

Univerzita Palackého v Olomouci

Přírodovědecká fakulta

Katedra experimentální fyziky

Aplikovaná fyzika

Diplomová práce

**Fokuzované záření gama v Mössbauerově  
spektroskopii: Od simulace k aplikaci**

**Bc. Jan Kočiščák**



**Vedoucí práce: Mgr. Petr Novák, Ph.D.**

## **Prohlášení**

Prohlašuji, že jsem předloženou práci vypracoval samostatně pod vedením Mgr. Petra Nováka, Ph.D. a že jsem užil zdrojů, které cituji a uvádím v seznamu použitých zdrojů.

V Olomouci dne: .....

Podpis autora: .....

## **Poděkování**

*Děkuji vedoucímu práce Mgr. Petru Novákovi, Ph.D., za konzultace, rady a podněty jak při tvorbě diplomové práce, tak v průběhu celého studia. Děkuji také Mgr. Vítu Procházkovi, Ph.D. za četné odborné konzultace v průběhu měření. Dík patří také Mgr. Davidu Smrčkovi, za pomoc s matematickými výpočty v programu Mathematica.*

*Rád bych také poděkoval své rodině za vytvoření vhodných studijních podmínek, především své ženě Magdaleně a mamince Petře.*

## Bibliografická identifikace

Jméno a příjmení autora:	Bc. Jan Kočiščák
Název práce:	Fokusované záření gama v Mössbauerově spektroskopii: Od simulace k aplikaci
Typ práce:	Diplomová
Pracoviště:	Katedra experimentální fyziky, UP v Olomouci
Vedoucí práce:	Mgr. Petr Novák, Ph.D.
Rok obhajoby práce:	2019
Abstrakt:	<p>Cílem práce je vyvinout výpočetní simulaci, která dokáže simulovat distribuci záření skrze Mössbauerův mikroskop. Poté teoreticky vypočtené hodnoty porovnat s experimentálně naměřenými hodnotami a charakterizovat tak jednotlivé komponenty Mössbauerova mikroskopu.</p> <p>Dílčím cílem práce je určit účinnost fokusačního prvku MCX, následně pak charakterizovat tvar stopy svazku v ohnisku.</p> <p>Dále se práce věnuje srovnávání měřicí techniky fokuse a měřicí techniky stínění.</p> <p>Jedním z hlavních cílů je pomocí výpočetní simulace optimalizovat prostorové uspořádání Mössbauerova mikroskopu.</p>
Klíčová slova:	Mössbauerův spektrometr, fokuse gama záření
Počet stran:	52
Počet příloh:	2
Jazyk:	Český

## Bibliographical identification

Author: Bc. Jan Kočišćák  
Title: Focused Gamma Radiation in Mössbauer Spectroscopy: From Simulation to Application

Type of thesis: Master  
Department: Department of Experimental Physics, UP in Olomouc  
Supervisor: Mgr. Petr Novák, Ph.D.  
The year of presentation: 2019

Abstract: The aim of this thesis is to develop a computational simulation which can simulate transmission through Mössbauer microscope. Then compare the theoretically calculated values with experimentally measured values and characterize individual components of the Mössbauer microscope.  
The partial aim of the work is to determine the effectiveness of the focusing element MCX, then to characterize the shape of the beam in the focus. Furthermore, the work is devoted to comparing focusing measurement techniques and shielding measuring techniques (using pinhole).  
One of the main goals is to optimize the spatial arrangement of the Mössbauer microscope using computational simulation.

Keywords: Mössbauer spectrometer, polycapillary X-ray focusing  
Number of pages: 52  
Number of appendices: 2  
Language: Czech

## Obsah

1. Úvod.....	8
2. Teoretická část .....	9
2.1. Mössbauerova spektroskopie.....	9
2.2. Mössbauerův jev.....	9
2.3. Pozorování Mössbauerova jevu.....	9
2.4. Fokusace gama záření.....	10
2.4.1. Princip fokusace gama záření .....	10
2.4.2. Absorpce gama záření v prvku MCX .....	11
2.4.3. Koeficient účinnosti fokusace.....	11
2.5. Aplikace fokusace.....	11
2.5.1. Kompaktní detektor kovu na bázi rentgenové fluorescence .....	12
2.5.2. Vysokotlaká rentgenová absorpční spektroskopie (High pressure XAFS ).....	12
2.5.3. Studium plazmatu .....	13
3. Výpočet efektivní aktivity zářiče .....	14
3.1. Úvod do problematiky .....	14
3.2. Aproximace bodového zářiče .....	14
3.3. Aproximace plochy kulového vrchlíku .....	14
3.4. Úhlová podmínka 2 mrad .....	16
3.5. Přejít na plošný zářič .....	17
3.6. Výpočet absorpce v materiálu .....	17
3.7. Výpočet aktivity dle rozpadového zákona.....	19
3.8. Korekce na rozpadové schéma .....	20
3.9. Výpočet efektivní aktivity s korekčními koeficienty .....	20
4. Simulace efektivní aktivity zářiče v programovacím prostředí LabVIEW.....	22
4.1. Motivace .....	22
4.2. Definování plochy zářiče a vstupní apertury.....	22
4.3. Výpočet dopadající aktivity do apertury včetně úhlové podmínky.....	24
4.4. Zahrnutí korekčních koeficientů.....	27
5. Ověření správnosti výpočtů pomocí experimentu .....	28
5.1. Experimentální sestava .....	28
5.2. Zpracování a vyhodnocení naměřených výsledků.....	28
6. Aplikace výpočetní simulace .....	31
6.1. Určení účinnosti plynového toroidního detektoru.....	31
6.2. Určení účinnosti scintilačního detektoru (NaI:TI).....	33

6.3.	Určení účinnosti fokusačního prvku MCX.....	35
7.	Charakterizace tvaru fokusovaného svazku.....	37
7.1.	Motivace .....	37
7.2.	Přímé měření stopy fokusovaného svazku .....	37
7.3.	Nepřímé měření stopy fokusovaného svazku pomocí vhodného vzorku .....	37
7.4.	Naměřené hodnoty.....	38
7.5.	Vyhodnocení tvaru svazku .....	39
8.	Porovnání konfigurací fokusace a stínění .....	41
8.1.	Simulace .....	41
8.2.	Vyhodnocení výsledků simulace .....	42
8.3.	Měření MS spekter v konfiguracích fokusace a stínění .....	43
8.4.	Porovnání naměřených spekter.....	45
9.	Hledání optimální vzdálenosti zářiče a fokusačního prvku .....	46
9.1.	Motivace .....	46
9.2.	Faktory ovlivňující SNR.....	46
9.3.	Průběh SNR .....	46
9.4.	Vyhodnocení výsledku .....	47
10.	Závěr.....	48
11.	Seznam použité literatury .....	49
	Příloha 1 .....	51
	Příloha 2 .....	52

# 1. Úvod

Předkládaná práce úzce souvisí s oborem Mössbauerovy spektroskopie, která je založena na bezodrazové rezonanční absorpci a emisí gama záření. Diplomová práce navazuje na bakalářskou práci, která se věnovala implementaci fokusačního prvku MCX do stávajícího Mössbauerova spektrometru [1].

Diplomová práce si klade za cíl vyvinout výpočetní simulaci, která dokáže simulovat distribuci záření skrze Mössbauerův mikroskop. Simulace umožní předpovídat, jakou část vyzářené aktivity dopadne do dané vstupní apertury detektoru a bude ji tedy možné detekovat.

S pomocí této simulace bude možné následně experimentálně změřit účinnost detektoru použitého ve stávajícím Mössbauerově mikroskopu a následně určit účinnost samotného fokusačního prvku MCX, která je doposud neznámá.

Bude-li známa účinnost fokusačního prvku, bude možné využít výpočetní simulaci k určení optimální vzdálenosti fokusačního prvku od zářiče, a tím optimalizovat stávající Mössbauerův mikroskop.

Dalším cílem práce je charakterizovat tvar stopy svazku v ohnisku fokusačního prvku.

Získání hodnot účinnosti fokusačního prvku a tvaru stopy v jeho ohnisku umožní následně srovnat měření s pomocí fokusačního prvku s měřením bez fokusace pouze s pomocí stínění (tzv. pinhole).

Aby byl eliminován výskyt chyby v teoretických výpočtech výpočetní simulace, bude každé teoretické měření podloženo experimentálním měřením a výsledky obou budou srovnávány.



## 2. Teoretická část

### 2.1. Mössbauerova spektroskopie

Mössbauerova spektroskopie poskytuje cenné informace v oblasti materiálového výzkumu. Je založena na tzv. Mössbauerově jevu, který byl objeven Rudolfem Mössbauerem v roce 1957 [2]. Jedná se o tzv. bezdrazovou rezonanční emisi a absorpci fotonů. Dopadající foton interaguje s jádrem měřeného vzorku. Jádro je vázáno v krystalické mříži a proto hybnost, kterou předává fotonu při emisi, je odebrána celé krystalické mříži. V mříži je však vázáno obrovské množství jader, proto má mnohem větší hmotnost oproti interagujícímu fotonu. Energie zpětného rázu při interakci je tak téměř nulová, proto se jev nazývá bezdrazovou rezonanční emisí.

### 2.2. Mössbauerův jev

Zásadní předností této techniky je extrémně vysoká relativní přesnost určení energie elektromagnetického záření. Při energii jaderného přechodu  $\approx 10^2$  keV je možné při šířce spektrální čáry přechodu  $10^{-8}$  eV určit energii přechodu s relativní přesností řádově  $10^{-13}$  [3].

Nevýhodou této metody je omezená možnost použití, neboť pro daný typ vzorku je nutné použít odpovídající zářič. Ten musí obsahovat stejný nuklid jako vzorek. V Mössbauerově spektroskopii se využívá především jader Fe. Ve speciálních případech se dále také využívá jader Eu, Sn, Au, Ge a Sm [4], [5].

### 2.3. Pozorování Mössbauerova jevu

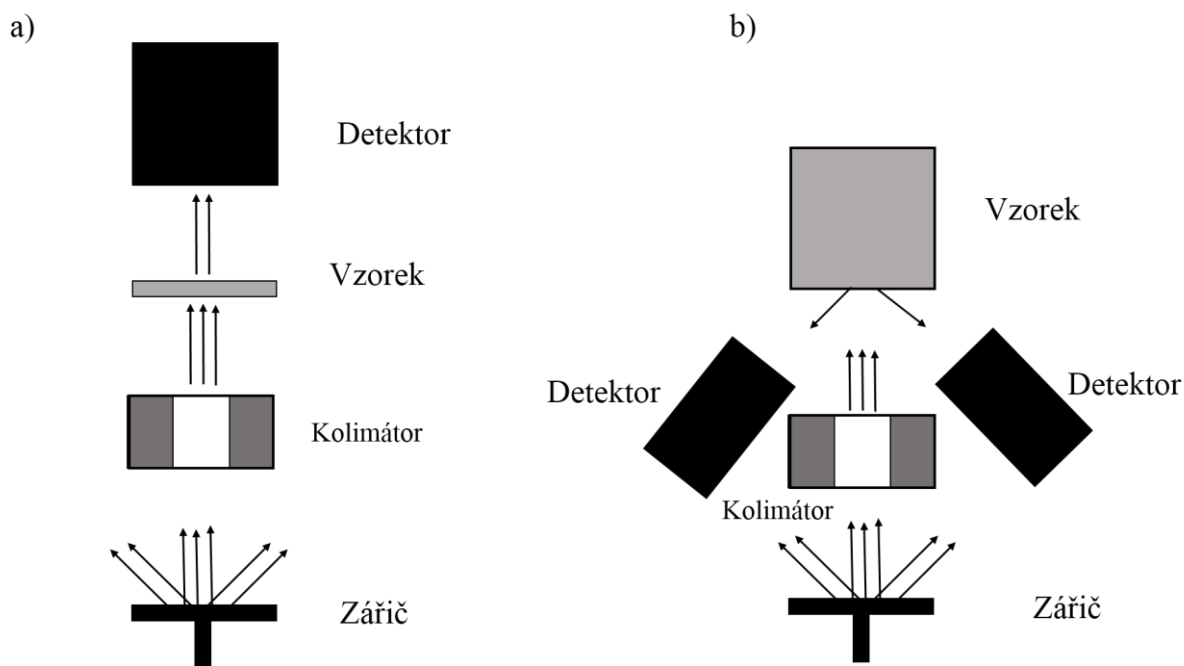
Aby bylo možné experimentálně pozorovat Mössbauerův jev, je nutné modulovat energii fotonu interagujícího s jádrem. Změna energie fotonu musí být velmi malá. K modulaci energie se využívá Dopplerova jevu, kdy je zářič nebo vzorek umístěn na pohybovém zařízení.

Pro posunutí emisní čáry zářiče o  $\Delta E$  platí vztah:

$$\Delta E = E_p \frac{v_p}{c} \cos \alpha, \quad (1)$$

kde  $E_p$  je energie jaderného přechodu,  $c$  rychlost světla,  $v_p$  rychlost pohybu zářiče a  $\alpha$  je úhel mezi směrem rychlosti pohybu a směrem emitovaných fotonů.

Spektrometry je možné rozdělit dle geometrického uspořádání. Nejčastěji využívaným je transmisní geometrické uspořádání, viz obrázek 1a). Méně využívaným uspořádáním je geometrie zpětného rozptylu, viz obrázek 1b).



Obrázek 1: a) Transmisní Mössbauerův spektrometr b) Mössbauerův spektrometr v geometrii zpětného rozptylu.

K měření v rámci diplomové práce byl využíván Mössbauerův mikroskop, což je spektrometr s fokusačním prvkem v transmisním geometrickém uspořádání [1]. Celý spektrometr je založen na koncepci virtuální instrumentace [6].

## 2.4. Fokusace gama záření

### 2.4.1. Princip fokusace gama záření

Fokusace gama záření je realizováno pomocí fokusačního prvku MCX. Jedná se o komponentu, která je složena z velkého množství tenkých skleněných kanálků – kapilár. V závislosti na výsledné charakteristice fokusovaného záření se prvek skládá z několika desítek tisíc až několika miliónů kapilár [7], [8]. Záření se šíří tenkými trubičkami pomocí série mnoha totálních odrazů. Kapiláry jsou mírně zakřiveny, tím je docíleno sbíhavosti výstupního svazku gama záření. Celý princip šíření se dá připodobnit k šíření optického záření optickým vláknem.

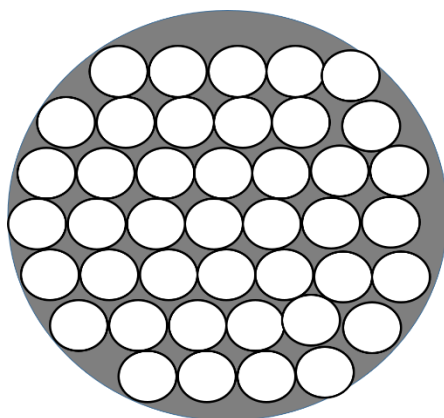
Významným rozdílem oproti optickému záření je míra absorpce záření v závislosti na úhlu, který svírá dopadající záření s vstupní aperturou fokusačního prvku. Rozdíl vystihuje tzv. mezní úhel  $\theta_c$ , což je úhel mezi směrem šíření fotonu a stěnou kapiláry. Platí pro něj vztah:

$$\theta_c[\text{mrad}] = \frac{30}{\text{energie}[\text{keV}]} \quad (2)$$

Fotony, které dopadnou pod úhlem větším, než je mezní úhel, se již neodráží od stěny kapiláry, ale jsou absorbovány. Energie gama záření je mnohonásobně vyšší než energie optického záření, proto je mezní úhel mnohem nižší. Pro energii 14 keV je roven mezní úhel zhruba 2 mrad. Je tedy nutné zajistit, aby záření dopadalo prakticky kolmo na aperturu fokusačního prvku. V případě, že je úhel záření větší než kritický, dochází k prudkému zvýšení absorpce [1].

### 2.4.2. Absorpce gama záření v prvku MCX

Jedním ze zásadních parametrů, popisujících vlastnosti fokusačního prvku MCX, je propustnost gama záření. Ta popisuje, s jakou pravděpodobností dopadnuvší foton prvkem projde. Znalost tohoto parametru je pro konstrukci pokročilých experimentálních sestav klíčová. Výrobce udává, že pravděpodobnost průchodu vláknem pro záření o energii 14 keV je více než 60%, viz Příloha 1. Prvek MCX je ale složen z mnoha takových vláken. To způsobuje, že ne celá vstupní apertura je vyplněna vlákny. Na vstupní apertuře se tedy nacházejí místa, která nejsou vyplněna vlákny a při dopadu záření na tato místa je záření prvkem absorbováno. Tuto situaci znázorňuje obrázek 2.



Obrázek 2: Ilustrativní znázornění kapilár v prvku MCX.

### 2.4.3. Koeficient účinnosti fokusace

Je výhodné charakterizovat pravděpodobnost průchodu prvkem MCX jako celkem. Byl proto zaveden parametr tzv. účinnost fokusace  $\mu_f$ , který je definován vztahem:

$$\mu_f = \frac{N_{out}}{N_{in}}, \quad (3)$$

kde  $N_{out}$  vyjadřuje počet fotonů prošlých výstupní aperturou prvku MCX a  $N_{in}$  počet fotonů dopadajících na vstupní aperturu MCX. Někdy se pro veličinu  $\mu_f$  užívá také název transmitance. Problematika počtu dopadajících fotonů na aperturu bude podrobněji rozebrána v kapitole 3.

## 2.5. Aplikace fokusace

První pokusy aplikovat fokusované gama záření do experimentálních technik se začaly objevovat kolem roku 1990 [7]. Od té doby se stále objevují nové možnosti použití fokusace. V dnešní době je fokusace záření využívána snad ve všech typech analytických technik, při kterých se využívá rentgenové záření. V následujícím textu je rozebráno několik příkladů aplikace fokusovaného záření.

### 2.5.1. Kompaktní detektor kovu na bázi rentgenové fluorescence

Konvenční měřicí systémy využívající rentgenovou fluorescenci umožňují detekovat kovy ve vzduchu, vodě či v půdě. Tato měření jsou však extrémně náročná, neboť kovy jsou ve vzorcích často pouze ve velmi malých koncentracích. Jedná se proto o přístroje velmi drahé a to jak na pořízení, tak na provoz a průběžnou údržbu. V mnoha případech je navíc nutné pro potřeby rentgenové fluorescence měřený vzorek speciálně upravovat. Inovaci představuje implementace fokusačního prvku MCX do měřicího systému [9]. Díky fokusaci záření je možné zvýšit poměr signálu k šumu, ve výsledku je tedy možné zvýšit citlivost měřicího systému. Hustota rentgenového toku je v místě ohniska fokusačního prvku vyšší typicky o 3 řády oproti použití stínění (kolimátor - pinhole). Výrazné zvýšení toku rentgenového záření v ohnisku fokusačního prvku umožňuje používat podstatně slabší zdroj rentgenového záření. Proto je možné konstruovat celý detekční systém lehčí a menší. To umožňuje také detekční systém přemísťovat a využívat jej pro měření v terénu. Další výhodou této aplikace je možnost měnit velikost rentgenového svazku pouhou změnou vzdálenosti mezi vzorkem a fokusačním prvkem. Například pro studium znečištění vzduchu je výhodné umístit vzorek přímo do ohniska, aby bylo možné dosáhnout maximální hustoty toku. Pro vzorky ve vodě nebo v půdě je ale vhodné vzorek posunout mimo rovinu ohniska a zvětšit tím měřenou oblast. Tímto postupem je možné průměrovat heterogenitu vzorku. Zvětšení měřené oblasti zapříčiňuje snížení hustoty toku rentgenového záření. Možnost proporcionální změny velikosti měřené oblasti však umožňuje nalezení ideálního kompromisu mezi velikostí zorného pole a hustotou toku.

### 2.5.2. Vysokotlaká rentgenová absorpční spektroskopie (High pressure XAFS )

Rentgenová absorpční spektroskopie za vysokých tlaků poskytuje cenné informace o lokální struktuře atomů vystavených extrémně vysokým tlakům. Tato experimentálně náročná technika se velmi dlouhou dobu potýkala s celou řadou problémů, a to při měření za nízkých energií, především do 10 keV. To je ale právě oblast energií, která je z hlediska rentgenové absorpční spektroskopie velmi zajímavá. Vysokotlaká cela, která zajišťuje vystavení vzorku extrémně vysokým tlakům, mechanicky působí na studovaný vzorek pomocí diamantového hrotu. Ten však v oblasti energií do 10 keV záření silně absorbuje a do měřeného spektra zanáší silný šum, který prakticky znemožňuje měření na takto nízkých energiích. Navíc rentgenové záření na diamantovém hrotu difraguje, což dále komplikuje vyhodnocení obdržených spekter. S vývojem velmi výkonných zdrojů záření, které představovaly synchrotrony třetí generace, se podařilo tyto problémy překlenout. Avšak jednalo se o velmi drahé měření s mnoha přísnými podmínkami na měřené vzorky.

Významným posunem představovala implementace fokusačního elementu do experimentální sestavy [10]. Do svazku záření byl umístěn fokusační element o vstupní apertuře 3,16 mm s ohniskem o průměru 77  $\mu\text{m}$  lokalizovaným 24 mm za fokusačním elementem. Transmitance fokusačního elementu byla určena jako 40 % pro energie 9 keV. Užitím fokusačního elementu byla zvýšena intenzita záření na vzorku více než desetinásobně. Vyšší tok záření a zvýšená divergence svazku výrazně oslabila vliv difrakce na diamantovém hrotu. Zavedení fokusačního prvku do vysokotlaké rentgenové absorpční spektroskopie umožnilo rozšířit spektrum měřitelných energií pomocí této techniky.

### 2.5.3. Studium plazmatu

Plazma, vytvořené v tokamaku emituje rentgenové záření o energiích 0,1 keV – 15 keV. Protože záření obsahuje informace o stabilitě, tvaru a nečistotách v plazmatu, je žádoucí emitované záření detekovat [11] [12]. Vysoká teplota plazmatu však znemožňuje umístění detektoru blízko plazmatu tak, aby jeden konkrétní detektor mohl měřit jednu konkrétní část plazmatu. Doposud bylo možné umisťovat detektor pouze do takové vzdálenosti od plazmatu, že zachycoval emitované záření z celého objemu plazmatu.

Použitím fokusačního elementu je možné detekovat záření vycházející pouze z jedné konkrétní části plazmatu a přitom umístit citlivý detektor v bezpečné vzdálenosti od horkého plazmatu. Nevýhodou fokusace gama záření bývá často značný útlum záření při průchodu fokusačním prvkem. V případě studia plazmatu je tato nevýhoda eliminována extrémní hustotou toku záření. Udává se, že i při fokusačním útlumu 99,9 % je možné analyzovat informaci přicházející do detektoru.

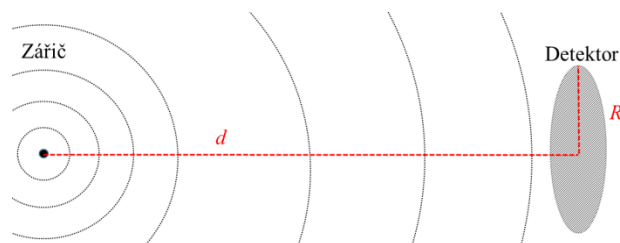
### 3. Výpočet efektivní aktivity zářiče

#### 3.1. Úvod do problematiky

Každá měřicí technika, využívající radioaktivního zářiče, je silně ovlivněna použitým zdrojem záření, tedy typem radioaktivního zářiče. V Mössbauerově spektroskopii se velmi často užívá zářič  $^{57}\text{Co}$ . Typ použitého zářiče však není jediným parametrem ovlivňujícím měření. Měření, především tedy dobu měření, zásadně ovlivňuje aktivita zářiče, tedy počet vyzářených fotonů za jednotku času. Radioaktivní rozpad však není deterministický proces a proto může být foton vyzářen kterýmkoliv směrem. Pro měření jsou však důležité pouze ty fotony, které míří do oblasti měřeného vzorku či detektoru (dále bude psán pouze detektor). Parametr, který popisuje aktivitu vztaženou na definovanou plochu v prostoru, je možné označit jako efektivní aktivita  $A_{ef}$ .

#### 3.2. Aproximace bodového zářiče

V prvním přiblížení mějme bodový zářič a detektor umístěn ve velké vzdálenosti od zářiče, viz obr. 3.



Obrázek 3: Schematické znázornění pro případ bodový zářič a vzdálený detektor.

V tomto případě stačí spočítat poměr plochy, do které zářič může vyzářit a plochy detektoru. Efektivní aktivitu lze pak vypočítat dle vztahu:

$$A_{ef} = A \frac{S_{det}}{\Omega d^2} = A \frac{\pi R^2}{4\pi d^2} = A \frac{R^2}{4 d^2} \quad (4)$$

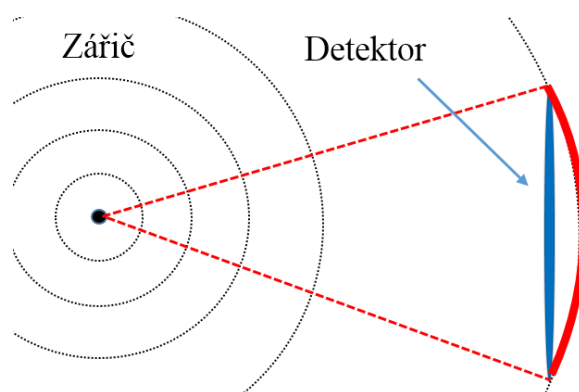
kde  $R$  je poloměr kruhového detektoru,  $d$  je vzdálenost mezi zářičem a detektorem,  $A$  je aktivita zářiče a  $\Omega$  značí prostorový úhel.

Ze vztahu (4) plyne, že velikost efektivní aktivity silně závisí na vzdálenosti zářiče od detektoru. Bylo by tedy výhodné omezit vzdálenost  $d$  na co nejmenší hodnotu, ideálně například položením detektoru/vzorku rovnou na zářič. Tento postup se však v reálných experimentech neprovádí, neboť ve velmi blízkých vzdálenostech se uplatňuje celá řada efektů, vlivem kterých dochází mimo jiné ke zvlnění pozadí spektra [13]. Za nejmenší vhodnou vzdálenost pro energii fotonů 14,4 keV je považována vzdálenost 12 cm.

#### 3.3. Aproximace plochy kulového vrchlíku

Jak již bylo zmíněno, není vhodné detektor umisťovat do velkých vzdáleností od zářiče. Vztah (4) však platí pouze pro velmi velká  $d$ . Pro malé vzdálenosti  $d$  je vztah (4) nepřesný,

neboť plochu detektoru je třeba vyjádřit pomocí prostorového úhlu a tím převést plochu detektoru na část plochy sféry, viz obrázek 4.

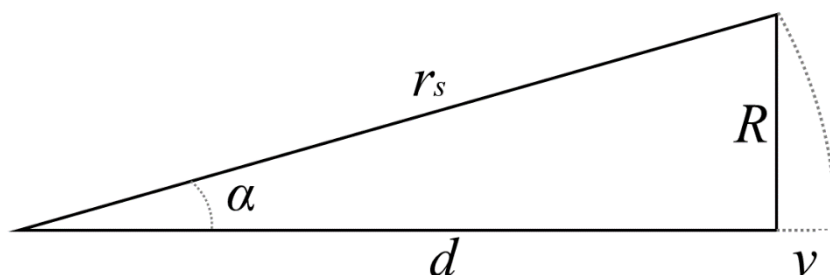


Obrázek 4: Znázornění plochy sféry a plochy detektoru.

Na obrázku 4 je zobrazen reálný tvar detektoru z profilu (modře), červeně je zobrazena část sféry, což je plocha vytnutá v prostoru pro daný prostorový úhel  $\Omega_d$ . Lze tedy pozorovat, že pro velké vzdálenosti  $d$  tvary obou ploch splývají, s klesající vzdáleností se však odchylka obou ploch zvětšuje. Plochu detektoru je proto třeba přenásobit koeficientem geometrické korekce  $K$ . Po přenásobení tímto koeficientem se plocha detektoru zvětší, jakoby se plocha detektoru zakřivila do tvaru kulového vrchlíku. Pro výpočet koeficientu  $K$  platí vztah:

$$K = \frac{S_v}{S_p} = \frac{2\pi d v}{\pi R^2}. \quad (5)$$

kde  $S_v$  je plocha kulového vrchlíku,  $S_p$  je plocha podstavy kulového vrchlíku (neopravená plocha detektoru),  $d$  je vzdálenost detektoru a zářiče,  $v$  je rozdíl vzdálenosti plochy detektoru a poloměru sféry  $r_s$ , viz obrázek 5.



Obrázek 5: Geometrické znázornění vzdáleností.

V experimentu je však výhodné měřit pouze veličiny  $d$  a  $R$ . S pomocí obrázku 5 lze vyjádřit vzdálenost  $r_s$  jako:

$$r_s = \frac{d}{\cos(\arctan \frac{R}{d})}, \quad (6)$$

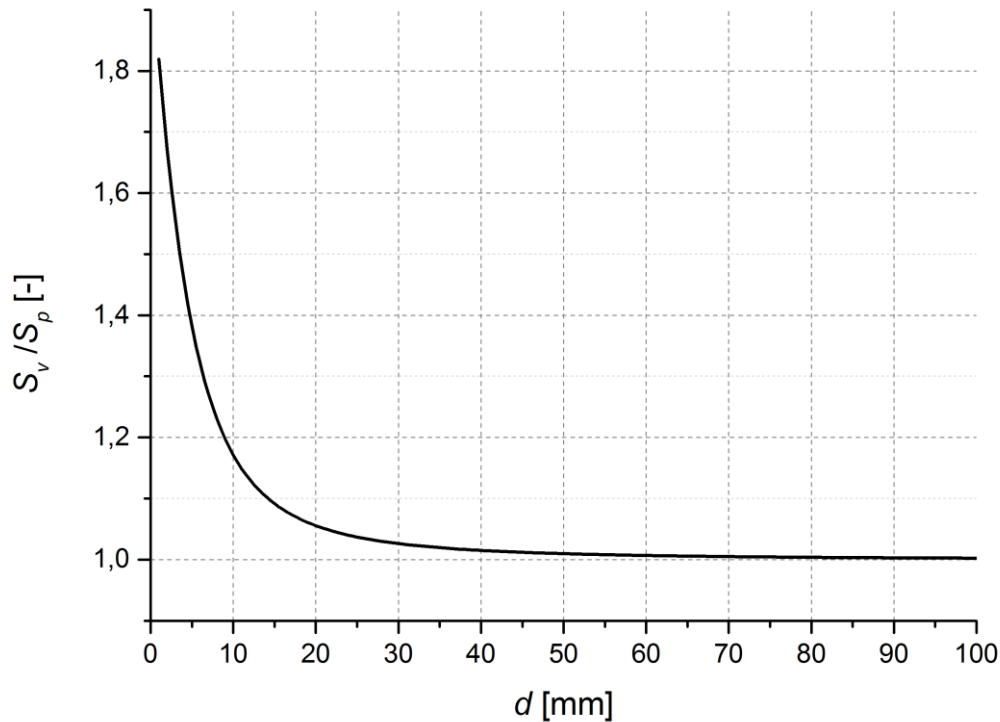
a vzdálenost  $v$  jako:

$$v = r_s - d. \quad (7)$$

Dosazením rovnic (6) a (7) do rovnice (5) obdržíme:

$$K = \frac{2}{R^2} \frac{d}{\cos(\arctan \frac{R}{d})} \left( \frac{d}{\cos(\arctan \frac{R}{d})} - d \right). \quad (8)$$

Dle rovnice (8) je možné snadno dopočítat geometrickou korekci na plochu detektoru i pro malé vzdálenosti  $d$ . Na obrázku 6 je zobrazen poměr ploch  $S_v/S_p$  v závislosti na vzdálenosti  $d$ .

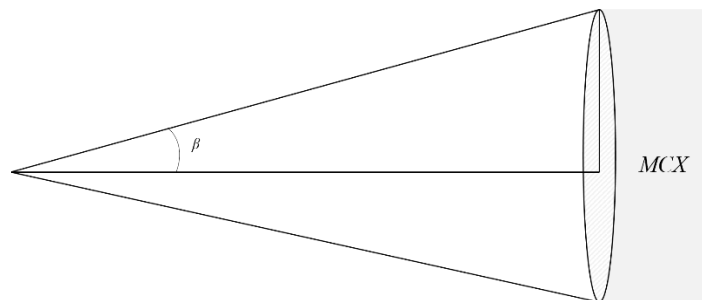


Obrázek 6: poměr ploch  $S_v/S_p$  v závislosti na vzdálenosti  $d$ .

### 3.4. Úhlová podmínka 2 mrad

Z fyzikální podstaty fokusace záření, která je v experimentu realizována, bylo nutné do výpočtu efektivní aktivity zahrnout také úhlovou podmínku [7], [8]. Tedy aby byl započten pouze foton dopadající do apertury MCX pod úhlem  $\beta$  menším než 2 mrad, viz obrázek 7. Tato podmínka je nezbytná, aby došlo k totálnímu odrazu. Jako platné jsou započteny fotony nacházející se v prostoru kuželu.

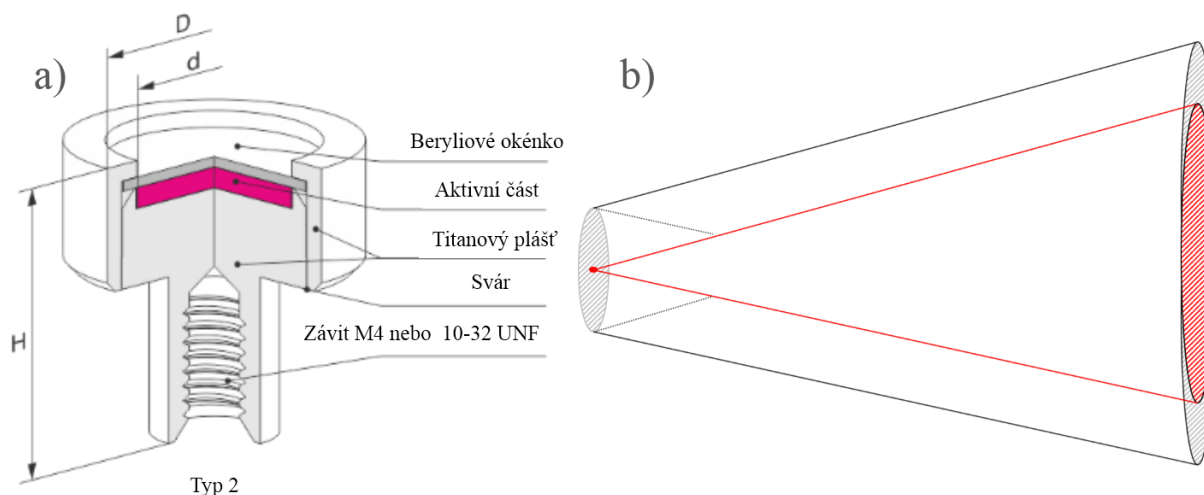




Obrázek 7: Kužel vytnutý úhlem  $\beta$ .

### 3.5. Přejít na plošný zářič

Pro naprostou většinu orientačních výpočtů se využívá aproximace bodového zářiče. Tedy zářič je nekonečně malý. Pro dostatečně velké vzdálenosti mezi detektorem a zářičem vnáší tato aproximace do výpočtů jen minimální chybu. V situacích, kdy je zářič blízko detektoru je však nutné vzít v úvahu, že zářič má jisté rozměry a především, že se jedná o plošný zářič. V laboratořích experimentální fyziky Přírodovědecké fakulty Univerzity Palackého se užívají především zářiče výrobce RITVERC, který vyrábí zářiče normované velikosti, viz obr 8a). Je tedy třeba počítat nikoliv s bodovým zářičem ale se zářící plochou definovaného průměru, v případě plošných zářičů RITVERC se jedná o průměr 8 mm nebo 10 mm. Přejít od aproximace bodového zářiče k plošnému zářiči je výhodný také v případě, že se do výpočtů zahrne úhlová podmínka, viz předchozí kapitola. Rozměr kuželu obsahujícího platné fotony je závislý na rozměrech zářiče. Na obrázku 8b) je červeně vyznačen případ bodového zářiče a šedou barvou vyznačeny kužely dvou krajních bodů plošného zářiče.



Obrázek 8a) Schéma zářiče výrobce RITVERC, upraveno [14]  
 b) kužely platných fotonů bodového a plošného zářiče.

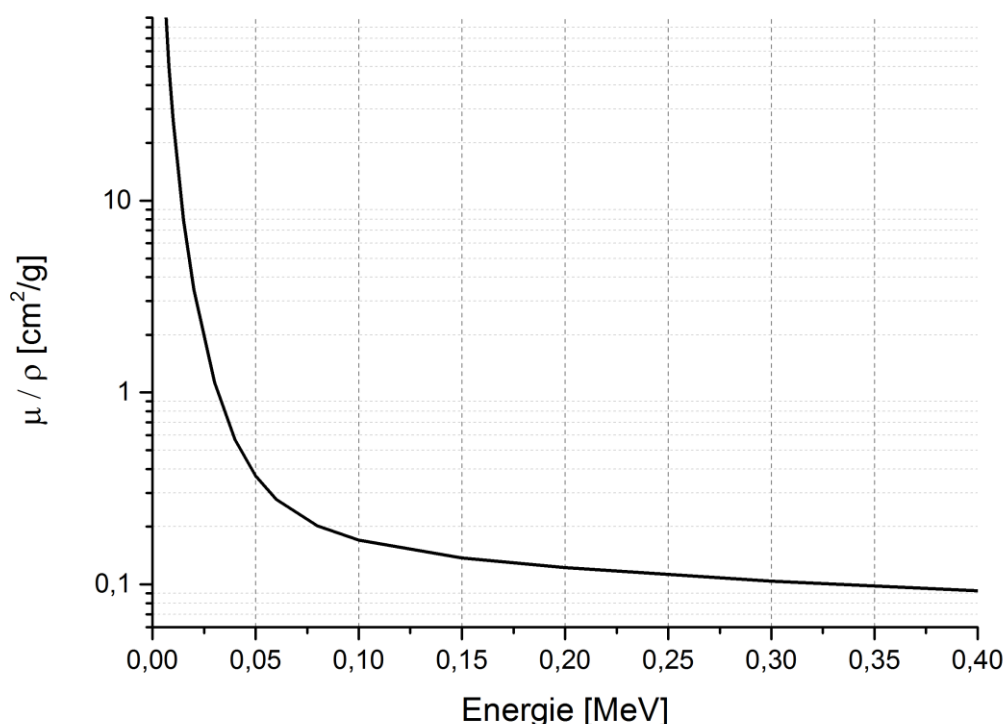
### 3.6. Výpočet absorpce v materiálu

Dalším nezanedbatelným faktorem, ovlivňujícím počet fotonů dopadajících do detektoru, je útlum záření v materiálu. Útlum záření v materiálu lze popsat následujícím vztahem:

$$\frac{I}{I_0} = e^{-\left(\frac{\mu_m}{\rho}\right)x\rho}, \quad (9)$$

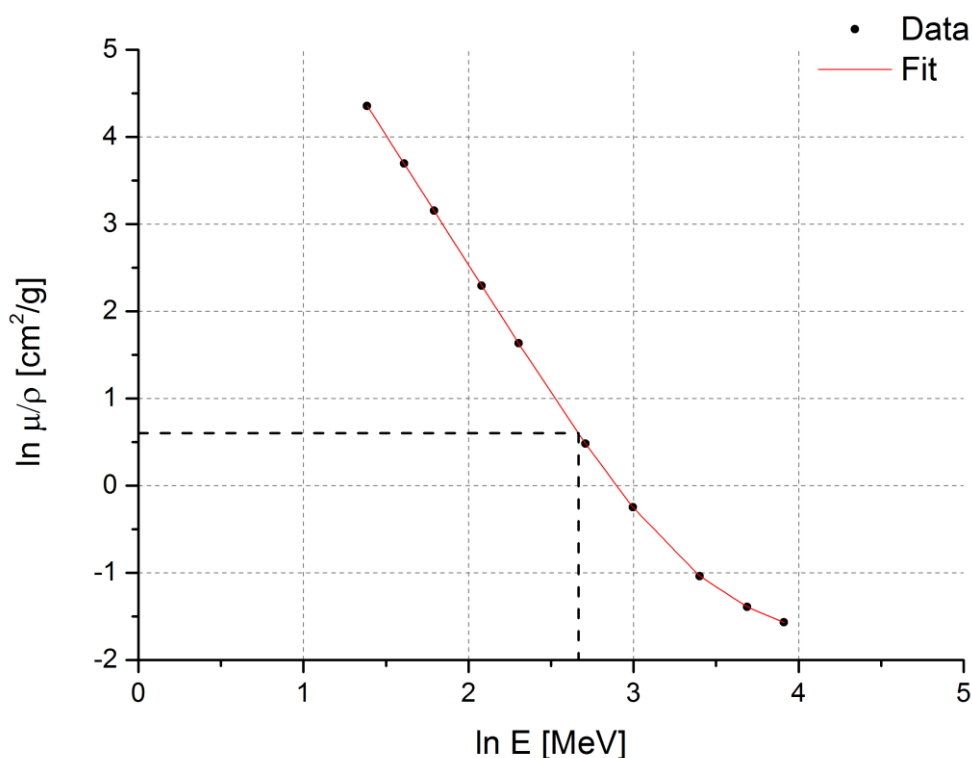
kde  $I_0$  je počáteční intenzita,  $I$  je intenzita po průchodu materiálem,  $x$  je tloušťka materiálu,  $\rho$  je hustota materiálu a  $\mu_m$  je tzv. „X-Ray Mass Attenuation Coefficient“.

Veličina  $\mu_m$  charakterizuje materiál. Udává schopnost materiálu pohlcovat radioaktivní záření. Nejedná se ale o materiálovou konstantu, neboť veličina  $\mu_m$  je silně závislá na energii procházejícího záření. Veličina  $\mu_m$  se vzrůstající energií procházejícího záření velmi rychle klesá. Na obrázku 9 je znázorněn průběh  $\mu_m/\rho$  na energii procházejícího záření pro  $^{13}\text{Al}$ .



Obrázek 9: Závislost veličiny  $\mu_m/\rho$  na energii procházejícího záření [15].

Na webových stránkách NIST jsou uvedeny hodnoty  $\mu_m/\rho$ , pouze však pro hodnoty 10 keV a 15 keV. Hodnota pro energii 14,4 keV chybí. Vzhledem k silně klesajícímu trendu závislosti  $\mu_m/\rho$  na energii by zaokrouhlování k hodnotě 15 keV způsobilo zbytečně velkou nejistotu výpočtu. Silně klesající trend znemožnil také přímou lineární interpolaci. Proto byla funkce nejprve zlogaritmována, poté byla provedena interpolace pomocí polynomu 6. řádu a výsledná hodnota odlogaritmována. Tímto postupem byla obdržena hodnota veličiny  $\mu_m/\rho$  pro hodnotu 14,4 keV pro materiály vzduch a hliník, viz obrázek 10 a tabulka 1.



Obrázek 10: Závislost veličiny  $\mu_m/\rho$  na energii procházejícího záření proložená křivkou, tečkovaně je znázorněna hodnota odpovídající energii 14,4 keV.

Tabulka 1: Hodnoty veličiny  $\mu_m/\rho$

Energie [keV]	$\mu/\rho$ [cm <sup>2</sup> /g]	
	Vzduch	Hliník
6	23,41	115,3
<b>14,4</b>	<b>1,808</b>	<b>10,04</b>
15	1,614	7,955

### 3.7. Výpočet aktivity dle rozpadového zákona

Aktivita každého radioaktivního materiálu se v čase mění. Změnu aktivity v čase nelze fyzikálně ovlivnit a popisuje ji tzv. rozpadový zákon, vyjádřený vztahem:

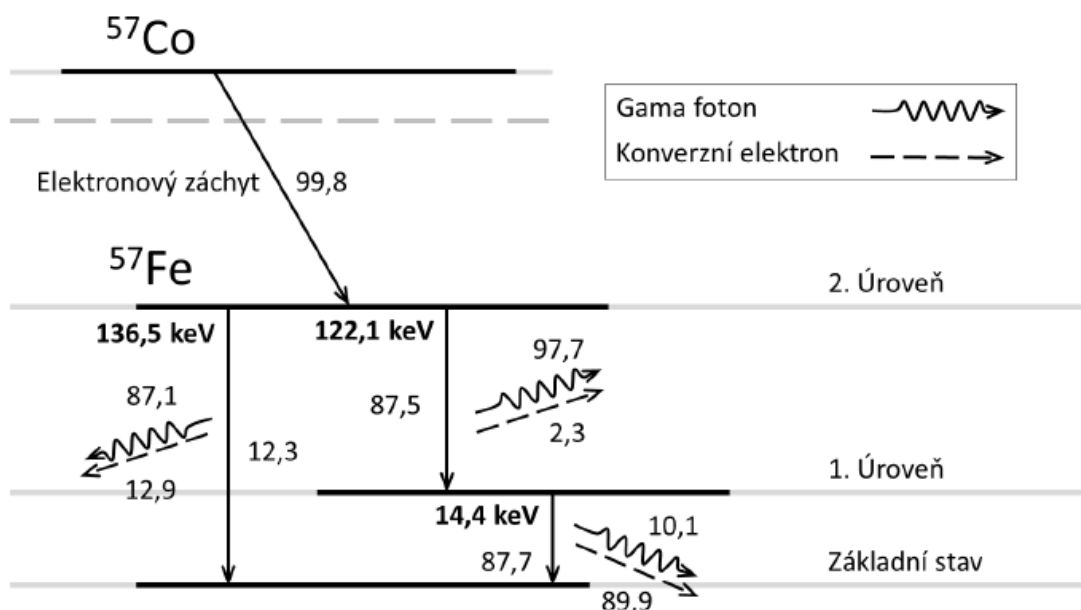
$$A_t = A_0 e^{-\frac{\ln 2}{\tau} t}, \quad (10)$$

kde  $A_t$  je aktivita v čase  $t$ ,  $A_0$  je počáteční aktivita a  $\tau$  je tzv. poločas rozpadu [16]. Poločas rozpadu je parametr charakteristický pro každý konkrétní radioaktivní prvek. Např. pro <sup>57</sup>Co je  $\tau = 271,8 \pm 0,05$  dnů. Ze vztahu (10) plyne, že záleží pouze na rozdílu času  $t$  (typicky mezi datem výroby zářiče a datem měření). Chybně zadané datum měření by znamenalo chybu, která nezávisí na původní aktivitě zářiče. Tedy i u velmi starých zářičů s nízkými aktivitami je

třeba důsledně zadat datum měření, neboť způsobí stejně velkou chybu jako v případě velmi silných zářičů.

### 3.8. Korekce na rozpadové schéma

Aktivita zářiče udává pravděpodobnost přechodu jádra na nižší energetickou hladinu. S přechodem jádra na nižší energetickou hladinu je spojeno vyzáření jednoho nebo více fotonů. Energie a počet fotonů vyzářených z jednoho energetického přechodu jádra jsou určeny dle tzv. rozpadového schématu, viz obrázek 11.



Obrázek 11: Rozpadové schéma kobaltu. Pravděpodobnosti přechodů jsou vztaheny k jednomu rozpadu  $^{57}\text{Co}$ . Pravděpodobnost emise je udávána v procentech. Převzato z [17].

Pomocí rozpadového schématu je možné určit, kolik fotonů konkrétní energie bylo vyzářeno z jednoho jaderného přechodu. Pravděpodobnost vyzáření fotonu o energii 14,4 keV zapříčiněná přechodem jádra  $^{57}\text{Fe}$  z první excitované na základní hladinu je vyjádřena vztahem:

$$P_{14,4} = 0,0918 \quad (11)$$

kde hodnota 0,0918 vychází z tabulek jaderných přechodů [5], [18]. Tedy ze sta jaderných přechodů se vyzáří přibližně 9 fotonů o energii 14,4 keV.

### 3.9. Výpočet efektivní aktivity s korekčními koeficienty

Vztah zahrnující všechny výše zmíněné korekce má tvar:

$$A_{ef} = A_0 P_{14,4} K e^{-\frac{\ln 2}{\tau} t} e^{-\left(\frac{\mu_m}{\rho}\right)_{x\rho} R} \frac{R^2}{4 d^2}. \quad (12)$$

V případě, že je záření prochází více materiály, např. vzduchem a hliníkem, rozšíří se vztah na:

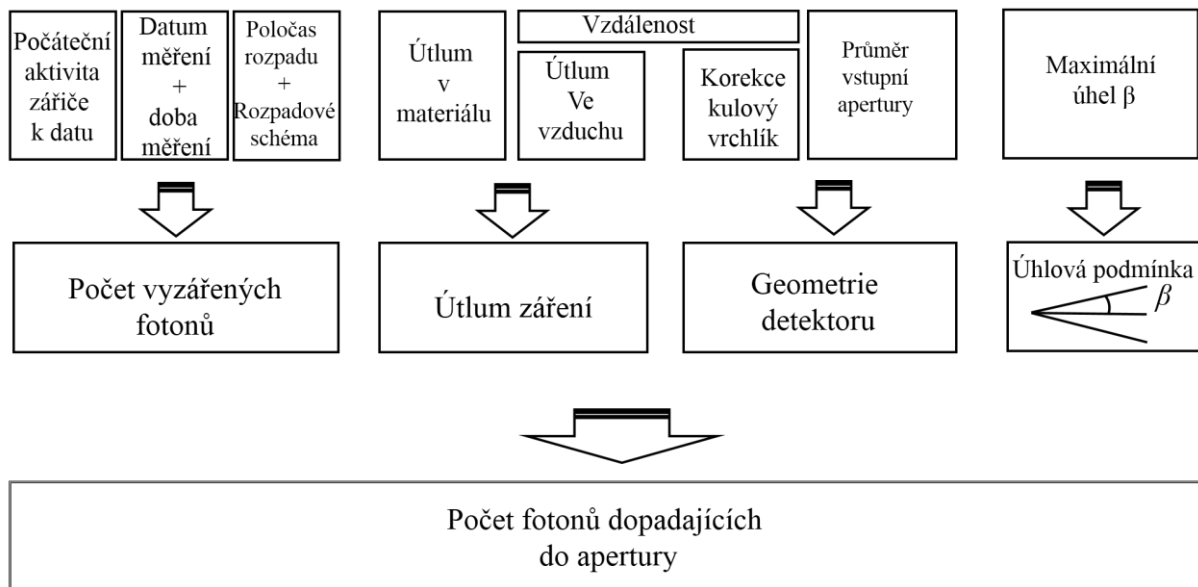
$$A_{ef} = A_0 P_{14,4} K e^{-\frac{\ln 2}{\tau} t} \sum_{i=1}^m e^{-\left(\frac{\mu_{\rho_i}}{\rho_i}\right) x_i \rho_i} \frac{R^2}{4 d^2}, \quad (13)$$

kde  $m$  je počet materiálů, kterými záření prochází.

## 4. Simulace efektivní aktivity zářiče v programovacím prostředí LabVIEW

### 4.1. Motivace

V předchozí kapitole byla detailně rozebrána problematika dopadajících fotonů do apertury konečných rozměrů a definované vzdálenosti. Množství platných fotonů má v Mössbauerově spektroskopii zásadní vliv na dobu měření spektra. Je tedy výhodné mít možnost rychle a jednoduše množství platných fotonů dopočítat a tím ověřit aparaturu. Za tímto účelem byla vytvořena simulace v programovacím prostředí LabVIEW, která má za cíl modelovat celý experiment. Programovací prostředí LabVIEW bylo zvoleno na základě předchozích zkušeností na pracovišti [19], [20]. Blokové schéma simulace je zobrazeno na obrázku 12.



Obrázek 12: Blokové schéma programu pro výpočet počtu fotonů dopadajících do apertury.

Simulace modeluje případ plošného zářiče, který vyzařuje fotony do všech směrů. Jako platné jsou však započteny fotony dopadající do apertury MCX pod úhlem menším než je maximální úhel  $\beta$ , jak již bylo zmíněno výše, viz obr 8b). Velmi často se v experimentech umísťuje před detektory tenká vrstva hliníku, která ochraňuje detektor před viditelným optickým zářením [21]. Proto do výpočtů byla zahrnuta absorpce fotonů, a to jak absorpce ve vzduchu, tak v různých materiálech (např. zmiňovaného hliníku). Simulace počítá množství fotonů, proto je také nutné do výpočtů zahrnout datum měření, stáří zářiče a jeho původní aktivitu. Dále je také nutné vzít v úvahu rozpadové schéma daného zářiče, neboť ne každý rozpad jádra vede ke vzniku fotonu požadované energie, tedy platného fotonu. V následujících kapitolách bude podrobně rozebrána problematika jednotlivých výpočetních částí simulace.

### 4.2. Definování plochy zářiče a vstupní apertury

Nejprve bylo v programovacím prostředí LabVIEW nutné definovat plošný zářič. Plošný zářič byl realizován pomocí kruhové oblasti ve čtvercové matici s pevně daným počtem, řádků/sloupců. Zářiče jsou typicky kruhové, proto nebylo nutné do výpočtů zahrnout případ, kdy by měla mít matice jiný počet řádků oproti počtu sloupců. Každý prvek matice reprezentuje malou část plochy zářiče případně okolí. Každé místo na zářiči vyzáří foton se

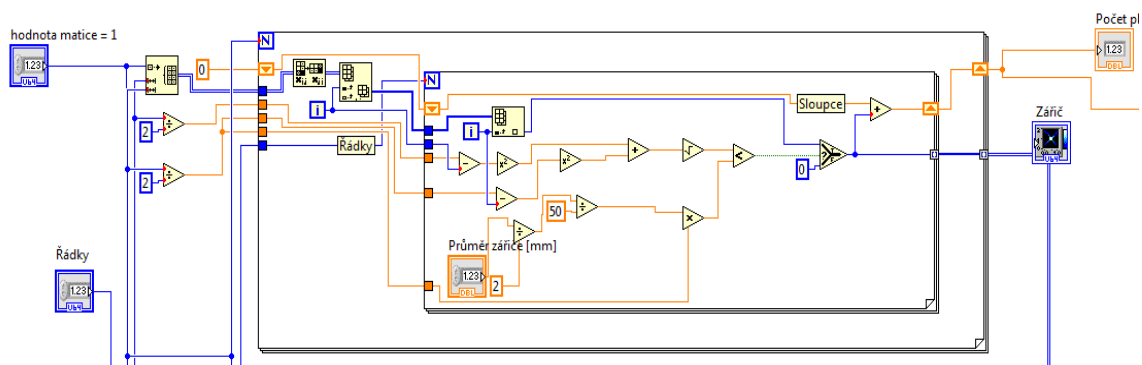
stejnou pravděpodobností, proto se jedná o matici se všemi prvky stejné hodnoty. Hodnota prvků matice byla vypočtena jako aktivita zářiče podělená počtem prvků matice.

Jak již bylo zmíněno, plošné zářiče mívají kruhový tvar, což by měla kopírovat i matice reprezentující plošný zářič. Nejprve byla definována matice s konstantními hodnotami všech prvků. Každý element matice byl poté porovnán dle vztahu:

$$R \geq \sqrt{(p_{x1} - p_{s1})^2 + (p_{x2} - p_{s2})^2} \quad (14)$$

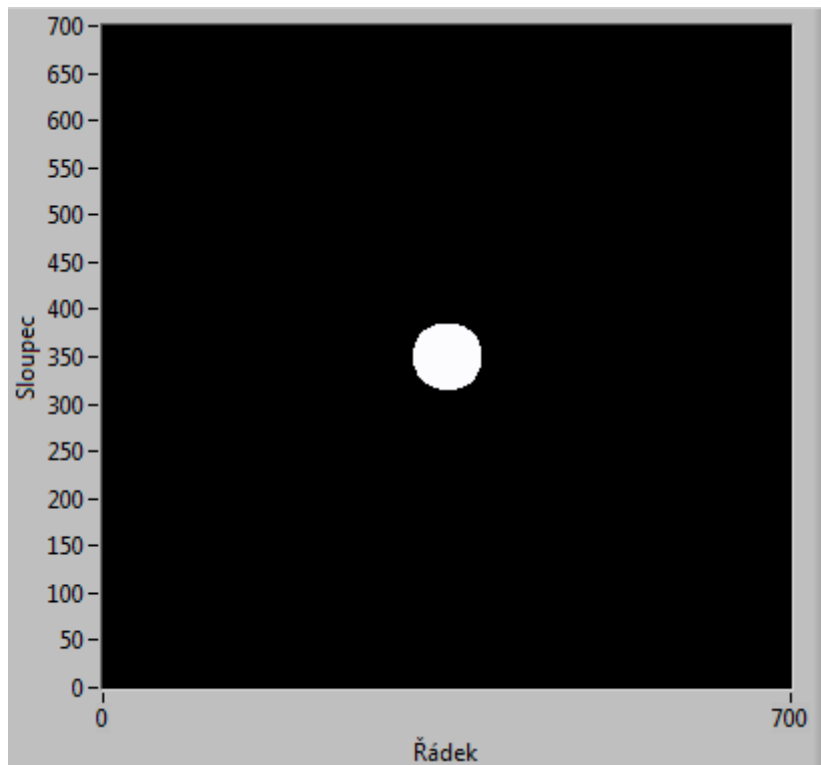
kde  $p_{x1}$  a  $p_{x2}$  jsou hodnoty indexů jednotlivých prvků v matici a  $p_{s1}$  a  $p_{s2}$  jsou hodnoty indexů prvku ve středu matice,  $R$  je číslo vyjadřující poloměr zářiče. Pokud byla rovnice (14) splněna, hodnota prvku zůstala zachována, pokud rovnice splněna nebyla, byla prvku přiřazena nulová hodnota.

Konkrétní realizace v programovacím prostředí LabVIEW je zobrazeno na obrázku 13.



Obrázek 13: Realizace podmínky ze vztahu (14) v programovacím prostředí LabVIEW.

Postupem uvedeným výše bylo docíleno definování matice o hodnotách, které představovaly tvar plošného zářiče. Každá hodnota elementu představovala aktivitu dané, velmi malé, části zářiče. Matice pro případ homogenního plošného zářiče o průměru  $R = 10$  mm je zobrazena na obrázku 14.



Obrázek 14: Matice reprezentující plošný zářič v programovacím prostředí LabVIEW.

Na obrázku 14 si lze všimnout, že zářič vyplňuje z celé plochy matice relativně malou část. To má svůj důvod a bude to rozebráno v dalších kapitolách. Z hlediska optimalizace výpočetního výkonu se nejedná o ideální řešení. Výpočet dopadající aktivity pro jednu danou vzdálenost pro zářič rozdělený na 500 000 bodů trvá zhruba 30 sekund. To je relativně krátká doba, proto nebylo nutné výpočet optimalizovat.

Plocha vstupní apertury byla zavedena obdobným způsobem. Opět byla definována matice konstantních hodnot. Tvar vstupní apertury byl určen opět dle toho, zda dané indexy matice splňují podmínku určenou vztahem (14).  $R$  tentokrát reprezentuje poloměr vstupní apertury. Matice, v níž je definován plošný zářič a vstupní apertura, musí mít stejný rozměr.

#### 4.3. Výpočet dopadající aktivity do apertury včetně úhlové podmínky

Zářič byl v předchozí kapitole rozdělen na mnoho malých částí. Nyní je třeba spočítat aktivitu dopadající do vstupní apertury vycházející z této malé plošky zářiče. Aby byl foton započten jako platný, musí splňovat úhlovou podmínku, tato podmínka je požadována pouze v případě fokusace. Kolem každého bodu zářiče vytíná úhlová podmínka kužel, viz obrázek 8b). Úhlová podmínka vytíná na vstupní apertuře kružnici o poloměru  $R_u$  dle vztahu:

$$R_u = d \tan \beta. \quad (15)$$

Protože jsou splněny následující podmínky:

- v experimentální sestavě jsou zářič i vstupní apertura v ose nad sebou,
- matice plošného zářiče i vstupní apertury mají stejný rozměr,



střed kružnice s poloměrem  $R_u$  dle vztahu (15) je určen stejnými indexy jako daná malá ploška zářiče. Tedy:

$$\begin{aligned} p_{a1} &= p_{z1} \\ p_{a2} &= p_{z2}, \end{aligned} \quad (16)$$

kde  $p_{z1}$  a  $p_{z2}$  jsou hodnoty indexů prvků v matici plošného zářiče a  $p_{a1}$  a  $p_{a2}$  jsou hodnoty indexů prvků v matici vstupní apertury.

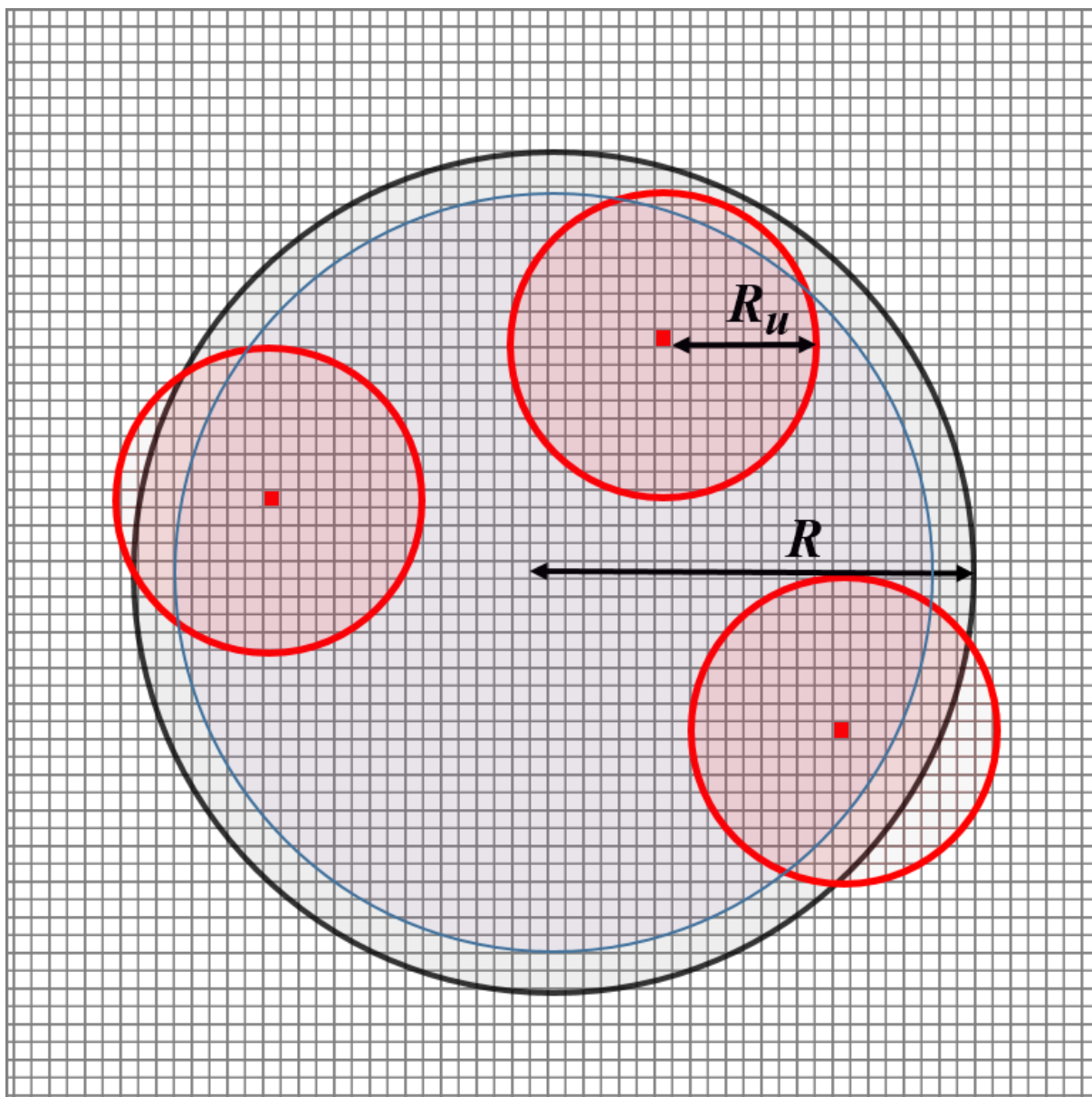
Poloměr kružnice vytnuté úhlovou podmínkou na vstupní apertuře lze vyjádřit vztahem:

$$R_u \geq \sqrt{(p_{x1} - p_{z1})^2 + (p_{x2} - p_{z2})^2} \quad (17)$$

kde  $p_{x1}$  a  $p_{x2}$  jsou hodnoty indexů jednotlivých prvků v matici vstupní apertury a  $p_{z1}$  a  $p_{z2}$  jsou hodnoty indexů prvků v matici plošného zářiče.

Každá ploška na vstupní apertuře, jejíž indexy splňují vztah (17), je započtena jako platná.

Ilustrativní příklad je zobrazen na obrázku 15. Na čtvercovém pozadí (matice) jsou zobrazeny kruhy 3 barev. Modrou barvou je znázorněna oblast plošného zářiče. Šedou barvou oblast vstupní apertury. Červenou barvou jsou zvýrazněny 3 náhodně vybrané body na zářiči. Každému z těchto bodů odpovídá jedna kružnice o poloměru  $R_u$ . Červeně jsou zvýrazněny platné plošky splňující podmínku (17).



Obrázek 15: Vykreslení platných bodů splňující podmínku (17) pro 3 náhodně zvolené body.

Na obrázku je možné si všimnout, že kružnice některé plošky protíná. Tím vzniká chyba ve výpočtech, neboť některá ploška je počítána jako platná, přestože je platná pouze její část. Tento obrázek je však pouze ilustrativní, ve výpočtech jsou zářič i apertura rozděleny do mnohem většího počtu dílků. Vzniklá chyba je proto zanedbatelná.

Aktivitu dopadající do vstupní apertury, lze vypočíst dle vztahu:

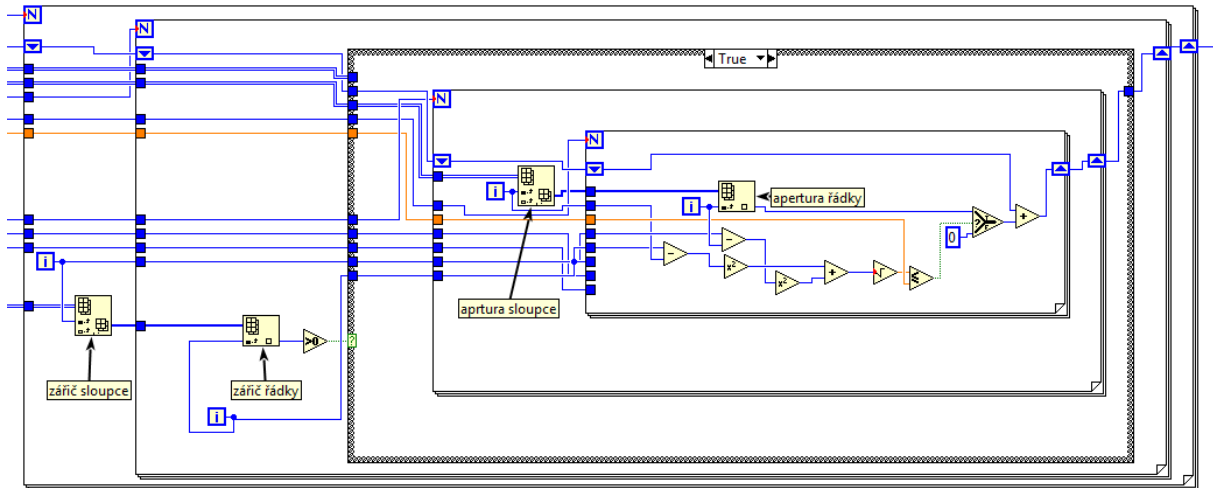
$$A'_{ef} = A_0 \frac{\sum_j^n S'_j}{4\pi n d^2}, \quad (18)$$

kde  $S'$  jsou plochy platných bodů na vstupní apertuře pro jednotlivé body na zářiči, a  $n$  je počet bodů zářiče,  $A_0$  je počáteční aktivita.

Z obrázku 15 je patrné, že při definování zářiče je třeba, aby zářič představoval jen malý element v celé matici. Tak jako je to na obrázku 14. Kdyby zářič vyplňoval co největší plochu v matici, bylo by to sice optimálnější řešení z hlediska potřebného výpočetního výkonu pro

výpočetní operace. Mohlo by se ale stát, že při porovnávání překryvů jednotlivých podmínek, jak je ilustrováno na obrázku 15, bude podmínka (17) přesahovat mimo definovanou matici. Mimo matici však není zaručena správnost výpočtů programu. Jak již bylo výše zmíněno, rychlost výpočtů je natolik velká, že toto neoptimální řešení nemá výrazný vliv dobu obdržení výsledku výpočtů.

Konkrétní řešení v programovacím prostředí LabVIEW je zobrazeno na obrázku 16.



Obrázek 16: Konkrétně řešení podmínky (17) v programovacím prostředí LabVIEW.

#### 4.4. Zahnutí korekčních koeficientů

Vztah (18) nezahrnuje útlum v materiálu. Proto je třeba vztah doplnit o korekční koeficienty uvedené v předchozí kapitole. Konkrétní provedení v programovacím prostředí LabVIEW není uvedeno, neboť se jedná o prosté násobení výsledku čísly. Výsledný vztah pro výpočet efektivní aktivity, který je kombinací rovnic (13) a (18) má tvar:

$$A_{ef} = A_0 P_{14,4} K e^{-\frac{\ln 2}{\tau} t} \sum_{i=1}^m e^{-\left(\frac{\mu_{mi}}{\rho_i}\right) x_i \rho_i} \frac{\sum_j^n S'_j}{4\pi n d^2}. \quad (19)$$

## 5. Ověření správnosti výpočtů pomocí experimentu

### 5.1. Experimentální sestava

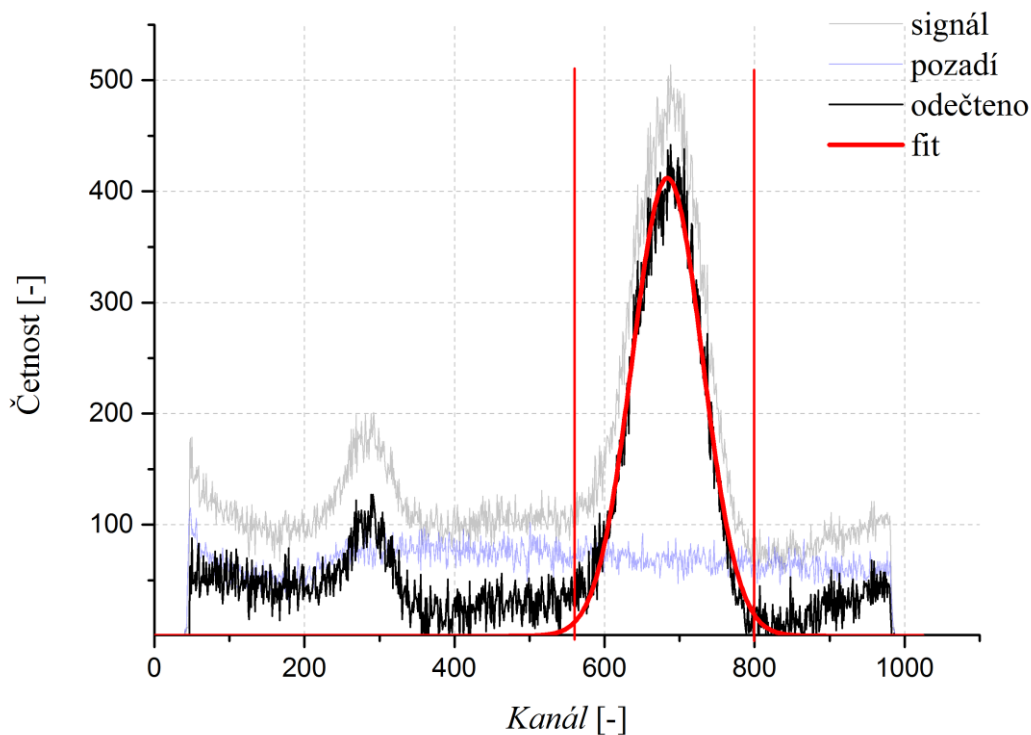
K ověření správnosti výpočtů bylo nutné sestavit kontrolní experiment. Jakkoliv pečlivá kontrola výpočtů totiž nezaručí správnost výpočtů. Aby se minimalizoval počet faktorů vnášející do měření nejistoty, byl zvolen nejjednodušší možný experiment. Byl využit detektor, zářič a kolimátor, přičemž všechny komponenty byly umístěny do jedné osy. V přesně definované vzdálenosti byl umístěn plošný zářič známých rozměrů, známé aktivity a známého stáří. Všechny parametry, ovlivňující výslednou efektivní aktivitu dopadající do detektoru byly známy a přesně měřitelné. Díky tomu bylo možné přesně určit počet vyzářených fotonů do apertury detektoru a tuto hodnotu porovnat s počtem experimentálně detekovaných fotonů.

Experiment byl zaměřen na fotony o energii 14,4 keV. Jako detektor byl zvolen plynový detektor 45479 od výrobce LND, Inc. Tento detektor byl zvolen kvůli dobrému energetickému rozlišení. Ze zářičů dostupných v laboratoři byl vybrán zářič 45/11, viz Příloha 2, který má počáteční aktivitu  $1,85 \pm 5 \%$  GBq. Všechny ostatní zářiče měly hodnoty nejistoty počáteční aktivity  $\pm 10 \%$ . Měření bylo provedeno pro několik vzdáleností  $d$  (vzdálenost detektor - zářič). Aby byla minimalizována statistická chyba měření, byla doba měření stanovena na 7200 s.

Pro každou vzdálenost  $d$  proběhla dvě měření. Nejprve byl změřen počet detekovaných fotonů, kdy záření pronikalo pouze vzduchem. Při druhém měření byl detektor zastíněn měděným plíškem o tloušťce 0,25 mm. Měděný plíšek účinně absorboval fotony o energii 14,4 keV. Toto měření sloužilo k určení pozadí detektoru.

### 5.2. Zpracování a vyhodnocení naměřených výsledků

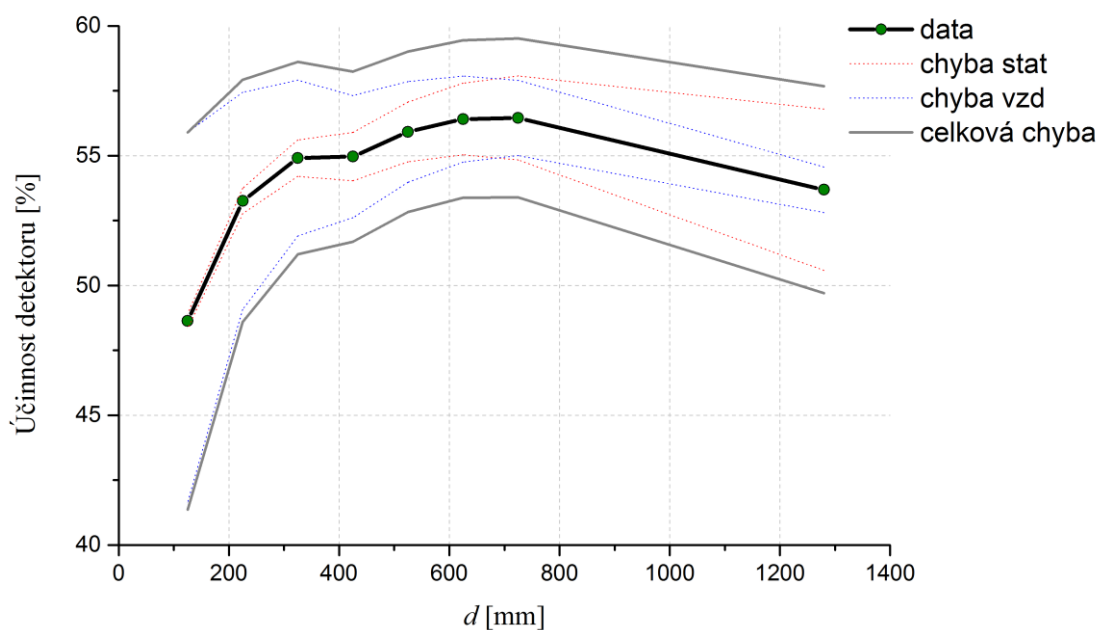
Pro naměření dat byl použit postup popsáný v předchozí kapitole. Při zpracování dat se nejprve odečte pozadí od naměřeného signálu. Naměřené hodnoty pro vzdálenost  $d = 430$  mm jsou zobrazeny na obrázku 17.



Obrázek 17: Naměřené hodnoty pro vzdálenost  $d = 430$  mm.

Počet detekovaných fotonů je možné získat dvěma způsoby. Prvním způsobem je spočítat plochu pod křivkou fitu. Protože je vodorovná osa vhodně normována, výsledná plocha pod křivkou se rovná počtu detekovaných fotonů. Druhým způsobem je sečíst všechny detekované fotony v kanálech odpovídajících energii 14,4 keV. Na obrázku 17 jsou znázorněny dvě svislé křivky, ty určují meze sumace. Oběma způsoby byly obdrženy podobné výsledky, pro výpočty uvedené níže bylo využito sečtení všech detekovaných fotonů.

Počet detekovaných fotonů byl porovnán s hodnotou efektivní aktivity. Ta byla vypočtena pomocí simulace. Postupně bylo proměřeno několik vzdáleností. Závislost účinnosti detektoru, tedy poměru počtu detekovaných fotonů ku počtu fotonů dopadnuvších do detektoru dle simulace, na vzdálenosti  $d$ , je zobrazena na obrázku 18.



Obrázek 18: Závislost účinnosti plynového detektoru na vzdálenosti.

Na celkové nejistotě měření se podílely především tři faktory. Prvním faktorem byla nepřesnost určení vzdálenosti  $d$ . Na obrázku 18 je modrými křivkami zobrazen interval možných hodnot při nejistotě měření vzdálenosti  $\pm 4$  mm. Chyba měření vzdálenosti je způsobena především nemožností určení přesné polohy aktivní zóny zářiče a detekční zóny detektoru. Druhým faktorem byla statistická nejistota. Interval možných hodnot je na obrázku 18 zobrazen červenými křivkami. Posledním faktorem výrazně ovlivňujícím výslednou účinnost byla nejistota určení počáteční aktivity zářiče, která byla  $A_0 = 1,85 \pm 5$  % GBq. Tento faktor však ovlivňuje všechna měření stejně, proto neovlivňuje samotný průběh křivky.

Z průběhu grafu je zřejmé, že při vyšších aktivitách se výrazněji projevila mrtvá doba detektoru. Proto byla účinnost detekce pro vyšší aktivity nižší. Se zvyšováním vzdálenosti  $d$  množství dopadajících fotonů do detektoru prudce kleslo. Detektor již registroval téměř všechny dopadající fotony, proto se pro vyšší vzdálenosti hodnota účinnosti již výrazně neměnila.

Jediným faktorem, který ovlivňuje účinnost detekce v závislosti na vzdálenosti, je již zmíněná mrtvá doba detektoru. Ten se však ve větších vzdálenostech již neuplatňuje. Proto by měl být průběh účinnosti detektoru na vzdálenosti nezávislý. Právě nezávislost vzdálenosti  $d$  na účinnosti potvrzuje, že simulace vykazuje věrohodné výsledky.

Účinnost plynového detektoru 45479 výrobce LND, Inc. pro fotony o energii 14,4 keV byla určena jako:

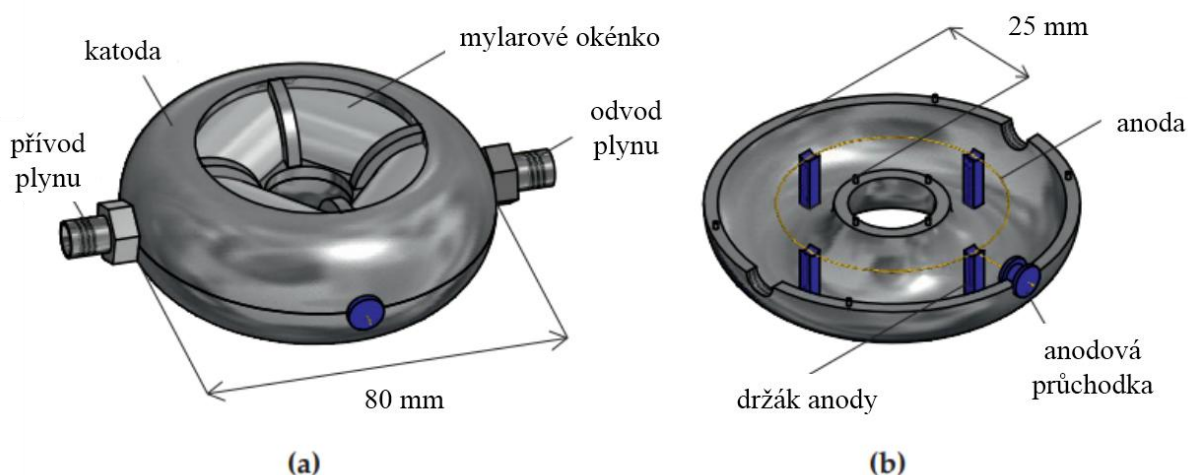
$\mu_d = 55 \pm 7$  %. Zásadními složkami určujícími velikost odchylky byla nepřesnost určení vzdálenosti a aktivity zářiče.

## 6. Aplikace výpočetní simulace

Tato kapitola se věnuje aplikacím výpočetní simulace. První aplikace simulace byla zmíněna již v kapitole 5. Jednoduchý experiment potvrdil správnost výpočtů simulace, proto mohla být výpočetní simulace použita pro komplexnější experimenty.

### 6.1. Určení účinnosti plynového toroidního detektoru

Ve spolupráci s laboratoří KEF umístěné ve Vědeckotechnickém parku Univerzity Palackého v Olomouci byla proměřena účinnost plynového toroidního detektoru, který zde byl vyvinut [22],[23]. Jedná se o detektor pro Mössbauerovu spektroskopii konverzních rentgenových fotonů. Detektor je tedy primárně konstruován k detekci konverzních fotonů o energiích 6,4 keV. Oproti citovaným zdrojům se použitý detektor mírně lišil, a to v použitém těle detektoru. Zatímco v uvedených zdrojích se využívá detektor s tělem z nerez, měření účinnosti probíhala s duralovým tělem detektoru. Tvar detektoru je znázorněn na obrázku 19.



Obrázek 19: Plynový detektor, převzato z [23], upraveno.

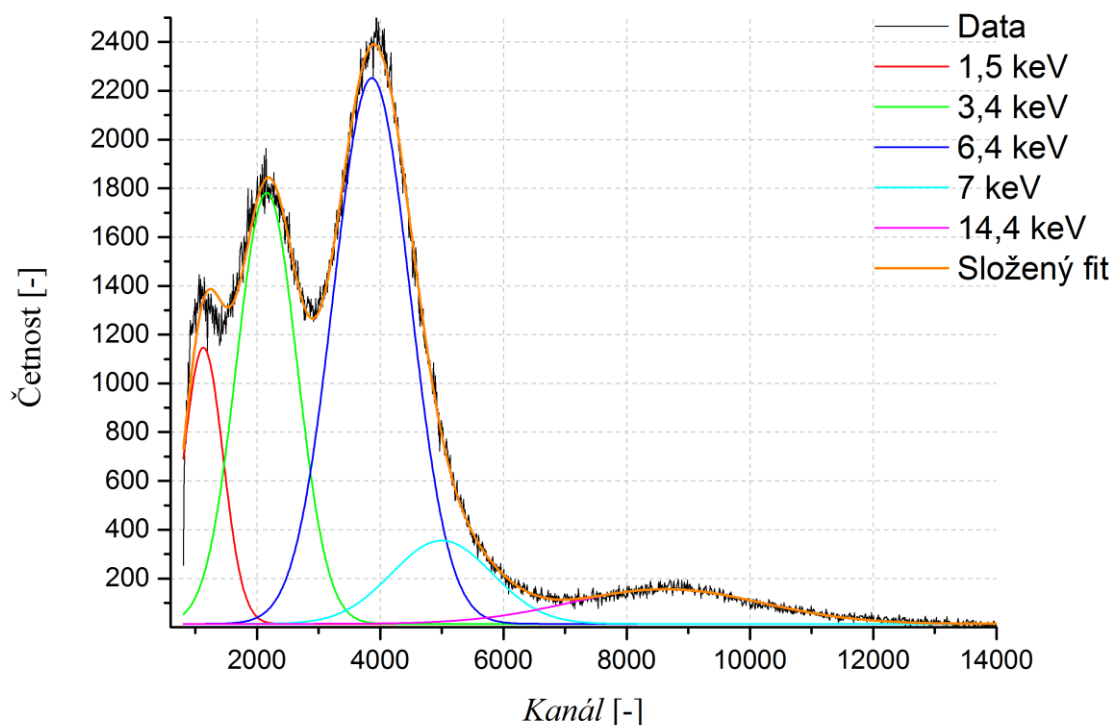
Pro potřeby výpočetní simulace byla tvarově komplikovaná detekční plocha detektoru nahrazena jednoduchou kruhovou plochou o stejné detekční ploše. Do definované vzdálenosti před detektor byl umístěn zářič o známé aktivitě. Následně bylo spuštěno měření a byl změřen počet detekovaných fotonů, přičemž záření procházelo pouze vzduchem. Poté proběhlo další měření se zachováním konfigurace, před zářič byl však umístěn měděný plíšek. Díky tomu docházelo k absorpci fotonů o energii 6,4 keV a 14,4 keV již před detektorem. Tímto způsobem bylo proměřeno pozadí detektoru.

Konkrétní parametry měření jsou shrnuty v tabulce 2.

Tabulka 2: Parametry měření účinnosti plynového detektoru

Parametry měření	
Datum měření	24.1.2019
Doba měření (live time)	3600 s
Vzdálenost zářič-detektor	155 mm
Detekční plocha	1323 mm <sup>2</sup>
Původní aktivita zářiče	1,85 GBq ke dni 15.11.2010
Plocha zářiče	78,5 mm <sup>2</sup>

Naměřená mnohokanálová analýza po odečtení pozadí detektoru je zobrazena na obrázku 20.



Obrázek 20: Mnohokanálová analýza plynového detektoru po odečtení pozadí.

Aby bylo možné z naměřené mnohokanálové analýzy vyčíst počty fotonů odpovídající jednotlivým energiím, bylo nutné data proložit vhodnými křivkami. Fit byl proveden pěti Gaussovskými křivkami. Funkce na obrázku znázorněna červeně odpovídá fotonům o energii 1,5 keV. Funkce zobrazena zeleně odpovídá fotonům o energii 3,4 keV. Fotony o energiích 1,5 keV a 3,4 keV vznikají jako důsledek interakcí plynu s fotony o vyšších energiích, jež vznikají deexcitací <sup>57</sup>Fe z vyšších energetických hladin [24]. Popřípadě vlivem interakcí fotonů s duralovým obalem detektoru. Funkce zobrazená zeleně představuje fotony o energii 6,39 keV a 6,40 keV. Funkce zobrazená modře představuje fotony o energii 7,06 keV a 7,11 keV. Funkce zobrazená tyrkysovou barvou představuje fotony o energii 14,4 keV.



Pro výpočet účinnosti plynového detektoru pro energie 6,4 keV byla použita data odpovídající fotonům o energiích 6,39 keV, 6,40 keV, 7,06 keV a 7,11 keV. Pro výpočet účinnosti plynového detektoru pro energii 14,4 keV byla použita data odpovídající fotonům a energii 14,4 keV. Naměřené účinnosti plynového detektoru jsou shrnuty v tabulce 3.

Tabulka 3: Naměřené účinnosti plynového detektoru

Energie	Účinnost	Nejistota
6,4 keV	77 %	7 %
14,4 keV	44 %	7 %

Na výslednou nejistotu měla stejně jako v předchozím případě vliv nejistota určení aktivity zářiče (5 %) a nejistota určení vzdálenosti detektoru a zářiče (4 %).

## 6.2. Určení účinnosti scintilačního detektoru (NaI:Tl)

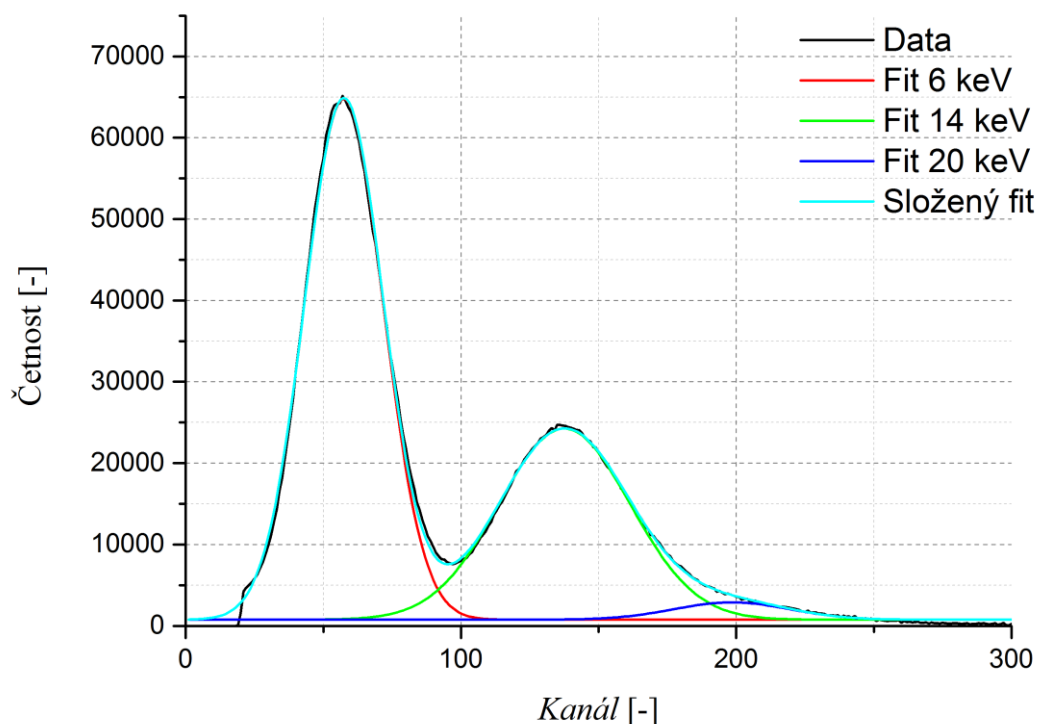
Další aplikací výpočetní simulace je určení účinnosti fokusačního prvku MCX. Aby však bylo možné účinnost změřit co nejpřesněji, je třeba nejprve určit účinnost detektoru, který bude pro charakterizaci prvku MCX sloužit. Jedná se o scintilační detektor zkonstruovaný na pracovišti Katedry experimentální fyziky [25]. Postup měření probíhal obdobně jako v kapitole 5, proto zde nebude detailně rozebrán.

Parametry měření jsou shrnuty v tabulce 4.

Tabulka 4: Parametry měření účinnosti scintilačního detektoru

Parametry měření	
Datum měření	13.12.2018
Doba měření (live time)	7200 s
Vzdálenost zářič-detektor	Postupně: 11, 21, 32, 41, 51 cm
Detekční plocha	201 mm <sup>2</sup>
Původní aktivita zářiče	1,85 GBq ke dni 1.9.2011
Plocha zářiče	78,5 mm <sup>2</sup>

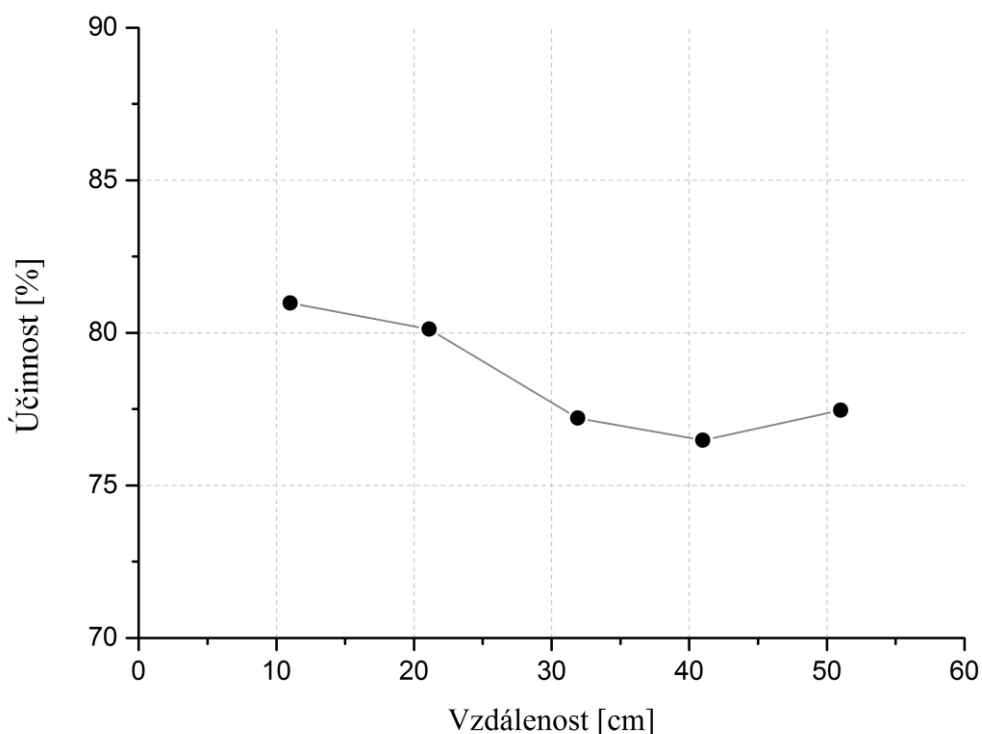
Na obrázku 21 je zobrazena naměřená mnohokanálová analýza ve vzdálenosti detektor – zářič 11 cm po odečtení pozadí.



Obrázek 21: naměřená mnohokanálová analýza ve vzdálenosti detektor – zářič 11 cm po odečtení pozadí.

Aby bylo možné určit počty fotonů odpovídající daným energiím, bylo třeba naměřená data proložit vhodnou křivkou. V tomto případě bylo prokládání provedeno třemi Gaussovskými funkcemi. Funkce označená červeně představuje fotony o energiích 6,39 keV a 6,40 keV.

Zelená křivka odpovídá fotonům o energii 14,4 keV. Třetí pík, odpovídající energii 20,2 keV je reprezentovaný modrou barvou a je pravděpodobně způsoben rhodiovou maticí. Ta je součástí zářiče. Fotony o energiích 122,1 keV a 136,5 keV mohou interagovat s rhodiovou maticí, čímž dochází k vyzáření fotonů o energii 20,2 keV. Jako platné fotony byly počítány fotony o energii 14,4 keV. Tímto způsobem byla účinnost vypočtena v několika vzdálenostech od zářiče. Průběh závislosti účinnosti na vzdálenosti je znázorněn na obrázku 22.



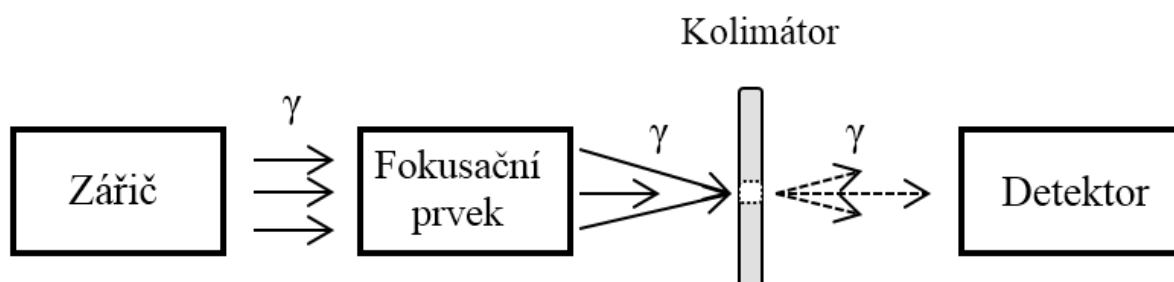
Obrázek 22: Závislost účinnosti scintilačního detektoru na vzdálenosti od zářiče.

Účinnost detektoru byla stanovena jako průměrná hodnota účinností v jednotlivých vzdálenostech. Nejistota byla způsobena nejistotou aktivity zářiče (5 %) a nepřesností určení vzdálenosti (4 %).

$$\mu_d = 78 \pm 7 \%$$

### 6.3. Určení účinnosti fokusačního prvku MCX

Se znalostí účinnosti detektoru bylo možné určit účinnost samotného fokusačního prvku. Vlivem významné závislosti účinnosti na úhlu dopadu záření do apertury fokusačního prvku [1] nebylo možné pouze drobně upravit experimentální uspořádání z kapitoly 5.1. Fokusační prvek bylo nutné umístit do polohovacího zařízení vyvinutého speciálně pro měření s fokusačním prvkem. Blokové schéma experimentu je znázorněno na obrázku 23.



Obrázek 23: Blokové schéma experimentu, Upraveno z [1].

V tomto experimentu bylo velmi důležité mezi fokusační prvek a detektor umístit kolimátor. Ten je možné umístit buď přímo do ohniska, nebo těsně před něj. Kolimátor byl sestaven ze dvou olověných destiček s výřezem (kleštiny), které byly umístěny na motorizovaných posuvech. Tím bylo možno měnit otvor kolimátoru od průměru otvoru jednoho centimetru až do otvoru přibližně kruhového tvaru o průměru 250  $\mu\text{m}$ . Při měření účinnosti kapiláry byl otvor kolimátoru maximálně přivřen, aby byly detekovány pouze fokusované fotony. Parametry měření jsou shrnuty v tabulce 5.

Tabulka 5: Parametry měření účinnosti fokusačního prvku

Parametry měření	
Datum měření	1-5.11.2018
Doba měření (live time)	92000 s
Vzdálenost zářič-fokusační prvek	362 mm
Detekční plocha	50,3 mm <sup>2</sup>
Původní aktivita zářiče	1,85 GBq ke dni 21.7.2017
Plocha zářiče	78,5 mm <sup>2</sup>

Naměřená hodnota účinnosti fokusace MCX prvku včetně korekce na účinnost detektoru byla stanovena jako:

$$\mu_f = 18 \pm 13 \%$$

Nejistota byla způsobena především nejistotou původní aktivity zářiče (10 %), dále pak nejistotou určení účinnosti detektoru (7 %) a nejistotou určení vzdálenosti (4 %).

## 7. Charakterizace tvaru fokusovaného svazku

### 7.1. Motivace

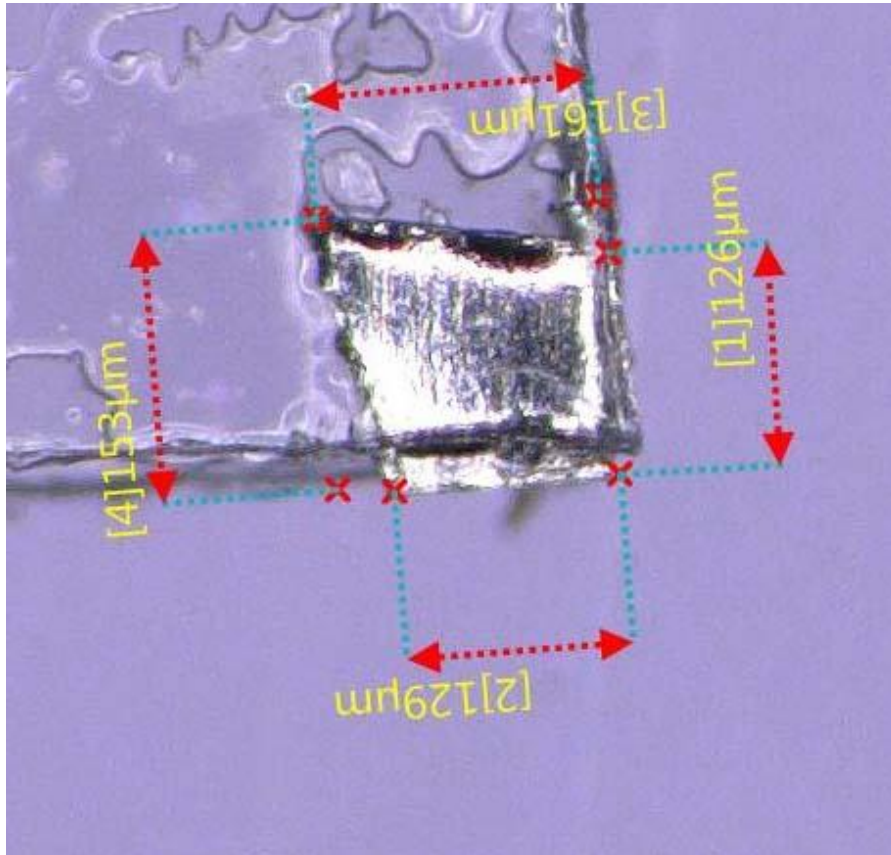
Jedním z hlavních cílů práce je porovnání fokusace záření s kolimací záření. Tedy zda je výhodnější záření fokusovat, nebo zda stačí vyrobit vhodný kolimátor. Aby bylo možné srovnání obou případů také kvantifikovat, bylo nutné charakterizovat stopu svazku v ohnisku. Se znalostí průměru stopy svazku v ohnisku bude možné vypočítat množství fotonů dopadajících do stejné stopy při použití kolimace. Následně pak bude možné oba výsledky porovnat.

### 7.2. Přímé měření stopy fokusovaného svazku

Způsob měření, který by poskytoval velmi přesný výsledek, by představoval proměření stopy svazku přímo v ohnisku detektorem s vhodným kolimátorem. Příprava olověné destičky s tloušťkou stěny alespoň 5 mm a otvorem s průměrem nejvýše 20  $\mu\text{m}$  by sama o sobě byla dost náročný úkol. Následně by bylo nutné detektor umístit na polohovací zařízení, které v ohnisku bude definovanými kroky skenovat prostor. Tento způsob byl pro svou náročnost provedení zamítnut.

### 7.3. Nepřímé měření stopy fokusovaného svazku pomocí vhodného vzorku

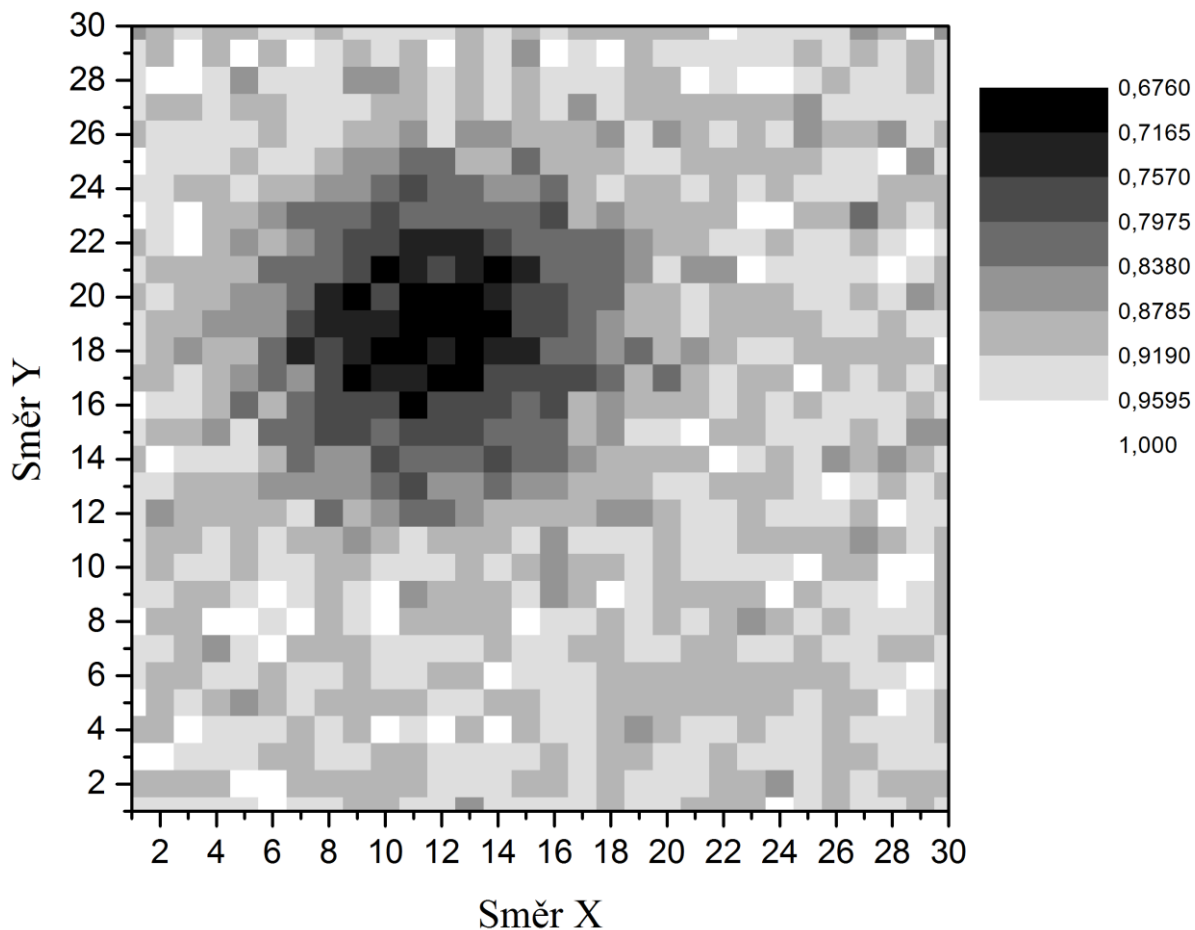
Rozměry stopy svazku je však možné měřit také nepřímou metodou. Do ohniska je třeba vložit vhodný vzorek. Vzorek by měl mít přibližně srovnatelné rozměry jako stopa svazku, v tomto případě tedy kolem 150  $\mu\text{m}$ . Dále by měl vzorek účinně absorbovat procházející gama záření, konkrétně fotony o energii 14,4 keV. V tomto případě byl zvolen tenký pásek nerez oceli o tloušťce 0,02 mm. Pásek byl postupně stříhán na stále menší kousky, čímž bylo dosaženo vhodného tvaru. Rozměry vzorku byly kontrolovány pomocí digitálního optického mikroskopu Keyence VHX-5000 [26]. Fotografie konečného tvaru vzorku včetně rozměrů hran je zobrazena na obrázku 24.



Obrázek 24: Fotografie tenkého pásku nerez oceli.

#### 7.4. Naměřené hodnoty

Vzorek z obrázku 24 byl zafixován a pomocí soustavy motorů bylo možné vzorkem pohybovat v prostoru svazku záření. Vzorek byl umístěn do roviny ohniska, následně se na definovanou dobu provedlo načítání platných detekcí. Poté bylo vzorkem posunuto o definovanou vzdálenost stále v rovině ohniska a postup čítání dat se opakoval. Tímto způsobem bylo možno proskenovat rovinu ohniska, v níž se nacházel fokusovaný svazek záření. Výsledkem měření byla intenzitní mapa. Normovaná intenzitní mapa je zobrazena na obrázku 25.



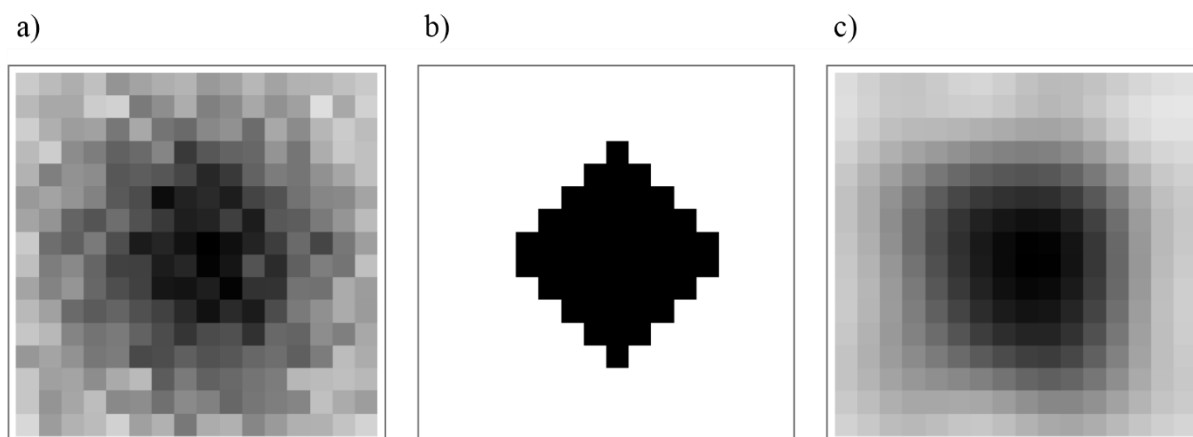
Obrázek 25: Normovaná intenzitní mapa s krokem 20  $\mu\text{m}$ .

Intenzitní mapa se skládá z celkem 900 bodů. Každý následující bod byl měřen s krokem o 20  $\mu\text{m}$ . V každém bodě měření bylo čítáno celkem 200 sekund. Na intenzitní mapě lze v levé horní části pozorovat pokles intenzity. To je oblast, kde docházelo k překrytí svazku a vzorku. Protože nebylo možné dopředu přesně určit, ve kterém místě se svazek a vzorek protnou, bylo nutné proměřit větší oblast. Velká oblast mimo překrytí svazku a vzorku se ovšem neměřila zbytečně. Naměřené hodnoty byly použity při určení účinnosti fokusačního prvku, které je rozebráno v kapitole 6.3.

### 7.5. Vyhodnocení tvaru svazku

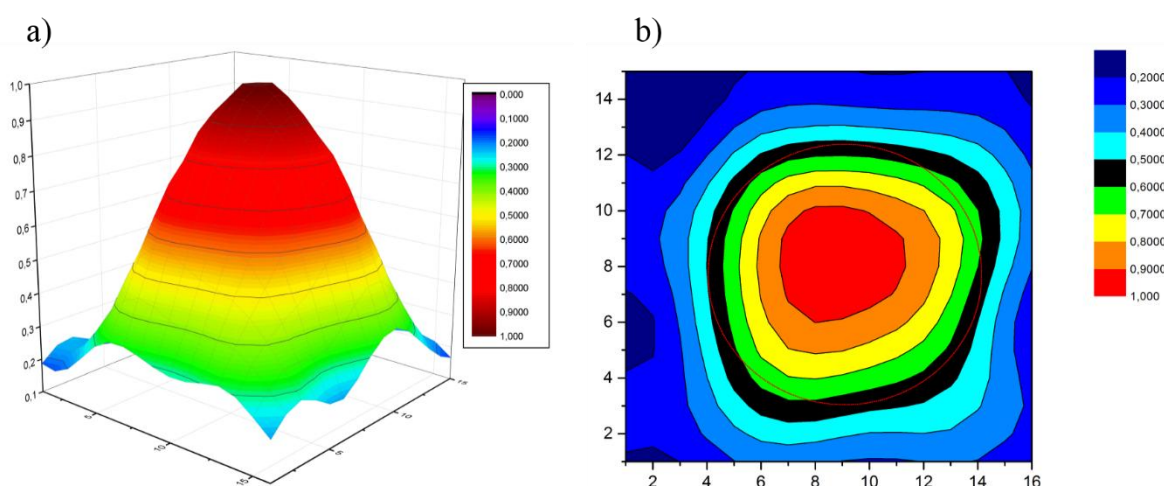
Naměřená oblast, ve které se svazek protíná se vzorkem, má rozměr 16 x 16 pole. Tato oblast v sobě nese informaci o tvaru vzorku a stopě svazku v ose kolmé na směr šíření záření. Tvar vzorku je známý, a proto je možné nástroji matematické analýzy extrahovat z naměřených dat informaci o tvaru stopy svazku. K získání informace o tvaru svazku byla použita matematická operace zvaná dekonvoluce. Výpočetní operace byly provedeny v programu Mathematica s pomocí Mgr. Davida Smrčky.

Na obrázku 26 a) jsou zobrazeny naměřené hodnoty z intenzitní mapy, na obrázku b) je zobrazena intenzitní mapa reprezentující vzorek, na obrázku c) je zobrazena intenzitní mapa znázorňující stopu svazku.



Obrázek 26: a) intenzitní mapa naměřených hodnot, b) intenzitní mapa reprezentující tvar vzorku a c) intenzitní mapa představující stopu svazku.

Aby bylo možné určit tvar stopy svazku, byla použita metoda FWHM (full width at half maximum). Za stopu svazku považujeme oblast s alespoň poloviční intenzitou oproti maximální intenzitě. Na obrázku 27 a) je znázorněna 3D intenzitní mapa tvaru stopy svazku, na obrázku 27 b) je znázorněna barevná intenzita mapa, černou barvou je znázorněna oblast s poloviční intenzitou oproti maximu, černá barva tedy znázorňuje hranici stopy svazku.



Obrázek 27: a) 3D intenzitní mapa tvaru stopy svazku, b) barevná intenzitní mapa. (Rozměry os x a y odpovídají násobkům 20  $\mu\text{m}$ .)

Z obrázku 27 b) vyplývá, že stopa svazku je přibližně kruhová. Lze ji tedy nahradit ideálním kruhem o poloměru 200  $\mu\text{m}$ .

Stopa svazku fotonů o energii 14,4 keV byla určena jako  $r_F = 200 \mu\text{m}$ . Nejistotu měření nelze spolehlivě určit. Nejistota byla způsobena především nedostatečným rozlišením intenzitní mapy, která byla použita pro dekonvoluci. Opakování měření s lepším rozlišením by ovšem znamenalo významné prodloužení doby měření. Získání intenzitní mapy s rozlišením 64 x 64 polí s neaktivnějším zářičem dostupným v laboratoři by trvalo zhruba 15 dní.



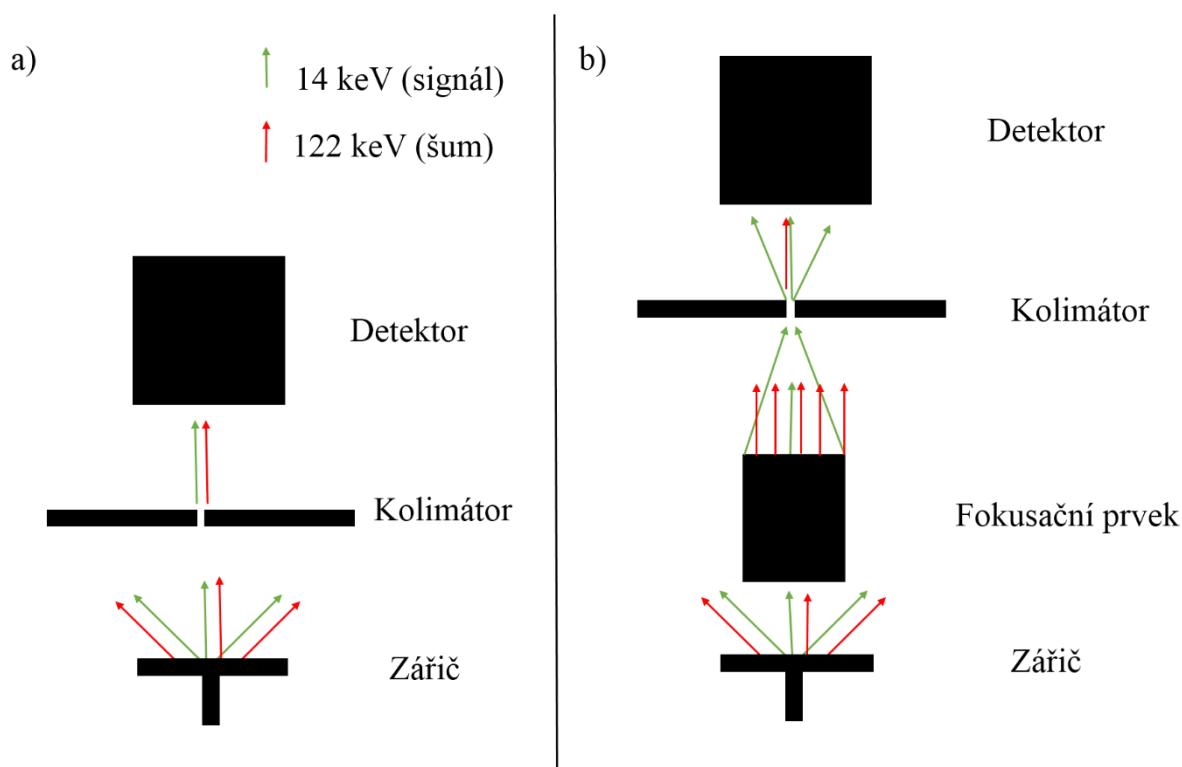
## 8. Porovnání konfigurací fokusace a stínění

### 8.1. Simulace

Na základě naměřených dat z předchozích kapitol je možné provést srovnání dvou technik měření. V této kapitole budou srovnány tyto dva případy:

- Měření bez fokusačního prvku, před vzorek/detektor je umístěna olověná destička s otvorem o průměru 200  $\mu\text{m}$ . Dále bude tento případ označován jako stínění.
- Měření pomocí fokusačního prvku MCX, který fokusuje fotony o energii 14,4 keV do oblasti o průměru 200  $\mu\text{m}$ . Dále bude tento případ označován jako fokusace.

Na obrázku 28 jsou znázorněna uspořádání obou měřicích technik:



Obrázek 28: a) Blokové schéma uspořádání experimentu stínění, b) blokové schéma uspořádání experimentu fokusace.

V tabulce 6 jsou uvedeny parametry měření obou případů:

Tabulka 6: Parametry simulace porovnání kolimace - fokusace

Parametry simulace	Stínění	Fokusace
Aktivita zářiče	0,55 GBq	0,55 GBq
Doba měření (live time)	92000 s	92000 s
Detekční plocha	0,03 mm <sup>2</sup>	0,03 mm <sup>2</sup>
Plocha zářiče	78,5 mm <sup>2</sup>	78,5 mm <sup>2</sup>
Vzdálenost zářič-detektor	<b>120 mm</b>	
Vzdálenost zářič-fokusační prvek		<b>362 mm</b>

Z tabulky 6 lze vyčíst, že jediný parametr, který se v obou případech liší, je vzdálenost zářiče a detektoru/fokusačního prvku. V případě stínění byla zvolena vzdálenost 120 mm, protože je to nejmenší vzdálenost, při které ještě nedochází k výraznému zvlnění pozadí spektra. V případě fokusace byla zvolena vzdálenost 362 mm, protože se jedná o skutečnou vzdálenost, která byla změřena mezi zářičem a fokusačním prvkem ve stávajícím experimentálním uspořádání Mössbauerova mikroskopu. Jako doplnění byla zvolena také vzdálenost 362 mm pro případ stínění.

V tabulce 7 jsou shrnuty výsledné hodnoty dle výpočetní simulace.

Tabulka 7: Vypočtené hodnoty SNR pro různé konfigurace

	Vzdálenost	Platné fotony	Šumové fotony	Šum detektoru	Celkový šum	Poměr signál/šum
<b>Stínění</b>	120 mm	773269	75894	13960	89854	<b>8,6</b>
<b>Stínění</b>	362 mm	80608	8305	13960	22265	<b>3,6</b>
<b>Fokusace</b>	362 mm	681011	5945	13960	19905	<b>34,2</b>

## 8.2. Vyhodnocení výsledků simulace

Porovnáme-li případy stínění ve vzdálenosti 120 mm a fokusaci, z vypočtených hodnot vyplývá, že množství platných fotonů je při užití stínění mírně vyšší oproti fokusaci. Mohlo by se tedy zdát, že levnější a výrazně jednodušší metoda – stínění – je výhodnější, skutečnost je však jiná. Zásadním parametrem ovlivňujícím kvalitu naměřeného spektra je totiž množství detekovaného šumu. To vystihuje poměr signálu k šumu tzv. SNR (signal-to-noise ratio) [27]. Šum do měření zavádějí především fotony o energii 122,1 keV. Ty se Comptonovsky rozptylují, přičemž část rozptýlených fotonů má takovou energii, že jsou detekovány v kanálech detektoru odpovídajícím 14,4 keV. Měřením bylo zjištěno, že z fotonů o energii 122,1 keV, které dopadnou do detektoru, je 1 % zaregistrováno jako šum v oblasti energií 14,4 keV. Z rozpadového schématu  $^{57}\text{Co}$  je známo, že pravděpodobnost vyzáření fotonů o energii 122,1 keV je téměř desetinásobná, oproti pravděpodobnosti vyzáření fotonu o energii 14,4 keV. Dalo by se tedy říct, že na 10 platných fotonů je detekován jeden šumový foton, původem z fotonu o energii 122,1 keV. Dále je k šumu je třeba také počítat šum detektoru, který je konstantní. Jedná se o charakteristiku detektoru, která se dá pouze částečně omezit vhodným naladěním detektoru a použitím vhodného scintilačního materiálu.

V případě stínění je vstupní apertura stejná jak pro užitečný signál, tedy fotony o energii 14,4 keV, tak pro šum, tedy fotony o energii 122,1 keV. **Výsledné SNR pro stínění je 8,6.**

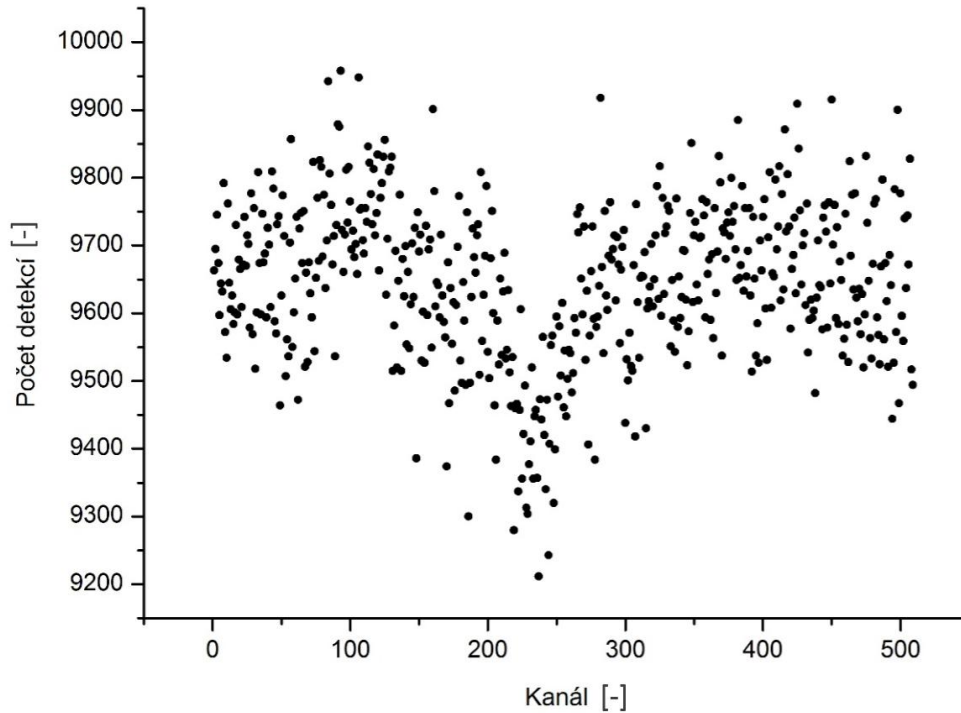
V případě fokusace je zde však výrazný rozdíl, neboť užitečný signál, který dopadne do apertury fokusačního prvku je fokusován. Fotony o energii 122 keV ale fokusovány nejsou, proto do detektoru dopadne výrazně méně šumu. Ilustrativně je tato situace znázorněna na obrázku 28. **Výsledné SNR pro fokusaci je 34,2.**

Porovnáním stínění a fokusace se ukazuje, že fokusaci je dosaženo v podstatě čtyřnásobného SNR, což je naprosto zásadní výhoda fokusace.

V případě stejných vzdáleností je SRN fokusace vyšší dokonce více než devětkrát. V praxi by ale nejspíše nebyl důvod volit tak velkou vzdálenost zářiče a detektoru.

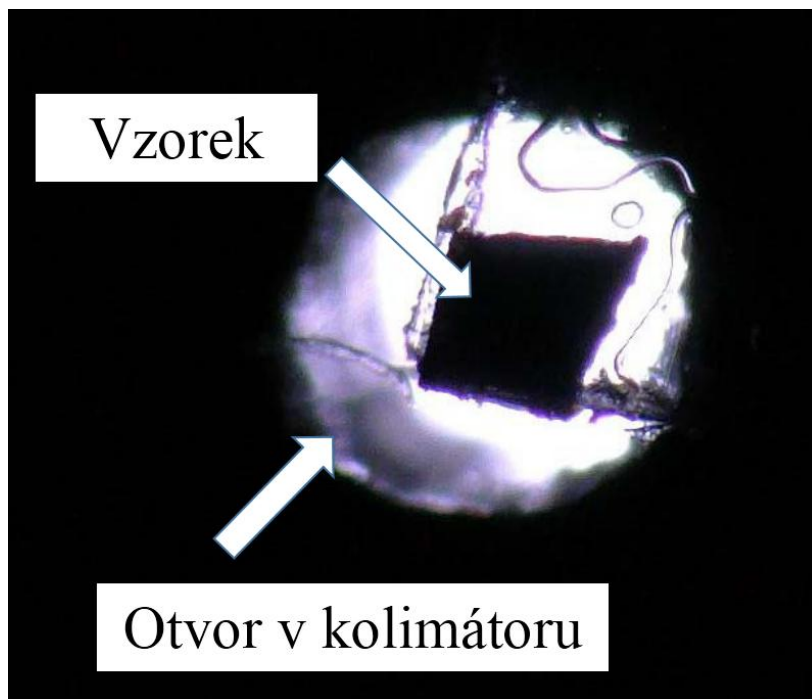
### 8.3. Měření MS spekter v konfiguracích fokusace a stínění

Nyní bylo třeba výsledky výpočetní simulace ověřit měřením. Proto byl pásek nerez oceli, zmíněný v kapitole 7.3, umístěn do ohniska fokusačního prvku a bylo spuštěno měření Mössbauerova spektra. Na obrázku 29 je zobrazeno spektrum naměřené v konfiguraci fokusace. Doba čítání spektra byla 357 hodin.



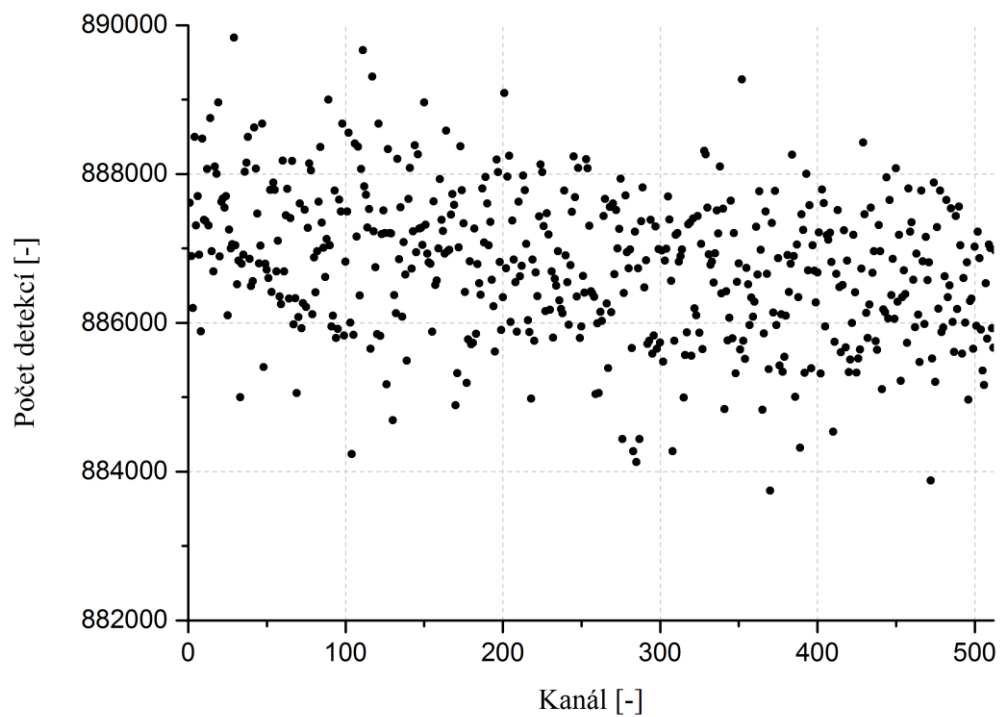
Obrázek 29: Naměřené spektrum v konfiguraci fokusace.

Následně bylo spuštěno měření spektra v režimu stínění. Fokusační prvek byl odstraněn. Vzorek byl připevněn k olověnému kolimátoru, který měl vstupní aperturu 250  $\mu\text{m}$ . Zářič byl umístěn 16 cm před vzorek. Fotografie vzorku umístěného v olověném kolimátoru je zobrazena na obrázku 30. Fotografie byla pořízena pomocí digitálního optického mikroskopu Keyence VHX-5000 [26].



Obrázek 30: Fotografie vzorku umístěného v otvoru kolimátoru

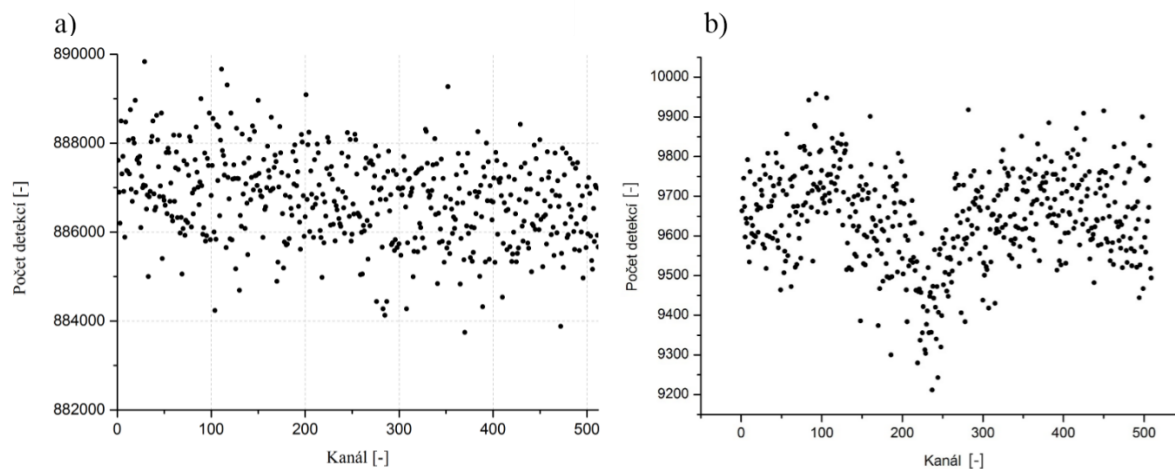
Poté bylo spuštěno měření Mössbauerova spektra. Doba čítání spektra byla 265 hodin. Na obrázku 31 je zobrazeno spektrum naměřené v konfiguraci stínění.



Obrázek 31: Naměřené spektrum v konfiguraci stínění.

## 8.4. Porovnání naměřených spekter

Pro názornost jsou obě naměřená spektra zobrazena vedle sebe na obrázku 32.



Obrázek 32: a) Naměřené spektrum v konfiguraci stínění, b) naměřené spektrum v konfiguraci fokusace.

Na obrázku 32 lze pozorovat, že zatímco v případě konfigurace stínění z naměřených hodnot nelze vyvodit žádný závěr, v případě konfigurace fokusace lze ve spektru pozorovat singlet, což odpovídá měřenému nerezovému pásku.

Lze tedy tvrdit, že v konfiguraci fokusace lze naměřit Mössbauerova spektra velmi malých vzorků, řádově kolem stovek mikrometrů, což v konfiguraci stínění s použitím běžného Mössbauerova spektrometru v transmisním režimu není dosažitelné v použitelných časech.

## 9. Hledání optimální vzdálenosti zářiče a fokusačního prvku

### 9.1. Motivace

Vzdálenost zářiče a vstupní apertury fokusačního prvku významně ovlivňuje kvalitu naměřeného spektra. Konstrukce Mössbauerova mikroskopu umožňuje do jisté míry tuto vzdálenost měnit. Pro optimalizaci funkčnosti MS mikroskopu je tedy zásadní nalézt optimální vzdálenost. Ve většině Mössbauerových spektrometrů se umísťuje vzorek do vzdálenosti od zářiče kolem 12 cm. Tedy tak, aby byla aktivita dopadající do apertury co nejvyšší, ale ještě nedocházelo k výraznému rozšíření spektrální čáry. V tomto případě je však celá situace složitější.

### 9.2. Faktory ovlivňující SNR

Bez využití fokusace je poměr platného signálu a šumu téměř nezávislý na vzdálenosti. Jediným faktorem ovlivňujícím tento poměr je útlum procházejícího záření ve vzduchu. Se zvyšující se vzdáleností klesá intenzita platného signálu rychleji oproti intenzitě šumu. Tento faktor SNR snižuje.

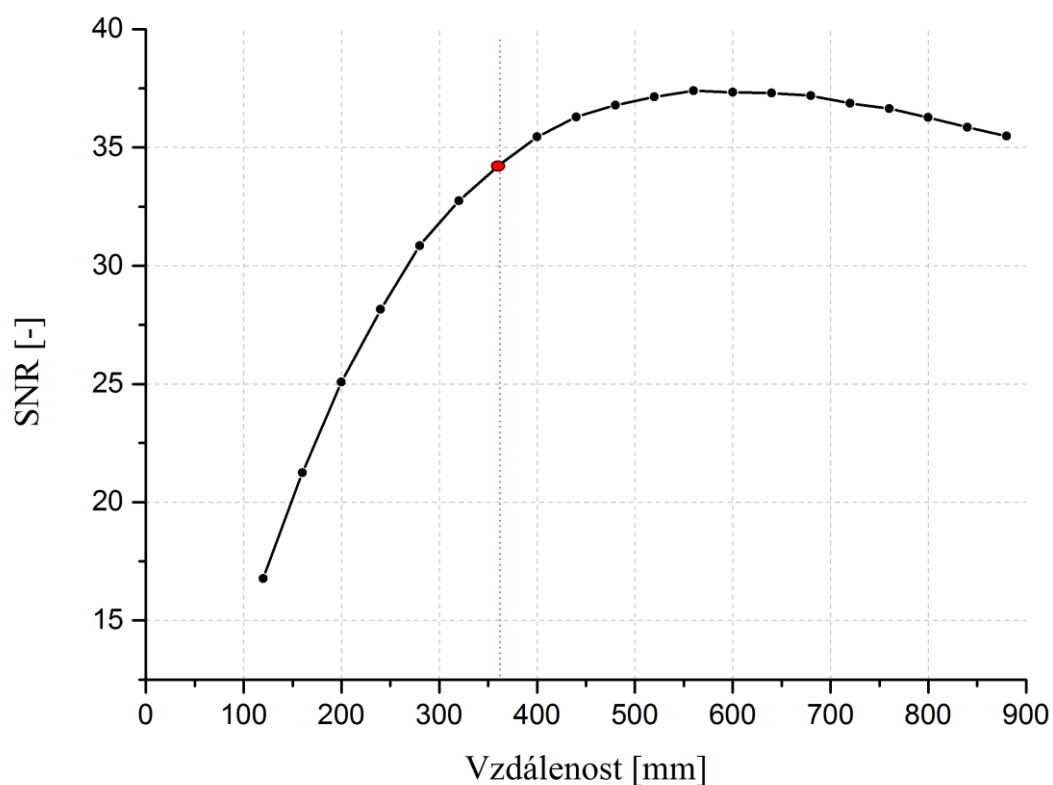
V případě využití fokusace je však SNR ovlivněno mimo faktoru útlumu ještě navíc těmito faktory:

- faktor fokusace signálu, který byl detailně zkoumán v kapitole 8. Ten SNR zvyšuje,
- úhlová podmínka fokusačního prvku, který je zmíněna v kapitole 3.4. Ta SNR snižuje,
- faktor absorpce/efektivní účinnosti fokusačního prvku, který je zmíněn v kapitole 2.4.3, dále pak v kapitole 6.3. Ten SNR snižuje.

### 9.3. Průběh SNR

S využitím výpočetní simulace, vytvořené v rámci diplomové práce, byl vypočítán průběh závislosti SNR na vzdálenosti. Výpočetní postup byl obdobný jako v kapitole 8.

Na obrázku 33 je znázorněna závislost SNR na vzdálenosti detektoru a vstupní apertury fokusačního prvku.



Obrázek 33: Průběh závislosti SNR na vzdálenosti zářiče a vstupní apertury fokusačního prvku

#### 9.4. Vyhodnocení výsledku

Z průběhu závislosti SNR na vzdálenosti je možné pozorovat, že nejvyšší nasimulované SNR odpovídá vzdálenosti 560 mm, konkrétně  $\text{SNR}_{\text{max}} = 37,4$ . Dalo by se ovšem říci, že optimální vzdálenost leží v intervalu 500 až 700 mm. V grafu je červeně zvýrazněn bod, který odpovídá vzdálenosti 362 mm. Ten označuje vzdálenost, která odpovídá momentálnímu uspořádání Mössbauerova mikroskopu. Konstrukční řešení stávajícího upořádání Mössbauerova mikroskopu umožňují posunout fokusační prvek do optimální vzdálenosti. Tím by bylo zvýšeno **SNR o 9%**. Bude však třeba ověřit, zda zvyšující se vzdálenost negativně neovlivní výsledky měření. Především jakým způsobem ovlivní měření vibrace a tepelná roztažnost nosníků mikroskopu.

## 10. Závěr

V rámci této práce bylo zkoumáno fokusované záření gama v Mössbauerově spektroskopii. Úvodní část byla věnována stručnému uvedení do problematiky Mössbauerovy spektroskopie. Dále byl rozebrán princip fokusace v Mössbauerově spektroskopii a jako doplnění bylo uvedeno několik příkladů aplikace fokusace v Mössbauerově spektroskopii.

Kapitola 3 byla věnována teoretickému rozboru problematiky dopadajícího záření do vstupní apertury detektoru. V rámci této kapitoly byly detailně zkoumány jednotlivé faktory, které ovlivňují dopadající aktivitu záření do detektoru.

Kapitola 4 se věnuje vývoji výpočetní simulace v programovacím prostředí LabVIEW, která umožňuje vypočítat dopadající aktivitu záření do apertury pro konkrétní případy.

Kapitola 5 je první z kapitol věnující se experimentální části diplomové práce. V této kapitole probíhalo ověření správnosti výpočtů výpočetní simulace. Výsledky, obdržené v této kapitole, byly v souladu s teoretickými výpočty. Proto bylo možné aplikovat simulaci na celou řadu praktických případů.

Aplikacím výpočetní simulace se věnuje kapitola 6. V rámci této kapitoly byla stanovena účinnost plynového toroidního detektoru jako  $\mu_d = 77 \%$  pro energie 6,4 keV. Dále byla určena účinnost scintilačního detektoru použité ve stávajícím Mössbauerově mikroskopu jako  $\mu_d = 78 \pm 7 \%$  pro energie 14,4 keV. Mezi hlavní výsledky této diplomové práce patří stanovení účinnosti fokusačního prvku MCX jako  $\mu_f = 18 \pm 13 \%$  pro energie 14,4 keV.

Kapitola 7 byla věnována charakterizaci tvaru fokusovaného svazku. V této kapitole byl uveden další zásadní výsledek předkládané diplomové práce, a to experimentálně naměřený průměr svazku v ohnisku  $r_f = 200 \mu\text{m}$ .

Se znalostí průměru fokusovaného svazku v ohnisku bylo možné s pomocí výpočetní simulace porovnat dvě techniky měření – s použitím fokusace záření a s použitím stínění. Tomuto porovnání se věnuje kapitola 8. Teoretické srovnání obou případů ukázalo, že v případě stínění je poměr signálu k šumu  $\text{SNR} = 8,6$  v případě fokusace je  $\text{SNR} = 34,2$ . Teoretické výpočty byly následně ověřeny pomocí experimentu, v kterém byly naměřeny Mössbauerova spektra v uspořádání stínění a v uspořádání fokusace. Zatímco v režimu stínění nebylo možno vzorek identifikovat, v režimu fokusace bylo možno z tvaru Mössbauerova spektra jednoznačně identifikovat měřený vzorek.

V kapitole 9 byla využita výpočetní simulace k proměření závislosti SNR na vzdálenosti pro případ fokusace. Bylo určeno, že při stávajícím uspořádání Mössbauerova mikroskopu dojde posunutím fokusačního prvku o 15 cm směrem od zářiče ke zvýšení SNR o 9 %.

V rámci této práce byla vyvinuta výpočetní simulace, která umožňuje určit dopadající aktivitu do apertury různých experimentálních sestav. S využitím výpočetní simulace byl charakterizován fokusační prvek, čímž bylo dosaženo všech vytyčených cílů.



## 11. Seznam použité literatury

- [1] J. Kočišćák, “*Charakterizace fokusovaného záření gama v Mössbauerově spektroskopii*”, 2017
- [2] P. Gütlich, “Fifty years of Mössbauer spectroscopy in solid state research - Remarkable achievements, future perspectives,” *Zeitschrift für Anorg. und Allg. Chemie*, svazek 638, č. 1, str. 15–43, 2012.
- [3] N. N. Greenwood, a T. C. Gibb, “*Mössbauer Spectroscopy*”, 1971.
- [4] M. Mašláň, “*Mössbauerova spektroskopie*“, 1992.
- [5] V. Procházka, “*Neobvyklá Mössbauerova spektroskopie*“, 2014.
- [6] J. Pechoušek, P. Novák, J. Navařík, P. Kohout, a L. Machala, “Mössbauer spectroscopy system with increased performance and flexibility --- utilization in material research,” *J. Electr. Eng.*, svazek 64, č. 6, str. 386–389, 2013.
- [7] P. J. Schields, D. M. Gibson, W. M. Gibson, N. Gao, H. P. Huang a I. Y. Ponomarev, “Overview of polycapillary X-ray optics,” *Powder Diffr.*, svazek 17, č. 2, str. 70–80, 2002.
- [8] C. A. MacDonald a W. M. Gibson, “Applications and advances in polycapillary optics,” *X-Ray Spectrom.*, svazek 32, č. 3, str. 258–268, 2003.
- [9] N. Gao, “A Compact Polycapillary-Based Microbeam X-Ray Fluorescence Analysis System for Remote Monitoring of Metal Contamination”.
- [10] Y. Li a kol., “Application of a polycapillary x-ray optics in high pressure XAFS,” *J. Opt. (United Kingdom)*, svazek 15, č. 7, 2013.
- [11] D. Mazon a kol., “Polycapillary lenses for Soft-X-ray transmission: Model, comparison with experiments and potential application for tomographic measurements in tokamaks,” *Nucl. Instruments Methods Phys. Res. Sect. B Beam Interact. with Mater. Atoms*, svazek 355, č. November 2016, str. 301–306, 2015.
- [12] D. Mazon a kol., “Polycapillary lenses for soft x-ray transmission in ITER: Model, comparison with experiments, and potential application,” *Rev. Sci. Instrum.*, svazek 87, č. 11, str. 11E302, 2016.
- [13] P. Gütlich, E. Bill, A. Trautwein, “*Mössbauer Spectroscopy and Transition Metal Chemistry, 2011*.”
- [14] “<sup>57</sup>Co Source“, dostupné online dne 13.5.2019 na: <http://ritverc.com/products/detail.php?ID=1691>.
- [15] “*X-ray mass attenuation coefficients*“, dostupné online dne 13.5.2019 na: <https://physics.nist.gov/PhysRefData/XrayMassCoef/ElemTab/z13.html>.
- [16] V. Procházka, “*Atomová a jaderná fyzika*“. 2012.
- [17] P. Novák, *Mössbauerův spektrometr s časovým rozlišením detekce fotonů záření gama - vývoj a aplikace*. 2016.
- [18] BIPM, “Table of Radionuclides ( Comments on evaluation ),” *Monogr. BIPM-5*, svazek

- 1–6, str. 1222, 2011.
- [19] J. Pechoušek, J., Vůjtek, M., Novák, P., Navařík, J., Frydrych, “Číslicové měřicí systémy pro Aplikovanou fyziku“, 2012.
- [20] V. V. Havlíček, M. Vlach, J. Vlach, “Začínáme s LabVIEW“, 2008.
- [21] J. T. P. Novák, J. Navařík, J. Pechoušek, V. Procházka, L. Machala, “Development of fast pulse processing algorithm for nuclear detectors and its utilization in LabVIEW-based Mössbauer spectrometer,” *J. Instrum.*, svazek 9, str. 1–11, 2014.
- [22] L. Kouřil, J. Pechoušek, P. Novák, J. Navařík, and P. Kohout, “Toroidal proportional gas flow counter for conversion X-ray Mössbauer spectroscopy,” *Nucl. Instruments Methods Phys. Res. Sect. B Beam Interact. with Mater. Atoms*, svazek 432, č. June, str. 55–59, 2018.
- [23] L. Kouřil, “Design and optimization of proportional gas flow counters for Mössbauer spectroscopy,” 2018.
- [24] V.P. Chechev, N.K. Kuzmenko “Table de Radionucléides” svazek 30, č. 18, str. 1–7, 2004.
- [25] J. Navařík, P. Novák, J. Pechoušek, L. Machala, D. Jančík, and M. Mašláň, “Precise compact system for ionizing radiation detection and signal processing with advanced components integration and electronic control,” *J. Electr. Eng.*, svazek 66, č. 4, str. 220–225, 2015.
- [26] Keyence Corporation, “VHX-5000 Digital Microscope User’s Manual”, 2014.
- [27] J. Pospíšil, “Analýzy a přenosové aspekty signálů”, 1993.

Příloha 1

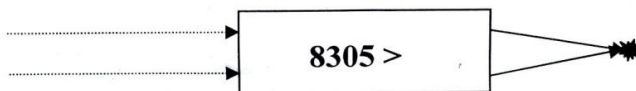


S/N: 8305  
Date: July 2, 2015

### Polycapillary X-Ray Optic Test Report

Output focal distance (to the optic enclosure)	50 mm	Output focal spot size* (FWHM) @ 14.4 keV	≤ 150 μm
Enclosure Length Diameter	83.0 mm 12.0 mm	Transmission efficiency of individual capillary channel** @ 14.4 keV	≥ 60%
Optic entrance acceptance diameter	8.0 mm		

\* The data were obtained by testing the optic in reverse orientation with a 150 μm x-ray source and combining the results with the simulation data under the incident beam conditions provided by the customer  
\*\* for x-rays within the field of view of each capillary channel



Physical orientation of optic within enclosure

Customer:	ScienceTech s.r.o. - Czech
PO #:	OBJ-006-2015
Sales Order #:	29526
XOS Drawing #:	6602686-01

*[Signature]*  
Approved by: Ning Gao, Ph.D.

15 Tech Valley Dr. East Greenbush, NY 12061  
Phone: (518)-880-1500 Fax: (518)-880-1520

Email: info@xos.com  
Visit us at: http://www.xos.com

Covered by one or more U.S. patents 5,192,869; 5,497,008; 5,745,547; 5,570,408 & other foreign patents pending

## Příloha 2

EUROSTANDARD CZ, s.r.o.  
Radiová 1, 102 00 Praha 10, tel. 266020499  
Držitel povolení SÚJB č.j 12997/2004 Ze dne: 15.7.2004 Platné do :31.12.2012

### Osvědčení uzavřeného radionuklidového zářiče ( URZ) č.: EUST-075-2011

Výrobní číslo URZ: MCo7.124/45.11 Typ: MCo7.124 Kód:  
Radionuklid: Co-57 Počet kusů: 1 Výrobce: Radium Institute  
Aktivita: 1,85 GBq Ke dni: 1.9.2011 Chyba měření: +/- 5%

Kermový (expoziční) příkon v 1 m:	Ke dni:	Chyba měření:
--------------------------------------	---------	---------------

Chemická a fyzikální forma: Co-57 elektrolyticky nanesen na folii z rhodia a tepelně difundován

Rozměry aktivní části: průměr Be-okénka 10 mm

Materiál a rozměry pouzdra: titanové pouzdro 14 x 14 mm

Údaje o zapouzdření a ochranném překryvu:

Stupeň odolnosti URZ: ISO/98/C54243

Další údaje: Jednoduchý zdroj

Potvrzení dodavatele, že těsnost a povrchová kontaminace URZ je v souladu s povolenými hodnotami dle ČSN 404302:		
Druh zkoušky: ořez za vlhka	Výsledek: vyhovuje	Datum: 3.1
Druh zkoušky:	Výsledek:	Datum:

Použitý kontejner: Pb kontejner

Způsob balení: typ A

Osvědčení URZ výrobce č: 3643/6

Datum vystavení osvědčení: 30.11.2010

Doporučená doba používání: 2 roky

Odběratel: Univerzita Palackého  
v Olomouci  
Přírodovědecká fakulta

Datum převzetí: 4.10.2011

Přepravní index: 0,1

příloženo

EUROSTANDARD CZ s.r.o.  
Radiová 1  
102 00 Praha 10  
Razítko a podpis odpovědného pracovníka: