

Document downloaded from:

<http://hdl.handle.net/10251/61045>

This paper must be cited as:

Gallardo Bermell, S.; Querol Vives, A.; Ródenas Diago, J.; Verdú Martín, GJ. (2014). Mejoras en la simulación de la eficiencia de un detector HPGe con el código Monte Carlo MCNP5. 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/34/34-16.pdf>

Copyright Grupo Senda

Additional Information

MEJORAS EN LA SIMULACIÓN DE LA EFICIENCIA DE UN DETECTOR HPGe CON EL CÓDIGO MONTE CARLO MCNP5

Sergio Gallardo, Andrea Querol, José Ródenas y Gumersindo Verdú
*Instituto de Seguridad Industrial, Radiofísica y Medioambiental,
Universitat Politècnica de València*

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

Resumen –Durante los últimos años se ha extendido el uso del método Monte Carlo, concretamente el código MCNP5, para la simulación de detectores de Germanio ultra puro (HPGe). La utilización de este tipo de detectores es muy habitual en medidas de radiactividad ambiental debido a la eficiencia del semiconductor y a su excelente resolución en energías. Normalmente, los fabricantes proporcionan información detallada sobre la geometría y resolución, incluyendo en algunas ocasiones características relacionadas con la capa inactiva y los contactos eléctricos. Sin embargo, con el uso el cristal de Germanio ultra puro va aumentando su capa inactiva y por tanto, disminuyendo su volumen activo. En general, el valor exacto del espesor de dicha capa no se conoce. De ahí la importancia de caracterizar de manera adecuada el transporte de la radiación en la capa inactiva para obtener una simulación realista del HPGe. Por este motivo, en este trabajo se propone realizar un modelo de simulación utilizando el código MCNP5 y un registro en forma de mallado para mejorar la simulación de la eficiencia del detector en el intervalo de energías comprendido entre 50 y 2000 keV. Dicho mallado se construye mediante el registro FMESH del código MCNP5 que permite reproducir una malla con celdas de pocas micras. La fluencia de fotones y electrones se calcula en las diferentes celdas del mallado que se superpone a la geometría del detector. La variación de eficiencia (relacionada con la variación de energía depositada en el volumen activo) se ha analizado.

1. INTRODUCCIÓN

En la actualidad, el uso de detectores de Germanio ultra puro (HPGe) es muy habitual para realizar las mediciones de radiactividad ambiental debido a la eficiencia del semiconductor y a su excelente resolución en energías, especialmente para baja actividad.

Para determinar la función de respuesta del detector HPGe se puede utilizar el método Monte Carlo. Este método es muy utilizado para la simulación de fotones y el transporte de electrones. Además, constituye una herramienta muy útil y flexible ya que permite el análisis de un amplio intervalo de energías optimizando el tiempo y los recursos [1, 2].

Entre los métodos de Monte Carlo, MCNP y GEANT son códigos altamente aceptados y contrastados por la comunidad científica para la simulación de los procesos físicos de la interacción de la radiación ionizante con la materia [3, 4]. En este trabajo, se presenta un estudio realizado con el código MCNP5 [5] para mejorar la simulación de un detector HPGe. En concreto, el detector que se estudia es el ORTEC GMX40P4, utilizado en el Laboratorio de Radiactividad Ambiental (LRA) de la Universitat Politècnica de València (UPV).

Normalmente, los fabricantes proporcionan información detallada sobre la geometría y resolución, incluyendo en algunas ocasiones características relacionadas con la capa inactiva y los contactos eléctricos. Sin embargo, con el uso el cristal de Germanio ultra puro va aumentando su capa inactiva y por tanto, disminuyendo su volumen activo. En general, el valor exacto del espesor de dicha capa no se conoce [6]. De ahí la importancia de caracterizar de manera adecuada el transporte de la radiación en la capa inactiva para obtener una simulación realista del HPGe.

Por este motivo, en este trabajo se propone realizar un estudio de los diferentes registros disponibles en MCNP5 para mejorar la simulación de la capa inactiva. En concreto, se utiliza el registro

FMESH ($1/\text{cm}^2$) que permite superponer una malla sobre todo el cristal de Germanio y obtener la fluencia de fotones y electrones para cada celda de la malla. El *F8 (MeV) permite obtener la energía depositada en la capa inactiva considerando diferentes espesores y con el F8 se obtiene la distribución de altura de impulsos (PHD) con lo que se puede calcular la eficiencia y obtener el espectro. Con esto se consigue analizar el espesor de Germanio en el que se producen las interacciones para cada radioisótopo, como varía la eficiencia, relacionada con la variación de energía depositada en el volumen de Germanio activo, así como estimar el valor real del espesor de la capa inactiva.

Una vez conocido el espesor de la capa inactiva se presenta una aplicación del modelo de MCNP5 para la obtención de la eficiencia del detector a partir de la reconstrucción de espectros. Para ello es necesario obtener la matriz de respuesta del sistema a partir de la simulación de diferentes haces monoenergéticos y aplicar un método de deconvolución.

2. MATERIALES Y MÉTODOS

2.1. Equipo y medidas experimentales

El detector de Germanio ultra puro (HPGe) coaxial que se ha estudiado en este trabajo se utiliza en el Laboratorio de Radiactividad Ambiental (LRA) de la Universitat Politècnica de València (UPV) para realizar las medidas experimentales. El detector es el 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. La Figura 1 muestra la geometría del detector y del modelo realizado con MCNP5.

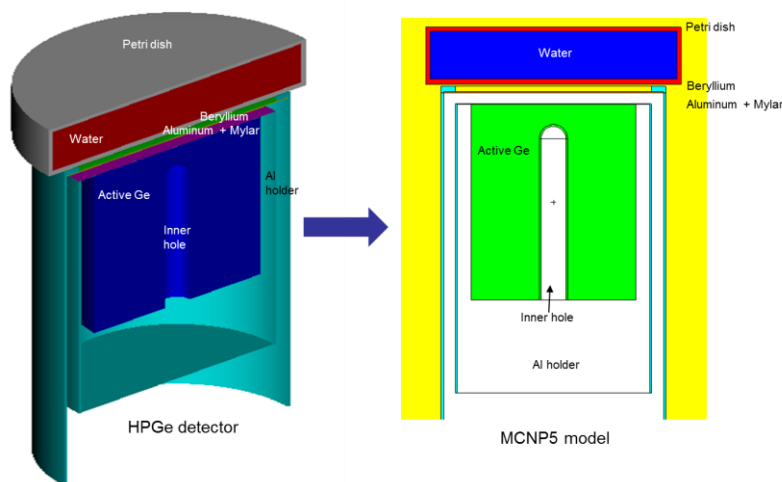


Figura 1. Geometría del detector HPGe

El espesor de la capa inactiva del detector no se conoce con exactitud, debido a la existencia de una zona de transición entre la capa inactiva y el volumen activo de detección. En este caso, el fabricante ha proporcionado los siguientes valores: 700 μm Ge/Li de capa inactiva 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 50 y 2000 keV.

2.2. Modelo de MCNP5

En general, el espesor adecuado de la capa inactiva se obtiene tras realizar un proceso iterativo, en el que se fija un valor de espesor de la capa inactiva, se realiza la simulación y se compara con los resultados experimentales. Según los resultados que se obtengan se reajusta el espesor de la capa inactiva y se repite la simulación hasta que los resultados simulados y experimentales sean similares. En este trabajo se proponen dos modelos de simulación para estimar el valor del espesor de la capa inactiva: un modelo simplificado de fuente puntual con un cristal de Germanio y otro modelo con caja Petri y el detector HPGe detallado, reproduciendo las principales características del detector proporcionadas por el fabricante. La Figura 2 muestra la geometría de los 2 modelos de MCNP5.

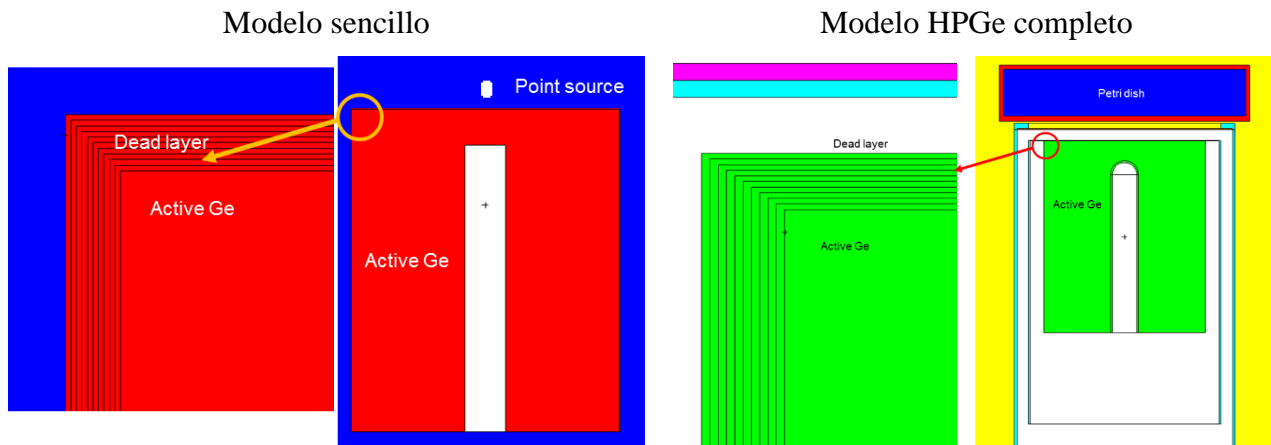


Figura 2. Modelos de MCNP5: a) modelo simple y b) modelo HPGe completo

En ambos modelos se ha realizado la misma nodalización. Se ha activado la simulación de fotones y electrones. El corte o cut-off para fotones se ha fijado en 1 keV (valor por defecto) y para electrones en 10 keV. El número de partículas simuladas ha sido de 20 millones en cada caso. Se ha utilizado un registro (o Tally) de tipo rejilla (o MESH) tanto para fotones como para electrones. Como resultado de la simulación, el código proporciona fluencia (en unidades $1/\text{cm}^2$) en cada nodo del mallado. Sobre el cristal de Germanio de 7,11 cm de longitud, se ha realizado la superposición del mallado de tal manera que el eje del cristal (tomado como cilíndrico) se ha dividido en 1000 celdas.

Por otro lado, se ha utilizado el registro F8 para simular la Distribución de Altura de Impulsos (PHD) que se obtendría experimentalmente con el equipo de espectrometría. Se han simulado 8192 canales en la PHD. En cualquier caso, el resultado proporcionado por MCNP está normalizado por fotón emitido por la fuente.

3. RESULTADOS Y DISCUSIÓN

3.1. F4 mesh

Utilizando el mallado F4 MESH, cuyas unidades son $1/\text{cm}^2$, se ha obtenido la fluencia de fotones en el cristal de Germanio. Los resultados obtenidos por fotón emitido por la fuente para Am-241, Cd-109, Cs-137 y Zn-65 se observan en la Figura 3. Dicho registro de MCNP5 permite superponer una malla sobre el cristal permitiendo obtener la fluencia de fotones en diferentes celdas pequeñas distribuidas sobre él. El diámetro del cristal de 6 cm se ha dividido en 10 celdas, mientras que para la altura del cristal se han considerado diferentes mallados. Para el caso del Am-241 y del Cs-137, al ser emisores de bajas energías, la mayoría de las interacciones ocurren próximas a la superficie del Germanio activo. Este motivo es el que justifica el efecto tan importante del espesor de la capa inactiva en la eficiencia del detector para dichos emisores gamma. Por tanto, el registro FMESH se ha obtenido a 1 cm de profundidad desde la superficie del cristal y se ha dividido en 1000 celdas.

Sin embargo, para el Cs-137 y el Zn-65, como son emisores gamma con mayor poder de penetración, las interacciones ocurren a mayor profundidad en el cristal de Germanio. Esto explica que el espesor de la capa inactiva no tenga casi efecto sobre la eficiencia del detector para estos emisores. Por eso, para estos emisores gamma se ha considerado una malla que ocupa todo el Germanio activo, es decir, 7,11 cm divididos en 1000 celdas.

Como se ha dicho las interacciones de los fotones de baja energía se producen principalmente próximos a la superficie del cristal, por lo que, algunos de los electrones secundarios podrían depositar parte de su energía en la capa inactiva y no ser considerados en los cálculos. Para incluirlos es necesario simular fotones y electrones. La fluencia de electrones por fotón emitido para el Am-241 y el Cd-109 se reduce en menos de 2 mm de Germanio. Sin embargo, para los emisores más penetrantes, Cs-137 y Zn-65, las interacciones Compton y los electrones fotoeléctricos se producen a lo largo de todo el cristal de Germanio.

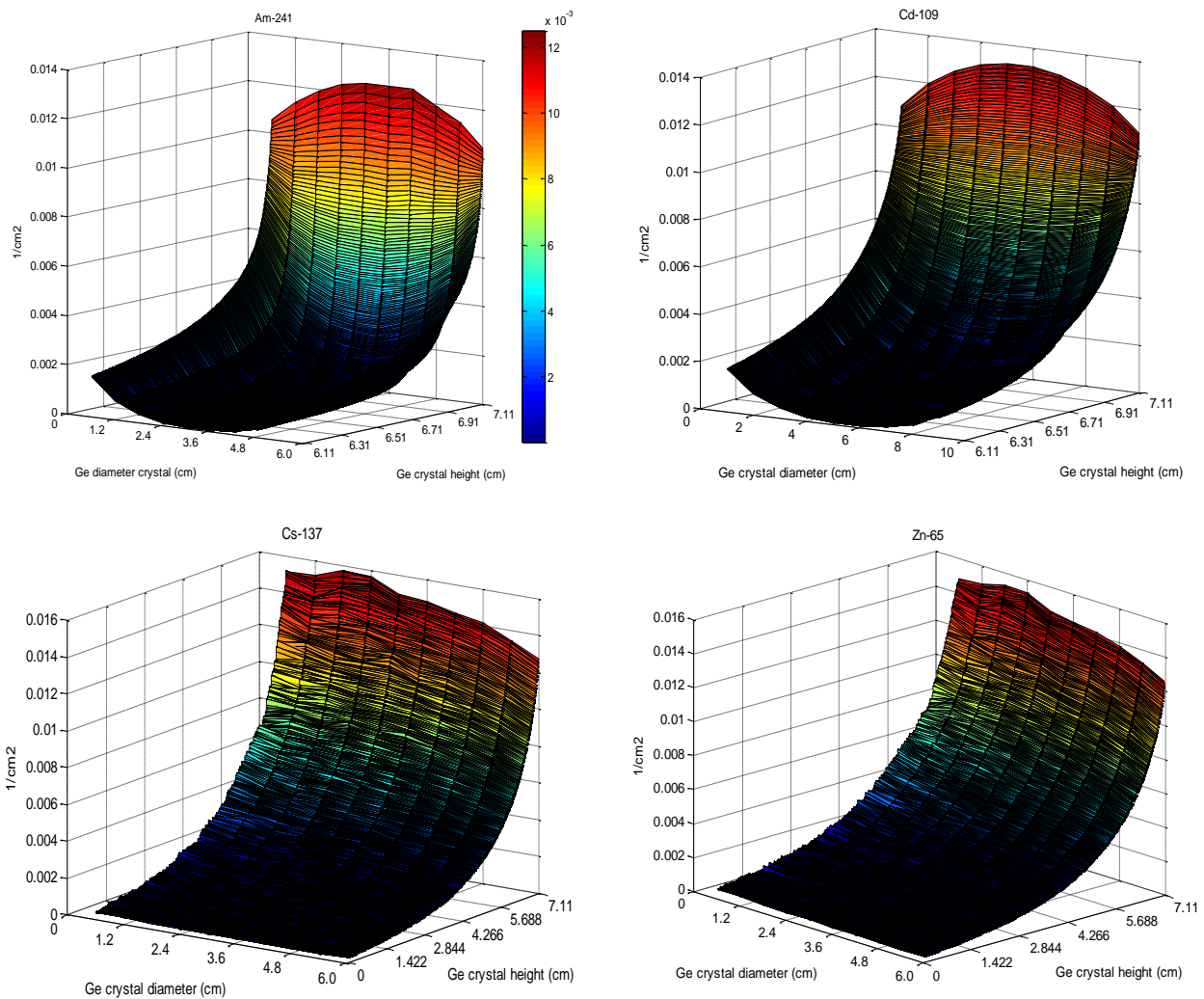


Figura 3. F4MESH para fotones ($1/\text{cm}^2$)

3.2. Registros *F8 y F8

El registro *F8, medido en MeV, se ha utilizado para obtener la energía depositada en la capa inactiva de los diferentes modelos, considerando diferentes espesores. En la Figura 4, donde se muestran los resultados de *F8, se puede observar que existe una relación lineal entre el espesor de la capa inactiva y la energía absorbida para cada radionucleído y cualquier modelo considerado: *F8 Am-

241 es aproximadamente 2 veces *F8 Cd-109. Con el modelo del detector completo, se reduce la energía depositada para todos los emisores.

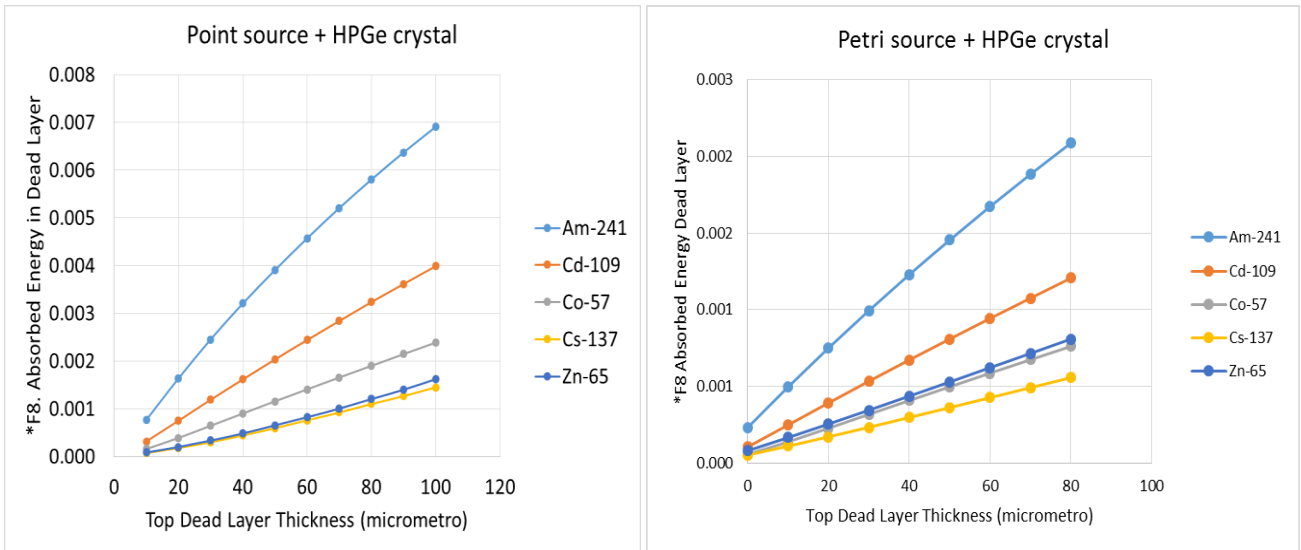


Figura 4. *F8 para diferentes DL

El registro F8 medido en el Germanio activo permite obtener el espectro a partir de la distribución de altura de impulsos (PHD) y calcular la eficiencia. La Figura 5 muestra la eficiencia calculada para cada radionucleído y cada uno de los espesores considerados.

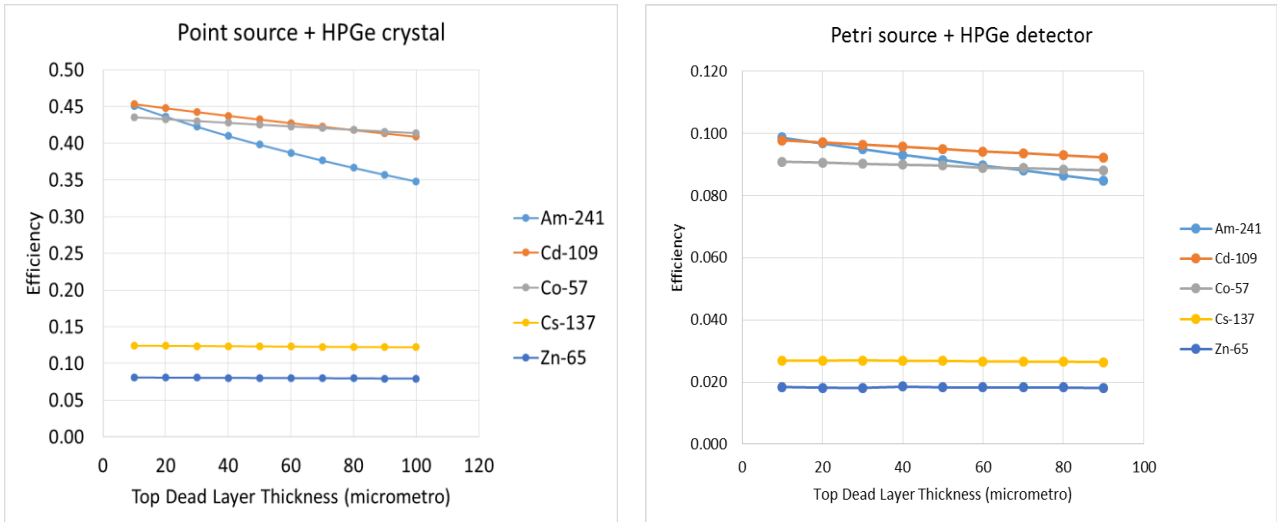


Figura 5. Eficiencia para diferentes DL

Como se puede observar, el espesor de la capa inactiva no influye en la eficiencia del Cs-137 y del Zn-65, independientemente del modelo considerado. Sin embargo, para el Am-241 la variación de eficiencia en 100 μm va desde 0,45 a 0,34 (22%) y desde 0,45 a 0,41 (9%) en el caso del Cd-109 para el modelo de fuente puntual. En el caso del modelo completo, solo la eficiencia del Am-241 se ve afectada en 100 μm . Además, de la comparación entre ambos modelos considerados se observa que la eficiencia se reduce de manera considerable a medida que la fuente es más extensa (más diferente a fuente puntual).

Comparando estos resultados con la eficiencia experimental obtenida utilizando el patrón gamma se obtiene que el espesor estimado de la capa inactiva del detector HPGe utilizado en el LRA de la UPV se encuentra entre 70 y 80 μm . Los resultados se muestran en la Tabla 1.

Tabla 1: Eficiencia experimental y la obtenida para diferentes espesores de capa inactiva

	Experimental	70 μm	80 μm
Am-241	0,094	0,095	0,093
Cd-109	0,097	0,097	0,096
Co-57	0,090	0,091	0,089

La Figura 6 muestra la comparación de los espectros obtenidos con los dos modelos considerados: modelo de fuente puntual y cristal de Germanio y modelo de fuente con Petri y detector HPGe detallado. Se observa que los espectros obtenidos con los dos modelos presentan diferencias en los rayos X del Germanio y en el borde Compton. Con el modelo detallado del detector HPGe desaparecen los rayos X del Germanio que se restan del fotopico y el Compton continuo está por encima del modelo sencillo.

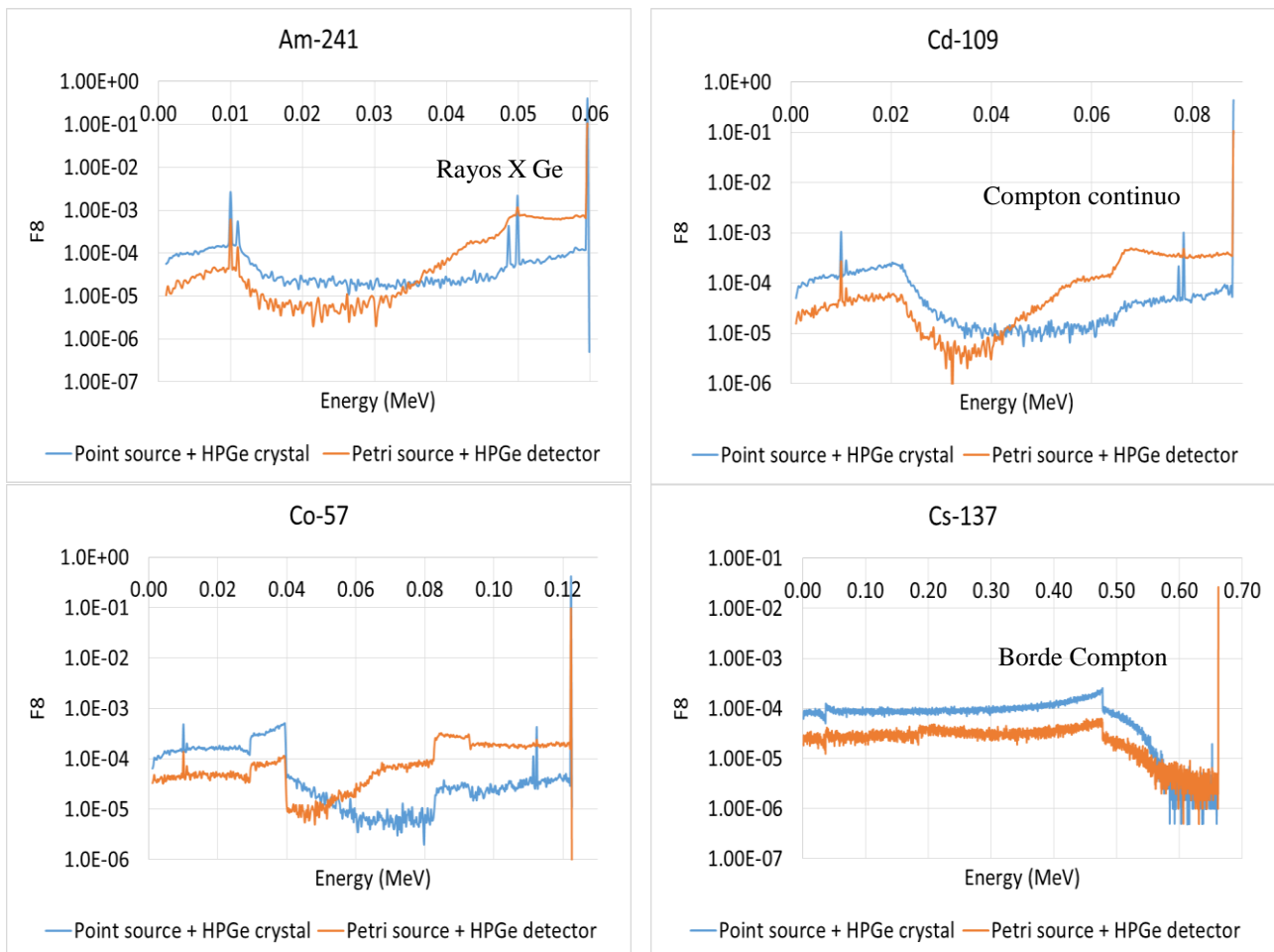


Figura 6. Espectros obtenidos para los diferentes modelos

Con estos resultados, se ha realizado un estudio para obtener el valor real del espesor de la capa inactiva (75 μm) del detector HPGe utilizado en el LRA de la UPV. Conocido el espesor de la capa inactiva del detector, el modelo de MCNP5 se puede utilizar para obtener la curva de eficiencia del detector.

4. APLICACIÓN: Reconstrucción de espectros para obtener la eficiencia

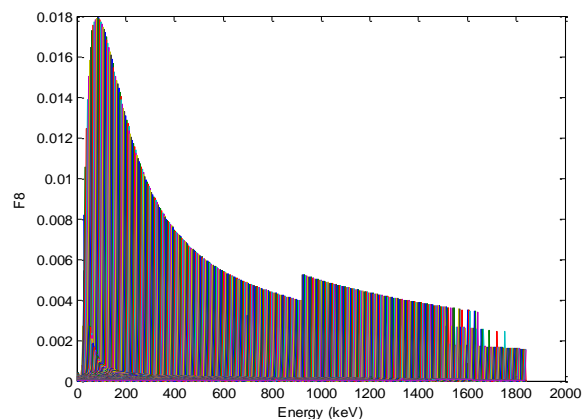
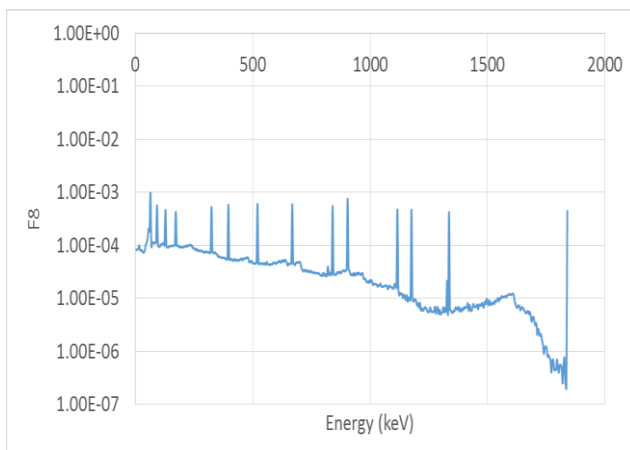
La curva de eficiencia del detector puede calcularse con la matriz de respuesta del sistema y conociendo el espectro que se obtiene en el Germanio activo. Dicha matriz de respuesta puede construirse a partir del registro F8 de MCNP5 obtenido para diferentes haces monoenergéticos que

van desde 1 hasta 1840 keV. El espectro experimental se obtiene a partir de un patrón gamma. En la Tabla 2 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 2. Características del patrón Gamma.

Nucleído	Energía (keV)	Branching ratio	Actividad (Bq)	Gamma/s
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

Una vez obtenido el espectro experimental y la matriz de respuesta del sistema, se puede aplicar un método de deconvolución para obtener el espectro reconstruido. Esto es necesario puesto que la matriz de respuesta del sistema está mal condicionada. El método de reconstrucción utilizado se basa en la descomposición de valores singulares de la matriz respuesta del sistema. En concreto, se ha utilizado el método “Truncated Singular Value Decomposition”, TSVD [7]. Una vez obtenido el espectro reconstruido se puede obtener la curva de la eficiencia. La Figura 7 muestra el espectro reconstruido obtenido tras aplicar el método TSVD y la eficiencia calculada a partir del espectro reconstruido.



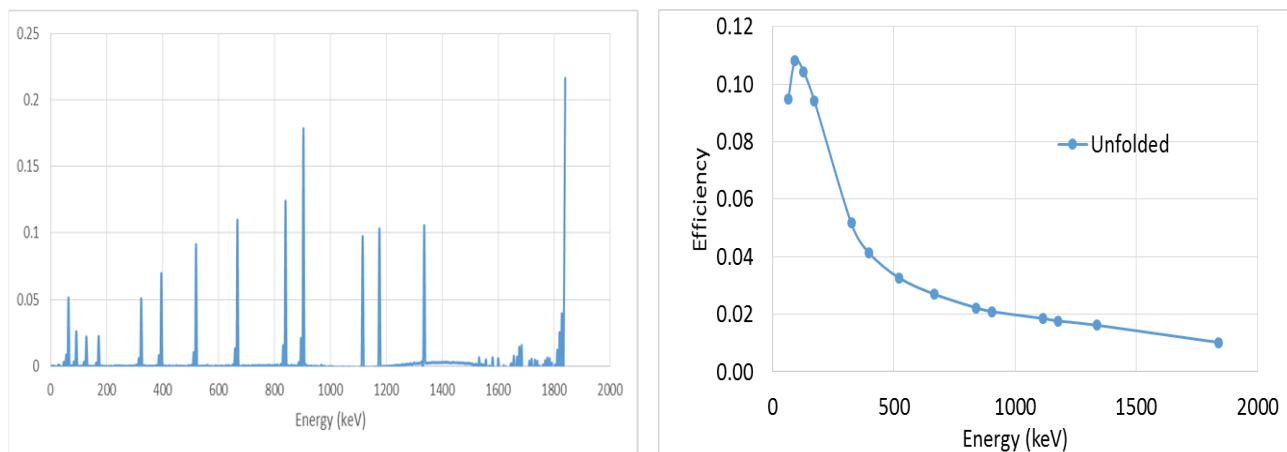


Figura 8. Espectro experimental y la matriz de respuesta del sistema; Espectro reconstruido y la curva de eficiencia

5. CONCLUSIONES

El código Monte Carlo MCNP5 se ha utilizado para estimar el valor del espesor de la capa inactiva del detector de Germanio ultra puro, HPGe, que se utiliza en el Laboratorio de Radiactividad Ambiental (LRA) de la Universitat Politècnica de València (UPV). Para ello se han utilizado diferentes registros disponibles en TRACE5.

Con el registro FMESH, que permite superponer una malla sobre el cristal de Germanio, se ha obtenido la profundidad del cristal de Germanio donde se producen las interacciones. El registro F8, que permite obtener la Distribución de Altura de Impulsos (PHD), se ha obtenido en el cristal de Germanio considerando diferentes espesores. También se ha calculado el registro *F8, que permite obtener la energía depositada, en diferentes celdas de 10 μm de espesor. Con estos cálculos se ha obtenido el valor del espesor de la capa inactiva del detector HPGe. En concreto se ha obtenido un espesor de la capa inactiva de 75 μm .

Además, se ha realizado una aplicación de este estudio al obtener la matriz de respuesta del detector HPGe tras la simulación de varios haces monoenergéticos. Conocida la matriz de respuesta y el espectro medido en el detector para un patrón estándar se ha obtenido la actividad de la muestra patrón utilizando métodos de reconstrucción.

REFERENCIAS

1. C. C. Conti, I. C. P. Salinas, H. Zylberberg, A detailed procedure to simulate an HPGe detector with MCNP5, *Progress in Nuclear Energy*, 66, pp. 35-40, 2013.
2. A.S.E. Santo, F. G. Wasserman, C. C. Conti, HPGe well detector calibration procedure by MCNP5 Monte Carlo computer code, *Annals of Nuclear Energy*, 46, pp. 213-217, 2012.
3. 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 HPGe detector in an environmental radioactivity laboratory, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B*, 263, pp.144–148, 2007.
4. 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, pp. 390–394, 2010.
5. X-5 MONTE CARLO TEAM, “MCNP – A General Monte Carlo Nparticle Transport Code, Version 5” LA-UR-03-1987, Los Alamos National Laboratory, April, 2003.

6. N. Q. Huy, D. Q. Binh y V. X. An, Study on the increase of inactive germanium layer in a high-purity germanium detector after a long time operation applying MCNP code, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research, 573, pp. 384-388, 2007.

7. Hansen, P.C., Regularization tools: A Matlab package for analysis and solution of discrete ill-posed problems, Numerical Algorithms, 6, pp.1-35, 1994.