

Document downloaded from:

<http://hdl.handle.net/10251/61053>

This paper must be cited as:

Gallardo Bermell, S.; Querol Vives, A.; Ortiz Moragón, J.; Ródenas Diago, J.; Verdú Martín, GJ. (2014). Análisis del Dead Layer de un detector de Germanio Ultrapuro con el código de Monte Carlo Sword-Geant. 40ª Reunión Anual de la Sociedad Nuclear Española. Grupo Senda.



The final publication is available at

<http://www.reunionanualsne.es/doc/40/ponencias/tecnicas/MEDICINA/34/34-08.pdf>

Copyright Grupo Senda

Additional Information

ANÁLISIS DEL DEAD LAYER DE UN DETECTOR DE GERMANIO ULTRAPURO CON EL CÓDIGO DE MONTE CARLO SWORD-GEANT

Sergio Gallardo¹, Andrea Querol¹, Josefina Ortiz², José Ródenas¹ y Gumersindo Verdú¹

¹*Instituto de Seguridad Industrial, Radiofísica y Medioambiental,*

Universitat Politècnica de València

²*Laboratorio de Radiactividad Ambiental, Universitat Politècnica de València*

sergalbe@iqn.upv.es; anquevi@upvnet.upv.es; jortiz@iqn.upv.es; jrodenas@iqn.upv.es; gverdu@iqn.upv.es

Resumen – En este trabajo se propone el uso del código de Monte Carlo SWORD-GEANT para simular un detector de germanio ultra puro High Purity Germanium Detector (HPGe), en concreto el detector ORTEC GMX40P4, de geometría coaxial. El modelo de Monte Carlo incluye una caja Petri con agua. La fuente reproduce un patrón certificado gamma, incluyendo los siguientes isótopos: Am-241; Cd-109; Co-57; Ce-139; Cr-51; Sn-113; Sr-85; Cs-137; Mn-54; Y-88 and Co-60. Uno de los objetivos de este trabajo es la obtención de la curva de eficiencias para una geometría Petri. Con el paso del tiempo, la eficiencia del germanio puede disminuir sensiblemente debido a la degradación de la zona periférica del cristal, o dicho de otro modo, con el tiempo puede aumentar el espesor de la capa muerta del cristal y en consecuencia, disminuir el volumen activo de detección. En este marco, se propone el uso de la fórmula Noether-Wilks para realizar un análisis de incertidumbres de ciertas variables geométricas de diseño y del experimento y su efecto sobre la curva de eficiencias. Este análisis se ha centrado en el espesor de la capa muerta presente en diferentes partes del cristal detector (superior, lateral y en el hueco interior). Con el objetivo de obtener resultados con un 95% de intervalo de confianza, se han realizado 93 simulaciones utilizando el código SWORD-GEANT. Los resultados obtenidos con este análisis se han comparado con la eficiencia obtenida experimentalmente, observándose una aceptable reproducción en el intervalo comprendido entre 59 y 800 keV. Sin embargo, se han encontrado importantes discrepancias en la eficiencia correspondiente a los radionucleidos Y-88 y Co-60. Éstas se deben a efectos de corrección por pico suma que no se han considerado en este trabajo.

1. INTRODUCCIÓN

En medidas pertenecientes a aplicaciones médicas y al campo de la radiactividad ambiental se suele utilizar equipos espectrométricos que incluyen detectores de germanio ultra puros (o de alta pureza). Los códigos de Monte Carlo han demostrado ser herramientas con un gran potencial para ser utilizados de manera complementaria a las medidas realizadas en el laboratorio, especialmente en los procesos de calibración de detectores. En la actualidad existen numerosos códigos de Monte Carlo que se están utilizando por parte de la comunidad científica internacional. Entre ellos, MCNP y GEANT son códigos altamente contrastados y aceptados para la simulación de los procesos físicos de la interacción de la radiación ionizante con la materia [1, 2]. Gran parte de la información necesaria para la correcta simulación del detector se puede encontrar en el certificado emitido por el fabricante, incluyendo las características principales en cuanto tamaño, capas y especificaciones en general.

Sin embargo, en muchas ocasiones, los fabricantes no ofrecen información detallada de la capa inactiva del cristal de germanio. Además, incluso en los casos en los que se facilita dicha información, ésta deja de ser adecuada, ya que la capa muerta aumenta progresivamente su espesor con el tiempo y el uso del detector, reduciéndose la eficiencia para determinadas energías. Por lo tanto, una mala simulación de la capa muerta conlleva una sobreestimación de la eficiencia, especialmente en el intervalo de bajas energías (40 – 100 keV), aunque también tiene efecto en el intervalo de energías correspondiente al Co-60.

En este trabajo se han obtenido experimentalmente y por simulación con el código SWORD-GEANT las curvas de eficiencia correspondientes a una geometría Petri utilizando un detector HPGe [3]. Las incertidumbres de la simulación vienen dadas fundamentalmente por el desconocimiento de las capas muertas reales del cristal. En esta línea, se ha utilizado la fórmula de Noether-Wilks [4] para estimar el efecto de la variación de las diferentes capas muertas con la eficiencia de detección.

2. MATERIALES Y MÉTODOS

2.1. Equipo y medidas experimentales

Se ha utilizado un detector de germanio ultra puro (HPGe) coaxial para realizar las medidas experimentales en el Laboratorio de Radiactividad Ambiental (LRA) de la Universitat Politècnica de València (UPV). El detector es modelo ORTEC GMX40P4 cuyas principales características técnicas son: la eficiencia relativa a 1,33 MeV para Co-60 es del 40%; la FWHM de 2 keV para esta misma energía; relación FWTM/FWHM 2,0 keV para 1,33 MeV y el ratio pico/Compton es de 59:1 para el Co-60. El cristal tiene un diámetro de 60 mm y una longitud de 71,1 mm. El diámetro del hueco interior del cristal es de 9 mm y la longitud de dicho hueco es de 63,1 mm.

El espesor de las diferentes capas muertas del detector no se conoce con exactitud, debido a la existencia de una zona de transición entre la capa muerta y el volumen activo de detección. En este caso, el fabricante ha proporcionado los siguientes valores: 700 μm Ge/Li de capa muerta en la parte superficial del hueco interior y 0,3 μm Ge/B en la parte superior y lateral exterior del cristal. La caja Petri, donde se disuelve un patrón gamma en una matriz de agua, es de polietileno. El patrón utilizado en este caso contiene radionucleidos emisores gamma en el intervalo de energías comprendido entre 59 and 1800 keV. En la Tabla 1 se listan los radionucleidos, la energía de sus principales líneas gamma, la actividad del patrón utilizado en la medida experimental y la tasa de emisión (gamma/s) del patrón en la caja Petri.

Tabla 1. Características del patrón Gamma.

Nucleido	Energía (keV)	Branching ratio	Actividad (Bq) Patrón con agua	Gamma/s En muestra de agua
Am-241	59,54	35,90	71,56	25,69
Cd-109	87,90	3,61	364,85	13,17
Co-57	122,06	85,59	13,37	11,45
Ce-139	165,85	79,95	14,43	11,54
Cr-51	320,15	9,83	269,53	26,50
Sn-113	391,74	64,16	55,01	35,30
Sr-85	513,95	98,30	48,08	47,27
Cs-137	661,59	85,21	68,36	58,25
Mn-54	834,90	99,97	64,41	64,40
Y-88	898,24	95,00	97,22	92,36
Co-60	1173,24	99,90	72,65	72,57
Co-60	1332,53	99,98	72,68	72,66
Y-88	1835,98	99,35	98,24	97,6

Mediante medidas directas de la fuente de calibración, se puede obtener la curva experimental de eficiencias en el intervalo de interés (59 – 1800 keV). La eficiencia experimental a la energía E_y para unas determinadas condiciones de medida es:

$$\text{Eff}_{E\gamma} = \frac{N_{Ei}}{A m t f} \quad (1)$$

donde N_{Ei} es el área neta del fotopico correspondiente a la energía $E\gamma$ de los fotones emitidos por el radionucleido con una actividad conocida, A ; f es el coeficiente de ramificación; m es la masa de patrón y t el tiempo real de medida [5].

2.2. Modelo SWORD

SWORD, “*Software for the Optimization of Radiation Detectors*” es un código ampliamente utilizado para la simulación de la radiación ionizante con la materia. Utiliza como motor de cálculo el código GEANT4 basado en el método general Monte Carlo que permite simular el transporte de neutrones, fotones y electrones por separado o el transporte acoplado neutrón/fotón/electrón. SWORD permite definir volúmenes de detección a partir de geometrías básicas y asignar a dichos objetos, materiales, características de detección, etc. La resolución del detector, en términos de Resolución a media altura de pico (FWHM) viene dada en SWORD por la Expresión 2.

$$\text{FWHM}(\text{keV}) = \sqrt{c^2 + a^2 \left(\frac{E}{E_0}\right)} \quad (2)$$

$E_0=661,66$ keV; a y c son constantes obtenidas por ajuste con la función de los valores experimentales de FWHM. En este caso, $a=1,232$ y $c=0,7329$. La Figura 1 muestra de manera esquemática la geometría del detector considerado.

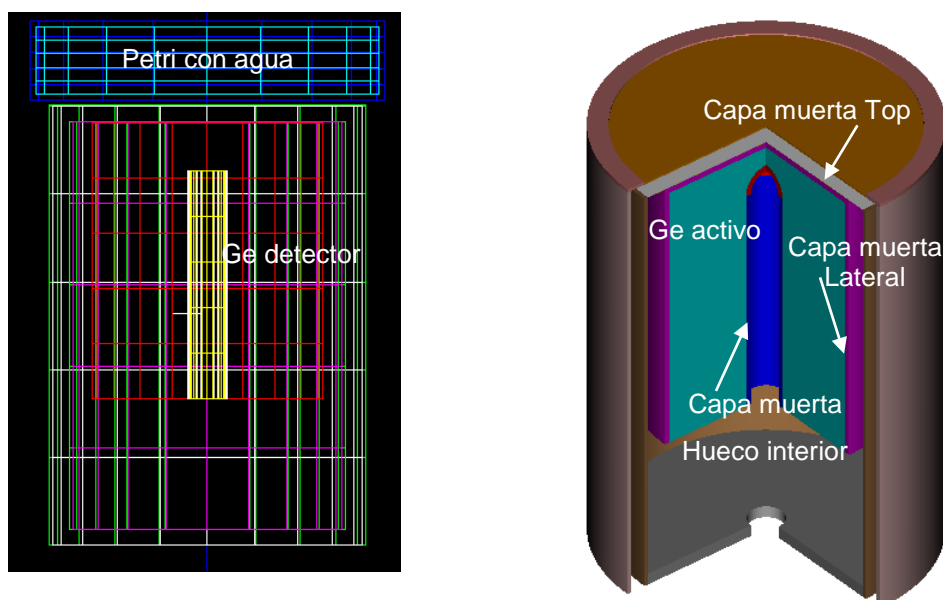


Figura 1. Geometría del detector simulado con SWORD.

2.3. Análisis de incertidumbres

En la simulación de Monte Carlo, la incertidumbre global de la simulación puede ser atribuida a diferentes causas:

- 1) Estadística: debido a la propia naturaleza estocástica del método de Monte Carlo y al número finito de eventos que se simulan.
- 2) Input: asociada a las variables geométricas del modelo, tales como la densidad, las dimensiones geométricas y la composición de los materiales.
- 3) Física: debida a los modelos utilizados para simular las interacciones de la radiación con la materia.

Y se puede expresar como se muestra en la Ecuación 3:

$$u_{\text{global}}^2 = (u_{\text{esta}}^2 + u_{\text{input}}^2 + u_{\text{física}}^2) \quad (3)$$

La incertidumbre física no se va a considerar ya que no se tienen datos experimentales con los que comparar directamente los resultados. La incertidumbre estadística la proporciona el código GEANT/SWORD junto con los resultados de simulación. Las incertidumbres de las variables geométricas del modelo son el objeto de estudio de este trabajo. Para ello, se han variado algunas de las variables geométricas de acuerdo con sus incertidumbres asociadas asignando una función de distribución de probabilidad (PDF) a cada una de las variables consideradas. La selección de estas funciones es la parte más subjetiva de la metodología ya que las PDF reflejan lo conocidas que son las incertidumbres de los parámetros de entrada. En este trabajo, se ha supuesto que todos los parámetros estudiados siguen distribuciones normales.

Así, el proceso empieza con la generación de una muestra aleatoria de valores para los parámetros geométricos, de acuerdo con la PDF que se les ha asignado. El número mínimo de simulaciones de SWORD viene determinado por la fórmula de Wilks [4, 6], y de acuerdo con el nivel de precisión deseado para las medidas de la incertidumbre. Así, el número de simulaciones necesarias no depende del número de parámetros geométricos a estudiar ni de la función de distribución de probabilidad supuesta [7]. Una tolerancia definida en el intervalo comprendido entre un límite inferior (L) y otro superior (U) es una estimación de que la variable aleatoria estará contenida en dicho intervalo con una probabilidad, p , y con un determinado nivel de confianza, γ [8]. Los intervalos de tolerancia se construyen a partir de los datos de la muestra con el fin de incluir un porcentaje de la población de una variable aleatoria X con un nivel de confianza γ dado.

Si una muestra aleatoria de valores de salida tiene una PDF normal, es posible calcular los intervalos de tolerancia a partir de la media de la muestra, m_y , y la desviación estándar de la muestra, s_y , tal y como se muestra en la Ecuación 4:

$$(L, U) = (m_y - Ks_y, m_y + Ks_y) \quad (4)$$

Donde K es el factor de tolerancia, cuyo valor depende del tamaño de muestra, la cobertura de probabilidad, p , y del nivel de confianza, γ . Los valores de K están tabulados en tablas estadísticas estándares para diferentes valores de p , N y γ [7, 8]. Así para estimar el intervalo de tolerancia con un 95% de confianza el número mínimo de simulaciones de SWORD necesario es de 93.

3. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

En la Tabla 2 se listan los valores de eficiencia correspondientes a los valores experimentales y simulados. En el modelo de simulación, se han considerado los valores de las diferentes capas muertas proporcionadas por el fabricante en el certificado del producto. Se ha utilizado como matriz de medida, el agua. Como puede apreciarse en la Tabla 2, las eficiencias obtenidas con SWORD son próximas a los valores experimentales en el intervalo de energías entre 50 y 800 keV, con un error relativo inferior al 5%.

Tabla 2. Cálculo de eficiencia. Comparación Experimental /SWORD.

Nucleído	Energía (keV)	gamma/s standard	Eficiencia experimental (1sigma %)	Eficiencia SWORD	Ratio SWORD /Experimental
Am-241	59,54	25,69	0,090 (0,525%)	0,090	1,00
Cd-109	88,03	13,17	0,097 (0,769%)	0,092	0,95
Co-57	122,06	11,45	0,090 (0,935%)	0,088	0,98
Ce-139	165,85	11,54	0,074 (1,094%)	0,072	0,97
Cr-51	320,08	26,5	0,045 (0,905%)	0,046	1,01
Sn-113	391,69	35,3	0,039 (0,716%)	0,038	0,97
Sr-85	513,99	47,27	0,031 (0,799%)	0,030	0,97
Cs-137	661,66	58,25	0,025 (0,899%)	0,026	1,04
Mn-54	834,83	64,4	0,021 (0,698%)	0,022	1,04
Y-88	898,02	92,36	0,020 (0,668%)	0,021	1,04
Co-60	1173,24	72,57	0,015 (0,008%)	0,017	1,15
Co-60	1332,5	72,66	0,014 (0,796%)	0,016	1,15
Y-88	1836,01	97,6	0,010 (0,858%)	0,013	1,25

Este intervalo contiene todos los radionucleidos considerados excepto el Y-88 y el Co-60, que son emisores gamma que presentan fenómenos de pico por la emisión de fotones en cascada. Este efecto no se ha considerado en el presente modelo. Las coincidencias por pico suma pueden explicar en cierto modo, las discrepancias observadas tanto para el Co-60 (15%) como para el Y-88 (25%), respecto de la eficiencia experimental. En la Figura 2 se muestra la curva de eficiencias simulada y experimental.

En la Figura 3 se muestra el resultado de los 93 casos ejecutados variando de manera aleatoria el espesor de la capa muerta superior, lateral y del hueco interior del cristal (las cruces rojas marcan el valor experimental de la eficiencia para cada energía considerada). El valor medio se ha establecido de acuerdo con las especificaciones del fabricante. Se ha asumido que los posibles valores de la capa muerta siguen una distribución normal con una desviación típica del 5% del valor medio. La Figura 4 muestra el cociente obtenido entre la eficiencia obtenida por simulación (para los 93 casos) y la eficiencia experimental.

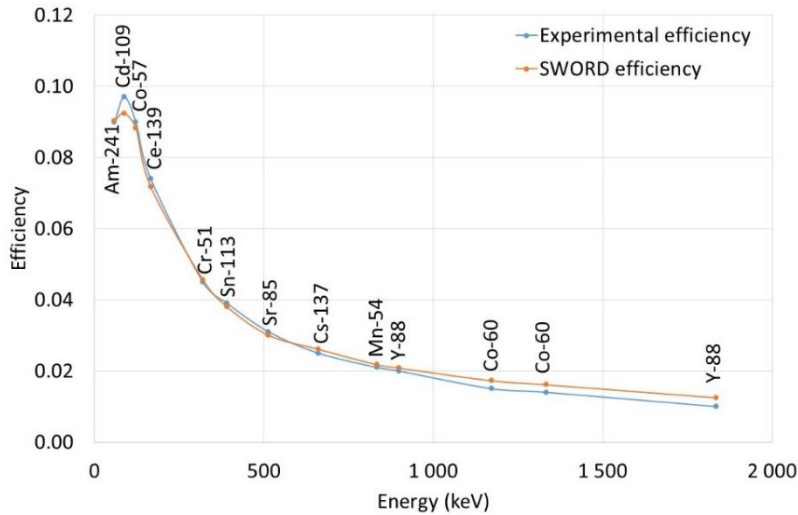


Figura 2. Eficiencias obtenidas por simulación y experimentales.

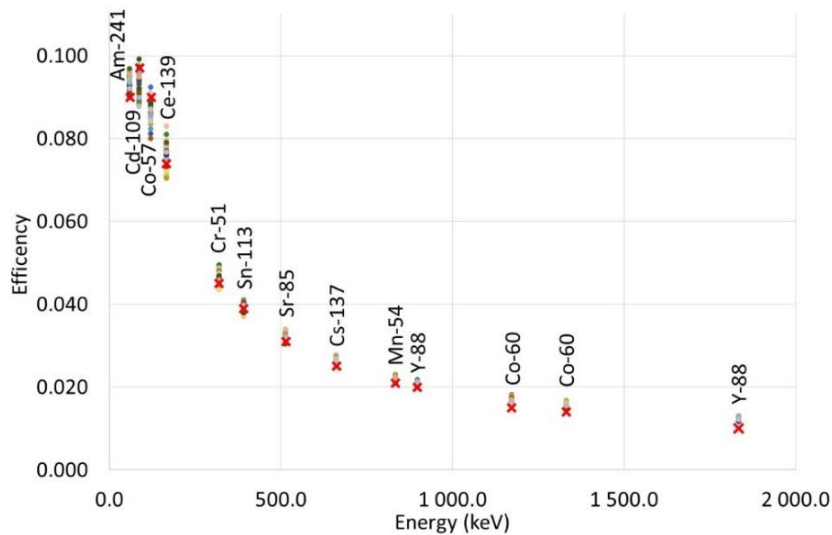


Figura 3. Eficiencias obtenidas con el análisis de incertidumbres.

De acuerdo con estos resultados, se puede decir que al considerar variable el espesor de la capa muerta de las diferentes partes del cristal detector (según las especificaciones descritas anteriormente), se produce una variación de la eficiencia de detección de como máximo el 15%. Si se calcula el cociente entre la eficiencia obtenida por simulación con SWORD y la eficiencia experimental para cada energía y para cada uno de los 93 casos, se obtiene la Figura 4. En este punto, se ha realizado un análisis de sensibilidad a partir de 6 casos diferentes: valor máximo y mínimo de la capa muerta superior; valor máximo mínimo para la capa muerta lateral; valor máximo y mínimo para la capa muerta del hueco interno.

Los resultados obtenidos con este análisis se pueden resumir en los siguientes puntos: La variación de la capa muerta superior produce mayor efecto sobre la eficiencia correspondiente a los radionucleidos en el intervalo de baja energía (por debajo del Ce-139 (5%)). Sin embargo, para el Cs-137, Y-88 y Co-60, este efecto es menor del 2%. En el caso de la capa muerta lateral, el efecto producido sobre la eficiencia es bastante uniforme en todo el intervalo de energías considerado (de 59 a 1800 keV). Dicho efecto es de aproximadamente el 5% del valor de la eficiencia para los valores de

referencia proporcionados por el fabricante. Por último, la capa muerta correspondiente al hueco interior del cristal tiene un efecto despreciable sobre la eficiencia para energías de hasta aproximadamente 600 keV y alrededor del 5% para energías mayores.

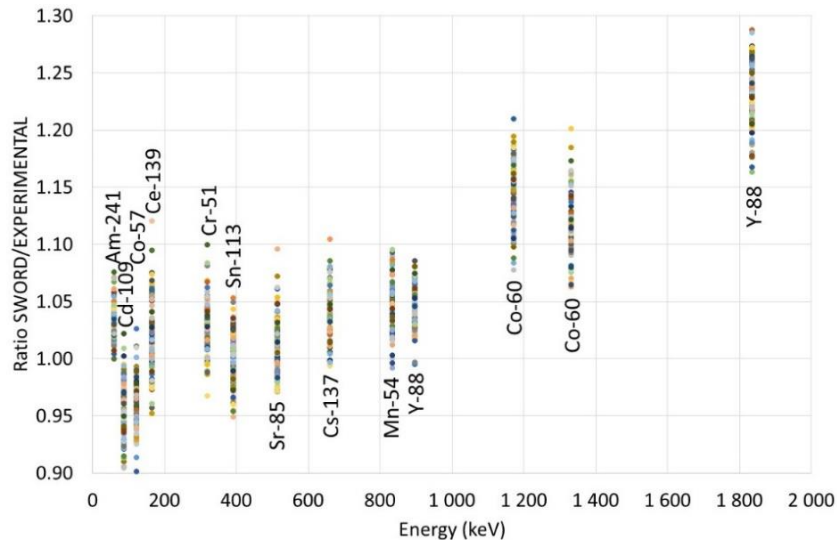


Figura 4. Ratio SWORD/Experimental para el método de Wilks.

4. CONCLUSIONES

El código de Monte Carlo SWORD-GEANT se ha utilizado para la obtención de la curva de eficiencias de un detector de germanio ultra puro. Se ha comprobado que la simulación correspondiente al intervalo de bajas energías presenta importantes dificultades debido especialmente a las incertidumbres asociadas al espesor de las diferentes capas muertas del cristal.

Para determinar su efecto sobre la eficiencia, se ha realizado un análisis de incertidumbres variando aleatoriamente el espesor de las diferentes capas muertas del cristal utilizando la fórmula de Noether-Wilks.

Los resultados obtenidos muestran que la variación del espesor de la capa muerta superior del cristal afecta fundamentalmente a la eficiencia en el intervalo de energías entre 59 and 300 keV. La variación de la capa muerta lateral tiene una influencia bastante homogénea en todo el intervalo de energías considerado (59 and 1800 keV), mientras que la capa muerta del hueco interior restringe su efecto para energías superiores a 600 keV.

REFERENCIAS

1. J. Ródenas, S. Gallardo, S. Ballester, V. Primault, J. Ortiz, “Application of the Monte Carlo method to the analysis of measurement geometries for the calibration of a HP Ge detector in an environmental radioactivity laboratory”, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B, 263, pp.144–148, 2007.
2. Ngo QuangHuy, “The influence of dead layer thickness increase on efficiency decrease for a coaxial HPGe p-type detector”, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A 621, 390–394, 2010.
3. SWORD 4.0: SoftWare for Optimization of Radiation Detectors, SWORD Version 4.0-Beta Build 5435. Debertin, K., Helmer, R.G. Gamma and X-Ray Spectrometry with Semiconductor Detectors. North-Holland, Amsterdam, 1988.

4. S. S. Wilks, *Mathematical statistics*, John Wiley & Sons, 1962.
5. K. Debertin, R.G. Helmer, *Gamma and X-Ray Spectrometry with Semiconductor Detectors*. North-Holland, Amsterdam, 1988.
6. H. Galeser, E. Hofer, M. Kloos, et al. “Uncertainty and sensitivity analysis of a post-experiment calculation in thermal-hydraulics”, *Reliability engineering & system safety*, 45, pp 19 – 33, 2004.
7. E. L. Crow, *Statistics manual with examples taken for ordnance development*, New York Dover Publications, 1960.
8. R. L. Iman, W. J. Conover, “Small sample sensitivity analysis techniques for computer-models, with an application to risk assessment”, *Communications in statistics part A - theory and methods*, 9, pp. 1749-1842, 1980.