolt, δείγμα υπό κλίση 30°



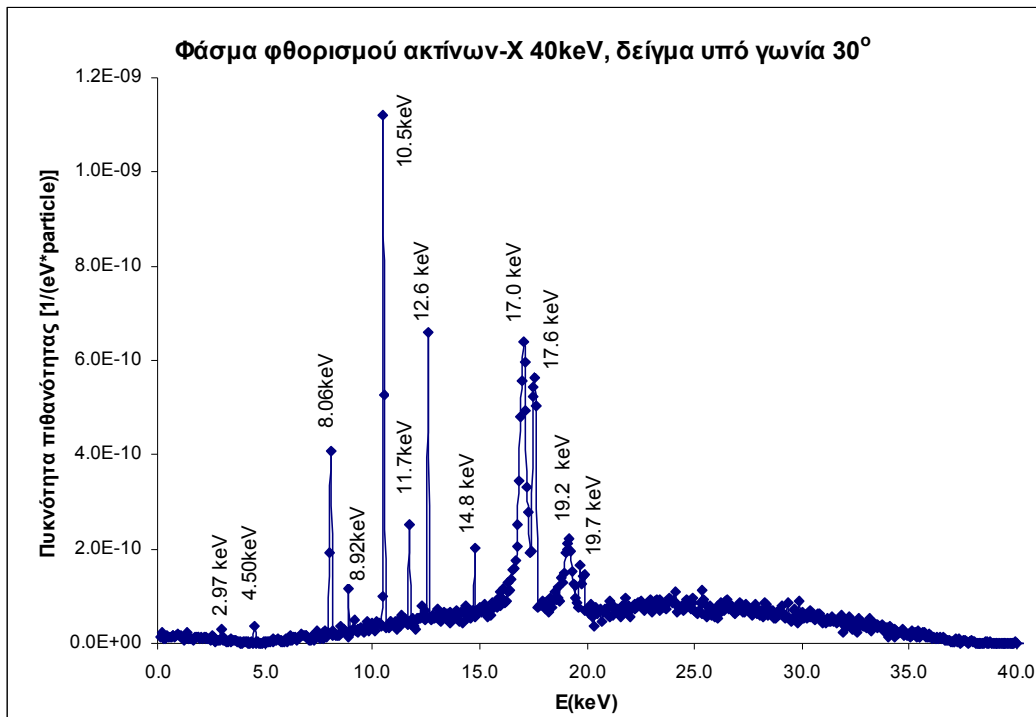
Σχήμα 5.20 Το φάσμα φθορισμού που καταγράφεται από τον ανιχνευτή αποτιθέμενης ενέργειας για τάση λειτουργίας της μηχανής 25kVolt, δείγμα υπό κλίση 45°



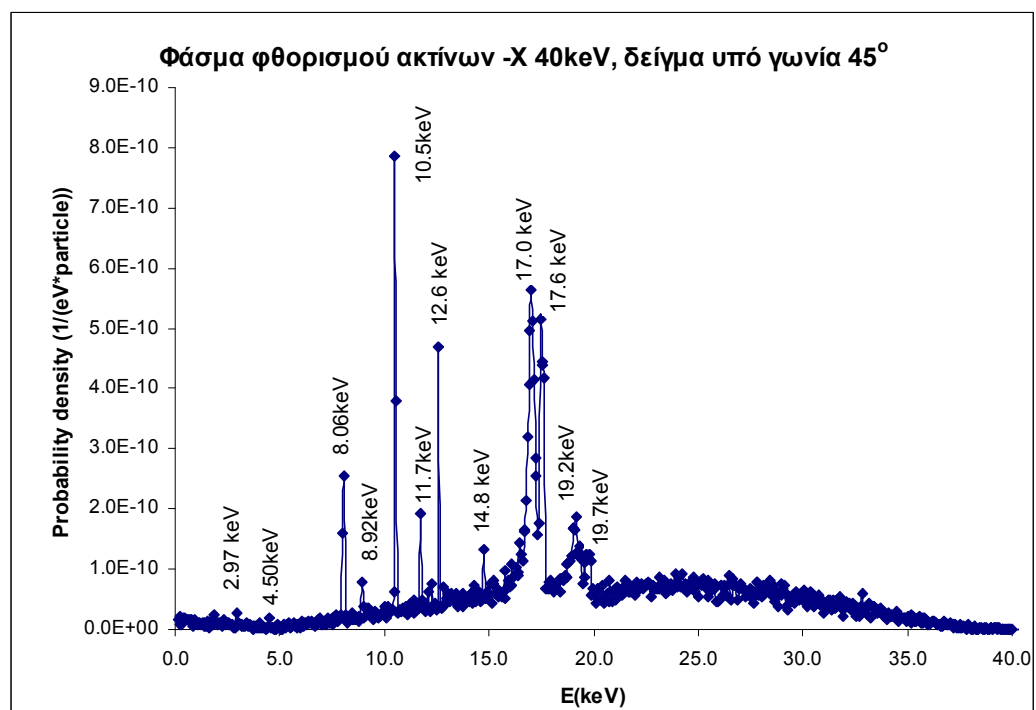
Σχήμα 5.21 Το φάσμα φθορισμού που καταγράφεται από τον ανιχνευτή αποτιθέμενης ενέργειας για τάση λειτουργίας της μηχανής 35kVolt , δείγμα υπό κλίση 30°



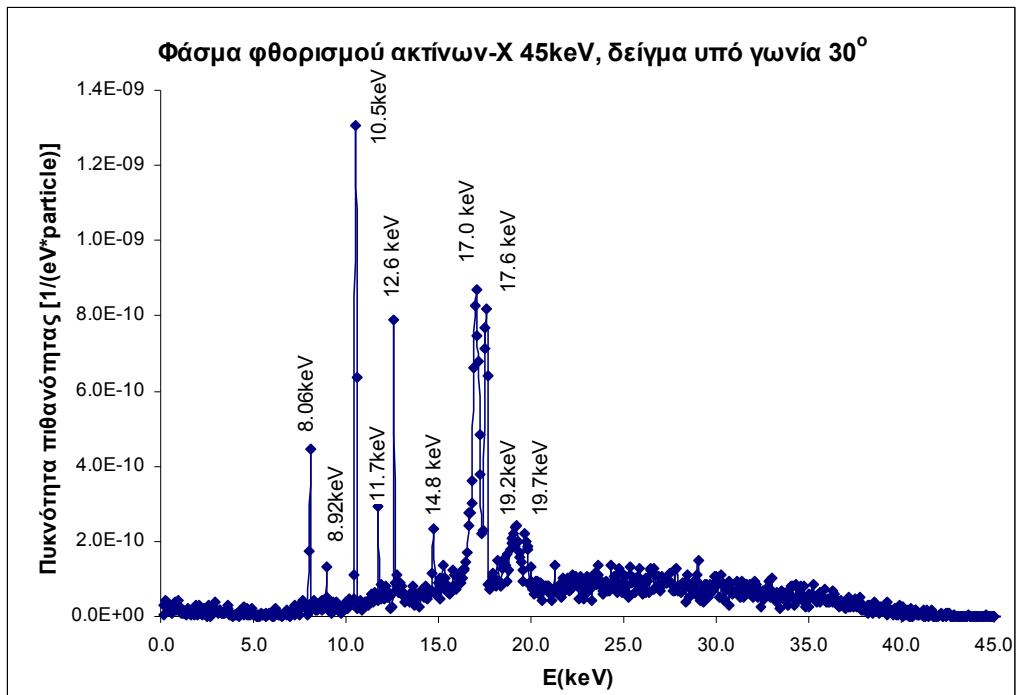
Σχήμα 5.22 Το φάσμα φθορισμού που καταγράφεται από τον ανιχνευτή αποτιθέμενης ενέργειας για τάση λειτουργίας της μηχανής 35kVolt, δείγμα υπό κλίση 45°



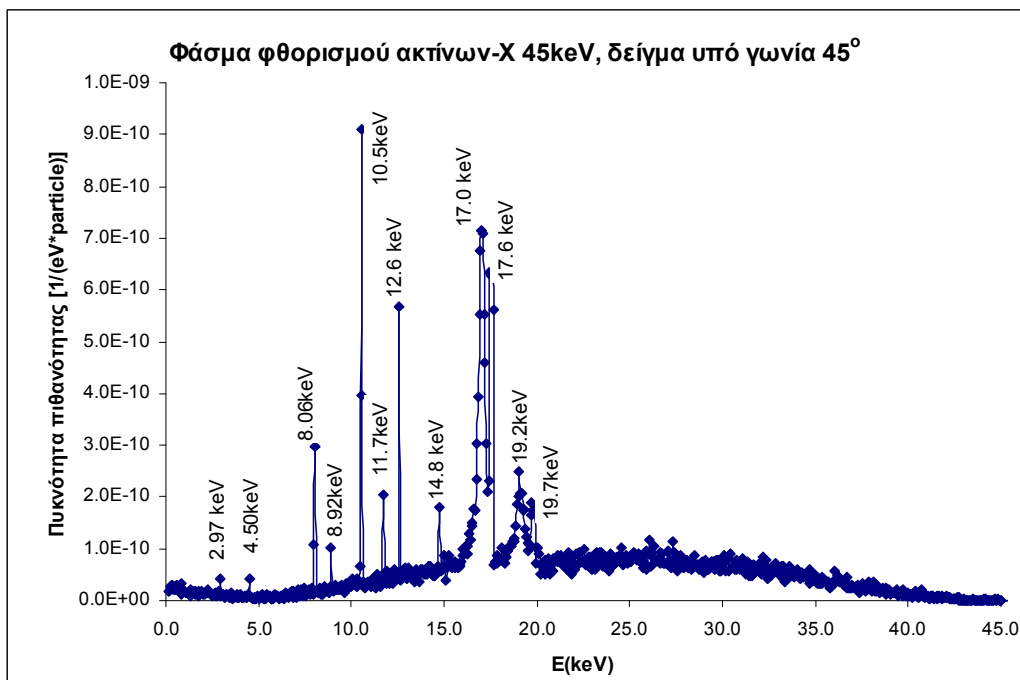
Σχήμα 5.23 Το φάσμα φθορισμού που καταγράφεται από τον ανιχνευτή αποτιθέμενης ενέργειας για τάση λειτουργίας της μηχανής 40kVolt , δείγμα υπό κλίση 30°



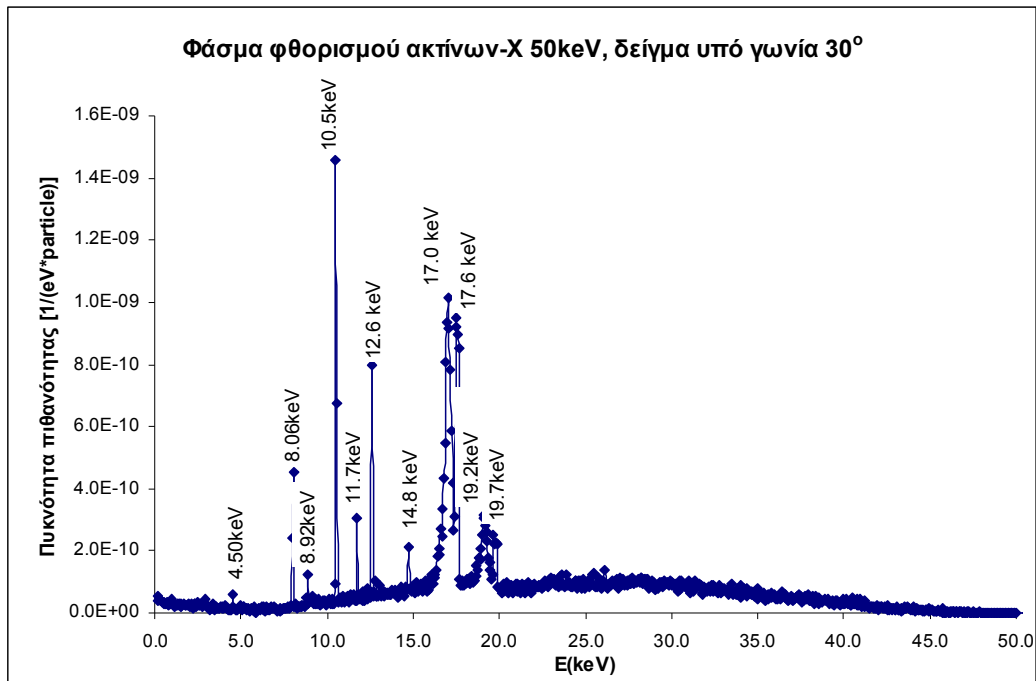
Σχήμα 5.24 Το φάσμα φθορισμού που καταγράφεται από τον ανιχνευτή αποτιθέμενης ενέργειας για τάση λειτουργίας της μηχανής 40kVolt, δείγμα υπό κλίση 45°



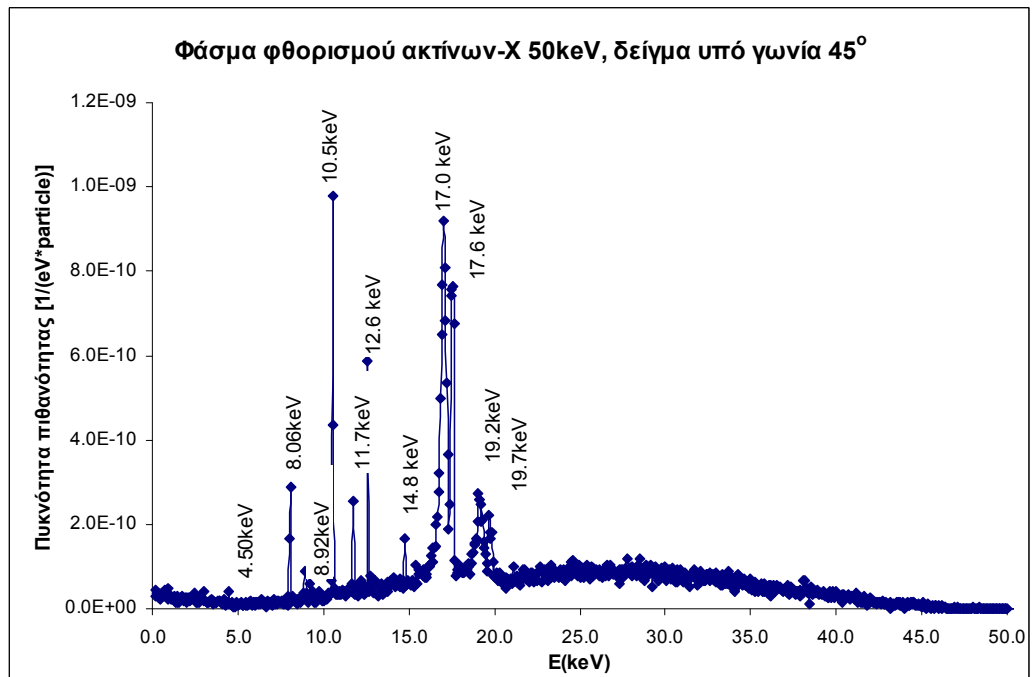
Σχήμα 5.25 Το φάσμα φθορισμού που καταγράφεται από τον ανιχνευτή αποτιθέμενης ενέργειας για τάση λειτουργίας της μηχανής 45kVolt , δείγμα υπό κλίση 30°



Σχήμα 5.26 Το φάσμα φθορισμού που καταγράφεται από τον ανιχνευτή αποτιθέμενης ενέργειας για τάση λειτουργίας της μηχανής 45kVolt, δείγμα υπό κλίση 45°



Σχήμα 5.27 Το φάσμα φθορισμού που καταγράφεται από τον ανιχνευτή αποτιθέμενης ενέργειας για τάση λειτουργίας της μηχανής 50kVolt, δείγμα υπό κλίση 30°



Σχήμα 5.28 Το φάσμα φθορισμού που καταγράφεται από τον ανιχνευτή αποτιθέμενης ενέργειας για τάση λειτουργίας της μηχανής 50kVolt, δείγμα υπό κλίση 45°

Πίνακας 5.1 Το αρχείο γεωμετρίας sensor_filters.geo

```
XXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXXX
A model of XRF disposition with filters (1 AL , 4 PVC)-40degrees

Materials: 1.- Silicon
           2.- Aluminium
           3.- Beryllium
           4.- Air
           5.- Plexiglass
           6.- digma_xrf
           7.- PVC
           8.-Aluminium (filter)

0000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000
SURFACE ( 1) Plane Z=0
INDICES=( 0, 0, 0, 1, 0)
0000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000
SURFACE ( 2) Plane Z=0.5
INDICES=( 0, 0, 0, 1,-1)
Z-SCALE=( 0.500000000000000E+00, 0)
0000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000
SURFACE ( 3) Plane Z=0.58
INDICES=( 0, 0, 0, 1,-1)
Z-SCALE=( 0.580000000000000E+00, 0)
0000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000
SURFACE ( 4) Plane Z=0.60
INDICES=( 0, 0, 0, 1,-1)
Z-SCALE=( 0.600000000000000E+00, 0)
0000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000
SURFACE ( 5) Plane Z=0.62
INDICES=( 0, 0, 0, 1,-1)
Z-SCALE=( 0.620000000000000E+00, 0)
0000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000
SURFACE ( 6) Plane Z=0.70
INDICES=( 0, 0, 0, 1,-1)
Z-SCALE=( 0.700000000000000E+00, 0)
0000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000
SURFACE ( 7) Cylinder R=0.51
INDICES=( 1, 1, 0, 0,-1)
X-SCALE=( 0.510000000000000E-00, 0)
Y-SCALE=( 0.510000000000000E-00, 0)
0000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000
SURFACE ( 8) Cylinder R=1.1
INDICES=( 1, 1, 0, 0,-1)
X-SCALE=( 1.100000000000000E-00, 0)
Y-SCALE=( 1.100000000000000E-00, 0)
0000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000
SURFACE ( 9) Cylinder R=1.15
INDICES=( 1, 1, 0, 0,-1)
X-SCALE=( 1.150000000000000E-00, 0)
Y-SCALE=( 1.150000000000000E-00, 0)
...

```



```
...
SURFACE ( 20)   Plane Z=0.05
INDICES=( 0, 0, 0, 1,-1)
Z-SCALE=( 0.0500000000000000E+00,  0)
  OMEGA=( 0.0000000000000000E+01,  0) DEG
  THETA=( 5.0000000000000000E+01,  0) DEG
  PHI=( 9.0000000000000000E+01,  0) DEG
Y-SHIFT=( 0.5000000000000000E+00,  0)
Z-SHIFT=( 1.5500000000000000E+01,  0)
000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000
SURFACE ( 21)   Cylinder R=1.9
INDICES=( 1, 1, 0, 0,-1)
X-SCALE=( 1.9000000000000000E-00,  0)
Y-SCALE=( 1.9000000000000000E-00,  0)
  OMEGA=( 0.0000000000000000E+01,  0) DEG
  THETA=( 5.0000000000000000E+01,  0) DEG
  PHI=( 9.0000000000000000E+01,  0) DEG
Y-SHIFT=( 0.5000000000000000E+00,  0)
Z-SHIFT=( 1.5500000000000000E+01,  0)
000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000
SURFACE ( 22)   Cylinder R=1.85
INDICES=( 1, 1, 0, 0,-1)
X-SCALE=( 1.8500000000000000E-00,  0)
Y-SCALE=( 1.8500000000000000E-00,  0)
  OMEGA=( 0.0000000000000000E+01,  0) DEG
  THETA=( 5.0000000000000000E+01,  0) DEG
  PHI=( 9.0000000000000000E+01,  0) DEG
Y-SHIFT=( 0.5000000000000000E+00,  0)
Z-SHIFT=( 1.5500000000000000E+01,  0)
000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000
SURFACE ( 23)   Plane Z=-0.8
INDICES=( 0, 0, 0, 1, 1)
Z-SCALE=( 0.8000000000000000E+00,  0)
  OMEGA=( 0.0000000000000000E+01,  0) DEG
  THETA=( 5.0000000000000000E+01,  0) DEG
  PHI=( 9.0000000000000000E+01,  0) DEG
Y-SHIFT=( 0.5000000000000000E+00,  0)
Z-SHIFT=( 1.5500000000000000E+01,  0)
000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000
SURFACE ( 24)   Plane Z=0.035
INDICES=( 0, 0, 0, 1,-1)
Z-SCALE=( 3.5000000000000000E-02,  0)
000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000
SURFACE ( 25)   Plane Z=0.075
INDICES=( 0, 0, 0, 1,-1)
Z-SCALE=( 7.5000000000000000E-02,  0)
000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000
BODY ( 1)   detector
MATERIAL( 1)
SURFACE ( 1), SIDE POINTER=(+1)
SURFACE ( 2), SIDE POINTER=(-1)
SURFACE ( 7), SIDE POINTER=(-1)
000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000
...
```



```
...  
BODY      ( 2)   Be window(detector's)  
MATERIAL( 3)  
SURFACE ( 10), SIDE POINTER=(+1)  
SURFACE ( 5),  SIDE POINTER=(-1)  
SURFACE ( 7),  SIDE POINTER=(-1)  
0000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000  
BODY      ( 3)   Al shield side(detector's)  
MATERIAL( 2)  
SURFACE ( 1),  SIDE POINTER=(+1)  
SURFACE ( 5),  SIDE POINTER=(-1)  
SURFACE ( 8),  SIDE POINTER=(+1)  
SURFACE ( 9),  SIDE POINTER=(-1)  
0000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000  
BODY      ( 4)   Al shield up(detector's)  
MATERIAL( 2)  
SURFACE ( 4),  SIDE POINTER=(+1)  
SURFACE ( 5),  SIDE POINTER=(-1)  
SURFACE ( 7),  SIDE POINTER=(+1)  
SURFACE ( 9),  SIDE POINTER=(-1)  
0000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000  
BODY      ( 5)   aluminium(collimator's)  
MATERIAL( 2)  
SURFACE ( 13), SIDE POINTER=(+1)  
SURFACE ( 14), SIDE POINTER=(-1)  
SURFACE ( 15), SIDE POINTER=(-1)  
SURFACE ( 16), SIDE POINTER=(+1)  
0000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000  
BODY      ( 6)   plexiglass(collimator's)  
MATERIAL( 5)  
SURFACE ( 13), SIDE POINTER=(+1)  
SURFACE ( 14), SIDE POINTER=(-1)  
SURFACE ( 16), SIDE POINTER=(-1)  
SURFACE ( 17), SIDE POINTER=(+1)  
0000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000  
BODY      ( 7)   Be window(collimator's)  
MATERIAL( 3)  
SURFACE ( 13), SIDE POINTER=(+1)  
SURFACE ( 18), SIDE POINTER=(-1)  
SURFACE ( 17), SIDE POINTER=(-1)  
0000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000  
MODULE   ( 8)  
MATERIAL( 0)  
SURFACE ( 1),  SIDE POINTER=(+1)  
SURFACE ( 5),  SIDE POINTER=(-1)  
SURFACE ( 9),  SIDE POINTER=(-1)  
BODY     ( 1)  
BODY     ( 2)  
BODY     ( 3)  
BODY     ( 4)  
11111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111  
...  

```


Πίνακας 5.2 Απόσπασμα του αρχείου εισόδου *sensor_final.in*

```
...
>>>>>>> Material data and simulation parameters.
NMAT      8 [Number of different materials, .le.10]
SIMPARG 1 5.0e3 1.0e2 5.0e3 0.2 0.2 5e3 5e3 [M,EABS,C1,C2,WCC,WCR]
SIMPARG 2 5.0e3 5.0e3 5.0e3 0.2 0.2 5e3 5e3 [M,EABS,C1,C2,WCC,WCR]
SIMPARG 3 5.0e3 1.0e2 5.0e3 0.2 0.2 5e3 5e3 [M,EABS,C1,C2,WCC,WCR]
SIMPARG 4 5.0e3 5.0e2 5.0e3 0.2 0.2 5e3 5e3 [M,EABS,C1,C2,WCC,WCR]
SIMPARG 5 5.0e3 5.0e3 5.0e3 0.2 0.2 5e3 5e3 [M,EABS,C1,C2,WCC,WCR]
SIMPARG 6 5.0e3 5.0e2 5.0e3 0.2 0.2 5e3 5e3 [M,EABS,C1,C2,WCC,WCR]
SIMPARG 7 5.0e3 1.0e2 5.0e3 0.2 0.2 5e3 5e3 [M,EABS,C1,C2,WCC,WCR]
SIMPARG 8 5.0e3 1.0e2 5.0e3 0.2 0.2 5e3 5e3 [M,EABS,C1,C2,WCC,WCR]
PFNAME ylika3.mat [Material definition file, 20 chars]
...
```


Πίνακας 5.5. Απόσπασμα του αρχείου sensor_final1.geo

```

...
SURFACE ( 19)  Plane Z=0
INDICES=( 0, 0, 0, 1, 0)
  OMEGA=( 0.0000000000000000E+01, 0) DEG
  THETA=( 4.5000000000000000E+01, 0) DEG
  PHI=( 9.0000000000000000E+01, 0) DEG
Y-SHIFT=( 0.5000000000000000E+00, 0)
Z-SHIFT=( 1.5500000000000000E+01, 0)
000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000
SURFACE ( 20)  Plane Z=0.05
INDICES=( 0, 0, 0, 1,-1)
Z-SCALE=( 0.0500000000000000E+00, 0)
  OMEGA=( 0.0000000000000000E+01, 0) DEG
  THETA=( 4.5000000000000000E+01, 0) DEG
  PHI=( 9.0000000000000000E+01, 0) DEG
Y-SHIFT=( 0.5000000000000000E+00, 0)
Z-SHIFT=( 1.5500000000000000E+01, 0)
0000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000
SURFACE ( 21)  Cylinder R=1.9
INDICES=( 1, 1, 0, 0,-1)
X-SCALE=( 1.9000000000000000E-00, 0)
Y-SCALE=( 1.9000000000000000E-00, 0)
  OMEGA=( 0.0000000000000000E+01, 0) DEG
  THETA=( 4.5000000000000000E+01, 0) DEG
  PHI=( 9.0000000000000000E+01, 0) DEG
Y-SHIFT=( 0.5000000000000000E+00, 0)
Z-SHIFT=( 1.5500000000000000E+01, 0)
0000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000
SURFACE ( 22)  Cylinder R=1.85
INDICES=( 1, 1, 0, 0,-1)
X-SCALE=( 1.8500000000000000E-00, 0)
Y-SCALE=( 1.8500000000000000E-00, 0)
  OMEGA=( 0.0000000000000000E+01, 0) DEG
  THETA=( 4.5000000000000000E+01, 0) DEG
  PHI=( 9.0000000000000000E+01, 0) DEG
Y-SHIFT=( 0.5000000000000000E+00, 0)
Z-SHIFT=( 1.5500000000000000E+01, 0)
0000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000
SURFACE ( 23)  Plane Z=-0.8
INDICES=( 0, 0, 0, 1, 1)
Z-SCALE=( 0.8000000000000000E+00, 0)
  OMEGA=( 0.0000000000000000E+01, 0) DEG
  THETA=( 4.5000000000000000E+01, 0) DEG
  PHI=( 9.0000000000000000E+01, 0) DEG
Y-SHIFT=( 0.5000000000000000E+00, 0)
Z-SHIFT=( 1.5500000000000000E+01, 0)
0000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000
...

```

Κεφάλαιο 6: Επίλογος

Στο Κεφάλαιο αυτό - το τελευταίο της ΔΕ - γίνεται μία συνοπτική παρουσίαση της Διπλωματικής Εργασίας, δίνοντας έμφαση στα συμπεράσματα που εξάγονται από αυτή. Τέλος, διατυπώνονται σκέψεις και προτάσεις για περαιτέρω βελτίωση των θεμάτων που πραγματεύεται η παρούσα ΔΕ και για άλλες μελλοντικές εργασίες.

6.1 Σύνοψη της ΔΕ και εξαγόμενα συμπεράσματα

Ο κεντρικός άξονας στον οποίο κινήθηκε η παρούσα ΔΕ ήταν η μελέτη της τεχνικής XRF δια μέσου υπολογιστικής προσομοίωσης με τη μέθοδο Monte-Carlo. Συγκεκριμένα, η προσπάθεια έγκειται στην προσομοίωση της τεχνικής XRF, όπως αυτή πραγματοποιείται στη διάταξη του ΕΠΤ-ΕΜΠ. Για το σκοπό αυτό επιλέχθηκε η χρήση του κώδικα PENELOPE, ο οποίος είναι ιδανικός για την προσομοίωση φωτονίων χαμηλής ενέργειας, επομένως για τις ακτίνες-X. Σε αυτό το σημείο τονίζεται πως η αρχική ιδέα ήταν η ΔΕ να επικεντρωθεί στη δημιουργία του φάσματος φθορισμού με χρήση έτοιμου φάσματος ακτίνων-X της μηχανής από τη βιβλιογραφία. Στη συνέχεια, αποφασίσθηκε η προσομοίωση να περιλαμβάνει και τη δημιουργία του φάσματος διέγερσης της μηχανής. Ο λόγος ήταν, αφενός μεν η δυσκολία ανεύρεσης φάσματος μηχανής με άνοδο Mo στη βιβλιογραφία, αφετέρου η επιθυμία για εμβάθυνση στη διαδικασία παραγωγής των ακτίνων-X της μηχανής και τη μελέτη των διαφόρων παραμέτρων που επιδρούν στη μορφή του φάσματός τους.

Μετά το 1^ο εισαγωγικό Κεφάλαιο, στο 2^ο Κεφάλαιο της ΔΕ παρουσιάζεται όλο το θεωρητικό υπόβαθρο που χρειάζεται, ούτως ώστε ο αναγνώστης να κατανοήσει εις βάθος τα βήματα και τα αποτελέσματα της ΔΕ. Σε αυτό το τμήμα έγινε μία βιβλιογραφική ανασκόπηση σχετικά με τις ακτίνες-X και την τεχνική XRF. Αρχικά, αναφέρθηκαν σημαντικά στοιχεία για τις ακτίνες-X, όπως η φύση και οι ιδιότητες τους, η προέλευσή τους καθώς και σημαντικές εφαρμογές τους. Ακολούθως, αναλύθηκε ενδελεχώς η

τεχνική φθορισμού των ακτίνων-X, με σκοπό την εμβάθυνση σε αυτήν. Το κεφάλαιο ολοκληρώνεται με αναφορά στη διάταξη XRF του ΕΠΤ-ΕΜΠ, δίνοντας έμφαση στα γεωμετρικά χαρακτηριστικά που παρουσιάζουν ενδιαφέρον ώστε να σχεδιαστεί στο πρόγραμμα PENELOPE η γεωμετρική διάταξη.

Στο 3^ο Κεφάλαιο έγινε εισαγωγή στον κώδικα PENELOPE που χρησιμοποιείται στο ΕΠΤ-ΕΜΠ για την προσομοίωση της αλληλεπίδρασης σωματιδίων/φωτονίων με την ύλη. Αρχικά, παρουσιάστηκε η κεντρική ιδέα στην οποία βασίζονται οι κώδικες Monte-Carlo και εν συνεχεία δόθηκε έμφαση στον κώδικα PENELOPE, ο οποίος και χρησιμοποιήθηκε. Ιδιαίτερη μνεία έγινε στον κώδικα χρήστη PENMAIN και στις δυνατότητες που αυτός παρέχει καθώς και στην περιγραφή της δημιουργίας των αρχείων εισόδου. Στη συνέχεια, σχεδιάζεται μία απλουστευμένη διάταξη η οποία αντιπροσωπεύει τη μηχανή ακτίνων-X του ΕΠΤ-ΕΜΠ. Για λόγους οικονομίας χρόνου τα φάσματα ελήφθησαν μέσα στο θάλαμο της μηχανής. Αυτό είχε ως αποτέλεσμα τη δημιουργία φασμάτων στα οποία διακρίνονται οι χαρακτηριστικές ακτίνες -X (L_{α} και L_{β}) του υλικού της ανόδου (μολυβδαίνιο), οι οποίες είναι χαμηλής ενέργειας και για αυτό συνήθως δεν φαίνονται στα πειραματικά φάσματα τα οποία λαμβάνονται έξω από το θάλαμο και αφού έχουν διέλθει από το παράθυρο της μηχανής. Ποιοτική σύγκριση των φασμάτων της προσομοίωσης με το φάσμα ενός θεωρητικού μοντέλου οδήγησε στο συμπέρασμα πως τα φάσματα δεν διαφέρουν, εκτός από τις χαρακτηριστικές ακτίνες L. Στο Κεφάλαιο αυτό παρήχθησαν μία σειρά από φάσματα μηχανής ακτίνων-X, τα οποία αντιστοιχούν στα πραγματικά φάσματα της μηχανής ακτίνων-X του ΕΠΤ-ΕΜΠ τα οποία παράγονται για τα συνήθη σενάρια ακτινοβολήσης που χρησιμοποιούνται στο ΕΠΤ-ΕΜΠ. Τα φάσματα αυτά παράγονται χωρίς τη χρήση φίλτρων στη μηχανή.

Στο 4^ο Κεφάλαιο της ΔΕ πρώτα σχεδιάστηκε το πρόβλημα της προσομοίωσης της τεχνικής XRF από το σημείο που αρχικά είχε οριστεί, δηλαδή με την παραδοχή πως η πηγή ακτίνων-X είναι σημειακή και παράγει το φάσμα το οποίο δημιουργήθηκε στο 3^ο Κεφάλαιο, ευρισκόμενη στο άκρο του κατευθυντή δέσμης. Για να εισαχθεί το φάσμα της μηχανής ακτίνων-X της που είχε παραχθεί μέσω της προσομοίωσης στο αρχείο εισόδου των επόμενων προσομοιώσεων, δημιουργήθηκε ένα μικρό πρόγραμμα ώστε το φάσμα

του αρχείου εισόδου να έχει την κατάλληλη μορφή. Ακολούθως, έγινε μία προσπάθεια βελτίωσης της ταχύτητας προσομοίωσης χωρίς επίδραση στη στατιστική του φάσματος που φθάνει στο δείγμα. Στα πλαίσια της προσπάθειας αυτής μελετήθηκαν ως παράμετροι η γωνία της εξερχόμενης δέσμης ακτίνων-X και οι ενέργειες αποκοπής της προσομοίωσης. Τελικά η γωνία της εξερχόμενης δέσμης επιλέχθηκε να οριστεί στις 14° και όχι στις 22°, που είναι η πραγματική γωνία εξόδου της μηχανής του ΕΠΤ-ΕΜΠ. Η επιλογή αυτή οδηγεί σε διπλασιασμό της ταχύτητας προσομοίωσης χωρίς σημαντικές διαφοροποιήσεις της μορφής του παραγομένου φάσματος. Τέλος, έγιναν μία σειρά από προσομοιώσεις με διαφορετικές τιμές των ενεργειών αποκοπής (cut off energies), με στόχο την αύξηση της ταχύτητας της προσομοίωσης. Με τη διερεύνηση αυτή κατέστη δυνατή η επιτάχυνση της διαδικασίας προσομοίωσης κατά περίπου τέσσερις φορές. Υπενθυμίζεται πως η πρώτη δοκιμαστική προσομοίωση πραγματοποιήθηκε με τις ενέργειες αποκοπής όπως προτείνεται στο εγχειρίδιο χρήσης του προγράμματος. Στο Κεφάλαιο αυτό δημιουργήθηκε και ένα δείγμα το οποίο περιείχε συγκεκριμένα ιχνοστοιχεία. Προσομοιώθηκε η ακτινοβολήση του δείγματος αυτού και κατέστη δυνατή η ανίχνευση όλων των ακτίνων-X των συγκεκριμένων ιχνοστοιχείων. Αυτό επιβεβαίωσε ότι ο κώδικας PENELOPE μπορεί να δώσει αποτελέσματα για πολύ χαμηλές ενέργειες φωτονίων, όπως είναι οι ακτίνες-X (4-15keV)

Αφού λοιπόν στο 3^ο Κεφάλαιο δημιουργήθηκε το φάσμα της μηχανής ακτίνων-X και στο 4^ο Κεφάλαιο διαπιστώθηκε ότι είναι δυνατή η συνολική προσομοίωση μία διάταξης XRF, στο 5^ο Κεφάλαιο προσεγγίστηκε ο κύριος στόχος της ΔΕ, δηλαδή η προσομοίωση της τεχνικής XRF, όπως αυτή πραγματοποιείται πειραματικά στο ΕΠΤ-ΕΜΠ. Αρχικά, προσομοιώθηκε η τεχνική με γνώμονα την ανίχνευση ιχνοστοιχείων σε ένα υλικό, που προσομοιάζει σε τυπικό περιβαλλοντικό δείγμα χώματος. Για λόγους απλότητας στο μίγμα εμπεριέχονταν τέσσερα (4) ιχνοστοιχεία. Μία επιπλέον παραδοχή που έγινε ήταν η μείωση της απόστασης δείγματος-ανιχνευτή καθώς η προσομοίωση θα διαρκούσε πολύ μεγάλο χρόνο. Τα αποτελέσματα οδήγησαν στο συμπέρασμα πως ποιοτικά όλα τα ιχνοστοιχεία ανιχνεύονται διά μέσου προσομοίωσης. Στη συνέχεια, πραγματοποιήθηκε η προσομοίωση ενός πιο σύνθετου σεναρίου ακτινοβολήσης και η διεξαγωγή του αντίστοιχου πειράματος, για την ακρίβεια για τάση μηχανής 30Volt,

καθορισμένο αριθμό-είδος φίλτρων και πραγματικού δείγματος, στο οποίο εμπεριέχονται αρκετά ιχνοστοιχεία. Το εξαγόμενο φάσμα, δηλαδή το φάσμα που ανιχνεύεται από τον ανιχνευτή αποτιθέμενης ενέργειας, μετετράπη σε «ρεαλιστικό» φάσμα, όπως αυτό που συλλέγεται από τον ανιχνευτή SiLi, λαμβάνοντας υπόψη και τη διακριτική ικανότητα του ανιχνευτή SiLi. Εν συνεχεία το «ρεαλιστικό φάσμα» εισήχθη στο πρόγραμμα ανάλυσης φασμάτων ακτίνων-X WinQXAS. Η ανάλυση του φάσματος που προέκυψε ήταν πράγματι αντίστοιχης μορφής με αυτό του αντίστοιχου πειράματος και επέτρεπε την αναγνώριση των αναμενόμενων χαρακτηριστικών φωτοκορυφών των στοιχείων του δείγματος αλλά και των αιχμών της ανόδου της μηχανής ακτίνων-X. Παρόλα αυτά, στην παρούσα ΔΕ, για λόγους απλοποίησης της διαδικασίας έγιναν ορισμένες παραδοχές που δεν επιτρέπουν την ποσοτική σύγκριση των φασμάτων που προκύπτουν από την προσομοίωση με τα διαθέσιμα πειραματικά. Προς αυτή την κατεύθυνση βελτίωσης της προσομοίωσης ίσως κινηθούν επόμενες εργασίες. Από τη διερεύνηση του Κεφαλαίου αυτού διαπιστώθηκε ότι είναι δυνατόν να κατασκευασθούν μέσω προσομοίωσης φάσματα τα οποία να είναι όμοια με τα πραγματικά φάσματα που συλλέγονται πειραματικά.

Τέλος, στο 5^ο Κεφάλαιο πραγματοποιήθηκαν μία σειρά από προσομοιώσεις με το δείγμα ευρισκόμενο σε διαφορετικές γωνίες, ως προς τη δέσμη των ακτίνων-X. Τα αποτελέσματα έδειξαν πως όσο μικραίνει η γωνία τοποθέτησης του δείγματος τόσο καλύτερη στατιστική έχει το φάσμα φθορισμού που καταγράφεται. Το συμπέρασμα αυτό επιβεβαιώνεται ποιοτικά και από τη ΔΔ [Π. Ρούνι, 2006]. Πέραν αυτού το συμπέρασμα, αυτό που έχει σημασία είναι ότι καταδείχθηκε η χρησιμότητα της προσομοίωσης για τη μελέτη της επίδρασης των διαφόρων παραμέτρων της λειτουργίας μίας διάταξης XRF. Ενδεικτικά αναφέρονται μερικές από τις παραμέτρους που μπορούν να μελετηθούν με τον τρόπο αυτό: αποστάσεις δείγματος-ανιχνευτή, γωνία δείγματος-δέσμης, πάχος και τύπος των φίλτρων κλπ

6.2 Μελλοντικά βήματα

Η ανάλυση του φάσματος που προέκυψε από την προσομοίωση της τεχνικής XRF ήταν πράγματι αντίστοιχης μορφής με αυτό του αντίστοιχου πειράματος και επέτρεπε την αναγνώριση των αναμενόμενων χαρακτηριστικών φωτοκορυφών των στοιχείων του δείγματος αλλά και της ανόδου της μηχανής ακτίνων-X. Παρόλα αυτά, στην παρούσα ΔΕ, δεν κατέστη δυνατή η ποσοτική σύγκριση των αποτελεσμάτων, δηλαδή σε όρους επιφάνειας φωτοκορυφής του πειράματος με το αντίστοιχο αποτέλεσμα της προσομοίωσης. Αυτό, σε μεγάλο βαθμό οφείλεται στο γεγονός ότι για λόγους απλοποίησης της διαδικασίας έγιναν ορισμένες παραδοχές που δεν επιτρέπουν την ποσοτική σύγκριση των φασμάτων που προκύπτουν από την προσομοίωση με τα διαθέσιμα πειραματικά. Ενδεικτικά αναφέρεται ότι για λόγους επιτάχυνσης ο ανιχνευτής σε ορισμένες προσομοιώσεις τοποθετήθηκε πιο κοντά στο δείγμα, ενώ αγνοήθηκαν ορισμένα υλικά, όπως το deal layer του ανιχνευτή ή το λεπτό φύλλο PVC που χρησιμοποιείται για προστασία του ανιχνευτή από τη ρύπανση κλπ. Προς αυτή την κατεύθυνση βελτίωσης της προσομοίωσης θα πρέπει να κινηθούν επόμενες εργασίες. Πάντως, πρέπει να τονισθεί ότι για τόσο χαμηλές ενέργειες υπάρχει μεγάλη επίδραση της εξασθένησης των φωτονίων, ενώ συγχρόνως είναι από δύσκολη έως αδύνατη η πραγματοποίηση πειραμάτων με πιστοποιημένες πηγές.

Γίνεται ξεκάθαρο πως τα αποτελέσματα της παρούσας ΔΕ επιτυγχάνουν μόνο ποιοτική σύγκριση με αυτά που προκύπτουν πειραματικά. Εντούτοις, γίνεται φανερό πως με χρήση του κώδικα PENELOPE είναι εφικτή η διερεύνηση αρκετών παραμέτρων της τεχνικής XRF, η οποίες είναι δύσκολο να μελετηθούν πειραματικά ή απαιτούν αρκετό χρόνο ώστε να περατωθούν. Ενδεικτικά αναφέρονται:

- Μελέτη της γωνίας κλήσης δείγματος ως προς τη δέσμη ακτίνων-X.
- Επανασχεδιασμός του κατευθυντή δέσμης.
- Εξέταση της δυνατότητας αλλαγής αποστάσεων πηγής-δείγματος-ανιχνευτή.
- Εξέταση βέλτιστου σεναρίου ακτινοβολήσης σε kV.
- Μελέτη επίδρασης της πυκνότητας και σύστασης του υλικού του δείγματος.
- Εξέταση της χρήσης φίλτρων από άλλα υλικά ή δευτερογενών στόχων.

- Μελέτη της συγκρότησης και της γεωμετρίας νέας διάταξης XRF στο ΕΠΤ-ΕΜΠ, με χρήση μηχανής ακτίνων-Χ που διατίθεται στο ΕΠΤ-ΕΜΠ για βιομηχανική ραδιογραφία και φορητού ανιχνευτή in-situ BEGe. Η συγκεκριμένη διάταξη θα μπορούσε να χρησιμοποιηθεί για την ανίχνευση των χαρακτηριστικών ακτίνων Κ στοιχείων πολύ υψηλού Ζ (π.χ. του μόλυβδου) που δεν είναι δυνατή με την υπάρχουσα διάταξη.

Όμως, το βασικότερο βήμα που πρέπει να γίνει πριν από οποιοδήποτε άλλο είναι η αύξηση της ταχύτητας της μεθόδου. Η μεγάλη διάρκεια προσομοίωσης - που συχνά είναι αρκετές ημέρες - καθιστά προβληματική την εφαρμογή της σε περίπτωση που πρέπει να γίνουν πολλές προσομοιώσεις, και ειδικότερα όταν είναι ταυτόχρονα επιθυμητή και υψηλή ακρίβεια αποτελεσμάτων. Προς την κατεύθυνση αυτή πρέπει να γίνει επιπλέον διερεύνηση τόσο κατά τον καθορισμό των ενεργειών αποκοπής, όσο κατά το σχεδιασμό της διάταξης.

Συνοψίζοντας, η παρούσα ΔΕ δύναται να αποτελέσει τον κεντρικό πυλώνα διερεύνησης αρκετών προβλημάτων που εμπίπτουν στο χώρο των ακτίνων-Χ και συγκεκριμένα, θέματα που αφορούν τόσο τις μηχανές ακτίνων-Χ και το εκπεμπόμενο από αυτές φάσμα όσο και την περαιτέρω διερεύνηση της τεχνική φθορισμού των ακτίνων-Χ.

ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ Ι

Χαρακτηριστικές ακτίνες -X των χημικών στοιχείων

Ατομικός αριθμός Z	Στοιχείο	Ενέργειες (keV) των χαρακτηριστικών ακτίνων -X								
		K Lines				L Lines				
		K _{β2}	K _{β1}	K _{α1}	K _{α2}	L _{γ1}	L _{β2}	L _{β1}	L _{α1}	L _{α2}
3	Li	-	-	0.052	-	-	-	-	-	-
4	Be	-	-	0.110	-	-	-	-	-	-
5	B	-	-	0.185	-	-	-	-	-	-
6	C	-	-	0.282	-	-	-	-	-	-
7	N	-	-	0.392	-	-	-	-	-	-
8	O	-	-	0.523	-	-	-	-	-	-
9	F	-	-	0.677	-	-	-	-	-	-
10	Ne	-	-	0.851	-	-	-	-	-	-
11	Na	-	-	1.041	-	-	-	-	-	-
12	Mg	-	-	1.254	-	-	-	-	-	-
13	Al	-	-	1.487	-	-	-	-	-	-
14	Si	-	-	1.740	-	-	-	-	-	-
15	P	-	-	2.015	-	-	-	-	-	-
16	Si	-	-	2.308	-	-	-	-	-	-
17	Cl	-	-	2.622	-	-	-	-	-	-
18	Al	-	3.132	2.957	2.955	-	-	-	-	-
19	K	-	3.589	3.313	3.310	-	-	-	-	-
20	Ca	-	4.012	3.691	3.688	-	-	0.344	0.341	-
21	Sc	-	4.460	4.090	4.085	-	-	0.399	0.395	-
22	Ti	-	4.931	4.510	4.504	-	-	0.458	0.452	-
23	V	-	5.427	4.952	4.944	-	-	0.519	0.510	-
24	Cr	-	5.946	5.414	5.405	-	-	0.581	0.571	-
25	Mn	-	6.490	5.898	5.887	-	-	0.647	0.636	-
26	Fe	-	7.057	6.403	6.390	-	-	0.717	0.704	-
27	Co	-	7.649	6.930	6.915	-	-	0.790	0.775	-
28	Ni	8.328	8.264	7.477	7.460	-	-	0.866	0.849	-
29	Cu	8.976	8.904	8.047	8.027	-	-	0.948	0.928	-
30	Zn	9.657	9.671	8.638	8.615	-	-	1.032	1.009	-
31	Ga	10.365	10.263	9.251	9.234	-	-	1.122	1.096	-
32	Ge	11.100	10.981	9.885	9.854	-	-	1.216	1.186	-
33	As	11.863	11.725	10.543	10.507	-	-	1.317	1.282	-
34	Se	12.651	12.495	11.221	11.181	-	-	1.419	1.379	-
35	Br	13.465	13.290	11.923	11.877	-	-	1.526	1.480	-
36	Kr	14.313	14.112	12.648	12.597	-	-	1.638	1.587	-
37	Rb	15.184	14.960	13.394	13.335	-	-	1.752	1.694	1.692
38	Sr	16.083	15.834	14.164	14.097	-	-	1.872	1.806	1.805
39	Y	17.011	16.736	14.957	14.882	-	-	1.996	1.922	1.920

Ατομικός αριθμός Z	Στοιχείο	Ενέργειες (keV) των χαρακτηριστικών ακτίνων -X								
		K Lines				L Lines				
		K _{β2}	K _{β1}	K _{α1}	K _{α2}	L _{γ1}	L _{β2}	L _{β1}	L _{α1}	L _{α2}
40	Zr	17.969	17.666	15.774	15.690	2.302	2.219	2.124	2.042	2.040
41	Nb	18.951	18.621	16.614	16.520	2.462	2.367	2.257	2.166	2.163
42	Mo	19.964	19.607	17.478	17.373	2.623	2.518	2.395	2.293	2.290
43	Tc	21.012	20.585	18.410	18.328	2.792	2.674	2.538	2.424	2.420
44	Ru	22.072	21.655	19.278	19.149	2.964	2.836	2.683	2.558	2.554
45	Rh	23.169	22.721	20.214	20.072	3.144	3.001	2.834	2.696	2.692
46	Pd	24.297	23.816	21.175	21.018	3.328	3.172	2.990	2.838	2.833
47	Ag	25.454	24.942	22.162	21.988	3.519	3.348	3.151	2.984	2.978
48	Cd	26.641	26.093	23.172	23.982	3.716	3.528	3.316	3.133	3.127
49	In	27.859	27.274	24.207	24.000	3.920	3.713	3.487	3.287	3.279
50	Sn	29.106	28.483	25.270	25.042	4.131	3.994	3.662	3.444	3.435
51	Sb	30.387	29.723	26.357	26.109	4.347	4.100	3.843	3.605	3.595
52	Te	31.698	30.993	27.471	27.200	4.570	4.301	4.029	3.769	3.758
53	In	33.016	32.292	28.610	28.315	4.800	4.507	4.220	3.937	3.926
54	Xe	34.446	33.644	29.802	29.485	5.036	4.720	4.422	4.111	4.098
55	Cs	35.819	34.984	30.970	30.623	5.280	4.936	4.620	4.286	4.272
56	Ba	37.255	36.376	32.191	31.815	5.531	5.156	4.828	4.467	4.451
57	La	38.728	37.799	33.440	33.033	5.789	5.384	5.043	4.651	4.635
58	Ce	40.231	39.255	34.717	34.276	6.052	5.613	5.262	4.840	4.823
59	Pr	41.772	40.746	36.023	35.548	6.322	5.850	5.489	5.034	5.014
60	Nd	43.298	42.269	37.359	36.845	6.602	6.090	5.722	5.230	5.208
61	Pm	44.955	43.945	38.649	38.160	6.891	6.336	5.956	5.431	5.408
62	Sm	46.553	45.400	40.124	39.523	7.180	6.587	6.206	5.636	5.609
63	Eu	48.241	47.027	41.529	40.877	7.478	6.842	6.456	5.846	5.816
64	Gd	49.961	48.718	42.983	42.280	7.788	7.102	6.714	6.059	6.027
65	Tb	51.737	50.391	44.470	43.737	8.104	7.368	6.979	6.275	6.241
66	Dy	53.491	52.178	45.985	45.193	8.418	7.638	7.249	6.495	6.457
67	Ho	55.292	53.934	47.528	46.686	8.748	7.912	7.528	6.720	6.680
68	Er	57.088	55.690	49.099	48.205	9.089	8.188	7.810	6.948	6.904
69	Tm	58.969	57.576	50.730	49.762	9.424	8.472	8.103	7.181	7.135
70	Yb	60.959	59.352	52.360	51.326	9.779	8.758	8.401	7.414	7.367
71	Lu	62.946	61.282	54.063	52.959	10.142	9.048	8.708	7.654	7.604
72	Hf	64.936	63.209	55.757	54.579	10.514	9.346	9.021	7.898	7.843
73	Ta	66.999	65.210	57.524	56.270	10.892	9.649	9.341	8.145	8.087
74	W	69.090	67.233	59.310	57.973	11.283	9.959	9.670	8.396	8.333
75	Re	71.220	69.298	61.131	59.707	11.684	10.273	10.008	8.651	8.584

Ατομικός αριθμός Z	Στοιχείο	Ενέργειες (keV) των χαρακτηριστικών ακτίνων -X								
		K Lines				L Lines				
		K _{β2}	K _{β1}	K _{α1}	K _{α2}	L _{γ1}	L _{β2}	L _{β1}	L _{α1}	L _{α2}
76	Os	73.393	71.404	62.991	61.477	12.094	10.596	10.354	8.910	8.840
77	Ir	75.605	73.549	64.886	63.278	12.509	10.918	10.706	9.173	8.098
78	Pt	77.866	75.736	66.820	65.111	12.939	11.249	11.069	9.441	9.360
79	Au	80.165	77.968	68.794	66.980	13.379	11.582	11.439	9.711	9.625
80	Hg	82.526	80.258	70.821	68.894	13.828	11.923	11.823	9.987	9.896
81	Tl	84.904	82.558	72.860	70.820	14.288	12.268	12.210	10.266	10.170
82	Pb	87.343	84.922	74.957	72.794	14.762	12.620	12.611	10.549	10.448
83	Bi	89.833	87.335	77.097	74.805	15.244	12.977	13.021	10.836	10.729
84	Po	92.386	89.809	79.296	76.868	15.740	13.338	13.441	11.128	11.014
85	At	94.976	92.319	81.525	78.956	16.248	13.705	13.873	11.424	11.304
86	Rn	97.616	94.877	83.800	81.080	16.768	14.077	14.316	11.724	11.597
87	Fr	100.305	97.483	86.119	83.243	17.301	14.459	14.770	12.029	11.894
88	Ra	103.048	100.136	88.485	85.446	17.845	15.233	15.233	12.338	12.194
89	Ac	105.838	102.846	90.894	87.681	18.405	15.227	15.712	12.650	12.499
90	Th	108.671	105.592	93.334	89.942	18.977	15.620	16.200	12.966	12.802
91	Pa	111.575	108.408	95.851	92.271	19.559	16.022	16.700	13.291	13.120
92	U	114.549	111.289	98.428	94.648	20.163	16.425	17.218	13.613	13.438

ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ ΙΙ

Κατάλογος χημικών στοιχείων χημικών ενώσεων και μιγμάτων που βρίσκονται στη βάση δεδομένων του προγράμματος PENELOPE

Χημικά Στοιχεία (ατομικός αριθμός = κωδικός στοιχείου)					
1	Hydrogen	34	Selenium	67	Holmium
2	Helium	35	Bromine	68	Erbium
3	Lithium	36	Krypton	69	Thulium
4	Beryllium	37	Rubidium	70	Ytterbium
5	Boron	38	Strontium	71	Lutetium
6	Amorphous carbon	39	Yttrium	72	Hafnium
7	Nitrogen	40	Zirconium	73	Tantalum
8	Oxygen	41	Niobium	74	Tungsten
9	Fluorine	42	Molybdenum	75	Rhenium
10	Neon	43	Technetium	76	Osmium
11	Sodium	44	Ruthenium	77	Iridium
12	Magnesium	45	Rhodium	78	Platinum
13	Aluminum	46	Palladium	79	Gold
14	Silicon	47	Silver	80	Mercury
15	Phosphorus	48	Cadmium	81	Thallium
16	Sulfur	49	Indium	82	Lead
17	Chlorine	50	Tin	83	Bismuth
18	Argon	51	Antimony	84	Polonium
19	Potassium	52	Tellurium	85	Astatine
20	Calcium	53	Iodine	86	Radon
21	Scandium	54	Xenon	87	Francium
22	Titanium	55	Cesium	88	Radium
23	Vanadium	56	Barium	89	Actinium
24	Chromium	57	Lanthanum	90	Thorium
25	Manganese	58	Cerium	91	Protactinium
26	Iron	59	Praseodymium	92	Uranium
27	Cobalt	60	Neodymium	93	Neptunium
28	Nickel	61	Promethium	94	Plutonium
29	Copper	62	Samarium	95	Americium
30	Zinc	63	Europium	96	Curium
31	Gallium	64	Gadolinium	97	Berkelium
32	Germanium	65	Terbium	98	Californium
33	Arsenic	66	Dysprosium	99	Einsteinium

Χημικές Ενώσεις και Μίγματα (αλφαβητική σειρά)			
100	Acetone	143	Chloroform
101	Acetylene	144	Concrete, portland
102	Adenine	145	Cyclohexane
103	Adipose tissue (ICRP)	146	1,2-dichlorobenzene
104	Air, dry (near sea level)	147	Dichlorodiethyl ether
105	Alanine	148	1,2-dichloroethane
106	Aluminum oxide	149	Diethyl ether
107	Amber	150	N,n-dimethyl formamide
108	Ammonia	151	Dimethyl sulfoxide
109	Aniline	152	Ethane
110	Anthracene	153	Ethyl alcohol
111	B-100 bone-equivalent plastic	154	Ethyl cellulose
112	Bakelite	155	Ethylene
113	Barium fluoride	156	Eye lens (ICRP)
114	Barium sulfate	157	Ferric oxide
115	Benzene	158	Ferrobtoride
116	Beryllium oxide	159	Ferrous oxide
117	Bismuth germanium oxide	160	Ferrous sulfate dosimeter solution
118	Blood (ICRP)	161	Freon-12
119	Bone, compact (ICRU)	162	Freon-12b2
120	Bone, cortical (ICRP)	163	Freon-13
121	Boron carbide	164	Freon-13b1
122	Boron oxide	165	Freon-13i1
123	Brain (ICRP)	166	Gadolinium oxysulfide
124	Butane	167	Gallium arsenide
125	N-butyl alcohol	168	Gel in photographic emulsion
126	C-552 air-equivalent plastic	169	Pyrex glass
127	Cadmium telluride	170	Glass, lead
128	Cadmium tungstate	171	Glass, plate
129	Calcium carbonate	172	Glucose
130	Calcium fluoride	173	Glutamine
131	Calcium oxide	174	Glycerol
132	Calcium sulfate	175	Graphite
133	Calcium tungstate	176	Guanine
134	Carbon dioxide	177	Gypsum, plaster of Paris
135	Carbon tetrachloride	178	N-heptane
136	Cellulose acetate, cellophane	179	N-hexane
137	Cellulose acetate butyrate	180	Kapton polyimide film
138	Cellulose nitrate	181	Lanthanum oxybromide
139	Ceric sulfate dosimeter solution	182	Lanthanum oxysulfide
140	Cesium fluoride	183	Lead oxide
141	Cesium iodide	184	Lithium amide
142	Chlorobenzene	185	Lithium carbonate

186	Lithium fluoride	226	Polypropylene
187	Lithium hydride	227	Polystyrene
188	Lithium iodide	228	Polytetrafluoroethylene (teflon)
189	Lithium oxide	229	Polytrifluorochloroethylene
190	Lithium tetraborate	230	Polyvinyl acetate
191	Lung (ICRP)	231	Polyvinyl alcohol
192	M3 wax	232	Polyvinyl butyral
193	Magnesium carbonate	233	Polyvinyl chloride
194	Magnesium fluoride	234	Polyvinylidene chloride (saran)
195	Magnesium oxide	235	Polyvinylidene fluoride
196	Magnesium tetraborate	236	Polyvinyl pyrrolidone
197	Mercuric iodide	237	Potassium iodide
198	Methane	238	Potassium oxide
199	Methanol	239	Propane
200	Mix d wax	240	Propane, liquid
201	Ms20 tissue substitute	241	N-propyl alcohol
202	Muscle, skeletal (ICRP)	242	Pyridine
203	Muscle, striated (ICRU)	243	Rubber, butyl
204	Muscle-equivalent liquid, with sucrose	244	Rubber, natural
205	Muscle-equivalent liquid, without sucrose	245	Rubber, neoprene
206	Naphthalene	246	Silicon dioxide
207	Nitrobenzene	247	Silver bromide
208	Nitrous oxide	248	Silver chloride
209	Nylon, du Pont elvamide 80 62	249	Silver halides in photographic emulsion
210	Nylon, type 6 and type 6/6	250	Silver iodide
211	Nylon, type 6/10	251	Skin (ICRP)
212	Nylon, type 11 (rilsan)	252	Sodium carbonate
213	Octane, liquid	253	Sodium iodide
214	Paraffin wax	254	Sodium monoxide
215	N-pentane	255	Sodium nitrate
216	Photographic emulsion	256	Stilbene
217	Plastic scintillator (vinyltoluene based)	257	Sucrose
218	Plutonium dioxide	258	Terphenyl
219	Polyacrylonitrile	259	Testes (ICRP)
220	Polycarbonate (makrolon, lexan)	260	Tetrachloroethylene
221	Polychlorostyrene	261	Thallium chloride
222	Polyethylene	262	Tissue, soft (ICRP)
223	Polyethylene terephthalate (mylar)	263	Tissue, soft (ICRU four-component)
224	Polymethyl methacrylate (lucite, perspex, plexiglass)	264	Tissue-equivalent gas (methane based)
225	Polyoxymethylene	265	Tissue-equivalent gas (propane based)

266	Tissue-equivalent plastic (A-150)	274	Uranium oxide
267	Titanium dioxide	275	Urea
268	Toluene	276	Valine
269	Trichloroethylene	277	Viton fluoroelastomer
270	Triethyl phosphate	278	Water, liquid
271	Tungsten hexafluoride	279	Water vapor
272	Uranium dicarbide	280	Xylene
273	Uranium monocarbide		

ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ ΙΙΙ

Στο Παράρτημα ΙΙΙ περιγράφονται τα δύο βοηθητικά προγράμματα που χρησιμοποιήθηκαν κατά την επεξεργασία των αρχείων δεδομένων και εξόδου του προγράμματος PENELOPE. Αρχικά, παρουσιάζεται το πρόγραμμα οπτικής παρουσίασης των αρχείων γεωμετρίας (*.geo) GVIEW και στη συνέχεια το πρόγραμμα γραφικής αναπαράστασης των αρχείων εξόδου GNUPLOT.

ΙΙΙ.1 Το πρόγραμμα GVIEW

Το λογισμικό αυτό χρησιμεύει τόσο για την απεικόνιση της γεωμετρίας που κατασκευάζεται για την επίλυση των προβλημάτων στο αρχείο γεωμετρίας (*.geo), όσο και για τον έλεγχο μιας υπό κατασκευή γεωμετρίας στα διάφορα στάδιά της, ούτως ώστε να αποφευχθούν τυχόν λάθη ή παραλείψεις. Βάσει του manual του προγράμματος PENELOPE συνίσταται η τακτική εκτέλεση του προγράμματος GVIEW. Ειδικότερα όταν κατασκευάζονται σύνθετες και πολύπλοκες γεωμετρίες με τον τακτικό έλεγχο της γεωμετρίας δια μέσου του λογισμικού αποφεύγεται η συσσώρευση λαθών στο αρχείο γεωμετρίας και είναι ευκολότερη η επίλυσή τους.

Στο πακέτο διανομής του προγράμματος PENELOPE περιλαμβάνεται το λογισμικό GVIEW, το οποίο αποτελείται από ένα ζεύγος υπολογιστικών προγραμμάτων, τα οποία ονομάζονται GVIEW2d και GVIEW3d, με τα οποία δημιουργούνται δισδιάστατες και τρισδιάστατες πολυχρωματικές (24-bit color) εικόνες. Επιπροσθέτως, μαζί με τον κώδικα παρέχονται εκτελέσιμα αρχεία (*.exe) των δύο προγραμμάτων, τα οποία «τρέχουν» σε ηλεκτρονικό υπολογιστή (PC) με λογισμικό Windows, χωρίς να απαιτείται η εγκατάσταση του προγράμματος στο PC.

ΙΙΙ.1.α Το πρόγραμμα GVIEW2d

Το πρόγραμμα GVIEW2d απεικονίζει την προς μελέτη γεωμετρία σε δύο διαστάσεις. Όταν ο χρήστης «τρέχει» το πρόγραμμα, ζητείται το όνομα του αρχείου γεωμετρίας και ο φάκελος (directory) στον οποίο βρίσκεται (path + name). Τονίζεται, πως αν το εκτελέσιμο αρχείο του προγράμματος και το αρχείο γεωμετρίας βρίσκονται

στο ίδιο directory τότε ΔΕΝ χρειάζεται να δοθεί το όνομα του directory. Επίσης, όταν γράφεται το όνομα του αρχείου γεωμετρίας πρέπει να υπάρχει η κατάληξη .geo. Εν συνεχεία, ζητείται ο καθορισμός των συντεταγμένων του κέντρου του παραθύρου. Ο χρήστης πληκτρολογεί τρεις (3) αριθμητικές τιμές χωρισμένες μεταξύ τους με κόμμα (,), δηλαδή είναι της μορφής XC, YC, ZC και οι τιμές δίδονται σε εκατοστά (cm). Τέλος, ο χρήστης επιλέγει αν η γεωμετρία θα απεικονιστεί κατά υλικά (materials) ή κατά σώματα (bodies), πληκτρολογώντας τον αριθμό '1' ή '2' αντίστοιχα.

Μετά την τελευταία επιλογή, παρουσιάζεται η εικόνα της γεωμετρίας στην οθόνη. Σε περίπτωση κατά την οποία στο παράθυρο εμφανιστεί μία μαύρη εικόνα πρέπει να τοποθετηθεί το κέντρο του παραθύρου κοντά ή μέσα σε ένα σώμα της γεωμετρίας. Ένας, ακόμη τρόπος αντιμετώπισης του παραπάνω προβλήματος είναι η χρήση εντολών όπως αυτές φαίνονται παρακάτω:

x	αλλαγή προσανατολισμού εικόνας, κατά άξονα x
y	αλλαγή προσανατολισμού εικόνας, κατά άξονα y
z	αλλαγή προσανατολισμού εικόνας, κατά άξονα z
r ή →	μετατόπιση δεξιά και l ή ← μετατόπιση αριστερά
u ή ↑	μετατόπιση πάνω και d ή ↓ μετατόπιση κάτω
f ή pgup	μετατόπιση μπροστά και b ή pgdn : μετατόπιση πίσω
i ή +	εστίαση (zoom in) και o ή - απομάκρυνση (zoom out)
1	αρχικό μέγεθος
h ή ?	βοήθεια
enter	επανάληψη προηγούμενης εντολής
q	έξοδος από πρόγραμμα

III.1.β Το πρόγραμμα GVIEW3d

Το πρόγραμμα GVIEW3d για τρισδιάστατη απεικόνιση του αρχείου γεωμετρίας. Κατά την έναρξη του προγράμματος, ζητείται στο χρήστη το όνομα του αρχείου γεωμετρίας και ο φάκελος (directory) στον οποίο βρίσκεται (path + name). Όπως και με το πρόγραμμα GVIEW2d, έτσι και εδώ είναι βολικό το αρχείο γεωμετρίας και το εκτελέσιμο αρχείο να τοποθετούνται στον ίδιο φάκελο. Επίσης, το αρχείο γεωμετρίας

πρέπει να γράφεται με την κατάληξη .geo. Ακολούθως, καθορίζεται η απόσταση από την οποία γίνεται η απεικόνιση πληκτρολογώντας μία αριθμητική τιμή σε εκατοστά (cm). Τέλος, παρέχεται η δυνατότητα στο χρήστη να απεικονίσει τη γεωμετρία σε τομή δίνοντας δύο (2) αριθμητικές τιμές σε μοίρες ($^{\circ}$) χωρισμένες μεταξύ τους με κόμμα (.), δηλαδή της μορφής PHI1, PHI2. Επισημαίνεται, πως η παράμετρος PHI1 δεν μπορεί να λάβει τιμή μικρότερη από -90° και η τιμή της παραμέτρου PHI2 δεν μπορεί να είναι μεγαλύτερη από την τιμή της PHI1+ 180° .

Μετά την τελευταία επιλογή, παρουσιάζεται η εικόνα της γεωμετρίας στην οθόνη. Η αρχική εικόνα είναι χαμηλής ευκρίνειας, αλλά με πληκτρολόγηση των αριθμητικών πλήκτρων 1-9 η ευκρίνεια βελτιώνεται ($1 \rightarrow$ υψηλότερη ευκρίνεια & $9 \rightarrow$ χαμηλότερη/αρχική ευκρίνεια). Ο χρήστης έχει τη δυνατότητα προσαρμογής της εικόνας με την πληκτρολόγηση των παρακάτω:

R ή \rightarrow	μετατόπιση δεξιά και	I ή \leftarrow	μετατόπιση αριστερά
u ή \uparrow	μετατόπιση πάνω και	d ή \downarrow	μετατόπιση κάτω
i ή +	εστίαση (zoom in) και o ή - απομάκρυνση (zoom out)		
r	περιστροφή του σχήματος		
enter	επανάληψη προηγούμενης εντολής		
q	έξοδος από πρόγραμμα		

Η περιστροφή της απεικόνισης επιτυγχάνεται με την πληκτρολόγηση τριών (3) αριθμητικών τιμών που χωρίζονται με κόμμα (,). Είναι της μορφής OMEGA, THETA, PHI και οι τιμές μετρώνται σε μοίρες (deg). Η περιστροφή του σχήματος αποτέλεσε καταλυτικό σημείο στην παρούσα ΔΕ καθώς οδήγησε στο σημαντικό συμπέρασμα πως για να επιτευχθεί περιστροφή ενός αντικειμένου ως προς άξονα παράλληλο στην οθόνη χρειάζεται να τεθεί η τιμή της παραμέτρου OMEGA=90. Η συγκεκριμένη δυνατότητα του προγράμματος GVIE3d βοηθά το χρήστη να καταλάβει την επίδραση των γωνιών στο σχήμα, έτσι ώστε να μπορεί να ορίσει σωστά τις γωνίες στο αρχείο γεωμετρίας με σκοπό την περιστροφή των σχημάτων.

III.2 Το πρόγραμμα GNUPLOT

Το πρόγραμμα GNUPLOT [23] είναι ένα πρόγραμμα γραφικών απεικονίσεων, δηλαδή με τη χρήση του υπάρχει η δυνατότητα χάραξης πλήθους γραφημάτων, σχημάτων κτλ. Αυτό επιτυγχάνεται καθώς το πρόγραμμα διαβάζει τα σχετικά δεδομένα από αντίστοιχα αρχεία, σε ASCII μορφή, κάτι που το καθιστά ιδιαίτερος διαδομένο όσον αφορά τη γραφική αναπαράσταση αποτελεσμάτων από διάφορα προγράμματα (π.χ. PENELOPE). Ένας άλλος λόγος που το καθιστά τόσο διαδεδομένο είναι πως παρέχεται η δυνατότητα δημιουργίας τρισδιάστατων σχημάτων και γραφημάτων. Πρόκειται για ελεύθερο λογισμικό, το οποίο διατίθεται από την ιστοσελίδα <http://www.gnuplot.info/>. Το πρόγραμμα μπορεί να τρέξει είτε σε παράθυρο εντολών με την εντολή *gnuplot *gnu*, διαβάζοντας τα δεδομένα από το αντίστοιχο αρχείο τύπου .gnu, είτε ανοίγοντας το εκτελέσιμο αρχείο (*wgnuplot.exe*), το οποίο παρέχεται μαζί με το πρόγραμμα.

Στην παρούσα ΔΕ το πρόγραμμα χρησιμοποιήθηκε με σκοπό την απεικόνιση των αποτελεσμάτων του ανιχνευτή δόσης (τρισδιάστατη απεικόνιση). Μαζί με τον κώδικα PENELOPE παρέχεται ένα πακέτο, στο οποίο περιέχονται όλα τα αρχεία .gnu που χρειάζονται ώστε να απεικονίζονται όλα τα αρχεία εξόδου του προγράμματος.

Στο πρόγραμμα GNUPLOT οι εντολές χωρίζονται σε τρεις (3) μεγάλες κατηγορίες τύπου:

- **set**, ο χρήστης ορίζει τις παραμέτρους σχεδίασης (τίτλους, υποδιαίρεσεις αξόνων, κλίμακες, μέγεθος γραμματοσειρών κτλ). Αν ο χρήστης επιθυμεί ακυρώνει την **set** με την εντολή **unset**
- **show**, ο χρήστης ζητάει από το πρόγραμμα να εμφανιστούν στο παράθυρο του προγράμματος οι προεπιλογές που έχουν γίνει με τις εντολές τύπου **set**
- **splot**, ο χρήστης ζητάει την απεικόνιση της γραφικής παράστασης

Παρακάτω δίνεται το αρχείο *dose_rate.gnu*, το οποίο χρησιμοποιήθηκε στα πλαίσια της παρούσης ΔΕ, και εν συνεχεία επεξηγούνται οι εντολές που το απαρτίζουν.

Αρχείο εισόδου του προγράμματος GNUPLOT, dose_rate.gnu

```
# Gnuplot MS-windows 32 bit version 4.4.3
# Plots results from 'penmain.f'
# File name 'dose_rate.gnu'

unset mouse

set zero 1.0e-35
set style line 100 lc rgb "black" lw 0.5
set pm3d solid hidden3d 100
set view 0, 90, 1.2,1
set xlabel "x (cm)" offset -12.5, 0, 0 font "1,13"
set ylabel "y (cm)" offset 0, 5, 0 font "1,13"
set zlabel "Dose rate (ev/g)" offset 118,38,0 font "1,13"

set nologscale x
set nologscale y
set nologscale z
set xrange [-2.5:2.5]
set yrange [-2.5:2.5]
set zrange [0.:*]
set palette defined (0 "white", 1000 "yellow", 2000 "dark-yellow", 3000 "sea-
green", \
4000 "light-green", 5000 "green", 6000 "dark-green",7000 "light-blue", \
7500 "blue", 8000 "dark-blue", 8500 "light-red", 9000 "red", 9500 "dark-red" )
set colorbox vertical user origin 0.8,0.12 size 0.08,0.7
set cbtics 2000 font "1,12"
set origin -0.15,-0.1
set xtics 1 font "1,12"
set ytics 1 font "1,12"
unset ztics
set size 1,1.2

set title 'κατανομή της δόσης (ev/g)' offset 0,1 font "15,20"
splot 'pm_2d_dose_6.6.dat' u 4:5:7 notitle w pm3d
pause -1 'Press enter to continue'
```

Το αρχείο αυτό απεικονίζει τις τιμές των επιμέρους κατανομών δόσης σε κάθε κατάτμηση του ανιχνευτή δόσης που χρησιμοποιήθηκε. Παρακάτω, γίνεται ανάλυση των εντολών, οι οποίες χρησιμοποιήθηκαν. Για περισσότερες πληροφορίες μπορεί κανείς να ανατρέξει στο εγχειρίδιο του προγράμματος [23]:

set mouse: με την εντολή αυτή καθορίζεται η λειτουργία ή όχι του ποντικιού του Η/Υ. Μπορεί να την ακολουθούν επιπλέον λέξεις, οι οποίες καθορίζουν με λεπτομέρεια της κινήσεις του ποντικιού

set zero <αριθμός>: καθορίζεται η τιμή κάτω από την οποία οι τιμές θεωρούνται μηδενικές

set style line <αριθμός> lt <αριθμός> lc <χρώμα> lw <αριθμός>

pt <αριθμός> ps <αριθμός> pi <αριθμός> : η εντολή αυτή καθορίζει τα χαρακτηριστικά των γραμμών και των σημείων. Υπάρχει μία πληθώρα διαμορφωμένων γραμμών στη βάση δεδομένων του προγράμματος, τις οποίες ο χρήστης μπορεί να δει πατώντας την εντολή *test*. Ο αριθμός που ακολουθεί την εντολή αποτελεί τον κωδικό της γραμμής. Η επιλογή “lt” αναφέρεται στο είδος της γραμμής (π.χ. συνεχής, διακεκομμένη κτλ.), ενώ με την “lc” καθορίζεται το χρώμα της και με την “lw” το πάχος της γραμμής. Οι επόμενες επιλογές “pi” και “ps” καθορίζουν τον τύπο και το μέγεθος των σημείων αντίστοιχα. Τέλος, με την εντολή “pi” καθορίζεται το βήμα σχεδίασης, δηλαδή κάθε πόσα δεδομένα θα σχεδιαστεί ένα σημείο. Τονίζεται, πως αν δεν αναγραφεί μία επιλογή η τιμή καθορίζεται αυτόματα στην default τιμή.

set view <αριθμός>, <αριθμός>, <αριθμός>, <αριθμός>: με την εντολή αυτή καθορίζεται η οπτική γωνία παρουσίασης μίας γραφικής παράστασης. Ο πρώτος αριθμός καθορίζει την περιστροφή γύρω από τον X άξονα, με εύρος 0-180° και ο δεύτερος την περιστροφή γύρω από τον Z άξονα, με εύρος 0-360°. Ο τρίτος αριθμός καθορίζει την κλίμακα ολόκληρου του γραφήματος και ο τέταρτος αυτή του Z άξονα μόνο. Οι default τιμές είναι 60, 30, 1, 1.

set (x, y ή z)label “επιθυμητή ονομασία” offset <αριθμός>, <αριθμός>

font <αριθμός>, <αριθμός> tc <χρώμα>: Αρχικά καθορίζεται η ονομασία του αντιστοίχου άξονα. Στη συνέχεια με την εντολή *offset* καθορίζεται η θέση του κειμένου στην οθόνη και εν συνεχεία με τη *font* καθορίζεται το είδος (πρώτος αριθμός) και το μέγεθος (δεύτερος αριθμός) της γραμματοσειράς. Τέλος με την εντολή *tc* καθορίζεται το χρώμα του κειμένου.

set (no)logscale “x, y ή z” <αριθμός>: με την εντολή αυτή καθορίζεται η κλίμακα του αντίστοιχου άξονα σε λογαριθμική ή όχι και από τον αριθμό ορίζεται η βάση του λογαρίθμου. Αν δεν δοθεί αριθμός θεωρείται δεκαδικός (10) λογάριθμός.

set (x,y ή z)range [αριθμός, αριθμός] (no)reverse (no)writeback: οι δύο αριθμοί αποτελούν το σύνολο τιμών του αντίστοιχου άξονα (εύρος). Αν δοθεί ο συμβολισμός [* , *] τότε το πρόγραμμα καθορίζει αυτόματα το εύρος βάσει τιμών. Η εντολή *reverse* αντιστρέφει τον άξονα, ενώ με την εντολή *writeback* αποθηκεύεται το εύρος τιμών και με την εντολή *set (x,y ή z)range [] restore* ανακτάται.

set palette defined (αριθμός “χρώμα”, ... , αριθμός “χρώμα”): με χρήση αυτής της εντολής επιτυγχάνεται η χρωματική απεικόνιση του Z άξονα σε ένα τρισδιάστατο σχήμα. Με την εισαγωγή του αριθμού καθορίζεται η αριθμητική τιμή από την οποία και πάνω τα αντίστοιχα σημεία έχουν το χρώμα, το όνομα του οποίου εισάγεται μετά από αυτή. Αν καθοριστεί σε ένα εύρος τιμών ένα χρώμα, τότε το χρώμα από έντονο εξασθενεί μέσα στα πλαίσια του εύρους. Με την εντολή *show palette colornames* ο χρήστης έχει τη δυνατότητα να δει τα χρώματα που υπάρχουν στη βάση δεδομένων του προγράμματος μαζί με τα αντίστοιχα ονόματά τους.

set colorbox vertical/horizontal default/user: η εντολή αυτή αναφέρεται στην εισαγωγή του ορθογώνιου που περιέχει την χρωματική κλίμακα. Με την εισαγωγή της λέξης *vertical* ή *horizontal* το ορθογώνιο σχεδιάζεται κάθετα ή οριζόντια αντίστοιχα. Η επιλογή *default* ή *user* καθορίζει το μέγεθος και τη θέση του ορθογώνιου. Αν επιλεγθεί η πρώτη τότε το μέγεθος και η θέση είναι οι προεπιλεγμένες από το πρόγραμμα. Σε περίπτωση της δεύτερης επιλογής η εντολή ακολουθείται από τις εντολές *origin <αριθμός>, <αριθμός>*, η οποία καθορίζει τη θέση του ορθογώνιου, και *size <αριθμός>, <αριθμός>*, με την οποία ορίζεται το μέγεθος του. Αν οι εντολές αυτές δίνονται χωριστά αναφέρονται σε όλο το γράφημα. Με την εντολή *front/back* καθορίζεται αν το ορθογώνιο θα σχεδιαστεί μπροστά ή πίσω από το γράφημα αντιστοίχως και με την εντολή *border <αριθμός>* καθορίζεται από τον αριθμό το είδος

της γραμμής που αποτελεί το περίγραμμα του ορθογωνίου (ο αριθμός αντιστοιχεί σε κάποιο style line όπως αυτό αναλύεται παραπάνω).

set (x,y,z ή cb)tics <αριθμός>: με αυτή την εντολή καθορίζεται η κλίμακα του αντίστοιχου άξονα (x,y,z) ή του χρωματικού άξονα (cb). Μπορεί να ακολουθείται από μια πληθώρα άλλων εντολών, όπως για παράδειγμα από την εντολή *font*.

set title ‘επιθυμητή ονομασία’: καθορίζεται η ονομασία του γραφήματος. Η εντολή μπορεί να ακολουθείται από άλλες εντολές με σκοπό την αλλαγή μεγέθους και είδους γραμματοσειράς, θέσης κτλ.

plot ‘όνομα αρχείου δεδομένων’ u <αρ. στήλης> : <αρ. στήλης> : <αρ. στήλης> w <ιδιότητα>: με την *plot* δίνεται η εντολή στο πρόγραμμα να απεικονίσει τα επιθυμητά δεδομένα, τα οποία καθορίζονται από τον αριθμό της στήλης μέσω της εντολής *u*. Με την εντολή *w* προσδίδονται διάφορες ιδιότητες όπως η απεικόνιση των σφαλμάτων (*w errorbars*) ή τη μετατροπή ενός γραφήματος σε ιστόγραμμα (*w histeps*) ή τη δημιουργία τρισδιάστατου γραφήματος (*w pm3d*). Τονίζεται πως η εντολή *plot* μπορεί να συνοδευθεί από πλήθος άλλων εντολών, κάτι το οποίο δεν αποτελεί αντικείμενο μελέτης στα πλαίσια της παρούσης ΔΕ. Αναλυτικές πληροφορίες μπορεί κανείς να βρει στο εγχειρίδιο του προγράμματος.

pause -1 ‘επιθυμητό κείμενο’: η εντολή αυτή εμφανίζει στην οθόνη το επιθυμητό κείμενο και δεν εκτελείται καμία άλλη εντολή αν ο χρήστης δεν πατήσει το πλήκτρο ENTER ή επιλέξει με τον κέρσορα την επιλογή “OK”.

ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ IV

Στο παράρτημα IV δίνεται τα πιστοποιητικό του πρότυπου υλικού 1633b



National Institute of Standards & Technology

Certificate of Analysis

Standard Reference Material® 1633b

Constituent Elements in Coal Fly Ash

This Standard Reference Material (SRM) is intended for use in the evaluation of analytical methods for the determination of constituent elements in coal fly ash or materials with a similar matrix. SRM 1633b is a bituminous coal fly ash that was sieved through a nominal sieve opening of 90 μm (170 mesh) and then blended to assure homogeneity. A unit of SRM 1633b consists of 75 g of powdered material.

The certified values for the constituent elements are given in Table 1. The values are based on measurements using one definitive method or two or more independent and reliable analytical techniques. Noncertified values for a number of elements are given in Table 2 as additional information on the composition of the material. The noncertified values should not be used for calibration or quality control. Analytical methods used for the certification of this SRM are given in Table 3 along with analysts and cooperating laboratories. All values are based on measurements using a dry sample weight of at least 250 mg.

Certified Values and Uncertainties: The certified values are weighted means of results of two or more independent analytical methods, or the means of results from a single definitive method. The weights for the weighted means were computed according to the iterative procedure of Paule and Mandel [1]. The stated uncertainty includes allowances for measurement imprecision, material variability, and differences among analytical methods. Each uncertainty is the sum of the half-width of a 95 % prediction interval, and includes an allowance for the systematic error among the methods used. In the absence of systematic error, a 95 % prediction interval predicts where the true concentrations of 95 % of the samples of this SRM lie.

Mercury certification is based on cold vapor isotope dilution inductively coupled plasma mass spectrometry (CV- ID-ICP-MS) at NIST [2]. The uncertainty in the certified value for mercury is expressed as an expanded uncertainty, $U = ku_c$, calculated according to the methods in the ISO/NIST Guide [3]. The quantity u_c represents, at the level of one standard deviation, the potential combined effects of the uncertainty due to material and measurement variability. The quantity k is the coverage factor used to obtain an expanded uncertainty with an approximate confidence level of 95 %. The value of the coverage factor, $k = 2.034$, is determined from the Student's t -distribution with 33 degrees of freedom and a confidence level of 95 %.

Expiration of Certification: The certification of this SRM is valid until 01 May 2014, within the uncertainty specified, provided the SRM is handled and stored in accordance with the instructions given in this certificate (see "Instructions for Use"). However, the certification will be nullified if the SRM is damaged or contaminated. Registration (see attached sheet) will facilitate notification.

Stability: This material is considered to be stable; however, its stability has not been rigorously assessed. NIST will monitor this material and will report any substantive changes in certification to the purchaser.

The overall direction and coordination of the analyses were under the chairmanship of R.R. Greenberg of the NIST Analytical Chemistry Division.

Statistical consultation was provided by S.B. Schiller and D.D. Leber of the NIST Statistical Engineering Division.

Willie E. May, Chief
Analytical Chemistry Division

Robert L. Watters, Jr., Chief
Measurement Services Division

Gaithersburg, MD 20899
Certificate Issue Date: 10 December 2004
See Certificate Revision History on Last Page

SRM 1633b

Page 1 of 5

The support aspects involved in the issuance of this SRM were coordinated through the NIST Standard Reference Materials Program by B.S. MacDonald of the NIST Measurement Services Division.

INSTRUCTIONS FOR USE

A minimum dry sample weight of 250 mg should be used for analytical determinations to be related to the certified values on this Certificate of Analysis.

To obtain the certified values, sample preparation procedures should be designed to affect complete dissolution. If volatile elements (e.g., Hg, As, Se) are to be determined, precautions should be taken in the dissolution of SRM 1633b to avoid volatilization losses.

Instructions for Drying: When non-volatile elements are being determined, this material should be dried to constant weight before using. Recommended procedures for drying are: 1) Vacuum drying for 24 h at ambient temperature using a cold trap at or below -50 °C and a pressure not greater than 0.2 mm Hg (30 Pa); 2) drying for 2 h in an oven of 105 °C. Samples of the dried material weighing at least 250 mg should be used for analysis. When not in use, the material should be kept in a tightly sealed bottle. Volatile elements should be determined on an as-received basis, and corrected to dry weight. Correction should be based on a separate determination of moisture using one of the above drying procedures.

Source and Preparation of the Material: The fly ash was supplied by a coal fired power plant and is the product of Pennsylvania and West Virginia coals. It was selected as a typical bituminous coal fly ash and is not intended as a fly ash from a specific coal or combustion process. The material was air dried, sieved, and blended for 24 h before being placed in a series of bulk containers. X-ray fluorescence and inductively coupled plasma atomic emission (ICP-AES) analyses were performed on ten grab samples taken from the bulk for a preliminary homogeneity assessment before proceeding with bottling the material in 75 g units.

Analysis: The homogeneity of the bottled material was assessed by X-ray fluorescence spectrometry (XRF) and instrumental neutron activation analysis, using selected elements as indicators. In some cases, statistically significant differences between samples were seen, and the variance due to material inhomogeneity is included in the overall uncertainties of the certified values. The estimated relative standard deviation for material inhomogeneity is less than 1 % for those elements for which homogeneity was assessed, except thorium, for which material inhomogeneity was estimated to be 2 %.

Table 1. Certified Values

Element	Mass Fraction (%)	Element	Mass Fraction (mg/kg)
Al	15.05 ± 0.27	As	136.2 ± 2.6
Ca	1.51 ± 0.06	Ba	709 ± 27
Fe	7.78 ± 0.23	Cd	0.784 ± 0.006
Mg	0.482 ± 0.008	Cr	198.2 ± 4.7
K	1.95 ± 0.03	Cu	112.8 ± 2.6
Si	23.02 ± 0.08	Pb	68.2 ± 1.1
Na	0.201 ± 0.003	Mn	131.8 ± 1.7
S	0.2075 ± 0.0011	Hg	0.1431 ± 0.0018
Ti	0.791 ± 0.014	Ni	120.6 ± 1.8
		Se	10.26 ± 0.17
		Sr	1041 ± 14
		Th	25.7 ± 1.3
		U	8.79 ± 0.36
		V	295.7 ± 3.6

Table 2. Noncertified Values

Element	Mass Fraction (mg/kg)	Element	Mass Fraction (mg/kg)
Sb	6	P	2300
Br	2.9	Rb	140
Ce	190	Sc	41
Co	50	Sm	20
Cs	11	Ta	1.8
Dy	17	Tb	2.6
Eu	4.1	Tl	5.9
Gd	13	Tm	2.1
Hf	6.8	W	5.6
Ho	3.5	Yb	7.6
La	94	Zn	210
Lu	1.2		
Nd	85		

Table 3. Analytical Methods Used for Certification Analyses

Element	Certification Methods
Al	INAA, XRF
As	FIA-HAAS, INAA
Ba	ICP-MS, INAA
Ca	ICP, INAA, XRF
Cd	ETAAS, IDTIMS
Cr	FAAS, INAA
Cu	FAAS, ICP-MS
Fe	INAA, XRF
Hg	CV-ID-ICP-MS
K	FAES, INAA, XRF
Mg	ICP, IDTIMS
Mn	FAAS, INAA
Na	FAES, INAA
Ni	ETAAS, ICP
Pb	ETAAS, ICP-MS
Rb	FAES, INAA
S	IDTIMS
Sb	ETAAS, INAA
Se	FIA-HAAS, INAA
Si	GRAV, XRF
Sr	FAES, INAA, IDTIMS
Th	ICP-MS, INAA
Ti	INAA, XRF
U	ICP-MS, INAA
V	ICP, INAA

ID-TIMS	Isotope Dilution Thermal Ionization Mass Spectrometry; mixed acid digestion
ICP-MS	Inductively Coupled Plasma Mass Spectrometry; mixed acid digestion
INAA	Instrumental Neutron Activation Analysis
XRF	Wavelength Dispersive X-ray Fluorescence on fused borate discs
ICP-AES	Inductively Coupled Plasma Atomic Emission Spectrometry; mixed acid digestion
ETAAS	Electrothermal Atomic Absorption Spectrometry; mixed acid digestion
CV-ID-ICP-MS	Cold Vapor Isotope Dilution Inductively Coupled Plasma Mass Spectrometry
FIA-HAAS	Flow Injection Analyses - Hydride Generation Atomic Absorption Spectrometry
FAAS	Flame Atomic Absorption Spectrometry; mixed acid digestion except for Au, leached with HBr-Br ₂
GRAV	Gravimetry; sodium carbonate fusion

Most information values were determined by INAA only; P was determined by ICP-AES and XRF; Ti was determined by ICP-MS; Zn was determined by FAAS and ICP-AES.

Participating NIST Analysts

Rocio Arvizu
Ellyn S. Beary
Diane S. Braverman
Michael S. Epstein
John D. Fassett
Karen M. Garrity
Robert R. Greenberg
W. Robert Kelly
Stephen E. Long
Elizabeth A. Mackey
John R. Moody
Karen E. Murphy
Paul J. Paulsen
Theresa A. Rush
Rajananda Saraswati
Johanna M. Smeller
Thomas W. Vetter
Robert D. Vocke
Robert L. Watters, Jr.

Participating Laboratories

J. Delles, H. Kanare; Construction Technology Laboratories, Inc., Skokie, IL 60077

P. Briggs, D. Siems; U.S. Geological Survey, Branch of Geochemistry, Lakewood, CO 80225

REFERENCES

- [1] Paule, R.C.; Mandel, J.; *Consensus Values and Weighting Factors*; J. Res. Natl. Bur. Stand., Vol. 87, pp. 377–385 (1982).
- [2] Christopher, S.J.; Long, S.E.; Rearick, M.S.; *Development of High Accuracy Vapor Generation ICP-MS and its Application to the Certification of Mercury in Standard Reference Materials*; Anal. Chem., Submitted for Publication (November 2000).
- [3] ISO; *Guide to the Expression of Uncertainty in Measurement*, ISBN 92-67-10188-9, 1st ed.; International Organization for Standardization: Geneva, Switzerland (1993); see also Taylor, B.N.; Kuyatt, C.E.; *Guidelines for Evaluating and Expressing the Uncertainty of NIST Measurement Results*; NIST Technical Note 1297, U.S. Government Printing Office: Washington, DC (1994); available at <http://physics.nist.gov/Pubs/>.

Certificate Revision History: 10 December 2004 (This revision reflects an update of the certified value for Hg based on new methodology, update expiration date, and editorial changes); 22 June 1993 (Original certificate date).

Users of this SRM should ensure that the certificate in their possession is current. This can be accomplished by contacting the SRM Program at: telephone (301) 975-6776; fax (301) 926-4751, email srminfo@nist.gov; or via the Internet at <http://www.nist.gov/srm>.

Βιβλιογραφία

- [1] Jenkins Ron, “*X-ray fluorescence spectroscopy*”, 2nd edition, Wiley, 1999.
- [2] Beckhoff B., Kanngießer B., Langhoff N., Wedell R., Wolff H., “*Handbook of practical X-ray fluorescence analysis*”, Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2006.
- [3] Van Grieken R. E, Markowicz A. A., “*Handbook of X-ray spectroscopy*”, 2nd edition, Marcel Dekker, 2002.
- [4] Tsuji K., Injuk J., Van Grieken R., “*X-ray spectrometry: Recent technological advances*”, John Wiley & Sons, Ltd, 2004.
- [5] Verma H. R., “*Atomic and nuclear analytical methods*”, Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2007.
- [6] Ide-Ektessabi A., “*Applications of synchrotron radiation*”, Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2007.
- [7] Coster D., De L. Kronig R., “*A new type of Auger effect and its influence on the X-ray spectrum*”, Physica, Vol.2, Issues 1-12, pp. 13-24, 1935.
- [8] Zsckornack G.H., 2006. “*Handbook of X –ray data*”, Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2007.
- [9] Αναγνωστάκης Μ. Ι., βοήθημα στο μάθημα “*Αλληλεπιδράσεις Ακτινοβολιών και Υλης*”, Σχολή Μηχανολόγων Μηχανικών Ε.Μ.Π., Αθήνα 2009.
- [10] Salvat F., Fernandez-Varea J.M., Costa E. and Sempau J., “*PENELOPE - A Code System for Monte Carlo Simulation of Electron and Photon Transport*”, Workshop Proceedings, Issy-les-Moulineaux, France, 2003.
- [11] Αθανασίου Ν., “*Προσομοίωση της αλληλεπίδρασης φωτονιακών ακτινοβολιών και ύλης με χρήση του κώδικα PENELOPE – Εφαρμογή σε προβλήματα υπολογισμού*”

θωρακίσεων και βαθμονόμησης ανιχνευτικών διατάξεων”, Διπλωματική Εργασία, Σχολή Μηχανολόγων Μηχανικών Ε.Μ.Π., Αθήνα 2006.

[12] Αναγνωστάκης Μ.Ι., βοήθημα στο μάθημα “*Πυρηνικά Μετρητικά Συστήματα και Αναλύσεις*”, Σχολή Μηχανολόγων Μηχανικών Ε.Μ.Π., Αθήνα 2005.

[13] Tucker D. M., Barnes G. T., Wu X., “*Molybdenum target x-ray spectra: A semiempirical model*”, Medical Physics, Vol.18, No.3, pp.402-407, 1991.

[14] Birch R., Marshall M., “*Computation of Bremsstrahlung X-ray Spectra and Comparison with Spectra Measured with a Ge(Li) Detector*”, Physics in Medicine and Biology, Vol. 24, No. 3, pp. 505-517, 1979.

[15] Tan D., Heaton B., “*Bremsstrahlung Intensity and Spectrum- Theoretical Deduction and Discussion*”, Applied Radiation Isotopes, Vol.45, No.11, pp. 1101-1111, 1994.

[16] Ρούνη Π., “*Ανίχνευση ιχνοστοιχείων σε δείγματα περιβαλλοντικής σημασίας, με χρήση μεθόδων Πυρηνικής Τεχνολογίας*”, Διδακτορική Διατριβή, Σχολή Μηχανολόγων Μηχανικών Ε.Μ.Π., Αθήνα 2008.

[17] Βαλμαντώνης Ν., “*Αναβάθμιση των τεχνικών ανάλυσης με νετρονική ενεργοποίηση (NAA) και φθορισμό ακτίνων-Χ (XRF) που χρησιμοποιούνται στο ΕΠΙΤ-ΕΜΠ για την ανίχνευση ιχνοστοιχείων σε περιβαλλοντικά δείγματα*”, Διπλωματική Εργασία, Σχολή Μηχανολόγων Μηχανικών Ε.Μ.Π., Αθήνα 2009.

[18] Βαρδαβά Α., “*Ανάλυση φασμάτων φθορισμού ακτίνων-Χ (XRF) περιβαλλοντικών δειγμάτων με το πρόγραμμα WinQXAS (AXIL)*”, Διπλωματική Εργασία, Σχολή Μηχανολόγων Μηχανικών Ε.Μ.Π., Αθήνα 2008.

[19] Δουλγκέρογλου Μ.-Ν., 2009. “*Ανάπτυξη μεθοδολογίας προσδιορισμού της δοσιμετρικής κατανομής γύρω από πηγή βραχυθεραπείας με χρήση τεχνικών προσομοίωσης Monte-Carlo*”, Διπλωματική Εργασία, Σχολή Μηχανολόγων Μηχανικών Ε.Μ.Π., Αθήνα 2009.

[20] Karfopoulos K.L., Anagnostakis M.J., “*Parameters affecting full energy peak efficiency determination during Monte-Carlo Simulation*”, Applied Radiation and Isotopes, Vol.68, pp. 1435-1437, 2010.

[21] Valkovic V., “*X-Ray Spectroscopy in Environmental Sciences*”, CRC Press Taylor & Francis Group, 1989.

[22] Malcolm Brown R., Jr, “*Cellulose: Molecular and Structural Biology*”, Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2007.

[23] Williams T., Kelley C., “*gnuplot 4.4: An interactive plotting program*”, Official gnuplot documentation, <http://sourceforge.net/projects/gnuplot>, 2010.