

Determinación de la función respuesta y la eficiencia de un detector de centelleo con cristal de NaI(Tl) para fotones con energías menores de 2 MeV –simulación por Monte Carlo vs medición experimental

Ernesto Mainegra y Roberto Capote*

Se desarrolló una metodología para la caracterización de detectores de centelleo con cristal de NaI(Tl) a partir de la simulación por Monte Carlo con el sistema Electron-Gamma-Shower vers.4. Se considera en la simulación la cubierta de Al del cristal y el blindaje protector del sistema de detección. Se reprodujo con precisión el espectro experimental, excepto para energías menores al pico de retrodispersión. Esta divergencia se explica por la no consideración de las dimensiones reales de la fuente y por ende de la dispersión de la radiación gamma en la misma.

La metodología y el código desarrollado pueden ser utilizados para caracterizar detectores de otros materiales con un mínimo de cambios (por ejemplo, detectores de semiconductores).

Introducción

El método más sencillo para determinar la eficiencia se basa en medir la cantidad de conteos producidos por una fuente de rayos gamma de actividad conocida. En el caso que se disponga de un juego de fuentes calibradas que cubran el rango energético de interés, entonces es

posible determinar experimentalmente una curva de eficiencia para el detector que se va a usar. Se han publicado mediciones de las fotofracciones para detectores de NaI(Tl) en [6,13-16]. En numerosos casos sucede que no se dispone del juego de fuentes calibradas o las mismas no representan adecuadamente las condiciones geométricas de irradiación del problema de interés. En este caso se podría recurrir a datos de eficiencia publicados, los cuales pueden abarcar una gran variedad de energías y condiciones experimentales. De todas formas esta variante es limitada en comparación con el sinnúmero de situaciones que surgen en las aplicaciones prácticas. Otra forma de obtener datos sobre la eficiencia es mediante cálculos teóricos que parten del conocimiento de las diferentes probabilidades de interacción de los rayos gamma con la sustancia. Para determinar la eficiencia total, basta conocer el coeficiente de absorción lineal μ el cual es característico para cada material.

A partir de μ se puede calcular la eficiencia intrínseca total, que es justamente el valor de la probabilidad de interacción del fotón $1 - e^{-\mu l}$ integrado sobre todas las longitudes de camino l de los fotones que tocan el detector. Para geometrías sencillas esta integración

* Laboratorio de análisis nuclear. Centro de Estudios Aplicados al Desarrollo Nuclear. P.O. Box 6122, Ciudad Habana, Cuba.

puede ser realizada analíticamente. Cálculos de este tipo han sido reportados en [7-11] para detectores de Ge(Li) a diferentes energías de los fotones y diferentes dimensiones del detector. Paradellis y Hontzeas^[12] han determinado la eficiencia del fotopico haciendo uso de una función semiempírica. En la mayoría de los casos reales las geometrías por considerar no son simples, además debido a los procesos tan complejos que ocurren a causa de las interacciones múltiples y debido a la naturaleza estadística de la interacción de las radiaciones ionizantes con la materia, es preciso desistir de las técnicas analíticas convencionales y recurrir al método de Monte Carlo para, realizando una modelación física del problema, poder calcular la eficiencia de detección a cualquier energía y geometría de interés. Großwendt y Weibel^[5] realizaron cálculos de la eficiencia intrínseca del fotopico mediante el método de Monte Carlo teniendo en cuenta solo el cristal de NaI(Tl).

La eficiencia desde el punto de vista matemático es una característica integral del detector, pues depende de la cantidad total de los gamma que interactúan en el detector, sin importar la distribución energética de las partículas resultantes de esta interacción. La característica diferencial correspondiente, que describe la cantidad de cuantos gamma de cada energía se producen al interactuar la radiación primaria con el detector se denomina función respuesta del sistema de detección^[4]. Numerosos trabajos han sido dedicados al cálculo de la función respuesta de detectores de NaI(Tl) ante la radiación gamma^[2-4]. Rogers^[2] calculó la función respuesta para detectores de NaI(Tl) y de Ge usando el EGS4, demostrando que el encapsulado de aluminio alrededor del cristal del detector tiene una gran importancia al calcular la función respuesta del detector. La información que se puede obtener de ella

permite convertir distribuciones de alturas de pulsos observadas experimentalmente en distribuciones de altura de pulso contra energía. Debido a limitaciones del rango energético de las fuentes disponibles se hace difícil determinar experimentalmente la función respuesta para todas las energías de interés. En este caso es necesario recurrir al cálculo numérico de la función respuesta. El cálculo de la función respuesta de forma analítica tiene las mismas limitantes que para los cálculos de la eficiencia, por lo que se hace necesario recurrir también al método de Monte Carlo.

Sistema de simulación EGS4

El EGS (Electron-Gamma-Shower) es un paquete de programas para la simulación por Monte Carlo del transporte de electrones y fotones en geometrías arbitrarias para energías de las partículas desde unos pocos keV hasta energías del orden de los TeV. Este sistema es un paquete de rutinas más un bloque de datos con una interfaz flexible para el usuario, lo que garantiza que se pueda disponer cómodamente del sistema sin conocerlo en todos sus detalles internos. Todo lo que se requiere por el usuario del sistema es desarrollar un código que especifique las características geométricas del sistema de detección y las magnitudes físicas que se desean calcular. Describamos someramente cómo se simula en el sistema EGS4 el transporte fotónico.

Transporte de una partícula en la materia

La simulación correcta de una cascada electromagnética puede ser descompuesta en la simulación del transporte y la interacción de una partícula simple acompañado esto del registro de la información necesaria para continuar el transporte.

El recorrido libre χ de una partícula a través de la materia es una variable aleatoria que puede tomar cualesquiera valores positivos con la densidad de probabilidad

$$p(x) = \Sigma \cdot e^{-\Sigma x} \quad (1)$$

donde Σ representa la sección eficaz macroscópica total definida por

$$\Sigma = \frac{N_A \cdot \rho \cdot \sigma}{M} \quad (2)$$

siendo

N_A número de Avogadro

ρ densidad del medio,

M peso molecular

σ sección eficaz por molécula microscópica

La sección eficaz total microscópica se compone a su vez de la suma de las secciones eficaces microscópicas de los diferentes tipos de interacciones posibles tomadas en cuenta en la simulación. Es fácil determinar el valor medio de la variable aleatoria χ a partir de su función de densidad. El valor medio se determina según la fórmula

$$\lambda = \int_0^{\infty} x \cdot p(x) \cdot dx \quad (3)$$

Integrando por partes se obtiene

$$\lambda = \frac{1}{\Sigma} = \frac{M}{N_A \cdot \rho \sigma} \quad (4)$$

Por lo general el recorrido libre medio de la partícula cambia cuando esta pasa de un medio a otro, o cuando existen pérdidas energéticas. El número de recorridos libres medios desde un punto inicial x_0 hasta el próximo punto de interacción se determina por la expresión

$$N_\lambda = \int_{x_0}^x \frac{dx}{\lambda(x)} \quad (5)$$

donde $\frac{dx}{\lambda}$ es la probabilidad de que

la partícula interactúe a la distancia dx . Si n_λ es una variable aleatoria que significa el

número de recorridos libres medios desde un punto dado hasta el punto de la próxima interacción, entonces se puede mostrar que esta variable aleatoria está distribuida según

$$P \{n_\lambda < N_\lambda\} = 1 - e^{-N_\lambda}, \text{ para } N > 0 \quad (6)$$

Aplicando el método del muestreo directo y el hecho de que $1 - \xi$ está uniformemente distribuida en $(0,1)$ si ξ también lo está, se puede obtener n_λ a partir de la expresión

$$N_\lambda = -\ln \xi \quad (7)$$

Debido a su neutralidad y su masa en reposo nula, el fotón se mueve a lo largo de una línea recta con energía constante entre una interacción y otra. A partir de esto si el espacio en que se mueve el fotón se compone de un número finito de regiones, en cada una de las cuales el material es homogéneo y de densidad constante, entonces la integral (5) se reduce a una suma. Si x_0, x_1, \dots, x_n son los límites entre los cuales λ es constante, entonces la Ec.(5) se convierte en

$$N_\lambda = \sum_{j=1}^{i-1} \left(\frac{x_j - x_{j-1}}{\lambda_j} \right) + \left(\frac{x - x_{i-1}}{\lambda_i} \right) \quad (8)$$

donde $x \in (x_{i-1}, x_i)$.

Utilizando las expresiones anteriores es posible realizar la simulación del transporte de la radiación gamma. En el caso de los electrones la simulación es mucho más compleja y remitimos a los interesados a la descripción del sistema EGS4^[1].

Resultados

Validación de los cálculos con resultados experimentales de otros autores

Como validación del modelo utilizado para simular el transporte de la radiación electromagnética se han realizado diferentes comparaciones con datos experimentales publicados. El Cuadro 1 compara valores de la fotofracción

Cuadro 1. Fotofracciones calculadas de un detector desnudo de $7.62 \times 7.62 \text{ cm}^2$ para una fuente puntual isotrópica a 10 cm del detector. Comparación con mediciones reportadas en la literatura.

E_γ [MeV]	DETBAR (EGS4)	Steyn <i>et al.</i> [14]	Zerby & Moran [15]	Belluscio <i>et al.</i> [13]	Giannini <i>et al.</i> [16]	Großwendt and Weibel [6]
0,662	0,566	0 ,571	0,580	0,570	0,551	0,520
1,28	0,385	0 ,402	0,360	–	0,380	0,350
2,75	0,228	0 ,268	0,190	0,240	0,229	0,190

(definida como la fracción de conteos en el fotopico) para diferentes energías determinados experimentalmente por diferentes autores con valores calculados con el programa DETBAR, el código de usuario del sistema EGS4, desarrollado en el presente trabajo.

Como se puede apreciar la coincidencia con los resultados experimentales es buena si se tiene en cuenta la exactitud de este tipo de experimento.

Comparación con nuestras mediciones experimentales

En el Laboratorio de Análisis Nuclear del CEADEN se llevaron a cabo mediciones experimentales de las distribuciones de alturas de pulso para fuentes de ^{137}Cs ($E_\gamma = 0,661 \text{ MeV}$), ^{54}Mn ($E_\gamma = 0,835 \text{ MeV}$) y ^{60}Co ($E_\gamma = 1,173 \text{ MeV}$, $E_\gamma = 1,332 \text{ MeV}$) con un detector comercial de centelleante inorgánico de NaI(Tl) de geometría cilíndrica de 7,62 cm de radio por 7,62 cm de espesor. El sistema fuente-detector estaba protegido de influencias externas por un blindaje de plomo también de geometría cilíndrica.

Las mediciones se realizaron para cada fuente a dos distancias fuente-detector, una con la fuente pegada a la superficie del detector y la otra a tres centímetros de la superficie.

Experimentalmente se obtuvieron las distribuciones de alturas de pulsos para

cada fuente contra canales. Para llevar estas distribuciones a espectros gamma contra energía se escribió el programa CALIBRA el cual aprovecha el hecho de que los centelleantes de NaI(Tl) generan un espectro compuesto por un continuo proveniente de la dispersión Compton, un pico de absorción total provocado por el efecto fotoeléctrico y en dependencia de la energía del fotón incidente ($E_\gamma > 2m_0c^2$) un pico de escape simple y otro de doble escape. Usando los pares de valores correspondientes al valor del canal con el máximo de conteos y la energía de los fotones incidentes para cada fuente se obtuvieron cuatro puntos en una representación de energía contra número de canal. Teniendo en cuenta la linealidad de los detectores con la energía se realizó un ajuste lineal de estos puntos y se obtuvo una recta de calibración energética para los espectros medidos.

Usualmente en los cálculos por Monte Carlo de la función respuesta se supone que el detector es solamente un cristal desnudo y se desprecia la posible influencia de la cubierta del detector. Pero cualquier detector comercial de NaI(Tl) consiste de un cristal rodeado por un material reflector (MgO o polvo de Al₂O₃) todo esto encerrado por una cubierta de Al y montado sobre un fotomultiplicador. En nuestro trabajo hemos sustituido estos materiales del revestimiento por una capa de aluminio equivalente de 2 mm. El fotomultiplicador ha sido simulado con un cilindro macizo de Al de 30 mm de

espesor, lo que constituye una aproximación bastante buena ya que el material detrás del detector tiene un efecto despreciable sobre la función respuesta. Por ejemplo se ha calculado que tomando un espesor de 10 mm la fotofracción ϵ_{ph} (conteos pertenecientes al fotopico por fotones detectados) varía aproximadamente en un 0,6% a 0,661 y 6,13 MeV y virtualmente no tiene efecto sobre la eficiencia del fotopico [2]. Por último se incluyó en la modelación el blindaje protector contra influencias externas en el sistema de detección. La Figura 1 muestra el esquema de la geometría del sistema de detección simulado con sus dimensiones.

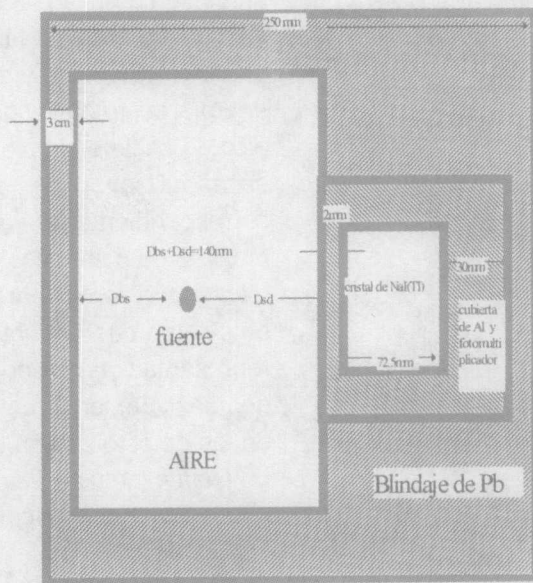


Figura 1. Esquema de la geometría utilizada para simular el sistema de detección empleado en las mediciones.

La Figura 2 compara el espectro calculado con el espectro experimental para la fuente de Co antes mencionada. Los cálculos reproducen el experimento con gran exactitud excepto para los canales de bajas energías. Esto se debe a que en el experimento, los efectos de retrodispersión en la fuente, el blindaje y la envoltura del detector no pudieron ser evitados. La fuente se simuló sin tener en cuenta sus dimensiones físicas y en la literatura consultada se plantea que los

resultados de la simulación casi siempre subestiman la contribución al pico de retrodispersión.

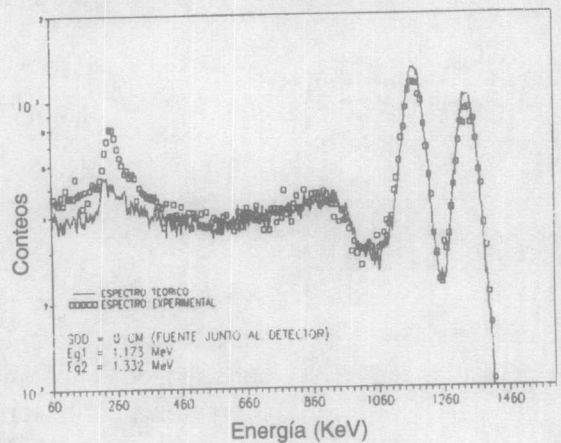


Figura 2. Función respuesta para una fuente de Co-60.

La Figura 3 compara el espectro determinado experimentalmente para el Cs con a) el resultado de la simulación sin considerar la cubierta de aluminio ni el blindaje de plomo, b) considerando ambos elementos. Al realizar la simulación para un cristal de NaI(Tl) desnudo el continuo Compton cae muy por debajo del experimental y el valle entre el borde Compton y el fotopico está mucho más profundo en el espectro así calculado que en el experimental (Figura 3).

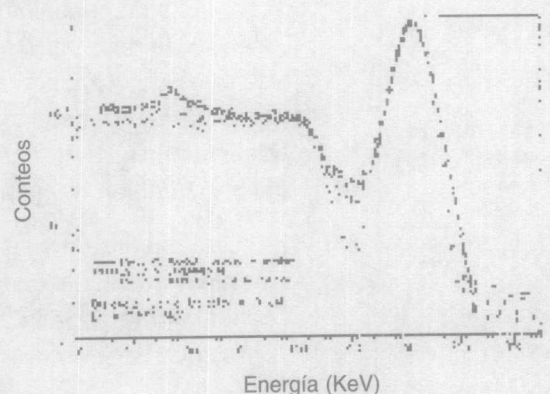


Figura 3. Función respuesta para una fuente de Cs-137.

Cuando se considera la cubierta de aluminio y el blindaje el valle entre el borde Compton y el fotopico se llena considerablemente y bordea con precisión el valle del espectro experimental.

El no considerar el transporte de los electrones no afecta el resultado de la función respuesta, lo cual se chequeó en los cálculos realizados. Para energías menores de 2 MeV esto es de esperar, sobre todo si las dimensiones del detector simulado son grandes comparadas con el rango de los electrones que se generan para estas energías (el rango para electrones de 400 keV en cristales de NaI(Tl) es de 0.6 mm [3]).

La actividad de las fuentes empleadas en este experimento no se conoce con exactitud, por lo que resulta imposible determinar la eficiencia de detección a partir de los datos experimentales. Por esta razón se comparan en el Cuadro 2 sólo los resultados para la fotofracción.

Cuadro 2. Comparación de las fotofracciones obtenidas teórica y experimentalmente para el sistema de detección modelado.

Fuente	Monte Carlo	Experimento
^{60}Co (0 cm)	0,349	0,326
^{60}Co (3 cm)	0,343	0,462
^{137}Cs (0 cm)	0,516	0,402
^{54}Mn (0 cm)	0,420	0,376
^{54}Mn (3 cm)	0,425	

Conclusiones

La comparación de los espectros experimentales y teóricos muestran buena coincidencia excepto en la zona de bajas energías donde el pico de retrodispersión no se reproduce totalmente. La causa puede ser atribuida al hecho de que simulamos una fuente puntual y no se tuvieron en cuenta las dimensiones reales de la misma. Las fuentes reales nunca son

puntuales y están constituidas usualmente por una deposición radiactiva en un soporte inerte plástico o metálico. Este soporte da aportes considerables de fotones retrodispersados de baja energía que no consideramos en el presente trabajo.

Las fotofracciones calculadas están en el rango de los valores experimentales reportados en la literatura por otros autores. Los resultados obtenidos demuestran que el sistema de programas EGS4 constituye una poderosa herramienta para la simulación de problemas en los cuales hay que considerar el transporte de la radiación electromagnética en la materia.

Referencias

- [1] W.R.Nelson, H.Hirayama, D.W.O.Rogers. *SLAC-265*.(1985)
- [2] D.W.O.Rogers. *Nucl.Instr.Meth.199* (1982)531-548.
- [3] K.Saito and S.Moriuchi. *Nucl.Instr.Meth.185* (1981) 299-308.
- [4] M.J.Berger and S.M.Seltzer. *Nucl.Instr.Meth.104* (1972)317-332.
- [5] B.Grosswendt and E.Waibel. *Nucl.Instr.Meth.*(1975)143-156.
- [6] B.Grosswendt and E.Waibel. *Nucl.Instr.Meth.*(1975)133-141.
- [7] J.L.Block and W.Gruhle. *Nucl.Instr.Meth.46* (1967)213.
- [8] D.C.Camp and A.L.van Lehn. *Nucl.Instr.Meth.76* (1969)192.
- [9] R.Griffith. *Nucl.Instr.Meth.91* (1971)377.
- [10] L.Ya.Graudynya, Yu.R.H.Kolnyn and L.L.Pelekis. *J.Rad.Chem.&* (1971)341.
- [11] H.F.Atwater. *Nucl.Instr.Meth.104* (1972)589.
- [12] T.Paradellis and S.Hontzeas. *Nucl.Instr.Meth.73* (1969)210.
- [13] M.Belluscio, R.De Leo, A.Pantaleo and A.Vox. *Nucl.Instr.Meth.118* (1974)553.
- [14] J.J.Steyn, R.Huan and D.W.Harris. *Nucl.Instr.Meth.107* (1973)465.
- [15] C.D.Zerby and H.S.Moran. *Nucl.Instr.Meth.14* (1961)115.
- [16] M.Giannini, R.R.Oliva and M.C.Ramorino. *Nucl.Instr.Meth.81* (1970)104.