

ECAP-2008-002

# Modellierung und Simulation physikalischer Eigenschaften photonenzählender Röntgenpixeldetektoren für die Bildgebung

Der Naturwissenschaftlichen Fakultät  
der Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg  
zur  
Erlangung des Doktorgrades



vorgelegt von  
Jürgen Durst  
aus Gunzenhausen

Als Dissertation genehmigt von der Naturwissen-  
schaftlichen Fakultät der Universität Erlangen-Nürnberg

Tag der mündlichen Prüfung:	22. Juli 2008
Vorsitzender der Promotionskommission:	Prof. Dr. Eberhard Bänsch
Erstberichterstatter:	Prof. Dr. Gisela Anton
Zweitberichterstatter:	Prof. Dr. Erhard Steffens

# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>Photonenzählende Röntgendetektoren am Beispiel der Detektoren der Medipix-Familie</b>	<b>3</b>
<b>3</b>	<b>Wechselwirkung von Röntgenphotonen mit Materie</b>	<b>9</b>
3.1	Photoeffekt . . . . .	9
3.2	Comptonstreuung . . . . .	10
3.3	Rayleighstreuung . . . . .	11
3.4	Paarbildung . . . . .	11
3.5	Sekundäreffekte: Fluoreszenzen, Augereffekt . . . . .	12
3.6	Propagation der Sekundärelektronen . . . . .	13
<b>4</b>	<b>Physikalische Grenzen der Ortsauflösung</b>	<b>15</b>
4.1	Einfluss der Reichweite von Sekundärelektronen auf die Ortsauflösung . .	15
4.2	Einfluss von Fluoreszenzen auf die Ortsauflösung . . . . .	19
4.3	Einfluss von Streuprozessen auf die Ortsauflösung . . . . .	23
4.4	Zusammenfassung . . . . .	24
<b>5</b>	<b>Energiedepositionsspektrum bei pixelierten Detektoren</b>	<b>25</b>
5.1	Abhängigkeit von der Primärenergie . . . . .	26
5.2	Abhängigkeit von der Pixelgröße am Beispiel von CdTe . . . . .	31
5.3	Abhängigkeit von der Sensordicke am Beispiel von CdTe . . . . .	32
<b>6</b>	<b>Transport von Ladungsträgern im Sensormaterial</b>	<b>35</b>
6.1	Variation der Anzahl erzeugter Elektron-Loch-Paare . . . . .	37
6.2	Lebenszeit der Ladungsträger . . . . .	39
6.3	Drift . . . . .	39
6.4	Diffusion . . . . .	41
6.5	Repulsion . . . . .	41
6.6	Umsetzung in der Monte-Carlo-Simulation . . . . .	42
<b>7</b>	<b>Signalerzeugung an den Pixelelektroden</b>	<b>45</b>
7.1	Wichtungspotential . . . . .	46
7.2	Influenzierung von Strömen . . . . .	47
7.3	Simulation von influenzierten Strömen . . . . .	49
7.4	Umsetzung in der Monte-Carlo-Simulation . . . . .	50
7.5	Relevanz der Berücksichtigung influenzierter Signale in Abhängigkeit vom Material . . . . .	51

7.6	Verarbeitung der Ladungssignale durch die Pixelelektronik . . . . .	52
7.7	Zusammenhang zwischen Energieantwortspektrum und Schwelle bei zählenden Detektoren . . . . .	53
<b>8</b>	<b>Bildqualitätskriterien bildgebender Systeme</b>	<b>57</b>
8.1	Abbildung eines Signals . . . . .	57
8.2	Abbildung von Rauschen . . . . .	57
8.3	Signal-Rausch-Verhältnis SNR . . . . .	58
8.4	Die detektierbare Quanteneffizienz DQE . . . . .	58
8.5	Die Linienbildfunktion LSF . . . . .	58
8.6	Die Modulationstransferfunktion MTF . . . . .	58
<b>9</b>	<b>DQE photonenzählender Röntgendetektoren</b>	<b>61</b>
9.1	Problem bei der Bestimmung des Signal-Rausch-Verhältnisses . . . . .	61
9.2	Multiplizitätsbetrachtungen . . . . .	62
9.3	DQE photonenzählender Detektoren - Theorie . . . . .	63
<b>10</b>	<b>Experimentelle Bestimmung von Multiplizität und DQE photonenzählender Röntgendetektoren</b>	<b>65</b>
10.1	Experimentelle Bestimmung der DQE . . . . .	65
10.2	Experimentelle Bestimmung der Multiplizität . . . . .	66
10.3	Clusteranalyse und Clustertypcharakterisierung . . . . .	66
10.4	Fehlerrechnung zu Multiplizitäten . . . . .	70
10.5	Beispiele . . . . .	76
<b>11</b>	<b>Abhängigkeit der DQE von der Energieschwelle</b>	<b>85</b>
11.1	Schwellenabhängigkeit der Effizienz . . . . .	86
11.2	Schwellenabhängigkeit der Multiplizität . . . . .	86
11.3	Schwellenabhängigkeit des Multiplizitätsfaktors . . . . .	87
11.4	Schwellenabhängigkeit der DQE . . . . .	87
11.5	Einfluss der Transportphänomene im Sensormaterial auf das Detektorantwortspektrum . . . . .	88
11.6	Abhängigkeit der DQE von der Primärenergie . . . . .	91
11.7	Einfluss der Mehrfachzählungen und der Diskriminatorschwelle auf die LSF	100
11.8	Einfluss der Mehrfachzählungen auf die MTF . . . . .	104
<b>12</b>	<b>Zusammenfassung</b>	<b>107</b>
<b>13</b>	<b>Summary</b>	<b>109</b>
	<b>Anhang</b>	<b>111</b>
<b>A</b>	<b>ROSI - Roentgen Simulation</b>	<b>113</b>
A.1	Funktionsprinzip von ROSI . . . . .	113
A.2	Evaluierung von ROSI und LSCAT-GISMO . . . . .	114
A.3	Evaluierung der Physik in EGS4/LSCAT . . . . .	116

A.4	Tipps zur Verwendung von Datencontainern . . . . .	119
<b>B</b>	<b>PEGS - Materialfiles für ROSI</b>	<b>123</b>
B.1	Erzeugung einer Materialdatei . . . . .	123
B.2	Wahl der Parameter für Comptonstreuung in PEGS . . . . .	125
B.3	Wahl des verwendeten Modells für die „Electron Impact Ionisation“ . . . . .	125
B.4	Wahl der Parameter für Stoßbremsvermögen in PEGS . . . . .	126
B.5	Wahl der Parameter für Strahlungsbremsvermögen IAPRIM . . . . .	126
<b>C</b>	<b>Medipix-Detektorklasse für ROSI zur Simulation photonenzählender Detektoren</b>	<b>127</b>
C.1	Implementierte Physik . . . . .	127
C.2	Dokumentation des Benutzerinterface . . . . .	128
<b>D</b>	<b>Übersicht über für die Simulationen verwendete Parameter</b>	<b>135</b>
D.1	Simulation des Einflusses physikalischer Wechselwirkungen . . . . .	135
D.2	Simulation photonenzählender Detektoren . . . . .	135
	<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>139</b>



# 1 Einleitung

Wilhelm Conrad Röntgen entdeckte 1895 die nach ihm benannten Röntgenstrahlen (engl. „X-ray“). Diese sind imstande, Material zu durchdringen, aber auch Film zu schwärzen, so dass sich zum ersten Mal die Möglichkeit ergab, in das Innere des menschlichen Körpers zu sehen. In der Folgezeit wurde das Röntgen zu einer Standardmethode, um Verletzungen im Inneren des Körpers zu diagnostizieren.

Im Zeitalter der Digitalisierung wurden elektronische Detektoren entwickelt, welche die Röntgenstrahlung absorbieren und die deponierte Energie aufintegrieren. Dabei unterscheidet man zwischen indirekt und direkt konvertierenden Detektoren. Die indirekt konvertierenden Methoden arbeiten mit Szintillatoren, das Signal wird in Form von Licht detektiert. Bei direkt konvertierenden Detektoren kommt ein Halbleiter als Sensormaterial zum Einsatz, in welchem freie Elektron-Loch-Paare erzeugt werden, die durch ein angelegtes elektrisches Feld abgesaugt werden und so ein Signal in der Elektronik erzeugen.

Standard im industriellen Einsatz sind bisher integrierende Röntgenpixeldetektoren für beide Konversionsvarianten. Diese liefern als Ausgabe an den Benutzer die insgesamt innerhalb einer bestimmten Messzeit in jedem Pixel deponierte Energie, wobei die Anzahl und Energie der einzelnen absorbierten Photonen nicht mehr zugänglich ist. Diese Detektoren liefern aufgrund von Dunkelstrom auch ein Signal, wenn keine Röntgenstrahlung vorliegt.

Die neueste Generation von pixelierten Röntgendetektoren arbeitet photonenzählend, d. h. das von einem einzelnen Röntgenphoton erzeugte Signal wird von einer in jedem Pixel vorhandenen Elektronik mit einer Diskriminatorschwelle verglichen. Dabei kommt meist ein ladungsempfindlicher Verstärker in jedem Pixel zum Einsatz, wodurch die Signalhöhe proportional zur deponierten Energie ist. Zu kleine Signale, erzeugt durch einen Dunkelstrom bzw. durch absorbierte Photonen mit sehr niedriger Energie, werden durch die Schwelle unterdrückt. Zählende Detektoren können zwischen einzelnen Ereignissen unterscheiden, wodurch prinzipiell auch die Energieinformation einzelner Röntgenphotonen zugänglich wird, beispielsweise durch Verwendung mehrerer Schwellen. Diese zusätzliche Information öffnet eine Reihe von neuen Möglichkeiten in der Bildgebung wie z. B. Materialrekonstruktion [1, 2]. In Kapitel 2 wird die zu dieser Generation von Röntgenpixeldetektoren zählende Familie der Medipixdetektoren vorgestellt.

In Kapitel 3 werden die für die Energiedeposition im Sensor verantwortlichen Prozesse erklärt. Die sich dadurch ergebenden physikalischen Limitierungen der Ortsauflösung werden in Kapitel 4 erörtert, während in Kapitel 5 das sich aufgrund dieser Limitierungen durch die Pixelierung ergebende ideale Energiedepositionsspektrum dargestellt wird.

In realen Detektoren entspricht das Signal jedoch nicht allein dem Energiedepositionsspektrum. Es spielen auch Transporteffekte im Sensormaterial und Eigenschaften der Pixelelektronik eine wichtige Rolle. Die dabei relevanten physikalischen Effekte wurden in einer Monte-Carlo-Simulation eines photonenzählenden Röntgenpixeldetektors in Form einer wiederverwendbaren Detektorklasse implementiert. Kapitel 6 beschreibt die im Sen-

sormaterial berücksichtigten Effekte, während Kapitel 7 die Influenzierung von Signalen in der Elektrodenebene und den Einfluss der Pixelelektronik selbst erklärt.

Bei photonenzählenden Pixeldetektoren können durch ein einzelnes Photon mehrere Zählereignisse in verschiedenen Pixeln ausgelöst werden. Aufgrund dieser Korrelation zeigt die Gesamtzahl der Zählereignisse in einer Detektormatrix ein vom Poissonrauschen abweichendes Rauschverhalten, was sich auch auf Bildqualitätskriterien auswirkt. Nach einer kurzen Einführung in gängige Bildqualitätskriterien (Kapitel 8) führt Kapitel 9 eine für photonenzählende Detektoren gültige Formel zur Bestimmung der detektierbaren Quanteneffizienz (DQE) ein, welche im Rahmen dieser Arbeit entwickelt wurde. Diese berücksichtigt die Korrelation zwischen mehreren von einem einzelnen Röntgenquant ausgelösten Zählereignissen. Wie die für die Berechnung der DQE nötige mittlere Multiplizität experimentell bestimmt werden kann und welche Fehler dabei auftreten können, wird in Kapitel 10 gezeigt.

Schließlich werden in Kapitel 11 beispielhaft mit dieser Simulation erhaltene Ergebnisse zur Schwellenabhängigkeit der DQE präsentiert. Dabei wird insbesondere auf den Einfluss der verschiedenen in der Simulation berücksichtigten physikalischen Effekte sowie auf das für den Medipix3-Detektor neuartige Konzept der Ladungssummierung zwischen benachbarten Pixeln eingegangen.

Außerdem finden sich im Anhang Angaben zur technischen Umsetzung der Simulation und zu den verwendeten Programmpaketen wie Materialfiles (PEGS), dem Röntgensimulationspaket ROSI allgemein und der Anwendung von ROSI zur Simulation eines photonenzählenden Detektors.

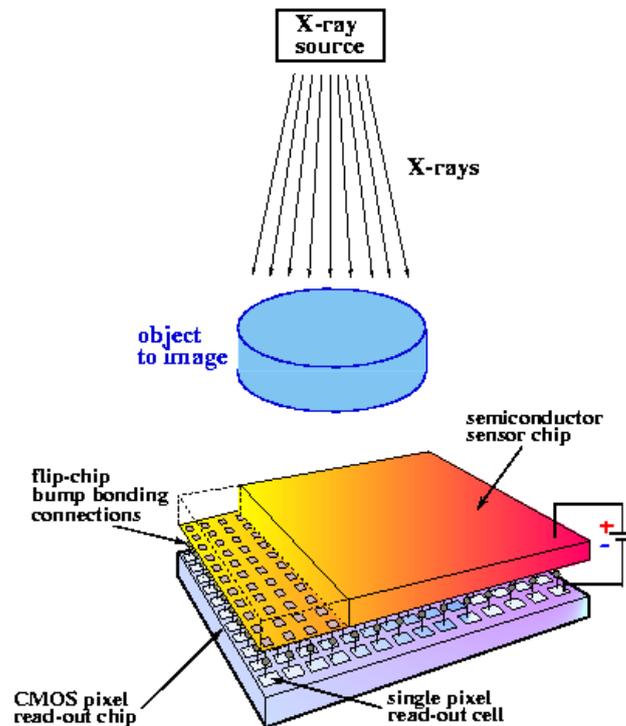
## 2 Photonenzählende Röntgendetektoren am Beispiel der Detektoren der Medipix-Familie

Aufgrund des schnellen Fortschritts in der Halbleiterindustrie wurde es möglich, mehr Funktionalität in die Pixelelektronik eines Röntgendetektors zu implementieren. Neben den bewährten integrierenden Detektoren wurden zunehmend andere Konzepte wie photonenzählende oder spektroskopische Röntgenpixeldetektoren interessant und rückten in den Bereich der Realisierbarkeit. Am Beispiel der Medipix-Detektoren soll hier zunächst die neuartige Generation der photonenzählenden Halbleiter-Pixeldetektoren vorgestellt werden.

In den 90er Jahren wurde am CERN in Genf die internationale Medipixkollaboration [3] gegründet, um das Konzept eines zählenden Röntgenpixeldetektors umzusetzen. Der große Vorteil bestand ursprünglich darin, dass solch ein Detektor ohne eintreffende Röntgenstrahlung rauschfrei ist, weil der Zählmechanismus aufgrund einer unteren Energieschwelle imstande ist, Rauschen zu unterdrücken.

Neben der Medipixkollaboration gibt es noch eine Reihe weiterer hauptsächlich in Europa angesiedelter Gruppen, die an solchen Konzepten arbeiten. Einige davon seien im Folgenden genannt:

- **PILATUS:** Die an der Swiss Light Source (SLS) in Villingen entwickelten PILATUS-Detektoren [4, 5] besitzen noch relativ große Pixel mit einer Kantenlänge von  $172\ \mu\text{m}$ . Bei der Entwicklung wurde vor allem Wert auf Strahlenhärte und auf die Produktion von großflächigen (größer  $40 \times 40\ \text{cm}^2$ ) aus mehreren Auslesebausteinen zusammengesetzten Detektorssystemen gelegt.
- **XPAD:** Im Rahmen des XPAD-Projektes am ESRF in Grenoble wurden bereits die dritte Generation der XPAD-Auslesechips entwickelt. Dort wurden spezielle bezüglich der Sammlung von Elektronen bzw. Löchern optimierte photonenzählende Detektoren realisiert, der XPAD3C und der XPAD3S [6]. Die Pixelgröße beträgt jeweils  $130\ \mu\text{m}$ .
- **MPEC:** An der Universität Bonn werden seit 1997 die Detektoren der MPEC-Reihe mit einer Kantenlänge der Pixel von  $200\ \mu\text{m}$  entwickelt. Bei diesen Detektoren können die Energieschwellen der einzelnen Pixel sehr gut abgeglichen werden. Diese Gruppe verwendet neben Silizium auch Cadmiumtellurid als Sensormaterial [7].
- **DIXI:** Der an der Universität in Uppsala entwickelte DIXI-Detektor [8, 9] besitzt quadratische Pixel mit einer Kantenlänge von  $270\ \mu\text{m}$ . Die Besonderheit ist hier, dass die Elektronik jedes Pixel zwei Zähler enthält, so dass zwei Aufnahme in sehr



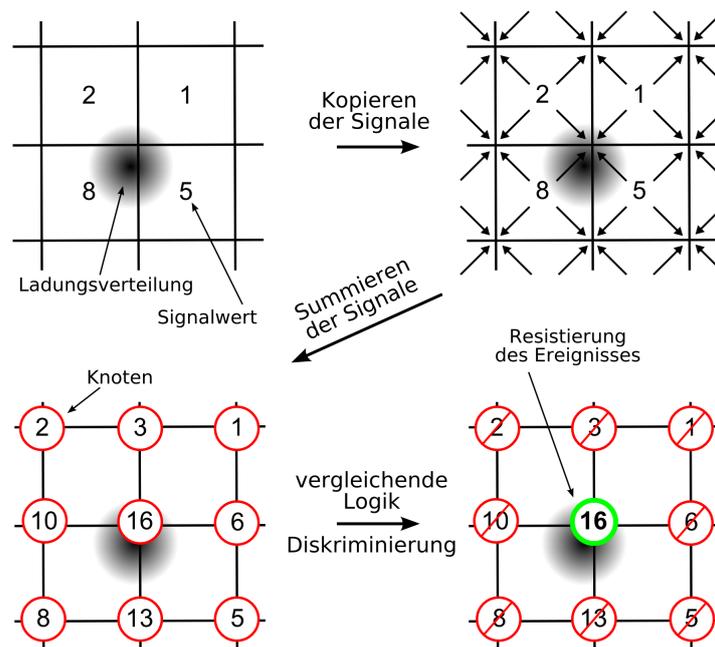
**Abbildung 2.1** Schematische Darstellung eines hybriden Pixeldetektors wie zum Beispiel die Detektoren der Medipixfamilie [10]

kurzem zeitlichen Abstand durchgeführt werden können, bevor beide Aufnahmen ausgelesen werden.

Das Medipix-Detektorsystem ist ebenso wie viele dieser Systeme hybrid aufgebaut, d. h. Sensormaterialien und Auslesechips können unabhängig voneinander ausgewählt und weiterentwickelt werden. Abbildung 2.1 zeigt schematisch den Aufbau. Der Halbleitersensor dient zur direktkonvertierenden Röntgenabsorption, wodurch in diesem freie Elektron-Loch-Paare erzeugt werden. Mit einem über eine am Sensor angelegte Spannung erzeugten elektrischen Feld werden Elektronen und Löcher getrennt und abgesaugt. Der Sensor ist über Bondperlen mittels „Flip-Chip-Bumpbonding“ mit dem Elektronikchip (ASIC) verbunden.

Der Elektronikchip besteht aus einem Array von Pixelzellen, wobei jeder Pixel seine eigene Elektronik besitzt. Diese besteht im Wesentlichen aus einem ladungsempfindlichen Vorverstärker, einer einstellbaren Energievergleichsschwelle und einem Zähler. Das am Vorverstärker anliegende Signal wird von diesem über die Zeit integriert und verstärkt, so dass ein Ausgangssignal mit einer Höhe proportional zur am Eingang des Vorverstärkers anliegenden Ladung entsteht. Die Schwelle gibt das Kriterium vor, ab welcher Signalhöhe und damit ab welcher Energie ein Zählereignis ausgelöst wird.

Der Medipix1 [11] sollte das Potential dieser Technologie zeigen und hatte noch eine relativ große Pixelgröße von  $170 \times 170 \mu\text{m}^2$ . Die Erfahrungen mit dem Medipix1 flossen in



**Abbildung 2.2** Schematische Veranschaulichung des Ladungssammlungsmodus des Medipix3 [15]

die Entwicklung des Nachfolgechips ein, wobei das Hauptziel darin bestand, eine deutlich größere Pixelzahl auf dem Chip unterzubringen. Die Pixelgröße des Mexipix2 [12] ist  $55 \times 55 \mu\text{m}^2$  auf einer Matrix von  $256 \times 256$  Pixeln. Aktuelles Modell dieser Generation ist der Medipix2-MXR [13], welcher verbesserte Temperaturstabilität und genauer einstellbare Schwellen besitzt. Ein „Split-off“ des Medipix2 ist der Timepix-Chip [14], welcher neben dem zählenden Modus durch Vergleich mit einer Schwelle wie beim Medipix2 noch zwei weitere Arbeitsmodi besitzt. Mit diesen kann zum einen eine absolute Zeitinformation von Ereignissen bzw. zum anderen die Zeit bestimmt werden, wie lange das Ausgangssignal des Vorverstärkers oberhalb der Schwelle liegt. Diese Zeit ist im Wesentlichen proportional zur bei einem Ereignis von diesem Pixel gesammelten Ladungsmenge. Der Timepix wird in dieser Arbeit nicht weiter behandelt und ist nur der Vollständigkeit halber hier mit aufgeführt.

Ein Nachteil pixelierter Detektoren besteht darin, dass die von einem einzelnen Röntgenquant im Sensor deponierte Ladung aufgrund von verschiedenen physikalischen Effekten ein Zählereignis in mehreren Pixeln hervorrufen kann. Dieses Phänomen wird allgemein mit „Charge Sharing“ bezeichnet. Dadurch wird das Leistungsvermögen dieses Konzeptes für kleine Pixelgrößen begrenzt. Die Medipix3-Kollaboration verfolgt daher das Ziel, in der Pixelzelle des Medipix3 [16] mehr Funktionalität unterzubringen. Eine neue Fähigkeit besteht in einer in der Pixelelektronik integrierten ereignisweisen Kommunikation mit Nachbarn, wodurch die auf mehrere Pixel verteilte Ladung so aufsummiert werden kann, dass nur ein Pixel zählt, solange sich die Ladung nur auf benachbarte Pixel verteilt. Dieser Modus wird mit „Charge-Summing“-Modus bezeichnet. Die Arbeitsweise ist in Abbildung 2.2 schematisch dargestellt.

Die Elektronik der Detektoren der Medipixfamilie erzeugt also aus dem vom Sensor her am Eingang des Pixels ankommenden Stromsignal über einen ladungsempfindlichen Verstärker einen Spannungspuls, dessen Höhe proportional zur Ladung des Stromsignals ist, so dass die Vergleichsschwelle direkt als Energieschwelle betrachtet werden kann. Dieser Puls besitzt eine annähernd linear abfallende Flanke mit kleiner Steigung. Die Länge des Pulses beträgt etwa  $1\mu s$ , wodurch die maximal erreichbare Zählrate pro Pixel auf etwa 100 kHz beschränkt wird. Durch einen auf den ladungsempfindlichen Verstärker folgenden impulsformenden Verstärker kann eine schmalere Pulsform erreicht werden. Prinzipiell sind auch andere Varianten der Pixelelektronik denkbar, z.B. eine Variante die mit einer schnellen Elektronik nur den Strompuls unter möglichst guter Beibehaltung von dessen Form verstärkt.

Für bildgebende Systeme werden photonenzählende Detektoren üblicherweise bei einer festen Energieschwelle betrieben. Jedoch läßt sich bei gleichbleibendem Röntgenfluss durch mehrere Messungen bei verschiedenen Einstellungen der Energieschwelle und anschließender Differenzbildung der einzelnen Messungen auch das Detektorantwortspektrum bestimmen. Der Medipix3 wird mehrere unabhängige Schwellen pro Pixel besitzen, so dass direkt ein in Energiekanäle einsortiertes Spektrum aufgenommen werden kann.

Tabelle 2.1 listet die wichtigsten Eigenschaften der einzelnen Medipix-ASICs auf. Die neueren Varianten eignen sich aufgrund kleinerer durch die Elektronik verursachte Rauschbeiträge (ENC) und genauer einstellbaren Energieschwellen besser zur Aufnahme von Antwortspektren.

Eine detaillierte Beschreibung des Medipix2-ASICs und seiner Varianten findet sich in der Dissertation des Chipentwicklers Xavier Llopart Cudié [13].

**Tabelle 2.1** Eigenschaften der Chips der Medipixfamilie (Quelle der Daten: [13]).

	Medipix1	Medipix2	Mpix2MXR20	Medipix3
Verfügbarkeit	1998	2002	2006	geplant 2008
quadratische Pixelgröße [ $\mu\text{m}$ ]	170	55	55	55
Matrix	$64 \times 64$	$256 \times 256$	$256 \times 256$	$256 \times 256$
CMOS-Technologie		$0.25 \mu\text{m}$	$0.25 \mu\text{m}$	$0.13 \mu\text{m}$
Polarität (+:Löcher, -:Elektronensammlung)	+	-/+	-/+	-/+
äquivalente Rauschladung ENC [e- rms]	$\approx 250$	160	110	72-210
Schwellenvariation (unkalibriert) [e- rms]	$\approx 500$	450	400	55-110
Schwellenvariation (kalibriert) [e- rms]	$\approx 100$	120	95	55-110
niedrigste Schwelle [ e- ]	$\approx 1500$	$\approx 1100$	$\approx 900$	
Anzahl möglicher Schwellenwerte	256	256	1024	
Zählertiefe	32767	8001	11810	
maximale Zählrate	$\approx 2 \text{ MHz}$	$100 \text{ kHz/Pixel}$	$100 \text{ kHz/Pixel}$	
Überlaufbit	nein	nein	ja	ja



# 3 Wechselwirkung von Röntgenphotonen mit Materie

## Inhaltsangabe

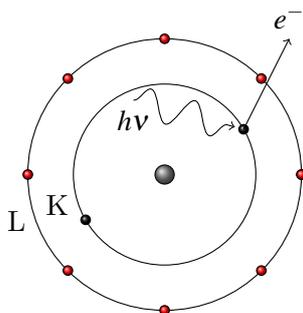
---

<b>3.1</b>	<b>Photoeffekt</b> . . . . .	<b>9</b>
<b>3.2</b>	<b>Comptonstreuung</b> . . . . .	<b>10</b>
<b>3.3</b>	<b>Rayleighstreuung</b> . . . . .	<b>11</b>
<b>3.4</b>	<b>Paarbildung</b> . . . . .	<b>11</b>
<b>3.5</b>	<b>Sekundäreffekte: Fluoreszenzen, Augereffekt</b> . . . . .	<b>12</b>
<b>3.6</b>	<b>Propagation der Sekundärelektronen</b> . . . . .	<b>13</b>
3.6.1	Bremsstrahlung . . . . .	13
3.6.2	Elektron-Elektron-Streuung . . . . .	13

---

In diesem Kapitel sollen zunächst die möglichen Wechselwirkungen von Röntgenstrahlung mit Materie, wie z.B. dem Sensormaterial des Detektors, aufgeführt werden. Es gibt verschiedene Möglichkeiten, wie die Photonen der Röntgenstrahlung mit Materie wechselwirken können. Im diagnostisch medizinischen Energiebereich sind dies Photoeffekt, Comptonstreuung und kohärente Streuung. [17, 18]

## 3.1 Photoeffekt



**Abbildung 3.1** Schematische Darstellung des Photoeffekts

Der häufig dominante Prozess ist der *Photoeffekt*: Übersteigt die Energie  $E_0$  des einfallenden Röntgenphotons die Bindungsenergie  $E_B$  eines Hüllenelektrons eines Atoms, so kann ein solches Hüllenelektron herausgeschlagen werden. Dabei wird das Photon absorbiert und seine überschüssige Energie als kinetische Energie  $E_{kin}$  an das Elektron übertragen:

$$E_{kin} = E_0 - E_B \tag{3.1}$$

Aufgrund der Impulserhaltung ist der Photoeffekt nur an gebundenen Elektronen möglich, der Rückstoß wird vom Atomkern übernommen. Der Wirkungsquerschnitt für den Photoeffekt an einem Elektron einer inneren Schale ist deutlich größer als bei einem Elektron einer äußeren Schale, falls die Energie des Photons die Bindungsenergie des Elektrons übersteigt. Je nach Material entfallen bei einer Energie knapp oberhalb der K-Kante etwa 80-90% des totalen Wirkungsquerschnitts auf die Absorption eines Photons in der K-Schale. Für steigende Energie ( $E \ll 511 \text{ keV}$ ) sinkt der Wirkungsquerschnitt etwa mit der dritten Potenz der Energie, für Materialien mit höherer Ordnungszahl  $Z$  steigt der Wirkungsquerschnitt mit  $Z^n$ , wobei  $n$  zwischen 3 und 3,5 liegt [19]:

$$\sigma(E) \propto E^{-k} \quad 3 < k < 4 \quad (3.2)$$

$$\sigma(Z) \propto Z^n \quad 3 < n < 3,5 \quad (3.3)$$

Infolge des Photoeffekts kann durch Sekundärprozesse (siehe Abschnitt 3.5) charakteristische Röntgenstrahlung freiwerden.

### 3.2 Comptonstreuung

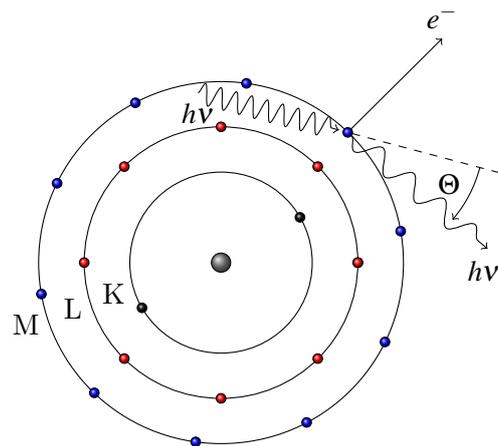


Abbildung 3.2 Schematische Darstellung einer Comptonstreuung

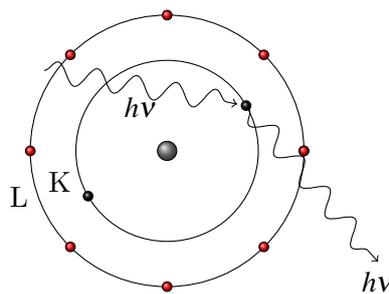
Eine weitere Interaktionsmöglichkeit von Röntgenstrahlung und Materie ist der *Comptoneffekt*. Hierbei werden Röntgenphotonen inkohärent an Hüllenelektronen gestreut. Teile der Energie  $E_0$  und des Impulses des einfallenden Photons werden auf das Hüllenelektron übertragen. Dabei ergibt sich eine Richtungsänderung des Photons, welches nach der Streuung die Energie  $E$  hat. Streuwinkel  $\theta$  und Energieübertrag  $E_e$  hängen über die Klein-Nishina-Formel zusammen:

$$E = \frac{E_0}{1 + \frac{E_0}{m_0c^2} (1 - \cos \theta)} \quad (3.4)$$

$$E_e = (1 - \cos \theta) \frac{E_0}{1 + \frac{E_0}{m_0c^2} (1 - \cos \theta)} \quad (3.5)$$

wobei  $m_0$  die Ruhemasse des Elektrons ist [18]. Es gibt eine feste Zuordnung zwischen Streuwinkel und Energieübertrag. Die Energie der Comptonelektronen ist kontinuierlich bis zum maximalen Energieübertrag bei Rückwärtsstreuung des Photons ( $\theta = 180^\circ$ ). Die maximale Energie des Comptonelektrons nennt man auch Compton-Kante. Im Vergleich zur Photoabsorption dominiert die Compton-Streuung vor allem bei leichten Atomen und größeren Photonenenergien (einige hundert keV).

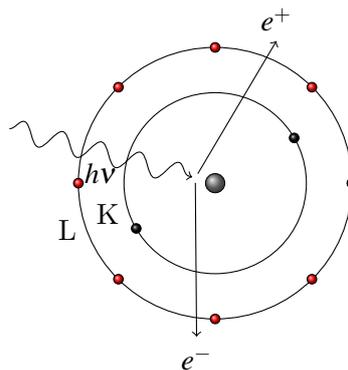
### 3.3 Rayleighstreuung



**Abbildung 3.3** Schematische Darstellung einer Rayleighstreuung

Eine kohärente elastische Streuung an allen Elektronen eines Atoms wird als *Rayleigh-Streuung* bezeichnet. Dabei ändert das Röntgenquant zwar seine Richtung, aber nicht seine Energie. Die Information über die ursprüngliche Ausbreitungsrichtung geht verloren.

### 3.4 Paarbildung



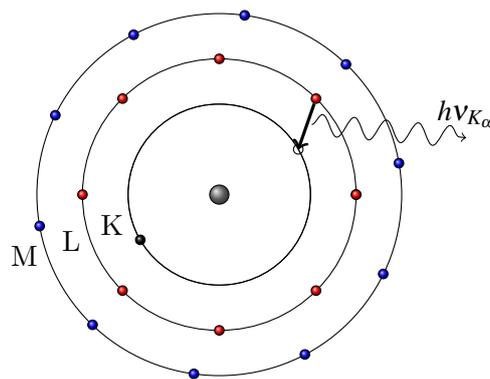
**Abbildung 3.4** Schematische Darstellung einer Paarbildung

Bei Energien deutlich über dem diagnostisch relevanten Energiebereich kann es noch zur *Paarbildung* kommen. Dabei wird ein Photon im Coulomb-Feld eines Atomkerns in ein Elektron-Positron-Paar umgewandelt. Elektron und Positron werden vorwiegend in der ursprünglichen Richtung des Photons emittiert. Der Kern erfährt einen Rückstoßimpuls,

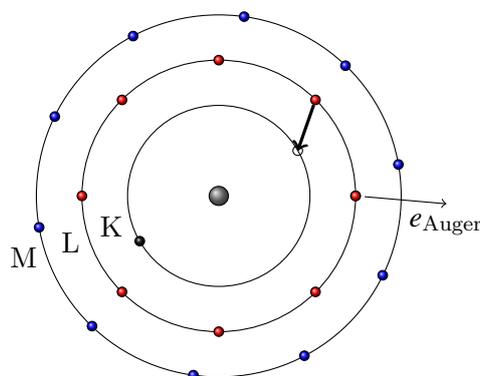
so dass die Impulserhaltung gewährleistet ist. Die Paarbildung kommt aber aufgrund der Ruhemassen von Elektron und Positron erst ab Energien von mehr als der doppelten Ruhemasse vor ( $2 \cdot 511 \text{keV}$ ). Auf die beiden Teilchen verteilt sich die Photonenergie abzüglich dieser  $1022 \text{keV}$  als kinetische Energie.

### 3.5 Sekundäreffekte: Fluoreszenzen, Augereffekt

Infolge von Photoeffekt bzw. Compton-Streuung entstehen angeregte Atomrümpfe mit fehlenden Elektronen in den Schalen. Diese Lücken können durch Elektronen aus höheren Schalen aufgefüllt werden, wobei die Differenz der Bindungsenergien beider beteiligter Schalen freiwerden kann. Dies kann einerseits in Form von Fluoreszenzphotonen erfolgen, wie schematisch in Abbildung 3.5 gezeigt. Auch eine strahlungslose Relaxation ist möglich, dabei wird ein weiteres Hüllenelektron frei, so dass anschließend beispielsweise statt einer Lücke in der K-Schale zwei Lücken in weniger gebundenen Schalen entstehen (siehe Abbildung 3.6). Diese Lücken können auch wieder von Elektronen höherer Schalen aufgefüllt werden, allerdings ist hier die Energiedifferenz nicht mehr so groß.



**Abbildung 3.5** Schematische Darstellung der Emission eines Fluoreszenzphotons, strahlungsbehaftete Relaxation



**Abbildung 3.6** Schematische Darstellung der Emission eines Augerelektrons, strahlungslose Relaxation

Als Grundlage für die in dieser Arbeit entwickelte Simulation photonenzählender Detektoren dient die Monte-Carlo-Simulation ROSI [20, 21]. Eine kurze Beschreibung der Arbeitsweise von ROSI findet sich im Anhang A. Die Evaluierung der enthaltenen Wechselwirkungen zeigte, dass Übergänge mit niederenergetischen Fluoreszenzen zum Teil zusammengefasst bzw. vernachlässigt wurden. Im Anhang A.3 sind die verschiedenen implementierten Übergänge aufgelistet.

## 3.6 Propagation der Sekundärelektronen

Aufgrund ihrer Ladung breiten sich Elektronen nicht wie Photonen geradlinig durch Materie aus, sondern erfahren ständig Wechselwirkungen, die zum Energieverlust der Elektronen führen. Dabei unterscheidet man zwischen Ionisationsverlusten und Strahlungsverlusten.

### 3.6.1 Bremsstrahlung

Bei der Wechselwirkung mit dem Coulombfeld der Atomkerne des durchdrungenen Materials werden Elektronen abgelenkt. Dabei wird aufgrund der Richtungsänderung ein Teil der kinetischen Energie des Elektrons in Form von Bremsstrahlung frei. Dieser Prozess tritt vor allem bei Energien im Bereich von MeV auf. Im diagnostisch medizinisch relevanten Energiebereich beträgt sein Anteil nur wenige Prozent. Der Wirkungsquerschnitt steigt etwa linear mit der Energie der streuenden Elektronen und auch etwa linear mit der Ordnungszahl  $Z$  der durchdrungenen Materie ( $\propto Z^2/A$ ,  $A$  = Massenzahl) [19]. Die Anzahl der von einem Elektron während seiner Ausbreitung erzeugten Bremsstrahlungsphotonen steigt etwa quadratisch mit der Anfangsenergie des Elektrons.

### 3.6.2 Elektron-Elektron-Streuung

Wesentlich häufiger findet die Ablenkung von Elektronen durch Elektron-Elektron-Streuung statt. Elektronen stoßen auf ihrem Weg durch die Materie mit gebundenen Elektronen und geben dabei kinetische Energie an diese ab, gleichzeitig findet eine Impulsänderung statt. Je nach Streuparameter kann man dabei zwei Bereiche unterscheiden [22].

#### Møllerstreuung

Für kleine Werte des Streuparameters, d. h. im klassischen Bild für frontalen Stoß (engl. „head-on impacts“) des Elektrons mit einem Elektron der streuenden Materie, wird ein großer Teil der Energie auf dieses Elektron übertragen. Dabei ist bei Überwindung der Bindungsenergie auch eine Ionisation des entsprechenden Atoms möglich. Diese Stöße sind eher selten, der zugehörige Wirkungsquerschnitt findet sich in der Literatur häufig unter dem Stichwort „Electron impact ionisation“ (EII) (z. B. [23–25]). Das in der Elektronenhülle entstehende Loch wird durch Relaxationsprozesse unter Emission von Fluoreszenzphotonen bzw. Augerelektronen wieder durch weniger stark gebundene Elektronen aus höheren Schalen aufgefüllt.

In Monte-Carlo-Simulationen werden dagegen häufig alle Prozesse, bei denen ein Elektron während seiner Ausbreitung ein freies Sekundärelektron mit genügend hoher Energie

( $E \geq E_{\text{cut}}$ ) durch Elektron-Elektron-Streuung erzeugt, als diskrete Møller-Streuung zusammengefasst.

#### **Kontinuierlicher Energieverlust**

Deutlich wahrscheinlicher findet ein streifender Zusammenstoß statt, bei welchem nur ein sehr kleiner Impulsübertrag stattfindet. Dabei muss das Elektron, welches diesen Impuls aufnimmt, nicht unbedingt aus seiner Elektronenhülle herausgelöst werden. Die übertragene Energie kann im Festkörper in Form von Gitterschwingungen (Phononen) bzw. erzeugten Elektron-Loch-Paaren deponiert werden.

In Monte-Carlo-Simulationen werden häufig alle Prozesse, die Energie im Material deponieren bzw. an Elektronen nicht genügend Energie ( $E < E_{\text{cut}}$ ) übergeben, als kontinuierlicher Energieverlust zusammengefasst.

# 4 Physikalische Grenzen der Ortsauflösung

## Inhaltsangabe

---

4.1	Einfluss der Reichweite von Sekundärelektronen auf die Ortsauflösung . . . . .	15
4.2	Einfluss von Fluoreszenzen auf die Ortsauflösung . . . . .	19
4.3	Einfluss von Streuprozessen auf die Ortsauflösung . . . . .	23
4.4	Zusammenfassung . . . . .	24

---

Für einen idealen Detektor wäre es wünschenswert, wenn die Energie des absorbierten Röntgenphotons punktförmig am Ort der ersten Wechselwirkung im Detektormaterial absorbiert würde. In der Realität führt allerdings die Reichweite von Elektronen und Photonen im Sensormaterial zu einer räumlich verteilten Energiedeposition. Diese limitiert für zählende und integrierende Detektoren die erreichbare Ortsauflösung. Zur Korrektur können spezielle Verfahren wie zum Beispiel die Bestimmung des Ladungsschwerpunktes pro Ereignis angewendet werden. Auch mit einer Bestimmung des Schwerpunktes wird die Ortsauflösung nicht beliebig gut. In diesem Kapitel werden Abschätzungen zur Limitierung der Ortsauflösung durch die bis zur Energiedeposition im Sensormaterial relevanten physikalischen Prozesse gemacht.

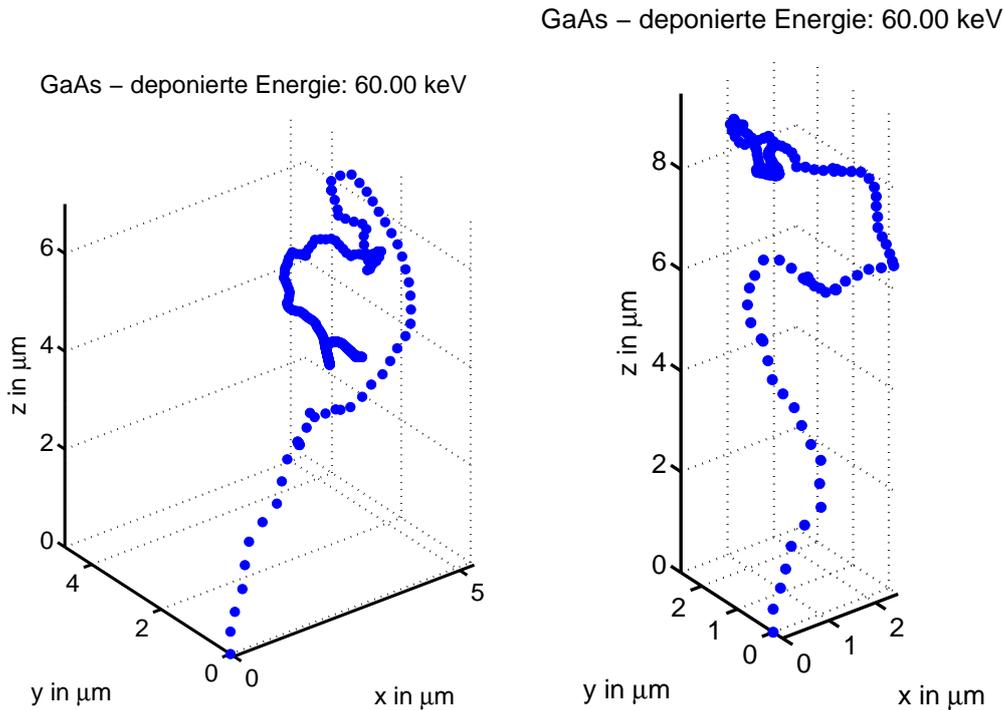
### 4.1 Einfluss der Reichweite von Sekundärelektronen auf die Ortsauflösung

Für niedrige Röntgenenergien dominiert die Absorption durch Photoeffekt. Dabei werden Photoelektronen erzeugt. Die Reichweite dieser Photoelektronen im Sensormaterial ist einer der Faktoren, die die maximal mögliche Ortsauflösung von direktkonvertierenden Röntgendetektoren limitieren. Aufgrund seiner Ladung bewegt sich ein Sekundärelektron durch das Sensormaterial auf einem nahezu zufälligen Weg, wobei bei höheren Energien kleine Ablenkungen gegenüber größeren Ablenkungen dominieren und der Pfad noch eine Vorzugsrichtung besitzt. Eine solche Ausbreitung durch Materie nennt man Zufallsbewegung (engl. „random walk“). Abbildung 4.1 zeigt beispielhaft zwei Wege eines Elektrons mit Startflugrichtung entlang der  $z$ -Achse, wie sie mit einer Monte-Carlo-Simulation berechnet wurden.

Während seiner Ausbreitung gibt das Elektron in Streuprozessen Energie an das umgebende Material ab, wobei der Energieverlust  $dE$  pro Wegstrecke  $dx$  mit dem energieabhängigen Bremsvermögen  $S(E_{e^-})$  über

$$dE = -S(E_{e^-}) dx \tag{4.1}$$

zusammenhängt. Das Bremsvermögen ist für ein bestimmtes Material jeweils direkt proportional zur Dichte dieses Materials. Es beschreibt den mittleren Energieverlust von



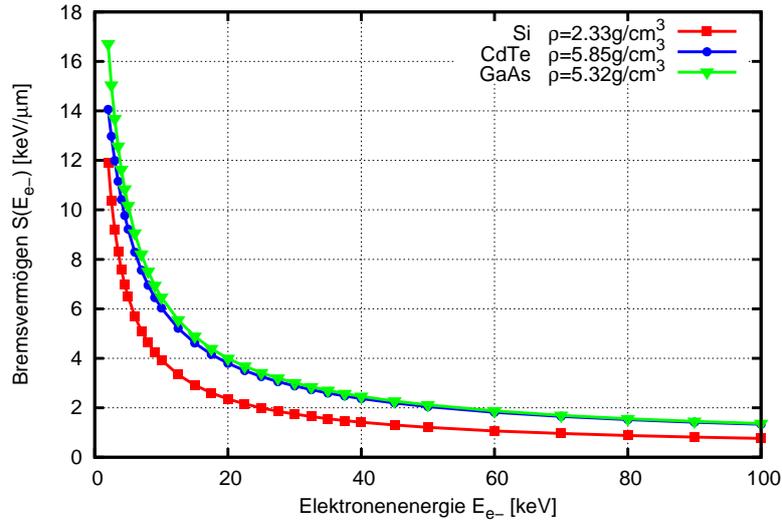
**Abbildung 4.1** Beispiel für zwei Zufallspfade (random walks) von Elektronen mit Anfangsenergie 60keV durch GaAs.

Elektronen pro zurückgelegtem Wegstück. Das Bremsvermögen lässt sich mit der Bethe-Formel [26, 27] berechnen. Abbildung 4.2 zeigt den Verlauf in Abhängigkeit von der Elektronenenergie für Silizium, GaAs und CdTe. Elektronen geben z. B. in Galliumarsenid der Dichte  $5.32g/cm^3$  zunächst eine Energie im Bereich von  $1 - 4keV/\mu m$  an das Material ab, gegen Ende ihres Pfades steigt die pro Längeneinheit abgegebene Energie allerdings stark an. Auch die Richtungsänderungen werden dann größer, so dass sich gegen Ende des Pfades näherungsweise eine kugelförmige Ladungsverteilung ergibt, im Vergleich zu einer näherungsweise, stückweise zylinderförmigen Ladungsverteilung solange das Elektron noch relativ hohe Energie hat. Dieses Verhalten lässt sich auch in den beiden Zufallspfaden aus Abbildung 4.1 erkennen.

Aus dem Bremsvermögen lässt sich mit Hilfe folgender Formel die mittlere Pfadlänge des Elektronenweges berechnen, wobei ein gleichmäßiges Abbremsen des Elektrons entsprechend des Bremsvermögens zugrunde gelegt wird:

$$R_{CSDA} = \int_{10eV}^{E_{e^-}} \frac{dE}{S(E)} \quad (4.2)$$

Diese CSDA-Reichweite (engl. „continuous slowing down approximation“) entspricht in etwa dem maximal möglichen Abstand der letzten Energiedeposition zum Erzeugungsort des Elektrons. Mit Hilfe einer Simulation der Energiedeposition vieler Elektronen, die am Ursprung in z-Richtung starten, kann in Abhängigkeit von der Startenergie der Elektronen die Reichweite bestimmt werden, innerhalb welcher ein bestimmter Teil der Gesamtener-



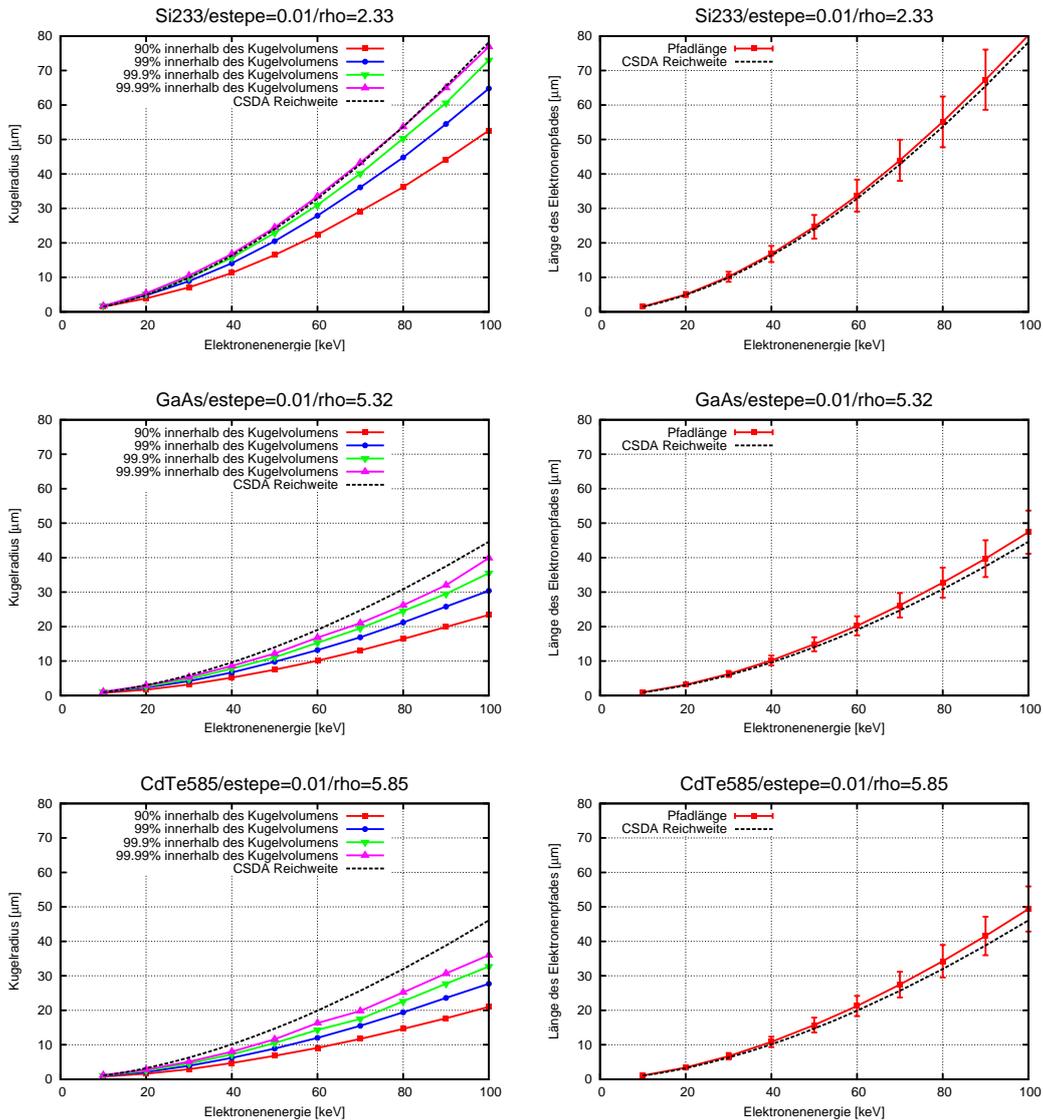
**Abbildung 4.2** Bremsvermögen in Abhängigkeit von der Energie der Elektronen für verschiedene Materialien (Quelle der Daten: [28]). Laut Quelle liegt die Genauigkeit der Daten im Energiebereich von 10keV bis 100keV bei 2 – 3% für Materialien mit niedriger Ordnungszahl  $Z$ , bei 5 – 10% für hohe Ordnungszahl  $Z$ .

gie deponiert wird. Abbildung 4.3 zeigt einen Vergleich der CSDA-Reichweiten mit den Kugelradien, innerhalb welcher 90, 99, 99.9 bzw 99.99% der Energie deponiert werden. Dabei wurden nur Ereignisse berücksichtigt, bei welchen keine Photonen (Bremsstrahlung, Fluoreszenzphotonen nach Elektron-Elektron-Streuung) erzeugt werden. Es zeigt sich, dass innerhalb eines Abstandes der CSDA-Reichweite praktisch die gesamte Energie deponiert wird. Tatsächlich ist der maximale Abstand der Energiedeposition eines einzelnen Elektrons nur einen Bruchteil der CSDA-Reichweite vom Erzeugungsort entfernt, da der Weg des Elektrons vor allem gegen Ende stark gekrümmt ist.

Die mittlere Pfadlänge in den rechten Diagrammen von Abbildung 4.3 stimmt jeweils relativ gut mit der CSDA-Reichweite überein.

In der Monte-Carlo-Simulation ROSI werden Materialdaten benutzt, welche vom Programm PEGS4 (siehe Anhang B) erzeugt werden. Für eine korrekte Simulation der Länge des Elektronenpfades muss bei diskreter Behandlung von Bremsstrahlungsverlusten und Elektron-Elektron-Streuungen mit Energien größer einer Grenzenergie (Møller) für die kontinuierliche Energiedeposition ein eingeschränktes Bremsvermögen verwendet werden, welches die Bremsanteile dieser diskreten Ereignisse nicht enthält. Dadurch ergibt sich für Ereignisse, bei welchen zufällig kein solches diskretes Ereignis vorkommt, eine Pfadlänge, die länger ist als die CSDA-Reichweite. In den Diagrammen zur Pfadlänge von Abbildung 4.3 ergibt sich daher eine geringfügig längere mittlere Pfadlänge. Die Streuung der Pfadlänge ist darin begründet, dass das Eintreten von Streuungen ein statistischer Prozess ist und für die diskret betrachteten Energiedepositionsvorgänge auch als solcher simuliert wird.

Für Energien bis 100keV ergibt sich bei Silizium eine Ortsverteilung der Energiedeposition von bis zu 80 $\mu\text{m}$ , für CdTe bzw. GaAs von bis zu 45 $\mu\text{m}$ . Die tatsächliche



**Abbildung 4.3** CSDA-Reichweite für Si, GaAs und CdTe im Vergleich zu den Radien, innerhalb welcher 90, 99, 99.9 bzw. 99.99% der Energie durch Elektronen deponiert werden bzw. im Vergleich zur Pfadlänge des Elektronenweges (Daten für die CSDA-Reichweite aus [28]).

Elektronenbahn ist stark verwinkelt, sie ähnelt dem Gang eines Betrunknen („drunken man’s walk“). Die maximale Entfernung, die das Elektron erreicht, ist in den meisten Fällen deutlich kleiner als die CSDA-Reichweite. Das Verhältnis der CSDA-Reichweite zu dieser maximalen Entfernung nennt man Umwegfaktor  $X$ . Für Cadmium liegt dieser im Energiebereich von 20 bis 100 keV zwischen 1,8 und 2,3. Es läßt sich daher festhalten, dass die Ortsauflösung durch die Reichweite der Elektronen im Energiebereich bis 100 keV auf einige  $10\mu\text{m}$  begrenzt wird.

**Tabelle 4.1 Fluoreszenzphotonen in den Halbleitermaterialien Si, GaAs und CdTe.**

Vergleich der Reichweite der Fluoreszenzphotonen von Si ( $\rho = 2.33\text{g/cm}^3$ ), GaAs ( $\rho = 5.32\text{g/cm}^3$ ) bzw. CdTe ( $\rho = 5.85\text{g/cm}^3$ ) in dem Sensormaterial, in welchem sie erzeugt wurden (Datengrundlage: Energien der Fluoreszenzen aus [29], photoelektrischer Massenabsorptionskoeffizient aus [30])

Material	Energie der K-Kante in keV	K-Fluoreszenz in keV		1/e Reichweite in $\mu\text{m}$	
		$K_{\alpha_1}$	$K_{\beta_1}$	$K_{\alpha_1}$	$K_{\beta_1}$
Si	1,8389	1,740	1,836	12	14
Ga	10,3671	9,252	10,264	40	56
As	11,8667	10,544	11,726	16	21
Cd	26,7112	23,174	26,095	129	179
Te	31,8138	27,472	30,995	65	89

## 4.2 Einfluss von Fluoreszenzen auf die Ortsauflösung

Im Gegensatz zu Elektronen wechselwirken Photonen deutlich seltener mit Materie und haben daher deutlich größere Reichweiten. Für die Röntgenphotonen, die auf ein Detektormaterial senkrecht auftreffen, spielt die genaue Position der Absorption, d.h. die Tiefe innerhalb des Sensors, in welcher absorbiert wird, zunächst keine Rolle. Allerdings können z.B. in Folge einer Absorption durch Photoeffekt Fluoreszenzphotonen entstehen, die mit einer isotropen Winkelverteilung erzeugt werden. Da sich Photonen geradlinig ausbreiten, läßt sich mit dem Gesetz von Lambert-Beer

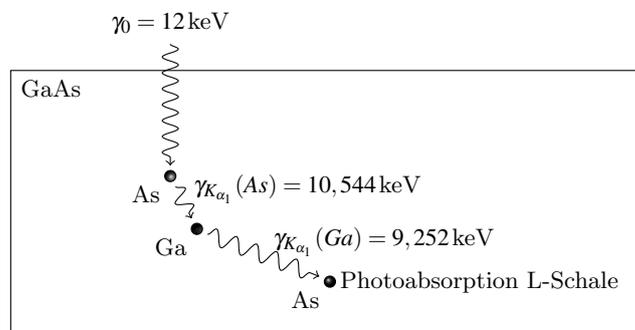
$$I(z) = I(0) \cdot e^{-\mu(E)\rho z} \quad (4.3)$$

die 1/e-Reichweite bzgl. Photoeffekt bestimmen, innerhalb welcher bei dem Bruchteil 1/e aller Photonen kein Photoeffekt stattfand. Dabei ist für  $\mu(E)$  der energieabhängige Massenabsorptionskoeffizient des Materials einzusetzen. Tabelle 4.1 gibt diese Reichweite für Fluoreszenzphotonen von Silizium in Silizium, von Gallium bzw. Arsen in Galliumarsenid sowie von Cadmium bzw. Tellur in Cadmiumtellurid an. Da für Silizium die Fluoreszenz bei einer Energie unter 2keV liegt, spielt diese aufgrund ihrer im medizinisch diagnostisch relevanten Energiebereich von 10 – 100keV mit der Elektronenreichweite von Photoelektronen vergleichbaren Reichweite keine Rolle.

Anders verhält es sich bei Sensormaterialien mit höherer Ordnungszahl, bei welchen die Energien der Fluoreszenzphotonen in der Größenordnung der Energie der Primärstrahlung liegen. Hierzu soll die mit der Monte-Carlo-Simulation ROSI simulierte räumliche Energiedeposition bzw. die Projektion dieser Energiedeposition auf die Detektorgrundfläche betrachtet werden. In den Simulationen wurde ein Sensormaterial von unten mit einem senkrecht auf diesen auftreffenden monoenergetischen Nadelstrahl bestrahlt. Dabei wurden für jedes Sensormaterial Energien knapp unterhalb bzw. oberhalb der K-Kante gewählt.

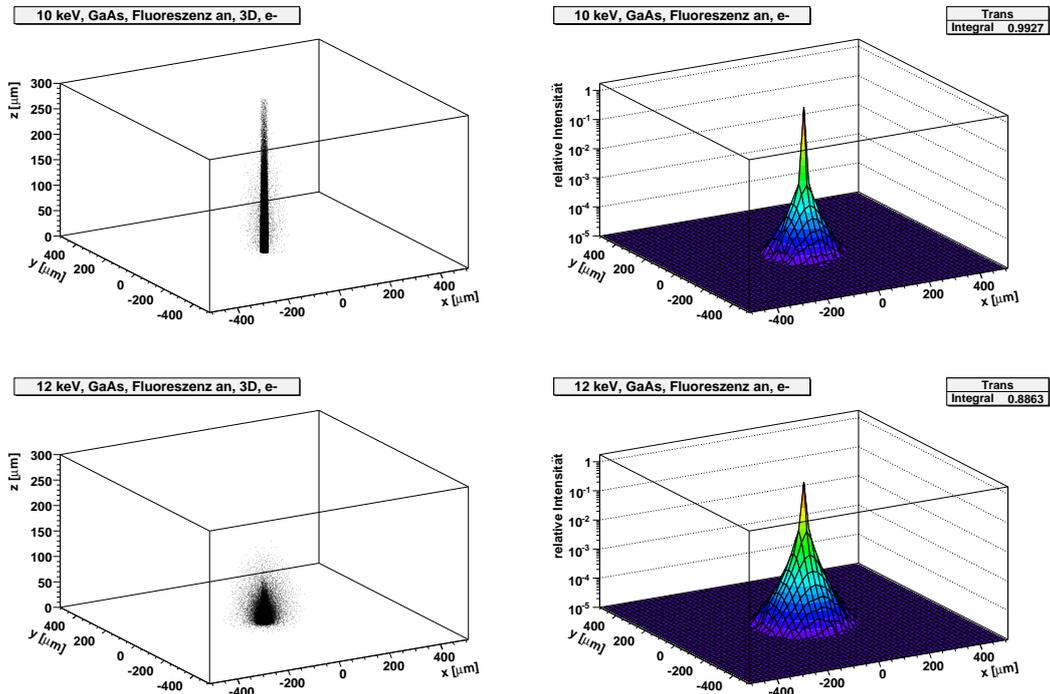
Für einen  $300\mu\text{m}$  dicken GaAs-Sensor mit Röntgenphotonen der Energie 10 bzw. 12keV zeigen die linken Bilder in Abbildung 4.5 die räumliche Energiedeposition. Es ist deutlich

zu erkennen, dass Photonen mit einer Energie von 12 keV wesentlich weniger tief in das Material eindringen als Photonen mit einer Energie unterhalb der K-Kante, da der Wirkungsquerschnitt für Photoeffekt deutlich höher ist. Stattdessen ergibt sich eine in lateraler Richtung deutlich breitere Verteilung. Auf der rechten Hälfte der Abbildung ist jeweils die Projektion auf die xy-Ebene dargestellt, mit einer logarithmischen Energieskala in z-Richtung. Es ist eine deutliche laterale Verbreiterung der Energiedeposition durch Fluoreszenzphotonen zu erkennen. Abbildung 4.6 zeigt die radiale Abhängigkeit der Energiedeposition für diese Anordnung. Dargestellt ist jeweils die Energiedeposition innerhalb eines Zylinders mit Radius  $r$  um den Nadelstrahl. Während bei einer Energie von 10 keV fast die gesamte Energie innerhalb der CSDA-Reichweite der Elektronen von etwa  $1\ \mu\text{m}$  deponiert wird, werden bei 12 keV im Mittel ca. 30% der Energie durch Fluoreszenzphotonen weiter entfernt deponiert. In der Simulation ist es auch möglich, einzelne physikalische Effekte anzubzw. auszuschalten. Ein Deaktivieren von Fluoreszenzen führt dann zu einer räumlichen Deposition der Fluoreszenzenergie am Ort des Photoeffektes. So konnte überprüft werden, dass die räumlich breitere Energiedeposition bei 12 keV auf die Reichweite von Fluoreszenzphotonen zurückzuführen ist. Um einen Vergleich mit der Reichweite von Elektronen herzustellen, kann man das Volumen betrachten, innerhalb welchem 99% der Fluoreszenzphotonen wieder absorbiert werden. Dieser Radius entspricht viereinhalb  $1/e$ -Reichweiten, liegt für GaAs somit bei ca.  $200\ \mu\text{m}$ . Die Fluoreszenzen des Arsens liegen energetisch noch oberhalb der K-Kante von Gallium und haben daher nur eine relativ kurze Reichweite, allerdings kann für das selbe Ereignis trotzdem noch ein Gallium-Fluoreszenzphoton erzeugt werden (siehe Skizze in Abbildung 4.4). Da  $K_\alpha$ -Fluoreszenzen etwa um eine Größenordnung häufiger auftreten als  $K_\beta$ -Fluoreszenzen [29] wird die Verbreiterung im Wesentlichen durch die  $K_\alpha$ -Fluoreszenzen von Gallium bestimmt.

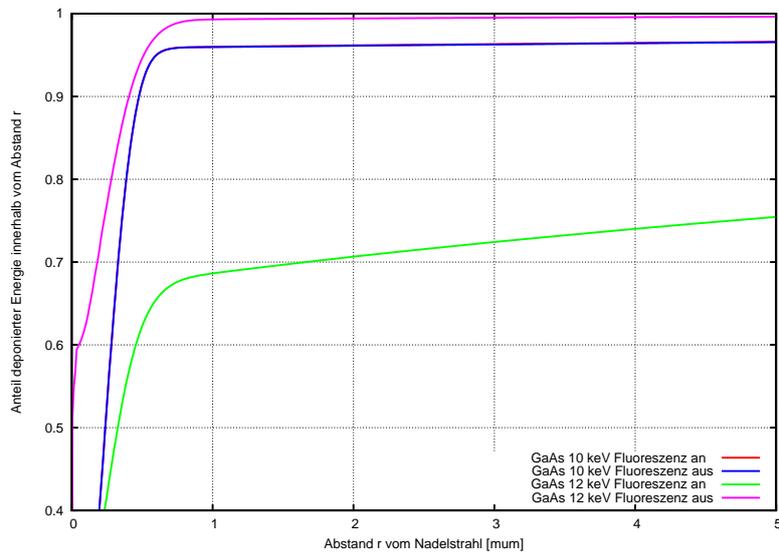


**Abbildung 4.4** Skizze eines möglichen Ereignisses mit Erzeugung eines Arsenfluoreszenzphotons, welches anschließend wieder durch Photoeffekt an einem Galliumatom absorbiert wird. Dabei kann ein weiteres Fluoreszenzphoton entstehen.

Die Simulation wurde auch für einen  $1600\ \mu\text{m}$  dicken CdTe-Sensor durchgeführt. Es ergibt sich ein ähnliches Verhalten. Der Einfluss der Fluoreszenz ist nochmal beispielhaft direkt an der K-Kante von Cd gezeigt (siehe Abbildung 4.7). Bis zu einer Energie von  $26,7112\ \text{keV}$  ist ein Photoeffekt bzw. Comptonstreuung an einem Elektron der K-Schale nicht möglich und daher die Eindringtiefe relativ groß. Fluoreszenzen können nur durch



**Abbildung 4.5** Energiedeposition in GaAs für Energien unterhalb bzw oberhalb der K-Kanten von Ga und As.



**Abbildung 4.6** Anteil der in GaAs deponierten Energie in Abhängigkeit vom Abstand zum Nadelstrahl. Hinweis: Die beiden Kurven für 10keV liegen fast übereinander.

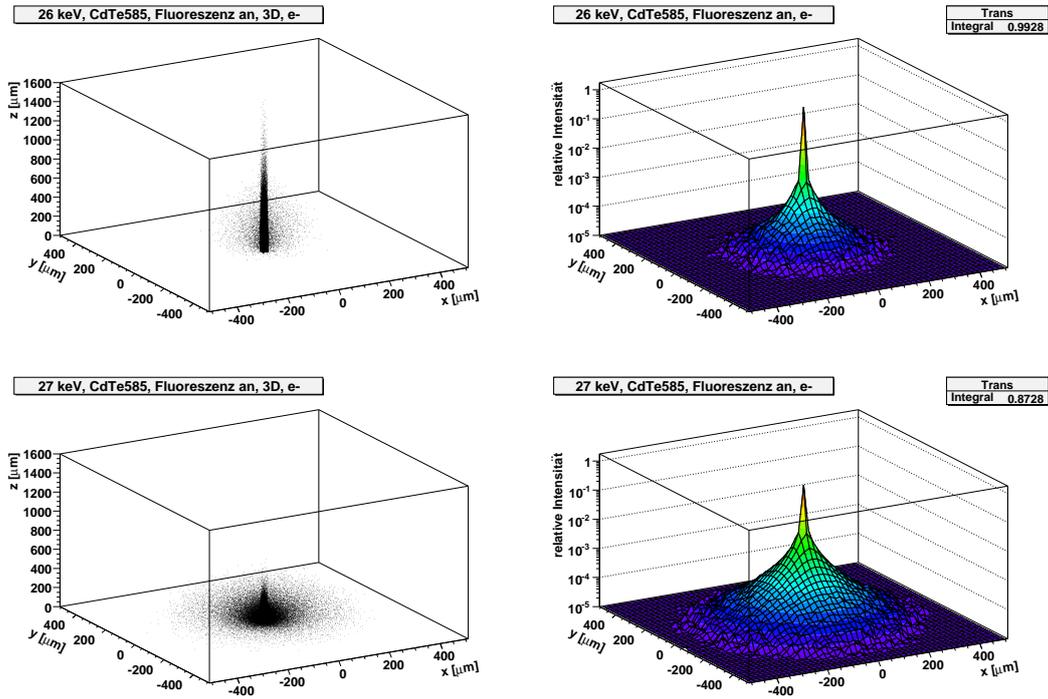


Abbildung 4.7 Energiedeposition in CdTe für Energien nahe der K-Kante von Cd.

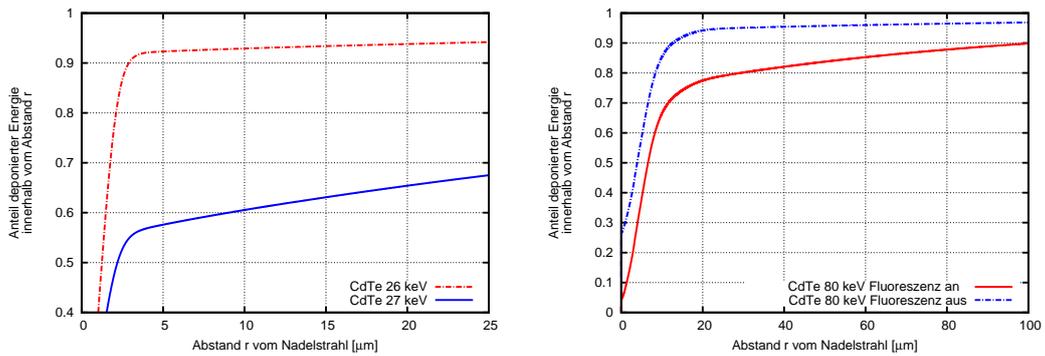


Abbildung 4.8 Radiale Abhängigkeit der Energiedeposition für CdTe.

Anteil der in CdTe deponierten Energie in Abhängigkeit vom Abstand zum Nadelstrahl. Der linke Graph zeigt einen Vergleich der radialen Energiedeposition für Photonenenergien knapp unterhalb bzw. knapp oberhalb der K-Kante von Cd. Im rechten Bild wird der Einfluss der Fluoreszenzen für höhere Photonenenergien wie beispielsweise 80keV sichtbar.

Löcher in niederenergetischen Schalen entstehen. Diese haben allerdings auch nur relativ kleine Energien von wenigen keV.

Ab einer Energie von 26,7112 keV ist dagegen Photoeffekt bzw. Comptonstreuung an der K-Schale des Cadmiums möglich, wobei der Photoeffekt sehr wahrscheinlich ist und daher dominiert. Die Eindringtiefe ist daher nur noch sehr klein. Die entstehenden Fluoreszenzphotonen mit Energien um 23 keV haben eine relativ große Reichweite. Sie werden isotrop erzeugt und erzeugen daher einen großen Beitrag zur Verbreiterung der radialen Verteilung der Energiedeposition.

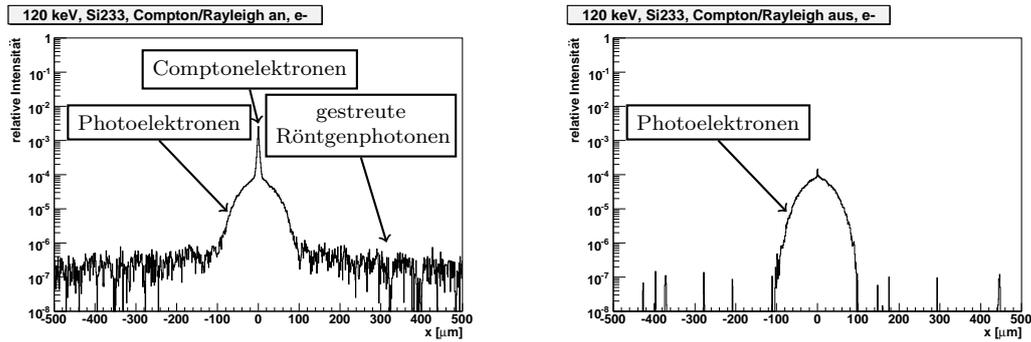
Ein Anteil von 99% der Fluoreszenzphotonen wird innerhalb von ca. 600  $\mu\text{m}$  wieder absorbiert. Auch hier dominieren die  $K_{\alpha}$ -Fluoreszenzen des leichteren Elements (Cadmium).

Abbildung 4.8 zeigt die innerhalb eines Projektionsradius deponierte Energie für die beiden eben genannten Energien nahe der Energie der K-Schale. Für Röntgenquanten mit 26 keV wird im Mittel 90% der Energie innerhalb eines Projektionsradius  $r < 5 \mu\text{m}$  deponiert. Bei einer Energie knapp oberhalb der K-Schale werden im Mittel 90% der Energie innerhalb eines deutlich größeren Projektionsradius von 135  $\mu\text{m}$  deponiert. Bei einer Energie von 80 keV wird 90% der Energie innerhalb eines Projektionsradius von  $r < 105 \mu\text{m}$  deponiert. Der größere 90%-Radius für 27 keV gegenüber 80 keV liegt daran, dass bei diesen Energien die Fluoreszenzphotonen relativ zur Energie des einfallenden Röntgenquants einen wesentlich größeren Anteil der Energie wegtransportieren.

Neben der Verschlechterung der Ortsauflösung beeinflussen Fluoreszenzen auch die Energieantwort. Dies wird in Kapitel 5 beschrieben.

### 4.3 Einfluss von Streuprozessen auf die Ortsauflösung

Bei höheren Energien bekommen Streueffekte einen größeren Einfluss, wobei bei Sensormaterialien mit kleinerer Ordnungszahl Streueffekte bereits bei kleinerer Energie dominieren können. Für Silizium beispielsweise dominieren Compton- und Rayleighstreuungen zusammen bereits bei Energien über 52 keV gegenüber der Absorption durch Photoeffekt. Für einen 2 mm dicken Siliziumsensor wurde die räumliche Energiedeposition durch 120 keV Röntgenphotonen untersucht. Abbildung 4.9 zeigt die Projektion der Energiedeposition auf die x-Achse der Detektorgrundfläche. Durch Abschalten von Comptoneffekt und Rayleighstreuung in der Simulation ROSI können die Beiträge zugeordnet werden. Bei dieser Energie dominiert die Comptonstreuung bereits extrem, so dass ein sehr großer Betrag der Energiedeposition auf Comptonelektronen mit einer Energie von bis zu 38,3 keV zurückzuführen ist. Diese haben aufgrund ihrer begrenzten Energie eine Reichweite von nur wenigen  $\mu\text{m}$  (CSDA-Reichweite für 38 keV-Elektronen ca. 10  $\mu\text{m}$ ). Photoelektronen werden in diesem Fall mit einer Energie von 118 – 120 keV erzeugt und können daher einen relativ großen Weg in Silizium zurücklegen. Die CSDA-Reichweite beträgt in diesem Fall 106  $\mu\text{m}$ . Die gestreuten Photonen selbst haben auf ihrem weiteren Weg durch den Detektor erneut die Möglichkeit, zu wechselwirken, und können daher weit entfernt vom ursprünglichen Auftreffort auf den Detektor absorbiert werden. Dies ergibt den Untergrund in Abbildung 4.9, der sich daher auch wieder aus Energiedeposition durch Photoelektronen und Comptonelektronen zusammensetzt.



(a) Compton-/Rayleighstreuung eingeschaltet

(b) Compton-/Rayleighstreuung ausgeschaltet

**Abbildung 4.9** Das Diagramm zeigt die Projektion der Energiedeposition von 120 keV-Photonen im Sensormaterial Silizium (Dichte  $2.33 \text{ g/cm}^3$ ). Durch Abschalten der Interaktionen Comptonstreuung und Rayleighstreuung können die einzelnen Beiträge separiert werden.

## 4.4 Zusammenfassung

Für Photonenenergien kleiner 100 keV ergibt sich eine energieabhängige und materialabhängige Reichweite der Sekundärelektronen (Photoelektron bzw. Comptonelektron) von bis zu etwa  $50 \mu\text{m}$ . Im Vergleich dazu haben für Sensormaterialien mit einer K-Kante im medizinisch relevanten Energiebereich die Fluoreszenzphotonen eine Reichweite in der Größenordnung von etwa wenigen  $100 \mu\text{m}$ . Da die Energie der Fluoreszenzphotonen nicht von der Primärenergie der Röntgenphotonen abhängt, ergibt sich eine nur materialabhängige Verbreiterung, welche für Primärenergien knapp oberhalb der Fluoreszenzenergien dominiert. Gestreute Röntgenphotonen (Comptonstreuung / Rayleighstreuung) spielen vor allem bei Primärenergien deutlich oberhalb der Fluoreszenzenergien und bei leichten Sensormaterialien eine Rolle. Die Größenordnung der räumlichen Energiedeposition ist dabei energieabhängig und liegt bei vielen  $100 \mu\text{m}$  bis zu einigen cm.

# 5 Energiedepositionsspektrum bei pixelierten Detektoren

## Inhaltsangabe

---

<b>5.1</b>	<b>Abhängigkeit von der Primärenergie . . . . .</b>	<b>26</b>
5.1.1	Silizium . . . . .	26
5.1.2	Cadmiumtellurid . . . . .	28
<b>5.2</b>	<b>Abhängigkeit von der Pixelgröße am Beispiel von CdTe . . .</b>	<b>31</b>
<b>5.3</b>	<b>Abhängigkeit von der Sensordicke am Beispiel von CdTe . .</b>	<b>32</b>

---

Die im vorherigen Kapitel besprochenen Effekte begrenzen bei pixelierten Detektoren die Ortsauflösung. Ist die Pixelgröße kleiner als die Reichweite der Elektronen bzw. getreuten Photonen, tritt der Effekt der Ladungsteilung (engl. „Charge Sharing“) zwischen mehreren Pixeln auf. Dabei müssen die beteiligten Pixel nicht zwangsläufig benachbart sein, da z.B. Fluoreszenzphotonen bei kleinen Pixeln durchaus weiter entfernte Pixel erreichen und dort ihre Energie deponieren können.

Das Energiedepositionsspektrum wird als ein Histogramm der in einem Pixelvolumen deponierten Energie dargestellt. Durch Charge Sharing kann ein Ereignis zu mehreren Einträgen in diesem Histogramm führen.

Kommerzielle Standarddetektoren arbeiten integrierend und summieren die Energiedeposition vieler Röntgenphotonen, die in einem bestimmten Pixel Energie deponiert haben, auf. Betreibt man diese Detektoren mit kleinem Röntgenfluss, kann das Energiedepositionsspektrum gemessen werden. Dabei wirken Beiträge durch Leckstrom oft störend.

Bei idealen zählenden Detektoren wird die in einem Pixel deponierte Energie mit einer Schwelle verglichen und ein Zähler inkrementiert, falls mehr Energie als durch die Schwelle definiert deponiert wurde. Durch einen sogenannten Schwellenscan kann mit diesen Detektoren bei gleichbleibendem Röntgenfluss auch das Energiedepositionsspektrum gemessen werden. Aufgrund des Zählmechanismus bezüglich einer festen Energieschwelle kann mit dieser Methode auch bei höherem Fluss das Energiedepositionsspektrum bestimmt werden.

Solange in Detektoren keine Kommunikation mit Nachbarpixeln implementiert ist, beinhaltet das Energiedepositionsspektrum die maximal erreichbare Energieauflösung.

Dieses Kapitel stellt Simulationen des Energiedepositionsspektrums für ideale Detektoren und Sensormaterialien vor, wobei die dabei auftretenden Signaturen beschrieben werden sollen. Ideal bedeutet hier, dass die sich durch das Bremsvermögen der Sekundärteilchen entlang ihres Weges ergebende Energiedeposition auf die Pixelebene projiziert wird. Die Energieantwortspektren von realistischen Detektoren können hiervon aufgrund der Transporteigenschaften im Sensormaterial und aufgrund von Elektronikeigenschaften abweichen (siehe Kapitel 6 und 7).

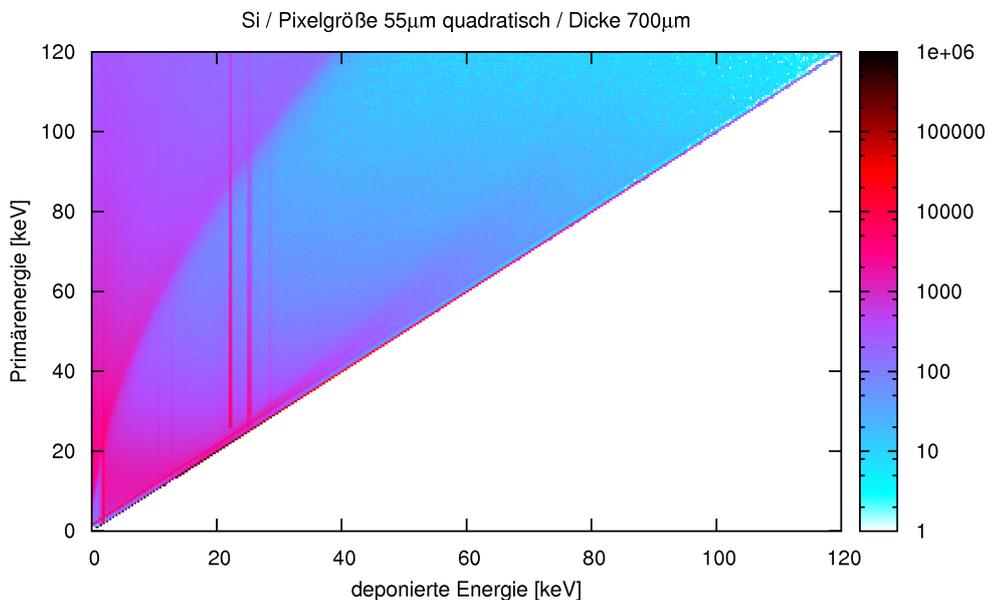
## 5.1 Abhängigkeit von der Primärenergie

Das Energiedepositionsspektrum hängt von der Energie der Röntgenphotonen und dem Sensormaterial ab. Für die nachfolgenden Simulationsergebnisse wurde die in dieser Arbeit entwickelte Simulation für photonenzählende Röntgendetektoren verwendet, welche im Anhang C genauer beschrieben wird. Für die Energiedepositionsspektren wurde jeweils eine Energiekanalgröße (engl. „Bin“) von 250 eV verwendet. Eine vollständige Auflistung der Simulationsparameter findet sich für jedes Diagramm in Anhang D.

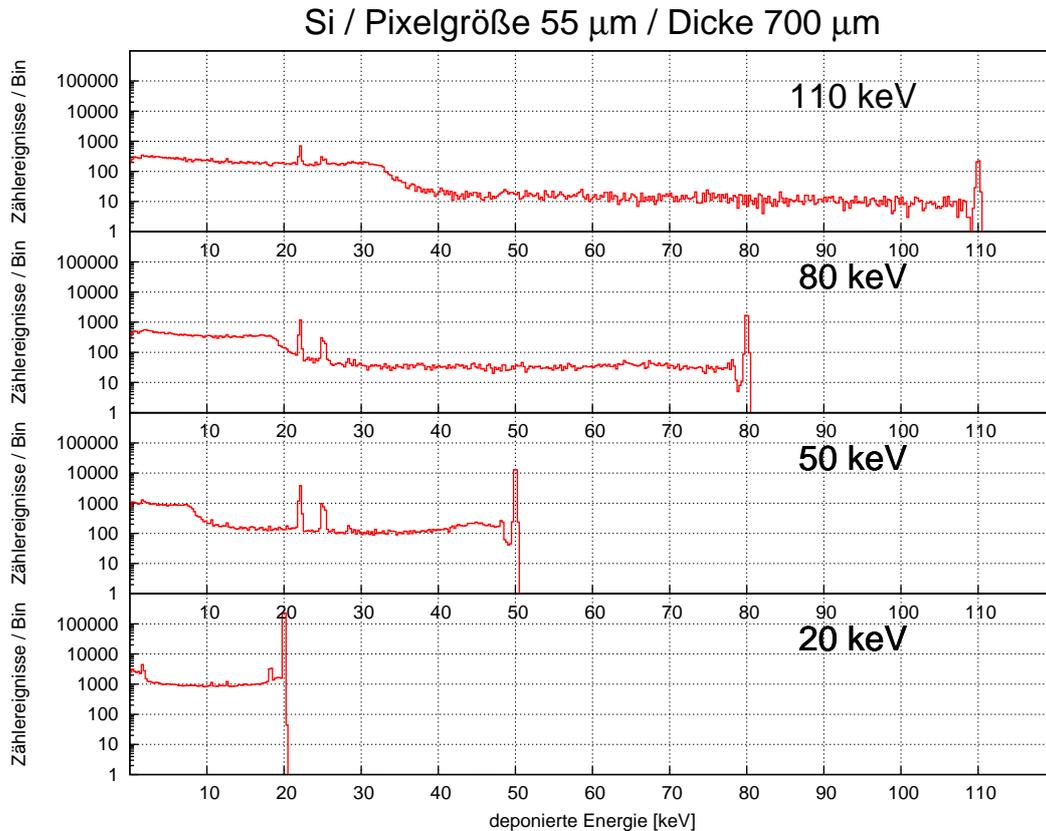
### 5.1.1 Silizium

Der in unserem Institut verwendete Medipix2-Detektor wird sehr häufig mit Silizium als Sensormaterial verwendet. Dabei stehen Sensoren mit einer Dicke von  $300\ \mu\text{m}$  bzw.  $700\ \mu\text{m}$  zur Verfügung.

Das Energiedepositionsspektrum in einer  $700\ \mu\text{m}$  dicken Sensorschicht für  $55\ \mu\text{m}$  Pixelkantenlänge ist in Abhängigkeit von der Energie der Röntgenphotonen in Abbildung 5.1 gezeigt. Für die Primärenergien 20, 50, 80 und 110 keV ist es beispielhaft in Abbildung 5.2 dargestellt. Diese Kurven entsprechen jeweils einem horizontalen Schnitt durch Abbildung 5.1. Man beachte jeweils die logarithmische Auftragung.



**Abbildung 5.1** Energiedepositionsspektrum in einem typischen für den Medipix2-Detektor verwendeten Sensormaterial ( $700\ \mu\text{m}$  Silizium) bei monoenergetischer Bestrahlung in Abhängigkeit von der Primärenergie. Der Medipixdetektor wurde in dieser Simulation inklusive Bondperlen, ASIC, silberhaltigem Wärmeleitkleber und Grundplatte berücksichtigt (siehe Anhang D). Diese Anordnung wird im Folgenden als „Medipixassembly“ bezeichnet.



**Abbildung 5.2** Energiedepositionsspektrum in einem typischen für den Medipix2-Detektor verwendeten Sensormaterial (700  $\mu\text{m}$  Silizium) bei monoenergetischer Bestrahlung für ausgewählte Röntgenenergien. Das Medipixassembly wurde in dieser Simulation berücksichtigt.

Für sehr kleine Energien werden Photonen vorwiegend durch Photoeffekt absorbiert. Dies äußert sich im Energiedepositionsspektrum durch eine Spitze (engl. „Peak“) bei der Primärenergie.

Mit steigender Primärenergie nimmt die Wahrscheinlichkeit für Comptonstreuung im Gegensatz zum Photoeffekt stark zu. Wie bereits im vorherigen Kapitel beschrieben, dominiert Comptonstreuung in Silizium bereits ab Energien von etwa 52 keV. Die Energiedeposition findet in diesem Fall durch Comptonelektronen statt, deren Energie durch die Comptonkante beschränkt ist. In Abbildung 5.1 ist der Beitrag durch Comptonelektronen deutlich sichtbar, da für Energien oberhalb der Comptonkante deutlich weniger Einträge vorhanden sind. Bei sehr hohen Energien ist kaum noch ein Photopeak wahrnehmbar.

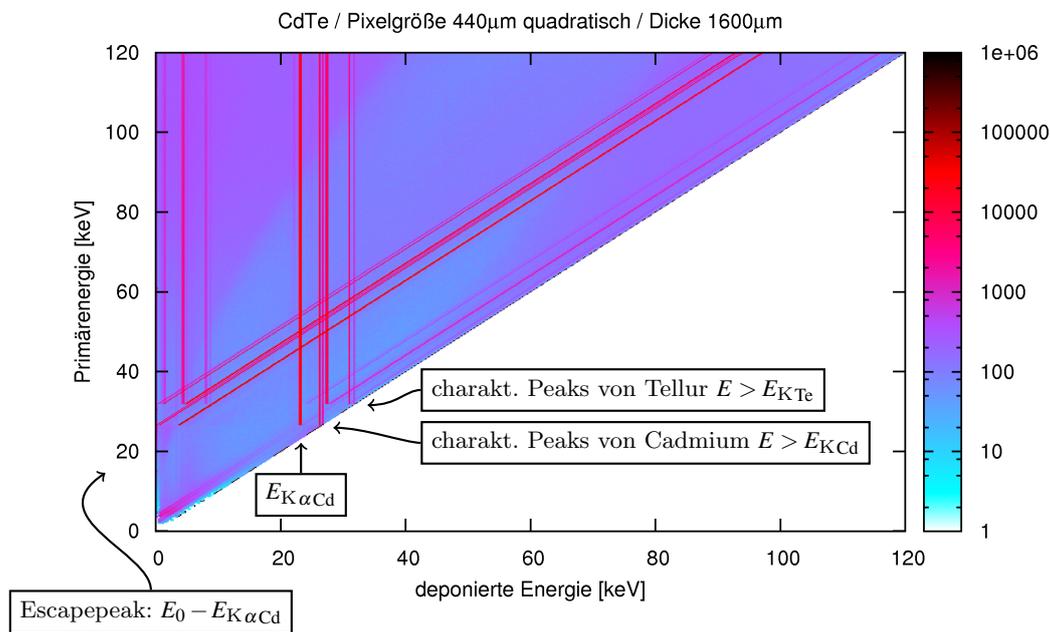
Aufgrund der niedrigen Ordnungszahl von Silizium ist der Massenabsorptionskoeffizient für Röntgenstrahlung relativ klein und bereits bei Energien von einigen 10 keV findet nur mit geringer Wahrscheinlichkeit eine Wechselwirkung mit dem Sensormaterial statt. Die Gesamtzahl an Einträgen im Energiedepositionsspektrum nimmt mit steigender Primärenergie stark ab.

Daher erreicht die Röntgenstrahlung relativ häufig die hinter dem Sensormaterial liegenden Materialien des Detektors: Bondperlen, Medipix-ASIC, silberhaltiger Wärmeleitkleber und Kupferplatte. Diese Anordnung wird im Folgenden mit „Assembly“ bezeichnet. Dieses Assembly wurde in der vorgenommenen Simulation bereits berücksichtigt und liefert daher Signaturen im Energiedepositionsspektrum. Es werden Fluoreszenzphotonen von Zinn (Bondperlen) und Silber (Wärmeleitkleber) freigesetzt und können den Sensor erreichen. Dies äußert sich in Peaks bei den der Energie der Fluoreszenzen entsprechenden Energien: 25,3 keV und 28,5 keV aufgrund von Zinn, 22 keV und 25 keV aufgrund von Silber. Zudem sind die L-Fluoreszenzen des in den Bondperlen enthaltenen Blei bei 10,5 keV und 12,6 keV noch schwach erkennbar.

Aufgrund von Ladungstrennung zwischen benachbarten Pixeln, ermöglicht vor allem durch die relativ große Reichweite von Sekundärelektronen in Silizium, ergibt sich in allen Energiekanälen bis zur Primärenergie ein Untergrund.

### 5.1.2 Cadmiumtellurid

Da Silizium Röntgenstrahlung nur relativ schlecht absorbiert, sind Materialien mit höherer Ordnungszahl zur Verwendung als Sensormaterial von großem Interesse. Ein beliebter

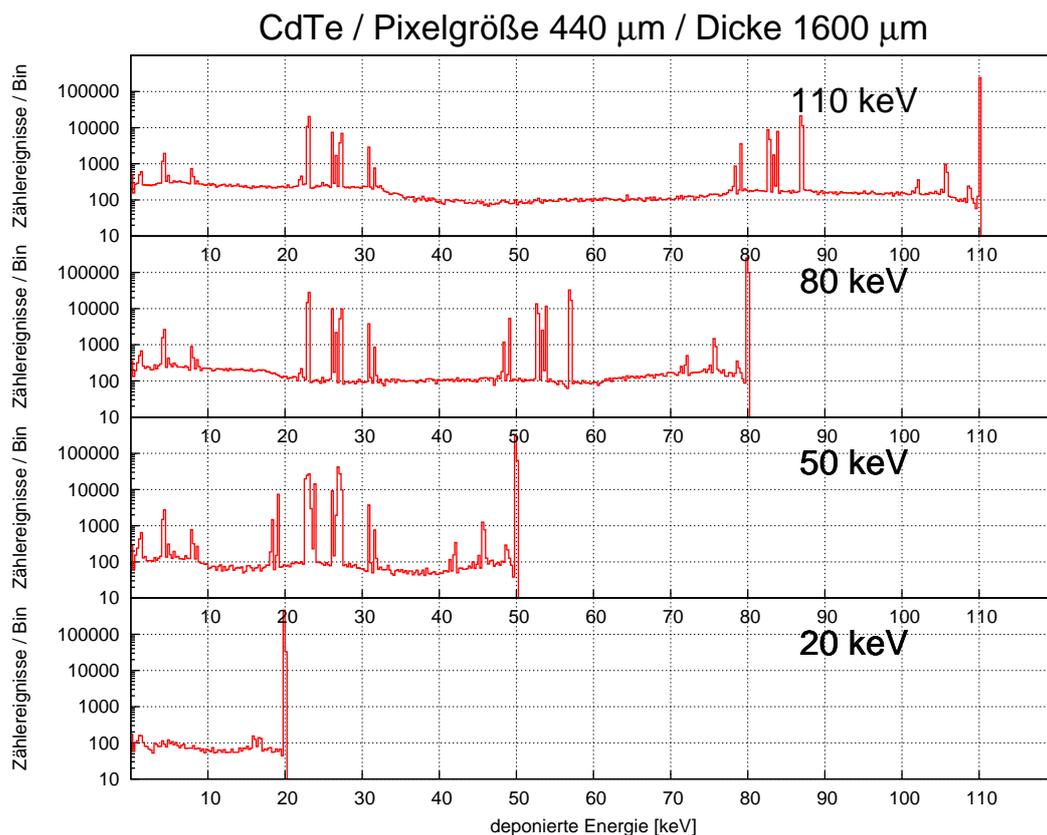


**Abbildung 5.3** Energiedepositionsspektrum in einem 1600µm dicken CdTe-Sensor bei monoenergetischer Bestrahlung in Abhängigkeit von der Primärenergie. Das Medipixassembly wurde in dieser Simulation berücksichtigt. Bondperlen wurden nur für kontaktierte Pixel im Abstand von 440µm implementiert.

Kandidat dafür ist Cadmiumtellurid. Es ergeben sich für solche Materialien weitere Signaturen im Energiedepositionsspektrum.

Cadmiumtellurid ist relativ spröde und steht daher nur in dickeren Schichten ab etwa 1 mm zur Verfügung. Der Wirkungsquerschnitt für Wechselwirkungen von Photonen mit dem Sensormaterial ist aufgrund der wesentlich höheren Ordnungszahl deutlich größer, so dass von solchen Sensoren fast die gesamte Strahlung im Energiebereich bis zu 100 keV absorbiert wird. Aufgrund der im Vergleich zu Silizium größeren Reichweite der Fluoreszenzphotonen wird hier die Ortsauflösung letztlich durch die Fluoreszenzphotonen begrenzt. Es ist zweckmäßig, als Pixelgrößen ein Vielfaches der Größe der Elektronikpixel auf dem Medipix-ASIC zu wählen, also  $n \cdot 55 \mu\text{m}$ .

Abbildung 5.3 zeigt analog zu Abbildung 5.1 das Energiedepositionsspektrum in Abhängigkeit von der Energie der Röntgenphotonen für Cadmiumtellurid mit einer Dichte von  $5.85 \text{ g/cm}^3$ . Abbildung 5.4 zeigt das Spektrum für ausgewählte Röntgenenergien. Der gewählte Sensor besitzt eine Dicke von  $1600 \mu\text{m}$  und eine quadratische Pixelgröße mit Kantenlänge  $440 \mu\text{m}$ . Für jede Primärenergie zeigt das Spektrum mehrere charakteristische Peaks.

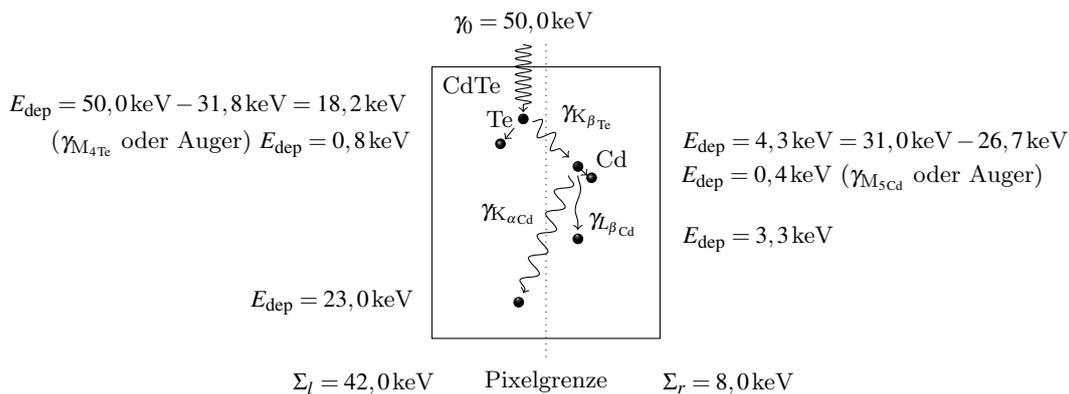


**Abbildung 5.4** Energiedepositionsspektrum in einem  $1600 \mu\text{m}$  dicken CdTe-Sensor bei monoenergetischer Bestrahlung für ausgewählte Röntgenenergien. Das Medipixassembly wurde in dieser Simulation berücksichtigt.

Am einfachsten zuzuordnen ist der Photopeak bei der Primärenergie. Dieser entsteht durch Ereignisse, bei welchen die gesamte Photonenenergie durch ein Photoelektron innerhalb eines Pixels deponiert wird.

In einem jeweils konstanten energetischen Abstand zum Photopeak findet man mehrere sogenannte „Escapepeaks“. Bei diesen Ereignissen wechselwirkte das Röntgenphoton über Photoeffekt mit einem Elektron der K-Schale eines Atoms im Sensormaterial. Anschließend wurde ein Fluoreszenzphoton erzeugt, welches den Detektor bzw. zumindest das Pixelvolumen verlassen hat. Ähnliches Verhalten ergibt sich für Photoeffekt mit einem Elektron der L-Schale. Diese Peaks treten auch bei Detektoren mit nur einem Pixel auf, welche zum Beispiel zur Spektromessung bei niedrigem Fluss verwendet werden (z.B. AMPTEK XR-100T [31]).

Bei pixelierten Detektoren treten zusätzlich weitere Peaks auf, die nicht von der Primärenergie abhängen. Die Peakpositionen entsprechen den Floreszenzenergien des Sensormaterials. Im Beispiel von Abbildung 5.3 sind Linien bei einer Energieantwort von 23 keV und 26 keV zu erkennen, welche erst ab einer Primärenergie von 26,7112 keV auftreten. Diese sind deswegen eindeutig den Fluoreszenzen des Elementes Cadmium zuzuordnen. Analog treten ab einer Primärenergie von 31,8 keV die Signaturen der Fluoreszenzen des Elementes Tellur auf. Ab dieser Energie treten auch besondere Linien bei etwa 8 keV auf. Diese lassen sich auf eine Absorption einer  $K_{\beta}$ -Fluoreszenz des Tellurs durch ein K-Schalenelektron des Cadmiums in der primären Wechselwirkung benachbarten Pixel zurückführen, wobei von den beiden daraufhin emittierten Fluoreszenzphotonen das  $K_{\alpha}$ -Fluoreszenzphoton diesen Pixel wieder verläßt und das L-Fluoreszenzphoton im gleichen Pixel absorbiert wird. Die 8 keV setzen sich damit aus etwa 4,3 keV des Photoelektrons ( $31 \text{ keV} - 26,7 \text{ keV}$ ), aus der Absorption der  $K_{\beta}$ -Fluoreszenz des Tellurs und  $3,5 - 3,7 \text{ keV}$  aus Fluoreszenzen aus der L-Schale des Cadmiums zusammen. Der Peak bei Primärenergie abzüglich 8 keV ergibt sich, wenn die K-Fluoreszenz des Cadmiums wieder den Pixel der ursprünglichen Wechselwirkung erreicht. Abbildung 5.5 zeigt schematisch einen möglichen Beitrag zu diesen beiden Peaks für eine Primärenergie von 50 keV.



**Abbildung 5.5** Schematische Darstellung des Zustandekommens eines Peaks bei 8 keV sowie bei Primärenergie reduziert um 8 keV im Energiedepositionsspektrum von CdTe.

Fluoreszenzen der hinter dem Sensormaterial liegenden Detektorbestandteile spielen aufgrund des hohen Massenabsorptionskoeffizienten von CdTe bei Bestrahlung des De-

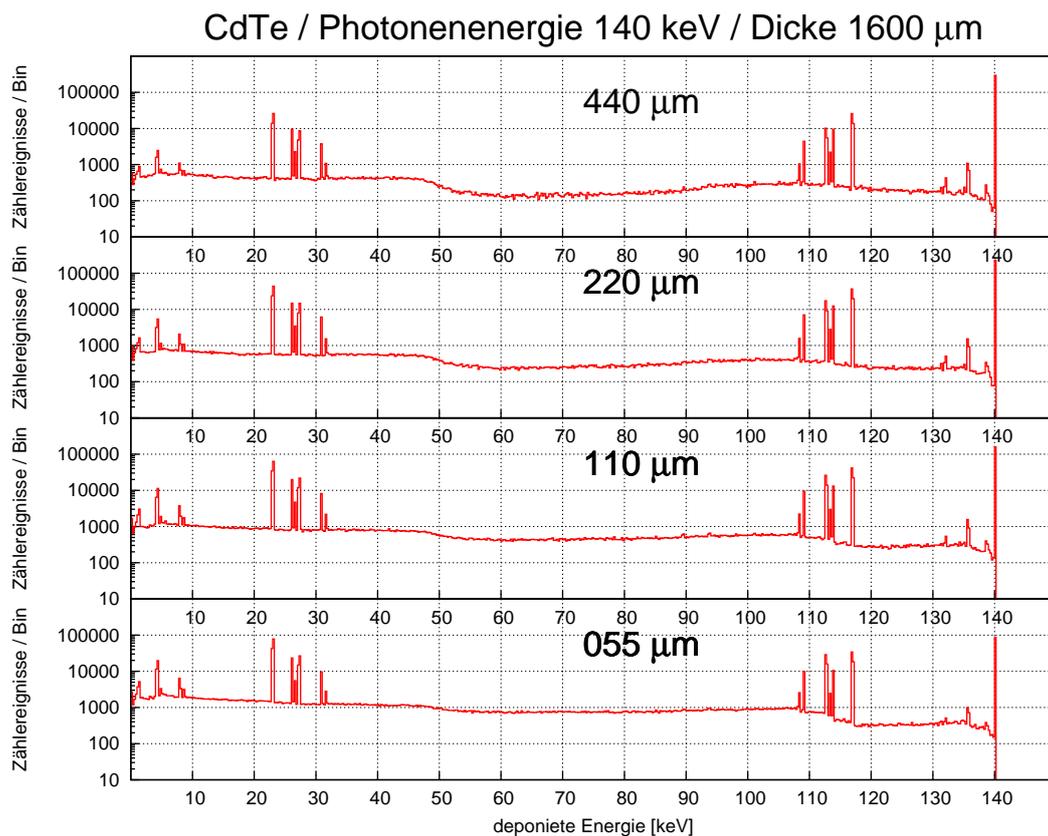
tektors von oben keine Rolle, da fast keine Röntgenphotonen hinter die Sensorschicht gelangen.

Analog zu Silizium gibt es für hohe Primärenergien im Energiedepositionsspektrum bei niedrigen Energien aufgrund der Energiedeposition durch Comptonelektronen leicht erhöhte Beiträge.

Der durch Ladungstrennung zwischen benachbarten Pixeln erzeugte Untergrund ist hier im Vergleich zum Beispiel für Silizium deutlich kleiner. Dies liegt an der kürzeren Reichweite von Sekundärelektronen in Cadmiumtellurid und an der größeren Pixelgröße. Dies soll im nächsten Abschnitt noch genauer erläutert werden.

## 5.2 Abhängigkeit von der Pixelgröße am Beispiel von CdTe

Das Energiedepositionsspektrum hängt für Pixelgrößen in der Größenordnung der Reichweite der Elektronen und Fluoreszenzphotonen stark von dieser ab. Abbildung 5.6 zeigt das Energiedepositionsspektrum für verschiedene Pixelgrößen für einen jeweils  $1600\mu\text{m}$  dicken Cadmiumtelluridsensor bei Bestrahlung mit Röntgenphotonen der Energie  $140\text{keV}$ .



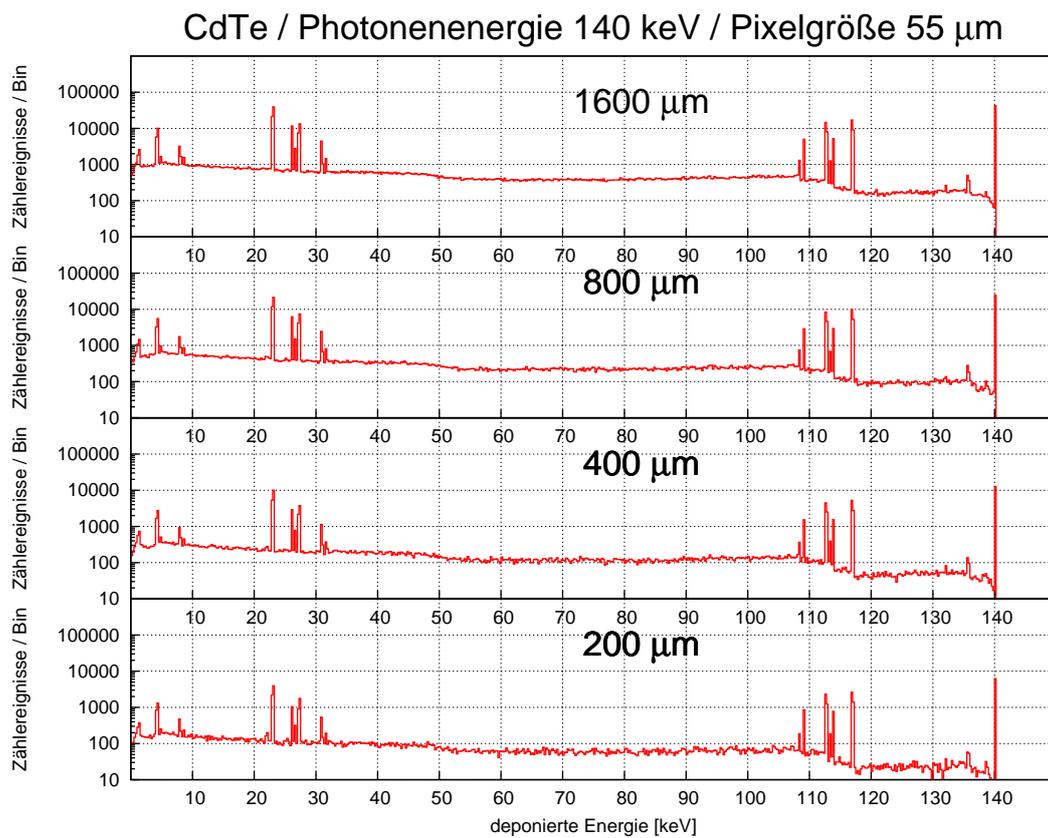
**Abbildung 5.6** Energiedepositionsspektrum in  $1600\mu\text{m}$  CdTe für Sensoren mit verschiedener Pixelgröße.

Man beachte die logarithmische Auftragung der Zählereignisse pro Energiekanal. Bei kleinerer Pixelgröße steigt die Anzahl der Fluoreszenzphotonen, die das Pixelvolumen verlassen können, an. Daher sind die Escapepeaks im Energiedepositionsspektrum höher, während gleichzeitig der Photopeak niedriger ist. Da die Reichweite der Elektronen unabhängig von der Pixelgröße ist, kann für alle Pixelgrößen bei Absorption von Photonen in einem Bereich in der Nähe der Pixelgrenzen, der eine Ausdehnung in der Größenordnung der CSDA-Reichweite hat, Ladungstrennung auftreten. Die Größe dieses Bereichs nimmt bei kleineren Pixelgrößen einen größeren Anteil der Pixelfläche in Anspruch, so dass häufiger Ladungstrennung auftritt. Dies erklärt den deutlich größeren Untergrund im Energiedepositionsspektrum für eine Pixelgröße von  $55\mu\text{m}$  im Vergleich zu beispielsweise einer Pixelgröße von  $220\mu\text{m}$ .

### 5.3 Abhängigkeit von der Sensordicke am Beispiel von CdTe

Die Sensordicke beeinflusst im Wesentlichen die Gesamtzahl der Einträge im Energiedepositionsspektrum, kaum aber dessen Form. Dies liegt an der Anzahl der nicht absorbierten Photonen, welche exponentiell mit der Dicke abnimmt.

Bei größerer Dicke ist der Raumwinkel, in welchem im Sensormaterial gestreute Photonen und Fluoreszenzphotonen die Chance haben, ein weiteres Mal mit dem Sensormaterial zu wechselwirken, größer. Daher steigt die Peakhöhe der Fluoreszenzen und der Untergrund relativ zur Peakhöhe des Photopeaks stärker an. Abbildung 5.7 zeigt das Energiedepositionsspektrum von  $140\text{keV}$ -Photonen für ausgewählte Dicken von CdTe bei einer Pixelgröße von  $55 \times 55\mu\text{m}^2$ .



**Abbildung 5.7** Energiedepositionsspektrum in einem CdTe-Sensor mit Pixelgröße  $55 \times 55 \mu\text{m}^2$  für ausgewählte Röntgenenergien für verschiedene Sensordicke.



# 6 Transport von Ladungsträgern im Sensormaterial

## Inhaltsangabe

---

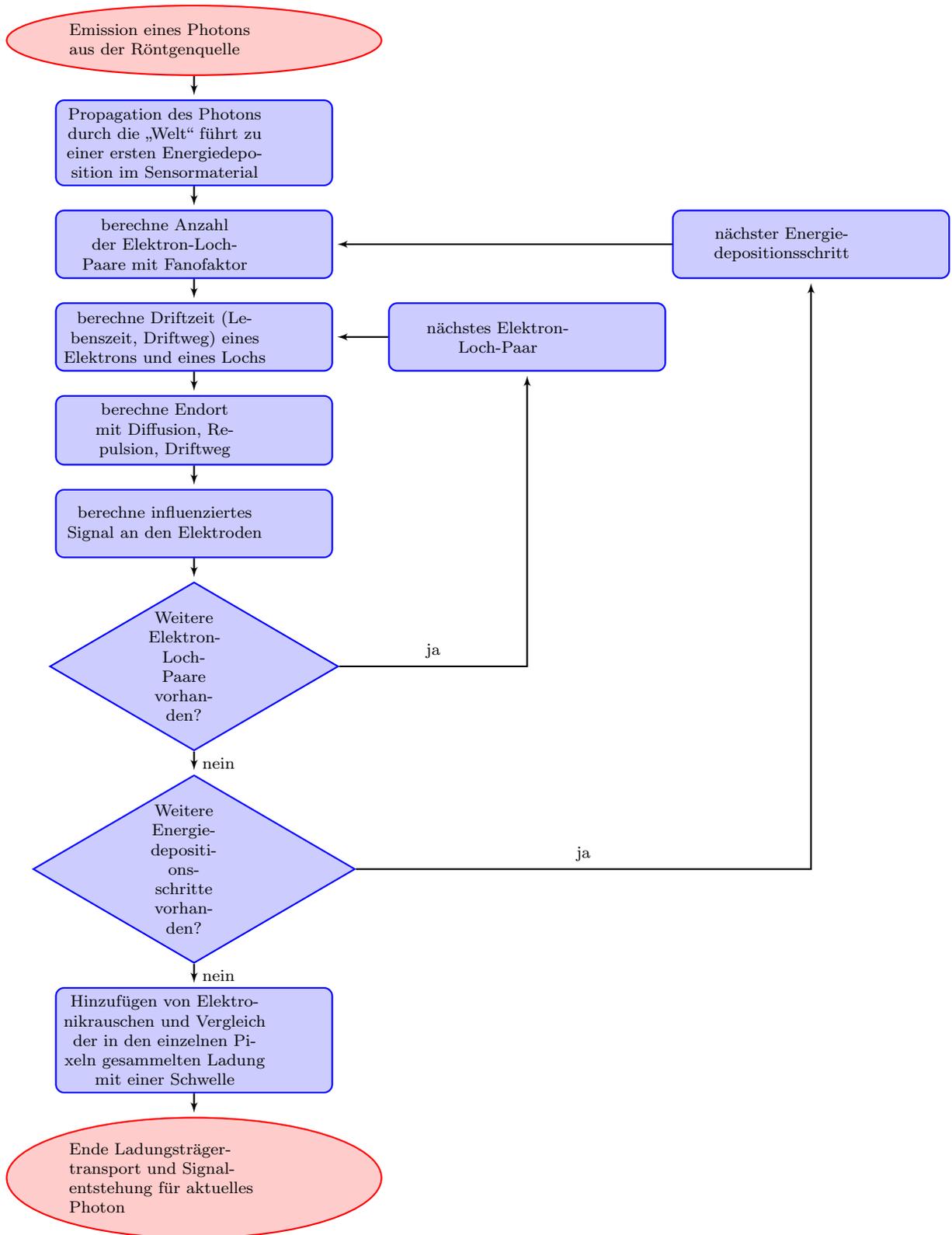
<b>6.1</b>	<b>Variation der Anzahl erzeugter Elektron-Loch-Paare . . . . .</b>	<b>37</b>
<b>6.2</b>	<b>Lebenszeit der Ladungsträger . . . . .</b>	<b>39</b>
<b>6.3</b>	<b>Drift . . . . .</b>	<b>39</b>
6.3.1	Konstantes elektrisches Feld . . . . .	39
6.3.2	Elektrisches Feld bei homogener Dotierung . . . . .	40
<b>6.4</b>	<b>Diffusion . . . . .</b>	<b>41</b>
<b>6.5</b>	<b>Repulsion . . . . .</b>	<b>41</b>
<b>6.6</b>	<b>Umsetzung in der Monte-Carlo-Simulation . . . . .</b>	<b>42</b>

---

Mit den in ROSI implementierten EGS4/LSCAT-Routinen wird die Absorption der Röntgenphotonen im Sensormaterial simuliert. Dabei kann eine Kombination von photonischen (Photoeffekt, Comptoneffekt, Rayleighstreuung sowie Fluoreszenzen) und elektronischen (Augereffekt, Bremsstrahlung, Møllerstreuung) Effekten stattfinden. Elektronen deponieren auf ihrem Ausbreitungsweg ihre Energie, indem sie Elektron-Loch-Paare erzeugen, wofür jeweils eine effektive Ionisierungsenergie (4.43 eV für CdTe) aufgewendet werden muss. Damit ergeben sich eine oder mehrere (z. B. bei Fluoreszenzen) Wolken aus Elektron-Loch-Paaren. Die Ladungsträger werden im Sensormaterial durch ein von außen angelegtes elektrisches Feld zu den Elektroden transportiert. Je nach Polarität der angelegten Spannung können Elektronen oder Löcher gesammelt werden.

Welche verschiedenen Transportphänomene im Sensormaterial Einfluss auf die Signalbildung an den Elektroden haben, soll in diesem Kapitel dargestellt werden. Abbildung 6.1 zeigt in einem Flussdiagramm den Ablauf der Simulation eines Ereignisses mit allen dabei berücksichtigten Sensoreffekten. Diese Effekte sollen in der dort auftretenden Reihenfolge dargestellt werden.

Als Sensorspannung an der Sensoroberseite sei eine negative Spannung gewählt, so dass Elektronen in der Pixelelektrodenenebene gesammelt werden. Aus der lokalen Energiedeposition im Sensor lassen sich die Entstehungsorte von Elektron-Loch-Paaren gewinnen. Die einzelnen Elektronen dieser Ladungswolken werden durch Monte-Carlo-Methoden unter Berücksichtigung von Diffusion und Repulsion zu den Elektroden (bzw. zur Kathode) propagiert. Mit Hilfe der Näherung, dass ein in Richtung Kathode driftendes Loch netto nur einen Beitrag zu dem Pixel liefert, welchen das zugehörige Elektron erreicht, kann man sich zunächst auf eine Transportsimulation der Elektronen beschränken.



**Abbildung 6.1** Flussdiagramm des Transport- und Signalentstehungsalgorithmus der Simulation photonenzählender Detektoren

## 6.1 Variation der Anzahl erzeugter Elektron-Loch-Paare

Während der Energiedeposition durch Elektronen im Festkörper ist für die Erzeugung eines Elektron-Loch-Paars eine bestimmte effektive Ionisierungsenergie nötig, die neben einer Reihe von weiteren wichtigen Materialparametern in Tabelle 6.1 für verschiedene Sensormaterialien aufgelistet ist.

Um in einem Festkörper freie Elektron-Loch-Paare zu generieren, muss die bei einer einzelnen Streuung absorbierte Energie groß genug sein, um die Bandlücke des Materials zu überwinden. Für Elektronenenergien oberhalb von etwa einem keV liegt die mittlere deponierte Energie pro erzeugtem Elektron-Loch-Paar deutlich oberhalb der Bandlücke.

Die mittlere Anzahl  $\bar{N}$  der durch ein Sekundärelektron der Energie  $E$  erzeugten freien Elektron-Loch-Paare ergibt sich als Verhältnis dieser Energie  $E$  und der effektiven Ionisierungsenergie  $\omega$ :

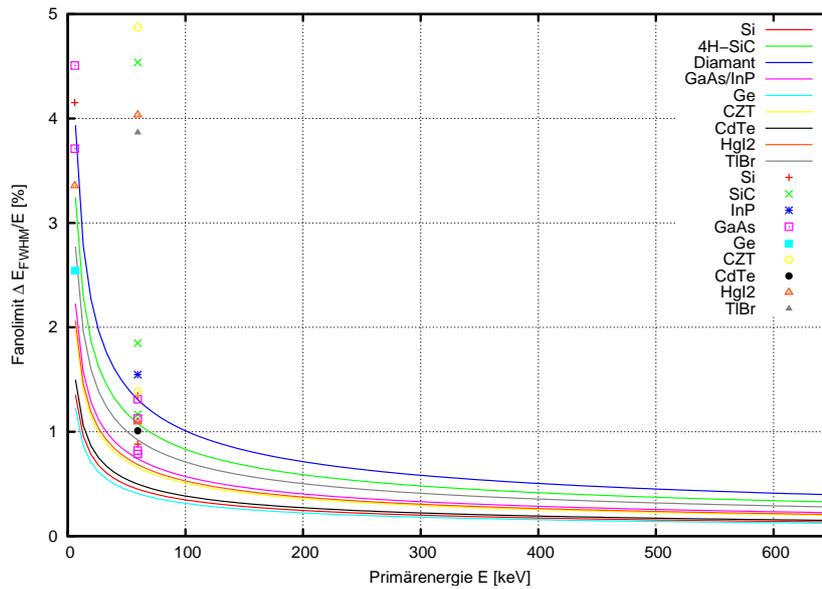
$$\bar{N} = \frac{E}{\omega} \quad (6.1)$$

Diese Zahl ist für ein Sekundärelektron gegebener Energie nicht fest, sondern variiert mit der Varianz [35]:  $\sigma_N^2 = FN$  wobei  $F$  der Fanofaktor ist. Diese Varianz ist um den Fanofaktor kleiner als bei Poissonrauschen erwartet. Auch der Fanofaktor ist für verschiedene Sensormaterialien in Tabelle 6.1 angegeben. In Abbildung 6.2 ist die aufgrund des Fanorauschens im Idealfall erreichbare Energieauflösung in Abhängigkeit von der in einer Ladungswolke deponierten Energie für verschiedene Sensormaterialien angegeben. Die eingezeichneten Datenpunkte entsprechend den besten bisher experimentell erreichten Energieauflösungen

**Tabelle 6.1 Materialparameter für Halbleitersensoren.**

Auflistung der soweit nicht anders angegeben in den Simulationen dieser Arbeit verwendeten spezifischen Daten für Sensormaterialien, die für die Ladungsdeposition und den Ladungstransport wichtig sind. Angegeben sind:  $\rho$  =Dichte,  $\omega$  =effektive Ionisierungsenergie,  $F$  =Fanofaktor,  $\epsilon$  =Dielektrizitätskonstante,  $\mu_{e,h}$  =Mobilität der Elektronen bzw. Löcher,  $(\mu\tau)_{e,h}$  =Mobilität-Lebenszeit-Produkt für Elektronen bzw. Löcher (Daten aus [32], [33] und [34]).

Material	$\rho$ [ $\frac{g}{cm^3}$ ]	$\omega$ [eV]	$F$	$\epsilon$	$\mu_e$ [ $\frac{cm^2}{Vs}$ ]	$\mu_h$ [ $\frac{cm^2}{Vs}$ ]	$(\mu\tau)_e$ [ $\frac{cm^2}{V}$ ]	$(\mu\tau)_h$ [ $\frac{cm^2}{V}$ ]
Si	2.33	3.62	0.06	11.7	1350	450	>1	>1
a-Si	2.3	6	-	12	1-4	0.05	$2 \cdot 10^{-7}$	$3 \cdot 10^{-8}$
4H-SiC	3.21	7.8	0.16	9.7	1000	115	$4 \cdot 10^{-4}$	$8 \cdot 10^{-5}$
Diamant	3.52	13.1	0.14	5.7	1800	1200		
InP	4.78	4.2	0.14	12.4	4600	150	$5 \cdot 10^{-6}$	$< 1.5 \cdot 10^{-5}$
GaAs	5.32	4.2	0.14	12.8	8000	400	$8 \cdot 10^{-5}$	$4 \cdot 10^{-6}$
Ge	5.33	2.96	0.06	16	3900	1900	>1	>1
Cd <sub>0.9</sub> Zn <sub>0.1</sub> Te	5.78	4.64	0.10	10	1000	120	$4 \cdot 10^{-3}$	$1.2 \cdot 10^{-4}$
CdTe	5.85	4.43	0.06	10.9	1100	100	$3 \cdot 10^{-3}$	$2 \cdot 10^{-4}$
GaN	6.15	8-10	-	-	1000	30		
HgI <sub>2</sub>	6.40	4.2	0.12	8.8	100	4	$3 \cdot 10^{-4}$	$4 \cdot 10^{-5}$
TlBr	7.56	6.5	0.14	29.8	30	4	$5 \cdot 10^{-4}$	$2 \cdot 10^{-6}$



**Abbildung 6.2** Durch den Fanofaktor vorgegebene Begrenzung der relativen Energieauflösung für verschiedene Materialien. Die durchgezogenen Linien wurden berechnet mit Daten aus Tabelle 6.1, die Punkte entsprechen besten experimentell bisher erhaltenen Energieauflösungen (exakte Werte und Referenzen siehe [33]).

für diese Materialien. Die maximal erreichbare FWHM-Auflösung liegt im Energiebereich bis 100 keV in der Größenordnung von etwa 1%.

## 6.2 Lebenszeit der Ladungsträger

Nicht alle Ladungsträger erreichen eine Pixelelektrode bzw. die Gegenelektrode. Einige rekombinieren bereits zuvor mit anderen Ladungsträgern im Sensormaterial. Über das  $\mu\tau$ -Produkt wird die Rekombination von Elektronen und Löchern berücksichtigt. Die Lebenszeit jedes Ladungsträgers wird bestimmt, indem entsprechend einer Exponentialverteilung als Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion Zufallszahlen bestimmt werden:

$$P(t) = ne^{-t/\tau} \quad \text{mit} \quad n = \frac{1}{\int_0^\infty e^{-t/\tau} dt} = \frac{1}{\tau} \quad (6.2)$$

## 6.3 Drift

Freie Ladungsträger driften im Sensormaterial entlang eines von außen durch die Sensorspannung angelegten elektrischen Feldes zu den Elektroden. Durch die Polarität der Sensorspannung kann gewählt werden, ob Elektronen oder Löcher an den Pixelelektroden gesammelt werden sollen.

Die Driftgeschwindigkeiten  $v_e$  und  $v_h$  für Elektronen und Löcher wird dabei bestimmt durch die Mobilität der Ladungsträger  $\mu_e$  bzw.  $\mu_h$  und das elektrische Feld  $\vec{E}$ , wobei folgender Zusammenhang besteht [32]:

$$\vec{v}_e = \mu_e \vec{E} \quad (6.3)$$

$$\vec{v}_h = -\mu_h \vec{E} \quad (6.4)$$

Die beiden Ladungsträgerarten driften in entgegengesetzte Richtung. Dadurch wird die bei der Energiedeposition erzeugte Elektronenwolke innerhalb kurzer Zeit von der Löcherwolke getrennt und die beiden Ladungsträgerarten können separat betrachtet werden.

Die Driftgeschwindigkeit ist bis zu hohen Feldstärken (ca.  $10^4 \frac{V}{cm}$ ) direkt proportional zur Mobilität und zur Feldstärke im Sensor. Bei sehr hohen Feldstärken gibt es eine Sättigungsgeschwindigkeit. Die Mobilität ist dann nicht mehr konstant und hängt von der Feldstärke ab. Die Mobilität zeigt auch eine deutliche Abhängigkeit von der Temperatur. Details finden sich in vielen Veröffentlichungen, für Silizium als Sensormaterial beispielsweise in [36], für GaAs in [37].

Für ein elektrisches Feld in  $z$ -Richtung (senkrecht zur Elektrodenenebene) ergibt sich der Aufenthaltsort eines am Ort  $z_0$  erzeugten Elektrons nach einer bestimmten Zeit  $t < t_{\max}(z_0)$ :

$$z(t) = z_0 + \int_0^t \mu_e E(z) dt \quad (6.5)$$

wobei  $E(z)$  das Profil des elektrischen Feldes in Abhängigkeit von der Tiefe  $z$  im Sensormaterial ist.

### 6.3.1 Konstantes elektrisches Feld

Bei undotiertem Sensormaterial bildet sich näherungsweise ein konstantes ortsunabhängiges elektrisches Feld im Sensormaterial:

$$E = U/d \quad (6.6)$$

mit der über dem Sensor angelegten Spannung  $U$  und Sensordicke  $d$ . Die Driftzeit hängt dann linear mit der Driftstrecke zusammen. Für einen Driftweg  $z$ , ergibt sich damit eine Driftzeit von

$$t(z) = \frac{zd}{\mu U} \quad (6.7)$$

Unter Berücksichtigung der Lebenszeit ergibt sich für die Wahrscheinlichkeit, dass ein Elektron die Pixelelektrode erreicht:

$$P = \exp\left(-\frac{zd}{U \cdot \mu \tau}\right) \geq \exp\left(-\frac{d^2}{U \cdot \mu \tau}\right) \quad (6.8)$$

wobei  $\mu \tau$  das Produkt aus Mobilität und Lebenszeit der Elektronen,  $z \leq d$  der Driftweg vom Erzeugungsort bis zur Elektrode,  $U$  die Sensorspannung und  $d$  die Sensordicke ist.

### 6.3.2 Elektrisches Feld bei homogener Dotierung

Ein konstantes elektrisches Feld ist nur bei komplett undotiertem Sensormaterial möglich. Reale Sensoren haben aber immer mindestens eine kleine intrinsische Dotierung. Diese ergibt sich aus dem Überschuss/Mangel an Akzeptoren gegenüber Donatoren. In einem Sensormaterial herrscht damit immer eine effektive Dotierung mit einer Störstellendichte  $N_{\text{eff}} = N_D - N_A$ . Dies führt auch dazu, dass bei Kontaktierung des Sensors als pn-Übergang eine Mindestsensorspannung  $U_D$  nötig ist, um den gesamten Sensor zu verarmen (engl. „depletion voltage“). Diese hängt linear von der Störstellendichte und quadratisch von der Sensordicke  $d$  ab:

$$U_D = \frac{N_{\text{eff}} e d^2}{2 \epsilon_0 \epsilon_r} \quad (6.9)$$

Es bildet sich ein tiefenabhängiges Profil des elektrischen Feldes aus:

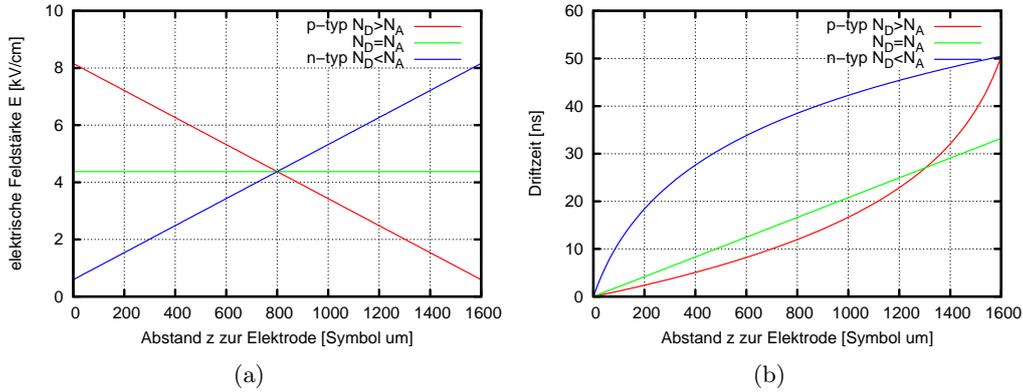
$$E(z) = \frac{U}{d} + \frac{2U_D}{d^2} \left(\frac{d}{2} - z\right) \quad (6.10)$$

Für die Driftzeit ergibt sich folgende Formel:

$$t(z) = -\frac{\epsilon_0 \epsilon_r}{N_{\text{eff}} e \mu} \log \left( 1 - \frac{N_{\text{eff}} e d z}{\epsilon_0 \epsilon_r \left( \frac{N_{\text{eff}} e d^2}{2 \epsilon_0 \epsilon_r} + U \right)} \right) \quad (6.11)$$

wobei  $\epsilon_r$  die Dielektrizitätskonstante,  $e$  die Elementarladung und  $U$  die am Sensor angelegte Spannung sind.

Die verschiedenen möglichen Fälle sind in Abbildung 6.3 dargestellt. Ein bei  $z = d$  erzeugtes Elektron benötigt in den beiden Fällen mit Dotierung die gleiche Zeit, um die Pixelelektrode zu erreichen. Je nach Dotierung driftet es zunächst mit hoher Driftgeschwindigkeit durch den Bereich mit erhöhter Feldstärke und anschließend mit geringer Driftgeschwindigkeit durch den Bereich mit verringerter Feldstärke, bzw umgekehrt. Es ergibt sich jeweils eine im Vergleich zum undotierten Fall erhöhte Driftzeit. Für n-dotiertes Material benötigen alle erzeugten Elektronen eine längere Zeit als im undotierten bzw. p-dotierten Fall, bis sie die Pixelelektrode erreichen.



**Abbildung 6.3** Elektrisches Feld im Sensormaterial für verschiedene Dotierungen (links) und Driftzeit in Abhängigkeit vom Erzeugungsort der Ladungsträger

## 6.4 Diffusion

Während der Driftbewegung der Elektronenwolke finden in dieser Diffusionsbewegungen statt. Durch den Diffusionsprozess wird aus einer punktförmigen Ladungsträgerverteilung eine Gauss'sche Verteilung. Der Diffusionsradius hängt ab von der Driftzeit, die für den Weg bis zur Pixelelektrode benötigt wird, sowie von der Diffusionskonstanten  $D$  des Materials:

$$\sigma = \sqrt{2Dt} \quad (6.12)$$

Für konstantes elektrisches Feld (undotiertes Material) gilt für den Diffusionsradius:

$$\sigma \sim \sqrt{\frac{z}{E}} = \sqrt{\frac{z \cdot d}{U}} \quad (6.13)$$

wobei  $E$  die elektrische Feldstärke,  $d$  die Dicke der Sensorschicht,  $U$  die am Sensor angelegte Spannung und  $z$  den Driftweg zwischen dem Ort der Ladungsdeposition und der Pixelelektrode angibt.

Die Diffusionskonstante  $D$  und die Beweglichkeit  $\mu$  sind durch die Einstein-Beziehung miteinander verknüpft [38]:

$$D = \frac{k_B T}{e} \mu \quad (6.14)$$

Der Beitrag der Diffusion hängt im Bereich konstanter Mobilität der Elektronen nicht von dieser ab, da sich bei höherer Mobilität die Driftzeit entsprechend verkürzt.

## 6.5 Repulsion

Aufgrund ihrer Ladung und der räumlichen Trennung von Elektronen und Löchern durch das angelegte elektrische Feld stoßen sich die Elektronen innerhalb einer Ladungswolke gegenseitig ab. Diese Repulsion wurde stückweise entlang des Weges der Ladungsdeposition modelliert (wie in der Dissertation von Alexander Korn [39] beschrieben). Schnelle

Sekundärelektronen erzeugen in einem eher langgezogenen abschnittsweise zylinderförmigen Volumen entlang ihres Weges eine Ladungsverteilung. Die Ladungsverteilung kann im Sinne der Repulsion als zylinderförmige Ladungswolke betrachtet werden. Während einer Driftzeit  $t$  ergibt sich ein maximaler Repulsionsradius für eine zylinderförmige Ladungsverteilung:

$$r_{\max, \text{zyl.}}(t) = \sqrt{\frac{\rho \mu t}{2\pi \epsilon \epsilon_0}} \quad (6.15)$$

wobei  $\rho$  der Ladungsbelag ist. Am Ende ihres Weges haben Sekundärelektronen kleine Energien und werden daher während ihrer Propagation stärker abgelenkt. Es entsteht eine eher kugelförmige Ladungsverteilung. Für diese Ladungsverteilung wurde ein sphärisches Repulsionsmodell verwendet, was zu folgendem maximalen Repulsionsradius führt:

$$r_{\max, \text{sph.}}(t) = \left( \frac{3N e \mu t}{4\pi \epsilon \epsilon_0} \right)^{\frac{1}{3}} \quad (6.16)$$

wobei  $N$  die Ladungsträgeranzahl innerhalb der Wolke ist. Für den Wechsel zwischen beiden Modellen wird der Energiedepositionspfad eines Sekundärelektrons bei einer bestimmten kinetischen Restenergie  $E_c$  aufgeteilt. Für die Pfadstücke bei Energien größer  $E_c$  wird das Modell für zylinderförmige Ladungsverteilungen, für niedrigere Energien das für sphärische Ladungsverteilungen verwendet. Dabei wird für die Berechnung der Anzahl  $N$  der Elektronen im kugelförmigen Kopf die kinetische Energie des Sekundärelektrons bei seiner Erzeugung verwendet, wenn diese niedriger als  $E_c$  war, ansonsten  $E_c$  selbst.

## 6.6 Umsetzung in der Monte-Carlo-Simulation

Der Elektronenpropagationsalgorithmus von EGS4 bzw. der zugehörigen Niedrigenergieerweiterung LSCAT arbeitet nach einem Verfahren der kondensierten Vergangenheit (engl. „condensed history“), d.h. mehrere Einzelstreuungsprozesse werden zu einem Propagationsschritt zusammengefasst. Dabei wird ein im Materialfile vorliegender Wirkungsquerschnitt verwendet, welcher Elektron-Elektron-Streuungen mit einem maximalen Energieübertrag von  $E_{\text{cut}}$  berücksichtigt. Elektron-Elektron-Streuungen mit größerem Energieübertrag werden als MØLLER-Ereignis separat berücksichtigt. Es werden jeweils die einem maximalen relativen Energieanteil ESTEPE entsprechenden Streuungen zu einem Schritt zusammengefasst. Dieser Energieanteil ist einstellbar, kleine Werte führen zu einer korrekteren räumlichen Energiedeposition. Für die Simulationen dieser Arbeit wurde ein Wert von ESTEPE=0.01 gewählt, d.h. pro Propagationsschritt wird ein Prozent der aktuellen kinetischen Energie deponiert.

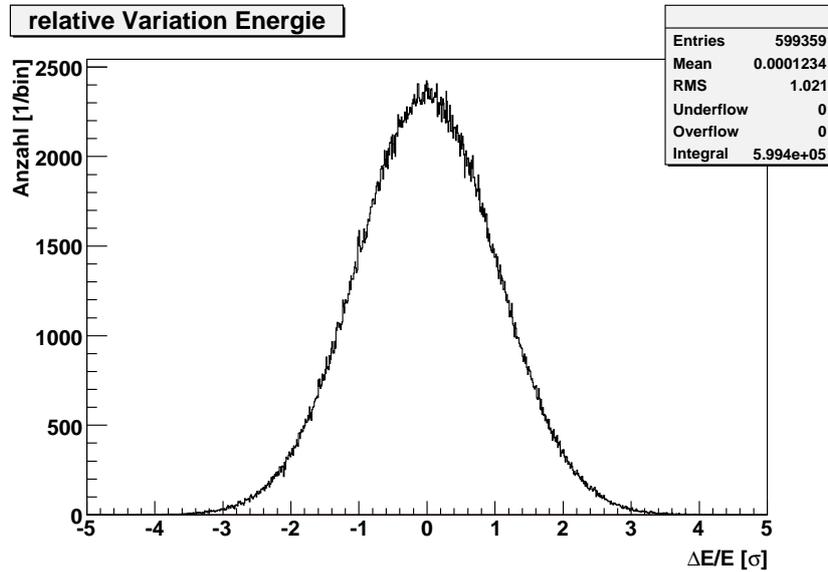
Die Variation der Anzahl der im Sensormaterial erzeugten Elektron-Loch-Paare kann für jeden Schritt  $i$  des Ereignisbaums separat berechnet werden, da wegen  $N = \sum_{i=1}^k N_i$  auch gilt:

$$(\Delta N)^2 = FN = F \sum_{i=1}^k N_i = \sum_{i=1}^k FN_i = \sum_{i=1}^k (\Delta N_i)^2. \quad (6.17)$$

Die Variation der im Schritt  $i$  erzeugten Elektron-Loch-Paare ist  $(\Delta N_i)^2 = FN_i$ .

Um Simulationszeit zu sparen, wurde näherungsweise die Anzahl der pro Schritt erzeugten Elektron-Loch-Paare jeweils statt mit einer Poissonverteilung mit einer Gauss-Verteilung mit dieser Varianz gewürfelt. Abbildung 6.4 zeigt, dass die dabei erhaltene

Variation der Gesamtzahl der in der Ladungswolke enthaltenen Elektron-Loch-Paare der dabei erwarteten Variation entspricht, so dass diese Näherung gerechtfertigt werden kann.



**Abbildung 6.4** Relative Abweichung der Energie in Einheiten der Standardabweichung  $\sqrt{FE}$  (Si,  $300\ \mu\text{m}$ ,  $120\ \text{keV}$  monoenergetische Quelle)

Spezialfall: Für einen Fanofaktor von Null ergeben sich ideale Simulationsergebnisse ohne Rauschbeiträge durch den Elektron-Loch-Paarerzeugungsprozess. Das mit idealer Elektronik bestmögliche Ergebnis entspricht dem Simulationsergebnis mit Verwendung des realen Fanofaktors.

Für jedes Elektron wird die Lebenszeit sowie die zum Erreichen der Pixelebene nötige Driftzeit berechnet. Erreicht das Elektron die Pixelebene, wird für die Driftzeit  $t_d$  der Beitrag durch Diffusion und Repulsion bestimmt.

Die Diffusion wird mit Hilfe zweier Gauss-Verteilungen jeweils mit Varianz  $\sigma^2(t_d)$  separiert für  $x$ - und  $y$ -Richtung gewürfelt. Dies ist erlaubt, da gilt:

$$e^{-\frac{r^2}{2\sigma^2}} = e^{-\frac{x^2}{2\sigma^2}} e^{-\frac{y^2}{2\sigma^2}} e^{-\frac{z^2}{2\sigma^2}} \quad (6.18)$$

wobei  $r$  im mit der Driftbewegung mitbewegten Koordinatensystem den Abstand des Elektrons vom Ursprungsort nach der Zeit  $t_d$  angibt. Die einzelnen Komponenten des Diffusionsvektors folgen jeweils einer Gauss'schen Wahrscheinlichkeitsverteilung mit Standardabweichung  $\sigma(t_d)$ .

Für die Repulsion einer zylinderförmigen Ladungsverteilung wird mit einer linearen Wahrscheinlichkeitsverteilung ein Wert zwischen 0 und 1 gewürfelt und mit dem Maximalradius für die Driftzeit  $t_d$  skaliert. Für den Winkel  $\phi$  wird eine Zufallszahl entsprechend einer konstanten Wahrscheinlichkeitsverteilung zwischen 0 und  $2\pi$  bestimmt. Damit ergibt sich eine homogene Abdeckung einer Kreisscheibe, entsprechend der homogenen Ladungsträgerdichte für Repulsion in einer zylinderförmigen Ladungsverteilung.

Für das Modell der kugelförmigen Ladungsverteilung ergibt sich durch Repulsion eine Kugel mit homogener Ladungsdichte. Um dies zu modellieren, muss entsprechend einer

quadratischen Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion eine Zufallszahl für den Radius der Kugelschale bestimmt werden, auf der sich das Elektron nach der Zeit  $t_d$  befindet. Die Richtung kann bestimmt werden, indem jeweils mit einer konstanten Wahrscheinlichkeitsverteilung der Winkel  $\phi$  im Intervall  $[0, 2\pi[$  und  $\cos(\theta)$  im Intervall  $[-1, 1]$  gewürfelt werden.

Mit Hilfe der so bestimmten Vektoren  $\vec{r}_{\text{Dif}}(x, y, z)$  und  $\vec{r}_{\text{Rep}}(x, y, z)$  kann der Endort des Elektrons berechnet werden.

$$\vec{r}(t_d) = \vec{r}(0) + \vec{r}_{\text{Drift}}(z) + \vec{r}_{\text{Dif}}(x, y) + \vec{r}_{\text{Rep}}(x, y) \quad (6.19)$$

Dabei wird eine die Driftzeit beeinflussende Diffusion und Repulsion in bzw. gegen die Driftrichtung vernachlässigt. Aufgrund lateraler Anteile von Diffusion und Repulsion erreicht das Elektron nicht zwangsläufig den Pixel, über welchem es erzeugt wurde. Aufgrund von Diffusion und Repulsion wird somit die Ortsauflösung verschlechtert. Dadurch können benachbarte Pixel zum Zählen getriggert werden, wenn genügend Elektronen diesen erreichen, obwohl im zugehörigen Pixelvolumen keine Ladung deponiert wurde.

Allerdings wird das Signal an den Pixelelektroden nicht nur von Elektronen erzeugt, die die Pixel erreichen, sondern auch die auf ihrem Weg rekombinierenden Elektronen und die auf die Kathode zudriftenden Löcher haben unter Umständen großen Einfluss auf das Signal.

# 7 Signalerzeugung an den Pixelelektroden

## Inhaltsangabe

---

<b>7.1</b>	<b>Wichtungspotential</b>	<b>46</b>
<b>7.2</b>	<b>Influenzierung von Strömen</b>	<b>47</b>
<b>7.3</b>	<b>Simulation von influenzierten Strömen</b>	<b>49</b>
<b>7.4</b>	<b>Umsetzung in der Monte-Carlo-Simulation</b>	<b>50</b>
<b>7.5</b>	<b>Relevanz der Berücksichtigung influenzierter Signale in Abhängigkeit vom Material</b>	<b>51</b>
<b>7.6</b>	<b>Verarbeitung der Ladungssignale durch die Pixelelektronik</b>	<b>52</b>
7.6.1	Zählverfahren durch Vergleich mit einer Diskriminatorschwelle	52
7.6.2	Rauschbeiträge	52
7.6.3	Umsetzung in der Simulation	52
<b>7.7</b>	<b>Zusammenhang zwischen Energieantwortspektrum und Schwelle bei zählenden Detektoren</b>	<b>53</b>

---

Wie bisher gezeigt, wird die durch ein interagierendes Photon erzeugte Ladungsverteilung durch ein von außen angelegtes elektrisches Feld zu den Pixelelektroden transportiert. Diffusionsprozesse können zu einer Ladungsverteilung zwischen benachbarten Pixeln führen („Charge Sharing“). Dabei entsteht an den Pixelelektroden bereits ein Signal bevor die Ladungswolke den Pixel erreicht. Dieses Signal wird verursacht durch eine sich aufgrund von Influenzeffekten in der Pixelelektrodenenebene ausbildende Verteilung von Spiegelladungen, die sich je nach Position der Ladungswolke im Sensor verändert. Diese Veränderungen resultieren in einem in den Pixelelektroden influenzierten Strom. Aber auch wenn die gesamte Ladungswolke letztlich nur eine Pixelelektrode erreicht, wird auf den Nachbarpixelelektroden aufgrund der sich im Sensormaterial bewegendes Ladungswolke ein Signal influenziert. Das influenzierte Signal hat sein Maximum zeitlich bereits deutlich vor der Ankunft der Ladungswolke an den Pixelelektroden. Bei Verwendung einer auf den zeitlichen Verlauf der influenzierten Strompulse sensitiven Pixelelektronik ist es wichtig, diese Strompulse so genau wie möglich zu kennen.

Im Folgenden wird gezeigt, wie die an den Pixelelektroden influenzierten Ströme berechnet werden können.

Durch die Drift der entstehenden Ladungsträger ergibt sich ein Verschiebungsstrom an den Pixelkontakten und dem Rückseitenkontakt. Bei zwei flächigen Kontakten (groß gegenüber der Dicke des Sensors) ergäbe sich ein konstanter Strom, dessen Amplitude proportional zur Driftgeschwindigkeit, also Mobilität der Ladungsträger ist (Shockley-Ramo Theorem [40]). Für einen Sensor mit Pixelabmessungen klein gegen die Sensordicke ist die Situation anders. Ist die Ladungswolke weit von dem Pixel entfernt, wird der Strom auch auf die benachbarten Pixel induziert, und somit hängt die Amplitude des induzierten

Stroms auf dem „richtigen“ Pixel von der Entfernung der Ladungswolke zum Pixelkontakt ab (Small-Pixel-Effekt [41]). Bei einem kleinen Längenverhältnis von Pixelgröße zu Detektordicke fließt erst dann ein signifikanter Strom am Pixel, wenn die Ladung nahe an den Pixelkontakt gedriftet ist.

## 7.1 Wichtungspotential

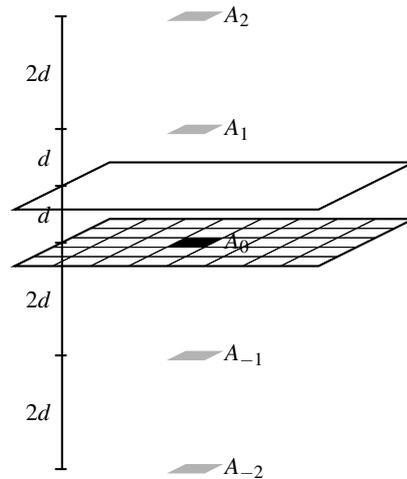
Für die Berechnung influenzierter Ströme und Ladungen kann das sogenannte Wichtungsfeld verwendet werden. Das Wichtungsfeld  $\vec{W}$  kann bestimmt werden, indem alle Pixelelektroden und der Rückseitenkontakt auf Nullpotential gesetzt werden, mit Ausnahme der betrachteten Pixelelektrode, bezüglich welcher das Wichtungsfeld berechnet werden soll. Diese wird auf ein normiertes Potential von 1 (Einheitspotential) gesetzt. Das Wichtungsfeld entspricht dem Gradienten des Wichtungspotentials  $\varphi$ :

$$\vec{W} = -\vec{\nabla}\varphi, \quad (7.1)$$

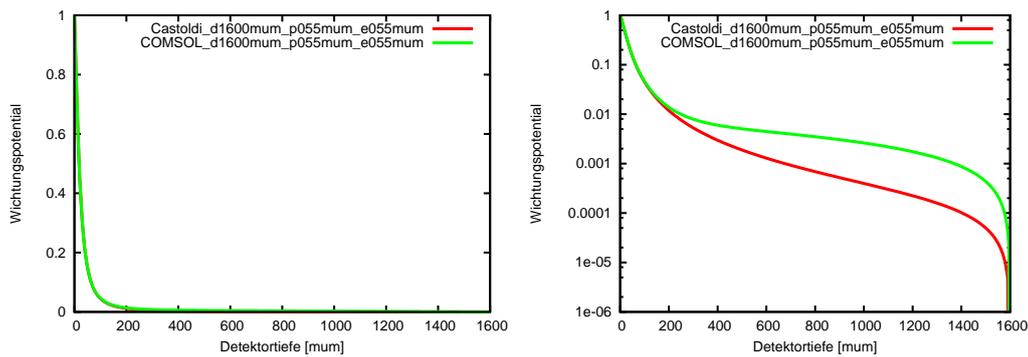
Die Berechnung selbst kann erfolgen durch Simulation mit einem Finite-Elemente-Programm wie COMSOL [42] oder mit Hilfe eines analytischen Ansatzes mit Spiegelladungen, wie er in [43] beschrieben wird: Zunächst wird das Potential berechnet, welches sich ausbildet, wenn eine rechteckige Fläche in der Pixelebene  $z = 0$  auf einem Einheitspotential liegt. Dabei ergibt sich außerhalb der Elektrode in der Elektrodenebene ein Nullpotential. Allerdings wird die Randbedingung, dass in der Ebene des Rückseitenkontaktes bei  $z = d$  Nullpotential herrscht, dann nicht erfüllt. Durch Superposition des Potentials einer Spiegelladung bei  $z = 2d$  erreicht man das Nullpotential in der gesamten Ebene  $z = d$ , allerdings sind dann die Randbedingungen bei  $z = 0$  nicht mehr erfüllt. Durch iteratives Hinzufügen von Spiegelladungen in den Ebenen  $z = nd$  bis zu einer Abbruchbedingung  $n \in \{-N..N\}$  erhält man eine sehr gute Näherung für das Wichtungspotential. Abbildung 7.1 zeigt schematisch dieses Verfahren. Mit diesem Verfahren kann für jeden einzelnen Punkt im Raum unabhängig voneinander das Wichtungspotential berechnet werden.

Abbildung 7.2 zeigt das mit COMSOL bzw. der Methode aus [43] berechnete Wichtungspotential für einen Pixelabstand von  $55\mu\text{m}$  mit einer Elektrodengröße von  $55\mu\text{m}$  bei einer Sensordicke von  $1600\mu\text{m}$ . Beide Methoden kommen auf sehr nahe beieinander liegende Ergebnisse.

Häufig füllt die Elektrode aber nicht die gesamte Pixelfläche aus, so dass ein Bereich zwischen den Pixelelektroden auf unbestimmtem Potential liegt. Für diese Flächen sind in Finite-Elemente-Programmen Neumannrandbedingungen zu wählen, um eine korrekte Lösung zu erhalten. Zur Berechnung des Potentials mit der Methode aus [43] müsste man das Potential in der gesamten Elektrodenebene gut kennen. Daher wurden die in dieser Arbeit verwendeten Wichtungspotentiale für Konfigurationen mit Elektroden, die kleiner als die Pixelgröße sind, mit COMSOL berechnet. Diese Wichtungspotentiale wurden von Björn Kreisler zur Verfügung gestellt.



**Abbildung 7.1** Schematische Darstellung des Verfahrens der Potentialberechnung nach Castoldi (nach [43]). In der Fläche  $A_0$  wird ein Einheitspotential festgelegt. Die restliche Ebene wird auf Nullpotential gelegt. Über eine Serie von Spiegelladungen bei  $A_1, A_{-1}, A_2, A_{-2}$  etc. wird das Nullpotential auf der Gegenkathode nachgebildet. Das Verfahren konvergiert gegen das exakte Wichtungspotential.



**Abbildung 7.2** Vergleich zweier Methoden zur Berechnung der Wichtungspotentiale: Beide Methoden liefern sehr ähnliche Ergebnisse. Die Abweichungen bei kleinen Werten kommen vom begrenzten räumlichen Simulationsvolumen in der COMSOL-Simulation und der endlichen Zahl der dort verwendeten finiten Elemente.

## 7.2 Influenzierung von Strömen

Die Bewegung der Ladungsträger kann durch die Kontinuitätsgleichung für Ladungsträgerdichten  $c$  beschrieben werden:

$$\frac{\delta c}{\delta t} - \vec{\nabla} \cdot (D \vec{\nabla} c) - \vec{\nabla} \cdot (c \vec{v}) = c_0, \quad (7.2)$$

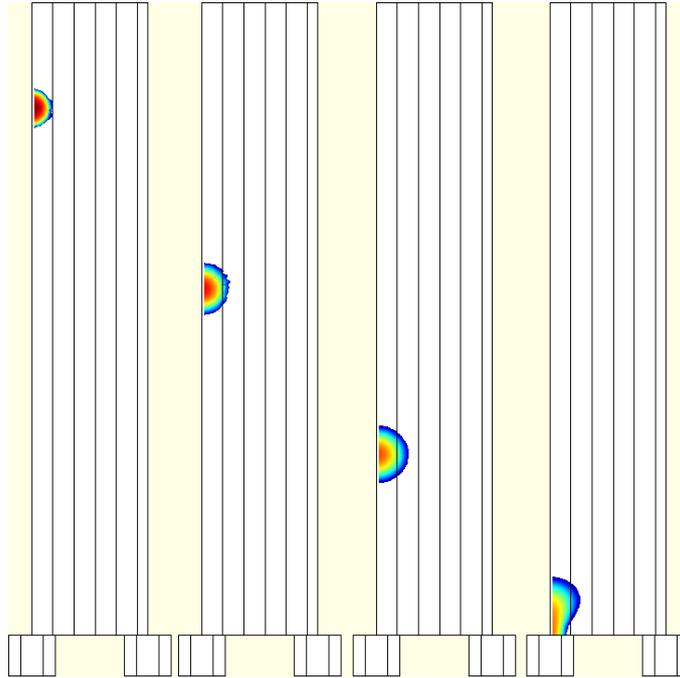
wobei  $D$  die Diffusionskonstante ist und  $c_0$  ein Generationsterm, welcher für den Zeitpunkt  $t = 0$  als Punktladung festgelegt wird.

Aus der gerichteten Driftbewegung mit Driftgeschwindigkeit  $\vec{v} = \mu \cdot \vec{E}$  und einer isotropen Diffusionsbewegung ergibt sich ein Gesamtfluß  $\vec{F}(t)$  an Ladungsträgern, welcher wie

folgt beschrieben werden kann:

$$\vec{F}(t) = c(t) \cdot \vec{v} + D \vec{\nabla} c(t) \quad (7.3)$$

Mit diesem Simulationsansatz kann die Ladungsträgerbewegung in Sensormaterial bis auf Repulsion, welche hier vernachlässigt wird, gut beschrieben werden. Abbildung 7.3 zeigt einen Querschnitt durch die in einer solchen Simulation berechnete Ladungsverteilung für verschiedene Zeitpunkte. Die Ladungswolke bewegt sich aufgrund des von außen angelegten elektrischen Feldes in Richtung Pixelelektrode. Während dieser Bewegung wird die Ausdehnung der Ladungswolke aufgrund der Diffusion größer.



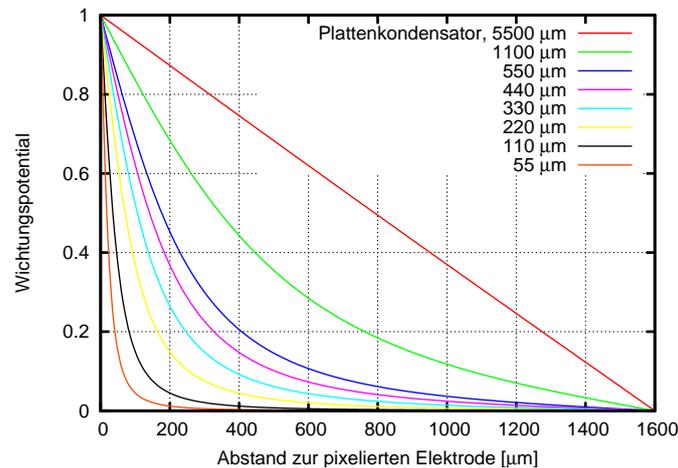
**Abbildung 7.3** Querschnitt der Ladungsträgerkonzentration für verschiedene Zeitpunkte (Quelle: Björn Kreisler [44])

Ladungsträger, welche sich auf eine Elektrode zu bewegen, influenzieren während dieser Bewegung einen Strom in der Elektrode. Dieser influenzierte Strom  $I(t)$  kann mit Hilfe des Ramos Theorem [45] mit einem Wichtungspotential berechnet werden. Der auf einer Elektrode influenzierte Strom kann dann für jeden Zeitschritt berechnet werden:

$$I(t) = \int_{\text{Volumen}} \vec{F}(t) \vec{W} dV \quad (7.4)$$

Dabei ist  $\vec{W}$  das Wichtungsfeld bezüglich der betrachteten Elektrode. Es wird dann ein hoher Strom influenziert, wenn die Ladungswolke sich in einem hohen Wichtungsfeld befindet, also dort wo das Wichtungspotential einen hohen Gradienten hat. Dies ist vor allem kurz vor Erreichen der Pixelelektrode der Fall. Je kleiner die Pixelgröße im Verhältnis zur Sensordicke ist, umso stärker kommt der Effekt zum tragen, dass der Strom erst kurz vor Erreichen der Pixelelektrode groß wird (engl. „small pixel effect“). Für den Fall

eines Plattenkondensators dagegen ergibt sich ein konstantes Wichtungsfeld (lineares Wichtungspotential) und es fließt während der gesamten Driftzeit der Elektronen ein konstanter Strom, bis schließlich die Elektronenwolke die Elektrodenoberfläche erreicht. In Abbildung 7.4 sind für verschiedene Pixelgrößen die Wichtungspotentiale dargestellt, jeweils zentral über der Mitte der Elektrode. Wichtungspotentiale zeigen eine deutliche Abhängigkeit von der Sensortiefe, aber innerhalb des Pixelvolumens eine geringe laterale Abhängigkeit.



**Abbildung 7.4** Wichtungspotential für verschiedene quadratische Pixelgrößen bei einer  $1600\mu\text{m}$  dicken Sensorschicht. Die Wichtungspotentiale wurden mit der Methode von Castoldi [43] berechnet. Dabei ist die Elektrodengröße identisch mit der Pixelgröße. Dargestellt ist das Wichtungspotential zentral über der Mitte der Pixelelektrode.

Elektronen und Löcher driften zwar in verschiedene Richtungen, jedoch besitzt der jeweilige influenzierte Strom aufgrund der unterschiedlichen Polarität von Elektronen und Löchern das gleiche Vorzeichen.

### 7.3 Simulation von influenzierten Strömen

Eine zeitabhängige Simulation dieser Strompulse kann z.B. mit Finite-Elemente-Programmen wie COMSOL [42] durchgeführt werden. Dabei kann ausgehend von einer Ladungswolke in einer transienten Simulation die Bewegung der Ladungswolke durch den Sensor des Detektors und daraus mit Hilfe von Gleichung 7.4 der an einer Elektrode influenzierte Strom berechnet werden. Die an einem Pixel influenzierte Ladung erhält man aus dem Integral des Strompulses über der Zeit.

$$Q(t) = Q_e(t) + Q_h(t) = \int_0^t I_e(t') dt' + \int_0^t I_h(t') dt' \quad (7.5)$$

Solche Simulationen sind sehr zeitaufwändig und liefern nur die Strompulse für eine gerade betrachtete Elektrode, während das Signal für die Nachbarelektrode in einer zusätzlichen zeitaufwändigen Simulation separat berechnet werden muss. Eine alternative Methode ist die Berechnung der adjungierten Lösung mittels einer einzigen Simulation für alle Orte der Ladungsdeposition (Details zur Berechnung: Björn Kreisler [44]). Damit

kann eine Ladungsinfluenzierungstabelle berechnet werden, welche als Nachschlagetabelle für Monte-Carlo-Simulationen unter Berücksichtigung der Auswirkungen zeitaufgelöster Signale verwendet werden könnte.

## 7.4 Umsetzung in der Monte-Carlo-Simulation

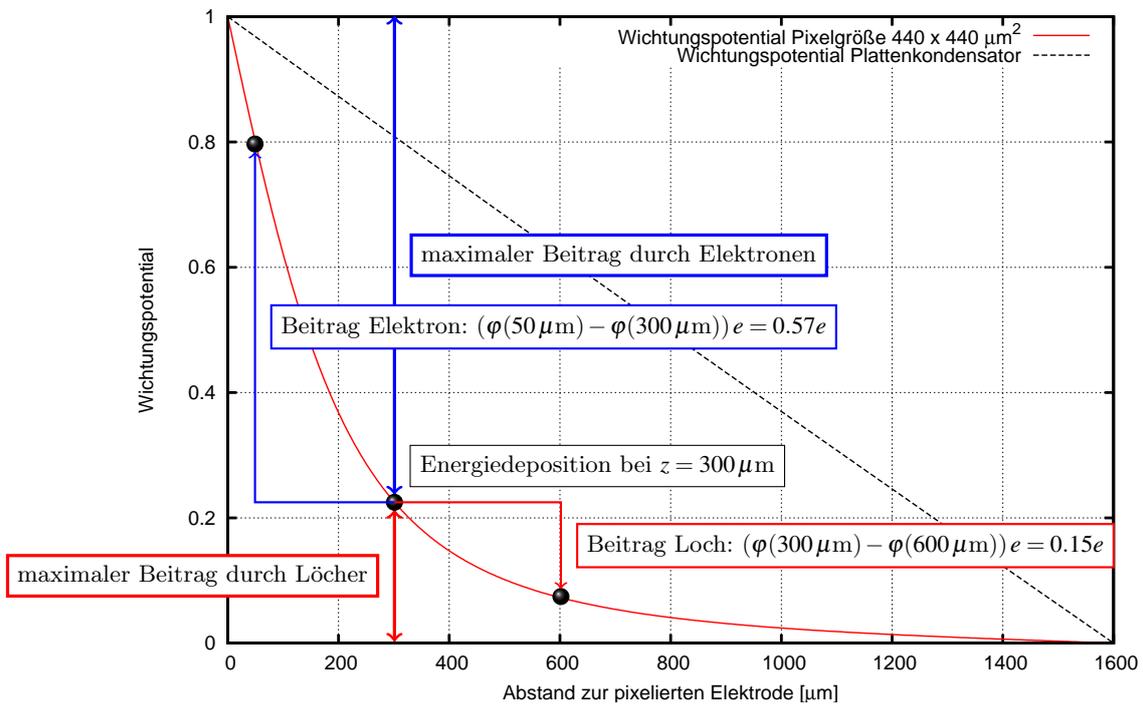
Die in dieser Arbeit entwickelte Monte-Carlo-Simulation berücksichtigt die influenzierte Ladung durch Elektronen und Löcher während ihrer Lebens- bzw. Driftzeit. Diese Zeit wird eingeschränkt durch eine Integrationszeit, welche die Zeitkonstante des ladungsempfindlichen Verstärkers der Pixelelektronik charakterisiert. Die Verwendung einer Konstanten für diese Zeit ist eine Näherung. Das zeitabhängige Signal wird jedoch nicht explizit berücksichtigt. Der Beitrag eines einzelnen Elektrons bzw. Lochs hängt dann ab von der Wichtungspotentialdifferenz, die dieses durchschritten hat. In Abbildung 7.5 ist dieser Sachverhalt schematisch dargestellt: Ein in einer bestimmten Tiefe deponiertes Elektron-Loch-Paar trägt zum Signal nur teilweise bei, wenn die beiden Ladungsträger nicht oder nicht rechtzeitig ihre Elektroden erreichen. Ein einzelner erzeugter Ladungsträger kann auf der Pixelelektrode maximal eine Ladungsmenge influenzieren, die der von ihm durchschrittenen Potentialdifferenz entspricht. In diesem Beispiel ist dies für einen  $1600\mu\text{m}$  dicken Sensor im Elektronensammlungsmodus für eine Absorptionstiefe von  $1300\mu\text{m}$  ( $300\mu\text{m}$  über der pixelierten Elektrodenebene) gezeigt. Das Loch kann auf dem Weg zur homogenen Gegenelektrode max. 22% seiner Ladungsmenge auf der Pixelelektrode influenzieren, welche vom zugehörigen Elektron erreicht wird. Dieses Elektron kann max. 78% seiner Ladungsmenge auf dieser Pixelelektrode influenzieren. Diese Werte gelten nur für ein Ensemble von Elektronen, da immer nur eine ganzzahlige Anzahl von Ladungsträgern in der Pixelelektronik influenziert werden kann. Rekombinieren Ladungsträger bevor sie eine Elektrode erreichen, tragen sie noch weniger zum Strom in der Pixelelektronik bei. Im Beispiel ist der Extremfall dargestellt, dass sowohl Elektron als auch Loch nach einiger Zeit rekombinieren. Dieses Elektron-Loch-Paar influenzierte in der Pixelelektronik eine Ladung, die etwa 72% der Elementarladung entspricht. Anders ausgedrückt driftet mit 72% Wahrscheinlichkeit aufgrund dieses Elektron-Loch-Paares ein Elektron der Pixelebene in die Elektronik des Pixels in Form einer Spiegelladung.

Für jedes Elektron und Loch wird unter Berücksichtigung der relevanten Transportprozesse im Sensor die Start- und Endposition nach Drift- bzw. Lebenszeit bestimmt. Die laterale Position bestimmt dann den Pixel, für welchen die influenzierte Ladung bestimmt wird. Falls der betrachtete Ladungsträger die Elektrode nicht erreicht, weil er vorher rekombiniert, würde er auf benachbarten Pixeln auch noch ein sehr kleines Signal beitragen. Dies wurde vernachlässigt. Aufgrund der z-Positionen kann dann die influenzierte Ladung bestimmt werden :

$$\Delta Q_e = e \cdot (\varphi(z(t_e)) - \varphi(z(0))) \quad (7.6)$$

$$\Delta Q_h = -e \cdot (\varphi(z(t_h)) - \varphi(z(0))) \quad (7.7)$$

Beide Ladungsmengen haben das gleiche Vorzeichen, weil die Wichtungspotentialdifferenz aufgrund der entgegengesetzten Driftrichtung entgegengesetztes Vorzeichen hat und die Ladungsträger selbst ebenfalls entgegengesetztes Vorzeichen besitzen. Falls beide Ladungsträger eines Elektron-Loch-Paares die jeweiligen Elektroden erreichen, wurde auf



**Abbildung 7.5** Skizze zur Erläuterung der influenzierten Ladungsmengen: Ein Elektron-Loch-Paar wurde in der Tiefe  $z = 300 \mu\text{m}$  erzeugt. Dargestellt ist ein Spezialfall, in welchem sowohl Elektron als auch Loch vor Erreichen der Elektroden rekombinieren.

der Pixelelektrode eine Ladungsmenge influenziert, die genau einer Elementarladung entspricht.

Wird eine maximale Integrationszeit der Pixelelektronik berücksichtigt, so werden für diese Rechnung die Endpositionen der Ladungsträger nach dieser maximalen Zeit verwendet.

## 7.5 Relevanz der Berücksichtigung influenzierter Signale in Abhängigkeit vom Material

Für Materialien mit geringen Driftzeiten bzw. langer Integrationszeit der Pixelelektronik sowie hohen Lebenszeiten erreichen alle Elektronen und Löcher ihre Zielelektrode. Dann ist die influenzierte Ladung identisch mit der gesammelten Ladung und eine explizite Simulation der influenzierten Ladung mit Hilfe des Wichtungspotentials kann vernachlässigt werden. Dies ist beispielsweise bei Silizium der Fall.

Bei Materialien mit hoher Ordnungszahl dagegen haben die Löcher sehr häufig eine relativ zu den Elektronen sehr kleine Mobilität. Bei CdTe liegt ein Faktor 10 zwischen beiden Mobilitäten. Dies hat zur Folge, dass der durch die Löcher influenzierte Strom wesentlich später endet als der durch Elektronen influenzierte Strom. Aufgrund einer endlichen Integrationszeit der Pixelelektronik geht dadurch nicht die gesamte durch Löcher influenzierte Ladung in die mit der Schwelle verglichene Signalhöhe ein. Daher ist eine Be-

rücksichtigung influenzierter Ladungen in der Simulation photonenzählender Detektoren mit Sensormaterialien hoher Ordnungszahl von großer Bedeutung.

## 7.6 Verarbeitung der Ladungssignale durch die Pixelelektronik

### 7.6.1 Zählverfahren durch Vergleich mit einer Diskriminatorschwelle

Das in der Elektrodenenebene influenzierte Signal wird von der Pixelelektronik weiterverarbeitet. Photonenzählende Detektoren wie der Medipixdetektor arbeiten dabei meist mit einem ladungsempfindlichen Verstärker, welcher an seinem Ausgang einen Spannungspuls mit einer zur Ladungsmenge am Eingang des Verstärkers proportionalen Signalthöhe produziert. Dieses wird mit einer Diskriminatorschwelle verglichen und bei Überschreiten der Schwelle ein Zählereignis ausgelöst. Dieser Fall liegt beim Medipix2-Detektor vor. Der Medipix3-Detektor besitzt außerdem einen Ladungssummiermodus, der bereits in Kapitel 2 erwähnt wurde.

### 7.6.2 Rauschbeiträge

In pixelierten Detektoren treten eine Reihe von Rauschbeiträgen auf, die sich dem Fanorauschen überlagern. Innerhalb der Pixelelektronik kommen zeitliche und räumliche Rauschbeiträge dazu.

Räumlich abhängige Rauschbeiträge sind eine Variation des Verstärkungsfaktors von Pixel zu Pixel. Dieser Rauschbeitrag kann in einem gewissen Ausmaß durch eine Einzelpixelenergiekalibrierung kompensiert werden. Im Ladungssummiermodus des Medipix3 tritt zusätzlich eine ortsabhängige Stromkopievariation auf.

Dazu kommen zeitabhängige Rauschbeiträge. Ladungsempfindliche Verstärker integrieren das ankommende Stromsignal in einem Kondensator auf und entladen diesen wieder mit einem konstanten Strom. Dadurch kann ein gegebenenfalls am Verstärker ankommender Dunkelstrom kompensiert werden. Nicht kompensiert wird allerdings das Rauschen des Dunkelstroms. Dies äußert sich letztlich in einer Variation der Höhe des Ausgangssignals des ladungsempfindlichen Verstärkers. Analog läßt sich dieses Rauschen als zeitliches Schwellenrauschen betrachten.

### 7.6.3 Umsetzung in der Simulation

In der Simulation kann ein Rauschen in Form eines Gauss'schen Rauschens mit konstanter Breite  $\sigma_{\text{abs}}$  angegeben werden. Zusätzlich kann ein energieabhängiger Rauschbeitrag als Relativwert  $\sigma_{\text{rel}}$  angegeben werden, beispielsweise 1%. Die Ladung, die bei der Simulation bei einem Ereignis in einem Pixel registriert wurde, wird entsprechend variiert:

$$Q_{\text{verrauscht}} = Q_{\text{in}} \cdot (1 + \text{Gauss}(0.0, \sigma_{\text{rel}})) + \text{Gauss}(0.0, \sigma_{\text{abs}}) \quad (7.8)$$

wobei  $\text{Gauss}(x, \sigma)$  für eine Zufallszahl nach einer normierten Gaussverteilung um den Mittelwert  $x$  mit Standardabweichung  $\sigma$  steht.

Ein ortsabhängiges Verstärkerrauschen kann am Anfang der Simulation in Form einer Nachschlagetabelle für Verstärkungsfaktoren berechnet werden. Dabei wird für jeden Pixel des simulierten Detektors ein Zufallswert entsprechend der Zufallsverteilung  $(1 + \text{Gauss}(0.0, \sigma_{\text{rel0}}))$  berechnet und für alle dann simulierten Ereignisse verwendet.

Im Ladungssummiermodus wird analog zur Variation der Verstärkungsfaktoren für jeden Pixel jeweils für jeden der vier Nachbarn die Stromkopievariation ( $\sigma_{CC}$ ) vorab berechnet. Während der Summation der Stromkopien der beteiligten Nachbarn kann ein zeitliches Rauschen der Stromkopien berücksichtigt werden.

Für den Medipix2 sind näherungsweise Werte für diese Rauschbeiträge bekannt. Für die Mexipix3-Detektoren sind bisher nur Abschätzungen aufgrund von Simulationen der Elektronik selbst bekannt. Dieser Detektor steht noch nicht zur Verfügung. Simulationen erlauben, im Vorfeld bereits das aufgrund des Ladungssummiermodus zu erwartenden Detektorantwort abzuschätzen.

## 7.7 Zusammenhang zwischen Energieantwortspektrum und Schwelle bei zählenden Detektoren

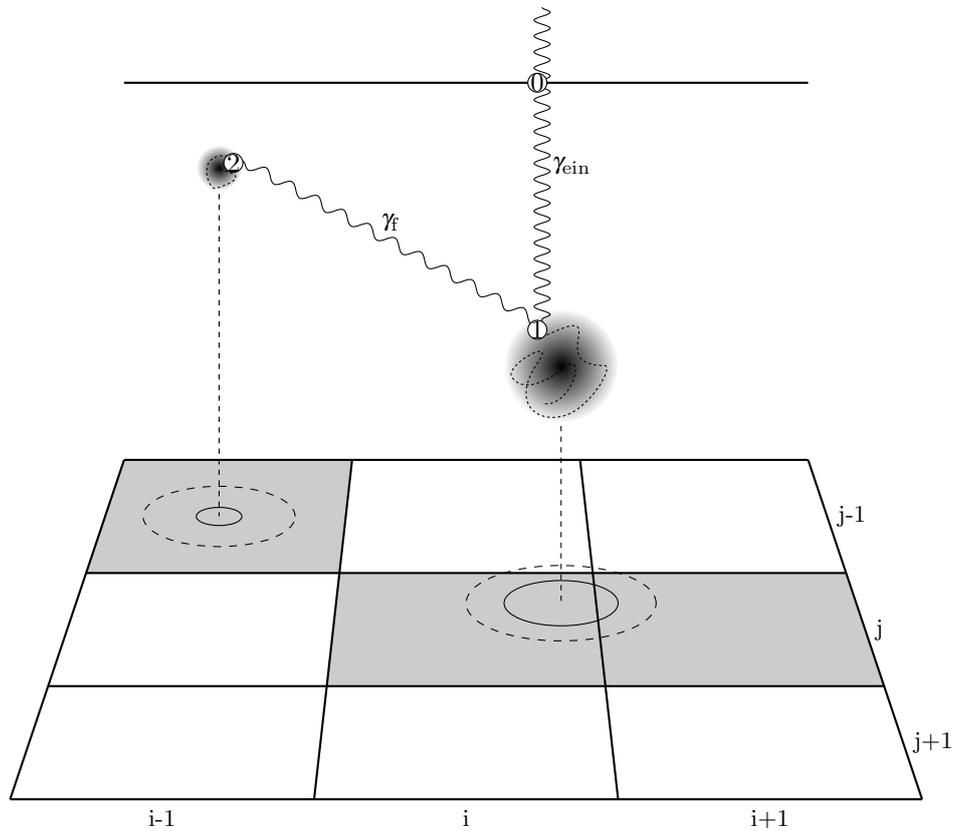
Bei integrierenden Detektoren summiert jeder Pixel die in seinem zugehörigen Pixelvolumen deponierte Energie auf, die üblicherweise von mehreren Photonen erzeugt wird. Eine Summation über die Energiedeposition aller Pixel ergibt die von vielen Photonen im Sensor deponierte Energie. Unbekannt bleibt dabei die auf den Detektor auftreffende Anzahl von Photonen und deren spektrale Verteilung.

Zählende Detektoren dagegen haben das Ziel, die Anzahl der Photonen zu bestimmen. Sie arbeiten mit einer Energieschwelle, welche überschritten werden muss, damit ein Pixel seinen Zähler erhöht. Dies hat den Vorteil, dass Grundrauschen in der Elektronik und Dunkelstrom im Sensor nicht zu Zählereignissen führen und der Detektor nur zählt, wenn auch ein Ereignis mit hoher Energiedeposition im Sensor stattgefunden hat. Durch die Energieschwelle steht ein zusätzlicher Parameter zur Verfügung, mit welchem der Zugang zur Energieinformation ermöglicht wird.

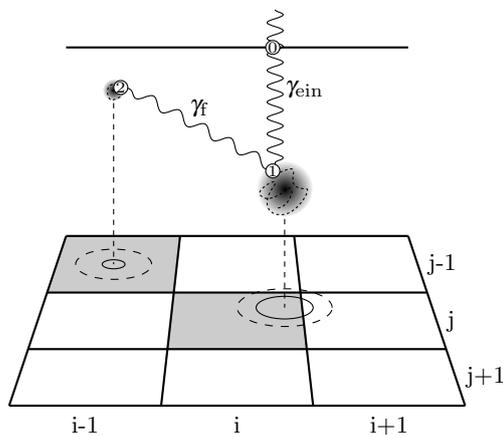
In zählenden Detektoren kann bei gleichbleibendem Röntgenfluss auf den Detektor über nacheinander vorgenommene Messungen mit verschiedenen Einstellungen der Diskriminatorschwelle jeweils die Anzahl der absorbierten Photonen mit entsprechender Mindestenergie gemessen werden. Dies ist ein sogenannter Schwellenscan (engl. „threshold scan“). Aus diesen Messungen kann durch Ableitung der Messung nach der Schwelle die Anzahl und spektrale Verteilung der im Sensor durch einzelne Photonen deponierten Energiebeiträge bestimmt werden. Durch mit der Energie gewichtete Integration erhält man die Messgröße von idealen integrierenden Detektoren. Neben der Intensität der Energiedeposition kann mit zählenden Detektoren zusätzlich eine Energieinformation erhalten werden.

Bei pixelierten zählenden Detektoren besitzt jeder Pixel seine eigene Elektronik und zählt eigenständig ein Ereignis, sobald aufgrund eines am Eingang seines Verstärkers ankommenden Signals seine Energieschwelle überschritten wird. Aufgrund von Ladungstrennung zwischen Pixeln und aufgrund von Influenzeffekten können mehrere Pixel eine Ladung sehen. Daher können bei niedrigen Schwelleneinstellungen unter Umständen mehrere Pixel dasselbe Ereignis zählen. Ein Beispiel ist in Abbildung 7.7(a) dargestellt. Diese Mehrfachzählungen führen zu einer verfälscht wiedergegebenen Anzahl der im Sensor absorbierten Photonenzahl.

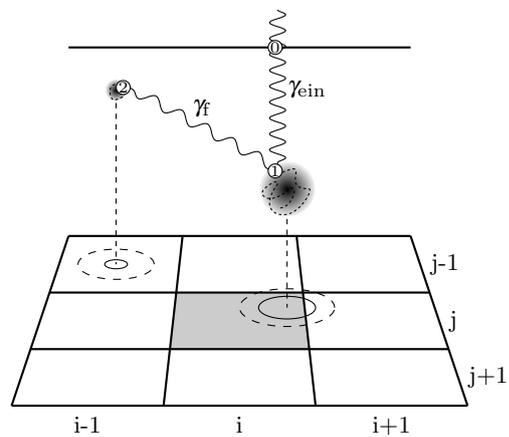
Die von pixelierten zählenden Detektoren erhaltene Messung entspricht dem Integral des Energieantwortspektrums ab der Schwellenenergie bis zur höchsten Energie. Im Vergleich zu integrierenden Detektoren verliert man die Energieantwortbeiträge, die unterhalb der



(a) sehr niedrige Schwelle



(b) mittlere Schwelle



(c) hohe Schwelle

**Abbildung 7.6** Das Beispiel zeigt eine Photoabsorption (1) im Sensormaterial unter Ausstrahlung eines Fluoreszenzphotons, welches im Sensorvolumen eines benachbarten Pixels absorbiert wird (2). Eine Projektion der erzeugten Ladungswolke auf die Elektrodenoberfläche zeigt, dass in diesem Beispiel im Sensorvolumen von mehreren Pixeln Ladung deponiert wurde. Die gestrichelten Kreise skizzieren den Einfluss von Diffusion und Repulsion.

Schwelle liegen. Manche Photonen lösen kein Zählereignis mehr aus, obwohl sie im Sensor interagiert haben. Durch Wahl einer ausreichend hohen Schwelle können andererseits Mehrfachzählungen weitgehend vermieden werden, wie in Abbildung 7.7(b) und 7.7(c) gezeigt. Zwischen beiden Effekten muss ein Kompromiss für die Wahl der Schwelle gefunden werden.

Zur Beschreibung der bildgebenden Eigenschaften eines Detektorsystems gibt es verschiedene Kriterien, die im Folgenden kurz eingeführt werden. Es wird gezeigt werden, wie die Mehrfachzählungen berücksichtigt werden können. Mit Hilfe dieser Bildqualitätskriterien ist es dann möglich, unter Verwendung der bisher dargestellten detaillierten Simulation systematisch optimale Detektoreinstellungen beispielsweise bzgl. der Energie der Diskriminatorschwelle zu finden.



# 8 Bildqualitätskriterien bildgebender Systeme

## Inhaltsangabe

---

8.1	Abbildung eines Signals . . . . .	57
8.2	Abbildung von Rauschen . . . . .	57
8.3	Signal-Rausch-Verhältnis SNR . . . . .	58
8.4	Die detektierbare Quanteneffizienz DQE . . . . .	58
8.5	Die Linienbildfunktion LSF . . . . .	58
8.6	Die Modulationstransferfunktion MTF . . . . .	58

---

Für die Bewertung der Qualität der abbildenden Eigenschaften eines Detektors gibt es verschiedene Standardkriterien. Das wichtigste Kriterium ist diesbezüglich die Bewertung des Informationstransfers durch ein bildgebendes System. In diesem Kapitel sollen die wichtigsten Standardkriterien vorgestellt werden.

### 8.1 Abbildung eines Signals

Ziel eines bildgebenden Systems ist es, ein am Eingang des Systems anliegendes Signal möglichst unverfälscht wiederzugeben. Das Eingangssignal läßt sich im Ortsraum als eine Überlagerung vieler  $\delta$ -Funktionen, auch Deltapeak genannt, beschreiben. Von einem realen System wird ein Deltapeak verfälscht wiedergegeben. Die Antwort eines Detektors auf einen Deltapeak im Ortsraum nennt man Punktbildfunktion (PSF, engl. „point spread function“). Im Orts-Frequenzraum kann die Antwort auf ein Signal mit der Modulationstransferfunktion (MTF, engl. „modulation transfer function“) beschrieben werden, die man über Fouriertransformation aus der Punktbildfunktion erhält:

$$MTF(f) = \mathcal{F}(PSF(x)) \tag{8.1}$$

### 8.2 Abbildung von Rauschen

Jedes reale bildgebende System wird auch von Rauschbeiträgen beeinflusst. Das Rauschen im Ortsraum läßt sich mit der Autokorrelationsfunktion beschreiben, dessen Fouriertransformierte das Rauschleistungsspektrum (NPS, engl. „noise power spectrum“) ist. Für ideale bildgebende Systeme ist das Rauschleistungsspektrum bezüglich der Frequenzabhängigkeit eine Konstante.

### 8.3 Signal-Rausch-Verhältnis SNR

Das Signal-Rausch-Verhältnis (SNR, engl. „signal to noise ratio“) gibt an, wie gut ein Signal von Rauschen unterschieden werden kann. Es ist definiert als Quotient aus Signalthöhe und Rauschen des Signals.

### 8.4 Die detektierbare Quanteneffizienz DQE

Einer der grundlegenden Parameter zur Bewertung eines Detektors ist die detektierbare Quanteneffizienz (DQE, engl. „detective quantum efficiency“). Diese ist ein Maß für den Informationstransfer durch ein System, d.h. es gibt an, um welchen Faktor das Signal-zu-Rauschverhältnis durch ein System (hier: Detektor) verändert wird. Definiert wird sie als Funktion der Ortsfrequenz  $f$ :

$$\text{DQE}(f) = \frac{\text{SNR}_{\text{out}}^2(f)}{\text{SNR}_{\text{in}}^2(f)} \quad (8.2)$$

Dabei bedeutet *out* die vom Detektor ausgegebene Information und *in* steht für das auf den Detektor treffende Röntgenfeld. Da die DQE den Informationstransfer durch ein System beschreibt, liegt der gültige Wertebereich im Intervall zwischen Null und Eins.

### 8.5 Die Linienbildfunktion LSF

Die Linienbildfunktion (LSF, engl. „line spread function“) ist ein eindimensionales Intensitätsprofil des Abbildes einer infinitesimal dünnen Linie. Die Linie kann durch eine breite emittierende Photonenquelle und einen Spalt realisiert werden. Dieser Spalt ist leicht gegenüber einer Pixelachse verkippt, so dass im Mittel über den Pixelgrundflächen alle Positionen gleich stark ausgeleuchtet werden. Durch eine Projektion der Detektorantwort auf eine Achse senkrecht zum Spalt erhält man schließlich die Linienbildfunktion. Für Detektoren mit translationsinvarianter Punktbildfunktion entspricht die Linienbildfunktion der Punktbildfunktion.

Experimentell sind infinitesimal dünne Spalte nicht umsetzbar. Um dieses Problem zu umgehen verwendet man üblicherweise eine Kante, die analog zur Linie über dem Detektor angeordnet wird. Durch Projektion auf eine Achse senkrecht zur Kante erhält man eine Kantenbildfunktion (ESF, engl. „edge spread function“), aus welcher man durch Differenzieren leicht die Linienbildfunktion bestimmen kann.

### 8.6 Die Modulationstransferfunktion MTF

Die Modulationstransferfunktion (MTF) ist eine Größe zur objektiven Bewertung der Qualität der Abbildung bildgebender Systeme. Sie gibt den Quotienten von Bild- und Objektcontrast in Abhängigkeit der Ortsfrequenz des abzubildenden Objektes an. Dies entspricht der Übertragung eines mit einer bestimmten Ortsfrequenz modulierten Objektcontrastes in den Bildcontrast.

Die MTF ist die Fouriertransformierte der Punktbildfunktion bzw. der Linienbildfunktion.

$$\text{MTF}(f) = \mathcal{F}(\text{LSF}(x)) \quad (8.3)$$



# 9 DQE photonenzählender Röntgendetektoren

## Inhaltsangabe

---

<b>9.1</b>	<b>Problem bei der Bestimmung des Signal-Rausch-Verhältnisses</b>	<b>61</b>
<b>9.2</b>	<b>Multiplizitätsbetrachtungen . . . . .</b>	<b>62</b>
9.2.1	Effizienz . . . . .	63
9.2.2	Mittlere Multiplizität und mittlere quadratische Multiplizität . .	63
<b>9.3</b>	<b>DQE photonenzählender Detektoren - Theorie . . . . .</b>	<b>63</b>

---

Für ein auf den Detektor treffendes homogenes Röntgenfeld sei  $N_{\text{in}}$  die Anzahl der auf ein Flächenelement treffenden Photonen mit einem Signal-zu-Rauschverhältnis  $\text{SNR}_{\text{in}}$ . Ein Detektor misst diesen Fluss mit einer bestimmten Effizienz und Ortsauflösung, was in einem  $\text{SNR}_{\text{out}}$  resultiert. Die Signalverarbeitungskette besteht bei integrierenden Detektoren aus einer Reihe von Schritten, die durchzuführen sind, um dieses  $\text{SNR}_{\text{out}}$  zu bestimmen (z.B. [46, 47] und [48]).

Für photonenzählende Detektoren erscheint diese Signalverarbeitungskette relativ einfach: Bei idealen photonenzählenden Detektoren ist dies nur ein Schritt, da direkt die Photonen gezählt werden. Man würde bei  $N_{\text{det}}$  absorbierten Photonen eine Anzahl an Zählereignissen  $N_{\text{det}}$  mit einem Poissonrauschen  $\sqrt{N_{\text{det}}}$  erwarten. Die bei realen photonenzählenden Detektoren beobachtete Fluktuation der Photonenzahl kann aber größer sein. Die Ursache dafür liegt in Mehrfachansprechern.

Im Folgenden wird eine Beziehung für die detektierbare Quanteneffizienz bei Raumfrequenz Null [49], d.h. homogener Bestrahlung, abgeleitet, welche durch die relative Häufigkeit von Mehrfachzählereignissen dargestellt werden kann. Diese läßt sich zumindest für geringen Fluss auch experimentell bestimmen.

## 9.1 Problem bei der Bestimmung des Signal-Rausch-Verhältnisses

Für homogenen Röntgenfluss in Richtung des Detektors läßt sich bezüglich der Messgröße zählender Detektoren, der Anzahl von Photonen, leicht das Signal-Rausch-Verhältnis angeben. Das einfallende Signal enthält  $N_{\text{in}}$  Photonen pro Flächeneinheit und Zeiteinheit mit einer Varianz von  $(\delta N_{\text{in}})^2 = N_{\text{in}}$ , weil ein homogener Röntgenfluss über einen Poissonprozess erzeugt wird. Das Signal-zu-Rauschverhältnis des einfallenden Röntgenfeldes ist daher gleich  $\sqrt{N_{\text{in}}}$ . Ein homogener Röntgenfluss entspricht der Raumfrequenz Null, damit gilt:

$$\text{SNR}_{\text{in}}(0) = \frac{N_{\text{in}}}{\sqrt{N_{\text{in}}}} = \sqrt{N_{\text{in}}} \quad (9.1)$$

Eine bestimmte Anzahl dieser  $N_{\text{in}}$  Photonen wechselwirkt mit dem Sensormaterial und erzeugt jeweils eines bzw. mehrere Zählereignisse im Detektor (siehe auch Abbildung 7.6). Die Ausgabe des Detektors sind die Zählerstände der einzelnen Pixel der gesamten Pixelmatrix. Die Summe dieser Zählerstände entspricht der Anzahl an Zählereignissen, die von  $N_{\text{in}}$  einfallenden Photonen vom Detektorsystem erzeugt wurden. Im medizinisch diagnostischen Energiebereich wird für dicke Sensoren (größer 1 mm) mit hoher Ordnungszahl (z. B. CdTe) fast jedes Photon absorbiert. Bei gleichzeitig kleiner Pixelgröße und relativ niedriger Diskriminatorschwelle löst ein Teil der Photonen Zählereignisse in mehreren Pixeln aus. Dadurch ist es möglich, dass die Anzahl an Zählereignissen insgesamt größer als  $N_{\text{in}}$  werden kann. Nach außen ist allerdings nicht ersichtlich, dass manche Photonen mehrere Zählereignisse ausgelöst haben. Nimmt man fälschlicherweise an, dass alle Zählereignisse unabhängig voneinander sind, also jedes Zählereignis von einem anderen einfallenden Röntgenphoton ausgelöst worden ist, ergibt sich aus der dann Poisson-verrauschten Gesamtzahl an Zählereignissen das Signal-zu-Rauschverhältnis zu:

$$\text{SNR}_{\text{out}}(0) = \frac{N_{\text{out}}}{\sqrt{N_{\text{out}}}} = \sqrt{N_{\text{out}}} \quad (9.2)$$

Ein Einsetzen in die Formel für die detektierbare Quanteneffizienz ergibt:

$$\text{DQE}(0) = \frac{\text{SNR}_{\text{out}}^2(0)}{\text{SNR}_{\text{in}}^2(0)} = \frac{N_{\text{out}}}{N_{\text{in}}} \quad (9.3)$$

Dieser Wert ist größer Eins für den oben geschilderten möglichen Fall mit  $N_{\text{out}} > N_{\text{in}}$  und liegt daher außerhalb des erlaubten Wertebereichs. Natürlich ergeben sich aufgrund von Mehrfachzählungen auch schon bei  $N_{\text{out}} < N_{\text{in}}$  fehlerhafte DQE-Werte, die nicht dem Informationstransfer entsprechen, wenn  $N_{\text{out}}$  Einfach- und Mehrfachzählereignisse enthält.

Für eine korrekte Bestimmung der detektierbaren Quanteneffizienz müssen die Mehrfachzählungen berücksichtigt werden. Dies kann mit dem nachfolgend vorgestellten Konzept der Multiplizitäten erfolgen.

## 9.2 Multiplizitätsbetrachtungen

In Simulationen und bei kleinem Fluss auch experimentell ist die Anzahl  $i$  der von einem einzelnen Photon ausgelösten Zählereignisse zugänglich. Spricht ein einzelner Pixel an, spricht man von einem Ereignis mit Multiplizität 1, bei zwei ansprechenden Pixeln von einem Ereignis mit Multiplizität 2, usw. Die Anzahl der Ereignisse, die genau  $i$  Zählerinkrementierungen auslösen, sei  $N_i$ .

Damit liefert der Detektor bei einer großen Anzahl von Röntgenphotonen eine Anzahl von Zählereignissen  $N_{\text{det}}$ , die  $N_1$  Eintreffer,  $N_2$  Doppeltreffer,  $N_3$  Dreifachtreffer usw. enthält, obwohl nur  $N_{\text{true}}$  Röntgenphotonen detektiert wurden:

$$N_{\text{det}} = \sum_{i>0} iN_i \quad (9.4)$$

$$N_{\text{true}} = \sum_{i>0} N_i \quad (9.5)$$

Mit Hilfe dieser  $N_i$  können nun wichtige Größen dargestellt werden.

### 9.2.1 Effizienz

Die Detektionseffizienz  $\varepsilon$  ist definiert als der Anteil der Photonen, die im Sensormaterial interagiert und wenigstens ein Zählereignis ausgelöst haben.

$$\varepsilon := \frac{N_{\text{true}}}{N_{\text{in}}} \quad (9.6)$$

Dargestellt mit der Anzahl an  $i$ -fach-Ansprechern  $N_i$  und den Nicht-Ansprechern  $N_0$  ergibt sich

$$\varepsilon = \frac{\sum_{i \geq 1} N_i}{N_{\text{in}}} = \frac{N_{\text{in}} - N_0}{N_{\text{in}}} \quad (9.7)$$

wobei  $N_{\text{in}}$  die Anzahl der auf den Detektor treffenden Röntgenquanten ist. Für die so definierte Detektionseffizienz gilt immer  $0 \leq \varepsilon \leq 1$ . Für den Idealfall, dass keine Mehrfachzählereignisse auftreten, ergibt sich für die DQE die Detektionseffizienz. Wichtig ist anzumerken, dass die Detektionseffizienz nicht dem Verhältnis aus  $N_{\text{det}}$  und  $N_{\text{in}}$  entspricht und auch nicht direkt messbar ist, da  $N_{\text{true}}$  experimentell nicht zugänglich ist.

### 9.2.2 Mittlere Multiplizität und mittlere quadratische Multiplizität

Die mittlere Multiplizität, d.h. die mittlere Anzahl an Pixeln, die pro Ereignis ansprechen, kann dann definiert werden als:

$$\langle m \rangle = \frac{\sum_i i N_i}{\sum_{i > 0} N_i} = \frac{N_{\text{det}}}{N_{\text{true}}} = \frac{N_{\text{det}}}{\varepsilon N_{\text{in}}} \quad (9.8)$$

Entsprechend ergibt sich für die Varianz der Multiplizität die mittlere quadratische Multiplizität:

$$\langle m^2 \rangle = \frac{\sum_i i^2 N_i}{\sum_{i > 0} N_i} = \frac{\sum i^2 N_i}{N_{\text{true}}} = \frac{\sum_i i^2 N_i}{\varepsilon N_{\text{in}}} \quad (9.9)$$

Für die mittlere Multiplizität und die mittlere quadratische Multiplizität gilt aufgrund dieser Definition:  $\langle m \rangle \geq 1$  und  $\langle m^2 \rangle \geq 1$

Für zählende Detektoren beschreiben diese beiden Größen, wie stark die Gesamtzahl der Zählereignisse gegenüber idealen Detektoren, die nicht unter dem Problem der Mehrfachzählereignisse leiden, erhöht ist, sowie die Schwankung dieser Erhöhung.

## 9.3 DQE photonenzählender Detektoren - Theorie

Die für die Bestimmung der detektierbaren Quanteneffizienz nötigen Signal-zu-Rauschverhältnisse lassen sich mit Hilfe der Multiplizitätsbetrachtungen darstellen.

Das Signal-zu-Rauschverhältnis des auf den Detektor treffenden Röntgenfeldes ist

$$\text{SNR}_{\text{in}} = \frac{N_{\text{in}}}{\sqrt{N_{\text{in}}}} = \sqrt{N_{\text{in}}} = \sqrt{\frac{N_{\text{true}}}{\varepsilon}} \quad (9.10)$$

Zur Berechnung des Signal-zu-Rauschverhältnisses der Ausgabe des Detektors wird neben der Anzahl der Zählereignisse auch noch deren Varianz benötigt.

Da jedes einfallende Photon zu genau einem  $N_i$  beiträgt, sind die Ensembles der  $N_i$  unabhängig voneinander. Daher ist das Rauschen für jeden Wert  $N_i$  Poisson-artig. Für

**Tabelle 9.1** Übersicht über Signal- und Rauschgrößen für photonenzählende Detektoren dargestellt mit Hilfe des Multiplizitätsformalismus

Beschreibung / Erklärung	Name / Formel
Anzahl der auf den Detektor treffenden Quanten	$N_{\text{in}}$
Anzahl der „i-fach-Ansprecher“	$N_i$
Nachweiseffizienz	$\varepsilon := \frac{\sum_{i \geq 1} N_i}{N_{\text{in}}} = \frac{N_{\text{in}} - N_0}{N_{\text{in}}}$
mittlere Multiplizität	$\langle m \rangle := \frac{\sum_i i N_i}{\varepsilon N_{\text{in}}}$
mittlere quadratische Multiplizität	$\langle m^2 \rangle := \frac{\sum_i i^2 N_i}{\varepsilon N_{\text{in}}}$
Signal <sub>in</sub>	$N_{\text{in}}$
Rauschen <sub>in</sub>	$\sqrt{N_{\text{in}}}$
Signal/Rausch-Verhältnis <sub>in</sub>	$\text{SNR}_{\text{in}} = \sqrt{N_{\text{in}}}$
Signal <sub>out</sub>	$\sum_i i N_i$
Rauschen $N_i$	$\delta N_i = \sqrt{N_i}$
Rauschen <sub>out</sub>	$\sqrt{\sum_i i^2 N_i}$
Signal/Rausch-Verhältnis <sub>out</sub>	$\text{SNR}_{\text{out}} = \frac{\langle m \rangle}{\sqrt{\langle m^2 \rangle}} \sqrt{\varepsilon N_{\text{in}}}$
Detektierbare Quanteneffizienz	$\text{DQE} = \frac{\langle m \rangle^2}{\langle m^2 \rangle} \varepsilon$

die Varianz der  $N_i$  gilt daher  $\sigma_{N_i}^2 = N_i$ , womit sich ein Rauschen der detektierten Zählerereignisse von  $\sigma_{N_{\text{det}}}^2 = \sum i^2 \sigma_{N_i}^2 = \sum i^2 N_i = \langle m^2 \rangle N_{\text{true}}$  ergibt. Damit lässt sich das Signal-zu-Rauschverhältnis der Detektorausgabe angeben:

$$\text{SNR}_{\text{out}} = \frac{N_{\text{det}}}{\sigma_{N_{\text{det}}}} = \frac{\langle m \rangle N_{\text{true}}}{\sqrt{\langle m^2 \rangle N_{\text{true}}}} \quad (9.11)$$

Eingesetzt in die Definition der DQE ergibt sich schließlich:

$$\begin{aligned} \text{DQE}(0) &= \frac{\text{SNR}_{\text{out}}^2(0)}{\text{SNR}_{\text{in}}^2(0)} \\ &= \frac{\langle m \rangle^2 N_{\text{true}}^2}{\langle m^2 \rangle N_{\text{true}}} \frac{N_{\text{true}}}{\varepsilon} \\ &= \frac{\langle m \rangle^2}{\langle m^2 \rangle} \varepsilon \end{aligned} \quad (9.12)$$

Der Multiplizitätsfaktor  $\frac{\langle m \rangle^2}{\langle m^2 \rangle}$  kann nur Werte kleiner gleich Eins annehmen. Dies bedeutet, dass die statistische Signifikanz des ankommenden Signals vom Detektorsystem durch die Detektionseffizienz und durch die Multiplizität und deren Rauschen verringert wird. Die detektierbare Quanteneffizienz bei Raumfrequenz 0 hängt nur von der mittleren Multiplizität, deren Variation und der Detektionseffizienz ab.

In Tabelle 9.1 sind die Ergebnisse dieses Kapitels nochmal zusammengefasst dargestellt.

# 10 Experimentelle Bestimmung von Multiplizität und DQE photonenzählender Röntgendetektoren

## Inhaltsangabe

---

10.1 Experimentelle Bestimmung der DQE . . . . .	65
10.2 Experimentelle Bestimmung der Multiplizität . . . . .	66
10.3 Clusteranalyse und Clustertypcharakterisierung . . . . .	66
10.4 Fehlerrechnung zu Multiplizitäten . . . . .	70
10.4.1 Statistischer Fehler . . . . .	70
10.4.2 Systematischer Fehler . . . . .	70
10.5 Beispiele . . . . .	76
10.5.1 Clusteranalyse einer Einzelaufnahme . . . . .	76
10.5.2 Clusteranalyse einer Menge von Einzelaufnahmen . . . . .	77

---

## 10.1 Experimentelle Bestimmung der DQE

Zur Bestimmung der detektierbaren Quanteneffizienz bei Raumfrequenz 0 ist die Messung der Effizienz und die Bestimmung der mittleren Multiplizität und deren Variation nötig. In der Definition der Detektionseffizienz taucht allerdings die nicht direkt messbare Größe  $N_{\text{true}}$ , die Anzahl der mindestens ein Zählereignis auslösenden Photonen, auf. Die Formel für die DQE lässt sich allerdings mit Hilfe des Zusammenhangs  $N_{\text{det}} = \langle m \rangle \varepsilon N_{\text{in}}$  von der Notwendigkeit der direkten Messung der Detektionseffizienz befreien:

$$\text{DQE}(0) = \frac{\langle m \rangle^2}{\langle m^2 \rangle} \varepsilon = \frac{\langle m \rangle}{\langle m^2 \rangle} \frac{N_{\text{det}}}{N_{\text{in}}} \quad (10.1)$$

Die Anzahl ausgelöster Zählereignisse  $N_{\text{det}}$  ist die direkte Messgröße eines photonenzählenden Detektors und auch bei hohem Fluss leicht experimentell bestimmbar.  $N_{\text{in}}$  lässt sich unabhängig vom Detektorsystem, für welches die DQE bestimmt werden soll, messen. Damit reduziert sich die Bestimmung der detektierbaren Quanteneffizienz bei Raumfrequenz Null auf die Messung der mittleren Multiplizität und der mittleren quadratischen Multiplizität.

## 10.2 Experimentelle Bestimmung der Multiplizität

Die Multiplizitäten von Ereignissen lassen sich nur bestimmen, wenn man die von verschiedenen Photonen ausgelösten Zählereignisse trennen kann und gleichzeitig mehrere von einem einzelnen Photon getriggerte Zählereignisse eindeutig diesem zuordnen kann. Dies ist bei sehr kleinem Fluss und häufigem Auslesen der Detektormatrix mit Hilfe eines Clusteranalyseverfahrens möglich. Solange der Röntgenfluss auf einen Detektor klein genug ist, um Zufallskoinzidenzen weitgehend zu vermeiden, kann die bei kleinem Fluss bestimmte mittlere Multiplizität auch für die Bestimmung der DQE bei höherem Fluss herangezogen werden.

## 10.3 Clusteranalyse und Clustertypcharakterisierung

Im Rahmen dieser Arbeit wurde zur Bestimmung der Multiplizität ein einfaches Clusteranalyseprogramm entwickelt. Dieses kann für typische Detektoraufnahmen bei niedrigem Fluss die Anzahl und Größe der in den einzelnen Aufnahmen vorhandenen Ereignisse bestimmen. Ein Beispiel einer solchen Aufnahme ist in Abbildung 10.1 gezeigt.

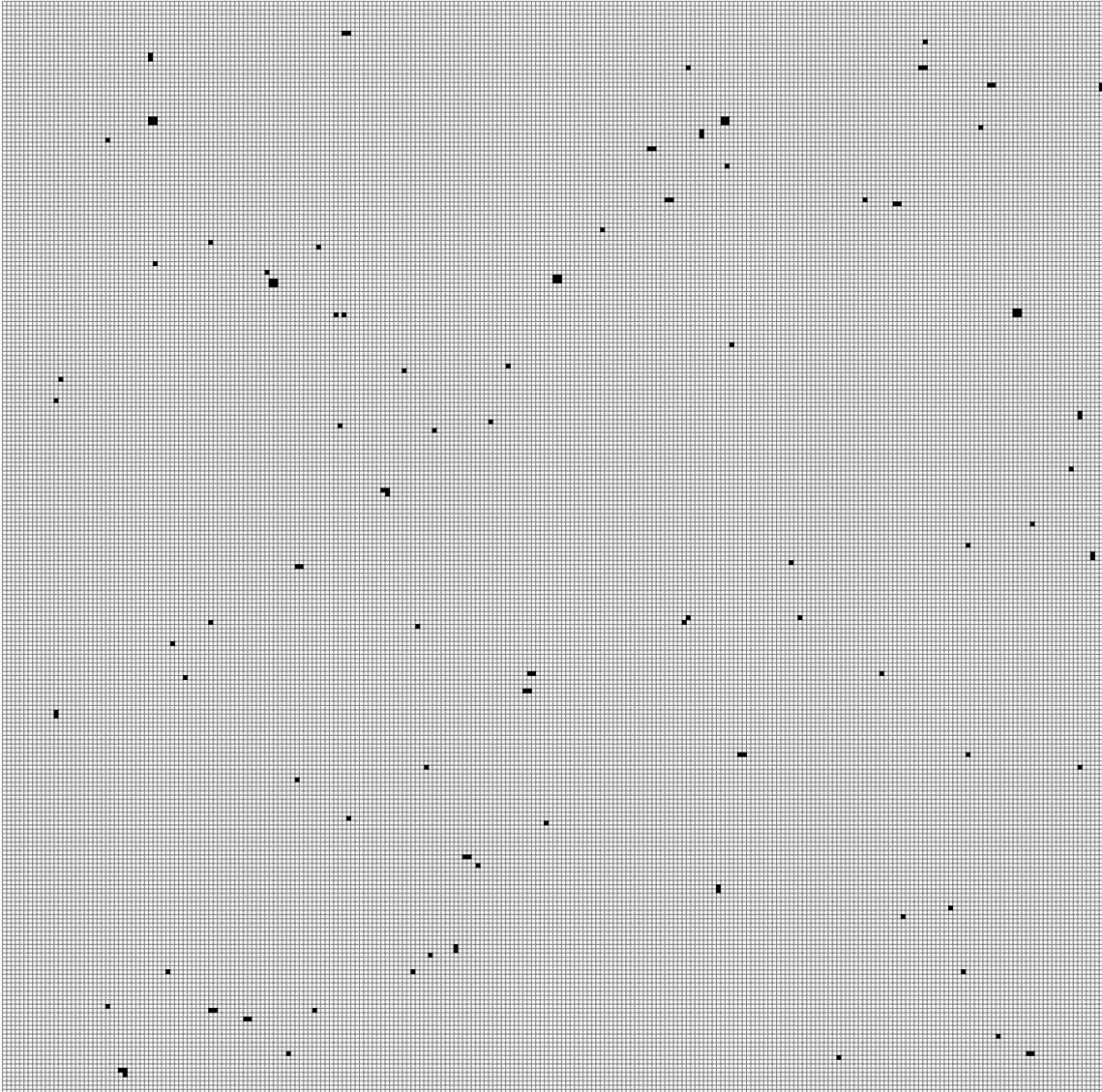
Das Clusteranalyseprogramm sucht Cluster bis zu einer Größe von  $n \times n$  Pixelabständen mit einstellbarer Größe  $n$ , wobei das mittlere Pixel jeder solchen Region ein Pixel ist, welches einen Zählerstand von Eins hat. Es wird in der Umgebung zählender Pixel innerhalb einer  $n \times n$ -Untermatrix nach Zählereignissen gesucht, wobei Ereignisse nur gewertet werden, wenn die Zählereignisse (bis auf Zufallskoinzidenzen innerhalb der  $n \times n$ -Region) eindeutig diesem Cluster zuzuordnen sind. Dazu wird für jeden Treffer des Clusters geprüft, ob in seiner  $n \times n$ -Umgebung weitere Pixel gezählt haben. Abbildung 10.2 verdeutlicht dieses Verfahren. Dabei ist ein Kompromiss für den Wert  $n$  zu finden. Bei zu großem Wert steigt die Wahrscheinlichkeit für Zufallskoinzidenzen innerhalb der  $n \times n$ -Untermatrix, die in der Analyse zu einer größeren Anzahl von Mehrfachtreffern führen. Bei kleinem  $n$  besteht die Gefahr, ein Mehrfachtrefferereignis als zwei oder mehr Einfachtreffer zu werten.

Alternativ kann bei der Messung eine kürzere Aufnahmezeit pro Bild gewählt werden oder der Röntgenfluss verringert werden.

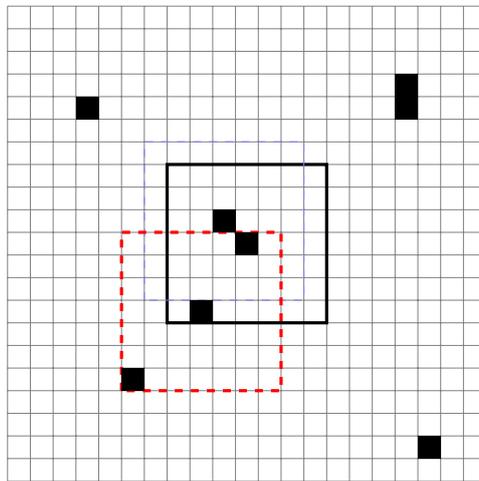
Diese Clusteranalyse ist gut für Messungen geeignet, bei welchen im Sensormaterial noch nicht zu häufig Comptonstreuung auftritt. Zudem sollte die Reichweite der Fluoreszenzphotonen wenige Detektorpixellängen betragen. Bei Ereignissen, welche in zwei weit entfernten Pixeln Zählerinkrementierungen auslösen, tritt durch das einfache Clusteranalyseprogramm eine Fehlzuordnung auf.

Gleichzeitig wurde im Clusteranalyseprogramm eine Typklassifizierung der einzelnen Mehrfachtreffer implementiert, um die Häufigkeit dieser einzelnen Typen mit Simulationen vergleichen zu können. Die einzelnen Typen sind durch die relative Lage der einzelnen Ansprecher eines Mehrfachtreffers charakterisiert, wobei alle durch Spiegelungen und Drehungen erhältlichen Konfigurationen zum selben Typ zusammengefasst werden. Dies soll eine weitere Möglichkeit bieten, in Zukunft Simulationen und Messungen detailliert zu vergleichen und gegebenenfalls den Einfluss von Zufallskoinzidenzen innerhalb einer  $n \times n$ -Untermatrix abzuschätzen.

Der prinzipielle Ablauf des Clusteranalyseprogramms ist in Abbildung 10.3 in Form eines Flussdiagramms schematisch dargestellt.



**Abbildung 10.1** Clusteraufnahme mit einem photonenzählenden Detektor bei sehr niedrigem Fluss. Als Detektor wurde ein Medipix2-Detektor mit einem  $300\mu\text{m}$  dicken Siliziumsensor verwendet. Jedes schwarze Quadrat steht für genau eine Zählerinkrementierung im Pixel, weiß für kein Zählereignis.



**Abbildung 10.2** Skizze zur Überprüfung, ob ein Cluster isoliert ist. Das Zählereignis im mittleren Pixel im Bild hat innerhalb des Suchfeldes (hier  $7 \times 7$ -Matrix) die meisten Ansprechere. Da das Pixel mit der dick bzw. in rot gestrichelten Umgebung einen weiteren zählenden Nachbarn hat ist dieser nicht eindeutig einem Cluster zuzuordnen. Für ein  $5 \times 5$ -Raster würden hier 4 Einfach- und 2 Doppeltreffer gewertet.

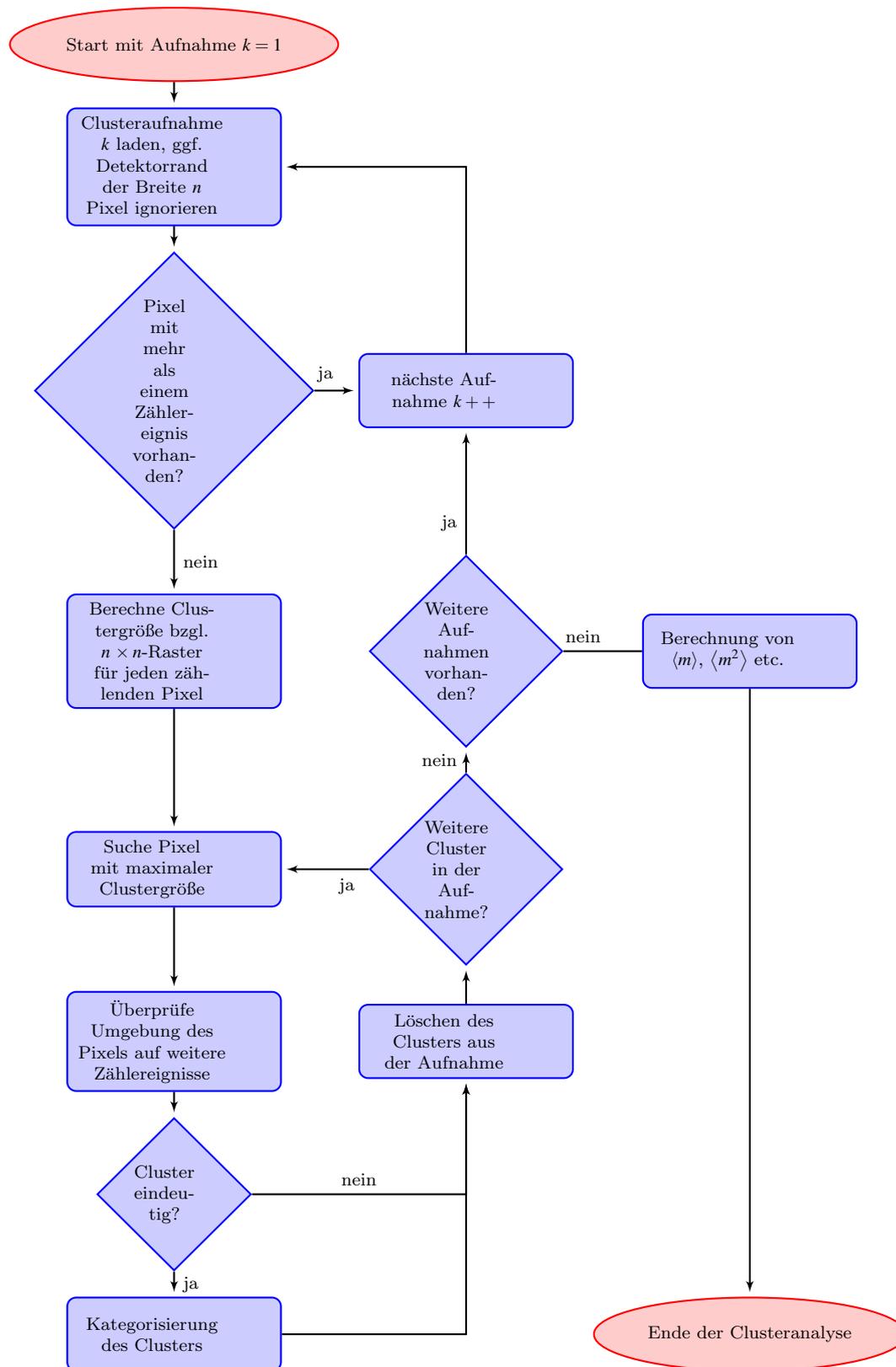


Abbildung 10.3 Flussdiagramm des Clusteranalyseprogramms.

## 10.4 Fehlerrechnung zu Multiplizitäten

Bei der Bestimmung der Multiplizitäten aus experimentellen Daten spielen sowohl statistische Fehler als auch systematische Fehler der Clusteranalyse eine wichtige Rolle.

### 10.4.1 Statistischer Fehler

Für die Bestimmung der zu erwartenden Schwankung der aus einer bestimmten Anzahl von Clustern bestimmten Multiplizitäten müssen bei einer Gaußschen Fehlerfortpflanzungsrechnung die unkorrelierten Variablen  $N_i$  verwendet werden, für welche  $\Delta N_i = \sqrt{N_i}$  gilt. Für die partiellen Ableitungen der mittleren Multiplizität bzw. der mittleren quadratischen Multiplizität gilt

$$\frac{\partial \langle m \rangle}{\partial N_i} = \frac{i - \langle m \rangle}{N_{\text{true}}} \quad (10.2)$$

$$\frac{\partial \langle m^2 \rangle}{\partial N_i} = \frac{i^2 - \langle m^2 \rangle}{N_{\text{true}}} \quad (10.3)$$

woraus sich für die Varianzen folgender Zusammenhang ergibt:

$$(\Delta \langle m \rangle)^2 = \frac{\langle m^2 \rangle - \langle m \rangle^2}{N_{\text{true}}} \quad (10.4)$$

$$(\Delta \langle m^2 \rangle)^2 = \frac{\langle m^4 \rangle - \langle m^2 \rangle^2}{N_{\text{true}}} \quad (10.5)$$

Für den Multiplizitätsfaktor läßt sich ebenfalls auf diese Weise die Varianz bestimmen.

$$\frac{\partial \left( \frac{\langle m^2 \rangle}{\langle m \rangle^2} \right)}{\partial N_i} = - \frac{\langle m \rangle^2 i^2 - 2 \langle m \rangle \langle m^2 \rangle i + \langle m \rangle^2 \langle m^2 \rangle}{N_{\text{true}} \langle m^2 \rangle^2} \quad (10.6)$$

woraus sich für die Varianzen folgender Zusammenhang ergibt:

$$\left( \Delta \left( \frac{\text{DQE}}{\varepsilon} \right) \right)^2 = \left( \Delta \left( \frac{\langle m \rangle^2}{\langle m^2 \rangle} \right) \right)^2 = \frac{\langle m \rangle^2}{\langle m^2 \rangle} \left[ 4 \left( 1 - \frac{\langle m^3 \rangle \langle m \rangle}{\langle m^2 \rangle^2} \right) - \frac{\langle m \rangle^2}{\langle m^2 \rangle} \left( 1 - \frac{\langle m^4 \rangle}{\langle m^2 \rangle^2} \right) \right] \quad (10.7)$$

Durch Erhöhen der Statistik können diese Fehler minimiert werden.

### 10.4.2 Systematischer Fehler

Aufgrund der in der Clusteranalyse nötigen Rastergröße treten aber auch nicht vermeidbare systematische Fehler auf. Diese werden verursacht durch Zufallskoinzidenzen innerhalb des Auswerterrasters der Clusteranalyse, weil dadurch mehr größere Cluster gefunden werden als in Wirklichkeit vorhanden. Beispielsweise ist nicht einmal sichergestellt, dass die beiden diagonal angrenzenden Zählereignisse in Abbildung 10.2 wirklich von einem einzelnen Ereignis stammen. Solch eine Signatur kann auch bei Aufnahmen mit sehr kleinem Fluss in seltenen Fällen von zwei verschiedenen Photonen stammen. Im Folgenden soll eine Abschätzung des systematischen Fehlers durch solche Fehlzuordnungen vorgenommen werden.

Eine exakte Berechnung der Wahrscheinlichkeiten für Fehlzuordnungen ist aufgrund der bei der Clusteranalyse auftretenden Korrelationen zwischen benachbarten Pixeln nicht möglich.

Es kann vorkommen, dass während einer Detektoraufnahme in manchen Pixeln mehr als ein Zählereignis ausgelöst wird, weil innerhalb der Aufnahmezeit zwei oder mehrere Photonen im Sensorvolumen dieses Pixels absorbiert wurden. Die Häufigkeit, mit der mindestens ein Pixel der Detektormatrix mehr als ein Ereignis registriert, kann relativ einfach berechnet werden. Dafür wird zunächst die Wahrscheinlichkeit berechnet, dass  $N$  unabhängige Zählereignisse in  $N$  verschiedenen Pixeln ausgelöst werden.

### Zufallskoinzidenzen in einzelnen Pixeln

Die Anzahl der Pixel eines Detektors sei  $n^2$ , angeordnet in einer  $n \times n$ -Detektormatrix. Die Wahrscheinlichkeit, dass bei homogener Ausleuchtung ein Photon ein Zählereignis in einem bestimmten Pixel auslöst, beträgt  $1/n^2$ . Ohne Beschränkung der Allgemeinheit kann nun eine Nummerierung der  $N$  in der Detektoraufnahme enthaltenen Zählereignisse angenommen werden (z.B. zeitliche Reihenfolge). Das erste Ereignis hat  $n^2$  Möglichkeiten. Für das zweite Zählereignis stehen noch  $n^2 - 1$ , für das dritte  $n^2 - 2$  Möglichkeiten usw. zur Verfügung, ohne dass ein Pixel zweimal zählt. Das  $j$ -te Zählereignis löst damit mit einer Wahrscheinlichkeit von  $1 - \frac{j-1}{n^2}$  ein Zählereignis in einem Pixel aus, das noch nicht gezählt hat. Damit ergibt sich für die Wahrscheinlichkeit, dass bei  $N$  in der Detektormatrix vorhandenen Zählereignissen kein einziger der  $n^2$  Detektorpixel mehrfach zählt:

$$P(\text{keine Zufallskoinzidenz}) = \prod_{k=1}^{N-1} \left(1 - \frac{k}{n^2}\right) \quad (10.8)$$

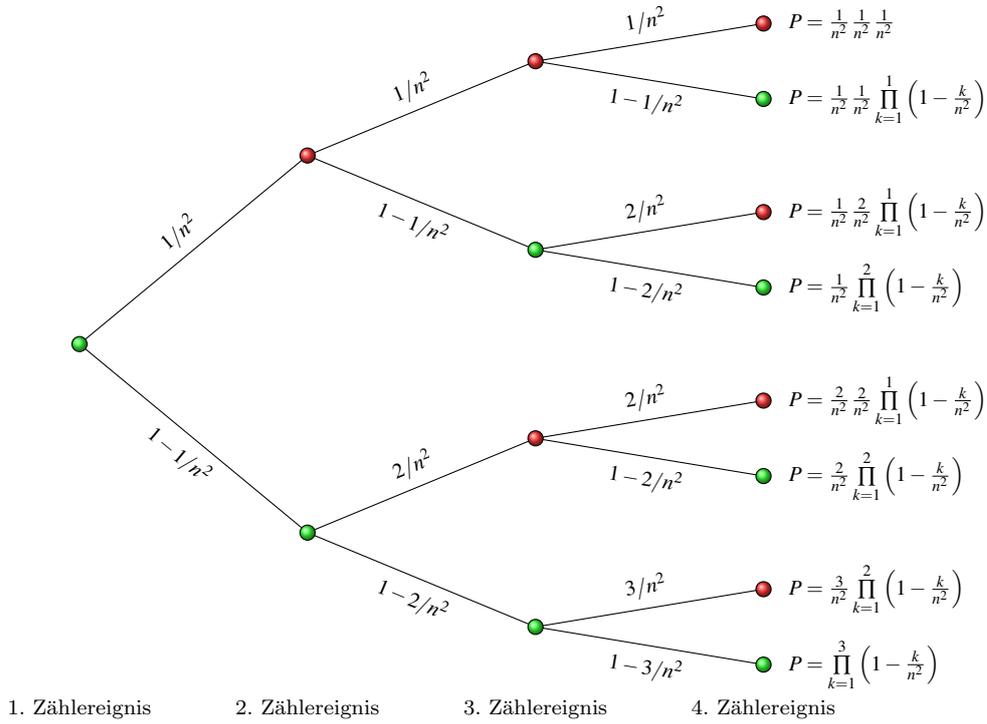
Damit gilt für die Wahrscheinlichkeit, dass in einer Detektoraufnahme mindestens ein Pixel mindestens zweimal inkrementiert wurde:

$$P(\text{mind. eine Zufallskoinzidenz}) = 1 - \prod_{k=1}^{N-1} \left(1 - \frac{k}{n^2}\right) \quad (10.9)$$

Die Wahrscheinlichkeit, dass das  $j$ -te Zählereignis einen freien Pixel trifft, hängt von der dann aktuellen Belegung der Detektormatrix ab. Darstellen läßt sich dieses Szenario mit einem Wahrscheinlichkeitsbaum (siehe Abbildung 10.4 mit jeweils zwei inversen Möglichkeiten (neuer Pixel / alter Pixel getroffen)), wobei sich für jedes Zählereignis die Anzahl der Äste verdoppelt. Die Wahrscheinlichkeiten an den Astabschnitten sind bedingte Wahrscheinlichkeiten und hängen daher von den vorhergehenden Ebenen ab. In diesem Wahrscheinlichkeitsbaum gibt es nur einen Ast, für welchen alle Entscheidungen „neuer Pixel getroffen“ lauten (grüne Kreise). Für diesen ergibt sich oben hergeleitete Wahrscheinlichkeit.

Wir betrachten nun den Fall, dass genau eine Zufallskoinzidenz aufgetreten ist. Dafür gibt es im Wahrscheinlichkeitsbaum  $N - 1$  Äste, über welche summiert werden muss. Es ergibt sich diese Wahrscheinlichkeit:

$$P(\text{genau eine Zufallskoinzidenz}) = \sum_{i=1}^{N-1} \frac{i}{n^2} \prod_{k=1}^{N-2} \left(1 - \frac{k}{n^2}\right) \quad (10.10)$$



**Abbildung 10.4** Wahrscheinlichkeitsbaum für 4 Zählereignisse in einer  $n \times n$ -Detektormatrix. Ein grüner Kreis kennzeichnet einen neuen vorher noch nicht getroffenen Pixel, ein roter Kreis einen Pixel, der bereits zuvor inkrementiert wurde.

Ist das  $(j-1)$ -te Zählereignis die Zufallskoinzidenz, dann hat das  $j$ -te Ereignis die Wahrscheinlichkeit  $1 - \frac{j-2}{n^2}$  um einen noch nicht zählenden Pixel zu treffen, da erst  $j-2$  verschiedene Pixel ein Ereignis registriert haben.

Über analoge Argumente erhält man die Wahrscheinlichkeiten, mit welchen genau zwei, drei etc. Zufallskoinzidenzen auftreten:

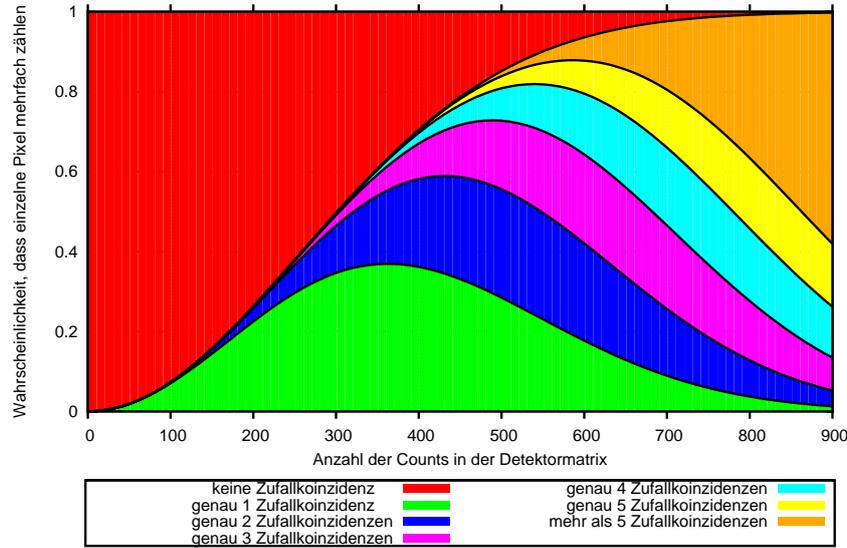
$$P(\text{genau zwei Zufallskoinzidenzen}) = \sum_{i=1}^{N-2} \frac{i}{n^2} \sum_{j=i}^{N-2} \frac{j}{n^2} \prod_{k=1}^{N-3} \left(1 - \frac{k}{n^2}\right) \quad (10.11)$$

$$P(\text{genau drei Zufallskoinzidenzen}) = \sum_{i=1}^{N-3} \frac{i}{n^2} \sum_{j=i}^{N-3} \frac{j}{n^2} \sum_{l=j}^{N-3} \frac{l}{n^2} \prod_{k=1}^{N-4} \left(1 - \frac{k}{n^2}\right) \quad (10.12)$$

$$P(\text{genau } q \text{ Zufallskoinzidenzen}) = \sum_{i=1}^{N-q} \frac{i}{n^2} \sum_{j=i}^{N-q} \frac{j}{n^2} \cdots \sum_{m=l}^{N-q} \frac{m}{n^2} \prod_{k=1}^{N-q-1} \left(1 - \frac{k}{n^2}\right) \quad (10.13)$$

Dabei versteht man hier unter Zufallskoinzidenz die erhöhte Anzahl der Zählereignisse im Bild im Vergleich zur Anzahl der mindestens einmal inkrementierten Pixel. In der Menge der Aufnahmen mit genau zwei Zufallskoinzidenzen sind die Bilder enthalten, welche genau einen Pixel mit 3 Zählereignissen oder genau 2 Pixel mit 2 Zählereignissen enthalten.

In Abbildung 10.5 sind diese Wahrscheinlichkeiten in Abhängigkeit von der Belegung der Detektormatrix für eine  $256 \times 256$ -Detektormatrix dargestellt. Oberhalb von weni-



**Abbildung 10.5** Wahrscheinlichkeit für Zufallskoinzidenzen für eine  $256 \times 256$ -Detektormatrix in Abhängigkeit von der Anzahl der Zählereignisse der Detektoraufnahme. Dabei ist der Anteil der Zufallskoinzidenzen zusätzlich aufgeteilt in Wahrscheinlichkeiten für die Anzahl der Zufallskoinzidenzen kumulativ dargestellt. Die Oberkante des blauen Bereiches liegt somit bei der Wahrscheinlichkeit, dass genau ein oder zwei Zufallskoinzidenzen auftreten.

gen Hundert Zählereignissen nimmt der Anteil der Zufallskoinzidenzen rapide zu, so dass solche Aufnahmen nicht mehr für eine Clusteranalyse geeignet sind.

### Zufallskoinzidenzen innerhalb des Clusteranalyserasters

Ausgehend von diesen Überlegungen lassen sich Abschätzungen zum Anteil der Zufallskoinzidenzen innerhalb des bei der Clusteranalyse verwendeten Rasters durchführen.

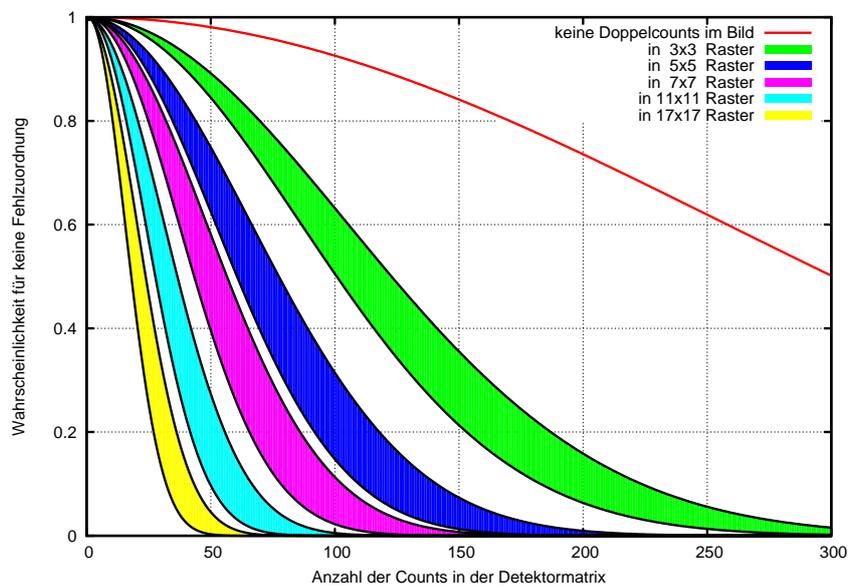
Zunächst wird eine untere und obere Schranke für die Wahrscheinlichkeit angegeben, mit welcher keine Fehlzuordnung/Zufallskoinzidenz vorliegt.

Das Raster der Clusteranalyse sei eine  $m \times m$ -Umgebung. Für die untere Schranke wird angenommen, dass jedes Zählereignis weit entfernt von anderen Zählereignissen registriert wird, so dass sich die  $m \times m$ -Umgebungen der einzelnen Zählereignisse nicht überlappen. Der Detektorrand sei für die Abschätzung vernachlässigt. Das erste Ereignis hat  $n^2$  Möglichkeiten. Für das zweite Zählereignis stehen noch  $n^2 - m^2$ , für das dritte  $n^2 - 2m^2$  Möglichkeiten usw. zur Verfügung, um zu vermeiden, dass sich die Umgebungen mehrerer getroffener Pixel überlappen. Das  $i$ -te Zählereignis löst damit mit einer Wahrscheinlichkeit von  $1 - \frac{(i-1)m^2}{n^2}$  ein Zählereignis in einem Pixel aus, das noch nicht gezählt hat. Damit ergibt sich für die Wahrscheinlichkeit, dass bei  $N$  in der Detektormatrix vorhandenen Zählereignissen kein einziger der  $n^2$  Detektorpixel mehrfach zählt:

$$P(\text{keine Zufallskoinzidenz}) \geq \prod_{k=1}^{N-1} \left(1 - \frac{km^2}{n^2}\right) \quad (10.14)$$

In Wirklichkeit können sich aber die Clusterumgebungen überlappen. Um vom Clusteranalyseprogramm als isolierter Cluster gewertet zu werden, muss ein Zählereignis mindestens gerade außerhalb der  $m \times m$ -Umgebung stattfinden. Dessen Umgebung kann maximal mit einer Fläche von  $\frac{m(m-1)}{2}$  Pixeln überlappen. Wenn ein neuer Pixel getroffen wird, werden somit mindestens  $\frac{m(m+1)}{2}$  neue Pixel für nachfolgende Zählereignisse blockiert. Damit sind nach  $i$  Zählereignissen mindestens  $\frac{i+1}{2}m^2 + \frac{i-1}{2}m$  Pixel durch die Umgebungen zählender Pixel belegt. Es ergibt sich folgende obere Schranke:

$$P(\text{keine Zufallskoinzidenz}) \leq \prod_{k=1}^{N-1} \left( 1 - \frac{\frac{k+1}{2}m^2 + \frac{k-1}{2}m}{n^2} \right) \quad (10.15)$$



**Abbildung 10.6** Wahrscheinlichkeit dafür, dass keine Fehlzählungen bzw. Zufallskoinzidenzen auftreten, für eine  $256 \times 256$ -Detektormatrix in Abhängigkeit von der Anzahl der Zählereignisse der Detektoraufnahme. Die für die einzelnen in der Clusteranalyse wählbaren Rastergrößen ist jeweils der Bereich der Wahrscheinlichkeit dargestellt, innerhalb welchem die exakte Wahrscheinlichkeit für Fehlzurordnungen liegt.

In Abbildung 10.6 ist für verschiedene in der Clusteranalyse wählbare Rastergrößen der aus obiger Abschätzung erhaltene Bereich der Wahrscheinlichkeit für Fehlzurordnungen in Abhängigkeit von der Belegung der Detektormatrix für eine  $256 \times 256$ -Detektormatrix dargestellt. Die Abschätzung liefert jeweils ein schmales Band, so dass der Einfluss der Rastergröße auf die Zufallskoinzidenzen deutlich wird.

Je nach verwendetem Sensormaterial und Pixelgröße ist aufgrund der Reichweite von Fluoreszenzphotonen die Verwendung eines relativ großen Rasters nötig, um nicht fälschlicherweise Mehrfachzählereignisse als mehrere Einfachzählereignisse zu werten. Allerdings leidet die Clusteranalyse bei größerem Raster bereits bei relativ kleinem Fluss stark unter Zufallskoinzidenzen. Beispielsweise sollte bei Verwendung eines  $7 \times 7$ -Rasters nach Möglichkeit bei einem Fluss von weniger als 100 Zählereignissen pro Detektoraufnahme gearbeitet werden.

Bei niedriger Belegung liegt die exakte Wahrscheinlichkeit tendenziell näher an der Schranke, die durch Annahme von sich nicht überlappenden  $m \times m$ -Umgebungen erhalten wurde. Unter dieser Annahme ergibt sich für die Wahrscheinlichkeit, genau ein, zwei usw. Zufallskoinzidenzen zu erhalten:

$$P_{m \times m}(\text{genau eine Zufallskoinzidenz}) \approx \sum_{i=1}^{N-1} \frac{im^2}{n^2} \prod_{k=1}^{N-2} \left(1 - \frac{km^2}{n^2}\right) \quad (10.16)$$

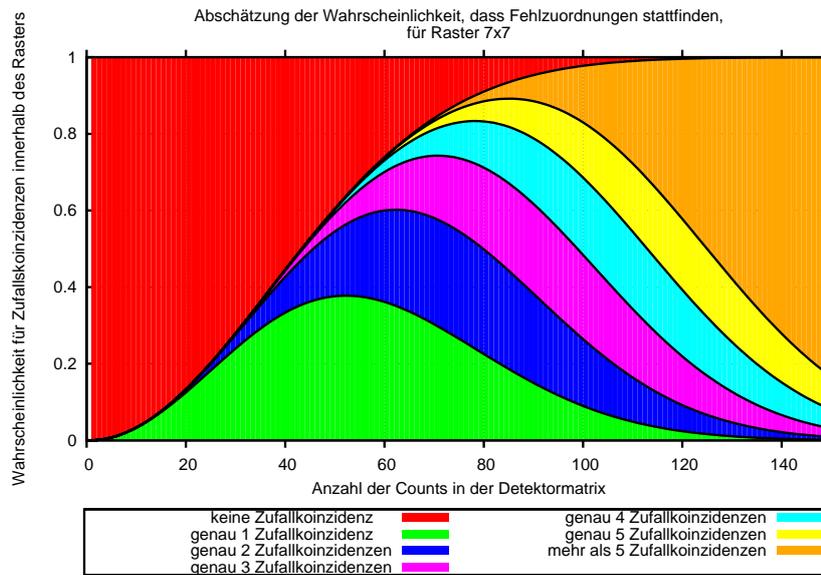
$$P_{m \times m}(\text{genau zwei Zufallskoinzidenzen}) \approx \sum_{i=1}^{N-2} \frac{im^2}{n^2} \sum_{j=i}^{N-2} \frac{jm^2}{n^2} \prod_{k=1}^{N-3} \left(1 - \frac{km^2}{n^2}\right) \quad (10.17)$$

$$P_{m \times m}(\text{genau drei Zufallskoinzidenzen}) \approx \sum_{i=1}^{N-3} \frac{im^2}{n^2} \sum_{j=i}^{N-3} \frac{jm^2}{n^2} \sum_{l=j}^{N-3} \frac{lm^2}{n^2} \prod_{k=1}^{N-4} \left(1 - \frac{km^2}{n^2}\right) \quad (10.18)$$

$$P_{m \times m}(\text{genau } q \text{ Zufallskoinzidenzen}) \approx \sum_{i=1}^{N-q} \frac{im^2}{n^2} \sum_{j=i}^{N-q} \frac{jm^2}{n^2} \dots \sum_{r=l}^{N-q} \frac{rm^2}{n^2} \prod_{k=1}^{N-q-1} \left(1 - \frac{km^2}{n^2}\right) \quad (10.19)$$

Dabei versteht man hier unter Zufallskoinzidenz wieder die erhöhte Anzahl der Zählerereignisse im Bild im Vergleich zur Anzahl der vom Clusteranalyseprogramm isolierten Cluster. Falls die Dektoreinstellungen wie Diskriminatorschwelle so gewählt sind, dass nur Einfachzählereignisse möglich sind, können vom Clusteranalyseprogramm trotzdem Mehrfachcluster isoliert werden. In der Menge der Aufnahmen mit genau zwei Zufallskoinzidenzen sind die Bilder enthalten, welche genau eine Fehlzuordnung von 3 Einzelereignissen zu einem Dreifachcluster oder genau 2 Fehlzuordnungen von 2 Einzelereignissen zu einem Doppelcluster enthalten.

In Abbildung 10.7 sind diese Wahrscheinlichkeiten in Abhängigkeit von der Belegung der Detektormatrix für eine  $256 \times 256$ -Detektormatrix dargestellt. Es wurde hier ein Raster von  $7 \times 7$  verwendet. Für eine Belegung von 100 Zählereignissen sind bereits in 8,5% der Aufnahmen eine Fehlzuordnung, in 16,8% zwei, in 21,7% drei, in 20,3% vier, in 14,8% fünf und in 15,8% noch mehr Fehlzuordnungen auf. Im Mittel muss daher in diesem Fall mit einer systematischen Erhöhung der erhaltenen Multiplizität von etwa 0.03 für  $\langle m \rangle \approx 1.0$  oder 0.07 für  $\langle m \rangle \approx 1.5$  gerechnet werden. Dieser systematische Fehler läßt sich nicht durch Erhöhen der Statistik minimieren. Um ihn zu minimieren, ist es nötig, Aufnahmen bei kleinerem Fluss zu erstellen, was allerdings eine höhere Messzeit zur Folge hat.



**Abbildung 10.7** Wahrscheinlichkeit für Fehlzuordnungen für eine  $256 \times 256$ -Detektormatrix in Abhängigkeit von der Anzahl der Zählereignisse der Detektoraufnahme. Dabei ist der Anteil der Zufallskoinzidenzen zusätzlich aufgeteilt in Wahrscheinlichkeiten für die Anzahl der Zufallskoinzidenzen kumulativ dargestellt. Die Oberkante des blauen Bereiches liegt somit bei der Wahrscheinlichkeit, dass genau ein oder zwei Fehlzuordnungen auftreten.

## 10.5 Beispiele

### 10.5.1 Clusteranalyse einer Einzelaufnahme

Tabelle 10.1 zeigt die aus der Clusteranalyse erhaltene Anzahl an Einfach-, Doppel-, Dreifachtreffern usw. für die Clusteraufnahme aus Abbildung 10.1. Bei Raster  $1 \times 1$  würde man trivialerweise alle Zählereignisse als Einfachtreffer werten, was sicher zu einem falschen Ergebnis führt. Mit steigender Rastergröße nimmt die Zahl der Einfachcluster ab, im Gegenzug steigt die Anzahl der Mehrfachcluster. Die aus dieser Clusteranalyse erhaltene mittlere Multiplizität liegt bei etwa  $1.58 \pm 0.10$ .

Liegen weitere Treffer in der Umgebung eines von einer Zufallskoinzidenz betroffenen Pixels (dick bzw. in rot gestrichelter Bereich in 10.2), reduziert sich die Wahrscheinlichkeit einer Fehlzuordnung, weil der Cluster komplett verworfen wird.

Selbst bei Clusteranalyse mit einer  $3 \times 3$ -Matrix findet bei etwa 75 Clustern im Bild bereits mit einer Wahrscheinlichkeit in der Größenordnung von etwa 50% mindestens eine Fehlzuordnung statt. Dies würde bereits einen systematischen Fehler von einem Prozent auf die mittlere Multiplizität beisteuern.

Tabelle 10.2 zeigt die einzelnen gefundenen Clustertypen bei der obigen Analyse. Beim Übergang von Raster  $7 \times 7$  auf Raster  $9 \times 9$  wird beispielsweise ein Dreifachcluster stattdessen als Vierfachcluster gewertet.

**Tabelle 10.1** Abhängigkeit der Clusteranalyse von der Rastergröße.

Anzahl der verschiedenen Clustergrößen  $N_i$  erhalten aus der Aufnahme aus Abbildung 10.1 für verschiedene Rastergrößen von  $3 \times 3$  bis  $11 \times 11$ .

Clusterart	Anzahl				
	$3 \times 3$	$5 \times 5$	$7 \times 7$	$9 \times 9$	$11 \times 11$
Alle Cluster	78	75	74	71	69
1-fach Cluster	49	45	45	43	41
2-fach Cluster	22	22	21	20	20
3-fach Cluster	2	3	3	2	2
4-fach Cluster	5	4	4	5	4
5-fach Cluster	0	1	1	1	1
6-fach Cluster	0	0	0	0	1
$\langle m \rangle$	1.53	1.59	1.58	1.61	1.65
$\Delta \langle m \rangle$	0.09	0.10	0.10	0.11	0.13

### 10.5.2 Clusteranalyse einer Menge von Einzelaufnahmen

Mit Hilfe der Clusteranalyse lassen sich für eine Ansammlung an Clusterbildern die einzelnen  $N_i$  für die Einzelbilder bzw. für die Gesamtheit dieser Clusterbilder bestimmen.

Aus den für die einzelnen Clusterbilder erhaltenen  $N_i$  lassen sich deren Mittelwerte und Varianzen bestimmen. Es ergeben sich die erwarteten Werte, wie Tabelle 10.3 zeigt. Die einzelnen Ensembles der Einfach-, Doppel-, Dreifachtreffer etc. schwanken von Aufnahme zu Aufnahme mit der erwarteten Varianz  $N_i$ , weil die einzelnen  $N_i$  unkorreliert sind. Die Varianz der Gesamtzahl der Cluster pro Bild entspricht ebenfalls dem Mittelwert der Cluster pro Bild. Im Gegensatz dazu variiert die Gesamtzahl der Zählereignisse pro Bild stärker, d. h. die Varianz der  $N_{\text{det}}$  ist größer als  $N_{\text{det}}$ .

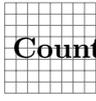
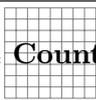
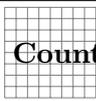
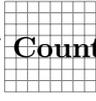
Diese Varianzen kann man auch einsetzen, um zu überprüfen, ob ein zu großes Raster für die Clusteranalyse gewählt wurde. Dann wird die Varianz der  $N_i$  für kleine  $i$  (Einfachtreffer, Zweifachtreffer) deutlich kleiner als  $N_i$ . Bei einem extremen Raster von  $21 \times 21$  beträgt die Varianz der aus dem Clusteranalyseprogramm erhaltenen  $N_1$  für das Beispiel aus Tabelle 10.3 nur noch  $0.89N_1$ . Dieses Raster leidet stark unter Zufallskoinzidenzen.

Von 10000 Detektoraufnahmen enthielten 1358 mindestens einen Pixel mit mehr als einem Zählereignis. Dieser Anteil stimmt sehr gut mit dem nach Formel 10.9 erwarteten Wert überein. Für eine  $256 \times 256$ -Matrix wird bei einer Bedeckung von 135 Zählereignissen ein Anteil von etwa 13% erwartet.

Tabelle 10.4 gibt den relativen Anteil der einzelnen Mehrfachzählungen an der Gesamtzahl der Cluster an. Für die Multiplizität ergibt sich ein Wert von  $\langle m \rangle = 1.5445 \pm 0.0009$ , die große Anzahl an Clusteraufnahmen ist damit ausreichend um die Multiplizität präzise zu bestimmen. Der systematische Fehler dieses Wertes liegt in der Größenordnung von 0.01. Die mittlere quadratische Multiplizität dieser Messung ist  $\langle m^2 \rangle = 3.015 \pm 0.004$ . Damit ergibt sich für den Multiplizitätsfaktor  $\frac{\langle m^2 \rangle}{\langle m \rangle^2} = 0.7913 \pm 0.0003$ . Der systematische Fehler liegt auch hier im Bereich 0.01. Trotzdem kann mit dieser Methode relativ gut die Verringerung der detektierbaren Quanteneffizienz durch Mehrfachzählungen bestimmt werden.

**Tabelle 10.2 Analyse nach Clustertypen erhalten aus Messdaten mit einer Clusteranalyse.**

Auflistung nach Clustertypen der Clusteranalyse aus Abbildung 10.1. Cluster, die nicht in ein  $4 \times 4$ -Raster passen, wurden pro Multiplizität jeweils zusammengefasst. Diesen großen Clustern wurden die Nummern 2000, 3000, etc. zugeordnet. Im Beispiel kommen je nach Raster nur bis zu drei Dreifachtreffer vor, zwei vom Typ Nummer 3001 und einer vom Typ Nummer 3016. Alle Dreifachtreffer im Beispiel sind also kategorisierbar, weil sie nicht die von der Clusterkategorisierung detailliert berücksichtigte räumliche Clusterausdehnung von  $4 \times 4$  Pixeln überschreiten.

Clustertyp	Nummer	Anzahl				
		$3 \times 3$	$5 \times 5$	$7 \times 7$	$9 \times 9$	$11 \times 11$
	1000	49	45	45	43	41
<b>2 Counts</b> 	2000	0	0	0	1	2
	2001	21	20	19	17	16
	2002	1	1	1	1	1
	2003	0	1	1	1	1
<b>3 Counts</b> 	3000	0	0	0	0	0
	3001	2	2	2	1	1
	3016	0	1	1	1	1
<b>4 Counts</b> 	4000	0	0	0	1	1
	4001	5	4	4	4	3
<b>5 Counts</b> 	5000	0	1	1	1	1
<b>6 Counts</b> 	6000	0	0	0	0	0
<b>7 Counts</b> 	7000	0	0	0	0	1

**Tabelle 10.3** Varianzen der Ensembles  $N_i$  erhalten aus Messdaten mit einer Clusteranalyse.

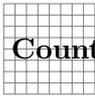
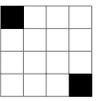
Gesamtstatistik der Clusteranalyse (Raster  $7 \times 7$ ) einer Messung von 8642 Detektoraufnahmen (ohne Doppeltreffer in einem Pixel) bei kurzer Belichtungszeit (70 ms) unter Verwendung eines an einer Kunststoffolie unter  $90^\circ$  gestreuten, mit 1 mm Eisen aufgehärteten 100kV-Spektrums. Die Energieschwelle lag bei 3,5 keV. Bei dieser Messung enthielten 1358 der 10000 Detektoraufnahmen mindestens einen Pixel mit mehr als einem Zählereignis. Diese wurden bei der Clusteranalyse nicht berücksichtigt.

Messgröße $M$	$M$	$\Sigma M$	$\langle M \rangle$	$\sigma_M$	$\frac{\sigma_M^2}{\langle M \rangle}$
mittlere Multiplizität	$\langle m \rangle$		1,5445	0,0868	0,00489
Clusterzahl	$N_{\text{true}}$	755794	87,456	9,086	0,944
Zählereignisse	$N_{\text{det}}$	1167308	135,07	15,95	1,884
1-fach Cluster	$N_1$	448567	51,905	7,163	0,988
2-fach Cluster	$N_2$	237354	27,465	5,189	0,980
3-fach Cluster	$N_3$	39430	4,5626	2,1531	1,016
4-fach Cluster	$N_4$	27503	3,1825	1,7841	1,000
5-fach Cluster	$N_5$	2123	0,2457	0,4952	0,998
6-fach Cluster	$N_6$	667	0,0772	0,2791	1,010
7-fach Cluster	$N_7$	95	0,0110	0,1042	0,989
8-fach Cluster	$N_8$	49	0,0057	0,0750	0,994
9-fach Cluster	$N_9$	3	0,0003	0,0186	1,000
10-fach Cluster	$N_{10}$	3	0,0003	0,0186	1,000

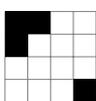
**Tabelle 10.4** Gesamtstatistik der Clusteranalyse aus Tabelle 10.3 inklusive Angabe prozentualer Anteile der Mehrfachcounts

Clusterart	Anzahl	prozentueller Anteil
Alle Cluster	755794	100%
1-fach Cluster	448567	59.35%
2-fach Cluster	237354	31.405%
3-fach Cluster	39430	5.217%
4-fach Cluster	27503	3.639%
5-fach Cluster	2123	0.281%
6-fach Cluster	814	0.108%

**Tabelle 10.5** Ergebnis der detaillierten Clusterkategorisierung zur Messung aus Tabelle 10.3: Einfach-, Doppel- und Dreifachcluster

Clustertyp	Anzahl	Clustertyp	Anzahl	Clustertyp	Anzahl
	448567	 <b>3 Counts</b>	2933		4
Clustertyp	Anzahl		28792		4
	1771		900		4
	1693		895		3
	1609		892		2
	1131		832		2
	973		829		2
	837		820		2
	833		809		2
	733		780		2
			462		2
			433		2
			6		1
			6		1
			5		1
			5		1

**Tabelle 10.6** Ergebnis der detaillierten Clusterkategorisierung zur Messung aus Tabelle 10.3: Vierfachcluster - Teil 1

Clustertyp	Anzahl	Clustertyp	Anzahl	Clustertyp	Anzahl
 4 Counts	1915		60		21
	23087		57		20
	253		57		17
	208		56		4
	203		53		4
	169		53		4
	117		49		3
	110		48		3
	109		48		3
	101		45		3
	100		45		3
	97		45		2
	95		44		2
	68		31		2

**Tabelle 10.7** Ergebnis der detaillierten Clusterkategorisierung zur Messung aus Tabelle 10.3: Vierfachcounts - Teil 2 und größere Cluster

	2		1		1
	2		1		1
	2		1		1
	2		1		1
	2		1		1
	1		1		1
	1		1		1
	1		1		1
	1		1	<b>Clustertyp</b>	<b>Anzahl</b>
	1		1	<b>5 Counts</b>	2123
	1		1		667
	1		1	<b>7 Counts</b>	95
	1		1		49
	1		1	<b>8 Counts</b>	3
					
				<b>9 Counts</b>	

Die Tabellen 10.5 bis 10.7 listen alle Cluster bis zu einer Größe von  $4 \times 4$ , die von der Clusteranalyse identifiziert wurden, auf. Einige dieser Typen sind mit großer Wahrscheinlichkeit Zufallskoinzidenzen zuzuordnen. Andere werden um Größenordnungen häufiger gefunden, als durch Zufallskoinzidenzen zu erwarten wäre. Die Auflistung ist sortiert nach Häufigkeit. Es zeigt sich, dass die Wahrscheinlichkeit für einen Doppeltreffer mit zwei diagonal benachbarten Pixeln niedriger ist als diejenige für Zählereignisse von zwei Pixeln, die entsprechend dem Rösselsprung beim Schach angeordnet sind. Dies liegt daran, dass durch Ladungsverteilung zwischen benachbarten Pixeln bei zwei naheliegenden Energie-depositionen sehr leicht ein Dreifachtreffer mit im rechten Winkel zueinander angeordneten Pixeln stattfinden kann.

Durch einen Vergleich von Clustertypen aus einer Clusteranalyse und Clustertypen aus Simulationen könnten weitere Erkenntnisse über Zufallskoinzidenzen und deren Häufigkeit gewonnen werden. Gegebenenfalls ist auch eine Überprüfung der Qualität verschiedener Simulationsmodelle mit solchen Vergleichen möglich.

In Monte-Carlo-Simulationen tritt das Problem von Zufallskoinzidenzen nicht auf, da für jedes auf einen Detektor auftreffende Photon separat die Detektorantwort berechnet werden kann.



# 11 Abhängigkeit der DQE photonenzählender Röntgendetektoren von der Energieschwelle

## Inhaltsangabe

---

11.1	Schwellenabhängigkeit der Effizienz . . . . .	86
11.2	Schwellenabhängigkeit der Multiplizität . . . . .	86
11.3	Schwellenabhängigkeit des Multiplizitätsfaktors . . . . .	87
11.4	Schwellenabhängigkeit der DQE . . . . .	87
11.5	Einfluss der Transportphänomene im Sensormaterial auf das Detektorantwortspektrum . . . . .	88
11.6	Abhängigkeit der DQE von der Primärenergie . . . . .	91
11.6.1	Idealer Energiedepositionsdetektor . . . . .	91
11.6.2	Ideale Antwort des Medipix2 . . . . .	96
11.6.3	Ideale Antwort des Medipix3 . . . . .	98
11.7	Einfluss der Mehrfachzählungen und der Diskriminatorschwel- le auf die LSF . . . . .	100
11.8	Einfluss der Mehrfachzählungen auf die MTF . . . . .	104

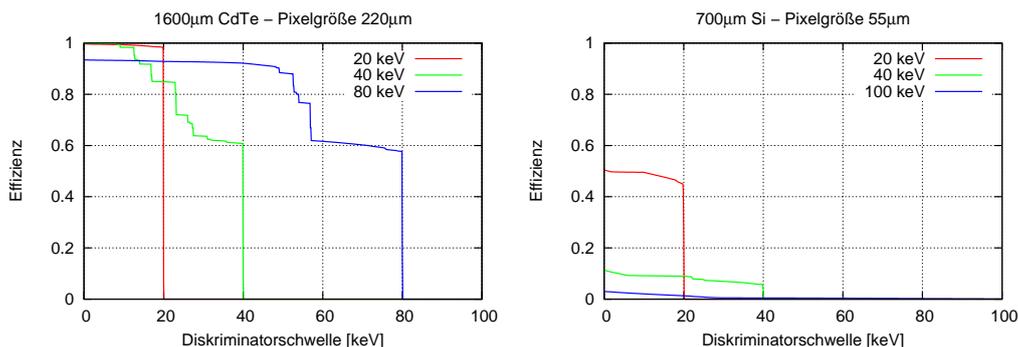
---

Bei photonenzählenden Detektoren hat man gegenüber integrierenden Detektoren einen zusätzlichen Freiheitsgrad. Es gibt eine Energievergleichsschwelle, ab welcher Energie ein Ereignis erst gezählt werden kann. Damit kann man das Grundrauschen der Elektronik und den Dunkelstromgleichanteil komplett unterdrücken. Durch geschickte Wahl der Schwelle können Mehrfachzählungen vermieden werden, allerdings verliert man bei zu hohen Schwellen mehr Ereignisse. Konsequenterweise wirkt sich die Schwellenabhängigkeit der Clusteranzahl pro Clustergröße auch auf die Effizienz, die Multiplizität und die DQE aus. Die Abhängigkeit dieser Werte von der Schwelle soll in diesem Kapitel dargestellt werden.

Diese Abhängigkeiten sollen zunächst für idealisierte Detektoren ohne Diffusion, Repulsion und mit optimaler Detektorelektronik ohne Rauschen gezeigt werden. Es wird hier also zunächst nur die Energiedeposition im Sensormaterial berücksichtigt, um den Einfluss der grundlegenden Röntgenwechselwirkungen zu zeigen. Hier wird dies für die Sensormaterialien Silizium und Cadmiumtellurid dargestellt, für Galliumarsenid finden sich entsprechende Ergebnisse auch in [50].

## 11.1 Schwellenabhängigkeit der Effizienz

Da bei einer höherenergetischen Wahl der Schwelle manche primären Röntgenphotonen überhaupt nicht mehr gezählt werden, sinkt mit steigender Schwelle die Effizienz. Diese Funktion zeigt Stufen bei der Primärenergie minus der Bindungsenergie der Schalen, weil erzeugte Fluoreszenzen zum Teil den Sensor verlassen können und daher die Energiedeposition nur dieser Energie entspricht. In Abbildung 11.1 sind Beispiele für zwei Sensoren für Bestrahlung mit verschiedener monoenergetischer Röntgenstrahlung dargestellt.



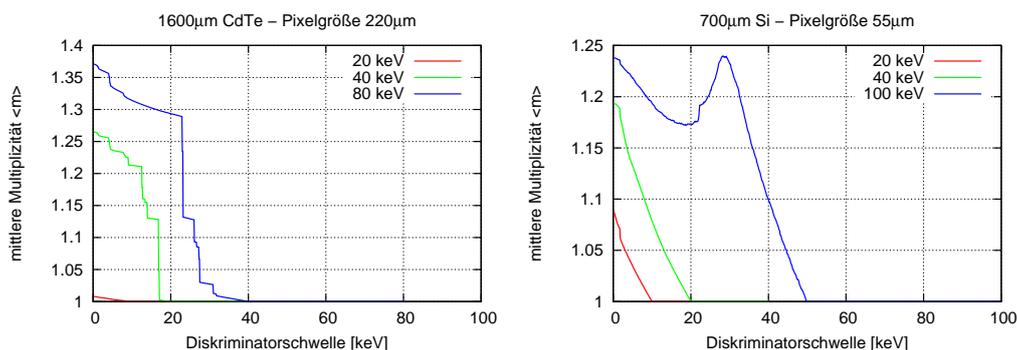
**Abbildung 11.1** Abhängigkeit der Effizienz von der Einstellung der Diskriminatorschwelle für verschiedene Röntgenenergien und für zwei verschiedene Sensoren. Berücksichtigt ist nur die Energiedeposition, d.h. der Graph entspricht der idealen Antwort eines Pixeldetektors.

## 11.2 Schwellenabhängigkeit der Multiplizität

Die mittlere Multiplizität hängt stark von der gewählten Schwelle ab. Für obiges Beispiel ist sie in Abbildung 11.2 dargestellt. Für sehr kleine Schwellenenergien ergibt sich ein Maximum, ab einer Schwelle von der halben Primärenergie erreicht die Multiplizität den Wert 1, weil dann keine Mehrfachzählereignisse mehr möglich sind.

Für einen Siliziumsensor bestrahlt mit einer Röntgenenergie von 100 keV hat die Multiplizität ein lokales Maximum bei einer Schwelle mit der Energie der Comptonkante, weil die Wechselwirkung von 100 keV-Photonen mit Silizium von Comptonstreuung dominiert ist. Bei Überschreiten der Comptonkante verliert man eine sehr große Anzahl an Einfachzählereignissen, wobei man gleichzeitig nur sehr wenige Mehrfachzählereignisse zu Einfachzählern reduziert. Dadurch steigt mit ansteigender Schwelle hier die mittlere Multiplizität zunächst an. Für schwerere Materialien mit K-Kanten im medizinisch relevanten Röntgenbereich zeigt die mittlere Multiplizität Kanten, wie für den CdTe-Sensor in Abbildung 11.2 zu sehen.

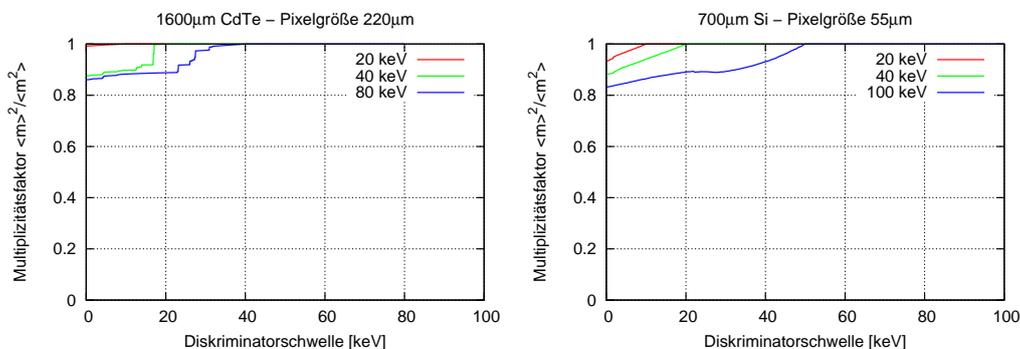
Die mittlere quadratische Multiplizität verhält sich qualitativ sehr ähnlich wie die mittlere Multiplizität. Sie hat immer einen Wert, der größer oder gleich ist zum Quadrat der mittleren Multiplizität.



**Abbildung 11.2** Abhängigkeit der mittleren Multiplizität von der Einstellung der Diskriminatorschwelle für verschiedene Röntgenenergien und für zwei verschiedene Sensoren. Berücksichtigt ist nur die Energiedeposition, d.h. der Graph entspricht der idealen Antwort eines Pixeldetektors.

### 11.3 Schwellenabhängigkeit des Multiplizitätsfaktors

Das Verhältnis aus dem Quadrat der mittleren Multiplizität und der mittleren quadratischen Multiplizität ist der Multiplizitätsfaktor  $\langle m \rangle^2 / \langle m^2 \rangle$ , um welchen die DQE verringert wird (vgl. Formel 10.1). Es ist daher interessant, die Schwellenabhängigkeit dieses Faktors zu betrachten. Abbildung 11.3 stellt diese Abhängigkeit dar. Für sehr kleine Schwellen beträgt der Multiplizitätsfaktor nur etwas über 0.80. Dies hat eine signifikante Verringerung der DQE zur Folge.

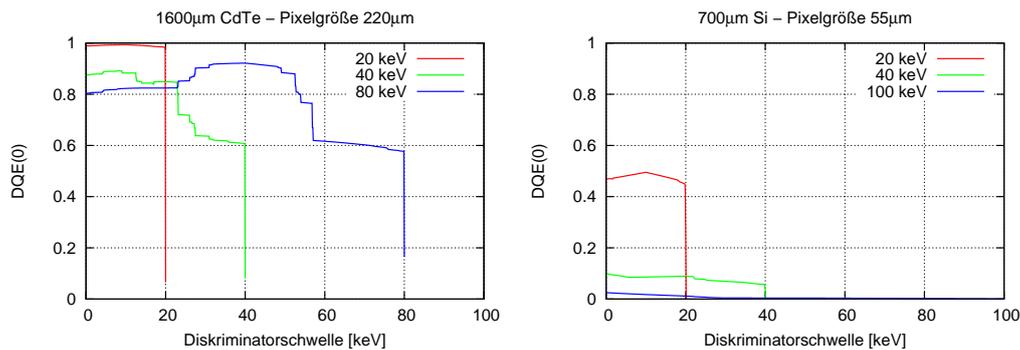


**Abbildung 11.3** Abhängigkeit des Multiplizitätsfaktors von der Einstellung der Diskriminatorschwelle für verschiedene Röntgenenergien und für zwei verschiedene Sensoren. Berücksichtigt ist nur die Energiedeposition, d.h. der Graph entspricht der idealen Antwort eines Pixeldetektors.

### 11.4 Schwellenabhängigkeit der DQE

Die DQE ergibt sich aus dem Produkt aus Multiplizitätsfaktor und Effizienz. Das Ergebnis ist in Abbildung 11.4 gezeigt. Die DQE wird aufgrund von Mehrfachzählungen bei niedri-

gen Schwellen um mehr als 10% verringert. Der Einfluss der Mehrfachzählungen ist daher durchaus signifikant. Verhindern kann man diese Verschlechterung der DQE teilweise, indem man eine höhere Schwelle wählt. Für Schwellen oberhalb der Hälfte der Primärenergie sind keine Mehrfachzählungen mehr möglich. Allerdings verliert man auch Zählereignisse durch die dann schlechtere Effizienz. Letztlich muss durch die Wahl der Diskriminator-schwelle ein Kompromiss gefunden werden, welcher vom verwendeten Spektrum und der Detektorkonfiguration aus Sensormaterial, -dicke und der Detektorelektronik abhängt.



**Abbildung 11.4** Abhängigkeit der DQE von der Einstellung der Diskriminatorschwelle für verschiedene Röntgenenergien und für zwei verschiedene Sensoren. Berücksichtigt ist nur die Energiedeposition, d.h. der Graph entspricht der idealen Antwort eines Pixeldetektors.

Zur Optimierung ist es wichtig, die relevanten Effekte im Sensormaterial und Elektronik detailliert in der Simulation zu integrieren, wie in Kapitel 6 und 7 beschrieben. Im den beiden folgenden Abschnitten wird der Einfluss von Ladungsträgertransport und Detektorelektronik auf das Detektorantwortspektrum und die DQE beschrieben.

### 11.5 Einfluss der Transportphänomene im Sensormaterial auf das Detektorantwortspektrum

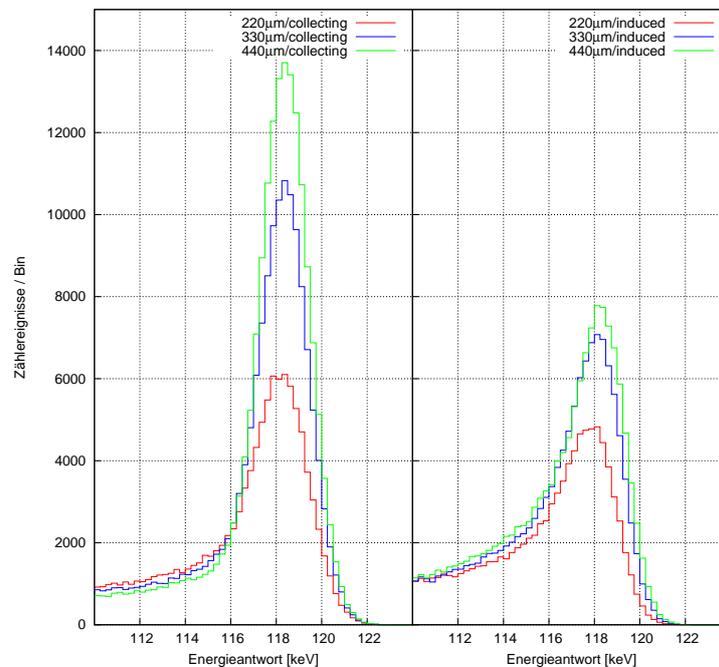
Anhand der Detektorantwort eines 1600µm dicken Cadmiumtelluridsensors (Dotierung:  $-2.85 \cdot 10^{11} \text{g/cm}^3$ ) mit quadratischer Pixelgröße von 220µm, 330µm bzw. 440µm bei monoenergetischer Bestrahlung soll beispielhaft der Einfluss der Transportphänomene beschrieben werden. Im Beispiel wurde eine Quelle von 120keV gewählt. Am Sensor wurde eine Vorspannung von  $-700\text{V}$  angelegt, so dass Elektronen in Richtung der pixelierten Elektrodenebene driften.

Die linke Hälfte von Abbildung 11.5 zeigt den Einfluss der Pixelgröße auf die Energieantwort des Detektors für den Photopeak. In dieser Simulation wurden Influenzeffekte nicht berücksichtigt, sondern der Fall einer unendlichen Ladungssammlungszeit pro Ereignis nachgebildet. Zudem wurde angenommen, dass ausschließlich die Elektronen für die Signalerzeugung verantwortlich sind.

Aufgrund der endlichen Lebenszeit der Elektronen rekombinieren einige innerhalb der Driftzeit und tragen in dieser Näherung überhaupt nicht zum Signal bei. Diese endliche Lebenszeit führt in diesem Fall zu einer Verschiebung der Energieantwort um etwa

2 keV auf eine Energie von 118 keV. Photonen, die sehr tief im Material absorbiert wurden führen zu einem kurzen Driftweg der Elektronen. Solche Ereignisse tragen zu Energiedepositionsereignissen bei 120 keV bei, da aufgrund der kurzen Driftzeit fast keine Elektronen rekombinieren können. Die wahrscheinlichste Position für die Absorption ist dagegen bei Auftreffen der Röntgenstrahlung von oben nahe der Oberseite des Sensormaterials. Die dort erzeugten Ladungswolken haben einen langen Driftweg, weshalb viele Elektronen rekombinieren.

Die Höhe des Peaks ist bei kleinerer Pixelgröße niedriger, da dann ein größerer Anteil der Fluoreszenzphotonen tatsächlich einen anderen Pixel erreicht und die Interaktion des Fluoreszenzphotons nicht bereits im gleichen Pixel wie die Primärinteraktion stattfindet. Außerdem haben kleinere Pixel relativ gesehen einen größeren Randbereich, von welchem aus Elektronen in das Sensorvolumen des Nachbarpixels eindringen und letztlich die Pixelelektrode eines benachbarten Pixels erreichen können. Dies äußert sich in obigem Beispiel auch darin, dass das Energieantwortspektrum bei Energien kleiner als 116 keV bei kleinerer Pixelgröße mehr Einträge aufweist.



**Abbildung 11.5** Einfluss des Löchertransports im Sensormaterial auf die Detektorantwort für verschiedene Pixelgrößen. Links ist die Detektorantwort unter Berücksichtigung von Dotierung, Diffusion, Repulsion und Detektorrauschen mit unendlicher Integrationszeit (Löcher erreichen die Gegenkathode), rechts die Detektorantwort für eine endliche Ladungsinfluenzierungszeit von 55 ns aufgetragen.

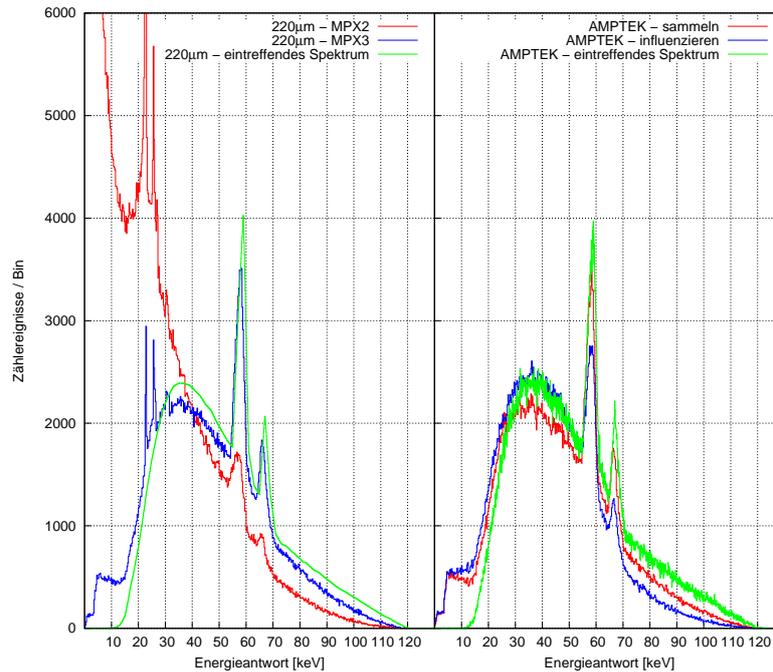
Im rechten Teil der Abbildung 11.5 wurde zusätzlich der Einfluss des Löchertransportes berücksichtigt. Während einer endlichen Integrationszeit von 55 ns erreichen Löcher nicht die Gegenkathode und haben daher nur zum Teil zum Signal beigetragen. Elektronen erreichen während dieser Integrationszeit soweit sie nicht rekombinieren immer die Pixelelektroden ebene. Für Ereignisse mit kurzem Driftweg der Löcher, d. h. wurde

die Ladungswolke im oberen Teil des Sensors erzeugt, ändert sich an der Detektorantwort nichts. Ereignisse, die sehr tief im Sensormaterial Ladungswolken erzeugen, werden jedoch aufgrund der für den Löchertransport zu kurzen Integrationszeit bei einer im Vergleich zum vorher geschilderten Fall niedrigeren Energie gebucht. Daher ist die Energieantwort des Photopeaks nicht mehr symmetrisch, sondern besitzt einen Niedrigenergieausläufer. Dieser ist bei großen Pixelgrößen ausgeprägter, da dann aufgrund des weniger stark durchgebogenen Wichtungspotentials der Beitrag der Löcher zum Signal größer ist.

Bei Auftreffen eines Röntgenröhrenspektrums auf den Detektor ist dagegen der Einfluss des Löchertransports kaum noch sichtbar. Für obigen Detektor dominiert die Ladungsverteilung auf mehrere Pixel durch Diffusion, Repulsion und Fluoreszenzen, was durch einen Ladungssammlungsmodus wie beim Medipix3 kompensiert werden könnte. Die Antwortspektren sind in der linken Hälfte von Abbildung 11.6 im Vergleich zum auf den Detektor auftreffenden Spektrum dargestellt. Die unvollständige Löchersammlung führt näherungsweise nur zu einer Verschiebung dieses Antwortspektrums um etwa einen Energiekanal (250 eV) nach links. Das Antwortspektrum für vollständige Löchersammlung (unendliche Integrationszeit) ist daher nicht in diesem Diagramm dargestellt.

Sehr großen Einfluss hat der Löchertransport bei endlicher Integrationszeit bei Detektoren mit großen Pixeln. Beispielhaft wurde hierfür eine Parametrisierung der Sensorgeometrie des AMPTEK-Detektors mit nur einem Pixel gewählt. Für den AMPTEK-Detektor (1 Pixel,  $5\ \mu\text{m} \times 5\ \mu\text{m}$ ) wirkt sich die unvollständige Löchersammlung entsprechend stärker aus. In der rechten Hälfte von Abbildung 11.6 sind die zugehörigen Antwortspektren gezeigt.

Während der pixelierte Detektor ohne intelligente Pixelelektronik das auftreffende Spektrum nicht wiedergibt, entspricht die Detektorantwort des Ladungssammlungsmodus wie auch die Antwort des AMPTEK-Detektors schon gut dem auftreffenden Spektrum. Bei den Antwortspektren gemeinsam sind Einträge bei Energien unterhalb von 15 keV, wobei das Primärspektrum erst ab etwa dieser Energie beginnt. Etwa 100 Einträge pro Energiekanal kommen dort durch Comptonstreuungen zustande, bei welchen im Detektor nur das Comptonelektron Energie deponiert. Ab 4 keV bzw. 5 keV kommen Ereignisse dazu, bei welchen Photonen durch Photoeffekt an K-Schalenelektronen von Cadmium bzw. Tellur absorbiert wurden und gleichzeitig K-Fluoreszenzphotonen den Detektor verlassen. Werden diese Fluoreszenzphotonen dagegen in einem benachbarten Pixel (MPX2-Mode) bzw. in weiter entfernten Nachbarn (MPX2-Mode und Ladungssammlungsmodus des MPX3) absorbiert, ergeben sich Einträge bei der Energie der Fluoreszenzen. Dies äußert sich in mehreren Peaks zwischen 20 und 30 keV. In den Antwortspektren des AMPTEK-Detektors sind diese Peaks nicht enthalten, da dieser Detektor nur einen Pixel enthält und außerhalb des Detektors kein Cadmiumtellurid vorhanden ist.



**Abbildung 11.6** Detektorantwortspektren bei Bestrahlung mit einem Röhrenspektrum bei Röhrenspannung 120kV [51]. Das Antwortspektrum eines pixelierten  $1600\mu\text{m}$  dicken CdTe-Sensors mit Pixelgröße  $220\mu\text{m}$  ist dargestellt im Vergleich zum Antwortspektrum des AMPTEK-Detektors, der aus einem unpixelierten  $5 \times 5\mu\text{m}^2$  großen 1 mm dicken CdTe-Sensor besteht.

## 11.6 Abhängigkeit der DQE von der Primärenergie

In diesem Abschnitt werden in den Abbildungen 11.7, 11.8 und 11.9 die Ergebnisse für das Energieantwortspektrum, die Effizienz, den Multiplizitätsfaktor sowie die DQE jeweils für ideales Detektorverhalten auch in Abhängigkeit von der Primärenergie dargestellt. In diesen Diagrammen ist jeweils auf der x-Achse die Diskriminatorschwelle und auf der y-Achse die Primärenergie aufgetragen. Die Abbildung (a) dieser Diagramme zeigt jeweils das Energieantwortspektrum, während in Abbildung (b) und (c) der Multiplizitätsfaktor und die Effizienz dargestellt werden, deren Produkt die DQE ergibt, wie in Abbildung (d) gezeigt.

Die Intensität bzw. die Werte der einzelnen Bildqualitätsparameter mittlere Multiplizitätsfaktor, Effizienz und DQE sind jeweils farbkodiert dargestellt. Die Abbildungen zeigen zudem farbkodierte Isolinien (z. B. Linien konstanter Multiplizität in (b) ).

### 11.6.1 Idealer Energiedepositionsdetektor

Ein idealer pixelierter Energiedepositionsdetektor würde exakt die in dem jeweiligen Pixelvolumen in Form von Elektron-Loch-Paaren deponierte Energie weiterverarbeiten bzw. die Diskriminatorschwelle mit dieser Energie vergleichen. In dieser Simulation spielt nur die Energiedeposition eine Rolle, d.h. Diffusion, Repulsion, Influenzierung von Ladungsträ-

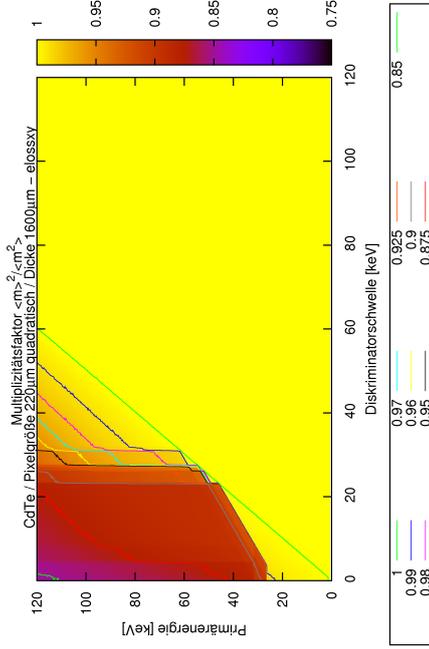
gern und sämtliche Rauschbeiträge werden hier vernachlässigt. Es wird nur die Variation der Anzahl der erzeugten Ladungsträger entsprechend des Fanofaktors berücksichtigt.

Das Ergebnis sind die bestmöglich erreichbaren Werte eines zählenden Röntgenpixeldetektors auf Halbleiterbasis für den gewählten Sensor und die gewählte Pixelgröße, soweit keine intelligente Interpixelkommunikation in der Elektronik implementiert ist.

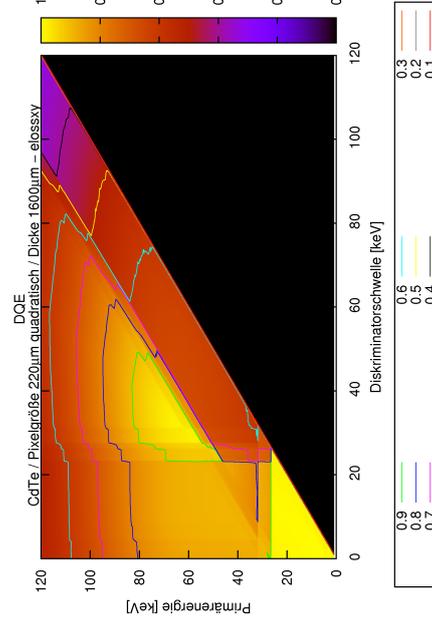
Abbildung 11.7 zeigt die Ergebnisse für diesen Fall unter Verwendung eines  $1600\mu\text{m}$  dicken CdTe-Sensors mit einer quadratischen Pixelgröße mit Kantenlänge  $220\mu\text{m}$ . Das Energieantwortspektrum in Abbildung 11.8(a) zeigt wie bereits in Kapitel 5 beschrieben charakteristische Peaks bei der Primärenergie, bei den Fluoreszenzenenergien und Escapepeaks bei den Energien, die der Primärenergie abzüglich der Fluoreszenzenenergien entsprechen. Im Unterschied zu Abbildung 5.3 in Kapitel 5, bei welcher das Energieepositionsspektrum ohne Berücksichtigung der Umwandlung in Elektron-Loch-Paare für eine Pixelgröße von  $440\mu\text{m}$  dargestellt ist, ist im hier dargestellten idealen Energieantwortspektrum beim Photopeak vor allem bei höheren Energien eine Verbreiterung auf mehrere Energiekanäle (Breite jedes Energiekanals  $250\text{eV}$ ) zu erkennen. Diese Verbreiterung ist aufgrund der in Abbildung 6.2 bereits gezeigten Begrenzung der Energieauflösung durch den Fanofaktor auch zu erwarten. Bei kleinen Energien bis zur Comptonkante gibt es eine gegenüber dem restlichen Untergrund erhöhte Anzahl an Einträgen. Zudem ist auch ein Untergrund über den gesamten Energiebereich vorhanden, welcher auf Ladungsteilung zwischen benachbarten Pixeln zurückzuführen ist, falls ein Sekundärelektron in der Nähe der Pixelgrenze erzeugt wurde und auf seinem Weg durch das Sensormaterial die Pixelgrenze überschreitet.

Aufgrund dieser Ladungsverteilung zwischen benachbarten Pixeln und vor allem auch aufgrund von Energiee deposition in mehreren Pixeln aufgrund der Fluoreszenzen sind häufig Beiträge mehrerer Pixel auf ein einzelnes absorbiertes Röntgenphoton zurückzuführen. Liegt die Schwelle unterhalb mehrerer dieser Beiträge, dann werden von einem einzelnen Röntgenphoton mehrere Zählereignisse ausgelöst. Die Reduzierung der DQE durch diese Mehrfachzählereignisse äußert sich im Multiplizitätsfaktor  $\langle m \rangle^2 / \langle m^2 \rangle$ . Die Abhängigkeit dieses Faktors von Schwelle und Primärenergie ist für den gerade betrachteten Sensor in Abbildung 11.8(b) dargestellt. Für eine Primärenergie unterhalb der Energie der K-Kante von Cadmium ist der Multiplizitätsfaktor etwa 1, da fast nie Mehrfachzählereignisse auftreten. Bei so niedrigen Energien haben Sekundärelektronen nur eine sehr kleine Reichweite von wenigen Mikrometern im Vergleich zur großen Pixelgröße von  $220\mu\text{m}$ . Außerdem können maximal L-Fluoreszenzphotonen auftreten, welche ebenfalls nur eine Reichweite von einigen Mikrometern haben und daher nur selten das Sensorvolumen eines benachbarten Pixels erreichen. Comptonstreuung tritt bei diesen Energien fast noch nicht auf, so dass auch auf diese Weise keine Mehrfachzählereignisse zustandekommen.

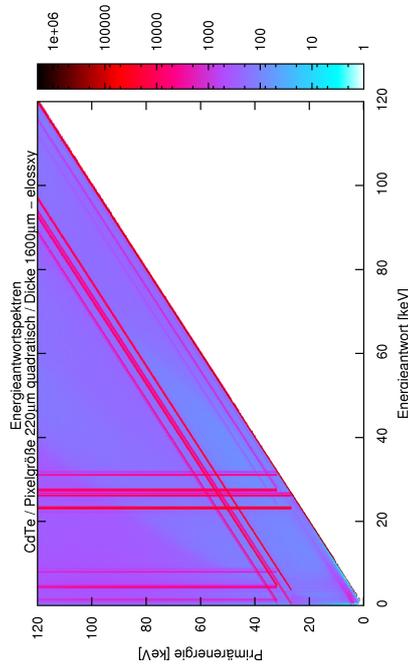
Liegt die Primärenergie oberhalb der Energie der K-Kante, treten K-Fluoreszenzen auf, welche isotrop abgestrahlt werden. Diese können sich im Gegensatz zur Primärstrahlung auch häufig lateral ausbreiten und werden daher auch oft im Sensorvolumen eines anderen Pixels absorbiert. Es werden also bereits durch die Wechselwirkung von Röntgenstrahlung mit dem Sensormaterial sowie zugehörigen Sekundäreffekten häufig Energiee depositionen im Sensorvolumen mehrerer Pixel verursacht. Bei Schwellen unterhalb der Energie der K-Fluoreszenzphotonen nimmt daher der Multiplizitätsfaktor Werte an, die deutlich kleiner als 1 sind. Die Werte liegen hier im Bereich von 85 - 90%. Erst wenn die Schwellen ober-



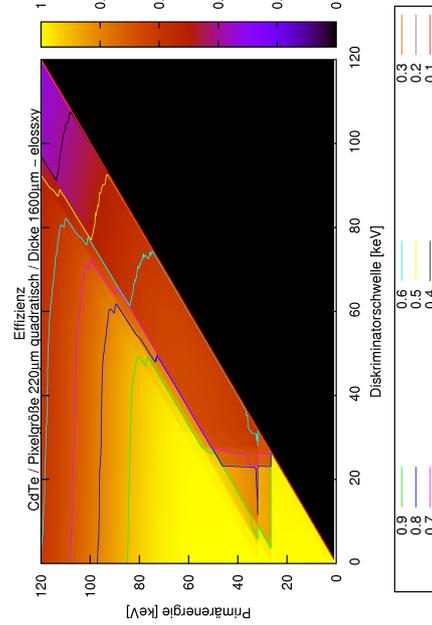
(b) Multiplizitätsfaktor



(d) DQE

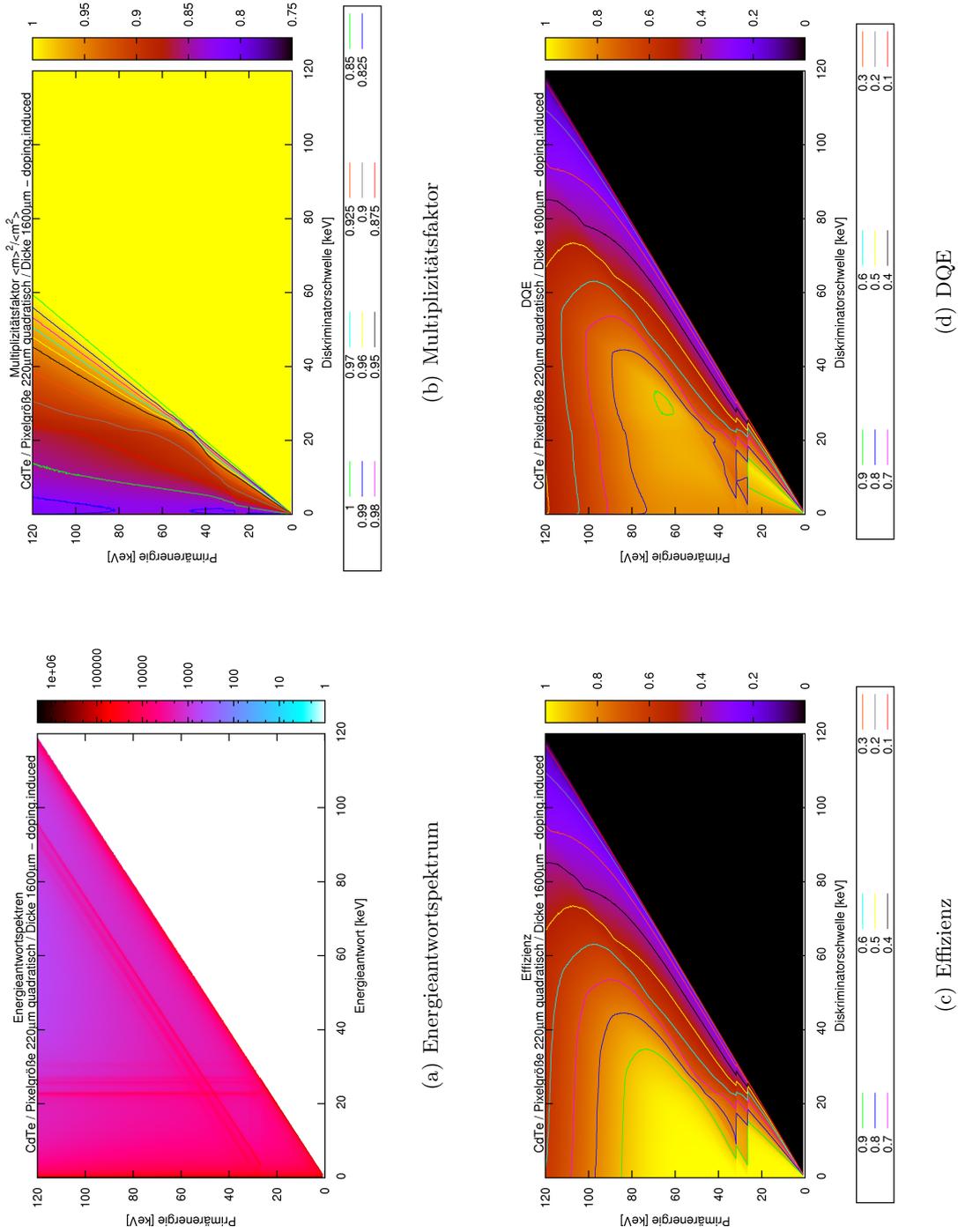


(a) Energieantwortspektrum

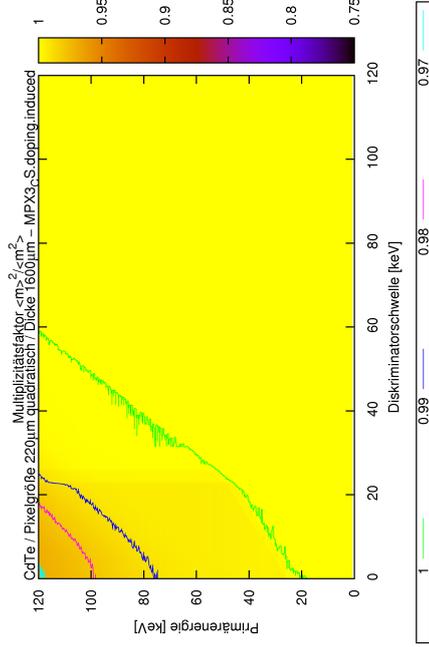


(c) Effizienz

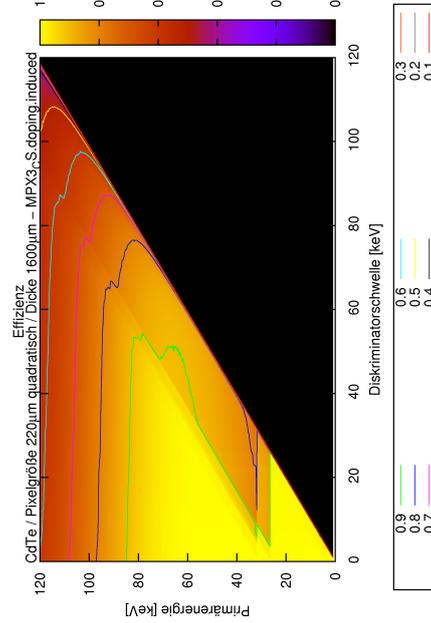
**Abbildung 11.7** Energieantwortspektrum und zugehörige DQE mit Effizienz und Multiplizitätsfaktor für idealen Detektor, d.h. Projektion der räumlichen Energiedeposition (mit Fano) ohne Diffusion, Repulsion und Influenzierung, für  $220\mu\text{m}$  Pixelkantenlänge bei  $1.6\text{mm}$  Dicke.



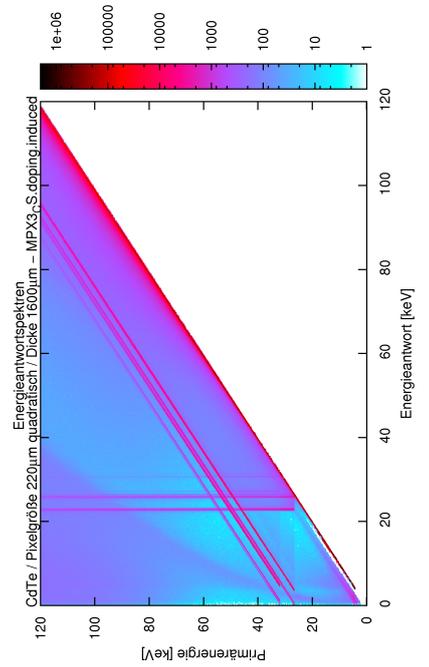
**Abbildung 11.8** Energieantwortspektrum und zugehörige DQE mit Effizienz und Multiplizitätsfaktor für rauschfreie Elektronik des Medipix2, d.h. unter Berücksichtigung von Diffusion, Repulsion und Influenzierung, für 220 μm Pixelkantenlänge bei 1.6mm Dicke.



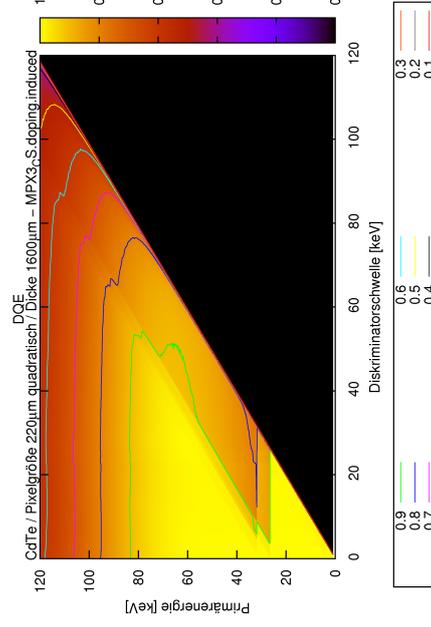
(a) Energieantwortspektrum



(b) Multiplizitätsfaktor



(c) Effizienz



(d) DQE

**Abbildung 11.9** Energieantwortspektrum und zugehörige DQE mit Effizienz und Multiplizitätsfaktor für rauschfreie Elektronik im Charge-Summing-Modus des Medipix3, d.h. unter Berücksichtigung von Diffusion, Repulsion und Influenzierung, für 220µm Pixelkantenlänge bei 1.6mm Dicke.

halb der Energie der niederenergetischen K-Fluoreszenzphotonen liegt, steigt der Multiplizitätsfaktor stark an.

Auch für die Schwellenabhängigkeit der Effizienz in Abbildung 11.8(c) spielt die Energiedeposition in mehreren Pixeln eine Rolle. Für Primärenergien unterhalb der K-Kante wird praktisch immer die gesamte Energie innerhalb des Sensorvolumens eines einzelnen Pixels deponiert. Die Effizienz hat daher hier auch aufgrund des dicken Sensors auch für Schwellen knapp unterhalb der Primärenergie noch den Wert 1. Bei Primärenergien knapp oberhalb der K-Kante werden zwar immer noch fast alle Röntgenphotonen von dem dicken Sensor absorbiert, jedoch wird aufgrund der jetzt möglichen K-Fluoreszenzen häufig Energie in mehreren Pixeln deponiert. Daher sinkt die Effizienz stark, sobald die Diskriminatorschwelle oberhalb einer Energie liegt, die der Primärenergie abzüglich der Fluoreszenzenergie entspricht. Dann hat das Photoelektron nicht mehr genug Energie, um aufgrund seiner Energiedeposition ein Zählereignis auszulösen. Die Effizienz verringert sich dort um die Ereignisse, bei welchen das Fluoreszenzphoton den Detektor komplett verlassen hat. Verbleibt das Fluoreszenzphoton jedoch im Detektor, wird immer noch ein Zählereignis in dem Pixel ausgelöst, über welchem das Fluoreszenzphoton absorbiert wurde. Übersteigt die Diskriminatorschwelle die Energie der K-Fluoreszenzen, tritt eine weitere unetstetige Reduzierung der Effizienz auf, weil dann nur noch Zählereignisse stattfinden, wenn keine K-Fluoreszenzphotonen entstanden sind oder wenn das K-Fluoreszenzphoton im selben Pixel absorbiert wurde, in welchem sie auch entstanden ist, d.h. wenn die gesamte Energiedeposition in einem Pixel stattfand.

Abbildung 11.8(d) zeigt schließlich die sich für den betrachteten Sensor aufgrund von Effizienz und Multiplizitätsfaktor ergebende detektierbare Quanteneffizienz bei Raumfrequenz Null in Abhängigkeit von Diskriminatorschwelle und Primärenergie. Die DQE zeigt die Strukturen von Effizienz und Multiplizitätsfaktor. Für monoenergetische Bestrahlung mit Energien unterhalb der Bindungsenergie der K-Schale kann prinzipiell eine sehr niedrige Schwelle gewählt werden. Für Energien bis zu etwa 50keV sollte bezüglich DQE bei Raumfrequenz Null die Schwelle knapp unterhalb der Primärenergie abzüglich der Fluoreszenzenergie gewählt werden, da die DQE hier noch von der Effizienz dominiert wird. Bezüglich Ortsauflösung könnte dies allerdings nachteilig sein, da das Zählereignis dann am Ort der Absorption des Fluoreszenzphotons stattfindet und nicht der Pixel zählt, in welchem das primäre Röntgenphoton absorbiert wurde. Bei noch höheren Energien reicht es, eine Schwelle knapp oberhalb der Fluoreszenzenergie zu wählen. Bei Verwendung eines Spektrums muss ein Kompromiss bei der Wahl der Schwelle eingegangen werden. Die optimale Schwelle kann durch eine Simulation mit der in dieser Arbeit entwickelten Methode unter Verwendung des gewünschten Spektrums als Quelle bestimmt werden.

Allerdings spielen auch Transportphänomene im Sensormaterial eine sehr wichtige Rolle und beeinflussen das Energieantwortspektrum und auch die DQE deutlich.

### 11.6.2 Ideale Antwort des Medipix2

Aufgrund der Transportphänomene im Sensormaterial und bei der Signalentstehung weicht das Energieantwortspektrum eines photonenzählenden pixelierten Halbleiterdetektors deutlich vom Energiedepositionsspektrum ab. Relevant sind hier Diffusion und Repulsion von Ladungsträgern im Sensormaterial, wodurch die Ortsauflösung reduziert wird, aber auch signifikante Anteile der Energie in anderen Pixeln landet und daher auch die Energie-

auflösung leidet. Durch Rekombination von Ladungsträgern und vor allem durch Löcher, die nicht rechtzeitig die Gegenelektrode erreichen, wird die Energieinformation weiter zu kleinen Energien hin verschoben.

Hier werden die Ergebnisse unter Berücksichtigung von Diffusion, Repulsion, Lebenszeit der Ladungsträger und Influenzierung von Ladungen gezeigt. Sämtliche Rauschbeiträge in der Pixelelektronik wurden vernachlässigt. Um die Influenzeffekte zu berücksichtigen, wurde hier eine ideale Elektronik mit einer Ladungssammelzeit von 55 ns ab Energiedeposition angenommen. Diese Zeit entspricht der maximalen Driftzeit von Elektronen durch den 1600  $\mu\text{m}$  dicken Sensor bei einer Vorspannung von  $-700\text{V}$ . Die innerhalb dieser Zeit als Spiegelladungsstrom influenzierte Ladungsmenge wird mit einer Schwelle verglichen. Die Ergebnisse entsprechen somit der idealen aufgrund der Sensoreigenschaften erreichbaren Energieantwort eines Medipix2-Detektors mit begrenzter Ladungssammelzeit der Pixelelektronik.

Abbildung 11.8 zeigt die Ergebnisse für eine Simulation mit diesen Randbedingungen. Im Energieantwortspektrum 11.9(a) sind die Strukturen des Energiedepositionsspektrums kaum noch zu erkennen. Die Farbkodierung ist zwar logarithmisch, jedoch ergibt sich ein durchaus signifikanter Untergrund. Dies liegt vor allem daran, dass Diffusion und Repulsion in diesem Fall Reichweiten von einigen 10  $\mu\text{m}$  haben, was in der Größenordnung der Reichweite der Sekundärelektronen liegt. Daher tritt sehr häufig eine Ladungsverteilung zwischen benachbarten Pixeln auf.

Letztlich wird im Wesentlichen die Energieinformation verwaschen. Bei sehr kleinen Schwellen treten viele zusätzliche Zählereignisse auf. Dies hat auch Auswirkungen auf Effizienz und Multiplizitätsfaktor. Der Multiplizitätsfaktor (Abbildung 11.9(b)) erreicht bei sehr kleinen Schwellen einen Wert von knapp über 80%. Strukturen in der Schwellenabhängigkeit des Multiplizitätsfaktors werden vor allem aufgrund von Diffusion und Repulsion verwaschen.

Die Effizienz (Abbildung 11.9(c)) ist für alle Diskriminatorschwellen in der Nähe der Kanten im zuvor betrachteten Fall niedriger. Die Kanten werden zu niedrigeren Schwellen hin verwaschen, da das Signal von Ladungsträgern fehlt, die durch Diffusion und Repulsion in benachbarte Pixel gelangt sind, sowie in geringerem Ausmaß, die aufgrund von Rekombination bzw. endlicher Ladungssammelzeit nicht ihre Zielelektrode erreicht haben und daher nicht ein Signal entsprechend ihrer Ladung influenzieren konnten.

Für die DQE bedeutet dies, dass sie gegenüber dem zuvor betrachteten Fall überall niedriger liegt. Zudem sind auch hier die Strukturen verwaschen. Jetzt gibt es auch für kleine Primärenergien ein deutlich sichtbares Maximum in der Schwellenabhängigkeit der DQE, weil auch bei kleinen Primärenergien bei niedrigen Schwellen aufgrund von der dann dominierenden Diffusions- und Repulsionseffekte mehrere Pixel zählen können. Bei höheren Primärenergien liegt das Optimum der Schwelle zwischen der Energie der Fluoreszenzen und der Primärenergie abzüglich der Fluoreszenzenergie, meist in der Nähe der Hälfte der Primärenergie.

Für Bestrahlung mit einem bestimmten Spektrum kann wieder über eine entsprechende Simulation eine optimale Einstellung der Diskriminatorschwelle gefunden werden.

### 11.6.3 Ideale Antwort des Medipix3

Der Medipix3 besitzt einen Ladungssummiermodus, bei welchem benachbarte Pixel miteinander kommunizieren und ihre Signale aufaddieren. Dabei zählt nur der Pixel, der gegenüber allen seiner Nachbarn das größte Signal sieht.

Dadurch kann der Einfluss von Diffusion und Repulsion praktisch komplett kompensiert werden. Zudem wird durch diesen Mechanismus sogar die Ladungsverteilung durch Sekundärelektronen des Photoeffektes und der Comptonstreuung über Pixelgrenzen hinweg kompensiert, so dass bessere Ergebnisse als bei einem idealem pixelierten Energiedepositionsdetektor ohne Interpixelkommunikation möglich sind. Auch der Teil der Fluoreszenzphotonen, welcher in Nachbarpixeln absorbiert wird, kann nun nicht mehr zu zusätzlichen Zählereignissen führen.

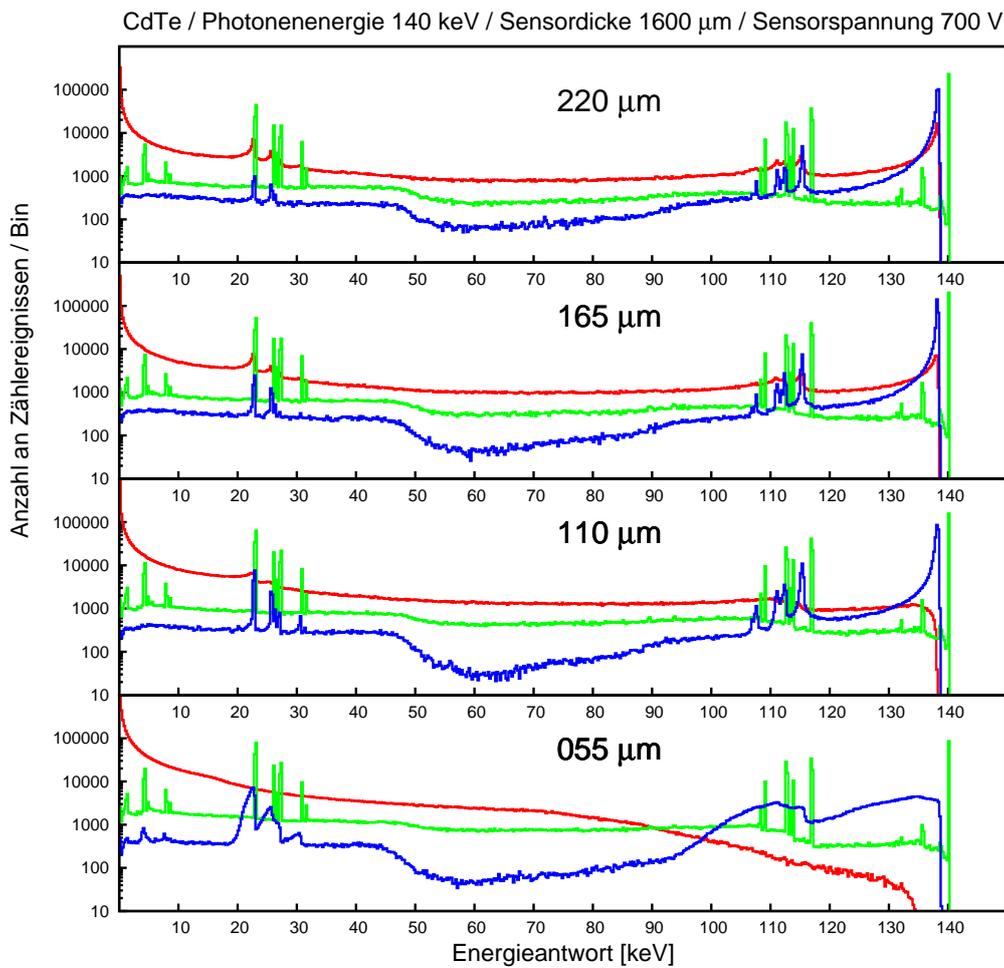
Simuliert wurde für einen Medipix3-Detektor mit Ladungssummiermodus mit einer idealen Elektronik ohne Rauschbeiträge. Nur ein minimales zeitliches Stromkopierrauschen von 0,1% wurde implementiert. Der Grund hierfür wird später im Kapitel 11.7 erläutert. Abbildung 11.9 zeigt wieder die Ergebnisse für Energieantwortspektrum, Multiplizitätsfaktor, Effizienz und DQE.

Im Energieantwortspektrum in Abbildung 11.10(a) fehlen nun die Peaks bei den L-Fluoreszenzphotonen, da diese praktisch nie den übernächsten Pixel erreichen können und deren Energie daher vom Ladungssummiermodus zum Pixel addiert wird, in welchem das zugehörige Photoelektron absorbiert wurde. K-Fluoreszenzphotonen erreichen jedoch gelegentlich weiter entfernte Pixel und erzeugen weiterhin eigene Einträge im Energieantwortspektrum. Auch die Comptonelektronen können zu eigenen Einträgen führen, da die gestreuten Photonen noch eine relativ große Reichweite besitzen und daher weiter entfernte Pixel erreichen können. Peaks hoher Energie besitzen allerdings einen deutlich sichtbaren Ausläufer hin zu kleineren Energien. Dies liegt an der unvollständigen Sammlung von Löchern und dadurch fehlendem Signal, was natürlich auch durch einen Ladungssummiermodus nicht kompensiert werden kann.

Da nun fast keine Mehrfachzählereignisse mehr auftreten können, liegt der Multiplizitätsfaktor (Abbildung 11.10(b)) immer sehr nahe am idealen Wert 1. Die DQE wird daher in diesem Fall von der Effizienz (Abbildung 11.10(c)) bestimmt. Es ergeben sich letztlich sehr gute Werte für die DQE, solange die Schwelle noch unterhalb der Primärenergie abzüglich der Energie der K-Fluoreszenzphotonen (soweit diese möglich sind) liegt.

Der Ladungssummiermodus besitzt jedoch eine relativ zeitaufwändige Elektronik, so dass für Detektoren mit diesem Modus kleinere Zählraten erforderlich sind. Soll mit einem höheren Röntgenfluss gemessen werden, so ist weiterhin die Verwendung eines normalen zählenden Modus nötig, welcher jedoch an „Charge Sharing“ leidet.

Abbildung 11.10 zeigt zusammenfassend noch einen direkten Vergleich der Energieantwortspektren für monogenergetische Bestrahlung eines  $1600\ \mu\text{m}$  dicken CdTe-Sensors mit  $140\ \text{keV}$  Röntgenphotonen für vier verschiedenen Pixelgrößen. Für jede Pixelgröße sind das Energiedepositionsspektrum sowie die Antwortspektren für idealen Medipix2 bzw. den Medipix3-Ladungssummiermodus dargestellt. Der Photopeak besitzt aufgrund partieller Ladungssammlung einen zu kleineren Energien hin unsymmetrischen Ausläufer. Der Photopeak der Energieantwortspektren ist aufgrund von Rekombination einiger Ladungsträger zu kleineren Energien hin verschoben.

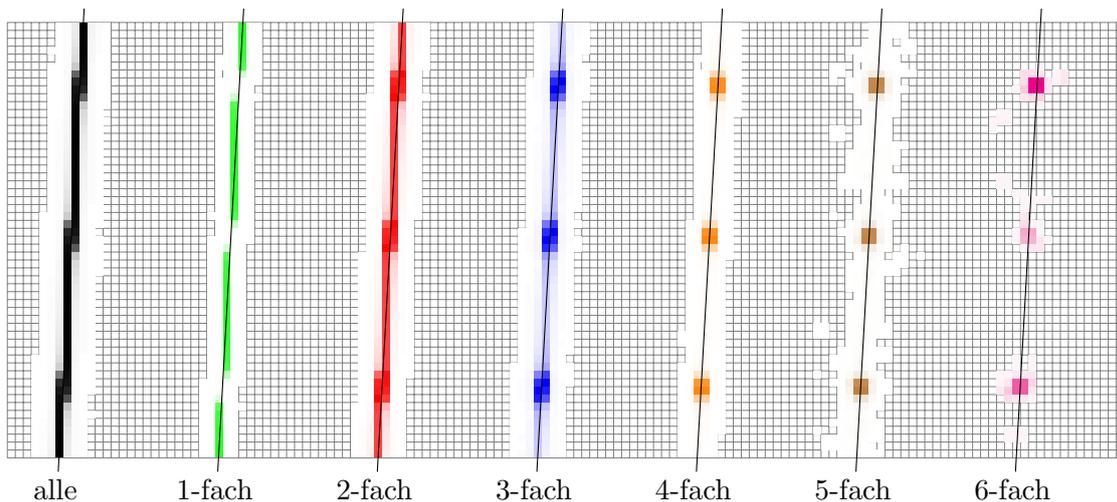


**Abbildung 11.10** Energieantwortspektren des Medipixdetektors im Medipix2-Zählmodus (rot) und im Medipix3-Ladungssummiermodus (blau) im Vergleich zum Energiedepositionsspektrum (grün) für monoenergetische Bestrahlung mit 140 keV für Pixelgrößen von  $(55 \mu\text{m})^2$  bis  $(220 \mu\text{m})^2$ . Elektronikrauschen wurde jeweils vernachlässigt.

## 11.7 Einfluss der Mehrfachzählungen und der Diskriminatorschwelle auf die Linienbildfunktion

In diesem und in im nächsten Abschnitt soll beispielhaft der Einfluss der Mehrfachzählungen auf die Linienbildfunktion und die Modulationstransferfunktion dargestellt werden. Mit diesen Bildqualitätskriterien wird die Qualität der Ortsauflösung eines bildgebenden Systems beschrieben.

Um den Einfluss von Mehrfachzählungen auf diese beiden Kriterien abzuschätzen, wurde eine Monte-Carlo-Simulation mit der in dieser Arbeit entwickelten Simulation photo-nenzählender Detektoren durchgeführt, wobei als Röntgenquelle ein infinitesimal dünner Linienstrahl gewählt wurde, welcher um  $3^\circ$  gegenüber einer Pixelkante verkippt ist, aber senkrecht auf den Sensor auftrifft. Die Zählereignisse wurden in der Simulation getrennt nach Einfachtreffern, Zweifachtreffern, usw. gewertet, so dass man für jede Einstellung der Diskriminatorschwelle und für jede Clustergröße separat das ortsaufgelöste Bild der Detektormatrix erhält. Abbildung 11.11 zeigt die Antwort des Detektors getrennt nach der Clustergröße.

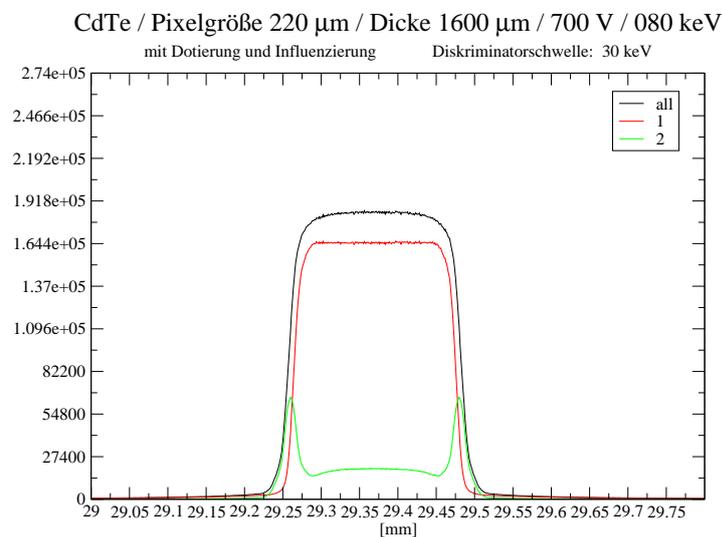
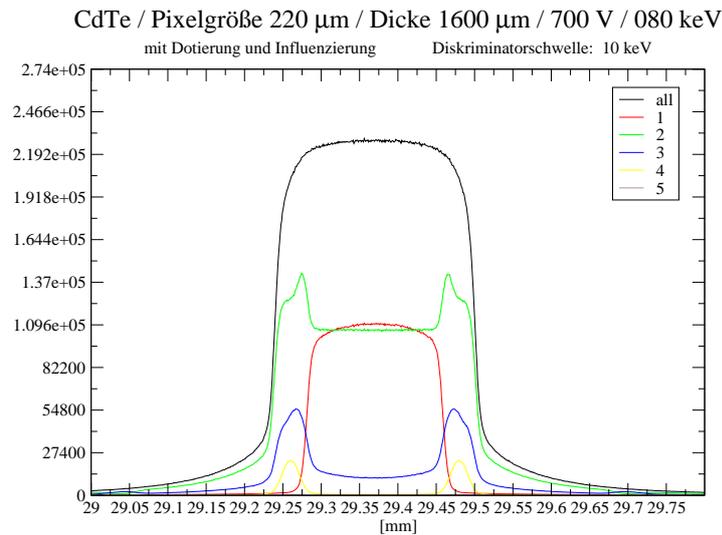


**Abbildung 11.11** Abbild einer Linie nach Mehrfachtreffern getrennt bei Bestrahlung (monoenergetisch, 80keV) eines  $1600\mu\text{m}$  dicken CdTe-Sensors mit Pixelgröße  $220\mu\text{m}$  im Medipix2-Modus bei einer Diskriminatorschwelle von 10keV. Für jede Trefferzahl wurde separat so normiert, dass der Pixel mit dem maximalen Zählerstand auf 100 gesetzt wurde. Zudem wurden nur Pixel eingefärbt, die wenigstens 1 Promille des Maximums gezählt haben.

Aufgrund der Reichweite der Sekundärelektronen, Diffusion und Repulsion sowie Fluoreszenzen zählen auch Pixel, die weit von den bestrahlten Pixeln entfernt liegen. Die Antwort für Einfachzählereignisse zeigt, dass diese bei niedrigen Schwellen vor allem dort auftreten, wo Röntgenphotonen weit entfernt von Pixelkanten absorbiert werden. Überschreitet der Linienstrahl eine Pixelkante, finden dort fast keine Einfachzählereignisse statt. Doppeltreffer treten dagegen überall entlang des Linienstrahls auf, da der Linienstrahl in der vertikalen immer zwei Pixelgrenzen überschreitet, an welchen Mehrfachzählereignisse auftreten können. Dreifachzählereignisse treten vor allem in der Nähe der Ecken von Pixeln auf. Vierfachzählereignisse treten fast nur dort auf, wo der Linienstrahl eine Pixelecke

## 11.7 Einfluss der Mehrfachzählungen und der Diskriminatorschwelle auf die LSF

überschreitet. Aufgrund von Fluoreszenzen können an verschiedenen einige Pixel entfernten Orten im Detektor Ladungswolken erzeugt werden. Liegen mehrere dieser Wolken an Pixelgrenzen bzw Pixelecken, dann können auch größere Cluster wie 5-fach und 6-fach-Cluster auftreten.



**Abbildung 11.12** Linienbildfunktion getrennt nach Multiplizitäten (1=Einfachtreffer, 2=Doppeltreffer etc., all=alle Ansprechere) für eine Schwelle von 10 bzw. 30keV bei Be- strahlung eines 1600  $\mu\text{m}$  dicken CdTe-Sensors mit Pixelgröße 220  $\mu\text{m}$  mit einem infinitesimal dünnen Linienstrahl von 80keV Röntgenphotonen.

Die Linienbildfunktion (LSF) erhält man durch Projektion der Detektorantwort auf eine Achse senkrecht zur Linie. Dabei wird als Abstand zur Linie der Abstand der Pixelmitte zur infinitesimal dünnen Linie verwendet. In Abbildung 11.12 ist dies für alle Clustergrößen getrennt für zwei verschiedene Diskriminatorschwellen dargestellt. Die effektive Pixelbreite der Einfachtreffer ist kleiner, die für Mehrfachtreffer größer als der Pixelabstand. Die effektive Pixelbreite aller Zählereignisse ist bei kleinen Schwellen größer als der Pixelabstand. Doppeltreffer treten meist entlang der Linie auf, was sich in der Linienbildfunktion mit einem Plateau auswirkt. Wird eine Ecke vom Linienstrahl überschritten, treten Doppeltreffer mit einer erhöhten Wahrscheinlichkeit auf. Dies äußert sich in der LSF durch zwei Peaks im Abstand der Pixelbreite. Bei Dreifach- und Mehrfachtreffern besteht die LSF im Wesentlichen nur noch aus diesen beiden Peaks, allerdings aufgrund der kleineren Häufigkeit mit einer kleineren Amplitude.

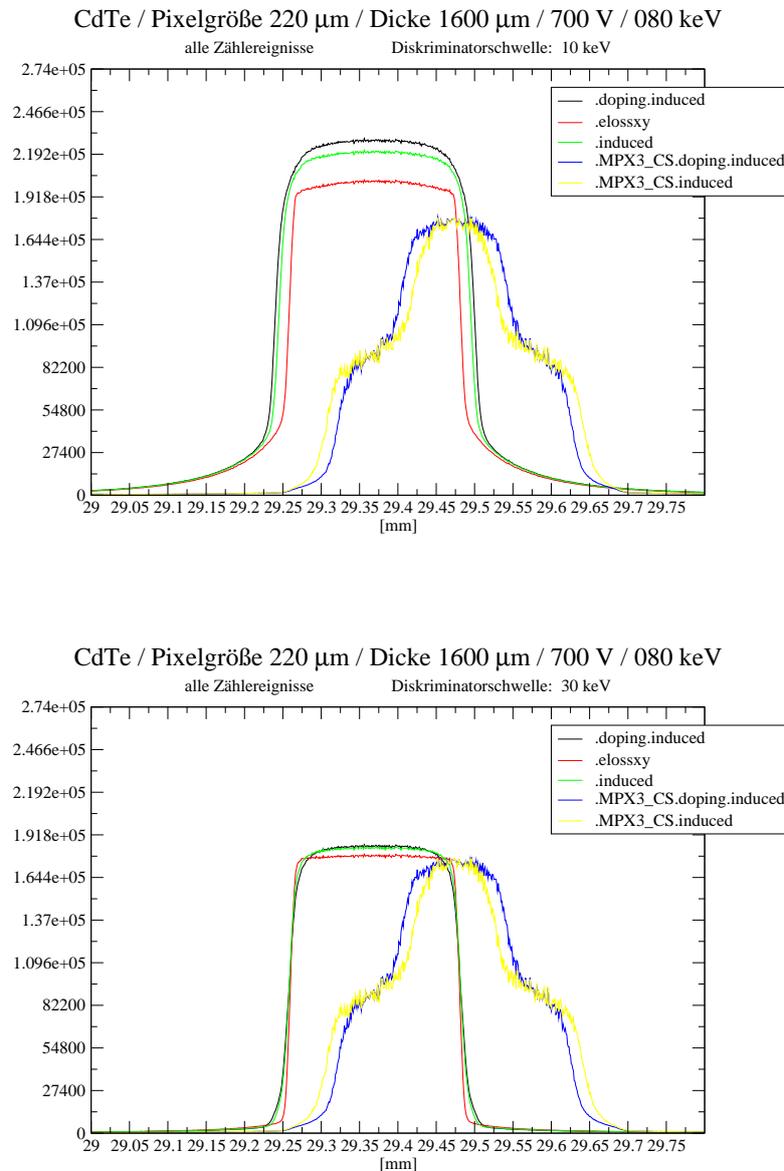
Für höhere Schwellenenergien werden Mehrfachzählungen zum Teil vermieden und Einfachzählungen dominieren die Linienbildfunktion. Die effektive Pixelbreite aller Zählereignisse erreicht etwa den Pixelabstand. Bei sehr hohen Schwellen sinkt die Effizienz des Detektors, weil man dann Einfachtreffer nahe der Pixelgrenzen verliert. Die effektive Pixelfläche verringert sich deutlich, was zu einer niedrigeren Amplitude und einer kleineren Breite der LSF führt.

Die verschiedenen in Sensorschicht und Detektorelektronik relevanten physikalischen Effekte haben zum Teil ebenfalls deutlichen Einfluss auf die Linienbildfunktion und damit auch auf die Ortsauflösung. Abbildung 11.13 zeigt die Abhängigkeit der LSF vom Simulationsmodell. Für den Idealfall eines unverrauschten Energiedepositionsdetektors ergibt sich eine Linienbildfunktion mit einer Breite des Pixelabstandes. Durch Diffusion und Repulsion wird die Ortsauflösung verschlechtert, es ergibt sich eine breitere LSF. Berücksichtigt man zusätzlich die Feldverkipfung durch Dotierung, erhöhen sich im vorliegenden Fall die Driftzeiten und es ergibt sich eine LSF mit noch größerer Breite. Influenzierungseffekte haben keinen Einfluss auf die Ortsauflösung, diese Kurven liegen sehr nahe an den Linien ohne Berücksichtigung der Influenzierung. Durch eine höhere Energie der Diskriminatorschwelle kann ein Teil der zusätzlichen durch Diffusion und Repulsion verursachten Zählereignisse vermieden werden und die Breite der LSF wird kleiner.

Im Medipix3-Modus tritt eine deutliche Verschlechterung der Ortsauflösung auf, falls die gesamte Ladung nur auf einem Pixel oder auf zwei benachbarten Pixeln landet. Dies liegt daran, dass dann die unterschiedlichen Rauschbeiträge der Stromkopien entscheiden, welcher der angrenzenden Pixel das Ereignis registriert. Dies ist manchmal der Pixel links vom Linienstrahl, manchmal der rechts davon. Dadurch ergibt sich effektiv eine doppelt so breite Linienbildfunktion. Superpositioniert ist ein Anteil mit einer Breite kleiner als die Pixelbreite, der durch Ereignisse erzeugt wird, bei welchen Ladung in drei oder mehr benachbarten Pixeln influenziert bzw. gesammelt wird, d.h. wenn die Ladungswolke inklusive Diffusion und Repulsion in der Pixelebene eine Fläche erreicht, welche eine Pixelecke mit einschließt. Daher hat hier bei Berücksichtigung der Dotierung die dann erhöhte Driftzeit positiven Einfluss auf die Ortsauflösung. Alternativ kann man den Detektor auch mit einer geringeren Sensorspannung betreiben und so eine Ladungsverteilung auf mehrere miteinander kommunizierende Pixel forcieren<sup>1</sup>.

---

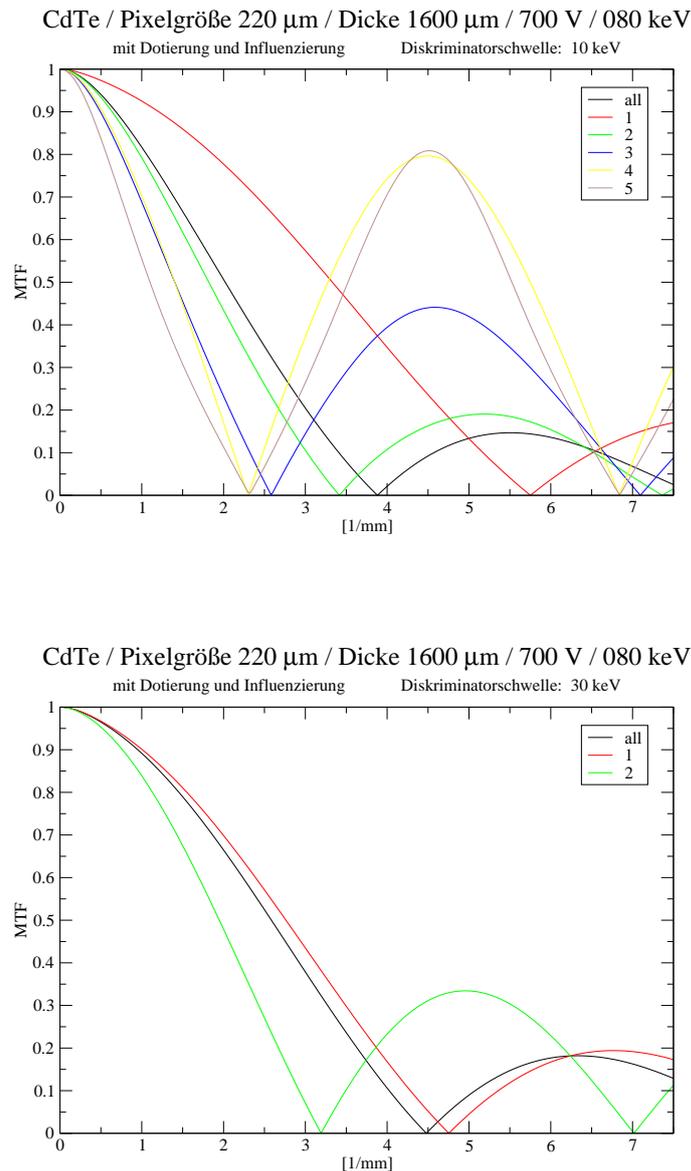
<sup>1</sup>Charge Sharing is our friend.



**Abbildung 11.13** Linienbildfunktion aller Zählereignisse für eine Schwelle von 10 bzw. 30 keV bei Bestrahlung eines 1600 μm dicken CdTe-Sensors mit Pixelgröße 220 μm mit einem infinitesimal dünnen Linienstrahl von 80 keV Röntgenphotonen. Dargestellt ist ein Vergleich der Linienbildfunktion unter Berücksichtigung verschiedener detaillierter Simulationsmodelle. Die einzelnen Kurven entsprechen folgenden Fällen: .elossxy: idealer Energiedepositionsdetektor unter Berücksichtigung des Fanofaktors, .induced=zählender Modus mit Influenzierung, aber ohne intrinsische Dotierung, d.h. konstantes elektrisches Feld, .doping.induced=zählender Modus mit Influenzierung mit intrinsischer Dotierung ( $N_{\text{eff}} = -2.85E11 \frac{1}{\text{cm}^3}$ ), .MPX3\_CS.induced=Ladungssummiermodus ohne Dotierung, .doping.MPX3\_CS.induced=Ladungssummiermodus mit intrinsischer Dotierung.

## 11.8 Einfluss der Mehrfachzählungen auf die Modulationstransferfunktion

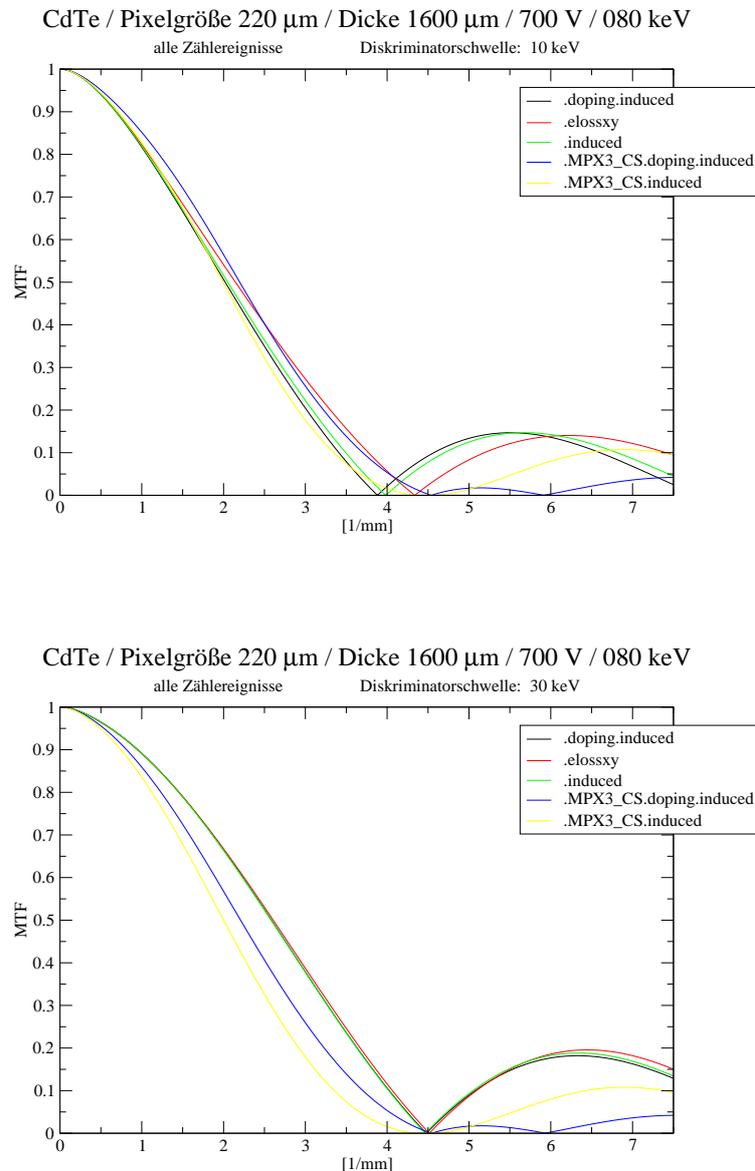
Die Modulationstransferfunktion ist die Fouriertransformierte der Linienbildfunktion. Abbildung 11.14 zeigt für den Sensor des letzten Abschnitts die Modulationstransferfunktion



**Abbildung 11.14** Modulationstransferfunktion (Fouriertransformierte der LSF aus Abbildung 11.12) getrennt nach Multiplizitäten für eine Schwelle von 10 bzw. 30 keV bei Bestrahlung eines 1600 μm dicken CdTe-Sensors mit Pixelgröße 220 μm mit einem infinitesimal dünnen Linienstrahl von 80 keV Röntgenphotonen.

tionen, die sich aus den einzelnen Clustergrößen ergeben würden. Die MTF aller Zählereignisse ist die MTF der Einfachzählereignisse reduziert um den Einfluss der Mehrfachzählereignisse. Die MTF der Einfachzählereignisse erreicht den Wert Null bei einer höheren Frequenz, als durch den Pixelabstand zu erwarten ist. Allerdings ist diese Auflösung nicht sinnvoll zu erreichen, da man Mehrfachzählungen nur durch die Wahl einer höheren Schwelle vermeiden kann und dabei auch Einfachzählereignisse verliert. Zudem entstehen Bereiche auf dem Detektor, die nicht mehr sensitiv sind.

In Abbildung 11.15 sind schließlich die Modulationstransferfunktionen unter Berücksichtigung verschiedener detaillierter Simulationsmodelle dargestellt. Aufgrund von Diffusion und Repulsion liegt die zugehörige MTF für alle Frequenzen unterhalb der MTF eines idealen Energiedepositionsdetektors. Die MTF des idealen unverrauschten Medipix3 im Ladungssummiermodus dagegen liegt bei einer Schwelle von 10keV für Frequenzen bis zu etwa 2.5 Linienpaaren pro mm sogar etwas oberhalb davon. Allerdings ist die MTF in diesem Fall bei hohen Ortsfrequenzen schlechter. Mit einer höheren Schwelle ändert sich dagegen die MTF im Ladungssummiermodus des Medipix3 kaum. Die Ortsauflösung des Medipix2-Modus ist daher für die meisten Schwellen deutlich besser als für den Medipix3, zumindest wenn die Pixelgröße größer als die Hälfte der Diffusions- und Repulsionsreichweite ist.



**Abbildung 11.15** Modulationstransferfunktion (Fouriertransformierte der LSF aus Abbildung 11.13) aller Zählereignisse für eine Schwelle von 10 bzw. 30 keV bei Bestrahlung eines 1600  $\mu\text{m}$  dicken CdTe-Sensors mit Pixelgröße 220  $\mu\text{m}$  mit einem infinitesimal dünnen Linienstrahl von 80 keV Röntgenphotonen. Dargestellt ist ein Vergleich der Modulationstransferfunktion unter Berücksichtigung verschieden detaillierter Simulationsmodelle. Die einzelnen Kurven entsprechen folgenden Fällen: .elossxy: idealer Energiedepositionsdetektor unter Berücksichtigung des Fanofaktors, .induced=zählender Modus mit Influenzierung, aber ohne intrinsische Dotierung, d.h. . konstantes elektrisches Feld, .doping.induced=zählender Modus mit Influenzierung mit intrinsischer Dotierung ( $N_{\text{eff}} = -2.85E11 \frac{1}{\text{cm}^3}$ ), .MPX3\_CS.induced=Ladungssummiermodus ohne Dotierung, .doping.MPX3\_CS.induced=Ladungssummiermodus mit intrinsischer Dotierung.

## 12 Zusammenfassung

Photonenzählende Detektoren wie die Medipix-Detektoren haben das Ziel, die Anzahl der Photonen zu zählen, die im Sensormaterial des Detektors gewechselwirkt haben. Es wird die Anzahl der Zählereignisse gemessen, die aufgrund einer die Energieschwelle übertreffenden Energiedeposition ausgelöst werden.

In dieser Arbeit werden zunächst die für die Energiedeposition im Sensorvolumen verantwortlichen physikalischen Prozesse untersucht. Die Begrenzung der Ortsauflösung aufgrund der Wechselwirkung von Photonen und der Reichweite der Sekundärelektronen wird diskutiert. Signaturen im Energiedepositionsspektrum direktkonvertierender Röntgenpixeldetektoren werden erklärt. Insbesondere wird auf Sensormaterialien mit hoher Ordnungszahl am Beispiel von Cadmiumtellurid eingegangen.

Die Energiedeposition einzelner Ereignisse kann mit dem Monte-Carlo-Simulationspaket ROSI berechnet werden. Die grundlegenden Wechselwirkungen von Photonen mit Materie wurden evaluiert mit dem Ergebnis, dass ROSI als Basis für die Simulation direktkonvertierender photonenzählender Röntgenpixeldetektoren geeignet ist.

Im Rahmen der Promotionsarbeit wurde eine Detektorklasse entwickelt, mit welcher die Antwort von hybriden photonenzählenden Röntgenpixeldetektoren simuliert werden kann. Alternativ zu Silizium können dabei insbesondere Sensormaterialien mit hoher Ordnungszahl wie Cadmiumtellurid (CdTe) oder Galliumarsenid (GaAs) verwendet werden. Um dies zu ermöglichen, müssen die relevanten physikalischen Prozesse und Eigenschaften implementiert werden: physikalische Prozesse im Sensormaterial (berechnet von EGS4/LSCAT in ROSI), Erzeugung von Ladungsträgern in Form von Elektron-Loch-Paaren, Diffusion und Repulsion von Ladungsträgern während Drift und Lebenszeit. Während der Driftbewegung von Ladungsträgern fließen durch Influenzeffekte Spiegelladungen in der Elektrodenebene zu den Elektroden. Dies führt auch dann zu einem Signal, wenn nicht alle Elektronen und Löcher ihre Elektrode erreichen. Diese unvollständige Ladungssammlung hat einen Einfluss auf die Energieauflösung. Desweiteren können auch Rauschbeiträge der Detektorelektronik in der Simulation berücksichtigt werden. Das Ergebnis ist eine Detektorklasse, welche die Simulation photonenzählender Detektoren wie dem Medipix2-Detektor und dem Medipix3-Detektor mit seinem Ladungssummiermodus ermöglicht. Mit Hilfe dieser Detektorklasse können komplexe bildgebende Systeme simuliert werden, welche mehrere Einheiten von photonenzählenden Röntgenpixeldetektoren enthalten, wobei das Verhalten jedes einzelnen Detektors detailliert simuliert wird.

Aufgrund von Ladungsverteilungseffekten können von einem einzelnen wechselwirkenden Röntgenphoton mehrere Zählereignisse ausgelöst werden. Die Gesamtanzahl der Zählereignisse in der Detektormatrix folgt nicht mehr zwangsläufig dem Poissonrauschen. In dieser Arbeit wird der Multiplizitätsformalismus beschrieben, mit welchem der Einfluss von Mehrfachzählungen berücksichtigt werden kann. Es wird eine Formel zur Berechnung oder Messung der detektierbaren Quanteneffizienz (DQE) bei Raumfrequenz Null hergeleitet. Die Effizienz wird um einen Faktor verringert, welcher die mittlere Multiplizität und

ihr Rauschen enthält. Zur experimentellen Bestimmung der Multiplizitätswerte wurde ein Clusteranalyseprogramm entwickelt. Die bei der Clusteranalyse auftretenden statistischen und systematischen Fehler werden diskutiert und es wird gezeigt, dass mit Clusteranalysemethoden der Einfluss der mittleren Multiplizität auf die DQE mit guter Genauigkeit gemessen werden kann. Die Methode wurde anhand experimenteller Daten überprüft.

Außerdem hängen Effizienz und mittlere Multiplizität von der Energieschwelle ab. Als Beispielanwendung der implementierten Detektorklasse wird die Abhängigkeit von DQE und Modulationstransferfunktion von der Energieschwelle detailliert untersucht, wobei Silizium und CdTe als Sensormaterial verwendet werden. Für CdTe werden diese Größen neben der Energieantwortfunktion für einen idealen Energiedepositionsdetektor, die ideale Antwort des Medipix2 und des Ladungssammlungsmodus des Medipix3-Detektors gezeigt. Das Ergebnis solcher Simulationen erlaubt die Wahl einer optimalen Schwelle für ein gegebenes bildgebendes System.

## 13 Summary

Photon counting detectors like the Medipix detectors aim for the provision of access to the number of photons interacting in the sensor material of the detector. The measured observable is the number of counts triggered by an energy deposition larger than a given threshold. To understand the response of these detectors, a detailed simulation model is required.

First of all the physics processes generating the energy deposition in the sensor volume are investigated. The spatial resolution limits of photon interactions and the range of secondary electrons are discussed. The signatures in the energy deposition spectrum in pixelated detectors with direct conversion layers are described.

The energy deposition for single events can be generated by the Monte-Carlo-Simulation package ROSI. The basic interactions of photons with matter are evaluated, resulting in the ability to use ROSI as a basis for the simulation of photon counting pixel detectors with direct conversion.

In the context of this thesis a detector class is developed to simulate the response of hybrid photon counting pixel detectors using high-Z sensor materials like Cadmium Telluride (CdTe) or Gallium Arsenide (GaAs) in addition to silicon. To enable the realisation of such a simulation, the relevant physics processes and properties have to be implemented: processes in the sensor layer (provided by EGS4/LSCAT in ROSI), generation of charge carriers as electron hole pairs, diffusion and repulsion of charge carriers during drift and lifetime. The drift of charge carriers induces a motion of mirror charges at the electrodes leading to a signal even if not all of the electrons and holes reach the electrode. The consequence is a partial charge collection and therefore has an impact on the energy resolution. Furthermore, several noise contributions of the electronics can be taken into account. The result is a detector class which allows the simulation of photon counting detectors like Medipix2 and Medipix3 also including the charge summing mode of the Medipix3. This detector class can be used to simulate complex imaging systems, containing several units of pixelated photon counting X-ray detectors and taking into account a detailed implementation of the processes inside each detector unit.

Due to the effect of Charge Sharing several pixels can be triggered by a single X-ray photon which interacts in the sensor volume. Therefore the total number of counts does not follow Poisson noise anymore. In this thesis the multiplicity framework is developed, including a formula to calculate or measure the zero frequency detective quantum efficiency (DQE). The detection efficiency is reduced by a factor containing the averaged multiplicity and its noise. To enable the measurement of the multiplicity of detected events a cluster analysis program was developed. Random and systematic errors introduced by the cluster analysis are discussed. It is also shown that the cluster analysis method can be used to determine the averaged multiplicity with high accuracy. The method is applied to experimental data.

Furthermore, efficiency and averaged multiplicity depend on the energy discriminator threshold. As an example using the implemented detector class, the discriminator threshold dependency of the DQE and modulation transfer function is investigated in detail for Silicon and CdTe as sensor materials. For CdTe these results are shown beside the energy response spectrum for an ideal energy deposition detector, the ideal response of a Medipix2 detector and for the charge summing mode of the Medipix3 detector. The results of such simulations permit a choice of an optimum energy threshold for a given imaging system.

# Anhang



# A ROSI - Roentgen Simulation

## Inhaltsangabe

---

<b>A.1 Funktionsprinzip von ROSI</b>	<b>113</b>
<b>A.2 Evaluierung von ROSI und LSCAT-GISMO</b>	<b>114</b>
A.2.1 Evaluierung der Implementierung des Zufallszahlengenerators Jamesrandom in RAVAR/LSCAT-GISMO	114
<b>A.3 Evaluierung der Physik in EGS4/LSCAT</b>	<b>116</b>
A.3.1 Photoeffekt	116
A.3.2 Comptoneffekt	117
A.3.3 Sekundäreffekte: Fluoreszenz	117
A.3.4 Sekundäreffekte: Auger	118
A.3.5 Übersicht über die bei photonischen Prozessen erzeugten Teilchen	118
A.3.6 Energiebilanz	119
<b>A.4 Tipps zur Verwendung von Datenkontainern</b>	<b>119</b>
A.4.1 Definition von aussagekräftigen Namen für die Datenstrukturen	119
A.4.2 Initialisierung der Datenstrukturen	120
A.4.3 Zugriff auf die Datenstrukturen	120
A.4.4 Ausgabe der Datenstrukturen	121
A.4.5 Hilfsroutinen für die Ausgabe der Datenstrukturen	121

---

## A.1 Funktionsprinzip von ROSI

Das an unserem Institut entwickelte Open-source Simulationspaket ROSI (Roentgen Simulation) [20, 21, 52] ist eine objektorientierte und parallelisierbare Monte-Carlo-Simulation für Röntgensimulationen, mit welcher zum Beispiel bildgebende Systeme aus dem Röntgenbereich modelliert werden können.

ROSI arbeitet ereignisbasiert, d. h. dass immer ein einzelnes Röntgenquant aus einer Quelle emittiert wird und dann durch die gesamte geometrische Anordnung unter Berücksichtigung implementierter physikalischer Prozesse propagiert wird. Dabei können auch weitere Teilchen entstehen, die dann ihrerseits wieder propagiert werden. So entsteht ein Ereignisbaum, welcher die Interaktionsinformationen bis hin zur lokalen Energiedeposition durch Sekundärelektronen beinhaltet. Nacheinander simulierte Ereignisse sind damit unabhängig voneinander.

ROSI selbst sorgt für eine benutzerfreundliche Implementierung von Röntgenquellen, geometrischen Streuobjekten und Detektoren sowie einen einfachen Zugriff auf den Ereignisbaum und dessen Auswertung. ROSI verwendet die Bibliotheken RAVAR [53] für

Zufallsvariablen und LAM/MPI [54, 55] zur Parallelisierung. Die ROSI zugrundeliegende Physik und Geometrieklassen sind in dem Paket LSCAT-GISMO [56, 57] vereint, wobei LSCAT-GISMO über eine abstrakte Interaktionsklasse verfügt, über welche die verwendeten Physikmodelle ausgetauscht werden können. Enthalten sind aktuell drei Physikklassen:

- Gheisha - für hadronische Wechselwirkungen
- EGS4 - für elektromagnetische Wechselwirkungen [58]
- LSCAT - die Niedrigenergieerweiterung von EGS4 [59]

Ein Benutzer von ROSI kann über die Datei *rosi.cpp* mit normalem C++-Quellcode eine ROSI-Anwendung für bestimmte Fragestellungen erstellen. Das Simulationspaket bietet eine einfache Möglichkeit, vielfältige Röntgenquellen (Geometrie und Spektrum) zu definieren und die von dieser Quelle emittierten Röntgenquanten beispielsweise mit einem Sensormaterial interagieren zu lassen. Durch die Freiheit einer Programmiersprache wie C++ ist komplexes Postprocessing durch den Benutzercode möglich.

Ausgehend von der im Ereignisbaum zur Verfügung gestellten Energiedeposition im Sensormaterial können für die Simulation photonenzählender Detektoren dadurch die für den Ladungsträgertransport im Sensor und für die Signalentstehung in der Pixelelektronik relevanten physikalischen Effekte implementiert werden.

## A.2 Evaluierung von ROSI und LSCAT-GISMO

Im Rahmen dieser Arbeit wurden ROSI und LSCAT-GISMO soweit für die Simulation von photonenzählenden Detektoren relevant evaluiert, wobei einige kleinere Fehler im Programmcode beider Pakete gefunden werden konnten. Diese wurden an die Entwickler dieser Pakete weitergeleitet und sind damit in die aktuellen Versionen eingeflossen.

### A.2.1 Evaluierung der Implementierung des Zufallszahlengenerators Jamesrandom in RAVAR/LSCAT-GISMO

Da Computer immer deterministisch rechnen, wurden für Monte-Carlo-Simulationen ausgeklügelte Algorithmen entwickelt, welche rationale reelle Zahlen meist in einem Intervall zwischen 0 und 1 mit einer konstanten Wahrscheinlichkeitsverteilung erzeugen, wobei die Anordnung pseudozufällig ist. Eine neue Zufallszahl wird meist jeweils aus der vorherigen berechnet. Vor Beginn einer Simulation muss daher der Zufallszahlengenerator mit einem „Seed“ (Datentyp: long int) initialisiert werden. Letztlich handelt es sich aufgrund der endlichen Rechentiefe von Computern um eine periodische Folge von Zahlen, wobei die Periodenlänge eines guten Zufallszahlenalgorithmus für jeden erlaubten Anfangswert extrem groß ist, so dass eine Initialisierung mit einem unterschiedlichen Seed-Wert unterschiedliche Zufallsfolgen ergibt.

Jamesrandom [60] ist der in LSCAT-GISMO und RAVAR verwendete Zufallszahlenalgorithmus. Dieser erzeugt bei korrekter Implementierung eine Pseudozufallszahlenfolge mit einer typischen Sequenzlänge von  $10^{34}$ , als Initialisierungswerte stehen für den Seed natürliche Zahlen im Intervall [0:900000000] zur Verfügung.

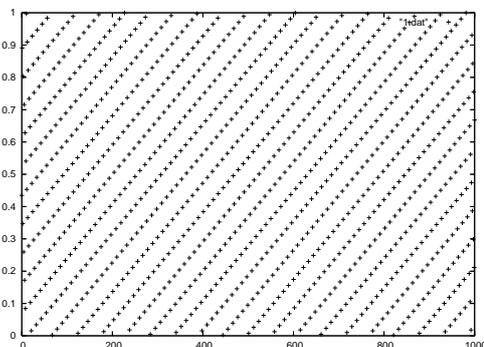
Durch einen Tippfehler im Quellcode war oben genannte Periodenlänge für bestimmte Seed-Werte sehr kurz, zudem ergab sich in diesem Fall ein sehr regelmäßiges Muster der Folge der „Zufallszahlen“. Betroffen waren 169/30082 aller möglichen Seedwerte. Zusätzlich wird nun sichergestellt, dass ein Seed im erlaubten Wertebereich verwendet wird:

- Codeausschnitt der setSeed-Routine von JamesRandom (LSCAT-GISMO und RAVAR, mit Fehler)

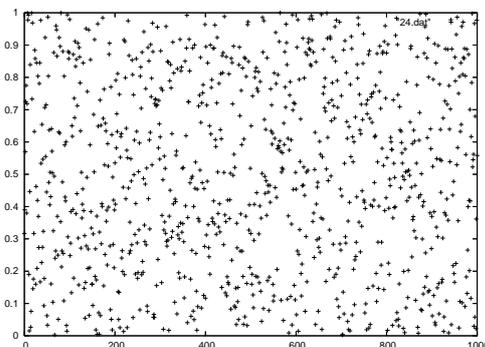
```
void JamesRandom::setSeed(long seed) {
    long ij = seed/30082;
    long kl = seed - 30082*ij;
    long i = (ij/177) % 177 + 2;
    long j = ij % 177 + 2;
    long k = (kl/169) % 178 + 1;
    long l = kl % 169;
    ...
}
```

- Codeausschnitt der setSeed-Routine von JamesRandom (korrigiert)

```
void JamesRandom::setSeed(long seed) {
    if (seed<0 || seed>900000000)
        std::cerr << "seed_should_be_within [0..900_000_000]:_";
    std::cerr << "using_seed=abs(seed)\%900000000" << std::endl;
    if (seed<0) seed=-seed;
    if (seed>900000000) seed=seed\%900000000; // valid range [0..900 000 000]
    long ij = seed/30082;
    long kl = seed - 30082*ij;
    long i = (ij/177) % 177 + 2;
    long j = ij % 177 + 2;
    long k = (kl/169) % 178 + 1;
    long l = kl % 169;
    ...
}
```



(a) defekter Zufallszahlenalgorithmus



(b) korrekter Zufallszahlenalgorithmus

**Abbildung A.1** Zufallszahlenfolge bei Initialisierung mit defektem Seed (links) im Vergleich zu einer Zufallszahlenfolge bei korrektem Seed.

Eine Initialisierung mit einem festen vorgegebenen Seed ist sinnvoll, falls man bei der Fehlersuche in Programmen Testläufe mit identischen Zufallszahlen durchführen möchte. Im Allgemeinen ist aber ein identischer Seed bei mehreren Durchläufen der Simulation zu vermeiden, insbesondere wenn die Ergebnisse mehrerer Simulationsläufe mit identischem Setup für eine bessere Statistik addiert werden sollen.

Häufig wird die aktuelle Zeit in Sekunden seit 01.01.1970 00:00 UTC, wie sie von der C-Routine „time(NULL)“ zurückgegeben wird, als Initialisierungswert benutzt. Bei Parallelsimulationen auf einem Rechnercluster mit abgestimmter Zeit ist diese Initialisierung ungeeignet, insbesondere wenn die Uhrzeiten der einzelnen Rechner abgeglichen sind. Dies gilt natürlich auch für den gleichzeitigen Start (innerhalb einer Sekunde) mehrerer Simulation auf einem Mehrkernprozessor, wie sie in der aktuellen Computertechnologie mittlerweile Standard sind. Dieses Problem kann gelöst werden, indem man sich eine andere Quelle für die Anfangsinitialisierung des Seeds sucht. Geeignet ist dafür unter Linux zum Beispiel ein extra für Zufallszahlen vorhandenes Device „/dev/urandom“:

```
// initialise random
int fd; // file descriptor
long myRandom[2];
long mySeed[2];
fd = open("/dev/urandom", O_RDONLY); // opening device - unix only!!!
if (fd) {
    read(fd, myRandom, 2*sizeof(long)); // read from device
    if (myRandom[0] < 0) myRandom[0] = -myRandom[0];
    if (myRandom[1] < 0) myRandom[1] = -myRandom[1];
    mySeed[0] = (myRandom[0] % 900000000); // seed should be within [0..900 000 000]
    mySeed[1] = (myRandom[1] % 900000000);
}
else
{
    std::cerr << "/dev/urandom_not_available" << std::endl;
    mySeed[0] = (time(NULL) + getpid()) % 900000000;
    mySeed[1] = mySeed[0] + 1;
}
Random::generator().setSeed(mySeed[0]);
RAVAR::RandomVariable::randomGenerator->setSeed(mySeed[1]);
```

Für die Simulationsergebnisse dieser Arbeit wurde jeweils oben angegebene Initialisierung über „/dev/urandom“ verwendet.

## A.3 Evaluierung der Physik in EGS4/LSCAT

Die photonischen Prozesse in EGS4/LSCAT wurden bezüglich ihrer Energiebilanz überprüft. Mögliche Interaktionen eines Röntgenquants im medizinisch relevanten Energiebereich mit dem Sensormaterial sind der Photoeffekt, Comptonstreuung und Rayleighstreuung. Es ergaben sich die in den folgenden Unterkapiteln genannten Erkenntnisse.

### A.3.1 Photoeffekt

Wie erwartet ergibt sich die Energie des Photoelektrons aus der Differenz der Röntgenenergie und der Bindungsenergie des Photoelektrons vor dem Photoeffekt:

$$E_{\text{photo}} = E_{\gamma_{\text{in}}} - E_{\text{bind}} \quad (\text{A.1})$$

wobei

$E_{\text{photo}}$  = kinetische Energie des Photoelektrons

$E_{\text{bind}}$  = Bindungsenergie des herausgeschlagenen Elektrons

ist. In EGS4/LSCAT wurden teils die Wirkungsquerschnitte für Elektronen mehrerer Schalen zusammengefasst, so dass Photoelektronen mit Energien entsprechend folgender Bindungsenergien vorkommen:

$$E_{\text{bind}} \in \{E_K, E_{L_1}, E_{L_2}, E_{L_3}, E_{M_{\text{avg}}}, E_{N_{\text{avg}}}, E_{O_{\text{avg}}}\}.$$

### A.3.2 Comptoneffekt

Bei der Comptonstreuung wird ein Photon an einem freien oder leicht gebundenem Elektron gestreut und ändert seine Energie. Dabei wird ein Comptonelektron frei. Die kinetische Energie des Comptonelektrons ergibt sich zu:

$$E_{\text{compton}} = E_{\gamma_{\text{out}}} - E_{\text{bind}} \quad (\text{A.2})$$

wobei

$E_{\text{compton}}$  = kinetische Energie des Comptonelektrons

$E_{\gamma_{\text{out}}}$  = Energie des gestreuten Photons

$E_{\text{bind}}$  = Bindungsenergie des herausgeschlagenen Elektrons

Auch hier wurde bei den Elektronenschalen mit kleiner Bindungsenergie wieder der Wirkungsquerschnitt mehrerer energetisch nahe beieinander liegende Schalen zusammengefasst. Es kommen folgende Bindungsenergien vor:

$$E_{\text{bind}} \in \{E_K, E_{L_1}, \text{avg}E_{L_2, L_3}, E_{M_1}, \text{avg}E_{M_2, M_3}, \text{avg}E_{M_4, M_5}\}$$

### A.3.3 Sekundäreffekte: Fluoreszenz

Infolge des Photoeffekts bzw. der Comptonstreuung entsteht ein Loch in der Elektronenhülle des betroffenen Atoms. Dabei werden in EGS4/LSCAT für den Photoeffekt (welcher eher bei stark gebundenen Elektronen auftritt) die K- und L-Fluoreszenzen berücksichtigt. Die K-Fluoreszenzphotonen haben je nach Material Energien von beispielsweise etwa 1,8 keV bei Silizium bis zu etwa 85 keV für  $K_\beta$  bei Blei. Die Energie der L-Fluoreszenzphotonen liegt je nach Material im Bereich bis zu 15 keV. Fluoreszenzen aus weniger gebundenen Schalen werden vernachlässigt, da sie nur sehr kleine Energien haben, selbst für schwere Materialien wie Blei liegen sie unterhalb von 4 keV. Detaillierte Werte für diese Energien finden sich in Anhang F in „Table of Isotopes“ [29].

Da Comptonstreuung vorwiegend an äußeren Schalen auftritt, wurden in EGS4/LSCAT Fluoreszenzen in Folge von Comptonstreuung komplett vernachlässigt.

Die Energie des Fluoreszenzphotons ergibt sich als Differenz der Bindungsenergien der beiden beteiligten Schalen, zum Beispiel für eine  $K_{\alpha 1}$ -Fluoreszenz:  $E_\gamma = E_K - E_{L_3}$

$E_\gamma$  = Energie des Fluoreszenzphotons

$E_K$  = Energie des Orbitals, auf dem sich die Elektronenlücke befindet

$E_{L_3}$  = Bindungsenergie des in die Lücke fallenden Elektrons

Folgende Übergänge sind in EGS4/LSCAT berücksichtigt:

$K_{\alpha_1} = L_3 \rightarrow K$	$K_{\alpha_2} = L_2 \rightarrow K$	$K_{\alpha_3} = L_1 \rightarrow K$	
$K_{\beta_1} = M_3 \rightarrow K$	$K_{\beta_2} = N_2N_3 \rightarrow K$	$K_{\beta_3} = M_2 \rightarrow K$	
$K_{\beta_4} = N_4N_5 \rightarrow K$	$K_{\beta_5} = M_4M_5 \rightarrow K$		
$KO_{2,3} = O_2O_3 \rightarrow K$	$KP_{2,3} = P_2P_3 \rightarrow K$		
$L_{\beta_3} = M_3 \rightarrow L_1$	$L_{\beta_4} = M_2 \rightarrow L_1$	$L_{\beta_{10}} = M_4 \rightarrow L_1$	$L_{\beta_{9/1}} = M_5 \rightarrow L_1$
$L_{\gamma_2} = N_2 \rightarrow L_1$	$L_{\gamma_3} = N_3 \rightarrow L_1$	$L_{\gamma_{41}} = O_5 \rightarrow L_1$	$L_{\gamma_{42}} = O_3 \rightarrow L_1$
$L_{\beta_1} = M_4 \rightarrow L_2$	$L_{\gamma_1} = N_4 \rightarrow L_2$	$L_{\gamma_5} = N_1 \rightarrow L_2$	$L_{\gamma_6} = O_4 \rightarrow L_2$
$L_{\eta} = M_1 \rightarrow L_2$			
$L_{\alpha_1} = M_5 \rightarrow L_3$	$L_{\alpha_2} = M_4 \rightarrow L_3$	$L_{\beta_2} = N_5 \rightarrow L_3$	$L_{\beta_5} = O_4O_5 \rightarrow L_3$
$L_{\beta_6} = N_1 \rightarrow L_3$	$L_{\beta_{15}} = N_4 \rightarrow L_3$	$L_1 = M_1 \rightarrow L_3$	

### A.3.4 Sekundäreffekte: Auger

Das Auffüllen der freien Plätze in der Elektronenhülle kann auch strahlungslos erfolgen. Beim Augereffekt wird während des Relaxationsprozesses statt eines Fluoreszenzphotons ein weiteres Elektron emittiert, das Augerelektron. In EGS4/LSCAT wird dieser Prozess nur in Folge von Photoeffekt berücksichtigt. Besonders wahrscheinlich ist dieser Prozess bei leichten Elementen.

Die Energie des Augerelektrons ergibt sich wie folgt:

$$E_{\text{kin}} = E_K - E_L - E_M \quad (\text{A.3})$$

wobei

$E_{\text{kin}}$  = kinetische Energie des Augerelektrons

$E_K$  = Energie des Orbitals, auf dem sich die Elektronenlücke befindet

$E_L$  = Bindungsenergie des in die Lücke fallenden Elektrons

$E_M$  = Bindungsenergie des Augerelektrons

Folgende Übergänge sind in EGS4/LSCAT berücksichtigt, wobei wieder für einige Schalen gemittelte Bindungsenergien verwendet wurden ( $M_{\text{avg}}$ ,  $N_{\text{avg}}$  und  $O_{\text{avg}}$ ):

$K-L_1L_1$	$K-L_1L_2$	$K-L_1L_3$	$K-L_2L_2$	$K-L_2L_3$	$K-L_3L_3$	$K-L_1M$
$K-L_2M$	$K-L_3M$	$K-L_1N$	$K-L_2N$	$K-L_3N$	$K-MM$	$K-MN$
$L_1-MM$	$L_1-MN$	$L_1-MO$	$L_1-NN$	$L_1-NO$	$L_1-OO$	
$L_2-MM$	$L_2-MN$	$L_2-MO$	$L_2-NN$	$L_2-NO$	$L_2-OO$	
$L_3-MM$	$L_3-MN$	$L_3-MO$	$L_3-NN$	$L_3-NO$	$L_3-OO$	

### A.3.5 Übersicht über die bei photonischen Prozessen erzeugten Teilchen

Da in EGS4/LSCAT Fluoreszenzen und Augerelektronen mit sehr kleiner Energie vernachlässigt wurden, entstehen bei Photoeffekt, Comptonstreuung und Rayleighstreuung inklusive implementierten Sekundärprozessen die in Tabelle A.1 gezeigten Sekundärteilchen.

**Tabelle A.1** Anzahl der in EGS/LSCAT erzeugten Sekundärteilchen infolge von photonischen Wechselwirkungen

Interaktionstyp	Elektronen nach Interaktion	Photonen nach Interaktion
Photoeffekt	1 Photoelektron + 0-3 Augerelektronen	0-2 Fluoreszenzphotonen
Comptoneffekt	1 Comptonelektron	1 Photon
Rayleighstreuung	0	1 Photon

### A.3.6 Energiebilanz

Durch die oben genannten Vernachlässigungen bleiben Löcher in wenig gebundenen Schalen übrig, dessen Bindungsenergie in ROSI zur Wahrung der Energiebilanz innerhalb des Ereignisbaums in der Variable „MissingEnergy“ gebucht wird.

Die „MissingEnergy“ ist die von ROSI bei diskreten Interaktionen nicht an Sekundärteilchen weitergegebene Energie. Sie setzt sich zusammen aus:

- Bindungsenergie der verbleibenden Löcher (nach berücksichtigten Fluoreszenzen und Augereffekt)
- Energie der vernachlässigten Intraschalenübergänge [19] z.B.  $L_3 \rightarrow L_1$

In ROSI kann auf diese vernachlässigten Energiebeiträge über die Funktion „detector->getMissingEnergy(i)“ zugegriffen werden. Üblicherweise haben Photonen (und Elektronen) dieser Energien nur eine extrem kleine Reichweite. Diese Energie kann daher lokal am Interaktionsort des Photoeffektes bzw. der Comptonstreuung deponiert werden.

## A.4 Tipps zur Verwendung von Datencontainern

ROSI bietet zur Datenverwaltung von Histogrammen eine Variable „simDataContainerList“ vom Typ „HepAList<SimDataContainer>“, über welche man auf die während der Initialisierungsphase erzeugten Histogramme zugreifen kann. Dabei muss aber beim Zugriff immer explizit die laufende Histogrammnummer angegeben werden. Bei Verwendung einer großen Anzahl an Histogrammen kann es daher leicht passieren, dass durch einen Programmierfehler auf das falsche Histogramm zugegriffen wird.

Beim Arbeiten mit der „simDataContainerList“ in ROSI muss sich der Benutzer wie im bei ROSI selbst mitgelieferten Beispiel merken, welcher Listenindex für welche Datenstruktur (Hist1D, Hist2D, Hist3D, Sum1D, Sum2D oder Sum3D) steht und wofür er diese benutzen möchte. Zur Vereinfachung dieser Zugriffe kann man Integervariablen mit aussagekräftigen Namen definieren und diese für den Zugriff auf die Datenstrukturen verwenden.

### A.4.1 Definition von aussagekräftigen Namen für die Datenstrukturen

Für jede mit einem Namen zu versehenende Datenstruktur muss eine Integervariable im globalen Teil von *rosi.cpp* angelegt werden. Es empfiehlt sich, in diesem Namen auch den Datentyp mit unterzubringen, so weiss man gleich, wie man casten muss.

```

...
//=====global available histogram indices=====
int iHist1D_spectrum;
int iHist2D_PositionOf1stIA;
int iHist3D_counts_by_threshold;
int iSum2D_detector;

Rosi::Rosi()
{...}

int Rosi::initialiseSetup()
{...}

```

### A.4.2 Initialisierung der Datenstrukturen

Am Anfang von „Rosi::initialiseSimDataContainers()“ muss ein Zähler für die angelegten Datenstrukturen definiert und auf den Wert 0 initialisiert werden. Die gewünschten Datenstrukturen können dann mit dem append-Befehl wie gewohnt erzeugt werden. Nach jedem append-Befehl muss die laufende Nummer (=Zählerstand) dem Namen der Struktur zugewiesen und der Zähler erhöht werden.

Beispiel:

```

int Rosi::initialiseSimDataContainers()
{
    int isimDataContainerList=0;

    simDataContainerList.append(new Histogram1D(100, 0.0 keV , 100.0 keV ));
    iHist1D_spectrum=isimDataContainerList;          isimDataContainerList++;

    simDataContainerList.append(new Histogram2D(
        100, -length/2, length/2,100, -width/2, width/2));
    iHist2D_PositionOf1stIA=isimDataContainerList;  isimDataContainerList++;

    simDataContainerList.append(new Histogram3D(
        numbins, -0.5*binsize, (numbins-0.5)*binsize,
        NumPixelx,0, double(NumPixelx),
        NumPixely,0, double(NumPixely)));
    iHist3D_counts_by_THL=isimDataContainerList; isimDataContainerList++;

    simDataContainerList.append(new Sum2D(
        NumPixelx,0, double(NumPixelx),
        NumPixely,0, double(NumPixely)));
    iSum2D_detector=isimDataContainerList;          isimDataContainerList++;

    return 0;
}

```

Somit muss man sich nicht mehr die zur Datenstruktur gehörende Nummer merken und es ist auch kein Problem, nachträglich in bestehendem Quellcode eine Datenstruktur irgendwo zwischen den anderen zu definieren. Bisher musste man dann immer darauf achten, in „Rosi::simulatePackage()“ und „Rosi::saveSimData()“ auch auf das richtige Array zuzugreifen.

### A.4.3 Zugriff auf die Datenstrukturen

Als Arrayindex kann jetzt einfach der Name der Datenstruktur verwendet werden. Es muss wie gewohnt darauf geachtet werden, am Anfang der Zeile richtig zu casten - hier im Beispiel: (Sum2D \*).

```
int Rosi::simulatePackage(int packageSize)
{...
  *((Sum2D *) simDataContainerList[iSum2D_detector]) << x << y << E;
  ...
}
```

Durch Integration des Datentyps in den Variablennamen lassen sich Fehler beim Histogrammzugriff leichter aufspüren.

#### A.4.4 Ausgabe der Datenstrukturen

Bei der Ausgabe der Datenstrukturen muss wieder über den Namen auf die Struktur zugegriffen werden und richtig gecastet werden. Dafür gibt es nun die folgenden Routinen, die dies erleichtern. Dazu müssen die in Kapitel A.4.5 abgedruckten Routinen vor „int Rosi::saveSimData()“ in *rosi.cpp* zur Verfügung gestellt werden.

Die Ausgabe selbst kann dann wie folgt aufgerufen werden:

```
int Rosi::saveSimData()
{
  output_iHist1D("iHist1D_spectrum.dat", iHist1D_spectrum, simDataContainerList);
  output_iHist2D("iHist2D_PositionOf1stIA.dat", iHist2D_PositionOf1stIA, simDataContainerList);
  { // output with user settings
    int outstreamFilter_backup=Histogram3D::outstreamFilter;
    Histogram3D::outstreamFilter = Histogram3D::CONTENT + Histogram3D::CHANNEL1 +
                                   Histogram3D::CHANNEL2 + Histogram3D::CHANNEL3;
    output_iHist3D("iHist3D_counts_by_THL.dat", iHist3D_counts_by_THL, simDataContainerList);
    Histogram3D::outstreamFilter = outstreamFilter_backup;
  }
  output_iSum2D("detector.dat", iSum2D_detector, simDataContainerList);
}
```

Die Ausgaberroutinen benötigen als Parameter den Ausgabedateinamen sowie den am Anfang für die Datenstruktur festgelegten Namen, der den für die Liste wichtigen Index enthält, sowie die Liste selbst (immer „simDataContainerList“). Das Ausgabeformat kann wie im Beispiel für iHist3D\_counts\_by\_THL gezeigt geändert werden. Das Backup wird dazu benötigt, dass andere iHist3D-Strukturen im Standardformat ausgegeben werden.

#### A.4.5 Hilfsroutinen für die Ausgabe der Datenstrukturen

```
//===== easy output routines =====
void output_iHist1D(string filename, int iHist1D, HepAList<SimDataContainer> simDataContainerList)
{
  // output of iHist1D to filename
  std::ofstream file;
  file.open(filename.c_str());
  if (!file) {std::cerr << "rosi::saveSimData:_file_error!_"("<<filename<<")\n";}
  else {
    file << *((Histogram1D *) (simDataContainerList[iHist1D]));
    file.close();
  }
  cout << "Data_written_to_" << filename << std::endl;
}

void output_iHist2D(string filename, int iHist2D, HepAList<SimDataContainer> simDataContainerList)
{
  // output of iHist2D to filename
  std::ofstream file;
  file.open(filename.c_str());
  if (!file) {std::cerr << "rosi::saveSimData:_file_error!_"("<<filename<<")\n";}
```

```

    else {
        file << *((Histogram2D *) (simDataContainerList[iHist2D]));
        file.close();
    }
    cout << "Data_written_to_" << filename << std::endl;
}

void output_iHist3D(string filename, int iHist3D, HepAList<SimDataContainer> simDataContainerList)
{
    // output of iHist3D to filename
    std::ofstream file;
    file.open(filename.c_str());
    if (!file) {std::cerr << "rosi::saveSimData:_file_error!_"<<filename<<")\n";}
    else {
        file << *((Histogram3D *) (simDataContainerList[iHist3D]));
        file.close();
    }
    cout << "Data_written_to_" << filename << std::endl;
}

void output_iSum1D(string filename, int iSum1D, HepAList<SimDataContainer> simDataContainerList)
{
    // output of iSum1D to filename
    std::ofstream file;
    file.open(filename.c_str());
    if (!file) {std::cerr << "rosi::saveSimData:_file_error!_"<<filename<<")\n";}
    else {
        file << *((Sum1D *) (simDataContainerList[iSum1D]));
        file.close();
    }
    cout << "Data_written_to_" << filename << std::endl;
}

void output_iSum2D(string filename, int iSum2D, HepAList<SimDataContainer> simDataContainerList)
{
    // output of iSum2D to filename
    std::ofstream file;
    file.open(filename.c_str());
    if (!file) {std::cerr << "rosi::saveSimData:_file_error!_"<<filename<<")\n";}
    else {
        file << *((Sum2D *) (simDataContainerList[iSum2D]));
        file.close();
    }
    cout << "Data_written_to_" << filename << std::endl;
}

void output_iSum3D(string filename, int iSum3D, HepAList<SimDataContainer> simDataContainerList)
{
    // output of iSum3D to filename
    std::ofstream file;
    file.open(filename.c_str());
    if (!file) {std::cerr << "rosi::saveSimData:_file_error!_"<<filename<<")\n";}
    else {
        file << *((Sum3D *) (simDataContainerList[iSum3D]));
        file.close();
    }
    cout << "Data_written_to_" << filename << std::endl;
}

```

# B PEGS - Materialfiles für ROSI

## Inhaltsangabe

---

B.1	Erzeugung einer Materialdatei . . . . .	123
B.2	Wahl der Parameter für Comptonstreuung in PEGS . . . . .	125
B.3	Wahl des verwendeten Modells für die „Electron Impact Ionisation“ . . . . .	125
B.4	Wahl der Parameter für Stoßbremsvermögen in PEGS . . . . .	126
B.5	Wahl der Parameter für Strahlungsbremsvermögen IAPRIM	126

---

Das PEGS4 System (Präprozessor zu EGS4, engl. „Preprocessor for EGS“) dient zur Berechnung der in EGS4 verwendeten Materialdateien. Diese enthalten vorberechnete Wirkungsquerschnitte und Verzweigungswahrscheinlichkeiten für die implementierten Physikroutinen.

Für die Niedrigenergieerweiterung LSCAT wurde dieses Programm vom KEK in den Veröffentlichungen [61] und [59] so erweitert, dass die für die dazugekommenen physikalischen Effekte nötigen zusätzlichen Wirkungsquerschnitte und Verzweigungswahrscheinlichkeiten enthalten sind. Dieses modifizierte Programm nennt sich PEGS4NB und muss für die Erstellung von Materialdateien für Simulationen mit ROSI verwendet werden.

Eine ausführliche Beschreibung der Verwendung von PEGS findet sich in Anhang 3 von [58], die Dokumentation für die erweiterte Version PEGS4NB in [61]. Im Folgenden soll ein einfaches Beispiel der Verwendung von PEGS gezeigt werden, wobei die für diese Arbeit relevanten Einstellungen kurz beschrieben werden.

## B.1 Erzeugung einer Materialdatei

Zur Definition der Materialeigenschaften und der Auswahl der zu verwendenden Physikmodelle wird eine Konfigurationsdatei benötigt. Abbildung B.1 zeigt ein Beispiel dieser Datei zur Erzeugung der Materialdatei für CdTe mit einer Dichte von  $5.85\text{g/cm}^2$ , wie sie für alle CdTe-Simulationen dieser Arbeit verwendet wurde.

Die erste Zeile enthält die Angabe, um welchen Typ Material es sich handelt. Es gibt die Möglichkeit, Elemente (ELEM), Verbindungen (COMP) und Mischungen (MIXT) zu erstellen.

Zeile zwei enthält neben Angaben zur Stöchiometrie des Materials (Namen der Elemente in Zeile 4, NE, RHO, PZ(i) in Zeile 2) weitere Parameter zur Auswahl der verwendeten theoretischen Formeln bzw. experimentellen Daten. Mit den Angaben IAPRIM, IMPACT, IXRAY, IBOUND, INCOH, ICPROF und IRAYL kann jeweils die für einen physikalischen Effekt verwendete Datengrundlage ausgewählt werden. Tabelle B.1 listet die wählbaren Modelle auf.

**Tabelle B.1** Übersicht über die Möglichkeiten in PEGS4NB, verschiedene theoretische Modelle bei der Materialdatenerzeugung zu benutzen. Mit (\*) markierte Einstellungen dienen nur für Testzwecke. Quelle der Optionen: PEGS4 User Manual [58], Anhang 3 sowie [62] und [59]

Option	Wert	Bedeutung
IAPRIM	0-1	Wahl der Wirkungsquerschnitte des Strahlungsbremsvermögens
IAPRIM	0	keine Anpassung an ICRU-37-Daten, nur theoretisches Modell
IAPRIM	1	Verwendung von ICRU-37-Daten
IBOUND	0-1	Wahl des Comptonwirkungsquerschnitts (frei=0, gebunden=1)
ICPROF	0-4	Wahl des Comptonprofils (ICPROF>0 erfordert IBOUND=1 und INCOH=1)
ICPROF	0	kein Comptonprofil
ICPROF	1	kumulative Dichtefunktion (*)
ICPROF	2	Dichtefunktion (*)
ICPROF	3	kumulatives Comptonprofil getrennt nach Schalen
ICPROF	4	Comptonprofil getrennt nach Schalen
IMPACT	0-6	Wahl des Wirkungsquerschnitts für „Electron Impact Ionisation“ (EII)
IMPACT	0	keine Ionisierung von K-Schalenelektronen durch Elektron-Elektron-Streuung
IMPACT	1	Formel nach Casnati
IMPACT	2	Formel nach Kolbenstvedt revised
IMPACT	3	Formel nach Kolbenstvedt
IMPACT	4	Formel nach Jakoby
IMPACT	5	Formel nach Gryzinski
IMPACT	6	Formel nach Gryzinski relativistisch
INCOH	0-1	Schalter, ob eine inkohärente Streufunktion bei Comptonstreuung benutzt werden soll (1=ja)
IRAYL	0-3	Schalter, ob und wie Materialdaten für Rayleighstreuung erzeugt werden sollen (1=ja)
IRAYL	0	keine kohärente Streuung
IRAYL	1	Berechnung der Rayleighwirkungsquerschnitte
IRAYL	2	Berechnung der Rayleighwirkungsquerschnitte mit Interferenzeffekt
IRAYL	3	Ausgabe von X-F2(x,Z) (*)
IXRAY	0-1	Schalter, ob der Anteil am Wirkungsquerschnitt des photoelektrischen Effekts bei Verbindungen/Mischungen für jedes Element getrennt berechnet werden soll (1=ja)

```

COMP
_&INP_IAPRIM=1,_IMPACT=4,_IXRAY=1,_IBOUND=1,_INCOH=1,_ICPROF=-3,_IRAYL=1,_NE=2,_
  RHO=5.85,_PZ(1)=1,_PZ(2)=1_&END
CdTe585_
CD_TE
ENER
_&INP_AE=0.512,_UE=25.511,_AP=0.0001,_UP=25._&END
PWLF
_&INP_&END
DECK
_&INP_&END

```

**Abbildung B.1** Beispiel einer Konfigurationsdatei für PEGS4NB, hier zur Erzeugung der Materialdatei CdTe585.mat.

Mit den Optionen AE, UE, AP und UP wird schließlich der Energiebereich definiert, für welchen die Wirkungsquerschnitte mit einer logarithmischen Abtastung vorberechnet werden sollen. Die Angaben sind jeweils in Einheiten von MeV.

Im Rahmen dieser Arbeit wurden mehrere dieser Parameter so gewählt, dass jeweils das für den diagnostisch medizinisch relevanten Energiebereich bis 200keV am Besten passende theoretische Modell aus den vorhandenen Modellen ausgewählt wurde.

## B.2 Wahl der Parameter für Comptonstreuung in PEGS

Für die Erzeugung der Materialdaten wurde die in [62] empfohlene Einstellung IBOUND=1, INCOH=1 und ICPROF=-3 verwendet, um die Dopplerverbreiterung [63] bei der Comptonstreuung zu berücksichtigen. Ein negatives Vorzeichen bei ICPROF sorgt dafür, dass die schalenweisen Comptonprofile aus den zur Kernladungszahl  $Z$  gehörenden Datei  $z###.dat$  eingelesen werden.

## B.3 Wahl des verwendeten Modells für die „Electron Impact Ionisation“

Wenn schnelle Elektronen das Material durchdringen, können diese an den im Material vorhandenen freien und gebundenen Elektronen streuen. Diese Streuung hat in LSCAT den Interaktionstyp MOLLER. Die Wahrscheinlichkeit, dass bei einem MOLLER-Ereignis die Interaktion mit einem K-Schalen-Elektron stattgefunden hat, wird von PEGS über die Materialdatei zur Verfügung gestellt. Zur Berechnung dieser Wahrscheinlichkeit in Abhängigkeit von der Energie stehen verschiedene theoretische Modelle zur Verfügung. Eine genaue Beschreibung findet sich in [64]. Für den in dieser Arbeit relevanten Energiebereich bis 200keV wurde die dafür gut passende Option IMPACT=4 (Jakoby) gewählt.

Die genauere Bestimmung dieser Wirkungsquerschnitte und die Entwicklung besserer theoretischer Modelle ist Gegenstand aktueller Forschung. Beispielsweise wurde 2006 von Uddin [65] eine verbesserte Kolbenstvedt-Formel für die MOLLER-Streuung mit einem K-Schalen-Elektron veröffentlicht.

Im Jahre 2007 lieferte Haque in [25] eine weiter verallgemeinerte Version nach, welche für MOLLER-Streuung mit beliebigen gebundenen Elektronen aus der K-,L- bzw. M-Schale

gilt. Diese Modellierung erfordert größere Änderungen an PEGS4NB und der LSCAT-Implementierung in LSCAT-GISMO und wurde nicht implementiert.

## **B.4 Wahl der Parameter für Stoßbremsvermögen in PEGS**

Der Energieverlust von Elektronen bzw. Positronen beim Durchqueren von Materie ( $dE/dx$ ) wird in PEGS mit einer Formulierung nach Berger und Seltzer (ähnlich der Bethe-Bloch-Formel) berechnet. Dabei kann auch die Dichtekorrektur unter Verwendung von Sternheimer-Seltzer-Berger-Koeffizienten [66] berücksichtigt werden, wodurch das Stoßbremsvermögen für kleine Energien besser beschrieben wird. Diese Koeffizienten sind in PEGS4NB für alle Elemente und viele Verbindungen verfügbar. Um die Verwendung der Korrektur zu aktivieren, muss in Zeile 3 ab Spalte 31 das korrekte Schlüsselwort angegeben werden, im Beispiel von Abbildung B.1 lautet dieses „CADMIUM TELLURIDE“.

## **B.5 Wahl der Parameter für Strahlungsbremsvermögen IAPRIM**

Laut [67] ergeben sich für niedrige Energien wie z.B. 80 keV bei der Einstellung IAPRIM=1 gute Übereinstimmungen mit den ICRU-37-Daten [68] für das Strahlungsbremsvermögen (engl. „radiative stopping power“). Daher wurde diese Einstellung auch für die Erzeugung unserer Materialdaten verwendet.

# C Medipix-Detektorklasse für ROSI zur Simulation photonenzählender Detektoren

## Inhaltsangabe

---

C.1 Implementierte Physik . . . . .	127
C.2 Dokumentation des Benutzerinterface . . . . .	128

---

Zur Simulation von photonenzählenden Detektoren wurde im Rahmen dieser Arbeit eine C++-Klasse entwickelt, welche ausgehend von der Energiedeposition über Berücksichtigung der in den Kapiteln 6 und 7 beschriebenen physikalischen Eigenschaften beim Ladungsträgertransport, der Signalentstehung und den Rauscheigenschaften der Elektronik die Detektorantwort generiert. Es kann gewählt werden welche Effekte berücksichtigt werden. Dadurch können sowohl idealisierte als auch realistischere Ergebnisse erhalten werden und der Einfluss einzelner Effekte auf die Detektorantwort simuliert werden. Die Detektorklasse kann vom Anwender in der Datei *rosi.cpp* initialisiert und verwendet werden. Dort werden auch die Röntgen- bzw. Elektronenquelle sowie absorbierende Objekte zwischen Quelle und Detektor definiert. So kann in Simulationen eines bildgebenden Systems ein photonenzählender Detektor auf einfache Weise verwendet werden.

## C.1 Implementierte Physik

In ROSI selbst implementiert sind:

- Wechselwirkung von Photonen mit Materie: Photoeffekt, Comptonstreuung, Rayleighstreuung sowie Sekundäreffekte
- Wechselwirkung von Elektronen mit Materie: Bremsstrahlung, Møllerstreuung und Energiedeposition

Durch den Befehl *trigger()* wird ein Photon bzw. Elektron aus der in der Simulation *rosi.cpp* definierten Quelle emittiert und durch die Welt propagiert. Treffen Teilchen auf den Detektor, wird innerhalb der Simulation ein Ereignisbaum zur Verfügung gestellt, welcher Angaben über den Pfad der Teilchen im Sensormaterial und die dazugehörige Energiedeposition entlang dieses Pfades enthält.

Ausgehend von der lokalen Energiedeposition ist die Detektorklasse dafür zuständig, den Ladungsträgertransport, die Signalentstehung und den Einfluss der Elektronik hinreichend genau zu modellieren.

Die in der Detektorklasse implementierten Prozesse sind:

- Variation der Anzahl der erzeugten Elektron-Loch-Paare entsprechend dem Fano-Rauschen.

- Rekombination von Ladungsträgern entsprechend dem  $\mu\tau$ -Produkt für einen konstanten vorgegebenen Wert des  $\mu\tau$ -Produktes.
- Drift entsprechend einer vorberechneten tiefenabhängigen Driftzeitabelle, wahlweise unter Berücksichtigung eines aufgrund einer intrinsischen Dotierung verkippten elektrischen Feldes. Eine beliebige tiefenabhängige Feldverteilung bzw. eine Sättigung der Mobilität bei hohen Feldern kann über eine extern vorberechnete Driftzeitabelle für Elektronen- und Löchertransport berücksichtigt werden.
- Diffusion der Ladungsträger während der Driftzeit. Dabei wird eine Diffusion in z-Richtung vernachlässigt.
- Repulsion der Ladungsträger während der Driftzeit. Dabei wird eine Repulsion in z-Richtung vernachlässigt.
- Influenzierung der Ladungsträger während der Driftzeit. Dabei wird wahlweise eine Berechnung des Wichtungspotentials mit der Methode von Castoldi oder ein vorberechnetes tiefenabhängiges Wichtungspotential verwendet. Die laterale Abhängigkeit des Wichtungspotentials wird vernachlässigt, um Rechenzeit zu sparen. Bei der Berechnung der influenzierten Signale kann eine „Integrationszeit“ beachtet werden, innerhalb welcher der ladungsempfindliche Verstärker empfindlich ist. Die aktuelle Implementierung verwendet hier eine wählbare aber für alle Ereignisse feste Zeit. Typische Werte liegen bei etwa 50ns. Tatsächlich hängt die Empfindlichkeit der Elektronik bezüglich des Löcherstroms auch von der Signallänge des Elektronenstroms ab.
- Berücksichtigung von Rauschbeiträgen der Elektronik.

## C.2 Dokumentation des Benutzerinterface

Die meisten von der Detektorklasse zur Verfügung gestellten Methoden sind in der nachfolgenden Tabelle aufgelistet.

**Tabelle C.1** Methoden der Klasse zur Simulation photonenzählender Detektoren

Methode	Erklärung
<code>PhotonCountingDetector::PhotonCountingDetector( std::ostream *LOGFILE = &amp;std::cout )</code>	Konstruktor der Klasse, legt Standardvariablen fest und initialisiert Zufallsvariablen.
<code>PhotonCountingDetector::~~ PhotonCountingDetector()</code>	Destruktor der Klasse, gibt allozierten Speicher wieder frei.

**Tabelle C.1** Methoden der Klasse zur Simulation photonenzählender Detektoren

Methode	Erklärung
<pre><b>bool PhotonCountingDetector::setSensorVolume(double pitchx, double pitchy, int numx, int numy, double thickness, std::string material)</b></pre>	<p>Erstellt quaderförmiges Sensorvolumen mit Kantenlängen <math>\text{pitchx} * \text{numx}</math>, <math>\text{pitchy} * \text{numy}</math> und Dicke <math>\text{thickness}</math>, welches aus dem Material <math>\text{material}</math> besteht.</p>
<pre><b>void PhotonCountingDetector::setSensorMaterialProperties(double sensor_epsilon, double sensor_pairenergy, double sensor_fanofactor, double sensor_mu_inm2perVs, double sensor_mutau_inm2perV, double sensor_diffcoeff_incm2pers, double sensor_muh_inm2perVs, double sensor_mutauh_inm2perV, double sensor_diffcoeffh_incm2pers)</b></pre>	<p>Festlegen der für Drift, Diffusion und Lebenszeit benötigten Sensoreigenschaften.</p> <p><math>\text{sensor\_epsilon}</math> = relative Dielektrizitätskonstante</p> <p><math>\text{sensor\_pairenergy}</math> = effektive Ionisierungsenergie zur Erzeugung eines Elektron-Loch-Paares</p> <p><math>\text{sensor\_fanofactor}</math> = Fanofaktor des Sensormaterials</p> <p><math>\text{sensor\_mu\_inm2perVs}</math> = Mobilität in <math>\frac{m^2}{Vs}</math> der zur pixelierten Elektrode driftenden Ladungsträgersorte</p> <p><math>\text{sensor\_mutau\_inm2perVs}</math> = Mobilität-Lebenszeit-Produkt in <math>\frac{m^2}{Vs}</math> der zur pixelierten Elektrode driftenden Ladungsträgersorte</p> <p><math>\text{sensor\_diffcoeff\_incm2pers}</math> = Diffusionskoeffizient in <math>cm^2/s</math> der zur pixelierten Elektrode driftenden Ladungsträgersorte. Aufgrund des Zusammenhangs <math>D_e = (k_B T / q) \cdot \mu_e</math> (mit Diffusionskonstante <math>D_e</math>, Boltzmannkonstante <math>k_B</math>, Temperatur <math>T</math>, Elementarladung <math>q</math> und Mobilität <math>\mu_e</math>) kann hiermit indirekt die Temperatur eingestellt werden. Berücksichtigt wird dieser Wert jedoch nur bei der Diffusion.</p> <p><math>\text{sensor\_muh\_inm2perVs}</math> = Mobilität in <math>\frac{m^2}{Vs}</math> der zur unpixelierten Elektrode driftenden Ladungsträgersorte.</p> <p><math>\text{sensor\_mutauh\_inm2perVs}</math> = Mobilität-Lebenszeit-Produkt in <math>\frac{m^2}{Vs}</math> der zur unpixelierten Elektrode driftenden Ladungsträgersorte.</p> <p><math>\text{sensor\_diffcoeffh\_incm2pers}</math> = Diffusionskoeffizient in <math>cm^2/s</math> der zur unpixelierten Elektrode driftenden Ladungsträgersorte.</p>

**Tabelle C.1** Methoden der Klasse zur Simulation photonenzählender Detektoren

---

**Methode**

Erklärung

---

---

**void PhotonCountingDetector::setDataContainerList(HepAList<SimDataContainer> list)**

Übergeben der Speicheradresse der Liste der Datenkontainer aus *rosi.cpp*.

---

**void PhotonCountingDetector::setSensorVoltage(double voltage)**

Einstellen des Betrags der Vorspannung (engl. „bias voltage“) des Detektors in Volt.

---

**void PhotonCountingDetector::setDrifttimeToPixelatedElectrode  
(RAVAR::ProbabilityDensityFunction\* drifttimewithdoping )**

Übergabe einer Driftzeit-Tabelle an die Detektor-Klasse für die zur pixelierten Elektrode driftende Ladungsträgersorte. Dadurch kann ein aufgrund von Dotierung beeinflusstes elektrisches Feld mit seinen Auswirkungen auf die Driftzeit berücksichtigt werden.

---

**void PhotonCountingDetector::setDrifttimeToNonpixelatedElectrode  
(RAVAR::ProbabilityDensityFunction\* drifttimewithdoping )**

Analog für die zur unpixelierten Elektrode driftende Ladungsträgersorte.

---

**void PhotonCountingDetector::setRepulsion(double sensor\_mu\_inm2perVs, double  
sensor\_epsilon, double sensor\_pairenergy, double sensor\_repulsion\_changemodelatenergy)**

Festlegen der für die Berechnung der Repulsion benötigten Sensoreigenschaften.

sensor\_mu\_inm2perVs = Mobilität in  $\frac{m^2}{Vs}$

sensor\_epsilon = relative Dielektrizitätskonstante

sensor\_pairenergy = effektive Ionisierungsenergie zur Erzeugung  
eines Elektron-Loch-Paares

sensor\_repulsion\_changemodelatenergy = Energie  $E_g$  für den Wechsel des verwendeten  
Repulsionsmodells (zylindrisch für  $E > E_g$ ,  
sphärisch für  $E < E_g$ )

---

**void PhotonCountingDetector::setWeightingPotential(RAVAR::InterpolatedPDF\*  
weightingpotential)**

Übergabe eines Wichtungspotentials an die Detektor-Klasse. Das Wichtungspotential muss hier als sensortiefenabhängige Nachschlagetabelle vorliegen, gekapselt in einem Objekt vom Typ „RAVAR::ProbabilityDensityFunction\*“.

---

**Tabelle C.1** Methoden der Klasse zur Simulation photonenzählender Detektoren

Methode	Erklärung
<b>void PhotonCountingDetector::setIntegrationtime(double integrationtime_ins)</b>	Einstellen des Ladungssammlungszeit der Pixelelektronik. Dieser Wert gibt die maximale Driftzeit an, während welcher influenzierte Signale berücksichtigt werden. Implementiert ist sie als scharfe Integrationszeit, unabhängig vom Absorptionort des Photons.
<b>void PhotonCountingDetector::enableMPX3_CS_mode()</b>	Anschalten des Ladungssummiermodus wie beim Medipix3. In der Simulation kommunizieren benachbarte Pixel wie beim Medipix3-Ladungssummiermodus, unabhängig von der Pixelgröße.
<b>void PhotonCountingDetector::setNoise(double NoiseConst)</b>	Festlegen der Standardabweichung eines gaussartigen energieunabhängigen Rauschbeitrages.
<b>void PhotonCountingDetector::setNoiseMPX3_gainVarSummingMap(double MPX3_gainVarSummingSigma)</b>	Berechnung einer Nachschlagetabelle, die die bauartbedingte Variation der Verstärkungsfaktoren für die einzelnen Pixel berechnet. Dies ist ein ortabhängiger Rauschbeitrag.
<b>void PhotonCountingDetector::setNoiseMPX3_gainVarSummingMap(std::string filename)</b>	Laden einer vorberechneten MPX3_gainVarSummingMap.
<b>void PhotonCountingDetector::setNoiseMPX3_currentcopyVariationMap(double MPX3_currentcopyVarSigma)</b>	Berechnung einer Nachschlagetabelle, die die bauartbedingte Variation der einzelnen Stromkopien, die von jeder Pixelelektronik an die vier Ecken gesendet werden. Dies ist ein ortabhängiger Rauschbeitrag.
<b>void PhotonCountingDetector::setNoiseMPX3_currentcopyVariationMap(std::string filename)</b>	Laden einer vorberechneten MPX3_currentcopyVariationMap.
<b>void PhotonCountingDetector::setNoiseMPX3_gainVarSummingSigma_time(double MPX3_gainVarSummingSigma_time)</b>	Festlegen der Standardabweichung des zeitlichen Rauschens des Verstärkungsfaktors.

**Tabelle C.1** Methoden der Klasse zur Simulation photonenzählender Detektoren

<b>Methode</b>	<b>Erklärung</b>
<b>void PhotonCountingDetector::setNoiseMPX3_currentcopyVarSigma_time(double MPX3_currentcopyVarSigma_time)</b>	Festlegen der Standardabweichung des zeitlichen Rauschens des Stromkopierauschens.
<b>void PhotonCountingDetector::rotateX_indeg(double angle_indeg);</b>	Dreht den gesamten Detektor um die X-Achse der Welt um angle_indeg Grad. Analog stehen Drehroutinen um die Y- und Z-Achse zur Verfügung. Mehrere Drehungen können hintereinander ausgeführt werden.
<b>void PhotonCountingDetector::rotateX_inrad(double angle_inrad);</b>	Analog für Drehungen im Bogenmaß.
<b>void PhotonCountingDetector::move(const Vector&amp;);</b>	Translation des Detektors in der Simulationswelt.
<b>void PhotonCountingDetector::addToWorld(World *xRayLab)</b>	Hinzufügen des Detektors zur Welt, idealerweise nachdem alle Einstellungen vorgenommen wurden. Mindestens „setSensorVolume“ und ggf. „setAssemblyVolume“ müssen zuvor aufgerufen werden.
<b>void PhotonCountingDetector::createDetectorView(ViewList &amp;v11)</b>	Es werden die erstellten Volumina für Sensor und Assembly zur Liste der darzustellenden Objekte hinzugefügt. Visuell überprüfen lässt sich die geometrische Anordnung durch Compilieren von <i>rosi.cpp</i> mit dem Befehl „make GUI“ und anschließendem Starten der ausführbaren Datei.
<b>void PhotonCountingDetector::setAssemblyVolume(MPX2_LengthOfPixel, MPX2_ASIC_width, MPX2_SilverGlue_width, MPX2_GroundPlate_width, MPX2_bumpbond_width)</b>	Hinzufügen der hinter dem Sensor liegenden Detektorbestandteile: Bondperlen, ASIC, silberhaltiger Wärmeleitkleber modelliert als Silberschicht, Grundplatte
<b>void PhotonCountingDetector::setTHL(double energy)</b>	Festlegen der Energie der Vergleichsschwelle.

**Tabelle C.1** Methoden der Klasse zur Simulation photonenzählender Detektoren

Methode	Erklärung
<code>void PhotonCountingDetector::getnumberofpixelswithcharge()</code>	Anzahl der Pixel, die eine die Vergleichsschwelle übertreffende Ladung gesammelt haben.
<code>void PhotonCountingDetector::getpixelwithchargeX(int n)</code>	X-Koordinate innerhalb der Pixelmatrix des n-ten Pixels, welcher Ladung gesammelt hat. Analog für Y.

Die im Rahmen dieser Arbeit entwickelte Klasse kann beispielsweise wie folgt verwendet werden:

- Im globalen Teil von *rosi.cpp* wird ein Pointer auf die spätere Instanz der Klasse angelegt:

```
PhotonCountingDetector* Medipix2;
```

- In der Prozedur *int Rosi::initialiseSetup()* wird die Instanz der Klasse angelegt und initialisiert:

```
xRayDetector = new TreeDetector(10000);
Medipix2 = new PhotonCountingDetector();
Medipix2->setSensorVolume(55 mm,55 mm,256,256,300 mm,"Si");
Medipix2->setSensorMaterialProperties( 11.7, 3.62, 0.06,
                                     0.1350, 1E-4, 34.9,
                                     0.0450, 1E-4, 11.633);

if (MPX2_assembly_flag)
    Medipix2->setAssemblyVolume(55 mm, 700 mm, 20 mm, 17.5 mm, 16 mm);
Medipix2->rotateY_indeg(45);
Medipix2->move(Vector(1 cm,1 cm,5 cm));
Medipix2->setDetector(xRayDetector);
Medipix2->addToWorld(xRayLab);
#ifdef WITH_GUI
    ViewList *v11b = new ViewList();
    Medipix2->createDetectorView(*v11b);
    viewListList.append(v11b);
#endif // WITH_GUI
//Medipix2->showBoxCoordinates();
//std::cout << Medipix2 << std::endl;
Medipix2->setSensorVoltage(150);
Medipix2->setDrifttimeToPixelatedElectrode(drifttimewithdoping);
Medipix2->setDrifttimeToNonpixelatedElectrode(drifttimewithdopingh);
Medipix2->setDataContainerList(simDataContainerList);
Medipix2->setTHL(15 keV);
Medipix2->setIntegrationtime(50E-9);
Medipix2->setRepulsion(0.1350, 11.7, 3.62, 10);
Medipix2->setWeightingPotential(weightingpotential);
Medipix2->enableMPX3_CS_mode();
Medipix2->setNoiseMPX3_gainVarSummingMap(MPX3_gainVarSummingSigma);
Medipix2->setNoiseMPX3_currentcopyVariationMap(MPX3_currentcopyVarSigma);
```

```
Medipix2->setNoiseMPX3_currentcopyVarSigma_time(MPX3_currentcopyVarSigma_time);  
...
```

- In der Prozedur *int Rosi::simulatePackage(int packageSize)* kann sie schließlich verwendet werden:

```
trigger(); // emit photon from source and generate an EventTree  
//Medipix2->printEventTree(std::cout);  
Medipix2->generateResponse();  
for(int n=0; n < Medipix2->getNumberOfPixelsWithCharge(); n++){  
    (*(Histogram2D *) _simDataContainerList[iHist2D_image])  
        << double(Medipix2->getPixelWithChargeX(n))  
        << double(Medipix2->getPixelWithChargeY(n));  
}
```

# D Übersicht über für die Simulationen verwendete Parameter

## Inhaltsangabe

---

D.1 Simulation des Einflusses physikalischer Wechselwirkungen .	135
D.2 Simulation photonenzählender Detektoren . . . . .	135

---

Dieser Anhang gibt einen Überblick über die Simulationsparameter, die zur Erzeugung der in dieser Arbeit dargestellten Ergebnisse verwendet wurden.

### D.1 Simulation des Einflusses physikalischer Wechselwirkungen

Für die in Abbildung 4.3 dargestellten Ergebnisse zur CSDA-Reichweite wurden pro Elektronenenergie (10 bis 100keV in 10keV-Schritten) jeweils  $10^4$  Elektronen simuliert. Erzeugungsort war jeweils in der Mitte eines Quaders aus Silizium, Galliumarsenid bzw. Cadmiumtellurid.

Für die Simulationen zum Einfluss der Fluoreszenzen (Abbildungen 4.5, 4.6, 4.7 und 4.8) und von Streuprozessen (Abbildung 4.9) wurde jeweils ein Quader aus Galliumarsenid, Cadmiumtellurid bzw. Silizium von unten mit einem Fadenstrahl aus Röntgenphotonen fester Energie bestrahlt. Die Anzahl der Photonen betrug jeweils  $10^6$ . Die Energie der Röntgenphotonen ist den Diagrammen zu entnehmen. Für diese Simulationen wurde teilweise die Erzeugung von Fluoreszenzphotonen bzw. die Berücksichtigung der Interaktionen Compton- und Rayleighstreuung abgeschaltet.

### D.2 Simulation photonenzählender Detektoren

Für die in Kapitel 5 gezeigten Ergebnisse wurde jeweils die Energiedeposition im Sensor material betrachtet. Dabei wurde die Variation der Anzahl erzeugter Elektron-Loch-Paare ebenso nicht berücksichtigt wie Transportphänomene im Sensormaterial und der Einfluss der Elektronik. In Kapitel 11 werden auch Resultate präsentiert, die diese Prozesse berücksichtigen.

Die Tabelle auf der nächsten Seite gibt eine Übersicht über die in den Simulationen verwendeten Parameter. Die genaue Pixelanzahl hat nur untergeordneten Einfluss auf die Detektorantwort. Teilweise wurde ein Ausschnitt des Detektors simuliert, z.B.  $21 \times 21$  Pixel.

D Übersicht über für die Simulationen verwendete Parameter

Abbildung		5.1	5.3	5.6	5.7	11.7
		5.2	5.4	11.10		11.8
		11.2(b)	11.5			11.9
		11.3(b)				
		11.4(b)				
		11.5(b)				
Sensormaterial		Si	CdTe	CdTe	CdTe	CdTe
Dichte	g/cm <sup>3</sup>	2,33	5,85	5,85	5,85	5,85
Sensordicke	μm	700	1600	1600	<sup>1</sup> )	1600
Pixelgröße quadratisch	μm	55	440	<sup>2</sup> )	55	220
Pixelanzahl		128 × 128	21 × 21	21 × 21	21 × 21	21 × 21
mit Assembly		ja	ja	nein	nein	ja
Größe der Bondperlen	μm	16	16			16
Dicke des ASIC	μm	700	700			700
Dicke der Silberschicht	μm	20	20			20
Dicke der Grundplatte	μm	17,5	17,5			17,5
effektive Ionisierungsenergie	eV	3,62	4,43	4,43		4,43
Fanofaktor		0.06	0	0		0.06
effektive Dotierung $N_{\text{eff}}$	$\frac{1}{\text{cm}^3}$	-3,92E11	-2,85E11	-2,85E11		-2,85E11
Dielektrizitätskonstante		11,7	11	11		11
Mobilität $\mu_e$	$\frac{\text{cm}^2}{\text{Vs}}$	1350	1000	1000		1100
$\mu_e \tau_e$ -Produkt	$\frac{\text{cm}^2}{\text{V}}$	1	3,3E-3	3,3E-3		3,0E-3
Diffusionskonstante $D_e$	$\frac{\text{cm}^2}{\text{s}}$	34,9	30	30		26,45
Mobilität $\mu_h$	$\frac{\text{cm}^2}{\text{Vs}}$	450	100	100		100
$\mu_h \tau_h$ -Produkt	$\frac{\text{cm}^2}{\text{V}}$	1	2,0E-4	2,0E-4		2,0E-4
Diffusionskonstante $D_h$	$\frac{\text{cm}^2}{\text{s}}$	11,633	3.0	3.0		2,405
Wechsel Repulsionsmodell $E_c$	keV	10	15	15		15
Wichtungspotential		1 <sup>3</sup> )	5 <sup>3</sup> )	6-10 <sup>3</sup> )		3 <sup>3</sup> )
Vorspannung	V	250	-700	-700		-700
Integrationszeit	ns	50	55	55		55
Sammlung von		$h$	$e$	$e$		$e$
Variation $\sigma_{G_{V_0}}$ räumlich <sup>4</sup> )	%	0,01	0,01	0,01		0,01
Variation $\sigma_{G_V}$ zeitlich <sup>4</sup> )	%	0	0	0		0
Variation $\sigma_{CC_0}$ räumlich <sup>5</sup> )	%	0,01	0,01	0,01		0,01
Variation $\sigma_{CC}$ zeitlich <sup>5</sup> )		0	0	0	0.05	0.01
Ausleuchtung		6) )	7) )	7) )	7) )	7) )
Röntgenenergie	keV	8) )	8) )	140	140	8) )
jeweils Anzahl Photonen		1000000	500000	1000000	500000	500000

<sup>1</sup>) Sensordicken: 200 μm, 400 μm, 800 μm und 1600 μm

<sup>2</sup>) Pixelgrößen: 55 μm, 110 μm, 165 μm, 220 μm und 440 μm

<sup>3</sup>) Wichtungspotential Nr. #, dargestellt in Abbildung D.1 als wpot#

<sup>4</sup>) Pixel-zu-Pixel-Variation bzw. zeitliche Variation des Verstärkungsfaktors des Vorverstärkers

<sup>5</sup>) Pixel-zu-Pixel-Variation bzw. zeitliche Variation der Stromkopien im Medipix3-Ladungssummiermodus

<sup>6</sup>) zentrale 64 × 64 Pixel homogen ausgeleuchtet

<sup>7</sup>) zentraler Pixel homogen ausgeleuchtet

<sup>8</sup>) Röntgenenergie monoenergetisch von 1 bis 120 keV in 0,25 keV-Schritten

D.2 Simulation photonenzählender Detektoren

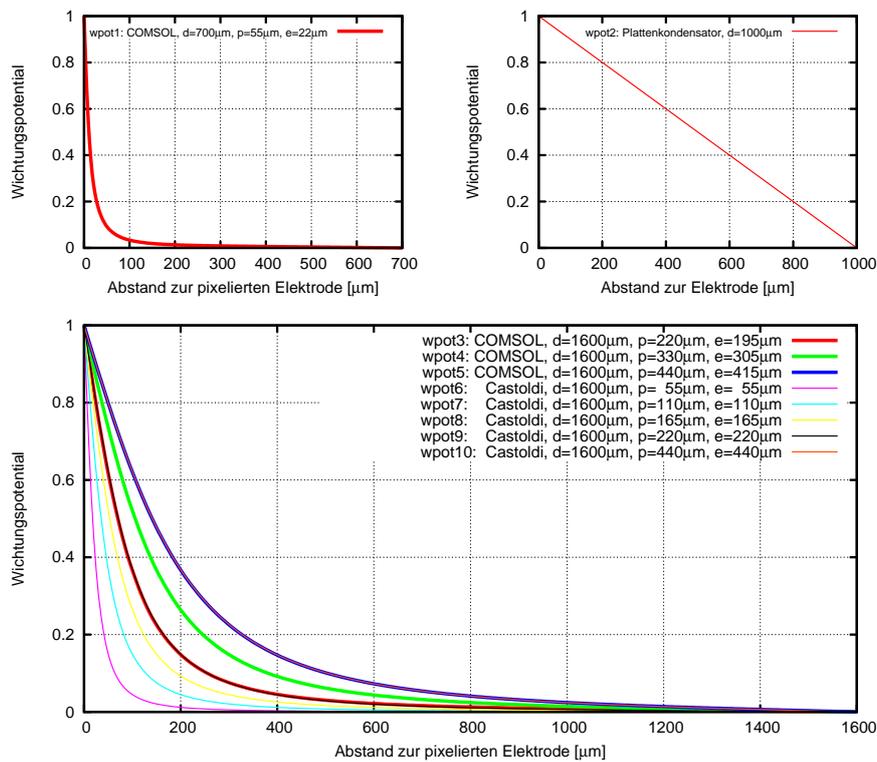
<b>Abbildung</b>		11.2(a)	11.5	11.6	11.6	11.12
		11.3(a)				11.13
		11.4(a)				11.14
		11.5(a)				11.15
		11.5				
<b>Sensormaterial</b>		CdTe	CdTe	CdTe	CdTe	CdTe
<b>Dichte</b>	g/cm <sup>3</sup>	5,85	5,85	5,85	5,85	5,85
<b>Sensordicke</b>		1600	1600	1000	1600	1600
<b>Pixelgröße quadratisch</b>	μm	220	330	5000	220	220
<b>Pixelanzahl</b>		21 × 21	21 × 21	1 × 1	21 × 21	256 × 256
<b>mit Assembly</b>		ja	nein	nein	ja	ja
<b>Größe der Bondperlen</b>	μm	16			16	16
<b>Dicke des ASIC</b>	μm	700			700	700
<b>Dicke der Silberschicht</b>	μm	20			20	20
<b>Dicke der Grundplatte</b>	μm	17,5			17,5	17,5
<b>effektive Ionisierungsenergie</b>	eV	4,43	4,43	4,43	4,43	4,43
<b>Fanofaktor</b>		0	0	0.06	0.06	0.06
<b>effektive Dotierung <math>N_{\text{eff}}</math></b>	$\frac{1}{\text{cm}^3}$	-2,85E11	-2,85E11	-2,85E11	-2,85E11	-2,85E11
<b>Dielektrizitätskonstante <math>\epsilon</math></b>		11	11	11	11	11
<b>Mobilität <math>\mu_e</math></b>	$\frac{\text{cm}^2}{\text{Vs}}$	1000	1000	1100	1100	1000
<b><math>\mu_e \tau_e</math>-Produkt</b>	$\frac{\text{cm}^2}{\text{V}}$	3,3E-3	3,3E-3	3,0E-3	3,0E-3	3,3E-3
<b>Diffusionskonstante <math>D_e</math></b>	$\frac{\text{cm}^2}{\text{s}}$	30	30	26,45	26,45	30
<b>Mobilität <math>\mu_h</math></b>	$\frac{\text{cm}^2}{\text{Vs}}$	100	100	100	100	100
<b><math>\mu_h \tau_h</math>-Produkt</b>	$\frac{\text{cm}^2}{\text{V}}$	2,0E-4	2,0E-4	2,0E-4	2,0E-4	2,0E-4
<b>Diffusionskonstante <math>D_h</math></b>	$\frac{\text{cm}^2}{\text{s}}$			2,645	2,645	
<b>Wechsel Repulsionsmodell <math>E_c</math></b>	keV	15	15	15	15	15
<b>Wichtungspotential</b>		3 <sup>3</sup> )	4 <sup>3</sup> )	2 <sup>3</sup> )	3 <sup>3</sup> )	3 <sup>3</sup> )
<b>Vorspannung</b>	V	-700	-700	-400	-700	-700
<b>Integrationszeit</b>	ns	55	55	60	55	55
<b>Sammlung von</b>		$e$	$e$	$e$	$e$	$e$
<b>Variation <math>\sigma_{\text{GV}_0}</math> räumlich<sup>4)</sup></b>	%	0,01	0,01	0,01	0,01	0,01
<b>Variation <math>\sigma_{\text{GV}}</math> zeitlich<sup>4)</sup></b>	%	0	0	0	0	0
<b>Variation <math>\sigma_{\text{CC}_0}</math> räumlich<sup>5)</sup></b>	%	0,01	0,01	0,01	0,01	0,01
<b>Variation <math>\sigma_{\text{CC}}</math> zeitlich<sup>5)</sup></b>				0.01	0.01	0.05
<b>Ausleuchtung</b>		7)	7)	7)	7)	9)
<b>Röntgenenergie</b>	keV	8)	8)	10)	10)	80
<b>jeweils Anzahl Photonen</b>		500000	500000	500000	500000	50000000

<sup>9)</sup>Linienstrahl, um 3° verkippt gegenüber Pixelkante

<sup>10)</sup>Röntgenspektrum nach Boone [51] mit Beschleunigungsspannung 35 bis 140keV in 1keV-Schritten

In den meisten Simulationen wurde auch das Medipixassembly berücksichtigt, obwohl bei Verwendung von Cadmiumtellurid als Sensormaterial nur selten Röntgenstrahlung in dieses eintritt. Das Assembly mit Sensor besteht aus folgender Anordnung, wobei alle Schichten mit der lateralen Ausdehnung des Sensors implementiert wurden:

- Sensormaterial bestimmter Dicke
- Würfelförmige Bondperlen der in der Tabelle angegebenen Kantenlänge (Näherung zur Verkürzung der Simulationszeit)
- Medipix-ASIC, welcher die Chipelektronik enthält
- Silberschicht zur Berücksichtigung des silberhaltigen Wärmeleitklebers. Die weiteren im Kleber enthaltenen Stoffe haben vernachlässigbaren Einfluss auf Röntgenstrahlung
- Grundplatte aus Aluminium, auf welcher der Medipixchip aufgeklebt wurde



**Abbildung D.1** In den Simulationen verwendete Wichtungspotentiale für verschiedene quadratische Pixelgrößen. Dargestellt ist das Wichtungspotential zentral über der Mitte der Pixelelektrode.

# Literaturverzeichnis

- [1] M. Firsching. *Die Methode der Materialrekonstruktion in der energieaufgelösten Röntgenbildung*. Diplomarbeit, Univ. Erlangen-Nürnberg, Jan. 2005.
- [2] M. Firsching, D. Niederlöhner, T. Michel und G. Anton. *Quantitative Material Reconstruction in CT with Spectroscopic X-Ray Pixel Detectors - a Simulation Study*. In *Conference Record, IEEE Nuclear Science Symposium and Medical Imaging Conference, San Diego*. 2006.
- [3] Medipix2 Collaboration. <http://medipix.web.cern.ch/MEDIPIX/>.
- [4] C. Brönnimann, R. Baur, E. F. Eikenberry, S. Kohout, M. Lindner, B. Schmitt und R. Horisberger. *A pixel read-out chip for the PILATUS project*. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment, 465:235–239, 2001.
- [5] C. Broennimann, E. F. Eikenberry, B. Henrich, R. Horisberger, G. Huelsen, E. Pohl, B. Schmitt, C. Schulze-Briese, M. Suzuki, T. Tomizaki, H. Toyokawa und A. Wagner. *The Pilatus 1M Detector*. J. Synchrotron Rad., 13:120–130, 2006.
- [6] P. Pangaud, S. Basolo, N. Boudet, J.-F. Berar, B. Chantepie, P. Delpierre, B. Dinkespiler, S. Hustache, M. Menouni und C. Morel. *XPAD3: A new photon counting chip for X-ray CT-scanner*. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment, 571:321–324, 2007.
- [7] M. Locker, P. Fischer, S. Krimmel, H. Kruger, M. Lindner, K. Nakazawa, T. Takahashi und N. Wermes. *Single Photon Counting X-Ray Imaging with Si and CdTe Single Chip Pixel Detectors and Multichip Pixel Modules*. Nuclear Science, IEEE Transactions on, 51(4):1717–1723, Aug. 2004. ISSN 0018-9499.
- [8] F. Edling, N. Bingefors, R. Brenner, K. Fransson, L. Gustafsson, L. del Risco Norrliid und C. Rönnqvist. *Characterisation of a pixel readout chip for medical X-ray imaging*. Nucl. Instr. and Meth. A, 525:217–220, June 2004.
- [9] F. Edling, N. Bingefors, R. Brenner, L. del Risco Norrliid, K. Fransson, L. Gustafsson und C. Rönnqvist. *Performance of a chip for hybrid pixel detectors with two counters for X-ray imaging*. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment, 531:215–220, 2004.
- [10] Medipix2 Home Page. <http://medipix.web.cern.ch/MEDIPIX/Medipix2/indexMPIX2.html>.
- [11] M. Campbell, E. Heijne, G. Meddeler, E. Pernigotti und W. Snoeys. *Readout for a 64 x 64 pixel matrix with 15-bit single photon counting*. IEEE Trans. Nucl. Sci., 45(3):751–753, June 1998.
- [12] X. Llopart, M. Campbell, R. Dinapoli, D. San Segundo und E. Pernigotti. *Medipix2: A 64-k pixel readout chip with 55- $\mu$ m square elements working in single photon counting mode*. IEEE Trans. Nucl. Sci., 49(5):2279–2283, 2002.

- [13] X. Llopart. *Design and Characterization of 64K Pixels Chips Working in Single Photon Processing Mode*. Dissertation, Mid Sweden University, 2007.
- [14] X. Llopart, R. Ballabriga, M. Campbell, L. Tlustos und W. Wong. *Timepix, a 65k programmable pixel readout chip for arrival time, energy and/or photon counting measurements*. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment, 581:485–494, 2007.
- [15] P. Bartl. *Untersuchung bildgebender Eigenschaften photonenzählender Halbleiter-Röntgendetektoren*. Diplomarbeit, Universität Erlangen-Nürnberg, Mai 2007.
- [16] R. Ballabriga, M. Campbell, E. H. M. Heijne, X. Llopart und L. Tlustos. *The Medipix3 Prototype, a Pixel Readout Chip Working in Single Photon Counting Mode With Improved Spectrometric Performance*. Nuclear Science, IEEE Transactions on, 54(5):1824–1829, Oct. 2007. ISSN 0018-9499.
- [17] W. R. Leo. *Techniques for Nuclear and Particle Physics Experiments*. Springer-Verlag, 2 Auflage, 1994.
- [18] H. Krieger. *Grundlagen der Strahlungsphysik und des Strahlenschutzes*. B.G. Teubner, Stuttgart, 2004.
- [19] H. Krieger. *Grundlagen der Strahlungsphysik und des Strahlenschutzes*. B.G. Teubner, Stuttgart, 2007.
- [20] J. Giersch, A. Weidemann und G. Anton. *ROSI – an object-oriented and parallel-computing Monte Carlo simulation for X-ray imaging*. Nucl. Instr. and Meth. A, 509:151–156, 2003.
- [21] J. Giersch und J. Durst. *Monte Carlo simulations in X-ray imaging*. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment, 591:300–305, 2008.
- [22] U. Fano. *On the Theory of Ionization Yield of Radiations in Different Substances*. Phys. Rev., 70(1-2):44–52, Jul 1946.
- [23] H. Deutsch, D. Margreiter und T. D. Märk. *A semi-empirical approach to the calculation of absolute inner-shell electron impact ionization cross sections*. Zeitschrift für Physik D Atoms, Molecules and Clusters, 29:31–37, 1994.
- [24] H. Deutsch, K. Becker und T. Märk. *Calculated absolute cross-sections for the electron-impact ionization of atoms with atomic numbers between 20 and 56 using the Deutsch-Märk (DM) formalism*. International Journal of Mass Spectrometry, 271:58–62, 2008.
- [25] A. K. Haque, M. A. Uddin, M. A. Patoary, A. K. Basak, M. R. Talukder, B. C. Saha, K. R. Karim und F. B. Malik. *Generalized Kolbenstvedt model for electron impact ionization of K-, L- and M-shell atoms*. The European Physical Journal D - Atomic, Molecular, Optical and Plasma Physics, 42:203–210, 2007.
- [26] H. Bethe. *Zur Theorie des Durchgangs schneller Korpuskularstrahlen durch Materie*. Annalen der Physik, 397:325–400, 1930.
- [27] H. Bethe. *Bremsformel für Elektronen relativistischer Geschwindigkeit*. Zeitschrift für Physik A Hadrons and Nuclei, 76:293–299, 1932.

- 
- [28] M. Berger, J. Coursey, M. Zucker und J. Chang. *ESTAR, PSTAR, and ASTAR: Computer Programs for Calculating Stopping-Power and Range Tables for Electrons, Protons, and Helium Ions (version 1.2.3)*. <http://physics.nist.gov/Star>, 2005. National Institute of Standards and Technology.
- [29] R. B. Firestone und V. S. S. (Eds.). *Table of Isotopes*. John Wiley & Sons, Inc., eighth edition Auflage, 1996.
- [30] M. Berger, J. Hubbell, S. Seltzer, J. Chang, J. Coursey, R. Sukumar und D. Zucker. *XCOM: Photon Cross Section Database (version 1.3)*. <http://physics.nist.gov/xcom>, 2005. National Institute of Standards and Technology.
- [31] AMPTEK. <http://www.amptek.com/xr100cdt.html>.
- [32] H. Spieler. *Semiconductor Detector Systems*. Oxford Science Publications, 2006.
- [33] A. Owens und A. Peacock. *Compound semiconductor radiation detectors*. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment, 531:18–37, 2004.
- [34] R. Devanathan, L. Corrales, F. Gao und W. Weber. *Signal variance in gamma-ray detectors—A review*. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment, 565:637–649, 2006.
- [35] U. Fano. *Ionization Yield of Radiations. II. The Fluctuations of the Number of Ions*. Phys. Rev., 72(1):26–29, Jul 1947.
- [36] C. Jacoboni, C. Canali, G. Ottaviani und A. Alberigi Quaranta. *A review of some charge transport properties of silicon*. Solid-State Electronics, 20:77–89, 1977.
- [37] J. S. Blakemore. *Semiconducting and other major properties of gallium arsenide*. Journal of Applied Physics, 53(10):R123–R181, 1982.
- [38] S. Sze. *Physics of Semiconductor Devices*. John Wiley & Sons, Inc., 2 Auflage, 1981.
- [39] A. Korn. *Spektrale und bildgebende Eigenschaften photonenzählender Röntgendetektoren am Beispiel des Medipix-Detektors*. Dissertation, Universität Erlangen-Nürnberg, 2007.
- [40] G. F. Knoll. *Radiation Detection and Measurement*. John Wiley & Sons, Inc., third edition Auflage, 2000.
- [41] H. Barrett, J. Eskin und H. Barber. *Charge Transport in Arrays of Semiconductor Gamma-Ray Detectors*. Physical Review Letters, 75:156–159, 1995.
- [42] COMSOL Multiphysics. <http://www.femlab.de>.
- [43] A. Castoldi, E. Gatti und P. Rehak. *Three-dimensional analytical solution of the Laplace equation suitable for semiconductor detector design*. Nuclear Science, IEEE Transactions on, 43(1):256–265, Feb 1996. ISSN 0018-9499.
- [44] B. Kreisler, G. Anton, J. Durst und T. Michel. *3D simulation of induced signals in the Medipix detector*. Nuclear Science Symposium Conference Record, 2007. NSS '07. IEEE, 4:3166–3169, 26 2007–Nov. 3 2007. ISSN 1082-3654.
- [45] S. Ramo. *Currents Induced by Electron Motion*. Proceedings of the I.R.E., 27:584–585, 1939.

- [46] I. A. Cunningham, M. S. Westmore und A. Fenster. *A spatial-frequency dependent quantum accounting diagram and detective quantum efficiency model of signal and noise propagation in cascaded imaging systems*. Med. Phys., 21(3):417–427, 1994.
- [47] I. Cunningham und R. Shaw. *Signal-to-noise optimization of medical imaging systems*. J. Opt. Soc. Am. A, 16(3):621–632, 1999.
- [48] M. Rabbani, R. Shaw und R. Van Metter. *Detective quantum efficiency of imaging systems with amplifying and scattering mechanisms*. J. Opt. Soc. Am. A, 4:895–901, 1987.
- [49] T. Michel, G. Anton, M. Böhnel, J. Durst, M. Firsching, A. Korn, B. Kreisler, A. Loehr, F. Nachtrab, D. Niederlöhner, F. Sukowski und P. Takoukam Talla. *A fundamental method to determine the signal-to-noise ratio (SNR) and detective quantum efficiency (DQE) for a photon counting pixel detector*. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment, 568:799–802, 2006.
- [50] J. Durst, G. Anton und T. Michel. *Discriminator threshold dependency of the zero-frequency DQE of photon-counting pixel detectors*. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment, 576:235–238, 2007.
- [51] J. Boone und J. Seibert. *An accurate method for computer-generating tungsten anode x-ray spectra from 30 to 140kV*. Med. Phys., 24(11):1661–1670, 1997.
- [52] J. Giersch. *Entwicklung einer Monte-Carlo-Simulation und Bau einer Messkammer zur Evaluierung von photonenzählenden Pixel-Röntgendetektoren für die medizinische Bildgebung*. Dissertation, Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg, Juli 2002.
- [53] J. Giersch. *RAVAR – RANdom VARIable*. <http://www.pi4.physik.uni-erlangen.de/Giersch/RAVAR/>, 2004.
- [54] G. D. Burns, R. B. Daoud und J. R. Vaigl. *LAM: An Open Cluster Environment for MPI*. Supercomputing Symposium 1994, 1994.
- [55] M. P. I. Forum. *MPI: A Message-Passing Interface-Standard*. Technical Report, May 1994.
- [56] *LSCAT-GISMO - an object-orientated Framework for Particle Simulation*, 2004. 3rd International EGS Workshop, KEK, Japan.
- [57] W. Atwood, A. Breakstone, D. Britton, T. Burnett, D. Myers und G. Word. *The GISMO project (C++)*. C++ Report, 5(3):38–43, März-April 1993. ISSN 1040-6042.
- [58] W. Nelson, H. Hirayama und D. Rogers. *The EGS4 Code System*. Technischer Bericht, Stanford Linear Accelerator Center SLAC-265, 1985.
- [59] Y. Namito und H. Hirayama. *LSCAT: Low-Energy Photon-Scattering Expansion for the EGS4 Code (Inclusion of Electron Impact Ionization)*. KEK Internal 2000-4, High Energy Accelerator Research Organization, 1-1 Oho, Tsukuba-shi, Ibaraki-ken, 305-0801, Japan, May 2000.
- [60] F. James. *A review of pseudorandom number generators*. Computer Physics Communications, 60:329–344, 1990.
- [61] H. Hirayama und Y. Namito. *Implementation of a General Treatment of Photoelectric-Related Phenomena for Compounds or Mixtures in EGS4*. KEK Internal 2000-3, High Energy Accelerator Research Organization, 1-1 Oho, Tsukuba-shi, Ibaraki-ken, 305-0801, Japan, May 2000.

- [62] Y. Namito, S. Ban und H. Hirayama. *LSCAT: Low-Energy Photon-Scattering Expansion for the EGS4 Code*. KEK Internal 95-10, High Energy Accelerator Research Organization, 1-1 Oho, Tsukuba-shi, Ibaraki-ken, 305-0801, Japan, August 1995.
- [63] Y. Namito, S. Ban und H. Hirayama. *Implementation of the Doppler broadening of a Compton-scattered photon into the EGS4 code*. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment, 349:489–494, 1994.
- [64] Y. Namito und H. Hirayama. *Implementation of electron-impact ionization into the EGS4 code*. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment, 423:238–246, 1999.
- [65] M. A. Uddin, A. K. Haque, K. R. Karim, A. K. Basak und F. B. Malik. *Modified Kolbenvedt model for the electron impact K-shell ionization cross-sections of atoms and ions*. The European Physical Journal D - Atomic, Molecular, Optical and Plasma Physics, 37:361–369, 2006.
- [66] S. M. Seltzer und M. J. Berger. *Evaluation of the collision stopping power of elements and compounds for electrons and positrons*. The International Journal of Applied Radiation and Isotopes, 33:1189–1218, 1982.
- [67] W. R. Nelson, A. F. Bielajew, D. W. O. Rogers und H. Hirayama. *EGS4 in 1994: A decade of enhancements*, 1994. World Congress on Medical Physics & Biomedical Engineering 21-26 Aug 1994, Rio de Janeiro, Brazil.
- [68] International Commission on Radiation Units and Measurements (Hg.). *Stopping Powers for Electrons and Positrons*, Band 37. International Commission on Radiation Units and Measurements, 1984.
- [69] G. Anton, J. Durst, M. Firsching, J. Giersch, A. Korn, M. Mitschke, D. Niederlöhner und F. Pfeiffer. *Imaging theory for X-ray pixel detectors*. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment, 563:116–123, 2006.



## Danksagung

Mit der Fertigstellung dieser Arbeit möchte ich allen danken, die mir während meiner Promotion während der letzten Jahre ein zufriedenes und glückliches Physiker- bzw. Forscherleben ermöglicht haben:

- Mein besonderer Dank gilt Frau Prof. Dr. Gisela Anton für die Überlassung dieses Themas. Sie hatte jederzeit ein offenes Ohr für Fragen zu Forschung und Lehre. Die Beschäftigung mit Fragestellungen der Röntgenphysik hat mein Interesse im Bereich neuartiger Detektorkonzepte und deren Anwendung geweckt. Ich möchte ihr insbesondere auch für die Entwicklung und Einrichtung des Projektpraktikums in Erlangen danken, wodurch ich überhaupt erst die Möglichkeit hatte, mich dort im Bereich der Lehre betreuend und gestaltend mit einzubringen.
- Weiterhin möchte ich dem ehemaligen Gruppenleiter Jürgen Giersch danken. Jürgen Giersch hat in seiner Promotion das Simulationspaket ROSI entwickelt, welches als Grundlage meiner Arbeit diente. Während der Promotion hatten wir regen Kontakt, welcher zu einer Reihe von erweiterten und verbesserten Versionen von ROSI führte. Vielen Dank dafür. Gerne denke ich auch an die Freizeitaktivitäten während Deiner Zeit am Institut zurück.
- In gleicher Weise möchte ich unserem aktuellen Gruppenleiter Thilo Michel danken. Er hat sich vom ersten Tag an sehr für meine Arbeit interessiert, was in diversen Diskussionen auch zu neuen Ideen geführt hat.
- Ich möchte der *International Max-Planck Research School (IMPRS) for Optics and Imaging* für die Unterstützung und Förderung dieser Arbeit danken. Im Rahmen der IMPRS konnte ich meine Arbeit interessierten Kommilitonen präsentieren sowie meinen Horizont in verwandten Gebieten erweitern. Dank gilt hier insbesondere meinem Co-Mentor Thomas Wittenberg für sein Interesse an meiner Arbeit und die Knüpfung von Kontakten.
- Auch bei Björn Heismann, Silke Janssen und Daniel Niederlöhner möchte ich mich ganz herzlich bedanken.
- Björn Kreisler und Ewald Guni möchte ich für die intensive wissenschaftliche Zusammenarbeit während ihrer Diplomarbeiten und danach danken.
- Dank geht auch an meine aktuellen Zimmerkollegen Anja Loehr, Ewald Guni, und Tilman Rügheimer sowie an die ehemaligen „Bewohner“ von Zimmer 212, Ralf Auer, Joseph Ferdinand Yaneu Yaneu, Björn Kreisler, Carsten Richardt, Frank Sukowski, Norman Uhlmann und Stefan Wölfel, die alle stets für eine angenehme Atmosphäre sorgten.
- Bedanken möchte ich mich auch bei allen aktuellen und ehemaligen Mitarbeitern der Arbeitsgruppe und darüber hinaus, die ich hier nicht alle einzeln aufzählen kann. Neben der Physik gab es zahlreiche schöne Gemeinschaftsaktivitäten wie Raketenschießen, Spieleabende, gemeinsames Kochen, Fußball-EM/WM-Abende, Geburtstagsfeiern und vieles mehr. Im Rahmen des *Erlangen Centre for Astroparticle Physics (ECAP)* entsteht hier eine noch größere Gemeinschaft.

- Danken möchte ich auch allen Tutoren und weiteren Beteiligten am Projektpraktikum, die für ein Gelingen dieser Lehrveranstaltung gesorgt haben. Nicht zuletzt durch die motivierende Betreuung durch Euch wurden sehr viele verschiedene spannende Projekte durchgeführt. Dies hat mir gezeigt, dass sich hinter fast allen Bereichen des Alltags spannende physikalische Fragestellungen verstecken.
- Einen extra Dank möchte ich noch an Johannes Pauli richten. Er war für mich bereits während meiner Diplomarbeit durch seine systematische Arbeitsweise mit dem Computer ein Vorbild und hat mir viele nützliche Dinge diesbezüglich beigebracht. PI4 - Wir forschen gern!
- Ich möchte allen meinen Freunden danken, die mich während Studium und Promotion begleitet haben, insbesondere: Ströms, Jochen und Moni sowie Georg.
- Dank an alle meine Verwandten, insbesondere meine Geschwister Bernd und Uwe sowie meine beiden Omas Hedwig und Lina.
- Der größte Dank gebührt meinen Eltern, Erna und Reinhold Durst, die mich immer auf meinem Bildungsweg unterstützt haben. Vielen Dank für Alles!