

Modellierung, Design und Realisierung von gedruckten Perowskit-Röntgendetektoren

Zur Erlangung des akademischen Grades eines

DOKTOR-INGENIEURS

von der KIT-Fakultät für
Elektrotechnik und Informationstechnik
des Karlsruher Instituts für Technologie (KIT)

genehmigte

DISSERTATION

von

M.Sc. Henning Ivar Mescher

geb. in Weilburg an der Lahn

Tag der mündlichen Prüfung:

Hauptreferent:

Korreferent:

08.12.2023

Prof. Dr. rer. nat. Uli Lemmer

Prof. Dr. rer. nat. Oliver Jäkel



Dieses Werk ist lizenziert unter einer Creative Commons Namensnennung -
Weitergabe unter gleichen Bedingungen 4.0 International Lizenz (CC BY-SA 4.0):
<https://creativecommons.org/licenses/by-sa/4.0/deed.de>

Kurzfassung

Die charakteristische Eigenschaft von Röntgenstrahlung, Materie durchdringen zu können, wird bei einer Vielzahl wissenschaftlicher, industrieller und medizinischer Anwendungen für eine zerstörungsfreie Strukturuntersuchung intransparenter Objekte genutzt. Im Rahmen dieser Untersuchungen ist eine effiziente Detektion der Röntgenphotonen essentiell. Bedingt durch die lösungsbasierten Fabrikationsmethoden, die für die Herstellung von Perowskit-Halbleitern verwendet werden können, und der damit verbundenen Möglichkeit, Detektoren mit leistungsfähigen unkonventionellen Bauformen zu realisieren, liegt der Hauptfokus dieser Arbeit auf der Erforschung von gedruckten Perowskit-Röntgendetektoren. Aufgrund ihres Potentials, eine hohe Leistungsfähigkeit mit einer kosteneffizienten Herstellung zu verknüpfen, sind diesbezüglich insbesondere mehrschichtige und gefaltete Detektoren Erfolg versprechend. Die vorliegende Arbeit beinhaltet sowohl theoretische Untersuchungen im Hinblick auf die Modellierung, die Simulation und das Design von Perowskit-Röntgendetektoren als auch experimentelle Forschungsprojekte hinsichtlich ihrer Realisierung. Im Rahmen der theoretischen Untersuchungen wird zunächst eine Vergleichsgrundlage auf der Basis von konventionellen einschichtigen Detektoren entwickelt, welche anschließend für die Bewertung der Leistungsfähigkeit von mehrschichtigen und gefalteten Bauteilen verwendet wird. Die theoretische Leistungsfähigkeit wird hierbei durch die Röntgensensitivität und die Detektive Quanteneffizienz quantifiziert. Mithilfe dieser theoretischen Leistungsanalyse wird demonstriert, dass mehrschichtige und gefaltete Detektoren das Potential besitzen, hochleistungsfähige Bauteile zu realisieren. Verglichen mit einschichtigen Detektoren werden dabei bedeutend dünnere Absorberschichten benötigt, wodurch potentiell sowohl die Herstellungskosten als auch der Fabrikationsaufwand reduziert werden können. Bedingt durch das zusätzliche Potential gefalteter Detektoren, eine besonders hohe räumliche Auflösung zu ermöglichen, liegt der Hauptfokus der darauf folgenden experimentellen Untersuchungen auf der Realisierung gefalteter Perowskit-Röntgendetektoren. Hierfür werden zunächst mechanisch flexible Röntgendetektoren auf der Basis von tintenstrahlgedruckten Perowskit-Absorbern realisiert und analysiert. Die Leistungsbewertung bezieht sich hierbei auf eine Vielzahl unterschiedlicher Aspekte und zeigt unter anderem eine hohe Röntgensensitivität, eine ausreichende mechanische Flexibilität, eine hohe Röntgenstabilität und die Anwendbarkeit in der Röntgenbildgebung. Auf der Grundlage dieser Untersuchungen wird abschließend ein Prototyp eines gefalteten Perowskit-Röntgendetektors entwickelt, hergestellt und charakterisiert. Mithilfe dieses Prototyps wird eine hohe Röntgensensitivität, eine hohe räumliche Auflösung und eine hohe Röntgenstabilität nachgewiesen.

Die Ergebnisse dieser Arbeit können die Grundlage dafür bilden, weitere Anwendungsfelder mithilfe mechanisch flexibler Perowskit-Röntgendetektoren zu erschließen und gefaltete Perowskit-Röntgendetektoren in einem größeren Maßstab zu erforschen. Konzeptionelle Erweiterungen und eine Weiterentwicklung und Optimierung der Herstellung sind im Hinblick auf gefaltete Detektoren hierbei besonders vielversprechend.

Inhaltsverzeichnis

Kurzfassung	i
Abkürzungsverzeichnis	vii
1 Einleitung	1
1.1 Einführung und Motivation	2
1.2 Wissenschaftliche Zielsetzung	3
1.3 Gliederung	5
2 Grundlagen	7
2.1 Röntgenstrahlung	8
2.1.1 Spektralbereich und Abgrenzung zur Gammastrahlung	8
2.1.2 Allgemeine physikalische Beschreibung	8
2.1.3 Erzeugung mithilfe von Röntgenröhren	9
2.1.4 Wechselwirkung mit Materie	11
2.1.5 Dosimetrische Beschreibung	16
2.1.6 Detektion	18
2.2 Physikalische Beschreibung von direkten Röntgendetektoren	20
2.2.1 Shockley-Ramo Theorem	20
2.2.2 Größen zur Beschreibung der Leistungsfähigkeit	22
2.3 Halbleiter für direkte Röntgendetektoren	25
2.3.1 Klassische Halbleiter	25
2.3.2 Perowskit-Halbleiter	26
2.3.3 Organischer Halbleiter mit Szintillator-Teilchen	27
2.3.4 Ladungsträgedynamik in Halbleitern	28
3 Simulationsmodelle	31
3.1 Röntgensensitivität	32
3.1.1 Grundlegende Modellannahmen	32
3.1.2 Umwandlung der Röntgenphotonen in Elektron-Loch-Paare	33
3.1.3 Signalinduktion durch Drift der Elektronen und Löcher	34
3.1.4 Modellierung der Röntgensensitivität	38
3.2 Detektive Quanteneffizienz	39
3.2.1 Grundlegender Aufbau des linearen Systems	39

3.2.2	Signal- und Rauschbreitung durch die einzelnen Modell-Stufen des linearen Systems	40
3.2.3	Modellierung der Detektiven Quanteneffizienz	42
4	Experimentelle Methoden	45
4.1	Herstellung	46
4.1.1	Abscheidung aus dem flüssigen Aggregatzustand	46
4.1.2	Abscheidung aus dem gasförmigen Aggregatzustand	51
4.1.3	Laserstrukturierung	52
4.2	Charakterisierung	53
4.2.1	Strukturcharakterisierung	53
4.2.2	Bauteilcharakterisierung unter verschiedenen Bestrahlungsbedingungen	56
5	Simulation und Design von einschichtigen Röntgendetektoren	59
5.1	Motivation und Zielsetzung	60
5.2	Aufbau und Parameter für die Simulation von einschichtigen Röntgendetektoren	60
5.3	Optimierung der Röntgensensitivität	63
5.3.1	Einfluss der Röntgenabsorptionseffizienz	63
5.3.2	Einfluss der Ladungssammeleffizienz	65
5.3.3	Einfluss der Normierung und der Konversionseffizienz	66
5.3.4	Schichtdicken-Optimierung zur Maximierung der Röntgensensitivität	67
5.4	Designvorgaben unter Berücksichtigung der Röntgensensitivität	68
5.5	Zusammenfassung	70
6	Modellierung, Simulation und Design von mehrschichtigen Röntgendetektoren	73
6.1	Motivation und Zielsetzung	74
6.2	Modellierung von mehrschichtigen Röntgendetektoren	76
6.2.1	Röntgensensitivität von mehrschichtigen Röntgendetektoren	76
6.2.2	Röntgensensitivität von mehrschichtigen Röntgendetektoren mit quasi-direkten Absorbern	78
6.2.3	Detektive Quanteneffizienz von mehrschichtigen Röntgendetektoren	79
6.3	Simulation und Design von mehrschichtigen Röntgendetektoren	80
6.3.1	Parameter für die Simulation von mehrschichtigen Röntgendetektoren	80
6.3.2	Optimierung der Röntgensensitivität	82
6.3.3	Optimierung der Detektiven Quanteneffizienz	87
6.3.4	Designvorgaben unter Berücksichtigung der Röntgensensitivität und der Detektiven Quanteneffizienz	90
6.3.5	Vergleich der Leistungsfähigkeit mehrschichtiger und einschichtiger Röntgendetektoren	92
6.4	Zusammenfassung	95
7	Modellierung, Simulation und Design von gefalteten Röntgendetektoren	99
7.1	Motivation und Zielsetzung	100

7.2	Modellierung von gefalteten Röntgendetektoren	103
7.2.1	Röntgensensitivität von gefalteten Röntgendetektoren	103
7.2.2	Röntgensensitivität von gefalteten Röntgendetektoren mit quasi-direkten Absorbern	105
7.2.3	Detektive Quanteneffizienz von gefalteten Röntgendetektoren	106
7.3	Simulation und Design von gefalteten Röntgendetektoren	108
7.3.1	Parameter für die Simulation von gefalteten Röntgendetektoren	108
7.3.2	Optimierung der Röntgensensitivität	110
7.3.3	Optimierung der Detektiven Quanteneffizienz	115
7.3.4	Designvorgaben unter Berücksichtigung der Röntgensensitivität und der Detektiven Quanteneffizienz	118
7.3.5	Vergleich der Leistungsfähigkeit gefalteter, mehrschichtiger und einschichtiger Röntgendetektoren	120
7.4	Zusammenfassung	123
8	Realisierung von mechanisch flexiblen Röntgendetektoren auf der Basis von tintenstrahlgedruckten Perowskit-Absorbern	127
8.1	Motivation und Zielsetzung	128
8.2	Aufbau und Herstellung der mechanisch flexiblen Perowskit-Röntgendetektoren	129
8.3	Charakterisierung der experimentellen Leistungsfähigkeit der mechanisch flexiblen Perowskit-Röntgendetektoren	134
8.3.1	Charakterisierung der Röntgensensitivität	134
8.3.2	Charakterisierung des Dunkelstroms	143
8.3.3	Charakterisierung der Anstiegszeit	146
8.3.4	Überprüfung der mechanischen Flexibilität	147
8.3.5	Untersuchung der Röntgenstabilität	149
8.3.6	Anwendbarkeit in der Röntgenbildgebung	152
8.4	Zusammenfassung	153
9	Realisierung von einem gefalteten Perowskit-Röntgendetektor	157
9.1	Motivation und Zielsetzung	158
9.2	Aufbau und Herstellung des faltbaren Perowskit-Röntgendetektors	158
9.3	Charakterisierung der experimentellen Leistungsfähigkeit des faltbaren Perowskit-Röntgendetektors	162
9.3.1	Bauteilcharakterisierung mithilfe von Strom-Spannungs-Kennlinien	162
9.3.2	Charakterisierung der Röntgensensitivität	165
9.3.3	Charakterisierung der räumlichen Auflösung	172
9.3.4	Untersuchung der Röntgenstabilität	177
9.4	Zusammenfassung	178
10	Zusammenfassung, Vergleich mit aktuellen Entwicklungen und Ausblick	181
10.1	Zusammenfassung	182
10.2	Vergleich mit aktuellen Entwicklungen	186
10.3	Ausblick	187

A Anhang zu Kapitel 8	189
B Anhang zu Kapitel 9	191
Abbildungsverzeichnis	193
Tabellenverzeichnis	197
Eigene Veröffentlichungen	199
Publikationen in referierten Fachzeitschriften	199
Publikationen zu Konferenzen	199
Vorträge auf Konferenzen	200
Betreute studentische Arbeit	200
Literaturverzeichnis	201
Danksagung	217

Abkürzungsverzeichnis

a-Se	Amorphes Selen
A⁺	A-Kation
Ag	Silber
Ar	Argon
Au	Gold
B²⁺	B-Kation
BCP	Bathocuproin
Bi	Bismut
Br	Brom
Br⁻	Bromid-Ion
c-PEDOT:PSS	Hochleitfähiges Poly-(3,4-ethyldioxythiophen)-poly-(styrolsulfonat) (c für engl. conductive)
C	Kohlenstoff
CCD	Ladungsgekoppeltes Bauteil (engl. charge-coupled device)
CdZnTe	Cadmiumzinktellurid
CPE	Gleichgewicht geladener Teilchen (engl. charged-particle equilibrium)
Cs	Caesium
Cs⁺	Caesium-Ion
CT	Computertomographie
DMF	<i>N,N</i> -Dimethylformamid
DMSO	Dimethylsulfoxid
DoD	Tropfen bei Bedarf (engl. drop-on-demand)
DQE	Detektive Quanteneffizienz
ESF	Kantenspreizfunktion (engl. edge spread function)
F8T2	Poly([9,9-dioctylfluorenyl-2,7-diyl]-co-bithiophen)

FA	Formamidinium ($\text{CH}(\text{NH}_2)_2$)
FA^+, $\text{CH}(\text{NH}_2)_2^+$	Formamidinium-Ion
Ga	Gallium
GA	Guanidinium
GOS:Tb	Terbium-dotiertes Gadoliniumoxysulfid
H	Wasserstoff
HgI₂	Quecksilberiodid
I	Iod
I⁻	Iodid-Ion
ICRU	International Commission on Radiation Units and Measurements
IPS	Institut für Photonenforschung und Synchrotronstrahlung
ITO	Indiumzinnoxid
KERMA	Freigesetzte kinetische Energie pro Masse (engl. kinetic energy released per mass)
KIT	Karlsruher Institut für Technologie
LSF	Linienpreizfunktion (engl. line spread function)
LSI	Linear verschiebungsinvariant (engl. linear and shift-invariant)
LTI	Lichttechnisches Institut
LUMO	Niedrigstes unbesetztes Molekülorbital (engl. Lowest Unoccupied Molecular Orbital)
m-CdZnTe	Monokristallines Cadmiumzinktellurid
m-MAPbI₃	Monokristallines Methylammoniumbleitriiodid
MA	Methylammonium (CH_3NH_3)
MA^+, CH_3NH_3^+	Methylammonium-Ion
MAPbI₃	Methylammoniumbleitriiodid
MTF	Modulationsübertragungsfunktion (engl. modulation transfer function)
N	Stickstoff
NEQ	Rauschäquivalente Quantenanzahl (engl. noise equivalent quanta)
NiO_x	Nickeloxid
NIST	National Institute of Standards and Technology
O	Sauerstoff
p-CdZnTe	Polykristallines Cadmiumzinktellurid

p-Hgl₂	Polykristallines Quecksilberiodid
p-MAPbI₃	Polykristallines Methylammoniumbleitriiodid
p-PbI₂	Polykristallines Bleiiodid
P3HT	Poly(3-hexylthiophen-2,5-diyl)
Pb	Blei
Pb²⁺	Blei-Ion
PbI₂	Bleiiodid
PCBM	Phenyl-C ₆₁ Buttersäuremethylester
PDMS	Polydimethylsiloxan
PEDOT:PSS	Poly-(3,4-ethylenedioxythiophen)-poly-(styrolsulfonat)
PEN	Polyethylenaphthalat
PET	Positronen-Emissions-Tomographie
PSF	Punktspreizfunktion (engl. point spread function)
PTFE	Polytetrafluorethylen
PVD	Physikalische Gasphasenabscheidung (engl. physical vapor deposition)
REM	Rasterelektronenmikroskop
Se	Selen
SMU	Quellen- und Messeinheit (engl. source measure unit)
SNR	Signal-Rausch-Verhältnis (engl. signal-to-noise ratio)
Sr	Strontium
TCP	Dreifach-Kationen-Perowskit (engl. triple cation perovskite)
TGME	Triethylenglykol-monomethylether
TIPGe-Pentacen	Bis(triisopropylgermylethynyl) Pentacen
TIPS-Pentacen	Bis(triisopropylsilylethynyl) Pentacen
X⁻	X-Anion

1 Einleitung

Dieses Kapitel ist der Einleitung dieser Arbeit gewidmet. Zu diesem Zweck wird im Verlauf des Kapitels zunächst die grundlegende Thematik der vorliegenden Untersuchungen eingeführt und motiviert. Anschließend wird die wissenschaftliche Zielsetzung und die Gliederung erläutert.

1.1 Einführung und Motivation

Die Röntgenstrahlung ist eine Form der elektromagnetischen Strahlung, welche am hochenergetischen Rand des elektromagnetischen Spektrums angesiedelt ist [1, Kapitel 1]. Innerhalb dieses hochenergetischen Spektralbereichs hängt die Wechselwirkung der Röntgenstrahlung mit Materie bedeutend von der Energie der Röntgenphotonen ab. In diesem Zusammenhang wird insbesondere die Art und die Ausprägung der Wechselwirkung von der Photonenenergie beeinflusst [2, Kapitel 7]. Infolgedessen können Röntgenphotonen einer bestimmten Energie Materialien in Abhängigkeit von deren Beschaffenheit durchdringen oder zumindest signifikant in diese eindringen. Aus diesem Grund kann die Röntgenstrahlung für eine zerstörungsfreie¹ Strukturuntersuchung von Objekten verwendet werden, die für sichtbares Licht intransparent sind. Diese charakteristische Eigenschaft der Röntgenstrahlung bildet die Grundlage für eine Vielzahl an unterschiedlichen Anwendungen in der Wissenschaft [3, 4], der Industrie [5, 6] und der Medizin [7, 8], in denen Röntgenphotonen für eine Charakterisierung von intransparenten Materialien verwendet werden.

Im Rahmen dieser Strukturuntersuchungen ist die Detektion der hochenergetischen Röntgenphotonen essenziell. Die Detektion der Röntgenstrahlung erfordert allerdings eine Wechselwirkung der Röntgenphotonen mit Materie. Folglich stellt die charakteristische Eigenschaft der Röntgenstrahlung, Materie durchdringen zu können, im Hinblick auf die Detektion eine Herausforderung dar. Im Allgemeinen kann die Strahlungsdetektion durch die Wechselwirkung zwischen der Strahlung und einem Material im gasförmigen, flüssigen oder festen Aggregatzustand realisiert werden [9, 10]. Die Untersuchungen in der vorliegenden Arbeit beziehen sich auf direkte Festkörper-Röntgendetektoren. In diesem Zusammenhang wird ein direkter Absorber bestehend aus einem Halbleiter verwendet, in welchem sowohl die Wechselwirkung der Röntgenstrahlung als auch eine Umwandlung in elektrische Ladung erfolgt [11, 12]. Die konventionelle Bauform dieser direkten Röntgendetektoren besteht im Wesentlichen aus einer einzelnen Absorber-Schicht, welche sich zwischen zwei Elektroden befindet. Die Bewegungen der im Halbleiter-Absorber erzeugten Ladungsträger führen hierbei unter den richtigen Voraussetzungen zu einer Induktion elektrischer Signale [13], welche ausgelesen werden können.

Im Hinblick auf das Absorber-Material direkter Röntgendetektoren können im Allgemeinen unterschiedliche Halbleiter in Betracht gezogen werden [14, Kapitel 45]. Die Anforderungen an das Absorber-Material liegen dabei im Wesentlichen in einer ausreichend starken Wechselwirkung mit den Röntgenphotonen, einer effizienten Erzeugung von Ladungsträgern und einem wirkungsvollen Ladungstransport. Im Hinblick auf eine potentielle Kommerzialisierung ist darüber hinaus eine kosteneffiziente Herstellung relevant. In einem vergleichsweise jungen Forschungsfeld werden in diesem Zusammenhang Perowskit-Halbleiter als Absorber-Material für direkte Röntgendetektoren untersucht [15, 16]. Es handelt sich hierbei um kristalline Halbleiter mit einer speziellen Zusammensetzung und bestimmten Kristallstrukturen [17, Kapitel 1]. Die Verwendung von Perowskit-Absorbern wurde hierbei insbesondere durch die vielversprechenden Forschungsergebnisse [18] initiiert, die mithilfe von Perowskit-Halbleitern in der Photovoltaik erreicht werden

¹ Zerstörungsfrei bezieht sich in diesem Zusammenhang auf eine makroskopische Betrachtung. Veränderungen auf mikroskopischer Ebene, die aufgrund von Wechselwirkungen der Röntgenphotonen mit Materie entstehen, werden an dieser Stelle nicht beachtet.

konnten. Die Bestandteile dieser Halbleiter können so ausgewählt werden, dass Absorber-Schichten mit einer hohen Röntgenabsorptionseffizienz realisiert werden können. Perowskit-Halbleiter bieten überdies eine effiziente Erzeugung von Ladungsträgern und zusätzlich einen wirkungsvollen Ladungstransport und sind infolgedessen besonders gut für eine Verwendung als Absorber in direkten Röntgendetektoren geeignet.

Perowskit-Halbleiter können darüber hinaus lösungsbasiert abgeschieden werden [19] und ermöglichen daher eine großflächige und kosteneffiziente Herstellung. Die Flüssigprozessierung von Perowskit-Halbleitern bietet zusätzlich die Möglichkeit, strukturierte Absorber mithilfe digitaler Drucktechnologien [20] auf dünnen mechanisch flexiblen Polymer-Substraten bei niedrigen Temperaturen herzustellen. Infolgedessen können mithilfe von Perowskit-Absorbern direkte Röntgendetektoren mit unkonventionellen Bauformen realisiert werden. Besonders vielversprechend sind diesbezüglich aufgrund ihres Potentials, eine hohe Leistungsfähigkeit zu ermöglichen, mehrschichtige und gefalteten Röntgendetektoren. Verglichen mit konventionellen einschichtigen Detektoren werden hierbei bedeutend dünnere Absorber-Schichten benötigt. Beide Bauformen bieten somit die Möglichkeit auf der Grundlage einer kosteneffizienten Herstellung mit einem potentiell geringen Herstellungsaufwand hochleistungsfähige Bauteile zu realisieren. Aus diesem Grund werden in den vorliegenden Untersuchungen neben den konventionellen einschichtigen Röntgendetektoren darüber hinaus Röntgendetektoren mit unkonventionellen mehrschichtigen und gefalteten Bauformen erforscht. Die aufeinander aufbauenden inhaltlichen Schwerpunkte dieser Arbeit erstrecken sich von der Modellierung über die Simulation und das Design bis hin zur Realisierung von gedruckten Perowskit-Röntgendetektoren.

1.2 Wissenschaftliche Zielsetzung

Im Fokus der vorliegenden Arbeit liegen fünf wesentliche Ziele, die inhaltlich eng miteinander verknüpft sind. Jedes einzelne dieser Ziele wird in einem einzelnen der Kapitel 5-9 behandelt. Die fünf wesentlichen Ziele bestehen hierbei in der:

Ziel 1 / Kapitel 5:

Entwicklung einer Vergleichsgrundlage für die Bewertung der theoretischen Leistungsfähigkeit von mehrschichtigen und gefalteten Röntgendetektoren auf der Basis von einschichtigen Röntgendetektoren,

Ziel 2 / Kapitel 6:

Bewertung der theoretischen Leistungsfähigkeit von mehrschichtigen Röntgendetektoren,

Ziel 3 / Kapitel 7:

Bewertung der theoretischen Leistungsfähigkeit von gefalteten Röntgendetektoren,

Ziel 4 / Kapitel 8:

Realisierung von mechanisch flexiblen Röntgendetektoren mit strukturierten Perowskit-Absorbern,

Ziel 5 / Kapitel 9:

Realisierung von einem gefalteten Perowskit-Röntgendetektor.

Abbildung 1.1 zeigt einen Überblick über diese fünf Ziele. Hierbei werden sowohl die inhaltlichen Zusammenhänge zwischen den einzelnen Zielen als auch die Zuordnung der Ziele zu den inhaltlichen Schwerpunkten illustriert.

Ein wesentlicher Aspekt der vorliegenden Untersuchungen besteht in der Erforschung direkter Röntgendetektoren mit unkonventionellen mehrschichtigen und gefalteten Bauformen. Im Rahmen dieser Arbeit wird der Ansatz verfolgt, die Leistungsfähigkeit dieser unkonventionellen Röntgendetektoren zunächst theoretisch zu bewerten, bevor eine potentielle Realisierung in Betracht gezogen wird. Als Vergleichsgrundlage für diese Leistungsbewertung wird die theoretische Leistungsfähigkeit konventioneller einschichtiger Röntgendetektoren herangezogen. Aus diesem Grund ist Kapitel 5 der **Entwicklung einer Vergleichsgrundlage für die Bewertung der theoretischen Leistungsfähigkeit von mehrschichtigen und gefalteten Röntgendetektoren auf der Basis von einschichtigen Röntgendetektoren** gewidmet. In diesem Zusammenhang kann im Wesentlichen auf bereits bestehende Simulationsmodelle zurückgegriffen werden und der inhaltliche Schwerpunkt in Kapitel 5 liegt daher auf der Simulation und dem Design. Auf der Grundlage der Ergebnisse aus Kapitel 5 kann anschließend die theoretische Leistungsbewertung unkonventioneller Röntgendetektoren erfolgen. Infolgedessen sind die Kapitel 6 und 7 der **Bewertung der theoretischen Leistungsfähigkeit von mehrschichtigen und gefalteten Röntgendetektoren** gewidmet. Hierbei ist eine Erweiterung der bereits bestehenden Simulationsmodelle auf mehrschichtige und gefaltete Röntgendetektoren erforderlich, sodass die inhaltlichen Schwerpunkte der Kapitel 6 und 7 sowohl auf der Modellierung als auch auf der Simulation und dem Design liegen. Basierend auf den Ergebnissen der

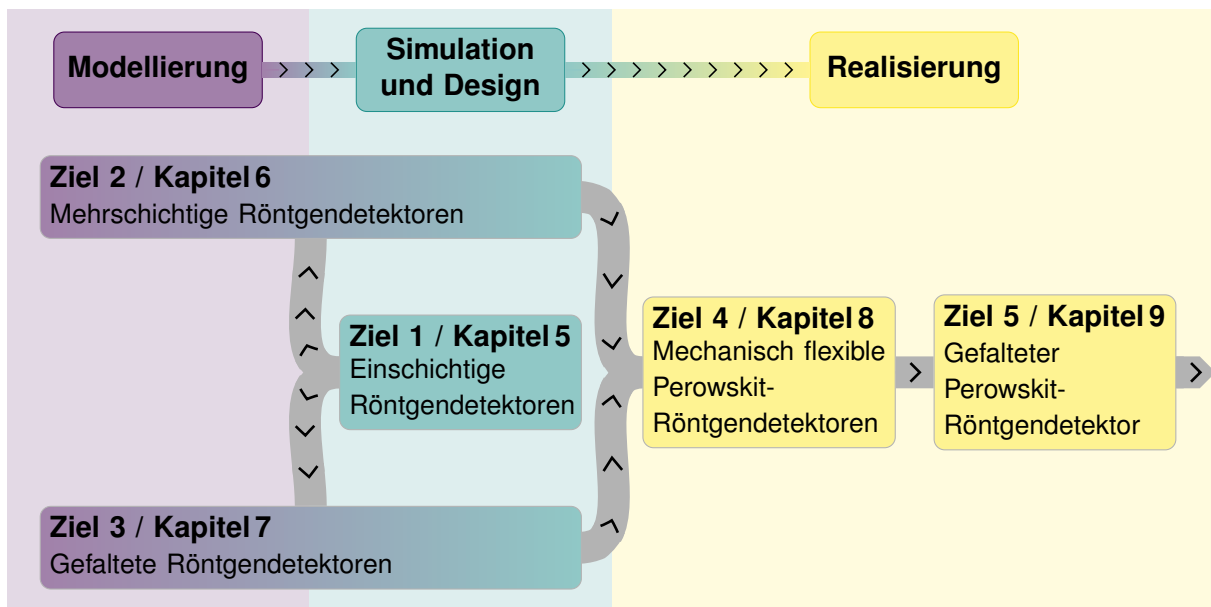


Abbildung 1.1: Überblick über die wesentlichen Ziele dieser Arbeit. Im Rahmen dieser Arbeit werden fünf wesentliche Ziele verfolgt. Jedes dieser Ziele wird in einem einzelnen der Kapitel 5-9 behandelt. Die inhaltlichen Zusammenhänge zwischen den einzelnen Zielen sind schematisch dargestellt. Die Ziele sind darüber hinaus farblich den inhaltlichen Schwerpunkten der Modellierung, der Simulation und dem Design sowie der Realisierung zugeordnet.

theoretischen Untersuchungen in den Kapiteln 5, 6 und 7 in Verbindung mit dem zusätzlichen Potential gefalteter Röntgendetektoren, eine besonders hohe räumliche Auflösung zu ermöglichen, liegt der Hauptfokus dieser Arbeit von Kapitel 8 an in der Realisierung gefalteter Perowskit-Röntgendetektoren. Zu diesem Zweck ist zunächst Kapitel 8 der **Realisierung von mechanisch flexiblen Röntgendetektoren mit strukturierten Perowskit-Absorbern** gewidmet. Auf der Grundlage der Ergebnisse der Untersuchungen in Kapitel 8 behandelt Kapitel 9 abschließend die **Realisierung von einem gefalteten Perowskit-Röntgendetektor**.

1.3 Gliederung

Der an dieses einleitende Kapitel anschließende Teil dieser Arbeit kann inhaltlich in die Bereiche Grundlagen (Kapitel 2), Methoden (Kapitel 3 und 4), Forschungsprojekte (Kapitel 5-9) und Zusammenfassung, Vergleich mit aktuellen Entwicklungen und Ausblick (Kapitel 10) unterteilt werden.

Grundlagen - Die Grundlagen, die für die vorliegenden Untersuchungen relevant sind, werden in Kapitel 2 beschrieben. In diesem Zusammenhang werden grundlegende Aspekte der Röntgenstrahlung, der physikalischen Beschreibung von direkten Röntgendetektoren und von Halbleitern für direkte Röntgendetektoren erläutert.

Methoden - Die Beschreibung der Methoden erfolgt im Rahmen dieser Arbeit in den Kapiteln 3 und 4. In Kapitel 3 werden hierbei zunächst die bereits bestehenden Simulationsmodelle beschrieben, die verwendet und erweitert werden. In Kapitel 4 werden anschließend die experimentellen Methoden eingeführt, die für die Fabrikation und die Untersuchung von Röntgendetektoren angewendet werden.

Forschungsprojekte - Die Beschreibung der Forschungsprojekte erstreckt sich über die Kapitel 5-9. Jedes einzelne dieser Kapitel ist dabei einem der fünf wesentlichen Ziele gewidmet (siehe Abschnitt 1.2). Diese Kapitel repräsentieren folglich den Hauptteil der vorliegenden Arbeit.

Zusammenfassung, Vergleich mit aktuellen Entwicklungen und Ausblick - Kapitel 10 beinhaltet eine abschließende Zusammenfassung der wesentlichen Ergebnisse dieser Arbeit, einen Vergleich mit aktuellen Entwicklungen und einen Ausblick auf potentielle Forschungsprojekte für zukünftige Untersuchungen.

2 Grundlagen

In diesem Kapitel werden die Grundlagen beschrieben, die für diese Arbeit relevant sind. Zu diesem Zweck werden im Verlauf des Kapitels grundlegende Aspekte der Röntgenstrahlung, der physikalischen Beschreibung von direkten Röntgendetektoren und von Halbleitern für direkte Röntgendetektoren eingeführt und beschrieben.

2.1 Röntgenstrahlung

Ein grundlegendes Verständnis der Röntgenstrahlung ist im Rahmen dieser Arbeit essenziell. Die folgenden Abschnitte dienen der Einführung und der Beschreibung der wesentlichen Aspekte der Röntgenstrahlung, die für die vorliegenden Untersuchungen relevant sind. Die Beschreibungen beziehen sich hierbei auf den Spektralbereich und die Abgrenzung zur Gammastrahlung, die allgemeine physikalische Beschreibung, die Erzeugung mithilfe von Röntgenröhren, die Wechselwirkung mit Materie, die dosimetrische Beschreibung und die Detektion.

2.1.1 Spektralbereich und Abgrenzung zur Gammastrahlung

Bei der Röntgenstrahlung handelt es sich um hochenergetische elektromagnetische Strahlung. Eine mögliche Eingliederung in das elektromagnetische Spektrum besteht darin, die Röntgenstrahlung zusammen mit der Gammastrahlung einem Spektralbereich mit einer Photonenenergie E im Intervall $4\text{ eV} \leq E \leq 2 \times 10^{10}\text{ eV}$ zuzuordnen und die beiden Strahlungsarten lediglich anhand der Art ihrer Erzeugung zu unterscheiden [1, Kapitel 1]. Hochenergetische elektromagnetische Strahlung, die durch die Wechselwirkung geladener Teilchen entsteht, wird hierbei üblicherweise als Röntgenstrahlung bezeichnet, wohingegen Strahlung, die durch die Emission von Atomkernen oder die Annihilation hervorgerufen wird, zur Gammastrahlung gezählt wird [2, Kapitel 1]. Die grundlegenden Beschreibungen und die Untersuchungen im Rahmen dieser Arbeit beziehen sich im Wesentlichen auf Röntgenphotonen. Auf der Grundlage der oben genannten Klassifizierung, bei der Röntgen- und Gammaphotonen sich lediglich in ihrer Entstehung unterscheiden, sind allerdings viele Erläuterungen und Schlussfolgerungen dieser Arbeit auf Gammaphotonen übertragbar.

2.1.2 Allgemeine physikalische Beschreibung

Eine adäquate physikalische Beschreibung der Röntgenstrahlung bedarf einer Vielzahl an physikalischen Größen. Im Folgenden werden einige grundlegende physikalischen Größen, die für die Beschreibung der Röntgenstrahlung in der vorliegenden Arbeit relevant sind, eingeführt. Die Erläuterungen beziehen sich auf die Anzahl der Photonen, die Strahlungsenergie, die Photonenfluenz und die Energiefluenz.

2.1.2.1 Anzahl der Photonen und Strahlungsenergie

Gemäß des Welle-Teilchen-Dualismus hat elektromagnetische Strahlung sowohl Wellen- als auch Teilchencharakter. Im Rahmen des Teilchenbildes lässt sich Röntgenstrahlung daher mithilfe der Anzahl der Röntgenphotonen N beschreiben. Die Energie dieser N Röntgenphotonen wird als Strahlungsenergie R bezeichnet. Im monoenergetischen Fall, in dem alle N Photonen die Energie E besitzen, ergibt sich die Strahlungsenergie R zu [21]: $R = NE$.

2.1.2.2 Photonenfluenz und Energiefluenz

Der Begriff der Fluenz beschreibt im Zusammenhang mit der Röntgenstrahlung das Verhältnis von einer physikalischen Größe zu einer Referenzfläche dA_{\perp} , welche senkrecht zur Ausbreitungsrichtung der Photonen orientiert ist. Im allgemeinen Fall beliebiger Ausbreitungsrichtungen der einzelnen Photonen wird das Flächenelement dA_{\perp} als Querschnittsfläche einer infinitesimalen Kugel im Raum gewählt, um eine senkrechte Orientierung des Flächenelements dA_{\perp} zur Ausbreitungsrichtung jedes einzelnen Photons zu gewährleisten [21]. Die Photonenfluenz Φ ist als die Anzahl der Photonen dN , die auf das Flächenelement dA_{\perp} auftreffen, definiert [21]:

$$\Phi = \frac{dN}{dA_{\perp}}. \quad (2.1)$$

In Analogie zur Photonenfluenz Φ ist die Energiefluenz Ψ als die Strahlungsenergie dR , die auf das Flächenelement dA_{\perp} auftrifft, definiert [21, 22]:

$$\Psi = \frac{dR}{dA_{\perp}}. \quad (2.2)$$

Im Falle von monoenergetischen Photonen der Strahlungsenergie $R = NE$ ergibt sich gemäß der Gleichungen (2.1) und (2.2) der Zusammenhang $\Psi = \Phi E$ zwischen der Energiefluenz Ψ und der Photonenfluenz Φ . Für den Fall polyenergetischer Röntgenstrahlung lässt sich die energetische Verteilung der Photonenfluenz Φ und der Energiefluenz Ψ mithilfe der spektralen Photonenfluenz Φ_E und der spektralen Energiefluenz Ψ_E beschreiben [21], [9, Kapitel 8]:

$$\Phi_E = \frac{d\Phi}{dE}, \quad \Psi_E = \frac{d\Psi}{dE}. \quad (2.3)$$

Hierbei sind $d\Phi$ und $d\Psi$ die Photonenfluenz und die Energiefluenz im Energieintervall $[E, E + dE]$. Entsprechend dem Zusammenhang im monoenergetischen Fall gilt der Zusammenhang $\Psi_E = \Phi_E E$ zwischen der spektralen Energiefluenz Ψ_E und der spektralen Photonenfluenz Φ_E [21].

Die Ableitungen der Photonenfluenz Φ und der spektralen Photonenfluenz Φ_E nach der Zeit t werden in der vorliegenden Arbeit als Photonenfluenzrate $\dot{\Phi} = d\Phi/dt$ und spektrale Photonenfluenzrate $\dot{\Phi}_E = d\Phi_E/dt$ bezeichnet.

2.1.3 Erzeugung mithilfe von Röntgenröhren

Die Erzeugung von Röntgenstrahlung kann auf der Grundlage von unterschiedlichen Verfahren wie beispielsweise mithilfe eines Synchrotrons, eines Freie-Elektronen-Lasers oder einer Röntgenröhre erfolgen [23, Kapitel 1]. Im Rahmen dieser Arbeit werden Röntgenröhren als Röntgenquellen verwendet. Die folgende Beschreibung von Röntgenröhren basiert im Wesentlichen auf den Erläuterungen in [23, Kapitel 1] und [24, Kapitel 6].

Das grundlegende Funktionsprinzip einer Röntgenröhre ist schematisch in Abbildung 2.1 dargestellt. Die Erzeugung von Röntgenstrahlung mithilfe einer Röntgenröhre basiert auf der Wechselwirkung zwischen beschleunigten Elektronen und einem Target. Die emittierte Röntgenstrahlung setzt sich aus Bremsstrahlung und charakteristischer Röntgenstrahlung zusammen. Die grundlegenden Komponenten einer Röntgenröhre sind eine Elektronenquelle und ein Target, die sich beide innerhalb einer Vakuumkammer befinden. Als Elektronenquelle wird üblicherweise ein Wolframdraht verwendet, der mithilfe von thermischer Emission Elektronen emittiert. Dabei wird der Wolframdraht von einem elektrischen Strom durchflossen, welcher das Material derart stark erhitzt, dass Elektronen im Wolframdraht genügend Energie besitzen, um den Wolframdraht zu verlassen. Zwischen der Elektronenquelle und dem Target, das in einem bestimmten Abstand zur Elektronenquelle positioniert ist, wird eine elektrische Spannung angelegt, mit deren Hilfe die emittierten Elektronen in Richtung des Targets beschleunigt werden. Die Elektronenquelle und das Target werden aus diesem Grund in diesem Zusammenhang ebenfalls als Kathode und Anode bezeichnet. Die Erzeugung von Röntgenstrahlung erfolgt durch die Wechselwirkung zwischen den auf die Anode auftreffenden Elektronen und dem Anodenmaterial. Hierbei führt die Wechselwirkung zwischen den auftreffenden Elektronen und den Atomkernen des Anodenmaterials zur Emission von Bremsstrahlung. Die Wechselwirkungen sind dabei unterschiedlich stark ausgeprägt und das Spektrum der emittierten Bremsstrahlung ist kontinuierlich. Zusätzlich zur Bremsstrahlung bewirkt die Wechselwirkung zwischen den auftreffenden Elektronen und den gebundenen Elektronen des Anodenmaterials die Emission charakteristischer Röntgenstrahlung. Als Folge dieser Wechselwirkung können die Atome des Anodenmaterials ionisiert werden. Die somit unbesetzten Energieniveaus können von anderen gebundenen Elektronen aus höheren Energieniveaus besetzt werden. Ein Übergang eines Elektrons aus einem höheren in ein niedrigeres Energieniveau führt hierbei zur Emission eines Photons, dessen Energie von den am Übergang beteiligten Energieniveaus abhängt. Die Lage der Energieniveaus und somit die Energien der charakteristischen Röntgenphotonen hängt vom verwendeten Anodenmaterial ab. Das Spektrum der Röntgenstrahlung, welches mithilfe einer Röntgenröhre erzeugt werden kann, setzt sich demzufolge

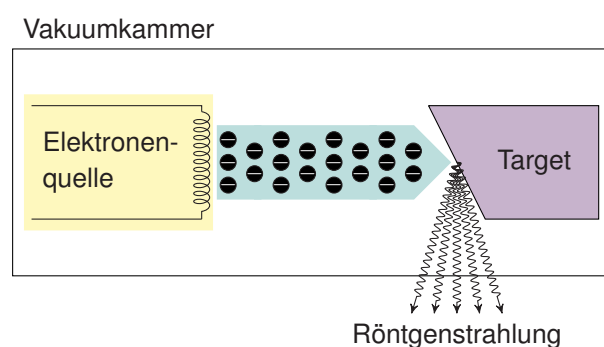


Abbildung 2.1: Schematische Darstellung des Funktionsprinzips einer Röntgenröhre. Eine Röntgenröhre besteht im Wesentlichen aus einer Elektronenquelle und einem Target, die sich beide innerhalb einer Vakuumkammer befinden. Die von der Elektronenquelle emittierten Elektronen werden in Richtung des Targets beschleunigt. Die Erzeugung von Röntgenstrahlung mithilfe einer Röntgenröhre basiert auf der Wechselwirkung zwischen den beschleunigten Elektronen und dem Target. Reproduziert in Anlehnung an [24, Kapitel 6].

aus einem kontinuierlichen Spektrum der Bremsstrahlung und den diskreten Spektren der charakteristischen Röntgenstrahlung zusammen. Neben der Erzeugung von Bremsstrahlung und charakteristischer Röntgenstrahlung bewirken die auf das Target auftreffenden Elektronen eine nicht zu vernachlässigende Erhitzung der Anode, welcher durch eine aktive Kühlung entgegengewirkt werden muss. Die Verwendung einer Vakuumkammer und der damit mögliche Betrieb bei einem geringen Druck ist für die Effizienz der Erzeugung von Röntgenstrahlung mithilfe einer Röntgenröhre essenziell, da somit Kollisionen der beschleunigten Elektronen mit anderen Teilchen reduziert werden können.

2.1.4 Wechselwirkung mit Materie

Röntgenstrahlung kann auf der Grundlage verschiedener Wechselwirkungsmechanismen mit Materie wechselwirken. Die Wechselwirkung kann mathematisch mithilfe von Wechselwirkungskoeffizienten beschrieben werden. Die folgenden Abschnitte dienen der Einführung und der Beschreibung verschiedener Mechanismen und Koeffizienten.

2.1.4.1 Wechselwirkungsmechanismen

Die folgenden Erläuterungen dienen der Beschreibung der wesentlichen Mechanismen, die bei der Wechselwirkung von Röntgenstrahlung mit Materie auftreten und darüber hinaus im Rahmen dieser Arbeit als relevant betrachtet werden. Die nachfolgende Einführung der Wechselwirkungsmechanismen von Röntgenstrahlung mit Materie basiert hierbei im Wesentlichen auf den Erläuterungen in [23, Kapitel 1] und [2, Kapitel 7].

Fotoelektrischer Effekt Beim Fotoelektrischen Effekt erfolgt die Wechselwirkung zwischen einem Röntgenphoton und einem gebundenen Elektron des wechselwirkenden Materials. Das Röntgenphoton wird hierbei absorbiert und überträgt seine gesamte Energie an das Elektron. Infolgedessen wird das gebundene Elektron in ein ungebundenes Elektron umgewandelt und das Atom des wechselwirkenden Materials wird ionisiert. Die Schwellenenergie des Röntgenphotons, ab welcher der Fotoelektrische Effekt auftreten kann, ergibt sich aus der Bindungsenergie des Elektrons.

Rayleigh-Streuung Die Rayleigh-Streuung repräsentiert einen Wechselwirkungsmechanismus, bei dem kein Energietransfer zwischen dem Röntgenphoton und dem wechselwirkenden Material stattfindet und das Röntgenphoton infolgedessen keine Energie verliert. Bei der Rayleigh-Streuung tritt folglich keine Ionisation auf, und es erfolgt lediglich eine Änderung der Ausbreitungsrichtung des Röntgenphotons.

Compton-Streuung Bei der Compton-Streuung erfolgt die Wechselwirkung zwischen einem Röntgenphoton und einem Elektron des wechselwirkenden Materials. Das Röntgenphoton wird hierbei gestreut und überträgt einen Teil seiner Energie an das Elektron. Bei der Compton-Streuung verliert das

Röntgenphoton einen Teil seiner Energie, und es erfolgt eine Änderung der Ausbreitungsrichtung des Röntgenphotons.

Paar- und Tripletbildung Bei der Paarbildung erfolgt die Wechselwirkung zwischen einem Röntgenphoton und dem elektrischen Feld eines Atomkerns des wechselwirkenden Materials. Das Röntgenphoton wird dabei absorbiert, und es wird ein Elektron und ein Positron erzeugt. Die Schwellenenergie des Röntgenphotons, ab welcher die Paarbildung auftreten kann, beträgt 1.022 MeV. In Analogie zur Paarbildung erfolgt die Wechselwirkung bei der Tripletbildung zwischen einem Röntgenphoton und dem elektrischen Feld eines Elektrons des wechselwirkenden Materials. Das Röntgenphoton wird hierbei absorbiert, es wird ein Elektron und ein Positron erzeugt und ein Teil der zur Verfügung stehenden Energie wird an das bereits bestehende Elektron des wechselwirkenden Materials übertragen. Die Schwellenenergie des Röntgenphotons, ab welcher die Tripletbildung auftreten kann, beträgt 2.044 MeV.

Ein Vergleich des Photoelektrischen Effekts, der Compton-Streuung und der Paarbildung zeigt, dass die Relevanz der einzelnen Wechselwirkungsmechanismen von der Energie der Röntgenphotonen und der Kernladungszahl des wechselwirkenden Materials abhängt. Wechselwirkungen auf der Grundlage des Photoelektrischen Effekts dominieren im Bereich niedriger Photonenenergien. Mit steigender Energie der Röntgenphotonen werden die Wechselwirkungen zunächst von der Compton-Streuung und anschließend von der Paarbildung dominiert. Die Ausdehnung der Energiebereiche, in denen der jeweilige Wechselwirkungsmechanismus dominiert, hängt dabei stark von der Kernladungszahl des wechselwirkenden Materials ab.

2.1.4.2 Wechselwirkungskoeffizienten

Die Wechselwirkung von Röntgenstrahlung mit Materie lässt sich mathematisch mithilfe von Wechselwirkungskoeffizienten beschreiben. Die in dieser Arbeit verwendeten Wechselwirkungskoeffizienten sind der Datenbank des *National Institute of Standards and Technology (NIST)* [25] entnommen¹. Die Datenbank basiert auf den Arbeiten von Seltzer [26] und Hubbell [27]. Die Beschreibung der Wechselwirkungskoeffizienten in den folgenden Abschnitten orientiert sich an [26] und an einer Veröffentlichung der *International Commission on Radiation Units and Measurements (ICRU)* [21].

Die formalen Definitionen der Wechselwirkungskoeffizienten von Photonen lassen sich mithilfe der schematischen Darstellung in Abbildung 2.2 anschaulich beschreiben. Hier sind N Photonen skizziert, die senkrecht auf eine Materialschicht mit einer infinitesimalen Dicke dl treffen. Das Material besitzt hierbei die Dichte ρ .

¹ Daten wurden im Zeitraum 05.07.2017-25.10.2017 aus der Datenbank abgerufen

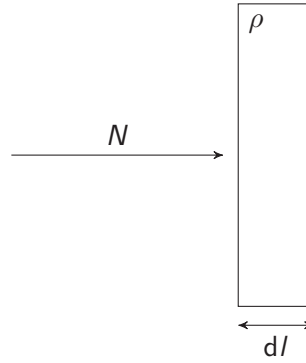


Abbildung 2.2: Schematische Darstellung zur Beschreibung der Wechselwirkungskoeffizienten von Photonen. Dargestellt sind N Photonen, die senkrecht auf eine Materialschicht mit einer infinitesimalen Dicke dl treffen. Das Material besitzt hierbei die Dichte ρ .

Massen-Schwächungskoeffizient Eine mögliche Definition des Massen-Schwächungskoeffizienten α/ρ basiert auf der Betrachtung der mittleren Anzahl der Photonen dN_W , die entlang der Strecke dl wechselwirken (siehe Abbildung 2.2). Im Rahmen dieser Betrachtungsweise kann der Massen-Schwächungskoeffizient α/ρ als Verhältnis aus dN_W/dl , der Anzahl der Photonen N und der Dichte des Materials ρ definiert werden [21]:

$$\frac{\alpha}{\rho} = \frac{1}{\rho dl} \frac{dN_W}{N}. \quad (2.4)$$

Basierend auf dieser Definition ergibt sich für die Anzahl der Photonen N die Differentialgleichung $dN/N = -dN_W/N = -\alpha dl$ mit dem linearen Schwächungskoeffizienten α . Mittels Integration folgt dann ein exponentieller Zusammenhang, auch bekannt als Lambert-beersches Gesetz, zwischen der Anzahl der auftreffenden Photonen N_0 und der Anzahl der transmittierenden Photonen $N(d)$ nach Durchquerung einer Materialschicht der Dicke d [23, Kapitel 1]:

$$N(d) = N_0 e^{-\alpha d}. \quad (2.5)$$

Eine alternative Definition des Massen-Schwächungskoeffizienten α/ρ basiert auf dem Gesamtwirkungsquerschnitt σ , der Avogadro Konstanten N_A und der molaren Masse M . Diese Betrachtungsweise ermöglicht es, zwischen den einzelnen Wechselwirkungsmechanismen (siehe Abschnitt 2.1.4.1) zu differenzieren [26, 21]:

$$\frac{\alpha}{\rho} = \frac{N_A}{M} \sigma = \frac{N_A}{M} \sum_j \sigma_j = \sum_j \frac{\alpha_j}{\rho}. \quad (2.6)$$

Dabei werden die unterschiedlichen Wechselwirkungsmechanismen mithilfe des Indexes j gekennzeichnet und durch den jeweiligen Wirkungsquerschnitt σ_j oder den jeweiligen Massen-Schwächungskoeffizienten α_j/ρ beschrieben.

Massen-Energieumwandlungskoeffizient In Analogie zur Definition des Massen-Schwächungskoeffizienten α/ρ in Gleichung (2.4) kann der Massen-Energieumwandlungskoeffizient α_{tr}/ρ mithilfe der mittleren Energie dR_{tr} , die durch Wechselwirkungen der Photonen entlang der Wegstrecke dl in

kinetische Energie geladener Teilchen umgewandelt wird, beschrieben werden (siehe Abbildung 2.2). Im Rahmen dieser Betrachtungsweise kann der Massen-Energieumwandlungskoeffizient α_{tr}/ρ als Verhältnis aus dR_{tr}/dl , der Strahlungsenergie R und der Dichte des Materials ρ definiert werden [21]:

$$\frac{\alpha_{\text{tr}}}{\rho} = \frac{1}{\rho dl} \frac{dR_{\text{tr}}}{R}. \quad (2.7)$$

Entsprechend der alternativen Definition des Massen-Schwächungskoeffizienten α/ρ in Gleichung (2.6) lässt sich auch der Massen-Energieumwandlungskoeffizient α_{tr}/ρ mithilfe des Wirkungsquerschnitts σ_j und des Massen-Schwächungskoeffizienten α_j/ρ der einzelnen Wechselwirkungsmechanismen definieren [26, 21]:

$$\frac{\alpha_{\text{tr}}}{\rho} = \frac{N_A}{M} \sum_j f_j \sigma_j = \sum_j f_j \frac{\alpha_j}{\rho} = f \frac{\alpha}{\rho}. \quad (2.8)$$

Hierbei beschreibt f_j den mittleren Anteil an der kinetischen Energie eines Photons, der beim j -ten Wechselwirkungsmechanismus in kinetische Energie geladener Teilchen umgewandelt wird und $f = (\sum_j f_j \sigma_j) / (\sum_j \sigma_j)$ den zugehörigen gewichteten Mittelwert.

Massen-Energieabsorptionskoeffizient Die geladenen Teilchen, die durch Wechselwirkungen der Photonen entlang der Wegstrecke dl erzeugt werden (siehe Abbildung 2.2), verlieren in Abhängigkeit vom zugrunde liegenden j -ten Wechselwirkungsmechanismus im Mittel den Anteil g_j ihrer kinetischen Energie durch Strahlungsverluste. Der restliche Anteil der kinetischen Energie der geladenen Teilchen $(1 - g_j)$ kann vom Material (lokal) absorbiert werden. Basierend auf dieser Betrachtung lässt sich der Massen-Energieabsorptionskoeffizient α_{en}/ρ mithilfe von Gleichung (2.8) definieren [26, 21]:

$$\frac{\alpha_{\text{en}}}{\rho} = \frac{N_A}{M} \sum_j f_j (1 - g_j) \sigma_j = \sum_j f_j (1 - g_j) \frac{\alpha_j}{\rho} = f (1 - g) \frac{\alpha}{\rho} = (1 - g) \frac{\alpha_{\text{tr}}}{\rho}. \quad (2.9)$$

Dabei beschreibt $g = (\sum_j g_j f_j \sigma_j) / (\sum_j f_j \sigma_j)$ den gewichteten Mittelwert von g_j .

Handelt es sich bei dem wechselwirkenden Material um eine Materialkomposition aus unterschiedlichen atomaren Bestandteilen, lassen sich der Massen-Schwächungskoeffizient α/ρ und der Massen-Energieumwandlungskoeffizient α_{tr}/ρ mithilfe einer gewichteten Summe beschreiben [26]:

$$\frac{\alpha}{\rho} = \sum_i w_i \left(\frac{\alpha}{\rho} \right)_i, \quad \frac{\alpha_{\text{tr}}}{\rho} = \sum_i w_i \left(\frac{\alpha_{\text{tr}}}{\rho} \right)_i. \quad (2.10)$$

Hierbei beschreibt w_i den relativen Massenanteil, $(\alpha/\rho)_i$ den Massen-Schwächungskoeffizienten und $(\alpha_{\text{tr}}/\rho)_i$ den Massen-Energieumwandlungskoeffizienten des i -ten atomaren Bestandteils. Die Strahlungsverluste der geladenen Teilchen hängen im Allgemeinen vom betrachteten Material in seiner Gesamtheit ab. Die relativen Strahlungsverluste g_j müssen daher explizit für jede Materialkomposition betrachtet werden. Eine Beschreibung des Massen-Energieabsorptionskoeffizienten α_{en}/ρ als Summe über die

Beiträge $(\alpha_{\text{en}}/\rho)_i$ der einzelnen atomaren Bestandteile ist daher nicht zulässig [26]. Eine explizite Evaluierung der Strahlungsverluste jeder einzelnen betrachteten Materialkomposition ist nicht trivial und liegt weit außerhalb des Rahmens dieser Arbeit. Die in den vorliegenden Untersuchungen verwendeten Massen-Energieabsorptionskoeffizienten α_{en}/ρ von Materialkompositionen sind daher in Analogie zu Gleichung (2.10) durch eine gewichtete Summe approximiert:

$$\frac{\alpha_{\text{en}}}{\rho} = \sum_i w_i \left(\frac{\alpha_{\text{en}}}{\rho} \right)_i. \quad (2.11)$$

Dabei beschreibt w_i den relativen Massenanteil und $(\alpha_{\text{en}}/\rho)_i$ den Massen-Energieabsorptionskoeffizienten des i -ten atomaren Bestandteils. Die in dieser Arbeit verwendeten Wechselwirkungskoeffizienten von Materialkompositionen sind alle gemäß der Gleichungen (2.10) und (2.11) berechnet.

Abbildung 2.3 zeigt den Massen-Schwächungskoeffizienten α/ρ als Funktion der Photonenenergie E exemplarisch für den Perowskit-Halbleiter MAPbI₃ (siehe Abschnitt 2.3.2). MA bezeichnet hierbei Methylammonium (CH₃NH₃). In diesem Zusammenhang sind in Abbildung 2.3 (a) die Massen-Schwächungskoeffizienten α/ρ der einzelnen atomaren Bestandteile und in Abbildung 2.3 (b) der Massen-Schwächungskoeffizient α/ρ der Materialkomposition dargestellt. Abbildung 2.3 (b) zeigt zusätzlich den Massen-Energieabsorptionskoeffizienten α_{en}/ρ des Perowskit-Halbleiters MAPbI₃.

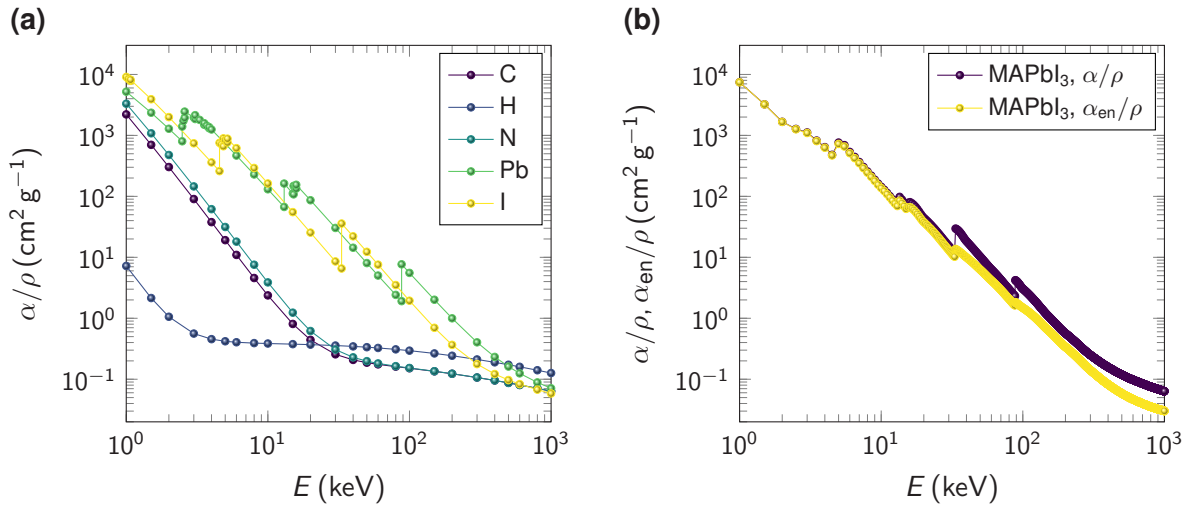


Abbildung 2.3: Wechselwirkungskoeffizienten als Funktion der Photonenenergie. (a) Massen-Schwächungskoeffizienten α/ρ der einzelnen atomaren Bestandteile des Perowskit-Halbleiters MAPbI₃ als Funktion der Photonenenergie E . MA bezeichnet hierbei Methylammonium (CH₃NH₃). (b) Massen-Schwächungskoeffizient α/ρ und Massen-Energieabsorptionskoeffizient α_{en}/ρ des Perowskit-Halbleiters MAPbI₃ als Funktion der Photonenenergie E . Die Wechselwirkungskoeffizienten α/ρ und α_{en}/ρ des Perowskit-Halbleiters MAPbI₃ in (b) sind gemäß der Gleichungen (2.10) und (2.11) mithilfe der Wechselwirkungskoeffizienten der atomaren Bestandteile berechnet. Die zugrunde liegenden Wechselwirkungskoeffizienten der atomaren Bestandteile (exemplarisch für α/ρ in (a) dargestellt) sind der Datenbank des *National Institute of Standards and Technology (NIST)* [25] entnommen[†].

[†] Daten wurden im Zeitraum 05.07.2017-25.10.2017 aus der Datenbank abgerufen

Es sei abschließend darauf hingewiesen, dass die nicht auf die Dichte ρ des wechselwirkenden Materials normierten Wechselwirkungskoeffizienten als linearer Schwächungskoeffizient α , Energieumwandlungskoeffizient α_{tr} und Energieabsorptionskoeffizient α_{en} bezeichnet werden.

2.1.5 Dosimetrische Beschreibung

Bei der dosimetrischen Beschreibung von Röntgenstrahlung handelt es sich um ein komplexes Themengebiet, welches eine Vielzahl an physikalischen Größen und Konzepten beinhaltet. Im Folgenden werden einige grundlegende Aspekte der dosimetrischen Beschreibung von Röntgenstrahlung, die für diese Arbeit als relevant betrachtet werden, eingeführt und beschrieben. Die Beschreibungen beziehen sich auf die freigesetzte kinetische Energie pro Masse, das Gleichgewicht geladener Teilchen und die Energiedosis.

2.1.5.1 Freigesetzte kinetische Energie pro Masse

Bei der Wechselwirkung von Röntgenphotonen mit Materie entstehen geladene Sekundärteilchen. Die freigesetzte kinetische Energie pro Masse (KERMA, kurz für engl. kinetic energy released per mass) beschreibt die kinetische Energie der geladenen Sekundärteilchen, die durch Wechselwirkungen der Photonen mit Materie pro Masse freigesetzt wird. Formal lässt sich die KERMA K als Verhältnis aus der mittleren Summe der anfänglichen kinetischen Energie aller geladenen Teilchen dE_{tr} , die in einem Massenelement dm durch Wechselwirkungen der Röntgenphotonen freigesetzt wird, und dem Massenelement dm definieren [21, 22]:

$$K = \frac{dE_{\text{tr}}}{dm}. \quad (2.12)$$

Im Falle von monenergetischen Röntgenphotonen der Energie E kann die KERMA K als Produkt aus der Energiefluenz Ψ (siehe Abschnitt 2.1.2.2) und dem Massen-Energieumwandlungskoeffizienten α_{tr}/ρ (siehe Abschnitt 2.1.4.2) beschrieben werden [21, 22]:

$$K = \Psi \frac{\alpha_{\text{tr}}}{\rho} = \Phi E \frac{\alpha_{\text{tr}}}{\rho}. \quad (2.13)$$

Hierbei gilt der Zusammenhang $\Psi = \Phi E$ zwischen der Energiefluenz Ψ und der Photonenfluenz Φ (siehe Abschnitt 2.1.2.2). Für den Fall polyenergetischer Röntgenstrahlung ergibt sich entsprechend der Definition in Gleichung (2.13) die KERMA K zu [21]:

$$K = \int dE \Psi_E \frac{\alpha_{\text{tr}}}{\rho} = \int dE \Phi_E E \frac{\alpha_{\text{tr}}}{\rho}, \quad (2.14)$$

mit der spektralen Energiefluenz Ψ_E und der spektralen Photonenfluenz Φ_E (siehe Abschnitt 2.1.2.2). Ein Teil der kinetischen Energie der geladenen Sekundärteilchen geht durch Strahlungsverluste verloren und kann daher nicht (lokal) vom Material absorbiert werden (siehe Abschnitt 2.1.4.2). Die

Kollisions- (engl. collision) KERMA K_{col} berücksichtigt diese Strahlungsverluste und ist in Analogie zur Definition der KERMA K in Gleichung (2.13) im monoenergetischen Fall über den Massen-Energieabsorptionskoeffizienten α_{en}/ρ (siehe Abschnitt 2.1.4.2) definiert [21]:

$$K_{\text{col}} = \Phi E \frac{\alpha_{\text{en}}}{\rho} = \Phi E \frac{\alpha_{\text{tr}}}{\rho} (1 - g) = K(1 - g), \quad (2.15)$$

mit dem gewichteten Mittelwert g der mittleren relativen Strahlungsverluste (siehe Abschnitt 2.1.4.2). Im polyenergetischen Fall ergibt sich entsprechend der Definition in Gleichung (2.15) die Kollisions-KERMA K_{col} zu [21]:

$$K_{\text{col}} = \int dE \Phi_E E \frac{\alpha_{\text{en}}}{\rho} = \int dE \Phi_E E \frac{\alpha_{\text{tr}}}{\rho} (1 - g). \quad (2.16)$$

2.1.5.2 Gleichgewicht geladener Teilchen

Das Gleichgewicht geladener Teilchen (CPE, kurz für engl. charged-particle equilibrium) ist ein wichtiges Konzept bei der Beschreibung dosimetrischer Größen von Röntgenstrahlung. Es beschreibt einen Zustand, in dem für ein betrachtetes Volumen ein Gleichgewicht zwischen den geladenen Sekundärteilchen, die in das Volumen eindringen, und denen, die es verlassen, besteht. Eine mögliche formale Beschreibung dieses Zustands basiert auf einem Gleichgewicht der Anzahl, der Energie und der Ausbreitungsrichtung der geladenen Sekundärteilchen, die in das Volumen eindringen und es verlassen [22]. Als direkte Folge beschreibt das CPE einen Zustand, in dem mit Ausnahme der Ruheenergien in Summe kein Energiefluss in oder aus dem Volumen durch geladene Sekundärteilchen existiert [28].

2.1.5.3 Energiedosis

Als Folge der Wechselwirkung der Röntgenphotonen mit Materie wird der bestrahlten Materie Energie zugeführt. Die Energiedosis D beschreibt diese Energie. Formal ist die Energiedosis D als Verhältnis aus der mittleren Energie $d\bar{\varepsilon}$, die der Materie mit dem Massenelement dm zugeführt wird, und dem Massenelement dm definiert [21, 22]:

$$D = \frac{d\bar{\varepsilon}}{dm}. \quad (2.17)$$

Für den Fall, dass ein CPE (siehe Abschnitt 2.1.5.2) herrscht und die Bindungsenergie der erzeugten geladenen Sekundärteilchen klein im Vergleich zur Photonenenergie ist, entspricht die Energiedosis D der Kollisions-KERMA K_{col} [21, 22]. Gemäß der Gleichungen (2.15) und (2.16) ergibt sich die Energiedosis D dann im mono- und im polyenergetischen Fall zu:

$$D = K_{\text{col}} = \Phi E \frac{\alpha_{\text{en}}}{\rho}, \quad D = K_{\text{col}} = \int dE \Phi_E E \frac{\alpha_{\text{en}}}{\rho}. \quad (2.18)$$

Die Ableitung der Energiedosis D nach der Zeit t wird in der vorliegenden Arbeit als Energiedosisrate $\dot{D} = dD/dt$ bezeichnet.

2.1.6 Detektion

Der Fokus dieser Arbeit liegt auf der Erforschung und der Entwicklung von direkten Röntgendetektoren. Abbildung 2.4 zeigt eine mögliche Einordnung direkter Röntgendetektoren im Hinblick auf unterschiedliche Konzepte, welche für die Realisierung von Strahlungsdetektoren verwendet werden können. Die Strahlungsdetektion kann auf der Grundlage von einer Vielzahl an unterschiedlichen Methoden realisiert werden. Die Detektion der Strahlung kann hierbei durch eine Wechselwirkung der Strahlung mit einem Gas, einer Flüssigkeit oder einem Festkörper erfolgen [9, 10]. Bei den im Rahmen dieser Arbeit in Betracht gezogenen direkten Röntgendetektoren handelt es sich um Festkörper-Röntgendetektoren, die zur Klasse der Festkörper-Strahlungsdetektoren gehören. Eine mögliche Klassifizierung von Festkörper-Röntgendetektoren besteht in einer anwendungsspezifischen Unterteilung der Detektoren in die Dosimetrie, die Spektroskopie und die Bildgebung [29, Kapitel 20]. Festkörper-Röntgendetektoren im Anwendungsbereich der Bildgebung werden darüber hinaus üblicherweise gemäß ihres Funktionsprinzips in indirekte und direkte Röntgendetektoren unterteilt [29, Kapitel 20].

Abbildung 2.5 zeigt einen Vergleich des Aufbaus und des Funktionsprinzips indirekter und direkter Röntgendetektoren. Die folgende Beschreibung indirekter und direkter Röntgendetektoren orientiert sich im Wesentlichen an den Erläuterungen in [11, 12]. Indirekte Röntgendetektoren bestehen vorwiegend aus einem Szintillator in Verbindung mit einem ladungsgekoppelten Bauteil (CCD, kurz für engl. charge-coupled device) oder in Verbindung mit einer Fotodiode und einer Auslese-Elektronik. Unabhängig von der Verwendung eines CCDs oder einer Fotodiode erfolgt die Wechselwirkung der Röntgenstrahlung im Falle indirekter Röntgendetektoren mit dem Szintillator. Hierbei wird die Röntgenstrahlung zunächst

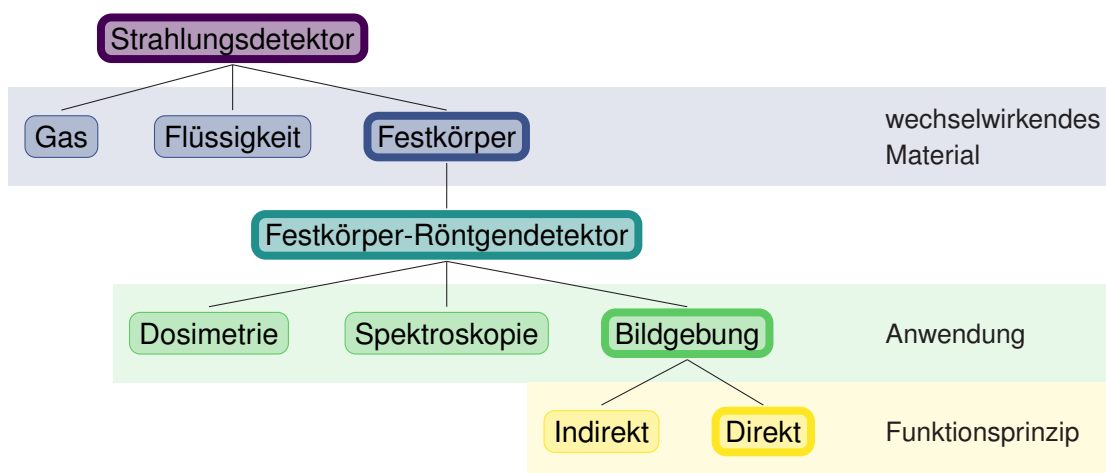


Abbildung 2.4: Einordnung direkter Röntgendetektoren im Hinblick auf unterschiedliche Konzepte zur Strahlungsdetektion. Die dargestellten Konzepte zur Strahlungsdetektion sind auf der Grundlage des wechselwirkenden Materials, der Anwendung und des Funktionsprinzips kategorisiert. Bei den im Rahmen dieser Arbeit in Betracht gezogenen direkten Röntgendetektoren handelt es sich um Festkörper-Röntgendetektoren mit einem bestimmten Funktionsprinzip, die üblicherweise zum Anwendungsbereich der Bildgebung gezählt werden. Festkörper-Röntgendetektoren gehören zur Klasse der Strahlungsdetektoren, die auf einer Wechselwirkung der Strahlung mit einem Festkörper basieren. Zum Teil reproduziert in Anlehnung an [29, Kapitel 20].

mithilfe des Szintillators in sichtbares Licht umgewandelt. Das sichtbare Licht wird in einem anschließenden Schritt in elektrische Ladung umgewandelt und das dadurch hervorgerufene Signal wird ausgelesen. Die Umwandlung in elektrische Ladung und das Auslesen des Signals erfolgt entweder durch das CCD oder separat mithilfe der Fotodiode und der Auslese-Elektronik. Direkte Röntgendetektoren bestehen hingegen im Wesentlichen aus einem direkten Absorber und ebenfalls einer Auslese-Elektronik. Im Gegensatz zu indirekten Röntgendetektoren erfolgt sowohl die Wechselwirkung der Röntgenstrahlung als auch die Umwandlung in elektrische Ladung mithilfe des direkten Absorbers. Anders als im Falle indirekter Röntgendetektoren wird keine zwischenzeitliche Umwandlung der Röntgenstrahlung in sichtbares Licht benötigt. Stattdessen erfolgt im Falle direkter Röntgendetektoren eine direkte Umwandlung der Röntgenstrahlung in Ladungsträger. Darüber hinaus ist der direkte Absorber eines direkten Röntgendetektors üblicherweise von elektrischen Leitern umgeben. Unter den richtigen Voraussetzungen liegt eine gerichtete Bewegung der erzeugten Ladungsträger im direkten Absorber vor, die dazu führt, dass ein elektrisches Signal auf die elektrischen Leiter induziert wird (siehe Abschnitt 2.2.1). Das Auslesen dieses Signals erfolgt dann mithilfe einer Auslese-Elektronik. Die gerichtete Bewegung der Ladungsträger im direkten Absorber wird hierbei häufig durch eine extern angelegte elektrische Spannung zwischen den elektrischen Leitern und dem daraus resultierenden elektrischen Feld hervorgerufen.

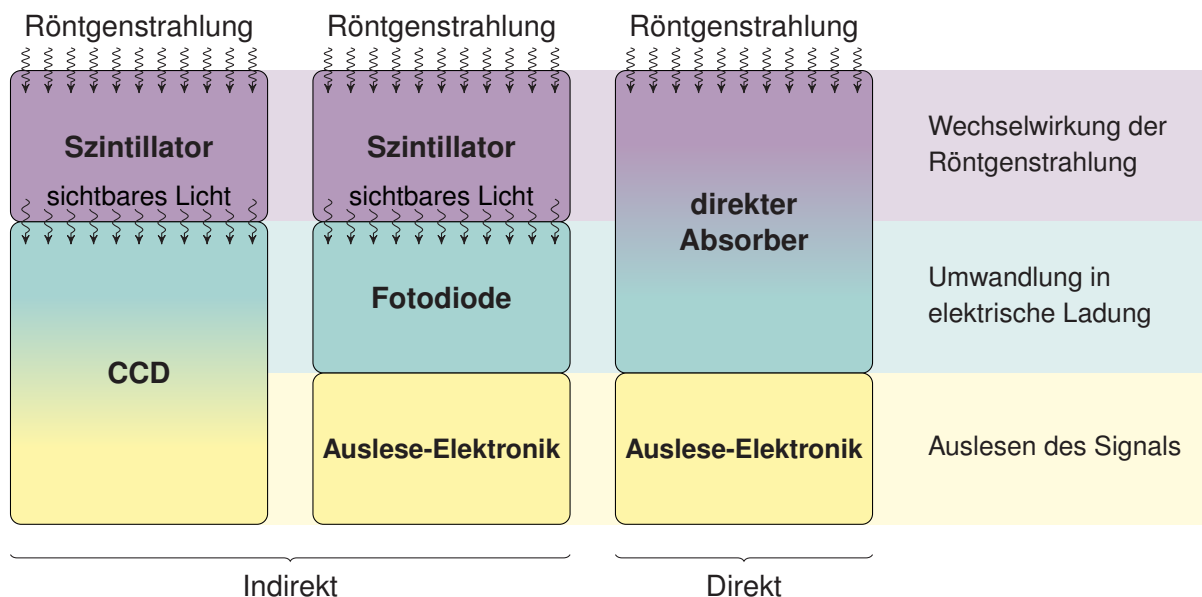


Abbildung 2.5: Aufbau und Funktionsprinzip indirekter und direkter Röntgendetektoren. Im Falle indirekter Röntgendetektoren erfolgt die Wechselwirkung der Röntgenstrahlung mit einem Szintillator, welcher die Röntgenstrahlung zunächst in sichtbares Licht umwandelt. Das sichtbare Licht wird anschließend in elektrische Ladung umgewandelt und das durch die elektrische Ladung hervorgerufene Signal wird ausgelesen. Die Umwandlung in elektrische Ladung und das Auslesen des Signals erfolgt hierbei entweder mit einem ladungsgekoppelten Bauteil (CCD, kurz für engl. charge-coupled device) oder mithilfe einer Fotodiode in Verbindung mit einer Auslese-Elektronik. Im Falle direkter Röntgendetektoren erfolgt sowohl die Wechselwirkung der Röntgenstrahlung als auch die Umwandlung in elektrische Ladung mithilfe eines direkten Absorbers. Im Gegensatz zu indirekten Röntgendetektoren wird die Röntgenstrahlung hierbei direkt ohne eine zwischenzeitliche Umwandlung in sichtbares Licht in elektrische Ladung umgewandelt. Das Auslesen des Signals, welches durch die elektrische Ladung hervorgerufen wird, erfolgt ebenfalls mithilfe einer Auslese-Elektronik. Reproduziert in Anlehnung an [11, 12].

2.2 Physikalische Beschreibung von direkten Röntgendetektoren

Sowohl die theoretischen als auch die experimentellen Untersuchungen im Rahmen dieser Arbeit erfordern eine adäquate physikalische Beschreibung von direkten Röntgendetektoren. Die folgenden Abschnitte dienen der Einführung und der Beschreibung der wesentlichen Aspekte, die für diese Beschreibung benötigt werden. Die Erläuterungen beziehen sich auf das Shockley-Ramo Theorem und auf Größen zur Beschreibung der Leistungsfähigkeit.

2.2.1 Shockley-Ramo Theorem

Mithilfe des Shockley-Ramo Theorems lässt sich das elektrische Signal beschreiben, welches durch eine bewegte Punktladung auf elektrische Leiter induziert wird. Das Theorem basiert auf den Arbeiten von Shockley [30] und Ramo [31] zu induzierten Strömen durch bewegte Ladungsträger. Eine Übersicht über das Shockley-Ramo Theorem und dessen Anwendung auf Halbleiter-Detektoren findet sich in He [13]. Die Beschreibung des Theorems in den folgenden Abschnitten orientiert sich im Wesentlichen an [30, 31, 13], an [32, Kapitel 2] und an [33, Kapitel 5]. Hierbei wird zunächst auf die allgemeine Formulierung und anschließend auf die Anwendung auf eine parallele Zwei-Leiter-Geometrie eingegangen.

2.2.1.1 Allgemeine Formulierung

Gemäß des Shockley-Ramo Theorems gilt für die Ladung Q und den Strom i , welche durch eine bewegte Punktladung mit der Ladung q , dem Ort \mathbf{x} und der Geschwindigkeit \mathbf{v} auf einen elektrischen Leiter induziert werden [13]:

$$Q = -q\varphi_0(\mathbf{x}), \quad (2.19a)$$

$$i = q\mathbf{v}\mathbf{F}_0(\mathbf{x}). \quad (2.19b)$$

Hierbei bezeichnen $\varphi_0(\mathbf{x})$ und $\mathbf{F}_0(\mathbf{x})$ das Wichtungspotential und das Wichtungsfeld am Ort der Punktladung. Das Wichtungspotential $\varphi_0(\mathbf{x})$ und das Wichtungsfeld $\mathbf{F}_0(\mathbf{x})$ sind über das elektrische Potential und das elektrische Feld definiert, welches unter den folgenden Annahmen herrschen würde: (1) Alle Ladungen im betrachteten Volumen seien entfernt, (2) der ausgewählte elektrische Leiter sei auf ein dimensionsloses Einheits-Potential gesetzt und (3) alle anderen elektrischen Leiter seien geerdet. Die Wichtungsgrößen $\varphi_0(\mathbf{x})$ und $\mathbf{F}_0(\mathbf{x})$ sind demnach nur von der räumlichen Anordnung der elektrischen Leiter abhängig und sind nicht mit dem tatsächlich herrschenden elektrischen Potential und Feld zu verwechseln. Während $\varphi_0(\mathbf{x})$ und $\mathbf{F}_0(\mathbf{x})$ gemäß der Gleichungen (2.19) beschreiben, wie sich die Bewegung einer Punktladung auf einen bestimmten Leiter auswirkt, beeinflussen das tatsächlich herrschende

elektrische Potential und Feld diese Bewegung. Es sei darauf hingewiesen, dass im Rahmen des Shockley-Ramo Theorems magnetische Effekte und die zeitliche Ausbreitung des elektrischen Feldes vernachlässigt werden.

2.2.1.2 Anwendung auf parallele Zwei-Leiter-Geometrie

Gemäß des Superpositionsprinzips kann der induzierte Strom i (und die induzierte Ladung Q) für unterschiedliche Einflussfaktoren isoliert betrachtet werden. Der durch eine bewegte Punktladung induzierte Strom i ist somit unabhängig von Potentialdifferenzen zwischen den elektrischen Leitern und Raumladungen im betrachteten Volumen. Für die Anwendung des Shockley-Ramo Theorems kann demnach der vereinfachte Fall betrachtet werden, in dem alle Leiter geerdet sind und keine Raumladung im betrachteten Volumen existiert. Abbildung 2.6 skizziert diesen vereinfachten Fall einer Punktladung mit der Ladung q , welche sich zwischen zwei parallel zueinander ausgerichteten Leitern mit der Geschwindigkeit v bewegt. Der obere Leiter (gekennzeichnet mit t für engl. top) sei am Ort $x = 0$ und der untere Leiter (gekennzeichnet mit b für engl. bottom) im Abstand d am Ort $x = d$ positioniert. Gemäß der in Abschnitt 2.2.1.1 beschriebenen Annahmen ergeben sich die Wichtungsfelder für den oberen und den unteren Leiter zu $F_{0,t}(x) = +\frac{1}{d}e_x$ und $F_{0,b}(x) = -\frac{1}{d}e_x$. Hierbei ist e_x der Einheitsvektor in x -Richtung. Mithilfe von Gleichung (2.19b) lassen sich dann die jeweiligen induzierten Ströme $i_{t,b}$ wie folgt beschreiben [33, Kapitel 5]:

$$i_t = qvF_{0,t}(x) = +qv\frac{1}{d}e_x = +\frac{qv_x}{d}, \quad (2.20a)$$

$$i_b = qvF_{0,b}(x) = -qv\frac{1}{d}e_x = -\frac{qv_x}{d}. \quad (2.20b)$$

Dabei bezeichnet v_x die Geschwindigkeitskomponente der Punktladung in x -Richtung.

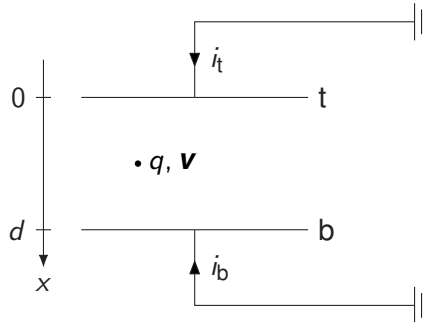


Abbildung 2.6: Parallele Zwei-Leiter-Geometrie. Parallele Zwei-Leiter-Geometrie mit einer Punktladung der Ladung q , die sich mit der Geschwindigkeit v zwischen den beiden Leitern bewegt. Der obere Leiter (gekennzeichnet mit t für engl. top) ist am Ort $x = 0$ und der untere Leiter (gekennzeichnet mit b für engl. bottom) am Ort $x = d$ positioniert. Beide Leiter sind geerdet. Die induzierten Ströme $i_{t,b}$ auf den jeweiligen Leiter sind ebenfalls dargestellt. Zum Teil reproduziert in Anlehnung an [30].

2.2.2 Größen zur Beschreibung der Leistungsfähigkeit

Die folgenden Abschnitte dienen der Einführung und der Beschreibung der wesentlichen Größen, die im Rahmen dieser Arbeit für die Beschreibung der Leistungsfähigkeit von direkten Röntgendetektoren verwendet werden. Die Erläuterungen beziehen sich hierbei auf die Röntgensensitivität, die Modulationsübertragungsfunktion und die Detektive Quanteneffizienz. Es sei drauf hingewiesen, dass diese Größen nicht auf die Anwendung im Zusammenhang mit direkten Röntgendetektoren beschränkt sind.

2.2.2.1 Röntgensensitivität

Die Röntgensensitivität S eines direkten Röntgendetektors setzt das elektrisch messbare Signal pro Fläche in Relation zur Strahlenexposition. Die Röntgensensitivität S kann demnach als Verhältnis aus dem Betrag der induzierter Ladung $|Q|$, der Energiedosis der einfallenden Röntgenstrahlung in Luft D_{air} und der bestrahlten Fläche A definiert werden [34]:

$$S = \frac{|Q|}{D_{\text{air}} A}. \quad (2.21)$$

Es sei darauf hingewiesen, dass anders als in der ursprünglichen Definition [34] die Strahlenexposition in Gleichung (2.21) mittels der heute gängigen Größe der Energiedosis in Luft D_{air} und nicht mithilfe der Ionendosis in Luft quantifiziert wird.

2.2.2.2 Modulationsübertragungsfunktion

Die räumliche Auflösung eines Röntgendetektors kann mithilfe der Modulationsübertragungsfunktion (MTF, kurz für engl. modulation transfer function) charakterisiert werden. Die folgende Beschreibung der MTF basiert im Wesentlichen auf den Erläuterungen in [23, Kapitel 2] und [35, Kapitel 4]. Bei der MTF handelt es sich um eine Größe, die mithilfe der Systemtheorie beschrieben werden kann. Im Rahmen der Systemtheorie kann ein System im Allgemeinen durch eine Eingangsgröße h , eine Übertragungscharakteristik und eine Ausgangsgröße b charakterisiert werden. Die Übertragungscharakteristik des Systems kann dabei mithilfe einer mathematischen Operation $\mathcal{O}\{\}$ beschrieben werden. Für eine Eingangsgröße $h(x, y)$ im Ortsraum (siehe Abbildung 2.7 (a)) ergibt sich somit die Ausgangsgröße $b(x, y)$ im Ortsraum zu [23, Kapitel 2]: $b(x, y) = \mathcal{O}\{h(x, y)\}$. Hierbei ist (x, y) der Ort. Im Falle eines linearen verschiebungsinvarianten (LSI, kurz für engl. linear and shift-invariant) Systems (siehe Abbildung 2.7 (b)) kann im Ortsraum die Ausgangsgröße $b(x, y)$ als eine Faltung zwischen der Eingangsgröße $h(x, y)$ und der

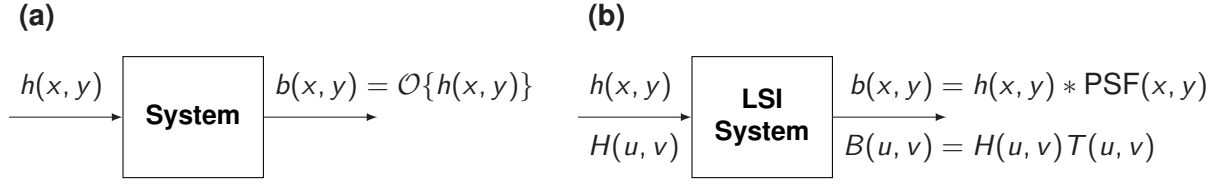


Abbildung 2.7: Schematische Darstellung eines allgemeinen und eines linearen verschiebungsinvarianten Systems. (a) Allgemeines System exemplarisch dargestellt mit einer Eingangsgröße $h(x, y)$ und einer Ausgangsgröße $b(x, y)$ im Ortsraum. Dabei ist (x, y) der Ort. Die Übertragungscharakteristik des Systems kann durch eine mathematische Operation $\mathcal{O}\{\}$ beschrieben werden. (b) Lineares verschiebungsinvariantes (LSI, kurz für engl. linear and shift-invariant) System exemplarisch dargestellt mit Eingangsgrößen $h(x, y)$ und $H(u, v)$ sowie Ausgangsgrößen $b(x, y)$ und $B(u, v)$ im Ortsraum und Ortsfrequenzraum. Hierbei sind u und v die Ortsfrequenzen. Die Übertragung der Eingangsgröße kann im Ortsraum durch eine Faltung mit der Punktspreizfunktion $\text{PSF}(x, y)$ (PSF kurz für engl. point spread function) und im Ortsfrequenzraum durch eine Multiplikation mit der charakteristischen Funktion $T(u, v)$ des Systems beschrieben werden. Reproduziert in Anlehnung an [23, Kapitel 2].

Punktspreizfunktion $\text{PSF}(x, y)$ (PSF kurz für engl. point spread function) des Systems formuliert werden [23, Kapitel 2]:

$$b(x, y) = \mathcal{O}\{h(x, y)\}, \quad (2.22a)$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} dx' \int_{-\infty}^{\infty} dy' h(x', y') \text{PSF}(x - x', y - y'), \quad (2.22b)$$

$$= h(x, y) * \text{PSF}(x, y). \quad (2.22c)$$

Die Punktspreizfunktion $\text{PSF}(x, y)$ repräsentiert hierbei die Ausgangsgröße $b(x, y) = \mathcal{O}\{h(x, y)\}$ des LSI-Systems für den Fall einer idealen punktförmigen Eingangsgröße $h(x, y) = \delta(x, y)$ [23, Kapitel 2], [35, Kapitel 4]: $\text{PSF}(x, y) = \mathcal{O}\{\delta(x, y)\}$. Dabei kennzeichnet $\delta(x, y)$ die zweidimensionale Delta-Distribution. Die mathematische Formulierung in den Gleichungen (2.22) auf der Grundlage einer Faltung ermöglicht eine Fourier-Analyse des LSI-Systems. Ausgehend von den Gleichungen (2.22) und unter Verwendung der Fourier-Transformation $\mathcal{F}\{\}$ ergibt sich im Ortsfrequenzraum folgender Zusammenhang zwischen der Eingangsgröße $H(u, v)$ und der Ausgangsgröße $B(u, v)$ des LSI-Systems [23, Kapitel 2]:

$$B(u, v) = \mathcal{F}\{b(x, y)\}, \quad (2.23a)$$

$$= \mathcal{F}\{h(x, y) * \text{PSF}(x, y)\}, \quad (2.23b)$$

$$= \mathcal{F}\{h(x, y)\} \mathcal{F}\{\text{PSF}(x, y)\}, \quad (2.23c)$$

$$= H(u, v) T(u, v), \quad (2.23d)$$

mit den fourier-transformierten Funktionen $B(u, v) = \mathcal{F}\{b(x, y)\}$, $H(u, v) = \mathcal{F}\{h(x, y)\}$, $T(u, v) = \mathcal{F}\{\text{PSF}(x, y)\}$ und den Ortsfrequenzen u und v . Die Funktion $T(u, v)$ wird hierbei als charakteristische Funktion des Systems bezeichnet. Im Falle eines LSI-Systems kann gemäß der Gleichungen (2.22) und (2.23) die Übertragung einer Eingangsgröße im Ortsraum durch eine Faltung mit der Punktspreizfunktion $\text{PSF}(x, y)$ und im Ortsfrequenzraum durch eine Multiplikation mit der charakteristischen Funktion $T(u, v)$ beschrieben werden. Dabei erfolgt bei der Übertragung im Ortsfrequenzraum demzufolge lediglich eine Skalierung der Eingangsgröße $H(u, v)$ mit der charakteristischen Funktion $T(u, v)$ des

LSI-Systems. Infolgedessen kann mithilfe der charakteristischen Funktion $T(u, v)$ beschrieben werden, wie sich die Übertragung durch ein LSI-System auf die einzelnen Frequenzanteile einer Eingangsgröße $H(u, v)$ auswirkt. Handelt es sich bei dem betrachteten LSI-System um ein bildgebendes System, kann folglich auf der Grundlage der charakteristischen Funktion $T(u, v)$ die räumliche Auflösung des Systems charakterisiert werden.

Im Rahmen dieser Beschreibung kann die Modulationsübertragungsfunktion $MTF(u, v)$ eines bildgebenden LSI-Systems als Betrag der charakteristischen Funktion $T(u, v)$ in Verbindung mit einer Normierung definiert werden [23, Kapitel 2], [35, Kapitel 4]:

$$MTF(u, v) = \frac{|T(u, v)|}{T(0, 0)}, \quad (2.24a)$$

$$= \frac{|\mathcal{F}\{\text{PSF}(x, y)\}|}{\mathcal{F}\{\text{PSF}(x, y)\}|_{u=0, v=0}}. \quad (2.24b)$$

Die Modulationsübertragungsfunktion $MTF(u, v)$ beschreibt demzufolge, in welchem Ausmaß die einzelnen Frequenzanteile einer Eingangsgröße $H(u, v)$ durch ein bildgebendes LSI-System übertragen und somit abgebildet werden. Infolgedessen repräsentiert die Modulationsübertragungsfunktion $MTF(u, v)$ eine Größe für die Bewertung der räumlichen Auflösung eines bildgebenden Systems. Für den Fall, dass für die Bewertung der räumlichen Auflösung lediglich eine räumliche Dimension und somit ausschließlich der Ort x oder y relevant ist, kann die räumliche Auflösung ohne Beschränkung der Allgemeinheit mithilfe der Modulationsübertragungsfunktion $MTF(u, v)$ bei einer Ortsfrequenz $v = 0$ charakterisiert werden. In diesem Fall kann die Modulationsübertragungsfunktion $MTF(u) = MTF(u, 0)$ mithilfe der Linienspreizfunktion $LSF(x)$ (LSF kurz für engl. line spread function) oder der Kantenspreizfunktion $ESF(x)$ (ESF kurz für engl. edge spread function) des Systems beschrieben werden [23, Kapitel 2], [35, Kapitel 4]:

$$MTF(u) = MTF(u, 0), \quad (2.25a)$$

$$= \frac{|\mathcal{F}\{LSF(x)\}|}{\mathcal{F}\{LSF(x)\}|_{u=0}}, \quad (2.25b)$$

$$= \frac{|\mathcal{F}\{d(ESF(x))/dx\}|}{\mathcal{F}\{d(ESF(x))/dx\}|_{u=0}}. \quad (2.25c)$$

Die Linienspreizfunktion $LSF(x)$ und die Kantenspreizfunktion $ESF(x)$ repräsentieren hierbei die Ausgangsgrößen $b(x, y) = \mathcal{O}\{h(x, y)\}$ eines bildgebenden LSI-Systems für den Fall einer idealen linienförmigen Eingangsgröße $h(x, y) = \delta(x)$ und einer idealen stufenförmigen Eingangsgröße $h(x, y) = \theta(x)$ [35, Kapitel 4]: $LSF(x) = \mathcal{O}\{\delta(x)\}$, $ESF(x) = \mathcal{O}\{\theta(x)\}$. Dabei kennzeichnen $\delta(x)$ und $\theta(x)$ die eindimensionale Delta-Distribution und die Heaviside Funktion.

2.2.2.3 Detektive Quanteneffizienz

Bei der Detektiven Quanteneffizienz (DQE) handelt es sich um eine weitere Größe zur Charakterisierung der Leistungsfähigkeit von Röntgendetektoren, die im Zusammenhang mit einer systembasierten Beschreibung und der Fourier-Analyse von Systemen steht. Im Folgenden wird ohne Beschränkung der Allgemeinheit lediglich eine räumliche Dimension als relevant betrachtet, und die Beschreibung bezieht sich auf den Ort x und die Ortsfrequenz u . Die DQE eines Röntgendetektors setzt die rauschäquivalente Quantenanzahl (NEQ, kurz für engl. noise equivalent quanta) als Funktion der Ortsfrequenz u in Relation zur mittleren auf den Detektor einfallenden Photonenfluenz $\bar{\Phi}_0$ [36], [23, Kapitel 2]:

$$\text{DQE}(u) = \frac{\text{NEQ}(u)}{\bar{\Phi}_0}. \quad (2.26)$$

Unter der Voraussetzung, dass keine statistische Korrelation zwischen den einfallenden Röntgenphotonen besteht und das Rauschen am Eingang des Detektors durch Photonenrauschen beschrieben werden kann, ergibt sich das quadrierte Signal-Rausch-Verhältnis (SNR, kurz für engl. signal-to-noise ratio) am Eingang des Detektors $\text{SNR}_{\text{in}}^2(u)$ zu [36]: $\text{SNR}_{\text{in}}^2(u) = \bar{\Phi}_0$. Unter der zusätzlichen Annahme, dass die rauschäquivalente Quantenanzahl $\text{NEQ}(u)$ als Maß für das quadrierte Signal-Rausch-Verhältnis am Ausgang des Detektors $\text{SNR}_{\text{out}}^2(u)$ interpretiert werden kann, lässt sich die Detektive Quanteneffizienz $\text{DQE}(u)$ mithilfe der Signal-Rausch-Verhältnisse am Eingang und am Ausgang des Detektors definieren [36], [23, Kapitel 2]:

$$\text{DQE}(u) = \frac{\text{SNR}_{\text{out}}^2(u)}{\text{SNR}_{\text{in}}^2(u)}. \quad (2.27)$$

2.3 Halbleiter für direkte Röntgendetektoren

Der Absorber eines direkten Röntgendetektors besteht in der Regel aus einem Halbleiter. Halbleiter-Absorberschichten repräsentieren folglich einen wesentlichen Bestandteil von direkten Röntgendetektoren. Im Folgenden werden die unterschiedlichen Halbleiter, die im Rahmen dieser Arbeit als Absorber-Material in Betracht gezogen werden, eingeführt und beschrieben. Hierbei wird zwischen klassischen Halbleitern, Perowskit-Halbleitern und einem organischen Halbleiter mit Szintillator-Teilchen unterschieden. Darüber hinaus wird abschließend die Ladungsträgerdynamik in Halbleitern erläutert.

2.3.1 Klassische Halbleiter

Zur inhaltlichen Abgrenzung gegenüber Perowskit-Halbleitern und Organischen Halbleitern werden in der vorliegenden Arbeit Selen, Bleiiodid, Quecksilberiodid und Cadmiumzinktellurid als klassische Halbleiter bezeichnet. Die folgenden Beschreibungen dieser Materialien basieren im Wesentlichen auf den Erläuterungen in [14, Kapitel 45].

Selen Für die Untersuchungen im Rahmen dieser Arbeit wird Selen (Se) in amorpher Form in Betracht gezogen. Zur Gewährleistung einer verbesserten Stabilität wird amorphes Selen (a-Se) üblicherweise mit Arsen und Chlor versetzt. Schichten bestehend aus a-Se können mittels vakuumbasierter Abscheidung hergestellt werden. Die Bandlücke E_g (g für engl. gap) von a-Se beträgt $E_g \approx 2.1 - 2.2$ eV [14, Kapitel 45]. Es sei darauf hingewiesen, dass die Bandlücke E_g von amorphen Halbleitern bedingt durch lokalisierte Zustände in der Bandlücke auch als Mobilitätslücke bezeichnet wird.

Bleiiodid Darüber hinaus beziehen sich die vorliegenden Untersuchungen auf Bleiiodid (PbI_2) in polykristalliner Form. Absorberschichten bestehend aus polykristallinem Bleiiodid (p- PbI_2) können mittels physikalischer Gasphasenabscheidung (PVD, kurz für engl. physical vapor deposition) hergestellt werden. Die Bandlücke E_g von p- PbI_2 beträgt $E_g = 2.3$ eV [14, Kapitel 45].

Quecksilberiodid Quecksilberiodid (HgI_2) wird im Zuge dieser Arbeit ebenfalls in polykristalliner Form in Betracht gezogen. Materialschichten bestehend aus p- HgI_2 können mittels PVD oder durch Siebdruck hergestellt werden. Die Bandlücke E_g von p- HgI_2 beträgt $E_g = 2.1$ eV [14, Kapitel 45].

Cadmiumzinktellurid Die Analysen im Hinblick auf Cadmiumzinktellurid (CdZnTe) beziehen sich auf das Material sowohl in polykristalliner als auch in monokristalliner Form. Schichten bestehend aus polykristallinem Cadmiumzinktellurid (p- CdZnTe) können mittels Sublimation mit geringem Abstand (engl. close-spaced sublimation) hergestellt werden. Die Bandlücke E_g von CdZnTe beträgt $E_g = 1.7$ eV [14, Kapitel 45].

Die Materialparameter von Se, PbI_2 , HgI_2 und CdZnTe , die für die Untersuchungen in dieser Arbeit relevant sind, sind in Tabelle 5.1 zusammengefasst.

2.3.2 Perowskit-Halbleiter

Neben den im vorangegangenen Abschnitt beschriebenen klassischen Halbleitern werden in einer Vielzahl der vorliegenden Untersuchungen Perowskit-Halbleiter in Betracht gezogen. Die folgende Beschreibung von Perowskit-Halbleitern basiert im Wesentlichen auf den Erläuterungen in [17, Kapitel 1]. Im Rahmen dieser Arbeit werden Halbleiter, welche der Materialklasse der Perowskite zugeordnet werden können, als Perowskit-Halbleiter bezeichnet. Die Materialklasse der Perowskite umfasst kristalline Materialien, die im Allgemeinen aus den Komponenten A, B und X in der Zusammensetzung ABX_3 bestehen und darüber hinaus in bestimmten Kristallstrukturen vorliegen. Abbildung 2.8 zeigt die ideale kubische Perowskit-Kristallstruktur. Die Materialklasse der Perowskite ist allerdings nicht auf diese ideale kubische Kristallstruktur begrenzt. Üblicherweise werden darüber hinaus kristalline Materialien mit einer Zusammensetzung von ABX_3 und einer tetragonalen oder orthorhombischen Kristallstruktur ebenfalls

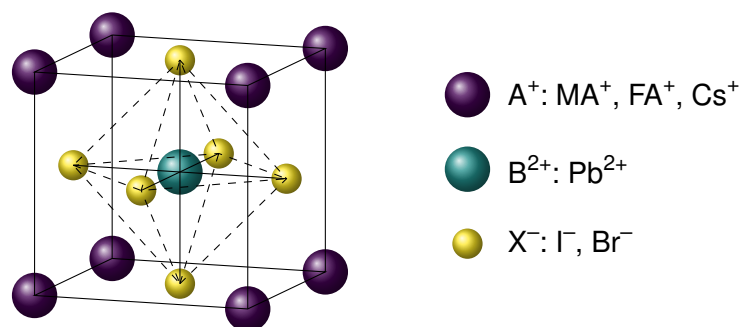


Abbildung 2.8: Ideale kubische Perowskit-Kristallstruktur. Perowskite bestehen im Allgemeinen aus den Komponenten A, B und X in der Zusammensetzung ABX_3 und liegen im Idealfall in der gezeigten kubischen Kristallstruktur vor. Für die Untersuchungen im Rahmen dieser Arbeit werden Perowskit-Halbleiter, die sich aus A-Kationen (A^+), B-Kationen (B^{2+}) und X-Anionen (X^-) zusammensetzen betrachtet. Hierbei werden als A-Kationen Methylammonium-Ionen ($CH_3NH_3^+$, MA^+ , MA kurz für Methylammonium), Formamidinium-Ionen ($CH(NH_2)_2^+$, FA^+ , FA kurz für Formamidinium) und Caesium-Ionen (Cs^+), als B-Kationen Blei-Ionen (Pb^{2+}) und als X-Anionen Iodid-Ionen (I^-) und Bromid-Ionen (Br^-) in Betracht gezogen. Reproduziert in Anlehnung an [17, Kapitel 1].

als Perowskite bezeichnet. Welche Kristallstruktur Perowskite ausbilden, hängt unter anderem wesentlich von den Ionenradien der Komponenten A, B und X ab. Für die Untersuchungen im Zuge dieser Arbeit werden Perowskit-Halbleiter, die sich aus A-Kationen (A^+), B-Kationen (B^{2+}) und X-Anionen (X^-) zusammensetzen, betrachtet. Hierbei werden als A-Kationen Methylammonium-Ionen ($CH_3NH_3^+$, MA^+ , MA kurz für Methylammonium), Formamidinium-Ionen ($CH(NH_2)_2^+$, FA^+ , FA kurz für Formamidinium) und Caesium-Ionen (Cs^+), als B-Kationen Blei-Ionen (Pb^{2+}) und als X-Anionen Iodid-Ionen (I^-) und Bromid-Ionen (Br^-) in Betracht gezogen. Auf der Grundlage dieser Komponenten beziehen sich die vorliegenden Untersuchungen im Hinblick auf Perowskit-Halbleiter auf Methylammoniumbleitriiodid ($MAPbI_3$) und Dreifach-Kationen-Perowskit (TCP, kurz für engl. triple cation perovskite) mit einer angestrebten Zusammensetzung von $Cs_{0.1}(FA_{0.83}MA_{0.17})_{0.9}Pb(Br_{0.17}I_{0.83})_3$. Bei beiden Materialien handelt es sich aufgrund ihrer Bestandteile um Blei-Halogenid-Perowskite. In den vorliegenden Untersuchungen wird $MAPbI_3$ sowohl in polykristalliner als auch in monokristalliner Form und TCP lediglich in polykristalliner Form in Betracht gezogen. Die Materialparameter von $MAPbI_3$, die für die Untersuchungen in dieser Arbeit relevant sind, sind in Tabelle 5.1 aufgelistet. Die relevanten Materialparameter von TCP sind hingegen im Rahmen der Kapitel 8 und 9 diskutiert. Sowohl $MAPbI_3$ als auch TCP zählen aufgrund ihrer organischen und anorganischen Komponenten zu den hybrid organisch-anorganischen Perowskit-Halbleitern.

2.3.3 Organischer Halbleiter mit Szintillator-Teilchen

Zusätzlich zu den in den vorangegangenen Abschnitten beschriebenen klassischen Halbleitern und Perowskit-Halbleitern wird in dieser Arbeit darüber hinaus ein organischer Halbleiter mit Szintillator-Teilchen untersucht. Die Betrachtung eines organischen Halbleiters mit Szintillator-Teilchen ist hierbei wesentlich durch das Forschungsprojekt von Patric Büchele, dessen Promotionsvorhaben ebenfalls von Uli Lemmer betreut wurde, motiviert. Die Forschungsergebnisse im Hinblick auf die Verwendung organischer Halbleiter mit

Szintillator-Teilchen sind in der Dissertation von Patric Büchele [37] und insbesondere in der Forschungsarbeit [38] veröffentlicht. Der verwendete Ansatz basiert auf einem organischen Halbleiter, in welchem sich zusätzlich homogen verteilt Szintillator-Teilchen befinden. Im Rahmen dieses Ansatzes werden der Aufbau und das Funktionsprinzip indirekter und direkter Röntgendetektoren (siehe Abbildung 2.5) miteinander kombiniert. In Anlehnung an einen direkten Absorber wird hierbei eine Halbleiter-Schicht bestehend aus einem organischen Halbleiter als Absorber verwendet. Diese organische Halbleiter-Schicht weist eine hohe Wechselwirkung mit optischen Photonen und eine vernachlässigbare Absorptionseffizienz für hochenergetische Röntgenphotonen auf. Um eine ausreichend hohe Absorptionseffizienz hochenergetischer Röntgenphotonen zu gewährleisten, befinden sich innerhalb der organischen Halbleiter-Schicht zusätzlich Szintillator-Teilchen. Die Wechselwirkung der einfallenden Röntgenphotonen erfolgt dann im Wesentlichen mit dem Szintillator-Material. Als Folge der Absorption der hochenergetischen Röntgenphotonen werden optische Photonen von den Szintillator-Teilchen emittiert. Die emittierten optischen Photonen können wiederum vom organischen Halbleiter, welcher die Szintillator-Teilchen umgibt, absorbiert und in elektrische Ladung umgewandelt werden. In Analogie zu einem direkten Absorber werden bei dieser Umwandlung Ladungsträger im organischen Halbleiter erzeugt, dessen Bewegung zur Induktion eines elektrischen Signals führen kann. Bedingt durch die Kombination indirekter und direkter Aufbauten und Funktionsprinzipien werden organische Halbleiter mit Szintillator-Teilchen als quasi-direkte Absorber bezeichnet. Im Zuge dieser Arbeit werden in Anlehnung an [38] quasi-direkte Absorber, die sich aus Szintillator-Teilchen auf der Basis von Terbium-dotiertem Gadoliniumoxysulfid (GOS:Tb) und einem organischen Halbleiter auf der Grundlage einer organischen Bulk-Heterojunction bestehend aus Poly(3-hexylthiophen-2,5-diyl) (P3HT) und Phenyl-C₆₁Buttersäuremethylester (PCBM) zusammensetzen, untersucht. Dieses quasi-direkte Absorber-Material wird in der vorliegenden Arbeit als P3HT:PCBM:GOS:Tb bezeichnet. Die Materialparameter von P3HT:PCBM:GOS:Tb, die für die Untersuchungen in dieser Arbeit relevant sind, sind im Rahmen der Kapitel 6 und 7 aufgeführt und sind zum Teil in Tabelle 6.1 aufgelistet.

2.3.4 Ladungsträgerdynamik in Halbleitern

Physikalische Vorgänge in Halbleitern, die im Zusammenhang mit Ladungsträgern auftreten, können mithilfe von Elektronen und Defektelektronen (Löchern) erklärt werden. Die Dynamik von Elektronen und Löchern in Halbleitern lässt sich mathematisch mithilfe von Kontinuitätsgleichungen beschreiben. Im Allgemeinen liegt einer Kontinuitätsgleichung der physikalische Sachverhalt zugrunde, dass die zeitliche Veränderung einer Erhaltungsgröße w von der räumlichen Verteilung ihrer Stromdichte und von ihrer Erzeugungs- und Vernichtungsrate abhängt. In differentieller Form lässt sich eine allgemeine Kontinuitätsgleichung über die räumliche Dichte ϱ_w , die Stromdichte \mathbf{j}_w und den Quellterm σ_w der Erhaltungsgröße als partielle Differentialgleichung beschreiben [39, Kapitel 2]:

$$\frac{\partial \varrho_w}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{j}_w = \sigma_w . \quad (2.28)$$

Hierbei werden Erzeugungs- und Vernichtungsprozesse im Quellterm σ_w zusammengefasst und die Zeit wird mit der Variable t beschrieben.

Die Kontinuitätsgleichungen von Elektronen und Löchern in Halbleitern lassen sich aus der allgemeinen Formulierung der Kontinuitätsgleichung in Gleichung (2.28) ableiten. Zu diesem Zweck werden Elektronen (e, kurz für engl. electron) und Löcher (h, kurz für engl. hole) im Halbleiter als Erhaltungsgröße w betrachtet und mithilfe der räumlichen Ladungsträgerdichten $\varrho_e = n$ und $\varrho_h = p$ beschrieben. Die Teilchenstromdichten der Elektronen und Löcher $\mathbf{j}_{e,h}$ ergeben sich aus den Definitionen der Ladungsstromdichten $\mathbf{J}_{e,h}$ [40, Kapitel 6], [41, Kapitel 1]:

$$\mathbf{j}_e = \frac{\mathbf{J}_e}{-e} = \frac{e\mu_e n \mathbf{F} + eD_e \nabla n}{-e} = -\mu_e n \mathbf{F} - D_e \nabla n, \quad (2.29a)$$

$$\mathbf{j}_h = \frac{\mathbf{J}_h}{e} = \frac{e\mu_h p \mathbf{F} - eD_h \nabla p}{e} = \mu_h p \mathbf{F} - D_h \nabla p. \quad (2.29b)$$

Dabei ist e die Elementarladung, $\mu_{e,h}$ die Beweglichkeit der Elektronen und Löcher, \mathbf{F} das elektrische Feld und $D_{e,h}$ der Diffusionskoeffizient der Elektronen und Löcher. Die in den Gleichungen (2.29) verwendeten Definitionen der Ladungsstromdichten $\mathbf{J}_{e,h}$ setzen sich aus der Driftstromdichte $\mathbf{J}_{e,h|\text{drift}} = e\mu_{e,h}\varrho_{e,h}\mathbf{F}$ und der Diffusionsstromdichte $\mathbf{J}_{e,h|\text{diff}} = \pm eD_{e,h}\nabla\varrho_{e,h}$ zusammen. Die Driftkomponente $\mathbf{J}_{e,h|\text{drift}}$ berücksichtigt den Drift der Ladungsträger in einem elektrischen Feld \mathbf{F} und die Diffusionskomponente $\mathbf{J}_{e,h|\text{diff}}$ die Diffusion der Ladungsträger als Folge eines Gradienten $\nabla\varrho_{e,h}$ in der Ladungsträgerdichte. Der Quellterm $\sigma_{e,h}$ in Gleichung (2.28) lässt sich mithilfe der Erzeugungsrate $g_{e,h}$ und der Vernichtungsrate $r_{e,h}$, mit der Elektronen und Löcher im Halbleiter pro Volumen erzeugt und vernichtet werden, beschreiben. Hierbei wirkt sich eine Erzeugung positiv und eine Vernichtung negativ auf die Teilchenbilanz aus und es gilt:

$$\sigma_{e,h} = -r_{e,h} + g_{e,h}. \quad (2.30)$$

Basierend auf der allgemeinen Formulierung in Gleichung (2.28) und mithilfe der Gleichungen (2.29) und (2.30) ergeben sich die Kontinuitätsgleichungen für Elektronen und Löcher in Halbleitern zu [40, Kapitel 6], [41, Kapitel 1]:

$$\frac{\partial n}{\partial t} = -\nabla \cdot \mathbf{j}_e + \sigma_e, \quad (2.31a)$$

$$= -\nabla \cdot (-\mu_e n \mathbf{F} - D_e \nabla n) - r_e + g_e, \quad (2.31b)$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = -\nabla \cdot \mathbf{j}_h + \sigma_h, \quad (2.31c)$$

$$= -\nabla \cdot (\mu_h p \mathbf{F} - D_h \nabla p) - r_h + g_h. \quad (2.31d)$$

3 Simulationsmodelle

In diesem Kapitel werden die bereits bestehenden Modelle zur Simulation der theoretischen Leistungsfähigkeit einschichtiger Röntgendetektoren beschrieben, die im Rahmen dieser Arbeit verwendet und erweitert werden. Zu diesem Zweck werden im Verlauf des Kapitels die Modellierung der Röntgensensitivität und der Detektiven Quanteneffizienz einschichtiger Röntgendetektoren eingeführt und erläutert. Die in diesem Kapitel beschriebenen Simulationsmodelle bilden die Grundlage für die Simulation und das Design von einschichtigen Röntgendetektoren in Kapitel 5 und für die Erweiterungen der Modellierungen auf mehrschichtige und gefaltete Röntgendetektoren in den Kapiteln 6 und 7.

3.1 Röntgensensitivität

Die Modellierung der Röntgensensitivität, welche in den vorliegenden Untersuchungen verwendet und erweitert wird, basiert auf einem Simulationsmodell für einschichtige direkte Röntgendetektoren, dessen Grundlagen und Anwendung im Wesentlichen durch die Arbeiten von Kasap, Kabir und Panneerselvam [34, 42, 43, 44] beschrieben sind. Die folgenden Abschnitte dienen der Einführung und Erläuterung dieses Modells. Die in dieser Arbeit entwickelten Erweiterungen der Modellierung auf mehrschichtige und gefaltete Röntgendetektoren sind in den Abschnitten 6.2 und 7.2 dargestellt.

3.1.1 Grundlegende Modellannahmen

Für die Modellierung der Röntgensensitivität wird ein einschichtiger direkter Röntgendetektor bestehend aus einem Absorber und zwei Elektroden betrachtet, der durch die obere Elektrode mit Röntgenphotonen bestrahlt wird (siehe Abbildung 3.1). Über dem Absorber zwischen den beiden Elektroden herrscht ein elektrisches Feld F , dass durch eine extern angelegte Spannung U erzeugt wird. Die wesentlichen Annahmen, die der Modellierung zugrunde liegen und eine mathematische Beschreibung der Röntgensensitivität ermöglichen, sind [34, 42]:

1. Die einfallende Röntgenstrahlung ist räumlich homogen, monoenergetisch, zeitlich gepulst und trifft senkrecht auf den Detektor. Die Pulsdauer ist vernachlässigbar klein gegenüber der Transitzeit der Ladungsträger im Absorber.
2. Die Reichweite der geladenen Sekundärteilchen, die durch die Wechselwirkung der Röntgenphotonen mit dem Absorber entstehen, wird vernachlässigt.
3. Die Energie, die benötigt wird, um ein Elektron-Loch-Paar im Absorber zu erzeugen, ist mit wenigen Ausnahmen eine Materialkonstante.

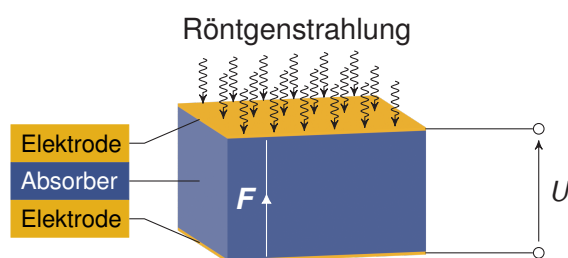


Abbildung 3.1: Grundlegender Aufbau eines einschichtigen direkten Röntgendetektors. Der betrachtete einschichtige direkte Röntgendetektor besteht aus einem Absorber, der sich zwischen zwei Elektroden befindet. Die auf die obere Elektrode einfallende Röntgenstrahlung, die elektrische Spannung U zwischen den Elektroden und die exemplarische Orientierung des elektrischen Feldes F sind zusätzlich dargestellt.

4. Das elektrische Feld über dem Absorber zwischen den beiden Elektroden ist senkrecht zu den Elektroden-Flächen ausgerichtet, erstreckt sich gleichmäßig über dem Absorber und ist sowohl räumlich als auch zeitlich konstant.
5. Die Bewegung der Ladungsträger wird durch ihren Drift im elektrischen Feld dominiert, und die Diffusion der Ladungsträger wird vernachlässigt.
6. Elektronen und Löcher haben eine konstante Beweglichkeit $\mu_{e,h}$ und eine konstante Lebensdauer $\tau_{e,h}$.

3.1.2 Umwandlung der Röntgenphotonen in Elektron-Loch-Paare

Für die Modellierung der Röntgensensitivität wird ein einschichtiger direkter Röntgendetektor mit einer Elektroden-Fläche A_{el} und einer Absorber-Schichtdicke d betrachtet (siehe Abbildung 3.2 (a)). Gemäß der Modellannahme 1 (siehe Abschnitt 3.1.1) wird ein kurzer Puls aus monoenergetischen Röntgenphotonen der Energie E angenommen, der senkrecht entlang der x -Achse auf den Detektor trifft und dessen Photonenfluenz räumlich konstant ist. In diesem Fall lässt sich die einfallende Röntgenstrahlung mithilfe der Photonenfluenz $\Phi_0 = N_0/A_{el}$ und der Energiefluenz $\Psi_0 = \Phi_0 E$ beschreiben (siehe Abschnitt 2.1.2.2). Hierbei beschreibt N_0 die Anzahl der Röntgenphotonen, die auf die Elektroden-Fläche A_{el} auftrifft. Aufgrund der Wechselwirkung der Röntgenphotonen mit dem Absorber nimmt die Photonenfluenz $\Phi(x)$ innerhalb des Absorbers mit zunehmender Eindringtiefe x ab. Gemäß des Lambert-beerschen Gesetzes (siehe Gleichung (2.5)) ergibt sich für den hier betrachteten Fall ein exponentieller Abfall der tiefenabhängigen Photonenfluenz $\Phi(x)$ und somit ebenfalls der tiefenabhängigen Energiefluenz $\Psi(x) = \Phi(x)E$ (siehe Abbildung 3.2 (b)) [34]:

$$\Phi(x) = \Phi_0 e^{-\alpha x}, \quad \Psi(x) = \Psi_0 e^{-\alpha x}. \quad (3.1)$$

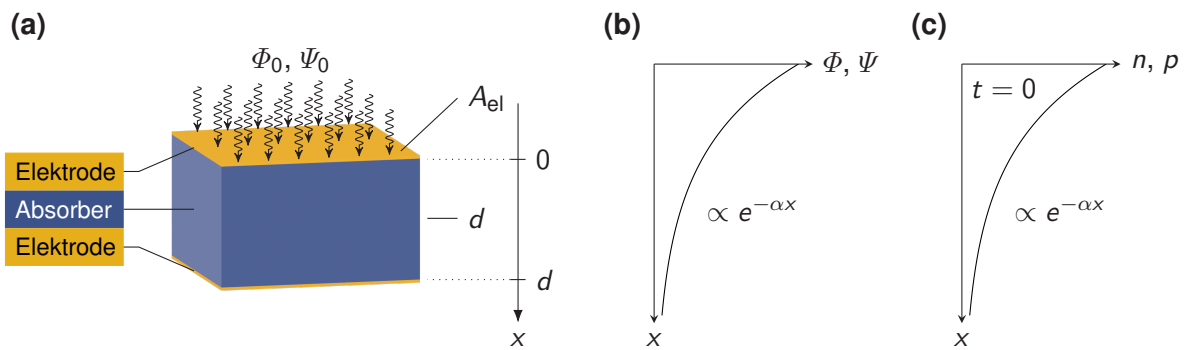


Abbildung 3.2: Aufbau des Röntgendetektors und Tiefenabhängigkeit der Photonenfluenz, Energiefluenz und Ladungsträgerdichten im Absorber. (a) Aufbau des einschichtigen direkten Röntgendetektors, der für die Beschreibung des Simulationsmodells betrachtet wird. Die Elektroden-Fläche A_{el} , die Absorber-Schichtdicke d , die Orientierung der x -Achse und die auf den Detektor auftreffende Photonenfluenz Φ_0 und Energiefluenz Ψ_0 sind zusätzlich gekennzeichnet. (b) Schematische Darstellung der Tiefenabhängigkeit der Photonenfluenz $\Phi(x)$ und der Energiefluenz $\Psi(x)$ im Absorber. (c) Schematische Darstellung der Tiefenabhängigkeit der Elektronendichte $n(x, t = 0)$ und Lochdichte $p(x, t = 0)$ zum Zeitpunkt $t = 0$ im Absorber.

Dabei ist α der lineare Schwächungskoeffizient des Absorbers. Die Wechselwirkung der Röntgenphotonen mit der oberen Elektrode sind in Gleichung (3.1) vernachlässigt.

Entsprechend der Modellannahme 2 (siehe Abschnitt 3.1.1) wird die räumliche Ausbreitung der geladenen Sekundärteilchen im Absorber vernachlässigt. Folglich kann die mittlere Energie dR_{en} , die vom Absorber entlang der Wegstrecke dl absorbiert wird, näherungsweise als $dR_{\text{en}}/dl \approx (1 - g)dR_{\text{tr}}/dl$ beschrieben werden. Hierbei ist dR_{tr} die mittlere Energie, die entlang der Wegstrecke dl durch Wechselwirkungen der Photonen in kinetische Energie geladener Sekundärteilchen umgewandelt wird, und g beschreibt den gewichteten Mittelwert der relativen Strahlungsverluste der geladenen Sekundärteilchen (siehe Abschnitt 2.1.4.2). Gemäß der Definitionen in Gleichungen (2.7) und (2.9) in Abschnitt 2.1.4.2 gilt dann [34]:

$$\frac{dR_{\text{en}}}{dl} \approx (1 - g) \frac{dR_{\text{tr}}}{dl} = (1 - g)\alpha_{\text{tr}}R = \alpha_{\text{en}}R. \quad (3.2)$$

Dabei sind $\alpha_{\text{tr, en}}$ der Energieumwandlungskoeffizient und der Energieabsorptionskoeffizient des Absorbers und R die Strahlungsenergie der Röntgenstrahlung. Mithilfe von Gleichung (3.2) lässt sich somit die mittlere Energie dR_{en} , die im Absorber pro Volumen dA_{el} absorbiert wird, abschätzen. Entsprechend der Modellannahme 3 (siehe Abschnitt 3.1.1) wird von einer materialspezifischen konstanten Energie W_{\pm} ausgegangen, die zur Erzeugung eines Elektron-Loch-Paares im Absorber benötigt wird. Ferner sei die Dauer des Röntgenpulses vernachlässigbar kurz im Vergleich zur Transitzeit der Ladungsträger im Absorber (siehe Modellannahme 1 in Abschnitt 3.1.1). Unter diesen Voraussetzungen, mithilfe der Gleichungen (3.2) und (3.1) und unter Verwendung des Zusammenhangs $\Psi(x) = R(x)/A_{\text{el}}$ ergeben sich die Ladungsträgerdichten $n(x, t = 0)$ und $p(x, t = 0)$ der Elektronen und Löcher im Absorber zum Zeitpunkt des Röntgenpulses $t = 0$ zu [42]:

$$n(x, t = 0) = p(x, t = 0) = \frac{dR_{\text{en}}(x)}{dA_{\text{el}}W_{\pm}} \approx \frac{\alpha_{\text{en}}R(x)}{A_{\text{el}}W_{\pm}} = \frac{\alpha_{\text{en}}}{W_{\pm}}\Psi(x) = \frac{\alpha_{\text{en}}}{W_{\pm}}\Psi_0 e^{-\alpha x}. \quad (3.3)$$

Als Folge der exponentiellen Abnahme der Photonenfluenz $\Phi(x)$ und der Energiefluenz $\Psi(x)$ ergeben sich für die zum Zeitpunkt $t = 0$ im Absorber erzeugte Elektronendichte $n(x, t = 0)$ und Löcherdichte $p(x, t = 0)$ ebenfalls exponentielle Zusammenhänge (siehe Abbildung 3.2 (c)).

3.1.3 Signalinduktion durch Drift der Elektronen und Löcher

Die durch die Wechselwirkung der Röntgenphotonen erzeugten Ladungsträgerdichten (siehe Gleichung (3.3)) stellen eine Randbedingung für die Elektronen- und Löcherdichten im Absorber zum Zeitpunkt $t = 0$ dar. Die Dynamik der Elektronen und Löcher im Absorber für $t \geq 0$ kann mithilfe der Kontinuitätsgleichungen für Elektronen und Löcher im Halbleiter beschrieben werden (siehe Gleichungen (2.31) in Abschnitt 2.3.4).

Gemäß der Modellannahme 1 (siehe Abschnitt 3.1.1) wird die Dauer des anfänglichen Röntgenpulses als vernachlässigbar klein angesehen, sodass für den Zeitraum $t \geq 0$ keine weiteren Ladungsträger erzeugt werden und die Erzeugungsraten $g_{\text{e, h}}$ verschwinden. Entsprechend der Modellannahme 4 (siehe

Abschnitt 3.1.1) wird ein homogenes und zeitlich konstantes elektrisches Feld $\mathbf{F} = \pm F \mathbf{e}_x$ der Feldstärke F entlang der x -Achse zwischen den beiden Elektroden über dem Absorber angenommen. Das Vorzeichen ergibt sich hierbei aus der Polarität der extern angelegten Spannung U . Des Weiteren wird in Übereinstimmung mit der Modellannahme 5 (siehe Abschnitt 3.1.1) die Diffusion der Ladungsträger im Absorber, die durch die Diffusionsterme $D_e \nabla n$ und $D_h \nabla p$ beschrieben wird, vernachlässigt. Ferner wird der Modellannahme 6 (siehe Abschnitt 3.1.1) zufolge eine konstante Lebensdauer $\tau_{e,h}$ der Elektronen und Löcher angenommen, mithilfe derer sich die Vernichtungsraten $r_e = n/\tau_e$ und $r_h = p/\tau_h$ der Elektronen und Löcher beschreiben lassen.

Unter diesen Voraussetzungen lassen sich die Kontinuitätsgleichungen für die hier betrachtete Problemstellung aus den allgemeinen Kontinuitätsgleichungen für Elektronen und Löcher (siehe Gleichungen (2.31) in Abschnitt 2.3.4) ableiten [42]:

$$\frac{\partial n}{\partial t} = -\nabla \cdot (-\mu_e n \mathbf{F} - D_e \nabla n) - r_e + g_e, \quad \frac{\partial p}{\partial t} = -\nabla \cdot (\mu_h p \mathbf{F} - D_h \nabla p) - r_h + g_h, \quad (3.4a)$$

\downarrow \downarrow \downarrow \downarrow
 $\pm F \mathbf{e}_x$ $\frac{n}{\tau_e}$ $\pm F \mathbf{e}_x$ $\frac{p}{\tau_h}$

$$\Rightarrow \frac{\partial n}{\partial t} = \pm \mu_e F \frac{\partial n}{\partial x} - \frac{n}{\tau_e}, \quad \Rightarrow \frac{\partial p}{\partial t} = \mp \mu_h F \frac{\partial p}{\partial x} - \frac{p}{\tau_h}. \quad (3.4b)$$

Hierbei wird gemäß der Modellannahme 6 (siehe Abschnitt 3.1.1) eine konstante Beweglichkeit $\mu_{e,h}$ der Elektronen und Löcher angenommen. Die Differentialgleichungen in Gleichung (3.4b) lassen sich mithilfe der Produktansätze $n(x, t) = f_n(x) f_n(t)$ und $p(x, t) = f_p(x) f_p(t)$ lösen. Dabei beschreiben $f_{n,p}(x)$ und $f_{n,p}(t)$ allgemeine Funktionen, die nur von der Variable x oder t abhängen. Die Lösungen der Kontinuitätsgleichungen der Elektronen und Löcher in Gleichung (3.4b) ergeben sich dann zu:

$$n(x, t) = e^{[(A_n + 1/\tau_e)/(\pm \mu_e F)]x} e^{A_n t} e^{B_n + C_n}, \quad p(x, t) = e^{[(A_p + 1/\tau_h)/(\mp \mu_h F)]x} e^{A_p t} e^{B_p + C_p}, \quad (3.5)$$

mit den Konstanten $A_{n,p}$, $B_{n,p}$ und $C_{n,p}$. Mithilfe der Randbedingung für $n(x, t = 0)$ und $p(x, t = 0)$ aus Gleichung (3.3) lassen sich die Konstanten bestimmen und die Lösungen der Elektronen- und Löcherdichte ergeben sich zu:

$$n(x, t) = \frac{\alpha_{en}}{W_{\pm}} \Psi_0 e^{-\alpha(x \pm \mu_e F t)} e^{-t/\tau_e}, \quad p(x, t) = \frac{\alpha_{en}}{W_{\pm}} \Psi_0 e^{-\alpha(x \mp \mu_h F t)} e^{-t/\tau_h}. \quad (3.6)$$

In Abhängigkeit von der Orientierung des elektrischen Feldes \mathbf{F} ergeben sich aus Gleichung (3.6) unterschiedliche Lösungen für die Ladungsträgerdichten. Im Falle eines elektrischen Feldes $\mathbf{F} = -F \mathbf{e}_x$,

das in negativer x -Richtung orientiert ist (siehe Abbildung 3.3 (a)), ergeben sich die Elektronen- und Löcherdichten zu [42]:

$$n(x, t) = \begin{cases} \frac{\alpha_{\text{en}}}{W_{\pm}} \Psi_0 e^{-\alpha(x - \mu_e Ft)} e^{-t/\tau_e} & \mu_e Ft < x < d, \\ 0 & x < \mu_e Ft \text{ und } x > d, \end{cases} \quad (3.7a)$$

$$p(x, t) = \begin{cases} \frac{\alpha_{\text{en}}}{W_{\pm}} \Psi_0 e^{-\alpha(x + \mu_h Ft)} e^{-t/\tau_h} & 0 < x < d - \mu_h Ft, \\ 0 & x < 0 \text{ und } x > d - \mu_h Ft. \end{cases} \quad (3.7b)$$

Für den Fall eines elektrischen Feldes $\mathbf{F} = F\mathbf{e}_x$, das in positiver x -Richtung orientiert ist (siehe Abbildung 3.3 (b)), ergeben sich die Elektronen- und Löcherdichten zu:

$$n(x, t) = \begin{cases} \frac{\alpha_{\text{en}}}{W_{\pm}} \Psi_0 e^{-\alpha(x + \mu_e Ft)} e^{-t/\tau_e} & 0 < x < d - \mu_e Ft, \\ 0 & x < 0 \text{ und } x > d - \mu_e Ft, \end{cases} \quad (3.8a)$$

$$p(x, t) = \begin{cases} \frac{\alpha_{\text{en}}}{W_{\pm}} \Psi_0 e^{-\alpha(x - \mu_h Ft)} e^{-t/\tau_h} & \mu_h Ft < x < d, \\ 0 & x < \mu_h Ft \text{ und } x > d. \end{cases} \quad (3.8b)$$

Gemäß der Gleichungen (3.7) und (3.8) bewirkt ein Wechsel der Orientierung des elektrischen Feldes $-F\mathbf{e}_x \leftrightarrow F\mathbf{e}_x$ lediglich einen Wechsel der ladungsträgerspezifischen Größen $n(x, t) \leftrightarrow p(x, t)$, $\mu_e \leftrightarrow \mu_h$ und $\tau_e \leftrightarrow \tau_h$ in der mathematischen Beschreibung der Ladungsträgerdichten. Folglich führt ein Wechsel der Orientierung des elektrischen Feldes dazu, dass die Lösung der Elektronendichte (Löcherdichte) durch die ursprüngliche Lösung der Löcherdichte (Elektronendichte) unter Verwendung der jeweiligen ladungsträgerspezifischen Konstanten $\mu_{e,h}$ und $\tau_{e,h}$ beschrieben wird.

Das elektrische Signal, das durch die Bewegung der Elektronen und Löcher auf die Elektroden des Detektors induziert wird, lässt sich mithilfe des Shockley-Ramo Theorems beschreiben (siehe Abschnitt 2.2.1). Der hier betrachtete Sachverhalt, in dem sich die Ladungsträger zwischen zwei parallel zueinander ausgerichteten Elektroden bewegen, entspricht der Situation der parallelen Zwei-Leiter-Geometrie, für welche

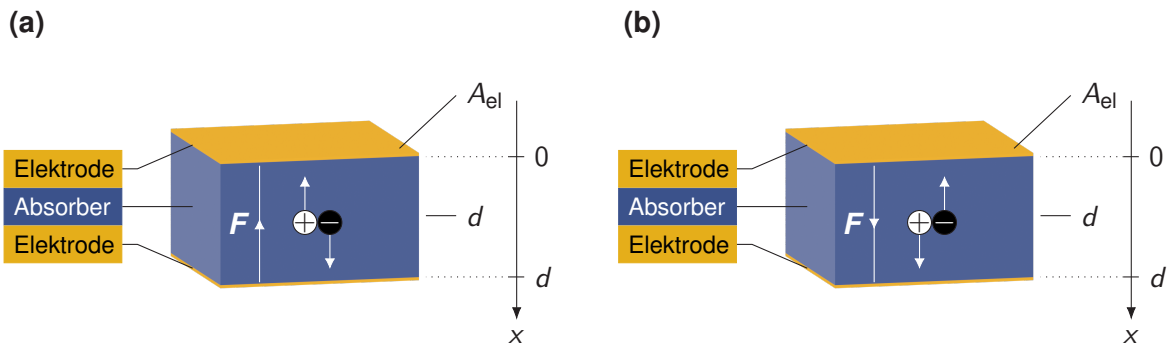


Abbildung 3.3: Drift der Elektronen und Löcher im elektrischen Feld. Schematische Darstellung des Drifts der Elektronen und Löcher im elektrischen Feld \mathbf{F} zwischen den beiden Elektroden über dem Absorber des Röntgendetektors. (a) Orientierung des elektrischen Feldes $\mathbf{F} = -F\mathbf{e}_x$ in negativer x -Richtung. (b) Orientierung des elektrischen Feldes $\mathbf{F} = F\mathbf{e}_x$ in positiver x -Richtung.

die Anwendung des Shockley-Ramo Theorems in Abschnitt 2.2.1.2 beschrieben und diskutiert ist. Gemäß der Gleichungen (2.20) unterscheiden sich die induzierten Ströme i_t und i_b auf die obere und auf die untere Elektrode lediglich in ihrem Vorzeichen. Das gegensätzliche Vorzeichen folgt hierbei aus der Betrachtung der induzierten Ströme hin zur jeweiligen Elektrode (siehe Abbildung 2.6). Dieser Aspekt ist für die Beschreibung des Simulationsmodells irrelevant. Es wird daher ohne Beschränkung der Allgemeinheit der Strom $i = i_t$ betrachtet, der auf die obere Elektrode des Detektors induziert wird. Gemäß Gleichung (2.20a) gilt für den Strom i , der auf die obere Elektrode induziert wird: $i = qv_x/d$. Dabei beschreibt q die Ladung der Punktladung, v_x die Geschwindigkeit der Punktladung in x -Richtung und d den Abstand der Elektroden. Mit den Ladungen $\mp e$ und den Driftgeschwindigkeiten $\mu_{e,h}F$ ergeben sich die Ströme i_e und i_h , die durch die Bewegung eines Elektrons und eines Lochs induziert werden, zu:

$$i_e = \mp \frac{e\mu_e F}{d}, \quad i_h = \mp \frac{e\mu_h F}{d}. \quad (3.9)$$

Hierbei ist e die Elementarladung, und das Vorzeichen ergibt sich aus der Orientierung des elektrischen Feldes F . Gemäß des Superpositionsprinzips lässt sich der Gesamtstrom, der durch die Bewegung mehrerer Ladungsträger induziert wird, als Summe über die Beiträge jedes einzelnen Ladungsträgers beschreiben. Gemäß Gleichung (3.9) sind die Beiträge $i_{e,h}$ jeweils für alle Elektronen und alle Löcher, die sich zwischen den beiden Elektroden bewegen, gleich. Folglich lassen sich die induzierten Gesamtströme $I_{e,h}(t)$ als Produkt aus den einzelnen Beiträgen $i_{e,h}$ und der Anzahl $N_{e,h}(t)$ der Ladungsträger, die sich zum Zeitpunkt t im Detektor-Volumen V_D bewegen, beschreiben. Die Anzahl der Ladungsträger $N_{e,h}(t)$ kann hierbei als Integral der Ladungsträgerdichten $n(x, t)$ und $p(x, t)$ über das Detektor-Volumen V_D dargestellt werden. Gemäß der Zusammenhänge für $i_{e,h}$ in Gleichung (3.9) ergeben sich die Gesamtströme $I_{e,h}(t)$ dann zu:

$$I_e(t) = i_e N_e(t) = \mp \frac{e\mu_e F}{d} \int_{V_D} dV n(x, t) = \mp \frac{e\mu_e F}{d} A_{el} \int_0^d dx n(x, t), \quad (3.10a)$$

$$I_h(t) = i_h N_h(t) = \mp \frac{e\mu_h F}{d} \int_{V_D} dV p(x, t) = \mp \frac{e\mu_h F}{d} A_{el} \int_0^d dx p(x, t). \quad (3.10b)$$

Die induzierte Ladung Q , die durch die Bewegung der Elektronen und Löcher im Detektor-Volumen hervorgerufen wird, ergibt sich dann aus dem Integral der Gesamtströme $I_{e,h}(t)$ über die jeweilige Transitzeit $t_{e,h}$ der Elektronen und Löcher im Absorber [42]:

$$Q = \int_0^{t_e} dt I_e(t) + \int_0^{t_h} dt I_h(t), \quad (3.11a)$$

$$= \mp \frac{eFA_{el}}{d} \left[\mu_e \int_0^{t_e} dt \int_0^d dx n(x, t) + \mu_h \int_0^{t_h} dt \int_0^d dx p(x, t) \right]. \quad (3.11b)$$

Die Transitzeiten $t_{e,h} = d/(\mu_{e,h}F)$ sind hierbei über die maximale Strecke d , die Ladungsträger im Absorber zurücklegen können, und über die jeweilige Driftgeschwindigkeit $\mu_{e,h}F$ definiert. Für den Fall eines elektrischen Feldes $F = -Fe_x$, das in negativer x -Richtung orientiert ist, ergibt sich mit den

Ladungsträgerdichten $n(x, t)$ und $p(x, t)$ aus den Gleichungen (3.7) die induzierte Ladung Q gemäß der Gleichung (3.11b) zu [34, 42]:

$$Q = -\frac{eF A_{\text{el}}}{d} \left[\mu_e \int_0^{t_e} dt \int_0^d dx n(x, t) + \mu_h \int_0^{t_h} dt \int_0^d dx p(x, t) \right], \quad (3.12a)$$

$$= -\frac{eF A_{\text{el}} \alpha_{\text{en}} \Psi_0}{d W_{\pm}} \left[\mu_e \int_0^{t_e} dt \int_{\mu_e F t}^d dx e^{-\alpha(x - \mu_e F t)} e^{-t/\tau_e} \right. \\ \left. + \mu_h \int_0^{t_h} dt \int_0^{d - \mu_h F t} dx e^{-\alpha(x + \mu_h F t)} e^{-t/\tau_h} \right], \quad (3.12b)$$

$$= -e A_{\text{el}} \Phi_0 \underbrace{\frac{E}{W_{\pm}} \left(\frac{\alpha_{\text{en}}}{\alpha} \right)}_{\eta_m} \underbrace{\left(1 - e^{-1/\Delta} \right)}_{\eta_x} \left[x_e \left(1 + \frac{e^{-1/x_e} - e^{-1/\Delta}}{(1 - e^{-1/\Delta})(\Delta/x_e - 1)} \right) \right. \\ \left. + x_h \left(1 - \frac{1 - e^{-1/\Delta - 1/x_h}}{(1 - e^{-1/\Delta})(\Delta/x_h + 1)} \right) \right] \underbrace{\quad}_{\eta_{\text{cc},-}}, \quad (3.12c)$$

$$= -e A_{\text{el}} \Phi_0 \eta_x \eta_m \eta_{\text{cc},-}. \quad (3.12d)$$

Dabei sind $\Delta = 1/(\alpha d)$ die normierte Absorptionslänge und $x_{e,h} = \mu_{e,h} F \tau_{e,h}/d$ der normierte Ladungsträger-Schubweg von Elektronen und Löchern. Gemäß der Gleichungen (3.12c) und (3.12d) lässt sich die induzierte Ladung Q als Produkt aus einem Vorfaktor und einzelnen Effizienzfaktoren beschreiben. Hierbei beschreibt η_x die Röntgenabsorptionseffizienz, η_m die Konversionseffizienz und $\eta_{\text{cc},-}$ die Ladungssammeleffizienz im Falle eines elektrischen Feldes $\mathbf{F} = -F \mathbf{e}_x$, das in negativer x -Richtung orientiert ist. Für den Fall eines elektrischen Feldes $\mathbf{F} = F \mathbf{e}_x$, das in positiver x -Richtung orientiert ist, ergibt sich aus der Bewegungsrichtung der Elektronen und Löcher ein positives Vorzeichen in Gleichung (3.11b). Des Weiteren werden in diesem Fall die Ladungsträgerdichten $n(x, t)$ und $p(x, t)$ mithilfe der Gleichungen (3.8) beschrieben. In Analogie zu den Gleichungen (3.12) ergibt sich die induzierte Ladung Q dann zu:

$$Q = +e A_{\text{el}} \Phi_0 \eta_x \eta_m \eta_{\text{cc},+}. \quad (3.13)$$

Die Ladungssammeleffizienz $\eta_{\text{cc},+}$ entspricht hierbei der Ladungssammeleffizienz $\eta_{\text{cc},-}$ aus den Gleichungen (3.12) mit ausgetauschten normierten Ladungsträger-Schubwegen $x_e \leftrightarrow x_h$.

3.1.4 Modellierung der Röntgensensitivität

Gemäß der Gleichung (2.21) kann die Röntgensensitivität S eines direkten Röntgendetektors mithilfe des Betrags der induzierten Ladung $|Q|$, der Energiedosis der einfallenden Röntgenstrahlung in Luft D_{air} und der bestrahlten Fläche A definiert werden: $S = |Q|/(D_{\text{air}} A)$. Für den hier betrachteten Fall eines einschichtigen Röntgendetektors lässt sich der Betrag der induzierten Ladung $|Q|$ mithilfe der Gleichungen (3.12d) und (3.13) modellieren, und die bestrahlte Fläche ist A_{el} (siehe Abbildung 3.2 (a)). Unter der Annahme eines Gleichgewichts geladener Teilchen (CPE) und einer vernachlässigbar kleinen

Bindungsenergie der geladenen Sekundärteilchen lässt sich die Energiedosis der einfallenden Röntgenstrahlung in Luft D_{air} mithilfe der Definition in Gleichung (2.18) beschreiben. Infolgedessen ergibt sich die theoretische Röntgensensitivität S_{theo} eines einschichtigen direkten Röntgendetektors zu [34, 42, 43]:

$$S_{\text{theo}} = S_0 \eta_x \eta_m \eta_{cc} , \quad (3.14)$$

mit

$$S_0 = \frac{e}{E (\alpha_{\text{en}}/\rho)_{\text{air}}} , \quad (3.15a)$$

$$\eta_x = 1 - e^{-1/\Delta} , \quad (3.15b)$$

$$\eta_m = \frac{E}{W_{\pm}} \left(\frac{\alpha_{\text{en}}}{\alpha} \right) , \quad (3.15c)$$

$$\eta_{cc} = \begin{cases} x_e \left(1 + \frac{e^{-1/x_e} - e^{-1/\Delta}}{(1 - e^{-1/\Delta})(\Delta/x_e - 1)} \right) + x_h \left(1 - \frac{1 - e^{-1/\Delta - 1/x_h}}{(1 - e^{-1/\Delta})(\Delta/x_h + 1)} \right) & \mathbf{F} = -\mathbf{F}e_x , \\ x_h \left(1 + \frac{e^{-1/x_h} - e^{-1/\Delta}}{(1 - e^{-1/\Delta})(\Delta/x_h - 1)} \right) + x_e \left(1 - \frac{1 - e^{-1/\Delta - 1/x_e}}{(1 - e^{-1/\Delta})(\Delta/x_e + 1)} \right) & \mathbf{F} = \mathbf{F}e_x . \end{cases} \quad (3.15d)$$

3.2 Detektive Quanteneffizienz

Die Modellierung der Detektiven Quanteneffizienz, welche in den vorliegenden Untersuchungen verwendet und erweitert wird, basiert auf einem Modell kaskadierter linearer Systeme. Der Ansatz kaskadierter (linearer) Systeme wurde bereits in einer Vielzahl unterschiedlicher Arbeiten [45, 46, 47, 48, 43, 49] für die Untersuchung der Detektiven Quanteneffizienz angewendet. Die folgenden Abschnitte dienen der Einführung und Erläuterung der grundlegenden Modellierung der Detektiven Quanteneffizienz einschichtiger Röntgendetektoren. Die in dieser Arbeit entwickelten Erweiterungen der Modellierung auf mehrschichtige und gefaltete Röntgendetektoren sind in den Abschnitten 6.2.3 und 7.2.3 dargestellt.

3.2.1 Grundlegender Aufbau des linearen Systems

Der grundlegende Aufbau des linearen Systems, das in dieser Arbeit für die Modellierung der Detektiven Quanteneffizienz einschichtiger Röntgendetektoren verwendet wird, ist in Abbildung 3.4 dargestellt. Das verwendete lineare System besteht aus vier aufeinanderfolgenden linearen Systemen. Jedes einzelne System repräsentiert hierbei eine Modell-Stufe. Der Aufbau der Modell-Stufen 1-3 basiert auf der Modellierung der Röntgensensitivität einschichtiger Röntgendetektoren in Abschnitt 3.1, der zufolge die Signalausbreitung in einem einschichtigen Röntgendetektor als eine Verkettung aus der Röntgenabsorption, der Konversion in Ladungsträger und der Ladungssammlung interpretiert werden kann. Jeder dieser Prozesse kann als eine einzelne Modell-Stufe in einer Kaskade linearer Systeme modelliert werden. Infolgedessen repräsentieren die Modell-Stufen 1-3 des verwendeten linearen Systems die Absorption der

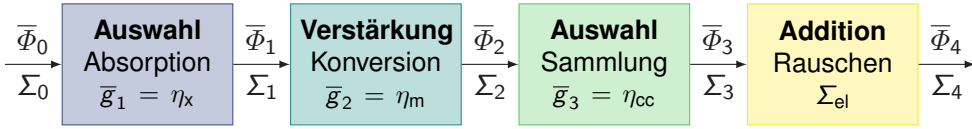


Abbildung 3.4: Blockdiagramm des linearen Systems zur Modellierung der Signal- und Rauschbreitung in einschichtigen Röntgendetektoren. Das lineare System setzt sich aus vier kaskadierten linearen Systemen zusammen, die jeweils eine Modell-Stufe repräsentieren. Bei den Modell-Stufen 1-3 handelt es sich um Quantenverstärkungs- oder Quantenauswahl-Stufen, die durch eine mittlere Verstärkung (Auswahl) \bar{g}_i charakterisiert werden können. Die Modell-Stufe 4 repräsentiert eine Rausch-Additions-Stufe, welche die Addition einer elektronischen Rauschleistung Σ_{el} ermöglicht. Die Ausbreitung der mittleren Quantenfluenz $\bar{\Phi}_i$ und der Rauschleistung Σ_i durch die einzelnen Modell-Stufen i ist ebenfalls dargestellt. Reproduziert in Anlehnung an [47, 43].

Röntgenphotonen (Modell-Stufe 1), die Konversion in Ladungsträger (Modell-Stufe 2) und die Sammlung der Ladungsträger (Modell-Stufe 3). Die abschließende Stufe 4 des verwendeten Modells dient der Modellierung von elektronischem Rauschen im Zusammenhang mit dem Auslesen des Detektors.

3.2.2 Signal- und Rauschbreitung durch die einzelnen Modell-Stufen des linearen Systems

In Anlehnung an andere Arbeiten [47, 48] werden räumliche Aspekte in der Signal- und Rauschbreitung an dieser Stelle vernachlässigt, und die Detektive Quanteneffizienz wird ausschließlich für die Ortsfrequenz $u = 0$ modelliert. Die Modell-Stufen 1-3 des verwendeten linearen Systems können als Quantenverstärkungs- oder als Quantenauswahl-Stufe modelliert werden [47, 43]. Infolgedessen ergeben sich im Falle der Modell-Stufen 1-3 ($i = 1, 2, 3$) die mittlere Quantenfluenz $\bar{\Phi}_i$ und die Rauschleistung Σ_i am Ausgang der Modell-Stufe i zu [23, Kapitel 2]:

$$\bar{\Phi}_i = \bar{\Phi}_{i-1} \bar{g}_i, \quad \Sigma_i = \bar{g}_i^2 \Sigma_{i-1} + \sigma_{g_i}^2 \bar{\Phi}_{i-1}, \quad (3.16)$$

mit der mittleren Quantenfluenz $\bar{\Phi}_{i-1}$ und der Rauschleistung Σ_{i-1} am Eingang der Modell-Stufe i sowie der mittleren Verstärkung (Auswahl) \bar{g}_i und der zugehörigen Varianz der Verstärkung (Auswahl) $\sigma_{g_i}^2$ der Modell-Stufe i . Die abschließende Modell-Stufe 4 repräsentiert eine Rausch-Additions-Stufe, welche die Addition einer elektronischen Rauschleistung Σ_{el} ermöglicht. Diese Rausch-Additions-Stufe hat keinen Einfluss auf die Ausbreitung des Signals und wirkt sich ausschließlich auf das Rauschen aus. Für die mittlere Quantenfluenz $\bar{\Phi}_4$ und die Rauschleistung Σ_4 am Ausgang der Modell-Stufe 4 gilt dann [47]:

$$\bar{\Phi}_4 = \bar{\Phi}_3, \quad \Sigma_4 = \Sigma_3 + \Sigma_{el}, \quad (3.17)$$

mit der mittleren Quantenfluenz $\bar{\Phi}_3$ und der Rauschleistung Σ_3 am Eingang der Modell-Stufe 4 sowie der elektronischen Rauschleistung Σ_{el} der Modell-Stufe 4.

3.2.2.1 Einfallende Röntgenstrahlung

Die mittlere Quantenfluenz $\bar{\Phi}_0$ und die Rauschleistung Σ_0 am Eingang des verwendeten linearen Systems (siehe Abbildung 3.4) sind durch die einfallende Röntgenstrahlung vorgegeben. Die mittlere Quantenfluenz $\bar{\Phi}_0$ entspricht hierbei dem Erwartungswert der Photonenfluenz Φ_0 der einfallenden Röntgenphotonen. Unter der Annahme, dass keine statistische Korrelation zwischen den einfallenden Röntgenphotonen besteht, ergibt sich die Rauschleistung Σ_0 der einfallenden Röntgenphotonen zu [23, Kapitel 2]: $\Sigma_0 = \bar{\Phi}_0$.

3.2.2.2 Absorption der Röntgenphotonen

Die Absorption der Röntgenphotonen lässt sich als eine Quantenauswahl-Stufe modellieren. Unter der Annahme, dass dieser Auswahl-Prozess durch eine Binomialverteilung beschrieben werden kann, lässt sich die mittlere Auswahl $\bar{g}_1 = \eta_x$ durch die Röntgenabsorptionseffizienz η_x aus Abschnitt 3.1 darstellen, und die zugehörige Varianz $\sigma_{g_1}^2$ ergibt sich zu [47, 43, 49], [23, Kapitel 2]: $\sigma_{g_1}^2 = \eta_x (1 - \eta_x)$. Die mittlere Quantenfluenz $\bar{\Phi}_1$ und die Rauschleistung Σ_1 am Ausgang der Model-Stufe 1 (siehe Abbildung 3.4) ergeben sich dann gemäß Gleichung (3.16) und mithilfe von Abschnitt 3.2.2.1 zu:

$$\bar{\Phi}_1 = \bar{\Phi}_0 \eta_x, \quad \Sigma_1 = \eta_x^2 \bar{\Phi}_0 + \eta_x (1 - \eta_x) \bar{\Phi}_0 = \bar{\Phi}_0 \eta_x. \quad (3.18)$$

3.2.2.3 Konversion in Ladungsträger

Die Konversion in Ladungsträger kann als eine Quantenverstärkungs-Stufe beschrieben werden. Unter Vernachlässigung von Effekten der Röntgenfluoreszenz und unter der Annahme, dass der Verstärkungsprozess durch eine Poissonverteilung modelliert werden kann, lässt sich die mittlere Verstärkung $\bar{g}_2 = \eta_m$ durch die Konversionseffizienz η_m aus Abschnitt 3.1 beschreiben, und die zugehörige Varianz $\sigma_{g_2}^2$ ergibt sich zu [47, 43]: $\sigma_{g_2}^2 = \eta_m$. Infolgedessen ergeben sich die mittlere Quantenfluenz $\bar{\Phi}_2$ und die Rauschleistung Σ_2 am Ausgang der Model-Stufe 2 (siehe Abbildung 3.4) gemäß der Gleichungen (3.16) und (3.18) zu:

$$\bar{\Phi}_2 = \bar{\Phi}_0 \eta_x \eta_m, \quad \Sigma_2 = \eta_m^2 \bar{\Phi}_0 \eta_x + \eta_m \bar{\Phi}_0 \eta_x = \bar{\Phi}_0 \eta_x \eta_m (1 + \eta_m). \quad (3.19)$$

3.2.2.4 Sammlung der Ladungsträger

Die Sammlung der Ladungsträger lässt sich in Analogie zur Absorption der Röntgenphotonen als eine Quantenauswahl-Stufe modellieren. Unter der Annahme, dass auch dieser Auswahl-Prozess durch eine Binomialverteilung beschrieben werden kann, lässt sich die mittlere Auswahl $\bar{g}_3 = \eta_{cc}$ durch die Ladungssammeleffizienz η_{cc} aus Abschnitt 3.1 darstellen, und die zugehörige Varianz $\sigma_{g_3}^2$ ergibt sich

zu: $\sigma_{g_3}^2 = \eta_{cc} (1 - \eta_{cc})$. Die mittlere Quantenfluenz $\bar{\Phi}_3$ und die Rauschleistung Σ_3 am Ausgang der Model-Stufe 3 (siehe Abbildung 3.4) ergeben sich dann gemäß der Gleichungen (3.16) und (3.19) zu:

$$\bar{\Phi}_3 = \bar{\Phi}_0 \eta_x \eta_m \eta_{cc}, \quad \Sigma_3 = \eta_{cc}^2 \bar{\Phi}_0 \eta_x \eta_m (1 + \eta_m) + \eta_{cc} (1 - \eta_{cc}) \bar{\Phi}_0 \eta_x \eta_m \quad (3.20a)$$

$$= \bar{\Phi}_0 \eta_x \eta_m \eta_{cc} (1 + \eta_m \eta_{cc}) . \quad (3.20b)$$

Es sei darauf hingewiesen, dass die Annahme eines Auswahl-Prozesses, der durch eine Binomialverteilung beschrieben werden kann, an dieser Stelle eine starke Vereinfachung darstellt. Unter dieser Annahme tragen Ladungsträger, die im Absorber des Röntgendetektors erzeugt werden, nur zu einem messbaren Signal bei, wenn sie eine der Elektroden erreichen und somit „eingesammelt“ werden können. Die tatsächliche Signalerzeugung gemäß des Shockley-Ramo Theorems (siehe Abschnitt 2.2.1) wird dabei nicht beachtet. Des Weiteren enthält die Ladungssammeleffizienz η_{cc} aus Abschnitt 3.1 eine zusätzliche formale Abhängigkeit von der normierten Absorptionslänge Δ (siehe Gleichung (3.15d)). Die Größe η_{cc} beschreibt somit nicht ausschließlich den Prozess der Sammlung der Ladungsträger.

3.2.2.5 Addition von elektronischem Rauschen

Bei der abschließenden vierten Stufe des verwendeten linearen Systems (siehe Abbildung 3.4) handelt es sich um eine Rausch-Additions-Stufe. Diese abschließende Rausch-Additions-Stufe wird dafür verwendet, die elektronische Rauschleistung Σ_{el} , die beim Auslesen des Röntgendetektors auftritt, in die Modellierung einfließen zu lassen. Die mittlere Quantenfluenz $\bar{\Phi}_4$ und die Rauschleistung Σ_4 am Ausgang der Model-Stufe 4 (siehe Abbildung 3.4) ergeben sich gemäß der Gleichungen (3.17) und (3.20) zu:

$$\bar{\Phi}_4 = \bar{\Phi}_0 \eta_x \eta_m \eta_{cc}, \quad \Sigma_4 = \bar{\Phi}_0 \eta_x \eta_m \eta_{cc} (1 + \eta_m \eta_{cc}) + \Sigma_{el} . \quad (3.21)$$

3.2.3 Modellierung der Detektiven Quanteneffizienz

Gemäß der Definition in Gleichung (2.27) kann die Detektive Quanteneffizienz $DQE(u)$ eines Röntgendetektors in Abhängigkeit der Ortsfrequenz u über die quadrierten Signal-Rausch-Verhältnisse $SNR_{in,out}^2(u)$ am Eingang und am Ausgang des Detektors beschrieben werden. Anhand des verwendeten linearen Systems zur Modellierung der Signal- und Rauschenausbreitung in einschichtigen Röntgendetektoren (siehe Abbildung 3.4) lassen sich die quadrierten Signal-Rausch-Verhältnisse $SNR_{in,out}^2(u)$ mithilfe der mittleren Quantenfluenzen $\bar{\Phi}_{0,4}$ und der Rauschleistungen $\Sigma_{0,4}$ am Eingang und am Ausgang des linearen Systems beschreiben. Die verwendete Modellierung der Signal- und Rauschenausbreitung durch die einzelnen Modell-Stufen des linearen Systems ist allerdings auf die Ortsfrequenz $u = 0$ beschränkt (siehe

Abschnitt 3.2.2). Anhand der Ergebnisse aus den Abschnitten 3.2.2.1 und 3.2.2.5 ergeben sich die quadrierten Signal-Rausch-Verhältnisse $\text{SNR}_{\text{in,out}}^2(0)$ zu:

$$\text{SNR}_{\text{in}}^2(0) = \frac{\bar{\Phi}_0^2}{\Sigma_0} = \bar{\Phi}_0, \quad \text{SNR}_{\text{out}}^2(0) = \frac{\bar{\Phi}_4^2}{\Sigma_4} = \frac{\bar{\Phi}_0 \eta_x \eta_m \eta_{cc}}{1 + \eta_m \eta_{cc} + \left(\frac{\Sigma_{\text{el}}}{\bar{\Phi}_0}\right) \frac{1}{\eta_x \eta_m \eta_{cc}}}. \quad (3.22)$$

Gemäß der Definition in Gleichung (2.27) und mithilfe der Ergebnisse aus Gleichung (3.22) lässt sich die Detektive Quanteneffizienz $\text{DQE}(0)$ eines einschichtigen Röntgendetektors bei der Ortsfrequenz $u = 0$ wie folgt modellieren:

$$\text{DQE}(0) = \frac{\text{SNR}_{\text{out}}^2(0)}{\text{SNR}_{\text{in}}^2(0)} = \frac{\eta_x \eta_m \eta_{cc}}{1 + \eta_m \eta_{cc} + \left(\frac{\Sigma_{\text{el}}}{\bar{\Phi}_0}\right) \frac{1}{\eta_x \eta_m \eta_{cc}}}. \quad (3.23)$$

Die elektronische Rauschleistung Σ_{el} , die beim Auslesen des Röntgendetektors auftritt, wird im Rahmen dieser Arbeit mithilfe des Dunkelstroms I_d des Röntgendetektors modelliert. Unter der Annahme, dass die Schwankungen im Dunkelstrom des Röntgendetektors ausschließlich durch Schrotrauschen (engl. shot noise) hervorgerufen werden, kann die elektronische Rauschleistung Σ_{el} mithilfe des Dunkelstroms I_d , der Integrationszeit t_{int} , der Fläche der Elektroden A_{el} des Röntgendetektors sowie der Elementarladung e modelliert werden [50]:

$$\Sigma_{\text{el}} = \frac{I_d t_{\text{int}}}{A_{\text{el}} e}. \quad (3.24)$$

Vorausgesetzt, dass sich die mittlere Photonenfluenz $\bar{\Phi}_0$ der einfallenden Röntgenphotonen als Produkt aus der Photonenfluenzrate $\dot{\Phi}_0$ der einfallenden Röntgenstrahlung und der Integrationszeit t_{int} des Röntgendetektors beschreiben lässt, ergibt sich das Verhältnis aus der elektronischen Rauschleistung Σ_{el} und der mittleren Photonenfluenz $\bar{\Phi}_0$ der einfallenden Röntgenphotonen in Gleichung (3.23) mithilfe von Gleichung (3.24) zu:

$$\frac{\Sigma_{\text{el}}}{\bar{\Phi}_0} = \frac{I_d}{A_{\text{el}} e \dot{\Phi}_0} = \frac{J_d}{e \dot{\Phi}_0}. \quad (3.25)$$

Hierbei beschreibt $J_d = I_d/A_{\text{el}}$ die Dunkelstromdichte des Röntgendetektors.

4 Experimentelle Methoden

In diesem Kapitel werden die experimentellen Methoden beschrieben, die im Rahmen dieser Arbeit verwendet werden. Zu diesem Zweck werden im Verlauf des Kapitels die angewendeten Verfahren zur Herstellung und Charakterisierung von Röntgendetektoren erläutert. Die in diesem Kapitel beschriebenen Verfahren bilden die Grundlage für die Realisierung der Perowskit-Röntgendetektoren in den Kapiteln 8 und 9.

4.1 Herstellung

Die Röntgendetektoren, die im Rahmen dieser Arbeit experimentell realisiert und untersucht werden, bestehen aus einer Vielzahl von unterschiedlichen Materialien. Für die Herstellung der Röntgendetektoren werden hierbei verschiedene Verfahren zur Abscheidung der unterschiedlichen Material-Schichten verwendet. Die folgenden Abschnitte dienen der Erläuterung der einzelnen verwendeten Verfahren. Dabei wird zwischen den Aggregatzuständen unterschieden, aus welchen die Abscheidung der Material-Schichten erfolgt. Darüber hinaus wird abschließend das verwendete Verfahren der Laserstrukturierung beschrieben.

Die folgenden Erläuterungen sind auf eine Beschreibung der grundlegenden Aspekte der Herstellungsverfahren beschränkt. Relevante experimentelle Details sind im Rahmen der Kapitel 8 und 9 aufgeführt.

4.1.1 Abscheidung aus dem flüssigen Aggregatzustand

Zu den verwendeten Herstellungsverfahren, bei denen die Abscheidung der Material-Schicht aus dem flüssigen Aggregatzustand erfolgt, gehören die Rotationsbeschichtung, der Tintenstrahldruck und der Aerosolstrahldruck. Im Falle aller drei Verfahren wird zunächst ein Flüssigkeitsfilm auf dem zu beschichtenden Substrat abgeschieden, welcher anschließend in eine Material-Schicht im festen Aggregatzustand überführt wird. Der Flüssigkeitsfilm besteht hierbei aus einer Lösung oder aus einer Dispersion des abzuscheidenden Stoffes, bei dem sich die Lösung oder das Dispersionsmedium im flüssigen Aggregatzustand befindet.

4.1.1.1 Rotationsbeschichtung

Bei der Rotationsbeschichtung handelt es sich um ein sowohl in der wissenschaftlichen Forschung als auch in der industriellen Fertigung weit verbreitetes Verfahren zur Abscheidung von Material-Schichten. Die folgende Beschreibung der Rotationsbeschichtung orientiert sich im Wesentlichen an den Erläuterungen in [51, 52].

Bei der Herstellung von Material-Schichten mittels Rotationsbeschichtung wird eine Flüssigkeit auf dem zu beschichtenden Substrat aufgebracht und durch eine Rotation des Substrats homogen auf dem Substrat verteilt. Bei der Flüssigkeit handelt es sich um eine Lösung oder eine Dispersion des abzuscheidenden Stoffes. Die Hauptkomponente einer Anlage zur Rotationsbeschichtung ist ein Substrathalter, der rotiert werden kann. Bei der Herstellung von Material-Schichten mittels Rotationsbeschichtung wird zunächst ein bestimmtes Volumen der Flüssigkeit zentral auf dem zu beschichtenden Substrat aufgebracht. Während dieses Vorgangs wird das Substrat noch nicht oder lediglich mit einer geringen Rotationsgeschwindigkeit rotiert. Direkt im Anschluss wird das Substrat beschleunigt und mit einer höheren Rotationsgeschwindigkeit über einen gewissen Zeitraum rotiert. Aufgrund der Adhäsionskräfte zwischen dem Substrat und der Flüssigkeit in Verbindung mit der Trägheit der Flüssigkeit wird die Flüssigkeit beschleunigt und ein radialer Fluss entsteht. Dies führt dazu, dass ab einem bestimmten Zeitpunkt das gesamte Substrat von einem

Flüssigkeitsfilm bedeckt ist, dessen Schichtdicke mit zunehmender Zeit sinkt. Die überschüssige Flüssigkeit wird in diesem Zusammenhang am Rand des Substrats abgeworfen. Die zusätzliche Verdampfung oder Verdunstung der Flüssigkeit führt dazu, dass sich nach einer gewissen Zeit eine Material-Schicht des abzuscheidenden Stoffes im festen Aggregatzustand mit einer bestimmten Schichtdicke auf dem Substrat ausbildet. Die Schichtdicke der Material-Schicht hängt hierbei stark von der Rotationsgeschwindigkeit, der Viskosität und der Konzentration der Lösung oder der Dispersion ab. Für eine gegebene Lösung oder Dispersion kann die Schichtdicke somit mithilfe der Rotationsgeschwindigkeit beeinflusst werden. Das aufgebrachte Volumen der Flüssigkeit und die Zeit, über welche die Rotation stattfindet, zeigen einen eher geringfügigen Einfluss auf die Schichtdicke. Bei der experimentellen Realisierung von Material-Schichten mittels Rotationsbeschichtung werden die hergestellten Material-Schichten häufig einer abschließenden Nachbehandlung unterzogen, in welcher das Substrat und die Material-Schicht über einen gewissen Zeitraum auf eine bestimmte Temperatur erhitzt werden, um sicherzustellen, dass der Flüssigkeitsfilm vollständig in eine Material-Schicht im festen Aggregatzustand umgewandelt wird.

4.1.1.2 Tintenstrahldruck

Der Tintenstrahldruck repräsentiert ein digitales Druckverfahren, mit dem strukturierte Material-Schichten abgeschieden werden können. Die folgenden Erläuterungen des Tintenstrahldrucks basieren auf den Beschreibungen in [19] und [53, Kapitel 2]. Aufgrund der hohen Komplexität des Tintenstrahldrucks sind die folgenden Erläuterungen lediglich auf eine vereinfachte Beschreibung der grundlegenden Aspekte des Herstellungsverfahrens beschränkt.

Bei dem verwendeten Verfahren des Tintenstrahldrucks werden einzelne Tropfen einer Tinte bei Bedarf (DoD kurz für engl. drop-on-demand) auf dem zu beschichtenden Substrat abgeschieden. Bei der Tinte handelt es sich um eine Lösung oder eine Dispersion des abzuscheidenden Stoffes. Ein DoD-Tintenstrahldrucker setzt sich aus drei Hauptkomponenten, dem Tintenvorrat, dem Druckkopf und der Druck-Plattform zusammen. Der Druckkopf ist hierbei mit dem Tintenvorrat verbunden und oberhalb der Druck-Plattform positioniert, auf welcher sich das zu beschichtende Substrat befindet. Zur Realisierung eines strukturierten Flüssigkeitsfilms auf dem Substrat besitzen der Druckkopf, die Druck-Plattform oder beide Komponenten eine variable und steuerbare Position. In einem einzelnen Druckkopf befinden sich üblicherweise mehrere Druckkopfdüsen, mit denen jeweils einzelne Tropfen abgeschieden werden können. Zur Abscheidung eines einzelnen Tropfens wird die Tinte dabei innerhalb der Druckkopfdüse einem Druckpuls ausgesetzt. Bei dem verwendeten Verfahren des Tintenstrahldrucks werden die Druckpulse in den Druckkopfdüsen mithilfe piezoelektrischer Wandler erzeugt. Unter den richtigen Voraussetzungen bilden die einzelnen abgeschiedenen Tropfen einen strukturierten Flüssigkeitsfilm auf dem Substrat. Der DoD-Tintenstrahldruck erlaubt somit eine materialsparende Herstellung von Flüssigkeitsfilmen mit einer hochaufgelösten räumlichen Struktur. Die Schichtdicke des Flüssigkeitsfilms wird hierbei unter anderem wesentlich von der Menge der abgeschiedenen Flüssigkeit beeinflusst. Bei dem verwendeten Verfahren des DoD-Tintenstrahldrucks wird die abgeschiedene Flüssigkeitsmenge mithilfe der Druckauflösung, die angibt, wie viele Tropfen pro Längeneinheit abgeschieden werden, quantifiziert. Die Umwandlung

des abgeschiedenen Flüssigkeitsfilms in eine Material-Schicht im festen Aggregatzustand erfordert eine abschließende Nachbehandlung. Im Rahmen dieser Arbeit werden die Substrate und die abgeschiedenen Schichten hierfür über einen bestimmten Zeitraum in einer Vakuumkammer einem speziellen Druck ausgesetzt und anschließend über einen weiteren Zeitraum auf eine gewisse Temperatur erhitzt. Für die Herstellung von Material-Schichten mittels Tintenstrahl Druck werden Tintenstrahl drucker vom Typ Pixdro LP50 (Meyer Burger) in Verbindung mit Druckkopfmodulen für DMC-11610 (Fujifilm Dimatix) Kartuschen verwendet. Die Fotografie in Abbildung 4.1 zeigt einen der Tintenstrahl drucker, die im Rahmen dieser Arbeit verwendet werden.

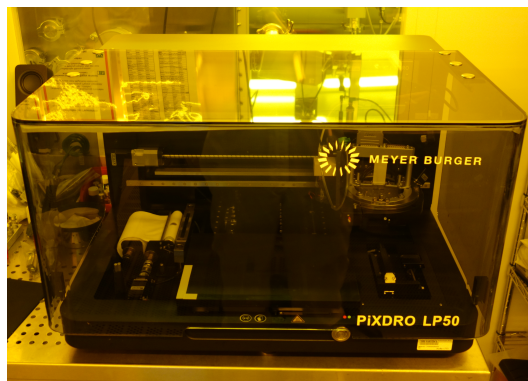


Abbildung 4.1: Fotografie von einem der verwendeten Tintenstrahl drucker.

4.1.1.3 Aerosolstrahl Druck

Der Aerosolstrahl Druck repräsentiert neben dem Tintenstrahl Druck ein weiteres digitales Druckverfahren, mit dessen Hilfe strukturierte Material-Schichten abgeschieden werden können. Die nachfolgende Beschreibung des Aerosolstrahl Drucks beruht im Wesentlichen auf den Erläuterungen in [54], [55, Kapitel 3] und [56, Kapitel 3]. In Analogie zur Beschreibung des Tintenstrahl Drucks sind die nachfolgenden Abschnitte bedingt durch die hohe Komplexität des Aerosolstrahl Drucks auf eine vereinfachte Erläuterung der grundlegenden Aspekte des Herstellungsverfahrens beschränkt.

Beim Aerosolstrahl Druck wird mithilfe eines kontinuierlichen Aerosolstrahls eine Material-Schicht auf dem zu beschichtenden Substrat abgeschieden. Üblicherweise werden hierbei Aerosole verwendet, die sich aus kleinen Tropfen einer Lösung oder einer Dispersion des abzuscheidenden Stoffes und einem Gas zusammensetzen und bei denen sich die Lösung oder das Dispersionsmedium im flüssigen Aggregatzustand befindet. Unter den richtigen Voraussetzungen kann dann mithilfe des Aerosolstrahls ein Flüssigkeitsfilm auf dem Substrat abgeschieden werden. Die Hauptkomponenten eines Aerosolstrahl Druckers sind ein Vernebler mit einem Tintenvorrat, ein Druckkopf und eine Druck-Plattform. Der Druckkopf ist dabei mit dem Vernebler verbunden und oberhalb der Druck-Plattform positioniert, auf welcher sich das zu beschichtende Substrat befindet. Zur Realisierung eines strukturierten Flüssigkeitsfilms auf dem Substrat besitzen der Druckkopf, die Druck-Plattform oder beide Komponenten eine variable und steuerbare

Position. Das für den Aerosolstrahl benötigte Aerosol wird mithilfe des Verneblers erzeugt. Zu diesem Zweck wird als Tinte eine Lösung oder eine Dispersion des abzuscheidenden Stoffes verwendet. Bei dem in dieser Arbeit angewendeten Verfahren des Aerosolstrahldrucks werden Ultraschallwellen verwendet, um die Tinte zu vernebeln und das Aerosol zu erzeugen. Der Transport des erzeugten Aerosols vom Vernebler zum Druckkopf erfolgt mithilfe eines Trägergasstroms. Zu diesem Zweck wird der Trägergasstrom innerhalb des Verneblers derart durch das erzeugte Aerosol geführt, dass sich ein Aerosolstrom ausbildet, welcher vom Vernebler zum Druckkopf geleitet wird. Als Trägergas wird üblicherweise Stickstoff (N_2) verwendet. Die Fokussierung des Aerosolstroms zu einem wohldefinierten Aerosolstrahl erfolgt abschließend im Druckkopf mithilfe eines Hüllgasstroms und einer Druckkopfdüse. Hierfür erfolgt eine erste räumliche Fokussierung des Aerosolstroms durch den Hüllgasstrom, der ringförmig um den Aerosolstrom in Richtung der Druckkopfdüse geleitet wird. Der Aerosolstrom wird infolgedessen ringförmig vom Hüllgasstrom umgeben, und beide Ströme verlassen den Druckkopf durch die Druckkopfdüse. Die räumlichen Dimensionen der Druckkopfdüse führen zu einer weiteren räumlichen Fokussierung der beiden Ströme und ergeben somit einen wohldefinierten Aerosolstrahl. Der Durchmesser des Aerosolstrahls hängt hierbei im Wesentlichen vom Verhältnis aus dem Aerosolstrom und dem Hüllgasstrom sowie vom Durchmesser der Druckkopfdüsenöffnung ab. Als Hüllgas wird üblicherweise ebenfalls N_2 verwendet. Unter den richtigen Voraussetzungen kann mithilfe des wohldefinierten Aerosolstrahls ein strukturierter Flüssigkeitsfilm auf dem Substrat abgeschieden werden. Die Schichtdicke des Flüssigkeitsfilms hängt unter anderem wesentlich von der Druckgeschwindigkeit, dem Durchmesser der Druckkopfdüsenöffnung, dem Aerosolstrom und dem Hüllgasstrom ab. Zur Initiierung der Umwandlung des abgeschiedenen Flüssigkeitsfilms in eine Material-Schicht im festen Aggregatzustand kann die Druck-Plattform beheizt werden. Anschließend werden die abgeschiedenen Material-Schichten üblicherweise einer zusätzlichen Nachbehandlung unterzogen, um sicherzustellen, dass der Flüssigkeitsfilm vollständig in eine Material-Schicht im festen Aggregatzustand umgewandelt wird. Eine mögliche Nachbehandlung besteht hierbei darin, das Substrat und die abgeschiedene Material-Schicht über einen bestimmten Zeitraum auf eine gewisse Temperatur zu erhitzen.

Bei dem in dieser Arbeit verwendeten Verfahren des Aerosolstrahldrucks wird eine Nachbehandlung mittels photonischen Sinterns angewendet. Die grundlegenden Aspekte der Nachbehandlung mithilfe von photonischem Sintern sind im Folgenden anhand der Beschreibungen in [57] zusammengefasst. Beim Verfahren des photonischen Sinterns handelt es sich um eine Nachbehandlung, mit der dünne Schichten mithilfe von Lichtpulsen über einen kurzen Zeitraum auf eine hohe Temperatur erhitzt werden können. Bei dem in dieser Arbeit verwendeten Verfahren des photonischen Sinterns werden die Lichtpulse mithilfe einer Xenon Blitzlampe erzeugt. Die erzeugten Photonen werden anschließend dafür verwendet, das Substrat und die mittels Aerosolstrahldruck abgeschiedene Schicht homogen zu bestrahlen. Die Photonen können mit den bestrahlten Materialien wechselwirken, und es kann ein Energieübertrag stattfinden, der dazu führt, dass sich das bestrahlte Material erhitzt. Die Wechselwirkung der Photonen und infolgedessen der Energieübertrag und die Erhitzung hängen hierbei wesentlich von den verwendeten Materialien ab. Das Verfahren des photonischen Sinterns eignet sich daher insbesondere dafür, auf transparenten Polymer-Substraten abgeschiedene Schichten zu erhitzen. Aufgrund der geringeren Wechselwirkung der Photonen mit den transparenten Polymer-Substraten können die abgeschiedenen Schichten nahezu selektiv und lokal

erhitzt werden, und die Erwärmung der Polymer-Substrate kann auf ein Minimum begrenzt werden. Der Zeitraum, in dem die Erhitzung stattfindet, kann dabei präzise über die Pulsdauer des Lichtpulses gesteuert werden. Sobald die Bestrahlung endet, findet eine Abkühlung statt. Verglichen mit anderen Verfahren zur Nachbehandlung erstrecken sich die Erhitzung und Abkühlung somit über einen vergleichsweise kurzen Zeitraum, wodurch die Erwärmung der Polymer-Substrate zusätzlich reduziert ist. Mithilfe der selektiven Erhitzung kann sichergestellt werden, dass die mittels Aerosolstrahl Druck abgeschiedene Schicht vollständig in eine Material-Schicht im festen Aggregatzustand umgewandelt wird. Durch eine geeignete Intensität und Dauer der Lichtpulse, kann die abgeschiedene Schicht hierbei derart stark erhitzt werden, dass eine Sinterung der Material-Schicht stattfindet. Das Verfahren des photonischen Sinterns ist daher insbesondere für die Nachbehandlung von Metall-Schichten geeignet, die mithilfe einer Metall-Dispersionstinte abgeschieden werden. Die starke Erhitzung, welche sich durch den Prozess des photonischen Sinterns erreichen lässt, ermöglicht dabei einen Zusammenschluss der abgeschiedenen Metall-Partikel und somit eine signifikante Veränderung der physikalischen Eigenschaften der abgeschiedenen Schicht. Die Nachbehandlung mittels photonischen Sinterns erfolgt üblicherweise durch eine Bestrahlung mit einer Vielzahl an Lichtpulsen. Die Erhitzung der bestrahlten Schichten wird hierbei im wesentlichen durch die Pulsintensität, die Pulsdauer, die Pulsrate und die Anzahl der Pulse gesteuert.

Für die Herstellung von Material-Schichten mittels Aerosolstrahl Druck wird ein Aerosolstrahl drucker vom Typ Aerosol Jet 5X System (Optomec, Inc.) verwendet. Die Nachbehandlung mittels photonischen Sinterns erfolgt mit einer Anlage vom Typ Pulseforge 1200 (Novacentrix). Die Fotografien in Abbildung 4.2 zeigen den Aerosolstrahl drucker und die Anlage für das photonische Sintern, die im Rahmen dieser Arbeit verwendet werden.

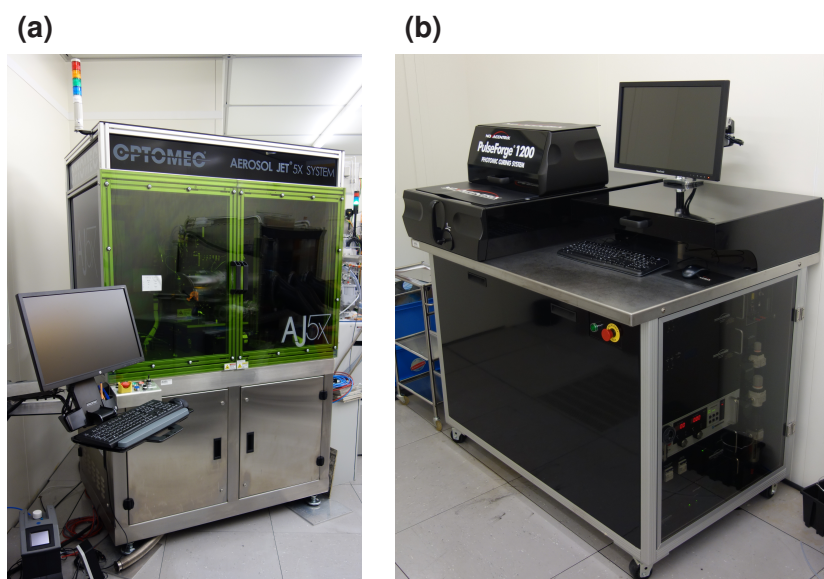


Abbildung 4.2: Fotografien (a) des verwendeten Aerosolstrahl Druckers und (b) der verwendeten Anlage für das photonische Sintern.

4.1.2 Abscheidung aus dem gasförmigen Aggregatzustand

Zu den verwendeten Herstellungsverfahren, bei denen die Abscheidung der Material-Schicht aus dem gasförmigen Aggregatzustand erfolgt, gehören das thermische Verdampfen und das Sputtern. Im Falle beider Verfahren wird das abzuscheidende Material zunächst in den gasförmigen Aggregatzustand überführt und anschließend auf dem zu beschichtenden Substrat abgeschieden.

4.1.2.1 Thermisches Verdampfen

Beim thermischen Verdampfen handelt es sich um ein sowohl in der wissenschaftlichen Forschung als auch in der industriellen Fertigung verwendetes Verfahren zur Abscheidung von Material-Schichten. Die folgende Beschreibung des thermischen Verdampfens basiert auf den Erläuterungen in [58].

Bei der Herstellung von Material-Schichten mittels thermischen Verdampfens wird das abzuscheidende Material durch eine starke Erhitzung in den gasförmigen Aggregatzustand überführt und anschließend auf dem zu beschichtenden Substrat abgeschieden. Die Hauptkomponenten einer Anlage für das thermische Verdampfen sind ein thermischer Verdampfer mit einem Materialvorrat und ein Substrathalter, die sich beide in einer Vakuumkammer befinden. Der thermische Verdampfer besteht üblicherweise aus einem Verdampferschiffchen oder einem Schmelztiegel, in dem sich das abzuscheidende Material zunächst im festen Aggregatzustand in Form von Pulver oder Klumpen befindet. Ein Verdampferschiffchen besteht hierbei im Regelfall aus einem hitzebeständigen Metall, das mit hohen elektrischen Strömen durchflossen werden kann, um es zu erhitzen. Ein Schmelztiegel besteht hingegen gewöhnlich aus einer Keramik, die von einer Metalldrahtspule umgeben ist. Die Erhitzung des Schmelztiegels erfolgt dabei über einen elektrischen Stromfluss durch die Metalldrahtspule. Durch eine starke Erhitzung im Verdampferschiffchen oder im Schmelztiegel wird das abzuscheidende Material in einen gasförmigen Aggregatzustand überführt. Das zu beschichtende Substrat ist mithilfe eines Substrathalters derart oberhalb des thermischen Verdampfers positioniert, dass das Material aus dem gasförmigen Aggregatzustand auf dem Substrat abgeschieden werden kann und sich eine Material-Schicht auf dem Substrat ausbildet. Üblicherweise wird das Substrat während des Verfahrens rotiert, um eine möglichst homogene Abscheidung der Material-Schicht zu gewährleisten. Die Herstellung von Material-Schichten mittels thermischen Verdampfens findet hierbei bei einem geringen Druck in einer Vakuumkammer statt. Bei einem geringen Druck kann in diesem Zusammenhang die Anzahl von Kollisionen zwischen den Atomen oder Molekülen des abzuscheidenden Materials und anderen Teilchen reduziert werden. Zur Herstellung strukturierter Material-Schichten mittels thermischen Verdampfens können Schattenmasken verwendet werden.

4.1.2.2 Sputtern

Das Sputtern repräsentiert ein Verfahren zur Abscheidung von Material-Schichten aus dem plasmagestützten gasförmigen Aggregatzustand. Das Herstellungsverfahren Sputtern wird häufig auch als Kathodenzerstäubung bezeichnet. Die nachfolgenden Erläuterungen des Sputterns beruhen im Wesentlichen auf den Beschreibungen in [58] und [59, Kapitel 3].

Bei dem im Rahmen dieser Arbeit verwendeten Verfahren des Sputterns wird das abzuscheidende Material durch einen plasmagestützten Ionenbeschuss in den gasförmigen Aggregatzustand überführt und anschließend auf dem zu beschichtenden Substrat abgeschieden. Die Hauptkomponenten einer Anlage für das Sputtern sind ein Target und ein Substrathalter, die sich beide in einer Vakuumkammer befinden. Bei dem in dieser Arbeit verwendeten Verfahren des Sputterns besteht das Target aus dem abzuscheidenden Material. Für die Realisierung des Ionenbeschusses wird ein Prozessgas einem elektrischen Feld ausgesetzt. Üblicherweise wird hierfür eine Gleich- oder eine Wechselspannung zwischen einer Anode und einer Kathode angelegt. Das Target befindet sich hierbei auf der Kathode. Unter den richtigen Voraussetzungen wird mithilfe des elektrischen Feldes das Prozessgas ionisiert, ein Plasma wird erzeugt, und die Prozessgasionen werden zum Target beschleunigt. Durch den Ionenbeschuss kann das Target-Material in den gasförmigen Aggregatzustand überführt werden. Infolgedessen entsteht eine Überlagerung aus dem Plasma und dem abzuscheidenden Material im gasförmigen Aggregatzustand. Das zu beschichtende Substrat ist dabei mithilfe des Substrathalters in einen bestimmten Abstand zum Target positioniert, so dass das Material aus dem gasförmigen Aggregatzustand auf dem Substrat abgeschieden werden kann und sich eine Material-Schicht auf dem Substrat ausbildet. Die Herstellung von Material-Schichten mittels Sputtern findet hierbei bei einem geringen Druck in einer Vakuumkammer statt. In Analogie zum thermischen Verdampfen kann bei einem geringen Druck die Anzahl von Kollisionen zwischen den Atomen oder Molekülen des abzuscheidenden Materials und anderen Teilchen reduziert werden. Bei der Herstellung von Material-Schichten mittels Sputtern ist ein geringer Druck darüber hinaus essenziell für die Erzeugung des Plasmas.

Für die Herstellung von Material-Schichten mittels Sputtern wird eine Anlage vom Typ Pro Line PVD75 (Kurt J. Lesker Company) verwendet.

4.1.3 Laserstrukturierung

Die Laserstrukturierung repräsentiert ein Verfahren, mit dessen Hilfe die Struktur von unterschiedlichen Materialien präzise verändert werden kann. Bei dem eingesetzten Verfahren der Laserstrukturierung wird ein gepulster Laser verwendet, und die Strukturierung erfolgt durch Laserablation. Die Hauptkomponenten der verwendeten Anlage für die Laserstrukturierung sind ein gepulster Laser, ein Ablenkspiegel und eine Substrat-Plattform. Das zu strukturierende Substrat befindet sich auf der Substrat-Plattform und wird von oben mit dem Laserstrahl des gepulsten Lasers bestrahlt. Zur Realisierung orts aufgelöster Strukturen kann der Laserstrahl bis zu einem gewissen Grad abgelenkt werden, und die Substrat-Plattform besitzt darüber hinaus eine variable und steuerbare Position. Bei dem verwendeten Verfahren der Laserstrukturierung wird ein gepulster Laser mit einer Pulslänge von 1.5 ps, einem Fokusbereich von 20 µm und einer Wellenlänge von 515 nm für die Laserablation verwendet. Die emittierten Photonen können hierbei mit dem bestrahlten Material wechselwirken, und es kann ein Energieübertrag stattfinden. Unter den richtigen Voraussetzungen wird das Material dabei derart stark erhitzt, dass Teile des Materials abgetragen werden. Für die Bearbeitung mittels Laserstrukturierung wird eine Anlage vom Typ ProtoLaser R4 (LPKF)

verwendet. Die Fotografie in Abbildung 4.3 zeigt die Anlage für die Laserstrukturierung, die im Rahmen dieser Arbeit verwendet wird.

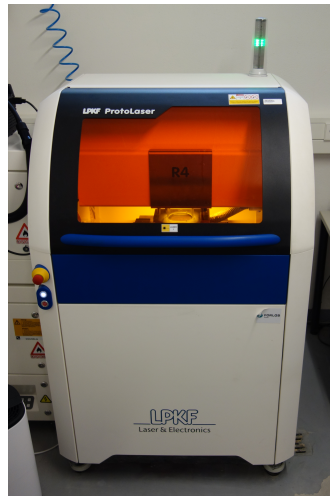


Abbildung 4.3: Fotografie der verwendeten Anlage für die Laserstrukturierung.

4.2 Charakterisierung

Für die experimentelle Charakterisierung der Röntgendetektoren werden in dieser Arbeit unterschiedliche Verfahren angewendet. Die folgenden Abschnitte dienen der Beschreibung der einzelnen verwendeten Verfahren. Hierbei wird zwischen Verfahren zur Strukturcharakterisierung und der Bauteilcharakterisierung unter verschiedenen Bestrahlungsbedingungen unterschieden.

Die folgenden Erläuterungen sind in Analogie zu den Beschreibungen der Herstellungsverfahren in Abschnitt 4.1 auf eine Beschreibung der grundlegenden Aspekte der Charakterisierungsmethoden beschränkt. Relevante experimentelle Details sind im Rahmen der Kapitel 8 und 9 aufgeführt.

4.2.1 Strukturcharakterisierung

Zu den verwendeten Verfahren der Strukturcharakterisierung gehören die taktile Profilometrie, die Weißlichtinterferometrie und die Rasterelektronenmikroskopie. Bei der taktilen Profilometrie und der Weißlichtinterferometrie handelt es sich um Verfahren zur Messung von Oberflächenprofilen. Die Rasterelektronenmikroskopie repräsentiert hingegen ein Verfahren zur vergrößerten Abbildung von Oberflächen und oberflächennahen Strukturen.

4.2.1.1 Taktile Profilometrie

Bei der taktilen Profilometrie handelt es sich um ein Verfahren zur Messung von Oberflächenprofilen, bei dem die Oberfläche des zu charakterisierenden Objekts mithilfe eines Taststifts abgetastet wird. Um eine ausreichende Kontaktierung zwischen dem Taststift und der Objektoberfläche sicherzustellen, wird während der Charakterisierung mithilfe des Taststifts eine bestimmte Kraft auf die Oberfläche des Objekts ausgeübt. Die Abtastung der Oberfläche erfolgt üblicherweise durch eine Veränderung der lateralen Position des Objekts in Verbindung mit einer Messung der Höhenveränderung des Taststifts. Zu diesem Zweck befindet sich das Objekt üblicherweise auf einer Objekt-Plattform, deren laterale Position variabel und steuerbar ist. Für die Charakterisierung mittels taktiler Profilometrie wird ein Taststiftprofilometer vom Typ Dektak XT (Bruker) verwendet.

4.2.1.2 Weißlichtinterferometrie

Die Weißlichtinterferometrie repräsentiert ein Verfahren zur kontaktlosen Messung von Oberflächenprofilen. Die folgenden Erläuterungen der Weißlichtinterferometrie beruhen im Wesentlichen auf den Beschreibungen in [60, 61].

Das im Rahmen dieser Arbeit verwendete Verfahren der Weißlichtinterferometrie basiert auf dem grundlegenden Aufbau und Messprinzip eines Michelson-Interferometers. Die wesentlichen Komponenten bestehen hierbei in einer Lichtquelle, einem Strahlteiler, einem Referenzspiegel, dem zu charakterisierenden Objekt und einem Detektor. Die Lichtquelle erzeugt und emittiert elektromagnetische Strahlung, die mithilfe des Strahlteilers aufgeteilt wird. Somit kann die elektromagnetische Strahlung sowohl in Richtung des Referenzspiegels als auch auf das zu charakterisierende Objekt geleitet werden. Die elektromagnetische Strahlung wird am Referenzspiegel reflektiert und am zu charakterisierenden Objekt sowohl reflektiert als auch gestreut. Die vom Referenzspiegel und vom zu charakterisierenden Objekt zurückgeworfene elektromagnetische Strahlung wird mithilfe des Strahlteilers überlagert und auf einen Detektor geleitet. Infolgedessen breitet sich die elektromagnetische Strahlung entlang zweier optischer Weglängen aus, die im Folgenden als Objektweglänge und Referenzweglänge bezeichnet werden. Das grundlegende Messprinzip des verwendeten Verfahrens der Weißlichtinterferometrie basiert auf einem Vergleich dieser beiden optischen Weglängen. Bei dem im Rahmen dieser Arbeit verwendeten Verfahren wird der Gangunterschied zwischen den beiden optischen Weglängen variiert, indem die Objektweglänge verändert wird. Im Falle einer schmalbandigen Lichtquelle mit einer großen Kohärenzlänge lassen sich somit in Abhängigkeit des Gangunterschiedes zwischen den beiden optischen Weglängen bei bestimmten Objektweglängen konstruktive Interferenzen der elektromagnetischen Strahlung erzeugen. Die spezifischen Objektweglängen, bei denen konstruktive Interferenzen auftreten, können durch eine Intensitätsmessung mithilfe des Detektors bestimmt werden. Bedingt durch die schmalbandige Lichtquelle mit einer großen Kohärenzlänge treten die konstruktiven Interferenzen allerdings in diesem Fall bei mehreren Objektweglängen auf, und die Oberfläche des zu charakterisierenden Objekts kann nicht eindeutig identifiziert werden. Aus diesem Grund wird beim Verfahren der Weißlichtinterferometrie eine breitbandige Lichtquelle mit einer

kurzen Kohärenzlänge verwendet. Eine konstruktive Interferenz ergibt sich somit nur dann, wenn die Objektweglänge und die Referenzweglänge nahezu gleich groß sind. Die Variation der Objektweglänge ermöglicht es infolgedessen, die Anordnung zu bestimmen, bei der eine maximale konstruktive Interferenz auftritt und die Objektweglänge und die Referenzweglänge nahezu identisch sind. Folglich kann somit die Oberfläche des zu charakterisierenden Objekts eindeutig identifiziert werden. Die Identifikation der Oberfläche in Abhängigkeit der Objektweglänge kann mithilfe lateral angeordneter Pixel des Detektors für unterschiedliche laterale Positionen auf dem zu charakterisierenden Objekt erfolgen und ermöglicht somit eine Messung des Oberflächenprofils.

Für die Charakterisierung mittels Weißlichtinterferometrie wird ein Weißlichtinterferometer vom Typ NetGAGE3D-I (ISRA vision) verwendet.

4.2.1.3 Rasterelektronenmikroskopie

Bei der Rasterelektronenmikroskopie handelt es sich um ein Verfahren, mit dessen Hilfe die Oberfläche und oberflächennahe Strukturen eines Objekts stark vergrößert abgebildet werden können. Die folgende Beschreibung der Rasterelektronenmikroskopie orientiert sich im Wesentlichen an den Erläuterungen in [62, Kapitel 1].

Die Rasterelektronenmikroskopie basiert auf einer Bestrahlung des zu charakterisierenden Objekts mit einem fokussierten Elektronenstrahl und einer Detektion der Sekundärstrahlung, welche aufgrund der Wechselwirkung der Elektronen des Elektronenstrahls mit dem Objekt auftritt. Bei dem im Rahmen dieser Arbeit verwendeten Verfahren der Rasterelektronenmikroskopie werden Elektronen mittels Feldemission emittiert und mithilfe einer bestimmten Spannung beschleunigt. Die Fokussierung und Ablenkung des Elektronenstrahls erfolgen hierbei durch Blenden und mithilfe elektrischer und magnetischer Felder. Die Ablenkung des Elektronenstrahls ist in diesem Zusammenhang essenziell, um eine laterale Abtastung des Objekts und somit eine orts aufgelöste Messung zu ermöglichen. Mithilfe des fokussierten Elektronenstrahls wird das zu charakterisierende Objekt lokal bestrahlt und die Elektronen können auf der Basis von unterschiedlichen Mechanismen mit den Atomen des Objekts wechselwirken. Als Folge der unterschiedlichen Wechselwirkungsmechanismen entstehen unterschiedliche Typen von Sekundärstrahlungen, deren Ausprägung von der Struktur des Objekts abhängen. Die Eindringtiefe des Elektronenstrahls und somit der Ort an dem Wechselwirkungen stattfinden können, hängt sowohl vom Material, aus dem das Objekt besteht, als auch von der Energie der Elektronen ab. Eine Detektion der Sekundärstrahlung in Verbindung mit einer lateralen Abtastung ermöglicht folglich eine Bildgebung der Oberfläche und oberflächennahe Strukturen des Objekts. Die beiden wesentlichen Typen der Sekundärstrahlung, die üblicherweise für die Bildgebung in der Rasterelektronenmikroskopie verwendet werden, sind Sekundärelektronen und Rückstreuelektronen. Sekundärelektronen entstehen in diesem Zusammenhang durch eine Ionisation der Atome, aus denen das bestrahlte Objekt besteht, wohingegen es sich bei Rückstreuelektronen um Primärelektronen handelt, welche durch Wechselwirkungen mit den Atomkernen des bestrahlten Objekts zurückgestreut werden. Neben Sekundärelektronen und Rückstreuelektronen können darüber hinaus unter anderem auch die zusätzlich auftretende Röntgenstrahlung und Augerelektronen für die Charakterisierung

verwendet werden. Das im Rahmen dieser Arbeit verwendete Verfahren der Rasterelektronenmikroskopie basiert auf einer Detektion der Sekundärelektronen. Um Kollisionen der Primär- und Sekundärstrahlung mit anderen Teilchen zu reduzieren, werden Charakterisierungen mittels Rasterelektronenmikroskopie bei einem geringen Druck in einer Vakuumkammer durchgeführt.

Für die Charakterisierung mittels Rasterelektronenmikroskopie wird ein Rasterelektronenmikroskop vom Typ Auriga (Zeiss) verwendet.

4.2.2 Bauteilcharakterisierung unter verschiedenen Bestrahlungsbedingungen

Für die Bewertung der experimentellen Leistungsfähigkeit werden die Röntgendetektoren im Rahmen dieser Arbeit unter verschiedenen Bestrahlungsbedingungen charakterisiert. Zu diesem Zweck werden zwei Röntgen-Messplätze verwendet. Im Falle beider Röntgen-Messplätze werden sowohl für die Dosimetrie als auch für die elektrische Charakterisierung und den Betrieb der Röntgendetektoren die selben grundlegenden Verfahren angewendet.

4.2.2.1 Röntgen-Messplätze

Für die Bauteilcharakterisierung unter verschiedenen Bestrahlungsbedingungen werden zwei Röntgen-Messplätze verwendet, die in der vorliegenden Arbeit als Detektor-Labor-Messplatz und Computertomographie-Labor-Messplatz bezeichnet werden. Sowohl beim Detektor-Labor-Messplatz als auch beim Computertomographie-Labor-Messplatz handelt es sich um Röntgen-Messplätze des *Instituts für Photonenforschung und Synchrotronstrahlung (IPS)*. Beide Röntgen-Messplätze bestehen jeweils aus einer Röntgenquelle und elektrisch betriebenen Positioniertischen, die eine präzise und automatisierte Positionierung der bestrahlten Objekte in Bezug auf die Röntgenstrahlung erlauben. Im Falle beider Röntgen-Messplätze wird die Röntgenstrahlung mithilfe von Röntgenröhren (siehe Abschnitt 2.1.3) erzeugt. Beide Röntgen-Messplätze befinden sich darüber hinaus aus Gründen des Strahlenschutzes innerhalb von massiven Bleikammern.

Detektor-Labor-Messplatz Die Röntgenquelle des Detektor-Labor-Messplatzes besteht aus einer Röntgenröhre vom Typ XT9160-DED (Viscom). Für die Röntgenbestrahlungen im Rahmen dieser Arbeit wird die Röntgenröhre des Detektor-Labor-Messplatzes mit einer Wolframanode, einem Filter aus 0.4 mm Aluminium und ohne Verschlussvorrichtung für die Röntgenstrahlung betrieben. Die Fotografien in Abbildung 4.4 zeigen den Detektor-Labor-Messplatz außerhalb und innerhalb der massiven Bleikammer.

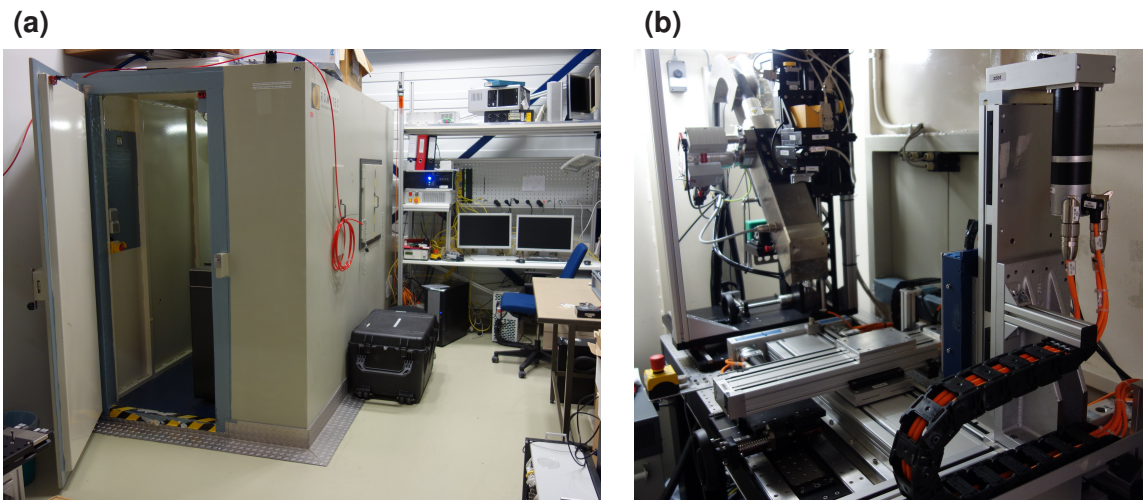


Abbildung 4.4: Fotografien des Detektor-Labor-Messplatzes. (a) Fotografie der aus Gründen des Strahlenschutzes verwendeten massiven Bleikammer und der Computer, die für die Verwendung des Messplatzes benötigt werden. (b) Fotografie der Röntgenröhre und der elektrisch betriebenen Positioniertische.

Computertomographie-Labor-Messplatz Im Falle des Computertomographie-Labor-Messplatzes wird die Röntgenstrahlung mithilfe einer Röntgenröhre vom Typ XWT-225 (X-RAY WorX) erzeugt, welche für die Röntgenbestrahlungen im Rahmen dieser Arbeit mit einer Wolframanode betrieben wird. Die Fotografien in Abbildung 4.5 zeigen den Computertomographie-Labor-Messplatz außerhalb und innerhalb der massiven Bleikammer.

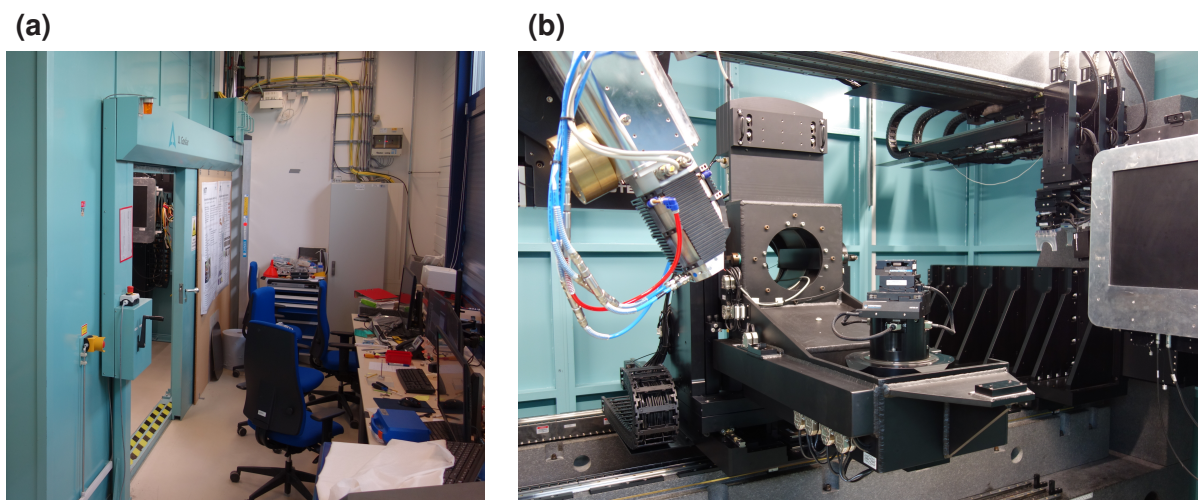


Abbildung 4.5: Fotografien des Computertomographie-Labor-Messplatzes. (a) Fotografie der aus Gründen des Strahlenschutzes verwendeten massiven Bleikammer und der Computer, die für die Verwendung des Messplatzes benötigt werden. (b) Fotografie der Röntgenröhre und der elektrisch betriebenen Positioniertische.

4.2.2.2 Dosimetrie

Die dosimetrischen Charakterisierungen in dieser Arbeit beziehen sich auf Messungen der Energiedosisrate der Röntgenstrahlung in Luft \dot{D}_{air} (siehe Abschnitt 2.1.5.3). Die Messungen der Energiedosisrate \dot{D}_{air} werden hierbei mithilfe eines Dosimeters vom Typ MagicMaX - rad/flu/dent (IBA) unter Verwendung eines Halbleiterdetektors vom Typ RQA (IBA) durchgeführt. Der Halbleiterdetektor besteht dabei aus einer Silizium-Diode. Die Charakterisierung der Energiedosisrate \dot{D}_{air} erfolgt in diesem Zusammenhang durch eine Messung des Diodenstroms in Verbindung mit Kalibrierfaktoren. Die Fotografie in Abbildung 4.6 zeigt das Dosimeter und den Halbleiterdetektor, die im Rahmen dieser Arbeit verwendet werden.

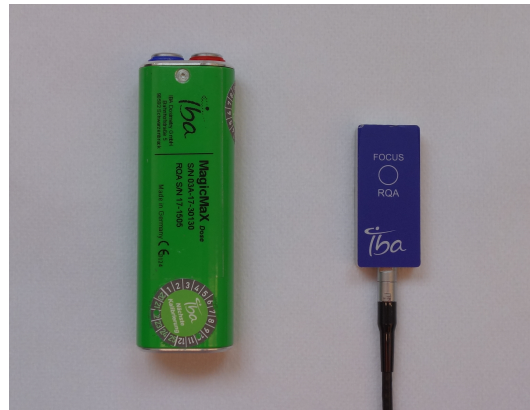


Abbildung 4.6: Fotografie des verwendeten Dosimeters und des verwendeten Halbleiterdetektors.

4.2.2.3 Elektrische Charakterisierung und Betrieb der Röntgendetektoren

Die elektrische Charakterisierung und der Betrieb der Röntgendetektoren im Rahmen dieser Arbeit basieren im Wesentlichen auf Messungen des Stroms I in Abhängigkeit der angelegten Spannung U und der Zeit t . Hierfür wird eine Quellen- und Messeinheit (SMU, kurz für engl. source measure unit) vom Typ 2450 SourceMeter (Keithley) verwendet.

5 Simulation und Design von einschichtigen Röntgendetektoren

Dieses Kapitel ist der Entwicklung einer Vergleichsgrundlage für die Bewertung der theoretischen Leistungsfähigkeit von mehrschichtigen und gefalteten Röntgendetektoren auf der Basis von einschichtigen Röntgendetektoren (Ziel 1) gewidmet. Zu diesem Zweck werden im Verlauf des Kapitels drei Zwischenziele verfolgt. Zunächst werden der grundlegende Aufbau und die Parameter für die Simulation einschichtiger Röntgendetektoren eingeführt. Anschließend wird die theoretische Röntgensensitivität einschichtiger Röntgendetektoren exemplarisch optimiert und analysiert. Abschließend werden auf der Grundlage der Ergebnisse der exemplarischen Optimierung der theoretischen Röntgensensitivität allgemeine Designvorgaben für einschichtige Röntgendetektoren entwickelt, und die zugehörige theoretische Leistungsfähigkeit wird berechnet. Die Simulation und das Design im Rahmen dieses Kapitels basieren im Wesentlichen auf den in Kapitel 3 beschriebenen bereits bestehenden Simulationsmodellen. Die Ergebnisse dieses Kapitels bilden die Grundlage für die Bewertung der theoretischen Leistungsfähigkeit mehrschichtiger und gefalteter Röntgendetektoren in den Kapiteln 6 und 7.

Teile der in diesem Kapitel präsentierten Inhalte sind in Mescher, Hamann, and Lemmer [63] veröffentlicht. Der Hauptbeitrag dieser Veröffentlichung stammt hierbei vom Erstautor Henning Mescher. Der Erstautor Henning Mescher wurde im Rahmen der Veröffentlichung vom Co-Autor Elias Hamann in Bezug auf die theoretische Arbeit unterstützt. Der Co-Autor Uli Lemmer hat in diesem Zusammenhang die wissenschaftliche Betreuung übernommen.

5.1 Motivation und Zielsetzung

Zwei wesentliche Ziele der vorliegenden Untersuchungen, die im Rahmen der Kapitel 6 und 7 behandelt werden, bestehen in der Bewertung der theoretischen Leistungsfähigkeit von mehrschichtigen und gefalteten Röntgendetektoren. Diese Leistungsbewertung erfordert eine Vergleichsgrundlage. In der vorliegenden Arbeit dient hierfür die theoretische Leistungsfähigkeit von einschichtigen Röntgendetektoren, die mithilfe der in Kapitel 3 beschriebenen Simulationsmodelle berechnet werden kann. Dieses Kapitel ist daher der Entwicklung einer Vergleichsgrundlage für die Bewertung der theoretischen Leistungsfähigkeit von mehrschichtigen und gefalteten Röntgendetektoren auf der Basis von einschichtigen Röntgendetektoren gewidmet. Aus diesem Grund werden in diesem Kapitel drei Zwischenziele verfolgt. Zunächst werden in Abschnitt 5.2 der grundlegende Aufbau und die Parameter für die Simulation von einschichtigen Röntgendetektoren eingeführt. Einige der Simulationsparameter werden darüber hinaus ebenfalls in den Kapiteln 6 und 7 verwendet. In Abschnitt 5.3 wird anschließend die theoretische Röntgensensitivität S_{theo} einschichtiger Röntgendetektoren im Falle zweier exemplarischer Absorber-Materialien optimiert und analysiert. Auf der Grundlage der Ergebnisse dieser exemplarischen Optimierung werden in Abschnitt 5.4 allgemeine Designvorgaben für einschichtige Röntgendetektoren entwickelt, und die zugehörige theoretische Leistungsfähigkeit wird berechnet. Abschnitt 5.5 fasst abschließend die wesentlichen Ergebnisse dieses Kapitels zusammen.

5.2 Aufbau und Parameter für die Simulation von einschichtigen Röntgendetektoren

Der grundlegende Aufbau, der für die Simulation von einschichtigen Röntgendetektoren in diesem Kapitel verwendet wird, ist in Abbildung 5.1 dargestellt. Die betrachteten einschichtigen Röntgendetektoren bestehen aus einem Absorber der Schichtdicke d , der sich zwischen zwei Elektroden befindet. Zwischen den beiden Elektroden herrscht ein elektrisches Feld \mathbf{F} , dass durch eine extern angelegte Spannung U erzeugt wird. Das elektrische Feld \mathbf{F} kann hierbei entlang oder entgegen der Ausbreitungsrichtung der einfallenden Röntgenphotonen ausgerichtet sein. Die Leistungsfähigkeit der Detektoren wird für den Fall einer Bestrahlung mit monoenergetischer Röntgenstrahlung mit Photonen der Energie E und einer Photonenflussdichte $\dot{\Phi}_0$ untersucht. Die Parameter für die Simulation einschichtiger Röntgendetektoren lassen sich in Designparameter des Detektors, Materialparameter des Absorber-Materials und Bestrahlungsparameter unterteilen.

Zu den Designparametern einschichtiger Röntgendetektoren zählen das Absorber-Material, die Schichtdicke d des Absorbers und das elektrische Feld \mathbf{F} . Die Untersuchungen in diesem Kapitel beschränken sich auf das verwendete Absorber-Material und die Schichtdicke d des Absorbers. Das elektrische Feld \mathbf{F} zwischen den Elektroden wird nicht variiert. Die Leistungsanalyse einschichtiger Röntgendetektoren in diesem Kapitel bezieht sich auf unterschiedliche direkte Absorber. Diesbezüglich werden direkte

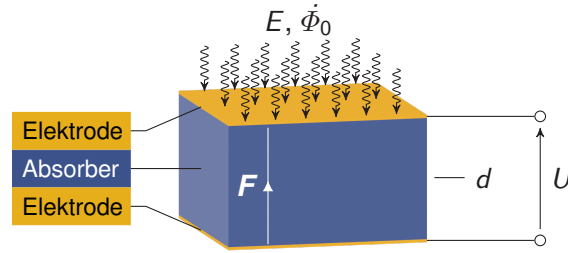


Abbildung 5.1: Grundlegender Aufbau für die Simulation einschichtiger Röntgendetektoren. Die betrachteten einschichtigen Röntgendetektoren bestehen aus einem Absorber der Schichtdicke d , der sich zwischen zwei Elektroden befindet. Zwischen den Elektroden herrscht ein elektrisches Feld F , dass durch eine extern angelegte Spannung U erzeugt wird. Das elektrische Feld F ist hierbei exemplarisch für eine der beiden möglichen Orientierungen gezeigt. Die einfallende monoenergetische Röntgenstrahlung mit Photonen der Energie E und einer Photonenflussdichte $\dot{\Phi}_0$ ist ebenfalls dargestellt.

Absorber bestehend aus amorphem Se (a-Se), polykristallinem PbI_2 (p- PbI_2), HgI_2 (p- HgI_2), CdZnTe (p- CdZnTe) und MAPbI_3 (p- MAPbI_3) (MA, kurz für Methylammonium) sowie monokristallinem CdZnTe (m- CdZnTe) und MAPbI_3 (m- MAPbI_3) (siehe Abschnitt 2.3) in Betracht gezogen. Die Auswahl der Absorber-Materialien orientiert sich hierbei an den Materialien, die im Rahmen der aktuellen Forschung in vielen Fällen als direkte Absorber in Betracht gezogen werden. Mit der Dichte ρ , der Elektron-Loch-Paar Erzeugungsenergie W_{\pm} und der Beweglichkeit-Lebensdauer-Produkte $\mu_{e,h}\tau_{e,h}$ von Elektronen und Löchern sind die wesentlichen Materialparameter der direkten Absorber-Materialien, die in den Simulationen verwendet werden, in Tabelle 5.1 zusammengefasst. Die Orientierung des elektrischen Feldes F entlang oder entgegen der Ausbreitungsrichtung der einfallenden Röntgenphotonen, die in den Simulationen verwendet wird, ist entsprechend der jeweiligen Beweglichkeit-Lebensdauer-Produkte $\mu_{e,h}\tau_{e,h}$ von Elektronen und Löchern der einzelnen Absorber-Materialien ausgewählt. Auf der Grundlage von experimentellen Untersuchungen der Beweglichkeit $\mu_{e,h}$ von Elektronen und Löchern in MAPbI_3 [64, 65, 66, 67] wird im Rahmen dieser Arbeit für Absorber bestehend aus MAPbI_3 ein ambipolarer Ladungstransport mit einer näherungsweise gleichen Beweglichkeit $\mu_e \approx \mu_h$ von Elektronen und Löchern angenommen [68, 69, 70]. Darüber hinaus wird auf der Basis von Messungen der Beweglichkeit $\mu_{e,h}$ und des Beweglichkeit-Lebensdauer-Produkts $\mu_{e,h}\tau_{e,h}$ von Elektronen und Löchern in m- MAPbI_3 [66] im Falle von MAPbI_3 zusätzlich von einer näherungsweise gleichen Lebensdauer $\tau_e \approx \tau_h$ von Elektronen und Löchern ausgegangen. Demzufolge wird in Bezug auf das Beweglichkeit-Lebensdauer-Produkt $\mu\tau$ von MAPbI_3 nicht zwischen Elektronen und Löchern unterschieden, und in den Simulationen wird sowohl für Elektronen als auch für Löcher der gleiche Wert verwendet. Im Falle von Absorbern bestehend aus p- MAPbI_3 werden darüber hinaus in den Simulationen zwei Beweglichkeit-Lebensdauer-Produkte $\mu\tau_{\text{high,low}}$ in Betracht gezogen. Hierbei liegen beide Werte zwischen dem Minimal- und dem Maximalwert, welche sich aus den in Tabelle 5.1 angegebenen Werten für die Beweglichkeit μ und die Lebensdauer τ abschätzen lassen. Untersuchungen des Beweglichkeit-Lebensdauer-Produkts $\mu\tau$ eines p- MAPbI_3 Röntgenabsorbers [65] stützen darüber hinaus die Auswahl von $\mu\tau_{\text{high}}$. Um bewerten zu können, inwieweit sich verschlechterte Ladungstransporteigenschaften von p- MAPbI_3 auf die Leistungsfähigkeit von Röntgendetektoren auswirken, wird im Falle von p- MAPbI_3 zusätzlich ein reduziertes Beweglichkeit-Lebensdauer-Produkt $\mu\tau_{\text{low}}$ in Betracht gezogen. Die Wechselwirkungskoeffizienten der unterschiedlichen Materialien, die für

Tabelle 5.1: Materialparameter direkter Absorber. Auflistung der Dichte ρ , der Elektron-Loch-Paar Erzeugungsenergie W_{\pm} und der Beweglichkeit-Lebensdauer-Produkte $\mu_{e,h}\tau_{e,h}$ von Elektronen und Löchern, die im Rahmen dieser Arbeit für die Simulation von Röntgendetektoren mit direkten Absorbern verwendet werden. Es werden direkte Absorber bestehend aus amorphem Se (a-Se), polykristallinem PbI_2 (p- PbI_2), HgI_2 (p- HgI_2), CdZnTe (p- CdZnTe) und MAPbI_3 (p- MAPbI_3) (MA, kurz für Methylammonium) sowie monokristallinem CdZnTe (m- CdZnTe) und MAPbI_3 (m- MAPbI_3) in Betracht gezogen. Die Orientierung des elektrischen Feldes F entlang oder entgegen der Ausbreitungsrichtung der einfallenden Röntgenphotonen, die in den Simulationen verwendet wird, ist entsprechend der jeweiligen Beweglichkeit-Lebensdauer-Produkte $\mu_{e,h}\tau_{e,h}$ von Elektronen und Löchern der einzelnen Absorber-Materialien ausgewählt. Entnommen aus Mescher et al. [63] und angepasst. (Creative Commons Attribution 4.0 International License, <http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>.)

	ρ (g cm ⁻³)	W_{\pm} (eV)	$\mu_e\tau_e$ (cm ² V ⁻¹)	$\mu_h\tau_h$ (cm ² V ⁻¹)
a-Se	4.3 [71]	45 ^a [71, 72]	5.0×10^{-7} [73, 74]	1.0×10^{-6} [73, 74]
p-PbI ₂	6.0 [71]	5 [71]	7.0×10^{-8} [71]	2.0×10^{-6} [71]
p-HgI ₂	6.3 [71]	5 [71]	2.0×10^{-5} [71, 75]	6.0×10^{-6} [71, 75]
p-CdZnTe	5.8 [71]	5 [71]	2.4×10^{-4b} [50, 76]	3.0×10^{-6b} [50, 76, 77]
m-CdZnTe	5.8 [71]	5 [71]	1.0×10^{-2b} [76, 78, 79, 80, 81, 82]	1.0×10^{-4b} [76, 78, 79, 80]
p-MAPbI ₃	4.3 [83]	5 [64, 44]	$\mu\tau_{\text{low}} = 10^{-6} \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1c}$, $\mu\tau_{\text{high}} = 10^{-4} \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1c}$	
m-MAPbI ₃	4.3 [83]	5 [64, 44]	3.8×10^{-2d}	

^a bei einem elektrischen Feld mit dem Betrag $F = 10 \text{ V } \mu\text{m}^{-1}$

^b Maximalwert aus den angegebenen Quellen

^c aus $\mu = 6.00 - 139 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$ [64, 65, 84, 85, 86] und $\tau = 0.01 - 8.00 \text{ } \mu\text{s}$ [65, 86, 87, 88] abgeschätzt

^d Maximalwert aus $\mu = 2.50 - 164 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$ [68, 69, 66, 67] und $\tau = 0.50 - 234 \text{ } \mu\text{s}$ [68, 69, 67] abgeschätzt

die Simulationen in diesem Kapitel benötigt werden, basieren auf den in Abschnitt 2.1.4.2 beschriebenen Zusammenhängen.

Die wesentlichen Bestrahlungsparameter im betrachteten Fall monoenergetischer Röntgenstrahlung sind die Photonenenergie E und die Photonenflussrate $\dot{\Phi}_0$. Die Bestrahlungsparameter, auf deren Grundlage die Leistungsfähigkeit einschichtiger Röntgendetektoren in diesem Kapitel bewertet wird, orientieren sich an den Bedingungen, die sich im Falle unterschiedlicher Anwendungsfälle ergeben. Im Hinblick auf die Energie E der Röntgenphotonen werden Photonenenergien E im Intervall $5 \text{ keV} \leq E \leq 515 \text{ keV}$ und darüber hinaus drei ausgewählte Photonenenergien $E \in \{20 \text{ keV}, 60 \text{ keV}, 511 \text{ keV}\}$ in Betracht gezogen. Die Auswahl der drei Photonenenergien E orientiert sich hierbei an der mittleren Energie E der Röntgenphotonen, die näherungsweise in verschiedenen Anwendungsbereichen verwendet wird. In diesem Zusammenhang werden Anwendungen wie die Mammographie, die Röntgenkristallographie und die Qualitätsbewertung von Landwirtschaftserzeugnissen und Lebensmitteln durch eine niedrige Photonenenergie $E = 20 \text{ keV}$, die Röntgen-Thoraxaufnahme, die Gepäckkontrolle und die klinische Computertomographie (CT) durch eine mittlere Photonenenergie $E = 60 \text{ keV}$ und die zerstörungsfreie Werkstoffprüfung vor Ort, die Frachtkontrolle und die Positronen-Emissions-Tomographie (PET) durch eine hohe Photonenenergie $E = 511 \text{ keV}$ repräsentiert. Die Simulationen werden darüber hinaus für zwei Photonenflussraten $\dot{\Phi}_{0,\text{high}} = 10^8 \text{ mm}^{-2} \text{ s}^{-1}$ und $\dot{\Phi}_{0,\text{low}} = 10^5 \text{ mm}^{-2} \text{ s}^{-1}$ durchgeführt. Hierbei repräsentiert $\dot{\Phi}_{0,\text{high}}$ näherungsweise die Photonenflussrate, die bei klinischen Anwendungen wie der

Mammographie, allgemeinen Röntgenaufnahmen und der CT auf den Patienten trifft [89, 90]. Diesbezüglich ist zu beachten, dass im Rahmen medizinischer Anwendungen die Photonenfluenzrate $\dot{\Phi}_0$ nicht beliebig groß gewählt werden kann, da sich mit einer zunehmenden Photonenfluenzrate $\dot{\Phi}_0$ die Strahlenbelastung für den Patienten und damit das Risiko von unerwünschten Nebenwirkungen erhöht. In Anwendungsgebieten außerhalb der Medizin werden allerdings auch höhere Photonenfluenzraten $\dot{\Phi}_0$ verwendet [91, 92]. Der in den Simulationen in dieser Arbeit verwendete Wert für die Photonenfluenzrate $\dot{\Phi}_{0,\text{high}} = 10^8 \text{ mm}^{-2} \text{ s}^{-1}$ repräsentiert demzufolge eine vergleichsweise hohe Anforderung in Bezug auf die Leistungsanalyse der untersuchten Röntgendetektoren. Um zu bewerten, inwieweit sich eine Abschwächung der Photonenfluenzrate als Folge der Interaktion der Röntgenphotonen mit dem untersuchten Objekt auf die Leistungsfähigkeit auswirkt, wird die Leistungsanalyse zusätzlich für eine niedrige Photonenfluenzrate $\dot{\Phi}_{0,\text{low}}$ durchgeführt.

5.3 Optimierung der Röntgensensitivität

Eine wichtige Größe zur Bewertung der Leistungsfähigkeit von Röntgendetektoren ist die Röntgensensitivität S (siehe Abschnitt 2.2.2.1). Im folgenden Abschnitt wird daher die Röntgensensitivität S einschichtiger Röntgendetektoren simuliert, und der Einfluss des Detektor-Designs wird analysiert. Zu diesem Zweck werden exemplarisch Absorber bestehend aus a-Se und m-MAPbI₃ mit unterschiedlichen Schichtdicken d betrachtet. Die Leistungsanalyse wird hierbei für unterschiedliche Photonenenergien E im Intervall $5 \text{ keV} \leq E \leq 515 \text{ keV}$ durchgeführt. In den Untersuchungen werden darüber hinaus konstante Beträge der elektrischen Felder F von $F = 10 \text{ V } \mu\text{m}^{-1}$ und $F = 0.25 \text{ V } \mu\text{m}^{-1}$ im Falle von a-Se und m-MAPbI₃ angenommen. Die in diesem Abschnitt durchgeführten Simulationen der Röntgensensitivität S einschichtiger Röntgendetektoren basieren auf dem in Abschnitt 3.1 beschriebenen Simulationsmodell. Gemäß der Gleichungen (3.14) und (3.15) lässt sich die theoretische Röntgensensitivität $S_{\text{theo}} = S_0 \eta_x \eta_m \eta_{\text{cc}}$ einschichtiger Röntgendetektoren als Produkt aus einer Normierung S_0 und einzelnen Effizienzen η modellieren. In den folgenden Abschnitten werden die Röntgenabsorptionseffizienz η_x , die Ladungssammelleffizienz η_{cc} und das Produkt aus der Normierung S_0 und der Konversionseffizienz η_m zunächst einzeln betrachtet und analysiert, um ihren jeweiligen Einfluss auf die theoretische Röntgensensitivität S_{theo} bewerten zu können.

5.3.1 Einfluss der Röntgenabsorptionseffizienz

Gemäß Gleichung (3.15b) lässt sich die Röntgenabsorptionseffizienz $\eta_x = 1 - e^{-1/\Delta} = 1 - e^{-\alpha d}$ eines einschichtigen Röntgendetektors mithilfe des linearen Schwächungskoeffizienten α (siehe Abschnitt 2.1.4.2) und der Schichtdicke d des Absorber-Materials modellieren. Abbildung 5.2 zeigt die simulierten Röntgenabsorptionseffizienzen η_x von einschichtigen Röntgendetektoren in Abhängigkeit von der Schichtdicke d des Absorbers und der Photonenenergie E exemplarisch für Absorber, bestehend aus a-Se (siehe Abbildung 5.2 (a)) und m-MAPbI₃ (siehe Abbildung 5.2 (b)). Unabhängig vom verwendeten Absorber-Material

und von der Photonenenergie E ergeben sich maximale Röntgenabsorptionseffizienzen η_x bei maximalen Schichtdicken d der Absorber. Die Energieabhängigkeit des Massenschwächungskoeffizienten α/ρ und somit ebenfalls des linearen Schwächungskoeffizienten α bewirkt, dass im betrachteten Energiebereich mit zunehmender Photonenenergie E immer dickere Schichtdicken d benötigt werden, um eine effiziente Röntgenabsorption zu gewährleisten. Der Massenschwächungskoeffizient α/ρ hängt hierbei von den atomaren Bestandteilen (siehe Gleichung (2.10)) und der lineare Schwächungskoeffizient α zusätzlich von der Dichte ρ des Absorber-Materials ab. Dadurch ergeben sich materialspezifisch unterschiedliche Schichtdicken d des Absorbers, ab denen eine ausreichend hohe Röntgenabsorptionseffizienz η_x gewährleistet werden kann (siehe beispielsweise die Bereiche mit $\eta_x \approx 1$ in Abbildung 5.2). Die in Abbildung 5.2 sichtbaren Sprünge in der Röntgenabsorptionseffizienz η_x bei konstanter Schichtdicke d und variabler Photonenenergie E ergeben sich aus den unterschiedlichen Absorptionskanten der Absorber-Materialien (siehe beispielsweise die Absorptionskanten von MAPbI₃ in Abbildung 2.3). Unter dem Gesichtspunkt einer optimalen Röntgenabsorptionseffizienz η_x ergibt sich für einschichtige Röntgendetektoren zusammenfassend die Designvorgabe, die Schichtdicke d des Absorbers zu maximieren: $d \uparrow \Rightarrow \eta_x \uparrow$.

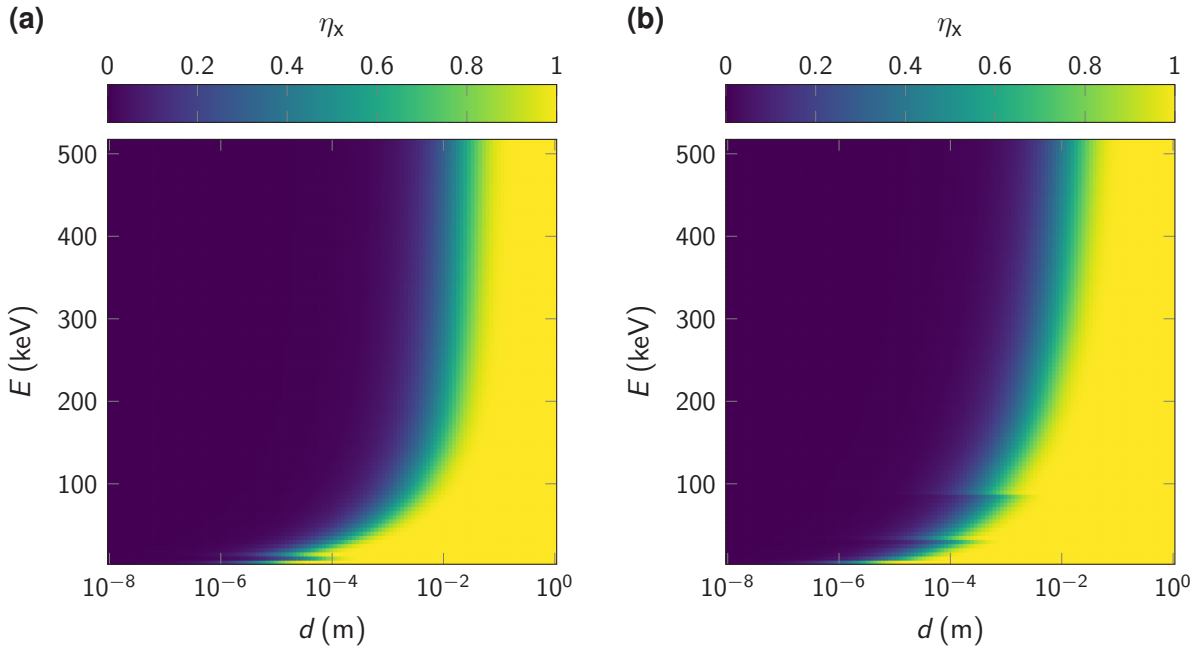


Abbildung 5.2: Simulierte Röntgenabsorptionseffizienz einschichtiger Röntgendetektoren. Simulierte Röntgenabsorptionseffizienz η_x einschichtiger Röntgendetektoren in Abhängigkeit von der Schichtdicke d des Absorbers und der Photonenenergie E . **(a)** Simulationsergebnis für einen Absorber bestehend aus amorphem Se (a-Se). **(b)** Simulationsergebnis für einen Absorber bestehend aus monokristallinem MAPbI₃ (m-MAPbI₃) (MA, kurz für Methylammonium).

5.3.2 Einfluss der Ladungssammeleffizienz

Die Modellierung der Ladungssammeleffizienz η_{cc} im Rahmen des verwendeten Simulationsmodells hängt gemäß Gleichung (3.15d) von dem normierten Ladungsträger-Schubweg $x_{e,h} = \mu_{e,h} F \tau_{e,h} / d$ der Elektronen und Löcher und von der normierten Absorptionslänge $\Delta = 1/(\alpha d)$ ab. Abbildung 5.3 zeigt die simulierte Ladungssammeleffizienz η_{cc} von einschichtigen Röntgendetektoren in Abhängigkeit von der Schichtdicke d des Absorbers und der Photonenenergie E exemplarisch für Absorber, bestehend aus a-Se (siehe Abbildung 5.3 (a)) und m-MAPbI₃ (siehe Abbildung 5.3 (b)). Für den betrachteten Energiebereich und die untersuchten Absorber-Materialien zeigt die simulierte Ladungssammeleffizienz η_{cc} keine signifikante Abhängigkeit von der Photonenenergie E . Im Gegensatz dazu zeigt die simulierte Ladungssammeleffizienz η_{cc} eine starke Abhängigkeit von der Schichtdicke d des Absorbers. Für beide untersuchten Absorber-Materialien sinkt die simulierte Ladungssammeleffizienz η_{cc} mit zunehmender Schichtdicke d des Absorbers. Der Bereich der Schichtdicke d , ab welcher die Abnahme in der simulierte Ladungssammeleffizienz η_{cc} bedeutend wird, hängt hierbei stark vom verwendeten Absorber-Material ab. Sowohl die Abhängigkeit von der Schichtdicke d als auch die Abhängigkeit vom verwendeten Absorber-Material lässt sich zum Teil mithilfe des Ladungsträger-Schubwegs $x_{e,h}$ in Gleichung (3.15d) erklären (siehe hierfür $1/d$ Abhängigkeit von $x_{e,h}$ und Werte für $\mu_{e,h} \tau_{e,h}$ in Tabelle 5.1 in Verbindung mit den in den Simulationen verwendeten Beträgen des elektrischen Feldes $F = 10 \text{ V } \mu\text{m}^{-1}$ und $F = 0.25 \text{ V } \mu\text{m}^{-1}$ im Falle von a-Se und m-MAPbI₃). Gemäß Gleichung (3.15d) besitzt die simulierte Ladungssammeleffizienz

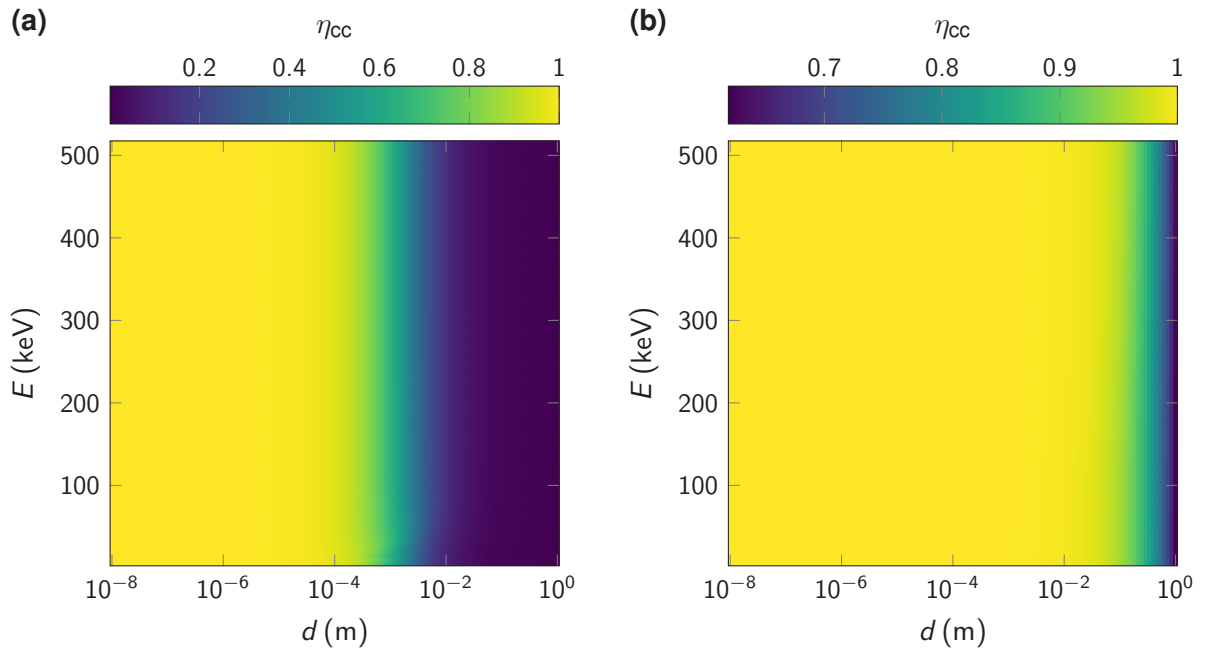


Abbildung 5.3: Simulierte Ladungssammeleffizienz einschichtiger Röntgendetektoren. Simulierte Ladungssammeleffizienz η_{cc} einschichtiger Röntgendetektoren in Abhängigkeit der Schichtdicke d des Absorbers und der Photonenenergie E . **(a)** Simulationsergebnis für einen Absorber bestehend aus amorphem Se (a-Se). **(b)** Simulationsergebnis für einen Absorber bestehend aus monokristallinem MAPbI₃ (m-MAPbI₃) (MA, kurz für Methylammonium).

η_{cc} allerdings mit der normierten Absorptionslänge $\Delta = 1/(\alpha d)$ eine zusätzliche formale Abhängigkeit von der Schichtdicke d .

Unter dem Gesichtspunkt einer optimalen Ladungssammeleffizienz η_{cc} ergibt sich für einschichtige Röntgendetektoren zusammenfassend die Designvorgabe, die Schichtdicke d zu minimieren: $d \downarrow \Rightarrow \eta_{cc} \uparrow$.

5.3.3 Einfluss der Normierung und der Konversionseffizienz

Gemäß der Gleichungen (3.15a) und (3.15c) lässt sich das Produkt aus der Normierung S_0 und der Konversionseffizienz η_m mithilfe der Elementarladung e , der Wechselwirkungskoeffizienten von Luft $(\alpha_{en}/\rho)_{air}$ und des Absorbers (α_{en}/α) sowie der Elektron-Loch-Paar Erzeugungsenergie W_{\pm} des Absorbers modellieren: $S_0\eta_m = e/(\alpha_{en}/\rho)_{air}(1/W_{\pm})(\alpha_{en}/\alpha)$. Abbildung 5.4 zeigt die simulierten Ergebnisse für das Produkt aus der Normierung S_0 und der Konversionseffizienz η_m von einschichtigen Röntgendetektoren in Abhängigkeit von der Schichtdicke d des Absorbers und der Photonenenergie E exemplarisch für Absorber, bestehend aus a-Se (siehe Abbildung 5.4 (a)) und m-MAPbI₃ (siehe Abbildung 5.4 (b)). Formal besitzen weder die Normierung S_0 noch die Konversionseffizienz η_m eine Abhängigkeit von der Schichtdicke d des Absorbers. Um die unterschiedlichen Einflüsse auf die theoretische Röntgensensitivität S_{theo} visuell miteinander vergleichen zu können, sind die Ergebnisse in Abbildung 5.4 in Analogie zu den vorangegangenen Abschnitten ebenfalls in Abhängigkeit der Schichtdicke d des Absorbers dargestellt. Als Folge

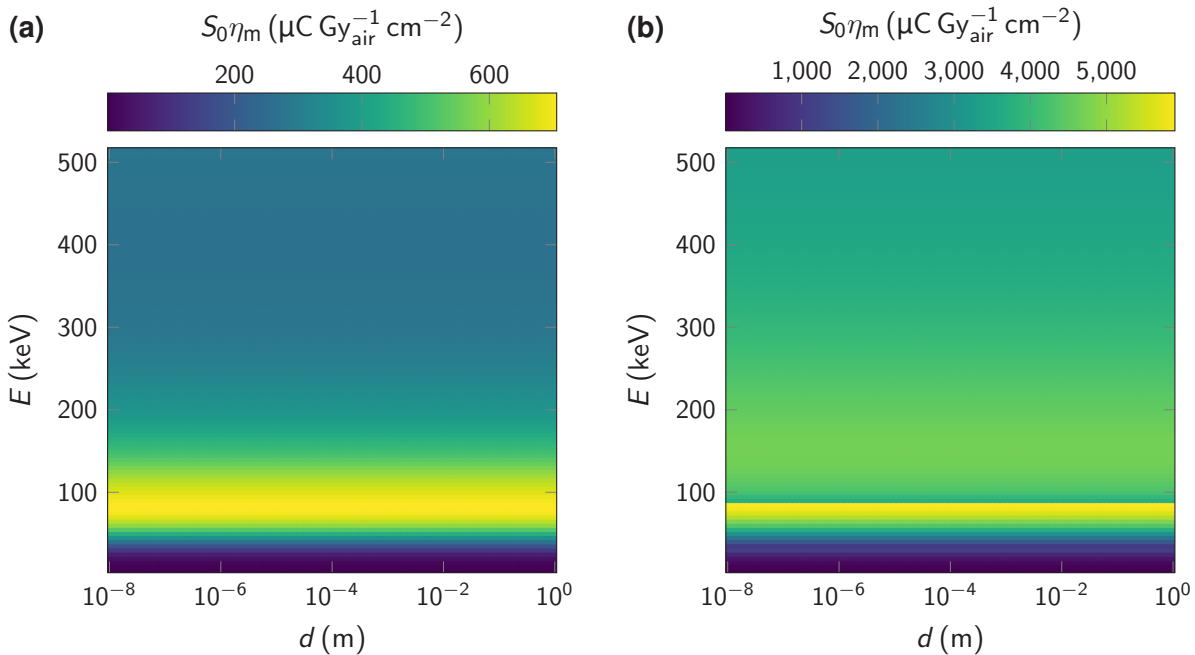


Abbildung 5.4: Simuliertes Produkt aus der Normierung und der Konversionseffizienz einschichtiger Röntgendetektoren. Simuliertes Produkt aus der Normierung S_0 und der Konversionseffizienz η_m einschichtiger Röntgendetektoren in Abhängigkeit der Schichtdicke d des Absorbers und der Photonenenergie E . **(a)** Simulationsergebnis für einen Absorber bestehend aus amorphem Se (a-Se). **(b)** Simulationsergebnis für einen Absorber bestehend aus monokristallinem MAPbI₃ (m-MAPbI₃) (MA, kurz für Methylammonium).

der Energieabhängigkeit der Wechselwirkungskoeffizienten $(\alpha_{\text{en}}/\rho)_{\text{air}}$ und $(\alpha_{\text{en}}/\alpha)$ zeigt auch das Produkt $S_0\eta_{\text{m}}$ eine starke materialspezifische Energieabhängigkeit. Aufgrund der unterschiedlichen Wechselwirkungskoeffizienten $(\alpha_{\text{en}}/\alpha)$ und Elektron-Loch-Paar Erzeugungsenergien W_{\pm} der Absorber ergeben sich im Falle von m-MAPbI₃ wesentlich höhere Werte für das Produkt $S_0\eta_{\text{m}}$ (siehe Abbildung 5.4 (b)) als im Falle von a-Se (siehe Abbildung 5.4 (a)).

5.3.4 Schichtdicken-Optimierung zur Maximierung der Röntgensensitivität

Abbildung 5.5 zeigt die theoretische Röntgensensitivität $S_{\text{theo}} = S_0\eta_{\text{x}}\eta_{\text{m}}\eta_{\text{cc}}$ einschichtiger Röntgendetektoren in Abhängigkeit von der Schichtdicke d des Absorbers und der Photonenenergie E exemplarisch für Absorber, bestehend aus a-Se (siehe Abbildung 5.5 (a)) und m-MAPbI₃ (siehe Abbildung 5.5 (b)). Unabhängig vom untersuchten Material zeigt die theoretische Röntgensensitivität S_{theo} eine starke Abhängigkeit von der Schichtdicke d des Absorbers. Dieser Sachverhalt lässt sich mithilfe der Simulationsergebnisse aus den vorangegangenen Abschnitten für die Röntgenabsorptionseffizienz η_{x} und für die Ladungssammelleffizienz η_{cc} erklären. Gemäß der Abbildungen 5.2 und 5.3 ergeben sich unabhängig vom untersuchten Material unter den Gesichtspunkten einer optimalen Röntgenabsorptionseffizienz η_{x} und einer optimalen Ladungssammelleffizienz η_{cc} unterschiedliche Designvorgaben für einen einschichtigen Röntgendetektor. Eine Optimierung der Röntgenabsorptionseffizienz η_{x} erfordert eine möglichst große Schichtdicke d des

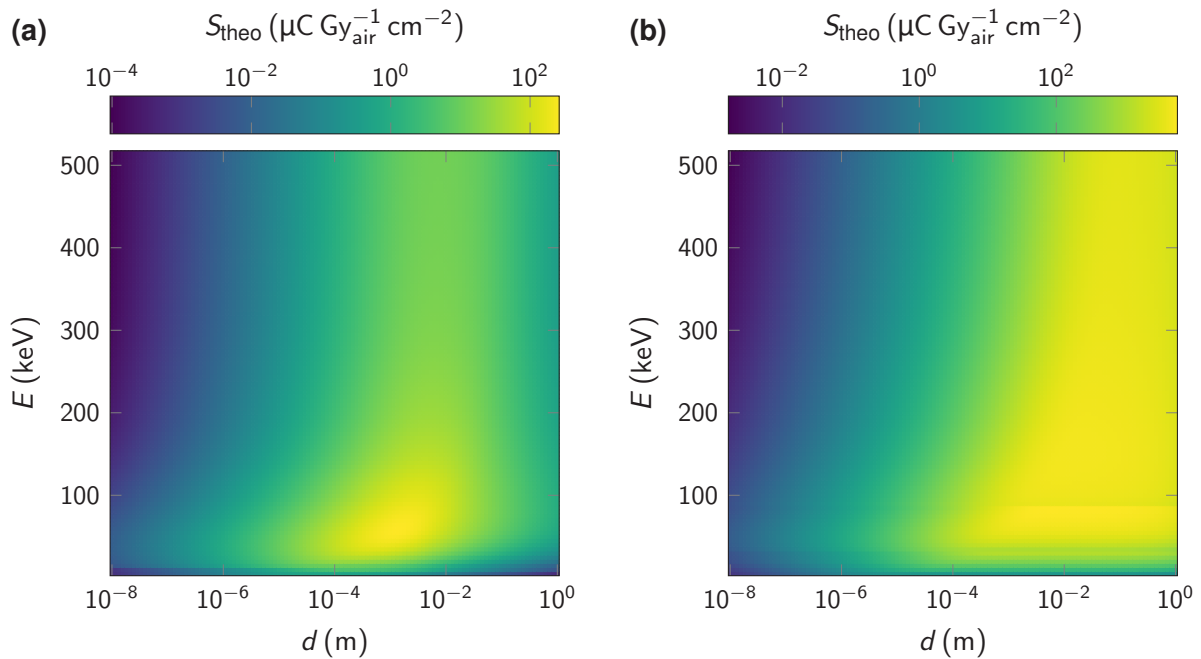


Abbildung 5.5: Theoretische Röntgensensitivität einschichtiger Röntgendetektoren. Theoretische Röntgensensitivität S_{theo} einschichtiger Röntgendetektoren in Abhängigkeit der Schichtdicke d des Absorbers und der Photonenenergie E . **(a)** Simulationsergebnis für einen Absorber bestehend aus amorphem Se (a-Se). **(b)** Simulationsergebnis für einen Absorber bestehend aus monokristallinem MAPbI₃ (m-MAPbI₃) (MA, kurz für Methylammonium).

Absorbers, wohingegen die Ladungssammeleffizienz η_{cc} für möglichst kleine Schichtdicken d des Absorbers optimiert wird. Als direkte Folge existiert für jede Photonenenergie E eine optimale Schichtdicke d , für welche das Produkt $\eta_x \eta_{cc}$ und somit die theoretische Röntgensensitivität S_{theo} maximiert wird. Gemäß Abbildung 5.3 nimmt die Ladungssammeleffizienz η_{cc} von m-MAPbI₃ verglichen mit a-Se erst bei wesentlich größeren Schichtdicken d bedeutend ab. Folglich ergeben sich im Falle von m-MAPbI₃ wesentlich dickere optimale Schichtdicken d .

Die Energieabhängigkeit der theoretischen Röntgensensitivität S_{theo} ergibt sich im Wesentlichen aus den Simulationsergebnissen für die Röntgenabsorptionseffizienz η_x (siehe Abbildung 5.2) und den Simulationsergebnissen für das Produkt aus der Normierung S_0 und der Konversionseffizienz η_m (siehe Abbildung 5.4). Die Maximalwerte der theoretischen Röntgensensitivität S_{theo} werden sowohl durch das Produkt aus der Normierung S_0 und der Konversionseffizienz η_m als auch durch das Zusammenspiel aus der Röntgenabsorptionseffizienz η_x und der Ladungssammeleffizienz η_{cc} beeinflusst. Die wesentlich höheren Werte der theoretischen Röntgensensitivität S_{theo} im Falle von m-MAPbI₃ verglichen mit a-Se (siehe Abbildung 5.5) ergeben sich demnach zum Teil aus den Simulationsergebnissen für das Produkt $S_0 \eta_m$ (siehe Abbildung 5.4). Des Weiteren kann im Falle von m-MAPbI₃ verglichen mit a-Se die Schichtdicke d wesentlich größer gewählt werden, ohne die Ladungssammeleffizienz η_{cc} signifikant zu reduzieren. Dieser Umstand äußert sich in wesentlich größeren optimalen Schichtdicken d bei denen höhere kombinierte Effizienzen $\eta_x \eta_{cc}$ und somit höhere theoretische Röntgensensitivitäten S_{theo} erreicht werden können.

Unter dem Gesichtspunkt einer maximalen theoretischen Röntgensensitivität S_{theo} ergibt sich für einschichtige Röntgendetektoren eine materialspezifische optimale Schichtdicke d des Absorbers. Die optimale Schichtdicke d hängt hierbei von der Photonenenergie E ab und muss somit explizit für unterschiedliche Anwendungsbereiche bestimmt werden. Das verwendete Material des Absorbers hat dabei einen starken Einfluss auf die Größe der optimalen Schichtdicke d und auf die Maximalwerte der theoretischen Röntgensensitivität S_{theo} .

5.4 Designvorgaben unter Berücksichtigung der Röntgensensitivität

Im Rahmen dieser Arbeit wird die Schichtdicke d des Absorbers, die eine maximale theoretischen Röntgensensitivität S_{theo} ermöglicht, als optimaler Designparameter d_{opt} einschichtiger Röntgendetektoren betrachtet. Die Optimierung der theoretischen Röntgensensitivität S_{theo} in Abschnitt 5.3 zeigt materialspezifische optimale Schichtdicken d_{opt} mit einer ausgeprägten Abhängigkeit von der Photonenenergie E . Aus diesem Grund ist es an dieser Stelle von besonderem Interesse, die theoretisch erreichbare Leistungsfähigkeit einschichtiger Röntgendetektoren für unterschiedliche Absorber-Materialien und verschiedene anwendungsspezifische Photonenenergien E zu untersuchen.

Die optimale Schichtdicken d_{opt} einschichtiger Röntgendetektoren, die sich im Hinblick auf eine maximale theoretische Röntgensensitivität S_{theo} mit unterschiedlichen Absorber-Materialien ergeben, sind

in Tabelle 5.2 für drei Photonenenergien $E \in \{20 \text{ keV}, 60 \text{ keV}, 511 \text{ keV}\}$ dargestellt. Die auf der Basis der optimalen Schichtdicke d_{opt} erreichbare Leistungsfähigkeit einschichtiger Röntgendetektoren ist

Tabelle 5.2: Designvorgaben und Leistungsfähigkeit einschichtiger Röntgendetektoren. Optimale Schichtdicke d_{opt} der Absorber einschichtiger Röntgendetektoren im Hinblick auf eine maximale theoretische Röntgensensitivität S_{theo} in Abhängigkeit des Absorber-Materials und der Energie E der einfallenden Röntgenphotonen. Die zugehörige Leistungsfähigkeit ist durch die theoretische Röntgensensitivität S_{theo} und die theoretische Detektive Quanteneffizienz DQE(0) quantifiziert. Der in den Simulationen angenommene Betrag des elektrischen Feldes F ist zusätzlich angegeben. Die Simulationen der theoretischen Detektiven Quanteneffizienz DQE(0) basieren auf einer konstanten Dunkelstromdichte $J_d = 10^{-8} \text{ A mm}^{-2}$. Es werden direkte Absorber bestehend aus amorphem Se (a-Se), polykristallinem PbI_2 (p-PbI₂), HgI_2 (p-HgI₂), CdZnTe (p-CdZnTe) und MAPbI_3 (p-MAPbI₃) (MA, kurz für Methylammonium) sowie monokristallinem CdZnTe (m-CdZnTe) und MAPbI_3 (m-MAPbI₃) in Betracht gezogen. Die Leistungsanalyse von direkten Absorbern bestehend aus p-MAPbI₃ beruht auf einem hohen Beweglichkeit-Lebensdauer-Produkt $\mu\tau_{\text{high}}$.

	$F (\text{V } \mu\text{m}^{-1})$	$E (\text{keV})$	$d_{\text{opt}} (\text{mm})$	$S_{\text{theo}} (\mu\text{C Gy}_{\text{air}}^{-1} \text{ cm}^{-2})$	DQE(0) ^a	DQE(0) ^b
a-Se	10	20	0.195	26.04	0.971	0.112
	10	60	1.48	262.1	0.772	0.249
	10	511	7.59	11.11	0.229	0.038
p-PbI ₂	1	20	0.117	196.1	0.975	0.858
	1	60	0.389	1220	0.777	0.708
	1	511	2.45	44.41	0.165	0.135
p-HgI ₂	1	20	0.162	302.2	0.994	0.939
	1	60	0.794	3510	0.957	0.943
	1	511	7.76	410.1	0.443	0.44
p-CdZnTe	0.25	20	0.741	307.7	1	0.946
	0.25	60	1.74	3274	0.998	0.981
	0.25	511	18.6	443.4	0.626	0.621
m-CdZnTe	0.25	20	1.12	341.7	1	0.956
	0.25	60	3.63	4129	1	0.989
	0.25	511	105	2030	0.996	0.995
p-MAPbI ₃	0.25	20	0.245	299.4	0.991	0.935
	0.25	60	1.1	3530	0.95	0.936
	0.25	511	11.5	491.4	0.436	0.434
m-MAPbI ₃	0.25	20	0.55	313.3	1	0.948
	0.25	60	3.16	4309	1	0.99
	0.25	511	95.5	3159	0.991	0.991

^a bei einer hohen Photonenflussrate $\dot{\Phi}_{0,\text{high}} = 10^8 \text{ mm}^{-2} \text{ s}^{-1}$

^b bei einer niedrigen Photonenflussrate $\dot{\Phi}_{0,\text{low}} = 10^5 \text{ mm}^{-2} \text{ s}^{-1}$

mithilfe der theoretischen Röntgensensitivität S_{theo} quantifiziert. Darüber hinaus zeigt Tabelle 5.2 zusätzlich die theoretische Detektive Quanteneffizienz $\text{DQE}(0)$, welche sich gemäß des in Abschnitt 3.2 beschriebenen Simulationsmodells ergibt. Die Simulationen der theoretischen Detektiven Quanteneffizienz $\text{DQE}(0)$ basieren hierbei unabhängig vom Absorber-Material auf einer konstanten Dunkelstromdichte $J_d = 10^{-8} \text{ A mm}^{-2}$. Es handelt sich dabei um einen vergleichsweise hohen Wert, dessen Auswahl im Wesentlichen dazu dient, die außergewöhnlich hohe theoretische Detektive Quanteneffizienz $\text{DQE}(0)$ einschichtiger Röntgendetektoren, die insbesondere im Falle monokristalliner Absorber erreicht werden kann, zu demonstrieren. Der in den Simulationen angenommene Betrag des elektrischen Feldes F ist zusätzlich in Tabelle 5.2 angegeben. Die Designvorgaben und die Angaben zur Leistungsfähigkeit einschichtiger Röntgendetektoren in Tabelle 5.2 bilden im Rahmen dieser Arbeit die Grundlage für die Bewertung der Leistungsfähigkeit mehrschichtiger und gefalteter Röntgendetektoren in den Kapiteln 6 und 7.

5.5 Zusammenfassung

In diesem Kapitel wird die Simulation und das Design von einschichtigen Röntgendetektoren beschrieben. In Abschnitt 5.1 wird hierbei zunächst die grundlegende Motivation und die wissenschaftliche Zielsetzung des Kapitels erläutert. In der vorliegenden Arbeit besteht der wesentliche Anreiz einer theoretischen Leistungsanalyse einschichtiger Röntgendetektoren darin, die theoretische Leistungsfähigkeit mehrschichtiger und gefalteter Röntgendetektoren bewerten zu können. Dieses Kapitel ist daher der Entwicklung einer Vergleichsgrundlage für die Bewertung der theoretischen Leistungsfähigkeit von mehrschichtigen und gefalteten Röntgendetektoren auf der Basis von einschichtigen Röntgendetektoren gewidmet. Im weiteren Verlauf des Kapitels werden aus diesem Grund im Rahmen der Abschnitte 5.2, 5.3 und 5.4 drei Zwischenziele verfolgt.

In Abschnitt 5.2 werden zunächst der grundlegende Aufbau und die Parameter für die Simulation einschichtiger Röntgendetektoren eingeführt. Die Simulationsparameter lassen sich in diesem Zusammenhang in Designparameter des Detektors, Materialparameter des Absorber-Materials und Bestrahlungsparameter unterteilen. Einige der hier eingeführten Simulationsparameter werden darüber hinaus in den Kapiteln 6 und 7 verwendet.

Abschnitt 5.3 zeigt anschließend die Optimierung der theoretischen Röntgensensitivität S_{theo} einschichtiger Röntgendetektoren exemplarisch im Falle zweier Absorber-Materialien. Die Optimierung der theoretischen Röntgensensitivität S_{theo} basiert hierbei auf einer Variation der Absorber-Schichtdicke d und der Photonenenergie E . Die einzelnen Bestandteile der theoretischen Röntgensensitivität S_{theo} werden in diesem Zusammenhang zunächst einzeln betrachtet und analysiert, um ihren jeweiligen Einfluss auf die theoretischen Röntgensensitivität S_{theo} bewerten zu können. Dabei ergeben sich im Hinblick auf eine optimale Röntgenabsorptionseffizienz η_x und eine optimale Ladungssammeleffizienz η_{cc} gegensätzliche Designvorgaben für die Absorber-Schichtdicke d . Infolgedessen existiert für jede Photonenenergie E eine optimale Schichtdicke d , für welche das Produkt $\eta_x \eta_{\text{cc}}$ und somit die theoretische Röntgensensitivität S_{theo} maximiert wird. Die Energieabhängigkeit der theoretischen Röntgensensitivität S_{theo} ergibt sich

darüber hinaus im Wesentlichen aus der Energieabhängigkeit der Röntgenabsorptionseffizienz η_x und des Produkts aus der Normierung S_0 und der Konversionseffizienz η_m . Unter dem Gesichtspunkt einer maximalen theoretischen Röntgensensitivität S_{theo} ergibt sich im Falle der hier betrachteten einschichtigen Röntgendetektoren eine materialspezifische optimale Absorber-Schichtdicke d , die darüber hinaus von der Photonenenergie E abhängt. Das verwendete Absorber-Material zeigt hierbei einen bedeutenden Einfluss auf die optimale Absorber-Schichtdicke d und die maximal erreichbare theoretische Röntgensensitivität S_{theo} .

Auf der Grundlage der Ergebnisse der exemplarischen Optimierung in Abschnitt 5.3 werden in Abschnitt 5.4 abschließend allgemeine Designvorgaben für einschichtige Röntgendetektoren entwickelt. In diesem Zusammenhang wird die Absorber-Schichtdicke d , welche eine maximale theoretische Röntgensensitivität S_{theo} ermöglicht, als optimaler Designparameter d_{opt} einschichtiger Röntgendetektoren betrachtet. Die Designvorgaben sind dabei für unterschiedliche Absorber-Materialien und verschiedene anwendungsspezifische Photonenenergien E berechnet. Die Leistungsfähigkeit, welche sich unter Beachtung der Designvorgaben theoretisch erreichen lässt, ist durch die theoretische Röntgensensitivität S_{theo} und die theoretische Detektive Quanteneffizienz DQE(0) quantifiziert.

Die Ergebnisse dieses Kapitels im Hinblick auf die Designvorgaben und die Angaben zur theoretischen Leistungsfähigkeit einschichtiger Röntgendetektoren bilden im Rahmen dieser Arbeit die Grundlage für die Bewertung der theoretischen Leistungsfähigkeit von mehrschichtigen und gefalteten Röntgendetektoren in den Kapiteln 6 und 7.

Teile der in diesem Kapitel präsentierten Inhalte sind in Mescher, Hamann, and Lemmer [63] veröffentlicht. Der Hauptbeitrag dieser Veröffentlichung stammt hierbei vom Erstautor Henning Mescher. Der Erstautor Henning Mescher wurde im Rahmen der Veröffentlichung vom Co-Autor Elias Hamann in Bezug auf die theoretische Arbeit unterstützt. Der Co-Autor Uli Lemmer hat in diesem Zusammenhang die wissenschaftliche Betreuung übernommen.

6 Modellierung, Simulation und Design von mehrschichtigen Röntgendetektoren

*Dieses Kapitel ist der **Bewertung der theoretischen Leistungsfähigkeit von mehrschichtigen Röntgendetektoren** (Ziel 2) gewidmet. Zu diesem Zweck werden im Verlauf des Kapitels zwei Zwischenziele verfolgt. Zunächst werden bereits bestehende Modelle zur Simulation der Röntgensensitivität und der Detektiven Quanteneffizienz von einschichtigen Röntgendetektoren auf mehrschichtige Röntgendetektoren erweitert, um die theoretische Leistungsfähigkeit dieser Detektoren analysieren und bewerten zu können. Anschließend wird die Leistungsfähigkeit mehrschichtiger Röntgendetektoren simuliert, Designvorgaben werden entwickelt, und das Potential, eine hohe Leistungsfähigkeit zu ermöglichen, wird auf der Grundlage eines Leistungsvergleiches mit einschichtigen Röntgendetektoren bewertet. Die bereits bestehenden Simulationsmodelle, die im Rahmen dieses Kapitels erweitert werden, sind in Kapitel 3 beschrieben. Der Leistungsvergleich mit einschichtigen Röntgendetektoren basiert auf den Ergebnissen aus Kapitel 5. Die Ergebnisse dieses Kapitels bilden zusammen mit den Resultaten aus Kapitel 5 die Grundlage für die Bewertung der theoretischen Leistungsfähigkeit gefalteter Röntgendetektoren in Kapitel 7.*

Teile der in diesem Kapitel präsentierten Inhalte sind in Mescher and Lemmer [93] veröffentlicht. Der Hauptbeitrag dieser Veröffentlichung stammt hierbei vom Erstautor Henning Mescher. Der Co-Autor Uli Lemmer hat in diesem Zusammenhang die wissenschaftliche Betreuung übernommen.

6.1 Motivation und Zielsetzung

Die Simulation und das Design einschichtiger Röntgendetektoren in Kapitel 5 zeigen eine starke Abhängigkeit der theoretischen Röntgensensitivität S_{theo} einschichtiger Röntgendetektoren vom verwendeten Absorber-Material und von der Schichtdicke d des Absorbers (siehe Abschnitt 5.3 und 5.4). Unter dem Gesichtspunkt einer maximalen theoretischen Röntgensensitivität S_{theo} ergeben sich für einschichtige Röntgendetektoren materialspezifische optimale Schichtdicken d des Absorbers (siehe Abschnitt 5.3.4). Die optimalen Schichtdicken d beschreiben hierbei einen Kompromiss zwischen der Röntgenabsorptionseffizienz η_x (steigt mit zunehmender Schichtdicke d) und der Ladungssammeleffizienz η_{cc} (sinkt mit zunehmender Schichtdicke d). In Abhängigkeit vom verwendeten Absorber-Material und von der anwendungsspezifischen Photonenenergie E ergeben sich unterschiedliche optimale Schichtdicken d_{opt} , die im Falle mittlerer Photonenenergien E über, und im Falle hoher Photonenenergien E weit über einem Millimeter liegen können (siehe Tabelle 5.2). Die Realisierung beliebig dicker Absorberschichten mit ausreichend hoher Qualität ist allerdings nicht trivial. Monokristalline Absorber können grundsätzlich in hoher Qualität und mit Schichtdicken d von mehreren Millimetern realisiert werden. Ihre Herstellung gilt allerdings im Allgemeinen als aufwendig und kostenintensiv. Polykristalline Absorber lassen sich hingegen kostengünstiger herstellen, können üblicherweise allerdings nicht mit der Qualität monokristalliner Materialien konkurrieren. Des Weiteren steigt auch bei polykristallinen Materialien der Herstellungsaufwand mit zunehmender Schichtdicke d .

Ein alternativer Ansatz, hochleistungsfähige Röntgendetektoren zu realisieren, besteht in einem mehrschichtigen Detektor-Aufbau. In Abbildung 6.1 wird der grundlegende Aufbau eines einschichtigen Röntgendetektors (siehe Abbildung 6.1 (a)) mit dem Aufbau eines mehrschichtigen Röntgendetektors (siehe Abbildung 6.1 (b)) verglichen. Einschichtige Röntgendetektoren bestehen aus einem Absorber der Schichtdicke d , der sich zwischen zwei Elektroden auf einem Substrat befindet. Mehrschichtige Röntgendetektoren bestehen aus K übereinander angeordneten Detektor-Schichten. Jede einzelne Detektor-Schicht entspricht hierbei im Aufbau und in der Funktionsweise einem einschichtigen Röntgendetektor. Die grundlegende Idee der hier betrachteten mehrschichtigen Röntgendetektoren ist eine Abschwächung der Kopplung zwischen der Röntgenabsorptionseffizienz η_x und der Ladungssammeleffizienz η_{cc} mithilfe des zusätzlichen Freiheitsgrads der Anzahl K der Detektor-Schichten. Zu diesem Zweck wird der mehrschichtige Röntgendetektor in seiner Gesamtheit bewertet und die Summe der Signale, die in den einzelnen Detektor-Schichten induziert werden, wird betrachtet. Der zusätzlich gewonnene Freiheitsgrad von mehrschichtigen Röntgendetektoren ermöglicht es, die Röntgenabsorptionseffizienz η_x und die Ladungssammeleffizienz η_{cc} nahezu unabhängig voneinander mithilfe einer Variation der Anzahl K der Detektor-Schichten und einer Variation der Absorber-Schichtdicke d zu optimieren. Als direkte Folge besitzen mehrschichtige Röntgendetektoren das Potential, eine hohe Leistungsfähigkeit auf der Basis von vergleichsweise einfach herzustellenden dünnen Absorber-Schichten zu realisieren.

In diesem Zusammenhang sei erwähnt, dass mehrschichtige Röntgendetektoren zusätzlich das Potential besitzen, mithilfe einer tiefenabhängigen Detektion spektrale Aspekte der einfallenden Röntgenphotonen

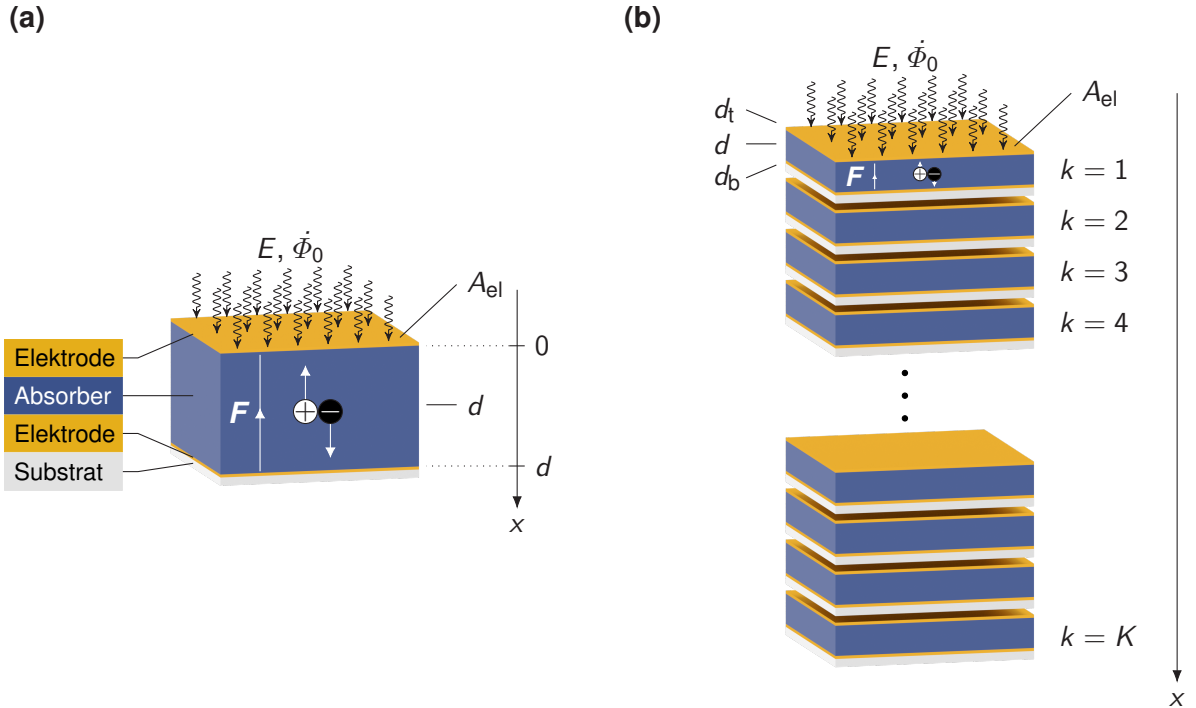


Abbildung 6.1: Grundlegender Aufbau einschichtiger und mehrschichtiger Röntgendetektoren. (a) Grundlegender Aufbau eines einschichtigen Röntgendetektors. Der betrachtete einschichtige Röntgendetektor besteht aus einem Absorber der Schichtdicke d , der sich zwischen zwei Elektroden auf einem Substrat befindet. Der Drift der Elektronen und Löcher im elektrischen Feld F zwischen den Elektroden ist schematisch dargestellt. Das elektrische Feld F ist hierbei exemplarisch für eine der beiden möglichen Orientierungen gezeigt. Die auf den Detektor auftreffende monoenergetische Röntgenstrahlung mit Röntgenphotonen der Energie E und einer Photonenflussrate $\dot{\Phi}_0$, die Detektor-Fläche A_{el} und die Orientierung der x -Achse sind ebenfalls gekennzeichnet. (b) Grundlegender Aufbau eines mehrschichtigen Röntgendetektors. Der betrachtete mehrschichtige Röntgendetektor besteht aus K entlang der x -Achse übereinander angeordneten Detektor-Schichten, die mit dem Index k gekennzeichnet sind. Jede einzelne Detektor-Schicht entspricht dabei im Aufbau und in der Funktionsweise dem in (a) dargestellten einschichtigen Röntgendetektor. Zusätzlich zur Schichtdicke d der einzelnen Absorber-Schichten sind die Schichtdicken $d_{t,b}$ der oberen (gekennzeichnet mit dem Index t für engl. top) und der unteren Elektrode (gekennzeichnet mit dem Index b für engl. bottom) dargestellt. Zum Teil reproduziert in Anlehnung an Mescher and Lemmer [93].

zu charakterisieren. Ein interessantes Konzept in diesem Kontext besteht darin, Perowskit-Szintillator-Schichten mit unterschiedlichen Emissionswellenlängen übereinander anzuordnen, um eine tiefenabhängige Detektion zu realisieren [94]. Eine tiefenabhängige Detektion im Falle der hier betrachteten mehrschichtigen Röntgendetektoren erfordert allerdings, dass das induzierte Signal separat für jede einzelne Detektor-Schicht ausgelesen wird. Eine potentielle Realisierung der hier betrachteten mehrschichtigen Röntgendetektoren ist allerdings auch ohne die Möglichkeit, das Signal einzelner Detektor-Schichten separat auszulesen, komplex. Aus diesem Grund wird in diesem Kapitel das grundlegende Potential mehrschichtiger Röntgendetektoren analysiert, welches sich bei einer summierten Betrachtung der induzierten Signale ergibt.

Dieses Kapitel ist der Bewertung der theoretischen Leistungsfähigkeit von mehrschichtigen Röntgendetektoren gewidmet. Im Rahmen dieses Kapitels werden daher zwei Zwischenziele verfolgt. In Abschnitt 6.2 werden zunächst die in Kapitel 3 beschriebenen bereits bestehenden Modelle zur Simulation

der Röntgensensitivität und der Detektiven Quanteneffizienz von einschichtigen Röntgendetektoren auf mehrschichtige Röntgendetektoren erweitert, um die theoretische Leistungsfähigkeit von mehrschichtigen Röntgendetektoren analysieren und bewerten zu können. Anschließend wird in Abschnitt 6.3 mithilfe der in Abschnitt 6.2 beschriebenen Erweiterungen die Leistungsfähigkeit mehrschichtiger Röntgendetektoren simuliert, Designvorgaben für mehrschichtige Röntgendetektoren werden entwickelt, und das Potential mehrschichtiger Röntgendetektoren, eine hohe Leistungsfähigkeit zu ermöglichen, wird auf der Grundlage eines Leistungsvergleiches mit einschichtigen Röntgendetektoren bewertet. Abschnitt 6.4 fasst abschließend die wesentlichen Ergebnisse dieses Kapitels zusammen.

6.2 Modellierung von mehrschichtigen Röntgendetektoren

Um die Leistungsfähigkeit von mehrschichtigen Röntgendetektoren analysieren zu können, werden die in Kapitel 3 beschriebenen Modelle zur Simulation der Röntgensensitivität und der Detektiven Quanteneffizienz von einschichtigen Röntgendetektoren in den folgenden Abschnitten auf mehrschichtige Röntgendetektoren erweitert.

6.2.1 Röntgensensitivität von mehrschichtigen Röntgendetektoren

Bei dem betrachteten mehrschichtigen Röntgendetektor handelt es sich um K entlang der x -Achse übereinander angeordnete Detektor-Schichten (siehe Abbildung 6.1 (b)). Jede einzelne dieser Detektor-Schichten entspricht hierbei im Aufbau und in der Funktionsweise einem einschichtigen Röntgendetektor. Diese Tatsache ermöglicht es, das in Abschnitt 3.1 beschriebene Modell zur Simulation der Röntgensensitivität einschichtiger Röntgendetektoren auf die betrachteten mehrschichtigen Röntgendetektoren zu erweitern. Formal kann eine einzelne Detektor-Schicht des mehrschichtigen Röntgendetektors in Analogie zu einem einschichtigen Röntgendetektor behandelt werden. Der einzige für die Modellierung relevante Unterschied besteht in der Photonenfluenz, die auf die Detektor-Schicht trifft. Im Falle des mehrschichtigen Röntgendetektors nimmt die Photonenfluenz innerhalb des Detektors mit zunehmender Anzahl an durchquerten Detektor-Schichten ab. Die auf eine Detektor-Schicht des mehrschichtigen Detektors auftreffende Photonenfluenz hängt demnach von ihrer Position innerhalb des Detektors ab. Formal lässt sich die Photonenfluenz $\Phi_{0,k}$, die auf die k -te Absorberschicht des mehrschichtigen Röntgendetektors trifft, mithilfe eines Abschwächungsfaktors ζ_k und der ursprünglich auf den Detektor einfallenden Photonenfluenz Φ_0 beschreiben [93]:

$$\Phi_{0,k} = \zeta_k \Phi_0, \quad \text{mit} \quad \zeta_k = e^{-k\alpha_t d_t - (k-1)\alpha d - (k-1)\alpha_b d_b}. \quad (6.1)$$

Hierbei beschreibt α den linearen Schwächungskoeffizienten und d die Schichtdicke des Absorbers. Die linearen Schwächungskoeffizienten $\alpha_{t,b}$ und Schichtdicken $d_{t,b}$ der oberen und unteren Elektrode sind mithilfe der Indizes t (für engl. top) und b (für engl. bottom) gekennzeichnet. An diesem Punkt wird davon

ausgegangen, dass die einzelnen Detektor-Schichten auf dünnen Polymer-Substraten realisiert werden können, deren Einfluss auf die Photonenfluenz vernachlässigt werden kann. Auf der Basis der selben grundlegenden Modellannahmen (siehe Abschnitt 3.1.1) und unter Beachtung der veränderten Photonenfluenz $\Phi_{0,k}$, lässt sich die in Abschnitt 3.1 beschriebene Modellierung einschichtiger Röntgendetektoren auf eine einzelne Detektor-Schicht des mehrschichtigen Röntgendetektors übertragen. Die in der k -ten Detektor-Schicht induzierte Ladung Q_k lässt sich dann mithilfe der induzierten Ladung Q eines einschichtigen Röntgendetektors (siehe Gleichungen (3.12) und (3.13)) und dem Abschwächungsfaktor ζ_k (siehe Gleichung (6.1)) beschreiben [93]:

$$Q_k = \zeta_k Q. \quad (6.2)$$

Die gesamte induzierte Ladung Q_K eines mehrschichtigen Röntgendetektors, der aus K Detektor-Schichten besteht, ergibt sich dann als Summe über die induzierten Ladungen Q_k der einzelnen Detektor-Schichten [93]:

$$Q_K = \sum_{k=1}^K Q_k = \sum_{k=1}^K \zeta_k Q = Q e^{\alpha d + \alpha_b d_b} \sum_{k=1}^K r^k, \quad (6.3a)$$

$$= Q e^{\alpha d + \alpha_b d_b} \left(\sum_{k=0}^K r^k - 1 \right), \quad (6.3b)$$

mit $r = e^{-(\alpha_1 d_t + \alpha d + \alpha_b d_b)}$. Bei der Summe in Gleichung (6.3b) handelt es sich um eine Partialsumme einer geometrischen Reihe, welche sich analytisch bestimmen lässt:

$$\sum_{k=0}^K r^k = \frac{1 - r^{K+1}}{1 - r} \quad \text{falls } r \neq 1. \quad (6.4)$$

Für die betrachtete Partialsumme einer geometrischen Reihe ist der Fall $r = 1$ äquivalent zu $-(\alpha_1 d_t + \alpha d + \alpha_b d_b) = 0$. Der Fall $r = 1$ ist daher für die Modellierung von mehrschichtigen Röntgendetektoren nicht relevant. Mithilfe der Gleichungen (6.3b), (6.4), (3.12) und (3.13) ergibt sich die gesamte induzierte Ladung Q_K dann zu [93]:

$$Q_K = Q e^{\alpha d + \alpha_b d_b} \frac{1 - r^K}{r - 1}, \quad (6.5a)$$

$$= \mp e A_{\text{el}} \Phi_0 \eta_x \eta_m \eta_{\text{cc}, \mp} \frac{e^{\alpha d + \alpha_b d_b} (1 - e^{-K(\alpha_1 d_t + \alpha d + \alpha_b d_b)})}{e^{\alpha_1 d_t + \alpha d + \alpha_b d_b} - 1}, \quad (6.5b)$$

$$= \mp e A_{\text{el}} \Phi_0 \underbrace{\frac{(e^{\alpha d + \alpha_b d_b} - e^{\alpha_b d_b}) (1 - e^{-K(\alpha_1 d_t + \alpha d + \alpha_b d_b)})}{e^{\alpha_1 d_t + \alpha d + \alpha_b d_b} - 1}}_{\eta_{\text{x,ML}}} \eta_m \eta_{\text{cc}, \mp}, \quad (6.5c)$$

$$= \mp e A_{\text{el}} \Phi_0 \eta_{\text{x,ML}} \eta_m \eta_{\text{cc}, \mp}. \quad (6.5d)$$

Das Vorzeichen in den Gleichungen (6.5) ergibt sich aus der Orientierung des elektrischen Feldes \mathbf{F} in negativer oder positiver x -Richtung (siehe Abschnitt 3.1.3).

Gemäß der Gleichung (2.21) kann die Röntgensensitivität S eines direkten Röntgendetektors mithilfe des Betrags der induzierten Ladung $|Q|$, der Energiedosis der einfallenden Röntgenstrahlung in Luft D_{air} und der bestrahlten Fläche A definiert werden: $S = |Q|/(D_{\text{air}}A)$. In Analogie zur Modellierung einschichtiger Röntgendetektoren (siehe Abschnitt 3.1.4) kann der Betrag der induzierten Ladung $|Q|$ des betrachteten mehrschichtigen Röntgendetektors mithilfe der Gleichung (6.5d) modelliert werden, und die bestrahlte Fläche ist A_{el} (siehe Abbildung 6.1 (b)). Unter Verwendung der Definition der Energiedosis der einfallenden Röntgenstrahlung in Luft D_{air} in Gleichung (2.18) (siehe Abschnitt 3.1.4 für eine Beschreibung der zugrundeliegenden Annahmen) ergibt sich die theoretische Röntgensensitivität $S_{\text{theo,ML}}$ mehrschichtiger Röntgendetektoren zu [93]:

$$S_{\text{theo,ML}} = S_0 \eta_{\text{x,ML}} \eta_{\text{m}} \eta_{\text{cc}} , \quad (6.6)$$

mit

$$\eta_{\text{x,ML}} = \frac{(e^{\alpha d + \alpha_{\text{b}} d_{\text{b}}} - e^{\alpha_{\text{b}} d_{\text{b}}}) (1 - e^{-K(\alpha_1 d_1 + \alpha d + \alpha_{\text{b}} d_{\text{b}})})}{e^{\alpha_1 d_1 + \alpha d + \alpha_{\text{b}} d_{\text{b}}} - 1} . \quad (6.7)$$

Die Größen S_0 , η_{m} und η_{cc} in Gleichung (6.6) entsprechen den Größen aus den Gleichungen (3.15).

6.2.2 Röntgensensitivität von mehrschichtigen Röntgendetektoren mit quasi-direkten Absorbern

Die in Abschnitt 6.2.1 beschriebene Modellierung der Röntgensensitivität mehrschichtiger Röntgendetektoren kann auf mehrschichtige Röntgendetektoren mit quasi-direkten Absorbern (siehe Abschnitt 2.3.3) erweitert werden. Die im Rahmen dieser Arbeit betrachteten quasi-direkten Absorber bestehen aus einem Absorber-Material, in welchem sich zusätzlich homogen verteilt Szintillator-Teilchen befinden. Das umgebende Absorber-Material besitzt eine hohe Absorptionseffizienz für optische Photonen und eine vernachlässigbare Wechselwirkung mit hochenergetischen Röntgenphotonen. Die Absorption der einfallenden hochenergetischen Röntgenphotonen innerhalb des quasi-direkten Absorbers findet daher ausschließlich im Szintillator-Material statt. Als Folge der Absorption der hochenergetischen Röntgenphotonen emittieren die Szintillator-Teilchen optische Photonen, die anschließend vom umgebenden Absorber-Material absorbiert und in Elektron-Loch-Paare umgewandelt werden können. Die Bewegung dieser Ladungsträger innerhalb des quasi-direkten Absorbers führt dann in Analogie zu direkten Absorbern zu einer Induktion eines messbaren Signals.

Unter der Annahme einer verlustfreien Umwandlung der von den Szintillator-Teilchen emittierten optischen Photonen in Elektronen-Loch-Paare durch das umgebende Absorber-Material lässt sich die Elektron-Loch-Paar Erzeugungsenergie $W_{\pm} \rightarrow 1/\gamma$ mithilfe der Umwandlungseffizienz γ des Szintillator-Materials modellieren. Unter Vernachlässigung der räumlichen Verschiebung zwischen der Absorption der Röntgenphotonen in den Szintillator-Teilchen und der Erzeugung der Elektron-Loch-Paare lassen sich die Randbedingungen der erzeugten Ladungsträger im quasi-direkten Absorber in Analogie zu einem direkten Absorber beschreiben. Der einzige relevante Unterschied besteht dann in der effektiven Wegstrecke

der Röntgenphotonen im Szintillator-Material. Mithilfe des Volumenanteils f der Szintillator-Teilchen im quasi-direkten Absorber ergibt sich die effektive Wegstrecke in einer Schicht des mehrschichtigen Röntgendetektors zu df . Hierbei ist d die Schichtdicke des quasi-direkten Absorbers. Unter der Annahme einer gleichen Ladungsträgerdynamik in direkten und quasi-direkten Absorbern lässt sich die theoretische Röntgensensitivität $S_{\text{theo,ML}}$ mehrschichtiger Röntgendetektoren mit quasi-direkten Absorbern dann mithilfe von Gleichung (6.6) und abgewandelten Funktionsargumenten modellieren:

$$S_{\text{theo,ML}}(W_{\pm}, \alpha d) \rightarrow S_{\text{theo,ML}}(1/\gamma, \alpha df) . \quad (6.8)$$

Es sei darauf hingewiesen, dass sich die Materialparameter quasi-direkter Absorber aus den Materialparametern des Szintillator-Materials und des umgebenden Absorber-Materials zusammensetzen. Die Wechselwirkung der einfallenden Röntgenstrahlung mit einem quasi-direkten Absorber hängt beispielsweise von dem Wechselwirkungskoeffizienten α und der Umwandlungseffizienz γ des Szintillator-Materials ab, wohingegen die Ladungsträgerdynamik durch die Materialparameter des umgebenden Absorber-Materials bestimmt wird.

6.2.3 Detektive Quanteneffizienz von mehrschichtigen Röntgendetektoren

Die in Abschnitt 3.2 beschriebene Modellierung der Detektiven Quanteneffizienz einschichtiger Röntgendetektoren basiert auf einem vierstufigen linearen System (siehe Abbildung 3.4). Hierbei basieren die Modell-Stufen 1-3 auf der Modellierung der Röntgensensitivität einschichtiger Röntgendetektoren und die Modell-Stufe 4 repräsentiert eine Rausch-Additions-Stufe. Gemäß der Erweiterung der Modellierung der Röntgensensitivität auf mehrschichtige Röntgendetektoren (siehe Abschnitt 6.2.1) kann die Signalausbreitung in mehrschichtigen Röntgendetektoren in Analogie zu einschichtigen Röntgendetektoren als eine Verkettung der Röntgenabsorption, der Konversion in Ladungsträger und der Ladungssammlung beschrieben werden. Unter Beachtung der Röntgenabsorptionseffizienz $\eta_{\text{x,ML}}$ (siehe Abschnitt 6.2.1) und der elektronischen Rauschleistung $\Sigma_{\text{el,ML}}$ mehrschichtiger Röntgendetektoren kann daher die Signal- und Rauschenausbreitung von mehrschichtigen Röntgendetektoren mithilfe des vierstufigen linearen Systems aus Abschnitt 3.2 modelliert werden. Infolgedessen lässt sich die Detektive Quanteneffizienz $\text{DQE}_{\text{ML}}(0)$ mehrschichtiger Röntgendetektoren bei einer Ortsfrequenz $u = 0$ mithilfe von Gleichung (3.23) wie folgt modellieren [93]:

$$\text{DQE}_{\text{ML}}(0) = \frac{\eta_{\text{x,ML}} \eta_{\text{m}} \eta_{\text{cc}}}{1 + \eta_{\text{m}} \eta_{\text{cc}} + \left(\frac{\Sigma_{\text{el,ML}}}{\Phi_0} \right) \frac{1}{\eta_{\text{x,ML}} \eta_{\text{m}} \eta_{\text{cc}}}} . \quad (6.9)$$

Die elektronische Rauschleistung, die beim Auslesen einer einzelnen Detektor-Schicht des mehrschichtigen Röntgendetektors auftritt, lässt sich in Analogie zu einem einschichtigen Röntgendetektor gemäß Gleichung (3.24) mithilfe des Dunkelstroms I_{d} , der Integrationszeit t_{int} , der Fläche der Elektroden A_{el} der Detektor-Schicht sowie der Elementarladung e modellieren (siehe Abschnitt 3.2.3 für die zugrundeliegenden Annahmen). Unter der Annahme, dass die Größen I_{d} , t_{int} und A_{el} konstant für alle Detektor-Schichten

sind, ergibt sich die elektronische Rauschleistung $\Sigma_{\text{el,ML}}$ eines mehrschichtigen Röntgendetektors, der aus K Detektor-Schichten besteht, mithilfe von Gleichung (3.24) zu:

$$\Sigma_{\text{el,ML}} = \frac{I_d K t_{\text{int}}}{A_{\text{el}} e} . \quad (6.10)$$

In Analogie zur Modellierung einschichtiger Röntgendetektoren in Abschnitt 3.2.3 ergibt sich das Verhältnis aus der elektronischen Rauschleistung $\Sigma_{\text{el,ML}}$ und der mittleren Photonenfluenz $\bar{\Phi}_0$ der einfallenden Röntgenphotonen in Gleichung (6.9) mithilfe von Gleichung (6.10) zu (siehe Abschnitt 3.2.3 für die zugrundeliegenden Annahmen) [93]:

$$\frac{\Sigma_{\text{el,ML}}}{\bar{\Phi}_0} = \frac{I_d K}{A_{\text{el}} e \dot{\Phi}_0} = \frac{J_d K}{e \dot{\Phi}_0} . \quad (6.11)$$

Hierbei ist $\dot{\Phi}_0$ die Photonenfluenzrate der einfallenden Röntgenstrahlung und $J_d = I_d/A_{\text{el}}$ ist die Dunkelstromdichte einer Detektor-Schicht des mehrschichtigen Röntgendetektors.

6.3 Simulation und Design von mehrschichtigen Röntgendetektoren

Zwei wesentliche Größen zur Beschreibung der Leistungsfähigkeit von Röntgendetektoren sind die Röntgensensitivität S (siehe Abschnitt 2.2.2.1) und die Detektive Quanteneffizienz DQE (siehe Abschnitt 2.2.2.3). Auf der Grundlage von den in Abschnitt 6.2 beschriebenen Erweiterungen der Simulationsmodelle werden in den folgenden Abschnitten die Röntgensensitivität $S_{\text{theo,ML}}$ und die Detektive Quanteneffizienz $\text{DQE}_{\text{ML}}(0)$ von mehrschichtigen Röntgendetektoren untersucht. Hierfür werden beide Größen für unterschiedliche Design- und Bestrahlungsparameter simuliert und analysiert, Designvorgaben werden entwickelt, und die theoretische Leistungsfähigkeit wird mit einschichtigen Röntgendetektoren verglichen.

6.3.1 Parameter für die Simulation von mehrschichtigen Röntgendetektoren

Der grundlegende Aufbau, der für die Simulation von mehrschichtigen Röntgendetektoren in diesem Kapitel verwendet wird, ist in Abbildung 6.1 (b) dargestellt. Entsprechend der Untersuchungen einschichtiger Röntgendetektoren in Kapitel 5 wird die Leistungsfähigkeit mehrschichtiger Röntgendetektoren in diesem Kapitel für den Fall einer Bestrahlung mit monoenergetischer Röntgenstrahlung mit Photonen der Energie E und einer Photonenfluenzrate $\dot{\Phi}_0$ untersucht. Die Parameter für die Simulation von mehrschichtigen Röntgendetektoren lassen sich in Analogie zu den Parametern einschichtiger Röntgendetektoren (siehe

Abschnitt 5.2) in Designparameter des Detektors, Materialparameter des Absorber-Materials und Bestrahlungsparameter unterteilen.

Im Hinblick auf die Designparameter mehrschichtiger Röntgendetektoren beschränken sich die Untersuchungen in diesem Kapitel auf das verwendete Absorber-Material, die Schichtdicke d der einzelnen Absorber und die Anzahl K der Detektor-Schichten. Das elektrische Feld F zwischen den Elektroden wird nicht variiert. Durch das Übereinanderstapeln mehrerer Detektor-Schichten besitzen mehrschichtige Röntgendetektoren das Potential einer hohen Leistungsfähigkeit, ohne dabei auf übermäßig dicke Absorber angewiesen zu sein. Aufgrund der Tatsache, dass bei der Realisierung mehrschichtiger Röntgendetektoren mehrere Detektor-Schichten fabriziert werden müssen, erfordert eine optimale Ausschöpfung dieses Potentials ein Absorber-Material, das sich kosteneffizient und vorzugsweise über große Flächen herstellen lässt. Um die Wechselwirkung der Röntgenphotonen mit den inaktiven Substraten der einzelnen Detektor-Schichten zu minimieren, ist es überdies essenziell, ein Substrat-Material mit geringer Wechselwirkung und möglichst dünner Schichtdicke zu wählen. Vorausgesetzt, die Detektor-Schichten können bei niedrigen Temperaturen realisiert werden, kommen hierfür insbesondere dünne Polymer-Substrate in Betracht. Im Rahmen dieser Arbeit werden quasi-direkte Absorber, die sich aus Szintillator-Teilchen auf der Basis von Terbium-dotiertem Gadoliniumoxysulfid (GOS:Tb) und einer organischen Bulk-Heterojunction bestehend aus Poly(3-hexylthiophen-2,5-diyl) (P3HT) und Phenyl- C_{61} Buttersäuremethylester (PCBM) zusammensetzen (siehe Abschnitt 2.3.3), und direkte Absorber bestehend aus polykristallinem $MAPbI_3$ (p- $MAPbI_3$) (MA, kurz für Methylammonium) (siehe Abschnitt 2.3.2) als potentielle Absorber-Materialien für mehrschichtige Röntgendetektoren untersucht. Das quasi-direkte Absorber-Material wird im Folgenden als P3HT:PCBM:GOS:Tb bezeichnet. Mit der Dichte ρ , der Elektron-Loch-Paar Erzeugungsenergie W_{\pm} , der Umwandlungseffizienz γ und der Beweglichkeit-Lebensdauer-Produkte $\mu_{e,h}\tau_{e,h}$ von Elektronen und Löchern sind die wesentlichen Materialparameter der Absorber-Materialien, die für die Simulationen in diesem Kapitel verwendet werden, in den Tabellen 5.1 und 6.1 zusammengefasst. Es sei darauf hingewiesen, dass im Falle quasi-direkter Absorber die Simulationen auf der Umwandlungseffizienz γ anstatt auf der Elektron-Loch-Paar Erzeugungsenergie W_{\pm} basieren (siehe Abschnitt 6.2.2). Darüber hinaus wird für die organische Bulk-Heterojunction P3HT:PCBM ein näherungsweise gleiches Beweglichkeit-Lebensdauer-Produkt $\mu_e\tau_e \approx \mu_h\tau_h$ für Elektronen und Löcher angenommen. Folglich wird in dieser Arbeit hinsichtlich des Beweglichkeit-Lebensdauer-Produkts $\mu\tau$ von P3HT:PCBM nicht zwischen Elektronen und Löchern unterschieden, und in den Simulationen wird sowohl für Elektronen als auch für Löcher der gleiche Wert verwendet. Im Falle von P3HT:PCBM:GOS:Tb basieren die Simulationen überdies auf dem optimalen Volumenanteil $f = 0.67$ [38] der Szintillator-Teilchen im quasi-direkten Absorber (siehe Abschnitt 6.2.2). Beide Absorber-Materialien können lösungsbasiert abgeschieden werden und ermöglichen daher eine kosteneffiziente Realisierung auf großflächigen dünnen Polymer-Substraten bei niedrigen Temperaturen. Die Untersuchungen in diesem Kapitel beschränken sich auf Schichtdicken d im Intervall $10^{-8} \text{ m} \leq d \leq 10^{-4} \text{ m}$. Die Auswahl der Intervallgrenzen orientiert sich hierbei an den vergleichsweise geringen Schichtdicken d , die üblicherweise mithilfe einer lösungsbasierten Abscheidung hergestellt werden können. Im Hinblick auf die Anzahl K der Detektor-Schichten werden Werte im Intervall $1 \leq K \leq 1000$ als realisierbar betrachtet und untersucht. In Anlehnung an den Detektor-Aufbau in [38] werden die Simulationen in diesem Kapitel für obere Elektroden bestehend aus Aluminium und

Tabelle 6.1: Materialparameter quasi-direkter Absorber. Auflistung der Dichte ρ , der Umwandlungseffizienz γ und des Beweglichkeit-Lebensdauer-Produkts $\mu\tau$, die im Rahmen dieser Arbeit für die Simulation von Röntgendetektoren mit quasi-direkten Absorbern verwendet werden. Die in Betracht gezogenen quasi-direkten Absorber setzen sich aus Szintillator-Teilchen auf der Basis von Terbium-dotiertem Gadoliniumoxysulfid (GOS:Tb) und einer organischen Bulk-Heterojunction bestehend aus Poly(3-hexylthiophen-2,5-diyl) (P3HT) und Phenyl-C₆₁Buttersäuremethylester (PCBM) zusammen. Entnommen aus Mescher and Lemmer [93] und angepasst.

	ρ (g cm ⁻³)	γ (eV ⁻¹)	$\mu\tau$ (cm ² V ⁻¹)
GOS:Tb	7.34 [23, Kapitel 4]	0.06 [23, Kapitel 4]	
P3HT:PCBM			1.8×10^{-8a}

^a an die Röntgensensitivität in [38] angepasst

untere Elektroden auf der Basis von Indiumzinnoxid (ITO) mit einer Schichtdicke von $d_t = d_b = 100$ nm durchgeführt (siehe Abbildung 6.1 (b)). Die Wechselwirkungskoeffizienten der unterschiedlichen Materialien, die für die Simulationen in diesem Kapitel benötigt werden, basieren auf den in Abschnitt 2.1.4.2 beschriebenen Zusammenhängen.

Entsprechend der Untersuchungen einschichtiger Röntgendetektoren in Kapitel 5 werden die Simulationen mehrschichtiger Röntgendetektoren in diesem Kapitel ebenfalls für drei Photonenenergien $E \in \{20 \text{ keV}, 60 \text{ keV}, 511 \text{ keV}\}$ und für zwei Photonenflussraten $\dot{\Phi}_{0,\text{high}} = 10^8 \text{ mm}^{-2} \text{ s}^{-1}$ und $\dot{\Phi}_{0,\text{low}} = 10^5 \text{ mm}^{-2} \text{ s}^{-1}$ durchgeführt (siehe Abschnitt 5.2 für die zugrundeliegenden Auswahlkriterien).

6.3.2 Optimierung der Röntgensensitivität

Eine grundlegende Fragestellung im Hinblick auf die Bewertung der Leistungsfähigkeit mehrschichtiger Röntgendetektoren ist, welches der in Betracht gezogenen Absorber-Materialien sich am besten für eine Realisierung eignet. Zu diesem Zweck wird im folgenden Abschnitt zunächst der Einfluss des Absorber-Materials auf die simulierte Röntgensensitivität $S_{\text{theo,ML}}$ untersucht. Diese Untersuchungen beinhalten eine Optimierung der theoretischen Röntgensensitivität $S_{\text{theo,ML}}$, basierend auf einer Variation der Absorber-Schichtdicke d und der Anzahl K der Detektor-Schichten. Anschließend wird bewertet, welchen Einfluss die Photonenenergie E auf die optimalen Designparameter und die zugehörige theoretische Röntgensensitivität $S_{\text{theo,ML}}$ hat. Im Rahmen der folgenden Untersuchungen wird ein konstanter Betrag des elektrischen Feldes F von $F = 0.25 \text{ V } \mu\text{m}^{-1}$ angenommen.

6.3.2.1 Einfluss des Absorber-Materials

Die theoretische Röntgensensitivität $S_{\text{theo,ML}}$ mehrschichtiger Röntgendetektoren, die mit quasi-direkten Absorbern auf der Basis von P3HT:PCBM:GOS:Tb und direkten Absorbern bestehend aus p-MAPbI₃ erreicht werden kann, ist in Abbildung 6.2 in Abhängigkeit der Absorber-Schichtdicke d und der Anzahl

K der Detektor-Schichten dargestellt. Die Simulationsergebnisse sind hierbei im Falle von monoenergetischen Röntgenphotonen der Energie $E = 60 \text{ keV}$ gezeigt und basieren im Falle von p-MAPbI₃ auf einem hohen Beweglichkeit-Lebensdauer-Produkt $\mu\tau_{\text{high}}$.

Die simulierte Röntgensensitivität $S_{\text{theo,ML}}$ in Abbildung 6.2 weist eine starke Abhängigkeit von der Schichtdicke d der einzelnen Absorber auf. In Analogie zu den Simulationsergebnissen einschichtiger Röntgendetektoren (siehe Abschnitt 5.3) kann diese Abhängigkeit durch den Einfluss der Röntgenabsorptionseffizienz $\eta_{x,\text{ML}}$ und der Ladungssammeleffizienz η_{cc} erklärt werden. Für eine feste Anzahl K der Detektor-Schichten steigt mit zunehmender Schichtdicke d einerseits die Effizienz, mit der Röntgenphotonen in den Absorber-Schichten absorbiert werden können. Andererseits reduzieren vergrößerte Schichtdicken d die Ladungssammeleffizienz in den einzelnen Absorber-Schichten. Folglich existiert eine optimale Schichtdicke d , welche das Produkt aus der Röntgenabsorptionseffizienz $\eta_{x,\text{ML}}$ und der Ladungssammeleffizienz η_{cc} und somit ebenfalls die theoretischen Röntgensensitivität $S_{\text{theo,ML}}$ maximiert. Für einen konstanten Betrag des elektrischen Feldes F hängt die Schichtdicke d , ab welcher die Ladungssammeleffizienz η_{cc} signifikant abfällt, im Wesentlichen von den Ladungstransporteigenschaften des Absorber-Materials ab. Die optimale Schichtdicke d , welche die theoretische Röntgensensitivität $S_{\text{theo,ML}}$

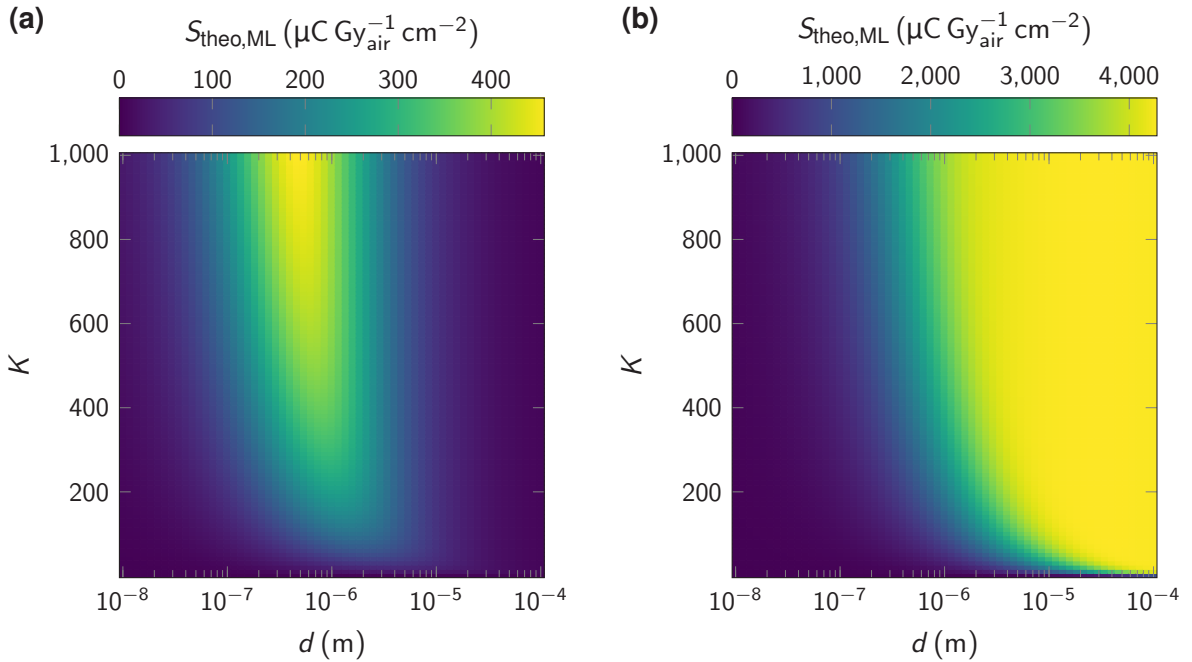


Abbildung 6.2: Simulierte Röntgensensitivität mehrschichtiger Röntgendetektoren im Falle von quasi-direkten und direkten Absorbern. Theoretische Röntgensensitivität $S_{\text{theo,ML}}$ mehrschichtiger Röntgendetektoren in Abhängigkeit der Schichtdicke d der einzelnen Absorber und der Anzahl K der Detektor-Schichten im Falle von monoenergetischen Röntgenphotonen der Energie $E = 60 \text{ keV}$. **(a)** Simulationsergebnis für quasi-direkte Absorber, die sich aus Szintillator-Teilchen auf der Basis von Terbium-dotiertem Gadoliniumoxysulfid (GOS:Tb) und einer organischen Bulk-Heterojunction bestehend aus Poly(3-hexylthiophen-2,5-diyl) (P3HT) und Phenyl-C₆₁Buttersäuremethylester (PCBM) zusammensetzen (P3HT:PCBM:GOS:Tb). **(b)** Simulationsergebnis für direkte Absorber bestehend aus polykristallinem MAPbI₃ (p-MAPbI₃) (MA, kurz für Methylammonium) mit einem hohen Beweglichkeit-Lebensdauer-Produkt $\mu\tau_{\text{high}}$. Reproduziert in Anlehnung an Mescher and Lemmer [93].

im untersuchten Bereich maximiert, wird daher maßgeblich durch das Beweglichkeit-Lebensdauer-Produkt $\mu\tau$ des Absorber-Materials bestimmt. Folglich ergeben sich im Falle von P3HT:PCBM:GOS:Tb mit einem vergleichsweise geringen Beweglichkeit-Lebensdauer-Produkt $\mu\tau = 1.8 \times 10^{-8} \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1}$ von P3HT:PCBM (siehe Tabelle 6.1) relativ geringe optimale Schichtdicken d (siehe Abbildung 6.2 (a)). Das bedeutend größere Beweglichkeit-Lebensdauer-Produkt $\mu\tau_{\text{high}} = 10^{-4} \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1}$ von p-MAPbI₃ (siehe Tabelle 5.1) ermöglicht hingegen wesentlich größere optimale Schichtdicken d , die bis zur Grenze des Intervalls $10^{-8} \text{ m} \leq d \leq 10^{-4} \text{ m}$ der untersuchten Schichtdicken d reichen (siehe Abbildung 6.2 (b)).

Neben der Abhängigkeit von der Schichtdicke d zeigt die simulierte Röntgensensitivität $S_{\text{theo,ML}}$ in Abbildung 6.2 ebenfalls eine starke Abhängigkeit von der Anzahl K der Detektor-Schichten. Eine Erhöhung der Anzahl K der Detektor-Schichten verbessert die Effizienz, mit der Röntgenphotonen absorbiert werden können. Im Falle von P3HT:PCBM:GOS:Tb verschiebt sich dadurch mit zunehmendem K die optimale Schichtdicke d zu kleineren Werten. Die verringerte Röntgenabsorption in den einzelnen Detektor-Schichten wird hierbei durch die erhöhte Anzahl K an Absorber-Schichten kompensiert. Die verbesserte Ladungssammeleffizienz bei den geringeren optimalen Schichtdicken d ermöglicht wiederum höhere Werte für die theoretische Röntgensensitivität $S_{\text{theo,ML}}$. Im Falle von p-MAPbI₃ vergrößert sich hingegen mit zunehmendem K der Bereich der Schichtdicken d , die eine nahezu optimale theoretische Röntgensensitivität $S_{\text{theo,ML}}$ ermöglichen.

Unter dem Gesichtspunkt einer maximalen theoretischen Röntgensensitivität $S_{\text{theo,ML}}$ ergeben sich in Abhängigkeit vom verwendeten Absorber-Material unterschiedliche Designvorgaben. Im Falle von P3HT:PCBM:GOS:Tb lassen sich optimale theoretische Röntgensensitivitäten $S_{\text{theo,ML}}$ mithilfe einer hohen Anzahl K der Detektor-Schichten erreichen. Die optimale Schichtdicke d ist dabei von der Anzahl K der Detektor-Schichten abhängig (siehe Abbildung 6.2 (a)). Für den Fall von p-MAPbI₃ ergeben sich hingegen die Designvorgaben, zusätzlich zu einer hohen Anzahl K der Detektor-Schichten sehr große Schichtdicken d auszuwählen. Im Falle von p-MAPbI₃ ergibt sich zusätzlich ein sehr großer Bereich, in dem mit vom Optimum abweichenden Schichtdicken d und Anzahlen K der Detektor-Schichten eine nahezu optimale theoretische Röntgensensitivität $S_{\text{theo,ML}}$ erreicht werden kann (siehe Abbildung 6.2 (b)). Die theoretische Röntgensensitivität $S_{\text{theo,ML}}$, die mit mehrschichtigen Röntgendetektoren und Absorbern bestehende aus p-MAPbI₃ erreicht werden kann, ist bedeutend größer als mit Absorbern bestehend aus P3HT:PCBM:GOS:Tb (siehe Abbildung 6.2). Dieser Sachverhalt hängt zum Teil mit den unterschiedlichen Ladungstransporteigenschaften von P3HT:PCBM und p-MAPbI₃ zusammen. Unabhängig von der Anzahl K der Detektor-Schichten ermöglicht das überlegene Beweglichkeit-Lebensdauer-Produkt $\mu\tau$ von p-MAPbI₃ sehr große optimale Schichtdicken d , die bis hin zum Rand des untersuchten Schichtdicken-Intervalls reichen. Bedingt durch ein unterlegendes Beweglichkeit-Lebensdauer-Produkt $\mu\tau$ von P3HT:PCBM liegen die optimalen Schichtdicken d im Falle von P3HT:PCBM:GOS:Tb bei wesentlich geringeren Schichtdicken d . Je größer die optimale Schichtdicke d gewählt werden kann, desto effizienter können bei gleicher Anzahl K der Detektor-Schichten Röntgenphotonen in den Absorber-Schichten des Röntgendetektors absorbiert werden. Eine verbesserte Röntgenabsorptionseffizienz $\eta_{\text{x,ML}}$ wirkt sich wiederum positiv auf die simulierte Röntgensensitivität $S_{\text{theo,ML}}$ aus und erklärt somit zum Teil die bedeutenden Unterschiede in der simulierten Leistungsfähigkeit der beiden untersuchten Absorber-Materialien. Unterschiedliche Ladungssammeleffizienzen η_{cc} bei der jeweiligen optimalen Schichtdicke

d vergrößern darüber hinaus den Unterschied in der Leistungsfähigkeit. Dieser Effekt wird zusätzlich durch eine höhere Konversionseffizienz η_m von p-MAPbI₃ verglichen mit P3HT:PCBM:GOS:Tb verstärkt. Die Unterschiede in der Konversionseffizienz η_m der beiden Absorber-Materialien werden hierbei im Wesentlichen durch den Kehrwert der Elektron-Loch-Paar Erzeugungsenergie $1/W_{\pm} = 0.2 \text{ eV}^{-1}$ von p-MAPbI₃ (siehe Tabelle 5.1) und der Umwandlungseffizienz $\gamma = 0.06 \text{ eV}^{-1}$ von GOS:Tb (siehe Tabelle 6.1) hervorgerufen (siehe Gleichung (3.15c) und Abschnitt 6.2.2).

Die Ladungstransporteigenschaften eines Absorber-Materials hängen von unterschiedlichen Einflussfaktoren ab. Im Hinblick auf die Herstellung der Absorber-Schichten können insbesondere die Vielzahl an Prozessparametern die Qualität und damit die Eigenschaften des Absorbers beeinflussen. An dieser Stelle ist es daher von besonderem Interesse zu bewerten, wie sich verschlechterte Materialeigenschaften auf die Leistungsfähigkeit der Röntgendetektoren auswirken. Zu diesem Zweck zeigt Abbildung 6.3 die theoretische Röntgensensitivität $S_{\text{theo,ML}}$ mehrschichtiger Röntgendetektoren, die mit direkten Absorbern bestehend aus p-MAPbI₃ mit verschlechterten Ladungstransporteigenschaften in Abhängigkeit der Schichtdicke d der einzelnen Absorber und der Anzahl K der Detektor-Schichten erreicht werden kann. In Analogie zu Abbildung 6.2 zeigt Abbildung 6.3 die Simulationsergebnisse für den Fall von monoenergetischen Röntgenphotonen der Energie $E = 60 \text{ keV}$. Die verschlechterten Ladungstransporteigenschaften von p-MAPbI₃ werden hierbei durch ein um zwei Größenordnungen reduziertes Beweglichkeit-Lebensdauer-Produkt $\mu\tau_{\text{low}} = 10^{-6} \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1}$ realisiert (siehe Tabelle 5.1).

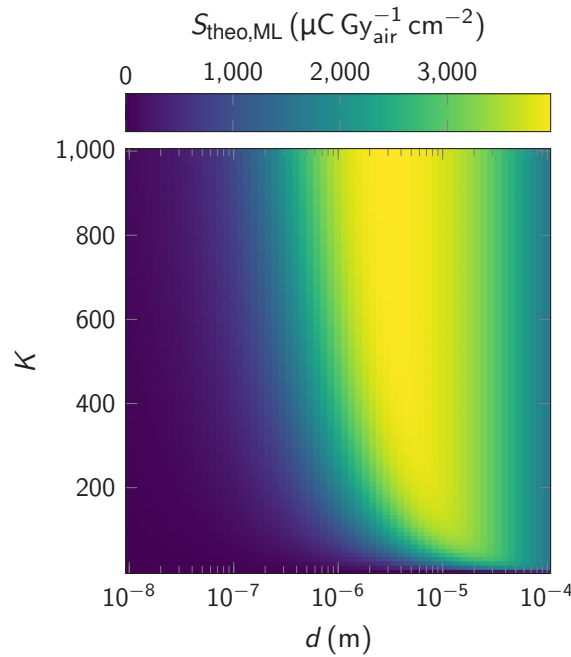


Abbildung 6.3: Simulierte Röntgensensitivität mehrschichtiger Röntgendetektoren im Falle von direkten Absorbern bestehend aus polykristallinem MAPbI₃ mit verschlechterten Ladungstransporteigenschaften. Theoretische Röntgensensitivität $S_{\text{theo,ML}}$ mehrschichtiger Röntgendetektoren in Abhängigkeit der Schichtdicke d der einzelnen Absorber und der Anzahl K der Detektor-Schichten im Falle von monoenergetischen Röntgenphotonen der Energie $E = 60 \text{ keV}$ und direkten Absorbern bestehend aus polykristallinem MAPbI₃ (p-MAPbI₃) (MA, kurz für Methylammonium) mit einem niedrigen Beweglichkeit-Lebensdauer-Produkt $\mu\tau_{\text{low}}$.

Verglichen mit den Ergebnissen in Abbildung 6.2 (b) bewirkt das reduzierte Beweglichkeit-Lebensdauer-Produkt von p-MAPbI₃ in Abbildung 6.3 eine Reduktion der optimalen Schichtdicken d und verringert somit die maximal erreichbare theoretische Röntgensensitivität $S_{\text{theo,ML}}$. Trotz der signifikanten Verschlechterung des Beweglichkeit-Lebensdauer-Produkts $\mu\tau$ um zwei Größenordnungen von $\mu\tau_{\text{high}} = 10^{-4} \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1}$ auf $\mu\tau_{\text{low}} = 10^{-6} \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1}$ fällt die Reduktion der erreichbaren theoretischen Röntgensensitivität $S_{\text{theo,ML}}$ gering aus. Verglichen mit den Simulationsergebnissen von P3HT:PCBM:GOS:Tb in Abbildung 6.2 (a) ermöglichen Absorber bestehend aus p-MAPbI₃ selbst mit den hier angenommenen bedeutend verschlechterten Ladungstransporteigenschaften immer noch wesentlich größere Werte für die theoretische Röntgensensitivität $S_{\text{theo,ML}}$.

Die Optimierung der theoretischen Röntgensensitivität $S_{\text{theo,ML}}$ mehrschichtiger Röntgendetektoren auf der Basis von quasi-direkten Absorbern bestehend aus P3HT:PCBM:GOS:Tb und direkten Absorbern auf der Basis von p-MAPbI₃ zeigt einen eindeutigen Leistungsvorteil von p-MAPbI₃ (siehe Abbildungen 6.2 und 6.3). Folglich eignet sich p-MAPbI₃ von den beiden untersuchten Materialien am besten für die Realisierung mehrschichtiger Röntgendetektoren, und die folgenden Untersuchungen beschränken sich auf Simulationen auf der Basis von p-MAPbI₃.

6.3.2.2 Einfluss der Photonenenergie

Die Energie der einfallenden Röntgenstrahlung hat einen erheblichen Einfluss auf die Schichtdicke eines Absorbers, die für eine effiziente Absorption der Röntgenphotonen benötigt wird. Um den Einfluss der Photonenenergie E auf die optimalen Designparameter mehrschichtiger Röntgendetektoren zu untersuchen, zeigt Abbildung 6.4 die theoretische Röntgensensitivität $S_{\text{theo,ML}}$ mehrschichtiger Röntgendetektoren, die mit Absorbern bestehend aus p-MAPbI₃ mit einem hohen Beweglichkeit-Lebensdauer-Produkt $\mu\tau_{\text{high}}$ im Falle niedriger und hoher Photonenenergien erreicht werden kann. Die Simulationsergebnisse sind hierbei in Abhängigkeit der Schichtdicke d der Absorber und der Anzahl K der Detektor-Schichten dargestellt und basieren auf monoenergetischen Röntgenphotonen der Energie $E = 20 \text{ keV}$ und $E = 511 \text{ keV}$. Verglichen mit den Simulationsergebnissen in Abbildung 6.2 (b) bei einer mittleren Photonenenergie $E = 60 \text{ keV}$ ergeben sich aus der theoretischen Röntgensensitivität $S_{\text{theo,ML}}$ in Abbildung 6.4 im Falle niedriger und hoher Photonenenergien ähnliche Designvorgaben für den optimalen Aufbau mehrschichtiger Röntgendetektoren. Bei allen drei untersuchten Energien E der Röntgenphotonen wird die optimale theoretische Röntgensensitivität $S_{\text{theo,ML}}$ für sehr große Schichtdicken d und sehr hohe Anzahlen K der Detektor-Schichten erreicht. Die Energie der Röntgenphotonen hat jedoch einen wesentlichen Einfluss darauf, ab welcher Schichtdicke d und ab welcher Anzahl K der Detektor-Schichten eine nahezu optimale theoretische Röntgensensitivität $S_{\text{theo,ML}}$ im untersuchten Parameterbereich erreicht werden kann. Im Falle einer niedrigen Photonenenergie von $E = 20 \text{ keV}$ reichen bedeutend geringere Schichtdicken d der Absorber und eine signifikant niedrigere Anzahl K der Detektor-Schichten aus, um die Röntgenstrahlung effizient zu absorbieren und somit eine hohe theoretische Röntgensensitivität $S_{\text{theo,ML}}$ zu gewährleisten (siehe Abbildung 6.4 (a)). Für den Fall einer hohen Photonenenergie von $E = 511 \text{ keV}$ ist der Bereich an Designparametern, die eine hohe Leistungsfähigkeit gewährleisten, stark verkleinert, und es werden

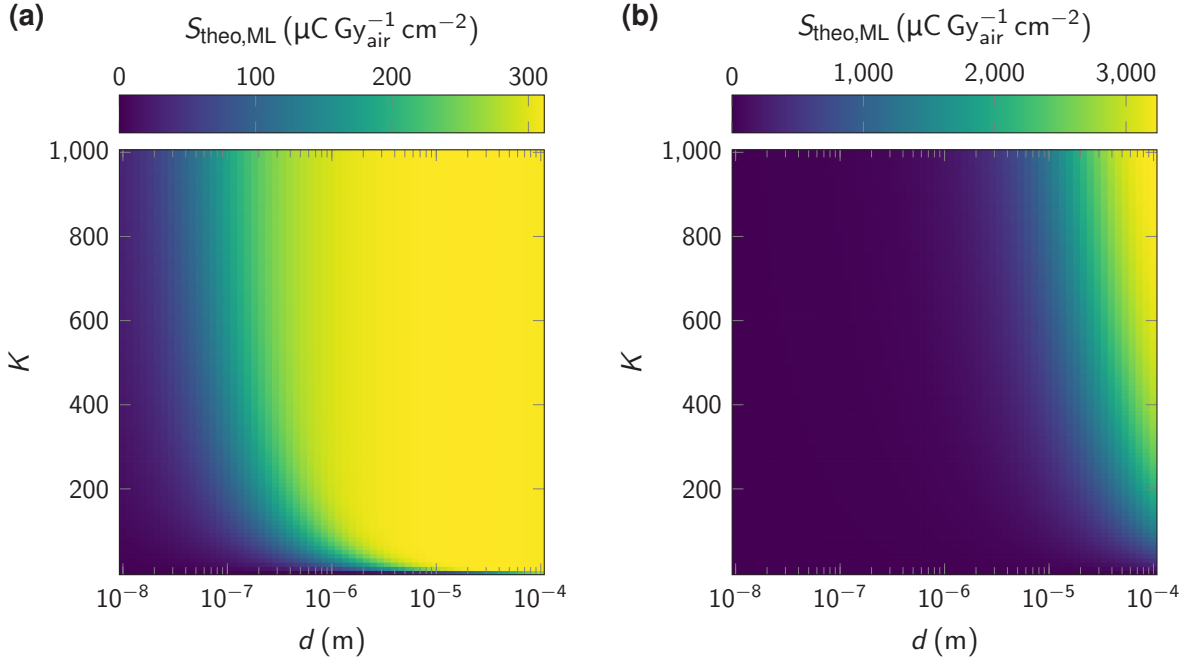


Abbildung 6.4: Simulierte Röntgensensitivität mehrschichtiger Röntgendetektoren im Falle von niedrigen und hohen Photonenenergien. Theoretische Röntgensensitivität $S_{\text{theo,ML}}$ mehrschichtiger Röntgendetektoren in Abhängigkeit der Schichtdicke d der einzelnen Absorber und der Anzahl K der Detektor-Schichten im Falle von direkten Absorbern bestehend aus polykristallinem MAPbI_3 (p-MAPbI₃) (MA, kurz für Methylammonium) mit einem hohen Beweglichkeit-Lebensdauer-Produkt $\mu\tau_{\text{high}}$. **(a)** Simulationsergebnis für monoenergetische Röntgenphotonen der Energie $E = 20$ keV. **(b)** Simulationsergebnis für monoenergetische Röntgenphotonen der Energie $E = 511$ keV.

Schichtdicken d der Absorber und Anzahlen K der Detektor-Schichten nahe der Grenzen der untersuchten Intervalle benötigt, um eine effiziente Röntgenabsorption und damit eine hohe theoretische Röntgensensitivität $S_{\text{theo,ML}}$ zu ermöglichen (siehe Abbildung 6.4 (b)). Die bedeutenden Unterschiede in der maximal erreichbaren theoretischen Röntgensensitivität $S_{\text{theo,ML}}$ für die drei untersuchten Photonenenergien in Abbildung 6.2 (b) und in Abbildung 6.4 ergeben sich aus der Energieabhängigkeit des Produkts aus der Normierung S_0 und der Konversionseffizienz η_m (siehe Gleichungen (6.6) und (3.15)).

6.3.3 Optimierung der Detektiven Quanteneffizienz

Eine weitere essenzielle Größe zur Bewertung der Leistungsfähigkeit mehrschichtiger Röntgendetektoren ist die Detektive Quanteneffizienz $\text{DQE}_{\text{ML}}(0)$. In Analogie zu den Optimierungen der theoretischen Röntgensensitivität $S_{\text{theo,ML}}$ in Abschnitt 6.3.2 wird in diesem Abschnitt die theoretische Detektive Quanteneffizienz $\text{DQE}_{\text{ML}}(0)$ mehrschichtiger Röntgendetektoren für unterschiedliche Designparameter untersucht. In diesem Zusammenhang wird analysiert, welchen Einfluss die Photonenflussrate $\dot{\Phi}_0$ und die Energie E der einfallenden Röntgenstrahlung auf die theoretische Detektive Quanteneffizienz $\text{DQE}_{\text{ML}}(0)$ haben. Im Rahmen der folgenden Untersuchungen wird ein konstanter Betrag des elektrischen Feldes F von $F = 0.25 \text{ V } \mu\text{m}^{-1}$ angenommen.

6.3.3.1 Einfluss der Photonenflussrate

Um den Einfluss der Photonenflussrate $\dot{\Phi}_0$ auf die Leistungsfähigkeit mehrschichtiger Röntgendetektoren bewerten zu können, zeigt Abbildung 6.5 die simulierte Detektive Quanteneffizienz $\text{DQE}_{\text{ML}}(0)$ mehrschichtiger Röntgendetektoren für den Fall einer hohen und einer niedrigen Photonenflussrate in Abhängigkeit der Schichtdicke d der Absorber und der Anzahl K der Detektor-Schichten. Die Simulationsergebnisse sind hierbei für Absorber bestehend aus p-MAPbI₃ mit einem hohen Beweglichkeit-Lebensdauer-Produkt $\mu\tau_{\text{high}}$, eine konstante Dunkelstromdichte $J_d = 3 \times 10^{-9} \text{ A mm}^{-2}$ [65] und monoenergetische Röntgenphotonen der Energie $E = 60 \text{ keV}$ gezeigt. Im Falle einer hohen Photonenflussrate $\dot{\Phi}_{0,\text{high}} = 10^8 \text{ mm}^{-2} \text{ s}^{-1}$ ergibt die Analyse der erreichbaren theoretischen Detektiven Quanteneffizienz $\text{DQE}_{\text{ML}}(0)$ ähnliche Designvorgaben wie die Optimierung der theoretischen Röntgensensitivität $S_{\text{theo,ML}}$ in Abbildung 6.2 (b) mit einer maximalen Leistungsfähigkeit für große Schichtdicken d der Absorber und einer hohen Anzahl K der Detektor-Schichten (siehe Abbildung 6.5 (a)). Im Falle einer niedrigen Photonenflussrate $\dot{\Phi}_{0,\text{low}} = 10^5 \text{ mm}^{-2} \text{ s}^{-1}$ zeigen die Simulationsergebnisse in Analogie zur

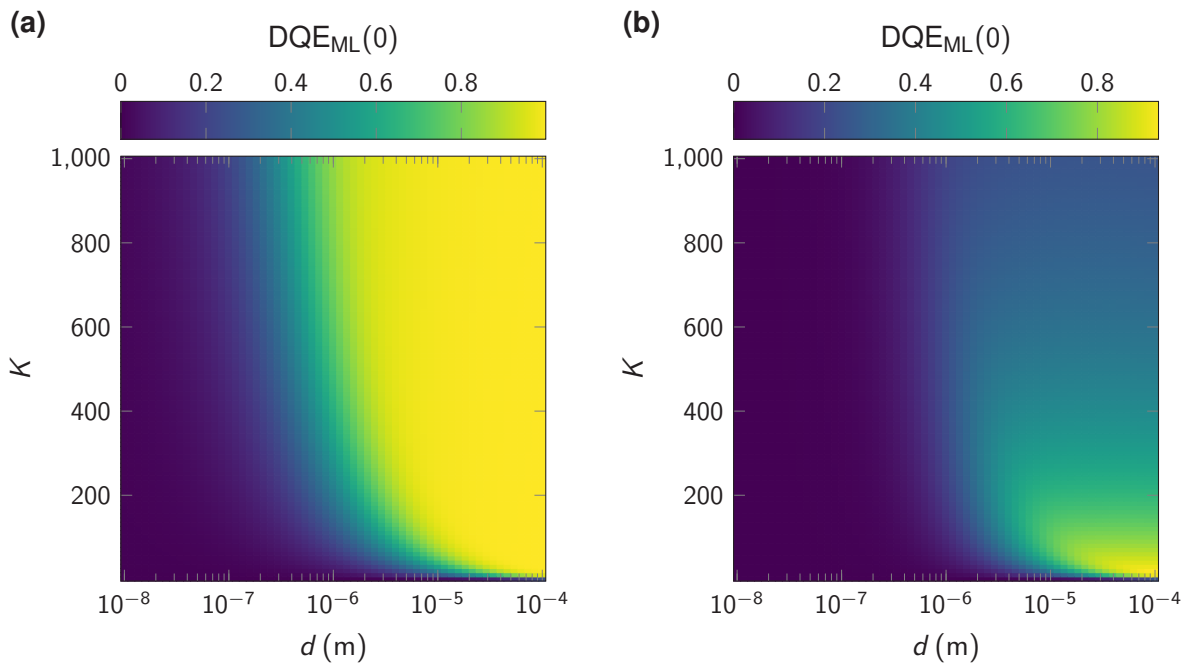


Abbildung 6.5: Simulierte Detektive Quanteneffizienz mehrschichtiger Röntgendetektoren im Falle von hohen und niedrigen Photonenflussraten. Theoretische Detektive Quanteneffizienz $\text{DQE}_{\text{ML}}(0)$ mehrschichtiger Röntgendetektoren in Abhängigkeit der Schichtdicke d der einzelnen Absorber und der Anzahl K der Detektor-Schichten im Falle von monoenergetischen Röntgenphotonen der Energie $E = 60 \text{ keV}$, direkten Absorbern bestehend aus polykristallinem MAPbI₃ (p-MAPbI₃) (MA, kurz für Methylammonium) mit einem hohen Beweglichkeit-Lebensdauer-Produkt $\mu\tau_{\text{high}}$ und einer konstanten Dunkelstromdichte $J_d = 3 \times 10^{-9} \text{ A mm}^{-2}$ [65] in einer Detektor-Schicht. **(a)** Simulationsergebnis für eine hohe Photonenflussrate $\dot{\Phi}_{0,\text{high}} = 10^8 \text{ mm}^{-2} \text{ s}^{-1}$. **(b)** Simulationsergebnis für eine niedrige Photonenflussrate $\dot{\Phi}_{0,\text{low}} = 10^5 \text{ mm}^{-2} \text{ s}^{-1}$. Reproduziert in Anlehnung an Mescher and Lemmer [93].

Untersuchung bei einer hohen Photonenflussrate eine maximale theoretische Detektive Quanteneffizienz $DQE_{ML}(0)$ bei großen Schichtdicken d der Absorber. Ein wesentlicher Unterschied in den Simulationsergebnissen besteht jedoch im Hinblick auf die Anzahl K der Detektor-Schichten. Gemäß der Gleichung (6.9) wirkt sich eine Erhöhung der Anzahl K der Detektor-Schichten durch eine Verbesserung der Röntgenabsorptionseffizienz $\eta_{x,ML}$ positiv auf die theoretische Detektive Quanteneffizienz $DQE_{ML}(0)$ aus. Darüber hinaus steigt gemäß Gleichung (6.11) allerdings mit zunehmender Anzahl K der Detektor-Schichten der Einfluss der Dunkelstromdichte J_d . Ein verstärkter Einfluss der Dunkelstromdichte J_d in den Gleichungen (6.9) und (6.11) wirkt sich wiederum negativ auf die theoretische Detektive Quanteneffizienz $DQE_{ML}(0)$ aus. Folglich existiert eine optimale Anzahl K der Detektor-Schichten, die bei einer festen Schichtdicke d der Absorber die theoretische Detektive Quanteneffizienz $DQE_{ML}(0)$ maximiert. In welchem Maß sich eine Erhöhung der Anzahl K der Detektor-Schichten negativ auf die theoretische Detektive Quanteneffizienz $DQE_{ML}(0)$ auswirkt, hängt gemäß Gleichung (6.11) vom Verhältnis aus der Dunkelstromdichte J_d und der Photonenflussrate $\dot{\Phi}_0$ ab. Für den Fall einer niedrigen Photonenflussrate $\dot{\Phi}_{0,low} = 10^5 \text{ mm}^{-2} \text{ s}^{-1}$ hat die Dunkelstromdichte $J_d = 3 \times 10^{-9} \text{ A mm}^{-2}$ in den Gleichungen (6.9) und (6.11) ein wesentlich größeren Einfluss verglichen mit dem Fall einer hohen Photonenflussrate $\dot{\Phi}_{0,high} = 10^8 \text{ mm}^{-2} \text{ s}^{-1}$. Folglich ergibt sich im Falle einer niedrigen Photonenflussrate eine bedeutend geringere optimale Anzahl K der Detektor-Schichten (siehe Abbildung 6.5 (b)).

6.3.3.2 Einfluss der Photonenenergie

In welchem Maß eine Erhöhung der Anzahl K der Detektor-Schichten zu einer Verbesserung der Röntgenabsorptionseffizienz $\eta_{x,ML}$ führt, hängt wesentlich von der Energie E der einfallenden Röntgenphotonen ab. Es ist daher von besonderem Interesse, zu untersuchen, wie sich diese Energieabhängigkeit auf die optimale Anzahl K der Detektor-Schichten auswirkt. Um den Einfluss der Photonenenergie bewerten zu können, zeigt Abbildung 6.6 die theoretische Detektive Quanteneffizienz $DQE_{ML}(0)$ mehrschichtiger Röntgendetektoren im Falle einer niedrigen und einer hohen Photonenenergie in Abhängigkeit der Schichtdicke d der Absorber und der Anzahl K der Detektor-Schichten. Die Simulationen basieren hierbei auf direkten Absorbern bestehend aus p-MAPbI₃ mit einem hohen Beweglichkeit-Lebensdauer-Produkt $\mu\tau_{high}$ und einer konstanten Dunkelstromdichte $J_d = 3 \times 10^{-9} \text{ A mm}^{-2}$ [65]. In Analogie zu Abbildung 6.5 (b) zeigt Abbildung 6.6 die Simulationsergebnisse für eine niedrige Photonenflussrate $\dot{\Phi}_{0,low} = 10^5 \text{ mm}^{-2} \text{ s}^{-1}$. Die unterschiedliche Energie E der Röntgenphotonen wirkt sich nicht auf die Designvorgaben im Hinblick auf die Schichtdicke d der Absorber aus. Für alle drei untersuchten Energien wird die optimale theoretische Detektive Quanteneffizienz $DQE_{ML}(0)$ bei einer großen Schichtdicke d erreicht (siehe Abbildungen 6.5 (b) und 6.6). Der erhebliche Einfluss der Photonenenergie E auf die Röntgenabsorptionseffizienz $\eta_{x,ML}$ führt allerdings dazu, dass sich die optimale Anzahl K der Detektor-Schichten in Abhängigkeit der Energie E der Photonen verschiebt. Verglichen mit den Ergebnissen in Abbildung 6.5 (b) bei einer mittleren Photonenenergie $E = 60 \text{ keV}$, reicht im Falle einer niedrigen Photonenenergie $E = 20 \text{ keV}$ eine geringere Anzahl K der Detektor-Schichten aus, um eine

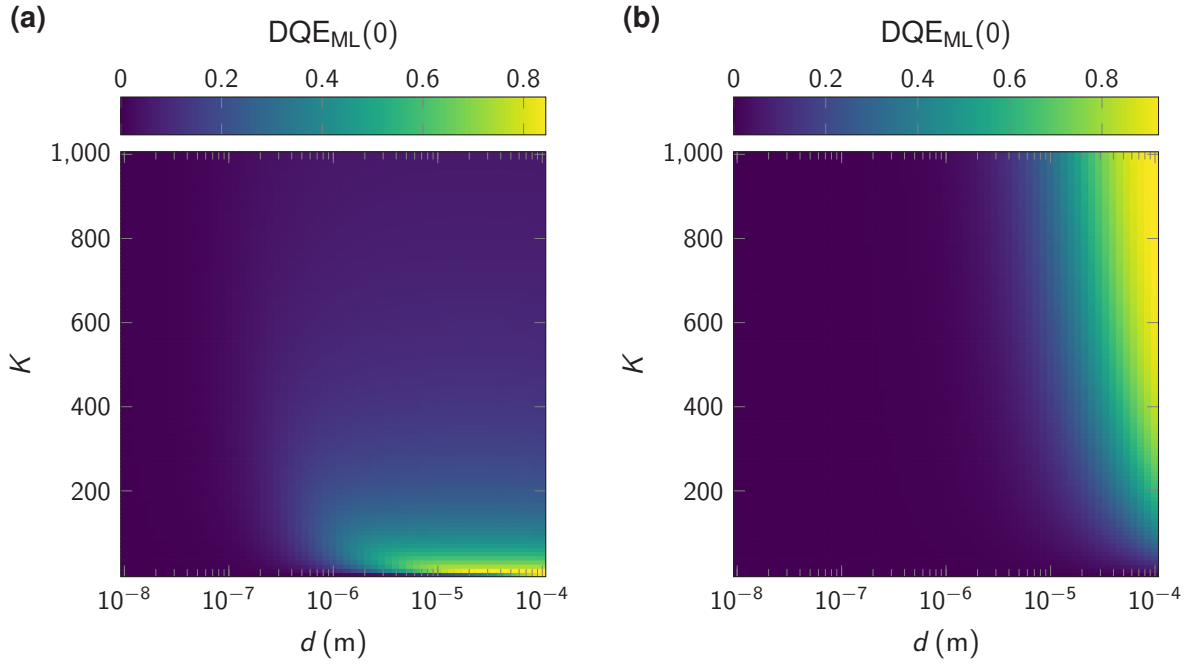


Abbildung 6.6: Simulierte Detektive Quanteneffizienz mehrschichtiger Röntgendetektoren im Falle von niedrigen und hohen Photonenenergien. Theoretische Detektive Quanteneffizienz $DQE_{ML}(0)$ mehrschichtiger Röntgendetektoren in Abhängigkeit der Schichtdicke d der einzelnen Absorber und der Anzahl K der Detektor-Schichten im Falle einer niedrigen Photonenflussrate $\dot{\Phi}_{0,low} = 10^5 \text{ mm}^{-2} \text{ s}^{-1}$, direkter Absorber bestehend aus polykristallinem MAPbI_3 (p-MAPbI₃) (MA, kurz für Methylammonium) mit einem hohen Beweglichkeit-Lebensdauer-Produkt $\mu\tau_{high}$ und einer konstanten Dunkelstromdichte $J_d = 3 \times 10^{-9} \text{ A mm}^{-2}$ [65] in einer Detektor-Schicht. **(a)** Simulationsergebnis für monoenergetische Röntgenphotonen der Energie $E = 20$ keV. **(b)** Simulationsergebnis für monoenergetische Röntgenphotonen der Energie $E = 511$ keV.

effiziente Röntgenabsorption zu gewährleisten. Folglich liegt auch die optimale Anzahl K der Detektor-Schichten bei einem geringeren Wert (siehe Abbildung 6.6 (a)). Im Falle einer hohen Photonenenergie $E = 511$ keV wird hingegen eine bedeutend größere Anzahl K der Detektor-Schichten für eine effiziente Röntgenabsorption benötigt und die optimale Anzahl K verschiebt sich zu bedeutend größeren Werten (Abbildung 6.6 (b)).

6.3.4 Designvorgaben unter Berücksichtigung der Röntgensensitivität und der Detektiven Quanteneffizienz

Die Optimierung der theoretischen Röntgensensitivität $S_{theo,ML}$ mehrschichtiger Röntgendetektoren in Abschnitt 6.3.2 zeigt einen eindeutigen Leistungsvorteil für direkte Absorber bestehend aus p-MAPbI₃ verglichen mit quasi-direkten Absorbern auf der Basis von P3HT:PCBM:GOS:Tb. Im Hinblick auf die in dieser Arbeit in Betracht gezogenen Absorber-Materialien ist daher p-MAPbI₃ am besten für eine Realisierung von mehrschichtigen Röntgendetektoren geeignet. Ferner ergeben sich aus den Simulationen in Abschnitt 6.3.2 für alle drei untersuchten Photonenenergien $E \in \{20 \text{ keV}, 60 \text{ keV}, 511 \text{ keV}\}$ ähnliche

Designvorgaben im Hinblick auf die Schichtdicke d der Absorber und die Anzahl K der Detektor-Schichten. Unabhängig von der Energie E der Photonen wird eine maximale theoretische Röntgensensitivität $S_{\text{theo,ML}}$ bei großen Schichtdicken d der p-MAPbI₃ Absorber und hohen Anzahlen K der Detektor-Schichten erreicht.

Die Optimierung der theoretischen Detektiven Quanteneffizienz $\text{DQE}_{\text{ML}}(0)$ mehrschichtiger Röntgendetektoren in Abschnitt 6.3.3 zeigt eine starke Abhängigkeit der Designvorgaben von der Photonenflussrate $\dot{\Phi}_0$ und der Energie E der einfallenden Röntgenstrahlung. Eine niedrige Photonenflussrate $\dot{\Phi}_{0,\text{low}}$ bewirkt in diesem Zusammenhang eine stärkere Limitierung der Anzahl K der Detektor-Schichten verglichen mit einer hohen Photonenflussrate $\dot{\Phi}_{0,\text{high}}$. Um eine hohe Leistungsfähigkeit sowohl bei einer hohen als auch bei niedrigen Photonenflussrate $\dot{\Phi}_0$ zu gewährleisten, werden die Designvorgaben in Bezug auf die theoretische Detektive Quanteneffizienz $\text{DQE}_{\text{ML}}(0)$ mithilfe der Simulationsergebnisse für den Fall einer niedrigen Photonenflussrate $\dot{\Phi}_{0,\text{low}} = 10^5 \text{ mm}^{-2} \text{ s}^{-1}$ bestimmt. Es zeigt sich, dass für alle drei untersuchten Photonenenergien $E \in \{20 \text{ keV}, 60 \text{ keV}, 511 \text{ keV}\}$ die Schichtdicke d der Absorber und die Anzahl K der Detektor-Schichten, die eine maximale theoretische Detektive Quanteneffizienz $\text{DQE}_{\text{ML}}(0)$ im Falle einer niedrigen Photonenflussrate $\dot{\Phi}_{0,\text{low}}$ ermöglichen, darüber hinaus zusätzlich eine nahezu optimale theoretischen Röntgensensitivität $S_{\text{theo,ML}}$ gewährleisten (siehe Abbildungen 6.2 (b), 6.4, 6.5 (b) und 6.6). Im Rahmen dieser Arbeit werden daher die Schichtdicke d der Absorber und die Anzahl K der Detektor-Schichten, die eine maximale theoretische Detektiven Quanteneffizienz $\text{DQE}_{\text{ML}}(0)$ im Falle einer niedrigen Photonenflussrate $\dot{\Phi}_{0,\text{low}}$ ermöglichen, als optimale Designparameter ($d_{\text{opt}}, K_{\text{opt}}$) betrachtet.

Die optimalen Designparameter ($d_{\text{opt}}, K_{\text{opt}}$) mehrschichtiger Röntgendetektoren, die sich im Hinblick auf eine maximale theoretische Detektive Quanteneffizienz $\text{DQE}_{\text{ML}}(0)$ im Falle einer niedrigen Photonenflussrate $\dot{\Phi}_{0,\text{low}} = 10^5 \text{ mm}^{-2} \text{ s}^{-1}$ ergeben, sind in Tabelle 6.2 für die drei untersuchten Photonenenergien $E \in \{20 \text{ keV}, 60 \text{ keV}, 511 \text{ keV}\}$ angegeben. Aufgrund des Leistungsvorteils gegenüber quasi-direkten

Tabelle 6.2: Designvorgaben und Leistungsfähigkeit mehrschichtiger Röntgendetektoren. Optimale Schichtdicke d_{opt} der Absorber und optimale Anzahl K_{opt} der Detektor-Schichten mehrschichtiger Röntgendetektoren im Hinblick auf eine maximale theoretische Detektive Quanteneffizienz $\text{DQE}_{\text{ML}}(0)$ im Falle einer niedrigen Photonenflussrate $\dot{\Phi}_{0,\text{low}} = 10^5 \text{ mm}^{-2} \text{ s}^{-1}$ in Abhängigkeit der Energie E der einfallenden Röntgenphotonen. Die zugehörige Leistungsfähigkeit ist durch die theoretische Röntgensensitivität $S_{\text{theo,ML}}$ und die theoretische Detektive Quanteneffizienz $\text{DQE}_{\text{ML}}(0)$ angegeben. Die Simulationen basieren auf direkten Absorbern bestehend aus polykristallinem MAPbI₃ (p-MAPbI₃) (MA, kurz für Methylammonium) mit einem hohen Beweglichkeit-Lebensdauer-Produkt $\mu\tau_{\text{high}}$ und einer konstanten Dunkelstromdichte $J_d = 3 \times 10^{-9} \text{ A mm}^{-2}$ [65] in einer Detektor-Schicht. Der in den Simulationen angenommene Betrag des elektrischen Feldes F ist zusätzlich angegeben.

$F (\text{V } \mu\text{m}^{-1})$	$E (\text{keV})$	$d_{\text{opt}} (\mu\text{m})$	K_{opt}	$S_{\text{theo,ML}} (\mu\text{C Gy}_{\text{air}}^{-1} \text{ cm}^{-2})$	$\text{DQE}_{\text{ML}}(0)^{\text{a}}$	$\text{DQE}_{\text{ML}}(0)^{\text{b}}$
0.25	20	100	3	308.1	0.996	0.948
0.25	60	100	17	4213	0.989	0.939
0.25	511	100	862	3214	0.985	0.923

^a bei einer hohen Photonenflussrate $\dot{\Phi}_{0,\text{high}} = 10^8 \text{ mm}^{-2} \text{ s}^{-1}$

^b bei einer niedrigen Photonenflussrate $\dot{\Phi}_{0,\text{low}} = 10^5 \text{ mm}^{-2} \text{ s}^{-1}$

Absorbern bestehend aus P3HT:PCBM:GOS:Tb beschränken sich die Designvorgaben auf Absorber bestehend aus p-MAPbI₃ mit einem hohen Beweglichkeit-Lebensdauer-Produkt $\mu\tau_{\text{high}}$ und einer konstanten Dunkelstromdichte $J_d = 3 \times 10^{-9} \text{ A mm}^{-2}$ [65] in einer Detektor-Schicht. Die auf der Grundlage der optimalen Designparameter erreichbare Leistungsfähigkeit mehrschichtiger Röntgendetektoren ist durch die theoretische Röntgensensitivität $S_{\text{theo,ML}}$ und die theoretische Detektive Quanteneffizienz $\text{DQE}_{\text{ML}}(0)$ in Tabelle 6.2 quantifiziert. Der in den Simulationen angenommene Betrag des elektrischen Feldes F ist zusätzlich angegeben. Es sei darauf hingewiesen, dass die optimalen Designparameter ($d_{\text{opt}}, K_{\text{opt}}$) in Tabelle 6.2 verglichen mit den bisher visuell dargestellten Simulationsergebnissen in den Abschnitten 6.3.2 und 6.3.3 auf der Grundlage einer erhöhten Auflösung der simulierten Parametervariation bestimmt sind. Insbesondere im Falle stark ausgeprägter Leistungsmaxima ergeben sich dadurch leichte Abweichungen zwischen den visuell dargestellten Ergebnissen und den Werten in Tabelle 6.2.

6.3.5 Vergleich der Leistungsfähigkeit mehrschichtiger und einschichtiger Röntgendetektoren

Mehrschichtige Röntgendetektoren haben das Potential, eine hohe Leistungsfähigkeit auf der Grundlage von vergleichsweise einfach herzustellenden dünnen Absorber-Schichten zu ermöglichen. Um dieses Potential mehrschichtiger Röntgendetektoren bewerten zu können, ist ein Leistungsvergleich mit konventionellen einschichtigen Röntgendetektoren an dieser Stelle von besonderem Interesse. Aus diesem Grund zeigt Abbildung 6.7 einen Vergleich der theoretischen Röntgensensitivität S_{theo} mehrschichtiger und einschichtiger Röntgendetektoren in Abhängigkeit der Schichtdicke d der Absorber. Der Leistungsvergleich bezieht sich hierbei auf die Kennzahlen, die sich gemäß der Designvorgaben in den Tabellen 6.2 und 5.2 im Falle monoenergetischer Röntgenphotonen der Energie $E \in \{20 \text{ keV}, 60 \text{ keV}, 511 \text{ keV}\}$ theoretisch mit mehrschichtigen und einschichtigen Röntgendetektoren erreichen lassen.

Im Falle einer niedrigen Photonenenergie $E = 20 \text{ keV}$ ermöglichen mit Ausnahme von a-Se und p-PbI₂ alle untersuchten Absorber-Materialien einschichtige Röntgendetektoren mit einer hohen theoretischen Röntgensensitivität S_{theo} (siehe Abbildung 6.7 (a)). Die optimalen Schichtdicken d_{opt} , die für diese hohe Leistungsfähigkeit einschichtiger Röntgendetektoren benötigt werden, liegen hierbei in einem Bereich von $0.162 \text{ mm} \leq d_{\text{opt}} \leq 1.12 \text{ mm}$ (siehe Tabelle 5.2 und Abbildung 6.7 (a)). Im Gegensatz dazu reicht im Falle eines mehrschichtigen Röntgendetektors eine optimale Schichtdicke von $d_{\text{opt}} = 100 \text{ }\mu\text{m}$ aus, um eine nahezu vergleichbar hohe Leistungsfähigkeit zu ermöglichen. Dabei liegt lediglich die theoretische Röntgensensitivität S_{theo} von einschichtigen Röntgendetektoren mit monokristallinen CdZnTe (m-CdZnTe) Absorbern der Schichtdicke $d_{\text{opt}} = 1.12 \text{ mm}$ bedeutend über der Leistungsfähigkeit mehrschichtiger Röntgendetektoren. Die Tatsache, dass allerdings bereits eine Schichtdicke von $d_{\text{opt}} = 0.162 \text{ mm}$ ausreicht, um eine hohe theoretische Röntgensensitivität S_{theo} einschichtiger Röntgendetektoren zu ermöglichen, relativiert im Falle einer niedrigen Photonenenergie $E = 20 \text{ keV}$ den potentiellen Vorteil mehrschichtiger Röntgendetektoren im Hinblick auf einfach herzustellende dünne Absorber-Schichten.

Mit zunehmender Energie E der Röntgenphotonen steigt allerdings die benötigte optimale Schichtdicke d_{opt} einschichtiger Röntgendetektoren, auf deren Grundlage eine hohe theoretische Röntgensensitivität

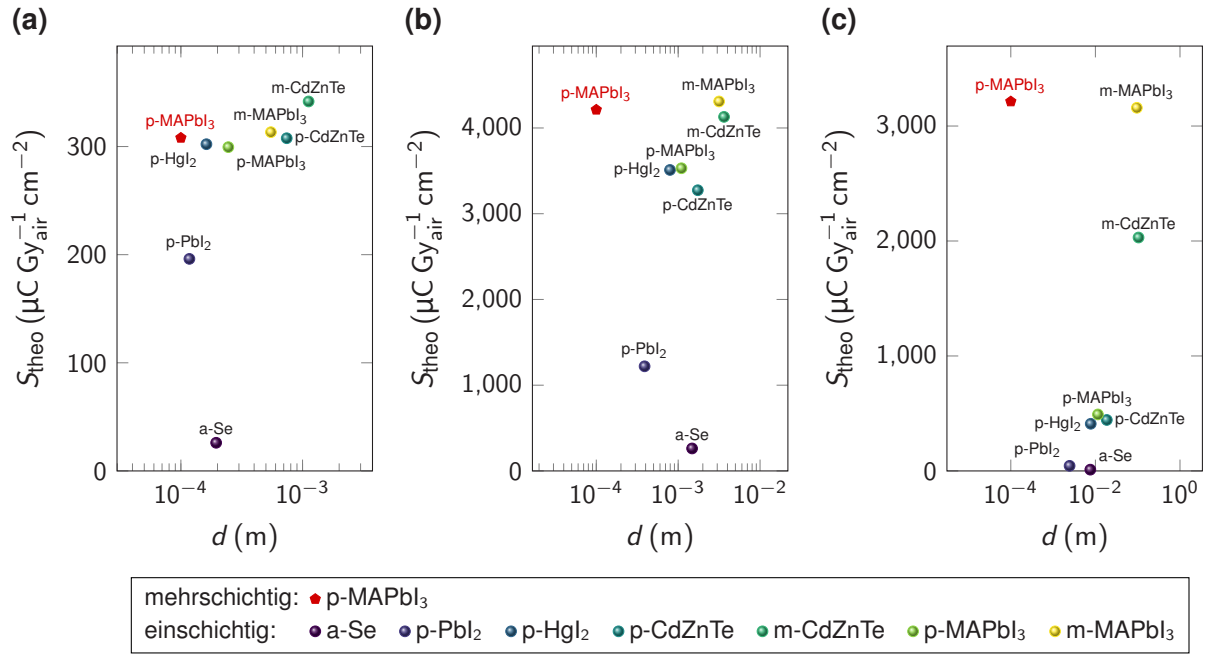


Abbildung 6.7: Vergleich der theoretischen Röntgensensitivität mehrschichtiger und einschichtiger Röntgendetektoren. Vergleich der theoretischen Röntgensensitivität S_{theo} mehrschichtiger und einschichtiger Röntgendetektoren in Abhängigkeit der Schichtdicke d der Absorber im Falle von monoenergetischen Röntgenphotonen der Energie (a) $E = 20 \text{ keV}$, (b) $E = 60 \text{ keV}$ und (c) $E = 511 \text{ keV}$. Die Datenpunkte basieren auf den Designvorgaben in den Tabellen 6.2 und 5.2 und zeigen die theoretische Röntgensensitivität S_{theo} , die sich mithilfe der jeweiligen optimalen Schichtdicke d_{opt} mit mehrschichtigen und einschichtigen Röntgendetektoren erreichen lässt. Gemäß der Designvorgaben in den Tabellen 6.2 und 5.2 werden mehrschichtige Röntgendetektoren mit Absorbern bestehend aus polykristallinem MAPbI₃ (p-MAPbI₃) (MA, kurz für Methylammonium) und einschichtige Röntgendetektoren mit Absorbern auf der Basis von amorphem Se (a-Se), polykristallinem PbI₂ (p-PbI₂), Hgl₂ (p-Hgl₂), CdZnTe (p-CdZnTe) und MAPbI₃ (p-MAPbI₃) sowie monokristallinem CdZnTe (m-CdZnTe) und MAPbI₃ (m-MAPbI₃) in Betracht gezogen. Zum Teil reproduziert in Anlehnung an Mescher et al. [63].

S_{theo} erreicht werden kann. Darüber hinaus lässt sich eine außergewöhnlich hohe Leistungsfähigkeit nur noch mit bestimmten Absorber-Materialien realisieren. Durch das Übereinanderstapeln mehrerer Detektor-Schichten ermöglichen die hier betrachteten mehrschichtigen Röntgendetektoren hingegen eine hohe theoretische Röntgensensitivität S_{theo} auch mit zunehmender Energie E der Röntgenphotonen auf der Basis von vergleichsweise einfach herzustellenden dünnen optimalen Schichtdicken $d_{\text{opt}} = 100 \mu\text{m}$ der einzelnen Absorber. Die hohe Leistungsfähigkeit mehrschichtiger Röntgendetektoren wird hierbei über die optimale Anzahl K_{opt} der Detektor-Schichten gewährleistet (siehe Tabelle 6.2). Infolgedessen zeigen mehrschichtige Röntgendetektoren im Falle einer mittleren Photonenenergie $E = 60 \text{ keV}$ auf der Grundlage einer optimalen Schichtdicke $d_{\text{opt}} = 100 \mu\text{m}$ der einzelnen Absorber eine derart hohe theoretische Röntgensensitivität S_{theo} , die in vergleichbarer Höhe nur noch durch einschichtige Röntgendetektoren mit Absorbern bestehend aus monokristallinem MAPbI₃ (m-MAPbI₃) und m-CdZnTe mit einer optimalen Schichtdicke d_{opt} von mehreren Millimetern erreicht werden kann (siehe Abbildung 6.7 (b) und Tabelle 5.2). Die bedeutend größere optimale Schichtdicke d_{opt} einschichtiger Röntgendetektoren erfordert nicht nur eine komplexe Herstellung, sondern erhöht darüber hinaus die Anforderungen an die Elektronik aufgrund der hohen Spannungen U , die für die Realisierung eines bestimmten Betrags des elektrischen

Feldes F benötigt werden. Aus dem Betrag des elektrischen Feldes $F = 0.25 \text{ V } \mu\text{m}^{-1}$ und der optimalen Schichtdicke $d_{\text{opt}} = 100 \text{ } \mu\text{m}$ (siehe Tabelle 6.2) ergibt sich im Falle mehrschichtiger Röntgendetektoren die benötigte Spannung zu $U = Fd_{\text{opt}} = 25 \text{ V}$. In Analogie dazu ergeben sich aus dem Betrag des elektrischen Feldes $F = 0.25 \text{ V } \mu\text{m}^{-1}$ und den optimalen Schichtdicken $d_{\text{opt}} = 3.16 \text{ mm}$ und $d_{\text{opt}} = 3.63 \text{ mm}$ von m-MAPbI₃ und m-CdZnTe (siehe Tabelle 5.2) im Falle einschichtiger Röntgendetektoren bereits bei einer mittleren Photonenenergie $E = 60 \text{ keV}$ sehr hohe Spannungen von $U = 790 \text{ V}$ und $U = 907.5 \text{ V}$. Im Falle einer hohen Photonenenergie $E = 511 \text{ keV}$ erreichen einschichtige Röntgendetektoren lediglich auf der Grundlage von extrem dicken Absorbern bestehend aus m-MAPbI₃ eine theoretische Röntgensensitivität S_{theo} , die mit der hohen Leistungsfähigkeit des betrachteten mehrschichtigen Röntgendetektors vergleichbar ist (siehe Abbildung 6.7 (c)). Aus der hierfür benötigten extrem großen optimalen Schichtdicke $d_{\text{opt}} = 95.5 \text{ mm}$ von m-MAPbI₃ (siehe Tabelle 5.2) und der damit verbundenen hohen benötigten Spannung $U > 20 \text{ kV}$ ergeben sich allerdings außergewöhnlich hohe Anforderungen im Hinblick auf eine Realisierung.

Der Vergleich der theoretischen Röntgensensitivität S_{theo} mehrschichtiger und einschichtiger Röntgendetektoren in Abbildung 6.7 zeigt, dass sich mithilfe von mehrschichtigen Röntgendetektoren für alle drei untersuchten Photonenenergien $E \in \{20 \text{ keV}, 60 \text{ keV}, 511 \text{ keV}\}$ eine hohe Leistungsfähigkeit auf der Grundlage von vergleichsweise einfach herzustellenden dünnen Absorber-Schichten erreichen lässt. Gerade im Hinblick auf mittlere und hohe Photonenenergien $E \in \{60 \text{ keV}, 511 \text{ keV}\}$ ist die Leistungsfähigkeit mehrschichtiger Röntgendetektoren derart hoch, dass sie durch einschichtige Röntgendetektoren nur mit sehr dicken monokristallinen Absorbern erreicht werden kann. Aufgrund der Herausforderungen im Hinblick auf die Herstellung hochqualitativer extrem dicker monokristalliner Absorber in Verbindung mit den erhöhten Anforderungen an die Elektronik, die sich im Zusammenhang mit den hohen, für dicke Absorber-Schichten benötigten Spannungen U ergeben, repräsentieren mehrschichtige Röntgendetektoren demzufolge insbesondere im Falle mittlerer und hoher Photonenenergien $E \in \{60 \text{ keV}, 511 \text{ keV}\}$ eine extrem leistungsfähige Alternative zu konventionellen einschichtigen Röntgendetektoren. An dieser Stelle sei darauf hingewiesen, dass auch im Falle mehrschichtiger Röntgendetektoren eine Realisierung aufgrund der steigenden optimalen Anzahl K_{opt} der Detektor-Schichten mit zunehmender Photonenenergie E an Komplexität gewinnt.

Im Hinblick auf die theoretische Detektive Quanteneffizienz $\text{DQE}(0)$ einschichtiger Röntgendetektoren zeigen m-MAPbI₃ und m-CdZnTe selbst unter der Annahme einer vergleichsweise hohen Dunkelstromdichte $J_d = 10^{-8} \text{ A mm}^{-2}$ eine außergewöhnlich hohe Leistungsfähigkeit sowohl bei einer niedrigen als auch bei einer hohen Photonenflussrate $\dot{\Phi}_0$ (siehe Tabelle 5.2). Die theoretische Detektive Quanteneffizienz $\text{DQE}(0)$ mehrschichtiger Röntgendetektoren liegt im Falle einer hohen Photonenflussrate $\dot{\Phi}_{0,\text{high}}$ leicht und im Falle einer niedrigen Photonenflussrate $\dot{\Phi}_{0,\text{low}}$ zum Teil deutlich unter den Werten, die mit einschichtigen Röntgendetektoren auf der Basis von m-MAPbI₃ und m-CdZnTe erreicht werden können (siehe Tabellen 6.2 und 5.2). Im Zuge einer potentiellen Realisierung mehrschichtiger Röntgendetektoren ist es daher besonders sinnvoll, weitere Möglichkeiten zur Reduktion der Dunkelstromdichte J_d von Absorbern bestehend aus p-MAPbI₃ zu erforschen, um die Konkurrenzfähigkeit mehrschichtiger Röntgendetektoren auch im Hinblick auf die theoretische Detektive Quanteneffizienz $\text{DQE}(0)$ sicherzustellen.

6.4 Zusammenfassung

In diesem Kapitel wird die Modellierung, die Simulation und das Design von mehrschichtigen Röntgendetektoren beschrieben. In Abschnitt 6.1 wird hierbei zunächst die grundlegende Motivation und die wissenschaftliche Zielsetzung des Kapitels diskutiert. Die fundamentale Idee der hier betrachteten mehrschichtigen Röntgendetektoren besteht darin, die Kopplung zwischen der Röntgenabsorptionseffizienz η_x und der Ladungssammeleffizienz η_{cc} mithilfe des zusätzlichen Freiheitsgrades der Anzahl K der Detektor-Schichten abzuschwächen. Infolgedessen haben mehrschichtige Röntgendetektoren das Potential, eine hohe Leistungsfähigkeit auf der Basis von vergleichsweise einfach herzustellenden dünnen Absorber-Schichten zu realisieren. Dieses Kapitel ist daher der Bewertung der theoretischen Leistungsfähigkeit von mehrschichtigen Röntgendetektoren gewidmet. Im weiteren Verlauf des Kapitels werden aus diesem Grund im Rahmen der Abschnitte 6.2 und 6.3 zwei Zwischenziele verfolgt.

In Abschnitt 6.2 werden zunächst die in Kapitel 3 beschriebenen, bereits bestehenden Modelle zur Simulation der Röntgensensitivität und der Detektiven Quanteneffizienz von einschichtigen Röntgendetektoren auf mehrschichtiger Röntgendetektoren erweitert, um die theoretische Leistungsfähigkeit von mehrschichtigen Röntgendetektoren analysieren und bewerten zu können. Die Modellierung der Röntgensensitivität wird in diesem Zusammenhang darüber hinaus auf mehrschichtige Röntgendetektoren mit quasi-direkten Absorbern erweitert.

Abschnitt 6.3 behandelt anschließend die Simulation und das Design von mehrschichtigen Röntgendetektoren. Hierbei werden zunächst die grundlegenden Parameter für die Simulation von mehrschichtigen Röntgendetektoren eingeführt. Die Simulationsparameter werden dabei in Analogie zu Kapitel 5 in Designparameter des Detektors, Materialparameter des Absorber-Materials und Bestrahlungsparameter unterteilt. In den folgenden Abschnitten wird die theoretische Röntgensensitivität $S_{\text{theo,ML}}$ und die theoretische Detektive Quanteneffizienz $\text{DQE}_{\text{ML}}(0)$ von mehrschichtigen Röntgendetektoren optimiert. Zu diesem Zweck werden sowohl die Absorber-Schichtdicke d als auch die Anzahl K der Detektor-Schichten variiert, und die zugehörige theoretische Leistungsfähigkeit wird simuliert und analysiert. Im Rahmen dieser Optimierungen wird der Einfluss des Absorber-Materials, der Photonenenergie E und der Photonenflussrate $\dot{\Phi}_0$ auf die theoretische Leistungsfähigkeit mehrschichtiger Röntgendetektoren untersucht. Die Optimierung der theoretischen Röntgensensitivität $S_{\text{theo,ML}}$ mehrschichtiger Röntgendetektoren auf der Basis von quasi-direkten Absorbern bestehend aus P3HT:PCBM:GOS:Tb und direkten Absorbern auf der Basis von p-MAPbI₃ zeigt einen eindeutigen Leistungsvorteil von p-MAPbI₃. Im Hinblick auf die beiden untersuchten Materialien eignet sich folglich p-MAPbI₃ besser für eine potentielle Realisierung mehrschichtiger Röntgendetektoren. Die weiteren Untersuchungen beschränken sich daher auf Simulationen auf der Basis von p-MAPbI₃. Die Optimierung der theoretischen Röntgensensitivität $S_{\text{theo,ML}}$ mehrschichtiger Röntgendetektoren im Hinblick auf unterschiedliche Photonenenergien E zeigt für alle drei untersuchten Photonenenergien E ähnliche Designvorgaben mit einer maximalen theoretischen Leistungsfähigkeit bei großen Absorber-Schichtdicken d und hohen Anzahlen K der Detektor-Schichten. Die Photonenenergie E hat allerdings einen wesentlichen Einfluss darauf, ab welcher Absorber-Schichtdicke

d und ab welcher Anzahl K der Detektor-Schichten eine nahezu optimale theoretische Röntgensensitivität $S_{\text{theo,ML}}$ erreicht werden kann.

Die Optimierung der theoretischen Detektiven Quanteneffizienz $\text{DQE}_{\text{ML}}(0)$ mehrschichtiger Röntgendetektoren zeigt eine starke Abhängigkeit der Designvorgaben von der Photonenflussrate $\dot{\Phi}_0$ und der Energie E der einfallenden Röntgenphotonen. Eine niedrige Photonenflussrate $\dot{\Phi}_{0,\text{low}}$ bewirkt in diesem Zusammenhang eine stärkere Limitierung der Anzahl K der Detektor-Schichten verglichen mit einer hohen Photonenflussrate $\dot{\Phi}_{0,\text{high}}$. Der erhebliche Einfluss der Photonenenergie E auf die Röntgenabsorptionseffizienz $\eta_{\text{x,ML}}$ führt darüber hinaus dazu, dass die Anzahl K der Detektor-Schichten, welche eine optimale theoretische Detektive Quanteneffizienz $\text{DQE}_{\text{ML}}(0)$ mehrschichtiger Röntgendetektoren ermöglicht, mit zunehmender Energie E der Röntgenphotonen steigt.

Auf der Grundlage der Ergebnisse der Optimierung der theoretischen Röntgensensitivität $S_{\text{theo,ML}}$ und der theoretischen Detektiven Quanteneffizienz $\text{DQE}_{\text{ML}}(0)$ mehrschichtiger Röntgendetektoren werden im nachfolgenden Abschnitt allgemeine Designvorgaben für mehrschichtige Röntgendetektoren entwickelt. Dabei zeigt sich, dass für alle drei untersuchten Photonenenergien E die Schichtdicke d der Absorber und die Anzahl K der Detektor-Schichten, die eine maximale theoretische Detektive Quanteneffizienz $\text{DQE}_{\text{ML}}(0)$ im Falle einer niedrigen Photonenflussrate $\dot{\Phi}_{0,\text{low}}$ ermöglichen, darüber hinaus zusätzlich eine nahezu optimale theoretische Röntgensensitivität $S_{\text{theo,ML}}$ gewährleisten. Im Rahmen dieser Arbeit werden daher die Schichtdicke d der Absorber und die Anzahl K der Detektor-Schichten, die eine maximale theoretische Detektiven Quanteneffizienz $\text{DQE}_{\text{ML}}(0)$ im Falle einer niedrigen Photonenflussrate $\dot{\Phi}_{0,\text{low}}$ ermöglichen, als optimale Designparameter $(d_{\text{opt}}, K_{\text{opt}})$ betrachtet. Die mithilfe der optimalen Designparameter erreichbare Leistungsfähigkeit ist durch die theoretische Röntgensensitivität $S_{\text{theo,ML}}$ und die theoretische Detektive Quanteneffizienz $\text{DQE}_{\text{ML}}(0)$ quantifiziert.

Die theoretische Leistungsfähigkeit mehrschichtiger Röntgendetektoren wird abschließend auf der Grundlage eines Leistungsvergleiches mit einschichtigen Röntgendetektoren bewertet. Der Leistungsvergleich bezieht sich dabei auf die Kennzahlen, die sich gemäß der Designvorgaben aus diesem Kapitel und aus Kapitel 5 theoretisch mit mehrschichtigen und einschichtigen Röntgendetektoren erreichen lassen. Der Vergleich der theoretischen Röntgensensitivität S_{theo} zeigt hierbei, dass sich mithilfe von mehrschichtigen Röntgendetektoren für alle drei untersuchten Photonenenergien E eine hohe Leistungsfähigkeit basierend auf vergleichsweise einfach herzustellenden dünnen Absorber-Schichten erreichen lässt. Besonders im Hinblick auf mittlere und hohe Photonenenergien E ist die Leistungsfähigkeit mehrschichtiger Röntgendetektoren derart hoch, dass sie durch einschichtige Röntgendetektoren nur mit sehr dicken monokristallinen Absorbern erreicht werden kann. Aufgrund der Herausforderungen im Hinblick auf die Herstellung hochqualitativer extrem dicker monokristalliner Absorber in Verbindung mit den erhöhten Anforderungen an die Elektronik, die sich im Zusammenhang mit den hohen, für dicke Absorber-Schichten benötigten Spannungen U ergeben, repräsentieren mehrschichtige Röntgendetektoren insbesondere im Falle mittlerer und hoher Photonenenergien E eine leistungsfähige Alternative zu konventionellen einschichtigen Röntgendetektoren. Die theoretische Detektive Quanteneffizienz $\text{DQE}(0)$ mehrschichtiger Röntgendetektoren liegt allerdings im Falle einer hohen Photonenflussrate $\dot{\Phi}_{0,\text{high}}$ leicht und im Falle einer niedrigen

Photonenfluenzrate $\dot{\Phi}_{0,\text{low}}$ zum Teil deutlich unter den Werten, die mit einschichtigen Röntgendetektoren erreicht werden können. Um die Konkurrenzfähigkeit mehrschichtiger Röntgendetektoren auch im Hinblick auf die theoretische Detektive Quanteneffizienz $\text{DQE}(0)$ sicherzustellen, ist es daher besonders sinnvoll, weitere Möglichkeiten zur Reduktion der Dunkelstromdichte J_d von Absorbern bestehend aus p-MAPbI₃ zu erforschen.

Die Ergebnisse dieses Kapitels im Hinblick auf die Designvorgaben und die Angaben zur theoretischen Leistungsfähigkeit mehrschichtiger Röntgendetektoren bilden zusammen mit den Resultaten aus Kapitel 5 die Grundlage für die Bewertung der theoretischen Leistungsfähigkeit von gefalteten Röntgendetektoren in Kapitel 7.

Teile der in diesem Kapitel präsentierten Inhalte sind in Mescher and Lemmer [93] veröffentlicht. Der Hauptbeitrag dieser Veröffentlichung stammt hierbei vom Erstautor Henning Mescher. Der Co-Autor Uli Lemmer hat in diesem Zusammenhang die wissenschaftliche Betreuung übernommen.

7 Modellierung, Simulation und Design von gefalteten Röntgendetektoren

*Dieses Kapitel ist der **Bewertung der theoretischen Leistungsfähigkeit von gefalteten Röntgendetektoren** (Ziel 3) gewidmet. Zu diesem Zweck werden im Verlauf des Kapitels zwei Zwischenziele verfolgt. Zunächst werden bereits bestehende Modelle zur Simulation der Röntgensensitivität und der Detektiven Quanteneffizienz von einschichtigen Röntgendetektoren auf gefaltete Röntgendetektoren erweitert, um die theoretische Leistungsfähigkeit dieser Detektoren analysieren und bewerten zu können. Anschließend wird die Leistungsfähigkeit gefalteter Röntgendetektoren simuliert, Designvorgaben werden entwickelt und das Potential, eine hohe Leistungsfähigkeit zu ermöglichen, wird auf der Grundlage eines Leistungsvergleiches mit einschichtigen und mehrschichtigen Röntgendetektoren bewertet. Die bereits bestehenden Simulationsmodelle, die im Rahmen dieses Kapitels erweitert werden, sind in Kapitel 3 beschrieben. Der Leistungsvergleich mit einschichtigen und mehrschichtigen Röntgendetektoren basiert auf den Ergebnissen aus den Kapiteln 5 und 6. Die Ergebnisse dieses Kapitels bilden zusammen mit den Resultaten aus den Kapiteln 5 und 6 die Grundlage für die Auswahl, für welchen Detektor-Aufbau die experimentelle Realisierung im Rahmen dieser Arbeit von Kapitel 8 an untersucht wird.*

Teile der in diesem Kapitel präsentierten Inhalte sind in Mescher, Hamann, and Lemmer [63] veröffentlicht. Der Hauptbeitrag dieser Veröffentlichung stammt hierbei vom Erstautor Henning Mescher. Der Erstautor Henning Mescher wurde im Rahmen der Veröffentlichung vom Co-Autor Elias Hamann in Bezug auf die theoretische Arbeit unterstützt. Der Co-Autor Uli Lemmer hat in diesem Zusammenhang die wissenschaftliche Betreuung übernommen.

7.1 Motivation und Zielsetzung

Die Herausforderungen bei der Realisierung hochleistungsfähiger einschichtiger Röntgendetektoren im Hinblick auf dicke Absorber-Schichten werden im Rahmen der Einführung mehrschichtiger Röntgendetektoren diskutiert (siehe Abschnitt 6.1). Zusätzlich zum mehrschichtigen Detektor-Aufbau besteht in einem gefalteten Detektor-Aufbau ein weiterer alternativer Ansatz, hochleistungsfähige Röntgendetektoren zu ermöglichen. Beim gefalteten Detektor-Aufbau handelt es sich um eine spezielle Realisierung eines edge-on (frei aus dem Engl. übersetzt: entlang der Kante) Detektors, dessen Potential bereits in früheren Arbeiten untersucht wurde [95, 96]. Der prinzipielle Ansatz, einen edge-on Detektor durch einen gefalteten Detektor-Aufbau zu realisieren, ist im Zusammenhang mit der Erforschung gefalteter thermoelektrischer Generatoren [97] am *Lichttechnischen Institut (LTI)* entstanden.

Abbildung 7.1 zeigt in einer schematischen Darstellung exemplarisch für drei Detektor-Elemente das Faltschema der in diesem Kapitel betrachteten gefalteten Röntgendetektoren. Die Grundlage der hier betrachteten gefalteten Röntgendetektoren bildet ein planarer Röntgendetektor mit mehreren Detektor-Elementen. Bei jedem einzelnen Detektor-Element des planaren Detektors handelt es sich um einen einschichtigen Röntgendetektor, der aus einem Absorber besteht, der sich zwischen zwei Elektroden befindet. Hierbei wird davon ausgegangen, dass diese einschichtigen Detektor-Elemente nebeneinander auf einem flexiblen Substrat hergestellt werden können. Durch eine entsprechende Faltung der einzelnen Detektor-Elemente kann der planare Röntgendetektor in einen gefalteten Röntgendetektor überführt werden (siehe Abbildung 7.1). An diesem Punkt ähnelt der gefaltete Röntgendetektor dem in Kapitel 6 behandelten mehrschichtigen Röntgendetektor (siehe Abbildung 6.1 (b)). Anders als im Falle mehrschichtiger Röntgendetektoren wird der gefaltete Röntgendetektor jedoch zusätzlich in einem finalen Schritt durch eine Rotation neu ausgerichtet.

In Abbildungen 7.2 wird der grundlegende Aufbau eines einschichtigen Röntgendetektors (siehe Abbildung 7.2 (a)) mit dem Aufbau eines gefalteten Röntgendetektors (siehe Abbildung 7.2 (b)) verglichen. Einschichtige Röntgendetektoren bestehen aus einem Absorber der Schichtdicke d , der sich zwischen zwei Elektroden auf einem Substrat befindet. Der grundlegende Aufbau gefalteter Röntgendetektoren ist in Abbildung 7.2 (b) exemplarisch für drei Detektor-Elemente dargestellt und kann mithilfe des in Abbildung 7.1 gezeigten Faltschemas realisiert werden. Vergleichbar zu den in Kapitel 6 untersuchten mehrschichtigen Röntgendetektoren liegt die grundlegende Idee der hier betrachteten gefalteten Röntgendetektoren in einer Abschwächung der Kopplung zwischen der Röntgenabsorptionseffizienz η_x und der Ladungssammeleffizienz η_{cc} . Anders als im Falle mehrschichtiger Röntgendetektoren basieren gefaltete Röntgendetektoren jedoch auf einer Neuausrichtung der einzelnen Detektor-Elemente hinsichtlich der einfallenden Röntgenstrahlung (siehe Abbildung 7.1 und 7.2 (b)). Unter der Annahme parallel einfallender Röntgenphotonen können die Detektor-Elemente somit entlang der Ausbreitungsrichtung der Röntgenstrahlung ausgerichtet werden. Dies hat zur Folge, dass die Röntgenphotonen entlang der Kante (frei in das Engl. übersetzt: edge-on) des Absorbers wechselwirken und absorbiert werden können. Demzufolge bewirkt die Neuausrichtung, dass die Kopplung zwischen der Röntgenabsorptionseffizienz η_x und der Ladungssammeleffizienz η_{cc} nicht nur abgeschwächt sondern komplett eliminiert wird. Infolgedessen

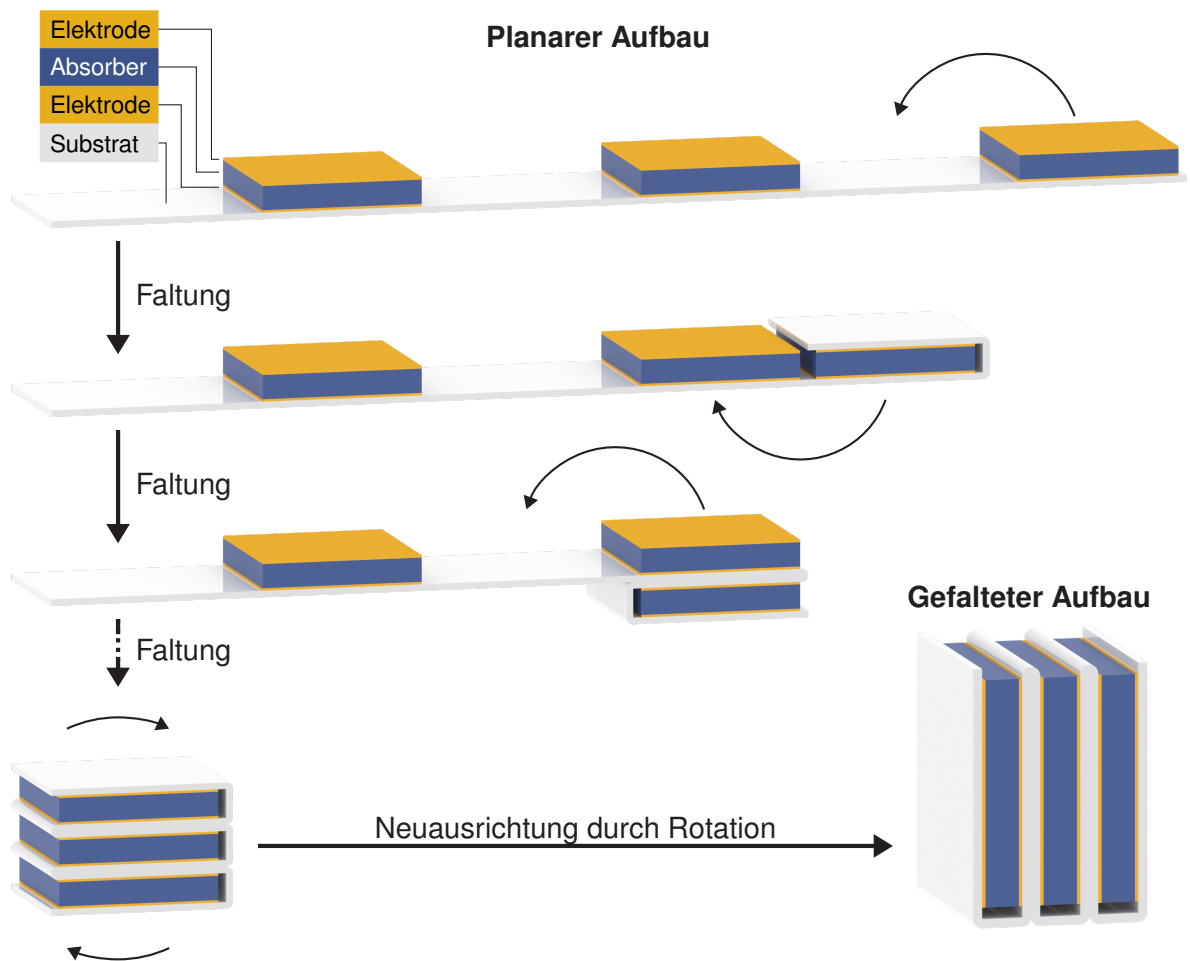


Abbildung 7.1: Faltschema gefalteter Röntgendetektoren exemplarisch dargestellt für drei Detektor-Elemente. Der Ausgangspunkt des hier betrachteten gefalteten Röntgendetektors ist ein Röntgendetektor mit einem planarem Aufbau. Der planare Röntgendetektor besteht aus mehreren einschichtigen Röntgendetektoren, die nebeneinander auf einem flexiblen Substrat positioniert sind. Jedes dieser Detektor-Elemente besteht aus einem Absorber, der sich zwischen zwei Elektroden befindet. Durch mehrmalige Faltung kann der planare Röntgendetektor in einen gefalteten Röntgendetektor überführt werden. Die ersten Faltungen sind exemplarisch dargestellt. Der gefaltete Röntgendetektor wird abschließend durch eine Rotation neu ausgerichtet. Zum Teil reproduziert in Anlehnung an Mescher et al. [63].

lässt sich im Falle gefalteter Röntgendetektoren die Röntgenabsorptionseffizienz η_x und die Ladungssammelfeffizienz η_{cc} unabhängig voneinander durch eine Variation der Kantenlänge l und der Schichtdicke d des Absorbers optimieren. In Analogie zu mehrschichtigen Röntgendetektoren haben auch gefaltete Röntgendetektoren das Potential, eine hohe Leistungsfähigkeit auf der Basis von vergleichsweise einfach herzustellenden dünnen Absorber-Schichten zu realisieren. Der Abstand und die Größe der einzelnen Detektor-Elemente des gefalteten Röntgendetektors entlang der x -Richtung hängt im Wesentlichen von der Absorber-Schichtdicke d und der Substrat-Schichtdicke d_{foil} ab (siehe Abbildung 7.2 (b)). Der hier betrachtete gefaltete Röntgendetektor bietet somit zusätzlich die Möglichkeit, ohne aufwendige Fabrikationsschritte Pixel mit einer sehr kleinen räumlichen Dimension und somit eine sehr hohe räumliche Auflösung zu realisieren.

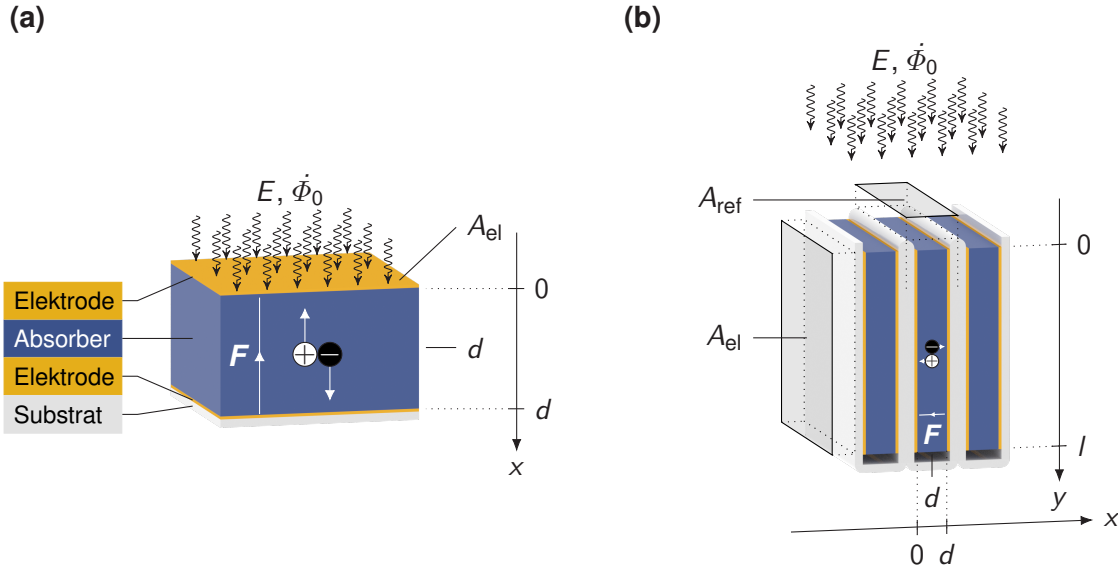


Abbildung 7.2: Grundlegender Aufbau einschichtiger und gefalteter Röntgendetektoren. (a) Grundlegender Aufbau eines einschichtigen Röntgendetektors. Der betrachtete einschichtige Röntgendetektor besteht aus einem Absorber der Schichtdicke d , der sich zwischen zwei Elektroden auf einem Substrat befindet. Der Drift der Elektronen und Löcher im elektrischen Feld F zwischen den Elektroden ist schematisch dargestellt. Das elektrische Feld F ist hierbei exemplarisch für eine der beiden möglichen Orientierungen gezeigt. Die auf den Detektor auftreffende monoenergetische Röntgenstrahlung mit Röntgenphotonen der Energie E und einer Photonenflussrate $\dot{\Phi}_0$, die Detektor-Fläche A_{el} und die Orientierung der x -Achse sind ebenfalls gekennzeichnet. (b) Grundlegender Aufbau eines gefalteten Röntgendetektors. Der betrachtete gefaltete Röntgendetektor ist exemplarisch für drei Detektor-Elemente dargestellt und kann mithilfe des in Abbildung 7.1 gezeigten Faltschemas realisiert werden. Die Orientierung der x - und der y -Achse, die Kantenlänge l und die Schichtdicke d der Absorber sowie die bestrahlte Fläche A_{ref} und die Fläche der Elektroden A_{el} eines Detektor-Elements sind ebenfalls dargestellt. Zum Teil reproduziert in Anlehnung an Mescher et al. [63].

Dieses Kapitel ist der Bewertung der theoretischen Leistungsfähigkeit von gefalteten Röntgendetektoren gewidmet. Im Rahmen dieses Kapitels werden daher in Analogie zu Kapitel 6 zwei Zwischenziele verfolgt. In Abschnitt 7.2 werden zunächst die in Kapitel 3 beschriebenen, bereits bestehenden Modelle zur Simulation der Röntgensensitivität und der Detektiven Quanteneffizienz von einschichtigen Röntgendetektoren auf gefaltete Röntgendetektoren erweitert, um die theoretische Leistungsfähigkeit von gefalteten Röntgendetektoren analysieren und bewerten zu können. Anschließend wird in Abschnitt 7.3 mithilfe der in Abschnitt 7.2 beschriebenen Erweiterungen die Leistungsfähigkeit gefalteter Röntgendetektoren simuliert, Designvorgaben für gefaltete Röntgendetektoren werden entwickelt und das Potential gefalteter Röntgendetektoren, eine hohe Leistungsfähigkeit zu ermöglichen, wird auf der Grundlage eines Leistungsvergleiches mit einschichtigen und mehrschichtigen Röntgendetektoren bewertet. Abschnitt 7.4 fasst abschließend die wesentlichen Ergebnisse dieses Kapitels zusammen.

7.2 Modellierung von gefalteten Röntgendetektoren

Um die Leistungsfähigkeit von gefalteten Röntgendetektoren analysieren zu können, werden in Analogie zur Erweiterung auf mehrschichtige Röntgendetektoren (siehe Abschnitt 6.2) die in Kapitel 3 beschriebenen Modelle zur Simulation der Röntgensensitivität und der Detektiven Quanteneffizienz von einschichtigen Röntgendetektoren in den folgenden Abschnitten auf gefaltete Röntgendetektoren erweitert.

7.2.1 Röntgensensitivität von gefalteten Röntgendetektoren

Der betrachtete gefaltete Röntgendetektor besteht aus einzelnen Detektor-Elementen, die entlang der einfallenden Röntgenstrahlung ausgerichtet sind (siehe Abbildung 7.2 (b)). Jedes einzelne Detektor-Element entspricht hierbei im Aufbau und bis zu einem gewissen Grad auch in der Funktionsweise einem einschichtigen Röntgendetektor. In Analogie zur Erweiterung auf mehrschichtige Röntgendetektoren (siehe Abschnitt 6.2.1) kann daher das in Abschnitt 3.1 beschriebene Model zur Simulation der Röntgensensitivität einschichtiger Röntgendetektoren auch auf die betrachteten gefalteten Röntgendetektoren erweitert werden. Ein wesentlicher Unterschied in der Modellierung besteht in den Randbedingungen der Elektronen- und Löcherdichte, die durch die Neuausrichtung der Detektor-Elemente beeinflusst werden. Unter der Annahme einer parallel einfallenden Röntgenstrahlung und in Verbindung mit den selben grundlegenden Modellannahmen (siehe Abschnitt 3.1.1) lassen sich die Randbedingungen $n(x, y, t = 0)$ und $p(x, y, t = 0)$ der Elektronen- und Löcherdichte für einen Absorber des gefalteten Röntgendetektors gemäß Gleichung (3.3) formulieren:

$$n(x, y, t = 0) = p(x, y, t = 0) = \frac{\alpha_{\text{en}}}{W_{\pm}} \Psi_0 e^{-\alpha y}. \quad (7.1)$$

Es sei darauf hingewiesen, dass durch die Neuausrichtung der Detektor-Elemente (siehe Abbildung 7.2 (b)) die Ladungsträgerdichten zum Zeitpunkt $t = 0$ nun entlang der y -Richtung exponentiell abnehmen und für alle Positionen x innerhalb des Absorbers konstant sind. Im Rahmen der verwendeten Modellierung ist die Verteilung der Ladungsträger parallel zu den Elektroden entlang der y -Richtung nicht relevant. Infolgedessen können die für die Modellierung relevanten Randbedingungen $n(x, t = 0)$ und $p(x, t = 0)$ der Elektronen- und Löcherdichte wie folgt formuliert werden:

$$n(x, t = 0) = p(x, t = 0) = \frac{1}{l} \int_0^l dy n(x, y, t = 0) = \frac{\alpha_{\text{en}} \Psi_0}{\alpha W_{\pm} l} (1 - e^{-\alpha l}) = n_{0,f}. \quad (7.2)$$

Mithilfe dieser Randbedingungen ergeben sich aus den allgemeinen Lösungen der Kontinuitätsgleichungen (siehe Gleichung (3.5)) die Elektronen- und Löcherdichte im Absorber eines Detektor-Elements des

gefalteten Röntgendetektors im Falle eines elektrischen Feldes $\mathbf{F} = -F\mathbf{e}_x$, das in negativer x -Richtung orientiert ist, zu:

$$n(x, t) = \begin{cases} n_{0,f}e^{-t/\tau_e} & \mu_e Ft < x < d, \\ 0 & x < \mu_e Ft \text{ und } x > d, \end{cases} \quad (7.3a)$$

$$p(x, t) = \begin{cases} n_{0,f}e^{-t/\tau_h} & 0 < x < d - \mu_h Ft, \\ 0 & x < 0 \text{ und } x > d - \mu_h Ft. \end{cases} \quad (7.3b)$$

Gemäß der Gleichung (3.12a) und mithilfe der Gleichungen (7.3) ergibt sich dann die induzierte Ladung Q_f in einem Detektor-Element des gefalteten Röntgendetektors zu [63]:

$$Q_f = -\frac{eFA_{el}}{d} \left[\mu_e \int_0^{t_e} dt \int_0^d dx n(x, t) + \mu_h \int_0^{t_h} dt \int_0^d dx p(x, t) \right], \quad (7.4a)$$

$$= -\frac{eFA_{el}}{d} n_{0,f} \left[\mu_e \int_0^{t_e} dt \int_{\mu_e Ft}^d dx e^{-t/\tau_e} + \mu_h \int_0^{t_h} dt \int_0^{d-\mu_h Ft} dx e^{-t/\tau_h} \right], \quad (7.4b)$$

$$= -eA_{el} \frac{d}{l} \Phi_0 \underbrace{\left(1 - e^{-\alpha l}\right)}_{\eta_{x,f}} \underbrace{\frac{E}{W_{\pm}} \left(\frac{\alpha_{en}}{\alpha}\right)}_{\eta_m} \underbrace{\left[x_e^2 \left(e^{-1/x_e} - 1\right) + x_e + x_h^2 \left(e^{-1/x_h} - 1\right) + x_h \right]}_{\eta_{cc,f}}, \quad (7.4c)$$

$$= -eA_{el} \frac{d}{l} \Phi_0 \eta_{x,f} \eta_m \eta_{cc,f}. \quad (7.4d)$$

Für den Fall eines elektrischen Feldes $\mathbf{F} = F\mathbf{e}_x$, das in positiver x -Richtung ausgerichtet ist, ergibt sich in Gleichung (7.4a) ein Vorzeichenwechsel. Des Weiteren kehrt sich die Bewegungsrichtung der Ladungsträgerdichten in den Gleichungen (7.3) um. Aufgrund der homogenen Randbedingungen der Ladungsträgerdichten im Bezug auf die Position in der x -Richtung (siehe Gleichung (7.2)) hat die Bewegungsrichtung der Ladungsträger keinen Einfluss auf das Ergebnis der Integrale in den Gleichungen (7.4), und die induzierte Ladung Q_f für den Fall eines elektrischen Feldes $\mathbf{F} = F\mathbf{e}_x$ ergibt sich zu [63]:

$$Q_f = eA_{el} \frac{d}{l} \Phi_0 \eta_{x,f} \eta_m \eta_{cc,f}. \quad (7.5)$$

Gemäß der Gleichung (2.21) kann die Röntgensensitivität S eines direkten Röntgendetektors mithilfe des Betrags der induzierten Ladung $|Q|$, der Energiedosis der einfallenden Röntgenstrahlung in Luft D_{air} und der bestrahlten Fläche A definiert werden: $S = |Q|/(D_{air}A)$. In Analogie zur Modellierung einschichtiger Röntgendetektoren (siehe Abschnitt 3.1.4) kann der Betrag der induzierten Ladung $|Q|$ des betrachteten gefalteten Röntgendetektors mithilfe der Gleichungen (7.4d) und (7.5) modelliert werden. Aufgrund der Neuausrichtung der Detektor-Elemente entlang der einfallenden Röntgenstrahlung entstehen inaktive Bereiche zwischen den Absorbern der einzelnen Detektor-Elemente des gefalteten Röntgendetektors (siehe Abbildung 7.2 (b)). Unter Vernachlässigung der Schichtdicken der vergleichsweise dünnen Elektroden

ergibt sich die Kantenlänge der bestrahlten Fläche A_{ref} eines Detektor-Elements des gefalteten Röntgendetektors in x -Richtung zu $d + 2d_{\text{foil}}$. Mithilfe der Kantenlänge l der Fläche der Elektroden A_{el} in y -Richtung folgt für das Verhältnis der beiden Flächen: $A_{\text{el}}/A_{\text{ref}} = l/(d + 2d_{\text{foil}})$. Unter Verwendung der Definition der Energiedosis der einfallenden Röntgenstrahlung in Luft D_{air} in Gleichung (2.18) (siehe Abschnitt 3.1.4 für eine Beschreibung der zugrundeliegenden Annahmen) ergibt sich die theoretische Röntgensensitivität $S_{\text{theo,f}}$ gefalteter Röntgendetektoren zu [63]:

$$S_{\text{theo,f}} = S_0 \eta_{\text{fill}} \eta_{\text{x,f}} \eta_{\text{m}} \eta_{\text{cc,f}}, \quad (7.6)$$

mit

$$\eta_{\text{fill}} = \frac{d}{d + 2d_{\text{foil}}}, \quad (7.7a)$$

$$\eta_{\text{x,f}} = 1 - e^{-\alpha l}, \quad (7.7b)$$

$$\eta_{\text{cc,f}} = x_{\text{e}}^2 \left(e^{-1/x_{\text{e}}} - 1 \right) + x_{\text{e}} + x_{\text{h}}^2 \left(e^{-1/x_{\text{h}}} - 1 \right) + x_{\text{h}}. \quad (7.7c)$$

Hierbei beschreibt η_{fill} den Füllfaktor des gefalteten Röntgendetektors. Die Größen S_0 und η_{m} in Gleichung (7.6) entsprechen den Größen aus den Gleichungen (3.15).

7.2.2 Röntgensensitivität von gefalteten Röntgendetektoren mit quasi-direkten Absorbern

In Analogie zur Erweiterung des Simulationsmodells mehrschichtiger Röntgendetektoren (siehe Abschnitt 6.2.2) kann auch die in Abschnitt 7.2.1 beschriebene Modellierung der Röntgensensitivität gefalteter Röntgendetektoren auf gefaltete Röntgendetektoren mit quasi-direkten Absorbern (siehe Abschnitt 2.3.3) erweitert werden. Der einzige relevante Unterschied zu der in Abschnitt 6.2.2 beschriebenen Erweiterung besteht in der effektiven Wegstrecke der Röntgenphotonen im Szintillator-Material. Anders als beim mehrschichtigen Röntgendetektor ist durch die Neuausrichtung der Detektor-Elemente hierbei nicht die Schichtdicke d sondern die Kantenlänge l der Absorber relevant. Mithilfe des Volumenanteils f der Szintillator-Teilchen im quasi-direkten Absorber ergibt sich die effektive Wegstrecke in einem Detektor-Element des gefalteten Röntgendetektors zu lf . In Analogie zu Abschnitt 6.2.2 lässt sich die theoretische Röntgensensitivität $S_{\text{theo,f}}$ gefalteter Röntgendetektoren mit quasi-direkten Absorbern dann mithilfe von Gleichung (7.6) und abgewandelten Funktionsargumenten modellieren:

$$S_{\text{theo,f}}(W_{\pm}, \alpha l) \rightarrow S_{\text{theo,f}}(1/\gamma, \alpha lf). \quad (7.8)$$

Dabei ist γ die Umwandlungseffizienz des Szintillator-Materials.

7.2.3 Detektive Quanteneffizienz von gefalteten Röntgendetektoren

Die in Abschnitt 3.2 beschriebene Modellierung der Detektiven Quanteneffizienz einschichtiger Röntgendetektoren basiert auf einem vierstufigen linearen System (siehe Abbildung 3.4). Hierbei basieren die Modell-Stufen 1-3 auf der Modellierung der Röntgensensitivität einschichtiger Röntgendetektoren, und die Modell-Stufe 4 repräsentiert eine Rausch-Additions-Stufe. Gemäß der Erweiterung der Modellierung der Röntgensensitivität auf gefaltete Röntgendetektoren (siehe Abschnitt 7.2.1) kann die Signalausbreitung in gefalteten Röntgendetektoren in Analogie zu einschichtigen Röntgendetektoren als eine Verkettung der Röntgenabsorption, der Konversion in Ladungsträger und der Ladungssammlung beschrieben werden. Im Falle der hier betrachteten gefalteten Röntgendetektoren hängt die Signalausbreitung zusätzlich zu diesen drei Prozessen vom Füllfaktor η_{fill} des Detektors ab (siehe Abschnitt 7.2.1). In Analogie zu den Prozessen der Röntgenabsorption, der Konversion in Ladungsträger und der Ladungssammlung wird der Einfluss des Füllfaktors η_{fill} im Rahmen dieser Arbeit mithilfe einer zusätzlichen Modell-Stufe in der Kaskade linearer Systeme modelliert. Infolgedessen wird das für die Modellierung einschichtiger Röntgendetektoren verwendete vierstufige lineare System aus Abschnitt 3.2 um eine Modell-Stufe am Eingang des linearen Systems erweitert. Der grundlegende Aufbau des linearen Systems, das in dieser Arbeit für die Modellierung der Detektiven Quanteneffizienz gefalteter Röntgendetektoren verwendet wird, ist in Abbildung 7.3 dargestellt. Die Modell-Stufe 1 beschreibt hierbei den Einfluss des Füllfaktors η_{fill} des Detektors. Vorausgesetzt, dass der Einfluss des Füllfaktors η_{fill} als eine Quantenauswahl-Stufe modelliert werden kann, lassen sich die mittlere Quantenfluenz $\bar{\Phi}_1$ und die Rauschleistung Σ_1 am Ausgang der Modell-Stufe 1 mithilfe von Gleichung (3.16) beschreiben. Unter der Annahme, dass dieser Auswahl-Prozess in Analogie zur Absorption der Röntgenphotonen (siehe Abschnitt 3.2.2.2) durch eine Binomialverteilung beschrieben werden kann, lässt sich die mittlere Auswahl $\bar{g}_1 = \eta_{\text{fill}}$ durch den Füllfaktor η_{fill} aus Abschnitt 7.2.1 darstellen, und die zugehörige Varianz $\sigma_{g_1}^2$ ergibt sich zu $\sigma_{g_1}^2 = \eta_{\text{fill}} (1 - \eta_{\text{fill}})$. Die mittlere Quantenfluenz $\bar{\Phi}_1$ und die Rauschleistung Σ_1 am Ausgang der Modell-Stufe 1 (siehe Abbildung 7.3) ergeben sich dann gemäß Gleichung (3.16) und mithilfe von Abschnitt 3.2.2.1 zu:

$$\bar{\Phi}_1 = \bar{\Phi}_0 \eta_{\text{fill}}, \quad \Sigma_1 = \eta_{\text{fill}}^2 \bar{\Phi}_0 + \eta_{\text{fill}} (1 - \eta_{\text{fill}}) \bar{\Phi}_0 = \bar{\Phi}_0 \eta_{\text{fill}}. \quad (7.9)$$

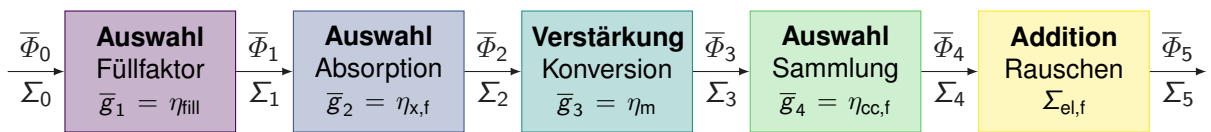


Abbildung 7.3: Blockdiagramm des linearen Systems zur Modellierung der Signal- und Rauschenausbreitung in gefalteten Röntgendetektoren. Das lineare System setzt sich aus fünf kaskadierten linearen Systemen zusammen, die jeweils eine Modell-Stufe repräsentieren. Bei den Modell-Stufen 1-4 handelt es sich um Quantenverstärkungs- oder Quantenauswahl-Stufen, die durch eine mittlere Verstärkung (Auswahl) \bar{g}_i charakterisiert werden können. Die Modell-Stufe 5 repräsentiert eine Rausch-Additions-Stufe, welche die Addition einer elektronischen Rauschleistung $\Sigma_{\text{el},f}$ ermöglicht. Die Ausbreitung der mittleren Quantenfluenz $\bar{\Phi}_i$ und der Rauschleistung Σ_i durch die einzelnen Modell-Stufen i ist ebenfalls dargestellt. Reproduziert in Anlehnung an Mescher et al. [63].

Die Modell-Stufen 2-5 des hier verwendeten linearen Systems (siehe Abbildung 7.3) entsprechen den Modell-Stufen 1-4 des linearen Systems aus Abschnitt 3.2 (siehe Abbildung 3.4), das für die Modellierung der Detektiven Quanteneffizienz einschichtiger Röntgendetektoren verwendet wird. Die Signal- und Rauschleistung durch die Modell-Stufen 2-5 lassen sich mithilfe der in Abschnitt 3.2.2 beschriebenen Zusammenhänge modellieren. Hierbei müssen die angepasste Röntgenabsorptionseffizienz $\eta_{x,f}$, die angepasste Ladungssammelleffizienz $\eta_{cc,f}$ und die Rauschleistung $\Sigma_{el,f}$ des gefalteten Röntgendetektors beachtet werden (siehe Abschnitt 7.2.1). Gemäß der Zusammenhänge in Abschnitt 3.2.2 und mithilfe von Gleichung (7.9) ergeben sich die mittlere Quantenfluenz $\bar{\Phi}_5$ und die Rauschleistung Σ_5 am Ausgang des hier verwendeten linearen Systems (siehe Abbildung 7.3) zu:

$$\bar{\Phi}_5 = \bar{\Phi}_0 \eta_{fill} \eta_{x,f} \eta_m \eta_{cc,f}, \quad \Sigma_5 = \bar{\Phi}_0 \eta_{fill} \eta_{x,f} \eta_m \eta_{cc,f} (1 + \eta_m \eta_{cc,f}) + \Sigma_{el,f}. \quad (7.10)$$

Die quadrierten Signal-Rausch-Verhältnisse $\text{SNR}_{in,out}^2(0)$ bei der Ortsfrequenz $u = 0$ am Eingang und am Ausgang des hier verwendeten linearen Systems (siehe Abbildung 7.3) ergeben sich dann in Analogie zu Gleichung (3.22) und mithilfe von Gleichung (7.10) zu:

$$\text{SNR}_{in}^2(0) = \frac{\bar{\Phi}_0^2}{\Sigma_0} = \bar{\Phi}_0, \quad \text{SNR}_{out}^2(0) = \frac{\bar{\Phi}_5^2}{\Sigma_5} = \frac{\bar{\Phi}_0 \eta_{fill} \eta_{x,f} \eta_m \eta_{cc,f}}{1 + \eta_m \eta_{cc,f} + \left(\frac{\Sigma_{el,f}}{\bar{\Phi}_0} \right) \frac{1}{\eta_{fill} \eta_{x,f} \eta_m \eta_{cc,f}}}. \quad (7.11)$$

Gemäß der Definition in Gleichung (2.27) und mithilfe der Ergebnisse aus Gleichung (7.11) kann die Detektive Quanteneffizienz $\text{DQE}_f(0)$ eines gefalteten Röntgendetektors bei der Ortsfrequenz $u = 0$ dann wie folgt modelliert werden [63]:

$$\text{DQE}_f(0) = \frac{\text{SNR}_{out}^2(0)}{\text{SNR}_{in}^2(0)} = \frac{\eta_{fill} \eta_{x,f} \eta_m \eta_{cc,f}}{1 + \eta_m \eta_{cc,f} + \left(\frac{\Sigma_{el,f}}{\bar{\Phi}_0} \right) \frac{1}{\eta_{fill} \eta_{x,f} \eta_m \eta_{cc,f}}}. \quad (7.12)$$

Die elektronische Rauschleistung $\Sigma_{el,f}$, die beim Auslesen eines gefalteten Röntgendetektors auftritt, lässt sich in Analogie zu einem einschichtigen Röntgendetektor gemäß Gleichung (3.24) mithilfe des Dunkelstroms I_d , der Integrationszeit t_{int} und der bestrahlten Fläche A_{ref} eines Detektor-Elements des gefalteten Röntgendetektors (siehe Abbildung 7.2) sowie der Elementarladung e modellieren (siehe Abschnitt 3.2.3 für die zugrunde liegenden Annahmen) [63]:

$$\Sigma_{el,f} = \frac{I_d t_{int}}{A_{ref} e}. \quad (7.13)$$

Es sei darauf hingewiesen, dass aufgrund der Neuausrichtung der Detektor-Elemente im Falle eines gefalteten Röntgendetektors zwischen der Fläche der Elektroden A_{el} und der bestrahlten Fläche A_{ref} unterschieden werden muss (siehe Abbildung 7.2). Anders als im Falle einschichtiger und mehrschichtiger Röntgendetektoren, für die beide Flächen identisch sind, bezieht sich die elektronische Rauschleistung $\Sigma_{el,f}$ eines gefalteten Röntgendetektors in Gleichung (7.13) daher explizit auf die bestrahlte Fläche A_{ref} eines Detektor-Elements des gefalteten Röntgendetektors. In Analogie zur Modellierung einschichtiger Röntgendetektoren in Abschnitt 3.2.3 ergibt sich das Verhältnis aus der elektronischen Rauschleistung

$\Sigma_{\text{el},f}$ und der mittleren Photonenfluenz $\bar{\Phi}_0$ der einfallenden Röntgenphotonen in Gleichung (7.12) mithilfe von Gleichung (7.13) zu (siehe Abschnitt 3.2.3 für die zugrundeliegenden Annahmen) [63]:

$$\frac{\Sigma_{\text{el},f}}{\bar{\Phi}_0} = \frac{I_d}{A_{\text{ref}} e \dot{\Phi}_0} = \frac{J_d}{e \dot{\Phi}_0} \frac{A_{\text{el}}}{A_{\text{ref}}} = \frac{J_d}{e \dot{\Phi}_0} \frac{l}{d + 2d_{\text{foil}}}. \quad (7.14)$$

Hierbei ist $\dot{\Phi}_0$ die Photonenfluenzrate der einfallenden Röntgenstrahlung und $J_d = I_d/A_{\text{el}}$ die Dunkelstromdichte eines Detektor-Elements des gefalteten Röntgendetektors. Der letzte Umformungsschritt in Gleichung (7.14) basiert auf dem in Abschnitt 7.2.1 beschriebenen Zusammenhang $A_{\text{el}}/A_{\text{ref}} = l/(d + 2d_{\text{foil}})$ zwischen der Fläche der Elektroden A_{el} , der bestrahlten Fläche A_{ref} , der Kantenlänge l und der Schichtdicke d des Absorbers sowie der Substrat-Schichtdicke d_{foil} .

7.3 Simulation und Design von gefalteten Röntgendetektoren

In Analogie zu den Untersuchungen mehrschichtiger Röntgendetektoren in Abschnitt 6.3 wird die Leistungsfähigkeit gefalteter Röntgendetektoren in den folgenden Abschnitten mithilfe der Röntgensensitivität S (siehe Abschnitt 2.2.2.1) und der Detektiven Quanteneffizienz DQE (siehe Abschnitt 2.2.2.3) bewertet. Zu diesem Zweck werden auf der Grundlage der in Abschnitt 7.2 beschriebenen Erweiterungen der Simulationsmodelle die Röntgensensitivität $S_{\text{theo},f}$ und die Detektive Quanteneffizienz $\text{DQE}_f(0)$ von gefalteten Röntgendetektoren untersucht. In Anlehnung an Abschnitt 6.3 werden hierfür beide Größen für unterschiedliche Design- und Bestrahlungsparameter simuliert und analysiert, Designvorgaben werden entwickelt und die theoretische Leistungsfähigkeit wird mit einschichtigen und mehrschichtigen Röntgendetektoren verglichen.

7.3.1 Parameter für die Simulation von gefalteten Röntgendetektoren

Der grundlegende Aufbau, der für die Simulation von gefalteten Röntgendetektoren in diesem Kapitel verwendet wird, ist in Abbildung 7.2 (b) dargestellt. Die betrachteten gefalteten Röntgendetektoren bestehen aus einzelnen Detektor-Elementen, die sich jeweils im Wesentlichen aus dem Substrat und einem Absorber der Schichtdicke d und der Kantenlänge l , der sich zwischen zwei Elektroden befindet, zusammensetzen. Zwischen den jeweiligen Elektroden herrscht ein elektrisches Feld \mathbf{F} , das durch eine extern angelegte Spannung U erzeugt wird. Die Detektor-Elemente sind darüber hinaus so ausgerichtet, dass sich die einfallende Röntgenstrahlung entlang der Kantenlänge l ausbreitet. Entsprechend der Untersuchungen einschichtiger und mehrschichtiger Röntgendetektoren in den Kapiteln 5 und 6 wird die Leistungsfähigkeit gefalteter Röntgendetektoren in diesem Kapitel für den Fall einer Bestrahlung mit monoenergetischer Röntgenstrahlung mit Photonen der Energie E und einer Photonenfluenzrate $\dot{\Phi}_0$ untersucht. Die Parameter

für die Simulation gefalteter Röntgendetektoren lassen sich in Analogie zu den Parametern einschichtiger und mehrschichtiger Röntgendetektoren (siehe Abschnitt 5.2 und 6.3.1) in Designparameter des Detektors, Materialparameter des Absorber-Materials und Bestrahlungsparameter unterteilen.

Die Parameter, die für die Simulation und das Design gefalteter Röntgendetektoren verwendet werden, orientieren sich im Wesentlichen an den Untersuchungen mehrschichtiger Röntgendetektoren (siehe Abschnitt 6.3.1). Im Hinblick auf die Designparameter gefalteter Röntgendetektoren beschränken sich die Untersuchungen in diesem Kapitel auf das verwendete Absorber-Material, die Schichtdicke d und die Kantenlänge l der Absorber. Das elektrische Feld \mathbf{F} zwischen den Elektroden wird entsprechend der Untersuchungen mehrschichtiger Röntgendetektoren auch im Falle gefalteter Röntgendetektoren nicht variiert. Durch die Neuausrichtung der Absorber, die durch die Faltung und die anschließende Rotation erreicht wird, haben gefaltete Röntgendetektoren in Analogie zu mehrschichtigen Röntgendetektoren ebenfalls das Potential einer hohen Leistungsfähigkeit ohne dabei auf übermäßig dicke Absorber angewiesen zu sein. Abweichend vom Konzept mehrschichtiger Röntgendetektoren bestehen die Anforderungen an das Absorber-Material, welches für eine Realisierung gefalteter Röntgendetektoren benötigt wird, allerdings nicht nur in einer kosteneffizienten und möglichst großflächigen Herstellung auf dünnen Substraten mit einer geringen Wechselwirkung mit den Röntgenphotonen. Der zunächst in einem planaren Aufbau realisierte Röntgendetektor muss darüber hinaus unbeschadet gefaltet werden können (siehe Abbildung 7.1). Mithilfe einer strukturierten Abscheidung kann eine explizite Faltung des Absorber-Materials vermieden werden. Die mechanische Belastung auf das Absorber-Material wird somit signifikant reduziert, und eine zerstörungsfreie Faltung wird erheblich begünstigt. Als faltbares Substrat-Material kommen in Analogie zu mehrschichtigen Röntgendetektoren dünne Polymer-Substrate in Betracht. Die Verwendung von Polymer-Substraten limitiert jedoch die Temperatur, die während der Herstellung verwendet werden kann. Entsprechend den Untersuchungen mehrschichtiger Röntgendetektoren werden im Rahmen dieser Arbeit quasi-direkte Absorber, die sich aus Szintillator-Teilchen auf der Basis von Terbium-dotiertem Gadoliniumoxysulfid (GOS:Tb) und einer organischen Bulk-Heterojunction bestehend aus Poly(3-hexylthiophen-2,5-diyl) (P3HT) und Phenyl- C_{61} Buttersäuremethylester (PCBM) zusammensetzen (siehe Abschnitt 2.3.3), und direkte Absorber bestehend aus polykristallinem MAPbI₃ (p-MAPbI₃) (MA, kurz für Methylammonium) (siehe Abschnitt 2.3.2) als potentielle Absorber-Materialien für gefaltete Röntgendetektoren untersucht. Das quasi-direkte Absorber-Material wird im Folgenden wie schon in Kapitel 6 als P3HT:PCBM:GOS:Tb bezeichnet. Die wesentlichen Materialparameter der Absorber-Materialien, die für die Simulationen in diesem Kapitel verwendet werden, sind in den Tabellen 5.1 und 6.1 zusammengefasst. Im Falle von P3HT:PCBM:GOS:Tb basieren die Simulationen in Analogie zu den Untersuchungen mehrschichtiger Röntgendetektoren darüber hinaus auf dem optimalen Volumenanteil $f = 0.67$ [38] der Szintillator-Teilchen im quasi-direkten Absorber (siehe Abschnitt 7.2.2). Beide Absorber-Materialien können lösungsbasiert abgeschieden werden und ermöglichen daher insbesondere eine strukturierte Fabrikation auf der Basis von digitalen Drucktechnologien. Darüber hinaus können beide Absorber kosteneffizient, großflächig und bei niedrigen Temperaturen auf dünnen Polymer-Substraten realisiert werden. In Analogie zu den Simulationen mehrschichtiger Röntgendetektoren, orientieren sich die untersuchten Schichtdicken d in diesem Kapitel ebenfalls an den vergleichsweise geringen Schichtdicken d , die üblicherweise mithilfe einer lösungsbasierten Abscheidung hergestellt werden können, und

es werden Schichtdicken d im Intervall $10^{-8} \text{ m} \leq d \leq 10^{-4} \text{ m}$ untersucht. Im Hinblick auf die Kantenlänge l der Absorber werden Werte im Intervall $10^{-5} \text{ m} \leq l \leq 10^0 \text{ m}$ als relevant und realisierbar betrachtet. In Anlehnung an die in [98] demonstrierten Solarzellen auf extrem dünnen Substraten wird die Leistungsfähigkeit der gefalteten Röntgendetektoren für Polymer-Substrate mit einer Schichtdicke von $d_{\text{foil}} = 1.4 \text{ }\mu\text{m}$ bewertet. Die Wechselwirkungskoeffizienten der unterschiedlichen Materialien, die für die Simulationen in diesem Kapitel benötigt werden, basieren auf den in Abschnitt 2.1.4.2 beschriebenen Zusammenhängen.

Um eine Vergleichbarkeit der Leistungsanalysen zu gewährleisten, werden die Simulationen in diesem Kapitel für die gleichen Bestrahlungsparameter durchgeführt, auf deren Grundlage die Leistungsfähigkeit mehrschichtiger Röntgendetektoren in Abschnitt 6.3 untersucht wird. Die Simulationen gefalteter Röntgendetektoren basieren folglich ebenfalls auf den drei repräsentativen Photonenenergien $E \in \{20 \text{ keV}, 60 \text{ keV}, 511 \text{ keV}\}$ und werden darüber hinaus für eine hohe Photonenflussrate $\dot{\Phi}_{0,\text{high}} = 10^8 \text{ mm}^{-2} \text{ s}^{-1}$ und für eine niedrige Photonenflussrate $\dot{\Phi}_{0,\text{low}} = 10^5 \text{ mm}^{-2} \text{ s}^{-1}$ durchgeführt (siehe Abschnitt 5.2 und 6.3.1 für die zugrundeliegenden Auswahlkriterien).

7.3.2 Optimierung der Röntgensensitivität

In Analogie zur Leistungsanalyse mehrschichtiger Röntgendetektoren in Abschnitt 6.3 wird im folgenden Abschnitt zunächst untersucht, welches der beiden in Betracht gezogenen Absorber-Materialien sich am besten für eine Realisierung gefalteter Röntgendetektoren eignet. Hierfür wird die theoretische Röntgensensitivität $S_{\text{theo},f}$ auf der Grundlage einer simulierten Variation der Schichtdicke d und der Kantenlänge l der Absorber im Falle beider Absorber-Materialien optimiert. Darüber hinaus wird der Einfluss der Photonenenergie E auf die optimalen Designparameter und die zugehörige theoretische Röntgensensitivität $S_{\text{theo},f}$ bewertet. Im Rahmen der folgenden Untersuchungen wird ein konstanter Betrag des elektrischen Feldes F von $F = 0.25 \text{ V }\mu\text{m}^{-1}$ angenommen.

7.3.2.1 Einfluss des Absorber-Materials

Die theoretische Röntgensensitivität $S_{\text{theo},f}$ gefalteter Röntgendetektoren, die mit quasi-direkten Absorbern bestehend aus P3HT:PCBM:GOS:Tb und direkten Absorbern bestehend aus p-MAPbI₃ erreicht werden kann, ist in Abbildung 7.4 in Abhängigkeit der Schichtdicke d und der Kantenlänge l der Absorber dargestellt. Die Simulationsergebnisse sind hierbei im Falle von monoenergetischen Röntgenphotonen der Energie $E = 60 \text{ keV}$ gezeigt und basieren im Falle von p-MAPbI₃ auf einem hohen Beweglichkeit-Lebensdauer-Produkt $\mu\tau_{\text{high}}$.

Die Simulationsergebnisse in Abbildung 7.4 zeigen eine starke Abhängigkeit von der Schichtdicke d der Absorber. Anders als im Falle einschichtiger und mehrschichtiger Röntgendetektoren kann diese Abhängigkeit allerdings nicht durch den gegensätzlichen Einfluss der Röntgenabsorptionseffizienz $\eta_{x,f}$ und der Ladungssammeleffizienz $\eta_{cc,f}$ erklärt werden, da im Falle gefalteter Röntgendetektoren keine formale Kopplung der beiden Effizienzen über die Schichtdicke d existiert (siehe Gleichungen (7.6) und (7.7)).

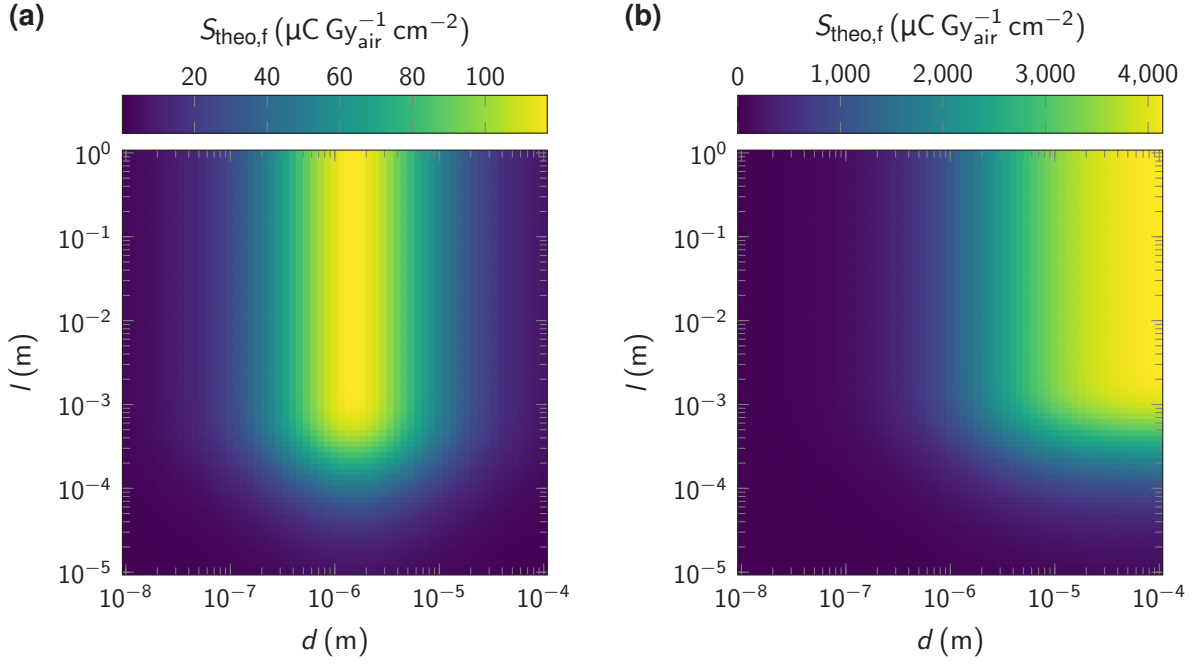


Abbildung 7.4: Simulierte Röntgensensitivität gefalteter Röntgendetektoren im Falle von quasi-direkten und direkten Absorbern. Theoretische Röntgensensitivität $S_{\text{theo},f}$ gefalteter Röntgendetektoren in Abhängigkeit der Schichtdicke d und der Kantenlänge l der Absorber im Falle von monoenergetischen Röntgenphotonen der Energie $E = 60 \text{ keV}$. **(a)** Simulationsergebnis für quasi-direkte Absorber, die sich aus Szintillator-Teilchen auf der Basis von Terbium-dotiertem Gadoliniumoxysulfid (GOS:Tb) und einer organischen Bulk-Heterojunction bestehend aus Poly(3-hexylthiophen-2,5-diyl) (P3HT) und Phenyl-C₆₁Buttersäuremethylester (PCBM) zusammensetzen (P3HT:PCBM:GOS:Tb). **(b)** Simulationsergebnis für direkte Absorber bestehend aus polykristallinem MAPbI₃ (p-MAPbI₃) (MA, kurz für Methylammonium) mit einem hohen Beweglichkeit-Lebensdauer-Produkt $\mu\tau_{\text{high}}$. Abbildung (b) reproduziert in Anlehnung an Mescher et al. [63].

Im Falle gefalteter Röntgendetektoren wird die Abhängigkeit der theoretischen Röntgensensitivität $S_{\text{theo},f}$ von der Schichtdicke d durch den gegensätzlichen Einfluss des Füllfaktors η_{fill} und der Ladungssammeleffizienz $\eta_{\text{cc},f}$ hervorgerufen (siehe Gleichungen (7.6) und (7.7)). Mit zunehmender Schichtdicke d steigt einerseits der Füllfaktor η_{fill} , wohingegen die Ladungssammeleffizienz $\eta_{\text{cc},f}$ mit steigender Schichtdicke d abnimmt. Folglich existiert auch im Falle gefalteter Röntgendetektoren eine optimale Schichtdicke d , die das Produkt aus dem Füllfaktor η_{fill} und der Ladungssammeleffizienz $\eta_{\text{cc},f}$ und somit ebenfalls die theoretische Röntgensensitivität $S_{\text{theo},f}$ maximiert. Im Falle eines konstanten Betrags des elektrischen Feldes F wird die Schichtdicke d , ab welcher die Ladungssammeleffizienz $\eta_{\text{cc},f}$ erheblich abnimmt, durch die Ladungstransporteigenschaften des Absorber-Materials bestimmt. Demzufolge hängt die optimale Schichtdicke d , welche die theoretische Röntgensensitivität $S_{\text{theo},f}$ im untersuchten Bereich maximiert, in Analogie zu einschichtigen und mehrschichtigen Röntgendetektoren vom Beweglichkeit-Lebensdauer-Produkt $\mu\tau$ des Absorber-Materials ab. Das vergleichsweise geringe Beweglichkeit-Lebensdauer-Produkt $\mu\tau = 1.8 \times 10^{-8} \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1}$ von P3HT:PCBM (siehe Tabelle 6.1) bewirkt folglich relative geringe optimale Schichtdicken d im Falle von Absorbern bestehend aus P3HT:PCBM:GOS:Tb (siehe Abbildung 7.4 (a)). Im Gegensatz dazu ermöglicht das erheblich größere Beweglichkeit-Lebensdauer-Produkt $\mu\tau_{\text{high}} = 10^{-4} \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1}$ von p-MAPbI₃ (siehe Tabelle 5.1) signifikant größere optimale Schichtdicken

d , die in Analogie zur Untersuchung mehrschichtiger Röntgendetektoren bis zur Grenze des Intervalls $10^{-8} \text{ m} \leq d \leq 10^{-4} \text{ m}$ der untersuchten Schichtdicken d reichen (siehe Abbildung 7.4 (b)).

Zusätzlich zur Abhängigkeit von der Schichtdicke d zeigt die simulierte Röntgensensitivität $S_{\text{theo},f}$ in Abbildung 7.4 ebenfalls eine starke Abhängigkeit von der Kantenlänge l der Absorber. Im Gegensatz zu einschichtigen und mehrschichtigen Röntgendetektoren sind die Röntgenabsorptionseffizienz $\eta_{x,f}$ und die Ladungssammeleffizienz $\eta_{cc,f}$ im Falle gefalteter Röntgendetektoren formal entkoppelt, und die Röntgenabsorptionseffizienz $\eta_{x,f}$ besitzt keine formale Abhängigkeit von der Schichtdicke d der Absorber (siehe Gleichungen (7.6) und (7.7)). Im Falle gefalteter Röntgendetektoren lässt sich somit die Effizienz, mit der Röntgenphotonen im Absorber absorbiert werden, unabhängig von der Schichtdicke d über die Kantenlänge l der Absorber beeinflussen. Folglich verbessert sich die Röntgenabsorptionseffizienz $\eta_{x,f}$ und damit die theoretische Röntgensensitivität $S_{\text{theo},f}$ mit zunehmender Kantenlänge l der Absorber.

Die Designvorgaben, die sich unter dem Gesichtspunkt einer maximalen theoretischen Röntgensensitivität $S_{\text{theo},f}$ ergeben, hängen gemäß der Simulationsergebnisse in Abbildung 7.4 wesentlich vom verwendeten Absorber-Material ab. Im Falle beider Absorber-Materialien ergibt sich eine optimale simulierte Röntgensensitivität $S_{\text{theo},f}$ für große Kantenlängen l der Absorber. Bedingt durch die unterschiedlichen Ladungstransporteigenschaften ergeben sich im Falle von P3HT:PCBM:GOS:Tb allerdings wesentlich geringere optimale Schichtdicken d (siehe Abbildung 7.4 (a)) als im Falle von p-MAPbI₃ (siehe Abbildung 7.4 (b)). Übereinstimmend mit den Untersuchungen mehrschichtiger Röntgendetektoren ermöglichen direkte Absorber bestehend aus p-MAPbI₃ verglichen mit quasi-direkten P3HT:PCBM:GOS:Tb Absorbern eine bedeutend höhere theoretische Röntgensensitivität $S_{\text{theo},f}$ (siehe Abbildung 7.4). Die signifikanten Unterschiede in der simulierten Leistungsfähigkeit werden hierbei zum Teil durch die unterschiedlichen Ladungstransporteigenschaften und die damit verbundenen unterschiedlichen optimalen Schichtdicken d hervorgerufen. Je größer die optimale Schichtdicke d gewählt werden kann, desto höhere Werte ergeben sich für den Füllfaktor η_{fill} . Ein verbesserter Füllfaktor η_{fill} wirkt sich wiederum positiv auf die simulierte Röntgensensitivität $S_{\text{theo},f}$ aus. Unterschiedliche Ladungssammeleffizienzen $\eta_{cc,f}$ bei der jeweiligen optimalen Schichtdicke d verstärken diesen Effekt zusätzlich. Folglich bewirkt die wesentlich größere optimale Schichtdicke d von p-MAPbI₃ verglichen mit P3HT:PCBM:GOS:Tb höhere Werte der theoretischen Röntgensensitivität $S_{\text{theo},f}$. In Analogie zu den Untersuchungen mehrschichtiger Röntgendetektoren bewirkt der bedeutend größere Kehrwert der Elektron-Loch-Paar Erzeugungsenergie $1/W_{\pm} = 0.2 \text{ eV}^{-1}$ von p-MAPbI₃ (siehe Tabelle 5.1) verglichen mit der Umwandlungseffizienz $\gamma = 0.06 \text{ eV}^{-1}$ von GOS:Tb (siehe Tabelle 6.1) zusätzlich einen Leistungsvorteil für p-MAPbI₃ im Hinblick auf die Konversionseffizienz η_m (siehe Gleichung (3.15c) und Abschnitt 7.2.2) und verstärkt somit den Unterschied in der simulierten Röntgensensitivität $S_{\text{theo},f}$.

In Analogie zu den Untersuchungen mehrschichtiger Röntgendetektoren ist es aufgrund der Vielzahl an Einflussfaktoren, welche die Qualität und die Eigenschaften eines Absorber-Materials beeinflussen können, auch im Falle von gefalteten Röntgendetektoren von besonderem Interesse zu bewerten, wie sich verschlechterte Materialeigenschaften auf die Leistungsfähigkeit der Röntgendetektoren auswirken. Aus diesem Grund zeigt Abbildung 7.5 die theoretische Röntgensensitivität $S_{\text{theo},f}$ gefalteter Röntgendetektoren, die mit direkten Absorbern bestehend aus p-MAPbI₃ mit verschlechterten Ladungstransporteigenschaften in Abhängigkeit der Schichtdicke d und der Kantenlänge l der Absorber erreicht werden

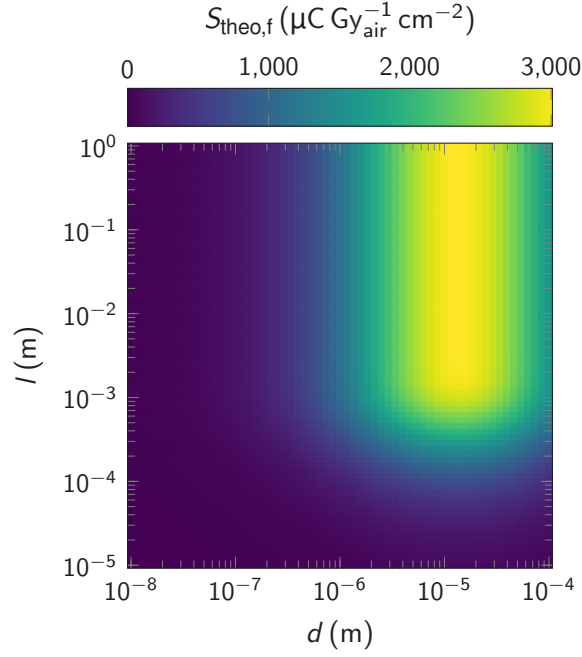


Abbildung 7.5: Simulierte Röntgensensitivität gefalteter Röntgendetektoren im Falle von direkten Absorbern bestehend aus polykristallinem MAPbI₃ mit verschlechterten Ladungstransporteigenschaften. Theoretische Röntgensensitivität $S_{\text{theo},f}$ gefalteter Röntgendetektoren in Abhängigkeit der Schichtdicke d und der Kantenlänge l der Absorber im Falle von monoenergetischen Röntgenphotonen der Energie $E = 60 \text{ keV}$ und direkten Absorbern bestehend aus polykristallinem MAPbI₃ (p-MAPbI₃) (MA, kurz für Methylammonium) mit einem niedrigen Beweglichkeit-Lebensdauer-Produkt $\mu\tau_{\text{low}}$. Reproduziert in Anlehnung an Mescher et al. [63].

kann. In Analogie zu den Untersuchungen in Abbildung 7.4 sind in Abbildung 7.5 Simulationsergebnisse für den Fall monoenergetischer Röntgenphotonen der Energie $E = 60 \text{ keV}$ gezeigt. Entsprechend der Untersuchungen mehrschichtiger Röntgendetektoren in Abschnitt 6.3.2.1 werden die verschlechterten Ladungstransporteigenschaften von p-MAPbI₃ mithilfe eines um zwei Größenordnungen reduzierten Beweglichkeit-Lebensdauer-Produkts $\mu\tau_{\text{low}} = 10^{-6} \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1}$ simuliert (siehe Tabelle 5.1). In Analogie zu den Simulationsergebnissen mehrschichtiger Röntgendetektoren führt das verschlechterte Beweglichkeit-Lebensdauer-Produkt von p-MAPbI₃ auch im Falle gefalteter Röntgendetektoren zu einer Reduktion der optimalen Schichtdicke d und wirkt sich damit negativ auf die maximal erreichbare theoretische Röntgensensitivität $S_{\text{theo},f}$ aus (siehe Abbildung 7.4 (b) und Abbildung 7.5). Verglichen mit den Simulationsergebnissen von P3HT:PCBM:GOS:Tb in Abbildung 7.4 (a) ermöglicht p-MAPbI₃ allerdings selbst mit den hier betrachteten stark verschlechterten Ladungstransporteigenschaften immer noch bedeutend höhere Werte für die theoretische Röntgensensitivität $S_{\text{theo},f}$ (siehe Abbildung 7.5).

Die Optimierung der theoretischen Röntgensensitivität $S_{\text{theo},f}$ gefalteter Röntgendetektoren auf der Basis von quasi-direkten Absorbern bestehend aus P3HT:PCBM:GOS:Tb und direkten Absorbern bestehend aus p-MAPbI₃ zeigt in Analogie zu den Untersuchungen mehrschichtiger Röntgendetektoren auch im Falle gefalteter Röntgendetektoren einen eindeutigen Leistungsvorteil für p-MAPbI₃ (siehe Abbildungen 7.4 und 7.5). Selbst mit verschlechterten Ladungstransporteigenschaften ermöglicht p-MAPbI₃ verglichen

mit P3HT:PCBM:GOS:Tb bedeutend höhere Werte für die simulierte Röntgensensitivität $S_{\text{theo,f}}$. Demzufolge eignet sich p-MAPbI₃ von den beiden untersuchten Absorber-Materialien auch im Falle gefalteter Röntgendetektoren am besten für eine Realisierung. In Analogie zu den Untersuchungen mehrschichtiger Röntgendetektoren beschränkt sich die Leistungsanalyse in den folgenden Abschnitten daher auf Simulationen auf der Basis von p-MAPbI₃.

7.3.2.2 Einfluss der Photonenenergie

Wie bereits im Rahmen der Untersuchungen mehrschichtiger Röntgendetektoren in Abschnitt 6.3.2.2 angemerkt ist, hat die Energie E der Röntgenphotonen einen erheblich Einfluss darauf, welche Absorber-Abmessungen für eine effiziente Röntgenabsorption erforderlich sind. Um den Einfluss der Photonenenergie E auf die optimalen Designparameter gefalteter Röntgendetektoren zu untersuchen, zeigt Abbildung 7.6 die theoretische Röntgensensitivität $S_{\text{theo,f}}$ gefalteter Röntgendetektoren in Abhängigkeit der Schichtdicke d und der Kantenlänge l der Absorber für den Fall niedriger und hoher Photonenenergien. Die Simulationsergebnisse sind hierbei für Absorber bestehend aus p-MAPbI₃ mit einem hohen Beweglichkeit-Lebensdauer-Produkt $\mu\tau_{\text{high}}$ und monoenergetischen Röntgenphotonen der Energie $E = 20 \text{ keV}$ und $E = 511 \text{ keV}$ dargestellt. Unabhängig von der Energie E der Röntgenphotonen ergeben

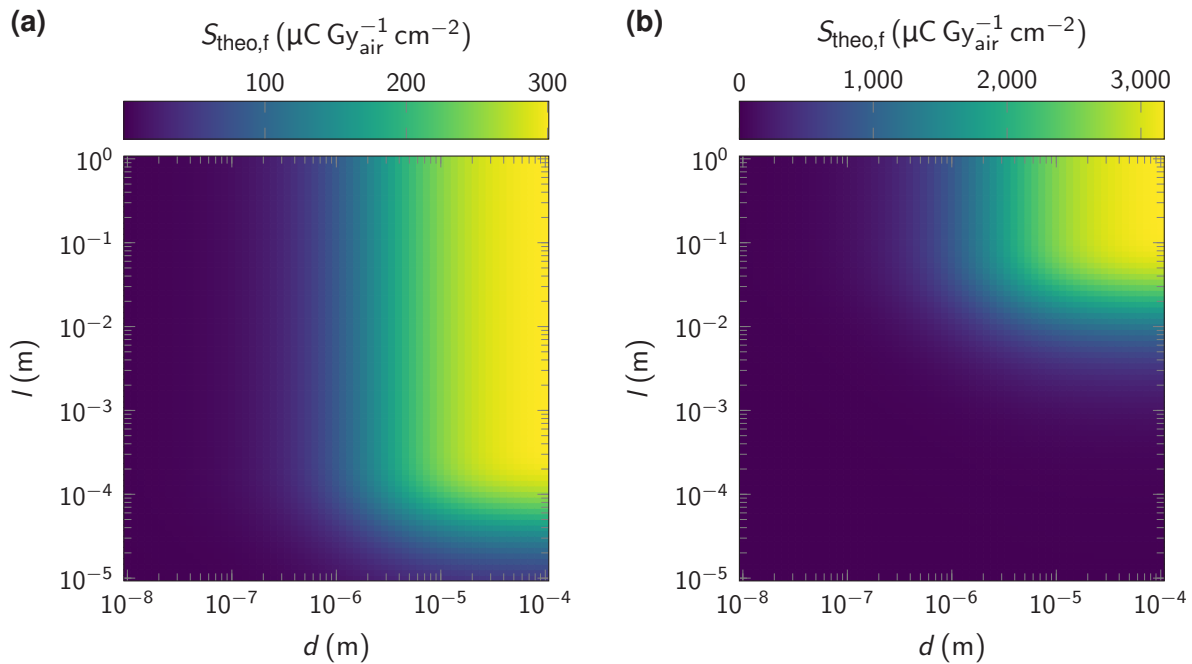


Abbildung 7.6: Simulierte Röntgensensitivität gefalteter Röntgendetektoren im Falle von niedrigen und hohen Photonenenergien. Theoretische Röntgensensitivität $S_{\text{theo,f}}$ gefalteter Röntgendetektoren in Abhängigkeit der Schichtdicke d und der Kantenlänge l der Absorber im Falle von direkten Absorbern bestehend aus polykristallinem MAPbI₃ (p-MAPbI₃) (MA, kurz für Methylanmonium) mit einem hohen Beweglichkeit-Lebensdauer-Produkt $\mu\tau_{\text{high}}$. **(a)** Simulationsergebnis für monoenergetische Röntgenphotonen der Energie $E = 20 \text{ keV}$. **(b)** Simulationsergebnis für monoenergetische Röntgenphotonen der Energie $E = 511 \text{ keV}$. Abbildung (a) reproduziert in Anlehnung an Mecher et al. [63].

sich für alle drei untersuchten Photonenenergien $E \in \{20 \text{ keV}, 60 \text{ keV}, 511 \text{ keV}\}$ ähnliche Designvorgaben mit einer optimalen theoretischen Röntgensensitivität $S_{\text{theo},f}$ bei großen Schichtdicken d und großen Kantenlängen l der Absorber (siehe Abbildung 7.4 (b) und Abbildung 7.6). Die Energie E der Röntgenphotonen hat jedoch einen erheblichen Einfluss darauf, ab welcher Absorber-Abmessung eine nahezu optimale theoretische Röntgensensitivität $S_{\text{theo},f}$ erreicht werden kann. Im Gegensatz zu einschichtigen und mehrschichtigen Röntgendetektoren findet die Absorption der Röntgenphotonen im Falle gefalteter Röntgendetektoren nicht entlang der Schichtdicke d sondern entlang der Kantenlänge l der Absorber statt (siehe Abbildung 7.2). Folglich lässt sich die Röntgenabsorptionseffizienz $\eta_{x,f}$ gefalteter Röntgendetektoren durch eine Anpassung der Kantenlänge l beeinflussen. Demzufolge verschiebt sich im Falle unterschiedlicher Energien E der Röntgenphotonen lediglich der Bereich der Kantenlängen l , der eine nahezu optimale theoretische Röntgensensitivität $S_{\text{theo},f}$ gewährleistet. Verglichen mit den Simulationsergebnissen in Abbildung 7.4 (b) für den Fall einer mittleren Photonenenergie $E = 60 \text{ keV}$ werden dementsprechend im Falle einer niedrigen Photonenenergie $E = 20 \text{ keV}$ bedeutend geringere Kantenlängen l und im Falle einer hohen Photonenenergie $E = 511 \text{ keV}$ erheblich größere Kantenlängen l benötigt, um eine hohe simulierte Röntgensensitivität $S_{\text{theo},f}$ zu gewährleisten (siehe Abbildung 7.6). In Analogie zu den Untersuchungen mehrschichtiger Röntgendetektoren in Abschnitt 6.3.2.2 ergeben sich die bedeutenden Unterschiede in der maximal erreichbaren theoretischen Röntgensensitivität $S_{\text{theo},f}$ für die drei untersuchten Photonenenergien in Abbildung 7.4 (b) und Abbildung 7.6 aus der Energieabhängigkeit des Produkts aus der Normierung S_0 und der Konversionseffizienz η_m (siehe Gleichungen (7.6) und (3.15)).

7.3.3 Optimierung der Detektiven Quanteneffizienz

Übereinstimmend mit den Untersuchungen mehrschichtiger Röntgendetektoren in Abschnitt 6.3 wird für die Leistungsanalyse gefalteter Röntgendetektoren neben der theoretischen Röntgensensitivität $S_{\text{theo},f}$ zusätzlich ebenfalls die theoretische Detektive Quanteneffizienz $\text{DQE}_f(0)$ analysiert. In Anlehnung an die Optimierung der theoretischen Röntgensensitivität $S_{\text{theo},f}$ in Abschnitt 7.3.2 wird in den folgenden Abschnitten die theoretische Detektive Quanteneffizienz $\text{DQE}_f(0)$ gefalteter Röntgendetektoren auf der Grundlage einer simulierten Variation der Schichtdicke d und der Kantenlänge l der Absorber optimiert. Die Untersuchungen beziehen sich hierbei auf unterschiedliche Photonenflussraten und Energien der einfallenden Röntgenphotonen, um den Einfluss verschiedener Bestrahlungsparameter auf die theoretische Detektive Quanteneffizienz $\text{DQE}_f(0)$ bewerten zu können. Im Rahmen der folgenden Untersuchungen wird ein konstanter Betrag des elektrischen Feldes F von $F = 0.25 \text{ V } \mu\text{m}^{-1}$ angenommen.

7.3.3.1 Einfluss der Photonenflussrate

Um bewerten zu können, wie sich eine veränderte Photonenflussrate auf die Leistungsfähigkeit gefalteter Röntgendetektoren auswirkt, zeigt Abbildung 7.7 die simulierte Detektive Quanteneffizienz $\text{DQE}_f(0)$

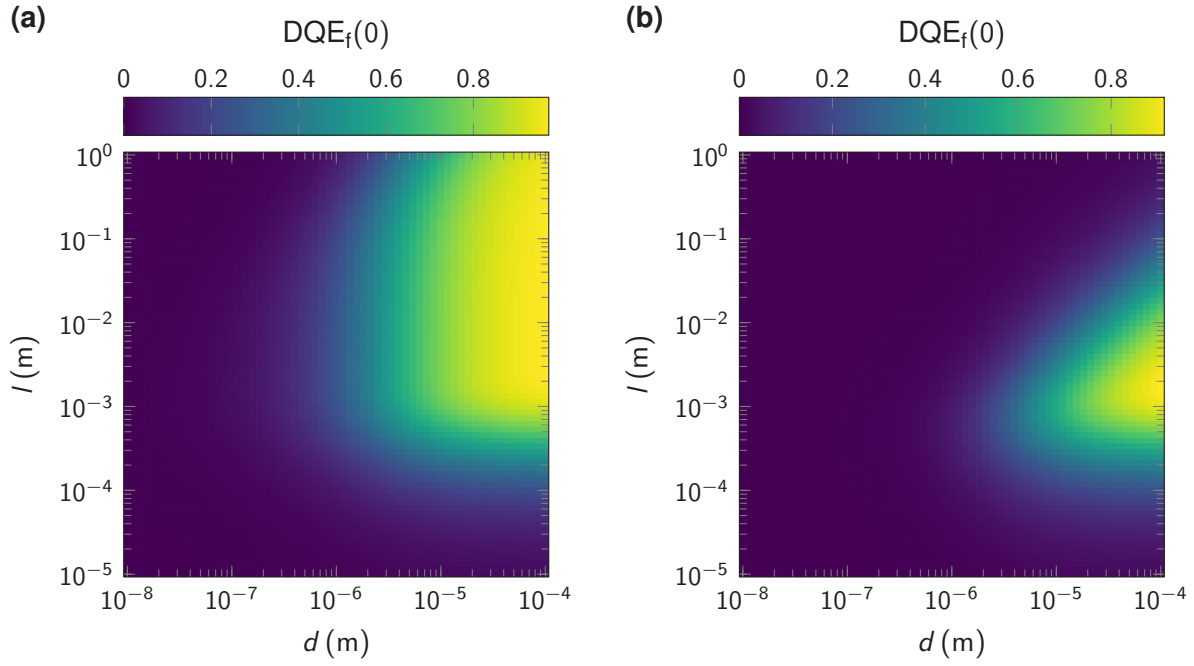


Abbildung 7.7: Simulierte Detektive Quanteneffizienz gefalteter Röntgendetektoren im Falle von hohen und niedrigen Photonenflussraten. Theoretische Detektive Quanteneffizienz $DQE_f(0)$ gefalteter Röntgendetektoren in Abhängigkeit der Schichtdicke d und der Kantenlänge l der Absorber im Falle von monoenergetischen Röntgenphotonen der Energie $E = 60 \text{ keV}$, direkten Absorbern bestehend aus polykristallinem MAPbI_3 (p-MAPbI₃) (MA, kurz für Methylammonium) mit einem hohen Beweglichkeit-Lebensdauer-Produkt $\mu\tau_{\text{high}}$ und einer konstanten Dunkelstromdichte $J_d = 3 \times 10^{-9} \text{ A mm}^{-2}$ [65]. **(a)** Simulationsergebnis für eine hohe Photonenflussrate $\dot{\Phi}_{0,\text{high}} = 10^8 \text{ mm}^{-2} \text{ s}^{-1}$. **(b)** Simulationsergebnis für eine niedrige Photonenflussrate $\dot{\Phi}_{0,\text{low}} = 10^5 \text{ mm}^{-2} \text{ s}^{-1}$. Reproduziert in Anlehnung an Mescher et al. [63].

gefalteter Röntgendetektoren im Falle einer hohen und einer niedrigen Photonenflussrate. In Analogie zur Optimierung der theoretischen Röntgensensitivität $S_{\text{theo},f}$ in Abschnitt 7.3.2 wird die theoretische Detektive Quanteneffizienz $DQE_f(0)$ hierbei in Abhängigkeit der Schichtdicke d und der Kantenlänge l untersucht. Die Simulationen basieren darüber hinaus auf monoenergetischen Röntgenphotonen der Energie $E = 60 \text{ keV}$, direkten Absorbern bestehend aus p-MAPbI₃ mit einem hohen Beweglichkeit-Lebensdauer-Produkt $\mu\tau_{\text{high}}$ und einer konstanten Dunkelstromdichte $J_d = 3 \times 10^{-9} \text{ A mm}^{-2}$ [65]. In Analogie zu den Untersuchungen mehrschichtiger Röntgendetektoren ergeben sich verglichen mit den Simulationen der theoretischen Röntgensensitivität $S_{\text{theo},f}$ (siehe Abbildung 7.4(a)) im Falle einer hohen Photonenflussrate $\dot{\Phi}_{0,\text{high}} = 10^8 \text{ mm}^{-2} \text{ s}^{-1}$ aus der Optimierung der theoretischen Detektive Quanteneffizienz $DQE_f(0)$ (siehe Abbildung 7.7(a)) ähnliche Designvorgaben. Eine große Schichtdicke d führt sowohl zu einer optimalen theoretischen Röntgensensitivität $S_{\text{theo},f}$ als auch zu einer maximalen theoretischen Detektiven Quanteneffizienz $DQE_f(0)$. Mit zunehmender Kantenlänge l steigt zunächst entsprechend der theoretischen Röntgensensitivität $S_{\text{theo},f}$ auch die theoretische Detektive Quanteneffizienz $DQE_f(0)$. Allerdings deutet sich für extrem große Kantenlängen l eine Limitierung im Hinblick auf eine optimale theoretische Detektive Quanteneffizienz $DQE_f(0)$ im Falle einer hohen Photonenflussrate an (siehe Abbildung 7.7(a)). Gemäß der Gleichungen (7.12) und (7.14) lässt sich die Abhängigkeit der theoretischen Detektiven Quanteneffizienz $DQE_f(0)$ von der Kantenlänge l mithilfe der Röntgenabsorptionseffizienz

$\eta_{x,f}$ und dem Verhältnis aus der elektronischen Rauschleistung $\Sigma_{el,f}$ und der mittleren Photonenfluenz $\bar{\Phi}_0$ erklären. Eine zunehmende Kantenlänge l verbessert die Röntgenabsorptionseffizienz $\eta_{x,f}$. Gemäß Gleichung (7.12) wirkt sich eine verbesserte Röntgenabsorptionseffizienz $\eta_{x,f}$ positiv auf die theoretische Detektive Quanteneffizienz $DQE_f(0)$ aus. Darüber hinaus bewirkt eine zunehmende Kantenlänge l allerdings zusätzlich gemäß Gleichung (7.14) einen verstärkten Einfluss der Dunkelstromdichte J_d , welcher sich gemäß der Gleichungen (7.12) und (7.14) negativ auf die theoretische Detektive Quanteneffizienz $DQE_f(0)$ auswirkt. Folglich existiert eine optimale Kantenlänge l , welche bei einer festen Schichtdicke d die theoretische Detektive Quanteneffizienz $DQE_f(0)$ maximiert. In welchem Maß sich eine Erhöhung der Kantenlänge l negativ auf die theoretische Detektive Quanteneffizienz $DQE_f(0)$ auswirkt, hängt in Analogie zu mehrschichtigen Röntgendetektoren gemäß Gleichung (7.14) vom Verhältnis aus der Dunkelstromdichte J_d und der Photonenfluenzrate $\dot{\Phi}_0$ ab. Je niedriger die Photonenfluenzrate $\dot{\Phi}_0$ ist, desto größer gestaltet sich der Einfluss der Dunkelstromdichte J_d im Verhältnis aus der elektronischen Rauschleistung $\Sigma_{el,f}$ und der mittleren Photonenfluenz $\bar{\Phi}_0$ (siehe Gleichung (7.14)). Ein gesteigerter Einfluss der Dunkelstromdichte J_d bewirkt wiederum eine stärkere Limitierung der Kantenlänge l . Dementsprechend zeigen die Simulationen der theoretischen Detektiven Quanteneffizienz $DQE_f(0)$ bei einer niedrigen Photonenfluenzrate $\dot{\Phi}_{0,low} = 10^5 \text{ mm}^{-2} \text{ s}^{-1}$ (siehe Abbildung 7.7 (b)) verglichen mit den Ergebnissen bei einer hohen Photonenfluenzrate $\dot{\Phi}_{0,high} = 10^8 \text{ mm}^{-2} \text{ s}^{-1}$ (siehe Abbildung 7.7 (a)) eine wesentlich ausgeprägtere Limitierung der Kantenlänge l , welche sich durch eine signifikant reduzierte optimale Kantenlänge l äußert.

7.3.3.2 Einfluss der Photonenenergie

In welchem Umfang sich eine Vergrößerung der Kantenlänge l positiv auf die Röntgenabsorptionseffizienz $\eta_{x,f}$ auswirkt, wird wesentlich von der Energie E der einfallenden Röntgenphotonen beeinflusst. In Analogie zur Untersuchung mehrschichtiger Röntgendetektoren ist es daher auch im Falle gefalteter Röntgendetektoren von besonderem Interesse zu analysieren, welchen Einfluss diese Energieabhängigkeit auf die optimale Kantenlänge l hat. Um den Einfluss der Photonenenergie zu untersuchen, zeigt Abbildung 7.8 die theoretische Detektive Quanteneffizienz $DQE_f(0)$ gefalteter Röntgendetektoren in Abhängigkeit der Schichtdicke d und der Kantenlänge l der Absorber für den Fall einer niedrigen und einer hohen Photonenenergie. Die Simulationen basieren hierbei auf einer niedrigen Photonenfluenzrate $\dot{\Phi}_{0,low} = 10^5 \text{ mm}^{-2} \text{ s}^{-1}$, direkten Absorbern bestehend aus p-MAPbI₃ mit einem hohen Beweglichkeit-Lebensdauer-Produkt $\mu\tau_{high}$ und einer konstanten Dunkelstromdichte $J_d = 3 \times 10^{-9} \text{ A mm}^{-2}$ [65]. Im Hinblick auf die optimale Schichtdicke d ergeben sich in Analogie zu mehrschichtigen Röntgendetektoren für alle drei untersuchten Energien $E \in \{20 \text{ keV}, 60 \text{ keV}, 511 \text{ keV}\}$ ähnliche Designvorgaben mit einer optimalen theoretischen Detektiven Quanteneffizienz $DQE_f(0)$ im Falle einer niedrigen Photonenfluenzrate bei großen Schichtdicken d (siehe Abbildung 7.7 (b) und Abbildung 7.8). Im Gegensatz dazu bewirkt die erhebliche Energieabhängigkeit der Röntgenabsorptionseffizienz $\eta_{x,f}$, dass die optimale Kantenlänge l ebenfalls eine bedeutende Abhängigkeit von der Photonenenergie E aufweist. Mit zunehmender Energie E der einfallenden Röntgenphotonen werden immer größere Kantenlängen l der Absorber benötigt, um

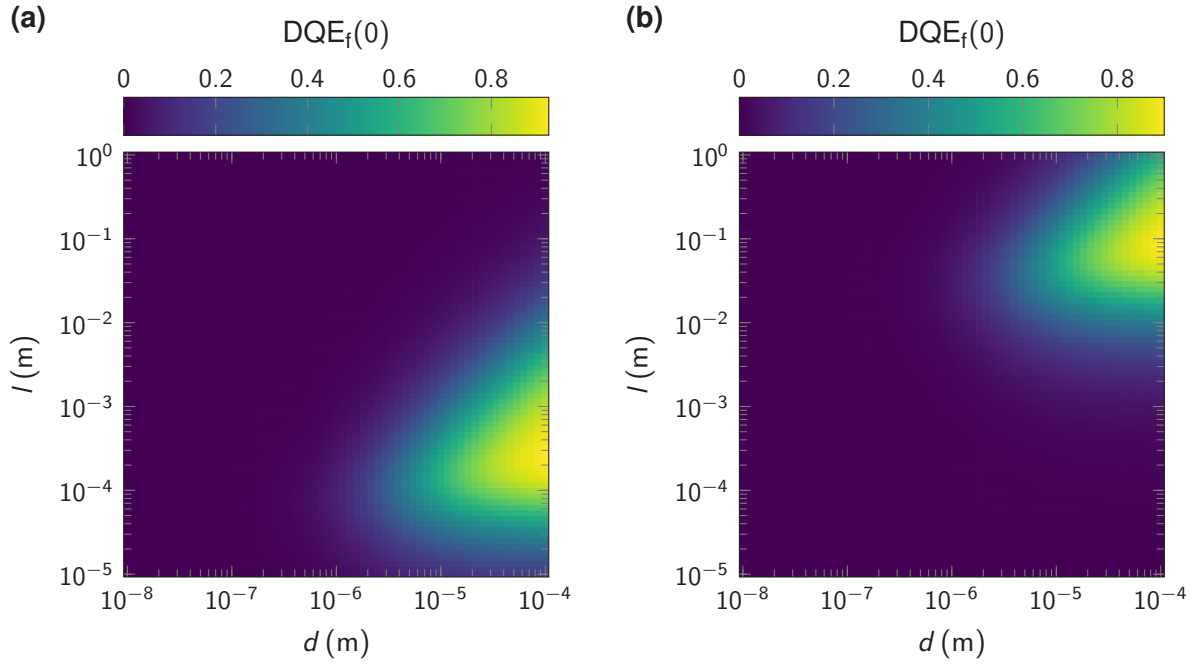


Abbildung 7.8: Simulierte Detektive Quanteneffizienz gefalteter Röntgendetektoren im Falle von niedrigen und hohen Photonenenergien. Theoretische Detektive Quanteneffizienz $DQE_f(0)$ gefalteter Röntgendetektoren in Abhängigkeit der Schichtdicke d und der Kantenlänge l der Absorber im Falle einer niedrigen Photonenflussrate $\dot{\Phi}_{0,\text{low}} = 10^5 \text{ mm}^{-2} \text{ s}^{-1}$, direkter Absorber bestehend aus polykristallinem MAPbI_3 (p-MAPbI₃) (MA, kurz für Methylammonium) mit einem hohen Beweglichkeit-Lebensdauer-Produkt $\mu\tau_{\text{high}}$ und einer konstanten Dunkelstromdichte $J_d = 3 \times 10^{-9} \text{ A mm}^{-2}$ [65]. **(a)** Simulationsergebnis für monoenergetische Röntgenphotonen der Energie $E = 20$ keV. **(b)** Simulationsergebnis für monoenergetische Röntgenphotonen der Energie $E = 511$ keV.

eine effiziente Röntgenabsorption zu gewährleisten. Demzufolge erstreckt sich der Bereich der Kantenlänge l , in welchem eine Erhöhung von l eine bedeutende Verbesserung der Röntgenabsorptionseffizienz $\eta_{x,f}$ bewirkt, mit zunehmender Energie E der Röntgenphotonen hin zu größeren Werten von l . Folglich steigt darüber hinaus ebenfalls die optimale Kantenlänge l mit zunehmender Photonenenergie E (siehe Abbildung 7.7 (b) und Abbildung 7.8).

7.3.4 Designvorgaben unter Berücksichtigung der Röntgensensitivität und der Detektiven Quanteneffizienz

In Analogie zu den Untersuchungen mehrschichtiger Röntgendetektoren in Abschnitt 6.3 ergibt sich aus der Optimierung der theoretischen Röntgensensitivität $S_{\text{theo},f}$ gefalteter Röntgendetektoren in Abschnitt 7.3.2 ein signifikanter Leistungsvorteil von direkten Absorbern bestehend aus p-MAPbI₃ gegenüber quasi-direkten Absorbern auf der Basis von P3HT:PCBM:GOS:Tb. Entsprechend der Leistungsanalyse mehrschichtiger Röntgendetektoren eignet sich daher von den beiden untersuchten Absorber-Materialien ebenfalls p-MAPbI₃ am besten für eine Realisierung gefalteter Röntgendetektoren. Im Hinblick auf unterschiedliche Energien E der einfallenden Röntgenphotonen ergeben sich in Bezug auf eine optimale theoretische Röntgensensitivität $S_{\text{theo},f}$ für alle drei untersuchten Photonenenergien

$E \in \{20 \text{ keV}, 60 \text{ keV}, 511 \text{ keV}\}$ ähnliche Designvorgaben, sowohl große Schichtdicken d als auch große Kantenlängen l der Absorber auszuwählen.

Übereinstimmend mit den Untersuchungen mehrschichtiger Röntgendetektoren zeigt die Optimierung der theoretischen Detektiven Quanteneffizienz $\text{DQE}_f(0)$ in Abschnitt 7.3.3 auch im Falle gefalteter Röntgendetektoren eine bedeutende Abhängigkeit der optimalen Designparameter von der Photonenflussrate $\dot{\Phi}_0$ und der Energie E der einfallenden Röntgenphotonen. Die in diesem Zusammenhang auftretende Limitierung der Kantenlänge l ist in Analogie zur Limitierung der Anzahl K der Detektor-Schichten mehrschichtiger Röntgendetektoren im Falle einer niedrigen Photonenflussrate $\dot{\Phi}_{0,\text{low}}$ verglichen mit einer hohen Photonenflussrate $\dot{\Phi}_{0,\text{high}}$ bedeutend stärker ausgeprägt. Entsprechend der Leistungsanalyse mehrschichtiger Röntgendetektoren beziehen sich die Designvorgaben im Hinblick auf eine optimale theoretische Detektive Quanteneffizienz $\text{DQE}_f(0)$ auch im Falle gefalteter Röntgendetektoren auf die optimalen Designparameter für den Fall einer niedrigen Photonenflussrate $\dot{\Phi}_{0,\text{low}} = 10^5 \text{ mm}^{-2} \text{ s}^{-1}$. Auf dieser Grundlage kann eine hohe theoretische Detektive Quanteneffizienz $\text{DQE}_f(0)$ sowohl für eine hohe als auch für eine niedrige Photonenflussrate gewährleistet werden. In Analogie zu den Untersuchungen mehrschichtiger Röntgendetektoren zeigt sich, dass für alle drei untersuchten Photonenenergien $E \in \{20 \text{ keV}, 60 \text{ keV}, 511 \text{ keV}\}$ die Schichtdicken d und die Kantenlängen l der Absorber, die eine optimale theoretische Detektive Quanteneffizienz $\text{DQE}_f(0)$ im Falle einer niedrigen Photonenflussrate $\dot{\Phi}_{0,\text{low}}$ ermöglichen, darüber hinaus ebenfalls eine nahezu optimale theoretische Röntgensensitivität $S_{\text{theo},f}$ gewährleisten (siehe Abbildungen 7.4 (b), 7.6, 7.7 (b) und 7.8). Die Schichtdicke d und die Kantenlänge l , die eine optimale theoretische Detektive Quanteneffizienz $\text{DQE}_f(0)$ im Falle einer niedrigen Photonenflussrate $\dot{\Phi}_{0,\text{low}}$ ermöglichen, werden daher im Rahmen dieser Arbeit als optimale Designparameter $(d_{\text{opt}}, l_{\text{opt}})$ betrachtet. Die analoge Vorgehensweise im Hinblick auf die Bestimmung der optimalen Designparameter ermöglicht darüber hinaus eine maximale Vergleichbarkeit der Leistungsanalyse von mehrschichtigen und gefalteten Röntgendetektoren.

Die optimalen Designparameter $(d_{\text{opt}}, l_{\text{opt}})$ gefalteter Röntgendetektoren, die sich im Hinblick auf eine maximale theoretische Detektive Quanteneffizienz $\text{DQE}_f(0)$ im Falle einer niedrigen Photonenflussrate $\dot{\Phi}_{0,\text{low}} = 10^5 \text{ mm}^{-2} \text{ s}^{-1}$ ergeben, sind in Tabelle 7.1 für die drei untersuchten Photonenenergien $E \in \{20 \text{ keV}, 60 \text{ keV}, 511 \text{ keV}\}$ angegeben. Aufgrund des Leistungsvorteils gegenüber quasi-direkten Absorbern bestehend aus P3HT:PCBM:GOS:Tb beschränken sich die Designvorgaben in Tabelle 7.1 in Analogie zu den Untersuchungen mehrschichtiger Röntgendetektoren (siehe Tabelle 6.2) auf direkte Absorber bestehend aus p-MAPbI₃ mit einem hohen Beweglichkeit-Lebensdauer-Produkt $\mu\tau_{\text{high}}$ und einer konstanten Dunkelstromdichte $J_d = 3 \times 10^{-9} \text{ A mm}^{-2}$ [65]. Die Leistungsfähigkeit, die mithilfe der optimalen Designparameter $(d_{\text{opt}}, l_{\text{opt}})$ erreicht werden kann, ist hierbei durch die theoretische Röntgensensitivität $S_{\text{theo},f}$ und die theoretische Detektive Quanteneffizienz $\text{DQE}_f(0)$ quantifiziert. Der in den Simulationen angenommene Betrag des elektrischen Feldes F ist zusätzlich angegeben. Es sei darauf hingewiesen, dass entsprechend der Untersuchungen mehrschichtiger Röntgendetektoren die optimalen Designparameter $(d_{\text{opt}}, l_{\text{opt}})$ in Tabelle 7.1 verglichen mit den bisher visuell dargestellten Simulationsergebnissen in den Abschnitten 7.3.2 und 7.3.3 auf der Grundlage einer erhöhten Auflösung der simulierten Parametervariation bestimmt sind.

Tabelle 7.1: Designvorgaben und Leistungsfähigkeit gefalteter Röntgendetektoren. Optimale Schichtdicke d_{opt} und optimale Kantenlänge l_{opt} der Absorber gefalteter Röntgendetektoren im Hinblick auf eine maximale theoretische Detektive Quanteneffizienz $\text{DQE}_f(0)$ im Falle einer niedrigen Photonenflussrate $\dot{\Phi}_{0,\text{low}} = 10^5 \text{ mm}^{-2} \text{ s}^{-1}$ in Abhängigkeit der Energie E der einfallenden Röntgenphotonen. Die zugehörige Leistungsfähigkeit ist durch die theoretische Röntgensensitivität $S_{\text{theo},f}$ und die theoretische Detektive Quanteneffizienz $\text{DQE}_f(0)$ angegeben. Die Simulationen basieren auf direkten Absorbern bestehend aus polykristallinem MAPbI_3 (p-MAPbI₃) (MA, kurz für Methylammonium) mit einem hohen Beweglichkeit-Lebensdauer-Produkt $\mu\tau_{\text{high}}$ und einer konstanten Dunkelstromdichte $J_d = 3 \times 10^{-9} \text{ A mm}^{-2}$ [65]. Der in den Simulationen angenommene Betrag des elektrischen Feldes F ist zusätzlich angegeben. Reproduziert in Anlehnung an Mescher et al. [63].

$F (\text{V } \mu\text{m}^{-1})$	$E (\text{keV})$	$d_{\text{opt}} (\mu\text{m})$	$l_{\text{opt}} (\text{mm})$	$S_{\text{theo},f} (\mu\text{C Gy}_{\text{air}}^{-1} \text{ cm}^{-2})$	$\text{DQE}_f(0)^a$	$\text{DQE}_f(0)^b$
0.25	20	100	0.251	298.4	0.964	0.925
0.25	60	100	1.66	4098	0.962	0.915
0.25	511	100	87.1	3133	0.96	0.899

^a bei einer hohen Photonenflussrate $\dot{\Phi}_{0,\text{high}} = 10^8 \text{ mm}^{-2} \text{ s}^{-1}$

^b bei einer niedrigen Photonenflussrate $\dot{\Phi}_{0,\text{low}} = 10^5 \text{ mm}^{-2} \text{ s}^{-1}$

7.3.5 Vergleich der Leistungsfähigkeit gefalteter, mehrschichtiger und einschichtiger Röntgendetektoren

In Analogie zu mehrschichtigen Röntgendetektoren besitzen auch gefaltete Röntgendetektoren das Potential, auf der Grundlage von vergleichsweise einfach herzustellenden dünnen Absorber-Schichten eine hohe Leistungsfähigkeit zu erreichen. Entsprechend der Analyse mehrschichtiger Röntgendetektoren in Abschnitt 6.3.5 bietet sich daher auch im Falle gefalteter Röntgendetektoren ein Leistungsvergleich mit einschichtigen Röntgendetektoren an. Zu diesem Zweck zeigt Abbildung 7.9 einen Vergleich der theoretischen Röntgensensitivität S_{theo} gefalteter und einschichtiger Röntgendetektoren in Abhängigkeit der Schichtdicke d der Absorber. In Entsprechung zu Abbildung 6.7 basieren die Datenpunkte in Abbildung 7.9 auf den Designvorgaben in den Tabellen 7.1 und 5.2. Der Leistungsvergleich in Abbildung 7.9 bezieht sich folglich auf die theoretische Röntgensensitivität S_{theo} , die sich mithilfe von gefalteten und einschichtigen Röntgendetektoren im Falle von monoenergetischen Röntgenphotonen der Energie $E \in \{20 \text{ keV}, 60 \text{ keV}, 511 \text{ keV}\}$ theoretisch erreichen lässt.

Die theoretische Röntgensensitivität S_{theo} gefalteter Röntgendetektoren liegt im Falle einer niedrigen Photonenenergie $E = 20 \text{ keV}$ geringfügig unter der Leistungsfähigkeit mehrschichtiger Röntgendetektoren und kann ebenfalls mithilfe einer geringen optimalen Schichtdicke von $d_{\text{opt}} = 100 \mu\text{m}$ erreicht werden (siehe Tabellen 7.1 und 6.2). Folglich zeigen auch gefaltete Röntgendetektoren eine hohe theoretische Röntgensensitivität S_{theo} , die nahe der Leistungsgrenze einschichtiger Röntgendetektoren liegt (siehe Abbildung 7.9 (a)). Entsprechend der Analyse mehrschichtiger Röntgendetektoren liegt hierbei lediglich die theoretische Röntgensensitivität S_{theo} von einschichtigen Röntgendetektoren mit monokristallinen CdZnTe (m-CdZnTe) Absorbern der Schichtdicke $d_{\text{opt}} = 1.12 \text{ mm}$ bedeutend über der Leistungsfähigkeit gefalteter Röntgendetektoren. Im Falle einer niedrigen Photonenenergie $E = 20 \text{ keV}$ lassen sich allerdings auf der Basis von polykristallinen HgI_2 (p-HgI₂) Absorbern bereits mit einer optimalen Schichtdicke von

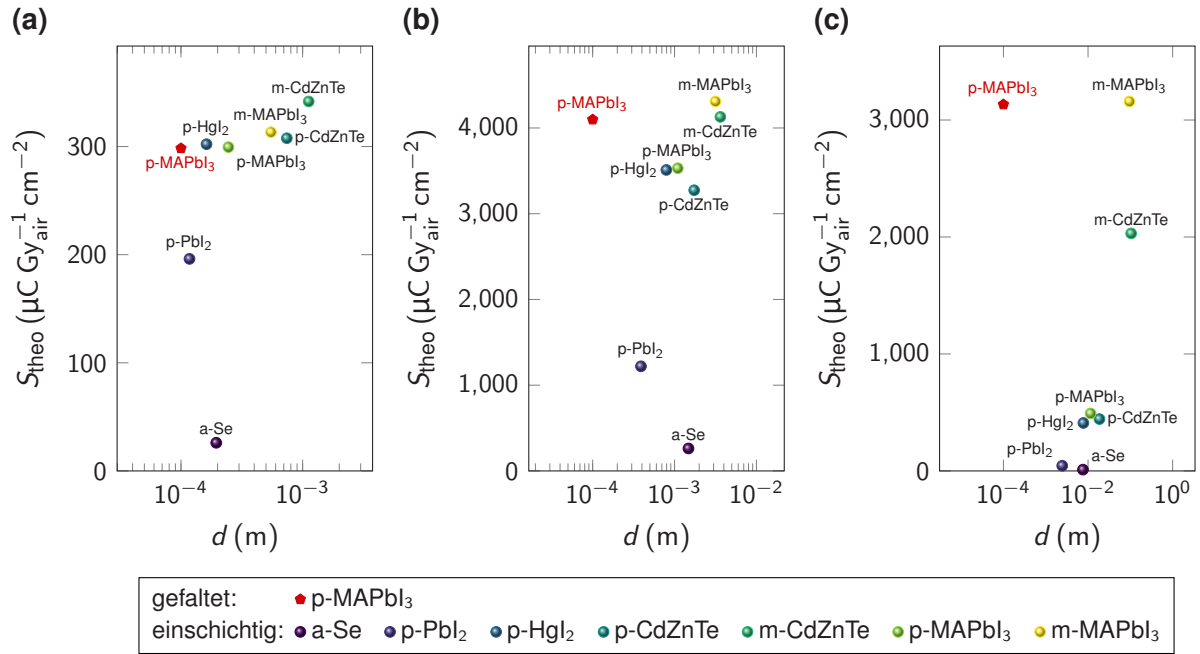


Abbildung 7.9: Vergleich der theoretischen Röntgensensitivität gefalteter und einschichtiger Röntgendetektoren. Vergleich der theoretischen Röntgensensitivität S_{theo} gefalteter und einschichtiger Röntgendetektoren in Abhängigkeit der Schichtdicke d der Absorber im Falle von monoenergetischen Röntgenphotonen der Energie (a) $E = 20 \text{ keV}$, (b) $E = 60 \text{ keV}$ und (c) $E = 511 \text{ keV}$. Die Datenpunkte basieren auf den Designvorgaben in den Tabellen 7.1 und 5.2 und zeigen die theoretische Röntgensensitivität S_{theo} , die sich mithilfe der jeweiligen optimalen Schichtdicke d_{opt} mit gefalteten und einschichtigen Röntgendetektoren erreichen lässt. Gemäß der Designvorgaben in den Tabellen 7.1 und 5.2 werden gefaltete Röntgendetektoren mit Absorbern bestehend aus polykristallinem MAPbI₃ (p-MAPbI₃) (MA, kurz für Methylammonium) und einschichtige Röntgendetektoren mit Absorbern auf der Basis von amorphem Se (a-Se), polykristallinem PbI₂ (p-PbI₂), Hgl₂ (p-Hgl₂), CdZnTe (p-CdZnTe) und MAPbI₃ (p-MAPbI₃) sowie monokristallinem CdZnTe (m-CdZnTe) und MAPbI₃ (m-MAPbI₃) in Betracht gezogen. Reproduziert in Anlehnung an Mescher et al. [63].

$d_{\text{opt}} = 0.162 \text{ mm}$ hochleistungsfähige einschichtige Röntgendetektoren realisieren (siehe Tabelle 5.2 und Abbildung 7.9 (a)). In Analogie zu mehrschichtigen Röntgendetektoren relativiert sich demzufolge auch für gefaltete Röntgendetektoren im Falle einer niedrigen Photonenenergie $E = 20 \text{ keV}$ der potentielle Vorteil in Bezug auf einfach herzustellende dünne Absorber-Schichten.

Wie bereits in Abschnitt 6.3.5 diskutiert ist, kann eine außergewöhnlich hohe Leistungsfähigkeit mit zunehmender Photonenenergie E im Falle von einschichtigen Röntgendetektoren nur noch mithilfe von bestimmten Absorber-Materialien und mit immer größeren optimalen Schichtdicken d_{opt} erreicht werden (siehe Tabelle 5.2 und Abbildung 7.9). Im Gegensatz dazu ermöglichen gefaltete Röntgendetektoren auch mit zunehmender Energie E der Röntgenphotonen auf der Grundlage einer Anpassung der optimalen Kantenlänge l_{opt} eine sehr hohe Leistungsfähigkeit bei einer gleichbleibend geringen optimalen Schichtdicke $d_{\text{opt}} = 100 \mu\text{m}$ (siehe Tabelle 7.1). Die theoretische Röntgensensitivität S_{theo} , die mit gefalteten Röntgendetektoren erreicht werden kann, liegt auch im Falle mittlerer und hoher Photonenenergien $E \in \{60 \text{ keV}, 511 \text{ keV}\}$ nahe der Leistungsfähigkeit mehrschichtiger Röntgendetektoren (siehe Tabellen 7.1 und 6.2). Folglich zeigen auch gefaltete Röntgendetektoren im Falle einer mittleren Photonenenergie $E = 60 \text{ keV}$ eine hohe theoretische Röntgensensitivität S_{theo} , die im Rahmen der untersuchten

Absorber-Materialien mit einschichtigen Röntgendetektoren nur auf der Grundlage von monokristallinem MAPbI₃ (m-MAPbI₃) und m-CdZnTe in Verbindung mit optimalen Schichtdicken d_{opt} von mehreren Millimetern erreicht werden kann (siehe Tabelle 5.2 und Abbildung 7.9 (b)). Wie bereits in Abschnitt 6.3.5 beschrieben ist, liegt die Herausforderung in Verbindung mit einer großen optimalen Schichtdicke d_{opt} nicht nur in einer komplexeren Herstellung, sondern ebenfalls in der hohen Spannung U , die zur Realisierung eines bestimmten Betrags des elektrischen Feldes F benötigt wird, und den damit verbundenen Anforderungen an die Elektronik. Gemäß der Abschätzungen in Abschnitt 6.3.5 werden bei einer mittleren Photonenenergie $E = 60 \text{ keV}$ im Falle von Absorbern bestehend aus m-MAPbI₃ und m-CdZnTe bereits Spannungen von $U = 790 \text{ V}$ und $U = 907.5 \text{ V}$ benötigt, um einschichtige Röntgendetektoren mit einer hohen theoretischen Röntgensensitivität S_{theo} zu realisieren, die mit der Leistungsfähigkeit gefalteter Röntgendetektoren vergleichbar ist. Demgegenüber ergibt sich aus dem Betrag des elektrischen Feldes $F = 0.25 \text{ V } \mu\text{m}^{-1}$ und der optimalen Schichtdicke $d_{\text{opt}} = 100 \mu\text{m}$ (siehe Tabelle 7.1) im Falle gefalteter Röntgendetektoren in Analogie zu mehrschichtigen Röntgendetektoren die benötigte Spannung lediglich zu $U = Fd_{\text{opt}} = 25 \text{ V}$. Entsprechend der Analyse mehrschichtiger Röntgendetektoren erreichen einschichtige Röntgendetektoren im Falle einer hohen Photonenenergie $E = 511 \text{ keV}$ im Rahmen der untersuchten Absorber-Materialien lediglich auf der Grundlage von extrem dicken Absorbern bestehend aus m-MAPbI₃ eine theoretische Röntgensensitivität S_{theo} , die mit der hohen Leistungsfähigkeit gefalteter Röntgendetektoren vergleichbar ist (siehe Abbildung 7.9 (c)). Wie bereits in Abschnitt 6.3.5 angemerkt ist, ist die benötigte optimale Schichtdicke $d_{\text{opt}} = 95.5 \text{ mm}$ der m-MAPbI₃ Absorber (siehe Tabelle 5.2) und die damit verbundene Spannung $U > 20 \text{ kV}$ in diesem Fall allerdings derart hoch, dass sich im Hinblick auf eine Realisierung extrem hohe Anforderung ergeben.

Der Vergleich der theoretischen Röntgensensitivität S_{theo} gefalteter und einschichtiger Röntgendetektoren in Abbildung 7.9 demonstriert, dass neben mehrschichtigen auch gefaltete Röntgendetektoren für alle drei untersuchten Photonenenergien $E \in \{20 \text{ keV}, 60 \text{ keV}, 511 \text{ keV}\}$ eine hohe Leistungsfähigkeit auf der Grundlage von vergleichsweise einfach herzustellenden dünnen Absorber-Schichten ermöglichen. Die theoretische Röntgensensitivität S_{theo} gefalteter Röntgendetektoren liegt hierbei geringfügig unter der Leistungsfähigkeit mehrschichtiger Röntgendetektoren (siehe Tabellen 7.1 und 6.2). Demzufolge zeigen auch gefaltete Röntgendetektoren insbesondere im Falle mittlerer und hoher Photonenenergien $E \in \{60 \text{ keV}, 511 \text{ keV}\}$ eine außergewöhnlich hohe theoretische Röntgensensitivität S_{theo} , die mit einschichtigen Röntgendetektoren im Rahmen der untersuchten Absorber-Materialien nur auf der Grundlage von dicken monokristallinen Absorbern erreicht werden kann. Mit zunehmender Schichtdicke d der monokristallinen Absorber gewinnt allerdings die Herstellung der Absorber-Schichten an Komplexität, und die Anforderungen an die Elektronik erhöhen sich aufgrund der steigenden benötigten Spannung U . Folglich repräsentieren auch gefaltete Röntgendetektoren neben mehrschichtigen Röntgendetektoren gerade im Falle mittlerer und hoher Photonenenergien $E \in \{60 \text{ keV}, 511 \text{ keV}\}$ eine außergewöhnlich leistungsfähige Alternative zu konventionellen einschichtigen Röntgendetektoren. Im Hinblick auf die Realisierung erscheint die Herstellung großer Kantenlängen l im Falle gefalteter Röntgendetektoren weniger komplex als das Übereinanderstapeln einer hohen Anzahl K von Detektor-Schichten. In welchem Ausmaß sich allerdings extrem große optimale Kantenlängen l_{opt} auf die Komplexität der Realisierung beispielsweise in

Bezug auf die Ausrichtung der Detektor-Elemente auswirken, ist von einem rein theoretischen Standpunkt aus schwierig zu bewerten und muss daher experimentell untersucht werden.

Im Hinblick auf die theoretische Detektive Quanteneffizienz $DQE(0)$ zeigen gefaltete Röntgendetektoren verglichen mit mehrschichtigen Röntgendetektoren eine reduzierte Leistungsfähigkeit sowohl für den Fall einer niedrigen als auch für den Fall einer hohen Photonenflussrate $\dot{\Phi}_0$ (siehe Tabelle 6.2 und 7.1). Folglich liegt die theoretische Detektive Quanteneffizienz $DQE(0)$ gefalteter Röntgendetektoren ebenfalls unter der Leistungsfähigkeit einschichtiger Röntgendetektoren, die mit m-MAPbI₃ und m-CdZnTe selbst unter der Annahme einer vergleichsweise hohen Dunkelstromdichte $J_d = 10^{-8} \text{ A mm}^{-2}$ erreicht werden kann (siehe Tabelle 5.2 und 7.1). Um konkurrenzfähige gefaltete Röntgendetektoren auch in Bezug auf die theoretische Detektive Quanteneffizienz $DQE(0)$ realisieren zu können, ist es demzufolge noch essenzieller als im Falle mehrschichtiger Röntgendetektoren, weitere Möglichkeiten zur Reduktion der Dunkelstromdichte J_d von Absorbern auf der Basis von p-MAPbI₃ zu erforschen.

7.4 Zusammenfassung

In diesem Kapitel wird die Modellierung, die Simulation und das Design von gefalteten Röntgendetektoren beschrieben. In Abschnitt 7.1 wird hierbei zunächst die grundlegende Motivation und die wissenschaftliche Zielsetzung des Kapitels erläutert. Vergleichbar zu den in Kapitel 6 untersuchten mehrschichtigen Röntgendetektoren basieren die hier betrachteten gefalteten Röntgendetektoren auf der grundlegenden Idee, die Kopplung zwischen der Röntgenabsorptionseffizienz η_x und der Ladungssammeleffizienz η_{cc} abzuschwächen. Anders als im Falle mehrschichtiger Röntgendetektoren basieren gefaltete Röntgendetektoren auf einer Neuausrichtung der Detektor-Elemente, die dazu führt, dass die Röntgenphotonen entlang der Kante (frei in das Engl. übersetzt: edge-on) der Absorber der Kantenlänge l wechselwirken können. Im Falle gefalteter Röntgendetektoren kann die Kopplung zwischen der Röntgenabsorptionseffizienz η_x und der Ladungssammeleffizienz η_{cc} somit nicht nur abgeschwächt sondern eliminiert werden. In Analogie zu mehrschichtigen Röntgendetektoren haben demzufolge auch gefaltete Röntgendetektoren das Potential, eine hohe Leistungsfähigkeit auf der Basis von vergleichsweise einfach herzustellenden dünnen Absorberschichten zu realisieren. Dieses Kapitel ist daher der Bewertung der theoretischen Leistungsfähigkeit von gefalteten Röntgendetektoren gewidmet. Im weiteren Verlauf des Kapitels werden aus diesem Grund in Analogie zu Kapitel 6 im Rahmen der Abschnitte 7.2 und 7.3 zwei Zwischenziele verfolgt.

In Abschnitt 7.2 werden in Anlehnung an Abschnitt 6.2 zunächst die in Kapitel 3 beschriebenen bereits bestehenden Modelle zur Simulation der Röntgensensitivität und der Detektiven Quanteneffizienz von einschichtigen Röntgendetektoren auf gefaltete Röntgendetektoren erweitert, um die theoretische Leistungsfähigkeit gefalteter Röntgendetektoren analysieren und bewerten zu können. In Analogie zu Abschnitt 6.2 wird hierbei die Modellierung der Röntgensensitivität zusätzlich auf gefaltete Röntgendetektoren mit quasi-direkten Absorbern erweitert.

In Abschnitt 7.3 wird anschließend die Simulation und das Design von gefalteten Röntgendetektoren präsentiert. In Anlehnung an Abschnitt 6.3 werden dabei zunächst die grundlegenden Parameter für die

Simulation von gefalteten Röntgendetektoren eingeführt und in Designparameter des Detektors, Materialparameter des Absorber-Materials und Bestrahlungsparameter unterteilt. Auf der Grundlage einer simulierten Variation der Schichtdicke d und der Kantenlänge l der Absorber wird in den folgenden Abschnitten anschließend die theoretische Röntgensensitivität $S_{\text{theo},f}$ und die theoretische Detektive Quanteneffizienz $\text{DQE}_f(0)$ von gefalteten Röntgendetektoren optimiert. In Analogie zu Abschnitt 6.3 wird hierbei im Rahmen der Optimierungen der Einfluss des Absorber-Materials, der Photonenenergie E und der Photonenflussrate $\dot{\Phi}_0$ auf die theoretische Leistungsfähigkeit gefalteter Röntgendetektoren untersucht.

Die Optimierung der theoretischen Röntgensensitivität $S_{\text{theo},f}$ gefalteter Röntgendetektoren auf der Basis von quasi-direkten Absorbern bestehend aus P3HT:PCBM:GOS:Tb und direkten Absorbern bestehend aus p-MAPbI₃ zeigt in Analogie zu den Untersuchungen mehrschichtiger Röntgendetektoren in Abschnitt 6.3 auch im Falle gefalteter Röntgendetektoren einen eindeutigen Leistungsvorteil für p-MAPbI₃. Demzufolge eignet sich p-MAPbI₃ von den beiden untersuchten Absorber-Materialien auch im Falle gefalteter Röntgendetektoren besser für eine potentielle Realisierung. In Analogie zu den Untersuchungen mehrschichtiger Röntgendetektoren in Abschnitt 6.3 beschränkt sich die weitere Leistungsanalyse gefalteter Röntgendetektoren im Rahmen dieses Kapitels daher auf Simulationen auf der Basis von p-MAPbI₃. Im Hinblick auf die Photonenenergie E ergeben die Untersuchungen der theoretischen Röntgensensitivität $S_{\text{theo},f}$ für alle drei untersuchten Photonenenergien E ähnliche Designvorgaben mit einer optimalen theoretischen Röntgensensitivität $S_{\text{theo},f}$ bei großen Schichtdicken d und großen Kantenlängen l der Absorber. Die Energie E der Röntgenphotonen zeigt jedoch einen erheblichen Einfluss darauf, ab welcher Absorber-Abmessung eine nahezu optimale theoretische Röntgensensitivität $S_{\text{theo},f}$ erreicht werden kann, und der Bereich der Kantenlängen l , der eine nahezu optimale theoretische Röntgensensitivität $S_{\text{theo},f}$ gewährleistet, verschiebt sich mit zunehmender Photonenenergie E zu größeren Kantenlängen l .

Übereinstimmend mit den Untersuchungen mehrschichtiger Röntgendetektoren in Abschnitt 6.3 zeigt die Optimierung der theoretischen Detektiven Quanteneffizienz $\text{DQE}_f(0)$ auch im Falle gefalteter Röntgendetektoren eine bedeutende Abhängigkeit der optimalen Designparameter von der Photonenflussrate $\dot{\Phi}_0$ und der Energie E der einfallenden Röntgenphotonen. Die in diesem Zusammenhang auftretende Limitierung der Kantenlänge l ist in Analogie zur Limitierung der Anzahl K der Detektor-Schichten mehrschichtiger Röntgendetektoren im Falle einer niedrigen Photonenflussrate $\dot{\Phi}_{0,\text{low}}$ verglichen mit einer hohen Photonenflussrate $\dot{\Phi}_{0,\text{high}}$ bedeutend stärker ausgeprägt. Die bedeutende Abhängigkeit der Röntgenabsorptionseffizienz $\eta_{x,f}$ von der Photonenenergie E führt zusätzlich dazu, dass die Kantenlänge l der Absorber, die eine optimale theoretische Detektive Quanteneffizienz $\text{DQE}_f(0)$ ermöglicht, mit zunehmender Photonenenergie E steigt.

Auf der Grundlage der Ergebnisse der Optimierung der theoretischen Röntgensensitivität $S_{\text{theo},f}$ und der theoretischen Detektiven Quanteneffizienz $\text{DQE}_f(0)$ gefalteter Röntgendetektoren werden im nachfolgenden Abschnitt allgemeine Designvorgaben für gefalteten Röntgendetektoren entwickelt. In Analogie zu den Untersuchungen mehrschichtiger Röntgendetektoren in Abschnitt 6.3 zeigt sich, dass für alle drei untersuchten Photonenenergien E die Schichtdicken d und die Kantenlängen l der Absorber, die eine optimale theoretische Detektive Quanteneffizienz $\text{DQE}_f(0)$ im Falle einer niedrigen Photonenflussrate $\dot{\Phi}_{0,\text{low}}$ ermöglichen, darüber hinaus ebenfalls eine nahezu optimale theoretische Röntgensensitivität $S_{\text{theo},f}$

gewährleisten. Die Schichtdicke d und die Kantenlänge l , die eine optimale theoretische Detektive Quanteneffizienz $\text{DQE}_f(0)$ im Falle einer niedrigen Photonenflussrate $\dot{\Phi}_{0,\text{low}}$ ermöglichen, werden daher im Rahmen dieser Arbeit als optimale Designparameter ($d_{\text{opt}}, l_{\text{opt}}$) betrachtet. In Anlehnung an Abschnitt 6.3 ist die Leistungsfähigkeit, die mithilfe der optimalen Designparameter erreicht werden kann, mithilfe der theoretischen Röntgensensitivität $S_{\text{theo},f}$ und der theoretischen Detektiven Quanteneffizienz $\text{DQE}_f(0)$ quantifiziert.

Die theoretische Leistungsfähigkeit gefalteter Röntgendetektoren wird abschließend auf der Grundlage eines Leistungsvergleiches mit einschichtigen und mehrschichtigen Röntgendetektoren bewertet. Der Leistungsvergleich bezieht sich hierbei auf die theoretische Leistungsfähigkeit, die gemäß der Designvorgaben aus diesem Kapitel und aus den Kapiteln 5 und 6 mit gefalteten, einschichtigen und mehrschichtigen Röntgendetektoren erreicht werden kann. Der Vergleich der theoretischen Röntgensensitivität S_{theo} gefalteter und einschichtiger Röntgendetektoren demonstriert, dass neben mehrschichtigen auch gefaltete Röntgendetektoren für alle drei untersuchten Photonenenergien E eine hohe Leistungsfähigkeit auf der Grundlage von vergleichsweise einfach herzustellenden dünnen Absorber-Schichten ermöglichen. Die theoretische Röntgensensitivität S_{theo} gefalteter Röntgendetektoren liegt hierbei geringfügig unter der Leistungsfähigkeit mehrschichtiger Röntgendetektoren. In Analogie zu mehrschichtigen Röntgendetektoren zeigen auch gefaltete Röntgendetektoren insbesondere im Falle mittlerer und hoher Photonenenergien E eine außergewöhnlich hohe theoretische Röntgensensitivität S_{theo} , die mit einschichtigen Röntgendetektoren im Rahmen der untersuchten Absorber-Materialien nur auf der Grundlage von dicken monokristallinen Absorbern erreicht werden kann. Aufgrund der bereits in Kapitel 6 genannten Herausforderungen hinsichtlich der Herstellung hochqualitativer extrem dicker monokristalliner Absorber in Verbindung mit den erhöhten Anforderungen an die Elektronik, die sich im Zusammenhang mit den hohen für dicke Absorber-Schichten benötigten Spannungen U ergeben, repräsentieren auch gefaltete Röntgendetektoren neben mehrschichtigen Röntgendetektoren gerade im Falle mittlerer und hoher Photonenenergien E eine außergewöhnlich leistungsfähige Alternative zu konventionellen einschichtigen Röntgendetektoren. Im Hinblick auf die theoretische Detektive Quanteneffizienz $\text{DQE}(0)$ zeigen gefaltete Röntgendetektoren verglichen mit mehrschichtigen Röntgendetektoren eine reduzierte Leistungsfähigkeit sowohl für den Fall einer niedrigen als auch für den Fall einer hohen Photonenflussrate $\dot{\Phi}_0$. Die theoretische Detektive Quanteneffizienz $\text{DQE}(0)$ gefalteter Röntgendetektoren liegt somit ebenfalls unter der Leistungsfähigkeit, die mit einschichtigen Röntgendetektoren erreicht werden kann. Um konkurrenzfähige gefaltete Röntgendetektoren auch in Bezug auf die theoretische Detektive Quanteneffizienz $\text{DQE}(0)$ realisieren zu können, ist es demzufolge noch essenzieller als im Falle mehrschichtiger Röntgendetektoren, weitere Möglichkeiten zur Reduktion der Dunkelstromdichte J_d von Absorbern auf der Basis von p-MAPbI₃ zu erforschen.

Aufgrund der Neuausrichtung der Detektor-Elemente im Hinblick auf die einfallende Röntgenstrahlung, bieten gefaltete Röntgendetektoren das Potential, ohne aufwendige Fabrikationsschritte Pixel mit einer sehr kleinen räumlichen Dimension zu realisieren. Ein Alleinstellungsmerkmal gefalteter Röntgendetektoren gegenüber einschichtigen und mehrschichtigen Röntgendetektoren besteht infolgedessen in einer besonders hohen potentiell realisierbaren räumlichen Auflösung.

Die Ergebnisse dieses Kapitels im Hinblick auf die Designvorgaben und die Angaben zur theoretischen Leistungsfähigkeit gefalteter Röntgendetektoren bilden zusammen mit den Resultaten aus den Kapiteln 5 und 6 die Grundlage für die Auswahl, für welchen Detektor-Aufbau die experimentelle Realisierung im Rahmen dieser Arbeit von Kapitel 8 an untersucht wird.

Teile der in diesem Kapitel präsentierten Inhalte sind in Mescher, Hamann, and Lemmer [63] veröffentlicht. Der Hauptbeitrag dieser Veröffentlichung stammt hierbei vom Erstautor Henning Mescher. Der Erstautor Henning Mescher wurde im Rahmen der Veröffentlichung vom Co-Autor Elias Hamann in Bezug auf die theoretische Arbeit unterstützt. Der Co-Autor Uli Lemmer hat in diesem Zusammenhang die wissenschaftliche Betreuung übernommen.

8 Realisierung von mechanisch flexiblen Röntgendetektoren auf der Basis von tintenstrahlgedruckten Perowskit-Absorbern

Dieses Kapitel ist der Realisierung von mechanisch flexiblen Röntgendetektoren mit strukturierten Perowskit-Absorbern (Ziel 4) gewidmet. Zu diesem Zweck werden im Verlauf des Kapitels zwei Zwischenziele verfolgt. Zunächst wird demonstriert, mit welchem Aufbau und mithilfe welcher Herstellungsmethoden mechanisch flexible Perowskit-Röntgendetektoren experimentell realisiert werden können. Anschließend wird die Leistungsfähigkeit dieser Detektoren charakterisiert und bewertet. Die Herstellung von mechanisch flexiblen Röntgendetektoren mit strukturierten Perowskit-Absorbern ist im Rahmen dieser Arbeit hauptsächlich durch die wissenschaftliche Fragestellung motiviert, wie gefaltete Perowskit-Röntgendetektoren experimentell verwirklicht werden können. Die getroffene Auswahl, den Hauptfokus im weiteren Verlauf dieser Arbeit von diesem Kapitel an auf die experimentelle Realisierung gefalteter Perowskit-Röntgendetektoren zu legen, basiert hierbei auf den Ergebnissen der theoretischen Untersuchungen in den Kapiteln 5, 6 und 7 sowie dem zusätzlichen Potential gefalteter Röntgendetektoren, eine besonders hohe räumlichen Auflösung zu ermöglichen. Die experimentellen Methoden, die im Rahmen dieses Kapitels verwendet werden, sind in Kapitel 4 beschrieben. Die Ergebnisse dieses Kapitels bilden die Grundlage für die in Kapitel 9 beschriebene Realisierung eines gefalteten Perowskit-Röntgendetektors.

Teile der in diesem Kapitel präsentierten Inhalte sind in Mescher, Schackmar, Eggers, Abzieher, Zuber, Hamann, Baumbach, Richards, Hernandez-Sosa, Paetzold, and Lemmer [99] veröffentlicht. Der Hauptbeitrag dieser Veröffentlichung stammt hierbei vom Erstautor Henning Mescher. Der Erstautor Henning Mescher wurde im Rahmen der Veröffentlichung von den Co-Autoren Helge Eggers, Marcus Zuber und Elias Hamann in Bezug auf die theoretische Arbeit und von den Co-Autoren Fabian Schackmar, Helge Eggers, Tobias Abzieher, Marcus Zuber und Elias Hamann hinsichtlich der experimentellen Arbeit unterstützt. Die Co-Autoren Tilo Baumbach, Bryce S. Richards, Gerardo Hernandez-Sosa, Ulrich W. Paetzold und Uli Lemmer haben in diesem Zusammenhang die wissenschaftliche Betreuung übernommen.

8.1 Motivation und Zielsetzung

Die theoretischen Untersuchungen einschichtiger, mehrschichtiger und gefalteter Röntgendetektoren in den Kapiteln 5, 6 und 7 demonstrieren das außergewöhnliche Potential von mehrschichtigen und gefalteten Röntgendetektoren hinsichtlich hochleistungsfähiger Röntgendetektoren auf der Basis von vergleichsweise einfach herzustellenden dünnen Absorber-Schichten. Aufgrund der besonders hohen räumlichen Auflösung, die darüber hinaus potentiell mithilfe der in Kapitel 7 betrachteten gefalteten Röntgendetektoren erreicht werden kann, liegt der Hauptfokus im weiteren Verlauf dieser Arbeit darauf, Röntgendetektoren mit einem gefalteten Aufbau weiter zu erforschen. In diesem Zusammenhang ergibt sich auf der Grundlage der ausführlichen theoretischen Untersuchungen in Bezug auf die Modellierung, die Simulation und das Design gefalteter Röntgendetektoren in Kapitel 7 die wissenschaftliche Fragestellung, wie gefaltete Röntgendetektoren experimentell realisiert werden können.

Eine Grundvoraussetzung für die Herstellung gefalteter Röntgendetektoren besteht hierbei in der Verwendung eines dünnen und flexiblen (faltbaren) Substrats (siehe Abbildung 7.1). Die Fabrikation von direkten Röntgendetektoren auf dünnen und flexiblen Substraten ist allerdings nicht nur im Hinblick auf die hier betrachteten gefalteten Röntgendetektoren relevant. Auf der Basis von flexiblen direkten Röntgendetektoren ergibt sich darüber hinaus die Möglichkeit, tragbare Röntgendetektoren mit einem geringen Gewicht und einer hohen Widerstandsfähigkeit herzustellen. Des Weiteren haben flexible direkte Röntgendetektoren das Potential, sich bis zu einem gewissen Grad an nicht planare Oberflächen anzupassen. Eine mögliche Anwendung in diesem Zusammenhang besteht beispielsweise in der Überprüfung der Hautdosis im Rahmen einer strahlentherapeutischen Behandlung.

Als flexible und faltbare Substrate kommen insbesondere Polymer-Substrate in Betracht. Die Verwendung von Polymer-Substraten limitiert allerdings die maximale Temperatur, die während der Herstellung der einzelnen Schichten der Detektoren verwendet werden kann. In dieser Arbeit werden sowohl direkte Perowskit-Absorber auf der Basis von polykristallinem MAPbI_3 (p- MAPbI_3) (MA, kurz für Methylammonium) als auch quasi-direkte Absorber, die sich aus Szintillator-Teilchen auf der Basis von Terbium-dotiertem Gadoliniumoxysulfid (GOS:Tb) und einer organischen Bulk-Heterojunction bestehend aus Poly(3-hexylthiophen-2,5-diyl) (P3HT) und Phenyl- C_{61} Buttersäuremethylester (PCBM) zusammensetzen, für die Realisierung gefalteter Röntgendetektoren in Betracht gezogen. Beide Absorber-Materialien können im Allgemeinen bei vergleichsweise niedrigen Temperaturen auf einem Substrat realisiert werden und eignen sich daher insbesondere für eine Abscheidung auf Polymer-Substraten. Gemäß der theoretischen Untersuchungen in Abschnitt 7.3.2.1 besitzen direkte Perowskit-Absorber auf der Basis von p- MAPbI_3 einen eindeutigen Leistungsvorteil gegenüber quasi-direkten Absorbern bestehend aus P3HT:PCBM:GOS:Tb. Von den beiden untersuchten Absorber-Materialien eignen sich demzufolge direkte Perowskit-Absorber am besten für eine Verwirklichung von gefalteten Röntgendetektoren. Experimentelle Studien belegen darüber hinaus, dass sich Perowskit-Absorber im Allgemeinen für die Realisierung flexibler direkter Röntgendetektoren eignen [100, 101].

Die lösungsbasierte Fabrikation hybrid organisch-anorganischer Perowskit-Halbleiter kann mithilfe einer Vielzahl unterschiedlicher Herstellungsmethoden erfolgen. Hierzu gehören beispielsweise Fabrikationstechniken wie die Rakelbeschichtung (engl. blade coating), die Sprühbeschichtung (engl. spray coating)

und der Siebdruck (engl. screen printing). Eine umfassende Übersicht über unterschiedliche Herstellungstechniken, die sowohl eine skalierbare als auch eine lösungsbasierte Herstellung von Perowskit-Absorbern für Anwendungen in der Photovoltaik ermöglichen, findet sich beispielsweise in [19]. Wie bereits in Abschnitt 7.3.1 diskutiert ist, kann eine zerstörungsfreie Faltung des zunächst in einem planaren Aufbau realisierten Röntgendetektors erheblich begünstigt werden, wenn eine explizite Faltung des vergleichsweise dicken Absorber-Materials durch eine strukturierte Abscheidung vermieden wird (siehe Abbildung 7.1). Die Herstellungsmethode des digitalen Tintenstrahldrucks (engl. inkjet printing) ermöglicht sowohl eine maskenfreie Strukturierung als auch eine Abscheidung bei niedrigen Temperaturen auf dünnen Polymer-Substraten. Im Hinblick auf die Realisierung der in Kapitel 7 betrachteten gefalteten Röntgendetektoren ist daher der digitale Tintenstrahldruck für die Herstellung der Perowskit-Absorber von besonderem Interesse. Der digitale Tintenstrahldruck repräsentiert darüber hinaus eine Fabrikationstechnik, die sowohl eine materialsparende als auch eine kontaktlose Herstellung unterschiedlicher Schichtdicken ermöglicht und die zusätzlich im Zusammenhang mit einer Rolle-zu-Rolle-Fabrikation mit einem hohen Durchsatz genutzt werden kann. Die experimentelle Realisierung von Solarzellen mit tintenstrahlgedruckten Perowskit-Absorbern [20] demonstriert überdies, dass sich der digitale Tintenstrahldruck für die strukturierte Herstellung von Perowskit-Absorbern eignet. Aufgrund der hohen Reproduzierbarkeit und der hohen Stabilität, die für Solarzellen mit rotationsbeschichteten (engl. spin-coated) [102] und tintenstrahlgedruckten Absorbern [103] auf der Basis von Dreifach-Kationen-Perowskit (TCP, kurz für engl. triple cation perovskite) (siehe Abschnitt 2.3.2) demonstriert werden kann, werden die Röntgendetektoren im Rahmen dieser Arbeit mithilfe von TCP-Absorbern realisiert. Untersuchungen im Hinblick auf Röntgendetektoren mit vergleichsweise dünnen TCP-Absorbern [104] und hinsichtlich flexibler Röntgendetektoren mit tintenstrahlgedruckten CsPbBr_3 Perowskit-Quantenpunkten [101] bestärken darüber hinaus die getroffene Auswahl, die Realisierung von Röntgendetektoren auf der Basis von tintenstrahlgedruckten TCP-Absorbern zu erproben.

Dieses Kapitel ist der Realisierung von mechanisch flexiblen Röntgendetektoren mit strukturierten Perowskit-Absorbern gewidmet. Im Rahmen dieses Kapitels werden daher zwei Zwischenziele verfolgt. Zunächst wird in Abschnitt 8.2 demonstriert, mit welchem Aufbau und mithilfe welcher Herstellungsmethoden mechanisch flexible Perowskit-Röntgendetektoren experimentell realisiert werden können. Anschließend wird in Abschnitt 8.3 die Leistungsfähigkeit der Perowskit-Röntgendetektoren experimentell charakterisiert und bewertet. Abschnitt 8.4 fasst abschließend die wesentlichen Ergebnisse dieses Kapitels zusammen.

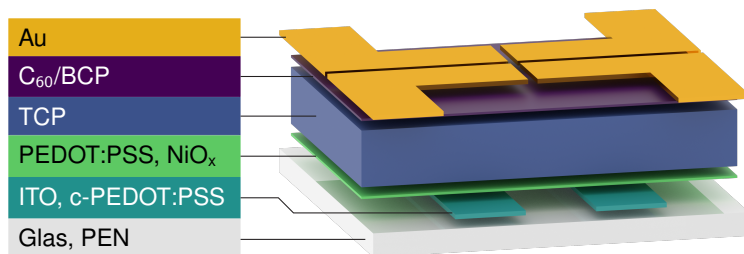
8.2 Aufbau und Herstellung der mechanisch flexiblen Perowskit-Röntgendetektoren

Die experimentelle Realisierung der Perowskit-Röntgendetektoren, die im Rahmen dieses Kapitels untersucht werden, basiert auf dem in Abbildung 8.1 (a) dargestellten grundlegenden Aufbau. Im Hinblick

auf die räumliche Anordnung der einzelnen Schichten handelt es sich hierbei um einen der Standard-Aufbauten, der für die Erforschung von unterschiedlichen Bauelementen am *Lichttechnischen Institut (LTI)* verwendet wird. Mithilfe der gewählten räumlichen Anordnung der sich überlappenden oberen und unteren Elektroden ergeben sich vier aktive Bereiche auf einem Substrat, die nahezu getrennt voneinander charakterisiert werden können. Diese aktiven Bereiche werden im Folgenden als Pixel der Perowskit-Röntgendetektoren bezeichnet. Im Hinblick auf die Auswahl der Materialien und der Fabrikationstechniken kann darüber hinaus das umfassende Wissen in den einzelnen Forschungsgruppen des *LTI*s genutzt werden. Die experimentellen Details zur Herstellung der einzelnen Schichten sind in Tabelle A.1 im Anhang zusammengefasst.

Um bewerten zu können, inwieweit sich das Material und die mechanische Flexibilität des Substrats auf die experimentelle Realisierung und die Leistungsfähigkeit auswirken, werden die Röntgendetektoren, die im Rahmen dieses Kapitels untersucht werden, sowohl auf unelastischen als auch auf flexiblen Substraten hergestellt. Bei den unelastischen Substraten handelt es sich um kommerziell erhältliche Glas-Substrate, die bereits mit strukturierten Elektroden aus Indiumzinnoxid (ITO) beschichtet sind. Als flexible Substrate werden Polymer-Folien aus Polyethylenaphthalat (PEN) mit einer Schichtdicke von 25 μm verwendet. In Anlehnung an [105, 98] befinden sich die dünnen PEN-Folien während der Herstellung der einzelnen Schichten der Röntgendetektoren auf mit Polydimethylsiloxan (PDMS) beschichteten Glas-Substraten. Auf der Grundlage von Adhäsionskräften zwischen den PDMS-Schichten und den PEN-Folien kann somit eine ausreichend starke Haftung zwischen den PEN-Folien und den beschichteten Glas-Substraten sichergestellt werden. Die zusätzlichen PDMS-beschichteten Glas-Substrate gewährleisten dabei die für die einzelnen Fabrikationsschritte benötigten möglichst planaren PEN-Substrate. Darüber hinaus vereinfacht

(a)



(b)

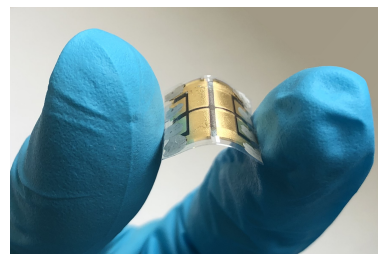


Abbildung 8.1: Grundlegender Aufbau der untersuchten Perowskit-Röntgendetektoren und Fotografie eines flexiblen Perowskit-Röntgendetektors. (a) Grundlegender Aufbau der Perowskit-Röntgendetektoren, die im Rahmen dieses Kapitels untersucht werden. Die Perowskit-Röntgendetektoren werden sowohl auf unelastischen Glas-Substraten als auch auf flexiblen Polymer-Substraten bestehend aus Polyethylenaphthalat (PEN) hergestellt. Im Falle von Glas-Substraten bestehen die unteren Elektroden aus Indiumzinnoxid (ITO) wohingegen in Verbindung mit PEN-Substraten untere Elektroden auf der Basis von hochleitfähigem Poly-(3,4-ethylenedioxythiophen)-poly-(styrolsulfonat) (PEDOT:PSS), das in dieser Arbeit als c-PEDOT:PSS (c für engl. conductive) bezeichnet wird, verwendet werden. Im Hinblick auf die Löcher-Transportschicht werden PEDOT:PSS und NiO_x in Betracht gezogen. Die verwendeten Absorber bestehen aus Dreifach-Kationen-Perowskit (TCP, kurz für engl. triple cation perovskite). Die Perowskit-Röntgendetektoren basieren darüber hinaus auf Elektronen-Transportschichten auf der Basis vom Fulleren C_{60} und Bathocuproin (BCP). Die abschließenden Schichten aus Au dienen als obere Elektroden. Experimentelle Details zur Herstellung der einzelnen Schichten sind in Tabelle A.1 im Anhang zusammengefasst. (b) Fotografie eines flexiblen Perowskit-Röntgendetektors. Entnommen aus Mescher et al. [99] und angepasst. (Reprinted (adapted) with permission from [99]. Copyright 2020 American Chemical Society.)

sich die Handhabung der dünnen und flexiblen PEN-Folien. Im Gegensatz zu den mit ITO beschichteten Glas-Substraten basieren die unteren Elektroden im Falle der flexiblen PEN-Folien auf hochleitfähigem Poly-(3,4-ethyldioxythiophen)-poly-(styrolsulfonat) (PEDOT:PSS), das im Rahmen dieser Arbeit als c-PEDOT:PSS (c für engl. conductive) bezeichnet wird. Für die experimentelle Realisierung der unteren Elektroden wird in diesem Zusammenhang eine Schicht bestehend aus c-PEDOT:PSS mittels Rotationsbeschichtung (siehe Abschnitt 4.1.1.1) auf dem flexiblen PEN-Substrat abgeschieden und anschließend mit hochreinen Tupfern strukturiert. Im Rahmen der theoretischen Untersuchungen in den Kapiteln 5, 6 und 7 werden direkte Röntgendetektoren betrachtet, deren Absorber-Schichten sich in direktem Kontakt mit den Elektroden befinden. In Anlehnung an den Aufbau anderer Bauelemente mit einem Perowskit-Absorber wie zum Beispiel Perowskit-Solarzellen wird dieser grundlegende Detektor-Aufbau für die Realisierung der Perowskit-Röntgendetektoren, die in diesem Kapitel untersucht werden, um zwei Arten von Ladungstransport-Schichten zwischen dem Perowskit-Absorber und den Elektroden erweitert. Die Verwendung dieser zusätzlichen Transport-Schichten ermöglicht es, die Ladungsextraktion und die Ladungsinjektion an den Grenzschichten zwischen dem Absorber und der jeweiligen Elektrode und damit die Leistungsfähigkeit der Röntgendetektoren zu beeinflussen. Darüber hinaus kann mithilfe der zusätzlichen Schichten einer potentiellen Degradation der Perowskit-Absorber entgegengewirkt werden. In diesem Kapitel werden Löcher-Transportschichten bestehend aus PEDOT:PSS und NiO_x untersucht. Zu diesem Zweck werden Löcher-Transportschichten bestehend aus PEDOT:PSS durch eine Rotationsbeschichtung (siehe Abschnitt 4.1.1.1) und Löcher-Transportschichten auf der Basis von NiO_x mittels Sputtern (siehe Abschnitt 4.1.2.2) experimentell realisiert.

Im Hinblick auf die experimentelle Realisierung der Perowskit-Absorber profitiert diese Arbeit wesentlich von der wissenschaftlichen Zusammenarbeit mit Fabian Schackmar und Helge Eggers, die im Rahmen ihrer Forschungsprojekte die Herstellung von Perowskit-Absorbern mittels Tintenstrahldruck untersucht und optimiert haben. Der Forschungsschwerpunkt der Arbeiten von Fabian Schackmar und Helge Eggers liegt in diesem Zusammenhang auf Anwendungen in der Photovoltaik, in denen üblicherweise Absorberschichtdicken d verwendet werden, die unterhalb der optimalen Schichtdicken d_{opt} einschichtiger (siehe Kapitel 5), mehrschichtiger (siehe Kapitel 6) und gefalteter Röntgendetektoren (siehe Kapitel 7) liegen. Die Schichtdicken d der Perowskit-Absorber, die mittels Tintenstrahldruck hergestellt werden können, sind keinesfalls auf Anwendungen in der Photovoltaik begrenzt. Die Realisierung von signifikant dickeren Perowskit-Absorbern ist allerdings mit einem nicht zu vernachlässigen experimentellen Aufwand verbunden. Im Hinblick auf den Hauptfokus im weiteren Verlauf dieser Arbeit, gefaltete Röntgendetektoren experimentell zu verwirklichen, wird daher trotz der geringen Schichtdicken d ein Machbarkeitsnachweis auf der Basis der bereits bestehenden und optimierten Druckverfahren favorisiert. Die Perowskit-Absorber der Perowskit-Röntgendetektoren, die in diesem Kapitel untersucht werden, sind infolgedessen von Fabian Schackmar und Helge Eggers mittels Tintenstrahldruck experimentell realisiert. Zu diesem Zweck werden Absorber auf der Basis von TCP mit einer Zusammensetzung von $\text{Cs}_{0,1}(\text{FA}_{0,83}\text{MA}_{0,17})_{0,9}\text{Pb}(\text{Br}_{0,17}\text{I}_{0,83})_3$ (FA, kurz für Formamidinium) und einer Schichtdicke von $d \approx 3,7 \mu\text{m}$ mittels Tintenstrahldruck (siehe Abschnitt 4.1.1.2) hergestellt (siehe Tabelle A.1 im Anhang für experimentelle Details zum verwendeten Druckverfahren und [106, 103] für eine Beschreibung ähnlicher Druckverfahren). Die angegebene Schichtdicke d basiert hierbei auf Messungen mittels taktiler Profilometrie (siehe Abschnitt 4.2.1.1).

Die TCP-Absorber werden in diesem Zusammenhang mit der maximalen Druckauflösung hergestellt, die zum Herstellungszeitpunkt im Rahmen der Forschungsprojekte von Fabian Schackmar und Helge Eggers zur Verfügung steht. Es handelt sich demzufolge dabei um die maximale Schichtdicke der TCP-Absorber, die für die experimentelle Realisierung der Perowskit-Röntgendetektoren, die in diesem Kapitel untersucht werden, verwendet werden kann. Im Hinblick auf einschichtige mechanisch flexible Perowskit-Röntgendetektoren kann es durchaus von Interesse sein, dickere Absorber zu verwenden, um eine erhöhte Röntgenabsorptionseffizienz zu erreichen. In welchem Ausmaß vergrößerte Schichtdicken d zu einer verbesserten Leistungsfähigkeit führen, hängt gemäß der theoretischen Untersuchungen in Kapitel 5 allerdings zusätzlich von der Ladungssammeleffizienz ab, welche ab einer gewissen Schichtdicke d signifikant abfällt. Darüber hinaus ist zu erwarten, dass sich die mechanische Flexibilität der Röntgendetektoren mit zunehmender Schichtdicke d der Absorber verschlechtert. Die gewählte Schichtdicke d der TCP-Absorber ist demzufolge nicht nur durch das zur Verfügung stehende Druckverfahren limitiert, sondern repräsentiert darüber hinaus einen guten Kompromiss zwischen der Leistungsfähigkeit und der mechanischen Flexibilität der Perowskit-Röntgendetektoren. Die Elektronen-Transportschicht setzt sich aus einer Schicht aus dem Fulleren C_{60} und einer Schicht bestehend aus Bathocuproin (BCP) zusammen. Beide Material-Schichten werden durch thermisches Verdampfen (siehe Abschnitt 4.1.2.1) experimentell realisiert. Die oberen Elektroden bestehend aus einer Au-Schicht werden ebenfalls mittels thermischen Verdampfens (siehe Abschnitt 4.1.2.1) hergestellt. Dabei werden Schattenmasken verwendet, um eine Strukturierung der oberen Elektroden zu ermöglichen. Die Fotografie in Abbildung 8.1 (b) zeigt einen flexiblen Perowskit-Röntgendetektor mit vier aktiven Bereichen (Pixeln) im gebogenen Zustand, der gemäß der beschriebenen Fabrikationsschritte hergestellt ist.

Aufgrund der lösungsbasierten Fabrikation mittels Tintenstrahl Druck ist davon auszugehen, dass die TCP-Absorber der Perowskit-Röntgendetektoren, die im Rahmen dieses Kapitels untersucht werden, in einer polykristallinen Form vorliegen und sich aus einer Vielzahl kleinerer Kristalle, die üblicherweise als Kristallite oder Körner bezeichnet werden, zusammensetzen. Der Ladungstransport innerhalb der TCP-Absorber und somit die Leistungsfähigkeit der Perowskit-Röntgendetektoren wird unter anderem durch die Struktur der Kristallite beeinflusst. Folglich ist es an dieser Stelle von besonderem Interesse, die Struktur der TCP-Absorber zu untersuchen. Zu diesem Zweck zeigt Abbildung 8.2 Rasterelektronenmikroskop (REM)-Aufnahmen (siehe Abschnitt 4.2.1.3) von den Querschnitten zweier unelastischer Perowskit-Röntgendetektoren, die gemäß der zu Beginn dieses Abschnittes beschriebenen Fabrikationsschritte realisiert sind. Die REM-Aufnahmen zeigen hierbei exemplarisch die Querschnitte zweier unelastischer Perowskit-Röntgendetektoren, deren Löcher-Transportschichten aus NiO_x (siehe Abbildung 8.2 (a)) und PEDOT:PSS (siehe Abbildung 8.2 (b)) bestehen. Die experimentelle Realisierung der Querschnitte basiert auf der Herstellung von Sollbruchstellen auf der unbeschichteten Unterseite der Glas-Substrate und anschließendem Zerschneiden der Röntgendetektoren. Die Sollbruchstellen sind dabei mithilfe eines Glasschneiders hergestellt. Die Probenpräparation und die REM-Charakterisierung sind in diesem Zusammenhang von Helge Eggers durchgeführt worden. Beide REM-Aufnahmen in Abbildung 8.2 zeigen TCP-Absorber mit großen säulenförmigen Kristalliten, die überwiegend senkrecht zu den Transport-Schichten und zu den Elektroden orientiert sind und sich zum Teil über die gesamte Absorber-Schicht erstrecken. Im Hinblick auf den Ladungstransport innerhalb polykristalliner Absorber werden die

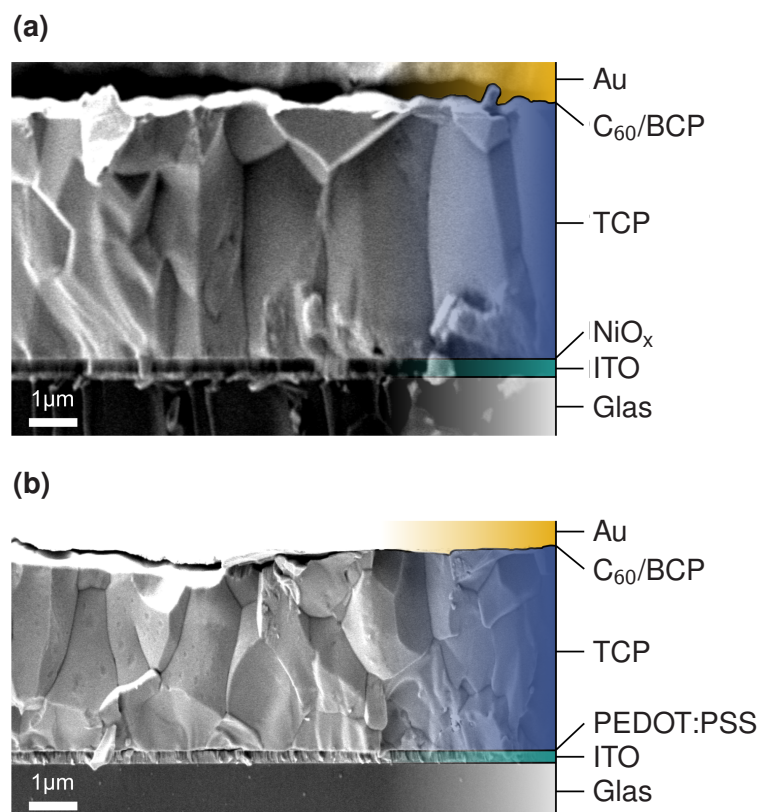


Abbildung 8.2: Rasterelektronenmikroskop-Aufnahmen von den Querschnitten zweier exemplarischer Perowskit-Röntgendetektoren. Rasterelektronenmikroskop (REM)-Aufnahmen von den Querschnitten zweier exemplarischer Perowskit-Röntgendetektoren, deren Löcher-Transportschichten aus (a) NiO_x und (b) Poly-(3,4-ethylenedioxythiophen)-poly-(styrolsulfonat) (PEDOT:PSS) bestehen. Beide Röntgendetektoren sind auf unelastischen Glas-Substraten, die mit Elektroden bestehend aus Indiumzinnoxid (ITO) beschichtet sind, realisiert und setzen sich darüber hinaus aus Absorbern bestehend aus Dreifach-Kationen-Perowskit (TCP, kurz für engl. triple cation perovskite), Elektronen-Transportschichten auf der Basis vom Fulleren C₆₀ und Bathocuproin (BCP) sowie oberen Elektroden aus Au zusammen. Die Lage der einzelnen Schichten ist durch die Beschriftungen am rechten Rand der REM-Aufnahmen gekennzeichnet. Darüber hinaus sind einige Schichten im rechten Bereich der REM-Aufnahmen durch eine farbliche Schattierung hervorgehoben. Die Probenpräparation und die REM-Charakterisierung sind von Helge Eggers durchgeführt worden. Entnommen aus Mescher et al. [99] und angepasst. (Reprinted (adapted) with permission from [99]. Copyright 2020 American Chemical Society.)

Übergänge zwischen den Kristalliten, die üblicherweise als Korngrenzen bezeichnet werden, häufig mit einem potentiellen Verlust von Ladungsträgern beispielsweise durch nicht-strahlende Rekombinationen in Verbindung gebracht. Die gezeigte Säulenstruktur der TCP-Absorber legt daher die Vermutung nahe, dass die Perowskit-Röntgendetektoren, die in diesem Kapitel untersucht werden, einen effizienten Ladungstransport innerhalb der TCP-Absorber senkrecht zu den Elektroden aufweisen. An dieser Stelle sei erwähnt, dass die angegebenen Längenskalen der gezeigten REM-Aufnahmen durch leichte Verkippen der Proben, unregelmäßige Bruchkanten und die verwendeten Integrationszeiten verfälscht werden können. Im Rahmen der gezeigten REM-Charakterisierung wird auf eine Korrektur dieser Einflussfaktoren verzichtet. Infolgedessen können die gezeigten REM-Aufnahmen lediglich für eine Abschätzung der räumlichen Dimensionen verwendet werden.

8.3 Charakterisierung der experimentellen Leistungsfähigkeit der mechanisch flexiblen Perowskit-Röntgendetektoren

Im Hinblick auf eine erfolgreiche Realisierung mechanisch flexibler Perowskit-Röntgendetektoren besteht neben dem in Abschnitt 8.2 beschriebenen Aufbau und der Herstellung ein weiterer wesentlicher Aspekt in der Charakterisierung der experimentellen Leistungsfähigkeit. In den folgenden Abschnitten wird daher die Leistungsfähigkeit der Perowskit-Röntgendetektoren in Bezug auf eine Vielzahl unterschiedlicher Aspekte untersucht.

8.3.1 Charakterisierung der Röntgensensitivität

Eine wesentliche Größe zur Beschreibung der Leistungsfähigkeit von Röntgendetektoren ist die Röntgensensitivität S , welche gemäß Gleichung (2.21) mithilfe des Betrags der induzierten Ladung $|Q|$, der Energiedosis der einfallenden Röntgenstrahlung in Luft D_{air} und der bestrahlten Fläche A definiert werden kann: $S = |Q|/(D_{\text{air}}A)$. Im Falle kontinuierlicher Röntgenstrahlung mit einer konstanten Energiedosisrate in Luft \dot{D}_{air} kann die experimentelle Röntgensensitivität S_{exp} mithilfe des durch die Röntgenstrahlung induzierten Stroms $I_{\text{x-ind}}$, der Energiedosisrate der Röntgenstrahlung in Luft \dot{D}_{air} und der bestrahlten Fläche A bestimmt werden:

$$S_{\text{exp}} = \frac{I_{\text{x-ind}}}{\dot{D}_{\text{air}}A} = \frac{J_{\text{x-ind}}}{\dot{D}_{\text{air}}} . \quad (8.1)$$

Hierbei beschreibt $J_{\text{x-ind}} = I_{\text{x-ind}}/A$ die durch die Röntgenstrahlung induzierte Stromdichte. Darüber hinaus ergeben sich die Größen $I_{\text{x-ind}} = I_{\text{x}} - I_{\text{d}}$ und $J_{\text{x-ind}} = J_{\text{x}} - J_{\text{d}}$ aus dem Strom I_{x} und der Stromdichte J_{x} unter Röntgenbestrahlung sowie aus dem Dunkelstrom I_{d} und der Dunkelstromdichte J_{d} . Es sei darauf hingewiesen, dass die mathematische Formulierung in Gleichung (8.1) auf die explizite Verwendung der Betragsnotation $||$ verzichtet.

Das im Rahmen dieses Kapitels verwendete Vorgehen zur Bestimmung der experimentellen Röntgensensitivität S_{exp} kann mithilfe von Abbildung 8.3 erklärt werden. Abbildung 8.3 (a) zeigt die gemessene Stromdichte J zweier exemplarischer flexibler Perowskit-Röntgendetektoren, deren Löcher-Transportschichten aus PEDOT:PSS oder NiO_x bestehen, in Abhängigkeit von der Zeit t . Beide Röntgendetektoren werden mit einer Spannung $U = -0.1 \text{ V}$ in Sperrrichtung betrieben und mit 70 kVp Röntgenstrahlung bestrahlt, welche sich aus vier Pulsen mit steigender Energiedosisrate in Luft \dot{D}_{air} zusammensetzt. Für den Betrieb der Röntgendetektoren wird eine Quellen- und Messeinheit (SMU, kurz für engl. source measure unit) (siehe Abschnitt 4.2.2.3) verwendet, die es ermöglicht, eine Spannung U anzulegen und den Strom I zu messen. Für die Bestimmung der in Abbildung 8.3 (a) dargestellten gemessenen Stromdichten J werden die gemessenen Ströme I auf die aktive Fläche A_{aktiv} (siehe Tabelle A.1 im Anhang) der Röntgendetektoren normiert. Die 70 kVp Röntgenstrahlung wird mithilfe einer Röntgenröhre unter Verwendung einer Wolframanode (siehe Beschreibung des Detektor-Labor-Messplatzes in Abschnitt 4.2.2.1) erzeugt.

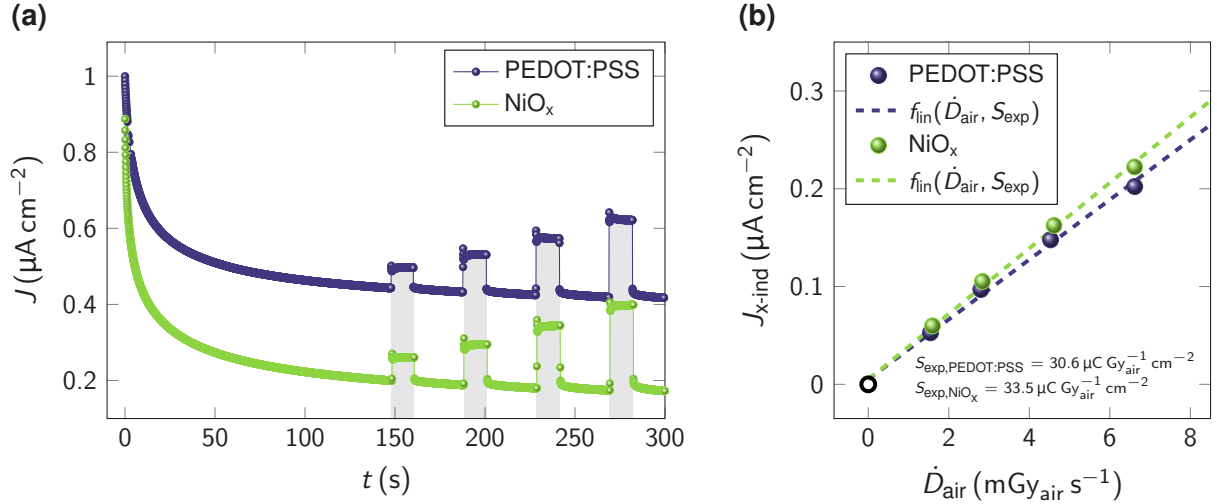


Abbildung 8.3: Zeitaufgelöste Detektorsignale unter Röntgenbestrahlung und Bestimmung der experimentellen Röntgensensitivität. (a) Gemessene Stromdichte J zweier exemplarischer flexibler Perowskit-Röntgendetektoren, deren Löcher-Transportschichten aus Poly-(3,4-ethyldioxythiophen)-poly-(styrolsulfonat) (PEDOT:PSS) oder NiO_x bestehen, in Abhängigkeit der Zeit t . Die Röntgendetektoren werden mit einer Spannung $U = -0.1 \text{ V}$ in Sperrrichtung betrieben und mit 70 kVp Röntgenstrahlung bestrahlt. Die Bestrahlungssequenz setzt sich aus vier Pulsen mit steigender Energiedosisrate der Röntgenstrahlung in Luft \dot{D}_{air} zusammen. Die vier Bestrahlungszeiträume sind grau hinterlegt. (b) Durch Röntgenstrahlung induzierte Stromdichte $J_{x\text{-ind}}$ in Abhängigkeit der Energiedosisrate der Röntgenstrahlung in Luft \dot{D}_{air} . Die Datenpunkte sind aus den in (a) gezeigten Messungen extrahiert. Eine lineare Modellfunktion $f_{\text{lin}}(\dot{D}_{\text{air}}, S_{\text{exp}})$ ist an die jeweiligen Datenpunkte angepasst. Hierbei ist \dot{D}_{air} die Variable und S_{exp} die Steigung der Modellfunktion. Die Werte der experimentellen Röntgensensitivität S_{exp} , die sich aus den Anpassungen ergeben, sind angegeben. Der Ursprung fließt als zusätzlicher Datenpunkt in die Anpassungen mit ein und ist zusätzlich gekennzeichnet. Entnommen aus Mescher et al. [99] und angepasst. (Reprinted (adapted) with permission from [99]. Copyright 2020 American Chemical Society.)

Variable Energiedosisraten der Röntgenstrahlung in Luft \dot{D}_{air} werden hierbei über eine Veränderung des Röhrenstroms $I_{\text{Röhre}}$ realisiert. Die Messungen der Energiedosisrate der Röntgenstrahlung in Luft \dot{D}_{air} werden in diesem Zusammenhang mithilfe eines Dosimeters in Verbindung mit einem Halbleiterdetektor (siehe Abschnitt 4.2.2.2) durchgeführt. Beide in Abbildung 8.3 (a) betrachteten Röntgendetektoren zeigen einen stark ausgeprägten Drift in der Dunkelstromdichte J_d . Die maximalen Änderungen liegen hierbei zu Beginn der Messungen vor, und die Dunkelstromdichten J_d stabilisieren sich mit zunehmender Zeit t . Darüber hinaus zeigen die in Abbildung 8.3 (a) dargestellten Messungen einen bedeutend niedrigere Dunkelstromdichte J_d für den Röntgendetektor mit einer Löcher-Transportschicht bestehend aus NiO_x . Der Drift in der Dunkelstromdichte J_d und der Einfluss der beiden unterschiedlichen Löcher-Transportschichten auf die Dunkelstromdichte J_d wird in Abschnitt 8.3.2 diskutiert. Um den Einfluss des Drifts in der Dunkelstromdichte J_d zu reduzieren und somit eine möglichst vergleichbare Charakterisierung zu gewährleisten, werden die Röntgendetektoren zunächst über einen Zeitraum $\Delta t = 120 \text{ s}$ ohne Röntgenbestrahlung betrieben. Erst im Anschluss wird die Bestrahlungssequenz bestehend aus vier Pulsen mit steigender Energiedosisrate der Röntgenstrahlung in Luft \dot{D}_{air} gestartet (siehe Abbildung 8.3 (a)). Die veränderten gemessenen Stromdichten J während der Bestrahlungszeiträume im Vergleich zu den Zeiträumen, in denen keine Röntgenstrahlung auf die Röntgendetektoren trifft, demonstrieren, dass die in diesem Kapitel untersuchten Perowskit-Bauteile grundsätzlich als Röntgendetektoren verwendet

werden können. Darüber hinaus lässt sich erkennen, dass die durch die Röntgenstrahlung induzierte Stromdichte $J_{x\text{-ind}}$ beider betrachteten Perowskit-Röntgendetektoren mit steigender Energiedosisrate der Röntgenstrahlung in Luft \dot{D}_{air} zunimmt. Um diesen Zusammenhang quantitativ zu analysieren, zeigt Abbildung 8.3 (b) die durch Röntgenstrahlung induzierte Stromdichte $J_{x\text{-ind}}$ beider in Abbildung 8.3 (a) betrachteten Röntgendetektoren in Abhängigkeit der Energiedosisrate der Röntgenstrahlung in Luft \dot{D}_{air} . Die Messwerte für $J_{x\text{-ind}}$ sind hierbei aus den in Abbildung 8.3 (a) gezeigten gemessenen Stromdichten J extrahiert. Unabhängig von der verwendeten Löcher-Transportschicht deuten die Datenpunkte beider betrachteten Röntgendetektoren auf einen linearen Zusammenhang zwischen $J_{x\text{-ind}}$ und \dot{D}_{air} hin. In Anlehnung an [64, 107] ist in Abbildung 8.3 (b) daher eine lineare Modellfunktion $f_{\text{lin}}(\dot{D}_{\text{air}}, S_{\text{exp}})$ an die jeweiligen Datenpunkte angepasst, um die experimentelle Röntgensensitivität S_{exp} zu bestimmen. Dabei ist \dot{D}_{air} die Variable der Modellfunktion und S_{exp} kann in Anlehnung an Gleichung (8.1) über die Steigung $df_{\text{lin}}/d\dot{D}_{\text{air}} = dJ_{x\text{-ind}}/d\dot{D}_{\text{air}}$ der Modellfunktion bestimmt werden. Der Ursprung fließt hierbei als zusätzlicher Datenpunkt in die Anpassungen mit ein und ist zusätzlich gekennzeichnet. Die Werte der experimentellen Röntgensensitivität S_{exp} , die sich aus den beiden Anpassungen ergeben, sind in Abbildung 8.3 (b) angegeben. Mit $S_{\text{exp,PEDOT:PSS}} = 30.6 \mu\text{C Gy}_{\text{air}}^{-1} \text{cm}^{-2}$ und $S_{\text{exp,NiO}_x} = 33.5 \mu\text{C Gy}_{\text{air}}^{-1} \text{cm}^{-2}$ zeigt dabei der Perowskit-Röntgendetektor mit einer Löcher-Transportschicht bestehend aus NiO_x eine höhere experimentelle Röntgensensitivität S_{exp} .

Um mehr Aufschluss darüber zu erhalten, inwieweit die verwendete Löcher-Transportschicht die experimentelle Röntgensensitivität S_{exp} beeinflusst, ist es sinnvoll eine größere Anzahl an Perowskit-Röntgendetektoren zu untersuchen. Dieses Vorgehen ermöglicht darüber hinaus, die Reproduzierbarkeit der ausgewählten Herstellungsmethoden zu bewerten. In Abbildung 8.4 wird daher die experimentelle Röntgensensitivität S_{exp} von 46 Perowskit-Röntgendetektoren, die mithilfe von Löcher-Transportschichten bestehend aus NiO_x oder PEDOT:PSS erreicht werden kann, verglichen. Aufgrund der unterschiedlichen Materialien, die im Rahmen dieses Kapitels für das Substrat und die unteren Elektroden verwendet werden, wird in Abbildung 8.4 darüber hinaus zwischen unelastischen Substraten bestehend aus Glas und flexiblen PEN-Substraten unterschieden. Die Bestimmung der experimentellen Röntgensensitivität S_{exp} erfolgt hierbei gemäß dem in Abbildung 8.3 illustrierten Vorgehen und basiert auf einem Betrieb der Röntgendetektoren mit einer Spannung $U = -0.1 \text{ V}$ in Sperrrichtung und einer Bestrahlung mit 70 kVp Röntgenstrahlung.

Die in Abbildung 8.4 dargestellten Datenpunkte zeigen eine akzeptable Reproduzierbarkeit der erreichbaren experimentellen Röntgensensitivität S_{exp} . In diesem Zusammenhang weisen die Perowskit-Röntgendetektoren, die auf flexiblen PEN-Substraten hergestellt sind, bedeutend größere Schwankungen in der gemessenen Leistungsfähigkeit auf. Eine mögliche Ursache für diese größere Variabilität besteht in der komplexeren Herstellungsmethode in Verbindung mit einer erhöhten Anzahl an Prozessparametern, die zur Realisierung der flexiblen Röntgendetektoren im Labor-Maßstab angewendet wird. Im Gegensatz zu den verwendeten kommerziell erhältlichen Glas-Substraten, die bereits mit strukturierten Elektroden aus ITO beschichtet sind, sind die unteren Elektroden im Falle der hier betrachteten flexiblen PEN-Substrate mittels Rotationsbeschichtung und anschließender Strukturierung hergestellt (siehe Tabelle A.1 im Anhang). In diesem Zusammenhang ist zu erwarten, dass die Reproduzierbarkeit der im Labor-Maßstab flüssigprozessierten unteren Elektroden gegenüber der kommerziellen Herstellung der

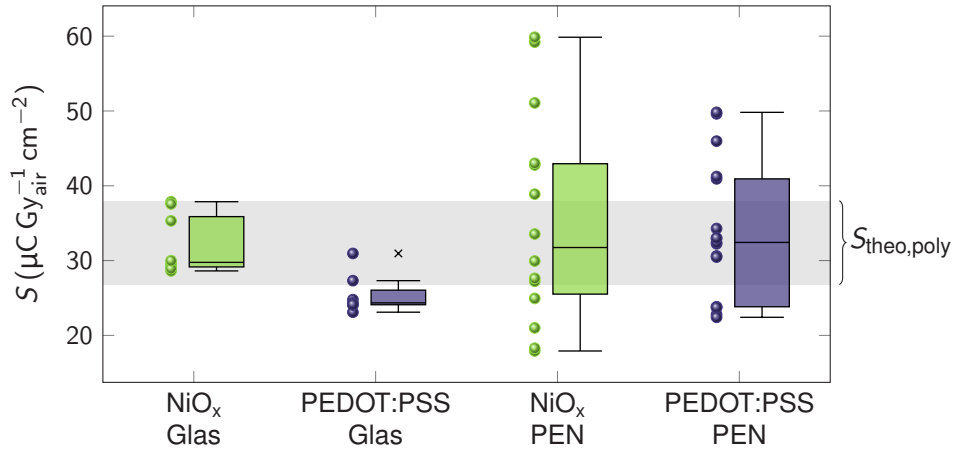


Abbildung 8.4: Gemessene Röntgensensitivität von Perowskit-Röntgendetektoren. Experimentelle Röntgensensitivität S_{exp} von 46 Perowskit-Röntgendetektoren in Abhängigkeit von den verwendeten Materialien. Die Röntgendetektoren sind auf unelastischen Glas-Substraten und auf flexiblen Polymer-Substraten bestehend aus Polyethylennaphthalat (PEN) hergestellt und basieren auf Löcher-Transportschichten bestehend aus NiO_x und Poly-(3,4-ethylenedioxythiophen)-poly-(styrolsulfonat) (PEDOT:PSS). Die Bestimmung der experimentellen Röntgensensitivität S_{exp} erfolgt gemäß dem in Abbildung 8.3 gezeigten Vorgehen. Zu diesem Zweck werden die Röntgendetektoren mit einer Spannung $U = -0.1 \text{ V}$ in Sperrrichtung betrieben und mit 70 kVp Röntgenstrahlung bestrahlt. Gezeigt werden sowohl die einzelnen Datenpunkte als auch die zugehörigen Kastengrafiken (engl. Box-Plots). Die Kastengrafiken beinhalten den Median und die (geschätzten) 0.25- und 0.75-Quantile. Die Antennen (engl. Whiskers) zeigen, welche Datenpunkte als Ausreißer betrachtet werden. Die Ausreißer sind zusätzlich durch eine gekreuzte Markierung gekennzeichnet. Die theoretische Röntgensensitivität $S_{\text{theo,poly}}$, welche sich mithilfe von Gleichung (8.2) berechnen lässt, ist durch den grau hinterlegten Bereich dargestellt. Entnommen aus Mescher et al. [99] und angepasst. (Reprinted (adapted) with permission from [99]. Copyright 2020 American Chemical Society.)

ITO-Elektroden unterlegen ist. Eine verschlechterte Reproduzierbarkeit der unteren Elektrode kann sich insbesondere durch die tatsächlich realisierte Fläche der Elektroden auf die gemessene Röntgensensitivität S_{exp} auswirken. Die Komplexität im Hinblick auf die Herstellung wird darüber hinaus durch die mechanische Flexibilität der PEN-Substrate erhöht. Die Verwendung der zusätzlichen mit PDMS-beschichteten Glas-Substrate bewirkt möglichst planare PEN-Substrate, erhöht allerdings zusätzlich zur Herstellung der unteren Elektrode die Anzahl an Prozessparametern, die im Labor-Maßstab angewendet werden, und wirkt sich somit potentiell negativ auf die Reproduzierbarkeit aus. Im Hinblick auf die beiden in Betracht gezogenen Löcher-Transportschichten zeigen die in Abbildung 8.4 dargestellten Ergebnisse lediglich einen geringen Einfluss auf die experimentelle Röntgensensitivität S_{exp} . Im Falle unelastischer Perowskit-Röntgendetektoren lassen sich auf der Basis von Löcher-Transportschichten bestehend aus NiO_x geringfügig höhere Werte für die experimentelle Röntgensensitivität S_{exp} erreichen. Eine mögliche Erklärung besteht hierbei in einem potentiell verbesserten Kristallwachstum der TCP-Absorber auf Löcher-Transportschichten bestehend aus NiO_x verglichen mit dem Kristallwachstum auf PEDOT:PSS. Ein weiterer möglicher Erklärungsansatz bezieht sich auf die relative Lage der Energieniveaus der Löcher-Transportschichten im Vergleich zum TCP-Absorber und der ITO-Elektrode. Eine verbesserte Abstimmung der Energieniveaus der Löcher-Transportschicht auf die Energieniveaus des TCP-Absorbers und der ITO-Elektrode kann in diesem Zusammenhang eine verbesserte Extraktion der Ladungsträger bewirken, welche sich wiederum positiv auf die experimentelle Röntgensensitivität S_{exp} auswirken kann. Im Falle flexibler Perowskit-Röntgendetektoren lässt sich kein eindeutiger Einfluss der

verwendeten Löcher-Transportschicht auf die experimentelle Röntgensensitivität S_{exp} feststellen. Die Variabilität der gemessenen Leistungsfähigkeit ist im Falle der flexiblen Röntgendetektoren allerdings derart stark ausgeprägt, dass die Möglichkeit besteht, dass ein potentieller Einfluss der verwendeten Löcher-Transportschicht durch die Schwankungen in der experimentellen Röntgensensitivität S_{exp} überlagert ist. Abgesehen von den stärker ausgeprägten Schwankungen zeigen die in diesem Kapitel betrachteten flexiblen Perowskit-Röntgendetektoren eine hohe experimentelle Röntgensensitivität S_{exp} , die mit den Ergebnissen der unelastischen auf Glas-Substraten realisierten Detektoren vergleichbar ist. Die experimentelle Röntgensensitivität S_{exp} , die mit den in diesem Kapitel betrachteten flexiblen Perowskit-Röntgendetektoren erreicht werden kann, liegt bei einem Mittelwert von $S_{\text{exp,Mittel}} = 34.4 \mu\text{C Gy}_{\text{air}}^{-1} \text{cm}^{-2}$ und reicht bis zu einem Maximalwert von $S_{\text{exp,Max}} = 59.9 \mu\text{C Gy}_{\text{air}}^{-1} \text{cm}^{-2}$. Um diese Leistungsfähigkeit bewerten zu können, zeigt Tabelle 8.1 einen Vergleich der Röntgensensitivität S von flexiblen direkten Röntgendetektoren, die bis zum Zeitraum des hier betrachteten Forschungsprojekts mithilfe unterschiedlicher Absorber-Materialien erreicht werden konnte. Die Auflistung in Tabelle 8.1 beinhaltet darüber hinaus Angaben zur Herstellungsmethode der Absorber, zum Betrag der Betriebsspannung $|U|$ und zur Energie E der Röntgenphotonen. Verglichen mit den anderen in Tabelle 8.1 aufgelisteten Arbeiten kann mit den in diesem Kapitel betrachteten flexiblen Röntgendetektoren einer der höchsten Werte für die Röntgensensitivität S erreicht werden. Die im Rahmen dieses Kapitels untersuchten flexiblen Röntgendetektoren sind demzufolge im höchsten Maße konkurrenzfähig. An dieser Stelle sei darauf hingewiesen, dass die hohe Leistungsfähigkeit der hier betrachteten flexiblen Röntgendetektoren bei einem vergleichsweise geringen Betrag der Betriebsspannung von $|U| = 0.1 \text{ V}$ erreicht werden kann. Ein niedriger benötigter Betrag der Betriebsspannung $|U|$ kann in diesem Zusammenhang die Komplexität der Auslese-Elektronik reduzieren und ist daher insbesondere im Hinblick auf eine industrielle Realisierung über den Labor-Maßstab hinaus von Interesse. Es sei des Weiteren auf die unterschiedliche Energie E der Röntgenphotonen hingewiesen, die in den verschiedenen Arbeiten zur Leistungscharakterisierung verwendet wird und welche somit einen erheblichen Einfluss auf die gemessene Leistungsfähigkeit haben kann.

Der Maximalwert der experimentellen Röntgensensitivität S_{exp} , der zum Zeitpunkt des hier betrachteten Forschungsprojekts in anderen Arbeiten mit unelastischen Röntgendetektoren auf der Basis von TCP-Absorbern erreicht wurde, liegt bei $S_{\text{exp,Max}} = 97 \mu\text{C Gy}^{-1} \text{cm}^{-2}$ [104]. Darüber hinaus wurden bis zum Zeitraum des hier betrachten Forschungsprojekts im Rahmen anderer Arbeiten, deren Fokus auf der Erforschung von Perowskit-Absorbern mit einer bedeutend größeren Schichtdicke d liegt, Werte für die experimentelle Röntgensensitivität S_{exp} in einem Bereich von $S_{\text{exp}} = 529 - 2,527 \mu\text{C Gy}_{\text{air}}^{-1} \text{cm}^{-2}$ [107, 108] bei einer vergleichbaren Energie E der Röntgenphotonen realisiert. Die in diesem Kapitel betrachteten flexiblen Perowskit-Röntgendetektoren sind demzufolge im Hinblick auf flexible direkte Röntgendetektoren im höchsten Maße konkurrenzfähig, ermöglichen allerdings keinen neuen Rekordwert für die experimentelle Röntgensensitivität S_{exp} von Perowskit-Röntgendetektoren im Allgemeinen.

Neben der Einordnung der Leistungsfähigkeit im Vergleich zu Röntgendetektoren, die im Rahmen anderer Arbeiten realisiert wurden, ist an dieser Stelle ein Vergleich der gemessenen experimentellen Röntgensensitivität S_{exp} mit der theoretischen Röntgensensitivität S_{theo} von besonderem Interesse. Gemäß Gleichung (3.14) kann die theoretische Röntgensensitivität S_{theo} eines einschichtigen direkten Röntgendetektors im Falle monoenergetischer Röntgenphotonen der Energie E als Produkt aus einer Normierung

Tabelle 8.1: Vergleich der Röntgensensitivität von flexiblen direkten Röntgendetektoren. Auflistung der Röntgensensitivität S von flexiblen direkten Röntgendetektoren, die mithilfe unterschiedlicher Absorber-Materialien realisiert ist. Die Methode zur Herstellung der Absorber, der Betrag der Betriebsspannung $|U|$ und die Energie E der Röntgenphotonen sind zusätzlich angegeben. Es werden direkte Absorber bestehend aus Dreifach-Kationen-Perowskit (TCP, kurz für engl. triple cation perovskite), CsPbBr₃ Perowskit-Quantenpunkten, Cs₂AgBiBr₆ Perowskit in einer Polymermatrix, Ga₂O₃, bis(triisopropylgermylethynyl) Pentacen (TIPGe-Pentacen), bis(triisopropylsilylethynyl) Pentacen (TIPS-Pentacen), Bi₂O₃ Nanopartikel in einer organischen Bulk-Heterojunction, Kohlenstoffnanoröhrchen in einem Polymer-Halbleiter und poly([9,9-dioctylfluorenyl-2,7-diyl]-co-bithiophen) (F8T2) betrachtet. Entnommen aus Mescher et al. [99] und angepasst. (Reprinted (adapted) with permission from [99]. Copyright 2020 American Chemical Society.)

	Herstellungsmethode	S ($\mu\text{C Gy}^{-1} \text{cm}^{-2}$)		$ U $ (V)	E (keV)
TCP (aus diesem Kapitel)	tintenstrahlgedruckt (engl. inkjet-printed)	59.9	(34.4) ^a	0.1	<70
CsPbBr ₃ Perowskit-Quantenpunkte	tintenstrahlgedruckt (engl. inkjet-printed)	17.7	[101]	0.1	0.1 – 2.5
Cs ₂ AgBiBr ₆ Perowskit in Polymermatrix	tropfengegossen (engl. drop-casted)	40	[100]	400	<45
Ga ₂ O ₃	gesputtert (engl. sputtered)	6.77	[109]	50	8
TIPGe-Pentacen	tropfengegossen (engl. drop-casted)	18	(12.4) [110] ^{ab}	3	<35
TIPS-Pentacen	tropfengegossen (engl. drop-casted)	0.77	(0.3) [111] ^{ab}	0.2	17
Bi ₂ O ₃ Nanopartikel in organischer Bulk-Heterojunction	gegossen (engl. casted)	143.2	[112] ^c	10	<50
Kohlenstoffnanoröhrchen in Polymer-Halbleiter	tropfengegossen (engl. drop-casted)	19.45	[113] ^b	150	8.06
F8T2	rotationsbeschichtet (engl. spin-coated)	0.1582	[114] ^b	50	17

^a Werte in Klammern zeigen den Mittelwert der Röntgensensitivität S

^b Röntgensensitivität S ist mithilfe der Absorber-Schichtdicke berechnet

^c Röntgensensitivität S ist mithilfe der Stromdichte in Abhängigkeit der Dosisrate berechnet

S_0 , der Röntgenabsorptionseffizienz η_x , der Konversionseffizienz η_m und der Ladungssammeleffizienz η_{cc} modelliert werden: $S_{\text{theo}} = S_0 \eta_x \eta_m \eta_{cc}$. Die Bestimmung der experimentellen Röntgensensitivität S_{exp} im Rahmen dieses Kapitels erfolgt allerdings mit polyenergetischer 70 kVp Röntgenstrahlung. Eine mögliche Vorgehensweise, die theoretische Röntgensensitivität $S_{\text{theo,poly}}$ eines einschichtigen direkten Röntgendetektors im Falle polyenergetischer Röntgenstrahlung abzuschätzen, besteht darin, die theoretische Röntgensensitivität S_{theo} im monoenergetischen Fall mit der normierten spektralen Photonenfluenz $\hat{\Phi}_E$ zu gewichten [99]:

$$S_{\text{theo,poly}} = \int_{E_{\min}}^{E_{\max}} dE S_{\text{theo}} \hat{\Phi}_E. \quad (8.2)$$

Die Integrationsgrenzen E_{\min} und E_{\max} sind hierbei über die minimale und die maximale Energie E der Röntgenphotonen bestimmt. Die theoretische Röntgensensitivität $S_{\text{theo,poly}}$, die sich gemäß Gleichung (8.2) für den Fall der in diesem Kapitel betrachteten Perowskit-Röntgendetektoren ergibt, ist in Abbildung 8.4 zusätzlich zur gemessenen experimentellen Röntgensensitivität S_{exp} dargestellt. Die Berechnungen basieren dabei auf Simulationen der theoretischen Röntgensensitivität S_{theo} auf der Grundlage des in Abschnitt 3.1 beschriebenen Modells und einer Simulation der normierten spektralen Photonenfluenz $\hat{\Phi}_E$ der verwendeten 70 kV_p Röntgenstrahlung. Die Simulation der normierten spektralen Photonenfluenz $\hat{\Phi}_E$ ist hierbei von Marcus Zuber mithilfe von *EGSnrc* [115, 116, 117] durchgeführt worden. Die Simulationen der theoretischen Röntgensensitivität S_{theo} für die Berechnungen in diesem Kapitel werden für TCP-Absorber der Schichtdicke $d = 3.7 \mu\text{m}$ durchgeführt und basieren auf der Annahme einer idealen Ladungssammeleffizienz η_{cc} mit Ladungsträger-Schubwegen $\mu_{\text{e,h}} F \tau_{\text{e,h}}$ von Elektronen und Löchern, welche die Schichtdicke d des TCP-Absorbers deutlich übersteigen. Hierbei ist $\mu_{\text{e,h}}$ die Beweglichkeit sowie $\tau_{\text{e,h}}$ die Lebensdauer der Elektronen und Löcher und F ist der Betrag des elektrischen Feldes. Zum Zeitpunkt des hier betrachteten Forschungsprojekts gab es noch keinen wissenschaftlichen Konsens über die exakte Struktur und den Phasenverlauf von Perowskit-Halbleitern wie beispielsweise FAPbI_3 [118, 119, 120] und insbesondere nicht in Bezug auf die komplexeren TCP-Absorber. Aus diesem Grund basieren die Simulationen der theoretischen Röntgensensitivität S_{theo} in diesem Kapitel auf einer Dichte ρ der TCP-Absorber in einem Bereich von $\rho = 4.092 - 4.221 \text{ g cm}^{-3}$ [120]. Darüber hinaus lassen sich unterschiedliche Werte für die Elektron-Loch-Paar Erzeugungsenergie W_{\pm} der verwendeten TCP-Absorber auf der Basis der Arbeiten von Que and Rowlands [121], Klein [122] und Devanathan et al. [123] motivieren. Unter der Annahme einer Bandlücke E_g (g für engl. gap) der TCP-Absorber von $E_g \approx 1.59 \text{ eV}$ [124] wird die Elektron-Loch-Paar Erzeugungsenergie W_{\pm} der verwendeten TCP-Absorber infolgedessen für die Simulationen der theoretischen Röntgensensitivität S_{theo} in diesem Kapitel auf einen Wertebereich von $W_{\pm} = 4.0 - 5.5 \text{ eV}$ [121, 122, 123] abgeschätzt. Es sei darüber hinaus darauf hingewiesen, dass die Abschwächung der Röntgenstrahlung durch die Au-Schicht der oberen Elektroden, welche durch die gewählte Orientierung der Röntgendetektoren während der experimentellen Charakterisierung hervorgerufen wird, in den Simulationen der theoretischen Röntgensensitivität S_{theo} beachtet wird. Aufgrund der in den Simulationen angenommenen Wertebereiche für die Dichte ρ und die Elektron-Loch-Paar Erzeugungsenergie W_{\pm} ergibt sich auch für die theoretische Röntgensensitivität $S_{\text{theo,poly}}$ in Abbildung 8.4 ein Wertebereich mit $S_{\text{theo,poly,min}} = 26.8 \mu\text{C Gy}_{\text{air}}^{-1} \text{ cm}^{-2}$ und $S_{\text{theo,poly,max}} = 38.0 \mu\text{C Gy}_{\text{air}}^{-1} \text{ cm}^{-2}$ (siehe grau hinterlegter Bereich in Abbildung 8.4). Die gute Übereinstimmung zwischen der gemessenen experimentellen Röntgensensitivität S_{exp} und der theoretischen Röntgensensitivität $S_{\text{theo,poly}}$ in Abbildung 8.4 demonstriert die Anwendbarkeit der Simulationsmodelle, die für die Abschätzung in Gleichung (8.2) verwendet werden. Die vergleichbaren Wertebereiche, die sich für die Röntgensensitivität S aus der experimentellen Charakterisierung und den theoretischen Simulationen ergeben, zeigen insbesondere, dass sich mithilfe des in Abschnitt 3.1 beschriebenen Simulationsmodells die Leistungsfähigkeit der in dieser Arbeit untersuchten Perowskit-Röntgendetektoren adäquat modellieren lässt. Diese gute Übereinstimmung zwischen der Theorie und dem Experiment bestärkt folglich die Ergebnisse und Schlussfolgerungen der im wesentlichen auf theoretischen Überlegungen und Simulationen basierenden Kapitel 5, 6 und 7. An dieser Stelle sei darauf hingewiesen, dass bedingt durch die Annahme einer idealen Ladungssammeleffizienz η_{cc} im

Rahmen der Simulation der theoretischen Röntgensensitivität $S_{\text{theo,poly}}$ Werte für $S_{\text{theo,poly}}$ oberhalb der experimentellen Röntgensensitivität S_{exp} zu erwarten sind, da bei einer Betriebsspannung von $U = -0.1 \text{ V}$ eine zumindest leicht reduzierte tatsächliche realisierte Ladungssammeleffizienz wahrscheinlich ist. Eine mögliche Erklärung für diese nicht vorliegende Abweichung liegt in dem Umstand, dass gemäß der Gleichungen (3.2) und (3.3) das verwendete Simulationsmodell die Interaktionen von sekundären Photonen, die durch Strahlungsverluste der geladenen Sekundärteilchen hervorgerufen werden, nicht beachtet. Eine Beachtung dieser Interaktionen kann zu einer Erhöhung der absorbierten Energie im Absorber und infolgedessen zu einer erhöhten theoretischen Röntgensensitivität $S_{\text{theo,poly}}$ führen. Ein weiterer möglicher Erklärungsansatz für geringfügig überschätzte Werte der experimentellen Röntgensensitivität S_{exp} liegt in Ladungsträgern, die an den Rändern der aktiven Bereiche des Röntgendetektors zur Signalinduktion beitragen.

Im Allgemeinen zeigt die Spannung U mit welcher ein direkter Röntgendetektor betrieben wird einen bedeutenden Einfluss auf die gemessenen Detektorsignale. Um den Einfluss der Betriebsspannung U auf die gemessenen Detektorsignale der in diesem Kapitel betrachteten Perowskit-Röntgendetektoren zu untersuchen, zeigt Abbildung 8.5 (a) die gemessene Stromdichte J eines exemplarischen unelastischen

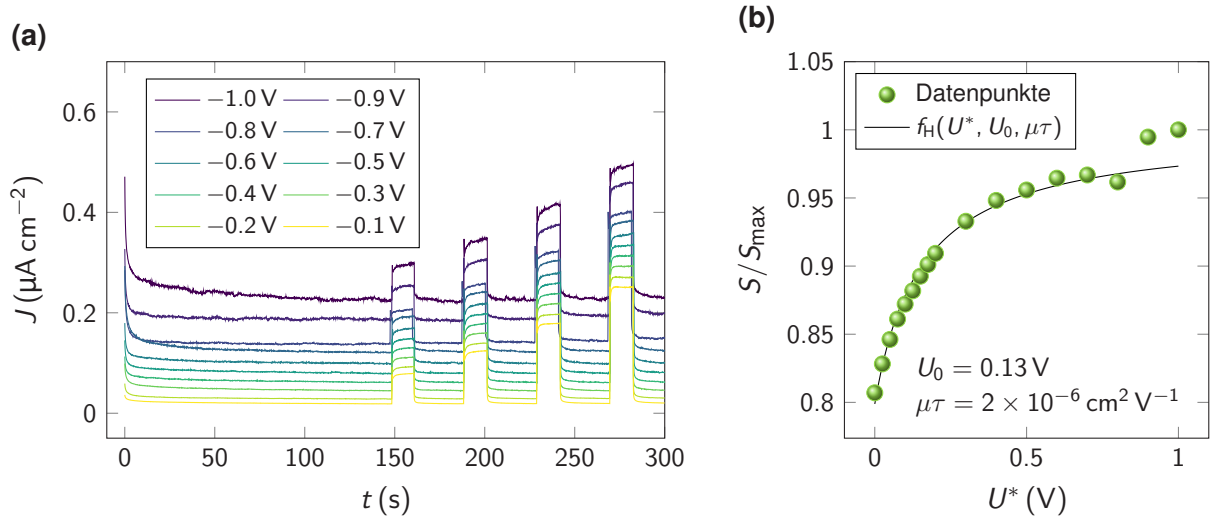


Abbildung 8.5: Zeitaufgelöste und spannungsabhängige Detektorsignale unter Röntgenbestrahlung und spannungsabhängige Röntgensensitivität. (a) Gemessene Stromdichte J eines exemplarischen unelastischen Perowskit-Röntgendetektors, dessen Löcher-Transportschicht aus NiO_x besteht, in Abhängigkeit der Zeit t . Der Röntgendetektor wird mit unterschiedlichen Spannungen im Intervall $-1.0 \text{ V} \leq U \leq -0.1 \text{ V}$ in Sperrrichtung betrieben und wird mit 70 kVp Röntgenstrahlung bestrahlt. Die Bestrahlungssequenz setzt sich aus vier Pulsen mit steigender Energiedosisrate in Luft \dot{D}_{air} zusammen. (b) Normierte experimentelle Röntgensensitivität $S_{\text{exp}}/S_{\text{exp,max}}$ des in (a) betrachteten Röntgendetektors in Abhängigkeit der negativen Betriebsspannung $U^* = -U$. Als Normierung $S_{\text{exp,max}}$ wird die experimentelle Röntgensensitivität S_{exp} bei einer Spannung $U^* = 1 \text{ V}$ verwendet. Die experimentelle Röntgensensitivität S_{exp} ist gemäß dem in Abbildung 8.3 beschriebenen Vorgehen und mithilfe der in (a) gezeigten Messungen bestimmt. Einzelne zugrundeliegende Messungen bei einzelnen Spannungen U^* sind hierbei in (a) nicht dargestellt. Die Modellfunktion $f_H(U^*, U_0, \mu\tau)$ aus Gleichung (8.3) ist an die Datenpunkte angepasst. Dabei ist U^* die Variable und U_0 und $\mu\tau$ sind Parameter der Modellfunktion. Die Werte der intrinsischen Spannung U_0 und des Beweglichkeit-Lebensdauer-Produkts $\mu\tau$, die sich aus der Anpassung ergeben, sind angegeben. Entnommen aus Mescher et al. [99] und angepasst. (Reprinted (adapted) with permission from [99]. Copyright 2020 American Chemical Society.)

Perowskit-Röntgendetektors, dessen Löcher-Transportschicht aus NiO_x besteht, in Abhängigkeit der Zeit t für den Fall unterschiedlicher Betriebsspannungen U im Intervall $-1.0 \text{ V} \leq U \leq -0.1 \text{ V}$ in Sperrrichtung. In Analogie zu den in Abbildung 8.3 (a) gezeigten Messungen wird der Röntgendetektor zunächst über einen Zeitraum von $\Delta t = 120 \text{ s}$ ohne Röntgenbestrahlung betrieben und anschließend mit 70 kVp Röntgenstrahlung bestrahlt, welche sich aus vier Pulsen mit steigender Energiedosisrate in Luft \dot{D}_{air} zusammensetzt. Für den Betrieb des Röntgendetektors wird eine SMU (siehe Abschnitt 4.2.2.3) verwendet. Die Röntgenstrahlung wird mithilfe einer Röntgenröhre unter Verwendung einer Wolframanode (siehe Beschreibung des Detektor-Labor-Messplatzes in Abschnitt 4.2.2.1) erzeugt. Die in Abbildung 8.5 (a) dargestellte gemessene Stromdichte J zeigt eine eindeutige Abhängigkeit der Dunkelstromdichte J_d von der verwendeten Betriebsspannung U . Mit zunehmendem Betrag der Betriebsspannung $|U|$ in Sperrrichtung steigt die Dunkelstromdichte J_d . Um den Einfluss der Betriebsspannung U auf die gemessenen Detektorsignale unter Röntgenbestrahlung zu untersuchen, zeigt Abbildung 8.5 (b) die normierte experimentelle Röntgensensitivität $S_{\text{exp}}/S_{\text{exp,max}}$ des in Abbildung 8.5 (a) betrachteten Röntgendetektors in Abhängigkeit der negativen Betriebsspannung $U^* = -U$. Die experimentelle Röntgensensitivität S_{exp} ist hierbei gemäß dem in Abbildung 8.3 beschriebenen Vorgehen und mithilfe der in Abbildung 8.5 (a) gezeigten Messungen bestimmt. Die in Abbildung 8.5 (b) gezeigten Datenpunkte der normierten experimentellen Röntgensensitivität $S_{\text{exp}}/S_{\text{exp,max}}$ zeigen, dass mit zunehmender (abnehmender) Spannung U^* (U) höhere Werte für die experimentelle Röntgensensitivität S_{exp} erreicht werden können. Die Veränderungen in der normierten experimentellen Röntgensensitivität $S_{\text{exp}}/S_{\text{exp,max}}$ sind für geringe Spannungen U^* stark ausgeprägt und deuten für größere Spannungen U^* ein Sättigungsverhalten an. Der spannungsabhängige Verlauf der normierten experimentellen Röntgensensitivität $S_{\text{exp}}/S_{\text{exp,max}}$ demonstriert darüber hinaus, dass mit den hier betrachteten Perowskit-Röntgendetektoren bedingt durch den verwendeten Aufbau mit Elektronen- und Löcher-Transportschichten die Detektion von Röntgenstrahlung auch ohne extern angelegte Betriebsspannung ($U^* = U = 0 \text{ V}$) möglich ist. Die für die Charakterisierung der in diesem Kapitel betrachteten Perowskit-Röntgendetektoren ausgewählte Betriebsspannung von $U = -0.1 \text{ V}$ in Sperrrichtung repräsentiert gemäß der Ergebnisse in Abbildung 8.5 einen Kompromiss zwischen einer hohen experimentellen Röntgensensitivität S_{exp} und einer akzeptablen Höhe der Dunkelstromdichte J_d . An die Datenpunkte in Abbildung 8.5 (b) ist zusätzlich eine Modellfunktion $f_H(U^*, U_0, \mu\tau)$ angepasst. Bei der verwendeten Modellfunktion $f_H(U^*, U_0, \mu\tau)$ handelt es sich um eine modifizierte Form der Hecht Gleichung [125, 34]:

$$f_H(U^*, U_0, \mu\tau) = \frac{\mu\tau(U^* + U_0)}{d^2} \left(1 - e^{-d^2/(\mu\tau(U^* + U_0))} \right). \quad (8.3)$$

Hierbei beschreibt U^* die negative Betriebsspannung, U_0 die intrinsische Spannung, $\mu\tau$ das Beweglichkeit-Lebensdauer-Produkt und d die Absorber-Schichtdicke. Darüber hinaus handelt es sich bei U^* um die Variable und bei U_0 und $\mu\tau$ um Parameter der Modellfunktion. Infolgedessen lassen sich U_0 und $\mu\tau$ aus der Anpassung der Modellfunktion abschätzen. Aus der Anpassung der Modellfunktion in Abbildung 8.5 (b) ergibt sich eine intrinsische Spannung von $U_0 = 0.13 \text{ V}$ und ein Beweglichkeit-Lebensdauer-Produkt von $\mu\tau = 2 \times 10^{-6} \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1}$ für die in diesem Kapitel betrachteten Perowskit-Röntgendetektoren.

8.3.2 Charakterisierung des Dunkelstroms

Eine weitere wesentliche Größe zur Beschreibung der Leistungsfähigkeit von Röntgendetektoren neben der Röntgensensitivität S ist die Detektive Quanteneffizienz DQE, welche gemäß Gleichung (2.27) mithilfe der Signal-Rausch-Verhältnisse $\text{SNR}_{\text{in,out}}$ am Eingang und am Ausgang eines Detektors beschrieben werden kann: $\text{DQE}(u) = \text{SNR}_{\text{out}}^2(u) / \text{SNR}_{\text{in}}^2(u)$. In diesem Zusammenhang beschreibt u die Ortsfrequenz. Die experimentelle Bestimmung der Signal-Rausch-Verhältnisse $\text{SNR}_{\text{in,out}}$ am Eingang und am Ausgang eines Röntgendetektors in Abhängigkeit der Ortsfrequenz u ist nicht trivial. Bis zum Zeitraum des hier betrachteten Forschungsprojekts wurde im Rahmen andere Publikationen mit dem Fokus auf der Erforschung von Perowskit-Röntgendetektoren häufig auf die experimentelle Charakterisierung der Detektiven Quanteneffizienz DQE verzichtet. In der vorliegenden Arbeit wird daher davon abgesehen, die DQE experimentell zu untersuchen. Ein wichtiger Einflussfaktor in dem Simulationsmodell, das in dieser Arbeit für die Modellierung der DQE verwendet wird, ist die elektronische Rauschleistung Σ_{el} (siehe Abschnitt 3.2). Gemäß Gleichung (3.24) kann die elektronische Rauschleistung Σ_{el} mithilfe der Dunkelstromdichte J_{d} des Röntgendetektors beschrieben werden. Die Untersuchungen im folgenden Abschnitt beziehen sich daher hauptsächlich auf die experimentelle Charakterisierung der Dunkelstromdichte J_{d} der hier betrachteten Perowskit-Röntgendetektoren.

Die beiden in Abbildung 8.3 (a) betrachteten Röntgendetektoren zeigen einen stark ausgeprägten Drift in der Dunkelstromdichte J_{d} . Die Änderungen in der Dunkelstromdichte J_{d} sind hierbei am stärksten zu Beginn der Messungen ausgeprägt, und die Dunkelstromdichte J_{d} stabilisiert sich mit zunehmender Zeit t . Ein möglicher Erklärungsansatz für den beobachteten, mit der Zeit abklingenden Drift in der Dunkelstromdichte J_{d} ist die Bewegung von Ionen innerhalb des Perowskit-Absorbers [126, 127, 128]. Die Stabilisierung der Dunkelstromdichte J_{d} mit zunehmender Zeit t kann in diesem Kontext mit einer Ansammlung der Ionen an den Grenzflächen zwischen dem TCP-Absorber und der Elektronen- und Löcher-Transportschicht erklärt werden. Im Rahmen dieser Erklärung wird das durch die extern angelegte Spannung hervorgerufene elektrische Feld durch die Ansammlung der Ladungsträger kompensiert, wodurch die Bewegung der Ionen im elektrischen Feld abnimmt und sich langsam ihrem Minimum nähert. Unter der Annahme, dass der Drift der Dunkelstromdichte J_{d} durch die Veränderungen in dem durch die Bewegung der Ionen induzierten Strom dominiert wird, erklärt sich somit, dass der Drift der Dunkelstromdichte J_{d} mit zunehmender Zeit t abnimmt. Der bei den hier betrachteten Perowskit-Röntgendetektoren auftretende Drift im Dunkelstrom wurde darüber hinaus über vergleichbare Zeiträume bereits in Detektoren mit polykristallinen [108] und monokristallinen [129] Perowskit-Absorbern beobachtet.

Die in Abbildung 8.3 (a) dargestellten Messungen zeigen eine bedeutend geringere Dunkelstromdichte J_{d} für den Röntgendetektor, dessen Löcher-Transportschicht aus NiO_x besteht. In Analogie zu den Untersuchungen in Abschnitt 8.3.1 ist es sinnvoll, die Dunkelstromdichte J_{d} einer größeren Anzahl an Perowskit-Röntgendetektoren zu untersuchen, um mehr Aufschluss darüber zu erhalten, inwieweit die verwendete Löcher-Transportschicht die Dunkelstromdichte J_{d} beeinflusst und um darüber hinaus die Reproduzierbarkeit der ausgewählten Herstellungsmethoden im Hinblick auf die Dunkelstromdichte J_{d} zu bewerten. Abbildung 8.6 vergleicht daher die Dunkelstromdichte J_{d} von 46 Perowskit-Röntgendetektoren, die sich

mithilfe von Löcher-Transportschichten bestehend aus NiO_x oder PEDOT:PSS erreichen lässt. In Anlehnung an Abbildung 8.4 wird auch in Abbildung 8.6 zwischen unelastischen Substraten bestehend aus Glas und flexiblen PEN-Substraten unterschieden. Die dargestellten Datenpunkte repräsentieren hierbei die Dunkelstromdichte J_d bei einer Betriebsspannung $U = -0.1 \text{ V}$ in Sperrrichtung nach Ablauf des Zeitraums $\Delta t = 120 \text{ s}$ kurz bevor die Detektoren im Rahmen der experimentellen Charakterisierung der Röntgensensitivität S mit Röntgenstrahlung bestrahlt werden. Für den Betrieb der Röntgendetektoren wird eine SMU (siehe Abschnitt 4.2.2.3) verwendet. Abgesehen von einigen Ausreißern zeigen die in Abbildung 8.6 betrachteten Perowskit-Röntgendetektoren eine akzeptable Reproduzierbarkeit in Bezug auf die Dunkelstromdichte J_d . Hinsichtlich der verwendeten Löcher-Transportschicht lässt sich gemäß der in Abbildung 8.6 dargestellten Analyse, unabhängig vom Material des Substrats und der unteren Elektrode, mithilfe von NiO_x eine geringere Dunkelstromdichte J_d erreichen. Dieses Ergebnis stimmt mit anderen Untersuchungen im Hinblick auf Perowskit-Bauteile mit Löcher-Transportschichten bestehend aus flüssigprozessiertem NiO_x und PEDOT:PSS [130, 131] überein. Eine mögliche Erklärung für die niedrige Dunkelstromdichte J_d , welche sich mit den Röntgendetektoren erreichen lässt, deren Löcher-Transportschichten aus NiO_x bestehen, basiert auf der großen Bandlücke von gesputtertem NiO_x [132, 133]. Eine große Bandlücke der Löcher-Transportschicht kann in diesem Zusammenhang als effiziente Barriere fungieren, welche die Injektion von Ladungsträgern von der unteren Elektrode in den TCP-Absorber reduziert. Die niedrigere Dunkelstromdichte J_d , die mit Löcher-Transportschichten aus NiO_x im Vergleich zu PEDOT:PSS erreicht werden kann, kann potentiell durch die Energieniveaus des

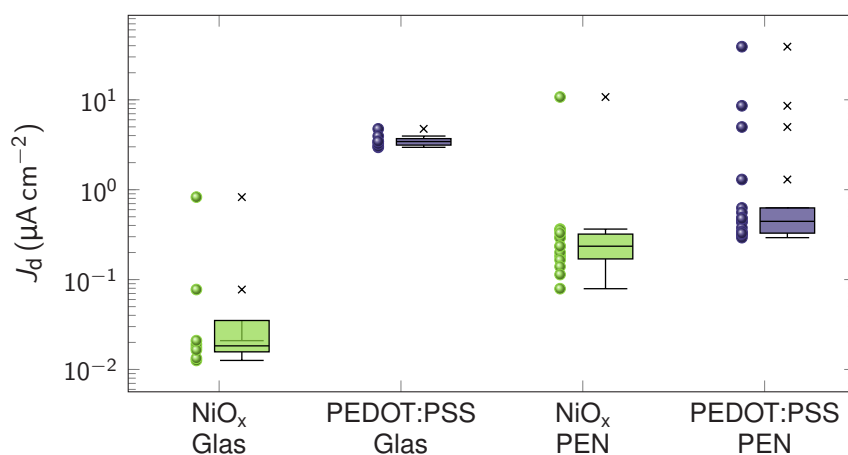


Abbildung 8.6: Gemessene Dunkelstromdichte von Perowskit-Röntgendetektoren. Gemessene Dunkelstromdichte J_d von 46 Perowskit-Röntgendetektoren während des Betriebs mit einer Spannung $U = -0.1 \text{ V}$ in Sperrrichtung in Abhängigkeit von den verwendeten Materialien. Die Röntgendetektoren sind auf unelastischen Glas-Substraten und auf flexiblen Polymer-Substraten bestehend aus Polyethylenaphthalat (PEN) hergestellt und basieren auf Löcher-Transportschichten bestehend aus NiO_x und Poly-(3,4-ethylenedioxythiophen)-poly-(styrolsulfonat) (PEDOT:PSS). Gezeigt werden sowohl die einzelnen Datenpunkte als auch die zugehörigen Kastengrafiken (engl. Box-Plots). Die Kastengrafiken beinhalten den Median und die (geschätzten) 0.25- und 0.75-Quantile. Die Antennen (engl. Whiskers) zeigen, welche Datenpunkte als Ausreißer betrachtet werden. Die Ausreißer sind zusätzlich durch eine gekreuzte Markierung gekennzeichnet. Entnommen aus Mescher et al. [99] und angepasst. (Reprinted (adapted) with permission from [99]. Copyright 2020 American Chemical Society.)

Leitungsbandes von NiO_x und dem niedrigsten unbesetzten Molekülorbital (LUMO, kurz für engl. Lowest Unoccupied Molecular Orbital) von PEDOT:PSS erklärt werden. Untersuchungen im Themengebiet der organischen Photovoltaik zeigen ein Leitungsband von NiO_x , dessen Energieniveau oberhalb des Energieniveaus des LUMO von PEDOT:PSS liegt [134, 135]. In diesem Kontext kann ein energetisch höher gelegenes Leitungsband von NiO_x verglichen mit dem Energieniveau des LUMO von PEDOT:PSS ein verbessertes Blockverhalten für Elektronen und somit eine niedrigere Dunkelstromdichte J_d bewirken. Bedingt durch die unterschiedlichen Herstellungsmethoden, die für die Fabrikation der NiO_x und PEDOT:PSS Löcher-Transportschichten verwendet werden, besteht darüber hinaus die Möglichkeit, dass die Löcher-Transportschichten in unterschiedlicher Qualität realisiert sind. Qualitätsunterschiede der Löcher-Transportschichten können sich in diesem Zusammenhang ebenfalls auf die erreichbare Dunkelstromdichte J_d auswirken. Die Unterschiede in der Dunkelstromdichte J_d , die sich mit den beiden in Betracht gezogenen Löcher-Transportschichten ergeben, fallen gemäß der Analyse in Abbildung 8.6 im Falle unelastischer Glas-Substrate verglichen mit den flexiblen PEN-Substraten bedeutend größer aus. Neben den verschiedenen Substrat-Materialien werden allerdings im Rahmen dieses Kapitels darüber hinaus zusätzlich unterschiedliche Materialien für die unteren Elektroden verwendet. Infolgedessen ist zu erwarten, dass die im Rahmen dieses Kapitels realisierten Grenzflächen zwischen der unteren Elektrode und der Löcher-Transportschicht nicht nur von der verwendeten Löcher-Transportschicht, sondern zusätzlich durch das Material der unteren Elektrode beeinflusst werden. Der in Abbildung 8.6 dargestellte unterschiedliche Einfluss der beiden in Betracht gezogenen Löcher-Transportschichten kann demzufolge durch die verschiedenen Substrat-Materialien in Verbindung mit den unterschiedlichen Materialien der unteren Elektroden hervorgerufen werden.

Um das Signal-Rausch-Verhältnis SNR_{out} am Ausgang der hier betrachteten Röntgendetektoren abschätzen zu können, wird das Signal-Rausch-Verhältnis SNR_{out} des flexiblen Perowskit-Röntgendetektors mit der maximalen experimentellen Röntgensensitivität S_{exp} gemäß dem in [136] beschriebenen Vorgehen berechnet. Zu diesem Zweck wird das Signal-Rausch-Verhältnis SNR_{out} am Ausgang des Röntgendetektors mithilfe des durch die Röntgenstrahlung induzierten Stroms $I_{x\text{-ind}} = \bar{I}_x - \bar{I}_d$ und des Rauschstroms $I_R = s(I_x)$ abgeschätzt: $\text{SNR}_{\text{out}} = I_{x\text{-ind}}/I_R$. Hierbei beschreibt \bar{I}_x den Mittelwert des Stroms unter Röntgenbestrahlung I_x , \bar{I}_d den Mittelwert des Dunkelstroms I_d und $s(I_x)$ die Standardabweichung des Stroms unter Röntgenbestrahlung I_x . Für den flexiblen Perowskit-Röntgendetektor mit der maximalen experimentellen Röntgensensitivität S_{exp} lässt sich somit das Signal-Rausch-Verhältnis SNR_{out} am Ausgang des Detektors bei einer Energiedosisrate der Röntgenstrahlung in Luft \dot{D}_{air} von $\dot{D}_{\text{air}} = 1.6 \text{ mGy}_{\text{air}} \text{ s}^{-1}$ zu $\text{SNR}_{\text{out}} = 376.78$ abschätzen. Mithilfe der Abschätzung des Signal-Rausch-Verhältnisses SNR_{out} am Ausgang der hier betrachteten flexiblen Perowskit-Röntgendetektoren lässt sich darüber hinaus die kleinste nachweisbare Energiedosisrate der Röntgenstrahlung in Luft $\dot{D}_{\text{air,limit}}$ ermitteln. In Anlehnung an [136] wird hierfür die Energiedosisrate der Röntgenstrahlung in Luft \dot{D}_{air} abgeschätzt, bei welcher die hier betrachteten Röntgendetektoren ein Signal-Rausch-Verhältnis SNR_{out} am Ausgang des Detektors von $\text{SNR}_{\text{out}} = 3$ aufweisen. Unter der Annahme, dass der durch Röntgenstrahlung induzierte Strom $I_{x\text{-ind}}$ linear von der Energiedosisrate der Röntgenstrahlung in Luft \dot{D}_{air} abhängt, und der zusätzlichen Annahme eines konstanten Rauschstroms I_R lässt sich die kleinste nachweisbare Energiedosisrate der

Röntgenstrahlung in Luft $\dot{D}_{\text{air,limit}}$ der hier betrachteten Röntgendetektoren zu $\dot{D}_{\text{air,limit}} = 12 \mu\text{Gy}_{\text{air}} \text{s}^{-1}$ abschätzen.

8.3.3 Charakterisierung der Anstiegszeit

Die zeitliche Auflösung ist ein weiterer bedeutender Aspekt bei der experimentellen Charakterisierung der Leistungsfähigkeit von Röntgendetektoren. Das Potential einer hohen Leistungsfähigkeit im Hinblick auf eine hohe Röntgensensitivität S und einer hohen Detektiven Quanteneffizienz DQE kann nur bedingt voll ausgeschöpft werden, wenn die Detektorsignale nur mit einer ausgeprägten zeitlichen Verzögerung gemessen werden können. Eine Möglichkeit, die zeitliche Auflösung eines Röntgendetektors zu beschreiben, besteht hierbei in der Bestimmung der Anstiegszeit t_r (r für engl. rise). Üblicherweise wird dabei die Anstiegszeit t_r über die Zeitdifferenz definiert, die zwischen zwei Schwellwerten des Detektorsignals innerhalb des Signalanstiegs verstreicht. Um die Anstiegszeit der in diesem Kapitel betrachteten Röntgendetektoren abzuschätzen, zeigt Abbildung 8.7 zwei Ausschnitte aus den in Abbildung 8.3 (a) gezeigten gemessenen Stromdichten J in Abhängigkeit der Zeit t . Die Ausschnitte zeigen hierbei die Anstiege der gemessenen Detektorsignale der in Abbildung 8.3 (a) betrachteten flexiblen Perowskit-Röntgendetektoren zu Beginn des ersten Röntgenpulses. Aufgrund der limitierten Anzahl an Datenpunkten im Anstieg der Detektorsignale wird im Rahmen dieses Kapitels die Anstiegszeit t_r mithilfe der Zeitdifferenz Δt , welche zum Erreichen des maximalen Detektorsignals benötigt wird, abgeschätzt. Die dieser Abschätzung zugrunde liegenden Datenpunkte und die zugehörigen Ergebnisse der Abschätzungen sind in Abbildung 8.7

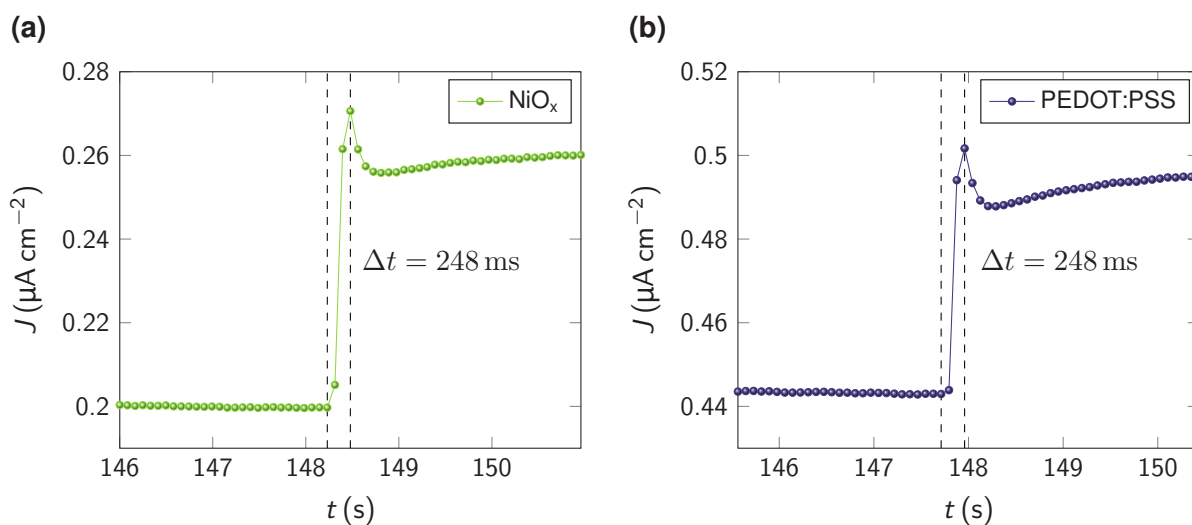


Abbildung 8.7: Abschätzung der Anstiegszeit des Detektorsignals. Ausschnitte aus den in Abbildung 8.3 (a) gezeigten gemessenen Stromdichten J in Abhängigkeit der Zeit t . Die Ausschnitte zeigen den Anstieg des gemessenen Detektorsignals des exemplarischen flexiblen Perowskit-Röntgendetektors, dessen Löcher-Transportschicht aus (a) NiO_x und (b) Poly-(3,4-ethylendioxythiophen)-poly-(styrolsulfonat) (PEDOT:PSS) besteht, zu Beginn des ersten Röntgenpulses. Die Anstiegszeit t_r (r für engl. rise) ist mithilfe der Zeitdifferenz Δt , welche zum Erreichen des maximalen Detektorsignals benötigt wird, abgeschätzt. Entnommen aus Mescher et al. [99] und angepasst. (Reprinted (adapted) with permission from [99]. Copyright 2020 American Chemical Society.)

zusätzlich dargestellt. Auf der Grundlage beider betrachteter Messungen lässt sich somit die Anstiegszeit t_r der in diesem Kapitel betrachteten Perowskit-Röntgendetektoren zu $t_r = 248 \text{ ms}$ abschätzen. An dieser Stelle sei darauf hingewiesen, dass es sich hierbei aufgrund der limitierten Anzahl an Datenpunkten, die zur Bestimmung der Zeitdifferenzen Δt verwendet wird, lediglich um eine sehr grobe Abschätzung handelt. Darüber hinaus wird die Röntgenröhre, die im Rahmen dieses Abschnittes für die Erzeugung der Röntgenstrahlung verwendet wird, ohne Verschlussvorrichtung für die Röntgenstrahlung betrieben (siehe Beschreibung des Detektor-Labor-Messplatzes in Abschnitt 4.2.2.1). Den in Abbildung 8.7 gezeigten Signalanstiegen liegt folglich sowohl die zeitliche Auflösung der Perowskit-Röntgendetektoren als auch das Verhalten der Röntgenröhre beim Einschalten zugrunde.

8.3.4 Überprüfung der mechanischen Flexibilität

Im Hinblick auf den Hauptfokus im weiteren Verlauf dieser Arbeit, Röntgendetektoren mit einem gefalteten Aufbau experimentell zu realisieren, ist die Untersuchung der mechanischen Flexibilität der in diesem Kapitel betrachteten Perowskit-Röntgendetektoren nicht zwingend notwendig. Die Verwendung des digitalen Tintenstrahldrucks zur Herstellung der Perowskit-Absorber ermöglicht es, das in Abbildung 7.1 gezeigte Faltschema gefalteter Röntgendetektoren anzuwenden, ohne die vergleichsweise dicken Absorber-Schichten explizit falten zu müssen. Für die experimentelle Verwirklichung gefalteter Röntgendetektoren ist hierbei lediglich relevant, dass die Perowskit-Röntgendetektoren auf flexiblen und damit faltbaren Polymer-Substraten wie der in diesem Kapitel verwendeten PEN-Substrate hergestellt werden. Welche der anderen benötigten Schichten wie beispielsweise elektrische Zuleitungen oder schwer zu strukturierende Transportschichten zusammen mit dem Polymer-Substrat gefaltet werden müssen, hängt vom expliziten Aufbau ab, der für die experimentelle Realisierung gefalteter Röntgendetektoren ausgewählt wird, und kann somit im Rahmen dieses Kapitels nicht sinnvoll untersucht werden. Die hier betrachteten flexiblen Perowskit-Röntgendetektoren sind allerdings, wie in Abschnitt 8.1 bereits diskutiert wird, nicht nur für die experimentelle Verwirklichung gefalteter Röntgendetektoren relevant, sondern bieten darüber hinaus weitere Anwendungsmöglichkeiten, in denen die mechanische Flexibilität der Röntgendetektoren auch im aktiven Bereich des Detektors eine Rolle spielt. Aus diesem Grund widmet sich der folgende Abschnitt Untersuchungen zur mechanischen Flexibilität der in diesem Kapitel betrachteten Perowskit-Röntgendetektoren.

Um den Einfluss unterschiedlicher Biegeradien auf das gemessene Detektorsignal der im Rahmen dieses Kapitels betrachteten flexiblen Perowskit-Röntgendetektoren zu untersuchen, zeigt Abbildung 8.8 die durch Röntgenstrahlung induzierte Stromdichte $J_{x\text{-ind}}$ eines flexiblen Perowskit-Röntgendetektors, dessen Löcher-Transportschicht aus NiO_x besteht, in flachen und gebogenen Zuständen in Abhängigkeit der Energiedosisrate der Röntgenstrahlung in Luft \dot{D}_{air} . Die gezeigten Datenpunkte basieren hierbei auf aufeinanderfolgenden Messungen in flachen und gebogenen Zuständen mit den Biegeradien $r_1 \approx 9 \text{ mm}$, $r_2 \approx 6 \text{ mm}$ und $r_3 \approx 3 \text{ mm}$. Der Röntgendetektor wird in diesem Zusammenhang mit einer Spannung $U = -0.1 \text{ V}$ in Sperrrichtung betrieben und mit 70 kVp Röntgenstrahlung bestrahlt. Für den Betrieb des Röntgendetektors wird eine SMU (siehe Abschnitt 4.2.2.3) verwendet. Die Röntgenstrahlung wird

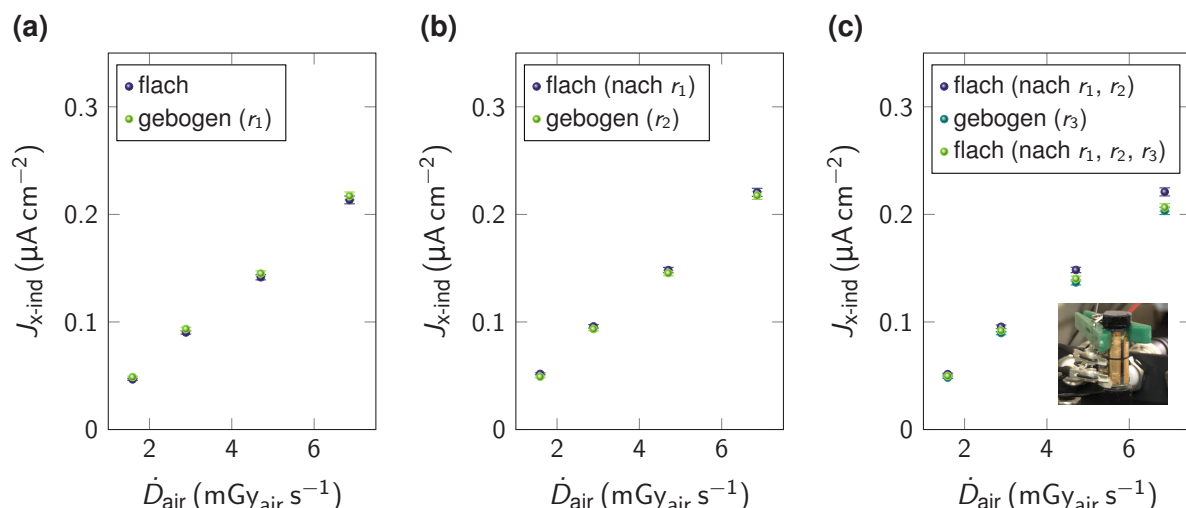


Abbildung 8.8: Detektorsignale in flachen und gebogenen Zuständen. Durch Röntgenstrahlung induzierte Stromdichte J_{x-ind} eines flexiblen Perowskit-Röntgendetektors, dessen Löcher-Transportschicht aus NiO_x besteht, in flachen und gebogenen Zuständen in Abhängigkeit der Energiedosisrate der Röntgenstrahlung in Luft \dot{D}_{air} . Die gezeigten Datenpunkte basieren auf aufeinanderfolgenden Messungen im (a) flachen und gebogenen Zustand mit einem Biegeradius $r_1 \approx 9$ mm, (b) flachen und gebogenen Zustand mit einem Biegeradius $r_2 \approx 6$ mm und (c) flachen, gebogenen und flachen Zustand mit einem Biegeradius $r_3 \approx 3$ mm. Abbildung (c) zeigt zusätzlich eine Fotografie des Röntgendetektors im gebogenen Zustand mit dem Biegeradius r_3 . Der Röntgendetektor wird mit einer Spannung $U = -0.1$ V in Sperrrichtung betrieben und mit 70 kVp Röntgenstrahlung bestrahlt. Die gezeigten Fehlerbalken sind aus den Schwankungen der Ströme unter Röntgenbestrahlung, der Dunkelströme und der aktiven Fläche abgeschätzt. Entnommen aus Mescher et al. [99] und angepasst. (Reprinted (adapted) with permission from [99]. Copyright 2020 American Chemical Society.)

mithilfe einer Röntgenröhre unter Verwendung einer Wolframanode (siehe Beschreibung des Detektor-Labor-Messplatzes in Abschnitt 4.2.2.1) erzeugt. Die in Abbildung 8.8 dargestellten Datenpunkte zeigen, dass der betrachtete flexible Perowskit-Röntgendetektor in allen untersuchten Zuständen funktionsfähig ist. Bis zu einem Biegeradius von r_2 sind die Detektorsignale nahezu unverändert. Erst mit dem Biegeradius r_3 weist der betrachtete Röntgendetektor erste Anzeichen einer Degradation auf, und die Detektorsignale zeigen eine geringfügige Verschlechterung.

Im Hinblick auf die Bewertung der mechanischen Flexibilität ist neben der Charakterisierung in gebogenen Zuständen mit unterschiedlichen Biegeradien darüber hinaus die Untersuchung der Detektorsignale nach einer Vielzahl von Biegezyklen relevant. Aus diesem Grund zeigt Abbildung 8.9 die durch Röntgenstrahlung induzierte Stromdichte J_{x-ind} eines flexiblen Perowskit-Röntgendetektors, dessen Löcher-Transportschicht aus NiO_x besteht, im flachen Zustand nach einer unterschiedlichen Anzahl an Biegezyklen in Abhängigkeit der Energiedosisrate der Röntgenstrahlung in Luft \dot{D}_{air} . Die gezeigten Datenpunkte basieren hierbei auf aufeinanderfolgenden Messungen im flachen Zustand vor und nach einer unterschiedlichen Anzahl an Biegezyklen mit dem Biegeradius $r_2 \approx 6$ mm. Der Röntgendetektor wird in diesem Zusammenhang mit einer Spannung $U = -0.1$ V in Sperrrichtung betrieben und mit 70 kVp Röntgenstrahlung bestrahlt. Trotz der leichten Schwankungen, die in den Detektorsignalen auftreten, demonstrieren die in Abbildung 8.9 gezeigten Datenpunkte einen flexiblen Perowskit-Röntgendetektor, der selbst nach 500 Biegezyklen mit dem Biegeradius r_2 funktionsfähig ist.

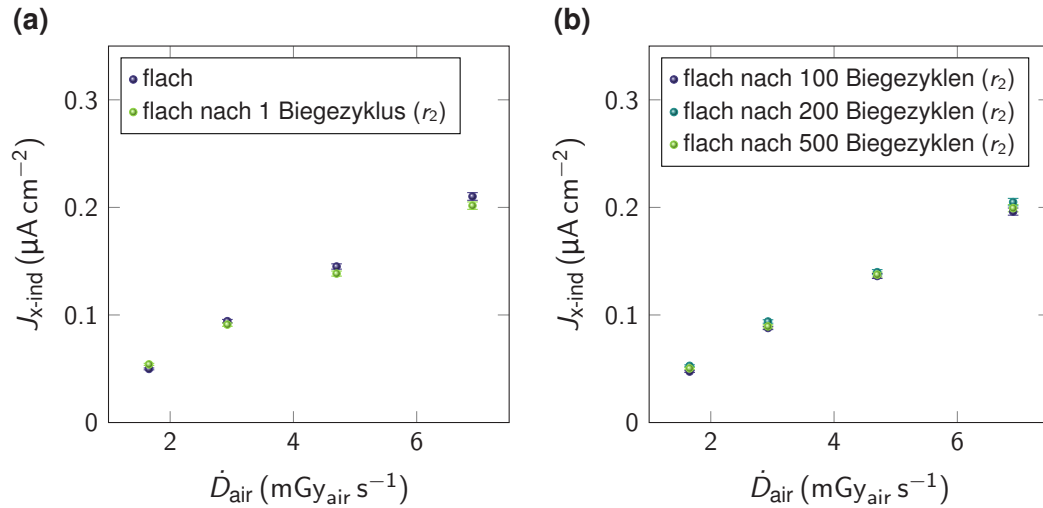


Abbildung 8.9: Detektorsignale im flachen Zustand nach mehreren Biegezyklen. Durch Röntgenstrahlung induzierte Stromdichte $J_{x\text{-ind}}$ eines flexiblen Perowskit-Röntgendetektors, dessen Löcher-Transportschicht aus NiO_x besteht, im flachen Zustand nach einer unterschiedlichen Anzahl an Biegezyklen in Abhängigkeit der Energiedosisrate der Röntgenstrahlung in Luft \dot{D}_{air} . Die gezeigten Datenpunkte basieren auf aufeinanderfolgenden Messungen im flachen Zustand (a) vor den Biegezyklen und nach 1 Biegezyklus mit einem Biegeradius $r_2 \approx 6 \text{ mm}$ und (b) nach 100, 200 und 500 Biegezyklen mit dem Biegeradius r_2 . Der Röntgendetektor wird mit einer Spannung $U = -0.1 \text{ V}$ in Sperrrichtung betrieben und mit 70 kVp Röntgenstrahlung bestrahlt. Die gezeigten Fehlerbalken sind aus den Schwankungen der Ströme unter Röntgenbestrahlung, der Dunkelströme und der aktiven Fläche abgeschätzt. Entnommen aus Mescher et al. [99] und angepasst. (Reprinted (adapted) with permission from [99]. Copyright 2020 American Chemical Society.)

8.3.5 Untersuchung der Röntgenstabilität

Unter dem Gesichtspunkt einer potentiellen Kommerzialisierung von Röntgendetektoren, für die im Rahmen wissenschaftlicher Untersuchungen eine hohe Leistungsfähigkeit nachgewiesen werden kann, ist die Stabilität der Röntgendetektoren unter Betriebsbedingungen ein wesentlicher Aspekt. Eine wichtige Fragestellung beschäftigt sich in diesem Zusammenhang damit, ob eine wiederholte Röntgenbestrahlung die Leistungsfähigkeit der Röntgendetektoren beeinflusst. Um die Röntgenstabilität der in diesem Kapitel betrachteten Perowskit-Röntgendetektoren zu untersuchen, zeigt Abbildung 8.10 (a) die gemessene Stromdichte J zweier exemplarischer flexibler Perowskit-Röntgendetektoren, deren Löcher-Transportschichten aus PEDOT:PSS oder NiO_x bestehen, unter wiederholter Röntgenbestrahlung in Abhängigkeit der Zeit t . Die Röntgendetektoren werden hierbei mit einer Spannung $U = -0.1 \text{ V}$ in Sperrrichtung betrieben und mit 70 kVp Röntgenstrahlung bestrahlt. Die verwendete Bestrahlungssequenz besteht in diesem Zusammenhang aus einer sich wiederholenden Untersequenz, die sich wiederum aus vier Pulsen mit einer steigenden Energiedosisrate in Luft \dot{D}_{air} zusammensetzt. Für den Betrieb der Röntgendetektoren wird eine SMU (siehe Abschnitt 4.2.2.3) verwendet. Die Röntgenstrahlung wird mithilfe einer Röntgenröhre unter Verwendung einer Wolframanode (siehe Beschreibung des Detektor-Labor-Messplatzes in Abschnitt 4.2.2.1) erzeugt. Unabhängig von der verwendeten Löcher-Transportschicht zeigen beide betrachteten Perowskit-Röntgendetektoren über den gesamten Messzeitraum stabile und reproduzierbare Detektorsignale unter der wiederholten Röntgenbestrahlung. Es sei darauf hingewiesen, dass die vereinzelt

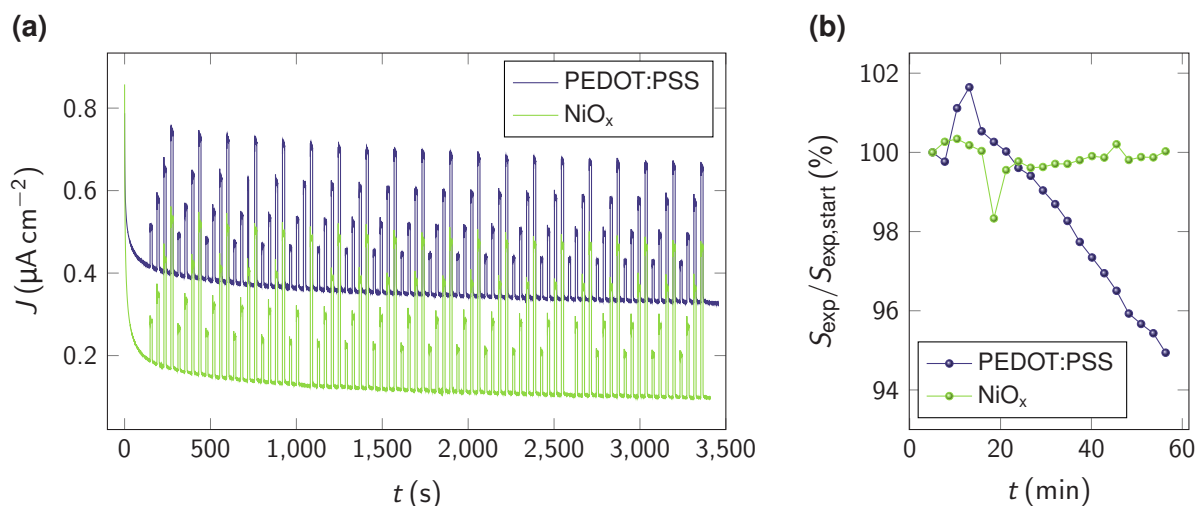


Abbildung 8.10: Zeitaufgelöste Detektorsignale unter wiederholter Röntgenbestrahlung und Röntgenstabilität. (a) Gemessene Stromdichte J zweier exemplarischer flexibler Perowskit-Röntgendetektoren, deren Löcher-Transportschichten aus Poly-(3,4-ethyldioxythiophen)-poly-(styrolsulfonat) (PEDOT:PSS) oder NiO_x bestehen, in Abhängigkeit der Zeit t . Die Röntgendetektoren werden mit einer Spannung $U = -0.1 \text{ V}$ in Sperrrichtung betrieben und mit 70 kVp Röntgenstrahlung bestrahlt. Die Bestrahlungssequenz besteht aus einer sich wiederholenden Untersequenz, die sich aus vier Pulsen mit einer steigenden Energiedosisrate in Luft \dot{D}_{air} zusammensetzt. (b) Normierte experimentelle Röntgensensitivität $S_{\text{exp}}/S_{\text{exp,start}}$ der beiden in (a) betrachteten Röntgendetektoren in Abhängigkeit der Zeit t . Die dargestellten Datenpunkte repräsentieren die normierte experimentelle Röntgensensitivität $S_{\text{exp}}/S_{\text{exp,start}}$, welche sich aus den in (a) gezeigten Messungen während der einzelnen Untersequenzen ergibt. Zu diesem Zweck werden die Messdaten während der einzelnen Untersequenzen separat voneinander betrachtet, und die zugehörige experimentelle Röntgensensitivität S_{exp} wird gemäß dem in Abbildung 8.3 illustrierten Vorgehen bestimmt. Die Größe $S_{\text{exp,start}}$ beschreibt hierbei die experimentelle Röntgensensitivität, welche sich aus den Messdaten während der ersten Untersequenz ergibt. Entnommen aus Mescher et al. [99] und angepasst. (Reprinted (adapted) with permission from [99]. Copyright 2020 American Chemical Society.)

fehlenden oder abgebrochenen Pulse in den Detektorsignalen höchstwahrscheinlich durch ein Problem in der Kommunikation mit der Röntgenröhre hervorgerufen sind und daher kein Problem der untersuchten Perowskit-Röntgendetektoren repräsentieren. Die in Abbildung 8.10 (a) dargestellten gemessenen Stromdichten J ermöglichen darüber hinaus eine Bewertung der Dunkelstromdichten J_d über einen längeren Zeitraum. Passend zu den bisherigen Beobachtungen zeigen beide Perowskit-Röntgendetektoren einen stark ausgeprägten Drift in der Dunkelstromdichte J_d , der am stärksten zu Beginn der Messungen ausgeprägt ist und mit zunehmender Zeit t langsam abklingt. Die Stabilisierung der Dunkelstromdichten J_d der beiden in Abbildung 8.10 (a) betrachteten Perowskit-Röntgendetektoren über einen solch langen Zeitraum stützt den in Abschnitt 8.3.2 diskutierten Erklärungsansatz, dass der zunächst stark ausgeprägte und anschließend langsam abklingende Drift in der Dunkelstromdichte J_d durch Bewegungen von Ionen innerhalb des Perowskit-Absorbers in Verbindung mit einer Ansammlung der Ionen an den Absorber-Grenzflächen hervorgerufen wird.

Um die Röntgenstabilität quantitativ zu untersuchen, zeigt Abbildung 8.10 (b) die normierte experimentelle Röntgensensitivität $S_{\text{exp}}/S_{\text{exp,start}}$ der beiden in Abbildung 8.10 (a) betrachteten Röntgendetektoren in Abhängigkeit der Zeit t . Die dargestellten Datenpunkte repräsentieren hierbei die normierte experimentelle Röntgensensitivität $S_{\text{exp}}/S_{\text{exp,start}}$, welche sich aus den in Abbildung 8.10 (a) gezeigten Messungen

während der einzelnen Untersequenzen ergibt. Zu diesem Zweck werden die Messdaten während der einzelnen Untersequenzen separat voneinander betrachtet, und die zugehörige experimentelle Röntgensensitivität S_{exp} wird gemäß dem in Abbildung 8.3 beschriebenen Vorgehen bestimmt. Abgesehen von einem einzelnen Ausreißer zeigen die in Abbildung 8.10 (b) dargestellten Datenpunkte des Perowskit-Röntgendetektors, dessen Löcher-Transportschicht aus NiO_x besteht, eine im höchsten Maße stabile normierte experimentelle Röntgensensitivität $S_{\text{exp}}/S_{\text{exp,start}}$. Die experimentelle Röntgensensitivität $S_{\text{exp,NiO}_x}$ bleibt hierbei über den gesamten Messzeitraum nahezu auf einem konstanten Wert nahe dem Wert $S_{\text{exp,start,NiO}_x} = 55.4 \mu\text{C Gy}_{\text{air}}^{-1} \text{cm}^{-2}$, welcher sich aus den Messdaten während der ersten Untersequenz ergibt. Mithilfe der Pulslängen lässt sich die kumulative Energiedosis in Luft $D_{\text{air,4 Pulse}}$ der Röntgenstrahlung einer einzelnen Untersequenz bestehend aus vier Pulsen zu $D_{\text{air,4 Pulse}} = 200 \text{ mGy}_{\text{air}}$ und die kumulative Energiedosis in Luft $D_{\text{air,tot}}$ der Röntgenstrahlung über den gesamten in Abbildung 8.10 betrachteten Messzeitraum zu $D_{\text{air,tot}} = 4 \text{ Gy}_{\text{air}}$ abschätzen. Unter der Annahme einer Strahlenbelastung von $0.3 \text{ mGy}_{\text{air}}$ [137] bei einer Röntgenaufnahme des Brustkorbes demonstrieren die Ergebnisse in Abbildung 8.10 einen Perowskit-Röntgendetektor, dessen Löcher-Transportschicht aus NiO_x besteht, mit einer außergewöhnlich hohen Röntgenstabilität, der für mehr als 13, 000 Röntgenaufnahmen ohne Verlust der Leistungsfähigkeit verwendet werden kann.

Im Gegensatz zu dem Perowskit-Röntgendetektor, dessen Löcher-Transportschicht aus NiO_x besteht, weist der Röntgendetektor mit einer PEDOT:PSS Löcher-Transportschicht eine deutlich geringere Stabilität auf. Die in Abbildung 8.10 (b) dargestellte normierte experimentelle Röntgensensitivität $S_{\text{exp}}/S_{\text{exp,start}}$ des Perowskit-Röntgendetektors mit einer PEDOT:PSS Löcher-Transportschicht zeigt vergleichsweise kurz nach Beginn der Messungen einen Maximalwert und degradiert anschließend deutlich mit zunehmender Zeit t . Mit einer experimentellen Röntgensensitivität $S_{\text{exp,start,end,PEDOT:PSS}}$ zu Beginn und zum Ende der Messungen von $S_{\text{exp,start,PEDOT:PSS}} = 51.1 \mu\text{C Gy}_{\text{air}}^{-1} \text{cm}^{-2}$ und $S_{\text{exp,end,PEDOT:PSS}} = 48.5 \mu\text{C Gy}_{\text{air}}^{-1} \text{cm}^{-2}$ liegt die normierte experimentelle Röntgensensitivität $S_{\text{exp}}/S_{\text{exp,start}}$ am Ende der Messungen lediglich bei einem Wert von $S_{\text{exp}}/S_{\text{exp,start}} = 95 \%$. An dieser Stelle sei allerdings darauf hingewiesen, dass während der Charakterisierung der in diesem Kapitel betrachteten Perowskit-Röntgendetektoren unter Röntgenbestrahlung keine expliziten Vorkehrungen zum Schutz der Detektoren im Hinblick auf die Umgebungsbedingungen getroffen werden. Die Charakterisierung der Perowskit-Röntgendetektoren findet dabei ohne eine zusätzliche Verkapselung unter normalen Laborbedingungen statt. Infolgedessen besteht die Möglichkeit, dass die Degradation des Perowskit-Röntgendetektors, dessen Löcher-Transportschicht aus PEDOT:PSS besteht, nicht ausschließlich auf die Bestrahlung mit Röntgenphotonen zurückzuführen ist. Weitere mögliche Einflussfaktoren, welche die Degradation in diesem Zusammenhang begünstigen können, sind die hygroskopischen und sauren Eigenschaften von PEDOT:PSS. Diese Aspekte wurden bereits in anderen Forschungsarbeiten [138, 139] aus dem Themengebiet der Perowskit-Solarzellen in Verbindung mit der Degradation von Bauteilen mit PEDOT:PSS Löcher-Transportschichten gebracht. Die stabile Leistungsfähigkeit des Perowskit-Röntgendetektors mit einer NiO_x Löcher-Transportschicht über nahezu den gesamten betrachteten Messzeitraum von fast 1 h (siehe Abbildung 8.10 (b)) deutet in Anbetracht der Tatsache einer Charakterisierung ohne zusätzlicher Verkapselung unter normalen Laborbedingungen darüber hinaus eine hohe Stabilität im Hinblick auf umweltbedingte Einflussfaktoren an.

8.3.6 Anwendbarkeit in der Röntgenbildgebung

Nach der Vielzahl an unterschiedlichen Aspekten, die in den vorangegangenen Abschnitten im Rahmen der Charakterisierung der experimentellen Leistungsfähigkeit untersucht worden sind, soll im folgenden Abschnitt abschließend überprüft werden, ob die in diesem Kapitel betrachteten Perowskit-Röntgendetektoren für die Röntgenbildgebung verwendet werden können. Zu diesem Zweck zeigen die Abbildungen 8.11 (a), 8.11 (c) und 8.11 (d) die Fotografien und die Abbildungen 8.11 (b) und 8.11 (e) die zugehörigen Röntgenaufnahmen unterschiedlicher Objekte. Die Röntgenaufnahmen basieren hierbei jeweils auf Messungen mit einem einzelnen Pixel eines flexiblen Perowskit-Röntgendetektors, dessen Löcher-Transportschicht aus NiO_x besteht. Die räumliche Auflösung der Röntgenaufnahmen in den Abbildungen 8.11 (b) und 8.11 (e) wird in diesem Zusammenhang durch eine laterale Verschiebung der Objekte realisiert. Die Röntgenaufnahmen werden darüber hinaus mithilfe von 70 kVp (siehe Abbildung 8.11 (b)) und 90 kVp (siehe Abbildung 8.11 (e)) Röntgenstrahlung erstellt. Für die hier betrachteten Messungen zur Röntgenbildgebung wird ein zweiter Röntgen-Messplatz verwendet. Im Rahmen dieses zweiten Röntgen-Messplatzes wird die 70 kVp und die 90 kVp Röntgenstrahlung mithilfe einer Röntgenröhre unter Verwendung einer Wolframanode (siehe Beschreibung des Computertomographie-Labor-Messplatzes in Abschnitt 4.2.2.1) erzeugt. Für den Röntgendetektor-Betrieb wird eine SMU (siehe

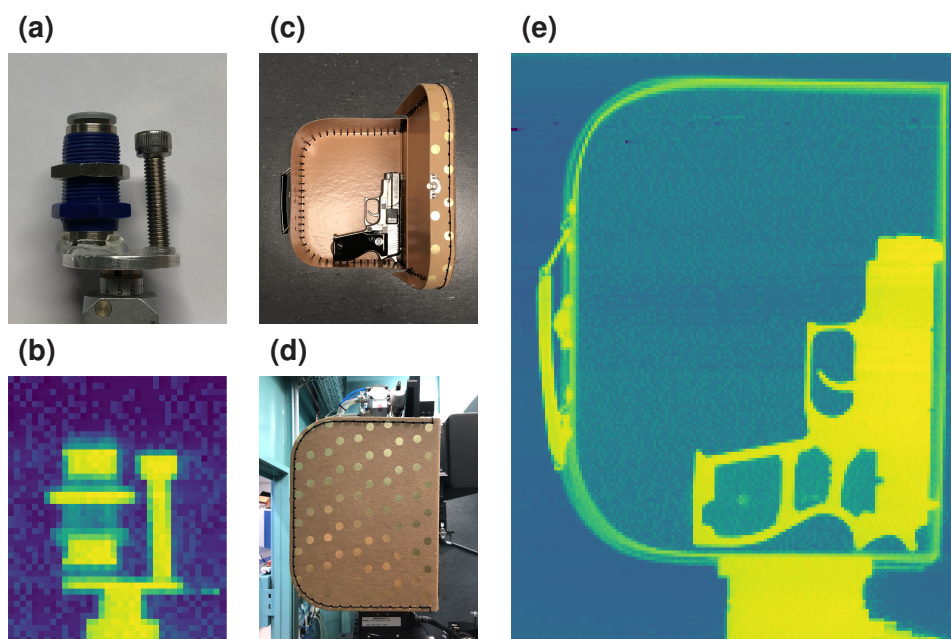


Abbildung 8.11: Röntgenbildgebung. (a) Fotografie eines pneumatischen Verbindungsstücks und einer Schraube auf einem Probentisch. (b) Röntgenaufnahme des in (a) gezeigten Objekts. Die Röntgenaufnahme basiert auf Messungen mit einem einzelnen Pixel eines flexiblen Perowskit-Röntgendetektors, dessen Löcher-Transportschicht aus NiO_x besteht, unter 70 kVp Röntgenstrahlung. (c), (d) Fotografie einer Spielzeugpistole in einem Spielzeugkoffer. (e) Röntgenaufnahme des in (c) und (d) gezeigten Objekts. Die Röntgenaufnahme basiert auf Messungen mit einem einzelnen Pixel eines flexiblen Perowskit-Röntgendetektors, dessen Löcher-Transportschicht aus NiO_x besteht, unter 90 kVp Röntgenstrahlung. Die räumliche Auflösung der Röntgenaufnahmen in (b) und (e) wird durch eine laterale Verschiebung der Objekte realisiert. Abbildungen (a) und (b) entnommen aus Mescher et al. [99] und angepasst. (Reprinted (adapted) with permission from [99]. Copyright 2020 American Chemical Society.)

Abschnitt 4.2.2.3) verwendet. Die in Abbildung 8.11 präsentierten Ergebnisse demonstrieren, dass sich die in diesem Kapitel betrachteten Perowskit-Röntgendetektoren im Allgemeinen für die Röntgenbildgebung eignen. Im Röntgenbild eines pneumatischen Verbindungsstücks und einer Schraube auf einem Probenstisch (siehe Abbildung 8.11 (b)) sind die Formen der einzelnen Objekte deutlich zu erkennen. Des Weiteren gibt das Röntgenbild Aufschluss darüber, aus welchen Materialien die einzelnen Objekte bestehen. Die homogene und vergleichsweise starke Abschwächung der Röntgenstrahlung im Bereich des Probenstisches und der Schraube lässt darauf schließen, dass beide Objekte aus stark abschwächenden höchstwahrscheinlich metallischen Materialien bestehen. Im Gegensatz dazu deutet die unterschiedliche Abschwächung der Röntgenstrahlung im Bereich des pneumatischen Verbindungsstücks an, dass sich das Objekt aus mehreren Bestandteilen und unterschiedlichen Materialien zusammensetzt. Das Röntgenbild des geschlossenen Spielzeugkoffers (siehe Abbildung 8.11 (e)) in Verbindung mit der eindeutig zu identifizierenden Spielzeugpistole innerhalb des Spielzeugkoffers demonstriert darüber hinaus sehr anschaulich, dass sich die hier betrachteten Perowskit-Röntgendetektoren für die Röntgenbildgebung eignen.

8.4 Zusammenfassung

In diesem Kapitel wird die Realisierung von mechanisch flexiblen Röntgendetektoren auf der Basis von röntgenstrahlgedruckten Perowskit-Absorbern beschrieben. Zu Beginn des Kapitels wird zunächst in Abschnitt 8.1 die grundlegende Motivation und die wissenschaftliche Zielsetzung des Kapitels diskutiert. Die Herstellung von Röntgendetektoren mit strukturierten Perowskit-Absorbern auf flexiblen Substraten ist im Rahmen dieser Arbeit hauptsächlich durch die wissenschaftliche Fragestellung motiviert, wie gefaltete Perowskit-Röntgendetektoren experimentell verwirklicht werden können. Aufgrund der Anwendungsfelder, welche sich durch die mechanische Flexibilität erschließen lassen, ist die Realisierung von mechanisch flexiblen Röntgendetektoren allerdings auch jenseits dieser Arbeit für andere Forschungsprojekte interessant. Dieses Kapitel ist daher der Realisierung von mechanisch flexiblen Röntgendetektoren mit strukturierten Perowskit-Absorbern gewidmet. Im weiteren Verlauf des Kapitels werden aus diesem Grund im Rahmen der Abschnitte 8.2 und 8.3 zwei Zwischenziele verfolgt.

Zunächst wird in Abschnitt 8.2 demonstriert, mit welchem Aufbau und mit welchen Herstellungsmethoden mechanisch flexible Perowskit-Röntgendetektoren experimentell realisiert werden können. Dieser Abschnitt beinhaltet detaillierte Informationen über den Aufbau, die Materialien und die unterschiedlichen Herstellungsmethoden, die für die Fabrikation der in diesem Kapitel betrachteten Perowskit-Röntgendetektoren verwendet werden. Der Abschnitt beinhaltet darüber hinaus Strukturuntersuchungen der Perowskit-Röntgendetektoren, auf deren Grundlage Perowskit-Absorber mit großen säulenförmigen Kristalliten identifiziert werden können, welche auf einen effizienten Ladungstransport innerhalb der Perowskit-Absorber hinweisen.

In Abschnitt 8.3 wird anschließend die Leistungsfähigkeit der Perowskit-Röntgendetektoren ausführlich experimentell charakterisiert. In diesem Zusammenhang wird zunächst gezeigt, dass die experimentelle Röntgensensitivität S_{exp} der hier betrachteten flexiblen Perowskit-Röntgendetektoren im Hinblick auf andere flexible direkte Röntgendetektoren im höchsten Maße konkurrenzfähig ist und zusätzlich

gut mit der theoretischen Röntgensensitivität $S_{\text{theo,poly}}$ übereinstimmt. Im Hinblick auf die beiden untersuchten Löcher-Transportschichten NiO_x und PEDOT:PSS ergibt sich lediglich im Falle unelastischer Detektoren ein geringfügiger Vorteil für Bauteile mit einer NiO_x Löcher-Transportschicht. Im Falle flexibler Perowskit-Röntgendetektoren lässt sich kein eindeutiger Einfluss der verwendeten Löcher-Transportschicht auf die experimentelle Röntgensensitivität S_{exp} feststellen. Die Untersuchung der experimentellen Röntgensensitivität S_{exp} in Abhängigkeit der Betriebsspannung ermöglicht darüber hinaus eine Abschätzung des Beweglichkeit-Lebensdauer-Produkts $\mu\tau$ und der intrinsischen Spannung U_0 der hier betrachteten Perowskit-Röntgendetektoren.

Die anschließende Untersuchung der Dunkelstromdichte J_d demonstriert, dass sich Löcher-Transportschichten bestehend aus NiO_x verglichen mit PEDOT:PSS bedeutend besser für die Realisierung der hier betrachteten Perowskit-Röntgendetektoren eignen. Ferner wird die Bewegung von Ionen innerhalb des Perowskit-Absorbers als mögliche Ursache für den ausgeprägten Drift in der Dunkelstromdichte J_d diskutiert. Des Weiteren wird auf der Grundlage einer Berechnung des Signal-Rausch-Verhältnisses SNR_{out} am Ausgang eines Detektors die kleinste nachweisbare Energiedosisrate der Röntgenstrahlung in Luft $\dot{D}_{\text{air,limit}}$ der hier betrachteten Röntgendetektoren bestimmt. Die darauf folgende Analyse der gemessenen Signalanstiege der Perowskit-Röntgendetektoren unter Röntgenbestrahlung ermöglicht es darüber hinaus die Anstiegszeit t_r der hier betrachteten Röntgendetektoren abzuschätzen.

Die im Anschluss präsentierte Überprüfung der mechanischen Flexibilität demonstriert, dass die hier betrachteten flexiblen Röntgendetektoren sowohl in gebogenen Zuständen mit unterschiedlichen Biegeradien als auch nach einer Vielzahl an Biegezyklen mit einem Biegeradius funktionsfähig sein können.

Die nachfolgende Untersuchung der Detektorsignale unter wiederholter Röntgenbestrahlung zeigen darüber hinaus einen Perowskit-Röntgendetektor mit einer außergewöhnlich stabilen Leistungsfähigkeit im Falle einer NiO_x Löcher-Transportschicht und mit einer über die Zeit abfallenden Leistungsfähigkeit im Falle einer PEDOT:PSS Löcher-Transportschicht. Die Tatsache, dass während der Charakterisierungen keine zusätzliche Verkapselung der Detektoren verwendet wird, deutet zum einen auf eine hohe Stabilität des Detektors mit einer NiO_x Löcher-Transportschicht im Hinblick auf umweltbedingte Einflussfaktoren hin. Zum anderen kann somit die Degradation im Falle des Detektors mit einer PEDOT:PSS Löcher-Transportschicht nicht eindeutig auf die Röntgenbestrahlung zurückgeführt werden. Die abschließend präsentierten Messungen zur Anwendbarkeit in der Röntgenbildgebung demonstrieren anschaulich, dass sich die hier betrachteten Perowskit-Röntgendetektoren für die Bildgebung mit Röntgenstrahlung eignen. Die Ergebnisse dieses Kapitels im Hinblick auf den Aufbau, die Herstellung und die Charakterisierung der experimentellen Leistungsfähigkeit von mechanisch flexiblen Perowskit-Röntgendetektoren bilden die Grundlage für die in Kapitel 9 beschriebene experimentelle Realisierung eines gefalteten Perowskit-Röntgendetektors.

Teile der in diesem Kapitel präsentierten Inhalte sind in Mescher, Schackmar, Eggers, Abzieher, Zuber, Hamann, Baumbach, Richards, Hernandez-Sosa, Paetzold, and Lemmer [99] veröffentlicht. Der Hauptbeitrag dieser Veröffentlichung stammt hierbei vom Erstautor Henning Mescher. Der Erstautor Henning Mescher wurde im Rahmen der Veröffentlichung von den Co-Autoren Helge Eggers, Marcus Zuber und Elias Hamann in Bezug auf die theoretische Arbeit und von den Co-Autoren Fabian Schackmar, Helge Eggers, Tobias Abzieher, Marcus Zuber und Elias Hamann hinsichtlich der experimentellen Arbeit unterstützt. Die Co-Autoren Tilo Baumbach, Bryce S. Richards, Gerardo Hernandez-Sosa, Ulrich W. Paetzold und Uli Lemmer haben in diesem Zusammenhang die wissenschaftliche Betreuung übernommen.

9 Realisierung von einem gefalteten Perowskit-Röntgendetektor

*Dieses Kapitel ist der **Realisierung von einem gefalteten Perowskit-Röntgendetektor** (Ziel 5) gewidmet. Zu diesem Zweck werden im Verlauf des Kapitels zwei Zwischenziele verfolgt. Zunächst wird demonstriert, mit welchem Aufbau und mithilfe welcher Herstellungsmethoden ein faltbarer Perowskit-Röntgendetektor experimentell verwirklicht werden kann. Anschließend wird die Leistungsfähigkeit dieses Detektors im planaren und im gefalteten Zustand charakterisiert und bewertet. Aufgrund der Ergebnisse der theoretischen Untersuchungen in den Kapiteln 5, 6 und 7 in Verbindung mit dem zusätzlichen Potential gefalteter Röntgendetektoren, eine besonders hohe räumliche Auflösung zu ermöglichen, liegt der Hauptfokus dieser Arbeit von Kapitel 8 an in der Realisierung gefalteter Perowskit-Röntgendetektoren. Die Ergebnisse im Hinblick auf den Aufbau, die Herstellung und die Charakterisierung der experimentellen Leistungsfähigkeit von mechanisch flexiblen Perowskit-Röntgendetektoren aus Kapitel 8 repräsentieren folglich die Grundlage für die in diesem Kapitel beschriebene Realisierung eines gefalteten Detektors. Die experimentellen Methoden, die im Rahmen dieses Kapitels verwendet werden, sind in Kapitel 4 beschrieben. Die Ergebnisse dieses Kapitels bilden die Grundlage für eine potentielle Entwicklung gefalteter Perowskit-Röntgendetektoren in einem größeren Maßstab mit einer Vielzahl an Pixeln.*

Teile der in diesem Kapitel präsentierten Inhalte sind in Mescher, Schackmar, Huber, Eggers, Zuber, Hamann, Gramlich, Dangelmaier, Zhang, Rösch, Zwick, Hernandez-Sosa, Paetzold, and Lemmer [140] veröffentlicht. Der Hauptbeitrag dieser Veröffentlichung stammt hierbei vom Erstautor Henning Mescher. Der Erstautor Henning Mescher wurde im Rahmen der Veröffentlichung von den Co-Autoren Marcus Zuber, Elias Hamann, Julian Dangelmaier und Andres Georg Rösch in Bezug auf die theoretische Arbeit und von den Co-Autoren Fabian Schackmar, Robert Huber, Helge Eggers, Marcus Zuber, Elias Hamann, Georg Gramlich, Julian Dangelmaier und Qiaoshuang Zhang hinsichtlich der experimentellen Arbeit unterstützt. Die Co-Autoren Thomas Zwick, Gerardo Hernandez-Sosa, Ulrich W. Paetzold und Uli Lemmer haben in diesem Zusammenhang die wissenschaftliche Betreuung übernommen.

9.1 Motivation und Zielsetzung

Wie bereits in Abschnitt 8.1 angemerkt ist, demonstrieren die theoretischen Untersuchungen einschichtiger, mehrschichtiger und gefalteter Röntgendetektoren in den Kapiteln 5, 6 und 7 das außergewöhnliche Potential von mehrschichtigen und gefalteten Röntgendetektoren im Hinblick auf hochleistungsfähige Röntgendetektoren. Aufgrund der besonders hohen räumlichen Auflösung, die darüber hinaus potentiell mithilfe der in Kapitel 7 theoretisch betrachteten gefalteten Röntgendetektoren erreicht werden kann, liegt der Hauptfokus im Verlauf dieser Arbeit von Kapitel 8 an in der experimentellen Verwirklichung gefalteter Röntgendetektoren. Auf der Grundlage der in Kapitel 8 detailliert beschriebenen und diskutierten Realisierung von mechanisch flexiblen Röntgendetektoren auf der Basis von tintenstrahlgedruckten Perowskit-Absorbern ist dieses Kapitel infolgedessen der Realisierung von einem gefalteten Perowskit-Röntgendetektor gewidmet. In Analogie zu Kapitel 8 werden daher im Rahmen dieses Kapitels zwei Zwischenziele verfolgt. In Abschnitt 9.2 besteht der Hauptfokus darin, aufzuzeigen, welcher Aufbau und welche Herstellungsmethoden für die experimentelle Realisierung eines faltbaren Perowskit-Röntgendetektors verwendet werden können. In Abschnitt 9.3 wird anschließend die experimentelle Leistungsfähigkeit des faltbaren Perowskit-Röntgendetektors charakterisiert und bewertet. Abschnitt 9.4 fasst abschließend die wesentlichen Ergebnisse dieses Kapitels zusammen.

9.2 Aufbau und Herstellung des faltbaren Perowskit-Röntgendetektors

Der Aufbau und die Faltung des Perowskit-Röntgendetektors, der im Rahmen dieses Kapitels betrachtet wird, ist in Abbildung 9.1 schematisch dargestellt. Der Perowskit-Röntgendetektor besteht aus 8 Pixeln und wird zunächst in einem planaren Aufbau auf einem flexiblen (faltbaren) Polymer-Substrat realisiert. Der grundlegende Aufbau der Pixel, die verwendeten Materialien und die genutzten Fabrikationstechniken sind detailliert im Zusammenhang mit Abbildung 9.2 beschrieben. Die Transformation des Perowskit-Röntgendetektors vom planaren in den gefalteten Aufbau ist in Abbildung 9.1 mithilfe von zwei Zwischenzuständen dargestellt. Die Transformation basiert hierbei auf einer geeigneten Faltung des Perowskit-Röntgendetektors unter Zuhilfenahme eines zweiten Polymer-Substrats. Um eine möglichst präzise Faltung des Perowskit-Röntgendetektors gewährleisten zu können, werden vor der Herstellung der einzelnen Schichten des Detektors mittels Laserstrukturierung (siehe Abschnitt 4.1.3) Linien in das Polymer-Substrat graviert, entlang derer der Detektor gefaltet werden kann. Das verwendete zweite Polymer-Substrat verhindert die elektrische Kontaktierung der unteren und oberen Elektroden der Pixel des Perowskit-Röntgendetektors und dient als zusätzlicher Schutz der einzelnen Pixel. Der gewählte Aufbau ermöglicht eine experimentelle Charakterisierung des Perowskit-Röntgendetektors sowohl im ursprünglichen planaren als auch im gefalteten Zustand. Abbildung 9.1 zeigt die Orientierung der Röntgenstrahlung, die im Rahmen dieses Kapitels für die Charakterisierung der experimentellen Leistungsfähigkeit des Perowskit-Röntgendetektors in beiden Zuständen verwendet wird.

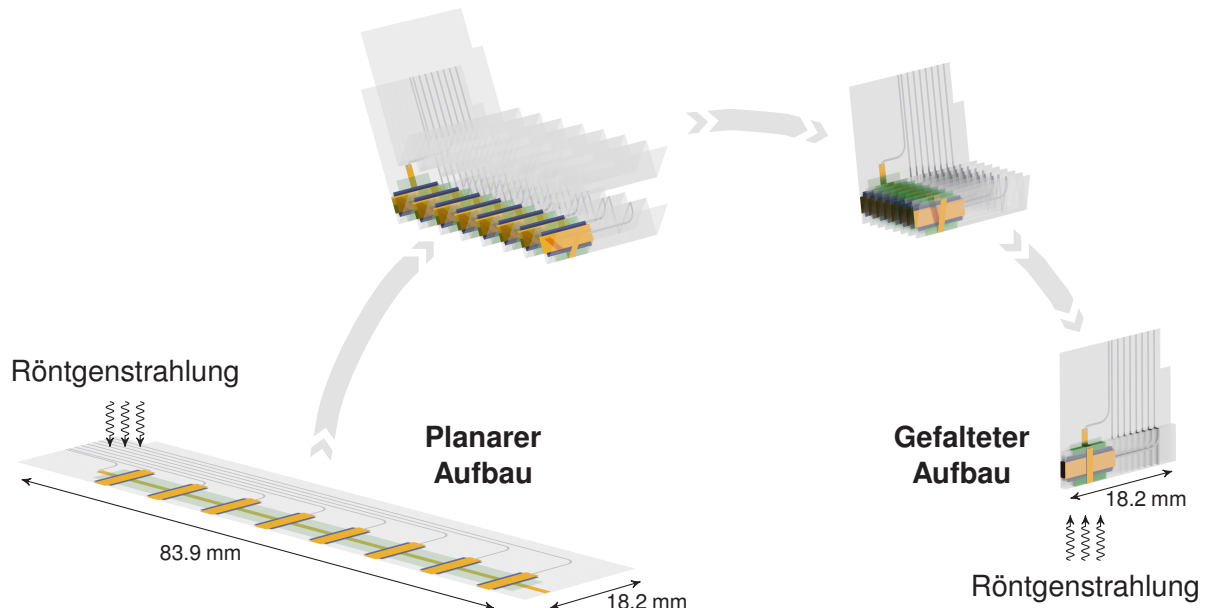


Abbildung 9.1: Aufbau und schematische Darstellung der Faltung des Perowskit-Röntgendetektors. Der im Rahmen dieses Kapitels betrachtete Perowskit-Röntgendetektor wird zunächst in einem planaren Aufbau hergestellt und besteht aus 8 Pixeln auf einem flexiblen (faltbaren) Polymer-Substrat. Durch eine geeignete Faltung und unter Zuhilfenahme eines zweiten Polymer-Substrats kann der Perowskit-Röntgendetektor von dem planaren in einen gefalteten Aufbau überführt werden. Die räumlichen Dimensionen und die Orientierung der Röntgenstrahlung, die für die Charakterisierung der experimentellen Leistungsfähigkeit verwendet wird, sind ebenfalls dargestellt. Entnommen aus Mescher et al. [140] und angepasst. (Creative Commons Attribution 4.0 International License, <http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>.)

Der grundlegende Aufbau eines exemplarischen Pixels des Perowskit-Röntgendetektors im planaren Zustand wird in Abbildung 9.2 (a) gezeigt. Experimentelle Details zur Herstellung der einzelnen Schichten sind in Tabelle B.1 im Anhang zusammengefasst. Die Auswahl der Materialien und der Fabrikationstechniken basiert hierbei wesentlich auf den Erfahrungen und den Ergebnissen, die im Zusammenhang mit der in Kapitel 8 beschriebenen Realisierung von mechanisch flexiblen Perowskit-Röntgendetektoren gemacht wurden (siehe Abbildung 8.1 (a)). Infolgedessen wird auch der in diesem Kapitel betrachtete Perowskit-Röntgendetektor auf einem flexiblen Polymer-Substrat bestehend aus Polyethylenaphthalat (PEN) mit einer Schichtdicke von $d_{\text{PEN}} = 25 \mu\text{m}$ hergestellt. Um ein möglichst planares Substrat zu gewährleisten, befindet sich das PEN-Substrat während der Herstellung der einzelnen Schichten des Perowskit-Röntgendetektors auf einem zweiten, weniger elastischen PEN-Substrat der Schichtdicke $125 \mu\text{m}$. Das dünnere PEN-Substrat ist dabei mithilfe von Sägefolie (engl. dicing tape) auf dem zweiten dickeren PEN-Substrat fixiert. Die untere Elektrode besteht aus einer mittels thermischen Verdampfens (siehe Abschnitt 4.1.2.1) hergestellten Schicht Au. Aufgrund der verbesserten experimentellen Leistungsfähigkeit von Perowskit-Röntgendetektoren mit einer Löcher-Transportschicht bestehend aus NiO_x , insbesondere im Hinblick auf den Dunkelstrom und die Stabilität (siehe Kapitel 8), wird auch für den hier betrachteten Perowskit-Röntgendetektor eine Schicht bestehend aus NiO_x , die mittels Sputtern (siehe Abschnitt 4.1.2.2)

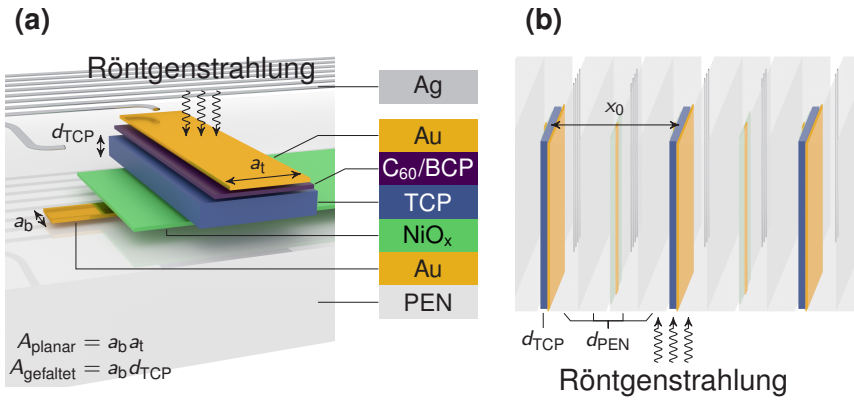


Abbildung 9.2: Grundlegender Aufbau und Orientierung der Pixel des untersuchten Perowskit-Röntgendetektors im planaren und gefalteten Zustand. (a) Grundlegender Aufbau eines exemplarischen Pixels des Perowskit-Röntgendetektors im planaren Zustand. Der Perowskit-Röntgendetektor wird auf einem flexiblen Polymer-Substrat bestehend aus Polyethylenaphthalat (PEN) hergestellt. Die untere Elektrode besteht aus einer Schicht Au. Die darauf folgende Löcher-Transportschicht besteht aus NiO_x. Die verwendeten Absorber bestehen aus Dreifach-Kationen-Perowskit (TCP, kurz für engl. triple cation perovskite). Jedes Pixel besteht darüber hinaus aus Elektronen-Transportschichten auf der Basis vom Fulleren C₆₀ und Bathocuproin (BCP). Als obere Elektrode dient eine Schicht Au. Die elektrische Verbindung zwischen den Elektroden der einzelnen Pixel und der Auslese-Elektronik ist mithilfe von Linien bestehend aus Ag hergestellt. Experimentelle Details zur Herstellung der einzelnen Schichten sind in Tabelle B.1 im Anhang zusammengefasst. Die Berechnung der effektiven Flächen eines Pixels im planaren A_{planar} und im gefalteten Zustand $A_{gefaltet}$ ist zusätzlich angegeben. Die hierfür relevanten Kantenlängen $a_{b,t}$ der unteren (gekennzeichnet mit dem Index b für engl. bottom) und der oberen (gekennzeichnet mit dem Index t für engl. top) Elektrode sowie die Schichtdicke des TCP-Absorbers d_{TCP} sind ebenfalls gekennzeichnet. Die Orientierung der Röntgenstrahlung, die für die Charakterisierung der experimentellen Leistungsfähigkeit verwendet wird, ist darüber hinaus dargestellt. (b) Ausschnitt aus drei exemplarischen Pixeln des Perowskit-Röntgendetektors im gefalteten Zustand. Der Pixelabstand im gefalteten Zustand x_0 sowie die hierfür relevanten Schichtdicken des TCP-Absorbers d_{TCP} und der PEN-Substrate d_{PEN} sind zusätzlich gekennzeichnet. Die Orientierung der Röntgenstrahlung, die für die Charakterisierung der experimentellen Leistungsfähigkeit verwendet wird, ist ebenfalls dargestellt. Entnommen aus Mescher et al. [140] und angepasst. (Creative Commons Attribution 4.0 International License, <http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>.)

hergestellt wird, als Löcher-Transportschicht verwendet. Die verwendeten Absorber bestehen aus Dreifach-Kationen-Perowskit (TCP, kurz für engl. triple cation perovskite) (siehe Abschnitt 2.3.2) mit einer angestrebten Zusammensetzung von Cs_{0,1}(FA_{0,83}MA_{0,17})_{0,9}Pb(Br_{0,17}I_{0,83})₃ (FA, kurz für Formamidinium und MA, kurz für Methylammonium) und einer Schichtdicke von $d_{TCP} = 6 \mu\text{m}$. Die angegebene Schichtdicke d_{TCP} basiert hierbei auf Messungen mittels Weißlichtinterferometrie (siehe Abschnitt 4.2.1.2). In Analogie zu Kapitel 8 basiert die Herstellung der TCP-Absorber auch in diesem Kapitel auf den Forschungsprojekten von Fabian Schackmar und Helge Eggers, in deren Rahmen die Herstellung von TCP-Absorbern mittels Tintenstrahldruck untersucht wird. Die TCP-Absorber des hier betrachteten Perowskit-Röntgendetektors sind infolgedessen von Fabian Schackmar mittels Tintenstrahldruck (siehe Abschnitt 4.1.1.2) hergestellt worden. Beschreibungen des verwendeten Druckverfahrens finden sich unter anderem in [141, 142]. Jedes Pixel des Perowskit-Röntgendetektors besteht darüber hinaus aus Elektronen-Transportschichten auf der Basis vom Fulleren C₆₀ und Bathocuproin (BCP). Beide Material-Schichten werden dabei mittels thermischen Verdampfens (siehe Abschnitt 4.1.2.1) experimentell realisiert. Als obere Elektrode dient eine mittels thermischen Verdampfens (siehe Abschnitt 4.1.2.1) hergestellte Schicht Au. Die elektrische Verbindung zwischen den Elektroden der einzelnen Pixel und der Auslese-Elektronik wird mithilfe von

elektrischen Verbindungslinien bestehend aus Ag hergestellt. Im Hinblick auf die experimentelle Realisierung der elektrischen Verbindungslinien profitiert diese Arbeit wesentlich von der wissenschaftlichen Zusammenarbeit mit Robert Huber, der im Rahmen seiner Forschungsprojekte die Herstellung von unterschiedlichen Material-Schichten mittels Aerosolstrahldruck untersucht und optimiert hat. Die elektrischen Verbindungslinien des hier betrachteten Perowskit-Röntgendetektors sind infolgedessen von Robert Huber mittels Aerosolstrahldruck (siehe Abschnitt 4.1.1.3) fabriziert worden. Die Herstellung der elektrischen Verbindungslinien beinhaltet hierbei eine Nachbehandlung der gedruckten Linien mithilfe von photonischem Sintern (siehe Abschnitt 4.1.1.3).

Die in Abbildung 9.1 schematisch dargestellte Faltung des Perowskit-Röntgendetektors ermöglicht eine Neuausrichtung der Pixel im Hinblick auf die einfallende Röntgenstrahlung. Abbildung 9.2 (b) zeigt einen Ausschnitt aus drei exemplarischen Pixeln des Perowskit-Röntgendetektors im gefalteten Zustand. Die in Abbildung 9.2 (a) und Abbildung 9.2 (b) zusätzlich dargestellte Orientierung der Röntgenstrahlung, die für die Charakterisierung der experimentellen Leistungsfähigkeit verwendet wird, verdeutlicht die Neuausrichtung der Pixel, welche durch die Faltung des Perowskit-Röntgendetektors erreicht werden kann. Im planaren Zustand wird der Perowskit-Röntgendetektor durch die obere Elektrode bestrahlt, und die Röntgenabsorptionseffizienz η_x ist maßgeblich durch die Schichtdicke des TCP-Absorbers d_{TCP} limitiert (siehe Gleichung (3.15b)). Im Gegensatz dazu bewirkt die Neuausrichtung der Pixel im Hinblick auf die einfallende Röntgenstrahlung, dass die Röntgenphotonen im gefalteten Zustand des Perowskit-Röntgendetektors entlang der Kante (frei in das Engl. übersetzt: edge-on) des TCP-Absorbers wechselwirken und absorbiert werden können. Die Röntgenabsorptionseffizienz $\eta_{x,f}$ im gefalteten Zustand hängt demzufolge maßgeblich von der Kantenlänge l des TCP-Absorbers ab (siehe Gleichung (7.7b)). In diesem Zusammenhang ist die experimentelle Realisierung von großen Kantenlängen l des TCP-Absorbers bedeutend einfacher als die Herstellung von TCP-Absorbern mit einer vergleichbar großen Schichtdicke d_{TCP} . Infolgedessen ist zu erwarten, dass ein Pixel des Perowskit-Röntgendetektors im gefalteten Zustand eine bedeutend höhere Röntgenabsorptionseffizienz aufweist als im planaren Zustand. Es sei darauf hingewiesen, dass im Rahmen dieses Kapitels lediglich die Kantenlänge des TCP-Absorbers innerhalb des aktiven Bereichs des Pixels $l = a_t$, welche durch die Kantenlänge der oberen Elektrode a_t gegeben ist, als relevante Kantenlänge in Betracht gezogen wird (siehe Abbildung 9.2 (a)). Es sei darüber hinaus darauf hingewiesen, dass Abbildung 9.2 (b) lediglich einen Ausschnitt aus drei exemplarischen Pixeln des Perowskit-Röntgendetektors im gefalteten Zustand zeigt, in dem nicht die komplette Kante der oberen Elektrode der Länge a_t sichtbar ist. Der Pixelabstand des Perowskit-Röntgendetektors im gefalteten Zustand x_0 ist zusätzlich in Abbildung 9.2 (b) dargestellt. Abbildung 9.2 (a) gibt darüber hinaus die Berechnung der effektiven Flächen eines Pixels im planaren A_{planar} und im gefalteten Zustand A_{gefaltet} an. Neben einer hohen Röntgenabsorptionseffizienz hat der hier betrachtete gefaltete Perowskit-Röntgendetektor darüber hinaus das Potential, eine hohe räumliche Auflösung zu ermöglichen. In diesem Zusammenhang ist die explizite räumliche Trennung der einzelnen Pixel (siehe Abbildung 9.2 (b)) vorteilhaft, da die im Absorber eines Pixels erzeugten Ladungsträger lediglich zur Signalinduktion in einem einzelnen Pixel beitragen können. Eine Signalinduktion in benachbarten Pixeln und damit eine Verschlechterung der räumlichen Auflösung kann somit vermieden werden. An dieser Stelle sei auf die Effekte der Röntgenfluoreszenz und der Röntgenstreuung hingewiesen, welche die räumliche Auflösung des hier betrachteten gefalteten

Perowskit-Röntgendetektors beeinflussen und limitieren können. Die Fotografien in Abbildung 9.3 zeigen den Perowskit-Röntgendetektor im planaren Zustand (siehe Abbildung 9.3 (a)) und im Übergang zwischen dem planaren und dem gefalteten Zustand (siehe Abbildung 9.3 (b)).

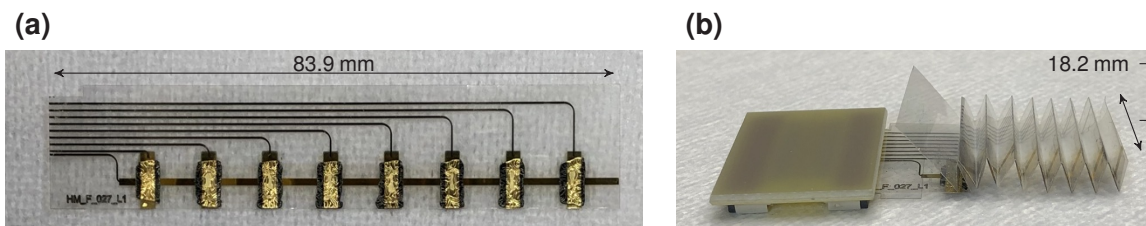


Abbildung 9.3: Fotografien des Perowskit-Röntgendetektors im planaren und in einem vorübergehenden Zustand. (a) Fotografie des Perowskit-Röntgendetektors im planaren Zustand. **(b)** Fotografie des Perowskit-Röntgendetektors in einem vorübergehenden Zustand zwischen dem planaren und dem gefalteten Zustand. Der Perowskit-Röntgendetektor ist hierbei bereits an einem Verbindungsstück angeschlossen (siehe linker Abschnitt der Fotografie), welches die elektrische Verbindung mit der Auslese-Elektronik ermöglicht. Das zweite Polymer-Substrat ist darüber hinaus deutlich zu erkennen. Entnommen aus Mescher et al. [140] und angepasst. (Creative Commons Attribution 4.0 International License, <http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>.)

9.3 Charakterisierung der experimentellen Leistungsfähigkeit des faltbaren Perowskit-Röntgendetektors

In Analogie zu Kapitel 8 besteht in Bezug auf eine erfolgreiche Realisierung eines gefalteten Perowskit-Röntgendetektors neben dem in Abschnitt 9.2 beschriebenen Aufbau und der Herstellung ein weiterer wesentlicher Aspekt in der Charakterisierung der experimentellen Leistungsfähigkeit. In den folgenden Abschnitten wird daher die experimentelle Leistungsfähigkeit des Perowskit-Röntgendetektors, der gemäß Abschnitt 9.2 hergestellt worden ist, untersucht.

9.3.1 Bauteilcharakterisierung mithilfe von Strom-Spannungs-Kennlinien

Die in Abschnitt 9.2 beschriebene Transformation vom planaren in den gefalteten Aufbau stellt einen nicht unwesentlichen Eingriff in den hier betrachteten Perowskit-Röntgendetektor dar. Der folgende Abschnitt dient daher dazu, zunächst ein grundlegendes Verständnis der realisierten Bauteile im planaren Zustand zu erlangen und anschließend zu überprüfen, inwieweit die Faltung die Bauteile beeinflusst. Zu diesem Zweck wird der Perowskit-Röntgendetektor in unterschiedlichen Zuständen mithilfe von Strom-Spannungs-Kennlinien charakterisiert.

Abbildung 9.4 zeigt einen Vergleich der Strom-Spannungs-Kennlinien, welche sich für einen exemplarischen Pixel des Perowskit-Röntgendetektors im planaren Zustand unter verschiedenen Bestrahlungsbedingungen ergeben. Zu diesem Zweck zeigt Abbildung 9.4 den Betrag des gemessenen Stroms $|I|$ des exemplarischen Pixels unter 150 kVp und unter 50 kVp Röntgenbestrahlung sowie im dunklen Zustand in Abhängigkeit der angelegten Spannung U . In Abbildung 9.4 wird darüber hinaus zwischen der Richtung, in welcher die angelegte Spannung U abgetastet wird, unterschieden. Für die Messungen wird eine Quellen- und Messeinheit (SMU, kurz für engl. source measure unit) (siehe Abschnitt 4.2.2.3) verwendet. Die Röntgenstrahlung wird mithilfe einer Röntgenröhre unter Verwendung einer Wolframanode (siehe Beschreibung des Detektor-Labor-Messplatzes in Abschnitt 4.2.2.1) erzeugt. Die in Abbildung 9.4 dargestellten Messungen zeigen unabhängig von der Richtung, in der die angelegte Spannung U abgetastet wird, ein für Dioden typisches Verhalten. In Sperrrichtung ($U < 0$) lässt sich ein eindeutiges Blockverhalten erkennen, wohingegen in Durchlassrichtung ($U > 0$) der Betrag des gemessenen Stroms $|I|$ mit zunehmender Spannung U steigt. Die gemessenen Strom-Spannungs-Kennlinien zeigen darüber hinaus eine ausgeprägte Abhängigkeit von der Richtung, in welcher die angelegte Spannung U abgetastet wird. Ein möglicher Erklärungsansatz für diese Hysterese ist die bereits in Kapitel 8 diskutierte potentielle Bewegung von Ionen innerhalb des Perowskit-Absorbers und die damit verbundene Ansammlung der Ionen an den Grenzflächen des Absorbers. Ferner lassen sich in Abbildung 9.4 die Zustände, in denen das Pixel mit Röntgenstrahlung bestrahlt wird, unabhängig von der Richtung, in der die angelegte Spannung U abgetastet wird, durch die bedeutenden Veränderungen im Betrag des gemessenen Stroms $|I|$ eindeutig identifizieren. Folglich eignen sich die hier betrachteten Bauteile für die Detektion von Röntgenphotonen.

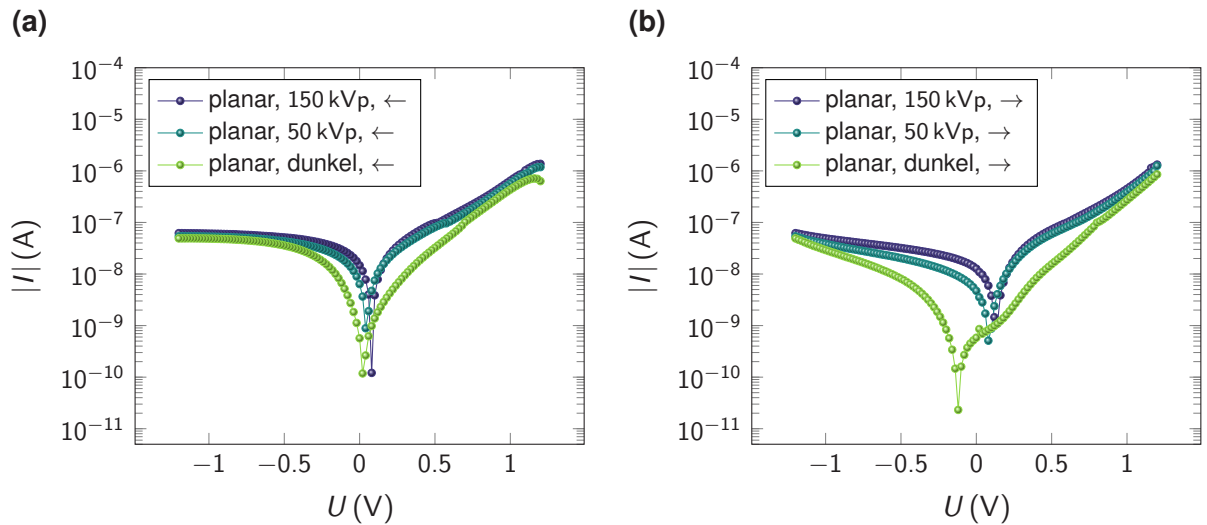


Abbildung 9.4: Strom-Spannungs-Kennlinien eines exemplarischen Pixels im planaren Zustand unter verschiedenen Bestrahlungsbedingungen. Betrag des gemessenen Stroms $|I|$ eines exemplarischen Pixels des Perowskit-Röntgendetektors im planaren Zustand in Abhängigkeit der angelegten Spannung U . Die Messungen sind unter 150 kVp und unter 50 kVp Röntgenbestrahlung sowie im dunklen Zustand durchgeführt worden. Die zusätzlichen Pfeile in der Legende deuten die Richtung an, in welcher die angelegte Spannung U abgetastet wird. **(a)** Strom-Spannungs-Kennlinien mit einer Abtastung der angelegten Spannung U in negativer Richtung. **(b)** Strom-Spannungs-Kennlinien mit einer Abtastung der angelegten Spannung U in positiver Richtung. Entnommen aus Mescher et al. [140] und angepasst. (Creative Commons Attribution 4.0 International License, <http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>.)

Um den Einfluss der Faltung auf den hier betrachteten Perowskit-Röntgendetektor untersuchen zu können, zeigt Abbildung 9.5 die Strom-Spannungs-Kennlinien eines exemplarischen Pixels im planaren und im gefalteten Zustand. Hierfür ist in Abbildung 9.5 der Betrag des gemessenen Stroms $|I|$ des exemplarischen Pixels im planaren und im gefalteten Zustand in Abhängigkeit der angelegten Spannung U dargestellt. Die Messungen werden hierbei im dunklen Zustand durchgeführt. In Analogie zu Abbildung 9.4 wird auch in Abbildung 9.5 zwischen der Richtung, in welcher die angelegte Spannung U abgetastet wird, unterschieden. Unabhängig von der Richtung, in der die angelegte Spannung U abgetastet wird, zeigen die gemessenen Strom-Spannungs-Kennlinien im planaren und gefalteten Zustand eine gute Übereinstimmung. Das bereits im Zusammenhang mit Abbildung 9.4 diskutierte, für Dioden typische Verhalten in Sperr- und in Durchlassrichtung zeigt sich sowohl im planaren als auch im gefalteten Zustand. Es ist daher davon auszugehen, dass die Pixel des hier betrachteten Perowskit-Röntgendetektor auch im gefalteten Zustand funktionsfähig sind und für die Detektion von Röntgenphotonen verwendet werden können. In diesem Zusammenhang sei allerdings darauf hingewiesen, dass zwei der acht Pixel durch den Prozess der Faltung stark beschädigt wurden. Diese beiden Pixel werden im Rahmen dieses Kapitels lediglich im planaren Zustand charakterisiert. Ein möglicher Erklärungsansatz für die geringfügigen Unterschiede in den in Abbildung 9.5 gezeigten Strom-Spannungs-Kennlinien des exemplarischen Pixels im planaren und gefalteten Zustand ist ein durch die Faltung hervorgerufener veränderter elektrischer Widerstand der unteren Au Elektrode und der elektrischen Verbindungslinien bestehend aus Ag. Hierbei besteht die Möglichkeit, dass die mechanische Belastung, welcher die Material-Schichten durch die Faltung des Perowskit-Röntgendetektors

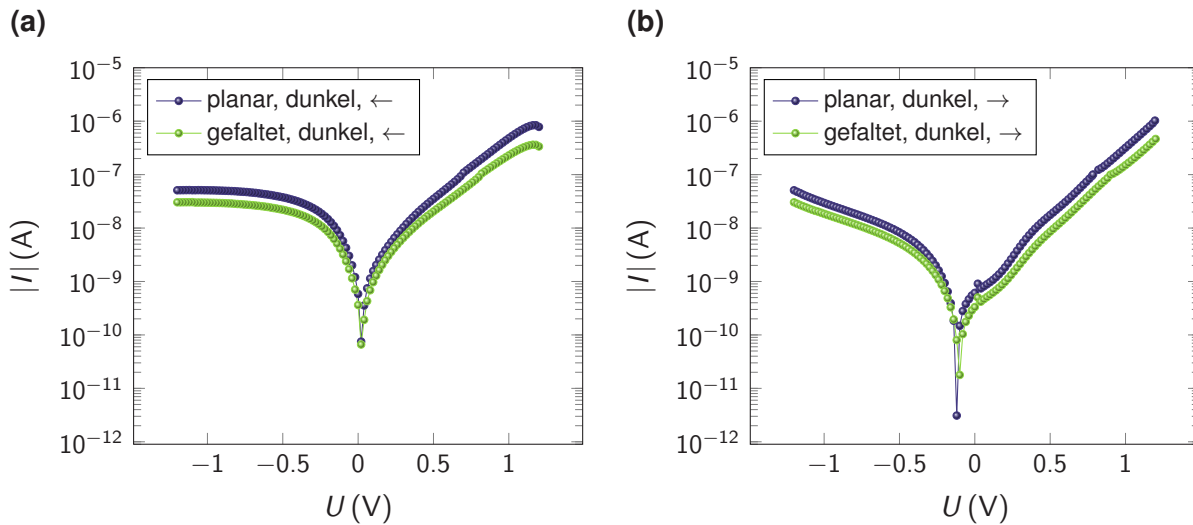


Abbildung 9.5: Strom-Spannungs-Kennlinien eines exemplarischen Pixels im planaren und gefalteten Zustand. Betrag des gemessenen Stroms $|I|$ eines exemplarischen Pixels des Perowskit-Röntgendetektors im planaren und gefalteten Zustand in Abhängigkeit der angelegten Spannung U . Die Messungen sind im dunklen Zustand durchgeführt worden. Die zusätzlichen Pfeile in der Legende deuten die Richtung an, in welcher die angelegte Spannung U abgetastet wird. **(a)** Strom-Spannungs-Kennlinien mit einer Abtastung der angelegten Spannung U in negativer Richtung. **(b)** Strom-Spannungs-Kennlinien mit einer Abtastung der angelegten Spannung U in positiver Richtung. Entnommen aus Mescher et al. [140] und angepasst. (Creative Commons Attribution 4.0 International License, <http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>.)

ausgesetzt sind, eine Veränderung der elektrischen Widerstände bewirkt. Die bereits im Zusammenhang mit den in Abbildung 9.4 dargestellten Messungen diskutierte ausgeprägte Hysterese zeigt sich darüber hinaus ebenfalls in den in Abbildung 9.5 präsentierten Strom-Spannungs-Kennlinien. Der Aufbau der Pixel des hier betrachteten Perowskit-Röntgendetektors mit vergleichsweise dünnen Absorbern in Verbindung mit Elektronen- und Löcher-Transportschichten ermöglicht einen Betrieb des Detektors ohne angelegte Betriebsspannung $U = 0 \text{ V}$. Um den Einfluss der ausgeprägten Hysterese zu minimieren, wird die experimentelle Leistungsfähigkeit des hier betrachteten Perowskit-Röntgendetektors daher im Folgenden bei einer Betriebsspannung $U = 0 \text{ V}$ charakterisiert.

9.3.2 Charakterisierung der Röntgensensitivität

In Analogie zu den Untersuchungen in Kapitel 8 wird auch im Rahmen dieses Kapitels die Röntgensensitivität S des hier betrachteten Perowskit-Röntgendetektors charakterisiert, um die Leistungsfähigkeit des Röntgendetektors zu beschreiben. Wie bereits in Abschnitt 8.3.1 erläutert wird, kann die Röntgensensitivität S gemäß Gleichung (2.21) mithilfe des Betrags der induzierten Ladung $|Q|$, der Energiedosis der einfallenden Röntgenstrahlung in Luft D_{air} und der bestrahlten Fläche A definiert werden: $S = |Q|/(D_{\text{air}}A)$. Entsprechend der Untersuchungen in Abschnitt 8.3.1 wird auch im vorliegenden Kapitel der Umstand genutzt, dass gemäß Gleichung (8.1) im Falle kontinuierlicher Röntgenstrahlung mit einer konstanten Energiedosisrate in Luft \dot{D}_{air} die experimentelle Röntgensensitivität S_{exp} mithilfe des durch die Röntgenstrahlung induzierten Stroms $I_{\text{x-ind}}$, der Energiedosisrate der Röntgenstrahlung in Luft \dot{D}_{air} und der bestrahlten Fläche A bestimmt werden kann: $S_{\text{exp}} = I_{\text{x-ind}}/(\dot{D}_{\text{air}}A) = J_{\text{x-ind}}/\dot{D}_{\text{air}}$. In diesem Zusammenhang sei daran erinnert, dass, wie bereits in Abschnitt 8.3.1 erläutert wird, $J_{\text{x-ind}} = I_{\text{x-ind}}/A$ die durch die Röntgenstrahlung induzierte Stromdichte beschreibt und sich die Größen $I_{\text{x-ind}} = I_{\text{x}} - I_{\text{d}}$ und $J_{\text{x-ind}} = J_{\text{x}} - J_{\text{d}}$ aus dem Strom I_{x} und der Stromdichte J_{x} unter Röntgenbestrahlung sowie aus dem Dunkelstrom I_{d} und der Dunkelstromdichte J_{d} ergeben.

Das im Rahmen dieses Kapitels verwendete Vorgehen zur Bestimmung der experimentellen Röntgensensitivität S_{exp} kann exemplarisch mithilfe von Abbildung 9.6 und Abbildung 9.7 beschrieben werden. In Analogie zu Abschnitt 8.3.1 werden hierfür die zeitaufgelösten Detektorsignale unter verschiedenen Bestrahlungsbedingungen gemessen und ausgewertet. Abbildung 9.6 zeigt den gemessenen Strom I eines exemplarischen Pixels des hier betrachteten Perowskit-Röntgendetektors im planaren (siehe Abbildung 9.6(a)) und gefalteten Zustand (siehe Abbildung 9.6(b)) in Abhängigkeit der Zeit t . Das Pixel wird hierbei mit einer Spannung $U = 0 \text{ V}$ betrieben und mit 150 kVp, 125 kVp, 100 kVp, 75 kVp und 50 kVp Röntgenstrahlung bestrahlt. Die dabei verwendeten Bestrahlungssequenzen setzen sich jeweils aus fünf Pulsen mit steigender Energiedosisrate der Röntgenstrahlung in Luft \dot{D}_{air} zusammen. Für den Betrieb des Röntgendetektors wird eine SMU (siehe Abschnitt 4.2.2.3) verwendet, die es ermöglicht, eine Spannung U anzulegen und den Strom I zu messen. Die Röntgenstrahlung wird mithilfe einer Röntgenröhre unter Verwendung einer Wolframanode (siehe Beschreibung des Detektor-Labor-Messplatzes in Abschnitt 4.2.2.1) erzeugt. In Analogie zu Abschnitt 8.3.1 sind hierbei variable Energiedosisraten der Röntgenstrahlung in Luft \dot{D}_{air} bei einer konstanten Röhrenspannung $U_{\text{Röhre}}$ über eine Veränderung des

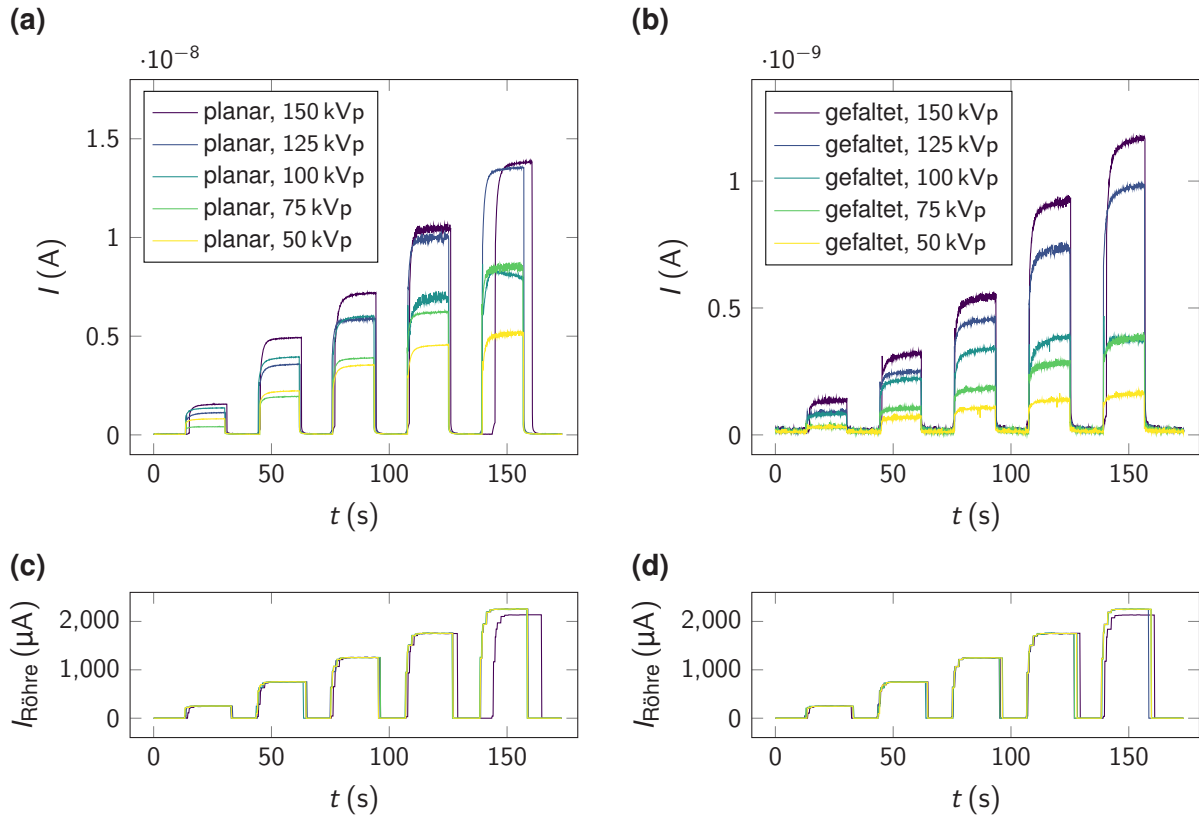


Abbildung 9.6: Zeitaufgelöste Detektorsignale im planaren und gefalteten Zustand. (a), (b) Gemessener Strom I eines exemplarischen Pixels des Perowskit-Röntgendetektors im (a) planaren und (b) gefalteten Zustand in Abhängigkeit der Zeit t . Das Pixel wird mit einer Spannung $U = 0\text{ V}$ betrieben und wird mit 150 kVp, 125 kVp, 100 kVp, 75 kVp und 50 kVp Röntgenstrahlung bestrahlt. Die Bestrahlungssequenzen setzen sich jeweils aus fünf Pulsen mit steigender Energiedosisrate der Röntgenstrahlung in Luft \dot{D}_{air} zusammen, die mithilfe einer Veränderung des Röhrenstroms $I_{\text{Röhre}}$ realisiert werden. (c), (d) Röhrenstrom $I_{\text{Röhre}}$ in Abhängigkeit der Zeit t . Hierbei zeigt (c) den Röhrenstrom $I_{\text{Röhre}}$, der für die Messungen in (a) verwendet wird und (d) den Röhrenstrom $I_{\text{Röhre}}$, der für die Messungen in (b) genutzt wird. Die Farbkodierung in (c) und (d) entspricht dabei der Farbkodierung aus (a) und (b). Entnommen aus Mescher et al. [140] und angepasst. (Creative Commons Attribution 4.0 International License, <http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>.)

Röhrenstroms $I_{\text{Röhre}}$ realisiert. Der für die in Abbildung 9.6 (a) und Abbildung 9.6 (b) dargestellten Messungen verwendete Röhrenstrom $I_{\text{Röhre}}$ in Abhängigkeit der Zeit t ist zusätzlich in Abbildung 9.6 (c) und Abbildung 9.6 (d) gezeigt. Die Messungen der Energiedosisrate der Röntgenstrahlung in Luft \dot{D}_{air} werden in diesem Zusammenhang mithilfe eines Dosimeters in Verbindung mit einem Halbleiterdetektor (siehe Abschnitt 4.2.2.2) durchgeführt. Sowohl im planaren als auch im gefalteten Zustand bewirken die Pulse der verwendeten Bestrahlungssequenzen eine eindeutige Veränderung des gemessenen Stroms I . Bedingt durch die unterschiedliche effektive Fläche des Pixels im planaren Zustand A_{planar} verglichen mit der effektiven Fläche im gefalteten Zustand A_{gefaltet} (siehe Abbildung 9.2) unterscheidet sich die Anzahl der Röntgenphotonen, die pro Zeitintervall auf das Pixel treffen und somit mit dem Absorber wechselwirken können. Infolgedessen bewirkt die bedeutend geringere Fläche A_{gefaltet} verglichen mit der Fläche A_{planar}

trotz der zu erwartenden höheren Röntgenabsorptionseffizienz $\eta_{x,f}$ signifikant geringere gemessene Ströme I im gefalteten Zustand (siehe Abbildung 9.6 (b)) im Vergleich zu den gemessenen Strömen I im planaren Zustand (siehe Abbildung 9.6 (a)).

Wie bereits zu Beginn dieses Abschnitts erläutert, wird im Rahmen dieses Kapitels die experimentelle Röntgensensitivität S_{exp} in Analogie zu Abschnitt 8.3.1 mithilfe der durch die Röntgenstrahlung induzierten Stromdichte $J_{x\text{-ind}}$ und der Energiedosisrate in Luft \dot{D}_{air} bestimmt. Zu diesem Zweck zeigt Abbildung 9.7 die durch Röntgenstrahlung induzierte Stromdichte $J_{x\text{-ind}}$ eines exemplarischen Pixels des Perowskit-Röntgendetektors im planaren (siehe Abbildung 9.7 (a)) und gefalteten Zustand (siehe Abbildung 9.7 (b)) in Abhängigkeit der Energiedosisrate der Röntgenstrahlung in Luft \dot{D}_{air} . Die Datenpunkte sind hierbei aus den in Abbildung 9.6 (a) und Abbildung 9.6 (b) gezeigten Messungen extrahiert. Die durch die Röntgenstrahlung induzierten Ströme $I_{x\text{-ind}}$ sind in diesem Zusammenhang auf die jeweiligen effektiven Flächen des Pixels im planaren A_{planar} und im gefalteten Zustand A_{gefaltet} normiert (siehe Abbildung 9.2). Die Füllfaktoren des Perowskit-Röntgendetektors im planaren und gefalteten Zustand werden folglich an dieser Stelle nicht beachtet. Die Datenpunkte in Abbildung 9.7 der jeweiligen Bestrahlungssequenz deuten auf einen linearen Zusammenhang zwischen $J_{x\text{-ind}}$ und \dot{D}_{air} hin. Infolgedessen wird in Analogie zum in Abschnitt 8.3.1 beschriebenen Vorgehen in Abbildung 9.7 eine lineare Modellfunktion $f_{\text{lin}}(\dot{D}_{\text{air}}, S_{\text{exp}})$ an die jeweiligen Datenpunkte angepasst, um die experimentelle Röntgensensitivität S_{exp} zu bestimmen. Dabei ist \dot{D}_{air} die Variable der Modellfunktion und S_{exp} kann in Anlehnung an Gleichung (8.1) über die Steigung $df_{\text{lin}}/d\dot{D}_{\text{air}} = dJ_{x\text{-ind}}/d\dot{D}_{\text{air}}$ der Modellfunktion bestimmt werden. Die Betrachtung der in Abbildung 9.7 dargestellten durch die Röntgenstrahlung induzierten Stromdichte $J_{x\text{-ind}}$

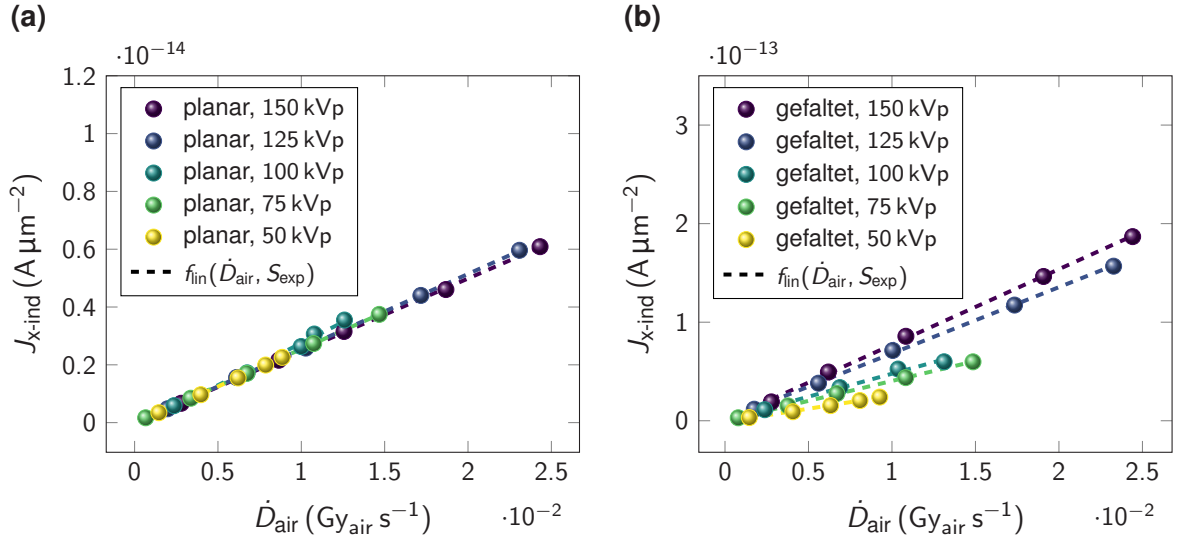


Abbildung 9.7: Bestimmung der experimentellen Röntgensensitivität im planaren und gefalteten Zustand. (a), (b) Durch Röntgenstrahlung induzierte Stromdichte $J_{x\text{-ind}}$ eines exemplarischen Pixels des Perowskit-Röntgendetektors im (a) planaren und (b) gefalteten Zustand in Abhängigkeit der Energiedosisrate der Röntgenstrahlung in Luft \dot{D}_{air} . Die Datenpunkte sind aus den in Abbildung 9.6 (a) und Abbildung 9.6 (b) gezeigten Messungen extrahiert. Eine lineare Modellfunktion $f_{\text{lin}}(\dot{D}_{\text{air}}, S_{\text{exp}})$ ist an die jeweiligen Datenpunkte angepasst. Hierbei ist \dot{D}_{air} die Variable und S_{exp} die Steigung der Modellfunktion. Entnommen aus Mescher et al. [140] und angepasst. (Creative Commons Attribution 4.0 International License, <http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>.)

in Abhängigkeit der Energiedosisrate der Röntgenstrahlung in Luft \dot{D}_{air} ermöglicht eine Bewertung der gemessenen Detektorsignale unabhängig von der effektiven Fläche des Pixels. Die Neuausrichtung des Pixels und die damit zu erwartende höhere Röntgenabsorptionseffizienz im gefalteten Zustand bewirkt hierbei bedeutend größere Werte für $J_{\text{x-ind}}$ im gefalteten Zustand (siehe Abbildung 9.7 (b)) verglichen mit den Datenpunkten im planaren Zustand (siehe Abbildung 9.7 (a)). Darüber hinaus deutet sich im gefalteten Zustand eine Abhängigkeit der experimentellen Röntgensensitivität S_{exp} von der verwendeten Röhrenspannung $U_{\text{Röhre}}$ und somit von der Energie der Röntgenphotonen an.

Um die Leistungsfähigkeit des hier betrachteten Perowskit-Röntgendetektors im planaren und im gefalteten Zustand bewerten zu können, zeigt Abbildung 9.8 die experimentelle Röntgensensitivität S_{exp} der Pixel des Perowskit-Röntgendetektors im planaren (siehe Abbildung 9.8 (a)) und im gefalteten Zustand (siehe Abbildung 9.8 (b)) in Abhängigkeit von der Röhrenspannung $U_{\text{Röhre}}$, die für die Erzeugung der Röntgenstrahlung verwendet wird. Die Bestimmung der experimentellen Röntgensensitivität S_{exp} erfolgt hierbei gemäß dem in Abbildung 9.6 und Abbildung 9.7 exemplarisch illustrierten Vorgehen. Hierfür werden die Pixel mit einer Spannung $U = 0 \text{ V}$ betrieben und mit Röntgenstrahlung bestrahlt, die mithilfe unterschiedlicher Röhrenspannungen $U_{\text{Röhre}}$ erzeugt wird. Es sei daran erinnert, dass zwei der acht Pixel des hier betrachteten Perowskit-Röntgendetektors durch den Prozess der Faltung stark beschädigt worden sind. Diese beiden Pixel werden im Rahmen dieses Kapitels lediglich im planaren Zustand charakterisiert. Folglich zeigt Abbildung 9.8 die experimentelle Röntgensensitivität S_{exp} von acht Pixeln im planaren Zustand und von sechs Pixeln im gefalteten Zustand. Die experimentelle Röntgensensitivität S_{exp} der Pixel im planaren Zustand liegt in einem Bereich von $25 - 35 \mu\text{C Gy}_{\text{air}}^{-1} \text{ cm}^{-2}$ (siehe Abbildung 9.8 (a)). Im Vergleich zur Leistungsfähigkeit im planaren Zustand lassen sich mithilfe der Pixel im gefalteten Zustand bedeutend größere Werte für die experimentelle Röntgensensitivität S_{exp} von bis zu $1,409 \mu\text{C Gy}_{\text{air}}^{-1} \text{ cm}^{-2}$ unter 150 kVp Röntgenstrahlung erreichen (siehe Abbildung 9.8 (b)). An dieser Stelle sei darauf hingewiesen, dass bis zum Zeitpunkt des hier betrachteten Forschungsprojekts bereits direkte Röntgendetektoren mit einer bedeutend höheren Leistungsfähigkeit realisiert wurden, mit denen Werte für die experimentelle Röntgensensitivität S_{exp} von mehr als $10^6 \mu\text{C Gy}_{\text{air}}^{-1} \text{ cm}^{-2}$ erreicht werden können [143, 144, 16, 145]. Insbesondere im Falle von Perowskit-Röntgendetektoren besteht ein Erklärungsansatz für die außergewöhnlich hohen Werte der experimentellen Röntgensensitivität S_{exp} in einer Leistungssteigerung durch fotoleitende Verstärkung (engl. photoconductive gain) [16].

Aufgrund des verwendeten Aufbaus mit Elektronen- und Löcher-Transportschichten, die eine Injektion von Ladungsträgern erschweren, in Verbindung mit dem Betrieb mit einer Spannung $U = 0 \text{ V}$ ist zu erwarten, dass im Falle des hier betrachteten Perowskit-Röntgendetektors keine signifikante Leistungssteigerung durch fotoleitende Verstärkung auftritt. Um diese Hypothese zu stützen und darüber hinaus die Leistungsfähigkeit des hier betrachteten Perowskit-Röntgendetektors besser bewerten zu können, zeigt Abbildung 9.8 neben den Werten der experimentellen Röntgensensitivität S_{exp} zusätzlich die Werte der theoretischen Röntgensensitivität $S_{\text{theo,poly}}^*$, die für den hier betrachteten Perowskit-Röntgendetektor für den Fall, dass keine fotoleitende Verstärkung vorliegt, berechnet werden können. Zu diesem Zweck wird ein im Vergleich zu Abschnitt 8.3.1 abgewandeltes Vorgehen angewendet. Anders als im Zusammenhang mit der Berechnung der theoretischen Röntgensensitivität $S_{\text{theo,poly}}$ in Gleichung (8.2) wird nicht die

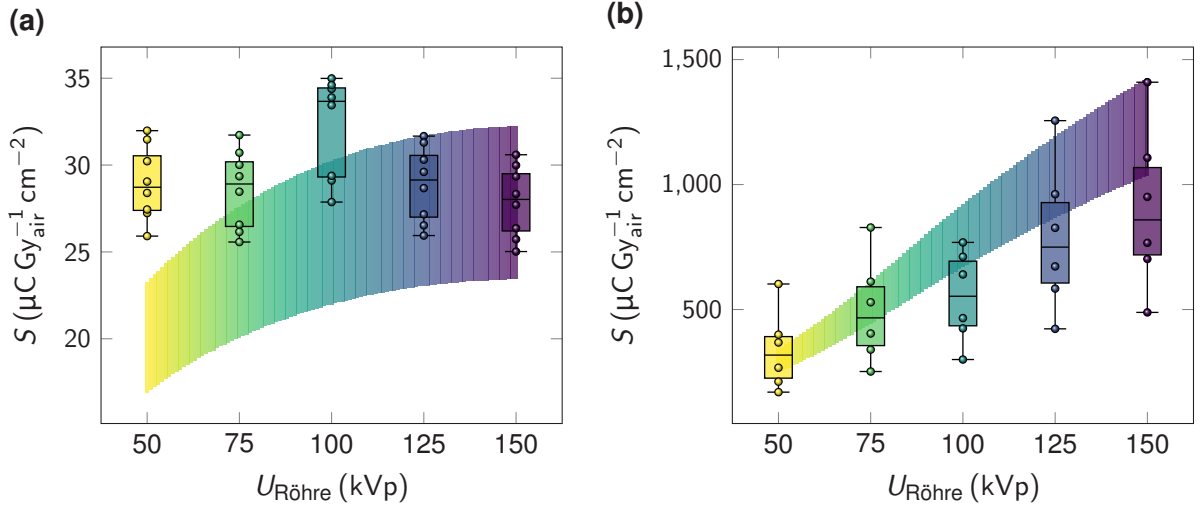


Abbildung 9.8: Gemessene Röntgensensitivität der Pixel des Perowskit-Röntgendetektors im planaren und gefalteten Zustand. (a), (b) Experimentelle Röntgensensitivität S_{exp} der Pixel des Perowskit-Röntgendetektors im (a) planaren und (b) gefalteten Zustand in Abhängigkeit von der Röhrenspannung $U_{\text{Röhre}}$, die für die Erzeugung der Röntgenstrahlung verwendet wird. Die Bestimmung der experimentellen Röntgensensitivität S_{exp} erfolgt gemäß dem in Abbildung 9.6 und Abbildung 9.7 illustrierten Vorgehen. Zu diesem Zweck werden die Pixel des Perowskit-Röntgendetektors mit einer Spannung $U = 0 \text{ V}$ betrieben und mit 50 kVp, 75 kVp, 100 kVp, 125 kVp und 150 kVp Röntgenstrahlung bestrahlt. Gezeigt werden sowohl die einzelnen Datenpunkte als auch die zugehörigen Kastengrafiken (engl. Box-Plots). Die Kastengrafiken beinhalten den Median und die (geschätzten) 0.25- und 0.75-Quantile. Die Antennen (engl. Whiskers) zeigen, welche Datenpunkte als Ausreißer betrachtet werden. Die theoretische Röntgensensitivität $S_{\text{theo,poly}}^*$, welche sich mithilfe von Gleichung (9.2) berechnen lässt, ist durch die farbig hinterlegten Bereiche dargestellt. Entnommen aus Mescher et al. [140] und angepasst. (Creative Commons Attribution 4.0 International License, <http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>.)

theoretische Röntgensensitivität S_{theo} im monoenergetischen Fall mit der normierten spektralen Photonenfluenz $\hat{\Phi}_E$ gewichtet. Für die Berechnung der theoretischen Röntgensensitivität $S_{\text{theo,poly}}^*$ im Rahmen dieses Kapitels wird explizit beachtet, dass für die Bestimmung der experimentellen Röntgensensitivität S_{exp} gemäß Gleichung (8.1) sowohl die durch die Röntgenstrahlung induzierte Stromdichte $J_{\text{x-ind}}$ als auch die Energiedosisrate der Röntgenstrahlung in Luft \dot{D}_{air} unter polyenergetischer Röntgenstrahlung gemessen werden. Infolgedessen wird die theoretische Röntgensensitivität $S_{\text{theo,poly}}^*$ im vorliegenden Kapitel mithilfe der theoretischen durch die Röntgenstrahlung induzierten Stromdichte $J_{\text{x-ind,theo}}$ und der theoretischen Energiedosisrate der Röntgenstrahlung in Luft $\dot{D}_{\text{air,theo}}$ im Falle polyenergetischer Röntgenstrahlung modelliert [140]:

$$S_{\text{theo,poly}}^* = \frac{J_{\text{x-ind,theo}}}{\dot{D}_{\text{air,theo}}} = \frac{\int dE e \dot{\Phi}_E \eta}{\int dE \dot{\Phi}_E E (\alpha_{\text{en}}/\rho)_{\text{air}}} . \quad (9.1)$$

Hierbei ist e die Elementarladung, $\dot{\Phi}_E$ die spektrale Photonenfluenzrate, η die Effizienz des Röntgendetektors ohne fotoleitende Verstärkung, E die Photonenenergie und $(\alpha_{\text{en}}/\rho)_{\text{air}}$ der Massen-Energieabsorptionskoeffizient von Luft. Gleichung (9.1) basiert auf der Annahme, dass die theoretische durch die Röntgenstrahlung induzierte Stromdichte $J_{\text{x-ind,theo}}$ als Integral über das Produkt aus der Elementarladung e , der spektralen Photonenfluenzrate $\dot{\Phi}_E$ und der Effizienz des Röntgendetektors η modelliert werden kann: $J_{\text{x-ind,theo}} = \int dE e \dot{\Phi}_E \eta$. Darüber hinaus wird in Gleichung (9.1) der Zusammenhang aus

Gleichung (2.18) verwendet, um die theoretische Energiedosisrate der Röntgenstrahlung in Luft $\dot{D}_{\text{air,theo}}$ formal zu beschreiben. Auf der Grundlage von Gleichung (9.1) kann die theoretische Röntgensensitivität $S_{\text{theo,poly}}^*(U_{\text{Röhre}})$ in Abhängigkeit der Röhrenspannung $U_{\text{Röhre}}$ wie folgt berechnet werden [140]:

$$S_{\text{theo,poly}}^*(U_{\text{Röhre}}) = \frac{\sum_i e \hat{\Phi}_E(U_{\text{Röhre}}, E_i) \eta(E_i)}{\sum_i \hat{\Phi}_E(U_{\text{Röhre}}, E_i) E_i (\alpha_{\text{en}} / \rho)_{\text{air}}(E_i)}, \quad (9.2)$$

mit der Summe \sum_i über alle relevanten Photonenenergien E_i und der normierten spektralen Photonenfluenz $\hat{\Phi}_E(U_{\text{Röhre}}, E_i)$ in Abhängigkeit der Röhrenspannung $U_{\text{Röhre}}$ und der Photonenenergie E_i . Die Berechnungen der theoretischen Röntgensensitivität $S_{\text{theo,poly}}^*(U_{\text{Röhre}})$ im vorliegenden Kapitel gemäß Gleichung (9.2) basieren auf Simulationen der normierten spektralen Photonenfluenz $\hat{\Phi}_E(U_{\text{Röhre}}, E_i)$ und auf den theoretischen Effizienzen planarer und gefalteter Röntgendetektoren $\eta(E_i)$, welche im Rahmen von Abschnitt 3.1 und Abschnitt 7.2.1 beschrieben werden. Die Simulationen der normierten spektralen Photonenfluenz $\hat{\Phi}_E(U_{\text{Röhre}}, E_i)$ werden in diesem Zusammenhang mit *spektr 3.0* [146] durchgeführt. Im planaren Zustand kann die Effizienz $\eta(E_i)$ des hier betrachteten Perowskit-Röntgendetektors Gleichung (3.14) zufolge als Produkt aus der Röntgenabsorptionseffizienz η_x , der Konversionseffizienz η_m und der Ladungssammeleffizienz η_{cc} beschrieben werden. Im gefalteten Zustand wird die Effizienz $\eta(E_i)$ des hier betrachteten Perowskit-Röntgendetektors gemäß Gleichung (7.6) als Produkt aus dem Füllfaktor η_{fill} , der Röntgenabsorptionseffizienz $\eta_{x,\text{f}}$, der Konversionseffizienz η_m und der Ladungssammeleffizienz $\eta_{\text{cc},\text{f}}$ modelliert. Es sei darauf hingewiesen, dass sowohl im planaren als auch im gefalteten Zustand die Modellierung der Effizienz $\eta(E_i)$ auf der Annahme beruht, dass keine fotoleitende Verstärkung vorliegt. Die Simulationen der Effizienz $\eta(E_i)$ des Perowskit-Röntgendetektors für die Berechnungen in diesem Kapitel werden für einen Betrag des elektrischen Feldes $F = 0.13/6 \text{ V } \mu\text{m}^{-1}$ durchgeführt. Aufgrund der verwendeten Betriebsspannung von $U = 0 \text{ V}$ basiert der verwendete Wert von F hierbei auf der intrinsischen Spannung $U_0 = 0.13 \text{ V}$, welche sich aus den in Abbildung 8.5 dargestellten Untersuchungen abschätzen lässt. Mithilfe der in Abbildung 8.5 gezeigten Untersuchungen lässt sich darüber hinaus das Beweglichkeit-Lebensdauer-Produkt $\mu\tau$ der TCP-Absorber für die Berechnungen in diesem Kapitel zu $\mu\tau = 2 \times 10^{-6} \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1}$ abschätzen. Bedingt durch den vergleichbaren Aufbau der Bauteile, insbesondere im Hinblick auf die verwendeten Elektronen- und Löcher-Transportschichten, die in diesem Kapitel und in Kapitel 8 untersucht werden, wird dabei davon ausgegangen, dass die verwendeten Werte von U_0 und $\mu\tau$ valide Abschätzungen für den hier betrachteten Perowskit-Röntgendetektor darstellen. Der verwendete Wert von F basiert darüber hinaus auf der Schichtdicke der TCP-Absorber $d_{\text{TCP}} = 6 \mu\text{m}$, die mithilfe von Messungen mittels Weißlichtinterferometrie (siehe Abschnitt 4.2.1.2) bestimmt wurde. Im planaren Zustand werden die Berechnungen überdies für eine obere Au-Elektrode mit einer Schichtdicke von 75 nm durchgeführt, wohingegen die Simulationen im gefalteten Zustand auf einer relevanten Kantenlänge $l = a_t = 2.1656 \text{ mm}$ basieren. Die Dichte ρ der TCP-Absorber wird für die Berechnungen in diesem Kapitel auf einen Wert von $\rho = 3.75 \text{ g cm}^{-3}$ abgeschätzt. Der verwendete Wert für ρ beruht hierbei auf einer Abschätzung der Masse und des Volumens der gedruckten TCP-Absorber. Die Abschätzung des Volumens erfolgt dabei mithilfe von Messungen mittels Weißlichtinterferometrie (siehe Abschnitt 4.2.1.2). In Anlehnung an die Simulationen in Abschnitt 8.3.1 wird die Elektron-Loch-Paar

Erzeugungsenergie W_{\pm} der verwendeten TCP-Absorber auch für die Berechnungen in diesem Kapitel auf einen Wertebereich von $W_{\pm} = 4.0 - 5.5$ eV abgeschätzt.

Die in Abbildung 9.8 dargestellte experimentelle Röntgensensitivität S_{exp} und die theoretische Röntgensensitivität $S_{\text{theo,poly}}^*$ zeigen sowohl im planaren als auch im gefalteten Zustand eine akzeptable Übereinstimmung. Im planaren Zustand sind die experimentellen Werte im Falle hoher Röhrensparnungen $U_{\text{Röhre}}$ im Einklang mit den theoretischen Werten. Zu niedrigeren Röhrensparnungen $U_{\text{Röhre}}$ hin weichen die experimentellen Werte allerdings zunehmend vom theoretischen Wertebereich ab (siehe Abbildung 9.8 (a)). Wie bereits in Abschnitt 8.3.1 diskutiert wird, werden im Rahmen des verwendeten Simulationsmodells gemäß der Gleichungen (3.2) und (3.3) die Interaktionen von sekundären Photonen, die durch Strahlungsverluste der geladenen Sekundärteilchen hervorgerufen werden, nicht beachtet. Eine Beachtung dieser Interaktionen kann zu einer Erhöhung der absorbierten Energie im Absorber und infolgedessen zu einer erhöhten theoretischen Röntgensensitivität $S_{\text{theo,poly}}^*$ führen. Ein weiterer möglicher Erklärungsansatz für geringfügig überschätzte Werte der experimentellen Röntgensensitivität S_{exp} , der ebenfalls bereits in Abschnitt 8.3.1 angemerkt wird, liegt in Ladungsträgern, die an den Rändern der aktiven Bereiche des Röntgendetektors zur Signalinduktion beitragen. Inwieweit die genannten Aspekte die von der Röhrensparnung $U_{\text{Röhre}}$ und somit von der Photonenenergie E abhängigen Abweichungen zwischen den experimentellen und den theoretischen Werten im planaren Zustand erklären können, ist an dieser Stelle nicht ohne weitere Untersuchungen abschließend zu beantworten. Im gefalteten Zustand sind die experimentellen Werte im Falle niedriger Röhrensparnungen $U_{\text{Röhre}}$ im Einklang mit den theoretischen Werten. Für höhere Röhrensparnungen $U_{\text{Röhre}}$ liegen die experimentellen Werte hingegen unter den theoretischen Werten (siehe Abbildung 9.8 (b)). Verglichen mit dem planaren Zustand ist allerdings zu erwarten, dass die tatsächliche Orientierung der Pixel im gefalteten Zustand im Hinblick auf die einfallende Röntgenstrahlung einen größeren Einfluss auf die Leistungsfähigkeit hat. Sowohl die simulierten Werte $S_{\text{theo,poly}}^*$ als auch die experimentellen Werte S_{exp} basieren im Falle des gefalteten Zustands auf den Annahmen parallel einfallender Röntgenphotonen und Detektor-Elementen, die entlang der Ausbreitungsrichtung der Röntgenstrahlung ausgerichtet sind. Abweichungen von diesen Annahmen führen im Hinblick auf die experimentellen Werte zu größeren effektiven Flächen A_{gefaltet} und in Bezug auf die theoretischen Werte zu einer Reduktion der Wegstrecke im TCP-Absorber, entlang welcher die Röntgenphotonen wechselwirken und absorbiert werden können. Infolgedessen führen Abweichungen von den genannten idealen Annahmen zu einer Reduktion sowohl der experimentellen als auch der theoretischen Werte. Inwieweit allerdings mit diesem Erklärungsansatz die auftretenden Abweichungen erklärt werden können, ist an dieser Stelle in Analogie zum planaren Zustand nicht ohne weitere Untersuchungen abschließend zu bewerten. In einer potentiell unterschiedlichen Orientierung der einzelnen Pixel im gefalteten Zustand im Hinblick auf die einfallende Röntgenstrahlung besteht darüber hinaus eine mögliche Erklärung für die starken Schwankungen, welche die experimentelle Röntgensensitivität S_{exp} im gefalteten Zustand aufweist (siehe Abbildung 9.8 (b)).

Die theoretischen Werte $S_{\text{theo,poly}}^*$ in Abbildung 9.8 sind für den Fall, dass keine fotoleitende Verstärkung vorliegt, simuliert. Trotz der zum Teil im planaren Zustand auftretenden größeren experimentellen Werte S_{exp} verglichen mit den theoretischen Werten $S_{\text{theo,poly}}^*$ stützt somit die akzeptable Übereinstimmung zwischen den experimentellen und den theoretischen Werten in Abbildung 9.8 die aufgestellte Hypothese,

dass bei dem hier betrachteten Perowskit-Röntgendetektor keine signifikante Leistungssteigerung durch fotoleitende Verstärkung vorliegt. Die enorme Steigerung der Leistungsfähigkeit der Pixel im gefalteten Zustand verglichen mit dem planaren Zustand wird hierbei folglich maßgeblich durch eine signifikante Verbesserung der Röntgenabsorptionseffizienz η_x erreicht. An dieser Stelle sei daran erinnert, dass diese bedeutende Leistungssteigerung lediglich durch die Faltung und die damit verbundene Neuausrichtung der Pixel im Hinblick auf die einfallende Röntgenstrahlung realisiert wird. In diesem Zusammenhang ist allerdings besonders wichtig anzumerken, dass sowohl bei der Bestimmung der experimentellen Werte S_{exp} als auch bei der Simulation der theoretischen Werte $S_{\text{theo,poly}}^*$ der Füllfaktor η_{fill} nicht beachtet wird. Unter der Annahme, dass der Füllfaktor η_{fill} des hier betrachteten Perowskit-Röntgendetektors im gefalteten Zustand durch die Dimensionen des TCP-Absorbers und der PEN-Substrate dominiert wird, kann der Füllfaktor η_{fill} mithilfe der Schichtdicken des TCP-Absorbers d_{TCP} und der PEN-Substrate d_{PEN} abgeschätzt werden (siehe Abbildung 9.2 (b)) [140]: $\eta_{\text{fill}} = d_{\text{TCP}} / (4d_{\text{PEN}} + d_{\text{TCP}})$. Mit der Schichtdicke der TCP-Absorber $d_{\text{TCP}} = 6 \mu\text{m}$ und der Schichtdicke der PEN-Substrate $d_{\text{PEN}} = 25 \mu\text{m}$ ergibt sich der Füllfaktor η_{fill} des hier betrachteten Perowskit-Röntgendetektors im gefalteten Zustand zu lediglich $\eta_{\text{fill}} = 5.7\%$. Im Hinblick auf eine potentielle Kommerzialisierung gefalteter Perowskit-Röntgendetektoren ist es daher von besonderem Interesse zu erforschen, inwieweit die Schichtdicke der TCP-Absorber d_{TCP} weiter vergrößert werden kann und wie dünn in diesem Zusammenhang die flexiblen Polymer-Substrate gewählt werden können.

9.3.3 Charakterisierung der räumlichen Auflösung

Mithilfe des hier betrachteten Perowskit-Röntgendetektors kann im gefalteten Zustand potentiell eine besonders hohe räumliche Auflösung erreicht werden. In Analogie zur hohen Röntgensensitivität S basiert auch das Potential einer hohen räumlichen Auflösung auf der Neuausrichtung der Pixel im Hinblick auf die einfallende Röntgenstrahlung, welche durch die Faltung des Perowskit-Röntgendetektors erreicht werden kann (siehe Abbildung 9.1 und Abbildung 9.2). Diese Neuausrichtung bewirkt, dass der Pixelabstand x_0 und die Dimension der Pixel maßgeblich von den Schichtdicken des TCP-Absorbers d_{TCP} und der PEN-Substrate d_{PEN} abhängen. Folglich können durch die hier betrachtete Faltung ohne weitere aufwendige Fabrikationsschritte wie zum Beispiel die Fotolithographie Pixel mit einer sehr kleinen räumlichen Dimension realisiert werden. Eine kleine räumliche Dimension der Pixel ist in diesem Zusammenhang essenziell, um eine hohe räumliche Auflösung des Röntgendetektors zu ermöglichen. Wie bereits in Abschnitt 9.2 angemerkt wird, ist darüber hinaus die hierbei auftretende explizite räumliche Trennung der einzelnen Pixel vorteilhaft, da die im Pixel erzeugten Ladungsträger lediglich zur Signalinduktion in einem einzelnen Pixel beitragen können. An dieser Stelle sei darauf hingewiesen, dass sich die genannten Aspekte auf die räumliche Auflösung in einer räumlichen Dimension beziehen. Das im Rahmen dieser Arbeit betrachtete Konzept eines gefalteten Röntgendetektors ist im Hinblick auf die räumliche Auflösung folglich insbesondere für die Realisierung von Linien-Detektoren interessant.

Gemäß Abschnitt 2.2.2.2 kann die räumliche Auflösung eines Röntgendetektors mithilfe der Modulationsübertragungsfunktion (MTF, kurz für engl. modulation transfer function) charakterisiert werden.

Für den Fall, dass nur eine räumliche Dimension für die Bewertung der räumlichen Auflösung relevant ist, kann gemäß der Gleichungen (2.25) die Modulationsübertragungsfunktion MTF formal mithilfe der Kantenspreizfunktion (ESF, kurz für engl. edge spread function) wie folgt beschrieben werden: $MTF(u) = |\mathcal{F}\{d(ESF(x))/dx\}|/(\mathcal{F}\{d(ESF(x))/dx\}|_{u=0})$. Hierbei ist u die Ortsfrequenz, $\mathcal{F}\{\}$ die Fourier-Transformation und x der Ort. Die räumliche Auflösung von Pixel-basierten Röntgendetektoren wird unter anderem durch die räumliche Anordnung der Pixel und die damit verbundene räumlich diskrete Abtastung des Detektorsignals beeinflusst. Im Rahmen dieser Arbeit wird das Potential des hier betrachteten Perowskit-Röntgendetektors im Hinblick auf eine hohe räumliche Auflösung mithilfe der vor-abgetasteten (engl. presampled) Modulationsübertragungsfunktion MTF bewertet, welche gemäß der Gleichungen (2.25) mithilfe der vor-abgetasteten Kantenspreizfunktion ESF bestimmt werden kann. Bei der vor-abgetasteten MTF und ESF handelt es sich um diejenigen Größen, die sich im Hinblick auf die Signal- und Rauschbreitung in einem System vor der räumlich diskreten Abtastung des Detektorsignals ergeben. Gemäß Abschnitt 2.2.2.2 kann die Kantenspreizfunktion $ESF(x)$ im Rahmen der Systemtheorie als das ortsabhängige Ausgangssignal eines Systems für den Fall einer stufenförmigen räumlichen Verteilung des Eingangssignals definiert werden. Im vorliegenden Kapitel wird die stufenförmige Verteilung des Eingangssignals durch die Abschattung der einfallenden Röntgenstrahlung mithilfe einer Wolfram-Kante umgesetzt. Um den Einfluss der räumlich diskreten Abtastung des Detektorsignals zu eliminieren, wird die vor-abgetastete Kantenspreizfunktion ESF in diesem Kapitel mithilfe von Messungen mit einem einzelnen Pixel und einer Vielzahl unterschiedlicher Abschattungen des Pixels durch die Wolfram-Kante realisiert. Aufgrund der Abhängigkeit des gemessenen Detektorsignals im gefalteten Zustand von der Orientierung des Pixels im Hinblick auf die einfallende Röntgenstrahlung werden die Messungen hierbei für einen festen Ort des Pixels und für unterschiedliche laterale Positionen der Wolfram-Kante durchgeführt.

Abbildung 9.9 (a) zeigt die gemessene vor-abgetastete Kantenspreizfunktion ESF eines exemplarischen Pixels des Perowskit-Röntgendetektors im gefalteten Zustand in Abhängigkeit des Ortes x . Die gezeigten Datenpunkte basieren hierbei auf Messungen des Stroms I des exemplarischen Pixels unter 150 kVp Röntgenstrahlung in Verbindung mit einer variablen Abschattung des Pixels durch eine Wolfram-Kante der Dicke $d_W = 2$ mm. Für den Betrieb des Röntgendetektors wird eine SMU (siehe Abschnitt 4.2.2.3) verwendet. Die Röntgenstrahlung wird mithilfe einer Röntgenröhre unter Verwendung einer Wolfram-anode (siehe Beschreibung des Computertomographie-Labor-Messplatzes in Abschnitt 4.2.2.1) erzeugt. Für die Messungen ist die Wolfram-Kante mit einer variablen lateralen Position zwischen dem Perowskit-Röntgendetektor und der Röntgenquelle platziert. Die dargestellten Datenpunkte repräsentieren den normierten gemessenen Strom I_{norm} des exemplarischen Pixels für unterschiedliche laterale Positionen der Wolfram-Kante. Die in Abbildung 9.9 (a) dargestellten Messungen zeigen eine bedeutende Reduktion des Detektorsignals, welche sich aufgrund der Abschattung des Pixels durch die Wolfram-Kante ergibt. Der maximale Abfall des Detektorsignals tritt dabei innerhalb eines begrenzten Bereiches des Ortes x auf. Der Einfluss auf das Detektorsignal, welcher sich aufgrund der Abschattung des Pixels durch die Wolfram-Kante ergibt, zeigt sich allerdings auch außerhalb dieses lokalisierten Bereiches und erstreckt sich über den gesamten dargestellten Bereich von x . Auf der Grundlage der in Abbildung 9.9 (a) gezeigten gemessenen vor-abgetasteten Kantenspreizfunktion $ESF(x)$ kann mithilfe der Gleichungen (2.25) die vor-abgetastete Modulationsübertragungsfunktion $MTF(u)$ des hier betrachteten Perowskit-Röntgendetektors

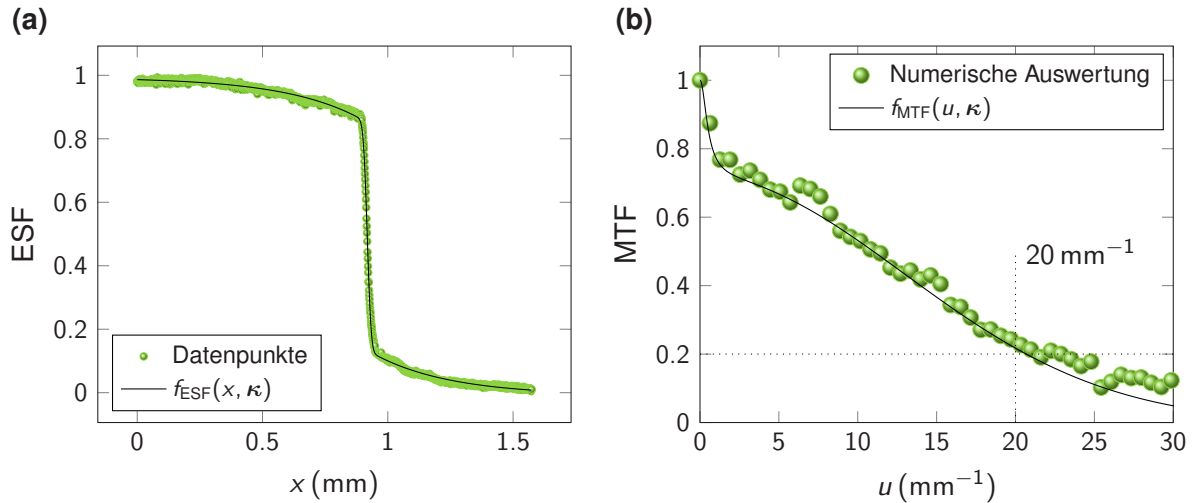


Abbildung 9.9: Kantenspreizfunktion und Modulationsübertragungsfunktion eines exemplarischen Pixels im gefalteten Zustand. (a) Vor-abgetastete (engl. presampled) Kantenspreizfunktion (ESF, kurz für engl. edge spread function) eines exemplarischen Pixels des Perowskit-Röntgendetektors im gefalteten Zustand in Abhängigkeit des Ortes x . Die gezeigten Datenpunkte basieren auf Messungen des Stroms I des exemplarischen Pixels unter 150 kVp Röntgenstrahlung in Verbindung mit einer Wolfram-Kante der Dicke $d_W = 2 \text{ mm}$ mit einer variablen lateralen Position zwischen dem Perowskit-Röntgendetektor und der Röntgenquelle. Die dargestellten Datenpunkte repräsentieren den normierten gemessenen Strom I_{norm} des exemplarischen Pixels für unterschiedliche laterale Positionen der Wolfram-Kante. Teile der Datenpunkte zu Beginn und zum Ende der Messungen fließen nicht in die Auswertung mit ein und sind daher nicht dargestellt. Im gezeigten Positionsbereich werden die lateralen Positionen der Wolfram-Kante jeweils zwei Mal erreicht, so dass die dargestellten Datenpunkte den Mittelwert aus jeweils zwei Messungen repräsentieren. Die Modellfunktion $f_{\text{ESF}}(x, \kappa)$ aus [147] ist an die Datenpunkte angepasst. Hierbei ist x die Variable und κ beschreibt die Parameter der Modellfunktion. (b) Vor-abgetastete (engl. presampled) Modulationsübertragungsfunktion (MTF, kurz für engl. modulation transfer function) des in (a) betrachteten Pixels in Abhängigkeit der Ortsfrequenz u . Die gezeigten Datenpunkte basieren auf einer numerischen Auswertung der in (a) dargestellten Datenpunkte. Die Ergebnisse der Modellfunktion $f_{\text{MTF}}(u, \kappa)$ aus [147] basieren auf dem Ergebnis der in (a) dargestellten Anpassung der Modellfunktion $f_{\text{ESF}}(x, \kappa)$ und der daraus resultierenden Parameter κ . Hierbei ist u die Variable und κ beschreibt die Parameter der Modellfunktion $f_{\text{MTF}}(u, \kappa)$. Die Ergebnisse beider Modellfunktionen $f_{\text{ESF}}(x, \kappa)$ und $f_{\text{MTF}}(u, \kappa)$ basieren auf den gleichen Werten der Parameter κ . Die Abschätzung der Ortsfrequenz u_{ref} , bei welcher die vor-abgetastete Modulationsübertragungsfunktion $\text{MTF}(u)$ einen Wert von $\text{MTF}(u_{\text{ref}}) = 0.2$ ergibt, ist zusätzlich dargestellt. Entnommen aus Mescher et al. [140] und angepasst. (Creative Commons Attribution 4.0 International License, <http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>.)

bestimmt werden. Abbildung 9.9 (b) zeigt die vor-abgetastete Modulationsübertragungsfunktion MTF des in Abbildung 9.9 (a) betrachteten Pixels in Abhängigkeit der Ortsfrequenz u . Die in Abbildung 9.9 (b) gezeigten Datenpunkte basieren hierbei auf einer numerischen Auswertung der in Abbildung 9.9 (a) dargestellten Messungen der vor-abgetasteten Kantenspreizfunktion $\text{ESF}(x)$ gemäß der Gleichungen (2.25). Zu diesem Zweck werden sowohl die Ableitung der Kantenspreizfunktion $\text{ESF}(x)$ nach dem Ort x $d(\text{ESF}(x))/dx$ als auch die Fourier-Transformation \mathcal{F} numerisch berechnet. In diesem Zusammenhang basiert die Berechnung der diskreten Fourier-Transformation auf einem in der Software *MATLAB* (MathWorks) implementierten Algorithmus zur Bestimmung einer schnellen Fourier-Transformation. Zusätzlich zur numerischen Auswertung zeigt Abbildung 9.9 die Ergebnisse zweier Modellfunktionen $f_{\text{ESF}}(x, \kappa)$ und $f_{\text{MTF}}(u, \kappa)$ aus [147], die dafür genutzt werden können, die Kantenspreizfunktion $\text{ESF}(x)$ und die Modulationsübertragungsfunktion $\text{MTF}(u)$ analytisch zu beschreiben. Dabei sind x und u die Variablen

und κ beschreibt die Parameter der Modellfunktionen. Die beiden Modellfunktionen $f_{\text{ESF}}(x, \kappa)$ und $f_{\text{MTF}}(u, \kappa)$ sind über die Parameter κ miteinander verknüpft und hierbei so ausgewählt, dass sie den mathematischen Zusammenhang in den Gleichungen (2.25) zwischen der Kantenspreizfunktion $\text{ESF}(x)$ und der Modulationsübertragungsfunktion $\text{MTF}(u)$ erfüllen. Gemäß dem in [147] beschriebenen Vorgehen wird die Modellfunktion $f_{\text{ESF}}(x, \kappa)$ in Abbildung 9.9 (a) an die gemessenen Datenpunkte angepasst. Die Ergebnisse der angepassten Modellfunktion $f_{\text{ESF}}(x, \kappa)$ und die gemessenen Datenpunkte zeigen hierbei eine akzeptable Übereinstimmung und stützen somit die getroffene Annahme, dass die für den hier betrachteten Perowskit-Röntgendetektor gemessene vor-abgetastete Kantenspreizfunktion $\text{ESF}(x)$ mithilfe der Modellfunktion $f_{\text{ESF}}(x, \kappa)$ aus [147] analytisch beschrieben werden kann. Auf der Grundlage der Parameter κ , die aus der Anpassung der Modellfunktion $f_{\text{ESF}}(x, \kappa)$ in Abbildung 9.9 (a) resultieren, ergeben sich die Ergebnisse der zugehörigen Modellfunktion $f_{\text{MTF}}(u, \kappa)$ in Abbildung 9.9 (b). Die Datenpunkte der numerischen Auswertung und die Resultate der Modellfunktion $f_{\text{MTF}}(u, \kappa)$ zeigen eine vergleichbare vor-abgetastete Modulationsübertragungsfunktion $\text{MTF}(u)$. Die Ergebnisse der numerischen Auswertung deuten in diesem Zusammenhang auf geringfügig größere Werte der vor-abgetasteten Modulationsübertragungsfunktion $\text{MTF}(u)$ hin. In Anbetracht der unterschiedlichen Ansätze, die gemessene vor-abgetastete Kantenspreizfunktion $\text{ESF}(x)$ auszuwerten, können die Abweichungen zwischen den beiden Resultaten in Abbildung 9.9 (b) allerdings als akzeptabel betrachtet werden. Die vergleichbaren Ergebnisse beider Ansätze ermöglichen vielmehr eine valide Abschätzung der räumlichen Auflösung des hier betrachteten Perowskit-Röntgendetektors. Um die räumliche Auflösung von Röntgendetektoren mithilfe der Modulationsübertragungsfunktion $\text{MTF}(u)$ auf der Grundlage eines einzelnen Wertes vergleichen zu können, wird häufig die Ortsfrequenz u_{ref} betrachtet, bei welcher die Modulationsübertragungsfunktion $\text{MTF}(u)$ einen Wert von $\text{MTF}(u_{\text{ref}}) = 0.2$ ergibt. Mithilfe der in Abbildung 9.9 (b) gezeigten Ergebnisse kann die Ortsfrequenz u_{ref} des hier betrachteten Perowskit-Röntgendetektors zu $u_{\text{ref}} \geq 20 \text{ lp mm}^{-1}$ abgeschätzt werden.

Tabelle 9.1 zeigt einen Vergleich der räumlichen Auflösung von Röntgendetektoren, die mithilfe unterschiedlicher Absorber-Materialien erreicht werden kann. Zu diesem Zweck werden in Tabelle 9.1 die Ortsfrequenz u_{ref} , das für die Charakterisierung verwendete Röntgenspektrum und die zugehörige Quelle verschiedener Absorber-Materialien aufgelistet. Der Wert für u_{ref} des hier betrachteten Perowskit-Röntgendetektors im gefalteten Zustand überschreitet hierbei deutlich die Werte für u_{ref} , die auf der Grundlage anderer Absorber-Materialien erreicht werden können. Es sei allerdings darauf hingewiesen, dass die Bestimmung von u_{ref} des hier betrachteten Perowskit-Röntgendetektors auf den in Abbildung 9.9 (b) dargestellten Ergebnissen der vor-abgetasteten Modulationsübertragungsfunktion $\text{MTF}(u)$ basiert. Wie bereits früher in diesem Abschnitt angemerkt ist, wird die tatsächlich realisierte räumliche Auflösung eines Pixel-basierten Röntgendetektors zusätzlich durch die diskrete Abtastung des Detektorsignals und damit verbundene Aliasing-Effekte beeinflusst. Inwieweit Aliasing-Effekte beachtet werden müssen, hängt im Wesentlichen von den Alias-Positionen im Hinblick auf die Ortsfrequenz u ab. Üblicherweise wird der Einfluss von Aliasing-Effekten in den Fällen als relevant bewertet, in denen die vor-abgetastete Modulationsübertragungsfunktion $\text{MTF}(u)$ bedeutende Anteile oberhalb der Grenzfrequenz u_c (c für engl. cut-off) aufweist. Die Grenzfrequenz u_c kann mithilfe des räumlichen Abstandes x_0 zwischen den Positionen, an denen das Signal abgetastet wird, definiert werden [23, Kapitel 2]: $u_c = 1/(2x_0)$. Im

Tabelle 9.1: Vergleich der räumlichen Auflösung von unterschiedlichen Absorber-Materialien. Auflistung der räumlichen Auflösung, die mithilfe unterschiedlicher Absorber-Materialien realisiert werden kann. Die räumliche Auflösung ist hierbei mithilfe der Ortsfrequenz u_{ref} angegeben, bei welcher die Modulationsübertragungsfunktion (MTF, kurz für engl. modulation transfer function) einen Wert von $\text{MTF}(u_{\text{ref}}) = 0.2$ ergibt. Das verwendete Röntgenspektrum und die zugehörige Quelle sind zusätzlich angegeben. Es werden Absorber bestehend aus MAPbBr_3 (MA, kurz für Methylammonium), CsFAGA:Sr (FA, kurz für Formamidinium und GA, kurz für Guanidinium), amorphem Se (a-Se), $\text{Cs}_2\text{AgBiBr}_6$, $\text{MA}_3\text{Bi}_2\text{I}_9$, MAPbI_3 und Dreifach-Kationen-Perowskit (TCP, kurz für engl. triple cation perovskite) betrachtet. Entnommen aus Mescher et al. [140] und angepasst. (Creative Commons Attribution 4.0 International License, <http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>.)

	u_{ref} (lp mm ⁻¹)	Röntgenspektrum	Quelle
MAPbBr_3	10	8 keV ^a	[148]
CsFAGA:Sr	8.0	nicht angegeben	[149]
a-Se	7.1	30 kVp ^b	[65]
$\text{Cs}_2\text{AgBiBr}_6$	4.9	50 kVp ^b	[150]
$\text{MA}_3\text{Bi}_2\text{I}_9$	4.22	40 kVp ^b	[151]
MAPbI_3	3.83	22 keV ^c	[152]
MAPbI_3	3.5	70 kVp ^b	[153]
MAPbI_3	3.1	100 kVp ^b	[65]
TCP	20 (vor-abgetastet)	150 kVp ^b	aus diesem Kapitel

^a Maximalenergie

^b Röhrenspannung

^c Energie bei maximaler Intensität

Fälle des hier betrachteten gefalteten Perowskit-Röntgendetektors ist der räumliche Abstand x_0 durch den Pixelabstand im gefalteten Zustand gegeben. Unter der Annahme, dass der Pixelabstand x_0 des hier betrachteten Perowskit-Röntgendetektors im gefalteten Zustand durch die Dimensionen des TCP-Absorbers und der PEN-Substrate dominiert wird, kann der Pixelabstand x_0 mithilfe der Schichtdicken des TCP-Absorbers d_{TCP} und der PEN-Substrate d_{PEN} abgeschätzt werden (siehe Abbildung 9.2 (b)) [140]: $x_0 = 4d_{\text{PEN}} + d_{\text{TCP}}$. Mit der Schichtdicke der TCP-Absorber $d_{\text{TCP}} = 6 \mu\text{m}$ und der Schichtdicke der PEN-Substrate $d_{\text{PEN}} = 25 \mu\text{m}$ kann die Grenzfrequenz u_c des hier betrachteten Perowskit-Röntgendetektors im gefalteten Zustand folglich zu $u_c = 4.7 \text{ lp mm}^{-1}$ berechnet werden. Die in Abbildung 9.9 (b) präsentierten Ergebnisse der Modulationsübertragungsfunktion $\text{MTF}(u)$ zeigen bedeutende Anteile weit oberhalb der Grenzfrequenz $u_c = 4.7 \text{ lp mm}^{-1}$. Im Falle des hier betrachteten gefalteten Perowskit-Röntgendetektors sind infolgedessen nicht zu vernachlässigende Aliasing-Effekte zu erwarten, und das Potential einer hohen räumlichen Auflösung mit $u_{\text{ref}} \geq 20 \text{ lp mm}^{-1}$ kann mit dem hier betrachteten Detektor nicht komplett genutzt werden. Für den Fall, dass der hier betrachtete gefaltete Perowskit-Röntgendetektor mithilfe der in Kapitel 7 angenommenen dünnen Polymer-Substrate mit einer Schichtdicke von $d_{\text{foil}} = 1.4 \mu\text{m}$ realisiert werden kann, ergibt sich die Grenzfrequenz u_c zu $u_c = 43.1 \text{ lp mm}^{-1}$. Unter diesen Voraussetzungen sind keine bedeutenden Aliasing-Effekte zu erwarten, und das Potential einer hohen räumlichen Auflösung kann wesentlich besser genutzt werden. Im Hinblick auf eine hohe räumliche Auflösung ist es

daher von besonderem Interesse, den Pixelabstand x_0 im gefalteten Zustand mithilfe einer Reduktion der Schichtdicke der verwendeten Substrate d_{foil} zu verringern. Inwieweit eine Reduktion des Pixelabstandes x_0 den Einfluss der Effekte der Röntgenfluoreszenz und der Röntgenstreuung auf die räumliche Auflösung verändern, ist an dieser Stelle allerdings nicht ohne weitere Untersuchungen abschließend zu beantworten.

9.3.4 Untersuchung der Röntgenstabilität

In Analogie zur Charakterisierung der experimentellen Leistungsfähigkeit in Kapitel 8 wird auch im Rahmen dieses Kapitels die Röntgenstabilität des hier betrachteten Perowskit-Röntgendetektors untersucht. Zu diesem Zweck zeigt Abbildung 9.10 (a) den gemessenen normierten Strom I_{norm} eines exemplarischen Pixels des Perowskit-Röntgendetektors im gefalteten Zustand in Abhängigkeit der Zeit t . Das Pixel wird hierbei mit einer Spannung $U = 0 \text{ V}$ betrieben und mit kontinuierlicher 150 kVp Röntgenstrahlung über einen Zeitraum $\Delta t = 19.56 \text{ h}$ bestrahlt. Für den Betrieb des Röntgendetektors wird eine

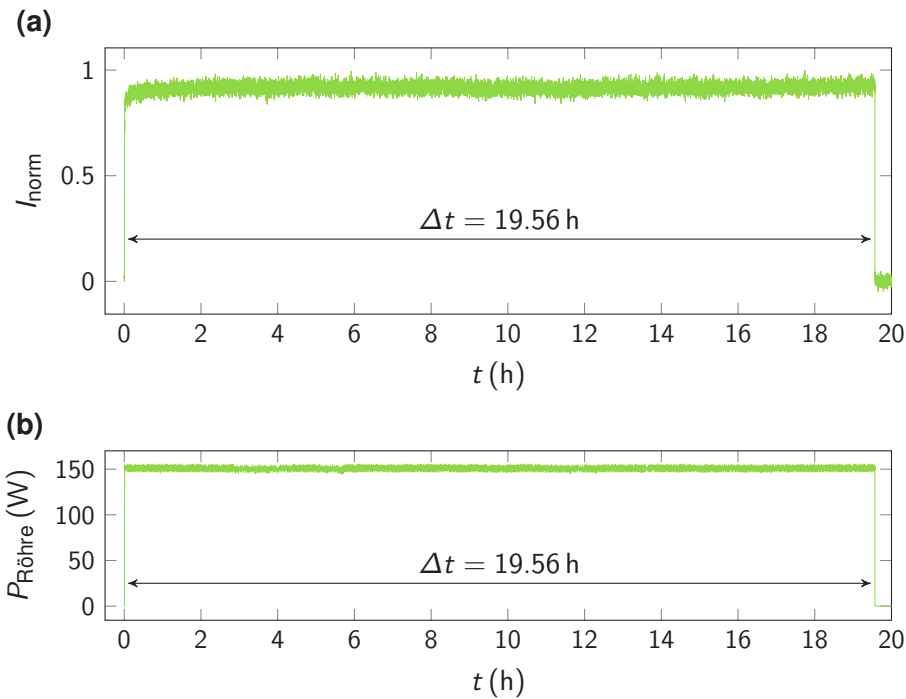


Abbildung 9.10: Zeitaufgelöstes Detektorsignal unter kontinuierlicher Röntgenbestrahlung. (a) Gemessener normierter Strom I_{norm} eines exemplarischen Pixels des Perowskit-Röntgendetektors im gefalteten Zustand in Abhängigkeit der Zeit t . Das Pixel wird mit einer Spannung $U = 0 \text{ V}$ betrieben und mit kontinuierlicher 150 kVp Röntgenstrahlung mit einer Energiedosisrate in Luft $\dot{D}_{\text{air}} = 1.8 \text{ mGy}_{\text{air}} \text{ s}^{-1}$ über einen Zeitraum $\Delta t = 19.56 \text{ h}$ bestrahlt. Die kumulative Energiedosis in Luft $D_{\text{air,tot}}$ der Röntgenstrahlung über den Zeitraum Δt ergibt sich zu $D_{\text{air,tot}} = 126.8 \text{ Gy}_{\text{air}}$. (b) Röhrenleistung $P_{\text{Röhre}}$, die zur Erzeugung der 150 kVp Röntgenstrahlung verwendet wird, in Abhängigkeit der Zeit t . Der Zeitraum Δt der Bestrahlung ist in (a) und (b) angegeben. Entnommen aus Mescher et al. [140] und angepasst. (Creative Commons Attribution 4.0 International License, <http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>.)

SMU (siehe Abschnitt 4.2.2.3) verwendet. Die Röntgenstrahlung wird mithilfe einer Röntgenröhre unter Verwendung einer Wolframanode (siehe Beschreibung des Computertomographie-Labor-Messplatzes in Abschnitt 4.2.2.1) erzeugt. Die Energiedosisrate der Röntgenstrahlung in Luft \dot{D}_{air} beträgt hierbei $\dot{D}_{\text{air}} = 1.8 \text{ mGy}_{\text{air}} \text{ s}^{-1}$. Infolgedessen ergibt sich die kumulative Energiedosis in Luft $D_{\text{air,tot}}$ der Röntgenstrahlung über den Zeitraum Δt zu $D_{\text{air,tot}} = 126.8 \text{ Gy}_{\text{air}}$. Die Messung der Energiedosisrate der Röntgenstrahlung in Luft \dot{D}_{air} wird in diesem Zusammenhang mithilfe eines Dosimeters in Verbindung mit einem Halbleiterdetektor (siehe Abschnitt 4.2.2.2) durchgeführt. Die Röhrenleistung $P_{\text{Röhre}}$, die zur Erzeugung der 150 kVp Röntgenstrahlung verwendet wird, ist zusätzlich in Abbildung 9.10 (b) in Abhängigkeit der Zeit t dargestellt. Abgesehen von einem geringfügigen Drift zu Beginn der Messung demonstriert die in Abbildung 9.10 (a) dargestellte Messung ein über den gesamten Messzeitraum im höchsten Maße stabiles Detektorsignal. In Anlehnung an die bereits in Abschnitt 8.3.5 getroffene Annahme einer Strahlenbelastung von $0.3 \text{ mGy}_{\text{air}}$ [137] bei einer Röntgenaufnahme des Brustkorbes demonstriert das in Abbildung 9.10 (a) gezeigte stabile Detektorsignal in Verbindung mit der kumulativen Energiedosis in Luft $D_{\text{air,tot}} = 126.8 \text{ Gy}_{\text{air}}$ der Röntgenstrahlung einen gefalteten Perowskit-Röntgendetektor, der für mehr als 422,000 Röntgenaufnahmen ohne Verlust der Leistungsfähigkeit verwendet werden kann. In Analogie zu Kapitel 8 werden auch in diesem Kapitel während der Charakterisierung des hier betrachteten Perowskit-Röntgendetektors unter Röntgenbestrahlung keine expliziten Vorkehrungen zum Schutz des Detektors im Hinblick auf die Umgebungsbedingungen getroffen. Die Charakterisierung des Perowskit-Röntgendetektors findet in diesem Zusammenhang ohne eine zusätzliche Verkapselung unter normalen Laborbedingungen statt. Im Gegensatz zu den in Kapitel 8 betrachteten Perowskit-Röntgendetektoren ist allerdings zu erwarten, dass die in diesem Kapitel betrachtete Faltung in Verbindung mit dem zweiten PEN-Substrat den Perowskit-Röntgendetektor vor umweltbedingten Einflussfaktoren schützt. In jedem Fall deuten die in Abbildung 9.10 dargestellten Messwerte neben einer hohen Röntgenstabilität darüber hinaus eine hohe Stabilität des hier betrachteten Perowskit-Röntgendetektors hinsichtlich umweltbedingter Einflussfaktoren an.

9.4 Zusammenfassung

In diesem Kapitel wird die Realisierung von einem gefalteten Perowskit-Röntgendetektor beschrieben. In Abschnitt 9.1 wird hierbei zunächst die grundlegende Motivation und die wissenschaftliche Zielsetzung des Kapitels erläutert. Die Herstellung eines gefalteten Perowskit-Röntgendetektors ist in diesem Zusammenhang durch die hohe Leistungsfähigkeit, die potentiell mithilfe eines gefalteten Detektor-Aufbaus erreicht werden kann, motiviert. Dieses Kapitel ist daher der Realisierung von einem gefalteten Perowskit-Röntgendetektor gewidmet. Im weiteren Verlauf des Kapitels werden aus diesem Grund im Rahmen der Abschnitte 9.2 und 9.3 in Analogie zu Kapitel 8 zwei Zwischenziele verfolgt.

In Abschnitt 9.2 werden zunächst der Aufbau und die Herstellungsmethoden erläutert, auf deren Grundlage der im Rahmen dieses Kapitels betrachtete faltbare Perowskit-Röntgendetektor realisiert wird. Die Auswahl der Materialien und der Fabrikationstechniken basiert hierbei wesentlich auf den Ergebnissen aus Kapitel 8.

In Abschnitt 9.3 wird anschließend die Leistungsfähigkeit des faltbaren Perowskit-Röntgendetektors im planaren und im gefalteten Zustand experimentell charakterisiert. Zu diesem Zweck wird der Perowskit-Röntgendetektor zunächst in unterschiedlichen Zuständen mithilfe von Strom-Spannungs-Kennlinien analysiert. In diesem Zusammenhang zeigt der Perowskit-Röntgendetektor sowohl im planaren als auch im gefalteten Zustand ein für Dioden typisches Verhalten. Der Vergleich von Strom-Spannungs-Kennlinien im planaren und gefalteten Zustand demonstriert darüber hinaus, dass der Perowskit-Röntgendetektor auch im gefalteten Zustand funktionsfähig ist. Aufgrund der ausgeprägten Hysterese, die bei der Charakterisierung mithilfe von Strom-Spannungs-Kennlinien auftritt, wird die experimentelle Leistungsfähigkeit des Perowskit-Röntgendetektors im weiteren Verlauf des Kapitels bei einer Betriebsspannung von $U = 0\text{ V}$ charakterisiert.

Die im Anschluss präsentierte Charakterisierung der experimentellen Röntgensensitivität S_{exp} mithilfe unterschiedlicher Röntgenspektren demonstriert, dass die Leistungsfähigkeit des Perowskit-Röntgendetektors allein durch die Transformation vom planaren in den gefalteten Zustand bedeutend gesteigert werden kann. Der Vergleich der experimentellen Röntgensensitivität S_{exp} mit der theoretischen Röntgensensitivität $S_{\text{theo,poly}}^*$ zeigt darüber hinaus eine akzeptable Übereinstimmung. Anders als im Falle einer Vielzahl anderer Forschungsprojekte kann somit davon ausgegangen werden, dass die hohe Leistungsfähigkeit des Perowskit-Röntgendetektors im gefalteten Zustand nicht durch eine Leistungssteigerung aufgrund von fotoleitender Verstärkung hervorgerufen wird, sondern maßgeblich durch eine signifikante Verbesserung der Röntgenabsorptionseffizienz η_{x} erreicht wird. Hierbei ist es wichtig anzumerken, dass dieses Potential einer hohen experimentellen Röntgensensitivität S_{exp} nur dann voll ausgeschöpft werden kann, wenn der Füllfaktor η_{fill} des hier betrachteten gefalteten Perowskit-Röntgendetektors signifikant verbessert wird. Eine Verbesserung des Füllfaktors η_{fill} kann dabei im wesentlichen durch dickere TCP-Absorber und dünnere Substrate erreicht werden.

Die darauf folgende Charakterisierung der räumlichen Auflösung auf der Grundlage der vor-abgetasteten Kantenspreizfunktion ESF und der vor-abgetasteten Modulationsübertragungsfunktion MTF demonstriert eine im Vergleich zu anderen Forschungsprojekten außergewöhnlich hohe potentiell realisierbare räumliche Auflösung des hier betrachteten Perowskit-Röntgendetektors. In diesem Zusammenhang sei allerdings darauf hingewiesen, dass dieses Potential einer hohen Auflösung mithilfe des hier betrachteten gefalteten Perowskit-Röntgendetektors nur dann voll ausgeschöpft werden kann, wenn die Schichtdicke des verwendeten Substrats signifikant reduziert werden kann.

Die abschließend gezeigte Untersuchung der Röntgenstabilität demonstriert ein im höchsten Maße stabiles Detektorsignal unter kontinuierlicher Röntgenbestrahlung über einen Zeitraum von mehreren Stunden. Hierbei werden keine expliziten Vorkehrungen zum Schutz des Detektors im Hinblick auf die Umgebungsbedingungen getroffen. Folglich deutet das stabile Detektorsignal neben einer hohen Röntgenstabilität darüber hinaus eine hohe Stabilität des Perowskit-Röntgendetektors hinsichtlich umweltbedingter Einflussfaktoren an.

Die Ergebnisse dieses Kapitels bilden die Grundlage für eine potentielle experimentelle Realisierung gefalteter Perowskit-Röntgendetektoren in einem größeren Maßstab mit einer Vielzahl an Pixeln.

Teile der in diesem Kapitel präsentierten Inhalte sind in Mescher, Schackmar, Huber, Eggers, Zuber, Hamann, Gramlich, Dangelmaier, Zhang, Rösch, Zwick, Hernandez-Sosa, Paetzold, and Lemmer [140] veröffentlicht. Der Hauptbeitrag dieser Veröffentlichung stammt hierbei vom Erstautor Henning Mescher. Der Erstautor Henning Mescher wurde im Rahmen der Veröffentlichung von den Co-Autoren Marcus Zuber, Elias Hamann, Julian Dangelmaier und Andres Georg Rösch in Bezug auf die theoretische Arbeit und von den Co-Autoren Fabian Schackmar, Robert Huber, Helge Eggers, Marcus Zuber, Elias Hamann, Georg Gramlich, Julian Dangelmaier und Qiaoshuang Zhang hinsichtlich der experimentellen Arbeit unterstützt. Die Co-Autoren Thomas Zwick, Gerardo Hernandez-Sosa, Ulrich W. Paetzold und Uli Lemmer haben in diesem Zusammenhang die wissenschaftliche Betreuung übernommen.

10 Zusammenfassung, Vergleich mit aktuellen Entwicklungen und Ausblick

Dieses Kapitel bildet den Schluss der vorliegenden Arbeit. Zu diesem Zweck wird im Verlauf des Kapitels zunächst eine Zusammenfassung der wesentlichen Ergebnisse dieser Arbeit präsentiert. Anschließend wird ein Vergleich mit aktuellen Entwicklungen gezogen. Abschließend werden im Rahmen eines Ausblicks potentielle Forschungsprojekte für zukünftige Untersuchungen beschrieben.

10.1 Zusammenfassung

Die inhaltlichen Schwerpunkte dieser Arbeit erstrecken sich von der Modellierung über die Simulation und das Design bis hin zu der Realisierung von gedruckten Perowskit-Röntgendetektoren. Im Fokus der Untersuchungen stehen hierbei fünf wesentliche Ziele. Jedes einzelne dieser fünf Ziele wird in Form eines Forschungsprojekts in einem einzelnen der Kapitel 5-9 behandelt. Die Beschreibung dieser Forschungsprojekte repräsentiert den Hauptteil der vorliegenden Arbeit. Die Kapitel 5-9 werden dabei von der Einleitung (Kapitel 1), den Grundlagen (Kapitel 2), den Methoden (Kapitel 3 und 4) und der Zusammenfassung, dem Vergleich mit aktuellen Entwicklungen und dem Ausblick (Kapitel 10) begleitet.

Ein bedeutender Aspekt der vorliegenden Untersuchungen besteht in der Erforschung direkter Röntgendetektoren mit einem unkonventionellen mehrschichtigen oder gefalteten Aufbau. Die Entscheidung einer potentiellen Realisierung dieser unkonventionellen Röntgendetektoren wird im Rahmen dieser Arbeit auf der Grundlage einer theoretischen Leistungsbewertung getroffen. Die Vergleichsgrundlage bildet hierbei die theoretische Leistungsfähigkeit konventioneller einschichtiger Röntgendetektoren. **Kapitel 5** behandelt daher die Simulation und das Design von einschichtigen Röntgendetektoren und ist der **Entwicklung einer Vergleichsgrundlage für die Bewertung der theoretischen Leistungsfähigkeit von mehrschichtigen und gefalteten Röntgendetektoren auf der Basis von einschichtigen Röntgendetektoren** (Ziel 1) gewidmet. Im Verlauf des Kapitels wird die theoretische Röntgensensitivität S_{theo} einschichtiger Röntgendetektoren exemplarisch im Falle zweier Absorber-Materialien optimiert. In diesem Zusammenhang werden sowohl die Absorber-Schichtdicke d als auch die Photonenenergie E variiert. Im Zuge dieser Optimierungen ergeben sich im Hinblick auf eine optimale Röntgenabsorptionseffizienz η_x und eine optimale Ladungssammeleffizienz η_{cc} gegensätzliche Designvorgaben für die Absorber-Schichtdicke d . Infolgedessen ergibt sich unter dem Gesichtspunkt einer maximalen theoretischen Röntgensensitivität S_{theo} eine materialspezifische optimale Absorber-Schichtdicke d , die darüber hinaus von der Photonenenergie E abhängt. Das verwendete Absorber-Material zeigt hierbei einen wesentlichen Einfluss auf die maximal erreichbare theoretische Röntgensensitivität S_{theo} . Anschließend werden auf der Grundlage der exemplarischen Optimierung der theoretischen Röntgensensitivität S_{theo} allgemeine Designvorgaben für einschichtige Röntgendetektoren entwickelt. Die Designvorgaben werden dabei für eine Vielzahl von unterschiedlichen Absorber-Materialien und drei anwendungsspezifische Photonenenergien $E \in \{20 \text{ keV}, 60 \text{ keV}, 511 \text{ keV}\}$ bestimmt und beinhalten die optimale Absorber-Schichtdicke d_{opt} im Hinblick auf eine maximale theoretische Röntgensensitivität S_{theo} und die theoretischen Werte für die Röntgensensitivität S_{theo} und die Detektive Quanteneffizienz $\text{DQE}(0)$. In Abhängigkeit vom Absorber-Material und von der Photonenenergie E liegen die optimalen Schichtdicken d_{opt} hierbei zum Teil deutlich über einem Millimeter. Die Realisierung von dicken Absorber-Schichten mit einer ausreichend hohen Qualität ist jedoch aufwendig und potentiell kostenintensiv.

Auf der Grundlage der Untersuchungen in **Kapitel 5** erfolgt im Anschluss in den **Kapiteln 6 und 7** die theoretische Leistungsbewertung mehrschichtiger und gefalteter Röntgendetektoren. **Kapitel 6** behandelt hierbei die Modellierung, die Simulation und das Design von mehrschichtigen Röntgendetektoren und ist der **Bewertung der theoretischen Leistungsfähigkeit von mehrschichtigen Röntgendetektoren** (Ziel 2) gewidmet. Im Verlauf des Kapitels werden zunächst die bereits bestehenden Modelle zur Simulation der Röntgensensitivität und der Detektiven Quanteneffizienz auf mehrschichtige Röntgendetektoren erweitert. Anschließend wird die Simulation und das Design mehrschichtiger Röntgendetektoren behandelt. Hierfür werden die theoretische Röntgensensitivität $S_{\text{theo,ML}}$ und die theoretische Detektive Quanteneffizienz $\text{DQE}_{\text{ML}}(0)$ mehrschichtiger Röntgendetektoren optimiert. In diesem Zusammenhang werden sowohl die Absorber-Schichtdicke d als auch die Anzahl K der Detektor-Schichten variiert, und der Einfluss des Absorber-Materials, der Photonenenergie E und der Photonenflussrate $\dot{\Phi}_0$ wird untersucht. Im Rahmen dieser Untersuchungen werden quasi-direkte Absorber, die sich aus Szintillator-Teilchen auf der Basis von Terbium-dotiertem Gadoliniumoxysulfid (GOS:Tb) und einer organischen Bulk-Heterojunction bestehend aus Poly(3-hexylthiophen-2,5-diyl) (P3HT) und Phenyl-C₆₁Buttersäuremethylester (PCBM) zusammensetzen, und direkte Absorber bestehend aus polykristallinem MAPbI₃ (p-MAPbI₃) (MA, kurz für Methylammonium) analysiert. Hierbei zeigen direkte Absorber bestehend aus dem Perowskit-Halbleiter p-MAPbI₃ im Hinblick auf die theoretische Röntgensensitivität $S_{\text{theo,ML}}$ einen eindeutigen Leistungsvorteil gegenüber quasi-direkten Absorbern auf der Basis von P3HT:PCBM:GOS:Tb. Auf der Grundlage der Optimierungen der theoretischen Röntgensensitivität $S_{\text{theo,ML}}$ und der theoretischen Detektiven Quanteneffizienz $\text{DQE}_{\text{ML}}(0)$ werden nachfolgend allgemeine Designvorgaben für mehrschichtige Röntgendetektoren entwickelt. In Analogie zu **Kapitel 5** werden die Designvorgaben hierbei für drei anwendungsspezifische Photonenenergien $E \in \{20 \text{ keV}, 60 \text{ keV}, 511 \text{ keV}\}$ bestimmt. Die Designvorgaben beinhalten die optimalen Designparameter ($d_{\text{opt}}, K_{\text{opt}}$) im Hinblick auf eine maximale theoretische Detektive Quanteneffizienz $\text{DQE}_{\text{ML}}(0)$ und die theoretischen Werte für die Röntgensensitivität $S_{\text{theo,ML}}$ sowie für die Detektive Quanteneffizienz $\text{DQE}_{\text{ML}}(0)$. Auf der Grundlage dieser Designvorgaben wird abschließend die theoretische Leistungsfähigkeit mehrschichtiger Röntgendetektoren durch einen Leistungsvergleich mit einschichtigen Röntgendetektoren bewertet. Der Vergleich der theoretischen Röntgensensitivität S_{theo} zeigt, dass mehrschichtige Röntgendetektoren eine hohe Leistungsfähigkeit auf der Grundlage von vergleichsweise einfach herzustellenden dünnen Absorber-Schichten ermöglichen. Insbesondere im Falle mittlerer und hoher Photonenenergien E ist die Leistungsfähigkeit mehrschichtiger Röntgendetektoren derart hoch, dass sie durch einschichtige Röntgendetektoren nur mit sehr dicken monokristallinen Absorbern erreicht werden kann. Die theoretische Detektive Quanteneffizienz $\text{DQE}(0)$ mehrschichtiger Röntgendetektoren liegt hingegen zum Teil deutlich unter den Werten einschichtiger Röntgendetektoren.

Kapitel 7 behandelt im Anschluss die Modellierung, die Simulation und das Design von gefalteten Röntgendetektoren und ist der **Bewertung der theoretischen Leistungsfähigkeit von gefalteten Röntgendetektoren** (Ziel 3) gewidmet. In Anlehnung an **Kapitel 6** werden hierfür zunächst die bereits bestehenden Modelle zur Simulation der Röntgensensitivität und der Detektiven Quanteneffizienz auf

gefaltete Röntgendetektoren erweitert, um darauf aufbauend die Simulation und das Design von gefalteten Röntgendetektoren behandeln zu können. Auf der Grundlage einer simulierten Variation der Schichtdicke d und der Kantenlänge l der Absorber werden hierbei die theoretische Röntgensensitivität $S_{\text{theo},f}$ und die theoretische Detektive Quanteneffizienz $\text{DQE}_f(0)$ gefalteter Röntgendetektoren optimiert. In Analogie zu **Kapitel 6** wird im Rahmen dieser Optimierungen der Einfluss des Absorber-Materials, der Photonenenergie E und der Photonenflussrate $\dot{\Phi}_0$ untersucht. Übereinstimmend mit den Ergebnissen aus **Kapitel 6** zeigen auch gefaltete Röntgendetektoren hinsichtlich der theoretischen Röntgensensitivität $S_{\text{theo},f}$ einen eindeutigen Leistungsvorteil von direkten Absorbern bestehend aus dem Perowskit-Halbleiter p-MAPbI₃ gegenüber quasi-direkten Absorbern auf der Basis von P3HT:PCBM:GOS:Tb. Dem Vorgehen in **Kapitel 6** entsprechend werden auf der Grundlage der Optimierungen der theoretischen Röntgensensitivität $S_{\text{theo},f}$ und der theoretischen Detektiven Quanteneffizienz $\text{DQE}_f(0)$ anschließend allgemeine Designvorgaben für gefaltete Röntgendetektoren entwickelt. In Analogie zu den **Kapiteln 5 und 6** beziehen sich die Designvorgaben hierbei auf drei anwendungsspezifische Photonenenergien $E \in \{20 \text{ keV}, 60 \text{ keV}, 511 \text{ keV}\}$. Die Designvorgaben beinhalten die optimalen Designparameter $(d_{\text{opt}}, l_{\text{opt}})$ hinsichtlich einer maximalen theoretischen Detektiven Quanteneffizienz $\text{DQE}_f(0)$ und die theoretischen Werte für die Röntgensensitivität $S_{\text{theo},f}$ sowie für die Detektive Quanteneffizienz $\text{DQE}_f(0)$. Basierend auf diesen Designvorgaben wird abschließend die theoretische Leistungsfähigkeit gefalteter Röntgendetektoren durch einen Leistungsvergleich mit einschichtigen und mehrschichtigen Röntgendetektoren bewertet. Der Vergleich der theoretischen Röntgensensitivität S_{theo} gefalteter und einschichtiger Röntgendetektoren demonstriert, dass neben mehrschichtigen auch gefaltete Röntgendetektoren eine hohe Leistungsfähigkeit auf der Grundlage von vergleichsweise einfach herzustellenden dünnen Absorber-Schichten ermöglichen. In diesem Zusammenhang zeigt sich, dass die theoretische Röntgensensitivität $S_{\text{theo},f}$ gefalteter Röntgendetektoren geringfügig unter der Leistungsfähigkeit mehrschichtiger Röntgendetektoren liegt. Im Hinblick auf die theoretische Detektive Quanteneffizienz $\text{DQE}(0)$ zeigen gefaltete Röntgendetektoren verglichen mit mehrschichtigen Röntgendetektoren überdies ebenfalls eine reduzierte Leistungsfähigkeit, die folglich auch unter der Leistungsfähigkeit einschichtiger Röntgendetektoren angesiedelt ist. Gefaltete Röntgendetektoren besitzen hingegen darüber hinaus durch das Potential einer besonders hohen räumlichen Auflösung ein bedeutendes Alleinstellungsmerkmal gegenüber einschichtigen und mehrschichtigen Röntgendetektoren.

Basierend auf den Ergebnissen der theoretischen Untersuchungen in den **Kapiteln 5, 6 und 7** in Verbindung mit dem zusätzlichen Potential gefalteter Röntgendetektoren, eine besonders hohe räumliche Auflösung zu ermöglichen, liegt der Hauptfokus von **Kapitel 8** an in der Realisierung gefalteter Perowskit-Röntgendetektoren. In einem ersten Schritt ist **Kapitel 8** daher der **Realisierung von mechanisch flexiblen Röntgendetektoren mit strukturierten Perowskit-Absorbern** (Ziel 4) gewidmet. Im Verlauf des Kapitels wird zunächst demonstriert, mit welchem Aufbau, auf der Grundlage welcher Materialien und mithilfe welcher Herstellungsmethoden mechanisch flexible Perowskit-Röntgendetektoren experimentell realisiert werden können. Anschließend wird die Leistungsfähigkeit der Perowskit-Röntgendetektoren charakterisiert. In dieser Hinsicht wird zunächst gezeigt, dass die experimentelle Röntgensensitivität

S_{exp} der hier betrachteten flexiblen Perowskit-Röntgendetektoren im Hinblick auf andere flexible direkte Röntgendetektoren im höchsten Maße konkurrenzfähig ist, und zusätzlich gut mit der theoretischen Röntgensensitivität $S_{\text{theo,poly}}$ übereinstimmt. Anschließend wird demonstriert, dass sich im Hinblick auf die Dunkelstromdichte J_d Löcher-Transportschichten bestehend aus NiO_x verglichen mit Poly-(3,4-ethyldioxythiophen)-poly-(styrolsulfonat) (PEDOT:PSS) bedeutend besser für die Realisierung der hier betrachteten Perowskit-Röntgendetektoren eignen. Darüber hinaus wird hinsichtlich der mechanischen Flexibilität aufgezeigt, dass die hier betrachteten flexiblen Röntgendetektoren sowohl in gebogenen Zuständen mit unterschiedlichen Biegeradien als auch nach einer Vielzahl an Biegezyklen mit einem Biegeradius funktionsfähig sein können. Weiterhin wird im Hinblick auf die Röntgenstabilität ein Perowskit-Röntgendetektor bestehend aus einer NiO_x Löcher-Transportschicht mit einer außergewöhnlich stabilen Leistungsfähigkeit unter wiederholter Röntgenbestrahlung demonstriert. Außerdem wird mithilfe weiterer Untersuchungen abschließend gezeigt, dass sich die hier betrachteten Perowskit-Röntgendetektoren für die Bildgebung mit Röntgenstrahlung eignen. Diese vielversprechenden experimentellen Ergebnisse bilden die Grundlage dafür, weitere wichtige Anwendungsfelder mithilfe mechanisch flexibler Perowskit-Röntgendetektoren zu erschließen (siehe Abschnitt 10.3).

Auf der Grundlage der Ergebnisse der Untersuchungen in **Kapitel 8** ist abschließend **Kapitel 9** der **Realisierung von einem gefalteten Perowskit-Röntgendetektor** (Ziel 5) gewidmet. Im Verlauf des Kapitels werden zunächst der Aufbau und die Herstellungsmethoden erläutert, auf deren Grundlage ein faltbarer Perowskit-Röntgendetektor realisiert werden kann. Anschließend wird die Leistungsfähigkeit des faltbaren Perowskit-Röntgendetektors im planaren und im gefalteten Zustand experimentell charakterisiert. In dieser Hinsicht wird zunächst mithilfe von Strom-Spannungs-Kennlinien sowohl im planaren als auch im gefalteten Zustand ein für Dioden typisches Verhalten demonstriert. Anschließend wird durch die Charakterisierung der experimentellen Röntgensensitivität S_{exp} aufgezeigt, dass die Leistungsfähigkeit des Perowskit-Röntgendetektors allein durch die Transformation vom planaren in den gefalteten Zustand bedeutend gesteigert werden kann. Auf der Grundlage einer akzeptablen Übereinstimmung zwischen der experimentellen Röntgensensitivität S_{exp} und der theoretischen Röntgensensitivität $S_{\text{theo,poly}}^*$ kann in diesem Zusammenhang davon ausgegangen werden, dass die hohe Leistungsfähigkeit des Perowskit-Röntgendetektors im gefalteten Zustand, anders als in einer Vielzahl anderer Forschungsprojekte, nicht durch eine Leistungssteigerung aufgrund von fotoleitender Verstärkung hervorgerufen wird, sondern maßgeblich durch eine signifikante Verbesserung der Röntgenabsorptionseffizienz η_x erreicht wird. Weiterhin wird basierend auf der Charakterisierung der vor-abgetasteten Kantenspreizfunktion ESF und der vor-abgetasteten Modulationsübertragungsfunktion MTF eine im Vergleich zu anderen Forschungsprojekten außergewöhnlich hohe potentiell realisierbare räumliche Auflösung des gefalteten Perowskit-Röntgendetektors aufgezeigt. Abschließend wird im Hinblick auf die Röntgenstabilität ein im höchsten Maße stabiles Detektorsignal unter kontinuierlicher Röntgenbestrahlung über einen Zeitraum von mehreren Stunden präsentiert. Auf der Grundlage dieser Erfolg versprechenden Ergebnisse können gefaltete

Perowskit-Röntgendetektoren in einem größeren Maßstab erforscht werden. In dieser Hinsicht sind konzeptionelle Erweiterungen und eine Weiterentwicklung und Optimierung der Herstellung von gefalteten Röntgendetektoren besonders interessant (siehe Abschnitt 10.3).

10.2 Vergleich mit aktuellen Entwicklungen

Ein bedeutendes Leistungsmerkmal des in Kapitel 9 betrachteten gefalteten Perowskit-Röntgendetektors besteht in einer hohen experimentellen Röntgensensitivität S_{exp} . Unter Verwendung von Dreifach-Kationen-Perowskit-Absorbern mit einer Schichtdicke von $d = 6 \mu\text{m}$ und einer angestrebten Zusammensetzung von $\text{Cs}_{0.1}(\text{FA}_{0.83}\text{MA}_{0.17})_{0.9}\text{Pb}(\text{Br}_{0.17}\text{I}_{0.83})_3$ (FA, kurz für Formamidinium) konnte hierbei im gefalteten Zustand mithilfe einer Betriebsspannung von $U = 0 \text{ V}$ eine experimentelle Röntgensensitivität S_{exp} von bis zu $1,409 \mu\text{C Gy}_{\text{air}}^{-1} \text{ cm}^{-2}$ unter 150 kVp Röntgenstrahlung nachgewiesen werden.

Der Stand der Technik von Perowskit-Röntgendetektoren hat sich seit der Durchführung des in Kapitel 9 beschriebenen Forschungsprojekts beständig weiterentwickelt. Im Rahmen aktueller Forschungsarbeiten werden dabei unterschiedliche Ansätze verfolgt, um hochleistungsfähige Perowskit-Röntgendetektoren herzustellen. Ein Schwerpunkt der aktuellen Forschung liegt hierbei auf Perowskit-Röntgendetektoren mit dünnen Absorber-Schichten [154, 155]. Auf der Grundlage von mit Stärke kombinierten $\text{FA}_{0.6}\text{MA}_{0.4}\text{PbI}_3$ Perowskit-Absorbern der Schichtdicke $d = 1,050 \text{ nm}$ konnten Verdi et al. [154] unter Verwendung einer Betriebsspannung von $U = 0 \text{ V}$ eine experimentelle Röntgensensitivität S_{exp} von $5.5 \mu\text{C Gy}^{-1} \text{ cm}^{-2}$ unter 40 kVp Röntgenstrahlung realisieren. Shabbir et al. [155] wiesen in diesem Zusammenhang eine bedeutend höhere experimentelle Röntgensensitivität S_{exp} von $6 \times 10^4 \mu\text{C Gy}^{-1} \text{ cm}^{-2}$ auf der Basis von Perowskit-Absorbern mit einer Zusammensetzung von $\text{Cs}_{0.1}\text{FA}_{0.9}\text{PbI}_3$ und einer Schichtdicke von $d = 800 \text{ nm}$ nach.

Ein weiterer Schwerpunkt aktueller Untersuchungen liegt auf Perowskit-Röntgendetektoren mit Absorbern bestehend aus Perowskit-Wafern, die durch Pressen hergestellt werden können [156, 157]. Wang et al. [156] konnten dabei unter Verwendung eines $\delta\text{-FAPbI}_3$ Perowskit-Wafers mit einer Schichtdicke von $d = 0.8 \text{ mm}$ eine experimentelle Röntgensensitivität S_{exp} von $590.6 \mu\text{C Gy}_{\text{air}}^{-1} \text{ cm}^{-2}$ unter 50 kVp Röntgenstrahlung verwirklichen. Auf der Grundlage eines mit Ethylendiamin Dihydroiodid kombinierten MAPbI_3 Perowskit-Wafers der Schichtdicke $d \approx 400 \mu\text{m}$ konnten Chai et al. [157] in dieser Hinsicht eine experimentelle Röntgensensitivität S_{exp} von $8,291.22 \mu\text{C Gy}_{\text{air}}^{-1} \text{ cm}^{-2}$ mithilfe einer Betriebsspannung von $U = 10 \text{ V}$ realisieren.

Darüber hinaus werden in aktuellen Forschungsarbeiten Perowskit-Röntgendetektoren mit monokristallinen Perowskit-Absorbern untersucht [158, 159, 160, 161]. In diesem Zusammenhang konnten Tao et al. [158] auf der Grundlage eines monokristallinen FAPbBr_3 Perowskit-Absorbers mit einer Schichtdicke von $d = 0.9 \text{ mm}$ eine experimentelle Röntgensensitivität S_{exp} von $402 \mu\text{C Gy}_{\text{air}}^{-1} \text{ cm}^{-2}$ unter Verwendung einer Betriebsspannung von $U = 0 \text{ V}$ realisieren. Auf der Basis eines Perowskit-Absorbers bestehend aus monokristallinem MAPbBr_3 der Schichtdicke $d = 5 \text{ mm}$ demonstrierten Qiu et al. [159] überdies eine experimentelle Röntgensensitivität S_{exp} von $1,030 \mu\text{C Gy}_{\text{air}}^{-1} \text{ cm}^{-2}$. Des Weiteren konnten Pan et al. [160]

mithilfe eines monokristallinen CsPbBr_3 Perowskit-Absorbers der Schichtdicke $d = 2.2 \text{ mm}$ eine experimentelle Röntgensensitivität S_{exp} von $13,734 \mu\text{C Gy}_{\text{air}}^{-1} \text{ cm}^{-2}$ unter Verwendung einer Betriebsspannung von $U = 50 \text{ V}$ verwirklichen. Ferner präsentierten Chen et al. [161] einen Perowskit-Röntgendetektor mit einem monokristallinen CsPbBr_3 Perowskit-Absorber und einer experimentellen Röntgensensitivität S_{exp} von $7.3 \times 10^4 \mu\text{C Gy}_{\text{air}}^{-1} \text{ cm}^{-2}$ unter 30 kVp Röntgenstrahlung bei einer Betriebsspannung von $U = 100 \text{ V}$.

10.3 Ausblick

In dieser Arbeit werden fünf wesentliche Ziele mit unterschiedlichen inhaltlichen Schwerpunkten erreicht. Bedingt durch das breite Spektrum behandelter Themengebiete sind im Zuge der vorliegenden Untersuchungen eine Vielzahl an weiteren wissenschaftlichen Fragestellungen entstanden. Einige ausgewählte potentielle Forschungsprojekte, die sich aus diesen Fragestellungen ableiten lassen, werden im Folgenden beschrieben.

Erschließung weiterer Anwendungsfelder Auf der Grundlage der in den vorliegenden Untersuchungen demonstrierten mechanischen Flexibilität der Perowskit-Röntgendetektoren können interessante Anwendungsgebiete erschlossen werden. Eine mögliche Weiterentwicklung besteht hierbei darin, die Fabrikation auf mechanisch flexiblen Polymer-Substraten dafür zu nutzen, widerstandsfähige Röntgendetektoren mit einem geringen Gewicht herzustellen, die für die Röntgenbildgebung in schwer zugänglichen Gebieten genutzt werden können. Die mechanische Flexibilität ermöglicht darüber hinaus die Entwicklung von Röntgendetektoren, die an nicht planare Oberflächen angepasst werden können. Eine potentielle Anwendung besteht in diesem Zusammenhang in der zeitaufgelösten Charakterisierung der Strahlenbelastung der Haut zur Sicherstellung der planmäßigen Bestrahlung im Rahmen strahlentherapeutischer Behandlungen mit Photonen [162, Kapitel 26]. Ein weiteres potentielles Anwendungsfeld betrifft die Art der Strahlung, die mithilfe der hier betrachteten Bauteile detektiert wird. Im Fokus der Untersuchungen der vorliegenden Arbeit liegt die Detektion von Röntgenphotonen. Eine interessante Fragestellung besteht diesbezüglich darin, inwieweit sich die hier betrachteten Detektoren für die Detektion von Teilchenstrahlung eignen. Ein mögliches Anwendungsfeld liegt in dieser Hinsicht in der Ionenstrahl-Therapie [163], die auf der Tumorbehandlung mit beschleunigten Protonen oder Schwerionen basiert.

Konzeptionelle Erweiterungen von gefalteten Röntgendetektoren Neben der Erschließung zusätzlicher Anwendungsfelder bieten Erweiterungen des grundlegenden Konzepts gefalteter Röntgendetektoren weiteren Raum für mögliche Forschungsprojekte. Ein wichtiger Aspekt betrifft diesbezüglich die Pixelstruktur gefalteter Röntgendetektoren. Die Untersuchungen in der vorliegenden Arbeit beziehen sich im Hinblick auf die räumliche Auflösung gefalteter Röntgendetektoren im Wesentlichen auf eine räumliche Dimension. Eine bedeutende Fragestellung besteht in diesem Zusammenhang darin, inwieweit eine zweidimensionale räumliche Auflösung durch eine Erweiterung der Pixelstruktur erreicht werden

kann. Während die räumliche Anordnung der Pixel der hier betrachteten gefalteten Röntgendetektoren in einer Dimension durch die Faltung hervorgerufen wird, muss die Pixelstruktur in der zweiten Dimension mittels strukturierender Herstellungsmethoden erzeugt werden. Eine mögliche Realisierung basiert hierbei auf Elektroden, die in der zweiten Dimension strukturiert sind. In Anlehnung an [96] besteht ein weiterer interessanter Ansatz in einer zusätzlichen Pixelstruktur entlang der Ausbreitungsrichtung der auftreffenden Röntgenphotonen. Eine solche zusätzliche Pixelstruktur bietet in Verbindung mit einer entsprechenden variablen elektrischen Verschaltung der einzelnen Pixelsegmente die Möglichkeit, den aktiven Bereich des Detektors im Hinblick auf die Ausbreitungsrichtung der Röntgenphotonen an unterschiedliche Anwendungen mit unterschiedlichen Photonenenergien anzupassen. Eine Pixelstruktur entlang der Ausbreitungsrichtung der auftreffenden Photonen ermöglicht darüber hinaus Untersuchungen hinsichtlich der Fragestellung, ob ein tiefenabhängiges Signalauslesen dafür verwendet werden kann, spektrale Informationen über die Röntgenphotonen zu erhalten. Ein weiteres interessantes Forschungsprojekt besteht in diesem Zusammenhang darin, zu untersuchen, ob die betrachteten gefalteten Röntgendetektoren durch die Verwendung einer geeigneten Auslese-Elektronik für die Einzelphotonen-Detektion [12] verwendet werden können.

Weiterentwicklung und Optimierung der Herstellung von gefalteten Röntgendetektoren

Zusätzlich zu den bereits genannten Aspekten können im Hinblick auf die Herstellung von gefalteten Röntgendetektoren weitere potentielle Forschungsprojekte abgeleitet werden. Eine wichtige Fragestellung betrifft dabei die Skalierbarkeit des Herstellungsprozesses und somit die Möglichkeit gefaltete Detektoren mit einer größeren Anzahl an Pixeln zu realisieren. Ein möglicher Ansatz, die Skalierbarkeit zu fördern, basiert hierbei darauf, alle verwendeten Material-Schichten mithilfe von digitalen Druckverfahren zu fabrizieren. In diesem Zusammenhang können die Erfolg versprechenden Ergebnisse eines Forschungsprojekts [141] von Fabian Schackmar und Helge Eggers genutzt werden, in welchem sowohl der Perowskit-Absorber als auch die Transportschichten mittels digitalem Tintenstrahldruck hergestellt wurden. Ein weiterer bedeutender Aspekt hinsichtlich der Skalierbarkeit des Herstellungsprozesses besteht darin, zu erforschen, wie die Faltung des Perowskit-Röntgendetektors automatisiert werden kann. Im Hinblick auf eine signifikant höhere Anzahl an Pixeln ist darüber hinaus eine Weiterentwicklung der Signal-Auslese wünschenswert. Ein möglicher Ansatz beruht diesbezüglich darauf, die vielversprechenden Ergebnisse hinsichtlich der Realisierung von einem organischen Dünnschichttransistoren Array auf einem flexiblen Substrat mittels digitalem Tintenstrahldruck [164] in Verbindung mit den hier betrachteten gefalteten Perowskit-Röntgendetektoren zu verwenden. Neben der Skalierbarkeit und der Weiterentwicklung der Signal-Auslese betrifft ein weiteres potentiell Forschungsprojekt die Optimierung der Leistungsfähigkeit der betrachteten gefalteten Perowskit-Röntgendetektoren. Diesbezüglich haben insbesondere eine Verringerung der Substrat-Schichtdicke und eine Vergrößerung der Absorber-Schichtdicke das Potential die Leistungsfähigkeit signifikant zu steigern.

A Anhang zu Kapitel 8

Tabelle A.1: Experimentelle Details zur Herstellung der in Kapitel 8 untersuchten Röntgendetektoren.

Schicht	Experimentelle Details
Unelastisches Substrat	<p><u>Substrat- und Elektroden-Material</u> - Glas-Substrate beschichtet mit ITO-Elektroden (Luminescence Technology), ITO-Elektroden bereits strukturiert.</p> <p><u>Reinigung</u> - Ultraschallbad mit Aceton (10 min) und Isopropanol (10 min).</p> <p><u>Weitere Behandlung</u> - Sauerstoffplasma (2 min).</p>
Flexibles Substrat	<p><u>Substrat-Material</u> - PEN Folien (Teonex Q51), Schichtdicke: 25 μm.</p> <p><u>Reinigung</u> - Spülung mit Isopropanol.</p> <p><u>Zusätzliche unelastische Substrate für PEN Folien</u> - Glas-Substrate beschichtet mit PDMS (Sylgard 184 Silicone Elastomer, Dow).</p> <p><u>Weitere Behandlung</u> - Sauerstoffplasma (0.1 min).</p> <p><u>Herstellung Elektroden</u> - Rotationsbeschichtung (c-PEDOT:PSS (Clevios F HC Solar, Heraeus), 80 μL, 30 s, 1000 rpm, Schichtdicke bei Herstellung auf Glas: $\approx 346 \text{ nm}$) mit c-PEDOT:PSS, Erhitzen bei 100 $^{\circ}\text{C}$ (10 min), Strukturierung mit hochreinen Tupfern.</p>
Löcher-Transportschicht	<p><u>Herstellung PEDOT:PSS</u> - Rotationsbeschichtung (PEDOT:PSS (Clevios P VP Al 4083, Heraeus) verdünnt mit entionisiertem Wasser (Verhältnis 1:1), 100 μL, 45 s, 4000 rpm, Schichtdicke bei Herstellung auf Glas: $\approx 19 \text{ nm}$) mit PEDOT:PSS, Erhitzen bei 150 $^{\circ}\text{C}$ (15 min), Flexible PEN Folien beschichtet mit c-PEDOT:PSS: zusätzlich Sauerstoffplasma (0.1 min) vor Rotationsbeschichtung.</p> <p><u>Herstellung NiO_x</u> - Sputtern (Schichtdicke: 20 nm, Prozessdruck: 1 mTorr, Prozessgas: Ar, 100 W, rf-Bedingungen, NiO Target (Kurt J. Lesker Company, 99.995% metallische Reinheit), Basisdruck $< 10^{-7} \text{ mTorr}$, ohne aktive Kühlung/Heizung des Substrats) von NiO_x mit einem Pro Line PVD75 (Kurt J. Lesker Company).</p>

Absorber	<p><u>Herstellung Lösung A</u> - MABr (GreatCell, 0.12 M), FAI (GreatCell, 0.6 M), PbBr₂ (TCI, 0.12 M) und PbI₂ (TCI, 0.66 M) gelöst in <i>N,N</i>-Dimethylformamid (DMF), Dimethylsulfoxid (DMSO), und γ-Butyrolacton (Volumenverhältnis 260:280:460).</p> <p><u>Herstellung Lösung B</u> - CsI (Alfa Aesar, 1.5 M) gelöst in DMSO.</p> <p><u>Herstellung TCP-Tinte</u> - Kombination von Lösung A und Lösung B, Zielzusammensetzung: 0.75 M und Cs_{0.1}(FA_{0.83}MA_{0.17})_{0.9}Pb(Br_{0.17}I_{0.83})₃.</p> <p><u>Herstellung TCP</u> - Filtrierung TCP-Tinte mit Polytetrafluorethylen (PTFE, Porengröße 0.45 μm) Filter, Tintenstrahldruck (TCP-Tinte, Umgebungstemperatur: $\approx 22^\circ\text{C}$, relative Umgebungsluftfeuchtigkeit: $\approx 45\%$, 2000 dpi, 2000 Hz, Einzelpuls-Wellenform (Spitzenspannung: 35 V, Pulsweite: 3 μs)) von TCP mit einem Pixdro LP50 (Meyer Burger) in Verbindung mit einem Druckkopfmodul für DMC-11610 (Fujifilm Dimatix) Kartuschen, Behandlung in Vakuumkammer (Pfeiffer Vacuum, $\approx 5 \cdot 10^{-2}$ mbar) (20 min), Erhitzen bei 100°C (1 h).</p>
Elektronen-Transportschicht	<p><u>Herstellung C₆₀ und BCP</u> - Thermisches Verdampfen von 25 nm C₆₀ (Alfa Aesar) und 3 nm BCP (Luminescence Technology).</p>
Obere Elektrode	<p><u>Herstellung Au</u> - Thermisches Verdampfen von ≈ 60 nm Au in Verbindung mit Schattenmasken, Aktive Fläche A_{aktiv} unelastische Detektoren: 0.105 cm², Aktive Fläche A_{aktiv} flexible Detektoren: 0.114 cm².</p>

B Anhang zu Kapitel 9

Tabelle B.1: Experimentelle Details zur Herstellung des in Kapitel 9 untersuchten Röntgendetektors.

Schicht	Experimentelle Details
Substrat	<p><u>Substrat-Material</u> - PEN Folie (Teonex Q51), Schichtdicke: 25 μm.</p> <p><u>Herstellung Faltlinien</u> - Gravur von Faltlinien in PEN Folie mittels Laserstrukturierung mit einem LPKF ProtoLaser R4.</p> <p><u>Reinigung</u> - Spülung mit Isopropanol, Ultraschallbad mit Aceton (10 min) und Isopropanol (10 min).</p> <p><u>Zusätzliches weniger elastisches Substrat</u> - PEN Substrat (Teonex), Schichtdicke: 125 μm.</p>
Untere Elektrode	<u>Herstellung Au</u> - Thermisches Verdampfen von $\approx 75 \text{ nm}$ Au.
Löcher-Transportschicht	<u>Herstellung NiO_x</u> - Sputtern (Schichtdicke: 15 nm, Abscheidungszeit: 450 s, Prozessdruck: $1.3 \times 10^{-3} \text{ mbar}$, Prozessgas: Ar, 100 W, rf-Bedingungen, NiO Target (Kurt J. Lesker Company, 99.995 % metallische Reinheit), Basisdruck: $< 10^{-7} \text{ mbar}$, ohne aktive Kühlung/Heizung des Substrats) von NiO _x mit einem Pro Line PVD75 (Kurt J. Lesker Company).
Absorber	<u>Herstellung TCP</u> - Tintenstrahldruck (TCP-Tinte, angestrebte Zusammensetzung: Cs _{0.1} (FA _{0.83} MA _{0.17}) _{0.9} Pb(Br _{0.17} I _{0.83}) ₃ , Beschreibungen des verwendeten Druckverfahrens finden sich unter anderem in [141, 142], zusätzlicher Tintenbestandteil: 2.4 vol% L- α -phosphatidylcholin (Sigma Aldrich) Lösung (0.5 mg mL ⁻¹ gelöst in Dimethylsulfoxid (DMSO)), Druckfrequenz: 2 – 5 kHz, Druckauflösung: 2000 dpi) von TCP.
Elektronen-Transportschicht	<u>Herstellung C₆₀ und BCP</u> - Thermisches Verdampfen von 25 nm C ₆₀ (Sigma Aldrich 99.5 %) und 3 nm BCP (Luminescence Technology).
Obere Elektrode	<u>Herstellung Au</u> - Thermisches Verdampfen von $\approx 75 \text{ nm}$ Au.

Elektrische Verbindungslinien *Herstellung Ag* - Aerosolstrahldruck (4 Lagen, Ag Dispersionstinte (Sigma Aldrich, 736481), Ultrasonic Decathlon (UA) System, Druckgeschwindigkeit: 1 mm s^{-1} , Durchmesser Druckkopfdüsenöffnung: $600 \mu\text{m}$, Durchflussrate Hüllgas (engl. sheath gas flow rate): 200 sccm, Durchflussrate Vernebler (engl. atomizer flow rate): 100 sccm, Addback-Lösemittel (engl. addback solvent): Triethylenglykol-monomethylether (TGME), Temperatur Addback-Lösemittel (engl. addback solvent temperature): 29°C , Temperatur Kartusche: 29°C , Ultraschallleistung: 530 mA, Temperatur Druck-Plattform: 100°C) von Ag mit einem Aerosol Jet 5X System (Optomec, Inc.).

Nachbehandlung Ag - Photonisches Sintern (Spannung: 350 V, Pulsdauer: $200 \mu\text{s}$, Wiederholzahl: 150, Feuerrate: 2.0 Hz) von Ag mit einem Pulseforge 1200 (Novacentrix).

Abbildungsverzeichnis

1.1	Überblick über die wesentlichen Ziele dieser Arbeit.	4
2.1	Schematische Darstellung des Funktionsprinzips einer Röntgenröhre.	10
2.2	Schematische Darstellung zur Beschreibung der Wechselwirkungskoeffizienten von Photonen.	13
2.3	Wechselwirkungskoeffizienten als Funktion der Photonenenergie.	15
2.4	Einordnung direkter Röntgendetektoren im Hinblick auf unterschiedliche Konzepte zur Strahlungsdetektion.	18
2.5	Aufbau und Funktionsprinzip indirekter und direkter Röntgendetektoren.	19
2.6	Parallele Zwei-Leiter-Geometrie.	21
2.7	Schematische Darstellung eines allgemeinen und eines linearen verschiebungsinvarianten Systems.	23
2.8	Ideale kubische Perowskit-Kristallstruktur.	27
3.1	Grundlegender Aufbau eines einschichtigen direkten Röntgendetektors.	32
3.2	Aufbau des Röntgendetektors und Tiefenabhängigkeit der Photonenfluenz, Energiefluenz und Ladungsträgerdichten im Absorber.	33
3.3	Drift der Elektronen und Löcher im elektrischen Feld.	36
3.4	Blockdiagramm des linearen Systems zur Modellierung der Signal- und Rauschausbreitung in einschichtigen Röntgendetektoren.	40
4.1	Fotografie von einem der verwendeten Tintenstrahldrucker.	48
4.2	Fotografien (a) des verwendeten Aerosolstrahldruckers und (b) der verwendeten Anlage für das photonische Sintern.	50
4.3	Fotografie der verwendeten Anlage für die Laserstrukturierung.	53
4.4	Fotografien des Detektor-Labor-Messplatzes.	57
4.5	Fotografien des Computertomographie-Labor-Messplatzes.	57
4.6	Fotografie des verwendeten Dosimeters und des verwendeten Halbleiterdetektors.	58
5.1	Grundlegender Aufbau für die Simulation einschichtiger Röntgendetektoren.	61
5.2	Simulierte Röntgenabsorptionseffizienz einschichtiger Röntgendetektoren.	64
5.3	Simulierte Ladungssammeleffizienz einschichtiger Röntgendetektoren.	65
5.4	Simuliertes Produkt aus der Normierung und der Konversionseffizienz einschichtiger Röntgendetektoren.	66
5.5	Theoretische Röntgensensitivität einschichtiger Röntgendetektoren.	67
6.1	Grundlegender Aufbau einschichtiger und mehrschichtiger Röntgendetektoren.	75
6.2	Simulierte Röntgensensitivität mehrschichtiger Röntgendetektoren im Falle von quasi-direkten und direkten Absorbern.	83

6.3	Simulierte Röntgensensitivität mehrschichtiger Röntgendetektoren im Falle von direkten Absorbern bestehend aus polykristallinem MAPbI ₃ mit verschlechterten Ladungstransporteigenschaften.	85
6.4	Simulierte Röntgensensitivität mehrschichtiger Röntgendetektoren im Falle von niedrigen und hohen Photonenenergien.	87
6.5	Simulierte Detektive Quanteneffizienz mehrschichtiger Röntgendetektoren im Falle von hohen und niedrigen Photonenfluenzraten.	88
6.6	Simulierte Detektive Quanteneffizienz mehrschichtiger Röntgendetektoren im Falle von niedrigen und hohen Photonenenergien.	90
6.7	Vergleich der theoretischen Röntgensensitivität mehrschichtiger und einschichtiger Röntgendetektoren.	93
7.1	Faltschema gefalteter Röntgendetektoren exemplarisch dargestellt für drei Detektor-Elemente.	101
7.2	Grundlegender Aufbau einschichtiger und gefalteter Röntgendetektoren.	102
7.3	Blockdiagramm des linearen Systems zur Modellierung der Signal- und Rauschausbreitung in gefalteten Röntgendetektoren.	106
7.4	Simulierte Röntgensensitivität gefalteter Röntgendetektoren im Falle von quasi-direkten und direkten Absorbern.	111
7.5	Simulierte Röntgensensitivität gefalteter Röntgendetektoren im Falle von direkten Absorbern bestehend aus polykristallinem MAPbI ₃ mit verschlechterten Ladungstransporteigenschaften.	113
7.6	Simulierte Röntgensensitivität gefalteter Röntgendetektoren im Falle von niedrigen und hohen Photonenenergien.	114
7.7	Simulierte Detektive Quanteneffizienz gefalteter Röntgendetektoren im Falle von hohen und niedrigen Photonenfluenzraten.	116
7.8	Simulierte Detektive Quanteneffizienz gefalteter Röntgendetektoren im Falle von niedrigen und hohen Photonenenergien.	118
7.9	Vergleich der theoretischen Röntgensensitivität gefalteter und einschichtiger Röntgendetektoren.	121
8.1	Grundlegender Aufbau der untersuchten Perowskit-Röntgendetektoren und Fotografie eines flexiblen Perowskit-Röntgendetektors.	130
8.2	Rasterelektronenmikroskop-Aufnahmen von den Querschnitten zweier exemplarischer Perowskit-Röntgendetektoren.	133
8.3	Zeitaufgelöste Detektorsignale unter Röntgenbestrahlung und Bestimmung der experimentellen Röntgensensitivität.	135
8.4	Gemessene Röntgensensitivität von Perowskit-Röntgendetektoren.	137
8.5	Zeitaufgelöste und spannungsabhängige Detektorsignale unter Röntgenbestrahlung und spannungsabhängige Röntgensensitivität.	141
8.6	Gemessene Dunkelstromdichte von Perowskit-Röntgendetektoren.	144
8.7	Abschätzung der Anstiegszeit des Detektorsignals.	146
8.8	Detektorsignale in flachen und gebogenen Zuständen.	148
8.9	Detektorsignale im flachen Zustand nach mehreren Biegezyklen.	149
8.10	Zeitaufgelöste Detektorsignale unter wiederholter Röntgenbestrahlung und Röntgenstabilität.	150
8.11	Röntgenbildgebung.	152

9.1	Aufbau und schematische Darstellung der Faltung des Perowskit-Röntgendetektors.	159
9.2	Grundlegender Aufbau und Orientierung der Pixel des untersuchten Perowskit-Röntgendetektors im planaren und gefalteten Zustand.	160
9.3	Fotografien des Perowskit-Röntgendetektors im planaren und in einem vorübergehenden Zustand.	162
9.4	Strom-Spannungs-Kennlinien eines exemplarischen Pixels im planaren Zustand unter verschiedenen Bestrahlungsbedingungen.	163
9.5	Strom-Spannungs-Kennlinien eines exemplarischen Pixels im planaren und gefalteten Zustand.	164
9.6	Zeitaufgelöste Detektorsignale im planaren und gefalteten Zustand.	166
9.7	Bestimmung der experimentellen Röntgensensitivität im planaren und gefalteten Zustand. . .	167
9.8	Gemessene Röntgensensitivität der Pixel des Perowskit-Röntgendetektors im planaren und gefalteten Zustand.	169
9.9	Kantenspreizfunktion und Modulationsübertragungsfunktion eines exemplarischen Pixels im gefalteten Zustand.	174
9.10	Zeitaufgelöstes Detektorsignal unter kontinuierlicher Röntgenbestrahlung.	177

Tabellenverzeichnis

5.1	Materialparameter direkter Absorber.	62
5.2	Designvorgaben und Leistungsfähigkeit einschichtiger Röntgendetektoren.	69
6.1	Materialparameter quasi-direkter Absorber.	82
6.2	Designvorgaben und Leistungsfähigkeit mehrschichtiger Röntgendetektoren.	91
7.1	Designvorgaben und Leistungsfähigkeit gefalteter Röntgendetektoren.	120
8.1	Vergleich der Röntgensensitivität von flexiblen direkten Röntgendetektoren.	139
9.1	Vergleich der räumlichen Auflösung von unterschiedlichen Absorber-Materialien.	176
A.1	Experimentelle Details zur Herstellung der in Kapitel 8 untersuchten Röntgendetektoren. . . .	189
B.1	Experimentelle Details zur Herstellung des in Kapitel 9 untersuchten Röntgendetektors. . . .	191

Eigene Veröffentlichungen

Publikationen in referierten Fachzeitschriften

- [1] **Henning Mescher**, Elias Hamann, and Uli Lemmer. Simulation and design of folded perovskite x-ray detectors. *Scientific Reports*, 9:5231, March 2019. doi: 10.1038/s41598-019-41440-6.
- [2] **Henning Mescher**, Fabian Schackmar, Helge Eggers, Tobias Abzieher, Marcus Zuber, Elias Hamann, Tilo Baumbach, Bryce S. Richards, Gerardo Hernandez-Sosa, Ulrich W. Paetzold, and Uli Lemmer. Flexible Inkjet-Printed Triple Cation Perovskite X-ray Detectors. *ACS Applied Materials & Interfaces*, 12(13):15774–15784, March 2020. doi: 10.1021/acsami.9b14649.
- [3] **Henning Mescher**, Fabian Schackmar, Robert Huber, Helge Eggers, Marcus Zuber, Elias Hamann, Georg Gramlich, Julian Dangelmaier, Qiaoshuang Zhang, Andres Georg Rösch, Thomas Zwick, Gerardo Hernandez-Sosa, Ulrich W. Paetzold, and Uli Lemmer. Origami-inspired perovskite X-ray detector by printing and folding. *npj Flexible Electronics*, 7(9), February 2023. doi: 10.1038/s41528-023-00240-9.
- [4] Dominik Theobald, Dominik Beutel, Luisa Borgmann, **Henning Mescher**, Guillaume Gomard, Carsten Rockstuhl, and Uli Lemmer. Simulation of light scattering in large, disordered nanostructures using a periodic T-matrix method. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 272: 107802, September 2021. doi: 10.1016/j.jqsrt.2021.107802.
- [5] Robert Huber, Santiago Eizaguirre, **Henning Mescher**, Christian Willig, Qiaoshuang Zhang, and Uli Lemmer. Fully Printed Temperature Sensor Array Comprising $625\ 60\times 60\ \mu\text{m}^2$ pixels. *Advanced Sensor Research*, 2(2), December 2022. doi: 10.1002/adsr.202200031.

Publikationen zu Konferenzen

- [1] **Henning Mescher** and Uli Lemmer. Novel hybrid organic-inorganic perovskite detector designs based on multilayered device architectures: simulation and design. In Taly Gilat Schmidt, Guang-Hong Chen, and Hilde Bosmans, editors, *Medical Imaging 2019: Physics of Medical Imaging*, volume 10948. International Society for Optics and Photonics, SPIE, March 2019. doi: 10.1117/12.2511739.

Vorträge auf Konferenzen

- [1] **Henning Mescher**, Fabian Schackmar, Helge Eggers, Tobias Abzieher, Marcus Zuber, Elias Hamann, Tilo Baumbach, Bryce S. Richards, Gerardo Hernandez-Sosa, Ulrich W. Paetzold, and Uli Lemmer. Inkjet-printed triple cation perovskite absorbers for mechanically flexible high performance X-ray detectors. In Michael Fiederle, Arnold Burger, and Stephen A. Payne, editors, *Hard X-Ray, Gamma-Ray, and Neutron Detector Physics XXII*. SPIE, August 2020. doi: 10.1117/12.2568063.
- [2] **Henning Mescher**, Fabian Schackmar, Helge Eggers, Marcus Zuber, Elias Hamann, Bryce S. Richards, Ulrich W. Paetzold, and Uli Lemmer. Novel hybrid organic-inorganic perovskite detector designs based on multilayered and folded device architectures: Simulation, design, and prototyping. In *SPIE Medical Imaging, SPIE Conference 10948: Physics of Medical Imaging*. SPIE, February 2019.
- [3] Robert Huber, **Henning Mescher***, Georg Gramlich, Qiaoshuang Zhang, Gerardo Hernandez-Sosa, and Uli Lemmer. Fully printed high-density temperature sensor array. In Ruth Shinar, Ioannis Kymissis, and Emil J. List-Kratochvil, editors, *Organic and Hybrid Sensors and Bioelectronics XV*. SPIE, October 2022. doi: 10.1117/12.2633363.
- [4] **Henning Mescher***, Fabian Schackmar, Robert Huber, Helge Eggers, Marcus Zuber, Elias Hamann, Georg Gramlich, Julian Dangelmaier, Qiaoshuang Zhang, Andres Rösch, Thomas Zwick, Gerardo Hernandez-Sosa, Ulrich Paetzold, and Uli Lemmer. Folded perovskite X-ray detector with high sensitivity and high spatial resolution. In Nerine J. Cherepy, Michael Fiederle, and Ralph B. James, editors, *Hard X-Ray, Gamma-Ray, and Neutron Detector Physics XXIV*. SPIE, October 2022. doi: 10.1117/12.2633440.
- [5] **Henning Mescher***, Fabian Schackmar, Uli Paetzold, and Uli Lemmer. Flexible perovskite X-ray detectors by inkjet printing. In *ICSM Glasgow*, July 2022.

* nicht von Henning Mescher präsentiert

Betreute studentische Arbeit

- Julian Dangelmaier. Entwicklung einer Ausleseelektronik für Perowskit-Röntgendetektoren. Bachelorarbeit, Elektrotechnik und Informationstechnik, 2019

Literaturverzeichnis

- [1] Hanno Krieger. *Grundlagen der Strahlungsphysik und des Strahlenschutzes*. Springer Berlin Heidelberg, seventh edition, 2023. doi: 10.1007/978-3-662-67610-3.
- [2] Frank Herbert Attix. *Introduction to Radiological Physics and Radiation Dosimetry*. Wiley, 1986. doi: 10.1002/9783527617135.
- [3] Andrei A. Bunaciu, Elena gabriela Udriștioiu, and Hassan Y. Aboul-Enein. X-Ray Diffraction: Instrumentation and Applications. *Critical Reviews in Analytical Chemistry*, 45(4):289–299, May 2015. doi: 10.1080/10408347.2014.949616.
- [4] Thomas van de Kamp, István Mikó, Arnold H. Staniczek, Benjamin Eggs, Daria Bajerlein, Tomáš Faragó, Lea Hagelstein, Elias Hamann, Rebecca Spiecker, Tilo Baumbach, Petr Janšta, and Lars Krogmann. Evolution of flexible biting in hyperdiverse parasitoid wasps. *Proceedings of the Royal Society B: Biological Sciences*, 289(1967), January 2022. doi: 10.1098/rspb.2021.2086.
- [5] Nachiket Kotwaliwale, Karan Singh, Abhimannu Kalne, Shyam Narayan Jha, Neeraj Seth, and Abhijit Kar. X-ray imaging methods for internal quality evaluation of agricultural produce. *Journal of Food Science and Technology*, 51(1):1–15, August 2011. doi: 10.1007/s13197-011-0485-y.
- [6] L. De Chiffre, S. Carmignato, J.-P. Kruth, R. Schmitt, and A. Weckenmann. Industrial applications of computed tomography. *CIRP Annals*, 63(2):655–677, 2014. doi: 10.1016/j.cirp.2014.05.011.
- [7] Willi A. Kalender. X-ray computed tomography. *Physics in Medicine and Biology*, 51(13):R29–R43, June 2006. doi: 10.1088/0031-9155/51/13/r03.
- [8] Martin Spahn. X-ray detectors in medical imaging. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, 731:57–63, December 2013. doi: 10.1016/j.nima.2013.05.174.
- [9] Hanno Krieger. *Strahlungsmessung und Dosimetrie*. Vieweg+Teubner Verlag Wiesbaden, 1 edition, 2011. doi: 10.1007/978-3-8348-8128-1.
- [10] Syed Naeem Ahmed. *Physics and Engineering of Radiation Detection*. Elsevier Science & Technology Books, second edition, 2015. ISBN 9780128013632.

- [11] Harrell G. Chotas, James T. Dobbins, and Carl E. Ravin. Principles of Digital Radiography with Large-Area, Electronically Readable Detectors: A Review of the Basics. *Radiology*, 210(3):595–599, March 1999. doi: 10.1148/radiology.210.3.r99mr15595.
- [12] Danilo Pacella. Energy-resolved X-ray detectors: the future of diagnostic imaging. *Reports in Medical Imaging*, January 2015. doi: 10.2147/rmi.s50045.
- [13] Zhong He. Review of the Shockley–Ramo theorem and its application in semiconductor gamma-ray detectors. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, 463(1-2):250–267, May 2001. doi: 10.1016/s0168-9002(01)00223-6.
- [14] Safa Kasap and Peter Capper, editors. *Springer Handbook of Electronic and Photonic Materials*. Springer International Publishing, second edition, 2017. doi: 10.1007/978-3-319-48933-9.
- [15] Haotong Wei and Jinsong Huang. Halide lead perovskites for ionizing radiation detection. *Nature Communications*, 10(1):1066, March 2019. doi: 10.1038/s41467-019-08981-w.
- [16] Yihui He, Ido Hadar, and Mercouri G. Kanatzidis. Detecting ionizing radiation using halide perovskite semiconductors processed through solution and alternative methods. *Nature Photonics*, 16(1): 14–26, December 2021. doi: 10.1038/s41566-021-00909-5.
- [17] Michael Grätzel, Shahzada Ahmad, and Samrana Kazim, editors. *Perovskite Solar Cells*. Wiley, November 2021. doi: 10.1002/9783527825790.
- [18] Ajay Kumar Jena, Ashish Kulkarni, and Tsutomu Miyasaka. Halide Perovskite Photovoltaics: Background, Status, and Future Prospects. *Chemical Reviews*, 119(5):3036–3103, March 2019. doi: 10.1021/acs.chemrev.8b00539.
- [19] Ian A. Howard, Tobias Abzieher, Ihtezaz M. Hossain, Helge Eggers, Fabian Schackmar, Simon Ternes, Bryce S. Richards, Uli Lemmer, and Ulrich W. Paetzold. Coated and Printed Perovskites for Photovoltaic Applications. *Advanced Materials*, 31(26):1806702, April 2019. doi: 10.1002/adma.201806702.
- [20] Florian Mathies, Tobias Abzieher, Adam Hochstuhl, Konstantin Glaser, Alexander Colsmann, Ulrich W. Paetzold, Gerardo Hernandez-Sosa, Uli Lemmer, and Aina Quintilla. Multipass inkjet printed planar methylammonium lead iodide perovskite solar cells. *Journal of Materials Chemistry A*, 4(48): 19207–19213, 2016. doi: 10.1039/c6ta07972e.
- [21] S. M. Seltzer, D. T. Bartlett, D. T. Burns, G. Dietze, H.-G. Menzel, H. G. Paretzke, and A. Wambersie. Report 85: Fundamental Quantities and Units for Ionizing Radiation. *Journal of the ICRU*, 11(1): 1–32, April 2011. doi: 10.1093/jicru/ndr011.
- [22] J. Zoetelief, D. R. Dance, G. Drexler, H. Järvinen, and M. Rosenstein. Report 74: Patient Dosimetry for X Rays used in Medical Imaging. *Journal of the ICRU*, 5(2):1–113, 2005. doi: 10.1093/jicru/ndi016.

-
- [23] Richard L. Van Metter, Jacob Beutel, and Harold L. Kundel, editors. *Handbook of Medical Imaging, Volume 1. Physics and Psychophysics*. SPIE, 2000. doi: 10.1117/3.832716.
- [24] Jerrold T. Bushberg, J. Anthony Seibert, Edwin M. Leidholdt, and John M. Boone. *The essential physics of medical imaging*. Wolters Kluwer Health/Lippincott Williams & Wilkins, third edition, 2012. ISBN 9780781780575.
- [25] J. H. Hubbell and S. M. Seltzer. Tables of X-Ray Mass Attenuation Coefficients and Mass Energy-Absorption Coefficients (version 1.4), 2004. URL <https://www.nist.gov/pml/x-ray-mass-attenuation-coefficients>. Originally published as NISTIR 5632, National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, MD (1995).
- [26] Stephen M. Seltzer. Calculation of Photon Mass Energy-Transfer and Mass Energy-Absorption Coefficients. *Radiation Research*, 136(2):147–170, November 1993. doi: 10.2307/3578607.
- [27] J. H. Hubbell. Photon Mass Attenuation and Energy-absorption Coefficients from 1 keV to 20 MeV. *The International Journal of Applied Radiation and Isotopes*, 33(11):1269–1290, November 1982. doi: 10.1016/0020-708x(82)90248-4.
- [28] N. Petoussi-Henss, W. E. Bolch, K. F. Eckerman, A. Endo, N. Hertel, J. Hunt, M. Pelliccioni, H. Schlattl, and M. Zankl. Conversion Coefficients for Radiological Protection Quantities for External Radiation Exposures. *Annals of the ICRP*, 40(2-5):1–257, April 2010. doi: 10.1016/j.icrp.2011.10.001.
- [29] Massimo Rudan, Rossella Brunetti, and Susanna Reggiani, editors. *Springer Handbook of Semiconductor Devices*. Springer International Publishing, 2023. doi: 10.1007/978-3-030-79827-7.
- [30] William Shockley. Currents to Conductors Induced by a Moving Point Charge. *Journal of Applied Physics*, 9:635–636, October 1938. doi: 10.1063/1.1710367.
- [31] Simon Ramo. Currents Induced by Electron Motion. *Proceedings of the IRE*, 27(9):584–585, September 1939. doi: 10.1109/jrproc.1939.228757.
- [32] Helmuth Spieler. *Semiconductor Detector Systems*. Oxford University Press, August 2005. doi: 10.1093/acprof:oso/9780198527848.001.0001.
- [33] Hermann Kolanoski and Norbert Wermes. *Teilchendetektoren*. Springer Spektrum Berlin, Heidelberg, 2016. doi: 10.1007/978-3-662-45350-6.
- [34] Safa O. Kasap. X-ray sensitivity of photoconductors: application to stabilized a-Se. *Journal of Physics D: Applied Physics*, 33:2853–2865, 2000. doi: 10.1088/0022-3727/33/21/326.
- [35] Glenn D. Boreman. *Modulation Transfer Function in Optical and Electro-Optical Systems*. SPIE, 2001. doi: 10.1117/3.419857.

- [36] Ian A. Cunningham and Rodney Shaw. Signal-to-noise optimization of medical imaging systems. *Journal of the Optical Society of America A*, 16(3):621–632, March 1999. doi: 10.1364/josaa.16.000621.
- [37] Patric Büchele. *Hybrid-organische Photodioden für die Radiographie*. PhD thesis, 2016.
- [38] Patric Büchele, Moses Richter, Sandro F. Tedde, Gebhard J. Matt, Genesis N. Ankah, Rene Fischer, Markus Biele, Wilhelm Metzger, Samuele Lilliu, Oier Bikondoa, J. Emyr Macdonald, Christoph J. Brabec, Tobias Kraus, Uli Lemmer, and Oliver Schmidt. X-ray imaging with scintillator-sensitized hybrid organic photodetectors. *Nature Photonics*, 9(12):843–848, November 2015. doi: 10.1038/nphoton.2015.216.
- [39] Radu Precup. *Linear and Semilinear Partial Differential Equations*. De Gruyter, Inc., 2012. ISBN 9783110269048.
- [40] Robert F. Pierret. *Advanced Semiconductor Fundamentals*. Pearson Education, Inc., second edition, 2002. ISBN 9780130617927.
- [41] S. M. Sze and Kwok K. Ng. *Physics of Semiconductor Devices*. John Wiley & Sons, Inc., third edition, April 2006. doi: 10.1002/0470068329.
- [42] M. Zahangir Kabir and S. O. Kasap. Charge collection and absorption-limited sensitivity of x-ray photoconductors: Applications to a-Se and HgI₂. *Applied Physics Letters*, 80(9):1664–1666, March 2002. doi: 10.1063/1.1454213.
- [43] M. Z. Kabir. Effects of charge carrier trapping on polycrystalline PbO x-ray imaging detectors. *Journal of Applied Physics*, 104(7):074506, 2008. doi: 10.1063/1.2990765.
- [44] Dhilippan M. Panneerselvam and M. Z. Kabir. Evaluation of organic perovskite photoconductors for direct conversion X-ray imaging detectors. *Journal of Materials Science: Materials in Electronics*, 28(10):7083–7090, February 2017. doi: 10.1007/s10854-017-6409-5.
- [45] Majid Rabbani, Rodney Shaw, and Richard Van Metter. Detective quantum efficiency of imaging systems with amplifying and scattering mechanisms. *Journal of the Optical Society of America A*, 4(5):895–901, May 1987. doi: 10.1364/josaa.4.000895.
- [46] Wei Zhao, W. G. Ji, and J. A. Rowlands. Effects of characteristic x rays on the noise power spectra and detective quantum efficiency of photoconductive x-ray detectors. *Medical Physics*, 28(10):2039–2049, October 2001. doi: 10.1118/1.1405845.
- [47] M. Zahangir Kabir and S. O. Kasap. DQE of photoconductive x-ray image detectors: application to a-Se. *Journal of Physics D: Applied Physics*, 35(21):2735–2743, October 2002. doi: 10.1088/0022-3727/35/21/308.

- [48] James G. Mainprize, Dylan C. Hunt, and Martin J. Yaffe. Direct conversion detectors: The effect of incomplete charge collection on detective quantum efficiency. *Medical Physics*, 29(6):976–990, May 2002. doi: 10.1118/1.1477235.
- [49] M. Z. Kabir, M. W. Rahman, and W. Y. Shen. Modelling of detective quantum efficiency of direct conversion x-ray imaging detectors incorporating charge carrier trapping and K-fluorescence. *IET Circuits, Devices & Systems*, 5(3):222–231, 2011. doi: 10.1049/iet-cds.2010.0338.
- [50] Safa Kasap, Joel B. Frey, George Belev, Olivier Tousignant, Habib Mani, Jonathan Greenspan, Luc Laperriere, Oleksandr Bubon, Alla Reznik, Giovanni DeCrescenzo, Karim S. Karim, and John A. Rowlands. Amorphous and Polycrystalline Photoconductors for Direct Conversion Flat Panel X-Ray Image Sensors. *Sensors*, 11(5):5112–5157, May 2011. doi: 10.3390/s110505112.
- [51] Dirk W. Schubert and Thomas Dunkel. Spin coating from a molecular point of view: its concentration regimes, influence of molar mass and distribution. *Materials Research Innovations*, 7(5):314–321, October 2003. doi: 10.1007/s10019-003-0270-2.
- [52] K. Norrman, A. Ghanbari-Siahkali, and N. B. Larsen. 6 Studies of spin-coated polymer films. *Annual Reports Section C (Physical Chemistry)*, 101:174–201, 2005. doi: 10.1039/b408857n.
- [53] Helge Eggers. *Tintenstrahlgedruckte und farbige Perowskit-Photovoltaik für die Gebäude-Integration*. PhD thesis, 2023.
- [54] N. J. Wilkinson, M. A. A. Smith, R. W. Kay, and R. A. Harris. A review of aerosol jet printing—a non-traditional hybrid process for micro-manufacturing. *The International Journal of Advanced Manufacturing Technology*, 105(11):4599–4619, May 2019. doi: 10.1007/s00170-019-03438-2.
- [55] Ralph Eckstein. *Aerosol Jet Printed Electronic Devices and Systems*. PhD thesis, 2016.
- [56] Noah Strobel. *Printed Organic Photodiodes with Enhanced Performance and Simplified Processing*. PhD thesis, 2020.
- [57] Md Mofasser Mallick, Leonard Franke, Andres Georg Rösch, Holger Geßwein, Zhongmin Long, Yolita M. Eggeler, and Uli Lemmer. High Figure-of-Merit Telluride-Based Flexible Thermoelectric Films through Interfacial Modification via Millisecond Photonic-Curing for Fully Printed Thermoelectric Generators. *Advanced Science*, 9(31):2202411, September 2022. doi: 10.1002/advs.202202411.
- [58] Jon Tomas Gudmundsson, André Anders, and Achim von Keudell. Foundations of physical vapor deposition with plasma assistance. *Plasma Sources Science and Technology*, 31(8):083001, September 2022. doi: 10.1088/1361-6595/ac7f53.
- [59] Ihteaz Muhaimen Hossain. *Semitransparent perovskite solar cells for perovskite-based tandem photovoltaics*. PhD thesis, 2021.

- [60] James C. Wyant. White light interferometry. In H. John Caulfield, editor, *SPIE Proceedings*. SPIE, July 2002. doi: 10.1117/12.474947.
- [61] Wilfried Bauer, Mark Weber, and Sirichanok Chanbai. White Light Interferometry. In *Encyclopedia of Tribology*, pages 4115–4127. Springer US, 2013. doi: 10.1007/978-0-387-92897-5_320.
- [62] Weilie Zhou and Zhong Lin Wang, editors. *Scanning Microscopy for Nanotechnology*. Springer New York, 2007. doi: 10.1007/978-0-387-39620-0.
- [63] Henning Mescher, Elias Hamann, and Uli Lemmer. Simulation and design of folded perovskite x-ray detectors. *Scientific Reports*, 9:5231, March 2019. doi: 10.1038/s41598-019-41440-6.
- [64] Sergii Yakunin, Mykhailo Sytnyk, Dominik Kriegner, Shreetu Shrestha, Moses Richter, Gebhard J. Matt, Hamed Azimi, Christoph J. Brabec, Julian Stangl, Maksym V. Kovalenko, and Wolfgang Heiss. Detection of X-ray photons by solution-processed lead halide perovskites. *Nature Photonics*, 9(7): 444–449, May 2015. doi: 10.1038/nphoton.2015.82.
- [65] Yong Churl Kim, Kwang Hee Kim, Dae-Yong Son, Dong-Nyuk Jeong, Ja-Young Seo, Yeong Suk Choi, In Taek Han, Sang Yoon Lee, and Nam-Gyu Park. Printable organometallic perovskite enables large-area, low-dose X-ray imaging. *Nature*, 550(7674):87–91, October 2017. doi: 10.1038/nature 24032.
- [66] Yihui He, Weijun Ke, Grant C. B. Alexander, Kyle M. McCall, Daniel G. Chica, Zhifu Liu, Ido Hadar, Constantinos C. Stoumpos, Bruce W. Wessels, and Mercouri G. Kanatzidis. Resolving the Energy of γ -Ray Photons with MAPbI₃ Single Crystals. *ACS Photonics*, 5(10):4132–4138, September 2018. doi: 10.1021/acsp Photonics.8b00873.
- [67] Qingfeng Dong, Yanjun Fang, Yuchuan Shao, Padhraic Mulligan, Jie Qiu, Lei Cao, and Jinsong Huang. Electron-hole diffusion lengths $> 175 \mu\text{m}$ in solution-grown CH₃NH₃PbI₃ single crystals. *Science*, 347(6225):967–970, February 2015. doi: 10.1126/science.aaa5760.
- [68] Dong Shi, Valerio Adinolfi, Riccardo Comin, Mingjian Yuan, Erkki Alarousu, Andrei Buin, Yin Chen, Sjoerd Hoogland, Alexander Rothenberger, Khabiboulakh Katsiev, Yaroslav Losovyj, Xin Zhang, Peter A. Dowben, Omar F. Mohammed, Edward H. Sargent, and Osman M. Bakr. Low trap-state density and long carrier diffusion in organolead trihalide perovskite single crystals. *Science*, 347(6221):519–522, January 2015. doi: 10.1126/science.aaa2725.
- [69] Makhsud I. Saidaminov, Ahmed L. Abdelhady, Banavoth Murali, Erkki Alarousu, Victor M. Burlakov, Wei Peng, Ibrahim Dursun, Lingfei Wang, Yao He, Giacomo Maculan, Alain Goriely, Tom Wu, Omar F. Mohammed, and Osman M. Bakr. High-quality bulk hybrid perovskite single crystals within minutes by inverse temperature crystallization. *Nature Communications*, 6(1):7586, July 2015. doi: 10.1038/ncomms8586.

- [70] Giacomo Giorgi and Koichi Yamashita. Organic–inorganic halide perovskites: an ambipolar class of materials with enhanced photovoltaic performances. *Journal of Materials Chemistry A*, 3(17): 8981–8991, 2015. doi: 10.1039/c4ta05046k.
- [71] S. O. Kasap, M. Zahangir Kabir, and J. A. Rowlands. Recent advances in X-ray photoconductors for direct conversion X-ray image detectors. *Current Applied Physics*, 6(3):288–292, June 2006. doi: 10.1016/j.cap.2005.11.001.
- [72] O. Bubon, K. Jandieri, S. D. Baranovskii, S. O. Kasap, and A. Reznik. Columnar recombination for X-ray generated electron-holes in amorphous selenium and its significance in a-Se x-ray detectors. *Journal of Applied Physics*, 119(12):124511, March 2016. doi: 10.1063/1.4944880.
- [73] Chris Allen, George Belev, Robert Johanson, and Safa Kasap. Relaxation of the electrical properties of vacuum-deposited a-Se_{1-x}As_x photoconductive films: Charge-carrier lifetimes and drift mobilities. *Journal of Vacuum Science & Technology A: Vacuum, Surfaces, and Films*, 28(5):1145–1156, September 2010. doi: 10.1116/1.3472623.
- [74] Salman M. Arnab and M. Z. Kabir. Impact of charge carrier trapping on amorphous selenium direct conversion avalanche X-ray detectors. *Journal of Applied Physics*, 122(13):134502, October 2017. doi: 10.1063/1.5000510.
- [75] Farzana Kabir, Dewan Fahim Noor, Zubayer Ibne Ferdous, and Shaikh Asif Mahmood. Sensitivity in polycrystalline HgI₂ X-ray imagers for mammography. In *8th International Conference on Electrical and Computer Engineering*. IEEE, December 2014. doi: 10.1109/icece.2014.7026998.
- [76] James G. Mainprize, Nancy L. Ford, Shi Yin, Eli E. Gordon, William J. Hamilton, Tümay O. Tümer, and Martin J. Yaffe. A CdZnTe slot-scanned detector for digital mammography. *Medical Physics*, 29(12):2767–2781, November 2002. doi: 10.1118/1.1523932.
- [77] Jae Ho Won, Ki Hyun Kim, Jong Hee Suh, Shin Hang Cho, Pyong Kon Cho, Jin Ki Hong, and Sun Ung Kim. The X-ray sensitivity of semi-insulating polycrystalline CdZnTe thick films. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, 591(1):206–208, June 2008. doi: 10.1016/j.nima.2008.03.057.
- [78] Stefano Del Sordo, Leonardo Abbene, Ezio Caroli, Anna Maria Mancini, Andrea Zappettini, and Pietro Ubertini. Progress in the Development of CdTe and CdZnTe Semiconductor Radiation Detectors for Astrophysical and Medical Applications. *Sensors*, 9(5):3491–3526, May 2009. doi: 10.3390/s90503491.
- [79] M. Suzuki, M. Tashiro, G. Sato, S. Watanabe, K. Nakazawa, T. Takahashi, Y. Okada, H. Takahashi, A. Parsons, S. Barthelmy, J. Cummings, N. Gehrels, D. Hullinger, H. Krimm, and J. Tueller. Hard X-ray response of CdZnTe detectors in the swift burst alert telescope. *IEEE Transactions on Nuclear Science*, 52(4):1033–1035, August 2005. doi: 10.1109/tns.2005.852968.

- [80] M. Schieber, H. Hermon, A. Zuck, A. Vilensky, L. Melekhov, R. Shatunovsky, E. Meerson, and H. Saado. Theoretical and experimental sensitivity to X-rays of single and polycrystalline HgI₂ compared with different single-crystal detectors. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, 458(1-2):41–46, February 2001. doi: 10.1016/S0168-9002(00)00849-4.
- [81] Feng Zhang, Cedric Herman, Zhong He, Gianluigi De Geronimo, Emerson Vernon, and Jack Fried. Characterization of the H3D ASIC Readout System and 6.0 cm³ 3-D Position Sensitive CdZnTe Detectors. *IEEE Transactions on Nuclear Science*, 59(1):236–242, February 2012. doi: 10.1109/tns.2011.2175948.
- [82] S. A. Awadalla, M. Al-Grafi, and K. Iniewski. High voltage optimization in CdZnTe detectors. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, 764:193–197, November 2014. doi: 10.1016/j.nima.2014.07.026.
- [83] Tom Baikie, Yanan Fang, Jeannette M. Kadro, Martin Schreyer, Fengxia Wei, Subodh G. Mhaisalkar, Michael Graetzel, and Tim J. White. Synthesis and crystal chemistry of the hybrid perovskite (CH₃NH₃)PbI₃ for solid-state sensitised solar cell applications. *Journal of Materials Chemistry A*, 1(18):5628–5641, 2013. doi: 10.1039/c3ta10518k.
- [84] Carlito S. Ponseca, Tom J. Savenije, Mohamed Abdellah, Kaibo Zheng, Arkady Yartsev, Tobjörn Pascher, Tobias Harlang, Pavel Chabera, Tonu Pullerits, Andrey Stepanov, Jean-Pierre Wolf, and Villy Sundström. Organometal Halide Perovskite Solar Cell Materials Rationalized: Ultrafast Charge Generation, High and Microsecond-Long Balanced Mobilities, and Slow Recombination. *Journal of the American Chemical Society*, 136(14):5189–5192, March 2014. doi: 10.1021/ja412583t.
- [85] Rebecca L. Milot, Giles E. Eperon, Henry J. Snaith, Michael B. Johnston, and Laura M. Herz. Temperature-Dependent Charge-Carrier Dynamics in CH₃NH₃PbI₃ Perovskite Thin Films. *Advanced Functional Materials*, 25(39):6218–6227, September 2015. doi: 10.1002/adfm.201502340.
- [86] Roberto Brenes, Dengyang Guo, Anna Osherov, Nakita K. Noel, Christopher Eames, Eline M. Hutter, Sandeep K. Pathak, Farnaz Niroui, Richard H. Friend, M. Saiful Islam, Henry J. Snaith, Vladimir Bulović, Tom J. Savenije, and Samuel D. Stranks. Metal Halide Perovskite Polycrystalline Films Exhibiting Properties of Single Crystals. *Joule*, 1(1):155–167, September 2017. doi: 10.1016/j.joule.2017.08.006.
- [87] Samuel D. Stranks, Giles E. Eperon, Giulia Grancini, Christopher Menelaou, Marcelo J. P. Alcocer, Tomas Leijtens, Laura M. Herz, Annamaria Petrozza, and Henry J. Snaith. Electron-Hole Diffusion Lengths Exceeding 1 Micrometer in an Organometal Trihalide Perovskite Absorber. *Science*, 342(6156):341–344, October 2013. doi: 10.1126/science.1243982.
- [88] Dane W. deQuilettes, Susanne Koch, Sven Burke, Rajan K. Paranj, Alfred J. Shropshire, Mark E. Ziffer, and David S. Ginger. Photoluminescence Lifetimes Exceeding 8 μ s and Quantum Yields

- Exceeding 30% in Hybrid Perovskite Thin Films by Ligand Passivation. *ACS Energy Letters*, 1(2): 438–444, July 2016. doi: 10.1021/acsenergylett.6b00236.
- [89] Michael Overdick, Christian Baumer, Klaus Jürgen Engel, Johannes Fink, Christoph Herrmann, Hans Kruger, Matthias Simon, Roger Steadman, and Gnter Zeitler. Status of Direct Conversion Detectors for Medical Imaging With X-Rays. *IEEE Transactions on Nuclear Science*, 56(4):1800–1809, August 2009. doi: 10.1109/tns.2009.2025041.
- [90] Mats Persson, Robert Bujila, Patrik Nowik, Henrik Andersson, Love Kull, Jonas Andersson, Hans Bornefalk, and Mats Danielsson. Upper limits of the photon fluence rate on CT detectors: Case study on a commercial scanner. *Medical Physics*, 43(7):4398–4411, June 2016. doi: 10.1118/1.4954008.
- [91] Nicolas Estre, Daniel Eck, Jean-Luc Pettier, Emmanuel Payan, Christophe Roure, and Eric Simon. High-energy X-ray imaging applied to non destructive characterization of large nuclear waste drums. In *2013 3rd International Conference on Advancements in Nuclear Instrumentation, Measurement Methods and their Applications (ANIMMA)*. IEEE, June 2013. doi: 10.1109/animma.2013.6727987.
- [92] D. Greiffenberg, A. Cecilia, A. Zwerger, A. Fauler, P. Vagovic, J. Butzer, E. Hamann, T. dos Santos Rolo, T. Baumbach, and M. Fiederle. Investigations of the high flux behavior of CdTe-Medipix2 assemblies at the synchrotron ANKA. In *IEEE Nuclear Science Symposium & Medical Imaging Conference*. IEEE, October 2010. doi: 10.1109/nssmic.2010.5874501.
- [93] Henning Mescher and Uli Lemmer. Novel hybrid organic-inorganic perovskite detector designs based on multilayered device architectures: simulation and design. In Taly Gilat Schmidt, Guang-Hong Chen, and Hilde Bosmans, editors, *Medical Imaging 2019: Physics of Medical Imaging*, volume 10948. International Society for Optics and Photonics, SPIE, March 2019. doi: 10.1117/12.2511739.
- [94] Mykhailo Sytnyk, Sarah Deumel, Sandro Francesco Tedde, Gebhard J. Matt, and Wolfgang Heiss. A perspective on the bright future of metal halide perovskites for X-ray detection. *Applied Physics Letters*, 115(19):190501, November 2019. doi: 10.1063/1.5125999.
- [95] Y. Gu, J. L. Matteson, R. T. Skelton, A. C. Deal, E. A. Stephan, F. Duttweiler, T. M. Gasaway, and C. S. Levin. Study of a high-resolution, 3D positioning cadmium zinc telluride detector for PET. *Physics in Medicine and Biology*, 56(6):1563–1584, February 2011. doi: 10.1088/0031-9155/56/6/004.
- [96] X. Liu, F. Grönberg, M. Sjölin, S. Karlsson, and M. Danielsson. Count rate performance of a silicon-strip detector for photon-counting spectral CT. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, 827:102–106, August 2016. doi: 10.1016/j.nima.2016.04.087.
- [97] Andres Georg Rösch, André Gall, Silas Aslan, Matthias Hecht, Leonard Franke, Md. Mofasser Mallick, Lara Penth, Daniel Bahro, Daniel Friderich, and Uli Lemmer. Fully printed origami thermoelectric generators for energy-harvesting. *npj Flexible Electronics*, 5(1), January 2021. doi: 10.1038/s41528-020-00098-1.

- [98] Martin Kaltenbrunner, Getachew Adam, Eric Daniel Głowacki, Michael Drack, Reinhard Schwödi-aer, Lucia Leonat, Dogukan Hazar Apaydin, Heiko Groiss, Markus Clark Scharber, Matthew Schuet-te White, Niyazi Serdar Sariciftci, and Siegfried Bauer. Flexible high power-per-weight perovskite solar cells with chromium oxide–metal contacts for improved stability in air. *Nature Materials*, 14 (10):1032–1039, August 2015. doi: 10.1038/nmat4388.
- [99] Henning Mescher, Fabian Schackmar, Helge Eggers, Tobias Abzieher, Marcus Zuber, Elias Hamann, Tilo Baumbach, Bryce S. Richards, Gerardo Hernandez-Sosa, Ulrich W. Paetzold, and Uli Lemmer. Flexible Inkjet-Printed Triple Cation Perovskite X-ray Detectors. *ACS Applied Materials & Interfaces*, 12(13):15774–15784, March 2020. doi: 10.1021/acsami.9b14649.
- [100] Haoran Li, Xin Shan, Jennifer N. Neu, Thomas Geske, Melissa Davis, Pengsu Mao, Kai Xiao, Theo Siegrist, and Zhibin Yu. Lead-free halide double perovskite-polymer composites for flexible X-ray imaging. *Journal of Materials Chemistry C*, 6(44):11961–11967, 2018. doi: 10.1039/c8tc01564c.
- [101] Jingying Liu, Babar Shabbir, Chujie Wang, Tao Wan, Qingdong Ou, Pei Yu, Anton Tadich, Xuechen Jiao, Dewei Chu, Dongchen Qi, Dabing Li, Ruifeng Kan, Yamin Huang, Yemin Dong, Jacek Jasieniak, Yupeng Zhang, and Qiaoliang Bao. Flexible, Printable Soft-X-Ray Detectors Based on All-Inorganic Perovskite Quantum Dots. *Advanced Materials*, page 1901644, June 2019. doi: 10.1002/adma.201901644.
- [102] Michael Saliba, Taisuke Matsui, Ji-Youn Seo, Konrad Domanski, Juan-Pablo Correa-Baena, Mo-hammad Khaja Nazeeruddin, Shaik M. Zakeeruddin, Wolfgang Tress, Antonio Abate, Anders Hag-feldt, and Michael Grätzel. Cesium-containing triple cation perovskite solar cells: improved stability, reproducibility and high efficiency. *Energy & Environmental Science*, 9(6):1989–1997, 2016. doi: 10.1039/c5ee03874j.
- [103] Florian Mathies, Helge Eggers, Bryce S. Richards, Gerardo Hernandez-Sosa, Uli Lemmer, and Ulrich W. Paetzold. Inkjet-Printed Triple Cation Perovskite Solar Cells. *ACS Applied Energy Materials*, 1(5):1834–1839, April 2018. doi: 10.1021/acsaem.8b00222.
- [104] Laura Basiricò, Satyaprasad P. Senanayak, Andrea Ciavatti, Mojtaba Abdi-Jalebi, Beatrice Fraboni, and Henning Sirringhaus. Detection of X-Rays by Solution-Processed Cesium-Containing Mixed Triple Cation Perovskite Thin Films. *Advanced Functional Materials*, 29(34):1902346, June 2019. doi: 10.1002/adfm.201902346.
- [105] Michael Drack, Ingrid Graz, Tsuyoshi Sekitani, Takao Someya, Martin Kaltenbrunner, and Siegfried Bauer. An Imperceptible Plastic Electronic Wrap. *Advanced Materials*, 27(1):34–40, October 2014. doi: 10.1002/adma.201403093.
- [106] Tobias Abzieher, Somayeh Moghadamzadeh, Fabian Schackmar, Helge Eggers, Florian Sutterlüti, Amjad Farooq, Danny Kojda, Klaus Habicht, Raphael Schmager, Adrian Mertens, Raheleh Azmi, Lukas Klotz, Jonas A. Schwenzler, Michael Hetterich, Uli Lemmer, Bryce S. Richards, Michael

- Powalla, and Ulrich W. Paetzold. Electron-Beam-Evaporated Nickel Oxide Hole Transport Layers for Perovskite-Based Photovoltaics. *Advanced Energy Materials*, 9(12):1802995, February 2019. doi: 10.1002/aenm.201802995.
- [107] Leqi Li, Xin Liu, Hongjian Zhang, Binbin Zhang, Wanqi Jie, Paul J. Sellin, Chuanhao Hu, Guoqiang Zeng, and Yadong Xu. Enhanced X-ray Sensitivity of MAPbBr₃ Detector by Tailoring the Interface-States Density. *ACS Applied Materials & Interfaces*, 11(7):7522–7528, January 2019. doi: 10.1021/acsami.8b18598.
- [108] Shreetu Shrestha, René Fischer, Gebhard J. Matt, Patrick Feldner, Thilo Michel, Andres Osvet, Ievgen Levchuk, Benoit Merle, Saeedeh Golkar, Haiwei Chen, Sandro F. Tedde, Oliver Schmidt, Rainer Hock, Manfred Rühlig, Mathias Göken, Wolfgang Heiss, Gisela Anton, and Christoph J. Brabec. High-performance direct conversion X-ray detectors based on sintered hybrid lead triiodide perovskite wafers. *Nature Photonics*, 11(7):436–440, June 2017. doi: 10.1038/nphoton.2017.94.
- [109] Huili Liang, Shujuan Cui, Rui Su, Pengfei Guan, Yuhang He, Lihong Yang, Liming Chen, Yonghui Zhang, Zengxia Mei, and Xiaolong Du. Flexible X-ray Detectors Based on Amorphous Ga₂O₃ Thin Films. *ACS Photonics*, 6(2):351–359, December 2018. doi: 10.1021/acsphotonics.8b00769.
- [110] Andrea Ciavatti, Laura Basiricò, Ilaria Fratelli, Stefano Lai, Piero Cosseddu, Annalisa Bonfiglio, John E. Anthony, and Beatrice Fraboni. Boosting Direct X-Ray Detection in Organic Thin Films by Small Molecules Tailoring. *Advanced Functional Materials*, 29(21):1806119, December 2018. doi: 10.1002/adfm.201806119.
- [111] Laura Basiricò, Andrea Ciavatti, Tobias Cramer, Piero Cosseddu, Annalisa Bonfiglio, and Beatrice Fraboni. Direct X-ray photoconversion in flexible organic thin film devices operated below 1 V. *Nature Communications*, 7(1):13063, October 2016. doi: 10.1038/ncomms13063.
- [112] H. M. Thirimanne, K. D. G. I. Jayawardena, A. J. Parnell, R. M. I. Bandara, A. Karalasingam, S. Pani, J. E. Huerdler, D. G. Lidzey, S. F. Tedde, A. Nisbet, C. A. Mills, and S. R. P. Silva. High sensitivity organic inorganic hybrid X-ray detectors with direct transduction and broadband response. *Nature Communications*, 9(1):2926, July 2018. doi: 10.1038/s41467-018-05301-6.
- [113] Heetak Han, Sanggeun Lee, Jungmok Seo, Chandreswar Mahata, Sung Hwan Cho, A-Reum Han, Keun-Sung Hong, Joon-Ho Park, Myung-Jin Soh, Cheolmin Park, and Taeyoon Lee. Enhancement of X-ray detection by single-walled carbon nanotube enriched flexible polymer composite. *Nanoscale Research Letters*, 9(1):610, November 2014. doi: 10.1186/1556-276x-9-610.
- [114] Christopher A. Mills, Akarin Intaniwet, Maxim Shkunov, Joseph L. Keddie, and Paul J. Sellin. Flexible radiation dosimeters incorporating semiconducting polymer thick films. In Ralph B. James, Larry A. Franks, and Arnold Burger, editors, *SPIE Proceedings*. SPIE, 2009. doi: 10.1117/12.829619.
- [115] D. W. O. Rogers, B. A. Faddegon, G. X. Ding, C.-M. Ma, J. We, and T. R. Mackie. BEAM: A Monte Carlo code to simulate radiotherapy treatment units. *Medical Physics*, 22(5):503–524, May 1995. doi: 10.1118/1.597552.

- [116] I. Kawrakow and D. W. O. Rogers. The EGSnrc Code System: Monte Carlo simulation of electron and photon transport. Technical Report PIRS-701 (4th printing). Technical report, 2003.
- [117] I. Kawrakow, E. Mainegra-Hing, and D. W. O. Rogers. EGSnrcMP: the multi-platform environment for EGSnrc. Technical Report PIRS-877. Technical report, 2003.
- [118] Olga Nazarenko, Sergii Yakunin, Viktoriia Morad, Ihor Cherniukh, and Maksym V. Kovalenko. Single crystals of caesium formamidinium lead halide perovskites: solution growth and gamma dosimetry. *NPG Asia Materials*, 9(4):e373, April 2017. doi: 10.1038/am.2017.45.
- [119] Mark T. Weller, Oliver J. Weber, Jarvist M. Frost, and Aron Walsh. Cubic Perovskite Structure of Black Formamidinium Lead Iodide, α -[HC(NH₂)₂]PbI₃, at 298 K. *The Journal of Physical Chemistry Letters*, 6(16):3209–3212, August 2015. doi: 10.1021/acs.jpcllett.5b01432.
- [120] Constantinos C. Stoumpos, Christos D. Malliakas, and Mercouri G. Kanatzidis. Semiconducting Tin and Lead Iodide Perovskites with Organic Cations: Phase Transitions, High Mobilities, and Near-Infrared Photoluminescent Properties. *Inorganic Chemistry*, 52(15):9019–9038, July 2013. doi: 10.1021/ic401215x.
- [121] W. Que and J. A. Rowlands. X-ray photogeneration in amorphous selenium: Geminate versus columnar recombination. *Physical Review B*, 51(16):10500–10507, April 1995. doi: 10.1103/physrevb.51.10500.
- [122] Claude A. Klein. Bandgap Dependence and Related Features of Radiation Ionization Energies in Semiconductors. *Journal of Applied Physics*, 39(4):2029–2038, March 1968. doi: 10.1063/1.1656484.
- [123] R. Devanathan, L. R. Corrales, F. Gao, and W. J. Weber. Signal variance in gamma-ray detectors—A review. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, 565(2):637–649, September 2006. doi: 10.1016/j.nima.2006.05.085.
- [124] Gabriella A. Tosado, Yi-Yu Lin, Erjin Zheng, and Qiuming Yu. Impact of cesium on the phase and device stability of triple cation Pb–Sn double halide perovskite films and solar cells. *Journal of Materials Chemistry A*, 6(36):17426–17436, 2018. doi: 10.1039/c8ta06391e.
- [125] Karl Hecht. Zum Mechanismus des lichtelektrischen Primärstromes in isolierenden Kristallen. *Zeitschrift für Physik*, 77(3-4):235–245, 1932. doi: 10.1007/bf01338917.
- [126] Christopher Eames, Jarvist M. Frost, Piers R. F. Barnes, Brian C. O’Regan, Aron Walsh, and M. Saiful Islam. Ionic transport in hybrid lead iodide perovskite solar cells. *Nature Communications*, 6(1):7497, June 2015. doi: 10.1038/ncomms8497.
- [127] Philip Calado, Andrew M. Telford, Daniel Bryant, Xiaoe Li, Jenny Nelson, Brian C. O’Regan, and Piers R. F. Barnes. Evidence for ion migration in hybrid perovskite solar cells with minimal hysteresis. *Nature Communications*, 7(1):13831, December 2016. doi: 10.1038/ncomms13831.

- [128] Simon E. J. O'Kane, Giles Richardson, Adam Pockett, Ralf G. Niemann, James M. Cave, Nobuya Sakai, Giles E. Eperon, Henry J. Snaith, Jamie M. Foster, Petra J. Cameron, and Alison B. Walker. Measurement and modelling of dark current decay transients in perovskite solar cells. *Journal of Materials Chemistry C*, 5(2):452–462, 2017. doi: 10.1039/c6tc04964h.
- [129] Sergii Yakunin, Dmitry N. Dirin, Yevhen Shynkarenko, Viktoriia Morad, Ihor Cherniukh, Olga Nazarenko, Dominik Kreil, Thomas Nauser, and Maksym V. Kovalenko. Detection of gamma photons using solution-grown single crystals of hybrid lead halide perovskites. *Nature Photonics*, 10(9):585–589, July 2016. doi: 10.1038/nphoton.2016.139.
- [130] Hugh Lu Zhu, Jiaqi Cheng, Di Zhang, Chunjun Liang, Claas J. Reckmeier, He Huang, Andrey L. Rogach, and Wallace C. H. Choy. Room-Temperature Solution-Processed NiOx:PbI₂ Nanocomposite Structures for Realizing High-Performance Perovskite Photodetectors. *ACS Nano*, 10(7):6808–6815, June 2016. doi: 10.1021/acsnano.6b02425.
- [131] Wei-Chih Lai, Kun-Wei Lin, Tzung-Fang Guo, Peter Chen, and Yuan-Yu Liao. Perovskite-based solar cells with inorganic inverted hybrid planar heterojunction structure. *AIP Advances*, 8(1):015109, January 2018. doi: 10.1063/1.5010951.
- [132] Kuo-Chin Wang, Po-Shen Shen, Ming-Hsien Li, Shi Chen, Ming-Wei Lin, Peter Chen, and Tzung-Fang Guo. Low-Temperature Sputtered Nickel Oxide Compact Thin Film as Effective Electron Blocking Layer for Mesoscopic NiO/CH₃NH₃PbI₃ Perovskite Heterojunction Solar Cells. *ACS Applied Materials & Interfaces*, 6(15):11851–11858, July 2014. doi: 10.1021/am503610u.
- [133] Guijun Li, Yibin Jiang, Sunbin Deng, Alwin Tam, Ping Xu, Man Wong, and Hoi-Sing Kwok. Overcoming the Limitations of Sputtered Nickel Oxide for High-Efficiency and Large-Area Perovskite Solar Cells. *Advanced Science*, 4(12):1700463, October 2017. doi: 10.1002/advs.201700463.
- [134] Erin L. Ratcliff, Jens Meyer, K. Xerxes Steirer, Neal R. Armstrong, Dana Olson, and Antoine Kahn. Energy level alignment in PCDTBT:PC70BM solar cells: Solution processed NiOx for improved hole collection and efficiency. *Organic Electronics*, 13(5):744–749, 2012. doi: 10.1016/j.orgel.2012.01.022.
- [135] H. R. Tan, X. W. Zhang, F. R. Tan, H. L. Gao, Z. G. Yin, Y. M. Bai, X. L. Zhang, and S. C. Qu. Performance improvement of conjugated polymer and ZnO hybrid solar cells using nickel oxide as anode buffer layer. *physica status solidi (a)*, 208(12):2865–2870, July 2011. doi: 10.1002/pssa.201127227.
- [136] Weicheng Pan, Haodi Wu, Jiajun Luo, Zhenzhou Deng, Cong Ge, Chao Chen, Xiaowei Jiang, Wan-Jian Yin, Guangda Niu, Lujun Zhu, Lixiao Yin, Ying Zhou, Qingguo Xie, Xiaoxing Ke, Manling Sui, and Jiang Tang. Cs₂AgBiBr₆ single-crystal X-ray detectors with a low detection limit. *Nature Photonics*, 11(11):726–732, October 2017. doi: 10.1038/s41566-017-0012-4.

- [137] Christina Heilmaier, Niklaus Zuber, and Dominik Weishaupt. Implementation of a patient dose monitoring system in conventional digital X-ray imaging: initial experiences. *European Radiology*, 27(3):1021–1031, June 2016. doi: 10.1007/s00330-016-4390-7.
- [138] Wei-Yi Chen, Lin-Long Deng, Si-Min Dai, Xin Wang, Cheng-Bo Tian, Xin-Xing Zhan, Su-Yuan Xie, Rong-Bin Huang, and Lan-Sun Zheng. Low-cost solution-processed copper iodide as an alternative to PEDOT:PSS hole transport layer for efficient and stable inverted planar heterojunction perovskite solar cells. *Journal of Materials Chemistry A*, 3(38):19353–19359, 2015. doi: 10.1039/c5ta05286f.
- [139] A. B. Huang, J. T. Zhu, J. Y. Zheng, Y. Yu, Y. Liu, S. W. Yang, S. H. Bao, L. Lei, and P. Jin. Achieving high-performance planar perovskite solar cells with co-sputtered Co-doping NiOx hole transport layers by efficient extraction and enhanced mobility. *Journal of Materials Chemistry C*, 4(46):10839–10846, 2016. doi: 10.1039/c6tc03624d.
- [140] Henning Mescher, Fabian Schackmar, Robert Huber, Helge Eggers, Marcus Zuber, Elias Hamann, Georg Gramlich, Julian Dangelmaier, Qiaoshuang Zhang, Andres Georg Rösch, Thomas Zwick, Gerardo Hernandez-Sosa, Ulrich W. Paetzold, and Uli Lemmer. Origami-inspired perovskite X-ray detector by printing and folding. *npj Flexible Electronics*, 7(9), February 2023. doi: 10.1038/s41528-023-00240-9.
- [141] Fabian Schackmar, Helge Eggers, Markus Frericks, Bryce S. Richards, Uli Lemmer, Gerardo Hernandez-Sosa, and Ulrich W. Paetzold. Perovskite Solar Cells with All-Inkjet-Printed Absorber and Charge Transport Layers. *Advanced Materials Technologies*, 6(2):2000271, July 2020. doi: 10.1002/admt.202000271.
- [142] Helge Eggers, Fabian Schackmar, Tobias Abzieher, Qing Sun, Uli Lemmer, Yana Vaynzof, Bryce S. Richards, Gerardo Hernandez-Sosa, and Ulrich W. Paetzold. Inkjet-Printed Micrometer-Thick Perovskite Solar Cells with Large Columnar Grains. *Advanced Energy Materials*, 10(6):1903184, December 2019. doi: 10.1002/aenm.201903184.
- [143] Yang Zhou, Jie Chen, Osman M. Bakr, and Omar F. Mohammed. Metal Halide Perovskites for X-ray Imaging Scintillators and Detectors. *ACS Energy Letters*, 6(2):739–768, January 2021. doi: 10.1021/acsenenergylett.0c02430.
- [144] Laura Basiricò, Andrea Ciavatti, and Beatrice Fraboni. Solution-Grown Organic and Perovskite X-Ray Detectors: A New Paradigm for the Direct Detection of Ionizing Radiation. *Advanced Materials Technologies*, 6(1):2000475, August 2020. doi: 10.1002/admt.202000475.
- [145] Zhengwei Pan, Long Wu, Jizhong Jiang, Liang Shen, and Kai Yao. Searching for High-Quality Halide Perovskite Single Crystals toward X-ray Detection. *The Journal of Physical Chemistry Letters*, 13(13):2851–2861, March 2022. doi: 10.1021/acs.jpcclett.2c00450.
- [146] J. Punnoose, J. Xu, A. Sisniega, W. Zbijewski, and J. H. Siewerdsen. Technical Note: spektr 3.0-A computational tool for x-ray spectrum modeling and analysis. *Medical Physics*, 43(8Part1): 4711–4717, July 2016. doi: 10.1118/1.4955438.

- [147] John M. Boone and J. Anthony Seibert. An analytical edge spread function model for computer fitting and subsequent calculation of the LSF and MTF. *Medical Physics*, 21(10):1541–1545, October 1994. doi: 10.1118/1.597264.
- [148] Wei Wei, Yang Zhang, Qiang Xu, Haotong Wei, Yanjun Fang, Qi Wang, Yehao Deng, Tao Li, Alexei Gruverman, Lei Cao, and Jinsong Huang. Monolithic integration of hybrid perovskite single crystals with heterogenous substrate for highly sensitive X-ray imaging. *Nature Photonics*, 11(5):315–321, April 2017. doi: 10.1038/nphoton.2017.43.
- [149] Jizhong Jiang, Min Xiong, Ke Fan, Chunxiong Bao, Deyu Xin, Zhengwei Pan, Linfeng Fei, Haitao Huang, Lang Zhou, Kai Yao, Xiaojia Zheng, Liang Shen, and Feng Gao. Synergistic strain engineering of perovskite single crystals for highly stable and sensitive X-ray detectors with low-bias imaging and monitoring. *Nature Photonics*, 16(8):575–581, July 2022. doi: 10.1038/s41566-022-01024-9.
- [150] Bo Yang, Weicheng Pan, Haodi Wu, Guangda Niu, Jun-Hui Yuan, Kan-Hao Xue, Lixiao Yin, Xinyuan Du, Xiang-Shui Miao, Xiaoquan Yang, Qingguo Xie, and Jiang Tang. Heteroepitaxial passivation of Cs₂AgBiBr₆ wafers with suppressed ionic migration for X-ray imaging. *Nature Communications*, 10(1):1989, April 2019. doi: 10.1038/s41467-019-09968-3.
- [151] Yucheng Liu, Yunxia Zhang, Zhou Yang, Jian Cui, Haodi Wu, Xiaodong Ren, Kui Zhao, Jiangshan Feng, Jiang Tang, Zhuo Xu, and Shengzhong (Frank) Liu. Large Lead-Free Perovskite Single Crystal for High-Performance Coplanar X-Ray Imaging Applications. *Advanced Optical Materials*, 8(19):2000814, July 2020. doi: 10.1002/adom.202000814.
- [152] Yilong Song, Liqi Li, Mingwei Hao, Weihui Bi, Anran Wang, Yifei Kang, Hanming Li, Xiaohui Li, Yanjun Fang, Deren Yang, and Qingfeng Dong. Elimination of Interfacial-Electrochemical-Reaction-Induced Polarization in Perovskite Single Crystals for Ultrasensitive and Stable X-Ray Detector Arrays. *Advanced Materials*, 33(52):2103078, October 2021. doi: 10.1002/adma.202103078.
- [153] Sarah Deumel, Albert van Breemen, Gerwin Gelinck, Bart Peeters, Joris Maas, Roy Verbeek, Santhosh Shanmugam, Hylke Akkerman, Eric Meulenkaamp, Judith E. Huerdler, Manogna Acharya, Marisé García-Batlle, Osbel Almora, Antonio Guerrero, Germà Garcia-Belmonte, Wolfgang Heiss, Oliver Schmidt, and Sandro F. Tedde. High-sensitivity high-resolution X-ray imaging with soft-sintered metal halide perovskites. *Nature Electronics*, 4(9):681–688, September 2021. doi: 10.1038/s41928-021-00644-3.
- [154] Matteo Verdi, Antonella Giuri, Andrea Ciavatti, Aurora Rizzo, Carola Esposito Corcione, Laura Basiricò, Silvia Colella, and Beatrice Fraboni. Record Stability for Fully Passive Perovskite-Based X-Ray Detectors Through the Use of Starch as Templating Agent. *Advanced Materials Interfaces*, 10(18):2300044, May 2023. doi: 10.1002/admi.202300044.

- [155] Babar Shabbir, Jae Choul Yu, Tharindu Warnakula, R. A. W. Ayyubi, James A. Pollock, M. Mosarof Hossain, Jueng-Eun Kim, Nasiruddin Macadam, Leonard. W. T. Ng, Tawfique Hasan, Doo-jin Vak, Marcus J. Kitchen, and Jacek J. Jasieniak. Printable Perovskite Diodes for Broad-Spectrum Multienergy X-Ray Detection. *Advanced Materials*, 35(20):2210068, February 2023. doi: 10.1002/adma.202210068.
- [156] Zihan Wang, Shujie Tie, Hui Zhang, Changmao Wan, Zheng Liang, Huifen Xu, Xiaojia Zheng, Wenhua Zhang, Dmitry Aldakov, Peter Reiss, Jiajiu Ye, and Xu Pan. Supple Formamidinium-Based Low-Dimension Perovskite Derivative for Sensitive and Ultrastable X-ray Detection. *ACS Nano*, 17(14):13638–13647, July 2023. doi: 10.1021/acsnano.3c02476.
- [157] Yingjun Chai, Zhili Juan, Ye Wu, Yang Liu, and Xiaoming Li. Suppressing the Ion Migration in Halide Perovskite Wafers for Current-Drift Free X-ray Detectors. *ACS Applied Electronic Materials*, 5(1):544–551, January 2023. doi: 10.1021/acsaelm.2c01597.
- [158] Kewen Tao, Chenwei Xiong, Jiachun Lin, Decai Ma, Shaopeng Lin, Biao Wang, and Huashan Li. Self-Powered Photodetector Based on Perovskite/NiOx Heterostructure for Sensitive Visible Light and X-Ray Detection. *Advanced Electronic Materials*, 9(3):2201222, January 2023. doi: 10.1002/aelm.202201222.
- [159] Liwen Qiu, Mingqiang Wang, Tian Sun, Qiang Lou, Tong Chen, Guoshen Yang, Wei Qian, Zixuan Zhang, Shihe Yang, Min Zhang, Yufeng Jin, and Hang Zhou. An interfacial toughening strategy for high stability 2D/3D perovskite X-ray detectors with a carbon nanotube thin film electrode. *Nanoscale*, 15(35):14574–14583, August 2023. doi: 10.1039/d3nr02801a.
- [160] Lei Pan, Zhifu Liu, Claire Welton, Vladislav V. Klepov, John A. Peters, Michael C. De Siena, Alessandro Benadia, Indra Pandey, Antonino Miceli, Duck Young Chung, G. N. Manjunatha Reddy, Bruce W. Wessels, and Mercouri G. Kanatzidis. Ultrahigh-Flux X-ray Detection by a Solution-Grown Perovskite CsPbBr₃ Single-Crystal Semiconductor Detector. *Advanced Materials*, 35(25):2211840, March 2023. doi: 10.1002/adma.202211840.
- [161] Zhilong Chen, Hu Wang, Fenghua Li, Wenqing Zhang, Yuchuan Shao, and Shuang Yang. Ultra-sensitive and Robust CsPbBr₃ Single-Crystal X-ray Detectors Based on Interface Engineering. *ACS Applied Materials & Interfaces*, 15(44):51370–51379, October 2023. doi: 10.1021/acsaami.3c11409.
- [162] Wolfgang Schlegel, Christian P. Karger, and Oliver Jäkel, editors. *Medizinische Physik*. Springer Berlin Heidelberg, 2018. doi: 10.1007/978-3-662-54801-1.
- [163] Oliver Jäkel, Gerhard Kraft, and Christian P. Karger. The history of ion beam therapy in Germany. *Zeitschrift für Medizinische Physik*, 32(1):6–22, February 2022. doi: 10.1016/j.zemedi.2021.11.003.
- [164] Luis Arturo Ruiz-Preciado, Sanghoon Baek, Noah Strobel, Kai Xia, Mervin Seiberlich, Sungmin Park, Uli Lemmer, Sungjune Jung, and Gerardo Hernandez-Sosa. Monolithically printed all-organic flexible photosensor active matrix. *npj Flexible Electronics*, 7(6), February 2023. doi: 10.1038/s41528-023-00242-7.

Danksagung

Mit dem Abschluss dieser Arbeit endet für mich persönlich ein sehr wichtiges Kapitel in meinem Leben. Während meiner Zeit als Doktorand habe ich eine Vielzahl an Höhen und Tiefen durchlaufen, eine Menge wichtiger Erfahrungen gesammelt und nicht zuletzt einige tolle Menschen kennengelernt. Mein besonderer Dank gilt:

- Prof. Dr. Uli Lemmer für das Vertrauen, das er mir als mein Doktorvater entgegengebracht hat. An dieser Stelle sollte erwähnt werden, dass Uli mich nicht nur als Wissenschaftler, sondern auch auf der menschlichen Ebene voll und ganz überzeugt hat. Ich freue mich daher nicht nur darüber, dass Uli meine Arbeit betreut hat, sondern ebenfalls, dass ich ihn als Menschen kennen lernen durfte.
- Prof. Dr. Oliver Jäkel für das Interesse an meiner Arbeit und die Übernahme des Korreferats.
- Elias und Marcus für die außergewöhnlich gute Zusammenarbeit und die Unterstützung bei den unzähligen Messungen zur Charakterisierung der Röntgendetektoren.
- Fabian und Helge für die fruchtbare wissenschaftliche Zusammenarbeit.
- Alexander, Andres, Dominik, Fabian, Felix, Leo, Philipp und Robert für die amüsanten Aktivitäten neben der Arbeit, die gut gemeinten frechen Sprüche auf dem Gang, die kollegiale Atmosphäre und die neu geschlossenen Freundschaften.
- Bahram, Donie, Fabian Denk, Georg und Noah für die Hilfsbereitschaft und die positive Arbeitsatmosphäre.
- Andres, Benjamin und Manuel für die sehr gute Zusammenarbeit im Rahmen unserer Lehrtätigkeiten.
- Adrian, Amos, Andreas, Anne, Carsten, Jan Preinfalk, Nate und Nico für den herzlichen Empfang, die Unterstützung und den positiven Umgang insbesondere zu Beginn meiner Zeit am Lichttechnischen Institut.
- Matthias und André für die Offenheit und Hilfsbereitschaft zu Beginn meines Forschungsprojekts sowie für die tolle Zeit im Zusammenhang mit Otego.
- Herrn Geislhöringer für die Hilfsbereitschaft und die Unterstützung beim Drucken von Klausuren.
- Christian für die Hilfe bei der Betreuung des Profilometers.

- Julian Dangelmaier für die tolle Arbeit als Student und als wissenschaftliche Hilfskraft.
- Prof. Dr. Uli Paetzold für die Hilfe im Umgang mit Gutachtern.
- Astrid und Claudia für die Unterstützung bei organisatorischen Fragestellungen.
- Amos, Dominik, Isabel, Jonathan, Junchi, Mohamed, Philipp und Raphael für die positive Arbeitssphäre im Büro.
- Jan, Elias, Dominik, Fabian, Leo, Georg, Felix, Pirmin, Helge, Robert und Jürgen für das Korrekturlesen.
- der Karlsruhe School of Optics & Photonics (KSOP) und dem Exzellenzcluster 3D Matter Made to Order (3DMM2O) für die abwechslungsreichen Veranstaltungen und die interessanten Weiterbildungsangebote.
- meinen Eltern Ulrike und Jürgen für die Möglichkeit, erfolgreich zu studieren und die Hilfe in herausfordernden Lebensabschnitten.
- meinen Schwiegereltern in spe Rosina und Walter für die Möglichkeit, beim Baumfällen und Holzspalten auf andere Gedanken zu kommen und für die spontanen gemeinsamen Abendessen.
- meinem Bruder Jan für die hilfreichen Gespräche und die entspannten Koch- und Grillabende.
- Julian, Benni, Karsten, Tobi, Micha, Christoph und Laura für (erfolgreiche) Erinnerungen, dass auch ein Leben neben der Promotion existiert.
- meiner Freundin Magdalena für die uneingeschränkte Unterstützung in jeder Lebenslage, für die Nachsicht im Hinblick auf lange Arbeitstage, für die Ausdauer und das Durchhaltevermögen in schwierigen Zeiten und für die Lebensfreude während meiner gesamten Zeit als Doktorand.