

ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ

Σχολή Μηχανολόγων Μηχανικών

Τομέας Πυρηνικής Τεχνολογίας

**ΜΕΛΕΤΗ ΣΧΕΔΙΑΣΗ ΚΑΙ ΚΑΤΑΣΚΕΥΗ ΚΑΤΕΥΘΥΝΤΗ
ΔΕΣΜΗΣ ΑΚΤΙΝΩΝ-Χ ΓΙΑ ΔΙΑΤΑΞΗ ΧRF**

ΔΙΠΛΩΜΑΤΙΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ της

ΑΜΑΛΙΑΣ ΕΥΑΓΓΕΛΙΔΟΥ

Σπουδάστριας της Σχολής

Μηχανολόγων Μηχανικών ΕΜΠ

Επίβλεψη: Καθηγητής Μ. Ι. Αναγνωστάκης

ΑΘΗΝΑ 2024

Η παρούσα Διπλωματική Εργασία παρουσιάζει μία περιεκτική μελέτη βελτίωσης της διάταξης φθορισμού ακτίνων-Χ (XRF) του Εργαστηρίου Πυρηνικής Τεχνολογίας του Εθνικού Μετσόβιου Πολυτεχνείου (ΕΠΤ-ΕΜΠ). Ο κύριος στόχος της είναι η βελτίωση της απόδοσης της διάταξης και της επαναληψιμότητας των αναλύσεων. Η αύξηση της απόδοσης πραγματοποιείται μελετώντας τη χρήση ενός κατευθυντή δέσμης ως δευτερεύον οπτικό μέσο, αλλά και άλλες παραμέτρους της διάταξης, όπως η απόσταση δείγματος-ανιχνευτή, η γωνία τοποθέτησης του δείγματος, το υλικό του κατευθυντή δέσμης και το περιβάλλον μέσο της διάταξης. Παρουσιάζεται επίσης μία πρώτη μελέτη της κατώτατης ανιχνευτικής ικανότητας της βελτιωμένης διάταξης. Αυτό γίνεται με δείγμα πολύ χαμηλής συγκέντρωσης σιδήρου (Fe). Η όλη μελέτη της επίδρασης των παραμέτρων που βελτιστοποιούνται γίνεται υπολογιστικά με τη μέθοδο προσομοίωσης Monte Carlo και ειδικότερα με τον κώδικα PENELOPE. Μετά την ολοκλήρωση της διαδικασίας βελτιστοποίησης σχεδιάστηκε και κατασκευάστηκε με τρισδιάστατη εκτύπωση κατευθυντής δέσμης και η όλη διάταξη ελέγχθηκε πειραματικά ως προς την αποτελεσματικότητά της.

Η ΔΕ είναι οργανωμένη σε 9 κεφάλαια. Το 1^ο κεφάλαιο περιέχει μία σύντομη εισαγωγή στη ΔΕ.

Στο 2^ο κεφάλαιο παρουσιάζεται η θεωρητική βάση για τη φύση και τις ιδιότητες των ακτίνων-Χ. Παρουσιάζεται η μορφή του ενεργειακού φάσματος, οι αλληλεπιδράσεις τους με την ύλη, και ορισμένες βασικές εφαρμογές της μεθόδου φθορισμού ακτίνων-Χ (XRF).

Στο 3^ο κεφάλαιο παρουσιάζεται ο φθορισμός ακτίνων-Χ. Αναλύεται ως μέθοδος, παρατίθενται υποκατηγορίες των πειραματικών εφαρμογών της και οι συνιστώσες της αντίστοιχης διάταξης: η πηγή της διεγείρουσας ακτινοβολίας, τα πρωτεύοντα οπτικά μέσα, η συγκράτηση και τοποθέτηση του δείγματος, τα δευτερεύοντα οπτικά μέσα και οι ανιχνευτές. Στη συνέχεια παρουσιάζονται δύο βασικές συνιστώσες της διάταξης XRF του ΕΠΤ-ΕΜΠ.

Στο 4^ο κεφάλαιο παρουσιάζονται τα οπτικά μέσα ακτίνων-Χ, ως εργαλείο οδήγησής τους σε πειράματα και εφαρμογές. Παρατίθενται τα είδη τους, ερμηνεύεται η σκέδαση, η διάθλαση και η ανάκλαση ακτίνων-Χ, και στη συνέχεια εξηγείται η χρήση δευτερευόντων οπτικών μέσων για τη βελτίωση του λόγου peak-to-background (p-t-b). Τέλος, παρατίθενται άλλες παράμετροι που μειώνουν το υπόστρωμα στη φασματοσκοπία φθορισμού ακτίνων-Χ.

Στο 5^ο κεφάλαιο παρουσιάζεται ο κώδικας PENELOPE, βασικό εργαλείο της ΔΕ για την προσομοίωση των αλληλεπιδράσεων σωματιδίων-φωτονίων με την ύλη.

Παρουσιάζονται τα προγράμματα και η δομή του κώδικα PENELOPE. Εξηγείται η χρήση του κυρίως προγράμματος PENMAIN, τμήματος του κώδικα PENELOPE, τα αρχεία εισόδου filename.in, filename.geo, filename.mat και οι εικονικοί ανιχνευτές.

Το 6^ο κεφάλαιο εστιάζει στη μέθοδο προσομοίωσης φασματοσκοπίας φθορισμού ακτίνων-Χ που γίνεται στο πλαίσιο της ΔΕ. Αρχικά, γίνεται μία εισαγωγή στη μεθοδολογία, και στη συνέχεια αναλύεται η προσομοίωση: η γεωμετρία της διάταξης του ΕΠΤ-ΕΜΠ και οι πιθανές βελτιώσεις της. Παρουσιάζεται η ανάγκη για δευτερεύον οπτικό μέσο μεταξύ του δείγματος και του ανιχνευτή της διάταξης.

Στο 7^ο κεφάλαιο, ξεδιπλώνονται τα αποτελέσματα των προσομοιώσεων για διαφορετικού τύπου κατευθυντές και γεωμετρίες της εργαστηριακής διάταξης. Η διερεύνηση χωρίζεται σε τέσσερα τμήματα. Το πρώτο τμήμα περιλαμβάνει προσομοιώσεις με δύο διαφορετικές γεωμετρίες κατευθυντή και για διαφορετικές γωνίες τοποθέτησης δείγματος. Το δεύτερο τμήμα περιλαμβάνει προσομοιώσεις με τον καλύτερο κατευθυντή που προέκυψε από την προηγούμενη διερεύνηση και με μεταβολή του περιβάλλοντος της διάταξης: από αέρα, σε ήλιο και σε κενό. Το τρίτο τμήμα περιλαμβάνει προσομοιώσεις με διαφορετικά υλικά κατευθυντή. Τα τμήματα αυτά αφορούν διατάξεις με 5 διαφορετικές θέσεις ανιχνευτή, από μακριά έως πολύ κοντά στο δείγμα. Το τέταρτο και τελευταίο τμήμα, ρίχνει μία πρώτη ματιά στην κατώτατη ανιχνευτική ικανότητα της διάταξης με τον ανιχνευτή σε μία κοντινή θέση, για κωνικούς κατευθυντές ίδιου σχήματος από αλουμίνιο και τεφλόν. Ακολούθως, παρουσιάζεται ο κατευθυντής που σχεδιάστηκε στα πλαίσια της ΔΕ και οι λεπτομέρειες των αρχείων εισόδου των προσομοιώσεων.

Στο 8^ο κεφάλαιο παρουσιάζονται τα πειράματα που έγιναν στην εργαστηριακή διάταξη του ΕΠΤ-ΕΜΠ με χρήση του κατευθυντή δέσμης που σχεδιάστηκε και κατασκευάστηκε. Τα αποτελέσματα των αναλύσεων που έγιναν συγκρίνονται και επικυρώνουν εκείνα των προσομοιώσεων.

Στο 9^ο κεφάλαιο συνοψίζεται η ΔΕ, συμπυκνώνονται τα συμπεράσματα που προέκυψαν από τις προσομοιώσεις και το πείραμα και προτείνονται μελλοντικές οδοί για περαιτέρω εμπάθυνση στη βελτίωση της φασματοσκοπίας φθορισμού ακτίνων-Χ του ΕΠΤ-ΕΜΠ με χρήση κατευθυντή ως δευτερεύον οπτικό μέσο.

Η ΔΕ συνεισφέρει στη δημιουργία γνώσης σχετικά με τη βελτιστοποίηση εργαστηριακών διατάξεων XRF, μέσω της μελέτης και του σχεδιασμού κατευθυντών δέσμης και διαφορετικών γεωμετρικών διατάξεων αλλά και της εφαρμογής της τεχνικής προσομοίωσης Monte Carlo. Τα ευρήματα χρησιμεύουν ως βάση για τη βελτίωση της απόδοσης και της ευαισθησίας των μεθόδων XRF, ενισχύοντας τελικά τις αναλυτικές τους ικανότητες για ένα ευρύ φάσμα επιστημονικών και βιομηχανικών εφαρμογών.

Καθοριστικό ρόλο στην εκπόνηση της εργασίας είχαν, ο επιβλέπων Καθηγητής Μάριος Αναγνωστάκης, ο Επίκ. Καθηγητής Νικόλαος Π. Πετρόπουλος, η Λέκτορας Παναγιώτα Ρούνη και οι μεταπτυχιακοί/-ές φοιτητές/-ριες Ιάσων Μήτσιος, Κωνσταντίνος Κανούτος και Αναστασία Μηλιώνη που εκπονούν τις Διδακτορικές τους Διατριβές στον τομέα. Η βοήθειά τους υπήρξε πολλές φορές κινητήρια δύναμη στην εκπόνηση της ΔΕ και τους ευχαριστώ πολύ.

ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΑ //

1. ΚΕΦΑΛΑΙΟ // Εισαγωγή	8
2. ΚΕΦΑΛΑΙΟ // Ακτίνες-X:	10
2.1. Φύση και παραγωγή ακτίνων-X	10
2.2. Ιδιότητες ακτίνων-X	11
2.3. Ενεργειακό φάσμα ακτίνων-X	12
2.3.1. Ακτινοβολία πέδησης	13
2.3.2. Χαρακτηριστική ακτινοβολία	13
2.4. Αλληλεπιδράσεις φωτονίων με την ύλη	15
2.4.1. Φωτοηλεκτρικό φαινόμενο	15
2.4.2. Ελαστική σκέδαση	16
2.4.3. Μη ελαστική σκέδαση	16
2.4.4. Δίδυμη γένεση	17
2.4.5. Εξασθένιση στην ύλη	17
2.5. Εφαρμογές του φθορισμού των ακτίνων-X	18
3. ΚΕΦΑΛΑΙΟ // Φθορισμός ακτίνων-X (X-Ray Fluorescence):	19
3.1. Φθορισμός ακτίνων-X (X-Ray Fluorescence, <i>XRF</i>)	19
3.2. Πειραματικές μέθοδοι φθορισμού ακτίνων-X	21
3.2.1. Η πηγή της διεγείρουσας ακτινοβολίας	22
3.2.2. Πρωτεύοντα οπτικά μέσα	23
3.2.3. Συγκράτηση και τοποθέτηση του δείγματος	23
3.2.4. Δευτερεύοντα οπτικά μέσα	23
3.2.5. Ανιχνευτής	24
3.3. Συνιστώσες της διάταξης <i>XRF</i> του εργαστηρίου ΕΠΤ-ΕΜΠ	25
3.3.1. Μηχανή παραγωγής ακτίνων-X	25
3.3.2. Ανιχνευτής Si-Li	26
4. ΚΕΦΑΛΑΙΟ // Οπτικά μέσα ακτίνων-X:	27
4.1. Οπτικά μέσα διατάξεων ακτίνων-X	27
4.1.1. Είδη οπτικών μέσων	27
4.1.2. Σκέδαση ακτίνων-X	28
4.1.3. Διάθλαση ακτίνων-X	29
4.1.4. Ανάκλαση ακτίνων-X	30
4.1.5. Δευτερεύοντα οπτικά μέσα	31
4.2. Άλλες τεχνικές βελτίωσης του λόγου p-t-b	31
4.2.1. Τάση και ρεύμα μηχανής ακτίνων-X	32
4.2.2. Χρόνος έκθεσης του δείγματος	32
4.2.3. Παράμετροι ανιχνευτών	33
4.2.4. Το είδος της μεθόδου φασματοσκοπίας	33
4.2.5. Χαρακτηριστικά του δείγματος	34
4.2.6. Πόλωση της ακτινοβολίας	34
4.2.7. Η εξασθένιση των ακτίνων-X στον αέρα	36
5. ΚΕΦΑΛΑΙΟ // Ο κώδικας <i>PENELOPE</i> για την προσομοίωση αλληλεπιδράσεων σωματιδίων-φωτονίων με την ύλη:	36
5.1. Γενική παρουσίαση του κώδικα <i>PENELOPE</i>	36
5.1.1. Προγράμματα Monte Carlo	36

5.1.2. Ο κώδικας <i>PENELOPE</i>	36
5.1.3. Η δομή του κώδικα <i>PENELOPE</i>	37
5.2. Χρήση του κυρίως προγράμματος <i>PENMAIN</i>	38
5.2.1. Αρχεία εισόδου: το αρχείο <i>filename.in</i>	38
5.2.2. Αρχεία εισόδου: το αρχείο <i>filename.geo</i>	39
5.2.3. Αρχεία εισόδου: τα αρχεία <i>.mat</i>	43
5.2.4. Εικονικοί ανιχνευτές	43
5.3. Πίνακες 5 ^ο κεφαλαίου	45
6. ΚΕΦΑΛΑΙΟ // Προσομοίωση διάταξης φθορισμού ακτίνων-X:	48
6.1. Μεθοδολογία βελτίωσης της διάταξης XRF του ΕΠΤ-ΕΜΠ	48
6.2. Η διάταξη XRF του ΕΠΤ-ΕΜΠ	49
6.2.1. Η γεωμετρία	50
6.2.2. Βελτιώσεις των παραμέτρων της διάταξης	50
6.3. Η ανάγκη για δευτερεύον οπτικό μέσο (κατευθυντή)	51
6.3.1. Μείωση των επιπτώσεων της σκέδασης στον αέρα.	51
6.3.2. Ο κατευθυντής που μελετήθηκε στην ΔΕ	52
6.4. Τα αρχεία εισόδου των προσομοιώσεων	53
6.4.1. Το αρχείο <i>.in</i>	53
6.4.2. Το αρχείο <i>.geo</i>	57
6.4.3. Τα αρχεία <i>.mat</i>	59
6.5. Πίνακες 6 ^ο κεφαλαίου	61
7. ΚΕΦΑΛΑΙΟ // Αποτελέσματα προσομοιώσεων της διάταξης XRF για διαφορετικού τύπου κατευθυντές και γεωμετρίες:	77
7.1. Εισαγωγικές σημειώσεις – υπολογισμός των λόγων <i>peak-to-background</i>	77
7.2. Διερεύνηση πρώτη: σχήμα κατευθυντή, κλίση δείγματος	78
7.2.1. Συγκριτική ανάλυση των αποτελεσμάτων των προσομοιώσεων με διαφορετικές γεωμετρίες κατευθυντή και γωνίες δείγματος	105
7.3. Διερεύνηση δεύτερη: περιβάλλον He, κενού	107
7.3.1. Συγκριτική ανάλυση αποτελεσμάτων σε διαφορετικά περιβάλλοντα	120
7.4. Διερεύνηση τρίτη: υλικό κατευθυντή	121
7.4.1. Συγκριτική ανάλυση αποτελεσμάτων των προσομοιώσεων με διαφορετικά υλικά κατευθυντή	128
7.5. Διερεύνηση τέταρτη: ανιχνευσιμότητα υλικού δείγματος	129
7.6. Πίνακες 7 ^ο κεφαλαίου	135
8. ΚΕΦΑΛΑΙΟ // Κατασκευή μοντέλου κατευθυντή και πειραματική δοκιμή στη διάταξη XRF του ΕΠΤ-ΕΜΠ	136
8.1. Κατασκευή μοντέλου κατευθυντή	136
8.2. Πειραματική διαδικασία διερεύνησης της αποτελεσματικότητας του κατευθυντή δέσμης	137
8.3. Σύγκριση των αποτελεσμάτων των διαφόρων σεναρίων και συμπεράσματα	142
9. ΚΕΦΑΛΑΙΟ // Επίλογος	146
9.1. Σύνοψη και συμπεράσματα	146
9.2. Από τη βελτίωση στη βελτιστοποίηση	149
ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ //	151
ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ // Α. Χαρακτηριστικές ενέργειες στοιχείων	154

Η φασματοσκοπία φθορισμού ακτίνων-X (*X-ray fluorescence, XRF*) είναι μία τεχνική που χρησιμοποιείται για τον προσδιορισμό της ατομικής σύστασης ενός ευρέος φάσματος υλικών. Οι διατάξεις μέσω των οποίων υλοποιείται ονομάζονται φασματόμετρα ακτίνων-X και χρησιμοποιούνται σε διάφορους τομείς όπως – μεταξύ άλλων – η επιστήμη των υλικών, η επιστήμες μελέτης του περιβάλλοντος, η γεωλογία, η βιομηχανία και η συντήρηση έργων τέχνης. Η απόδοση ενός φασματόμετρου ακτίνων-X εξαρτάται από διάφορους παράγοντες, συμπεριλαμβανομένου του σχεδιασμού του, της γεωμετρίας της διάταξης δείγματος-ανιχνευτή, των χαρακτηριστικών της πηγής ακτίνων-X και του ανιχνευτή. Μία συνιστώσα-κλειδί της διάταξης είναι ο κατευθυντής δέσμης, που χρησιμοποιείται για να φιλτράρει ακτίνες-X προερχόμενες από σημεία που δεν εξυπηρετούν την ανάλυση, ώστε να μειωθεί ο θόρυβος στο φάσμα που συλλέγεται. Η επιλογή του σχεδιασμού ενός κατευθυντή έχει σημαντικό αντίκτυπο στην ευαισθησία και στην ακρίβεια μιας διάταξης XRF, καθιστώντας τη βελτιστοποίησή του σημαντικό τμήμα έρευνας.

Η παρούσα ΔΕ, εστιάζει στη βελτίωση μιας διάταξης που είναι εγκατεστημένη και λειτουργεί στο Εργαστήριο Πυρηνικής Τεχνολογίας του Εθνικού Μετσόβιου Πολυτεχνείου (ΕΠΤ-ΕΜΠ), όσον αφορά στο συνεχές υπόστρωμα και τα επίπεδα ανίχνευσης διαφόρων ιχνοστοιχείων. Συγκεκριμένα, μελετάται ο λόγος κορυφής-προς-υπόστρωμα (*peak-to-background, p-t-b*) για διάφορες γεωμετρίες κατευθυντών, και μελετάται η επίδραση των διάφορων γεωμετρικών χαρακτηριστικών της διάταξης, συμπεριλαμβανομένης της απόστασης δείγματος-ανιχνευτή και της γωνίας τοποθέτησης του δείγματος. Για το σκοπό αυτό χρησιμοποιείται η τεχνική προσομοίωσης Monte Carlo με εργαλείο τον κώδικα *PENELOPE*, για τη μοντελοποίηση της απόδοσης διαφορετικών σχεδιασμών κατευθυντών, προκειμένου να αναγνωριστεί η επίδραση των διάφορων γεωμετρικών παραμέτρων της διάταξης στους λόγους p-t-b.

Οι προσομοιώσεις Monte Carlo είναι ένα ισχυρό εργαλείο στη μοντελοποίηση σύνθετων φυσικών συστημάτων και μπορούν να φανούν πολύ χρήσιμες σε περιπτώσεις όπου αναλυτικές λύσεις είναι δύσκολο έως αδύνατο να βρεθούν. Στις προσομοιώσεις της ΔΕ χρησιμοποιείται ο κώδικας *PENELOPE*, ένας γενικής χρήσης κώδικας Monte Carlo για την προσομοίωση της μεταφοράς συζευγμένων ηλεκτρονίων-φωτονίων σε τυχαία υλικά. Η διάταξη XRF μοντελοποιείται χρησιμοποιώντας λεπτομερείς τρισδιάστατες

γεωμετρίες των συνιστωσών της και προσομοιώνονται οι αλληλεπιδράσεις μεταξύ ακτίνων-X και των υλικών των διαφόρων συνιστωσών της διάταξης, καθώς και η διάδοση και ανίχνευση των εκπεμπόμενων από τον ανιχνευτή της διάταξης ακτίνων-X.

Η ολοκλήρωση των προσομοιώσεων οδηγεί σε σχεδιασμό κωνικού κατευθυντή που βελτιώνει σημαντικά το λόγο peak-to-background και γίνεται μία πρώτη προσπάθεια διερεύνησης της κατώτατης ανιχνευτικής του ικανότητας της διάταξης, για χαμηλή συγκέντρωση σιδήρου σε δείγμα. Η κατασκευή του κατευθυντή με την τεχνική της τρισδιάστατης εκτύπωσης επέτρεψε την πειραματική δοκιμή στην διάταξη XRF του εργαστηρίου ΕΠΤ-ΕΜΠ, για την επικύρωση των αποτελεσμάτων των προσομοιώσεων.

Συνοπτικά, η παρούσα ΔΕ παρουσιάζει μια ολοκληρωμένη μελέτη της βελτίωσης ενός φασματόμετρου XRF, με επίκεντρο τη βελτίωση των λόγων κορυφή-προς-υπόστρωμα, για διάφορες γεωμετρίες κατευθυντών δέσμης και τη μελέτη της επίδρασης των γεωμετρικών χαρακτηριστικών της διάταξης στα επίπεδα ανίχνευσης και άλλα χαρακτηριστικά της διάταξης.

2.1. Φύση και παραγωγή ακτίνων-X

Οι ακτίνες-X ανήκουν στο φάσμα της μη ορατής ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας, είναι δηλαδή ηλεκτρομαγνητικά κύματα τα οποία φέρουν ενέργεια μεγαλύτερη από αυτήν του φωτός.

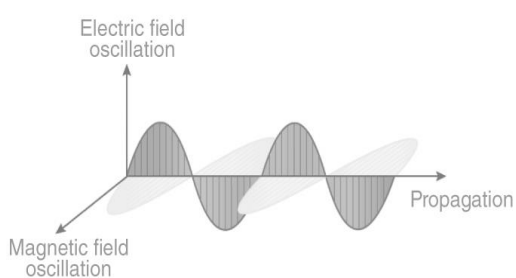
Τα ηλεκτρομαγνητικά (η/μ) κύματα είναι συγχρονισμένες, κάθετες μεταξύ τους περιοδικές ταλαντώσεις ηλεκτρικού και μαγνητικού πεδίου. Ανάλογα με την ένταση και τη συχνότητα της ταλάντωσής τους, διαφοροποιούνται στην κατάταξή τους εντός του ηλεκτρομαγνητικού φάσματος, ονομάζονται διαφορετικά, έχουν διαφορετικές αιτίες παραγωγής και διαφορετικές αλληλεπιδράσεις με την ύλη. Στο κενό, όλα τα η/μ κύματα ταξιδεύουν με την ταχύτητα του φωτός, δηλαδή 299,792,498 m/s. Σε ομοιογενή και ισότροπα μέσα, οι ταλαντώσεις των δύο πεδίων, εκτός από κάθετες μεταξύ τους, είναι και κάθετες στην διεύθυνση διάδοσης της ενέργειας, σχηματίζοντας εγκάρσια κύματα. Το μέτωπο διάδοσης των ηλεκτρομαγνητικών κυμάτων που εκπέμπονται από μια σημειακή πηγή, στην αφετηρία του είναι σφαιρικό. Κατά σειρά αυξανόμενης συχνότητας και μειούμενου μήκους κύματος, τα η/μ κύματα κατατάσσονται σε: ραδιοκύματα, μικροκύματα, υπέρυθη ακτινοβολία, ορατό φως, υπεριώδη ακτινοβολία, ακτίνες-X και ακτίνες γ (1).

Οι ακτίνες-X οφείλουν την ονομασία τους στον πρώτο άνθρωπο που πραγματοποίησε επιστημονική δημοσίευση για αυτές – και στον οποίο χάρισαν το πρώτο βραβείο Nobel, το 1901 – τον Wilhelm Conrad Röntgen (1845-1923). Ο Röntgen είχε παρατηρήσει, κατά τη διάρκεια ενός πειράματος με ηλεκτρικές εκκενώσεις, ένα είδος ακτίνων που διαπερνούσε περισσότερο υλικά απ' ό τι το φως, επιδρούσε σε φωτοευαίσθητο φιλμ, ήταν όμως άορατο, και απέδωσε τη μυστηριώδη τότε φύση της ακτινοβολίας αυτής με το όνομα του αγνώστου “X”. Στη συνέχεια, στο πλαίσιο ενός νέου πειράματος, πραγματοποίησε την πρώτη “ακτινογραφία” χεριού, δημιουργώντας τη βάση για την ακτινοδιαγνωστική που γνωρίζουμε σήμερα (2).



Εικόνα 2.1: Εκτύπωση της πρώτης «ιατρικής» ακτινογραφίας του χεριού της Anna Bertha Ludwig (3).

Οι γνωστές μας πλέον ακτίνες-Χ, παράγονται όταν ηλεκτρόνια αλληλεπιδρούν με την ύλη, οπότε λόγω διαφορετικών αλληλεπιδράσεων, μπορούν να παραχθούν σε συνεχές ενεργειακό φάσμα ή με συγκεκριμένες διακριτές ενέργειες. Η πρώτη περίπτωση – γνωστή ως ακτινοβολία πέδησης – προκύπτει όταν “ελεύθερα” ηλεκτρόνια επιβραδύνονται από το ηλεκτρικό πεδίο πυρήνων ατόμων και η ενέργεια που χάνουν εκπέμπεται ως φωτόνιο, το οποίο κατά συνέπεια δεν έχει συγκεκριμένη ενέργεια. Η δεύτερη περίπτωση – λεγόμενη και χαρακτηριστική ακτινοβολία – προκύπτει όταν “ελεύθερα” ηλεκτρόνια προκαλούν διεγέρσεις και ιονισμούς ατόμων, τα οποία στη συνέχεια αποδιηγείρονται, εκπέμποντας φωτόνια καθορισμένων από το υλικό ενεργειών (4).



Σχήμα 2.2: Σχηματική απεικόνιση κατευθύνσεων διάδοσης ηλεκτρομαγνητικού κύματος (propagation), ηλεκτρικού πεδίου (electric field oscillation) και μαγνητικού πεδίου (magnetic field oscillation) (5).

2.2. Ιδιότητες ακτίνων-Χ

Οι ακτίνες-Χ ανήκουν στο τμήμα του ηλεκτρομαγνητικού φάσματος που έχει μήκος κύματος 10^{-9} έως 10^{-12} m και συχνότητα ταλάντωσης 3×10^{16} έως 3×10^{19} Hz. Να σημειωθεί ότι, κατηγοριοποιούμενες με βάση την ενέργειά τους, ταυτίζονται εν μέρει με τις ακτίνες-γ και άρα μοιράζονται κοινό τμήμα στο ηλεκτρομαγνητικό φάσμα. Διαφέρουν

όμως στον τρόπο δημιουργίας τους, και γι' αυτό ονομάζονται διαφορετικά. Συγκεκριμένα, ενώ οι ακτίνες-Χ παράγονται από αλληλεπιδράσεις ηλεκτρονίων με την ύλη, οι ακτίνες-γ παράγονται από την αποδιέγερση ραδιενεργών πυρήνων. Τα χαρακτηριστικά μεγέθη κάθε ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας (συχνότητα, μήκος κύματος, ενέργεια) συνδέονται με βάση τη μαθηματική σχέση:

$$c = \lambda * \nu \leftrightarrow E = h * \nu \quad \{2.1\}$$

όπου:

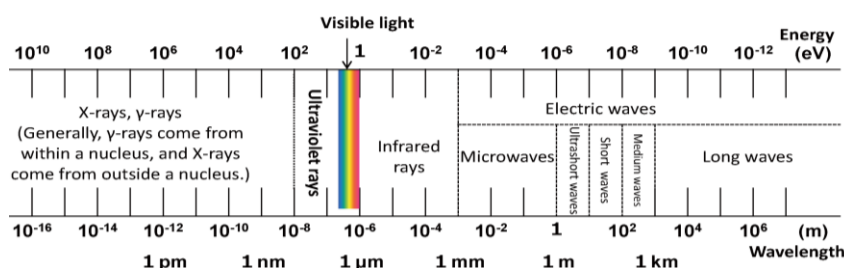
c η ταχύτητα του φωτός στο κενό ίση με 299,792,498 m/s,

h η σταθερά του Planck ίση με 6.626068 Js,

λ (m) το μήκος κύματος της ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας,

ν (Hz) η συχνότητα της ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας,

E (J) η ενέργεια της ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας.



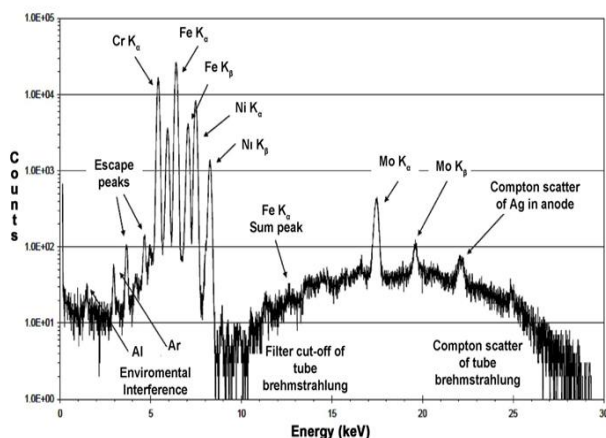
Σχήμα 2.3: Κατηγορίες ηλεκτρομαγνητικών κυμάτων (6).

Συνοπτικά, ακολουθούν μερικές ιδιότητες των ακτίνων-Χ (7):

- Είναι αόρατες για το ανθρώπινο μάτι.
- Είναι ηλεκτρικά ουδέτερες. Δεν μπορούν να επιταχυνθούν ή να αλλάξουν κατεύθυνση από ένα ηλεκτρικό ή μαγνητικό πεδίο.
- Δεν έχουν μάζα.
- Δεν εστιάζονται με οπτικά μέσα με τον ίδιο τρόπο που εστιάζεται το ορατό φως.
- Μπορούν να παράξουν δευτερογενείς ακτίνες-Χ

2.3. Ενεργειακό φάσμα ακτίνων-Χ

Όπως προαναφέρθηκε, οι ακτίνες-Χ παράγονται από διάφορες αιτίες σε συνεχές ενεργειακό φάσμα (ακτινοβολία πέδησης) ή με συγκεκριμένες διακριτές ενέργειες (χαρακτηριστική ακτινοβολία).



Σχήμα 2.4: Φάσμα φθορισμού ακτίνων-Χ από ανάλυση χάλυβα-316. Διακρίνεται η ακτινοβολία πέδησης και χαρακτηριστικές ενέργειες (8).

Στο φάσμα φθορισμού ακτίνων-Χ εμφανίζονται μία σειρά από φωτοκορυφές πάνω στο συνεχές υπόστρωμα που αντιστοιχούν σε διάφορα στοιχεία.

2.3.1. Ακτινοβολία πέδησης

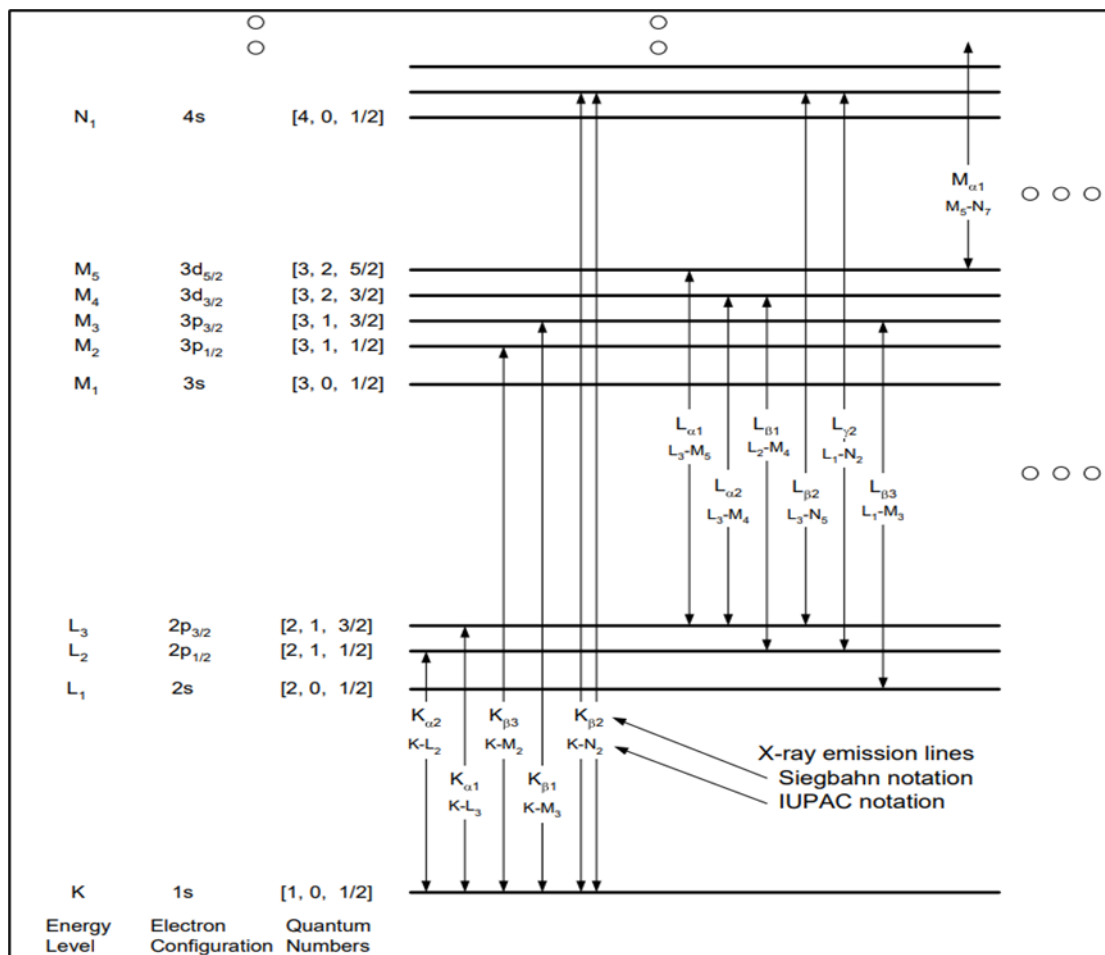
Η ακτινοβολία πέδησης (Bremsstrahlung radiation ή “λευκή ακτινοβολία”) προκύπτει από την αλληλεπίδραση ηλεκτρονίων με πυρήνες του ατόμου. Στην είσοδο τους στο ηλεκτρικό πεδίο του πυρήνα, αυτά αλλάζουν κατεύθυνση και επιβραδύνονται λόγω της ηλεκτρικής δύναμης που τους ασκείται, χάνουν κινητική ενέργεια, η οποία εκπέμπεται υπό μορφή ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας (φωτόνια). Σύμφωνα με τα παραπάνω, η ενέργεια της ακτινοβολίας πέδησης θα έχει εύρος από μηδενική ενέργεια έως την αρχική ενέργεια των ηλεκτρονίων που αλληλεπιδρούν με τους πυρήνες.

2.3.2. Χαρακτηριστική ακτινοβολία

Η χαρακτηριστική ακτινοβολία προκύπτει όταν “ελεύθερα” ηλεκτρόνια προκαλούν διεγέρσεις και ιονισμούς ατόμων, τα οποία στη συνέχεια αποδιηγείρονται και αποϊονίζονται εκπέμποντας φωτόνια καθορισμένων από το υλικό ενεργειών. Πιο συγκεκριμένα, ένα άτομο βρίσκεται σε διεγερμένη κατάσταση όταν κάποιο ηλεκτρόνιο μετακινηθεί από μία στιβάδα σε άλλη χαμηλότερης ενέργειας, και αποδιηγείται αυθόρμητα εκπέμποντας σε μορφή φωτονίου τη διαφορά ενέργειας των δύο καταστάσεων. Ιονισμένο άτομο είναι εκείνο που έχει λιγότερα ηλεκτρόνια από εκείνα της θεμελιώδους του κατάστασης, και όταν κάποιο άλλο ηλεκτρόνιό του καλύψει την κενή θέση, πάλι εκπέμπεται φωτόνιο ενέργειας ίσης με τη διαφορά των δύο καταστάσεων του ηλεκτρονίου που “μετακινήθηκε”. Η χαρακτηριστική ακτινοβολία επομένως, αφορά την εκπομπή φωτονίου λόγω μετακίνησης κάποιου ηλεκτρονίου του ατόμου από μία στιβάδα (K, L, M,...) σε μία άλλη, με τάση προς την επαναφορά στη θεμελιώδη κατάσταση.

Η εκπομπή ηλεκτρομαγνητικής ακτινοβολίας (συμπεριλαμβανόμενης της ορατής) από ένα υλικό που έχει απορροφήσει φως ή άλλη ηλεκτρομαγνητική ακτινοβολία ονομάζεται και φθορισμός. Οι χαρακτηριστικές ακτίνες-*X* που αξιοποιούνται στις μεθόδους φθορισμού προκύπτουν, όπως ήδη αναφέρθηκε, από μεταβάσεις ηλεκτρονίων μεταξύ των ατομικών στιβάδων. Το διάγραμμα του σχήματος 2.5 απεικονίζει την ονοματολογία των ακτίνων-*X*, ανάλογα με την ενεργειακή διαδρομή που θα ακολουθήσει ένα ηλεκτρόνιο. Μια ακτίνα *X* “*K*” προκύπτει από μια μετάβαση προς τη στιβάδα *K* από μία εξωτερική στιβάδα κ.ο.κ. Για παράδειγμα, μια ακτίνα *X* “*K_{α1}*” προκύπτει όταν υπάρχει μια κενή θέση στην στιβάδα *K* και ένα ηλεκτρόνιο πέφτει από την στιβάδα *L₃* για να το γεμίσει. Το άτομο τότε εκπέμπει μια ακτίνα *X* με ενέργεια που αντιστοιχεί στη διαφορά:

$$E_{xray} = E_K - E_{L3} \quad \{2.2\}$$



Σχήμα 2.5: Ονοματολογία ακτίνων-*X* ανάλογα με την ενεργειακή διαδρομή που θα ακολουθήσει ένα ηλεκτρόνιο (9).

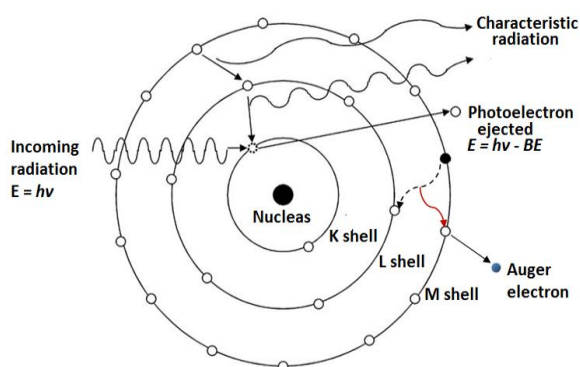
Γενικά, όταν ένα ηλεκτρόνιο μεταβαίνει από ένα επίπεδο με ενέργεια E_i σε ένα άλλο με ενέργεια E_j , η εκπεμπόμενη ακτίνα-*X* έχει ενέργεια ίση με $E_i - E_j$.

Επειδή κάθε στοιχείο του περιοδικού συστήματος έχει ένα μοναδικό συνδυασμό επιπέδων ατομικής ενέργειας, εκπέμπει και ένα μοναδικό σύνολο ακτίνων-Χ που είναι χαρακτηριστικές αυτού του στοιχείου, και μπορούν να χρησιμοποιηθούν για την ταυτοποίησή του (βλ. Παράρτημα 1: Χαρακτηριστικές Ενέργειες Στοιχείων).

2.4. Αλληλεπιδράσεις φωτονίων με την ύλη

2.4.1 Φωτοηλεκτρικό φαινόμενο

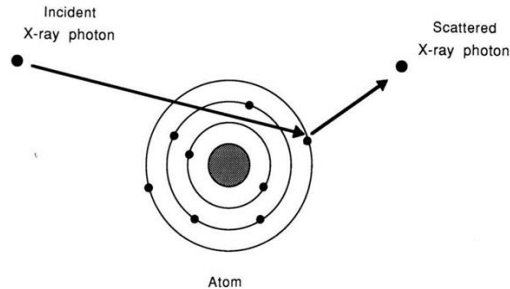
Η ανακάλυψη του φωτοηλεκτρικού φαινομένου αποτέλεσε σημείο καμπής στην πορεία της σύγχρονης μελέτης της φυσικής, λόγω των αιγισματικών ερωτημάτων που έθεσε σχετικά με τη φύση του φωτός – έχει συμπεριφορά σωματιδίων ή κυμάτων; Τέτοια ερωτήματα μελετήθηκαν από τον Άλμπερτ Αϊνστάιν που, εξηγώντας το συγκεκριμένο φαινόμενο, έθεσε τα θεμέλια της θεωρίας για τον κυματο-σωματιδιακό δυϊσμό του φωτός και της πρώιμης κβαντικής μηχανικής, για τα οποία του αποδόθηκε βραβείο Νόμπελ το 1921. Το φωτοηλεκτρικό φαινόμενο είναι μια κβαντική διεργασία κατά την οποία ηλεκτρικά φορτισμένα σωματίδια (ηλεκτρόνια) απελευθερώνονται από – ή μέσα σε – ένα υλικό, όταν αυτό απορροφά ηλεκτρομαγνητική ακτινοβολία. Ακτινοβολία υψηλών συχνοτήτων, όπως οι ακτίνες-Χ και οι ακτίνες-γ, μπορεί να απελευθερώσει ηλεκτρόνια ισχυρά συνδεδεμένα με τον πυρήνα του ατόμου. Αποτέλεσμα του φαινομένου είναι, ότι ένα κοντινό ηλεκτρόνιο υψηλότερης ενέργειας “μετακινείται” καλύπτοντας το κενό που δημιουργήθηκε και εκπέμποντας την ενέργεια που χάνει σε μορφή νέου φωτονίου. Αξίζει να σημειωθεί ότι εναλλακτικά μπορεί να εκπεμφθεί ακόμη ηλεκτρόνιο από το άτομο (φαινόμενο Auger) (10).



Σχήμα 2.6: Διάγραμμα που αναπαριστά το φωτοηλεκτρικό φαινόμενο σε σχήμα πλανητικού μοντέλου του ατόμου (8).

2.4.2 Ελαστική σκέδαση

Η ελαστική σκέδαση (σκέδαση Rayleigh) μπορεί να κατανοηθεί ως η αλληλεπίδραση ενός φωτονίου με το άτομο συνολικά. Συμβαίνει όταν το φωτόνιο δεν έχει επαρκή ενέργεια προκειμένου να ιονίσει μία ηλεκτρονιακή στιβάδα.

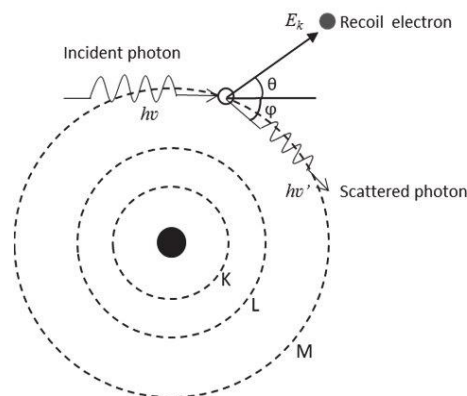


Σχήμα 2.7: Διάγραμμα που αναπαριστά την ελαστική σκέδαση σε σχήμα πλανητικού μοντέλου του ατόμου (11).

Το άτομο διεγείρεται και αποδιεγείρεται εκπέμποντας φωτόνιο, το οποίο έχει ίδια ενέργεια και διεύθυνση συνήθως ίδια ή παραπλήσια με αυτήν του αρχικού φωτονίου. Η αλληλεπίδραση αυτή προκαλείται κυρίως από φωτόνια ενέργειας κάτω των 10 keV και για το λόγο αυτό μπορεί να περιοριστεί σχετικά εύκολα με φίλτρα που απορροφούν χαμηλής ενέργειας φωτόνια.

2.4.3. Μη ελαστική σκέδαση

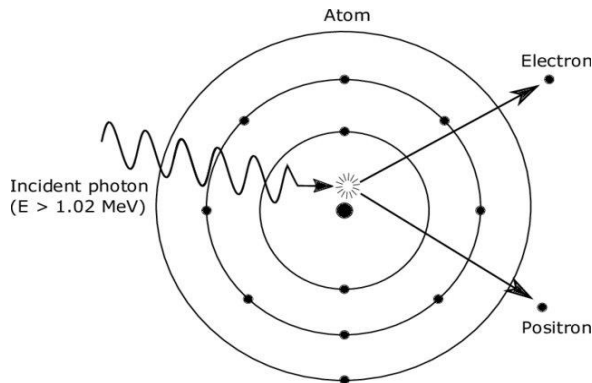
Η μη ελαστική σκέδαση – γνωστή και ως φαινόμενο Compton – προκύπτει όταν ένα φωτόνιο ακτίνων-X ή ακτίνων-γ που προσπίπτει σε ένα άτομο, αλληλεπιδρά με ένα ασθενώς συνδεδεμένο ηλεκτρόνιο. Ο Arthur Compton μελέτησε πειραματικά το πρόβλημα, κατάφερε να το εξηγήσει με τη βοήθεια της κβαντικής θεωρίας και τιμήθηκε με το βραβείο Νόμπελ το 1927. Το φωτόνιο χάνει μέρος της ενέργειάς του, το ηλεκτρόνιο απορροφά αυτή την ενέργεια σε μορφή κινητικής. Η συχνότητα (και κατά συνέπεια η ενέργεια) της σκεδαζόμενης ακτινοβολίας εξαρτάται μόνον από τη γωνία σκέδασης και το φαινόμενο διέπεται από την αρχή διατήρησης ενέργειας και ορμής.



Σχήμα 2.8: Διάγραμμα που αναπαριστά την μη-ελαστική σκέδαση σε σχήμα πλανητικού μοντέλου του ατόμου (12).

2.4.4. Δίδυμη γένεση

Η δίδυμη γένεση είναι ένα φαινόμενο παραγωγής ύλης και αντιύλης, και προκύπτει από την αλληλεπίδραση ενός φωτονίου σχετικά υψηλής ενέργειας με ισχυρό ηλεκτρικό πεδίο, όπως εκείνο κοντά στον πυρήνα ενός ατόμου. Όταν αυτό συμβαίνει, παράγονται ένα ηλεκτρόνιο και ένα ποζιτρόνιο (σωματίδιο και αντισωματίδιο). Προϋπόθεση για την παραγωγή του ζεύγους είναι η ενέργεια του φωτονίου να είναι τουλάχιστον ίση με την ολική μάζα ηρεμίας των δύο σωματιδίων (1,022 MeV) και οι συνθήκες να επιτρέπουν τη διατήρηση της ενέργειας και της ορμής, κάτι που προϋποθέτει την παρουσία ενός πυρήνα.



Σχήμα 2.9: Διάγραμμα που αναπαριστά την δίδυμη γένεση σε σχήμα πλανητικού μοντέλου του ατόμου (13).

2.4.5. Εξασθένιση των φωτονίων στην ύλη

Σύμφωνα με τα παραπάνω, όταν μία δέσμη ακτίνων-X διεισδύσει στην ύλη, λόγω των αλληλεπιδράσεων με αυτήν χάνει μέρος της ισχύος της – σε όρους πλήθους αρχικών φωτονίων, τα οποία αλληλεπιδρούν με το υλικό. Ο ρυθμός με τον οποίο η δέσμη χάνει ισχύ εξαρτάται από το είδος του υλικού, την απόσταση που διανύει μέσα σε αυτό και την αρχική ενέργεια των φωτονίων. Για μια παράλληλη δέσμη μονοενεργειακών φωτονίων ισχύει ο νόμος της εκθετικής εξασθένισης:

$$I(x) = I_0 * e^{-\mu x} \quad \{2.3\}$$

όπου:

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

I_0 : αρχικό πλήθος 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 και αναλύεται σε τέσσερις συνιστώσες, για τους τέσσερις μηχανισμούς εξασθένισης, δηλαδή το φωτοηλεκτρικό φαινόμενο (τ), τη σκέδαση Compton (σ), την ελαστική σκέδαση (σ_s) και τη δίδυμη γένεση (κ): $\mu = \tau + \sigma + \sigma_s + \kappa$.

2.5. Εφαρμογές του φθορισμού των ακτίνων-X

Όπως ήδη αναφέρθηκε, η διαδικασία κατά την οποία ένα υλικό έχει απορροφήσει ηλεκτρομαγνητική ακτινοβολία και στη συνέχεια εκπέμπει άλλη ηλεκτρομαγνητική ακτινοβολία ονομάζεται φθορισμός. Χρησιμοποιείται – μεταξύ άλλων – στις επιστήμες της ορυκτολογίας, της γεωλογίας, της αρχαιομετρίας, στην παραγωγή χημικών αισθητήρων, των βιολογικών ανιχνευτών, της σήμανσης φθορισμού, στις οθόνες φθορισμού κενού κ.α. Σε πολλές από αυτές τις επιστήμες χρησιμοποιείται ο φθορισμός με ακτίνες-X για τη μελέτη υλικών, την ταυτοποίηση και την ποσοτικοποίηση διαφόρων στοιχείων σε αυτά. Άλλες, χρησιμοποιούν τον φθορισμό με ορατό φως για την παραγωγή οπτικών σημάτων, είτε για αναγνώριση από το ανθρώπινο μάτι, είτε από μηχανή.

Η συγκεκριμένη ΔΕ ασχολείται με τη φασματοσκοπία φθορισμού ακτίνων-X (X-Ray Fluorescence – XRF). Ήτοι, τη διαδικασία κατά την οποία ένα δείγμα άγνωστης χημικής σύστασης διεγείρεται από δέσμη ακτίνων-X με συνέπεια την εκπομπή φάσματος ακτίνων-X, η μορφή του οποίου είναι το κλειδί για την ταυτοποίηση των στοιχείων από τα οποία αποτελείται το δείγμα (14), (15).

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 3 // Φθορισμός ακτίνων-X (X-Ray Fluorescence)

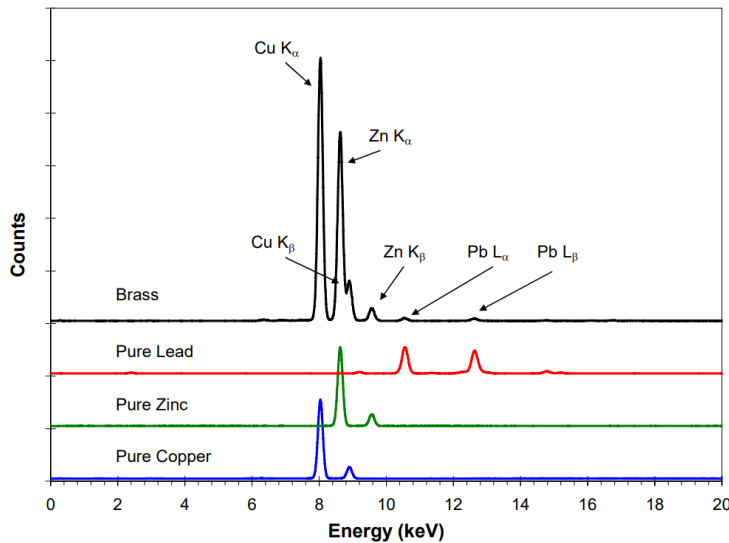
3.1 Φθορισμός ακτίνων-X (X-Ray Fluorescence, XRF)

Ορίζεται ως η εκπομπή χαρακτηριστικής, δευτερεύουσας, ή αλλιώς φθορίζουσας ακτινοβολίας-X, από υλικό που διεγέρθηκε από βομβαρδισμό ακτίνων-X ή ακτίνων-γ. Χρησιμοποιείται ευρέως στην ανάλυση υλικών. Όπως ήδη αναφέρθηκε, τα φωτόνια της διεγείρουσας ακτινοβολίας, διεγείρουν τα άτομα του υλικού-στόχου, δημιουργώντας κενό ηλεκτρονίων στις εσωτερικές τους στιβάδες. Τα ηλεκτρόνια των εξωτερικών τους στιβάδων τότε, μεταπίπτουν σε αυτό το κενό, εκπέμποντας την ενεργειακή διαφορά των δύο στιβάδων/καταστάσεων. Επειδή κάθε στοιχείο έχει στις στιβάδες του συγκεκριμένες τιμές ενέργειας, θα εκπέμπει συγκεκριμένα μοτίβα ενεργειών που ονομάζονται χαρακτηριστικές ακτίνες-X. Η ένταση των χαρακτηριστικών ακτίνων-X που εκπέμπονται από το στόχο αυξάνεται με τη συγκέντρωση του αντίστοιχου στοιχείου στο υλικό.

Οι τιμές ενέργειας των χαρακτηριστικών ακτίνων-X εξαρτώνται μόνο από τις ηλεκτρονιακές στιβάδες του ατόμου, άρα θα είναι πάντα οι ίδιες. Η ένταση των χαρακτηριστικών όμως, εξαρτάται πρωτίστως από τον αριθμό των διεγερμένων ατόμων στο ακτινοβολούμενο δείγμα, αλλά και από αρκετές άλλες παραμέτρους. Η πιθανότητα να ανιχνευθεί χαρακτηριστική ακτινοβολία που εκπέμπεται, εξαρτάται τόσο από το υλικό όσο και από την ενέργεια της διεγείρουσας πηγής. Συγκεκριμένα, η πιθανότητα να εκπέμψει χαρακτηριστική ακτινοβολία αυξάνεται εάν τα φωτόνια που προσπίπτουν στο άτομο έχουν ενέργεια κοντά στην ενεργειακή στάθμη της στιβάδας που θα διεγερθεί για την εκπομπή της χαρακτηριστικής του ακτινοβολία. Γι' αυτό το λόγο, όταν δεν είναι γνωστά τα στοιχεία που περιέχονται στο δείγμα που ακτινοβολείται, επιλέγονται πηγές που εκπέμπουν συνεχές φάσμα και όχι μονοενεργειακή ακτινοβολία. Επιπλέον, η πιθανότητα να ανιχνευθεί χαρακτηριστική ακτινοβολία εξαρτάται και από την ευαισθησία του ανιχνευτή, από την εξασθένιση μέσα στο δείγμα καθώς και από διάφορες άλλες παραμέτρους.

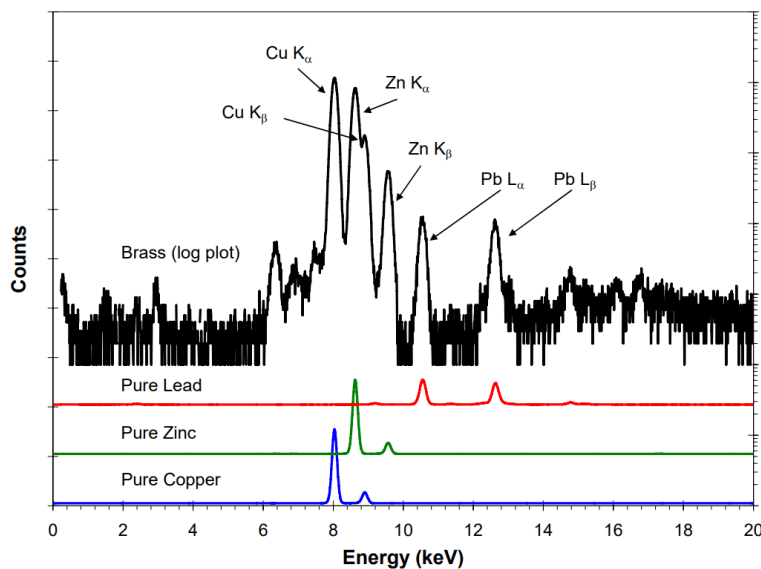
Τα παρακάτω διαγράμματα δείχνουν πώς ένα φάσμα ακτίνων-X που εκπέμπεται από ένα δείγμα, μπορεί να οδηγήσει στον προσδιορισμό των στοιχείων που βρίσκονται εντός του δείγματος. Η πρώτη εικόνα συγκρίνει τα διαγράμματα χαρακτηριστικών καθαρών υλικών (χαλκός Cu, ψευδάργυρος Zn, μόλυβδος Pb) με το διάγραμμα ενός δείγματος ορείχαλκου (κράμα Cu-Zn που μερικές φορές έχει Pb) που τα περιέχει σε

διάφορες συγκεντρώσεις. Οι κορυφές Cu, Zn είναι πολύ ευδιάκριτες, ενώ οι κορυφές Pb πιο αχνές, εντοπίζεται όμως με βεβαιότητα στο δείγμα.



Σχήμα 3.1: Ενεργειακό φάσμα (γεγονότα – ενέργεια σε keV) που ανιχνεύεται από δείγμα ορείχαλκου (9).

Στη συνέχεια φαίνεται το ίδιο διάγραμμα σε λογαριθμική κλίμακα, η οποία χρησιμοποιείται συχνά στην ανάλυση φασματοσκοπίας. Ενώ η γραμμική κλίμακα δείχνει καθαρά τα κυρίαρχα υλικά του δείγματος, η λογαριθμική αποκαλύπτει τις μικρότερες κορυφές και τις ιδιότητες του φάσματος που δεν φαίνονται καθαρά σε απλή γραμμική κλίμακα, όπως για παράδειγμα την ύπαρξη μολυβδου στο δείγμα. Σε κάποια σημεία του φάσματος παρατηρείται αλληλοεπικάλυψη κορυφών, στην αντιμετώπιση της οποίας αναφερόμαστε παρακάτω, ενώ φαίνεται και η συνύπαρξή τους με το συνεχές υπόστρωμα.



Σχήμα 3.2: Ενεργειακό φάσμα (γεγονότα – ενέργεια σε keV) από δείγμα ορείχαλκου, σε λογαριθμική κλίμακα (9).

Το ύψος των κορυφών του φάσματος σχετίζεται με τη συγκέντρωση του στοιχείου στο δείγμα, όχι όμως μονοσήμαντα. Εξαρτάται επίσης από τη μορφή και την ένταση του διεγείροντος φάσματος, από την απόδοση του ανιχνευτή, από τη γεωμετρία και τις υπόλοιπες συνιστώσες της διάταξης. Ορισμένες χαρακτηριστικές, όπως στο προηγούμενο παράδειγμα, οι ακτίνες K_{α} του ψευδάργυρου (Zn) αλληλεπιδρούν με τα άτομα του χαλκού Cu που υπάρχουν στο δείγμα και τα οδηγούν σε φθορισμό, ενισχύοντας με τον τρόπο αυτό τις κορυφές του χαλκού και εξασθενώντας εκείνες του ψευδάργυρου που εξέρχονται του δείγματος. Τέτοια φαινόμενα που εξαρτώνται από τη σύσταση του δείγματος ονομάζονται *matrix-effects* και ορισμένα λογισμικά ανάλυσης μπορούν να τα λάβουν υπόψη εισάγοντας κατάλληλους συντελεστές διόρθωσης.

Κατά την ανάλυση ενός φάσματος φθορισμού συνήθως ακολουθούνται τρία βασικά βήματα. Αρχικά προσδιορίζεται ο αριθμός των γεγονότων που καταγράφονται κάτω από τις φωτοκορυφές. Αυτό που μπορεί να περιλαμβάνει τον διαχωρισμό των κορυφών από το υπόστρωμα, τον υπολογισμό των γεγονότων που δεν ανιχνεύτηκαν και τον διαχωρισμό κορυφών που αλληλεπικαλύπτονται. Στη συνέχεια λαμβάνεται υπόψη η ευαισθησία του ανιχνευτή, το παράθυρό του, τα γεωμετρικά χαρακτηριστικά της διάταξης και το διεγείρον φάσμα. Τέλος, διορθώνονται τα *matrix-effects* εμπειρικά ή μέσω κατάλληλου λογισμικού (9).

3.2 Πειραματικές μέθοδοι φθορισμού ακτίνων-X

Τα βασικά προτερήματα των μεθόδων φθορισμού ακτίνων-X είναι η μεγάλη ακρίβεια που επιτυγχάνουν, αφού, λόγω του μεγάλου ρυθμού καταγραφής (*high count rate*) η αβεβαιότητα που επιτυγχάνεται είναι μικρή. Ως αποτέλεσμα, είναι δυνατός ο ταχύς προσδιορισμός στοιχείων από σχεδόν όλον τον περιοδικό πίνακα ($Z=14$ έως 92), με μεγάλη ευαισθησία και όρια ανίχνευσης στην περιοχή των ppm (16). Η επιφάνεια κάθε κορυφής χαρακτηριστικής ακτινοβολίας εξαρτάται από το πλήθος των ατόμων του υλικού στο δείγμα. Μετά από δεκαετίες εξέλιξης και βελτιστοποίησης, οι σημερινές διατάξεις φθορισμού ακτίνων-X (φασματόμετρα ακτίνων-X) χρησιμοποιούνται σε πολλές και διαφορετικές βιομηχανικές, και ερευνητικές εφαρμογές, οι οποίες αποσκοπούν στην ποιοτική και ποσοτική ανάλυση δειγμάτων.

Οι μέθοδοι φθορισμού ακτίνων-X διακρίνονται σε κατηγορίες, ανάλογα με το είδος της ακτινοβολίας που διεγείρει το υπό μελέτη δείγμα. Για φορτισμένα σωματίδια – συνήθως δέσμη σωματιδίων από επιταχυντή, η μέθοδος ονομάζεται *PIXE* (Particle

Induced X-ray Emission). Για ακτίνες-X, ονομάζεται *XRF* (X-Ray Fluorescence). Η μέθοδος *XRF* πάλι, χωρίζεται σε δύο κατηγορίες. Στη μέθοδο *EDXRF* (Energy Dispersive XRF), στην οποία γίνεται καταγραφή και ανάλυση της ενέργειας των χαρακτηριστικών ακτίνων-X, και στη μέθοδο *WDXRF* (Wavelength Dispersive XRF), στην οποία γίνεται καταγραφή και ανάλυση του μήκους κύματος των φθορίζουσών ακτινοβολιών.

Τα φασματόμετρα ακτίνων-X έχουν γενικά παρόμοιο σχεδιασμό. Περιλαμβάνουν την πηγή της διεγείρουσας ακτινοβολίας, πρωτεύοντα οπτικά στοιχεία, τη διάταξη συγκράτησης του δείγματος, δευτερεύοντα οπτικά στοιχεία, τον ανιχνευτή και το σύστημα εμφάνισης του φάσματος.

3.2.1. Η πηγή της διεγείρουσας ακτινοβολίας:

Η εκπομπή χαρακτηριστικής ακτινοβολίας-X επιτυγχάνεται μέσω διέγερσης με ακτινοβολία υψηλής ενέργειας, όπως ηλεκτρόνια, πρωτόνια, φωτόνια. Σε κάθε περίπτωση, η ενέργεια της διεγείρουσας ακτινοβολίας πρέπει να είναι μεγαλύτερη από την ενέργεια σύνδεσης των ηλεκτρονίων στο άτομο. Στις εργαστηριακές διατάξεις φασματοσκοπίας ακτίνων-X, η διέγερση συνήθως επιτυγχάνεται με σωλήνες ακτίνων-X. Για την επιτόπια ανάλυση δειγμάτων υπάρχουν και χρησιμοποιούνται και φορητά όργανα που φέρουν ραδιενεργές πηγές για τη διέγερση με ακτινοβολία-γ. Για περιπτώσεις που απαιτείται πολύ μεγάλης έντασης διεγείρουσα ακτινοβολία χρησιμοποιούνται επιταχυντές.

Οι σωλήνες ακτίνων-X, οι οποίοι χρησιμοποιούνται συνηθέστερα στη φασματοσκοπία ακτίνων-X λειτουργούν επιταχύνοντας ηλεκτρόνια που προσβάλουν και διεγείρουν την άνοδο της μηχανής, από την οποία εκπέμπεται χαρακτηριστική ακτινοβολία καθώς και ακτινοβολία πέδησης. Η άνοδος της μηχανής είναι κατασκευασμένη από ένα υλικό υψηλού Z, συνήθως βολφράμιο (W), μολυβδαίνιο (Mo), ρόδιο (Rh), χαλκός (Cu) ή χρώμιο (Cr). Το φάσμα διέγερσης πρέπει να περιλαμβάνει ενέργειες υψηλότερες των χαρακτηριστικών των υλικών που θα διεγείρει, συνεπώς για την αποτελεσματική διέγερση ποικιλίας στοιχείων, θα πρέπει να έχει ακτινοβολία πέδησης υψηλής ενέργειας. Αυτό ρυθμίζεται από τη διαφορά δυναμικού (Υψηλή Τάση) μεταξύ ανόδου και καθόδου-στόχου της μηχανής. Οι κορυφές του διεγείροντος φάσματος της μηχανής ανιχνεύονται στο φάσμα φθορισμού λόγω ελαστικής και μη-ελαστικής σκέδασης,, κάτι που πρέπει να λαμβάνεται υπόψη και να λαμβάνονται κατάλληλα μέτρα για τη μείωσή τους, επιλέγοντας κατάλληλα υλικά ανόδου, κατευθυντές δέσμης ή φίλτρα στην πηγή.

Οι σωλήνες ακτίνων-X παράγονται σε μεγάλη ποικιλία, ανάλογα με την ισχύ της ακτινοβολίας που μπορούν να παράγουν, τη γεωμετρία τους, τη θωράκισή τους κλπ.

3.2.2. Πρωτεύοντα οπτικά μέσα

Πολύ συνοπτικά, τα οπτικά μέσα σε μία διάταξη ακτίνων-Χ χρησιμοποιούνται για τη μεταβολή του φάσματος ή της γεωμετρίας της διεγείρουσας ακτινοβολίας. Η μεταβολή του φάσματος γίνεται με φίλτρα, δευτερεύοντες στόχους ή φίλτρα μονοχρωματικής ακτινοβολίας (monochromators), ενώ η μεταβολή του σχήματος της δέσμης και της κατεύθυνσης της ακτινοβολίας γίνεται με κατευθυντές δέσμης ή οπτικά στοιχεία ακτίνων-Χ. Ο όρος «πρωτεύον» ορίζει τη θέση ενός οπτικού μέσου στη διάταξη φασματοσκοπίας, μεταξύ της πηγής ακτίνων-Χ και του υπό ανάλυση δείγματος. Τα πρωτεύοντα οπτικά μέσα μπορεί να εξειδικεύσουν την μέθοδο ανάλυσης σε micro-XRF, στην οποία διερευνώνται μόνο μικρές περιοχές δείγματος, λόγω της εστίασης της διεγείρουσας ακτινοβολίας σε πολύ μικρή περιοχή. Λεπτομερέστερη ανάλυση της οπτικής των ακτίνων-Χ θα γίνει σε επόμενο κεφάλαιο.

3.2.3. Συγκράτηση και τοποθέτηση του δείγματος

Η τοποθέτηση του δείγματος πρέπει να είναι πάνω στη διεγείρουσα δέσμη. Στη φασματοσκοπία μεσαίων και μικρών δειγμάτων, αυτά συνήθως τοποθετούνται σε ένα δοχείο με τέτοιο τρόπο ώστε οι ακτίνες-Χ να μπορούν να προσβάλουν άμεσα την επιφάνεια του δείγματος. Για πολύ μεγάλα ή δείγματα που δεν μετακινούνται, χρησιμοποιούνται φορητές διατάξεις. Ειδικότερα, στην τεχνική micro-XRF, που η ακριβής θέση διέγερσης έχει σημασία, γίνεται μετακίνηση του δείγματος κατά τους άξονες x και y χειροκίνητα ή μηχανικά. Το δείγμα μπορεί να αναλυθεί σε διάφορες μορφές: υγρό, στερεό, κονιοποιημένο, ακόμη και ατμοποιημένο. Στην περίπτωση δείγματος με διαστρωματώσεις υλικών, επειδή οι κορυφές επηρεάζονται από το πάχος της κάθε στρώσης, για την ανάλυσή τους χρειάζεται περισσότερη πληροφορία σε σχέση με τη λεπτομερή διαμόρφωση του δείγματος.

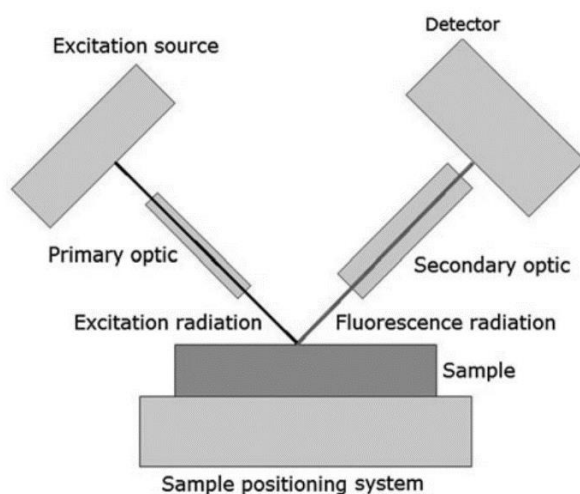
3.2.4. Δευτερεύοντα οπτικά μέσα

Τα δευτερεύοντα οπτικά μέσα είναι της ίδιας φύσεως με τα πρωτεύοντα, όμως διαφέρουν στο ότι τοποθετούνται στη διαδρομή των φωτονίων που εκπέμπονται από το δείγμα, συνήθως ανάμεσα στο δείγμα και τον ανιχνευτή. Είναι διατάξεις που μπορεί να γίνουν πολύ περίπλοκες. Όπως θα δούμε αναλυτικά στο κεφ. 4.1, τα μέσα αυτά είναι απαραίτητα για τη βελτίωση του φάσματος φθορισμού που συλλέγεται από τον ανιχνευτή, και επηρεάζουν σημαντικά το ρυθμό καταγραφής ακτίνων-Χ από αυτόν, τα αποτελέσματα της ανάλυσης του φάσματος, τη σχέση των κορυφών του φάσματος προς το υπόστρωμα και κατά συνέπεια τα επίπεδα ανίχνευσης των φωτοκορυφών.

3.2.5. Ανιχνευτής

Εν γένει, υπάρχει ποικιλία ανιχνευτών με διαφορετική αρχή ως προς την ανίχνευση των φωτονίων. Ορισμένοι απλώς ανιχνεύουν φωτόνια, ενώ άλλοι έχουν και την ικανότητα να προσδιορίζουν την ενέργειά τους. Ο απλούστερος ανιχνευτής ακτίνων- X είναι το φωτογραφικό φιλμ, το οποίο όμως δεν έχει δυνατότητα προσδιορισμού της ενέργειας και είναι μίας χρήσης. Οι περισσότεροι ανιχνευτές που χρησιμοποιούνται στη μέθοδο XRF βασίζονται στη μετατροπή των γεγονότων που καταγράφονται λόγω των ακτίνων-Χ σε ηλεκτρικό παλμό. Το μέσο του ανιχνευτή μπορεί να είναι αέριο που ιονίζεται μέσα σε ηλεκτρικό πεδίο (gas ionization chambers, proportional counters), φωτοδίοδος, κρύσταλλος που παράγει φωτόνια στο ορατό φάσμα (φθορισμός) με το σήμα να ενισχύεται σε φωτοπολλαπλασιαστή (scintillation counters) ή συνηθέστερα κρύσταλλος από ημιαγωγό υλικό.

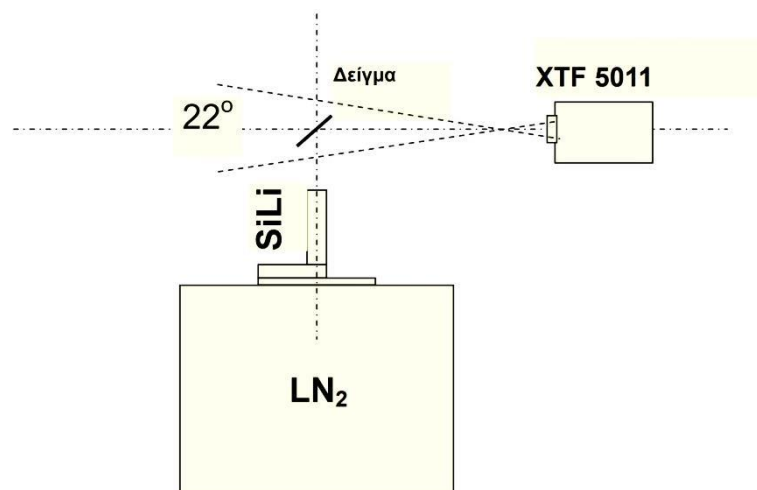
Πέρα από όσα προαναφέρθηκαν, σε ένα φασματόμετρο απαιτούνται και ορισμένες ακόμα συνιστώσες. Καθώς οι ακτίνες-Χ είναι ιονίζουσα ακτινοβολία και βλάπτει τους ανθρώπινους ιστούς, ένα πλήρες φασματόμετρο θα πρέπει να είναι θωρακισμένο ώστε να αποτρέπει ακτινοβολήση του προσωπικού που το χρησιμοποιεί. Ταυτόχρονα, ο σχεδιασμός της διάταξης πρέπει να είναι τέτοιος που να μειώνει τις ανεπιθύμητες σκεδάσεις και εισάγει θόρυβο στις μετρήσεις. Το φάσμα που συλλέγεται υφίσταται αξιολόγηση και επεξεργασία μέσω λογισμικού, προκειμένου να προκύψουν τα τελικά αποτελέσματα της ανάλυσης με ακρίβεια. Τέλος πρέπει να επισημανθεί ότι η τεχνική μπορεί να εφαρμόζεται σε περιβάλλον αέρα, κενό ή σε περιβάλλον ηλίου (He) σε κατάλληλο θάλαμο (17).



Σχήμα 3.3: Οι κυριότερες συνιστώσες ενός φασματόμετρου ακτίνων-Χ (17).

3.3. Συνιστώσες της διάταξης XRF του εργαστηρίου ΕΠΤ-ΕΜΠ

Στην παράγραφο αυτή γίνεται μία συνοπτική περιγραφή των βασικών συνιστωσών της διάταξης XRF του ΕΠΤ-ΕΜΠ, όπως λειτουργεί σήμερα, απαραίτητη για τη μελέτη της παρούσας Διπλωματικής Εργασίας. Η περιγραφή εστιάζει στις δύο βασικότερες συνιστώσες, παραλείποντας τις υπόλοιπες συνιστώσες, οι οποίες περιγράφονται στην παράγραφο 6.2.1.



Σχήμα 3.4: Απεικόνιση βασικών συνιστωσών της διάταξης XRF του ΕΠΤ-ΕΜΠ (18).

3.3.1. Μηχανή παραγωγής ακτίνων-X

Για την παραγωγή του διεγείροντος φάσματος ακτίνων-X χρησιμοποιείται θάλαμος ακτίνων-X με άνοδο από μολυβδαίνιο (Mo) και παράθυρο στο πλάι. Πρόκειται για το μοντέλο *XTF5011* της Oxford Instruments, μέγιστης ισχύος 50W, με τάση λειτουργίας 4-50kV και ρεύμα λειτουργίας 0-1mA. Η κάθοδος διαθέτει θερμαινόμενο νήμα από βολφράμιο (W), το σημείο εστίασης (focal spot) της μηχανής έχει διαστάσεις 150x70μm, το πλαϊνό παράθυρο εξόδου των ακτίνων-X είναι κατασκευασμένο από Be πάχους 0.254 mm, και οι ακτίνες-X εξέρχονται από τη μηχανή υπό μορφή κωνικής δέσμης γωνίας 22°. Κατά τη διάρκεια λειτουργίας της μηχανής, όπως είναι φυσικό, παράγεται θερμότητα στην άνοδο, η οποία πρέπει να απάγεται για τη σωστή λειτουργία της μηχανής. Ο σωλήνας ακτίνων-X περιβάλλεται από θάλαμο με ψυκτικό έλαιο και – σύμφωνα με τον κατασκευαστή – η θερμοκρασία στην εξωτερική επιφάνεια της μηχανής δεν πρέπει να υπερβαίνει τους 55°C. Η θερμοκρασία του θαλάμου παρακολουθείται από δύο θερμοστοιχεία, ένα ενσωματωμένο στη μηχανή και ένα πρόσθετο για λόγους ελέγχου.

Η μηχανή ακτίνων-X έχει εκ κατασκευής κυλινδρική θωράκιση από ανοξείδωτο ατσάλι με στρώμα μολύβδου (Pb) και ο ρυθμός έκθεσης λόγω διαρρέουσας ακτινοβολίας

σε απόσταση 2" από τη μηχανή είναι μικρότερος των 0.25mR/hr. Για την παροχή της υψηλής τάσης της μηχανής χρησιμοποιείται τροφοδοτικό της εταιρείας Spellman μοντέλο *XPM50P50x2372*, με μέγιστη ισχύ 50W και δυνατότητα ρύθμισης της υψηλής τάσης στα 4-50 kV και του ρεύματος στα 0-1 mA.

Για τον έλεγχο εξ αποστάσεως της μηχανής ακτίνων-X έχει κατασκευασθεί ειδική μονάδα χειρισμού. Η μονάδα χειρισμού σηματοδοτεί δύο λαμπτήρες, τοποθετημένους στον χώρο ελέγχου της μηχανής και στην είσοδο του χώρου ακτινοβολήσης, οι οποίοι που προειδοποιούν το χρήστη όταν η διάταξη είναι, ή πρόκειται να τεθεί σε λειτουργία.

3.3.2. Ανιχνευτής Si-Li

Η διάταξη XRF του ΕΠΤ-ΕΜΠ διαθέτει τον ανιχνευτή πυριτίου - λιθίου SiLi (Lithium drifted Si detector), μοντέλο *SSL80160* της Canberra Industries, με σειριακό αριθμό s/n 1199903. Πρόκειται για 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 δίοδος p-i-n, ως αποτέλεσμα μονόπλευρης διάχυσης ιόντων λιθίου (Li) n-τύπου μέσα στον κρύσταλλο. Βρίσκεται σε θάλαμο κενού, με παράθυρο βηρυλλίου για τη διέλευση της φθορίζουσας ακτινοβολίας. Ο ανιχνευτής SiLi τροφοδοτείται με ανάστροφη τάση πόλωσης -500V, ενώ όταν βρίσκεται υπό υψηλή τάση είναι απαραίτητο να ψύχεται σε θερμοκρασία υγρού αζώτου. Σύμφωνα με τις προδιαγραφές του κατασκευαστή, στο χώρο όπου λειτουργεί η διάταξη απαιτούνται συνθήκες θερμοκρασίας 5-40°C και σχετικής υγρασίας <95% χωρίς συμπύκνωση.

Ο ανιχνευτής SiLi έχει εξαιρετική διακριτική ικανότητα, με εύρος ημίσειας ύψους (full width at half-maximum, FWHM) 160eV στην φωτοκορυφή 5.9 keV του ⁵⁵Fe και ικανότητα ανίχνευσης φωτονίων πολύ χαμηλών ενεργειών, που τον καθιστά από τους πλέον κατάλληλους για εφαρμογές XRF. Ο ανιχνευτής SiLi ψύχεται με υγρό άζωτο μέσω κρυοστάτη με ενσωματωμένο προενισχυτή, ο οποίος είναι βυθισμένος σε δοχείο υγρού αζώτου.

Άλλες συνιστώσες της ανιχνευτικής διάταξης είναι η μονάδα NIM-BIN, το τροφοδοτικό υψηλής τάσης 500V, ο ενισχυτής ύψους παλμών για το σήμα του προενισχυτή, ο φορητός πολυκαναλικός αναλυτής, και ο ηλεκτρονικός υπολογιστής για την εποπτεία και επεξεργασία του φάσματος που συλλέγεται από τον πολυκαναλικό αναλυτή (19).

4.1. Οπτικά μέσα διατάξεων ακτίνων-X

Όπως με την ορατή ηλεκτρομαγνητική ακτινοβολία, όμοια και για τις ακτίνες-X χρησιμοποιούνται «οπτικά» μέσα για την προσαρμογή των ιδιοτήτων τους σε μία εφαρμογή ή πείραμα. Στον φθορισμό ακτίνων-X (XRF), τα οπτικά μέσα, ανάλογα με τη θέση τους, διαχωρίζονται σε πρωτεύοντα και δευτερεύοντα. Τα πρωτεύοντα οπτικά μέσα τοποθετούνται ανάμεσα στην πηγή των ακτίνων-X και το δείγμα, ενώ τα δευτερεύοντα οπτικά μέσα τοποθετούνται ανάμεσα στο δείγμα και την ανιχνευτική διάταξη. Σε κάθε περίπτωση, ανάλογα με τη λειτουργία τους μπορούν να μεταβάλλουν τη γεωμετρία της δέσμης (γωνία κωνικότητας, παραλληλοποίηση, εστίαση) και την ενέργεια των φωτονίων της, βελτιώνοντας την εκάστοτε μέθοδο από άποψη απόδοσης και ποιότητας αποτελεσμάτων. Για κάποιες μεθόδους μάλιστα, τα οπτικά μέσα είναι καθοριστικό τμήμα της διαδρομής των ακτίνων-X.

Σε αντίθεση με το ορατό φως, και επειδή οι ακτίνες-X έχουν πολύ μεγαλύτερη ενέργεια και διεισδύουν στην ύλη, η ανάκλαση, η διάθλαση και η σκέδασή τους επιτυγχάνονται μόνο σε ειδικές περιπτώσεις. Στη φασματοσκοπία ακτίνων-X, ως οπτικά μέσα συναντώνται φίλτρα, στόχοι από καθαρά στοιχεία, φίλτρα μονοχρωματικής ακτινοβολίας, κατευθυντές δέσμης με οπές και φακοί. Οι ιδιότητες τους ουσιαστικά καθορίζονται από τις αλληλεπιδράσεις ακτινοβολιών και ύλης που ήδη αναφέρθηκαν στο 2^ο κεφάλαιο.

4.1.1. Είδη οπτικών μέσων

Τα πάσης φύσεως φίλτρα απορροφούν ένα τμήμα του ενεργειακού φάσματος των ακτίνων-X, συνήθως τις χαμηλές ενέργειες, βελτιώνοντας την αναλογία κορυφής προς υπόστρωμα (peak-to-background ratio) στο φάσμα.

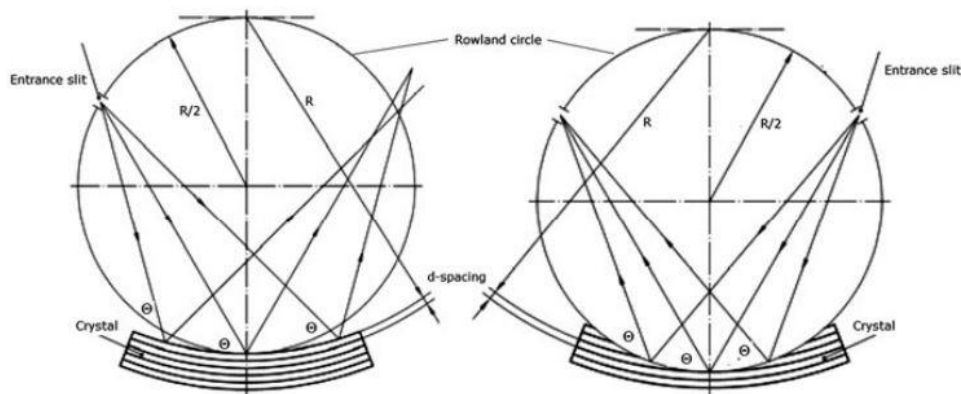
Οι στόχοι από καθαρά στοιχεία χρησιμοποιούνται ως οπτικά μέσα καθώς όταν ακτινοβολούνται, εξαιτίας του φθορισμού, παράγουν μονοενεργειακή ακτινοβολία – που εξαρτάται από το υλικό του φίλτρου – μειώνοντας τελικά το υπόστρωμα του φάσματος.

Οι κατευθυντές δέσμης με οπές αποτελούν μηχανικούς περιορισμούς της ακτινοβολίας, μειώνουν τον ανεπιθύμητο θόρυβο και βελτιώνουν το λόγο peak-to-background ratio του φάσματος που ανιχνεύεται.

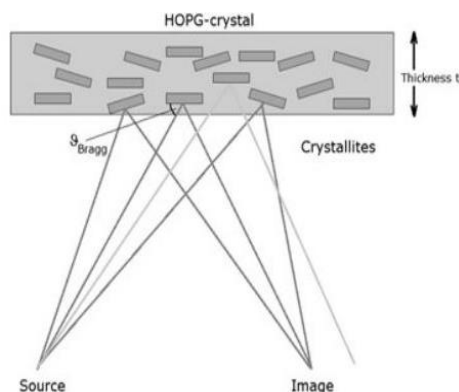
Στις επόμενες παραγράφους παρουσιάζονται μία σειρά από άλλα οπτικά μέσα, τα οποία μπορούν να χρησιμοποιήσουν μηχανισμούς όπως εκείνοι του ορατού φωτός (ανάκλαση, διάθλαση σκέδαση) για να αλλάξουν την κατεύθυνση, να εστιάσουν ή να καταστήσουν «παράλληλη» μία δέσμη ακτίνων-Χ.

4.1.2. Σκέδαση ακτίνων-Χ

Τα μέσα που σκεδιάζουν τις ακτίνες-Χ στην τεχνική XRF μπορούν να τις εστιάσουν, χρησιμοποιούνται όμως συχνότερα ως φίλτρα μονοχρωματικής ακτινοβολίας, και κυρίως ως δευτερεύοντα οπτικά μέσα. Οι ιδιότητές τους υπόκεινται στο νόμο του Bragg, που συνδέει τη γωνία σκέδασης της ακτινοβολία με το μήκος κύματος για σκέδαση ακτίνων- Χ σε κρυσταλλικό πλέγμα.



Σχήμα 4.1: Δύο γεωμετρίες εστίασης που χρησιμοποιούνται συχνά. Αριστερά, γεωμετρία-Johann: ο κρύσταλλος έχει ακτίνα καμπυλότητας διπλή του κύκλου Rowland (κύκλος μισής ακτίνας που εφάπτεται εσωτερικά του τόξου), και οι ακτίνες που έχουν την ίδια γωνία σκέδασης (άρα και το ίδιο μήκος κύματος σύμφωνα με το νόμο του Bragg) δεν είναι εστιασμένες στο ίδιο σημείο του κύκλου. Δεξιά, γεωμετρία-Johannson: το σχήμα της επιφάνειας του κρυστάλλου είναι προσαρμοσμένο στον κύκλο Rowland, και οι ακτίνες με ίδια γωνία σκέδασης εστιάζονται στο ίδιο σημείο του κύκλου (17).



Σχήμα 4.2: Κρύσταλλος-μωσαϊκό με ανακλάσεις τύπου Bragg. Οι κρύσταλλοι HOPG (High Oriented Pyrolytic Graphite) είναι τεχνητές κρυσταλλικές δομές από εξαγωνικό γραφίτη με ατομικές αποστάσεις $2d=0.6708\text{nm}$. Ο κρύσταλλος είναι κατάλληλος για ενέργειες ακτίνων-Χ έως αυτές του φώσφορου. Για ελαφρύτερα στοιχεία η ατομική απόσταση είναι πολύ μικρή (17).

4.1.3. Διάθλαση ακτίνων-X

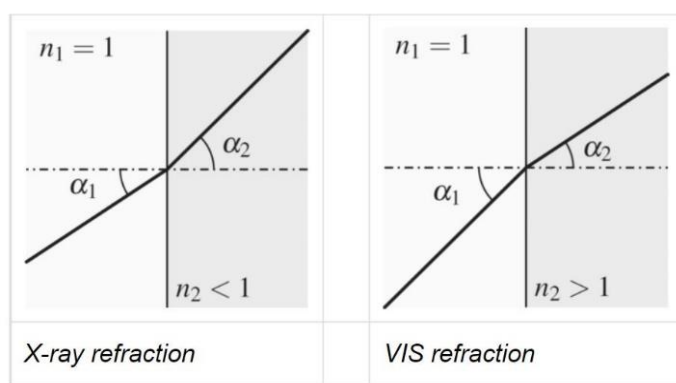
Στα διαθλαστικά οπτικά μέσα, τα ηλεκτρομαγνητικά κύματα αλλάζουν κατεύθυνση κατά την έλευσή τους από διεπιφάνειες μεταξύ διαφορετικών υλικών. Το φαινόμενο περιγράφεται από το νόμο του Snell:

$$\frac{\sin(\alpha_1)}{\sin(\alpha_2)} = \frac{v_1}{v_2} = \frac{n_1}{n_2} \quad \{4.1\}$$

όπου:

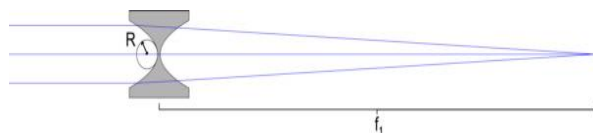
$n_i = c_0/v_i$ ο δείκτης διάθλασης,

c_0 : η ταχύτητα του φωτός στο κενό.

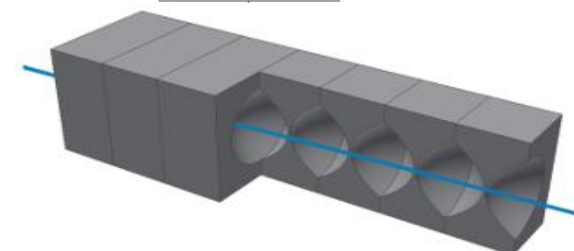
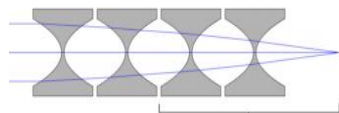


Σχήμα 4.3: Η κατεύθυνση της διαθλούμενης ακτίνας για ακτίνες-X (αριστερά) και φωτόνια στο ορατό (δεξιά) από το κενό (λευκό) σε στερεό ή ρευστό (γκρι). Για τις ακτίνες-X οι γωνίες α_1, α_2 είναι σχεδόν ίσες.

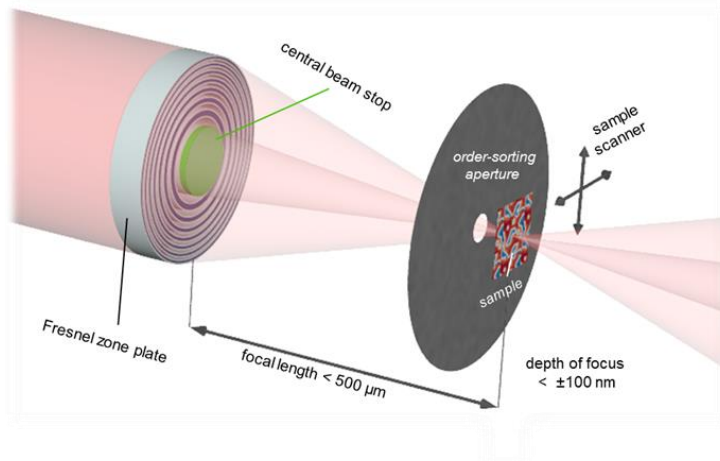
Επειδή ο δείκτης διάθλασης των ακτίνων-X είναι πολύ κοντά στη μονάδα, για να κατασκευαστεί ένα διαθλαστικό μέσο με εστιακή απόσταση μικρότερη του ενός μέτρου, χρειάζονται εκατοντάδες καλά ευθυγραμμισμένοι φακοί με πολύ μικρές ακτίνες καμπυλότητας. Επίσης, επειδή ο δείκτης διάθλασης είναι μικρότερος της μονάδας, οι φακοί εστίασης των ακτίνων-X, σε αντίθεση με τους φακούς της ορατής ακτινοβολίας, είναι λεπτότεροι στο κέντρο (αμφίκυρτοι) με παραβολοειδές σχήμα (20), (21), (22).



Σχήμα 4.3 Διαθλαστικό οπτικό μέσο σε δύο διαστάσεις (17).



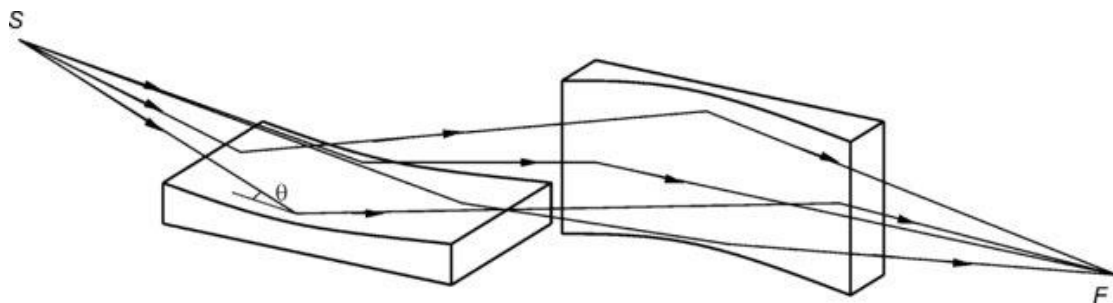
Σχήμα 4.4 Διαθλαστικό οπτικό μέσο σε τρεις διαστάσεις (17).



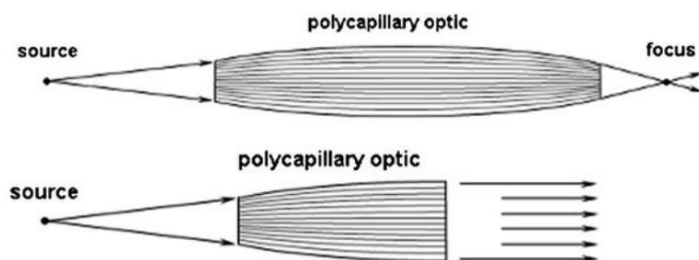
Σχήμα 4.5: Φακοί Fresnel, ένα περιθλαστικό οπτικό μέσο. Στην απλούστερη μορφή του, ένας φακός Fresnel αποτελείται από εναλλασσόμενους διαφανείς και αδιαφανείς (για ακτίνες-Χ) δακτύλιους (23).

4.1.4. Ανάκλαση ακτίνων-Χ

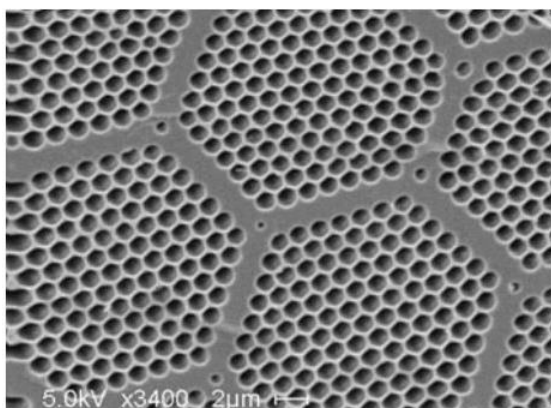
Η ανάκλαση των ακτίνων-Χ επιτυγχάνεται σε λείες μεταλλικές επιφάνειες για πάρα πολύ μικρές γωνίες πρόσπτωσης (“grazing incidence”) και είναι ιδιαίτερα αποδοτική (με μικρή απορρόφηση) για μέταλλα μεγάλης πυκνότητας όπως χρυσός, λευκόχρυσος και ιρίδιο. Όμοια με τις ακτινοβολίες ενέργειας κοντά στο ορατό φως, επιτυγχάνεται χωρίς διασπορά των ακτινών, περιορίζεται όμως από την κρίσιμη γωνία πρόσπτωσης. Η κρίσιμη γωνία πρόσπτωσης είναι μικρότερη για ακτίνες-Χ μικρότερου μήκους κύματος, μεγαλώνει όμως με την πυκνότητα του ανακλαστικού υλικού.



Σχήμα 4.6: Σύστημα δύο ανακλαστήρων, γνωστό ως σύστημα «Kirkpatrick–Baez». Λόγω της πολύ μικρής γωνίας πρόσπτωσης και της ανάκλασης ευρείας ζώνης ενέργειας, τα κάτοπτρα ανάκλασης (“total reflection mirrors”) χρησιμοποιούνται ως οπτικά ακτίνων-Χ για τη μορφοποίηση δέσμης (24).



Σχήμα 4.7 Πολυ-τριχοειδή οπτικά μέσα ως φακοί και ημι-φακοί.



Σχήμα 4.8 Διατομή πολυ-τριχοειδούς οπτικού μέσου από ηλεκτρονικό μικροσκόπιο (17).

4.1.5. Δευτερεύοντα οπτικά μέσα

Στη φασματοσκοπία φθορισμού ακτίνων-X, όπως προαναφέρθηκε, τα δευτερεύοντα οπτικά μέσα τοποθετούνται ανάμεσα στο δείγμα και τον ανιχνευτή. Η κυριότερη χρήση τους αφορά το σχηματισμό της δέσμης, σε αντίθεση με τα πρωτεύοντα που καθορίζουν πρωτίστως το ενεργειακό της φάσμα. Φυσικά, ο σχηματισμός της δέσμης επηρεάζει και το ενεργειακό φάσμα, όπως για παράδειγμα οι οπές κατευθυντών δέσμης που μειώνουν το υπόστρωμα και βελτιώνουν το peak-to-background ratio, αποτρέποντας την ανίχνευση της ανακλώμενης ακτινοβολίας.

4.2. Άλλες τεχνικές βελτίωσης του λόγου p-t-b

Στο φάσμα ακτίνων-X που ανιχνεύεται στην τεχνική XRF, περιλαμβάνεται η χαρακτηριστική ακτινοβολία των υλικών του δείγματος υπό μορφή φωτοκορυφών πάνω σε ένα συνεχές υπόστρωμα. Το δεύτερο, είναι προϊόν δύο κυριότερων παραγόντων. Αφενός, η ακτινοβολία που παράγεται από την πηγή αλλά και από το δείγμα, σκεδάζεται στις επιφάνειες της διάταξης και στον αέρα, και ανιχνεύεται ως συνεχές φάσμα. Αφετέρου, είναι πιθανό να ανιχνεύεται και θόρυβος από το περιβάλλον του φασματόμετρου, όπως ραδιενεργά ισότοπα στην ατμόσφαιρα και τα οικοδομικά υλικά. Η ένταση του υποστρώματος μπορεί να δυσκολέψει την ανίχνευση στοιχείων μικρής συγκέντρωσης στο δείγμα. Επομένως, η μείωση του υποστρώματος και κατά συνέπεια η βελτίωση του λόγου peak-to-background είναι ζήτημα μεγάλης σημασίας σε πολλές εφαρμογές της φασματοσκοπίας ακτίνων-X. Για κάθε διάταξη XRF, ο λόγος p-t-b έχει περιθώριο βελτίωσης με τη ρύθμιση γεωμετρικών παραγόντων, όπως η απόσταση δείγματος-ανιχνευτή και η κλίση της επιφάνειας του δείγματος. Ο τρόπος με τον οποίο αυτές ρυθμίζονται εξαρτάται από πολλούς παράγοντες και δεν υπάρχει ένας συγκεκριμένος

κανόνας για επιτυχία του βέλτιστου λόγου p-t-b, επομένως έχει ενδιαφέρον η μελέτη τους σε κάθε διάταξη ανεξάρτητα.

4.2.1. Τάση και ρεύμα μηχανής

Ρυθμίζοντας κατάλληλα τις παραμέτρους της μηχανής παραγωγής ακτίνων-X επηρεάζεται σημαντικά η μορφή του φάσματος και εντέλει η ποιότητα των μετρήσεων. Σε γενικές γραμμές, αυξάνοντας την τάση και την ένταση του ρεύματος της μηχανής, μπορεί να αυξηθεί ο λόγος p-t-b, αυξάνοντας την ανιχνευσιμότητα της μεθόδου, κάτι το οποίο εξαρτάται και από το υπό ανίχνευση στοιχείο (25). Στο σχήμα 4.9 παρατίθενται ενδεικτικές τιμές του βαθμού βελτίωσης του λόγου p-t-b συναρτήσει της υψηλής τάσης και του ρεύματος της μηχανής ακτίνων-X για τυπική διάταξη XRF και διάφορες εφαρμογές.

Σχήμα 4.9 Βελτίωση του μέσου p-t-b όταν αυξάνεται η τάση και το ρεύμα μηχανής,

Voltage increased from	Flood chronologies ^a					Floodplain contamination ^c		
	Si	K	Ti	Rb	Zr	Cu	Zn	Pb
30 kV to 40 kV	0.750 (0.071)	0.938 (0.021)	1.020 (0.029)	2.096 (0.092)	1.657 (0.055)	1.320 (0.007)	1.605 (0.051)	2.013 (0.082)
40 kV to 50 kV	0.752 (0.044)	0.908 (0.020)	0.965 (0.033)	1.455 (0.041)	1.114 (0.041)	1.192 (0.101)	1.253 (0.080)	1.381 (0.062)
Current increased from	Flood chronologies ^b					Floodplain contamination ^c		
	Si	K	Ti	Rb	Zr	Cu	Zn	Pb
30 mA to 40 mA	1.209 (0.064)	1.121 (0.023)	1.121 (0.005)	1.140 (0.022)	1.073 (0.044)	1.187 (0.003)	1.119 (0.028)	1.136 (0.043)
40 mA to 50 mA	1.108 (0.053)	1.096 (0.033)	1.099 (0.013)	1.066 (0.016)	1.134 (0.026)	0.996 (0.071)	1.085 (0.066)	1.171 (0.071)

^a = Mean of sections CM C1 S1 700-800, RO C13 S2 500-600, RO C16 S2 133.5-233.5 and ST C1 S4 250-370.
^b = Mean of sections CM C1 S1 700-800 and ST C1 S4 250-370.
^c = Mean of sections KN C1 S1 510-610 and TIG C1 S1 340-440

για διάφορα ανιχνευόμενα στοιχεία. Στις παρενθέσεις η τυπική απόκλιση (25).

4.2.2. Χρόνος έκθεσης του δείγματος

Η αύξηση του χρόνου έκθεσης ενός δείγματος σε ακτίνες-X, αυξάνει γενικά το πλήθος των ατόμων που διεγείρονται και το πλήθος των χαρακτηριστικών ακτίνων-X που θα καταλήξουν στον ανιχνευτή. Παρ' ότι συγχρόνως αυξάνεται και το πλήθος των σκεδάσεων στον αέρα και την υπόλοιπη διάταξη, συνήθως υπερισχύει η βελτίωση του λόγου p-t-b λόγω της καλύτερης στατιστικής, ανάλογα και με τη γεωμετρία της διάταξης (σχήμα 4.10).

Αξίζει να σημειωθεί πως για την ίδια διάταξη και για χρόνους έκθεσης της τάξεως των λίγων sec, η αύξηση του χρόνου έκθεσης μπορεί να είναι πιο αποτελεσματική από την αύξηση του ρεύματος ή της τάσης της (25).

Exposure time increased from	Si	K	Ti	Rb	Zr
10 to 15 seconds ^a	1.270 ^c (0.038)	1.223 ^c (0.018)	1.229 ^c (0.011)	1.233 ^c (0.042)	1.225 ^c (0.032)
10 to 20 seconds ^a	1.515 ^c (0.081)	1.415 ^c (0.030)	1.427 ^c (0.028)	1.442 ^c (0.050)	1.397 ^c (0.039)
10 to 30 seconds ^a	1.910 ^c (0.173)	1.740 ^c (0.056)	1.748 ^c (0.039)	1.744 ^c (0.055)	1.729 ^c (0.054)
10 to 60 seconds ^b	2.882 ^d (0.521)	2.518 ^d (0.114)	2.500 ^d (0.092)	2.481 ^d (0.057)	2.423 ^d (0.105)
10 to 120 seconds ^b	4.232 ^d (0.908)	3.570 ^d (0.181)	3.542 ^d (0.138)	3.531 ^d (0.076)	3.376 ^d (0.141)

^a = Mean of sections CM C1 S1 500-700, CM C1 S1 850-1000, CM C1 S2 250-350, CM C2 S1 600-700, all scanned at 30 kV 50 mA, CM C2 S2 450-550 and RO C13 S2 500-600, scanned at 30 kV 50 mA and at 50 kV 30 mA, and RO C16 S2 133.5-233.5, scanned at 40 kV 35 mA.
^b = Mean of sections CM C1 S1 580-700, CM C1 S2 270-350, CM C2 S1 620-700 and CM C2 S2 500-550, the latter scanned at both 30 kV 50 mA and 50 kV 30 mA.

Σχήμα 4.10: Βελτίωση του μέσου p-t-b με το χρόνο έκθεσης για διάφορα στοιχεία. Στις παρενθέσεις η τυπική απόκλιση (25).

4.2.3. Παράμετροι ανιχνευτών

Ο ρυθμός ανίχνευσης φωτονίων από τον ανιχνευτή επηρεάζει την ποιότητα των μετρήσεων με παρόμοιο τρόπο που την επηρεάζει ο χρόνος έκθεσης του δείγματος. Επιλέγοντας έναν ανιχνευτή με ικανότητα ανίχνευσης γεγονότων με υψηλό ρυθμό – εντέλει μεγαλύτερη απόδοση – καταγράφονται στον ίδιο χρόνο περισσότερες χαρακτηριστικές ακτίνες-X που εκπέμπει το δείγμα και επομένως βελτιώνεται η ανιχνευσιμότητα της διάταξης. Άλλες παράμετροι ενός ανιχνευτή που την επηρεάζουν είναι η ενεργειακή απόκριση και η διακριτική ικανότητα.

Στο σημείο αυτό πρέπει να επισημανθεί ότι μια σημαντική πηγή ακτινοβολίας συνεχούς υποστρώματος είναι ο στερεός όγκος του υλικού του ίδιου του ανιχνευτή. Μία απλή βελτίωση στη μέθοδο είναι η μείωση του πάχους του ανιχνευτή στο απαραίτητο για τη λειτουργία του, πίσω από το παράθυρό του (9), (26), (27). Προφανώς αυτό είναι κατασκευαστικό θέμα του ανιχνευτή.

4.2.4. Το είδος της μεθόδου φασματοσκοπίας

Η τεχνική EDXRF, σε σύγκριση με την WDXRF, επειδή μπορεί να έχει μέτρια ενεργειακή ανάλυση, ειδικά για μεσαία και ελαφριά στοιχεία, επηρεάζεται σημαντικά από την αλληλο-επικάλυψη κορυφών (peak overlapping). Ειδικότερα στην περίπτωση της ανάλυσης ενός ελαφρού στοιχείου (χαμηλή ενέργεια ακτίνων-X) που εμφανίζεται κοντά στα κύρια συστατικά του δείγματος – τα οποία είναι επίσης συνήθως χαμηλού Z – η ουρά

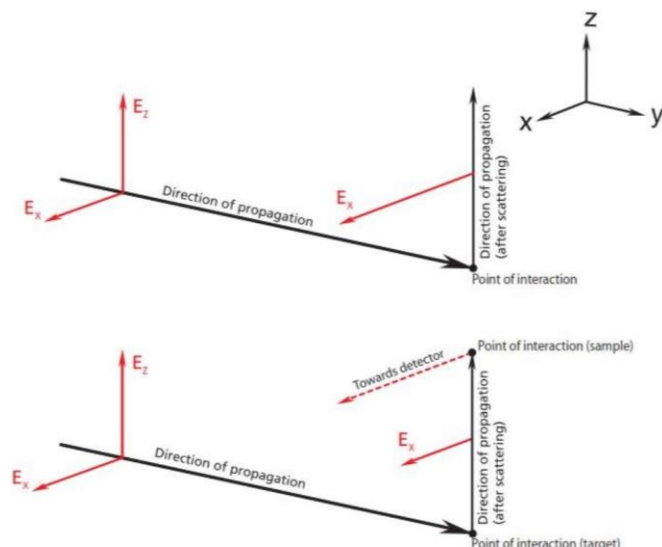
της κορυφής των κύριων συστατικών (low energy tail) δημιουργεί υψηλό υπόστρωμα και η αναλογία p-t-b μπορεί να γίνει χαμηλή.

4.2.5. Χαρακτηριστικά του δείγματος

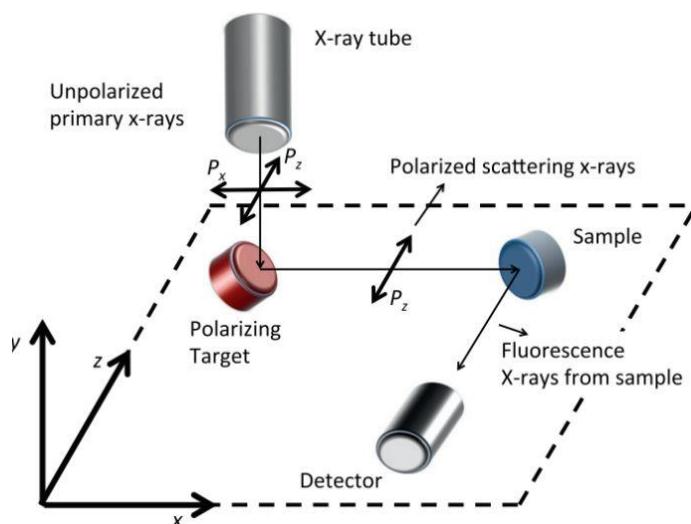
Σε στερεά δείγματα, η μορφή της ακτινοβολούμενης επιφάνειας απηρεάζει σημαντικά το φάσμα που ανιχνεύεται. Εάν είναι δυνατόν, είναι σημαντικός ο καθαρισμός, το στέγνωμα και η λείανσή της, ώστε να περιοριστεί η ακτινοβολία υποστρώματος που οφείλεται στις περιττές ακαθαρσίες, την υγρασία και την τραχύτητά της. Συγκεκριμένα, για τη βελτίωση του λόγου p-t-b σε φασματοσκοπία δείγματος με σχετικά μη λεία επιφάνεια, θα πρέπει να ελεγχθούν παράμετροι όπως η ενέργεια και η κλίση των ακτίνων-X, καθώς και η κλίση του δείγματος, για κάθε σημείο που ακτινοβολείται (28), (29).

4.2.6. Πόλωση της ακτινοβολίας

Η ακτινοβολία που παράγεται σε ένα σωλήνα ακτίνων-X είναι ηλεκτρομαγνητικά κύματα με δύο διευθύνσεις ταλάντωσης. Η πόλωση της ακτινοβολίας, δηλαδή ο περιορισμός του διανύσματος του ηλεκτρικού πεδίου ή του διανύσματος μαγνητικού πεδίου σε ένα επίπεδο κατά μήκος της κατεύθυνσης διάδοσης, μπορεί να λειτουργήσει θετικά στη φασματοσκοπία ακτίνων-X μειώνοντας την ακτινοβολία από τις σκεδάσεις (Σχήμα 4.11). Συγκεκριμένα, περιλαμβάνοντας στη διάταξη έναν δευτερεύοντα στόχο (Σχήμα 4.12) με κατάλληλη κλίση, η ακτινοβολία που φτάνει στο δείγμα είναι πολωμένη λόγω της προηγούμενης σκέδασης και δεν μπορεί να σκεδαστεί δεύτερη φορά προς τον ανιχνευτή. Έτσι, εξαλείφεται το υπόστρωμα που οφείλεται στη σκέδαση πάνω στο δείγμα, και βελτιώνεται σημαντικά ο λόγος p-t-b (14).



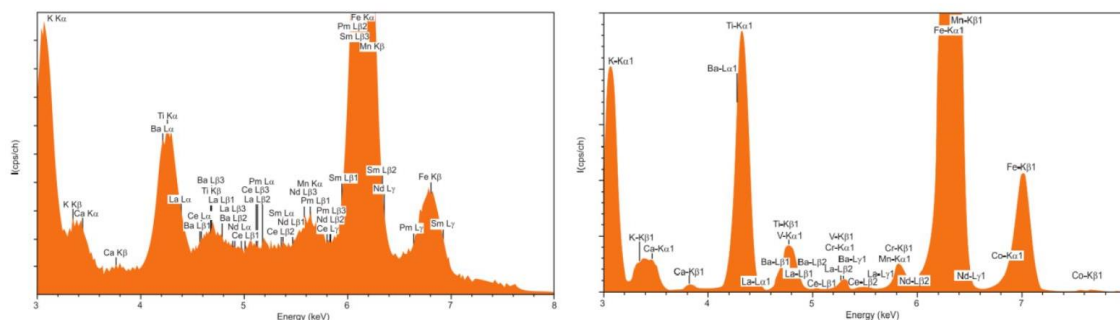
Σχήμα 4.11 Πόλωση ηλεκτρομαγνητικού κύματος μετά από μία (πάνω) και δύο (κάτω) κάθετες σκεδάσεις.



Σχήμα 4.12: Διάταξη XRF με δευτερεύοντα στόχο.

Στο σχήμα 4.13 που

ακολουθεί παρατίθενται δύο φάσματα χωρίς και με χρήση δευτερεύοντος στόχου, όπου διακρίνεται σαφώς η βελτίωση του υποστρώματος.



Σχήμα 4.13: Άμεση ακτινοβόληση του δείγματος (αριστερά) και ακτινοβόληση με χρήση δευτερεύοντος στόχου (δεξιά).

4.2.7. Η εξασθένιση των ακτίνων-X στον αέρα

Όπως προαναφέρθηκε, η ακτινοβολία σκεδάζεται στα σωματίδια του αέρα στη διαδρομή μεταξύ της πηγής ακτινοβόλησης και του δείγματος, καθώς και μεταξύ του δείγματος και του ανιχνευτή – που πρωτίστως ενδιαφέρει. Αυτό έχει ως αποτέλεσμα αφενός τη δημιουργία ανεπιθύμητου υποστρώματος, και αφετέρου τη μείωση της έντασης των χαρακτηριστικών που εκπέμπονται από το δείγμα, ειδικότερα για τις χαμηλής ενέργειας ακτίνες-X. Επομένως, η εφαρμογή της τεχνικής XRF στο κενό, είτε μέσα σε ένα ελαφρύτερο μέσο (για παράδειγμα σε περιβάλλον He) μπορεί να έχει θετικά αποτελέσματα στο λόγο p-t-b και κατά συνέπεια στην ποιότητα των μετρήσεων.

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 5 // Ο κώδικας PENELOPE για την προσομοίωση αλληλεπιδράσεων σωματιδίων-φωτονίων με την ύλη

5.1. Γενική παρουσίαση του κώδικα *PENELOPE*

5.1.1. Προγράμματα *Monte Carlo*

Η αυξανόμενη ισχύς των υπολογιστών και η εξέλιξη των μεθόδων προσομοίωσης έχουν οδηγήσει στην αναγνώριση των υπολογισμών (*computation*) ως έγκυρο δρόμο για την πρόοδο των φυσικών επιστημών, μαζί με τη θεωρία και το παραδοσιακό πείραμα. Οι μέθοδοι Monte-Carlo είναι μία ευρεία κατηγορία υπολογιστικών αλγορίθμων που βασίζονται στην «τυχαία» δειγματοληψία για τα αποτελέσματα που παράγουν. Μπορούν να πειραματιστούν με τυχαίους αριθμούς για την αξιολόγηση μαθηματικών εκφράσεων, να λύσουν πολύ μεγάλα συστήματα εξισώσεων, ή να αναπαράγουν φαινόμενα με πολλές πιθανές εκβάσεις. Στα παραπάνω προβλήματα δεν υπάρχει εγγενής τυχαιότητα. Η μέθοδος, ως εναλλακτική στην κατανάλωση απαγορευτικής υπολογιστικής μνήμης και χρόνου, χρησιμοποιεί τυχαίους αριθμούς για να λύσει ντετερμινιστικά προβλήματα. Συγκεκριμένα, επειδή η παραγωγή πραγματικής τυχαιότητας είναι γενικά δύσκολη διαδικασία, οι περισσότερες εφαρμογές χρησιμοποιούν ψευδο-τυχαίους αριθμούς, που δείχνουν μεν τυχαίοι αλλά έχουν προκύψει ντετερμινιστικά (30), (31), (32), (33).

5.1.2. Ο κώδικας PENELOPE

Στην παρούσα ΔΕ χρησιμοποιήθηκε ο κώδικας *PENELOPE* (Penetration and ENergy LOss of Positrons and Electrons) για την προσομοίωση της λειτουργίας της διάταξης XRF του ΕΠΤ-ΕΜΠ. Πρόκειται για υπολογιστικό κώδικα σε γλώσσα Fortran βασισμένο στη μέθοδο Monte-Carlo. Αναπτύχθηκε από τους *F. Salvat, J. M. Fernández-Varea, J. Sempau* σε συνεργασία με το Τμήμα Φυσικής του Πανεπιστημίου της Βαρκελώνης και η πρώτη έκδοση κυκλοφόρησε το 1996. Στη ΔΕ χρησιμοποιείται η έκδοση του 2011.

Ο κώδικας προσομοιώνει τη διάδοση ποζιτρονίων, ηλεκτρονίων και φωτονίων σε έναν χώρο με σώματα/υλικά. Η ιστορία ενός σωματιδίου/φωτονίου είναι η πορεία του στον χώρο, όπου εκπέμπεται, αλληλεπιδρά και απορροφάται ή διαφεύγει, με τρόπο καθορισμένο κατά Monte-Carlo. Στηρίζεται στους φυσικούς νόμους που περιγράφουν τις αλληλεπιδράσεις σωματιδίων/φωτονίων με την ύλη και τελειώνει με καθορισμένα από το χρήστη ενεργειακά και χωρικά όρια. Με το πέρας της ιστορίας καταγράφονται τα μεγέθη

που αφορούν το συγκεκριμένο σωματίδιο, όπως η διεύθυνσή του σε κάποια διεπιφάνεια ή η ενέργεια που απέθεσε. Όταν δημιουργηθεί ικανό πλήθος ιστοριών, οι μέσες τιμές των μεγεθών που καταγράφονται θα προσεγγίζουν πραγματικές τιμές με ικανοποιητική ακρίβεια.

Ο κώδικας εφαρμόζεται για όλα τα υλικά και καλύπτει ένα ενεργειακό εύρος από 50 eV έως 1 GeV, ενώ χρησιμοποιεί τα πιο αξιόπιστα διαθέσιμα δεδομένα μικροσκοπικών διατομών των διαφόρων αλληλεπιδράσεων. Οι ενεργές διατομές των μορίων των διαφόρων υλικών προκύπτουν από το άθροισμα των ατομικών ενεργών διατομών των ατόμων τους. Η προσομοίωση των ιστοριών πραγματοποιείται χρησιμοποιώντας μικτό σχήμα: οι σκληρές αλληλεπιδράσεις (*hard interactions*) προσομοιώνονται μεμονωμένα, ενώ το αποτέλεσμα των μαλακών αλληλεπιδράσεων (*soft interactions*) περιγράφεται με χρήση προσεγγίσεων πολλαπλών σκεδάσεων (34).

5.1.3. Η δομή του κώδικα *PENELOPE*

Ο κώδικας *PENELOPE* αποτελείται από δύο κύρια τμήματα. Το πρώτο αφορά την παραγωγή ιστοριών των σωματιδίων/φωτονίων και το δεύτερο, που ορίζεται από το χρήστη, αφορά το προς επίλυση πρόβλημα. Το πρώτο τμήμα αποτελείται από προγράμματα/υπορουτίνες (*penelope.f*, *pengeom.f*, *penvared.f*, *timer.f*) που περιγράφουν τους φυσικούς νόμους της προσομοίωσης, την κατασκευή των γεωμετριών του χώρου που προσομοιώνεται, βελτιώνουν τη στατιστική της προσομοίωσης και καταγράφουν τον χρόνο. Το δεύτερο τμήμα είναι ο κώδικας χρήστη. Για τις ανάγκες της ΔΕ χρησιμοποιήθηκε ο κώδικας χρήστη με την ονομασία *PENMAIN* (αρχείο *penmain.f*) που πραγματοποιεί την προσομοίωση των αλληλεπιδράσεων σωματιδίων/φωτονίων διερχόμενων από έναν τρισδιάστατο σύνθετο χώρο με ομογενή σώματα καθορισμένα από δευτεροβάθμιες επιφάνειες (*quadric surfaces*). Στο πακέτο που παρέχεται με τον κώδικα, πέραν του προγράμματος *penmain.f*, περιλαμβάνονται και άλλα προγράμματα, όπως το *material.exe* για τη δημιουργία αρχείων υλικών, το *tables.exe* για την απεικόνιση των περιεχόμενων των αρχείων υλικών, και τα *gview2d.exe* και *gview3d.exe* για την απεικόνιση των σωμάτων του χώρου που δημιουργήθηκαν από το χρήστη. Στη συνέχεια θα περιγραφεί ο τρόπος χρήσης του προγράμματος, που γίνεται με τη δημιουργία των αναγκαίων αρχείων εισόδου.

Για περισσότερες πληροφορίες σε σχέση με τη δομή και τη λειτουργία του κώδικα *PENELOPE* ο αναγνώστης μπορεί να ανατρέξει στο εγχειρίδιο του λογισμικού «*PENELOPE-2014: A Code System for Monte Carlo Simulation of Electron and Photon*

Transport Workshop Barcelona» (2015), καθώς και σε ΔΕ που έχουν υλοποιηθεί στο ΕΠΤ-ΕΜΠ (36).

5.2. Χρήση του κυρίως προγράμματος PENMAIN

Ο κώδικας χρήστη *penmain.f* είναι γενικής χρήσης και διανέμεται για τη διευκόλυνση του χρήστη, ώστε να μην χρειαστεί να συνθέσει εκ νέου ένα πρόγραμμα. Για τη λειτουργία του είναι απαραίτητοι τρεις τύποι αρχείων εισόδου: τα αρχεία υλικού (*.mat*), το αρχείο γεωμετρίας (*.geo*) και το αρχείο εισόδου (*.in*). Για την εκτέλεση μίας προσομοίωσης, ο χρήστης πρέπει να συγκεντρώσει στον κατάλογο που επιθυμεί τα αρχεία εισόδου και να δώσει την εντολή *penmain <filename.in*. Όσο τρέχει το πρόγραμμα, και ανά τακτά χρονικά διαστήματα ορισμένα από το χρήστη, ο κώδικας παράγει/ανανεώνει στον ίδιο κατάλογο διάφορα αρχεία αποτελεσμάτων, τα σημαντικότερα των οποίων είναι:

- Το *penmain.dat* που περιέχει γενικές πληροφορίες για την προσομοίωση.
- Το *material.dat* που αναγράφει πληροφορίες για τα υλικά.
- Το *geometry.rep* που παρακολουθεί την λειτουργικότητα της σχεδιασμένης γεωμετρίας.
- Τα *spc-endsdet.dat* και *spc-impdet.dat*, αρχεία που καταγράφουν την εναποτιθέμενη ενέργεια σε (και την διερχόμενη μέσα από) το σώμα που είναι ορισμένο ως εικονικός ανιχνευτής. Στις προσομοιώσεις που πραγματοποιήθηκαν αποτελούν ουσιαστικά τα πιο σημαντικά αρχεία αποτελεσμάτων για την πορεία της διπλωματικής, καθώς περιλαμβάνουν μετρήσεις του φάσματος που ανιχνεύεται από τον ανιχνευτή.
- Τα *polar-angle-particle.dat* για την γωνιακή κατανομή των αναδύμενων σωματιδίων/φωτονίων.
- Τα *energy-particle-direction.dat* για την ενεργειακή κατανομή των σωματιδίων/φωτονίων που διαφεύγουν από τον καθορισμένο χώρο.
- Το *penmain-res.dat* που δημιουργείται στο τέλος της προσομοίωσης και περιέχει ολικές και μέσες τιμές για το σύνολο της προσομοίωσης.

5.2.1. Αρχεία εισόδου: το αρχείο *filename.in*

Το αρχείο αυτό, τύπου *.in* συντίθεται από το χρήστη σε μορφή ASCII, παρέχει στον κώδικα τα δεδομένα της προσομοίωσης και ονόματα για τα αρχεία εισόδου και εξόδου. Κάθε γραμμή του αρχείου ξεκινά από μια δεσμευτική λέξη-εντολή 6 χαρακτήρων και

ακολουθείται από αριθμό ή αλφαριθμητική σειρά που ξεκινούν από την 8^η στήλη. Οι δεσμευτικές λέξεις πρέπει να γράφονται με συγκεκριμένη σειρά, και κάποιες μπορούν να χρησιμοποιηθούν αρκετές φορές. Επιτρέπεται σε οποιοδήποτε σημείο του αρχείου η δεσμευτική λέξη να είναι κενοί χαρακτήρες, οπότε ο κώδικας θα αγνοήσει την τρέχουσα γραμμή. Για την πληρέστερη κατανόηση από τον αναγνώστη, στο τέλος του 5^{ου} κεφαλαίου παρατίθεται η δομή ενός αρχείου δεδομένων *.in*, με τις βασικές δεσμευτικές λέξεις που χρησιμοποιήθηκαν για την ΔΕ, σύμφωνα με το εγχειρίδιο του λογισμικού (Πίνακας 5.1). Ακολουθούν τα ονόματα των μεταβλητών που τις συνοδεύουν και σε παρένθεση οδηγίες στα αγγλικά, από το εγχειρίδιο του λογισμικού. Οι οδηγίες μπορούν να συμπεριληφθούν στο αρχείο εισόδου για τη διευκόλυνση του χρήστη, καθώς ο κώδικας προχωράει στην επόμενη γραμμή όταν συναντήσει κενό χαρακτήρα μετά τη μεταβλητή. Συμπληρωματικά, στο πέρας του 6^{ου} κεφαλαίου παρατίθεται παράδειγμα αρχείου *.in* που χρησιμοποιήθηκε αυτούσιο σε προσομοίωση της ΔΕ.

5.2.2. Αρχεία εισόδου: το αρχείο *filename.geo*

Η περιγραφή του είδους του αρχείου βασίζεται στο παράδειγμα που παρατίθεται στο τέλος του κεφαλαίου (πίνακας 5.2) για τη διευκόλυνση του αναγνώστη. Το αρχείο αυτό, τύπου *.geo*, συντίθεται από το χρήστη σε μορφή ASCII, παρέχει στον κώδικα τα δεδομένα για τα στοιχεία του χώρου στον οποίο γίνεται η προσομοίωση. Είναι χωρισμένο σε παραγράφους σε αυστηρά τυποποιημένη μορφή και η κάθε μία από αυτές περιέχει τα χαρακτηριστικά κάθε στοιχείου. Η μορφή στην οποία πρέπει να αναγράφονται δίνεται στις επόμενες παραγράφους. Τα στοιχεία του χώρου είναι 3: επιφάνειες (*surfaces*), σώματα (*bodies*) και ενότητες (*modules*). Μεταξύ των παραγράφων επιβάλλεται η ύπαρξη μιας γραμμής συμπληρωμένης από μηδενικά (0), ενώ επιτρέπεται η παρεμβολή γραμμών με σχόλια που ο κώδικας παραβλέπει, με την προϋπόθεση ότι ξεκινούν με τον χαρακτήρα "C".

Η αρχή κάθε παραγράφου θα πρέπει να έχει κάποια από τις λέξεις 8 χαρακτήρων «*SURFACE_*», «*BODY_____*», «*MODULE_*», «*END_____*», «*CLONE_*» και «*INCLUDE_*». Το κάθε στοιχείο της γεωμετρίας αναγνωρίζεται από το είδος του (επιφάνεια, σώμα, ενότητα) και από ένα τριψήφιο ακέραιο αριθμό (από -99 μέχρι 999). Επειδή τα σώματα και οι ενότητες θεωρούνται στοιχεία του ίδιου είδους, δεν επιτρέπεται να έχουν τον ίδιο ακέραιο αριθμό. Τα χαρακτηριστικά κάθε στοιχείου που αφορούν αριθμητικό μέγεθος γράφονται με αυστηρή διαμόρφωση, οι αποστάσεις δίνονται σε εκατοστά και οι γωνίες σε μοίρες ή σε rad.

Στο τέλος του 5ου κεφαλαίου παρατίθεται μια βασική δομή του αρχείου *.geo* με δύο επιφάνειες, ένα σώμα και δύο ενότητες (Πίνακας 5.2), ενώ στο τέλος του 6^{ου} κεφαλαίου

παρατίθεται παράδειγμα αρχείου .geo που χρησιμοποιήθηκε αυτούσιο σε προσομοίωση της ΔΕ.

Στη συνέχεια της παραγράφου δίνονται περισσότερες λεπτομέρειες για τις τρεις βασικές συνιστώσες της γεωμετρίας:

Επιφάνεια (surface)

Ο χρήστης μπορεί να εισάγει και να καθορίσει πλήρως οποιαδήποτε δευτεροβάθμια επιφάνεια με μία παράγραφο που ξεκινά με την εντολή *SURFACE* και έχει δομή όπως του δείγματος αρχείου που παρατίθεται στο τέλος του κεφαλαίου (σχήμα 5.4). Για την περιγραφή ικανοποίησης χρησιμοποιούνται οι παράμετροι:

- *A4* ο αριθμός/όνομα της επιφάνειας, το 4 είναι ο αριθμός των θέσεων μέσα στην παρένθεση,
- *I2* οι δείκτες που ορίζουν το είδος της δευτεροβάθμιας επιφάνειας, προέρχονται από την εξίσωση επιφάνειας:

$$F(r) = I2_1x^2 + I2_2y^2 + I2_3z^2 + I2_4z + I2_5 \quad \{5.1\}$$

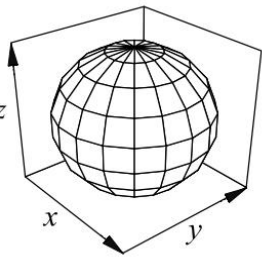
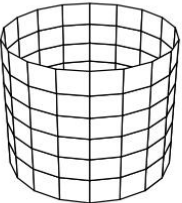
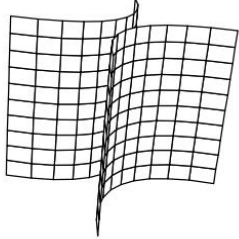
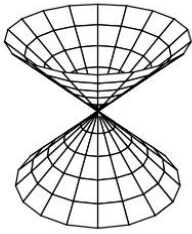
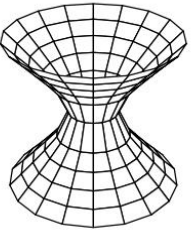
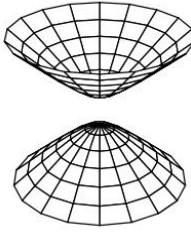
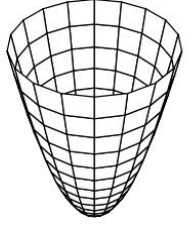
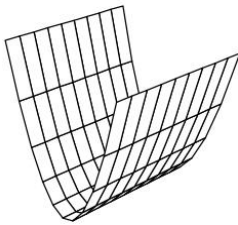
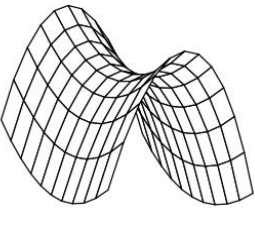
Το 2 υποδηλώνει τον αριθμό των θέσεων μέσα στην παρένθεση.

- Η παραμόρφωση, η περιστροφή και η μετακίνηση της επιφάνειας γίνονται με χρήση των εντολών X(Y,Z)-SCALE, OMEGA, THETA, PHI και X(Y,Z)-SHIFT, ενώ η τιμή τους πρέπει να είναι στη μορφή (+0.000000000000000E+00,000). π.χ. για μετακίνηση 20cm της επιφάνειας κατά τον άξονα y γράφεται Y-SHIFT=(+2.000000000000000E+01, 0)
- Οι γωνίες ω, θ, φ για την περιστροφή της επιφάνειας είναι οι γωνίες Euler, όπως φαίνεται στο σχήμα 5.6.
- Για την περιγραφή της γεωμετρίας επιφάνειας σε implicit μορφή χρησιμοποιείται η έκφραση της δευτεροβάθμιας επιφάνειας:

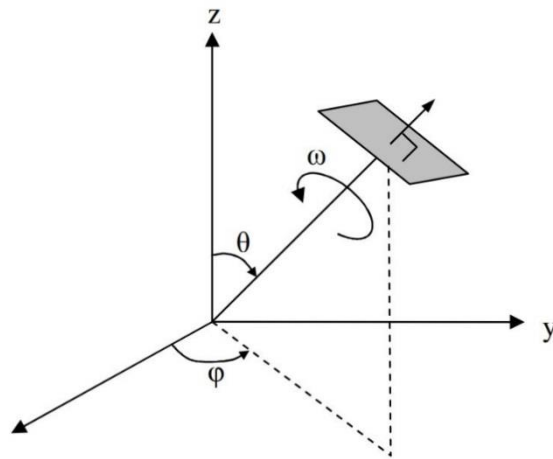
$$F(r) = A_{xx}x^2 + A_{xy}xy + A_{xz}xz + A_{yy}y^2 + A_{yz}yz + A_{zz}z^2 + A_{xx} + A_{yy} + A_{zz} + A_0 = 0 \quad \{5.2\}$$

Σώμα (body)

Για να ορίσει ένα ομογενές σώμα ο χρήστης, το οριοθετεί με επιφάνειες (ή άλλα σώματα ή ενότητες) και ακολούθως προσθέτει μία παράγραφο που ξεκινά με την εντολή *BODY* και έχει τη μορφή του δείγματος αρχείου που παρατίθεται στο τέλος του κεφαλαίου (σχήμα 5.4). Την εντολή *BODY* ακολουθεί ο αριθμός/όνομα του σώματος σε παρένθεση (*A4*), η γραμμή εντολής που αφορά το υλικό του σώματος (*MATERIAL (A4)*), και οι γραμμές με τα στοιχεία που το οριοθετούν, με δείκτες +1 ή -1 που καθορίζουν τον προσανατολισμό του ορίου. Ο αριθμός του υλικού (*A4* στο δείγμα αρχείου, να μη συγχέεται με τους αριθμούς/ονόματα των επιφανειών και των σωμάτων) πρέπει να είναι ο αύξων αριθμός του υλικού που ορίστηκε στο αρχείο εισόδου *.in* με τις εντολές *MFNAME*.

 <p>1, 1, 1, 0, -1 sphere</p>	 <p>1, 1, 0, 0, -1 cylinder</p>	 <p>1, -1, 0, 0, -1 hyperbolic cylinder</p>
 <p>1, 1, -1, 0, 0 cone</p>	 <p>1, 1, -1, 0, -1 one-sheet hyperboloid</p>	 <p>1, 1, -1, 0, 1 two-sheet hyperboloid</p>
 <p>1, 1, 0, -1, 0 paraboloid</p>	 <p>1, 0, 0, -1, 0 parabolic cylinder</p>	 <p>1, -1, 0, -1, 0 hyperbolic paraboloid</p>

Σχήμα 5.1: Δευτεροβάθμιες επιφάνειες και οι δείκτες που τους αντιστοιχούν, σύμφωνα με την εξίσωση {5.1}. (40)



Σχήμα 5.2: Οι γωνίες Euler

Ενότητα (module)

Ενότητα είναι μία ομάδα συνδεδεμένων σωμάτων που έχουν ήδη οριστεί στο αρχείο, και η οποία μπορεί να χρησιμοποιηθεί για τη διευκόλυνση του χρήστη στο σχεδιασμό σύνθετων γεωμετριών, όπως η πλήρωση κενών χώρων με κάποιο υλικό, ή για την ομαδική περιστροφή σωμάτων. Ο χρήστης ορίζει το όνομα και το υλικό του με τον ίδιο τρόπο που ορίζει ενός σώματος, με μία παράγραφο της δομής του αρχείου-δείγματος. Να σημειωθεί ότι το κενό ως υλικό, δεν χρειάζεται να οριστεί στο αρχείο *.in* και έχει τον αριθμό (00). Ακολουθεί μια γραμμή γεμάτη με τα στοιχεία «1» που σημαίνει ότι θα ακολουθήσουν οι παράμετροι μετακίνησης/περιστροφής του module, μόνο για την περίπτωση που αυτή απαιτείται. Τα σώματα ή οι ενότητες που περιέχονται στην ενότητα πρέπει να περιέχονται στο εσωτερικό του όγκου της, ενώ οι ενότητες δεν επιτρέπεται να αλληλοεπικαλύπτονται ως προς τον όγκο.

Με την εντολή *CLONE*, ο χρήστης μπορεί να εισάγει μία δίδυμη ενότητα σε διαφορετική θέση και με διαφορετικό προσανατολισμό, με μία παράγραφο όπως αυτή του δείγματος αρχείου (Πίνακας 5.2).

Προς το τέλος του αρχείου ορίζεται μία ενότητα που θα περιέχει όλο το σύστημα που ορίστηκε, με σκοπό τον περιορισμό του χώρου στον οποίο παρακολουθούνται τα σωματίδια/φωτόνια. Εάν δεν οριστεί η ενότητα αυτή, ο κώδικας την ορίζει με ακτίνα 10^{15} cm. Το αρχείο ολοκληρώνεται με μία παράγραφο που ξεκινά με την εντολή *END*.

Η απεικόνιση της γεωμετρίας που περιγράφεται σε ένα αρχείο τύπου *.geo* σε δύο και τρεις διαστάσεις, μπορεί να γίνει με τα προγράμματα *gview2d* και *gview3d*. τα οποία πρέπει να βρίσκονται στον ίδιο κατάλογο (directory) με το αρχείο της γεωμετρίας.

5.2.3. Αρχεία εισόδου: τα αρχεία *.mat*

Τα αρχεία εισόδου τύπου *.mat* περιέχουν όλες τις πληροφορίες για τα υλικά της προσομοίωσης, όπως μικροσκοπικές ενεργές διατομές αλληλεπιδράσεων και φυσικές ιδιότητες. Παράγονται από τον κώδικα *material.f* από δεδομένα που υπάρχουν σε μεγάλη βάση δεδομένων την οποία διαθέτει ο κώδικας *PENELOPE* και παραμέτρους που ορίζει ο χρήστης μέσω του πληκτρολογίου.

5.2.4. Εικονικοί ανιχνευτές

Για τις ανάγκες μίας προσομοίωσης συχνά απαιτείται ο ορισμός από το χρήστη ενός σώματος στο οποίο θα καταγράφονται διάφορες πληροφορίες, δηλαδή θα λειτουργεί ως ανιχνευτής. Ένας εικονικός ανιχνευτής ουσιαστικά περιγράφεται από ένα τμήμα του προγράμματος *penmain*, μέσω του οποίου καταγράφονται δεδομένα για τα σωματίδια/φωτόνια που θα αλληλεπιδράσουν ή θα διέλθουν από συγκεκριμένο σώμα. Το σώμα αυτό πρέπει να έχει οριστεί στο αρχείο *.geo* (με εξαίρεση τον ανιχνευτή δόσης, βλ. παρακάτω), ενώ η ιδιότητα του ανιχνευτή δίνεται στο αρχείο *.in*. Το πρόγραμμα *penmain*, περιλαμβάνει τρία είδη εικονικών ανιχνευτών:

- **Ανιχνευτές αλληλεπίδρασης:** Όταν ένα σώμα οριστεί ως ανιχνευτής αλληλεπίδρασης (*impact detector*), τότε καταγράφεται η ενέργεια των σωματιδίων/φωτονίων που εισέρχονται σε αυτό. Στο πέρας της προσομοίωσης δημιουργείται ένα αρχείο που περιέχει το φάσμα της ενέργειας όλων των σωματιδίων/φωτονίων που εισήλθαν στον ανιχνευτή. Μπορεί επίσης να καταγραφεί το είδος, η ενέργεια, η θέση, η κατεύθυνση, ο παράγων βαρύτητας και η προέλευσή τους εφόσον οριστεί από το χρήστη στο αρχείο *.in*, με κατάλληλη τροποποίηση της εντολής *IMPDET*.
- **Ανιχνευτές εναποτιθέμενης ενέργειας:** Όταν ένα σώμα οριστεί ως ανιχνευτής αποτιθέμενης ενέργειας (*energy deposition detector*), τότε καταγράφεται η ενέργεια που τα σωματίδια/φωτόνια αποθέτουν μέσα σε αυτό. Αντίστοιχα με τους ανιχνευτές αλληλεπίδρασης, στο πέρας της προσομοίωσης δημιουργείται ένα αρχείο που περιέχει το φάσμα της ενέργειας που απορρόφησε ο ανιχνευτής. Οι προσομοιώσεις που έγιναν στο πλαίσιο της ΔΕ χρησιμοποιούν μόνο τέτοιους ανιχνευτές.
- **Ανιχνευτές δόσης:** Ο χρήστης μπορεί να ζητήσει την καταγραφή κατανομής της δόσης σε ένα τμήμα της κατασκευής. Ως ανιχνευτής δόσης (*dose enclosure*) ορίζεται ένα ορθογώνιο παραλληλεπίπεδο πλέγμα, και στο πέρας της

προσομοίωσης υπολογίζεται η κατανομή της δόσης στο εσωτερικό του σύμφωνα με τις προδιαγραφές που έχει ορίσει ο χρήστης (35), (36).

```

TITLE Title of the job, up to 65 characters.
      . (the dot prevents editors from removing trailing blanks)
>>>>>>> Source definition.
SKPAR KPARP [Primary particles: 1=electron, 2=photon, 3=positron]
      KPARP=0 activates a user-defined SOURCE model.
SENERG SE0 [Initial energy (monoenergetic sources only)]
SPECTR Ei,Pi [E bin: lower end and total probability]
SPOSIT SX0,SY0,SZ0 [Coordinates of the source]
SCONE THETA,PHI,ALPHA [Conical beam; angles in deg]
      .
>>>>>>> Material data and simulation parameters.
      Up to MAXMAT materials; 2 lines for each material.
MFNAME mat-filename1.ext [Material file, up to 20 chars]
MSIMPA EABS(1:3),C1,C2,WCC,WCR [EABS(1:3),C1,C2,WCC,WCR]
MFNAME mat-filename2.ext [Material file, up to 20 chars]
MSIMPA EABS(1:3),C1,C2,WCC,WCR [EABS(1:3),C1,C2,WCC,WCR]
      .
>>>>>>> Impact detectors (up to 25 different detectors).
      IPSF=0; no psf is created.
      IPSF=1; a psf is created (for only one detector).
      IDCUT=0; tracking is discontinued at the detector entrance.
      IDCUT=1; the detector does not affect the tracking.
      IDCUT=2; the detector does not affect tracking, the energy
      distribution of particle fluence (integrated over the
      volume of the detector) is calculated.
IMPDET EL,EU,NBE,IPSF,IDCUT [E-window, no. of bins, IPSF, IDCUT]
IDAGEL AGEL,AGEU,NAGE [Age interval and no. of bins]
IDBODY KB [Active body]
IDKPAR KPAR [Type of detected particles]
      .
>>>>>>> Energy-deposition detectors (up to 25).
ENDETC EL,EU,NBE [Energy window and no. of bins]
EDSPC spc-enddet-##.dat [Output spectrum file name, 20 chars]
EDBODY KB [Active body]
      .
>>>>>>> Job properties.
RESUME dump1.dmp [Resume from this dump file, 20 chars]
DUMPTO dump2.dmp [Generate this dump file, 20 chars]
DUMPP DUMPP [Dumping period, in sec]
      .
NSIMSH DSHN [Desired number of simulated showers]
TIME TIMEA [Allotted simulation time, in sec]
      .
END [Ends the reading of input data]

```

Πίνακας 5.1: Η δομή ενός αρχείου δεδομένων *.in*, με τις βασικές δεσμευτικές λέξεις που χρησιμοποιήθηκαν για την ΔΕ σύμφωνα με το εγχειρίδιο του λογισμικού *PENELOPE-2014*.

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 6 // Προσομοίωση διάταξης φθορισμού ακτίνων-X

6.1. Μεθοδολογία βελτίωσης της διάταξης XRF του ΕΠΤ-ΕΜΠ

Σε αυτό το κεφάλαιο, ξεδιπλώνεται η διαδικασία μελέτης της διάταξης XRF του ΕΠΤ-ΕΜΠ μέσω προσομοίωσης Monte-Carlo με στόχο τη βελτίωση της ανιχνευσιμότητας. Ο στόχος της διαδικασίας είναι η βελτίωση του λόγου peak-to-background, κομβικό εργαλείο για την αξιολόγηση μετρήσεων στη φασματοσκοπία των ακτίνων-X. Αρχικά, παρουσιάζεται η διάταξη του ΕΠΤ-ΕΜΠ και πως αυτή περιγράφεται σε αρχεία εισόδου των προσομοιώσεων. Στη συνέχεια, εξηγείται η λογική πίσω από τη χρήση κατευθυντή δέσμης, ως δευτερεύον οπτικό μέσο, και περιγράφεται η εξέταση διαφορετικών κατευθυντών αλλά και γεωμετρικών χαρακτηριστικών ώστε να προσδιοριστεί ο καλύτερος σχεδιασμός.

Όπως ήδη αναφέρθηκε, η διαδικασία προσομοιώσεων πραγματοποιείται μέσω του προγράμματος *PENELOPE*, που είναι το πλέον κατάλληλο λόγω της δυνατότητάς του να προσομοιώνει με ακρίβεια την αλληλεπίδραση ακτίνων-X με την ύλη, καθώς και να μοντελοποιεί σύνθετες γεωμετρίες. Η βάση της μελέτης είναι η μοντελοποίηση της εργαστηριακής διάταξης που είχε γίνει σε παλαιότερη ΔΕ (44) στην οποία μελετήθηκε η κατάλληλη ισορροπία μεταξύ αφενός της – κατά το δυνατόν – ακριβέστερης περιγραφής όλων των στοιχείων της διάταξης και αφετέρου της απλοποίησής τους για την επιτάχυνση των προσομοιώσεων. Το μοντέλο αυτό περιλαμβάνει την πηγή των ακτίνων-X, το πρωτεύον οπτικό μέσο που χρησιμοποιείται σήμερα στο εργαστήριο, το δείγμα και τον ανιχνευτή. Η διάταξη λειτουργεί σε περιβάλλον αέρα χωρίς θωράκιση. Με στόχο τη βελτίωση του λόγου peak-to-background, στο μοντέλο που αναπτύχθηκε στην παρούσα ΔΕ προστέθηκε η διερεύνηση των παρακάτω συνιστωσών και παραμέτρων:

- Δευτερεύον οπτικό μέσο διαφόρων γεωμετριών.
- Μικρότερες αποστάσεις δείγματος – ανιχνευτή.
- Περιστροφή του δείγματος σε δύο ενδεικτικές γωνιακές θέσεις.
- Αντικατάσταση του αέρα με ήλιο ή κενό.
- Μελέτη επίδρασης του υλικού του δείγματος.
- Μελέτη επίδρασης του υλικού δευτερεύοντος οπτικού μέσου, από αλουμίνιο σε συνθετικό υλικό, κατάλληλο για τρισδιάστατη εκτύπωση.

Σε αυτό το πλαίσιο δημιουργήθηκαν τα αρχεία εισόδου που περιλαμβάνουν το ενεργειακό φάσμα της πηγής και διάφορες άλλες παραμέτρους που θα εξηγηθούν λεπτομερώς στη συνέχεια. Μεταξύ άλλων, αφορούν τη μοντελοποίηση και τη διερεύνηση που προαναφέρθηκε. Ακολούθως πραγματοποιήθηκε μία μεγάλη σειρά προσομοιώσεων, από τα αποτελέσματα των οποίων επιλέχθηκαν οι παράμετροι που βελτιώνουν τον λόγο peak-to-background και την απόδοση της διάταξης συνολικά και οι οποίοι αναλύονται σε επόμενο κεφάλαιο.

Στις επόμενες ενότητες, παρουσιάζονται περισσότερες λεπτομέρειες σχετικά με τη διαδικασία προσομοίωσης, συμπεριλαμβανομένων των αρχείων εισόδου, των παραμέτρων προσομοίωσης και των αποτελεσμάτων των προσομοιώσεων. Αναφέρονται επίσης οι προκλήσεις και οι περιορισμοί που προέκυψαν κατά τη διαδικασία της βελτίωσης, καθώς και πιθανές οδοί για μελλοντικές μελέτες που μπορούν από τη βελτίωση να μεταβούν στη βελτιστοποίηση.

6.2. Η διάταξη XRF του ΕΠΤ-ΕΜΠ

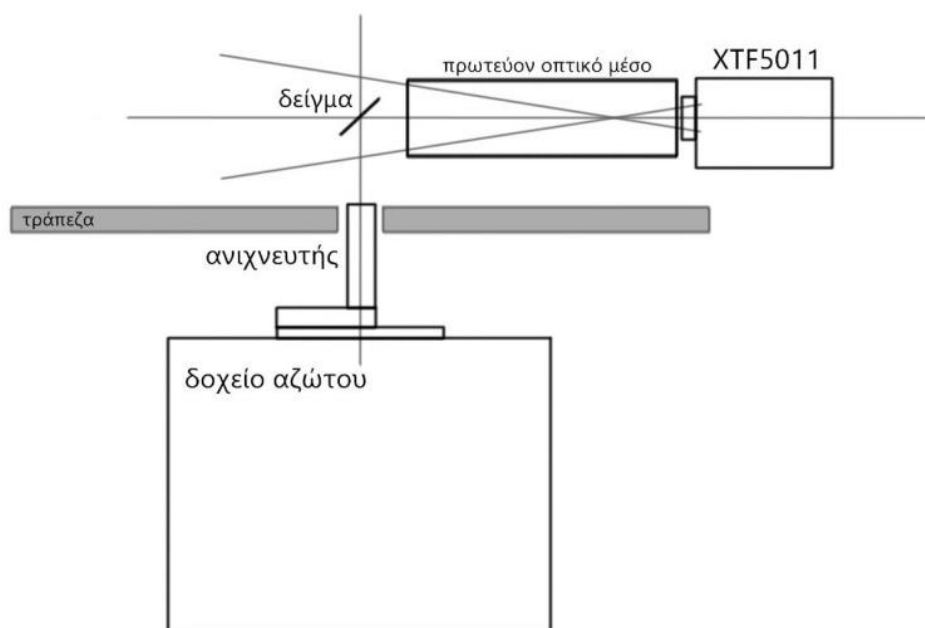
6.2.1. Η γεωμετρία

Στην παράγραφο 3.3 περιεγράφηκαν τα τεχνολογικά χαρακτηριστικά της μηχανής παραγωγής ακτίνων-X και του ανιχνευτή της διάταξης. Η παράγραφος που ακολουθεί εστιάζει στα γεωμετρικά της χαρακτηριστικά, τα απαραίτητα για την προσομοίωση.

Η διάταξη είναι τοποθετημένη σε τραπέζι, και περιλαμβάνει μηχανή ακτίνων-X που εκπέμπει σε κωνική δέσμη γωνίας 22° . Ωστόσο, σύμφωνα με τη μελέτη που έγινε στο πλαίσιο παλαιότερης ΔΕ (44) η γωνία κωνικότητας μπορεί να μειωθεί κατά την διαδικασία προσομοίωσης στις 14° για λόγους επιτάχυνσης των προσομοιώσεων, χωρίς να επηρεάζεται η ακρίβεια των αποτελεσμάτων. Αμέσως μετά την πηγή της πρωτεύουσας ακτινοβολίας, η οποία εκπέμπει φάσμα ακτίνων-X, βρίσκεται ένα λεπτό παράθυρο βηρυλλίου. Ανάμεσα στην πηγή ακτίνων-X και το υπό μελέτη δείγμα, υπάρχει πρωτεύον οπτικό μέσο, ένας κατευθυντής από αλουμίνιο, με εσωτερική επένδυση από plexiglass.

Το δείγμα που χρησιμοποιείται στις προσομοιώσεις είναι κυλινδρικό και με κλίση 30° προς την επιφάνεια του ανιχνευτή και τοποθετείται σε κατάλληλη βάση στήριξης κατασκευασμένη από plexiglass, σε απόσταση 15.5 εκατοστών από την πηγή. Στις πρώτες προσομοιώσεις που πραγματοποιήθηκαν επιλέχθηκε το υλικό του δείγματος να είναι

σίδηρος, καθώς οι χαρακτηριστικές του είναι σχετικά χαμηλής ενέργειας σε ενεργειακή περιοχή κατάλληλη για να εξαχθούν συμπεράσματα στην αξιολόγηση της διάταξης.



Σχήμα 6.1. Σχηματική απεικόνιση της διάταξης XRF το EPIT-EMPI. Περιλαμβάνει τον ανιχνευτή και το δοχείο αζώτου, το τραπέζι, το δείγμα, πρωτεύον οπτικό μέσο, και τη μηχανή παραγωγής ακτίνων-X (XTF5011).

Ο ανιχνευτής της διάταξης, καθώς είναι σταθερά συνδεδεμένος με το ογκώδες δοχείο αζώτου και τον κρυοστάτη, είναι τοποθετημένος κατακόρυφα, κάτω από το επίπεδο του τραπεζιού. Για να διέρχονται οι ακτίνες-X από το δείγμα στον ανιχνευτή, το τραπέζι έχει κατάλληλο άνοιγμα. Αξίζει να σημειωθεί ότι το τραπέζι δεν συμπεριλαμβάνεται στην μοντελοποίηση της διάταξης, και δεν μελετάται η συνεισφορά του στο υπόστρωμα, καθώς θεωρήθηκε αμεληταία. Ο άξονας λοιπόν του ανιχνευτή είναι κάθετος στην αρχική δέσμη ακτίνων-X της πηγής. Στις προσομοιώσεις που πραγματοποιήθηκαν χρησιμοποιήθηκαν 5 διαδοχικές καθ' ύψος θέσεις του ανιχνευτή, που απέχουν από 3cm έως και 12.5cm από το δείγμα.

6.2.2. Βελτιώσεις των παραμέτρων της διάταξης

Για τη βελτίωση της διάταξης, εκτός από τις βελτιώσεις που έχουν ληφθεί υπ' όψιν στις προσομοιώσεις, δηλαδή την απόσταση δείγματος-ανιχνευτή και την κλίση του δείγματος, θα μπορούσαν να προταθούν και επιπλέον ιδέες. Για παράδειγμα, η γεωμετρία του παραθύρου βηρυλλίου θα μπορούσε να διερευνηθεί ως προς το πάχος, ώστε να μειωθεί το υπόστρωμα λόγω σκέδασης (37). Επίσης, η επιλογή υλικού υψηλότερου Z για το πρωτεύον οπτικό μέσο (κατευθυντής) ίσως μείωνε το υπόστρωμα. Ακόμη, θα μπορούσε

να προταθεί βελτίωση του συστήματος συγκράτησης του δείγματος: η ακριβής τοποθέτησή του, αλλά και η δυνατότητα περιστροφής του, θα επέτρεπε λεπτομερέστερη ανάλυση του δείγματος.

6.3. Η ανάγκη για δευτερεύον οπτικό μέσο (κατευθυντή)

Η εργαστηριακή διάταξη, όπως προαναφέρθηκε, περιλαμβάνει την πηγή ακτίνων-Χ, το δείγμα, ένα πρωτεύον οπτικό μέσο και τον ανιχνευτή, με διάνυσμα κάθετο στην αρχική δέσμη των ακτίνων-Χ. Η διάταξη του κατακόρυφου ανιχνευτή επιτρέπει ακρίβεια στις μετρήσεις των ακτίνων-Χ του φθορίζοντος δείγματος, καθώς μπορεί να τοποθετηθεί αρκετά κοντά στο δείγμα, χωρίς να ακτινοβολείται άμεσα από την πρωτογενή ακτινοβολία της πηγής. Αυτό επίσης επιτρέπει τις μετρήσεις σε μικρά δείγματα, καθώς και ευκολία στη μεταχείρισή τους (38), (39), (40). Ωστόσο, χωρίς δευτερεύον οπτικό μέσο, ο ανιχνευτής ανιχνεύει σημαντικό ποσοστό της σκεδαζόμενης ακτινοβολίας από τον αέρα και τις λοιπές συνιστώσες της διάταξης, κάτι που αυξάνει την ακτινοβολία υποστρώματος και επηρεάζει τα αποτελέσματα των μετρήσεων.

Το δευτερεύον οπτικό μέσο – στη συγκεκριμένη περίπτωση ο κατευθυντής – αποσκοπεί στο να περιορίζει τη γωνία των φωτονίων που φτάνουν στην επιφάνεια του ανιχνευτή. Περιορίζοντας τη γωνία των φωτονίων σε όσα μόνο προέρχονται ευθέως από το δείγμα, μειώνεται το υπόστρωμα, βελτιώνεται ο λόγος peak-to-background και κατά συνέπεια η ακρίβεια των μετρήσεων. Η χρήση ενός κατευθυντή με κατάλληλη γεωμετρία μπορεί επίσης να βελτιώσει την απόδοση ενός ανιχνευτή, μειώνοντας τον κορεσμό του και αυξάνοντας την ενεργειακή διακριτική ικανότητα, κάτι που δεν μελετάται στα πλαίσια της παρούσας ΔΕ (41), (42), (43).

6.3.1. Μείωση των επιπτώσεων της σκέδασης στον αέρα.

Κατά τη διέλευσή τους από τον αέρα, οι ακτίνες-Χ υφίστανται σκεδάσεις στα μόρια του. Αυτό σημαίνει, αφενός μείωση της έντασης των χαρακτηριστικών του δείγματος που φτάνουν στον ανιχνευτή, και αφετέρου αύξηση του θορύβου λόγω της σκεδαζόμενης ακτινοβολίας που καταλήγει στον ανιχνευτή. Ο κατευθυντής ελαχιστοποιεί αυτές τις επιπτώσεις μειώνοντας τη σκεδαζόμενη ακτινοβολία που συμβάλλει στο υπόστρωμα. Πέρα από τη χρήση του κατευθυντή, έχουν πραγματοποιηθεί και συγκριτικές προσομοιώσεις για την ίδια διάταξη σε περιβάλλον με και χωρίς αέρα, για τον περαιτέρω προσδιορισμό των επιπτώσεων που έχει στο υπόστρωμα.

Ένα φάσμα φθορισμού ακτίνων-X μπορεί να έχει κορυφές σε πολύ κοντινές ενέργειες, κάτι που δυσκολεύει τον διαχωρισμό τους. Μειώνοντας το θόρυβο, ο κατευθυντής βελτιώνει έμμεσα και την ικανότητα δικάκρισης μεταξύ διαφορετικών κορυφών.

Επίσης, όταν προσπίπτουν στον ανιχνευτή πάρα πολλές ακτίνες-X, υπάρχει το ενδεχόμενο να κορεστεί και να μην ανιχνεύει ικανοποιητικά, ενώ μπορεί να παρατηρείται και παραμόρφωση του σχήματος των φωτοκορυφών. Μειώνοντας λοιπόν τον θόρυβο, μέσω της μείωσης της σκεδαζόμενης ακτινοβολίας που φτάνει στον ανιχνευτή διασφαλίζεται ότι ανιχνεύονται κυρίως οι ακτίνες-X που ενδιαφέρουν, με τον τρόπο αυτό ο κατευθυντής προστατεύει σε ένα βαθμό τη διάταξη από το ενδεχόμενο κορεσμού, ιδιαίτερα όταν το δείγμα είναι πολύ κοντά στον ανιχνευτή. Τέλος, πρέπει να επισημανθεί ότι η βελτίωση της αποτελεσματικότητας του ανιχνευτή, που εκφράζεται ως βελτίωση των επιπέδων ανίχνευσης, είναι ιδιαίτερα σημαντική για την ανάλυση στοιχείων με πολύ μικρή συγκέντρωση στο δείγμα.

6.3.2. Ο κατευθυντής που μελετήθηκε στην ΔΕ

Το δευτερεύον οπτικό μέσο που μελετάται στις προσομοιώσεις που έγιναν στη συγκεκριμένη ΔΕ είναι ένας απλός κατευθυντής από αλουμίνιο, ή από τεφλόν (πολυτετραφθοροαιθυλένιο). Η προτίμηση στο αλουμίνιο για τις περισσότερες από τις δοκιμές οφείλεται στον μεγάλο ατομικό του αριθμό και στην εύκολη επεξεργασία του υλικού. Το τεφλόν από την άλλη – όπως όλα τα συνθετικά υλικά – έχει μικρό ατομικό αριθμό, χρησιμοποιείται όμως ως υλικό δευτερευόντων οπτικών μέσων διότι πρακτικά δεν παράγει ακτινοβολία φθορισμού και δεν έχει μεταλλικές προσμίξεις και επομένως δεν συμβάλλει τόσο στο υπόστρωμα.

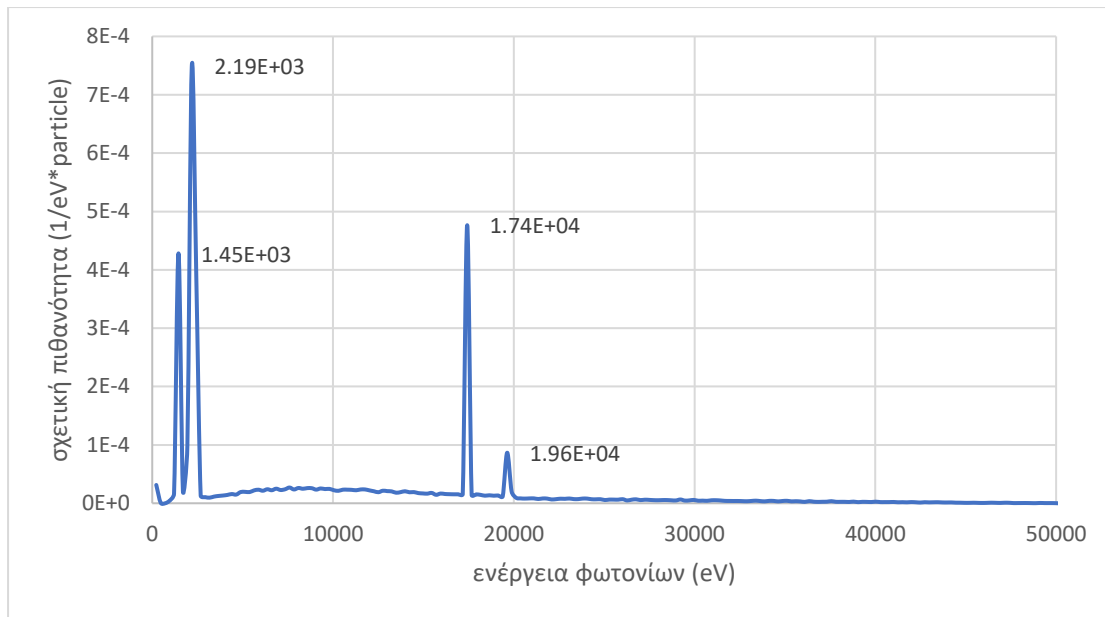
Για να επιλεγθεί ο καταλληλότερος για τη διάταξη του ΕΠΤ-ΕΜΠ κατευθυντής, μελετήθηκαν αρκετές γεωμετρίες. Οι προσομοιώσεις Monte-Carlo επιτρέπουν ακριβώς το να εξαχθούν συμπεράσματα για την κάθε γεωμετρία κατευθυντή χωρίς να απαιτείται το ίδιο το πείραμα. Η μέθοδος αυτή είναι ιδιαίτερα χρήσιμη όταν σε μία διάταξη εξετάζονται πολλές γεωμετρίες με μικρές διαφορές, ή διαφορετικοί σχεδιασμοί σε σχήμα και υλικό ενός εξαρτήματος.

6.4. Τα αρχεία εισόδου των προσομοιώσεων

Προκειμένου να προσομοιωθεί η διάταξη, ο κώδικας χρήστη *penmain.f* τροφοδοτήθηκε με τους τρεις τύπους αρχείων: το αρχείο “.in”, το αρχείο “.geo” και τα αρχεία “.mat”. Όπως αναφέρθηκε στην ενότητα 4.2, αυτά περιέχουν πληροφορίες σχετικά με τις παραμέτρους της προσομοίωσης, τη γεωμετρία της, και τις ιδιότητες των υλικών που επιλέχθηκαν. Στις επόμενες παραγράφους, περιγράφονται τα περιεχόμενα που αξιοποιήθηκαν για τις ανάγκες της ΔΕ, και παρατίθεται η μορφοποίηση καθενός από τα αρχεία που χρησιμοποιήθηκαν.

6.4.1. Το αρχείο .in

Το αρχείο εισόδου *.in* περιέχει, μεταξύ άλλων, το φάσμα της πηγής ακτίνων-X, όπως προέκυψε από τις προσομοιώσεις που έγιναν στο πλαίσιο της ΔΕ (44), για τάση μηχανής 50 kV. Η τάση αυτή, παράγει φωτόνια της ανώτατης ενέργειας 50keV τα οποία, αφενός καλύπτουν το ενεργειακό εύρος που εξυπηρετεί τις προσομοιώσεις για την ανίχνευση σιδήρου, και αφετέρου είναι ικανά να παράξουν αρκετό από το θόρυβο υποστρώματος προς μελέτη και περιορισμό. Άλλοι τρόποι δημιουργίας του φάσματος εξόδου της πηγής που θα μπορούσαν να χρησιμοποιηθούν με ικανοποιητική ακρίβεια, θα ήταν ο υπολογισμός με εμπειρικές σχέσεις ή η χρήση έτοιμων πακέτων λογισμικού (44). Όπως φαίνεται στο σχήμα 6.2 που ακολουθεί, το φάσμα αποτελείται από το συνεχές φάσμα, τις φωτοκορυφές του Mo (K_{α} : 17.4keV, K_{β} : 19.6keV, L_{α} : 2.29keV, L_{β} : 2.46keV, L_{γ} : 2.62keV) και μια φωτοκορυφή στα 1.45keV που αντιστοιχεί στις χαρακτηριστικές K του αλουμινίου (K_{α} : 1.49keV, K_{β} : 1.55keV). Το φάσμα διαιρείται σε 200 κανάλια, κοντά στο ανώτατο επιτρεπόμενο όριο που δέχεται ο κώδικας χρήστη *penmain.f*. Η φαινομενικά ελαφρά μετατόπιση προς τις χαμηλότερες ενέργειες – ειδικά για τις ακτίνες-X χαμηλών ενεργειών – πιθανότατα οφείλεται στο εύρος των καναλιών του φάσματος ακτίνων-X στο αρχείο εισόδου ($50000/200= 250\text{eV}$).



Σχήμα 6.2: Ενεργειακό φάσμα της μηχανής ακτίνων-X του ΕΠΤ-ΕΜΠ.

Μία άλλη παράμετρος που περιλαμβάνεται στο αρχείο *.in* είναι η ενέργεια αποκοπής, ή αλλιώς ενέργεια απορρόφησης των σωματιδίων μέσα σε κάθε υλικό. Ορίζεται με την εντολή *MSIMPA* και καθορίζει κάτω από ποια τιμή ενέργειας ο κώδικας σταματά να παρακολουθεί την ιστορία ενός σωματιδίου. Χαμηλές τιμές στις ενέργειες αποκοπής αυξάνουν τον ρεαλισμό της προσομοίωσης, ενώ υψηλές τιμές αυξάνουν την ταχύτητά της. Είναι σημαντικό να επιλέγονται τιμές κατάλληλες για τις ανάγκες της συγκεκριμένης διερεύνησης ώστε να επιτυγχάνεται η βέλτιστη ισορροπία μεταξύ ταχύτητας και ακρίβειας της προσομοίωσης. Η συγκεκριμένη ΔΕ βασίστηκε εν μέρει σε τιμές προτεινόμενες από το εγχειρίδιο χρήσης του κώδικα *PENELOPE*, και εν μέρει σε μελέτη των τιμών αυτών που είχε γίνει στην ΔΕ (44). Καθώς στις προσομοιώσεις που έγιναν μεταβάλλονται διάφορες άλλες παράμετροι – κυρίως γεωμετρικές – οι τιμές των ενεργειών απορρόφησης παρέμειναν σταθερές ώστε να προκύψουν αποτελέσματα κατάλληλα για σύγκριση. Η ενέργεια απορρόφησης ηλεκτρονίων και ποζιτρονίων για τα περισσότερα υλικά είναι η προτεινόμενη από το εγχειρίδιο χρήσης του κώδικα, 10% της μέγιστης ενέργειας της πηγής. Η προτεινόμενη ενέργεια απορρόφησης φωτονίων είναι 1% της μέγιστης ενέργειας της πηγής και χρησιμοποιείται στα υλικά αλουμίνιο, σίδηρος, αέρας, plexiglass, Teflon και οξείδιο του πυριτίου¹. Για τα υλικά βηρύλλιο και πυρίτιο, που έχουν ιδιαίτερο ενδιαφέρον

¹ Στα πλαίσια της διερεύνησης που έγινε, πέραν του σιδήρου, ως υλικό του δείγματος προσομοιώθηκε και το οξείδιο του πυριτίου που περιέχει προσμίξεις σιδήρου.

καθώς αφορούν τον ανιχνευτή και το παράθυρό του, η ενέργεια αποκοπής ηλεκτρονίων μειώθηκε στο 0.2% (100eV).

<i>EABS(1:3)</i>	<i>Ηλεκτρονίων</i>	<i>Φωτονίων</i>	<i>Ποζιτρονίων</i>
<i>Πυρίτιο Si</i>	5000	100	5000
<i>Αλουμίνιο Al</i>	5000	500	5000
<i>Βηρύλλιο Be</i>	5000	100	5000
<i>Σίδηρος Fe</i>	5000	500	5000
<i>αέρας</i>	5000	500	5000
<i>plexiglass</i>	5000	500	5000
<i>teflon</i>	5000	500	5000
<i>δείγμα</i>	5000	500	5000

Πίνακας 6.1: Ενέργειες απορρόφησης των υλικών που χρησιμοποιήθηκαν στις προσομοιώσεις.

Το αρχείο *.in* καθορίζει και τον αριθμό ενεργειακών καναλιών του ανιχνευτή στον οποίο καταγράφεται το φάσμα που συλλέγεται από τον ανιχνευτή SiLi. Για την παρούσα ΔΕ επιλέχθηκε ο μέγιστος επιτρεπτός από τον κώδικα, δηλαδή 1000 κανάλια.

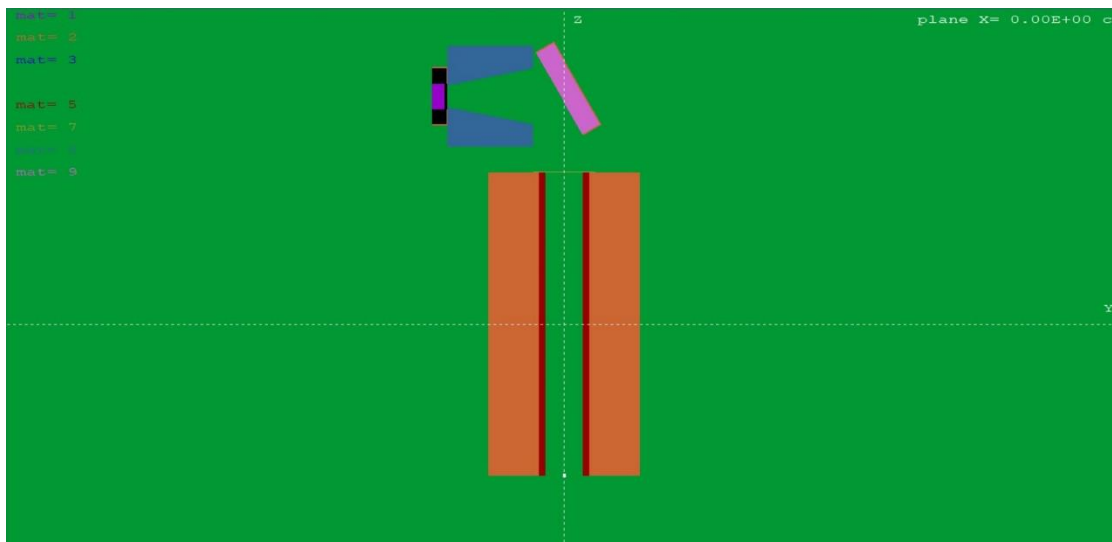
Η τελευταία παράμετρος που αξίζει να αναφερθεί είναι η διάρκεια της προσομοίωσης. Σε γενικές γραμμές, η διάρκεια μίας προσομοίωσης πρέπει να επιλέγεται βάσει της μέγιστης ενέργειας των σωματιδίων και των φωτονίων, της πολυπλοκότητας της γεωμετρίας και των ενεργειών απορρόφησης που έχουν επιλεγεί. Για τη μελέτη της συγκεκριμένης ΔΕ, η διάρκεια προσομοίωσης επιλέχθηκε εν γένει κοινή για τις περισσότερες δοκιμές (περίπου 24h), με σκοπό να εξασφαλίζεται ικανοποιητική ακρίβεια των αποτελεσμάτων και παράλληλα λογική διάρκεια προσομοίωσης. Η αύξηση της διάρκειας των προσομοιώσεων αλλάζει τη στατιστική της προσομοίωσης, βελτιώνοντας γενικά τα αποτελέσματα. Γι' αυτό το λόγο, αλλά και προκειμένου να επιτυγχάνεται σε κάθε περίπτωση αποτελέσματα κατάλληλα για σύγκριση, η διάρκεια των προσομοιώσεων αυξήθηκε μόνο στις περιπτώσεις που τα αποτελέσματα δεν επέτρεπαν την εξαγωγή ικανοποιητικών αποτελεσμάτων και συμπερασμάτων, και όπου αυτό συνέβη, αναφέρεται.

Στο τέλος του 6^{ου} κεφαλαίου παρατίθεται παράδειγμα αρχείου *.in* που χρησιμοποιήθηκε σε προσομοίωση της ΔΕ (Πίνακας 6.2). Στις διάφορες προσομοιώσεις, αλλάζει μόνο η διάρκεια της προσομοίωσης, είτε σε όρους χρόνου, είτε σε όρους πλήθους ιστοριών. Οι υπόλοιπες παράμετροι που προσφέρει προς ρύθμιση ο κώδικας και παρουσιάστηκαν στην παράγραφο 5.2.1, έλαβαν τις default τιμές.

6.4.2. Το αρχείο .geo

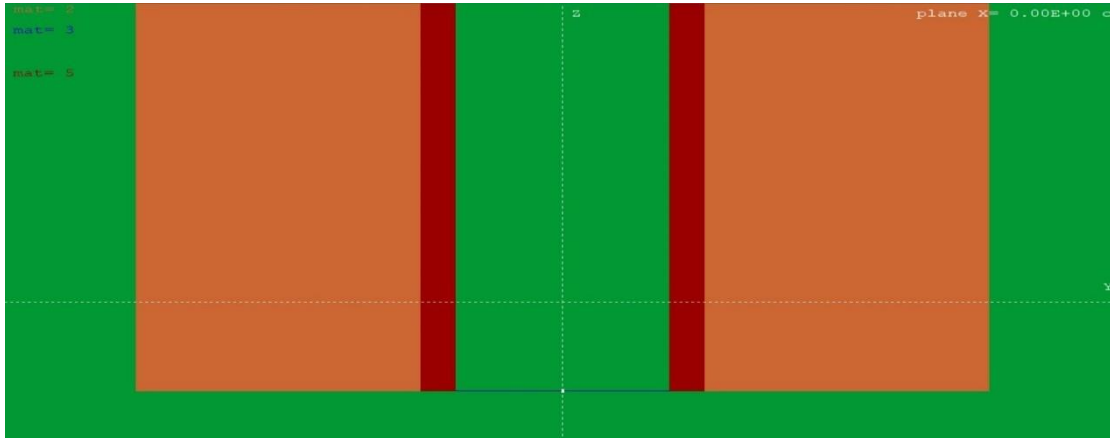
Η δομή, η λειτουργία και οι εντολές ενός αρχείου .geo εξηγήθηκαν στην παράγραφο 5.2.2. Στις επόμενες σελίδες, ακολουθεί περιγραφή και απεικόνιση των στοιχείων που χρησιμοποιήθηκαν για τις ανάγκες της ΔΕ.

Στα αρχεία .geo που δόθηκαν στον κώδικα *penmain.f*, ορίζονται κατά μέσο όρο 30 δευτεροβάθμιες επιφάνειες (*surfaces*), οι οποίες συνθέτουν 10 σώματα (*bodies*) και 3 ενότητες (*modules*). Τα σώματα και οι ενότητες προσομοιώνουν τη διάταξη σύμφωνα με τη γεωμετρία που περιγράφηκε στην παράγραφο 6.2.1, ενώ, όπως προαναφέρθηκε, η διερεύνηση της διάταξης περιλαμβάνει αλλαγές στη γεωμετρία του κατευθυντή, τις αποστάσεις δείγματος – ανιχνευτή, τη γωνία του δείγματος, το περιβάλλον μέσο, τα υλικά δείγματος και κατευθυντή. Στο Σχήμα 6.3 παρατίθεται μία γενική απεικόνιση της διάταξης, από το πρόγραμμα *gview2d*. Σε επόμενες παραγράφους θα παρουσιαστούν λεπτομερώς όλες οι διαφορετικές γεωμετρίες που προσομοιώθηκαν, μαζί με τα αποτελέσματα και τη σύγκριση-αξιολόγησή τους. Επιπροσθέτως, στο τέλος του κεφαλαίου 6 παρατίθεται παράδειγμα αρχείου .geo (Πίνακας. 6.3) που χρησιμοποιήθηκε σε προσομοίωση της ΔΕ.

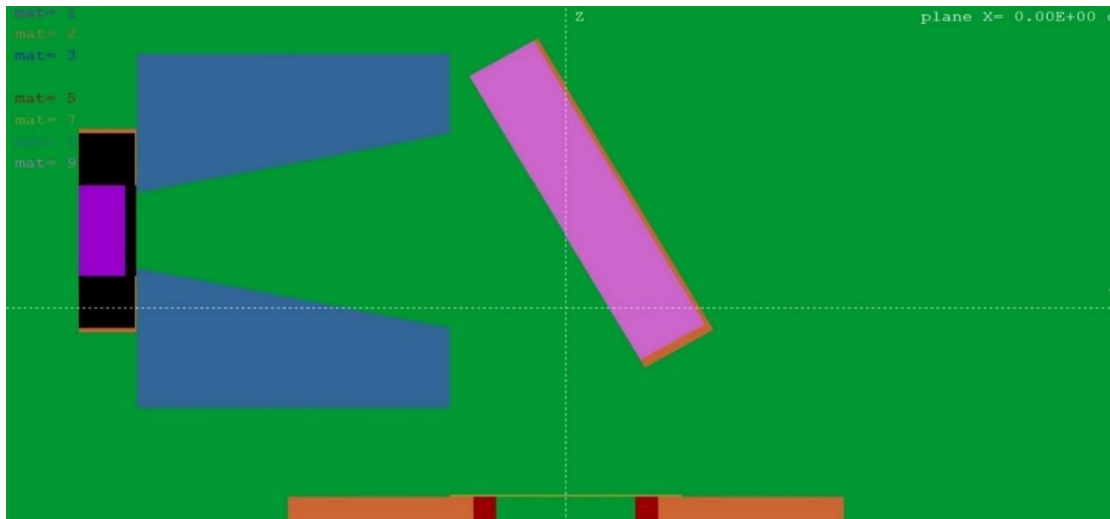


Σχήμα 6.3: Απεικόνιση της διάταξης XRF. Διακρίνεται η πηγή ακτίνων-X στο κέντρο χαμηλά (λευκό σημείο), ο πρωτεύων κατευθυντής από αλουμίνιο με εσωτερική ενίσχυση από plexiglass (πορτοκαλί, κόκκινο), το δείγμα από υλικό $\text{SiO}_2 - \text{Fe}$ 30ppm (ροζ), ο κωνικός κατευθυντής από Teflon (μπλε) που αποτελεί και τη σημαντικότερη υπό μελέτη παράμετρο, ο ανιχνευτής πυριτίου (φούξια) σε περίβλημα με κενό (μαύρο) και ο περιβάλλον αέρας (πράσινο). Στη συγκεκριμένη απεικόνιση η απόσταση ανιχνευτή-δείγματος είναι 5.25εκ, ενώ χρησιμοποιείται και φίλτρο μολυβδαινίου πάχους 0,2mm.

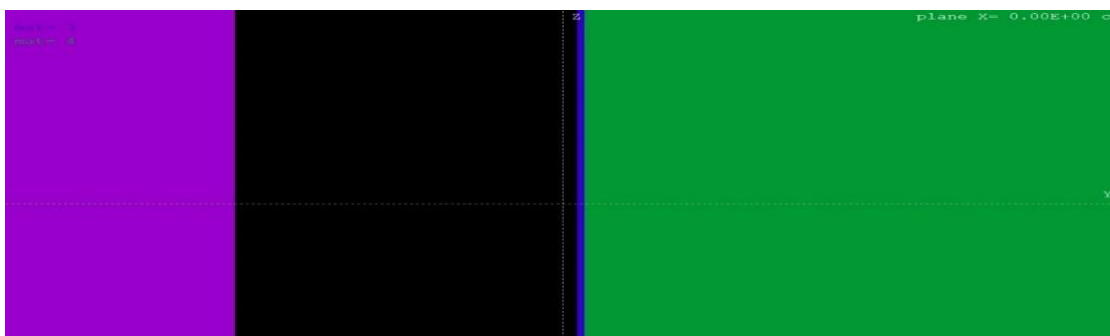
Στα σχήματα 6.4, 6.5 και 6.6 που ακολουθούν παρατίθενται λεπτομέρειες τις διάταξης.



Σχήμα 6.4: Λεπτομέρεια της διάταξης και εστίαση στο φίλτρο βηρυλλίου (μπλε) αμέσως μετά την πηγή ακτίνων-X (λευκό σημείο).



Σχήμα 6.5: Λεπτομέρεια της διάταξης και εστίαση στη διάταξη ανιχνευτή-κωνικού κατευθυντή-δείγματος. Η απόσταση του μέσου του δείγματος από τη βάση του ανιχνευτή είναι 5.25εκ. Στην εικόνα φαίνεται και το δείγμα που τοποθετείται σε δοχείο από αλουμίνιο.



Σχήμα 6.6: Λεπτομέρεια της διάταξης και εστίαση στο παράθυρο βηρυλλίου του ανιχνευτή (μπλε).

6.4.3. Τα αρχεία .mat

Τα αρχεία .mat δημιουργήθηκαν από τον κώδικα *PENELOPE* μέσω του υπο-προγράμματος του *material.f*. Οι ανάγκες της διερεύνησης οδήγησαν στη χρήση 9 υλικών, των οποίων τα ονόματα αρχείων αναφέρονται και στο παράδειγμα αρχείου .in του Πίνακα 6.2, να συνοδεύουν την εντολή *MFNAME*. Οι παράμετροι των υλικών που υπάρχουν στον κατάλογο του κώδικα, καθορίστηκαν από τον ίδιο τον κώδικα (προεπιλογές) και όχι από το χρήστη.

Δημιουργήθηκαν τα υλικά:

- Πυρίτιο Si
- Αλουμίνιο Al
- Βηρύλλιο Be
- Σίδηρος Fe
- Μολυβδένιο Mo
- Αέρας (ξηρός, κοντά στην επιφάνεια της θάλασσας. Αντιστοιχεί στον κωδικό αριθμό 104)
- Plexiglass (Πολυ-μεθακρυλικό μεθύλιο. Αντιστοιχεί στον κωδικό αριθμό 224)
- Teflon (πολυ-τετρα-φθορο-αιθυλένιο. Αντιστοιχεί στον κωδικό αριθμό 228)
- SiO₂ – Fe 30ppm (Δημιουργήθηκε από το χρήστη: διοξείδιο του πυριτίου με προσμίξεις σιδήρου σε συγκέντρωση 30ppm. Στον κώδικα δόθηκαν οι παράμετροι: πυκνότητα 1.7g/cm³, κατά βάρος σύσταση σιδήρου 0.00003w/w, πυριτίου 0.53331w/w, οξυγόνου 0.46665w/w)
- SiO₂ – Fe 500ppm (Δημιουργήθηκε από το χρήστη: διοξείδιο του πυριτίου με προσμίξεις σιδήρου σε συγκέντρωση 500ppm. Στον κώδικα δόθηκαν οι παράμετροι: πυκνότητα 1.7g/cm³, κατά βάρος σύσταση σιδήρου 0.0005w/w, πυριτίου 0.46636w/w, οξυγόνου 0.53303w/w)
- SiO₂ – Fe 1000ppm (Δημιουργήθηκε από το χρήστη: διοξείδιο του πυριτίου με προσμίξεις σιδήρου σε συγκέντρωση 1000ppm. Στον κώδικα δόθηκαν οι παράμετροι: πυκνότητα 1.7g/cm³, κατά βάρος σύσταση σιδήρου 0.001w/w, πυριτίου 0.46613w/w, οξυγόνου 0.53276w/w)

```
TITLE Simulation with X-ray spectrum from Mo anode
      >>>>>>> Source
SKPAR 2          [Primary particles: 1=electron, 2=photon, 3=positron]
SPECTR 222.85 3.13e-05
SPECTR 4.6855e2 6.99e-07
SPECTR 7.1426e2 0.00e00
SPECTR 9.5996e2 4.44e-06
SPECTR 1.2057e3 1.64e-05
SPECTR 1.4514e3 4.28e-04
SPECTR 1.6971e3 2.08e-05
SPECTR 1.9428e3 9.86e-05
SPECTR 2.1885e3 7.49e-04
SPECTR 2.4342e3 3.92e-04
SPECTR 2.6799e3 1.30e-05
SPECTR 2.9256e3 1.05e-05
SPECTR 3.1713e3 9.58e-06
SPECTR 3.4170e3 1.14e-05
SPECTR 3.6627e3 1.25e-05
SPECTR 3.9084e3 1.32e-05
SPECTR 4.1541e3 1.43e-05
SPECTR 4.3998e3 1.58e-05
SPECTR 4.6455e3 1.49e-05
SPECTR 4.8912e3 1.92e-05
SPECTR 5.1369e3 1.96e-05
SPECTR 5.3826e3 1.92e-05
SPECTR 5.6283e3 2.20e-05
SPECTR 5.8740e3 2.32e-05
SPECTR 6.1197e3 2.15e-05
SPECTR 6.3654e3 2.40e-05
SPECTR 6.6111e3 2.23e-05
SPECTR 6.8568e3 2.49e-05
SPECTR 7.1025e3 2.27e-05
```

Πίνακας 6.2: Παράδειγμα αρχείου *.in* που χρησιμοποιήθηκε σε προσομοίωση της ΔΕ. Στις διάφορες προσομοιώσεις, αλλάζει μόνο η διάρκεια της προσομοίωσης, είτε σε όρους χρόνου, είτε σε όρους αριθμού ιστοριών. Οι υπόλοιπες παράμετροι που προσφέρει προς ρύθμιση ο κώδικας και παρουσιάστηκαν στην παράγραφο 5.2.1, δεν καθορίστηκαν από το χρήστη.

```
SPECTR 7.3482e3 2.39e-05
SPECTR 7.5939e3 2.69e-05
SPECTR 7.8396e3 2.36e-05
SPECTR 8.0854e3 2.61e-05
SPECTR 8.3311e3 2.48e-05
SPECTR 8.5768e3 2.59e-05
SPECTR 8.8225e3 2.58e-05
SPECTR 9.0682e3 2.34e-05
SPECTR 9.3139e3 2.53e-05
SPECTR 9.5596e3 2.43e-05
SPECTR 9.8053e3 2.46e-05
SPECTR 1.0051e4 2.23e-05
SPECTR 1.0297e4 2.14e-05
SPECTR 1.0542e4 2.33e-05
SPECTR 1.0788e4 2.33e-05
SPECTR 1.1034e4 2.30e-05
SPECTR 1.1279e4 2.23e-05
SPECTR 1.1525e4 2.36e-05
SPECTR 1.1771e4 2.37e-05
SPECTR 1.2017e4 2.21e-05
SPECTR 1.2262e4 2.06e-05
SPECTR 1.2508e4 1.89e-05
SPECTR 1.2754e4 2.15e-05
SPECTR 1.2999e4 2.08e-05
SPECTR 1.3245e4 2.03e-05
SPECTR 1.3491e4 1.81e-05
SPECTR 1.3737e4 1.91e-05
SPECTR 1.3982e4 2.06e-05
SPECTR 1.4228e4 1.88e-05
SPECTR 1.4474e4 1.92e-05
SPECTR 1.4719e4 1.74e-05
SPECTR 1.4965e4 1.69e-05
SPECTR 1.5211e4 1.65e-05
SPECTR 1.5456e4 1.77e-05
```

Πίνακας 6.2: (συνέχεια) Παράδειγμα αρχείου *.in* που χρησιμοποιήθηκε σε προσομοίωση της ΔΕ. Στις διάφορες προσομοιώσεις, αλλάζει μόνο η διάρκεια της προσομοίωσης, είτε σε όρους χρόνου, είτε σε όρους αριθμού ιστοριών. Οι υπόλοιπες παράμετροι που προσφέρει προς ρύθμιση ο κώδικας και παρουσιάστηκαν στην παράγραφο 5.2.1, δεν καθορίστηκαν από το χρήστη.

```
SPECTR 1.5702e4 1.45e-05
SPECTR 1.5948e4 1.66e-05
SPECTR 1.6194e4 1.59e-05
SPECTR 1.6439e4 1.55e-05
SPECTR 1.6685e4 1.54e-05
SPECTR 1.6931e4 1.54e-05
SPECTR 1.7176e4 1.55e-05
SPECTR 1.7422e4 4.76e-04
SPECTR 1.7668e4 1.41e-05
SPECTR 1.7913e4 1.52e-05
SPECTR 1.8159e4 1.44e-05
SPECTR 1.8405e4 1.30e-05
SPECTR 1.8651e4 1.37e-05
SPECTR 1.8896e4 1.29e-05
SPECTR 1.9142e4 1.33e-05
SPECTR 1.9388e4 1.18e-05
SPECTR 1.9633e4 8.66e-05
SPECTR 1.9879e4 2.02e-05
SPECTR 2.0125e4 9.48e-06
SPECTR 2.0371e4 8.33e-06
SPECTR 2.0616e4 7.98e-06
SPECTR 2.0862e4 8.28e-06
SPECTR 2.1108e4 8.33e-06
SPECTR 2.1353e4 7.28e-06
SPECTR 2.1599e4 8.23e-06
SPECTR 2.1845e4 7.98e-06
SPECTR 2.2090e4 6.54e-06
SPECTR 2.2336e4 7.04e-06
SPECTR 2.2582e4 7.78e-06
SPECTR 2.2828e4 7.58e-06
SPECTR 2.3073e4 8.13e-06
SPECTR 2.3319e4 7.13e-06
SPECTR 2.3565e4 7.13e-06
SPECTR 2.3810e4 8.03e-06
```

Πίνακας 6.2: (συνέχεια) Παράδειγμα αρχείου *.in* που χρησιμοποιήθηκε σε προσομοίωση της ΔΕ. Στις διάφορες προσομοιώσεις, αλλάζει μόνο η διάρκεια της προσομοίωσης, είτε σε όρους χρόνου, είτε σε όρους αριθμού ιστοριών. Οι υπόλοιπες παράμετροι που προσφέρει προς ρύθμιση ο κώδικας και παρουσιάστηκαν στην παράγραφο 5.2.1, δεν καθορίστηκαν από το χρήστη.

```
SPECTR 2.4056e4 7.98e-06
SPECTR 2.4302e4 6.89e-06
SPECTR 2.4547e4 6.74e-06
SPECTR 2.4793e4 6.94e-06
SPECTR 2.5039e4 5.54e-06
SPECTR 2.5285e4 6.29e-06
SPECTR 2.5530e4 6.24e-06
SPECTR 2.5776e4 6.14e-06
SPECTR 2.6022e4 6.99e-06
SPECTR 2.6267e4 4.84e-06
SPECTR 2.6513e4 6.09e-06
SPECTR 2.6759e4 6.74e-06
SPECTR 2.7004e4 5.44e-06
SPECTR 2.7250e4 6.09e-06
SPECTR 2.7496e4 5.74e-06
SPECTR 2.7742e4 5.34e-06
SPECTR 2.7987e4 5.19e-06
SPECTR 2.8233e4 5.49e-06
SPECTR 2.8479e4 5.49e-06
SPECTR 2.8724e4 5.04e-06
SPECTR 2.8970e4 4.84e-06
SPECTR 2.9216e4 6.44e-06
SPECTR 2.9462e4 4.59e-06
SPECTR 2.9707e4 4.89e-06
SPECTR 2.9953e4 5.69e-06
SPECTR 3.0199e4 4.34e-06
SPECTR 3.0444e4 4.49e-06
SPECTR 3.0690e4 4.19e-06
SPECTR 3.0936e4 5.09e-06
SPECTR 3.1181e4 5.19e-06
SPECTR 3.1427e4 4.79e-06
SPECTR 3.1673e4 4.09e-06
SPECTR 3.1919e4 3.94e-06
SPECTR 3.2164e4 3.89e-06
```

Πίνακας 6.2: (συνέχεια) Παράδειγμα αρχείου *.in* που χρησιμοποιήθηκε σε προσομοίωση της ΔΕ. Στις διάφορες προσομοιώσεις, αλλάζει μόνο η διάρκεια της προσομοίωσης, είτε σε όρους χρόνου, είτε σε όρους αριθμού ιστοριών. Οι υπόλοιπες παράμετροι που προσφέρει προς ρύθμιση ο κώδικας και παρουσιάστηκαν στην παράγραφο 5.2.1, δεν καθορίστηκαν από το χρήστη.

```
SPECTR 3.2410e4 3.89e-06
SPECTR 3.2656e4 3.64e-06
SPECTR 3.2901e4 3.44e-06
SPECTR 3.3147e4 3.94e-06
SPECTR 3.3393e4 4.44e-06
SPECTR 3.3638e4 3.74e-06
SPECTR 3.3884e4 3.29e-06
SPECTR 3.4130e4 4.09e-06
SPECTR 3.4376e4 3.99e-06
SPECTR 3.4621e4 3.19e-06
SPECTR 3.4867e4 3.89e-06
SPECTR 3.5113e4 4.19e-06
SPECTR 3.5358e4 3.24e-06
SPECTR 3.5604e4 3.49e-06
SPECTR 3.5850e4 3.09e-06
SPECTR 3.6096e4 2.35e-06
SPECTR 3.6341e4 3.59e-06
SPECTR 3.6587e4 2.69e-06
SPECTR 3.6833e4 2.35e-06
SPECTR 3.7078e4 2.54e-06
SPECTR 3.7324e4 2.69e-06
SPECTR 3.7570e4 3.54e-06
SPECTR 3.7815e4 2.49e-06
SPECTR 3.8061e4 2.44e-06
SPECTR 3.8307e4 2.44e-06
SPECTR 3.8553e4 2.20e-06
SPECTR 3.8798e4 2.79e-06
SPECTR 3.9044e4 1.90e-06
SPECTR 3.9290e4 2.44e-06
SPECTR 3.9535e4 2.30e-06
SPECTR 3.9781e4 2.10e-06
SPECTR 4.0027e4 2.69e-06
SPECTR 4.0272e4 2.00e-06
SPECTR 4.0518e4 2.00e-06
```

Πίνακας 6.2: (συνέχεια) Παράδειγμα αρχείου *.in* που χρησιμοποιήθηκε σε προσομοίωση της ΔΕ. Στις διάφορες προσομοιώσεις, αλλάζει μόνο η διάρκεια της προσομοίωσης, είτε σε όρους χρόνου, είτε σε όρους αριθμού ιστοριών. Οι υπόλοιπες παράμετροι που προσφέρει προς ρύθμιση ο κώδικας και παρουσιάστηκαν στην παράγραφο 5.2.1, δεν καθορίστηκαν από το χρήστη.

```
SPECTR 4.0764e4 2.00e-06
SPECTR 4.1010e4 2.20e-06
SPECTR 4.1255e4 1.70e-06
SPECTR 4.1501e4 1.85e-06
SPECTR 4.1747e4 1.60e-06
SPECTR 4.1992e4 2.00e-06
SPECTR 4.2238e4 1.70e-06
SPECTR 4.2484e4 1.20e-06
SPECTR 4.2730e4 1.80e-06
SPECTR 4.2975e4 1.50e-06
SPECTR 4.3221e4 1.70e-06
SPECTR 4.3467e4 1.75e-06
SPECTR 4.3712e4 1.40e-06
SPECTR 4.3958e4 1.30e-06
SPECTR 4.4204e4 1.40e-06
SPECTR 4.4449e4 9.98e-07
SPECTR 4.4695e4 9.48e-07
SPECTR 4.4941e4 6.99e-07
SPECTR 4.5187e4 6.99e-07
SPECTR 4.5432e4 8.98e-07
SPECTR 4.5678e4 6.49e-07
SPECTR 4.5924e4 5.49e-07
SPECTR 4.6169e4 6.49e-07
SPECTR 4.6415e4 9.48e-07
SPECTR 4.6661e4 7.48e-07
SPECTR 4.6906e4 5.99e-07
SPECTR 4.7152e4 8.98e-07
SPECTR 4.7398e4 7.98e-07
SPECTR 4.7644e4 2.99e-07
SPECTR 4.7889e4 3.49e-07
SPECTR 4.8135e4 3.99e-07
SPECTR 4.8381e4 3.99e-07
SPECTR 4.8626e4 2.49e-07
SPECTR 4.8872e4 1.50e-07
```

Πίνακας 6.2: (συνέχεια) Παράδειγμα αρχείου *.in* που χρησιμοποιήθηκε σε προσομοίωση της ΔΕ. Στις διάφορες προσομοιώσεις, αλλάζει μόνο η διάρκεια της προσομοίωσης, είτε σε όρους χρόνου, είτε σε όρους αριθμού ιστοριών. Οι υπόλοιπες παράμετροι που προσφέρει προς ρύθμιση ο κώδικας και παρουσιάστηκαν στην παράγραφο 5.2.1, δεν καθορίστηκαν από το χρήστη.


```

SPECTR 4.9118e4 4.99e-07
SPECTR 4.9363e4 2.99e-07
SPECTR 4.9609e4 2.99e-07
SPECTR 4.9855e4 2.49e-07
SPECTR 5.0101e4 -0.0
SPOSIT 0 0 0 [Coordinates of the source]
SCONE 0 0 7 [Beam axis direction angles, aperture, in deg]
.
>>>>>>> Material data and simulation parameters.
Up to MAXMAT materials; 2 lines for each material.
MFNAME Si.mat
MSIMPA 5.0e3 1.0e2 5.0e3 0.1 0.1 5.0e3 1.0e2 [EABS (1:3),C1,C2,WCC,WCR]
MFNAME Al.mat
MSIMPA 5.0e3 5.0e2 5.0e3 0.1 0.1 5.0e3 5.0e2 [EABS (1:3),C1,C2,WCC,WCR]
MFNAME Be.mat
MSIMPA 5.0e3 1.0e2 5.0e3 0.1 0.1 5.0e3 1.0e2 [EABS (1:3),C1,C2,WCC,WCR]
MFNAME Air.mat
MSIMPA 5.0e3 5.0e2 5.0e3 0.1 0.1 5.0e3 5.0e2 [EABS (1:3),C1,C2,WCC,WCR]
MFNAME Plexiglass.mat
MSIMPA 5.0e3 5.0e2 5.0e3 0.1 0.1 5.0e3 5.0e2 [EABS (1:3),C1,C2,WCC,WCR]
MFNAME Fe.mat
MSIMPA 5.0e3 5.0e2 5.0e3 0.1 0.1 5.0e3 5.0e2 [EABS (1:3),C1,C2,WCC,WCR]
MFNAME Mo.mat
MSIMPA 5.0e3 5.0e2 5.0e3 0.1 0.1 5.0e3 5.0e2 [EABS (1:3),C1,C2,WCC,WCR]
MFNAME Teflon.mat
MSIMPA 5.0e3 5.0e2 5.0e3 0.1 0.1 5.0e3 5.0e2 [EABS (1:3),C1,C2,WCC,WCR]
MFNAME deigma.mat
MSIMPA 5.0e3 5.0e2 5.0e3 0.1 0.1 5.0e3 5.0e2 [EABS (1:3),C1,C2,WCC,WCR]
.
>>>>>>> Geometry definition file.
GEOMFN cha.geo [Geometry definition file, 20 chars]
.
>>>>>>> Energy deposition detectors (up to 25).
ENDETC 2e2 5e4 1000 [Energy window and number of bins]

```

Πίνακας 6.2: (συνέχεια) Παράδειγμα αρχείου *.in* που χρησιμοποιήθηκε σε προσομοίωση της ΔΕ. Στις διάφορες προσομοιώσεις, αλλάζει μόνο η διάρκεια της προσομοίωσης, είτε σε όρους χρόνου, είτε σε όρους αριθμού ιστοριών. Οι υπόλοιπες παράμετροι που προσφέρει προς ρύθμιση ο κώδικας και παρουσιάστηκαν στην παράγραφο 5.2.1, δεν καθορίστηκαν από το χρήστη.

```

EDBODY 1 [Active body; one line for each body]
.
>>>>>>> Job properties
RESUME dump.dmp [Resume from this dump file, 20 chars]
DUMPTO dump.dmp [Generate this dump file, 20 chars]
DUMPP 60 [Dumping period, in sec]
NSIMSH 1e15 [Desired number of simulated showers]
TIME 864e3 [Allotted simulation time, in sec]
.
END

```

Πίνακας 6.2: (συνέχεια) Παράδειγμα αρχείου *.in* που χρησιμοποιήθηκε σε προσομοίωση της ΔΕ. Στις διάφορες προσομοιώσεις, αλλάζει μόνο η διάρκεια της προσομοίωσης, είτε σε όρους χρόνου, είτε σε όρους αριθμού ιστοριών. Οι υπόλοιπες παράμετροι που προσφέρει προς ρύθμιση ο κώδικας και παρουσιάστηκαν στην παράγραφο 5.2.1, δεν καθορίστηκαν από το χρήστη.


```

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)
00000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000
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)
00000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000
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)
00000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000
BODY    (   7) Be window(collimator's)
MATERIAL(   3)
SURFACE (  13), SIDE POINTER=(+1)
SURFACE (  18), SIDE POINTER=(-1)
SURFACE (  17), SIDE POINTER=(-1)
00000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000
BODY    (   8) 8iki digmatos
MATERIAL(   2)
SURFACE (  19), SIDE POINTER=(+1)
SURFACE (  20), SIDE POINTER=(-1)
SURFACE (  21), SIDE POINTER=(-1)
00000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000
BODY    (   9) 8iki digmatos
MATERIAL(   2)

```

Πίνακας 6.3: (συνέχεια) Παράδειγμα αρχείου *.geo* που χρησιμοποιήθηκε σε προσομοίωση της ΔΕ. Στις παραγράφους που ακολουθούν, δεν παρατίθενται ολόκληρα τα αρχεία αλλά στιγμιότυπα οθόνης απεικονίσεων της κάθε διάταξης και αναφέρονται οι παράμετροι που ρυθμίζονται ανάλογα με το σκοπό της εκάστοτε προσομοίωσης.


```
SURFACE ( 19), SIDE POINTER=(-1)
SURFACE ( 23), SIDE POINTER=(+1)
SURFACE ( 21), SIDE POINTER=(-1)
SURFACE ( 22), SIDE POINTER=(+1)
00000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000
BODY ( 10) digma
MATERIAL( 9)
BODY ( 9)
SURFACE ( 23), SIDE POINTER=(+1)
SURFACE ( 19), SIDE POINTER=(-1)
SURFACE ( 22), SIDE POINTER=(-1)
00000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000
MODULE ( 11)
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)
11111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111111
OMEGA=( 0.0000000000000000E+00, 0) DEG
THETA=( 9.0000000000000000E+01, 0) DEG
PHI=( 9.0000000000000000E+01, 0) DEG
X-SHIFT=( 0.0000000000000000E+00, 0)
Y-SHIFT=(-5.2500000000000000E+00, 0)
Z-SHIFT=( 1.5000000000000000E+01, 0)
00000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000000
MODULE ( 12) collimator
MATERIAL( 8)
SURFACE ( 27), SIDE POINTER=( 1)
SURFACE ( 24), SIDE POINTER=(-1)
SURFACE ( 25), SIDE POINTER=( 1)
SURFACE ( 26), SIDE POINTER=(-1)
```

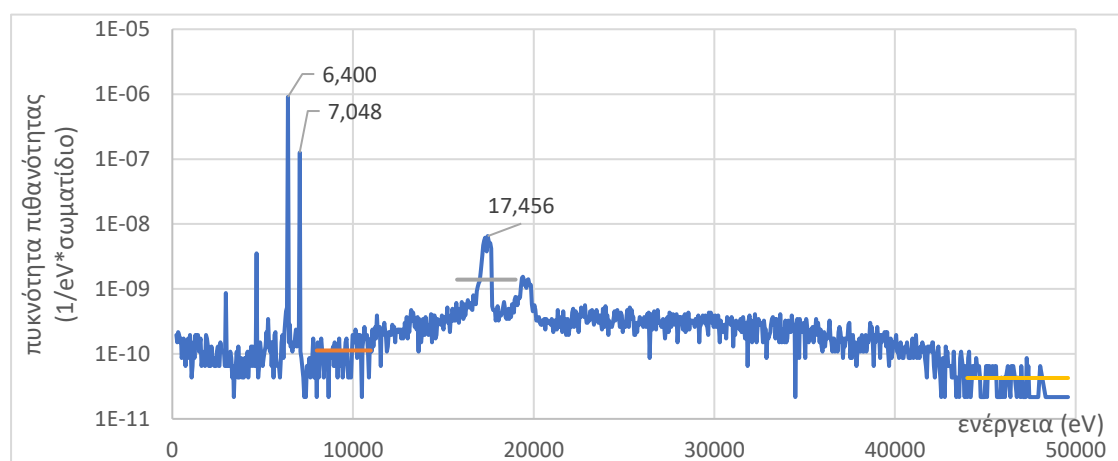
Πίνακας 6.3: (συνέχεια) Παράδειγμα αρχείου *.geo* που χρησιμοποιήθηκε σε προσομοίωση της ΔΕ. Στις παραγράφους που ακολουθούν, δεν παρατίθενται ολόκληρα τα αρχεία αλλά στιγμιότυπα οθόνης απεικονίσεων της κάθε διάταξης και αναφέρονται οι παράμετροι που ρυθμίζονται ανάλογα με το σκοπό της εκάστοτε προσομοίωσης.

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 7 // Αποτελέσματα προσομοιώσεων της διάταξης XRF για διαφορετικού τύπου κατευθυντές και γεωμετρίες

7.1. Εισαγωγικές σημειώσεις – υπολογισμός των λόγων peak-to-background

Στο κεφάλαιο αυτό παρουσιάζονται τα αποτελέσματα των προσομοιώσεων που πραγματοποιήθηκαν, εστιάζοντας στις διαφορετικές παραμέτρους της διάταξης XRF που επηρεάζουν το λόγο κορυφή-προς-υπόστρωμα (peak-to-background) στο φάσμα που συλλέγεται. Κάθε ενότητα αφορά συγκεκριμένες παραμέτρους της διάταξης και περιέχει πληροφορίες σχετικά με τη σημασία τους για τη διάταξη, το σκεπτικό πίσω από τη ρύθμισή τους, τα αριθμητικά αποτελέσματα που προέκυψαν, και συγκριτική ανάλυσή τους.

Τα αποτελέσματα των προσομοιώσεων (βλ. παρ. 5.2) περιλαμβάνουν ένα αρχείο με το ενεργειακό φάσμα που ανιχνεύεται, σε μορφή τιμών εύρους ενέργειας (eV) και πυκνότητας πιθανότητας ($1/eV \cdot \text{σωματίδιο}$). Στο διάγραμμα του σχήματος 7.1 παρουσιάζεται ένα τυπικό φάσμα του ανιχνευτή. Στο διάγραμμα έχουν σημειωθεί οι ενέργειες K_{α} (6.4keV) και K_{β} (7.04keV) του σιδήρου, υλικό του δείγματος. Φαίνονται επίσης οι ακτίνες-X του μολυβδαινίου (Mo) υλικού της πηγής ακτίνων-X, καθώς και οι μέσες τιμές πυκνότητας πιθανότητας σε τρεις περιοχές του διαγράμματος (πορτοκαλί, γκρι, κίτρινο). Από τα δεδομένα του αρχείου απομονώθηκαν οι τιμές πυκνότητας πιθανότητας που δεν αντιστοιχούν σε μηδέν, για να γίνει εφικτή η λογαρίθμηση των δεδομένων.



Σχήμα 7.1: Φάσμα που παράγεται από το αρχείο αποτελεσμάτων src-enddet.dat σε λογαριθμική κλίμακα.

Για την αξιολόγηση της ποιότητας του ενεργειακού φάσματος που ανιχνεύεται, σε κάθε προσομοίωση υπολογίζονται τρεις λόγοι peak-to-background (p-t-b). Γενικά, οι λόγοι

p-t-b χρησιμοποιούνται στη φασματοσκοπία για να ποσοτικοποιηθεί η επιφάνεια μιας κορυφής σε σχέση με το υπόστρωμα. Στην περίπτωση της ΔΕ, εντοπίζεται η υψηλότερη κορυφή των διαγραμμάτων, που αντιστοιχεί στη χαρακτηριστική K_{α} του σιδήρου, στα 6.4keV και καταγράφεται η αντίστοιχη τιμή της πυκνότητας πιθανότητας, καθώς και το μέσο επίπεδο υποστρώματος σε τρεις διαφορετικές περιοχές του φάσματος (σχήμα 7.1). Οι τρεις περιοχές επιλέχθηκαν ώστε να παρέχεται μια λεπτομερής αξιολόγηση του κάθε ενεργειακού φάσματος.

- Ο πρώτος λόγος p-t-b κάθε διαγράμματος υπολογίζεται για την περιοχή αμέσως μετά τις κορυφές του σιδήρου, ως η πυκνότητα πιθανότητας της κορυφής K_{α} προς τη μέση τιμή της πυκνότητας πιθανότητας του υποστρώματος, στην περιοχή 8keV-11keV.
- Ο δεύτερος λόγος p-t-b κάθε διαγράμματος δίνει μία εκτίμηση του υποστρώματος για την περιοχή γύρω από την κορυφή K_{α} του μολυβδαινίου. Η περιοχή αυτή παρουσιάζει ιδιαίτερο ενδιαφέρον καθώς αφορά την έντονα σκεδαζόμενη ακτινοβολία των χαρακτηριστικών της ανόδου τη μηχανής. Υπολογίζεται ως η πυκνότητα πιθανότητας της κορυφής K_{α} του σιδήρου προς τη μέση τιμή της πυκνότητας πιθανότητας στην περιοχή γύρω από την κορυφή K_{α} του μολυβδαινίου, συγκεκριμένα στην περιοχή των 16keV-19keV.
- Ο τρίτος λόγος p-t-b κάθε διαγράμματος δίνει μία εκτίμηση του υποστρώματος στην περιοχή στο τέλος του διαγράμματος. Υπολογίζεται ως η πυκνότητα πιθανότητας της κορυφής K_{α} του σιδήρου προς τη μέση τιμή της πυκνότητας πιθανότητας του υποστρώματος για τις υψηλότερες ενέργειες του φάσματος. Συγκεκριμένα, επιλέγεται το ενεργειακό εύρος 44keV-50keV, διπλάσιο από τις προηγούμενες δύο περιπτώσεις.

Στις παραγράφους που ακολουθούν παρουσιάζεται η διερεύνηση που έγινε αναφορικά με την επίδραση που έχουν οι διάφορες παράμετροι της διάταξης στον λόγο p-t-b.

7.2. Διερεύνηση πρώτη: σχήμα κατευθυντή και κλίση δείγματος

Η ενότητα αυτή εστιάζει στη μελέτη της επίδρασης του σχήματος του κατευθυντή και της γωνίας κλίσης του δείγματος στους λόγους p-t-b για δύο γεωμετρίες και πέντε διαφορετικές αποστάσεις δείγματος-ανιχνευτή.

Το σχήμα του κατευθυντή καθορίζει την ποσότητα και την κατεύθυνση της ακτινοβολίας που φτάνει ως τον ανιχνευτή, φιλτράροντας τις ακτίνες-X που δεν έχουν αξία για το πείραμα. Η βασική λογική για την επιλογή του σχήματος του κατευθυντή ήταν η

ενεργός επιφάνεια του ανιχνευτή να δέχεται ακτίνες-X μόνον από την επιφάνεια του δείγματος. Για το σκοπό αυτό, σχεδιάστηκε ένας κατευθυντής με κωνική διαμόρφωση και ένας τύπου pinhole. Το κύριο χαρακτηριστικό του κατευθυντή με κωνική διαμόρφωση είναι ότι επιτρέπει σε όλα τα σημεία της επιφάνειας του ανιχνευτή, να βλέπουν όλα τα σημεία του δείγματος και μόνον, σε μεγάλο ποσοστό. Ωστόσο, από την επιφάνεια του δείγματος, πέρα από τις χαρακτηριστικές ακτίνες-X που αυτό εκπέμπει, καταφτάνουν και σκεδασμένες στο δείγμα ακτίνες-X που συμβάλλουν στο υπόστρωμα. Για το λόγο αυτό, η λογική πίσω από τον σχεδιασμό του κατευθυντή τύπου pinhole είναι η επιφάνεια του ανιχνευτή να βλέπει περιορισμένο τμήμα του δείγματος, έτσι ενώ μειώνεται η ακτινοβολία που επιτρέπεται να φτάσει στον ανιχνευτή, μπορεί σε κάποιες περιπτώσεις να μειώνεται περισσότερο η ακτινοβολία υποστρώματος, βελτιώνοντας έτσι τον λόγο p-t-b. Αυτό επιτυγχάνεται εμποδίζοντας τα φωτόνια που εκπέμπονται από το δείγμα να σκεδαστούν στην εσωτερική επιφάνεια του κατευθυντή πριν φτάσουν στον ανιχνευτή.

Αξίζει να σημειωθεί πως και οι δύο σχεδιασμοί μοντελοποιήθηκαν χωρίς να περάσουν από κάποια διαδικασία βελτιστοποίησης – με την αυστηρή έννοια του όρου – καθώς η ΔΕ εστιάζει σε μία πρώτη σύγκριση της επίδοσής τους. Επομένως, περαιτέρω μελέτες μπορούν να επικεντρωθούν στη βελτιστοποίηση της γεωμετρίας τους ώστε να επιτευχθούν ακόμα καλύτερα αποτελέσματα.

Οι δύο κατευθυντές δοκιμάστηκαν με τη μέθοδο των προσομοιώσεων για πέντε διαδοχικές αποστάσεις δείγματος-ανιχνευτή, από πολύ μακριά έως πολύ κοντά, για τα δεδομένα μίας τυπικής διάταξης XRF: 12.5cm (θέση 1), 10cm (θέση 2), 8cm (θέση 3), 5.25cm (θέση 4), 3cm (θέση 5). Με τον όρο απόσταση εννοείται η απόσταση μεταξύ των θέσεων που ορίστηκαν στο αρχείο .geo και αφορούν την απόσταση της βάσης του ανιχνευτή από τη βάση του δείγματος. Επιπλέον, πραγματοποιήθηκε και μία προσομοίωση χωρίς κατευθυντή για κάθε θέση, για μια πιο ολοκληρωμένη αξιολόγηση των αποτελεσμάτων.

Η γωνία του δείγματος επηρεάζει επίσης τις μετρήσεις, καθώς η ρύθμισή της μεταβάλλει τη στερεά γωνία με την οποία βλέπει ο ανιχνευτής το δείγμα, αλλά και τη στερεά γωνία που βλέπει η δέσμη ακτίνων-X το δείγμα. Για λόγους απλότητας, αλλάζοντας τη γωνία μπορεί να θεωρηθεί ότι αλλάζει η «ενεργός επιφάνεια» του ανιχνευτή. Αυξάνοντας την ενεργό επιφάνεια προς την πηγή, αναμένεται καλύτερος φθορισμός του δείγματος και αύξηση των ακτίνων-X που εκπέμπονται. Αντίθετα, αυξάνοντας την ενεργό επιφάνεια προς τον ανιχνευτή αναμένεται αύξηση του πλήθους των ακτίνων-X που ανιχνεύονται από τον ανιχνευτή. Οι δύο αυτές παράμετροι είναι ανταγωνιστικές μεταξύ

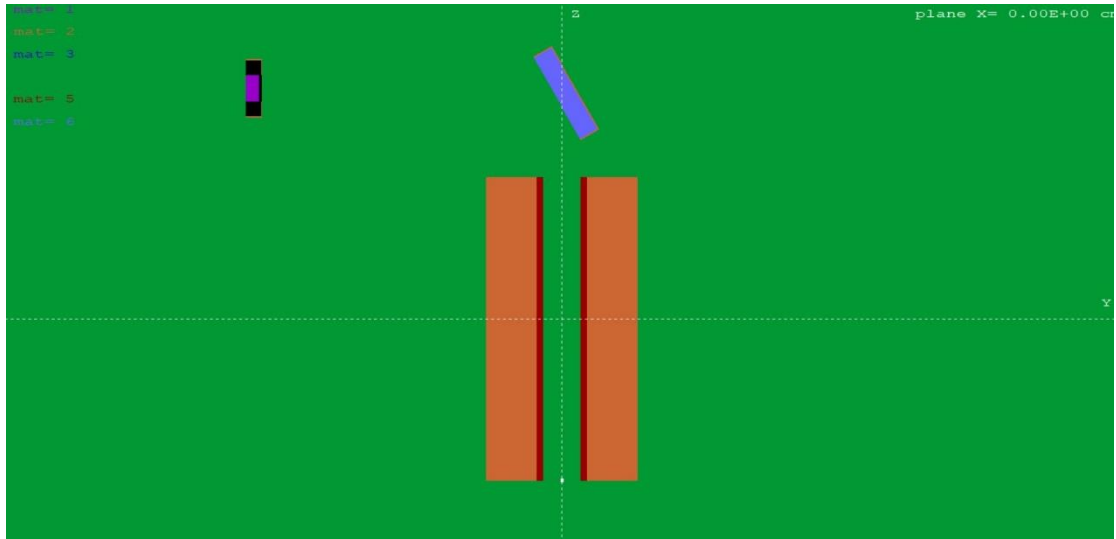
τους, επομένως έγιναν δοκιμές για μία μικρότερη και για μία μεγαλύτερη γωνία δείγματος από εκείνη της διάταξης του εργαστηρίου που είναι 30°, συγκεκριμένα δοκιμάστηκαν 25°, 30°, 50°, για τέσσερις αποστάσεις δείγματος-ανιχνευτή. Για τη μικρότερη απόσταση των 3cm δεν προσομοιώθηκε η περιστροφή του δείγματος στις 50° καθώς το δείγμα ερχόταν σε επαφή με τον κατευθυντή.

Στον Πίνακα 7.1 που ακολουθεί παρατίθεται η περιγραφή και η κωδικοποίηση των διαφόρων γεωμετριών που προσομοιώθηκαν. Η κωδικοποίηση γίνεται με έναν κωδικό με τρεις αριθμούς που χωρίζονται από «.». Ο πρώτος αριθμός αναφέρεται στη θέση, ο δεύτερος στην ύπαρξη και το είδος του κατευθυντή και ο τρίτος στη γωνία του κατευθυντή.

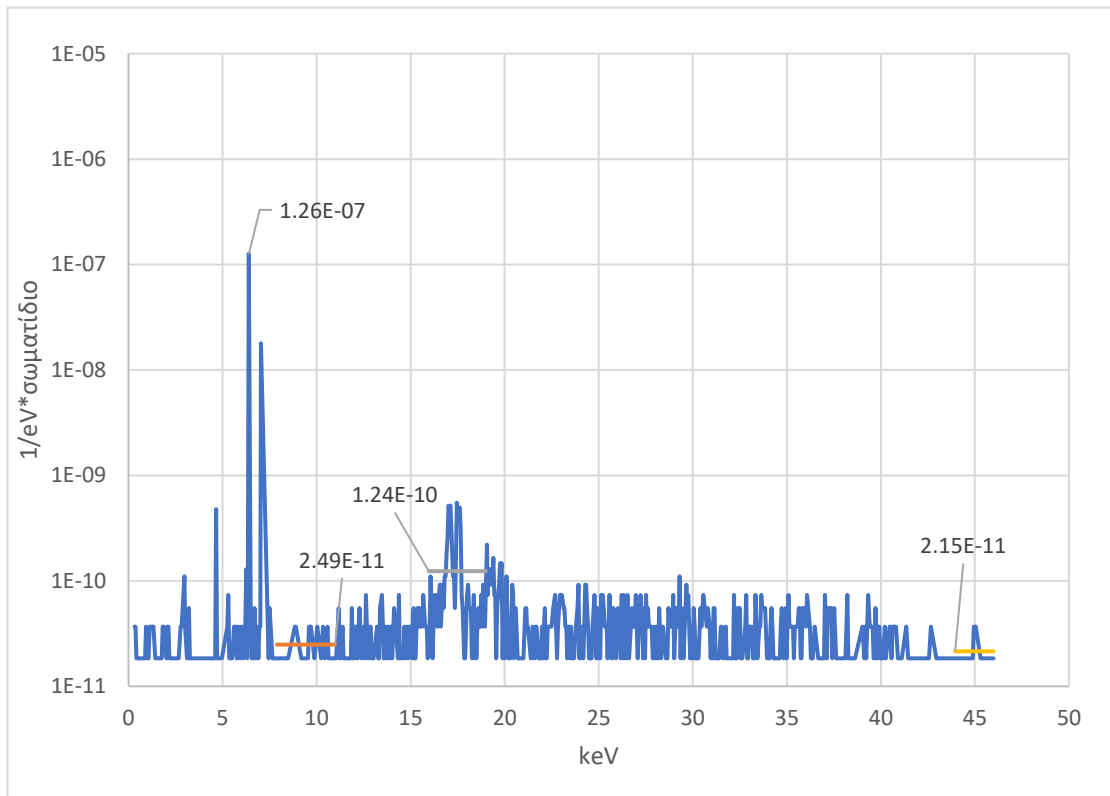
Αρίθμηση θέση	Απόσταση βάσης ανιχνευτή – βάσης δείγματος (cm)	χωρίς κατευθυντή, 30°	κωνικός κατευθυντής, 30°	κωνικός κατευθυντής, 50°	κωνικός κατευθυντής, 25°	κατευθυντής pinhole, 30°
1	12.50	1.0.30	1.1.30	1.1.50	1.1.25	1.2.30
2	10.00	2.0.30	2.1.30	2.1.50	2.1.25	2.2.30
3	8.00	3.0.30	3.1.30	3.1.50	3.1.25	3.2.30
4	5.25	4.0.30	4.1.30	4.1.50	4.1.25	4.2.30
5	3.00	5.0.30	5.1.30	5.1.50	5.1.25	5.2.30

Πίνακας 7.1: Περιγραφή και αρίθμηση των διαφόρων γεωμετριών που προσομοιώθηκαν.

Στη συνέχεια της παραγράφου παρατίθενται για κάθε γεωμετρία: (α) η απεικόνιση της γεωμετρίας μέσω του προγράμματος gview2d (β) το αντίστοιχο φάσμα ακτίνων-Χ που συλλέγει ο ανιχνευτής, και (γ) οι τιμές του λόγου p-t-b για τις τρεις περιοχές υποστρώματος του φάσματος.



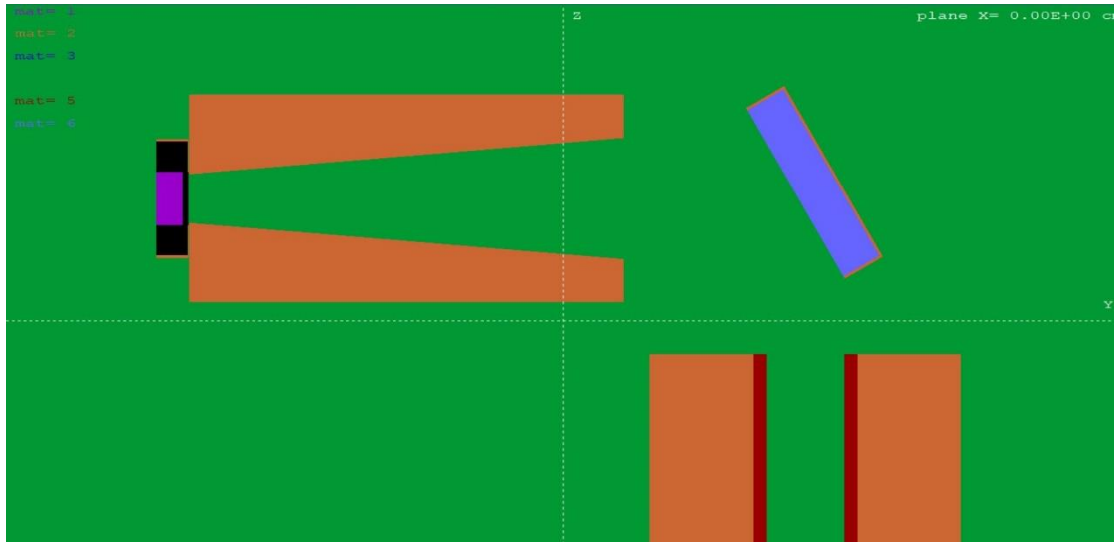
Σχήμα 7.2: Απεικόνιση της διάταξης 1.0.30. Ο ανιχνευτής βρίσκεται στη θέση 1 (απόσταση βάσης ανιχνευτή – βάσης δείγματος 12.5cm), χωρίς κατευθυντή (0), για κλίση δείγματος 30°.



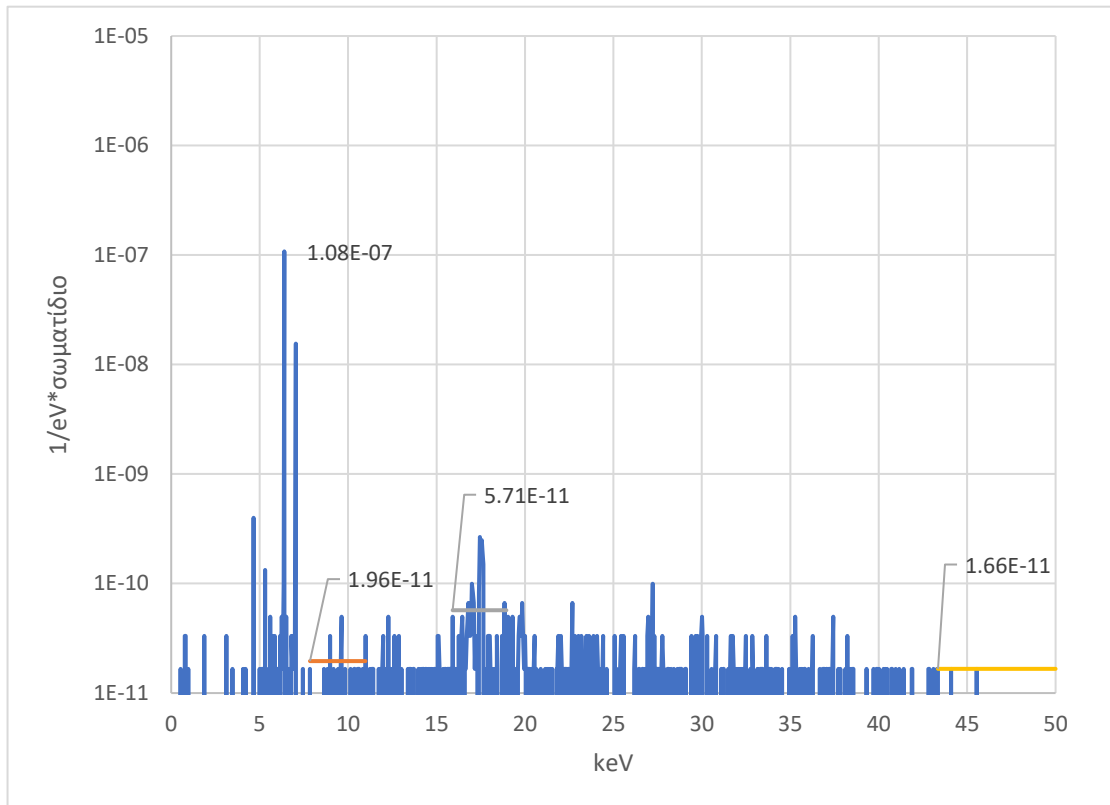
Σχήμα 7.3: Φάσμα της προσομοίωσης της γεωμετρίας 1.0.30.

p-t-b	Περιοχή 8-11keV	Περιοχή 16-19keV	Περιοχή 46-50keV
	5066	1018	5862

Πίνακας 7.2: Οι τιμές peak-to-background για τη γεωμετρία 1.0.30.



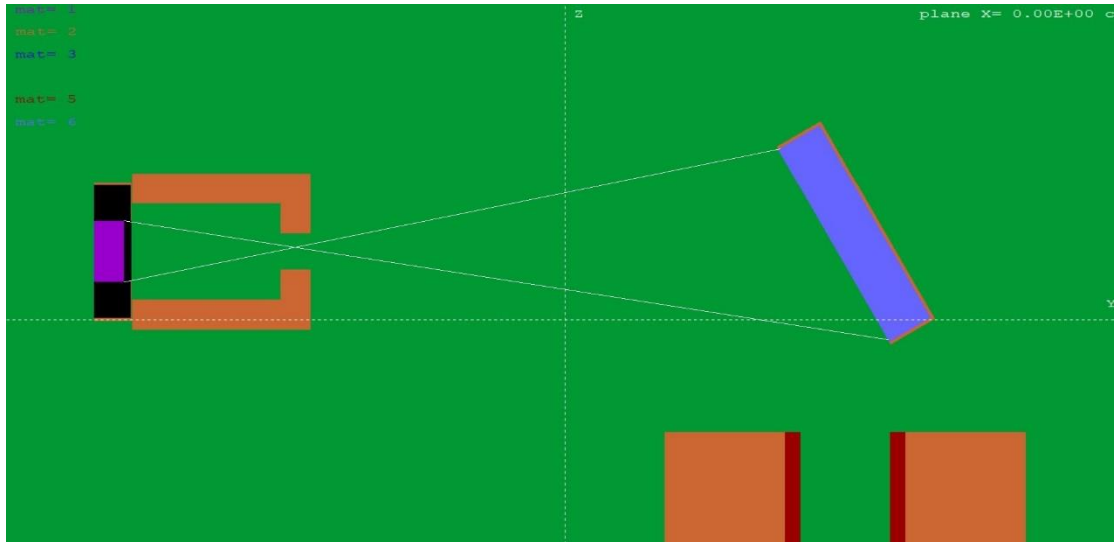
Σχήμα 7.4: Απεικόνιση της διάταξης 1.1.30: στη θέση 1 (απόσταση βάσης ανιχνευτή – βάσης δείγματος 12.5cm), με κωνικό κατευθυντή (1), για κλίση δείγματος 30°.



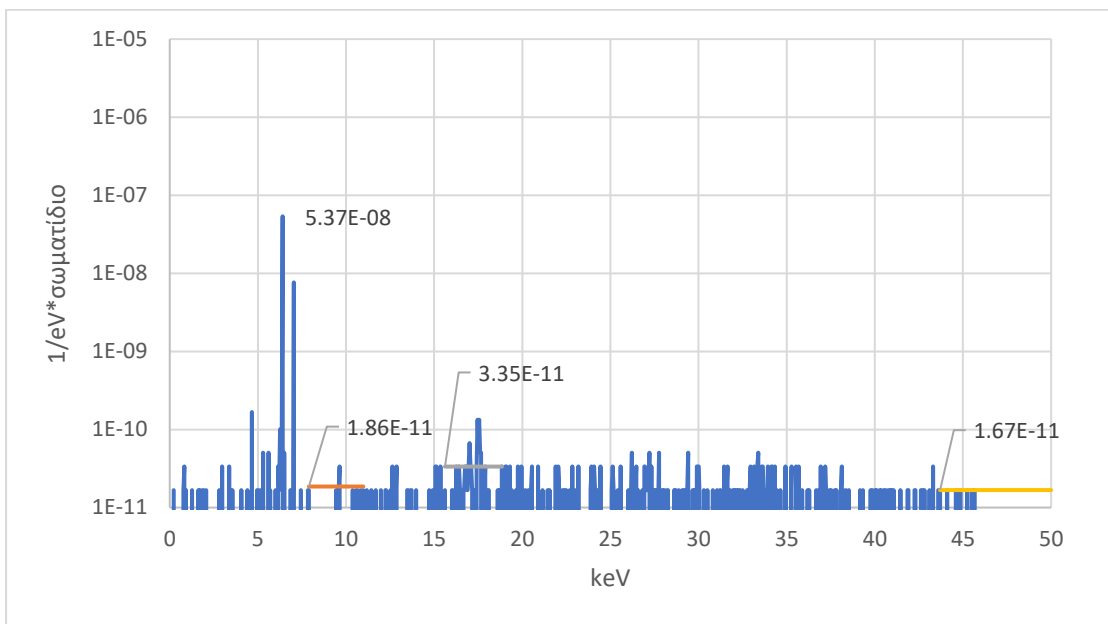
Σχήμα 7.5: Φάσμα προσομοίωσης της διάταξης 1.1.30.

p-t-b	Περιοχή 8-11keV	Περιοχή 16-19keV	Περιοχή 46-50keV
	5513	1892	6486

Πίνακας 7.3: Οι τιμές peak-to-background για τη γεωμετρία 1.1.30.



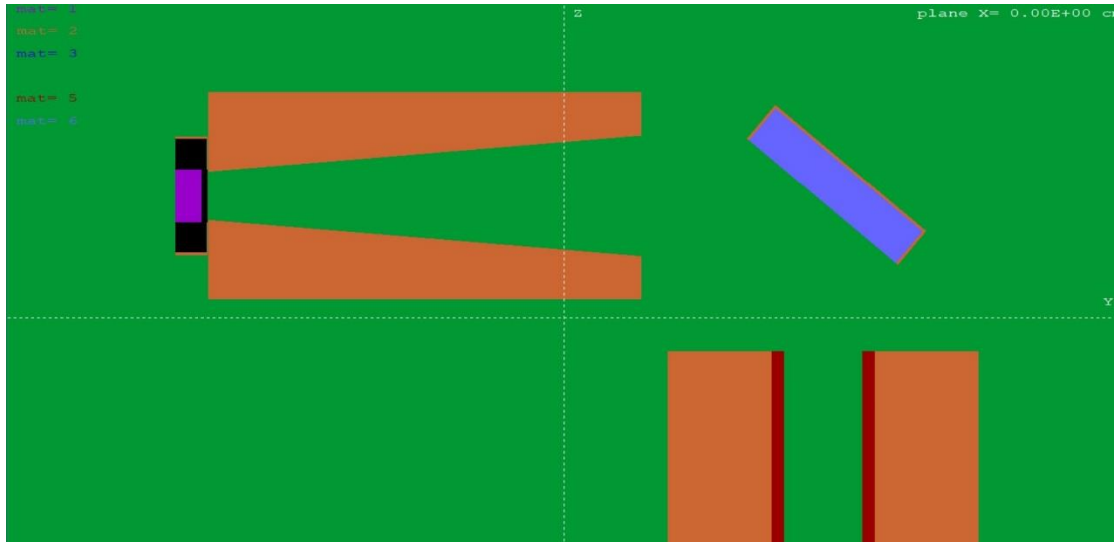
Σχήμα 7.6: Απεικόνιση της διάταξης 1.2.30: στη θέση 1 (απόσταση βάσης ανιχνευτή – βάσης δείγματος 12.5cm), με κατευθυντή τύπου pinhole (2), για κλίση δείγματος 30°. Σε μελλοντική μελέτη ο κατευθυντής μπορεί να βελτιστοποιηθεί ως προς το άνοιγμα, τη θέση και το σχήμα της σχισμής, καθώς και το πάχος του για καλύτερη θωράκιση.



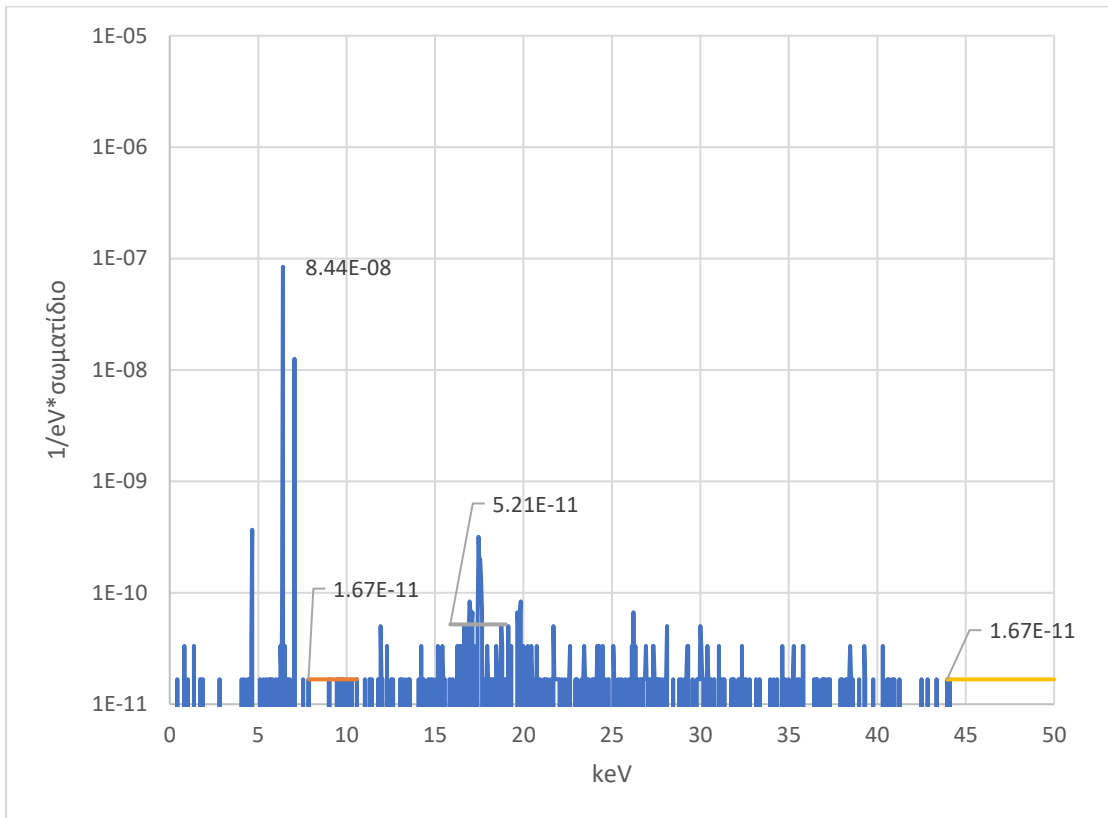
Σχήμα 7.7: Φάσμα προσομοίωσης της διάταξης 1.2.30.

p-t-b	Περιοχή 8-11keV	Περιοχή 16-19keV	Περιοχή 46-50keV
	2890	1606	3211

Πίνακας 7.4: Οι τιμές peak-to-background για τη γεωμετρία 1.2.30.



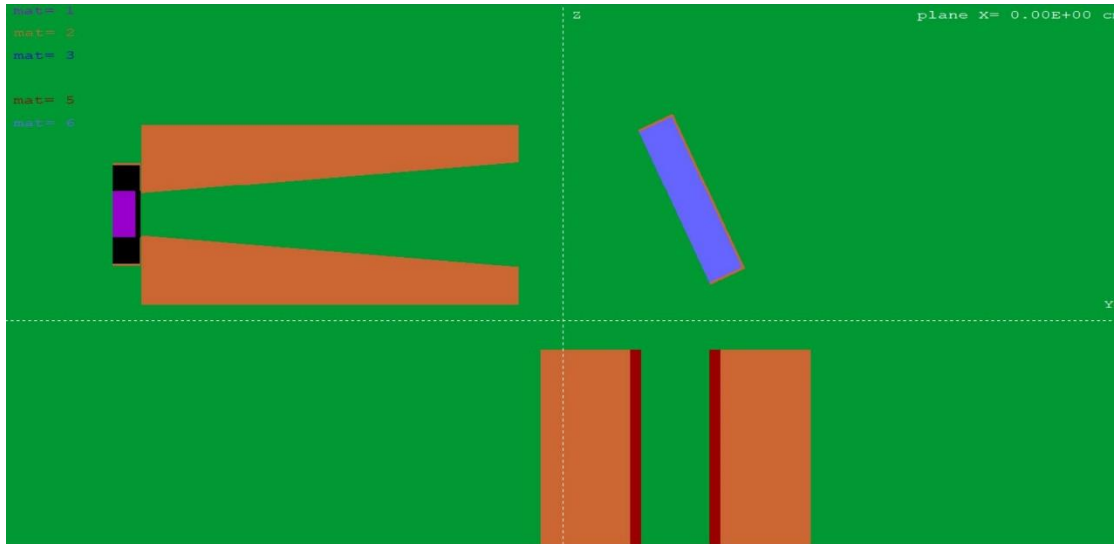
Σχήμα 7.8: Απεικόνιση της διάταξης 1.1.50: στη θέση 1 (απόσταση βάσης ανιχνευτή – βάσης δείγματος 12.5cm), με κωνικό κατευθυντή, για κλίση δείγματος 50°.



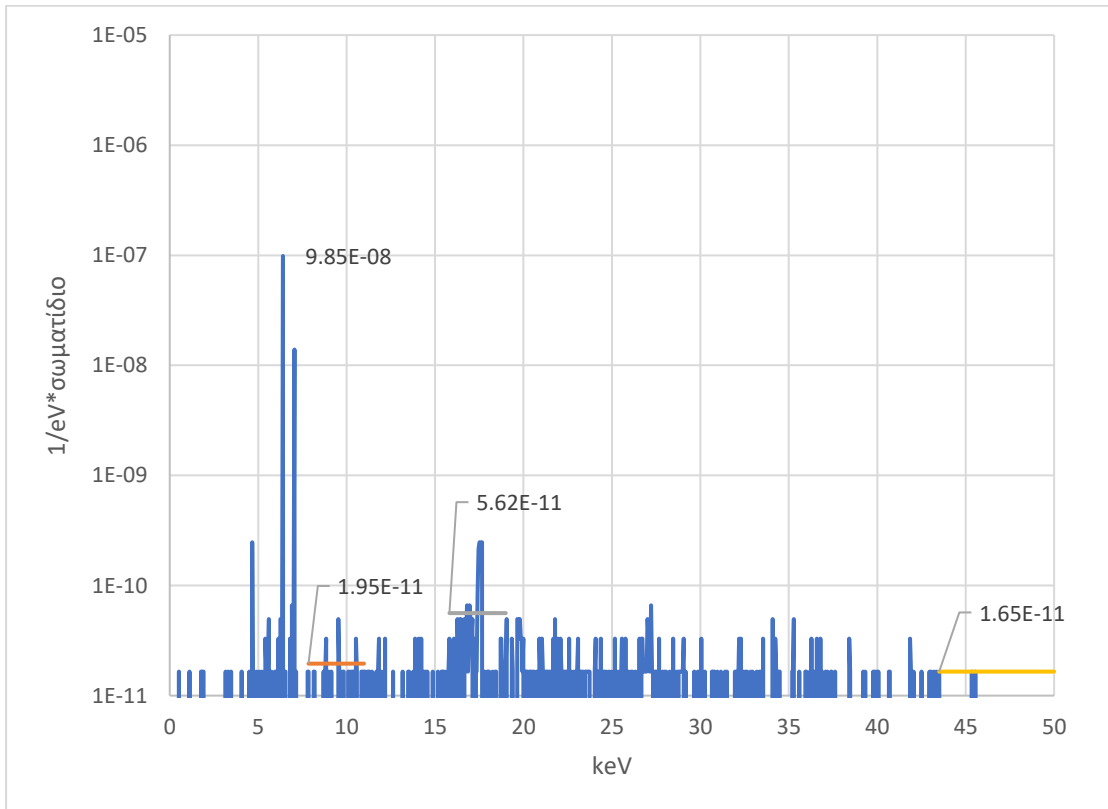
Σχήμα 7.9: Φάσμα προσομοίωσης της διάταξης 1.1.50.

p-t-b	Περιοχή 8-11keV	Περιοχή 16-19keV	Περιοχή 46-50keV
	5045	1622	5045

Πίνακας 7.5: Οι τιμές peak-to-background για τη γεωμετρία 1.1.50.



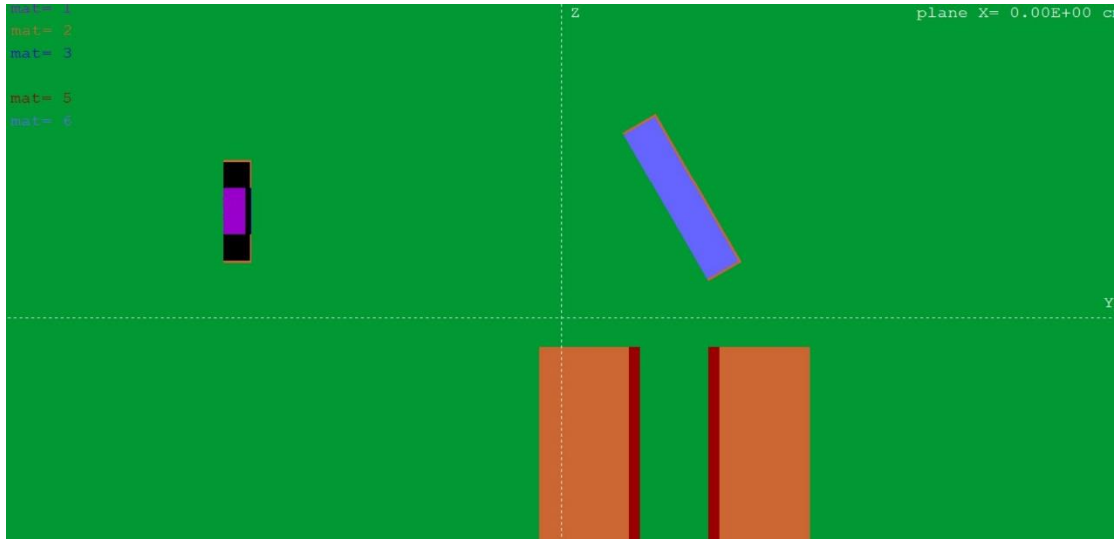
Σχήμα 7.10: Απεικόνιση της διάταξης 1.1.25: στη θέση 1 (απόσταση βάσης ανιχνευτή – βάσης δείγματος 12.5cm), με κωνικό κατευθυντή, για κλίση δείγματος 25°.



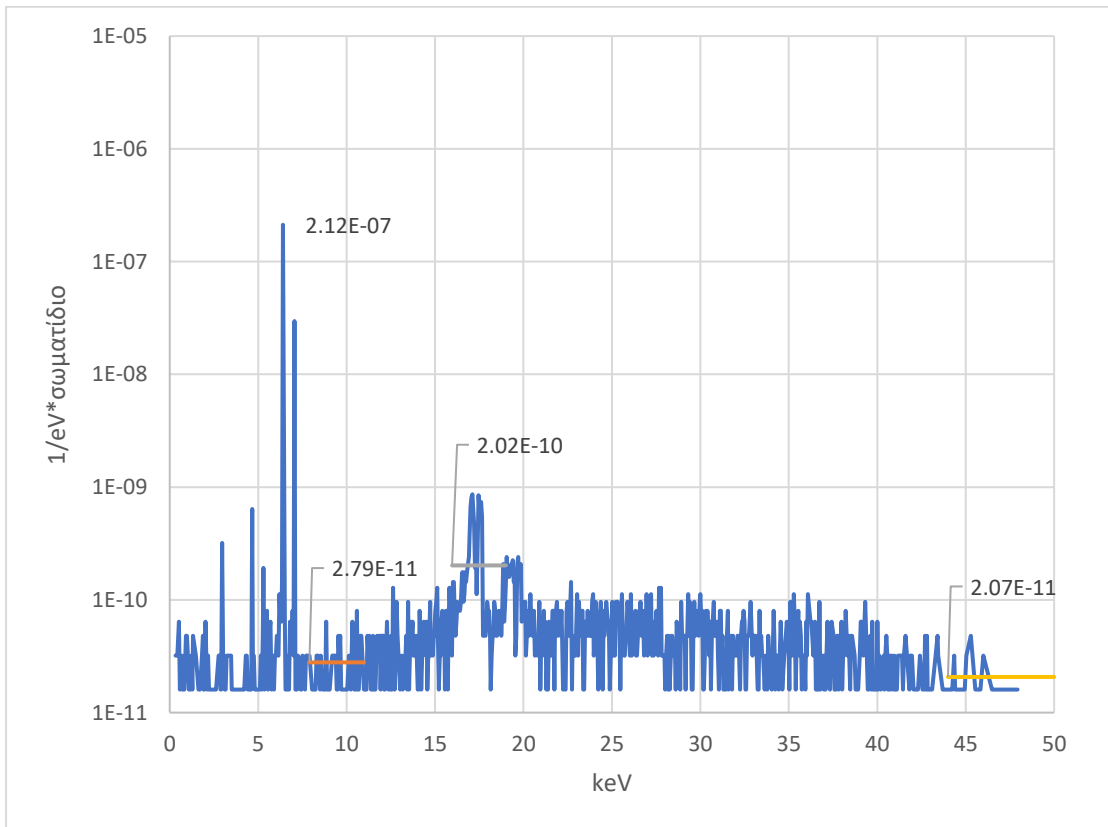
Σχήμα 7.11: Φάσμα προσομοίωσης της διάταξης 1.1.25.

p-t-b	Περιοχή 8-11keV	Περιοχή 16-19keV	Περιοχή 46-50keV
	5046	1754	5964

Πίνακας 7.6: Οι τιμές peak-to-background για τη γεωμετρία 1.1.25



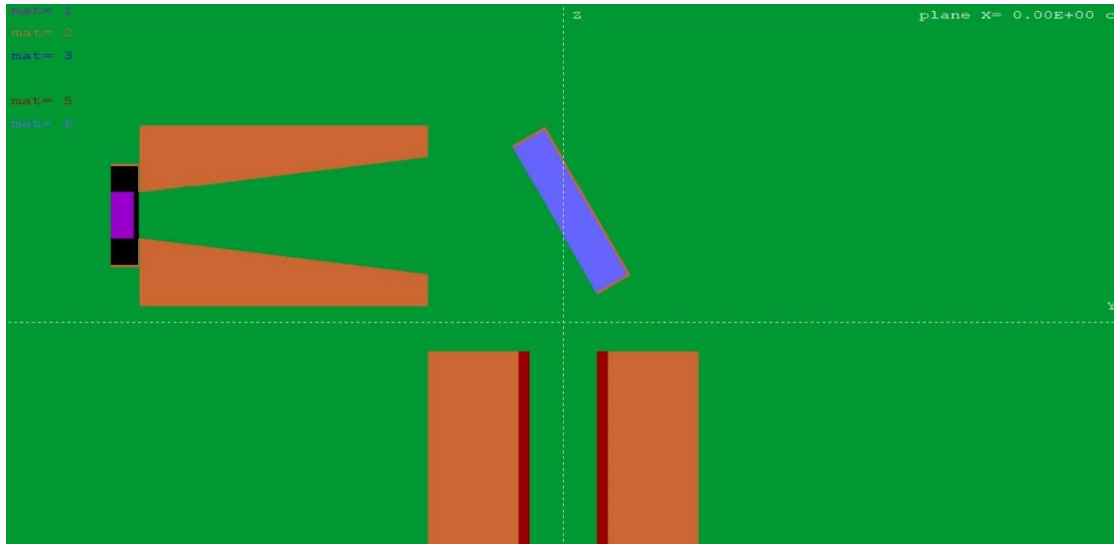
Σχήμα 7.12: Απεικόνιση της διάταξης 2.0.30: στη θέση 2 (απόσταση βάσης ανιχνευτή – βάσης δείγματος 10cm), χωρίς κατευθυντή, για κλίση δείγματος 30°.



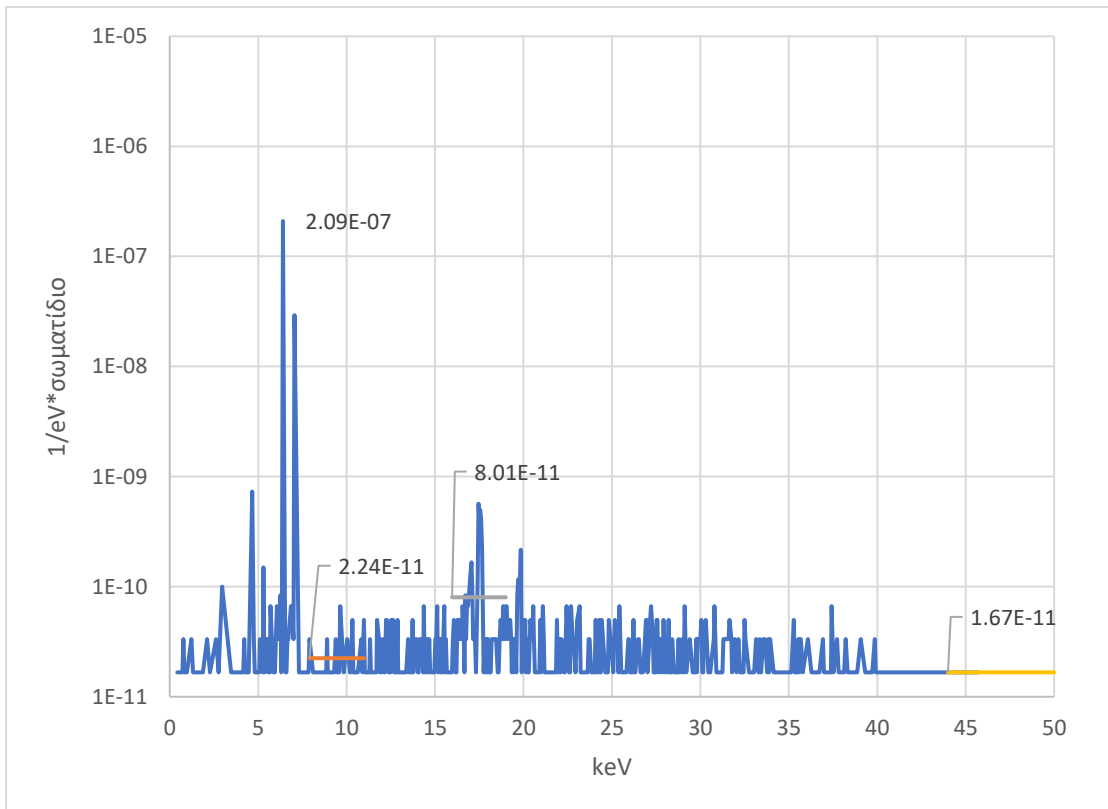
Σχήμα 7.13: Φάσμα προσομοίωσης της διάταξης 2.0.30.

p-t-b	Περιοχή 8-11keV	Περιοχή 16-19keV	Περιοχή 46-50keV
	7601	1050	10241

Πίνακας 7.7: Οι τιμές peak-to-background για τη γεωμετρία 2.0.30



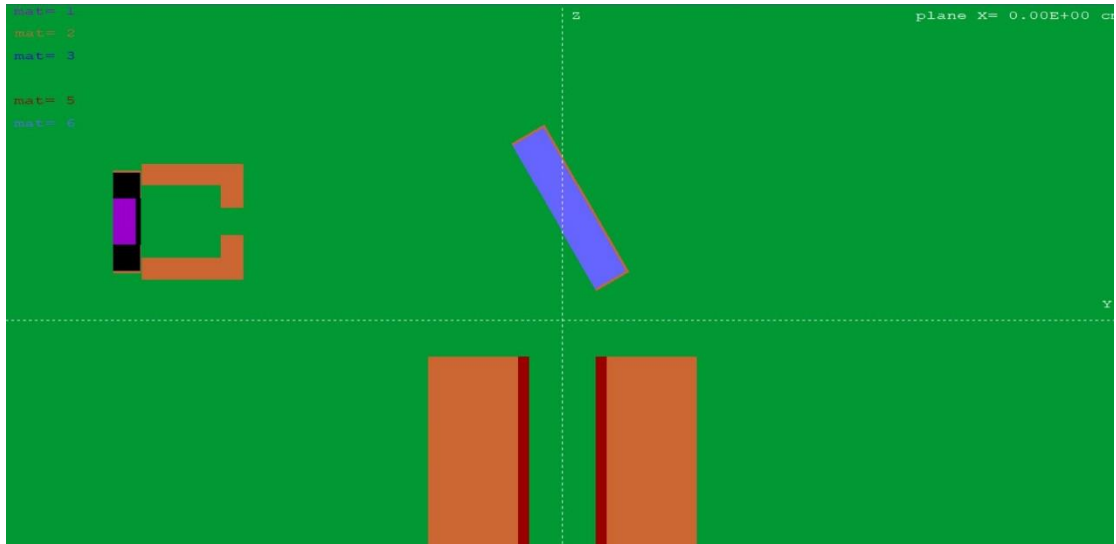
Σχήμα 7.14: Απεικόνιση της διάταξης 2.1.30: στη θέση 2 (απόσταση βάσης ανιχνευτή – βάσης δείγματος 12.5cm), με κωνικό κατευθυντή, για κλίση δείγματος 30°.



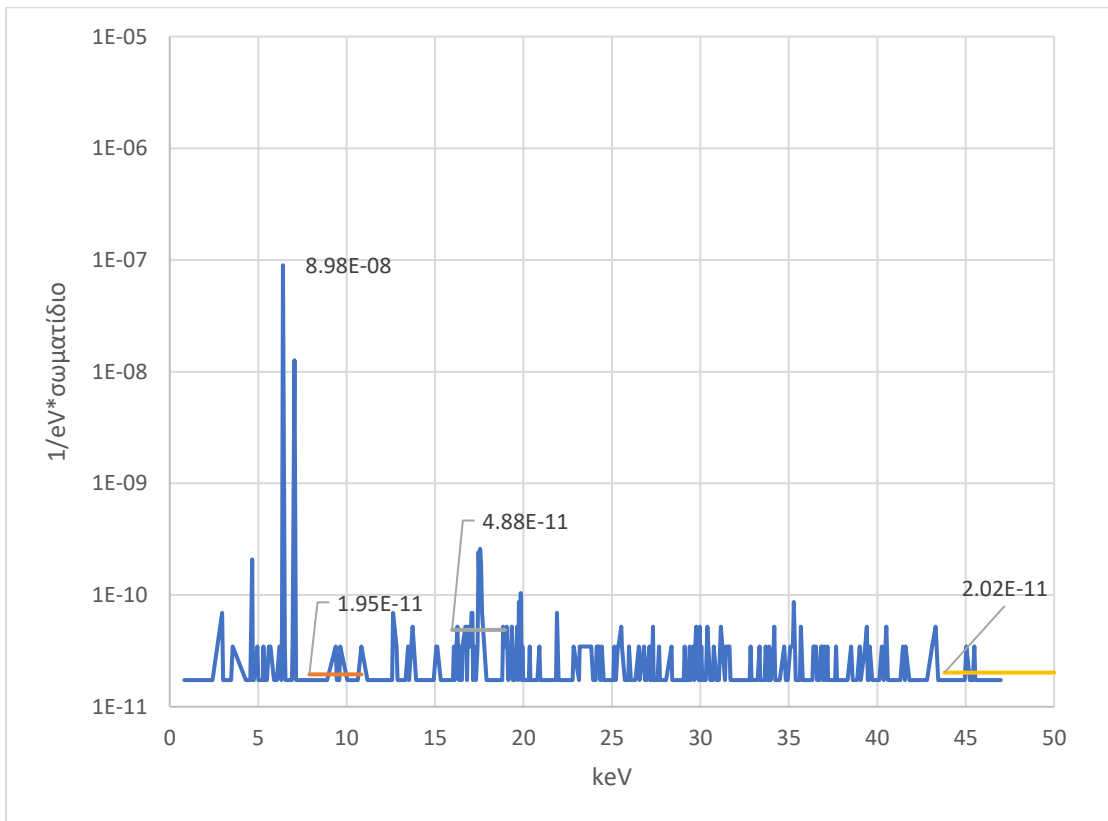
Σχήμα 7.15: Φάσμα προσομοίωσης της διάταξης 2.1.30.

p-t-b	Περιοχή 8-11keV	Περιοχή 16-19keV	Περιοχή 46-50keV
	9348	2615	12572

Πίνακας 7.8: Οι τιμές peak-to-background για τη γεωμετρία 2.1.30



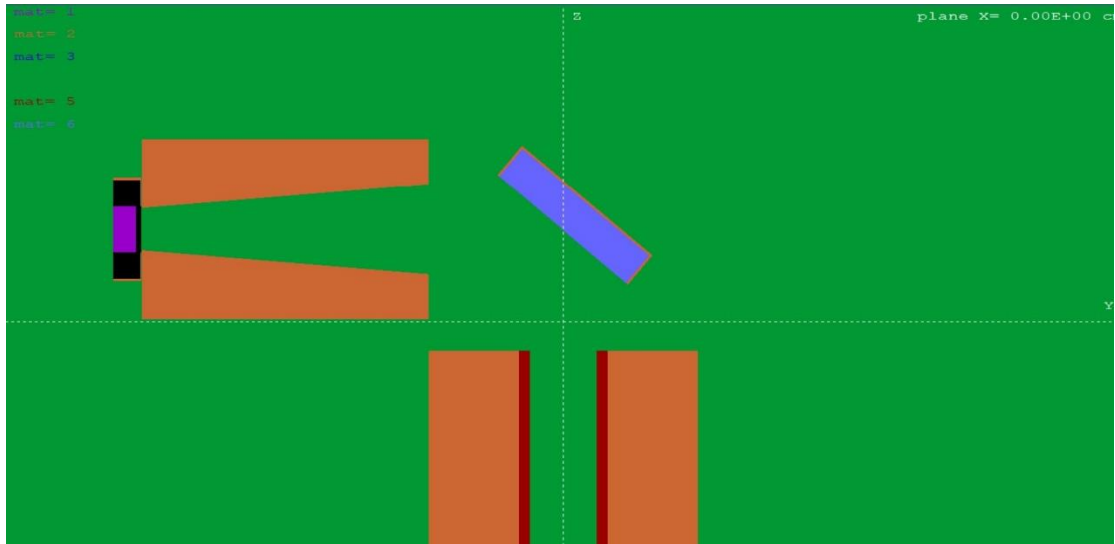
Σχήμα 7.16: Απεικόνιση της διάταξης 2.2.30: στη θέση 2 (απόσταση βάσης ανιχνευτή – βάσης δείγματος 10cm), με κατευθυντή τύπου pinhole, για κλίση δείγματος 30°.



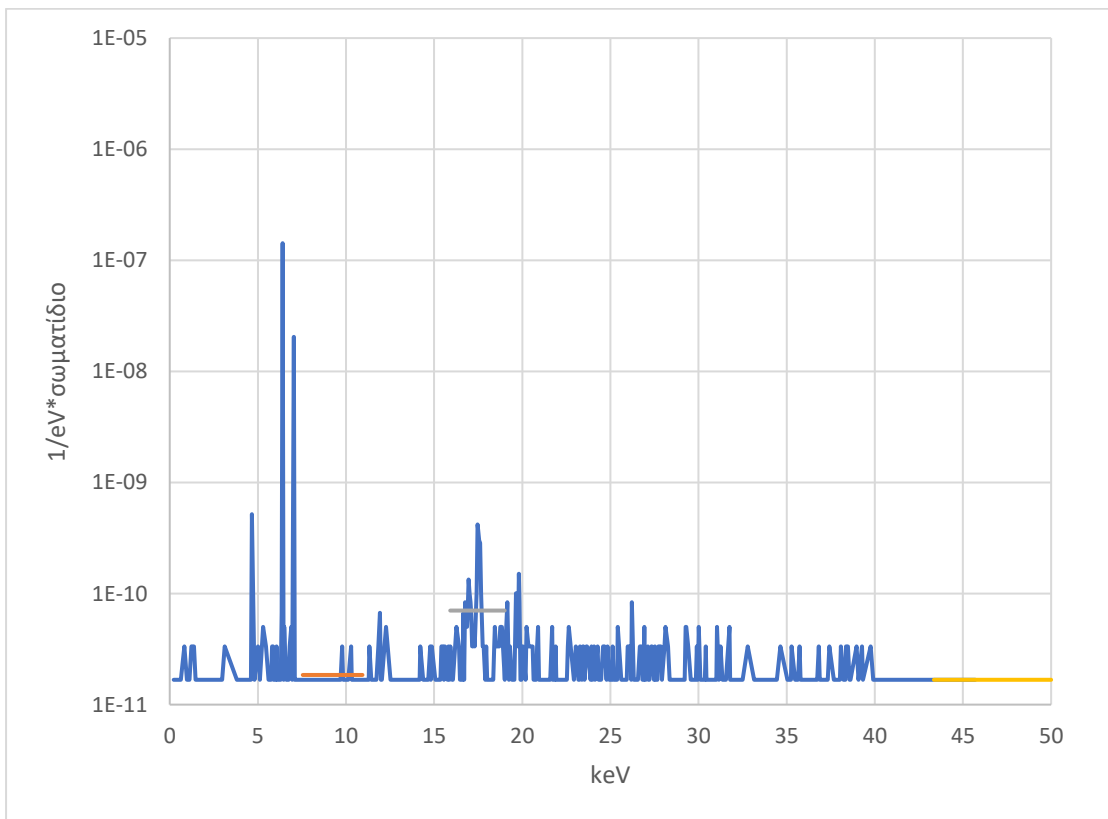
Σχήμα 7.17: Φάσμα προσομοίωσης της διάταξης 2.2.30.

p-t-b	Περιοχή 8-11keV	Περιοχή 16-19keV	Περιοχή 46-50keV
	4607	1841	4443

Πίνακας 7.9: Οι τιμές peak-to-background για τη γεωμετρία 2.2.30



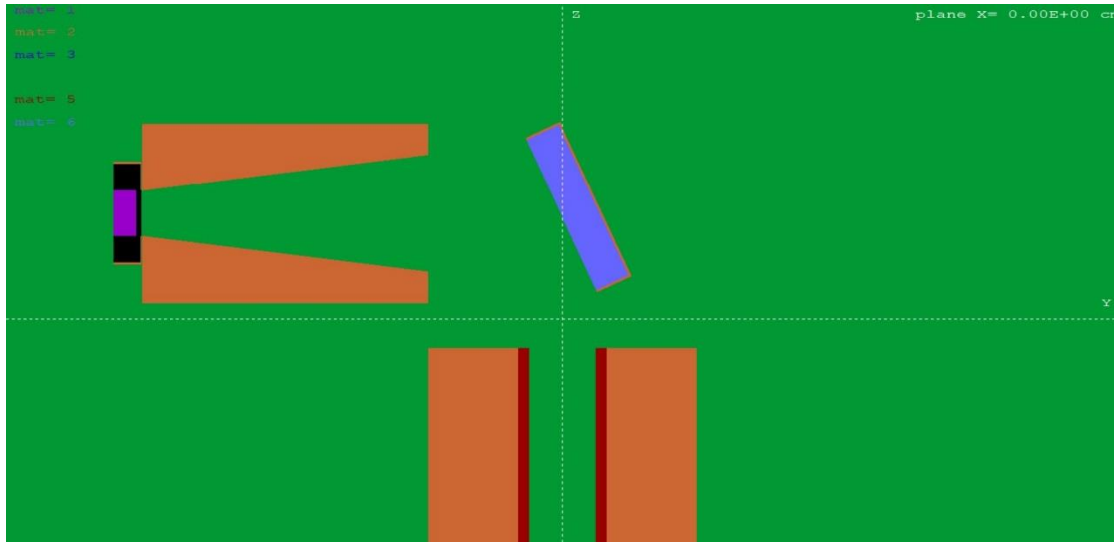
Σχήμα 7.18: Απεικόνιση της διάταξης 2.1.50: στη θέση 2 (απόσταση βάσης ανιχνευτή – βάσης δείγματος 10cm), με κωνικό κατευθυντή, για κλίση δείγματος 50°.



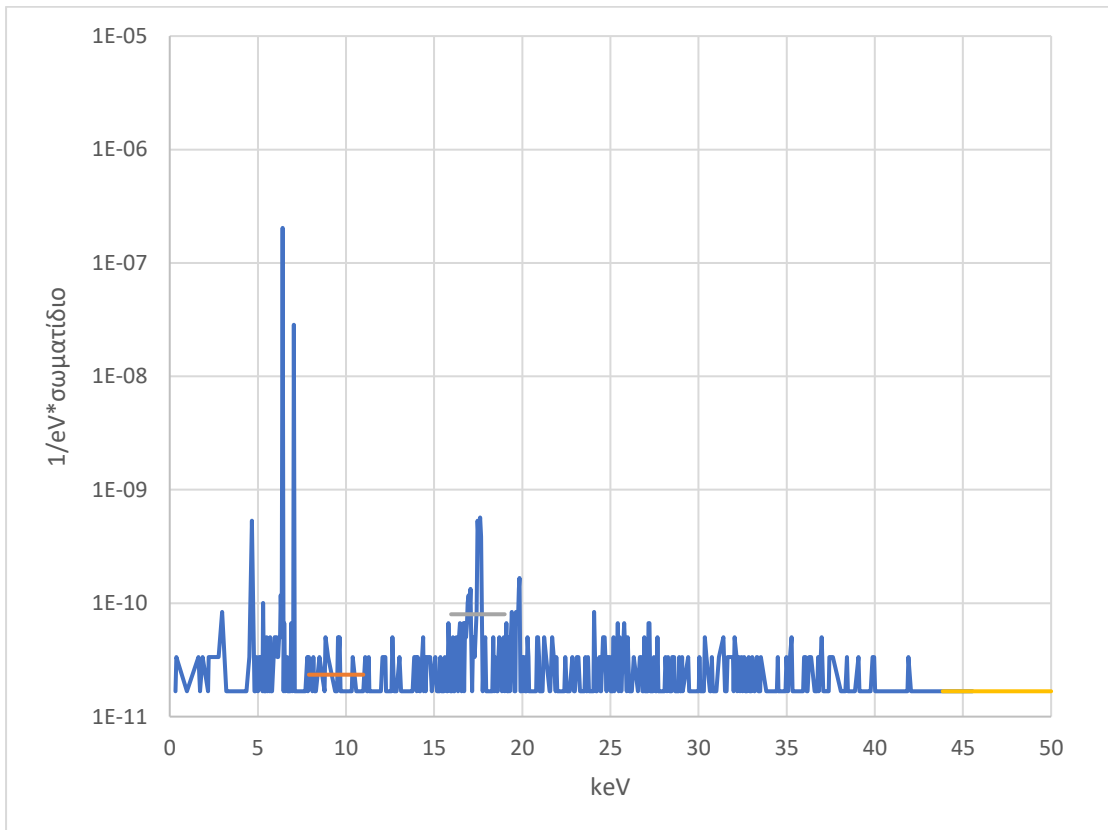
Σχήμα 7.19: Φάσμα προσομοίωσης της διάταξης 2.1.50.

p-t-b	Περιοχή 8-11keV	Περιοχή 16-19keV	Περιοχή 46-50keV
	7706	2028	8517

Πίνακας 7.10: Οι τιμές peak-to-background για τη γεωμετρία 2.1.50



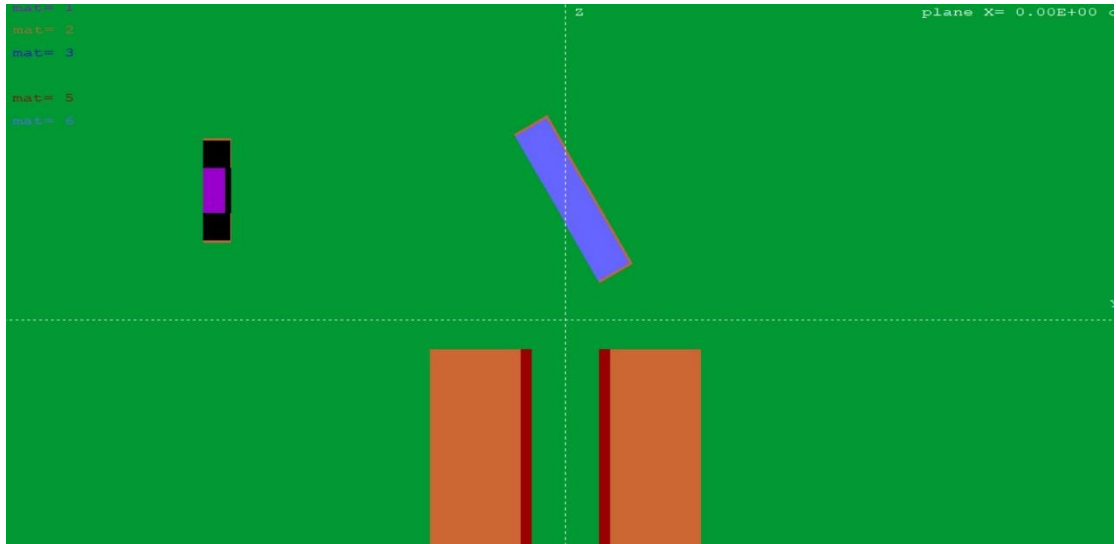
Σχήμα 7.20: Απεικόνιση της διάταξης 2.1.25: στη θέση 2 (απόσταση βάσης ανιχνευτή – βάσης δείγματος 10cm), με κωνικό κατευθυντή, για κλίση δείγματος 25°.



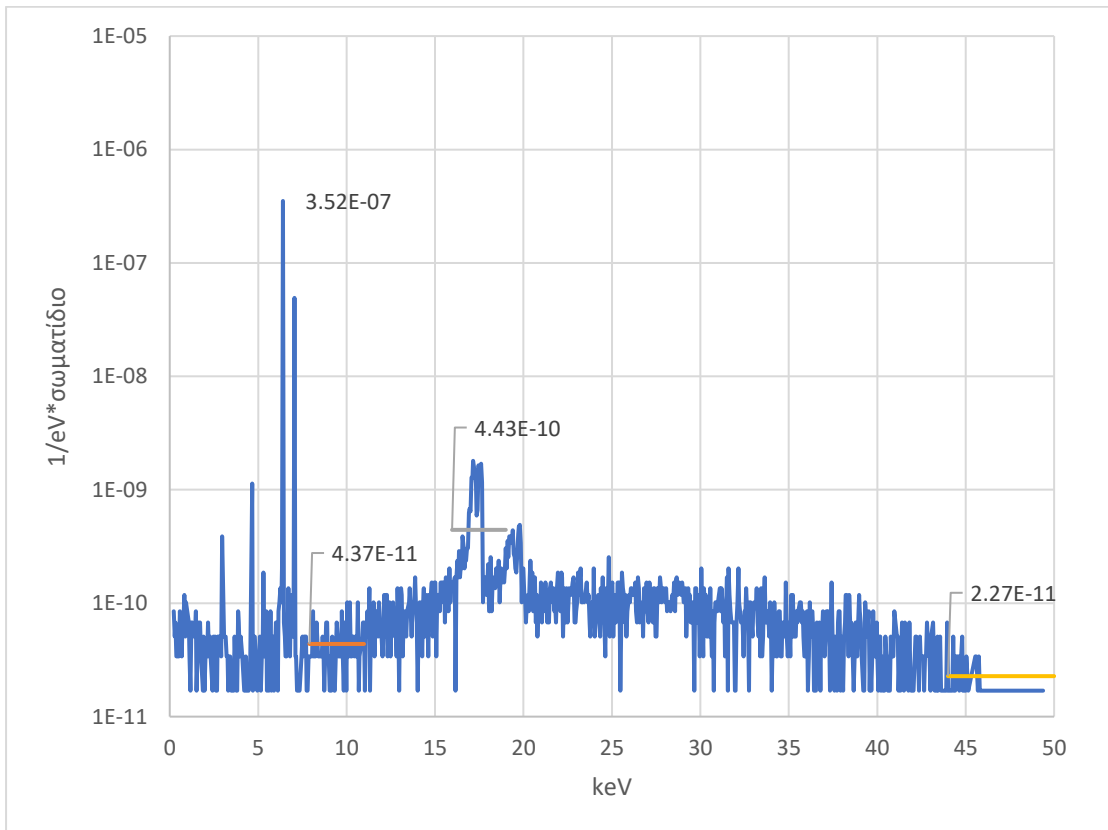
Σχήμα 7.21: Φάσμα προσομοίωσης της διάταξης 2.1.25.

p-t-b	Περιοχή 8-11keV	Περιοχή 16-19keV	Περιοχή 46-50keV
	8701	2552	12181

Πίνακας 7.11: Οι τιμές peak-to-background για τη γεωμετρία 2.1.25.



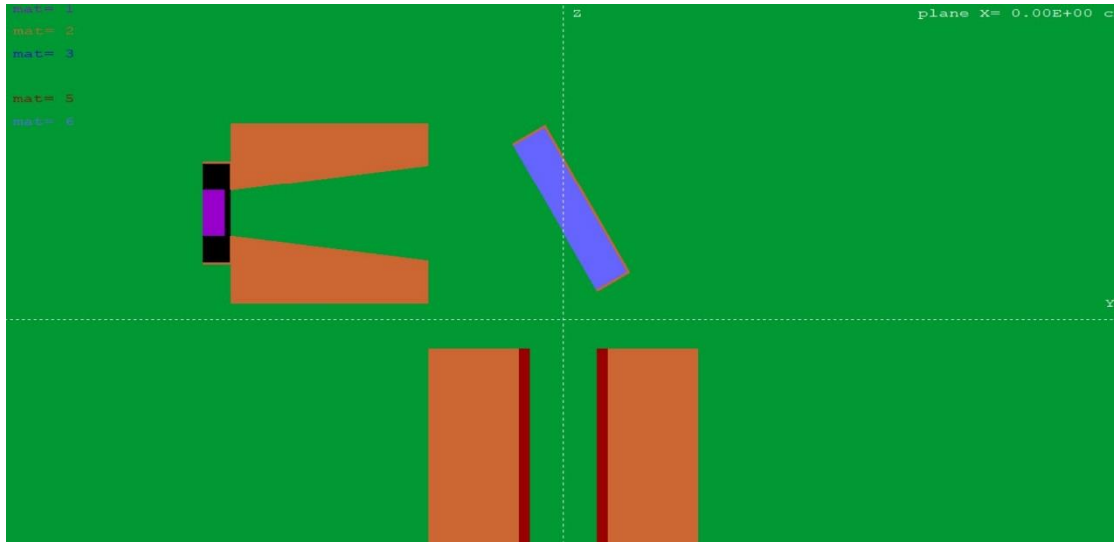
Σχήμα 7.22: Απεικόνιση της διάταξης 3.0.30: στη θέση 3 (απόσταση βάσης ανιχνευτή – βάσης δείγματος 8cm), χωρίς κατευθυντή, για κλίση δείγματος 30°.



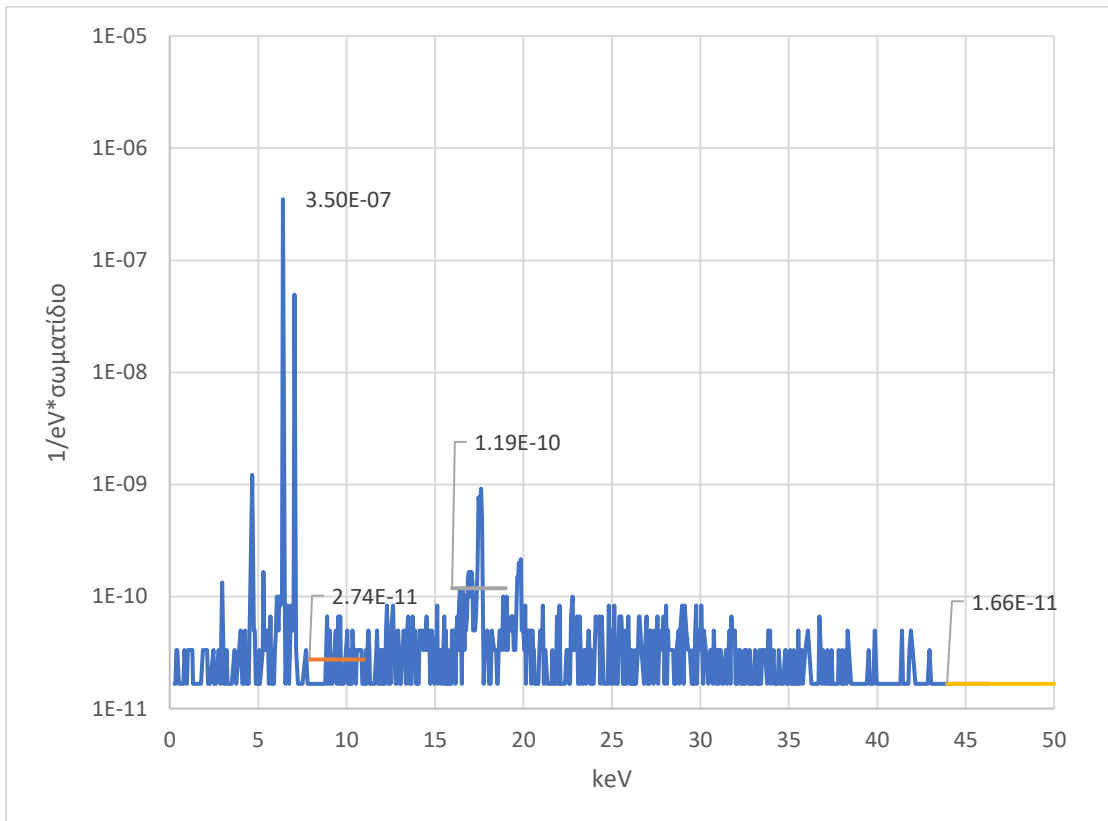
Σχήμα 7.23: Φάσμα προσομοίωσης της διάταξης 2.2.30.

p-t-b	Περιοχή 8-11keV	Περιοχή 16-19keV	Περιοχή 46-50keV
	8044	793	15466

Πίνακας 7.12: Οι τιμές peak-to-background για τη γεωμετρία 2.2.30.



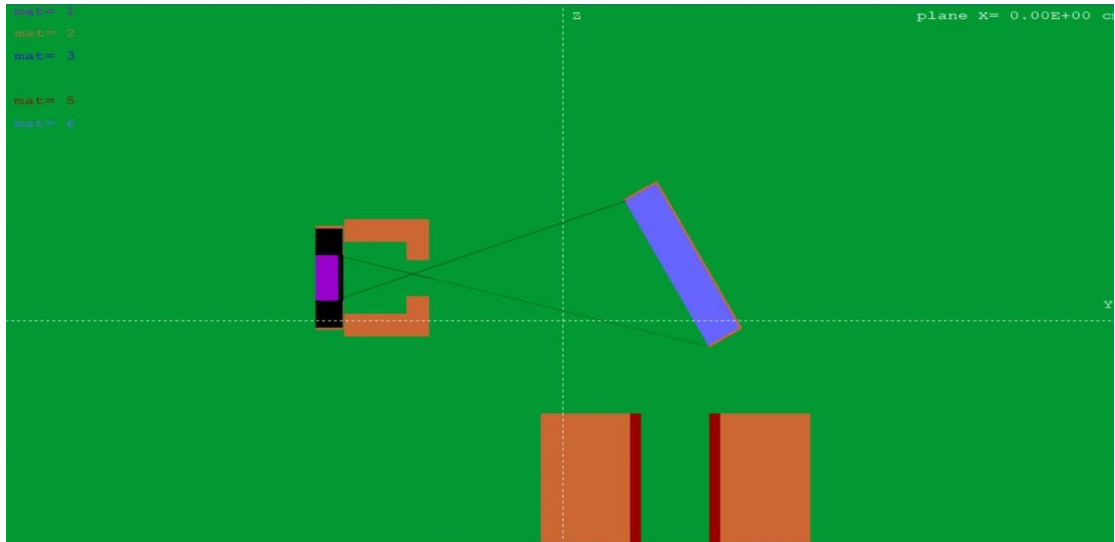
Σχήμα 7.24: Απεικόνιση της διάταξης 3.1.30: στη θέση 3 (απόσταση βάσης ανιχνευτή – βάσης δείγματος 8cm), με κωνικό κατευθυντή, για κλίση δείγματος 30°.



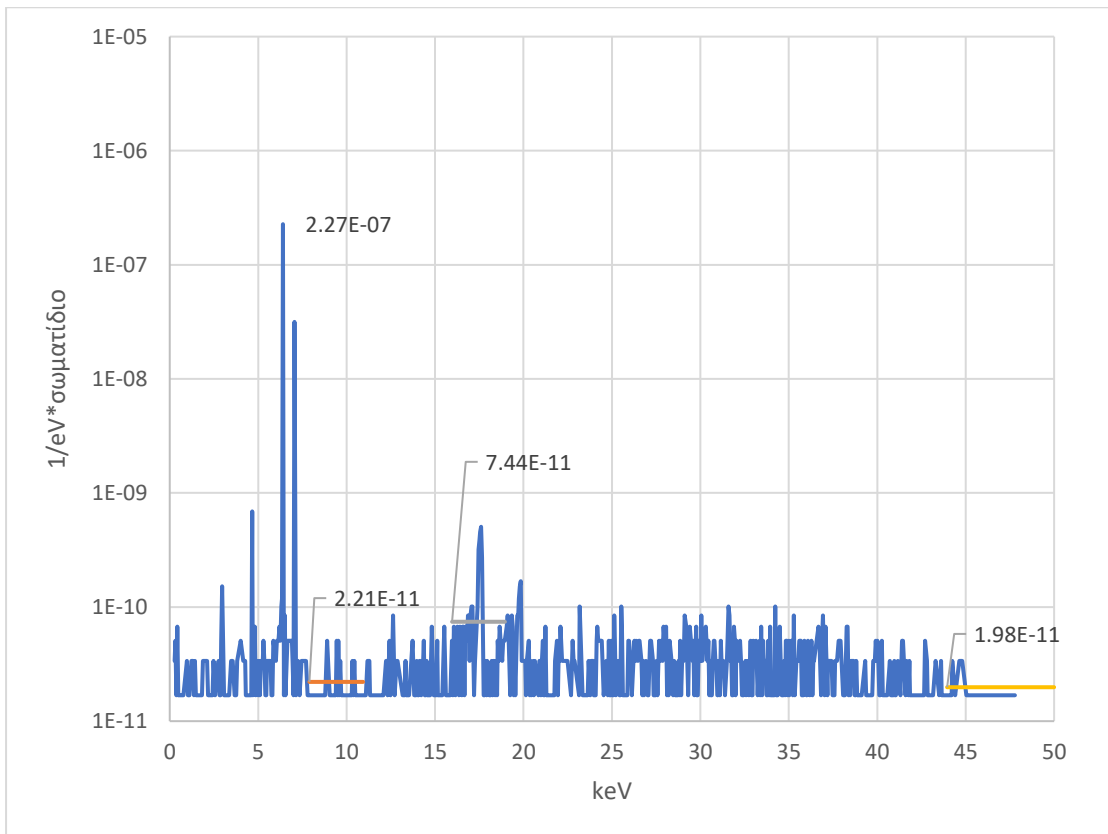
Σχήμα 7.25: Φάσμα προσομοίωσης της διάταξης 3.1.30.

p-t-b	Περιοχή 8-11keV	Περιοχή 16-19keV	Περιοχή 46-50keV
	12774	2956	21060

Πίνακας 7.13: Οι τιμές peak-to-background για τη γεωμετρία.



Σχήμα 7.26: Απεικόνιση της διάταξης 3.2.30: στη θέση 3 (απόσταση βάσης ανιχνευτή – βάσης δείγματος 8cm), με κατευθυντή τύπου pinhole, για κλίση δείγματος 30°.



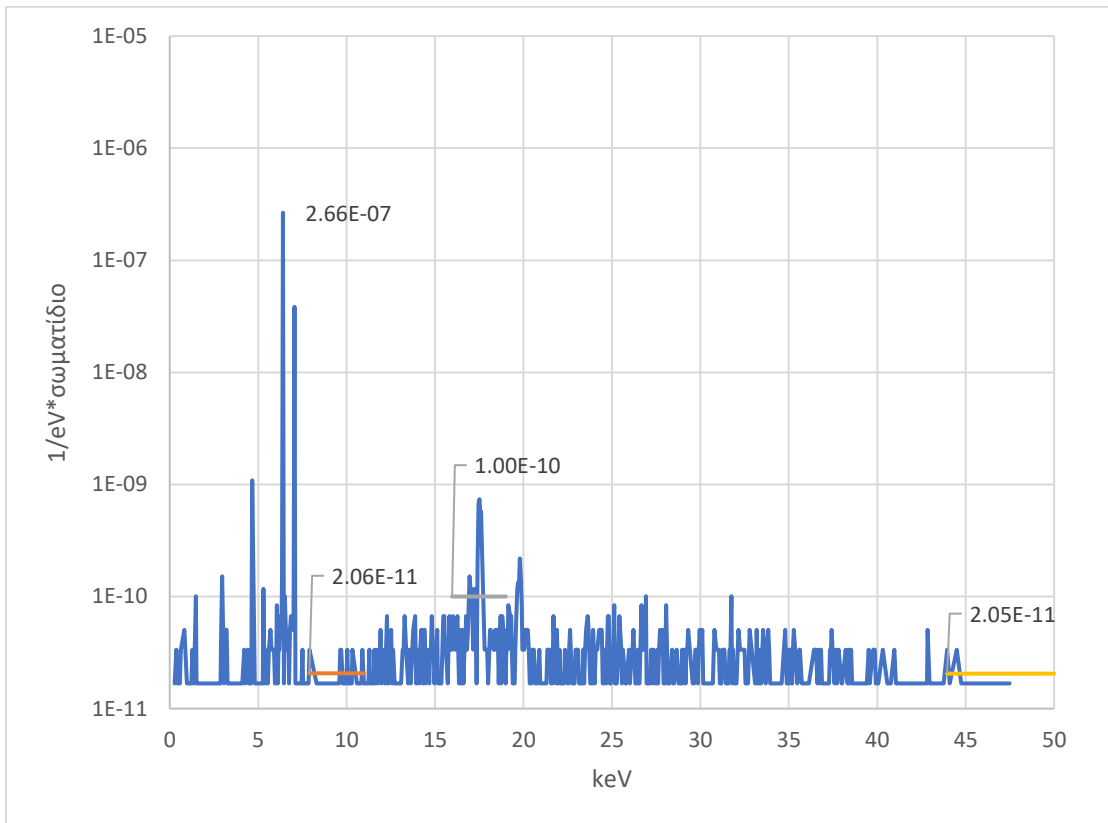
Σχήμα 7.27: Φάσμα προσομοίωσης της διάταξης 3.2.30.

p-t-b	Περιοχή 8-11keV	Περιοχή 16-19keV	Περιοχή 46-50keV
	10277	3053	11447

Πίνακας 7.14: Οι τιμές peak-to-background για τη γεωμετρία 3.2.30.



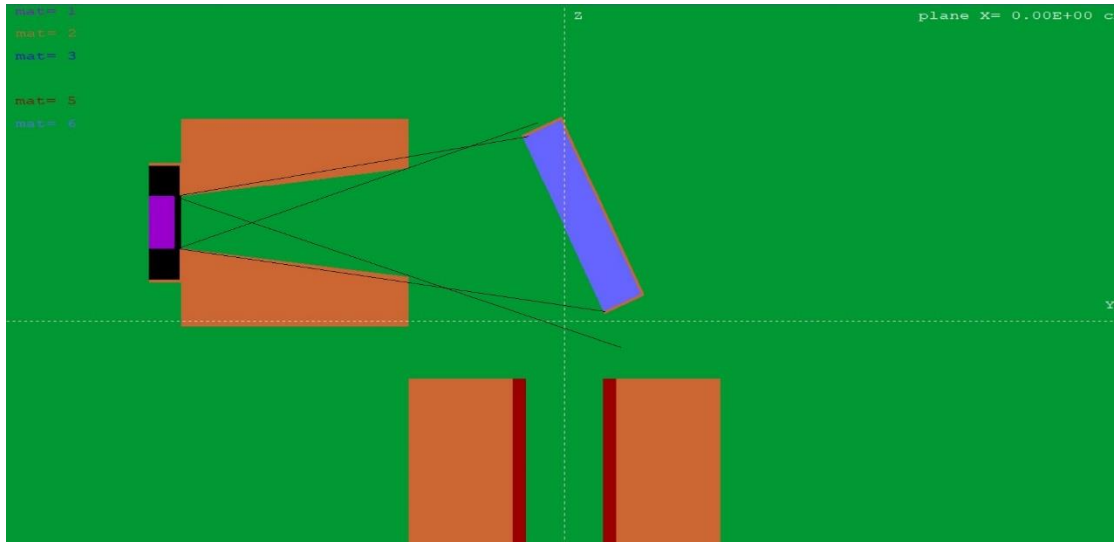
Σχήμα 7.28: Απεικόνιση της διάταξης 3.1.50: στη θέση 3 (απόσταση βάσης ανιχνευτή – βάσης δείγματος 8cm), με κωνικό κατευθυντή, για κλίση δείγματος 50°.



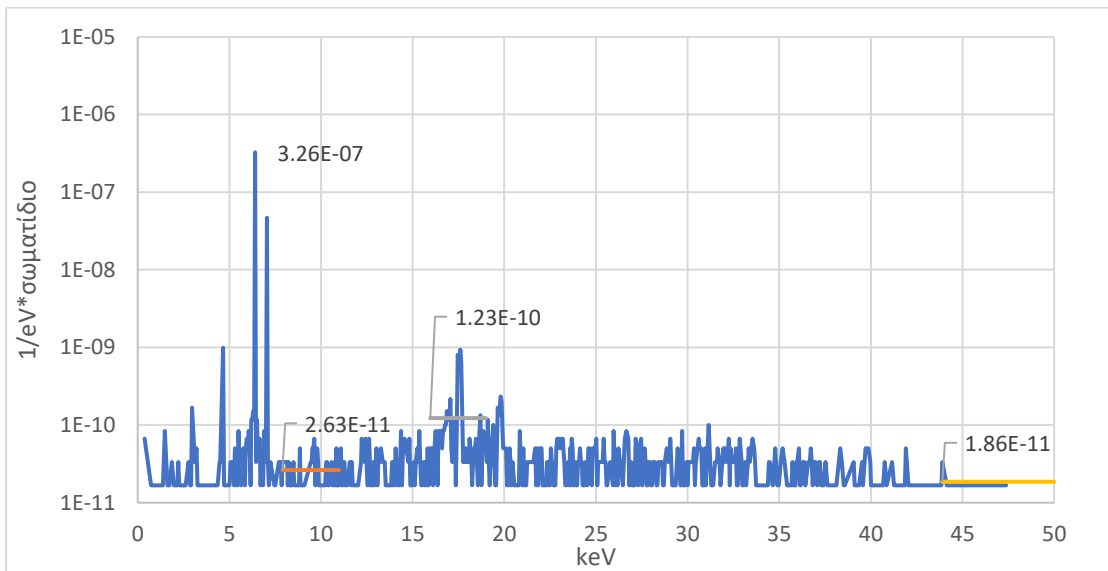
Σχήμα 7.29: Φάσμα προσομοίωσης της διάταξης 3.1.50.

p-t-b	Περιοχή 8-11keV	Περιοχή 16-19keV	Περιοχή 46-50keV
	12882	2659	12972

Πίνακας 7.15: Οι τιμές peak-to-background για τη γεωμετρία 3.1.50.



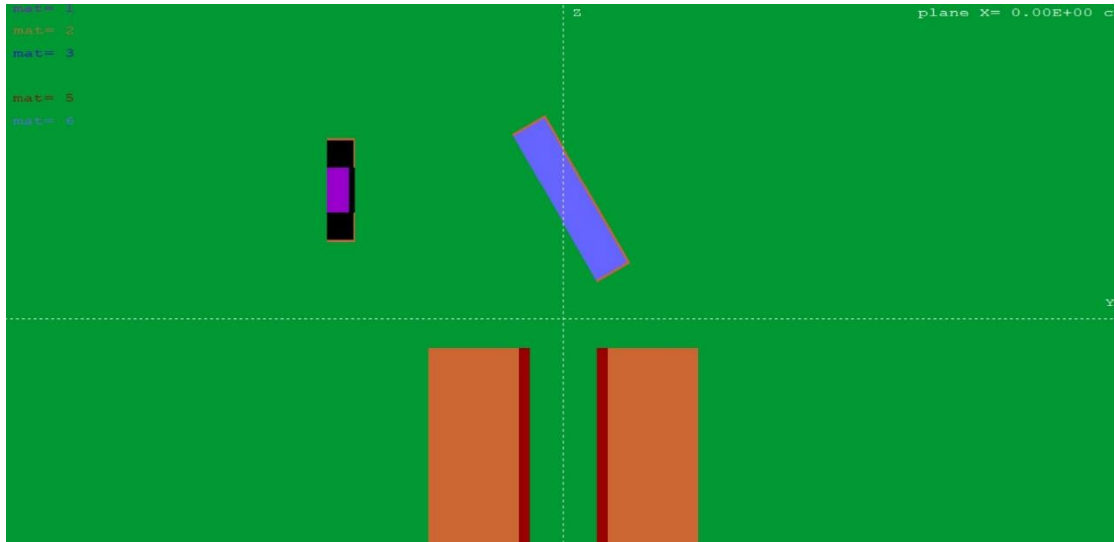
Σχήμα 7.30: Απεικόνιση της διάταξης 3.1.25: στη θέση 3 (απόσταση βάσης ανιχνευτή – βάσης δείγματος 8cm), με κωνικό κατευθυντή, για κλίση δείγματος 25°. Στο σχήμα φαίνονται ορισμένες γραμμές που οδήγησαν στην επιλογή της κωνικότητας, με κριτήριο την «ορατότητα» των ακραίων σημείων του ανιχνευτή. Εάν πχ διευρυνθεί η κωνικότητα, τότε το κάτω ακραίο σημείο του ανιχνευτή θα βλέπει το κάτω σημείο του δείγματος, όμως θα βλέπει και έξω από το δείγμα. Αντίστροφα, εάν στενέψει η κωνικότητα, ο ανιχνευτής θα βλέπει μόνο το δείγμα, όχι όμως ολόκληρο. Το σχήμα επιλέχθηκε ως μία μέση λύση μεταξύ των δύο καταστάσεων, και εξαρτάται από την απόσταση δείγματος-ανιχνευτή και την κλίση του δείγματος. Σε μελλοντική μελέτη μπορεί να βελτιστοποιηθεί σε σχέση με το μήκος αλλά και με το πάχος του.



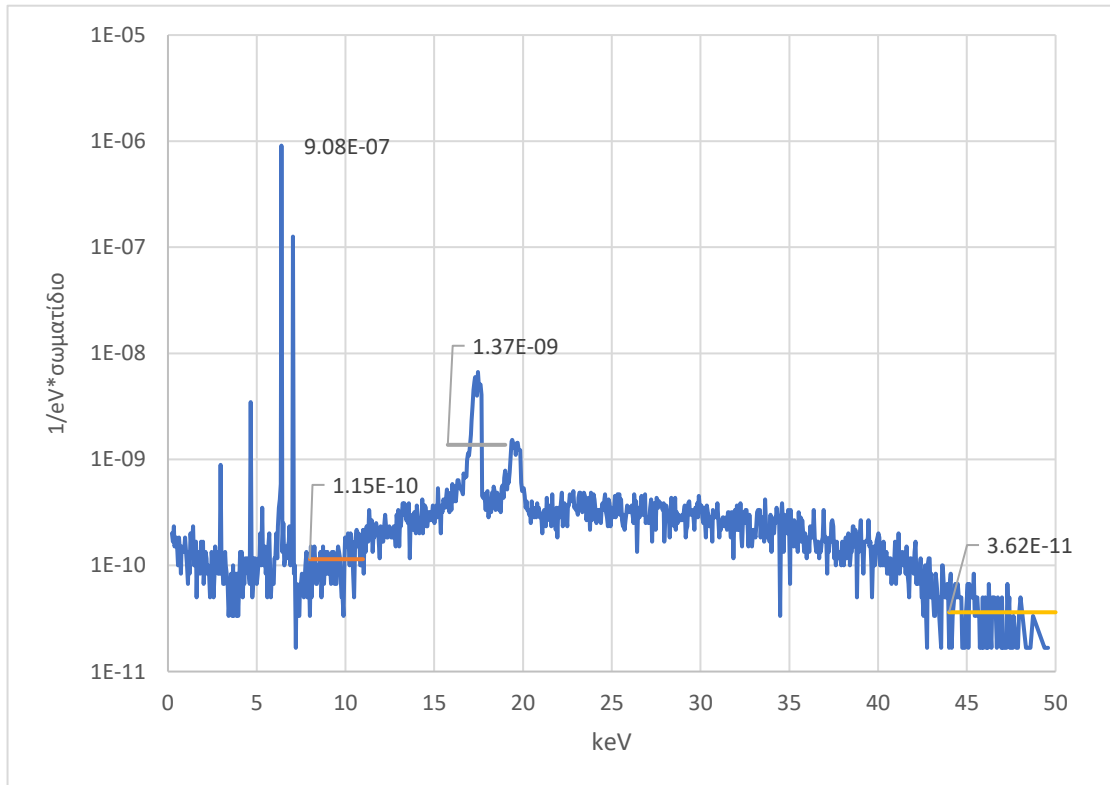
Σχήμα 7.31: Φάσμα προσομοίωσης της διάταξης 3.1.25.

p-t-b	Περιοχή 8-11keV	Περιοχή 16-19keV	Περιοχή 46-50keV
	12415	2654	17559

Πίνακας 7.16: Οι τιμές peak-to-background για τη γεωμετρία 3.1.25.



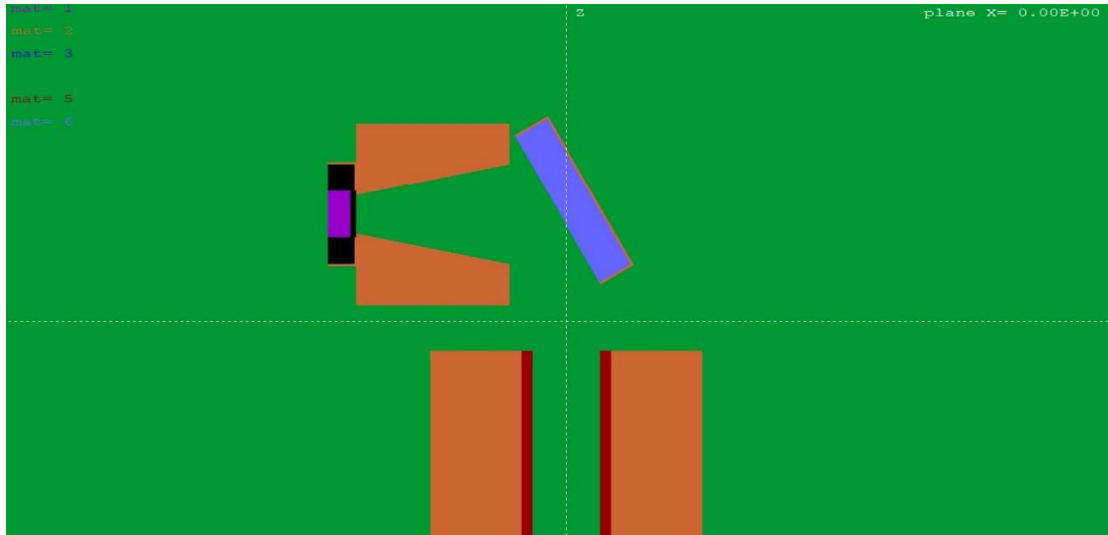
Σχήμα 7.32: Απεικόνιση της διάταξης 4.0.30: στη θέση 4 (απόσταση βάσης ανιχνευτή – βάσης δείγματος 5.25cm), χωρίς κατευθυντή, για κλίση δείγματος 30°.



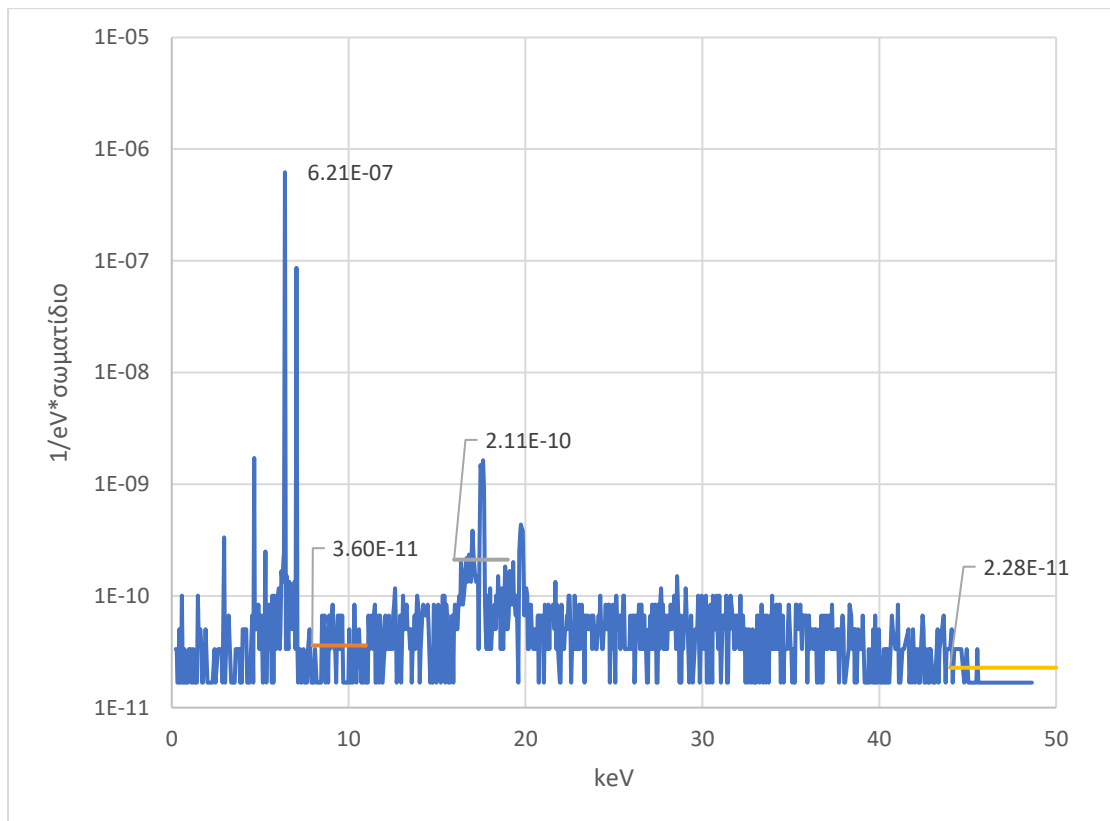
Σχήμα 7.33: Φάσμα προσομοίωσης της διάταξης 4.0.30.

p-t-b	Περιοχή 8-11keV	Περιοχή 16-19keV	Περιοχή 46-50keV
	7925	662	25071

Πίνακας 7.17: Οι τιμές peak-to-background για τη γεωμετρία 4.0.30.



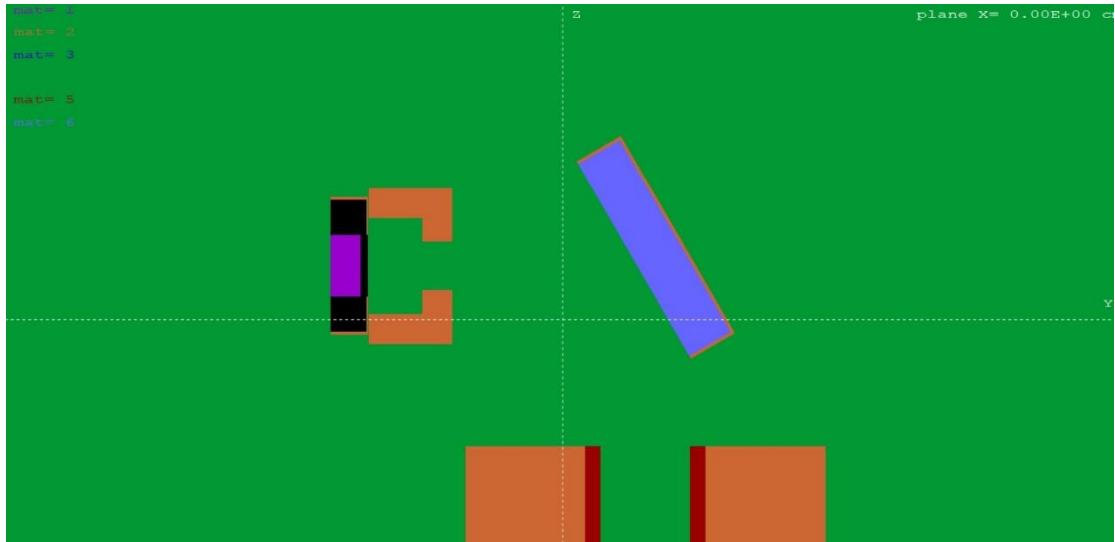
Σχήμα 7.34: Απεικόνιση της διάταξης 4.1.30: στη θέση 4 (απόσταση βάσης ανιχνευτή – βάσης δείγματος 5.25cm), με κωνικό κατευθυντή, για κλίση δείγματος 30°.



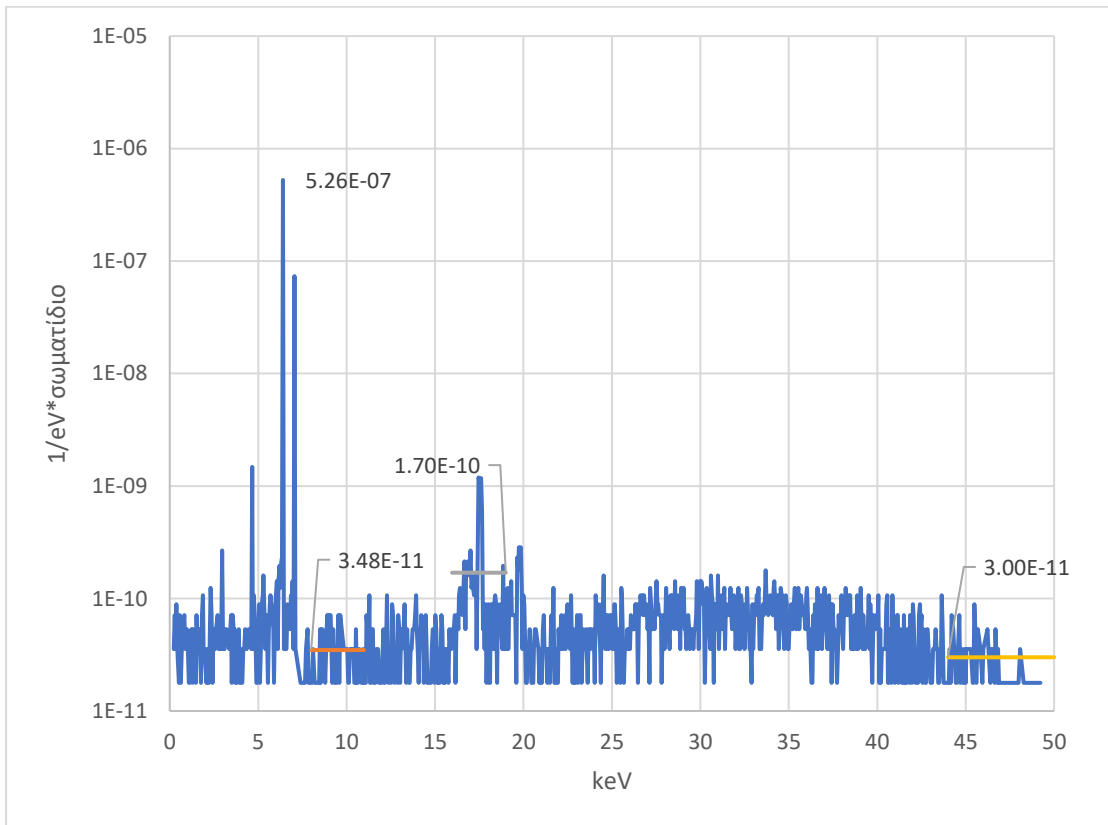
Σχήμα 7.35: Φάσμα προσομοίωσης της διάταξης 4.1.30.

p-t-b	Περιοχή 8-11keV	Περιοχή 16-19keV	Περιοχή 46-50keV
	17266	2942	27308

Πίνακας 7.18: Οι τιμές peak-to-background για τη γεωμετρία 4.1.30.



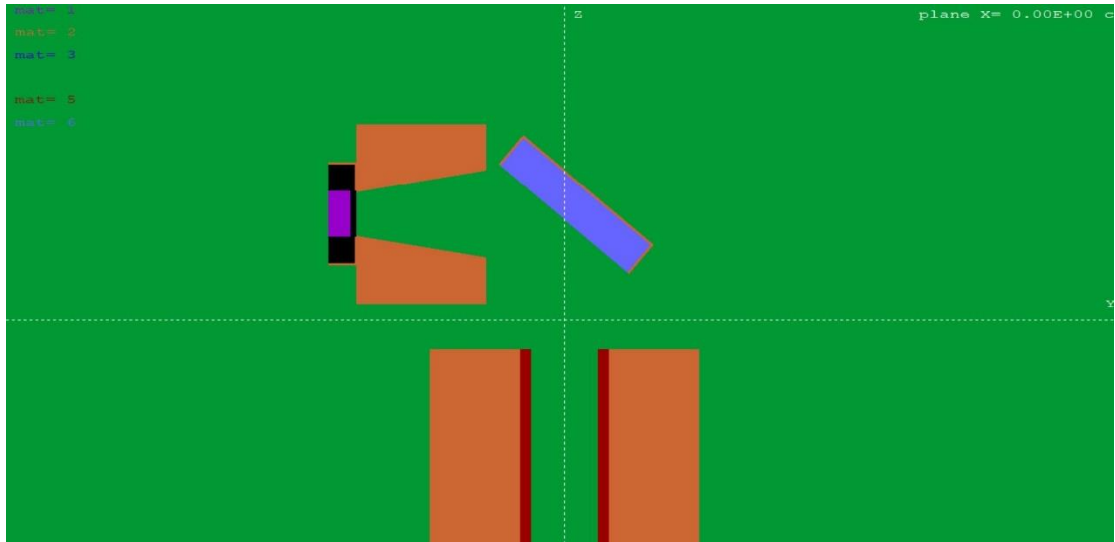
Σχήμα 7.36: Απεικόνιση της διάταξης 4.2.30: στη θέση 4 (απόσταση βάσης ανιχνευτή – βάσης δείγματος 5.25cm), με κατευθυντή τύπου pinhole, για κλίση δείγματος 30°.



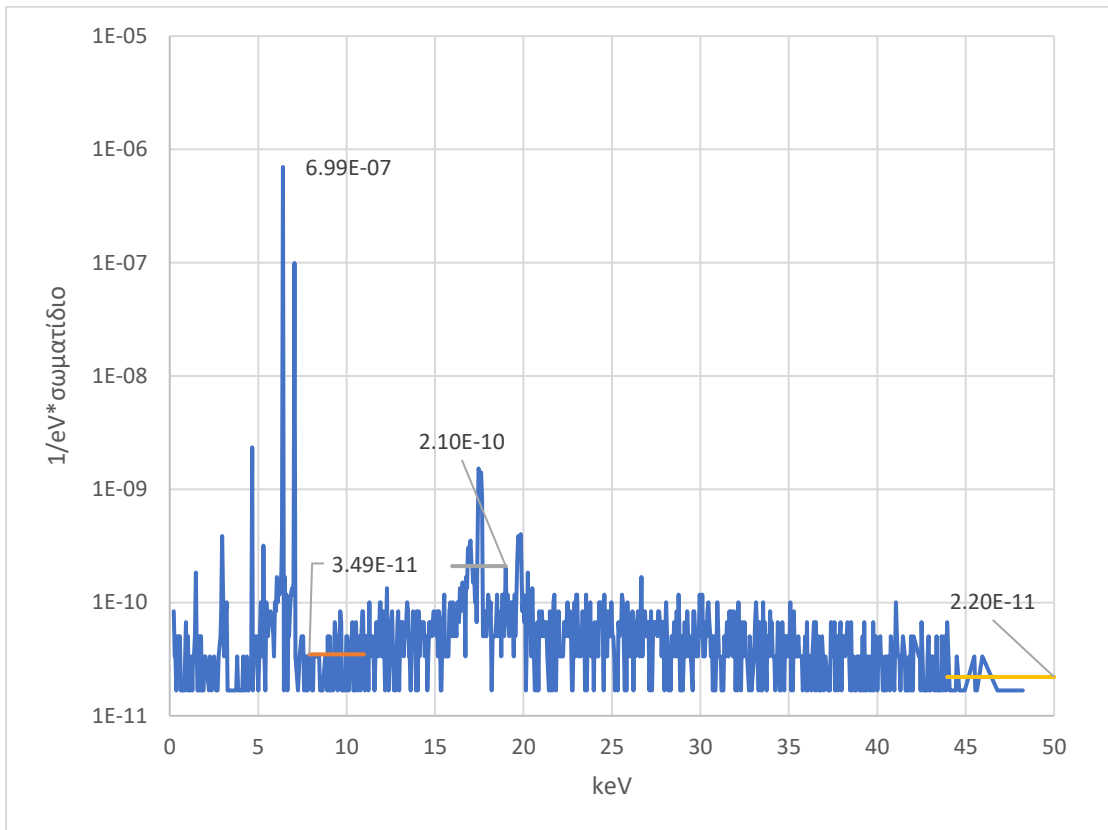
Σχήμα 7.37: Φάσμα προσομοίωσης της διάταξης 4.2.30.

p-t-b	Περιοχή 8-11keV	Περιοχή 16-19keV	Περιοχή 46-50keV
	15102	3101	17518

Πίνακας 7.19: Οι τιμές peak-to-background για τη γεωμετρία.



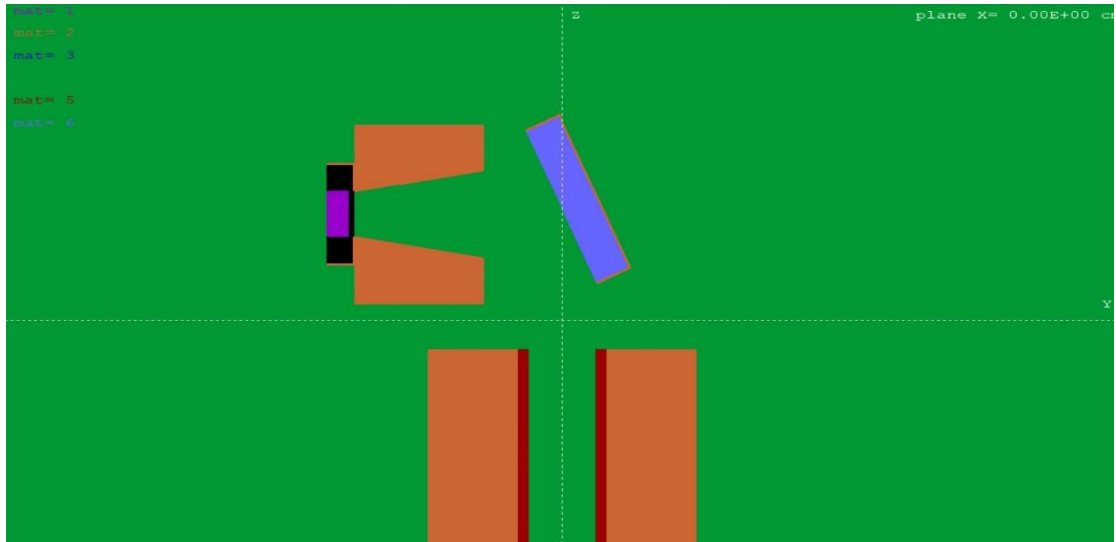
Σχήμα 7.38: Απεικόνιση της διάταξης 4.1.50: στη θέση 4 (απόσταση βάσης ανιχνευτή – βάσης δείγματος 5.25cm), με κωνικό κατευθυντή, για κλίση δείγματος 50°.



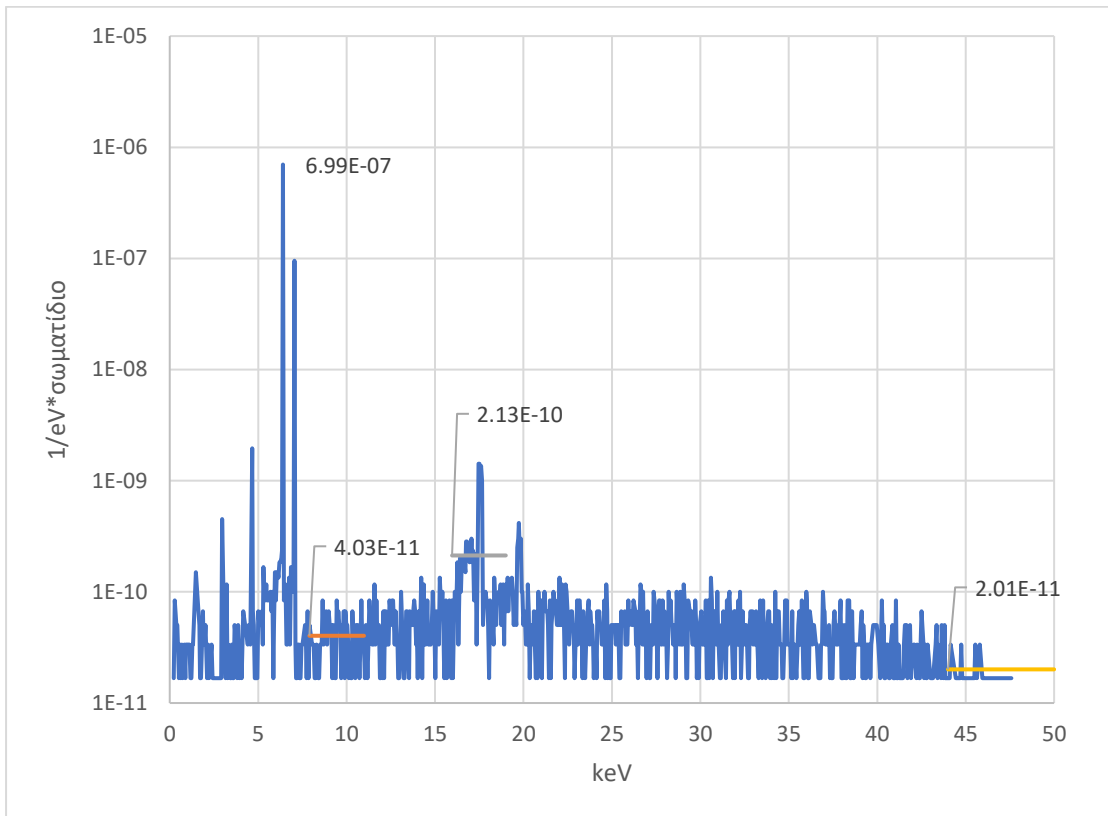
Σχήμα 7.39: Φάσμα προσομοίωσης της διάταξης 4.1.50.

p-t-b	Περιοχή 8-11keV	Περιοχή 16-19keV	Περιοχή 46-50keV
	20017	3332	31694

Πίνακας 7.20: Οι τιμές peak-to-background για τη γεωμετρία 4.1.50.



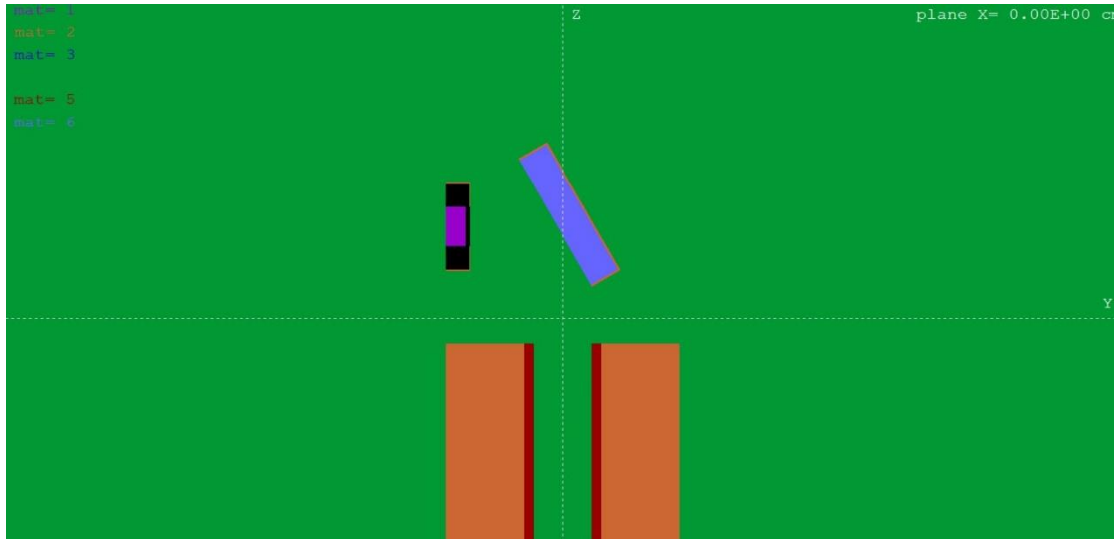
Σχήμα 7.40: Απεικόνιση της διάταξης 4.1.25: στη θέση 4 (απόσταση βάσης ανιχνευτή – βάσης δείγματος 5.25cm), με κωνικό κατευθυντή, για κλίση δείγματος 25°.



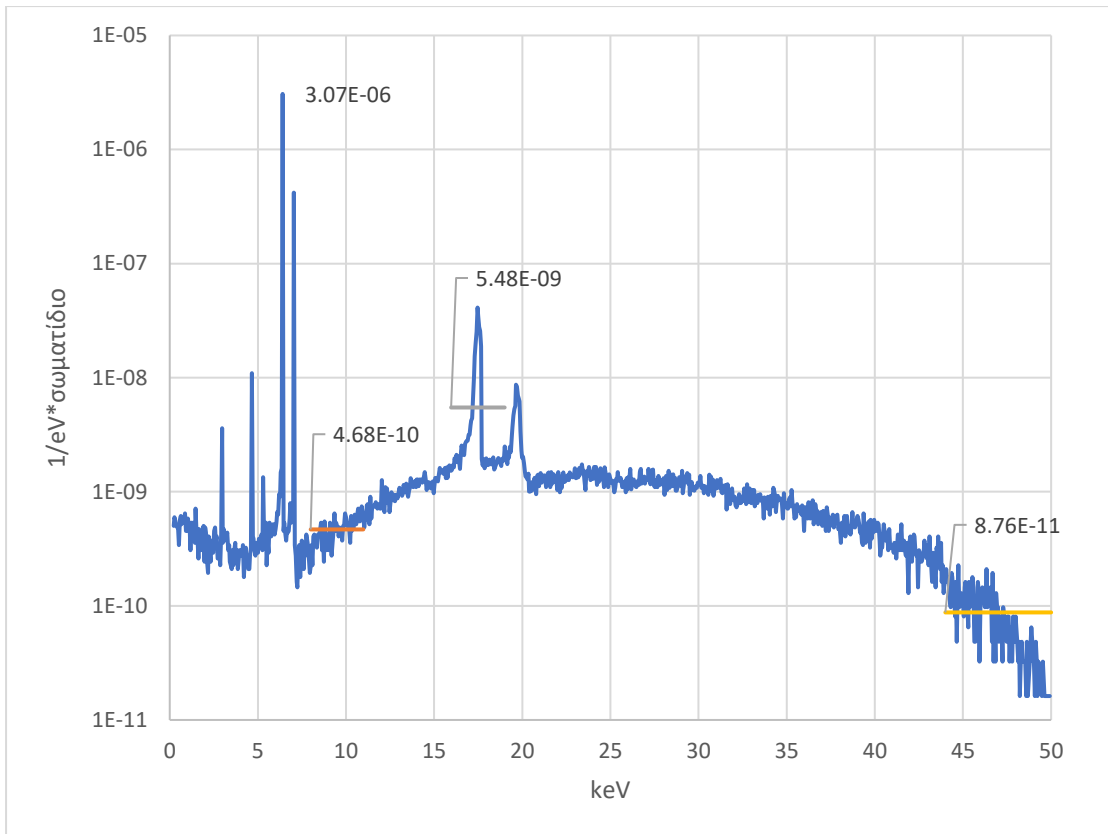
Σχήμα 7.41: Φάσμα προσομοίωσης της διάταξης 4.1.25.

p-t-b	Περιοχή 8-11keV	Περιοχή 16-19keV	Περιοχή 46-50keV
	17350	3288	34807

Πίνακας 7.21: Οι τιμές peak-to-background για τη γεωμετρία 4.1.25.



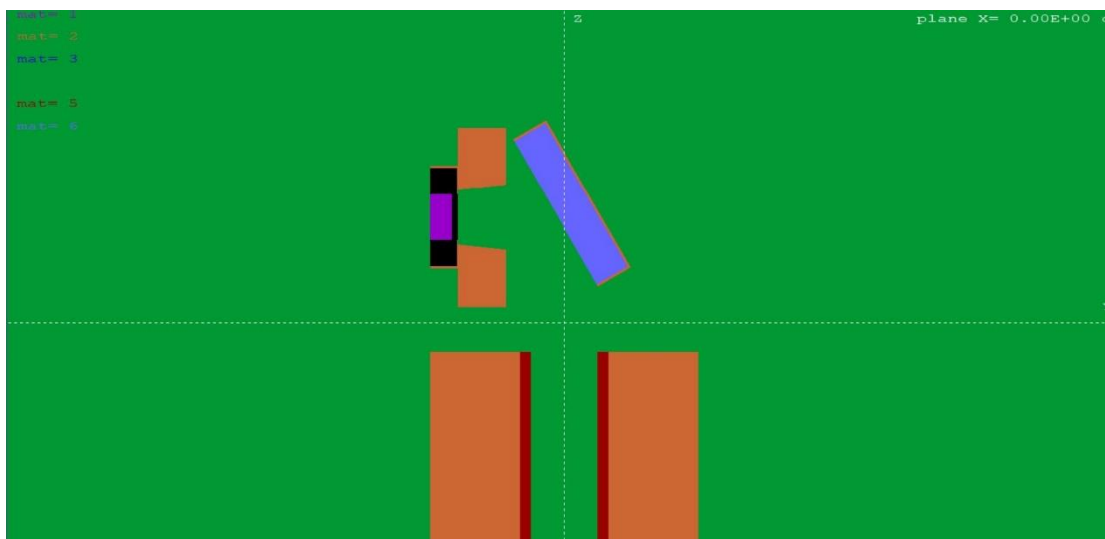
Σχήμα 7.42: Απεικόνιση της διάταξης 5.0.30: στη θέση 5 (απόσταση βάσης ανιχνευτή – βάσης δείγματος 3cm), χωρίς κατευθυντή, για κλίση δείγματος 30°.



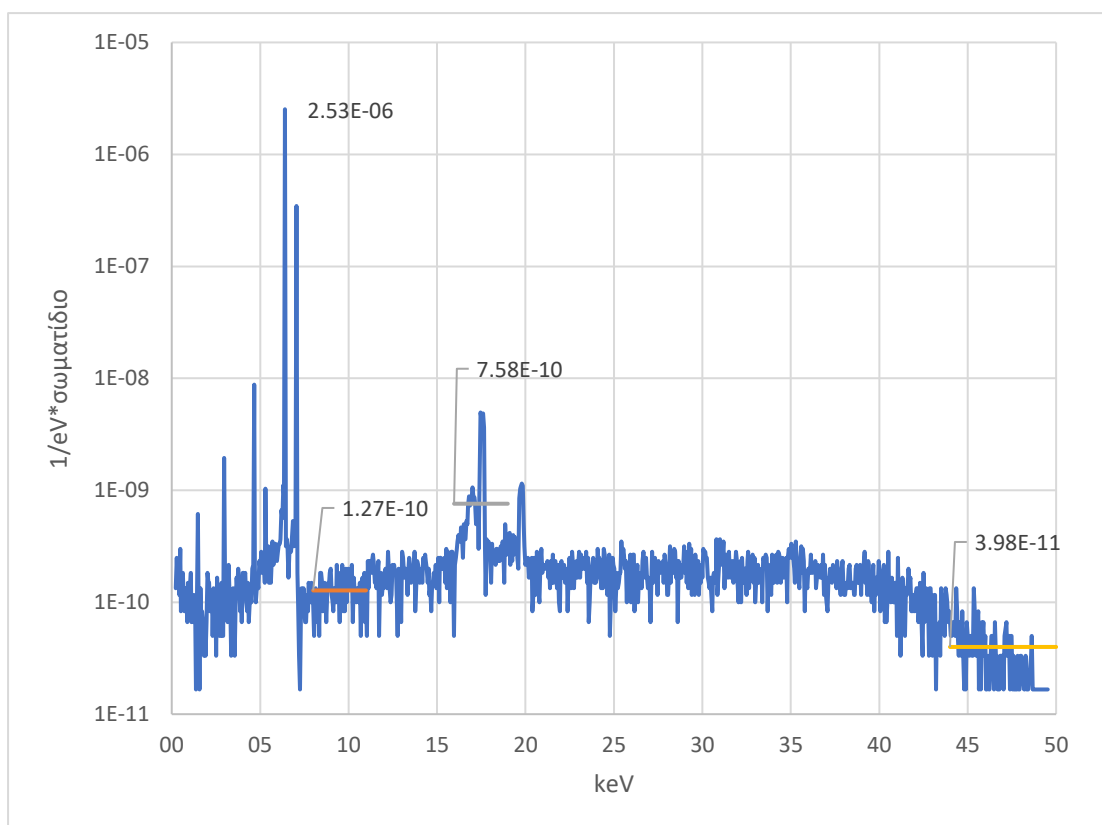
Σχήμα 7.43: Φάσμα προσομοίωσης της διάταξης 5.0.30.

p-t-b	Περιοχή 8-11keV	Περιοχή 16-19keV	Περιοχή 46-50keV
	6565	560	35054

Πίνακας 7.22: Οι τιμές peak-to-background για τη γεωμετρία 5.0.30.



Σχήμα 7.44: Απεικόνιση της διάταξης 5.1.30: στη θέση 5 (απόσταση βάσης ανιχνευτή – βάσης δείγματος 3cm), με κωνικό κατευθυντή, για κλίση δείγματος 30°.



Σχήμα 7.45: Φάσμα προσομοίωσης της διάταξης 5.1.30.

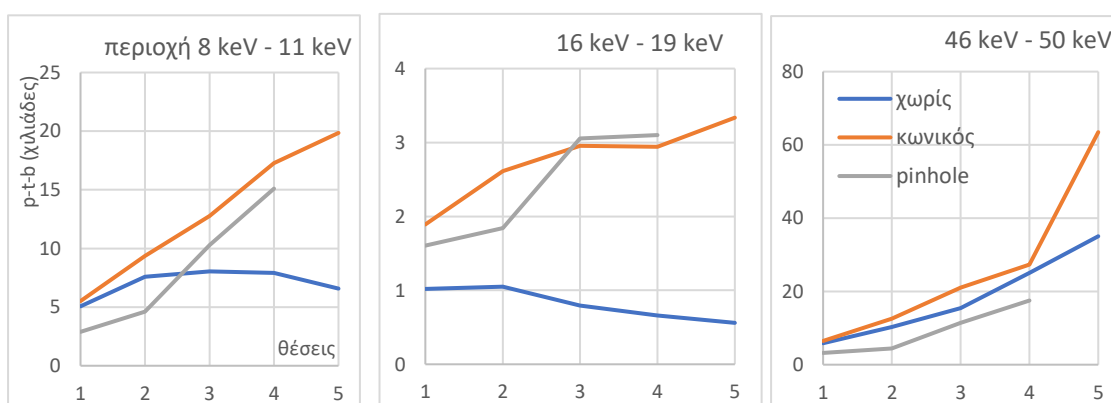
p-t-b	Περιοχή 8-11keV	Περιοχή 16-19keV	Περιοχή 46-50keV
	19852	3336	63475

Πίνακας 7.23: Οι τιμές peak-to-background για τη γεωμετρία 5.1.30.

Στον Πίνακα 7.24 και στο σχήμα 7.46 παρουσιάζονται και συγκρίνονται οι λόγοι p-t-b για όλες τις γεωμετρίες που προσομοιώθηκαν και γωνία δείγματος 30°.

p-t-b θέση	περιοχή	χωρίς κατευθυντή	κωνικός κατευθυντής	κατευθυντής pinhole
1	8keV-11keV	5067	5513	2890
	16keV-19keV	1018	1892	1606
	46keV-50keV	5863	6486	3211
2	8keV-11keV	7601	9348	4607
	16keV-19keV	1050	2615	1841
	46keV-50keV	10241	12572	4443
3	8keV-11keV	8044	12774	10277
	16keV-19keV	793	2956	3053
	46keV-50keV	15466	21060	11447
4	8keV-11keV	7925	17266	15102
	16keV-19keV	662	2942	3101
	46keV-50keV	25071	27308	17518
5	8keV-11keV	6565	19852	
	16keV-19keV	560	3336	
	46keV-50keV	35054	63475	

Πίνακας 7.24: Συγκεντρωτικός πίνακας με τις τιμές p-t-b για τα όλες τις διαφορετικές γεωμετρίες και το δείγμα βρίσκεται σε γωνία 30°.

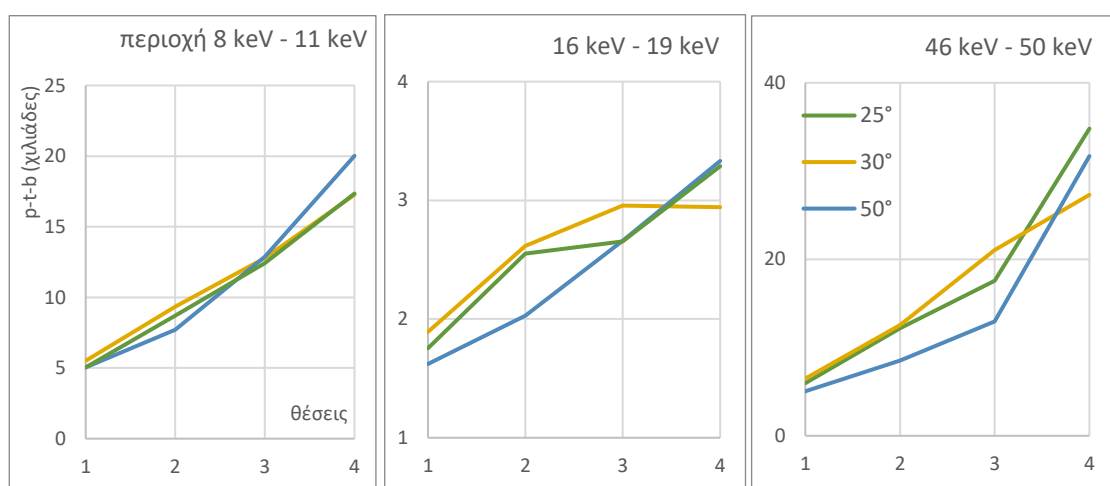


Σχήμα 7.46: Διαγράμματα των τιμών p-t-b για όλες τις γεωμετρίες που προσομοιώθηκαν (απόσταση 1: 12.50cm, απόσταση 2: 10.00cm απόσταση 3: 8.00cm απόσταση 4: 5.25cm απόσταση 5: 3.00cm)

Στον Πίνακα 7.25 και στο σχήμα 7.47 παρουσιάζονται και συγκρίνονται οι λόγοι p-t-b για τον κωνικό κατευθυντή δέσμης και για όλες τις γωνίες.

p-t-b θέση	περιοχή	30°	50°	25°
1	8keV-11keV	5513	5045	5046
	16keV-19keV	1892	1622	1754
	46keV-50keV	6486	5045	5964
2	8keV-11keV	9348	7706	8701
	16keV-19keV	2615	2028	2552
	46keV-50keV	12572	8517	12181
3	8keV-11keV	12774	12882	12415
	16keV-19keV	2956	2659	2654
	46keV-50keV	21060	12972	17559
4	8keV-11keV	17266	20017	17350
	16keV-19keV	2942	3332	3288
	46keV-50keV	27308	31694	34807

Πίνακας 7.25: Συγκεντρωτικός πίνακας με τις τιμές p-t-b για τον κωνικό κατευθυντή δέσμης και τις γωνίες 30°, 50° και 25°.



Σχήμα 7.47: Διαγράμματα των τιμών p-t-b για όλες τις γεωμετρίες που προσομοιώθηκαν (απόσταση 1: 12.50cm, απόσταση 2: 10.00cm απόσταση 3: 8.00cm απόσταση 4: 5.25cm απόσταση 5: 3.00cm)

7.2.1 Συγκριτική ανάλυση των αποτελεσμάτων των προσομοιώσεων με διαφορετικές γεωμετρίες κατευθυντή και γωνίες δείγματος

Πριν από τη σύγκριση των διαφόρων γεωμετρών και το σχετικό σχολιασμό είναι σημαντικό να σημειωθεί ότι για μια ικανοποιητική σύγκριση των προσομοιώσεων, προϋπόθεση είναι αυτές να έχουν οδηγήσει σε ένα φάσμα με καλή στατιστική και κατά συνέπεια ικανοποιητική μορφή φάσματος. Σε πολλές περιπτώσεις, κατά τις προσομοιώσεις που έγιναν, και ειδικότερα για τις διατάξεις με μεγάλη απόσταση ανιχνευτή – δείγματος, είναι φανερό από τη μορφή των διαγραμμάτων πως ικανοποιητική στατιστική δεν πρόλαβε να επιτευχθεί. Ο κύριος στόχος όμως της παρούσας μελέτης είναι να παρουσιάσει μία γενική κατεύθυνση βελτίωσης της διάταξης, συγκρίνοντας την απόδοση διατάξεων και εντοπίζοντας κάποιες πρώτες τάσεις. Αυτή η προσέγγιση, επέτρεψε μια ευρεία διερεύνηση των παραμέτρων και παρείχε ενδείξεις για οδούς βελτίωσης και βελτιστοποίησης σε μελλοντικές σχετικές μελέτες. Στις προσομοιώσεις που παρουσιάζονται στη συνέχεια το πλήθος ιστοριών ήταν περί τις $1.2 \cdot 10^9$ κατά μέσο όρο, το περιβάλλον μέσο ήταν αέρας και το υλικό του κατευθυντή δέσμης ήταν αλουμίνιο.

Από τη σύγκριση των διαγραμμάτων που παρουσιάστηκαν προηγουμένως και τις τιμές p-t-b προκύπτουν οι εξής παρατηρήσεις:

- **Σχετικά με τη θέση του ανιχνευτή:** Πλησιάζοντας το δείγμα, ο λόγος p-t-b αυξάνεται και για τα δύο σχήματα κατευθυντή, ενώ χωρίς τη χρήση κατευθυντή ο λόγος μειώνεται. Η πλησιέστερη θέση στο δείγμα έχει τη μεγαλύτερη απόκλιση λόγων p-t-b μεταξύ των προσομοιώσεων με και χωρίς κατευθυντή. Επομένως, μειώνοντας την απόσταση δείγματος–ανιχνευτή το σήμα υποστρώματος αυξάνεται περισσότερο από το σήμα φθορισμού, ενώ η χρήση κατευθυντή είναι καθοριστική για τη βελτίωση της απόδοσης της διάταξης. Στην τρίτη περιοχή του διαγράμματος που αφορά τις υψηλές ενέργειες (46-50keV), ο λόγος p-t-b αυξάνεται ακόμη και χωρίς τη χρήση κατευθυντή.
- **Σχετικά με το σχήμα του κατευθυντή:** Η σύγκριση έγινε για 4 θέσεις του ανιχνευτή, διότι ένας κατευθυντής τύπου pinhole στη θέση 5 θα παρουσίαζε πρόβλημα στο λεπτομερή σχεδιασμό λόγω του μικρού του μεγέθους, σε σχέση με τις επιδιώξεις της ΔΕ. Σε όλες τις θέσεις φαίνεται η επικράτηση του κωνικού κατευθυντή σε σύγκριση με τον τύπου pinhole, με εξαίρεση τις μεσαίες ενέργειες στις κοντινές θέσεις. Αυτό οφείλεται στο ότι ο κατευθυντής τύπου pinhole επιτρέπει σε μικρότερη ποσότητα σήματος να φτάσει στον ανιχνευτή και στη συγκεκριμένη περίπτωση μειώνει ισχυρότερα τη σκεδαζόμενη

ακτινοβολία του μολυβδαινίου της πηγής, στην οποία οφείλεται το υψηλό υπόστρωμα της περιοχής. Στις περιπτώσεις που ο κατευθυντής τύπου pinhole μειώνει τόσο το ανιχνεύσιμο σήμα, ώστε η απόδοσή του να είναι αρκετά χαμηλότερη από του κωνικού, είναι σημαντικό να γίνει μελέτη σύγκλισης του φάσματος με προσομοιώσεις πολύ μεγαλύτερου χρόνου.

- Το σχήμα και των δύο κατευθυντών έχει περιθώριο βελτιστοποίησης. Για παράδειγμα, ένας κωνικός κατευθυντής μπορεί να προσαρμοστεί με ακρίβεια στη διάταξη, εφόσον επιλεγθεί μία συγκεκριμένη απόσταση δείγματος – ανιχνευτή. Αυτό γίνεται με τη βελτιστοποίηση του μήκους του, του πάχους του και της κωνικότητάς του: από κυκλική σε ελλειψοειδή. Επίσης, ένας κατευθυντής τύπου pinhole μπορεί να έχει σχήμα κλεψύδρας, ή βελτιστοποιημένο πάχος και σχήμα οπής.
- Είναι άξια αναφοράς η μεγάλη αβεβαιότητα των μετρήσεων πυκνότητας πιθανότητας. Αυτό σημαίνει πως απαιτούνται πολύ μεγαλύτερης διάρκειας προσομοιώσεις για μειωθεί η αβεβαιότητα των λόγων p-t-b και να προκύψουν πιο αξιόπιστα συμπεράσματα, ειδικά σε τιμές που δεν παρουσιάζουν μεγάλη διαφορά.
- **Σχετικά με τις γωνίες δείγματος:** Η σύγκριση έγινε μόνο με κωνικό κατευθυντή, διότι για τους συγκεκριμένους χρόνους προσομοιώσεων, έχει γενικά υψηλότερους λόγους p-t-b. Επίσης, η σύγκριση έγινε μόνο για 4 θέσεις, επειδή στη θέση 5 είναι αδύνατη η περιστροφή του δείγματος στις 50°. Με βάση όσα αναφέρθηκαν σχετικά με την αβεβαιότητα των μετρήσεων, και επειδή οι τιμές p-t-b είναι παρόμοιες για τις 3 γωνίες τοποθέτησης δείγματος, δεν μπορεί να εξαχθεί ασφαλές συμπέρασμα. Ωστόσο, ειδικά για τη θέση 4 -όπως θα φανεί στη συνέχεια - η γωνία 30° φαίνεται να είναι η χειρότερη περίπτωση. Για ασφαλέστερο συμπέρασμα στη σύγκριση, θα πρέπει να γίνει ευρύτερη διερεύνηση σε περισσότερες γωνίες δείγματος και με μεγαλύτερη διάρκεια προσομοίωσης.

7.3. Διερεύνηση δεύτερη: Περιβάλλον He, κενού

Στην ενότητα που ακολουθεί εξετάζεται η επίδραση του περιβάλλοντος της διάταξης στην απόδοση της φασματοσκοπίας XRF. Συγκεκριμένα, γίνονται προσομοιώσεις για 4 αποστάσεις δείγματος-ανιχνευτή, με και χωρίς κατευθυντή από αλουμίνιο, σε περιβάλλον με αέρα, ήλιο (He) και κενό.

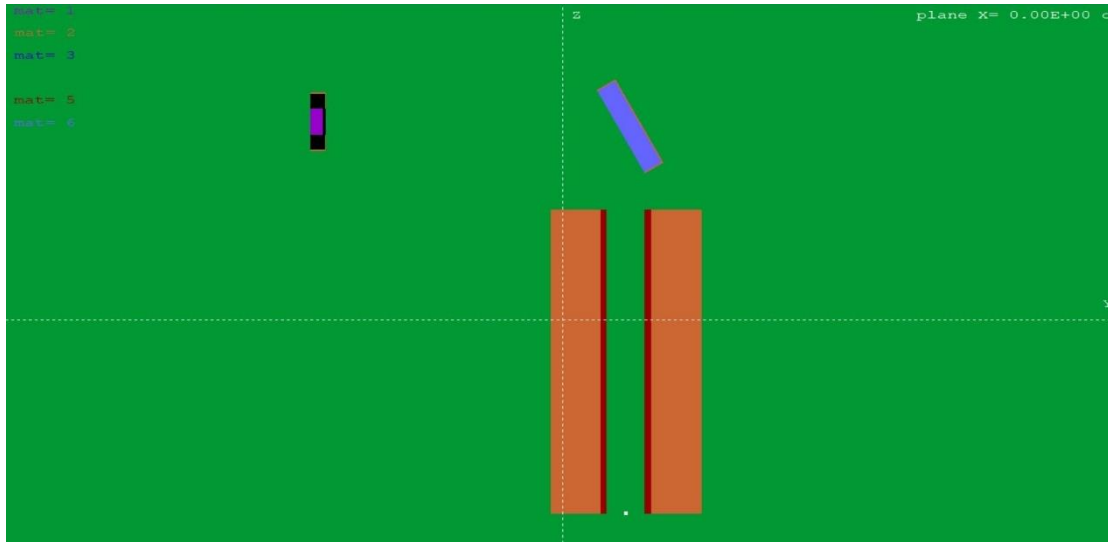
Η μελέτη του περιβάλλοντος μέσου γίνεται επειδή – ανάλογα και με την ενέργεια των ακτίνων-X – μπορεί να υπάρχει σημαντική αλληλεπίδρασή τους με το περιβάλλον υλικό π.χ. αέρας με συνέπεια, αφενός την εξασθένηση της χρήσιμης χαρακτηριστικής ακτινοβολίας, αφετέρου την αύξηση της σκεδαζομένης και τελικά μείωση του λόγου p-t-b. Μεταβάλλοντας συστηματικά για την ίδια διάταξη το περιβάλλον μέσο, από αέρα, σε ήλιο και σε ορισμένες περιπτώσεις σε κενό, μπορεί να μελετηθεί η επίδραση του περιβάλλοντος τη διάταξη υλικού.

Οι προσομοιώσεις με υλικό περιβάλλοντος αέρα έχουν ήδη παρουσιαστεί στην ενότητα 6.2. Ο αέρας αποτελεί το περιβάλλον αναφοράς, όντας η πιο συνηθισμένη εργαστηριακή συνθήκη, καθώς και η επικρατούσα στο εργαστήριο ΕΠΤ-ΕΜΠ. Το ήλιο (He) έχει χαμηλότερο ατομικό αριθμό από αυτό των ατόμων του ατμοσφαιρικού αέρα, με αποτέλεσμα μικρότερη αλληλεπίδραση των ακτίνων-X με αυτό και προσφέρει μια ρεαλιστική – αν και όχι πολύ εύκολη τεχνικά – λύση στο ζήτημα της επίδρασης του περιβάλλοντος μέσου. Τέλος, το περιβάλλον κενού, αν και εφαρμόζεται με δυσκολία σε μία πραγματική διάταξη, προσομοιώνεται για μία θέση ώστε να εξαλειφθεί η επίδραση σκέδασης και απορρόφησης στον αέρα, και να φανεί η καθαρή επίδραση των υπολοίπων συνιστωσών της διάταξης XRF. Υπενθυμίζεται στο σημείο αυτό ότι, τόσο ο ανιχνευτής, όσο και η μηχανή ακτίνων-X βρίσκονται σε περιβάλλον κενού.

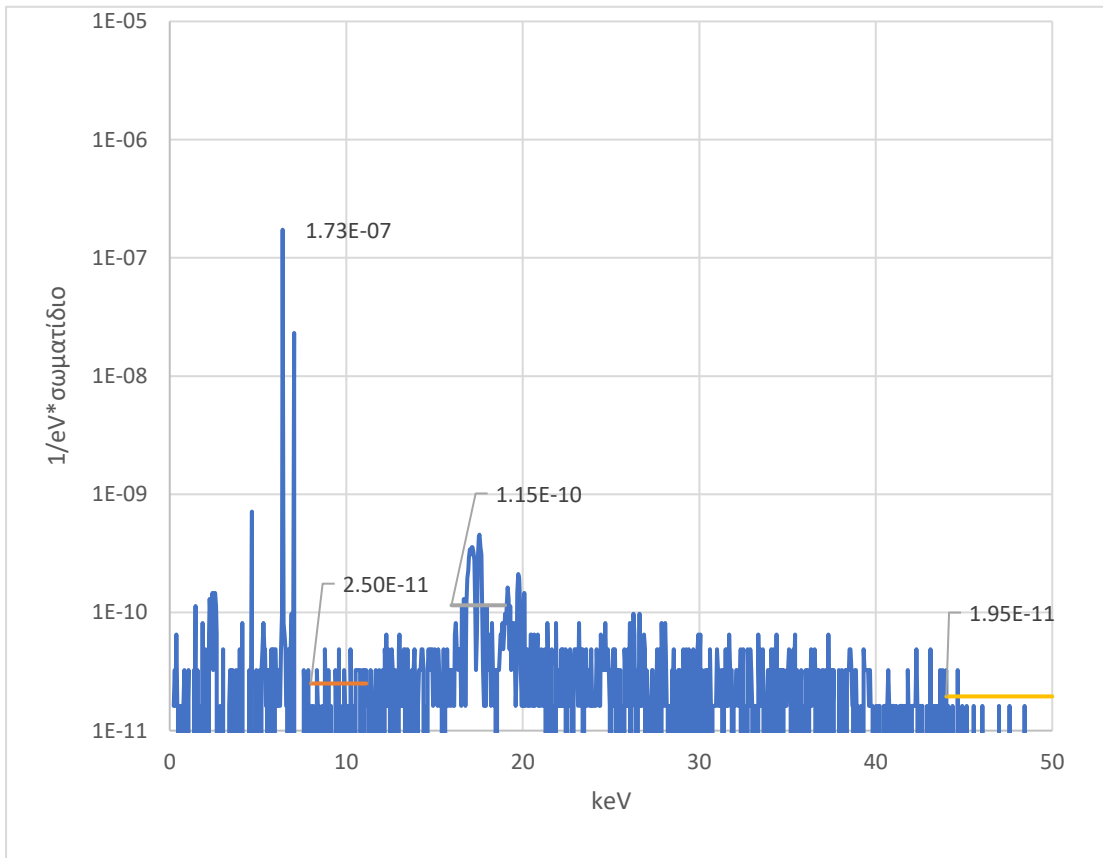
Εμβαθύνοντας στην επίδραση του αέρα στη φασματοσκοπία φθορισμού ακτίνων-X, γίνεται μία αναφορά στις ιδιότητες του να σκεδάζει και να απορροφά ακτινοβολίες. Όπως κάθε μορφή ύλης, τα μόρια του αέρα μπορούν να αναγκάσουν ένα φωτόνιο σε ελαστική σκέδαση ή μη ελαστική σκέδαση. Αυτό σημαίνει πως, ενώ οι συνιστώσες του πειράματος είναι διατεταγμένες υποθέτοντας ευθεία πορεία των ακτίνων-X στο περιβάλλον μέσο, ορισμένες ακτίνες-X διασκορπίζονται σε διαφορετικές κατευθύνσεις. Είτε διασκορπίζονται φωτόνια από το δείγμα μακριά από τον ανιχνευτή, είτε διασκορπίζεται ακτινοβολία από κάποια άλλη συνιστώσα προς τον ανιχνευτή, το αποτέλεσμα είναι η μείωση του λόγου p-t-b στο φάσμα και κατά συνέπεια της ανιχνευτικής ικανότητας της διάταξης. Επίσης, τα μόρια του αέρα μπορούν να απορροφήσουν ακτίνες-X συγκεκριμένων ενεργειών, μειώνοντας την ένταση ή αλλοιώνοντας τη μορφή κάποιων

κορυφών του φάσματος φθορισμού. Η έκταση της απορρόφησης εξαρτάται από παράγοντες όπως η ενέργεια των φωτονίων, η απόσταση που διανύει ένα φωτόνιο, και η σύσταση του αέρα. Αξίζει να σημειωθεί ότι στην παρούσα ΔΕ ο αέρας που προσομοιώνεται δημιουργήθηκε από τον κώδικα PENELOPE με χρήση του προγράμματος material και είναι ξηρός, χωρίς προσμίξεις κοντά στην επιφάνεια της θάλασσας (18).

Οι ενότητες που ακολουθούν παρουσιάζουν τα αποτελέσματα των προσομοιώσεων, με οπτική αναπαράσταση των φασμάτων που συλλέγονται, συγκεντρωτικό πίνακα των λόγων p-t-b και συγκριτική μελέτη τεσσάρων θέσεων για κάθε περιβάλλον μέσο.



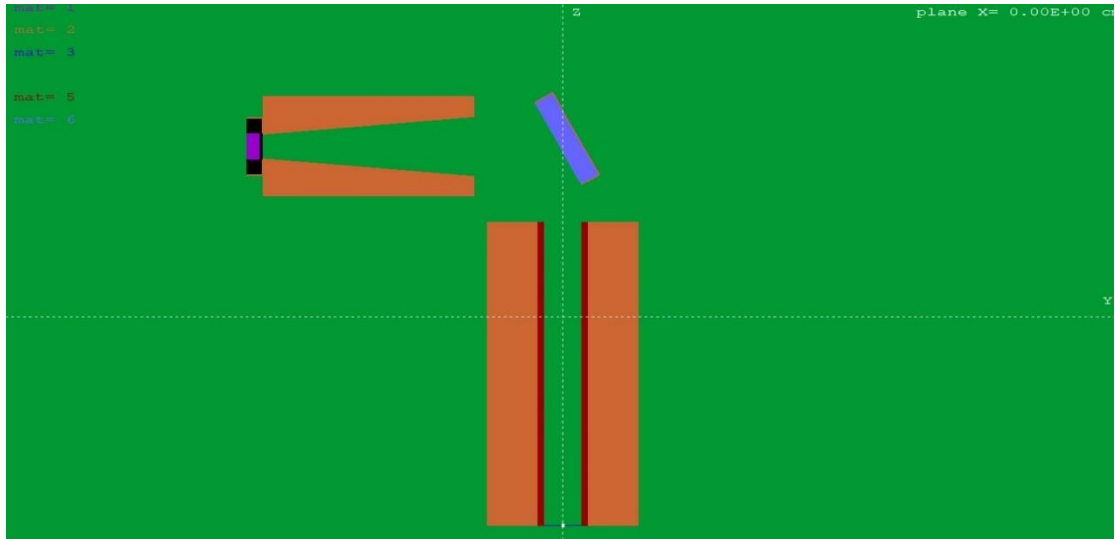
Σχήμα 7.48: Απεικόνιση της διάταξης της διάταξης 1.0.30, σε περιβάλλον He.



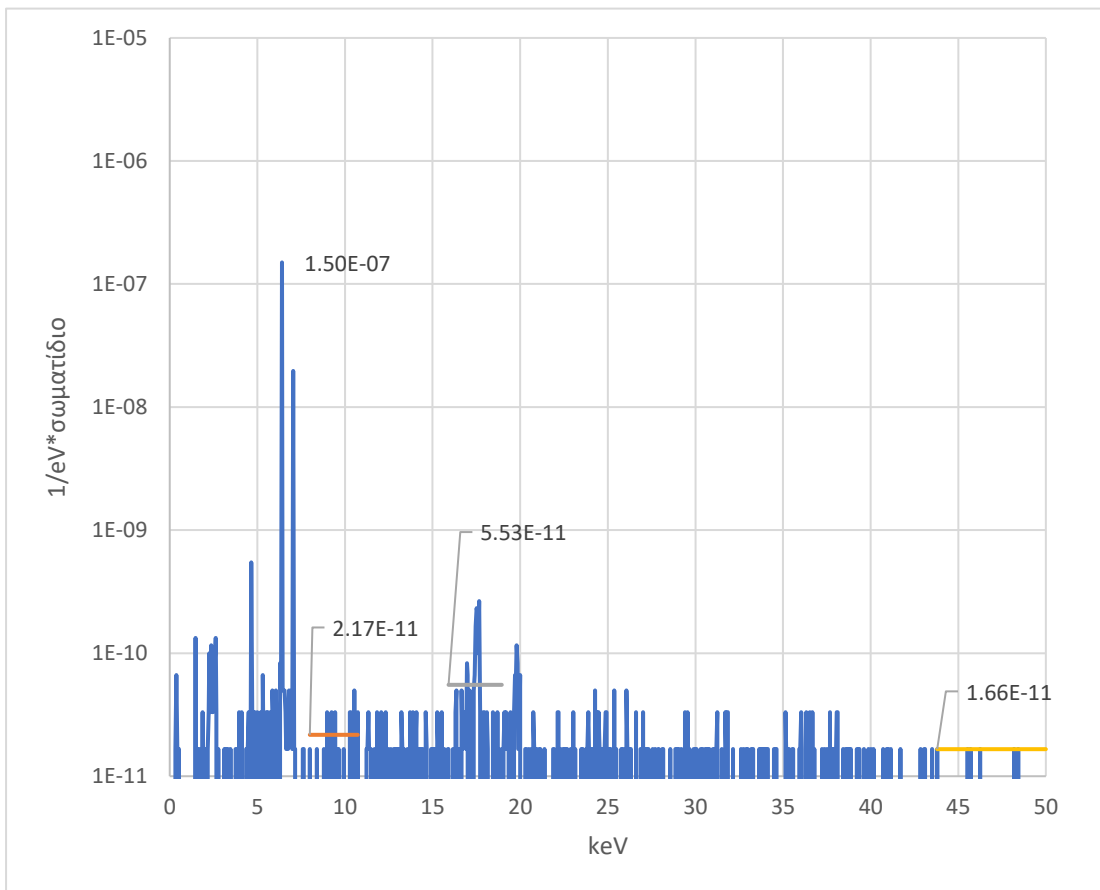
Σχήμα 7.49: Φάσμα προσομοίωσης της διάταξης 1.0.30, σε περιβάλλον He.

p-t-b	Περιοχή 8-11keV	Περιοχή 16-19keV	Περιοχή 46-50keV
	6911	1505	8885

Πίνακας 7.26: Οι τιμές peak-to-background για τη γεωμετρία 1.0.30, σε περιβάλλον He.



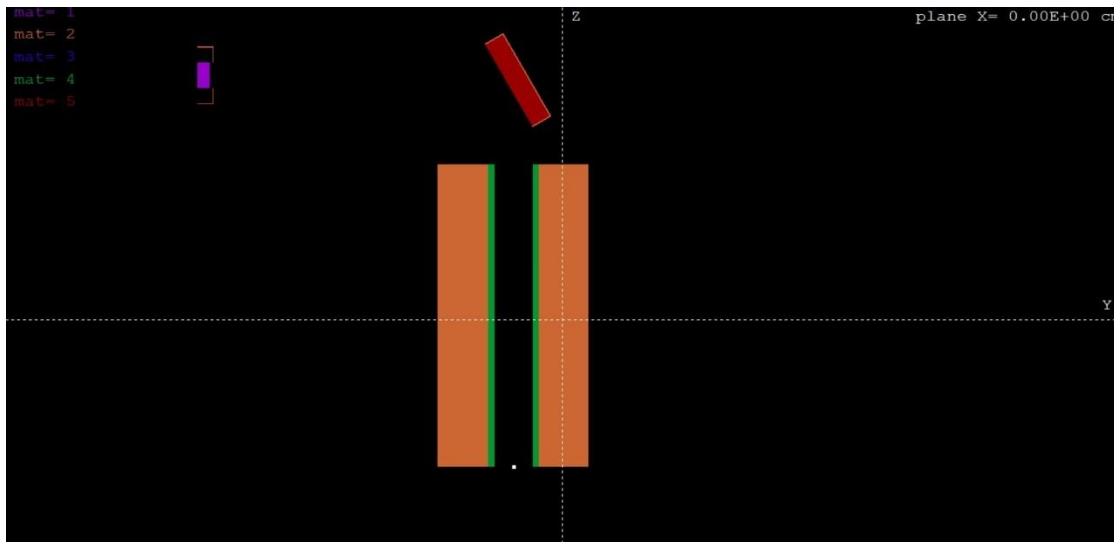
Σχήμα 7.50: Απεικόνιση της διάταξης 1.1.30, σε περιβάλλον He.



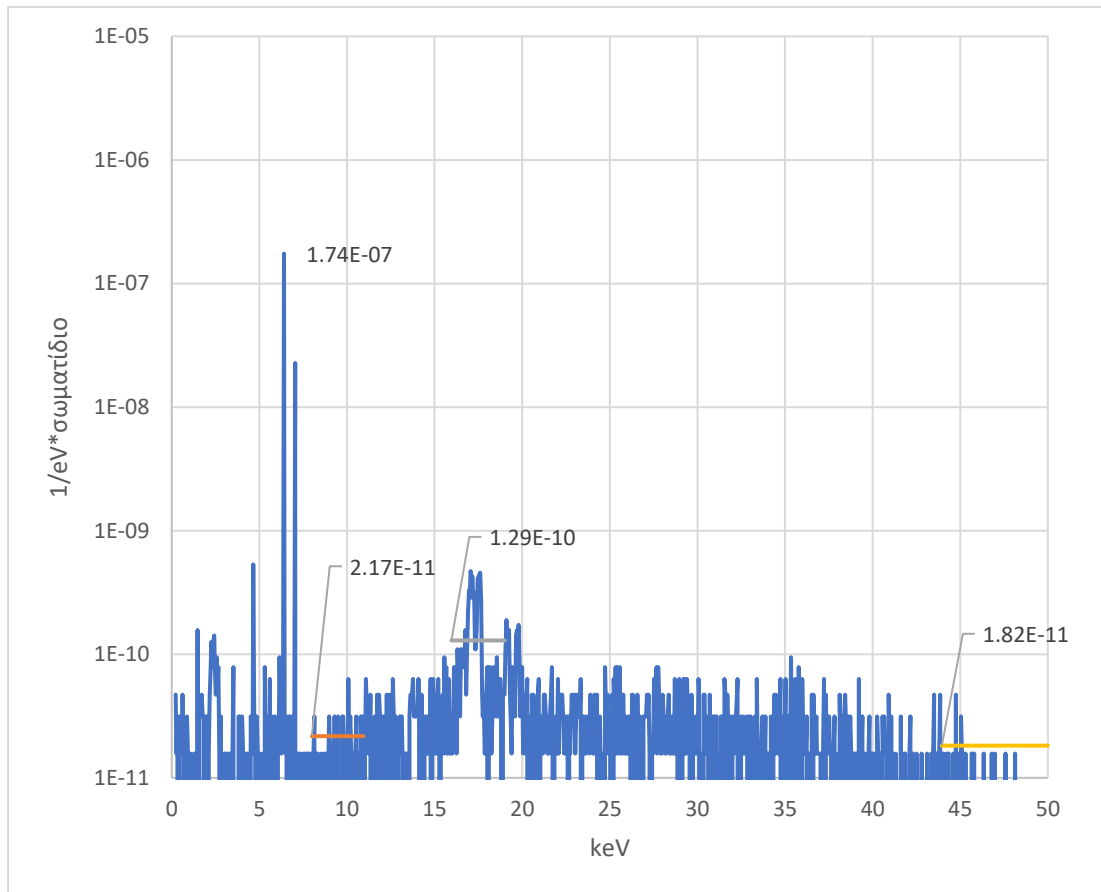
Σχήμα 7.51: Φάσμα προσομοίωσης της διάταξης 1.1.30, σε περιβάλλον He.

p-t-b	Περιοχή 8-11keV	Περιοχή 16-19keV	Περιοχή 46-50keV
	6906	2709	9032

Πίνακας 7.27: Οι τιμές peak-to-background για τη γεωμετρία 1.1.30, σε περιβάλλον He.



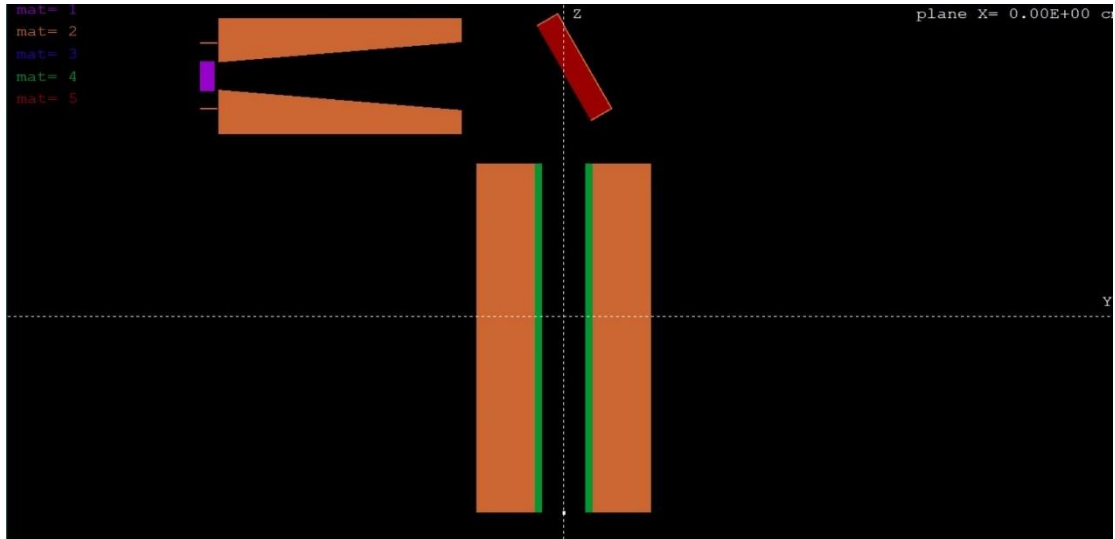
Σχήμα 7.52: Απεικόνιση της διάταξης 1.0.30, σε περιβάλλον κενού.



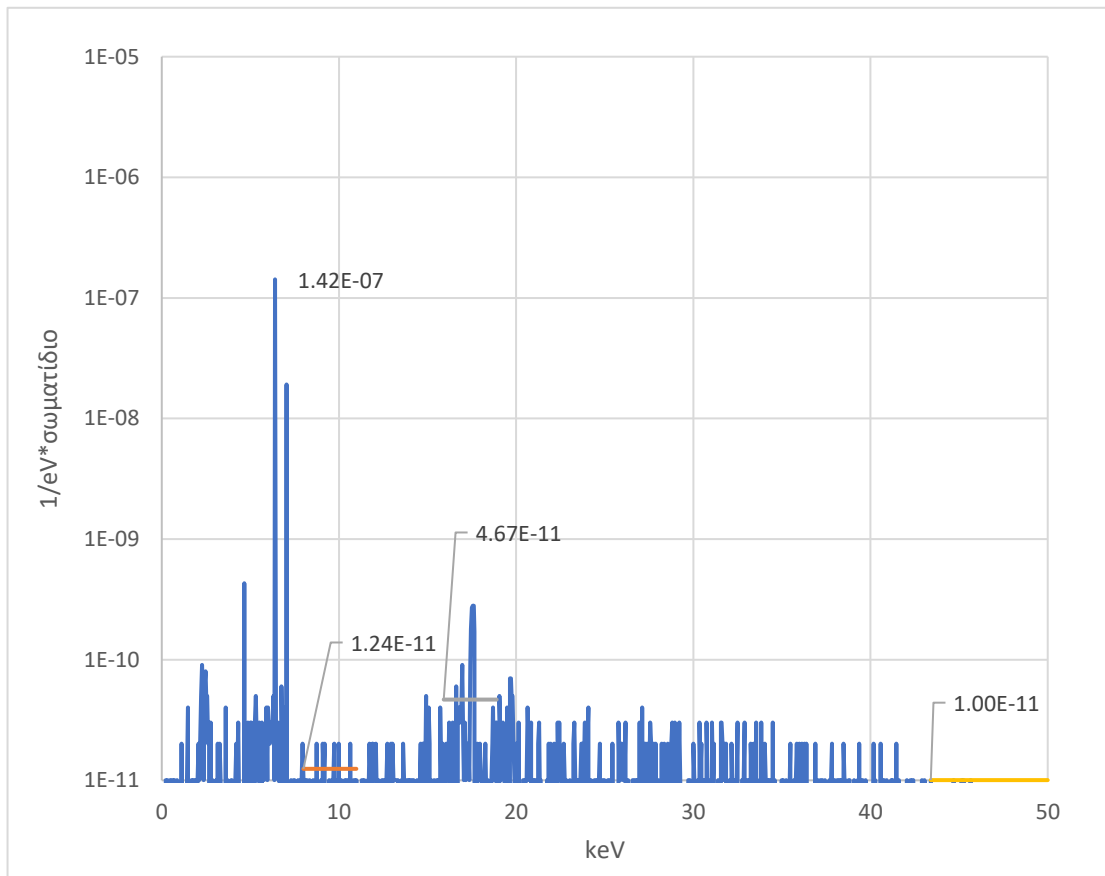
Σχήμα 7.53: Φάσμα προσομοίωσης της διάταξης 1.0.30, σε περιβάλλον κενού.

p-t-b	Περιοχή 8-11keV	Περιοχή 16-19keV	Περιοχή 46-50keV
	8016	1348	9569

Πίνακας 7.28: Οι τιμές peak-to-background για τη γεωμετρία 1.0.30, σε περιβάλλον κενού.



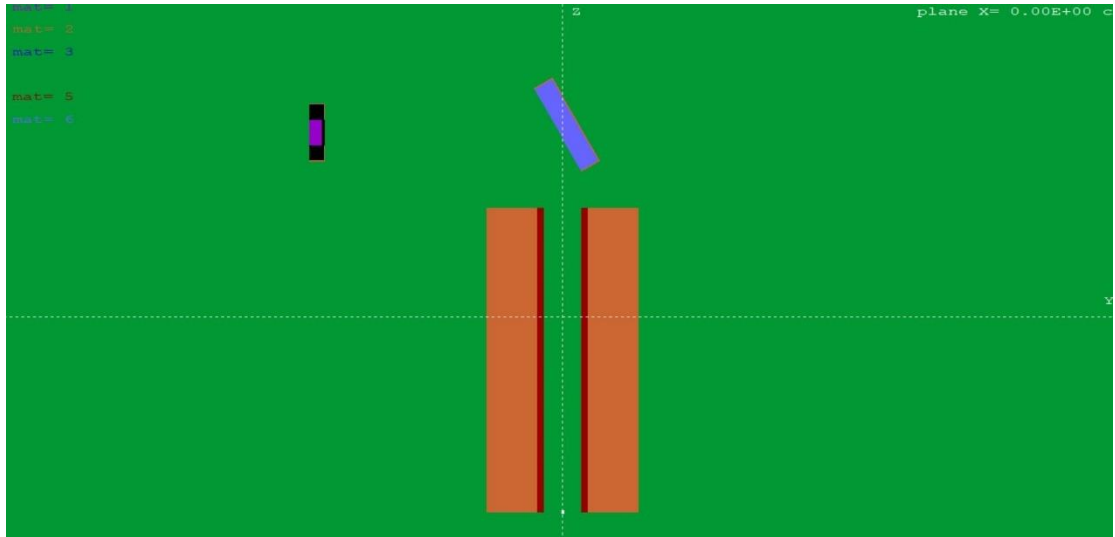
Σχήμα 7.54: Απεικόνιση της διάταξης 1.1.30, σε περιβάλλον κενού.



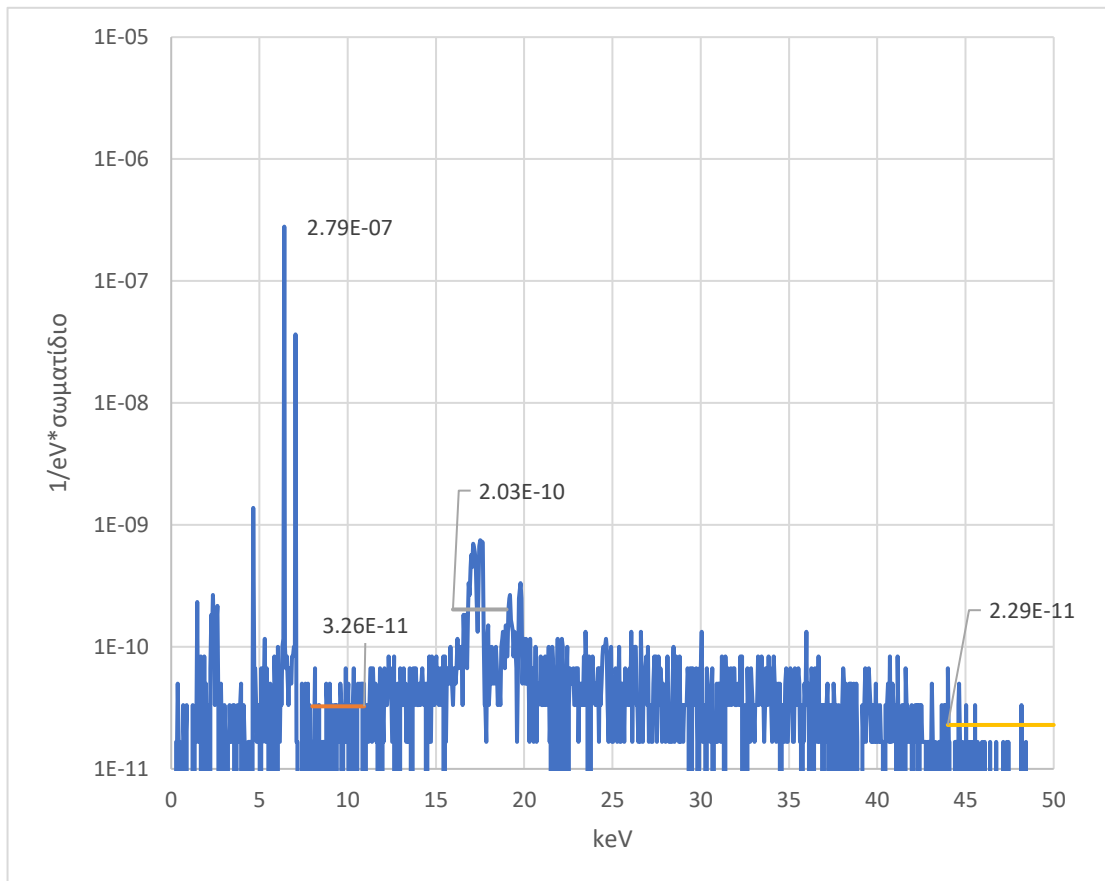
Σχήμα 7.55: Φάσμα προσομοίωσης της διάταξης 1.1.30, σε περιβάλλον κενού.

p-t-b	Περιοχή 8-11keV	Περιοχή 16-19keV	Περιοχή 46-50keV
	11437	3048	14182

Πίνακας 7.29: Οι τιμές peak-to-background για τη γεωμετρία 1.1.30 σε περιβάλλον κενού.



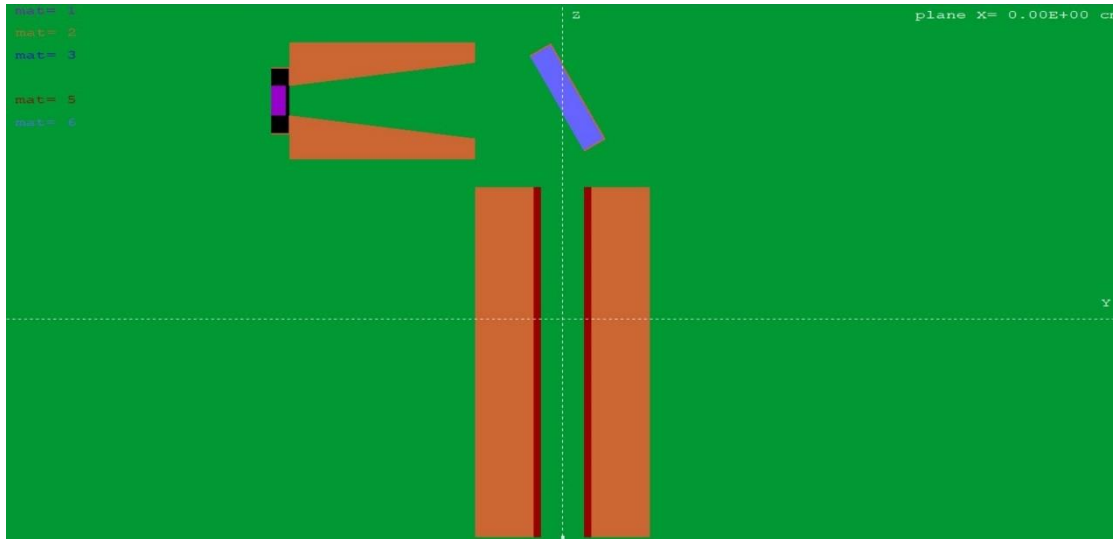
Σχήμα 7.56: Απεικόνιση της διάταξης 2.0.30, σε περιβάλλον He.



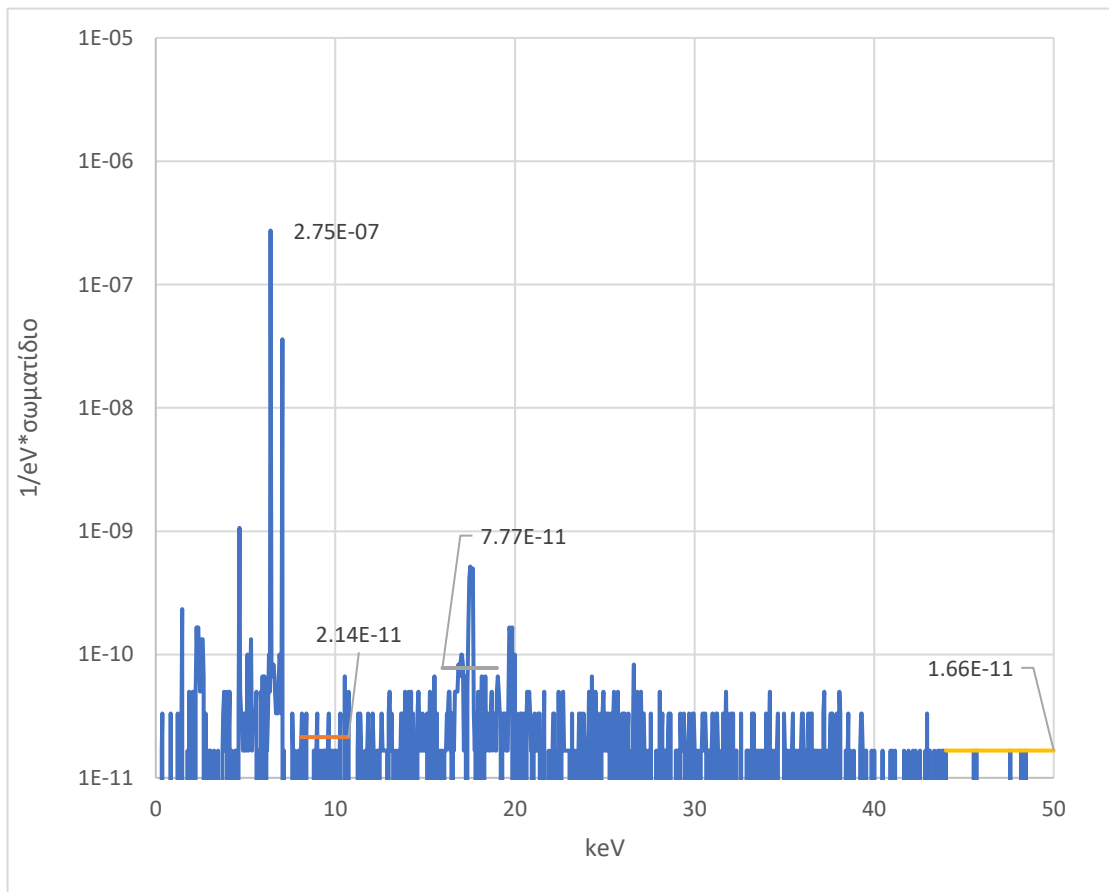
Σχήμα 7.57: Φάσμα προσομοίωσης της διάταξης 2.0.30, σε περιβάλλον He.

p-t-b	Περιοχή 8-11keV	Περιοχή 16-19keV	Περιοχή 46-50keV
	8581	1378	12192

Πίνακας 7.30: Οι τιμές peak-to-background για τη γεωμετρία 2.0.30, σε περιβάλλον He.



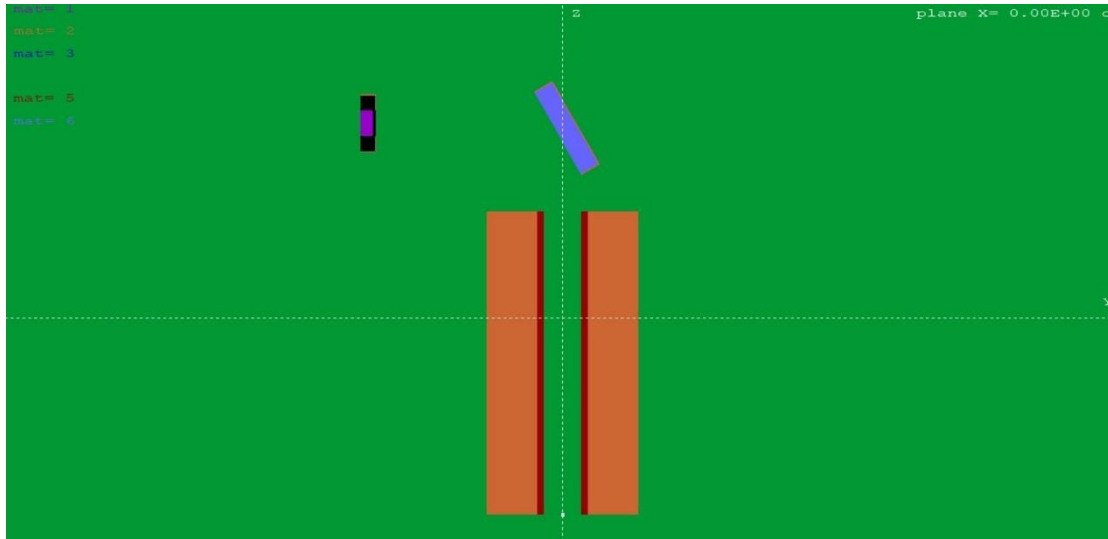
Σχήμα 7.58: Απεικόνιση της διάταξης 2.1.30, σε περιβάλλον He.



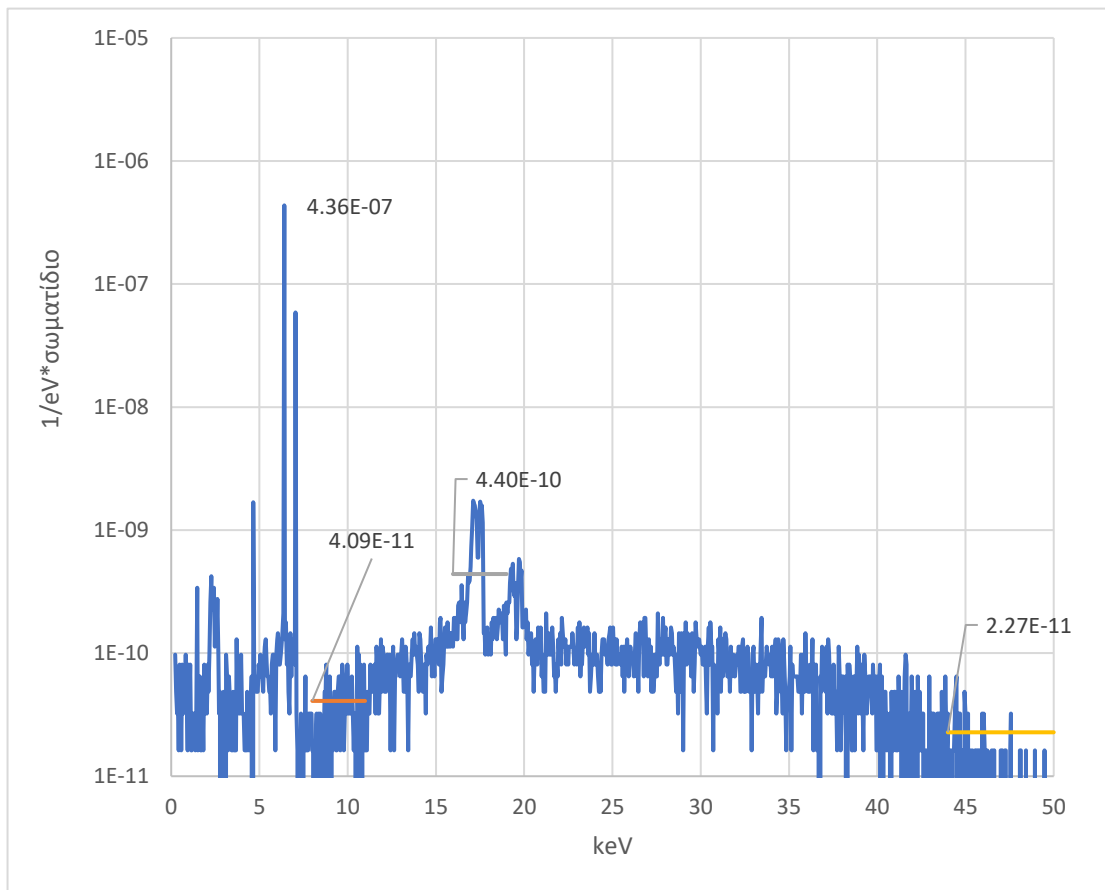
Σχήμα 7.59: Φάσμα προσομοίωσης της διάταξης 2.1.30, σε περιβάλλον He.

p-t-b	Περιοχή 8-11keV	Περιοχή 16-19keV	Περιοχή 46-50keV
	12833	3531	16500

Πίνακας 7.31: Οι τιμές peak-to-background για τη γεωμετρία 2.1.30, σε περιβάλλον He.



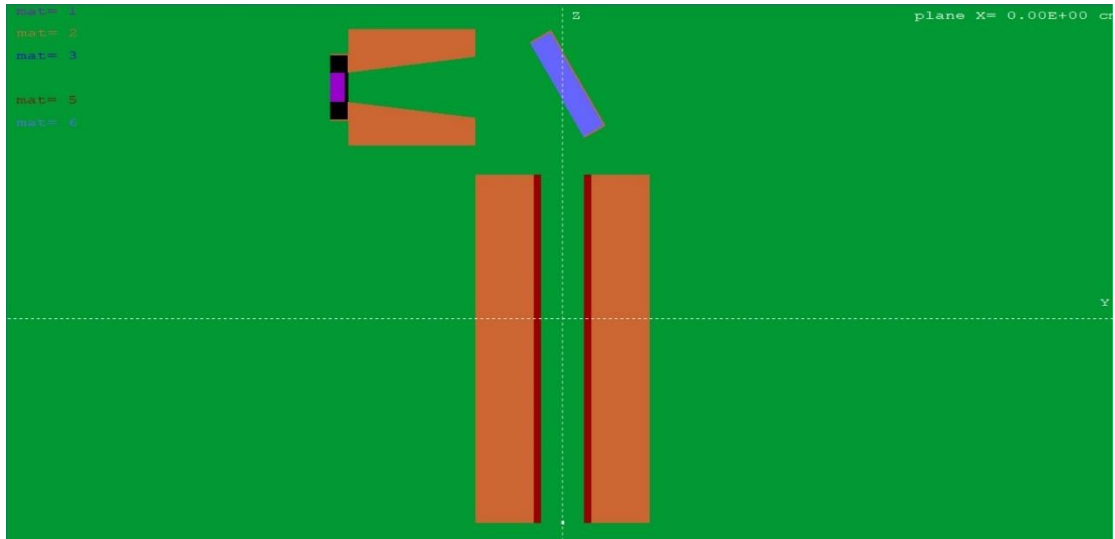
Σχήμα 7.60: Απεικόνιση της διάταξης 3.0.30, σε περιβάλλον He.



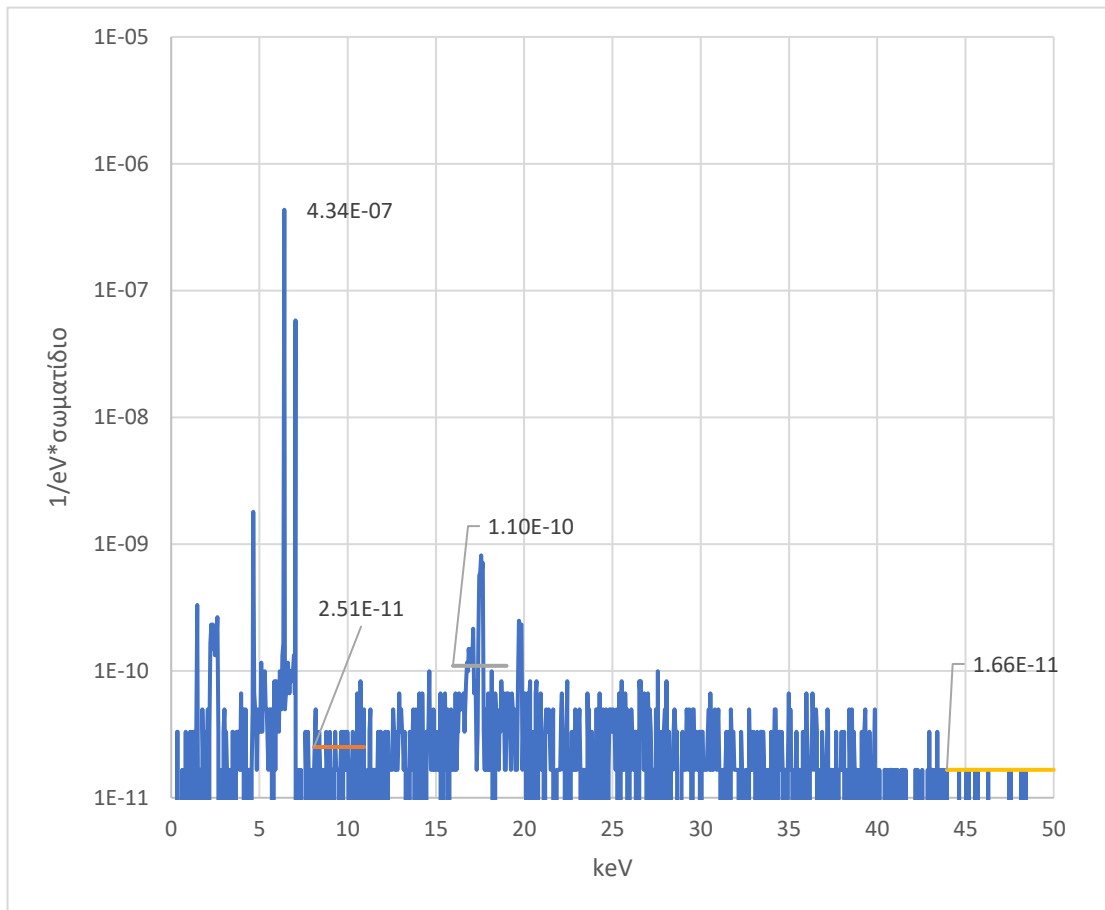
Σχήμα 7.61: Φάσμα προσομοίωσης της διάταξης 3.0.30, σε περιβάλλον He.

p-t-b	Περιοχή 8-11keV	Περιοχή 16-19keV	Περιοχή 46-50keV
	10645	990	19160

Πίνακας 7.32: Οι τιμές peak-to-background για τη γεωμετρία 3.0.30, σε περιβάλλον He.



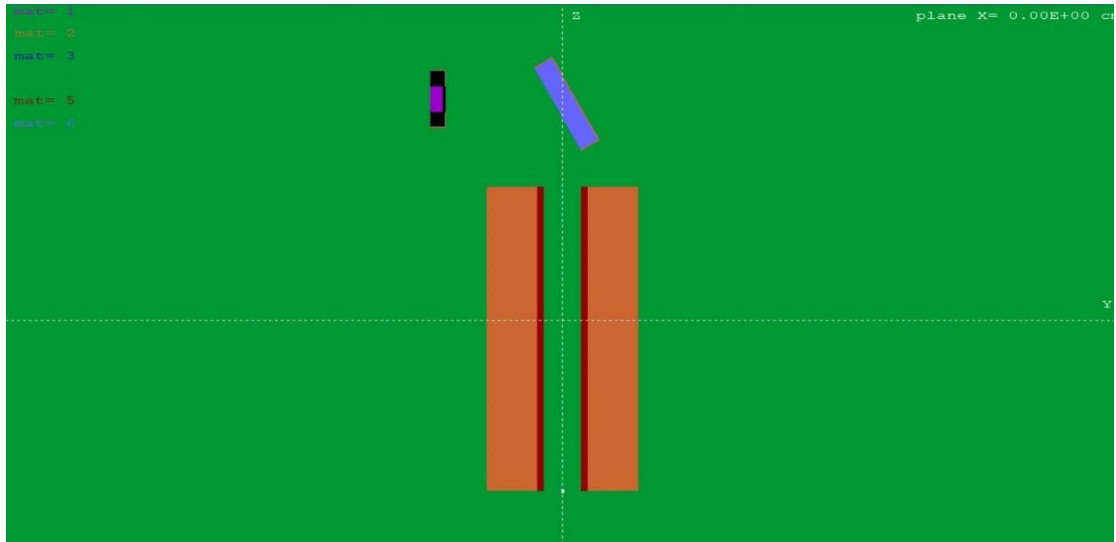
Σχήμα 7.62: Απεικόνιση της διάταξης 3.1.30, σε περιβάλλον He.



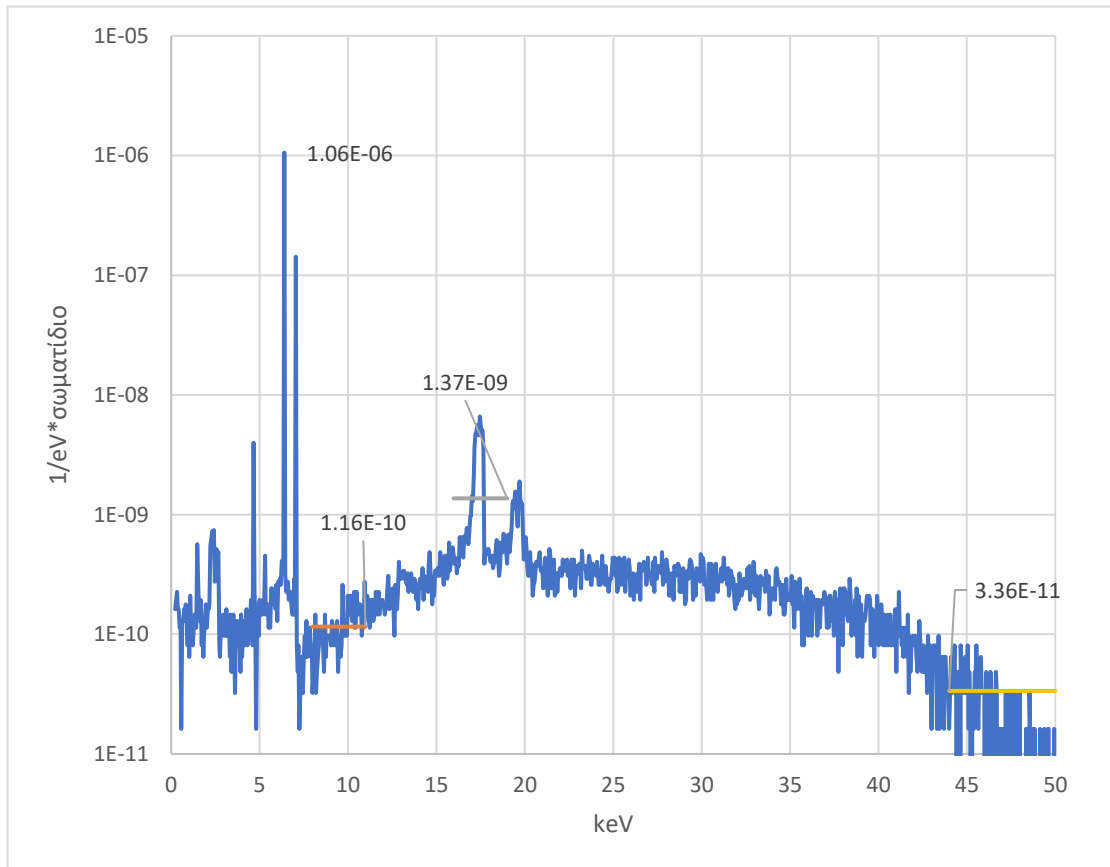
Σχήμα 7.63: Φάσμα προσομοίωσης της διάταξης 3.1.30, σε περιβάλλον He.

p-t-b	Περιοχή 8-11keV	Περιοχή 16-19keV	Περιοχή 46-50keV
	17263	3951	26117

Πίνακας 7.33: Οι τιμές peak-to-background για τη γεωμετρία 3.1.30, σε περιβάλλον He.



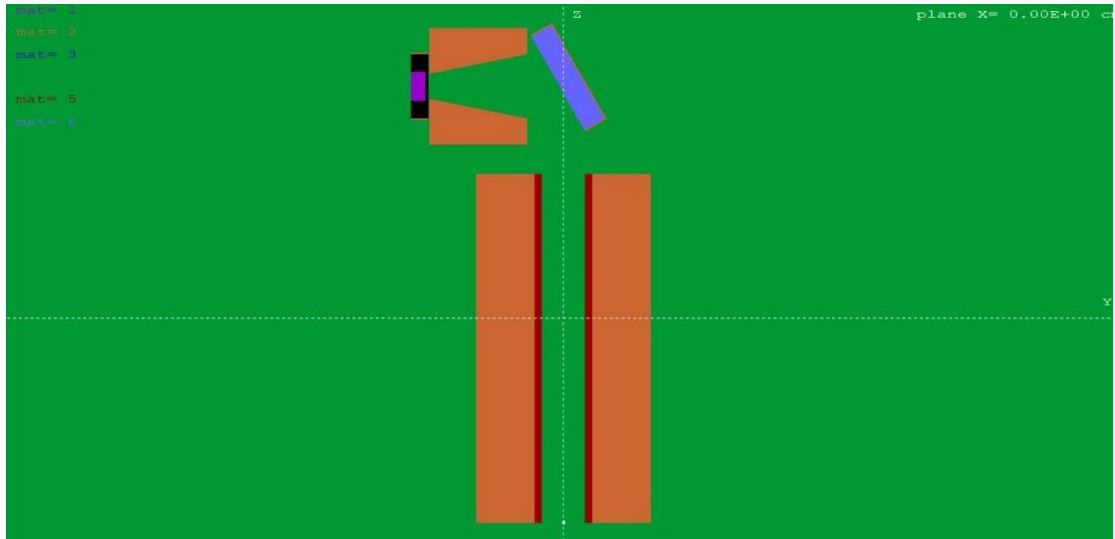
Σχήμα 7.64: Απεικόνιση της διάταξης 4.0.30, σε περιβάλλον He.



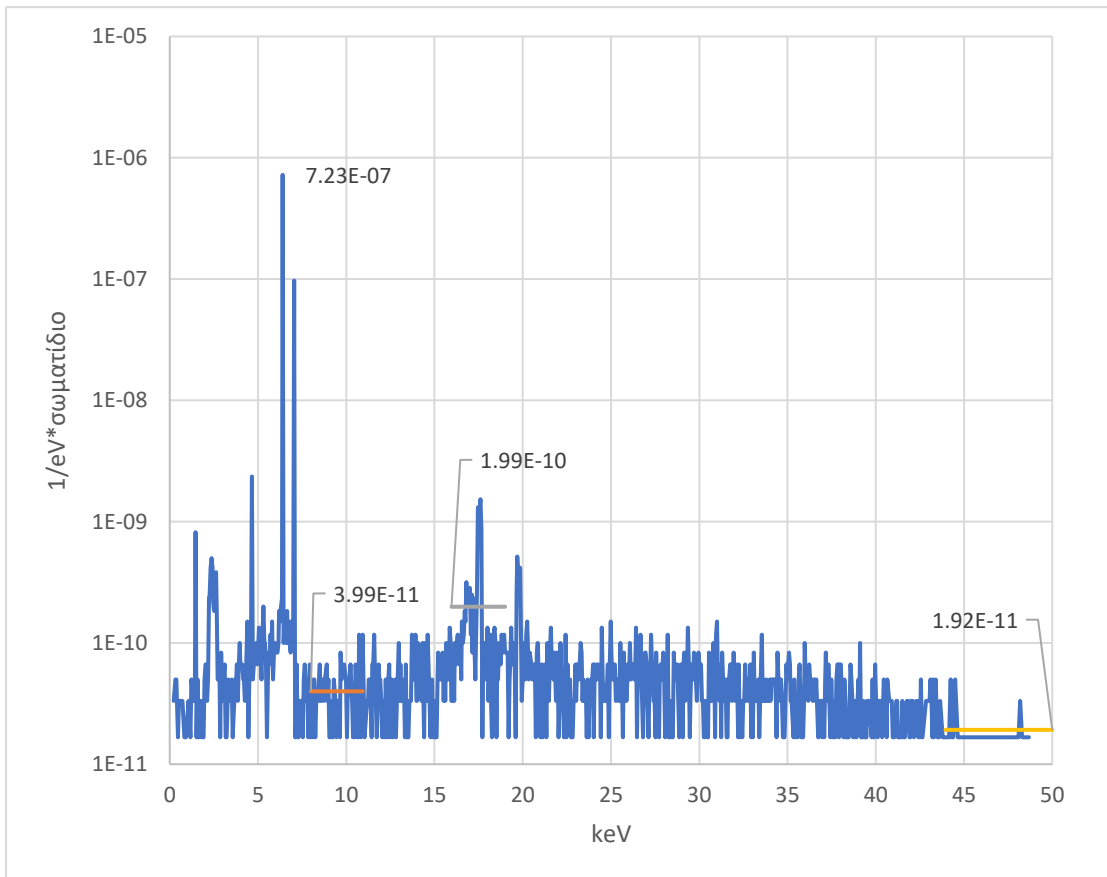
Σχήμα 7.65: Φάσμα προσομοίωσης της διάταξης 4.0.30, σε περιβάλλον He.

p-t-b	Περιοχή 8-11keV	Περιοχή 16-19keV	Περιοχή 46-50keV
	9125	773	31442

Πίνακας 7.34: Οι τιμές peak-to-background για τη γεωμετρία 4.0.30, σε περιβάλλον He.



Σχήμα 7.66: Απεικόνιση της διάταξης 4.1.30, σε περιβάλλον He.



Σχήμα 7.67: Φάσμα προσομοίωσης της διάταξης 4.1.30, σε περιβάλλον He.

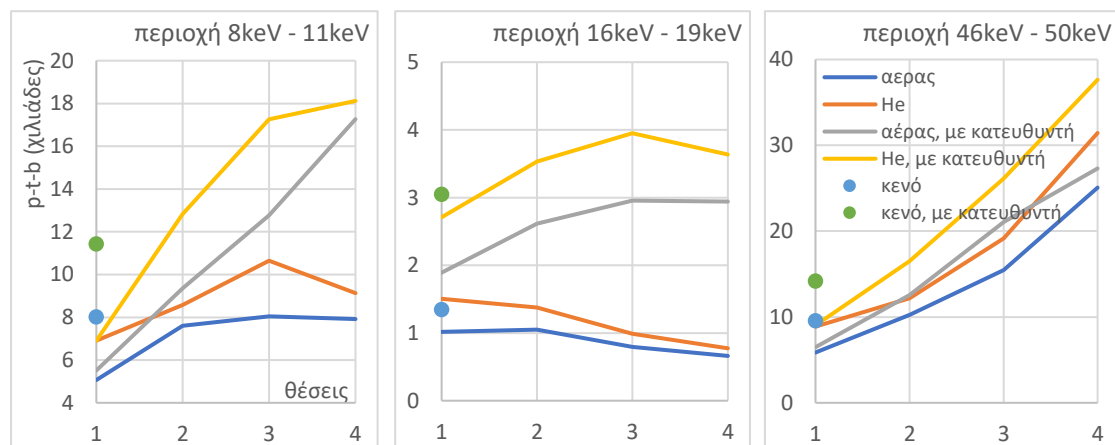
p-t-b	Περιοχή 8-11keV	Περιοχή 16-19keV	Περιοχή 46-50keV
	18119	3636	37640

Πίνακας 7.35: Οι τιμές peak-to-background για τη γεωμετρία 4.1.30, σε περιβάλλον He.

Στον πίνακα 7.36 και στο σχήμα 7.68 παρουσιάζονται και συγκρίνονται οι λόγοι p-t-b με και χωρίς κατευθυντή δέσμης για περιβάλλον αέρα, ήλιο και κενό και για γωνία 30°.

p-t-b		αερας		ήλιο (He)		κενό	
θέση	περιοχή	χωρίς κατευθυντή	κωνικός κατευθυντής	χωρίς κατευθυντή	κωνικός κατευθυντής	χωρίς κατευθυντή	κωνικός κατευθυντής
1	8-11keV	5067	5513	6911	6907	8016	11437
	16-19keV	1018	1892	1505	2710	1348	3048
	46-50keV	5863	6486	8886	9032	9570	14182
2	8-11keV	7601	9348	8582	12833		
	16-19keV	1050	2615	1378	3531		
	46-50keV	10241	12572	12192	16500		
3	8-11keV	8044	12774	10646	17264		
	16-19keV	793	2956	991	3951		
	46-50keV	15466	21060	19161	26117		
4	8-11keV	7925	17266	9126	18119		
	16-19keV	662	2942	774	3637		
	46-50keV	25071	27308	31442	37641		

Πίνακας 7.36: Τιμές p-t-b για τα διαφορετικά περιβάλλοντα, με και χωρίς κατευθυντή, για τις 4 θέσεις και τις 3 περιοχές των διαγραμμάτων. Σε κάθε περίπτωση το δείγμα βρίσκεται στις 30°.



Σχήμα 7.68: Διαγράμματα των τιμών p-t-b για όλες τις γεωμετρίες που προσομοιώθηκαν (απόσταση 1: 12.50cm, απόσταση 2: 10.00cm απόσταση 3: 8.00cm απόσταση 4: 5.25cm απόσταση 5: 3.00cm)

7.3.1. Συγκριτική ανάλυση αποτελεσμάτων προσομοιώσεων σε διαφορετικά περιβάλλοντα

Όλες οι προσομοιώσεις της παραγράφου πραγματοποιήθηκαν με $1.3 \cdot 10^9$ ιστορίες. Ο κατευθυντής είναι σε κάθε περίπτωση από αλουμίνιο και κωνικός λόγω της καλύτερης απόδοσής του, σύμφωνα με την παρ.7.2. Η γωνία δείγματος παρέμεινε σταθερή στις 30° . Ακολουθούν παρατηρήσεις για τα αποτελέσματα που παρατέθηκαν προηγουμένως.

- Η συμπεριφορά των λόγων $p-t-b$ είναι η αναμενόμενη, με αυξανόμενη τάση όσο «αραιώνουν» τα μόρια του περιβάλλοντος μέσου, τόσο με τη χρήση κατευθυντή και χωρίς. Αυτό φανερώνει την έντονη επίδραση του αέρα στην απόδοση της διάταξης. Ωστόσο, στις μεσαίες ενέργειες, η αντικατάσταση του αέρα με ήλιο (He) δεν επιφέρει μεγάλη αύξηση του λόγου $p-t-b$, με αποτέλεσμα να είναι πιο αποτελεσματική η χρήση κατευθυντή από την αντικατάσταση του περιβάλλοντος.
- Το παραπάνω συμπέρασμα μπορεί να γενικευθεί για τις περισσότερες θέσεις: Η χρήση του κατευθυντή είναι πιο αποτελεσματική στην αύξηση της ανιχνευσιμότητας, από την αλλαγή του περιβάλλοντος αερίου, που στην πράξη είναι ιδιαίτερα πολύπλοκη διαδικασία.
- Σε κάθε περιβάλλον (αέρα, ηλίου), η χρήση του κατευθυντή φαίνεται να επιφέρει το ίδιο αποτέλεσμα στους λόγους $p-t-b$.
- Συγκρίνοντας τα διαγράμματα ενέργειας keV – πυκνότητας πιθανότητας για την ίδια διάταξη (για παράδειγμα την 1.1.30) σε περιβάλλον αέρα και σε κενό περιβάλλον, η πιο έντονη διαφορά παρατηρείται στις χαμηλές ενέργειες, όπου η ύπαρξη του αέρα φαίνεται να απορροφά τις χαρακτηριστικές L_α και L_β του Mo στις ενέργειες 2.4-2.5keV. Επομένως, το περιβάλλον έχει μεγαλύτερη σημασία για τις χαρακτηριστικές χαμηλών ενεργειών.
- Επίσης, στα διαγράμματα Ηλίου (He) και κενού είναι φανερή η χαρακτηριστική κορυφή από το φθορισμό του αλουμινίου στα 1.47keV.
- Συμπληρωματικά, για μια πληρέστερη μελέτη της επίδρασης του περιβάλλοντος στην υπό μελέτη διάταξη, είναι χρήσιμη η προσομοίωση σε κενό περιβάλλον και των υπόλοιπων θέσεων του ανιχνευτή.

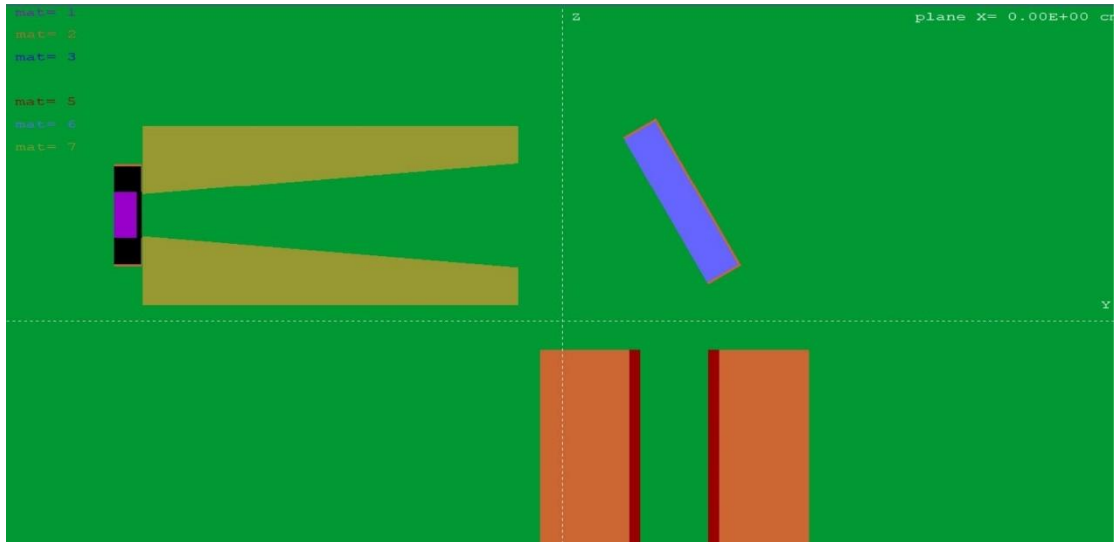
7.4. Διερεύνηση τρίτη: υλικό κατευθυντή

Στην ενότητα που ακολουθεί παρουσιάζονται τα αποτελέσματα των προσομοιώσεων που εστιάζουν στη μελέτη του υλικού των κατευθυντών, καθώς αναμένεται να επηρεάζει τα αποτελέσματα της φασματοσκοπίας. Συγκεκριμένα, διερευνάται η απόδοση κατευθυντών κατασκευασμένων από δύο υλικά: αλουμίνιο και τεφλόν, για 5 αποστάσεις δείγματος – ανιχνευτή.

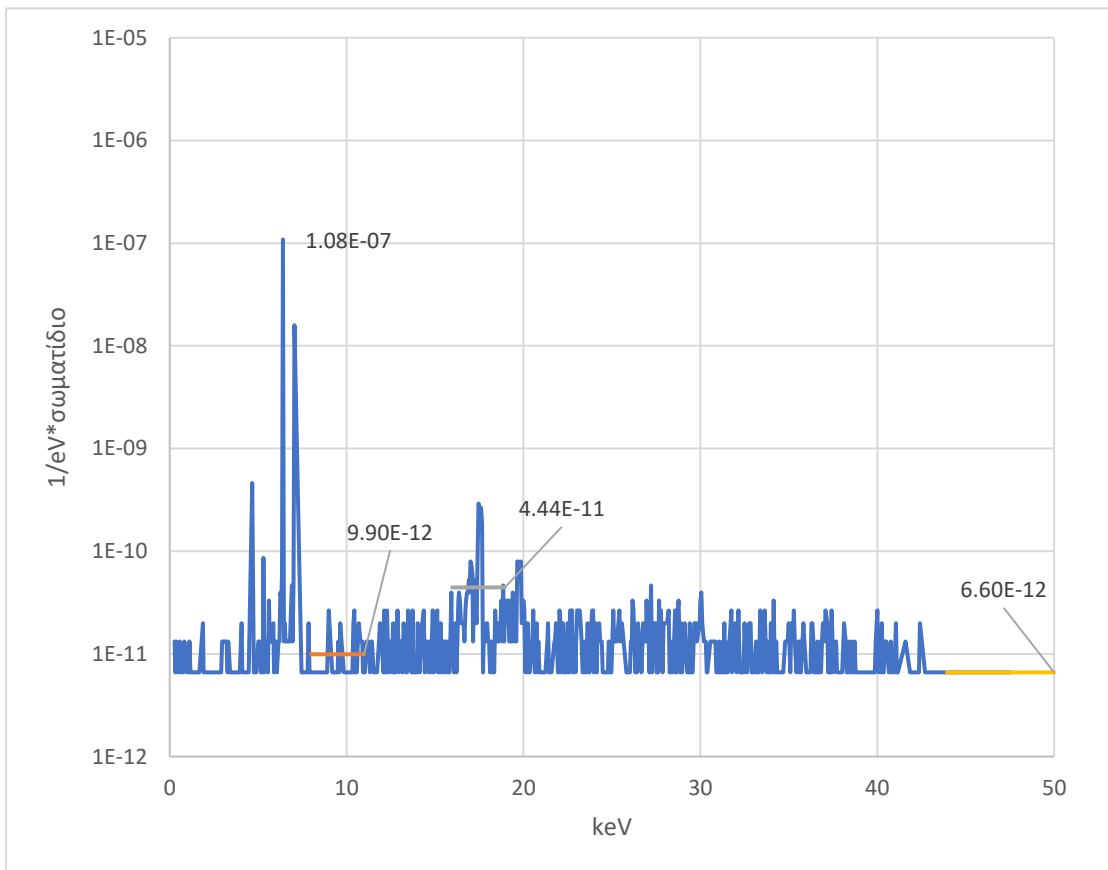
Το αλουμίνιο χρησιμοποιείται ως υλικό διάφορων συνιστωσών της διάταξης XRF αφενός διότι έχει καλή επεξεργασιμότητα και αφετέρου λόγω της ικανότητάς του να απορροφά ακτίνες-X. Ένας κατευθυντής από αλουμίνιο μπορεί να κατασκευαστεί εύκολα και χωρίς μεγάλο κόστος από συμπαγές υλικό διαμορφωμένο σε τόρνο. Ένα συνθετικό μη-μεταλλικό υλικό όπως το Teflon από την άλλη, έχει μικρότερη ικανότητα θωράκισης, όμως είναι πολύ πιο καθαρό υλικό σε σχέση με το αλουμίνιο, που μπορεί να έχει προσμίξεις οι οποίες θα μπορούσαν να παράγουν ανεπιθύμητες χαρακτηριστικές ακτίνες-X. Ένας κατευθυντής από συνθετικό υλικό θα μπορούσε να δημιουργηθεί με τρισδιάστατη εκτύπωση. (βλ. παρ. 6.3.3 *ο κατευθυντής της ΔΕ*)

Συγκρίνοντας την απόδοση κατευθυντών από αλουμίνιο και τεφλόν, εξάγουμε κάποια βασικά συμπεράσματα για τα πλεονεκτήματα και τους περιορισμούς τους, όσον αφορά το γεωμετρικό τους σχήμα και την ένταση σήματος και υποστρώματος. Η μελέτη των διαφορετικών θέσεων του ανιχνευτή καθορίζει τελικά και το σχήμα του κατευθυντή.

Στην παράγραφο αυτή παρουσιάζονται τα αποτελέσματα των προσομοιώσεων που έγιναν για τις διατάξεις με κατευθυντή από τεφλόν, σε μορφή διαγραμμάτων και τιμών p-t-b. Υπενθυμίζεται ότι οι διατάξεις με κατευθυντή από αλουμίνιο έχουν παρατεθεί στην παράγραφο 7.2. Στο τέλος της παρούσας παραγράφου υπάρχει συγκεντρωτικός πίνακας για τη σύγκριση τιμών των λόγων p-t-b μεταξύ τεφλόν και αλουμινίου, για τις 5 διαφορετικές θέσεις και τις 3 ενεργειακές περιοχές κάθε διαγράμματος.



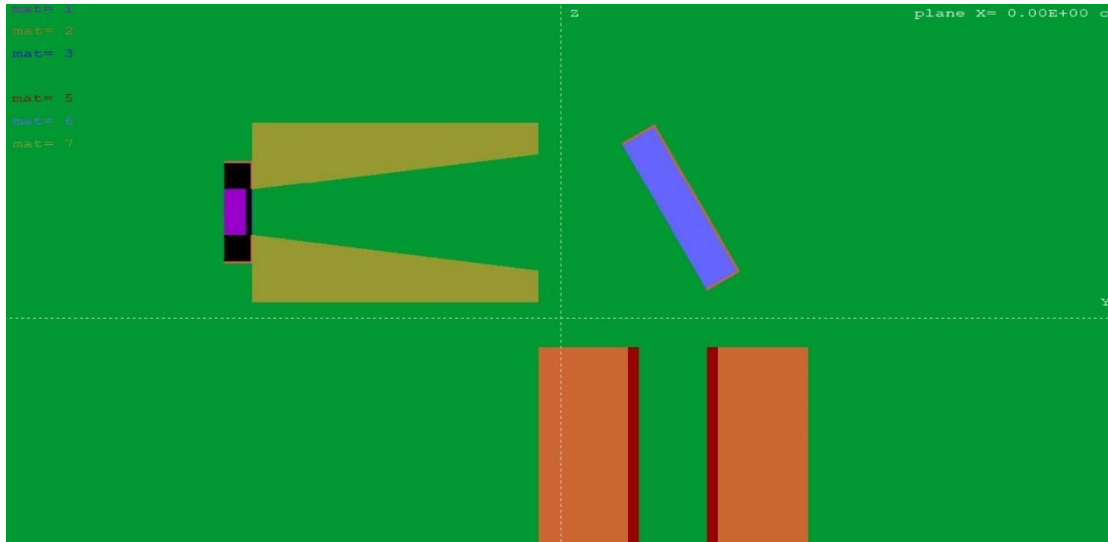
Σχήμα 7.69: Απεικόνιση της διάταξης 1.1.30 με κωνικό κατευθυντή από teflon.



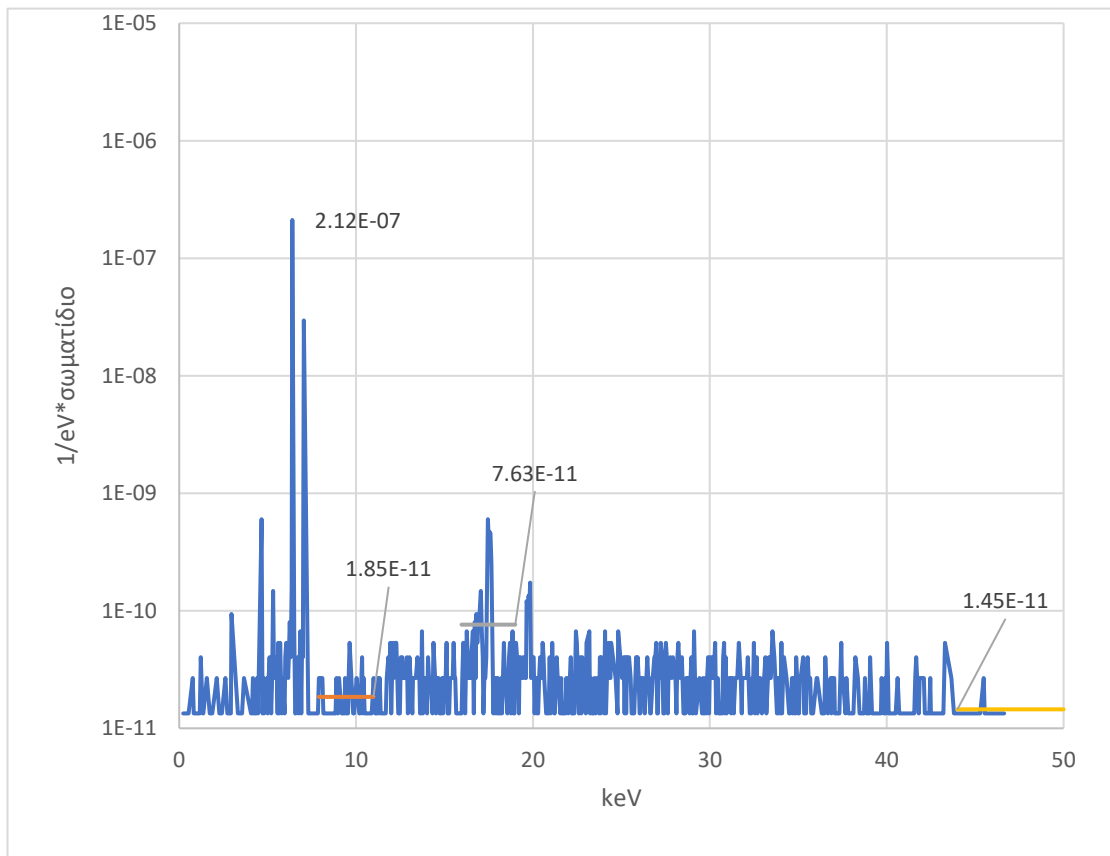
Σχήμα 7.70: Φάσμα προσομοίωσης της διάταξης 1.1.30, με κωνικό κατευθυντή από teflon.

p-t-b	Περιοχή 8-11keV	Περιοχή 16-19keV	Περιοχή 46-50keV
	10942	2442	16414

Πίνακας 7.37: Οι τιμές peak-to-background της διάταξης 1.1.30 με κωνικό κατευθυντή από teflon



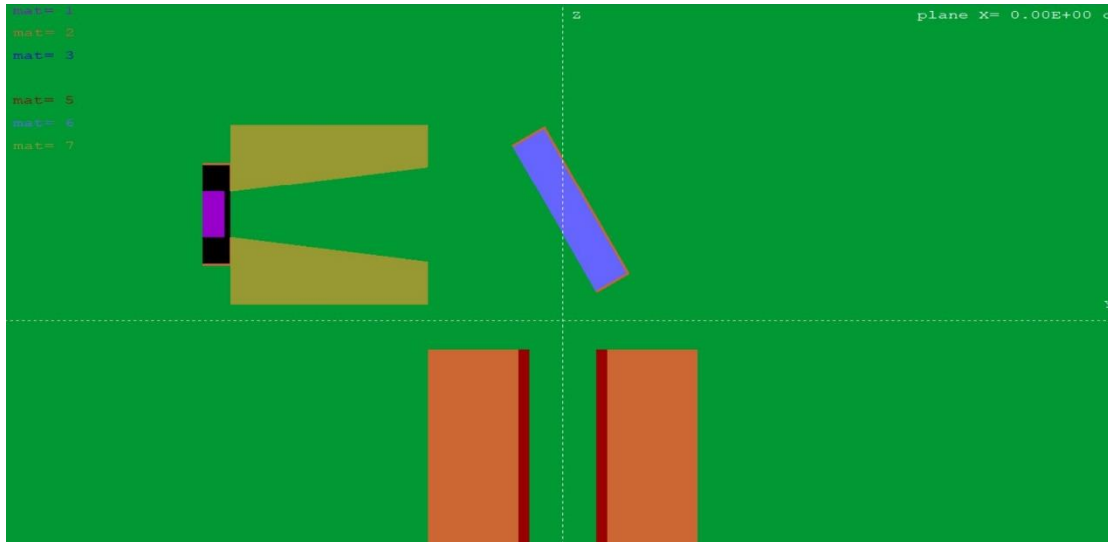
Σχήμα 7.71: Απεικόνιση της διάταξης 2.1.30 με κωνικό κατευθυντή από teflon.



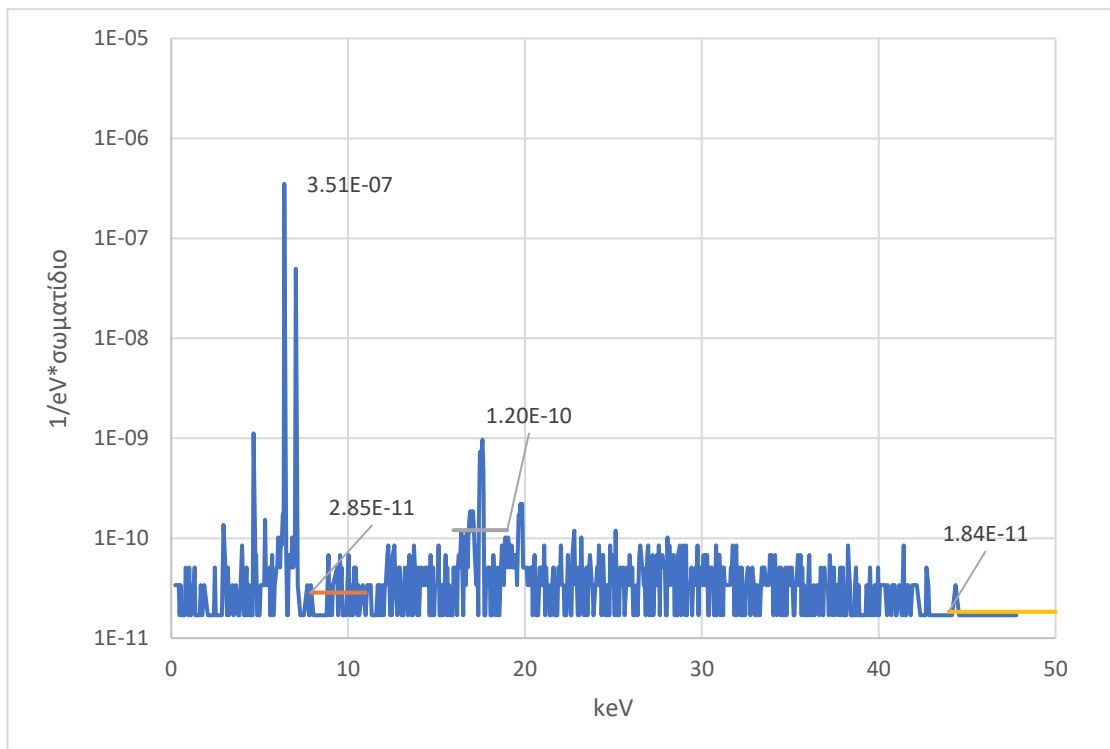
Σχήμα 7.72: Φάσμα προσομοίωσης της διάταξης 2.1.30, με κωνικό κατευθυντή από Teflon.

ρ-t-b	Περιοχή 8-11keV	Περιοχή 16-19keV	Περιοχή 46-50keV
	11436	2775	14592

Πίνακας 7.38: Τιμές peak-to-background της διάταξης 2.1.30 με κωνικό κατευθυντή από teflon.



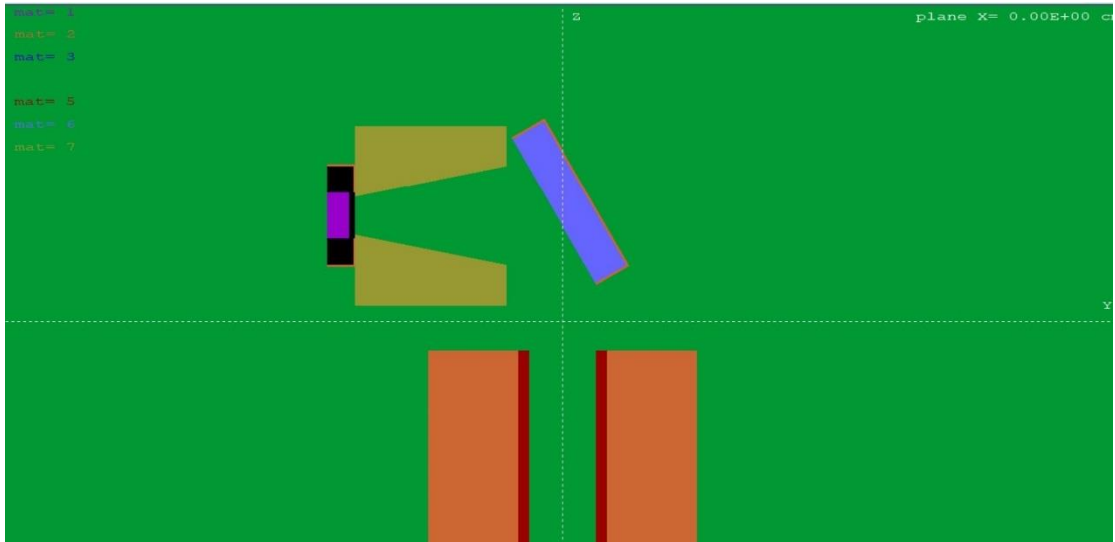
Σχήμα 7.73: Απεικόνιση της διάταξης 3.1.30 με κωνικό κατευθυντή από teflon.



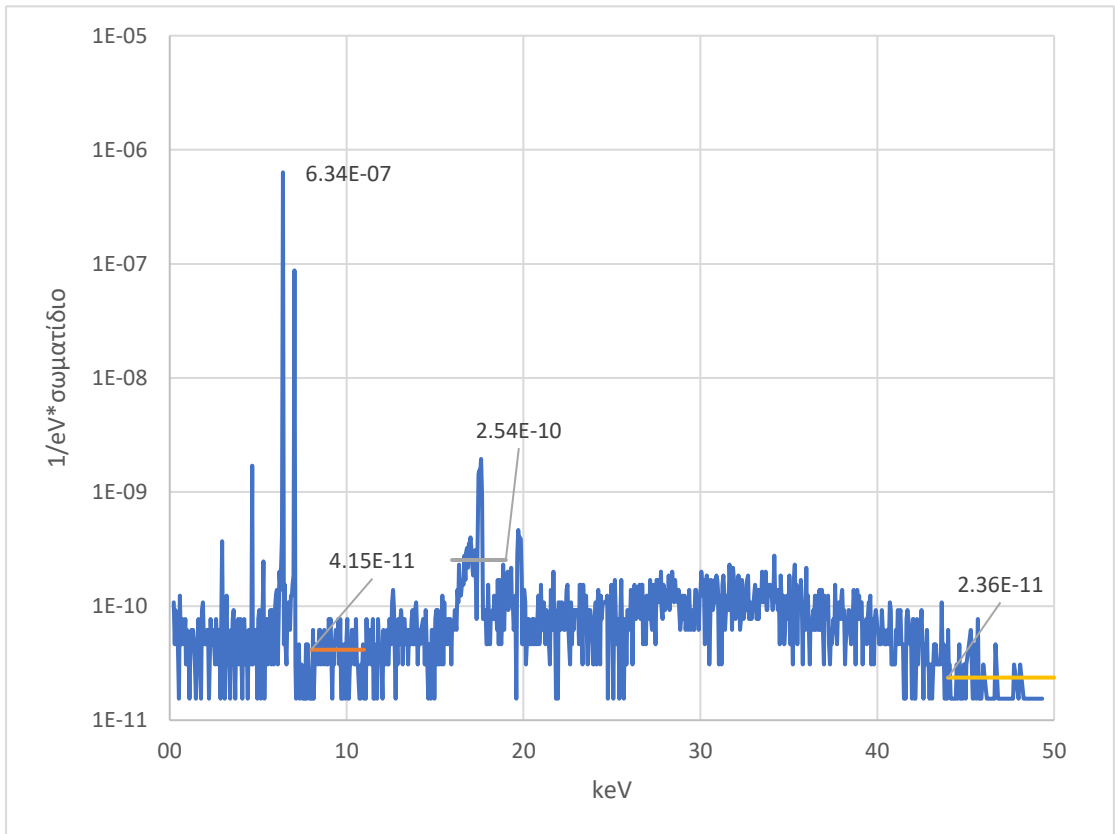
Σχήμα 7.74: Φάσμα προσομοίωσης της διάταξης 1.1.30, με κωνικό κατευθυντή από Teflon.

p-t-b	Περιοχή 8-11keV	Περιοχή 16-19keV	Περιοχή 46-50keV
	12313	2919	19143

Πίνακας 7.39: Τιμές peak-to-background της διάταξης 1.1.30, με κωνικό κατευθυντή από Teflon.



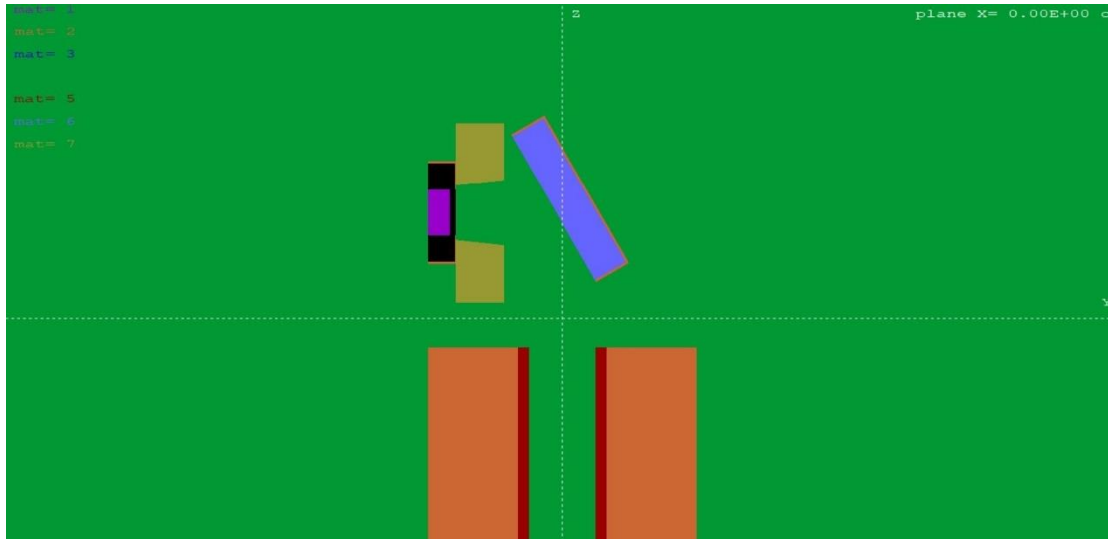
Σχήμα 7.75: Απεικόνιση της διάταξης 4.1.30 με κωνικό κατευθυντή από teflon.



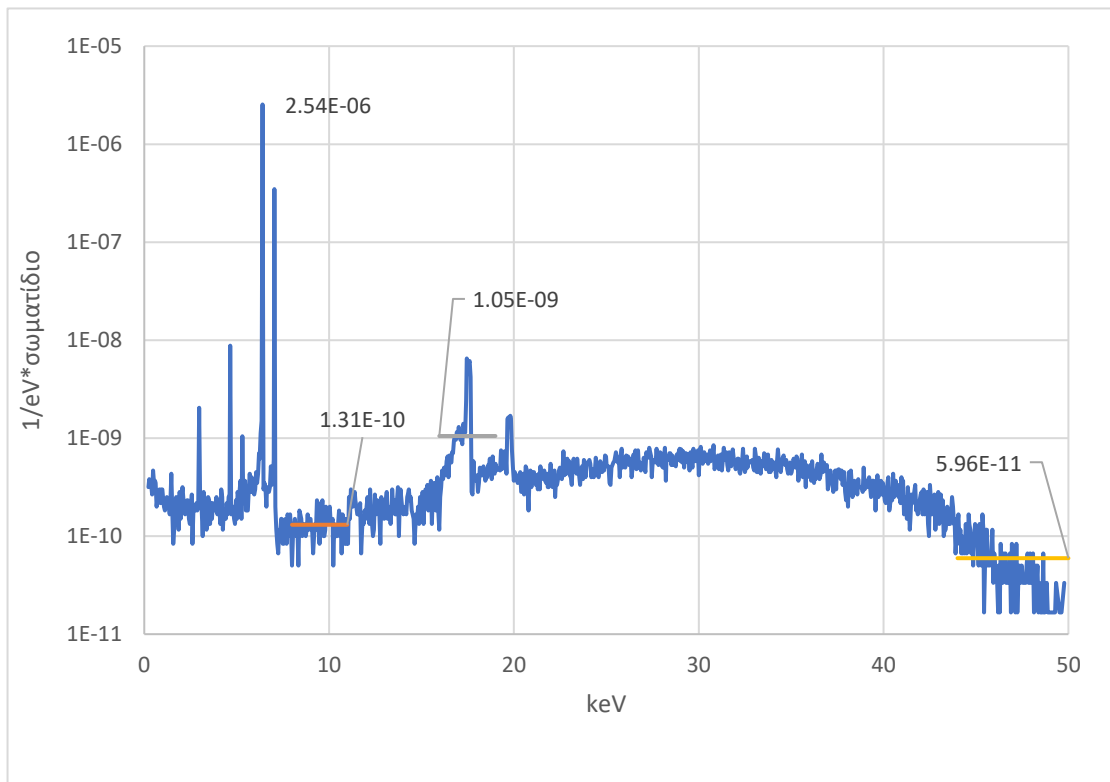
Σχήμα 7.76: Φάσμα προσομοίωσης της διάταξης 4.1.30, με κωνικό κατευθυντή από Teflon.

ρ-t-b	Περιοχή 8-11keV	Περιοχή 16-19keV	Περιοχή 46-50keV
	15284	2498	26813

Πίνακας 7.40: Τιμές peak-to-background της διάταξης 4.1.30, με κωνικό κατευθυντή από Teflon.



Σχήμα 7.77: Απεικόνιση της διάταξης 5.1.30 με κωνικό κατευθυντή από teflon.



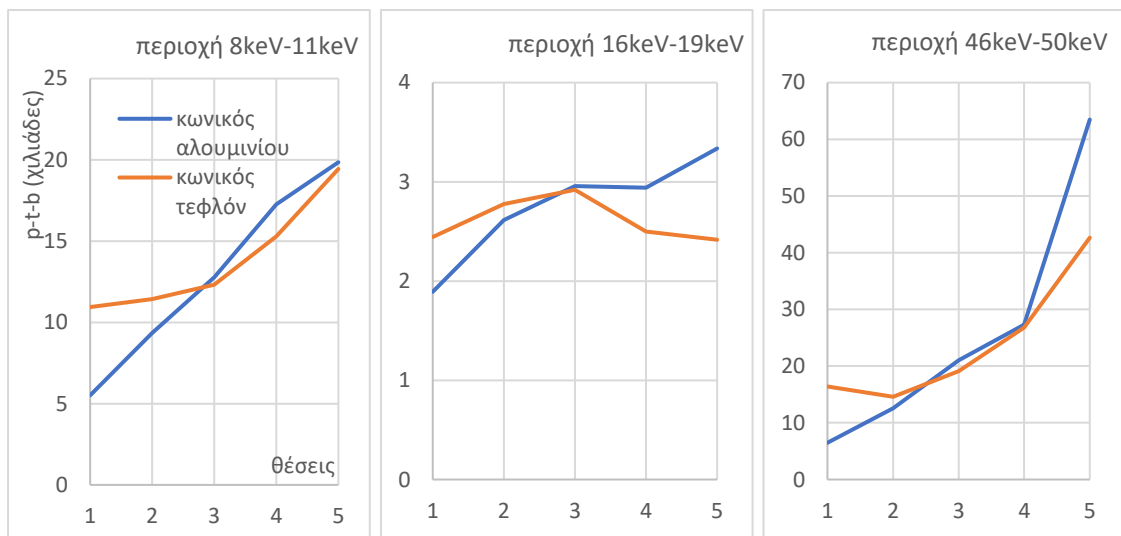
Σχήμα 7.78: Φάσμα προσομοίωσης της διάταξης 5.1.30, με κωνικό κατευθυντή από Teflon.

ρ-t-b	Περιοχή 8-11keV	Περιοχή 16-19keV	Περιοχή 46-50keV
	19437	2416	42640

Πίνακας 7.41: Οι τιμές peak-to-background της διάταξης 5.1.30, με κωνικό κατευθυντή από Teflon.

ρ-t-b θέση	περιοχή	κωνικός κατευθυντής από αλουμίνιο	κωνικός κατευθυντής από τεφλόν
1	8keV-11keV	5513	10943
	16keV-19keV	1892	2443
	46keV-50keV	6486	16414
2	8keV-11keV	9348	11436
	16keV-19keV	2615	2775
	46keV-50keV	12572	14593
3	8keV-11keV	12774	12314
	16keV-19keV	2956	2920
	46keV-50keV	21060	19144
4	8keV-11keV	17266	15284
	16keV-19keV	2942	2499
	46keV-50keV	27308	26813
5	8keV-11keV	19852	19438
	16keV-19keV	3336	2416
	46keV-50keV	63475	42640

Πίνακας 7.42: Τιμές ρ-t-b για τα διαφορετικά υλικά των κατευθυντών, για τις 5 θέσεις και τις 3 περιοχές των διαγραμμάτων. Σε κάθε περίπτωση το δείγμα βρίσκεται στις 30°, σε περιβάλλον αέρα.



Σχήμα 7.79: Διαγράμματα των τιμών ρ-t-b για τις γεωμετρίες που προσομοιώθηκαν (απόσταση 1: 12.50cm, απόσταση 2: 10.00cm απόσταση 3: 8.00cm απόσταση 4: 5.25cm απόσταση 5: 3.00cm)

7.4.1. Συγκριτική ανάλυση αποτελεσμάτων των προσομοιώσεων με διαφορετικά υλικά κατευθυντή

Για τις συγκεκριμένες προσομοιώσεις το πλήθος ιστοριών επελέγη να είναι $1.2 \cdot 10^9$ κατά μέσο όρο, με εξαίρεση την προσομοίωση της διάταξης 1.1.30 με κωνικό κατευθυντή από Teflon, για την οποία προσομοιώθηκαν $3 \cdot 10^9$ ιστορίες. Υπενθυμίζεται πως τα αποτελέσματα με κατευθυντή από αλουμίνιο, παρατίθενται στην παράγραφο 7.2, όπου ο αναγνώστης μπορεί να ανατρέξει για σύγκριση των διαγραμμάτων μεταξύ υλικών κατευθυντών. Από τις προσομοιώσεις αυτές μπορούν να προκύψουν τα παρακάτω συμπεράσματα:

- **Ως προς τη θέση:** Πλησιάζοντας προς το δείγμα, ο κατευθυντής δέσμης από αλουμίνιο είναι πιο αποτελεσματική. Ειδικά στις υψηλές ενέργειες, η χρήση του κατευθυντή από Teflon δεν επιτυγχάνει τόσο ικανοποιητικό περιορισμό του υποστρώματος. Αντίθετα, στις απομακρυσμένες θέσεις η χρήση του κατευθυντή από Teflon παρουσιάζει καλύτερη απόδοση από τον κατευθυντή του αλουμινίου, καθιστώντας το Teflon ανταγωνιστικό υλικό σε παρόμοια οπτικά μέσα ακτίνων-X.
- Η προσομοίωση υπερδιπλάσιων ιστοριών στη διάταξη 1.1.30 με κωνικό κατευθυντή από Teflon, έγινε για να επιτευχθεί καλύτερη στατιστική. Ενώ δεν μπορεί να συγκριθεί με ασφάλεια με τις υπόλοιπες προσομοιώσεις, καταδεικνύει πως ένας κατευθυντής από Teflon έχει πράγματι την ικανότητα να αυξήσει τους λόγους p-t-b.
- **Σχετικά με την απουσία κατευθυντή:** Σε όλες τις θέσεις, ακόμη και για την περιοχή υψηλών ενεργειών του φάσματος, ο κατευθυντής από Teflon επιτυγχάνει αύξηση των λόγων p-t-b. Επομένως, αν και υλικό με μικρό ατομικό αριθμό, έχει ικανότητα θωράκισης από ακτίνες-X.
- **Μορφή υποστρωμάτων:** Συγκρίνοντας τα διαγράμματα ενέργειας keV – πυκνότητας πιθανότητας για την ίδια διάταξη, με διαφορετικό υλικό κατευθυντή, παρατηρείται διαφορετική μορφή υποστρώματος. Τα διαγράμματα με χρήση κατευθυντή από Teflon έχουν όμοια μορφή καμπύλης υποστρώματος με εκείνα που δεν χρησιμοποιείται κατευθυντής, χαμηλότερης όμως έντασης, ενώ τα διαγράμματα με κατευθυντή από αλουμίνιο τείνουν προς την οριζοντίωσή του υποστρώματος. Είναι ένα σημείο που επιβεβαιώνει την καλύτερη ικανότητα θωράκισης του αλουμινίου. Ωστόσο, ανάλογα με τη γεωμετρία της εκάστοτε διάταξης, είναι πιθανό να υπάρχει μία αντιστοιχία

παχών κατευθυντών αλουμινίου-τεφλόν που να επιτυγχάνουν ίδια επίπεδα θωράκισης.

- Στις θέσεις 4 και 5 διακρίνονται οι χαρακτηριστικές ακτίνες-X του αλουμινίου, στην ενέργεια $\sim 1.5\text{keV}$, κάτι το οποίο θα πρέπει να λαμβάνεται υπόψη σε περίπτωση που ενδιαφέρουν ακτίνες-X σε τόσο χαμηλές ενέργειες.

7.5. Διερεύνηση τέταρτη: ανιχνευσιμότητα υλικού δείγματος

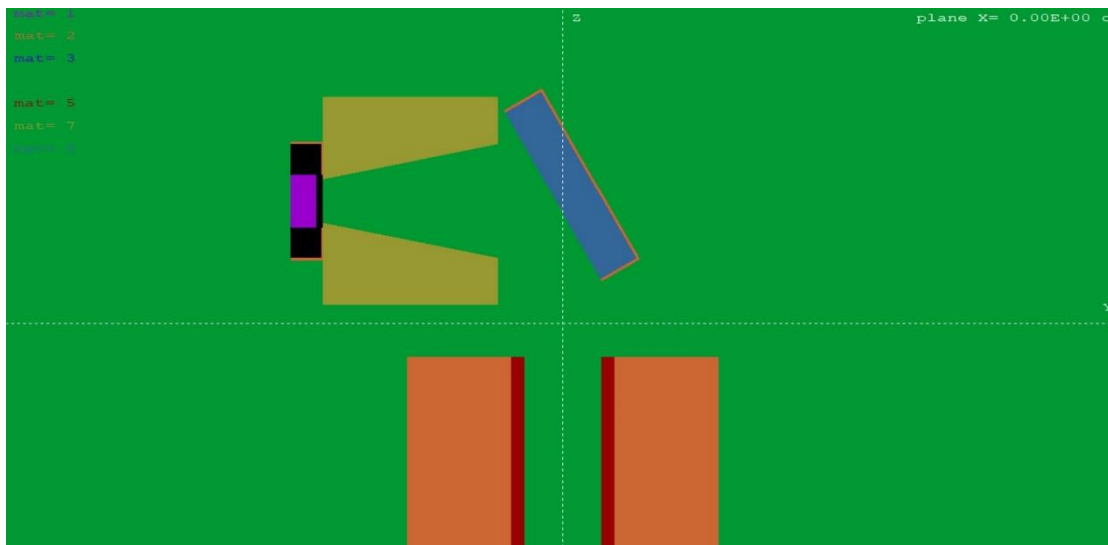
Στην ενότητα που ακολουθεί παρουσιάζονται τα αποτελέσματα των προσομοιώσεων που διεξήχθησαν για τη μελέτη της ανιχνευτικής ικανότητας της διάταξης. Η διερεύνηση αυτή έγινε μόνο για τη διάταξη 4.1.30 και για υλικό του δείγματος: μία αδρανή βάση από υλικά χαμηλού Z (SiO_2), με προσμίξεις ενός στοιχείου υψηλότερο Z (συγκεκριμένα επιλέχθηκε Fe), με χρήση κατευθυντή από αλουμίνιο και Teflon.

Το υλικό του δείγματος που μελετάται στην ενότητα αυτή είναι το διοξείδιο του πυριτίου (SiO_2), το οποίο περιέχει προσμίξεις από σίδηρο (Fe) στις συγκεντρώσεις των 30, 500 και 1000 ppm. Το διοξείδιο του πυριτίου επιλέχθηκε ως βάση του δείγματος γιατί οι χαρακτηριστικές ακτίνες-X που εκπέμπει είναι πολύ χαμηλής ενέργειας και δύσκολα ανιχνεύονται, τουλάχιστον στο ενεργειακό εύρος που χρησιμοποιείται συνήθως στη φασματοσκοπία ακτίνων-X. Επιπλέον, ως υλικό εμφανίζεται συχνά σε δείγματα περιβαλλοντικής προέλευσης (π.χ. άμμος, χώμα κ.α.), έχει σχετικά υψηλή πυκνότητα και παρουσιάζει σχετικά υψηλή εξασθένηση των ακτίνων-X.

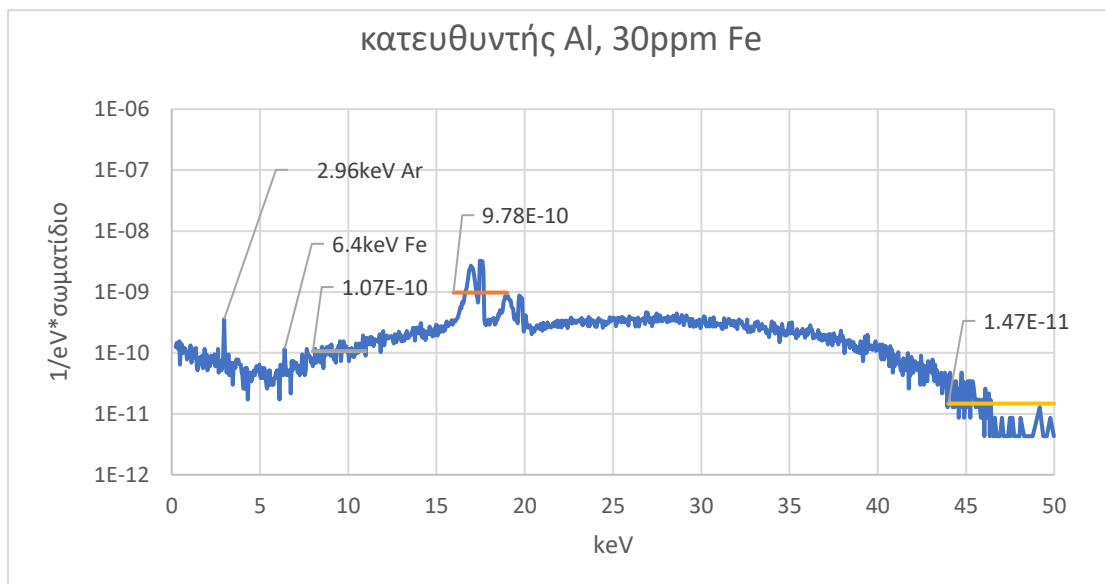
Σε αυτή τη διερεύνηση δεν μελετώνται οι διαφορετικές αποστάσεις ανιχνευτή-δείγματος αλλά επιλέγεται η σταθερή απόσταση 5.25cm. Η διάταξη αυτή είναι υλοποιήσιμη για τη διάταξη XRF του ΕΠΤ-ΕΜΠ, ενώ ταυτόχρονα παρουσιάζει υψηλούς λόγους p-t-b στις περισσότερες προσομοιώσεις που παρουσιάστηκαν στις προηγούμενες ενότητες. Επίσης, το περιβάλλον υλικό είναι αέρας, ενώ γίνονται προσομοιώσεις με κατευθυντές από αλουμίνιο και από Teflon, ώστε να διαπιστωθεί εάν το υλικό τους έχει επίδραση στην κατώτατη ανιχνευτική ικανότητα της ίδιας διάταξης.

Τα υλικά του δείγματος δημιουργήθηκαν με το πρόγραμμα material (βλ. παρ. 6.4.3) σε συγκέντρωση $1,7\text{g/cm}^3$ και περιέχουν προσμίξεις σιδήρου ομοιόμορφα κατανεμημένες σε όλο τον όγκο του δείγματος.

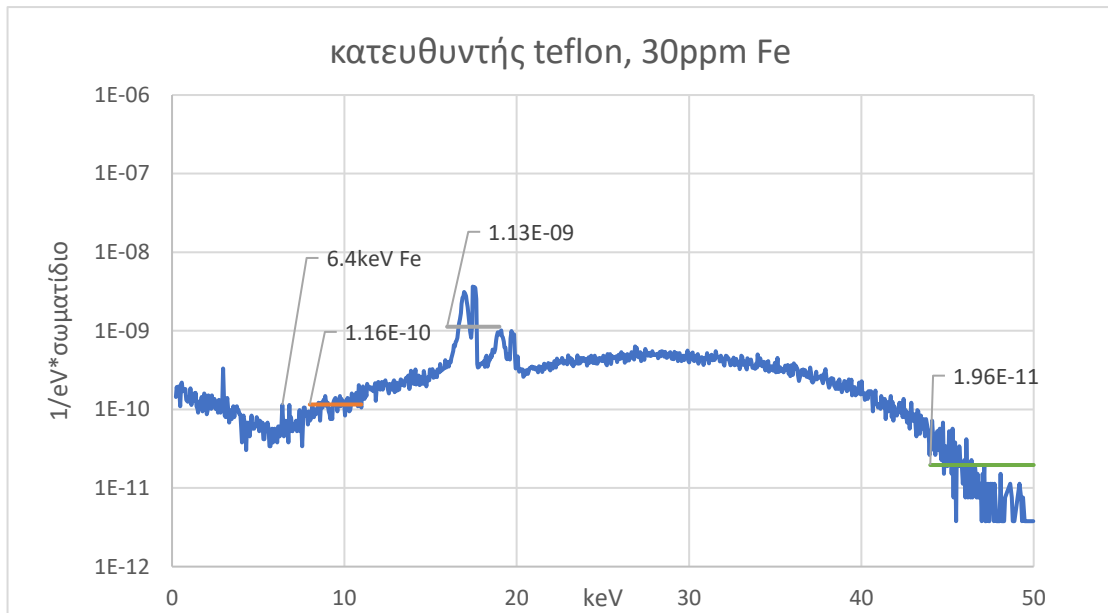
Στη συνέχεια της παραγράφου παρουσιάζονται τα φάσματα που παρήχθησαν για κάθε μία από τις 6 προσομοιώσεις, σε μορφή διαγράμματος. Για τη διερεύνηση της ανιχνευσιμότητας δεν υπολογίζονται οι λόγοι p-t-b, αλλά το ενδιαφέρον εστιάζει στον απλό εμπειρικό εντοπισμό της κορυφής της χαρακτηριστικής ενέργειας K_{α} του σιδήρου, στα 6.4keV. Επιπλέον, στα διαγράμματα σημειώνονται οι μέσες τιμές των 3 περιοχών του υποστρώματος, ώστε να δώσουν μια πρώτη εικόνα για την επίδραση του υλικού του κατευθυντή στο υπόστρωμα. Ενδιαφέρον έχει ότι στο φάσμα ανιχνεύεται και η χαρακτηριστική ενέργεια $K_{\alpha}+K_{\beta}$ @ 2.96 keV του Αργού (Ar), συστατικού του αέρα.



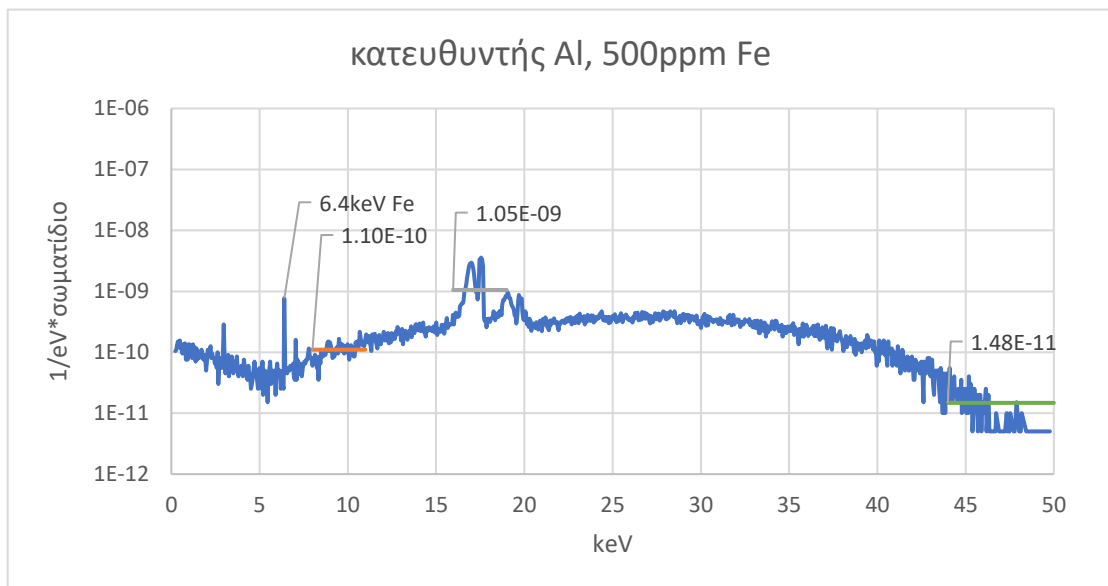
Σχήμα 7.80: Απεικόνιση της διάταξης 4.1.30 με κωνικό κατευθυντή.



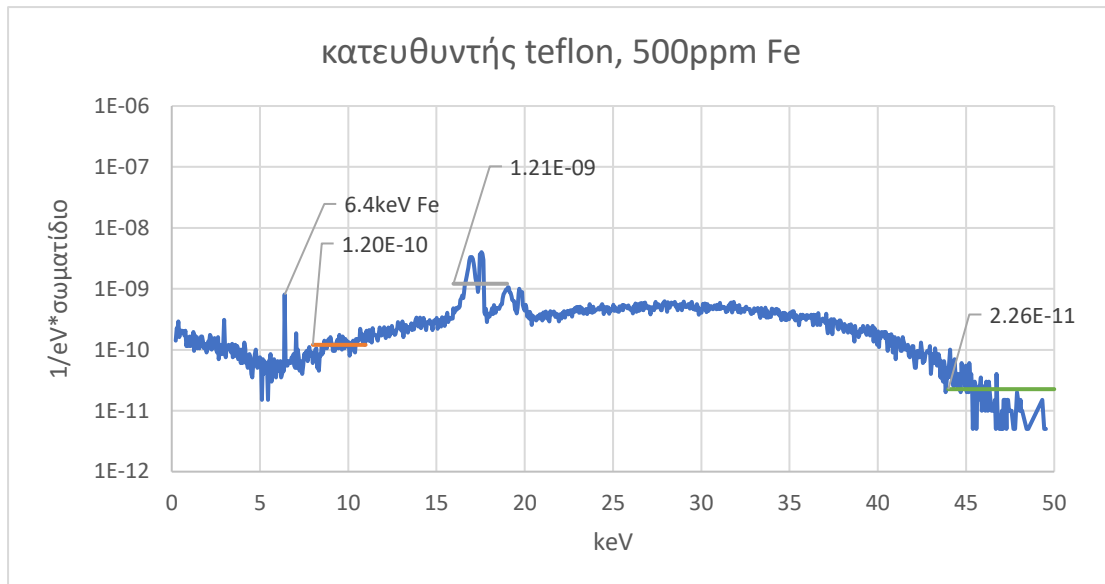
Σχήμα 7.81: Φάσμα προσομοίωσης της διάταξης 4.1.30, σε περιβάλλον αέρα, με κατευθυντή από αλουμίνιο (Al) και δείγμα SiO_2 με προσμίξεις σιδήρου (Fe) 30ppm.



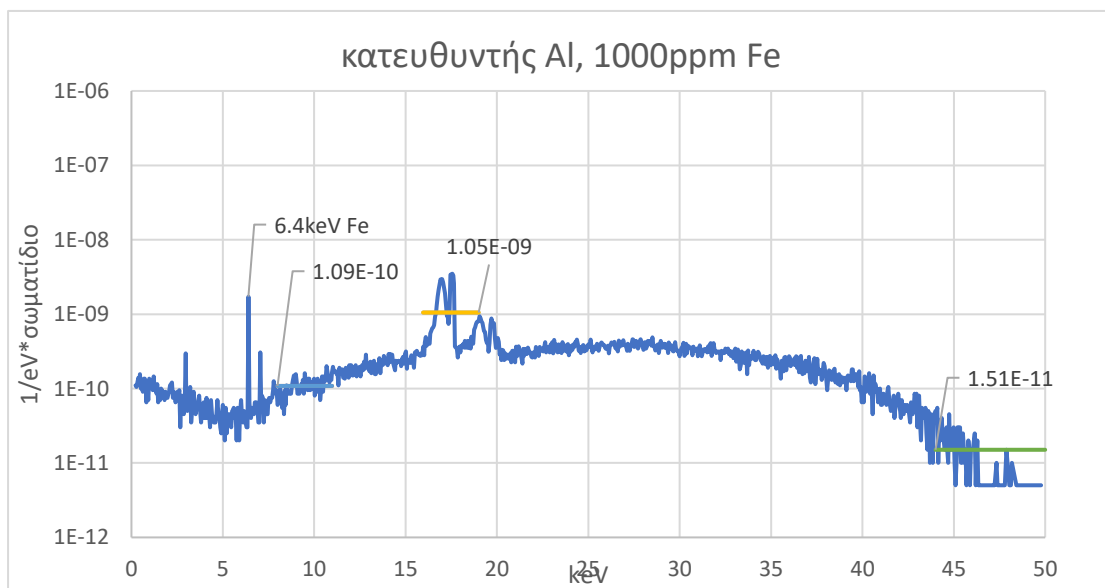
Σχήμα 7.83: Φάσμα προσομοίωσης της διάταξης 4.1.30, σε περιβάλλον αέρα, με κατευθυντή από teflon και δείγμα SiO₂ με προσμίξεις σιδήρου (Fe) 30ppm.



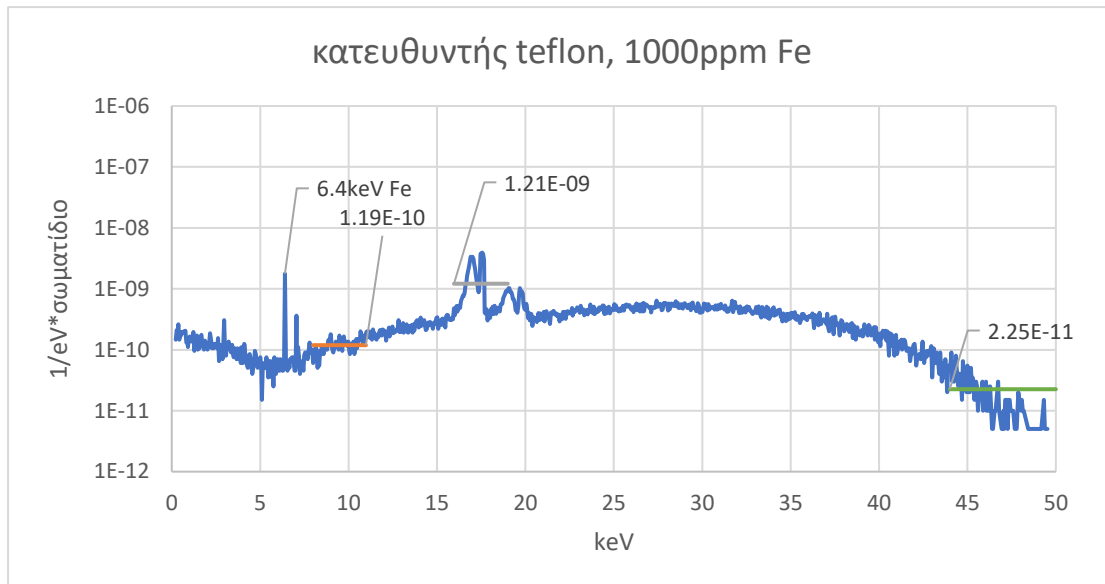
Σχήμα 7.84: Φάσμα προσομοίωσης της διάταξης 4.1.30, σε περιβάλλον αέρα, με κατευθυντή από αλουμίνιο (Al) και δείγμα SiO₂ με προσμίξεις σιδήρου (Fe) 500ppm.



Σχήμα 7.85: Φάσμα προσομοίωσης της διάταξης 4.1.30, σε περιβάλλον αέρα, με κατευθυντή από Teflon και δείγμα SiO_2 με προσμίξεις σιδήρου (Fe) 500ppm.



Σχήμα 7.86: Φάσμα της διάταξης 4.1.30, σε περιβάλλον αέρα, με κατευθυντή από αλουμίνιο (Al) και δείγμα SiO_2 με προσμίξεις σιδήρου (Fe) 1000ppm.



Σχήμα 7.87: Φάσμα της διάταξης 4.1.30, σε περιβάλλον αέρα, με κατευθυντή από Teflon και δείγμα SiO₂ με προσμίξεις σιδήρου (Fe) 1000ppm.

7.5.1 Συμπεράσματα για την ανιχνευτική ικανότητα της διάταξης 4.1.30

Οι προσομοιώσεις που έγιναν για τη μελέτη της ανιχνευτικής ικανότητας της διάταξης πραγματοποιήθηκαν για $4 \cdot 10^9$ ιστορίες – περισσότερες από όλες τις άλλες προσομοιώσεις που έγιναν στο πλαίσιο της ΔΕ. Σε ορισμένες μάλιστα περιπτώσεις, μετά την προδιαγεγραμμένη ολοκλήρωση της προσομοίωσης χρειάστηκε να αυξηθεί ακόμα περισσότερο το πλήθος των ιστοριών για καλύτερη σύγκριση των αποτελεσμάτων.

Είναι σημαντικό να σημειωθεί πως η εκτίμηση της ανιχνευσιμότητας (σε όρους κατωτέρων επιπέδων ανίχνευσης) στην φασματοσκοπία φθορισμού ακτίνων-Χ περιλαμβάνει συνδυασμό τεχνικών, καθώς και αυστηρές διαδικασίες βαθμονόμησης. Οι μετρήσεις επαληθεύονται με χρήση υλικών αναφοράς με γνωστή σύσταση υλικού, και κατάλληλα λογισμικά αξιολόγησης. Σε κάθε περίπτωση οι υπολογισμοί αυτοί γίνονται πάνω σε ένα πραγματικό φάσμα και όχι σε ένα φάσμα που προκύπτει από προσομοίωση. Πρέπει δε να τονισθεί ότι σημαντικό ρόλο στην ανίχνευση ή όχι μίας αιχμής παίζει και η ενεργειακή διακριτική ικανότητα της ανιχνευτικής διάταξης (fwhm). Η παραπάνω διερεύνηση δεν εμπίπτει στο πλαίσιο της ΔΕ, επομένως δεν έγινε καμία προσπάθεια ποσοτικής εκτίμησης των επιπέδων ανίχνευσης του σιδήρου στο δείγμα. Παρόλα αυτά, μπορούν να γίνουν αξιόλογες παρατηρήσεις σχετικά με την ανίχνευση χαρακτηριστικών φωτοκορυφών του σιδήρου στα παραπάνω διαγράμματα:

- Στην περίπτωση του δείγματος με περιεκτικότητα 30ppm σίδηρο (Fe), εμφανίζεται μία μικρή αιχμή στην ενέργεια των 6.4keV, όμως είναι πολύ

ασθενής σε σχέση με το υπόστρωμα και δεν μπορεί να θεωρηθεί ότι γίνεται με βεβαιότητα ανίχνευση του Fe. Αυτό ισχύει και για τα δύο υλικά κατευθυντή.

- Στην περίπτωση του δείγματος με περιεκτικότητα 500ppm, παρατηρείται εντονότερη φωτοκορυφή στα 6.4keV, επομένως θεωρείται ότι έχει επιτευχθεί η ανίχνευση. Είναι λοιπόν ένα ασφαλές συμπέρασμα, πως για τη διάταξη που προσομοιώνεται, και για τους δύο κατευθυντές η κατώτατη συγκέντρωση του σιδήρου που ανιχνεύεται στο δείγμα βρίσκεται στην περιοχή 30-500ppm².
- Η περίπτωση του δείγματος με περιεκτικότητα 1000ppm, για κατευθυντή από αλουμίνιο και Teflon παρουσιάζει έντονη φωτοκορυφή στα 6.4keV η οποία προφανώς ανιχνεύεται, και λογικό και αναμενόμενο.
- Από τα 500 ppm και πάνω ανιχνεύεται καθαρά και η αιχμή K_β του σιδήρου στα 7.04keV
- Το υλικό του κατευθυντή δεν φαίνεται να επηρεάζει την ανιχνευσιμότητα του σιδήρου από τη διάταξη, παρ' ότι η χρήση αλουμινίου περιορίζει το ύψος του υποστρώματος. Αυτό βέβαια ισχύει διότι το προς ανίχνευση στοιχείο παρουσιάζει κορυφή στις χαμηλές ενέργειες, όπου και το Teflon προσφέρει ικανοποιητική θωράκιση. Σε υλικά με υψηλότερες χαρακτηριστικές ενέργειες, η χρήση κατευθυντή από αλουμίνιο αναμένεται να λειτουργήσει καλύτερα στην απόδοση της διάταξης.

² Θα είχε πολύ ενδιαφέρον να προσομοιωθούν διάφορες συγκεντρώσεις Fe για να εκτιμηθούν καλύτερα τα επίπεδα ανίχνευσης του, όπως επίσης και να ληφθεί υπ' όψη η διακριτική ικανότητα του πραγματικού ανιχνευτή.

Πίνακες Κεφαλαίου 7

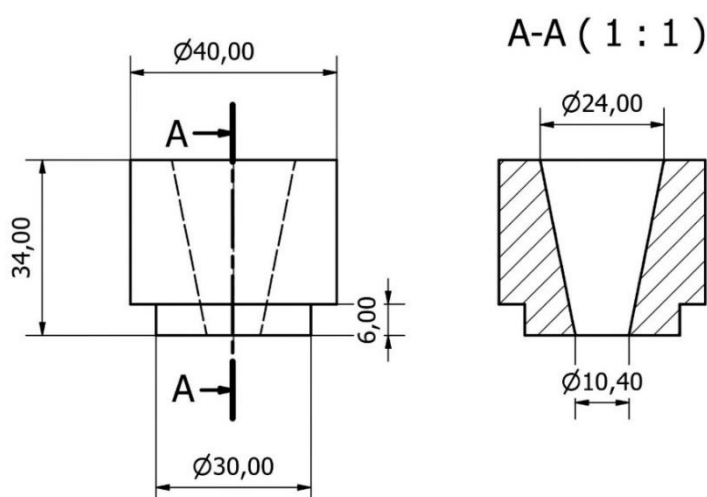
p-t-b	περιβάλλον:	αέρας						ήλιο		κενό	
	δευτερεύον οπτικό μέσο:	χωρίς	pinhole (Al)	κωνικός (teflon)	κωνικός (Al)		χωρίς	κωνικός (Al)	χωρίς	κωνικός (Al)	
	γωνία δείγματος:	30°			25°	50°	30°				
θέση	Ενεργειακή περιοχή										
1	8keV-11keV	5067	2890	10943	5513	5046	5045	6911	6907	8016	11437
	16keV-19keV	1018	1606	2443	1892	1754	1622	1505	2710	1348	3048
	46keV-50keV	5863	3211	16414	6486	5964	5045	8886	9032	9570	14182
2	8keV-11keV	7601	4607	11436	9348	8701	7706	8582	12833		
	16keV-19keV	1050	1841	2775	2615	2552	2028	1378	3531		
	46keV-50keV	10241	4443	14593	12572	12181	8517	12192	16500		
3	8keV-11keV	8044	10277	12314	12774	12415	12882	10646	17264		
	16keV-19keV	793	3053	2920	2956	2654	2659	991	3951		
	46keV-50keV	15466	11447	19144	21060	17559	12972	19161	26117		
4	8keV-11keV	7925	15102	15284	17266	17350	20017	9126	18119		
	16keV-19keV	662	3101	2499	2942	3288	3332	774	3637		
	46keV-50keV	25071	17518	26813	27308	34807	31694	31442	37641		
5	8keV-11keV	6565		19438	19852						
	16keV-19keV	560		2416	3336						
	46keV-50keV	35054		42640	63475						

Πίνακας 7.43: Συγκεντρωτικός πίνακας των λόγων p-t-b για όλα τα σεναρίων που προσομοιώθηκαν, για τις 5 θέσεις και τις 3 ενεργειακές περιοχές των διαγραμμάτων, για περιβάλλον αέρα, ηλίου και κενού, με κατευθυντή από αλουμίνιο και τεφλόν, χωρίς και με δευτερεύον οπτικό μέσο (κωνικό κατευθυντή ή τύπου pinhole) για κλίση δείγματος 30°, 25° και 50°.

ΚΕΦΑΛΑΙΟ 8 // Κατασκευή μοντέλου κατευθυντή και πειραματική δοκιμή στη διάταξη XRF του ΕΠΤ-ΕΜΠ

8.1. Κατασκευή μοντέλου κατευθυντή

Μετά την ολοκλήρωση των προσομοιώσεων, και ως αποτέλεσμα των συμπερασμάτων που προέκυψαν από αυτές, ελήφθη η απόφαση για την κατασκευή ενός κατευθυντή δέσμης που θα χρησιμοποιηθεί ως δευτερεύον οπτικό μέσο, και η εν συνεχεία πειραματική δοκιμή του. Το μοντέλο που επιλέχθηκε να κατασκευαστεί ήταν ο κατευθυντής εξωτερικής διαμέτρου 4.0cm και ύψους 3.4cm, με κωνική διαμόρφωση, ο οποίος διαθέτει μία διαμόρφωση εσοχής στη βάση του για την κατάλληλη στερέωσή του. Για την επιλογή αυτή ελήφθη υπόψη και η γεωμετρική συμβατότητα με τη διάταξη XRF του ΕΠΤ-ΕΜΠ. Στο σχήμα 8.1 παρατίθεται σκαρίφημα του κατευθυντή αυτού.



Σχήμα 8.1: Σκαρίφημα του κατευθυντή που επιλέχθηκε για να κατασκευαστεί, σε πλάγια όψη και τομή.

Η κατασκευή του μοντέλου κατευθυντή έγινε με τη διαδικασία Σύντηξης Πούδρας σε Κλίνη, με πρώτη ύλη συνθετικό υλικό σε κοκκώδη μορφή. Η διαδικασία αυτή είναι μία τεχνολογία τρισδιάστατης εκτύπωσης, συνήθως διαθέσιμη στην αγορά σε τοπικά καταστήματα παροχής σχετικών υπηρεσιών. Το υλικό επιλέχθηκε ως κατάλληλο για τη διαδικασία κατασκευής διότι επιτρέπει τεχνολογία εκτύπωσης πλήρως συμπαγούς υλικού, με υψηλή πυκνότητα – συγκριτικά με άλλα συνθετικά υλικά – και χωρίς να περιέχει μεταλλικές προσμίξεις. Παράλληλα, παρουσιάζει παρόμοια σύσταση και πυκνότητα με το Teflon, για το οποίο έχει πραγματοποιηθεί μεγάλος αριθμός προσομοιώσεων στα πλαίσια της ΔΕ. Τέλος, είναι ανθεκτικότερο από τη ρητίνη, ένα εναλλακτικό υλικό που

χρησιμοποιείται για παρόμοιες κατασκευές. Στο σχήμα 8.2 διακρίνεται ο κατευθυντής δέσμης που κατασκευάστηκε.



Σχήμα 8.2: Φωτογραφίες του κατευθυντή, τοποθετημένου στη διάταξη. Διαγώνια όψη (αριστερά) και κάτοψη (δεξιά).

8.2. Πειραματική διαδικασία διερεύνησης της αποτελεσματικότητας του κατευθυντή δέσμης

Η διερεύνηση της αποτελεσματικότητας του κατευθυντή που κατασκευάστηκε έγινε μέσω της ακτινοβολήσης ενός «πραγματικού δείγματος» κάτω από διαφορετικά σενάρια. Το υλικό που επελέγη να ακτινοβοληθεί ήταν δείγμα ιπτάμενης τέφρας από καύση λιγνίτη (με κωδική ονομασία KNFA). Σκοπός του πειράματος ήταν να προσδιοριστεί η επίδραση του κατευθυντή κατά την εφαρμογή της τεχνικής XRF και ο βαθμός στον οποίο επιβεβαιώνονται ή διαψεύδονται τα συμπεράσματα και οι προβλέψεις που προέκυψαν από τις προσομοιώσεις του Κεφαλαίου 7. Η διαδικασία του πειράματος περιλαμβάνει μετρήσεις για πέντε διαφορετικές περιπτώσεις (σενάρια) τα οποία προκύπτουν με μεταβολές (α) στη γεωμετρία της διάταξης XRF, (β) στο ρεύμα της μηχανής παραγωγής ακτίνων-X και (γ) στη διάρκεια των μετρήσεων. Σε κάθε περίπτωση η υψηλή τάση είχε ρυθμιστεί στα 35kV.

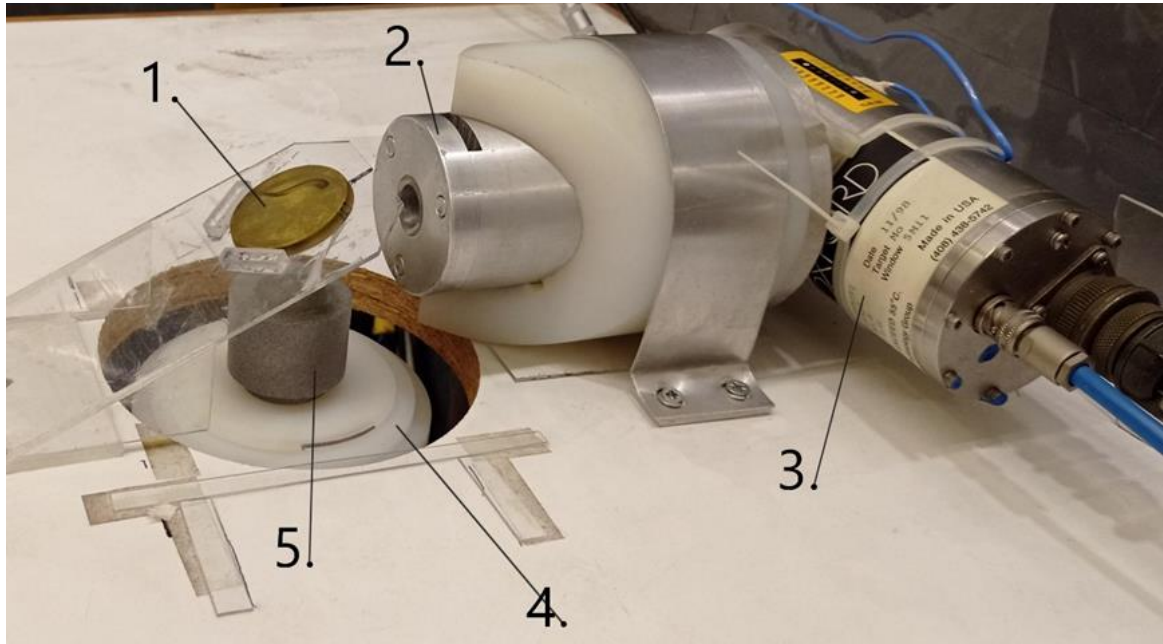
Στη συνέχεια της παραγράφου, για κάθε περίπτωση, παρατίθεται το αντίστοιχο φάσμα της ακτινοβολίας που συλλέγεται και οι λόγοι peak-to-background (p-t-b) που προκύπτουν για τις τέσσερις περιοχές του φάσματος. Για καλύτερη απεικόνιση τα φάσματα παρουσιάζονται σε λογαριθμική κλίμακα. Οι λόγοι p-t-b υπολογίζονται ενδεικτικά, διαιρώντας το ύψος της υψηλότερης κορυφής που εντοπίζεται στα 6.40 keV ($K_{\alpha 1}$ του Fe), προς τα μέσα ύψη του συνεχούς φάσματος στις εξής περιοχές: 7.33-8.41keV, 10.77-

11.42keV, 16.20-17.80keV και 30.00-35.00keV. Οι δύο πρώτες περιοχές αφορούν σε περιοχές συνεχούς υποστρώματος ανάμεσα σε ανιχνευόμενες στο φάσμα κορυφές, λίγο μετά τις χαρακτηριστικές ενέργειες του σιδήρου. Η περιοχή των 16.20-17.80keV αφορά το υπόστρωμα που οφείλεται στη σκέδαση των χαρακτηριστικών φωτονίων του μολυβδαινίου της μηχανής ακτίνων-X. Τέλος, η περιοχή 30.00-35.00keV αφορά τα μεγαλύτερης ενέργειας φωτόνια που συμβάλλουν στο υπόστρωμα.

Σε αυτό το σημείο είναι σημαντικό να αναφερθούν οι παράμετροι που διατηρήθηκαν σταθερές κατά τη διάρκεια του πειράματος σε κάθε περίπτωση:

- Η μηχανή παραγωγής (περιγράφεται αναλυτικά στην παράγραφο 3.3.1) έχει άνοδο από Μολυβδαίνιο (Mo).
- Το φάσμα που εκπέμπεται από τη μηχανή παραγωγής ακτίνων-X περιλαμβάνει φωτόνια ενεργειών έως και 35keV, λόγω της υψηλής τάσης που ορίζεται στα 35kV.
- Στη διάταξη χρησιμοποιούνται λεπτά φίλτρα μολυβδαινίου μεταξύ της μηχανής ακτίνων-X και του δείγματος. Τα φίλτρα αυτά φιλτράρουν τόσο τα φωτόνια ενεργειών μεγαλύτερων από τις χαρακτηριστικές του μολυβδαινίου, αλλά και φωτόνια χαμηλότερων ενεργειών. Ταυτόχρονα, εκπέμπουν χαρακτηριστικές του μολυβδαινίου 17.47keV ($K_{\alpha 1}$) και 19.60keV ($K_{\beta 1}$).
- Το δείγμα που ακτινοβολείται έχει κατασκευαστεί από ιπτάμενη τέφρα από την καύση λιγνίτη που έχει συμπιεστεί στο τυπικό δοχείο ανάλυσης με χρήση ειδικής πρέσας. Το υλικό αυτό επιλέχθηκε για το σκοπό του πειράματος γιατί περιέχει μία σειρά από στοιχεία και ιχνοστοιχεία των οποίων οι χαρακτηριστικές ενέργειες αναμένεται να ανιχνεύονται στο φάσμα που συλλέγεται. Έτσι, σε σύγκριση με τα δείγματα καθαρού σιδήρου και SiO_2 που περιείχε ίχνη σιδήρου, τα οποία χρησιμοποιήθηκαν στις προσομοιώσεις, το δείγμα ιπτάμενης τέφρας που αναλύθηκε αποτελεί μια πιο ρεαλιστική περίπτωση δείγματος προς ανάλυση. Ορισμένα στοιχεία που ανιχνεύονται στο δείγμα – όπως έχει προκύψει από παλαιότερες αναλύσεις του υλικού αυτού στο ΕΠΤ-ΕΜΠ – είναι: Σίδηρος (Fe, K_{α} @ 6.40keV, K_{β} @ 7.06keV), Τιτάνιο (Ti, K_{α} @ 4.51keV, K_{β} @ 4.95keV), Αρσενικό (As, K_{α} @ 10.54keV, K_{β} @ 11.72keV) και Στρόντιο (Sr, K_{α} @ 14.16keV, K_{β} @ 15.82keV).
- Ο ανιχνευτής SiLi που περιγράφηκε αναλυτικά στην παράγραφο 3.3.2.

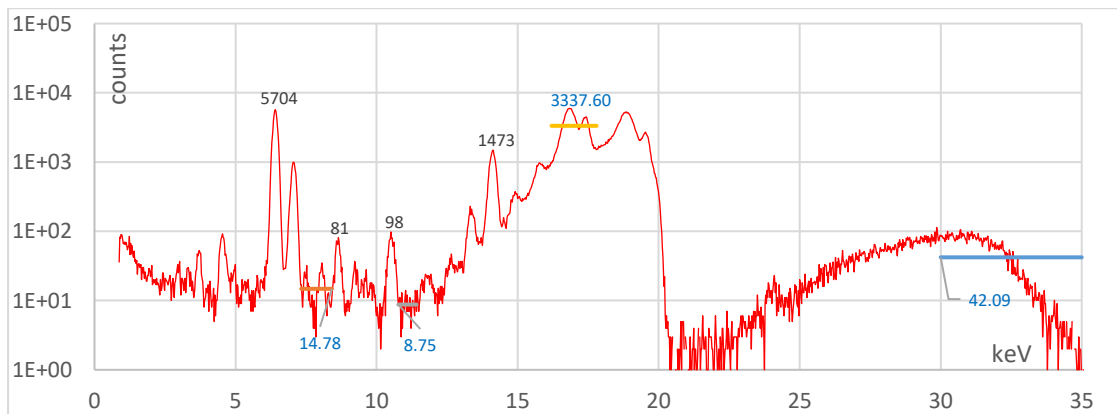
Στο σχήμα 8.3 που ακολουθεί διακρίνεται η διάταξη, με το δείγμα και τον κατευθυντή έτοιμη προς λειτουργία.



Σχήμα 8.3: Φωτογραφία της διάταξης XRF του ΕΠΤ–ΕΜΠ. Εμφανίζονται ωρολογιακά οι συνιστώσες: δείγμα (1), πρωτεύον οπτικό μέσο (2), μηχανή παραγωγής ακτίνων-X (3), διάταξη συγκράτησης ανιχνευτή (4), κατευθυντής (5).

Στη συνέχεια παρατίθενται τα πέντε σενάρια που διερευνήθηκαν πειραματικά:

Σενάριο 1^ο: Η διάταξη δεν περιλαμβάνει το νέο κωνικό κατευθυντή, αλλά έναν αυτοσχέδιο κατευθυντή pinhole που ήδη χρησιμοποιείται στο ΕΠΤ-ΕΜΠ, ο οποίος διαθέτει μικρή κυκλική οπή. Το ρεύμα της μηχανής ορίζεται στα 280μΑ και το φάσμα συλλέγεται για 1000sec.

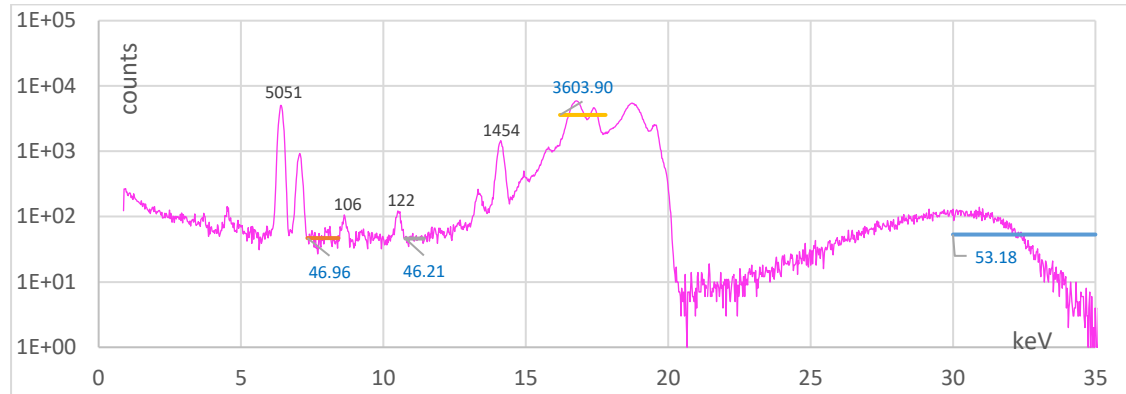


Σχήμα 8.4: Φάσμα φθορισμού του δείγματος KNFA που συλλέχθηκε με το 1^ο σενάριο. Σημειώνεται το ύψος του φάσματος (counts) σε ορισμένες χαρακτηριστικές κορυφές (με μαύρο χρώμα) και το μέσο ύψος στις τέσσερις περιοχές υποστρώματος (με μπλε χρώμα).

p-t-b	7.33-8.41keV	10.77-11.42keV	16.20-17.80keV	30.00-35.00keV
	385.86	651.89	1.71	135.52

Πίνακας 8.1: Οι τιμές p-t-b για τις τέσσερις περιοχές του διαγράμματος το 1^ο σενάριο.

Σενάριο 2^ο: Στην προηγούμενη διάταξη προστίθεται ο κωνικός κατευθυντής που κατασκευάστηκε στο πλαίσιο της ΔΕ. Το ρεύμα μηχανής μειώνεται στα 80μΑ, λόγω του πολύ υψηλότερου count-rate που επιτυγχάνεται. Το φάσμα συλλέγεται για 1000sec.

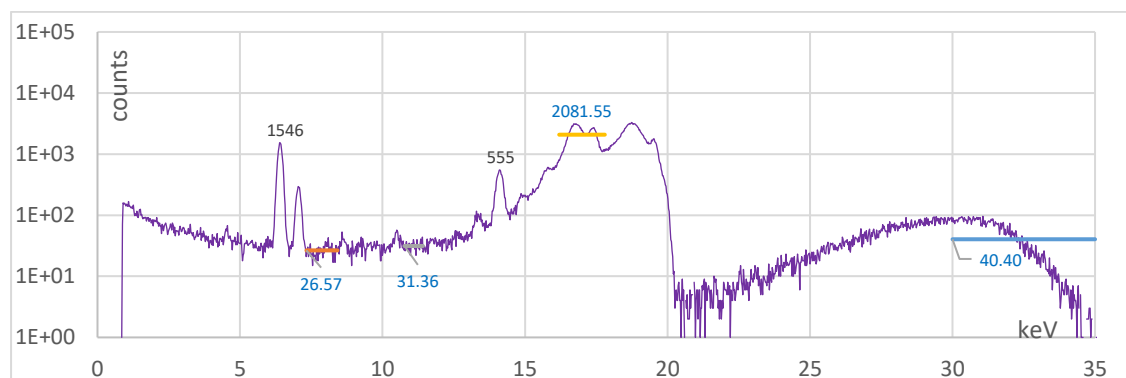


Σχήμα 8.5: Φάσμα φθορισμού του δείγματος KNFA που συλλέχθηκε με το 2^ο σενάριο. Σημειώνεται το ύψος του φάσματος (counts) σε ορισμένες χαρακτηριστικές κορυφές (μαύρο χρώμα) και το μέσο ύψος στις τέσσερις περιοχές υποστρώματος (μπλε χρώμα).

p-t-b	7.33-8.41keV	10.77-11.42keV	16.20-17.80keV	30.00-35.00keV
	107.93	109.66	1.41	95.30

Πίνακας 8.2: Οι τιμές peak-to-background για τις τέσσερις περιοχές του διαγράμματος το 2^ο σενάριο.

Σενάριο 3^ο: Διάταξη με τον κατευθυντή pinhole και τον κωνικό κατευθυντή, απόσταση δείγματος – ανιχνευτή μικρότερη κατά 1cm. Το ρεύμα μηχανής μειώνεται στα 50μΑ, η τάση μηχανής είναι 35keV και η καταγραφή γεγονότων έχει διάρκεια 1000sec.

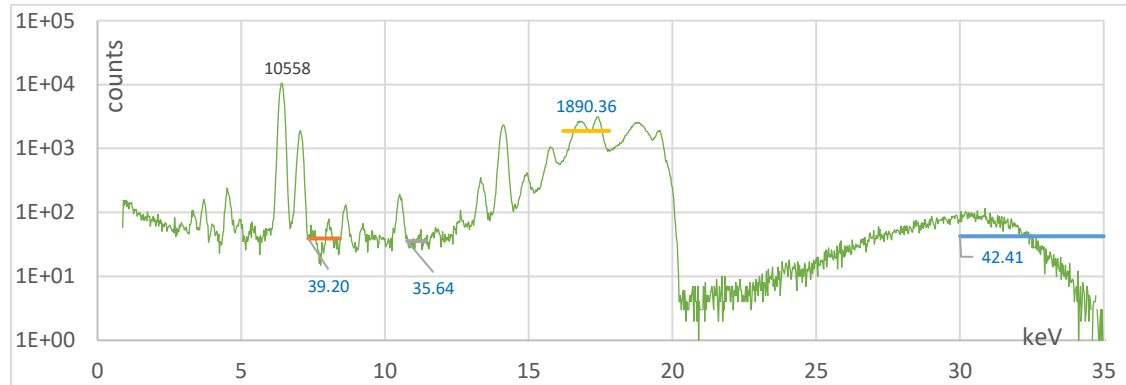


Σχήμα 8.6: Φάσμα φθορισμού του δείγματος KNFA που συλλέχθηκε με το 3^ο σενάριο. Σημειώνεται το ύψος του φάσματος (counts) σε ορισμένες χαρακτηριστικές κορυφές (με μαύρο) και το μέσο ύψος στις τέσσερις περιοχές υποστρώματος (με μπλε).

p-t-b	7.33-8.41keV	10.77-11.42keV	16.20-17.80keV	30.00-35.00keV
	58.20	49.30	0.74	38.27

Πίνακας 8.3: Οι τιμές p-t-b για τις τέσσερις περιοχές του διαγράμματος το 3^ο σενάριο.

Σενάριο 4^ο: Από τη διάταξη αφαιρείται ο αυτοσχέδιος κατευθυντής τύπου pinhole, ενώ παραμένει ο κωνικός κατευθυντής. Το ρεύμα μηχανής παραμένει στα 50μΑ, η τάση μηχανής είναι 35keV και η καταγραφή γεγονότων έχει διάρκεια 1000sec.

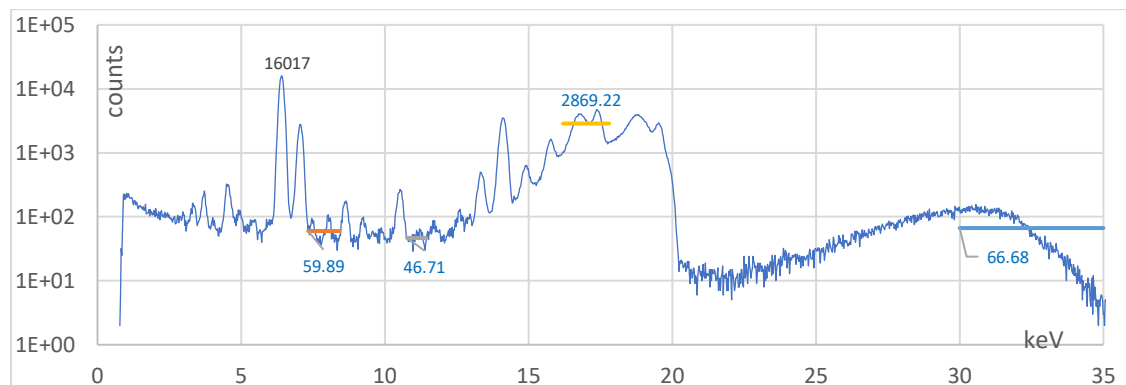


Σχήμα 8.7: Φάσμα φθορισμού του δείγματος KNFA που συλλέχθηκε με το 4^ο σενάριο. Σημειώνεται το ύψος του φάσματος (counts) σε ορισμένες χαρακτηριστικές κορυφές (με μαύρο) και το μέσο ύψος στις τέσσερις περιοχές υποστρώματος (με μπλε).

p-t-b	7.33-8.41keV	10.77-11.42keV	16.20-17.80keV	30.00-35.00keV
	269.37	296.22	5.59	248.94

Πίνακας 8.4: Οι τιμές p-t-b για τις τέσσερις περιοχές του διαγράμματος το 4^ο σενάριο.

Σενάριο 5^ο: Η διάταξη παραμένει η ίδια, με μόνη διαφορά την αύξηση του ρεύματος στα 280μΑ, η τάση μηχανής είναι 35keV και η καταγραφή γεγονότων έχει διάρκεια 300sec.



Σχήμα 8.8: Φάσμα φθορισμού του δείγματος KNFA που συλλέχθηκε με το 5^ο σενάριο. Σημειώνεται το ύψος του φάσματος (counts) σε ορισμένες χαρακτηριστικές κορυφές (με μαύρο) και το μέσο ύψος στις τέσσερις περιοχές υποστρώματος (με μπλε).

p-t-b	7.33-8.41keV	10.77-11.42keV	16.20-17.80keV	30.00-35.00keV
	267.43	342.87	5.58	240.21

Πίνακας 8.5: Οι τιμές p-t-b για τις τέσσερις περιοχές του διαγράμματος το 5^ο σενάριο.

8.3. Σύγκριση των αποτελεσμάτων των διαφόρων σεναρίων και συμπεράσματα

Συγκρίνοντας τα σενάρια ακτινοβολήσης που παρατέθηκαν στην παράγραφο 8.2, είναι δυνατό να εξαχθούν συμπεράσματα για τις εξής παραμέτρους της πειραματικής διάταξης: την επίδραση στις μετρήσεις του κωνικού κατευθυντή, την επίδραση της απόστασης ανιχνευτή-δείγματος καθώς και της έντασης ρεύματος. Η σύγκριση σε κάθε περίπτωση πραγματοποιείται ανάμεσα σε δύο διαδοχικά σενάρια.

Συγκρίνοντας το 1^ο με το 2^ο σενάριο (σχήματα 8.4 και 8.5, πίνακες 8.1 και 8.2), μελετάται μια πρώτη επίδραση του κωνικού κατευθυντή στη διάταξη XRF του ΕΠΤ-ΕΜΠ. Με τη χρήση του κατευθυντή και παράλληλα μειώνοντας το ρεύμα μηχανής από 280μΑ σε 80μΑ, το ύψος των χαρακτηριστικών κορυφών φαίνεται να μην παρουσιάζει ιδιαίτερη μεταβολή συνολικά, ενώ το υπόστρωμα αυξάνεται. Ο εντοπισμός το ίδιου και – σε μερικές περιπτώσεις – μεγαλύτερου πλήθους χαρακτηριστικών φωτονίων με σημαντικά μικρότερη ένταση ρεύματος, καταδεικνύει τη χρησιμότητα του κατευθυντή στη διάταξη, καθώς συμβάλλει σημαντικά στην προστασία της μηχανής από υπερθέρμανση, χωρίς να υποβαθμίζεται εν γένει η πληροφορία που περιέχει το φάσμα. Ωστόσο, λόγω της σημαντικής αύξησης του υποστρώματος, ορισμένες κορυφές παύουν να είναι διακριτές, κάτι που μειώνει την ικανότητα ανίχνευσης, ιδίως στην περιοχή των 7-13keV. Σε μία προσπάθεια μείωσης αυτού του φαινομένου, μελετώνται τα υπόλοιπα σενάρια, όπως αναλύεται παρακάτω.

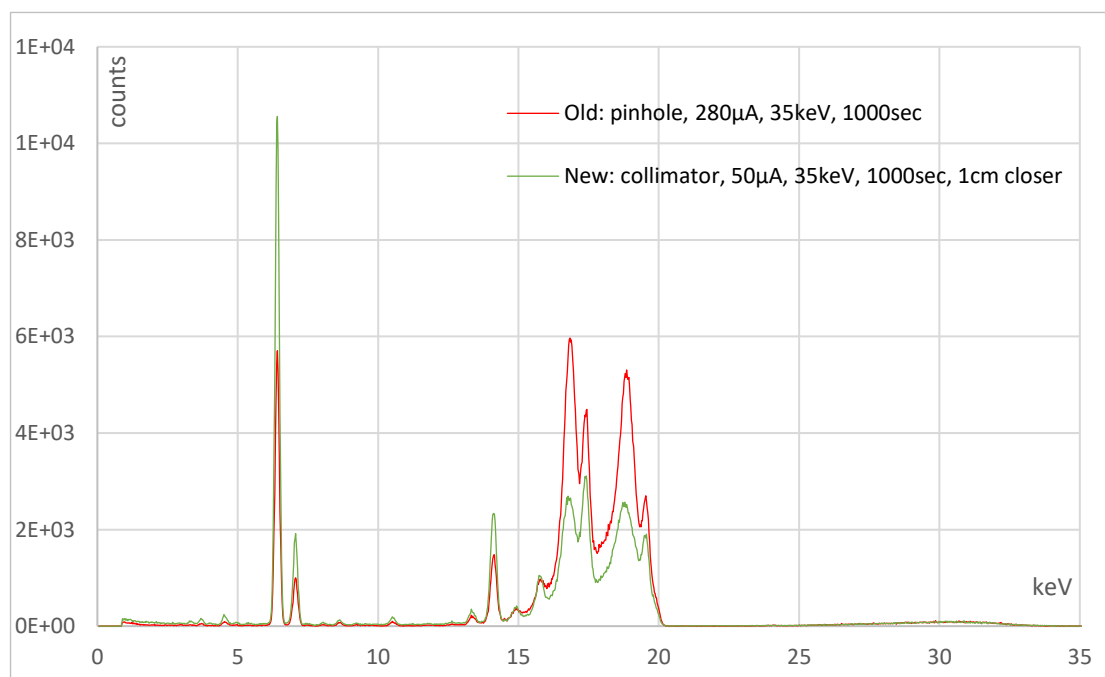
Συγκρίνοντας το 2^ο με το 3^ο σενάριο (σχήματα 8.5 και 8.6, πίνακες 8.2 και 8.3), μελετάται μια πρώτη επίδραση της μείωσης της απόστασης δείγματος – ανιχνευτή στη συγκεκριμένη διάταξη. Μειώνοντας την απόσταση δείγματος-ανιχνευτή και μεταβάλλοντας το ρεύμα μηχανής από 80μΑ σε 50μΑ, η συνολική ποιότητα των μετρήσεων φαίνεται να χειροτερεύει. Αυτό συμβαίνει διότι μειώνεται το πλήθος των φωτονίων σε όλες τις χαρακτηριστικές ενέργειες που έχουν προηγουμένως εντοπιστεί, ενώ το σχετικό ύψος του υποστρώματος σε σχέση με τις κορυφές αυξάνεται. Παρ' όλα αυτά, το κυριότερο συστατικό του δείγματος, ο σίδηρος, εξακολουθεί να εντοπίζεται με βεβαιότητα στο δείγμα.

Συγκρίνοντας το 3^ο με το 4^ο σενάριο (σχήματα 8.6 και 8.7, πίνακες 8.3 και 8.4), φαίνεται η επίδραση της αφαίρεσης του αυτοσχέδιου κατευθυντή pinhole από τη διάταξη, ενώ παραμένουν ο κωνικός κατευθυντής και σταθερή η κοντινότερη απόσταση δείγματος – ανιχνευτή. Με την αφαίρεση του κατευθυντή pinhole, και διατηρώντας την ένταση του

ρεύματος στα 50μΑ, παρατηρείται σημαντική βελτίωση στην ποιότητα του φάσματος. Αφενός, το υποστρώμα μειώνεται, και αφετέρου, τα ύψη των χαρακτηριστικών φωτοκορυφών αυξάνονται σημαντικά (ενδεικτικά, από 1546 σε 10558 γεγονότα στην K_{α} @ 6.40keV του Fe) ξεπερνώντας πλέον και τις μετρήσεις της 1^{ης} περίπτωσης με κατευθυντή pinhole και χωρίς κωνικό κατευθυντή. Η χρήση του κωνικού κατευθυντή επομένως, για κοντινή απόσταση δείγματος – ανιχνευτή, έχει θετική επίδραση στις μετρήσεις εφόσον αφαιρείται ο αυτοσχέδιος κατευθυντής pinhole .

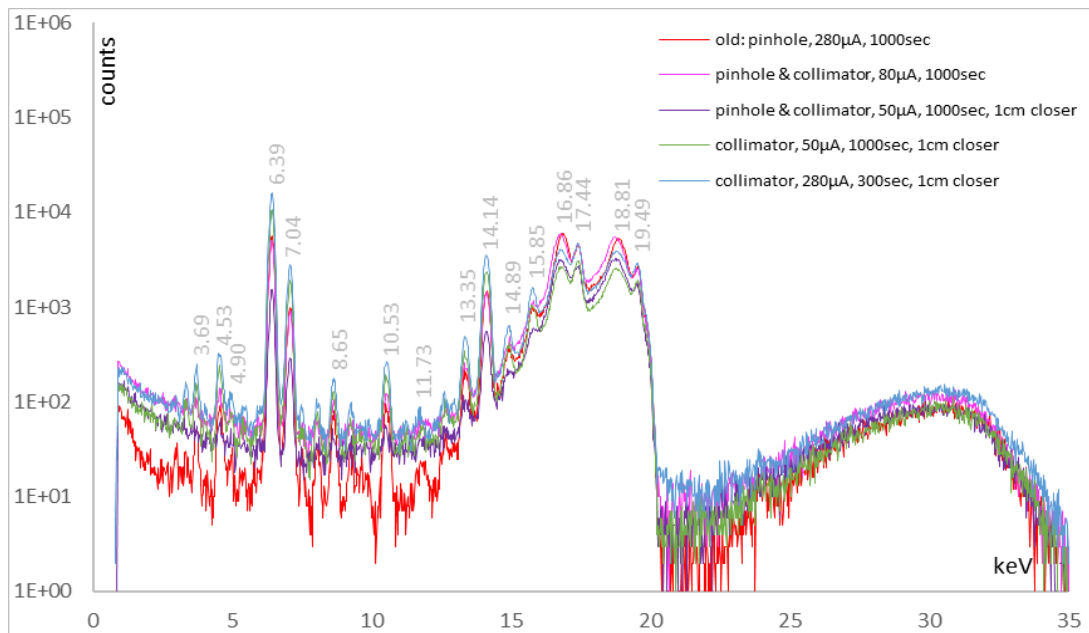
Συγκρίνοντας το 4^ο με το 5^ο σενάριο (σχήματα 8.7 και 8.8, πίνακες 8.4 και 8.5), μελετάται η αύξηση ρεύματος για την ίδια διάταξη στα αρχικά επίπεδα των 280μΑ. Λόγω της αύξησης ισχύος της δέσμης φωτονίων που ακτινοβολούν το δείγμα, αυξάνονται αμφότερα τα ύψη των κορυφών και του υποστρώματος. Παράλληλα, συγκρίνοντας τους ενδεικτικούς λόγους peak-to-background, η ποιότητα των μετρήσεων δείχνει ανεπηρέαστη. Επομένως, η μεγάλη αύξηση του ρεύματος στη διάταξη με κωνικό κατευθυντή και για κοντινότερη απόσταση δείγματος – ανιχνευτή, δεν βελτιώνει τις μετρήσεις ενώ επιβαρύνει θερμικά και τη μηχανή ακτίνων-X.

Από τις προηγούμενες συγκρίσεις, προκύπτει πως το 4^ο σενάριο χωρίς κατευθυντή τύπου pinhole, με κωνικό κατευθυντή, απόσταση δείγματος – ανιχνευτή μικρότερη κατά 1cm από την αρχική, ρεύμα μηχανής 50μΑ και διάρκεια 1000sec, υπερτερεί σημαντικά έναντι των υπολοίπων, διότι επιτυγχάνει καλύτερη διακριτική ικανότητα με πολύ μικρότερη θερμική επιβάρυνση της μηχανής ακτίνων-X.



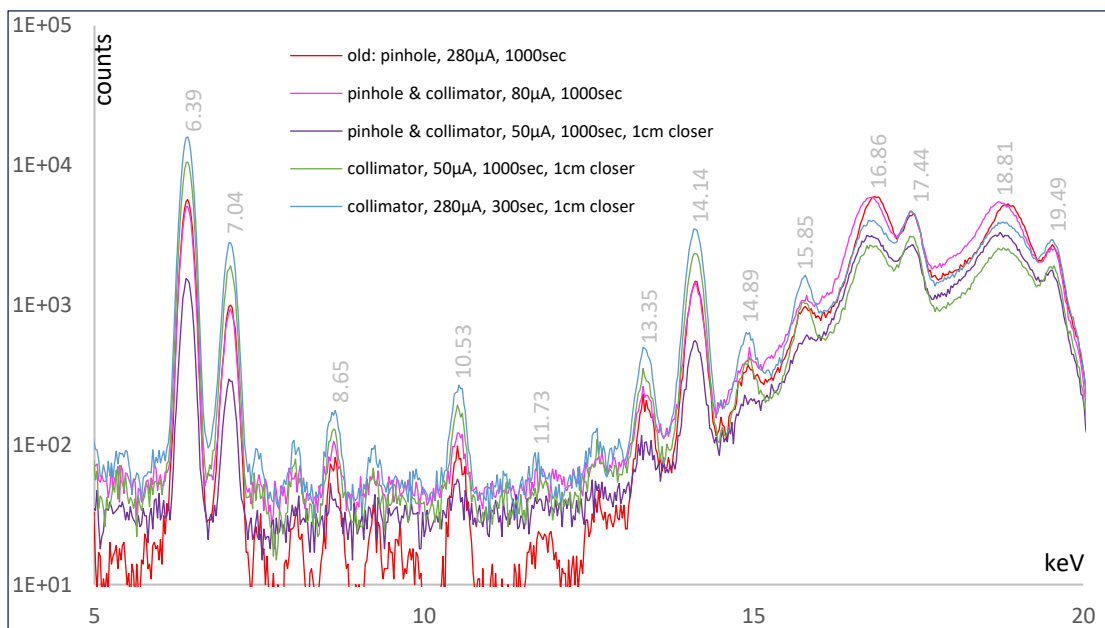
Σχήμα 8.8: Συγκριτική απεικόνιση στην ίδια (γραμμική) κλίμακα όλων των φασμάτων φθορισμού του δείγματος KNFA, για την αρχική (κόκκινο) και βελτιωμένη (πράσινο) περίπτωση.

Στο σχήμα 8.9 παρατίθενται τα φάσματα και για τα πέντε σενάρια.



Σχήμα 8.9: Φάσματα φθορισμού του δείγματος KNFA σε ημιλογαριθμική κλίμακα. Σημειώνονται οι ενέργειες που αντιστοιχούν σε φωτοκορυφές στοιχείων που εντοπίζονται στο δείγμα. Περίπτωση 1^η: κόκκινο, περίπτωση 2^η: ροζ, περίπτωση 3^η: κυανό, περίπτωση 4^η: πράσινο, περίπτωση 5^η: μπλε.

Στο σχήμα 8.10 που ακολουθεί, παρατίθεται λεπτομέρεια του παραπάνω διαγράμματος στην περιοχή 5-20 keV.



Σχήμα 8.10: Λεπτομέρεια διαγράμματος φασματοσκοπίας φθορισμού του δείγματος KNFA στην περιοχή 5-20keV.

Ορισμένα στοιχεία που αναγνωρίζονται στο σχήμα 8.10 είναι: Σίδηρος (K_{α} @ 6.40keV, K_{β} @ 7.06keV), Τιτάνιο (K_{α} @ 4.51keV, K_{β} @ 4.95keV), Αρσενικό (As, K_{α} @ 10.54keV, K_{β} @ 11.72keV) και Στρόντιο (K_{α} @ 14.16keV, K_{β} @ 15.82keV). Το σύνολο των παραπάνω στοιχείων ανιχνεύονται ικανοποιητικά στο δείγμα στο 1^ο, 4^ο και 5^ο σενάριο, ενώ στο 2^ο και 3^ο σενάριο ανιχνεύονται ο Σίδηρος και το Στρόντιο, λόγω της μείωσης του ύψους των κορυφών και της αύξησης του υποστρώματος.

Τελειώνοντας την παρουσίαση της πειραματικής διερεύνησης για την αποτελεσματικότητα του κατευθυντή δέσμης, είναι σκόπιμο να γίνουν μερικές προτάσεις για πιθανές μελλοντικές βελτιώσεις της διάταξης. Άξιο μελέτης είναι η βελτιστοποίηση του σχήματος του κατευθυντή ώστε να προσαρμοστεί πλήρως στη γεωμετρία της διάταξης: αυτό αφορά το πάχος του, που αυξανόμενο μπορεί να επιτύχει καλύτερη θωράκιση έναντι μη χρήσιμων ακτινοβολιών, αλλά και την κωνικότητα και το σχήμα του (π.χ. ελλειψοειδές), έτσι ώστε ο ανιχνευτής να βλέπει μόνον την επιφάνεια του δείγματος. Επίσης, χρήσιμο κρίνεται η βάση στήριξης του δείγματος να αποκτήσει διαμόρφωση τέτοια, ώστε να προσφέρει καλύτερη και πλήρως επαναλήψιμη τοποθέτηση. Τέλος, θα πρέπει να γίνει λεπτομερής ανάλυση των φασμάτων με λογισμικό ανάλυσης, κάτι που θα επιτρέψει την καλύτερη σύγκριση των διαφόρων σεναρίων από αυτήν που έγινε και παρουσιάστηκε προηγουμένως, αλλά και τον προσδιορισμό των πραγματικών επιπέδων ανίχνευσης σε ppm.

9.1 Σύνοψη και συμπεράσματα

Η παρούσα ΔΕ ασχολήθηκε με πιθανές οδούς βελτίωσης της διάταξης φασματοσκοπίας φθορισμού ακτίνων-Χ του εργαστηρίου ΕΠΤ-ΕΜΠ. Η διερεύνηση βασίστηκε σε μεγάλο βαθμό στον υπολογισμό των λόγων κορυφής προς υπόστρωμα (peak-to-background, *p-t-b*) στο φάσμα που συλλέγεται από τη διάταξη, για διάφορες γεωμετρίες, με χρήση δευτερεύοντος οπτικού μέσου (κατευθυντή). Για το σκοπό αυτό, στο πλαίσιο της ΔΕ διερευνήθηκε η επίδραση των ιδιοτήτων και των διάφορων γεωμετρικών χαρακτηριστικών και της θέσης του κατευθυντή: απόσταση ανιχνευτή-δείγματος, κλίση δείγματος, σχήμα και το υλικό του κατευθυντή, περιβάλλον μέσο της διάταξης. Επίσης, έγινε διερεύνηση της ανιχνευτικής ικανότητας της βελτιωμένης διάταξης, σε όρους κατώτατης συγκέντρωσης υλικού στο δείγμα. Οι διαφορετικές παράμετροι μοντελοποιήθηκαν με χρήση του κώδικα προσομοίωσης Monte-Carlo PENELOPE. Τέλος, κατασκευάστηκε μοντέλο κατευθυντή το οποίο αξιολογήθηκε πειραματικά στη διάταξη XRF του ΕΠΤ-ΕΜΠ.

Στο 1^ο κεφάλαιο της ΔΕ έγινε μία σύντομη περιγραφή του αντικειμένου και των περιεχομένων της.

Στο 2^ο κεφάλαιο παρατίθεται η θεωρητική βάση για τη φύση και τις ιδιότητες των ακτίνων-Χ, της ακτινοβολίας δηλαδή που χρησιμοποιείται στην πειραματική μέθοδο που μελετάται και βελτιώνεται. Παρουσιάστηκε η φύση των ακτίνων-Χ, οι βασικές τους ιδιότητες, η μορφή του ενεργειακού τους φάσματος, οι αλληλεπιδράσεις τους με την ύλη ορισμένες βασικές εφαρμογές της μεθόδου φθορισμού τους.

Στο 3^ο κεφάλαιο εξηγήθηκε λεπτομερώς ο φθορισμός ακτίνων-Χ. Αναλύθηκε η εφαρμογή του στην αναλυτική μέθοδο XRF, παρατέθηκαν υποκατηγορίες πειραματικών της εφαρμογών και παρουσιάστηκαν τα δομικά της στοιχεία μίας τέτοιας διάταξης: η πηγή της διεγείρουσας ακτινοβολίας, τα πρωτεύοντα οπτικά μέσα, η συγκράτηση και τοποθέτηση του δείγματος, τα δευτερεύοντα οπτικά μέσα, και οι ανιχνευτές. Στη συνέχεια παρουσιάστηκαν οι δύο βασικές συνιστώσες της διάταξης XRF του ΕΠΤ-ΕΜΠ: η μηχανή παραγωγής ακτίνων-Χ και ο ανιχνευτής.

Στο 4^ο κεφάλαιο παρουσιάστηκαν τα οπτικά μέσα ακτίνων-Χ, ως εργαλείο οδήγησής τους, σε πειράματα και εφαρμογές. Παρατέθηκαν τα είδη τους, ερμηνεύτηκε η

σκέδαση, η διάθλαση και η ανάκλαση ακτίνων-X, και στη συνέχεια εξηγήθηκε η χρήση δευτερευόντων οπτικών μέσων για τη βελτίωση των λόγων p-t-b σε μία τέτοια διάταξη. Τέλος, παρατέθηκαν και άλλες παράμετροι που μειώνουν το υπόστρωμα στη φασματοσκοπία φθορισμού: η τάση και το ρεύμα μηχανής παραγωγής, ο χρόνος έκθεσης του δείγματος, παράμετροι ανιχνευτών, το είδος της μεθόδου φασματοσκοπίας, τα χαρακτηριστικά του δείγματος, η πόλωση της ακτινοβολίας και ο αέρας ως περιβάλλον μέσο.

Στο 5^ο κεφάλαιο παρουσιάστηκε συνοπτικά ο κώδικας *PENELOPE*, βασικό εργαλείο της ΔΕ στην προσομοίωση αλληλεπιδράσεων σωματιδίων-φωτονίων με την ύλη. Παρουσιάστηκαν τα προγράμματα και η δομή του κώδικα *PENELOPE* και περιγράφηκε η χρήση του κυρίως προγράμματος *PENMAIN*, τμήματος του κώδικα, τα αρχεία εισόδου *filename.in*, *filename.geo*, *.mat* και οι εικονικοί ανιχνευτές. Με το κεφάλαιο αυτό, ολοκληρώθηκε το θεωρητικό υπόβαθρο που χρειάζεται ένας αναγνώστης για την πλήρη κατανόηση της ΔΕ.

Στο 6^ο κεφάλαιο, έγινε εστίαση στη μέθοδο προσομοίωσης της φασματοσκοπίας φθορισμού ακτίνων-X που χρησιμοποιήθηκε στη ΔΕ. Αρχικά, έγινε μία εισαγωγή στη μεθοδολογία και στη συνέχεια αναλύθηκε η διαδικασία προσομοίωσης: η γεωμετρία της διάταξης του εργαστηρίου και οι πιθανές βελτιώσεις της. Παρουσιάστηκε η ανάγκη για τη χρήση δευτερεύοντος οπτικού μέσου μεταξύ του δείγματος και του ανιχνευτή της διάταξης: μείωση των επιπτώσεων της σκέδασης και βελτίωση της ανιχνευτικής ικανότητας του ανιχνευτή. Στη συνέχεια παρουσιάστηκε ο κατευθυντής που σχεδιάστηκε στα πλαίσια της ΔΕ. Τέλος, εξηγήθηκαν οι λεπτομέρειες των αρχείων εισόδου που χρησιμοποιήθηκαν για τις προσομοιώσεις: το αρχείο *.in*, το αρχείο *.geo* και τα αρχεία *.mat*.

Στο 7^ο κεφάλαιο, αφού εξηγήθηκε ο τρόπος υπολογισμού των λόγων p-t-b, ξεδιπλώθηκαν τα αποτελέσματα όλων των προσομοιώσεων για τους διαφορετικού τύπου κατευθυντές και γεωμετρίες της εργαστηριακής διάταξης που σχεδιάστηκαν και προσομοιώθηκαν. Η στατιστική ακρίβεια των μετρήσεων κρίθηκε χαμηλή αλλά ικανή να παράξει βασικά συμπεράσματα. Η διερεύνηση χωρίστηκε σε τέσσερα τμήματα (φάσεις). Το πρώτο και μεγαλύτερο σε έκταση τμήμα, περιλαμβάνει προσομοιώσεις: (α) χωρίς κατευθυντή, (β) για δύο διαφορετικές γεωμετρίες κατευθυντή και (γ) για τρεις γωνίες τοποθέτησης δείγματος. Τα αποτελέσματα καταδεικνύουν τον αποτελεσματικότερο κατευθυντή, όμως παρουσιάζεται δυσκολία εξαγωγής συμπεράσματος για τις γωνίες δείγματος. Το δεύτερο τμήμα περιλαμβάνει προσομοιώσεις με τον καλύτερο κατευθυντή – όπως τουλάχιστον προέκυψε από την προηγούμενη διερεύνηση – με αρχική γωνία

δείγματος και με μεταβολή του περιβάλλοντος της διάταξης: από αέρα, σε ήλιο, σε κενό. Η χρήση περιβάλλοντος από υλικό χαμηλού Z (He) βελτιώνει τα αποτελέσματα, όχι όμως τόσο ώστε να υποκαθιστά τη χρήση κατευθυντή. Η συνδυαστική περιβάλλοντος από He και κατευθυντή βελτιώνει περισσότερο την εικόνα του φάσματος. Το τρίτο τμήμα περιλαμβάνει προσομοιώσεις με διαφορετικά υλικά κατευθυντή: αλουμίνιο και Teflon. Το αλουμίνιο παρουσιάζει καλύτερη θωράκιση, όμως το Teflon βελτιώνει την εικόνα του υποστρώματος στις χαμηλές ενέργειες του φάσματος που συλλέγεται. Επισημαίνεται ότι στη διερεύνηση που έγινε στα διάφορα τμήματα που παρουσιάστηκαν προηγουμένως, χρησιμοποιήθηκαν πέντε διαφορετικές αποστάσεις δείγματος-ανιχνευτή. Όπως διαπιστώθηκε, όσο πλησιάζουμε προς το δείγμα, και σε συνδυασμό με τη χρήση κατευθυντή, η ανιχνευσιμότητα των φωτονίων αυξάνεται. Στο τέταρτο τμήμα της διερεύνησης, ρίχνει μία πρώτη ματιά στην κατώτατη ανιχνευτική ικανότητα της διάταξης με ανιχνευτή σε μία κοντινή θέση, για κωνικούς κατευθυντές ίδιου σχήματος από αλουμίνιο και Teflon. Όπως διαπιστώνεται μπορούν να ανιχνεύονται ίχνη σιδήρου σε δείγμα χαμηλού Z, αλλά σχετικά υψηλής πυκνότητας σε συγκέντρωση μεταξύ 30 και 500ppm. Στο τέλος του κεφαλαίου παρατέθηκε συγκεντρωτικός πίνακας με όλα τα αποτελέσματα των προσομοιώσεων.

Στο 8^ο κεφάλαιο, παρουσιάστηκε η σχεδίαση, κατασκευή και πειραματική δοκιμή κατευθυντή δέσμης για την ανάλυση δείγματος τέφρας από καύση λιγνίτη. Για τον προσδιορισμό της επίδρασης του κατευθυντή στα αποτελέσματα των αναλύσεων με την τεχνική XRF, πραγματοποιήθηκαν μετρήσεις για 5 διαφορετικά σενάρια, με μεταβολές στη διάταξη της φασματοσκοπίας, στο ρεύμα της μηχανής παραγωγής ακτίνων-X και στη διάρκεια των μετρήσεων. Για κάθε περίπτωση, παρατίθεται το φάσμα που συλλέχθηκε και εκτιμώνται τυπικοί λόγοι peak-to-background. Οι παράμετροι που διατηρήθηκαν σταθερές κατά τη διάρκεια του πειράματος είναι: η τάση της μηχανής στα 35keV, η χρήση φίλτρων μολυβδαινίου, η σύσταση του δείγματος και η σταθερή απόστασή του δείγματος από την πηγή. Προέκυψε πως η διάταξη χωρίς τον χρησιμοποιούμενο κατευθυντή τύπου pinhole, με κωνικό κατευθυντή, απόσταση δείγματος – ανιχνευτή μικρότερη κατά 1cm, ρεύμα μηχανής 50μΑ, και διάρκεια 1000sec, επιτυγχάνει καλύτερη ικανότητα ανίχνευσης σε σχέση με την αρχική διάταξη του εργαστηρίου, για πολύ μικρότερη τιμή του ρεύματος, κάτι που σημαίνει προστασία της μηχανής ακτίνων-X από υπερθέρμανση. Αυτό επιβεβαιώνει τα αποτελέσματα των προσομοιώσεων του κεφαλαίου 7, ότι δηλαδή ο κατευθυντής λειτουργεί επικουρικά στη λειτουργία του ανιχνευτή βελτιώνοντας την απόδοση της διάταξης.

9.1 Από τη βελτίωση στη βελτιστοποίηση

Η παρούσα ΔΕ παρουσίασε ένα ευρύ φάσμα μεθόδων βελτίωσης της απόδοσης της διάταξης φασματοσκοπίας φθορισμού XRF του ΕΠΤ-ΕΜΠ, με όρους σύγκρισης λόγων $p-t-b$. Ενώ προέκυψαν χρήσιμα συμπεράσματα κατά τη διερεύνηση του κεφαλαίου 7, αλλά και στα αποτελέσματα του πειράματος του κεφαλαίου 8, παρατίθενται ιδέες για περαιτέρω βελτίωση πολλών χαρακτηριστικών ακόμη. Για την ολοκλήρωση της παρούσας εργασίας, αξίζει τον κόπο να παρουσιασθούν ιδέες για μελλοντική διερεύνηση και βελτίωση της διάταξης, εστιάζοντας σε ορισμένες διαπιστώσεις και παρατηρήσεις από τη μέχρι τώρα μελέτη:

- Στη μελέτη που πραγματοποιήθηκε, η στατιστική ακρίβεια των μετρήσεων κρίθηκε χαμηλή. Ενώ επιτυγχάνει σε έναν βαθμό την εξαγωγή συμπερασμάτων, υπολείπεται της βεβαιότητας που είναι σημαντική για κάθε επιστημονική έρευνα. Η μεγαλύτερη διάρκεια προσομοιώσεων, καθώς και η στατιστική ανάλυση των λόγων $p-t-b$ που τους αντιστοιχούν, θα παρέχει μεγαλύτερη ασφάλεια έως και βεβαιότητα στην αξιολόγηση και σύγκριση των διατάξεων.
- Μία πιθανή μελλοντική οδός αφορά τη βελτιστοποίηση του σχήματος και των διαστάσεων του κατευθυντή με στόχο την ελαχιστοποίηση του ανιχνεύομενου υποστρώματος. Παρόμοια μελέτη θα μπορούσε να γίνει και αναφορικά με το σχήμα και τη γεωμετρία του δείγματος – ιδιαίτερα το πάχος του – κάτι το οποίο δεν έχει μελετηθεί καθόλου έως σήμερα.
- Όλες οι προσομοιώσεις της ΔΕ αφορούσαν το φθορισμό δείγματος σιδήρου. Σε μελλοντικές μελέτες, χρειάζεται η προσομοίωση φθορισμού δειγμάτων με χαρακτηριστικές ενέργειες σε όλο το ενεργειακό φάσμα, ώστε να γενικευτούν τα συμπεράσματα για τη συμπεριφορά των κατευθυντών.
- Ενδιαφέρον θα είχε μία μελέτη που θα ελάμβανε υπόψη και το σενάριο ακτινοβόλησης, αλλά και τα φίλτρα που χρησιμοποιούνται κατά την ακτινοβόληση. Πάντως, μία τέτοια πολύ-παραμετρική διερεύνηση θα απαιτούσε μεγάλο πλήθος αλλά και διάρκειας προσομοιώσεις.

Κλείνοντας την εργασία αυτή, αξίζει να αναφερθούν ορισμένες δυσκολίες που προέκυψαν κατά την εκπόνησή της. Η πιο προφανής αφορά τη μεγάλη διάρκεια των προσομοιώσεων, που στάθηκε εμπόδιο στην εμβάθυνση της μελέτης όλων των

παραμέτρων και στη διόρθωση λαθών που συχνά προέκυπταν (π.χ. από μία λανθασμένη γεωμετρία). Επίσης, αξίζει να αναφερθεί πως ο κώδικας PENELOPE, αν και ισχυρό εργαλείο για την προσομοίωση, είναι πολύ ευαίσθητος στο ανθρώπινο λάθος, με αποτέλεσμα απλά τυπογραφικά λάθη – τα οποία συχνά είναι πολύ δύσκολο να ανιχνευθούν – αποτελούν εμπόδιο στην προσομοίωση. Υπολείπεται δηλαδή μίας φιλικής διεπαφής με το χρήστη, που θα βελτιώνε σημαντικά την εμπειρία χρήσης του, και θα τον έκανε προσιτό σε πολύ μεγαλύτερο φάσμα μελετητών των ακτινοβολιών. Μία ακόμη πρόκληση αποτέλεσε η παράθεση αποτελεσμάτων μεγάλου αριθμού προσομοιώσεων, χωρίς να παραλείπονται βασικά στοιχεία απαραίτητα για την κατανόηση των φαινομένων που παρατηρούνται. Τέλος, αξίζει τον κόπο μία αναφορά στις συνθήκες της πανδημίας covid-19, η οποία ξέσπασε στην αφετηρία της εκπόνησης της Διπλωματικής Εργασίας. Παράλληλα με όλες τις μεταβολές που επέβαλε στην καθημερινότητα, χρειάστηκε να επαναπροσδιοριστούν οι επικοινωνίες με το προσωπικό του εργαστηρίου και τον επιβλέποντα καθηγητή, αλλά και η προσβασιμότητα στο φυσικό χώρο λειτουργίας της πειραματικής διάταξης και του Εθνικού Μετσόβιου Πολυτεχνείου συνολικά.

1. Maxwell, J. Clerk “A Dynamical Theory of the Electromagnetic Field” (1865) Philosophical Transactions of the Royal Society of London. 155: 459–512.
2. Röntgen, W. C. “On a New Kind of Rays” (1896) Science, vol.3, no.59, American Association for the Advancement of Science, pp. 227–31.
3. Kevles BH “Naked to the Bone Medical Imaging in the Twentieth Century” (1996) Camden, NJ: Rutgers University Press. pp. 19–22.
4. Δ. Λεωνίδου “Αλληλεπιδράσεις Ακτινοβολιών και Ύλης – Δοσιμετρία – Θωράκιση” (1984)
5. “Physics - Electromagnetic Waves” Byju's website <https://byjus.com/physics/electromagnetic-waves/>
6. “BOOKLET to Provide Basic Information Regarding Health Effects of Radiation, Chapter 1: Basic Knowledge on Radiation” Ministry of the Environment Government of Japan website <https://www.env.go.jp/en/chemi/rhm/basic-info/1st/01-03-05.html>
7. Van Grieken R. E, Markowicz A. A. “Handbook of X-ray spectroscopy”, 2nd edition (2002) Marcel Dekker.
8. Mahuvava, Courage. “Monte Carlo evaluation of the dose perturbation effect of various hip prostheses during pelvic megavoltage photon radiotherapy” (2016). PhD Thesis. University of the Free State.
9. X-Ray Fluorescence (XRF): Understanding Characteristic X-Rays στην ιστοσελίδα <https://www.amptek.com/>
10. Hewitt, Paul G. “FOCUS ON PHYSICS: The Photoelectric Effect.” (2019) The Science Teacher, vol.87, no.3, National Science Teachers Association, pp. 12–14.
11. Daniel, Odeh; Ogbanje, D.; Jonah, S. A. “X-Rays and scattering from filters used in diagnostic radiology” (2013) International Journal of Scientific and Research Publications, 3.7: 1-11.
12. Manninen, Anna-Leena “Clinical applications of radiophotoluminescence (RPL) dosimetry in evaluation of patient radiation exposure in radiology: determination of absorbed and effective dose.” (2014)
13. Shirajum Monira Erina “Charging-up Behaviour of MicroPattern Gaseous Detectors” (2020)
14. Συμεών Ζ. Γρίβας “Διερεύνηση της δυνατότητας συγκρότησης διάταξης XRF με χρήση μηχανής ακτίνων-X 200kV” (2018), Διπλωματική Εργασία, Ε.Μ.Π.
15. Valeur, Bernard, Berberan-Santos, Mario “Molecular Fluorescence: Principles and Applications” (2012) Wiley-VCH.
16. Ιωάννης Α. Σιανούδης, Ανδρέας Γ. Καρύδας, Χαράλαμπος Ζαρκάδας, Ελένη Δρακάκη “ΦΑΣΜΑΤΟΣΚΟΠΙΑ ΦΘΟΡΙΣΜΟΥ ΑΚΤΙΝΩΝ Χ (XRF): ΜΙΑ ΠΡΟΤΑΣΗ ΓΙΑ ΑΞΙΟΠΟΙΗΣΗ ΤΗΣ ΣΤΗΝ ΕΚΠΑΙΔΕΥΤΙΚΗ ΔΙΑΔΙΚΑΣΙΑ” (2015)
17. Michael Haschke “Laboratory Micro-X-Ray Fluorescence Spectroscopy - Instrumentation and Applications” (2014) Cham: Springer International Publishing, 10: 978-983.

18. Π. Ρούνη “Ανίχνευση ιχνοστοιχείων σε δείγματα περιβαλλοντικής σημασίας, με χρήση μεθόδων Πυρηνικής Τεχνολογίας” (2008) Διδακτορική Διατριβή, Σχ. Μηχ. Μηχ. Ε.Μ.Π.
19. Ευστάθιος Π. Βλασσόπουλος “ΑΝΑΒΑΘΜΙΣΗ ΚΑΙ ΒΑΘΜΟΝΟΜΗΣΗ ΤΗΣ ΔΙΑΤΑΞΗΣ ΦΘΟΡΙΣΜΟΥ ΑΚΤΙΝΩΝ Χ (XRF) ΤΟΥ ΕΠΤ-ΕΜΠ ΓΙΑ ΤΗΝ ΑΝΑΛΥΣΗ ΔΕΙΓΜΑΤΩΝ ΠΕΡΙΒΑΛΛΟΝΤΙΚΗΣ ΣΗΜΑΣΙΑΣ” (2013) Διπλωματική Εργασία, ΕΜΠ
20. “Röntgenoptische Systeme, Refraktive Röntgenoptiken” (“X-ray optical systems; Refractive X-ray optics”) (2019) VDI/VDE 5575 pt.7
21. G. R. Morrison, “Diffractive X-Ray Optics,” Chapter 8 in A. G. Michette and C. J. Buckley, Eds., “X-Ray Science and Technology” (1993) Inst. Phys., London.
22. Kirz, Janos “Phase zone plates for x rays and the extreme UV” (1974)
23. Benedikt Rösner, Simone Finizio, Frieder Koch, Florian Döring, Vitaliy A. Guzenko, Manuel Langer, Eugenie Kirk, Benjamin Watts, Markus Meyer, Joshua Loroña Ornelas, Andreas Späth, Stefan Stanescu, Sufal Swaraj, Rachid Belkhou, Takashi Ishikawa, Thomas F. Keller, Boris Gross, Martino Poggio, Rainer H. Fink, Jörg Raabe, Armin Kleibert, Christian David “Soft x-ray microscopy with 7 nm resolution” (2020) Optica 7.11: 1602-1608.
24. Irina Snigireva, A. Snigirev “X-Ray microanalytical techniques based on synchrotron radiation” (2006) Journal of Environmental Monitoring, 8.1: 33-42
25. Anna F. Jones, Jonathan N. Turner, J. Stephen Daly, Pierre Francus and Robin J. Edwards “Signal-to-noise ratios, instrument parameters and repeatability of Itrax XRF core scan measurements of floodplain sediments” (2019) Quaternary International
26. Ren, Liqiang, Zheng, Bin and Liu, Hong “Tutorial on X-ray Photon Counting Detector Characterization” (2018) Journal of X-ray science and technology, 26.1: 1-28
27. Heikki Sipilä and Erkki Kiuru “Background phenomena and their elimination in gas filled detectors” (2004) Astroparticle, Particle And Space Physics, Detectors And Medical Physics Applications p. 512-516
28. Seyed Mahmoud Bayazid, Yu Yuan and Raynald Gauvin «Study of the Peak to Background (P-T-B) Method Behavior as a Function of Take-Off Angle, Tilt Angle, Particle Size, and Beam Energy» (2021) Scanning 2021
29. B. Beckhoff, B. Kanngießer, N. Langhoff, R. Wedell, H. Wolff (Eds.) “Handbook of Practical X-Ray Fluorescence Analysis” (2007) Springer
30. Κωνσταντίνος Ντανάκας “ΜΕΛΕΤΗ ΤΗΣ ΚΕΦΑΛΗΣ ΙΑΤΡΙΚΟΥ ΓΡΑΜΜΙΚΟΥ ΕΠΙΤΑΧΥΝΤΗ ΜΕ ΧΡΗΣΗ ΤΕΧΝΙΚΩΝ ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΗΣ MONTE CARLO” (2019) Διπλωματική Εργασία, Ε.Μ.Π.
31. Βασιλική Ν. Κεφαλλονίτη «ΜΕΛΕΤΗ ΤΗΣ ΑΠΟΚΡΙΣΗΣ Γ-ΚΑΜΕΡΑΣ ΜΕ ΤΕΧΝΙΚΕΣ ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΗΣ MONTE-CARLO» (2018) Διπλωματική Εργασία, Ε.Μ.Π.
32. James E. Gentle “Random Number Generation and Monte Carlo Methods” (2003) New York: springer
33. Dirk P. Kroese, The University of Queensland, Tim Brereton, Ulm University, Thomas Taimre, The University of Queensland, Zdravko I. Botev, The University of New South Wales “Why

- the Monte Carlo Method is so important today” (2014) Wiley Interdisciplinary Reviews: Computational Statistics, 6.6: 386-392.
34. X. Llovet, J. M. Fernandez-Varea, J. Sempau and F. Salvat «Monte Carlo simulation of X-ray emission using the general-purpose code PENELOPE» (2005) Surface and Interface Analysis: An International Journal devoted to the development and application of techniques for the analysis of surfaces, interfaces and thin films, 37.11: 1054-1058.
 35. Francesc Salvat “PENELOPE-2014: A Code System for Monte Carlo Simulation of Electron and Photon Transport” (2015) Facultat de Fisica (ECM and ICC), Universitat de Barcelona. Diagonal 645, E-08028 Barcelona, Spain.
 36. Αθανάσιος Νικόλαος “ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΗ ΤΗΣ ΑΛΛΗΛΕΠΙΔΡΑΣΗΣ ΦΩΤΟΝΙΑΚΩΝ ΑΚΤΙΝΟΒΟΛΙΩΝ ΚΑΙ ΥΛΗΣ ΜΕ ΧΡΗΣΗ ΤΟΥ ΚΩΔΙΚΑ PENELOPE - ΕΦΑΡΜΟΓΗ ΣΕ ΠΡΟΒΛΗΜΑΤΑ ΥΠΟΛΟΓΙΣΜΟΥ ΘΩΡΑΚΙΣΕΩΝ ΚΑΙ ΒΑΘΜΟΝΟΜΗΣΗΣ ΑΝΙΧΝΕΥΤΙΚΩΝ ΔΙΑΤΑΞΕΩΝ” (2006) Διπλωματική Εργασία, Ε.Μ.Π.
 37. Alan R. Hawthorne and Robin P. Gardner “Monte Carlo simulation of x-ray fluorescence from homogeneous multielement samples excited by continuous and discrete energy photons from x-ray tubes.” (1975) Analytical Chemistry 47 (13), 2220-2225
 38. Aniouar A. Bzhaumikhov, Norbert Langhoff, J. Schmalz, R. Wedell, Valentin I. Beloglazov, and N. F. Lebedev "Polycapillary conic collimator for micro-XRF" (1998) Proc. SPIE 3444, X-Ray Optics, Instruments, and Missions, SPIE
 39. Birgit Kanngießner, Wolfgang Malzer, Alexis Fuentes Rodriguez, Ina Reiche “Three-dimensional micro-XRF investigations of paint layers with a tabletop setup” (2005) Spectrochimica Acta Part B: Atomic Spectroscopy, Volume 60, Issue 1
 40. R. E. Sturgeon, S. N. Willie, and S. S. Berman “Atomic absorption determination of tin using in situ concentration of stannane in a graphite furnace” (1987) Analytical Chemistry
 41. Robert A. Meyers, “Encyclopedia of Analytical Chemistry” (2000) V.15, Wiley Publishing.
 42. Yves Kayser, Rainer Unterumsberger, Andre Wahlisch, Karina Bzheumikhova, Philipp Hönicke, Claudia Zech, Burkhard Beckhoff “Polychromatic and Microfocused X-ray Radiation for Traceable Quantitative X-ray Fluorescence Analysis” (2021) X-ray Spectroscopy Methods & Applications for Today's Spectroscopists, Volume 36, Issue S11, Pages: 13–16.
 43. Beckhoff B. “Traceable Characterization of Nanomaterials by X-ray Spectrometry Using Calibrated Instrumentation.” (2022) Nanomaterials
 44. Σπυρίδων Σ. Χαυλής “ΜΕΛΕΤΗ ΤΗΣ ΛΕΙΤΟΥΡΓΙΑΣ ΔΙΑΤΑΞΗΣ XRF ΜΕ ΧΡΗΣΗ ΚΩΔΙΚΑ ΠΡΟΣΟΜΟΙΩΣΗΣ MONTE-CARLO” (2011) Διπλωματική Εργασία, Ε.Μ.Π.

ΠΑΡΑΡΤΗΜΑ Α // Χαρακτηριστικές ενέργειες στοιχείων

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

Πίνακας Α.1. Χαρακτηριστικές ακτίνες-Χ και αιχμές απορρόφησης για τη σειρά Κ σε KeV (14).

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

Πίνακας Α.1. (συνέχεια) Χαρακτηριστικές ακτίνες-Χ και αιχμές απορρόφησης για τη σειρά Κ σε KeV (14).

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

Πίνακας Α.1. (συνέχεια) Χαρακτηριστικές ακτίνες-Χ και αιχμές απορρόφησης για τη σειρά Κ σε KeV (14).

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

Πίνακας Α.2. Χαρακτηριστικές ακτίνες-X και αιχμές απορρόφησης για τη σειρά L σε KeV (14).

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

Πίνακας Α.2. (συνέχεια) Χαρακτηριστικές ακτίνες-Χ και αιχμές απορρόφησης για τη σειρά L σε KeV (14).

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

Πίνακας Α.2. (συνέχεια) Χαρακτηριστικές ακτίνες-Χ και αιχμές απορρόφησης για τη σειρά L σε KeV (14).

Atomic number and element	M-series							
	M _{II} N _{IV}	M _{III}	M _{III} N _V	M _{IV}	M _{IV} N _{VI}	M _V	M _V N _{VII}	M _V N _{VI}
		edge	M γ	edge	M β	edge	M α_1	M α_2
<i>Intensity</i>		—		—		—		
29Cu				0.015				
30Zn				0.022				
31Ga		0.115		0.030				
32Ge		0.132		0.041				
33As		0.150		0.052				
34Se		0.170		0.066				
35Br		0.191		0.082				
36Kr		0.217		0.095				
37Rb		0.240		0.114		0.112		
38Sr		0.270		0.136		0.134		
39Y		0.300		0.159		0.156		
40Zr		0.335	0.323	0.187		0.184		
41Nb		0.362	0.349	0.207		0.204		
42Mo		0.394	0.379	0.232		0.228		
43Tc		0.429	0.412	0.260		0.257		
44Ru		0.467	0.448	0.290		0.288		
45Rh		0.506	0.485	0.321		0.315		
46Pd		0.546	0.522	0.354		0.349		
47Ag		0.588	0.562	0.389		0.383		
48Cd		0.632	0.603	0.423		0.420		
49In		0.678	0.646	0.464		0.456		
50Sn		0.720	0.684	0.506		0.497		
51Sb		0.774	0.735	0.537		0.527		
52Te		0.822	0.779	0.583		0.572		
53I		0.873	0.826	0.631		0.619		
54Xe		0.926	0.874	0.678		0.672		
55Cs		0.981	0.924	0.740		0.726		
56Ba		1.036	0.974	0.796		0.781		
57La		1.092	1.025	0.854	0.854	0.833	0.833	
58Ce		1.152	1.079	0.902	0.902	0.883	0.883	
59Pr		1.210	1.131	0.951	0.950	0.931	0.929	
60Nd		1.266	1.180	1.000	0.997	0.978	0.978	
61Pm		1.327	1.234	1.052		1.027		
62Sm		1.388	1.287	1.106	1.100	1.081	1.081	
63Eu		1.450	1.341	1.161	1.153	1.131	1.131	
64Gd		1.511	1.334	1.217	1.209	1.185	1.185	
65Tb		1.583	1.457	1.275	1.266	1.241	1.24	
66Dy		1.642	1.507	1.333	1.325	1.295	1.293	

Πίνακας Α.3. Χαρακτηριστικές ακτίνες-Χ και αιχμές απορρόφησης για τη σειρά Μ σε KeV (14).

Atomic number and element	M-series							
	M _{II} N _{IV}	M _{III}	M _{III} N _V	M _{IV}	M _{IV} N _{VI}	M _V	M _V N _{VII}	M _V N _{VII}
		edge	M γ	edge	M β	edge	M α_1	M α_2
Intensity		—		—		—		
67Ho		1.715	1.570	1.392	1.383	1.351	1.348	
68Er		1.783	1.627	1.453	1.443	1.409	1.406	
69Tm		1.861	1.694	1.515	1.503	1.468	1.462	
70Yb		1.948	1.770	1.576	1.568	1.528	1.521	
71Lu		2.025	1.833	1.637	1.623	1.586	1.572	
72Hf		2.109	1.902	1.718	1.700	1.664	1.646	
73Ta		2.184	1.961	1.783	1.760	1.725	1.702	
74W		2.273	2.033	1.864	1.835	1.803	1.776	1.774
75Re		2.361	2.104	1.946	1.910	1.879	1.845	1.843
76Os		2.453	2.177	2.033	1.988	1.963	1.921	1.918
77Ir		2.551	2.255	2.119	2.062	2.040	1.988	1.983
78Pt		2.649	2.332	2.204	2.134	2.129	2.065	2.059
79Au		2.744	2.404	2.307	2.220	2.220	2.142	2.133
80Hg		2.848	2.485	2.392	2.285	2.291	2.195	2.184
81Tl	3.012	2.957	2.569	2.483	2.360	2.389	2.270	2.266
82Pb	3.125	3.072	2.658	2.586	2.442	2.484	2.345	2.340
83Bi	3.234	3.186	2.745	2.694	2.534	2.586	2.422	2.426
84Po	3.354	3.312	2.842	2.798	2.620	2.681	2.501	2.503
85At	3.475	3.428	2.929	2.905	2.707	2.780	2.581	2.582
86Rn	3.593	3.536	3.006	3.014	2.794	2.882	2.663	2.662
87Fr	3.724	3.654	3.093	3.125	2.881	2.986	2.746	2.742
88Ra	3.853	3.779	3.185	3.237	2.967	3.093	2.829	2.823
89Ac	3.981	3.892	3.265	3.352	3.054	3.202	2.913	2.904
90Th	4.118	4.030	3.369	3.474	3.145	3.313	2.996	2.984
91Pa	4.261	4.164	3.470	3.597	3.251	3.416	3.083	3.070
92U	4.401	4.303	3.566	3.728	3.337	3.552	3.171	3.161
93Np	4.543	4.435	3.665	3.850	3.435	3.666	3.262	3.251
94Pu	4.699	4.557	3.756	3.973	3.527	3.778	3.346	3.332
95Am		4.667	3.839	4.092		3.887		
96Cm		4.797		4.227		3.971		
97Bk		4.927		4.366		4.132		
98Cf		5.109		4.487		4.253		
99Es		5.252		4.630		4.374		
100Fm		5.397		4.766		4.498		
101Md		5.546		4.903		4.622		
102No		5.688		5.037		4.741		
103Lw		5.710		5.150		4.860		

Πίνακας Α.3. (συνέχεια) Χαρακτηριστικές ακτίνες-Χ και αιχμές απορρόφησης για τη σειρά Μ σε KeV (14).