Mag. Utz Dominik

Simulation gestreuter Röntgenspektren

Diplomarbeit

zur Erlangung des akademischen Grades Diplom-Ingenieur

Diplomstudium Technische Physik



Technische Universität Graz

Betreuer: Univ.-Prof. Dr. Peter Kindl Institut für Materialphysik

Graz, im Mai 2010

Danksagung

An erster Stelle möchte ich mich ganz herzlich bei meinem Betreuerteam von der TU-Graz bedanken. Im Besonderen bei meinem Diplomarbeitsbetreuer Herrn Univ.-Prof. Dr. Peter Kindl, für die Vermittlung von strahlenphysikalischem Wissen, sowie für die Betreuung während der eigentlichen Arbeit, als auch für die Durchsicht derselbigen.

Des Weiteren geht ein besonders herzliches Dankeschön an Herrn Dipl.-Ing. Dr. Waldemar Ninaus für die Einführung in das sehr umfangreiche Simulationstool MCNPX, als auch für die zielführenden Diskussionen.

Zu guter Letzt möchte ich mich an dieser Stelle noch bei Herrn Ass.-Prof. Dr. Herbert Rabitsch bedanken. Ohne ihn wäre diese Arbeit nicht möglich gewesen, da er mich erst auf die, dieser Arbeit zugrundeliegende, Aufgabenstellung aufmerksam gemacht hat.

Selbstredend darf in dieser Danksagung die Familie, allen voran meine Eltern, nicht zu kurz kommen. Ohne die finanzielle und auch moralische Unterstützung von klein auf, würde es diese Diplomarbeit nicht geben.

Last but not least, wie man so schön sagt, möchte ich mich noch bei allen meinen Freunden für ihre volle Unterstützung bedanken. An vorderster Stelle bei meiner Freundin Bianca, welche auf etliche Stunden an gemeinsam verbrachter Zeit verzichten mußte, damit diese Arbeit entstehen konnte.

Kurzzusammenfassung:

Diese Arbeit beschäftigt sich mit der Simulation gestreuter Röntgenspektren. Röntgenquellen erfreuen sich einer hohen Beliebtheit in der diagnostischen Medizin als auch in der technischen Werkstoffprüfung bzw. in der automatischen Erfassung von Werkstoffeigenschaften (z.B.: Materialstärkenmessung). Aus strahlenschutztechnischer Sicht ist es interessant nicht nur das primäre Spektrum einer Röntgenquelle zu erfassen, sondern ebenfalls Details über die am Werkstück bzw. am Strahlenschutzraum auftretende gestreute Strahlung in Erfahrung zu bringen. Für diesen Zweck wurde in der vorliegenden Arbeit mit einem Monte Carlo Simulationstool (MCNP(X)) eine 200 keV Röntgenquelle simuliert.

Ein erster Arbeitsschritt beschäftigte sich hierbei mit der Erzeugung des Röntgenspektrums für die weitere Simulation. Wir führten diese Simulation getrennt von den anderen Aufgaben durch, um ein erhebliches Maß an Rechenzeit einzusparen. Gerade die Simulation von Elektronen ist sehr aufwendig, da die dahinterstehende Physik aufwendiger zu simulieren ist als für eine reine (niederenergetische) Photonenstrahlung. Unser Referenspektrum wurde über einen kleinen Raumwinkelbereich unter 45° zur Anodenfläche aufgenommen. Der Elektronenstrahl hatte eine monoenergetische Zusammensetzung von 200 keV und traf ebenfalls unter 45° auf die Anode auf. Der Winkel zwischen dem gemessenen Spektrum und den auftreffenden Elektronen beträgt somit 90°.

Nach der Simulation unserer Röntgenquelle widmeten wir uns der Simulation von Streuspektren an unterschiedlichen Wandmaterialen und Wandstärken. Zu diesem Zwecke verwendeten wir als Materialien Blei (1, 0.3, 0.1 mm Stärke), Beton (20, 6, 2 cm) und Ziegelsteine (40, 13, 4 cm). Hierbei ist zu beachten, dass das Ziegelmaterial mit dem Tonmineral Montmorillonit angenähert wurde. Die Ergebnisse liegen nicht nur graphisch in Form von Rückstreuspektren vor, sondern es wurde auch versucht eigene Rückstreukoeffizienten zu definieren. Der interessanteste ist hierbei wohl der energetische Rückstreukoeffizient, welcher die mittlere in den Raum rückgestreute Energie beschreibt. Dieser Koeffizient nahm Werte zwichen 2 % für Blei und 6 % für die beiden anderen Materialien an. Wir sehen somit, dass bei hinreichend hoher primärer Strahlstärke auch die Rückstreuung für den Strahlenschutz von Relevanz sein kann. Interessant ist auch, dass es sich bei der Rückstreuung scheinbar um einen Oberflächeneffekt handelt, da der Koeffizient für nahezu alle Wandstärken (bei demselben Material) unabhängig von der Wandstärke war. Nur für ganz dünne Wände nimmt der Koeffizient ab. Weiters ist zu erwähnen, dass bei Blei die charakteristischen Röntgenlinien in Streuung aufgetreten sind. In diesen ist die Rückstreuung besonders hoch und kann Werte in der Nähe von 1 annehmen.

Ein weiterer Punkt in dieser Arbeit war die Simulation der sogenannten Luftstreuung. Hierbei handelt es sich um Streuvorgänge in der Luft, welche bei stark gebündelten bzw. intensiven Photonenstrahlern ebenfalls zu einer Strahlenbelastung im Strahlenschutzraum beitragen können. In unserer Simulation verwendeten wir als Modell einen 10 m langen mit Luft gefüllten Zylinder. Das generelle Verhältnis der aus dem Strahl herausgestreuten Phtonen zu den primären Photonen bewegt sich zwischen 10^{-3} und 10^{-4} (auf 10 m). Dies trifft allerdings nicht für den niederenergetischen Bereich (< 10 keV) zu. Hier kommt es zu vermehrter Photonenaktivität und zu einer verstärkten Streuung (Faktor um 10). Als letzten wesentlichen Punkt in dieser Arbeit wollten wir uns die räumliche Verteilung der gestreuten Röntgenstreuung ansehen. Generell kann festgestellt werden, dass die Intensität der Strahlung mit dem wohlbekannten quadratischen Abstandsgesetz abfällt. Dies ist auch nicht weiter verwunderlich, da es ansonsten zu ausgezeichneten Raumrichtungen bei der Streuung kommen müßte (wir denken das MCNP(X) allerdings keine Gittereigenschaften bzw. Kristallstruktuen simulieren kann). Als weiten Unterpunkt führten wir diese Simulation nicht nur mit einem Normal auf die ebene gerichteten Phtonenstrahl durch, sondern auch mit einem unter 45° zur Ebene geneigten Phtonenstrahl. Interessant hierbei ist, dass es nicht zu einer Reflexion unter dem Einfallwinkel gekommen ist, sondern vielmehr die Strahlung in Strahlrichtung rückgestreut wurde.

Abstract:

This work is based on the simulation of scattered X-ray spectra. X-ray sources are very popular in the diagnostic medicine but also used in technical applications and for measurement purposes, like obtaining automatically the thickness of a material. From the point of radiation safety it is not only interesting to know how the primary X-ray spectrum looks like, but furthermore it is of principle value to know details about the scattered spectra on parts or the walls of the radiation safety shelter. For the outlined purposes this work deals with a Monte Carlo simulation-tool to simulate a 200 keV X-ray source.

The first step of the work focused on the simulation of the X-ray source for the further simulation. This simulation was done separately for time saving reasons from the other tasks. The simulation of electrons is quite time consuming, as the simulation of an electron is a lot more complicated than of a simple (low energetic) photon. The reference spectrum was obtained over a tiny solid angle under an angle of 45° to the anode. The electron beam had a mono-energetic composition of 200 keV and aimed also under 45° at the anode. The total angle between the measured spectrum and the impacting electrons was therefore 90° .

After the simulation of the X-ray source we worked on the simulation of scattered spectra on different kinds of materials with several different thicknesses. For this purpose we considered the following materials: lead (1, 0.3, 0.1 mm thickness), concrete (20, 6, 2 cm) and bricks (40, 13, 4 cm). One should take in mind that bricks are formed of clay-materials. In our simulation we used the so called Montmorillonit as clay-mineral. The results were not only derived graphically in the kind of scattered spectra but we also tried to introduce coefficients which describe the scattering process. The most interesting coefficient is the so called energetic scattering coefficient, which describes the ratio between total amount of back scattered energy to the total amount of impacting energy. This coefficient took values between 2 % for lead up to 6 % for the other two materials. We see now, that for a sufficient high beam amplitude the back scattering is a surface effect. We conclude this by the fact that the back scattering coefficients are nearly independent of the material thickness. Only for very thin materials the coefficient changed slightly. Another finding is that for lead we identified characteristic X-ray lines in the back scattered spectra. This can be of interest as the back scattering in this lines is very high and amounts nearly to 1.

Another interesting point in this work was the simulation of the air-scattering effect. This effect is due to scattering processes in air which can also lead to a significant radiation risk for highly coherent or intense photon sources. For the simulation set up we used a 10 m long cylinder filled with air. The general ratio between scattered photons to primary source photons was between 10^{-3} to 10^{-4} (at a cylinder length of 10 m). This does not hold for very low energetic photons in this region (< 10 keV) the photon activity is increased (by a factor of about 10).

The last important point of this work was the simulation of the distribution of the scattered radiation. Generally we can say that the intensity of the radiation decreases with the square of the distance of the emission point. This is also not very surprising as we would need some coherent scattering processes for confuting this. We think that MCNP(X) does not support coherent scattering processes due to material properties (crystal structure). The last point of this work dealt with the distribution of radiation in a room when the incident photon beam is not normal to the anode surface but rather penetrating under an angle of 45° . The interesting outcome was that the radiation is not going outwards like a visible light beam. More of the incident radiation is going more or less back to the source.

Inhaltsverzeichnis

1	Einf	führung und Motivation	7
2	Rön	tgenröhren & Röntgenspektrum	10
	2.1	Röntgenröhre	10
		2.1.1 Elektronenerzeugung	10
		2.1.2 Anode	12
		2.1.3 Glaskolben	12
		2.1.4 Rontgenschutzgehause	13
	0.0	2.1.5 Begriffe und Effekte bei Kontgenrohren	13
	2.2	Rontgenspektrum	14
		2.2.1 kontinuierliches Rontgenbremsspektrum	14
		2.2.2 charakteristische Röntgenstrahlung	15
3	Wee	chselwirkungsprozesse von Photonenstrahlung	18
	3.1	Kohärente Streuung	18
	3.2	Inkohärente Streuung (Compton Effekt)	19
	3.3	Photoeffekt	19
	3.4	Übersicht über die besprochenen WW-Effekte	20
4	Tra	nsporttheorie	21
	4.1	Transportgleichung	21
	4.2	Numerische Lösungsmöglichkeiten für die Transportgleichung	22
5	Das	Programm MCNPX	26
0	5 1	Übersicht über MCNPX	26
	5.2	Input File/Anweisungen	$\frac{20}{27}$
	0.2	5.2.1 Geometriesetun	27
		5.2.2 Materialdefinitionen	27
		5.2.3 Tallies	30
	5.3	Varianzreduktionsverfahren	33
	0.0	5.3.1 Cut off Verfahren	33
		5.3.2 Gewichtsverfahren mit russischem Boulette	35
	5.4	statistische Signifikanztests	36
0	Б		
6	Res		39
	0.1	Erzeugung des Keierenzspektrums	39
	6.2 C.2	Rontgenspektrum für die weitere Simulation	44
	0.3	Kuckstreuspektren	47
		6.3.1 Blei	49

		6.3.2	Beton	56
		6.3.3	Ziegel	65
		6.3.4	Zusammenfassung der Rückstreusimulationen	73
	6.4	Luftstre	uung	73
		6.4.1 I	Luft	73
		6.4.2	Trockene Luft	76
	6.5	Dosislei	stungstest	77
	6.6	Dosisve	teilungen	82
		6.6.1 I	Dosisverteilung einer aufgefächerten Photonenquelle	82
		6.6.2	Dosisverteilung der Pencil Beam Phtonenquelle	82
		6.6.3	Rückgestrute Dosisverteilungen nach Streuung unter 45 Grad	83
7	Zus	ammenf	assung	89
7	Zus 7.1	ammenf Rückstr	assung	89 89
7	Zus 7.1 7.2	ammenf Rückstr Luftstre	assung euspektren	89 89 89
7	Zus 7.1 7.2 7.3	ammenf Rückstr Luftstre Dosisve	assung euspektren	89 89 89 90
7	Zus 7.1 7.2 7.3	ammenf Rückstr Luftstre Dosisve	assung euspektren uung cteilungen	89 89 89 90
7 A	Zus 7.1 7.2 7.3 Wei	ammenf Rückstr Luftstre Dosisver	assung euspektren uung rteilungen ende Forschungsschwerpunkte	 89 89 90 91 91
7 A	Zus 7.1 7.2 7.3 Wei A.1	ammenf Rückstr Luftstre Dosisver iterführe Streusp	assung euspektren uung rteilungen ende Forschungsschwerpunkte ektren	 89 89 90 91 91 92
7 A	Zus 7.1 7.2 7.3 Wei A.1 A.2	ammenf Rückstr Luftstre Dosisve iterführe Streuspe Luftstre	assung euspektren uung cteilungen ende Forschungsschwerpunkte ektren uung	 89 89 90 91 92 92
7 A	Zus 7.1 7.2 7.3 Wei A.1 A.2 A.3	ammenf Rückstr Luftstre Dosisver iterführe Streuspe Luftstre Dosisver	assung euspektren uung	 89 89 90 91 92 92

"Motivation is a battle for the heart, not just an appeal to the mind. Passion is always an expression of the soul."

by Patrick Dixon

Kapitel 1

Einführung und Motivation

In dieser Arbeit wird die Streuung von Röntgenstrahlung an Versuchsmaterialien (Baustoffen) untersucht und zu diesem Zwecke simuliert. Die hieraus resultierenden Spektren werden hinsichtlich strahlenschutztechnisch interessierender Parameter ausgewertet. Warum ist dies von Interesse und warum wird der Sachverhalt simuliert und nicht einfach ausgemessen oder berechnet?

Das Interesse begründet sich darin, dass Strahlenquellen in der Industrie, Forschung und auch Medizin einen stetigen Aufschwung und vermehrte Anwendung finden. Anwendungsmöglichkeiten für Strhalungsquellen erstrecken sich von zerstörungsfreier Werkstoffprüfung über die meßtechnische Erfassung von Produktionsmerkmalen (Dicken und Schichtdickenmessungen, Feuchtigkeitsgehaltermittlungen) bis hin zur klassischen Röntgenaufnahme in der Medizin. Da natürlich mit den entsprechenden Quellen auch entsprechende Dosisbelastungen einhergehen, ist auch die Kontrolle und der Schutz vor Belastungen ein gesellschaftliches Anliegen, welches auch in entsprechenden Normen und Gesetzen seinen Niederschlag findet. Während man die Primärstrahlung und ihre Wirkung vergleichsweise gut abschätzen kann, ist dies für die gestreute Strahlung nicht mehr der Fall. Da diese jedoch auch zu einer nicht zu vernachlässigenden Belastung führen kann, ist ein besseres Verständnis derselbigen unbedingt von Nöten.

Um einen näheren Einlick in dieses Problemfeld zu gewinnen, ist ein Simulationstool von Nöten. Auf Grund der komplexen Vorgänge bei den Wechselwirkungen des Strahlenbündels mit einem Versuchsmaterial ist der direkte analytische Weg zur Lösung eines Problems wohl kaum gangbar. Auch der meßtechnische Zugang wäre, unter Berücksichtigung der limitierenden Faktoren (Zeitbedarf, um ein 3 dimensionales Strahlungsfeld auszumessen; Meßgerätegüte/portabler Einsatz; spektrale Auflösung; örtlicher Zugang,...), unverhältmäßig.

Wenden wir uns nun noch kurz der wissenschaftlichen Community zu, um einen ersten Einblick in die zahlreichen Anwendungsmöglichkeiten von Monte Carlo Codes im Bereich der Röntgenstrahlungssimulation zu geben. Unser kurzer Überblick wird folgende Themen (ohne Anspruch auf Vollständigkeit enthalten):

- Monte Carlo und Theorie
- Erweiterungen von Monte Carlo Codes
- Simulation von Röhren
- Optimierung von Spektren

• Simulation von komplexen Röntgensystemen (Computer Tomographie)

Diese Liste zeigt uns bereits, dass Monte Carlo Codes in der Röntgenstrahlungsforschung sehr weit verbreitet sind und ein aktives Forschungsfeld definieren. Wir wollen nun noch einzelne Arbeiten aus diesen Feldern vorstellen, um den werten Leser einen Eindruck in die Größe dieses Feldes zu vermitteln.

Monte Carlo und Theorie: Eine Gegenüberstellung von Simulationsdaten mit analytischen Lösungen bei koherenter Bremsstrahlung wurde zum Beispile von einer Gruppe um Natter et al. (2003) durchgeführt.

Erweiterungen von Monte Carlo Codes: O'Dwyer & Tickner (2007) hat sich dem Problem der Deffraktionsstreuung im EGS Monte Carlo Code angenommen. Dieser arbeitet normalerweise mit einem Modell unabhängiger Atome. Deshalb kann es in diesem Code nicht zu einer Deffraktionsstreuung kommen. Diese wurde nun von der Gruppe implementiert und sogleich angewendet, um ein mineralogisches Analysegerät zu verbessern.

Simulation von Röhren: Simulationssoftware wird natürlich nicht nur eingesetzt um fertige Röntgenröhrenkonfigurationen zu simulieren. Nein auch in der Designphase oder auch zum Verbesseern von vorhandenen Röhrendesigns finden die Tools Eingang. So hat zum Beispiel eine Gruppe um Tavora et al. (2001) ein neues Röhrendesign vorgeschlagen, um die Photonenausbeute zu erhöhen. In ihrem Artikel kommen die Autoren zu dem Schluß, dass Elektronen, welche tiefer ins Anodenmaterial vordringen können, eine bessere Photonenausbeute erzielen. Da auf Grund von Rückstreuung aus dem Material, weniger Elektronen verloren gehen. Daher schlagen sie ein kleines Bohrloch im Anodenmaterial vor. Dies soll die Wahrscheinlichkeit der Wechselwirkung der primären und sekundären Elektronen mit Anodenmaterial erhöhen und somit die Photonenausbeute steigern.

Optimierung von Spektren: Aber natürlich spielt nicht nur die Optimierung der Photonenausbeute im Design und in der Anwendung von Röntgenröhren eine Rolle, sondern aus strahlenmedizinischer Sicht ist vorallem die applizierte Dosis von Bedeutung. Deshalb gibt es auch Bemühungen die in den Röntgeneinrichtungen (CT-Systemen) erzeugten Spektren zu erfassen, um eine möglichst genaue Dosisabschätzung vornehmen zu können. Im Idealfall soll ein Spektrum durch Blendensysteme derartig optimiert werden, dass sich Eigenschaften, wie Bildkontrast, Rausch/Signalabstand, ..., maximieren lassen, während die entsprechende Dosis minimal sein soll. Mit Fragestellungen wie diesen beschäftigt sich zum Beispile eine Gruppe um Taschereau et al. (2006), welche in einen ersten Schritt zeigten, dass sich reelle Röhrenspektren sehr gut mit Monte Carlo Verfahren nachbilden lassen.

Simulation von komplexen Röntgensystemen: Eine andere Gruppe um Miceli et al. (2007b) hat zum Beispiel den GEANT4 Code benutzt um eine hochauflösende industrielle Röntgenstrahlungsquelle zu simulieren. Diese Simulation wurde dann in einem zweiten Schritt dazu benutzt ein komplettes CT (Computer Tomographie) System nachzubilden. Mit der Nachbildung wurden dann theoretische Kontrastverhältnisse von Objekten ermittelt und mit praktisch ausgemessenen verglichen. Diese Puplikation ist ein gutes Beispiel für eine recht komplexe Simulationsaufgabe. Natürlich werden Simulationshilfsmittel aber nicht nur für derartig komplexe Sachverhalte eingesetzt. Von der gleichen Forschungsgruppe wie zuvor gibt es zum Beispiel auch eine Arbeit über den Vergleich von simulierten und gemessenen Spektren einer Industrieröntgenröhre (Miceli et al. 2007a). Dies ist zum Beispiel eine einfachere Anwendung eines Simulationstools. Was natürlich nicht heißt, dass auch das Tool einfacher/ungenauer sein kann. Ganz im Gegenteil, muß hierbei die Physik besonders genau abgebildet werden, um einen guten spektralen Vergleich zu ermöglichen.

"I did not think; I investigated."

by Wilhelm Röntgen

Kapitel 2

Röntgenröhren & Röntgenspektrum

In diesem Kapitel wird die Funktionsweise von Röntgenröhren¹ und die Entstehung von Röntgenspektren erläutert.

2.1 Röntgenröhre

Eine Röntgenröhre dient, wie der Name schon sagt, zur Generierung von Röntgenstrahlung, welche in vielfältiger Weise heutzutage in Technik und Medizin eingesetzt wird. Erstmalig wurde Röntgenstrahlung von W. C. Röntgen 1895 erzeugt und entdeckt. Da zu Beginn der Charakter und die Art dieser Strahlung nur unzureichend bekannt war, wurde sie im Englischen als X-Rays (soviel bedeutend wie unbekannte Strahlung) eingeführt. Der prinzipielle Aufbau einer Röntgenröhre läßt sich folgendermaßen untergliedern:

- Elektronenerzeugung normalerweise mittels einer Glühkathode
- Anode besteht zumeist aus Wolfram oder einer Legierung daraus (hoher Schmelzpunkt)
- Glaskolben mit Austrittsfenster
- gekühltes Röhrenschutzgehäuse wichtig bei höheren Strahlungsleistungen (Schutz vor unerwünschter Durchlassstrahlung und thermischer/mechanischer Schutz der Röntgenrhöhre)

Siehe dazu auch folgende vereinfachte Abbildung 2.1 bzw. die etwas detailgetreuere Abbildung 2.2, in welcher die eigentlich Röhre als das Röhrenschutzgehäuse dargestellt ist.

2.1.1 Elektronenerzeugung

Wie aus der Physik hinlänglich bekannt, gibt es verschiedene Möglichkeiten freie Elektronen zu erzeugen. Die bei Röntgenröhren normalerweise verwendete ist die sogenannte thermische Glühemission. Bei dieser wird ein Glühdraht aus einer hochschmelzenden Metalllegierung durch den durch

 $^{^{1}\}mathrm{ein}$ sehr guter Einblick zu diesem Thema kann in dem Buch Hanno (2005) gewonnen werden. Aus diesem stammt auch ein Großteil der hier dargestellten Information.



Abbildung 2.1: Schematische Abbildung einer Röntgenröhre. Mit K wird die Glühkathode bezeichnet. A steht für die Anode. Des Weiteren wird die Wasserkühlung in einem Blauton hervorgehoben und mit C bzw. W_{in} W_{out} bezeichnet. Diese Abbildung wurde wikimedia.org (2009) entnommen.



Abbildung 2.2: Detailgetreuere Abbildung einer Röntgenröhre. Diese Abbildung entstammt folgender Internetseite: http://i.onmeda.de/roengen-abb02.gif; 8.2.2009.

ihn hindurchfließenden elektrischen Strom erwärmt. Erreicht der Draht eine genügend hohe Temperatur (über 1000 K) so beginnen sich Elektronen aus dem Metall zu lösen und bilden eine freie Elektronenwolke im Vakuum um ihn herum. Diese Elektronen können nun über eine elektrische Beschleunigungsspannung abgesaugt werden. Die ins Vakuum austretende Stromdichte wird durch die Richardson Dushmann Gleichung beschrieben:

$$j = AT^2 exp\left(-\frac{W_e}{k_B T}\right) \tag{2.1}$$

j	elektrische Stromdichte
<i>A</i>	Richardson Konstante
<i>T</i>	Temperatur
W_e	Austritts arbeit
$k_B \ldots$	$Boltzmann\ Konstante$

Die sich nun von der Glühkathode wegbeschleunigenden Elektronen (hervorgerufen durch eine Beschleunigungsspannung) werden durch den Wehneltzylinder zu einem Elektronenstrahl fokusiert, welcher dann auf die Anode hin beschleunigt wird. Typische Beschleunigungsspannungen liegen im Bereich von mehreren 10 keV für radiologische Untersuchungsverfahren (klassisches Röntgen bzw. Zahnarzt Röntgen) bis hinauf in den Bereich von mehreren 100 keV für die industrielle Werkstoffprüfung.

2.1.2 Anode

Die auf der Anode auftreffenden Elektronen wechselwirken mit den Anodenatomen und erzeugen das Röntgenspektrum. Dieses besteht aus zwei Komponenten. Zum Einen ist dies die kontinuierliche Röntgenbremsstrahlung, welche beim Durchgang von Elektronen im elektrischen Kernfeld erzeugt wird und zum Anderen die charakteristische Röntgenstrahlung aus der Elektronenhülle. Wichtige Anforderungen an die Anode bestehen hinsichtlich ihrer thermischen Haltbarkeit. Der Koeffizient für die Photonenausbeute ist leider relativ gering und liegt nur bei einigen Prozentpunkten, weshalb der Großteil der über die Elektronen eingebrachten kinetischen Energie in der Anode in Wärme umgewandelt wird. Deshalb sind Temperaturen im sogenannten Brennfleck von mehreren tausend Grad keine Seltenheit. Bei längerer Belastung würde die Anode deshalb schmelzen. Um dies zu verhindern wird sie einerseits, wenn möglich, gekühlt, andererseits als Drehanode² ausgeführt. Die Anoden bestehen zumeist aus einer hochschmelzenden Wolframverbindung, welche auf einem Kupferträger, (wegen der besseren Wärmeleitfähigkeit) aufgebracht ist.

2.1.3 Glaskolben

Für die Haltbarkeit der Glühwendel ist es natürlich unerläßlich, dass sich diese in einem Vakuum befindet³. Um dieses Vakuum zu gewährleisten, werden die zuvor besprochenen Bauelemente (Glühwendel, Wehneltzylinder, Anode) in einem evakuierten Gehäuse untergebracht. Normalerweise ist dies ein Glaskolben. Bei heutigen Hochleistungsröhren finden aber auch zum Teil metallische Gehäuse Anwendung. Allen diesen Gehäusen ist gemeinsam, dass sie ein Austrittsfenster für die

 $^{^{2}}$ Eine Drehanode rotiert mit einer konstanten Umdrehungsgeschwindigkeit. Hierdurch trifft der Elektronenstrahl kontinuierlich in einem anderen Gebiet auf. Dies führt zu einer besseren thermischen Belastung (Entlastung) der Anode. Da sich nun die überschüssige Wärme nicht nur auf den aktuellen Brennfleck konzentriert, sondern auf das "beleuchtete" Ringsegement verteilt. Siehe hierzu auch Hanno (2005).

³Ansonsten würden bei den hohen Temperaturen sofort Oxidationsprozesse am Glühfaden (Verbrennen desselbigen) einsetzen.

Röntgennutzstrahlung benötigen. Dieses ist zumeist auf Grund der geringen Absorption/Streuung aus Beryllium gefertigt.

2.1.4 Röntgenschutzgehäuse

Der Glaskolben (die eigentliche Röntgenröhre) befindet sich nun noch in einem Röntgenschutzgehäuse, welches drei Erfordernisse erfüllen muß:

- Schutz der Umgebung vor Strahlung
- Kühlung der eigentlichen Röntgenröhre
- mechanischer Schutz der Röhre

Die erzeugte Strahlung darf natürlich nur bei einer vorgegebenen Nutzstrahlöffnung in Form eines Strahlenbündels mit vorgegebenen Spektrum austreten. Um dies zu gewährleisten umgibt man die Röhre mit einem sogenannten Schutzgehäuse, welches die Strahlung außerhalb der Nutzstrahlöffnung absorbieren muß (Abschirmung der Umgebung). In diese Öffnung können zumeist verschiedene Blenden eingesetzt werden, um das austretende Strahlenbündel zu formen (Aufzuhärten und oder den Öffnungswinkel⁴ einzustellen). Wie bereits zuvor erwähnt benötigen moderne Röntgenröhren eine ausreichende Kühlung um nicht thermisch überlastet zu werden (Wasserkühlung, Ölbadkühlung). Der dritte wesentliche Punkt ist der mechanische Schutz der Röntgenröhre, als auch die Möglichkeit sie entsprechend Montieren und oder Bewegen zu können.

2.1.5 Begriffe und Effekte bei Röntgenröhren

Filterung:

Die Filterung von Röntgenspektren dient dazu, den energetischen Bereich des Nutzstrahlbündels festzulegen. Die Aufweitung desselbigen kann über Blenden eingestellt werden. Die obere Grenzenergie⁵ des Spektrums ist über die maximale Energie der auftreffenden Elektronen und somit über die Röhrenspannung definiert. Das entstehende Spektrum erstreckt sich nun von dieser oberen Energie bis hinab zu Energien von wenigen keV (dort setzt die Eigenfilterung⁶ bzw. Filterung durch das Strahlenaustrittsfenster ein). Gerade in der medizinischen Röntgendiagnostik wird aber nur ein genügend hochenergetisches Spektrum, welches den Patienten bzw. die zu beobachtenden Körperpartien zu durchdringen vermag, benötigt. Der niederenergetische Anteil wird zu einem großen Teil im Patienten absorbiert und würde dort zu einer unnötigen Strahlenexposition führen. Um diesen Effekt möglichst klein zu halten wird nun durch entsprechende Filterung der niederenergetische Anteil der Strahlung herausgefiltert.

Brennfleck:

Beim Brennfleck wird zwischen dem optischen und dem thermischen Brennfleck unterschieden. Der optische Brennfleck ist der nach aussen hin sichtbare Durchmesser des Nutzstrahlenbündels. Der

 $^{^{4}}$ Der Öffnungswinkel soll nach Maßgabe der Möglichkeiten immer so klein wie möglich gewählt werden, um eine Exponierung von nicht zu bestrahlendem Gewebe (Medizin) bzw. Umgebung (Industrie) zu vermeiden.

⁵Wichtig für Eindringtiefe und Kontrast. In der medizinischen Röntgendiagnostik ist weiters darauf zu achten, dass ein nicht benötigter niederenergetischer Strahlanteil nach Möglichkeit wegzufiltern ist (Aufhärtung und ALARA (as low as reasonable) Prinzip).

⁶Unter Eigenfilterung versteht man die relative Abschwächung im niederenergetischen Spektralbereich gegenüber höheren Energien in der Anode selbst. Die eindringenden Elektronen erreichen je nach Beschleunigungsspannung unterschiedliche Tiefen im Anodenmaterial (bis sie komplett thermalisiert sind). Die entstehenden Photonen müssen durch dieses wieder Austreten. Je höher die primäre Elektronenenergie, desto tiefer lieg der Entstehungsort der Photonen. Hieraus ergibt sich ein längerer Weg zur Anodenoberfläche und damit eine stärkere Abschwächung.

thermische Brennfleck ist die mit den Elektronen bestrahlte Fläche. Um hohe Röntgenleistungen ohne thermische Beschädigung oder gar Zerstörung der Anode erreichen zu können, kann man sich einen Projektionseffekt zu Nutze machen. Wird der Winkel unter welchem die Elektronen auf die Anode auftreffen verändert, so verändert sich auch der thermische als auch der optische Brennfleck (jedoch gegensinnig). Dies kann sozusagen zu einer Bündelung der Strahlung von einer großen Brennfleckfläche auf ein kleines Strahlenbündel benutzt werden. Allerding muß der Heel Effekt hierbei beachtet werden (siehe unten).

Extrafokalstrahlung:

Extrafokalstrahlung ist unerwünschte Röntgenstrahlung, welche nicht aus dem Brennpunkt herrührt, sondern an anderen Punkten entsteht. Zu dieser kann es kommen, wenn Elektronen nach einer ersten Wechselwirkung die Anode wieder verlassen und an anderen Punkten innerhalb der Röntgenröhre auftreffen. Der Effekt der Extrafokalstrahlung kann durch mehrere Techniken vermindert werden:

- Tiefenblendensystem
- Elektronenfängerkopf

Beim Tiefenblendensystem (Drehanodensytem) kommt eine gestaffelte Anzahl von Blenden zum Einsatz, sodass nach Möglichkeit nur die erwünschte Nutzstrahlung austreten kann. Beim Elektronenfängerkopf (Stehanodensytem) können die Elektronen durch eine vorgegebene Lochblende eintreten. Ansonsten ist die Anode bis auf ein Austrittsfenster mit möglichst elektronenabsorbie-rendem Material umgeben.

Heel-Effekt:

Der Heel-Effekt beschreibt die unterschiedliche Aufhärtung von Röntgenspektren unter unterschiedlichen Winkeln zur Anode hin. Der Effekt kann dadurch erklärt werden, dass der Weg von Photonen durch das Anodenmaterial für unterschiedliche Winkel unterschiedlich lang ist (siehe hierzu auch die Fußnote zu Eigenfilterung). Für Photonen, welche sehr flach aus der Anode austreten ist der Weg besonders lang und somit ist deren Spektrum härter (höher energetischer) als das Spektrum für Elektronen, welche unter einem größeren Winkel austreten. Siehe auch Abbildung 2.3.

2.2 Röntgenspektrum

Röntgensepektren bestehen aus zwei, in ihrer Entstehung und Aussehen unterschiedlicher, Komponenten:

- kontinuierliches Röntgenbremsspektrum
- charakteristisches Linienspektrum

2.2.1 kontinuierliches Röntgenbremsspektrum

Dieser Teil des Spektrums entsteht beim Durchgang von Elektronen in Nähe eines Atomkerns und stellt eine Elektronenstreuung am Kernpotentialfeld dar. Dieses Streuproblem ist theoretisch nicht mehr so einfach zu lösen und es wird an dieser Stelle auf einschlägige Fachwerke der theoretischen Physik verwiesen. Ein Übersichtsartikel, welcher zahlreiche verschiedene Lösungsansätze und Lösungen für den differentiellen Wirkungsquerschnitt der Röntgenbremsstrahlung enthält, ist z.B.: Koch & Motz (1959). Aus diesem wurde auch folgende Abbildung entnommen 2.4. In ihr sieht man eine schematische Auflistung der verschiedenen Lösungsansätze.



Abbildung 2.3: Schematische Abbildung des Heel Effekts (nach Carlton and Adler, 1996). Man sieht das die Strahlstärke vom Winkel zur Anode abhängig ist. Würde man sich die spektrale Zusammensetzung ansehen, so könnte erkannt werden, dass unter flacheren Winkeln zwar die Intensität abnimmt, jedoch die Härte des Spektrums zunimmt. Entnommen von http://www.nova.edu am 8.2.2009.

Für Bremsspektren an dünnen Folien kann gezeigt werden, dass die spezifische Intensität ein konstantes Niveau (Rechteckspektrum) bis zur Grenzenergie (maximale Elektronenergie) annimmt.

Realistische Bremsspektren bekommt man nun, indem man sich einen dicken Absorber aus dünnen Folien aufgebaut vorstellt. Es entsteht an jeder einzelnen dünnen Folie ein Rechteckspektrum (siehe kurz zuvor im Text). Die Überlagerung dieser einzelnen Spektren formt nun unser realistisches Spektrum an dicken Absorbern. Zu Beachten ist, dass die einzelnen Rechteckspektren in ihrer Länge (Grenzenergie) jeweils leicht verkürzt sind, da die Elektronen auf ihrem Weg in tiefere Schichten bereits einen Teil ihrer Energie verloren haben. Aus diesen Überlegungen ergibt sich für dicke Absorber schließlich ein sogenanntes "Dreiecksspektrum". Dieses theoretische Dreiecksspektrum ist in der Praxis jedoch nicht zu sehen, da es zu einer sogenannten Eigenfilterung kommt. Die Photonen aus den tieferen Schichten werden zum Teil bereits wieder im Absorber absorbiert, weshalb gerade im Bereich der niederenergetishen Photonen das Spektrum erheblich von der theoretischen Dreiecksform abweicht. Zusätzlich kommt es zur Überlagerung mit den charakteristischen Röntgenemissionslinien und schließlich muß das Röntgenspektrum auch noch durch ein Fenster als Nutzstrahlbündel austreten, wodurch es nocheinmal leicht gefiltert wird.

2.2.2 charakteristische Röntgenstrahlung

Entsteht bei einem Stoßprozess eines freien Elektrons mit einem Elektron aus der Elektronenhülle. Dabei wird das gestoßene Elektron aus der Hülle gestoßen und es kommt in Folge zu einer Nachbesetzung aus äußeren Schalen unter Emission von charakteristischer Röntgenstrahlung einer bestimmten Energie. Die Energie der Strahlung entspricht dem energetischen Abstand der Schalen. Anstatt der Auslösung von Photonen kann es auch zur Auslösung von Auger Elektronen kommen. Siehe hierzu auch den Photoeffekt im Kapitel Photonen Wechselwirkungen. Die Entstehung dieser charakteristischen Röntgenstrahlung kann auch sehr gut in der schematischen Abbildung 2.5 ersehen werden.



Abbildung 2.4: Zeigt einen Überblick über verschiedene Lösungsformeln für den differentiellen Wirkungsquerschnitt für die Erzeugung von Röntgenbremsstrahlung. Entnommen aus Koch & Motz (1959).

923



Abbildung 2.5: In dieser Abbildung ist schematisch der Prozess der Röntgenfluoreszenz dargestellt. Beim primären Strahl kann es sich um einen Photonen oder Elektronenstrahl handeln. Kommt es zu einer Wechselwikrung dises Strahls mit einem inneren Hüllenelektron so kann dieses entfernt werden. Die entstehende Lücke wird von weiter außen liegenden Elektronen unter Aussendung der charakteristischen Röntgenstrahlung wieder aufgefüllt. Die freiwerdende Energie kann aber auch auf Elektronen übertragen werden. Dies führt zum Auger Effekt (hier nicht dargestellt). Diese Abbildung wurde aus dem Internet von der folgenden Seite übernommen: http//www.roentgenanalytik.de.

"Light travels faster than sound, but sound is still louder."

by Leonid S. Sukhorukov

Kapitel 3

Wechselwirkungsprozesse von Photonenstrahlung

In diesem Kapitel¹ wird eine Übersicht und, soweit es möglich und sinnvoll erscheint, auch eine theoretische Beschreibung der für diese Arbeit wichtigen Wechselwirkungen der Photonenstrahlung mit Materie gegeben. Photonenstrahlung kann mit Materie prinzipiell auf 5 Arten wechselwirken, welche man auf 3 Gruppen aufteilen kann:

- Wechselwirkung der Strahlung mit der Atomhülle:
 - Kohärente Streuung
 - Inkohärente Streuung (Compton Effekt)
 - Photoeffekt
- Wechselwirkung der Strahlung mit dem elektro magnetischen Kernfeld:
 - Paarbildung
- Wechselwirkung der Strahlung mit dem Atomkern:
 - Kernphoteffekt

Die vorliegende Arbeit beschäftigt sich stets mit Photonenenergien kleiner als 0.5 MeV. Diese Energie ist viel zu klein, als dass Paarbildung stattfinden könnte. Hierzu wird zumindest die doppelte Ruheenergie des Elektrons 512 keV benötigt. Somit können wir in unseren Betrachtungen von vornherein den Paarbildungseffekt ausklammern. Für den Kernphotoeffekt werden ebenfalls Energiewerte jenseits unserer maximalen Photonenenergie benötigt, weshalb auch dieser Effekt in unsere Betrachtungen keinen Eingang findet.

3.1 Kohärente Streuung

Kohärente Streuung oder auch elastische Streuung liegt vor, wenn das einwirkende Strahlenbündel energetisch gleich belassen bleibt, sprich sich die Photonenenergie nicht ändert. Es kann bzw. wird

¹Die Informationen zu diesem Kapitel wurden zu einem Großteil dem Buch von Hanno (2007) entnommen.

aber zu einer Richtungsänderung kommen. Dieser Streuprozess ist in der Literatur auch unter den Namen Thomson und Rayleigh Streuung anzufinden.

Ein einlaufendes Photon wird von der Elektronenhülle bzw. fest gebundenen Elektronen absorbiert und regt diese zu Schwingungen an. Nach kurzer Zeit wird diese Energie, ähnlich zu einer Dipolantenne wieder abgegeben. Die Energie bleibt erhalten, die Strahlungsrichtung hat sich allerdings verändert. Der Streukoeffizient ist oberhalb von 10 keV proportional zu der Dichte (ρ) und der Kernladungszahl (Z) des Absorbers, sowie indirekt proprotional zu der Photonenenergie (E_{γ}), wie man der folgenden Formel entnehmen kann:

$$\sigma_{kl} \propto \rho \frac{Z^{1.5}}{E_{\gamma}^2} \tag{3.1}$$

Man sieht hieaus, dass die klassische Streuung vorallem bei niederenergetischen Photonenwechselwirkungen (< 10 keV) eine Rolle spielt. Vorallem in Hinblick auf Wechselwirkung mit bioligischen Stoffen, welche generell ein niedriges Z aufweisen.

3.2 Inkohärente Streuung (Compton Effekt)

Die Inkohärente Streuung oder auch Compton Effekt genannt, spielt in dieser Arbeit und im Strahlenschutz im allgmeinen eine viel wichtigere Rolle als die Kohärente Streuung. Bei diesem Streuprozess findet die Wechselwirkung an einem äußeren und daher fast freien (schwach gebundenen) Elektron statt. Die Winkelenergieabhängigkeit kann noch relativ einfach über relativistisch zu behandelnde Energie Impulserhaltungsgleichungen gewonnen werden. Bei diesen Ableitungen wird die schwache Bindung des Hüllenelektrons vernachlässigt und man kommt zu folgendem formalen Zusammenhang:

$$E'_{\gamma} = \frac{E_{\gamma}}{1 + \frac{E_{\gamma}}{m_0 c^2} \cdot (1 - \cos \phi)}$$
(3.2)

Für eine vollständige Problembeschreibung muß man die relativistische Dirac´sche Quantenmechanik heranziehen. Dies wurde erstmals von Klein und Nishina 1929 bewerkstelligt, weshalb auch die Formel zur Beschreibung des differentiellen Compton Stoßquerschnitts Klein-Nishina-Formel heißt.

3.3 Photoeffekt

Beim Photoeffekt stoßt ein einfallendes Photon mit einem stark gebundenen Elektron der inneren Elektronenschalen (vorallem K-Schale; 80%) zusammen und überträgt bei diesem Stoß seine gesamte Energie auf dieses Hüllenelektron. Der Energieteil, welcher auf Grund der Impulserhaltung auf den Atomkern übertragen wird, kann im allgemeinen aufgrund der sehr viel größeren Masse des Kerns im Vergleich zu einem Hüllenelektron vernachlässigt werden. Die kinetische Energie, welche dem Elektron nach dem Stoß mit dem Photon zur Verfügung steht, ist genau die Photonenenergie abzüglich der Bindungsenergie:

$$E_{kin} = E_{\gamma} - E_B \tag{3.3}$$

Die Bindungsenergie hängt natürlich von der Schale (K,L,M) ab. Ist die Photonenenergie niedriger als die Bindungsenergie einer bestimmten Schale, so können aus dieser trivialerweise keine Elektronen emitiert werden. Es bilden sich die für das Material charakteristischen Absorptionskanten.

Das Loch, welches sich nun in der Elektronenhülle befindet, wird durch Elektronen von äußeren Schalen aufgefüllt. Hierbei kommt es zu kaskadenartigen Emissionsvorgängen von sogenannter "charakteristischer" Röntgenstrahlung oder auch in Konkurrenz zu dieser zur Emission weiterer Elektronen, sogenannter Auger Elektronen. Die Energie und Materialabhängigkeit bei diesem Wechselwirkungs (WW) - Prozess setzt sich folgendermaßen zusammen:

$$\tau \propto \rho \frac{Z^n}{E_\gamma^3} \tag{3.4}$$

$$n = 3 - 3.5$$
 (3.5)

Der Photeffekt ist ebenfalls, wie die kohärente Streuung, vorallem bei niederenergetischer Photonenstrahlung und bei schweren Elementen anzutreffen. Ein Problem für den Strahlenschutz kann die entstehende hochenergetische Röntgenstrahlung bei Bleiabschirmungen darstellen.

3.4 Übersicht über die besprochenen WW-Effekte

Hier nocheinmals in tabellarischer Form eine Übersicht über die besprochenen WW-Prozesse:

Tabelle 3.1: die nachfolgende Tabelle gibt eine Übersicht über die Abhängigkeiten (Energie, Kernladungs-
zahl, Massenzahl) der besprochenen Wechselwirkungsprozesse sowie über die entstehenden
Sekundärstrahlungsarten.

Wechselwirkung	f(Z,A)	$f(E_{\gamma})$	Sekundärstrahlung
klassische Streuung	$Z^{2.5}/\mathrm{A}$	$1/E^{2}$	γ
Compton Streuung	Z/A	$1/E^{0.5}$ bis $1/E$	$\gamma,~e^-$
Photoeffekt	Z^4/A bis $Z^{4.5}/A$	$1/E^{3.5}$	e^- , Röntgen und UV Strahlung,
			Auger Elektronen

"It doesn't matter how beautiful your theory is, it doesn't matter how smart you are. If it doesn't agree with experiment, it's wrong."

by Richard Feynman

Kapitel 4

Transporttheorie

Die in dieser Diplomarbeit behandelte Aufgabenstellung gehört, vom Gesichtspunkt der physikalisch mathematischen Beschreibung, zu den sogeannten Transportproblemen. Mit Problemen dieser Art beschäftigt sich die gleichlautende Transporttheorie. In ihr wird die sogenannte Boltzmann Gleichung aufgestellt. Diese beschreibt Transportprobleme in ganz allgemeiner Art. Da es sich bei dieser Gleichung um eine Integrodifferentialgleichung höherer Ordnung handelt, können nur sehr wenige, stark vereinfachte Probleme auf analytischem Weg gelöst werden. Für Probleme komplizierterer Art greift man sehr häufig auf sogenannte Simulationstools - vorallem auch auf sogenannte Monte Carlo Simulationen - zurück.

4.1 Transportgleichung

Die allgemeinste Form der Transportgleichung sieht wie folgt aus (siehe Duderstadt & Martin (1979)):

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \frac{\partial n}{\partial \mathbf{r}} + \frac{\mathbf{F}}{m} \cdot \frac{\partial n}{\partial \mathbf{v}} = \left(\frac{\partial n}{\partial t}\right)_{coll} + s \tag{4.1}$$

Durch die Einführung des Konzeptes einer mittleren freien Weglänge, kann der Stoßterm (erster Term der obigen Gleichung auf der rechten Seite) noch genauer spezifiziert werden:

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \frac{\partial n}{\partial \mathbf{r}} + \frac{\mathbf{F}}{m} \cdot \frac{\partial n}{\partial \mathbf{v}} + v \Sigma n = \int d^3 v' \mathbf{v}' \mathbf{\Sigma}(\mathbf{r}, \mathbf{v}' \to \mathbf{v}) n(\mathbf{r}, \mathbf{v}', t) + s$$
(4.2)

n Phasenraumdichte des betrachteten Problems z.B.: [Teilchen $m^{-3}(m/s)^{-3}$]

t Zeit

- v Geschwindigkeit
- r Richtungsvektor
- F externe Kräfte
- m Masse
- Σ makroskopischer Stoßterm
- s Quellterm

Diese Gleichung beschreibt die Veränderung der Phasenraumdichte mit der Zeit. Diese Veränderungen können durch Zu und Abfließen von Teilchen (zweiter Term), durch externe Kräfte (dritter Term), durch Umordnungsvorgänge zumeist Stöße (vierter Term, beschreibt die Zunahme durch 'Hineinstreuen'; fünfter Term, die Abnahme durch 'Hinausstreuen', aus dem Phasenraumvolumen) und natürlich durch Quellen oder Senken (sechster Term) verursacht werden.

Im Falle von Strahlungsfeldern (Photonen) ist diese Beschreibung nicht sinnvoll, da sich die Photonen mit Lichtgeschwindigkeit ausbreiten und deshalb die Abhängigkeit der Gleichung von der Geschwindigkeit nicht erwünscht (gegeben) ist. Man kann die Gleichung relativ leicht in eine Form bringen, in welcher sie nicht mehr von der Geschwindigkeit sondern von der Energie und der Raumrichtung abhängt¹.

$$\frac{1}{c}\frac{\partial\phi}{\partial t} + \mathbf{\Omega}\cdot\nabla\phi = \int dE' \int d\Omega' \Sigma_s(E' \to E, \mathbf{\Omega}' \to \mathbf{\Omega})\phi(\mathbf{r}, E', \mathbf{\Omega}', t) + s$$
(4.3)

In dieser Gleichung beschreibt das Doppelintegral oder genauer gesagt der Term Σ_s die eigentliche Physik des zu lösenden Problems. Dieser Term beschreibt wie Photonen einer Energie, welche sich in eine bestimmte Richtung bewegen, zu Photonen mit einer anderen Energie und einem anderen Richtungsvektor umverteilt (gestreut, absorbiert, reemitiert) werden. Das bedeutet, dass alle in den vorhergehenden Kapiteln beschriebenen Wechselwirkungen in diesen Term einfließen. Wir sehen nun, dass es sich bei der theoretischen Beschreibung und Lösung von Strahlungsfeldern, um eine nicht triviale Angelegenheit handelt. Des Weiteren sollte der geneigte Leser berücksichtigen, dass die hochenergetischen Photonen immer in Wechselwirkung mit Elektronen treten. Deshalb müßte eine weitere Transportgleichung für den Elektronentransport aufgestellt werden, welche mit der ersten Gleichung koppelt. Will man das Problem ganz genau lösen, bzw. verwendet man sehr hohe Energien, so muß berücksichtigt werden, dass nun das Photonenstrahlungsfeld auch noch mit den Atomkernen wechselwirken kann und somit auch noch Kernbruchstücke und Neutronen entstehen können (Weitere Transportgleichungen, welche über physikalische Wechselwirkungsprozesse miteinander koppeln.). Aus diesen Gründen beschränken sich die analytischen Lösungen im Allgemeinen auf sehr einfache und/oder eingeschränkte Modelle. So kann man obige Gleichung für sehr niederenergetische Photonen (Lichtstrahlung) stark vereinfachen. Dies führt zum Beispiel auf die sogennante Strahlungstransportgleichung (im Englischen radiative transport equation). Diese wird z.B.: sehr umfangreich in der Astrophysik für die Berechnung von Sternatmosphären und Linienprofilen verwendet. Die folgende Tabelle 4.1 wurde aus Duderstadt & Martin (1979) entnommen und soll einen Überblick über die analytischen Lösungsmöglichkeiten der Transportgleichung geben:

Aus den oben genannten Gründen und wie auch in Tabelle 4.1 ersichtlich war, ist die Transportgleichung analytisch nicht lösbar. Deshalb wollen wir uns im Folgenden mit numerischen Lösungsmethoden beschäftigen.

4.2 Numerische Lösungsmöglichkeiten für die Transportgleichung

Monte Carlo Mehtoden:

Die sogenannten Monte Carlo Mehtoden wurden in den 40 Jahren des letzten Jahrhunderts entwickelt und können für unterschiedlichste Probleme eingesetzt werden (Transportprobleme, Lösen von Differentialgleichungen, Integrodifferentialgleichungen, …). Das Prinzip erscheint relativ einfach. Anstatt ein Problem direkt anzugehen, versucht man die interessierenden Variablen statistisch zu erfassen. Wir wollen dies für ein Transportproblem näher erläutern:

¹Beachte die drei variablen Komponenten der Geschwindigkeit wurden durch die Komponenten Energie und zwei Komponenten für die Beschreibung der Richtung ersetzt.

Tabelle 4.1: Diese Tabelle zeigt eine Übersicht über die analytische Lösbarkeit der Transporttheorie unter
unterschiedlichen Bedingungen. In dieser Tabelle steht a für analytisch lösbar, n für numerisch
 lösbar und u für unter erheblichen Aufwand bzw. sehr schwer lösbar.

Geometrie	eindim.			zweidim.		dreidim.
Problemtyp	∞ -Medium	Halbraum	Begrenzt	х-у	r-z	allgemein
Energie:						
Monoenergetisch	a	a	a	n	n	n
Multigroup	a	$^{\mathrm{a,n}}$	n	n	n	n
Kontinuierlich	a	$^{\mathrm{a,n}}$	n	u	u	u
Winkel:						
Isotrop	a	a	a	n	n	n
Anisotrop	a	a	n	n	n	n
Material:						
Vakuum	a	a	a	a	a	a
Nur Absorption	a	a	a	a	a	a
Homogen	a	a	a	n	n	n
Inhomogen	n	n	n	n	n	n
Quellen:						
Lokalisiert	a	a	a	n	n	n
Green Funktion	a	a	a	n	n	n
Periodisch	a	a	a	n	n	u
Weder noch		a	n	n	n	n
Zeitabhängigkeit:						
Statisch	a	a	a	n	n	n
Kritisch	a	a	a	n	n	n
Periodisch	a	a	a	u	u	u
Gepulst	a	a	a	u	u	u
Allgemein	a	a	n	u	u	u

Denken wir uns eine Strahlungsquelle an einem Punkt x. Gesucht ist die Teilchenfluenz am Punkt y. Zwischen den Punkten befindet sich ein bestimmtes Material m. Anstatt nun die konkreten Gleichungen zu lösen, simuliert man das Verhalten vieler einzelner Teilchen wie folgt:

- 1. Generiere Quellteilchen
- 2. Ermittle eine Wegdistanz
- 3. Ermittle ein Ereignis
- 4. Ist Teilchen noch vorhanden?
- 5. Wenn ja: Punkt 2 ansonsten Punkt 1

Generieren von Quellteilchen:

Beim Generieren von Quellteilchen wird die Position, Richtung, Energie, Teilchenart durch Sampeln² der Quelleneigenschaften (Verteilungen) festgelegt.

Ermittlung der Wegdistanz:

Legen wir das Konzept der mittleren freien Weglänge unserer Simulation zu Grunde, so folgt für die Wahrscheinlichkeit (P(x)), dass eine Reaktion (Wechselwirkung des Teilchens) auf der Strecke (x) eintritt³:

$$P(x) = \int_0^x d\tilde{x} \ p(\tilde{x}) = 1 - exp(-\Sigma_t x) \tag{4.4}$$

Hierbei bedeutet p(x) die Wechselwirkungs-Wahrscheinlichkeit des Teilchens am Punkt x. P(x) ist die kumulative (Gesamt-) Wahrscheinlichkeit, dass das Teilchen an einer Wechselwirkung teilgenommen hat, bis es eine Distanz x zurückgelegt hat. Σ_t ist schließlich noch der totale makroskopische Wechselwirkungsquerschnitt (englisch: macroscopic cross-section).

P(x) nimmt einen Wertebereich von [0,1] ein und darf (wie man zeigen kann) in Richtung x invertiert werden. Durch Sampeln von P mit einer Gleichverteilung im Wertebereich [0,1] folgt für ein konkretes Sampel P_i :

$$x(P_i) = -\frac{1}{\Sigma} \cdot \ln(1 - P_i)$$

$$(4.5)$$

$$x(P_i) = -\frac{1}{\Sigma} \cdot \ln(P_i) \tag{4.6}$$

In Zeile 4.6 haben wir noch eine Eigenschaft der gleichverteilten Zahlen im Intervall [0,1] benutzt, nämlich dass sich die Gleichverteilung nicht ändert ob man [0,1] oder [1,0] abtastet.

 $^{^2}$ Unter Sampeln versteht man das Abtasten einer Wahrscheinlichkeitsverteilungsfunktion. Sprich, werden viele Elemente x aus X generiert so folgen die Werte der Wahrscheinlichkeitsfunktion $\mathbf{p}(\mathbf{x})$

³Für genauere Ableitungen in diesem Kapitel siehe Duderstadt & Martin (1979)

Ermittlung der Wechselwikrung:

Die Wechselwirkungsart kann folgendermaßen (abhängig von der Physik) ermittelt werden:

$$\Sigma_t = \Sigma_s + \Sigma_b + \Sigma_r + \dots \tag{4.7}$$

$$p_s(\Sigma_s) = \frac{\Sigma_s}{\Sigma_t} \tag{4.8}$$

$$p_b(\Sigma_b) = \frac{\Sigma_b}{\Sigma_t} \tag{4.9}$$

$$p_x(\Sigma_x) = \frac{\Sigma_b}{\Sigma_t} \tag{4.10}$$

Der totale Wirkungsquerschnitt ist die Summe aller einzelnen Wirkungsquerschnitte (abhängig von der betrachteten Physik und der Komplexität des zu betrachteten Systems). Die Wahrscheinlichkeit für ein Ereignis, zum Beispiel Streuung, beträgt dann einfach Streuquerschnitt zu totaler Wirkungsquerschnitt. Diese Wahrscheinlichkeiten befinden sich nun wieder in einem Intervall von [0,1] und können wieder mit einem gleichverteilten Zufallszahlengenerator gesampelt werden.

Weiterer Ablauf der Simulation:

Wir haben nun alle prinzipiellen Bestandteile für einen simplen Monte Carlo Code durchgesprochen. Je nach Wechselwirkung kann ein Teilchen vernichtet werden (z.B.: Absorption) oder aber auch Teilchen generiert werden (z.B.: Neutronen durch Kernspaltung, Photonen durch Bremsstrahlung, Elektronen durch den Augereffekt, ...), oder aber auch in seinen Eigenschaften (Energie, Ausbreitungsrichtunge) verändert werden. Wird ein Teilchen vernichtet, so startet die Simulation einen neuen Durchlauf mit einem neuen Quellteilchen. Wird das Teilchen in seinen Eigenschaften verändert, so werden die zuvor besprochenen Punkte solange wiederholt bis ein Abbruchkriterium erreicht wird (z.B.: Teilchen verläßt interessierenden Bereich, besitzt zu wenig Energie, ...). Die dritte Möglichkeit besteht darin, dass bei Reaktionen Sekundärteilchen ausgelöst werden. Diese werden in der Simulation für weitere Berechnungen gespeichert und nach Vernichtung des Primärteilchens betrachtet.

Das oben beschriebene Monte Carlo Verfahren wird als sogenannte analoge Monte Carlo Simulation bezeichnet. In diesem Verfahren kann es zu einem Problem kommen, wenn nämlich ein interessierender Bereich (z.B.: ein Raumbereich hinter einer Strahlenschutzeinrichtunge) durch die zufällig generierten Teilchen nur ungenügend oder gar nicht abgedeckt wird. Die Wahrscheinlichkeit, dass ein Teilchen durch eine Strahlenschutzwand dringt ist eben sehr gering (zum Glück). Dies äußert sich in sehr fehlerhaften Ergebnissen, wenn zum Beispiel ein sehr wichtiges (für das Ergebnis) Ereignis auf Grund seiner kleinen Wahrscheinlichkeit nicht auftritt, und in sehr großen statistischen Varianzen der Ergebnisse. Deshalb gibt es sogenannte Varianzreduktionsverfahren, welche im Grunde versuchen die interessierenden, aber nicht sehr wahrscheinlichen, Ereignisse besser zu sampeln (sozusagen verstärkt zu betrachten). Hierdurch wird die Varianz, oder bei gleicher Varianz, die Rechenzeit erheblich reduziert. Man spricht dann aber nicht mehr von analogen Monte Carlo Simulationen. "...elementary particles are terrible boring, which is one reason why we're so interested in them."

by Steven Weinberg

Kapitel 5

Das Programm MCNPX

Die folgende Zusammenfassung über das Simulationstool MCNPX wurde den entsprechenden Unterlagen (Briesmeister 1997; Waters 1999; Los Alamos National Laboratory 2006) zur Software entnommen und wird hier verkürzt wiedergegeben.

5.1 Übersicht über MCNPX

MCNPX als auch MCNP sind zwei Monte Carlo Simulationstools zum Simulieren von Strahlungsteilchentransport, wobei beide Codes sehr eng miteinander verwandt sind und sich nur in einigen Details unterscheiden. So bietet MCNPX mehr (in der von uns verwendeten Version 2.5.0, z.B.: 34) verschiedene Teilchensorten¹ an als MCNP und verfügt des Weiteren über das Feature eines sogenannten Mesh Tallies, weshalb wir uns für MCNPX entschieden haben. Wir werden in diesem Kapitel den Umgang mit MCNPX erörtern, sowie die einzelnen Komponenten des Input Files vorstellen, welche der Benutzer erstellt. Dieses Input File untergliedert sich in mehrere Komponenten und kann sehr flexibel gestaltet werden. Dies ermöglicht zum Einen eine optimale Anpassung der Simulation an die Problemstellung und gibt dem Benutzer des Weiteren die Möglichkeit das Problem detailierter oder weniger detailiert (je nach zur Verfügung stehender Rechenzeit/Rechenleistung) zu modellieren.

Übersicht über die Inputkomponenten:

- Geometriesetup
- Material definitionen
- Strahlungsquelle & Physik
- Meßgrößen (Tallies)
- Speziellere Anweisungen

 $^{^1}$ Die zusätzlichen Teilchensorten umfassen vorallem hochenergetische Teilchen, wie z.B.: Muon, Pion, Kaon,...; für eine vollständige Liste siehe z.B.: Tabelle 5.1 Waters (1999)

5.2 Input File/Anweisungen

5.2.1 Geometriesetup

Der Benutzer muß dem Programm die Geometrie seines Problems über sogenannte Input Karten² mitteilen. Die Problemstellung muß dabei in eindeutige Zellen, welche sich nicht überlagern dürfen, aufgeteilt werden. Die einzelnen Zellen werden über ihre Oberflächen definiert. So wird ein Kubus zum Beispiel über 6 miteinander geschnittenen Ebenen definiert. MCNP(X) unterstützt den Benutzer mit geometrischen Flächen bis zur vierten Ordnung (Ebenen, Zylinder, Kegel, Kugeln, ...). Oft ergeben sich in Problemstellungen sich wiederholende (baugleiche) Elemente (siehe Abbildung 5.1). Denken wir z.B.: an ein Brennelement in einem Reaktor, so sehen wir, dass bei einer Simulation eines solchen Bereichs sehr viele dieser Brennelemente meist in Form eines Gitters (oder ähnlich) angeordnet werden müssen. MCNP(X) ermöglicht es dem Benutzer mit einigen Karten (universe, fill, like,...) sich derartige Elemente zu definieren und sie sodann mehrfach zu verwenden.

Des Weiteren gibt es Transformationskarten mit deren Hilfe man Objekte beliebig im Raum drehen kann.

Zum Geometriesetup gehört weiters die Definition des Materials aus welchem eine Zelle bestehen soll, sowie die Angabe der Dichte desselbigen³. Schließlich muß für jede Zelle noch die Wichtigkeit (Engslisch "Importance") für den Teilchentransport (Simulation) festgelegt werden. Diese "Importance" gibt Auskunft darüber, wie wichtig dem Benutzer die Resultate in dieser Zelle sind, und beeinflußt darüberhinaus die Varianzreduktionsverfahren⁴.

5.2.2 Materialdefinitionen

Materialdefinitionen können in MCNP(X) über Materialkarten erfolgen. Eine derartige Karte kann z.B.: wie folgt aufgebaut sein:

mn element
1% element
2% \ldots

, m identifiziert den Eintrag als Materialkarte; n ist eine Laufvariable (Material Nummer). Danach wird die Zusammensetzung des Materials in Form der einzelnen Isotope angegeben (Isotop, gefolgt durch normierte Anzahldichte). Dies soll am konkreten Beispiel eines Stoffes (Wasser) nun dargestellt werden:

m1 1000 0.666 8000 0.333

Material1 Wasserstoff 66% Sauerstoff 33%

Es sei im Folgenden noch darauf hingewiesen, dass es für die Simulation von unterschiedlichen Teilchen (e^-, n, γ) unterschiedliche Isotopenbibliotheken gibt (mitunter existieren auch mehrere Bibliotheken für die gleiche Teilchenart), aus welchen man auswählen kann. Dies hat den Grund darin, dass manche Bibliotheken um etliches genauer sind als andere, wofür man allerdings in Kauf nehmen muß, dass die Berechnung entsprechend langsamer abläuft. Vorallem bei den Neutronenbibliotheken gibt es erhebliche Unterschiede. So gibt es unter anderem sehr genaue, welche die

 $^{^{2}}$ Der Begriff Karte kann im Kontext dieses Kapitels als Synonym für eine Codezeile verwendet werden. Wahrscheinlich bezieht sich das englische "card" noch auf die Ursprünge von MCNP(X), welche in die Urzeiten der Computer zurückreichen. Mit den damaligen mechanischen Rechnern gingen auch sogenannte Lochkarten, auf welchen das eigentliche Programm eingestanzt war, einher.

 $^{^3\}mathrm{Entweder}$ als Massendichte: g/cm^3 oder als Atom
dichte in 10^{24} Atome pro cm^3

⁴siehe das entsprechende nachfolgende Kapitel



Abbildung 5.1: Zeigt ein Beispiel (entnommen aus Hendricks et al. 2005) für die Anwendung von sich wiederholenden Strukturen. Diese können mit verschiedenen Karten definiert und anschließend mehrfach verwendet werden. Für genauere Informationen siehe Text bzw. die einschlägigen Benutzerhandbücher.

Tabelle 5.1: Diese Tabelle zeigt zusammenfassend, welche verschiedenen Oberflächen der Benutzer in MCNP(X) verwenden kann, um seine Zellen aufzubauen (diese, nicht vollständige, Tabelle wurde dem Benutzerhandbuch Briesmeister (1997) entnommen). In dieser Tabelle bedeutet // parallel, Menm. bedeutet mnemonisch;

Mnem.	Тур	Beschreibung	Gleichung
Р	Ebene	allgemein	Ax+By+Cz-D=0
PX	-//-	normal zu x-Achse	x-D=0
PY	-//-	normal zu y-Achse	y-D=0
ΡZ	_//_	normal zu z-Achse	z-D=0
SO	Kugel	Kugel im Ursprung	$x^2 + y^2 + z^2 - R^2 = 0)$
S	-//-	Kugel allgemein	$(x - x_0)^2 + (y - y_0)^2 + (z - z_0)^2 - R^2 = 0$
SX	-//-	Kugel auf x-Achse	$(x - x_0)^2 + y + z - R^2 = 0$
SY	-//-	Kugel auf y-Achse	$x^2 + (y - y_0)^2 + z^2 - R^2 = 0$
SZ	_//_	Kugel auf z-Achse	$x^2 + y^2 + (z - z_0)^2 - R^2 = 0$
C/X	Zylinder	Zylinder // zu x-Achse	$(y - y_0)^2 + (z - z_0)^2 - R^2 = 0$
C/Y	-//-	Zylinder // zu y-Achse	$(x - x_0)^2 + (z - z_0)^2 - R^2 = 0$
C/Z	-//-	Zylinder // zu z-Achse	$(x - x_0)^2 + (y - y_0)^2 - R^2 = 0$
CX	-//-	Zylinder // auf x-Achse	$y^2 + z^2 - R^2 = 0$
CY	_//_	Zylinder // auf y-Achse	$x^2 + z^2 - R^2 = 0$
CZ	_//_	Zylinder // auf z-Achse	$x^2 + y^2 - R^2 = 0$
K/X	Kegel	Kegel // zu x-Achse	$\sqrt{(y-y_0)^2 + (z-z_0)^2} - t(x-x_0) = 0$
K/Y	_//_	Kegel // zu y-Achse	$\sqrt{(x-x_0)^2 + (z-z_0)^2} - t(y-y_0) = 0$
K/Z	_//_	Kegel // zu z-Achse	$\sqrt{(x-x_0)^2 + (y-y_0)^2} - t(z-z_0) = 0$
KX	_//_	Kegel auf x-Achse	$\sqrt{y^2 + z^2} - t(x - x_0) = 0$
KY	_//_	Kegel auf y-Achse	$\sqrt{x^2 + z^2} - t(y - y_0) = 0$
ΚZ	-//-	Kegel auf z-Achse	$\sqrt{x^2 + y^2} - t(z - z_0) = 0$
SQ	Ellipsoid	Achse //	$A(x-x_0)^2 + B(y-y_0)^2 + C(z-z_0)^2$
	Hyperboloid	zu	$+2D(x-x_0)^2+2E(y-y_0)^2$
	Paraboloid	X-, Y- oder Z-Achse	$+2F(z-z-0)^2 + G = 0$

mnemonische	Teilchensorte	Tally Beschreibung	Maßeinheit
Beschreibung			
F1	n/ γ / e^-	integrierter Fluß über eine Oberfläche	Anzahl
F2	n/ γ / e^-	mittlerer Fluß durch eine Oberfläche	$Anzahl/cm^2$
F4	n/ γ / e^-	mittlerer Fluß durch ein Volumen	$Anzahl/cm^2$
F5	n/ γ	Fluß an einem Punkt	$Anzahl/cm^2$
		oder in einem Ringdetektor	
F6	n/n & γ / γ	Energie Deposition	MeV/g
		gemittelt über Volumen	
F7	n	Spaltenergie Deposition	MeV/g

Tabelle 5.2: listet die im Simulationstool MCNP(X) vorhanden Tallies und ihre Meßgröße auf:

vielen sogenannten Neutronenresonanzlinien enthalten und auch andere, welche praktisch nur den kontinuierlichen Neutronenspektralbereich behandeln. Für uns ist dies aber von untergeordnetem Interesse, da wir fast ausschließlich mit Photonenbibliotheken arbeiten werden (Nur für die Erzeugung unseres Röntgenreferenzspektrums benötigen wir auch die Elektronenbibliotheken.). Die Photonenbibliotheken unterscheiden sich meistens nur im Alter ihrer Compilierung und deshalb zum Teil in ihrer Genauigkeit. Wenn nicht anders angegeben, so wurden für unsere Berechnungen immer die jeweils letztgültigen Bibliotheken verwendet.

5.2.3 Tallies

Unter Tallies kann man vereinfacht die Darstellung von Meßgeräten in der Simulationsumgebung verstehen. Für verschiedenartige Aufgaben, wie z.B.: das Messen von Strahlungsgrößen an Punkten, Flächen bzw. Volumina, besitzt MCNPX unterschiedliche Tallies, welche dort relevante Größen, wie Teilchenfluß, Teilchenfluenz, Energiedeposition, ..., messen. Die nachfolgende Tabelle (5.2) soll Aufschluss über die in dem Simulationstool MCNP(X) vorhanden Tallies geben.

Wir sehen, dass es sich bei den meisten Tallies um sogenannte Flusstallies handelt und auch die meisten Tallies für alle vorhandenen Teilchensorten zu verwenden sind. Für unsere Zwecke können wir natürlich von vornherein den F7 Tallie ausschließen, da dieser nur für Kernspaltungs Simulationen Verwendung findet. Für uns von besonderem Interesse ist der sogenannte F4 Tally, welcher den Teilchenfluß durch eine Zelle/Volumen mißt. Ein wesentlicher Vorteil/Erleichterung des Simulationstools gegenüber wirklichen Meßungen ist, dass es dem Benutzer frei steht, praktisch beliebige Volumina/Oberflächen für seine Simulation zu kreieren und dort die ihn interessierenden Parameter zu messen. Weiters kann der Benutzer über eine sogenannte Energiekarte die spektrale Auflösung des Tallies vorgeben und über eine Winkelkarte kann auch noch eine Winkelabhängigkeit der Meßgröße mitbestimmt werden. Die Winkelabhängigkeit ist allerdings nur für den Winkel zwischen dem Oberflächen-Lot und der Oberfläche möglich (In diesem Sinne kann man nicht die allgmeine Abhängigkeit einer Größe (X) von den Kugelkoordinaten $\theta \& \phi$ bestimmen.).

theoretische Grundlage für Tally F4 (Fluss über Volumen Tally):

Da dieser Tally für uns von praktischer Relevanz ist⁵, wollen wir uns nun im näheren Ansehen wie die Simulation das gewünschte Ergebnis (Teilchenfluss) erzielt. Die Definition des Teilchenflusses $(\phi(\mathbf{r}, E, t))$ ist:

$$\phi(\mathbf{r}, E, t) = v \cdot N(\mathbf{r}, E, t), \tag{5.1}$$

⁵Wir haben bei unseren Simulationen stets auf diesen Tally zurückgegriffen, da die Definition von zu messenden Oberflächen nicht so einfach ist, wie die Angabe einer Meßzelle und deren Volumen.

Dies entspricht der Teilchendichte (N) multipliziert mit der Teilchengeschwindigkeit (v). Wie kann diese Größe nun in der Simulation bestimmt werden?

Betrachten wir zunächst einmal das Integral des Flußes (ϕ) über die Zeit (t), gemittelt über ein Zellvolumen (V) pro Quellteilchen (Anzahl der Quellteilchen N_0):

$$\frac{1}{N_0} \frac{1}{V} \int \int \phi(\mathbf{r}, \mathbf{E}, \mathbf{t}) dt \, dV = \left| dt \to \frac{dt}{ds} \, ds \to \frac{1}{v} \, ds \right| =$$
(5.2)

$$\frac{1}{N_0} \frac{1}{V} \int \int \phi(\mathbf{r}, \mathbf{E}, \mathbf{t}) \frac{1}{v} ds \, dV = \frac{1}{V} \int \int \frac{N(\mathbf{r}, \mathbf{E}, \mathbf{t})}{N_0} ds \, dV =$$
(5.3)

$$\frac{W(E)}{V} \int ds = \frac{W(E)}{V} T_l \tag{5.4}$$

- N_0 Anzahl der Quellteilchen (Simulationsteilchen)
- V Volumen der betrachteten Zelle
- ϕ Teilchenfluß
- r Positionsvektor
- E Teilchenenergie
- t Zeit
- v Teilchengeschwindigkeit
- W(E) Teilchengewicht in betrachteter Zelle
- T_l Tracklength zurückgelegte mittlere Teilchenspur (Länge)

Wir sehen also, dass wir in einer statischen Simulation (Vorgang ist unabhängig von der Zeit) den Teilchenfluß über das sogenannte Teilchengewicht in einer Zelle, der Flugbahnlänge und dem Volumen der Zelle bestimmen können. Um nun zu den physikalischen Einheiten des Flusses zurückzukommen, müssen wir nur unseren Tallywert mit der Gesamtanzahl der in der Quelle emittierten Teilchen pro Zeit multiplizieren.

Wie wird ein Tally verwendet:

Ein Tally kann in MCNP(X) sehr einfach eingebaut werden:

$f_{xy:t} c$

Die Tallykarte beginnt mit f optional gefolgt mit einer Laufvariablen x, welche benötigt wird um in einer Problemstellung denselben Tallytyp öfters verwenden zu können. Anschließend kommt die Deklaration der Art von Tally y, welche den Tally festlegt (siehe 5.2). Gefolgt wird die Deklaration von einem Doppelpunkt, hinter welchem die Teilchenart t festgelegt wird. Danach kommt ein Abstand und die Angabe der Zelle(n) c, in welchen gemessen werden soll. Wir wollen dies nun an einem konkreten Beispiel verdeutlichen:

f24:p 5

- f Start einer Tallykarte
- 2 Laufvariable (kombiniert mit der nachfolgenden Zahl zur Tallynummer)
- 4 Tallytyp: Teilchenfluß ermittelt über ein Volumen
- p Teilchenart: Photonen
- 5 Bestimmung der Meßzelle

Der Tally kann mit Erweiterungskarten verändert werden. Die beiden wichtigsten sind:

Тур	gemessene Größe	Beschreibung
1	Flugbahn Meshtally	Ist der wohl am umfangreichsten zu verwendende Tally. Mit
		diesem können die Tracks (die Anzahl der Spuren) in einer
		Zelle festgestellt werden, als auch der Fluss durch die Zelle,
		die Dosisleistung oder Teilchenpopulation.
2	Quellentally	Für Abschirmprobleme gibt es den sogenannten Quellentally, mit welchen festgestellt werden kann in welcher Zelle ein gemessenes Teilchen ursprünglich emitiert wurde.
3	Energie Depositions Tally	Mißt die in einer Zelle abgegebene Energie. Hierbei kann über Optionen die Art der zu messenden Energie eingestellt werden. Es wird allerdings immer die Energie aller Teilchenarten berücksichtigt.
4	DXTRAN Tally ^a	Dieser Tally soll den Benutzer darin unterstützen ein gutes Setup für einen zuvor definierten DXTRAN Tally zu finden. Es werden die Spuren der Teilchen, welche zu einem DXTRAN Tally gehören aufgezeichnet.

Tabelle 5.3: beschreibt die in MCNPX vorhandenen Meshtallies.

^aDiese Tallies sind eigentlich gar keine "Tallies", sondern dienen vielmehr der Optimierung des Simulationssetups und der Reduktion der Varianz der Ergebnisse. Wir wollen in dieser Arbeit nicht näher auf diesen Spezialtally eingehen und verweisen auf die entsprechende Literatur (Briesmeister 1997; Waters 1999; ?).

- Cn
- En

Diese stehen für die Winkelabhängigkeit respektive Energieabhängigkeit. Natürlich gibt es noch zahlreiche weitere Tallykarten. Welche dies sind, und wie man sie verwendet, würde den Rahmen dieser kurzen Einführung sprengen (wir verweisen hierfür auf das Handbuch Briesmeister 1997).

Meshtallies oder auch Gittertallies

Eine Besonderheit in den neueren Versionen von MCNP(X) stellen die sogenannten Meshtallies dar. Mit diesem kann ein dreidimensionales Meßgitter in die Aufgabenstellung eingebettet werden. Da in dieser Arbeit unter anderem die dreidimensionale Dosis- bzw. Dosisleistungsverteilung festgestellt werden soll, erweist sich dieses Feature als sehr sinnvoll. Wie bei den Tallies gibt es auch bei den Meshtallies verschiedene Varianten.

Für uns am wesentlichsten war der Meshtally des Typs Nummer 1, welcher genauer beschrieben werden soll:

Meshtally des Typs 1:

Um einen Meshtally verwenden zu können, muß man als erstes die Art des Gitters (Mesh) festlegen. Im Simulationstool MCNP(X) stehen hierzu drei Arten von Gittern zur Verfügung:

- normales kartesisches Koordinatensystem
- Kugelkoordinaten
- Zylinderkoordinaten

Je nach Problemtyp und Symmetrieeigenschaften der Aufgabenstellung wählt man den entsprechenden Typ aus und kann das Gitter dann mittels dreier Gitterkarten im Programm definieren:

 $CORAn \ corra(n,1), \ corra(n,2), \ ..., \\ CORBn \ corrb(n,1), \ corrb(n,2), \ ..., \\ CORCn \ corrb(n,1), \ corrb(n,2), \ ...,$

Hierbei stehen CORAn, CORBn und CORCn für die drei Koordinatenachsen des Gitters (*n* gibt die verwendete Tally Nummer an). corra(n,1),... sind Zahlenwerte, welche die Gitterpunkte definieren sollen. Im einfachsten Falle des kartesischen Koordinatensystems sieht eine echte Eingabe wiefolgt aus:

cora101 -230 45I 230 corb101 -230 45I 230 corc101 -230 45I 230

Diese Zeilen definieren einen Tally des Typs 1 mit der laufenden Nummer 10 (xn.... x=laufende Nummer n=Tally Typ). Die Gitterpunkte bzw. Meßzellen ergeben sich über die Intervallinterpolationsanweisung (-230 45I 230). Diese erzeugt 45 Einträge zwischen -230 und 230. Es gibt daher 46 Intervalle mit einer jeweiligen Länge von 10 cm. Wir haben nun zwar ein Gitter definiert allerdings noch nicht den Typ des Tallies bzw. die Art des Gitters festgelegt. Dies muß vor der Gitterdefinition mit folgendem Eintrag geschehen:

rmesh11:p dose 10 $1\ 2$

rmesh11:p definiert ein kartesisches Koordinatensystem (Gitter) für den Tally Nummer 11, bei welchem es sich um einen Photonentally handeln soll.

dose 1012 ist ein Keyword Eintrag, welcher unseren Tally (eigentlich ein Tracklengthtally) in einen Dosisleistungstally verwandelt. Siehe Tabelle 5.4 für weitere Informationen über andere Tallies, die noch über Keywörter aus dem Tally des Typs 1 realisiert werden können. 1012 sind die genaueren Spezifikationen zur Dosisleistungstally Realisierung (siehe Tabelle 5.5).

5.3 Varianzreduktionsverfahren

Sie dienen der Reduktion der Varianz (Meßunsicherheit, Simulationsunsicherheit) von Ergebnissen. Dies wurde bereits im Unterkapitel *Numerische Lösungsmöglichkeiten für die Transportgleichung* kurz angedeutet und soll im Folgenden etwas detailierter ausgeführt werden. Wir können die Mehrzahl der Verfahren grob in folgende Kategorien einteilen:

- Cut-off Verfahren
- Gewichtsverfahren mit russischem Roulette
- andere Verfahren

5.3.1 Cut off Verfahren

Die wohl am einfachsten zu verwendenden Verfahren sind die sogenannten Cut-off Verfahren. Bei diesen wird die Simulation eines Teilchens bei erreichen eines kritischen Wertes einfach abgebrochen und mit einem neuen Teilchen fortgesetzt. Man kann sich sehr einfach folgende Abbruchkriterien überlegen: Tabelle 5.4: zeigt die verschiedenen Optionen, welche einen Meshtally vom Typus 1 n\u00e4her definieren. Diese Informationen wurden dem Benutzerhandbuch entnommen, in welchem die Informationen nat\u00fcrlich auch noch genauer dargestellt sind (Los Alamos National Laboratory (2006))

Keyword	Beschreibung
Tracks	Diese Option versetzt den Tally in den Bahnaufzeichnungsmodus. Es wird
	die Anzahl der Flugbahnen durch das entsprechende Gittervolumen gemessen.
Flux	Dies ist die Standard (default) Einstellung des Tallys.
	Es wird der Teilchenfluß in jeder Zelle protokolliert (siehe hierzu
	auch den Abschnitt zur theoretische Grundlage von Tally F4).
Dose	Der Tally ermittelt nun die strahlenbiologisch wichtige Dosisleistung an den angegebenen Punkten. Dies geschieht indem er den Photonenfluß spektral mit einer Gewichtungsfunktion multipliziert und aufsummiert. Die Art der Gewichtung (Dosisfunktion) kann über einen Parameter eingestellt werden. Es kann aber auch eine eigene Funktion definiert werden. Weiters kann die Ausgabe in rem/Stunde oder in Sievert/Stunde ^{<i>a</i>} erfolgen.
Popul	Wird dieses Keyword gesetzt so wird die Teilchenpopulation im Meßvolumen berechnet. (<i>Teilchengewicht</i> \times <i>Teilchenspur</i>)
Pedep	Dieses Keyword veranlaßt den Tally die deponierte Energie zu messen. im Gegensatz zu Meshtally 3 wird hier aber die Energie Teilchenart abhängig mitgemessen. Da sich die Gitterzellen über verschiedene Materialzellen erstrecken können, werden die Ergebnisse auf das Volumen und nicht die Masse bezogen!
Mfact	Mit Mfact kann eine energieabhängige Gewichtungsfunktion definiert werden. Je nach Einträge werden die deponierten Energiewerte oder die momentanen Teilchen- Energiewerte gewichtet.
Trans	Mit Trans kann auf eine Transformationskarte verwiesen werden, um den ganzen Meshtally zu drehen und oder zu verschieben.

^{*a*}Wie sich später noch zeigen wird (siehe Abschnitt 6.5 *Dosisleistungstest*) ist dies nicht die volle Wahrheit. Das Ergebnis ist immer noch auf die Anzahl der Quellteilchen bezogen. Somit ist die eigentliche Einheit des Ergebnisses (Sv/h)(Quellteilchen/sec) bzw. (rem/h)/(Quellteilchen/sec). Das tatsächliche Ergebnis erhält man durch Multiplikation des simulierten Wertes mit der Quellfluenz. In unserem Fall also mit dem "Röhrenstrom".

Tabelle 5.5: gibt Auskunft über die Parameter des Dosisleistungsmeshtallys. Die Abfolge der Parameter
der Dose Karte ist wie folgt: DOSE ic it iu fac.

Parameter	Beschreibung
ic	Auswahl des Dosiskonvertierungskoeffizienten. Prinzipiell gibt es die Möglichkeit
	die Equivalentdosisleistung (H) nach einer älteren Norm über die sogenannten (Q)
	Faktoren zu berechnen, oder über die neuere Norm mit den
	Strahlungswichtungsfaktoren (w_r) .
it	Interpolationsmethode (logarithmisch, linear,)
111	Dosisleistungseinheiten (rem/h)(Teilchen/sec) bzw. (Sv/h)(Teilchen/sec)
C C	
Iac	Normalisierungskonstante für die Dosisgewichtungsfunktion

- Räumlicher Cut-off
- Zeitlicher Cut-off
- Energetischer Cut-off
- Gewichts Cut-off

Man sollte bei den entsprechenden Cut-off Bedingungen immer im Hinterkopf behalten, dass auch Ereignisse in einem prinzipiell nicht interessanten Gebiet (egal ob räumlich, zeitlich, oder energetisch) doch signifikant zum Ergebniss beitragen können. Am Sichersten und Einfachsten anzuwenden ist wahrscheinlich noch der zeitliche Cut-off, da die meisten Prozesse entweder eine steigende/fallende oder gleichbleibende Tendenz haben. Des Weiteren ist ein bereits simulierter Zeitschritt stets von der Zukunft unabhängig ist. Wird die Simulation zu bald abgebrochen, so können unter Umständen wesentliche Ergebnisse übersehen werden. Diese können jedoch zum Glück nicht die bereits erzielten Ergebnisse verfälschen (Kausalität; spätere Ereignisse können nicht auf frühere zurückwirken).

Beim energetischen Cut-off muß dies zum Beispiel nicht sein. Teilchen mit kleiner Energie können wieder zu Teilchen mit großer Energie führen, welche dann signifikant zum Ergebnis beitragen (siehe Beispiel Kernspaltung). Ähnlich verhält es sich auch bei einem räumlichen Cut-off. Natürlich wird die Wahrscheinlichkeit, dass ein Teilchen, welches sich in die falsche Richtung bewegt und schon sehr weit vom Detektor entfernt ist, noch signifikant zum Ergebnis beiträgt sehr klein. Allerdings kann es auf Grund von Streuprozessen oder anderen Wechselwirkungen zu Ablenkungen kommen, bzw. auch Sekundärteilchen entstehen, welche dann den Detektor erreichen würden, und nun auf Grund eines zu baldigen Cuf-offs fehlen. Man sieht, dass das Festlegen von geeigneten Cuf-off Bedingungen sehr schwierig sein kann. Wählt man sie zu groß, steigt mitunter der Rechenaufwand ennorm an. Wählt man sie zu klein, können die Ergebnisse deutlich verfälscht werden. Daher wurden sogenannte Gewichtsverfahren mit russischem Roulette entwickelt.

5.3.2 Gewichtsverfahren mit russischem Roulette

Wie wir gesehen haben, findet man mit den einfachen Cut-Off Verfahren oft nicht sein Auslangen. Eine Verbesserung kann erreicht werden, indem man für jedes simuliertes Teilchen ein sogenanntes Gewicht einführt. Die Überlegung ist folgende: Man kann sich ein Simulationsergebnis an einem Punkt zusammengesetzt als ein gemitteltes Ergebniss über einen allgemeinen Phasenraum (bestehend aus Ort, Energie, Teilchenart) vorstellen. Jeder Ort trägt somit unterschiedlich zum Ergebnis bei. Damit nun auch Orte, die fast nie für das Egebnis berücksichtigt werden (aber eventuell, wenn sie auftreten einen signifikanten Anteil am Ergebnis haben), trotzdem ihren entsprechenden Beitrag liefern können, versucht man gezielt an diesen Raumpunkten mehr Ereignisse auszlösen. Um das Ergebnis nicht zu verzerren, müssen diese dann aber natürlich geringer gewichtet werden. Dies mag sich im ersten Moment sehr kompliziert anhören, kann aber relativ anschaulich erklärt werden.

Zellimportance oder geometrisches russisches Roulette:

Stellen wir uns ein Abschirmungsproblem vor. Das heißt, wir haben eine Quelle, welche durch Absorber umgeben ist, und wollen wissen, wiviel Strahlung durch diese Abschirmung durchtritt und dann z.B.: hinter der Abschirmung Sekundärreaktionen auslöst. Wir sehen auf einen Blick, dass unsere Simulationssoftware fast die ganze Zeit über Teilchen vor der Abschirmung produzieren wird (an welcher wir aber eigentlich nicht interessiert sind) und es nur sehr sehr selten zu Teilchen hinter der Abschirmung kommen wird, welche für uns von Interesse sind. Wie kann dies verbessert werden?

Als erstes wird jedem Teilchen ein Startgewicht von 1 zugeteilt. Tritt es in den Absorber ein so werden dort Reaktionen stattfinden und weitere Teilchen ausgelöst. Betrachten wir die weiteren Teilchen so können sie vor der Wand oder hinter der Wand austreten oder absorbiert werden. Wir können die Wand eigentlich in mehrere Schichten (Zellen) unterteilen. Für jede können wir unterschiedliche Wichtigkeiten (Importances) festlegen. Natürlich sind wir an den Teilchen hinter der Wand interessiert. Somit steigt die Importance aus unserer Sicht in Richtung Detektor an. Wie kann man das nun nützen?

Wir könnten ganz einfach hergehen und ein Teilchensplitting einführen. Betritt ein Teilchen eine Zelle mit höherer Importance, so können wir das Teilchen mit einer bestimmten Wahrscheinlichkeit in zwei gleiche Teilchen aufsplitten. Um die Ergebnisse nicht zu verfälschen müssen wir natürlich das Gewicht halbieren. Gelangt ein Teilchen jedoch in eine Zelle mit geringerer Importance, so können wir das Teilchen vernichten (Es wird innerhalb der Simulation nicht mehr weiterverfolgt.). Hierzu dient das russische Roulette. Ew wird eine Zufallszahl generiert und je nach Ausgang überlebt das Teilchen oder wird vernichtet. Natürlich muß auch hier das Gewicht berücksichtigt werden. Dies geschieht indem das Gewicht der überlebenden Teilchen entsprechend erhöht wird. Je nach Importance Werten in den Zellen wird mehr oder weniger gesplittet. Zusammenfassend kann gesagt werden, dass wir die Teilchen somit in eine von uns gewünschte Richtung treiben, ohne jedoch das Problem zu beeinflussen⁶.

Natürlich kann man ähnliches auch für die Energie, Teilchenart oder Wechselwirkungsart durchführen. Je nachdem was man betrachtet und welche Ergebnisse man aus der Simulation gewinnen will. Natürlich sollten alle Varianzreduktionsverfahren nur äußerst vorsichtig eingesetzt werden, da sie, wenn sie nicht richtig verwendet werden, das Ergebnis verändern können.

Auf andere Verfahren möchten wir nicht mehr genauer eingehen, da die Cut-off und die Gewichtsverfahren ohnehin die wesentlichsten sind. Für genauere Informationen siehe die entsprechende Literatur oder auch die in dieser Diplomarbeit angeführten Bedienungsanleitungen zu MCNP(X).

5.4 statistische Signifikanztests

Das Simulationstool MCNPX bzw. auch das sehr eng verwandte MCNP bieten dem Benutzer 10 statistische Tests an. Auf Grund dieser kann die Qualität der Ergebnisse beurteilt werden. Die Tests werden während den Berechnungen automatisch mit durchgeführt und können im Output File eingesehen werden. Die 10 Tests umfassen:

⁶Dies gilt natürlich nur, wenn die Verfahren richtig eingesetzt werden und man Dinge nicht zu überbetont (übergewichtet, bzw. die Simulation zu sehr verzerrt), bzw. auch entsprechend "lange" simuliert.
- Verhalten des Mittelwerts
- relativer Fehler (Varianz)
 - Wert
 - Abnahme
 - Abnahmerate
- Varianz der Varianz
 - Wert
 - Abnahme
 - Abnahmerate
- Figure of Merit (FOM)
 - Wert
 - Verhalten
- Steigung der Wahrscheinlichkeitsverteilungsfunktion

Verhalten des Mittelwerts:

Der Mittelwert sollte nach einer relativ kurzen Einschwingphase einen konkreten Wert annehmen (welcher ein Schätzwert für den wahren Wert darstellt) und anschließend um diesen zufällie Schwankungen durchführen. Die Schwankungsbreite wird durch die Varianz vorgegeben und sollte mit der Zeit abnehmen. Ein Zeichen für eine schlecht konditionierte Aufgabenstellung ist es, wenn sich der Mittelwert entlang eines Trends verschiebt, bzw. wenn man einen solchen Trend findet.

relativer Fehler:

Der relative Fehler ist proportional der Varianz der Simulationswerte und sollte zumindest kleiner als 0.1 sein. Ansonsten sollte man die Ergebnisse als zu ungenau verwerfen. Gute Ergebnisse liegen bei einer Genauigkeit kleiner 0.01 (1% relativer Fehler) vor. Um die Genauigkeit zu steigern gibt es prinzipiell zwei Möglichkeiten.

- Längere Simulationszeit
- Reduktion der Varianz mit speziellen Mitteln

Variante 1 kann immer angewandt werden, führt aber zum Teil zu exorbitanten Rechenzeiten und ist deshalb nicht unbedingt zu empfehlen. Außerdem muß man beachten, dass die Rechenzeit quadratisch mit der Genauigkeit steigt oder anders ausgedrückt, will man den relativen Fehler von 0.1 auf 0.01 reduzieren, so benötigt man einen Faktor von 100 mehr Rechenzeit zum Simulieren. Nimmt man an, dass man bereits einen Tag für die Ergebnisse mit Genauigkeit 0.1 benötigt hat, so sieht man, dass man mit dieser Variante schnell zu unmöglich langen Simulationszeiten kommt. Variante 2 funktioniert über spezielle Tricks deren Ziel es ist, die, für den Benutzer, interessanten Ereignisse öfters als die uninteressanten Ereignisse auftreten zu lassen. Man sieht, dass diese Verfahren zwar sehr gut den Rechenaufwand reduzieren können, aber auf der anderen Seite auch gefährlich sind, da sie eventuell die Natur des Problems verzerren. Siehe dazu den eigenen Abschnitt Varianzreduktionsverfahren.

Der Fehler sollte mit Fortschreiten der Simulation kleiner werden, und die Abnahme des relativen Fehlers sollte mit der Quadratwurzel der simulierten Ereignisse stattfinden. Hieraus folgt auch die quadratische Steigerung der Rechenzeit.

Figure of Merit:

Die Kennzahl Figure of Merit (FOM) beschreibt die Effektivität der Simulation. Je Größer dieser Wert ist, desto schneller konvergieren die Ergebnisse. Dieser statistische Wert sollte relativ konstant sein. Dies wird ebenfalls während der Laufzeit kontrolliert und dem Benutzer am Ende der Laufzeit mitgeteilt. Die FOM Kennzahl läßt sich folgendermaßen berechnen:

$$FOM = \frac{1}{R^2 T} \tag{5.5}$$

In dieser Formel bedeutet T die Laufzeit der Simulation und R ist der relative Fehler der Ergebnisse da $R \propto \sqrt{(n)}$ (n... Anzahl der simulierten Teilchen) und n aber wiederum selbst proportional zu T ist, sieht man, dass die Kennzahl FOM konstant sein sollte. Des Weiteren kann man unschwer erkennen, dass diese Kennzahl die Effektivität der Simulation beurteilt, da es natürlich erstrebenswert erscheint bei möglichst kurzen Simulationsdauern möglichst kleine relative Fehler zu erhalten. Dies kumuliert in einem kleinen Nenner in Gleichung 5.5 oder anders gesagt in einem großen FOM Wert.

Steigung der Wahrscheilichkeitsverteilungsfunktion:

Bei Monte Carlo Simulationen geht man prinzipiell davon aus, dass man Meßwerte in Form von Mittelwerten über einzelne gewürfelte Ereignisse berechnen kann. Wenn nun genügend Ereignisse generiert wurden, so sollte, wegen dem Theorem der Großen-Zahlen bzw. dem sogenannten zentralen Grenzwertsatz, die Verteilung der Ereignisse einer Normalverteilung gehorchen. Bei gegen unendlich gehender Anzahl der Ereignisse, müßte schließlich auch die Standardabweichung gegen Null tendieren. Die wesentliche Frage, welche sich für den Benutzer stellt, ist:

Wann wurden genügend Ereignisse generiert um den zentralen Grenzwertsatz anwenden zu können, bzw. wurden auch alle Regionen der Wahrscheinlichkeitsverteilungsfunktion ausreichend gesampelt/berücksichtigt?

Um diese Frage beantworten zu können, werfen wir einen Blick auf die Varianz, welche dem zweiten Moment der Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion entspricht:

$$varianz = \int x^2 f(x) dx \tag{5.6}$$

Für $\lim_{n\to\infty} varianz = 0$, soll diese Aussage wahr sein, so muß f(x) schnell genug (schneller als x^3) abfallen. MCNPX hat hierfür einen Test integriert. Es speichert eine endliche Anzahl von Ereignissen, welche am weitesten vom Mittelwert entfernt sind, während der Ausführung mit und legt anschließend einen sogenannten Pareto Fit durch diese Meßwerte. Wenn die Steigung dieses Fites zu klein ist, so wird dieser Signifikanztest nicht bestanden.

"When you are solving a problem, don't worry. Now, after you have solved the problem, then that's the time to worry."

by Richard Feynman

Kapitel 6

Resultate

Das Ziel dieser Arbeit ist die Ermittlung der Dosisleistungen innerhalb von Strahlenschutzräumen auf Grund gestreuter Röntgenspektren an den Wänden des Raumes sowie die Simulation des gestreuten Spektrums. Um dieses Ziel effizient erreichen zu können, wurde das Problem in mehrere kleinere Einzelaufgaben unterteilt. Dass dies sinnvoll ist, zeigte sich bereits zu Beginn, als wir versuchten eine komplette Röntgenröhre nachzubilden (siehe hierzu folgende Abbildung 6.1).

Die Simulation dieser Röhre war sehr zeitaufwendig, konnte allerdings trotzdem keine zufriedenstellenden Ergebnisse liefern. Nur sehr wenige simulierte Teilchen gelangten bis zum Meßpunkt hinter dem Berylliumfenster. Die meisten berechneten Teilchen bewegten sich innerhalb der simulierten Röntgenröhre. Da aber jedes dieser Teilchen Simulationszeit benötigt, war die Effizienz einer solchen Simulation sehr niedrig (Ausbeute von gemessenen erzeugten Photonen zu primären simulierten Elektronen) und es konnten auch keine sinnvollen Ergebnisse erzielt werden¹. Als nächstes wurde der Übergang in den Innenraum der Röntgenröhre vollzogen. Dies erhöhte zwar die Anzahl der nun detektierten Photonen, gleichzeitig wurden aber beträchtliche Anteile an Photonen, welche von der Bleiummantelung stammten, mitgezählt. Dies kummulierte in viel zu starken Bleilinien, welche in dieser Form sicher nicht in einem primären Röntgenspektrum vorhanden sind (siehe hierzu Abbildung 6.2). Auf Grund dieser Erfahrungen wollten wir die Simulation so einfach wie möglich halten und zerteilten unser Problem in mehrere Unterschritte.

6.1 Erzeugung des Referenzspektrums

Da die Simulation von Elektronen gegenüber Photonen sehr zeitraubend ist², wie sich sehr bald herausstellte, sollte die Simulation nicht in einem Arbeitsschritt, beginnend mit den primär ein-

¹Wie bereits zuvor erwähnt, war die Effizients der Simulation niedrig, wenn man den Austrittsbereich nach dem Beryllium Fenster betrachtete. Dieser Effekt beruht auf der folgenden Überlegung. Die betrachtete Durchstrahlungsfläche (Zylinderscheibe hinter dem Austrittsfenster) ist sehr klein im Vergleich zur gesamten Halbraumfläche, in welche Photonen emitiert werden. Dies könnte verbessert werden, indem man ein Durchschnittsspektrum innerhalb der Röntgenröhre ermittelt (Durchschnitt über den ganzen Halbraum)

²Dies kann mit der komplexeren Physik und vorallem auch mit der höheren Wechselwirkungswahrscheinlichkeit begründet werden. Während das durchschnittliche Photon in unseren Simulationen vielleicht eine Wechselwirkung im Material erfährt, bevor es dieses wieder verläßt, kommt es bei Elektronen zu unzähligen Sekundärprozessen, welche einen richtiggehenden Teilchenschauer (Photonen, Elektronen) auslösen können. Nachdem jedes dieser Sekundärteilchen berechnet werden muß, und des Weiteren Tertiärteilchen und sofort auslösen kann, ist die Simulation eines Elektrons ungemein rechenintensiver.

04/06/09 10:05:33 Roentgenquelle

probid = 04/06/09 10:04:50
basis: XZ
(1.000000, 0.0000000, 0.0000000)
origin:
(0.00, 0.00, 0.00, 0.00)
extent = (20.00, 20.00)





Abbildung 6.1: Die obere Abbildung zeigt einen Aufriss (x/z Ebene) der zu Beginn dieser Diplomarbeit angedachten Röntgenquelle. In Grün ist die eigentliche Wolframanode gezeigt. Der blaue Farbton verdeutlicht das Röntgenschutzgehäuse, welches aus Blei bestand. Schließlich ist in roter Farbe das Beryllium Austrittsfenster illustriert. Die zu simulierenden Elektronen sollten senkrecht oberhalb der Wolframanode generiert werden und in der Mitte derselbigen auftreffen. Der Großteil des entstehenden Photonensprektrums sollte dann durch das Austrittsfenster nach außen gelangen. Für weitere Informationen und die aufgetretenen Probleme, siehe Text. Die untere Abbildung zeigt den Grundriß (x/y Ebene) unserer Versuchsröhre.



Abbildung 6.2: Diese Abbildungen zeigen uns das gewonnene Spektrum mit Hilfe unserer detailierten Röntgenquelle. Hierzu wurde das Spektrum im inneren "void" Bereich (Innenraum) der Röhre gemessen. Deutlich erkennbar sind zahlreiche charakteristische Röntgenlinien. Ungefähr die Hälfte davon gehört zu dem Element Wolfram, die andere Hälfte entsteht durch die Bleiummantelung. Da die Bleilinien aber durch Sekundärprozesse in der Röhrenummantelung entstehen, kann angenommen werden, dass sie in einem "echten" Röntgenspektrum nicht oder in viel schwächerer Form vorkommen würden (für genauere Diskussion siehe Text). Die obere Abbildung zeigt das Spektrum über den ganzen energetischen Bereich. Der untere Teil zeigt uns ein Detail des Spektrums mit zahlreichen Linien. Diese Abbildungen wurden direkt mit dem Plot- Programm von MCNP(X) erstellt.



Abbildung 6.3: In dieser Abbildung ist die Anordnung zur Erzeugung des Referenzspektrums gezeigt. In blauer Farbe ist die Wolframanode gehalten. Die rote Farbe zeigt uns das Beryllium Austrittsfenster. Dieses hat sich durch den Schnitt eines Kegels mit 45° Öffnung mit einer Kugel ergeben. Anschließend an das 0.5 cm dicke Beryllium Fenster befindet sich das eigentliche Meßvolumen für das Referenzspektrum. Der hier gezeigte Schnitt verläuft entlang der x/z Ebene durch den Ursprung. Die Elektronenquelle befindet sich senkrecht oberhalb der Mitte der Wolframanode.

fallenden Elektronen, begonnen werden. Daher wurde dazu übergegangen als ersten Schritt das ungefilterte entstehende Photonenspektrum der Röntgenanode zu simulieren und sodann für die folgenden Schritte dieses Spektrum als Referenzspektrum zu verwenden. Dies verspricht einen Simulationszeitgewinn um einen Faktor 10 bis 100, welcher sich noch weiters steigert, wenn man annimmt, dass man manche Simulationen öfters mit unterschiedlichen Parametern (wie Wandstärken und Materialien) durchführen möchte. Für die Simulation dieses Spektrums wurde ein sehr kurzes und einfaches Input File erstellt. Die Quelle emittierte Elektronen mit einer monoenergetischen Energie von 200 keV als Pencil Beam (Linienstrahler; also ohne Aufweitung des Strahlbündels) in Richtung einer Wolframanode. Der Einfallswinkel betrug dabei 45° . Das Spektrum wurde in einer Entfernung von 10.5 cm ebenfalls unter einem Winkel von 45° zur Anodenoberfläche in einer Ebene zur Quelle aufgenommen. Damit betrug der Winkel zwischen Quelle und Meßzelle 90° (siehe dazu auch nachfolgende Graphik 6.3).

Der Öffnungswinkel der Meßzelle wurde als 45° gewählt. Es wurde somit kein Punktspektrum gemessen, sondern das sich ergebende Durchschnittsspektrum über eine Fläche von 203 cm². Diese



Abbildung 6.4: zeigt unser simuliertes Referenzspektrum der Wolframanode unter Beschuss mit monoenergetischen 200 keV Elektronen unter einem Winkel zur Anodenoberfläche von 45°. Das Spektrum wurde in einer Entfernung von 10 cm mit einem Öffnungswinkel von 45° aufgenommen. Man erkennt sehr deutlich die charakteristischen Wolframlinien (beide L-Linien bei ca. 10 keV und die 4 K-Linien zwischen 60 bis 70 keV; siehe auch Tabelle 6.1), welche dem kontinuierlichen Bremsspektrum überlagert sind.

kann mit Hilfe der Oberflächen Berechnungsformel für die Kugelkalotte gewonnen werden:

$$A = \int_0^s U(s) \, ds \tag{6.1}$$

$$= \int_{0}^{r \phi} 2\pi \ x(s) \ ds \tag{6.2}$$

$$= 2\pi \int_0^{\phi} r \sin(\phi) r \, d\phi \tag{6.3}$$

$$= 2\pi r^2 (1 - \cos(\phi)) \tag{6.4}$$

Hierbei ist r der Kugelradius und ϕ der Öffnungswinkel des schneidenden Kegels. Diese integrale Ermittlung des Spektrums hat gewisse Auswirkungen. So wird zum Beispiel in unserem Fall der sogenannte Heel Effekt vernachlässigt, welcher eine "Aufhärtung" des Röntgenspektrums zu kleineren Austrittswinkeln von der Anode beschreibt³. Da der Effekt aber relativ klein ist und der Nutzen dieser Vorgehensweise (kürzere Simulationszeiten) deutlich, gegenüber den hierdurch implizierten Fehlern, überwiegt, wurde diese Vorgangsweise beibehalten. Für dieses erste simulierte Spektrum zeigte sich uns folgendes Bild 6.4. In diesem kann man sehr schön die entstehenden charakteristischen Röntgenlinien (siehe Tabelle 6.1) erkennen, welche dem kontinuierlichen Bremsspektrum überlagert sind. Dieses Spektrum wurde mit einer Anzahl von 2 000 000 primärer Elektronen

³Siehe dazu auch den entsprechenden Punkt bzw. Fußnote im Kapitel 2.

KAPITEL 6. RESULTATE

Tabelle 6.1: Diese Tabelle listet die für uns wichtigen (da im Referenzspektrum vorkommenden) charakteristischen Wolframlinien und ihre Energien auf. Des Weiteren sind wichtige Übergänge für Blei aufgelistet. Diese konnten bei unserer ersten Versuchsquelle gesehen werden (siehe Abbildungen 6.2) bzw. werden wir auf diese Linien noch bei den rückgestreuten Spektren (siehe z.B.: Abbildung 6.8) treffen. Die Daten zu dieser Tabelle wurden aus Annals of the ICRP (1983) entnommen.

Element	Linienbezeichnung	Energie [keV]
Wolfram $^{178}_{74}W$	L_{α}	8.14
	L_{eta}	9.4
	L_{γ}	11.12
	$K_{\alpha 1}$	57.54
	$K_{\alpha 2}$	56.28
	$K_{\beta 1}$	65.22
	$K_{\beta 2}$	67.04
	$K_{\beta 3}$	64.95
	$K_{\beta 5}$	65.66
Blei $^{195}_{82}$ Pt	L_{lpha}	10.26
	L_{eta}	12.23
	$K_{\alpha 1}$	72.87
	$K_{\alpha 2}$	70.83
	$K_{\beta 1}$	82.57
	$K_{\beta 2}$	84.97
	$K_{\beta 3}$	82.11

erstellt. Dazu wurde eine Rechenzeit von 210 Minuten benötigt. Die erreichte Genauigkeit (Standardabweichung) ist bis 170 keV stets kleiner als 10%. Danach steigt sie bis auf maximal 70% für die 199-200 keV Photonen an. Dies ist nicht verwunderlich, da die Auslösung von Photonen im Bereich 199-200 keV sehr unwahrscheinlich ist, da dies einen kompletten Energieübertrag vom primären Teilchen auf das Photon bedeutet. Die Gesamtgenaugkeit über alle Energiebereiche gibt das Programm mit 0.2% an.

6.2 Röntgenspektrum für die weitere Simulation

Der nächste Schritt bestand nun darin unser Refernzspektrum ausreichend genau zu sampeln und in eine Quellendefinition umzusetzen. Die Genauigkeit der nachfolgenden Schritte hängt natürlich von der erzielten Genauigkeit des Referenzspektrums ab und ist auch durch dieses beschränkt. Sas gemessene Referenzspektrum eins zu eins zu übernehmen, macht keinen Sinn, da der Input File zu diesem Zwecke sehr kompliziert gestaltet sein müßte und in Folge die Simulation verlangsamt (Bei Simulationen ist man immer bestrebt die Problemstellung möglichst einfach aber doch genau abzubilden, da jeder Genauigkeitsgewinn sehr teuer über die Rechenzeit erkauft werden muß⁴.). Für die Generierung der energetischen Verteilung der Photonen wurde ein kleines Programm (in der Programmiersprache IDL- Interaktive Data Language) geschrieben, welches es dem Benutzer erlaubt das zu sampelnde Spektrum komfortabel aus dem Referenzspektrum zu gewinnen. Zu diesem Zweck wird das zuvor ermittelte Spektrum eingelesen und am Bildschirm ausgegeben. Man kann nun mit einem Cursour Datenpunkte auswählen zwischen welchen der Verlauf durch eine Gerade angenähert wird. Nach Abschluß der Auswahl der Datenpunkte werden die entsprechenden Zeilen für den Inputcode von MCNP(X) generiert. Das, für alle weiteren Schritte verwendete,

⁴Als Grundsatz kann festgehalten werden: Nur so genau modellieren als es auch erforderlich ist!



Abbildung 6.5: zeigt das Spektrum, mit welchem die folgenden Simulationsschritte durchgeführt wurden (Die Modellierung des ermittelten Referenzspektrums für 200 keV Elektronenbeschleunigungsspannung;). Das kontinuierliche Bremsspektrum wurde durch mehrere Geradenstücke angenähert. Die charakteristischen Linien wurden Punktweise definiert. Für einen direkten Vergleich des Referenzspektrums mit unserem zukünftigen "Input" Spektrums siehe Abbildung 6.6.

Referenzspektrum hat durch diesen Prozess folgende Gestalt 6.5 angenommen.

Für einen besseren Vergleich des original (gemessenen) Spektrums mit dem für die weitere Simulation verwendeten Spektrums (Referenzspektrums) sind beide auch gemeinsam in Abbildung 6.6 dargestellt.



Abbildung 6.6: zeigt den direkten Vergleich zwischen dem simulierten primären Röntgenspektrum (strichliert) einer Wolframanode, mit dem für die weitere Simulation verwendeten Spektrums (durchgezogene Linie). Wie auch in den vorausgegangenen Abbildungen sind die charakteristischen K- und L- Linien von Wolfram zu sehen.

6.3 Rückstreuspektren

Eine der Kernaufgaben dieser Arbeit war es, die meßtechnisch relativ schwer zugänglichen Rückstreuspektren zu erfassen und zu beschreiben. Bestrahlt man Materie mit Röntgenphotonen mit einer bestimmten spektralen Zusammensetzung so kommt es zu zahlreichen Wechselwirkungen (siehe dazu das Kapitel im Grundlagenteil), welche das Spektrum sowohl in seiner energetischen Zusammensetzung als auch in seiner Stärke verändern.

In dieser Arbeit wurde hierzu ein Röntgenstrahler als Strichquelle (Englisch: pencil-beam) modelliert. Die spektrale Zusammensetzung folgt dem bereits beschriebenen Referenzspektrum (siehe Kapitel 6.1 und 6.2). Es wurde versucht, sowohl das rückgestreute Spektrum als, auch das durchtretende Spektrum an einer Versuchswand mit variabler Zusammensetzung (Blei, Beton, Ziegel bzw. Montmorillonit) bzw. Stärke aufzuzeichnen. Die zu messende Größe (Anzahl der gestreuten Photonen pro einfallenden Photon) besitzt eine vierfache Abhängigkeit. Zum Einen hängt sie von der Energie ab, zum Anderen von zwei Winkeln, welche die räumliche Position des Meßpunktes beschreiben, sowie dem Abstand zum Aufpunkt der Strichquelle. Da eine mehrfach differentielle Größe schwer zu simulieren ist⁵, wurde versucht die Problemstellung zu vereinfachen und in eine simulationstechnisch handhabbare Aufgabe zu verwandeln. Die Strichquelle wurde senkrecht zum Material ausgerichtet. Dies ergibt einen symmetrischen Simulationsaufbau, weshalb eine der beiden Winkelabhängigkeiten aus dem Problem verschwindet. Die andere Winkelabhängigkeit wurde dadurch eliminiert, dass wir sozusagen das integrale Spektrum über ein Kugelvolumen gemessen haben (Ausgenommen war das primäre Spektrum, welches durch eine gedachte Zylinderbohrung unsere Meßkugel durchdringen konnte und somit nicht in die Meßergebnisse eingeht.)

Die folgenden Versuchsreihen wurden durchgeführt:

- Blei mit folgenden Wandstärken: 1 cm, 0.3 cm, 0.1 cm
- Beton: 20 cm, 6 cm, 2 cm
- Ziegel: 40 cm, 13 cm , 4 cm

Wir wollen nun noch kurz drei beschreibende Streukoeffizienten einführen, bzw. deren Definition an dieser Stelle angeben:

Mittlerer Streukoeffizient:

$$r_s = \frac{1}{N} \sum_{i=0}^{N} \frac{N_s}{N_r},$$
(6.5)

hierbei steht N für die Anzahl der spektralen Intervalle, N_s ist die Anzahl der gestreuten Photonen und N_r die Anzahl der Referenzphotonen (eingestrahlte Phtonen).

Teilchen Streukoeffizient:

$$r_t = \frac{\sum_{i=0}^N N_s}{\sum_{i=0}^N N_r},$$
(6.6)

⁵Die Anzahl der benötigten primären Photonen steigt schneller als die entsprechende Potenz der Abhängigkeit an, um dieselbe Genauigkeit als bei einer einfach abhängigen Größe zu erzielen.



Abbildung 6.7: zeigt die Modellierung für die Rückstreuspektren-Simulation. In der Mitte der Graphik befindet sich eine Wand aus einem Versuchsmaterial (Blei, Beton, Ziegel bzw. Montmorillonit). An diese sind sowohl links als auch rechts Halbkugeln angeschlossen. In diesen wird das rückgestreute bzw. vorwärtsgestreute Spektrum gemessen. In den beiden Bohrungen wird das primäre Spektrum bzw. das Durchlassspektrum festgestellt. hierbei steht N für die Anzahl der spektralen Intervalle, N_s ist die Anzahl der gestreuten Photonen und N_r die Anzahl der Referenzphotonen (eingestrahlte Phtonen).

Energetischer Streukoeffizient:

$$r_e = \frac{\sum_{i=0}^{N} N_s \cdot E_i}{\sum_{i=0}^{N} N_r \cdot E_i},$$
(6.7)

hierbei steht N für die Anzahl der spektralen Intervalle, N_s ist die Anzahl der gestreuten Photonen, N_r die Anzahl der Referenzphotonen (eingestrahlte Phtonen) und E_i ist die Photonenenergie im Intervall i. Wie man sieht, handelt es sich beim energetischen Streukoeffizienten um einen gewichteten Teilchenstreukoeffizienten.

6.3.1 Blei

Die Simulation wurde zuerst mit einer Bleiversuchswand durchgeführt. Wir simulierten diese Wand mit unterschiedlichen Dicken beginnend von 0.1 cm bis 1 cm. Die Bleiwand kann sehr einfach simuliert werden, da wir sie chemisch als homogen (nur Bleiatome) aufgebaut ansehen können. Wir verwendeten die natürliche Isotopengewichtung. Diese ist in der Bibliothek mit dem Material 82000.02p bereits vorgegeben.

1 cm Blei:

Bei einer Wandstärke von 1 cm war die Abschirmwirkung so groß, dass wir kein durchtretendes Spektrum messen konnten (10 000 000 primäre Photonen). Natürlich konnte demnach auch kein vorwärtsgesreutes Spektrum⁶ erfaßt werden. Das rückgestreute Spektrum zeigt deutliche Bleilinien, welche im primären Spektrum nicht vorhanden waren (siehe hierzu Abbildungen 6.8, 6.9 bzw. auch Tabelle 6.1). Der mittlere Rückstreukoeffizient (r_s) beträgt rund 0.24 Photon pro einfallendem Photon (für die spektrale Zusammensetzung siehe die vorgenannten Abbildungen). Der totale Teilchenstreukoeffizient (r_t) wurde zu 2.1% ermittelt. Für den energetischen Streukoeffizienten fanden wir einen Wert von ebenfalls (r_e) 2.1%⁷. Wir sehen aus diesem Egebnissen, dass die Angabe eines mittleren Streukoeffizienten dazu verleitet die Ergebnisse falsch zu interpretieren. Dies liegt daran, dass der niederenergetische Bereich überbewertet wird.

0.3 cm Blei:

Bei einer reduzierten Wandstärke auf 0.3 cm war die Abschirmwirkung nicht mehr ausreichend, um keine Primärstrahlung durchzulassen. Das Durchlassspektrum kann mit dem rückgestreuten, sowie dem Referenzspektrum in Abbildung 6.10 gesehen werden. Das rückgestreute Spektrum weist wieder deutliche Bleilinien auf, welche im primären Spektrum nicht vorhanden waren. Das durchgelassene Spektrum zeigt eine deutliche Abschwächung sowie eine spektrale Aufhärtung. Des Weiteren

⁶In dieser Arbeit unterscheiden wir folgende 4 Typen von Spektren: 1.) Unser Referenzspektrum, welches wir immer als energetische Zusammensetzung der Quelle heranziehen bzw. eben auch als Quellspektrum benutzen. 2.) Rückgestreutes Spektrum: Dieses ist das über die im Raum (Richtung Quelle) liegende Halbkugel aufintegrierte (gemittelte) Spektrum der in den Raum rückgestreuten Photonen. Das Quellspektrum wird hierbei durch eine Zylinderbohrung exkludiert. 3.) Durchtretendes Spektrum: Wird über die Fortsetzung des Zylinders auf der Rückseite der Wand ermittelt und sollte dem geschwächten primären Photonenstrahl entsprechen. 4.) Vorwärts oder durchgestreutes Spektrum: entspricht dem aufintegrierten (gemittelten) Spektrum auf der Rückseite unseres Wandmaterials (ohne durchtretendem Spektrum).

⁷Der energetische Streukoeffizient wurde mit einem etwas kleineren Wert als der Teilchenstreukoeffizient gemessen. Der Unterschied liegt aber innerhalb der Fehlergrenzen, weshalb das Ergebnis nicht so genau angegeben wurde (gerundet auf die signifikanten Stellen). Begründen läßt sich dies dadurch, das zwar mehr Photonen gestreut werden, diese aber im niederenergetischen Bereich liegen.



Abbildung 6.8: zeigt das auf eine 1 cm dicke Bleiwand eingestrahlte Spektrum (strichliert), sowie das in den Raum zurückgestreute Spektrum (durchgezogene Linie). Bei dem eingestrahlten Spektrum handelt es sich um unser 200 keV (Beschleunigungsspannung) Referenzspektrums (siehe Kapitel 6.1 und 6.2, sowie die Abbildungen in diesen Kapiteln;). Deutlich sind die nun vorhanden Bleilinien zu sehen (siehe auch Tabelle 6.1). Diese sind im Verhältnis zur einfallenden Strahlung auch fast nicht geschwächt. Dies sieht man noch besser in Abbildung 6.9.



Abbildung 6.9: zeigt das spektral aufgelöste Verhältnis zwischen rückgestreuten Spektrum und eingestrahltem Spektrum. Deutlich sind auch hier die nun vorhanden Bleilinien zu sehen. Weiters kann gesehen werden, dass das Wandmaterial den spektral stark schwächeren niederenergetischen Bereich (herausgefiltert durch das Berylliumfenster), durch Streuung wieder verstärkt (ca. Faktor 10).



Abbildung 6.10: zeigt das auf eine 0.3 cm dicke Bleiwand eingestrahlte Spektrum (strichliert; siehe Kaptiel 6.1 & 6.2, sowie die Abbildungen in diesen Kapiteln), sowie das in den Raum zurückgestreute Spektrum (durchgezogene Linie). Als drittes Spektrum ist nun auch das durchgelassene Spektrum aufgetragen (strich/punktierte Linie). Deutlich sind wieder die nach der Streuung bzw. Durchgang vorhanden Bleilinien zu sehen. Für das Durchgangsspektrum wäre es notwendig, dieses mit mehr Quellphotonen zu simulieren, da ansonsten nur rein qualitative Aussagen darüber möglich sind, da es bereits zu stark abgeschwächt ist (bis Faktor 10⁸). Im durchtretenden Spektrum sieht man auch die charakteristische K-Bandkante (bei ca. 90 keV).

kann eine Bandkante im Spektrum erkannt werden. Der mittlere Rückstreu Koeffizient beträgt nun rund 0.24 Photonen pro einfallendem Photon (für die spektrale Zusammensetzung siehe die vorgenannte Abbildung 6.10). Die aussagekräftigeren anderen beiden Streukoeffizienten betragen nun 2.1% für den Teilchen-Koeffizienten bzw. ebenfalls 2.1% für den energetischen. Wir sehen, dass sich die Streukoeffizienten nur minimal verändert haben. Wir konnten auch für das Durchlassspektrum Streukoeffizienten ermitteln. Diese betragen 3.3e-3 für r_s , 2.2e-4 für r_t bzw. 6.6e-4 für r_e . Beim Durchlassspektrum ist die spektrale Aufhärtung der Strahlung deutlich an den unterschiedlichen Werten der Koeffizienten sichtbar.

0.1 cm Blei:

Bei einer weiteren Reduzierung der Wandstärke auf 0.1 cm, konnten wir eine weitere Verringerung der Abschirmwirkung feststellen. Die Rückstreuung blieb allerdings innerhalb der erzielten Genauigkeit unverändert. Dies war auch bereits im Falle der 0.3 cm dicken Bleiwand zu beobachten. Die interessierenden Spektren (Rückstreuung, Durchdringung, Vorwärtsstreuung) sind gemeinsam mit dem Referenzspektrum in Abbildung 6.10 ersichtlich. Das rückgestreute Spektrum weist, wie in den beiden anderen Fällen, deutliche Bleilinien auf, welche im primären Spektrum nicht vorhanden waren (siehe hierzu 6.10 bzw.6.8). Das durchgelassene Spektrum zeigt eine nicht mehr ganz so deutliche Abschwächung, sowie eine spektrale Aufhärtung. Des Weiteren kann die Bandkante im Spektrum wieder erkannt werden. Für die erzielten Streukoeffizienten in Rückstreuung ergibt



Abbildung 6.11: zeigt das auf eine 0.1 cm dicke Bleiwand eingestrahlte Spektrum (strichliert), sowie das in den Raum zurückgestreute Spektrum (durchgezogene Linie). Als drittes Spektrum ist nun auch das durchgelassene Spektrum aufgetragen (strich/punktierte Linie). Deutlich sind wieder die nach der Streuung bzw. Durchgang vorhanden Bleilinien zu sehen. Als viertes Spektrum wurde auch das in Vorwärtsrichtung gestreute Spektrum (doppeltpunktiert/liniert) aufgetragen.

sich, ein zu den vorhergehenden Simultionen, übereinstimmendes Bild. Die mittlere Rückstreung r_s beträgt: 0.24, der Teilchenstreukoeffizient r_t weist einen Wert von 0.021 auf. Der energetische Streukoeffizient r_e wurde ebenfalls zu 0.021 ermittelt. Die Werte für die Koeffizienten für die Durchlassstrahlung betragen: $r_s = 0.07$, $r_t = 0.013$ und $r_e = 0.029$. Die Wandstärke von 0.1 cm ist nun bereits so gering, dass wir auch eine Durchlassstreuung (Vorwärtsstreuung) ermitteln konnten. Für diese finden wir die folgenden Werte: $r_s = 0.013$, $r_t = 3.1e-3$ und $r_e = 5e-3$.

Zusammenfassung für Blei:

Die Versuchsreihe an Blei zeigte, dass die Rückstreuspektren unabhängig (zumindest bis zu einer Wandstärke von 0.1 cm) von der Dicke der Bleiwand sind. Energetisch umfassen sie den niedrigeren Bereich des Spektrums (Bei einer maximalen Quellenstärke von 200 keV, den Bereich unterhalb von 100 keV). Deutlich zu sehen sind die durch das Blei hervorgerufenen charakteristischen Röntgenlinien, welche im primären Spektrum nicht vorhanden sind. Generell ist das Spektrum stärker als um einen Faktor 10^2 gegenüber dem primären Spektrum abgeschwächt. Für die charakteristischen Bereich < 10 keV kann es sogar zu einer leichten Verstärkung des rückgestreuten Spektrums kommen. Interessant ist auch, dass der Wert für den Teilchen- und Energie- Rückstreukoeffizient nahezu übereinstimmt (jeweils 2.1%, unabhängig von der Wandstärke).

Die Durchlassspektren zeigen ein zu erwartendes Verhalten (siehe hierzu Abbildung 6.13). Je nach Stärke der Bleiwand kommt es zu einer mehr oder weniger starken Abschwächung und Aufhärtung des erhaltenen Spektrums. Dies ist auch aus den Streukoeffizienten ersichtlich. So stei-



Abbildung 6.12: zeigt die Rückstreuspektren der drei Bleiwände (1 cm, 0.3 cm, 0.1 cm) nach einer Bestrahlung mit dem 200 kev Röntgenreferenzspektrum (siehe Kapitel 6.1 & 6.2). In dieser Graphik wurde einer nicht logarithmischen Darstellung der y-Achse der Vorzug gegeben, um eventuelle Unterschiede deutlicher zu machen (für 'normale' logarithmische Darstellung siehe z.B.: 6.8, 6.10, 6.11). Die Spektren der drei Versuche gleichen sich aber derart, dass sie übereinander zu liegen kommen. Sehr deutlich treten in dieser Abbildung die charakteristischen Röntgenbleilinien zu Tage. Man kann sagen, dass sie die spektrale Zusammensetzung dominierenn.



Abbildung 6.13: zeigt die Durchlassspektren der zwei dünneren Bleiwände (0.3 cm, 0.1 cm). In voller Linie ist das Referenzspektrum gezeigt (Kapitel 6.1 & 6.2). Die strichlierte Linie zeigt das erhaltene Spektrum bei einer Bleiwandstärke von 0.3 cm und die gepunktete Linie zeigt das erhaltene Spektrum bei einer Wandstärke von 0.1 cm. In beiden Fällen ist die K-Kante des Versuchsmaterials (Blei) bei ungefähr 90 keV deutlich zu erkennen.



Abbildung 6.14: zeigt die Streusprekten zweier dünner Bleiwände in Durchstrahlungsrichtung. In voller Linie ist das Referenzspektrum gezeigt (Kaptiel 6.1 & 6.2). Die strichlierte Linie zeigt das erhaltene Spektrum bei einer Bleidicke von 0.3 cm und die gepunktete Linie zeigt das erhaltene Spektrum bei einer Wandstärke von 0.1 cm.

gen diese zwar mit dünnerer Wandstärke an, gleichzeitig verringert sich aber das Verhältnis r_e/r_t (dieses gibt Auskunft über das Ausmaß der spektralen Aufhärtung). Des Weiteren ist eine charakteristische Bleiabsorptionskante ersichtlich. Die Simulation konnte nur für die beiden dünneren Bleistärken (0.3 sowie 0.1 cm) durchgeführt werden, da bei einer Stärke von 1 cm keine Photonen (10 000 000 Quellphotonen) die Wand durchdringen konnten.

Die Streuspektren in Durchstrahlungsrichtung (siehe 6.14) zeigen ein ähnliches Verhalten wie die Spektren in Strahlrichtung (siehe 6.13). Allerdings treten hier ebenfalls die charakteristischen Bleilinien auf.

6.3.2 Beton

Ein weiteres für den Strahlenschutz maßgebliches Material ist Beton, da dieser in der Bauwirtschaft sehr weitverbreitet ist und natürlich auch für Strahlenschutzräume Anwendung findet. Beton ist eine Mischung aus Gesteinskörnung mit Zement unter Zuschlag von Sand, Kies, oder auch Schotter. Zusätzlich zu diesen Stoffen können noch Betonzusatzstoffe hinzugefügt werden, um diesen in unterschiedlichsten Anwendungsgebieten einsetzen zu können (vom Unterwasserbeton bis hin zum Spritzbeton). Man kann daher anmerken, dass Beton nicht gleich Beton ist. Des weiteren wird Beton im Bauwesen zumeist mit Stahl versehen und zum sogenannten Stahlbeton verarbeitet. Um die Simulation so einfach wie möglich zu halten, gingen wir von einem Beton ohne Stahlbewährung mit folgender Zusammensetzung aus:

- Wasserstoff 8.48 %
- Sauerstoff 60.40 %

- Natrium 0.95 %
- Magnesium 0.30 %
- Aluminium 2.48 %
- Silizium 24.18 %
- Kalium 0.69 %
- Kalzium 2.05 %
- Eisen 0.47 %

Für die Dichte des Betons verwendeten wir einen Wert von 2.35 g/cm³. Die Simulation wurde wie zuvor für drei verschiedene Wandstärken durchgeführt (20 cm; 6 cm; 2 cm). Auf Grund der geringer zu erwartenden Effekte wurden dickere Materialstärken gewählt. Die maßgebliche Größe für die durchschnittliche Abschwächung ist die Stoffdichte. Die, durch die Abschirmung hervorgerufene spektrale Zusammensetzung, wird jedoch durch die stoffliche Zusammensetzung des streuenden Objektes bestimmt.

20 cm Beton:

Als erstes präsentieren wir die an einer relativ dicken (20 cm) Betonwand gewonnenen Ergebnisse. Es kann festgestellt werden, dass die für Blei charakteristischen Linien nun im Spektrum fehlen⁸. Es treten allerdings auch keine anderen charakteristischen Linien im Rückstreuspektrum auf. Die Kurve verläuft deshalb sehr viel "glatter", wenngleich generell die Rückstreuung von Photonen erhöht ist (siehe hierzu Abbildung 6.15 und vergleiche diese mit den Abbildungen für Blei). Für diese erste Betonwand erhielten wir einen Rückstreukoeffizienten von: rund 140 Photonen auf 1 000 000 einfallende Photoen. Dieser Wert ist rund 2.5 mal so hoch wie für Blei.

Das Spektrum für die durchgelassenen Photonen weißt nun ebenfalls keine charakteristischen Röntgenlinien oder Bandkanten auf. Dies trifft ebenfalls für das Spektrum der in Vorwärtsrichtung gestreuten Photonen zu. Die verschiedenen Streukoeffizienten für die Rückstreuung haben für die 20 cm dicke Betonwand folgende Werte angenommen: $r_s = 0.25$, $r_t = 0.05$ und $r_e = 0.06$. In Durchstrahlungs-Richtung konnten wir folgende Werte für die Koeffizienten feststellen: $r_s = 7.5e$ -4, $r_t = 1.1e$ -4 und $r_e = 2.9e$ -4. Schließlich, um das Bild abzurunden, geben wir auch noch die Koeffizienten für die Vorwärtsstreuung an: $r_s = 1.2e$ -3, $r_t = 4.6e$ -4 und $r_e = 9.0e$ -4.

6 cm Beton:

Als zweite Wandstärke für die Simulationsserie mit Beton wählten wir eine Dicke von 6 cm für die Wandstärke. Man kann den beiden Abbildungen 6.18, 6.19 entnehmen, dass das Rückstreuspektrum unabhänging von der Dicke des rückstreuenden Materials ist. Die Form und auch die Stärke bleiben erhalten (vergleiche hierzu die beiden vorgenannten Abbildungen mit 6.15, 6.16). Wir sehen also bereits in der zweiten Simulation mit Beton, dass sich das Rückstreuspektrum zwar von der Form und Stärke je nach Materialart unterscheidet, jedoch unabhängig von der Dicke des betrachteten Materials ist (wahrscheinlich gilt dies streng erst ab einer bestimmten Minimalstärke, da das sich ausbildende Rückstreufeld wahrscheinlich bei sehr geringer Wandstärke schon von der Dicke des Materials abhängen wird).

Das Spektrum des abgeschwächten durchtretenden Photonestrahls (siehe Abbildung 6.17) besitzt nun sogar eine niederenergetische Komponente, welche bei der dickeren Wandstärke komplett

 $^{^{8}}$ Dies ist auch nicht weiter verwunderlich, da es sich bei den Linien um charakteristische Bleilinien handelte, und dieses Element in der verwendeten Betonzusammensetzung nicht vorkommt.



Abbildung 6.15: zeigt das Rückstreuspektrum (durchgezogene Linie) unserer Referenzquelle (siehe Kapitel 6.1 & 6.2; strichlierte Linie) an einer 20 cm dicken Betonwand. Drei interessante Aspekte stechen ins Auge. Zum Einen fehlen die charakteristischen Linien völlig. Es treten weder Bleilinien noch andere Linien auf. Zum Anderen ist die Rückstreuung generell viel höher. Siehe hierzu auch im Text die entsprechenden Rückstreukoeffizienten. Das dritte interessante Feature ist die energetische Verschiebung der relativ schwach ausgeprägten Liniengruppe im Primärspektrum zu niedrigeren Energien (rund 10 keV).



Abbildung 6.16: zeigt das Rückstreuspektrum im Verhältnis zu unserem Referenzspektrum (wir verweisen wieder auf Kapitel 6.1 & 6.2 sowie die in diesen Kapiteln enthaltenen Abbildungen) an einer 20 cm dicken Betonwand. Der Verlauf ist generell höher als bei Blei (siehe vorallem Abbildung 6.9, was auf eine stärkere Rückstreuung schließen läßt. Vorallem im niederenergetischen Bereich kommt es sogar zu einer Verstärkung des Spektrums gegenüber dem primären einfallenden Spektrum. Auch im mittleren spektralen Bereich (30 - 100) keV ist die Rückstreuung relativ groß (Abschwächung zu primärem Spektrum nur um einen Faktor ~ 10).



Abbildung 6.17: zeigt die erhaltenen Spektren an einer 20 cm dicken Betonwand. Die durchgezogene Linie repräsentiert das Rückstreuspektrum, strichliert wurde das Referenzspektrum (siehe Kapitel 6.1 und 6.2) eingetragen. Das Spektrum der durchgelassenen Photonoen ist punktiert gezeichnet und das in Vorwärtsrichtung gestreute Spektrum wurde strich/punktiert festgehalten. Im niederenergetischen Bereich bis ca 30 keV kann eine sehr gute Abschirmwirkung festgestellt werden (besser als 10⁸). Danach geht die Abschirmwirkung allerdings auf einen Faktor 10⁵ zurück. Dieser ist aber immer noch sehr hoch. Für Details zu den Streukoeffizienten siehe Text.



Abbildung 6.18: zeigt das Rückstreuspektrum (durchgezogene Linie) unserer Referenzquelle (strichlierte Linie; siehe Kapitel 6.1 und 6.2) an einer 6 cm dicken Betonwand. Man erkennt keinen merklichen Unterschied zu dem bereits zuvor gezeigten Spektrum an einer 20 cm dicken Betonwand (siehe Abbildung 6.15).



Abbildung 6.19: zeigt das Rückstreuspektrum im Verhältnis zu unserem Referenzspektrum an einer 6 cm dicken Betonwand. Drei interessante Aspekte können dieser Abbildung entnommen werden: Im niederenergetischen Bereich bildet sich eine Komponente aus, welche sogar verstärkt gegenüber dem primären Spektrum zum Tragen kommt. Ein weiteres Ergebnis ist, dass die Rückstreuung gerade im energetisch mittleren Bereich (30 - 120 keV) besonders stark ausfällt. Das dritte Detail, welches ins Auge sticht, ist die Verschiebung der primären Lininenkomponente um rund 10 keV zu niedrigeren Energien (als welliger spektraler Verlauf zwischen 50 und 70 keV ersichtlich).



Abbildung 6.20: zeigt die erhaltenen Spektren an einer 6 cm dicken Betonwand. Die durchgezogene Linie repräsentiert das Rückstreuspektrum, strichliert wurde das Referenzspektrum (siehe Kapitel 6.1 und 6.2 für mehr Details) eingetragen. Das Spektrum der durchgelassenen Photonoen ist punktiert gezeichnet und das in vorwärts Richtung gestreute Spektrum wurde strich/punktiert festgehalten. Gegenüber dem vorigen Simulationsdurchlauf (mit einer 20 cm starken Betonwand) ist die Abschirmwirkung deutlich zurückgegangen (siehe auch Abbildung 6.17).



Abbildung 6.21: zeigt die erhaltenen Spektren an einer 2 cm dicken Betonwand. Die durchgezogene Linie repräsentiert das Rückstreuspektrum (Kapitel 6.1 und 6.2), strichliert wurde das Referenzspektrum eingetragen. Das Spektrum der durchgelassenen Photonoen ist punktiert gezeichnet und das in vorwärts Richtung gestreute Spektrum wurde strich/punktiert festgehalten. Diese Abbildung sollte mit dfen Abbildungen der anderen Simulationen verglichen werden (6.17 und 6.21). Man erkennt, dass die Abschirmung gegenüber den beiden anderen Simulationsdurchläufen stark abgenommen hat. Die Rückstreuung tritt vorallem im energetisch mittleren Bereich zwischen (50 - 120) keV auf. Dort erreicht sie etwa eine Stärke von rund einem Zehntel des primären Spektrums.

weggefiltert wurde. Wir erkennen, dass diese Wandstärke bei weitem nicht mehr ausreicht, um den Photonenstrahl ausreichend abzuschwächen. Auch die Komponente des in Vorwärtsrichtung gestreuten Photonenstrahls ist nun deutlich stärker.

2 cm Beton:

Als dritte und letzte Wandstärke mit dem Versuchsmaterial Beton wurde eine 2 cm Versuchsanordnung simuliert. Für das Rückstreuspektrum stellte sich die Vermutung, welche oben genannt wurde, als richtig heraus, dass nämlich das Rückstreuspektrum unabhängig von der Wandstärke sei (zumindest für die von uns zur Simulation herangezogenen Wandstärken). Auch in diesem Versuch konnten wir keine merkbare Veränderung des Rückstreuspektrums zu den beiden vorangegangenen Simulationen feststellen. Deshalb wurde dieses Spektrum auch nicht mehr abgebildet.

Abbildung 6.21 zeigt uns die Zusammenfassung des Versuches an der 2 cm dicken Betonwand. Es sind wieder alle 4 Spektren geplottet. Das Durchlassspektrum ist in seiner Stärke weiter angewachsen. Dies triff auch für das in Vorwärtsrichtung gestreute Spektrum zu.

Zusammenfassung Beton:

Fassen wir nun die Erkenntnisse für Beton zusammen: Qualitativ kann gesagt werden, dass das Rückstreuspektrum unabhängig von der Wandstärke ist. Im Vergleich zu Blei werden jedoch generell mehr Photonen in den Raum rückgestreut. Auf der anderen Seite fehlen die charakteristischen Bleilinien, welche auch im Rückstreuspektrum relativ stark ausgeprägt waren. Es treten auch keine anderen charakteristischen Röntgenlinien im Spektrum hervor. Vom Durchstrahlverhalten her zeigt sich, dass die Wanddicke die Stärke des Spektrums stark beeinflußt. Je dicker eine Wand, desto schwächer der durchtretende Strahl. Dies ist wohl bekannt und kann im allgemeinen durch ein Exponential-Gesetz beschrieben werden. Im durchtretendem Spektrum gibt es weder charakteristische Linien noch Absorptionskanten, welche für den Bleiversuch typisch waren. Man sieht weiters, dass Beton vorallem bis zu einem Energiebereich von 40 keV ein recht guter Absorber ist. Geht die Energie der Photonen darüber hinaus, so wird Beton relativ durchlässig.

6.3.3 Ziegel

Als drittes wesentliches Baumaterial, welches im Strahlenschutz Verwendung findet, wollen wir uns mit Ziegelsteinen beschäftigen. Ziegelsteine werden aus Lehm, genauer gesagt aus Tonmineralien gebrannt. In unserem Breiten werden Ziegelsteine in Öfen unter großer Hitze (Brennen) verfestigt. Es gibt aber auch andere Möglichkeiten den Lehm zu verfestigen, z.B.: das sogenannte Lufttrocknen. Generell kann gesagt werden, dass es eine Vielzahl unterschiedlicher Ziegelsteine gibt. Man unterscheidet sie sowohl hinsichtlich ihrer Herstellungsmethode (gebrannt, luftgetrocknet) als auch ihres Verwendungszwecks (Vormauerziegel, Hintermauerziegel, Spezialziegel). Des Weiteren kann man die Ziegelsteine auf Grund ihrer chemischen und physikalischen Eigenschaften unterschiedlich. Dies spiegelt sich in zahlreichen Normen wider. Für uns ist in dieser Arbeit aber vorallem die chemische Zusammensetzung von entscheidender Bedeutung, da wir diese für die Modellierung unserer Aufgabenstellung benötigen. Wie bereits angesprochen, besteht Ziegel aus gebranntem Lehm und dieser wieder aus sogenannten Tonmineralien.

Tonmineralien:

Die Definition von Tonmineralien ist nicht ganz einfach (siehe hierzu wikipedia.de 2008)⁹. Zum Einen werden hierunter Mineralien verstanden, welche eine sehr kleine Korngröße ($< 2 \ \mu m$) aufweisen, zum Anderen aber auch sogenannte Schichtsilikate. Diese Silikate bestehen aus Silizium, Sauerstoff, Wasserstoff und Metallen wie Aluminium, Magnesium (zum Teil können diese auch durch andere Elemente substituiert werden). Viele Betrachter verstehen deshalb unter der Bezeichnung Tonminerale gerne die Kombination von Schichtsilikaten mit einer feinen Körnung.

Schichtsilikate der Tonmineralien-Gruppe bestehen aus zwei charakteristischen Elementen (Tetraederschicht, Oktaederschicht), aus welchen die einzelnen Schichten aufgebaut sind. Man unterscheidet nun folgende unterschiedliche Schichtsysteme:

- 1:1 Tonminerale: Tetraederschicht gefolgt von Oktaederschicht
- 2:1 Tonminerale: Tetraeder.- Oktaeder.- Tetraederschicht
- 2:1:1 Tonminerale: Tetraeder.- Oktaeder.- Tetraeder.- Oktaederschicht

Die einzelnen Tetraeder bzw. Oktaeder Elemente bestehen normalerweise aus SiO_4 bzw. AlO_6 . In diesen Bausteinen kann allerdings Si durch Al bzw. Al durch Mg substituiert sein. Je nach Anzahl der Substituierungen baut sich eine größere oder kleiner Raumladung zwischen den einzelnen Schichten auf. Diese Raumladung hat natürlich eine Auswirkung auf die chemisch/pyhsikalischen Eigenschaften der Mineralien. Deshalb wird das "tatsächliche" Tonmineral gerne anhand der Substituierungsfraktion dem einen oder anderen Mineral (bzw. Mineralien-Gruppe) zugeordnet. Eine

⁹Die Informationen über die Tonminerale wurde wikipedia.de (2008) entnommen. Man kann sich dort natürlich noch ausführlicher über das interessante (aber leicht verwirrende) Gebiet der Mineralogie informieren.



Abbildung 6.22: zeigt den chemischen Aufbau des Minerals Montmorillonit. Dieses wurde als Referenzmineral für Tonminerale in den Simulationen herangezogen. Diese Graphik wurde dem online Lexikon wikipedia.de (2008) entnommen. Es handelt sich hierbei um ein 2:1 Tonmineral (Oktaeder-, Tetraeder-, Oktaederschicht) zwischen der 2:1 Schichtfolge und der nächsten 2:1 Gruppierung kann Wasser eingelagert werden. Dies führt zum Aufquellen des Minerals. Hierbei handelt es sich allerdings um einen reversiblen Prozess. Silizium und Aluminium können zum Teil durch andere metallische Elemente substituiert sein. Für weitere Details wird auf den Text verwiesen.

weitere interessante Eigenschaft von Schichtsilikaten, die hier nicht unerwähnt bleiben soll, ist die Möglichkeit Wasser zwischen den einzelnen Schichten einzulagern. Dies kann zu einem Aufquellen (Volumensvergrößerung) der Tonmineralien führen. Dieser Vorgang ist allerdings temporär und demnach auch reversibel¹⁰. Wir sehen also, dass die Simulation von Ziegelsteinen nicht ganz einfach ist, da wir die zu Grunde liegende chemische Zusammensetzung ad hoc nicht so leicht feststellen können. Da es sich aber um durchwegs leichte Elemente handelt, aus welchen die Minerale zusammengesetzt sind, sollte eine kleinere Variation der chemischen Zusammensetzung keine deutlichen Änderungen in den Simulationsergebnissen zeitigen. Wir haben uns daher entschieden ein möglichst einfach aufgebautes Tonmineral für unsere Simulation von Ziegelsteinen heranzuziehen.

Montmorillonit:

Montmorillonit ist ein Dreischichtsilikat, wie zuvor beschrieben und besitzt die chemische Formel $Al_2[(OH)_2/Si_4O_10] \bullet nH_2O$ (siehe auch die entsprechende Abbildung 6.22)¹¹. Aus der chemischen Formel für Montmorillonit läßt sich sehr leicht die entsprechende Materialkarte für MCNP(X) generieren. In unserem Fall sieht sie wie folgt aus:

m
5 1000 0.1 8000 0.6 13000 0.1 14000 0.2 \$Montmorillonit

Wir simulieren die Tonziegel daher mit folgender Materialzusammensetzung:

¹⁰Im Gegensatz hierzu kann zum Beispiel Gips ($Ca[SO_4] \bullet 2H_2O$) auch Wasser aufnehmen. Dieser bindet das Wasser allerdings nicht temporär, sondern nimmt es dauerhaft in From von sogenannten Kristallwaser auf (härtet aus).

¹¹Auch die Information über Montmorillonit wurde der entsprechenden wikipedia Seite entnommen.

- 10 % Wasserstoff
- 60 % Sauerstoff
- 10 % Aluminium
- 20 % Silizium

Wie üblich wurde die Simulation für drei unterschiedliche Wandstärken vorgenommen (40 cm, 13 cm, 4 cm).

Ziegelwand 40 cm Dicke:

Der erste Simulationsdurchlauf in dieser Serie erfolgte mit einer 40 cm dicken Ziegelwand. Da wir von einer schwächeren Abschirmung ausgegangen sind, wurden generell dickere Stärken angenommen, um zu ähnlichen Effekten wie bei den anderen Materialien zu gelangen. Vergleicht man die erhaltenen Abbildungen mit den bereits vorher erhaltenen Graphen von Blei und Beton, so sieht man, dass die Ziegelwand (zumindest in unserer Simulation) einen sehr ähnlichen Effekt auf das Strahlenbündel ausübt wie die Betonwand. Dieses Verhalten verwundert aber eigentlich kaum, da ja auch die chemischen Zusammensetzungen beider Materialien sehr ähnlich sind (ähnliches Isotopengewicht/Kernladungszahl). Einzig die Abschwächung des Phtonenbündels ist deutlich reduziert, sowohl über den ganzen spektralen Bereich, als auch im niederenergetischen Bereich, wo sich die Grenze stärkerer Abschwächung weiter zu kleineren Energien verschoben hat (siehe hierzu die Abbildungen 6.23, 6.24, 6.25 bzw auch 6.17). Betrachten wir nun wieder die zu ermittelnden Streukoeffizienten. Für diese haben sich in Rückstreuung folgende Werte ergeben: $r_s = 0.29$, $r_t = 0.006$ und $r_e = 0.01$. Der Vollständigkeit halber geben wir auch noch die Werte für die Streuung in Vorwärtsrichtung an: $r_s = 0.02$, $r_t = 0.007$ und $r_e = 0.01$.

Ziegelwand 13 cm Dicke:

Der zweite Simulationsablauf wurde mit einer auf 13 cm Stärke reduzierten Ziegelwand durchgeführt. Wie auch schon bei der Betonserie zeigt auch hier das Rückstreuspektrum nahez keine Veränderung mit der Dicke. Daher wird im Folgendem auch nur die Gesamtgrafik zu dieser Simulation angegeben (siehe Abbildung 6.26). Wir sehen, wie nicht anders zu erwarten war, wieder ein verstärktes Durchtreten der Primärstrahlung und der Vorwärtsstreuung gegenüber der dickeren Wandstärke von zuvor. Wie bereits für die anderen Simulationsdurchläufe ausgeführt, geben wir nun noch die quantitativ ermittelten Streukoeffizienten an: In Rückstreuung konnten folgende Werte ermittelt werden: $r_s = 0.30$, $r_t = 0.06$ und $r_e = 0.06$. Diese sind nahezu identisch mit den zuvor ermittelten Werten für eine 40 cm dicke Ziegelwand. Einmal mehr sieht man hieraus, dass die Rückstreuung scheinbar nur sehr schwach von der Wandstärke abhängt. Die Koeffizienten für die durchtretende Strahlung betragen: $r_s = 0.22$, $r_t = 0.10$ und $r_e = 0.17$. Diese sind deutlich stärker ausgefallen, als zuvor. Wir erwarten dies aber auch auf Grund der exponentiellen Schwächung eines Photonenbündels mit der Wandstärke. Da die Wandstärke um einen Faktor drei abgenommen hat, würden wir auch eine Zunahme um einen Faktor um 20 erwarten. Zu guter Letzt geben wir auch noch die Faktoren für die Vorwärtsstreuung an. Diese nahmen die folgenden Werte an: $r_s = 0.07$, $r_t = 0.044$ und $r_e = 0.064$.

Ziegelwand 4 cm Dicke:

Der letzte Simulationsdurchgang mit Tonziegeln wurde an einer 4 cm dicken Ziegelwand durchgeführt. Wie auch zuvor verringert sich die Abschirmwirkung weiter. Eigentlich kann man schon von keiner Abschirmwirkung mehr sprechen, da ein sehr bedeutender Teil der primären Strahlung



Abbildung 6.23: zeigt das Rückstreuspektrum (durchgezogene Linie) unserer Referenzquelle (strichlierte Linie; siehe Kapitle 6.1 und 6.2) an einer 40 cm dicken Ziegelwand. Das erhaltene Rückstreuspektrum ist dem Betonspektrum sehr ähnlich. Bei dieser Simulation von Ziegelmaterial (mit dem Mineral Montmorillonit) treten keine charakteristischen Röntgenlinien auf. Dies lässt sich durch die Zusammensetzung von Montmorillonit aus leichten Elementen erklären.



Abbildung 6.24: zeigt das Rückstreuspektrum im Verhältnis zu unserem Referenzspektrum (Die Erzeugung dieses Spektrums wurde ausführlich in den Kapiteln 6.1 und 6.2 dargestellt.) an einer 40 cm dicken Ziegelwand. Deutlich ist die Verstärkung der Primärstrahlung im Bereich < 10 keV zu sehen. Die maximale Rückstreuung liegt auch bei Ziegeln im mittleren energetischen Bereich bei rund (50 - 110) keV. Sehr hochenergetische Photonen > 150 keV werden nicht in den Raum zurückgestreut. Auch im niederenergetischen Bereich > 10 keV, aber < 50 keV, kommt es zu einer deutlichen Reduktion.



Abbildung 6.25: zeigt die erhaltenen Spektren an einer 40 cm dicken Ziegelwand. Die durchgezogene Linie repräsentiert das Rückstreuspektrum, strichliert wurde das Referenzspektrum (siehe Kapitel 6.1 und 6.2) eingetragen. Das Spektrum der durchgelassenen Photonoen wurde punktiert gezeichnet und das in Vorwärtsrichtung gestreute Spektrum wurde strich/punktiert festgehalten. Wir sehen, dass das von uns simulierte Ziegelmaterial bestehend aus Montmorillonit für den spektralen Bereich < 30 keV einen sehr guten Absorber darstellt. Ab 50 keV nimmt die Durchlässigketi stark zu, sodass die Abschwächung nur mehr einen Faktor von ungefähr 100 annimmt.



Abbildung 6.26: zeigt die erhaltenen Spektren an einer 13 cm dicken Ziegelwand. Die durchgezogene Linie repräsentiert das Rückstreuspektrum, strichliert wurde das Referenzspektrum (siehe Kapitel 6.1 und 6.2) eingetragen. Das Spektrum der durchgelassenen Photonoen wurde punktiert gezeichnet und das in Vorwärtsrichtung gestreute Spektrum wurde strich/punktiert festgehalten. Für diese Abbildung gilt im Großen und Ganzen dasselbe wie für Abbildung 6.25. Natürlich treten die Durchlassspektren nun deutlicher zu Tage, da die Wandstärke reduziert wurde.



Abbildung 6.27: zeigt die erhaltenen Spektren an einer 4 cm dicken Ziegelwand. Die durchgezogene Linie repräsentiert das Rückstreuspektrum, strichliert wurde das Referenzspektrum (siehe Kapitel 6.1 und 6.2) eingetragen. Das Spektrum der durchgelassenen Photonoen wurde punktiert gezeichnet und das in vorwärts Richtung gestreute Spektrum wurde strich/punktiert festgehalten. In diesem Fall sehen wir, dass eine nur 4 cm dicke Ziegelwand praktisch keine Abschirmwirkung mehr bietet. Nur der Bereich bis ca. 20 keV wird stark abgeschwächt. Höher energetische Photonen gelangen beinahe ungehindert durch die Versuchswand.

die Wand unbeeinflußt passieren kann. Das in den Raum zurückgestreute Spektrum ist dieses Mal auch leicht schwächer ausgefallen, als in den vorangegangenen Simulationsdurchläufen. Betrachten wir die quantitativen Streukoeffizienten, so sehen wir erstmals eine leichte Abnahme der Rückstreukoeffizienten: $r_s = 0.22$, $r_t = 0.04$ und $r_e = 0.04$. Dies bedeutet, dass sich die Rückstreuung in einer Schichtdicke bis knapp über 4 cm bei Tonmineralien aufbaut. Die Koeffizienten für die durchtretende Strahlung werden bei einer derartig dünnen Wand natürlich sehr groß: $r_s = 0.55$, $r_t = 0.37$ und $r_e = 0.51$. Wir sehen, dass bereits ein Drittel aller primären Photonen die Wand ungehindert passieren kann. Energetisch betrachtet, schützt die Wand sogar noch schlechter. Die durchtretende Photonenenergie wird nurmehr um einen Faktor von 2 abgeschwächt. Eine derartige Wand würde also keinen wirklichen Schutz vor Photonenstrahlung (mit Photonenenergien größer 20 keV) bieten. Interessant ist, dass die Streukoeffizienten in Vorwärtsrichtung nahezu unverändert geblieben sind: $r_s = 0.1$, $r_t = 0.05$ und $r_e = 0.06$.

Zusammenfassung Ziegelwand:

Zusammenfassend kann gesagt werden, dass eine Ziegelwand hinsichtlich der Abschwächung eines Photonenstrahls ein sehr ähnliches Verhalten zeigt wie eine Betonwand, aber auf Grund der geringeren Dichte sehr viel weniger in Erscheinung tritt. Das durchtretende Spektrum kann in zwei Teile zerlegt werden. Im niederenergetischen Bereich ist immer eine sehr viel bessere Abschirmung gegeben, als im höher energetischen Bereich. Zwischen diesen beiden Bereichen tritt eine Grenzenergie auf, bei welcher es einen Sprung von mehreren Zehnerpotenzen in der Abschirmwirkung gibt. Diese
Grenzenergie hat einen etwas niedrigeren Wert für Ziegel als für Beton (Ziegel 20 - 30 keV; Beon 30 - 40 keV). Es treten im untersuchten Energiebereich keine Resonanzen oder Absorptionskanten auf.

6.3.4 Zusammenfassung der Rückstreusimulationen

Generell kann gesagt werden, dass ab einer bestimmten (relativ geringen) Wandstärke die Rückstreuspektren unabhängig von der Wanddicke werden. Das durchtretende Photonenstrahlbündel und die in Vorwärtsrrichtung gestreuten Photonen zeigen natürlich eine Wandstärkenabhängigkeit. Ziegelmaterial und Betonmaterial verhalten sich sehr ähnlich in ihren spektralen Eigenschaften. Dies kann auf eine ähnliche chemische Zusammensetzung (hierbei ist vorallem das ähnliche Isotopengewicht bzw Kernladungszahl ausschlaggebend) zurückgeführt werden. Die Abschirmwirkung ist allerdings bei einer Betonwand um einiges größer als bei einer Ziegelwand, weshalb man dieses Baumaterial im Strahlenschutz bevorzugen sollte. Blei zeigt im Gegensatz zu den beiden anderen Materialien ein viel komplexeres spektrales Verhalten. Man kann deutlich charakteristische Bleilinien und Absorptionskanten in den Spektren erkennen. Innerhalb des spektralen Bereichs der Bleilinien ist die Rückstreuung besonders stark und auch die Abschirmwirkung besonders niedrig. Nähere Informationen zu den spektralen Zusammensetzungen können den entsprechenden Abbildungen entnommen werden. Nachfolgende Tabelle (6.2) gibt einen numerischen Überblick über die erzielten Ergebnisse.

6.4 Luftstreuung

Eine Röntgenröhre oder andere Bestrahlungseinrichtung befindet sich normalerweise in einem speziellen Strahlenschutzraum, der allerdings nicht evakuiert ist. Deshalb kommt es zu einer sogenannten Luftstreuung. Hierunter versteht man die Streuung der hochenergetischen Photonen an den Luftmolekülen. Dies kann bei hohen Photonenflüssen (zum Beispiel bei Kernspaltreaktoren) zu einem leichten Leuchten der durchstrahlten Luft führen. Die Frage, welche sich stellt, ist natürlich ob diese Luftstreuung bei technischen und medizinischen Strahleneinrichtungen als ein für Personen strahlenexponierender Faktor zu sehen ist. Um zu ersten Einblicken in diese Problemstellung zu gelangen, soll im Folgenden ein einfaches Modell simuliert werden. Wie bereits bei den vorhergegangenen Aufgaben wird auch hierbei ein sogenannter Pencil Beam mit spektraler Energieverteilung verwendet. Dieser durchstrahlt einen luftgefüllten Zylinder, in welchem die Luftstreuung auftreten kann. Das gestreute Spektrum wird durch einen zweiten, den ersten Zylinder umhüllenden Zylinder, gemessen. Des Weiteren wird das durchtretende Spektrum aufgezeichnet. Für einen genaueren Überblick zur Modellierungsgeometrie siehe Abbildung 6.29.

Im nächsten Unterkapitel werden wir uns kurz mit wichtigen physikalischen Parametern von Luft beschäftigen.

6.4.1 Luft

Die chemische Zusammensetzung von Luft ist im Allgemeinen durch folgended Elemente gegeben¹²:

- 78 % molekularer Stickstoff (N_2)
- 21 % molekularer Sauerstoff (O_2)
- 1 % atomares Argon (Ar)

 $^{^{12}}$ unter Vernachlässigung von Spurengasen

 Tabelle 6.2:
 führt noch einmal zusammenfassend die numerischen Ergebnisse zu den Rückstreuspektren an unterschiedlichen Wandmaterialen auf. Die verschiedenen Streukoeffizienten sind als Photon je primäres Quellphoton gegeben.

Materialart	Streurichtung	Mittlerer St.koeff.	Teilchen St.koeff	energ. St.koeff.
& Stärke [cm]		r_s	r_t	r_e
Blei 1	Rückstreuung	0.24	0.021	0.021
Blei 0.3	Rückstreuung	0.24	0.021	0.021
	Durchtritt	3.3e-3	2.2e-4	6.6e-4
Blei 0.1	Rückstreuung	0.24	0.021	0.021
	Durchtritt	0.07	0.013	0.029
	Vorwärts	0.013	3.1e-3	5e-3
Beton 20	Rückstreuung	0.25	0.05	0.06
	Durchtritt	7.5e-4	1.1e-4	2.9e-4
	Vorwärts	1.2e-3	4.6e-4	9.0e-4
Beton 6	Rückstreuung	0.24	0.05	0.06
	Durchtritt	0.08	0.025	0.05
	Vorwärts	0.04	0.021	0.035
Beton 2	Rückstreuung	0.24	0.04	0.05
	Durchtritt	0.36	0.18	0.29
	Vorwärts	0.08	0.07	0.05
Ziegel 40	Rückstreuung	0.29	0.06	0.06
	Durchtritt	0.02	0.005	0.01
	Vorwärts	0.02	0.007	0.01
Ziegel 13	Rückstreuung	0.30	0.06	0.06
	Durchtritt	0.22	0.1	0.17
	Vorwärts	0.07	0.044	0.06
Ziegel 4	Rückstreuung	0.22	0.04	0.04
	Durchtritt	0.55	0.36	0.51
	Vorwärts	0.10	0.05	0.06





Abbildung 6.28: zeigt die Geometrie zu den Luftstreuungs-Simulationen. Der mit Luft bei Normalbedingungen gefüllte Zylinder hat einen Durchmesser von 10 cm und ist 10 m lang. An diesen Zylinder schließt sich ein weiterer Zylinder an, in welchem das gestreute Spektrum aufgezeichnet wird. Das durchtretende Spektrum wird schließlich am Ende des ersten Zylinders ermittelt. Spurengase wie Ozon (O_3) , welches in höher liegenden Atmosphärenschichten eine wichtige Rolle spielt (UV-Schutz), Kohlendioxid, Kohlenmonoxid, Stickoxide, Methan,, sollen in der Simulation vernachlässigt werden. Die Auswirkung von Wasserdampf wird ebenfalls vernachlässigt. Die Simulation wird mit trockener Luft (mit obiger Zusammensetzung) durchgeführt. Um Luft zu modellieren benötigen wir nicht nur die chemische Zusammensetzung sondern auch die Dichte. Diese wird im folgenden für Noramalbedingungen (1023 mbar Druck, 20 °C, obige Zusammensetzung) berechnet. Wir gehen von der idealen Gasgleichung aus:

$$p \cdot V = n \cdot R \cdot T \tag{6.8}$$

Hierbei bedeuten:

- p Gasdruck in Pascal
- V Volumen in Kubikmeter
- n Anzahl der Mol
- R ideale Gaskonstante 8.3145 Joule pro Mol und Kelvin
- T Temperatur in Kelvin

Wir können n berechnen indem wir die Masse eines Stoffes durch die molare Masse dividieren:

$$n = \frac{m}{M} \tag{6.9}$$

Hierbei bedeuten:

- n Anzahl der Mol
- m Masse in Gramm
- M molare Masse in Gramm pro Mol

Setzen wir diese Beziehung (6.9) in Beziehung 6.8 ein (und bringen auch noch V auf die andere Seite), so folgt:

$$p = \frac{m}{V} \frac{1}{M} \cdot R \cdot T \tag{6.10}$$

Natürlich ist müber V die gewünschte Dichte ρ , nach welcher wir auflösen können. Hiermit erhalten wir schließlich die folgende Gleichung:

$$\rho = \frac{p \cdot M}{R \cdot T} \tag{6.11}$$

Wir können nun unsere Normalbedingungen einsetzen um zu der gewünschten Dichte von trockener Luft zu gelangen. Der von uns berechnete Wert hierfür beträgt 1.18 kg/m³ oder $1.18 \cdot 10^{-3}$ g/cm³.

6.4.2 Trockene Luft

Mit den vorgenannten Werten können wir nun unsere Simulation für trockene Luft durchführen. Wir verwenden hierzu wieder unser alt bekanntes Referenzspektrum (siehe Kapitel 6.1 & 6.2). Die Ergebnisse bei trockener Luft können in den Abbildungen 6.29, 6.30, 6.31 gesehen werden. Ein verwunderndes Ergebnis ist, dass die durchtretende Strahlung nach einer 10 Meter langen Luftsäule bereits auf einen Faktor von rund 0.8 abgeschwächt ist. Der spektrale Verlauf dieser Abschwächung ist in Abbildung 6.31 dargestellt. Sehr interessant an diesem Abschwächungsverlauf ist, dass er unter 20 keV sehr stark ansteigt und bei sehr niedrigen Energien wieder stark abfällt und sogar 1 unterschreitet. Dies bedeutet, dass Luft bei niedrigen Energien sehr stark streut, bzw. absorpiert. Diese Streuung und Absorption erzeugt Photonen mit noch niedrigerer Energie. Und zwar derartig viele, dass es hierbei sogar zu einer Verstärkung statt einer Abschwächung im Spektrum kommt.

Berechnung des Schwächungskoeffizienten:

Wenn wir die allseits bekannte Schwächungsgleichung:

$$N(x) = N_0 \cdot exp(-\kappa \cdot x) \tag{6.12}$$

betrachten und mit unseren Simulationsergebnissen vergleichen, so können wir die Abschwächung κ in Luft berechnen.

$$\kappa = \frac{\ln\left(\frac{-N(x)}{N_0}\right)}{x} \tag{6.13}$$

Für unsere Werte $(N/N_0 = 0.75 - 0.83; x = 10m)$ errechnen wir ein κ von ca. $(0.02 - 0.03) m^{-1}$. Mit diesem Wert können wir auch noch sehr einfach die sogenannte Halbwertsdicke¹³ für Luft berechnen. Diese beträgt ca. (23 - 35) m.

Berechnung des Streukoeffizienten:

Wir definieren nun noch einen mittleren Streukoeffizienten für Luft wie folgt:

$$\sigma = \frac{1}{E} \cdot \int \frac{N_s(E)}{N_q(E)} dE \tag{6.14}$$

Hierbei bedeutet $N_s(E)$ bzw. $N_q(E)$ die Anzahl der gestreuten Photonen bzw. die Anzahl der Quellphotonen pro Meter durchstrahlter Luftsäule in Abhängigkeit von der Energie. Wie wir aus Abbildung 6.30 ersehen können, ist die Anwendung eines mittleren Streukoeffizienten natürlich nicht sehr realistisch, da wir zwar im höher energetischen Bereich (> 10 keV) einen praktisch konstanten Koeffizienten vorfinden, im niederenergetischen Bereich befindet sich allerdings ein Peak. Deshalb wäre die Angabe von zwei getrennten Koeffizienten, oder idealerweise überhaupt der komplette spektrale Verlauf, zielführender.

Mit unserer Definition haben wir den Streukoeffizienten zu $2 \cdot 10^{-5}$ bestimmt (Die scheinbare Abweichung um einen Faktor 10 zu Abbildung 6.30 ergibt sich aus dem Umstand, dass die Abbildung das Streuverhältnis für den 10 m langen Zylinder zeigt).

6.5 Dosisleistungstest

Die Bedienungsanleitung zu MCNPX ist bei den Meshtallies leider sehr kurz gehalten und es scheint so, als hätte sich bei den Einheiten für die Dosissimulationen ein Fehler eingeschlichen. Man findet nämlich zwei sich widersprechende Aussagen:

- rem/hour
- $(\text{rem/hour})/(\text{particles}/cm^2-\text{s})$

Die erste Einheit kann als falsch verworfen werden, da die Zeit (bzw. zeitliche Abläufe) keinen direkten Eingang in die Simulation findet¹⁴. Bei der zweiten Aussage besteht das Problem im Bezug

 $^{^{13}}$ Dicke einer Schicht, welche die primäre Strahlungsintensität auf einen Faktor 1/2 abschwächt.

¹⁴Wir betrachten statische Vorgänge. Eine zeitliche Information kann nach Beendigung der Simulation leicht eingeführt werden, indem man die Ergebnisse um einen Quellfaktor modifiziert (n Teilchen/s).



Abbildung 6.29: zeigt das bekannte Referenzspektrum (Kapitel 6.1 und 6.2; strichliert), das gestreute Spektrum (durchgezogene Linie) und das durchtretende Spektrum (strich punktiert). Man erkennt, dass sich die Luftmoleküle vorallem auf den niederenergetischen Anteil (< (10 - 20) keV) der Strahlung auswirken.

des Ergebnisses auf eine Fläche¹⁵. Wir vermuteten, dass die angegebene Einheit sich eigentlich auf eine Fluss/Dosis-Konversionsfunktion beziehen sollte und die Ergebnisse in Einheiten von:

- (rem/hour)/(particle/s)
- bzw. (sievert/hour)/(particle/s)

vorliegen. Somit bräuchte der Benutzer nur die Ergebnisse mit dem primären Teilchenfluss multiplizieren, um zu Dosisraten zu gelangen. Um dies zu zeigen, simulierten wir eine Kobalt 60 Quelle, welche wohl definierte Photonenübergänge besitzt (siehe dazu 6.32). Die sogenannte Dosisleistungskonstante für diese Quelle liegt in tabellarischer Form vor (siehe z.B.: Hanno 2007) und beträgt $0.354 \ mSv \cdot m^2 \cdot h^{-1} \cdot GBq^{-1}$. Für unseren Simulationslauf erhielten wir einen Rechenwert in 1 Meter Entfernung von 0.1747e-12 (siehe auch 6.33). Dies stimmt mit der Dosisleistung in 1 Meter Entfernung bis auf einen Faktor 2 überein, wenn man die Dosisleistung auf 1 Zerfall normiert und die Einheit auf Sievert bringt. Der Faktor zwei begründet sich darin, dass die Simulation zwei Teilchen (Photonen) simulieren muß, um einen Zerfall darzustellen. Deshalb wird das Ergebnis um einen Faktor 2 zu gering ausgegeben. Schließlich wurde die Simulation mit verringerter Meshgrid Auflösung wiederholt, um zu zeigen, dass die Simulation unabhängig von der Oberflächengröße der Messzellen ist. Bei diesem zweiten Simulationsdurchgang konnte ein Ergebnis von 0.1723e-12 erzielt werden. Wir schließen hieraus, dass die verwendeten Einheiten (sievert/hour)/(particle/s) sind.

¹⁵Eine biologische Dosis stellt normalerweise eine nach ihrer biologischen Wirksamkeit gewichtete Energiedosis (Energiedeposition) dar. Diese Energiedosis wird aber bereits auf das Gewicht ($m = V \cdot \rho$) bezogen. Somit macht eine Angabe bezogen auf eine Fläche keinen Sinn!



Abbildung 6.30: Zeigt das Verhältnis von gestreuten Photonen zu den in den Luftzylinder eintretenden primären Photonenstrahl bei der Luftstreuungssimulation. Interessant an der Abbildung ist der niederenergetische Bereich, welcher sich deutlich vom höher energetischen Bereich unterscheidedet. Das Spektrum zerfällt in zwei Teile: im niederenergetischen Bereich kommt es zu einer starken Streuung (praktisch alle Photonen werden aus dem primären Strahl herausgestreut. Im höher energetischen Bereich kommt es zu fast keiner Streuung (Unterschied im Streukoeffizienten von 5 Zehnerpotenzen).



Abbildung 6.31: Zeigt das Verhältnis der eintretenden Strahlung zur durchtretenden Strahlung für die Luftstreuungssimulation. Man sieht, dass der niederenergetische Bereich bereits von einer 10 m dicken Luftsäule gut abgeschirmt werden kann. Im höher energetischen Bereich wird die Strahlung allerdings nur mehr auf einen Faktor von ca. 0.8 abgeschwächt. Hieraus kann man eine korrespondierende Halbwertsdicke von 35 m errechnen. Im sehr niederenergetischen Bereich kommt es sogar zu einer Verstärkung des primären Spektrums (Schwächungskoeffizient < 1).</p>



Abbildung 6.32: Zerfallsschemata des Kobalt 60. Zu beachten ist, dass für einen Zerfall von Co zu Ni zwei Photonen (1.17 MeV bzw. 1.33 MeV) ausgesendet werden.



Abbildung 6.33: Die Dosisverteilung in einer Entfernung von 1 m von einer Kobalt 60 Quelle. Die Werte sind jeweils auf ein primäres Quellenteilchen bezogen (sievert/hour)/(particle/s).

6.6 Dosisverteilungen

In diesem letzten Teil des Kapitels Resultate wollen wir räumliche Dosisverteilung der Strahlungsquelle bzw. der rückgestreuten Strahlung behandeln. Gerade die räumliche Beschreibung der Dosisverteilung macht einen simulationstechnischen Zugang an die Problemstellung notwendig, da dieses Problem meßtechnisch nicht gut erfaßt werden kann. Man stelle sich vor, dass man einen Raum in 100 Abschnitte oder mehr in jeder Dimension teilen möchte, um ein genaues Abbild der Dosisverteilung zu bekommen. In diesem Fall müßte man $(10^2)^3$ Detektoren verwenden, was natürlich unmöglich ist, oder aber derart viele Einzelmessungen durchführen. Dies ist natürlich auch nahezu unmöglich. Des Weiteren ergibt sich das Problem, dass wir eine eher geringe Rückstreudosisleistung erwarten werden. Diese wird sich spektral auch noch im niederenergetischen, und daher meßtechnisch schwer zugänglichen, Bereich abspielen. Der analytische Lösungsweg erscheint ohnehin auf Grund der Komplexität aussichtslos. Vorallem, wenn man bedenkt, dass man unterschiedlichste räumliche Anordnungen mit unterschiedlichsten Materialien berücksichtigen können sollte. Simulationstechnisch erscheint die Aufgabenstellung hingegen nicht unlösbar. Der limitierende Faktor ist hierbei vorallem die Rechenzeit und damit die erzielbare räumliche Auflösung.

6.6.1 Dosisverteilung einer aufgefächerten Photonenquelle

Zu Beginn der räumlichen Dosisverteilungssimulation arbeiteten wir mit einer aufgefächerten Quelle. Die Quelle wurde hierbei derartige modelliert, dass sie die Photonen innerhalb eines bestimmten Öffnungswinkels abstrahlt. Somit ergibt sich ein Strahlungskegel, welcher auf die Wand gerichtet wurde. Die entstehende Bestrahlungsfläche war unter Normaleinfall ein Kreis. Jedoch zeigte sich sehr bald, dass dieses relativ realistische Szenario nur sehr schwer geeignet ist, ausgewertet zu werden, da sich das eingestrahlte Photonenfeld mit dem rückgestreuten Photonenfeld überlagert und es praktisch unmöglich ist diese beiden Felder zu trennen. Da wir aber an dem rückgestreuten Feld interessiert sind und nicht an dem Gesamtfeld (Dosisverteilung) ist dieses Simulations Set-Up für uns ungeeignet.

6.6.2 Dosisverteilung der Pencil Beam Phtonenquelle

Wie wir im vorangehenden Unterkapitel gesehen haben, ergeben sich bei einer aufgefächerten Quelle größere Probleme in der Interpretation der Ergebnisse, da die Primärstrahlung nicht von der interessierenden Rückstreustrahlung getrennt werden kann. Dieses Problem kann man sehr elegant umschiffen indem man für die Primärstrahlung einen sogenannten Pencilbeam (Strichquelle) verwendet. Hierbei ergibt sich allerdings ein gewisses Normierungsproblem, da eine derartige Pencilquelle nicht wirklich normierbar ist! Dieses Problem stellt sich folgendermaßen dar: Die Simulationssoftware berechnet die Strahlungsdosis über einen Tracklength Tally mit anschließender spektraler Gewichtung der Teilchen. Dieses Ergebnis wird noch auf das Volumen und die Anzahl der Primärteilchen bezogen. Man erhält als Ergebnis: (sievert/hour)/(particle/sec) Das Problem ist nun, dass ein Pencilbeam definitonsgemäß immer nur ein differentielles Flächenelement dA durchstrahlt. Deswegen steigt bei Verkleinerung des Volumens (bessere Auflösung \rightarrow feinerer Meshgrid), die errechnete Dosisleistung in den betroffenen Zellen an. Somit kann die Quellendosis nicht wirklich angegeben werden. Wir beziehen deshalb in den folgenden Kapiteln die Rückstreudosisleistung nicht auf die primäre Quellendosisleistung, sondern auf eine Rückstreudosisleistung in einer definierten Entfernung vom Aufpunkt des Pencilbeams an der Wand (näheres hierzu in den nächsten Abschnitten).

Rückgestreute Dosisverteilung an einer 1 cm dicken Bleiwand

Als erstes wollen wir die rückgestreute Dosisverteilung an einer 1 cm dicken Bleiwand näher betrachten. Als Quelle verwendeten wir unsere wohlbekannte Pencil Beam Photonenquelle mit einem Referenzspektrum wie unter Abschnitt 6.2 und 6.3 beschrieben. Als Referenzpunkt für die Bestimmung der Rückstreudosisleistung wurde ein Punkt in einer Entfernung von einem halben Meter vor der Wand gewählt. Dieser Punkt befindet sich in der Strahlebene direkt benachbart zu der Zelle die der Primärstrahl passiert. Die Zelle, durch die die Primärstrahlung tritt, kann natürlich nicht als Referenzzelle herangezogen werden, die diese Primärstrahlund das Ergebnis verfälschen würde. Abbildung 6.34 zeigt uns die räumliche Dosisverteilung nach Rückstreuung an der Bleiwand in Höhe des Primärstrahls. Dieser x/y Schnitt durch die Dosisverteilung wurde unter Ausmaskierung des Primärstrahls erzeugt. Die Farben spiegeln die Strahlungsintensität wieder. Um Ergebnisse ablesen zu können, wurden auch Dosisleistungskonturen eingezeichnet. Die eingezeichneten Linien geben jeweils die Positionen an, an welchen die Strahlungsleistung ein Vielfaches zur Referenzstrahlung (2.7 10⁻¹⁴ (sievert/hour)/(particle/sec)) beträgt. Aus der Abbildung kann entnommen werden, dass eine 1 cm dicke Bleiwand doch noch einen beträchtlichen Strahlungsanteil in Vorwärtsrichtung streut. Außerdem ersieht man, dass sich die Rückstrahlung reziprok mit dem Quadrat der Entfernung abschwächt und sehr "ausgefranst" ist. Dieses "Ausfransen" ist ein statistischer Effekt und kommt dadurch zustande, dass in größerer Entfernung zum Aufpunkt der Primärstrahlung nur sehr wenige Photonen gemessen werden und dadurch die statistischen Schwankungen zunehmen. Man kann dieses Verhalten durch Mittelwertbildungen bzw. durch Reduzieren der Auflösung oder längere Simulationszeiten (Rechenzeiten) verbessern.

Rückgestreute Dosisverteilung an einer 40 cm dicken Ziegelwand

Wir wenden uns nun noch der rückgestreuten Dosisleistungsverteilung an einer 40 cm dicken Ziegelwand zu. Wie wir in den vorhergehenden Kapiteln ausgeführt haben, verwenden wir, als Simulationsanalogon für die Ziegelwand, das Mineral Montmoriollonit (siehe Abbildung 6.22). Die Ergebnisse sind denen an der Bleiwand sehr ähnlich. Es bilden sich auch nahezu die selben Äuqidosisflächen im Raum aus. Die Dosisleistung in einem halben Meter Entfernung ist in diesem Fall allerdings etwas geringer: $1.6 \cdot 10^{-14}$ (sievert/hour)/(particle/sec)

6.6.3 Rückgestrute Dosisverteilungen nach Streuung unter 45 Grad

Von besonderem Interesse ist natürlich auch die Richtungsabhängigkeit der Streustrahlung an einem Medium. Dies allgemein zu simulieren erscheint sehr schwierig bzw. zumindest sehr zeitaufwendig. Nichts desto trotz wollen wir zumindest das Verhalten der rückgestreuten Dosisverteilung unter einem ausgewählten Winkel von 45 Grad betrachten. Wir verwenden hierzu das gleiche Set-Up wie bereits zuvor. Der Unterschied im Inputfile besteht nur dahingehend, dass die Quelle nun auf der y-Achse bei einer Position von -150 cm angebracht wird. Die Strahlrichtung verläuft sowohl in positiver x als auch in positiver y Richtung, womit sich ein Strahlwinkel von 45 Grad einstellen sollte. Auf Grund der Platzierung trifft der Photonenstrahl das Wandmaterial beim Durchgang durch die x-Achse unter 45 Grad (Position: x/y/z = 150/0/0 cm). Die Resultate für eine 13 cm dicke Ziegelwand sind in Abbildung 6.37 dargestellt. Betrachten wir die linke obere Abbildung so sehen wir, dass der hauptsächliche Teil der Streustrahlung die Wand unter 45 Grad verläßt. Jedoch, und dies ist auffällig, nicht in einer gedachten reflektierten Richtung, sondern zurück in Richtung der einfallenden Strahlung (wie bereits zuvor erwähnt, strahlen wir von der negativen y-Richtung kommend ein). Dies ist ein überraschendes Ergebnis, da man eher vermuten würde, dass es zu einer Art von



Abbildung 6.34: zeigt einen x/y Schnitt durch die räumliche Dosisverteilung in Strahlhöhe der Pencil Beam Photonenquelle nach Rückstreuung an einer 1 cm dicken Bleiwand. Als eingestrahltes Spektrum wurde wieder unser Referenzquellenspektrum von Kapitel 6.1 bzw. 6.2 herangezogen. Dieses nähert eine Röntgenröhre, welche mit 200 kV betrieben wird, an. Die durchgezogenen vertikalen Linien verdeutlichen die Position der Wand, die strichlierten Linien zeigen die von der Wand betroffene Meßzelle; Die Positionen, an welchen die Strahlungsdosisleistung bestimmte Vielfache der Dosisleistung des Referenzpunktes überschreitet, sind als Contourplot angegeben. Der Referenzpunkt wurde lotnormal vor der Wand in einem Abstand von 50 cm vom Aufpunkt des Pencil-Beams angenommen. Die Werte der Farbskalierung sind in Vielfachen der Einheit (Sievert/Stunde)/(Partikel/s) (wie unter Kapitel 6.3 diskutiert) angegeben. Partikel bezieht sich hierbei auf ein Quellphoton.



Abbildung 6.35: die linke Seite zeigt in der oberen Graphik wie Abbildung 6.34 einen x/y Schnitt durch die räumliche Dosisverteilung in Strahlhöhe der Pencil Beam Photonenquelle nach Rückstreuung an einer 1 cm dicken Bleiwand. Darunter sieht man einen x/z Schnitt in der Strahlebene (der Primärstrahl wurde ausmaskiert). Die rechte Seite zeigt oberhalb ebenfalls einen x/y Schnitt, in diesem Fall allerdings 0.5 m oberhalb der primären Strahlebene. Als vierte Graphik (links unterhalb) ist ein y/z Schnitt einem halben Meter vor dem Aufpunkt gegeben. Wie bereits in Abbildung 6.34 ist auch hier wieder die Farbskalierung in Vielfachen der Einheit (Sievert/Stunde)/(Partikel/s) (wie unter Kapitel 6.3 diskutiert) angegeben. Partikel bezieht sich hierbei auf ein Quellphoton. Bei dem eingestrahlten Spektrum handelt es sich um unser alt bewährtes 200 keV Röntgenspektrum aus Kapitel 6.1 bzw. 6.2.



Abbildung 6.36: diese vier Abbildungen zeigen wie zuvor (Abbildung: 6.35) einen x/y Schnitt (links oben) durch die räumliche Dosisverteilung in Strahlhöhe der Pencil Beam Photonenquelle nach Rückstreuung an einer 40 cm dicken Ziegelwand (simuliert mit Montmorillonit Tonmineral), einen x/y Schnitt (rechts oben), in diesem Fall allerdings 0.5 m oberhalb der primären Strahlebene, einen x/z Schnitt (links unten), sowie einen y/z Schnitt (rechts unten) einen halben Meter vor dem Strahlaufpunkt auf der Wand. Die Wand selbst ist durch die beiden durchgezogenen Linien, sowohl in ihrer Position als auch hinsichtlich ihrer Dicke, angedeutet. Die Farbskalierung gibt wieder die Stärke der lokalen Dosisleistung in Einheiten von (Sievert/Stunde)/(Partikel/s) an, wobei sich Partikel auf ein Quellphoton bezieht. Es wurde wie immer unser Referenzspektrum als Photonenquellspektrum verwendet (siehe Kaptitel 6.1 bzw. 6.2).

"Reflexion¹⁶" am Wandmaterial kommen sollte. Die scheinbare Verbreiterung (Auffächerung) der Strahlung bei den x/z bzw. y/z Schnitten sind ein Auswerteartefakt. Um die Streustrahlung von der primären Strahlung zu trennen, wurden die Ebenen, in welchen sich die primäre Strahlung ausbreitet, durch die darüber bzw. darunterliegenden Ebenen ersetzt. Da die Resultate bezüglichh der Einstrahleben symmetrisch sind, erscheint das Gebiet rund um die Strahlebene nun sehr homogen und breit (Bereich $z=\pm 10 \ cm$).

Eine mögliche Erklärung für den Effekt der Rückstreuung in Richtung Quelle anstatt in Ausfallsrichtung kann das Simulationsmodell liefern. Wir gehen davon aus, dass MCNP(X) mit Atomen rechnet, welche untereinander keine Wechselwirkungen zeitigen. Durch dieses einfache Modell gehen aber auch eventuelle Gittereigenschaften, welche feste Stoffe aufweisen, verloren. Somit kann es zu keiner Brechung bzw. Reflexion an Gitterebenen kommen. Eigentlich ist das Ergebniss gar nicht so verwunderlich, da in einer Betrachtungsweise von einzelnen unabhängigen Atomen keine Richtung, außer der Verbindungslinie einfallende Strahlung/Atom ausgezeichnet ist. Auf Grund dessen, können wir erwarten, dass sich das unter einem Winkel ϕ ergebende Dosisleistungsbild nur durch eine Drehung um ϕ vom lotrechten Bild unterscheidet. Dies gilt natürlich nur, wenn es zu keinen Sekundärwechselwirkungen kommt¹⁷.

 $^{^{16}}$ Wie wir es im Bereich der "gewöhnlichen" sichtbaren Optik vom Reflexionsgesetz (Einfallswinkel ist gleich Ausfallswinkel) her kennen.

¹⁷Das gestreute Spektrum könnte innerhalb des Wandmaterials ein zweites Mal gestreut werden. Aber selbst dieser Einfluß wird das Ergebnis nicht zu sehr verändern, da die "Streuausbeute" (Streuphotonen zu streuenden Photonen) sehr gering ist.



Abbildung 6.37: diese drei Abbildungen zeigen wie zuvor (Abbildung: 6.35, 6.36) einen x/y Schnitt (links oben) durch die räumliche Dosisverteilung in Strahlhöhe der Pencil Beam Photonenquelle nach Rückstreuung an einer 13 cm dicken Ziegelwand (simuliert mit Montmorillonit Tonmineral), einen x/z Schnitt (rechts oben), sowie einen x/y Schnitt (unten) einen halben Meter vor dem Strahlaufpunkt auf der Wand. Bei dieser Serie befindet sich die Photonenquelle auf der y-Achse bei einer Position von -150 cm und strahlt unter 45 Grad auf die Wand ein. Strahlrichtung (x/y/z=1/1/0); Auftreffpunkt (x/y/z=150/0/0); Die spektrale Zusammensetzung der eingestrahlten Energie folgt wieder unserem Referenzspektrum aus Kaptitel 6.1 bzw. 6.2. Die Wand ist wieder durch die senkrechten Linien angedeutet. Die Strahlrichtung ist durch die strichlierten Linien gegeben. Auf Grund der meßtechnischen Auswertung kommt es zu einigen Artefakten in den Abbildungen (scheinbare Verschiebung des Aufpunktes aus Strahlrichtung, vertikale Aufweitung des Strahlbündels). Diese Artefakte werden im Text näher erläutert. Die Werte der Farbskalierung sind in Vielfachen der Einheit (Sievert/Stunde)/(Partikel/s) (wie unter Kapitel 6.3 diskutiert) angegeben. Partikel bezieht sich hierbei auf ein Quellphoton.

"All models are wrong, but some are useful.."

by George E. P. Box

Kapitel 7

Zusammenfassung

Diese Arbeit beschäftigte sich mit der Simulation von Röntgenspektren und vorallem mit der Rückstreuung derselbigen an unterschiedlichen Wandmaterialen und Wandstärken. Nach einer allgemeinen Einführung in die Problemstellung wurde die Funktionsweise und der Aufbau von Röntgenröhren näher erläutert. Im Anschluß daran beschäftigten wir uns mit der Wechselwirkung von Photonenstrahlung mit Materie. Nach einem kurzen Schwenk in Richtung Transporttheorie wurde das verwendete Simulationstool vorgestellt. Schließlich kamen wir zu unseren eigenenen Ergebnisse. Diese unterteilen sich in folgende drei Aspekte:

- 1. Rückstreuspektren
- 2. Luftstreuung
- 3. Dosisverteilungen

7.1 Rückstreuspektren

Nach der Erzeugung unseres Referenzspektrums (200 keV primäre Elektronenenergie; eingestrahlt unter 45° auf eine Wolframanode) streuten wir dieses an verschiedenen Materialien und Wandstärken. Generell kann gesagt werden, dass die Intensitäten der Rückstreuspektren nahezu unabhängig von den Wandstärken sind. Daher dürfte es sich bei der Rückstreuung vorallem, um einen Oberflächeneffekt handeln. Zu beachten sind weiters die relativ stark zu Tage tretenden charakteristischen Linien (bei Blei als Wandmaterial), welche erst durch die Streuprozesse im Wandmaterial hervorgerufen werden. Der konkrete spektrale Verlauf und vorallem auch die Abschirmwirkung wind jedoch stark vom Material abhängig. Es zeigt sich das wohlbekannte Verhalten, dass Materialien mit höherer atomarer Masse bessere Abschirmwirkungen erzielen (z.B.: Blei im Vergleich zu Ton).

7.2 Luftstreuung

Die Luftstreuungs-Simulation zeigt, dass vorallem niederenergetische Photonen (bis ca. 10 keV) aus dem Primärstrahl herausgestreut bzw. absorbiert werden. Dieser Effekt führt sogar zu einer spektralen Verstärkung im niederenergetischen Bereich (wenige keV). Allerdings ist gerade dieser Bereich auch für die Computersimulation schwer zugänglich, weshalb die Ergebnisse in diesem Bereich nicht überinterpretiert werden sollten. Wir haben einen mittleren Schwächungskoeffizienten

der Primärstrahlung in Luft von ca. 0.02 - 0.03 m⁻¹ bestimmt. Mit diesem hat sich eine Halbwertsdicke in Luft von ca. (23 - 35) mergeben. Die eigentliche Streuung in Luft betrug ca. $2 \cdot 10^{-5}$ Streuphotonen pro primären Photon und Meter durchstrahlter Luftsäule.

7.3 Dosisverteilungen

Schließlich wendeten wir uns noch der dreidimensionalen Verteilung der Dosisleistung im Raum zu. Diese ist für alle Materialien ähnlich und zeigt, wie nicht weiter verwunderlich, einen mit dem Quadrat der Entfernung abfallenden Verlauf. In einer zweiten Analyseserie befaßten wir uns noch mit der Dosisverteilung der Rückstreuung unter einem Einfall der Primärstrahlung von 45 Grad. Das verwundernde Ergebniss ist, dass die Strahlung nicht, wie man es in der Optik durch das Reflexionsgesetz gewohnt ist, unter dem Einfallswinkel reflektiert wird, sondern der Großteil der Strahlung in Richtung der Quelle rückreflektiert wird. Dies wird aber eventuell durch ein zu einfaches Simulationsmodell in MCNPX verursacht. So berücksichtigt dieses Simulationstool nicht den kristalinen Aufbau von Festkörpern. "People are always asking for the latest developments in the unification of this theory with that theory, and they don't give us a chance to tell them anything about what we know pretty well. They always want to know the things we don't know."

by Richard Feynman

Anhang A

Weiterführende Forschungsschwerpunkte

In diesem kurzen abschließenden Kapitel soll ein Einblick in die weiteren Forschungsmöglichkeiten gegeben werden.

A.1 Streuspektren

In diesem Bereich könnte man die Arbeit in folgenden Punkten fortsetzen bzw. detailierter ausführen:

Abhängigkeiten von der Quelle: In unserer Arbeit haben wir stets immer mit derselben primären Elektronenenergie gerechnet (Referenzspektrum). Natürlich kann man erwarten, dass sich die Ergebnisse für andere Energien von denen bei unserer Referenzenergie (200 keV) unterscheiden werden. Des Weiteren haben wir für unser Referenzspektrum ein integriertes Spektrum über die Halbkugel oberhalb des Brennflecks betrachtet. Dies war erforderlich um die Effizienz der Simulation zu steigern. Da das Röntgenbremsspektrum jedoch eine Winkelabhängigkeit aufweist, müßte man diese eigentlich berücksichtigen. Generell wäre es wahrscheinlich interessant mehr über die Quellcharakteristika einer Röntgenröhre in Erfahrung zu bringen (Energieabhängigkeit, Winkelabhängigkeit, Ausbeutekoeffizient¹, Gehäuseeffekte, Blendeneffekte,).

Abhängigkeiten von primären Strahlbündel: In dieser Arbeit wurde generell auf einen Pencil Beam Strahl zurückgegriffen, da dieser sowohl von Seiten der Simulation als auch von Seiten der Datenauswertung am einfachsten zu handhaben ist. Dies entspricht aber naturgemäß nicht den reellen Bedingungen einer Röntgenröhre, bei welcher das primäre Strahlenbündel immer mehr oder weniger aufgefächert ist. Außerdem müßte man berücksichtigen, dass auch das primäre Spektrum winkelabhängig ist.

Aufnahme des Rückstreuspektrums: Um die Effizienz der Simulation zu steigern, wurde das Rückstreuspektrum über eine fiktive Halbkugel (mit einer Bohrung für die primäre Strahlung) vor der Versuchswand aufgenommen. Wie wir allerdings im Kapitel über die Dosisverteilungen gesehen

 $^{^1 \}mathrm{Verhältnis}$ von Nutzphotonenstrahlung zu primären Elektronenstrom

haben, weist die Dosisverteilung eine Winkelabhängigkeit auf. Wahrscheinlich trifft dies auch für die Rückstreuspektren zu.

Untersuchung von Rückstreuspektren: Eine detailiertere Untersuchung der Rückstreuspektren, sollte natürlich auch die Untersuchung von zahlreichen unterschiedlichen Einstrahlrichtungen (der Primärstrahlung) beinhalten. Unsere Untersuchung zeigt, dass die Rückstreuung vorwiegend ein Oberflächeneffekt ist. Dies könnte man im Detail durch Variation der Materialstärken untersuchen.

A.2 Luftstreuung

Bei der Streuung eines Photonenstrahls in Luft könnte in Zukunft auch noch die Abhängigkeit der Streuung vom Wasserdampfgehalt betrachtet werden. Des Weiteren könnte man mit der Information über die Streuung eine Linienphotonenquelle modelieren. An dieser Stelle bleibt anzumerken, dass diese Quelle für den Strahlenschutz eventuell nicht zu vernachlässigen ist, da sie entlang des durchstrahlten Zylinders (Kegel) wirkt, und deshalb die Strahlungsintensität nicht mit dem Abstandsquadrat, sondern nur mit dem einfachen Abstand abfällt.

A.3 Dosisverteilungen

Auch in diesem Kapitel zeigen sich einige spannende Ansatzpunkte für zukünftige Arbeiten:

3 dimensionale Form: Wie wir gesehen haben, lassen sich mit dem Programm MCNPX sehr schön räumlich aufgelöste Simulationsdaten gewinnen. Bei einem entsprechend feinen Raster (Simulationsdauer) kann man die Isodosisflächen im 3 dimenensionalen Raum betrachten. Es wäre sicher spannend und von Vorteil, wenn man diese Flächen mit einer analytischen Funktion fitten könnte.

allgemeine Abhängigkeit vom Einstrahlwinkel: Nicht nur für die spektrale Zusammensetzung, sondern auch oder gerade für die Dosisverteilungen, ist es von Interesse die Winkelabhängigkeit zu kennen. Hierbei ergeben sich die zwei Fragen nach der entstehenden Verteilung (Kann man eine Art simples Brechungs/Reflexionsgesetz für Röntgenstrahlung finden.) und nach der energetischen Zusammensetzung (Wird bei streifenden oder bei senkrechten Einfall der primären Strahlung, mehr in den Raum zurückgestreut?). Wir haben in dieser Arbeit gesehen, dass es sich hierbei um eine komplexere Aufgabe handelt, da man auch das Gefüge (Gitter und Kristallstruktur) des streuenden Mediums berücksichtigen muß.

Literaturverzeichnis

- Annals of the ICRP. 1983, Radionuclide Transformations Energy and Intensity of Emissions, ed. F. I. Sowobay & G. Sutten, Vol. 11-13 (ICRP Publication 38)
- Briesmeister, J. F. 1997, MCNP A General Monte Carlo N-Particle Transport Code, 4th edn., Radiation Safety Information Coputational Center (RSICC), P.O. Box 2008, Oak Ridge, TN, 37831-6362, ergänzende Unterlagen zu MCNPX siehe auch: https://mcnpx.lanl.gov/documents.html
- Duderstadt, J. J. & Martin, W. R. 1979, Transport Theory (Textbuch erschienen im: John Wiley & Sons Verlag)
- Hanno, K. 2005, Strahlungsquellen für Technik und Medizin, 1st edn. (Textbuch erschienen im Teubner Verlag)
- Hanno, K. 2007, Grundlagen der Strahlungsphysik und des Strahlenschutzes, 2nd edn. (Textbuch erschienen im: Teubner Verlag)
- Hendricks, J. S., McKinney, G. W., Waters, L. S., et al. 2005, MCNPX EXTENSIONS VERSION 2.5.0, 2nd edn., Los Alamos National Laboratory, ergänzende Unterlagen zu MCNPX siehe auch: https://mcnpx.lanl.gov/documents.html
- Koch, H. W. & Motz, J. W. 1959, Rev. Mod. Phys., Bremsstrahlung Cross-Section Formulas and Related Data, 31, 920
- Los Alamos National Laboratory, Los Alamos, N. M. 2006, MCNP/MCNPX Monte Carlo N-Particle Transport Code System Including MCNP5 1.40 and MCNPX 2.5.0 and Data Libraries, rsicc computer code collection edn., Radiation Safety Information Coputational Center (RSICC), P.O. Box 2008, Oak Ridge, TN, 37831-6362, ergänzende Unterlagen zu MCNPX siehe auch: https://mcnpx.lanl.gov/documents.html
- Miceli, A., Thierry, R., Bettuzzi, M., et al. 2007a, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment, Comparison of simulated and measured spectra of an industrial 450 kV X-ray tube, 580, 123
- Miceli, A., Thierry, R., Flisch, A., et al. 2007b, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment, Monte Carlo simulations of a high-resolution X-ray CT system for industrial applications, 583, 313
- Natter, F. A., Grabmayr, P., Hehl, T., Owens, R. O., & Wunderlich, S. 2003, Nuclear Instruments and Mehtods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms, *Monte Carlo simulation and analytical calculation of coherent bremsstrahlung and its polarisation*, 211, 465

- O'Dwyer, J. N. & Tickner, J. R. 2007, Nuclear Instruments and Mehtods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment, Modelling diffractive X-ray scattering using the EGS Monte Carlo code, 580, 127
- Taschereau, R., Chow, P. L., Cho, J. S., & Chatziioannou, A. F. 2006, Nuclear Instruments and Mehtods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment, A microCT X-ray head model for spectra generation with Monte Calo simulations, 569, 373
- Tavora, L. M. N., Gilboy, W. B., & Morton, E. J. 2001, Radiation Physics and Chemistry, Monte Carlo studies of novel X-ray tube anode design, 61, 527
- Waters, L. S. 1999, MCNPX Users Manual, 2nd edn., Accelerator Production of Tritium APT, P.O. Box 2008, Oak Ridge, TN, 37831-6362, ergänzende Unterlagen zu MCNPX siehe auch: https://mcnpx.lanl.gov/documents.html
- wikimedia.org. 2009, File: Roentgen-Roehre, Internet, http://commons.wikimedia.org/wiki/File:Roentgen-Roehre.png

wikipedia.de. 2008, Tonminerale, Internet, http://de.wikipedia.org/wiki/Tonmineral