

Informatik-Praktikum: Absorptionskorrektur für Röntgen-Streuexperimente

Betreuer: Benjamin Klee: 06421 28 22396 ; benjamin.klee@staff.uni-marburg.de

Raum: -1/2040 Neubau Chemie

Gemessen wird die Streuintensität I . Diese Intensität ist die Summe der Streuintensitäten I_i die von jedem Volumenelement i gestreut wird.

$$I = \sum_i A_i I_i$$

Die Intensität der Strahlung nimmt gemäß dem Lambert-Beerschen Gesetz exponentiell mit der in einem Medium zurückgelegten Strecke d ab.

$$A_i = \exp(-\mu_C \cdot d_{C,i} - \mu_S \cdot d_{S,i})$$

Zu berücksichtigen sind die im Probenmaterial (Index S, sample) und im das Probenmaterial umgebende Glas (Index C, cell) zurückgelegten Strecken $d_{S,i}$ und $d_{C,i}$. Diese sind jeweils die Summe der vor und nach dem Streueignis zurückgelegten Strecken. Die sogenannten linearen Massenschwächungskoeffizienten μ sind materialspezifische Konstanten.

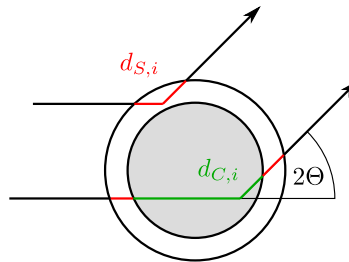


Abbildung 1: Wegstrecken durch Kapillare mit Streuwinkel 2Θ ; 2-dimensional.

Die gestreute Intensität ist in erster Linie abhängig vom sogenannten Streuwinkel 2Θ . Dies ist quasi die absolute Ablenkung von der Richtung des einfallenden Strahls. Die Intensität wird daher abhängig vom Streuwinkel gemessen: $I = I(2\Theta)$. Um den störenden Einfluss der Absorption für die Datenauswertung herauszurechnen müssen gemittelte Absorptionsfaktoren bestimmt werden. Die Mittelung erfolgt dabei über alle streuenden Volumenelemente i .

$$\langle A \rangle = \frac{1}{V} \sum_i V_i \cdot A_i \stackrel{\text{alle } V_i \text{ gleich}}{=} \sum_i V_i$$

Für die rechnerische Umsetzung können daher entweder gleich große Volumenelemente gewählt, oder jeder Beitrag zur Absorption mit dem entsprechenden Volumen gewichtet werden.

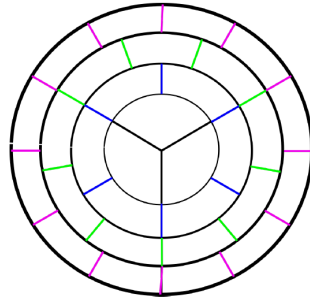


Abbildung 2: Radial, gleiche Volumina.

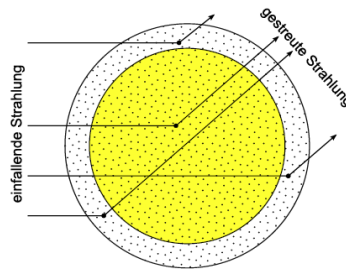


Abbildung 3: Statistisch (Monte-Carlo).

3 unterschiedliche Fälle sind zu betrachten:

- Messung nur in der horizontalen (ebene Geometrie)
- Messung mit Flächendetektor, Daten über Ringsegmente integriert
- Messung mit Flächendetektor, Korrektur der rohen Pixeldaten

Jeweils 3 unterschiedliche Absorptionsfaktoren sind zu berechnen:

- $A_{C,CS}$: Streuung in Zelle, Absorption durch Zelle und Probe
- $A_{S,CS}$: Streuung in Probe, Absorption durch Zelle und Probe
- $A_{C,C}$: Streuung in Zelle, Absorption nur durch (leere) Zelle

Parameter:

- Fallunterscheidung
- Messbereich (z.B. Liste expliziter 2Θ -Werte)
- Innen- und Außendurchmesser bzw. Wandstärke der Kapillare
- Flächendetektor: Abstand, Pixelgröße etc.
- Strahldurchmesser (wenn kleiner als Breite der Kapillare auch Position)
- Materialkonstanten (μ_C und μ_S)

Annahme:

- Kapillare vertikal unendlich ausgedehnt

Anforderungen:

- Maximal 1% Abweichung (Testen mit sehr exakter Rechnung als Vergleich)
- Schnelle Rechnung < 1 min falls möglich (Symmetrien nutzen)
- Selbsterklärend zu bedienen (kleine Anleitung oder so)
- Ausführbares Programm für Windows und Linux

Bonusziel:

- Beliebiges Strahlprofil in Bezug auf Form (z.B. rund) und Intensitätsverteilung (z.B. in der Mitte intensiver wegen Fokussierung)