

ESTUDIO DE LA RECONSTRUCCIÓN DEL ESPECTRO PRIMARIO DE RAYOS X A PARTIR DE LA SIMULACIÓN DE DETECTORES DE SEMICONDUCTOR

A. Querol¹ ♦, S. Gallardo¹, J. Ródenas¹, G. Verdú¹

¹Universidad Politécnica de Valencia, Departamento de Ingeniería Química y Nuclear, Camino de Vera s/n 46022, Valencia

RESUMEN

Se estudia la reconstrucción del espectro primario de rayos X en el intervalo de energía de radiodiagnóstico utilizando un espectrómetro Compton y un detector de semiconductor. Se aplica un método mixto experimental-simulación junto con un método matemático de reconstrucción. Se ha utilizado el programa MCNP5 para simular el proceso físico. Se ha seleccionado el método de Tikhonov para reconstruir el espectro primario de rayos X a partir de la distribución de altura de impulsos (PHD) medida en el detector. Se han considerado tres detectores diferentes: germanio, silicio y telurio de cadmio. Los resultados obtenidos en la reconstrucción del espectro para cada detector se han comparado con el espectro teórico extraído del IPEM 78, calculando el error cuadrático medio (RMS) y los parámetros de calidad del espectro: primera y segunda capa hemirreductora (CHR), factor de homogeneidad y energía media del espectro. El objetivo final es determinar la idoneidad de los detectores considerados.

Palabras clave: Rayos-X, Monte Carlo, método de reconstrucción, detectores de semiconductor.

ABSTRACT

The unfolding of the X-ray primary spectrum along the radiodiagnostic energy range is analyzed by using a Compton spectrometer and a semiconductor detector. A mixed experimental-simulation method together with a mathematical unfolding method has been applied. The MCNP5 code has been used to simulate the physical process. The Tikhonov method has been selected for unfolding the primary X-ray spectrum from PHD measured in the detector. Three different semiconductor detectors have been considered: Germanium, Silicon and Cadmium Telluride. Results from simulation plus unfolding have been compared with the theoretical spectrum extracted from IPEM 78. Comparison has been done by calculating root mean squared (RMS) and quality parameters (QP) of the spectrum: first and second half value layer (HVL), homogeneity factor and mean energy. The goal of the work is to assess the idoneity of these detectors considered.

Keywords: X-ray, Monte Carlo, unfolding method, semiconductor detectors.

♦ aniquevi@upvnet.upv.es.

1. Introducción

En trabajos anteriores [1, 2] se ha presentado una metodología para obtener el espectro primario de tubos de rayos X en el intervalo de energías de radiodiagnóstico, utilizando un espectrómetro Compton. Dicha metodología se basa en un procedimiento mixto experimental-Monte Carlo (MC), en el que se utiliza el programa MCNP5 [3] para simular el proceso real de adquisición de la distribución de altura de impulsos (PHD). Tras un estudio previo de los métodos de reconstrucción: el Modificado Truncado de Descomposición en Valores Singulares (MTSVD), el Amortiguado de Descomposición en Valores Singulares (DSVD) y el de Tikhonov, se ha escogido este último por ser el que mejor aproxima el espectro reconstruido al espectro teórico. El objetivo del trabajo es estudiar la idoneidad de tres detectores de semiconductor: germanio, silicio y telurio de cadmio, aplicando dicha metodología de reconstrucción en radiodiagnóstico. Para realizar un estudio comparativo se ha calculado el valor del error cuadrático medio (RMS) y los parámetros de calidad de cada espectro respecto del teórico, extraído del catálogo IPFM-78 [4].

2. Modelo Monte Carlo

El modelo de MCNP5 incluye la fuente de rayos X, el espectrómetro Compton y el detector. El espectrómetro Compton está compuesto por las cámaras de blindaje y dispersión, donde se encuentra la varilla dispersora de polimetilmetacrilato (PMMA) y el tubo del espectrómetro. Los espectros teóricos de rayos X se han obtenido del catálogo IPFM-78.

El detector de germanio simulado es un Ultra Low Energy Germanium (LEGe) de Canberra [5]. Sus principales características son las siguientes: 0,05 mm de espesor de berilio, un área activa de 50 mm² y un espesor de aluminio de 5 mm. La resolución es de 145 eV (FWHM) a 5,9 keV (Fe-55) y 500 eV (FWHM) a 122 keV (Co-57).

El detector de silicio es un Si-pin de AMPTEK [6] con 1 mm de berilio, un área activa de 25 mm² y un espesor de aluminio 5 mm. Su resolución es de 149 eV FWHM a 5,9 keV correspondiente al pico del Fe-55. Ambos detectores tienen una resolución similar para el pico del Fe-55.

El detector de telurio de cadmio, es también de la marca comercial AMPTEK y presenta un área activa de 25 mm², un espesor de berilio de 1 μm y su resolución es de 530 eV (FWHM) a 14,4 keV y 850 eV (FWHM) a 122 keV (Co-57).

La PHD se obtiene utilizando el registro F8 del programa MCNP5, reproduciendo las PHD registradas en los detectores. Además, se ha utilizado la opción Gaussian Energy Broadening (GEB), la cual proporciona un mejor ajuste a la forma de los picos de la PHD.

También se ha utilizado la tarjeta MODE: P, E para simular el transporte de fotones y electrones y las tarjetas PHYS: P y PHYS: E que permiten fijar parámetros físicos como el límite superior de energía para los fotones y electrones así como la producción de electrones o fotones secundarios.

3. Metodología

Del estudio previo de los distintos métodos de reconstrucción: MTSVD, DSVD y Tikhonov se ha concluido que el método de Tikhonov es el que presenta un mejor ajuste entre los espectros reconstruidos y teóricos. De ahí que para realizar el estudio de la idoneidad de los tres detectores de semiconductor se haya escogido dicho método de reconstrucción.

El procedimiento a seguir consiste en obtener las matrices de respuesta de los detectores a partir de distintos haces monoenergéticos (con 0,5 keV de diferencia entre ellos), utilizando el modelo de MCNP5. Además, dicho modelo permite obtener las PHD para diferentes condiciones de trabajo (voltaje, ángulo de ánodo y filtrado), es decir, para un espectro primario dado. Una vez obtenidas las PHD y la matriz de respuesta se aplica el método de reconstrucción de Tikhonov y su resultado se compara con el espectro teórico obtenido del IPEM78. En la figura 6 se muestra de forma esquemática el proceso realizado.

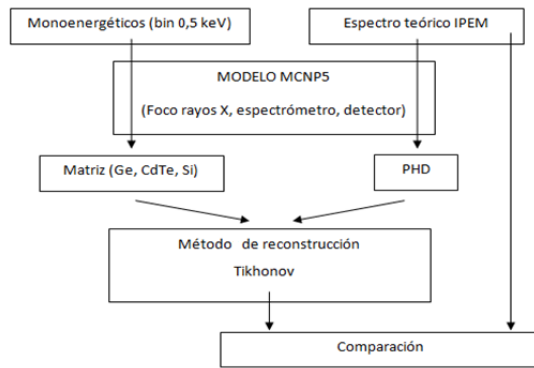


Fig. 2 Esquema del proceso de trabajo.

4. Resultados

Del estudio de la descomposición en valores singulares (SVD) de la matriz de respuesta se obtiene que éstos tienden a cero. Este hecho hace que la matriz esté mal condicionada, por lo que la obtención de su matriz inversa por métodos convencionales no da buenos resultados. Sin embargo, se puede elaborar una nueva matriz de respuesta \mathbf{R}_k , eliminando de la solución los valores singulares más pequeños [7]. De esta forma se consigue mejorar en gran medida del número de condición de \mathbf{R}_k .

En cualquier caso, el problema a resolver es de mínimos cuadrados y al aplicar el método de Tikhonov lo que se pretende es encontrar la solución regularizada s que minimice la siguiente combinación de la norma residual:

$$s = \arg \min \left\{ \|\mathbf{R}_k \tilde{s} - \tilde{m}\|_2^2 + k \|\mathbf{L} \tilde{s}\|_2^2 \right\} \quad (5)$$

La calidad del resultado depende de la elección del parámetro de regularización, k . Para obtener el valor óptimo de k , se ha seguido el criterio de la curva-L, que consiste en representar la norma $\tilde{s}_{L,k}$ del vector solución frente a la norma-2 del vector residuo $\mathbf{R}_k \tilde{s} - \tilde{m}$ y se-

leccionar como valor óptimo el correspondiente a la esquina de la curva-L, ya que minimiza de manera simultánea la norma de la solución y el residuo. La Figura 3 muestra las curvas-L obtenidas para cada uno de los detectores utilizados, con sus respectivos valores de k .

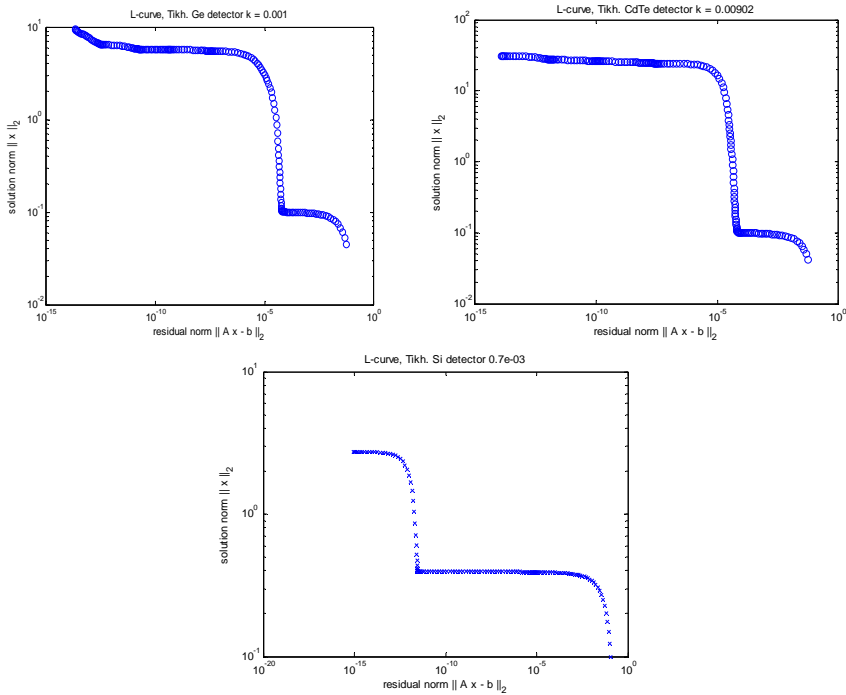


Fig. 3 Curva-L para el método de Tikhonov y los detectores de germanio, silicio y telurio de cadmio.

Se ha aplicado el método de Tikhonov para reconstruir espectros primarios en todo el intervalo de energías de radiodiagnóstico. Para las aplicaciones, que requieren energías más elevadas, se ha considerado un ánodo de tungsteno y los detectores de germanio y telurio de cadmio, mientras que para las aplicaciones de mamografía, de menor energía, se han considerado ánodos de molibdeno y rodio y el detector de silicio.

Las Figuras 4 y 5 muestran los espectros teóricos junto con los reconstruidos utilizando el método de Tikhonov para los detectores de germanio y telurio de cadmio, ánodo de tungsteno de 12° , filtro de aluminio de 5 mm y un voltaje de 110 keV.

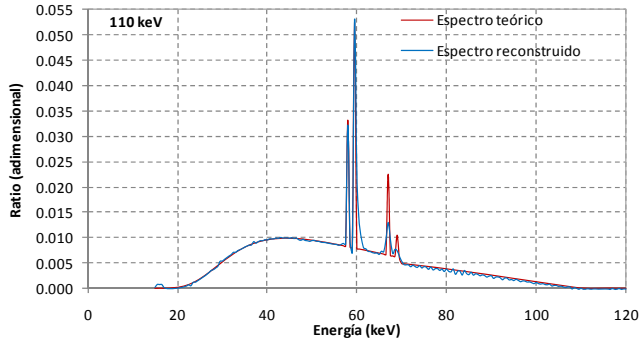


Fig. 4 Reconstrucción del espectro con detector de germanio.

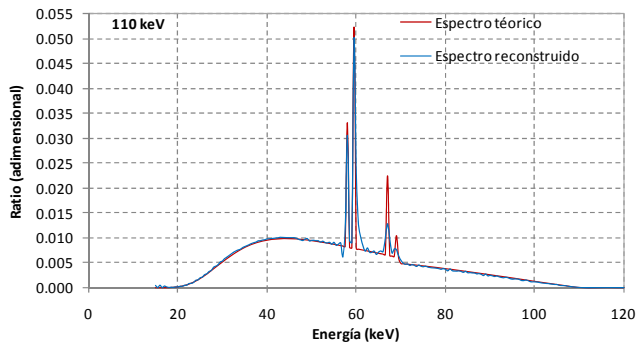


Fig. 5 Reconstrucción del espectro con detector de telurio de cadmio.

Las Figuras 6 y 7 representan el espectro reconstruido y el teórico para 29 kV, 4 mm de aluminio y 9° de ángulo para ánodos de molibdeno y rodio utilizando el detector de silicio.

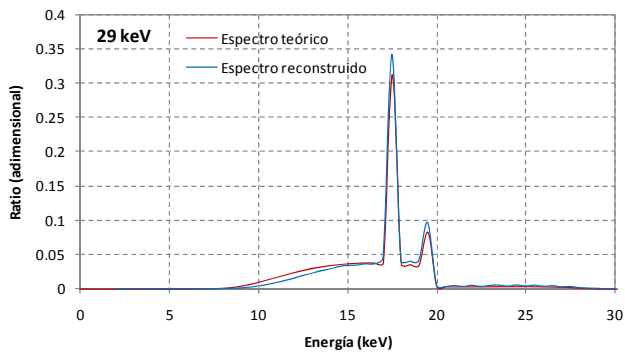


Fig. 6 Reconstrucción del espectro para ánodo de molibdeno con detector de silicio.

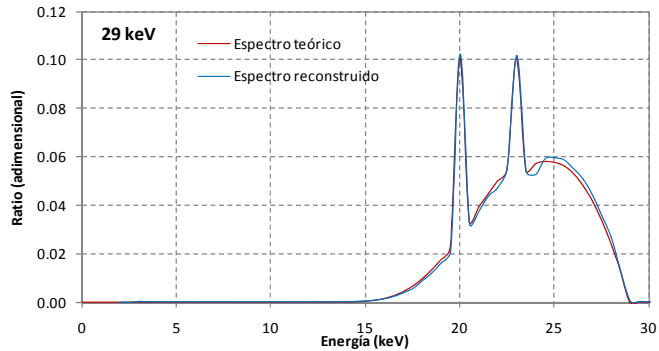


Fig. 7 Reconstrucción del espectro para ánodo de rodio con detector de silicio.

En el caso del detector de germanio y telurio de cadmio para ánodo de tungsteno, la principal diferencia entre el espectro reconstruido y el teórico reside en las líneas características del tungsteno ($K_{\alpha 1}$, $K_{\alpha 2}$, $K_{\beta 1}$ y $K_{\beta 2}$ a 58, 59,5, 67 y 69 keV), sobre todo en las líneas $K_{\beta 1}$ y $K_{\beta 2}$. Para el detector de silicio y ánodos de molibdeno y rodio, el método produce una sobreestimación de las líneas características (K_{α} y K_{β} del molibdeno a 17,5 y 19,2 keV y K_{α} y K_{β} del rodio a 20,1 y 22,9 keV), que lleva consigo una disminución en el espectro continuo debido a la normalización. Este hecho es más notable para el caso del ánodo de molibdeno. Para determinar la idoneidad de cada detector se ha calculado el error cuadrático medio (RMS) entre el espectro reconstruido y el teórico. Los valores obtenidos para los detectores de germanio y telurio de cadmio con ánodo de tungsteno se muestran en la Tabla 1, mientras que en la Tabla 2 se muestran los resultados para el detector de silicio y ánodo de molibdeno y rodio.

Tabla No.1 Error cuadrático medio (%) para los detectores de germanio y telurio de cadmio con ánodo de tungsteno.

Ánodo W	78 kV	98 kV	102 kV	110kV
Detector Ge	4,17	3,03	2,91	2,90
Detector CdTe	4,61	3,19	3,23	3,03

Tabla No.2 Error cuadrático medio (%) para el detector de silicio con ánodos de molibdeno y rodio.

Detector Si	27 kV	28 kV	29 kV	30kV
Ánodo Mo	2,05	1,82	1,69	1,44
Ánodo Ro	4,65	4,00	3,83	4,80

A la vista de los resultados, se tiene que el valor de RMS no supera el 5% en ningún caso y que su valor disminuye al aumentar el voltaje.

Se han calculado también los parámetros de calidad del espectro de rayos X: la primera y segunda capa de hemirreducción (CHR), el factor de homogeneidad y la energía media del espectro [7].

En la Tabla 3 se listan los valores correspondientes a los detectores de germanio y telurio de cadmio con ánodo de tungsteno, mientras que las Tablas 4 y 5 hacen lo propio con el detector de silicio con ánodos de molibdeno y rodio, respectivamente. En las tres tablas se muestran, entre paréntesis, los errores relativos que se obtienen al comparar los valores obtenidos para los espectros reconstruidos con los obtenidos para los espectros teóricos.

Tabla No.3 Primera y segunda CHR, factor de homogeneidad y energía media del espectro para los detectores de germanio y telurio de cadmio con ánodo de tungsteno.

Espectro	IPEM78	Tikhonov	Espectro	IPEM78	Tikhonov
78 kV	3,400	3,180 (6,47)	98 kV	4,350	4,090(5,98)
	8,030	7,780 (3,11)		10,450	10,120 (3,16)
	0,423	0,409 (3,47)		0,416	0,404 (2,91)
	45,010	44,460 (1,22)		51,740	52,540 (-1,55)
Espectro	IPEM78	Tikhonov	Espectro	IPEM78	Tikhonov
102 kV	4,530	4,320 (4,64)	110 kV	5,410	5,010 (7,39)
	10,910	10,600 (2,84)		12,750	12,150 (4,71)
	0,415	0,408 (1,85)		0,424	0,412 (2,82)
	52,920	53,770 (-1,61)		56,400	57,560 (-2,06)

Tabla No.4 Primera y segunda CHR, factor de homogeneidad y energía media del espectro para el detector de silicio con ánodo de molibdeno.

Espectro	IPEM78	Tikhonov	Espectro	IPEM78	Tikhonov
27 kV	0,315	0,343 (8,95)	28 kV	0,326	0,353 (8,31)
	0,725	0,762 (5,13)		0,751	0,783 (4,21)
	0,435	0,450 (3,63)		0,438	0,451 (3,94)
	16,200	16,700 (3,09)		16,400	16,900 (3,05)
Espectro	IPEM78	Tikhonov	Espectro	IPEM78	Tikhonov
29 kV	0,336	0,361 (7,50)	30 kV	0,346	0,370 (6,99)
	0,774	0,801 (3,49)		0,796	0,821 (3,08)
	0,434	0,451 (3,88)		0,435	0,451 (3,80)
	16,600	17,100 (3,01)		16,700	17,300 (3,59)

Tabla No.5 Primera y segunda CHR, factor de homogeneidad y energía media del espectro para el detector de silicio con ánodo de rodio.

Espectro	IPEM78	Tikhonov	Espectro	IPEM78	Tikhonov
27 kV	0,934	0,947 (1,40)	28 kV	0,987	1,001 (1,43)
	1,934	1,962 (1,44)		2,049	2,074 (1,25)
	0,483	0,483 (-0,03)		0,482	0,483 (0,17)
	22,300	22,100 (-0,90)		23,800	23,300 (-2,10)
Espectro	IPEM78	Tikhonov	Espectro	IPEM78	Tikhonov
29 kV	1,035	1,052 (1,63)	30 kV	1,083	1,102 (1,82)
	2,155	2,190 (1,67)		2,261	2,300 (1,76)
	0,485	0,480 (-0,03)		0,479	0,479 (0,06)
	23,300	23,300 (0,00)		24,800	23,700 (-4,44)

Del cálculo de los parámetros de calidad se obtiene un error relativo máximo inferior al 9%. Los mayores valores del error relativo se dan para el ánodo de molibdeno y los menores para el ánodo de rodio.

5. Conclusiones

La comparación de los espectros de rayos X reconstruidos con los teóricos, extraídos del catálogo IPeM78, permite determinar la idoneidad de los detectores estudiados para el intervalo de energías utilizado en radiodiagnóstico. Se ha realizado un análisis cuantitativo mediante el cálculo del error cuadrático medio (RMS) y los parámetros de calidad del espectro: la primera y segunda capa hemirreductora (CHR), el factor de homogeneidad y la energía media del espectro. Los resultados obtenidos muestran un valor de RMS por debajo del 5% en todos los espectros estudiados. Para el cálculo de los parámetros de calidad se ha obtenido el error relativo respecto al espectro teórico, siendo en todos los casos inferior al 9%.

A la vista de estos resultados se puede afirmar que el detector de silicio resulta adecuado para el intervalo de bajas energías (hasta 30 keV) propio de las aplicaciones de mamografía, mientras que el detector de telurio de cadmio se puede considerar como válido para un intervalo de energías mayores (hasta 150 keV).

Estas afirmaciones pueden significar una alternativa al detector de germanio, ya que los detectores de silicio y telurio de cadmio además de tener un manejo sencillo y de no requerir un sistema de refrigeración con nitrógeno líquido, se ha demostrado que tienen un comportamiento aceptable en el intervalo de energías estudiado.

REFERENCIAS

- [1] S. Gallardo, J. Ródenas, G. Verdú, Monte Carlo simulation of the Compton scattering technique applied to characterise diagnostic X-ray spectra, *Med Phys* 2004, 31(7), 2082–2090.
- [2] S. Gallardo, D. Ginestar, G. Verdú, J. Ródenas, V. Puchades and J. I. Villaescusa, X-ray spectrum unfolding using a regularized truncated SVD method, *X-ray spectrometry* 2006, 35, 63–70.
- [3] X-5 Monte Carlo Team, 2005. MCNP—A general Monte Carlo N-Particle transport code, version 5, Los Alamos National Laboratory, 2003 (revised 10/03/2005).
- [4] IPeM Report 78, Catalogue of Diagnostic X-Ray Spectra & Other Data, Institute of Physics and Engineering in Medicine.
- [5] www.canberra.com
- [6] www.amptek.com
- [7] G. H. Golub, C.F. Van Loan. *Matrix Computations*. The Johns Hopkins University Press. Third edition, 1996.