

Trabajo de Fin de Máster



Simulación Monte Carlo de detectores HPGe para espectrometría gamma

Autor:

Raül Roperó Cobos

Tutores:

José María Fernández-Varea

María Doncel Monasterio

Noviembre de 2023



UNIVERSITAT DE
BARCELONA

Resumen

Los detectores de germanio son muy utilizados en espectroscopía nuclear de rayos γ debido a su excelente resolución energética. La caracterización de estos espectrómetros se lleva a cabo tanto experimentalmente como mediante la técnica de simulación Monte Carlo, con el objetivo de comprender mejor y cuantificar las principales propiedades del detector. Hemos hecho una serie de medidas experimentales con un detector BEGe para realizar una calibración en energía, resolución FWHM y determinar la eficiencia total y de fotopico del mismo. Hemos aprovechado también para estudiar las ventajas e inconvenientes de las mediciones en geometría cercana, como son los efectos de las coincidencias. Paralelamente hemos realizado simulaciones Monte Carlo con el programa PENELOPE/penEasy y hemos visto cómo sus resultados replican los obtenidos experimentalmente. Finalmente, mediante un proceso de optimización hemos conseguido encontrar algunos parámetros del detector que difieren ligeramente de los indicados por el fabricante.

Abstract

Germanium detectors are commonly used in nuclear γ -ray spectroscopy due to their excellent energy resolution. The characterization of these spectrometers is carried out both experimentally and through the Monte Carlo simulation technique, aiming to better understand and quantify the detector's key properties. We have conducted a series of experimental measurements with a BEGe detector to perform energy calibration, FWHM resolution, and determine the total and full-energy peak efficiencies. We have utilized these measurements to investigate the advantages and disadvantages of close-geometry measurements, such as the effects of coincidences. In parallel, we have carried out Monte Carlo simulations using the PENELOPE/penEasy program and observed how the results replicate those obtained experimentally. Finally, through an optimization process, we have managed to find some detector parameters that differ slightly from those specified by the manufacturer.

Agradecimientos

Me gustaría dar las gracias a mis tutores, José María Fernández-Varea (*Universitat de Barcelona*) y María Doncel Monasterio (*Stockholms universitet*), por su orientación y apoyo a lo largo de este TFM. También quiero agradecer a Néstor Cornejo (Ciemat), por su explicación sobre el programa DETEFF y por permitirme su uso para este trabajo. Asimismo agradezco a Joana Tent (*Universitat de Barcelona*) por dejarnos utilizar el detector BEGe para nuestras medidas y su ayuda en la adquisición de datos. Finalmente, quiero aprovechar para dar las gracias a mi familia y a mis compañeros de carrera y máster que me han ayudado a llegar hasta aquí.

Índice

1	Introducción	1
2	Objetivos	1
3	Interacción de los rayos γ con la materia	2
3.1	Efecto fotoeléctrico	2
3.2	Dispersión Rayleigh	3
3.3	Dispersión Compton	3
3.4	Creación de pares y tripletes	4
4	Espectrometría gamma	5
4.1	Detectores	5
4.2	Deposición de energía	9
4.3	Coincidencias	10
5	Simulación Monte Carlo	13
5.1	Simulación Monte Carlo de transporte de rayos γ	13
5.2	El sistema PENELOPE/penEasy	14
5.3	DETEFF	15
6	Materiales y métodos	15
6.1	Desarrollo teórico de las eficiencias totales y de fotopico	15
6.2	Simulaciones realizadas	17
6.2.1	Eficiencia total y de fotopico	17
6.2.2	Correcciones coincidencias	17
6.3	Medidas experimentales	19
6.3.1	Fuentes radiactivas	19
6.3.2	Sistema de detección	20
6.3.3	Análisis de datos	21
7	Resultados y discusión	25
7.1	Calibración en energía	25
7.2	Espectros netos calibrados en energía	27
7.3	Resolución energética FWHM	33
7.4	Simulación de las eficiencias total y de fotopico	35
7.5	Corrección de las eficiencias de fotopico por el efecto de suma en coincidencia	39
7.5.1	Expresión general de Tomarchio y Rizzo	39
7.5.2	Método aproximado de Vidmar <i>et al</i>	41
7.6	Calibración de la eficiencia de fotopico experimental	41
7.7	Comparación de la eficiencia de fotopico	42
7.8	Optimización de la geometría	45
7.9	Geometría completa	50
7.9.1	Eficiencia total y eficiencia de fotopico	50
7.9.2	Valores de los coeficientes de corrección	52

7.9.3 Comparación de espectros	53
8 Conclusiones y perspectivas futuras	57
Apéndice A	59
Apéndice B	64
Apéndice C	68
Bibliografía	70

1 Introducción

La espectrometría de radiación γ desempeña un papel fundamental en la medición de la radiactividad ambiental, de la actividad de una muestra o en la caracterización de muestras desconocidas. Esta técnica no destructiva es ampliamente utilizada, ya que permite obtener información sobre los diferentes radionúclidos presentes en las muestras.

Un tipo particular de detector muy utilizado en espectrometría gamma es el de germanio de alta pureza (HPGe), que es especialmente valioso debido a su eficiencia y excelente resolución energética en un amplio rango de energías. Sin embargo, la calibración experimental de estos detectores puede ser un proceso complejo y costoso desde el punto de vista económico. Esto se debe a la necesidad de utilizar múltiples fuentes radiactivas con actividades conocidas, adaptadas a cada geometría específica que se desee emplear en el sistema de medida. La eficiencia del detector depende de varios factores tales como sus características intrínsecas, la energía de los fotones o la geometría de los elementos bajo análisis. Para llevar a cabo esta calibración de manera precisa se utilizan radionucleidos de referencia que emiten radiación γ con actividades certificadas. Esta calibración es fundamental para garantizar mediciones fiables de la actividad de los núcleos radiactivos de las muestras.

Por este motivo se han desarrollado métodos alternativos, como el cálculo de eficiencias a partir de fórmulas teóricas. Si bien este método tiene la ventaja de calcular eficiencias de manera rápida y sin ningún coste económico, presenta la desventaja de no proporcionar la precisión que se requiere.

Un método cada vez más empleado para estimar la eficiencia del detector es la simulación Monte Carlo. Con esta alternativa se pueden conseguir resultados más precisos que los que se alcanzan con las fórmulas teóricas con un tiempo razonablemente bajo y sin ningún coste.

En este trabajo llevaremos a cabo mediciones de diferentes fuentes de radiación para poder valorar la exactitud de los resultados obtenidos utilizando las simulaciones Monte Carlo. Además también nos proponemos comparar los resultados que predicen algunas fórmulas teóricas, con los resultados de los programas de simulación Monte Carlo PENELOPE/penEasy y DETEFF.

2 Objetivos

El objetivo principal de este trabajo de fin de Máster es llevar a cabo un método para caracterizar un detector de germanio de alta pureza utilizando el código Monte Carlo PENELOPE/penEasy.

Queremos estudiar la eficiencia total y de fotopico de un detector específico y su dependencia con la energía de la radiación incidente y con la distancia entre la fuente y el detector. Compararemos diversos métodos que se utilizan para realizar este cálculo, como lo pueden ser fórmulas teóricas u otros programas de simulación, para ver sus puntos fuertes y limitaciones.

También nos centraremos en las mediciones en geometría cercana, es decir, cuando la fuente se encuentra a una distancia pequeña respecto al detector. Este tipo de mediciones

tiene ciertas ventajas, pero debido a los inconvenientes que acarrearán se intenta evitar, y solo se realizan cuando no hay otra opción. En este contexto, nuestro proyecto tiene como finalidad profundizar en la comprensión de las implicaciones y dificultades asociadas a estas mediciones y aplicar las correcciones necesarias para garantizar la obtención de resultados precisos.

Realizaremos una serie de experimentos con el propósito de realizar una caracterización experimental detallada del detector en cuestión. Posteriormente, aplicaremos la metodología desarrollada previamente para evaluar su validez.

Finalmente, se buscará hacer una optimización de la geometría del detector simulado, con el fin de que los datos que arrojen las simulaciones Monte Carlo sean lo más próximos posible a los obtenidos experimentalmente.

3 Interacción de los rayos γ con la materia

Es fundamental entender los mecanismos mediante los cuales los fotones provenientes de desexcitaciones nucleares interactúan con la materia. Por ello en esta sección resumiremos los principales procesos de interacción de la radiación γ con la materia (efecto fotoeléctrico, dispersión Rayleigh, dispersión Compton y creación de pares y tripletes). La probabilidad de que suceda cada uno de estos mecanismos tiene una dependencia importante con la energía E del fotón incidente y el número atómico Z del material con el que interactúan. En la figura 1 se puede observar esta dependencia para el germanio (Ge). A bajas energías (hasta unos 200 keV) domina el efecto fotoeléctrico; a partir de esta energía el proceso más importante es el efecto Compton y a altas energías (a partir de unos 10 MeV) domina la creación de pares y tripletes. En este trabajo vamos a tratar con fotones con energías entre 50 y 1400 keV y por lo tanto este último mecanismo no va a tener una gran incidencia.

3.1 Efecto fotoeléctrico

El efecto fotoeléctrico tiene lugar cuando el fotón interactúa con un electrón ligado del átomo y le cede toda su energía. El fotón es absorbido y el electrón es emitido con una energía cinética

$$E_e = E - U_i, \quad (1)$$

donde U_i es la energía de ligadura de la (sub)capa i en la cual se encontraba el electrón. Cuando esto sucede, el átomo queda en un estado excitado y a continuación puede relajarse de dos formas. La primera es que se desexcite mediante la emisión de un electrón Auger. También puede pasar que un electrón de una capa más externa caiga al hueco que ha dejado el electrón liberado, emitiendo un rayo x característico con una energía igual a la diferencia de energías de los niveles atómicos involucrados.

La sección eficaz de efecto fotoeléctrico es aproximadamente proporcional a Z^5 y a $E^{-7/2}$ [1]. La probabilidad de que suceda el efecto fotoeléctrico aumenta cuanto más alto sea el número atómico y decrece rápidamente al aumentar la energía.

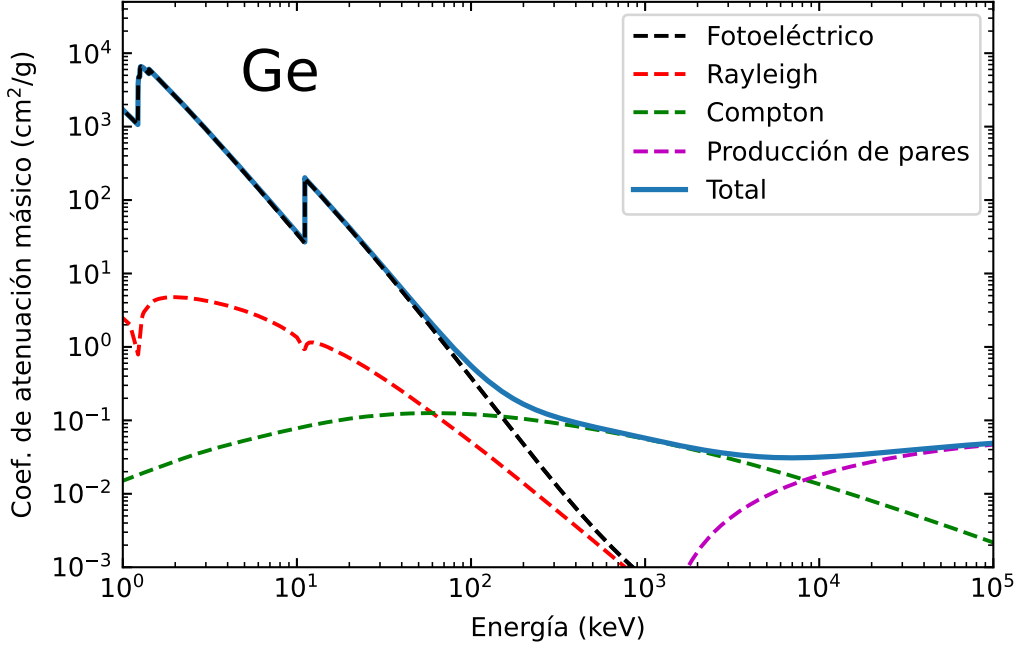


Figura 1: Coeficientes de atenuación másicos de los principales mecanismos de interacción fotón-materia (curvas discontinuas) y el coeficiente de atenuación másico total (curva continua) del germanio, extraídos de la base de datos de PENELOPE.

3.2 Dispersión Rayleigh

La dispersión Rayleigh (también llamada elástica o coherente) sucede cuando un fotón interactúa elásticamente con los electrones del átomo, provocando un cambio de dirección en el fotón pero sin ceder energía al átomo y, por lo tanto, el fotón y el átomo siguen con la misma energía que tenían antes del choque.

La sección eficaz de la dispersión Rayleigh se puede calcular mediante la expresión

$$\sigma(E) = \pi r_e^2 \int_{-1}^1 (1 + \cos^2 \theta) [F(q, Z)]^2 d(\cos \theta), \quad (2)$$

donde r_e es el radio clásico del electrón, $F(q, Z)$ es el factor de forma atómico y q es el momento lineal transferido. A bajas energías $F(q, Z) \approx Z$ y entonces $\sigma \propto Z^2$, mientras que en el límite de altas energías tenemos una dependencia de la sección eficaz con la energía del tipo $\sigma \propto E^{-2}$ [1].

3.3 Dispersión Compton

La dispersión Compton (inelástica o incoherente) ocurre cuando el fotón colisiona inelásticamente con uno de los electrones de un átomo cediéndole parte de su energía. Como resultado

se emite un fotón secundario en un cierto ángulo polar θ y el electrón de retroceso es liberado con una energía cinética E_e . Si adoptamos la aproximación de Klein–Nishina [1], que supone que el electrón blanco está libre y en reposo antes de la colisión, la energía del fotón secundario se puede calcular en función del ángulo polar de dispersión usando

$$E_C = \frac{E}{1 + \frac{E}{m_e c^2} (1 - \cos \theta)}. \quad (3)$$

Por conservación de la energía y el momento lineal se debe cumplir que

$$E_e = E - E_C. \quad (4)$$

A partir de esta expresión se puede obtener que la energía cinética del electrón de retroceso Compton es

$$E_e = E \left(1 - \frac{1}{1 + \frac{E}{m_e c^2} (1 - \cos \theta)} \right). \quad (5)$$

De la ecuación (3) se puede extraer la energía mínima del fotón secundario, que ocurrirá cuando $\theta = \pi$,

$$E_{\min} = \frac{E}{1 + 2E/m_e c^2}. \quad (6)$$

Y cuando $\theta = 0$ tenemos la energía máxima, $E_{\max} = E$, que corresponde al caso en el que no ha habido dispersión. Entre E_{\min} y E_{\max} hay un continuo de valores de energías que puede tomar el fotón dispersado por efecto Compton.

La sección eficaz del efecto Compton es aproximadamente proporcional a $1/E$ [2] y por este motivo este mecanismo es el dominante en la zona de energías superiores a unos 200 keV, ya que su probabilidad de interacción decrece más lentamente que la probabilidad de interacción mediante efecto fotoeléctrico.

3.4 Creación de pares y tripletes

En la creación de pares el fotón inicial desaparece dando lugar a un electrón y a un positrón. Este suceso no puede ocurrir en el vacío sino que es necesario que el fotón interactúe con el núcleo o uno de los electrones para que se pueda conservar el momento lineal.

Para que se produzca la creación de pares es necesario que el fotón tenga una energía mínima de 1,022 MeV, es decir $2m_e c^2$, que corresponde a la suma de las masas en reposo de los dos leptones. La energía restante se reparte entre el positrón y el electrón en forma de energía cinética. Posteriormente se crean dos fotones de aproximadamente 511 keV debido a que el positrón se aniquilará con un electrón del encapsulado de la fuente.

La sección eficaz de la creación de pares se puede expresar como

$$\sigma_{pp} \propto Z^2 f(E, Z), \quad (7)$$

donde $f(E, Z)$ es una función creciente desde la energía mínima necesaria para que se de este mecanismo, 1,022 MeV [2]. Este hecho, combinado con que la sección eficaz de la dispersión Compton disminuye como $1/E$ hace que la creación de pares sea dominante a energías superiores a unos 10 MeV.

4 Espectrometría gamma

La espectrometría gamma es una técnica utilizada para analizar la radiación γ emitida por núcleos inestables o muestras radioactivas. Consiste en medir la energía y la intensidad de los fotones que emiten las fuentes, con lo que se puede conseguir información importante, como la actividad o la composición de la muestra. Para estudiar la radiación γ es necesario disponer de una herramienta que sea capaz de medirla, y para ello utilizamos los detectores.

4.1 Detectores

Hay diferentes tipos de detectores pero los más usados en espectrometría gamma son los centelleadores y los semiconductores. Los centelleadores tienen la ventaja de tener una eficiencia más alta y ser más baratos y robustos, pero tienen una resolución energética mucho menor a la de los detectores semiconductores. En este apartado nos vamos a centrar en los detectores semiconductores. A continuación vamos a explicar las características más significativas de estos materiales para poder entender su funcionamiento.

Los semiconductores tienen la banda de valencia llena y la banda de conducción vacía, pero la energía que las separa es muy baja (del orden de 1 eV). En la figura 2 se muestra de manera esquemática la banda de conducción, la de valencia y la diferencia que hay entre ellas (E_g). Los electrones que se encuentran en la banda de valencia pueden pasar a la banda de conducción si reciben una energía superior a la de la diferencia entre las dos bandas. La forma habitual en la que un electrón pasa a la banda de conducción es mediante un aumento de temperatura, pero la absorción de radiación ionizante puede producir el mismo efecto. Cuando un electrón pasa a la banda de conducción deja un vacío en la banda de valencia que se comporta como una partícula con carga positiva conocida como hueco.

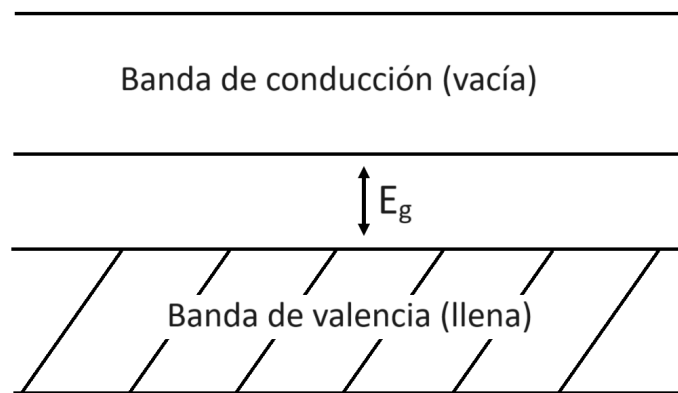


Figura 2: Esquema de bandas de un semiconductor.

A priori los semiconductores son materiales neutros. Para alterar sus propiedades se utiliza la técnica del dopaje, que consiste en añadir impurezas al material para generar más electrones libres o más huecos, aumentando así la conductividad del material.

Si queremos tener un exceso de electrones se agregan impurezas donadoras, que son átomos de un material con un electrón de valencia más que el material semiconductor. Los donadores aportan electrones adicionales al material, provocando que haya más electrones libres que huecos, haciendo que el semiconductor pase a ser un semiconductor de tipo n.

Por otro lado tenemos el dopaje con impurezas aceptadoras. Estas impurezas son átomos que tienen menos electrones de valencia que el semiconductor y provocan que se creen huecos adicionales en la banda de valencia. Esto da como resultado un semiconductor de tipo p, donde la cantidad de huecos supera a la de electrones libres.

Si unimos un semiconductor de tipo p con uno de tipo n, el exceso de electrones tenderá a moverse hacia la zona p, donde hay una menor concentración por el efecto de la difusión, y de la misma forma los huecos se moverán hacia la zona n. Este desplazamiento genera un campo eléctrico que acaba por detener la difusión, llegando a un equilibrio y formando una región neutra conocida como zona de agotamiento o zona de carga espacial donde no hay portadores en exceso.

Como ya se ha mencionado, entre la zona p y la zona n se genera una diferencia de potencial V_0 que depende de la concentración de electrones y huecos [3]. Esta zona de carga espacial puede aumentar de tamaño si aplicamos una polarización inversa a la unión ya que este potencial extra dificultará el movimiento de los huecos y de los electrones. El nuevo grosor de esta zona será

$$X_0 \approx \sqrt{\mu\rho(V_0 + V_b)}, \quad (8)$$

donde μ es la concentración de impurezas, ρ es la resistividad del material y V_b es el voltaje aplicado en inversa.

Cuando la radiación incide en la zona de carga espacial genera pares electrón-hueco. Los electrones se desplazan hacia la región de tipo n mientras que los huecos se dirigen a la región de tipo p. Estos portadores son recolectados en el cátodo y en el ánodo formando una señal eléctrica cuya amplitud es proporcional a la energía depositada en el volumen sensible.

En los detectores semiconductores no se juntan dos materiales, uno p y otro n, sino que la unión p-n se realiza en el contacto eléctrico dopando con impurezas de signo contrario a las del material del cristal. De esta forma se puede conseguir que la zona libre de carga se extienda por todo el volumen del detector.

Una característica fundamental en los detectores es la resolución energética, que se refiere a la precisión con la cual el detector puede medir la energía de los fotones incidentes. Los picos presentes en los espectros debido a los fotones no tienen la forma de una delta de Dirac situada a la energía exacta del fotón sino que tienen una cierta anchura por tres motivos. El primero es debido a las fluctuaciones estadísticas en la producción de pares electrón-hueco, que sigue una estadística gaussiana. El segundo es el ruido electrónico del detector, del preamplificador y del amplificador. El ruido electrónico consiste en pequeñas fluctuaciones alrededor del voltaje 0 que pueden causar que dos pulsos generados a partir de un fotón que deposita la misma energía acaben teniendo un voltaje diferente. Estas oscilaciones también tienen un comportamiento gaussiano. Finalmente tenemos que los niveles nucleares tienen incertidumbre en su energía y, por consiguiente, las transiciones que dan lugar a los rayos γ no tienen una energía fija, sino que siguen una distribución de Lorentz.

La convolución de una gaussiana con una lorentziana se conoce como función Voigt [4]. En principio se deberían ajustar los picos a esta función. Sin embargo, en nuestro caso, donde la amplitud de los picos debido a las fluctuaciones estadísticas es órdenes de magnitud superior a la amplitud de las transiciones, la gaussiana domina claramente sobre la lorentziana, por lo que podemos tratar los picos como si tuvieran una distribución puramente gaussiana.

El parámetro que se utiliza para cuantificar la resolución energética es la anchura a media altura (*Full Width at Half Maximum*, FWHM), que está directamente relacionada con la desviación estándar σ de la gaussiana

$$\text{FWHM} = 2\sqrt{2 \ln 2} \sigma \approx 2,355 \sigma. \quad (9)$$

σ tiene dos contribuciones. La primera es la fluctuación estadística en el número de portadores de carga que genera el fotón debido a que no toda la energía del fotón se invierte en generar pares electrón-hueco. Si llamamos \bar{W} a la energía media necesaria para crear un par electron-hueco y E la energía del fotón, tenemos que

$$\sigma_e = \sqrt{\frac{FE}{\bar{W}}}, \quad (10)$$

donde F es el factor de Fano. El factor de Fano es un coeficiente empírico que depende del material del detector. Se introduce porque experimentalmente se ha comprobado que las fluctuaciones observadas son menores de las que se esperarían si fueran puramente estadísticas. De esta forma la contribución del ruido estadístico a la anchura del pico es

$$\mathcal{T}_e = 2\sqrt{2 \ln 2 \bar{W} F E}. \quad (11)$$

La otra causa del ensanchamiento de los picos es el ruido electrónico, cuya contribución, independiente de la energía del fotón, se puede expresar como

$$\mathcal{T}_r = 2\sqrt{2 \ln 2} \sigma_r. \quad (12)$$

Una buena resolución energética es esencial. Además de definir de una forma más precisa la energía de los fotones, también facilita la discriminación de picos con energías cercanas entre sí. En caso de que la resolución energética no alcance un nivel suficiente, dos picos con energías similares podrían aparecer como uno solo.

Otra característica fundamental es la eficiencia total absoluta

$$\eta = \frac{\text{número de fotones detectados}}{\text{número de fotones emitidos por la fuente}}. \quad (13)$$

Se añade el término “absoluta” al nombre para distinguirlo de la eficiencia intrínseca

$$\bar{\eta} = \frac{\text{número de fotones detectados}}{\text{número de fotones emitidos que llegan al detector}}. \quad (14)$$

La relación entre ambas eficiencias es

$$\eta(E) = \frac{\Omega}{4\pi \text{ sr}} \bar{\eta}(E), \quad (15)$$

siendo Ω el ángulo sólido subtendido por el detector.

También se define la eficiencia de fotopico, que representa la fracción de fotones que depositan toda su energía entre el total de fotones emitidos

$$\varepsilon = \eta \frac{\text{número de cuentas en el fotopico}}{\text{número de cuentas en el espectro}}. \quad (16)$$

Adicionalmente se utiliza la eficiencia de fotopico intrínseca, que se define igual que la total

$$\varepsilon(E) = \frac{\Omega}{4\pi \text{ sr}} \bar{\varepsilon}(E). \quad (17)$$

Los detectores semiconductores más usados son los de silicio ($Z_{\text{Si}} = 14$) y los de germanio ($Z_{\text{Ge}} = 32$). Estos últimos tienen mayor eficiencia ya que, como hemos explicado en el apartado anterior, la sección eficaz de efecto fotoeléctrico aumenta rápidamente con Z y esto los hace adecuados para la detección de radiación γ . Además los detectores de germanio al tener un gap menor entre la banda de conducción y la de valencia tienen una mejor resolución ($E_g(\text{Ge}) = 0,66 \text{ eV}$, $E_g(\text{Si}) = 1,11 \text{ eV}$). Los de silicio son ideales para fotones de menor energía, como los rayos x.

En este trabajo utilizaremos un detector de germanio de alta pureza. Dentro de estos hay varios tipos según sus características, cada uno con sus ventajas y dependiendo del experimento puede ser mejor escoger uno u otro.

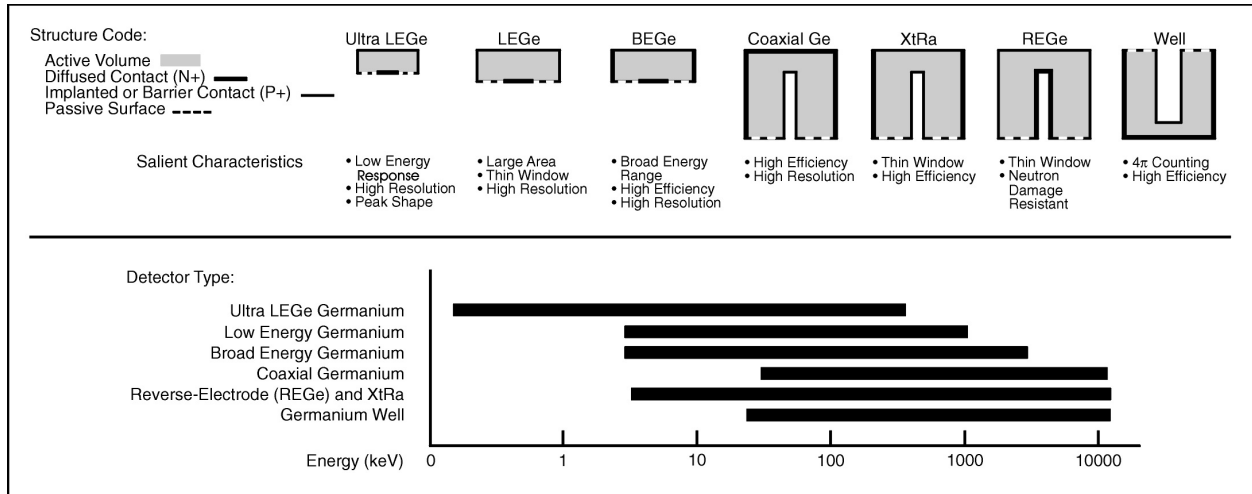


Figura 3: Geometrías más utilizadas en los detectores de germanio. Imagen obtenida de [5].

Nosotros vamos a trabajar con un espectrómetro *Broad Energy Germanium* (BEGe). Como se puede ver en la figura 3, estos detectores cubren un rango amplio de energía entre aproximadamente 3 keV y 3 MeV. Su resolución a baja energía es similar a la de los *Low Energy Germanium* (LEGe) (el pico a 122 keV tiene una anchura a media altura (FWHM) de 0,72 keV) y su resolución a altas energías es comparable a la de los detectores HPGe coaxiales (su FWHM a 1332 keV es de 1,9 keV) [5, 6].

4.2 Deposición de energía

Los fotones emitidos por las fuentes radioactivas son identificados cuando interactúan con el detector, cediéndole energía a uno o más electrones mediante los procesos de interacción fotón-materia explicados en el apartado anterior. Esta energía acaba formando una señal eléctrica cuya amplitud es proporcional a la energía depositada.

Para estudiar la energía de los rayos γ utilizamos los “espectros de altura de impulsos” que son una representación gráfica (histograma) de la distribución de energía depositada. En el eje horizontal se representa la energía transferida por los fotones y en el eje vertical se muestra la cantidad de fotones que ha depositado esa determinada energía. Una fuente con solo una emisión γ no va a tener únicamente un pico con la energía de ese rayo γ sino que su espectro energético va a tener otras componentes que vamos a explicar a continuación.

- Fotopico (FP): Este pico se genera cuando el detector absorbe la totalidad de la energía del fotón. Esto ocurre cuando el fotón interactúa con los electrones por efecto fotoeléctrico, en el que deposita toda su energía, o mediante varias dispersiones Compton, en las que cede una parte de su energía en cada una de ellas y finalmente acabe transfiriendo el resto por efecto fotoeléctrico (este segundo caso es más frecuente a energías más altas, donde el coeficiente de atenuación del efecto Compton es mayor que el de efecto fotoeléctrico).
- Pico de *backscattering* (PB): Este pico corresponde a los fotones que son retrodispersados en el material cercano al detector con un ángulo de unos 180° y que tienen una energía que viene definida por la fórmula (6).
- Borde Compton (BC): corresponde a la energía máxima que puede depositar un fotón mediante una única interacción Compton, la cual viene dada por

$$E' = E \left(1 - \frac{1}{1 + \frac{2E}{m_e c^2}} \right). \quad (18)$$

- Continuo Compton: Espectro continuo que termina en el borde Compton. Es debido a aquellos fotones que interactúan por efecto Compton depositando una parte de su energía y acaban escapando del cristal.
- Picos de escape simple (ES) y escape doble (ED): Estos dos picos se producen cuando la fuente emite rayos γ con una energía superior a 1022 keV, a partir de la cual es posible la creación de pares electrón-positrón. Como se ha explicado anteriormente, este mecanismo consiste en la creación de un positrón y un electrón con una energía cinética conjunta correspondiente a la energía del fotón original menos los 1022 keV de sus masas en reposo. Normalmente el electrón y positrón transfieren toda su energía cinética al detector, y finalmente el positrón se acaba aniquilando con otro electrón, originando dos fotones de aproximadamente 511 keV. Si uno de estos fotones escapa del detector la energía depositada en el detector será la del γ inicial menos 511 keV y de esta forma aparece el pico de escape simple. Si los dos fotones de 511 keV escapan del detector sin interactuar con él la energía absorbida sería la del γ inicial menos 1022 keV, que corresponde a la energía del pico de escape doble.

En la figura 4 se muestran de forma esquemática las componentes descritas anteriormente.

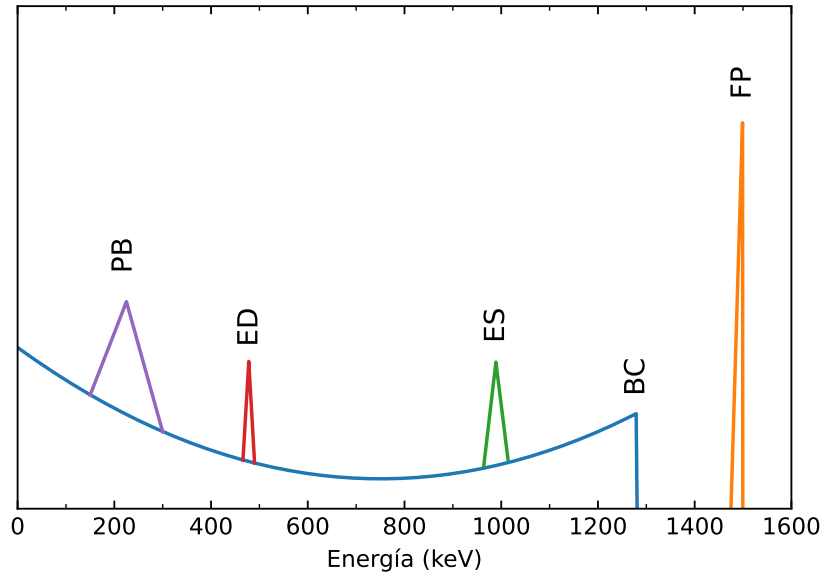


Figura 4: Esquema ideal de un espectro energético donde se muestran sus partes principales.

4.3 Coincidencias

El hecho de que los BEGe tengan buena eficiencia en un rango tan amplio de energías permite que el efecto de coincidencia entre diferentes rayos γ y/o rayos x sea aún más significativo que en otros detectores [7]. Este fenómeno puede llevar a error en la determinación de la actividad de ciertos radionúclidos o en la construcción de la curva de eficiencias de un detector [8], sobre todo cuando se hacen medidas a corta distancia, y por ello ahora vamos a explicar más en detalle este efecto y sus consecuencias.

Llamamos coincidencia al hecho de que dos (o más) fotones lleguen al detector en un intervalo de tiempo más breve que su resolución temporal. Esto puede provocar que cuentas que deberían ir a los correspondientes fotopicos acaben contribuyendo al pico suma, que aparece a una energía igual a la suma de las energías de los fotones individuales ya que el detector trata a los fotones en coincidencia como uno solo.

Para que se dé una coincidencia, los dos fotones tienen que ser captados. En este aspecto juega un papel importante la eficiencia del detector. Si nos fijamos en la figura 5, que muestra la curva $\eta(E)$ de un HPGe en el rango de energías entre 20 y 1400 keV, se observa cómo a medida que aumenta la energía de los fotones la eficiencia total absoluta decrece. Este comportamiento es el esperado conociendo la curva de los coeficientes de atenuación mostrados en la figura 1. Vemos que para el detector simulado en la figura 5 a una energía de unos 100 keV tiene una eficiencia de 0,25, es decir, 1 de cada 4 fotones emitidos por la fuente serán detectados. En cambio, a energías superiores la eficiencia disminuye hasta 0,1,

en otras palabras, solo se detectará 1 de cada 10 fotones. Por este motivo, las coincidencias entre fotones de menor energía serán más probables que las coincidencias entre fotones de mayor energía.

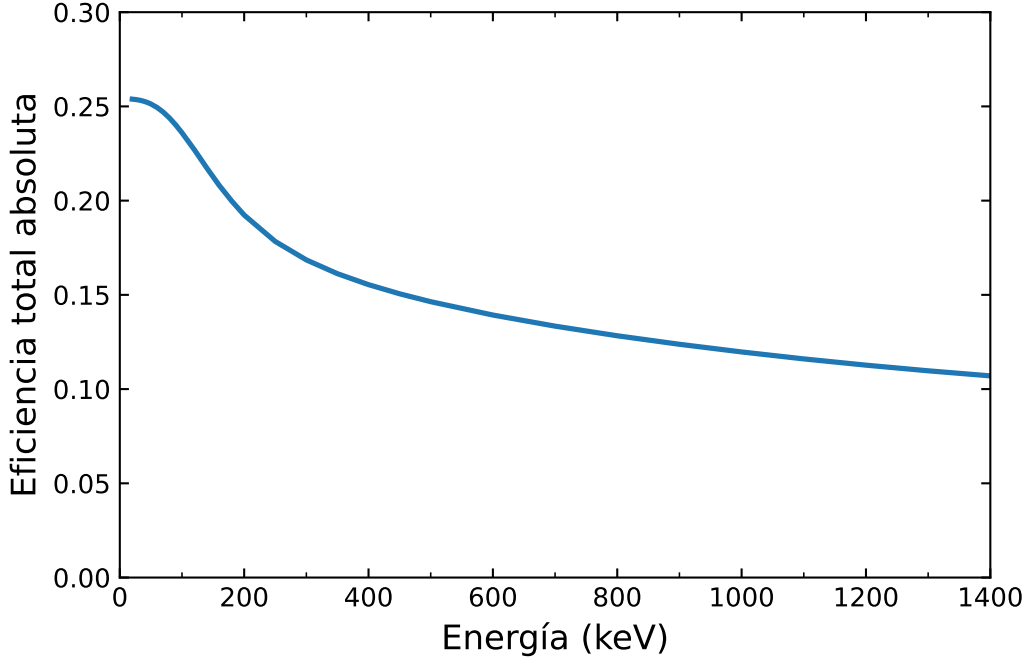


Figura 5: Eficiencia total absoluta de un detector BEGe con un cristal de 31,5 mm de grosor y 35,4 mm de radio, situado a 20 mm de una fuente puntual, calculada con PENELOPE/penEasy.

Existen dos tipos de coincidencias, las aleatorias y las verdaderas. Las coincidencias aleatorias ocurren cuando dos o más fotones originados por desintegraciones de dos núcleos distintos llegan tan cercanos en el tiempo que se superponen y se registran como un único pulso, causando el *pile-up*. Por otro lado tenemos las coincidencias verdaderas. Estas solo aparecen cuando medimos núcleos que emiten dos o más fotones en cascada y se diferencian de las aleatorias en que en este caso los dos fotones provienen del mismo decaimiento. Para explicarlo mejor trataremos el decaimiento de la figura 6.

Para un decaimiento nuclear en el que no hubiera coincidencias la tasa de cuentas en el fotopico de γ_1 sería

$$\dot{N}_1 = A p_1 \varepsilon_1, \quad (19)$$

donde A es la actividad de la fuente, p_1 la probabilidad de emisión de γ_1 y ε_1 la eficiencia de fotopico absoluta. Pero en el caso que estamos tratando podemos tener coincidencia entre γ_1 y γ_2 , de forma que la expresión para la tasa de cuentas observada en el fotopico de γ_1 sería

$$\dot{N}'_1 = A p_1 \varepsilon_1 - A p_1 \varepsilon_1 \eta_2, \quad (20)$$

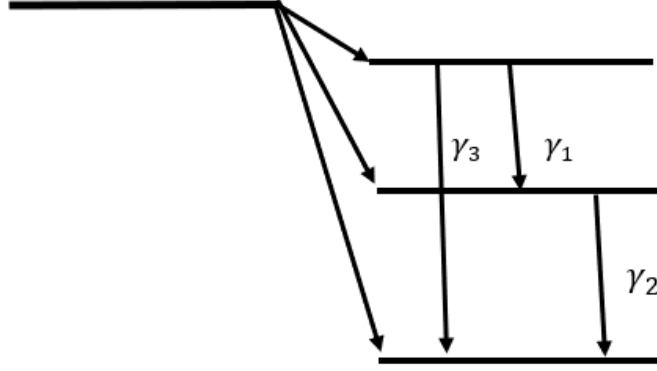


Figura 6: Esquema de decaimiento utilizado para explicar las coincidencias verdaderas.

donde η_2 es la eficiencia total absoluta de γ_2 . Vemos que aparece un término negativo debido al segundo fotón, que hace que el número de cuentas detectado sea inferior del que debería ser. Podemos definir un factor de corrección

$$C_1 \equiv \frac{\dot{N}_1}{\dot{N}'_1} = \frac{1}{1 - \eta_2}. \quad (21)$$

Este factor de corrección es el valor por el cual debemos multiplicar la eficiencia de fotopico medida para obtener la eficiencia $\varepsilon(E_1)$ real. De la ec. (21) se deduce que $C_1 > 1$ ya que aquí el efecto de las coincidencias hace que se pierdan cuentas del fotopico de γ_1 . Actuando de la misma forma para γ_2 llegamos a la expresión

$$C_2 \equiv \frac{\dot{N}_2}{\dot{N}'_2} = \frac{Ap_2\varepsilon_2}{Ap_2\varepsilon_2 + Ap_1\eta_1\varepsilon_2} = \frac{1}{1 - (p_1/p_2)\eta_1} \quad (22)$$

Pasemos ahora a analizar el caso del fotón γ_3 . Este fotón no tiene coincidencia con ningún otro, por lo tanto su correspondiente fotopico no perderá cuentas. Pero sí se puede dar que haya una coincidencia entre los fotones γ_1 y γ_2 , que depositen toda su energía en el detector aumentando así las cuentas en el fotopico de γ_3 y, por lo tanto, tendríamos más cuentas a la energía de γ_3 de las que deberíamos tener. En este caso el factor de corrección es

$$C_3 \equiv \frac{\dot{N}_3}{\dot{N}'_3} = \frac{Ap_3\varepsilon_3}{Ap_3\varepsilon_3 + Ap_1\varepsilon_1\varepsilon_2} = \frac{1}{1 + p_1\varepsilon_1\varepsilon_2/(p_3\varepsilon_3)}. \quad (23)$$

Obsérvese que $C_3 < 1$ ya que, como hemos explicado anteriormente, el fenómeno de las coincidencias hace que tengamos más cuentas en el fotopico de las que deberíamos tener.

Para el ejemplo expuesto, las expresiones de los factores de corrección son sencillas, pero en otros casos pueden llegar a ser muy complicadas. En la referencia [9] se presenta la expresión general para el inverso de los factores de corrección

$$F_{ij}^S = \prod_{l=i}^{n-2} \prod_{k=l+1}^{n-1} A_{kl} \prod_{p=1}^j \prod_{m=0}^{p-1} B_{pm} \prod_{g=j+1}^{i-1} C_{gj} \prod_{l=i}^{n-2} \prod_{k=l+1}^{n-1} D_{kl} \prod_{p=1}^j \prod_{m=0}^{p-1} E_{pm} \prod_{l=i}^{n-1} F_{nl}. \quad (24)$$

Los valores de los coeficientes de la ec. (24) están definidos en [9], donde se evalúa (24) para los rayos γ de diversos núcleos, encontrando expresiones considerablemente más simples para los valores de F_{ij}^S con las que calcularemos los coeficientes de corrección que nos interesan.

5 Simulación Monte Carlo

La simulación Monte Carlo (MC) es una herramienta estadística empleada para analizar fenómenos complejos y estocásticos utilizando números aleatorios. Para ello se hace un modelo de un sistema y mediante la simulación MC se intenta reproducir su comportamiento para saber como va a evolucionar.

En este método se generan un cierto número de eventos independientes y a partir de sus resultados podemos extraer información relevante tal como su valor medio, su dispersión y su incertidumbre. A partir del teorema del límite central (que podemos aplicar debido a que N es grande), sabemos que la incertidumbre del resultado es proporcional a \sqrt{N} , siendo N el número de historias simuladas. Por lo tanto, la incertidumbre relativa será proporcional a $1/\sqrt{N}$, de modo que si queremos tener un resultado más preciso tendremos que aumentar el número de historias.

Las simulaciones MC se aplican en una amplia gama de disciplinas y campos, como la física, la ingeniería, la biología o las finanzas, entre otras, pero nosotros nos vamos a centrar en su aplicación para la simulación de transporte de radiación ionizante en la materia.

5.1 Simulación Monte Carlo de transporte de rayos γ

El método MC consiste en la simulación de los procesos de interacción de un fotón con el medio que le rodea, a lo largo de su trayectoria. Para ello los códigos de simulación siguen la historia del fotón (partícula primaria) y de las partículas secundarias resultantes de su interacción con el detector (como los electrones a los que cede energía por efecto Compton o fotoeléctrico), hasta que sus energías sean menores a un cierto valor umbral o hasta que la partícula sale del sistema definido [10].

El proceso de simulación de cada una de las historias es similar para todos los programas MC. Se empieza con una partícula cuyo estado inicial está definido por su posición, dirección de emisión y energía. Una vez definido su estado inicial se calcula la distancia que recorre hasta la primera interacción. Esta distancia es inversamente proporcional al coeficiente de atenuación del material en el que se encuentre. A continuación se elige al azar qué tipo de interacción ha sufrido, teniendo en cuenta el coeficiente de atenuación parcial de cada tipo de interacción. Una vez conocido el tipo de interacción se muestrea aleatoriamente su nueva energía y dirección y finalmente se guardan los estados de partículas secundarias que se hayan creado. Se repite el proceso hasta que la partícula haya sido absorbida por el material o abandone el sistema.

5.2 El sistema PENELOPE/penEasy

PENELOPE [11] (PENetration and Energy LOSS of Positrons and Electrons) es un software de simulación MC desarrollado por Francesc Salvat (*Universitat de Barcelona*), que permite estudiar el transporte acoplado de fotones, electrones y positrones en un rango de energías entre 50 eV y 1 GeV.

Para generar la geometría en la que se va a llevar a cabo la simulación se utiliza el paquete PENGEOM. Este sistema se basa en la definición de superficies (*surfaces*) que se agrupan para acabar formando cuerpos (*bodies*) que a su vez pueden agruparse en módulos (*modules*). Para crear una superficie se puede utilizar su forma implícita

$$\Phi(\vec{\mathbf{r}}) = A_{xx}x^2 + A_{xy}xy + A_{xz}xz + A_{yy}y^2 + A_{yz}yz + A_{zz}z^2 + A_x x + A_y y + A_z z + A_0 = 0 \quad (25)$$

o la forma reducida

$$\Phi(\vec{\mathbf{r}}) = I_1 x^2 + I_2 y^2 + I_3 z^2 + I_4 z + I_5 = 0 \quad (26)$$

con $I_i = 0, \pm 1$.

En el archivo .geo necesario para definir la geometría se deben añadir los valores de los coeficientes A_{ij} e I_i de las anteriores ecuaciones para generar la superficie deseada. Además es posible escalar cualquiera de los ejes,

$$x \rightarrow ax, \quad y \rightarrow by, \quad z \rightarrow cz, \quad (27)$$

se puede aplicar una rotación a la superficie mediante la inclusión de los ángulos de Euler ω, θ, ϕ

$$\vec{\mathbf{r}} \rightarrow R(\omega, \theta, \phi) \vec{\mathbf{r}} = R_z(\phi) R_y(\theta) R_x(\omega) \vec{\mathbf{r}}, \quad (28)$$

y realizar una translación para desplazar la superficie

$$\vec{\mathbf{r}} \rightarrow \vec{\mathbf{r}} + \vec{\mathbf{a}}. \quad (29)$$

Cada cuerpo se define indicando las superficies que lo limitan y señalando si el cuerpo se encuentra dentro o fuera de estas.

PenEasy es el programa principal para PENELOPE que hemos usado en este trabajo [12]. Su propósito es proporcionar un conjunto de modelos de fuente de radiación y diversos contadores (*tallies*) para poderlos aplicar a una gran variedad de situaciones prácticas, con el objetivo de facilitar su uso y reducir al mínimo la programación [13].

PenEasy necesita cuatro archivos. El primero de ellos ya lo hemos comentado, que es el fichero .geo en el cual se describe la geometría de la simulación. También requiere de un archivo .mat por cada material que se quiera añadir a la simulación. Para generar este archivo se tiene que utilizar el ejecutable material.exe, donde se tiene que indicar el elemento o composición química del material deseado. El tercero es el .in en el que se describe los parámetros de la simulación. En este archivo se incluyen varias variables a modelar. Las más importantes para este trabajo son el número de historias simuladas, el tipo de partícula a simular (o fuente radiactiva), su posición, el rango de direcciones de emisión que puede tomar, su energía y los materiales de los que está hecho cada cuerpo. Además se activa el contador *Tally Pulse Height Spectrum*, que se encarga de guardar la distribución espectro de energía depositada en el detector (el espectro). Finalmente tenemos el ejecutable peneasy.exe mediante el cual se inicia la simulación.

5.3 DETEFF

DETEFF [14] (DETECTOR EFFiciency) es un programa de simulación MC *user-friendly* desarrollado por Néstor Cornejo (Ciemat) específicamente para el cálculo de eficiencias de fotopico y eficiencias totales para fotones en un rango de entre 10 y 2000 keV [15].

DETEFF permite la simulación de detectores de cuatro materiales diferentes (NaI, CsI, Ge y Si). El programa ya cuenta con una geometría base (cilíndrica o coaxial) para cada detector en la que el usuario sólo debe añadir las medidas de sus partes más importantes, como por ejemplo el diámetro y grosor del cristal o las dimensiones de la ventana, entre otras.

También se puede modelar la geometría de la fuente, eligiendo entre tres formas (cilíndrica, rectangular o Marinelli) y una vez escogida la forma puedes editar las sus dimensiones y especificar el material del encapsulado entre varias opciones ya definidas (poliestireno, polipropano, polietileno, PMMA y aluminio) u otro material que elija el usuario teniendo que añadir la densidad másica de este.

6 Materiales y métodos

6.1 Desarrollo teórico de las eficiencias totales y de fotopico

Aunque el eje principal de este trabajo es la simulación MC, en este apartado también trataremos de usar fórmulas analíticas para poder comparar resultados.

Partimos de un detector cuyo volumen sensible tiene forma de cilindro de un grosor L y radio R , y con una fuente radiactiva a una distancia D , como el de la figura 7. De esta forma podemos definir los ángulos

$$\theta_1 = \arctan\left(\frac{R}{L+D}\right), \quad (30)$$

$$\theta_2 = \arctan\left(\frac{R}{D}\right), \quad (31)$$

que son los ángulos polares máximos que pueden tomar los fotones para salir por la cara posterior y la cara lateral, respectivamente.

Una vez definidos los ángulos θ_1 y θ_2 , la expresión exacta para la eficiencia total absoluta del detector es [3]

$$\eta(E) = \frac{1}{2} \left\{ \int_0^{\theta_1} [1 - e^{-\mu(E)d_1}] \sin \theta \, d\theta + \int_{\theta_1}^{\theta_2} [1 - e^{-\mu(E)d_2}] \sin \theta \, d\theta \right\}. \quad (32)$$

El primer término corresponde a los fotones que llegan con un ángulo polar $\theta < \theta_1$, es decir, fotones que se escaparían por la cara posterior del detector si no interactuasen, mientras que el segundo término corresponde a la contribución de los fotones que escaparían por la pared lateral. Las distancias d_1 y d_2 son los recorridos de los fotones a través del detector, cuyas

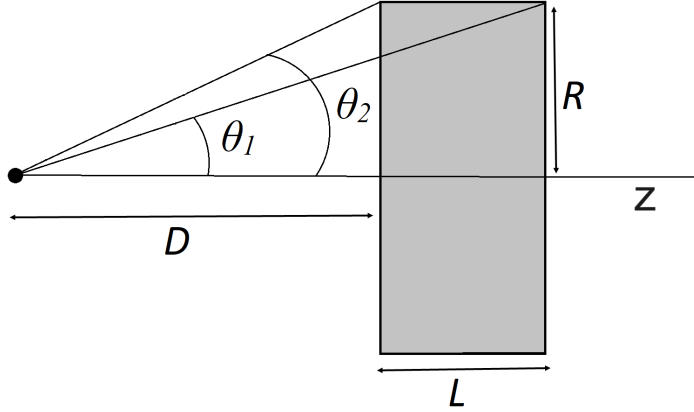


Figura 7: Esquema de la geometría de un detector cilíndrico.

expresiones son

$$d_1 = \frac{L}{\cos \theta}, \quad (33)$$

$$d_2 = \frac{R}{\sin \theta} - \frac{D}{\cos \theta}. \quad (34)$$

Además, si tenemos en cuenta la posible absorción en diferentes materiales que se encuentran entre la fuente y el cristal de Ge (como puede ser la ventana o el propio aire) [16] la fórmula es

$$\eta(E) = \frac{1}{2} \left\{ \int_0^{\theta_1} e^{-\sum_i \frac{\mu_i(E) t_i}{\cos \theta}} [1 - e^{-\mu(E) d_1}] \sin \theta d\theta + \int_{\theta_1}^{\theta_2} e^{-\sum_i \frac{\mu_i(E) t_i}{\cos \theta}} [1 - e^{-\mu(E) d_2}] \sin \theta d\theta \right\}, \quad (35)$$

donde μ_i y t_i son el coeficiente de atenuación lineal y el grosor de cada material, respectivamente.

Abbas [17] propuso otra expresión simplificada para calcular la eficiencia total intrínseca del detector en la que no se tienen que resolver integrales, lo que facilita el cálculo

$$\eta(E) = 1 - e^{-\mu(E) \bar{d}}, \quad (36)$$

donde \bar{d} es la distancia media recorrida por los fotones en el detector. Esta fórmula solo tiene en cuenta los fotones que saldrían por la cara posterior del detector, pero también hay que considerar los fotones que saldrían por la pared lateral. De esta forma la expresión completa queda

$$\begin{aligned} \eta(E) &= \frac{\Omega^{(1)}}{\Omega} \eta^{(1)}(E) + \frac{\Omega^{(2)}}{\Omega} \eta^{(2)}(E) \\ &= \frac{1 - \cos \theta_1}{1 - \cos \theta_2} \left[1 - e^{-\mu(E) \bar{d}^{(1)}} \right] + \frac{\cos \theta_1 - \cos \theta_2}{1 - \cos \theta_2} \left[1 - e^{-\mu(E) \bar{d}^{(2)}} \right], \end{aligned} \quad (37)$$

siendo $\frac{\Omega^{(1)}}{\Omega}$ y $\frac{\Omega^{(2)}}{\Omega}$ las fracciones de ángulo sólido que hay entre 0 y θ_1 y entre θ_1 y θ_2 , respectivamente, mientras que $\Omega = \Omega^{(1)} + \Omega^{(2)}$. Al igual que con \bar{d} , $\bar{d}^{(1)}$ y $\bar{d}^{(2)}$ también son la distancia media recorrida por los fotones

$$\bar{d}^{(1)} = L \frac{\ln(1/\cos \theta_1)}{1 - \cos \theta_1}, \quad (38)$$

$$\bar{d}^{(2)} = \frac{R(\theta_2 - \theta_1) - D \ln(\cos \theta_1 / \cos \theta_2)}{\cos \theta_1 - \cos \theta_2}. \quad (39)$$

Tanto en (35) como en (37) hay que tener en cuenta que μ no es el coeficiente de atenuación total, sino que es el total menos la contribución de la dispersión Rayleigh, debido a que este proceso no conlleva asociado deposición de energía en el detector.

6.2 Simulaciones realizadas

6.2.1 Eficiencia total y de fotopico

Para caracterizar nuestro detector hemos llevado a cabo una serie de simulaciones utilizando el código MC PENELOPE/penEasy. Hemos empezado simulando las curvas de eficiencia total y de fotopico de un detector cuya geometría solo constaba del cristal de Ge con las medidas nominales del fabricante.

Hemos realizado simulaciones para 33 energías en el rango $20 \text{ keV} \leq E \leq 1500 \text{ keV}$ ¹ y 4 distancias fuente-detector $20 \text{ mm} \leq D \leq 150 \text{ mm}$ ², sumando un total de 132 simulaciones. Para cada una de ellas se simulan 10^7 fotones monoenergéticos. Al cambiar de distancia se ajustaba el ángulo de emisión de los fotones para que coincidiera con el ángulo sólido cubierto por el detector. Esta estrategia permite reducir el tiempo necesario para realizar la simulación, ya que evita malgastar tiempo en seguir historias de partículas que no acaban en el detector y que por lo tanto no pueden ser contabilizadas.

La energía escogida como valor umbral para decidir que la partícula se ha absorbido ha sido de 10 keV para electrones y positrones y 1 keV en el caso de los fotones. Los valores de número de fotones y energía umbral se han elegido bajo el criterio de mantener un equilibrio entre tener una simulación lo más precisa posible y evitar un tiempo de simulación excesivo. Con los valores seleccionados una simulación podía llegar a durar 45 min.

6.2.2 Correcciones coincidencias

Como hemos explicado anteriormente, al trabajar con una geometría cercana (en las medidas experimentales la fuente se encuentra a 15 o 20 mm del detector), los efectos de las coincidencias pueden afectar significativamente al resultado.

¹Las energías simuladas son: 20, 25, 30, 35, 40, 45, 50, 60, 70, 80, 90, 100, 120, 140, 160, 180, 200, 250, 300, 350, 400, 450, 500, 600, 700, 800, 900, 1000, 1100, 1200, 1300, 1400 y 1500 keV.

²Las distancias son: 20, 50, 100 y 150 mm.

Utilizaremos las expresiones del artículo [9], donde aparecen las fórmulas para calcular los valores de C que necesitamos. Estas expresiones son

$$F_{81,0} = [1 - 0,6831 \eta(356,0)] [1 - 0,2019 \eta(302,9)] [1 - 0,0691 \eta(276,4)] \times [1 - 0,0292 \eta(79,6)] [1 - 0,0161 \eta(53,2)] [1 - 0,7507 \eta_{XK}(31,7)], \quad (40)$$

$$F_{302,9} = [1 - 0,3622 \eta(81,0)] [1 - 0,0746 \eta(53,2)] \times [1 + 0,0078 \varepsilon(79,6) \varepsilon(223,2)/\varepsilon(302,9)] [1 - 1,4541 \eta_{XK}(31,7)], \quad (41)$$

$$F_{356,0} = [1 - 0,3622 \eta(81,0)] [1 + 0,0365 \varepsilon(79,6) \varepsilon(276,4)/\varepsilon(356,0)] \times [1 + 0,0220 \varepsilon(302,9) \varepsilon(53,2)/\varepsilon(356,0)] [1 - 1,0887 \eta_{XK}(31,7)], \quad (42)$$

$$F_{1173,2} = [1 - 1,0001 \eta(1332,5)], \quad (43)$$

$$F_{1332,2} = [1 - 0,9988 \eta(1173,2)], \quad (44)$$

$$F_{1274,6} = [1 - 1,7924 \eta(511,0)]. \quad (45)$$

En las fórmulas anteriores aparecen factores con η y ε . Estas variables dependen de la distancia fuente-detector (a diferencia de los coeficientes, que están relacionados con las probabilidades de emisión). Por este motivo debemos encontrar estos valores para las distancias de interés. Para ello hacemos simulaciones de fotones monoenergéticos de las energías que aparecen en las fórmulas anteriores, a las diferentes distancias para encontrar los coeficientes de corrección.

Para asegurarnos de la precisión de los coeficientes calculados utilizando las expresiones de la referencia [9], realizamos simulaciones de fotones monoenergéticos de las energías de los γ que requieren corrección y de los decaimientos nucleares de los núcleos que tienen coincidencias (^{22}Na , ^{60}Co y ^{133}Ba). En la simulación del decaimiento nuclear (que es posible debido al paquete de subrutinas PENNUC [18], en el que mediante los esquemas de desintegración de los núcleos de interés de la base de datos de nucleide [19], se simula las partículas que se generan a partir de su desintegración y la correspondiente desexcitación de los núcleos hijos), ya están incluidos los efectos de las coincidencias verdaderas. En cambio, en la simulación de los fotones monoenergéticos, no. Calculando el cociente entre estos dos valores obtendremos el coeficiente de corrección estimado mediante simulación MC.

Vidmar *et al* [20] desarrollaron una forma aproximada de calcular el efecto de las coincidencias utilizando únicamente datos experimentales. Este método solo funciona para núcleos que emiten dos rayos γ en cascada. Elaboraron este método debido a que se encontraban con el problema de tener un sistema de tres ecuaciones con cuatro incógnitas. Estas ecuaciones son

$$\varepsilon_2 = \dot{N}_{12}/(wA\varepsilon_1), \quad (46)$$

$$\eta_1 = 1/w - \varepsilon_1 \dot{N}'_2/\dot{N}'_{12} \quad (47)$$

$$\eta_2 = 1/w - \dot{N}'_1/(wA\varepsilon_1), \quad (48)$$

donde ε_1 y η_1 son, respectivamente, las eficiencias de fotopico y total para el fotón de menor energía (E_1), mientras que ε_2 y η_2 son las eficiencias de fotopico y total del fotón de mayor

energía (E_2), \dot{N}_{12} es la tasa de cuentas del pico suma y w es la correlación angular de los fotones emitidos.

Ante este problema utilizaron unas relaciones que se cumplen para rayos γ con energías superiores a unos 200 keV

$$\varepsilon_1 > \varepsilon_2 \quad (49)$$

$$\eta_1 > \eta_2 \quad (50)$$

$$\eta_2/\varepsilon_2 > \eta_1/\varepsilon_1, \quad (51)$$

Combinando las primeras ecuaciones con estas relaciones se puede llegar a las siguientes expresiones para las eficiencias de fotopico corregidas

$$\varepsilon_1 = \sqrt{\frac{\dot{N}'_1 \dot{N}'_2}{wA\dot{N}'_2}} + \frac{\dot{N}'_1 - \dot{N}'_2 + [(\dot{N}'_1 - \dot{N}'_2)^2 + 4A\dot{N}_{12}/w]^{1/2}}{2A}, \quad (52)$$

$$\varepsilon_2 = \frac{\dot{N}_{12}}{wA\varepsilon_1}. \quad (53)$$

Aunque este método proporciona resultados aproximados y es válido para unas condiciones concretas (en este trabajo solo lo podremos aplicar al ^{60}Co), es interesante estudiar hasta qué punto reproduce los resultados experimentales.

6.3 Medidas experimentales

6.3.1 Fuentes radiactivas

Disponíamos de dos conjuntos de fuentes radiactivas puntuales, unas fabricadas por Amersham y otras por PTB. Las fuentes que utilizamos se indican en la tabla 1 y en la figura 8 se muestran las fuentes de ^{60}Co utilizadas. Los rayos γ que se emiten a partir de las desintegraciones de estas fuentes nos permiten tener diez puntos experimentales bien repartidos en el intervalo $50 \text{ keV} < E < 1400 \text{ keV}$.

Tabla 1: Valores de la actividad en la fecha de certificación y en la fecha del experimento de las fuentes utilizadas. Las incertidumbres corresponden a 2 desviaciones estándar (2SD).

Fabricante	Núcleo	A_0 (kBq)	A (kBq)
Amersham	^{22}Na	41.9(1.1)	0.0378(10)
	^{60}Co	42.8(1.1)	1.37(4)
	^{133}Ba	45.9(1.5)	8.2(3)
	^{137}Cs	41.9(1.1)	22.9(6)
	^{241}Am	38.0(1.0)	36.4(1.0)
PTB	^{22}Na	28.7(3)	26.3(3)
	^{60}Co	157(2)	151(2)



Figura 8: Fuentes radiactivas de ^{60}Co de Amersham (izquierda) y PTB (derecha).

Conocemos las actividades de las fuentes en la fecha de certificación pero las hemos tenido que corregir utilizando la ley de decaimiento exponencial para considerar su decaimiento temporal³

$$A(t) = A(t_0) e^{-\lambda(t-t_0)}, \quad (54)$$

donde $A(t_0) \equiv A_0$ es la actividad de la muestra en la fecha de certificación, λ es la constante de decaimiento de cada radionúcleo [19], t_0 es la fecha de certificación de las fuentes (01/03/1997 para las fuentes de Amersham, 01/01/2023 para las del PTB), y t es la fecha en que se realizó la medida.

6.3.2 Sistema de detección

Para realizar las medidas experimentales hemos utilizado un detector BEGe, concretamente el modelo BE3830 del fabricante Canberra. Según el fabricante el cristal de Ge tiene un grosor de 31,5 mm, un diámetro de 70,8 mm y una ventana de *carbon epoxy* cuyo grosor es 0,6 mm. Su composición química ($\text{C}_{21}\text{H}_{25}\text{ClO}_5$) [21] le aporta la ventaja de ser más resistente que otros materiales que se utilizan con el mismo propósito, como por ejemplo el Be, y a la vez es lo suficientemente delgada como para que su presencia tenga un impacto pequeño en la eficiencia a bajas energías. El detector está rodeado de un blindaje de plomo cuya finalidad es reducir al mínimo la radiación de fondo. En la figura 9 se muestran imágenes del detector.

Se utilizó un montaje que permitía poner las fuentes a 15 mm o 20 mm del cristal de Ge. El número de fotones que llega al detector por unidad de tiempo es mayor a medida que acercamos la fuente al detector. Colocar la fuente tan cerca del detector es una gran ventaja, sobre todo teniendo en cuenta que la mayoría de las fuentes empleadas tiene una actividad baja. Otro aspecto por el que hemos escogido estas distancias es que cuanto menor sea la separación entre el cristal y la fuente, mayor será el número de coincidencias. En las aplicaciones prácticas se busca alejar la fuente del detector para evitar el efecto de las

³Para aplicar la corrección se ha tenido en cuenta que 1 año = 365,242 198 78 días [19].

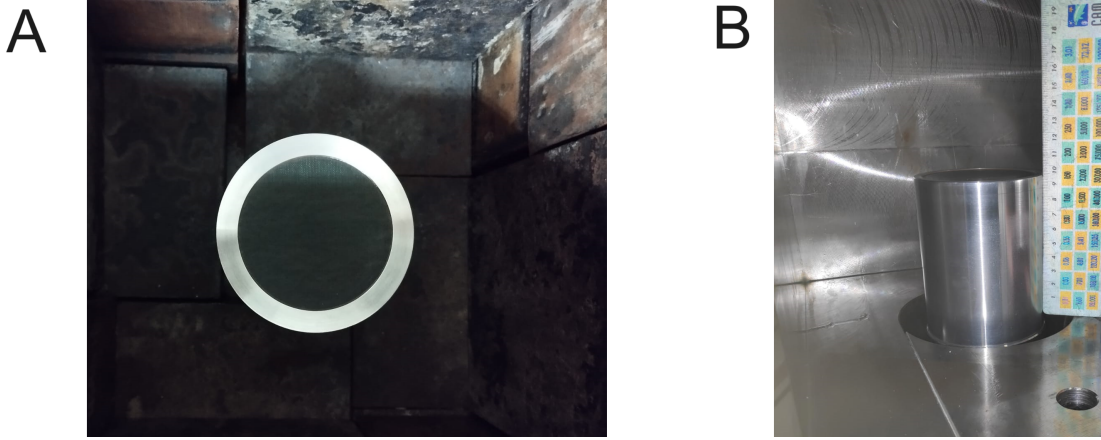


Figura 9: (A) Vista cenital del detector utilizado. (B) Fotografía lateral de un detector BE3830, análogo al utilizado en este trabajo.

coincidencias, pero como en este trabajo también queremos estudiar su efecto, estas distancias son ideales.

Uno de los inconvenientes de tener la fuente tan cercana del detector es que aumenta el *pile-up* y el tiempo muerto, ya que sus efectos aumentan con la tasa de conteo y, por lo tanto, su efecto será pequeño en aquellas fuentes con actividades más bajas, pero será importante en los núcleos con una actividad más alta.

6.3.3 Análisis de datos

Una vez hechas las medidas, el *software* del multicanal genera un archivo de texto con las cuentas detectadas en cada uno de sus 4096 canales, estando los dos primeros canales destinados a guardar el tiempo vivo τ_{live} y el tiempo total de adquisición τ_{real} , respectivamente.

La primera tarea a realizar con los espectros de las fuentes es restarles la radiación de fondo, que se midió durante $\tau_{\text{live}}^{\text{bg}} = 250000$ s. Los espectros netos se obtuvieron utilizando la expresión

$$y_n^{\text{net}} = y_n^{\text{raw}} - \left(\tau_{\text{live}}^{\text{raw}} / \tau_{\text{live}}^{\text{bg}} \right) y_n^{\text{bg}}, \quad (55)$$

donde n es el número de canal. Para cada pico de interés debemos extraer la componente continua debida a la contribución del continuo Compton de otros rayos γ más energéticos. Para hacerlo utilizamos uno de los métodos explicados en [3], que consiste en escoger dos canales, uno a cada lado del pico, y trazar una recta entre ellos, tal y como se observa en la figura 10. La ecuación de la recta será

$$C(n) = C_0 + C_1 n. \quad (56)$$

Cuando se haya trazado la línea se restarán de las cuentas del canal las cuentas correspondientes a la recta para conseguir definitivamente las cuentas netas de ese canal, quedando un espectro

$$y_n \equiv y_n^{\text{net}} - C(n). \quad (57)$$

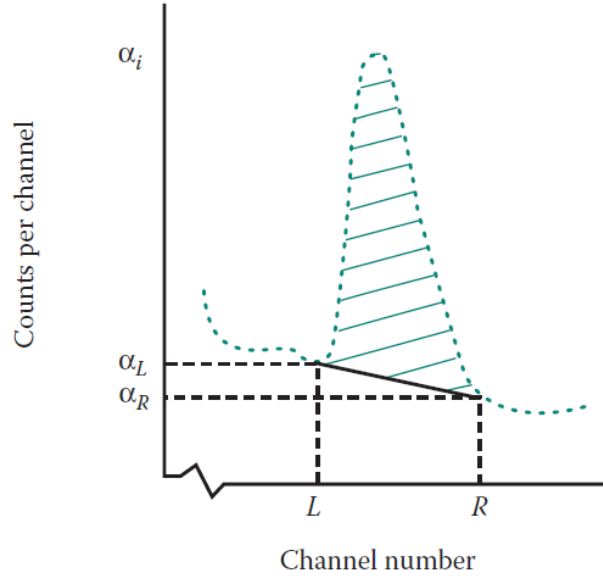


Figura 10: Método utilizado para sustraer la componente continua. Imagen obtenida de [3].

A continuación ajustamos una gaussiana a los picos debidos a los rayos γ con la expresión

$$G(n) = N \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp\left(-\frac{n - \mu}{2\sigma^2}\right), \quad (58)$$

siendo μ el centroide, σ la desviación estándar y N el área. Si tomamos el logaritmo de la gaussiana obtenemos un polinomio de grado 2

$$\ln G(n) = \alpha + \beta n + \gamma n^2. \quad (59)$$

Para encontrar los parámetros α , β y γ empleamos la función *curve fit* de Python que implementa el método de mínimos cuadrados encontrando los valores de α , β y γ con sus respectivas incertidumbres, que minimizan la función

$$\sum_{n \in \text{pico}} [y_n - f(x)]^2 = \sum_{n \in \text{pico}} [\ln y_n - (\alpha + \beta n + \gamma n^2)]^2. \quad (60)$$

A partir de los valores de α , β y γ determinamos los parámetros de la gaussiana mediante las relaciones

$$N = \sqrt{\frac{\pi}{-\gamma}} \exp\left(\alpha - \frac{\beta^2}{4\gamma}\right), \quad (61)$$

$$\sigma = \frac{1}{\sqrt{-2\gamma}}, \quad (62)$$

$$\mu = \frac{\beta}{-2\gamma}. \quad (63)$$

Con los centroides μ de los picos, lo siguiente es hacer una calibración preliminar en energía utilizando los cuatro picos que aparecen en el espectro del ^{60}Co (los dos correspondientes a las emisiones γ , el pico de escape simple y el pico de escape doble). Para hacer el paso de canal a energía utilizamos la relación lineal

$$E = a + bn. \quad (64)$$

La calibración previa permite identificar con más seguridad los picos correspondientes a los rayos γ del ^{22}Na , ^{60}Co , ^{133}Ba , ^{137}Cs y ^{241}Am , y con estos realizamos la calibración definitiva que nos permite pasar de canal a energía.

Teniendo el espectro calibrado se pasa a hacer el estudio de la resolución de los picos. Si combinamos las ecs. (11) y (12) llegamos a esta expresión para el FWHM

$$\text{FWHM} = 2 \sqrt{2 \ln 2 (\bar{W}FE + \sigma_r^2)}. \quad (65)$$

Elevándola al cuadrado queda

$$\text{FWHM}^2 = (2 \sqrt{2 \ln 2})^2 \bar{W}FE + (2 \sqrt{2 \ln 2})^2 \sigma_r^2. \quad (66)$$

Como todos los coeficientes excepto E son constantes, podemos agrupar los términos en la forma

$$\text{FWHM}^2 = c + dE. \quad (67)$$

Esta relación permite realizar un ajuste lineal con el método de mínimos cuadrados para determinar los parámetros c y d . A partir de estos parámetros, calcularemos los valores del factor de Fano y el ruido electrónico. Para ajustar el FWHM en la literatura también se utilizan otras funciones empíricas [22], pero hemos decidido escoger esta función porque en ella se puede apreciar el significado físico de los parámetros.

El siguiente paso en la caracterización del detector consiste en obtener las eficiencias de fotopico experimentales de las energías de las emisiones medidas, para poder compararlas con los valores predichos por las simulaciones MC. La fórmula utilizada para calcular la eficiencia de fotopico experimental es

$$\varepsilon^{\text{exp}}(E) = \frac{N}{Ap \tau_{\text{live}}}, \quad (68)$$

donde N es el número de cuentas del pico, p es el *yield*, es decir la probabilidad de que se produzca ese fotón cuando hay un decaimiento del núcleo padre y A es la actividad de la fuente radiactiva.

En este trabajo utilizaremos preferentemente la eficiencia de fotopico intrínseca. Para obtenerla experimentalmente, es necesario tomar en cuenta la eficiencia geométrica. De este modo, podemos expresar la eficiencia de fotopico intrínseca como

$$\bar{\varepsilon}^{\text{exp}}(E) = \frac{N}{Ap \tau_{\text{live}}} \frac{1}{\varepsilon_g}, \quad (69)$$

y para nuestro caso podemos expresar la eficiencia geométrica como

$$\varepsilon_g \equiv \frac{\Omega}{4\pi \text{ sr}} = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{1}{\sqrt{1 + (R/D)^2}} \right). \quad (70)$$

Con esto, la incertidumbre de la eficiencia de fotopico intrínseca experimental es

$$\delta\bar{\varepsilon}^{\text{exp}} = \bar{\varepsilon}^{\text{exp}} \sqrt{\left(\frac{\delta N}{N}\right)^2 + \left(\frac{\delta A}{A}\right)^2 + \left(\frac{\delta p}{p}\right)^2 + \left(\frac{\delta\tau_{\text{live}}}{\tau_{\text{live}}}\right)^2 + \left(\frac{\delta\varepsilon_g}{\varepsilon_g}\right)^2}. \quad (71)$$

La incertidumbre de la actividad no es inmediata, ya que existe incertidumbre tanto en la actividad inicial A_0 como en la constante de decaimiento λ . Utilizando el método de propagación de incertidumbres encontramos que la incertidumbre de la actividad es

$$\delta A = e^{-\lambda(t-t_0)} \sqrt{(\delta A_0)^2 + [A_0(t-t_0) \delta\lambda]^2}. \quad (72)$$

La eficiencia de fotopico intrínseca solo tiene una fuente de incertidumbre, que es la incertidumbre en la distancia D entre la fuente y el cristal, que debido al montaje hemos estimado en 1 mm (2SD). Aunque solo tenga una fuente de incertidumbre, la expresión para su cálculo no es inmediata. Si se hace propagación de incertidumbres se encuentra que la incertidumbre en ε_g es

$$\delta\varepsilon_g = \frac{R}{2D^3 [1 + (R/D)^2]^{3/2}} \delta D. \quad (73)$$

La incertidumbre en el número de cuentas la hemos determinado mediante la propagación de las incertidumbres de los parámetros α , β y γ que aparecen en la expresión de N . Se ha tomado 1 s como incertidumbre del tiempo de adquisición y las incertidumbres de p se recopilan en la tabla 2.

Tabla 2: Probabilidad de emisión de las transiciones de interés [19]. Las incertidumbres corresponden a 2SD.

Núcleo	E (keV)	p
^{22}Na	1274.537(14)	0.999(3)
^{60}Co	1173.228(6)	0.9985(6)
	1332.493(8)	0.999826(12)
^{133}Ba	80.9979(19)	0.333(3)
	276.399(2)	0.0713(14)
	302.8508(10)	0.183(2)
	356.0129(14)	0.621(4)
	383.849(2)	0.0894(12)
^{137}Cs	661.655(10)	0.851(6)
^{241}Am	59.5409(2)	0.359(3)

7 Resultados y discusión

7.1 Calibración en energía

Para hacer la calibración y poder pasar de canal a energía primero tenemos que encontrar a qué canal pertenece cada uno de los centroides de los diferentes picos analizados. Para ello ajustamos los puntos experimentales a una gaussiana, como muestra la figura 11.

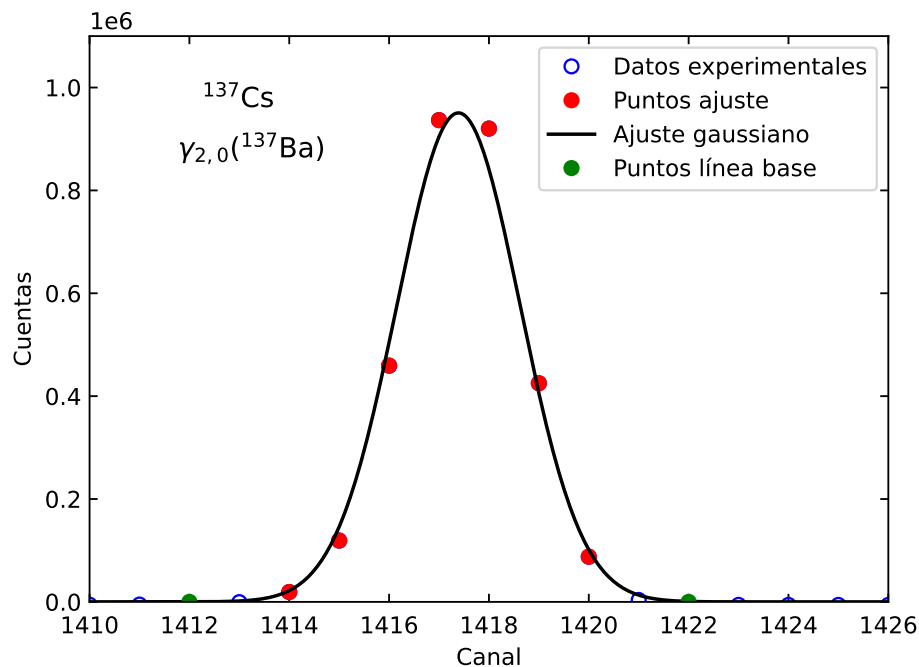


Figura 11: Ajuste gaussiano del pico de 661,7 keV del ^{137}Cs una vez se le ha restado el fondo y la componente continua. Se indica la transición $\gamma_{2,0}$ que produce esta emisión con la notación de NUCLEIDE [19].

En la figura 11 los marcadores rojos son los que se han escogido para realizar el ajuste. En verde se representan los dos puntos seleccionados para generar la recta que corresponde a la componente continua. Los demás ajustes realizados están en el apéndice A. Con los centroides (tabla 3) podemos realizar el ajuste (figura 12), que proporciona los valores

$$a = 0,32(8) \text{ keV} \quad \text{y} \quad b = 0,46642(6) \text{ keV/canal.} \quad (74)$$

La recta de ajuste se ha obtenido con un coeficiente de correlación $R^2 = 0,999\,999\,95$ lo que confirma un buen ajuste a los datos experimentales.

Tabla 3: Identificación del canal de los picos utilizados para la calibración y comparación entre sus energías de referencia [19] y las experimentales. Las incertidumbres se muestran con 2SD.

Núcleo	Canal	E_{ref} (keV)	E_{exp} (keV)
^{22}Na	2732.79	1274.537(14)	1274.62(16)
^{60}Co	2515.67	1173.228(6)	1173.21(16)
	2857.48	1332.493(8)	1332.62(17)
^{133}Ba	174.24	80.9979(19)	81.12(9)
	592.83	276.399(2)	276.36(10)
	649.50	302.8508(10)	302.80(10)
	763.42	356.0129(14)	355.95(10)
^{137}Cs	823.00	383.849(2)	383.76(11)
	1418.43	661.655(10)	661.54(12)
^{241}Am	128.23	59.5409(2)	59.66(9)

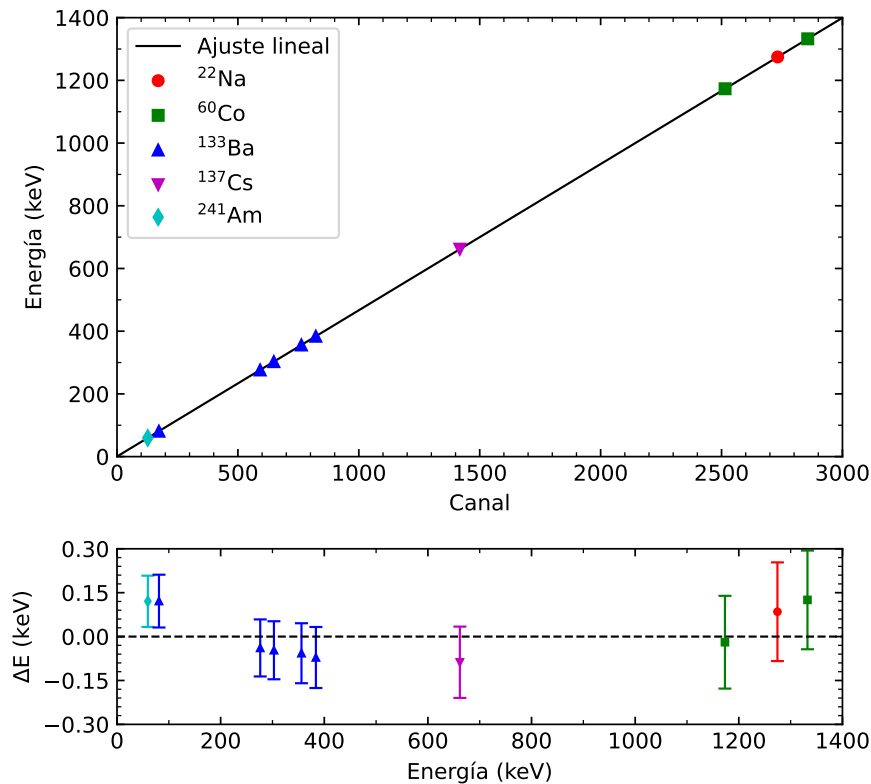


Figura 12: Arriba se muestra la recta de calibración canal-energía. En este gráfico no se ven las barras de error porque son muy pequeñas. En la parte inferior se puede ver la diferencia $\Delta E = E_{\text{fit}} - E_{\text{ref}}$. Sus incertidumbres corresponden a 2SD.

7.2 Espectros netos calibrados en energía

En esta sección se mostrarán los espectros de las diversas fuentes radiactivas. Empezaremos por el espectro del fondo (figura 13). Aunque el detector esté rodeado por un blindaje de plomo, hay fotones que lo consiguen atravesar y llegan al detector. Se ha aprovechado este espectro para identificar los núcleos que al desintegrarse producen esta radiación de fondo. Para ello nos hemos centrado en los elementos de las cadenas de desintegración natural del ^{232}Th , ^{238}U y ^{235}U . Además hemos identificado el pico de ^{40}K . Los núcleos que hemos localizado se recogen en la tabla 4.

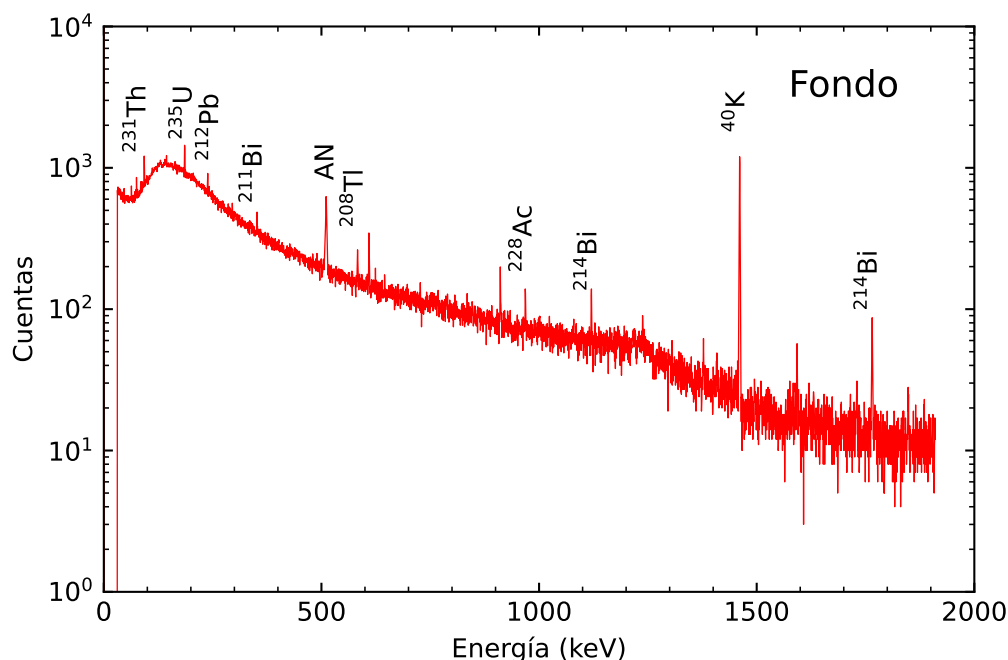


Figura 13: Espectro del fondo calibrado en energía.

Una vez identificado el fondo ya lo podemos substrair y mostrar los espectros netos (los espectros brutos se encuentran en el apéndice B). Es interesante entender la forma de los espectros. Comenzamos con el más sencillo, que es el del ^{137}Cs (figura 14). Del espectro podemos ver como lo que más destaca es el pico de 661,7 keV, originado por la desexcitación del segundo nivel excitado de su núcleo hijo (^{137}Ba) al estado fundamental (esquema de desintegración en el apéndice C).

Adicionalmente vemos dos pequeños picos asimétricos a 184 keV y 477 keV que corresponden al pico de *backscattering* y al borde Compton, respectivamente. El resto del espectro entre estos picos se corresponde a los fotones que han interactuado con el detector mediante efecto Compton, depositando una parte de su energía que varía en función del ángulo polar de dispersión θ , ec. (5).

Entre el borde Compton y el fotopico se encuentran los eventos correspondientes a aquellos fotones que han interactuado inelásticamente en más de una ocasión antes de salir del

Tabla 4: Emisiones identificadas en el análisis del fondo. Las incertidumbres corresponden a 2SD.

Núcleo	E_{ref} (keV)
^{231}Th	84.214(1)
^{235}U	185.720(4)
^{212}Pb	238.632(2)
^{224}Ra	240.986(6)
^{214}Pb	295.224(2)
^{228}Ac	968.968(5)
^{211}Bi	351.03(4)
^{208}Tl	583.187(2)
^{214}Bi	609.310(7)
	1120.295(15)
	1238.115(12)
	1729.611(13)
	1764.498(14)
1847.43(3)	
^{40}K	1460.822(6)
AN	511.000

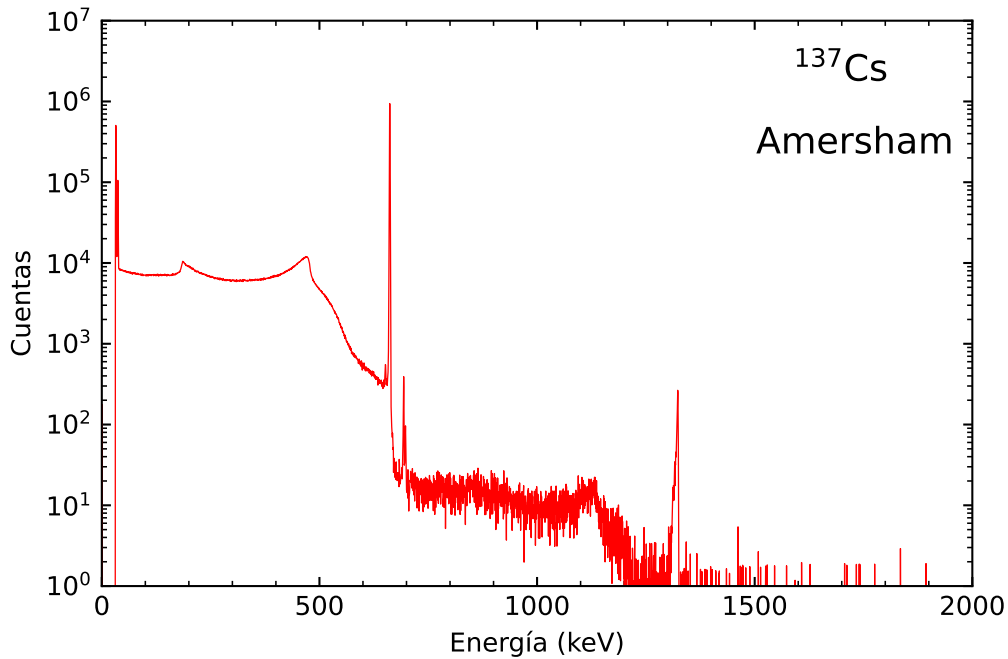


Figura 14: Espectro de la fuente de ^{137}Cs (Amersham), una vez restado el fondo y calibrado en energía.

detector. A una energía cercana a los 700 keV, concretamente a 694 keV se ve otro pico menos intenso. Este es debido a una coincidencia verdadera entre el rayo γ de 661,7 keV con el rayo x característico $K\alpha$ de 32,2 keV del ^{137}Ba . A la derecha de este pico vemos un pico bastante más ancho que se extiende entre 1305 y 1325 keV y es causado por la coincidencia aleatoria de dos fotones de 661,7 keV. Los eventos que se encuentran entre este último pico y el pico de 694 keV son debidos también a la coincidencia aleatoria entre dos fotones de 661,7 keV, pero uno de los dos (o ambos) interacciona mediante dispersión Compton con el detector y no deposita toda su energía.

En la figura 15 vemos los espectros medidos para la fuente de ^{60}Co de Amersham y PTB. Ambos espectros tienen aproximadamente la misma estadística. Como se ha mostrado en la tabla 1, la actividad de la fuente de ^{60}Co de PTB es dos órdenes de magnitud superior a la fuente de Amersham. Por ello el tiempo de adquisición de la fuente de Amersham ha sido de 43200 s (12 h) mientras que para la fuente de PTB han bastado 600 s (10 min). Que la fuente de PTB tenga esta actividad tiene la contrapartida de que hay más *pile-up* y más tiempo muerto, lo que empeora la medida. A simple vista ya se aprecia alguna de sus consecuencias, como el ensanchamiento de los picos.

En los espectros aparecen claramente dos picos, uno a 1173,2 keV y otro a 1332,5 keV, junto con sus bordes Compton a 963 keV y 1117 keV, respectivamente. Se aprecia un único pico de retrodispersión, ya que los fotones que son dispersados en un ángulo cercano a 180° tienen prácticamente la misma energía, tanto los que provienen del fotón de 1173,2 keV como los que provienen del fotón de 1332,5 keV.

Un aspecto interesante son los picos de escape simple (ES) y escape doble (ED). Estos picos se pueden ver claramente en el espectro de la fuente de Amersham, debido a que su anchura es menor y al tener aproximadamente las mismas cuentas (y por lo tanto la misma área), la altura de estos picos es mayor, sobresaliendo más sobre las cuentas de la zona Compton.

A la derecha del pico de 1332,5 keV hay un continuo de cuentas debido a coincidencias verdaderas entre los γ de 1173,2 y 1332,5 keV. Este continuo acaba en un pico suma de 2506 keV, que no aparece en el espectro porque con la configuración del sistema de detección solo podemos acceder hasta una energía de 1910 keV.

Con las fuentes de ^{22}Na (figura 16) ocurre lo mismo que con las de ^{60}Co , la fuente de PTB tiene una actividad mucho más elevada que la de Amersham. Los tiempos de adquisición son los mismos que para las fuentes de ^{60}Co (43200 s para la de Amersham y 600 s para la de PTB). Incluso con esta diferencia de tiempo de medida, como la fuente de ^{22}Na de Amersham tiene una actividad tan baja, el espectro de la fuente de PTB tiene mejor estadística.

En este espectro están bien diferenciadas las dos zonas Compton, la de la derecha debido al γ de 1274,5 keV y la de la izquierda causada por el fotón de 511 keV. Estos dos picos tienen un origen diferente. El γ de 1274,5 keV proviene de la desexcitación del núcleo hijo ^{22}Ne mientras que el fotón de 511 keV proviene de la aniquilación del positrón generado por el decaimiento β^+ del ^{22}Na . Este positrón se aniquila con un electrón del encapsulado de la fuente, creando dos fotones de aproximadamente 511 keV. Los dos fotones se emiten en sentidos opuestos, así que al detector solo puede llegar uno de ellos, que es el que origina el

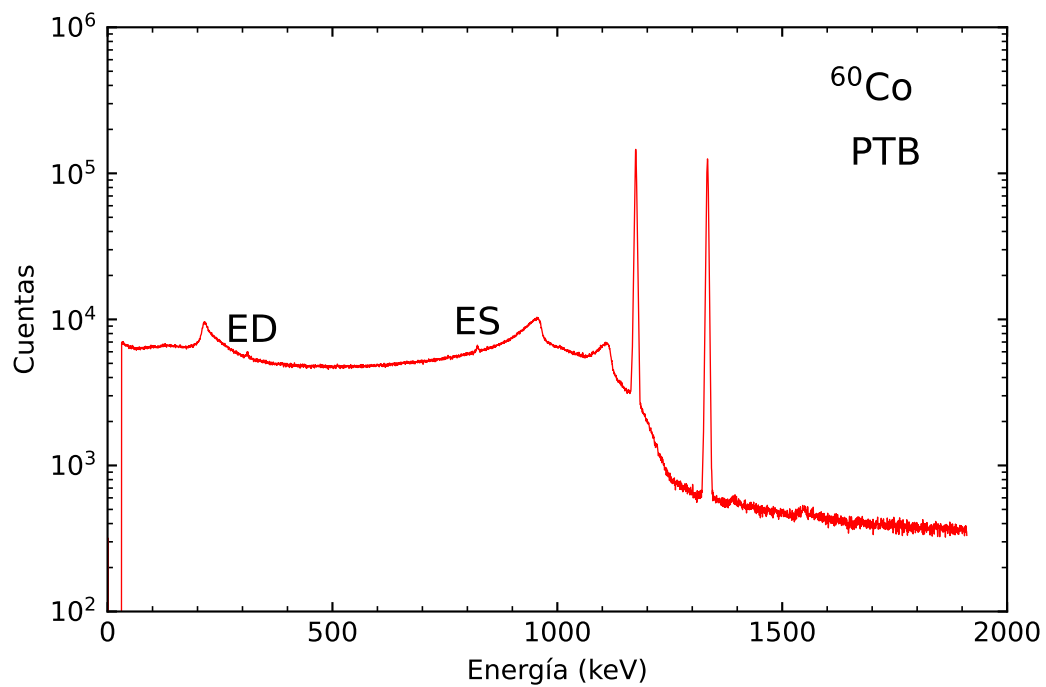
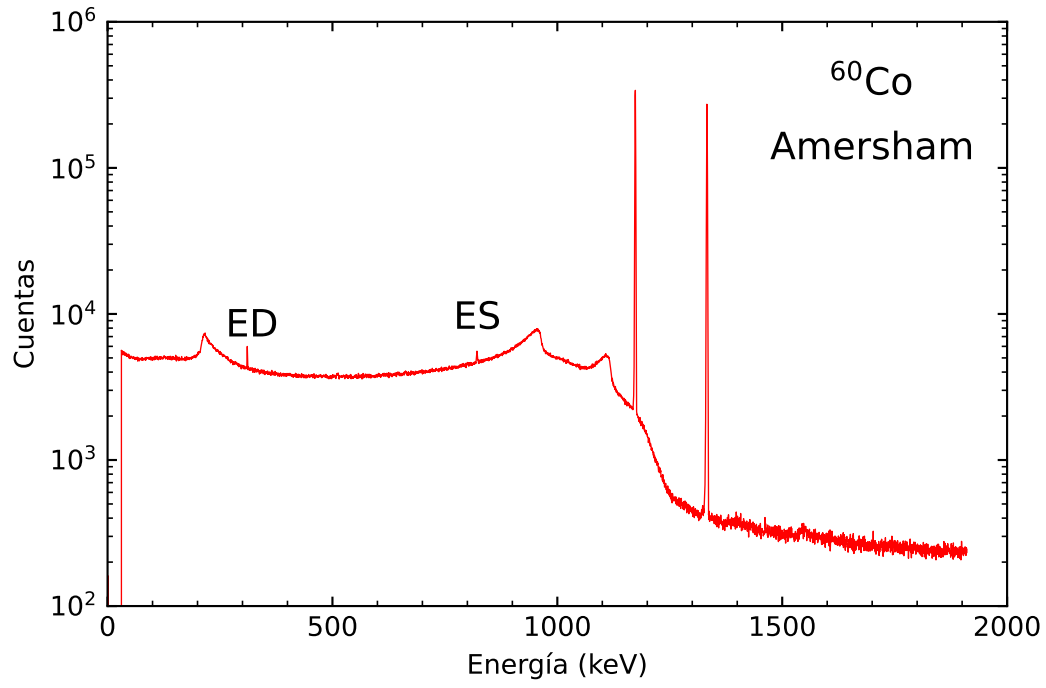


Figura 15: Espectros de las fuentes de ^{60}Co de Amersham (arriba) y PTB (abajo) una vez restado el fondo y calibrados en energía.

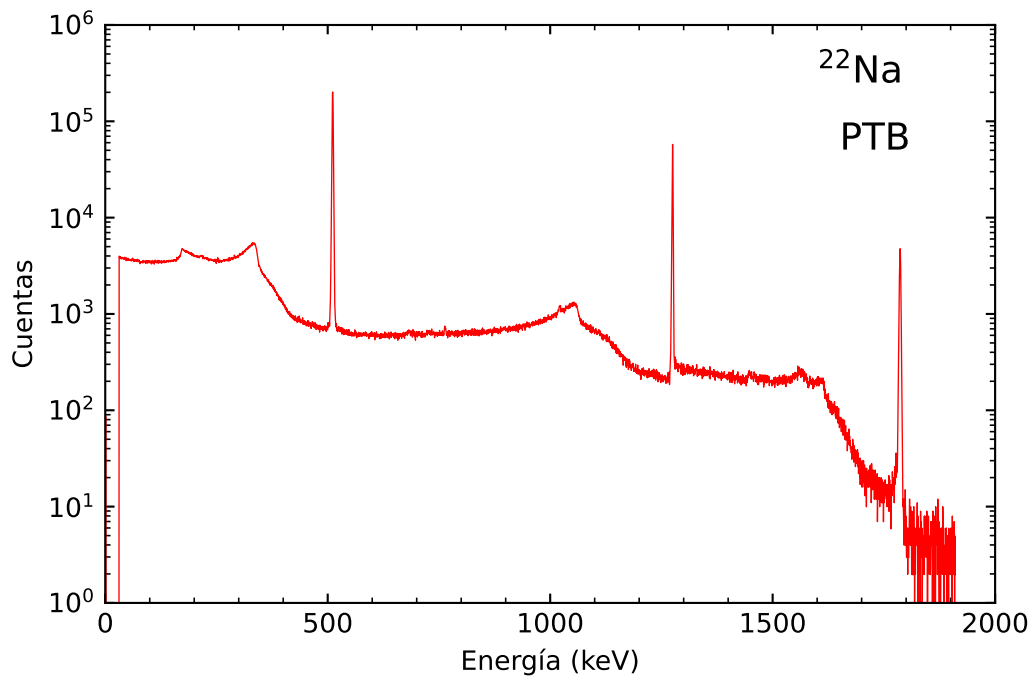
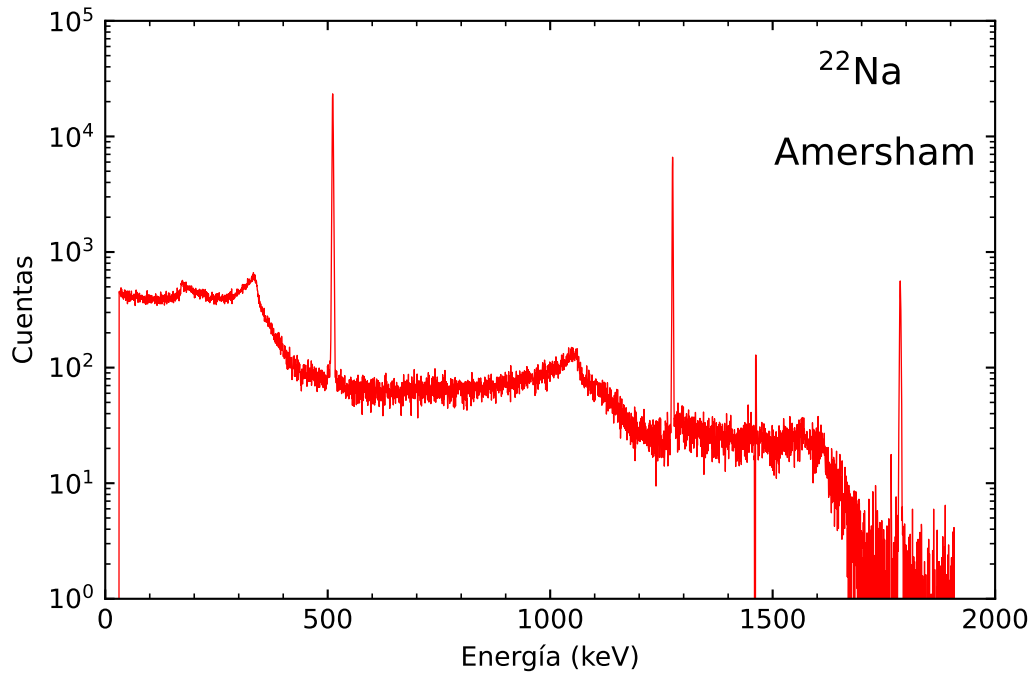


Figura 16: Espectros de las fuentes de ^{22}Na de Amersham (arriba) y PTB (abajo) una vez restado el fondo y calibrados en energía.

pico.

El pico que aparece a una energía de 1785 keV es debido a la coincidencia verdadera de los fotones de 511 keV y 1274,5 keV. En estos espectros no podemos ver los picos de escape simple y escape doble por diversas razones. La primera de ellas es que estos picos pueden aparecer cuando la fuente emite un γ con energía superior a 1022 keV (energía mínima para que se produzca la creación de pares). Si bien el fotón de 1274,5 keV supera este umbral, a esta energía la sección eficaz de creación de pares aún es muy baja y, por lo tanto, estos picos sobresaldrían muy poco sobre el continuo Compton. A esto se le añade el problema que en el caso de la fuente de Amersham las fluctuaciones son lo suficientemente grandes como para esconder los picos que se podrían haber formado. Con la fuente de PTB no tenemos tantas fluctuaciones, pero como la fuente es más activa hay más *pile-up*, la resolución es peor y el pico al ser más ancho pero manteniendo el número de cuentas (y por lo tanto el área) pierde altura, por lo que tampoco los podemos observar en el espectro de la fuente de PTB.

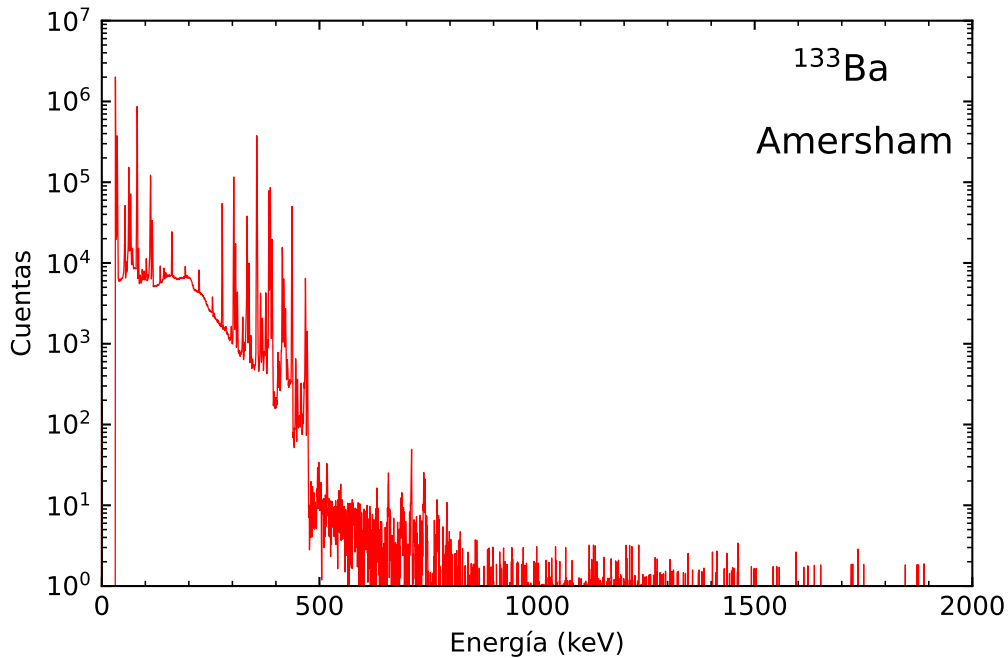


Figura 17: Espectro de la fuente de ^{133}Ba (Amersham), una vez restado el fondo y calibrado en energía.

En los espectros del ^{133}Ba (figura 17) y del ^{241}Am (figura 18) hay muchos más picos que en los espectros anteriores debido a sus complejos esquemas de desexcitación (apéndice C). De la fuente de ^{241}Am el único pico que se usará para el cálculo de la curva de eficiencia es el de 59,5 keV ya que los demás tienen una intensidad muy baja.

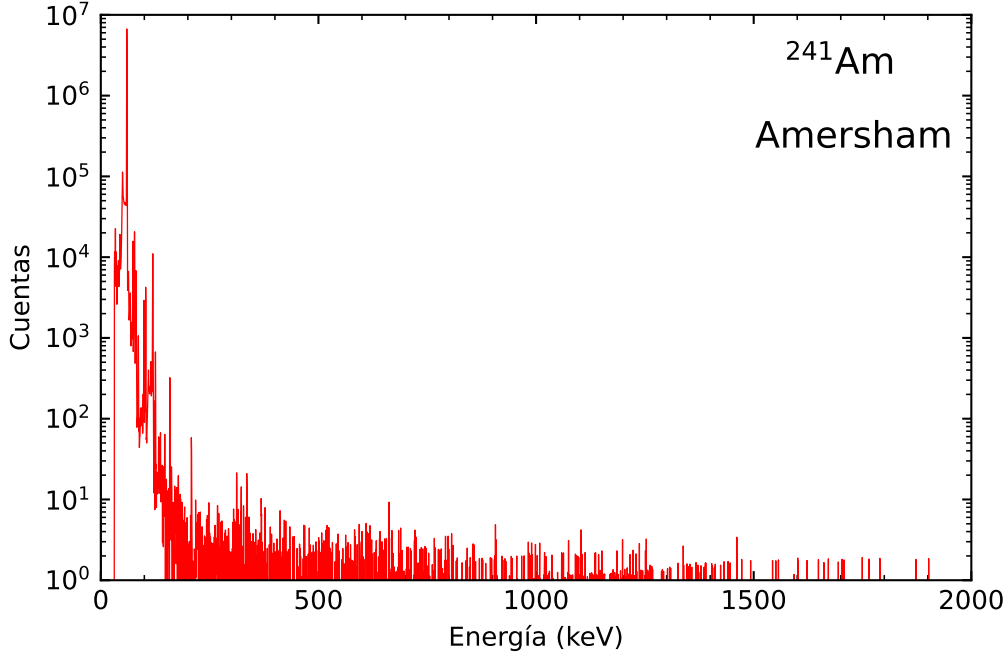


Figura 18: Espectro de la fuente de ^{241}Am (Amersham), una vez restado el fondo y calibrado en energía.

7.3 Resolución energética FWHM

En la figura 19 se ha realizado un ajuste de la dependencia de FWHM^2 con la energía, con un coeficiente de correlación $R^2 = 0,9995$, y se han deducido los valores

$$c = 0,36(2) \text{ keV}^2 \quad \text{y} \quad d = 2,04(3) \text{ eV}. \quad (75)$$

El parámetro d está directamente relacionado con el factor de Fano ya que

$$d = (2\sqrt{2 \ln 2})^2 F \bar{W}. \quad (76)$$

Sabiendo que $\bar{W} = 2,96 \text{ eV}$ [23] encontramos $F = 0,124(2)$, valor que concuerda con otros estudios [24]. A partir de c estimamos la contribución del ruido electrónico al FWHM

$$\sigma_r = \frac{\sqrt{c}}{2\sqrt{2 \ln 2}} = 0,254(13) \text{ keV}. \quad (77)$$

Los valores de los FWHM calculados para las emisiones de interés se muestran en la tabla 5. Se ve en la figura 19 que los puntos debidos al pico de escape simple y al pico de aniquilación no siguen el comportamiento de los demás picos. Esto es debido a la naturaleza del pico. Mientras que en la mayoría de los casos el fotón proviene de una desintegración, en los picos de aniquilación y de escape doble el fotón que se detecta se origina en una aniquilación entre dos partículas.

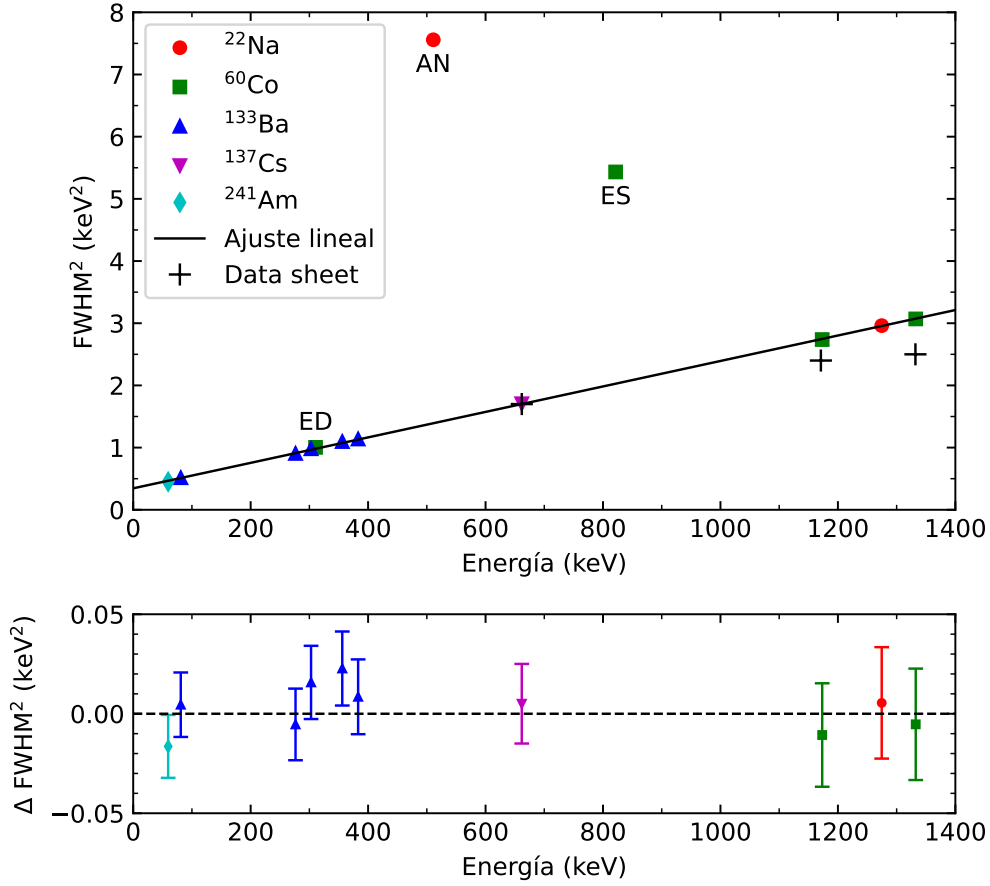


Figura 19: Dependencia de FWHM^2 con la energía. Los puntos marcados como AN (aniquilación), ES (escape simple) y ED (escape doble) no se han tenido en cuenta en el ajuste lineal. Se incluyen los valores especificados por el fabricante (cruces negras). En la parte inferior se muestran las diferencias $\Delta\text{FWHM}^2 = \text{FWHM}_{\text{exp}}^2 - \text{FWHM}_{\text{fit}}^2$. En el gráfico superior no se aprecian las barras de error porque son demasiado pequeñas, y en el inferior las incertidumbres corresponden a 2SD.

Los fotones γ que se generan en una desexcitación tienen una energía definida, que es la diferencia en energía entre los niveles del núcleo. No es el caso de los fotones creados por aniquilación de positrones. Aunque para simplificar a menudo se hace la aproximación de que el positrón se aniquila con un electrón libre y en reposo, esto no es completamente cierto. Ese electrón no está libre, sino que está unido a un átomo mediante una energía de ligadura U_i , y tampoco está en reposo, sino que tiene un cierto momento lineal p_z (elegiendo el eje z al eje que une la fuente y el detector). Entonces la energía del electrón será

$$E_e = m_e c^2 - \frac{1}{2} U_i + \frac{c}{2} p_z. \quad (78)$$

Tabla 5: FWHM de las emisiones de interés. Las incertidumbres se muestran con 2SD.

Núcleo	E (keV)	FWHM (keV)
^{22}Na	511.0	2.728(15)
	1274.5	1.72(3)
^{60}Co	311.5	1.00(9)
	821.5	2.334(12)
	1173.2	1.65(3)
	1332.4	1.75(3)
^{133}Ba	81.0	0.718(16)
	276.4	0.951(18)
	302.9	0.990(19)
	356.0	1.047(19)
	383.9	1.067(19)
^{137}Cs	661.7	1.30(2)
^{241}Am	59.5	0.671(16)

Asumiendo una distribución isotrópica de las velocidades de los electrones atómicos tenemos que $\langle p_z \rangle = 0$. En cambio $\langle p_z^2 \rangle \neq 0$, lo que dará una contribución extra a la anchura del pico. Esta contribución hace que los picos de aniquilación y escape simple sean más anchos. El pico de escape doble no sufre ensanchamiento, ya que este se forma cuando los dos fotones escapan del detector.

La distribución debida a la velocidad del electrón añade una varianza “Doppler” igual a

$$\sigma_D^2 = \left(\frac{c}{2}\right)^2 \langle p_z^2 \rangle. \quad (79)$$

Esta relación nos permite encontrar la energía cinética promedio $\langle T \rangle$ de los electrones, ya que mediante el ajuste de la figura 19 podemos saber cuál sería su anchura si únicamente hubiera el efecto del ruido estadístico y electrónico. La diferencia entre esa anchura y el valor experimental corresponderá a la contribución de la velocidad. De esta forma conociendo el momento podemos determinar la energía cinética promedio que es

$$\langle T \rangle = \frac{3 \langle p_z^2 \rangle}{2m_e}. \quad (80)$$

Con esta fórmula encontramos $\langle T \rangle \approx 5$ eV para los electrones del pico de aniquilación y $\langle T \rangle \approx 2$ eV para el escape simple.

7.4 Simulación de las eficiencias total y de fotopico

En este apartado se presentan los resultados de las curvas de eficiencia total y eficiencia de fotopico generadas mediante PENELOPE/penEasy y la comparación con las curvas generadas con el programa DETEFF.

DETEFF tiene la ventaja de que las simulaciones son muy rápidas (por ejemplo, una simulación con 10^7 historias de fotones de 1500 keV tarda unos 40 s con el programa DETEFF frente a los 45 min que dura empleando PENELOPE/penEasy). El objetivo de interés

aquí es determinar si existen diferencias significativas entre los resultados de PENELOPE y DETEFF.

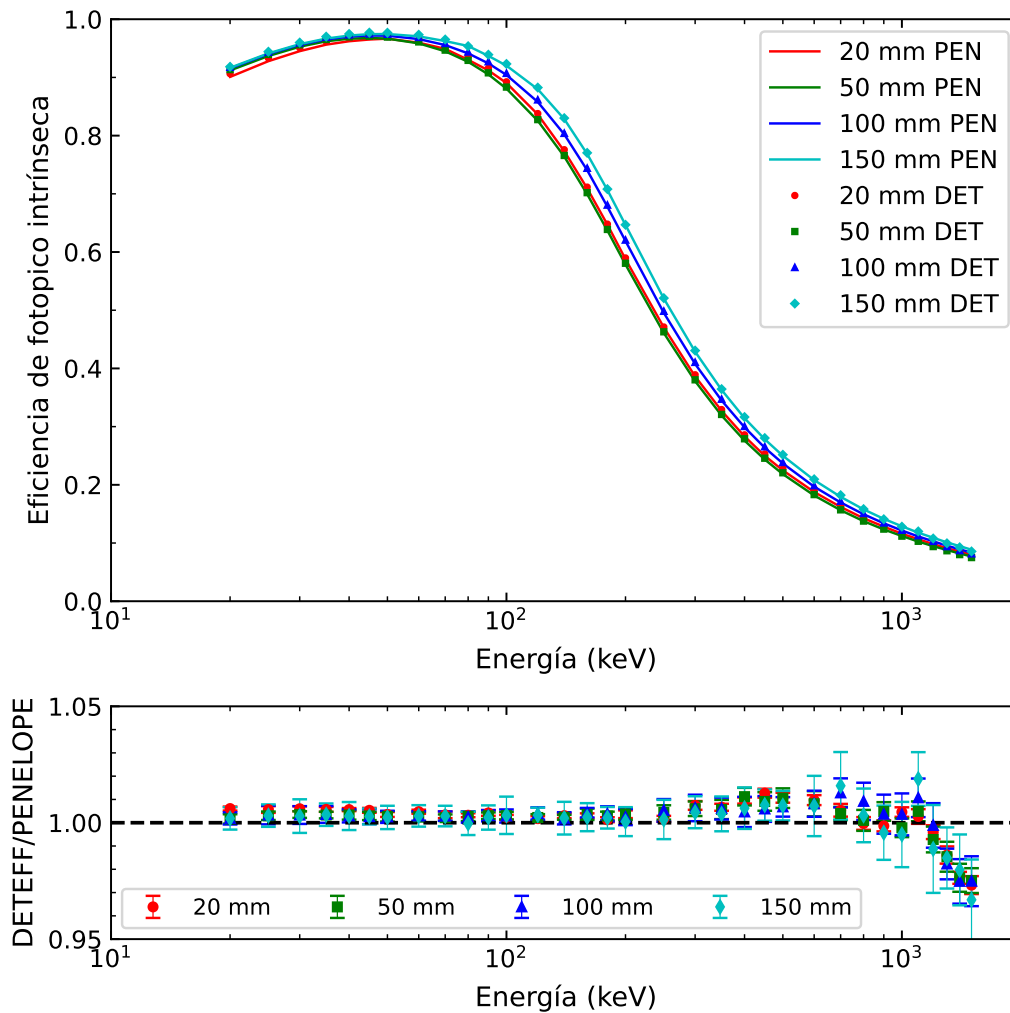


Figura 20: Arriba se compara la eficiencia de fotopico intrínseca calculada con PENELOPE/penEasy (curvas continuas) y DETEFF (símbolos). En este caso no se muestran las incertidumbres porque son de un tamaño igual o menor que los puntos. Abajo se muestra el cociente DETEFF/PENELOPE. Las incertidumbres corresponden a 2SD.

En la figura 20 se comparan las eficiencias de fotopico intrínseca obtenidas mediante el programa DETEFF con las calculadas empleando PENELOPE/penEasy. A simple vista no se aprecian diferencias significativas entre ambos conjuntos de datos. Para obtener más información decidimos representar el cociente entre estos resultados. En el gráfico inferior de la figura 20 se observa que el cociente es aproximadamente igual a 1 hasta aproximadamente 1000 keV, disminuyendo luego hasta un mínimo de 0,967(13). Es interesante destacar que este comportamiento es el mismo para todas las distancias.

En el caso de la eficiencia total sucede algo parecido. Al observar el gráfico inferior de la

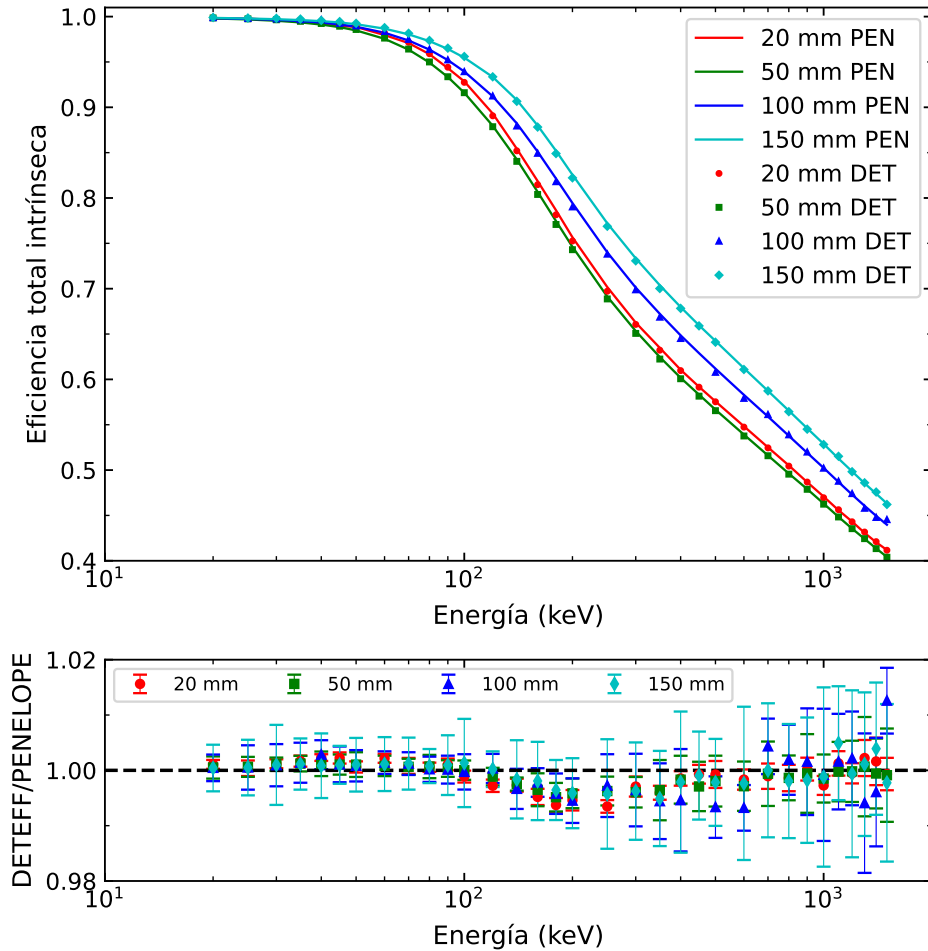


Figura 21: En el gráfico superior se compara la eficiencia total intrínseca calculada con PENELOPE/penEasy (curvas continuas) y DETEFF (símbolos). Las incertidumbres no se muestran porque son de un tamaño igual o menor que los puntos. En la parte inferior se muestra el cociente DETEFF/PENELOPE, con unas incertidumbres de 2SD.

En la figura 21 notamos que los resultados son aún más similares que en el caso de la eficiencia de fotopico ya que el cociente entre los resultados de ambos programas se mantiene en 1, salvo por pequeñas fluctuaciones que entran dentro de la incertidumbre de los datos.

El siguiente paso es comparar los resultados de PENELOPE con los de la fórmula integral de la eficiencia total, fórmula (35), y con la fórmula aproximada (37). En la figura 22 podemos encontrar los resultados de la comparación. De la misma manera que hemos hecho con las eficiencias de fotopico y total simuladas, aquí también hemos representado el cociente entre los diversos resultados para visualizar mejor sus diferencias.

Lo primero que vemos es que la simulación con PENELOPE (y por lo tanto con DETEFF) muestra unos resultados idénticos a los predichos por la teoría utilizando la expresión (35). Por otro lado, también se observa que los valores de la fórmula aproximada distan de los de la expresión exacta.

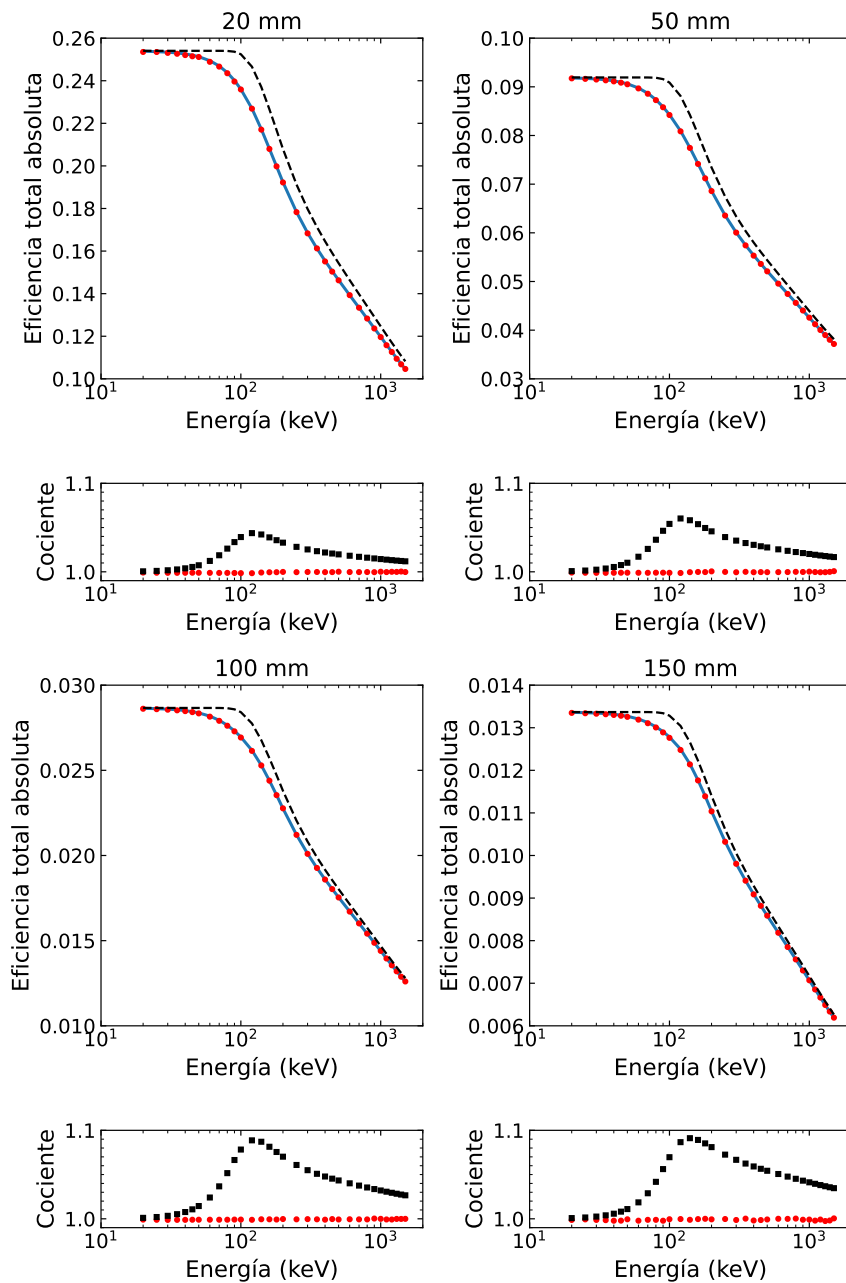


Figura 22: Eficiencia total absoluta obtenida con PENELOPE/penEasy (símbolos rojos), la fórmula exacta (35) (curva azul) y la fórmula aproximada (37) (curva discontinua negra). En la parte inferior se muestra el cociente PENELOPE/fórmula exacta (símbolos rojos) y el cociente fórmula exacta/fórmula aproximada (símbolos negros).

7.5 Corrección de las eficiencias de fotopico por el efecto de suma en coincidencia

Como se ha comentado anteriormente, a las distancias tan cortas a las que estamos midiendo el efecto de las coincidencias verdaderas sobre el espectro es muy importante y se tiene que corregir para no llegar a resultados erróneos.

7.5.1 Expresión general de Tomarchio y Rizzo

El cálculo de los factores de corrección (C) se ha hecho utilizando las fórmulas del artículo [9] ya mostradas en el apartado 6.2.2. Para asegurarnos de que estos valores son correctos hemos seguido el siguiente método. Primero se ha simulado la fuente utilizando el programa PENELOPE/penEasy con el paquete PENNUC, de donde se han extraído las eficiencias de fotopico a las energías de las emisiones de interés (que incluyen el efecto de las coincidencias). Después hemos simulado los diferentes fotones de interés individualmente, de forma que estos no están afectados por coincidencias. Si multiplicamos la eficiencia obtenida con la simulación de la fuente por el factor de corrección, deberíamos reencontrar la eficiencia del detector a la energía de los rayos γ simulados individualmente. Esto lo mostramos en las tablas 6, 7 y 8.

Tabla 6: Eficiencias de fotopico obtenidas mediante simulaciones MC para la emisión de 1274,5 keV del ^{22}Na , factores de corrección, eficiencias corregidas y eficiencias para el caso de rayos γ monoenergéticos para las diferentes distancias. Las incertidumbres se consignan con 2SD.

E (keV)	D (mm)	^{22}Na	C	^{22}Na corregido	Monoenergético
1274.54	15	0.0201(2)	1.481(7)	0.0297(2)	0.0298(4)
	20	0.0174(1)	1.332(6)	0.0232(1)	0.0236(4)
	50	0.00749(4)	1.102(2)	0.00826(4)	0.00821(2)
	100	0.00270(3)	1.0322(4)	0.00279(3)	0.00278(2)
	150	0.00138(2)	1.0155(2)	0.00140(2)	0.00137(1)

En las tablas vemos como los valores de las eficiencias de fotopico una vez han sido corregidas por el factor C son consistentes (dentro de su incertidumbre) con los valores de las eficiencias para la energía de los fotones de interés simulados individualmente, independientemente de la distancia, energía del fotón o del núcleo simulado. Esto nos permite concluir que los factores de corrección son precisos, y por lo tanto los usaremos para corregir las eficiencias que obtengamos experimentalmente.

No tenemos fórmulas para calcular los factores de corrección correspondientes a las emisiones de 276,4 y 383,7 keV del ^{133}Ba . Para solucionar este problema lo que se ha hecho es dividir la eficiencia de la simulación con γ individuales entre la eficiencia obtenida para esos fotones en la simulación del decaimiento del núcleo, que es básicamente aplicar la definición de C para el caso de la simulación MC. Estos coeficientes son los que se usarán para hacer la corrección de los puntos experimentales. Los valores de C para el rayo γ de 276,4 keV han sido 2,353(7) y 1,894(5) para 15 y 20 mm, respectivamente, y los del rayo γ de 383,7 keV han sido de 1,177(6) y 1,152(3) para las distancias de 15 y 20 mm.

Tabla 7: Eficiencias de fotopico obtenidas mediante simulaciones para las emisiones γ del ^{60}Co , factores de corrección, eficiencias corregidas y eficiencias correspondientes a rayos γ monoenergéticos para las diferentes distancias y energías. Las incertidumbres que se muestran corresponden a 2SD.

E (keV)	D (mm)	^{60}Co	C	^{60}Co corregido	Monoenergético	Vidmar
1173.23	15	0.0278(1)	1.157(3)	0.0321(1)	0.0322(3)	0.0320(2)
	20	0.0227(3)	1.122(4)	0.0254(3)	0.0255(4)	0.02459(7)
	50	0.00861(6)	1.040(1)	0.00896(6)	0.00893(2)	0.00900(16)
	100	0.00296(3)	1.0133(4)	0.00300(3)	0.00300(1)	0.00313(6)
	150	0.00148(2)	1.0068(2)	0.00149(2)	0.00148(3)	0.00126(8)
1332.49	15	0.0245(1)	1.164(4)	0.0286(1)	0.0285(2)	0.0285(13)
	20	0.0201(3)	1.128(4)	0.0226(3)	0.0228(4)	0.0219(7)
	50	0.00755(6)	1.042(1)	0.00786(6)	0.00792(2)	0.0079(4)
	100	0.00262(2)	1.0138(4)	0.00266(2)	0.00267(1)	0.0028(5)
	150	0.00131(2)	1.0065(2)	0.00132(2)	0.00132(2)	0.0011(6)

Tabla 8: Eficiencias de fotopico obtenidas mediante simulaciones para las emisiones del ^{133}Ba , factores de corrección, eficiencias corregidas y eficiencias para el caso de gammas monoenergéticos para las diferentes distancias y energías. Las incertidumbres se muestran con 2SD.

E (keV)	D (mm)	^{133}Ba	C	^{133}Ba corregido	Monoenergético
81.00	15	0.175(2)	1.610(7)	0.282(3)	0.286(3)
	20	0.160(2)	1.469(8)	0.235(3)	0.236(3)
	50	0.0749(7)	1.140(5)	0.0853(7)	0.0847(6)
	100	0.0263(4)	1.0424(13)	0.0275(4)	0.0270(3)
	150	0.0127(3)	1.0199(8)	0.0129(3)	0.0128(2)
302.85	15	0.0600(7)	2.047(1)	0.1227(14)	0.1211(13)
	20	0.0548(6)	1.764(8)	0.0966(11)	0.0972(6)
	50	0.0285(2)	1.197(5)	0.0341(3)	0.0342(3)
	100	0.01087(9)	1.0558(8)	0.0115(9)	0.01155(8)
	150	0.00462(3)	1.0255(3)	0.00470(3)	0.00475(4)
356.01	15	0.0604(7)	1.637(8)	0.0990(11)	0.102(1)
	20	0.0531(4)	1.487(5)	0.0789(5)	0.0816(6)
	50	0.0245(2)	1.139(4)	0.0281(2)	0.0287(3)
	100	0.00920(7)	1.0404(12)	0.00958(7)	0.00970(6)
	150	0.00462(3)	1.0186(7)	0.00470(3)	0.00475(4)

Es importante hacer notar la diferencia entre estos últimos factores de corrección con los que se han mostrado en las tablas. Podríamos haber calculado todos los factores de corrección con este último método utilizando únicamente simulación MC, pero con las fórmulas del artículo [9] combinamos el método MC con la teoría, ya que en las fórmulas hay eficiencias que se calculan mediante simulación. Creemos que haciéndolo de esta manera se puede entender

y aprender más sobre la física que hay detrás de las coincidencias y además también nos sirve para comprobar que los factores de corrección son precisos.

7.5.2 Método aproximado de Vidmar *et al*

En lo que respecta a las eficiencias corregidas por el método de Vidmar *et al* [20], vemos en la tabla 7 cómo los resultados encontrados para distancias inferiores a 50 mm son bastante precisos. Al aumentar la distancia los resultados empiezan a desviarse más, lo que era de esperar ya que, como se señala en el propio artículo [20], la precisión del método es mejor cuanto más efectos de coincidencia haya.

7.6 Calibración de la eficiencia de fotopico experimental

En el *Servei d'Anàlisi Isotòpica de la Facultat de Química de la Universitat de Barcelona* (donde se realizaron los experimentos) utilizan el *software* GENIE que, entre otras funciones, tiene la opción de calcular el área del pico y por lo tanto el número de cuentas. Para verificar nuestros resultados hemos comparado los datos que suministra GENIE con los nuestros. Como se muestra en la tabla 9 los valores son muy parecidos, lo cual aporta un grado más de confianza a nuestros resultados.

Tabla 9: Número de cuentas en los picos (una vez restado el fondo y la componente continua) calculados con el *software* GENIE y calculados mediante un ajuste gaussiano para las medidas realizadas a 20 mm. Las incertidumbres que se muestran corresponden a 2SD.

Fabricante	E (keV)	N_{FE}	
		gaussiana	GENIE
Amersham	59.54	1.142(2)E+07	1.14E+07
	81.00	1.539(3)E+06	1.62E+06
	276.40	1.155(2)E+05	1.16E+05
	302.85	2.935(5)E+02	2.93E+05
	356.01	9.65(11)E+05	9.81E+05
	383.85	1.771(3)E+05	1.78E+05
	661.66	3.005(5)E+06	3.03E+06
	1173.23	1.2918(16)E+06	1.30E+06
	1274.54	2.664(4)E+04	2.66E+04
	1332.49	1.1256(18)E+06	1.15E+06
PTB	1173.23	1.67545(7)E+06	1.68E+06
	1274.54	2.6252(2)E+05	2.62E+05
	1332.49	1.480(6)E+06	1.48E+06

En la tabla 10 donde se muestran las eficiencias de fotopico intrínsecas, se observa la importancia de aplicar los factores de corrección. También vemos como hay bastante diferencia entre las eficiencias calculadas para los picos de 1173,2 keV y 1332,5 keV de la fuente de ^{60}Co de Amersham y de PTB, siendo esta última la que muestra menor eficiencia. Esto es debido a que la fuente de PTB tiene una mayor actividad, y por lo tanto, un mayor tiempo

Tabla 10: Eficiencias de fotopico intrínsecas correspondientes a las emisiones de interés obtenidas experimentalmente antes de aplicar la corrección por suma en coincidencia ($\bar{\varepsilon}$) y después de aplicarla ($\bar{\varepsilon}'$). Las incertidumbres se indican con 2SD.

Fabricante	E (keV)	$\bar{\varepsilon}$	$\bar{\varepsilon}'$
Amersham	59.54	0.95(3)	0.95(3)
	81.00	0.615(15)	0.90(2)
	276.40	0.204(7)	0.416(14)
	302.85	0.208(6)	0.376(11)
	356.01	0.207(5)	0.307(8)
	383.84	0.259(7)	0.297(8)
	661.66	0.168(5)	0.168(5)
	1173.23	0.0860(16)	0.096(3)
	1274.54	0.0647(15)	0.086(2)
	1332.49	0.0747(15)	0.084(2)
PTB	1173.23	0.0738(18)	0.082(2)
	1274.54	0.0655(16)	0.0873(17)
	1332.49	0.0645(15)	0.0728(16)

muerto (35 % de la fuente de PTB frente a un 0,5 % de la fuente de Amersham). Por este motivo hemos decidido trabajar únicamente con los datos de las fuentes de Amersham.

7.7 Comparación de la eficiencia de fotopico

Hasta el momento las simulaciones realizadas se han hecho considerando el cristal de Ge en el vacío, sin tener en cuenta la atenuación del aire ni de la ventana de *carbon epoxy*. Se ha actuado de esta forma sabiendo que esta atenuación no tiene un efecto importante en la eficiencia de fotopico para las energías que nos interesan. Esto se puede comprobar fácilmente conociendo el factor de transmisión

$$T(E) = \exp\left(-\sum_i \mu_i(E) d_i\right), \quad (81)$$

donde μ_i es el coeficiente de atenuación lineal del material y d_i el grosor del material. Como vemos en la figura 23 los 20 mm de aire que hay entre la fuente y el detector apenas afectan a la transmisión de los fotones y la ventana de *carbon epoxy* tiene una transmisión superior al 98 % a partir de los 60 keV, lo cual es conveniente ya que los rayos γ que estudiamos tienen una energía superior a esta.

En la figura 24 se muestran los resultados de las eficiencias de fotopico intrínsecas de las energías de los rayos γ de las diferentes fuentes, conjuntamente con la curva de eficiencias simulada con PENELOPE/penEasy para una geometría que incluye la ventana de *carbon epoxy* y el cristal de Ge con las dimensiones especificadas por el fabricante ($L = 31,5$ mm, $R = 35,4$ mm). Para las medidas hemos utilizado tanto fuentes radiactivas en las cuales no había efectos de coincidencias verdaderas (^{137}Cs y ^{241}Am) y que por lo tanto no necesitan ninguna corrección, así como fuentes en las que hay coincidencias verdaderas (^{22}Na , ^{60}Co y

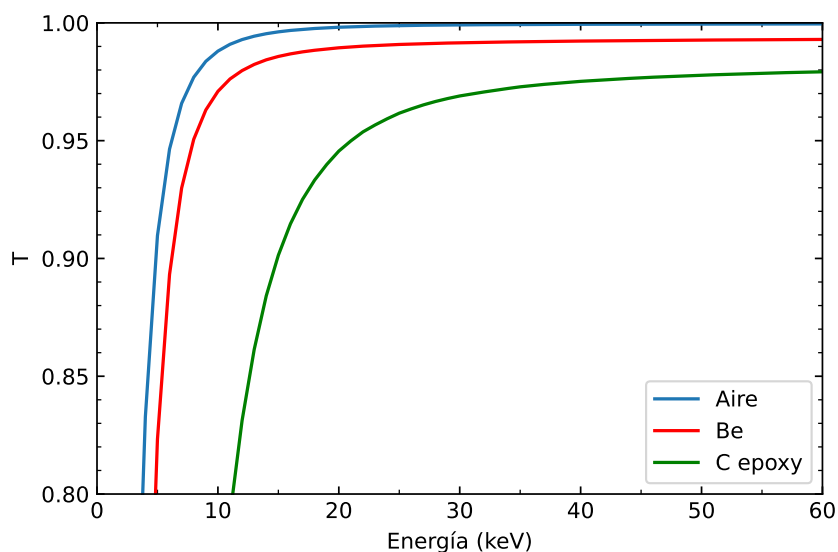


Figura 23: Factor de transmisión del aire (azul), berilio (rojo) y *carbon epoxy* (verde). Estas curvas corresponden a un grosor de 20 mm para el aire, 0,254 mm para el berilio y 0,6 mm para el *carbon epoxy*.

^{133}Ba). Para estas tres fuentes se representan dos puntos para cada energía, el punto inferior corresponde a la eficiencia sin el factor de corrección mientras que el punto superior tiene ya aplicada la corrección por el efecto de las coincidencias verdaderas. Es importante hacer notar que si no se hubieran hecho estas correcciones algunos puntos quedarían muy alejados de la curva $\bar{\epsilon}(E)$ obtenida por simulación, pero una vez aplicadas las correcciones casi todos los puntos coinciden con la curva a excepción de los de más alta energía (1173,2, 1274,5 y 1332,5 keV) que quedan un poco por debajo. Estas pequeñas diferencias pueden ser debidas a que las dimensiones del detector no sean exactamente las mismas que indica el fabricante. En el apartado 7.8 discutiremos con más profundidad este tema.

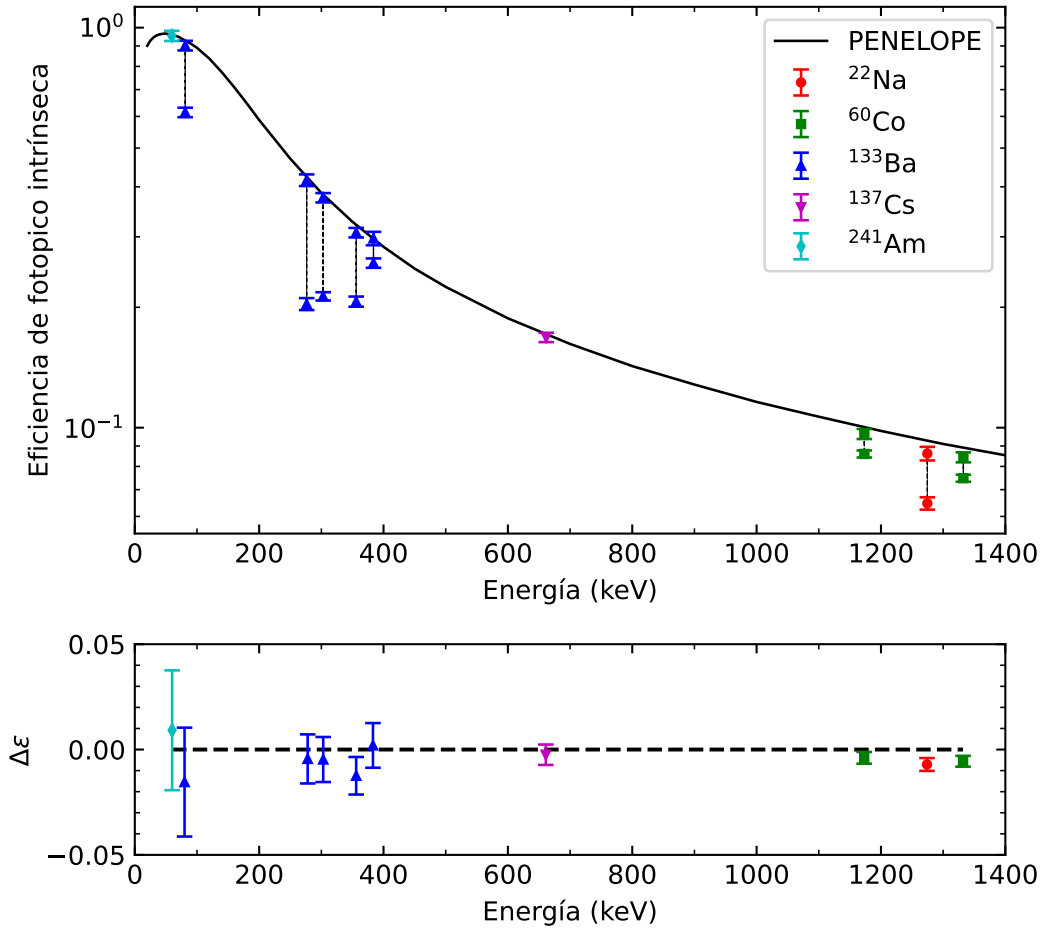


Figura 24: Eficiencias de fotopico intrínsecas de las diferentes emisiones de interés, eficiencias corregidas y eficiencia simulada en una geometría con la ventana de *carbon epoxy* y el cristal de Ge con las dimensiones nominales ($L = 31,5$ mm, $R = 35,4$ mm). En la parte inferior se muestra la diferencia $\Delta\bar{\epsilon} = \bar{\epsilon}_{\text{PENELOPE}} - \bar{\epsilon}_{\text{exp}}$. Las incertidumbres se muestran con 2SD.

7.8 Optimización de la geometría

Los valores nominales de los tamaños de los diferentes componentes del detector y las distancias que hay entre ellos no son siempre correctos, y esto puede llevar a discrepancias entre los resultados simulados y los experimentales [25, 26]. Como podemos ver en la figura 24 los valores experimentales se ajustan muy bien a la curva $\bar{\varepsilon}(E)$, pero aunque esto indica que los valores nominales son muy próximos a los reales hay un pequeño margen de mejora. Por eso modificaremos algunos de los parámetros geométricos del detector para intentar caracterizarlo aún mejor. Los parámetros más relevantes son el grosor de la capa muerta del detector, la longitud L del detector y la distancia entre el cristal de Ge y la ventana de *carbon epoxy*.

Cada uno de estos parámetros afecta de forma distinta a la curva $\bar{\varepsilon}(E)$. Aumentar la capa muerta reduce la eficiencia a bajas energías, ya que a menor energía menor es el recorrido libre medio de los fotones y en consecuencia, la mayoría de fotones de energías bajas son absorbidos cerca de la superficie frontal del cristal. Si aumentamos la capa muerta provocaríamos que estos fotones no fueran detectados, disminuyendo así la eficiencia. A medida que aumentamos la energía, los fotones penetran más en el cristal por lo que la influencia de la capa muerta es menos relevante. Con un razonamiento similar podemos entender que disminuir L no cambia a la eficiencia a bajas energías (porque los rayos γ son detectados mucho antes de que lleguen a la superficie posterior), pero a medida que la energía del fotón aumenta, su recorrido libre medio también lo hace, provocando que el efecto de disminuir la longitud del detector sea más notable. Por último tenemos el efecto de la distancia entre el cristal y la ventana. Variar esta distancia modifica principalmente al ángulo sólido subtendido por el detector, de forma que su influencia es independiente de la energía.

Como se observa en la figura 24, la curva a bajas energías se ajusta muy bien a los puntos experimentales así que decidimos no añadir ninguna capa muerta. En cambio sí vamos a optimizar la distancia entre el cristal y la ventana (más concretamente la distancia cristal-fuente) ya que podemos ver como sistemáticamente la mayoría de puntos quedan por debajo de la curva. También consideramos oportuno optimizar la longitud L del cristal de Ge puesto que los puntos experimentales a altas energías se desvían bastante más de la curva que los demás puntos.

Para llevar a cabo esta optimización simularemos la eficiencia del detector a las energías de los 10 rayos γ de interés para una serie de longitudes del detector, y posteriormente calcularemos el χ^2 entre los datos experimentales y las simulaciones para diferentes combinaciones de L y D . χ^2 se define como

$$\chi^2 = \sum_i \frac{(\bar{\varepsilon}_i^{\text{exp}} - \bar{\varepsilon}_i^{\text{MC}})^2}{\text{var}(\bar{\varepsilon}_i^{\text{exp}})}. \quad (82)$$

En la figura 25 se muestran seis curvas, cada una perteneciente a un grosor del cristal de Ge, y se puede ver cómo varía χ^2 en función de la distancia entre el detector y la fuente. Cada curva tiene un mínimo, que corresponde a la distancia D entre la fuente y el cristal que hace que la curva se ajuste mejor a los puntos experimentales. Haciendo simulaciones de varias L podremos encontrar los valores de L y D que consiguen el mejor ajuste posible.

Se ha ajustado una curva cuadrática del tipo $aD^2 + bD + c$ a los valores de los mínimos, con un coeficiente de correlación de $R^2 = 0,995$. Conociendo la ecuación de la curva podemos

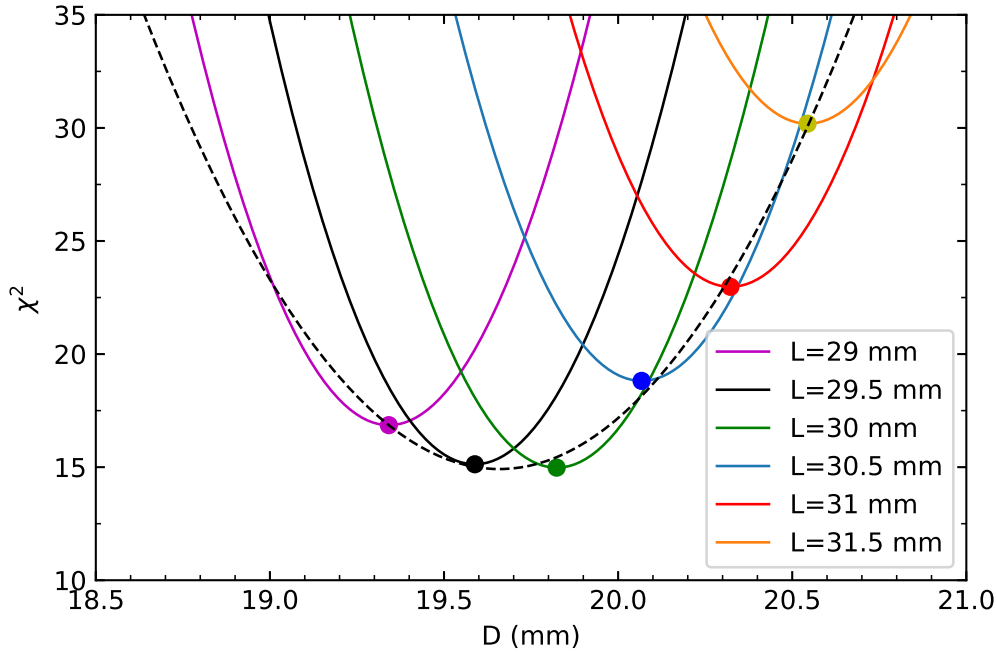


Figura 25: Valor de χ^2 en función de la distancia fuente-detector D para seis grosores L del cristal de Ge. Los puntos marcan el mínimo de cada curva, y la curva discontinua negra representa un ajuste cuadrático a los mínimos.

encontrar para que distancia χ^2 es mínimo, que ha resultado ser **19.7 mm**. Ahora que sabemos la distancia tenemos que saber cuál es el grosor que combinando con esta distancia minimiza χ^2 . Para ello tomamos los datos de los mínimos de las curvas de los diferentes grosores y representamos su grosor en función de la distancia.

El ajuste (figura 26) que se ha obtenido con un coeficiente de correlación de $R^2 = 0,9998$ es

$$G = 2,068(9)D - 11,0(2), \quad (83)$$

donde G es el grosor del cristal y D la distancia fuente-cristal. Con esta función y conociendo la distancia se puede calcular el grosor que hace que para 19,7 mm de distancia entre la fuente y el cristal χ^2 sea mínima, siendo este grosor **29.7 mm**.

Teniendo en cuenta estos resultados hemos vuelto a simular la eficiencia con una geometría compuesta por la ventana de *carbon epoxy* y el cristal de Ge, pero con los nuevos valores de L y D .

En la figura 27 se aprecia cómo la curva $\bar{\varepsilon}(E)$ simulada reproduce mejor los puntos experimentales que la curva de la figura 24, sobre todo los puntos correspondientes a los rayos γ de mayor energía.

Para confirmar los nuevos valores de la geometría se realizaron nuevas medidas, pero esta vez con una distancia fuente-cristal de 15 mm. La idea inicial era utilizar los mismos núcleos que se habían estudiado anteriormente, pero cuando ya se habían medido las fuentes

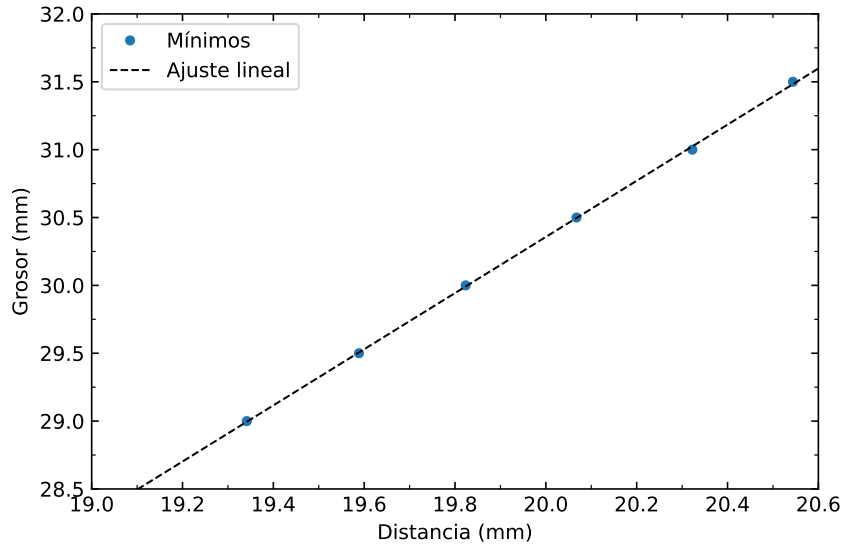


Figura 26: Ajuste lineal a los valores de grosor y distancia de los mínimos de las curvas de la figura 25.

de ^{133}Ba y ^{137}Cs un problema en el sistema de refrigeración impidió que pudiéramos realizar las medidas restantes. Hemos comparado los valores experimentales de estas dos fuentes con la curva de eficiencias que predice PENELOPE, para una distancia de 14,7 mm y un grosor de 29,7 mm.

En este caso no era factible hacer una optimización del grosor, dado que como la mayoría de los puntos que tenemos son de baja energía, su eficiencia es poco sensible a los cambios en el grosor del cristal. Es por eso que se ha optado por reproducir las condiciones de la optimización anterior para ver si las eficiencias experimentales y las simuladas son compatibles.

La figura 28 proporciona un argumento más que nos sirve para verificar que los parámetros optimizados son correctos, ya que los valores simulados coinciden con los experimentales, a excepción del punto correspondiente a la emisión de 383,6 keV. La discrepancia en la eficiencia de fotopico de esta emisión es debido a que a una energía de 387,0 keV hay otro pico más intenso (causado por una coincidencia verdadera entre el γ de 356,0 keV y el rayo x $K\alpha$ de 31,0 keV), con una anchura lo suficientemente grande para que algunas de sus cuentas entren en el pico de 383,6 keV, provocando que la eficiencia experimental calculada sea superior a la real.

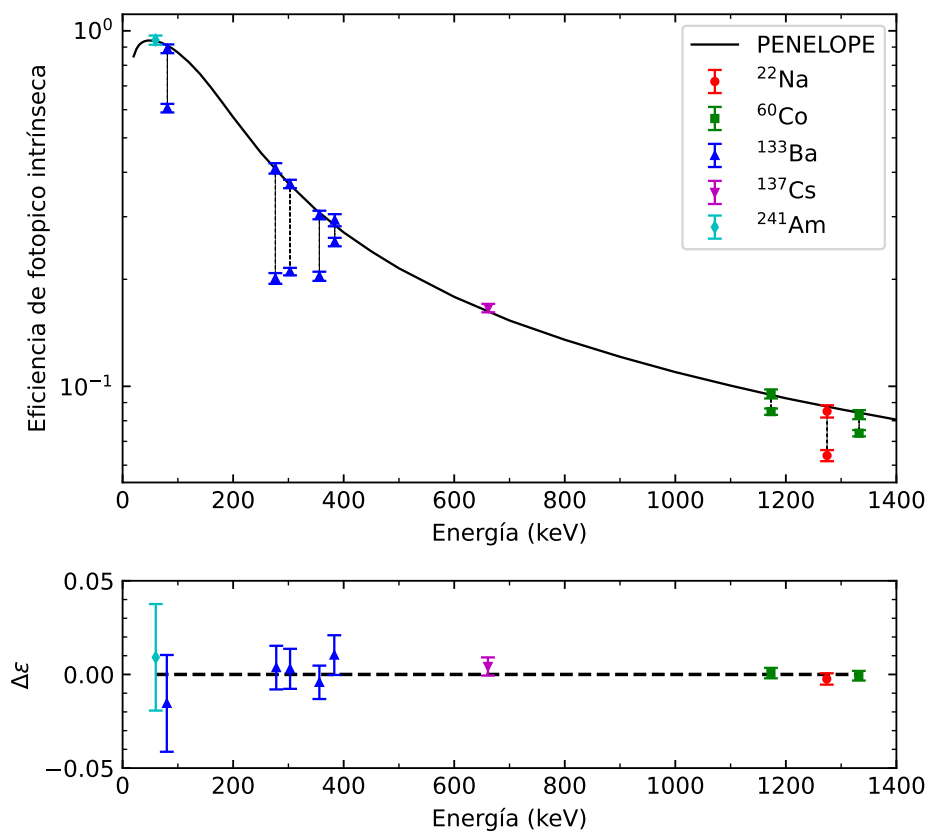


Figura 27: Comparación de las eficiencias de fotopico intrínsecas experimentales con las obtenidas con PENELOPE/penEasy una vez aplicados los valores de L y D optimizados. En la parte inferior se muestra la diferencia $\Delta\varepsilon = \bar{\varepsilon}_{\text{PENELOPE}} - \bar{\varepsilon}_{\text{exp}}$. Las incertidumbres se muestran con 2SD.

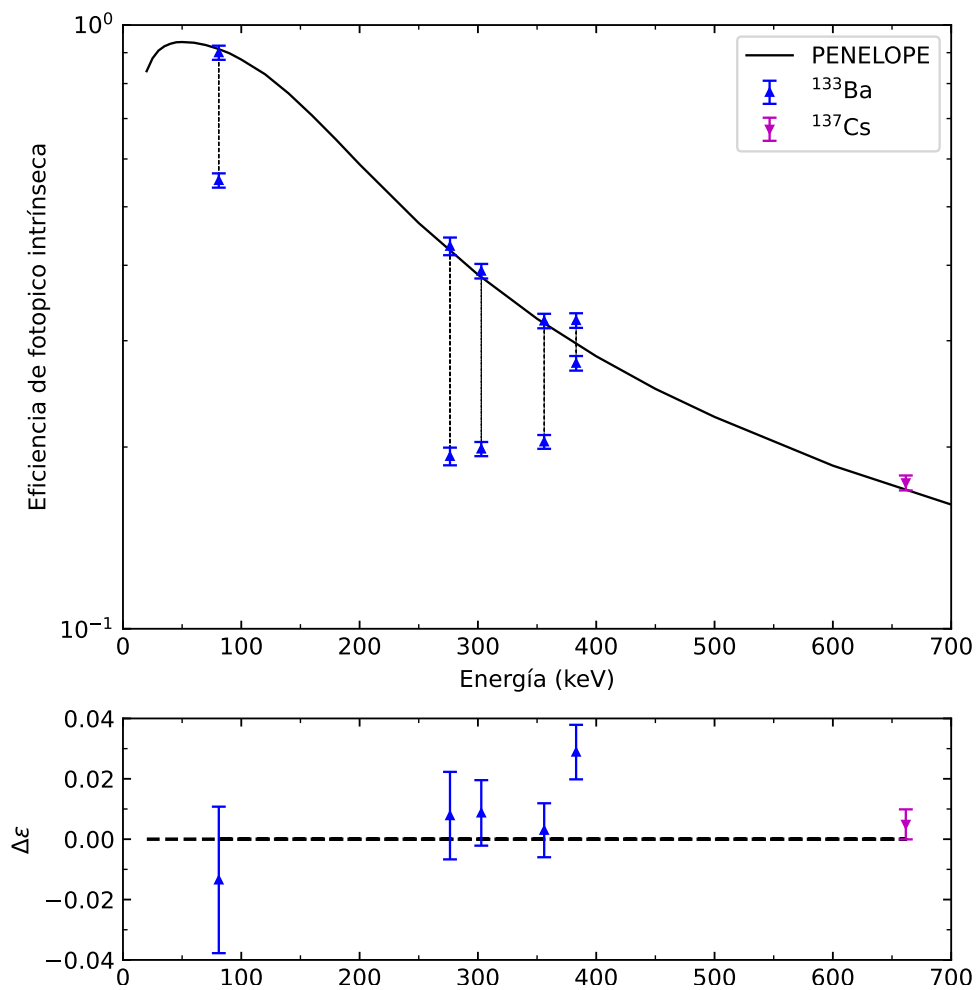


Figura 28: Comparación de las eficiencias de fotopico intrínsecas experimentales con las obtenidas con PENELOPE/penEasy una vez aplicados los valores de L y D optimizados para las medidas a 15 mm. También se muestra $\Delta\bar{\epsilon} = \bar{\epsilon}_{\text{PENELOPE}} - \bar{\epsilon}_{\text{exp}}$. Las incertidumbres corresponden a 2SD.

7.9 Geometría completa

Hasta ahora en la geometría de las simulaciones solo se había incluido el cristal de Ge y la ventana de *carbon epoxy*. En realidad hay componentes que se han obviado y que se muestran en la figura 29.

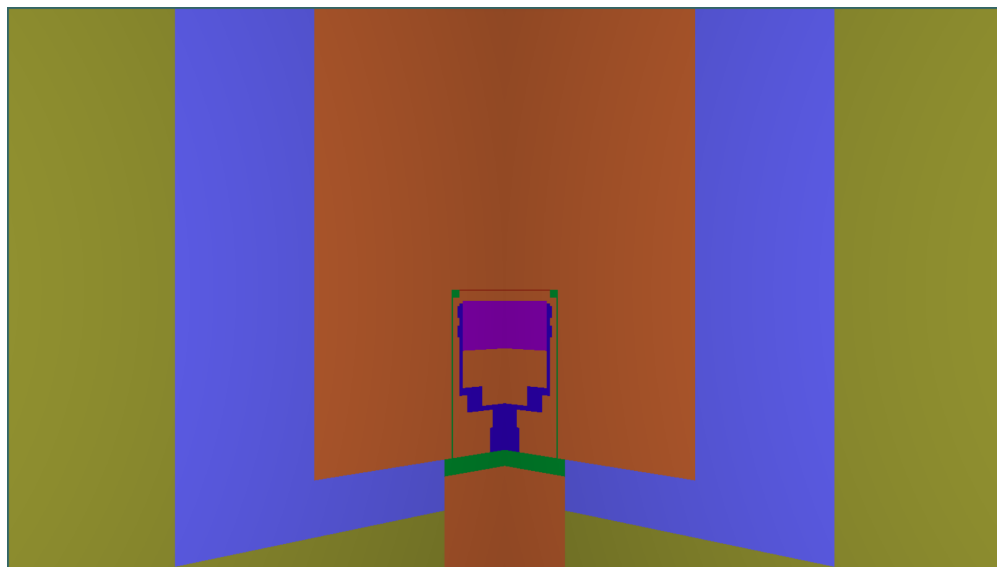


Figura 29: Esquema de la geometría completa simulada, con un corte en el ángulo azimutal entre -45° y 45° .

En la imagen anterior se representa en lila el cristal de Ge. En azul oscuro tenemos el soporte del cristal, hecho de cobre, y envolviendo al soporte tenemos la carcasa de aluminio (color verde). Justo debajo le hemos añadido una capa de 10 mm de aluminio para imitar el efecto de estructuras que no conocemos exactamente sus dimensiones, como es el caso del *dewar*. Lo que se ve en naranja corresponde a aire. El resto es plomo, que está separado en dos zonas, la azul claro donde la energía umbral de absorción de fotones es 1 keV, y la amarillo oscuro en la que todos los fotones que llegan son absorbidos. Esta distinción se ha hecho para ganar tiempo en las simulaciones, habiéndose comprobado previamente que este cambio no tiene ningún efecto en los resultados.

Puesto que ya tenemos el detector caracterizado con todas sus componentes, vamos a estudiar si su inclusión afecta a los resultados obtenidos hasta ahora.

7.9.1 Eficiencia total y eficiencia de fotopico

Empezamos por una de las características más importante de los detectores, como es su eficiencia.

En la figura 30, donde se compara la eficiencia de fotopico intrínseca obtenida con la geometría completa y con la geometría simplificada, podemos apreciar que la eficiencia de fotopico no cambia al incorporar todas las partes de la geometría. Esto coincide con nuestras expectativas, puesto que una vez el fotón atraviesa el cristal sin interactuar con él, para

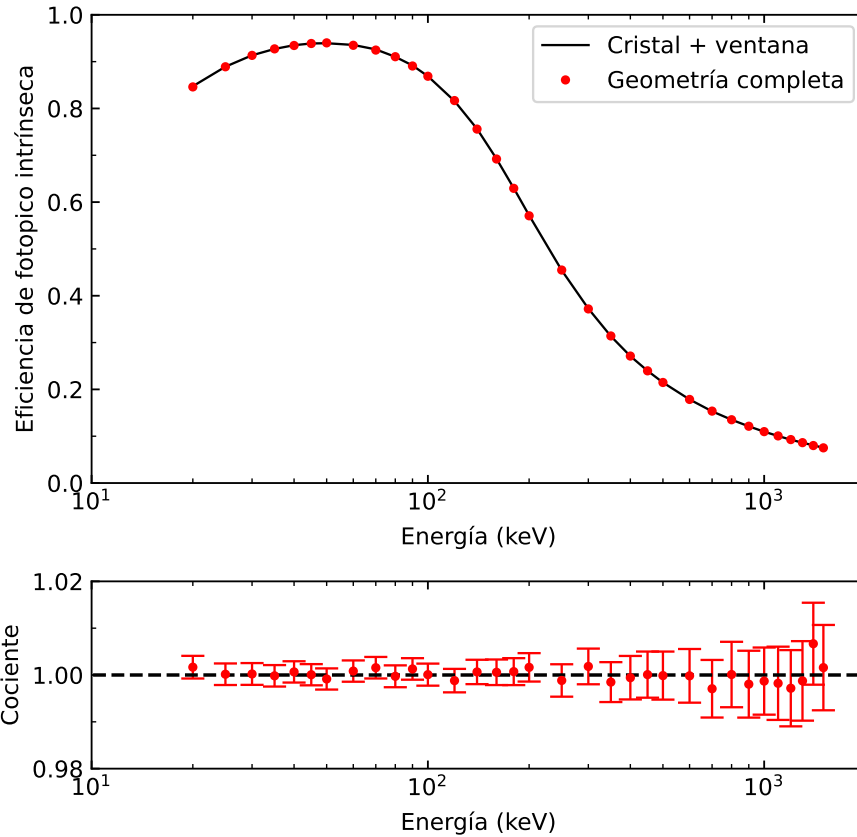


Figura 30: Comparación de la eficiencia de fotopico intrínseca de la geometría con los valores optimizados con la geometría completa, conjuntamente con el cociente cristal y ventana/geometría completa para una distancia fuente-cristal de 20 mm. Las incerdumbres corresponden a 2SD.

volver al cristal tendría que interactuar con alguno de los componentes circundantes y, por lo tanto, perdería parte de su energía no contribuyendo al fotopico.

Una vez analizada la eficiencia de fotopico pasamos a la total, donde sí esperamos que el hecho de añadir todas las componentes de la geometría afecte a los resultados.

La figura 31, que compara la eficiencia total obtenida con la geometría simplificada con la geometría completa, confirma que el hecho de incluir todos los elementos sí afecta a la eficiencia total. Este efecto varía según la energía, siendo más importante a energías más altas, llegando a una variación del 5%. Este comportamiento se debe a que a bajas energías, prácticamente todos los fotones que interactúan con el cristal son absorbidos, lo que provoca que la presencia o ausencia de otros componentes alrededor del cristal no tenga influencia alguna. A medida que la energía de los fotones aumenta, la probabilidad de que no interactúen con el cristal también aumenta. En este caso, la reproducción de todos los componentes de

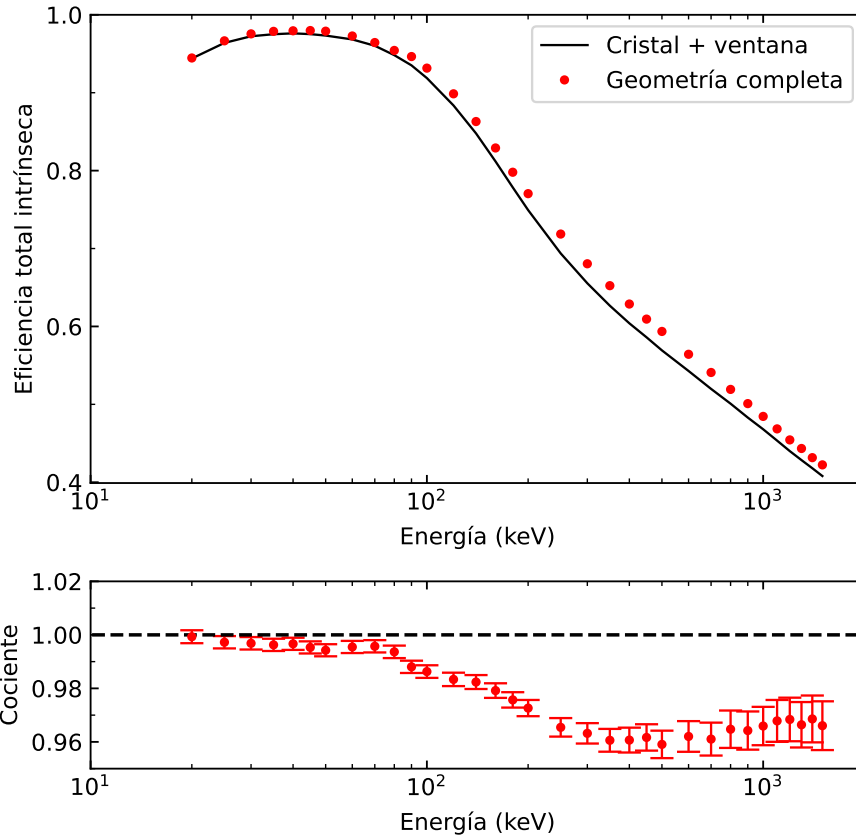


Figura 31: Comparación de la eficiencia total intrínseca de la geometría con los valores optimizados, con la geometría completa, conjuntamente con el cociente cristal y ventana/geometría completa para una distancia fuente-cristal de 20 mm. Las incertidumbres corresponden a 2SD.

la geometría permite que los fotones “reboten” y regresen al detector, lo que se refleja en un mayor número de cuentas en el espectro simulado con la geometría completa.

7.9.2 Valores de los coeficientes de corrección

Como hemos visto en el apartado anterior, la eficiencia de fotopico no cambia aunque añadamos los elementos que están alrededor del cristal. En cambio la eficiencia total sí se ve modificada, y como los coeficientes de corrección de los efectos de suma en coincidencia están directamente relacionados con la eficiencia total del detector, se podrían ver alterados.

En la tabla 11 se muestran los valores de los coeficientes de corrección obtenidos con la geometría completa. Observamos que los coeficientes de corrección que se obtienen simulando la geometría completa son prácticamente los mismos que teníamos anteriormente. Que no haya cambios es debido principalmente a tres efectos que influyen de diferente forma a las

Tabla 11: Valores de los coeficientes de corrección obtenidos con la geometría completa (C_{opt}) en comparación con los calculados cuando la geometría solo incluía el cristal de Ge. Las incertidumbres corresponden a 2SD.

Núcleo	$E(\text{keV})$	C	C_{opti}
^{22}Na	1274.5	1.332(6)	1.354(9)
^{60}Co	1173.2	1.122(4)	1.125(6)
	1332.5	1.128(4)	1.130(7)
^{133}Ba	81.0	1.469(8)	1.469(12)
	276.4	1.894(5)	1.901(7)
	302.9	1.764(8)	1.744(13)
	356.0	1.487(5)	1.478(7)
	383.9	1.152(3)	1.148(4)

coincidencias. El primero de ellos es que en las primeras simulaciones solo se había simulado el cristal de Ge sin la ventana de *carbon epoxy*, de manera que llegaban más fotones al detector, aumentando así la probabilidad de que las coincidencias ocurrieran. Por otro lado, al tener ahora diferentes cuerpos rodeando el detector es posible que fotones interaccionen con estos cuerpos y vayan a parar al detector, aumentando la probabilidad de coincidencia. Finalmente, estas últimas simulaciones se han realizado con un grosor del cristal de Ge de 29,7 mm en vez de los 31,5 mm iniciales, y en consecuencia disminuye la eficiencia del detector, causando que la probabilidad de que ocurra una coincidencia baje.

En definitiva, tenemos un efecto que hace que en la nueva geometría las coincidencias aumenten (el hecho de tener material rodeando el cristal) y dos que hacen que disminuyan respecto a la geometría anterior (el cambio de grosor y la ventana). Probablemente estos cambios por separado no introducirían grandes diferencias en el resultado pero además son efectos que se contraponen, por lo que no es de extrañar que los coeficientes de corrección no hayan variado.

Conociendo estos resultados y añadiendo los que hemos visto en el apartado anterior constatamos que ni la eficiencia de fotopico ni los factores de corrección varían sustancialmente al incluir la geometría completa del sistema de detección. Por consiguiente los resultados obtenidos con la geometría simplificada son válidos.

7.9.3 Comparación de espectros

Como en paquete PENNUC de PENELOPE permite simular el decaimiento de los núcleos que hemos medido, vamos a comparar los espectros experimentales con los que proporciona PENELOPE/penEasy.

De los espectros mostrados en las figuras 32-36 podemos hacer algunos comentarios generales. El primero de ellos es que en la simulación no hemos incluido el ensanchamiento de los picos debido a la fluctuación estadística del número de portadores de carga ni al factor de Fano. Entonces como los picos son menos anchos pero tienen la misma área, los picos de los espectros simulados son más altos.

Otro punto a valorar es que PENELOPE no simula las coincidencias aleatorias, así que todas las cuentas que se producen experimentalmente por estas coincidencias no se reproducen en el espectro simulado. El pico a 1300 keV del ^{137}Cs (figura 32) o el de 119,08 keV del ^{241}Am (figura 36) son algunos ejemplos.

Asimismo es importante mencionar que aunque PENELOPE es capaz de simular todas las componentes del espectro, a energías bajas el espectro simulado no reproduce con exactitud el espectro experimental. Este problema ya aparece en otros artículos [27, 28, 29] donde los espectros simulados con PENELOPE no consiguen replicar exactamente a los experimentales. Estas discrepancias también aparecen en los espectros simulados con otros códigos MC de propósito general como por ejemplo MNCPX (Monte Carlo N-particle eXtended) [30].

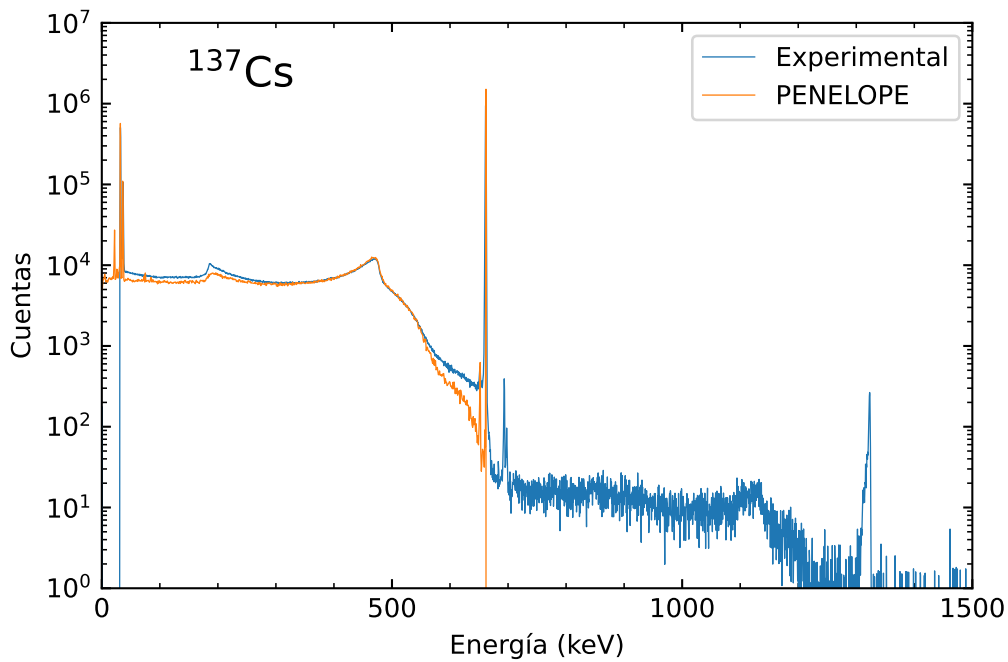


Figura 32: Espectros experimental neto y simulado de la fuente de ^{137}Cs .

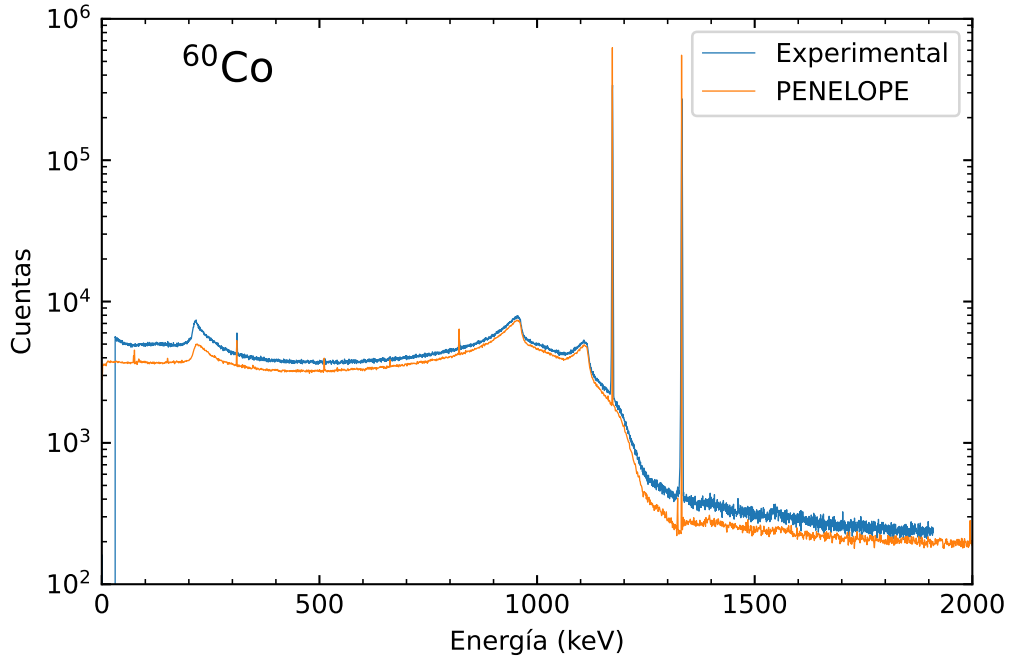


Figura 33: Espectros experimental neto y simulado de la fuente de ^{60}Co (Amersham).

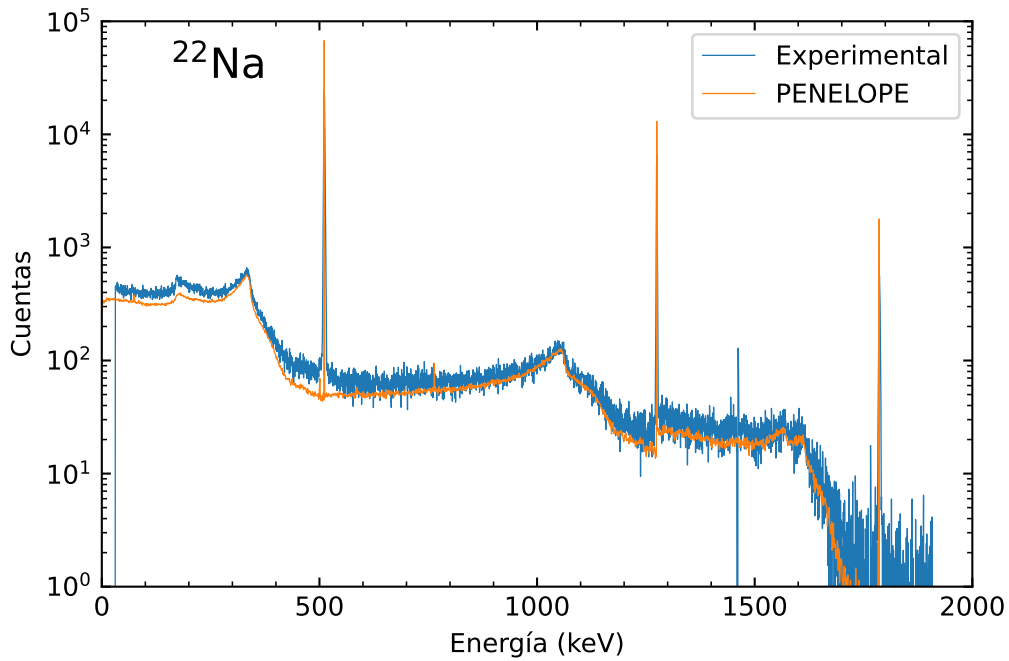


Figura 34: Espectros experimental neto y simulado de la fuente de ^{22}Na (Amersham).

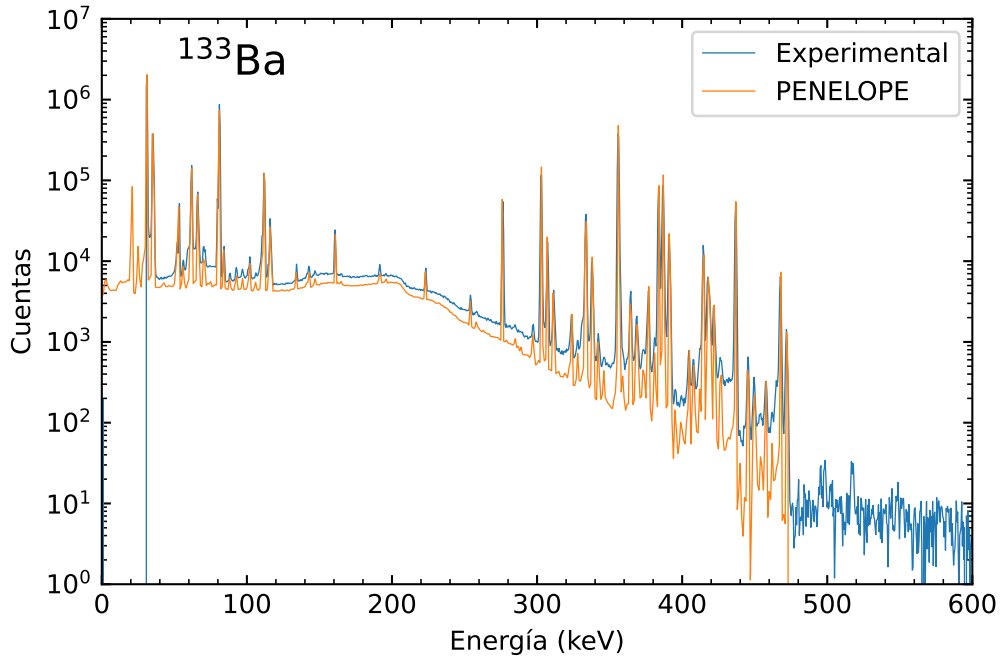


Figura 35: Espectros experimental neto y simulado de la fuente de ^{133}Ba .

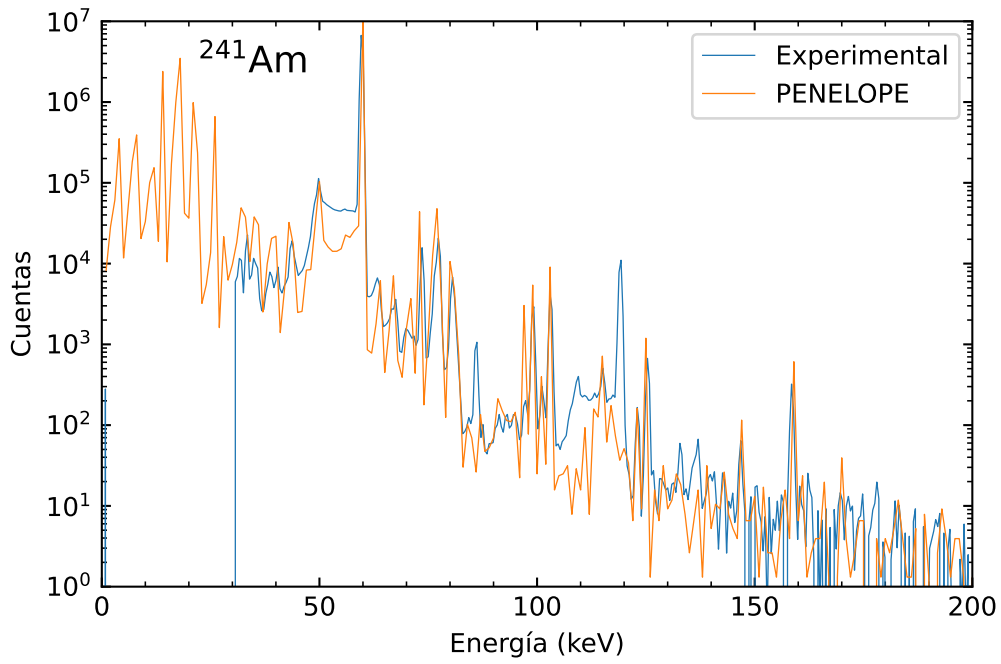


Figura 36: Espectros experimental neto y simulado de la fuente de ^{241}Am .

8 Conclusiones y perspectivas futuras

Finalizado este proyecto es el momento de analizar si se han logrado sus metas. El objetivo principal del TFM era llevar a cabo un método que sirviera para caracterizar un detector de rayos γ utilizando simulación MC y que sus resultados fueran lo suficientemente precisos para que se pueda considerar este método como una alternativa a la caracterización experimental. A la vista de los diferentes resultados que se han ido aportando y discutiendo podemos afirmar que se ha logrado este objetivo, puesto que los resultados obtenidos usando PENELOPE/penEasy y las medidas experimentales difieren dentro del rango de incertidumbres.

Otro objetivo que habíamos fijado era la comparación entre diferentes programas de simulación MC y entre estos programas y desarrollos teóricos. En primer lugar hemos visto como no existen diferencias significativas entre las eficiencias de fotopico de PENELOPE/penEasy y DETEFF, sea cual sea la energía del fotón incidente o la distancia entre la fuente y el detector. En los que respecta a los desarrollos teóricos, destacamos que la expresión exacta da unos resultados idénticos a los que se consiguen utilizando tanto PENELOPE/penEasy como DETEFF. La expresión aproximada logra dar unos valores parecidos, pero no tiene la exactitud que se necesita en estos experimentos.

El siguiente paso era enfrentarnos a los inconvenientes de la geometría cercana. Hemos calculado los factores de corrección de coincidencias para varias emisiones de fuentes radioactivas para diferentes distancias, pudiendo constatar que a medida que se aleja la fuente del detector el efecto es menor, y a partir de los 100 mm sus efectos son tan pequeños que podrían quedar enmascarados por la propia incertidumbre en la actividad de la fuente. Además, hemos utilizado dos métodos distintos para calcular los coeficientes de corrección que han dado valores compatibles, lo que aporta una confianza extra a estos resultados.

La importancia de las correcciones por efecto de coincidencia ha sido corroborada cuando se ha realizado la comparación entre los valores experimentales y los de la curva de eficiencia de fotopico intrínseca obtenida con PENELOPE/penEasy. En los resultados se puede ver que sin estas correcciones los puntos experimentales quedarían lejos de lo esperado, pero una vez corregidos los puntos concuerdan con la curva de eficiencias simulada, añadiendo otra prueba más de que los valores de los coeficientes de corrección son correctos.

Se ha efectuado una optimización de la geometría simulada que ha permitido descubrir que la distancia entre las fuentes radiactivas y el cristal era de 19,7 mm en las primeras medidas, frente a los 20 mm considerados. Este resultado indica que el montaje experimental ha conseguido tener una precisión submilimétrica, lo cual no es fácil de conseguir. También hemos encontrado que el grosor efectivo del cristal es de 29,7 mm. Finalmente se han podido comprobar los efectos que tienen los diferentes elementos pasivos del detector sobre las características principales de este, en particular la eficiencia total y la eficiencia de fotopico.

En este trabajo también hemos tenido limitaciones. La más importante con diferencia es que debido a su coste, la *Universitat de Barcelona* no posee un detector HPGe para uso docente sino que el único que hay es propiedad del *Servei d'Anàlisi Isotòpica* y se utiliza diariamente, así que teníamos que pedir permiso y no excedernos en los tiempos ni en el número de mediciones. Además tuvimos el inconveniente ya mencionado de que falló el

sistema de refrigeración cuando estábamos realizando las medidas a 15 mm.

Aun así creo que se ha conseguido realizar un trabajo bastante completo en el que se han logrado alcanzar los objetivos previstos. De cara a futuros trabajos se podrían explorar el uso de fórmulas teóricas para calcular la eficiencia de fotopico y compararlas con los resultados de simulación MC, los cuales ya hemos visto que dan resultados muy precisos. Otro aspecto a estudiar en el futuro sería encontrar la razón por la cual PENELOPE/penEasy consigue reproducir bien la forma de los espectros experimentales a altas energías pero presenta algunas discrepancias a energías bajas.

Apéndice A

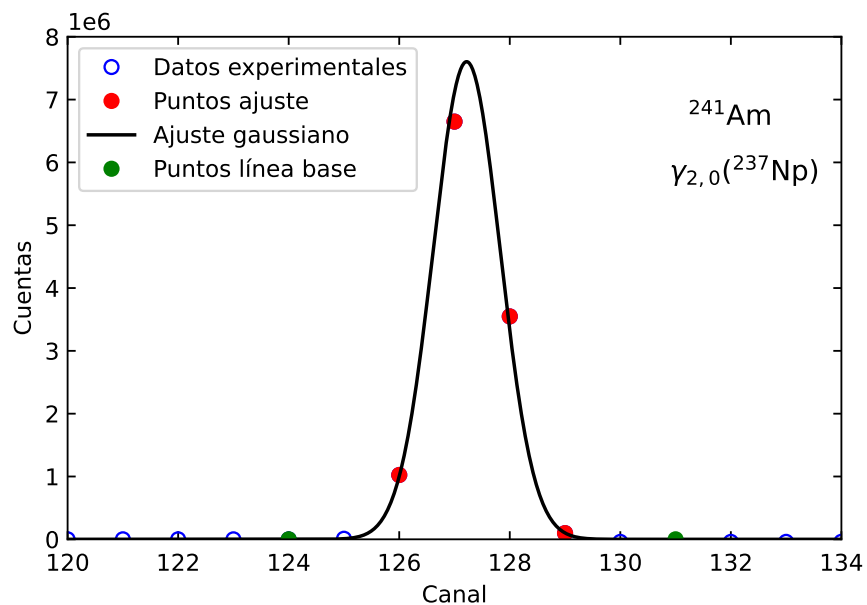


Figura 37: Ajuste gaussiano del pico de 59,5 keV del ^{241}Am una vez se le ha restado el fondo y la componente continua.

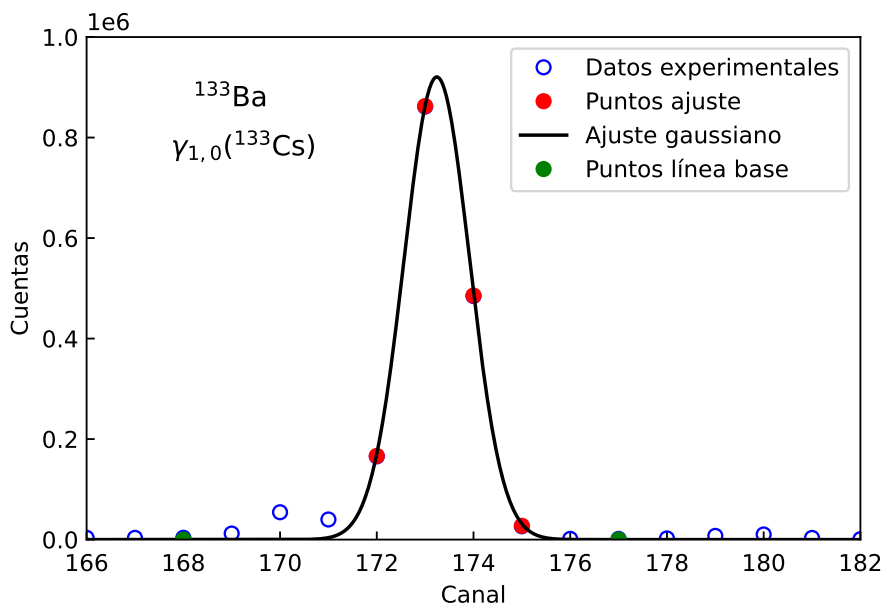


Figura 38: Ajuste gaussiano del pico de 81,0 keV del ^{133}Ba una vez se le ha restado el fondo y la componente continua.

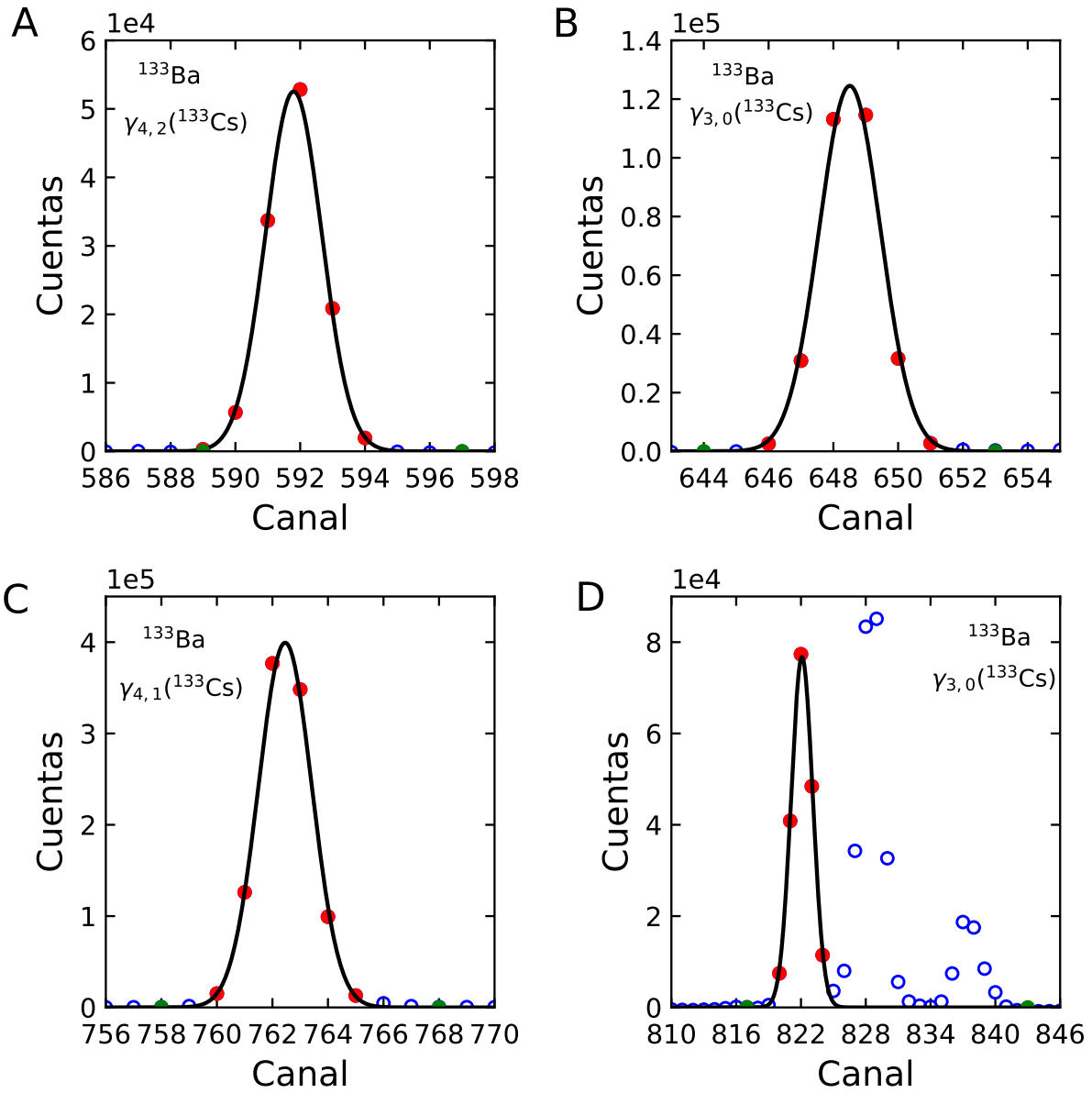


Figura 39: Ajuste gaussiano de los picos de 276,4 (A), 302,9 (B), 356,0 (C) y 383,8 (D) keV del ^{133}Ba una vez se le ha restado el fondo y la componente continua.

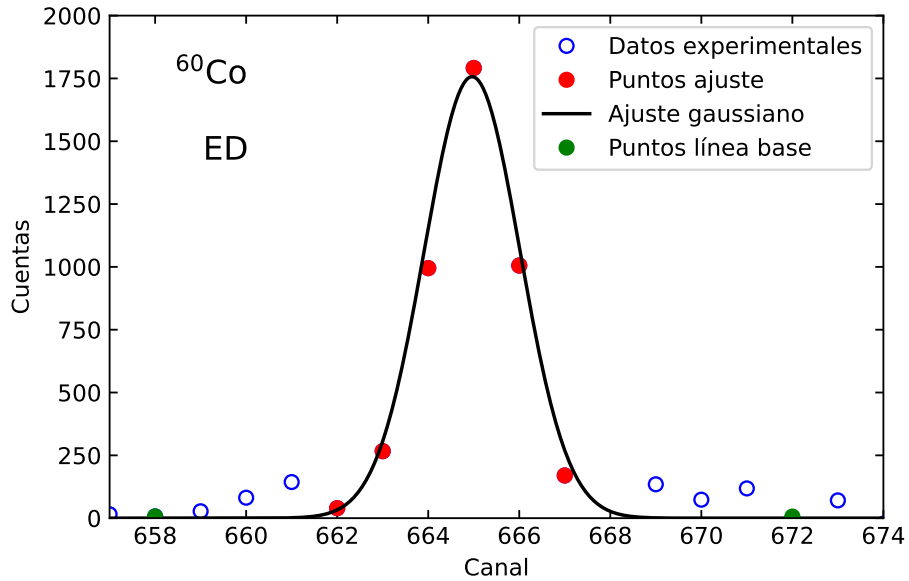


Figura 40: Ajuste gaussiano del pico de escape doble de 311,5 keV del ^{60}Co una vez se le ha restado el fondo y la componente continua.

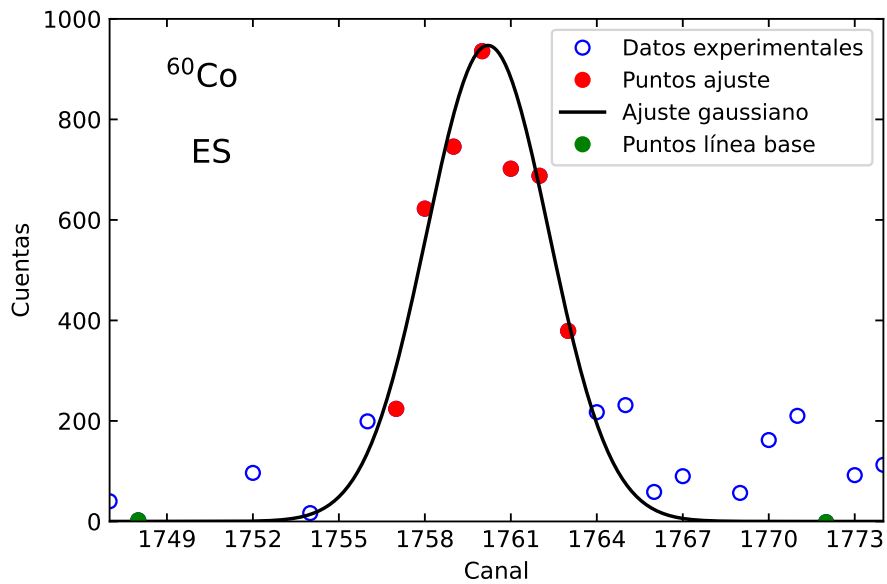


Figura 41: Ajuste gaussiano del pico de escape simple de 822,5 keV del ^{60}Co una vez se le ha restado el fondo y la componente continua.

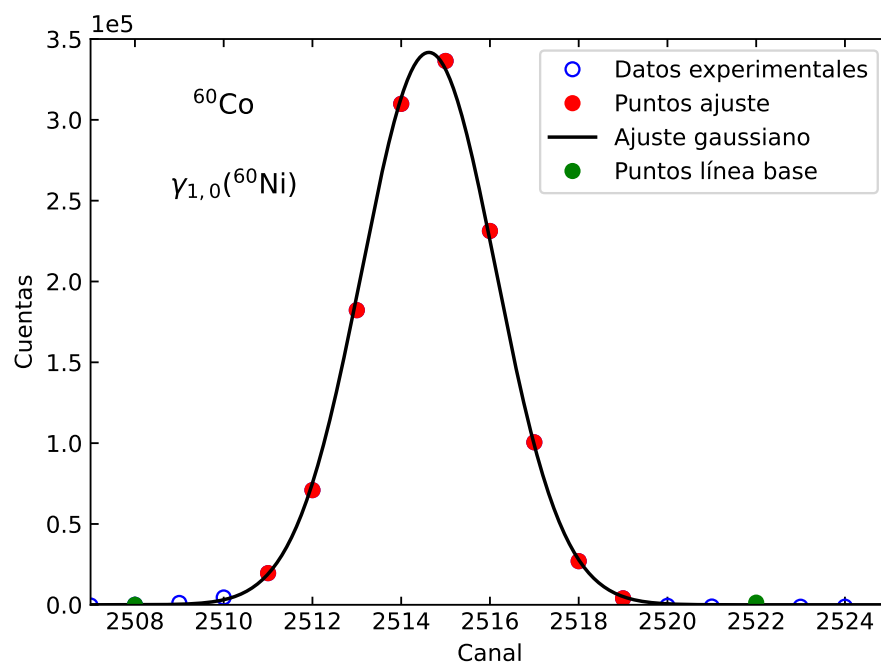


Figura 42: Ajuste gaussiano del pico de 1173,2 keV del ^{60}Co una vez se le ha restado el fondo y la componente continua.

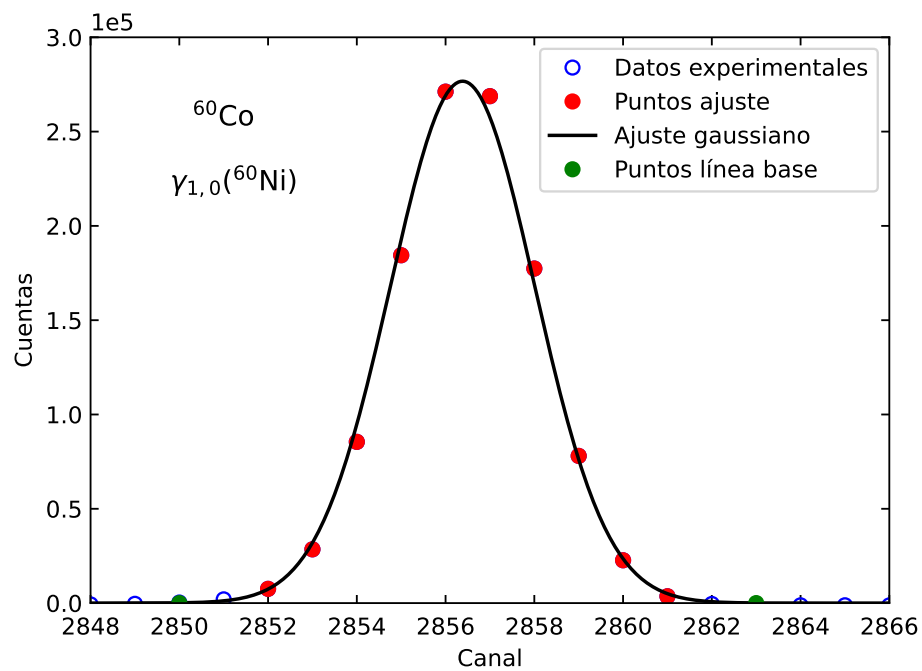


Figura 43: Ajuste gaussiano del pico de 1332,5 keV del ^{60}Co una vez se le ha restado el fondo y la componente continua.

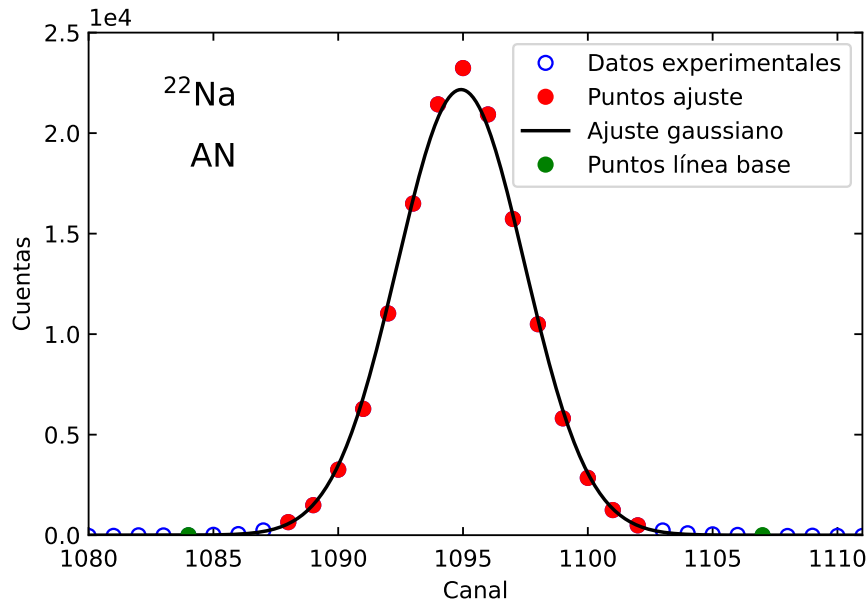


Figura 44: Ajuste gaussiano del pico de 511 keV del ^{22}Na una vez se le ha restado el fondo y la componente continua.

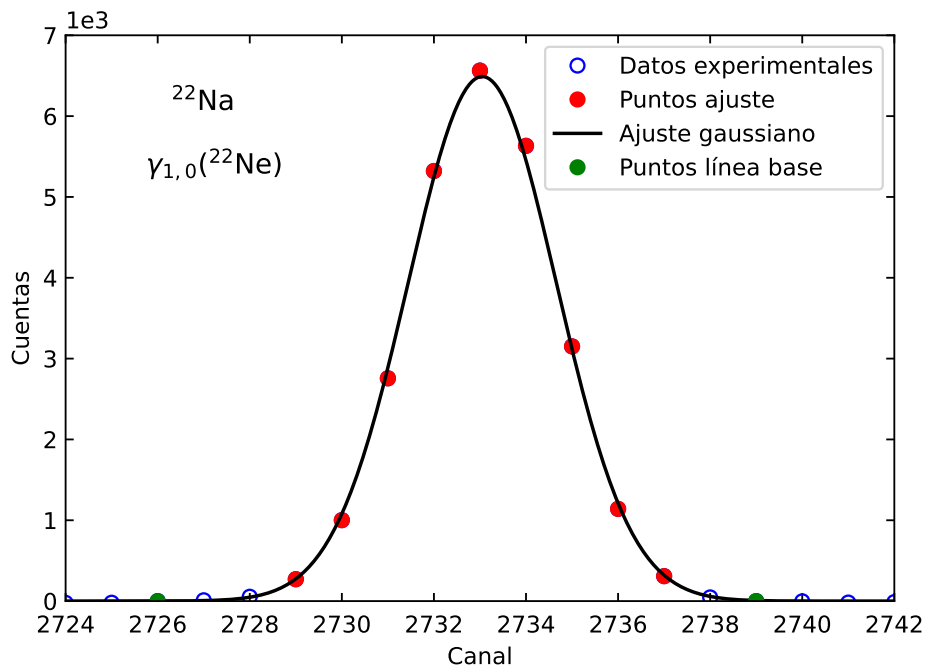


Figura 45: Ajuste gaussiano del pico de 1274,5 keV del ^{22}Na una vez se le ha restado el fondo y la componente continua.

Apéndice B

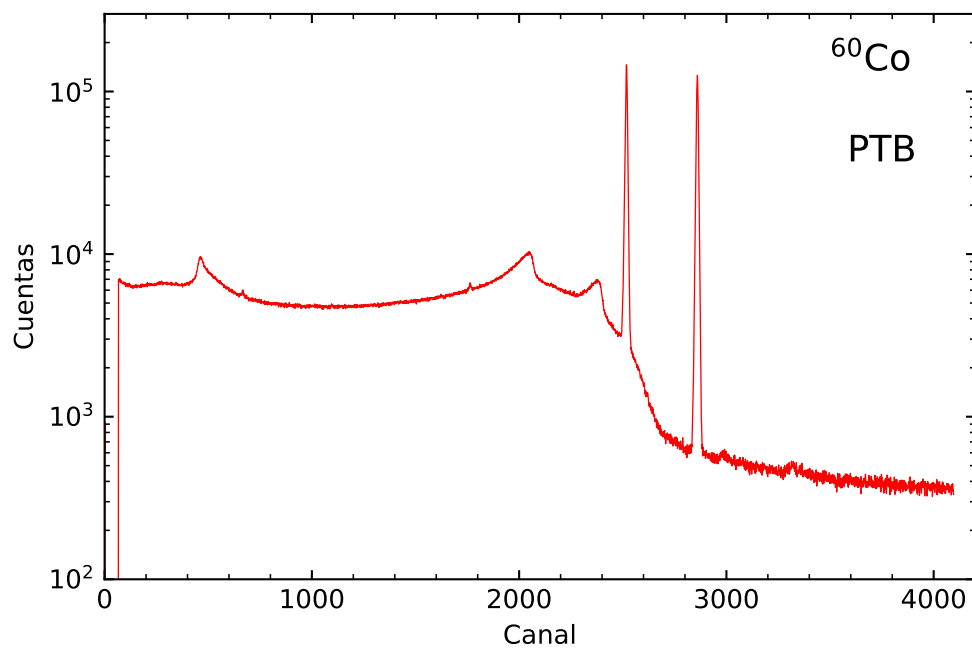
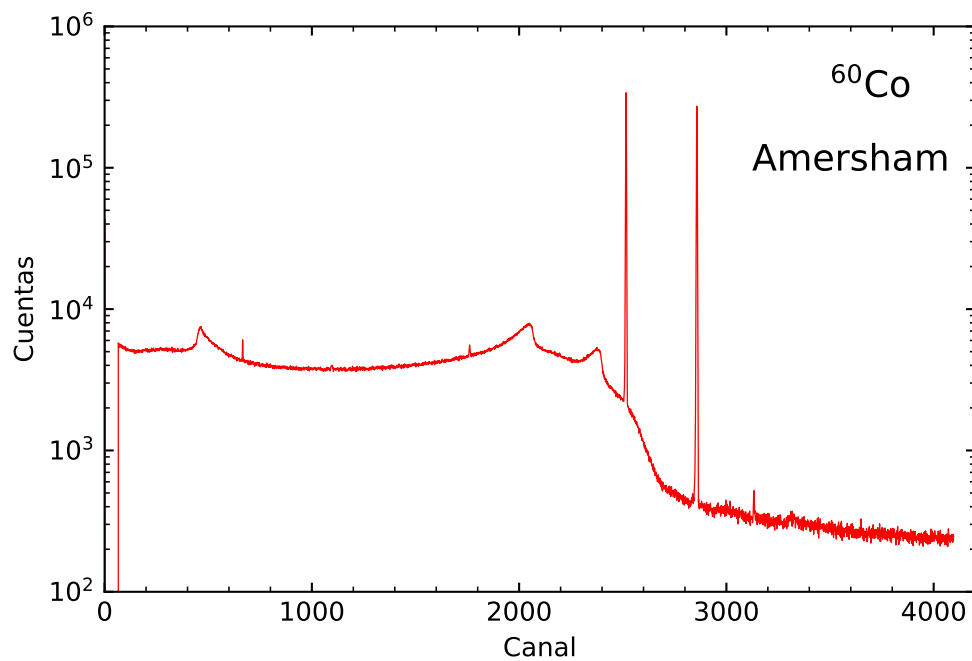


Figura 46: Espectros de las fuentes de ^{60}Co de Amersham (arriba) y de la fuente de PTB (abajo).

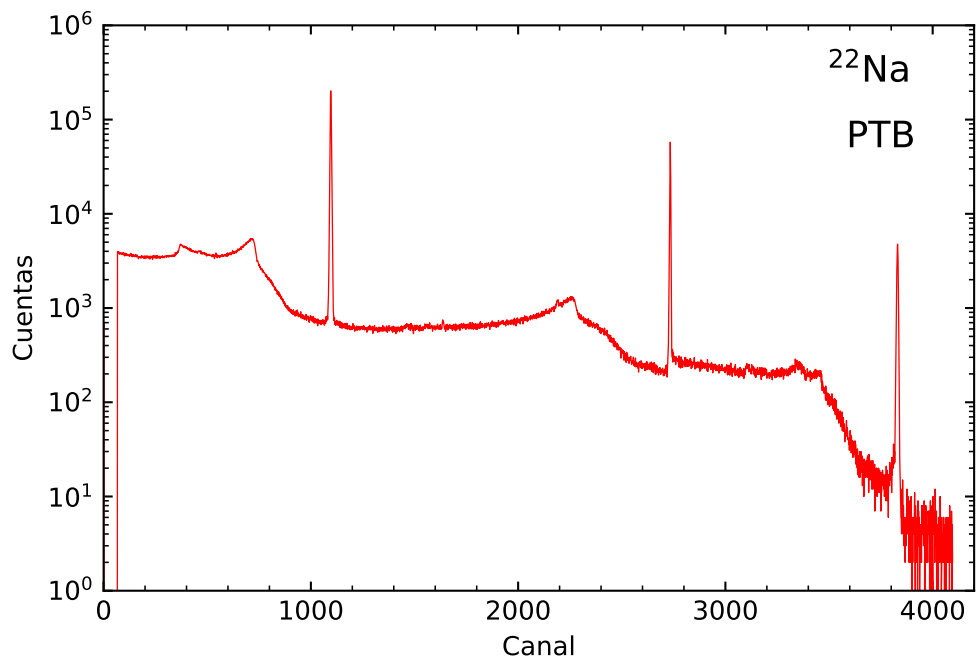
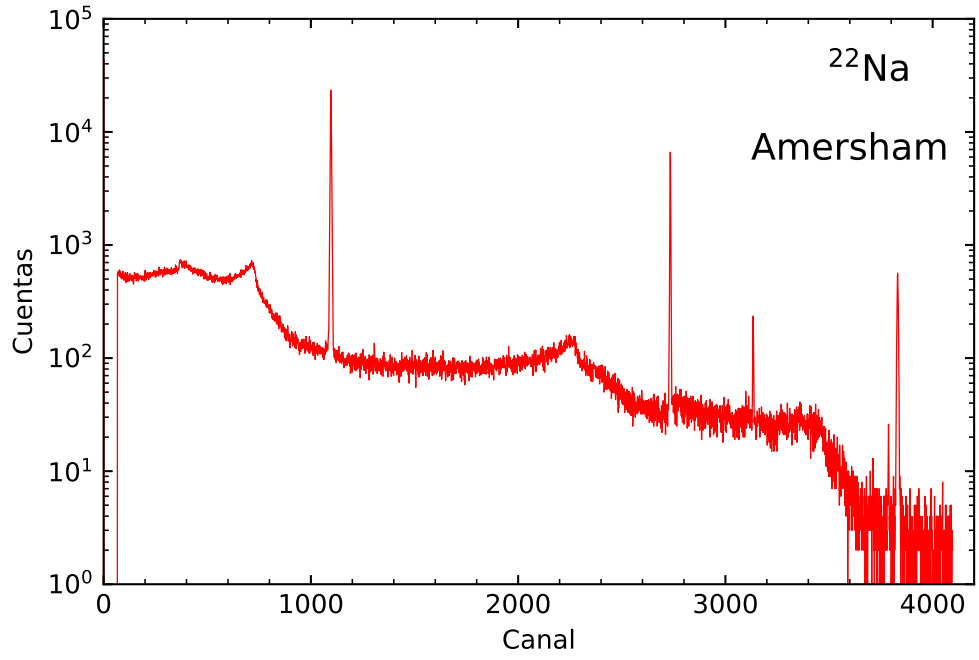


Figura 47: Espectros de las fuentes de ^{22}Na de Amersham (arriba) y PTB (abajo).

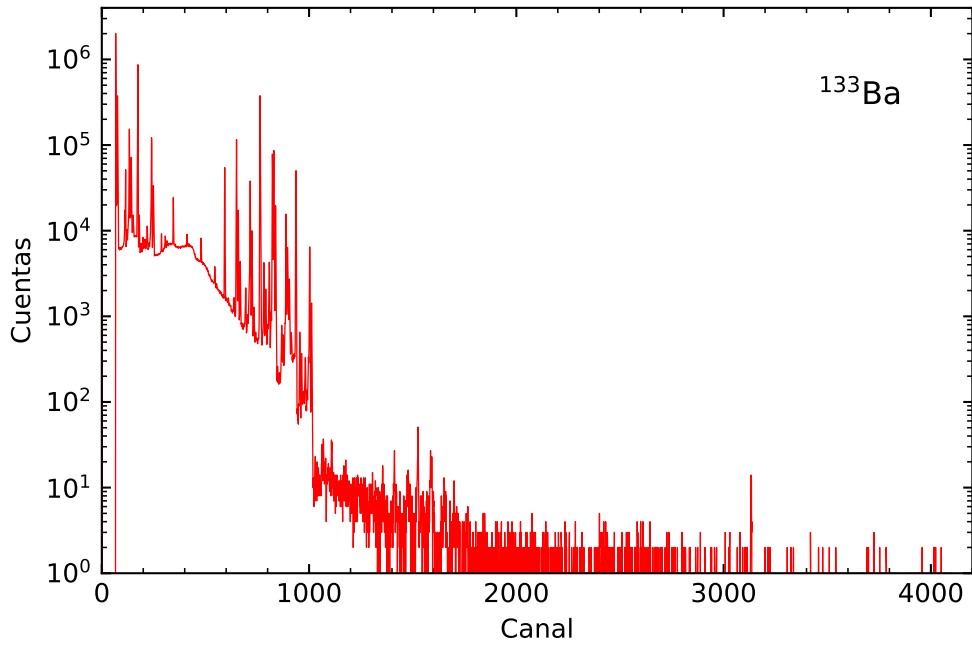


Figura 48: Espectro del ^{133}Ba .

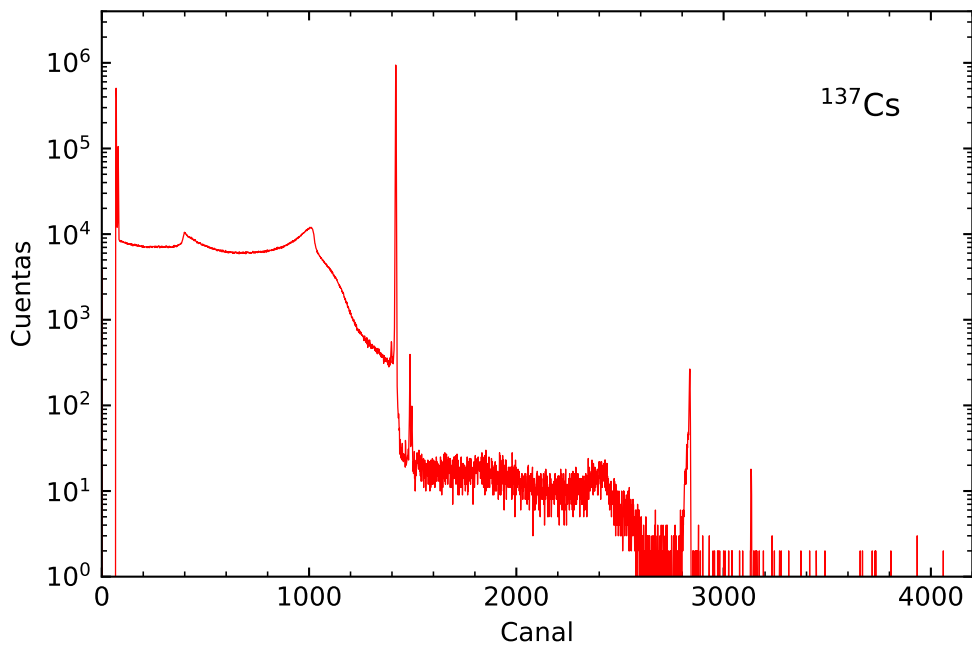


Figura 49: Espectro del ^{137}Cs .

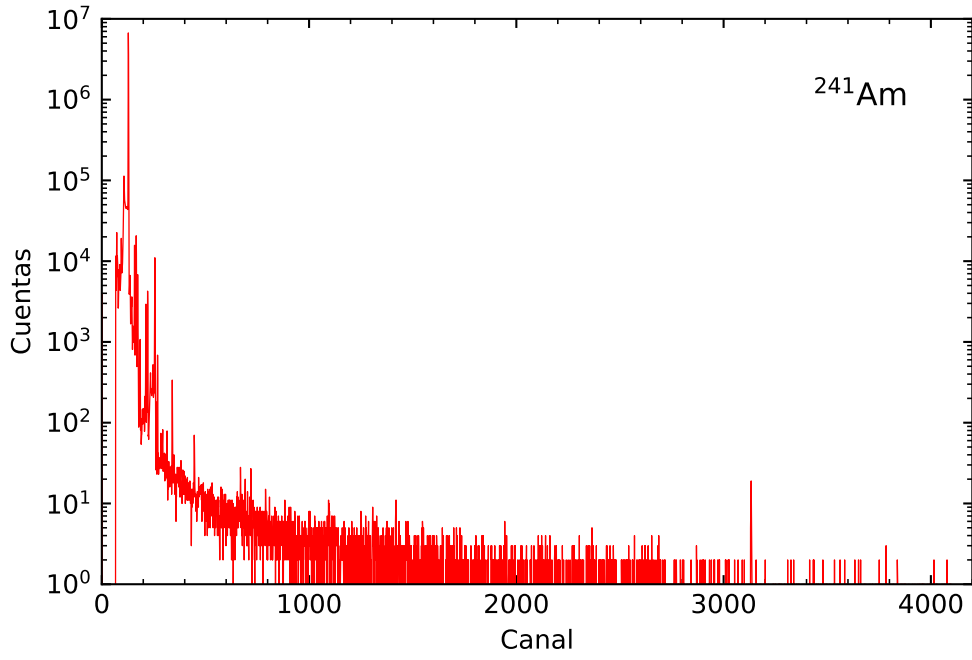


Figura 50: Espectro del ^{241}Am .

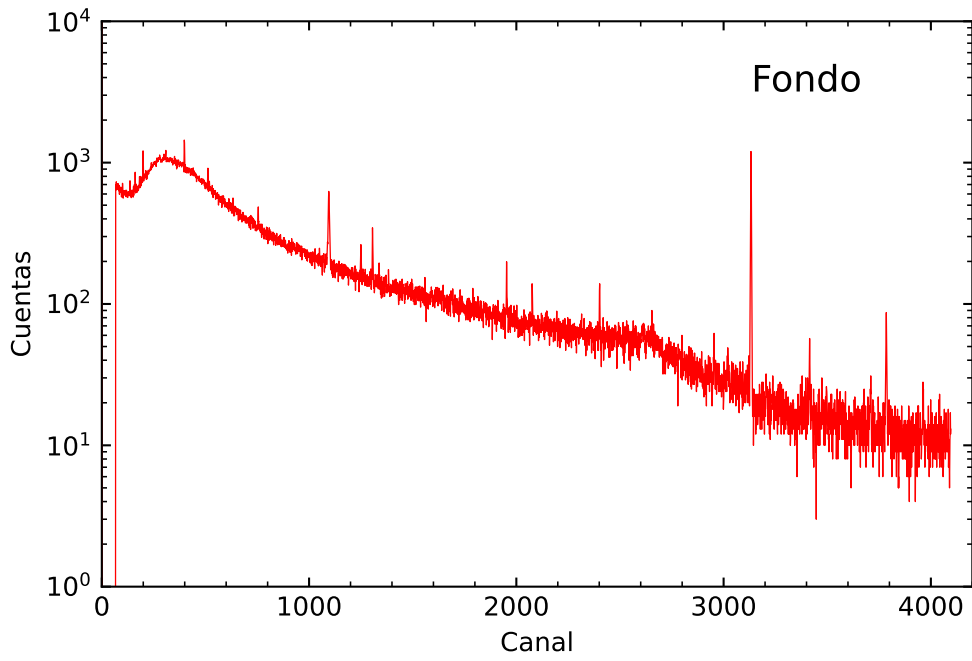


Figura 51: Espectro del fondo.

Apéndice C

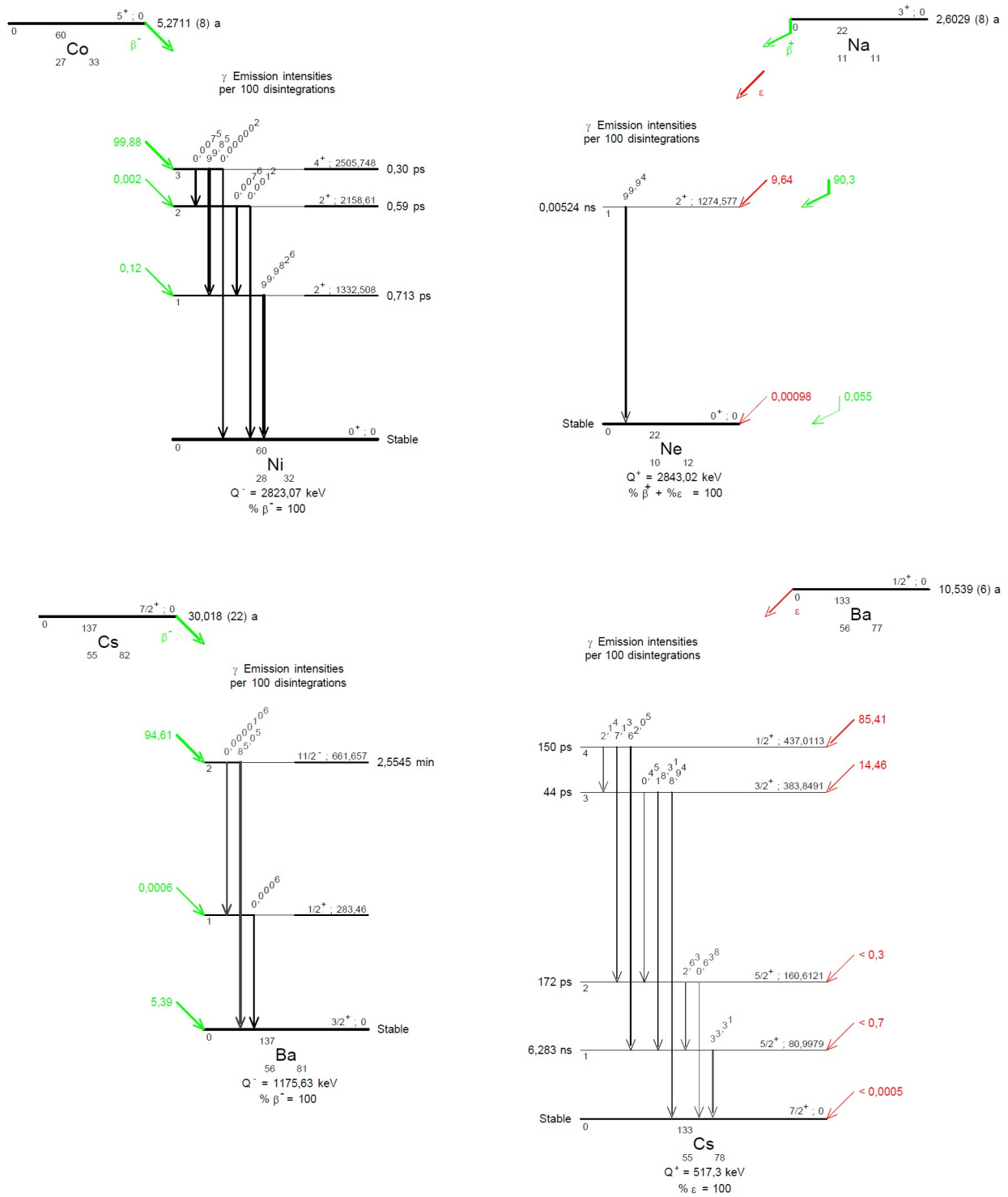


Figura 52: Esquema de decaimiento del ^{60}Co , ^{22}Na , ^{137}Cs y ^{133}Ba , tomados de [19].

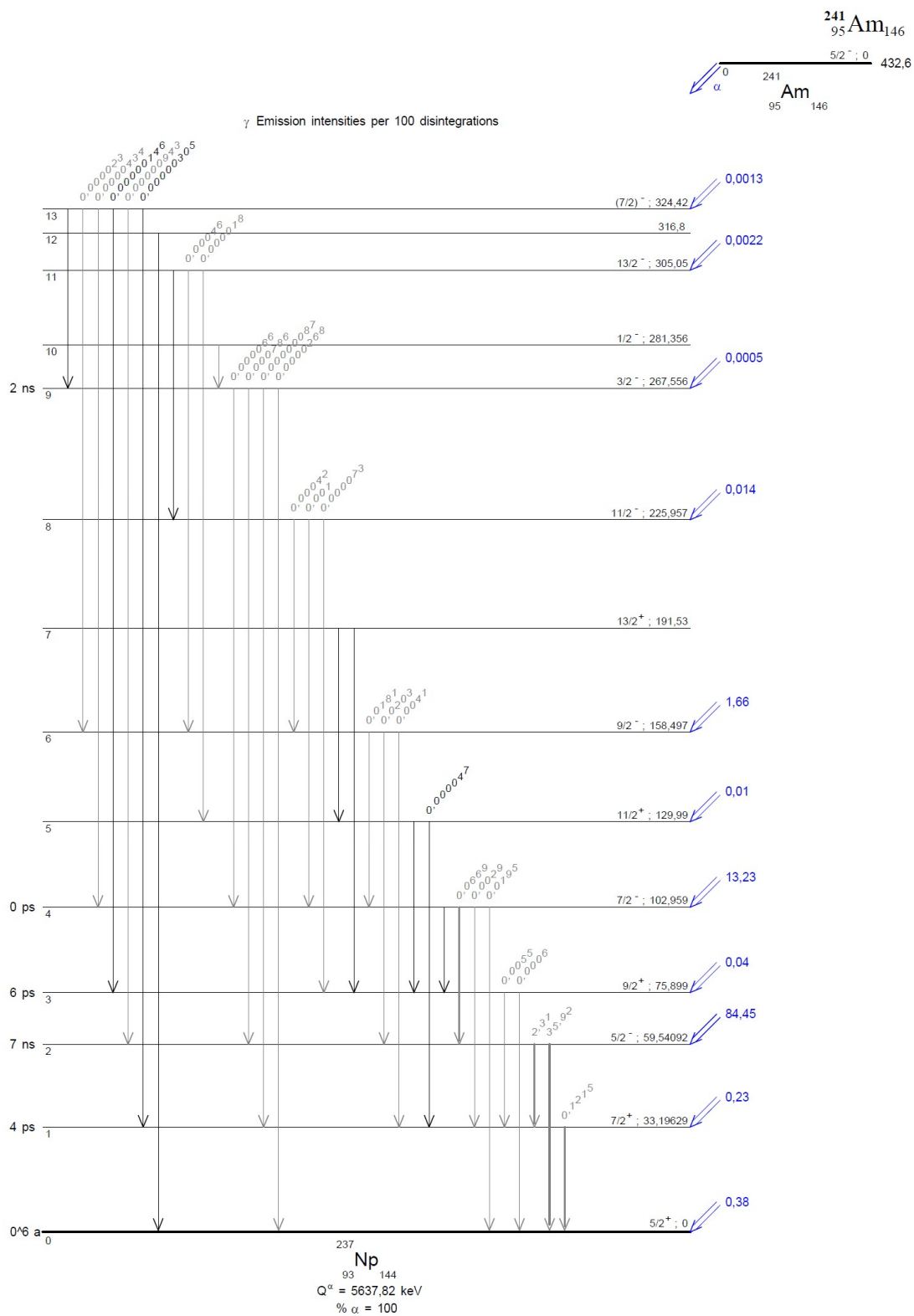


Figura 53: Esquema de decaimiento del ^{241}Am , tomado de [19]. Se muestran únicamente los niveles de la zona de interés.

Bibliografía

- [1] J.M. Fernández-Varea, Interacción de las radiaciones ionizantes con la materia. (2018).
- [2] G.R. Gilmore, Practical Gamma-Ray Spectroscopy, 2nda. ed. capítulo 2 (John Wiley & sons, 2008).
- [3] N. Tsoufanidis, Measurement and Detection of Radiation, 4rta. ed. capítulos 7, 9, 11 y 12. (Taylor & Francis Group, 2015).
- [4] S.F. Barros, N.L. Maidana, J.M. Fernández-Varea, V.R. Vanin, Full-energy peak efficiency of Si drift and Si(Li) detectors for photons with energies above the Si K binding energy. X-Ray Spectrometry 46, 34–43 (2017)
- [5] Germanium Detectors (Canberra Industries, 2003).
- [6] Broad energy germanium detectors (Mirion Technologies, 2020).
- [7] R. Luís, J. Bento, G. Carvalhal, P. Nogueira, L. Silva, P. Teles, P. Vaz, Parameter optimization of a planar BEGe detector using Monte Carlo simulations. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A623 1014–1019 (2010).
- [8] K. Debertin, U.Schötzig, Coincidence summing corrections in Ge(Li)-spectrometry at low source-to-detector distances. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research 158 471-477 (1979).
- [9] E. Tomarchio, S. Rizzo, Coincidence-summing correction equations in gamma-ray spectrometry with p-type HPGe detectors. Radiation Physics and Chemistry 80, 318–323 (2011).
- [10] M.C. Lépy, T. Altitzogloub, *et al*, Intercomparison of efficiency transfer software for gamma-ray spectrometry. Applied Radiation and Isotopes 55 493–503 (2001).
- [11] F. Salvat, PENELOPE, a code system for Monte Carlo simulation of electron and photon transport. (OECD, 2019).
- [12] J. Sempau, A. Badal, L. Brualla, A PENELOPE-based system for the automated Monte Carlo simulation of clinacs and voxelized geometries—application to far-from-axis fields. Medical Physics 38 5887-5895 (2011).
- [13] J.M. Fernández-Varea, Monte Carlo simulation of radiation transport. Introduction to the PENELOPE/penEasy system. (2022).
- [14] N. Cornejo, M. Jurado, DETEFF: An improved Monte Carlo computer program for evaluating the efficiency in coaxial gamma-ray detectors. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A 586 204–210 (2008).
- [15] N. Cornejo, M. Jurado, Improving the trade-off between simulation time and accuracy in efficiency calibrations with the code DETEFF. Applied Radiation and Isotopes 68 1413–1417 (2010).

- [16] A.M. El-Khatib, A. Salem, M.S. Badawi *et al*, Full-Energy peak efficiency of an NaI(Tl) detector with coincidence summing correction showing the effect of the source-to-detector distance. *Chinese Journal of Physics* 55 478–489 (2017).
- [17] M.I. Abbas, HPGe detector absolute full-energy peak efficiency calibration including coincidence correction for circular disc sources. *Journal of Phys. D: Applied Physics*. 39 3952 (2006).
- [18] E. García-Toraño, V. Peyres, M.-M. Bé, C. Dulieu, M.C. Lépy, F. Salvat, Simulation of decay processes and radiation transport times in radioactivity measurements. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B* 396 43–49 (2017).
- [19] Datos atómicos y nucleares del LNHB; <http://www.lnhb.fr/donnees-nucleaires/donnees-nucleaires-tableau>.
- [20] T. Vidmar, M. Korun, A. Likar, Close-geometry efficiency calibration in gamma-ray spectrometry using radio-nuclides with a two-step cascade decay. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A* 508 404–413 (2003).
- [21] J. Guembou, M. Ndontchueng, E.J. Nguemlem Mekongtso, O. Motapon, D. David, Monte Carlo method for gamma spectrometry based on GEANT4 toolkit: Efficiency calibration of BE6530 detector. *Journal of Environmental Radioactivity* 189 109–119 (2018).
- [22] R. Casanovas, J.J. Morant, M. Salvadó, Energy and resolution calibration of NaI(Tl) and LaBr₃(Ce) scintillators and validation of an EGS5 Monte Carlo user code for efficiency calculations. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A* 675 78–83 (2012).
- [23] K. Vetter, *Recent Developments in the Fabrication and Operation of Germanium Detectors*, 3era. ed. (Livermore National Laboratory, California, 2007).
- [24] F. Gao, L.W. Campbell, R. Devanathan *et al*, Gamma-ray interaction in Ge: A Monte Carlo simulation. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B* 255 286–290 (2007).
- [25] T.F. Woodroof, A.J. Boston, D.S. Judson, Monte Carlo simulation of a BEGe 6530 detector in GAMOS. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A* 1034 166726 (2022).
- [26] V. Peyrés, E. García-Toraño, Efficiency calibration of an extended-range Ge detector by a detailed Monte Carlo simulation. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A* 580 296–298 (2007).
- [27] E. García-Toraño, M. Pozuelo, F. Salvat, Monte Carlo calculations of coincidence-summing corrections for volume sources in gamma-ray spectrometry with Ge detectors. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A* 544 577–583 (2005).
- [28] N.L. Maidana, V.R. Vanin, J.A. García-Alvarez, M. Hermida-López, L. Brualla, Experimental HPGe coaxial detector response and efficiency compared to Monte Carlo simulations. *Applied Radiation and Isotopes* 108 64–74 (2016).

- [29] V. Peyrés, Caracterización de detectores de fotones mediante el método de Montecarlo y aplicación a la medida de emisores de positrones de interés en medicina nuclear. (Universidad Complutense de Madrid, Madrid, 2010).
- [30] S. Dziri, A. Nourreddine, A. Sellam, A. Pape, E. Baussan, Simulation approach to coincidence summing in γ -ray spectrometry. *Applied Radiation and Isotopes* 70 1141–1144 (2012).