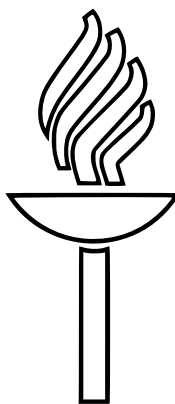


# ECR-ionilähteen tuottaman röntgensäteilyn simulointi

Pro gradu

Janne Ropponen



Jyväskylän yliopisto  
Fysiikan laitos

Huhtikuu 2008

## **Tiivistelmä**

Electron Cyclotron Resonance (ECR) -ionilähteissä syntyy röntgensäteilyä plasmassa olevien elektronien törmätessä plasmakammion seinään. Tuotettaessa yhä korkeampia varausasteita ja suurempia intensiteettejä kasvavat yleensä myös röntgensäteilyn määrä ja energia, mikä vaikeuttaa erityisesti suprajohtavilla magneeteilla toteutettujen ECR-ionilähteiden jäädyttämistä.

Tässä pro gradu -työssä tutkitaan ECR-ionilähteiden tuottamaa röntgensäteilyä Monte Carlo -simulaatioiden avulla. Teoriaosassa käydään läpi röntgensäteilyn syntymisen kannalta oleelliset prosessit ja tutustutaan magneettiseen säilöntään, ECR-ionilähteisiin sekä Geant4-simulaatiotyökaluun. Loppuosassa esitellään simulaatio ja vertaillaan simulaatiosta saatuja röntgenspektrejä Jyväskylän yliopiston kiihdytinlaboratorion 6,4 GHz ECR-ionilähteellä mitattuihin spektreihin ja pyritään selvittämään röntgensäteilyn tuottavien elektronien energiajakauma.

# Kiitokset

Haluan kiittää graduni ohjaajaa ja tarkastajaa yliassistentti Hannu Koivistoa erittäin mielenkiintoisesta ja haasteellisesta aiheesta sekä kärsivällisyydestä työn valmistumisen kestänyä odotettua kauemmin. Kiitos myös Tommi Ropposelle työni ohjauksesta ja hyvistä vinkeistä koko pitkän prosessin aikana. Tohtori Pekka Suomista haluan kiittää ECR-ionilähteen magneettikenttädatan laskemisesta. Kiitollisuuteni osoitan luonnollisesti myös lehtori Juha Merikoskelle toimimisesta tutkielmani toisena tarkastajana ja hänen antamastaan rakentavasta ja valaisevasta palautteesta.

Kiitokset gammaryhmän Panu Rahkilalle gr1-palvelimen käyttöoikeudesta, jota ilman tutkielmani tekeminen olisi vaikeutunut huomattavasti, sekä Markus Nymanille valaisevista keskusteluista germanium-ilmaisinten ominaisuuksista.

Lopuksi kiitän Holvin poikia rennosta ja innostavasta työilmapiiristä, joka auttoi jaksamaan hankalinakin hetkinä, ja Perttu Luukkoa hänen ehtymättömästä tietämyksestään  $\text{\LaTeX}$ -asioissa.

# Sisältö

<b>1</b>	<b>Johdanto</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>Sähkömagneettinen säteily</b>	<b>3</b>
2.1	Sähkömagneettinen spektri . . . . .	3
2.2	Röntgensäteily . . . . .	6
2.3	Gammasäteily . . . . .	7
<b>3</b>	<b>Varauksen sähkö- ja magneettikenttä</b>	<b>8</b>
3.1	Paikallaan oleva varaus . . . . .	8
3.2	Liikkuva varaus . . . . .	9
3.3	Kiihtyvässä liikkeessä olevan varauksen sähkö- ja magneettikenttä . . . . .	11
3.4	Synkrotronisäteily . . . . .	13
<b>4</b>	<b>Hiukkasten törmäysprosessit aineessa</b>	<b>16</b>
4.1	Fotonien vuorovaikutus aineen kanssa . . . . .	16
4.1.1	Rayleigh'n sironta . . . . .	16
4.1.2	Comptonin sironta . . . . .	17
4.1.3	Valosähköinen ilmiö . . . . .	21
4.2	Röntgensäteilyn vaimeneminen väliaineessa . . . . .	21
4.3	Atomin viritystilan purkautuminen . . . . .	24
4.3.1	Fluoresenssi . . . . .	24
4.3.2	Karakteristinen säteily . . . . .	24
4.3.3	Auger-elektronit . . . . .	26
4.4	Nopeat elektronit materiaalissa . . . . .	27
4.4.1	Jarrutussäteily . . . . .	28
4.4.2	Varausten moninkertainen sironta . . . . .	29
4.5	Vaikutusaloista . . . . .	30
<b>5</b>	<b>Magneettinen säilöntä</b>	<b>33</b>
5.1	Varatun hiukkasen liike magneettikentässä . . . . .	33
5.2	Magneettinen peili . . . . .	35
<b>6</b>	<b>ECR-ionilähde</b>	<b>38</b>
6.1	Toimintaperiaate . . . . .	38
6.2	Röntgensäteily . . . . .	41

## SISÄLTÖ

---

6.3	JYFL ionilähteet . . . . .	42
6.4	JYFL 6,4 GHz ECR-ionilähde . . . . .	43
<b>7</b>	<b>Geant4</b>	<b>46</b>
7.1	Yleistä . . . . .	46
7.2	Geometria ja materiaalit . . . . .	49
7.3	Fysiikkaprosessit ja -parametrit . . . . .	50
7.3.1	Standardifysiikka . . . . .	51
7.3.2	Matalan energian sähkömagneettinen fysiikka . . . . .	51
7.3.3	Penelope-fysiikka . . . . .	52
7.3.4	LECS-laajennus . . . . .	52
7.4	Seuranta . . . . .	52
7.5	Rajat . . . . .	53
7.6	Alkutilanteen määrittäminen . . . . .	55
7.7	Satunnaisuus ja statistiikka . . . . .	55
<b>8</b>	<b>Simulaatio ja koejärjestelyt</b>	<b>56</b>
8.1	Geometria ja käytetyt materiaalit . . . . .	56
8.2	Simulaation eteneminen . . . . .	59
8.3	Simulaatiossa käytetyt parametrit ja alkuarvot . . . . .	60
8.4	Tietojen talteenotto . . . . .	63
8.5	Optimointi . . . . .	63
8.6	Röntgenmittaus . . . . .	64
8.7	Ilmaisinvasteen simulointi . . . . .	66
<b>9</b>	<b>Tulokset</b>	<b>69</b>
9.1	Histogrammeista . . . . .	70
9.2	Parametrit ja kalibrointi . . . . .	71
9.2.1	Magneettikentän vaikutus . . . . .	72
9.2.2	MMPS-rautanapojen asennot . . . . .	73
9.2.3	Elektronien alkuparametrit . . . . .	75
9.2.4	Fysiikkamallit . . . . .	76
9.2.5	Simulaation nopeus . . . . .	78
9.2.6	Elektronien energian vaikutus . . . . .	79
9.3	Ilmaisinvasteen vaikutus mitattuun röntgenspektriin . . . . .	80
9.4	Mittaus- ja simulaatiotulokset . . . . .	81
9.4.1	Mittaustuloksiin sovitettu röntgenspektri . . . . .	83
9.4.2	Elektronien energijakauma . . . . .	85
9.4.3	Röntgensäteilyn jakauma ionilähteen pinnalla . . . . .	86
9.5	Simulaatiot alumiinilevyllä . . . . .	90
9.6	Muita tuloksia . . . . .	94
<b>10</b>	<b>Päätelmät</b>	<b>96</b>

# Luku 1

## Johdanto

Nykyäänä fysiikan kiihdytinperustainen tutkimus nojaa vahvasti entistä tehokkaampien, tarkempien – ja kalliimpien – laitteiden käyttöön. Laitteiden monimutkaistessa on entistä tärkeämpää, että jokainen laiteketjun osa toimii optimaalisesti eikä muodosta pullonkaulaa, jonka vaikutukset voivat kertyä ketjun loppupäässä. Jo suunnitteluvaiheessa on huomioitava jokaisen laitteen vaikutus kokonaisuuteen, jotta vältytään muutostöiden tuomilta turhilta jälkikäteiskustannuksilta valmiissa laitteessa. Elektronisyklotroniresonanssi (ECR) -ilmiön hyödyntämiseen perustuvat ionilähteet ovat suosittuja raskasioneihiukkaskiihdyttimien yhteydessä. Niiden toiminta vaikuttaa suoraan hiukkassuihkun laatuun ja intensiteettiin ennen ja jälkeen hiukkaskiihdyttimen. Vakaa, laadukas ja käyttötarkoitukseen riittävän intensiivinen ionisuihku on ensimmäinen edellytys onnistuneen tieteellisen kokeen suorittamiseen hiukkaskiihdyttimen avulla.

Jyväskylän yliopiston fysiikan laitoksella (JYFL) on käytössä kaksi ECR-tyyppistä ionilähdettä. Mikroaalloilla lämmitetyssä plasmassa tapahtuvat elektroni-ionitörmäykset ja plasmavuon osuminen plasmakammion seinään aiheuttavat röntgensäteilyä, jonka voimakkuus on yleensä sitä suurempi mitä enemmän korkeasti varattua ionisuihkua ionilähteestä saadaan. Laitteen ulkopuolelle pääsevä ionisoiva säteily on haitallista työsuojelun kannalta, sillä altistuminen ionisoivalle säteilylle voi aiheuttaa soluvaurioita. Perinteisissä ECR-ionilähteissä säteilyn määrää voidaan tehokkaasti vähentää ulkoista säteilysuojauksella parantamalla, mutta suprajohdettavissa laitteissa pelkkä ulkoinen suojaus ei riitä. Energialtaan jopa 1-2 megaelektronivolttiin ulottuvan röntgensäteilyn ollessa liian voimakasta ionilähteen suprajohdettavat magneetit alkavat lämmitä ja saattavat pahimmassa tapauksessa jopa tuhoutua äkillisen suprajohdettavuuden menetyksen seurauksena [1]. Säteilyn määrää voidaan vähentää ionilähteen sisäisillä säteilysuojauksilla, mutta tämä on harvoin käytännöllinen vaihtoehto käytettävissä olevan tilan rajoitetun määrän vuoksi. Vaihtoehtona on pyrkiä minimoimaan ongelmallisien energettisimpien elektronien plasmakammion seinään törmätessä syntyvä korkean energian säteily vähentämällä jollain menetelmällä kyseisten elektronien suhteellista määrää ilman, että ionilähteen toiminta heikentyy.

## 1. JOHDANTO

---

ECR-ionilähteiden röntgensäteilyä on aikaisemmin mitattu aksiaalisesti ja selvitetty sen perusteella plasman elektronien energiajakaumaa (esim. [2], [3]). Ionilähteen rakenteita lämmittää kuitenkin eniten radiaalisesti plasmakammion seinään osuva plasmavuo ja siinä olevat energettiset elektronit, joten aksiaalinen mittaus ei anna todellista kuvaa radiaalisen röntgensäteilyn aiheuttavien elektronien energiajakaumasta. Tärkeimmät syyt radiaalisen datan puuttumiseen ovat, että elektronien energiajakauman suora mittaaminen plasmakammioista on miltei mahdotonta ja laitteen ulkopuolelta mitatun röntgendatan analysointi on monimutkaista, koska säteilyn kulkiessa ionilähteen rakenteiden läpi se vaimentuu ja vääristyy merkittävästi.

Tässä tutkielmassa tarkastellaan tietokonesimulaatioiden avulla ECR-ionilähteen plasmakammion seiniin törmäävien elektronien aiheuttamaa röntgensäteilyä. Simulaatiotuloksia verrataan mittauksista saatuihin röntgenspektreihin ja pyritään saamaan tietoa ionilähteen plasman korkeaenergiaisten elektronien energiajakaumasta. Simulaatiot on tehty mallintamalla JYFL 6,4 GHz ECR-ionilähde Geant4-simulaatioyökalujen [4] avulla.

Aluksi tutkielmassa esitellään lyhyesti sähkömagneettisen säteilyn muodot (luku 2) ja tutustutaan eri liiketiloissa olevien varausten aiheuttamiin sähkömagneettisiin kenttiin (luku 3). Luvussa 4 tarkastellaan lähemmin varattujen hiukkasten törmäyksiä ja säteilyn kulkeutumista väliaineessa. Tarkoituksena on ymmärtää oleelliset prosessit, joiden vaikutuksesta röntgensäteily syntyy ja siirtyy ionilähteen ulkopuolelle. Luvussa 5 paneudutaan plasman magneettiseen säilöntään, minkä jälkeen kerrotaan perusteita ECR-ionilähteistä ja esitellään tutkielman simulaatioissa mallinnettu JYFL 6,4 GHz ECR-ionilähde luvussa 6. Luvussa 7 tutustutaan Geant4-simulaatioympäristön toimintaan ja kerrotaan sen mahdollisuuksista ja rajoituksista. Luku 8 puolestaan keskittyy varsinaisen simulaation esittelyyn. Osiossa perustellaan simulaatiokoodissa tehtyjä oletuksia ja valintoja ja käydään läpi mittauslaitteisto, jolla simulaatioiden vertailukohtana olevat mittaukset on tehty. Luvussa 9 käsitellään simulaatioista saatuja tuloksia ja vertaillaan niitä mittauksista saatuihin tietoihin. Viimeisessä luvussa tarkastellaan saattujen tulosten merkitystä ja arvioidaan niiden vaikutusta ECR-ionilähteiden kehitysnäkymiin tulevaisuudessa.

## Luku 2

# Sähkömagneettinen säteily

Sähkömagneettinen säteily saa alkunsa varatun hiukkasen tai hiukkasten kiihtyvistä liikkeistä, sillä valonnopeuden rajallisuuden seurauksena sähkö- ja magneettikenttien muutokset eivät välittömästi leviä koko avaruuteen. Paikallaan tai tasaisessa liikkeessä olevalla varauksella voidaan ajatella olevan staattinen, äärettömän pitkälle ulottuva sähkökenttä. Kun varaus kiihdytetään äkkiä uuteen nopeuteen, ei sähkökenttä kaukana varauksesta mukaudu välittömästi uuteen tilanteeseen, vaan vasta kun tieto varauksen liiketilän muutoksesta saavuttaa sen. Tämä signaali etenee valonnopeudella. Signaalin määrittelemän valokartion ulkopuolella varauksen sähkökenttä on edelleen kiihdytystä edeltävää tilannetta vastaava ja sisäpuolella kiihdytyksen jälkeisen liiketilän määrittelemä. Uuden ja vanhan sähkökentän kenttäviivat yhdistää häiriö, jonka suuruus on verrannollinen kiihdytykseen. Häiriön aiheuttama muutos puolestaan indusoi magneettikentän (ja päinvastoin) ja havaitsemme kokonaisvaikutuksen sähkömagneettisena pulssina.

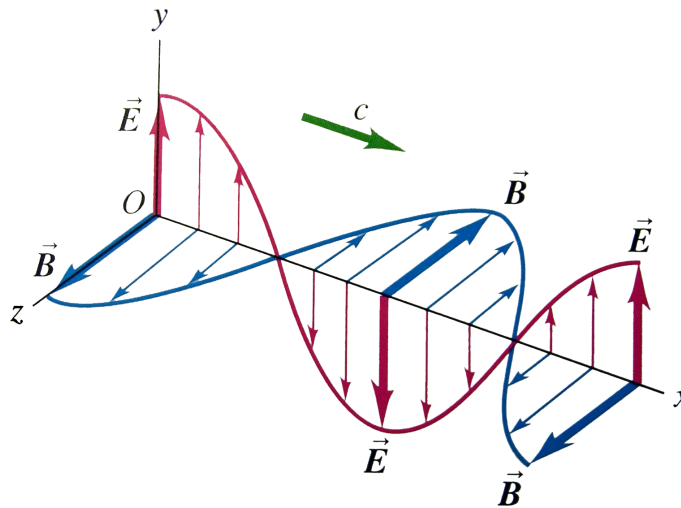
Esimerkiksi radioaallot ovat sähkömagneettista säteilyä, jota syntyy radioantennissa liikkuvien elektronien edestakaisesta liikkeestä. Myös valo on sähkömagneettista säteilyä, mutta sen taajuus on paljon radioaaltoja korkeampi. Valon saa aikaan atomien ulompien elektronikuorien viritystilojen purkautuminen. ECR-ionilähteessä syntyy korkean energian röntgensäteilyä elektronien vauhdin hidastuessa äkillisesti niiden törmätessä plasmakammion seinämiin.

## 2.1 Sähkömagneettinen spektri

Sähkömagneettinen säteily tai sähkömagneettinen aalto on valon nopeudella etenevää poikittaista aaltoliikettä, joka sisältää toisiaan ja etenemissuuntaa vastaan kohtisuorassa värähtelevän sähköisen ja magneettisen komponentin (kuva 2.1).



## 2. SÄHKÖMAGNEETTINEN SÄTEILY

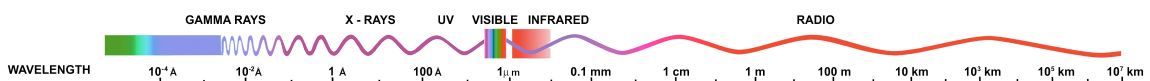


Kuva 2.1: X-akselin suuntaan kulkeva lineaarisesti polarisoitunut sähkömagneettinen aalto. Sähkö- ja magneettikentät ovat kohtisuorassa toisiaan ja aallon kulkusuuntaa vastaan ([5], s. 1224).

Sähkömagneettisen säteilyn energia voi vaihdella nolasta lähes äärettömään. Koko vaihteluväliä kutsutaan *sähkömagneettiseksi spektriksi*. Se käsittää kaiken sähkömagneettisen säteilyn alkaen erittäin matalaenergisestä sähköisestä värähtelystä, jatkuen radiotaajuuksien ja mikroaaltojen kautta infrapunasäteilyyn ja näkyvään valoon ja edelleen ultravioletti- ja röntgensäteilyn kautta aina gammasäteilyyn asti. Vaikka spektri on jaettu osiin säteilyn ominaisuuksien ja käyttötarkoituksen mukaan, eivät eri säteilytyyppien rajat ole tarkkoja. Esimerkiksi röntgenalueella olevaa säteilyä kutsutaan (matalaenergisiksi) gammasäteilyksi yhteydessä, jossa nimenomaan tutkitaan gammasäteilyn spektriä. Usein nimitys riippuu siitä millä tavalla säteily on tuotettu. Kuvassa 2.2 sähkömagneettinen spektri on jaoteltu karkeasti gamma-, röntgen-, uv-, infrapuna- ja radiosäteilyyn sekä näkyvään valoon. Erityisesti radioaaltojen alue on edelleen jaettu lukuisiin pienempiin osiin käyttötarkoituksen mukaan.

Kaksijakoisen aaltohiukkasluonteensa vuoksi sähkömagneettista säteilyä voidaan käsitellä joko aaltolina tai hiukkasina. Albert Einstein<sup>1</sup> esitti vuonna 1905 valosähköisen ilmiön selittämiseksi säteilyn koostuvan yksittäisistä säteilykvanteista eli fotoneista. Fotonien energia  $E_f$  on suoraan verrannollinen säteilyn taajuuteen  $f$  siten, että

<sup>1</sup>Albert Einstein (1879-1955), Nobelin palkinto fysiikassa vuonna 1921.



Kuva 2.2: Sähkömagneettinen spektri gammasäteistä radioaaltoihin [Courtesy NASA/JPL-Caltech].

## 2. SÄHKÖMAGNEETTINEN SÄTEILY

---

$$E_f = hf, \quad (2.1)$$

missä kerroin  $h$  on Planckin vakio<sup>2</sup>. Tästä seuraa myös se, että säteilyn aallonpituus  $\lambda$  on käänteisesti verrannollinen sen energiaan, sillä

$$f = \frac{c}{\lambda}, \quad (2.2)$$

missä  $c$  on valonnopeus<sup>3</sup>. Säteilyn aaltohiukkasluonne tulee helpoiten esiin juuri massattomilla hiukkasilla kuten fotoneilla, mutta pätee itse asiassa myös massallisille hiukkasille, minkä Louis-Victor de Broglie<sup>4</sup> teorisoi väitöskirjassaan jo vuonna 1924 [6]. Hänen mukaansa aallonpituus  $\lambda$  on yhteydessä hiukkasen liikemäärään  $p$  siten, että

$$\lambda = \frac{h}{p}. \quad (2.3)$$

Fotonin liikemäärä on

$$p = \frac{E}{c}, \quad (2.4)$$

joten kaava (2.3) on sopusoinnussa kaavan (2.1) kanssa.

Energialtaan vähäisimmät käytännön sovelluksissa tarpeelliset sähkömagneettiset aallot kuuluvat radiospektrin alueeseen. Radioaallot kattavat hyvin laajan alueen taajuuksista muutamasta hertsistä useisiin satoihin gigahertzeihin vastaten energioita noin kymmenestä femtoelektronivoltista yhteen millielektronivolttiin. Radiospektrin jälkeen alkaa infrapunasäteilyn alue, jonka jälkeen tulee suhteellisen kapea näkyvän valon alue (noin 1,8 - 3,1 eV) ja ultraviolettisäteily. Valkoinen valo (kuva 2.3) koostuu kaikista näkyvän valon spektrin osista.

Ultraviolettivovalo ja sitä suuremman energian sähkömagneettisen säteilyn muodot ovat elävälle kudokselle haitallisia [8], sillä niiden energia on sopivissa olosuhteissa riittävä orgaanisen molekyylin sidosten rikkomiseen. Ultraviolettivoaloa käytetäänkin muun muassa laboratorioissa ja sairaaloissa tilojen ja työvälineiden sterilointiin. Vedenpuhdistamoilla ja maasto-olosuhteissa UV-valoa voidaan käyttää vedessä olevien mikrobien tappamiseen.

---

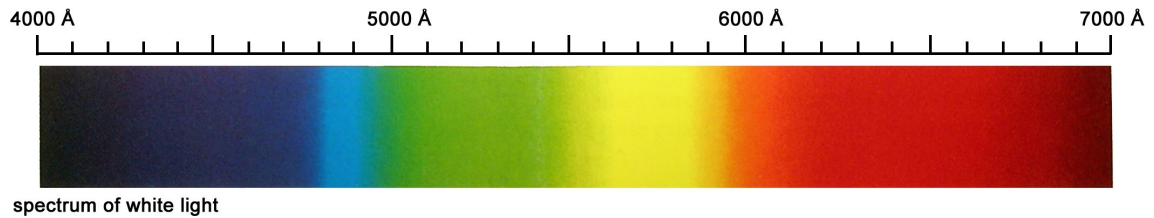
<sup>2</sup> $h = 6,62606876 \cdot 10^{-34} \text{ J s}$

<sup>3</sup> $c = 2,99792458 \cdot 10^8 \text{ m/s}$

<sup>4</sup>Louis-Victor de Broglie (1892-1987), Nobelin palkinto fysiikassa vuonna 1929.

## 2. SÄHKÖMAGNEETTINEN SÄTEILY

---



Kuva 2.3: Valkoisen valon spektri [7].

### 2.2 Röntgensäteily

Röntgensäteily on saanut nimensä Wilhelm Röntgenin<sup>5</sup> mukaan. Röntgen sai aikaan X-säteiksi kutsumaansa energieettistä säteilyä ensimmäisen kerran vuonna 1895 [9]. Hänen koelaitteessaan tyhjiöputken sisällä olevasta katodista irronneita termisiä elektroneja kiihdytettiin kilovoltiluokan jännitteellä. Anodiin törmänneet elektronit saivat aikaan voimakasta, tunkeutuvaa säteilyä.

Tyypillisesti röntgensäteilyn energia on joistakin sadoista elektronivolteista satoihin kiloelektronivolteihin. Pehmeästä röntgensäteilystä puhuttaessa tarkoitetaan röntgensäteily-spektrin matalan energian osaa, joka menee osittain päällekkäin korkean energian ultraviolettisäteilyn kanssa ja kovasta röntgensäteilystä puhuttaessa spektrin yläpäättä. Pehmeän ja kovan röntgensäteilyn rajana pidetään suurin piirtein kymmenen kiloelektronivoltin energiaa, mikä vastaa noin sadan pikometrin aallonpituutta tai kolmen petahertsin taajuutta.

Röntgensäteilyä syntyy periaatteessa päinvastaisessa prosessissa kuin valosähköisessä ilmiössä. Valosähköisessä ilmiössä materiaaliin osuvat fotonit luovuttavat energiaansa elektronien kineettiseksi energiaksi [10], mutta röntgensäteilyä syntyy kun elektronien kineettinen energia muuttuu fotoneiksi. Valosähköiseen ilmiöön tutustutaan lähemmin kappaleessa 4.1.3.

Röntgensäteily jaetaan tuottotavan perusteella *jarrutussäteilyyn* (bremsstrahlung) ja *karakteristiseen säteilyyn*, joista ensimmäistä syntyy varatun hiukkasen (yleensä elektronin) jarruuntuessa sen osuessa kohtioon ja jälkimmäistä atomin sisimpien kuorien viritystilojen purkautuessa. Jarrutussäteilystä kerrotaan lisää kappaleessa 4.4.1 ja karakteristisesta säteilystä kappaleessa 4.3.2.

Röntgensäteilyn tunnetuin käyttö lienee läpivalaisu. Monissa korkeajännitteitä käyttävissä laitteissa joudutaan huolehtimaan röntgensäteilyn tuoton pysymisestä kohtuullisena, sillä energieettisenä säteilyinä se on haitallista eläville kudoksille. ECR-ionilähteissä mikroaaltujen lämmittämät elektronit aiheuttavat röntgensäteilyä plasman ionisaatioprosesseissa ja osuessaan plasmakammion seinämille.

---

<sup>5</sup>Wilhelm Konrad Röntgen (1845-1923), Nobelin palkinto fysiikassa 1901.

### 2.3 Gammasäteily

Sähkömagneettisen spektrin energeettisimmät aallot ovat gammasäteitä. Niiden energia on 10 keV tai enemmän ja matalan energian gammasäteilyn alue meneekin osittain päällekkäin korkean energian röntgensäteilyn kanssa. Gamma- ja röntgensäteily erotetaan toisistaan enemmän tuottotavan kuin energian perusteella: gammasäteet syntyvät ydinreaktioissa ja röntgensäteet korkeaenergiaisten elektronien aiheuttamissa prosesseissa. Gammasäteilyn energialla ei ole ylärajaa, mutta energian ylittäessä 1,022 MeV alkaa parinmuodostus olla mahdollista. Tällöin voi käydä niin, että gammasäteen kulkiessa atomiytimen läheltä muodostuu elektroni-positronipari. Energian lisääntyessä parinmuodostuksen todennäköisyys kasvaa ja myös elektroni-positroniparia raskaampien hiukkasparien muodostuminen mahdollistuu. Usein gammasäteilystä puhuttaessa tarkoitetaan koko sähkömagneettista spektriä ja fotonia merkitään kirjallisuudessa yleisesti kreikkalaisella kirjaimella  $\gamma$  (gamma).

Tässä tutkielmassa termit gamma, röntgenhiukkanen, röntgensäteily, röntgenkvantti ja niin edelleen tarkoittavat kaikki samaa asiaa, ellei asiayhteydestä erikseen käy muuta ilmi. Niitä käytetään puhuttaessa ECR-ionilähteissä tuotetusta sähkömagneettisesta säteilystä, jonka energian yläraja on yleensä korkeintaan muutamia megaelektronivoltteja. Yleensä kyseinen säteily on lähes yksinomaan jarrutussäteilyä, sillä karakteristisen röntgensäteilyn piikit jäävät kiinnostavimman energia-alueen alapuolelle. JYFL 6,4 GHz ECR-ionilähteen tapauksessa simulaatioiden ja mittausten ylärajana on 1 MeV. Kiinnostavin energia-alue on noin 60-600 keV, sillä tätä matalamman energian säteily absorboituu kokonaan ionilähteen rakenteisiin.

# Luku 3

## Varauksen sähkö- ja magneettikenttä

Sähkömagneettinen säteily liittyy nimensä mukaisesti sähkö- ja magneettikenttiin. Sähkömagneettisessa aallossa nämä kentät värähtelevät toisiaan ylläpitäen ja etenevät valonnopeudella. Tässä luvussa tutustumme varauksia ympäröiviin kenttiin ja säteilyn syntymiseen varausten liiketilojen muutosten myötä.

### 3.1 Paikallaan oleva varaus

Paikallaan olevan yksittäisen pistevarauksen  $q$  sähkökenttä eli Coulombin kenttä on

$$\vec{E} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q}{r^2} \hat{r}, \quad (3.1)$$

missä  $\epsilon_0$  on tyhjiön permittiivisyys<sup>1</sup>,  $r$  etäisyys varauksesta ja  $\hat{r}$  varauksesta radiaaliseen suuntaan osoittava yksikkövektori. Jos varaus on positiivinen, sähkökentän kenttäviivat<sup>2</sup> alkavat varauksesta ja kulkevat suoraviivaisesti joka suuntaan (kuva 3.1). Vastaavasti negatiivisen varauksen voimaviivat päättyvät varaukseen. Useiden varausten tapauksessa sähkökenttä tietyssä pisteessä on yksittäisten varausten sähkökenttien vektorisumma tai yleistäen integraali varaustiheyslementtien muodostamien sähkökenttien yli.

Kun varauksen  $q$  muodostamaan sähkökenttään asetetaan testivaraus  $q_0$ , vaikuttaa näiden välillä voima, jota kutsutaan Coulombin vuorovaikutukseksi. Voima  $F$  on muotoa

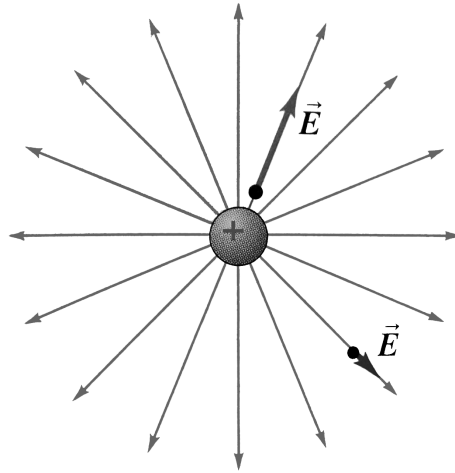
---

<sup>1</sup> $\epsilon_0 = 8,8541878176 \cdot 10^{-12} \text{ C}^2/(\text{N m}^2)$

<sup>2</sup>Mitään fyysisiä kenttäviivoja ei tietenkään ole olemassa; ne ovat vain kätevä ajatusmalli ilmiön havainnollistamiseen.

### 3. VARAUKSEN SÄHKÖ- JA MAGNEETTIKENTTÄ

---



Kuva 3.1: Positiivisen pistevarauksen sähkökenttä. Kentän voimakkuus on suurin lähellä varausta. Negatiivisen varauksen kenttäviivat osoittavat kohti varausta ([5], s. 819).

$$\vec{F} = q_0 \vec{E}, \quad (3.2)$$

jolloin yhtälön (3.1) avulla saadaan kahden varauksen välillä vaikuttavaksi Coulombin voimaksi

$$\vec{F} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q_0 q}{r^2} \hat{r}, \quad (3.3)$$

missä  $\hat{r}$  on  $q$ :n ja  $q_0$ :n välinen suuntavektori.

## 3.2 Liikkuva varaus

Tasaisella nopeudella  $\vec{v}$  havainnoijan suhteen liikkuvan varauksen ympärille muodostuu sähkökentän (3.1) lisäksi myös toisenlainen kenttä, jota kutsumme magneettikentäksi  $\vec{B}$ :

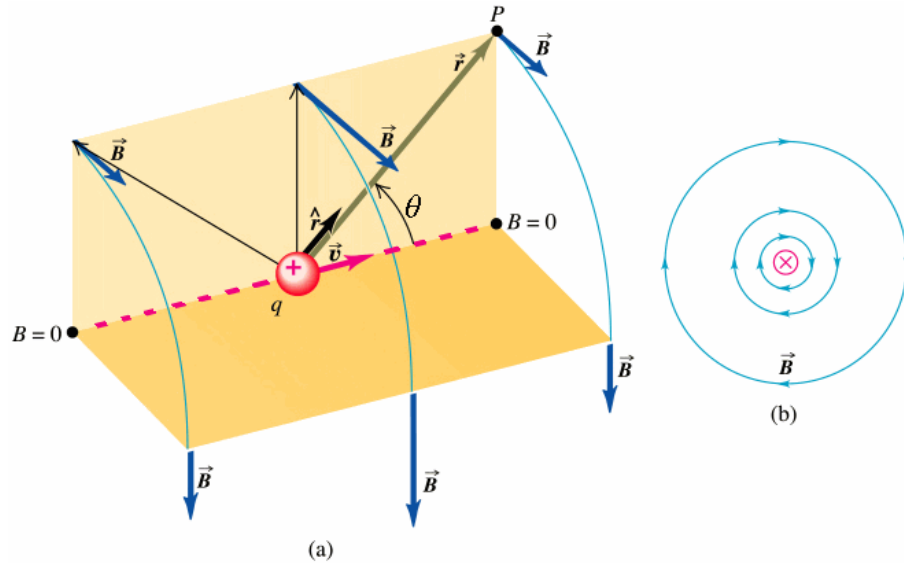
$$\vec{B} = \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{q \vec{v} \times \hat{r}}{r^2}, \quad (3.4)$$

missä  $\mu_0$  on tyhjiön permeabiliteetti<sup>3</sup> ja  $\vec{r}$  on vektori varauksesta mittauspisteeseen P. Tämä tulos on yksi muoto *Biot-Savart'n* laista. Tarkasti ottaen tämä pätee vain kun nopeus  $v$  on

---

<sup>3</sup> $\mu_0 = 4\pi \cdot 10^{-7} \text{ Wb}/(\text{A m})$

### 3. VARAUKSEN SÄHKÖ- JA MAGNEETTIKENTTÄ



Kuva 3.2: Liikkuvan positiivisen pistevarauksen aiheuttama magneettikenttä. (a) Kaikissa pisteissä  $P$  magneettikenttä  $\vec{B}$  on kohtisuorassa varauksen nopeusvektorin  $\vec{v}$  ja  $\vec{r}$ :n muodostaman tason suhteen. Varauksen kulkusuunnassa magneettikenttä  $\vec{B} = 0$ . (b) Magneettikentän kenttäviivat kuvattuna hiukkasen takaa ([5], s. 1065).

pieni valonnopeuteen  $c$  nähden. Liikkuvan varauksen sähkökenttä on radiaalinen kuten paikallaan olevalla varauksella ja magneettikentän kenttäviivat ovat varauksen kulkusuuntaan kohtisuorassa olevia sisäkkäisiä ympyröitä. Tilanne on havainnollistettu kuvassa 3.2.

Einsteinin mukaan magneettikenttä on sähkökentän relativistinen osa, joka syntyy kun liikkuvan varauksen sähkökenttä ei paikallaan olevan havainnoijan mielestä ole enää pallosymmetrinen [11]. Eri havainnoijien inertiaalikoordinaatistojen<sup>4</sup> välisten Lorentz-muunnosten avulla sähkökentästä "irtoaa" tällöin magneettikentän termi. Magneetti- ja sähkökentät ovatkin pohjimmiltaan sama ilmiö. Sama kenttä saattaa näyttää toiselle havainnoijalle sähkökentältä ja toiselle magneettikentältä riippuen näiden liiketiloista toisiinsa nähden. Nopeudella  $v$  liikkuvan varauksen sähkökenttä saa relativistisen tarkastelun myötä muodon

$$\vec{E} = \frac{q}{4\pi\epsilon_0 r^3} \frac{1 - \beta^2}{[1 - \beta^2 \sin^2 \theta]^{3/2}} \vec{r}, \quad (3.5)$$

missä  $\beta = v/c$ ,  $\vec{r}$  on etäisyys havainnoijasta varaukseen ja  $\theta$  on  $\vec{r}$ :n ja varauksen nopeusvektorin  $\vec{v}$  välinen kulma. Jos varauksen nopeus on huomattavasti valonnopeutta pienempi ( $v \ll c$ ), supistuu edellinen tulos kaavaksi (3.1).

Varauksen sähkökentän ja magneettikentän välillä on yhteys

<sup>4</sup>Inertiaalikoordinaatisto on koordinaatisto, jossa Newtonin lait pätevät.

### 3. VARAUKSEN SÄHKÖ- JA MAGNEETTIKENTTÄ

---

$$\vec{B} = \frac{\vec{v} \times \vec{E}}{c^2}. \quad (3.6)$$

Valonnopeus  $c$ , tyhjiön permeabiliteetti  $\mu_0$  ja tyhjiön permittiivisyys  $\epsilon_0$  liittyvät toisiinsa siten, että  $\epsilon_0\mu_0 = 1/c^2$ .

Magneettikenttä kohdistaa siinä liikkuvaan varattuun hiukkaseen voiman

$$\vec{F} = q\vec{v} \times \vec{B}, \quad (3.7)$$

joka on nolasta eroava vain jos hiukkasen nopeudella on kohtisuorassa magneettikenttää vastaan oleva komponentti. Magneettinen voima ei siis vaikuta levossa olevaan varattuun hiukkaseen tai hiukkaseen, joka kulkee magneettikentän suuntaisesti.

Sähkö- ja magneettikenttien  $\vec{E}$  ja  $\vec{B}$  yhdessä nopeudella  $\vec{v}$  liikkuvaan varaukseen  $q$  kohdistamaa voimaa,

$$\vec{F} = q(\vec{E} + \vec{v} \times \vec{B}), \quad (3.8)$$

kutsutaan Lorentzin voimaksi.

### 3.3 Kiihtyvässä liikkeessä olevan varauksen sähkö- ja magneettikenttä

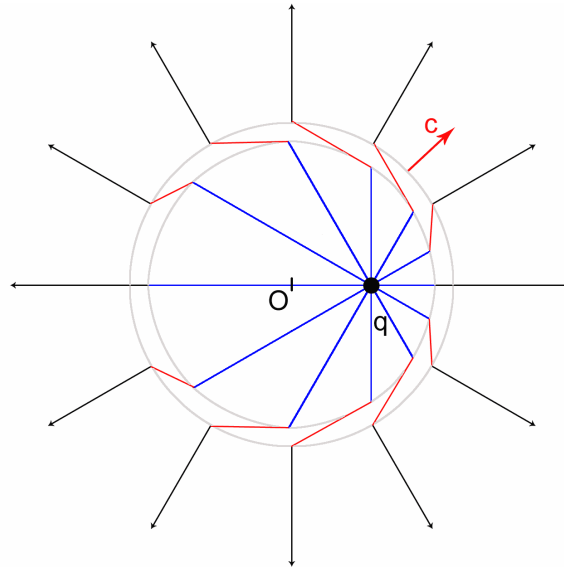
Varauksen ollessa kiihtyvässä liikkeessä, muodostuu sen ympärille sähkö- ja magneettikenttien (3.1, 3.4) lisäksi ylimääräinen, varauksesta valonnopeudella loittoneva sähkömagneettinen pulssi, joka kuljettaa mukanaan sekä energiaa että liikemäärää. Pulssin muodostuessa säännöllisesti syntyy sähkömagneettinen aalto, jossa sähkö- ja magneettikentät ylläpitävät toisiaan: sähkökenttä indusoi magneettikentän ja magneettikenttä indusoi sähkökentän. Tämän vuoksi sähkömagneettinen aalto ei tarvitse väliainetta edetäkseen. Asia voidaan todeta myös Maxwellin yhtälöistä tyhjiössä: Maxwell III eli Faradayn laki

$$\nabla \times \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \quad (3.9)$$

kuvaa sähkökentän  $\vec{E}$  indusoitumista liikkeen tai magneettikentän  $\vec{B}$  muutosten myötä ja Maxwell IV eli Maxwellin-Ampèren laki



### 3. VARAUKSEN SÄHKÖ- JA MAGNEETTIKENTTÄ



Kuva 3.3: Kiihtyvän varauksen aiheuttama häiriö sähkökentässä. Varaus on aluksi levossa pisteessä  $O$ . Sitten se kiihdyttää nopeasti ja liikkuu lopuksi tasaisesti kuvassa oikealle. Varauksen alkuperäisiä ja kiihdytyksen jälkeisiä sähkökentän kenttäviivoja yhdistää häiriö, joka liikkuu valonnopeudella pois päin.

$$\nabla \times \vec{B} = \mu_0 \epsilon_0 \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} \quad (3.10)$$

sisältää magneettikentän  $\vec{B}$  indusoitumisen muuttuvan sähkökentän  $\vec{E}$  aiheuttamana.

Aalto saa alkunsa kiihtyvän varauksen muodostamasta poikkeamasta varauksen sähkökenttään. Tilanne on havainnollistettu kuvassa 3.3. Ajatellaan varausta, joka kiihdyttää lyhyessä ajassa nopeuteen  $v$ . Varauksen sähkökentän kenttäviivat ennen ja jälkeen kiihdytyksen ovat radiaalisia, mutta kiihdytyksen aikana niihin muodostuu mutka. Tämän mutkan poikittainen sähkökentän komponentti (vs. radiaalinen) on sähkömagneettisen aallon alkuperä. Poikittainen komponentti saa muodon

$$E_\theta = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{qa \sin \theta}{c^2 r}, \quad (3.11)$$

missä  $a$  on kiihtyvyys,  $\theta$  varauksen etenemissuunnan ja mittauspisteen välinen kulma ja  $r$  etäisyys. Huomionarvoista tuloksessa on, että sähkökentän poikittainen komponentti on käänteisesti riippuvainen etäisyydestä  $r$  toisin kuin varauksen Coulombin kenttä (3.5), joka riippuu käänteisesti etäisyyden neliöstä – aalto vaimenee siis paljon hitaammin kuin varauksen sähkökenttä. Tulos on myös suoraan verrannollinen kiihtyvyyteen  $a$ , eli poikittainen sähkökentän komponentti on sitä voimakkaampi mitä suurempi kiihtyvyys on.

### 3. VARAUKSEN SÄHKÖ- JA MAGNEETTIENTÄ

---

Harmonisesti<sup>5</sup> kulmanopeudella  $\omega$  oskilloivan varauksen kiihtyvyys voidaan kirjoittaa muodossa  $a = a_0 \sin \omega t$ , missä  $a_0$  on vakio. Tällöin sen aiheuttama säteilykenttä on

$$E_{\theta}(t,r) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q \sin \theta}{c^2 r} a_0 \sin\left(\omega t - \frac{\omega r}{c}\right) = \text{vakio} \times \sin\left(\omega t - \frac{\omega r}{c}\right). \quad (3.12)$$

Tämä tulos vastaa taajuudella  $\omega$  värähtelevää ja radiaalisesti etenevää harmonista palloaaltoa.

Kiihtyvä varaus muodostaa häiriön magneettikenttäänsä vastaavalla tavalla kuin sähkökenttäänsä. Säteilykentän magneettikomponentti ilmaistuna sähkökentän poikittaisen komponentin avulla on

$$B = \frac{E_{\theta}}{c}. \quad (3.13)$$

Magneettikenttä on aina kohtisuorassa sähkökenttää vastaan ja niiden keskinäiset suunnat saadaan oikean käden säännöstä.

## 3.4 Synkrotronisäteily

Varatun hiukkasen nopeuden muuttuessa osa kiihdyttävästä tai jarruttavasta energiasta kuluu sähkömagneettisen säteilyn tuottamiseen. Kiihdytettäessä elektroneja lineaarikiihdyttimessä tämä ei ole suurikaan ongelma, sillä kevyinä hiukkasina elektronit on helppo kiihdyttää lähelle valonnopeutta. Lähellä valonnopeutta kiihtyvyys alkaa relativistisista ilmiöistä johtuen hidastua kiihdyttävän voiman pysyessä vakiona. Syklotroneissa ja erityisesti synkrotroneissa<sup>6</sup> ongelma sen sijaan on merkittävä, sillä hiukkasen pitäminen ympyrä- tai spiraaliradalla magneettikenttien avulla aiheuttaa jatkuvaa radiaalista kiihtyvyyttä. Jokaisella kierroksella kiihdyttimessä hiukkasen suunta siis muuttuu 360 asteen verran.

Sähkömagneettisena säteilynä menetetyn kokonaistehon laskeminen perustuu klassiseen *Larmorin kaavaan* [12]

$$P = \frac{dE_k}{dt} = \frac{q^2 a^2}{6\pi\epsilon_0 c^3}, \quad (3.14)$$

---

<sup>5</sup>Yksinkertainen harmoninen liike on värähtelyä tasapainoaseman ympärillä: värähtelijän kiihtyvyys on verrannollinen, mutta vastakkaisuuntainen, poikkeamaan tasapainoasemasta.

<sup>6</sup>Synkrotroni on hiukkaskiihdytin, jossa hiukkasten kiertotaajuuteen kiihdyttimessä synkronoidut muuttuvat sähkö- ja magneettikentät mahdollistavat hiukkasten kiihdyttämisen senkin jälkeen kun relativistiset ilmiöt vaikuttavat merkittävästi.

### 3. VARAUKSEN SÄHKÖ- JA MAGNEETTIKENTTÄ

missä  $dE_k/dt$  on energian muutos aikayksikössä ja  $a$  on varauksen  $q$  kiihtyvyys. Kaava pätee hitaasti liikkuvalla ( $v \ll c$ ) ja hetkellisesti levossa olevalle varaukselle. Lorentz-muuntamalla olennaiset suureet päästään myös relativistisille hiukkasille pätevään tulokseen:

$$P = \frac{dE_k}{dt} = \frac{q^2}{6\pi\epsilon_0 c^3} \frac{a^2 - \frac{(\vec{v} \times \vec{a})^2}{c^2}}{\left(1 - \frac{v^2}{c^2}\right)^3}, \quad (3.15)$$

missä  $\vec{v}$  ja  $\vec{a}$  ovat hiukkasen nopeus ja kiihtyvyys. Tulos tunnetaan myös *Lienardin kaavana*.  $R$ -säteisellä ympyräradalla olevalle elektronille  $\vec{v} \times \vec{a} = va$  ja  $a = v^2/R$ , jolloin yhtälöstä 3.15 saadaan säteilytehoksi

$$P = \frac{cq^2(E_{\text{tot}}^2/E_0^2 - 1)^2}{6\pi\epsilon_0 R^2} = \frac{cq^2(\gamma^2 - 1)^2}{6\pi\epsilon_0 R^2}, \quad (3.16)$$

missä  $E_0$  on varauksen lepoenergia,  $E_{\text{tot}}$  varauksen kokonaisenergia ja  $\gamma = (1 - v^2/c^2)^{-1/2} = E_k/(m_0c^2) + 1 = E_{\text{tot}}/E_0$  relativistinen gamma. Tämä pätee tietenkin vain hetkellisesti, ellei varausta jatkuvasti kiihdytetä säteilynä hukatun energian kompensoimiseksi. ECR-ionilähteissä synkrotronisäteilyn aiheuttama hetkellinen energiahukka on energialtaan 1 MeV:n elektroneille korkeintaan suuruusluokkaa 1 MeV/s tai 0,1 pW. Yhtä elektronin kierrosta kohden ionilähteen magneettikentässä energianmenetys on noin 0,1 meV, mikä on samaa suuruusluokkaa ECR-ionilähteen mikroaaltolähettimen taajuuden kanssa. Erittäin suurilla energioilla ( $\gamma \gg 1$ ) termiä  $(\gamma^2 - 1)^2$  voidaan arvioida yksinkertaisesti  $\gamma^4$ :llä [13].

Synkrotronisäteilyn säteilytehon kulmajakauma suuntaan  $\hat{n}$  saadaan nopeuden suuntaan tapahtuvalle kiihdytykselle yhtälöstä

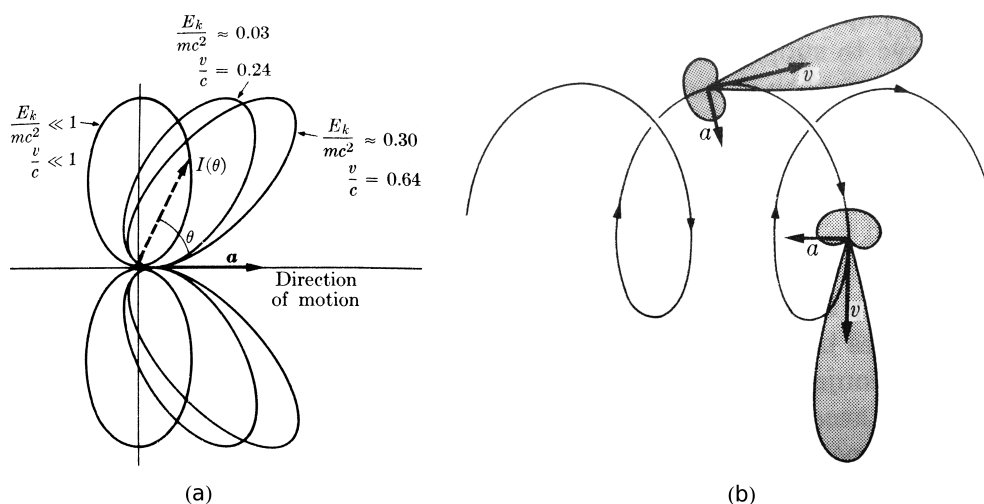
$$P(\hat{n}, t) = \frac{q^2}{16\pi^2 c^3} a^2 (1 - \beta^2)^3 \frac{\sin^2 \theta}{(1 - \beta \cos \theta)^5}, \quad (3.17)$$

ja kohtisuoraan nopeusvektoria vastaan tapahtuvalle vakiokiihdytykselle eli ympyräliik-  
keelle kaavasta

$$P(\hat{n}, t) = \frac{q^2}{16\pi^2 c^3} a^2 (1 - \beta^2) \left[ \frac{1}{(1 - \beta \cos \theta)^3} (1 - \beta^2) \frac{\sin^2 \theta \cos^2 \theta}{(1 - \beta \cos \theta)^5} \right], \quad (3.18)$$

missä  $\theta$  on vektorin  $\hat{n}$  ja nopeuden  $\vec{v}$  välinen kulma napakoordinaatistossa, jossa z-akseli on yhdensuuntainen varauksen hetkellisen nopeuden kanssa ja ympyräliike on xz-tasossa [15].

### 3. VARAUKSEN SÄHKÖ- JA MAGNEETTIKENTTÄ



Kuva 3.4: (a) Kiihtyvän varauksen säteilemän energian kulmajakauma kun kiihtyvyys on yhdensuuntainen nopeuden kanssa. Säteilykeila kääntyy kohti kulkusuuntaa nopeuden lähestyessä valonnopeutta. (b) Synkrotronisäteily magneettikentässä suuntaansa muuttavasta varauksesta. Säteilykeila on piikittynyt kulkusuunnan tangentin suuntaan. Kuvat [14], ss. 737-738.

Epärelativistisen varauksen tapauksessa säteilyenergian kulmajakauma on dipolikentän muotoinen ja kohtisuorassa kiihtyvyyttä vastaan, kuten kuvassa 3.4 (a). Varauksen nopeuden kasvaessa säteilyä alkaa emittoitua enenevissä määrin hiukkasen kulkusuuntaa kohden, kunnes erittäin relativistisissa tapauksissa säteilyjakauma on hyvin terävästi piikittynyt varauksen kulkusuunnassa.

Energiahukka on suurin kevyitä varauksia, kuten elektroneja, kiihdytettäessä. Synkrotroneja käytetäänkin nykyään voimakkaan ja koherentin eli saman vaiheen sekä polarisaation omaavan röntgensäteilyn tuottamiseen lukuisiin käyttötarkoituksiin. Elektronit kiihdytetään vakionopeuteen ja niitä pidetään pitkiä aikoja niin sanotussa varastorenkaassa. Renkaassa on suoria osuuksia ja kääntömagneetteja. Kääntömagneetin läpi kulkiessaan relativistiset elektronit tuottavat voimakkaan säteilykeilan (kuva 3.4 (b)), joka ohjataan tutkimusasemalle renkaan ulkopuolelle [16]. Myös niin sanottujen undulator- ja wiggler-magneettien käyttö synkrotroneissa on yleistä. Molemmat muodostavat suihkulinjaan periodisesti muuttuvan magneettikentän, joka ravistaa sen läpi kulkevia elektroneja edestakaisin. Magneettikentän jaksoa ja voimakkuutta säätämällä saadaan aikaan halutunlaista synkrotronisäteilyä.

Kaikkein suurimpia kiihtyvyyksiä varaus kokee törmätessään kiinteään materiaaliin, jolloin suuri osa varauksen liike-energiasta voi muuntua kerralla yksittäiseksi fotoniksi. Tällöin puhutaan jarrutussäteilystä.

## Luku 4

# Hiukkasten törmäysprosessit aineessa

Kahden hiukkasen kohdatessa tapahtuu elastinen tai epäelastinen törmäys. Ensimmäisessä tapauksessa hiukkasten välinen energia ja liikemäärä säilyvät. Varattujen hiukkasten törmätessä materiaaliin elastiset törmäykset ovat Couloumbin vuorovaikutuksen aiheuttamia. Epäelastisessa törmäyksessä hiukkasen energia muuttuu tai voi jopa muuntua kokonaan kohtiomateriaalin energiaksi, jolloin puhutaan absorptiosta.

Tärkeimmät elektronien kokemat sähkömagneettista säteilyä tuottavat fysikaaliset prosessit niiden törmätessä materiaaliin ovat sironta, jarrutussäteily ja atomien ionisaatio. Syntynyt säteily puolestaan vuorovaikuttaa materiaalin kanssa valosähköisen ilmiön, Comptonin ilmiön, Rayleigh'n sironnan ja fluoresenssin kautta. Riittävän suurilla energioilla myös parinmuodostus on mahdollista.

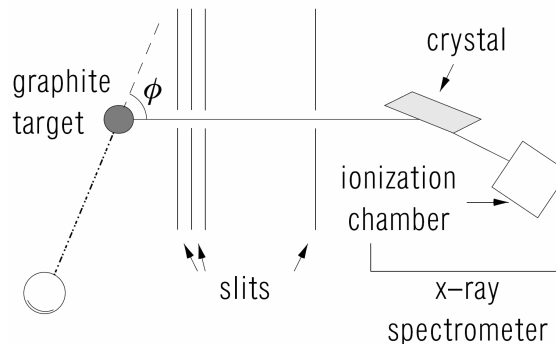
### 4.1 Fotonien vuorovaikutus aineen kanssa

Tärkeimmät röntgensäteilyn ja atomien törmäysprosessit ovat Comptonin sironta, valosähköinen absorptio sekä Rayleigh'n sironta. Yli 1,022 MeV:n energioilla myös parinmuodostus on mahdollista ja hyvin pienillä energioilla muut sirontaprosessit alkavat näytellä merkittävää roolia. Tässä työssä käytetyllä energia-alueella valosähköinen ilmiö ja Comptonin sironta ovat hallitsevimpiä prosesseja.

#### 4.1.1 Rayleigh'n sironta

Sähkömagneettisen säteilyn törmätessä aineessa paljon aallonpituuttaan pienempään hiukkaseen täysin kimmoisasti puhutaan Rayleigh'n sironnasta. Säteilyn aallonpituus ei siis

## 4. HIUKKASTEN TÖRMÄYSPROSESSIT AINEESSA



Kuva 4.1: Comptonin koejärjestely [19].

muutu. Sironnan suuruus on voimakkaasti ( $\propto 1/\lambda^4$ ) riippuvainen fotonin aallonpituudesta. Tämä selittää esimerkiksi sen, miksi taivas on sininen, sillä sininen komponentti valosta siroaa paljon enemmän kuin punainen, jolloin sinistä valoa näyttää tulevan joka puolelta taivasta. Rayleigh'n sironnan kulmajakauma on symmetrinen siroamispisteeseen saapuvaa säteilyä kohtisuoraan olevan tason kanssa.

Rayleigh'n sironnasta paljon epätodennäköisemmässä Raman-sironnassa sähkömagneettinen säteily siroaa aineesta siten, että säteilyn taajuus muuttuu. Tällaisen epäelastisen sironnan todennäköisyys on yleensä vähintään kuusi kertaluokkaa pienempi kuin elastisen Rayleigh'n sironnan [17]. Raman sironnalla voi tapahtua kahdella tavalla: Stokesin sironnalla, missä molekyyli siirtyy perustilasta viritystilaan ja fotonit menettävät energiaa sekä päinvastaisella anti-Stokes sironnalla, missä fotonin energia kasvaa. Raman-sironnalla ei ole fluoresenssin tapaan resonanssi-ilmiötä, vaan voi esiintyä riippumatta fotonien taajuudesta.

### 4.1.2 Comptonin sironnasta

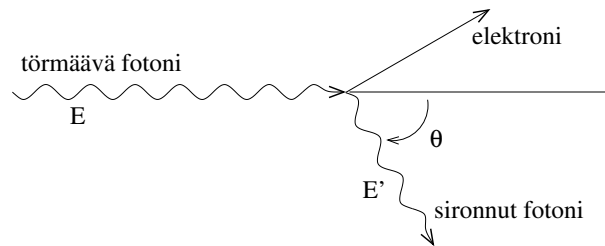
Comptonin ilmiössä fotonit siroavat vapaista elektroneista ja sen energia muuttuu. Ilmiöllä on historiallisesti tärkeä rooli nykyfysiikan kehityksessä. Sen selittäminen lisäsi merkittävästi fysiikan ymmärrystä, sillä selitys toi lisätietoa valosähköisen ilmiön yhteydessä havaitusta sähkömagneettisen säteilyn hiukkasluonteesta.

Kuuluisassa kokeessaan vuonna 1923 A. H. Compton<sup>1</sup> pommitti grafiittikohtiota röntgensäteillä (kuva 4.1) ja yritti selvittää, miten kohtiomateriaalin säteilemät sekundaariset röntgensäteet voitaisiin selittää [18]. Vaikka valosähköinen ilmiö oli selitetty jo aikaisemmin valon hiukkasluonteen avulla, Comptonin sironnasta toi merkittävää lisätietoa fotoneista: sironnasta voitiin selittää vain, jos fotonit kuljettamansa energian lisäksi olivat lepomassattomia ja niillä oli tietty liikemäärä.

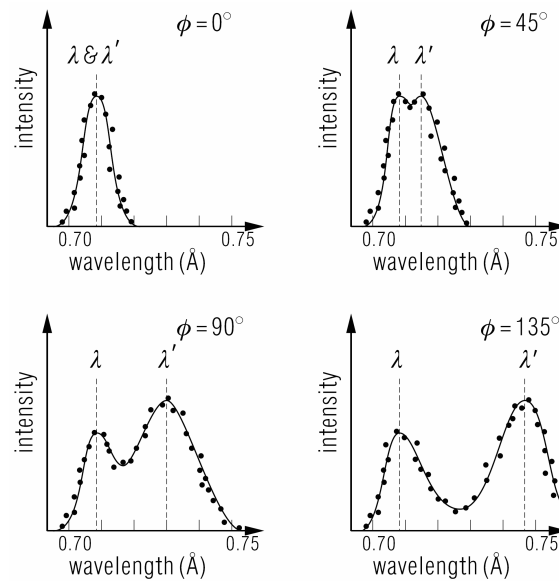
<sup>1</sup>Arthur Holly Compton (1892-1962).

#### 4. HIUKKASTEN TÖRMÄYSPROSESSIT AINEESSA

---



Kuva 4.2: Comptonin ilmiössä fotoni törmää vapaaseen elektroniin ja siroaa kulmaan  $\theta$  menettäen samalla osan energiastaan elektronin rekylienergiaksi.



Kuva 4.3: Comptonin sironnassa mitatut röntgenpiikit aallonpituuden funktiona eri energioilla. Sironnakulman kasvaessa myös sironneen piikin aallonpituus kasvaa [19].

#### 4. HIUKKASTEN TÖRMÄYSPROSESSIT AINEESSA

Kuvassa 4.2 on yksinkertaistettu kuva sirontatapahtumasta Comptonin ilmiössä. Sähkömagneettisen aallon vuorovaikuttaessa vapaan elektronin kanssa havaitaan, että aalto siirtyy ja energiaspektriin ilmestyy toinen, suuremman aallonpituuden piikki nolasta eroavilla sirontakulmilla. Kuvasta 4.3 nähdään, että ylimääräisen piikin aallonpituus kasvaa sirontakulman kasvaessa. Klassinen Thomsonin sironta ei voi selittää ilmiötä, sillä sen mukaan sironneen aallon aallonpituus on sama kuin alkuperäisen elektroniin törmäyksen aallon aallonpituus. Ilmiön selittämiseksi aallon ja elektronin törmäystä on käsiteltävä kahden hiukkasen kinemaattisena törmäyksenä, missä sekä energia että liikemäärä säilyvät. Tämä onnistuu, kun törmäävä aalto koostuu hiukkasista, joiden lepomassa on nolla ja jotka kuljettavat mukanaan sekä energiaa että liikemäärää. Aalto siis siirtää törmäyksessä osan energiastaan elektronille. Sähkömagneettisen aallon kvantin eli fotonin energia voidaan ilmaista muodossa  $E = hc/\lambda$ , missä  $h$  on Planckin vakio,  $\lambda$  aallonpituus ja  $c$  valonnopeus. Energian ja liikemäärän säilymisen nojalla voidaan Comptonin sironnalle johtaa kaava

$$\lambda' - \lambda = \frac{h}{m_e c} (1 - \cos \theta) \quad (4.1)$$

tai

$$E' = \frac{E}{1 + (E/m_e c^2)(1 - \cos \theta)}, \quad (4.2)$$

missä  $\lambda$  ( $E$ ) on alkuperäinen aallonpituus (energia),  $\lambda'$  ( $E'$ ) sironneen aallon aallonpituus (energia),  $m_e$  elektronin massa ja  $\theta$  sirontakulma.

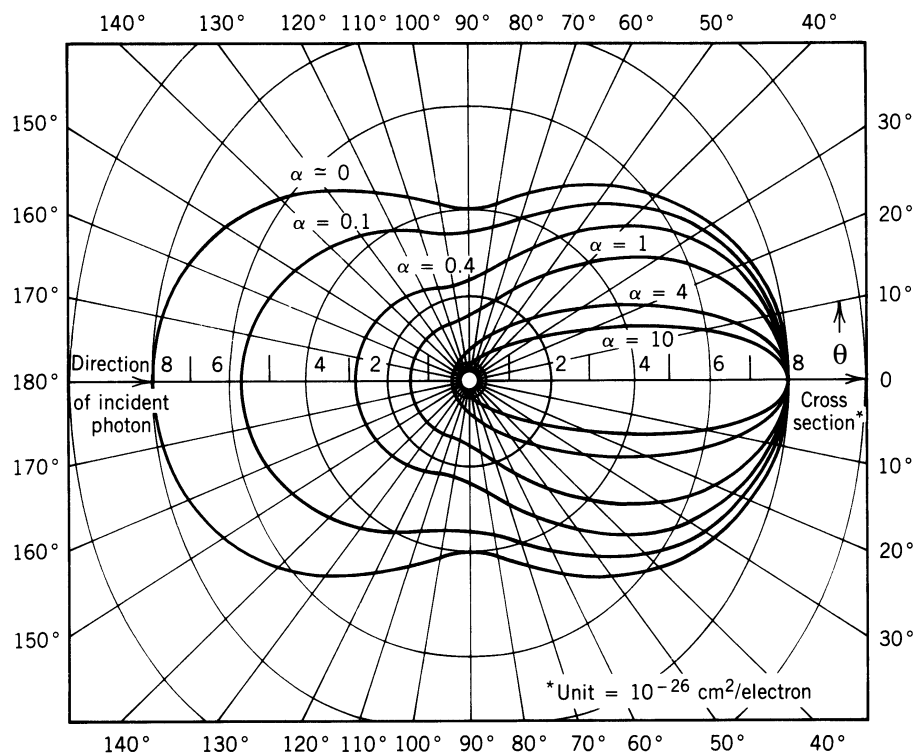
Törmäys vapaaseen elektroniin tarkoittaa tässä sitä, että elektronin sidosenergia atomiin on paljon pienempi kuin siihen törmäyvän fotonin energia, jolloin elektronia voidaan käytännössä käsitellä vapaana. Koska kaikki sirontakulmat ovat mahdollisia, energiaa voi törmäyksessä siirtyä elektronille lähes nolasta valtaosaan fotonin alkuperäisestä energiasta. Suurilla energioilla valtaosa sironneista fotoneista havaitaan etukulmilla, mutta pienillä energioilla kaikki kulmat ovat todennäköisiä. Siroamisen todennäköisyys kulmaan  $\theta$  voidaan laskea *Kleinin-Nishinan kaavasta* differentiaaliselle vaikutusalalle elektronia kohden [20]:

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma_c}{d\Omega} = & \left( \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 m_e c^2} \right)^2 \left[ \frac{1}{1 + \alpha(1 - \cos \theta)} \right]^3 \left[ \frac{1 + \cos \theta}{2} \right] \\ & \times \left[ 1 + \frac{\alpha^2(1 + \cos \theta)}{(1 + \cos^2 \theta)[1 + \alpha(1 - \cos \theta)]} \right], \end{aligned} \quad (4.3)$$

missä  $\alpha$  on alkuperäisen fotonin energian ja elektronin lepoenergian (511 keV) suhde. Kuvassa 4.4 on napakoordinaatistoon piirretty kuva Comptonin sironnan vaikutusaloista eri



#### 4. HIUKKASTEN TÖRMÄYSPROSESSIT AINEESSA



Kuva 4.4: Comptonin sironnan vaikutusaloja fotonille eri energioilla [21]. Fotoni saapuu kuvaan vasemmalta ja sen energiaa kuvaava parametri  $\alpha$  on fotonin energian ja elektronin lepoenergian suhde. Napakoordinaatistoon piirretyt käyrät kertovat sironneen säteilyn määrän sirontakulmaan  $\theta$  energioilla  $\alpha$ .

kulmiin muutamalla eri energialla. Pienillä energioilla sirontakulma on symmetrinen etu- ja takakulmien välillä, mutta energian kasvaessa sironneet fotonit piikittyvät etukulmille.

Osa elektroneja kohti ammutuista fotoneista jatkaa matkaansa suoraan tai siroaa aineen atomiytimistä, joten alkuperäisen aallonpituuden fotoneja näkyy spektrissä myös nolasta eroavilla kulmilla. Myös fotonin ja atomiytimen välisessä törmäyksessä energian ja liikemäärän säilyminen toteutuu ja sironneen fotonin energia ei ole täsmälleen sama kuin alkuperäisen. Muutos on kuitenkin noin neljä kertaluokkaa pienempi kuin elektroneihin törmätessä, koska ytimet ovat paljon massiivisempia. Atomiytimeistä tai siihen vahvasti sidotusta elektronista siroaminen tarkoittaa oleellisesti koko atomista siroamista ja sen vaikutus on usein niin pieni, että sitä ei edes havaita. Comptonin sirontaa tapahtuu kaikissa materiaaleissa ja siroavan piikin aallonpituus saadaan aina kaavasta (4.1).

### 4.1.3 Valosähköinen ilmiö

Valosähköisessä ilmiössä materiaaliin osuva sähkömagneettinen säteily saa aikaan elektronin emittoitumisen. Säteilyn energian on oltava suurempi kuin materiaalille ominaisen *työfunktion*. Yksittäinen säteilykvantti siirtää aina elektronille koko energiansa, josta osa kuluu elektronin irrottamiseen atomista materiaalista (työfunktio) ja loput siirtyvät elektronin kineettiseksi energiaksi. Säteilyn energian ollessa liian pieni fotoelektroneja ei siis havaita ollenkaan. Säteilyn intensiteetti vaikuttaa suoraan emittoitujen elektronien määrään, mutta vain säteilyn energia vaikuttaa elektronien kineettiseen energiaan. Säteilykvantin energialla  $E_f = hf$ , missä  $f$  on kvantin taajuus, työfunktio  $\phi$  ja havaitun elektronin maksimienergialla  $E_{kmax}$  on näin ollen yhteys

$$hf = \phi + E_{kmax}. \quad (4.4)$$

Alunperin valosähköistä ilmiötä tutkittiin pommittamalla metallilevyn pintaa valolla ja tutkimalla siitä irronneita elektroneja, mutta sama ilmiö havaitaan kaikilla materiaaleilla ja myös niiden sisällä. Pommitettaessa materiaalia riittävän suuren energian fotoneilla, voivat myös tiukemmin atomiin sidotut sisäkuorien elektronit irrota atomista. Tällöin virittyneen atomin relaksaatio aiheuttaa karakteristisen röntgensäteilyn emittoitumisen eli niin sanotun röntgenfluoresenssi-ilmiön tai Auger-emission eli ylemmän kuoren atomielektronin poistumisen atomista.

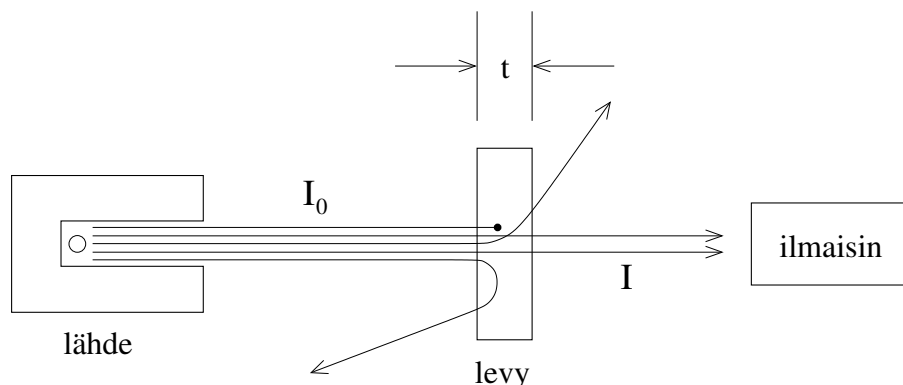
Valosähköinen ilmiö mahdollistaa puolijohteisiin sovellettuna muun muassa valodiodien ja aurinkopaneelien valmistuksen. Muita ilmiön hyödyntämiseen perustuvia laitteita ovat esimerkiksi valonmonistimet. Fotojohtavuudesta puhutaan kun puolijohde alkaa johtaa pommitettaessa sitä sopivan energian säteilyllä.

## 4.2 Röntgensäteilyn vaimeneminen väliaineessa

Röntgensäteilyn kulkiessa väliaineen läpi sen intensiteetti vaimenee voimakkaasti. Tärkeimmät mekanismit ovat Comptonin sironta, missä alkuperäinen fotoni siroaa aineen elektroneista, ja valosähköinen absorptio, missä alkuperäinen säteily vaimenee fluoresenssin ja Auger-elektronien tuoton myötä. Korkeilla energioilla myös parinmuodostuksella on merkittävä vaikutus.

Kuvassa 4.5 on esitelty mittausjärjestely, jossa ammutaan kollimoituja, tietyn energian fotoneita  $t$ -paksuisen levyn läpi ja mitataan läpi päässeitä fotoneita levyn toisella puolella olevalla ilmaisimella. Eri prosessien myötä materiaalissa kulkevia fotoneita absorboituu tai siroaa ja niitä ei enää havaita toisella puolella. Jokaiselle prosessille voidaan määrittää todennäköisyys absorboivan materiaalin pituusyksikköä kohden ja niiden summa kertoo

#### 4. HIUKKASTEN TÖRMÄYSPROSESSIT AINEESSA



Kuva 4.5: Koejärjestely  $t$ -paksuisen levyn säteilyabsorption mittaamiseen.

todennäköisyyden sille, että fotonit poistuu alkuperäisestä kollimoidusta fotonisuihkusta kuljettuaan materiaalin läpi. Tulosta sanotaan *lineaariseksi vaimennuskertoimeksi*:

$$\mu = \tau + \sigma + \kappa, \quad (4.5)$$

missä  $\tau$ ,  $\sigma$  ja  $\kappa$  ovat valosähköisestä absorptiosta, Comptonin sironnasta ja parinmuodostuksesta johtuvat kertoimet, joiden yksikkö on yleensä ilmoitettu muodossa  $1/\text{cm}$ . Esimerkiksi Comptonin sironnalle kerroin  $\sigma = \sigma_c NZ$  saadaan integroimalla kaava (4.3) kaikkien kulmien yli, jolloin saadaan vaikutusala fotonin sironnalle materiaalin elektroneja kohti  $\sigma_c$ . Tämä tulos kerrotaan vielä materiaalin järjestysluvulla  $Z$  ja atomitiheydellä  $N$  (atomeita per yksikkötilavuus).

Intensiteetistä  $I$  menetetään ohuessa siivussa  $dx$  materiaalia osuus

$$\frac{dI}{I} = -\mu dx, \quad (4.6)$$

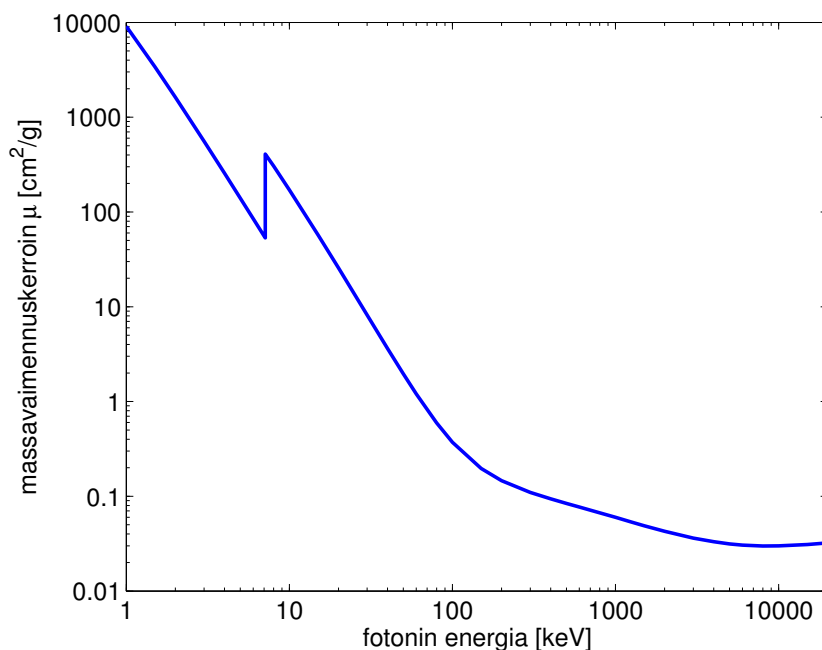
josta saadaan

$$I = I_0 e^{-\mu t}, \quad (4.7)$$

missä  $I_0$  on alkuperäinen intensiteetti ja  $I$  intensiteetti fotonisuihkun kuljettua paksuudeltaan  $t$  olevan materiaalin läpi. Tulosta kutsutaan myös *Lambertin-Beerin laiksi*.

Lineaarisen vaimennuskertoimen sijasta käytetään yleisesti *massavaimennuskerrointa*,  $\mu_\rho = \mu/\rho$ , joka on lineaarinen vaimennuskerroin jaettuna materiaalin tiheydellä. Tällöin kaavassa (4.7) korvataan  $\mu$   $\mu_\rho$ :lla ja paksuus  $t$  korvataan *massapaksuudella*  $\rho t$ . Massavaimennuskertoimen etuna on, että se on riippumaton materiaalin tiheydestä. Toisin sanoen

#### 4. HIUKKASTEN TÖRMÄYSPROSESSIT AINEESSA



Kuva 4.6: Massavaimennuskertoimen energian funktiona raudalle. Terävä piikki 7,11 keV energialla on karakteristisen röntgensäteilyn K-piikin energiaa vastaava siirtymä.

kerroin on sama tietyn energian fotonille esimerkiksi vedessä riippumatta siitä, onko vesi nesteenä vai höyrynä. Massavaimennuskertoimet yhdisteille tai sekoituksille voidaan laskea summana yksittäisten komponenttien kertoimista painotettuna niiden osuuksilla kokonaismassasta [20].

Yleisesti ottaen massavaimennuskertoimen pienenee röntgensäteilyn energian suurentuessa [22], mutta jos fotonilla on energiaa riittävästi materiaalin ionisoimiseen, kerroin nousee jyrkästi. Tämä vastaa käänteistä karakteristisen röntgensäteilyn prosessia. Kuvassa 4.6 on massavaimennuskertoimen arvo raudalle energian funktiona [23], josta näkyy myös ionisoitumisen aiheuttama sahalaitaisuus massavaimennuskertoimen suuruudessa.

Usein on hyödyllistä tietää miten paksultti tiettyä materiaalia tarvitaan, jotta tietyn energian säteilyn intensiteetti saadaan puolitettyä. Puolipaksuus  $t_{1/2}$  saadaan sijoittamalla yhtälöön (4.7)  $I = I_0/2$ , jolloin

$$t_{1/2} = \frac{\ln 2}{\mu} = \frac{\ln 2}{\rho\mu_p}. \quad (4.8)$$

### 4.3 Atomin viritystilan purkautuminen

Atomin viritystilan purkautuminen voi tapahtua karakteristisen röntgensäteilyn lisäksi Auger-elektroniemissiolla. Spektroskopian datakirjoissa on usein kerrottu suhdeluku, joka määrittää osuuden kaikista atomin viritystilan purkautumisista, joissa emittoidaan röntgenkvantti. Tällöin puhutaan fluoresenssin osuudesta (engl. fluorescence yield).

Pienen järjestysluvun atomeilla havaitaan vain pienen energian pehmeää röntgensäteilyä, sillä niillä on vähän elektronikuoria ja elektronien sidosenergiat ovat suhteellisen pieniä. Korkeammilla järjestysluvuilla karakteristisen säteilyn energia kasvaa. Esimerkiksi lyijyn karakteristisen  $K_{\alpha}$ -piikin energia on 72,8 keV, mutta alumiinilla vain 1,49 keV. Kyseisillä materiaaleilla sisäkuoren ionisaation tarvittavat minimienergiat eli  $K_{reuna}$  energiat ovat vastaavasti 88,0 keV ja 1,56 keV.

Atomin viritystilan purkautuminen on yleensä nopea (aikaskaala noin 1 ns), mutta monivaiheinen prosessi: sisäkuorella olevaan aukkoon siirtyy elektroni ulommalta kuorelta, tämän jättämään aukkoon taas uusi elektroni ulompaa ja niin edelleen. Jokainen siirtymä aiheuttaa aineelle ominaisen tietyn energian säteilykvantin. Koska röntgenkvantti ei emitoidu atomista välittömästi törmäyksen jälkeen, se voi lähteä mihin tahansa suuntaan yhtä todennäköisesti riippumatta alkuperäisen elektronin tulosuunnasta.

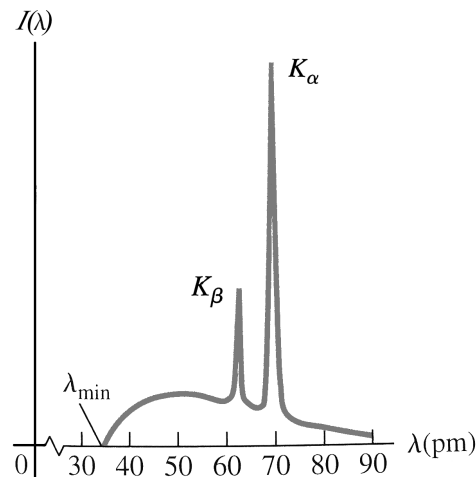
#### 4.3.1 Fluoresenssi

Fluoresenssista puhutaan kun materiaalin atomi absorboi atomiin osuvan fotonin kokonaan ja siirtää sen virittyneeseen tilaan, joka purkautuu hyvin pienen resonanssiajan jälkeen emittoiden pienemmän aallonpituuden fotonin. Fluoresenssi kuuluu luminesenssi-ilmiön alalajeihin. Jokapäiväinen esimerkki fluoresenssista ovat fluoresoivat väriaineet, jotka loistavat näkyvää valoa kun niitä valaistaan ultraviolettivalolla. Toinen tuttu samantapainen ilmiö on fosforesenssi, jossa viritystilan purkautuminen kestää paljon kauemmin. Edellä mainituissa tapauksissa fotoniemission aiheuttavat siirtymät atomiin suhteellisen löyhästi sidottujen ulkokuorien välillä. Myös sisäkuorien elektronivajeen aiheuttaman viritystilan purkautumista fotoniemissiolla kutsutaan fluoresenssiksi riippumatta siitä millä tavoin viritystila on alunperin syntynyt.

#### 4.3.2 Karakteristinen säteily

Röntgenfluoresenssia eli *karakteristista röntgensäteilyä* havaitaan kun atomin sisäkuorien elektronivajeen aiheuttama viritystila purkautuu. Toisin kuin jarrutus säteily, se on kohtiomateriaalille ominaista ja aiheuttaa teräviä piikkejä röntgenspektriin (kuva 4.7).

#### 4. HIUKKASTEN TÖRMÄYSPROSESSIT AINEESSA



Kuva 4.7: Röntgensäteilyn intensiteetti aallonpituuden funktiona 35 kV kiihdytysjännitteellä ja molybdeenikohtiolla. Kuvassa näkyvät kaksi piikkiä ovat karakteristisen röntgensäteilyn tuottamia ja tasainen osa jarrutussäteilyä ([5], s. 1573).

Karakteristista röntgensäteilyä syntyy, kun atomin sisäelektronikuorella olevan elektroniva-  
jauksen täyttää toinen, atomiin heikommin sidottu elektroni. Tällöin emittoituu elektronin  
sidosenergioiden eroja vastaava foton. Vajaus sisäkuorelle saadaan aikaan esimerkiksi  
pommittamalla atomia elektroneilla, joiden energia on suurempi kuin sisäkuoren *kriittinen*  
*ionisaatiopotentiaali*  $E_c$  [24]. Atomiin törmäävä vapaa elektroni luovuttaa prosessissa  
energiaa sisäkuorella olevalle elektronille, joka irtoaa atomista ja jättää jälkeensä vapaan  
aukon. Ilmiö voidaan havaita riittävän suuren järjestyksluvun alkuaineilla, joilla on riittävä-  
sti elektroneja eri elektronikuorilla. Myös raskaammilla varatuilla hiukkasilla, esimerkiksi  
protoneilla, pommitettaessa<sup>2</sup> saadaan aikaan vastaava ilmiö [26]. Atomista voi irrota usei-  
takin elektroneja yhdellä kertaa, joskin tällaisen tapahtuman todennäköisyys on varsinkin  
elektronien tapauksessa paljon pienempi kuin yhden sisäelektronin poistuminen.

Atomin elektronikuoret on nimetty sisimmästä alkaen kirjaimilla K, L, M, N, O, P ja Q.  $K_\alpha$ -  
siirtymäksi kutsutaan tapahtumaa, missä elektroni siirtyy toiseksi sisimmältä L-kuorelta  
sisimmälle K-kuorelle,  $K_\beta$  -siirtymäksi M:n ja K:n välistä siirtymää ja niin edespäin.  $K_\alpha$ -  
siirtymien intensiteetti röntgenspektrissä on suurin, mutta muutkin kuorien väliset siirtymät  
voidaan havaita suhteellisen helposti. Riittävän erottelukyvyn ilmaisimilla voidaan havaita  
jopa vielä tarkempaa rakennetta riippuen siitä, mikä elektroni tietyltä kuorelta täyttää  
aukon. Kuvassa 4.7 näkyvät  $K_\alpha$ - ja  $K_\beta$ -siirtymien aiheuttamat piikit.

Vuonna 1913 brittiedemies H. G. J. Moseley<sup>3</sup> tutki karakteristisen säteilyn spektrejä eri  
alkuaineilla ja havaitsi, että  $K_\alpha$ -piikin taajuudella ja atomin järjestyksluvulla  $Z$  oli selvä  
yhteys [27]:

<sup>2</sup>Röntgensäteilyn tuottamista pommittamalla materiaalia atomiytimillä kutsutaan termillä PIXE (particle induced x-ray emission). Menetelmää käytetään materiaalin koostumuksen analysointiin [25].

<sup>3</sup>Henry Gwyn Jeffreys Moseley (1887-1915).

## 4. HIUKKASTEN TÖRMÄYSPROSESSIT AINEESSA

---

$$f = 2,48 \cdot 10^{15} \text{ Hz } (Z - 1)^2, \quad (4.9)$$

missä  $f$  on  $K_\alpha$ -piikin taajuus. Tulosta kutsutaan *Moseleyn laiksi*. Moseley osoitti myöhemmin, että samaan tulokseen päästään teoreettisesti tarkastelemalla kohtioatomin energiatasoja *varjostus* (engl. screening) huomioon ottaen.

Eri siirtymien intensiteetit riippuvat niiden todennäköisyyksistä ja atomien ionisaatiotavasta. Elektronien ollessa vastuussa ionisaatiosta pääasialliset tekijät intensiteetti- ja taajuuksien muodostumisessa ovat elektronien energia ja määrä sekä ionisaation vaikutusala. Atomiin törmäävän elektronin energian ollessa monta kertaa kriittistä ionisaatiopotentiaalia suurempi kasvaa todennäköisyys sille, että atomista irtoaa yhdellä kertaa useampi elektroni. Tällöin atomin elektronirakenne muuttuu ja elektronikuorien väliset energiaerot hieman pienentyvät, jolloin myös emittoituvilla fotoneilla on hieman vähemmän energiaa kuin normaalisti. Karakteristisen säteilyn piikkien viereen ilmestyy siis pienempiä satelliitti- ja jollaisia voidaan havaita myös Auger-elektroniprosessien synnyttämänä. Pieniä muutoksia karakteristisen säteilyn röntgenspektriin syntyy myös, kun mitattava aine ei ole puhdasta vaan osana molekyyliä. Sidoksen muodostumiseen osallistuvat valenssielektronit muuttavat hieman sisäelektronikuoren rakennetta, jolloin myös röntgenpiikkien paikat muuttuvat. Suurimmillaan ilmiö on kevyillä alkuaineilla uloimmille siirtymille. Karakteristisen röntgensäteilyn avulla voidaan tunnistaa, mistä alkuaineista näyttemateriaali koostuu tutkimalla röntgenspektrin piikkien paikkoja ja vertaamalla mittaustuloksia tunnettuihin alkuaineen elektronien sidosenergioihin.

### 4.3.3 Auger-elektronit

Atomin viritystilän purkautuessa sisäkuorelta emittoitunut fotoni voi törmätä johonkin atomin ulommilla kuorilla olevista elektroneista, jolloin fotonin energia siirtyy elektronille ja elektroni poistuu atomista. Tällaista elektronia kutsutaan *Auger-elektroniksi* ja sen kineettinen energia on sen sidosenergian ja siihen osuneen fotonin energian erotus. Auger-elektronien energiaspektri on siis diskreetti ja riippuu atomin viritystilasta ja emittoituneen elektronin sidosenergiasta. Syntyvästään johtuen Auger-elektronien energia on aina pienempi kuin sisimmän elektronikuoren viritysen energia. Prosessi on yleisin pienen järjestysluvun materiaaleissa, joissa sidosenergiat ovat pieniä. Tyypilliset Auger-elektronien energiat ovat muutamien kiloelektronivolttien luokkaa.

## 4.4 Nopeat elektronit materiaalissa

Aineessa liikkuva elektroni vuorovaikuttaa atomielektronien ja niiden verhoaman atomiytimen kanssa Coulombisten, jatkuvasti elektronin kulkusuuntaa muuttavien törmäysten kautta. Törmäykset atomielektronien kanssa ovat enimmäkseen epäelastisia ja johtavat atomien ionisaatioon ja viritystiloihin. Elastinen sironta atomielektroneista on käytännössä tärkeää vain alle 100 eV energioilla [28]. Joskus elektroni voi sirota epäelastisesti tai elastisesti myös atomiytimestä. Elastisessa eli Rutherfordin<sup>4</sup> sironnassa elektronin kulkusuunta muuttuu rajusti.

Elektroni poukkoilee aineessa lukuisten törmäysten myötä monimutkaista polkua pitkin ja sen kulkema matka on yleensä moninkertainen verrattuna tunkeutumissyvyyteen aineen pinnasta. Törmäysten tapahtuessa elektronien välillä voi suuri määrä liike-energiaa siirtyä yksittäisessä törmäyksessä elektronilta toiselle ja on mahdotonta sanoa kumpi vuorovaikutuksen jälkeisistä elektroneista on "alkuperäinen". Rajuissa törmäyksissä elektroni kokee voimakkaita kiihdytyksiä, jolloin klassisen teorian mukaisesti kiihdytetty varaus emittoi jarrutussäteilyä.

Hiukkasen liike-energian ja sen aineessa kulkeman matkan välillä on yhteys, jonka johti ensimmäisenä Hans Bethe<sup>5</sup> vuonna 1930. Törmäysprosessin kvanttimekaaninen laskenta antaa tulokseksi niin sanotun pysäytystehon (engl. stopping power), joka kertoo energiahäviön hiukkasen kulkeman polun pituusyksikköä kohden:

$$\left(\frac{dE}{dx}\right)_t = \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\right)^2 \frac{2\pi N_0 Z \rho}{mc^2 \beta^2 A} \left[ \ln \frac{E_k(E_k + mc^2)^2 \beta^2}{2I^2 mc^2} + (1 - \beta^2) - (2\sqrt{1 - \beta^2} - 1 + \beta^2) \ln(2) + \frac{1}{8} (1 - \sqrt{1 - \beta^2})^2 \right] \quad (4.10)$$

$$\left(\frac{dE}{dx}\right)_s = \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\right)^2 \frac{Z^2 N_0 (E_k + mc^2) \rho}{137 m^2 c^4 A} \left[ 4 \ln \frac{2(E_k + mc^2)}{mc^2} - \frac{4}{3} \right], \quad (4.11)$$

missä  $N_0$  on Avogadron luku<sup>6</sup>,  $E_k$  on elektronin liike-energia,  $m$  elektronin massa,  $c$  valonnopeus,  $I$  atomielektronien keskimääräistä viritysenergiaa kuvaava parametri,  $\beta = v/c$ ,  $Z$  materiaalin järjestysluku,  $A$  atomimassa ja  $\rho$  massatiheys. Parametrille  $I$  käytetään empiiristä arvoa, joka on suuruusluokkaa  $10 \cdot Z$ . Esimerkiksi alumiinille  $I = 166$  eV. Alaindeksit  $t$  ja  $s$  merkitsevät törmäys- ja säteilyprosessien aiheuttamia energiahäviöitä. Kokonaisenergiähäviö on yksinkertaisesti yhtälöiden (4.10) ja (4.11) summa.

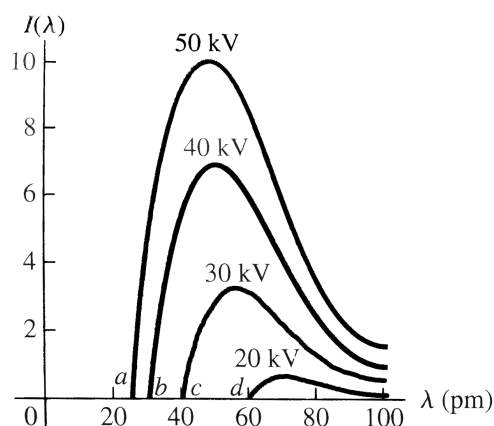
<sup>4</sup>Ernest Rutherford (1871-1937), Nobelin palkinto kemiassa vuonna 1908.

<sup>5</sup>Hans Bethe (1906-2005), Nobelin palkinto fysiikassa vuonna 1967.

<sup>6</sup> $N_0 = 6,0221415 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1}$



## 4. HIUKKASTEN TÖRMÄYSPROSESSIT AINEESSA



Kuva 4.8: Jarrutussäteilyn intensiteetti aallonpituuden funktiona eri kiihdytysjännitteillä volframi-kohtiolle ([5], s. 1573).

### 4.4.1 Jarrutussäteily

Jarrutussäteilyksi kutsutaan säteilyä, jota muodostuu varatun hiukkasen nopeuden hidastuessa äkillisesti. Vaikka jarrutussäteily on periaatteessa yleisnimitys mille tahansa varatun hiukkasen nopeuden muuttuessa syntyvälle sähkömagneettiselle säteilylle, tarkoitetaan sillä useimmiten tapausta, jossa säteilyä syntyy relativististen elektronien törmätessä kohtiin atomeihin.

Tässä työssä keskitymme lähinnä energialtaan noin 1-1000 keV elektroneihin, jotka tuottavat röntgenalueella olevaa jarrutussäteilyä. Suurin energia emittoidulla röntgensäteilyllä on silloin kun elektronin koko liike-energia muuntuu kerralla yhdeksi röntgenkvantiksi. Alarajaa ei sen sijaan ole, joten jarrutussäteilyllä on jatkuva spektri: elektroni voi menettää energiaa säteilyinä kuinka paljon tahansa nolasta maksimiliike-energiaan asti.

Kuvassa 4.8 olevalla röntgenspektrillä on minimaallonpituus  $\lambda_{min}$ . Tätä vastaa tilanne, jossa kohtioon törmäävä elektroni luovuttaa koko liike-energiansa yhdelle fotonille eli

$$E_e = \frac{hc}{\lambda_{min}}, \quad (4.12)$$

missä  $E_e$  on elektronin liike-energia,  $h$  on Planckin vakio ja  $c$  on valonnopeus. Spektrin maksimienergia ei riipu kohtiomateriaalista vaan ainoastaan elektronin liike-energiasta. Maksimienergian fotonit säteily-spektrissä ovat suhteellisen epätodennäköisiä. Aallonpituuden kasvaessa myös havaittujen fotonien määrä kasvaa kunnes tietyn maksimi-intensiteetin jälkeen fotonien määrä alkaa laskea aallonpituuden edelleen kasvaessa, sillä matalan energian säteily absorboituu helposti kohtiomateriaaliin. Kaavan (3.15) perusteella nähdään, että havaitun säteilyn intensiteetti on verrannollinen hiukkasen kokeman kiihtyvyyden neliöön; toisin sanoen

## 4. HIUKKASTEN TÖRMÄYSPROSESSIT AINEESSA

---

$$I \propto a^2 = \frac{F^2}{m^2}, \quad (4.13)$$

missä  $F$  on jarruttava voima ja  $m$  on hiukkasen massa.

Materiaalissa liikkuvien tietyn energian  $E$  elektronien keskimäärin jarrutussäteilynä menetettävää energiaosuutta  $I/E$  voidaan arvioida [28] tuloksella

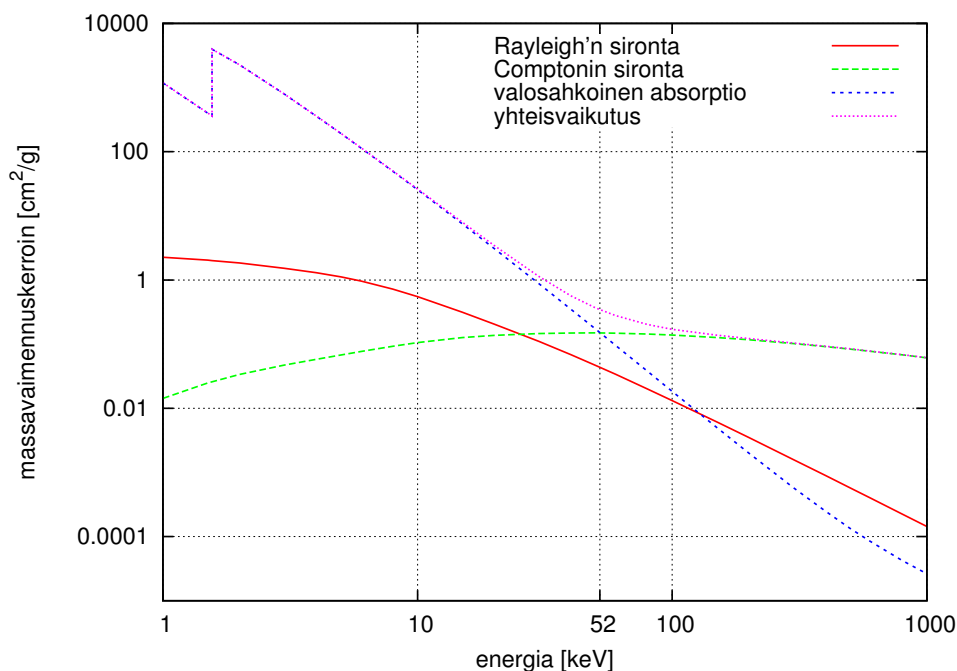
$$I/E \approx 0,0007 \cdot ZE, \quad (4.14)$$

missä  $Z$  on materiaalin järjestysluku ja  $[E]=\text{MeV}$ . Jarrutussäteilynä menetetyt energian osuus siis kasvaa sekä elektronin energian että materiaalin järjestysluvun kasvaessa. Esimerkiksi 1 MeV elektronit alumiinissa ( $Z = 13$ ) menettävät keskimäärin noin 0,9 % energiastaan jarrutussäteilynä kun 10 MeV elektroneille lyijyssä ( $Z = 82$ ) suhde on jo 57 %. Tulos pätee vain suurelle joukolle saman energian elektroneita, sillä yksittäinen elektroni voi menettää jarrutussäteilynä kineettisestä energiastaan kaiken, ei mitään tai jotain siltä väliltä. Elektronin energian ollessa niin sanotun kriittisen energian,  $E_{\text{crit}} = 800/(Z + 1,2)$  MeV, yläpuolella, jarrutussäteilyhäviöt dominoivat. Alumiinissa kriittinen energia on noin 56 MeV.

### 4.4.2 Varausten moninkertainen sironta

Korkeaenergiaisen elektronin kulkiessa materiaalin läpi se kokee jatkuvasti energiaa “syöviä” törmäyksiä atomielektronien kanssa. Coulombin voiman pitkistä kantamasta johtuen vuorovaikutukset jakaantuvat usean eri atomielektronin kanssa. Jokainen yksittäinen sironta on oleellisesti satunnainen ja näissä törmäyksissä varaus menettää yleensä vain pienen osan liike-energiastaan kerrallaan. Useamman törmäyksen yhteisvaikutus sen sijaan on ennustettavampi eli on olemassa jokin funktio, joka määrittelee hiukkasen energian, suunnan ja paikan todennäköisyyden useiden siroamisten jälkeen. Kaikkien törmäysten yhteisvaikutus voidaan periaatteessa laskea askel kerrallaan, mutta yleensä samaan kvalitatiiviseen tulokseen päästään oikaisemalla ja laskemalla suoraan monien törmäysten yhteisvaikutus. Tällöin säästyään suurelta määrältä “turhaa” laskemista. Useimmat Monte Carlo -tietokonesimulaatiot käyttävät moninkertaiselle sironnalle yksinkertaistavia eli tiivistettyjä malleja. Yksi tällaisista malleista perustuu Lewisin teoriaan [29], mutta useita muitakin malleja on esitetty (esim. [30], [31], [32]). Lewisin malli antaa hiukkaselle sironnan jälkeisen kulmajakauman lisäksi avaruusjakauman momentit, mutta mikään edellä mainituista malleista ei kerro hiukkasen siirtymän todennäköisyysjakaumaa. Eri Monte Carlo -simulaatiot käyttävät erilaisia käytetystä askelpituudesta riippuvia arvioita hiukkasen siirtymän suuruudesta. Suurin osa simulaatioiden virheistä johtuu kyseisten arvioiden epätarkkuuksista [33].

## 4. HIUKKASTEN TÖRMÄYSPROSESSIT AINEESSA



Kuva 4.9: Röntgensäteilyn kokemat vuorovaikutukset alumiinissa 1-1000 keV:n fotonienenergioilla [34]. Valosähköinen absorptio on todennäköisin vuorovaikutus alle 52 keV:n energioilla ja Comptonin sironta sitä korkeammilla energioilla.

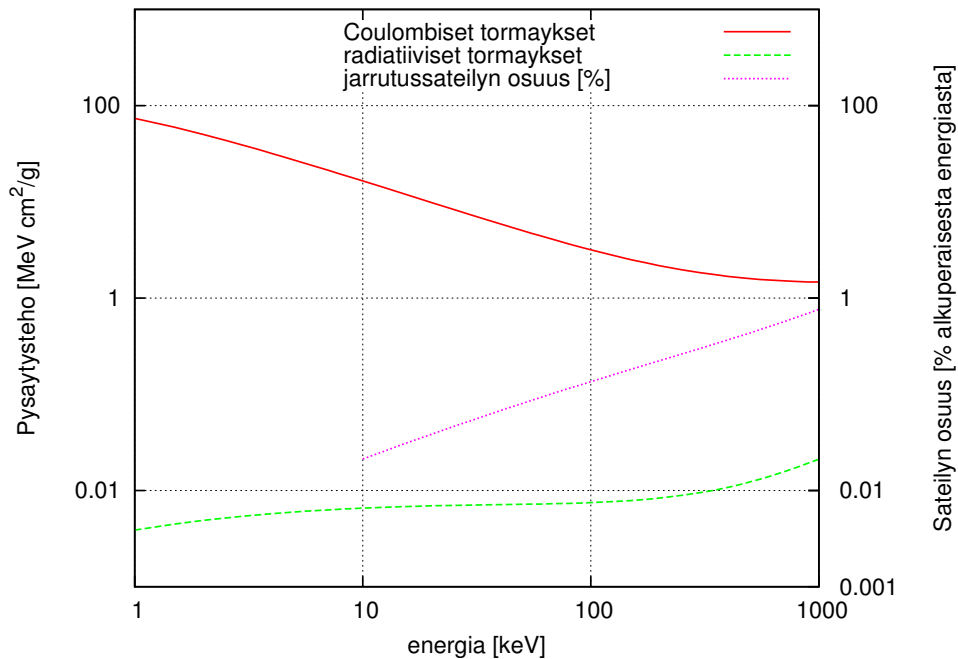
### 4.5 Vaikutusaloista

Tässä työssä kiinnostavalla energia-alueella, 1-1000 keV, hallitsevimmat fysikaaliset prosessit fotonien törmätessä materiaaliin ovat valosähköinen ilmiö ja Comptonin sironta. Eri prosessien massavaimennuskertoimet  $\mu/\rho$  alumiinissa ja niiden yhteisvaikutus on piirretty kuvaan 4.9. Matalilla energioilla valosähköinen absorptio on lähes kokonaan vastuussa fotonin energiahukasta. Noin 52 kiloelektronivoltin energialla valosähköinen ilmiö ja Comptonin sironta ovat yhtä todennäköisiä ja tätä suuremmilla energioilla Comptonin ilmiö dominoi. Koherentin eli Rayleigh'n sironnan suhteellinen vaikutus muihin prosesseihin verrattuna on suurimmillaan noin 50 keV:n fotonienenergialla, jää silti melkein kymmenesosaan voimakkaimmasta vuorovaikutuksesta.

Massavaimennuskertoimen voidaan haluttaessa ilmaista myös kokonaisvaikutusalanana atomia kohti muodossa

$$\sigma_{\text{kok}} = (\mu/\rho)uA, \quad (4.15)$$

#### 4. HIUKKASTEN TÖRMÄYSPROSESSIT AINEESSA



Kuva 4.10: Elektronien energiahäviö alumiinissa ja jarrutussäteilyn osuus energiahäviöstä [35]. Vasen y-akseli: pysäytysteho, oikea y-akseli: jarrutussäteilyn prosenttiosuus energiahukasta.

missä  $u$  on atomimassayksikkö<sup>7</sup> ja  $A$  on kohtiomateriaalin suhteellinen atomimassa, joka on alumiinin tapauksessa  $A_{\text{Al}} = 26,98$ . Kokonaisvaikutusala mitataan barneissa<sup>8</sup> atomia kohden.

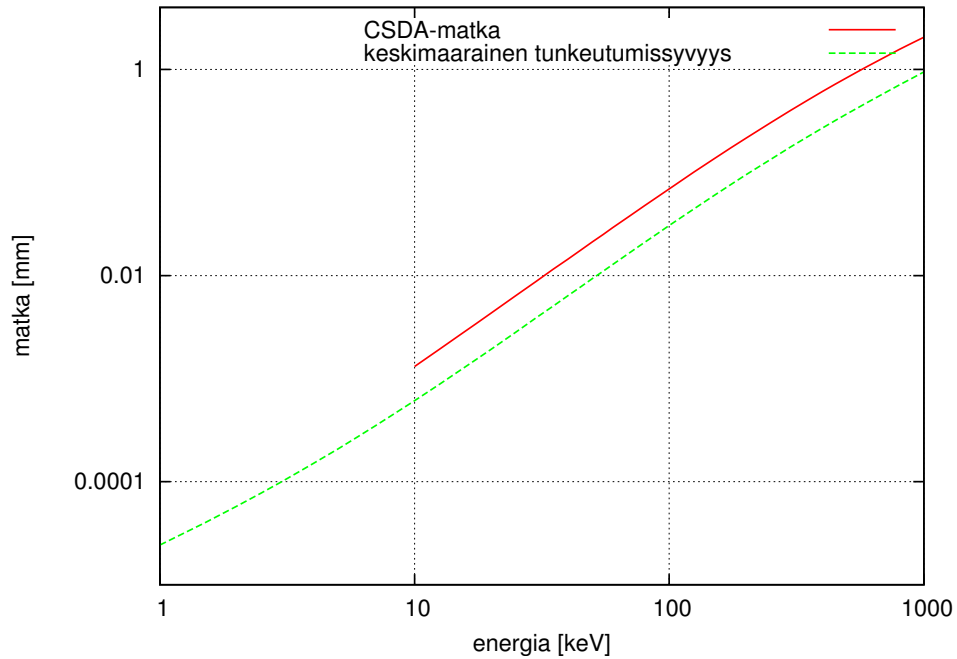
Elektronit puolestaan kokevat enimmäkseen Coulombisia törmäyksiä, joissa ne menettävät energiaa pieniä määriä kerrallaan ionisoidessaan ja virittäessään atomeja. Tyypillisesti korkean energian elektronit menettävät törmäyksissä alumiinissa kerrallaan korkeintaan joitakin kymmeniä kiloelektronivolteja liike-energiaa. Kuvaan 4.10 on piirretty pysäytysteho elektroneille energian funktiona alumiinissa (vasen y-akseli). Atomien ionisaatioon tai virittymiseen johtavat Coulombiset törmäykset hallitsevat selvästi verrattuna radiatiivisiin häviöihin, joita muodostuu kun elektronin törmäys atomin tai atomielektronin kanssa aiheuttaa jarrutussäteilykvantin emittoitumisen. Samaan kuvaan on piirretty myös jarrutussäteilyn osuus elektronin menettämästä energiasta (oikea y-akseli). Yhden megaelektronivoltin energialla vajaa prosentti elektronin energiasta muuntuu suoraan jarrutussäteilyksi ja pienemmillä energioilla prosenttiosuus pienenee. Vasta yli 125 MeV:n energioilla (ei kuvassa) jarrutussäteilyenergian osuus on suurempi kuin muiden häviöiden.

Elektronisuihkun osuessa riittävän paksuun materiaaliin se ei useinkaan etene siellä kovin pitkälle. Tunkeutumissyvyys on alle megaelektronivoltin elektroneilla korkeintaan

<sup>7</sup> $u = 1,6605402 \cdot 10^{-27}$  kg

<sup>8</sup>1 barn =  $10^{-24}$  cm<sup>2</sup>

#### 4. HIUKKASTEN TÖRMÄYSPROSESSIT AINEESSA



Kuva 4.11: Elektronien kulkema matka [35] ja tunkeutumissyvyys [36] alumiinissa.

millimetriluokkaa kohtiomateriaalista riippuen [36], mutta elektronien kulkema matka on lukuisten sirontatapahtumien ansiosta paljon pidempi. Elektronien kokonaisuudessaan kulkema matka materiaalissa voidaan laskea niin sanotulla jatkuvan hidastumisen menetelmällä (engl. continuous slowing down approximation, CSDA, esim. [37], [38]). Elektronien CSDA-matka ja keskimääräinen tunkeutumissyvyys alumiinissa energian funktiona on piirretty kuvaan 4.11. Yhden megaelektronivoltin elektroni tunkeutuu alumiiniin vain noin millimetrin syvyydelle, mutta kulkee kahden millimetrin matkan. Sadan kiloelektronivoltin energialla tunkeutumissyvyys on vain 0,03 mm ja kuljettu matka 0,07 mm.

# Luku 5

## Magneettinen säilöntä

Varattujen hiukkasten lentorataan voidaan vaikuttaa sähkö- ja magneettikenttien avulla, joista jälkimmäiset ovat erityisen käyttökelpoisia varaussuihkujen ohjailuun. Magneettikentän varauksiin kohdistama voima riippuu varauksen nopeudesta ja suunnasta, joten varaussuihkuja voidaan esimerkiksi fokusoida ja taivuttaa ympyräradalle. Toisaalta magneettikenttä ei tee koskaan työtä varaukselle, joten varauksen kineettinen energia ei muutu. Varaus voi silti menettää energiaa säteilemällä sitä synktronisäteilynä. Sähkökentät puolestaan vaikuttavat varauksiin vakiovoimalla ja tekevät niille työtä, mikä mahdollistaa varausten kiihdyttämisen. Kumpikaan kenttä ei vaikuta neutraaleihin hiukkasiin, joskin eräät ilmiöt, kuten *Zeemanin efekti*<sup>1</sup>, tulevat esiin kenttien vaikutuksesta.

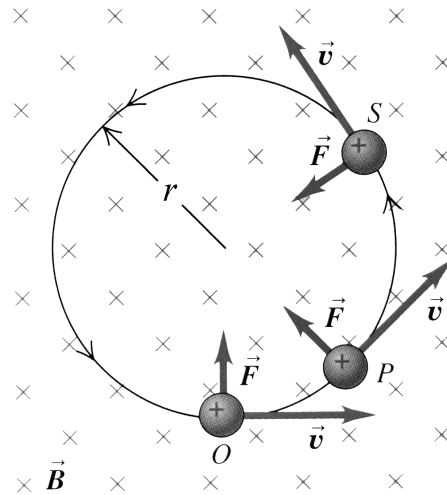
### 5.1 Varatun hiukkasen liike magneettikentässä

Tarkastellaan tilannetta, jossa varattu hiukkanen liikkuu homogeenisessa ja staattisessa magneettikentässä  $\vec{B}$ . Olkoon hiukkasen varaus  $q$  ja nopeus  $\vec{v}$  ( $v \ll c$ ) kohtisuorassa magneettikenttää  $\vec{B}$  vastaan. Tällöin magneettikentän aiheuttaman voiman suuruus on  $F = qvB$  ja suunta kuten kuvassa 5.1. Hiukkanen joutuu ympyräradalle, sillä yhtälöstä (3.7) nähdään, että voima  $\vec{F}$  on aina kohtisuorassa hiukkasen nopeutta  $\vec{v}$  vastaan; toisin sanoen nopeuden suuruus ei muutu, vain sen suunta. Tämä pitää paikkansa myös magneettikentän ollessa epähomogeeninen. Ratasäde  $r$  voidaan laskea Newtonin toisen lain  $F = ma$  ja keskihakukiihtyvyyden  $a = v^2/r$  avulla:

---

<sup>1</sup>Zeemanin ilmiössä magneettikentässä olevan atomin viritystilan purkautumisessa havaitut spektriviivat ovat jakaantuneet elektronien kvanttilukujen vaikutuksesta. Vastaava ilmiö sähkökentässä on nimeltään *Starkin ilmiö*.

## 5. MAGNEETTINEN SÄILÖNTÄ



Kuva 5.1: Positiivinen varaus homogeenisessä magneettikentässä  $\vec{B}$ , jonka suunta on kohti sivua (kuva: [5], s. 1029). Varauksen nopeusvektori  $\vec{v}$  on kohtisuorassa magneettikenttää vastaan. Voima  $\vec{F}$  on tällöin kohtisuorassa sekä nopeutta että magneettikenttää vastaan ja sen suunta saadaan oikean käden säännöllä. Varaus joutuu magneettikentän vaikutuksesta ympyräradalle, jonka säde on  $r$ .

$$F = |q|vB = m\frac{v^2}{r}, \quad (5.1)$$

missä  $m$  on varauksen massa. Näin ollen saamme ratasäteeksi

$$r = \frac{mv}{|q|B}. \quad (5.2)$$

Tällöin hiukkasen kulmanopeus  $\omega$  saadaan yhtälön  $v = r\omega$  avulla:

$$\omega = \frac{v}{r} = v\frac{|q|B}{mv} = \frac{|q|B}{m}. \quad (5.3)$$

Kun muistetaan, että kierrostaajuus  $f = \omega/2\pi$ , saadaan syklotronitaajuudeksi

$$f_c = \frac{|q|B}{2\pi m}. \quad (5.4)$$

Syklotronitaajuus on siis taajuus, jolla varattu hiukkanen kiertää magneettikentässä ympyrärataa. Taajuus riippuu vain hiukkasen varauksesta, massasta ja magneettikentän voimakkuudesta. Tätä ominaistaajuutta käytetään hyödyksi esimerkiksi kiihdytettäessä ioneja

## 5. MAGNEETTINEN SÄILÖNTÄ

---

syklotronissa: vakiotaajuudella oskilloiva korkeajännite antaa magneettikentässä syklotronitaajuudella kiertäville ioneille jokaisella kierroksella hieman lisää energiaa, jolloin varausten ratasäde kasvaa, mutta kulmanopeus säilyy samana. Saavutettuaan kiihdyttimen ulkoreunan kiihdytetty suihku poistetaan eli ekstraktoidaan kiihdyttimestä ja ohjataan haluttuun kohteeseen. Syklotronilla saavutettavaa maksimienergiaa rajoittavat relativistiset ilmiöt: Kun kiihdytettyjen ionien nopeus alkaa lähestyä valonnopeutta, hidastuu niiden kiertotaajuus ja vakiotaajuuksisen kiihdytysjännitteen vaihe karkaa suihkun edelle.

Yhtälöt (5.1)-(5.4) pätevät tarkalleen ottaen vain epärelativistisille hiukkasille. Hiukkasen nopeuden kasvaessa oikea muoto ratasäteelle on

$$r = \frac{m_0 c}{|q|B} \sqrt{\gamma^2 - 1}, \quad (5.5)$$

missä  $c$  on valonnopeus,  $\gamma = (1 - v^2/c^2)^{-1/2} = E_k/(m_0 c^2) + 1$  relativistinen gamma ja  $E_k$  hiukkasen kineettinen energia. Esimerkiksi 1 MeV elektronille 1 teslan magneettikentässä saadaan kaavasta (5.5) ratasäteen arvoksi

$$r_{\text{relativistinen}} = \frac{9,1 \cdot 10^{-31} \text{ kg} \cdot 3,0 \cdot 10^8 \text{ m/s}}{1,6 \cdot 10^{-19} \text{ C} \cdot 1,0 \text{ T}} \cdot \sqrt{\left(\frac{1 \text{ MeV}}{0,511 \text{ MeV}} + 1\right)^2 - 1} \approx 4,7 \text{ mm} \quad (5.6)$$

ja klassisesta kaavasta (5.2), kun  $v = \sqrt{2T/m}$ ,

$$r_{\text{klassinen}} = \frac{9,1 \cdot 10^{-31} \text{ kg} \cdot 3,0 \cdot 10^8 \text{ m/s}}{1,6 \cdot 10^{-19} \text{ C} \cdot 1,0 \text{ T}} \cdot \sqrt{\frac{2 \cdot 1 \text{ MeV}}{0,511 \text{ MeV}}} \approx 3,4 \text{ mm}, \quad (5.7)$$

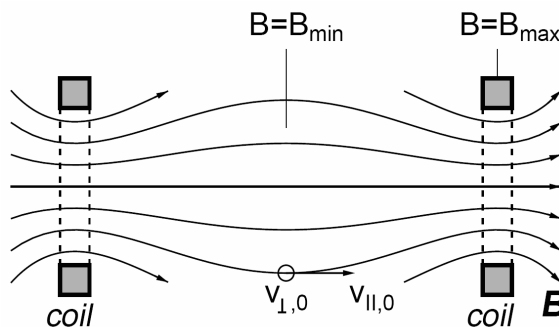
eli relativistinen säde on noin 40 % suurempi kuin klassisesti laskettu säde. Vastaavasti 100 keV elektronille yhden teslan magneettikentässä ratasäteet ovat  $r_{\text{relativistinen}} = 1,12 \text{ mm}$  ja  $r_{\text{klassinen}} = 1,07 \text{ mm}$ , jolloin ero on enää noin viisi prosenttia.

### 5.2 Magneettinen peili

Jos homogeenisessa magneettikentässä liikkuvalla varauksella on kentän suuntainen nopeuskomponentti ( $v_{\parallel} \neq 0$ ), se liikkuu korkkiruuvin muotoisella radalla syklotronitaajuudella ja etenee vakionopeudella  $v_{\parallel}$  kenttäviivojen suuntaan. Epähomogeenisessa kentässä, kuten kahden solenoidin välissä (kuva 5.2), varauksen kokemat voimat ovat monimutkaisempia, mutta magneettikenttä ei tässäkään tapauksessa tee työtä varaukseen. Kenttäviivoja kiertävällä varauksella on magneettinen momentti  $\vec{\mu}$ , jonka suuruus on muotoa



## 5. MAGNEETTINEN SÄILÖNTÄ



Kuva 5.2: Yksinkertainen magneettinen pullo. Kahdella solenoidilla muodostettu magneettikenttä on voimakkaimmillaan solenoidin kohdalla ja heikempi niiden välissä [39].

$$\mu = \frac{W_{\perp}}{B} = \frac{\frac{1}{2}mv_{\perp}^2}{B}, \quad (5.8)$$

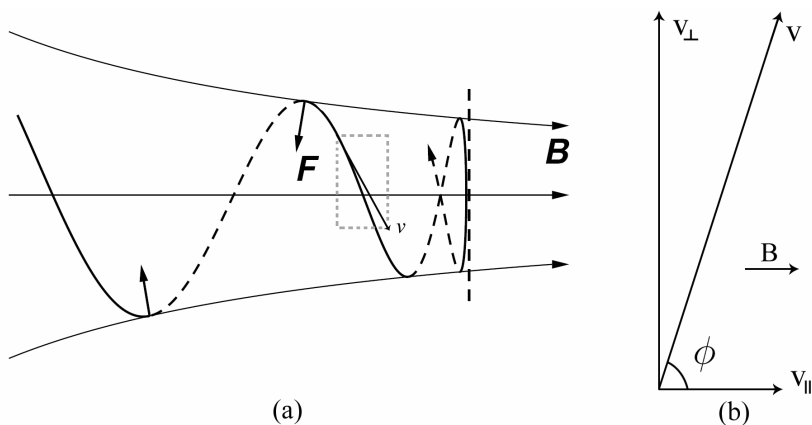
missä  $W_{\perp}$  on varauksen magneettikenttää kohtisuoraan olevaan nopeuskomponenttiin liittyvä kineettinen energia. Tässä  $\mu$  on niin sanottu *adiabaattinen invariantti* eli liikevakio, joka säilyy vakiona hitaasti muuttuvassa magneettikentässä. Koska magneettikenttä ei tee työtä hiukkaseen, täytyy magneettikentän  $B$  suhde hiukkasen nopeuden neliöön  $v_{\perp}^2$  myös säilyä vakiona. Kahden pisteen  $P$  ja  $P'$  välillä on hiukkaselle siis voimassa

$$\left(\frac{v_{\perp}}{v'_{\perp}}\right)^2 = \frac{B}{B'}. \quad (5.9)$$

Magneettikentän muuttuessa on tällöin nopeuden kohtisuoran komponentin muututtava, jolloin kokonaisenergian säilyttämiseksi myös magneettikentän kanssa yhdensuuntainen nopeuskomponentti muuttuu vastakkaiseen suuntaan. Toisin sanoen, hiukkasen liikkessa kasvavan magneettikentän suuntaan kasvaa vastaavasti  $W_{\perp}$ , joka on suurimmillaan silloin kun  $v_{\parallel} = 0$  eli kun varauksen koko liike-energia on siirtynyt nopeuden magneettikenttää kohtisuoralle komponentille. Tällöin hiukkanen heijastuu takaisin heikkenevän magneettikentän suuntaan.

Tutkitaan tapausta, jossa varaus liikkuu muuttuvan magneettikentän minimi- ja maksimiarvojen välillä. Olkoon varauksen kulkusuunnan ja magneettikentän välinen kulma  $\phi$ , kuten kuvassa 5.3. Nopeuden magneettikenttää kohtisuoraan oleva komponentti voidaan kirjoittaa muodossa  $v_{\perp} = v \sin \phi$ , joka on suurimmillaan kun  $\sin \phi = 1$  eli kulman  $\phi$  ollessa  $\frac{\pi}{2}$ . Tällöin hiukkasen nopeus on kokonaan siirtynyt kohtisuoralle komponentille eli  $v_{\perp \max} = v \sin \frac{\pi}{2} = v$ . Yhtälön (5.9) perusteella saadaan magneettikentän minimi- ja maksimivoimakkuuksien ja varauksen nopeuden välille yhtälö

## 5. MAGNEETTINEN SÄILÖNTÄ



Kuva 5.3: (a) Varaus liikkuu kohti magneettisen pullon peilipistettä ja heijastuu takaisin. (b) Magneettikentän suuntainen ja kohtisuora nopeus varauksen liikkuessä magneettikentässä.

$$\left(\frac{v_{\perp max}}{v_{\perp min}}\right)^2 = \frac{B_{max}}{B_{min}} = \left(\frac{v}{v \sin \phi_{B_{min}}}\right)^2 = \frac{1}{\sin^2 \phi_{B_{min}}} \quad (5.10)$$

eli

$$\phi_{B_{min}} = \arcsin \sqrt{\frac{B_{min}}{B_{max}}}. \quad (5.11)$$

Jos hiukkasen *nousukulma*  $\phi$  on magneettikentän minimikohdassa suurempi kuin yhtälöstä (5.11) saatava kulma, varaus heijastuu *magneettisesta peilistä* takaisin. Kahden magneettisen peilin välissä sopivan nopeusjakauman sisältävät varaukset heijastuvat vuorotellen peilistä toiseen ja jäävät loukkuun. Tällöin puhutaan *magneettisesta pullosta*.

Magneettipullon “voimakkuus” ilmaistaan useimmiten magneettikentän maksimin ja minimin välisen suhteen avulla:

$$R = \frac{B_{max}}{B_{min}} \quad (5.12)$$

Suuretta  $R$  kutsutaan *peilisuhteeksi*. ECR-ionilähteissä peilisuhte määritetään erikseen plasmakammion injektio- ja ekstraktiopäissä sekä plasman radiaaliselle kahlinnalle.

# Luku 6

## ECR-ionilähde

Ydinfysiikan kiihdytinpohjaisessa tutkimuksessa tarvitaan kokeen luonteesta riippuen lukuisia erilaisia hiukkassuihkuja. Kevyiden, esimerkiksi elektroni- ja protonisuihkujen, lisäksi tarvitaan yhä useammin monipuolista valikoimaa raskasionisuihkuja. Tietyn ydinreaktion tutkiminen vaatii hiukkassuihkun energian, koostumuksen ja intensiteetin tarkan valinnan. Hiukkasten kiihdyttämistä varten on olennaista saada aikaan hyvälaatuinen ja riittävän voimakas ionisuihku halutusta alkuaineesta. *Ionilähteet* ovat hiukkassuihkun tuottamiseen tarkoitettuja laitteita. Toimintaperiaatteeltaan erilaisia ionilähteitä on lukuisia, mutta yhteistä niille on, että ne tuottavat varattuja hiukkasia, jotka voidaan ekstrahoida eli poistaa lähteestä ja ohjata ionioptiikan keinoin haluttuun kohteeseen tai edelleen hiukkaskiihdyttimessä kiihdyttäväksi.

Eräs suosituimmista ionilähdetyypeistä tutkimuksessa on elektronisyklotroniresonanssiin perustuva ECR-ionilähde. Sen vahvuutena on kyky tuottaa halutun varausasteen ionisuihkuja lähes kaikista alkuaineista. ECR-ionilähteellä voidaan tuottaa vakaita ionisuihkuja pitkiäkin aikoja ilman säätötoimenpiteitä, sillä se kuluttaa vain pieniä määriä materiaalia ja sisältää vähän kuluvia osia.

### 6.1 Toimintaperiaate

ECR-ionilähteessä magneettikentillä vangittua plasmaa tuotetaan ja ylläpidetään syöttämällä laitteeseen kaasua ja mikroaaltoja. Ionisuihku saadaan ulos ionilähteestä korkeajännitteiden avulla.

Plasman säilömiseksi tarvittava magneettikenttä voidaan tuottaa useilla eri tavoilla. Yksinkertaisimmillaan riittää kahden virtakelan eli solenoidin avulla tehty magneettinen pullo kuten kuvassa 5.2, mutta tämä ratkaisu ei mahdollista kovinkaan korkeiden varausasteiden

## 6. ECR-IONILÄHDE

---

tuottamista. Yleensä käytetään rakennetta, jossa magneettikenttä muodostuu aksiaalisesta ja radiaalisesta osasta, mikä jättää plasmakammion keskelle magneettikentän minimin (ns. min-B rakenne) [40]. Tämä mahdollistaa plasman säilömistä sekä aksiaalisessa että radiaalisessa suunnassa. Aksiaalinen kenttä muodostetaan esimerkiksi solenoidimagneeteilla ja radiaalinen *multipolikenttä* plasmakammion ympärille asetetuilla kestopagneeteilla. Kentät voidaan ionilähteen käyttötarkoituksesta riippuen muodostaa myös kokonaan kestopagneeteilla tai sähkömagneeteilla. Suurimmat magneettikentät saadaan aikaan suprajohtavilla magneeteilla.

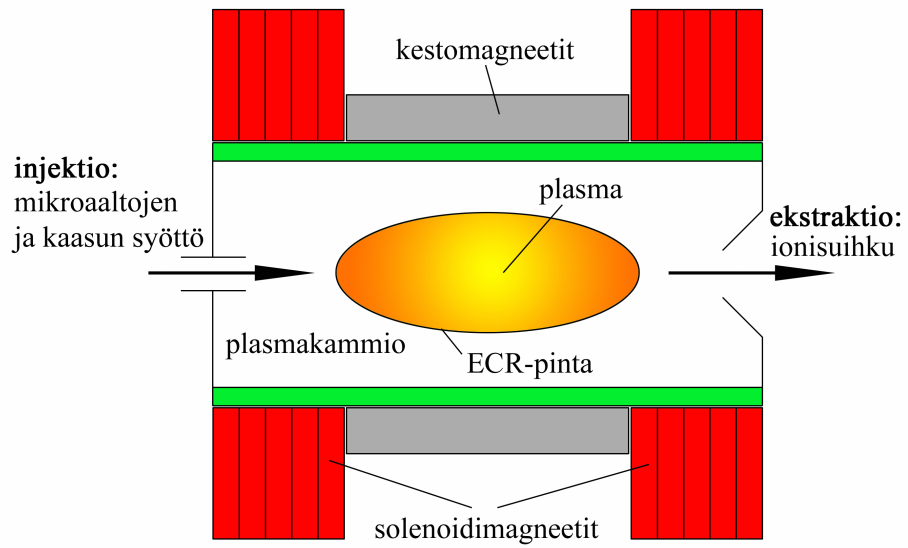
Magneettikentän kenttäviivojen ympäri syklotronitaajuudella pyöriviä vapaita elektroneja lämmitetään mikroaalloilla, joiden taajuus on valittu sopivasti. Koska syklotronitaajuus riippuu magneettikentän voimakkuudesta, muodostuu lähteen sisällä olevaan magneettikenttään ECR-pinnaksi kutsuttu ellipsoidin muotoinen alue, jossa elektronit ovat resonanssissa mikroaaltojen kanssa. Mikroaallon vaiheesta riippuen vaikutus on joko hidastava tai kiihdyttävä nettovaikutuksen ollessa kiihdyttävä. Elektronit törmäilevät plasmakammioon syötetyn kaasun atomeihin ja ionisoivat niitä vapauttaen samalla lisää elektroneja mikroaaltojen kiihdyttäväksi, kunnes jossain vaiheessa saavutetaan tasapainotila ionisaation ja sille vastakkaisen prosessin eli rekombinaation välillä.

Kuvassa 6.1 on eritelty ECR-ionilähteen tärkeimmät osat. Solenoidimagneetit tuottavat aksiaalisen magneettikentän plasmakammion sisälle, ionisoitava kaasu sekä mikroaallot syötetään kammioon injektio-putkesta ja ekstraktioelektrodissa olevasta reiästä saadaan ionisuihku ulos lähteestä. Kuvassa näkyy myös ionisoitu plasma ja ECR-pinta, jonka läheisyydessä mikroaallot lämmittävät elektroneja. Kuvassa 6.2 puolestaan on näkymä ionilähteeseen injektiosuunnasta ja multipolikentän muodostamiseksi tarvittavat kestopagneetit. Plasman muoto on tässä kuvatussa heksapolikentässä kuusisakarainen. Plasmavuo osuu siis kammion seinämille niissä kuudessa kohdassa, joissa magneettikenttä lävistää plasmakammion.

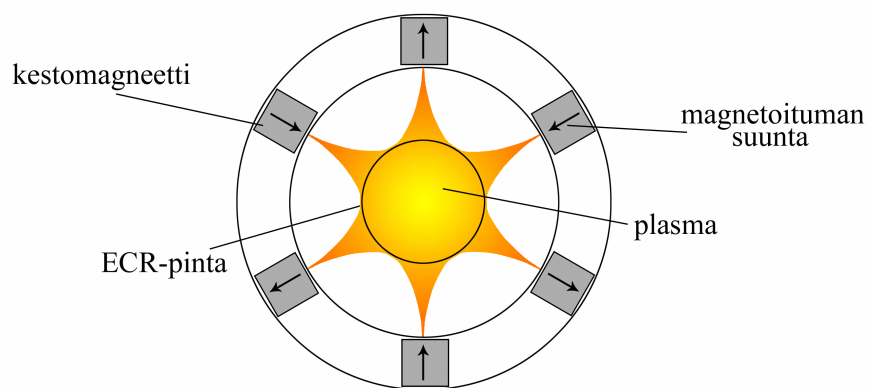
Toimiakseen optimaalisesti ECR-tyyppiset ionilähteet tarvitsevat hyvälaatuisen tyhjiön. Neutraalien atomien määrän minimoimiseksi plasmakammion paine saa olla korkeintaan  $10^{-7}$  millibaarin luokkaa. Paineen ollessa liian suuri hallitsevat varauksenvaihtoprosessit ionisaatioon nähden siinä määrin, että korkeasti varattujen ionien tuotto jää liian pieneksi. Empiirisesti on havaittu [41], että käytetyn mikroaaltolähteen taajuuden  $f$  noustessa nousee tietyn varausasteen ionien intensiteetti taajuuden neliössä ( $I_q \propto f^2$ ).

ECR-plasman elektronit eivät ole termodynaamisessa tasapainossa vaan plasma sisältää kolme erillistä elektronipopulaatiota [42], [43]: kylmät elektronit käsittävät noin puolet kaikista elektroneista ja niiden lämpötila on kymmenien elektronivolttien luokkaa, lämmin elektronipopulaatio on lämpötilaltaan joitakin kymmeniä kiloelektronivolttia ja kuumien elektronien korkean energian häntä ulottuu jopa useiden satojen kiloelektronivolttien energioille. Kaikkien ionien lämpötilat puolestaan ovat vain muutamia elektronivolttia kerrottuna ionin varausasteella, sillä ioni-ioni törmäykset tasaavat niiden lämpötilaeroja

## 6. ECR-IONILÄHDE



Kuva 6.1: ECR-tyyppisen ionilähteen periaatekuva sivulta katsottuna.



Kuva 6.2: ECR-tyyppisen ionilähteen magneettien heksapolirakenne aksiaalisesta suunnasta katsottuna.

tehokkaasti.

Magneettisesta pullosta karkaa elektroneja ja ioneja kolmella tavalla: injektioon, ekstraktioon, ja plasmakammion seinille multipolikentän kenttäviivoja seuraten. Ioneja kevyempinä hiukkasina elektronit karkaavat plasmasta helpommin. Plasman elektronitiheyden pienentyessä vähentyvät elektroni-ionitörmäykset, jolloin ionisaatiotehokkuus heikkenee ja korkeasti varattujen ionien tuotto vaikeutuu. Injektiopäässä tätä pyritään estämään negatiiviseen jännitteeseen varatulla bias-levyllä, jolla peilataan elektroneja takaisin plasmakammioon. Ekstraktioon karkaavat elektronit vetävät mukanaan ioneja, mikä on puolestaan aivan toivottua.

Plasmakammion seinille törmäävien elektronien vaikutusta plasmaan voidaan hallita sopivasti valitulla kammiomateriaalilla, sillä kammion seinämään osuva elektroni irrottaa materiaalista uusia elektroneja, joista osa kulkeutuu takaisin plasmaan. Yleisesti kammiomateriaalina käytetään alumiinia, joka hapettuessaan alumiinioksidiksi toimii hyvänä sekundaarielektronien lähteenä [44].

Elektronikato aiheuttaa plasman varautumisen positiivisesti eli niin sanotun plasmapotentiaalilin syntymisen. Yleensä plasmapotentiaalilin arvo on 10-50 voltia [45]. Plasmapotentiaali halutaan pitää mahdollisimman pienenä, jotta positiivisesti varautuneen plasman ioneita hylkivä vaikutus ei aiheuttaisi ionien säilöntäajan pienenemistä, mikä johtaisi korkeiden varausasteiden tuoton heikkenemiseen.

## 6.2 Röntgensäteily

Ionilähteen tuottama röntgensäteily aiheuttaa ongelmia niin säteilysuojelun kuin rakenteiden lämpenemisen kannalta. ECR-ionilähteessä röntgensäteilyä syntyy plasmassa tapahtuvissa elektroni-ionitörmäyksissä ja elektronien törmätessä plasmakammion seinään magneetikentän ja seinän leikkauskohdissa. Valtaosa elektronien lämmittämiseen käytetystä mikroaaltoenergiasta absorboituu plasmakammion seinille joko suoraan tai seinään törmäävien elektronien mukana.

Plasmakammion seinään törmäävät elektronit menettävät energiaa ionisaatioprosesseissa ja sirotessaan plasmakammion materiaalista. Näistä prosesseista syntyy havaittava jarrutus-säteilyn ja karakteristisen röntgensäteilyn spektri. Jos materiaalia on paksult, vaimenee matalimman energian osuus röntgenspektristä voimakkaasti materiaalin läpi kulkiessaan ja vain säteilyspektrin energeettisimmät fotonit pääsevät ionilähteen ulkopuolelle.

Myös plasmassa syntyy jarrutussäteilyä varausten törmäilyssä toisiinsa ja jatkuvat ionien rekombinaatioprosessit muodostavat kulloinkin käytetyille kaasuseoksille ominaista karakteristista röntgensäteilyä. Plasmasta tuleva röntgensäteily hukkuu kuitenkin radiaalisesti mitattaessa plasmakammion seinään törmäävien elektronien aiheuttaman röntgensäteilyn

alle.

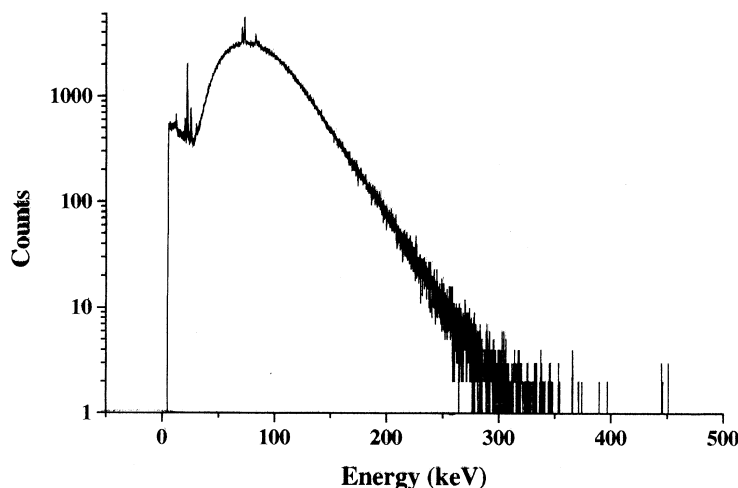
Säteily ei ole toivottavaa, sillä se on terveydelle vaarallista, jolloin joudutaan käyttämään aikaa ja rahaa säteilysuojausten suunnittelemiseen ja rakentamiseen laitteen ympärille. Lisäksi säteilyä tuottavat seinämiin törmäävät elektronit olisivat hyödyllisempiä plasman lämmityksessä. Tärkein syy säteilyn minimoimiseen kuitenkin on, että yhä tehokkaampien suprajohtavilla magneeteilla varustettujen ionilähteiden jäähdyttäminen on erittäin haasteellista säteilyn lisääntyessä. On myös havaittu, että röntgensäteily voi johtaa ionilähteen korkeajännite-eristeiden haurastumiseen [1].

Avain röntgensäteilyn vähentämiseen on rajoittaa plasman korkean energian elektronien määrää ionilähteen toiminnan kärsimättä. Tavoitteen saavuttamiseksi täytyy ensin ymmärtää millaiset lämmitysprosessit ECR-plasmassa tuottavat korkean energian elektroneita ja millainen röntgensäteilyn tuottamisesta vastuussa olevan elektronipopulaation energiajakauma tarkalleen on. Koska energiajakaumaa ionilähteen sisällä on lähes mahdotonta mitata suoraan laitteen ollessa käynnissä, täytyy mitatun säteilyn ja energiajakauman välille yrittää löytää yhteys välillisesti, esimerkiksi simuloimalla.

### 6.3 JYFL ionilähteet

Jyväskylän yliopiston fysiikan laitoksella (JYFL) on kaksi ECR-ionilähdettä, mikroaaltotaajuudeltaan 6,4 GHz ja 14 GHz, ja yksi niin sanottu *multicusp*-ionilähde, LIISA, H<sup>-</sup>kevytionituotantoa varten. Vanhempaa 6,4 GHz:n ECR-ionilähdettä (ECR1) käytetään enimmäkseen ionilähteiden kehitystyössä ja materiaalfysiikan tutkimuksessa ja uudempi 14 GHz:n ECR-ionilähde (ECR2) toimii K-130 kiihdyttimen raskasionilähteenä useimmissa ajoissa. Tehokkaammasta 14 GHz:n ECR-ionilähteestä mitattu röntgenspektri on esitelty kuvassa 6.3. Mikroaaltotehon muuttaminen ei merkittävästi vaikuttanut spektrin maksimienergiaan, joskin säteilyn intensiteetti muuttui selvästi eri tehoilla [46]. Testien aikana lähteen ympäriltä mitattu annosnopeus oli jopa 1 mSv/h, kun lyijysuojaukset eivät olleet paikoillaan. Tämä on paljon, kun sitä verrataan suomalaisen keskimäärin saamaan noin 3.7 millisievertin vuosiannokseen [47].

Kuvan 6.3 röntgenspektri muodostuu pitkälti plasmakammion seinään törmänneiden elektronien aiheuttamasta röntgensäteilystä, mutta sisältää myös osuuden plasman törmäysprosesseissa muodostuvasta säteilystä. Toimivan ionilähteen sisäolosuhteiden suora mittaaminen on hankalaa, mutta joitakin tuloksia on saatavilla pelkän plasman tuottamasta säteilyjakaumasta (esim. [48], [3], [2]). Pelkästään plasmakammion seinistä tulevan säteilyn mittaaminen on erityisen ongelmallista varsinkin, jos halutaan tietää sen aiheuttavien elektronien energiajakauma, sillä ilmaisilla joudutaan mittaamaan voimakkaasti vaimentunut röntgensäteily vasta kun se on kulkenut ionilähteen seinämien ja tukirakenteiden läpi. Epäsuoralla lähestymistavalla voidaan laskennallisesti yrittää etsiä mitatun kaltaisen



Kuva 6.3: JYFL 14 GHz ECR-ionilähteen röntgenspektri noin 1 m etäisyydeltä mitattuna. Laitteessa ajettiin happiplasmaa 150 W mikroaaltoteholla [46].

röntgenspektrin tuottava elektronien energiajakauma ionilähteen sisällä. Koska kyseessä on lukuisia hiukkasia sisältävä monimutkainen ongelma, järkevintä lienee simuloida tilannetta tietokoneella.

### 6.4 JYFL 6,4 GHz ECR-ionilähde

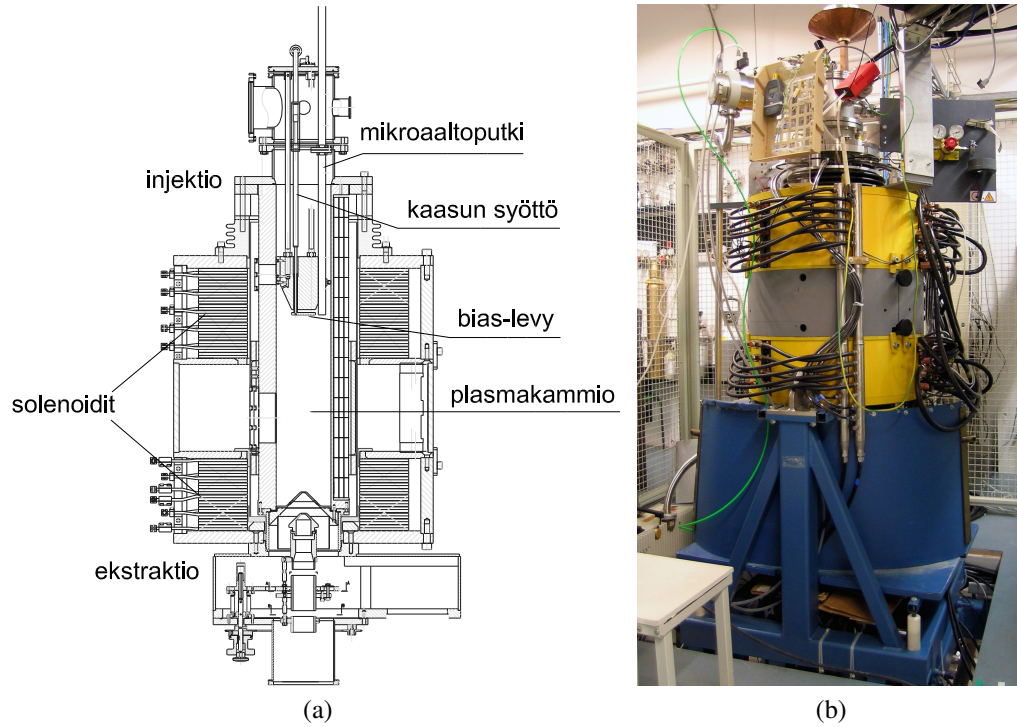
Jyväskylän yliopiston kiihdytinlaboratorion 6,4 GHz:n ECR-ionilähteen rakenne on esitetty kuvassa 6.4. Ionilähde on asennettu normaalista käytännöstä poiketen pystyasentoon ja sen suihkulinja jatkuu suoraan alaspäin kohti 90 asteen kääntömagneettia. Alunperin ionilähde rakennettiin vuosina 1990-1991 Michiganin yliopiston piirustusten pohjalta kaksivaiheiseksi, mutta se muunnettiin vuonna 2002 yksivaiheiseksi [49] ja päivitettiin vuonna 2003 kestmagneettien muodostamaa magneettikenttää vahvistavalla rautakuorella. Vuonna 2005 ionilähteen plasmakammio ja heksapolimagneettikenttä uusittiin hyödyntämään muunneltua multipolirakennetta (MMPS)<sup>1</sup> [50]. Päivitysten ansiosta lähteellä pystytään tuottamaan huomattavasti suuremman intensiteetin suihkuja useimmista alkuaineista kuin alkuperäisellä ionilähteellä.

Ionilähteen plasmakammion poikkileikkaus on esitetty kuvassa 6.5. Kuvassa näkyy sisähalkaisijaltaan 140 mm alumiininen plasmakammio ja sen ulkopintaan upotetut kuparista valmistetut jäähdytysputket. Jäähdytysputkien viereen magneettien puolelle on myös ko-verrettu urat, jotta lämmön johtuminen itse magneetteihin voitaisiin minimoida. Joka toisen magneetin välissä on kohta, jossa magneettikenttä kulkee plasmakammion seinän

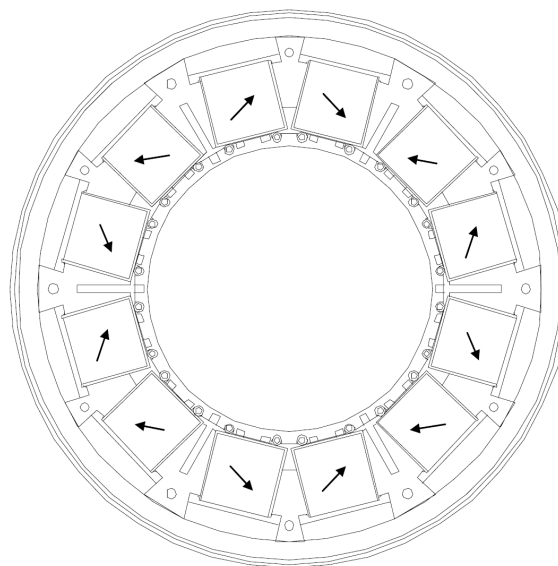
<sup>1</sup>MMPS = Modified MultiPole Structure.



## 6. ECR-IONILÄHDE



Kuva 6.4: JYFL 6,4 GHz ECR-ionilähde. (a) Ionilähteen kaaviokuva ja (b) valokuva ionilähteestä.



Kuva 6.5: JYFL 6,4 GHz ECR-ionilähteen plasmakammio [50]. Nuolet osoittavat kestmagneettien magneetoituman suunnan.

## 6. ECR-IONILÄHDE

---

läpi ja plasma pääsee osumaan kammion seinään. Kuvassa näkyvät kyseisissä pisteissä plasmakammioon tehdyt urat, jotka mahdollistavat MMPS-rautanapojen viemisen mahdollisimman lähelle plasmaa. Kammion alumiini on näissä kohdissa vain 1,5 mm paksua kun muualla se on 6,2 mm. MMPS-navat vahvistavat paikallisesti heksapolikenttää, mikä kasvattaa kentän peilisuhdetta. Magneettien välissä erottuvat alumiiniset tukivarret, jotka pitävät magneetit paikoillaan ja parantavat ionilähteen rakenteellista jäykkyyttä. Itse neodmium-magneetit on koteloitu ja liimattu ruostumattomasta teräksestä valmistettujen kuorien sisään. Kokonaisuutta ympäröi tukeva teräksinen ulkokuori. Kuvasta 6.2 poiketen JYFL 6,4 GHz ECR-ionilähteen kestmagneettien heksapolirakenne muodostetaan kahdella magneetilla jokaista napaa kohden.

# Luku 7

## Geant4

*Geant4* (GEometry ANd Tracking) [4], [51], [52] on kokoelma avoimen lähdekoodin työkaluja hiukkasten ja materian vuorovaikutuksen simulointiin Monte Carlo -menetelmällä [53]. Erityisen käyttökelpoinen se on suurenergiafysiikan, ydinfysiikan ja kiihdytinfysiikan tutkimuksessa, mutta kattaa laajenuksineen myös matalan energian sovelluksia. Geant4 on viimeisin versio alunperin CERNin<sup>1</sup> kehittämistä hiukkasfysiikan simulointityökaluista. Aikaisemmat versiot oli kirjoitettu Fortran-kielillä, mutta Geant4 ohjelmoitiin alusta asti C++ -kielillä olio-ohjelmoinnin periaatteita noudattaen. Ohjelmiston kehityksessä on ollut mukana tutkijoita ja ohjelmoijia ympäri maailmaa ja sitä kehitetään edelleen aktiivisesti. Olioperustaisena ja modulaarisena ympäristönä Geant4 soveltuu hyvin suuren kehittäjäjoukon ylläpidettäväksi. Ohjelmisto on vapaasti käytettävissä ja sen voi ladata internetistä ohjelmiston kotisivuilta [4].

### 7.1 Yleistä

Geant4 ei ole varsinaisesti itsenäinen simulaatio-ohjelmisto, vaan se tarjoaa alustan fyysikaalisten ilmiöiden mallintamiseen. Rakennuspalikat simulaation toteuttamiseen koostuvat datakirjastoista ja niitä hyödyntävistä C++ -luokista, jotka sisältävät useimmat tavallisimmista ydin- ja hiukkasfysiikan kokeiden ja laitteistojen mallintamisessa tarvittavista elementeistä. Tarvittaessa käyttäjä voi helposti laajentaa tai jopa korvata haluamiaan osia kirjastoista omilla toteutuksillaan. Laajennuksia onkin tehty niin avaruusteknologian (esim. [54], [55], [56]), lääketieteellisen tutkimuksen [57] kuin suihkulinjasimulaatioidenkin [58] käyttöön.

Tärkeimpiin Geant4:n sisältämiin palveluihin kuuluvat:

---

<sup>1</sup>CERN on Ranskan ja Sveitsin rajalla sijaitseva Euroopan hiukkasfysiikan tutkimuskeskus.

## 7. GEANT4

---

- *Fysiikka*: yleisimmät hiukkasten ja materian vuorovaikutusprosessit parametreineen ja vakioineen.
- *Kentät*: tuki sähkömagneettisille ja yleisille kentille.
- *Geometria*: täydellinen laitteiden, kohtioiden ja ilmaisimien geometrian mallintaminen.
- *Materiaalit*: koejärjestelyn kaikkien osien materiaalien generointi ja mallintaminen.
- *Hiukkaset*: alkeishiukkasten ja ionien ominaisuudet ja integrointi simulaatioon.
- *Tapahtumat* (engl. primary events): fysikaalisen alkutapahtuman generointi (esimerkiksi elektroni, joka kulkee tiettyyn suuntaan tietyllä energialla).
- *Seuranta* (engl. tracking): hiukkasen kokemien fysikaalisten vuorovaikutusten toteuttaminen ja hiukkasen kuljettaminen koegeometrian läpi.
- *Pinoaminen* (engl. stacking): seurattujen hiukkasratojen hallinnointi ja priorisointi.
- *Ilmaisinvaste*: Ilmaisinkomponentin keräämät tiedot siihen osuvien hiukkasten ominaisuuksista.
- *Visualisaatio*: koegeometrian, hiukkasten liikeratojen ja tapahtumien esittäminen graafisesti.

Mainittujen ominaisuuksien lisäksi Geant4 mahdollistaa simulointiprosessin muokkaamisen missä tahansa simuloinnin vaiheessa tai jopa palvelujen uudelleenkirjoittamisen käyttäjän vaatimusten mukaiseksi. Ohjelmiston ajonaikaiseen ohjaukseen voidaan käyttää sisäänrakennettua komentorivipohjaista käyttöliittymää tai vastaavaa komentojonotiedostoa, mutta myös oman – vaikkapa graafisen – käyttöliittymän ohjelmointi on suhteellisen yksinkertaista.

Vaikka ohjelmisto sisältääkin kattavan kokoelman työkaluja, sen käyttö ei ole aivan suoraviivaista. Käyttäjän on itse rakennettava simulaatio käyttäen hyväkseen tarjottuja apuvälineitä, mikä voi olla hyvinkin työlästä simulaatiogeometrian ollessa monimutkainen. Geant4:n oppimiskäyrä on varsin jyrkkä, sillä simulaation toteuttaminen vaatii simuloitavien fysiikkaprosessien ymmärryksen lisäksi C++ -ohjelmointikielen osaamista, olioperiaatteiden sisäistämistä ja itse Geant4-arkkitehtuurin omaksumista. Toisaalta ohjelmisto tarjoaa äärimmäisen joustavan ja monipuolisen tavan hyvinkin erilaisten hiukkassimulaatioiden toteuttamiseen – rajana on yleensä vain se, kuinka paljon aikaa projektin toteuttamiseen on.

Jos koe on riittävän yksinkertainen, on sen yksityiskohtien ohjelmointiin olemassa puoliautomaattisia käyttöliittymiä (esim. GGE – Geant4 Graphical Geometry Editor), jotka

## 7. GEANT4

---

generoivat tarvittavan C++ koodin. Useimmissa tapauksissa geometria täytyy kuitenkin kirjoittaa käsin, joskin tarvittavien fysiikkaprosessien valitsemiseen on tarjolla valmiita listoja. Yksinkertaisimmillaan käyttäjä kirjoittaa simulaation toteuttamiseksi vain pääohjelman sekä Geant4:n perusluokista perityt pakolliset luokat, jotka ovat geometrian ja materiaalien määrittely (emoluokka `G4VUserDetectorConstruction`), fysiikkalista (emoluokka `G4VUserPhysicsList`) ja ensiöhiukkasen parametrit (emoluokka `G4VUserPrimaryGeneratorAction`). Simuloinnin kulkuun voidaan haluttaessa vaikuttaa omien luokkien avulla millä tasolla tahansa.

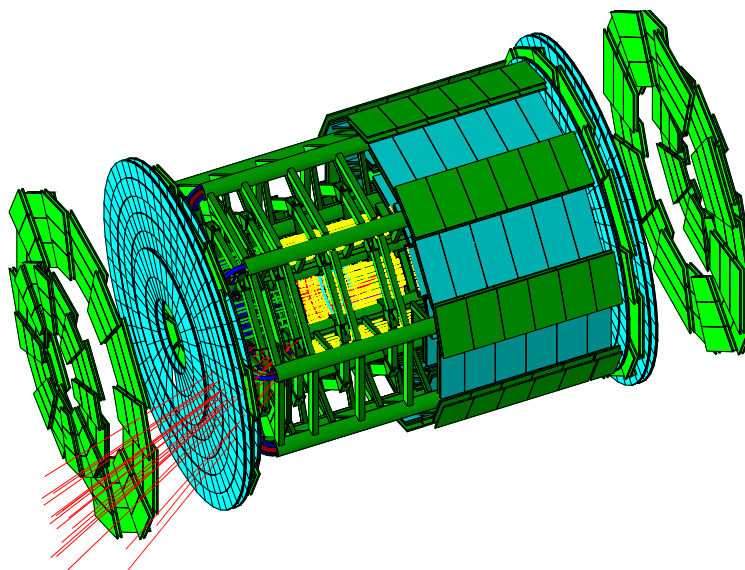
Geant4 ei automaattisesti tallenna simulaatiosta saatuja tietoja, vaan halutut parametrit on irrotettava simulaatiosta sopivassa kohdassa. Tätä tarkoitusta varten Geant4 sisältää ilmaisluokan `G4SensitiveDetector`, joka tallentaa haluttuja tietoja valitussa geometrian osassa. Vaikka simulointidatasta voidaan jo simulointivaiheessa rakentaa histogrammeja tai muunlaisia graafeja AIDA-rajapinnan<sup>2</sup> [59] avulla, on usein järkevää tallentaa raakadata erikseen ja analysoida se vasta jälkikäteen. Käyttäjän ohjelmoitua simulaationsa valmiiksi se käännetään, minkä jälkeen valmistu simulaatiota voi käyttää kuten tavallista suoritettavaa ohjelmaa.

Geant4:n vahvuus on siinä, että esimerkiksi kalliin koejärjestelyn toimintaa voidaan simuloida etukäteen ja muuttaa tarvittaessa sen rakennetta simuloinnissa havaittujen tulosten perusteella ennen kuin mitään on fyysisesti rakennettu. Myös sellaisia fysikaalisia prosesseja voidaan simuloida, joita ei käytännön syistä pystytä mittaamaan suoraan. Ohjelmiston tapa simuloida tapahtumia hiukkanen kerrallaan voi johtaa siihen, että laskentatehon tarve kasvaa liian suureksi monimutkaisten ja suuria määriä hiukkasia sisältävien tapahtumien simulointiin kohtuullisessa ajassa. Tällaisia tilanteita varten on olemassa lukuisia mahdollisuuksia yksinkertaistaa simulaatiota, mutta käyttäjän vastuulle jää päättää mikä osuus simulaatiosta on fysikaalisesti olennainen ja mikä voidaan jättää vähemmälle huomiolle.

ECR-ionilähteen röntgensäteilyn simuloinnin toteuttaminen Geant4:llä voidaan jakaa seuraaviin vaiheisiin: ionilähteen geometrian ohjelmoiminen, magneetti- ja sähkökenttien määrittely, tarvittavien fysikaalisten prosessien käyttöönotto ja lopuksi elektronien alkutilan määrittely energia-, kulma ja paikkajakaumineen. Tämän jälkeen ajetaan simulaatio ja tutkitaan millainen röntgenspektri simulaatiosta saadaan. Vertaamalla tuloksia mitattuihin spektreihin voidaan mahdollisesti saada selville millainen elektronijakauma on vastuussa havaitun säteilyn tuottamisesta.

---

<sup>2</sup>AIDA (Abstract Interfaces for Data Analysis) määrittelee yhteisen ohjelmointirajapinnan, jonka kautta yleisimpiä fysiikan ohjelmistoissa käytettyjä objekteja (esim. histogrammit, ntuplet) voidaan siirtää vaivatta eri ohjelmien välillä.



*Kuva 7.1: LHC-hiukkaskiihdyttimen ATLAS-ilmaisinaseman osa Geant4:llä mallinnettuna [60].*

## 7.2 Geometria ja materiaalit

Simulaation toteuttamisessa suuritöisin vaihe on yleensä geometrian määrittely. Monimutkainen koejärjestely vaatii jokaisen yksittäisen kappaleen määrittelyn erikseen, joskin symmetrioita voidaan käyttää hyväksi monistamalla, peilaamalla, siirtämällä tai pyörittämällä kerran määriteltyjä kappaleita. Tietyissä tapauksissa on mahdollista tuoda ohjelmaan kappaleita suoraan CAD-piirustuksista. Kuvassa 7.1 näkyy osa CERNin uudesta LHC-hiukkaskiihdyttimen (Large Hadron Collider) ATLAS-ilmaisinasemasta ja simuloituja hiukkasratoja Geant4:llä mallinnettuna. Geant4 on erityisesti suunniteltu toimimaan myös monimutkaisten geometrioiden kanssa, mutta yksinkertaiset geometriat ovat tietenkin nopeimpia mallintaa.

Geometrian rakentaminen aloitetaan luomalla kolmiulotteinen Maailma (engl. World volume), joka rajoittaa simulaation toimimaan sen sisällä ja määrittää samalla yleisen karteesisen koordinaatiston, jonka origo on Maailman keskipisteessä. Maailma on yleensä kuutio tai jokin muu yksinkertainen muoto. Simulaatiossa käytettävät kappaleet sijoitetaan aina joko Maailmaan tai toisten kappaleiden sisään siten, että niiden koordinaatiston keskipiste sijoitetaan haluttuun pisteeseen emokappaleen koordinaatistossa. Varsinainen simulaatio käyttää vain yleisiä (Maailman) koordinaatteja ja kaikki sijainnit ilmoitetaan tässä koordinaatistossa.

Jokaiselle kappaleelle määritellään muoto ja materiaali. Muoto voi olla yksinkertainen (esimerkiksi suorakaide tai pallo), yhdistelmä useista yksinkertaisista muodoista tai yleinen pintojen avulla määritelty suljettu muoto. Simulaatioissa kannattaa käyttää niin yksin-

kertaisia muotoja kuin mahdollista, sillä monimutkaiset geometriat ovat laskennallisesti kalliita. Kappaleen materiaali voi koostua yhdestä alkuaineesta, yhdisteestä tai useamman aineen seoksesta. Materiaalille määritellään koostumuksen lisäksi tiheys ja haluttaessa muita parametreja kuten lämpötila, olomuoto (kaasu, neste, kiinteä) tai paine.

### 7.3 Fysiikkaprosessit ja -parametrit

Sopivien fysiikkaprosessien ja -parametrien valinta on tärkeä osa realistisen Geant4-simulaation rakentamista. Käyttäjän on tunnistettava tutkimusongelmaan liittyvät oleelliset fysikaaliset prosessit ja otettava ne käyttöön fysiikkalistassa (engl. physics list). Tämän lisäksi on huolehdittava sopivien seurantarajojen käyttämisestä.

Fysiikkaprosessit on jaettu seitsemään pääluokkaan: sähkömagneettiset prosessit, hadroniset prosessit, hajoamiset, fotoleptoni-hadroniset prosessit, optiset prosessit, parametrisointi ja kuljetus (engl. transportation). Näistä tarvitaan ECR-ionilähdesimulaatiossa vain sähkömagneettisia prosesseja ja kuljetusta, sillä ydinreaktioita esiintyy vasta useiden megaelektronivolttien energioilla. Parametrisoinnilla<sup>3</sup> ohitetaan normaali askel askeleelta simulointi ja annetaan mahdollisuus käyttää omaa, parametrisoitua toteutusta hiukkasen käyttäytymiselle materiaalissa. Joissakin tapauksissa parametrisoinnilla saavutetaan merkittävä simulaation nopeutuminen säilyttäen silti haluttu tarkkuus. Kuljetusprosessi on vastuussa hiukkasen kuljettamisesta geometrian läpi ja sähkömagneettisiin prosesseihin sisältyvät tarvittavat vuorovaikutukset elektronien, fotonien ja materiaalin välillä.

Prosessia kuvaa tietty hiukkasen alku- ja lopputila, joten se pitää sisällään hyvin määritellyn vaikutusalan. Prosessi voidaan toteuttaa useammalla eri *mallilla*, jotka voivat toimia joko yhdessä tai erikseen. Uusia malleja voidaan tarvittaessa lisätä tai vanhoja korvata ilman, että varsinaiseen prosessin määrittelevään koodiin tarvitsee kajota. Tätä lähestymistapaa on käytetty erityisesti matalan energian prosesseissa.

Sähkömagneettiset prosessit on edelleen jaettu useampaan luokkaan käyttötarkoituksen, tutkittavien hiukkasten ja energian mukaan. Kiinnostava energia-alue tässä työssä on noin 1 keV - 1 MeV, joten esimerkiksi elektroni-positroniannihilaatio ja myoniprosessit voitiin jättää huomioimatta. Tällä energia-alueella Geant4 tarjoaa fysiikkaprosessien mallinnukseen kolme lähestymistapaa, jotka tunnetaan nimillä tavallinen (standard), Livermore ja Penelope. Standardifysiikka kattaa energia-alueen 1 keV - 10 PeV [61], Livermore 250 eV - 100 GeV [62] ja Penelope noin alueen 250 eV - 1 GeV [63]. Periaatteessa kaikkien kolmen mallin pitäisi toimia vastaavasti päällekkäin menevällä energia-alueella, mutta

---

<sup>3</sup>Parametrisoinnissa asian täydellisen simuloimisen sijaan käytetään suoraan tiedettyjä arvoja. Esimerkiksi tietyillä hiukkasen alkuarvoilla katsotaan taulukosta tai yksinkertaisen funktion avulla millainen hiukkasen lopputila on. Näin säästetään joissain tapauksissa paljon laskenta-aikaa kun hiukkasen yksityiskohtainen askel-askeleelta simulointi ei ole tarpeellinen.

käytännössä matalan energian mallit ovat tarkempia, sillä ne ottavat huomioon materiaalin atomirakenteen ja atomin viritystilan purkautumisessa muodostuvat sekundaarifotonit ja elektronit [64]. Livermore- ja Penelope-mallit toimivat jopa 1 eV energioihin asti prosessista riippuen, mutta tarkkuuden kustannuksella. Edellä mainittujen Geant4:ään valmiina kuuluvien fysiikkaprosessien lisäksi ulkopuolisen tahon kirjoittama LECS-koodi (Low Energy Compton Scattering) [65] sisältää kulmajakaumaltaan realistisemmän toteutuksen Comptonin ja Rayleigh'n sironnasta. Tässä työssä käytettiin Livermore+LECS koodia mahdollisimman todenmukaisten tulosten saamiseksi.

### 7.3.1 Standardifysiikka

Sähkömagneettisten prosessien standardikoodi on tarkoitettu lähinnä korkean energian ydin- ja hiukkasfysiikan tarpeisiin. Koodi sisältää luokat Comptonin sironnan, parinmuodostuksen ja valosähköisen ilmiön simulointiin fotoneilla sekä ionisaation ja jarrutussäteilyn simulointiin elektroneilla. Näiden lisäksi standardikoodissa on useita luokkia muiden hiukkasten vuorovaikutusten simulointiin. Standardikoodi ottaa analyttisen lähestymistavan vuorovaikutusten laskemiseen. Valosähköistä ilmiötä lukuunottamatta atomien elektronien oletetaan olevan kvasivapaita eli niiden sidosenergiaa ei oteta huomioon ja atomiytimien rekyyliliikemäärä jätetään huomioimatta [66].

Sähköisesti varattujen hiukkasten moninkertaiselle Coulombin sironnalle on kirjoitettu yleinen luokka [67], jota hyödynnetään kaikille varatuille hiukkasille myös matalan energian malleissa. Sironnan aiheuttamat muutokset simuloitavan hiukkasen lentorataan lasketaan askeleen lopuksi Lewisin teoriaan [29] perustuvalla algoritmilla.

Hiukkasten kuljettamisesta simuloitun geometrian läpi huolehtii kuljetusprosessi. Luokan tehtävänä on määrittää geometrian asettamat rajat askeleen pituudelle ja päivittää hiukkasen lentoaika alkunopeuden perusteella. Jos simulaatioon on määritelty (sähkömagneettisia) kenttiä, ottaa kuljetusprosessi tehtäväkseen hiukkasen lentoradan laskemisen kentän vaikutusalueella käyttäen hyväkseen joko sisäänrakennettua tai käyttäjän määrittelemää liikeyhtälöä.

### 7.3.2 Matalan energian sähkömagneettinen fysiikka

Matalan energian Livermore-koodi laajentaa standardifysiikkaprosesseja fotonien ja elektronien osalta ja käyttää prosessien vaikutusalojen ja lopputilojen määrittämiseen Lawrence Livermoren kansallisen laboratorion (LLNL) datakirjastoja fotoneille [68], elektroneille [69] ja atomeille [70]. Livermore-malli tarjoaa tarkemman käsittelyn seuraaville prosesseille: Comptonin sironna, Rayleigh'n sironna, parinmuodostus, valosähköinen ilmiö, jarrutussäteily ja ionisaatio. Atomin viritystilan purkautuminen mallinnetaan fluoresenssiemission



ja Auger-elektronien tuoton avulla, jolloin atomin elektronikuorirakenteesta johtuvat ilmiöt tulevat esiin. Saatavilla olevien datapisteiden väliarvot interpoloidaan tarpeen vaatiessa tai käytetään vastaavaa teoreettista mallia – Geant4 osaa valita sopivan mallin prosessin käsittelyyn hiukkasen energian perusteella.

### 7.3.3 Penelope-fysiikka

Vaihtoehtoinen tapa mallintaa matalan energian fysiikkaa Geant4:ssä on käyttää Penelope-mallia [63]. Malli tarjoaa samat prosessit kuin Livermore, mutta käyttää analyyttistä lähestymistapaa vaikutusalojen ja hiukkasten lopputilojen laskemiseen. Lisäksi Penelope laajentaa Comptonin sirontaprosessia ottamalla huomioon Dopplerin ilmiön ja atomien viritystilojen muodostumisen ja purkautumisen [62].

### 7.3.4 LECS-laajennus

Tässä työssä käytettiin matalan energian Livermore-koodin lisäksi G4LECS-pakettia [65], joka tarjoaa tavallista matalan energian koodia tarkemman käsittelyn Comptonin ja Rayleigh'n sironnalle [71] ottamalla huomioon muun muassa atomiin sidottujen elektronien aiheuttamat muutokset niistä siroavien ensiöhiukkasten energioissa. Erityisesti alle muutamman sadan kiloelektronivoltin fotonien simuloinnissa LECS-koodi tuottaa realistisempia tuloksia.

Riippumatta käytetystä mallista, primäärielektronien energioilla 300-1000 keV Geant4:n on todettu antavan hyvin realistisia tuloksia elektronien energiahukasta materiaalissa virheen ollessa mittaustataan verrattuna enimmillään noin 3 % [72]. Myös jarrutussäteilyn tuotto matalilla energioilla on riittävän lähellä mittaustataa [73], vaikka validaatioprosessi onkin vielä kesken. Sähkömagneettiset prosessit on yleisesti ottaen validoitu erittäin hyvin yhteensopiviksi saatavilla olevan mittaustatan kanssa [61], [66].

## 7.4 Seuranta

Simuloinnin nopeuttamiseksi ja ohjelmoinnin helpottamiseksi hiukkasen liikkeen seuranta on Geant4:ssä erotettu sen kokemista vuorovaikutuksista. Tästä johtuen hiukkasia *kuljetetaan* simulaatiossa sen sijaan, että niiden ajateltaisiin liikkuvan itsenäisesti. Kuljetuksesta vastaava kuljetusprosessi määritellään samoin kuin muutkin vuorovaikutuksista vastaavat fysiikkaprosessit.

Simulaatio etenee kuljettamalla hiukkasta geometrian läpi askel kerrallaan. Askeleen

aikana kaikki hiukkaselle määritellyt fysiikkaprosessit ehdottavat vuorovaikutusmatkoja, joista lyhin valitaan toteutettavaksi. Lyhin matka voi olla myös pelkkä kuljetusprosessi lähimmälle geometrian rajapinnalle tai käyttäjän itse määrittelemä pisin sallittu askel. Prosessien toteutusjärjestys riippuu niiden fysikaalisesta luonteesta, jota kuvaillaan yhdellä tai useammalla seuraavista kolmesta ominaisuudesta:

- *levossa*: levossa oleville hiukkasille (esimerkiksi hajoamisprosessit)
- *askeleen aikana*: tapahtuu ”jatkuvasti” askeleen aikana (esimerkiksi jatkuva energiahäviö, Cerenkovin säteily)
- *askeleen jälkeen*: toteutetaan askeleen lopuksi (esimerkiksi sekundaarihiukkasten tuottaminen vuorovaikutuksissa)

*Askeleen aikana* toimiviksi määritellyt prosessit toteutetaan aina ja niiden vaikutus kumuloiduu, mutta *levossa* ja *askeleen jälkeen* toimivista prosesseista toteutetaan vain yksi. Askeleen jälkeen käyttämättä jääneiden fysiikkaprosessien vuorovaikutusmatkaa lyhennetään kuljetun askeleen verran ja aloitetaan alusta. Askeleen pituutta voidaan rajoittaa erikseen tarkkuuden säilyttämiseksi. Kappaleiden rajapintoja ei koskaan ylitetä askeleen aikana, vaan tällöin askeleen päätepiste (ja seuraavan askeleen alkupiste) jää rajapinnalle. Eräät prosessit, kuten kuljetusprosessi, määrittelevät itsensä toteutettavaksi jokaisella askeleella.

### 7.5 Rajat

Laskentakapasiteetin rajallisuuden vuoksi simulaatio ei voi olla mielivaltaisen tarkka. Eri-tyisesti infrapunadivergenssin<sup>4</sup> välttämiseksi energiaskaalan alapäähän täytyy määritellä raja, jota pienemmän energian hiukkasia ei enää oteta huomioon. Perinteisesti Monte Carlo-simulaatioissa on energiana määritelty seurantaraja (engl. tracking cut), jota pienemmän energian hiukkasten seuraaminen lopetetaan ja niiden loppuenergia tallennetaan kyseiseen pisteeseen menetetyksi. Tästä seuraa se, että hiukkasen lopullinen pysähtymispaikka voi olla virheellinen ja energia merkitään menetetyksi väärässä kohdassa materiaalia. Lisäksi esimerkiksi vuorottelevista materiaaleista koostuvassa geometriassa sama energiaraja saattaa tarkoittaa hyvinkin erilaista kantomatkaa materiaalista riippuen. Geant4 ratkaisee ongelman käyttämällä *etäisyytenä* määriteltyä tuottorajaa (production threshold), jonka oletusarvo on 1 mm. Tuottoraja muunnetaan automaattisesti energiaksi jokaisessa materiaalissa, joten kantama on sama materiaalista riippumatta. Varsinaista seurantarajaa

---

<sup>4</sup>Infrapunadivergenssi tarkoittaa matalan energian sekundaarihiukkasten ylenmääräistä tuottoa esimerkiksi jarrutus säteilyprosessin tai ionisaation ja sitä seuraavan atomin viritystilan purkautumisen yhteydessä. Tätä halutaan välttää, koska kaikkien mainituissa prosesseissa syntyvien matalaenergiisten hiukkasten simuloiminen on laskennallisesti erittäin kallista.

Geant4:ssä ei siis ole ollenkaan, vaan kaikkien tuotettujen hiukkasten kulkua simuloidaan kunnes ne ovat menettäneet kaiken energiansa. Sopiva tuottoraja riippuu paikallisen energiahäviön tarkkuusvaatimuksesta, mutta oletusarvo (1 mm) on usein hyvä kompromissi tarkkuuden ja laskenta-aikavaatimusten välillä.

Materiaalissa kulkiessaan hiukkanen menettää energiaa erilaisten diskreettien prosessien kautta synnyttäen sekundaarielektroneja ja -gammaa. Hiukkasen energian laskiessa niin alas, että se ei enää riitä synnyttämään tuottorajaa suuremman kantaman sekundaarihiukkasia, loppuu sekundaarihiukkasten tuotto ja alkuperäistä hiukkasta seurataan nollaenergiaan asti siten, että se menettää energiaa jatkuvasti. Toisin sanoen tuotettavan hiukkasen energian jäädessä tuottorajan alle sen energia siirtyy kyseessä olevan prosessin diskreetiltä *askeleen jälkeen* komponentilta jatkuvalla *askeleen aikana* komponentille. Tämän lähestymistavan ansiosta hiukkasen energiahäviö ja pysähtymispaikka rekisteröidään oikeassa paikassa geometriaa.

Eräät prosessit, kuten ionisaatio ja jarrutussäteily, käyttävät tuottorajanaan oletusarvoisesti materiaalikohtaista kantamaa, kun taas eräät toiset prosessit (esimerkiksi spontaani hajoaminen) käyttävät omaa sisäistä tuottorajaansa. Joissakin tapauksissa prosessi saattaa tuottaa myös tuottorajaa alemman energian sekundaarihiukkasia. Näin voi käydä esimerkiksi silloin, kun matka geometrian rajalle on pienempi kuin tuottorajan perustana käytetty matka. Tällöin sekundaarihiukkanen voi päästä toiseen, pienemmän tiheyden materiaaliin, vaikka sen alkuperäinen energia onkin liian pieni edetäkseen siinä materiaalissa, missä hiukkanen syntyy. Myös antihiukkaset (esimerkiksi positroni) tuotetaan aina, vaikka niille ei jäisi ollenkaan liike-energiaa.

Geant4 tarjoaa sisäänrakennettuna mahdollisuuden asettaa muutamia geometrisille alueille määriteltyjä ehtoja, jotka rajoittavat hiukkasten seuraamiseen liittyviä parametreja tai määrittelevät raja-arvot, joiden täytyttyä kyseisen hiukkasen seuraaminen lopetetaan kokonaan. Näitä voidaan käyttää optimointisyistä, sillä joissakin tapauksissa ei ole järkevää seurata kaikkia simulaation kannalta epäolennaisia hiukkasia loppuun saakka. Tällaiset rajat täytyy käyttäjän aina ottaa käyttöön itse. Valmiina tarjolla on mahdollisuus asettaa raja simuloitavan askeleen maksimipituudelle tuottorajasta riippumatta, hiukkasen kokonaislentomatalle, lentoajalle, hiukkasen minimienergialle ja pienimmälle jäljellä olevalle lentomatalle. Näistä erityisesti kokonaislentomatkan rajoitus on kätevä, kun simulaatiossa on mukana magneettikenttiä, sillä rajoituksen avulla voidaan välttää tilanne, jossa varattu hiukkanen jää ikuisesti pyörimään magneettikenttään törmäämättä koskaan mihinkään. Vastaavia ehtoja voi toki helposti määritellä itsekin, sillä Geant4 mahdollistaa puuttumisen simuloinnin kulkuun missä vaiheessa tahansa.

### 7.6 Alkutilanteen määrittäminen

Tärkeä osa simulaation toteuttamista on ensiöhiukkasten eli simulaation alkutilanteen määrittäminen. Simulaatiolle kerrotaan ensiöhiukkasen tyyppi, alkupaikka, suunta, energia ja muut olennaiset suureet. Hiukkasia voi olla yksi tai useampi. Geant4 tarjoaa primäärihiukkasten generointia varten `G4ParticleGun`-luokan, jolle syötetään edellä mainitut parametrit. Tarpeen vaatiessa on mahdollista käyttää myös muuta omaa tai valmista hiukkaslähdettä.

### 7.7 Satunnaisuus ja statistiikka

Koska Geant4 on Monte Carlo -periaatteella toimiva simulaatio, on vakaan ja laadukkaan (pseudo)satunnaislukugeneraattorin<sup>5</sup> valinta erittäin tärkeää. Oletusarvoisesti Geant4 käyttää Ranecu-satunnaislukugeneraattoria [74], mutta sen todettiin olevan jaksoltaan liian pieni ECR-ionilähdesimulaation tarpeisiin, sillä simulaatiotulokset alkoivat usein toistua huolellisesti tehdystä satunnaislukugeneraattorin alustuksesta huolimatta ajettaessa samaa simulaatiota usealla eri suorittimella. Tilalle vaihdettiin Mersenne Twister -satunnaislukugeneraattori [75], joka on jaksoltaan erittäin pitkä ( $2^{19937} - 1$ ), statistisesti hyvä satunnaisuudeltaan ja nopeampi kuin muut yhtä hyvät satunnaislukugeneraattorit. Mersenne Twister todettiin toimivaksi vaihtoehdoksi Raneculle. Generaattori alustetaan jokaisen simulaation alussa jyvällä, joka muodostetaan sen hetkisestä päivämäärästä ja kellonajasta.

Monte Carlo -simulaation luonteesta johtuen yksittäisestä simulaatiotapahtumasta saatu tulos voi vaihdella paljonkin, mutta simuloimalla suuri määrä tapahtumia saadaan tilastollisesti samansuuntaisia tuloksia kuin vastaavasta mittauksesta. Tilastollisuuden ansiosta samaa simulaatiota voidaan ajaa usealla eri tietokoneella yhtäaikaan ja yhdistää niiden tulokset jälkikäteen, kunhan vain satunnaislukugeneraattori on alustettu jokaisella koneella eri jyvällä. Käytännössä varsinkin pientä alkuenergiaa käyttäviä, hitaasti statistiikkaa tuottavia simulaatioita ajettiin useammalla suorittimella riittävän statistiikan saavuttamiseksi.

---

<sup>5</sup>Pseudosatunnaisluvut jäljittelevät ominaisuuksiltaan satunnaislukuja, mutta ne tuotetaan algoritmeilla, jotka mahdollistavat saman satunnaislukujakson toistamisen kun algoritmille syötetään sama alkuarvo eli jyvä. Erityisesti numeerisissa Monte Carlo -simulaatioissa tästä ominaisuudesta on hyötyä, sillä tarvittaessa simulaatio tai sen haluttu osa voidaan toistaa. Myös kryptografian eli salakirjoituksen sovelluksissa pseudosatunnaislukugeneraattorit ovat keskeisessä osassa.

# Luku 8

## Simulaatio ja koejärjestelyt

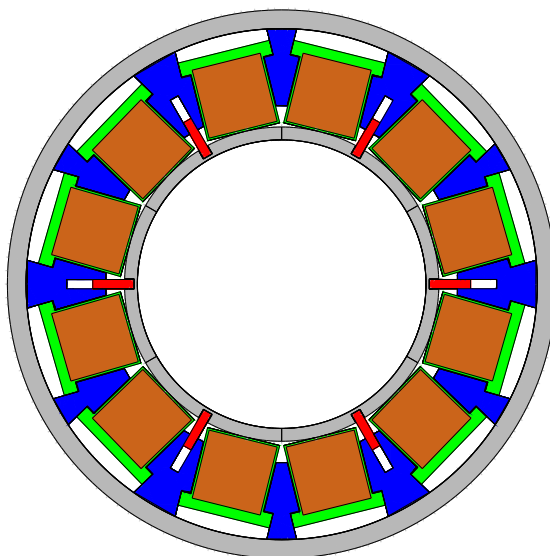
ECR-ionilähteen tuottaman röntgensäteilyn simulointi tehtiin Geant4-ohjelmiston avulla. Simulaation toteuttamiseen tarvittiin noin 7000 riviä itse kirjoitettua C++ koodia ja Geant4:n tarjoamat palvelut. Apuohjelmia kerätyn datan käsittelyyn ja analysointiin kirjoitettiin noin 1500 C++ koodiriviä ja 1000 MatLab koodiriviä. Simuloinnissa käytettiin pääasiassa Geant4:n versioita 4.8.1.p01, 4.8.2.p01 ja 4.9.0. Eri versiot antoivat simulaatioissa identtisiä tuloksia, mutta viimeisin on laskentanopeudeltaan edellisiä jonkin verran parempi. G4LECS-paketista käytettiin versiota 1.07. Simulaatioita ajettiin tavallisilla PC-laitteistoilla AMD Opteron, AMD Athlon X2, Intel Pentium D ja Intel Core 2 Duo suorittimilla. Kokonaisuudessaan laskenta-aikaa tarvittiin simulaatioihin ja testaukseen noin 20000 suoritinyksikkötunnin verran.

### 8.1 Geometria ja käytetyt materiaalit

Ionilähteen radiaalisen geometrian mallinnus tehtiin huolella erityisesti heksapolikentän napojen kohdalla. Geant4:llä toteutettu JYFL 6,4 GHz ECR-ionilähteen mallinnus on kuvassa 8.1 aksiaalisesta suunnasta katsottuna. Verrattessa mallinnusta plasmakammion suunnitelukuvaan 6.5 nähdään, että suurista komponenttikokonaisuuksista jätettiin mallintamatta ainoastaan heksapolikentän napojen välissä sijaitsevat plasmakammion jäädytysputket ja niiden välissä olevat lämmönjohtumista estävät urat, sillä niiden vaikutus röntgensäteilyn simuloinnissa todettiin lähes merkityksettömäksi. Napojen kohdalla lähteen mallinnus on tarkkaa ja sisältää sisältä ulospäin lukien plasmakammion, MMPS-rautanavat, tukitangot ja lähteen ulkokuoren. Napojen väliin on mallinnettu NdFeB-kestomagneetit ja niiden teräksestä valmistetut kotelot. Kaikki rakenteet on mahdutettu plasmakammion (sisähalkaisija 140 mm) ja ulkokuoren (halkaisija 266 mm) väliin ja kokonaisuus on korkeudeltaan 600 mm. Kuvassa valkoiset alueet ovat joko “tyhjiötä” (plasmakammion sisäosat) tai ilmaa.

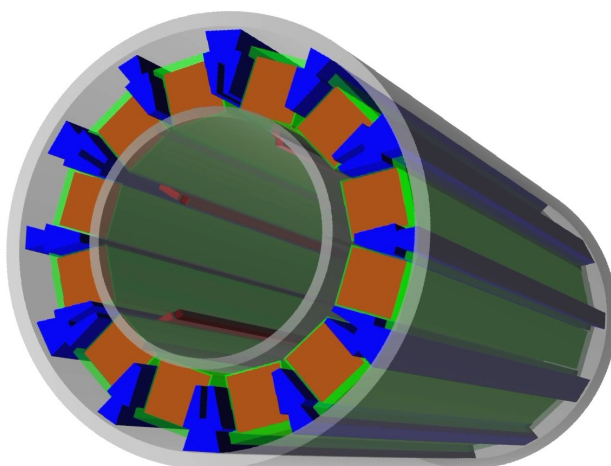
## 8. SIMULAATIO JA KOEJÄRJESTELYT

---



*Kuva 8.1: Poikkileikkaus JYFL 6,4 GHz ECR-ionilähteestä Geant4:llä mallinnettuna.*

Kyseisillä alueilla ei ole suurta fysikaalista merkitystä verrattuna ionilähteen rakenteisiin simuloitaessa elektroneja ja niillä on lähes olematon vaikutus röntgensäteilyä simuloitaessa. MMPS-rautanapoja voidaan tarvittaessa liikuttaa radiaalisessa suunnassa yksinkertaisella komennolla ennen simulaation aloittamista. Varsinaisen ionilähdegeometrian lisäksi määriteltiin ilmaisimena toimiva, ionilähdettä ympäröivä sylinteri (ei kuvassa). Ilmaisinsylinterin ainoana tarkoituksena oli rekisteröidä ionilähteen ulkopuolelle pääsevien gammojen suunta, energia ja paikka. Fysikaalista vaikutusta simulaatioon sillä ei ole. Simulaatioissa käytetty plasmakammion lopullinen kolmiulotteinen malli on piirretty kuvaan 8.2.



*Kuva 8.2: JYFL 6,4 GHz ECR-ionilähde Geant4:llä mallinnettuna. Plasmakammio keskellä ja runkoputki uloimpana ovat tässä osittain läpinäkyviä, jotta niiden välissä olevista rakenteista saa paremman käsityksen.*

## 8. SIMULAATIO JA KOEJÄRJESTELYT

Taulukko 8.1: JYFL 6,4 GHz ECR-ionilähteen tärkeimmät rakennusmateriaalit.

kappale	materiaali	tyyppi
plasmakammio	alumiini	Al 6005 T6
MMPS-napa	hiiliteräs	AISI 1010
tukitanko	alumiini	Al 6082 T6
magneetin kotelo	ruostumaton teräs	AISI 316L
magneetin kansi	ruostumaton teräs	RST AISI 304
kestomagneetti	Nd <sub>2</sub> Fe <sub>14</sub> B	N48
ulkokuori	ruostumaton teräs	AISI 316L

Taulukko 8.2: Simulaatiossa käytetyt materiaalit.

kappale	materiaali	koostumus (paino-%)	tiheys/paine
plasmakammion sisäosa	vakuumi	H (100%)	$3 \times 10^{-18}$ Pa
plasmakammio	alumiini	Al (100%)	2,700 g/cm <sup>3</sup>
MMPS-napa	hiiliteräs	Fe (100%)	7,870 g/cm <sup>3</sup>
tukitanko	alumiini	Al (100%)	2,700 g/cm <sup>3</sup>
magneetin kotelo	ruostumaton teräs	Fe (72%), Cr (16%), Ni (12%)	8,030 g/cm <sup>3</sup>
magneetin kansi	ruostumaton teräs	Fe (72%), Cr (16%), Ni (12%)	8,030 g/cm <sup>3</sup>
kestomagneetti	Nd <sub>2</sub> Fe <sub>14</sub> B	Nd (27%), Fe (72%), B (1%)	6,200 g/cm <sup>3</sup>
ulkokuori	ruostumaton teräs	Fe (72%), Cr (16%), Ni (12%)	8,030 g/cm <sup>3</sup>
Maailma (=muut osat)	ilma (NTP)	N (70%), O (30%)	1,205 mg/cm <sup>3</sup>

Simulaatiossa mallinnetun JYFL 6,4 GHz ECR-ionilähteen rakennusmateriaalit on eritelty taulukossa 8.1 ja simulaatiossa käytetyt materiaalit fysikaalisine parametreineen taulukossa 8.2. Rakennusmateriaalien tyyppi viittaa alumiinin ja teräksen tapauksessa kyseisen materiaalin teollisuusstandardiin ja magneetin tapauksessa magneettien energiatiheyteen. Karkeasti sanottuna mitä suurempi neodmium-magneetin N-luku on sitä voimakkaampi on sen tuottama magneettikenttä. T-merkintä alumiinityyppien perässä viittaa tehtyyn lämpökäsittelyyn, joka vaikuttaa metallin lujuuteen ja korroosionkestoon. Simulaation kannalta eri standardin teräkset ja alumiinit ovat ominaisuuksiltaan oleellisesti samanlaisia, sillä lähinnä materiaalin tiheys vaikuttaa röntgenspektriin lähteen ulkopuolella. Tämän vuoksi niitä kaikkia simuloitiin samalla "keskiarvoisella" teräksellä tai alumiinilla. Hiiliteräksestä valmistettua MMPS-napaa simuloitiin yksinkertaisesti raudalla. Ionilähteen ulkopuolinen Maailma koostui typen ja hapen sekoituksesta ja ionilähteen sisäpuoli vakuumista. Taulukossa ilmoitettu simulaatiossa käytetty vakuumi ei ole sama kuin normaali ECR-ionilähteen toimintavakuumi ( $\sim 10^{-6} - 10^{-5}$  Pa eli  $\sim 10^{-8} - 10^{-7}$  mbar), mutta tällä ei ole käytännössä mitään merkitystä, sillä kaasumaisten materiaalien vaikutus tässä simulaatiossa on lähes olematon.

### 8.2 Simulaation eteneminen

Geant4 simuloi yhden hiukkasen kerrallaan. Tyypillinen simulaatiotapahtuma ECR-ioni-lähdesimulaatiossa etenee seuraavasti:

1. Asetetaan elektroni plasmakammion sisälle ja ammutaan se kohti plasmakammion sisäseinää halutulla energialla.
2. Huomioidaan elektronin menettämä energia sironta- ja jarrutussäteilyprosesseissa sen kulkiessa materiaalisissa ja tuotetaan tarvittaessa sekundaarielektroneja ja -gammoja simuloitavaksi myöhemmin.
3. Jatketaan elektronin seuraamista kunnes se on joko menettänyt kaiken energiansa tai päässyt ulos lähteestä ja lentänyt simulaatiomaailman ulkopuolelle.
4. Seurataan tuotettujen sekundaarihiukkasten eteneminen loppuun saakka. Jos kyseessä on lähteestä poistuva röntgenkvantti, tallennetaan sen energia, suunta ja poistumiskohta.

Simulaatioissa ammuttiin elektroneja plasmakammion seinään eri energioilla. Ajoja tehtiin erilaisilla kulmajakaumilla sekä magneettikentän kanssa että ilman. Huomioon otettiin elektronien sironta väliaineessa, jarrutussäteilyn muodostuminen sekä ionisaatio-prosessit. Tyypillisessä ajatussimulaatiossa korkean energian elektroni (satoja kiloelektronivoltteja) menettää energiaa enimmäkseen sirontaprosesseissa, mutta voi emittoida jarrutussäteilynä riittävän suuren energian fotonin, joka pääsee ionilähteen ulkopuolelle. Loput elektronin energiasta kuluu ionisaatioprosesseissa. Syntyneiden fotonien simuloinnissa huomioitiin valosähköinen ilmiö, sekä Comptonin ja Rayleigh'n sironnat. Simulaation atomirelaksatiomalleissa huomioitiin fluoresenssi, mutta Auger-prosessi jätettiin simuloimatta, koska sillä ei ollut havaittavaa vaikutusta simulaatiotuloksiin – tyypillisten Auger-elektronien energia on liian pieni ollakseen merkityksellinen simuloituissa spektreissä. Parinmuodostusta ei simuloitu, sillä suurin käytetty energia, 1 MeV, ei vielä riitä elektroni-positroniparin syntymiseen.

Törmäysprosesseissa syntyvien ja ionilähteen ulkopuolelle kulkeutuvien gammakvanttien energia, suunta ja poistumiskoordinaatti otettiin talteen. Tallennetuista arvoista piirrettiin jälkikäteen histogrammeja halutulla resoluutiolla. Koska röntgenkvanteista tallennettiin sekä energia että suunta, voitiin tiedoista helposti valikoida halutut tapahtumat jälkikäteen esimerkiksi suunnan tai kulman mukaan.



## 8. SIMULAATIO JA KOEJÄRJESTELYT

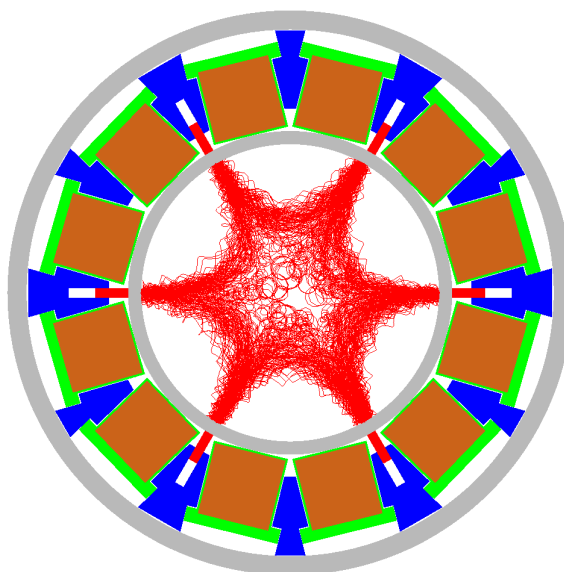
Taulukko 8.3: Tyypillisiä ensiöelektronien parametreja JYFL 6,4 GHz ECR-ionilähdesimulaatiossa kun  $B_{ECR} = 0,23$  T ja  $B_{max} = 0,78$  T, peilisuhte  $R = 3,4$  ja kriittinen nousukulma  $\alpha = 33^\circ$ .

energia [keV]	$\gamma$	$\gamma_{\vec{v}_e \perp \vec{B}}$	max ratasäde [mm] $\vec{v}_e \perp \vec{B}$	kriittinen ratasäde [mm]
$E_k$	$E_k/(m_e c^2) + 1$	$E_k \sin \alpha / (m_e c^2) + 1$	$\frac{cm_e}{eB_{max}} \sqrt{\gamma^2 - 1}$	$\frac{cm_e}{eB_{max}} \sqrt{\gamma_c^2 - 1}$
100	1,2	1,1	1,4	1,0
200	1,4	1,2	2,1	1,5
300	1,6	1,3	2,7	1,9
400	1,8	1,4	3,2	2,2
500	2,0	1,5	3,7	2,5
600	2,2	1,6	4,2	2,8
700	2,4	1,7	4,7	3,1
800	2,6	1,9	5,2	3,4
900	2,8	2,0	5,6	3,7
1000	3,0	2,1	6,1	4,0

### 8.3 Simulaatiossa käytetyt parametrit ja alkuarvot

Kaikissa simulaatioissa elektronit ammuttiin navan kohdalta kohti plasmakammion seinämää. Ensiöelektronien lähtöparametreja eri energioilla on laskettu taulukkoon 8.3. Kaikki käytetyt arvot on laskettu käyttäen JYFL 6,4 GHz ECR-ionilähteelle ominaista peilisuhdetta  $R = 3,4$ . Relativistinen gamma  $\gamma$  ja suurin ratasäde vastaavat tilannetta, jossa elektroni kiertää kohtisuoraan magneettikenttää vastaan kineettisellä energialla  $E_k$  ionilähteen navalla, missä  $B = B_{max}$ . Tilanne on kuitenkin harvinainen, sillä elektronien lämmitys tapahtuu ECR-pinnalla ja pelkkää magneettikenttää vastaan kohtisuoraa energiaa omaavat elektronit heijastuisivat takaisin plasmaan jo kauan ennen kuin ne saavuttavat ionilähteen seinän. Tämän vuoksi on laskettu niin sanottu kriittinen ratasäde elektronille, jolla on ECR-pinnalla syntyessään riittävästi magneettikentän suuntaista liike-energiaa päästäkseen juuri ja juuri plasmakammion seinämälle asti. Kriittistä ratasädettä käytettiin simulaatioissa elektronin lähtöpaikan maksimisäteenä.

Simulaatiokoodi mahdollisti elektronisuihkun energian, suunnan ja paikan määrittämisen kiinteäksi tai satunnaiseksi haluttujen rajojen sisällä. Satunnaistamisen tarkoituksena oli saada aikaan homogeenista elektronisuihkua realistisempi lähtötilanne. Energiana käytettiin yleensä vain yhtä vakioenergiaa simulaatiota kohti, sillä eri energian simulaatiotuloksia voitiin jälkikäteen yhdistää halutun alkuenergiajakauman saamiseksi. Kestomagneettien ja solenoidien muodostama magneettikenttä ionilähteessä voitiin haluttaessa kytkeä päälle tai pois. Magneettikenttädata saatiin FT Pekka Suomisen tekemästä kenttäsimulaatiosta [76], joka antoi magneettikentän arvot 1x1x1 mm:n tarkkuudella plasmakammion sisällä. Kenttädatasta käytettiin vain kaksiulotteinen, plasmakammion keskeltä lohkaistu radiaalinen siivu, joka "venytettiin" kolmiulotteiseksi, koko kammion kattavaksi magneettikentäksi aksiaalissa suunnassa. Kentän datapisteistä laskettiin tarvittavat väliarvot ajonaikaisesti



*Kuva 8.3: Elektronien lentoratoja ionilähdesimulaatiossa kun magneettikenttä oli päällä. Punaisista lentoradoista näkee selvästi magneettikentän heksapolirakenteen.*

linearisella interpolaatiolla. Kuvaan 8.3 on piirretty elektronien lentoratoja plasmakammiossa magneettikentän ollessa päällä. Kuvaa varten ammuttiin kammion seinää kohti 5000 elektronia 200-400 keV:n energialla. Itse kuvassa näkyvät elektronit ovat suurimmalta osaltaan sekundaarielektroneja, joita syntyy ionisaatioprosesseissa plasmakammion pinnan läheisyydessä.

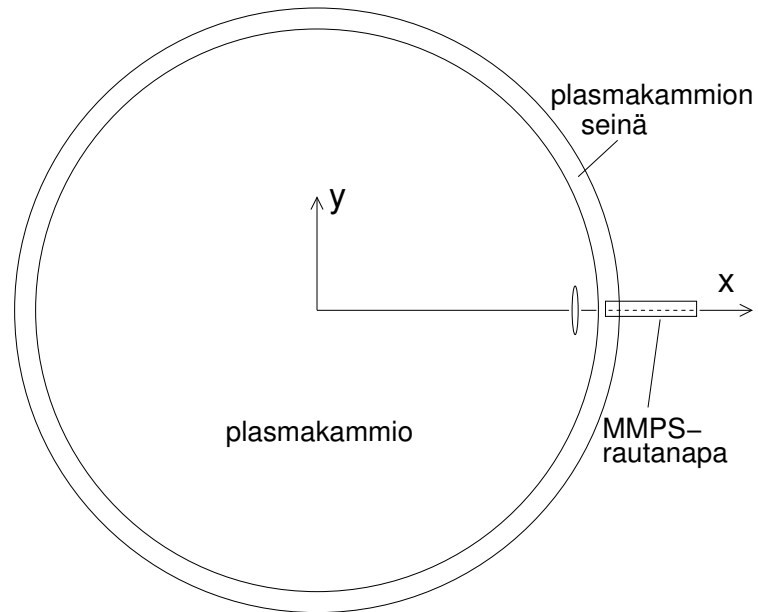
Kuvassa 8.4 on periaatteellinen piirros plasmakammioista ja suihkun lähtöpaikasta. Oletusarvoisesti elektronisuihku ammutaan vakioenergialla kohtisuoraan plasmakammion sisäseinään MMPS-navan kohdalla ( $y = 0$ ). Lähtöpaikka määriteltiin simulaatioissa 69 mm:n kohdalle  $x$ -akselilla plasmakammion sisäsäteen ollessa 70 mm. Primäärielektronin lähtöpaikka voidaan satunnaistaa kuvassa 8.5 esitetyllä tavalla  $r$ -säteisen ympyrän sisään oletuspaikasta, jolloin elektronin alkupaikka arvotaan kyseisen ympyrän sisältä. Paikkaa satunnaistettaessa taivutettiin 2-ulotteista,  $r$ -säteistä ympyrää niin, että elektronin lähtöpaikka oli aina 1 mm etäisyydellä plasmakammion seinästä. Lähtökulma voidaan satunnaistaa väliltä  $[0, \theta]$  suhteessa  $x$ -akseliin. Lähes kaikissa simulaatioissa lähtökartion kulmaksi valittiin 90 astetta ja lähtöpaikan säde vastasi kulloisenkin energian määrittelemää, taulukon 8.3 mukaista kriittistä ratasädettä.

Ilman magneettikenttää suoritetuissa simulaatioissa MMPS-rautanapa on siirretty mahdollisimman kauas plasmakammioista (-13 mm) ja magneettikentän kanssa tehdyissä mittauksissa rauta on täysin sisäasennossa (0 mm). Navat voidaan siirtää haluttuun kohtaan ennen simulaation aloittamista ilman, että koodia tarvitsee muokata.

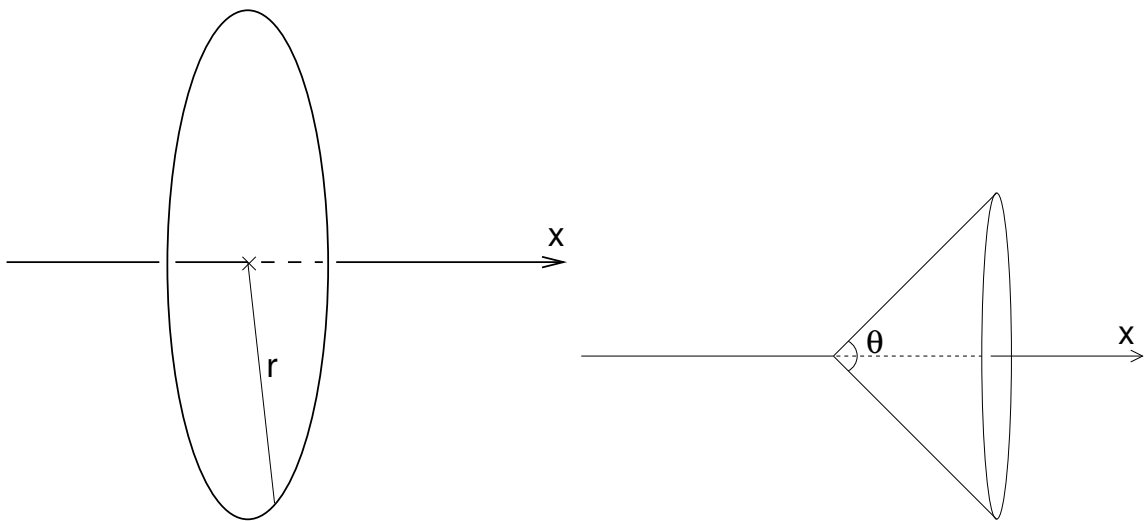
Erillisiä simulaatioita tehtiin lisäksi mallintamalla vain plasmakammion rautanapojen koh-

## 8. SIMULAATIO JA KOEJÄRJESTELYT

---



Kuva 8.4: Poikkileikkaus plasmakammioista ja periaatteellinen piirros hiukkassuihkun lähtöpaikasta.



Kuva 8.5: Hiukkassuihkun lähtöpaikka arvotaan satunnaisesti  $r$ -säteisen ympyrän sisältä ja lähtökulma väliltä  $[0, \theta]$ .

dalla oleva 1,5 mm:n paksuinen alumiiniseinä. Levy on leveydeltään ja korkeudeltaan puoliääretön eli riittävän suuri, jotta siihen ammutut elektronit eivät näe levyn reunoja.

Fysiikkaprosessien tuottorajat määräytyvät automaattisesti valitun kantaman perusteella. Lukuisten testien jälkeen ECR-ionilähdesimulaatioissa päädyttiin käyttämään kantaman oletusarvoa (1 mm), joskin osa ensimmäisistä simulaatioista on ajettu 3,2 mikrometrin kantamalla. Näiden kahden välillä ei havaittu merkittävää eroa simulaatiotuloksissa, mutta 1 mm:n kantama lyhensi simulaatioon vaadittavaa laskenta-aikaa jopa alle puoleen alkuperäiseen 3,2  $\mu\text{m}$ :n kantamaan verrattuna. Auger-elektronien tuottaminen on Geant4:n matalan energian atomirelaksaatiomallissa oletusarvoisesti poissa päältä, ja se pidettiin poissa päältä myös näissä simulaatioissa, sillä sen vaikutuksen todettiin olevan olematon.

### 8.4 Tietojen talteenotto

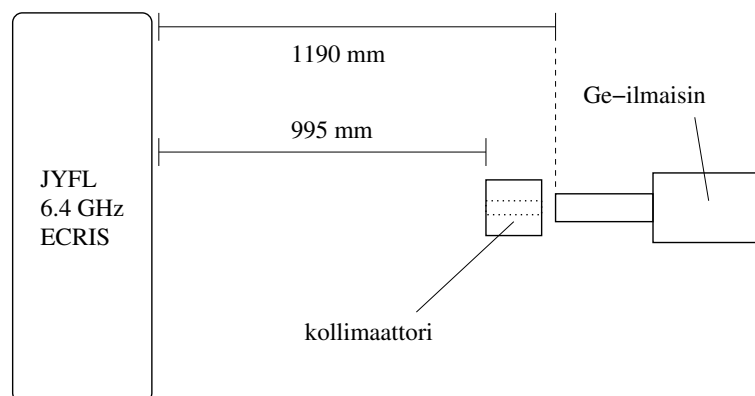
Geant4 tarjoaa mahdollisuuden simulaatiotulosten keräämiseen niin sanottujen herkkien ilmaisimien (engl. sensitive detectors) kautta. Tietty alue geometriasta määritellään ilmaisimeksi, jolloin Geant4 kerää talteen halutut arvot simuloiduista hiukkasista. Tässä työssä tätä mahdollisuutta ei kuitenkaan käytetty, vaan tiedot simuloidusta ionilähteestä poistuvista röntgensäteistä kirjoitettiin talteen tekstitiedostoon. Jokaisen röntgensäteen energia, suunta ja poistumiskohta ionilähteen ulkopinnalta tallennettiin. Tallennetut tiedot tarkistettiin jälkikäteen, jotta välttyttäisiin kahdentuneilta tapahtumilta, joita satunnaisluku-generaattorin jakson pyörähtäminen ympäri saattaisi aiheuttaa. Käytetty Mersenne Twister-generaattori todettiin kuitenkin ongelmattomaksi tältä osalta.

Kerättyjen tietojen hyödyntämiseksi kirjoitettiin useita apuohjelmia, joiden avulla tekstitiedostoista generoitiin histogrammeja esimerkiksi energia- ja kulmajakaumista erilaisia kollimointeja käyttäen. Ottamalla talteen kaikki oleelliset tiedot gammoista ja käsittelemällä simulaatiotulokset vasta jälkikäteen saavutetaan se etu, että yhden ajon aikana kerättyjä tietoja voidaan analysoida useiden eri parametrien suhteen ja eri tavoin simuloituja röntgensäteitä valikoiden. Myös otosten kokoa histogrammeissa on helppo hallita ja muuttaa tarpeiden mukaan. Useiden eri energialla tehtyjen simulaatioiden tuloksia yhdistelemällä saadaan sama tulos kuin jos yhdessä simulaatioissa olisi ajettu hiukkasia vastaavalla energiajakaumalla.

### 8.5 Optimointi

Simulaation nopeuttamiseksi kaikki takaisin plasmakammion sisälle siroavat hiukkaset jätettiin simuloimatta. Käytännössä niiden käyttäytymisestä ei voida sanoa mitään, koska ne vuorovaikuttavat plasman ja sitä lämmittävien mikroaaltojen kanssa. Plasmakammion

## 8. SIMULAATIO JA KOEJÄRJESTELYT



Kuva 8.6: Röntgenmittausten koejärjestely.

sisäosiin määriteltiin hiukkasille maksimilentomatka, ennen kuin niiden simulointi lopetetaan. Tällöin vältetään ikisilmukalta, jossa magneettikentässä lentävä varattu hiukkanen poukkoilee ionilähteen sisällä törmäämättä koskaan mihinkään. Kaikkien hiukkasten simulointi lopetettiin myös ionilähteen ulkoreunalla heti kun ulos pääsevien röntgensäteiden ominaisuudet oli tallennettu. Ulos pääsevät sekundaarielektronit yksinkertaisesti unohdettiin.

Magneettikentän käyttäminen hidasti simulaatiota merkittävästi, joten testejä lukuunottamatta sitä ei varsinaisissa simulaatioissa käytetty. Kentän vaikutus oli joka tapauksessa hyvin pieni ja vastaavia tuloksia saatiin ilman magneettikenttää elektronin lähtöpaikkaa ja kulmaa satunnaistamalla.

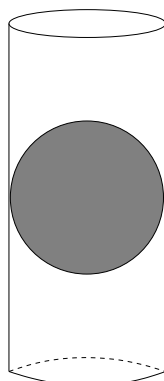
Muutamien prosenttien etu suoritusnopeudessa saavutettiin kääntäjäoptioiden muokkaamisella kulloisellekin suoritinarkkitehtuurille sopivaksi. Merkittävän, yli kymmenen prosentin nopeutuksen simulaatioon toi Geant4 ohjelmiston päivittäminen versiosta 4.8 versioon 4.9.

### 8.6 Röntgenmittaus

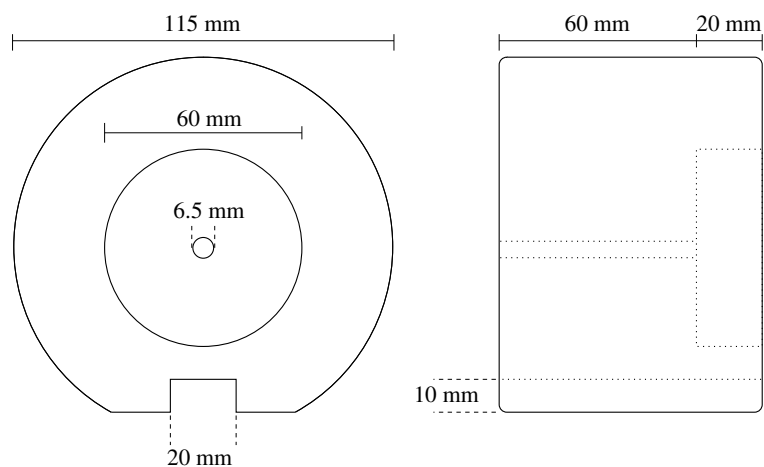
Tutkielman röntgensäteilysimulaatiot tehtiin mallintamalla JYFL 6,4 GHz ionilähde (kuva 6.4a) Geant4:llä ja vertaamalla tuloksia FM Tommi Ropposen samalla ionilähteellä keväällä 2006 tekemiin röntgensäteilymittauksiin [77]. Mittausgeometria on esitetty kuvassa 8.6. Mittaus on tehty MMPS-navan kohdalta ja korkeussuunnassa plasmakammion keskeltä. Germanium-ilmaisimella mitattu röntgensäteily on kollimoitu 6,5 mm lyijykollimaattorilla, jonka tarkemmat mitat ovat kuvassa 8.8. Ilmaisimen ympärille oli aseteltu lyijylevyä taustasäteilyn vaikutusta vähentämään. Kollimoinnin ansiosta ilmaisimella näkee ionilähteesä alueen, jonka suuruus on korkeussuunnassa noin 260 mm ja kattaa vaakasuunnassa käytännössä koko plasmakammion, sillä plasmakammion ulkopinnan halkaisija on 26,6

## 8. SIMULAATIO JA KOEJÄRJESTELYT

---



Kuva 8.7: Ilmaisimen näkemä alue (ympyrä) ECR-ionilähteen plasmakammion ulkopinnasta (sylinteri).



Kuva 8.8: Kollimaattorin mitat.

cm. Ilmaisim näkee tällöin noin kolmasosan koko plasmakammion ilmaisimen puoleisesta osuudesta, mikä on havainnollistettu kuvaan 8.7.

Röntgenmittaukset on tehty noin 10 minuutin sarjoissa useilla eri ionisuihkuilla ja ionilähteen asetuksilla, mukaan lukien erilaiset MMPS-rautanapojen paikat. Tätä tutkielmaa varten valittiin simulaation pääasialliseksi vertailukohtaksi mittaus, jossa MMPS-raudat ovat sisäasennossa ja kaasuna käytettiin argonin ja hapen sekoitusta. Itse ionilähde oli viritetty  $\text{Ar}^{12+}$  ionille. Mittauksen muut asetukset on koottu taulukkoon 8.4.

## 8. SIMULAATIO JA KOEJÄRJESTELYT

Taulukko 8.4: JYFL 6,4 GHz ECR-ionilähteen röntgenmittauksen tiedot (MMPS-raudat sisäasennossa).

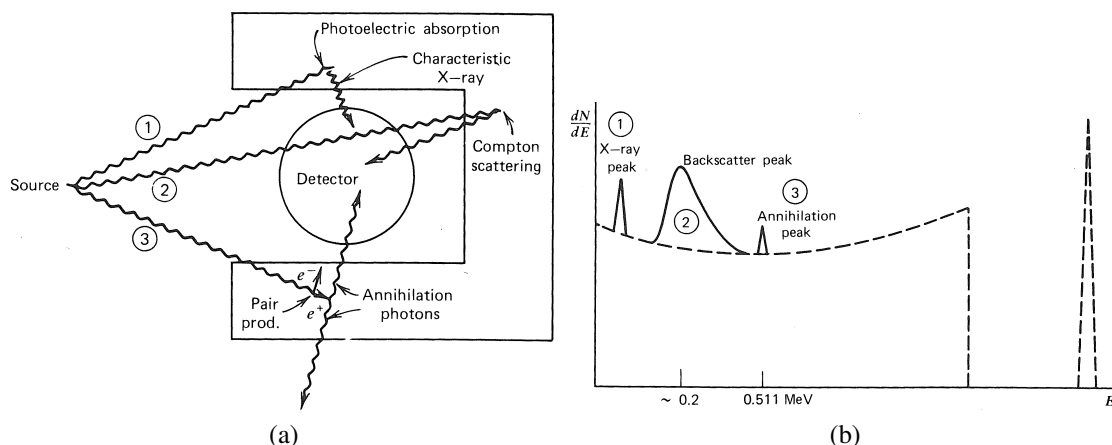
<b>paine (injektio)</b>	5,6E-7 mbar
<b>paine (ekstraktio)</b>	1,4E-7 mbar
<b>mikroaaltoteho</b>	300 W
<b>kiihdytysjännite</b>	12 kV
<b>vuotovirta</b>	1,19 mA
<b>Einzel-linssin jännite</b>	6,88 kV
<b>puller-elektrodin jännite</b>	0
<b>bias-levyn jännite</b>	-180 V
<b>mittausaika</b>	600,59 s
<b>havaittujen tapahtumien määrä</b>	2067204
<b>tapahtumataajuus</b>	<3,4 kHz
<b>kuollut aika</b>	<6 %

### 8.7 Ilmaisinvasteen simulointi

Simulaatiotulosten sovittaminen suoraan mitattuun röntgenspektriin osoittautui hankalaksi, sillä röntgenmittauksissa ilmaisimissa oli pelkästään energiakalibroitu. Tehokkuuskalibroinnin puuttuminen mitattaessa jatkuvaa röntgenspektriä germanium-ilmaisimella johtaa röntgenspektrin muodon muuttumiseen ja spektrin huippuenergian siirtymiseen matalammille energioille. Tämä johtuu siitä, että germanium-kiteeseen saapuva röntgenkvantti ei aina luovuta kaikkea energiaansa kiteeseen kerralla tai ollenkaan. Kvantin saapumiskulma kiteeseen vaikuttaa siihen, kuinka paljon materiaalia fotoni näkee ja samaan aikaan ilmaisimeen saapuvat kvantit saatetaan lukea yhdeksi tapahtumaksi. Ilmaisimen rakenne on erittäin tärkeä ilmaisinvasteeseen vaikuttava asia ja sisältää lukuisia muuttujia:

- ilmaisinkiteen koko: suurempi kide absorboi röntgenkvantin suuremmalla todennäköisyydellä,
- ilmaisinkiteen muoto: sopivan muotoinen kide parantaa ilmaisipuolihoitteen sähkökentän homogeenisuutta ilmaisinelektroniikan kannalta parempaan suuntaan,
- ilmaisinkiteen laatu: kidevirheet heikentävät ilmaisimen mittaustuloksia,
- ilmaisinta ympäröivät materiaalit: ilmaisinkiteen tukirakenteet ja kiteeseen sähkökentän muodostavat elektrodimateriaalit vaikuttavat havaittuun spektriin karakteristisen röntgensäteilyn ja takaisinsironnan myötä,
- mittauselektroniikka: ilmaisinpulseja lukeva elektroniikka huomioi vain rajatulla aikavälillä havaitut röntgenkvantit.

## 8. SIMULAATIO JA KOEJÄRJESTELYT



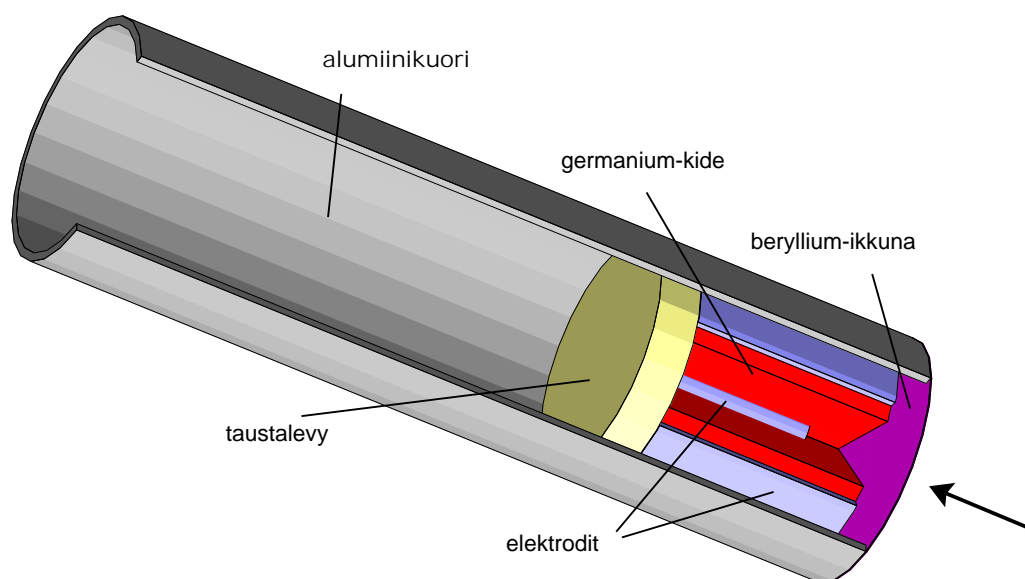
Kuva 8.9: Ilmaisinta ympäröivän materiaalin vaikutus ilmaisinvasteeseen [20]. Kuvan (a) numeroitujen tapahtumien vaikutus gammaspektriin nähdään kuvassa (b) yhtenäisellä viivalla piirrettynä. Kuvassa (b) nähdään myös alkuperäisen lähteen gammapiikki oikealla ja ilmaisinkiteessä tapahtuvan Compton-sironnan aiheuttama Compton-häntä vasemmalla (katkoviiva).

Suurimmat yksittäiset muutokset spektriin johtuvat Compton-hännästä ja takaisinsironnasta. Compton-häntä muodostuu kun röntgenkvantti Compton-siroaa ilmaisimateriaalin elektronista ja poistuu tämän jälkeen ilmaisimesta, jolloin kiteeseen rekisteröityy vain osa kvantin energiasta. Tietyin energian kvanttien saapuessa ilmaisimeen on Compton-hännällä jatkuva jakauma nollaenergiasta tiettyyn kynnyksenergiiaan, joka määräytyy kaavan (4.2) avulla lasketusta kvantin menettämästä energiasta 180 asteen Compton-sironnassa. Gamma- eli piikkispektreissä tämä nähdään gammapiikin alapuolella olevasta kynnyksmäisestä spektrin alueesta, mutta jatkuvaa spektriä mitattaessa yksittäiset Compton-hännät summautuvat alkuperäiseen spektriin ja muuttavat sen muotoa. Takaisinsironnassa kvantti heijastuu ilmaisinta ympäröivästä materiaalista takaisin ilmaisinkidettä kohti ja rekisteröityy väärällä energialla. Yleisimmät ilmaisinvastetta muuttavat ilmiöt on esitelty kuvassa 8.9. Muita spektriin vaikuttavia virhelähteitä ovat esimerkiksi:

- sekundaarielektronien karkaaminen ilmaisinkiteestä kun gammaenergiat ovat suuria ja ilmaisimen koko pieni tai kun sekundaarielektroni syntyy lähellä ilmaisinkiteen pintaa,
- syntyvän jarrutussäteilyn karkaaminen ilmaisinkiteestä tai kiteeseen,
- yli 1,022 MeV:n gammaenergioilla ilmaisimessa tai sen välittömässä läheisyydessä syntyneen elektroni-positroniparin annihilaation aiheuttamat ylimääräiset piikit havaittuun spektriin,
- karakteristinen säteily ilmaisinta ympäröivästä materiaalista tai
- samaan aikaan ilmaisimeen saapuvien kvanttien rekisteröiminen niiden energioiden summana.



## 8. SIMULAATIO JA KOEJÄRJESTELYT



*Kuva 8.10: Poikkileikkaus ilmaisinvasteen simuloinnissa käytetystä yksinkertaisesta germanium-ilmaisimen mallista. Röntgenvalo saapuu ilmaisimeen nuolen osoittamasta suunnasta beryllium-ikkunan läpi.*

Ilmaisimen vaikutus simuloituihin röntgenspektreihin arvioitiin rakentamalla Geant4-simulaatio mittaauksissa käytetystä ilmaisimesta ja tutkimalla millä tavalla se havaitsee siihen syötetyn jatkuvan spektrin. Valitettavasti tarkkoja mittoja ilmaisimen rakenteesta ei ollut saatavilla ja kyseinen ilmaisimien on mittausten jälkeen hajonnut käyttökelvottomaan kuntoon. Ilmaisimen geometria arvioitiin saatavilla olevien tietojen perusteella [78], [79] niin lähelle oikeaa kuin mahdollista. Simulaatiossa käytetty ilmaisingeometria on piirretty kuvaan 8.10. Käytetyssä ilmaisimessa oli ohut, noin 250 mikrometrin paksuinen ikkuna, jonka läpi röntgensäteily kulki germaniumista valmistettuun ilmaisinkiteeseen. Kide on niin sanottua closed-ended coaxial -mallia eli toisesta päästä avoin sylinteri, jonka keskellä ja ympärillä ovat korkeajännite-elektrodit. Ilmaisinkiteen taakse on sijoitettu alumiinilevy mallintamaan muita ilmaisimissa olevia rakenteita ja ilmaisinta ympäröi alumiinikuori.

Ilmaisinvastetta simuloitiin tallentamalla yksittäisten röntgenkvanttien ilmaisinkiteeseen jättämä energia. Tapauksissa, joissa useampi röntgenkvantti poistui kiteestä tai saapui kiteeseen saman tapahtuman (ensiöröntgenkvantin) simuloinnin aikana, ilmaisimen “havaitsema” energia jouduttiin arvioimaan hyvin karkeasti, sillä tapahtumien aikajärjestys vaikuttaa siihen mitä ilmaisinelektroniikka rekisteröi. Simulaatiossa ei mallinnettu ilmaisipuolijohteessa käytettyä kilovolttiluokan bias-jännitettä, sillä simulaatiossa rajoituttiin tarkastelemaan vain röntgenkvanttien energiahäviötä kiteessä jättäen ilmaisinelektroniikan vaikutus huomioimatta. Tästä johtuen simulaatiosta saatu ilmaisinspektri on ideaalitapaus, jossa ilmaisimien havaitsee kaikki siihen saapuvat gammakvantit. Todellisuudessa ilmaisimien havaitsee gammakvanteista vain murto-osan, mutta simuloidun spektrin muodon pitäisi olla suhteellisen lähellä oikeaa.

# Luku 9

## Tulokset

Ionilähteen plasmasta karkaavan elektronin osuessa plasmakammion seinään se alkaa välittömästi vuorovaikuttaa kammiomateriaalin kanssa ja menettää energiaa erilaisten sirontaprosessien myötä. Eräs tärkeimmistä on Coulombin sironta materiaalin atomeista, missä elektronin energia muuttuu vain vähän, mutta lentosuunta saattaa muuttua rajustikin. Riittävän energian elektroni ionisoi atomeja kulkiessaan materiaalin läpi tai voi tuottaa jarrutussäteilykvantin koettuaan voimakkaan törmäyksen. Syntyneet sekundaariset fotonit kulkeutuvat samassa materiaalissa paljon pidemmälle kuin elektronit menettäen matkallaan energiaa lähinnä Comptonin sironnan ja valosähköisen ilmiön kautta. Osa korkeimman energian fotoneista tunkeutuu koko kammion läpi ionilähteen ulkopuolelle, missä ne havaitaan röntgensäteilynä.

Tietyn energian elektronien törmätessä aineeseen on materiaalin läpäisevän röntgensäteilyn intensiteetti riippuvainen materiaalin pintatiheydestä. Riittävän suuri määrä materiaalia – kuten ECR-ionilähteen tapauksessa – siirtää havaitun jatkuvan röntgensäteilyspektrin intensiteettihiipun yhä korkeammille energioille, sillä matalan energian röntgensäteily ei koskaan pääse materiaalin läpi.

Tässä luvussa esitellään JYFL 6,4 GHz ECR-ionilähteen Geant4-simulaatioista saatuja röntgenspektrejä ja verrataan niitä valikoituihin mittaustuloksiin. Aluksi käydään läpi kalibrointiajojen tuloksia, joiden perusteella valittiin sopivat parametrit varsinaisiin simulaatioihin. Simulaatiotuloksia esitetään ensin JYFL 6,4 GHz ECR-ionilähteelle ja lopuksi pelkälle ohuelle (1,5 mm) alumiinilevyllä. Tulokset esitetään energia- ja kulmajakaamina, joiden yksikkönä käytetään havaittujen röntgenkvanttien määrää kanavassa miljoonaa ensiöelektronia kohti ellei toisin mainita. Energia on jaettu kanaviin, joita on käytetty vaihteleva määrä riippuen halutusta tarkkuudesta. Yleensä kanavia on käytössä siten, että kanavanleveudeksi saadaan yksi kiloelektronivoltti. Kulmajakaumissa tarkkuus on useimmiten väliltä 1-5 astetta.

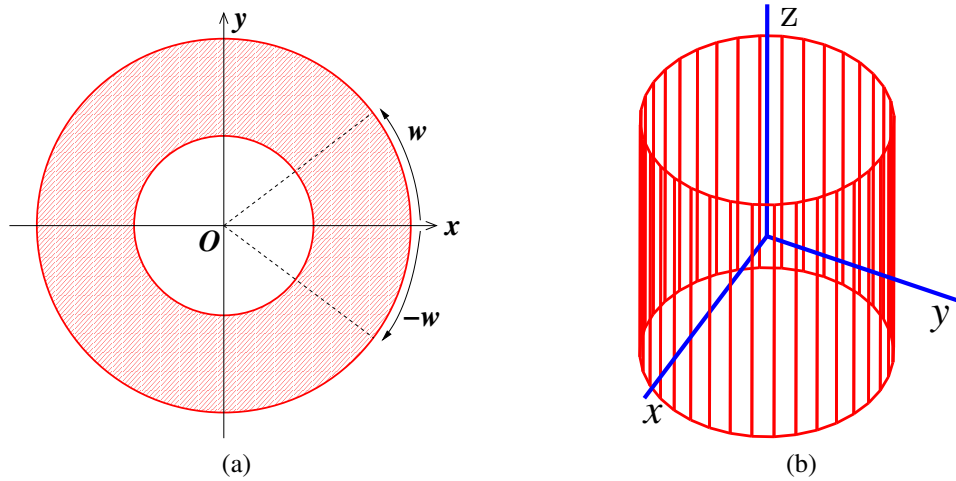
### 9.1 Histogrammeista

Simulaatioista voitiin piirtää monenlaisia kuvia valitsemalla tallennetuista röntgenkvanteista halutut ja laskemalla niistä tarvittaessa niistä muita suureita. Kaikki histogrammit on normitettu siten, että intensiteetti ilmoitetaan yhtä miljoonaa ( $1 \cdot 10^6$ ) plasmakammion seinään ammuttua ensiöelektronia kohti kerrottuna kanavanleveydellä. Näin eri graafeja voidaan helposti verrata keskenään riippumatta siitä kuinka suuri määrä elektroneja simuloitiin tai mitä kanavanleveyttä histogrammeissa käytettiin. Kanavanleveys vaikuttaa vain graafin tarkkuuteen: mitä leveämpi kanava sitä suurempi virhe, mutta samalla tasaisempi kuvaaja. Graafin tasaisuuteen vaikuttaa myös saatu statistiikan määrä. Statistiikan parantuessa simulaatiograafit tasoittuvat, sillä gammaspektrit ovat jatkuvia. Kaikki karakteristisen röntgensäteilyn aiheuttamat piikit jäävät simulaatiossa alle 50 kiloelektronivoltin, sillä neodmium-magneettimateriaalin tuottaman, korkeimmankin energian  $K_{\alpha}$ -piikki on noin 36 keV. Käytännössä näitä piikkejä ei nähdä simulaatiossa ollenkaan (tai hyvin pienillä laskumäärillä), koska matalan energian säteily vaimentuu lähes täysin kulkiessaan kammiomateriaalien läpi.

Energiagraafeissa yksikkönä on kiloelektronivoltti ja kulmagraafeissa aste. Kulmahistogrammeissa on yleensä määritelty yksi suunta, jonka suhteen muut suunnat ilmoitetaan. Näissä tapauksissa on hyödynnetty vahvasti ECR-ionilähteen ulkopinnan sylinterisymmetriaa ja oletettua säteilyn riippumattomuutta  $z$ -akselista. Toisin sanoen, vaikka elektronit ammutaan navalle vain yhdestä kohdasta, voidaan olettaa, että lähes samanlainen prosessi tapahtuu muissakin kohdissa plasmakammion navoilla. Useimmat histogrammit on piirretty käyttäen *kaikkia* simulaatiosta saatuja gammoja eikä pelkästään sellaisia, jotka on kollimoitu samoilla parametreilla kuin mittauksista saadut röntgenspektrit. Näin meneteltiin siitä yksinkertaisesta syystä, että simulaatio ei tuottanut tuloksia riittävän nopeasti, jotta kollimoiduissa histogrammeissa olisi ollut riittävä määrä statistiikkaa. Käytännössä kollimoinnin puutteella simulaatiospektreissä ei ole suurta merkitystä, sillä mittauksissa ilmaisin näki joka tapauksessa suuren osan plasmakammion alueesta kuten kuvasta 8.7 nähtiin.

Simulaation parametreja määriteltäessä tutkittiin gammojen käyttäytymistä neljän graafin avulla. Ensimmäinen näistä on energiahistogrammi, jossa gammat on jaoteltu lokeroihin (kanaviin) niiden energian perusteella. Gammojen poistumiskohtaa ionilähteestä havainnollistettiin kulmahistogrammin avulla, missä ionilähteen sylinterimäinen ulkopinta on jaettu sektoreihin, joihin viitataan kulmalla. Käytetty koordinaatisto on havainnollistettu kuvassa 9.1. Nolla astetta tarkoittaa simulaatiossa käytettyä positiivista  $x$ -akselia eli napaa, jota kohti elektronit ammuttiin. Kyseisessä kuvaajatyypissä kulmat voivat vaihdella  $[-180, 180]$  asteen välillä. Röntgensäteiden lentosuuntaa ei huomioitu vaan ainoastaan niiden poistumissektori.

Röntgenkvantin lentosuuntaa tarkasteltiin kulmahistogrammilla, jossa kulmaparametri on  $\theta/2$  (katso kuva 8.5) eli kulma määritellään positiivisen  $x$ -akselin suhteen. Nolla astetta



Kuva 9.1: Koordinaatistot. (a) Ionilähde ylhäältä nähtynä ja kuvaajissa käytetty koordinaatisto. Kulma  $\pm w$  ionilähteen ulkopinnalla mitataan  $xy$ -tasolla. Primäärielektronit ammutaan plasmakammion sisäpuolelta valitulla kulma- ja paikkajakaumalla keskimäärin  $x$ -akselia pitkin. (b) Koordinaatisto sylinterimäisen ionilähteen suhteen. Origo on ionilähteen keskellä ja  $z$ -suunta vastaa korkeutta.

merkitsee ionilähteestä poistuvan gammakvantin kulkevan  $x$ -akselin suuntaan riippumatta paikasta, jossa gamma tulee ulos ionilähteestä ja 180 astetta vastaa negatiivisen  $x$ -akselin suuntaa. Suunta 90 astetta tarkoittaa  $y$ - ja  $z$ -akselien muodostamaa tasoa eli käytännössä kulman  $\theta/2$  määrittelemät suunnat muodostavat  $x$ -akselin ympärille kartiopintoja.

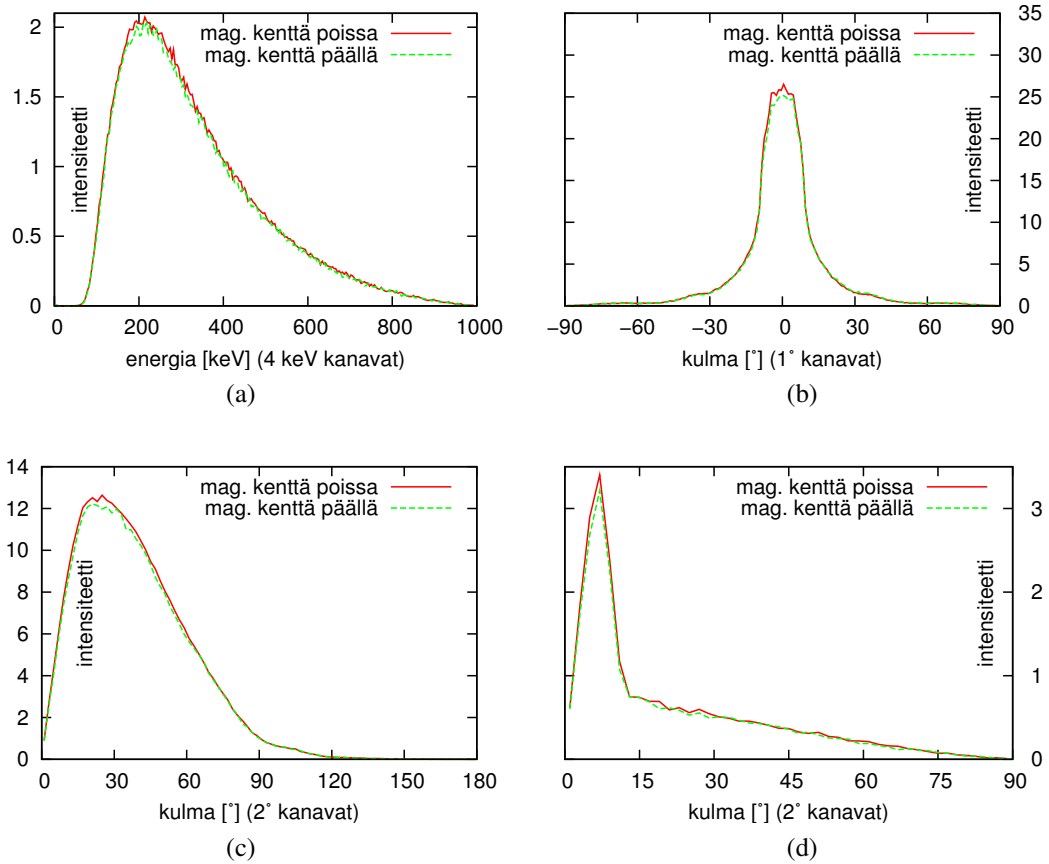
Gammojen lentosuuntaa tutkittiin myös kollimoimalla ionilähteestä poistuvia gammoja. Yleisimmin käytettiin halkaisijaltaan 20 mm:n pallomaista virtuaalikollimaattoria, jonka keskipiste asetettiin ionilähteen ulkopinnalle  $x$ -akselille. Kollimaattorin koko valittiin testiajojen perusteella ja se vastaa suurin piirtein suurimman intensiteetin aluetta ionilähteen ulkopinnalla.

## 9.2 Parametrit ja kalibrointi

Eri parametrien vaikutuksia simulaatitulosiin vertailtiin yhden megaelektronivoltin ensiöelektroneilla. Energia valittiin testiajoissa simulaatioenergioiden ylärajalle, jotta riittävä määrä статистиikkaa saataisiin laskettua järjellisessä ajassa. Tulosten perusteella päätettiin käyttää varsinaisissa simulaatioissa yhden millimetrin seurantarajoja ja 90 asteen kulmahajontaa ensiöelektroneille.

Käytetty kanavanleveys on ilmoitettu kuvaajien  $x$ -akselin yhteydessä ja kanavan keräämät laskentatapahtumat on kuvaajissa piirretty kanavan keskelle. Esimerkiksi energiavälin 0-5 kiloelektronivoltin kattavan kanavan tapahtumien lukumäärä on kuvaajassa merkitty 2,5 kiloelektronivoltin kohdalle. Seuraavat neljän kuvaajan sarjat sisältävät energiahistogrammin

## 9. TULOKSET



Kuva 9.2: Simulaatio magneettikentän kanssa ja ilman 1 MeV:n elektroneilla. Molemmissa tapauksissa MMPS-raudat ovat sisäasennossa (0 mm). (a) energiahistogrammi, (b) röntgenkvanttien ulostulokohta ionilähteestä, (c) röntgenkvanttien lentosuunta x-akseliin nähden niiden ja (d) lentosuunta 20 mm:n kollimaattorilla rajoitettuna navan kohdalla.

(vasen yläkulma), poistumiskohtakuvaajan (oikea yläkulma) sekä lentosuuntajakauman kaikista ja 20 millimetrin kollimaattorilla kollimoiduista röntgenkvanteista (vasen ja oikea alakulma).

### 9.2.1 Magneettikentän vaikutus

Ionilähteen magneettikentän vaikutusta simulaatioon tutkittiin kytkemällä magneettikenttä päälle ja pois käyttäen muuten identtisiä alkuparametreja. Ensielektronien kulmajakauman määrittävänä kartiokulman arvona oli 90 astetta. Saadut simulaatiotulokset on piirretty kuvaan 9.2. MMPS-raudanavat olivat molemmissa simulaatioissa sisäasennossa (0 mm) ja ainoa muutettu parametri oli magneettikentän päälläolo. Magneettikentän vaikutuksen röntgenspektrin muotoon todettiin olevan lähes merkityksetön. Vähäiset eroavaisuudet

## 9. TULOKSET

---

spektreissä johtuvat magneettikentän aiheuttamasta pienestä muutoksesta kulmaan, jolla ensiöelektronit osuvat kammion seinään ja toisaalta satunnaisesta vaihtelusta simulaatioajojen välillä.

Käytännössä magneettikentän vaikutus voidaan röntgensäteilyn syntyä simuloitaessa huomioida hyvin valituilla elektronien lähtöparametreilla ja laskennallisesti kallis magneettikentän simuloiminen voidaan välttää. Tällöin tulokset magneettikentän kanssa ja ilman tehdyissä simulaatioissa eivät eroa toisistaan oleellisesti. Kentän vaikutusten arvioinnin tekee kuitenkin hankalaksi se, että ei tiedetä millainen elektronien kulmajakauma ionilähteen sisällä todellisuudessa on. Koska magneettikentän päälläolo moninkertaisti laskentaan kuluvan ajan ja elektronien "oikeasta" kulmajakaumasta ei silti olisi takeita, päätettiin loput simulaatiot ajaa ilman magneettikenttää.

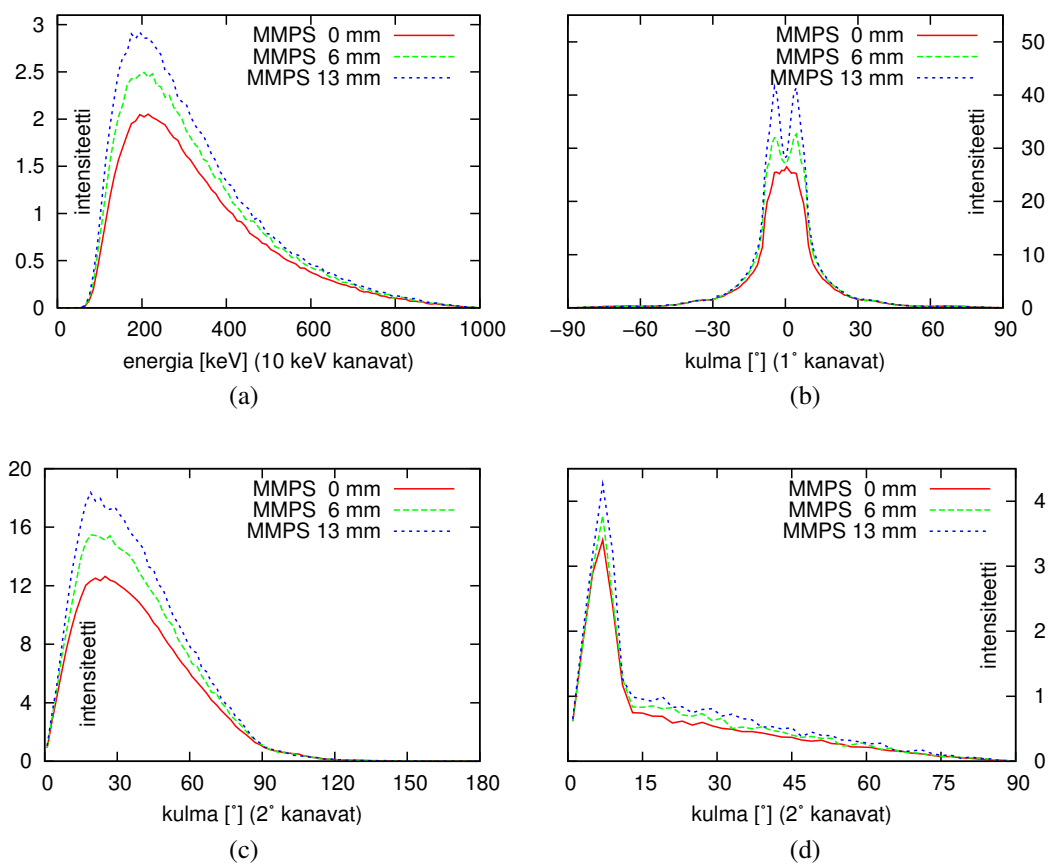
### 9.2.2 MMPS-rautanapojen asennot

MMPS-rautanapojen asento vaikutti röntgenspektrin maksimi-intensiteetin paikkaan ja ulos pääsevän röntgenvuon määrään. MMPS-rautojen ollessa sisäasennossa (lähinnä plasmakammiota) löytyi röntgenspektrin huippu hieman korkeammalta energialta ja säteilyn intensiteetti jäi noin 25 % pienemmäksi kuin rautojen ollessa ulkoasennossa (kuva 9.3 (a)). Tämä johtuu siitä, että alumiinista plasmakammiota ja tukirakenteita tiheämpi MMPS-rautanapa kasvattaa röntgensäteilyn näkemää efektiivistä pintatiheyttä, mikä vaimentaa tehokkaasti säteilyn intensiteettiä rautojen ollessa lähellä elektronien törmäyspaikkaa. Napojen ollessa kauempana pääsee osa syntyneestä röntgensäteilystä kulkemaan rautanavan ohi ja ulos ionilähteestä.

Napojen asento vaikutti voimakkaasti myös röntgenvuon poistumispaikkaan ionilähteen ulkokuoren pinnalla, kuten kuvasta 9.3 (b) nähdään. Uloimmassa asennossa rautanapa "varjosti" röntgenvuota, mikä aiheuttaa kuvan kaksoispiikin. Piikkien väli on noin 9 astetta mikä vastaa suunnilleen 20 mm:n matkaa ionilähteen ulkopinnalla.

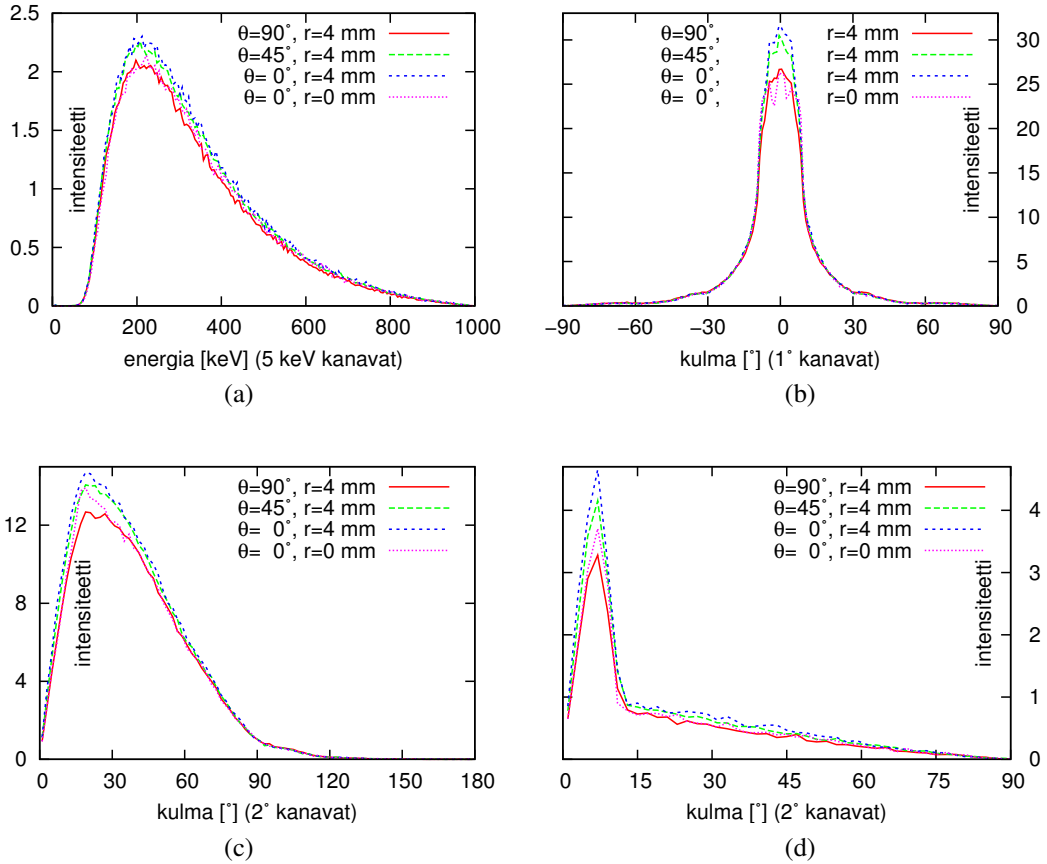
Röntgenkvanttien lentosuunnissa ei havaittu merkittäviä poikkeamia kuvien 9.3 (c) ja (d) perusteella lukuunottamatta intensiteetin selvää pienentymistä vietäessä raudat lähemmäksi plasmakammiota. Kaikki testien jälkeiset simulaatiot ajettiin MMPS-navat täysin sisäasennossa, sillä se on normaali käytännön ajokonfiguraatio JYFL 6,4 GHz ionilähteellä. Valinnan haittapuolena oli simulaatioajan kasvaminen tietyn röntgenkvanttimäärän saamiseksi verrattuna muihin rautanapojen asentoihin.

## 9. TULOKSET



Kuva 9.3: Simulaatio 1 MeV:n elektroneilla MMPS-tangon eri asennoilla, joista 0 mm on täysin sisällä ja 13 mm täysin ulkona. (a) energiahistogrammi, (b) röntgenkvanttien ulostulo kohta ionilähteestä, (c) röntgenkvanttien lentosuunta x-akseliin nähden niiden ja (d) lentosuunta 20 mm:n kollimaattorilla rajoitettuna navan kohdalla.

## 9. TULOKSET



Kuva 9.4: Lähtöparametrien vaikutus 1 MeV:n elektroneille. MMPS-tangot olivat kaikissa ajoissa sisäasennossa. (a) energiahistogrammi, (b) röntgenkvanttien ulostulokohta ionilähteestä, (c) röntgenkvanttien lentosuunta  $x$ -akseliin nähden ja (d) lentosuunta 20 mm:n kollimaattorilla rajoitettuna navan kohdalla.

### 9.2.3 Elektronien alkuparametrit

Kuvassa 9.4 on vertailtu elektronien alkutilanteen parametrien vaikutusta havaittuihin röntgenkvantteihin ionilähteen ulkopinnalla. Kulma  $\theta$  viittaa kartiokulmaan, jonka sisällä lähtösuunta valittiin sattumanvaraisesti. Nolla astetta tarkoittaa kohtisuoraan seinää päin eli  $x$ -akselin suuntaan lähtevää elektronia. Etäisyys  $r$  on kaksikulotteisen, plasmakammion sisäpinnasta joka pisteessä yhtä kaukana olevan ympyrän säde, jonka sisältä elektronin lähtöpaikka arvottiin. Säteen ollessa  $r=0$  mm, on elektronin lähtöpaikka aina  $x$ -akselilla, kuten kuvassa 8.5 on havainnollistettu.

Kuvasta 9.4 (b) nähdään, että elektronien lähtiessä samasta paikasta suoraan kohti plasmakammion seinää (0 mm,  $0^\circ$ ) on röntgensäteilyn poistumispaikassa ionilähteestä kolmoispiikki ja intensiteetti on hieman pienempi kuin muissa tapauksissa. Tämä aiheutuu



## 9. TULOKSET

---

sisäasennossa olevasta MMPS-rautanavasta, joka muita ECR-ionilähteen rakenteita tiheämpänä aineena vaimentaa voimakkaasti siihen osuvaa säteilyä. Elektronisuihkun lähtöparametreja satunnaistettaessa kolmoispiikki häviää ja röntgenkvantit poistuvat ionilähteestä siten, että suurin osa tulee ulos rautanavan kohdalla: tällöin merkittävä osa säteilystä pääsee kulkemaan rautanavan ohi ja vaimenee vähemmän. Tapauksessa, jossa elektronien kartiokulma on 90 astetta (4 mm, 90°), intensiteetti vaimenee lähes yhtä paljon kuin piste-mäistä lähtöpaikkaa käytettäessä. Tällöin suuri osa alkuperäisten elektronien synnyttämästä röntgensäteilystä lähtee suuntaan, joka säteilyn näkemän pintatiheyden kasvamisen myötä johtaa säteilyn vaimenemiseen sen joutuessa kulkemaan pidemmän matkan ionilähteen rakenteiden sisällä. Muissa tapauksissa havaitun röntgensäteilyn intensiteetit olivat lähellä toisiaan, joskin korkein intensiteetti saatiin parametreilla (4 mm, 0°), missä elektronien lähtöpaikka oli 4 mm säteisen ympyrän alueella, mutta lähtökulma oli aina suoraan  $x$ -akselin suuntaan.

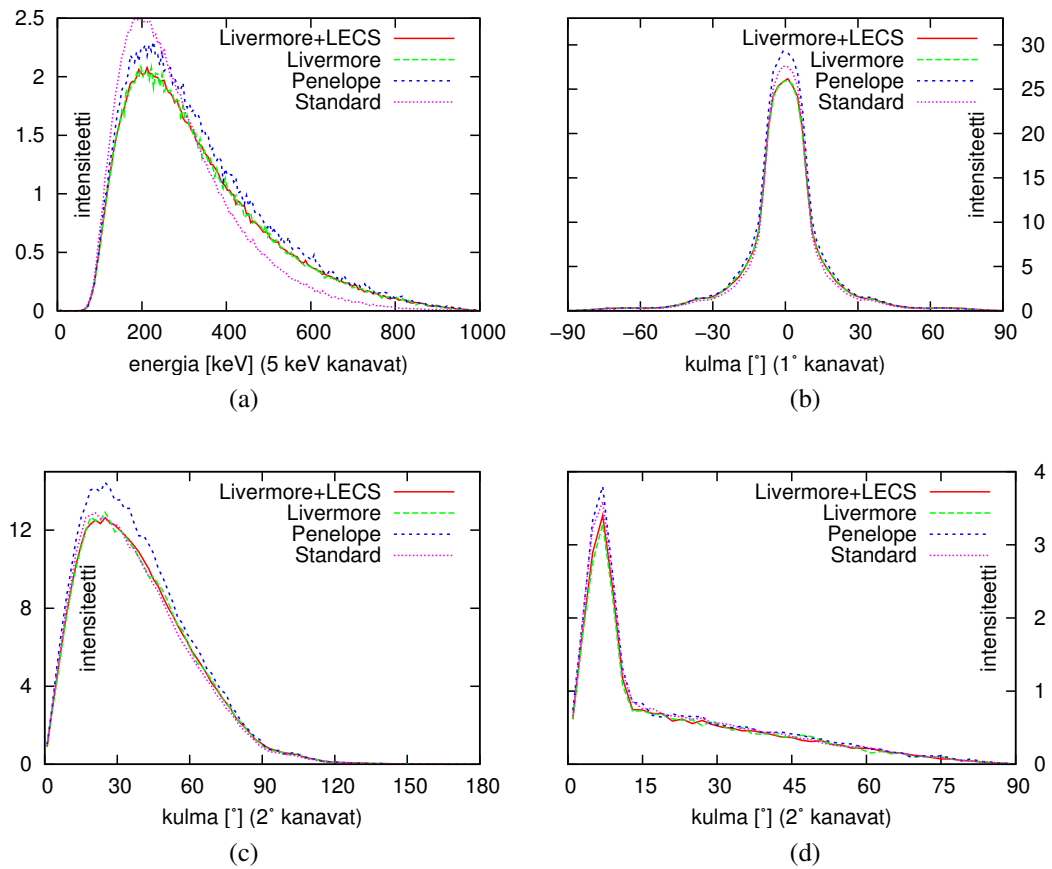
Varsinaisissa simulaatioissa käytettiin ensiöhiukkastykin parametreina 90 asteen kartiokulmaa ja energiasta riippuvaa sädettä lähtöympyrälle. Säde määriteltiin ECR-pinnan ja plasmakammion sisäpinnan magneettikenttien perusteella siten, että ECR-pinnalla kriittisen nousukulman omaavien elektronien ratasäde toimi lähtöympyrän säteenä (kaava (5.11)).

### 9.2.4 Fysiikkamallit

Eri fysiikkamallien vaikutuksia simulaatitulosiin vertailtiin 1 MeV:n elektroneita käyttäen. MMPS-rautanavat olivat sisäasennossa, elektronien lähtöparametrit (4 mm, 90°) ja ainoa muutettu parametri oli käytetty fysiikkamalli. Tulokset on piirretty kuvaan 9.5. Neljän eri mallin (standardifysiikka, Penelope, Livermore ja Livermore+LECS) välillä oli jonkin verran eroja ja Penelope-mallin kanssa kohdattiin ongelmia Geant4-simulaation joutuessa ikuiseen silmukkaan muutamien kymmenien miljoonien ensiöhiukkasten simuloinnin jälkeen. Ongelma on ilmeisesti itse Geant4-ohjelmiston versiossa 9. Livermore-fysiikka ja sitä tarkentava LECS-malli eivät eroa toisistaan merkittävästi. Penelope-fysiikka tuotti olenaisilta osiltaan samanlaisen energiahistogrammin kuin Livermore-fysiikka (kuva 9.5 (a)), mutta se sisältää noin 10 % enemmän gammoja. Standardifysiikan tuottama energiakäyrä sisälsi sen sijaan vähemmän korkean energian gammoja kuin matalan energian fysiikkalisat ja histogrammi oli selvemmin piikittynyt. Kulmajakaumissa ei havaittu mallien välillä merkittävää eroa muuten kuin Penelope-fysiikan muita suuremmassa intensiteetissä.

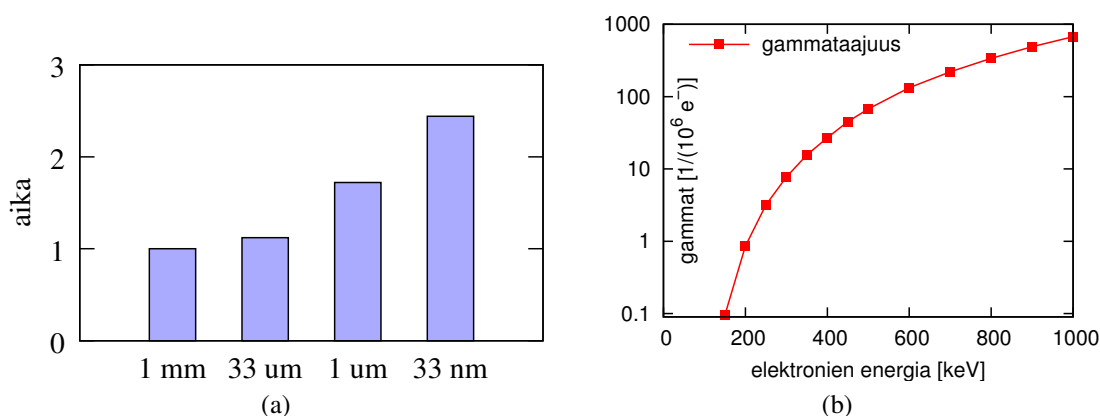
Varsinaisissa simulaatioissa päädyttiin käyttämään Livermore+LECS fysiikkaa, sillä Livermore on tarkoitukseen sopiva matalan energian fysiikkamalli ja LECS tarjoaa todenmukaisemman kulmajakauman Rayleigh'n ja Comptonin sironnasta syntyville fotoneille, kuten kappaleessa 7.3.4 todettiin.

## 9. TULOKSET



Kuva 9.5: Fysiikkalistan vaikutus 1 MeV:n elektroneille. MMPS-tangot olivat kaikissa ajoissa sisäasennossa ja ensiötykin asetukset samat. (a) energiahistogrammi, (b) röntgenkvanttien ulostulo-kohta ionilähteestä, (c) röntgenkvanttien lentosuunta x-akseliin nähden niiden ja (d) lentosuunta 20 mm:n kollimaattorilla rajoitettuna navan kohdalla.

## 9. TULOKSET



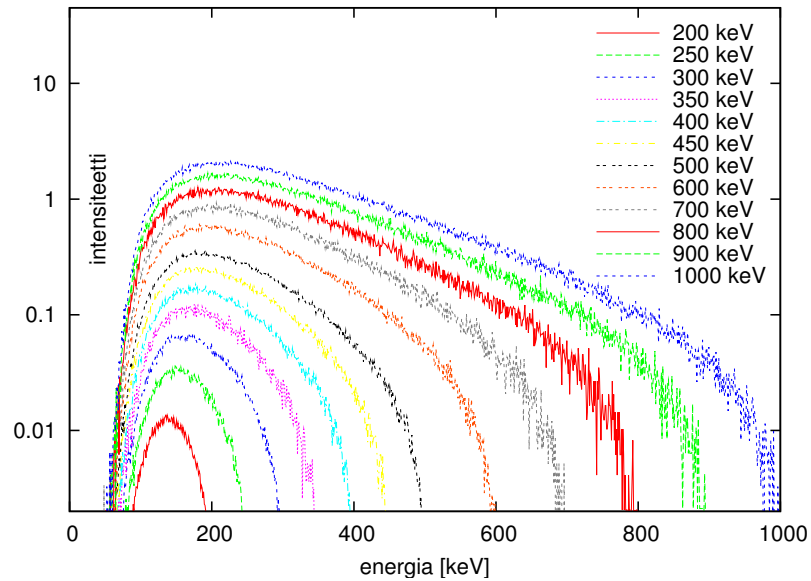
Kuva 9.6: (a) Simulaation kuluva aika tuottorajojen eri arvoilla ja (b) ionilähteen ulkopuolelle pääsevien röntgenkvanttien määrä miljoonaa ensiöelektronia kohti elektronien energian funktiona.

### 9.2.5 Simulaation nopeus

Seurantarajojen (kappale 7.5) muuttamisella Geant4:n yhden millimetrin oletusasetuksesta ei havaittu olevan merkittävää vaikutusta energia- ja kulmahistogrammeihin, joskin pienempiä rajoja käytettäessä nähtiin marginaalisesti enemmän gammoja. Tämän hyödyn söi laskentanopeuden hidastuminen rajaa pienennettäessä: käytettäessä 33 mikrometrin rajaa oli laskentanopeus 90 % 1 mm:n rajan laskentanopeuteen verrattuna, kun taas 33 nanometrinen rajaa käytettäessä laskentanopeus oli enää 41 %. Laskentaan kuluva aika on esitetty graafisesti kuvassa 9.6 (a), jossa laskenta-aika on normalisoitu siten, että oletusrajalla (1 mm) simulaation ajamiseen kulunut aika on 1. Yksi millimetri on riittävä tarkkuus energiahäviön määrittämiseksi ECR-ionilähtesimulaatiossa, sillä ionilähteen sisä- ja ulkopinnan välimatka on noin 63 mm. Täten valtaosa simulaatioista päätettiin ajaa kyseisellä tarkkuudella.

Simulaation tuottaman tilastotieteen kertymänopeuteen vaikutti erittäin voimakkaasti elektronien alkuenergia. Kuvan 9.6 (b) perusteella 1 MeV elektroneilla saatiin tilastotietoa eli havaittuja gammoja lähes kolme kertaluokkaa enemmän kuin 200 keV:n elektroneilla. Simulaationopeus sen sijaan hidastuu vain tekijällä 1,07 energiavälillä 200-1000 keV eli samassa ajassa saadaan laskettua moninkertainen määrä röntgensäteilydataa korkeilla alkuenergioilla. Ongelmallista tässä on se, että mitatun röntgensäteilyn piikki sijoittuu noin 135 kiloelektronivoltin energialle ja korkeilla energioilla on havaittavissa vain muutamia gammoja, joten hyvin suuri osa röntgenspektrin tuottavista elektroneista on matalan energian elektroneja – simulaatiossa on siis painotettava matalaa energiaa ja korkean energian elektroneita tarvitaan vain kourallinen. 200 keV oli käytännössä alaraja elektronienergialle, jolla saadaan vielä simuloitua järjestelmässä ajassa riittävästi gammoja lähteen ulkopuolelle käytettävissä olevalla laskentakapasiteetilla. Valtaosa kaikesta laskennasta tehtiin tällä energialla, mikä tarkoitti noin puolen vuoden jatkuvaa simulaatiota kahdella suoritusajalla

## 9. TULOKSET



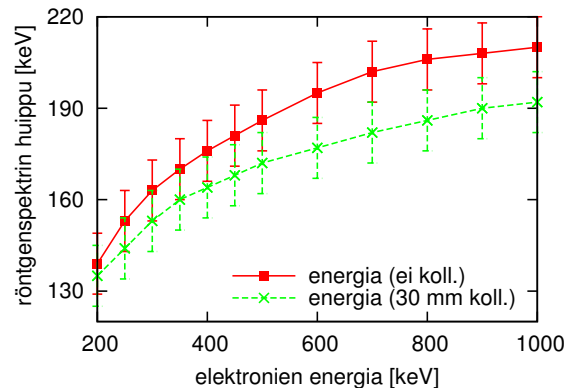
Kuva 9.7: Elektronien alkuenergian vaikutus röntgensäteilyn energiaspektriin. Sisimmän spektrin elektronienergia on 200 keV ja uloimman 1000 keV.

pelkästään 200 keV:n energian röntgenspektrin selvittämiseksi. Intel Pentium D 3 GHz suorittimella saatiin 200 keV:n ajoista statistiikkaa noin 150 havaitun gamman verran vuorokautta ja suoritinydintä kohti. Energian laskeminen 150 kiloelektronivolttiin olisi pudottanut laskentataajuutta vielä tästäkin noin kertaluokalla.

### 9.2.6 Elektronien energian vaikutus

Elektronien alkuenergia vaihteli 200-1000 kiloelektronivoltin välillä. Kuvaan 9.7 on koottu eri alkuenergian simulaatioista saadut energiahistogrammit ja kuvaan 9.8 histogrammien huippuenergioiden paikat. Alkuenergian kasvaessa liikkuu röntgenspektrin huippu hiljalleen korkeammille energioille intensiteetin kasvaessa nopeasti. Energiaspektrin huippu on 200 keV:n alkuenergialla noin 140 keV ja 1000 keV:n alkuenergialla noin 210 keV. Elektronien alkuenergian lisääminen 800 kiloelektronivoltilla siirsi siis röntgenspektrin maksimi-intensiteetin paikkaa vain noin 70 kiloelektronivoltin verran ylöspäin. Röntgenspektrin huippu siirtyy matalammalle energialle käytettäessä spektrin kollimointiin 30 mm:n pystysuuntaista rakoa ionilähteen ulkopinnalla. Ero on merkittävin 1 MeV:n elektroneilla (noin 20 keV) ja pienenee matalamman energian simulaatioissa ollen vain muutamia kiloelektronivoltteja 200 keV:n elektroneilla. Syynä piikin siirtymiseen on se, että ilman kollimoitetta otetaan huomioon gammat, jotka tulevat ulos ionilähteestä suurilla kulmilla ja ovat keskimääräistä energettisempiä kuljettuaan pidemmän matkan ionilähteen rakenteissa.

## 9. TULOKSET



Kuva 9.8: Röntgenspektrin huippuarvo elektronien energian funktiona. Alempi käyrä on saatu kollimoimalla röntgenfotoneja 30 mm:n pystysuuntaisella raolla navan kohdalla.

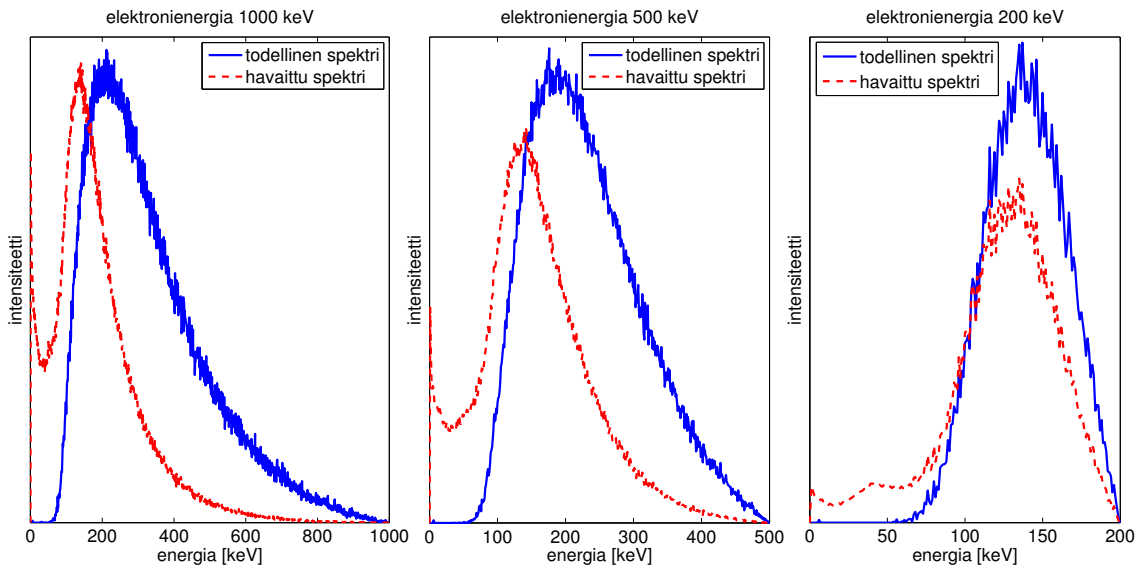
### 9.3 Ilmaisinvasteen vaikutus mitattuun röntgenspektriin

Koska alkuperäisissä mittauksissa germanium-ilmaisinta ei oltu tehokkuuskalibroitu, arvioitiin ilmaisimen vaikutus simuloituihin röntgenspektreihin mallintamalla ilmaisimien ja ajamalla kaikki ECR-ionilähdesimulaatiosta saadut spektrit ilmaisinsimulaation läpi. Yksittäiset röntgenkvantit ammuttiin ilmaisinta kohti jakaumaltaan ja tulokulmaltaan todellista mittaustilannetta vastaavasti, ottaen huomioon kollimaattorin vaikutuksen. Tulokulma ja paikkahajonta eivät kuitenkaan olleet kriittisiä parametreja ilmaisimen vastetta ajatellen. Valitettavasti ilmaisimen tarkkoja mittoja tai kyseisen ilmaisimen ilmaisinvastetta ei voitu tarkistaa jälkikäteen, sillä ilmaisimien oli mennyt rikki. Ilmaisimen fyysiset ominaisuudet, materiaalit, mitat ja itse mittauselektroniikka ovat kuitenkin ilmaisinvasteen kannalta hyvin merkittäviä, joten näitä simulaatioita voidaan pitää vain hyvinä arvauksina todellisesta vasteesta.

Kuvassa 9.9 on simuloitua ilmaisinvasteita kolmelle eri ilmaisimeen syötetylle jatkuvalla röntgenspektrille. Spektrit vastaavat ionilähdesimulaatiosta saatuja spektrejä yksittäisille elektronien energioille. Ilmaisinvaste muuttuu todellisesta sitä enemmän mitä korkeamman energian röntgenkvantteja spektri sisältää, sillä kaikkein energoittisimmat röntgenkvantit kulkevat helposti suoraan ilmaisimen läpi tai jättävät jälkeensä vain osan energiastaan. Vasemmanpuolimmainen kuva sisältää paljon korkeaa energiaa, jota ilmaisimien ei näe tehokkaasti. Keskimmaisessa vaikutuksessa on pienempi ja oikeanpuolimmaisessa havaittu spektri on jo melko lähellä oikeaa spektriä, mutta on silti hieman toispuoleinen. Huomattavaa kuvissa on se, että havaitut spektrit edustavat ideaalitulannetta, jossa kaikki ilmaisimeen jäävä energia rekisteröidään. Todellisuudessa laskentataajuus on vain joitakin prosentteja todellisesta. Havaitun spektrin muodon pitäisi tästä huolimatta olla lähellä simuloitua, mutta huomattavasti pienemmällä intensiteetillä.

Ilmaisinsimulaatiosta saadut tulokset osoittautuivat riittävän hyväiksi, jotta varsinaisen

## 9. TULOKSET



Kuva 9.9: Simuloitu ilmaisimen vaikutus jatkuvaan röntgenspektriin. Ilmaisimessa on käytetty sylinterimäistä 5x5 cm:n (korkeus x halkaisija) germanium-kidettä.

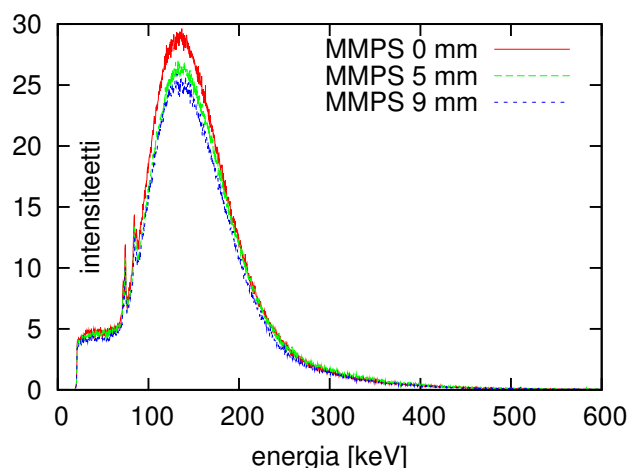
ECR-ionilähdesimulaation tuloksia voitiin sen avulla sovittaa mittaustuloksiin. Samalla ilmaisinsimulaatio lienee suurin yksittäinen röntgenspektrien sovitustarkkuuteen vaikuttava virhelähde.

### 9.4 Mittaus- ja simulaatiotulokset

Kuvassa 9.10 on JYFL 6,4 GHz ECR-ionilähteestä mitattuja röntgenspektrejä MMPS-rautojen eri asennoilla. Spektrin alkupäässä näkyvät kaksi piikkiä ovat kollimaattorista ja ilmaisimen suojauksista aiheutuvia lyijyn karakteristisia röntgenpiikkejä. Rautojen ollessa täysin sisällä (0 mm) saadaan intensiteetiltään suurempia käyriä kuin napojen muissa asennoissa. Yksi mahdollinen selitys tälle on, että ionilähteen toiminta tehostuu kun navat ovat mahdollisimman lähellä plasmakammiota, sillä napojen aiheuttama paikallinen magneettikentän vahvistuminen kasvattaa plasman elektronitiheyttä. Spektrin huippu (noin 135 keV) on kaikissa MMPS-rautojen asennoissa samassa kohdassa, mikä eroaa hieman 1 MeV:n elektroneilla tehdyistä simulaatioista, joissa spektrin huippu siirtyy korkeammille energioille kun MMPS-napojä siirretään sisään. Syitä tähän voi vain arvailla. Tässä työssä ei pyritä – eikä pystytä – selittämään erilaisilla ionilähteen asetuksilla tapahtuvia muutoksia röntgensäteily-spektrissä, vaan keskitytään sovittamaan simuloitu spektri yhteen valittuun mitattuun spektriin.

Röntgensimulaatiot tehtiin elektronien alkuenergioilla 200-1000 keV. Välillä 200-500 keV käytettiin 50 keV:n askeleita ja 500-1000 keV välillä 100 keV:n askeleita. Simulaatiopa-

## 9. TULOKSET



*Kuva 9.10: Mitattuja röntgenspektrejä MMPS-napojen eri asennoilla. Korkeimman intensiteetin spektri mitattiin kun rautanavat olivat täysin sisäasennossa. Intensiteetti pieneni siirrettäessä rautoja ulospäin.*

rametit olivat samat kaikissa tapauksissa alkuenergiaa ja energian mukaan määräytyvää alkupaikan hajontaa lukuunottamatta. Elektronien lähtösuunnan kartiokulmana oli kaikilla energioilla  $90^\circ$  ja muut ajettujen simulaatioiden tiedot on koottu taulukkoon 9.1. Suoritinai-  
kaa on varsinaisten simulaatioiden lisäksi kulunut testi- ja kalibraatioajoihin arviolta usean tuhannen tunnin verran.

Elektronien eri alkuenergioilla tehdyistä simulaatioista saatuja röntgenspektrejä yritettiin sovittaa mittausdataan summaamalla spektrejä sopivia kertoimia käyttämällä. Spektrin korkean energian osa huippuintensiteetistä ylöspäin saatiin tietyillä kertoimilla sopimaan yhteen mittauksen ja simulaatioiden välillä, mutta vasemmalla puolella huippuintensiteettiä simuloitu spektri vaimeni huomattavasti nopeammin kuin mitattu spektri. Toisin sanoen spektrien muodot eivät vastanneet toisiaan ja ongelmaa ei pystytty korjaamaan kertoimia muuttamalla. Osoittautui, että tehokkuuskalibroimaton mittausdata oli selvästi vääristynyt verrattuna "oikeaan", ilmaisimeen osuvaan spektriin, koska Comptonin sironta ja takaisinsironta ilmaisimessa muuttivat spektrin muotoa ja siirsivät sen huipun matalammalle energialle. Ongelman ratkaisemiseksi simulaatioista saadut röntgenspektrit ajettiin uuden, mittauksissa käytettyä germanium-ilmaisinta mallintavan simulaation läpi. Ilmaisintehtokkuuden huomioon ottavat spektrit onnistuttiin nyt sovittamaan mittausdataan hyvällä tarkkuudella. Sovituksen jälkeen saatiin todellinen spektri selville ilmaisimen vääristämistä spektreistä "takaperin" laskemalla, koska ilmaisimen vaikutus oli nyt tiedossa. Vaikka ilmaisinsimulaatio antoi vain karkean arvion todellisesta ilmaisinvasteesta, se osoittautui toimivaksi ja ratkaisevaksi tekijäksi simulaatiodatan ja mittausdatan sovittamisessa yhteen.

## 9. TULOKSET

Taulukko 9.1: JYFL 6,4 GHz ECR-ionilähteen röntgensimulaatiot.

elektronien alkuenergia [keV]	elektronien lähtöpaikan säde [mm]	simuloitujen elektronien määrä [ $\times 10^6$ ]	laskentaan käytetty suoritinaika [h]	röntgen- fotonien määrä
200	1,5	29512	7300	25392
250	1,7	7810	1900	24349
300	1,9	9180	2200	70950
350	2,1	4240	1000	66836
400	2,2	4468	1100	120869
450	2,4	3530	880	159312
500	2,5	5255	1300	353367
600	2,8	1735	420	229704
700	3,1	581	140	127577
800	3,4	486	130	164358
900	3,7	473	120	231207
1000	4,0	610	160	409910
<b>yhteensä</b>		<b>67880</b>	<b>16700</b>	<b>1983831</b>

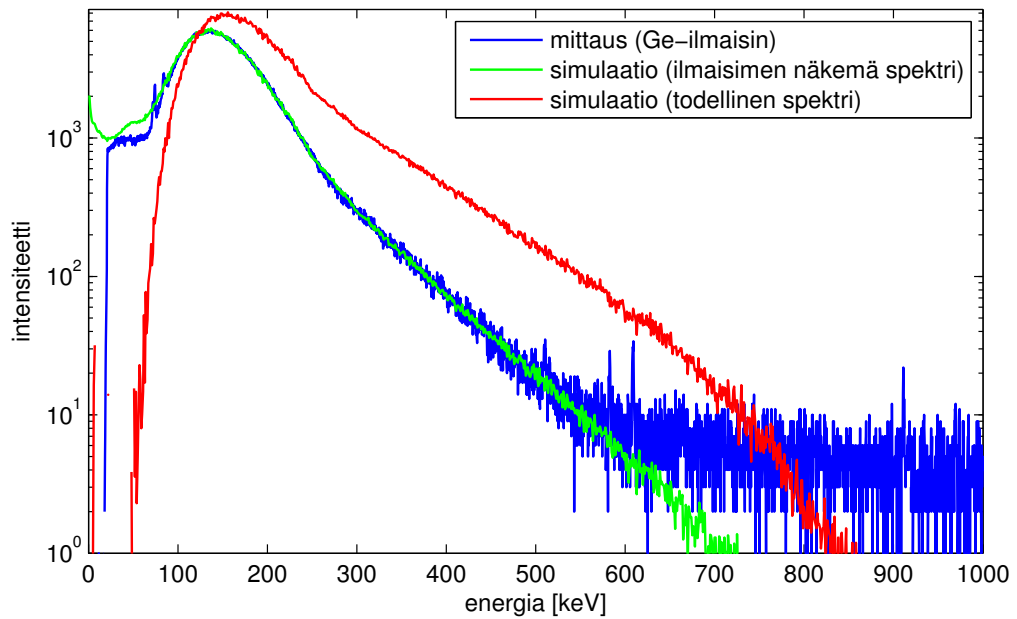
### 9.4.1 Mittaustuloksiin sovitettu röntgenspektri

Kuvaan 9.11 on piirretty mitattu spektri, siihen sovitettu ilmaisinsimulaation läpi ajettu usean simulaatiospektrin summa sekä todellinen, ilmaisimen vääristävästä vaikutuksesta korjattu spektri. Kuvat (a) ja (b) sisältävät samat spektrit logaritmisella ja lineaarisella intensiteettiasteikolla. Mittausten sisältämää korkeaenergista häntää yli 600 keV:n energialla ei pystytty toistamaan millään sovituksella, joten sovitus tyydyttiin tekemään röntgenspektrin lineaarisen osan perusteella. Mittausdatan häntä saattaa johtua taustasäteilystä tai muusta ionilähteestä saapuvaan röntgensäteilyyn liittymättömästä seikasta, jota ei ole pystytty mittaushetkellä eliminoimaan. Kuvasta (b) nähdään, että sovitus on lähes täydellinen noin 100 keV:n energiasta ylöspäin. Matalilla energioilla sovitus alkaa vähitellen erota mitatusta. Tämä johtuu käytetyn ilmaisinsimulaation ja mittauksen epätarkkuuksista, jotka korostuvat matalalla energialla. Mittausdata alkaa 30 keV energiasta, joten tämän energian alapuolelta ei voida sanoa mitään myöskään simulaatiotulosten luotettavuudesta. Käytännössä simulaatiosovitusta mittausdataan voidaan pitää luotettavana ainakin intensiteettihiippua korkeammalla energian osuudella epätarkkuuden kasvaessa siirryttäessä matalammille energioille.

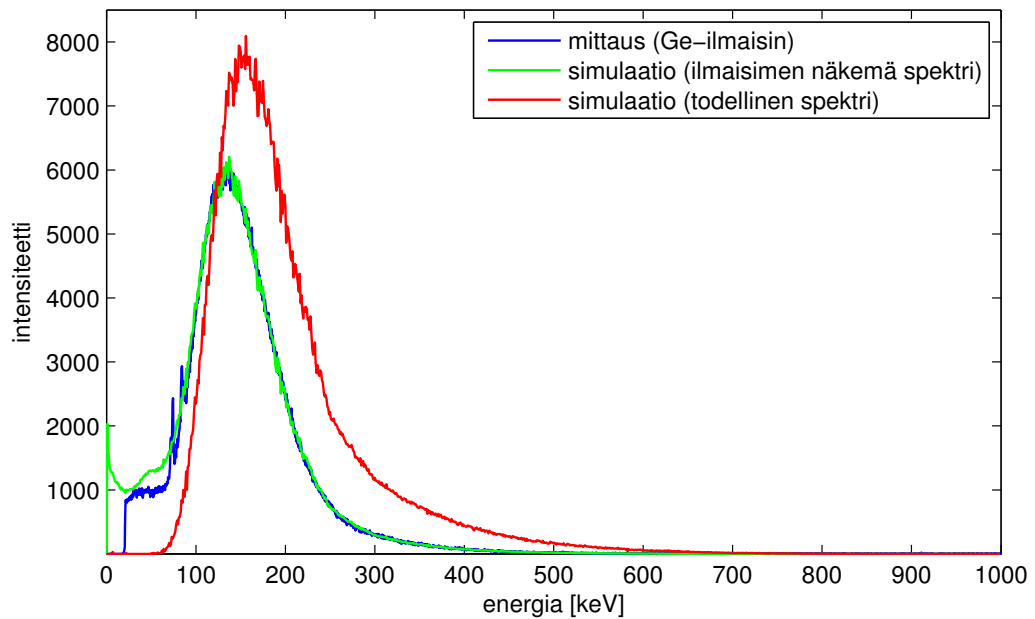
Sovitus on siinä mielessä yksiselitteinen, että sellaisia merkittävästi erilaisia sovituskertoimien arvoja, joilla simuloitu röntgenspektri olisi saatu sopimaan yhtä hyvin mitattuun röntgenspektriin, ei löytynyt. Pieniä painotuseroja elektronien erilaisilla alkuenergialla saatujen spektrien kertoimiin voitiin tehdä spektrin muodon paljoo vääristymättä, mutta kokonaisuutena ensiöelektronien määrän muutostrendi korkeammille energioille siirryttäessä säilyi samana eli eksponentiaalisesti pienentyvä.



## 9. TULOKSET



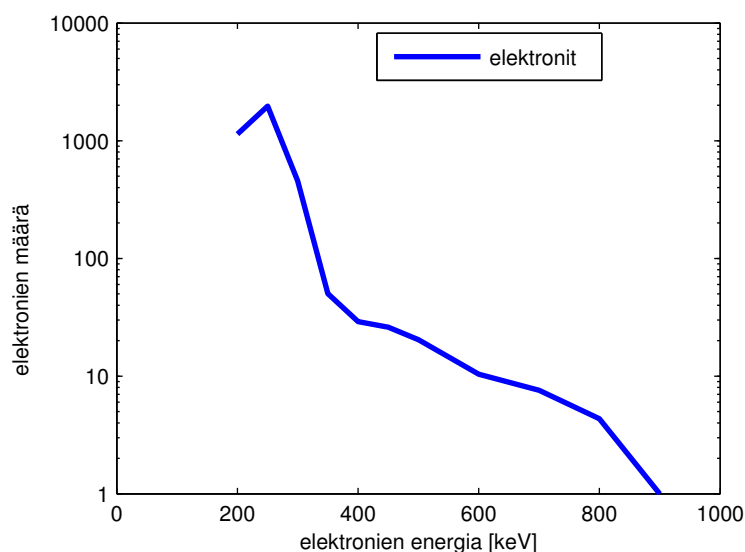
(a)



(b)

Kuva 9.11: Mitattu spektri, siihen sovitettu ilmaisimen näkemä simuloitu spektri ja todellinen spektri ennen ilmaisinta. Kuvassa (a) intensiteetti on logaritminen ja kuvassa (b) lineaarinen.

## 9. TULOKSET



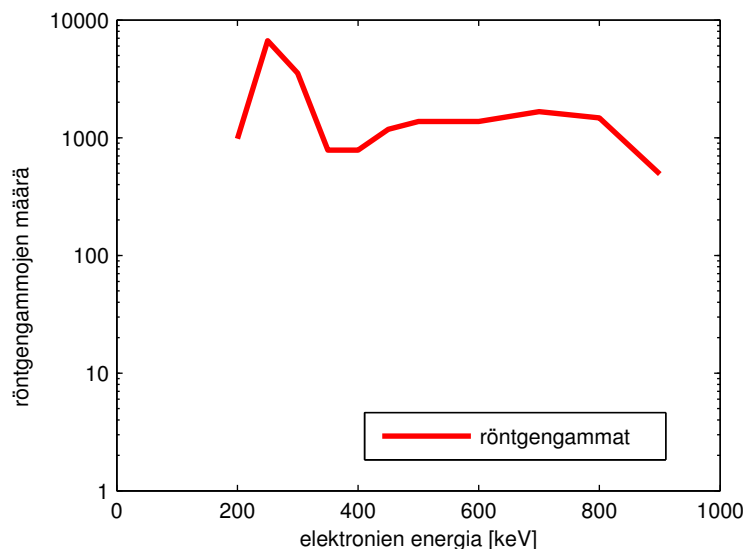
Kuva 9.12: Ionilähteen ulkopuolella havaitun röntgensäteily-spektrin tuottavien elektronien energiajakauma.

### 9.4.2 Elektronien energiajakauma

Mittausten ja simulaatioiden röntgenspektrisovituksista voidaan viimein johtaa niiden elektronien energiajakauma, jotka plasmakammion seinään törmätessään ovat vastuussa röntgensäteily-spektrin tuottamisesta. Energiajakauma 200 keV:n energiasta ylöspäin on kuvassa 9.12. Kuva on normitettu siten, että pienin elektronimäärä 900 keV:n kohdalla on 1 eli kaikki elektronimäärät ovat suhteellisia toisiinsa nähden. Elektronien energialla 350-900 keV elektronien määrä vähenee energian kasvaessa suurin piirtein eksponentiaalisesti kuten odotettua olikin. Sen sijaan välillä 250-350 keV väheneminen on huomattavan paljon jyrkempää. Tällä 100 keV:n välillä elektronien määrä tipahtaa noin kahdella kertaluokalla kun korkeamman energian kattavalla 650 keV:n suuruisella välillä elektronien määrä vähenee vain 1,5 kertaluokan verran. Tämä saattaa viitata kahteen erilliseen erittäin korkean energian elektronipopulaatioon, jotka menevät päällekkäin. Tähän viittaisi myös se, että mitatuissa röntgenspektreissä on pieni, mutta havaittava kulmakertoimen muutos noin 260 keV:n energiassa, mikä on havaittavissa myös kuvassa 9.11 (a).

Mielenkiintoinen piirre energiajakaumassa on siinä, että aivan pienimmän simuloidun energian, 200 keV, elektronimäärä on pienempi kuin sitä seuraavan 250 keV:n elektronien määrä. Kyseessä saattaa olla lokaali maksimi, mutta aivan varmasti tätä ei voida sanoa. Analyysiä auttaisi, jos 200 keV:n alapuolella olisi ainakin yksi datapiste lisää, mutta suoritinaikavaatimukset nousivat liian korkeiksi näin pienien energioiden simuloimiseen. Koska röntgenspektrisovitus tehtiin tässä työssä käsin ylemmiltä elektronien energioilta alempia kohti edeten, vaikuttaisivat matalampien energioiden lisädatapisteet elektronien energiajakaumaan korkeintaan nykyisen 200 keV:n elektronien määrää marginaalisesti

## 9. TULOKSET



Kuva 9.13: Röntgenspektrisovitukseen käytettyjen röntgenkvanttien kokonaismäärä eri ensiöelektronienenergioilla ajetuista simulaatioista.

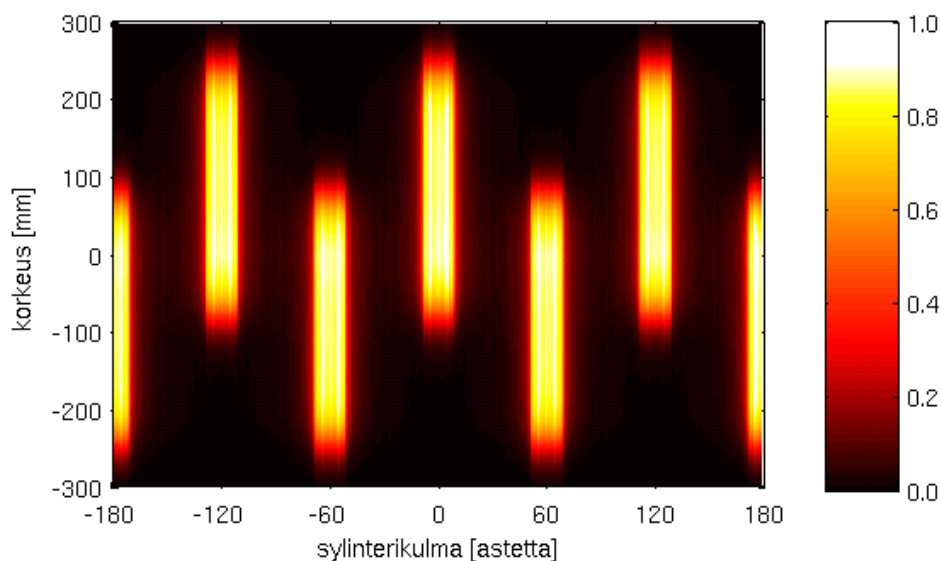
vähentäen.

### 9.4.3 Röntgensäteilyn jakauma ionilähteen pinnalla

Kuvaan 9.13 on piirretty niiden röntgenfotonien *kokonaismäärä*, jotka summautuvat mitauksiin sovitettuun röntgenspektriin eri ensiöelektronienenergioilla ajetuista simulaatioista. Kuvan akselien asteikot vastaavat kuvan 9.12 akseleita ja määrät ovat tässäkin suhteellisia. Esimerkiksi 400 keV:n elektroneilla tuotettuja röntgenfotoneita tarvittiin sovitukseen noin kertaluokan verran vähemmän kuin 250 keV:n elektroneilla tuotettuja. Kun verrataan kuvia 9.12 ja 9.13 havaitaan, että vaikka elektronien energian kasvaessa niiden määrä vähenee jyrkästi, pysyy spektrisovituksessa käytettyjen röntgenfotonien määrä suunnilleen samana. Tulos johtuu siitä, että korkeammalla energialla röntgenfotoneita syntyy enemmän ja ne pääsevät kulkeutumaan helpommin ionilähteen ulkopuolelle, kuten kuvasta 9.6 (b) nähtiin. Tästä huolimatta sovitukseen tarvittavien röntgenfotonien määrässä havaitaan selvä piikki energiavälillä 200-350 keV.

Seuraavaksi esitellään väärävärikuvia röntgensäteilyn jakaumista ionilähteen ulkopinnalla. Kaikissa kuvissa on käytetty röntgenspektrisovituksen (kuva 9.11) antamaa dataa. Kuvissa ionilähteen sylinterimäinen ulkopinta on levitetty tasoksi ja x-akselilla on paikka sylinterin pinnalla asteissa ja y-akselilla korkeus millimetreinä. Väriasteikolla kuvataan kulloistakin tutkittua parametria. Ellei toisin ole mainittu, kuvan valkoiset alueet merkitsevät sitä, että kyseisestä pisteestä ei ole dataa eli kyseiselle alueelle ei ole simulaatioissa osunut yhtään röntgenfotonia.

## 9. TULOKSET



Kuva 9.14: Röntgensäteilyn suhteellinen energiamäärä ionilähteen ulkopinnalla paikan funktiona. Energiajakauma on normitettu välille  $[0,1]$ .

Vaikka elektroneilla olikin simulaatioissa tietty kulma- ja paikkahajonta, on niiden *keskimääräinen* lähtöpaikka kuvissa origossa ja keskimääräinen lentosuunta paperin pinnasta suoraan kohti lukijaa. Tämän vuoksi röntgenjakaumakin on keskittynyt origon ympärille. Symmetriasyistä simuloitu data pystyttiin peilaamaan sekä pysty- että vaakasuunnassa ja näin saatiin (näennäisesti) nelinkertainen statistiikka väärävarikuvia varten. Tästä johtuu myös se, että jokainen kuvaneljännes on näissä kuvissa identtinen.

Suurin osa kuvista on piirretty suoraan käyttäen mittausdataan sovitettua simulaatiodataa, jotta nähdään miten yksittäisellä alueella ionilähteen seinään törmäävät elektronit vaikuttavat röntgensäteilyn syntymiseen. Joissakin kuvissa (9.14) on havainnollisuuden vuoksi kopioitu röntgendata koko sille alueelle, missä elektronivuo törmää plasmakammion seinään. Tällöin nähdään millainen on todellinen röntgenvalo ionilähteen pinnalla sen ollessa käynnissä ja mahdolliset spektrin paikkahajonnan aiheuttamat summausilmiöt. On kuitenkin huomattava, että summattu spektri on vain suuntaa-antava, sillä todellisuudessa plasmakammion magneettikenttä ei ole homogeeninen  $z$ - eli korkeussuunnassa ja plasma ei osu kammioon samalla tavalla eri korkeuksilla.

Ionilähteen ulkopuolelle pääsevän röntgensäteilyn energiamäärä on esitetty kuvassa 9.14, missä sylinterimäisen ionilähteen ulkopinta on levitetty tasoksi ja simulaatiodata on kopioitu kattamaan kaikki navat, vaikka itse simulaatio onkin tehty vain (keskimäärin) yksittäisessä pisteessä. Energiajakauma on suhteellinen ja normitettu välille  $[0,1]$  siten, että suurinta energiamäärää (1,0) kuvaa valkoinen väri ja nollaenergiaa musta väri. Kuvasta nähdään, että suurin energiamäärä poistuu ionilähteestä röntgensäteilynä napojen välittömästä läheisyydestä.

## 9. TULOKSET

---

Röntgenfotonien määrä ionilähteen ulkopinnalla on piirretty kuvaan 9.15. Spektrin tuottavat alkuperäiset elektronit lentävät kammion seinään keskimäärin  $x$ -akselia pitkin (kuvan origossa) eli suoraan kohti lukijaa. Röntgenvalo on keskittynyt navan kohdalle ja on voimakkaimmillaan hieman napojen molemmin puolin. Tämän aiheuttaa keskellä napaa oleva MMPS-rautatanko, joka vaimentaa aivan navan keskeltä tulevaa röntgensäteilyä. Säteilyn määrä vähenee voimakkaasti heti kun siirrytään navan välittömästä läheisyydestä kauemaksi vaakasuunnassa. Heikko varjojakauma röntgensäteilyä heijastuu viereisten napojen,  $\pm 60$  asteen, kohdille. Myös napojen välissä  $\pm 30$  asteen kohdalla on havaittavissa hieman enemmän säteilyä. Vaikka heijastuneen säteilyn määrä on vähäinen verrattuna alkuperäisellä navalla ulospääsevään säteilyyn, on se silti havaittavissa. Syynä varjojakaumille lienee kyseisissä kohdissa oleva keskimääräistä alhaisempi materiaalin pintatiheys radiaalisessa suunnassa. Navoilta ja niiden välistä tulevan röntgenvalon yhteisvaikutus näkyy juuri ja juuri myös kuvasta 9.14, missä kokonaisenergian määrä on aavistuksen korostunut niillä kohdilla napoja, joissa plasmavuot ovat osittain päällekkäin vaakasuunnassa.

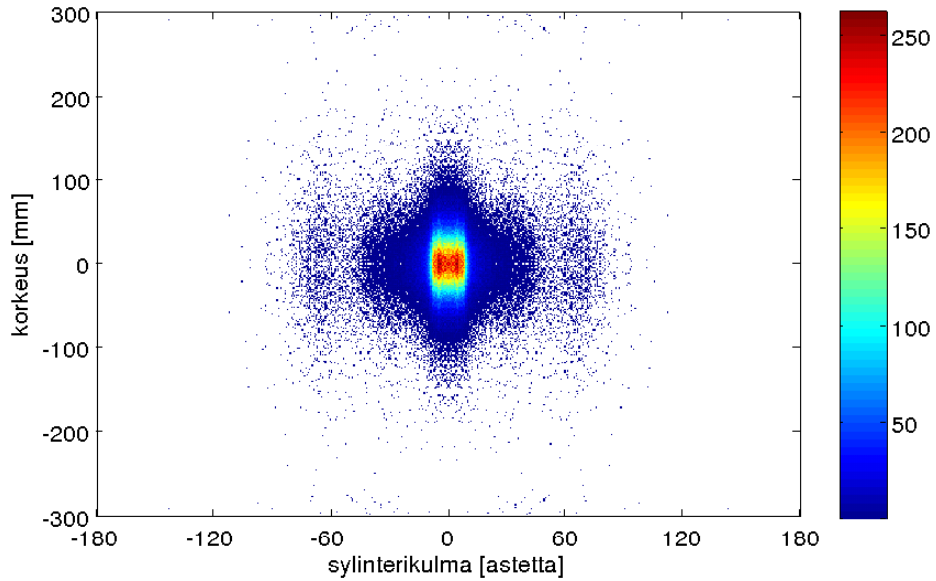
Kuvassa 9.16 värit merkitsevät röntgenfotonien keskimääräistä lentosuuntaa ionilähteen pinnan normaaliin nähden niiden poistuessa ionilähteestä. Origion ympäristössä keskimääräinen kulma on  $10-30$  asteen välillä kun  $0^\circ$  tarkoittaisi pinnan normaalin suuntaista röntgenvaloa. Tässäkin kuvassa  $\pm 30$  ja  $\pm 60$  asteen kohdille syntyy alueet, joissa keskimääräinen kulma on pienempi kuin niiden ympäristössä. Toisin sanoen napojen kohdalla röntgensäteily tulee ulos ionilähteestä kohtisuorempaan kuin muissa kohdissa.

Mittaustuloksiin sovitetun simuloidun spektrin röntgenfotonien kulmajakauma energian funktiona on esitetty kuvassa 9.17. Kuvan vaaka-akseli on röntgenspektrin energiajakauma ja pystyakseli yksittäisten röntgenfotonien kulma alkuperäisten elektronien keskimääräiseen lähtökulmaan eli  $x$ -suuntaan nähden. Nolla astetta tarkoittaa siis samaa kuin elektronien keskimääräinen lähtösuunta. Kuvassa olevat harmaan sävyt puolestaan kuvaavat kyseisen kohdan energia- ja kulmajakaumalla havaittujen röntgenfotonien määrää: mitä tummempi kohta sitä enemmän röntgeneitä kyseisillä parametreilla. Kuvan hahmottamisen helpottamiseksi samaan kuvaan on piirretty simuloidun röntgensäteilyn energiahistogrammi. Sen avulla huomataan heti, että suurimman intensiteetin kohta vastaa kuvan tummintaa aluetta.

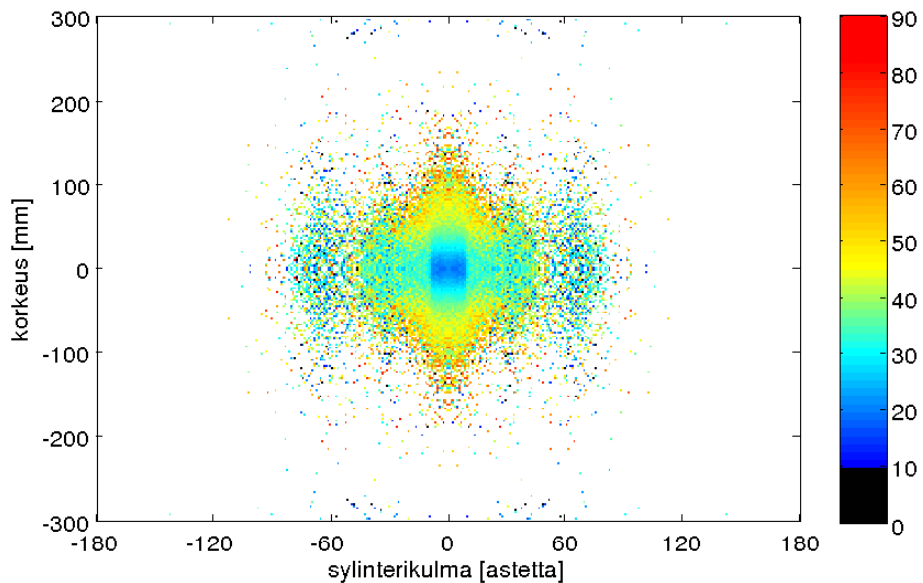
Energialtaan noin  $110-210$  keV:n fotonien kulmajakauma keskittyy suurin piirtein  $10-40$  asteen välille. Korkeammille energioille siirryttäessä kulmajakauman hajonta pienenee ja lähestyy noin  $20$  astetta. Pienimmillä energioilla sen sijaan havaitaan röntgenkvanteja suhteellisen tasaisesti noin  $10-80$  asteen välillä. Kulman ollessa suurempi kuin  $100$  astetta tai energian ollessa yli  $600$  keV, on röntgenfotonien suhteellinen määrä liian pieni näkyäkseen tässä kuvassa.

## 9. TULOKSET

---

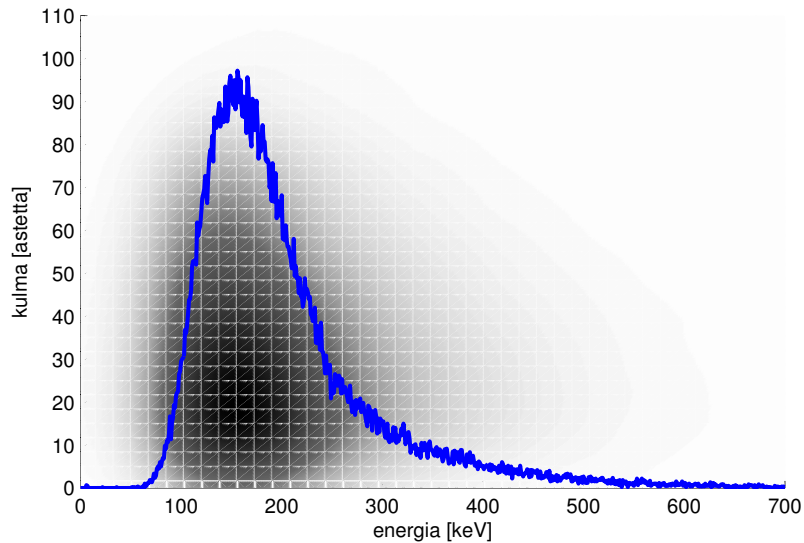


*Kuva 9.15: Ionilähteen ulkopuolelle pääsevien röntgensäteilyfotonien määrä paikan funktiona ionilähteen ulkopinnalla. Kuva on piirretty mittauksiin tehdyn sovituksen antamasta datasta.*



*Kuva 9.16: Ionilähteen ulkopuolelle pääsevien röntgensäteilyfotonien keskimääräinen lentokulma ionilähteen pinnan normaaliin nähden ionilähteen ulkopinnalla. Kuva on piirretty mittauksiin tehdyn sovituksen antamasta datasta.*

## 9. TULOKSET



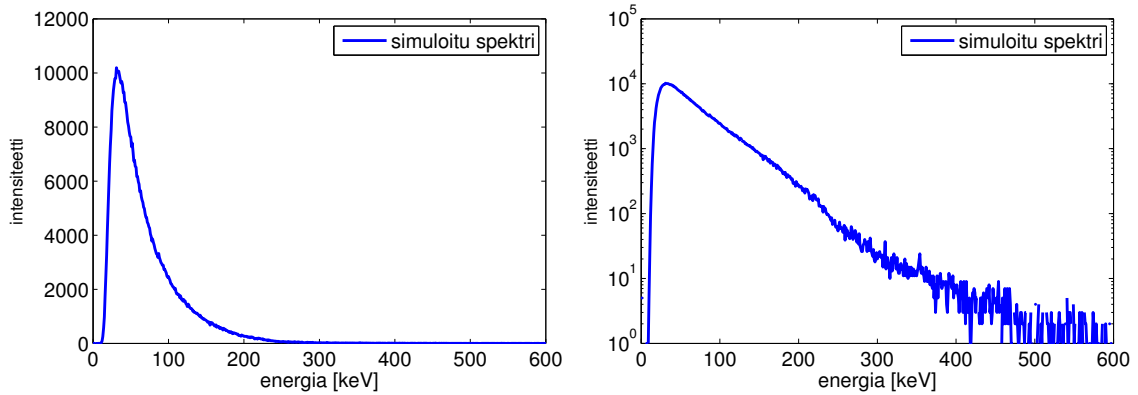
Kuva 9.17: Ionilähteen ulkopuolelle pääsevien röntgensäteilyfotonien keskimääräinen lentokulma  $x$ -suuntaan nähteen röntgenfotonien energian funktiona. Tummempi väri kuvaa suurempaa intensiteettiä. Kuva on piirretty mittauksiin tehdyn sovituksen antamasta datasta.

### 9.5 Simulaatiot alumiinilevyllä

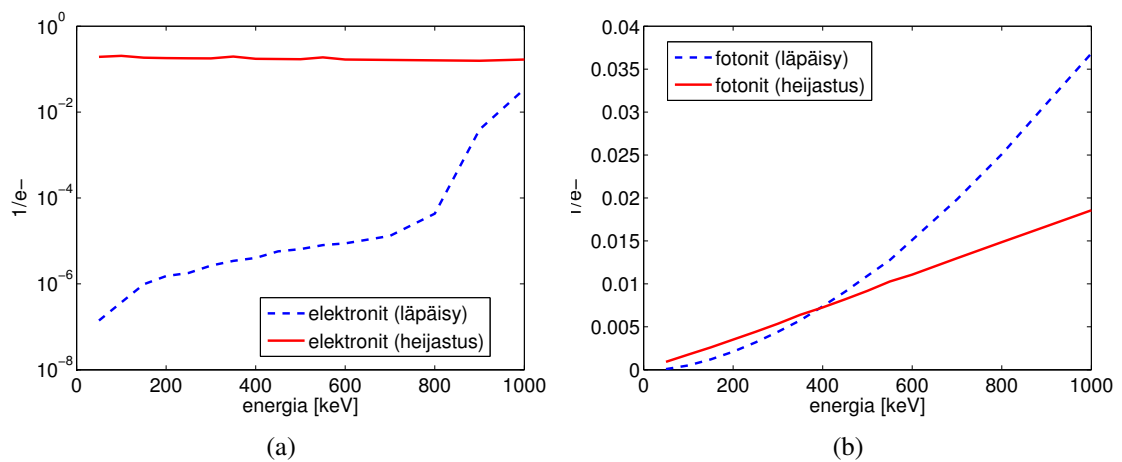
Röntgensimulaatioita tehtiin myös käyttäen kohtiona pelkästään 1,5 millimetrin paksuista alumiinilevyä. Elektroneja ammuttiin kohti levyä vastaavasti kuin varsinaisissa ECR-ionilähdesimulaatioissa ja levyn toiselle puolelle päässeet röntgenfotonit tallennettiin. Lisäksi näistä simulaatioista otettiin talteen tietoa levyn läpäisseistä elektroneista ja takaisin lähtösuuntaan heijastuneista röntgenfotoneista ja elektroneista. Kaikissa levysimulaatioissa elektronit ammuttiin yhdestä pisteestä kohti levyä joko 0, 60 tai 120 asteen kartiokulmalla. Seuraavaksi esiteltävissä tuloksissa on käytetty vain 120 asteen kartiokulmalla tehtyjä simulaatiotuloksia, sillä tämä on lähimpänä ionilähdesimulaatioissa käytettyjä parametreja. Kartiokulman vaikutus näkyi lähinnä kuvaajien hieman erilaisissa intensiteeteissä, sillä energiakäyttäytyminen oli samanlaista kaikilla arvoilla.

Kuvassa 9.18 on alumiinilevyn läpäisseen säteilyn röntgenspektri lineaarisella ja logaritmisella asteikolla kun alkuperäinen elektronien energiajakauma on sama kuin kuvassa 9.12. Käytetty jakauma tuottaisi JYFL 6,4 GHz ionilähteen ulkopuolella samanlaisen röntgenspektrin kuin kuvassa 9.11. On muistettava, että logaritmisessä spektrin näennäisen tasainen käyrä välillä 40–250 keV ei ole aivan todellinen, sillä alkuperäisten elektronien energiajakauma jää alimmillaan 200 kiloelektronivolttiin. Röntgenspektrin huippu siirtyy joka tapauksessa paljon alemmalle energialle, sillä 1,5 mm alumiinia vaimentaa matalan energian säteilyn osuutta merkittävästi vähemmän kuin noin 63 mm:n paksuinen plasmakammio kokonaisuus magneetteineen ja muine rakenteineen.

## 9. TULOKSET



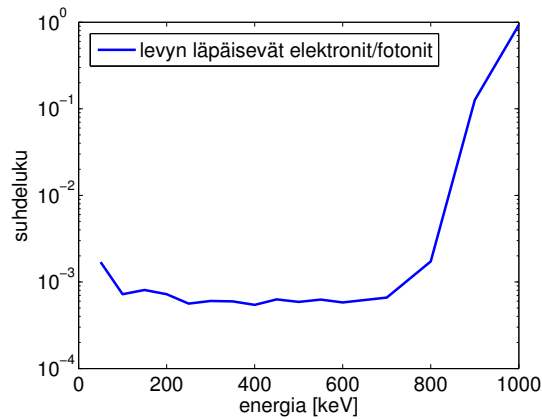
Kuva 9.18: Paksuudeltaan 1,5 mm:n alumiinilevyn läpäisevä röntgenspektri käytettäessä kuvan 9.12 mukaista energiajakaumaa levyä kohti ammuttaville ensiöelektroneille.



Kuva 9.19: (a) Paksuudeltaan 1,5 mm:n alumiinilevyn läpäisevien ja siitä heijastuvien elektronien määrä levyyn ammuttujen elektronien energian funktiona. (b) Levyn läpäisevät ja siitä heijastuvat röntgenfotonit. Pystyakselilla on fotonien määrä yhtä levyä kohti ammuttua elektronia kohti.



## 9. TULOKSET



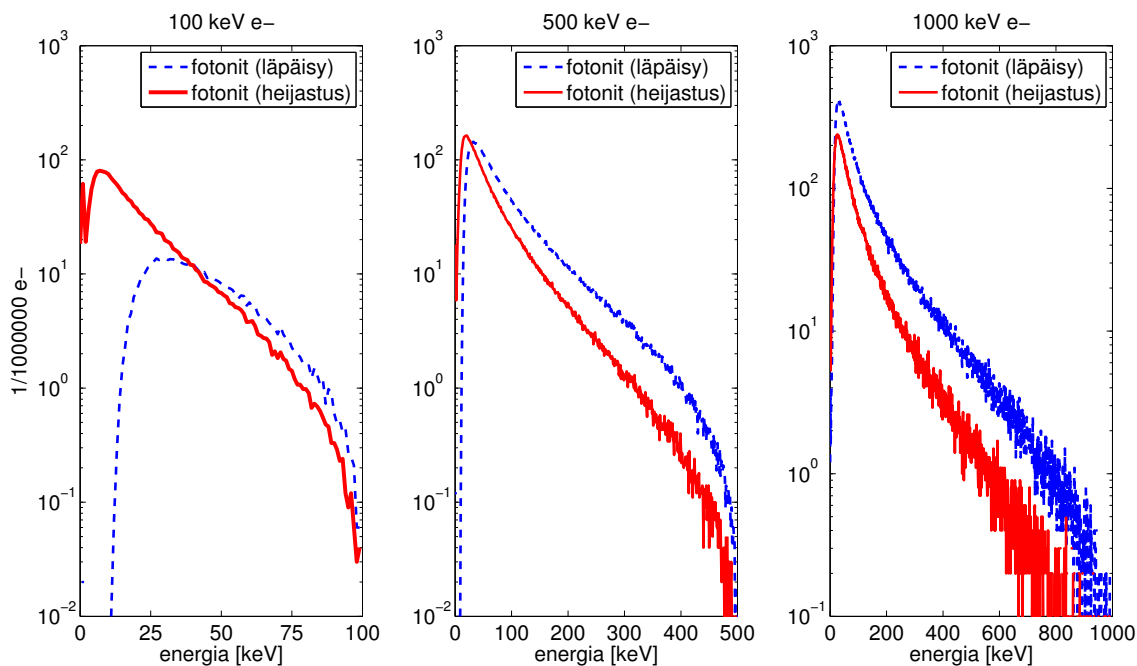
Kuva 9.20: Alumiinilevyn läpäisevien elektronien ja fotonien määrien suhde levyyen ammuttujen elektronien energian funktiona.

Alumiinilevyn läpäisseiden ja siitä heijastuneiden elektronien ja röntgenfotonien määrät on piirretty kuvaan 9.19. Kuvan (a)-kohdassa levyn läpäisseiden elektronien määrä on pienillä energioilla hyvin pieni, sillä ne absorboituvat tehokkaasti ohueenkin määrään materiaalia. Yli 700 kiloelektronivoltin energialla levyn läpäisseiden elektronien määrä alkaa kasvaa rajusti, sillä elektronien kantomatra alumiinissa alkaa lähestyä levyn paksuutta eli 1,5 millimetriä. Levyn toisella puolella nähtyjen elektronien määrän lievä kasvu 50-700 keV:n välillä johtuu levyn läpäisevien röntgenfotonien määrän kasvusta, sillä ne irrottavat elektroneja läheltä levyn ulkopintaa. Tämä nähdään kuvan 9.20 perusteella, missä alumiinilevyn läpäisevien elektronien suhde levyn läpäiseviin fotoneihin pysyy suurin piirtein vakiona 100 ja 700 keV:n välillä. Levystä takaisinpäin heijastuneiden elektronien määrä pysyy energiasta riippumatta melkein samana. Nämä elektronit ovat suurelta osin alkuperäisten, levyyen ammuttujen elektronien levyyen pinnasta irrottamia elektroneja.

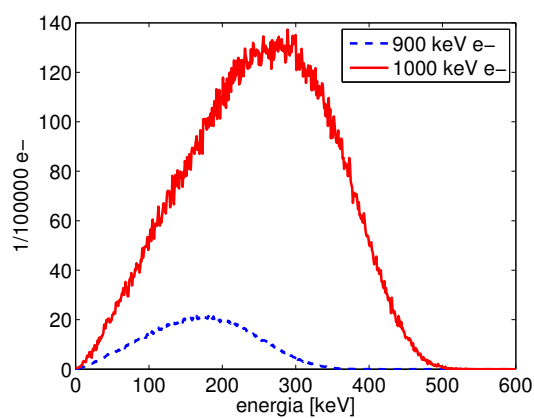
Kuvasta 9.19 (b) nähdään, että levystä heijastuneiden eli takakulmille lähtevien röntgenfotonien määrä kasvaa tasaisesti elektronienergian kasvaessa. Hieman tätä nopeammin kasvaa levyyen läpäisseiden fotonien määrä ja noin 400 kiloelektronivoltin energialla käyrät leikkaavat. Matalilla energioilla alumiinilevy absorboi osan röntgenfotoneista, mutta korkeammilla energioilla syntyvän jarrutusäteilyn jakauma alkaa piikittyä vahvasti kohti etukulmia.

Alumiinilevyyen läpäisevien ja siitä heijastuvien röntgenfotonien energiaspektrit elektronien alkuenergioilla 100, 500 ja 1000 keV on esitetty kuvassa 9.21. Näiden lisäksi kuvassa 9.22 on levyyen läpäisevien elektronien energiaspektrit 900 keV ja 1000 keV ensiöelektronien energioilla. Levyyen läpäisevien elektronien määrä ja huippuenergia kasvaa erittäin nopeasti elektronin alkuenergian kasvaessa.

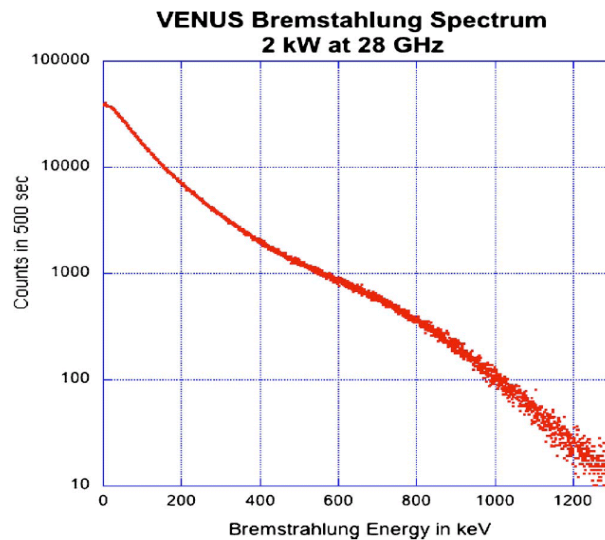
## 9. TULOKSET



Kuva 9.21: Paksuudeltaan 1,5 mm:n alumiinilevyn läpäisevien ja heijastuneiden röntgenfotonien energiaspektrit elektronien alkuenergioilla 100, 500 ja 1000 keV. Intensiteetti on normitettu vastaamaan havaittua fotonimäärää miljoonaa levyyn ammuttua elektronia kohti.



Kuva 9.22: Paksuudeltaan 1,5 mm:n alumiinilevyn läpäisevien elektronien energiaspektrit elektronien alkuenergioilla 900 ja 1000 keV. Intensiteetti on normitettu vastaamaan levyn läpäissyttä elektronimäärää miljoonaa levyyn ammuttua elektronia kohti.



Kuva 9.23: Aksiaalinen röntgenspektri VENUS-ionilähteestä [48]. Spektrin loppupää ylettyy noin 1300 keV:n energialle.

## 9.6 Muita tuloksia

Röntgenmittaukset ECR-ionilähteistä on yleensä tehty aksiaalisesti ekstraktiopäädä eli kyseisissä mittauksissa näkyy plasmassa tapahtuvien törmäysten aiheuttama röntgenspektri, johon on usein sekoittunut plasmakammion injektio-pään seinään törmäävän plasman aiheuttamaa röntgensäteilyä. Suprajohtavin magneetin toteutetusta 28 GHz:n VENUS ECR-ionilähteestä Lawrence Berkelyyn kansallisessa laboratoriossa Kaliforniassa aksiaalisesti mitattu röntgenspektri [48] on esitetty kuvassa 9.23. Spektri on mitattu käyttäen 3 x 3 tuuman NaI-ilmaisinta, jonka tehokkuus on germanium-ilmaisinta parempi energiaresoluution kustannuksella. Spektriä ei kuitenkaan ole tehokkuuskalibroitu. Aksiaalisesti mitattu röntgenspektri ei vaimene matalilla energioilla kuten kuvan 9.11 JYFL 6,4 GHz ionilähteen spektri, sillä aksiaalisessa suunnassa plasma nähdään suoraan ilman välissä olevaa kammiomateriaalia. Aksiaalinen spektrikään ei välttämättä anna oikeaa kuvaa plasman elektronien energiajakaumasta, sillä siinä otetaan huomioon vain aksiaaliseen suuntaan lähtevä säteily. Plasmassa syntyy röntgensäteilyä oletettavasti selvästi vähemmän kuin plasmavuon törmätessä plasmakammion seinään ja erityisesti sen korkean energian osuus on pienempi. Sekä VENUS 28 GHz että JYFL 6,4 GHz röntgenspektrit vaimenevat korkeilla energioilla suurin piirtein eksponentiaalisesti. Eroavaisuuksia löytyy esimerkiksi logaritmisesti intensiteettiä tehdyn suorasovituksen kertoimista ja sovituksen muutoksista eri energioilla.

VENUS-ionilähteellä on mitattu epäsuorasti radiaalista röntgenjakaumaa tarkastelemalla kryostaattien lämpökuormaa mikroaaltolähtetimen eri tehoilla ja ionilähteen magneettikenttää muuttamalla [48]. Radiaalista magneettikenttää kasvatettaessa röntgensäteilyn havaittiin

## 9. TULOKSET

---

lisääntyvän. Riippuen käytetyistä ajoparametreista röntgensäteily aiheuttaa jopa seitsemän watin lämpökuorman kryostaateille [80]. Tällä hetkellä röntgensäteily rajoittaaakin mikroaaltotehoja ja magneettikenttäkonfiguraatiota, joita ionilähteellä voidaan käyttää. RF-tehon nostaminen vaikuttaa syntyvän röntgensäteilyn intensiteettiin ja RF-taajuuden nostaminen keskimääräiseen elektronien lämpötilaan. Plasmakammion magneettikentän  $B_{\min}/B_{\text{ECR}}$  suhteen nostaminen eli magneettikentän gradientin pienentäminen kentän resonanssialueella nostaa voimakkaasti röntgensäteilyn energiaa.

# Luku 10

## Päätelmät

Jatkuvasti lisääntyvä tarve yhä korkeamman varausasteen ja suuremman intensiteetin hiukkassuihkujen tuottamiseksi ajaa ECR-ionilähteiden kehitystä eteenpäin. Suprajohtavilla magneeteilla toteutetuissa laitteissa merkittäväksi ongelmaksi on muodostumassa kasvavan röntgensäteilyn määrä lämmitettäessä ECR-ionilähteen plasmaa yhä suuremmilla mikroaaltotehoilla, sillä kryostaattien jäädytyskapasiteetti ei enää riitä niihin absorboituvan röntgensäteilyenergian poistamiseen. Kryostaatteja lämmittävä röntgensäteily-spektrin osuus muodostuu korkeaenergiaisten ( $> 100$  keV) eli niin sanotun kuumen populaation elektronien törmätessä plasmakammion seinään. Spektrin häntä voi ulottua jopa parin megaelektronivoltin energialle. Näin korkean energian elektroneista ei ole merkittävää hyötyä ionisaatioprosesseissa, joten niistä on käytännössä vain haittaa. Jotta voitaisiin alkaa etsiä keinoja kuumen elektronipopulaation määrän suhteelliseen vähentämiseen ECR-ionilähteen toiminnan tehostamiseksi, on ensin selvitettävä millainen populaation energiajakauma on ja millaiset lämmitysprosessit plasmassa nostavat joidenkin elektronien energian näin korkealle.

Elektronien energiajakauman suora mittaaminen plasmakammioista on käytännössä mahdotonta sillä tarvittavat mittalaitteet eivät kestä plasmakammion olosuhteita. Ongelman statistisen luonteen vuoksi myös analyttinen lähestymistapa on työläs. Tässä tutkielmassa plasmakammion seinään törmäävien elektronien energiajakaumaa selvitettiin Monte Carlo -simulaation avulla ja sovittamalla saadut tulokset mittauksiin. Simulaatiossa käytetty ohjelmisto, Geant4, osoittautui toimivaksi elektronien ja fotonien simulointiin. Simulointienergia rajoittui alhaalta 200 kiloelektronivolttiin suoritinaikavaatimusten vuoksi. Energioilla 200-1000 keV simuloitujen plasmakammion seinään törmäävien elektronien muodostama, lähinnä jarrutussäteilystä koostuva, röntgensäteily-spektri saatiin sovitettua hyvin mittaustuloksiin siitä huolimatta, että mittauksissa käytetyn ilmaisimen ilmaisinvaste jouduttiin arvioimaan jälkikäteen.

Germanium-ilmaisimen ilmaisinvaste simuloitiin rakentamalla ilmaisimesta yksinkertais-

## 10. PÄÄTELMÄT

---

tettu malli, jonka läpi yksittäiset röntgenspektrit ajettiin ja tutkittiin minkä osuuden röntgenenergiasta ilmaisin näkee. Ilmaisimen vaikutuksesta jatkuvan spektrin huippu siirtyy näennäisesti matalammille energioille ja sen muoto muuttuu merkittävästi. Mitä korkeammalle energialle spektri ulottuu sitä enemmän sen muoto muuttuu.

Tutkielmassa saatiin selville plasmakammion seinään törmäävien ja röntgensäteilyä tuottavien elektronien energiajakauma. Jakauman matalan energian päässä (200-350 keV) näyttäisi olevan lokaali maksimi, mutta datapisteitä ei ole riittävästi varman analyysin tekemiseksi. Noin 400 keV:n energian yläpuolella elektronien määrä vähenee eksponentiaalisesti. Kaksi erilaista muotoa käyrässä saattaisi tarkoittaa kahden korkean energian elektronipopulaation summautumista, joista näissä tuloksissa nähdään toinen lähes kokonaan ja toisesta vain häntä. Tähän viittaa myös alkuperäisessä röntgenmittausdatassa näkyvä röntgenspektrin kulmakertoimen pieni muutos noin 260 keV:n energialla.

Simulaatioissa tallennettiin jokaisen ionilähteen ulkopuolelle pääsevän röntgenfotonin paikka, lentosuunta ja energia, joten saatua simulaatiodataa voitiin analysoida monelta eri kantilta. Analysointivaiheessa huomattiin muun muassa, että ionilähteen ulkopuolelle pääsevä säteily keskittyy erittäin voimakkaasti napojen välittömään läheisyyteen.

Tulevaisuudessa tämän tutkielman tulokset voivat toimia lähtökohtana lisätutkimuksille, joiden avulla pyritään ymmärtämään plasman lämmitysprosesseja paremmin. Tavoitteena on selvittää voidaanko kuumen elektronipopulaation suhteellista osuutta ratkaisevasti pienentää esimerkiksi erilaisilla magneettikenttä- tai plasmakammiokonfiguraatioilla ECR-ionilähteen toiminnan kärsimättä. Toiminnan tehostaminen mahdollistaa lopulta entistäkin korkeampien varausasteiden ja intensiteettien saamisen ECR-ionilähteestä tutkimuksen alati kasvaviin tarpeisiin.

# Kirjallisuutta

- [1] D. Leitner, J. Y. Benitez, T. J. Galloway, T. J. Loew, C. M. Lyneis, and D. S. Todd, Progress and perspective for high frequency, high performance superconducting ECR ion sources, in *Proceedings of Cyclotrons 07 (preprint)*, 2007.
- [2] C. Barúe, M. Lamoureux, P. Briand, A. Girard, and G. Melin, *J. Appl. Phys.* 76(5), 2662 (1994).
- [3] M. Hohl, P. Wurz, and P. Bochler, *Plasma Sources Sci. Technol.* 14, 692 (2005).
- [4] Geant4 Collaboration, Geant4 (GEometry ANd Tracking) simulation toolkit, <http://geant4.cern.ch/>.
- [5] H. D. Young and R. A. Freedman, *University Physics with Modern Physics*, Pearson Addison-Wesley, international 11th edition, 2004.
- [6] L. de Broglie, *Recherches sur la théorie des quanta (Researches on the quantum theory)*, PhD thesis, University of Paris, 1924.
- [7] H. C. Ohanian, *Physics*, W. W. Norton and Company, Inc., expanded second edition, 1989.
- [8] D. H. Paul, Lighten up on ultrapure applications, *Water Technology Magazine*, <http://www.watertechonline.com/article.asp?IndexID=5180503>, (May), 1995.
- [9] W. C. Röntgen, *Nature* 53, 274 (1896).
- [10] M. Brandl, The photoelectric effect, Project PHYSNET (MISN-0-213), 2001.
- [11] A. Einstein, *J. Ann. Phys.* 17, 891 (1905).
- [12] J. Larmor, *Philos. Trans. Roy. Soc. London* 190, 205 (1897).
- [13] S. J. Humphries, *Principles of Charged Particle Acceleration*, John Wiley & Sons, New York, 1999, ISBN 0-471-87878-2.

- [14] M. Alonso and E. J. Finn, *Fundamental University Physics, Volume II, Fields and Waves*, Addison-Wesley, world student series edition, 1969.
- [15] J. Schwinger, *Phys. Rev.* 75(12), 1912 (1949).
- [16] H. Winick and S. Doniach, *Synchrotron Radiation Research*, Plenum Press, 1980.
- [17] R. A. Alberty, *Physical Chemistry*, Wiley, New York, 6th edition, 1983.
- [18] A. H. Compton, *Phys. Rev.* 21, 483 (1923).
- [19] M. Brandl, The Compton effect, Project PHYSNET (MISN-0-219), 2000.
- [20] G. F. Knoll, *Radiation detection and measurement*, John Wiley & Sons, New York, 1989.
- [21] R. D. Evans, *The Atomic Nucleus*, McGraw-Hill, New York, 1955.
- [22] S. M. Seltzer, *Radiat. Res.* 136(2), 147 (1993).
- [23] J. H. Hubbell and S. M. Seltzer, Tables of X-Ray mass attenuation coefficients and mass energy-absorption coefficients, Available: <http://physics.nist.gov/xaamdi> [2007, November 19], 2004, version 1.4.
- [24] J. Wittke, Electron microprobe techniques, lecture notes, 2003, Available: <http://www4.nau.edu/microanalysis/Microprobe/Course%20Overview.html> [2008, March 28].
- [25] S. A. E. Johansson, J. L. Campbell, and K. G. Malmqvist, *Particle-induced X-ray emission spectrometry (PIXE)*, John Wiley & Sons, 1995.
- [26] N. A. Dyson, *Phys. Med. Biol.* 20(1), 1 (1975).
- [27] H. G. J. Moseley, *Philosophical Magazine* 26, 1024 (1913).
- [28] J. Kantele, *Handbook of Nuclear Spectrometry*, Academic Press, 1995.
- [29] H. W. Lewis, *Phys. Rev.* 78(5), 526 (1950).
- [30] G. Z. Molière, *Z. Naturforsch* 3a, 78 (1948).
- [31] S. Goudsmit and J. L. Saunderson, *Phys. Rev.* 57, 24 (1940).
- [32] J. M. Fernández-Varea, R. Mayol, J. Baró, and F. Salvat, *NIM B73*, 447 (1993).
- [33] Geant4 Collaboration, Geant4 physics reference manual, Available: <http://geant4.web.cern.ch/geant4/UserDocumentation/UsersGuides/PhysicsReferenceManual/html/index.html>, Geant4 9.0 (29 June, 2007).



- [34] M. J. Berger, J. H. Hubbell, S. M. Seltzer, J. Chang, J. S. Coursey, R. Sukumar, and D. S. Zucker, Photon cross sections database, Available: <http://physics.nist.gov/xcom> [2007, November 19], 2005, version 1.3.
- [35] Y.-K. Kim et al., Electron-impact ionization cross section for ionization and excitation database, Available: <http://physics.nist.gov/ionxsec> [2007, November 19], 2004, version 3.0.
- [36] V. Lazurik, V. Moskvina, and T. Tabata, *IEEE Trans. Nucl. Sci.* 45(3), 626 (1998).
- [37] A. Akar, H. Gümüŝ, and N. T. Okumuŝođlu, *Appl. Radiat. Isot.* 64(5), 543 (2006).
- [38] C.-J. Tung and C.-M. Kwei, *Chin. J. Phys.* 17(1), 1 (1979).
- [39] H. J. de Blank, *Fusion Science and Technology* 45(2T), 47 (2004).
- [40] R. Geller, *Electron Cyclotron Resonance Ion Sources and ECR plasmas*, Institute of Physics Publishing, Bristol, Philadelphia, 1996.
- [41] R. Geller, F. Bourg, P. Briand, J. Debernardi, M. Delaunay, B. Jacquot, P. Ludwig, R. Pauthenet, M. Pontonnier, and P. Sortais, in *Proceedings of the International Conference on ECR Ion Sources and their Applications*, page 1, East Lansing, USA, 1987, (unpublished).
- [42] O. Tarvainen, *Studies of Electron Cyclotron Resonance Ion Source Plasma Physics*, PhD thesis, University of Jyväskylä, 2005.
- [43] G. Douysset, H. Khodja, A. Girard, and J. P. Briand, *Phys. Rev. E* 61, 3015 (2000).
- [44] T. Nakagawa, *Jpn. J. Appl. Phys.* 30(5B), L930 (1991).
- [45] T. Ropponen, ECR-ionilähteiden plasmapotentialiaali ja ambipolaarinen diffuusio, Master's thesis, Jyväskylän yliopisto, 2005.
- [46] H. Koivisto, P. Heikkinen, V. Hänninen, A. Lassila, H. Leinonen, V. Nieminen, J. Pakarinen, K. Ranttila, J. Ärje, and E. Liukkonen, *Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. B* 174, 379 (2001).
- [47] Säteilyturvakeskus, <http://www.stuk.fi/>.
- [48] C. Lyneis, D. Leitner, D. Todd, S. Virostek, and T. Loew, *Rev. Sci. Instrum.* 77(03A342) (2006).
- [49] H. Koivisto, M. Moisio, V. Nieminen, P. Suominen, and E. Liukkonen, *Nukleonika* 48, supplement 2, S81 (2003).
- [50] P. Suominen, *Modified Multipole Structure for Electron Cyclotron Resonance Ion Sources*, PhD thesis, University of Jyväskylä, 2006.

- [51] S. Agostinelli et al., *Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. A* 506, 250 (2003).
- [52] J. Allison et al., *IEEE Trans. Nucl. Sci.* 53(1), 270 (2006).
- [53] K. Binder, *Monte Carlo simulation in statistical physics: an introduction*, Springer, New York, 1988.
- [54] G. Santina, R. Nartallo, P. Nieminen, H. Evans, F. Lei, P. R. Truscott, D. Heynderickx, B. Quaghebeur, C. S. Dyer, and E. Daly, Geant4 in the space environment: Tools and applications, in *Nuclear Science Symposium Conference Record*, volume 3, pages 1522–1526, IEEE, 2003.
- [55] T. Ersmark, *Geant4 Monte Carlo Simulations of the International Space Station Radiation Environment*, PhD thesis, Kungl Tekniska Högskolan, Stockholm, Sweden, 2006.
- [56] E. I. Novikova, E. A. Wulf, B. F. Philips, J. D. Kurfess, A. Zoglauer, G. Weidenspointner, and R. M. Kippen, Simulations of a Si-based advanced Compton telescope, in *Nuclear Science Symposium Conference Record*, volume 2, pages 985–989, IEEE, 2005.
- [57] L. Archambault et al., Overview of Geant4 applications in medical physics, in *Nuclear Science Symposium Conference Record*, volume 3, pages 1743–1745, IEEE, 2003.
- [58] T. J. Roberts and D. M. Kaplan, G4beamline simulation program for matter-dominated beamlines, in *Proceedings of PAC07*, Albuquerque, New Mexico, USA, 2007.
- [59] G. Barrand et al., AIDA – abstract interfaces for data analysis, Available: <http://aida.freehep.org/> [2007, December 4], 2007.
- [60] ATLAS Collaboration, The ATLAS experiment, <http://atlas.ch/>.
- [61] K. Amako et al., *IEEE Trans. Nucl. Sci.* 52(4), 910 (2005).
- [62] S. Chauvie et al., Geant4 low energy electromagnetic physics, in *Nuclear Science Symposium Conference Record*, pages 1881–1885, IEEE, 2004.
- [63] F. Salvat, J. M. Fernández-Varea, and J. Sempau, PENELOPE-2006: A code system for Monte Carlo simulation of electron and photon transport, in *Workshop Proceedings, Barcelona, Spain, 4-7 July*, Nuclear Energy Agency, OECD, 2006, NEA No. 6222, ISBN 92-64-02301-1.
- [64] A. Mantero, B. Mascialino, M. G. Pia, M. Saliceti, and P. Nieminen, Geant4 atomic relaxation models, in *The Monte Carlo Method: Versatility Unbounded in a Dynamic Computing World*, Chattanooga, Tennessee, 2005, American Nuclear Society, on CD-ROM.

- [65] R. M. Kippen, GEANT4 Low-Energy Compton Scattering Package, <http://public.lanl.gov/mkippen/actsim/g4lecs/>.
- [66] K. Amako et al., Validation of Geant4 electromagnetic physics versus protocol data, in *IEEE Nuclear Science Symposium Conference, Rome (Italy)*, pages 2115–2119, 2004.
- [67] L. Urban, A model of multiple scattering in Geant4, in *Proceedings of MC2005*, Chattanooga, Tennessee, 2005, American Nuclear Society, on CD-ROM. CERN-OPEN-077.
- [68] D. E. Cullen, J. H. Hubbell, and L. Kissel, EPDL97: the evaluated photon data library, '97 version, UCRL-50400, Vol. 6, Rev. 5, 1997.
- [69] D. E. Cullen and S. M. Seltzer, Tables and graphs of electron-interaction cross sections from 10 eV to 100 GeV derived from the llnl evaluated electron data library (EEDL), UCRL-50400, Vol. 31, 1997.
- [70] S. T. Perkins, D. E. Cullen, M. H. Chen, J. H. Hubbell, J. Rathkopf, and J. Scofield, Tables and graphs of atomic subshell and relaxation data derived from the LLNL evaluated atomic data library (EADL), Z=1-100, UCRL-50400, Vol. 30, 1997.
- [71] R. M. Kippen, *New Astron. Rev.* 48, 221 (2004).
- [72] O. Kadri, V. N. Ivanchenko, F. Gharbi, and A. Trabelsi, *Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. B* 258(2), 381 (2007).
- [73] S. Chauvie, S. Guatelli, B. Mascialino, L. Pandola, M. G. Pia, P. Rodrigues, and A. Trindade, Validation of Geant4 bremsstrahlung models: first results, in *Nuclear Science Symposium Conference Record*, pages 1511–1515, IEEE, 2006.
- [74] F. James, *Comp. Phys. Comm.* 60(3), 329 (1990).
- [75] M. Matsumoto and T. Nishimura, *ACM Transactions on Modeling and Computer Simulation* 8(1), 3 (1998).
- [76] P. Suominen, private communication, 2007.
- [77] T. Ropponen, private communication, 2007.
- [78] M. Nyman, private communication, 2008.
- [79] B. Herskind, *Nucl. Phys. A* 447 (1986).
- [80] D. Leitner, J. Y. Benitez, C. M. Lyneis, D. S. Todd, T. Ropponen, J. Ropponen, H. Koivisto, and S. Gammino, *Rev. Sci. Instrum.* 79(033302) (2008).