

Johannes Delfs

**Inverse Fan-Beam
X-ray Diffraction Imaging
with Applications in
Liquids Identification**



Cuvillier Verlag Göttingen
Internationaler wissenschaftlicher Fachverlag



Inverse Fan-Beam X-ray Diffraction Imaging with Applications in Liquids Identification





Inverse Fan-Beam X-ray Diffraction Imaging with Applications in Liquids Identification

Dissertation
zur Erlangung des Doktorgrades
des Department Physik
der Universität Hamburg

vorgelegt von
Johannes Delfs
aus Hamburg

Hamburg

2012



Bibliografische Information der Deutschen Nationalbibliothek
Die Deutsche Nationalbibliothek verzeichnet diese Publikation in der
Deutschen Nationalbibliografie; detaillierte bibliografische Daten
sind im Internet über <http://dnb.d-nb.de> abrufbar.

1. Aufl. - Göttingen: Cuvillier, 2013

Zugl.: Hamburg, Univ., Diss., 2012

978-3-95404-442-9

Gutachter der Dissertation :	Prof. Dr. G. Harding Prof. Dr. R. L. Johnson
Gutachter der Disputation :	Prof. Dr. G. Harding PD Dr. R. Röhlsberger
Datum der Disputation :	19. Februar 2013
Vorsitzender des Prüfungsausschusses :	PD Dr. M. Martins
Vorsitzender des Promotionsausschusses :	Prof. Dr. P. Hauschildt
Dekan der MIN-Fakultät :	Prof. Dr. H. Graener

© CUVILLIER VERLAG, Göttingen 2013

Nonnenstieg 8, 37075 Göttingen

Telefon: 0551-54724-0

Telefax: 0551-54724-21

www.cuvillier.de

Alle Rechte vorbehalten. Ohne ausdrückliche Genehmigung
des Verlages ist es nicht gestattet, das Buch oder Teile
daraus auf fotomechanischem Weg (Fotokopie, Mikrokopie)
zu vervielfältigen.

1. Auflage, 2013

Gedruckt auf säurefreiem Papier

978-3-95404-442-9

Deutsche Zusammenfassung

Die Arbeit beschäftigt sich mit der Inversen Fächerstrahl-Geometrie für die Röntgendiffraktionsbildgebung (engl.: X-ray Diffraction Imaging (XDI)) und den Möglichkeiten, diese Methode für die Identifizierung von flüssigen und amorphen Substanzen zu nutzen, um sie im Bereich der Sprengstoffdetektion einzusetzen. Als charakteristisches Erkennungsmerkmal von Flüssigsprengstoffen wird die elastisch gestreute Strahlung aus kleinen Volumenelementen innerhalb von inhomogenen, ausgedehnten Objekten ausgewertet. Durch den Einsatz des neuartigen Verfahrens bei der Handgepäckkontrolle an Flughäfen könnten Belästigungen, Verunsicherungen und Kosten für die Passagiere in Zukunft vermieden werden. Es wurden Konzepte für die Verwendung mehrerer Detektoren, eines multidirektionalen Primärkollimators und eines Streukollimators vorgestellt und mit Hilfe numerischer Methoden ausgewertet. Es wurde ein Raytracing-Programm zur Berechnung des Primärstrahlprofils, der Streuwinkelverteilung und der Strahlungseffizienz bei vorgegebener Kollimatorgeometrie entwickelt. Messungen der Röntgenbeugung mit Synchrotronstrahlung wurden an verschiedenen, für Sicherheitsanwendungen relevanten Flüssigkeiten durchgeführt. Anhand der Messdaten wurden charakteristische Merkmale identifiziert, welche möglicherweise zur Sprengstoffdetektion geeignet sind. Es konnten materialspezifische Informationen über die amorphe Struktur und eine Abschätzung der effektiven Atomzahl erlangt werden. Weitere Parameter zur Beschreibung der Struktur und Dichte der Probe konnten anhand der molekularen Interferenzfunktion abgeleitet werden.



Abstract

The Inverse Fan-beam (IF) configuration for X-ray Diffraction Imaging (XDI) and its capability of identifying liquid and amorphous substances for the purpose of explosive detection are described and investigated. Material specific information can be obtained by measuring x-ray diffraction profiles from selected volume elements within inhomogeneous extended objects. This new technique can be used to fingerprint liquid explosives and may eliminate the inconvenience, uncertainty, and expense associated with monitoring liquids separately from hand luggage at airport checkpoints. Design concepts for multi-detector arrangements, a multi-directional primary collimator and the scatter imaging collimator are presented and evaluated using numerical procedures. A computer program using ray-tracing methods is described for calculating the primary beam profile, the scattering angle distribution, and the radiation efficiency with respect to the x-ray collimation geometry. Synchrotron x-ray diffraction measurements were performed on various liquids which are of interest for security applications. The diffraction profiles are presented and the key features which are potentially suitable for the purpose of explosive detection identified. Material specific information is obtained about the morphology and its effective atomic number. Several additional parameters describing the structure and density of the object under investigation can be derived from the peaks in the molecular interference function.





Contents

1	Introduction	1
2	Theoretical background	7
2.1	X-ray cross-sections	7
2.2	Photoelectric absorption	9
2.3	Coherent scattering	10
2.4	Incoherent scattering	14
2.5	Diffraction from crystals	16
2.6	Diffraction from liquids and amorphous solids	19
3	System geometry studies	25
3.1	Inverse Fan-beam configuration	25
3.2	Multi-detector arrangements	27
3.3	Multi-directional primary collimators	30
3.4	Scatter imaging collimator	36
4	Experimental	41
4.1	Synchrotron beamline	41



4.2	Multi-purpose diffractometer	43
4.3	Liquid samples	44
4.4	X-ray scattering measurements	46
5	Liquids identification studies	51
5.1	Validity of the independent atom model	51
5.2	Z dependence of x-ray scattering	54
5.3	HETRA: High Energy Tip Region Analysis	55
5.4	Calculation of the effective atomic number	59
5.5	Universal scattering function	62
5.6	The density dependence of x-ray scattering	63
5.7	Calculation of the packing fraction	65
6	Summary and outlook	69
A	Matlab source code	73
A.1	User input	73
A.2	User definitions	74
A.3	Geometry calculations	75
A.4	Primary collimator program	77
A.5	Ray-tracing program	85
B	Abbreviations	93
	List of Tables	95
	List of Figures	97



<i>CONTENTS</i>	ix
Bibliography	101
Publications	109
Acknowledgements	111

