



TECHNISCHE
UNIVERSITÄT
WIEN

VIENNA
UNIVERSITY OF
TECHNOLOGY

DISSERTATION

Monte-Carlo Methoden zur Beschreibung der physikalischen Wechselwirkungen von Röntgenstrahlung mit Probe und Detektor in der Computertomographie

ausgeführt zum Zwecke der Erlangung des akademischen Grades eines
Doktors der technischen Wissenschaften unter der Leitung von

Ao.Univ.Prof. Dipl.-Ing. Dr.techn. Michael Mantler

eingereicht an der Technischen Universität Wien
bei der Fakultät für Physik

von

Dipl.-Ing. Björn Chyba
Himmelstraße 47a
1190 Wien

Wien, im Mai 2009

Kurzfassung

Bei der Erstellung von Projektionsbildern zur Werkstoffprüfung in der Computer-unterstützten Tomographie (CT) kommt häufig die Kegelstrahlgeometrie in Verbindung mit einem Matrixdetektor zur Anwendung. Der Vorteil dabei ist die wesentlich bessere Ausnützung des Röntgenstrahls und die schnellere Erfassung von Projektionsaufnahmen im Gegensatz zu einem kollimierten Strahl bei 2D-Erfassung (Parallelstrahlgeometrie). Das Fehlen von Kollimatoren am Detektor führt jedoch dazu, dass die Projektion durch Streuung der Quellstrahlung in der Probe verfälscht wird und bei der Rekonstruktion zu einer 3D-Abbildung Artefakte verursacht.

Zur Untersuchung solcher Abbildungsfehler wurde ein Simulationsprogramm entwickelt, das in der Lage war, Projektionsbilder unter Einbeziehung von Fluoreszenzstrahlung sowie kohärenter und inkohärenter Streustrahlung zu erstellen. Die Messwerte an jedem Detektorpixel konnten dabei in mehrere Energiekanäle aufgeteilt und die Wechselwirkungshistorie der primären Photonen bis zu sekundärer Streuung aufgezeichnet werden. Berechnungen wurden zum Vergleich und als Erweiterung auch mit einem in der Neutronen- und medizinischen Physik etablierten Programm (MCNP) durchgeführt.

Es wurden detaillierte Untersuchungen an allen Abschnitten der Entstehung von Projektionsaufnahmen erstellt: Erzeugung von Röntgenstrahlung in Röntgenröhren unter Berücksichtigung der vom Abstrahlungswinkel abhängigen spektralen Häufigkeitsverteilung, kohärente und inkohärente Streuung von Photonen in der Probe, an der Luft und im Detektor sowie Einbeziehung der Sekundärwechselwirkungen von Photoelektronen.

Als wesentliche Einflussfaktoren auf das Projektionsbild wurden neben der Abschwächung der Strahlung bei der Durchdringung der Probe die Streuung an Luft im Strahlungsweg und die detektorinhärente Streuung ermittelt. Die möglichst genaue Kenntnis der Detektoreffizienz war ein weiterer wichtiger Faktor. Die unter diesen Aspekten erstellten Simulationen wurden mit Messungen an einer CT Anlage verglichen, wobei gute Übereinstimmung erzielt werden konnte.

Abstract

Computed tomography (CT) in cone beam geometry has become a common method for material testing in industry. The advantage of this setup compared to parallel beam geometry is the fast acquisition of projection images on a flat panel detector and the optimized utilization of the x-ray beam. The lack of collimators, on the other hand, leads to unwanted measurement of scattered radiation due to interactions of the beam with the sample, which causes artefacts in the reconstructed 3D image.

Simulation software was developed for investigation of possible image defects arising from fluorescence as well as coherent and incoherent scattered radiation. Interaction histories of scattered photons could be stored up to secondary level with a definable energy resolution. For comparison and in addition to the self-developed software simulations were also calculated using MCNP, which is a well known program used for neutron physics and medical physics.

Detailed investigations were made for all stages of the creation of projection images in CT: modelling of tube spectra including angle dependent spectral distribution, coherent and incoherent scattering of photons by the sample and by the air, detector inherent scattering and secondary interactions of photoelectrons.

In addition to attenuation of radiation by the sample the main impact factors on the projection image were identified as scattering in air in combination with detector inherent scattering. Also the exact knowledge of the detector response was of high importance. Simulations made according to these influences were in good agreement with measurements made on an available CT device.

Danksagung

An dieser Stelle möchte ich mich bei allen bedanken, die durch ihre Unterstützung zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen haben, allen voran Prof. Michael Mantler vom Institut für Festkörperphysik der TU-Wien (IFP) für die wissenschaftliche Betreuung. Vielen Dank auch an Prof. Norbert Gurker (IFP) für seine Unterstützung bei Themen rund um die CT sowie die zur Verfügung Stellung von Aufnahmen aus der μ CT Anlage des Instituts, Prof. Horst Ebel (IFP) für hilfreiche Diskussionen zum Thema Modellierung von Röntgenröhrenspektren und Robert Svagera (IFP) für die zur Verfügung Stellung von Messungen von Röntgenspektren, die für den Vergleich von Modellrechnungen von großer Bedeutung waren.

Weiters bedanke ich mich bei Prof. Johann Kastner und ganz besonders bei Michael Reiter vom Campus Wels der Fachhochschule-Oberösterreich für die zahlreichen Messungen an der CT-Anlage, Anfertigungen von Testkörpern und Abbildungen sowie die gute Zusammenarbeit und den regen Gedankenaustausch in unzähligen Diskussionen, Prof. Eduard Gröller vom Institut für Computergraphik und Algorithmen der TU-Wien für die wertvolle Unterstützung zum Thema Visualisierung, Daniel Weiß von der Firma Carl Zeiss Industrielle Messtechnik GmbH in Oberkochen/Deutschland für wichtige Hintergrundinformationen zum Thema Detektoren, Prof. Peter Wobraschek vom Atominstitut der österreichischen Universitäten (ATI) für die fachliche Unterstützung und die Begutachtung der Dissertation, Prof. Christina Streli (ATI) für diverse Gespräche zu Fragen der analytischen Methoden der Röntgenphysik, Fareeha Hameed (ATI) und besonders Rustam Kahn (ATI) für die hilfreichen Diskussionen zum Programm MCNP sowie Ernst Haunschmid vom Zentralen Informatikdienst der TU-Wien für die technische Unterstützung bei Fragen zur Programmierung und Konfiguration am Computer-Cluster Phoenix.

Inhaltsverzeichnis

Kurzfassung.....	1
Abstract	2
Danksagung	3
Inhaltsverzeichnis	4
1. Einleitung	6
2. Grundlagen	8
2.1. Streuung und Absorption von Photonen	9
Fluoreszenz.....	10
Strahlungslose Übergänge.....	11
Kohärente Streuung.....	12
Inkohärente Streuung	13
Analytische Formeln	17
2.2. Streuung von Elektronen	21
Elastische Streuung	21
Bremsstrahlung bei elastischer Streuung	22
Anregung des Atoms durch inelastische Streuung.....	23
Continuous Slowing Down Approximation	24
2.3. Modellierung von Röntgenstrahlung aus Röhren.....	25
Kontinuierliche Bremsstrahlung.....	26
Charakteristische Strahlung.....	27
Analytische Modelle zur Berechnung von Röhrenspektren.....	27
Modell von Ebel	28
2.4. Detektor	31
Szintillator	31
Halbleiterdetektor	34
2.5. Computertomographie.....	36
Prinzip	36
Gefilterte Rückprojektion.....	37
Kegelstrahlgeometrie.....	39
Artefakte.....	41
3. Umsetzung – Experimente und Programme.....	45
3.1. Versuchsanordnung CT	45
3.2. Monte-Carlo Simulation.....	49
3.3. Simulationsprogramm	51
Photonenquelle	51
Probenkörper	51
Detektor	52
3.4. Analytische Berechnungen.....	52
3.5. MCNP.....	53
3.6. PHOENIX Linux Cluster	55
4. Ergebnisse	55
4.1. Projektion	56
4.2. Effekte durch Wechselwirkungen mit dem Detektor	64
Detektorempfindlichkeit.....	64
Einfluss der Al-Filterplatte vor dem Detektor.....	66

Detektorgehäuse	68
4.3. Punktverbreiterung durch detektorinhärente Streuung.....	68
Schichtenaufbau	68
Point Spread Function	70
4.4. Berechnungen zur Streuung	73
Vergleich der MC-Methode mit analytischer Berechnung	73
Streuung.....	75
Einfaches Modell zur Beschreibung von Bremsstrahlung in der Probe.....	83
4.5. Vergleichende Simulationen mit MCNP.....	84
Simulation der Durchstrahlung	84
Vergleich der eigenen Programmierung mit MCXRF	86
Simulation mit MCNP unter Einbeziehung zusätzlicher Annahmen aus Rahmenbedingungen der Messung	89
Detektorempfindlichkeit des Szintillators auf Basis der Simulation im Detektor- Schichtenmodell	95
4.6. Röntgenröhrenspektren	98
4.7. Simulation der Projektion von TK01 auf Position X2 unter Berücksichtigung aller bisher analysierten Einflüsse	107
5. Diskussion und Conclusio	112
Projektion	112
Streuung.....	113
Effekte durch Wechselwirkungen mit dem Detektor	114
Punktverbreiterung infolge detektorinhärenter Streuung	115
Vergleichende Simulationen mit MCNP	116
Röhrenspektren.....	116
Betrachtung der Simulation unter Berücksichtigung aller bisher gewonnenen Erkenntnisse	117
Ausblick.....	117
6. Referenzen.....	118
Appendix A: Simulationskonfigurationen (<i>MCNPX</i>)	123
Röhrenanode.....	123
TK01.....	124
Nadelstrahl.....	125
Lebenslauf	126
Publikationsliste:	127

1. Einleitung

Röntgenstrahlen sind eine wichtige Grundlage moderner zerstörungsfreier Werkstoffprüfung. Ihre Eigenschaften, Materie durchdringen und ionisieren zu können, ermöglichen Rückschlüsse auf die Zusammensetzung von Proben. Die unterschiedlichen Wechselwirkungen der Strahlung mit Materie erlauben es z.B., die chemische Zusammensetzung einer Probe sowohl qualitativ als auch quantitativ zu bestimmen, indem die von der bestrahlten Probe wieder ausgesandte Strahlung in ihrer elementspezifischen spektralen Verteilung und konzentrationsabhängigen Intensität analysiert wird. Man spricht hierbei von röntgenspektroskopischen Methoden der Probencharakterisierung.

Bei radiographischen Methoden wiederum wird die Eigenschaft der unterschiedlichen Abschwächung der Strahlung bei der Durchdringung von inhomogenen Probenkörpern genutzt. Abhängig von der materialspezifischen Absorption im Strahlengang wird ein Schattenbild aufgezeichnet, das Rückschlüsse auf die innere Beschaffenheit der Probe erlaubt. In den letzten Jahren wurde diese Technik für industrielle Anwendungen durch die Computertomographie (CT) erweitert, wie sie in der medizinischen Diagnostik bereits seit langem gebräuchlich ist. Dabei werden vom Probenkörper zweidimensionale Durchstrahlungsprojektionen für viele unterschiedliche Betrachtungswinkel erzeugt, die dann in einem Computer zu einem dreidimensionalen grafischen Objekt rekonstruiert werden. In Visualisierungsprogrammen hat man somit die Möglichkeit, den Probenkörper etwa auf verborgene Fehler zu überprüfen. Im Gegensatz zu medizinischen Anwendungen, wo die gesamte Messeinheit (Röhre und Detektor) um den Patienten gedreht werden muss, ist es für die Werkstoffprüfung ausreichend, die Probe auf einen Drehteller zu platzieren.

Eine in der industriellen CT weit verbreitete Methode der Erstellung von 2D Projektionen ist die Verwendung eines flächigen Szintillator-Matrixdetektors im Kegelstrahl der Röntgenröhre. Ein großer Vorteil dieser Anordnung ist die optimale Ausnützung des Röntgenstrahls, da im Gegensatz zu einem kollimierten Fächerstrahl eine 2D Projektion auf diese Weise in nur einem Schritt erstellt werden kann. Ein weiterer Vorteil ist die verbesserte Auflösung des Probenkörpers durch den Vergrößerungseffekt der Kegelstrahlgeometrie. Der in einer feinen Matrixstruktur aufgebaute Detektor misst die einfallende Intensität der Strahlung an allen Punktelementen der Detektorfläche, und die Ausleseelektronik liefert ein Projektionsbild der Auflösung von z.B. 1024 x 1024 Pixel. Die Rekonstruktion eines 3D Objekts ist jedoch gerade für die Kegelstrahlgeometrie mathematisch sehr aufwendig und daher äußerst empfindlich gegenüber Effekten, die bei der Rückrechnung Artefakte verursachen. Artefakte sind Fehler in der 3D Darstellung des rekonstruierten Objektes aufgrund des Verlusts oder Verfälschung von Information bei der Messung bzw. Projektionserstellung. Physikalische Effekte, die solche Artefakte verursachen können, sind:

- Strahlaufhärtung des polychromatischen Röhrenspektrums infolge energie- und materialabhängiger Absorption in der inhomogenen Probe,
- Streuung (kohärente und inkohärente) der Röntgenstrahlen in der Probe; dies stellt gerade durch die Bestrahlung des gesamten Probenvolumens in der Kegelstrahlgeometrie eine große Herausforderung dar
- Streuung der Röntgenstrahlung entlang des Luftwegs,

- Anregung von Fluoreszenzstrahlung in der Probe,
- Streuung und Reflexion der Strahlung innerhalb des Detektors.

Viele dieser Störfaktoren lassen sich durch entsprechende Instrumentierung und experimentelle Einstellungen reduzieren, etwa durch geeignete Wahl der Röhrenspannung oder den Einsatz von Filter. Die Optimierung aller Messparameter ist für die Qualität des Ergebnisses von hoher Bedeutung. Letztendlich beruht die optimale Parametrisierung aber meist auf der Erfahrung der messenden Person. In Abbildung 1.1 ist zum Vergleich der Auswirkungen entsprechender Instrumentierung jeweils eine CT-Aufnahme mit schlechten und optimierten Parametern zu sehen.

Von großem Interesse ist daher eine möglichst genaue Simulation aller relevanten physikalischen Wechselwirkungen im gesamten Entstehungsprozess einer 2D Projektion, da sie eine hilfreiche Ergänzung wie auch Alternative zur Messung sein kann [chy08]. Auch kann die genaue Kenntnis der wichtigsten Ursachen für Artefakte als Grundlage für Korrekturalgorithmen in der Bildrekonstruktion dienen.

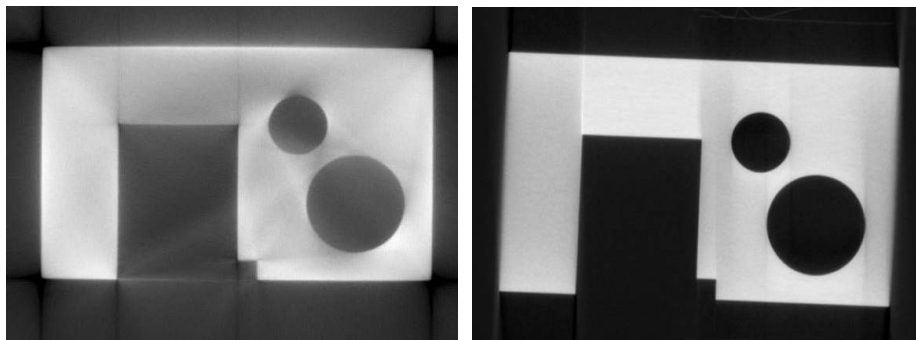


Abbildung 1.1: Beispiel einer CT-Aufnahme mit deutlichen Artefakten (links) und mit optimierter Parametrisierung (rechts) [chy08]

Das Ziel dieser Arbeit ist die möglichst genaue Identifikation und Quantifikation der zuvor genannten Störfaktoren über den Weg der Simulation sowie die Überprüfung der theoretischen Daten, auf die sich die hier vorgestellten Simulationen stützen. Dazu wurden Monte-Carlo-Simulationen und teilweise analytische Berechnungen aller Abschnitte im Entstehungsprozess einer 2D-Projektion in einer CT Anlage unter realistischen Bedingungen für einfache inhomogene Probenkörper erstellt:

1. Röntgenröhre

Berechnung der richtungsabhängigen spektralen Zusammensetzung des Röntgenstrahls innerhalb der kegelförmigen Strahlausbreitung; Überprüfung und Vergleich der theoretischen Modelle zur Vorhersage von Röhrenspektren

2. Probenkörper

Wechselwirkung der Strahlung mit dem Probenkörper; Simulation der kohärenten und inkohärenten Streuung sowie Anregung von Fluoreszenz in beliebiger Anzahl aufeinanderfolgender Wechselwirkungen; Quantifizierung der Streueffekte

3. Detektor

Absorption der Strahlung im Szintillator des Detektors und Ausbreitung durch

Streuung in den verschiedenen Detektorschichten, sowie Streuung durch das Detektorgehäuse; Ermittlung einer theoretischen Eichkurve für die Detektoreffizienz und einer Modulationstransferfunktion (MTF) für den sich durch interne Streuung ergebenden Abbildungsfehler.

Für die Simulationen wurde ein parallelisierbares Monte-Carlo-Programm erstellt, das so konzipiert wurde, dass es auf einem Rechencluster mit mehreren Nodes gleichzeitig gestartet werden kann, da für einige Simulationsanforderungen sehr hohe Rechenzeiten zu erwarten waren. Referenzberechnungen wurden mit einem kommerziell erhältlichen Simulationspaket (MCNP) erstellt. Messungen zur Überprüfung der Ergebnisse wurden an einer CT-Anlage der FH OÖ, Campus-Wels durchgeführt [rei09].

2. Grundlagen

Eine detaillierte Simulation des CT-Verfahrens zur Erfassung der 3D-Information eines Probenkörpers muss aus einer genauen Betrachtung der physikalischen Prozesse von der Strahlungsquelle bis zur Aufzeichnung im Detektor bestehen. Die wesentlichen Abschnitte sind die Erzeugung von Röntgenstrahlen in einer Röntgenröhre, die Entstehung von röntgenographischen Projektionsabbildungen durch Aufzeichnung der 2D-Informationen mittels eines Detektors und die Wechselwirkungen der Strahlung im Detektor selbst.

Die Simulation der von der Röhre emittierten Strahlung erfordert die Kenntnis der Wechselwirkungen zwischen beschleunigten Elektronen und den getroffenen Atomen der Röhren-Anode (Target). Die Erzeugung von Röntgenstrahlung und deren Projektion auf einen Probenkörper kann durch Streuung von Elektronen an den Atomkernen im Target, inelastische Wechselwirkung der Elektronen mit gebundenen Hüllenelektronen und eine Reihe von sekundären Wechselwirkungen beschrieben werden.

Die theoretischen Grundlagen sind der Atomphysik und der Festkörperphysik zuzuordnen und werden in den ersten beiden Kapiteln (2.1, 2.2) beschrieben; einen aktuellen Überblick zur Theorie liefern [ell05],[tho01],[tan77] für Photonen und [dap03],[tan77],[leo94] für Elektronen, aktuelle Methoden bzw. der Stand der Technik vieler analytischer Methoden im Zusammenhang mit Röntgenstrahlung sind in [bec06] beschrieben.

Das darauffolgende Kapitel 2.3 liefert einen Einblick in einige Modelle und Methoden zur analytischen Berechnung von Röntgenspektren, die vereinfachte Algorithmen zur Verfügung stellen.

Die Erfassung der 2D-Projektion der Probe erfolgt durch Messung der Intensitätsverteilung der durch die Probe gestreuten Strahlung im Matrixdetektor. Die Funktionsweise eines solchen Detektors und eines Halbleiterdetektors, der zur Messung von Röhrenspektren und in der Röntgenfluoreszenzanalyse verwendet wird, werden in Kapitel 2.4 beschrieben.

Kapitel 2.5 liefert die Grundlagen der CT als bildgebendes Verfahren. Beschrieben werden das Prinzip der Datenerfassung und der Rekonstruktion der 3D Information der Probe durch

Vorstellung der Methode der gefilterten Rückprojektion. Das Prinzip wird zunächst für den vereinfachten Fall (Parallelstrahl) erläutert und daraufhin auf die hier zugrundeliegende Kegelstrahlgeometrie erweitert. Zum Verständnis der Problemstellung folgt eine Beschreibung der damit verbundenen Artefakte.

2.1. *Streuung und Absorption von Photonen*

Bei der Bestrahlung des Probenkörpers durch Röntgenstrahlen treten Photonen in Wechselwirkung mit den Schalelektronen der Atome; ein Teil der eindringenden Strahlung wird bei der Durchdringung von Materie (photo-)absorbiert oder gestreut und damit dem ursprünglichen Strahl entzogen. Dieser Effekt kann durch das Beer-Lambert'sche Gesetz [bee52] beschrieben werden

$$N = N_0 \cdot e^{-\bar{\mu} \cdot x} \quad (2.1)$$

mit der verbleibenden Photonenzahl N , der ursprünglichen Photonenzahl N_0 , der Wegstrecke x und dem linearen Absorptionskoeffizienten $\bar{\mu}$ [cm^{-1}]; $\bar{\mu}$ entspricht dem Kehrwert der mittleren freien Weglänge und beschreibt die Summe aller Wechselwirkungen, d.h. die Summe der linearen Absorptionskoeffizienten der jeweiligen relevanten Wechselwirkungen,

$$\bar{\mu} = \bar{\tau} + \bar{\sigma}_{\text{coh}} + \bar{\sigma}_{\text{incoh}} \quad (2.2)$$

mit τ für Photoabsorption, σ_{coh} für kohärente Streuung und σ_{incoh} für inkohärente Streuung. In der Literatur werden meistens die Massenabsorptionskoeffizienten [cm^2/g] angegeben [ela02],[bru04]. Der Zusammenhang zum linearen Absorptionskoeffizienten wird dann über die Dichte ρ [g/cm^3] hergestellt. Alternativ werden die atomaren Wechselwirkungsquerschnitte (Wechselwirkungswahrscheinlichkeit je Atom)

$$\mu^{\text{Atom}} = \mu^{\text{Mass}} \cdot \frac{A}{L} \quad (2.3)$$

und analog für τ^{Atom} und σ^{Atom} mit der Einheit *barn/Atom* angegeben, mit dem Atomgewicht A und der Loschmidtschen Zahl L ist A/L die Anzahl der Atome pro Gramm.

Die tabellarisch vorliegenden Absorptionskoeffizienten werden in der MC-Simulation benötigt, um den mittleren in der Probe zurückgelegten Weg der Photonen für jeden Schritt zu berechnen sowie die Wahrscheinlichkeit zu ermitteln, mit der eine der möglichen Wechselwirkungen eintritt. Die gesuchten Absorptionskoeffizienten sind in der Regel nicht exakt aus der Tabelle auszulesen; sie werden daher anhand benachbarter Daten interpoliert. Für die Interpolation erfüllt meist ein kubisches Polynom (spline [knu02],[pre92]) diese Anforderung mit ausreichender Genauigkeit.

Fluoreszenz

Photonen, deren Energie größer als die Bindungsenergie eines Rumpfelektrons ist, können dieses aus seiner Schale schlagen. Die dabei entstehende Vakanz in der Atomhülle wird durch Elektronen aus höheren Schalen nachbesetzt, wobei der diskrete Energieunterschied wieder in Form eines Photons als charakteristische Strahlung abgegeben wird. Solche Übergänge verursachen in erster Linie Dipolstrahlung, für die quantenmechanische Auswahlregeln gelten. Strahlungsübergänge höherer Multipolordnung sind deutlich unwahrscheinlicher, siehe $K\alpha_3$ (KL3 mit $\Delta l=0$) im Vergleich zu $K\alpha_1$ (KL1) und $K\alpha_2$ (KL2) in Tabelle 1. Die Auswahlregeln für Dipolübergänge für die Änderung der Quantenzahlen des Bahndrehimpulses l und des Gesamtdrehimpulses j sind

$$\Delta j = 0 \text{ oder } \Delta j = \pm 1 \text{ für } j > 0, \Delta m = 0, 1, \Delta s = 0 \text{ und } \Delta l = \pm 1 \quad (2.4)$$

Beispiele von Übergangswahrscheinlichkeiten für $K\alpha_1$, $K\alpha_2$ und $K\alpha_3$ bei den Elementen Cu, Mo und W sind (aus Elam [ela02]):

	IUPAC-Symbol	Siegbahn-Symbol	Energie [keV]	Wahrscheinlichkeit
Cu:	K-L1	Ka3	7.88230	3.06271e-04
	K-L2	Ka2	8.02670	2.94269e-01
	K-L3	Ka1	8.04630	5.77108e-01
Mo:	K-L1	Ka3	17.1340	4.23374e-04
	K-L2	Ka2	17.3750	2.88884e-01
	K-L3	Ka1	17.4800	5.50837e-01
W:	K-L1	Ka3	57.4250	2.17130e-04
	K-L2	Ka2	57.9810	2.87705e-01
	K-L3	Ka1	59.3180	5.00601e-01

Tabelle 1: Linien der K-Schale für die Elemente Cu, Mo und W – typische Anodenmaterialien für Röntgenröhren

Der K-L1 Übergang ist ein sogenannter „verbotener Übergang“, da er die Auswahlregeln für Dipolstrahlung verletzt, die Übergangswahrscheinlichkeit ist um etwa einen Faktor 1000 kleiner als bei K-L2 und K-L3.

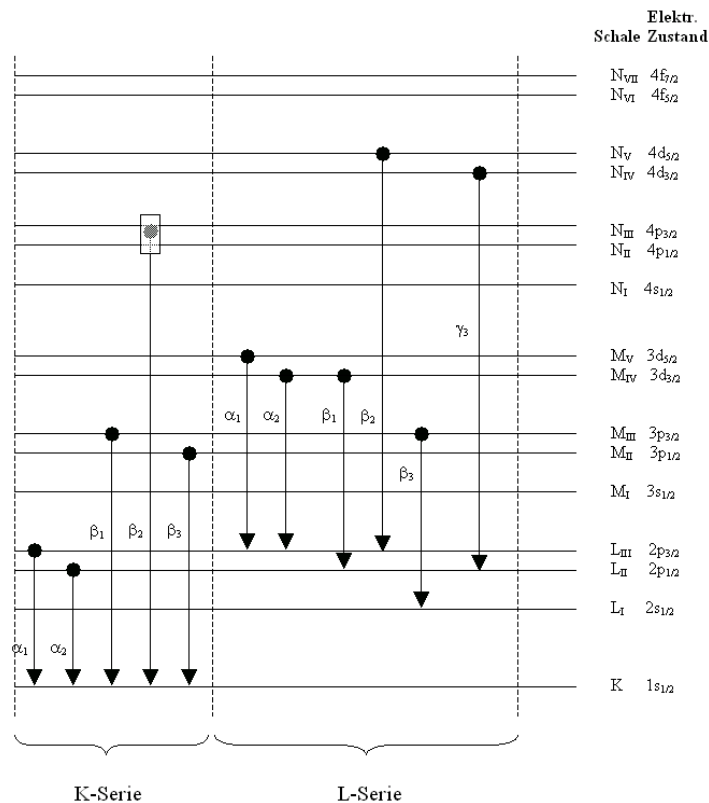


Abbildung 2.1: Darstellung der wichtigsten erlaubten Dipolübergänge der ersten zwei Serien

Strahlungslose Übergänge

Die Besetzung einer Vakanz durch ein Elektron kann statt der Emission charakteristischer Strahlung auch in der Weise erfolgen, dass die frei werdende Energie des nachbesetzenden Elektrons auf ein weiteres Elektron übertragen wird. Der Übergang erfolgt somit strahlungslos in Form von Auger-Elektronen.

Der Auger-Effekt steht in Konkurrenz zur Fluoreszenz und tritt besonders bei leichten Elementen auf; die Summe von Auger-Wahrscheinlichkeit p_{Auger} und Fluoreszenzwahrscheinlichkeit (Fluoreszenzausbeute) ergibt für jede Schale den Wert 1, z.B.

$$p_{K,\text{Auger}} + \omega_K = 1.$$

Der Verlauf der Fluoreszenzausbeute für die Elemente $Z=1$ bis 92 ist in Abbildung 2.2 dargestellt. Die Freisetzung von Elektronen aus der Probe ist jedoch durch die im Vergleich zu Photonen viel kürzeren freien Weglängen in Materie auf die Randschichten des bestrahlten Materials beschränkt.

Strahlungslos sind weiters die Coster-Kronig Übergänge, die im Gegensatz zum Auger-Effekt auf einen strahlungslosen Elektronenübergang innerhalb der zu einer Hauptquantenzahl gehörenden Unterschalen beschränkt sind.

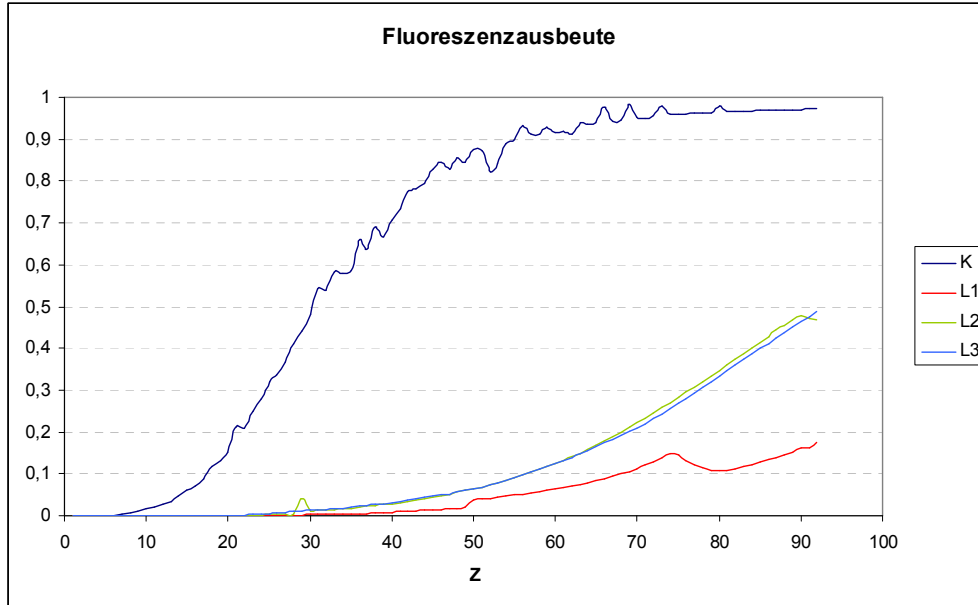


Abbildung 2.2: Fluoreszenzausbeute der Elemente $Z=1-92$ für die Schalen K, L1, L2 und L3. Eigene Rechnung mit Funktionen aus `xraylib` [bru04]

Kohärente Streuung

Die kohärente Streuung eines Photons an einem Elektron ist ein elastischer Prozess. Das gestreute Photon ändert seine Impulsrichtung, jedoch nicht seine Energie und damit auch nicht seine Wellenlänge; es besteht eine feste Phasenbeziehung zum primären Photon, weswegen man von Kohärenz spricht.

Der differentielle Wirkungsquerschnitt für die Streuung eines linear polarisierten Photons an einem freien Elektron (Thomson-Streuung) ist energieunabhängig

$$\left(\frac{\partial \sigma}{\partial \Omega} \right)_T = r_e^2 \cdot (1 - \sin^2 \theta \cdot \cos^2 \phi) \quad \left[\frac{\text{barn}}{\text{atom} \cdot \text{sr}} \right] \quad (2.5)$$

mit dem klassischen Elektronenradius r_e

$$r_e = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 m_e c^2} \quad (2.6)$$

für den Raumwinkel $\partial\Omega = \sin\theta \cdot \partial\theta \cdot \partial\phi$ mit den Streuwinkeln θ , ϕ des Polarisationsvektors.

Der energieabhängige differentielle Streuquerschnitt für kohärente Streuung an gebundenen Elektronen von Atomen (Rayleigh-Streuung) ist

$$\left(\frac{\partial \sigma}{\partial \Omega}\right)_{\text{Rayl}} = \left(\frac{\partial \sigma}{\partial \Omega}\right)_T \cdot |f(Z, q)|^2 \quad \left[\frac{\text{barn}}{\text{atom} \cdot \text{sr}}\right] \quad (2.7)$$

oder

$$\left(\frac{\partial \sigma}{\partial \Omega}\right)_{\text{Rayl}} = \left(\frac{\partial \sigma}{\partial \Omega}\right)_T \cdot |f(Z, q)|^2 \cdot \frac{L}{A(Z)} \cdot 10^{-24} \quad \left[\frac{\text{cm}^2}{\text{g}}\right] \quad (2.8)$$

$$q = \frac{1}{\lambda} \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \quad (2.9)$$

f ...Formfaktor

L ... Loschmidt-Zahl (Avogadro-Konstante)

$A(Z)$...Atomgewicht [g/mol]

Die Stärke der Rayleigh-Streuung nimmt mit fallender Energie und steigender Ordnungszahl zu. Die Richtungsabhängigkeit wird durch den Formfaktor [cha01],[cha01a] beschrieben. Für Energien bis 2keV ist der Formfaktor nahezu unabhängig vom Streuwinkel. Bei größeren Energien nimmt er stark mit dem Streuwinkel ab [tho01].

Inkohärente Streuung

Inkohärente oder Compton-Streuung ist eine inelastische Wechselwirkung zwischen dem einfallenden Photon und einem (freien oder gebundenen) Elektron. Der Impuls des Photons wird teilweise auf das Elektron übertragen, der Energieverlust ist abhängig vom Streuwinkel.

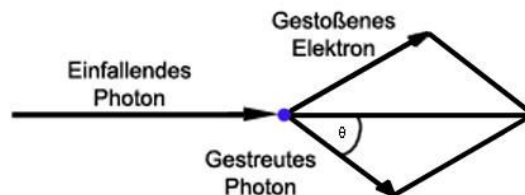


Abbildung 2.3: Schematische Darstellung des Compton-Effekts

Die Änderung der Wellenlänge des Photons $\Delta\lambda$ durch den Compton-Effekt beträgt

$$\Delta\lambda = \frac{h}{m_e c} \cdot (1 - \cos \theta) \quad (2.10)$$

Das Verhältnis zwischen der Energie E vor und E' nach der Streuung beträgt

$$\frac{E'}{E} = \frac{1}{1 + \frac{E}{m_e c^2} \cdot (1 - \cos \theta)} \quad (2.11)$$

$$\text{aus } E = h \nu = \frac{hc}{\lambda}$$

$$E' \leq E$$

mit der Ruhemasse des Elektrons m_e , der Lichtgeschwindigkeit c und dem Streuwinkel θ des Photons. Die inkohärente Streuung polarisierter Photonen an freien Elektronen wird durch die Klein-Nishina Formel beschrieben

$$\left(\frac{\partial \sigma}{\partial \Omega} \right)_{KN} = \frac{r_e^2}{2} \cdot \frac{E'^2}{E^2} \cdot \left(\frac{E}{E'} + \frac{E'}{E} - 2 \sin^2 \theta \cdot \cos^2 \varphi \right) \quad \left[\frac{\text{barn}}{\text{atom} \cdot \text{sr}} \right] \quad (2.12)$$

$$r_e = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 m_e c^2}$$

mit dem klassischen Elektronenradius r_e , den Winkeln θ , ϕ zwischen Polarisationssebene des Photons vor der Streuung und Impuls des Photons nach der Streuung.

Bei Streuung an Atomen gibt das Photon einen Teil seiner Energie an ein schwach gebundenes Hüllenelektron ab. Die Stärke der Compton-Streuung an gebundenen Elektronen nimmt mit steigender Energie der Photonen und fallender Masse der Probeelemente zu.

Für die Streuung an gebundenen Elektronen von Atomen folgt

$$\left(\frac{\partial \sigma}{\partial \Omega} \right)_{Compt} = \left(\frac{\partial \sigma}{\partial \Omega} \right)_{KN} \cdot S(Z, E, \theta) \quad \left[\frac{\text{barn}}{\text{atom} \cdot \text{sr}} \right] \quad (2.13)$$

oder

$$\left(\frac{\partial \sigma}{\partial \Omega} \right)_{Compt} = \left(\frac{\partial \sigma}{\partial \Omega} \right)_{KN} \cdot S(Z, E, \theta) \cdot \frac{L}{A(Z)} \cdot 10^{-24} \quad \left[\frac{\text{cm}^2}{\text{g}} \right] \quad (2.14)$$

S ...Streuungsfunktion

L ... Loschmidt-Zahl (Avogadro-Konstante)

$A(Z)$...Atomgewicht [g/mol]

Bei großen Energien nähert sich der Compton-Wirkungsquerschnitt dem Klein-Nishina-Wirkungsquerschnitt $\sigma_{incoh} \Rightarrow Z\sigma_{KN}$. Bei kleinen Energien und kleinen Streuwinkeln

gewinnen Elektronen-Bindungseffekte an Einfluss und lassen den Compton-Wirkungsquerschnitt σ_{incoh} so stark schrumpfen, sodass kohärente Streuung dominiert [tho01].

Die differentiellen Wirkungsquerschnitte geben die Stärke der Streustrahlung in den Raumwinkel an. Somit werden sie in der MC-Simulation für die Ermittlung der Wahrscheinlichkeit herangezogen, mit der eine Streuung in eine bestimmte Richtung erfolgt.

Zur Illustration der Energie- und Winkelabhängigkeit der verschiedenen Absorptionskoeffizienten und differentiellen Wirkungsquerschnitte sind nachfolgend Plots von Berechnungen für Al und Fe gezeigt (Abbildung 2.4, Abbildung 2.5, Abbildung 2.6 und Abbildung 2.7).

Daraus ist zu erkennen, dass die im Zusammenhang mit den verwendeten Materialien (Fe, Al) bei der industriellen CT verwendeten Energien (einige 100keV) einen hohen Anteil an inkohärenter Streustrahlung im Vergleich zu kohärenter Streuung und Photoabsorption erwarten lassen. Kohärente Streuung wird nur in einem schmalen Bereich um kleine Streuwinkel erwartet. Fluoreszenz wird im Probenmaterial nur aus Randbereichen nahe dem Detektor messbar sein und kann wegen der niedrigen Linienenergien und der geringen Fluoreszenzausbeute (siehe Abbildung 2.2 für $Z=13$) für die MC-Simulation vernachlässigt werden. Die Photoabsorption wird auf jeden Fall berücksichtigt.

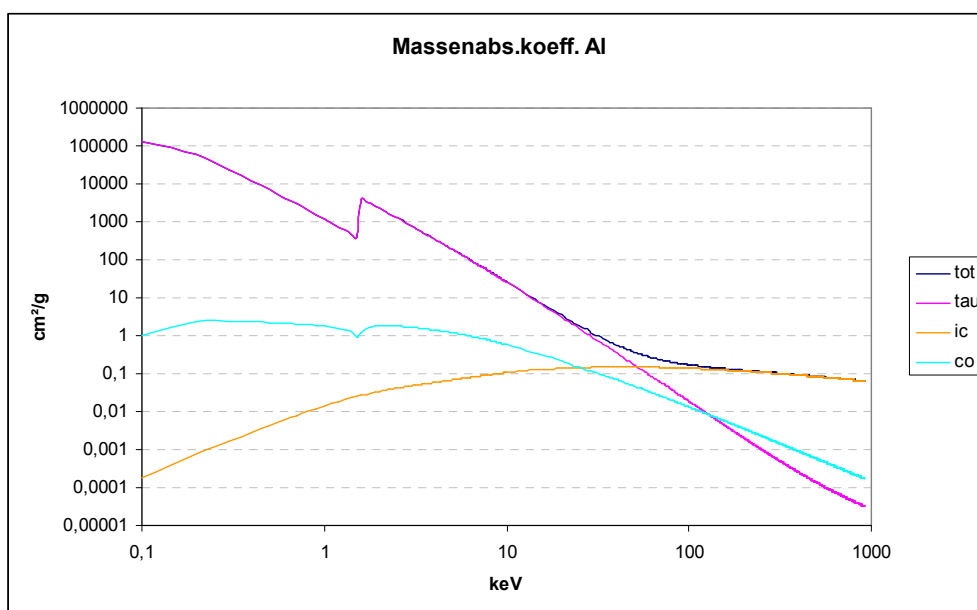


Abbildung 2.4: Darstellung Massenabsorptionskoeffizienten, berechnet für Al als Funktion der Energie, aufgetragen für den Bereich $0,1 - 10^3$ keV. Absorptionskoeffizienten für Rayleighstreuung (co), Comptonstreuung (ic), Photoabsorption (tau), totaler Massenabsorptionskoeffizient (tot). Berechnung mit XCell [man08]

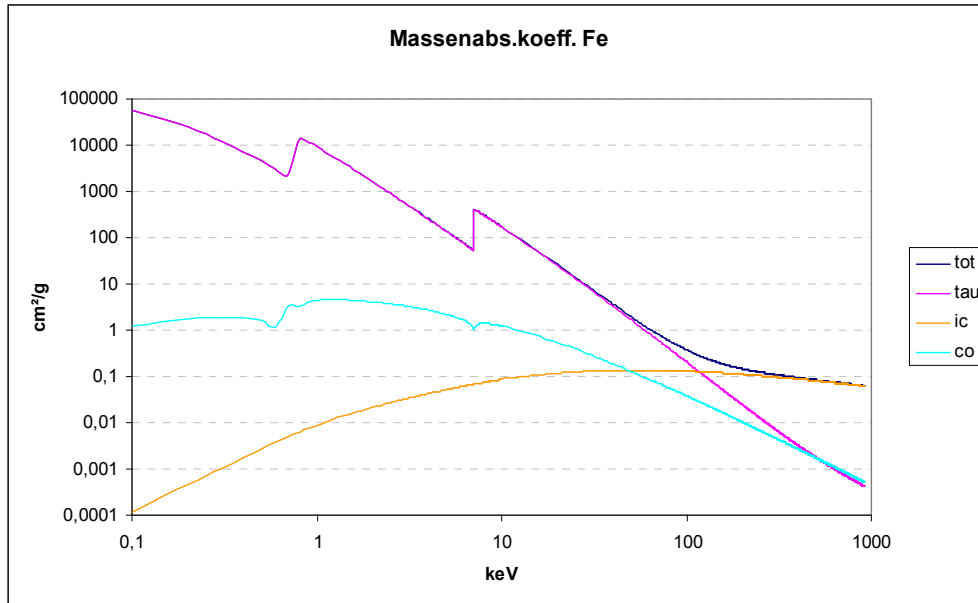


Abbildung 2.5: Darstellung Massenabsorptionskoeffizienten, berechnet für Fe als Funktion der Energie, aufgetragen für den Bereich $0,1 - 10^3$ keV. Absorptionskoeffizienten für Rayleighstreuung (co), Comptonstreuung (ic), Photoabsorption (tau), totaler Massenabsorptionskoeffizient (tot). Berechnung mit XCell [man08]

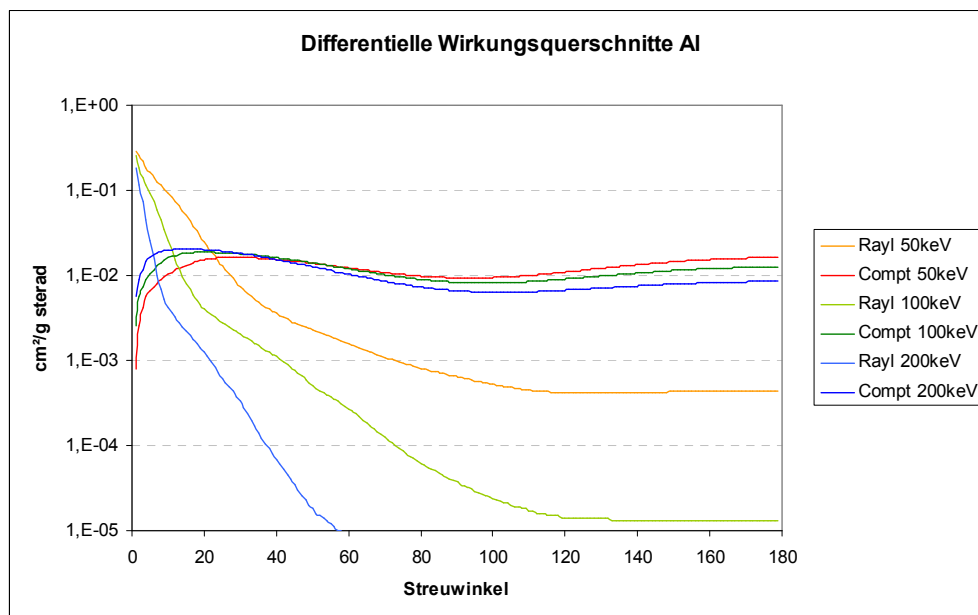


Abbildung 2.6: Vergleich von Rayleigh- und Comptonstreuung an Al bei 50. 100 und 200keV, differentielle Streuquerschnitte für unpolarisierte Strahlung und Streuwinkel von $\theta=0$ (vorwärts) bis $\theta=180$ (rückwärts). Eigene Rechnung mit Funktionen aus `xraylib` [bru04]

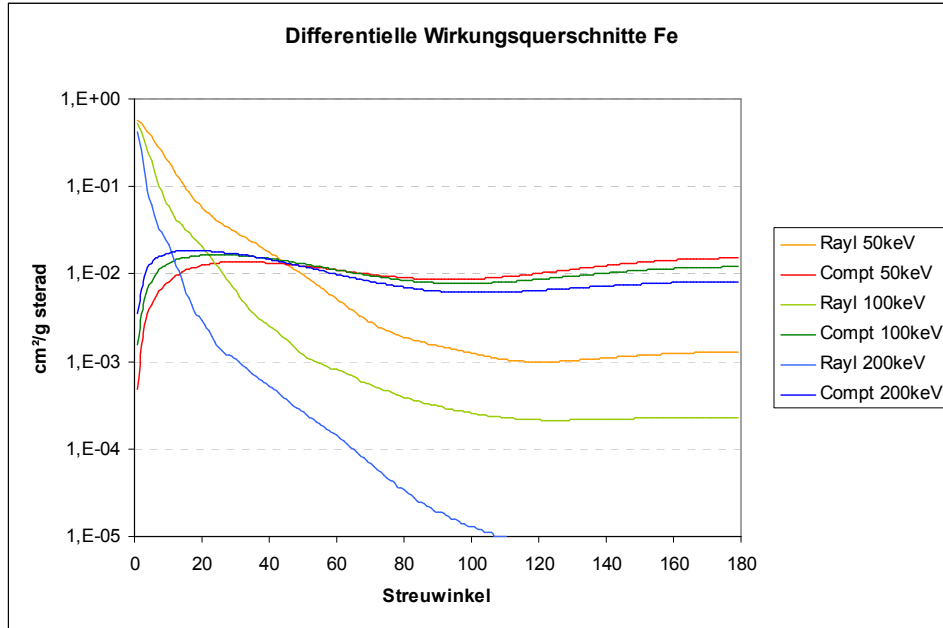


Abbildung 2.7: Vergleich von Rayleigh- und Comptonstreuung an Fe bei 50. 100 und 200keV, differentielle Streuquerschnitte für unpolarisierte Strahlung und Streuwinkel von $\theta=0$ (vorwärts) bis $\theta=180$ (rückwärts). Eigene Rechnung mit Funktionen aus `xraylib` [bru04]

Die Formeln (2.5) und (2.12) können auch für unpolarisierte Strahlung angegeben werden, wie sie aus Röntgenröhren emittiert wird. Für die korrekte Modellierung von Zwei- und Mehrfachstreuung in der MC-Simulation wird jedoch der differentielle Wirkungsquerschnitt für polarisierte Strahlung benötigt. Die anfängliche Polarisationssebene wird für jedes simulierte Photon neu gewählt.

Analytische Formeln

Ausgehend von einem Strahl mit der spektralen Häufigkeitsverteilung $N_0(E)$, der in eine homogene Probe unter dem Winkel ψ_1 bis zur Tiefe dx eindringt und unter dem Winkel ψ_2 die Probe wieder verlässt, kann man für die Zählrate, die den Detektor unter dem Raumwinkel Ω erreicht, die Formel (2.15) angeben. Strahlungsquelle und Detektor befinden sich dabei auf der gleichen Seite relativ zur Probe.

$$dN_i = -N_0(E) \cdot \frac{\Omega}{4\pi \cdot \sin \psi_1} \cdot \rho \cdot c_i \cdot \frac{S_i - 1}{S_i} \cdot \omega_i \cdot p_{Ki} \cdot \tau_i(E) \cdot \exp\left(-x \cdot \left(\frac{\bar{\mu}(E)}{\sin \psi_1} + \frac{\bar{\mu}(E_i)}{\sin \psi_2}\right)\right) \cdot dx \quad (2.15)$$

Im Falle von Durchstrahlung ändert sich lediglich der Exponent darin zu

$$\exp\left(-x \cdot \left(\frac{\bar{\mu}(E)}{\sin \psi_1} - \frac{\bar{\mu}(E_i)}{\sin \psi_2}\right) - D \frac{\bar{\mu}(E_i)}{\sin \psi_2}\right) \quad (2.16)$$

mit der Probendicke D . Für kohärente und inkohärente Streuung ist der Ausdruck (2.17) durch (2.18) zu ersetzen, E_i mit E für kohärente Streuung respektive mit E_{compt} für inkohärente Streuung und die Integration nach $d\Omega$ zu erweitern.

$$\frac{S_i - 1}{S_i} \cdot \omega_i \cdot p_{K_i} \cdot \tau_i(E) \quad (2.17)$$

$$\frac{d\sigma_{\text{coh, incoh}}}{d\Omega} \quad (2.18)$$

Die einzelnen Ausdrücke in (2.15) sind:

- ρ die Dichte der Probe resultierend aus $\frac{1}{\rho} = \sum_i \frac{c_i}{\rho_i}$ mit der Konzentration c_i und der Dichte ρ_i der Probenkomponente i . Dieser Index gilt genauso für alle weiteren Ausdrücke)
- S_i der Sprungfaktor aus den Kantensprüngen der Absorptionskanten aller Elektronenschalen resultierend aus den jeweiligen Absorptionskoeffizienten, z.B. für die K-Schale

$$S_K = \frac{\tau_K + \tau_{L1} + \tau_{L2} + \tau_{L3} + \tau_{M1} \dots}{\tau_{L1} + \tau_{L2} + \tau_{L3} + \tau_{M1} \dots} = \frac{\tau}{\tau - \tau_K} \quad (2.19)$$

- die Fluoreszenzausbeute ω_i (siehe Abbildung 2.2) für $\omega_K, \omega_{L1}, \omega_{L2}, \omega_{L3}$
- die Linien-Emissionswahrscheinlichkeit p_i z.B. für $p_{K\alpha}, p_{K\beta}, \dots$ für das jeweilige Element
- den Photoabsorptionskoeffizienten τ_i
- den linearen totalen Absorptionskoeffizienten $\bar{\mu}$ aus der Beziehung

$$\bar{\mu} = \sum_i \left(\bar{\mu}_i \cdot \frac{c_i \cdot \rho}{\rho_i} \right) \quad (2.20)$$

Der Index i bezeichnet je nach Zusammenhang das analysierte Element, die analysierte Linie, die zu dieser Linie gehörige Übergangswahrscheinlichkeit, Absorptionskante usw. Für ein analytisches Ergebnis und monochromatischer Anregungsstrahlung muss (2.15) nach dx integriert werden. Je nach Anwendung kann man das Integral vereinfachen und man erhält die

- Dünnschichtnäherung für die Dicke T:

$$N_i = N_0(E) \cdot \frac{\Omega}{4\pi \cdot \sin \psi_1} \cdot c_i \cdot \frac{S_i - 1}{S_i} \cdot \omega_i \cdot p_i \cdot \tau_i(E) \cdot \frac{1 - \exp\left(-T \cdot \rho \cdot \left(\frac{\mu(E)}{\sin \psi_1} + \frac{\mu(E_i)}{\sin \psi_2}\right)\right)}{\frac{\mu(E)}{\sin \psi_1} + \frac{\mu(E_i)}{\sin \psi_2}} \quad (2.21)$$

und die

- Näherung für kompaktes Material (unendlich dicke Schichten) natürlich nur für Rückstreuung:

$$N_i^{at\ surface} = \frac{\Omega}{4\pi \cdot \sin \psi_1} \cdot c_i \cdot \frac{S_i - 1}{S_i} \cdot \omega_i \cdot p_i \cdot \frac{N_0(E) \cdot \tau_i(E)}{\frac{\mu(E)}{\sin \psi_1} + \frac{\mu(E_i)}{\sin \psi_2}} \quad (2.22)$$

In der Literatur findet man oft die Abkürzung

$$\tilde{\mu} = \tilde{\mu}(i) = \frac{\mu(E)}{\sin \psi_1} + \frac{\mu(E_i)}{\sin \psi_2} \quad (2.23)$$

Für polychromatische Strahlung ist (2.22) noch nach dE zu integrieren oder nach ΔE aufzusummieren (2.24).

$$N_i = \frac{\Omega}{4\pi \cdot \sin \psi_1} \cdot c_i \cdot \frac{S_i - 1}{S_i} \cdot \omega_i \cdot p_i \cdot \int_{E=E_i-Edge}^{E_{max}} \frac{\tau_i(E)}{\tilde{\mu}} \cdot N_0(E) \cdot dE \quad (2.24)$$

$$N_i = \frac{\Omega}{4\pi \cdot \sin \psi_1} \cdot c_i \cdot \frac{S_i - 1}{S_i} \cdot \omega_i \cdot p_i \cdot \sum_{E_i-Edge}^{E_{max}} \frac{\tau_i(E)}{\tilde{\mu}} \cdot N_0(E) \cdot \Delta E$$

Ein Problem, das auf analytischem Weg in der Simulation nur mehr schwer bis gar nicht kontrollierbar ist, ist die Strahldivergenz des Röntgenstrahls. In Abbildung 2.8 ist die Strahldivergenz einer Röntgenröhre und die dadurch resultierenden unterschiedlichen Einfallswinkel dargestellt. Im analytischen Rechenmodell wird von nur einem Einfallswinkel ausgegangen, innerhalb der bestrahlten Fläche variiert dieser aber aufgrund der kegelförmigen Ausdehnung des Strahls. Der Strahl besitzt dazu noch in jeder Richtung eine etwas andere spektrale Häufigkeitsverteilung und Intensität. Zur Veranschaulichung der Intensitätsverteilung wurde im Probenträger eines Röntgenspektrometers ein Film durch dessen Röntgenröhre bestrahlt, der in Abbildung 2.9 zu sehen ist. Weitere Probleme werden durch die Einflüsse von Streuungen sekundärer und höherer Ordnung, Aggregatzustand, Korngröße und Oberflächenrauigkeit der Probe verursacht. Eine hinreichend genaue Simulation ist in diesen Fällen nur mehr über die Monte-Carlo Methode möglich.

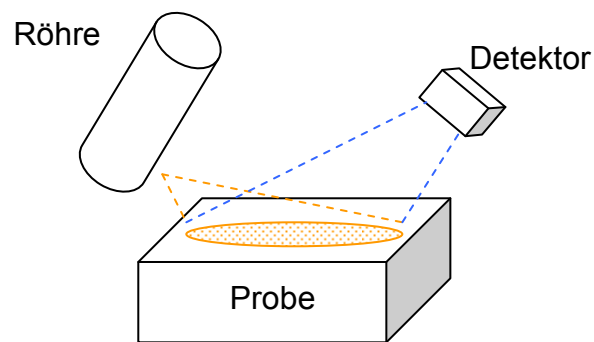


Abbildung 2.8: Schematische Abbildung der Bestrahlung einer Probe bei der Röntgenfluoreszenzanalyse durch einen divergenten Röntgenstrahl

Die eben beschriebenen Formeln sind ein wesentlicher Bestandteil zur Beschreibung der charakteristischen Strahlung in Modellen zur Berechnung von Röntgenröhrenspektren. Röntgenfluoreszenz spielt auch bei der MC-Simulation der Durchstrahlung eine Rolle, wenn auch nicht eine dominante, da der Anteil der messbaren Fluoreszenzstrahlung nur aus äußeren Randschichten stammen können.



Abbildung 2.9: Filmaufnahme der Intensitätsverteilung des primären Röntgenstrahls in einem Röntgenspektrometer wie in Abbildung 2.8

2.2. Streuung von Elektronen

Freie Elektronen werden in Materie durch Streuung an Atomkernen oder Rumpfelektronen abgebremst. Bei einem inelastischen Stoß verringert sich die Energie des freien Elektrons durch Anregung von Rumpfelektronen (Ionisierung oder Inter-/Intrabandübergänge im Festkörper), bei Streuprozessen durch Abgabe von Bremsstrahlung. Paarbildung erfolgt erst bei Energien jenseits von 1 MeV und wird daher hier nicht weiter behandelt. Anregung von Phononen (im Kristallgitter) oder Plasmaschwingungen ist ebenfalls möglich. Das Elektron kann auch als elastisch gestreut beschrieben werden, was jedoch genau genommen physikalisch nicht möglich ist. Da nämlich eine Richtungsänderung eines geladenen Teilchens immer mit der Aussendung von Bremsstrahlung verbunden ist, verringert sich auch hier die kinetische Energie des Elektrons. Dieser Effekt ist allerdings bei den in dieser Arbeit vorkommenden Energien kaum von Relevanz. In jedem Fall wird die Stärke der Wechselwirkungen wie für Photonen in den letzten Kapiteln beschrieben durch Wirkungsquerschnitte ausgedrückt.

Elastische Streuung

Bei der elastischen Streuung an einem Atom wird ein Elektron primär durch das Coulombfeld des Atomkerns von seiner ursprünglichen Ausbreitungsrichtung abgelenkt. Die Herleitung eines differentiellen Wirkungsquerschnitts für die elastische Streuung von geladenen Teilchen erfolgte zuerst durch Rutherford [rut11] auf klassischem Wege nach Streuexperimenten mit α - und β -Strahlen an dünnen Metallfolien und unter der Annahme von Erhaltungssätzen für Energie und Drehimpuls. Die Formel für den Rutherford-Streuquerschnitt lautet

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Z_1 Z_2 e^2}{4E_0} \right)^2 \frac{1}{\sin^4\left(\frac{\theta}{2}\right)} \quad (2.25)$$

mit der Dielektrizitätskonstante ϵ_0 , den Ladungszahlen Z_1 und Z_2 der Stoßpartner, der Elementarladung e , der Anfangsenergie des gestreuten Teilchens E_0 und dem Streuwinkel θ zur ursprünglichen Bewegungsrichtung.

Weder Abschirmeffekt der äußeren Elektronen noch der Elektronenspin sind dabei noch berücksichtigt. Durch Einführung eines Potentials entsprechend dem Atommodell von Wentzel [wen27]

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} e^{-r/R} \quad (2.26)$$

mit

$$R = a_H Z^{-1/3} \quad a_H \dots \text{Bohrradius} \quad (2.27)$$

wird dem Umstand der Abschirmung äußerer Bahnen Rechnung getragen. Durch Anwendung der ersten Born'schen Näherung erhält man somit bei der Herleitung den

differentiellen Wirkungsquerschnitt für die abgeschirmte Rutherford-Streuung („screened Rutherford scattering“)

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{Ze^2}{8\pi\epsilon_0 E} \right)^2 \frac{1}{(1 - \cos\theta + 2\alpha)^2} \quad (2.28)$$

mit dem Abschirmparameter α .

$$\alpha = \frac{1}{2K^2 R^2} \quad (2.29)$$

K ist die Wellenzahl des Elektrons aus der Beziehung

$$E = \frac{\hbar^2 K^2}{2m} \quad (2.30)$$

Wie man sehen kann, geht (2.28) für den Grenzfall $\alpha=0$ in die Rutherford-Formel (2.25) über und ist eine gute Näherung für leichte Elemente und Elektronenenergien ab 10keV. Für Streuung von nichtrelativistischen Elektronen an schweren Elementen muss man das Problem quantenmechanisch exakt lösen und kommt damit auf den differentiellen Streuquerschnitt von Mott [mot65].

Wie eingangs erwähnt durchläuft ein Elektron in Materie sehr viele Stöße, bis es absorbiert ist oder sie wieder verlässt. Die Rutherford-Formel wird für kleine Winkel sehr groß; der totale Streuquerschnitt divergiert bei $\theta=0$, was für eine Beschreibung vieler Stöße ein Problem darstellt. Goudsmit und Saunderson [gou40] versuchten dieses Problem für dünne Schichten mit einem alternativen mathematischen Konzept zu umgehen, das für die gestreuten Elektronen eine statistische Winkelverteilung angibt. Diese Theorie wurde eine wichtige Basis für viele Simulationsprogramme, darunter das im Rahmen dieser Arbeit auch verwendete MCNP [mcn03].

Bremsstrahlung bei elastischer Streuung

Wird das Elektron inelastisch gestreut, gibt es einen Teil seiner kinetischen Energie in Form von Anregung des Zustands des Streupartners oder unter Aussendung von Bremsstrahlung ab. Die bei der Beschleunigung durch Richtungsänderung ausgesandte Bremsstrahlung kann für ein freies Elektron basierend auf der Larmorschen Formel [lar97] berechnet werden

$$\begin{aligned} \frac{dP}{d\Omega} &= \frac{q^2}{(4\pi)^2 c \epsilon_0} \dot{\beta}^2 \sin^2 \theta \\ P &= \frac{q^2}{6\pi c \epsilon_0} \dot{\beta}^2 \end{aligned} \quad (2.31)$$

mit der Abstrahlungsleistung P , der Ladung q , Lichtgeschwindigkeit c , Dielektrizitätskonstante ϵ_0 , der Beschleunigung $\dot{\beta}$ und dem Winkel θ zwischen Beschleunigungsvektor und Ausstrahlungsrichtung.

Die Larmorsche Formel findet z.B. bei der Berechnung von Synchrotronstrahlung Anwendung. Bremsstrahlung bei elastischer Streuung mit Energien unter der Größenordnung von $< \text{MeV}$ kann jedoch vernachlässigt werden; die in dieser Arbeit behandelten Prozesse finden bei Energien der maximalen Größenordnung von $\sim 100 \text{ keV}$ statt. Gemäß Berechnungen von Seltzer [sel82] ist bei etwa 100 keV und leichten Elementen mit einem Anteil an Bremsstrahlung von etwa $0,1\%$ zu rechnen; bei schweren Elementen bis etwa 1% .

Anregung des Atoms durch inelastische Streuung

Der hier in Frage kommende Prozess ist die Ionisierung durch Herausschlagen eines Rumpfelektrons aus kernnahen Schalen (K, L). Dies hat die Erzeugung von kontinuierlicher Bremsstrahlung und charakteristischer Fluoreszenzstrahlung zur Folge sowie die Freisetzung von sekundären Elektronen.

Alle anderen inelastischen Wechselwirkungen (Elektron-Positron-Paarbildung, Anregung von Molekülschwingungen, Gitterschwingungen, Plasmaschwingungen und Bandübergänge äußerer Elektronen) werden hier nicht näher betrachtet, weil die entsprechenden Prozesse entweder nicht möglich (Paarbildung) oder energetisch nicht relevant sind. In Abbildung 2.10 sind die Wirkungsquerschnitte für inelastische Streuung von Elektronen in Fe und C für Energien bis 50 keV aus drei unterschiedlichen Referenzen dargestellt.

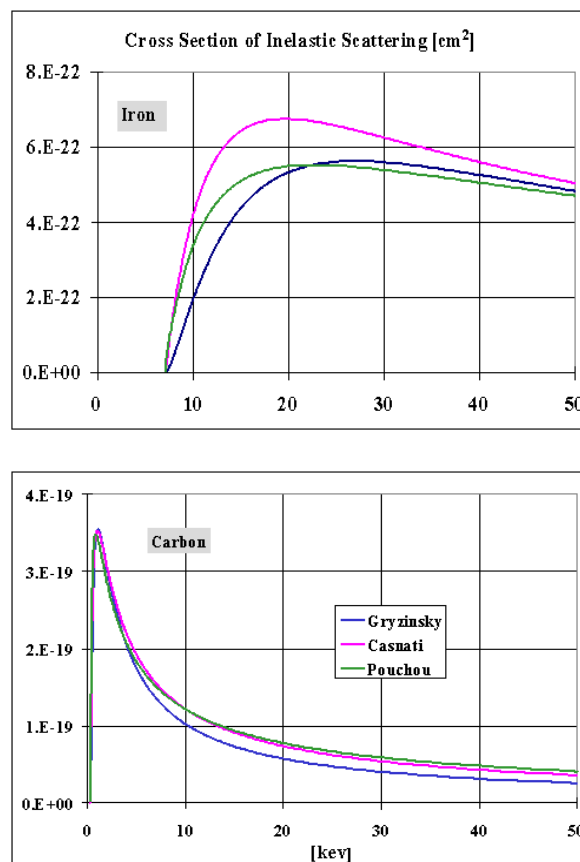


Abbildung 2.10: Wirkungsquerschnitte für inelastische Elektronenstreuung in Fe und C aus drei unterschiedlichen Referenzen [gry65],[cas83],[pou91]

Sowohl die numerischen Daten als auch die theoretischen Formeln weichen stark von einander ab. Die Wahrscheinlichkeit für inelastische Stöße gegenüber elastischen Stößen ist sehr gering. Eine Möglichkeit beide Effekte zu modellieren ist die Continuous Slowing Down Approximation.

Continuous Slowing Down Approximation

Die mittlere freie Weglänge von Elektronen in Materie ist um einige Größenordnungen geringer als die von Photonen; die Anzahl an Stößen, die zur Energieabnahme führen, ist groß. Die Modellierung über diskrete Einzelstöße wäre somit unpraktisch und mathematisch sehr aufwendig.

Eine vereinfachende Annahme zur theoretischen Beschreibung der inelastischen Streuung ist die Continuous Slowing Down Approximation (CSDA). Hierbei wird davon ausgegangen, dass das Elektron beim Durchdringen von Materie kontinuierlich Energie abgibt. Bethe führte dazu den Energieverlust pro Wegstrecke für geladene Teilchen ein [bet30], die Stopping Power

$$S(E) = -\frac{dE}{ds} \quad (2.32)$$

Für nichtrelativistische Elektronen [bet33],[bet34] wurde die Stopping Power zu

$$S(E, Z) = \frac{1}{\rho} \frac{dE}{ds} = -\frac{e^4}{8\pi\epsilon_0^2} \frac{ZN_A}{AE} \ln \frac{1.1658E}{J} \quad (2.33)$$

mit der Dichte ρ des Elements Z , Loschmidtzahl N_A (Avogadrokonst.), Massenzahl A und einem mittleren Ionisierungspotential J .

Das Konzept der CSDA ist Grundlage für viele Theorien; die wichtigsten davon (für die im Rahmen dieser Arbeit auch verwendete Monte-Carlo Software MCNP [mcn03]) stammen von Landau [lan44] und wurden von Blunck und Leisegang [blu50] erweitert. Wesentlich dabei ist, dass der Energieverlust jeweils nach vielen Stoßprozessen Schwankungen aufweist und durch eine statistische Verteilung beschrieben werden kann.

In Abbildung 2.11 ist eine 3D-Visualisierung einer Monte-Carlo-Simulation von Elektronentrajektorien zu sehen, die mittels diskreter Wechselwirkungen berechnet wurden.

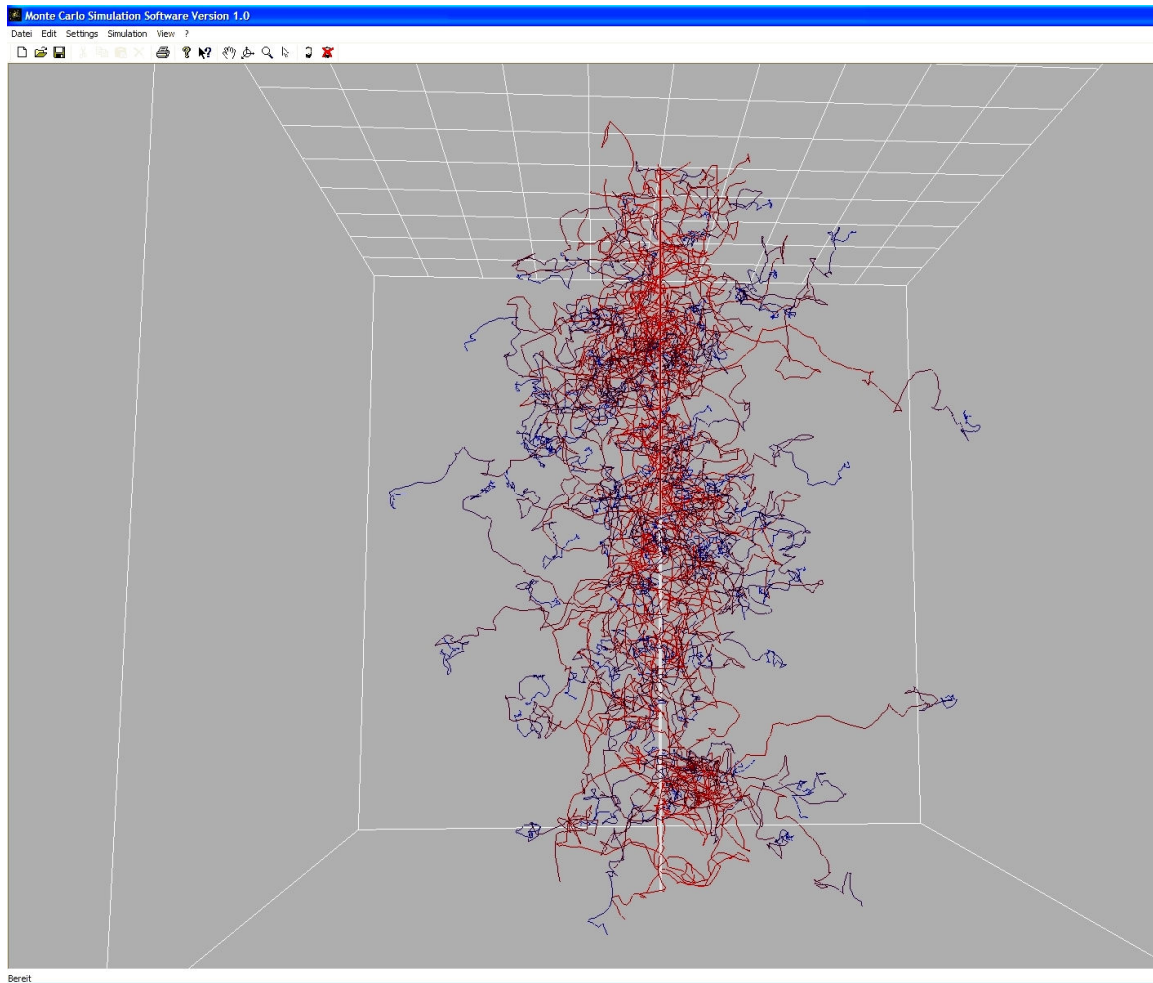


Abbildung 2.11: Screenshot einer 3D-Visualisierung einer Monte-Carlo Simulation zur Berechnung von Elektronentrajektorien bei der Streuung in Materie. Die Elektronen sind Photoelektronen und Augerelektronen, die entlang eines dünnen Strahls durch primäre Photoionisation emittiert werden [man09].

2.3. Modellierung von Röntgenstrahlung aus Röhren

Im starken elektrischen Feld einer Röntgenröhre werden Elektronen im Vakuum zum Target (Anode) hin beschleunigt und dort durch Kollision wieder stark abgebremst. Typische Elemente für das Targetmaterial sind Kupfer (Cu), Molybdän (Mo), Rhodium (Rh) und Wolfram (W), die angelegte Beschleunigungsspannung beträgt einige 10kV (in der Medizin) bis mehrere 100kV (industrielle Messtechnik).

Das Abbremsen der Elektronen erfolgt wie zuvor beschrieben durch unzählige elastische und inelastische Stöße mit den Atomen des Targetmaterials, solange bis die kinetische Energie des Elektrons aufgebraucht ist. Die Eindringtiefe der Elektronen beträgt abhängig von Material und Spannung bis zu etwa 200 μm , bei W und 200kV sind das z.B. ungefähr 60 μm (Abschätzung aus Eindringtiefe in Pb [bil72] korrigiert auf die Dichte von W). Die bei jedem Stoß entstehende Bremsstrahlung wird beim Austritt aus dem Target abhängig von der Richtung und damit von der zu durchdringenden Wegstrecke durch Absorption abgeschwächt (siehe Abbildung 2.12). Zusätzlich wird dabei charakteristische Strahlung

durch Photoabsorption und daraus resultierender Fluoreszenz erzeugt (siehe Kapitel 2.1). Auch die Sekundäranregung durch Bremsstrahlung trägt zur Anregung charakteristischer Strahlung bei. Die Energien für die Linien der K-Schale typischer Anodenmaterialien sind in Tabelle 1 (Kapitel 2.1) aufgezählt.

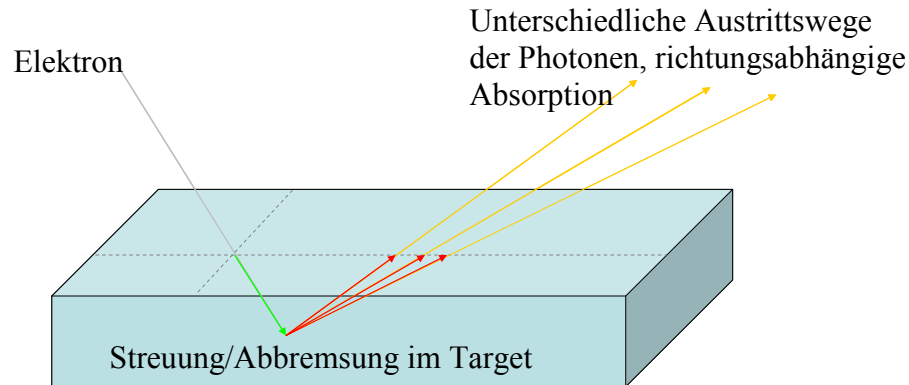


Abbildung 2.12: Schematische Darstellung der Erzeugung von Bremsstrahlung im Targetmaterial (Anode) einer Röntgenröhre, deren Intensität durch den richtungsabhängigen Austrittsweg verringert wird

Kontinuierliche Bremsstrahlung

Die kontinuierliche spektrale Verteilung $N(\lambda)$ der Bremsstrahlung kann nach Kramers [kra23] wie folgt angegeben werden

$$N(\lambda) = K \cdot I \cdot Z \cdot \left(\frac{\lambda}{\lambda_{\min}} - 1 \right) \cdot \frac{1}{\lambda^2} \quad (2.34)$$

mit der Kramerschen Konstanten K , dem Strom I und der Ordnungszahl Z des Anodenmaterials. Dabei ist die Grenzwellenlänge $\lambda_{\min}$ der größtmöglichen Elektronenenergie über den Zusammenhang

$$E = h\nu = eU = \frac{hc}{\lambda} \quad (2.35)$$

$$\lambda = \frac{hc}{eU} \quad (2.36)$$

mit der an der Röhre angelegten Spannung U verknüpft und somit über die Faustregel

$$\lambda_{\min, [nm]} = \frac{1,24}{U_{[kV]}} \quad (2.37)$$

abschätzbar.

h ...Planksches Wirkungsquantum

c ...Lichtgeschwindigkeit
 e ...Elementarladung
 ν ...Frequenz

Charakteristische Strahlung

Neben der kontinuierlichen Bremsstrahlung wird im Röhrenspektrum auch charakteristische Strahlung erzeugt, welche ihre Ursache in der Anregung von Fluoreszenz im Targetmaterial hat. Die Fluoreszenz kann einerseits durch den Elektronenstrahl verursacht werden (siehe Kapitel 2.2, Anregung des Atoms durch inelastische Streuung) oder durch den energiereicheren Teil der Bremsstrahlung.

Eine analytische Methode zur Vorhersage der Linienintensitäten aus der K-Schale wurde von Green & Cosslett entwickelt [gre61] und findet in vielen Modellen zur Berechnung der spektralen Verteilung von Röntgenstrahlung Anwendung. Neuere semiempirische Modelle zur Beschreibung von Röntgenröhrenspektren stammen von Pella et al. [pel85] und darauf aufbauend Ebel et al. mit verbesserter Genauigkeit der Vorhersage von Linienintensitäten der L und M-Serie [pel91], [ebe06].

Analytische Modelle zur Berechnung von Röhrenspektren

Die Bremsstrahlung entspringt einem birnenförmigen räumlichen Bereich im Targetmaterial nahe der Oberfläche (siehe Abbildung 2.13) in dicken Targets, in den die Elektronen eindringen können. Die charakterisierende Absorption der Bremsstrahlung beim Austritt aus der Probe geht also auf jeden Punkt in diesem Eindringbereich zurück.

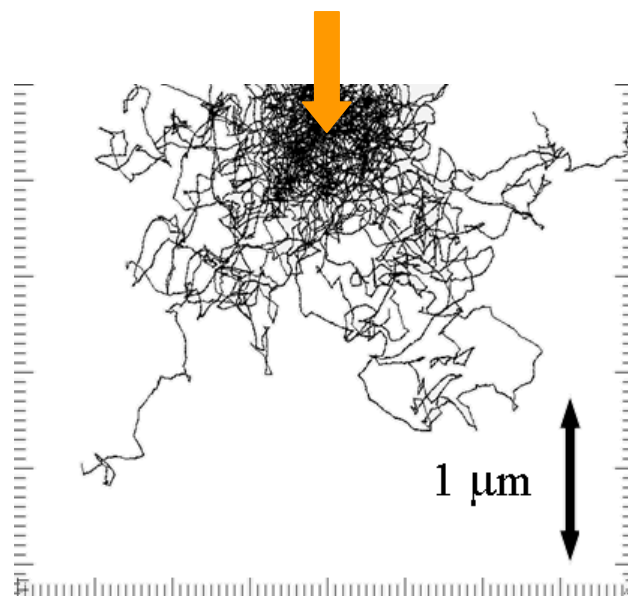


Abbildung 2.13: Pfade von Elektronen, die senkrecht von oben in einen Festkörper eindringen, berechnet mittels Monte-Carlo Simulation für 100 Elektronen und 10kV [man09]

In vielen Modellen zur Vorhersage der Röhrenstrahlung wird dieser Eindringbereich auf einen einzigen Punkt im Target vereinfacht, der energieabhängigen mittleren Eindringtiefe, um bis zu dieser eine Tiefenverteilungsfunktion zu definieren.

In der Literatur sind für solche Modelle verschiedene angegeben wie z.B. von

- Pouchou und Pichoir [pou91]
- Love und Scott [ebe92],[sew85]
- Sewell et al. [sew85]
- Ebel [ebe05],[ebe06]
- Pella [pel85]

Schoßmann et al. [sch97] verglichen diese Modelle untereinander, wobei sich herausstellte, dass das Modell von Love und Scott trotz der Vereinfachungen, die darin getroffen wurden, die geringsten Abweichungen aufweist.

Modell von Ebel

Im Modell von Ebel [ebe05],[ebe06] wird die Tiefenverteilungsfunktion von der Oberfläche bis zur Tiefe $2\rho z$ als konstant angenommen. Die kontinuierliche spektrale Verteilungsfunktion wird wie folgt angegeben

$$dN(E) = \text{const} \cdot \Omega \cdot i \cdot t \cdot Z \cdot \left(\frac{E_0}{E} - 1 \right)^x \cdot f_{\text{abs,cont}} \cdot dE \quad (2.38)$$

Mit der Photoabsorption der Strahlung bei Einfallswinkel ϕ und Austrittswinkel ε

$$\chi = \frac{\tau_{E,j} \sin \phi}{\sin \varepsilon} \quad (2.39)$$

Folgt für den Absorptionsparameter f

$$f_{\text{abs,cont}}(\chi) = \frac{1 - \exp(-2\chi \overline{\rho z})}{2\chi \overline{\rho z}} \quad (2.40)$$

mit der mittleren Eindringtiefe

$$\overline{\rho z} = \rho z_m \frac{0.49269 - 1.0987\eta + 0.78557\eta^2}{0.70256 - 1.09865\eta + 1.0046\eta^2 + \ln U_0} \ln U_0 \quad (2.41)$$

$$\rho z_m = \frac{A}{Z} \left(0.787 \cdot 10^{-5} \sqrt{J} E_0^{3/2} + 0.735 \cdot 10^{-6} E_0^2 \right) \quad (2.42)$$

$$U_0 = \frac{E_0}{E} \quad , \quad J = 0.0135 \cdot Z \quad , \quad \eta = E_0^m e^c$$

$$m = 0.1382 - \frac{0.9211}{\sqrt{Z}} \quad (2.43)$$

$$e^c = 0.1904 - 0.2236 \ln Z + 0.1292 (\ln Z)^2 - 0.0149 (\ln Z)^3$$

$$const = 1.35 \cdot 10^9 (sr^{-1} mA^{-1} s^{-1} keV^{-1})$$

$$x = 1.109 - 0.00435Z + 0.00175E_0 \quad (2.44)$$

Das charakteristische Spektrum folgt daraus zu

$$N_{jkl} = Const_{jkl} \cdot \Omega \cdot i \cdot t \cdot R \cdot \frac{1}{S_{jk}} \cdot \bar{\omega}_{jk} \cdot p_{jkl} \cdot f_{abs,jkl} \quad (2.45)$$

mit

$$R = 1 - 0.0081517 \cdot Z + 3.613 \cdot 10^{-5} \cdot Z^2 + 0.009583 \cdot Z \cdot e^{-U_0} + 0.001141 \cdot E_0$$

$$\frac{1}{S_{jk}} = \frac{z_k b_k}{Z} (U_0 \ln U_0 + 1 - U_0) \cdot \left[1 + 16.05 \sqrt{\frac{J}{E_{jk}}} \cdot \frac{\sqrt{U_0} \ln U_0 + 2(1 - \sqrt{U_0})}{U_0 \ln U_0 + 1 - U_0} \right]$$

$$\chi = \frac{\tau_{E_{jkl},j} \sin \varphi}{\sin \varepsilon}$$

$$f_{abs,jkl}(\chi) = \frac{1 - \exp(-2\chi \overline{\rho z})}{2\chi \overline{\rho z}}$$

$$\overline{\rho z} = \rho z_m \frac{0.49269 - 1.0987\eta + 0.78557\eta^2}{0.70256 - 1.09865\eta + 1.0046\eta^2 + \ln U_0} \ln U_0$$

$$\rho z_m = \frac{A}{Z} \left(0.787 \cdot 10^{-5} \sqrt{J} E_0^{3/2} + 0.735 \cdot 10^{-6} E_0^2 \right)$$

$$U_0 = \frac{E_0}{E} \quad , \quad J = 0.0135 \cdot Z \quad , \quad \eta = E_0^m e^c$$

$$m = 0.1382 - \frac{0.9211}{\sqrt{Z}}$$

$$e^c = 0.1904 - 0.2236 \ln Z + 0.1292 (\ln Z)^2 - 0.0149 (\ln Z)^3$$

Zur Veranschaulichung des Einflusses von Elektronenstrahlwinkel und Detektorwinkel auf das Spektrum sind in Abbildung 2.14 und Abbildung 2.15 für verschiedene Winkel gerechnete Spektren dargestellt. Deutlich zu sehen ist, dass ein flach einfallender Elektronenstrahl mehr in den Außenraum abgegebene und damit nutzbare Bremsstrahlung - insbesondere auch im langwelligen Bereich - anzuregen vermag, während ein flacher Detektorwinkel durch den Strahlauhfärtungseffekt weniger Intensität im langwelligen Bereich des Spektrums messen lässt.

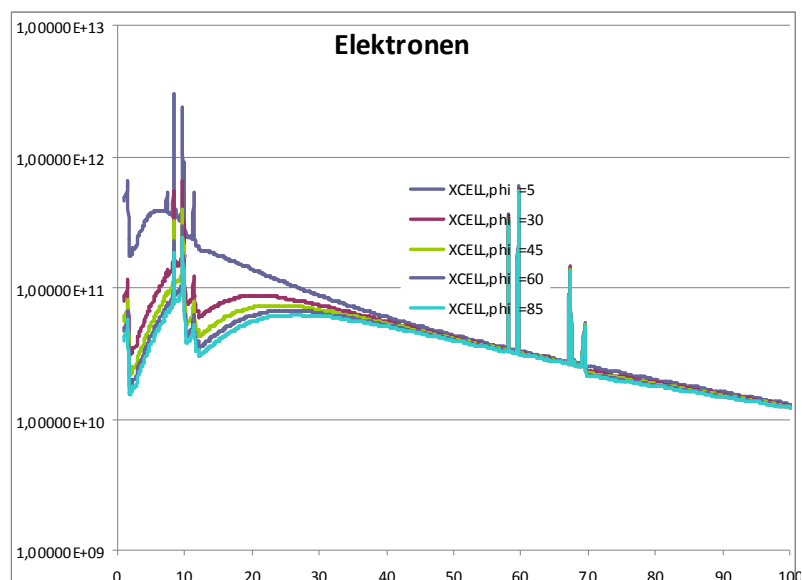


Abbildung 2.14: Veranschaulichung des Einflusses verschiedener Winkel für den Elektronenstrahl auf das Röhrenspektrum. Ein flacher Einfallswinkel erhöht den langwelligen Anteil an Bremsstrahlung infolge der daraus resultierenden Nähe der mittleren Eindringtiefe zur Oberfläche

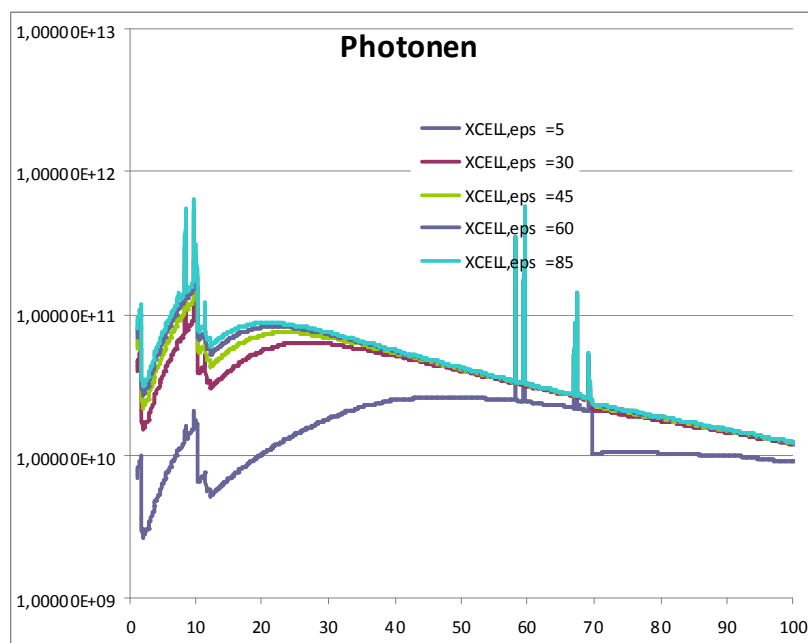


Abbildung 2.15: Veranschaulichung des Einflusses verschiedener Detektorwinkel auf das Röhrenspektrum. Ein flacher Austrittswinkel senkt den langwelligen Anteil des Spektrums infolge des Strahlauhfärtungseffekts.

2.4. Detektor

Der bei den CT-Untersuchungen, die im Rahmen dieser Arbeit gemacht wurden, verwendete Detektor ist ein Flat-Panel-Detektor, ein Szintillator mit direkt anschließendem TFT-Photodetektor, der in Form einer Matrix aufgebaut ist. Bei der Vermessung von Röhrenspektren und in der Röntgenfluoreszenzanalyse kommen Si(Li) Halbleiterdetektoren zur Anwendung. In diesem Kapitel soll ein grober Überblick zur Funktionsweise geschaffen werden.

Szintillator

Ein Szintillator ist ein nichtleitendes meist optisch transparentes Material, das die Eigenschaft hat, einfallende Strahlung aus dem keV-Bereich in sichtbares Licht (eV-Bereich) zu transformieren. Das emittierte Licht bleibt dabei von der Wellenlänge konstant und seine Intensität ist weitestgehend proportional zur Intensität des primären Röntgenstrahls. Dieses Licht wird in einer direkt anschließenden Photodiode gemessen.

Die Grundlagen des Szintillationseffektes können anhand des Bändermodells der Festkörper beschrieben werden [tan77],[ahm07]. In einem Festkörper wird durch die geringe Entfernung der Atome zu einander ein Elektron von mehreren Atomen gleichzeitig gebunden. In diesem Zustand ergibt sich nämlich eine Potentialabsenkung, der den Aufenthaltsort des Elektrons zwischen den Atomen begünstigt. Man spricht hierbei auch von der kovalenten Bindung. Die Entartung der diskreten Energieniveaus der freien Atome wird vollständig aufgehoben, wodurch diese in Energiebänder aufgespaltet werden, innerhalb derer fast jeder Energiezustand möglich ist. Die Energiebänder sind wiederum durch verbotene Bänder getrennt. Energiebänder, die unter der Fermi-Energie liegen, nennt man Valenzbänder, Energiebänder darüber Leitungsbander (siehe Abbildung 2.16). Die Fermi-Energie liegt genau in der Mitte zwischen Leitungs- und Valenzband. Im Leitungsband können sich Elektronen fast frei bewegen.

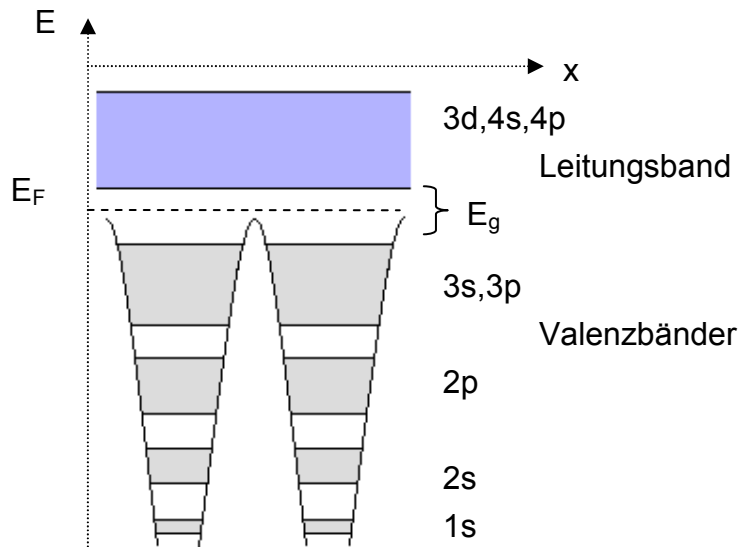


Abbildung 2.16: Schematische Darstellung des Bändermodells in Festkörpern anhand von Potentialtöpfen zweier benachbarter Atomkerne im Kristallgitter

Der An- und Abregungsprozess, der zur Entstehung des Szintillationslichtes führt, ist in Abbildung 2.17 schematisch dargestellt. Einfallende Photonen können durch komplexe Anregungsprozesse Photoelektronen aus dem Valenzband des Szintillatormaterials in das viel höher liegende Leitungsband heben. Dazu muss die Photonenenergie höher als die Ionisierungsenergie und somit höher als Bindungsenergie des Rumpfelektrons und Energiedifferenz des Abstandes zwischen Valenz und Leitungsband sein (E_g). Das in das Leitungsband gehobene Elektron entspricht einem Loch im Valenzband. Das Elektron-Loch-Paar rekombiniert sofort wieder aus diesem kurzlebigen Anregungszustand.

Ein Szintillator ist nun so beschaffen, dass im verbotenen Band zwischen Leitungs- und Valenzband ein Lumineszenz-Zentrum in Form von zusätzlichen Energieniveaus existiert. Im Falle des in dieser Arbeit verwendeten Detektors (mit *GADOX* als anorganischen Szintillator, $\text{Gd}_2\text{O}_2\text{S:Tb}$) sind das zusätzliche Energieniveaus, die durch ein Element (Tb) zur Verfügung gestellt wird, das in geringer Konzentration dotiert wurde. Von den Übergängen aus den Niveaus des Dotierungselements geht das Szintillationslicht aus.

Zusätzliche Energieniveaus zwischen Leitungs- und Valenzband werden auch durch Gitterfehlstellen oder Verunreinigungen eingebracht und können dazu führen, dass ein Teil der angeregten Elektronen in *traps* einen metastabilen Zustand einnehmen. Traps sind für die Qualität des Szintillators ein Problem, da die Ausbeute des Szintillationslichtes dadurch geschmälert wird. Auch kann es zu Effekten wie Nachglühen, Thermolumineszenz oder Phosphoreszenz kommen, wenn die in den traps zurückgehaltenen Elektronen infolge thermischer Anregung viel später wieder in das Valenzband zurückfallen.

Abgesehen von Fehlern und Verunreinigungen, die bereits bei der Herstellung in den Szintillator gelangen, werden Gitterfehlstellen auch durch Strahlenschäden beim eigentlichen Einsatz hervorgerufen. Dieser einsatzbedingte Qualitätsverlust lässt sich durch Verschieben von Filterplatten verzögern. Bei dem hier verwendeten Detektor wurde dafür ein 1mm starkes Al-Blech vorgeschoben.

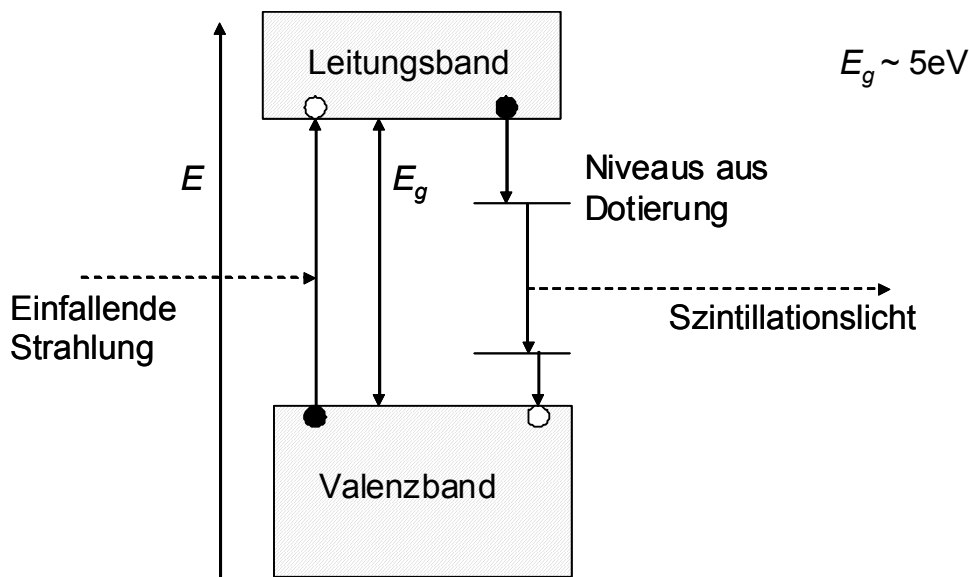


Abbildung 2.17: Vereinfachte Darstellung des Anregungsprozesses durch einfallende Strahlung in einem Szintillator anhand des Bändermodells der Festkörper mit anschließender verzögerter Emission von Szintillationslicht aus einem Lumineszenz-Zentrum (Energieniveaus aus Dotierung)

Wichtige Kenngrößen eines Szintillators sind:

- Wellenlänge des Szintillationslichtes
- Lichtausbeute (light yield), Konversionsfaktor oder Effizienz des Szintillators
- Relative Lichtausbeute (relative light yield)
- Abklingzeit

Die Wellenlänge des Szintillationslichtes ist insofern von Bedeutung, als die Empfindlichkeit der zählenden Photodiode darauf abgestimmt sein soll.

Ein idealer Detektor liefert ein Messsignal, das direkt proportional zum Quellsignal ist, was für den Szintillator bedeutet, dass die Intensität des Szintillationslichtes direkt proportional zur Intensität der einfallenden Röntgenstrahlung ist. Die Wellenlänge der Szintillationsphotonen ist weitgehend konstant, womit die in der Photodiode gemessene Photonenzahl auch proportional zur Energie des Röntgenphotons ist. Den entsprechenden Proportionalitätsfaktor nennt man auch Konversionsfaktor, der vom Szintillator abhängig ist und in Photonen pro MeV angegeben wird. Für *GADOX* wird in der Literatur etwa 20.000MeV^{-1} [hje03] respektive 60.000MeV^{-1} [eij02] angegeben. In der Realität ist die Photonenzählrate aus dem Szintillator an der Photodiode nicht proportional zur primären Energie, was mit der relativen Lichtausbeute ausgedrückt wird. Die relative Lichtausbeute des Szintillators ist die für die Detektoreffizienz maßgebliche Größe und damit wichtig für die Interpretation des Ergebnisses einer Messung. Sie entspricht dem Verhältnis aus gezählter Energie zu ursprünglicher Energie. Zur Veranschaulichung ist in Abbildung 2.18 die relative Lichtausbeute für einige typische Szintillatoren angegeben (Plots aus [mos02]). Durch sie wird die spektrale Sensitivität des Detektors bestimmt, weswegen sie gerade in

der Simulation unumgänglich für die genaue Auswertung von Abschwächung und Streuung polychromatischer Strahlung ist. Genaue Responsekurven sind aber in der Literatur schwer zu finden, was im hohen Aufwand einer genauen Messung zu begründen ist, für die monochromatische Strahlung in einem möglichst breiten Energiebereich zur Verfügung stehen muss. Die Anforderungen an die sogenannte Brillianz der Photonenquelle treffen sehr gut auf ein Synchrotron zu. An einem solchen wurde von Reitz et al. [rei07] die Response des in dieser Arbeit verwendeten Matrixdetektor-Modells gemessen.

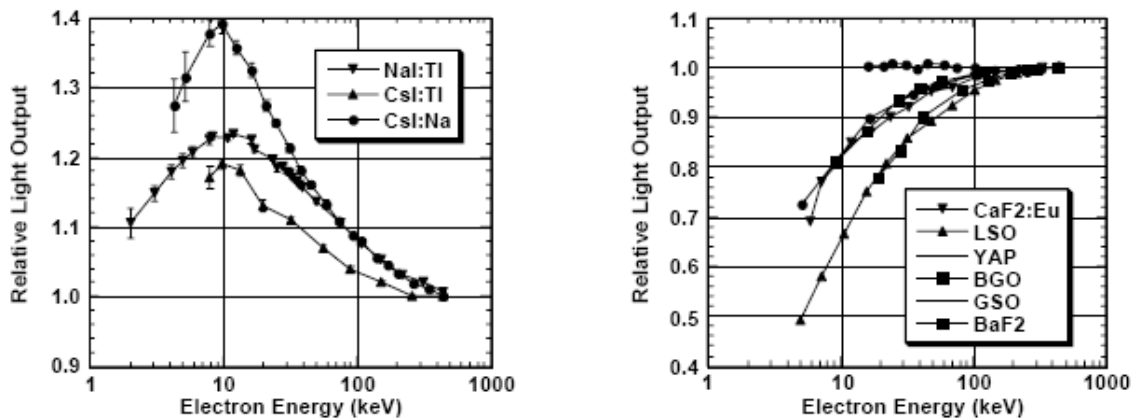


Abbildung 2.18: Relative Lichtausbeute verschiedener Szintillatoren als Funktion der primären Energie (in diesem Fall von Elektronen) normiert auf den Funktionswert bei 662keV [mos02]

Theoretisch lässt sich die Responsekurve durch den absorbierten Anteil der einfallenden Photonen annähern. Ein Vergleich von auf verschiedenen Wegen berechneten Responsekurven mit der Messung von Reitz et al. folgt im Abschluss des Kapitels 4.5.

Halbleiterdetektor

Für die Messung bei der RFA, von Röntgenspektren oder des Szintillationslichtes kommen Halbleiterdetektoren zur Anwendung. Diese haben gegenüber anderen Detektorarten wie Flüssigkeits- oder Gasdetektoren den Vorteil des viel höheren Absorptionsvermögens der zu messenden Strahlung und das dadurch stärkere Zählsignal. Die niedrigere Ionisierungsenergie gegenüber Gasmolekülen, der sich aus der Bindung und den geringen Abständen der Atome im Festkörper ergibt, macht sie auch für die Messung von Photonen bis in den spektralen Bereich des sichtbaren Lichts geeignet.

Halbleiter sind Elemente, deren Leitfähigkeit zwischen der von Isolatoren und der von Leitern liegt. Der Energieabstand zwischen Valenz- und Leitungsband, das sogenannte verbotene Band, ist also bei Halbleitern geringer als bei Isolatoren. Durch Dotierung mit anderen Elementen, meist aus benachbarten Elementgruppen, werden zusätzliche Energieniveaus zwischen Valenz- und Leitungsband eingebracht. Diese Nachbarelemente sind in den äußeren Elektronenschalen um ein Elektron mehr oder eines weniger besetzt, liefern also zusätzliche Elektronen oder binden welche. Entsprechend werden solche Dotierungselemente in Verbindung mit dem betroffenen Halbleiter auch Donatoren oder Akzeptoren genannt, die damit dotierten Halbleiter werden wegen der resultierenden

Ladung somit zu n-Halbleitern oder p-Halbleitern im Gegensatz zu intrinsischen Halbleitern.

Verbindet man einen Halbleiter vom Typ p mit einem vom Typ n, bildet sich durch Ausgleich der Ladung entlang der Verbindung eine neutrale Schicht, auch Sperrschicht genannt. Durch Anlegen einer elektrischen Spannung weitet sich entsprechend der Polung die Sperrschicht aus oder wird schmaler. Die Sperrschicht ist der für einen Halbleiterdetektor relevante Teil. In ihr werden durch Einfall von ionisierender Strahlung Elektron-Loch-Paare erzeugt, die infolge der hohen Raumladung zu den entgegengesetzt geladenen Schichten (p- respektive n-Schicht) driften, dort rekombinieren und einen messbaren elektrischen Strom erzeugen. Eine schematische Darstellung dieses Vorgangs ist in Abbildung 2.19 zu sehen. Der Einfall von Strahlung in der n-Schicht oder p-Schicht führt zwar auch zu Elektron-Loch-Paaren, diese rekombinieren jedoch wieder an Ort und Stelle.

Halbleiterdetektoren werden in Sperr-Richtung gepolt unter möglichst hoher Spannung betrieben, um die detektierende Sperrschicht so groß wie möglich zu machen. Dies hat auch den Vorteil, dass der Leckstrom niedrig und der Signal-Rauschabstand hoch ist. Die Sperrschicht wird meist durch Einbringen einer intrinsischen Schicht zwischen p und n-Schicht vergrößert (PIN-Diode). Der gemessene Strom ist abhängig von der einfallenden Strahlungsintensität und seiner Absorption im Detektormaterial. Das Minimum der Detektoreffizienz steht im Zusammenhang mit der Ionisierungsenergie; diese ist für Si z.B. 3,62eV, also so niedrig, dass bereits thermische Schwankungen bei Zimmertemperatur Störungen verursachen, weshalb ihr Einsatz wegen der notwendigen Kühlung und stabiler Temperatur sehr aufwendig ist. Für die Photodioden, die das Szintillationslicht in einem Matrixdetektor messen, ist diese Problematik weniger tragend, da ohnehin nur Photonen einer Wellenlänge gezählt werden.

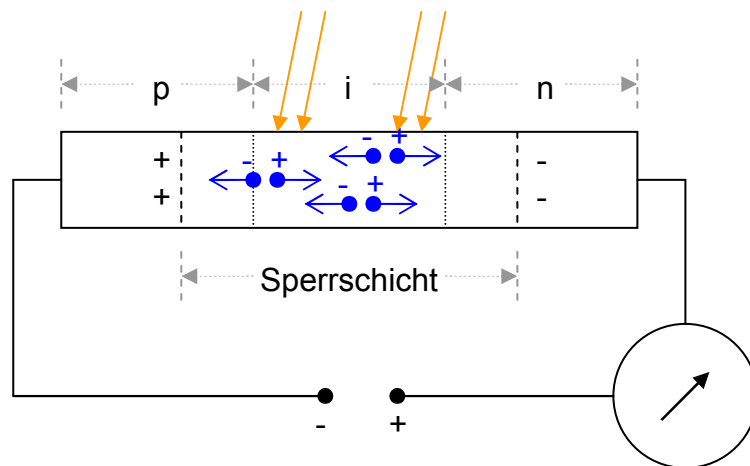


Abbildung 2.19: Schematische Darstellung des pn-Übergangs mit eingeschobener intrinsischer Schicht in einem Halbleiterdetektor. Elektron-Loch-Paare werden durch einfallende Strahlung erzeugt, rekombinieren in den entsprechenden Schichten außerhalb der Sperrschicht und erzeugen einen messbaren Strom

2.5. Computertomographie

Die Computertomographie ist ein zerstörungsfreies Verfahren zur Untersuchung der inneren Zusammensetzung eines Probenkörpers. Dabei werden Röntgenprojektionen der Probe aus vielen verschiedenen Richtungen aufgenommen und daraus zweidimensionale Schnittbilder oder dreidimensionale Visualisierungen rekonstruiert. Das Verfahren zur Datenerfassung und Rekonstruktion wird im Folgenden näher beschrieben, wobei der Fokus auf die Rahmenbedingungen der eingesetzten CT-Anlage gerichtet ist. Eine umfassende Einführung in die CT und Beschreibung aller beteiligten Prozesse ist bei Buzug [buz08] zu finden.

Prinzip

Das Verfahren der Projektionsaufnahme und der Rekonstruktion lässt sich am einfachsten in der Parallelstrahlgeometrie erklären. Ein idealer Weise monochromatischer kollimierter Röntgenstrahl tastet die Probe normal zur Strahlrichtung ab, während der Detektor dahinter der Abtastrichtung folgend die Intensität misst. Der Messvorgang ist schematisch in Abbildung 2.20 mit der Durchstrahlungslänge D und dem Winkel θ für die Drehung der Probe zur ursprünglichen Position dargestellt.

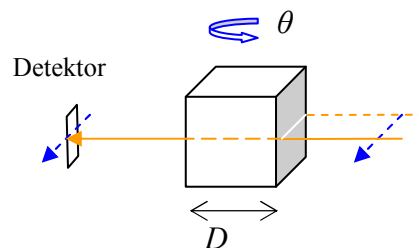


Abbildung 2.20: Schematische Darstellung der Abtastung der Probe durch parallele Strahlen (orange); Abtastungsrichtung (blau)

Aufgrund der Inhomogenität der Probe ist der lineare Absorptionskoeffizient $\mu(x)$ eine Funktion des Weges x entlang des Strahls. Die theoretische Zählrate $N(D)$ des im Detektor gemessenen Strahls ist somit

$$N(D) = N_0 e^{-\int_0^D \mu(x) dx} \quad (2.46)$$

und daher jeweils abhängig von der Zusammensetzung der Probe entlang jedes aufgenommenen Strahls. Der Abtastvorgang wird für viele Winkel θ wiederholt. Trägt man die Abtastprofile über den Drehwinkel der Probe auf, so erhält man ein Sinogramm. Das Sinogramm ist die Grundlage der Rekonstruktion des Probenquerschnitts durch Rückprojektion. Ein Sinogramm und die daraus erstellte Rückprojektion eines Querschnitts einer Wallnuss ist in Abbildung 2.21 zu sehen. Die Abbildungen sind mit einer am Institut für Festkörperphysik entwickelten MicroCT Anlage entstanden [gur99], welche

grundsätzlich das soeben beschriebene Verfahren anwendet. Der Röntgenstrahl wurde durch einen biegsamen Multilayer monochromatisiert.

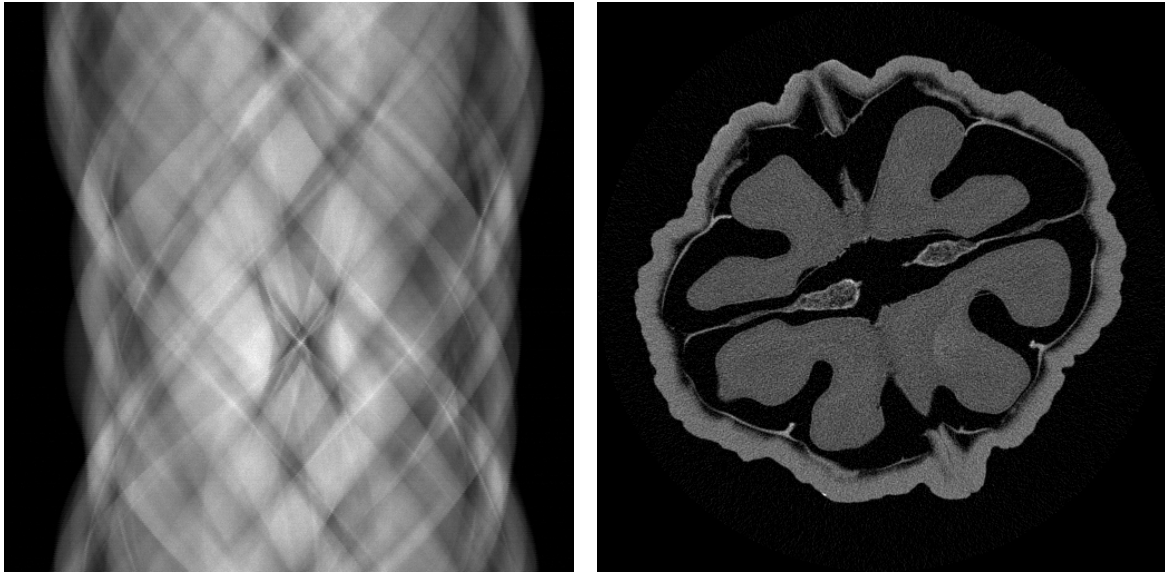


Abbildung 2.21: Sinogramm (links) und Rekonstruktion (rechts) des Querschnitts einer Walnuss [gur09], Aufnahme mit einer MicroCT Anlage [gur99]

Die Monochromatisierung hat den Vorteil, dass man den effektiven Absorptionskoeffizienten misst und nicht auch noch die Energieabhängigkeit berücksichtigen muss. Bei polychromatischer Strahlung muss nämlich zur Berücksichtigung der spektralen Verteilung die Formel (2.46) auch noch über die Energie integriert werden. Dies führt bei der Rekonstruktion zu sogenannten Strahlauhfärtungsartefakten.

Gefilterte Rückprojektion

Die einfache Rückprojektion und der Zusammenhang mit der Projektion ist in Abbildung 2.22 schematisiert. Das Schattenprofil aus jeder Aufnahme-richtung wird über den Bereich der Rekonstruktion gelegt (entlang der strichlierten Linien). Werden auf diese Weise viele Absorptionsprofile aus unterschiedlichen Richtungen übereinandergelegt und summiert, resultiert daraus ein Abbild der Dichtezusammensetzung des Querschnitts des durchstrahlten Bereichs. Durch das Summieren des Absorptionsprofils für jede Richtung über den gesamten Rekonstruktionsbereich ergibt sich aber in der Rekonstruktion ein Kontrastverlust. Das Bild wirkt weich gezeichnet wie durch einen Tiefpassfilter modifiziert. Der Begriff Filterung entspringt in diesem Zusammenhang dem Gebiet der Signalverarbeitung und entspricht mathematisch einer Faltung (convolution, [buz08],[smi98]).

In dem für ein Computerprogramm diskretisierten Fall bedeutet das für jedes Pixel (oder Voxel in 3D) des Rekonstruktionsbereiches, dass der Grauwert aus dem Winkel der Aufnahme darauf projiziert wird. In Abbildung 2.23 ist der Vorgang des Aufsummierens

der Grauwerte aus den Projektionsrichtungen schrittweise für 6 verschiedene Winkel aus eigener Berechnung dokumentiert. Die Grauwerte wurden aus einem Sinogramm der in Abbildung 2.21 dargestellten Nuss entnommen [gur09]. Die Grauwerte aus der Messung wurden zuerst logarithmiert, um den effektiven Massenabsorptionskoeffizienten für jeden Messpunkt zu erhalten. Anschließend wurde auf das Sinogramm ein eindimensionaler Faltungskern der Form (2.47) angewandt (Hochpassfilter).

$$k_i = -\frac{1}{(i \cdot \pi)^2} \quad , 0,25 \text{ für } i = 0 \text{ und } 0 \text{ für } i \dots \text{gerade} \quad (2.47)$$

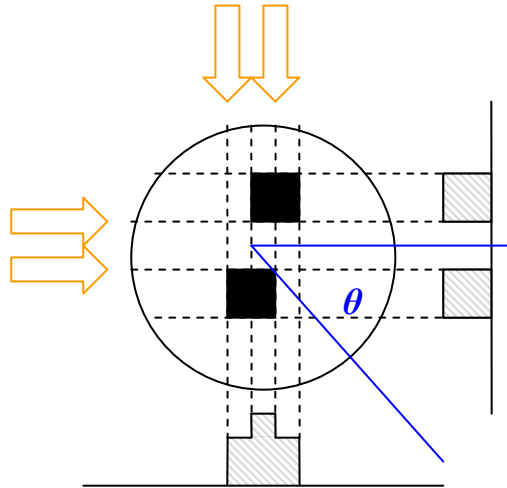


Abbildung 2.22: Schematische Darstellung der Durchleuchtung einer Probe aus zwei unterschiedlichen Richtungen. Die Strahlungsquelle ist durch Pfeile symbolisiert, der Intensitätsverlauf wird hinter den strichlierten Verbindungen zur Probe grau schraffiert dargestellt

Der Vorgang der Aufnahme der Absorptionsprofile für alle Winkel θ lässt sich mathematisch als Radontransformation formulieren [rad17]. Radon hat in seiner Arbeit ein allgemeines Transformationsproblem behandelt, die Arbeit wurde jedoch erst viel später als wichtigstes mathematisches Konzept für die Rückprojektion in der CT entdeckt.

Wie man zeigen kann, wird bei der einfachen Rückprojektion implizit ein Tiefpassfilter auf das rekonstruierte Bild angewandt ([buz08], S.194). Dem kann durch Faltung mit einer Hochpassfilter-Funktion (Verstärkung des Kontrasts) unmittelbar vor der Rückprojektion entgegengewirkt werden. Man spricht in diesem Fall von der gefilterten Rückprojektion. Radon hatte dies für die Eindeutigkeit der Transformation bereits durch eine Gewichtungsfunktion in der Rücktransformation berücksichtigt.

Für eine 3D-Rekonstruktion müssen die Schichtbilder übereinander gestapelt werden (sekundäre Rekonstruktion).

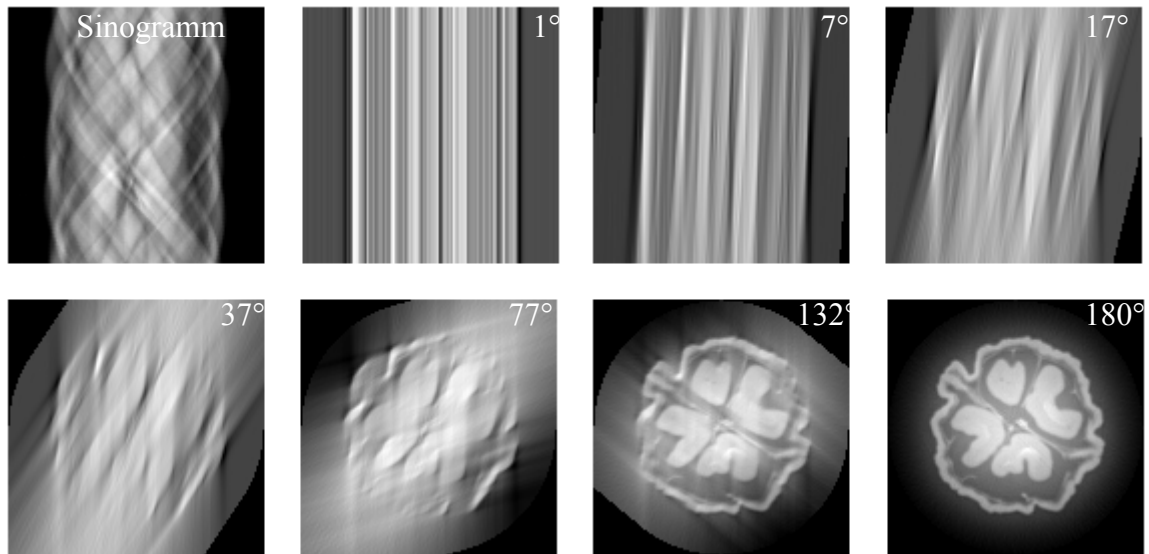


Abbildung 2.23: Darstellung des Sinogramms und der gefilterten Rückprojektion. Dokumentation einzelner Zwischenschritte für 7 unterschiedliche Projektionswinkel nacheinander; jeder Abschnitt entspricht der Summation der Zeilen aus dem Sinogramm aus aufeinanderfolgenden Winkeln bis zum angegebenen Winkel. Eigene Berechnung aus einem Sinogramm einer Nuss, welches durch eine μ CT-Messung am Institut für Festkörperphysik aufgenommen wurde; [gur09],[gur99], Programmierung in C und MATLAB

Kegelstrahlgeometrie

So einfach die Rückprojektion in Parallelstrahlgeometrie rechentechnisch auch zu behandeln ist, man stößt mit dem langwierigen und aufwendigen Aufnahmeverfahren bald an gewisse Grenzen. Die Verwendung des gesamten Strahlkegels der Röhre bringt dagegen einen immensen Zeitgewinn bei gleichzeitig viel höherer Strahlausbeute im Detektor. Denn anstatt mit einem Nadelstrahl, bei dem der Großteil des Strahls nutzlos ausgeblendet wird, die Probe rasterförmig abzutasten, ist in der Kegelstrahlgeometrie eine 2D-Projektion in einem einzigen Schritt erstellt (Abbildung 2.24). Voraussetzung dafür ist ein Matrixdetektor mit einer einigermaßen hohen Auflösung. Der im Rahmen dieser Arbeit verwendete Detektor besteht aus einer Matrix von 1024x1024 Pixel. Das zu verarbeitende Datenmaterial ist entsprechend umfangreich, und muss entsprechend schnell verarbeitet werden können, weshalb diese Methode aufgrund der hohen Anforderungen an die Computer-Hardware (hohe Bandbreite) erst seit relativ kurzer Zeit zur Anwendung kommt ([buz08], S. 337).

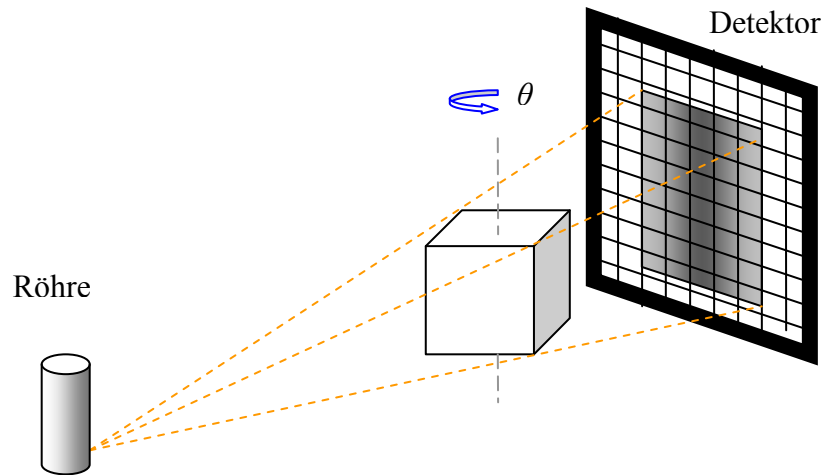


Abbildung 2.24: Schematische Darstellung der Kegelstrahlgeometrie; die Probe ist zwischen Röhre und Detektor auf einem Drehtisch positioniert, der die Probe nach jeder Aufnahme schrittweise um seine Drehachse weiterdreht

Die mathematische Formulierung der gefilterten Rückprojektion als echte 3D-Rekonstruktion (im Gegensatz zur sekundären Rekonstruktion) ist in der Kegelstrahlgeometrie sehr aufwendig. Die exakte Radontransformation lässt sich zwar formulieren [gra91], aber dafür muss nach der Vollständigkeitsbedingung von Tuy-Smith [tuy83] auch ein vollständiger Satz an Radon-Daten vorhanden sein.

Bei der in der Industrie verbreiteten und auch hier eingesetzten Form der zirkularen CT, bei der die Position der Probe auf einem Drehtisch in nur einer Drehachse verändert wird, ist diese Vollständigkeitsbedingung allerdings nicht erfüllt. Es existieren sogenannte Schattenzonen entlang der Drehachse oberhalb und unterhalb der Ebene normal auf die Detektorfläche, die den Brennfleck der Röhre einschließt. Die Lage der Schattenzonen ist in Abbildung 2.25 eingezeichnet. Vollständige Radondaten befinden sich nur innerhalb eines Torus, dessen Mittelpunkt auf der Drehachse liegt.

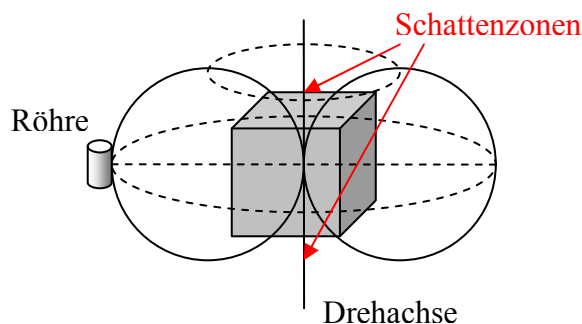


Abbildung 2.25: Schematische Darstellung der Schattenzonen bei zirkularer CT

Nach der häufig verwendeten Näherungsmethode von Feldkamp, Davis und Kress [fel84] (FDK-Methode) kann dennoch ein gutes Resultat bei der Rekonstruktion erreicht werden. Bei dieser Methode werden die Bilder von jeder Detektorreihe als Projektionen aus der 2D-Fächerstrahl-Geometrie behandelt.

Artefakte

Der Prozess der Datenerfassung für eine CT Aufnahme und Rekonstruktion kann in folgende Bereiche unterteilt werden:

- Röntgenphysik: Strahlungsquelle, Wechselwirkungen in der Probe
- Detektor: Umwandlung der detektierten Strahlung in messbare Signale
- Elektronik: Signalverarbeitung, Digitalisierung
- Datenverarbeitung: Rekonstruktionsalgorithmen, Digitale Signalverarbeitung
- Visualisierung: grafische Darstellung, Rendering, selektive Nachbearbeitung

In jedem dieser Bereiche gibt es mögliche Ursachen für eine Reduzierung der Qualität der Darstellung der Rekonstruktion, sogenannte Artefakte. Der Fokus dieser Arbeit richtet sich auf die ersten beiden Bereiche. Im Folgenden werden die Ursachen für Artefakte beschrieben, die in diesen Bereichen entstehen können.

Brennfleck

Die Größe des Brennflecks in einer Röntgenröhre ist abhängig von der Divergenz der Breite des Elektronenstrahls, vom Röhrenstrom, der Röhrenspannung und der Form der Anode, d.h. dem Winkel der einfallenden Elektronen und austretenden Photonen, den sie mit der Anodenoberfläche einschließen; sie bestimmt bei der Projektion die Größe des Bildpunktes auf der Detektorfläche und damit die Schärfe und den Kontrast. In Abbildung 2.26 ist dies schematisch dargestellt.

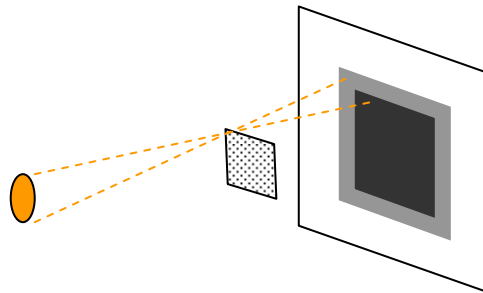


Abbildung 2.26: Schematische Darstellung einer unscharfen Abbildung auf der Detektorfläche infolge eines großen Brennflecks

Der Brennfleck kann weiters während des Betriebs der Röhre auf der Anode wandern. Dies hat zur Folge, dass Projektionen für verschiedene Probenwinkel unterschiedliche Projektionszentren haben. Rekonstruktionsfehler bei der Rückprojektion sind die Folge.

Strahlaufhärtung

Bei der mathematischen Formulierung der CT-Rekonstruktion wird zunächst nur von der Abschwächung eines monochromatischen primären Strahls in der Probe ausgegangen. Die polychromatische Strahlung realer Quellen verursacht jedoch Probleme. Die Massenabsorptionskoeffizienten sind nichtlineare unstetige Funktionen der Energie und der Ordnungszahl (siehe Abbildung 2.4). Das Spektrum der durchdringenden Strahlung wird also abhängig von der Wellenlänge in der Probe geschwächt. Da die Absorption langwelliger Strahlung höher ist, wird dieser Teil des Spektrums stärker geschwächt. Die spektrale Verteilung verschiebt sich somit zu höheren Energien, der Strahl wird „härter“. Ein Beispiel für die Auswirkungen unterschiedlicher Stärken eines Al-Filters auf ein 200kV Spektrum einer W-Röhre ist in Abbildung 2.27 dargestellt.

Die Strahlaufhärtung ist vom effektiven Absorptionskoeffizienten des gesamten Durchstrahlungsweges abhängig. Für inhomogene Proben gilt somit, dass dichtere Bereiche oder Gebiete mit Elementen höherer Ordnungszahl aus unterschiedlichen Richtungen den Strahl unterschiedlich schwächen, auch wenn sie aus unterschiedlichen Betrachtungswinkeln gleich dick sind. Die Änderung der spektralen Zusammensetzung der durchdringenden Strahlung bewirkt zusätzlich im Detektor ein verändertes Signal wegen dessen energieabhängiger Effizienz. Strahlaufhärtungsartefakte machen sich durch verbindende Schatten zwischen unterschiedlich dichten Bereichen der Rekonstruktion bemerkbar (siehe Abbildung 2.28) oder als scheinbare Dichteänderung in homogenen Bereichen („cupping artifact“).

Strahlaufhärtungsartefakte können durch geeignete Filter auf dem Röhrenfenster stark reduziert werden, da der langwellige Anteil im Spektrum dadurch bereits vor dem Eindringen in die Probe reduziert wird.

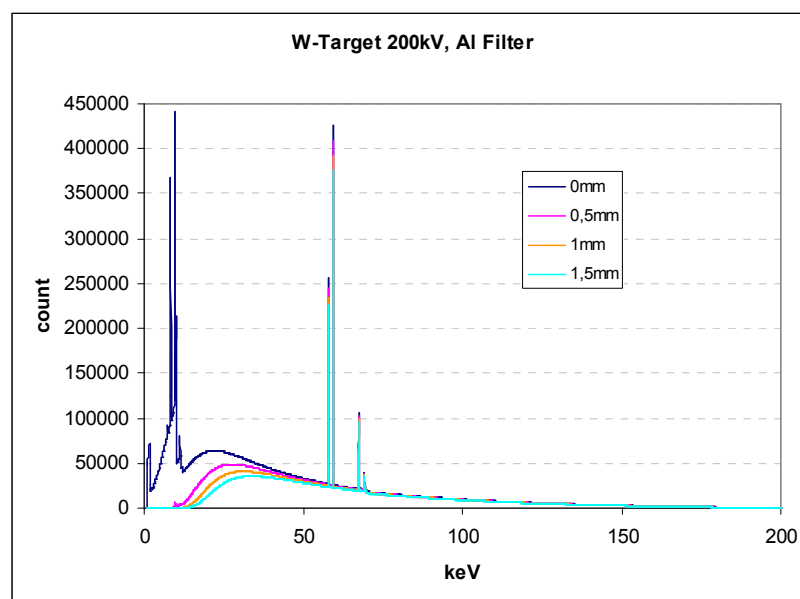


Abbildung 2.27: Vergleich eines 200kV Spektrums einer W-Röhre ohne und mit Al-Filter in drei unterschiedlichen Stärken zur Veranschaulichung des Strahlaufhärtungseffektes. Eigene Berechnung mit *XCell* [man08]

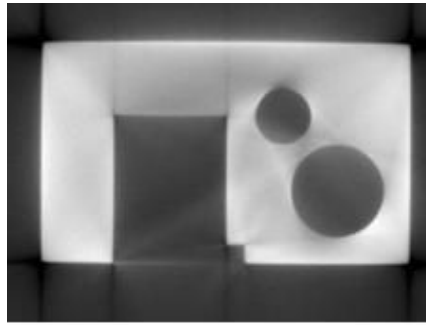


Abbildung 2.28: Darstellung einer Rekonstruktion mit deutlichen Strahlhärtungsartefakten in Form von verbindenden Schatten [chy08]

Streuung

Die hohe Strahlausbeute und der große Winkel der Bestrahlung haben bei CT in Kegelstrahlgeometrie den großen Nachteil, dass ein hoher Anteil an gemessener Streustrahlung in der Probe generiert wird. Der hohe Streuanteil und die Komplexität der mathematischen Rekonstruktion machen diese Methode sehr anfällig für Abbildungsfehler in der Rückprojektion. Die Auswirkung der Streuung kann durch hohe Entfernung vom Detektor verringert werden, wie das im anschließenden Kapitel 4 an mehreren Stellen gezeigt wird. Abhilfe schaffen auch Kollimatoren vor dem Detektor. Allerdings ist dies bei einem Matrixdetektor, wie er im Rahmen dieser Arbeit verwendet wird, technisch (derzeit) nicht machbar. Gewisse Szintillatorschichten wie z.B. CsI bestehen aus nadelförmigen Kristallen, die als Lichtleiter fungieren und sind ähnlich wie ein Kollimator in der Lage, störende Streustrahlung größtenteils zu eliminieren [spa03].

Kegelstrahl

Wie bereits erwähnt ist der Rekonstruktionsbereich bei der Zirkularen CT nicht vollständig im Radonraum, woraus Schattenzonen resultieren, die durch Näherungen wie die FDK-Methode ausgefüllt werden können. Dies führt zu Artefakten in der 3D Rekonstruktion, die sich mit größerem Öffnungswinkel des Strahlkegels weiter verschlechtern. Abhilfe schafft hier eine Änderung der Orientierung der Rekonstruktionsebene, sodass möglichst wenige Bereiche von Interesse in den Schattenzonen zu liegen kommen (siehe Abbildung 2.25).

Bewegungen der Probe

Ähnlich wie bei der Wanderung des Brennflecks während der Aufnahme können unkontrollierte Bewegungen der Probe 3D-Artefakte verursachen. Diese können durch mechanische Ungenauigkeiten des Drehtisches oder Temperaturschwankungen hervorgerufen werden.

Detektor

Das aufgenommene Bild ist durch die begrenzte Ortsauflösung des Detektors in seiner Qualität beschränkt. Nach dem Nyquist-Shannon Theorem muss die Abtastfrequenz mindestens doppelt so hoch wie die abzubildende Ortsfrequenz sein. Die diskrete Natur des Matrixdetektors bestimmt also mit der Zahl der Detektorpixel pro Längeneinheit die maximale Auflösung unter idealen Bedingungen.

Ein wichtiger physikalischer Effekt, der für eine weitere Verschlechterung der Auflösung sorgt, ist die Streuung der zu messenden Strahlung im Detektor selbst. Die Strahlung eines Abbildungspunktes auf einem Pixel des Detektors breitet sich vor allem entlang der Szintillatorschicht aus und verursacht ein nicht vernachlässigbares Restsignal in benachbarten Pixel.

Die zeitliche Abtastfrequenz und damit die Totzeit sind durch die Dauer limitiert, innerhalb der alle Anregungsprozesse, die für ein Signal gesorgt haben, wieder abgeklungen sind. Dies gilt speziell für die komplizierten Anregungsprozesse in einem Szintillator, die zu einem Nachglühen (Phosphoreszenz) führen können ([ahm07], S. 329).

Korrekturfunktionen

Viele der hier beschriebenen Artefakte können bei hinreichender Bekanntheit der Ursachen durch Korrekturfunktionen in den Projektionen oder der Rekonstruktion reduziert werden. Die Modulationstransferfunktionen (MTF) sind Funktionen im Frequenzraum, der durch Fouriertransformation aus dem Ortsraum erreicht wird. Die große Aussagekraft einer MTF liegt vor allem in der genauen Anzeige der Bewertung bestimmter Ortsfrequenzen. Ihr mathematischer Vorteil liegt in der Einfachheit der Handhabung, denn gemäß Faltungstheorem [buz08],[smi98] müssen sie lediglich auf die Fouriertransformierte der Abbildung multipliziert werden. Eine MTF ist ein Faktor zwischen 0 und 1 aufgetragen über die Frequenz (üblicherweise angegeben in Linienpaaren pro mm, lp/mm; siehe Abbildung 2.29). Eine stark abfallende MTF bedeutet also eine schlechte Abbildungsübertragung.

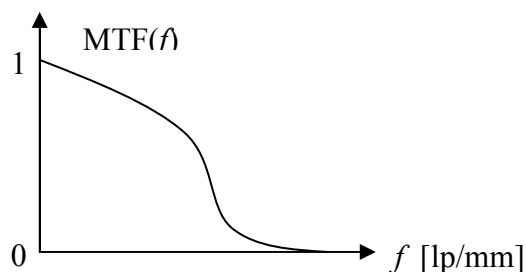


Abbildung 2.29: Beispiel eines Funktionsverlaufs einer Modulationstransferfunktion, als Maß der Bildübertragungsqualität. Der Funktionswert liegt zwischen 0 und 1 aufgetragen über die Ortsfrequenz in Linienpaaren pro mm. Je steiler die Funktion abfällt, umso schlechter ist die Bild-/Signalübertragung

3. Umsetzung – Experimente und Programme

3.1. Versuchsanordnung CT

Die experimentellen Untersuchungen erfolgten an einer CT Anlage (hergestellt von der *Hans Wälischmiller GmbH*, Abbildung 3.1) in Kooperation mit der Fachhochschule Oberösterreich am Campus Wels. Das eingesetzte Modell hat die Bezeichnung *RayScan200* und kann mit zwei unterschiedlichen Röntgenröhren betrieben werden, einer Mikro-Fokus Röhre (*Viscom* 225 kV; 5 μm Mikro-Fokus; W-Anode) und einer Makro-Fokus Röhre (*Comet* 450 kV), welche beide auf einem Granitsockel befestigt sind. Die Makro-Fokus Röhre erlaubt durch die höhere Betriebsspannung infolge eines kurzwelligeren Spektrums eine bessere Durchdringung und ist deshalb für dicke Proben und Proben mit schweren Elementen gut geeignet. Der größere Brennfleck dieser Röhre resultiert aber in einer schlechteren Auflösung der Projektion. Die Untersuchungen im Rahmen dieser Arbeit beziehen sich nur auf die Mikro-Fokus Röhre, da eine möglichst gute Auflösung gewünscht war, um Streueffekte bestmöglich identifizieren zu können. Die Probenkörper wurden auch nur aus leichten Elementen angefertigt.

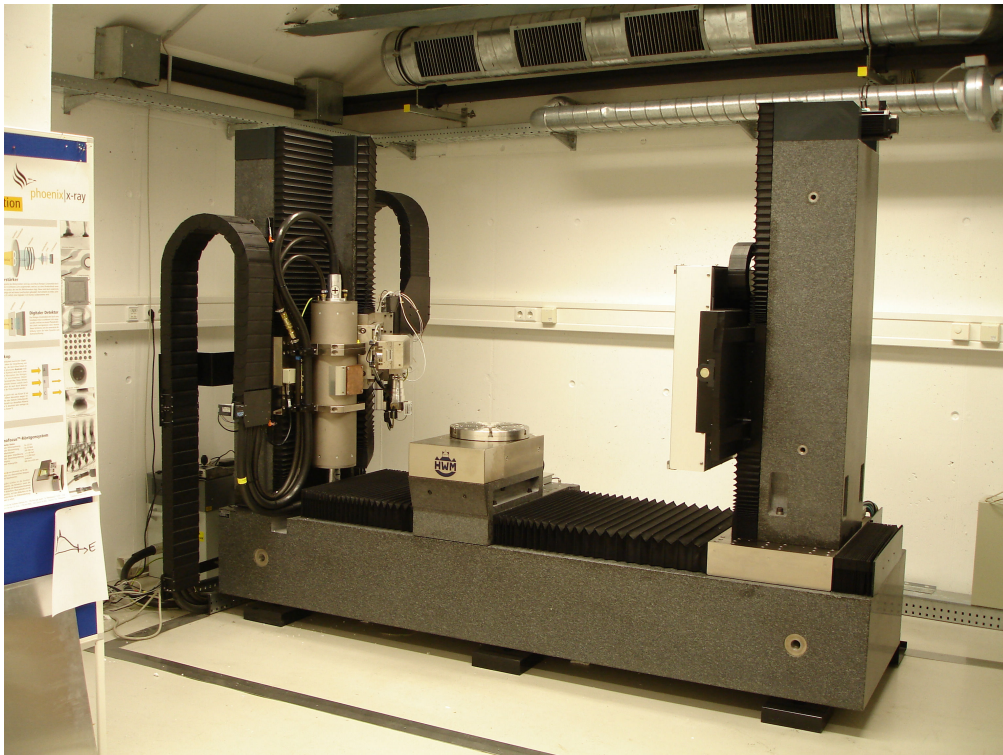


Abbildung 3.1: CT Anlage, auf der die Untersuchungen durchgeführt wurden, Modell *RayScan200*, Hersteller *Hans Wälischmiller GmbH*

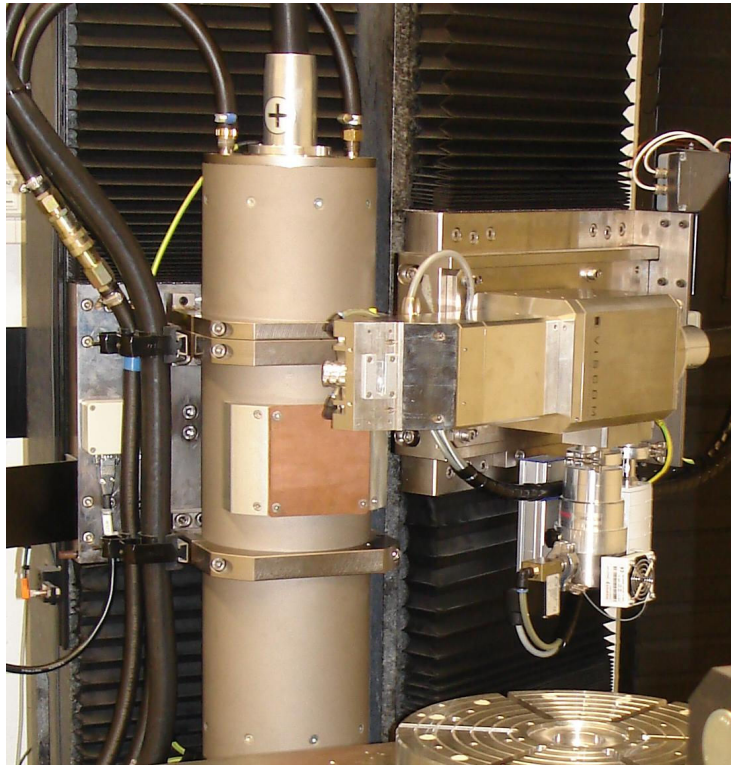


Abbildung 3.2: Makrofokus- (vertikal) und Mikrofokus-Röhre (horizontal)

Als Detektor ist ein Matrix Detektor, bei dem jedes Pixel aus einer Photodiode und einem TFT besteht, mit einer Szintillatorschicht verbaut (Hersteller: *Perkin Elmer* Modell: *RID 1640*) mit einer Auflösung von 1024×1024 Pixel bei einer Fläche von 410×410 mm. Der aktive Szintillator besteht aus $\text{Gd}_2\text{O}_2\text{S:Tb}$ (Hersteller: *Kasei-Optonix*). Der Schematische Aufbau der Detektoreinheit ist in Abbildung 3.3 dargestellt, die Detektorfläche besteht – soweit feststellbar – aus folgenden Schichten:

1. Graphit oder Mo, $500\mu\text{m}$ (lt. Angabe *Perkin Elmer*, Handbuch)
2. Szintillator, Gd, $550\mu\text{m}$ (lt. Angabe *Kasei-Optonix*)
3. Zähler, Si, $1\mu\text{m}+200\mu\text{m}$, (eigene Annahme, da keine Beschreibung vorhanden)
4. Platine, C, 3mm, (eigene Annahme, da keine Beschreibung vorhanden)

Welche der beiden angegebenen Schutzschichten verwendet wurde (Graphit oder Molybdän), war der Dokumentation nicht zu entnehmen, was die Überprüfung der Simulationsergebnisse erschwerte.

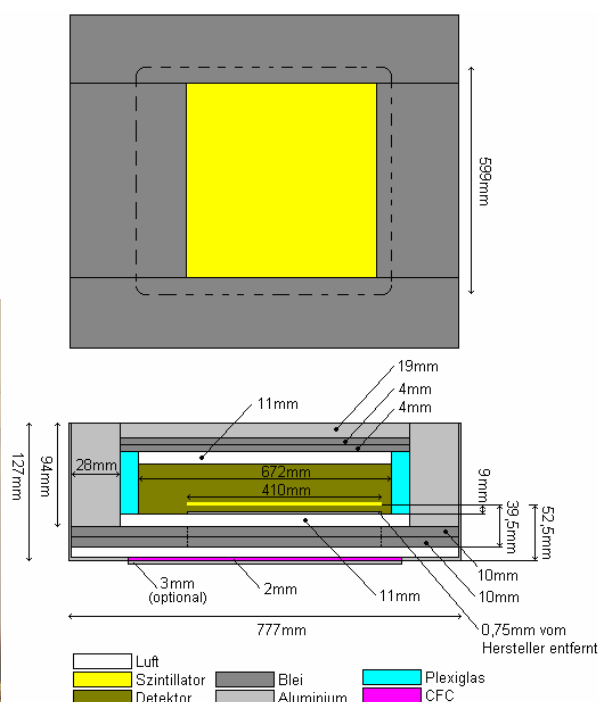


Abbildung 3.3: Bild (links) und schematischer Aufbau der Detektoreinheit (rechts), [rei09]

Für die Untersuchung wurden einfache inhomogene Proben an verschiedenen Positionen zwischen Röhre und Detektor gemessen. Die Probenkörper bestanden aus Aluminium mit einer zentralen zylinderförmigen Aushöhlung, die wahlweise leer oder mit einem Eisenstab gefüllt waren. Der erste Testkörper (TK01) war ein Quader mit etwa 4cm Kantenlänge (genaue Abmessungen siehe Abbildung 3.4), TK02 war ein Zylinder mit 8cm Höhe und 8cm Kreisdurchmesser. Die genaue Materialzusammensetzung der Testkörper ist Tabelle 2 zu entnehmen. Die genauen Messpositionen auf der CT Anlage sind in Abbildung 3.5 dargestellt, die Messparameter der CT Anlage in Tabelle 3 angeführt.

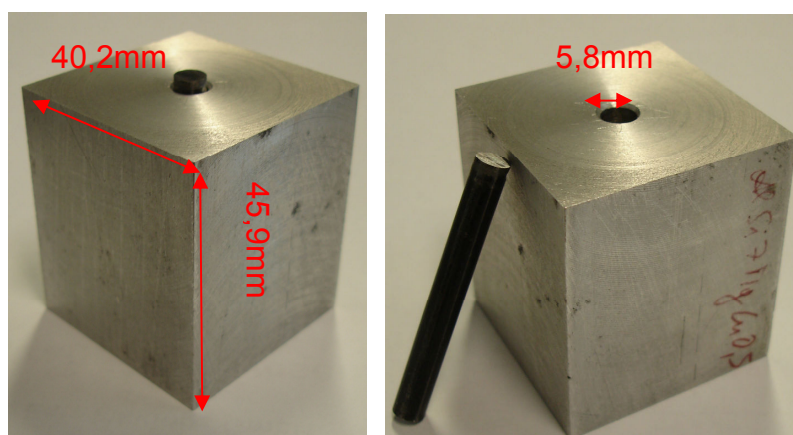


Abbildung 3.4: Testkörper TK01 mit Abmessungen [rei09]

Aluminiumwürfel: AlSi7MgCu0,5	Si 7% Mg <1% Cu 0,5
Rundeisen: S600 (HS-6-5-2) Weichglühgefüge	C 0,9% Cr 4,4% Mo 5% V 1,8% W 6,4%

Tabelle 2: Zusammensetzung der Testkörper [rei09]

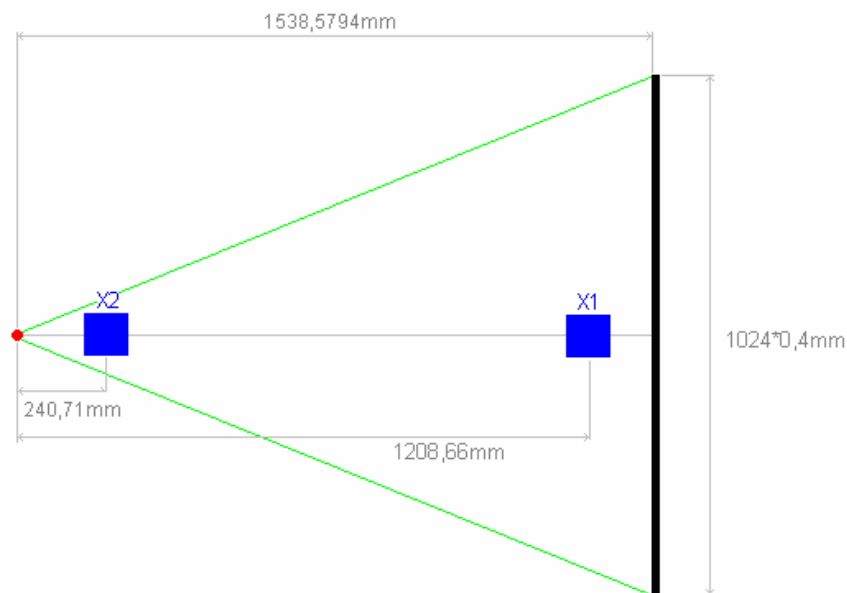


Abbildung 3.5: Schematische Anordnung der Messpositionen X1 und X2, sowie des Abstands Röhre-Detektor [rei09]

Röhrenbezeichnung	Viscom XT9225 DED
Röhrenbeschleunigungsspannung	200kV
Bestrahltes Target-Material (45°)	Wolfram
Röhrenstrom	160uA
Austrittsfenster Material	0,4mm Al
Vorfilter (einschiebbare Plättchen direkt nach dem Austrittsfenster)	1mm Al
Nachfilter (direkt vor dem Detektor)	1mm Al
Detektorbezeichnung	Perkin Elmer RID 1640 Al1 ES
Szintillator Material	Lanex fast (Gd ₂ O ₂ S:Tb)
Pixelgröße	400x400um
Detektorauflösung	1024x1024 Pixel ADC 16Bit
Detektorintegrationszeit	1000ms

Tabelle 3: Messparameter der CT Anlage [rei09]

3.2. Monte-Carlo Simulation

Die MC-Methode beruht im Gegensatz zu analytischen Methoden auf zufälligen Werten innerhalb von Wahrscheinlichkeitsverteilungen für einzelne Abschnitte eines mathematischen Modells. Sie liefert Ergebnisse nach dem statistischen Prinzip, wonach der ausreichend genau bestimmte Durchschnitt vieler Einzelmessungen ein nur von diesen Messparametern abhängiges System beliebig genau wiedergeben kann. Eine Einzelmessung entspricht hier einem Berechnungszyklus. Die MC-Methode findet hauptsächlich dann Anwendung, wenn es schwer oder unmöglich ist, für das zu berechnende System analytische Formeln herzuleiten. Verglichen mit der rein numerischen Lösung eines komplizierten mathematischen Problems führt sie bei gleicher Rechenzeit oft schneller zu einer Abschätzung des Ergebnisses und lässt dieses in ausreichender Genauigkeit erstellen. Ein für die später beschriebene Programmierung wichtiges Beispiel einer Verteilungsfunktion ist die Eindringtiefe eines Photons einer definierten Energie in Materie, siehe Gleichung (2.1). Wenn man diese umformt auf

$$\frac{N}{N_0} = e^{-\mu \cdot x} \quad (2.48)$$

und statistisch betrachtet, sieht man, dass N/N_0 zwischen 0 und 1 liegen muss, 0 für vollständige Absorption und 1 für keine Absorption. (2.48) ist also eine Wahrscheinlichkeitsverteilung für die Absorption eines Photons der Energie E in Materie des Elements Z mit dem dazugehörigen Abschwächungskoeffizienten $\mu(E, Z)$ über die Eindringtiefe x .

Eine Möglichkeit ein System nach der MC Methode zu berechnen ist, jeweils zwischen dem Gültigkeitsintervall der Verteilungsfunktion per Zufallszahl einen Wert zu finden und den (normierten) Funktionswert als Multiplikator zu verwenden. Voraussetzung für diese Methode ist, dass sich die Verteilungsfunktion geeignet umformen lässt, sodass ein gleichverteilter Term identifizierbar ist; dieser kann somit durch eine Zufallszahl aus einem Zufallszahlengenerator ersetzt werden. Für das Beispiel in (2.48) lautet die Umformung

$$x = -\frac{1}{\mu} \ln(Rnd) \quad (2.49)$$

mit der Zufallszahl Rnd . Sollte eine entsprechende Umformung nicht möglich sein, ist die Methode der Rückweisung anzuwenden. Dafür werden im Unterschied zum reinen Anwenden der Wahrscheinlichkeitsverteilung mindestens zwei Zufallszahlen benötigt, im einfachen Beispiel eine für den Definitionsbereich der Verteilungsfunktion $P(x)$ und eine für den Bereich zwischen Minimum P_{min} und Maximum P_{max} der möglichen Werte der Verteilungsfunktion, siehe Abbildung 3.6. Kommt der dabei gewählte Punkt innerhalb der Verteilung zu liegen, wird er übernommen und zum nächsten Rechenabschnitt fortgefahren. Liegt er jedoch außerhalb der Verteilung, wird er zurückgewiesen und ein neues Set an Zufallszahlen gezogen. Ein Beispiel für eine Verteilungsfunktion, die für die Wahl der Streuwinkel bei inkohärenter Streuung verwendet wird, ist die Klein-Nishina-Formel (2.12)

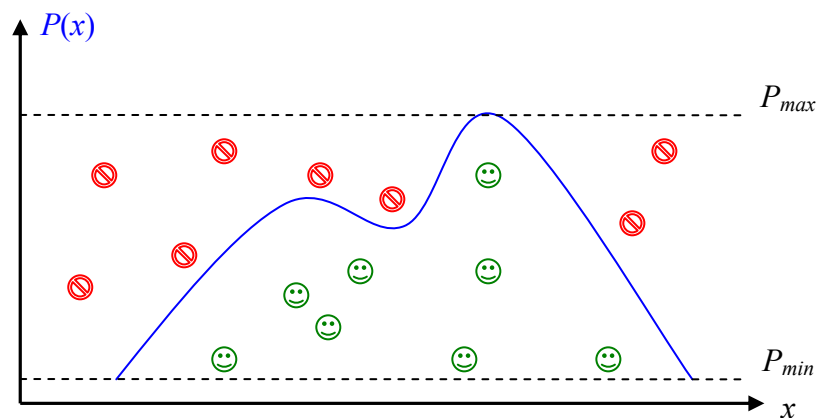


Abbildung 3.6: Schematische Darstellung der Rückweisungsmethode; Wertepaare $[x, P(x)]$, die im Definitionsbereich innerhalb der Verteilungskurve zu liegen kommen werden akzeptiert, alle anderen zurückgewiesen

Ein hoher Qualitätsfaktor für eine MC-Simulation ist der Zufallszahlengenerator selbst. Um die Statistik nicht künstlich zu beeinflussen, sollte er eine möglichst niedrige Periodizität besitzen. Das heißt, im Idealfall sollte die gleiche Abfolge an Zufallszahlen erst nach unendlich vielen Aufrufen erscheinen. Dass es hier große Unterschiede gibt, zeigt bereits der einfache Test der Gleichverteilung zweier Zufallszahlengeneratoren, einer Standardfunktion und einem Generator hoher Qualität (*Mersenne Twister* [mat02]) (Abbildung 3.7).

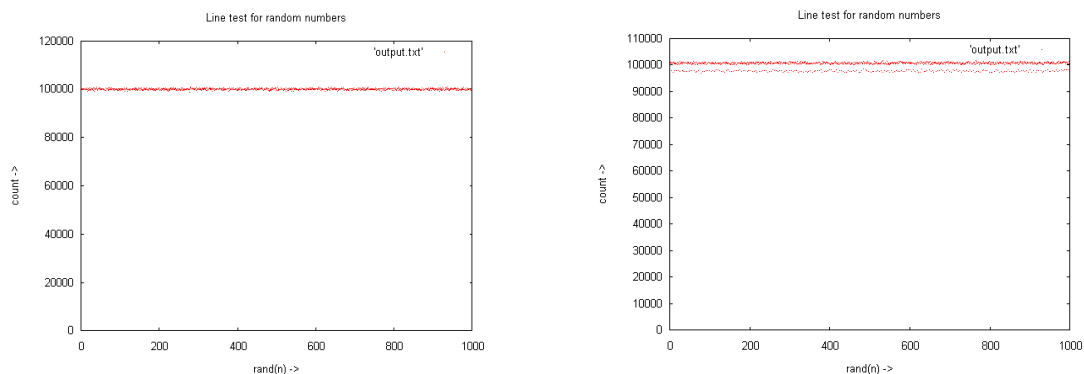


Abbildung 3.7: Test der Gleichverteilung des *Mersenne Twisters* [mat02] (links) und des Standard Zufallszahlengenerators (rechts)

Der in der eigenen Programmierung verwendete Zufallszahlengenerator *Mersenne Twister* ist für die Monte-Carlo Simulation besonders gut geeignet, da er mit der äußerst langen Periode von $2^{19937}-1$ (d.h. etwa $4,3 \cdot 10^{6001}$ eindeutige Kombinationen von Zufallszahlen) arbeitet und höchst gleichverteilte Zufallszahlen liefert. Aus dieser Gleichverteilung folgt eine sehr geringe Korrelation der Zufallszahlen untereinander [mat98].

3.3. Simulationsprogramm

Das Simulationsprogramm wurde nach der Methode der direkten MC-Simulation größtenteils in ANSI-C erstellt, um möglichst einfach in verschiedene Systeme portiert werden zu können. Das Programm bezieht sich nur auf die Streuung, Absorption und Fluoreszenz von Röntgenphotonen in Materie, aufbauend auf Bibliotheksfunktionen des Pakets *xraylib* [bru04], welche einen einfachen Zugriff auf umfangreiches Datenmaterial kompiliert aus verschiedenen publizierten Datenbanken für Fundamentalparameter enthält. Eine der für Fluoreszenz und Streuung wesentlichen Datenbanken ist die von Elam et al. [ela02], sie enthält für jedes Element der Ordnungszahl 1 (H) bis 98 (Cf) Daten wie Atomgewicht, Dichte (g/cm^3), Absorptionskanten und Listen mit Absorptionskoeffizienten (cm^2/g) für Fluoreszenz, elastische und Compton Streuung bei ausgewählten Energien. Formfaktoren stammen aus der Datenbank von Chantler et al. [cha01a]. Die gewünschten Werte für Absorptionskoeffizienten werden über die *xraylib*-Funktionen für jede Energie innerhalb des Definitionsbereich aus den Einträgen dieser Datenbanken interpoliert (spline [knu02],[pre92]).

Photonenquelle

Für die hier beschriebenen Simulationen werden Photonen mit einer zufälligen Anfangsrichtung und Polarisationsachse generiert. Die Photonen können einem einzigen Anfangspunkt entspringen oder über einen Brennfleck wählbarer Größe verteilt generiert werden. Die Anfangsrichtung kann über einen maximalen Winkel θ_{max} eingeschränkt werden, um den Strahlkegel der Röntgenröhre wiederzugeben oder einen Nadelstrahl zu simulieren. Für die Energieverteilung der Photonenquelle kann eine Datei mit einem Röhrenspektrum eingelesen werden; in Erweiterung dessen kann auch eine raumwinkelabhängige spektrale Häufigkeitsverteilung angegeben werden.

Probenkörper

Photonen, die den Probenkörper passieren und den Detektor erreichen, werden dort mit ihrer Anfangsenergie und Anfangsbewertung (Zählrate) registriert. Für Photonen, die in den Probenkörper eindringen, werden zunächst alle möglichen Schnittpunkte der Bewegungsgeraden mit denjenigen Flächen ermittelt, die den Körper definieren (Oberfläche des Würfels und Zylinder der Bohrung), und anhand der Schnittpunkte die Weglängen in den einzelnen Abschnitten (Al, Fe). Die Eindringtiefe des Photons in den inhomogenen Körper wird nun so ausgewählt, dass gilt

$$-\ln(1 - Rnd) = \mu x = \mu_1 x_1 + \mu_2 x_2 + \dots + \mu_n x_n \quad (3.1)$$

Rnd ist eine Zufallszahl, μ_i und x_i jeweils die linearen Absorptionskoeffizienten und Wegstrecken in den einzelnen durchlaufenen Materialabschnitten. An dem erreichten Punkt wird eine Wechselwirkung gewählt und dieser entsprechend eine neue Richtung ermittelt. Bei Fluoreszenz sind alle Richtungen gleichwertig. Bei Streuung muss jedoch auf den

differentiellen Streuquerschnitt Rücksicht genommen werden. In diesem Fall erfolgt die Wahl der neuen Richtung nach der Rückweisungs-Methode (rejection sampling, siehe Kapitel 3.2), die einhüllende Wahrscheinlichkeitsverteilung ist in diesem Fall der differentielle Streuquerschnitt der gewählten Streuung, Rayleigh in Gleichung (2.7) oder Compton in Gleichung (2.13). Sowohl bei kohärenter als auch bei inkohärenter Streuung bleibt die Polarisierung erhalten.

Detektor

Der Detektor ist als Fläche definiert, über die eine Pixel-Matrix gelegt wird. Abhängig von der Richtung und vom Austrittspunkt der Photonen aus der Probe wird das Detektor-Pixel ermittelt, in dem das Photon gezählt wird. Wahlweise kann die Energie gezählt werden oder die Photonenzahl (Zählrate) in dem entsprechenden Energiekanal. Die Anzahl der definierbaren Energiekanäle ist nur durch den auf dem Computer verfügbaren Arbeitsspeicher limitiert. Übliche Werte für Simulationen waren 10 und 200 Energiekanäle. Photonen können entsprechend ihrer Wechselwirkungshistorie in getrennten Dateien gespeichert werden. Es kann bei der Speicherung unterschieden werden:

1. durchdringende Photonen – keine Wechselwirkung
2. Gesamtsumme ohne Berücksichtigung der Historie
3. Photonen nach nur einer Wechselwirkung (jeweils Fluoreszenz, Rayleigh, Compton)
4. Summe aller Photonen, die den Detektor nach genau einer Wechselwirkung erreichen
5. Photonen nach genau zwei Wechselwirkungen (jeweils aufgeteilt nach allen möglichen Kombinationen: f-f, f-c, f-i, c-f, c-c, c-i, i-f, i-c, i-i mit f...Fluoreszenz, c...kohärent (Rayleigh), i...inkohärent (Compton))
6. Summe aller Photonen, die den Detektor nach zwei Wechselwirkungen erreichen

Bei beispielsweise 200 Energiekanälen und Aufzeichnung von nur einer Datei über alle 1024x1024 Detektorpixel wird alleine für das Simulationsprogramm ein verfügbarer Arbeitsspeicher (RAM) von etwa 1,7GB benötigt ($200 \cdot 1024 \cdot 1024 \cdot 8 \text{Byte}$).

Der Detektor kann auch mit bis zu 5 Schichten modelliert werden, wobei eine Schicht davon (Szintillator) als die zählende definiert wird. Dies ist, wie später in Kapitel 4.3 beschrieben, für die Analyse der Ausbreitung des Pixelsignals auf benachbarte Pixel durch detektorinhärente Streuung notwendig.

3.4. Analytische Berechnungen

Einige Berechnungen wurden auch auf analytischem Wege erstellt, unter Anderem zur Überprüfung der Ergebnisse der MC-Simulation. Die Programme wurden unter C, C++, *Excel* und *Matlab* erstellt und dienen der Ermittlung von

1. Röhrenspektren
2. Streuung erster Ordnung im Probenkörper TK01
3. Einfachstes Modell für Analyse von Bremsstrahlung im Probenkörper TK01
4. Fouriertransformation und Modulation der theoretischen Ergebnisse

Die Programme werden bei den Ergebnissen an den jeweils zugehörigen Stellen näher beschrieben.

3.5. MCNP

MCNP [mcn03] ist ein Softwarepaket der *Los Alamos National Laboratories* (LANL) zur MC-Simulation von Neutronen-, Elektronen- und Photonentransport in Materie und hat seinen Ursprung in der Neutronen- und Hochenergiephysik. Es erlaubt die Simulation für nahezu beliebige Strahlenquellen (Punkt, Fläche, Raum), Geometrien und Materialien und wird sowohl in der Reaktortechnik z.B. zur Berechnung des Neutronenflusses als auch häufig in der medizinischen Physik etwa zur Berechnung der Patientendosis bei der CT oder in der Strahlentherapie eingesetzt. Der simulierbare Energiebereich liegt zwischen 1keV und mehreren 100MeV. Der Teilchentransport ist nicht auf nur die Teilchenart der Quelle beschränkt, sondern es kann bei jeder Reaktion auch der Transport aller beteiligten Teilchen weiterverfolgt werden. Im vorliegenden Fall ist das für Photonen und Elektronen von Interesse.

Die hier verwendete Version ist MCNPX 2.5.0. Das Programm basiert auf Modulen für Berechnung, Ausgabe und Darstellung, sodass während einer Simulation auf die temporären Ergebnisse zugegriffen werden kann. Die Module sind in C++ und Fortran90 verfasst. Das gesamte Paket wird im Quellcode ausgeliefert und muss den Bedürfnissen entsprechend konfiguriert und kompiliert werden. Dies hat den Vorteil, dass das Programm auf vielen Plattformen lauffähig ist. Im Rahmen dieser Arbeit wurde MCNP auf Linux eingesetzt.

Die Definition einer zu simulierenden Problemstellung ist in einer Textdatei unter Einhaltung strenger Formatierungsregeln vorzunehmen und ist in drei Blöcke aufgeteilt, einem Zellenblock, einem Geometrieblock und dem Datenblock. Im Zellenblock wird die gesamte Probengeometrie definiert. Die einzelnen Zellen werden hier durch Zuweisung der im Geometrieblock definierten Ebenen und im Datenblock definierten Materialien aufgebaut.

Die Materialdefinitionen im Datenblock bestehen aus Elementzusammensetzung und Auswahlmöglichkeiten der zu verwendenden Wirkungsquerschnitt-Datenbanken. Weitere Definitionen im Datenblock sind:

- Definition der Partikelquelle (Form, Art, Energie, Richtung, Verteilung...)
- Einschränkungen der Partikel, Physik, und Wechselwirkungen
- Einstellungen zur Varianzreduzierung
- Zählerdefinitionen (Form, Partikel, Art: Pulshöhe, Energie, Zählrate, ...)
- Ausgabedefinition.

Ein weiterer wichtiger Bestandteil des Pakets ist der *MCNP Visual Editor*, der als Schnittstelle zu MCNP in Form einer (nur unter Windows laufenden) grafischen Oberfläche fungieren kann (Screenshot siehe Abbildung 3.8). Neben der Definition der Geometrie mit interaktiver 3D-Darstellung zur Überprüfung auch von Quell- und Eintrittspunkten erlaubt er auch die Betrachtung der Ergebnisse und den Import von CAD Daten. Der Geometrie eines Simulations-Problems ist in jedem Fall höchste Aufmerksamkeit zu schenken, da sie meistens die Hauptursache einer falschen oder fehlgeschlagenen Simulation ist.

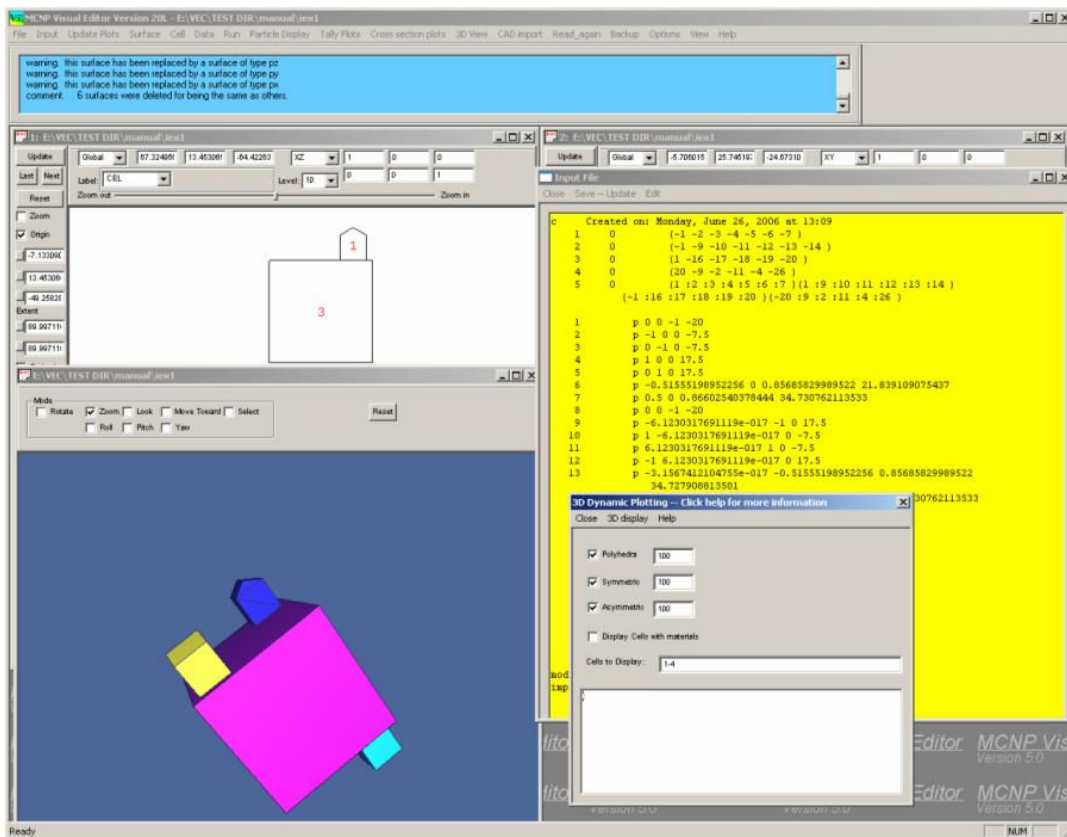


Abbildung 3.8: Screenshot des MCNPVised aus einem Übungsbeispiel
http://mcnpvised.com/sample_exercises/images/display_and_plotting.jpg

Die in Form von pdf-Dateien mitgelieferte Dokumentation ist sehr umfangreich und beinhaltet einen Teil zur Theorie, einen Teil zur Konfiguration und Definition von Simulationen sowie einen Teil für Entwickler, die das Paket individuell anpassen möchten. Eine schnelle Einführung mit kurzen Anwendungsbeispielen sind im Teil2 der Dokumentation zu finden sowie auch online von Shultis und Faw [shu04].

Weiterführende Informationen zu MCNP sind unter diesen Weblinks zu finden:

<http://mcnp-green.lanl.gov>
<http://mcnpx.lanl.gov>
<http://mcnpvised.com>

3.6. *PHOENIX Linux Cluster*

Sämtliche Berechnungen wurden auf dem Phoenix Linux Cluster [pho09] des Zentralen Informatik Dienstes der Technischen Universität Wien durchgeführt. Phoenix ist ein 140-CPU Opteron Cluster basierend auf einem Linux Betriebssystem. Jeder single-core Prozessor wird mit der Taktung von 2,4GHz betrieben und hat eine theoretische peak performance von 4,8 GFlop/s. Jedem Node stehen 4GB Hauptspeicher zur Verfügung.

4. Ergebnisse

Die Simulationen wurden zunächst mit vereinfachten Annahmen mit dem eigenen Programm durchgeführt, um einen qualitativen Eindruck zu gewinnen. Die Vereinfachungen dabei waren:

- Annahme reiner Elemente Fe und Al (keine Verunreinigungen)
- Keine Umgebungsluft
- Röhrenspektrum nach einem Modell, dessen Gültigkeit nur bis maximal 50keV gesichert ist
- Reine Photonen-zählung in Detektorpixel
- Keine Elektronenwechselwirkungen
- Keine Fluoreszenz in der Probe
- Keine sonstigen Effekte der Strahlung im Detektor

Im weiteren Verlauf wurden mögliche Quellen identifiziert, die das Streubild beeinflussen können, und in spezifischen Simulationen untersucht. Dabei wurde MCNP einerseits zum Vergleich der Ergebnisse des eigenen Programms herangezogen und andererseits dort eingesetzt, wo das eigene Programm nicht mehr angewandt werden konnte (Elektronen-Wechselwirkungen). Die näher untersuchten Einflüsse auf das Projektionsbild waren:

- Streuung der Strahlung in exponierten Komponenten des Detektors
- Detektoreffizienz und Eichkurven
- Spektrale Verteilung der in der Röhre erzeugten Strahlung; sowohl in der direkten Simulation für die richtungsabhängige Spektral- und Intensitätsverteilung bei der Projektion, als auch zum Vergleich der Ergebnisse mit dem analytischen Modell
- Streuung durch die Probe
- Streuung durch Umgebungsluft
- Bremsstrahlung in der Probe
- Durch Sekundäre Elektronen in der Probe verursachte Effekte
- Ausbreitung der in einem Detektorpixel ankommenden Photonen auf benachbarte Pixel durch detektorinhärenter Streuung

In abschließenden Simulationen wurden alle in den Einzeluntersuchungen erhaltenen relevanten Erkenntnisse verwendet und mit der Messung verglichen.

4.1. Projektion

Die Röntgenprojektion des Probenkörpers TK01 mit eingesetztem Eisenkern wurde für die Positionen X1 und X2 zunächst mit dem selbstentwickelten Programm simuliert. Für eine Reihe von Messungen wurden immer jeweils eine Dunkelmessung (ohne Röhre) und ein Weißbild (Röhrenstrahl ohne Probe) erstellt. Der Messwert jedes Pixels einer Projektion des Probenkörpers wurde dann auf das Weißbild (abzüglich Dunkelwert) normiert

$$PixelNorm_{ij} = \frac{Messwert_{ij} - Dunkelwert_{ij}}{Weißwert_{ij} - Dunkelwert_{ij}} \quad (4.1)$$

Dieser Weißabgleich wurde bei den Simulierten Projektionen ebenfalls vorgenommen. Für die Simulation entfiel jedoch die Dunkelmessung, da elektronische Effekte des Detektors nicht einbezogen werden. Das Röntgenspektrum der Röhre wurde gemäß der experimentellen Einstellungen (Tabelle 4) nach dem Modell von Ebel [ebe05],[ebe06] berechnet. Der Strahlungskegel wurde in 200*200 Teile gleicher Grundfläche segmentiert, für die entsprechenden Winkel θ und φ wurde jeweils ein Spektrum von 200 Kanälen berechnet. Das Spektrum entlang der Außenseite des Kegels für den Winkel $\theta = 15^\circ$ ist in Abbildung 4.2 dargestellt. In Abbildung 4.3 bis Abbildung 4.6 werden jeweils Simulation (a) und Messung (b) gegenübergestellt. Bei allen dargestellten Projektionen wurde bereits der Weißabgleich berücksichtigt.

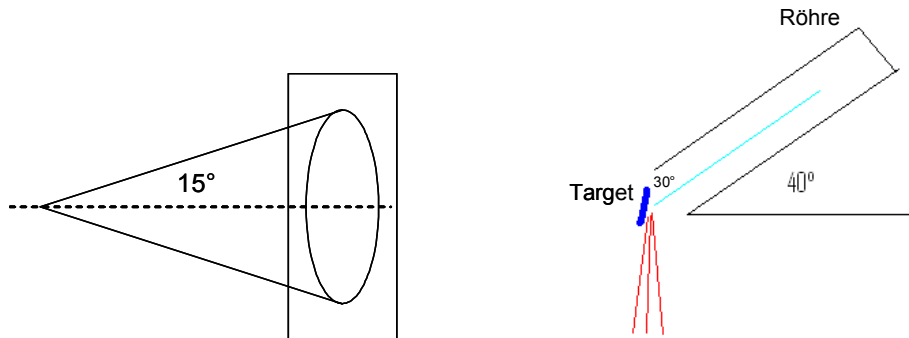


Abbildung 4.1: Schematische Darstellung der Geometrie der Röntgenröhre, d.h. Winkel des ein- und ausfallenden Strahls sowie Lage der Röhre in Bezug auf Probe und Detektor

Abbildung 4.5 und Abbildung 4.6 zeigen deutlich die Unterschiede der beiden Positionen X1 und X2, die je nach Anwendungsfall Vor- und Nachteile aufweisen können. Bei der detektornahen Position X1 tritt der Effekt der Kegelstrahlgeometrie weniger stark in Erscheinung, die Strahlung der Röhre trifft bereits fast parallel auf die Probe ein und die Größe des Brennflecks auf dem Röhrentarget ist hier nicht von so großer Bedeutung. Die Auswirkungen von Streuung in der Probe wirken sich somit nicht so stark auf die Rekonstruktion aus. Die Auflösung der Objektdetails ist jedoch nur etwa ein Fünftel im Vergleich zu der Projektion resultierend aus der detektorfernen Position X2. Die Verzerrungen der Abbildung infolge der divergenten Strahlung sind dagegen in der detektorfernen Position deutlich sichtbar.

$\varphi_{\text{Elektron}}$	30
θ_{max}	15
Target Element	W
Window Dicke (Be) [μm]	200
Ω [sterad]	0.01
Spannung [kV]	200
Strom [mA]	0.19
E_{min} [keV]	1
E_{max} [keV]	200
Esteps	200
Filter Element	Al
Filter Dicke [μm]	1400

Tabelle 4: Röhrenparameter, die für die Berechnung des Spektrums verwendet wurden

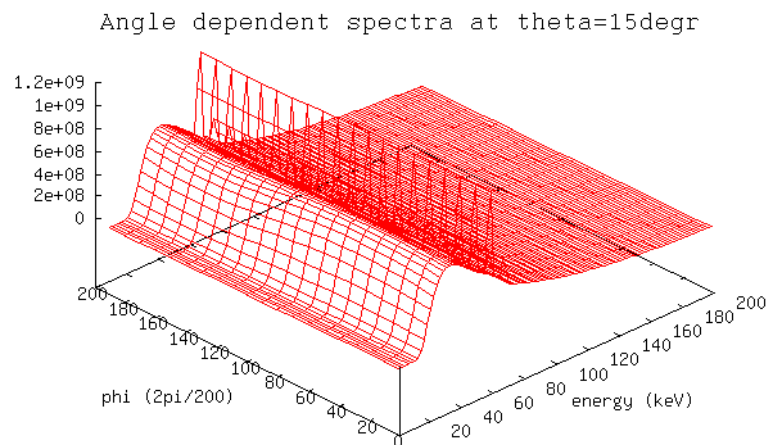


Abbildung 4.2: Richtungsabhängigkeit des Röhrenspektrums am äußeren Rand des für die Detektorbreite relevanten Strahlkegels bei $\theta = 15^\circ$ für $\varphi = 0 - 360^\circ$ und einer Energieauflösung von 1 - 200keV

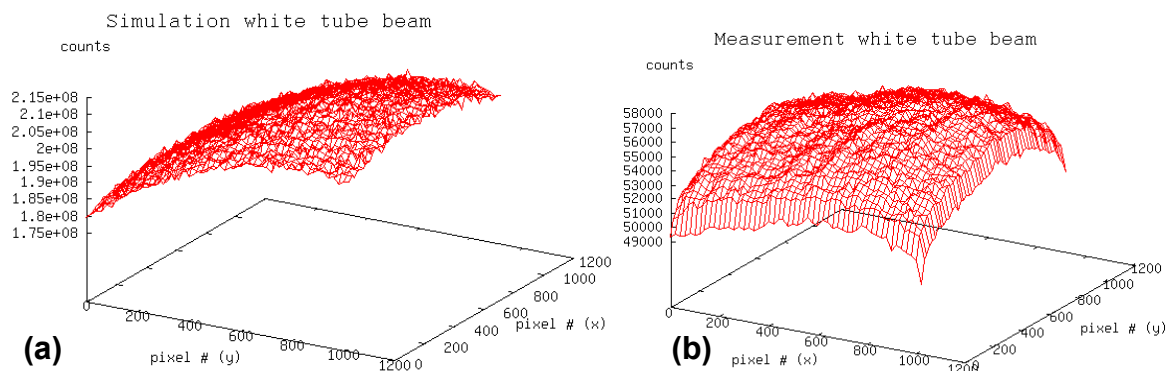


Abbildung 4.3: Simulation (a) und Messung (b) des weißen Röhrenstrahls ohne Probe über die gesamten 1024x1024 Pixel der Detektorfläche, der für den Weißabgleich der Probenstreubilder verwendet wird

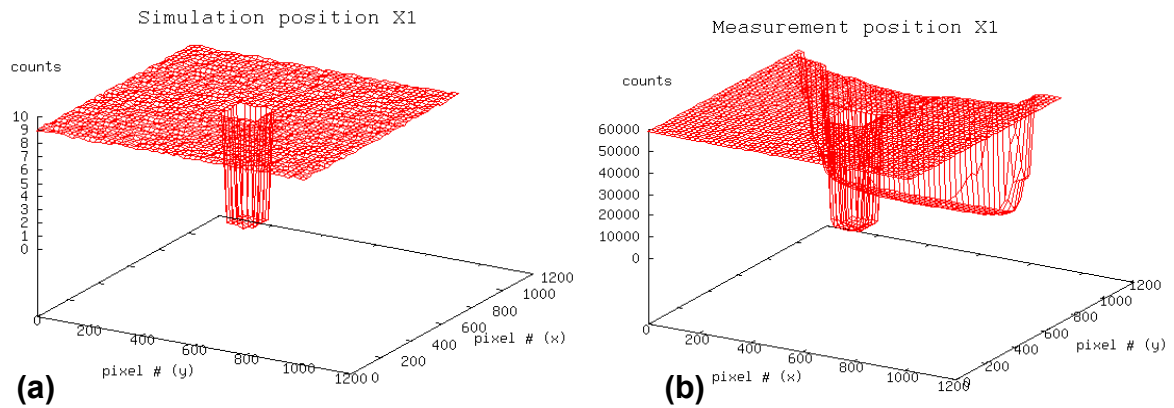


Abbildung 4.4: Simulation (a) und Messung (b) der Projektion des Probenkörpers TK01 an der Position X1 über die gesamten 1024x1024 Pixel der Detektorfläche. Die Verzerrungen am Rand des Bildes aus der Messung (b) stammen von der Probenhalterung

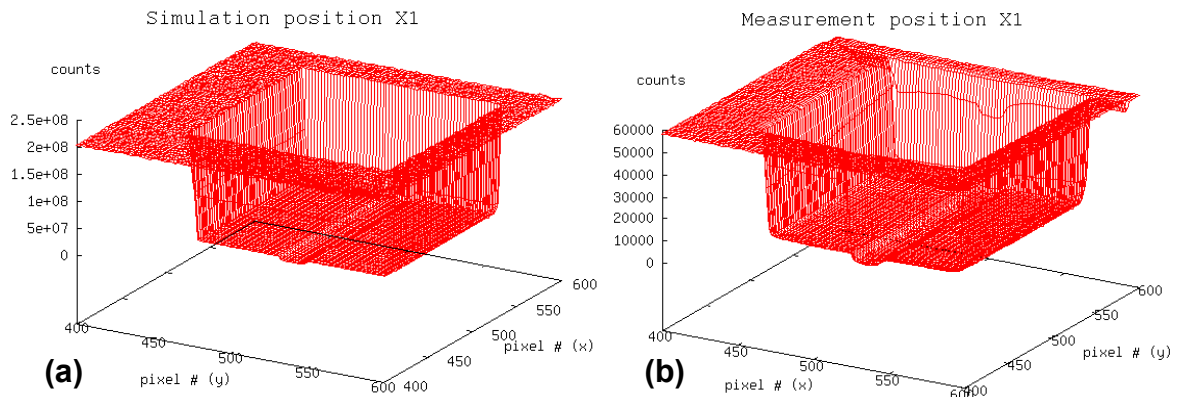


Abbildung 4.5: Simulation (a) und Messung (b) der Projektion des Probenkörpers TK01 an der Position X1 über 200x200 Pixel des Zentrums der Detektorfläche. Deutlich zu sehen ist hier die scharfe Kante der Projektion im Gegensatz zu der Position X2 (Abbildung 4.6), die aufgrund des schon fast parallelen Strahlengangs zustande kommt. Die Größe des Brennflecks in der Röhre spielt hier eine untergeordnete Rolle.

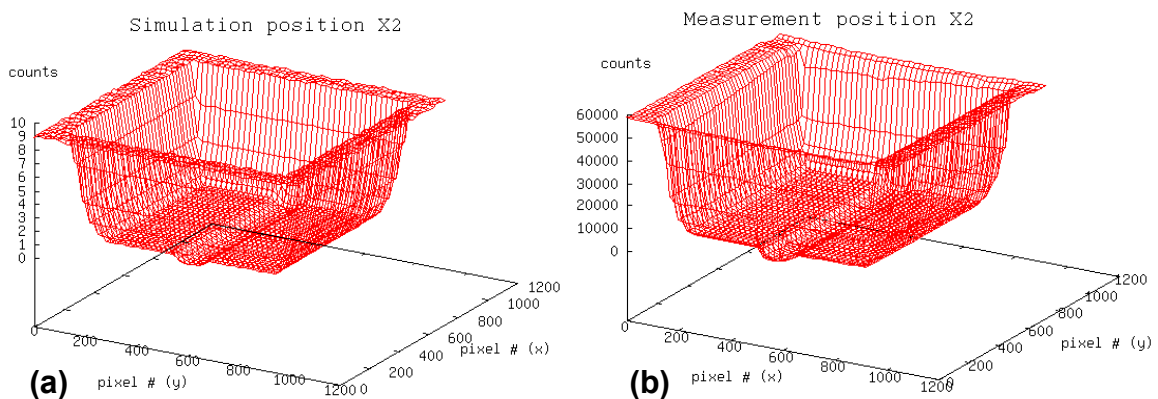


Abbildung 4.6: Simulation (a) und Messung (b) der Projektion des Probenkörpers TK01 an der Position X2 über die gesamten 1024x1024 Pixel der Detektorfläche.

Der objektive Vergleich zwischen Messung und Simulation ist am besten im Plot für die Intensitätswerte entlang der mittleren Pixelreihe des Detektors zu sehen. Abbildung 4.7 zeigt den Probenkörper TK01 an der detektornahen Position X1, Abbildung 4.8 an der detektorfernen Position X2. Für X2 ist die Differenz zwischen Messung und Simulation in Abbildung 4.9 zu sehen. Die Abweichung von mindestens etwa 5% der ungestreuten Intensität des primären Strahls und mindestens 50% der Intensität der Kernschatten für den Aluminium-Bereich ist beträchtlich (siehe Abbildung 4.10).

Außerdem zu erkennen ist eine systematische Abweichung, die bei der Messung gegenüber der Simulation eine Wölbung der Intensitätskurve zu höheren Intensitäten an den Rändern des Schattens verursacht. Die Intensitätswerte sind in den folgenden Abbildungen jeweils auf den Intensitätsverlauf des Weißbildes (Messung/Simulation der Röhrenstrahlung ohne Probe) entsprechend der Formel (4.1) normiert.

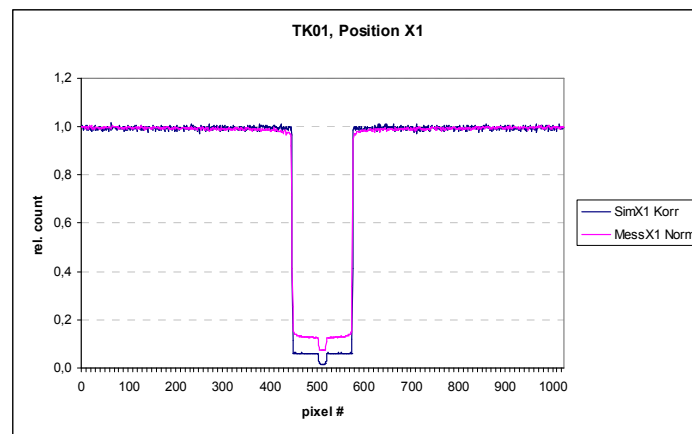


Abbildung 4.7: Vergleich Simulation und Messung von TK01 an der Position X1 (detektornah); Intensität normiert auf Weißbild (Messung/Simulation ohne Probe)

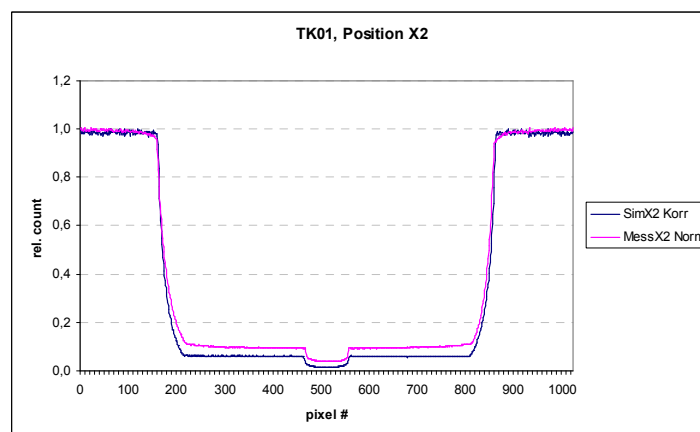


Abbildung 4.8: Vergleich Simulation und Messung von TK01 an der Position X2 (detektorfern) ; Intensität normiert auf Weißbild (Messung/Simulation ohne Probe)

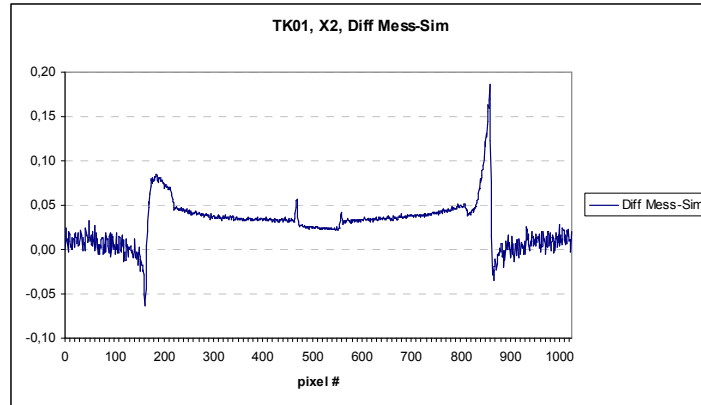


Abbildung 4.9: Differenz Messung-Simulation TK01 an Position X2

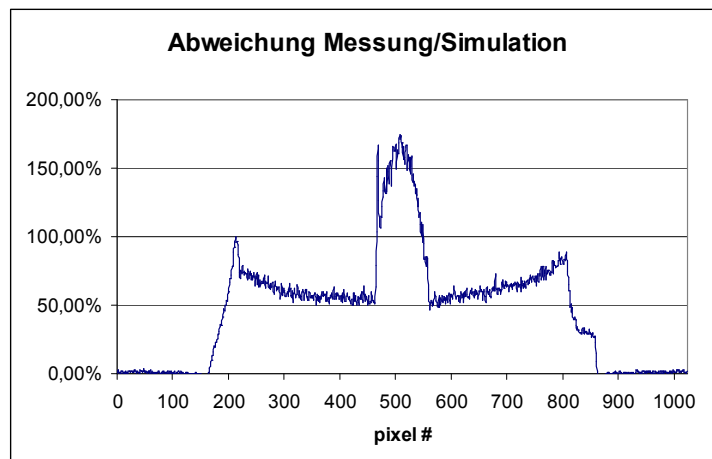


Abbildung 4.10: Relative Abweichung Messung/Simulation bei Position X2, Verhältnis der Intensitätsverläufe

Für eine genauere Analyse des Streubildes wurde das Schattenprofil über die mittlere Detektorreihe für mehrere Energiebereiche getrennt dargestellt (Abbildung 4.12). Die ersten beiden Energiekanäle (0-20 und 20-40keV) wurden nicht mehr einbezogen, da die Intensität im Schatten verschwand und somit ein Weißabgleich nicht mehr sinnvoll war. Zur Verbesserung der Aussagekraft wurde jeder Kanal auf sein jeweiliges Weißbild normiert, d.h. der Weißabgleich erfolgte kanalweise. Es ist deutlich zu sehen, dass sowohl die Intensität des gesamten Schattens als auch die Form des Bereichs hinter dem zylindrischen Eisenkern vom Spektralbereich der primären Strahlung abhängt, verursacht durch den Effekt der Strahlaufhärtung. Dieser Effekt ist auch in Abbildung 4.11 dargestellt. Der Spektralbereich zwischen 0 und 40keV wurde nicht mehr dargestellt, da im Bereich des Schattens keine Intensität mehr vorhanden war und ein Weißabgleich nicht mehr möglich war. In Abbildung 4.13 ist zu sehen, dass sich die Übereinstimmung mit der Messung durch Unterdrückung des langwelligen Bereichs drastisch verbessert, da dieser im ungestreuten (weißen) Bereich am Rand des Detektors nichts mehr zur Zählung beiträgt.

Eine Unterdrückung dieses Bereichs kann teilweise durch Einbeziehung der Streuung und Absorption an der Umgebungsluft erklärt werden, was durch Simulationen mit MCNP bestätigt wird. Weiters ist weder das Röntgenspektrum in diesem Fall noch genau bekannt (unter Anderem durch die Limitation des angewandten Modells auf niedrigere Energien < 60keV), noch wurde die Detektoreffizienz in irgendeiner Weise berücksichtigt.

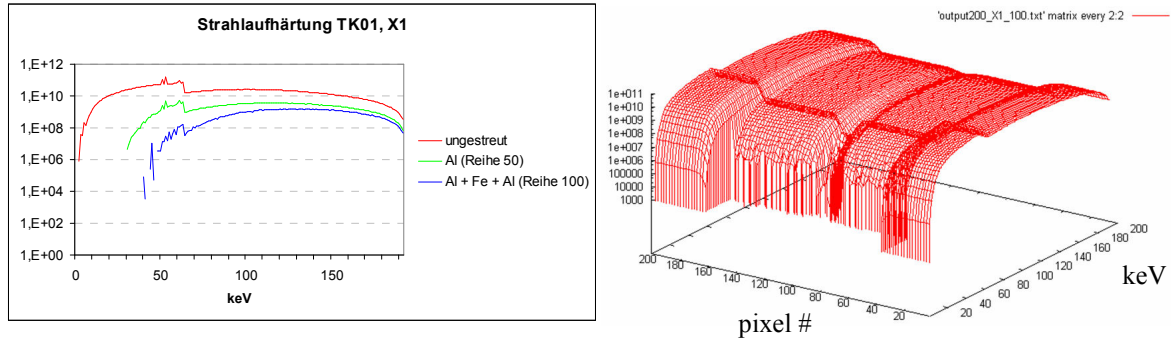


Abbildung 4.11: Energieverteilung des Schattenprofils an drei wesentlichen Punkten (li) und über 200 Pixel der mittleren Detektorreihe (re) für Position X1. Der Verlauf am Rand entspricht dem Röhrenspektrum. Deutlich zu sehen ist der Effekt der Strahlaufhärtung im Bereich des Schattens, also der Unterdrückung des niederenergetischen Spektralbereichs

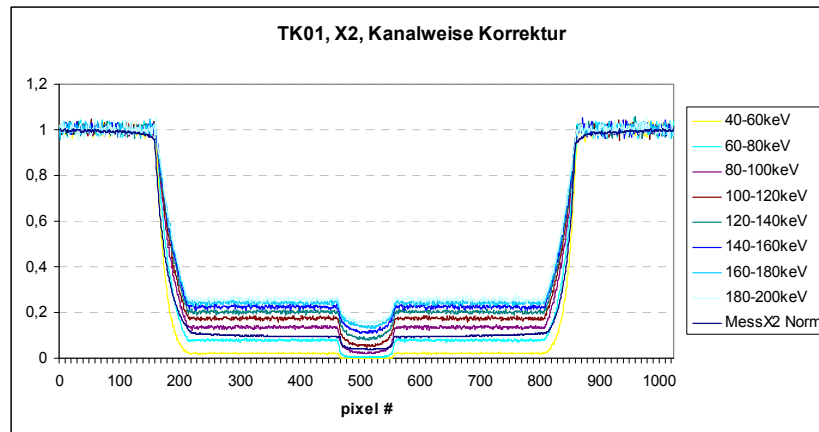


Abbildung 4.12: Aufteilung des Schattenprofils für TK01 bei X2 auf mehrere Energiekanäle. Der Graph der Messung ist am besten anhand der Krümmung im Schattenbereich zu erkennen.

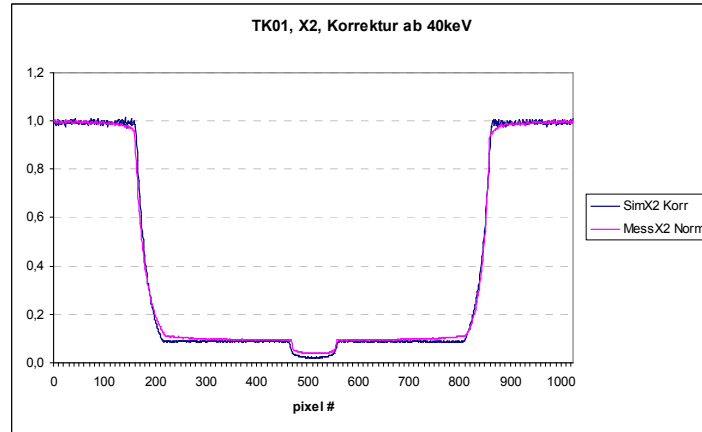


Abbildung 4.13: Schattenprofil von TK01 bei X2 unter Einbeziehung aller Energiekanäle ohne den Bereich von 0-40keV

Für den Probenkörper TK02 (siehe Kapitel 3.1) wurde aus der simulierten Projektion ein 3D-Bild rekonstruiert. Aufgrund der Kreissymmetrie war für die Rekonstruktion eine einzige Projektion ausreichend. Da eine genaue Simulation einer einzigen Projektion unter Inanspruchnahme von 25 gleichzeitigen Rechenprozessen etwa einen Tag in Anspruch nahm (CPU Zeit von 24h * 25Nodes) und für eine genaue Rekonstruktion etwa 700 Aufnahmen mit unterschiedlichen Winkelstellungen zum Detektor benötigt werden, wurde darauf verzichtet, die Rekonstruktion mit TK01 zu erstellen. Jedem Benutzer auf dem phoenix-Cluster [pho09] standen nämlich (kurzfristig) maximal 64 Nodes von insgesamt etwa 140 gleichzeitig zur Verfügung.

Die simulierte Projektion ist in Abbildung 4.14 zu sehen, Querschnitte des rekonstruierten 3D-Bilds in Abbildung 4.15. Das Grauwertprofil in Abbildung 4.16 zeigt deutliche Artefakte möglicherweise aufgrund von kohärenter Streuung in der Probe; wie in Kapitel 4.4 gezeigt wird, ist der Effekt der kohärenten Streuung stärker als erwartet.

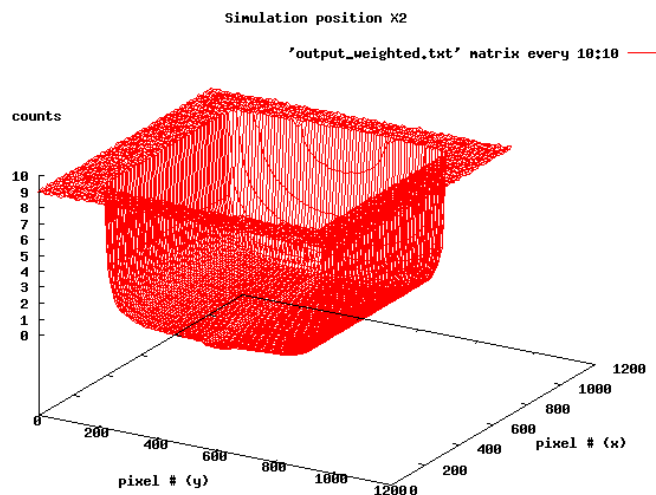


Abbildung 4.14: Simulierte Projektion des Probenkörpers TK02 an der Position X2

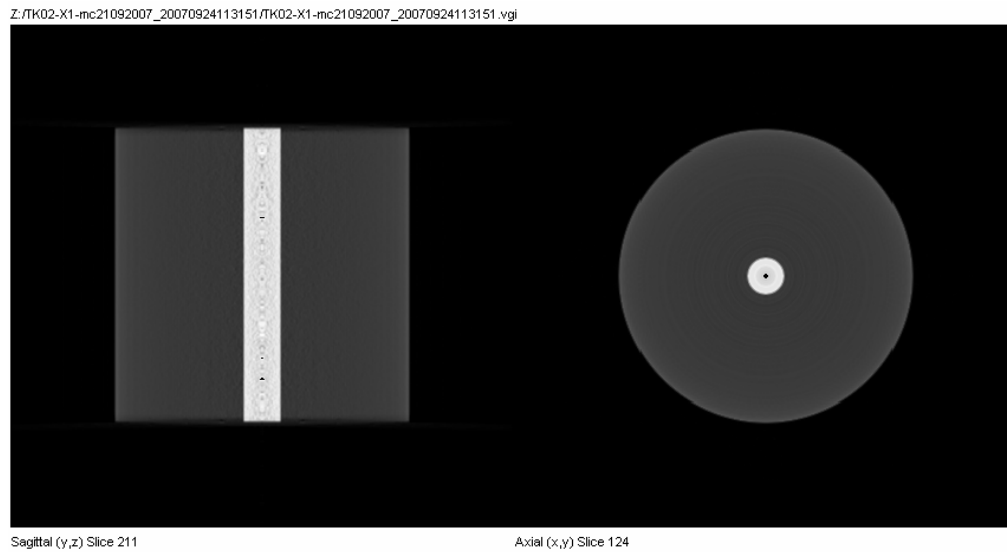


Abbildung 4.15: Rekonstruiertes 3D-Bild des Probenkörpers TK02 [rei09]

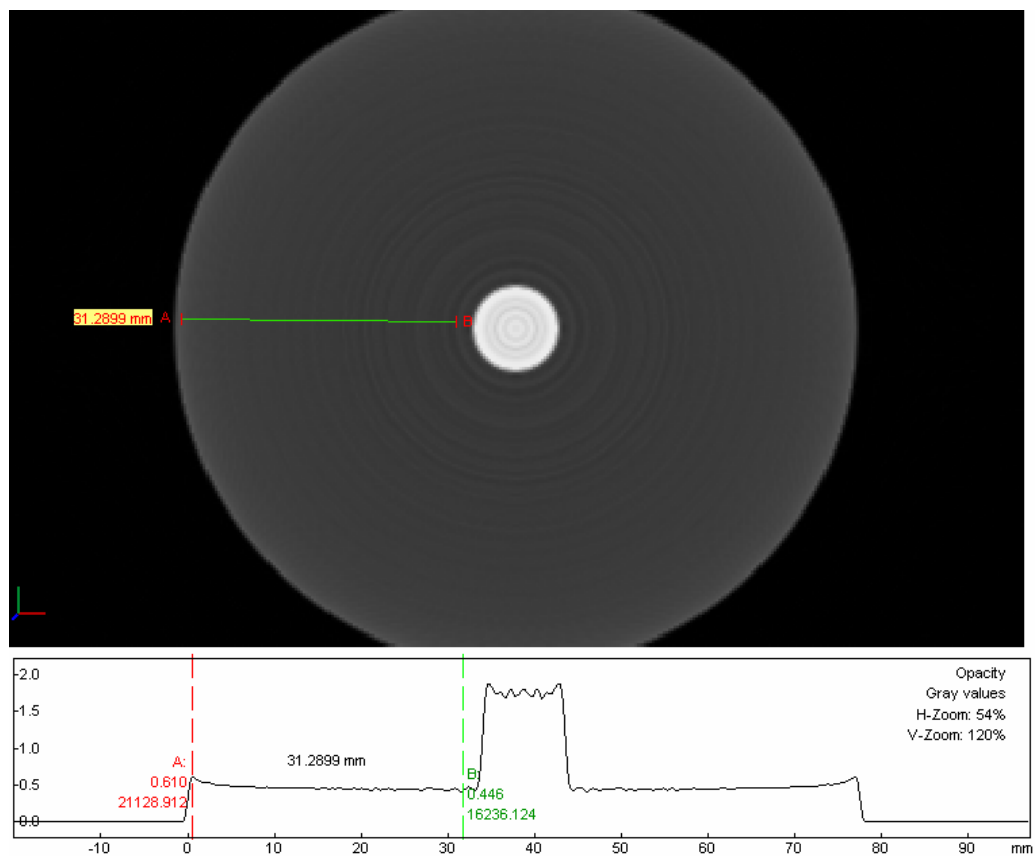


Abbildung 4.16: Vergrößerung der Draufsicht des rekonstruierten Probenkörpers TK02. Das Grauwertprofil (darunter) zeigt deutliche Artefakte jeweils am Rand der Zylinder (Fe innen, Al außen; M.Reiter)

4.2. Effekte durch Wechselwirkungen mit dem Detektor

Detektorempfindlichkeit

Der Detektor in der CT Anlage, auf der die Messungen stattfanden, beruht auf dem Prinzip der Szintillation. Dieser Umstand wurde bei den bisherigen Messungen noch nicht berücksichtigt. Da in der Realität in diesem Fall nur das Szintillationslicht gemessen wird, das durch die einfallende Strahlung hervorgerufen wird, wurde zunächst davon ausgegangen, dass der Messwert im Detektorpixel aus der gesamten gezählten Energie resultiert. In der Simulation muss daher die Photonenzahl mit der entsprechenden Energie und einem energieabhängigen Faktor für die Detektoreffizienz multipliziert werden, bevor sie in der entsprechenden Feldvariablen gespeichert wird. Für den Messwert gilt also

$$\text{Messwert}_{ij} = \int I_{ij}(E) f(E) dE \quad (4.2)$$

mit der theoretischen Intensität $I(E)$ im Detektorpixel (ij) und der noch zu bestimmenden Detektoreffizienz $f(E)$.

In einem stark vereinfachten Modell wurde dieser Effekt über die totale Massenabsorption des Szintillatormaterials in die Simulation eingebaut. Es wurde als Abschätzung nur der Anteil N gezählt, der vom ursprünglichen Anteil N_{det} in der Szintillatorschicht der Dicke d absorbiert wurde.

$$N = N_{\text{det}} \cdot (1 - e^{-\mu d}) \quad (4.3)$$

Dabei spielt natürlich die Einfallsrichtung der Photonen eine Rolle, denn bei schrägem Einfall ist der Weg durch die Szintillatorschicht größer und damit die Zahl der absorbierten Photonen höher. Die Szintillatorschicht wurde aus reinem Gd bestehend angenommen, da die Absorptionskoeffizienten der anderen Bestandteile (S, O) im Vergleich zu dem von Gd vernachlässigbar sind; Tb ist nur in Spuren vorhanden (Dotierung).

Bezieht man sämtliche Schichten des Detektors in diese Abschätzung ein, so erhält man eine grobe Näherung für eine Detektoreffizienz. Der Verlauf dieser geschätzten Eichkurve ist für beide in der Dokumentation angegebenen Szintillator-Schutzschichten (Graphit, Mo) in Abbildung 4.17 dargestellt. Im Übrigen sieht man anhand dieser Kurven, dass Fluoreszenz in der Probe, also von Al (K-Kante bei 1.559keV) oder Fe (K-Kante bei 7.112keV), mit einer Mo-Schutzschicht problemlos und mit einer Graphit-Schutzschicht gerade noch vernachlässigt werden kann, was die Berechnungszeit wesentlich verkürzt. In beiden Fällen ist ja dem Detektor noch eine 1mm starke Al-Platte vorgeschoben.

Das Ergebnis der Streubildsimulation des Probenkörpers TK01 an der Position X2 unter Einbeziehung dieser Annahmen jedoch ohne Schutzschichten ist in Abbildung 4.18 dargestellt. Wie der Graph in Abbildung 4.19 zeigt, verbessert sich dadurch zwar die Differenz des Schattens des Aluminiumbereichs nicht wesentlich; im Unterschied zu Abbildung 4.9 hat sich jedoch der Bereich des Schattens hinter dem Eisenstab verbessert.

Die systematische Abweichung in Form der Krümmung ist nach wie vor vorhanden, ihre Ursache wurde in der Signalausbreitung auf benachbarte Pixel infolge detektorinhärenter Streuung angenommen.

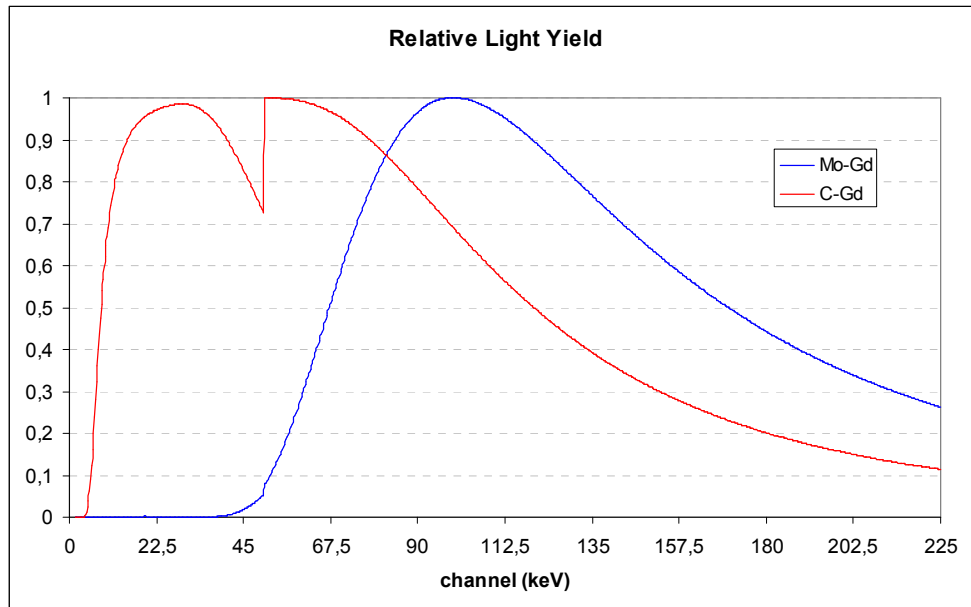


Abbildung 4.17: Theoretische Detektoreffizienz berechnet anhand von Fundamentalparametern bei senkrechter Einfallsrichtung für reines Gd als absorbierendes Material und jeweils mit einer Schutzschicht von Mo oder C (Graphit)

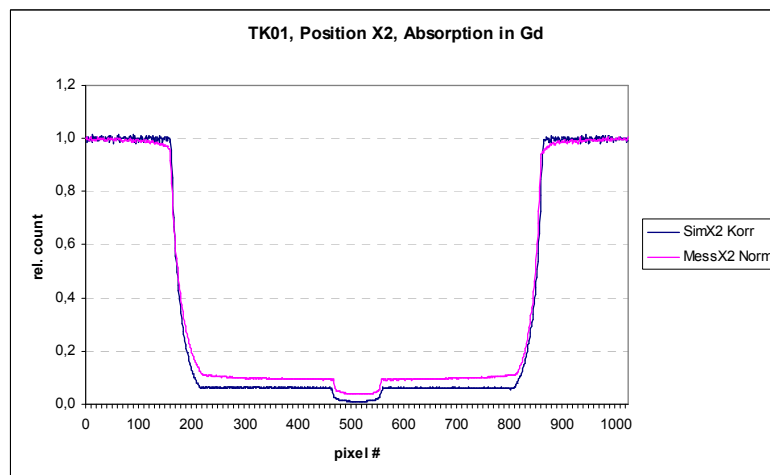


Abbildung 4.18: Vergleich Simulation und Messung von TK01 an Position X2 mit Absorption in Gd-Schicht auf Detektor, ohne Schutzschicht auf dem Szintillator

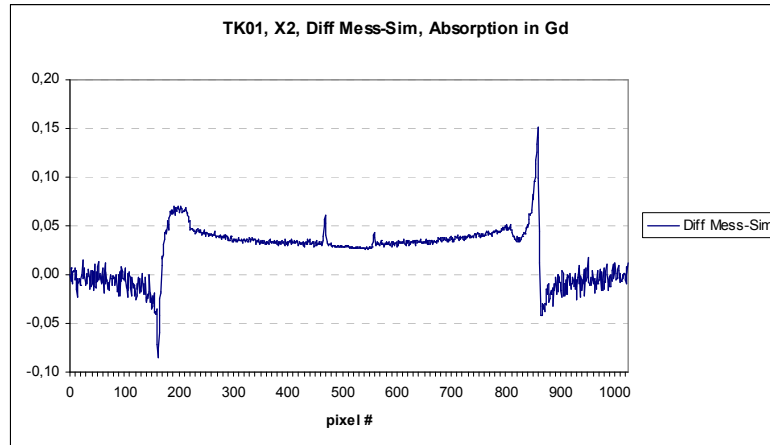


Abbildung 4.19: Differenz Messung-Simulation TK01 an Position X2 mit Absorption in Gd-Schicht auf Detektor

Einfluss der Al-Filterplatte vor dem Detektor

Der Detektor wird zum Schutz vor der Strahlung und zur Verlängerung der Lebensdauer mit einer Filterplatte aus Aluminium verdeckt. Diese Filterplatte ist außen am Detektorgehäuse angebracht, 1mm dick und befindet sich 4cm vor der obersten Detektorschicht. Die Streuung des primären Strahls durch die Filterplatte wurde durch einen Probenkörper mit entsprechender Dicke und Abstand vor dem Detektor mit einem auf ein einziges Detektorpixel fokussierten Strahl simuliert. Der Einfallswinkel auch der gestreuten Strahlung wurde dabei für die Energieabsorption wie auch schon weiter oben in der ersten einfachen Untersuchung der Auswirkungen der Szintillatorschicht im Detektor herangezogen. Das Streuprofil der mittleren Detektorreihe ist in Abbildung 4.20 und in Abbildung 4.21 aufgeteilt nach verschiedenen Energiekanälen dargestellt. Grundsätzlich könnte dieses Profil ähnlich wie im Kapitel 4.3 vorgestellt für die weitere Bildbearbeitung benutzt werden, der Effekt kann jedoch aufgrund der viel zu geringen Intensität neben dem an fokussierten Pixel ohne Bedenken vernachlässigt werden; die Filterplatte hat eine nur sehr geringe Strahl aufweitende Auswirkung (mehr als 5 Größenordnungen geringer als der ungestreute Strahl). Auch eine wesentlich dickere Szintillatorschicht würde an diesem Effekt nicht viel ändern, wie Abbildung 4.22 zeigt.

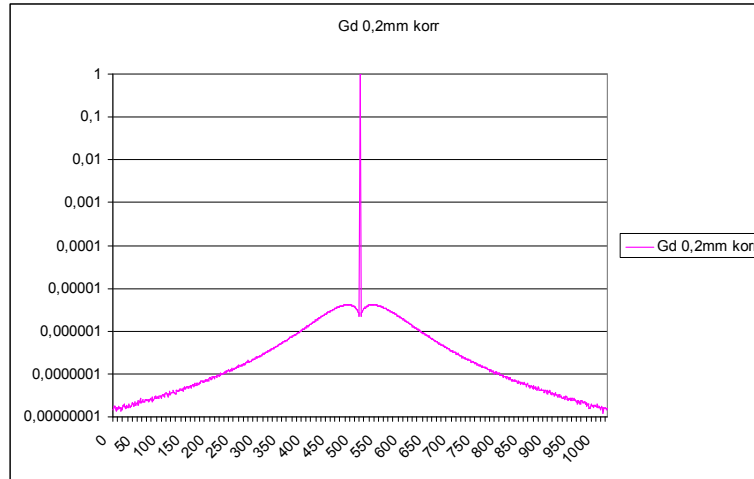


Abbildung 4.20: Streuung eines fokussierten Strahls durch eine 1mm dicke Al-Platte 4cm vor dem Detektor

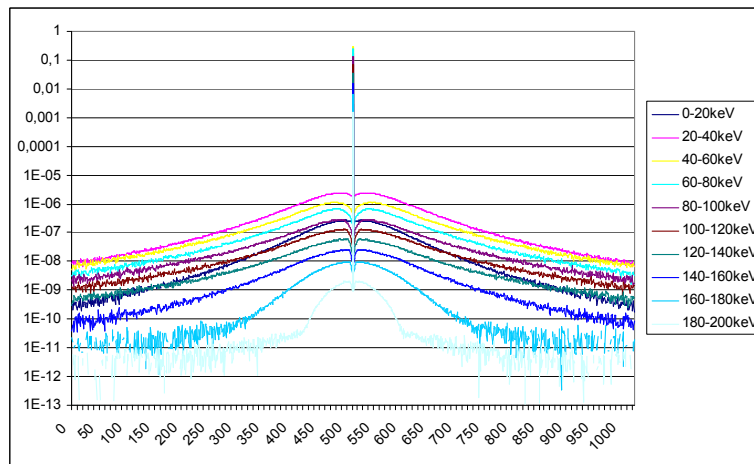


Abbildung 4.21: Energiekanalweise Trennung der Streustrahlung durch den Nadelstrahl

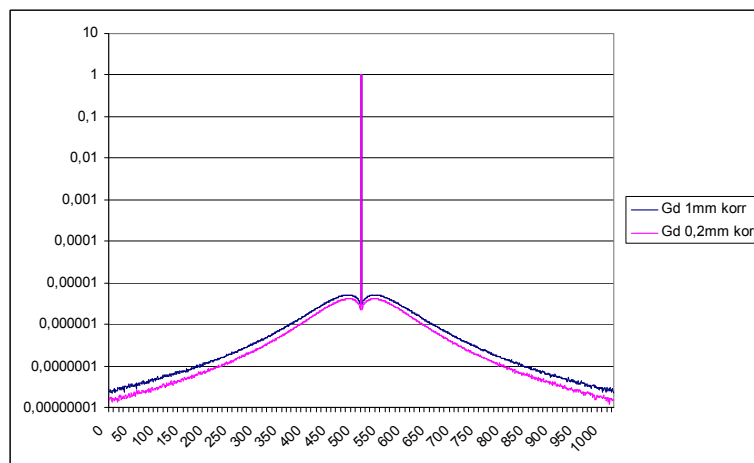


Abbildung 4.22: Einfluss unterschiedlicher Szintillatorschichtdicken auf die Auswirkungen der Al-Filterplatte

Detektorgehäuse

Der Detektor ist in einem Aluminiumgehäuse eingebettet, das die Bleiabschirmung für die den Detektor umgebende Ausleseelektronik trägt (siehe Abbildung 3.3). Da sich dieses Gehäuse auch zumindest teilweise im Röhrenstrahlkegel befindet, ist es möglich, dass Strahlung vom Gehäuse auf den Detektor rückgestreut wird. Dies könnte das Streubild beeinflussen. Zur Untersuchung dieses Einflusses wurde das Simulationsprogramm entsprechend erweitert. Für die Simulation wurde ein 4cm hoher und 4cm breiter Rahmen rund um den Detektor angenommen.

Wie in Abbildung 4.23 zu sehen ist, beträgt die Intensität der eingestreuten Strahlung maximal 1% der Intensität des Kernschattens und kann somit vernachlässigt werden.

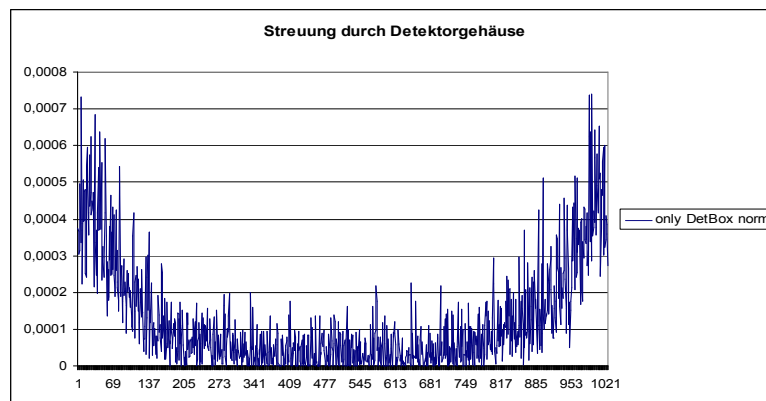


Abbildung 4.23: Simulation des Einflusses der Rückstreuung vom bestrahlten Detektorgehäuse auf die Detektorfläche

4.3. Punktverbreiterung durch detektorinhärente Streuung

Schichtenaufbau

Die Szintillatorschicht des Detektors ist in mehrere Schichten verschiedener Materialien eingebettet (siehe Kapitel 3.1):

1. Schutz- und Trägerschicht des Szintillators (PET),
2. Vorfilter (Mo oder Graphit) als Schutzschicht und zur Erhöhung der Szintillations-Lichtausbeute wegen dessen reflektierenden Eigenschaften
3. Photodetektor und Träger (Si) direkt unter dem Szintillator
4. Abschirmung der Rückseite (Pb)

Realistischer Weise wird die in den Detektor eindringende Strahlung in all diesen Schichten gestreut und kann im Gd des Szintillators Streustrahlung und Fluoreszenzphotonen generieren, die über einige Pixelbreiten hinwegtransportiert werden könnten.

Um diese Effekte untersuchen zu können, wurde das zählende Detektor-Modul des Simulationsprogramms erweitert, um in den genannten Schichten Mehrfachstreuung (bis zur vierten Ordnung) zuzulassen, in der Szintillatorschicht zusätzlich auch noch Fluoreszenz, die in den anderen Schichten so wie im Probenkörper vernachlässigt werden kann; in Pb hat der Transport der Fluoreszenzphotonen wiederum zu geringe Reichweite, um den Szintillator über mehrere Pixelbreiten zu beeinflussen.

Zur Veranschaulichung wurden in Abbildung 4.24 mittels der Formel (4.4) mit der Dichte ρ und dem totalen Massenabsorptionskoeffizienten $\mu(E)$ aus *XCell* [man08] die mittleren freien Weglängen von Photonen in Gd und Pb berechnet.

$$l = \frac{1}{\mu(E) \cdot \rho} \quad (4.4)$$

Für Pb erhält man somit bei 200keV etwa 880 μ m, bei 150keV etwa 410 μ m und bei 100keV etwa 160 μ m. Also erst bei Energien zwischen 180 und 200keV würde die Breite eines Detektorpixels (400 μ m) überschritten, was obige Annahme zur Vernachlässigung bestätigt. Die Abschätzung zeigt auch, dass parallel zur Schicht gestreute Photonen durchaus in der Lage sind, im Mittel bis zu 4 Detektorpixellängen zu durchqueren.

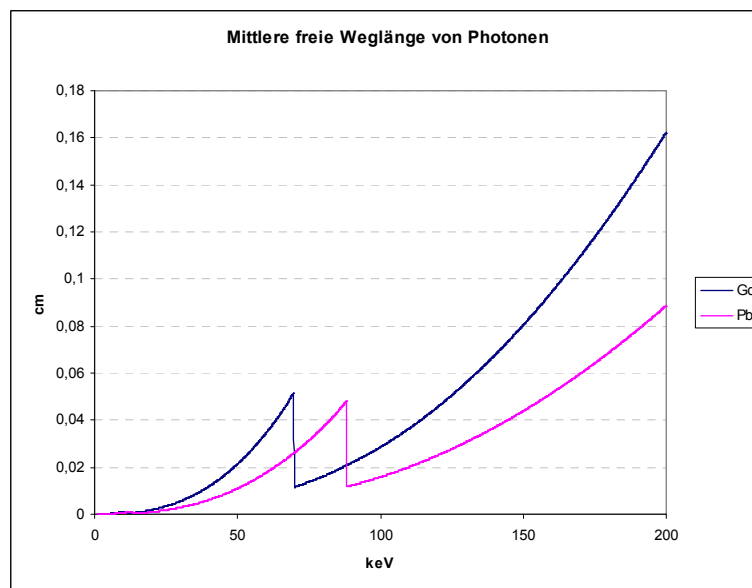


Abbildung 4.24: Mittlere freie Weglängen von Photonen in Gd und Pb, Berechnung mit *XCell* [man08]

Gezählt wird für jedes betroffene Pixel die gesamte Energie, die in der Szintillatorschicht deponiert wird, also jener Teil, der nach einer Wechselwirkung nicht über ein Photon weitertransportiert wird. Der Transport von Elektronen wird dabei nicht mehr weiterverfolgt, da er im Vergleich zur Breite eines Pixels also einer Strecke von der Größenordnung von 0,5mm nicht relevant ist, was durch folgende vereinfachte Abschätzung gezeigt werden kann. Drei Werte für die mittlere Eindringtiefe von Elektronen in Pb [bil72] wurden auf die Dichte von Gd korrigiert, was für eine grobe

Abschätzung aufgrund der ähnlich hohen Ordnungszahl ausreichend ist. Die so geschätzten Werte für die mittleren Eindringtiefen sind in Tabelle 5 aufgelistet.

Energie [keV]	Reichweite [μm]
50	13
100	40
200	127

Tabelle 5: Grobe Abschätzung für die mittlere Reichweite von Elektronen in Gd

Grundsätzlich kann die Strahlung auch Energie in der Photodiodenschicht des Detektors deponieren. Die Schichtdicke dieser Photodiode ist jedoch sehr gering ($<1\mu\text{m}$) und Simulationen ergaben bei dieser Schichtdicke keinen nennenswerten Einfluss auf die Ausbreitung der deponierten Energie über mehrere Pixellängen hinweg.

Ein erster Test dieses Modells zeigte, dass das Schichten-Modul im Programm nicht zusätzlich zur Streusimulation angewandt werden konnte, da die Statistik der simulierten Photonen-zählausbeute bei realistischen Berechnungszeiten (in der Größenordnung von Tagen) noch viel zu schlecht war; das Schattenprofil war auch nach mehreren Tagen Rechenzeit noch viel zu verrauscht.

Point Spread Function

Statt der Simulation der Streuprojektion inklusive inhärenter Detektorstreuung in einem einzigen Schritt wurde ein Schattenprofil eines auf die Detektormitte fokussierten Nadelstrahls simuliert, um daraus eine Punktausbreitung zu ermitteln. Diese Funktion ist in der Literatur auch als eine Point Spread Function (PSF) zu finden. Dabei wurden zehn Simulationen mit jeweils monochromatischer Quelle zwischen 22,5 und 225keV erstellt. Die PSF für 45 und 225keV sind in Abbildung 4.25 dargestellt.

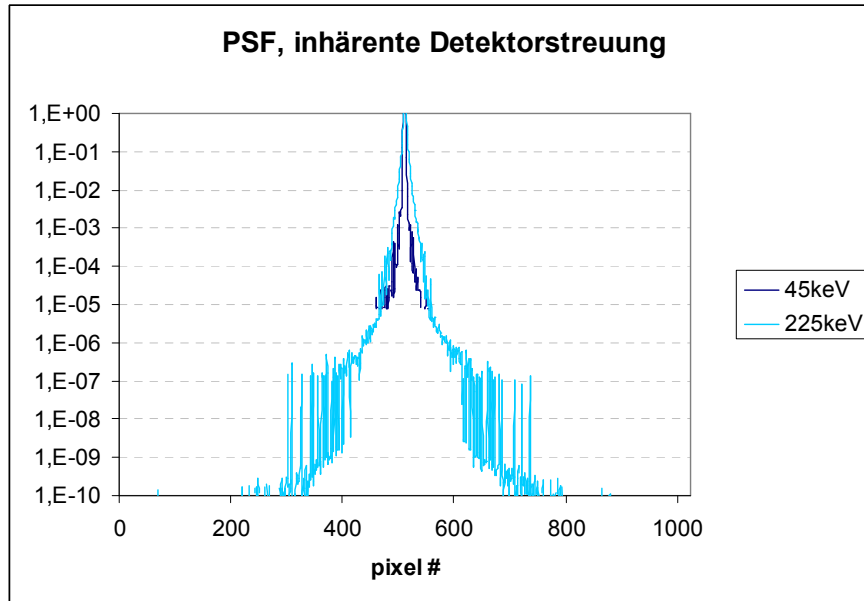


Abbildung 4.25: Ausbreitung des Signals eines durch einen Nadelstrahl fokussierten Pixels auf seine benachbarten Pixel, zwei Simulationen mit jeweils monochromatischer Quelle. Die Ausbreitung scheint im gegebenen Bereich energieunabhängig zu sein.

Wie das folgende einfache Beispiel zur Untersuchung der Auswirkungen einer PSF im Detektor auf das Projektionsbild zeigt, kann durch Faltung der simulierten Projektion, wie sie in Abbildung 4.8 dargestellt wird, mit einem Faltungskern der Form (4.5) - auch dargestellt in Abbildung 4.26 - eine Krümmung im Intensitätsverlauf zu höheren Intensitäten in Richtung Detektorrand erreicht werden. Faltung jeweils von Projektion und Weißbild mit diesem Faltungskern und darauf folgender Weißabgleich der gefalteten Projektion mit dem gefalteten Weißbild ergibt einen Intensitätsverlauf, der bis auf die absolute Intensität relativ gut mit dem Messergebnis übereinstimmt (siehe Abbildung 4.28).

$$p_i = \left| \frac{1}{i^{1.75}} \right| \text{ und } p_0 = 1 \quad (4.5)$$

i ... Pixel-Index ab dem mit dem Nadelstrahl anfokussierten Pixel

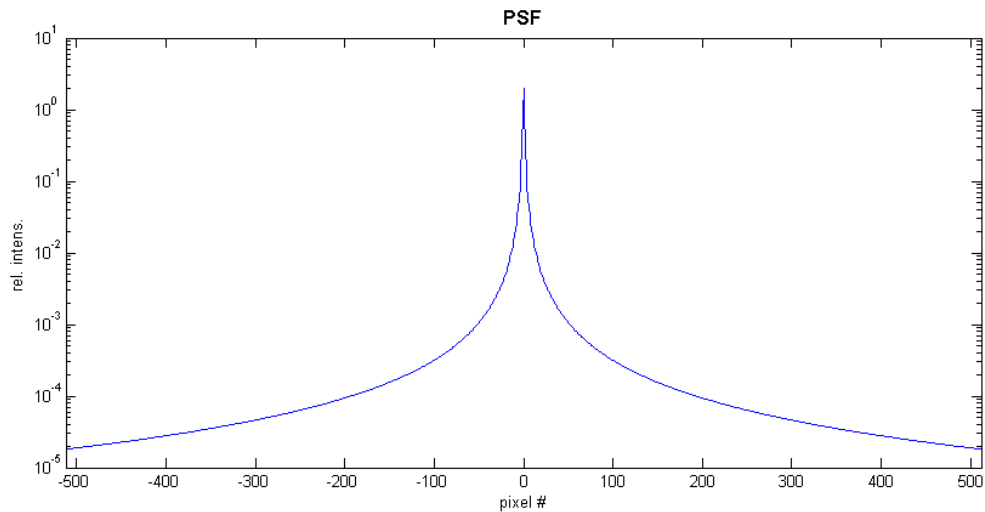


Abbildung 4.26: Einfacher eindimensionaler Faltungskern zur Untersuchung der Auswirkungen einer Punktverbreiterung auf das simulierte Projektionsbild

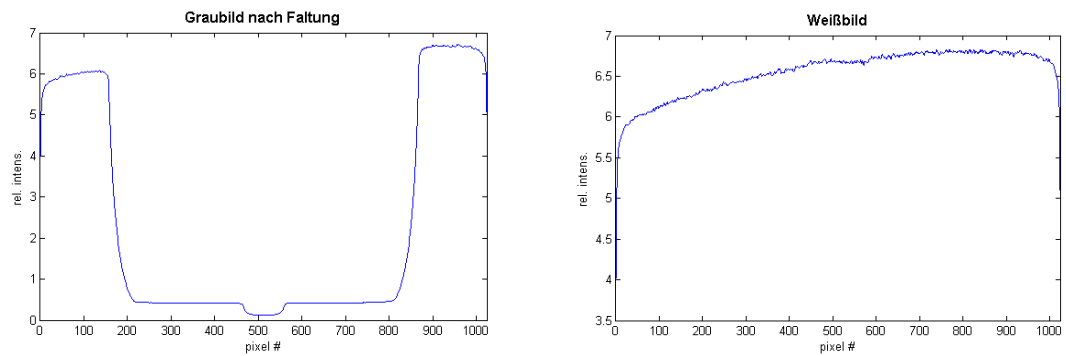


Abbildung 4.27: Eindimensionale Faltung angewandt jeweils auf simuliertes Graubild und Weißbild

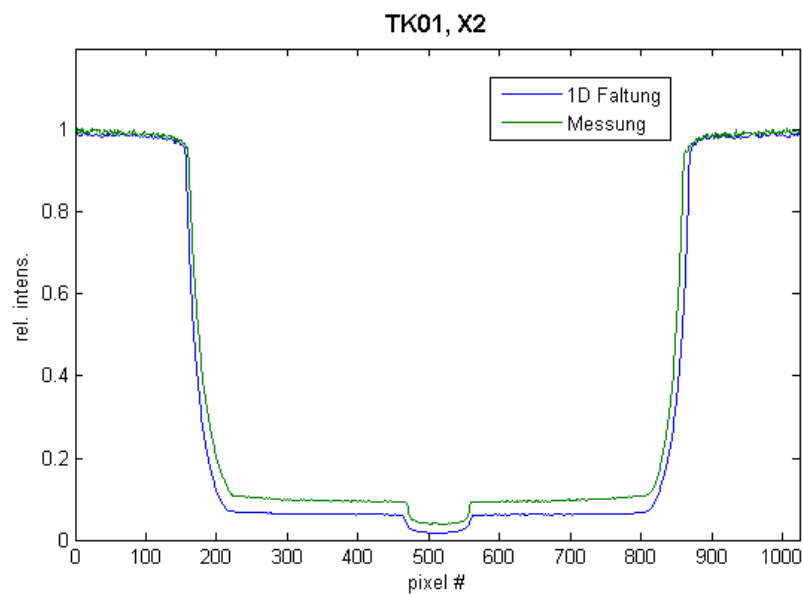


Abbildung 4.28: Vergleich der korrigierten Simulation mit Weißabgleich (blau), Messung mit Weißabgleich (grün)

Eine in der Signalverarbeitung gängige Methode ist es, die PSF im Ortsraum zu ermitteln, um daraus über Fouriertransformation eine Modulationstransfer-Funktion (MTF) im Frequenzraum zu definieren. Statt einer Faltung im Ortsraum, die für 2D-Informationen sehr rechenintensiv ist, reicht es gemäß Faltungstheorem, die Streuprojektion im Frequenzraum mit der MTF zu multiplizieren und danach wieder in den Ortsraum zu transformieren [buz08],[smi98].

In dem soeben vorgestellten einfachen Beispiel wurde noch nicht berücksichtigt, dass die PSF, die aus der Nadelstrahlsimulation erstellt wird, eine 2D Funktion sein muss. Dazu reicht es aber, das ermittelte eindimensionale Profil kreissymmetrisch über die ganze Fläche zu ergänzen und zu transformieren. Die transformierte Funktion stellt somit die MTF dar [smi98].

Die zweidimensionale Behandlung der simulierten PSF wird in Kapitel 4.7 nachgeholt.

4.4. *Berechnungen zur Streuung*

Vergleich der MC-Methode mit analytischer Berechnung

Zur Kontrolle des MC-Programms wurde ein Programm erstellt, das den Streu- und Durchstrahlungsanteil der Röhrenstrahlung für einen reinen Aluminiumwürfel berechnet. Die Berechnung entspricht einer numerischen Integration über die Energie des Röhrenspektrums und über das Volumen des Würfels für jeweils ein Detektorpixel entlang der mittleren Pixelreihe (Abbildung 4.29). Das Ergebnis wurde aufgespalten in Durchstrahlung und inkohärente Streuung. In Abbildung 4.30 und Abbildung 4.31 ist zu sehen, dass zwischen MC-Simulation und analytischer Berechnung für die Anteile der Durchstrahlung und inkohärenten Streuung dieses einfachen Beispiels gute Übereinstimmung herrscht.

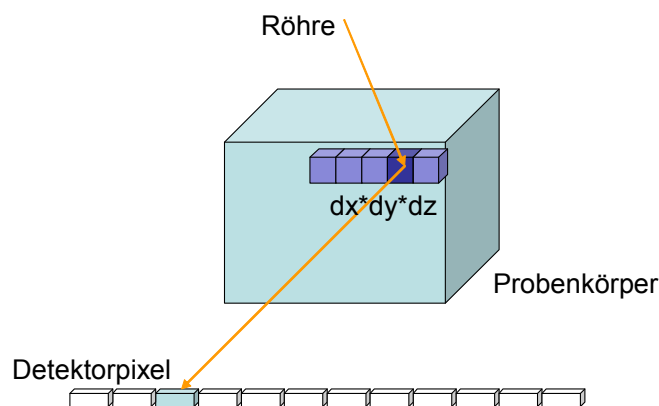


Abbildung 4.29: Schematische Darstellung der analytischen Berechnung der Streuung in einem Aluminiumwürfel gemessen an den einzelnen Detektorpixel der mittleren Reihe

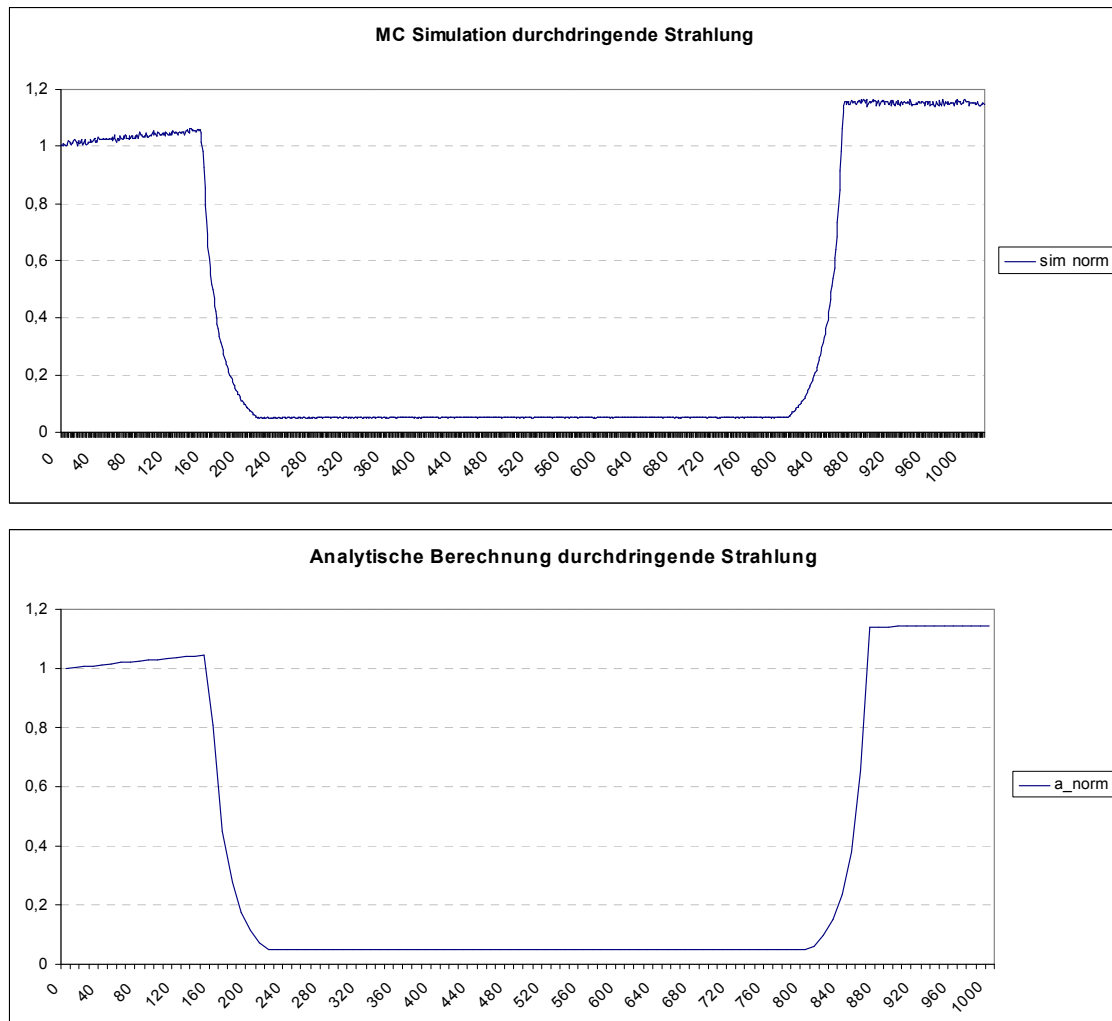


Abbildung 4.30: Vergleich der Durchstrahlungsintensität aus der MC-Simulation (oben) und analytischer Berechnung (unten)

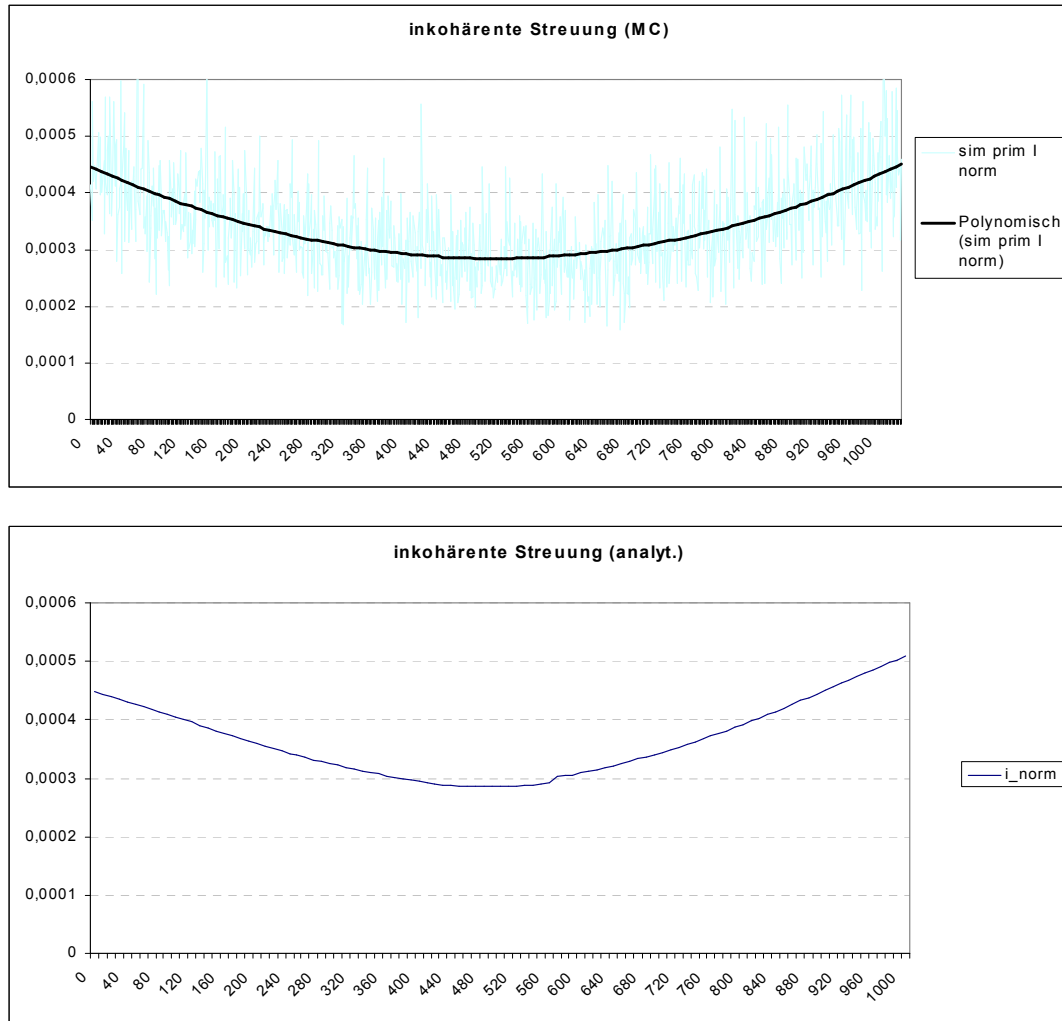


Abbildung 4.31: Vergleich der Ergebnisse für die inkohärente Streuung (primäre Wechselwirkung) aus der MC-Berechnung (oben, inkl. polynomischen fit) und der analytischen Berechnung (unten)

Streuung

In der analytischen Berechnung für das gesamte Streuprofil (Abbildung 4.32) ist bei der Position X1 und besonders bei einer nur für diesen Fall eingeführten Position X3 (100mm vor dem Detektor, auf der CT Anlage nicht einstellbar) eine starke Wölbung durch die kohärente Streuung sichtbar. Die Überhöhung bei Position X1 ist weder in der MC Simulation noch in der Messung zu erkennen. Die Anteile der Streustrahlung sind in Abbildung 4.33 für kohärente und in Abbildung 4.34 für inkohärente Streuung dargestellt.

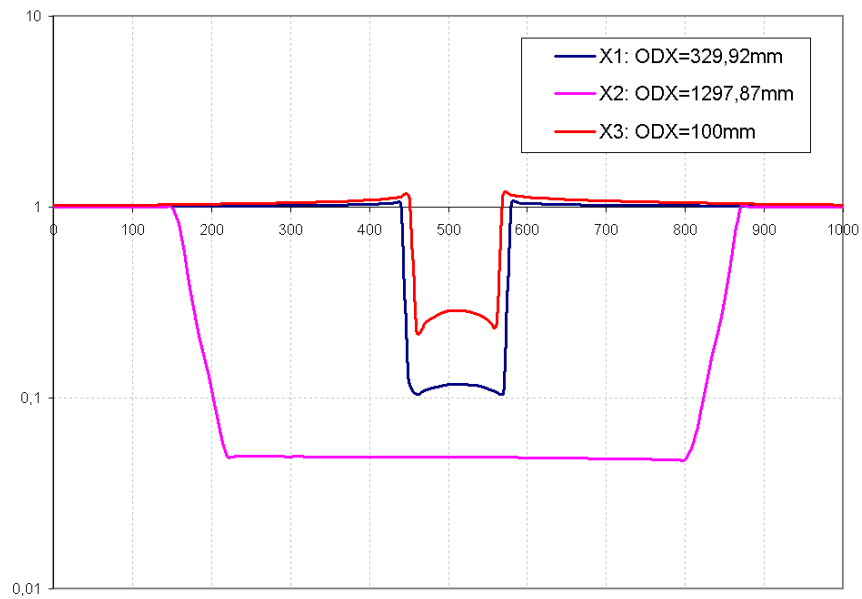


Abbildung 4.32: Analytische Berechnung des Streuprofiles der mittleren Detektorreihe eines Aluminiumwürfels an den Positionen X1, X2 und X3 (100mm zwischen Probenmittelpunkt und Detektor)

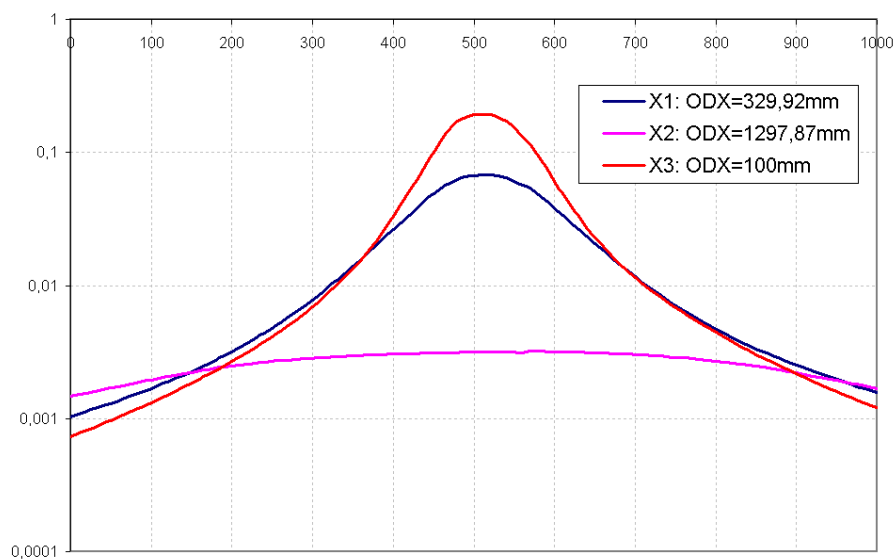


Abbildung 4.33: Anteil der kohärenten Streuung in der analytischen Berechnung für die drei Positionen X1, X2 und X3. In der detektornahen Position X3 ist deutlich zu sehen, dass die Verzerrung infolge der Streuung besonders stark ist

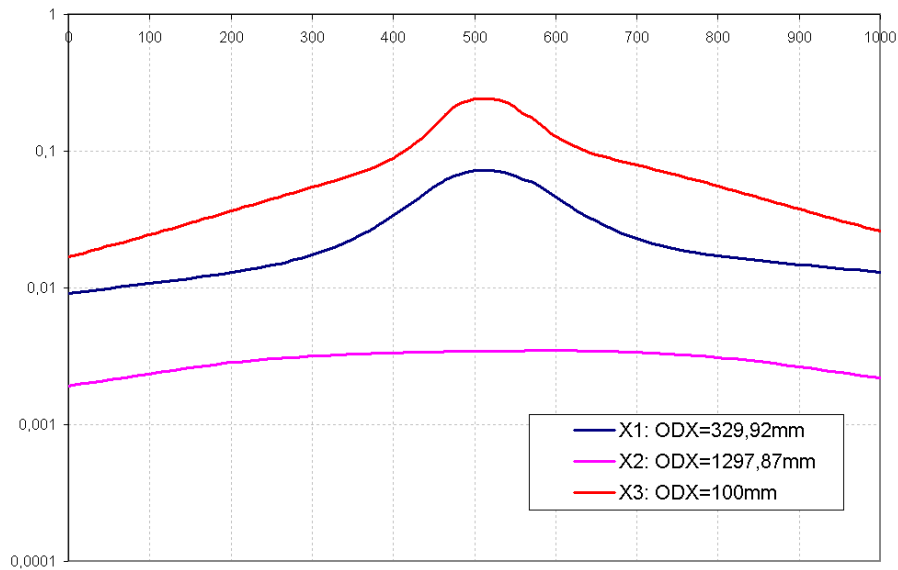


Abbildung 4.34: Anteil der inkohärenten Streuung in der analytischen Berechnung für die drei Positionen X1, X2 und X3

Zur Kontrolle der primären Streuungsanteile wurde daher ein Nadelstrahl mit W-Röhrenspektrum, der zentral auf einen kleinen Al-Würfel (4mm) gerichtet wurde, an der Position X1 nach der MC-Methode simuliert (Skizze siehe Abbildung 4.35). Im Ergebnis in Abbildung 4.36 ist zu erkennen, dass der kohärente Anteil gegenüber dem inkohärenten für den Bereich direkt hinter der Probe auf dem Detektor dominiert, was mit der Theorie (siehe differentielle Wirkungsquerschnitte für Al in Abbildung 2.6) in Übereinstimmung ist.

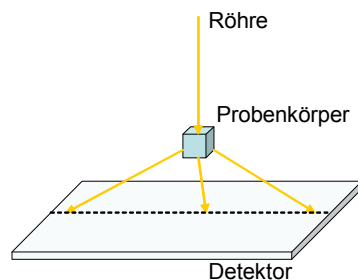


Abbildung 4.35: Schematische Darstellung einer Kontrollsimulation nach der MC-Methode zur Untersuchung der kohärenten und inkohärenten Streuung

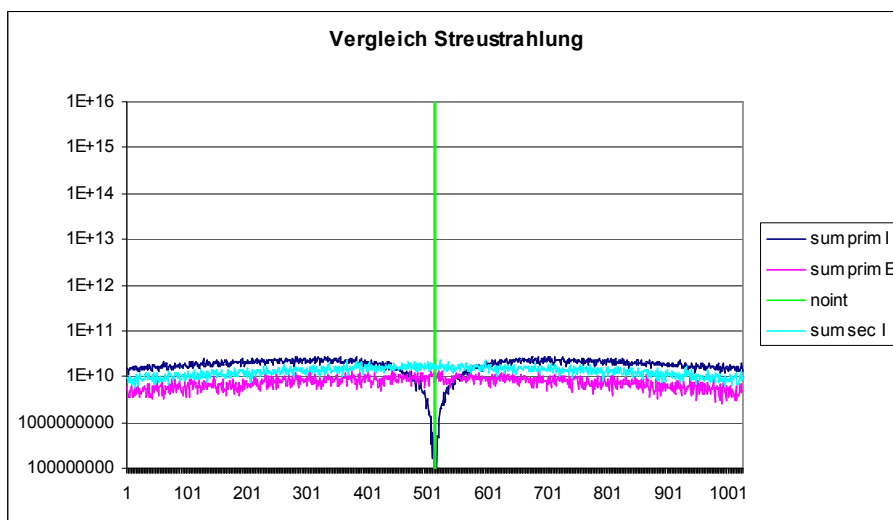


Abbildung 4.36: Vergleich der einzelnen Streuanteile eines fokussierten Nadelstrahls auf einen kleinen Würfel (4mm) in detektornaher Position X1, logarithmische Skala für die Intensität. Durchdringender Anteil *grün*, Summe primär inkohärenter Streuung *dunkelblau*, Summe primär kohärenter Streuung *violett*, sekundärer inkohärenter Anteil *hellblau*.

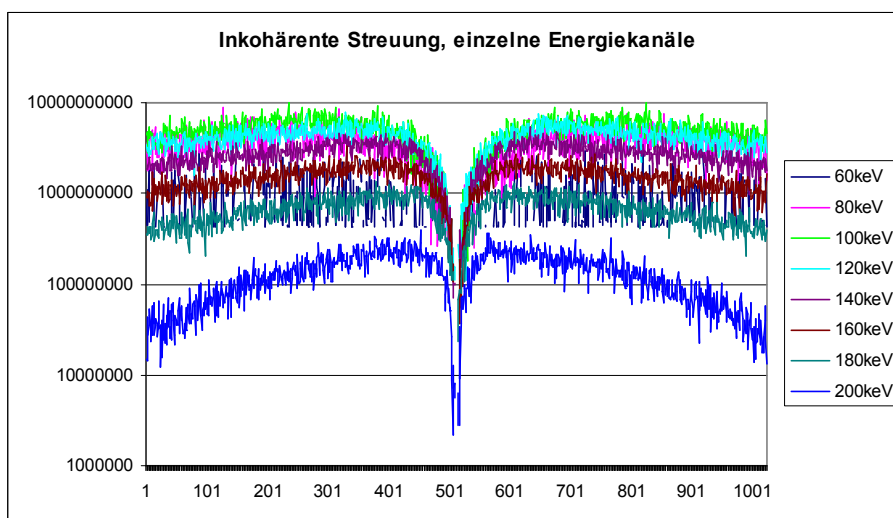


Abbildung 4.37: Inkohärenter Streuanteil aufgeteilt nach einzelnen Energiekanälen

Der inkohärente Streuanteil wurde an der Position X2 für den Probenkörper TK01 mit drei unterschiedlichen Zusammensetzungen simuliert. Einmal für die tatsächliche Zusammensetzung (Al Würfel, Fe Kern), einmal Al und Fe homogen gemischt bei gleichen Anteilen wie in der tatsächlichen Zusammensetzung und einmal mit reinem Al. Abbildung 4.38 zeigt, dass der inkohärente Streuanteil für die tatsächliche Zusammensetzung ziemlich genau zwischen reinem Al und Al/Fe homogen gemischt liegt, und dass die Verteilung der inkohärenten Streustrahlung unabhängig von der lokalen Verteilung der Inhomogenitäten in der Probe ist.

Dies könnte als Vereinfachung der Berechnung des gesamten Streubilds dienen, da die Berechnung der Streuung in der MC-Simulation relativ berechnungsintensiv und daher zeitaufwendig ist im Gegensatz zur Berechnung der reinen Durchstrahlungsintensität. Statt der genauen Verteilung der Inhomogenitäten würde somit eine Transformation in einen Probenaufbau aus einzelnen Schichten ausreichen (Abbildung 4.39).

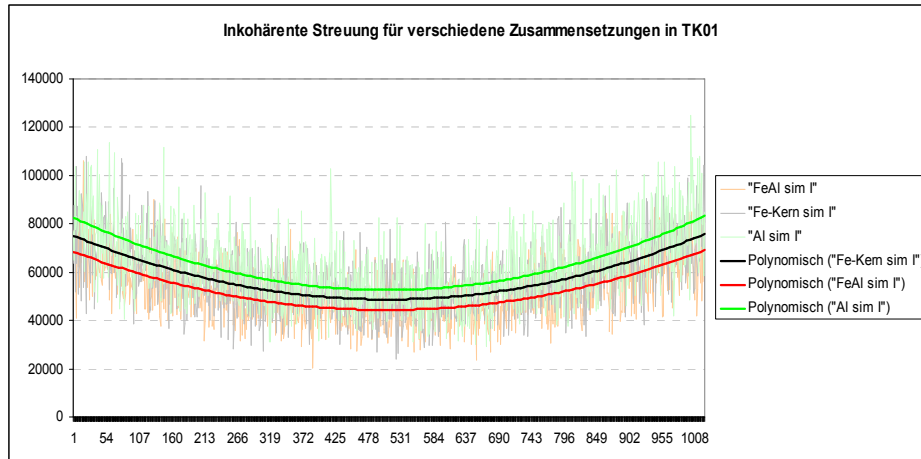


Abbildung 4.38: Vergleich des inkohärenten Streuungsanteils des Probenkörpers TK01 in drei verschiedenen Zusammensetzungen: Fe/Al homogen verteilt, tatsächliche Verteilung laut Datenblatt und reines Al

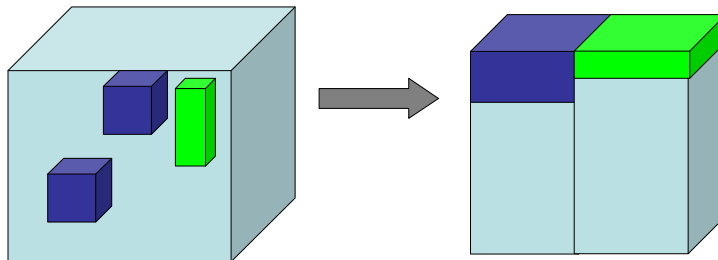


Abbildung 4.39: Mögliche Transformation des Probenkörpers von der tatsächlichen Zusammensetzung in einen einfacher zu berechnenden Aufbau in Schichten

Zur Untersuchung und Veranschaulichung der Auswirkungen von inkohärenter Streuung in der Probe (TK01) wurde eine Simulation mit einem Kegelstrahl erstellt. Um einen möglichst hohen Streuwinkel betrachten zu können, wurde die detektornahe Position X1 für die Simulation gewählt. Der maximale beobachtbare Streuwinkel (aus primärer Streuung) ist auf der dem Detektor zugewandten Seite der Probe in dieser Position etwa 40° . Durch Umformen von Gleichung (2.11) mit $\theta = \text{const}$ zu

$$\frac{E}{E'} = 1 + E \cdot \text{const} \quad (4.6)$$

sieht man, dass der Energieverlust E/E' bei einem vorgegebenen Streuwinkel, z.B. an einem fixen äußeren Punkt des Detektors, von der Primärenergie E abhängt. Das bedeutet

für einen realen Detektor, dass der inkohärent gestreute Anteil höherer Primärenergie mit einer höheren Differenz in der Detektoreffizienz zu bewerten ist.

Abbildung 4.40 zeigt das Streuprofil aus einem monochromatischen Kegelstrahl mit 200keV über die mittlere Detektorreihe mit zusätzlicher Energieauflösung als 3D Plot. Eingesetzt in Gleichung (2.11) resultiert für 40° ein maximaler Energieverlust von etwas weniger als 20keV. Zur Verdeutlichung des Energieverlaufs werden in diesem 3D Plot daher 200Energiekanäle zwischen 180 und 200keV dargestellt.

Durch die Energieauflösung sind die Beiträge für durchdringende Strahlung und kohärenter Streuung sehr schön vom Anteil inkohärenter Streuung getrennt, ohne dafür separat gezählt werden zu müssen. Da der Anteil durchdringender Strahlung um Größenordnungen höher ist als der Rest, wurde für den Plot die logarithmische Skalierung für die Intensität gewählt. Im höchsten Energiekanal (200keV, rechts im Bild) sind der Anteil durchdringender Strahlung und der Anteil kohärenter Streuung zu sehen. Letzterer Anteil ist dabei sehr gering, nicht zu sehen und daher unbedeutend. In dieser Darstellung ist auch deutlich zu sehen, dass der Hauptanteil für das zur CT-Rekonstruktion notwendige Streubild aus dem ungestreuten (durchdringenden) Anteil stammt. Der schmale Bereich dahinter im Energiekanal direkt darunter stammt von sekundären Streuungen, wobei jeweils eine davon eine inkohärente Streuung mit kleinem Streuwinkel ist. Der dicke gekrümmte Bereich in allen Kanälen darunter resultiert aus vorwiegend primärer inkohärenter Streuung, dazwischen liegen vereinzelt sekundäre inkohärente Streuungen. Der letzte Anteil im untersten Energiekanal ist lediglich die Summe aller Kanäle von 1 bis 180keV.

In Abbildung 4.41 ist die Energieverteilung der inkohärenten Streustrahlung über die mittlere Detektorreihe dargestellt; der Rest wurde ausgeblendet. Die gleiche Simulation jedoch in einer Detektorreihe etwas näher zum äußeren Rand des Detektors (Reihe 768) gezählt ist in Abbildung 4.42 zu sehen. Die Energie breitet sich hier über einen etwas größeren Bereich auf, das Energiemaximum ist der Lage entsprechend etwas niedriger.

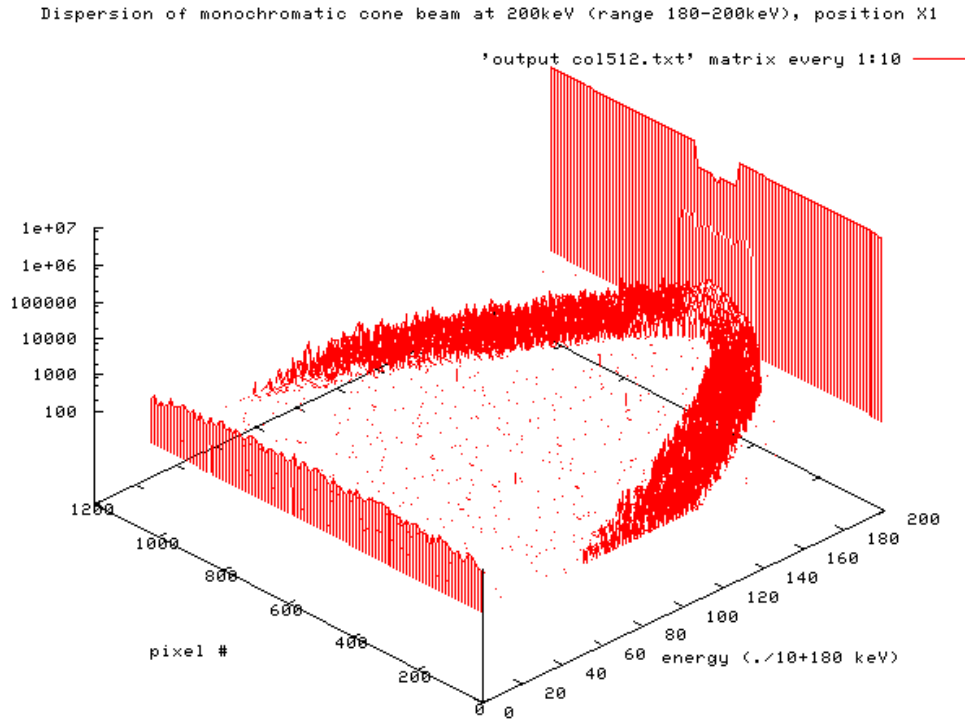


Abbildung 4.40: Simulation des Streuprofiles von TK01 (Kegelstrahl monochromatisch 200keV) über die mittlere Detektorreihe mit einer Energieauflösung von 200Kanälen zwischen 180keV und 200keV, logarithmische Skala für die Zählrate

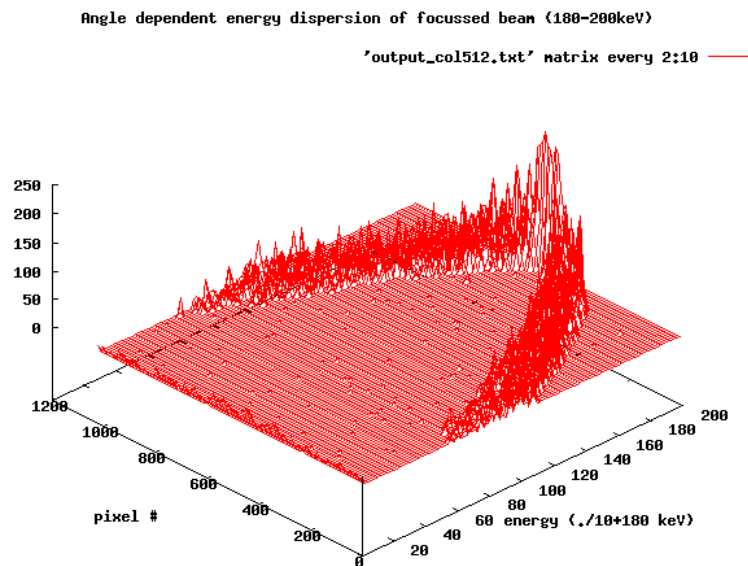


Abbildung 4.41: Simulation der inkohärenten Streustrahlung eines Kegelstrahls von 200keV, Energieauflösung von 200Kanälen im Intervall von 180keV bis 200keV für die mittlere Detektorzeile.

Angle dependent energy dispersion of focussed beam (180-200keV)

'output_col768.txt' matrix every 2:10 —

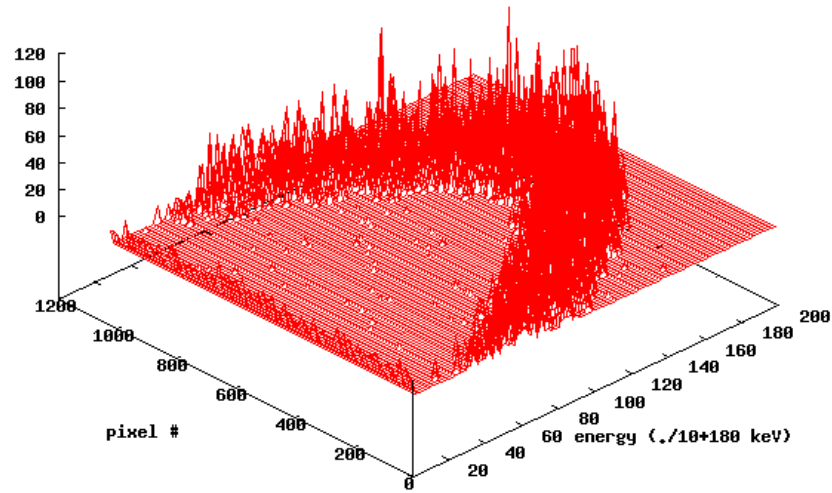


Abbildung 4.42: Simulation der inkohärenten Streustrahlung eines Kegelstrahls von 200keV, Energieauflösung von 200Kanälen im Intervall von 180keV bis 200keV für eine Detektorzeile im äußeren Viertel des Detektors (Zeile 768).

Angle dependent energy dispersion of focussed beam (80-100keV)

'output_col768.txt' matrix every 2:10 —

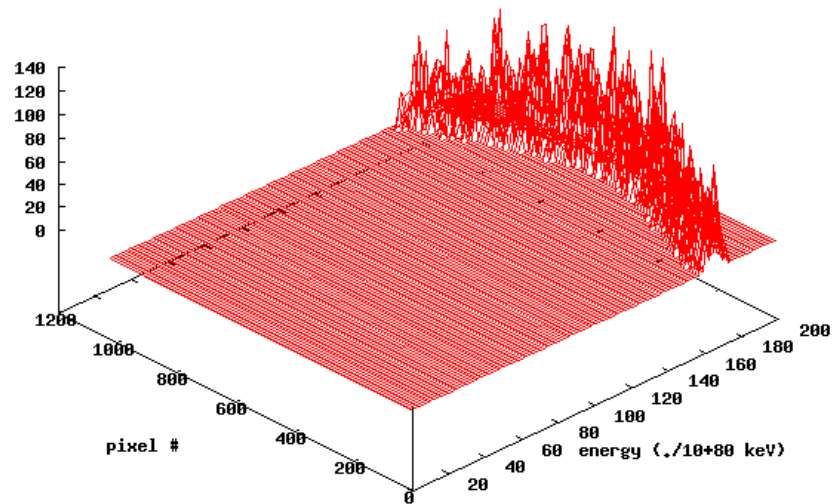


Abbildung 4.43: Simulation der inkohärenten Streustrahlung eines Kegelstrahls von 100keV, Energieauflösung von 200Kanälen im Intervall von 80keV bis 100keV für eine Detektorzeile im äußeren Viertel des Detektors (Zeile 768).

Einfaches Modell zur Beschreibung von Bremsstrahlung in der Probe

Zur Untersuchung der Auswirkungen von Bremsstrahlung in der Probe, die durch sekundäre Elektronen hervorgerufen werden kann, wurde ein stark vereinfachtes Modell in das analytische Programm eingebaut. Dafür wurden für das Targetmaterial Al mit dem Modell von Ebel mehrere Bremsspektren berechnet für Beschleunigungsspannungen von 80 bis 200keV (siehe Abbildung 4.44). Die dabei zu verwendende Zählrate wurde von mA des Röhrenstroms auf die Anzahl der Elektronen/s umgerechnet, um einen entsprechenden Wert für ein einzelnes Elektron zu erhalten. Bei Photoabsorption oder inkohärenter Streuung wurde die Differenzenergie als die Energie des freien Elektrons interpretiert, das sofort und an Ort und Stelle wieder abgebremst wird, und das entsprechende Bremsspektrum wurde ausgesandt. In dieser Näherung war der Anteil der Bremsstrahlung in der Probe um fast zwei Größenordnungen höher als Streustrahlung (Abbildung 4.45). Dem Ergebnis kann aber wegen der hohen zu erwartenden Ungenauigkeit für die zuverlässige Anwendbarkeit (Ebel definiert eine obere Energieschranke von 60keV) keine große Bedeutung beigemessen werden, zumal mit MCNP (siehe Kapitel 4.5) eine alternative Möglichkeit offen stand.

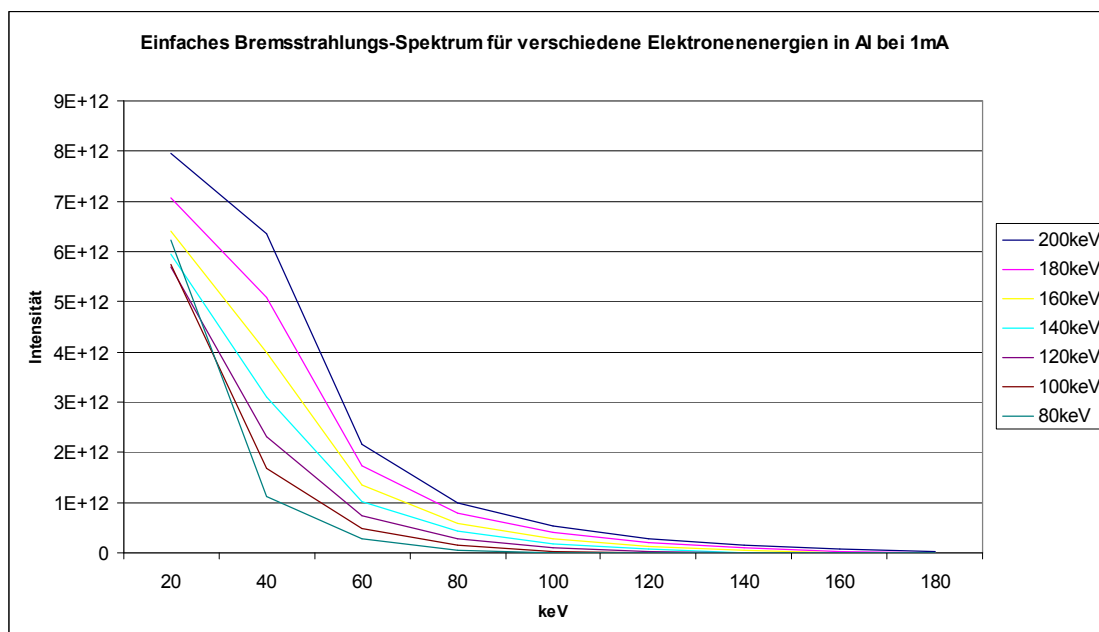


Abbildung 4.44: Unterschiedliche Bremsspektren für das Targetmaterial Al auf analytischem Weg über das Modell von Ebel berechnet.

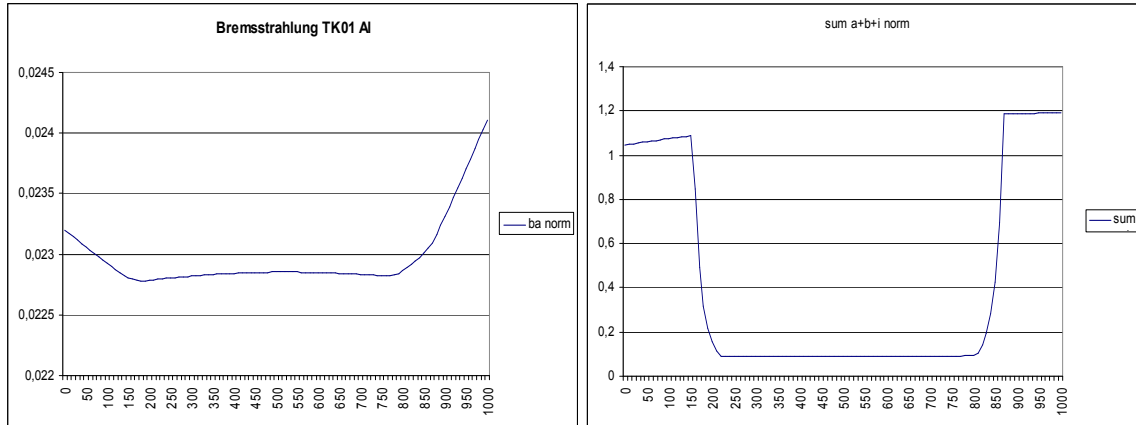


Abbildung 4.45: Anteil der Bremsstrahlung in der Probe (links) übersteigt in diesem Modell die Streustrahlung um fast zwei Größenordnungen. Rechts: Streuprofil eines Al-Würfels (Abmessungen TK01) mit Streu- und Bremsstrahlung

4.5. Vergleichende Simulationen mit MCNP

Zur Überprüfung der Ergebnisse aus eigener Programmierung wurden einige der Simulationen auch mit MCNP erstellt. Die Simulation der Durchstrahlung des Probenkörpers TK01 wurde einerseits unter simplen Voraussetzungen mit Ergebnissen aus der eigenen Programmierung verglichen und andererseits so weit wie möglich erweitert, um den realen Bedingungen so nah wie möglich zu kommen und die Grenzen der Möglichkeiten des Einsatzes von MCNP für diese Problemstellung herauszufinden.

Simulation der Durchstrahlung

Die Durchstrahlung von TK01 wurde an der Position X2 (detektorfern) simuliert. Zunächst wurde ein monochromatischer Kegelstrahl einmal mit 100keV und einmal mit 200keV angenommen. Ein contour plot der Durchstrahlung mit 200keV ist in Abbildung 4.46 zu sehen. Obwohl in der Dokumentation das Limit der Farbabstufungen mit 64 angegeben wurde, konnten nicht mehr als 20 Abstufungen erzeugt werden. Die Aussagekraft dieses Plots ist jedoch für die gegebene Problemstellung unbefriedigend.

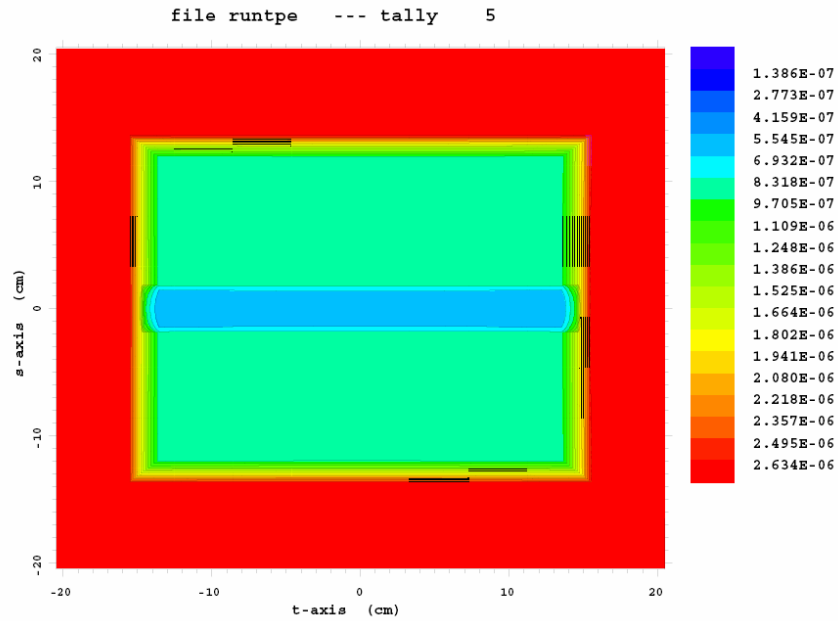


Abbildung 4.46: Durchstrahlung mit Kegelstrahl bei 200keV von TK01 auf Position X2 im *contour plot*

Das Streuprofil der mittleren Detektorreihe für dieselben Einstellungen der Simulation ist in Abbildung 4.47 dargestellt. Unter den einfachen Voraussetzungen war auch ein Vergleich mit Ergebnissen aus eigener Programmierung möglich.

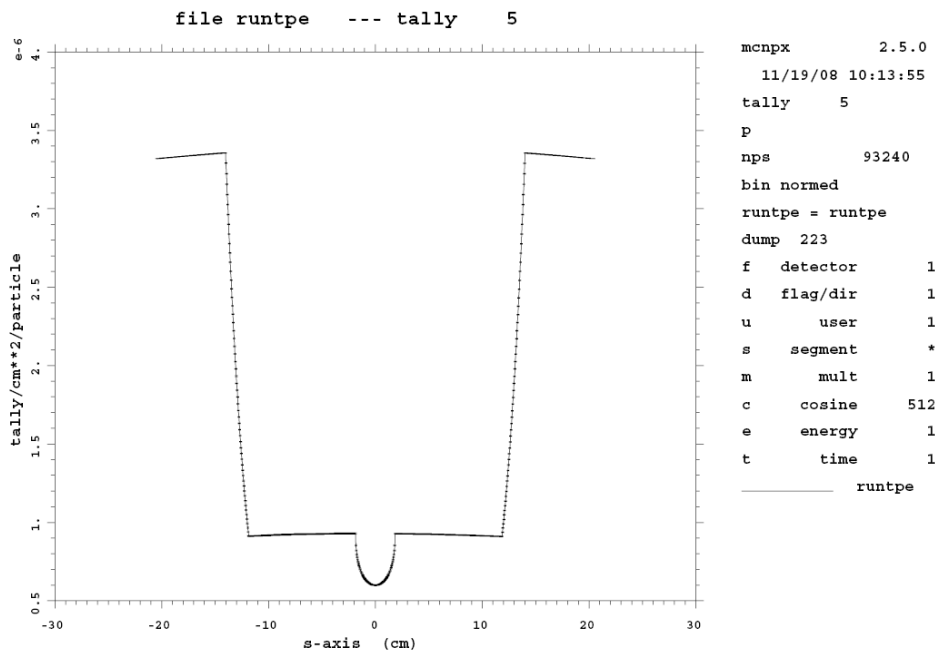


Abbildung 4.47: 2D Plot der mittleren Detektorreihe der Durchstrahlung von TK01 auf Position X2 mit einem monochromatischen Kegelstrahl der Energie 200keV

Vergleich der eigenen Programmierung mit MCXRF

Das soeben vorgestellte Streuprofil wurde für die Energien 100keV und 200keV im monochromatischen Kegelstrahl mit Ergebnissen aus der Simulation mit dem eigenen Programm verglichen. Die Vergleiche sind in Abbildung 4.48 für 100keV und in Abbildung 4.50 für 200keV dargestellt, die Differenzen und relativen Abweichungen in Abbildung 4.49 und Abbildung 4.51.

Es ist zu erkennen, dass die Intensitäten aus der Simulation mit MCNP im Bereich des Schattens etwas höher sind als aus der eigenen Programmierung. Die Abweichungen sind für die kleinere Energie höher, sowie auch im Bereich des Schattens hinter dem Fe-Zylinder. Da die Simulation von Photoelektronen und Bremsstrahlung im eigenen Programm unberücksichtigt bleibt, wirkt die höhere Intensität aus der Simulation mit MCNP plausibel.

Für Pixel 350 und 512 wurden mit MCNP noch einmal Simulationen durchgeführt, wobei die Energie jeweils drei Kanäle aufgeteilt wurde, um den Anteil aus sekundärer Elektronenanregung vom Compton-Anteil abzugrenzen. Für einen maximalen Streuwinkel von 40° erhält man für die Bandbreite von Photonen aus Compton-Streuung mit (4.6) etwa 10% der primären Energie. Die Kanäle waren:

- 1-30, 30-90, 90-100keV für 100keV primäre Energie und
- 1-60, 60-180, 180-200keV für 200keV primäre Energie.

Der Energieanteil von Sekundärelektronenprozessen aus Photoabsorption und Compton-Streuung ist somit im zweiten Kanal enthalten. Die entsprechenden Ergebnisse sind in Tabelle 6 für 100keV und Tabelle 7 für 200keV angegeben. In beiden Fällen haben Sekundärelektroneneffekte einen Anteil von etwa 1% der Intensität im Schatten – also der gleichen Größenordnung wie die Streuung – und sind an jedem Punkt im Schatten hinter der Probe etwa gleich stark.

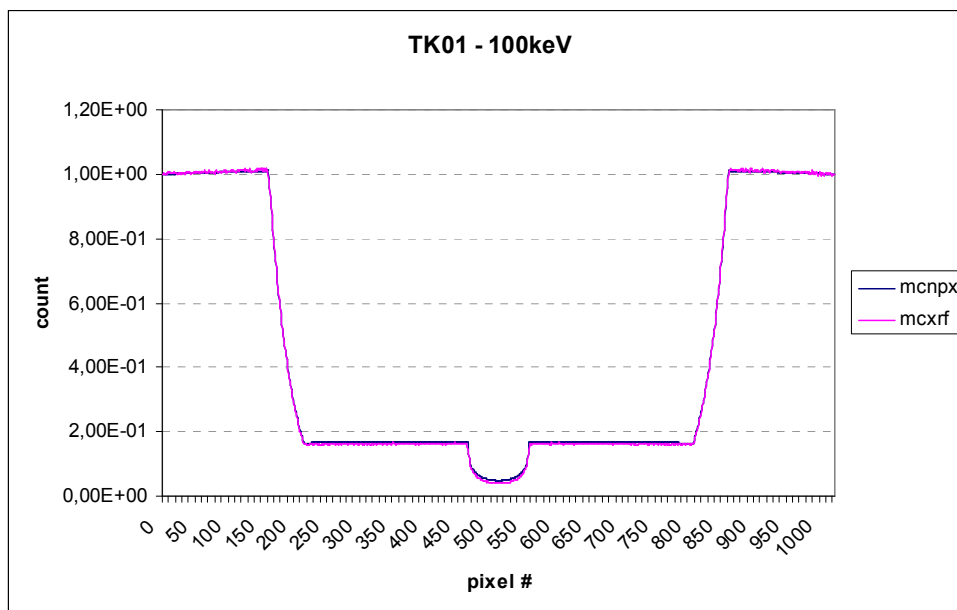


Abbildung 4.48: Simulation des Streuprofiles mit einem monochromatischen Kegelstrahl der Energie 100keV. Vergleich der Berechnung mit eigenem Programm und mcnp

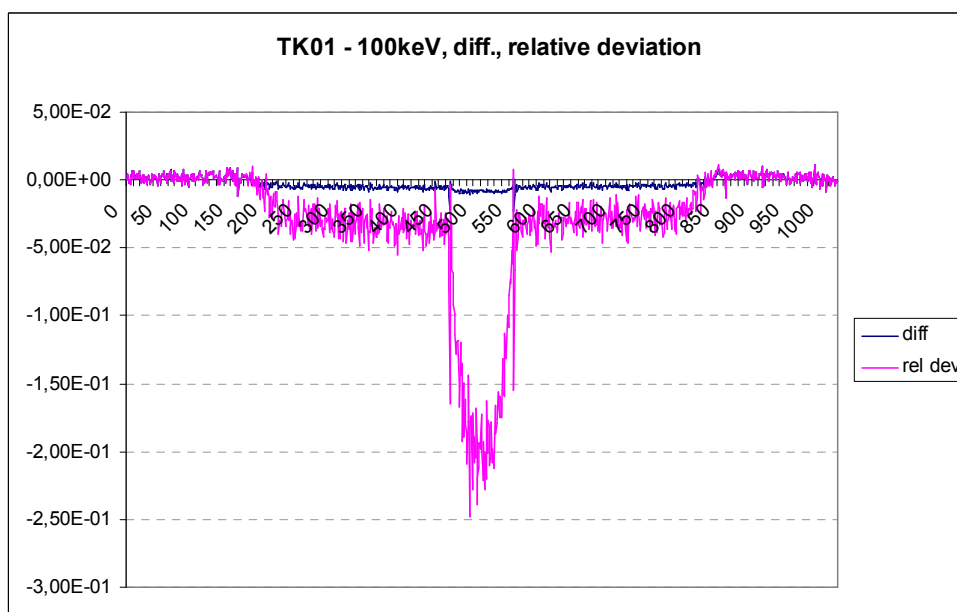


Abbildung 4.49: Differenz (blau) und relative Abweichung (rosa) der Simulationsergebnisse aus Abbildung 4.48

100keV

Energiekanal	pix350	pix512	rel. Abw.
1-30keV	8,93E-14	8,43E-14	1,06
30-90keV	1,37E-09	1,36E-09	1,01
90-100keV	5,57E-07	1,62E-07	3,45

Tabelle 6: Zählraten (relativ zu primären Photonen mit 100keV) für drei verschiedene Energiebereiche in Pixel 350 und 512 sowie relative Abweichungen der beiden Positionen

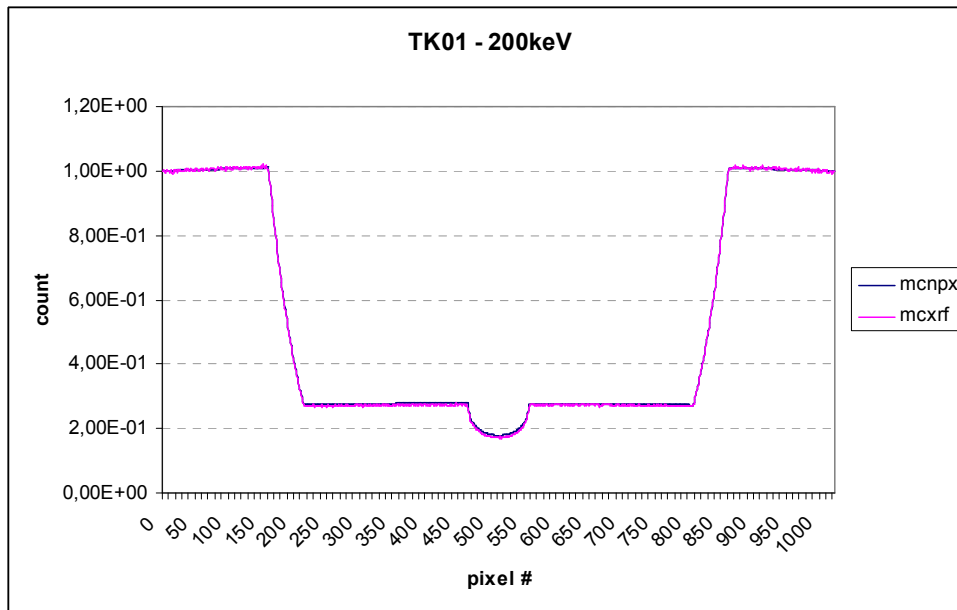


Abbildung 4.50: Simulation des Streuprofiles mit einem monochromatischen Kegelstrahl der Energie 200keV. Vergleich der Berechnung mit eigenem Programm und mcnp

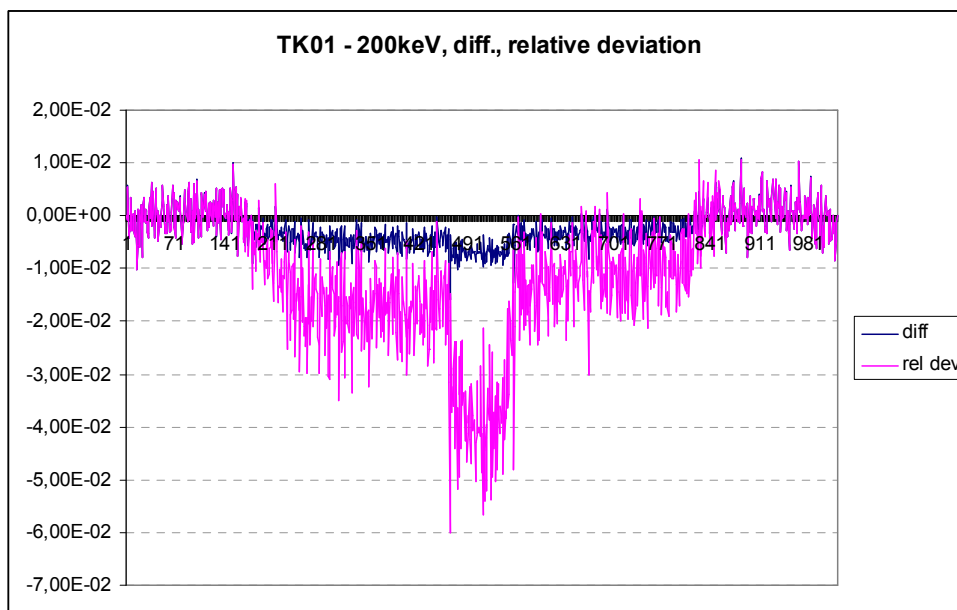


Abbildung 4.51: Differenz (blau) und relative Abweichung (rosa) der Simulationsergebnisse aus Abbildung 4.50

200keV

Energiekanal	pix350	pix512	rel. Abw.
1-60keV	3,22E-11	3,20E-11	1,01
60-180keV	2,61E-09	2,60E-09	1,00
180-200keV	9,18E-07	5,93E-07	1,55

Tabelle 7: Zählraten (relativ zu primären Photonen mit 200keV) für drei verschiedene Energiebereiche in Pixel 350 und 512 sowie relative Abweichungen der beiden Positionen

Simulation mit MCNP unter Einbeziehung zusätzlicher Annahmen aus Rahmenbedingungen der Messung

Die Simulationen für TK01 wurden schrittweise um zusätzliche Annahmen erweitert. Zunächst wurde statt eines monochromatischen Strahls versucht, das Röhrenspektrum samt dessen Richtungsabhängigkeit in die Simulation mit einzubeziehen. Nun kann in MCNP zwar eine spektrale Häufigkeitsverteilung der Strahlenquelle in der Konfigurationsdatei vorgegeben werden, nicht jedoch auch eine Richtungsabhängigkeit dieser Verteilung. Dazu müsste der Quellcode von MCNP angepasst werden. Da eine Adaptierung des Quellcodes zu aufwendig erschien, wurde das Simulations-Szenario so geändert, dass ein monochromatischer Elektronenstrahl von 200keV auf ein W-Target gerichtet war. Die daraus resultierende Bremsstrahlung war somit wieder die Quellstrahlung für die Streusimulation an der Probe. Das Ergebnis dieser Simulation ist in Abbildung 4.52 zu sehen.

Wie in Kapitel 4.6 gezeigt wird, gibt es Abweichungen zwischen den Spektren, die mit MCNP berechnet wurden und Spektren, die nach dem Modell von Ebel berechnet wurden. Die Streupprofile aus eigener Programmierung und durch Simulation mit MCNP sind daher nicht direkt vergleichbar, wie auch in Abbildung 4.53 zu sehen ist.

Bisher wurde in den Simulationen keine Umgebungsluft angenommen, wie das bei realen Messbedingungen der Fall ist. Die Konfiguration wurde also um diese Rahmenbedingung erweitert. Das Simulationsergebnis in Abbildung 4.55 zeigt einen (unerwartet) starken Einfluss der Streuung an Luft. Zu sehen ist das an der deutlichen Absenkung der rechten Seite des Graphen, der den weißen von der Probe ungestreuten Bereich darstellt.

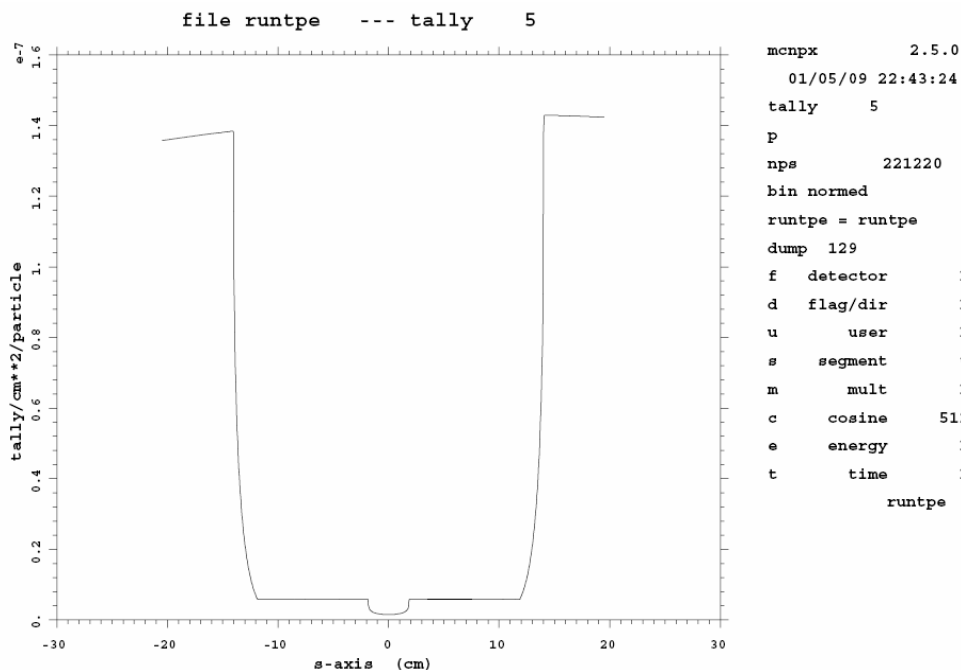


Abbildung 4.52: Simulation der Durchstrahlung mittels richtungsabhängigen Röhrenspektrums im Kegelstrahl durch Einbeziehung des Elektronenstrahls auf ein W-Target gerichtet zur Simulation der Röhrenstrahlung

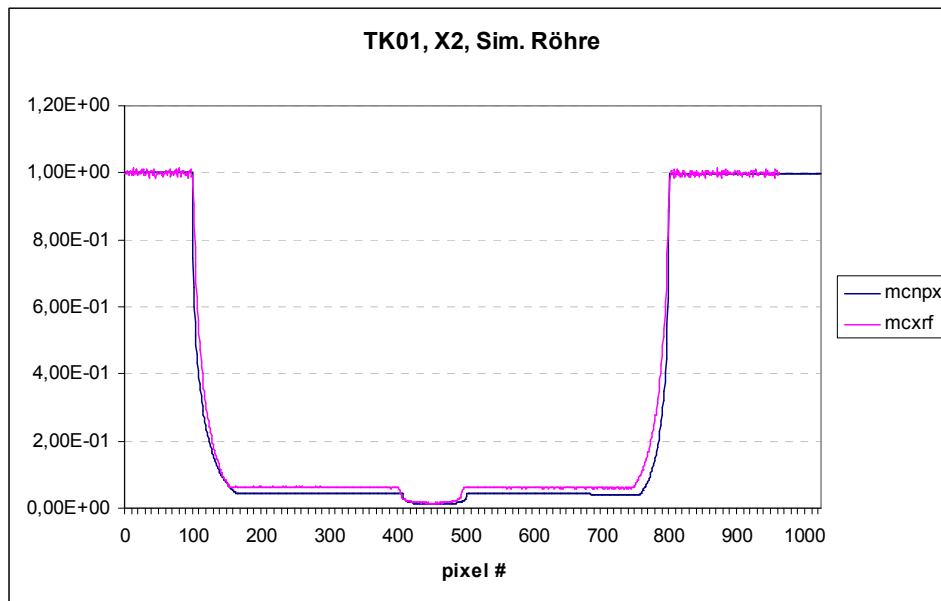


Abbildung 4.53: Vergleich des Streuprofiles aus eigenem Programm mit zuvor berechnetem richtungsabhängigem Spektrum und aus MCNP durch gleichzeitiger Simulation der Röhre (beide nach Weißabgleich)

Zu erklären ist das durch die spektrale Zusammensetzung der Röhrenstrahlung abhängig von der Richtung. Die Intensität der Röhrenstrahlung im Bezug auf die Richtung ist abhängig vom Austrittsweg der Photonen aus dem Röhrentarget. Ein steiler Austrittswinkel (bezüglich der Oberfläche des Targets) bedeutet einen geringeren Austrittsweg, eine geringere Absorption im Targetmaterial und damit eine höhere Intensität des Röhrenstrahls (siehe dazu Abbildung 4.54). Umgekehrt ist der Austrittsweg des Strahls bei einem flachen Austrittswinkel länger und die Intensität somit geringer. Die Nichtlinearität der Absorption in Bezug auf Durchstrahlungslänge und Energie bewirkt aber, dass der langwellige Teil der austretenden Strahlung stärker absorbiert wird und sich das Maximum der spektralen Verteilung zu kürzeren Wellenlängen verschiebt (Strahlaufhärtung). Der langwellige Teil des Spektrums mit dem steileren Austrittswinkel (rechts in Abbildung 4.52) wird nun durch die Umgebungsluft stärker herausgefiltert, was die Absenkung der gesamten (integrierten) Intensität begründen kann.

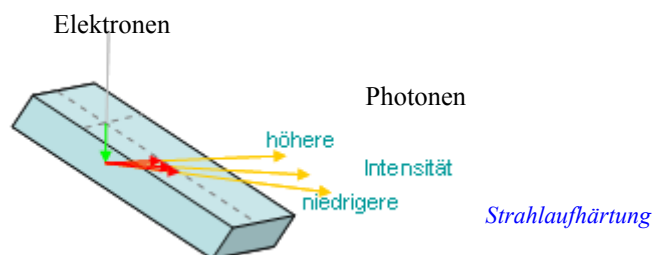


Abbildung 4.54: Schematische Darstellung der Intensitätsabhängigkeit vom Winkel der aus dem Röhrentarget austretenden Strahlung. Strahlaufhärtungseffekt bei flachem Austrittswinkel (in Bezug auf Targetoberfläche, Heel Effekt)

In einem weiteren Schritt wurde versucht, den Detektor in die physikalische Betrachtung mit einzubeziehen. Wie in Kapitel 4.3 beschrieben ergibt sich durch die Streuung der Strahlung in den verschiedenen Schichten des Detektors eine Aufweitung oder Verschmierung der Abbildung eines Punktes. Dem wurde versucht, in einem stark vereinfachten Modell Rechnung zu tragen. In diesem Modell wird nur die Streuung in den Schichten betrachtet, nicht jedoch der genaue Szintillationseffekt. Gezählt wird nur in einer Matrix hinter der Szintillatorschicht. Dies ist aber für eine rein qualitative Betrachtung der Punktaufweitung eine ausreichende Näherung.

Die genaue Betrachtung des Szintillationseffektes als deponierte Energie in der Szintillatorschicht führt jedoch in der Simulation dazu, dass auch nach einigen Wochen Rechenzeit kein auch nur annähernd brauchbares Ergebnis zu bekommen ist. Die Statistik verschlechtert sich nämlich in der MC-Simulation mit jedem zusätzlichen zu simulierenden Element, das ja durch eine weitere Statistische Verteilung repräsentiert wird.

Die Simulation, erweitert durch das stark vereinfachte Detektormodell, zeigt nun eine weitere Absenkung der integrierten Intensität des weißen ungestreuten Anteils auf der rechten Seite des Plots, wie in Abbildung 4.56 zu sehen ist. Der Intensitätsverlauf der weißen Strahlung (des Weißbildes) erscheint gespiegelt zum theoretisch erwarteten Verlauf, was auch in der Messung beobachtet wurde. Die MC-Simulation konnte somit qualitativ einen Effekt erklären, der analytisch nicht direkt zugänglich war.

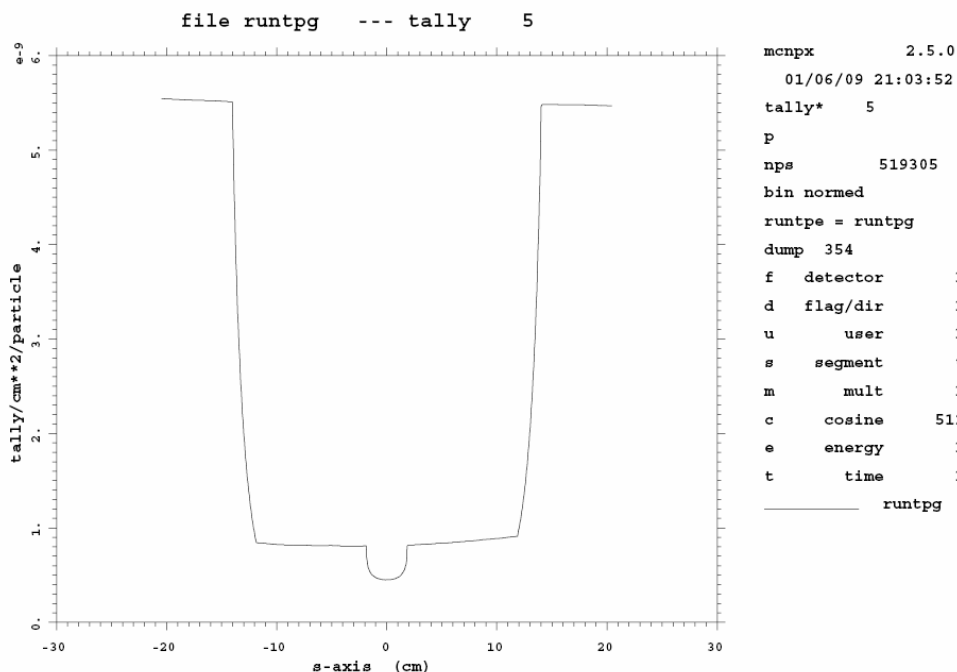


Abbildung 4.55: Streuprofil unter Einbeziehung der Simulation von Streuung der Röhrenstrahlung an der Umgebungsluft

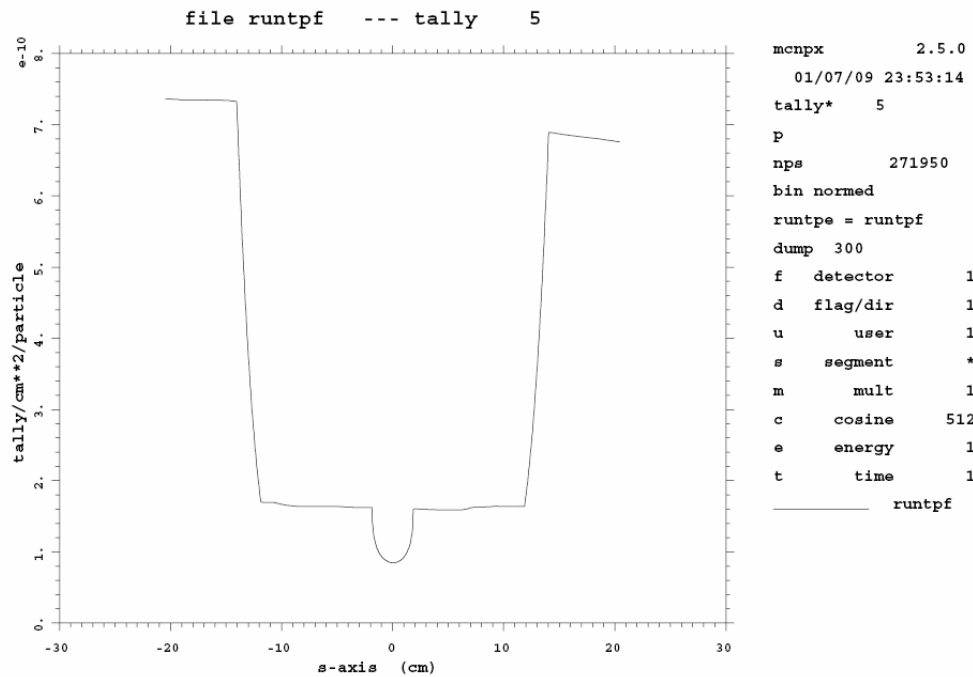


Abbildung 4.56: Streuprofil mit vereinfachtem Detektormodell. Interessant die Absenkung des rechten Teils des Plots im Gegensatz zum theoretisch erwarteten Verlauf (siehe Abbildung 4.52)

In Abbildung 4.57 und Abbildung 4.58 sind Vergleiche der letzten beiden Ergebnisse mit Ergebnissen aus dem eigenen Programm und der Messung zu sehen. Die schlechte Übereinstimmung ist einerseits durch die unterschiedlichen Modelle zur Berechnung der Röhrenspektren und der starken Vereinfachung des Detektormodells zu begründen. In diesem wird nämlich sämtliche Strahlung gezählt, welche die Mo und die Gd Schicht durchdringt. Genau betrachtet darf aber nur die in der Gd-Schicht deponierte Energie gezählt werden. Andererseits wurde bisher nicht auf die Detektoreffizienz eingegangen.

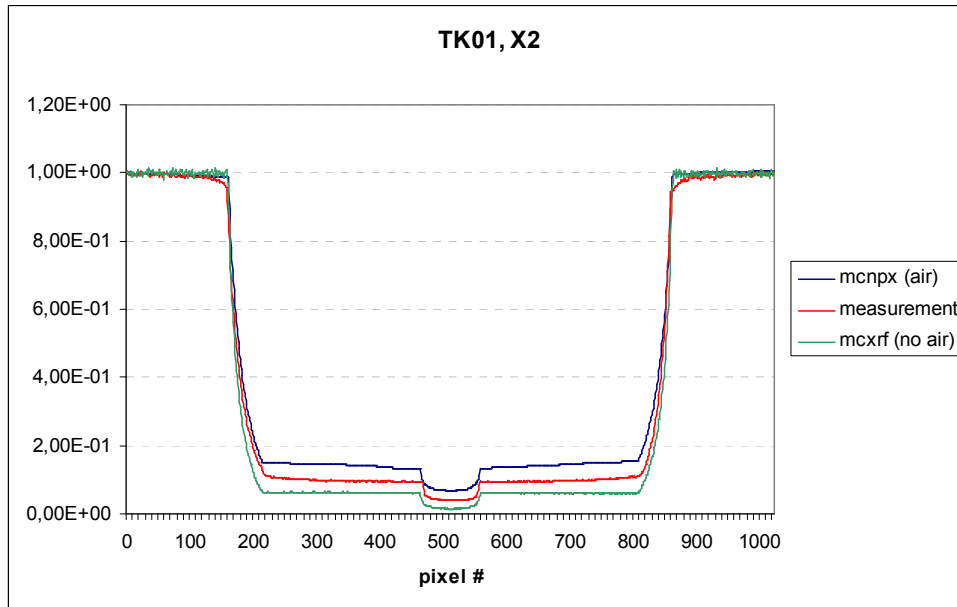


Abbildung 4.57: Vergleich Simulation aus eigenem Programm mit Messergebnis und Simulation mit MCNP unter Einbeziehung von Streuung an Umgebungsluft

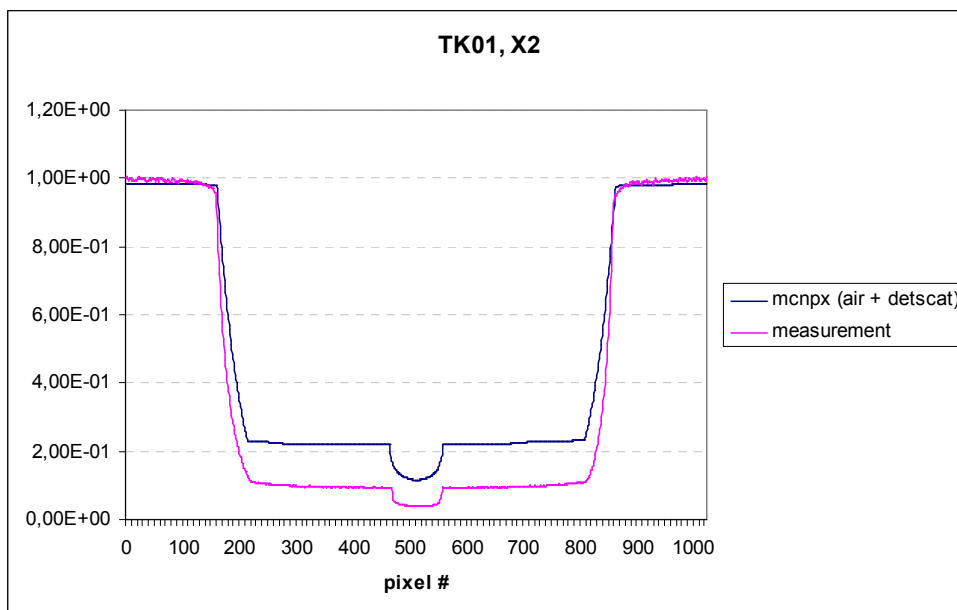


Abbildung 4.58: Vergleich Messergebnis und Simulation mit MCNP unter Einbeziehung von Streuung an Umgebungsluft und stark vereinfachtem Detektormodell

Zum Vergleich der Punktaufweitung (PSF) eines Nadelstrahls im stark vereinfachten Detektormodell wurde eine entsprechende Simulation erstellt. Das Ergebnis ist in Abbildung 4.59 zu sehen. Die genauere Berechnung über die deponierte Energie in der Szintillatorschicht ist in Abbildung 4.60 dargestellt. Zu erkennen ist, dass die Aufweitung im vereinfachten Modell etwas stärker ist als im genaueren Modell.

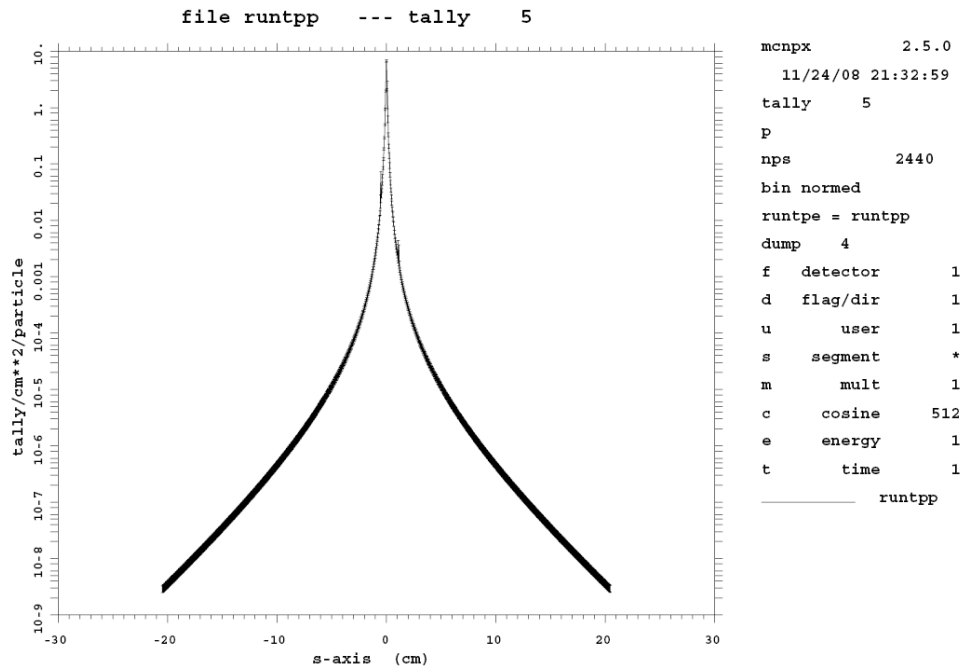


Abbildung 4.59: PSF aus stark vereinfachtem Detektormodell

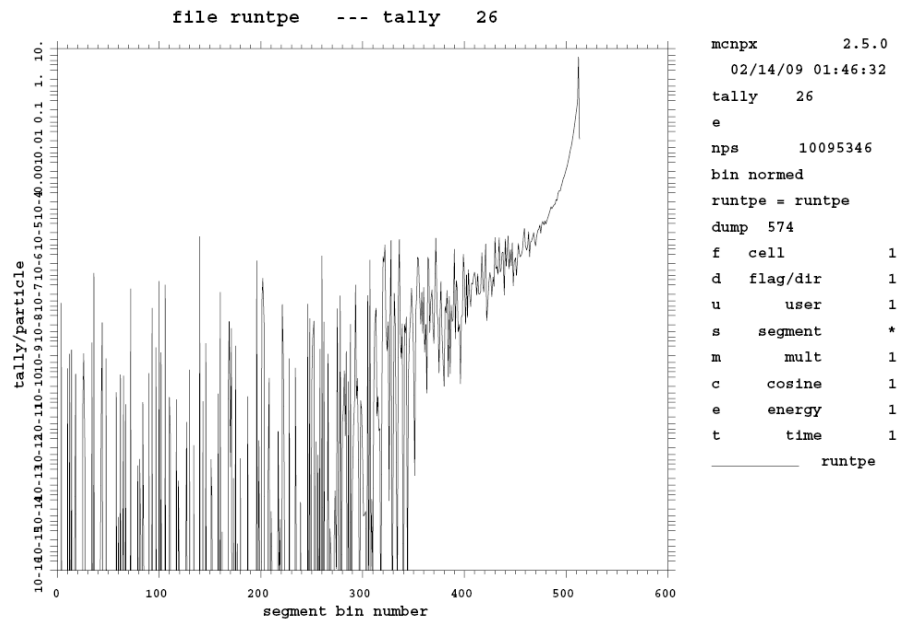


Abbildung 4.60: PSF aus genauerem Detektormodell über die in der Szintillatorschicht deponierte Energie. Gezählt wurde nur über die linke Hälfte der Detektorreihe

Detektorempfindlichkeit des Szintillators auf Basis der Simulation im Detektor-Schichtenmodell

Zur Untersuchung der Detektorempfindlichkeit wurde der Detektor mit einem auf das Zentrum gerichteten Nadelstrahl simuliert. Die Simulation des monochromatischen Nadelstrahls wurde für mehrere Energien wiederholt und dabei die in der Szintillatorschicht deponierte Energie der Elektronen gezählt. Die gezählte Energie wurde jeweils in Verhältnis zur Strahlenergie gesetzt. Die theoretische Detektoreffizienz lässt sich auch analytisch berechnen, indem man die Absorption in der Szintillatorschicht und die Abschwächung durch vorgelagerte Schichten mittels Fundamentalparameter direkt berechnet, das heißt für die Zählrate $N_0(E)$ der primären Strahlung

$$N(E) = N_0(E) \cdot \left(1 - e^{-\mu_{Gd} \rho_{Gd} d_{Scint}}\right) \cdot e^{-\mu_{Mo} \rho_{Mo} d_{Mo}} \quad (4.7)$$

mit den Massenabsorptionskoeffizienten μ und den Dichten ρ für Gd und Mo und den entsprechenden Schichtdicken d .

Die Detektoreffizienz aus der MC-Simulation ergibt sich aus deponierter Energie durch primäre Energie. Dafür wurden mehrere Simulationen mit Nadelstrahlen von 10 bis 300keV nacheinander durchgeführt und in einem Graphen dargestellt. In Abbildung 4.61 ist für den Szintillator mit einer Mo-Schutzschicht die aufgrund der Simulation berechnete Detektoreffizienz im Vergleich zur analytisch berechneten Kurve dargestellt. Für 30 bis 70keV konnte kein Ergebnis ermittelt werden. Die Übereinstimmung zwischen der Kurve aus der MC-Simulation, in der auch Photoelektronen und Mehrfachstreuungen berücksichtigt werden, zur theoretischen Kurve, die sich rein aus der primären Absorption ergibt, ist verhältnismäßig gut.

In Abbildung 4.63 ist die gleiche Simulation für eine Graphit-Schutzschicht wiederholt worden. Hierzu wurde vor kurzem von Reitz et al. [rei07] die Detektoreffizienz am Synchrotron HASYLAB gemessen. Bei der MC-Simulation befindet sich hier nur der Bereich zwischen 50 und 80keV einigermaßen in Übereinstimmung mit der theoretischen Absorption, das erste Maximum ist überhaupt nicht beobachtbar, weder in der MC-Simulation noch in der Messung. Da in diesem Bereich aber nur wenige MC-Ergebnisse gemacht werden konnten, ist die Vergleichbarkeit eingeschränkt. Außerdem wurde am HASYLAB nur ein Teilbereich der Simulation gemessen.

In Abbildung 4.62 (für Mo) und in Abbildung 4.64 (für C) ist jeweils die deponierte Energie für 4 benachbarte Segmente der mittleren Detektorzeile dargestellt. Das anfokuskierte Pixel ist das Segment 511-512. Zu sehen ist auch, dass die Intensität im benachbarten Pixel bereits zwei Größenordnungen geringer ist.

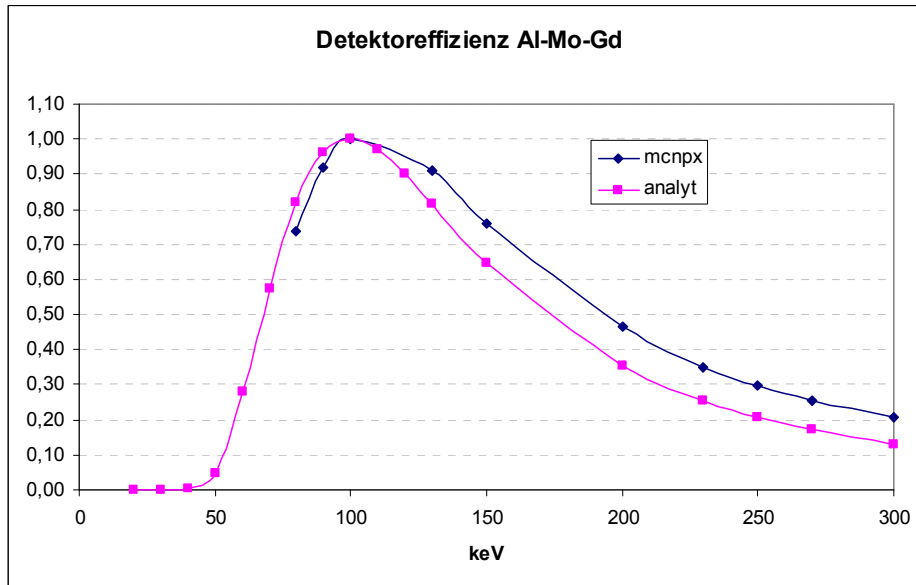


Abbildung 4.61: Vergleich der Detektoreffizienz analytisch anhand von Fundamentalparametern für die Abschwächung und Absorption eines senkrechten Strahls berechnet und in der Simulation mit MCNP. Angenommene Schichten: 1mm Al, 0,5mm Mo, 0,5mm Gd

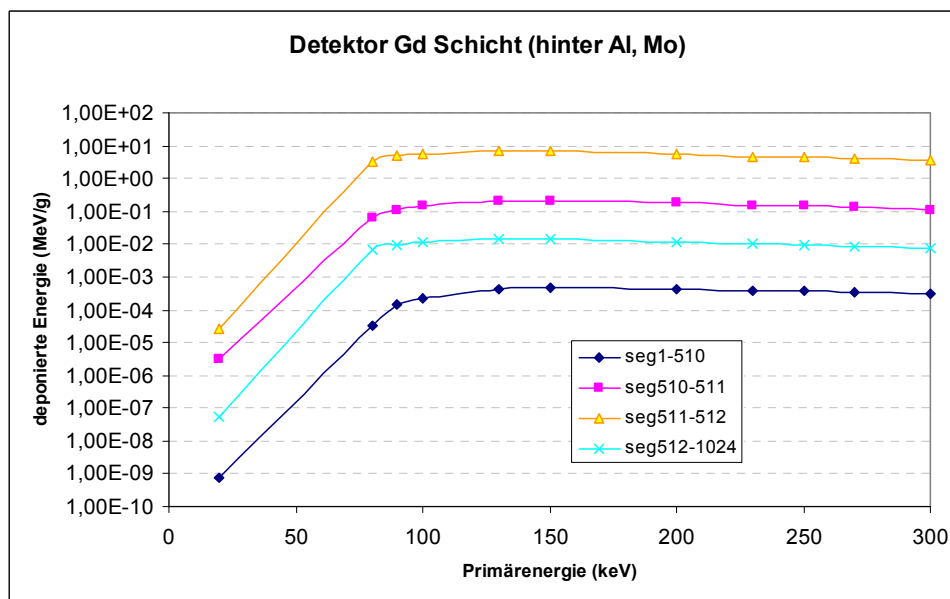


Abbildung 4.62: Logarithmische Darstellung der in der Gd-Schicht deponierten Energie für unterschiedliche Segmente des mittleren Pixelstreifens. Das mit dem Nadelstrahl anfokusierte Pixel entspricht Segmentierung 511-512. Ab der Energie von etwa 100keV stellt sich ein nahezu linearer Bereich ein. Es wird die deponierte Energie scheinbar nahezu unabhängig von der Primärenergie und die gemessene Zählrate somit nahezu direkt proportional zur primären Zählrate.

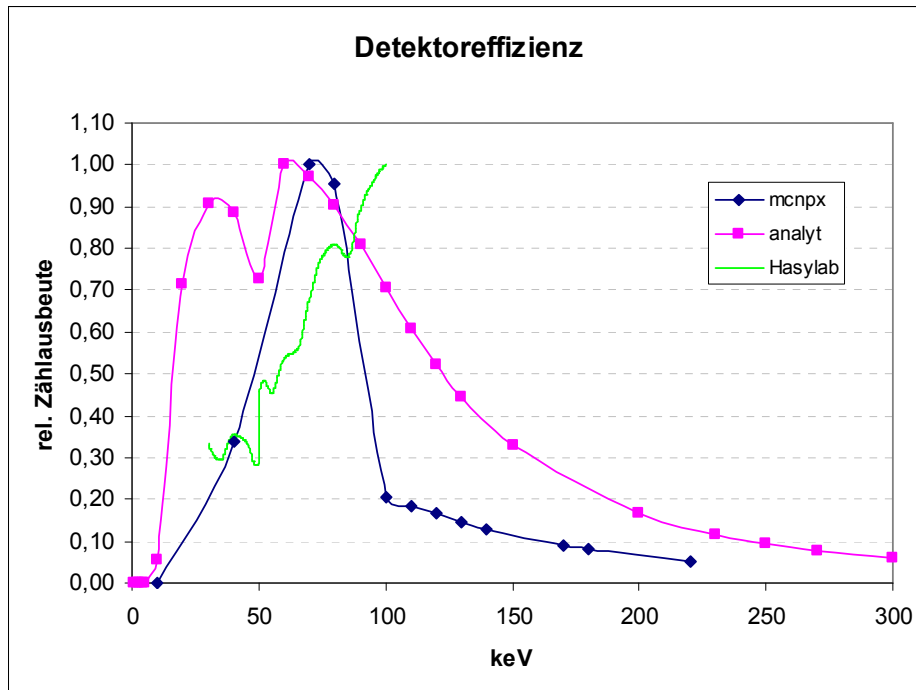


Abbildung 4.63: Vergleich der Detektoreffizienz aus analytischer Berechnung, Simulation mit MCNP und Messung im Hasylab [rei07]. Angenommene Schichten: 1mm Al, 0,5mm C, 0,5mm Gd

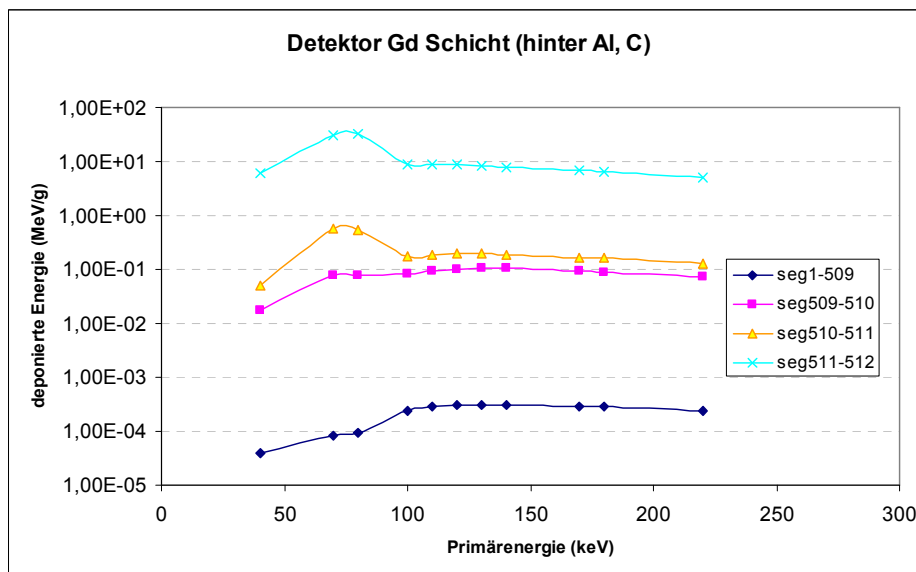


Abbildung 4.64: Logarithmische Darstellung der in der Gd-Schicht deponierten Energie für unterschiedliche Segmente des mittleren Pixelstreifens. Das mit dem Nadelstrahl anfokusierte Pixel entspricht Segmentierung 511-512. Ab der Energie von etwa 100keV stellt sich auch hier ein nahezu linearer Bereich ein. Es wird die deponierte Energie scheinbar nahezu unabhängig von der Primärenergie und die gemessene Zählrate somit nahezu direkt proportional zur primären Zählrate.

4.6. Röntgenröhrenspektren

Die richtungsabhängigen Röhrenspektren, die für das eigene Programm verwendet wurden, waren nach dem Modell von Ebel [ebe06] berechnet. Dieses Modell ist zwar experimentell gesichert bis 50kV, also weit unter der maximalen Energie, die hier zur Anwendung kommt, aber als analytisches Modell liefert es wesentlich schneller ein Ergebnis als die MC-Simulation. Der wichtigste Unterschied der beiden Berechnungsmethoden ist, dass bei der MC-Simulation die Bremsstrahlung und die charakteristische Strahlung aus dem gesamten dreidimensionalen Eindringbereich der Elektronen im Target stammt im Gegensatz zu einem einzigen Punkt in einer mittleren Eindringtiefe (siehe Kapitel 2.3).

Zur Untersuchung der Abweichungen wurden vergleichende Simulationen für verschiedene Geometrien mit MCNP erstellt. Für die analytische Berechnung wurde das Modell von Ebel verwendet in der aktuellsten Implementierung *XCell* von Mantler [man08]. Abbildung 4.65 zeigt den Vergleich der Berechnung des Spektrums einer W-Anode bei einer Beschleunigungsspannung von 50kV also der oberen Grenze des gesicherten Bereichs für das Modell von Ebel und MCNP. Für die Winkel des Elektronenstrahls und der Verbindung Brennfleck-Detektor wurde jeweils 45° in Bezug auf die Probenoberfläche angenommen. An dieser Stelle ist zu erwähnen, dass die Definition der Winkel für einfallende Elektronen und austretende Photonen in der Literatur nicht einheitlich angegeben wird. Die Winkel beziehen sich einmal auf die Oberfläche der Anode und einmal auf die Flächennormale im Brennfleck. Bei allen Simulationen im Rahmen dieser Arbeit ist dieser Bezug stets auf die Probenoberfläche zu interpretieren.

Die absoluten Werte wurden willkürlich auf den Betrag bei 30keV normiert, um in einem Plot gemeinsam dargestellt werden zu können. Für die gleiche Geometrie und das gleiche Target jedoch einer Spannung von 100kV ist ein Spektrum in Abbildung 4.66 zu sehen, hier mit der Normierung auf die Intensitäten bei 50keV. In beiden Spektren ist die relative Übereinstimmung zwischen den beiden Berechnungsmethoden gut. Zur Verdeutlichung wurden Energieabschnitte mit charakteristischen Linien nochmals vergrößert dargestellt, in Abbildung 4.67 für die Absorptionskante der M-Schale, in Abbildung 4.68 für die L-Kante und in Abbildung 4.69 für die K-Kante. Zu sehen ist, dass MCNP nicht alle Linien anzeigt, lediglich Ka_1 , Ka_2 , Kb_1 , Kb_2 und La_1 . Weiters ist bei den angezeigten Linien aufgrund der unterschiedlichen verwendeten Datenbanken (Elam et al. [ela02] in *XCell* und Cullen et al. [cul97] für MCNP) ein Unterschied von einigen eV zu erkennen. Ein weiteres 100kV Spektrum mit den Winkeln $45^\circ/45^\circ$ für Mo als Targetmaterial ist in Abbildung 4.70 dargestellt, sowie vergrößert für den Bereich der L-Kante in Abbildung 4.71 und der K-Kante in Abbildung 4.72. Auch hier herrscht wieder gute relative Übereinstimmung der beiden Programme.

Bei Erhöhung der Spannung auf 200kV sind zwischen den Ergebnissen der beiden Programme schließlich Abweichungen zu erkennen, die mit Abflachung des Winkels zum Detektor auch noch stark zunehmen. In Abbildung 4.74 ist hiezu ein 200kV Spektrum für W zu sehen für den Elektronenstrahlwinkel von 20° und dem Detektorwinkel von 70° . Für die Änderung des Detektorwinkels auf 20° ist das Ergebnis in Abbildung 4.75 dargestellt. Dieses Ergebnis wurde auch noch für absolute Zählraten umgerechnet (siehe Abbildung 4.76). *XCell* liefert diese bereits bei der Berechnung. MCNP hingegen setzt das Ergebnis immer in Relation zur Anzahl der emittierten Zahl an Quellpartikel, hier Elektronen. Dieses

Ergebnis musste somit noch mit einer Konstanten multipliziert werden, die sich aus Faktoren für die Unterschiede in Energieschrittweite, Raumwinkel des Detektors, einem bei Ebel angegebenen Proportionalitätsfaktor und der reziproken Elementarladung zur Umrechnung in mA zusammensetzen.

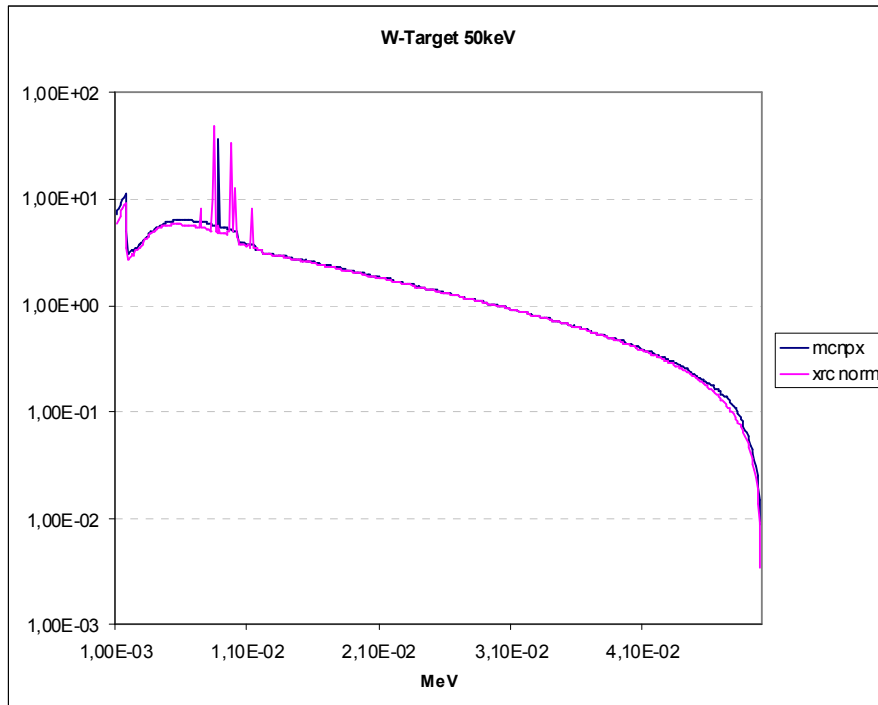


Abbildung 4.65: 50kV Spektrum für ein W-Target mit den Strahlwinkeln 45°/45°, Rechnung mit MCNP (blau) und XCell (rosa). Die beiden Funktionsgraphen wurden bei ihrem Wert für 30keV normiert

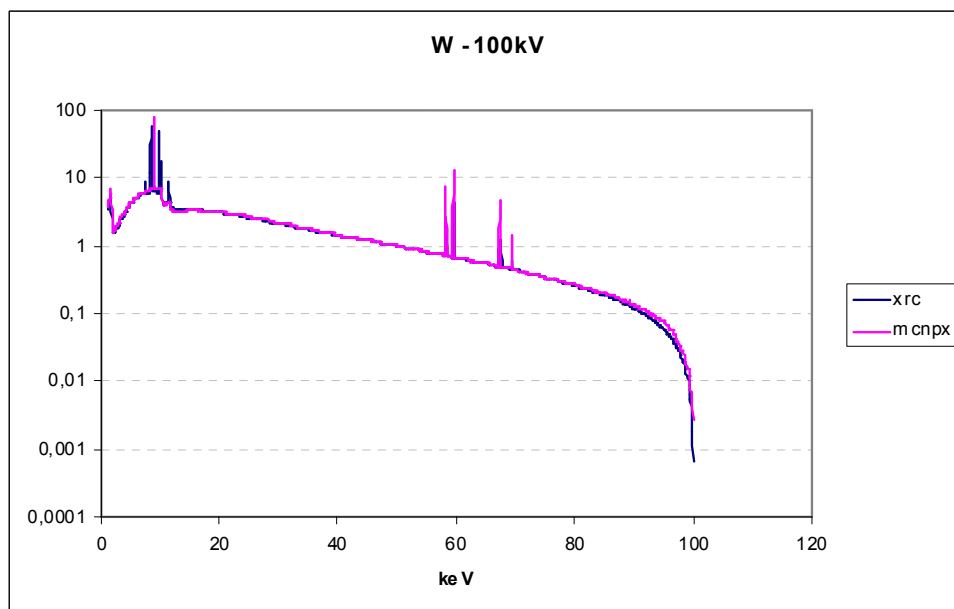


Abbildung 4.66: 100kV Spektrum für ein W-Target mit den Strahlwinkeln 45°/45°, Rechnung mit MCNP (rosa) und XCell (blau), Normierung der Graphen bei 50keV. Die Übereinstimmung im langwelligen Bereich unter 20keV erscheint noch besser als im Spektrum für 50kV

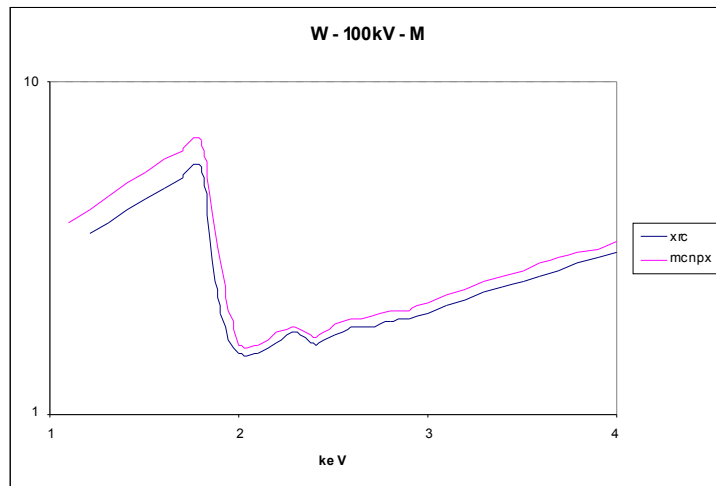


Abbildung 4.67: Vergrößerung des Bereichs der M-Kante für das W-Spektrum in Abbildung 4.66

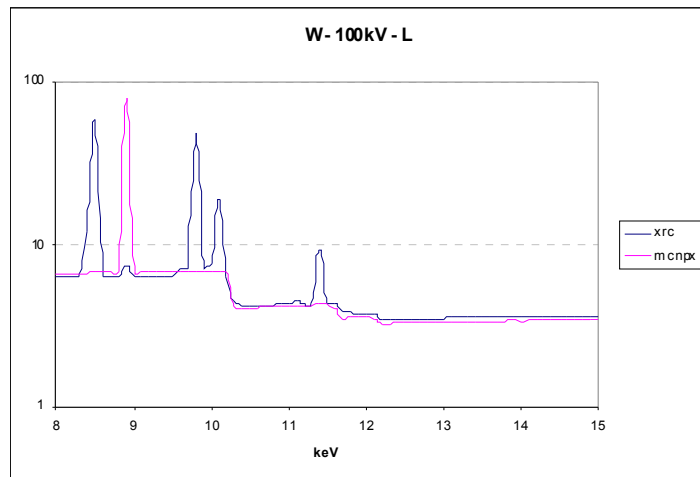


Abbildung 4.68: Vergrößerung des Bereichs der L-Kante für das W-Spektrum in Abbildung 4.66. Deutlich zu sehen ist die Vernachlässigung vieler Fluoreszenzlinien bei MCNP

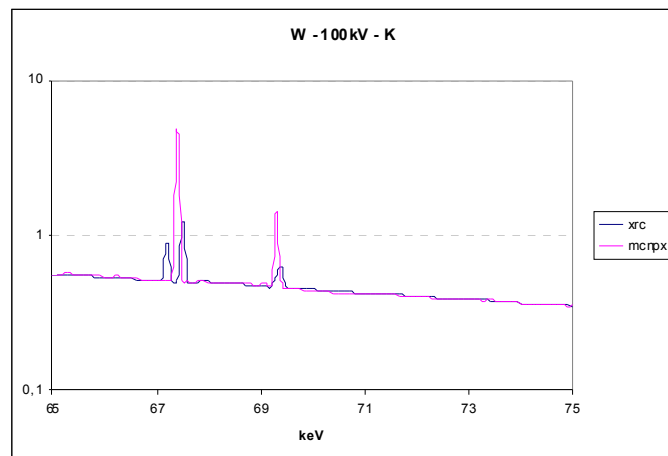


Abbildung 4.69: Vergrößerung des Bereichs der K-Kante für das W-Spektrum in Abbildung 4.66

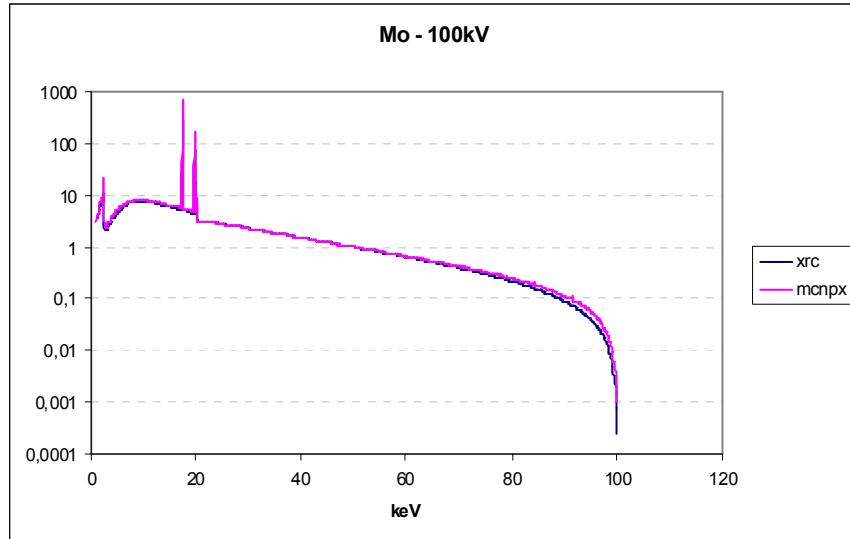


Abbildung 4.70: 100kV Spektrum für ein Mo-Target, Rechnung mit MCNP (rosa) und XCell (blau). Die Übereinstimmungen sind nach wie vor verhältnismäßig gut

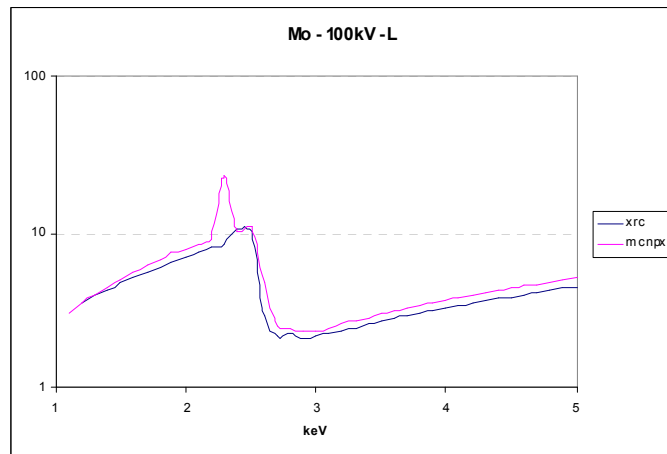


Abbildung 4.71: Vergrößerung des Bereichs der L-Kante für das W-Spektrum in Abbildung 4.70

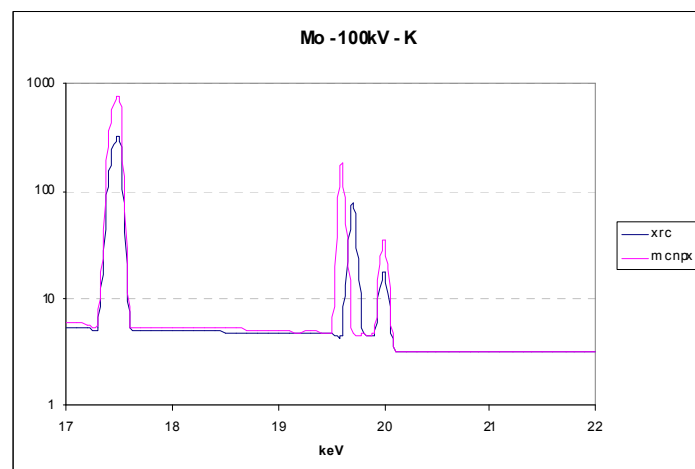


Abbildung 4.72: Vergrößerung des Bereichs der K-Kante für das W-Spektrum in Abbildung 4.70

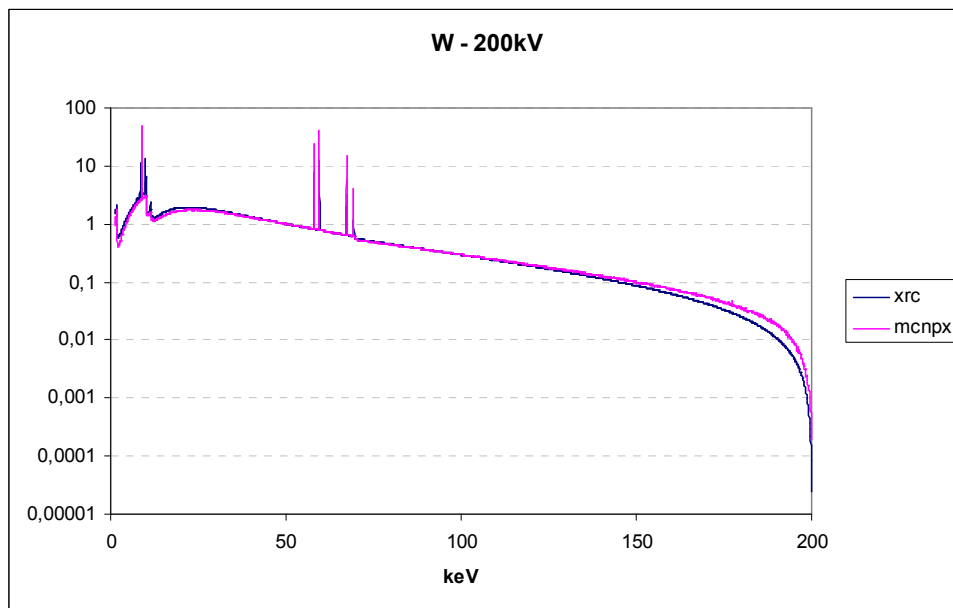


Abbildung 4.73: 200kV Spektrum für ein W-Target mit den Strahlwinkeln 45°/45°, Rechnung mit MCNP (rosa) und XCell (blau), Normierung der Graphen bei 50keV. Sowohl im Energiebereich unter 30keV als auch im Bereich über 100keV sind die Abweichungen gegenüber dem Spektrum für 50kV und für 100kV größer.

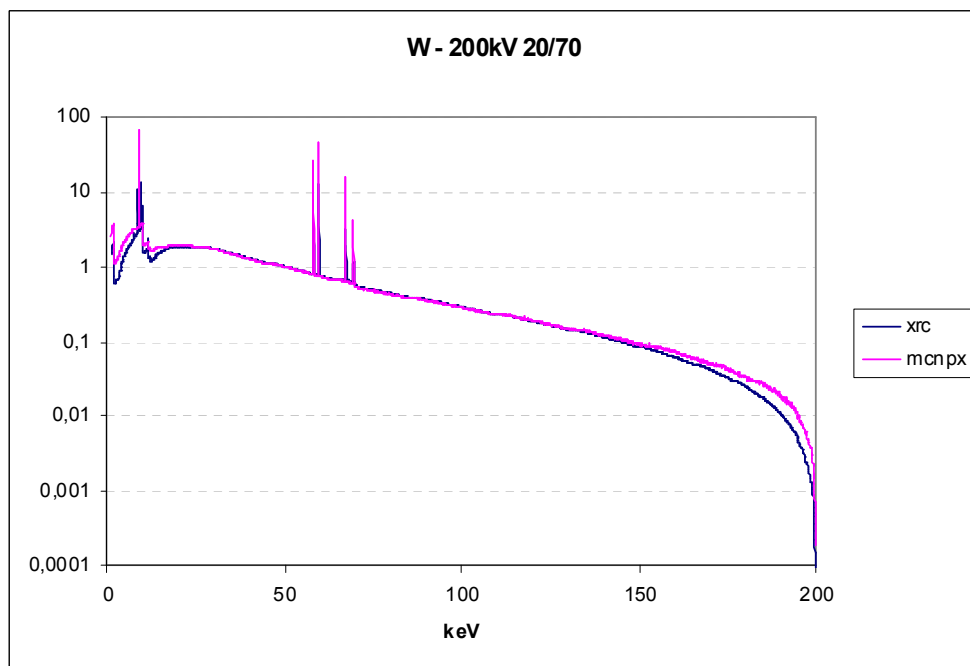


Abbildung 4.74: 200kV Spektrum für ein W-Target, 20°/70°, Rechnung mit MCNP (rosa) und XCell (blau). Der flache Einfallswinkel der Elektronen verursacht noch deutlichere Abweichungen gegenüber dem vorigen Spektrum für die 45°/45° Geometrie

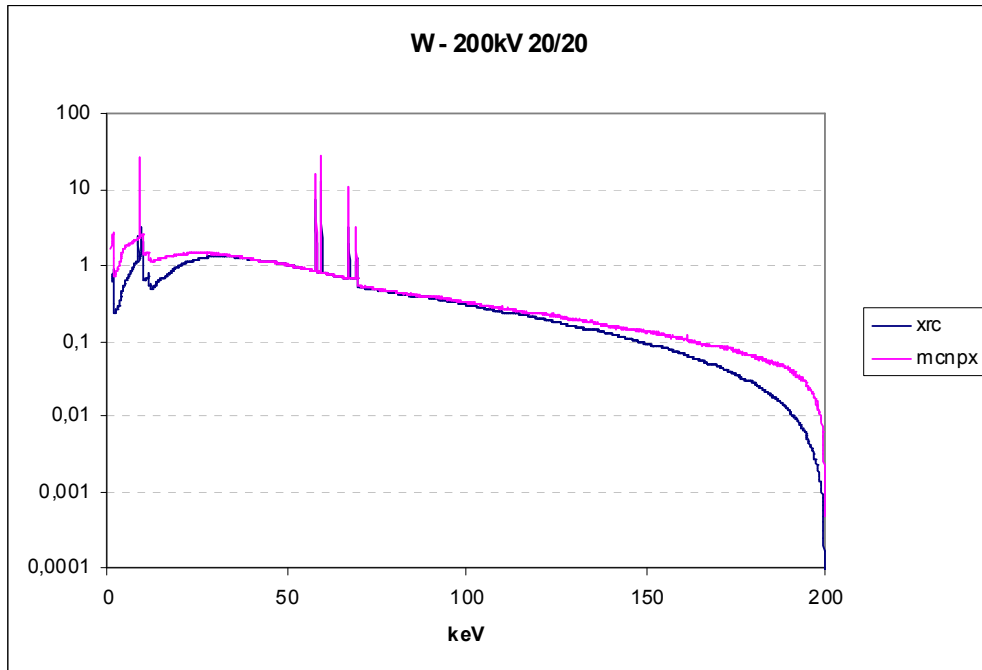


Abbildung 4.75: 200kV Spektrum für ein W-Target, 20°/20°, Rechnung mit MCNP (rosa) und XCell (blau). Sowohl Einfallswinkel der Elektronen als auch Austrittswinkel der Photonen sind hier sehr flach und die Abweichungen sowohl am langwelligen als auch am kurzwelligen Ende des Spektrums sehr groß.

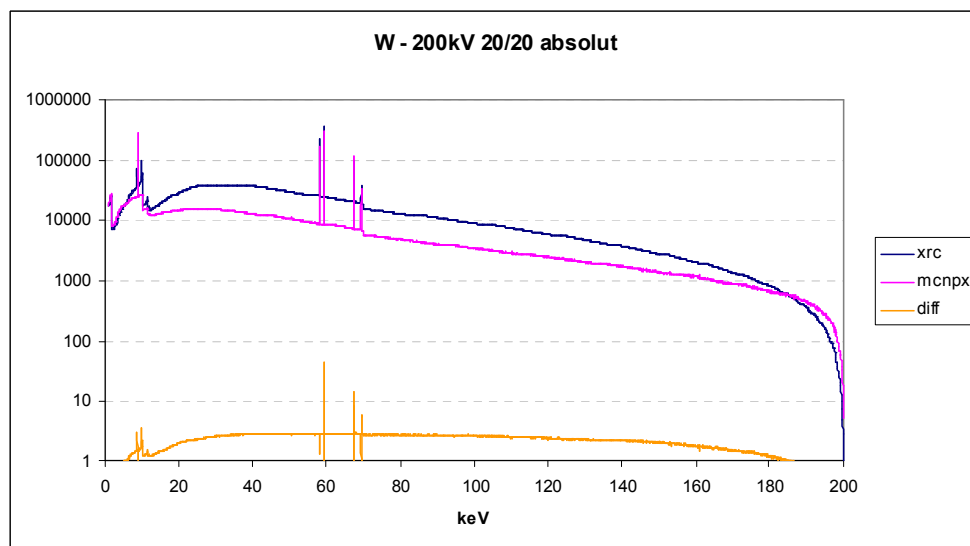


Abbildung 4.76: 200kV Spektrum für ein W-Target, 20°/20°, Vergleich der absoluten Werte aus Rechnung mit MCNP (rosa) und XCell (blau), relative Abweichung (orange)

Zur Überprüfung des Modells von Ebel wurde auf bereits existierende Messungen zurückgegriffen, die mit dem SEM (Scanning Electron Microscope) für drei verschiedene Spannungen an Gold und Kupfer durchgeführt worden waren [sva09]. Der Elektronenstrahl traf unter rechtem Winkel auf die Probe auf und der Detektorwinkel betrug 35°. Die Berechnung wurde nicht über die Eichkurve des verwendeten Detektors korrigiert, sodass

das Ergebnis für einen realen Detektor gilt und über die Detektoreffizienz des verwendeten Detektors korrigiert werden muss.

Die Ergebnisse wurden zusätzlich noch mit Simulationen aus MCNP verglichen und sind in Abbildung 4.77 bis Abbildung 4.82 dargestellt. Dabei sind durchwegs gute Übereinstimmungen zu erkennen. Die Simulationsprogramme sind beide auf die minimale Energie von 1keV begrenzt, weshalb die Übereinstimmungen für das langwellige Ende des Spektrums nicht mehr zu kontrollieren sind.

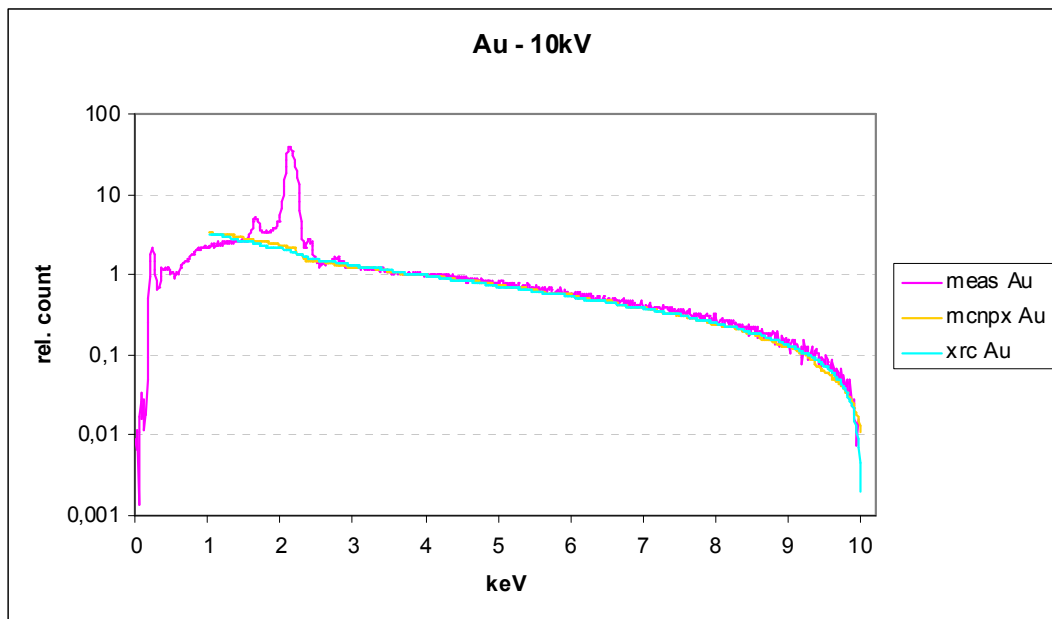


Abbildung 4.77: 10kV Spektrum für Gold, Vergleich Messung (rosa) und Rechnung mit MCNP (orange), XCell (grün)

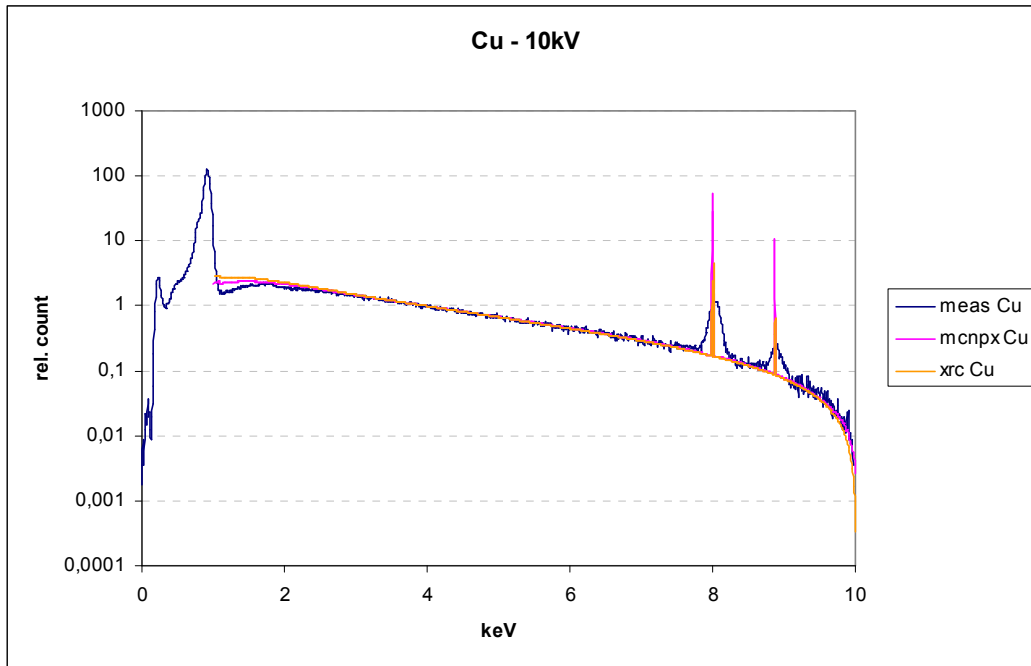


Abbildung 4.78: 10kV Spektrum für Kupfer, Vergleich Messung (blau) und Rechnung mit MCNP (rosa), XCell (orange)

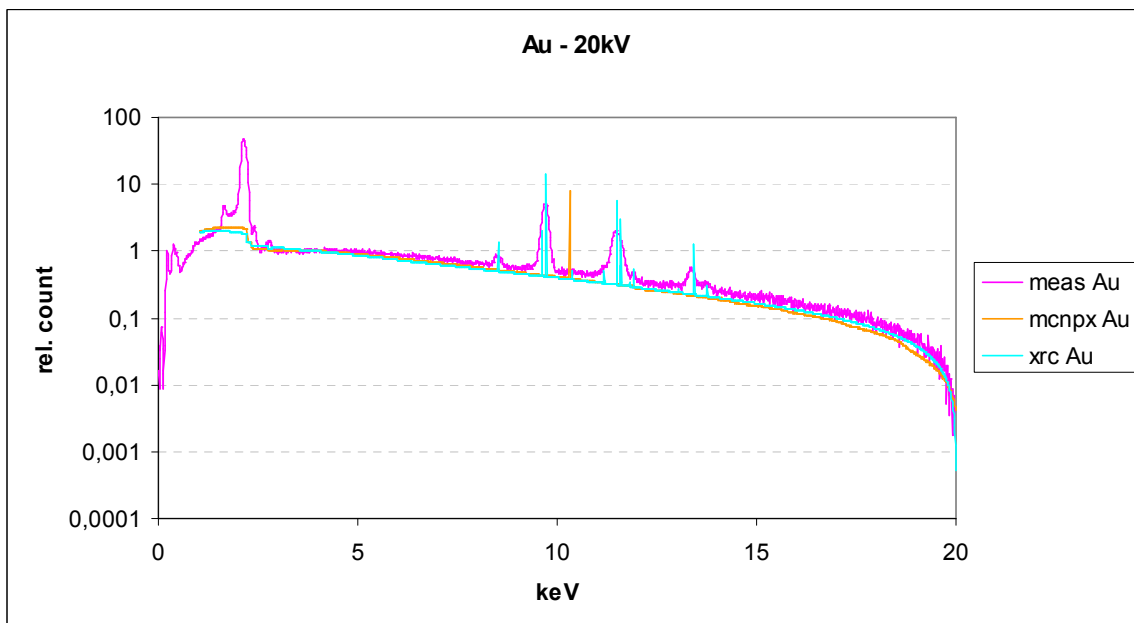


Abbildung 4.79: 20kV Spektrum für Gold, Vergleich Messung (rosa) und Rechnung mit MCNP (orange), XCell (grün)

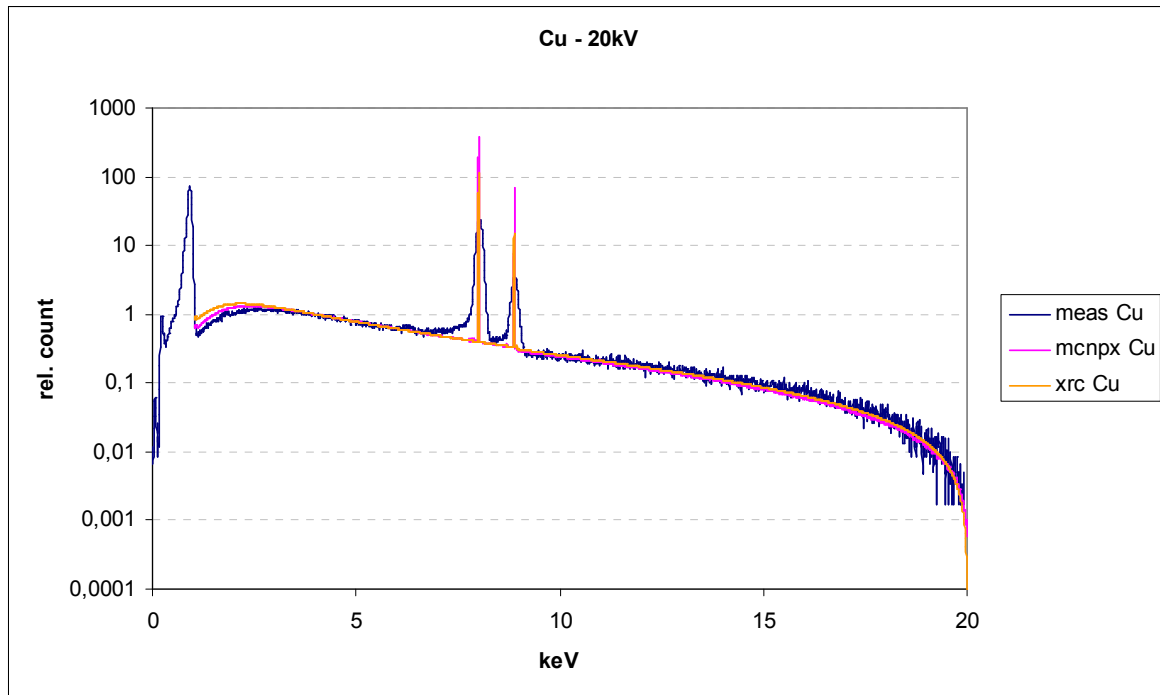


Abbildung 4.80: 20kV Spektrum für Kupfer, Vergleich Messung (blau) und Rechnung mit MCNP (rosa), XCell (orange)

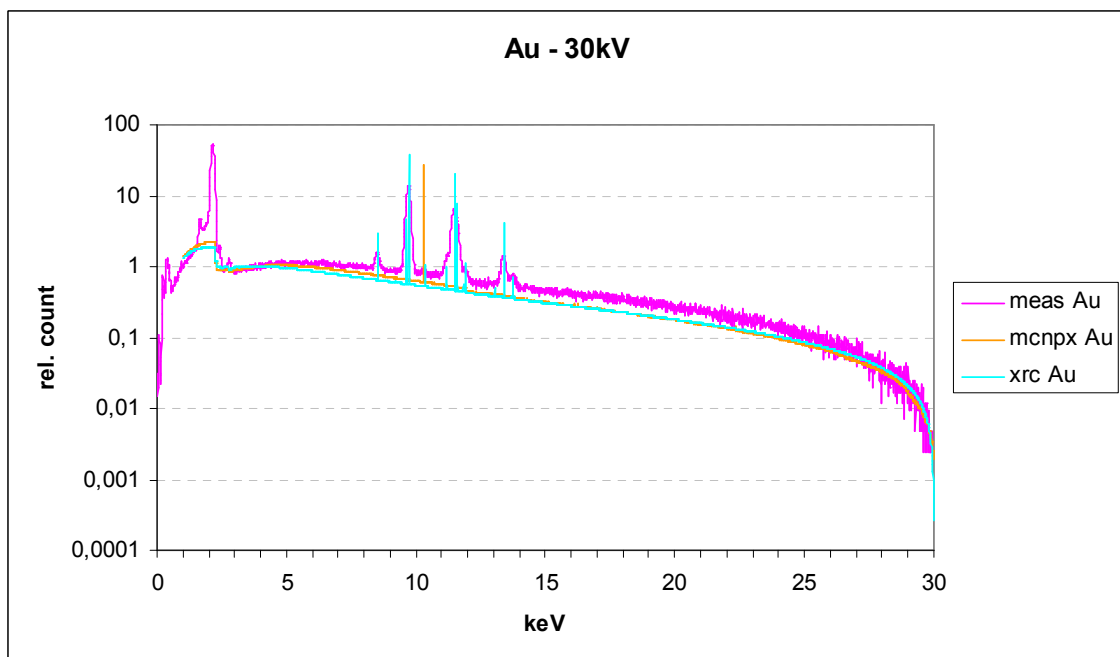


Abbildung 4.81: 30kV Spektrum für Gold, Vergleich Messung (rosa) und Rechnung mit MCNP (orange), XCell (grün)

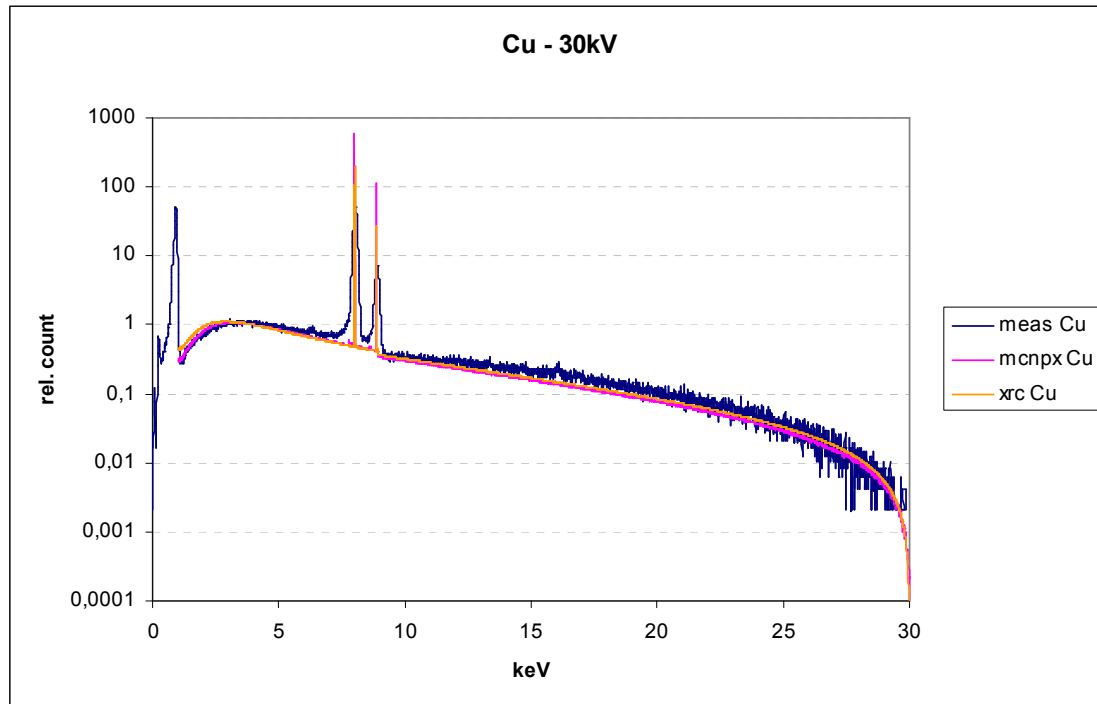


Abbildung 4.82: 30kV Spektrum für Kupfer, Vergleich Messung (blau) und Rechnung mit MCNP (rosa), XCell (orange)

4.7. Simulation der Projektion von TK01 auf Position X2 unter Berücksichtigung aller bisher analysierten Einflüsse

Die in den bisherigen Schritten analysierten Einflüsse wurden abschließend auf die Simulation der Projektion des Testkörpers TK01 in der Position X2 angewandt. Aufgrund der Analysen konnte festgestellt werden, dass die Schutzschicht über dem Szintillator aus Graphit (C) bestand statt der auch in der Dokumentation angeführten Molybdän-Schicht. Die in einer MCNP Simulation ermittelte Detektoreffizienz wurde somit auf eine mit getrennten Energiekanälen durchgeführte Simulation angewandt. Da nicht für alle Energien in der Simulation Ergebnisse zu bekommen waren, wurden die fehlenden Kanäle durch lineare Interpolation ergänzt. Die sich daraus ergebende Eichkurve ist in Abbildung 4.83 dargestellt.

Anwendung dieser Eichfunktion auf das Ergebnis aus Abbildung 4.12 zeigt schon sehr gute Übereinstimmung mit der Messung (siehe Abbildung 4.84). Die beim Schatten der Messung zu sehende Krümmung (Anstieg der Intensität zum Rand) ist jedoch nach wie vor unberücksichtigt.

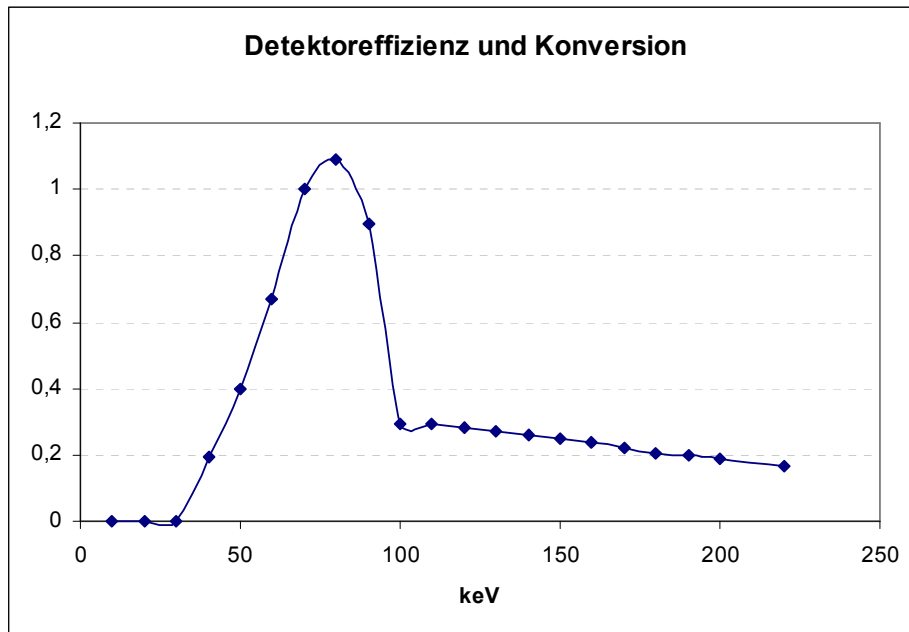


Abbildung 4.83: Eichkurve für den Szintillatordetektor mit den Schichten Al 1mm, C 0,5mm und Gd 0,5mm aus der Simulation der Detektoreffizienz über die deponierte Energie und Ladungskonversion (hier lediglich Multiplikation mit der Energie des Kanals).

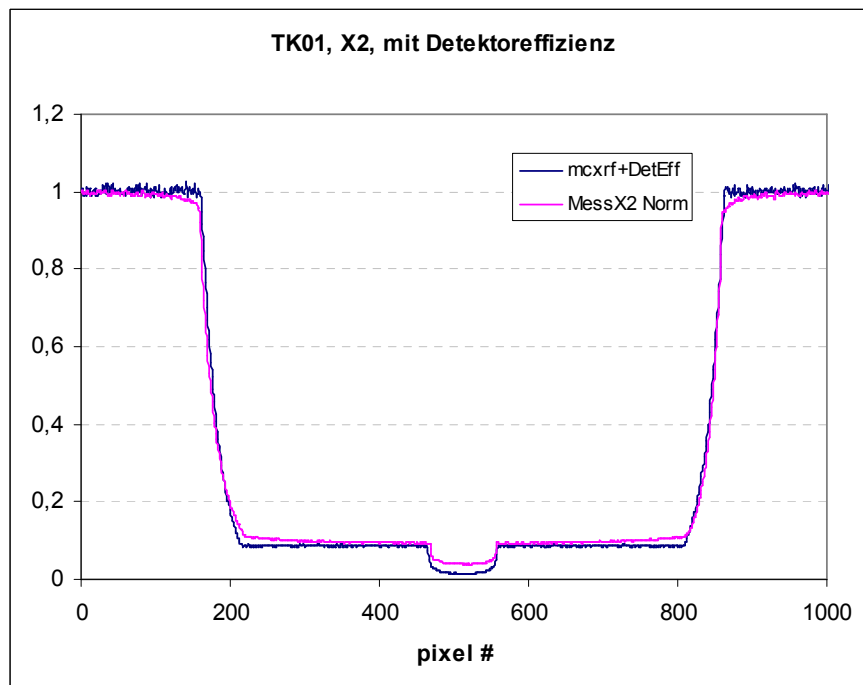


Abbildung 4.84: Vergleich Messung mit Simulation, welche durch Anwendung der Eichfunktion aus Abbildung 4.83 korrigiert wurde.

Dazu wurde eine Nadelstrahlsimulation für den Detektor durchgeführt. Ein 200keV Nadelstrahl wurde auf die Detektormitte fokussiert, für den Detektoraufbau wurde wieder die Graphit-Schutzschicht angenommen und in 4cm Abstand davor das Al-Schutzblech mit 1mm Stärke. Die Simulation wurde einmal mit Umgebungsluft und einmal ohne Luft durchgeführt. Der Intensitätsabfall für beide Simulationen ist in Abbildung 4.85 dargestellt. Der simulierte Graph wurde für die einfachere Handhabung in *Matlab* durch folgende fit-Funktionen angenähert:

$$p^{AIR}_i = k_i^{-3.2} + \frac{i^{2.6}}{k_i \cdot 10^{11}} \cdot \log(-k_i^{2.2}) \quad (4.8)$$

$$p^{NOAIR}_i = k_i^{-3.9} + \frac{i^{2.8}}{2.5 \cdot k_i \cdot 10^{12}} \cdot \log(-k_i^2) \quad (4.9)$$

$$k_i = (512 - i) \quad (4.10)$$

mit dem Pixelindex i (1-1024) für die mittlere Detektorreihe. Für die entsprechenden zweidimensionalen Filterkerne wurden die beiden Funktionen kreissymmetrisch um den Detektormittelpunkt ergänzt. Sowohl das Weißbild als auch das Graubild (siehe Kapitel 4.1) wurden mit diesen PSFs zweidimensional gefaltet, das gefilterte Graubild danach auf das gefilterte Weißbild normiert. In Abbildung 4.86 ist das Ergebnis der Anwendung des Faltungskerns mit Umgebungsluft zu sehen. Es ist deutlich zu erkennen, dass die Krümmung des Schattens gut mit der Messung übereinstimmt. Der nach wie vor erkennbare Unterschied in der Intensität des Schattens ist darauf zurückzuführen, dass die Detektoreffizienz noch nicht angewandt wurde. Abbildung 4.87 zeigt dagegen die Anwendung des zweiten Faltungskerns ohne Umgebungsluft, der lediglich die detektorinhärente Streuung wiedergibt. Durch diesen Faltungskern wird die Simulation so gut wie gar nicht verändert.

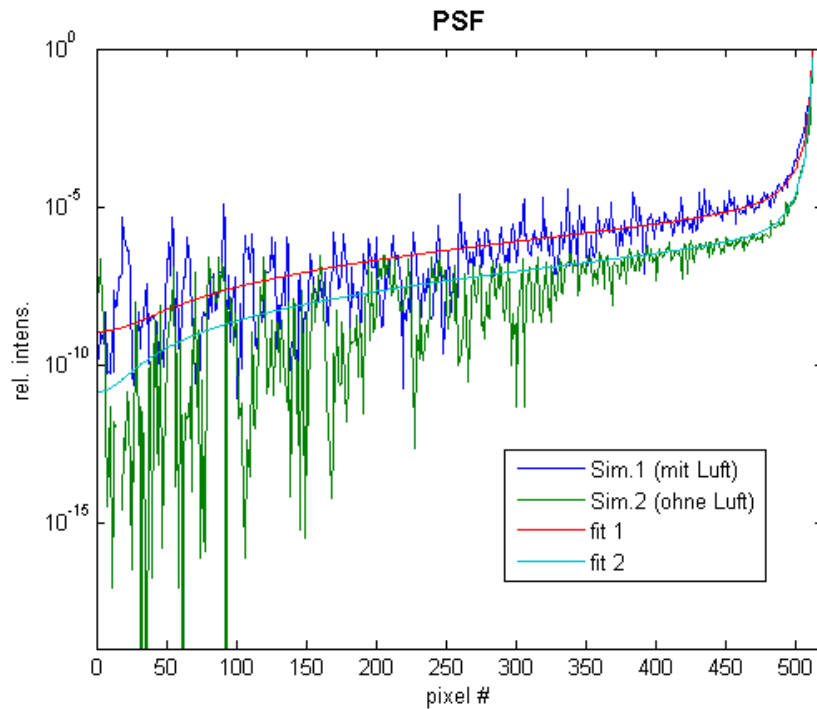


Abbildung 4.85: Ermittlung der PSF durch Simulation eines Nadelstrahls (200keV) fokussiert auf die Detektormitte unter Einbeziehung von Umgebungsluft (Sim.1) und ohne Luft (Sim.2)

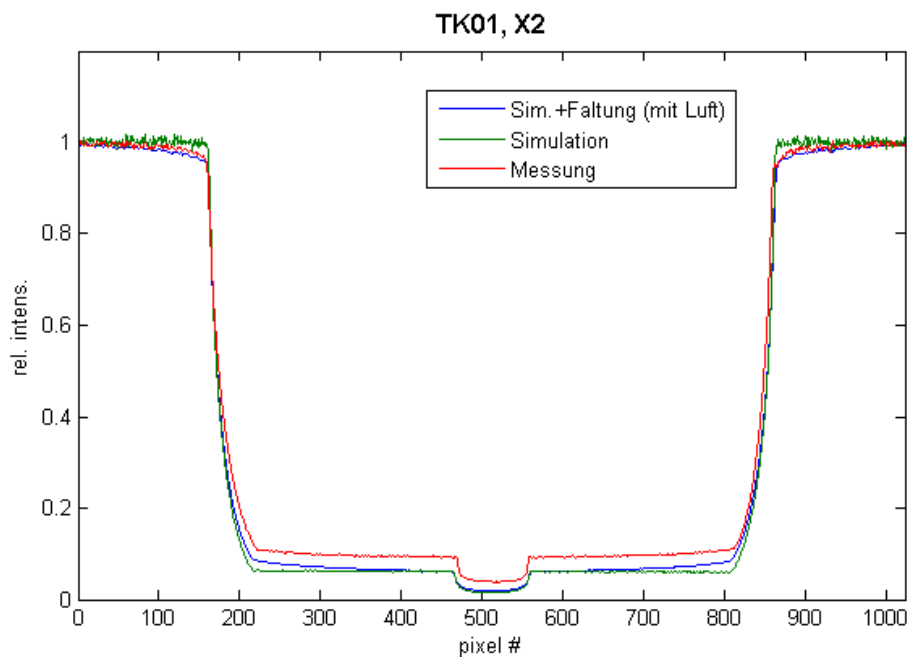


Abbildung 4.86: Vergleich der Messung des TK01 auf Position X2 mit der Simulation, bei der der erste Faltungskern aus Abbildung 4.85 (detektorinhärente Streuung + Umgebungsluft) angewandt wurde

Der Verlauf der Krümmung zeigt im Nahbereich außerhalb des Schattens besonders gute Übereinstimmung, im Bereich des Schattens scheint sie jedoch in der Simulation etwas stärker auszufallen. Dies ist mit dem etwas verkürzten Luftweg – um die Probenlänge vermindert - zu begründen.

Die Einbeziehung der ermittelten Detektoreffizienz und der PSF aus detektorinhärenter Streuung kombiniert mit Streuung an Luft konnte schließlich sehr gute Übereinstimmung mit der Messung erzielen, siehe Abbildung 4.88.

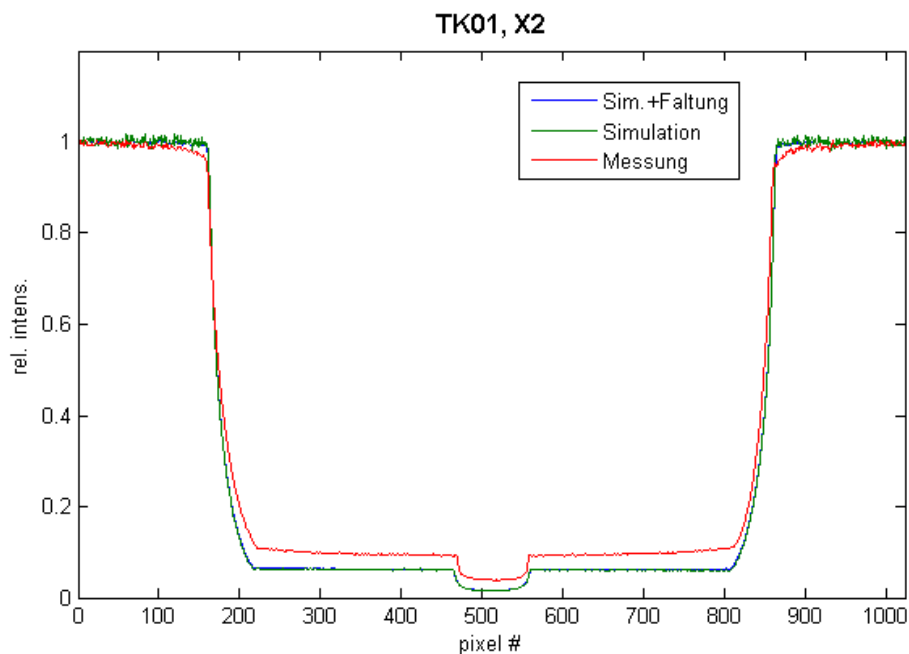


Abbildung 4.87: Vergleich der Messung des TK01 auf Position X2 mit der Simulation nach Anwendung des zweiten Faltungskerns aus Abbildung 4.85 (detektorinhärente Streuung ohne Umgebungsluft) . Die im roten Graphen (Messung) zu sehende Krümmung kann somit durch detektorinhärente Streuung allein nicht beschrieben werden.

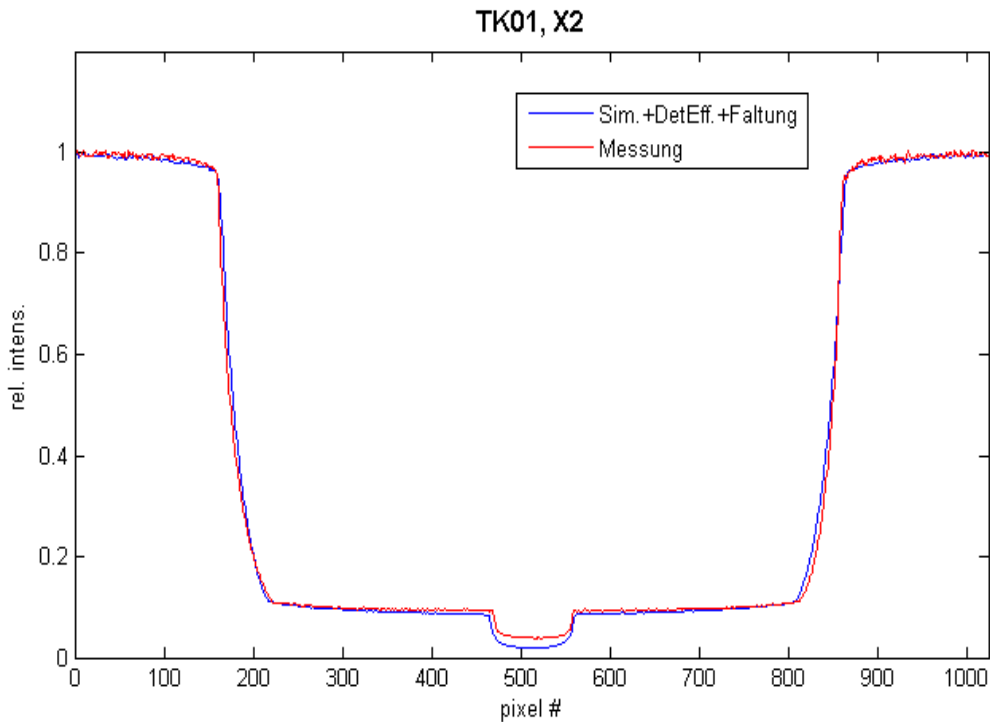


Abbildung 4.88: Vergleich der Messung des TK01 auf Position X2 mit der Simulation unter Berücksichtigung der in der MC-Simulation ermittelten Detektoreffizienz. Für den Faltungskern wurde detektorinhärente Streuung und Streuung an Umgebungsluft angenommen (Abbildung 4.85)

5. Diskussion und Conclusio

Projektion

Ein Programm wurde erstellt, um die Projektion eines einfachen Testkörpers bei Durchstrahlung mit Röntgenstrahlung und dessen Streuung zu simulieren. Die Ergebnisse konnten entsprechend ihrer Partikelhistorien unterteilt werden, um durchdringende und gestreute Strahlung quantifizieren zu können. Als Röntgenquelle wurde ein richtungsabhängiges Spektrum verwendet, das anhand des analytischen Modells von Ebel [ebe06] berechnet wurde. Die Ergebnisse wurden so wie bei der Messung auf die Intensität des ungestreuten (weißen) Strahls normiert. In der ersten Vereinfachung wurden lediglich die Wechselwirkungen der Photonen in der Probe simuliert. Die Zählung über einen Matrixdetektor erfolgte entweder als Photonenzahl oder Energie. Als Probenmaterial wurden reine Elemente angenommen, Streuung an der Umgebungsluft oder im Detektor sowie Fluoreszenz oder Sekundärelektronenprozesse in der Probe wurden vernachlässigt.

Für alle simulierten Testkörper und Positionen konnten bei den anfänglichen Vereinfachungen nur mäßige Übereinstimmungen mit den Messungen erzielt werden. Die relativen Abweichungen betrugen zwischen 50% im Al-Bereich und 150% im Bereich hinter Al und Fe. Die Simulationen waren aber bereits hilfreich, um die Einflüsse unterschiedlicher Parameter wie Messposition (Abstand zur Röhre und zum Detektor) und Strahlaufhärtung qualitativ bestimmen zu können. Im Unterschied zur Messung konnten nämlich Streuprofile energieaufgelöst betrachtet werden, die je nach betrachtetem Energiekanal unterschiedliche Verhältnisse der Intensitäten und deswegen unterschiedliche Formen aufwiesen.

Bei optimaler Berücksichtigung und vollständiger Kenntnis aller Einflussfaktoren könnte die Krümmung und die Intensität des Schattenprofils hinter dem Fe-Stab als weiterer Anhaltspunkt zur Ermittlung oder Überprüfung der Detektoreffizienz herangezogen werden. Die Library Least Square MC-Methode könnte dafür angewandt werden, ähnlich wie das von Guo et al. [guo04] zur Ermittlung von Elementkonzentrationen in der Röntgenfluoreszenz vorgeschlagen wurde. Jedoch müssten für eine solche Methode wesentlich mehr Profile des gleichen Probenkörpers mit unterschiedlichen Materialien gemessen und simuliert werden.

Streuung

Die Simulation zeigte bereits in dieser vereinfachten Form, dass trotz der bereits schon sehr hohen Röhrenspannung von 200kV Streueffekte in der Probe (primär und sekundär) maximal etwa 1% der Intensität hinter der Probe ausmachen, obwohl bei dieser Energie die inkohärente Streuung bereits den hauptsächlichen Beitrag zum totalen Massenabsorptionskoeffizienten beiträgt (siehe Abbildung 2.4). Die kohärente Streuung trägt jedoch interessanterweise den größeren Teil zur Streuung bei, obwohl der Absorptionskoeffizient für kohärente Streuung bei 200keV mehr als eine Größenordnung unter dem der inkohärenten Streuung liegt. Erklären lässt sich das am besten mittels des differentiellen Wirkungsquerschnitts für Streuung. Der Öffnungswinkel des Strahlkegels ist etwa 15° . In der detektornahen Position treffen die Strahlen nahezu senkrecht auf die Probe, und bei kleinen Streuwinkeln dominiert die kohärente Streuung (siehe Abbildung 2.6). In der detektorfernen Position sind Streueffekte weit unter 0,5% beteiligt.

Eine andere Simulation zeigt, dass sekundäre inkohärente Streuung bei einem noch kleineren Probenkörper in der detektornahen Position etwa im Bereich der primären kohärenten Streuung liegt (Abbildung 4.36). In allen Fällen zeigt sich der inkohärente Anteil relativ unabhängig gegenüber der Lage von Inhomogenitäten (im vorliegenden Fall der Fe-Stab im Al), was zur Vereinfachung der Berechnung eine Aufteilung in Schichten vorschlagen lässt.

Der in dieser Studie festgestellte Beitrag zur Streuung ist etwas geringer als bei Miceli et al. [mic07], wo bei einem zu TK01 vergleichbaren Probenkörper jedoch höherer Röhrenspannung und größerem Öffnungswinkel des Strahlkegels der Anteil der Streuung bis zu 5% betrug.

Effekte durch Wechselwirkungen mit dem Detektor

Die in der bisherigen Simulation gemachten Ergebnisse wiesen trotz Betrachtung von sekundären und höheren Streueffekten immer noch beträchtliche Abweichungen zur Messung auf. Bei der genaueren Untersuchung von Streuung und deren Auswirkungen auf das Projektionsbild zeigte sich, dass Streueffekte höchstens in der Größenordnung von 1% einzuordnen sind, die Abweichungen zu Messungen betrugen aber ein Vielfaches davon. Abgesehen von möglichen Ungenauigkeiten der Fundamentalparameter waren bis dahin zwei weitere Fehlerquellen in der Simulation unberücksichtigt. Einerseits ist das verwendete Modell zur Berechnung der richtungsabhängigen Röhrenstrahlung nur bis 50kV gesichert, Simulationen zeigen bereits deutliche Abweichungen bei 200kV Spektren. Andererseits zeigte ein früher Versuch der Modellierung der Absorption im Szintillator und die kanalweise Betrachtung des Streubildes, dass der Detektormodellierung in der Simulation eine viel größere Bedeutung beigemessen werden muss als anfänglich vermutet. Das größte Problem dabei war aber, dass weder Angaben zur Detektoreffizienz gemacht werden konnten, noch ausreichende Information über den genauen Aufbau des Detektors verfügbar waren. In der Dokumentation des Detektors wurden Mo oder Graphit als Szintillatorschutzschicht angegeben, es war jedoch nicht ausfindig zu machen, welche Schicht wirklich eingebaut war. Eine vergleichende Simulation (Abbildung 5.1) zeigte, dass die Schutzschicht über dem Szintillator wohl aus Graphit bestehen musste. Die Übereinstimmung bei Verwendung einer C-Schutzschicht über dem Szintillator war um einiges besser.

Die detektorinhärente Streuung wurde in einem Schichtenmodell auf unterschiedliche Weise betrachtet. Einerseits in einem einfachen analytischen Modell, das nur die Absorption in der Szintillatorschicht beschreibt, andererseits durch die MC-Simulation. Die MC-Simulation zeigte, dass dieses analytische Modell zwar für eine gewisse Schichtenfolge brauchbar war (Al-Mo-Gd), bei einer anderen Schichtenfolge jedoch große Abweichungen sowohl zur Messung als auch zur MC-Simulation aufwies (Al-C-Gd). Die MC-Simulation wies trotz immer noch hoher Abweichungen gewisse Ähnlichkeiten zu einer Messung am Hasylab [rei07] auf; das erste lokale Maximum der analytischen Detektoreffizienz fehlte nämlich sowohl der Messung als auch der MC-Simulation.

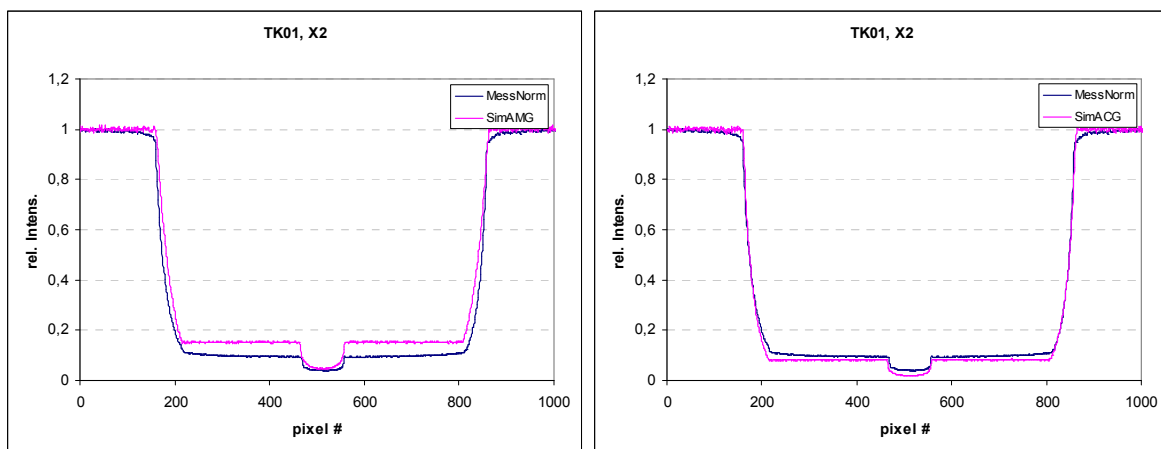


Abbildung 5.1: Vergleichende Simulation des TK01 auf Position X2, einmal mit Mo-Schutzschicht (links) und einmal mit Graphit-Schutzschicht über dem Szintillator (rechts)

Die kanalweise Betrachtung des Streubildes (Abbildung 4.12, Abbildung 4.13) zeigte bereits vorher, dass die Unterdrückung des langwelligen Bereichs des Spektrums bis etwa 40keV zu wesentlich besserer Übereinstimmung mit der Messung führte. Dies korrespondiert auf jeden Fall mit der in der Simulation ermittelten Detektoreffizienz.

Das zum Schutz des Detektors vorgelagerte Al-Blech (1mm) zeigte sowohl bei der Detektoreffizienz als auch bei der im Folgenden betrachteten Punktaufbreitung keinen signifikanten Einfluss. Einstreuungen durch einen Al-Rahmen können ebenso vernachlässigt werden.

Die Plots für die deponierte Energie zeigen ab etwa 100keV einen Bereich, der bis etwas über 200keV nahezu linear abfällt.

Punktverbreiterung infolge detektorinhärenter Streuung

Die Übereinstimmungen der Simulationsergebnisse konnten durch Einbeziehung eines einfachen Modells zur Detektoreffizienz grundsätzlich verbessert werden, jedoch war ein anderer systematischer Fehler damit nicht zu erklären. Bei der Differenz zwischen dem gemessenen und dem simulierten Streubild des Probenkörpers TK01 gab es einen gewölbten Anstieg der Intensität des Schattens zum Rand hin, der speziell in der Messposition X2 sehr deutlich zu sehen war. Genauso fiel die Intensität der daneben passierenden weißen Strahlung im Bereich kurz vor dem Beginn des Schattens stark ab. Die Projektion schien also unscharf, ein Teil der in einem Pixel gemessenen Intensität wurde auf benachbarte Pixel übertragen. Es wurde angenommen, dass dies durch Streuung der Strahlung in den Schichten des Detektors verursacht wurde. Das Übersprechen der Pixelinformation durch Spiegelung des Szintillationslichts an der Graphit oder Mo-Schicht wie bei [lia04] und [fro98] wurde nicht in Betracht gezogen.

Die Simulation der Streuung in den Detektorschichten konnte nicht in die Simulation der Projektion integriert werden, da sich die Statistik der Ergebnisse damit drastisch verschlechterte. Stattdessen wurde eine Point Spread Function (PSF) anhand eines auf die Detektormitte fokussierten Nadelstrahls ermittelt. Es konnte auf mathematischem Weg gezeigt werden, dass die Faltung mit einem Kern ähnlich dem Simulationsergebnis für die PSF die Wölbung im Messergebnis grundsätzlich erklären konnte.

Genauere Untersuchungen zeigten, dass die Szintillatorschutzschicht aus Graphit bestehen musste, was aus der Dokumentation nicht hervorging. Mit diesem Aufbau und dem 1mm starken Al-Schutzblech davor wurde eine neue PSF über die Simulation der in der Gd-Schicht deponierten Energie ermittelt. Dabei zeigte sich, dass die detektorinhärente Streuung vernachlässigt werden kann. Anwendung einer zweiten PSF, bei der auch Streuung an der Umgebungsluft in Betracht gezogen wurde, zeigte jedoch einen starken Einfluss der Umgebungsluft. Dies war bereits bei einer Simulation mit MCNP zu sehen, bei der teilweise Luft im Strahlengang angenommen wurde (siehe Abbildung 4.55). Ein so starker Einfluss von Streuung an Luft wurde nicht unmittelbar erwartet, da die mittlere freie Weglänge von Photonen mit nur 50keV (~40m) die Abmessungen der CT Anlage bereits um ein Vielfaches überschritt.

Vergleichende Simulationen mit MCNP

Um das eigene Programm zu überprüfen wurden vergleichende Simulationen mit dem Paket MCNP erstellt. Zwei Projektionen des Testkörpers TK01 an der Position X2 für jeweils monochromatische Kegelstrahlen von 100keV und 200keV zeigen verhältnismäßig gute Übereinstimmung mit der eigenen Entwicklung. Die relativen Abweichungen des Schattenprofils sind als Anregungsprozesse durch sekundäre Elektronen zu interpretieren. Diese machen etwa 1% der Intensität im Schatten aus und sind somit von der Größenordnung vergleichbar mit Effekten aus kohärenter und inkohärenter Streuung.

Der Übergang der Simulation zum richtungsabhängigen Röhrenspektrum wurde durch direkte Simulation des Elektronenstrahls mit der W-Anode im gleichen System mit dem Probenkörper gelöst, da die Einbindung eines vorher berechneten Spektrums nicht mit vertretbarem Aufwand möglich war. Dadurch waren die Ergebnisse des eigenen Programms mit MCNP ab dieser Stufe nicht mehr direkt vergleichbar. Die in Abbildung 4.51 gezeigte Differenz resultiert aus dem höheren Anteil des langwelligen Bereichs des Spektrums in der MCNP Simulation, wie später bei den Röhrenspektren noch genauer behandelt wird.

Das System wurde sukzessive um Rahmenbedingungen aus der Messung erweitert, wie Streuung an der Umgebungsluft und in den Schichten des Detektors. Qualitativ wurden dabei einige in der Messung beobachtete Effekte entdeckt. So zeigte die Streuung an der Umgebungsluft einen Wölbungseffekt im Intensitätsverlauf des Schattens zu höherer Intensität am Rand (Abbildung 4.53), dessen Ursprung bisher nur in der Streuung im Detektor vermutet wurde. Bei der Messung des ungestreuten Röhrenstrahls sowie auch des sogenannten Graubildes ergab sich eine Umkehrung des erwarteten Intensitätsverlaufs. Simulationen zeigten, dass dies möglicherweise auf Streuung in Luft und Streuung in den Detektorschichten zurückzuführen ist. Es konnten somit qualitativ einige unerwartete Effekte erklärt werden, quantitativ waren die Abweichungen jedoch immer noch sehr groß.

Röhrenspektren

Das analytische Modell von Ebel [ebe06] ist zwar nur bis zu einer Röhrenspannung von 50kV experimentell gesichert, seine Anwendung bis Spannungen von 200kV war aber wegen der hohen Zeitersparnis bei der Berechnung von richtungsabhängigen Spektren von hohem Interesse. Im Vergleich zu MCNP-Simulationen zeigte sich bis 50kV gute Übereinstimmung, für nicht zu flache Ausfallswinkel der Photonen sogar bis 100kV. Darüber zeigten sich zunehmende Abweichungen, die zu flachen Ausfallswinkel noch verstärkt wurden. Die größten Abweichungen waren zum langwelligen Ende des Spektrums hin zu bemerken.

Die Verwendung des analytischen Modells erscheint jedoch im Zusammenhang mit der Durchstrahlungssimulation für die CT dennoch gerechtfertigt, da im Bereich der höchsten Detektoreffizienz des hier verwendeten Szintillatordetektors bei etwa 100keV die relativen Abweichungen nicht von hoher Relevanz waren. Die hier ermittelte Detektoreffizienz ist günstigerweise gerade in den spektralen Bereichen hoher Unsicherheiten bei der

Simulation des Röhrenspektrums sehr niedrig. Aus diesem Grund scheint die genaue Modellierung der Röhrenspektren hier eine eher untergeordnete Rolle zu spielen.

Betrachtung der Simulation unter Berücksichtigung aller bisher gewonnenen Erkenntnisse

Die Anwendung der Detektoreffizienz, die durch MC-Simulation der in der Szintillatorschicht deponierten Energie ermittelt wurde, konnte das Simulationsergebnis quantitativ bereits sehr nahe an das Simulationsergebnis bringen. Jedoch erst die 2D-Faltung mit dem Faltungskern aus der PSF, die unter Berücksichtigung der detektorinhärenten Streuung kombiniert mit der Streuung an Umgebungsluft ermittelt wurde, konnte gute Übereinstimmung erzeugen. Wichtig war dabei, die Streuung der Luft nicht bei der Durchstrahlung sondern im Faltungskern zu berücksichtigen.

Unsicherheiten bestehen nach wie vor in der exakten Ermittlung der Detektoreffizienz, da mit MCNP gerade für niedrigere Energien zwischen 10 und 90keV nicht immer Berechnungsergebnisse erzielt werden konnten.

Ausblick

Die scheinbare Umkehrung des Intensitätsverlaufs der weißen Röhrenstrahlung auf dem Matrixdetektor, die sowohl bei der Messung als auch bei der Simulation mit MCNP beobachtet wurde, konnte auf analytischem Weg und über das selbstentwickelte Programm nicht nachvollzogen werden. Der Zusammenhang wird in der Streuung an Luft und diversen Filterplatten und Detektorschichten sowie in der Detektoreffizienz vermutet und sollte Gegenstand weiterer Untersuchungen sein. Die Simulation der Detektoreffizienz wurde in Schritten von 10keV ermittelt; diese Schrittweite könnte verkleinert werden. Die Abweichungen zur Messung der Detektoreffizienz (am gleichen Detektortyp) von Reitz et al. [rei07] sind verhältnismäßig hoch, was auch Gegenstand zu weiteren Untersuchungen sein sollte.

Die für die Faltung verwendete PSF stammt aus einem Nadelstrahl von 200keV monochrom. Diese Näherung wurde gemacht, da der Verlauf im wesentlichen Bereich der PSF annähernd gleich war. Unterschiede sind bei größeren Abständen zum Nadelstrahlfokus zu erwarten, wo die Intensität jedoch bereits sehr gering ist. Für eine noch genauere Simulation wäre es sinnvoll, die PSF für unterschiedliche Energiekanäle zu ermitteln und entsprechend anzuwenden.

6. Referenzen

- [ahm07] Ahmed, S.N. (2007): *Physics & Engineering of Radiation Detection*, Academic Press, UK
- [bec06] Beckhoff, B., Kanngießer, B., Langhoff, N., Wedell, R., Wolff, H. (2006): *Handbook of Practical X-Ray Fluorescence Analysis*, Springer
- [bee52] Beer, A. (1852): Bestimmung der Absorption des rothen Lichts in farbigen Flüssigkeiten; von Beer., *Annalen der Physik* 86, 78–87
- [bet30] Bethe, H.A. (1930): Zur Theorie des Durchgangs schneller Korpuskularstrahlen durch Materie. *Ann. Phys.* 5, 325–400
- [bet33] Bethe, H. A. (1933): *Handbook of Physics* 24, Springer, Berlin, p 273
- [bet34] Bethe, H. A., Heitler, W. (1934): *On Stopping of Fast Particles and on the Creation of Positive Electrons*, *Proc. Roy. Soc. (London)* A146 83
- [bil72] Billings, B.H., et al. (1972): *American Handbook of Physics*, McGRAW-Hill, fig. 8i-2
- [blu50] Blunck, O., Leisegang, S. (1950): Zum Energieverlust schneller Elektronen in dünnen Schichten, *Z. Physik* 128, p 500.
- [bru04] Brunetti, A. (2004): A library for X-ray–matter interaction cross sections for X-ray fluorescence applications. *Spectrochimica Acta Part B* 59, 1725– 1731
- [buz08] Buzug, T.M. (2008): *Computed Tomography; From Photon Statistics to Modern Cone-Beam CT*, Springer
- [cas83] Casnati E. et al (1983): *J. Phys. B* 16, 505
- [cha01] Chantler, C.T. (2001): *X-Ray Form Factor, Attenuation and Scattering Tables*, section 2, School of Physics, University of Melbourne
(<http://physics.nist.gov/PhysRefData/FFast/Text2000/contents2000.html>)
- [cha01a] Chantler, C. T.; Olsen, K.; Dragoset, R. A.; Chang, J.; Kishore, A. R.; Kotochigova, S. A.; Zucker, D. S. *X-Ray Form Factor, Attenuation and Scattering Tables* (version 2.1) (<http://physics.nist.gov/ffast>)
- [chy08] Chyba, B., Mantler, M., Reiter M. (2008): *Monte-Carlo Simulation of Projections in Computed Tomography*, *Powder Diffraction* 23 (2), 150-153

- [cul97] Cullen, D. E., Hubbel, J. H. , Kissel, L. D. (1997): *EPDL97: The Evaluated Photon Data Library, '97 Version*, Lawrence Livermore National Laboratory report, UCRL-50400, Volume 6, Rev. 5
- [dap03] Dapor, M. (2003): *Electron-beam interactions with solids*. Berlin, Springer
- [ebe92] Ebel, H., Wiederschwinger, H., Wernisch, J. (1992): *Adv. X-ray Anal.* 35, 721
- [ebe05] Ebel, H. (2005): Fundamental Parameter Programs: Algorithms for the Description of K-, L- and M-spectra of X-ray tubes, 54th Annual Denver Conference, 1-5 August 2005, Colorado Springs, Co, USA
- [ebe06] Ebel, H. (2006): *Adv. X-ray Anal.*, 49, 267–273
- [eij02] van Eijk, C.W.E. (2002): *Inorganic scintillators in medical imaging*, *Phys. Med. Biol.* 47 R85-R106
- [ela02] Elam, W.T., Ravel, B.D., Sieber, J.R. (2002): *Radiat. Phys. Chem.* 63, 121-128
- [ell05] Ellis, A. M. (2005): *Electronic and photoelectron spectroscopy*. Cambridge, Cambridge Univ. Press
- [fel84] Feldkamp, L.A., Davis, L.C., Kress, J.W., (1984): *Practical cone-beam algorithm*, *J. Opt. Soc. Am.*, A6, 612–619
- [fro98] Frojdh, C., Nilsson, H.E., Nelvig, P., Petersson, C.S. (1998): *Simulation of the X-ray response of scintillator coated silicon CCDs*, *Nuclear Science, IEEE Transactions on* , vol.45, no.3, pp.374-378
- [gol92] Goldstein, J. (1992): *Scanning Electron Microscopy and X-ray Microanalysis*, second edition, Plenum Press, p 68
- [gou40] Goudsmit, S., Saunderson, J. L. (1940): *Multiple Scattering of Electrons*, *Phys. Rev.* 57, p 24
- [gra91] Grangeat, P. (1991): *Mathematical framework of cone-beam 3D reconstruction via the first derivative of the Radon transform*, *Mathematical Methods in Tomography*, vol. 1497 of Lecture Notes in Mathematics, pp. 66–97, Springer, Berlin, Germany.
- [gre61] Green, M., Cosslett, V. E. (1961): The Efficiency of Production of Characteristic X-radiation in Thick Targets of a Pure Element, *Proc. Phys. Soc. London* 78, 1206
- [gry65] Gryzinski, M. (1965): *Phys. Rev. A*, 138, pp. 305-358
- [guo04] Guo, W., Gardner, R.P., Todd, A.C. (2004): *Using the Monte Carlo – Library Least-Squares (MCLS) approach for the in vivo XRF measurement of lead in bone*. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A* 516: 586-593

[gur99] Gurker, N., Nell, R., Seiler, G., Wallner, J. (1999): *A tunable focusing beamline for desktop x-ray microtomography*, Rev.Sci.Instrum., 7, 2935-2949.

[gur09] Gurker, N., private Kommunikation

[hje03] Hjelm, M. et al. (2003): *Monte Carlo simulation of the imaging properties of scintillator-coated X-ray pixel detectors*, Nucl. Instrum. Meth. A, Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment Volume 509, Issues 1-3, , Proceedings of the 4th International Workshop on Radiation Imaging Detectors, 21 August 2003, Pages 76-85.

[knu02] Knuth, Donald E. (2002): *The art of computer programming, Seminumerical algorithms*. Boston, Mass., U.S.A: Addison-Wesley, 2002

[kra23] Kramers, H.A. (1923): *On the Theory of X-Ray Absorption of the continuous X-Ray Spectrum*, Phil. Mag, 46,836-871

[lan44] Landau, L. (1944): *On the Energy Loss of Fast Particles by Ionization*, J. Phys. USSR 8, p 201.

[lar97] Larmor, J. (1897): *On a dynamical theory of the electric and luminiferous medium*, Philosophical Transactions of the Royal Society 190, pp 205-300

[leo94] Leo, W.R., (1994): *Techniques for Nuclear and Particle Physics Experiments: A How-to Approach*, Springer

[lia04] Liaparinos, P.F., Kandarakis, I.S., Cavouras, D.A., Nikolopoulos, D.N., Valais, I.G., Panayiotakis, G.S. (2004): *Simulating the emission efficiency and resolution properties of fluorescent screens by Monte Carlo methods*, Nuclear Science Symposium Conference Record, 2004 IEEE , vol.2, no., pp. 874-878 Vol. 2, 16-22 Oct. 2004

[man00] Mantler, M. (2000): *VXRF: A software package for teaching (and learning) XRF*. Advances in X-ray Analysis, vol 43, pp 429-434

[man08] Mantler, M. (2008): *XrayCell, a collection of Excel add-in functions* (<http://xweb.atp.tuwien.ac.at>)

[man09] Mantler, M., private Kommunikation

[mat98] Matsumoto, M., Nishimura, T. (1998): *Mersenne twister: A 623-dimensionally equidistributed uniform pseudorandom number generator*. ACM Trans. on Modeling and Computer Simulations, vol. 8, no. 1, pp. 3-33

[mat02] Matsumoto, M., Nishimura, T. (2002): *MersenneTwister, a C-program for MT19937, with initialization improved* 2002/2/10

[mcn03] Booth, T. E. et al. (X-5 Monte Carlo Team) (2003): *MCNP - A General Monte Carlo N-Particle Transport Code*, Version 5, 1, Overview and Theory

- [mic07] Miceli, A., Thierry, R., Flisch, A., Sennhauser, U., Casali, F., Simon, M. (2007): *Monte Carlo simulations of a high-resolution X-ray CT system for industrial applications*, Nucl. Instrum. Meth. A, Vol. 583, Issues 2-3, pp 313-323
- [mor93] Mori, S., Mantler, M. (1993): *Application of the fundamental parameter method to analyses of light element compounds considering the scattering effects*. In: Gilfrich et al. (Hrsg.): *Advances in X-Ray Analysis*: 47-57. Plenum Press, New York.
- [mos02] Moses, W.W. (2002): *Current Trends in Scintillator Detectors and Materials*, Nucl. Instrum. Meth. A, 487
- [mot65] Mott, N. F., Massey, H. S. W. (1965): *The Theory of Atomic Collisions*. (The International Series of Monographs on Physics.) Oxford, Clarendon Press, and New York, Oxford University Press
- [pel85] Pella, P. A., Feng, L., Small, J. A. (1985): X-ray Spectrom. 14, 3, pp 125-135
- [pel91] Pella, P. A., Feng, L., Small, J. A. (1991): Addition of M- and L-series lines to NIST algorithm for calculation of x-ray tube output spectral distributions. X-Ray Spectrometry, 20, pp 109-110
- [pho09] The Phoenix Linux Cluster
(http://www.zid.tuwien.ac.at/zserv/applikationsserver/phoenix_linux_cluster/)
- [pis07] Pistrucci-Maximean, S.A., Létang, J.M., Freud, N., Koch, A., Walenta, A.H., Montarou, G., Babot, D. (2007): *Measurement and Monte Carlo modelling of the spatial response of scintillation screens*, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A 581: 719-727
- [pou91] Pouchou, J.L., Pichoir, F. (1991): *Electron Probe Quantitation*, Ed. Heinrich and Newbury, Plenum Press, pp 31-75
- [pre92] Press, W.H., Teukolsky, S.A., Vetterling, W.T., Flannery, B.P. (1992): *Numerical Recipes in C. The Art of Scientific Computing*, 2nd edition, Cambridge University Press.
- [rad17] Radon, J. (1917): *Über die Bestimmung von Funktionen durch ihre Integralwerte längs gewisser Mannigfaltigkeiten*, 69, Bericht Sächsische Akademie der Wissenschaften, Leipzig, 262-267
- [ras74] Raspberry, S.D., Heinrich, K.F.J. (1974): *Calibration of Inter-element Effects in X-Ray Fluorescence Analysis*, Anal. Chem. 46, 81-89
- [rei07] Reitz, I., Webb, M. A., Graafsma, H., Lohmann, M., Partridge, M., Tacke, M. B., Rau, A., Ulrich, S., Hesse, B.-M., Nill, S., Oelfke, U. (2007): *Measurement of the radiation response of a flat-panel detector with monochromatic X-rays at HASYLAB, Radiotherapy and Oncology*, 84 (Suppl.1):79–80
- [rei09] Reiter, M., Fachhochschule Oberösterreich, Campus Wels, private Kommunikation

- [rut11] Rutherford E. (1911): *The Scattering of α and β Particles by Matter and the Structure of the Atom*, Philosophical Magazine. Series 6, 21, 669-688
- [sch97] Schoßmann, B., Wiederschwinger, H., Ebel, H., Wernisch, J. (1997): *Comparison of various descriptions of x-ray tube spectra*, Proceedings of the Forty-fourth Annual Conference on Applications of X-Ray Analysis, held July 31 - August 4, 1995, in Colorado Springs, Colorado. New York, NY, U.S.A., 1997, pp 127-135
- [sel82] Seltzer, S. M., Berger, M. J. (1982): Int. J. Appl. Rad. Isot. 33, Issue 11, pp 1219-1226
- [sew85] Sewell, D.A., Love, G., Scott, V.D. (1985): J.Phys.D: Appl.Phys. 18 1269-1280
- [shu04] Shultis, J.K., Faw, R.E. (2004): *A Primer for MCNP5*, revised Sept. 2007, (<http://www.mne.ksu.edu/~jks/MCNPprmr.pdf>)
- [smi98] Smith, S.W. (1998): *The Scientist & Engineer's Guide to Digital Signal Processing*, California Technical Pub, (<http://www.dspguide.com>)
- [spa03] Spahn, M., Heer, V., Freytag, R. (2003): *Flachbilddetektoren in der Röntgendiagnostik*, Radiologe, 43, 340-350, Springer, Berlin, Heidelberg
- [sva09] Svagera, R., Technische Universität Wien, Institut für Festkörperphysik, private Kommunikation
- [tan77] Cohen-Tannoudji, C., Diu, B., Laloë, F. (1977): *Quantum Mechanics*, Wiley, New York, pp 901-964
- [tho01] Thompson, A. C., Vaughan, D. (2001): *X-Ray Data Booklet*, section 3.1, Lawrence Berkeley National Laboratory, University of California, (<http://xdb.lbl.gov>)
- [tuy83] Tuy, H. K. (1983): *An inversion formula for cone-beam reconstruction*, SIAM Journal on Applied Mathematics, vol. 43, no. 3, pp. 546–552
- [wen27] Wentzel, G. (1927): Z. Phys. 40, p 590

Appendix A: Simulationskonfigurationen (MCNPX)

In diesem Abschnitt werden die wichtigsten Konfigurationen aufgelistet, die für die Simulationen mit MCNP erstellt wurden, um für spätere Studien als Beispiel dienen zu können.

Röhrenanode

Konfiguration zur Simulation eines von der Anode ausgehenden Strahlkegels, der durch Abbremsung von 200kV Elektronen aus einem Nadelstrahl 45° zur Anodenoberfläche erzeugt wird. Der unter 45° austretende Teil des Strahlkegels wird in einem Punktdetektor mit dem Radius von 0,1mm gemessen. Die Energieauflösung beträgt 100eV im Bereich von 1keV bis 200keV.

```
c-----
c      target, pure element, 45/45 degrees, 200kV
c      500 energy bins, point source, e-Database
  1      74      -19.3 -1
  2      0              1 -2
  3      0              2

  1      box -2 -2 0  4 0 0  0 4 0  0 0 1
  2      so 20

mode p e
m74 74000.      1 $Tungst
imp:p      1 1 0 $ 1, 2
imp:e      1 1 0 $ 1, 2
phys:e 100 0 0 0 0 1 1 1 1 1
nps 10000000
print
prdmp 2j 1
sdef POS=-5 0 -5 PAR=3 ERG=0.2 VEC=1 0 1 DIR=1
f5:p 5 0 -5 0.01 $point detector
e5 0.001 1989i 0.2
fl:e 2
c-----
```

TK01

Simulation der Durchstrahlung des Testkörpers TK01 (Aluminiumwürfel mit Eisenkern) von einem Kegelstrahl mit einem 200kV W-Röhrenspektrum. Der Elektronenstrahl und die Anode werden von einer 1,4mm dicken Al-Röhre umschlossen, die gleichzeitig als Filter (Austrittsfenster) dient. Außerhalb der Röhre ist Umgebungsluft angenommen. Zur Eingrenzung des Systems ist der gesamte Aufbau inklusive Matrixdetektor von einem Kegel umgeben, außerhalb dessen jede Historie abgebrochen wird.

```

c-----
c simulation electron source -> brems/xrf -> TK01 -> tally grid
  1    26   -7.68 -1           $ TK01 Fe pole
  2    13   -2.694 1 -2        $ TK01 Al cube
  3    74   -19.3 -3           $ Tube target W
 30    13   -2.694 31 -32       $ Tube (Al filter)
 31    0    -31 3             $ evacuated tube
  4   204   -0.001225 2 32 -4   $ Confinement cone (air)
  5    0           4           $ outer world

  1          rcc 0 -2.295 0 0 4.59 0 0.29           $ TK01 pole
  2          box -2.01 -2.295 -2.01 4.02 0 0 0 4.59 0 0 0 4.02 $ TK01 cube
  3          box -1 -0.707 -24.071 0 1.414 0 1 0 -1 0.5 0 0.5
 31          rcc -4 0 -24.071 8 0 0 4
 32          rcc -4 0 -24.071 8 0 0 4.14           $ x-ray tube (Al filter)
  4          trc 0 0 135 0 0 -170 35 5             $confinement cone
  5          so 300                                $ outer confinement sphere

mode  p e
m26   26000.           1  $Fe
m13   13000.           1  $Al
m74   74000.           1  $W
m204  7000.   -0.755636 $Air
      8000.   -0.231475 18000. -0.012889

c
c ---
imp:p          1 5r          0 $ 1, 5
imp:e          1 5r          0 $ 1, 5
c
c electron source starting from point
sdef POS=2 0 -24.071 PAR=3 ERG=0.2 VEC=-1 0 0 DIR=1
print
prdmp 2j 1
fir5:p 0 0 129.787 0 0 0 -1 0 60 0 $ matrix detector
fs5 -20.48 1023i 20.48
c5 -20.48 1023i 20.48
c
c default tally to count backscattered electrons
fl:e 5
c-----

```

Nadelstrahl

Simulation eines monochromatischen Photonen-Nadelstrahls auf die Mitte des Szintillatordetektors im Schichtenmodell.

```
C-----
  61 13 -2.694 -61 FCL:p=-1
  62 42 -10.2 -62 FCL:p=-1
  71 64 -7.877 -71 FCL:p=1
  72 64 -7.877 -72 FCL:p=1
  73 64 -7.877 -73 FCL:p=1
  64 14 -2.32 -64 FCL:p=-1
  65 82 -11.33 -65 FCL:p=-1
  4 204 -0.001225 61 62 71 72 73 64 65 -5 $ Confinement sphere (air)
  5 0 5 $ outer world

  4 trc 0 0 135 0 0 -170 35 5 $confinement cone
  5 so 500 $ outer confinement sphere
  61 box -20.48 -20.48 129.787 40.96 0 0 0 40.96 0 0 0 0.1 $Al
  62 box -20.48 -20.48 129.887 40.96 0 0 0 40.96 0 0 0 0.05 $Mo
  71 box -20.48 -2 129.937 40.96 0 0 0 2 0 0 0 0.05 $Gd
  72 box -20.48 0 129.937 40.96 0 0 0 0.04 0 0 0 0.05 $Gd
  73 box -20.48 0.04 129.937 40.96 0 0 0 2 0 0 0 0.05 $Gd
  64 box -20.48 -20.48 129.987 40.96 0 0 0 40.96 0 0 0 0.1 $Si
  65 box -20.48 -20.48 130.087 40.96 0 0 0 40.96 0 0 0 1 $Pb
10001 px -20.44
10002 px -20.4
10003 px -20.36
10004 px -20.32
c ...
c ... further sections analogical
c ...
10510 px -0.08
10511 px -0.04
10512 px 0

mode p e
m13 13000. 1 $Al
m74 74000. 1 $W
m204 7000. -0.755636 $Air
      8000. -0.231475 18000. -0.012889
m42 42000. 1 $Mo
m64 64000. 1 $Gd
m14 14000. 1 $Si
m82 82000. 1 $Pb
c
c ---
imp:p 1 7r 0 $ 1, 12
imp:e 1 7r 0 $ 1, 12
c
c monocromatic photon point source
sdef pos=0 0 -24.071 erg=0.2 par=2 vec=0 0 1 dir=1
nps 1000000000
c ---
print
prdmp 2j 1
c ---
f16:p 72
fs16 -10001 -10002 509i -10512
f26:e 72
fs26 -10001 -10002 509i -10512
c
c default tally to count backscattered electrons
f1:p 5
C-----
```

Lebenslauf

Geboren:

1969 in Wien

Sprachen:

Deutsch

Dänisch

Englisch

Norwegisch, Schwedisch

Finnisch

Bildungsweg:

10/2006-06/2009

Doktoratsstudium, Technische Universität Wien (berufsbegleitend)

10/1989-06/2006

Studium der technischen Physik, Technische Universität Wien (berufsbegleitend)

Diplomarbeit: *Monte-Carlo-Simulation von Streustrahlung als Referenzgröße in der Röntgenfluoreszenzanalyse*

09/1976-06/1988

2. BRG XIX in Wien - AHS Matura

Berufliche Laufbahn:

Seit 05/1995

IT-Consultant, Software-Developer und Software-Architect

als Angestellter, Einzelunternehmer, Gesellschafter und Prokurist

IBM Certified Advanced Application Developer

Publikationsliste:

Poster:

Mantler, M., Chyba, B., Reiter M., *Monte-Carlo Simulation of Projections in Computed Tomography*, Poster Denver X-ray Conference, 2007

M. Reiter, S. Kunzmann, H. Lettenbauer, B.Chyba, M. Mantler, J. Kastner, *SimCT - Modellierung und Simulation eines industriellen Röntgen 3D Computertomographie Systems*, 2. Forschungsforum der österreichischen Fachhochschulen, Wels (AT) 26.3.-27.3, 2008

Chyba, B., Mantler, M., Ebel, H., Svagera, R., *Calculation Methods of X-ray Spectra: a comparative Study*, Poster Denver X-ray Conference, 2009

Papers:

Chyba, B., Mantler, M., Reiter M., *Monte-Carlo Simulation of Projections in Computed Tomography*, Proceedings Denver X-ray Conference 2007, auch veröffentlicht in Powder Diffraction 23 (2), 150-153, 2008

M. Reiter, S. Kunzmann, H. Lettenbauer, B.Chyba, M. Mantler, J. Kastner, *Simulation eines industriellen 3D-Röntgen-Computertomographen zur verbesserten Geometriebestimmung*, St.Gallen (CH) 28.4.-30.4 2008.

Chyba, B., Mantler, M., Ebel, H., Svagera, R., *Calculation Methods of X-ray Spectra: a comparative Study*, Proceedings Denver X-ray Conference 2009

Chyba, B., Mantler, M., Reiter M., *Monte-Carlo Simulations for Evaluation of Different Influences on Projections in Computed Tomography*, Proceedings Denver X-ray Conference 2009

Vortrag:

Chyba, B., Mantler, M., Ebel, H., Svagera, R., *Calculation Methods of X-ray Spectra: a comparative Study*, Denver X-ray Conference 2009