

Caracterización de Detectores de Germanio Mediante Códigos Monte Carlo

**CARRERA: ESPECIALIZACIÓN EN
RADIOQUIMICA Y APLICACIONES NUCLEARES**

**Alumno: Mario Rossi
Directora: Gabriela Cerutti
Co-Director: Pablo Arenillas
Fecha:**



UNSAM
UNIVERSIDAD
NACIONAL DE
SAN MARTÍN

Dedicada a mi familia y en especial Karina, Gaby, Lidia y Mario

Índice

Resumen	4
----------------	----------

Capítulo 1	5
-------------------	----------

Método Monte Carlo

1.1 Introducción

1.2 Características del método Monte Carlo

1.3 Necesidad de la Simulación Monte Carlo en el laboratorio

1.4 Estrategias de muestreo

1.4.1 Método de la transformación inversa

1.4.1.a Distribución uniforme

1.4.1.b Distribución exponencial

1.4.2 Método de aceptación rechazo

1.5 Generación de números aleatorios

1.6 Códigos Monte Carlo aplicados a física de las Radiaciones

Capítulo 2

15

Metrología de las Radiaciones

2.1 Interacción de la radiación Gamma con la materia

2.2 Eficiencia de detección

Capítulo 3

18

Desarrollo - mediciones

3.1 Conocimientos previos

3.2 Materiales y equipos utilizados

3.3 Mediciones

Capítulo 4

26

Simulación Monte Carlo

4.1 Testeo del uso del código

4.2 Simulación del Detector

4.2.1 Fuentes Puntuales

4.2.2 Diferencias geométricas entre detector y la simulación

4.2.3 Pruebas con Fuentes extensas

Conclusiones	37
Apéndice A	38
Generadores Congruenciales	
Apéndice B	41
Método Box-Muller	
Apéndice C	44
Semiconductores	
Bibliografía	47
Agradecimientos	50

Resumen

En este trabajo se caracterizó un detector de Germanio coaxial que posee el Laboratorio de Metrología de Radioisotopos (LMR), mediante la utilización de Código Monte Carlo. Se trata de paquetes de software especialmente diseñados para trabajar en el área de la física de las radiaciones. La caracterización se realizó con fuentes puntuales según los procedimientos indicados en las publicaciones del tema. Finalizada esta etapa se pasó a simular una fuente extensa multi-gamma de un volumen de 500cm^3 , obteniéndose diferencias menores al 8% respecto de resultados experimentales.

Paralelamente a la caracterización del detector, se realizó un testeo del uso de los códigos MCNP y PENELOPE logrando reproducir los resultados de un trabajo de intercomparación internacional entre laboratorios.

Capítulo 1

Método Monte Carlo

1.1 Introducción

En gran parte de la literatura especializada en el tema, se puede encontrar como introducción al método Monte Carlo la mención al *problema de Buffón*. George Louis Leclerc, conocido como el Conde de Buffón, fue un hábil matemático y naturalista francés nacido en 1707, quien planteó y resolvió estadísticamente el cálculo de la probabilidad de que una aguja lanzada sobre una superficie conteniendo líneas equidistantes corte alguna de ellas. Posteriormente, P. S. Laplace observó que esta respuesta podría utilizarse para estimar el valor del número π . Ref. [1]. [2].

Sin embargo, el nacimiento de Monte Carlo como herramienta de cálculo, se sitúa en la década del '40, como parte del desarrollo de la primera computadora electrónica ENIAC, según redacta Nicholas Metropolis en su escrito "The beginning of the Monte Carlo Method" [3]. Allí se relata brevemente la urgencia que existía en época de guerra por resolver rápidamente problemas de balística y paralelamente, el interés de realizar una simulación numérica de una reacción termo nuclear, lo que requeriría resolver el transporte de neutrones en la materia, esto era equivalente a resolver la ecuación de transporte de Boltzman [4].

En ese marco, se destaca la participación del matemático Stanislaw Ulam, a quien se le atribuye la creación del método. El nombre del método (Monte Carlo), según comenta Metropolis, fue sugerido debido a que Ulam, testeaba sus algoritmos con mazo de naipes, aunque no es la única versión comentada.

1.2 Características del método Monte Carlo

Monte Carlo es un método pseudo-aleatorio que permite resolver problemas determinísticos y no determinísticos. Básicamente dos tipos de problemas:

En primer lugar, permite extraer un conjunto de valores X^i los cuales provienen de una dada **función de distribución de probabilidad (fdp)**. En segundo lugar, permite el cálculo de esperanzas de funciones, asociadas a una dada función de distribución de probabilidad.

El primer problema, que parece más simple de resolver, no es sencillo aunque se cuente con la **fdp**. Imaginemos que el conjunto de estudio cuenta con una enorme cantidad de elementos, y por tal motivo resulta impráctico (o computacionalmente imposible) la extracción del total de los elementos mediante la **fdp**. Entonces solo podríamos extraer un subconjunto de valores X^i del conjunto total, el problema aparece en la elección de estos elementos, ya que deben ser extraídos de la **fdp** de forma que resulten representativos del conjunto total.

En el segundo problema, resulta más intuitiva su complejidad, ya que en este caso se podría requerir calcular una integral. Entonces podríamos encontrarnos con la situación en la cual nuestra función no es integrable. Sumemos a esto que nuestro cálculo involucra resolver la integral en un espacio multidimensional.

Monte Carlo resuelve estas cuestiones mediante la generación de números aleatorios o dicho con rigurosidad pseudo-aleatorios, como se verá más adelante, mas la aplicación de estrategias matemáticas que incluyen, transformación del espacio de coordenadas, calculo de funciones inversas, entre otras técnicas.

El método Monte Carlo, toma ventaja sobre los métodos determinísticos a medida que aumenta el número de dimensiones del problema.

Un ejemplo de aplicación puede verse en [2]. Allí se aborda el problema de modelar una red periódica multidimensional de forma determinística y de forma no determinística, arribándose a que la convergencia del modelo, se asocia al aumento de las dimensiones del problema, para el caso determinístico. Mientras que con Monte Carlo, la convergencia se independiza de las dimensiones del problema, y la exactitud del método, solo depende de la varianza. Siendo esto un resultado general.

1.3 Necesidad de la Simulación Monte Carlo en el laboratorio

La necesidad de caracterizar un detector por medio de la generación de un input de simulación Monte Carlo, surge de las ventajas que presenta contar con dicha herramienta a saber:

- a) Posibilidad de tener curvas de eficiencias a diferentes distancias entre fuente y detector, sin necesidad de realizar la experiencia real.
- b) Simular fuentes patrones, las cuales son costosas o complicadas de fabricar.
- c) Diseño de contenedores, que por sus características geométricas, permitan la mejora de la eficiencia del sistema fuente - detector.
- d) Obtención de resultados sin irradiación del personal.
- e) Promover el intercambio de conocimientos entre laboratorios pares.
- f) Reducción de costos en la compra del detector al no contratar el servicio de caracterización del mismo.

1.4 Estrategias de muestreo

Para resolver problemas como los comentados anteriormente, a través del tiempo se fueron desarrollando diferentes estrategias matemáticas para obtener el muestreo buscado. Aquí haremos un repaso breve de las estrategias utilizadas en simulación de la física de las radiaciones.

1.4.1 Método de la transformación inversa:

Supongamos una **fdp** $p(x)$ con su respectiva **función de distribución acumulada (fda)** $P(x)$, definida como:

$$p(x) \geq 0 \quad \text{Con:} \quad \int_{x_{\min}}^{x_{\max}} p(x) dx = 1. \quad (1)$$

Donde la **fda** es:

$$\mathcal{P}(x) \equiv \int_{x_{\min}}^x p(x') dx'. \quad (2)$$

La cual indica la probabilidad que la variable x' sea menor o igual a un dado valor x .

Observar que:

$$p(x) = d\mathcal{P}(x)/dx. \quad (3)$$

Además, la probabilidad de tener X en el intervalo (a, b) es:

$$P\{x | a < x < b\} = \int_a^b p(x) dx = \mathcal{P}(b) - \mathcal{P}(a), \quad (4)$$

Supongamos ahora que la **fda** admite inversa. Entonces digamos que si; $\xi = P(x)$, define una nueva variable en $(0,1)$. Entonces, como la **fda** admite inversa podemos hacer: $P^{-1}(\xi) = x$; que es lo que estamos buscando.

Entonces, el procedimiento consiste en definir una variable aleatoria $\xi \in (0,1)$ de alguna forma, para luego obtener la variable x haciendo la inversa de la **fda**. La variable ξ , se obtendrá mediante los generadores de números pseudo-aleatorios, como veremos más adelante.

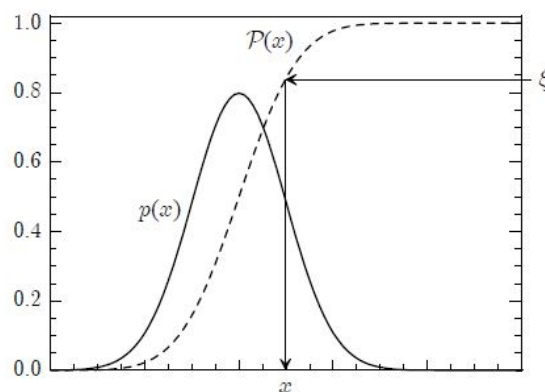


Figura 1. Relación entre la variable X la variable generada ξ ,

Algunos ejemplos:

1.4.1. a Distribución uniforme

$$U_{x_{\min}, x_{\max}}(x) \equiv \begin{cases} 1/(x_{\max} - x_{\min}) & x_{\min} \leq x \leq x_{\max}, \\ 0 & \text{otra cosa} \end{cases} \quad (5)$$

Podríamos tener la necesidad de definir una fuente rectangular distribuida uniformemente, en un dado intervalo $x \in (a, b)$; $y \in (c, d)$

$$p(x) = U_{a,b}(x) = \frac{1}{b-a}. \quad (6)$$

$$x = a + \xi(b-a). \quad (7)$$

De igual forma, podría hacerse lo mismo con (y) en el intervalo (c, d) .

1.4.1.b Distribución exponencial

$$p(s) = \frac{1}{\lambda} \exp(-s/\lambda), \quad s \geq 0, \quad (8)$$

Donde hacemos:

$$s = -\lambda \ln(1 - \xi) \stackrel{\vee}{=} -\lambda \ln \xi. \quad (9)$$

Esta distribución es utilizada para la obtención de camino recorrido (s), por ejemplo, por partículas en algún dado material. Donde λ representa el camino libre medio característico de las partículas en el material, asociado a secciones eficaces de interacción.

Por supuesto, no siempre es posible calcular simplemente una función inversa, incluso puede ocurrir que nuestra **fdp** no sea integrable. Por tal motivo, existen muchas otras estrategias para realizar el muestreo. Un método muy usado es el llamado **aceptación rechazo**.

1.4.2 Método de aceptación rechazo

Supongamos una **fdp** $p(x)$ la cual se quiere muestrear pero no podemos hacerlo con el procedimiento anteriormente comentado. Supongamos una función $f(x)$ la cual es similar a $p(x)$.

Si la $f(x)$ cumple las siguientes condiciones:

$$1) f(x) \geq p(x) \quad \forall x \in (-\infty, \infty) \quad (10)$$

2) La integral existe y es conocida

$$F(x) \equiv \int_{-\infty}^x dy f(y) \text{ es conocida} \quad (11)$$

3) La integral impropia tiene límite

$$F(\infty) = \int_{-\infty}^{\infty} dy f(y) = A (> 1) \quad (12)$$

Entonces podemos generar números aleatorios U tal que $U \in (0,A)$ a partir de aquí definimos

$$X=F^{-1}(U); \quad (13)$$

Ahora se genera un segundo número aleatorio $V \in (0,f(x))$ y se aplica el criterio:

$$\begin{aligned} V < p(X) &\text{ entonces } x \text{ es aceptado} \\ V \geq p(X) &\text{ entonces } x \text{ es rechazado} \end{aligned} \quad (14)$$

Otra estrategia interesante es la realizada por BOX y Muller (Ref. [1].[2]) la cual obtiene un conjunto de valores de una **fdp** gaussiana, cuando es sabido que la función gaussiana no tiene primitiva elemental. Puede verse un ejemplo en el Apéndice C.

1.5 Generación de números aleatorios

Monte Carlo es un método pseudo-aleatorio, debido a que la generación de los números se produce mediante un algoritmo determinístico, esto trae como consecuencia la generación de un conjunto de números que mantendrán un comportamiento periódico. Los más conocidos son los generadores congruenciales lineales, ver Apéndice C.

Estos algoritmos de recurrencia, comienzan con una o mas semillas o valores iniciales y así generan una tira de números, que para el uso en Monte Carlo, estos deben pertenecer al intervalo $(0,1)$.

En general tienen la forma:

$$S_{i+1} = (aS_i) \text{MOD } m. \quad (15)$$

Con período del orden de $T \sim 2 \times 10^9$.

Con la evolución de la simulación, fue surgiendo la necesidad de aumentar el periodo de estos números pseudo-aleatorios.

Trabajando con dos generadores simultáneamente se logra aumentar el periodo $T \sim 2 \times 10^{18}$, (L. Ecuyer 1988, Ref. [5]).

$$S_i = (S_i^{(1)} - S_i^{(2)}) \text{ MOD } (m^{(1)} - 1). \quad (16)$$

En 1994 Luscher [6] y F. James [7], generan el RANLUX, Se trata de dos publicaciones donde se produce un generador de números aleatorios y la prueba de este generador mediante FORTRAN. Se logra un periodo muy alto.

$$S_i = (S_{i-10} - S_{i-24} - c_{i-1}) \text{ MOD } 2^{24}, \quad i > 23 \quad (17)$$

Con periodo de $T \sim 10^{171}$.

En el año 1998 Makoto Matsumoto y Takuji Nishimura [8] presentan un trabajo sobre un generador multidimensional logrando una periodicidad del orden de 10^{6000} .

Para hacer una simple comparación, las simulaciones en este trabajo de tesis se realizan con un orden de 10^6 historias.

El generador implementado por el Fortran 77 se muestra a continuación en la figura 2, es del tipo indicado en la formula (16).

```

C *****
C               FUNCTION RAND
C *****
C               FUNCTION RAND(DUMMY)
C
C This is an adapted version of subroutine RANECU written by F. James
C (Comput. Phys. Commun. 60 (1990) 329-344), which has been modified to
C give a single random number at each call.
C
C The 'seeds' ISEED1 and ISEED2 must be initialised in the main program
C and transferred through the named common block /RSEED/.
C
C      IMPLICIT DOUBLE PRECISION (A-H,O-Z), INTEGER*4 (I-N)
C      PARAMETER (USCALE=1.0D0/2.147483563D9)
C      COMMON/RSEED/ISEED1,ISEED2
C
C      I1=ISEED1/53668
C      ISEED1=40014*(ISEED1-I1*53668)-I1*12211
C      IF(ISEED1.LT.0) ISEED1=ISEED1+2147483563
C
C      I2=ISEED2/52774
C      ISEED2=40692*(ISEED2-I2*52774)-I2*3791
C      IF(ISEED2.LT.0) ISEED2=ISEED2+2147483399
C
C      IZ=ISEED1-ISEED2
C      IF (IZ.LT.1) IZ=IZ+2147483562
C      RAND=IZ*USCALE
C
C      RETURN

```

Figura 2. Generador del FORTRAN 77: Ref. [5].

1.6 Códigos Monte Carlo

Existen diferentes softwares de simulación (Códigos) que se emplean para representar el transporte de la radiación en un determinado material. Estos programas tienen en cuenta aspectos físicos como el tipo de radiación emitida y su interacción con la materia, aspectos geométricos como la forma de la fuente y el material, entre otros más.

Se han utilizado para este trabajo, dos códigos de simulación, de los más conocidos; MCNP [4] (Monte Carlo N- Partículas) que tuvo sus inicios en Los Alamos National Laboratory, USA, en periodo de la segunda guerra mundial y PENELOPE [5],[9],[10] (Penetration and ENERgy LOss of Positrons and Electrons) desarrollado en la década del '90 en la Universidad del Barcelona. Ambos códigos utilizan la herramienta Monte Carlo en su código fuente para describir la física del problema.

Entre los posibles objetivos y/o ventajas de realizar una simulación se puede mencionar la posibilidad de anticiparse a un resultado sin la necesidad de realizar la experiencia, pudiendo sacar conclusiones rápidamente para luego aplicarlas en el desarrollo de la experiencia real, reduciendo el tiempo de exposición a la radiación del personal.

Algunas aplicaciones de programas de simulación están relacionadas con la medicina nuclear, caracterización de radiación ambiental en reactores nucleares, cálculos de eficiencia de detectores de radiación, etc.

Para simular los procesos de interacción de la radiación con la materia (Compton, Fotoeléctrico, Creación de pares), la mayoría de los programas de simulación utilizan métodos no deterministas. El método comúnmente usado es Monte Carlo. Se generan pseudo-aleatoriamente historias de partículas individuales. Luego, almacenando y procesando la información de estas historias individuales, se puede inferir el comportamiento promedio del conjunto total, formado por todas las partículas en cuestión.

Los programas de simulación cuentan con un código propio de programación. Para su aprendizaje se utiliza manuales de estudio siendo además indispensable contar con el aporte de un usuario experimentado, el cual con sus conocimientos prácticos aporta conceptos fundamentales para la implementación de dichos programas. Obviamente es imprescindible la lectura de publicaciones de trabajos relacionados con el tema para consolidar conocimientos.

Para simular un experimento con dichos programas, por ejemplo, una fuente radiactiva que emite radiación y parte de esta es captada por un detector ubicado a una cierta distancia, en el programa de simulación se indican (en su

particular código de programación) sus características geométricas. Entre ellas, dimensiones de la fuente, dimensiones del detector, distancia entre ellos. También se consideran aspectos relacionados a la física del problema tales como tipo de radiación emitida, composición química del detector, es decir, composición de todos los elementos que conforman al detector, etc.

Una vez definidos los aspectos mencionados, se ejecuta el programa, el cual da una salida (resultados) en forma de tablas de valores las cuales deben ser interpretadas. Esta tarea no es trivial ya que requiere de buen conocimiento y comprensión del manual de usuario (tarea no sencilla). Un mejor manejo del manual de usuario permitirá extraer la totalidad de la información que se presenta en dichas tablas.

Para el caso en el cual los resultados de la corrida pudiesen ser comparados con datos experimentales, se puede realizar correcciones al modelo teórico (al programa de entrada). Las mejoras estarán asociadas principalmente a aspectos geométricos y a la introducción y/o modificación de lo que se denominan “tarjetas de física”. Cuando mencionamos “tarjetas” nos referimos a librerías especiales que poseen los programas de simulación, las cuales aportan información sobre la física del transporte de radiación (ejemplo; modelos de cálculo de secciones eficaces). Para la adecuada utilización de estas tarjetas, se debe conocer la característica de la radiación involucrada, su interacción con la materia y la forma en que el programa representa estas interacciones a través de su código de programación, etc.

Es importante comentar que MCNP requiere un trámite de registro para obtener la licencia de usuario ante la Radiation Safety Information Computational Center (RSICC), organismo representante del gobierno de EEUU. Luego de la aprobación, el envío del software tiene un costo asociado a tasas de impuestos. En el caso del código PENELOPE, se puede obtener de Internet y es de libre distribución hasta el momento.

Capítulo 2

Medición de las Radiaciones

2.1 Interacción de la radiación Gamma con la materia

El sistema de medición es el comúnmente utilizado en espectrometría gamma de alta resolución. Consta de un detector de Germanio (HPGe), y la electrónica y software asociados. La radiación incidente actúa con el detector de la misma forma que interactúa con la materia en general a saber:

Efecto Fotoeléctrico: El fotón gamma interactúa con un electrón del material y le transfiere su energía, como resultado de la interacción el fotón desaparece y el electrón es expulsado del átomo. La energía cinética del fotoelectrón resultante es igual a la energía del fotón gamma incidente menos la energía de enlace del electrón. El efecto fotoeléctrico es el mecanismo de transferencia de energía para rayos x y fotones gamma en energías superiores al keV.

Efecto Compton: Un fotón gamma incidente transfiere parte de su energía a un electrón atómico, suficiente como para provocar su expulsión. En este proceso, se produce un nuevo fotón de menor energía, con un ángulo de dispersión respecto del fotón incidente. Debido a que todos los ángulos de dispersión están permitidos, la energía del electrón expulsado, puede variar desde cero hasta una fracción de la energía del fotón incidente.

Creación de pares: Cuando la energía del fotón incidente supera los 1.022keV, se hace posible el efecto de creación de pares. Aquí la interacción se produce en el campo eléctrico del núcleo del material absorbente. El fotón gamma desaparece y es reemplazado por un par electrón-positrón (la carga no puede variar en la interacción). Luego la energía de 1.022KeV disponible, se distribuye entre el electrón y el positrón. Finalmente en su recorrido, el positrón se aniquila con un electrón del medio emitiéndose en la interacción dos fotones de aniquilación. [11] a [15].

2.2 Eficiencia de detección

Dado que vamos a trabajar en términos de *eficiencia* de medición, es necesario conocer los diferentes tipos de eficiencias con los que se trabaja en general.

Eficiencia absoluta en el pico de absorción total (ϵ): viene dada por el cociente entre el número de fotones que depositan toda su energía en el volumen activo del detector, y el número de fotones generados por la fuente en todo el ángulo sólido. Este es el valor de eficiencia utilizado en las estimaciones de actividad.

Eficiencia absoluta total (ϵ_T): viene dada por el cociente entre el número de fotones que interactúan con el volumen activo del detector y el número de fotones emitidos por la fuente en todo el ángulo sólido.

Eficiencia intrínseca en el pico de absorción total (ϵ_i): cociente entre el número de fotones que dejan toda su energía en el volumen activo del detector y el número de fotones incidentes en el detector.

Eficiencia intrínseca total (ϵ_{iT}): cociente entre el número de fotones que interactúan con el volumen activo del detector y el número de fotones que inciden en el detector.

Eficiencia relativa al NaI: Especialmente útil para detectores de tipo semiconductor. Se define como el cociente de las eficiencias absolutas en el pico de absorción total, correspondientes al detector dado y a un detector de NaI(Tl) de 7.62 cm x 7.62 cm. Ambas eficiencias se determinan con una fuente puntual ^{60}Co (1332 keV) a una distancia de 25 cm del detector.

En el caso que se necesitare calcular la actividad (A) de una fuente radiactiva se puede determinar mediante:

$$A = \frac{N}{\gamma \cdot t \cdot \epsilon} \cdot \prod_{i=1}^n C_i$$

(18)

Donde:

N: es el número de cuentas netas en el pico de absorción total.

Y: probabilidad de emisión de un fotón con la energía de interés por cada desintegración radiactiva de la fuente.

t: el tiempo de medición.

ε: la eficiencia absoluta en el pico de absorción total para la energía dada.

C_i: representa los coeficientes de corrección debidos al decaimiento radiactivo antes y durante la medida, al efecto de suma por coincidencias, a las sumas aleatorias y a las pérdidas de cuentas por saturación.

El método más común para determinar la eficiencia es el experimental. Este requiere la medida de fuentes de calibración marcadas con radionucleídos que emitan rayos gamma de diferentes energías a lo largo del intervalo en el que se desea calibrar. Los resultados de las mediciones pueden interpretarse mediante el programa Gamma Visión, con esta herramienta se calculan las áreas de los picos de absorción total producidos por cada una de estas emisiones y luego pueden calcularse las eficiencias experimentales para cada energía gamma según la siguiente ecuación:

$$\epsilon = N / (A t \gamma) \quad (19)$$

N: corresponde al Área Neta obtenida a través del programa Gamma Vision.

A: es la actividad de la fuente correspondiente al momento de medición. [Becquerels o dps].

t: es el tiempo de medición. [Segundos].

Y: es la probabilidad de emisión de los rayos gamma que se están midiendo y se obtiene, a partir de la base de datos nucleares, por ejemplo, los contenidos en la Monografía V publicada por Bureau International des Poids et Mesures (BIMP) para la energía gamma en cuestión. [12] a [15].

Capítulo 3

Desarrollo - Mediciones

3.1 Conocimientos previos

Muchas publicaciones fueron generadas en las décadas del ´90 - ´00 y hasta la actualidad, las cuales fueron dejando a la comunidad científica información sobre los principales aspectos a considerar al momento de representar una experiencia mediante una simulación, en especial para este caso, simulación de un detector de HPGe.

Consideraciones a saber:

- 1) Se comienza la caracterización del detector con fuentes puntuales.
- 2) Se coloca a estas fuentes a una distancia de por lo menos 15cm respecto del detector, para reducir efectos sumas debido a esquema de niveles. Ref. [16].
- 3) Podría ocurrir que el detector estuviera inclinado, dentro del cilindro contenedor, pero se estudió este efecto en trabajos previos [17], arribándose a que el efecto sobre la eficiencia no es significativo.
- 4) Con el software de adquisición de datos se contabilizan cuentas registradas en el correspondiente pico de energía plena, porque es lo que se utiliza al momento de hacer calibraciones con los detectores de germanio. Los códigos de simulación están preparados para entregar esta eficiencia, por supuesto, entre otras variables que se pueden pedir.
- 5) Las mediciones con fuentes puntuales se realizan de forma que el tiempo muerto (fracción del tiempo real en que el sistema no es capaz de contar nuevos pulsos, ver Ref. [11]), no supere el 2%. Esto asegura que su influencia sobre el cálculo de la eficiencia sea despreciable.

3.2 - Materiales y equipos utilizados

Se utilizaron para el cálculo de la eficiencia fuentes patrones puntuales de ^{241}Am , ^{57}Co , ^{152}Eu , ^{137}Cs , ^{54}Mn , ^{60}Co , ^{137}Cs .

Además se utilizó una fuente extensa o volumétrica multi-gamma (identificada con el número 37-07). Se trata básicamente de una solución acuosa de un volumen aproximado de 500cm^3 , la cual contiene ^{241}Am , ^{152}Eu , ^{137}Cs , ^{133}Ba , ^{60}Co , ^{137}Cs .

Estas fuentes pertenecen al Laboratorio de Metrología de Radioisótopos (LMR), algunas de las cuales pueden verse en la figura 3.



Figura 3. Fuentes puntuales con las que cuenta el laboratorio.

El detector utilizado es un Germanio Hiperpuro (ORTEC modelo MEm 30185-5) de 30% de eficiencia relativa, identificado por el laboratorio como #2. El mismo posee plano de medidas características aportadas por el fabricante (ver figura 4 y tabla 1). Generalmente, el plano hay que pedirlo al momento de la compra del detector porque luego de ese periodo, se hace más difícil su obtención.

El software de adquisición utilizado es el Gamma Visión, de uso habitual en el laboratorio.

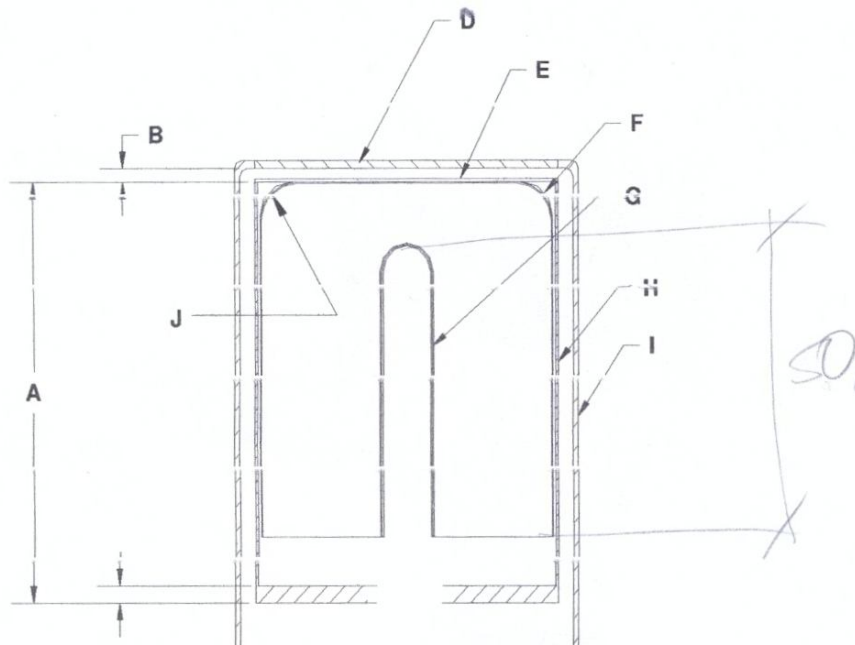


Figura 4. Plano del detector de Germanio.

BASIC DETECTOR DIMENSIONS	
DETECTOR DIAMETER	59 mm
DETECTOR LENGTH	64.1 mm
DETECTOR END RADIUS (J)	8 mm, NOMINAL
HOLE DIAMETER	8.5 mm
HOLE DEPTH	50.5 mm
HOLE BOTTOM RADIUS	HOLE DIAMETER / 2, NOMINAL

MISCELLANEOUS DETECTOR ASSEMBLY DIMENSIONS AND MATERIALS			
IDENTIFIER	DIMENSION	DESCRIPTION	MATERIAL(S)
A	94 mm	MOUNT CUP, LENGTH	ALUMINUM
B	3 mm	END CAP TO CRYSTAL GAP	N.A.
C	3.2 mm	MOUNT CUP BASE	ALUMINUM
D	1.3 mm	END CAP WINDOW	ALUMINUM
E	0.03/0.03 mm/mm	INSULATOR/SHEILD	MYLAR/ALUMINIZED MYLAR
F	700 microns	OUTSIDE CONTACT LAYER	LITHIUM
G	0.3 microns	HOLE CONTACT LAYER	BORON
H	0.76 mm	MOUNT CUP WALL	ALUMINUM
I	1.3 mm	END CAP WALL	ALUMINUM

Tabla 1. Plano del detector y tabla de medidas.

Se fabricó un soporte (figura 5) que permite tomar mediciones a diferentes alturas e incluso en forma excéntrica (el soporte utilizado solo permite medir a dos alturas).



La figura 5. Muestra el soporte de las fuentes puntuales.

3.3 Mediciones

Como se comentó anteriormente, se realizaron mediciones con fuentes puntuales, en dos alturas diferentes, a 17cm (posición 3) y 27cm (posición 5). Los resultados son tomados mediante el equipo de adquisición y procesados con el software Gamma Vision, para determinar el pico fotoeléctrico, luego el cálculo de eficiencia se realiza con otro software que dispone el laboratorio, especialmente diseñado para estos fines (WINGELI), arrojando un resultado numérico con incertidumbre menor al 1% habitualmente.

El montaje experimental se puede ver en la figura 6, donde se encuentra la fuente puntual dentro del blindaje contenedor.



Figura 6. Soporte dentro del contenedor del detector.

Debido a que trabajando con las fuentes puntuales, intentando reproducir la experiencia, en diferentes días de la semana, comparando los cálculos de eficiencia entre sí, pueden encontrarse diferencias superiores a la incertidumbre informada por el software. Por tal motivo se realizaron mediciones en diferentes días, se calcularon las eficiencias correspondientes, y se trabajó con el promedio de estas eficiencias y con una incertidumbre asociada a ese promedio.

La eficiencia calculada con los datos experimentales (posición 3) se puede ver en la tabla 2.

Radioisótopo	Energ. (keV)	Pos.3(1)	Pos. 3(2)	Eff. Prom	incertidumbre %
Am 241	5.954E+01	1.693E-03	1.6239E-03	1.6586E-03	2.092E+00
Co 57	1.221E+02	4.156E-03	4.260E-03	4.208E-03	1.236E+00
Co 57	1.365E+02	4.087E-03	4.106E-03	4.096E-03	2.355E+00
Eu 152	3.443E+02	2.472E-03	2.656E-03	2.564E-03	3.575E+00
Eu 152	4.440E+02	2.038E-03	2.184E-03	2.111E-03	3.458E+00
Cs 137	6.617E+02	1.575E-03	1.473E-03	1.524E-03	3.336E+00
Mn 54	8.348E+02	1.247E-03	1.222E-03	1.235E-03	1.011E+00
Co 60	1.173E+03	9.288E-04	9.513E-04	9.401E-04	1.197E+00
Co 60	1.332E+04	8.434E-04	8.617E-04	8.525E-04	1.078E+00

Tabla 2. Eficiencias experimentales. Posición 3.

Para aproximar la curva de eficiencia se utilizó la ecuación 20, mediante la implementación de cuadrados mínimos (**CM**), se utilizaron polinomios de grado 3 y 5, siendo el ultimo el más adecuado. Figuras 7 y 8.

$$\log(\epsilon) = a_0 + a_1 \log(E_\gamma)^1 + a_2 \log(E_\gamma)^2 + \dots \quad (20)$$

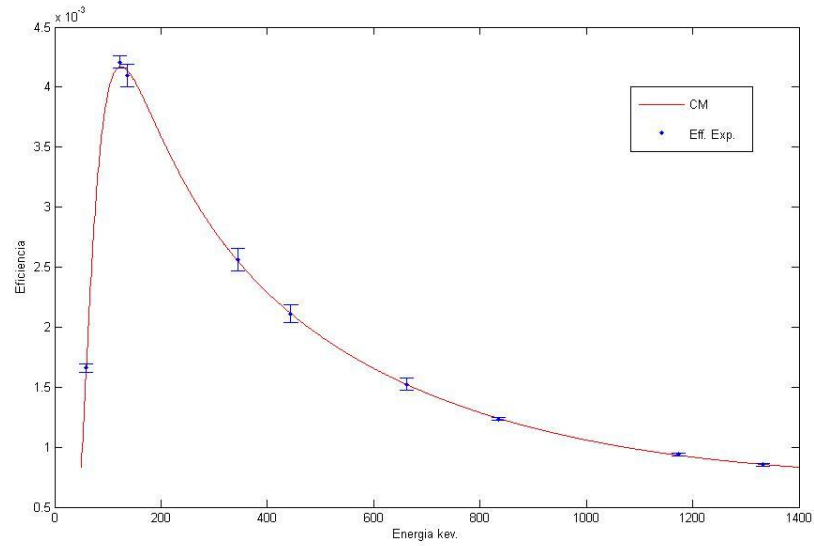


Figura 7. Eficiencia calculada con los datos experimentales (posición 3). Tabla 2.

Radioisótopo	Energ.(keV.)	Pos.5(1)	Pos. 5(2)	Eff.Prom	incertidumbre %
Am241	5.954E+01	7.011E-04	6.944E-04	6.978E-04	4.762E-01
Co 57	1.221E+02	1.800E-03	1.786E-03	1.793E-03	4.032E-01
Co 57	1.365E+02	1.790E-03	1.853E-03	1.822E-03	1.736E+00
Eu	3.443E+02	1.069E-03	1.066E-03	1.068E-03	1.161E-01
Eu	4.440E+02	8.748E-04	8.561E-04	8.654E-04	1.080E+00
Cs137	6.617E+02	6.389E-04	6.336E-04	6.362E-04	4.160E-01
Mn54	8.348E+02	5.472E-04	5.303E-04	5.388E-04	1.568E+00
Co60	1.173E+03	4.160E-04	4.159E-04	4.160E-04	1.635E-02
Co60	1.332E+04	3.768E-04	3.762E-04	3.765E-04	7.636E-02

Tabla 3. Eficiencias experimentales. Posición 5.

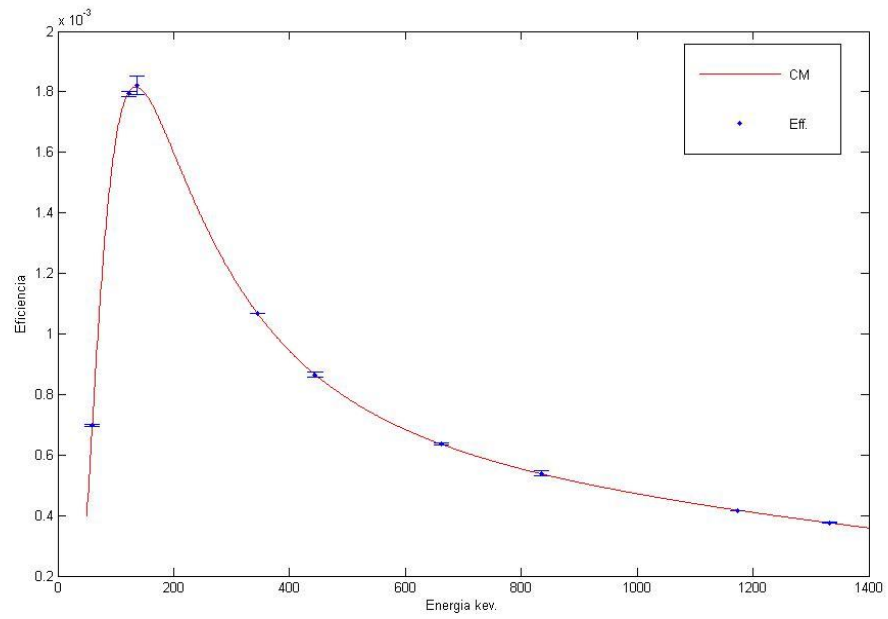


Figura 8. Eficiencia calculada con los datos experimentales (posición 5). Tabla 3.

Capítulo 4

4.1 Testeo del uso del código

Existe un trabajo (Ref. [18]) del año 2010 en el cual, varios laboratorios de referencia en el mundo, participaron realizando una intercomparación acerca del uso de los diferentes códigos Monte Carlo, que se utilizan actualmente. El objetivo consistía en simular detectores de germano tipo p y tipo n, junto con fuentes de diferentes formas y composición, y luego se calcularía una relación entre las eficiencias obtenidas de las diferentes geometrías. El resultado del trabajo arrojó que los resultados obtenidos con los diferentes códigos de simulación, no se apartan en más de un 2% (en general) respecto del valor medio calculado.

En esta tesis, se realizó la simulación de las diferentes configuraciones propuestas en la publicación de referencia para los códigos PENELOPE y MCNP y se comparó los resultados.

Los datos con los que se cuenta son los siguientes:

Tipo de Fuente	Referencia	Puntual	Filtro
Diámetro de la muestra (incluyendo el contenedor)	60	0.0	80
Altura de la muestra (incluyendo el contenedor)	20	0.0	3
Material de la muestra	Agua	-	Celulosa
Distancia entre contenedor y fuente	0.0	1.0	0.0
Espesor de las paredes del contenedor (Dimensiones en cm)	1	-	1

Datos de los materiales constituyentes:

Densidad del material (g/cm ³)	/	formula química	
Ge	5.323	/	Ge
Al	2.700	/	Al
Be	1.848	/	Be
Agua	1.000	/	H ₂ O
Celulosa	0.200	/	C ₆ H ₁₂ O ₆
Plástico (Polietileno)	1.050	/	C ₈ H ₉

La figura 8. Muestra el arreglo fuente detector propuesto en la publicación:

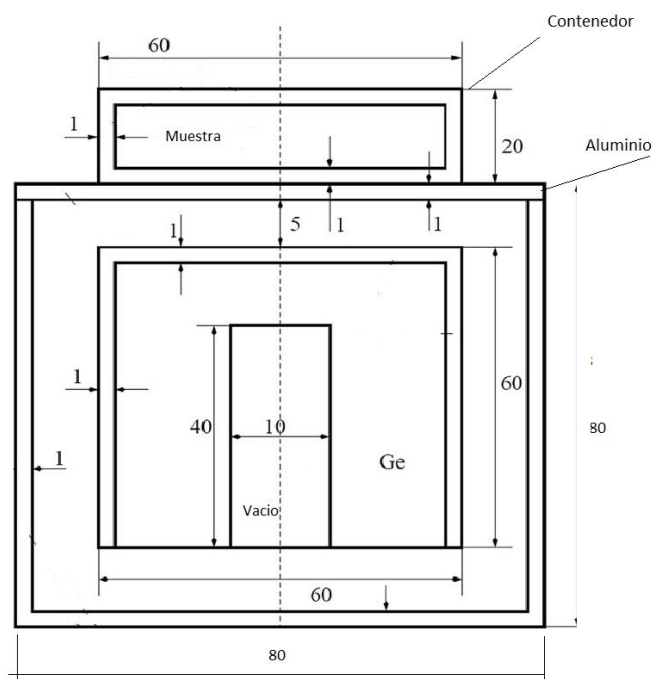


Figura 8. Detector de germanio con fuente en volumen

La configuración de la figura 8 representa un detector tipo p. Como nuestro laboratorio (LMR) cuenta con detectores de este tipo, resultó la configuración que más que nos interesaba representar.

A continuación, podemos observar las imágenes que reconstruyen los programas de simulación con los parámetros geométricos ingresados.

La figura 9 muestra la geometría generada por PENELOPE. Por una cuestión de comodidad del autor, la construcción de la geometría esta generada a la inversa respecto de la experiencia real, por supuesto que esto no varía los resultados. Allí, gracias a los colores de la imagen, queda evidenciado que PENELOPE, a través de su modulo PENCYL, genera las geometrías en función de cilindros concéntricos. Por tal motivo, su aplicación está destinada al diseño de fuentes cilíndricas. Estas fuentes son las utilizadas comúnmente en los laboratorios, mediante viales y botellas de vidrio o plásticas.

La figura 10, muestra la geometría generada por MCNP. En este caso, la geometría se construye con intersecciones entre cilindros y planos. MCNP resulta ser un programa más versátil al momento de la construcción de geometrías.

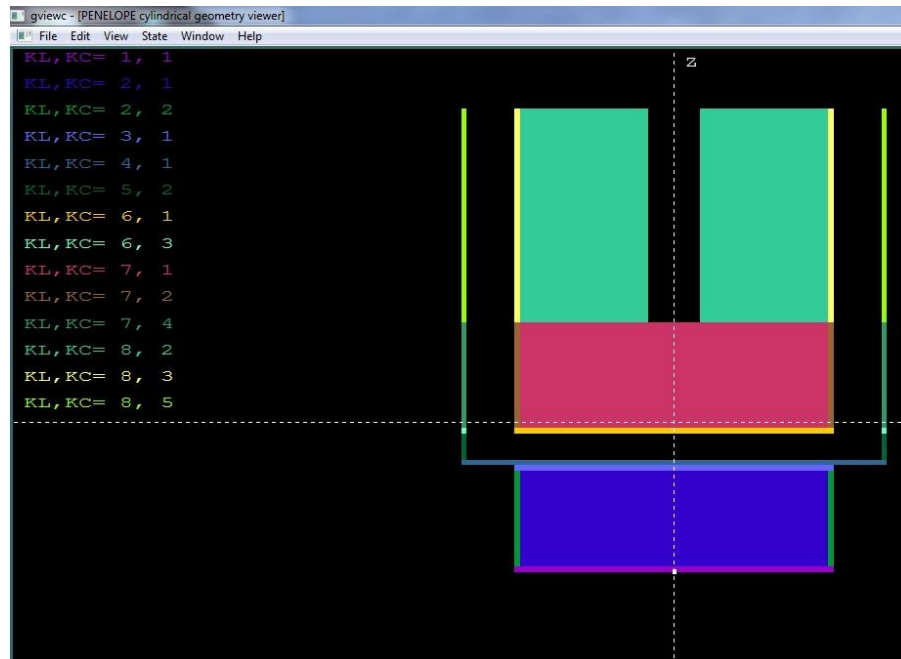


Figura 9. Geometría obtenida con PENELOPE-PENCYL

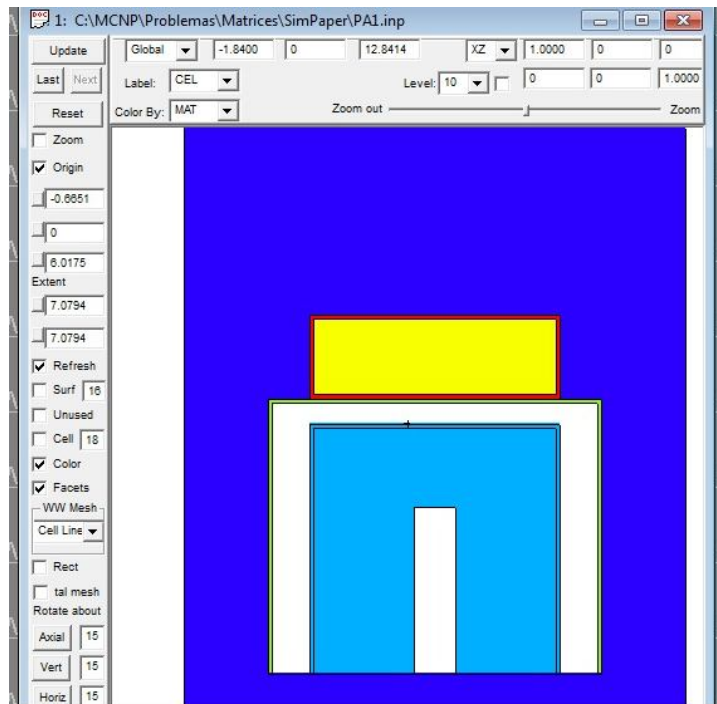


Figura 10. Geometría obtenida con MCNP.

En la tabla 4, podemos ver los resultados de las simulaciones efectuadas, para MCNP y PENELOPE. Las primeras cinco columnas, fueron calculadas para la comparación con la publicación de referencia. Allí vemos que las primeras tres columnas poseen la eficiencia simulada con la fuente puntual, fuente en volumen (agua), y otra fuente en volumen que contiene Celulosa, denominada filtro en la publicación, la cuarta y quinta columna contiene la relación de eficiencias (cocientes) propuestas en la publicación. Luego, las columnas siguientes, sexta y séptima, (prom1 y prom2, proporcionadas en la publicación) informan los cocientes promedios obtenidos entre estas eficiencias, por los participantes de la publicación, que es lo que nos interesaba comparar en esta simulación. Finalmente las últimas dos columnas informan las diferencias obtenidas entre la simulación realizada para este trabajo y lo informado en la publicación. Como puede apreciarse, las diferencias se mantienen por debajo del 2% (en general) que era lo que se esperaba obtener.

Energía KeV	Eficiencias				Coeficientes	Promedios	Informados	Diferencias	
45					MCNP				
	Ef. Muestra	Ef. puntual	Ef. Celulosa	Puntual/Muestra	Filtro/Muestra	Prom1	Prom2	Dif % 1	Dif % 2
	6,71E-03	1,13E-02	6,08E-03	1,69E+00	9,06E-01	1,72E+00	9,25E-01	1,90	2.05
	7,17E-02	1,49E-01	7,88E-02	2,07E+00	1,10E+00	2,09E+00	1,11E+00	0.74	0.90
	8,33E-02	1,90E-01	1,04E-01	2,28E+00	1,25E+00	2,26E+00	1,26E+00	0.85	0.79
2000	1,35E-02	2,71E-02	1,67E-02	2,01E+00	1,23E+00	2,00E+00	1,24E+00	0.50	0.80
80					PENELOPE				
	Ef. muestra	Ef. puntual	Ef. Celulosa	Puntual/Muestra	Filtro/Muestra	Prom1	Prom2	Dif% 1	Dif% 2
	6,49E-03	1,12E-02	6,05E-03	1,73E+00	9,32E-01	1,72E+00	9,25E-01	0,40	0,007
	7,05E-02	1,47E-01	7,86E-02	2,09E+00	1,11E+00	2,09E+00	1,11E+00	0,13	0,004
	8,32E-02	1,89E-01	1,05E-01	2,27E+00	1,26E+00	2,26E+00	1,26E+00	0,51	0,004
2000	1,34E-02	2,69E-02	1,66E-02	2,01E+00	1,24E+00	2,00E+00	1,24E+00	0,47	0,001

Tabla 4. Se representa los resultados de comparación.

4.2 Simulación del Detector

4.2.1 Fuentes Puntuales

La caracterización del detector, consiste en comparar datos experimentales o calculados con datos experimentales, con los obtenidos de la simulación del experimento. Luego de esta comparación se evalúan las diferencias relativas existentes y se va ajustando el modelo de simulación, mediante el método de prueba y error, hasta lograr diferencias relativas que se consideren aceptables según bibliografía consultada. Se trata de caracterizar detectores de germanio de tipo coaxial, el plano con sus dimensiones y tabla de materiales de construcción son provistos por el fabricante. Como es bien sabido, en la literatura del tema, las características geométricas provistas por los fabricantes,

relacionadas con las dimensiones del cristal del detector, resultan ser inexactas. Por tal motivo, se pueden encontrar discrepancias superiores al 10% entre eficiencia calculada con datos experimentales y la simulada, si utilizásemos las dimensiones indicadas en el plano de fabricación para generar la simulación.

Haciendo uso de la bibliografía, se conocen algunos aspectos destacados a considerar en la simulación, por ejemplo: A los bordes de la cara superior del detector, se le practica un redondeo (Bulletization, en ingles) en fábrica para reducir efectos no deseados de campo eléctrico en esta zona (figura 11). Por otra parte, está estudiado [16] que podría haber diferencias de 5% y más en los resultados si no se considera el redondeado del borde en la simulación. También es fundamental considerar en la simulación la zona muerta del detector la que actúa como un apantallamiento de la radiación incidente, en este aspecto se sugiere la lectura de las referencias [12] a [15].

Una radiografía del detector podría determinar la verdadera distancia entre la ventana del detector y la fuente. Pero en nuestro caso, no fue posible realizarla porque eso implica desmontar el sistema y trasladar el detector utilizado para servicios.

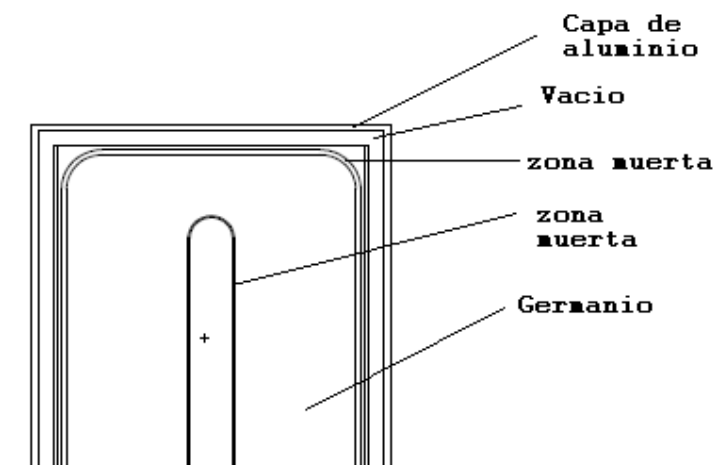


Figura 11. Esquema del detector.

Con respecto a la fuente puntual, en la práctica esta fuente es una pequeña gota de un determinado radiactivo, diluido en una solución acuosa. Se podría elegir en la simulación, tomarla como una fuente puntual teórica, sin volumen ni densidad, o representarla como una aproximación más cercana a la realidad. En este trabajo se optó por lo segundo, estimando un diámetro de 2mm y un espesor de una decima de mm, formada por el material agua.

Radioisótopo	Energ. (keV)	MCNP	Eff. Prom.	Diferencia %
Am241	5.954E+01	1,6470E-03	1.6586E-03	6,9968E-01
Co 57	1.221E+02	4,2420E-03	4.208E-03	8,0104E-01
Co 57	1.365E+02	4,2670E-03	4.096E-03	4,1634E+00
Eu 152	3.443E+02	2,5214E-03	2.564E-03	1,6689E+00
Eu 152	4.440E+02	2,0370E-03	2.111E-03	3,4970E+00
Cs137	6.617E+02	1,4470E-03	1.524E-03	5,0696E+00
Mn54	8.348E+02	1,2123E-03	1.235E-03	1,8067E+00
Co60	1.173E+03	9,4010E-04	9.401E-04	3,4572E-03
Co60	1.332E+04	8,4760E-04	8.525E-04	5,8055E-01

Tabla 5. Eficiencias Experimentales y Simuladas. Posición 3.

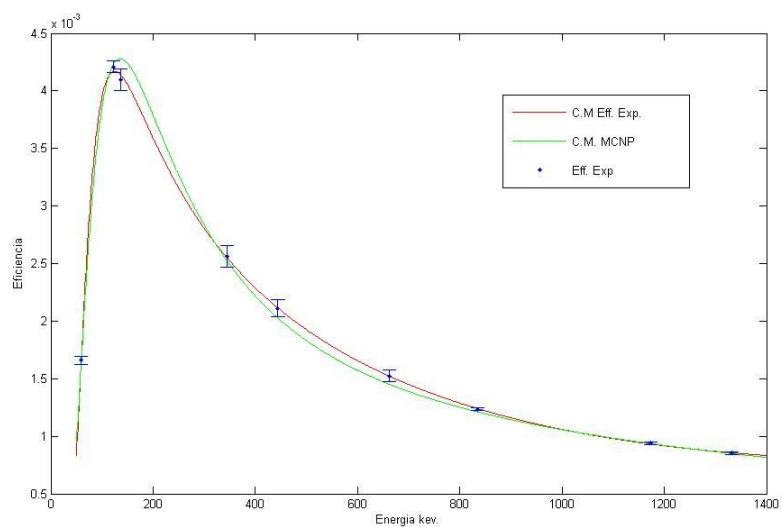


Figura 12. C. M. con MCNP y con la Eficiencia Experimental. Posición 3.

De igual forma que se hizo con los datos de la posición 3, se realizaron curvas de eficiencia para la posición 5. Figura 13.

Radioisótopo	Energ.(kev.)	MCNP	Eff.Prom.	Diferencia %
Am241	5.954E+01	6,990E-04	6.978E-04	1,779E-01
Co 57	1.221E+02	1,811E-03	1.793E-03	9,921E-01
Co 57	1.365E+02	1,824E-03	1.822E-03	1,348E-01
Eu152	3.443E+02	1,066E-03	1.068E-03	1,508E-01
Eu152	4.440E+02	8,969E-04	8.654E-04	3,635E+00
Cs137	6.617E+02	6,386E-04	6.362E-04	3,754E-01
Mn54	8.348E+02	5,426E-04	5.388E-04	7,106E-01
Co60	1.173E+03	4,166E-04	4.160E-04	1,555E-01
Co60	1.332E+04	3,750E-04	3.765E-04	3,975E-01

Tabla 6. Eficiencias Experimentales y Simuladas. Posición 5.

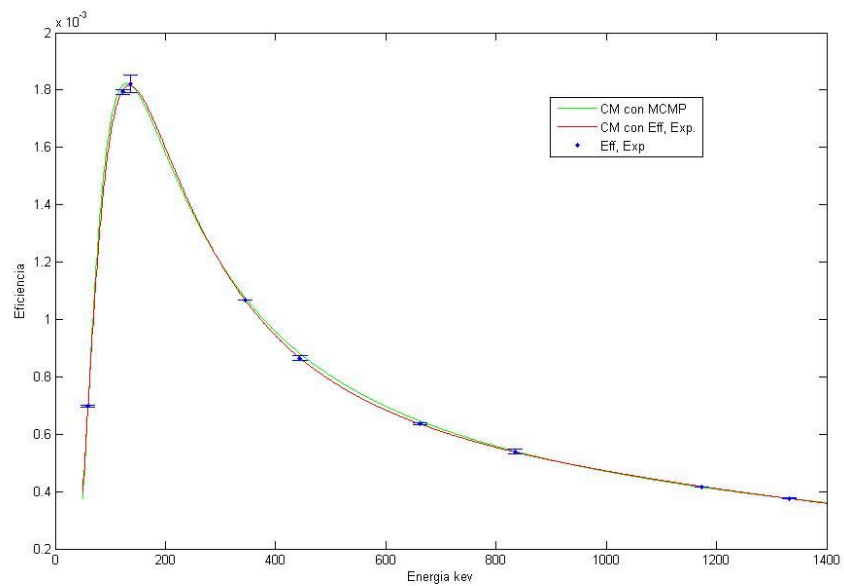


Figura 13. (C M) con MCNP y con la Eficiencia Experimental. Posición 5.

4.2.1 Diferencias geométricas entre el detector y la simulación

La tabla 7, muestra como se alteraron las dimensiones indicadas en el plano respecto de lo realizado en la simulación.

Dimensiones en mm	Según Esquema	Simulación	Diferencia %
Longitud del cristal	64,1	55,9	12,79
Diámetro externo	59	59	0,00
Diámetro interno	8,5	8,5	0,00
Radio borde superior	8	8	0,00
Profundidad del agujero int.	50,5	42,3	16,24
Zona Muerta exterior Frente	0,7	1,19	70,00
Zona Muerta exterior Lateral	0,7	1	42,86
Zona Muerta interior	0,03	0,05	66,67
Partes metálicas sin alteración			

Tabla 7. Apartamiento respecto de las dimensiones del esquema provisto por el fabricante.

La zona muerta del cristal de Germanio es un parámetro de gran influencia en la caracterización del detector. En este caso se variaron tanto la zona muerta exterior como la interior, como refleja la tabla 7. El blindaje de aluminio no se modificó, pero se comprobó que variaciones del 10% en el espesor del blindaje de aluminio, prácticamente no contribuyen a la variación de la eficiencia.

4.2.3 Pruebas con fuentes extensas

Para poner a prueba el modelo se intentó modelar una fuente extensa multi-gamma, identificada como 10-07. La figura 14 muestra el modelo de la fuente patrón, en su envase de polipropileno, apoyada sobre el detector. La fuente es una solución acuosa diluida de un volumen de aproximadamente 500cm^3 y por lo tanto, se puede tomar su densidad igual a 1 g/cm^3 .

Todo este arreglo se encuentra dentro del blindaje, el cual no es necesario simular porque no interfiere en la física del problema, en nuestro caso.

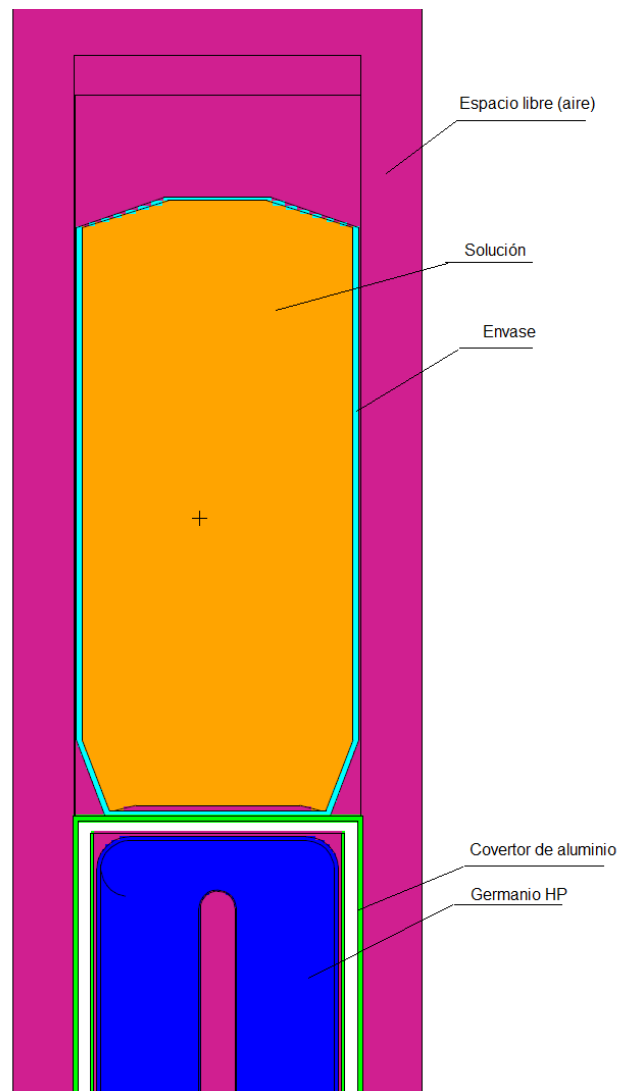


Figura 14. Simulación del arreglo experimental, fuente volumétrica.

Los resultados de la simulación pueden verse en la tabla 8.

Energía (keV.)	Eff. 1	Eff.2	Eff. prom	Dif %	MCNP	Dif %
59	0,00488	0,00516	0,00502	2.79	0,00499	0,60
121	0,01466	0,01473	0,01470	0.24	0,01500	2,08
276	0,01050	0,01117	0,01084	3.09	0,01170	7,98
302	0,01028	0,01013	0,01021	0.73	0,01100	7,79
356	0,00951	0,01048	0,01000	4.85	0,00974	2,55
662	0,00629	0,0067	0,00650	3.16	0,00613	5,65
779	0,00502	0,00516	0,00509	1.38	0,00549	7,86
964	0,00453	0,00477	0,00465	2.58	0,00476	2,41
1173	0,00400	0,00413	0,00407	1.63	0,00419	3,04
1332	0,00370	0,00370	0,00370	0.04	0,00385	4,01

Tabla 8. Resultados de matriz volumétrica.

Estas mediciones fueron realizadas sobre el detector, o sea a distancia corta. Luego cabe la corrección de los valores obtenidos, debido a los efectos producidos por esquema de niveles (Ref. [12] a [15]), por ejemplo, en el caso de ^{152}Eu . También está pendiente estudiar efectos de densidad de matriz, aunque estos efectos son importantes en matrices de densidades diferentes a uno. En nuestro caso, como se comentó anteriormente, esta solución es 98% agua, aproximadamente.

Conclusiones

La técnica de caracterización de detectores mediante fuentes puntuales, es una técnica usada desde hace varios años y existen muchas publicaciones al respecto. Por supuesto, en la metrología científica se busca obtener diferencias con los valores experimentales y simulaciones, menores al 1%. Lograr este nivel de diferencias, requiere tiempo y equipamiento especialmente dedicado a este fin.

El detector simulado en este trabajo, pertenece al área de prestación de servicios, donde se realizan controles de radiación natural en alimentos, por tal motivo estos detectores se encuentran en constante operación, no siendo utilizados estrictamente para el área experimental.

Sin embargo, en esta área de control, se trabaja con incertidumbres de hasta 10%. Al observar la tabla 8, podemos ver que la simulación mantiene diferencias inferiores al 8% en todos sus casos respecto a los valores promedios para la matriz en volumen. De igual forma ocurre para fuentes puntuales.

Otro aspecto a destacar es que observando las tablas 2 y 3 de valores experimentales, podemos ver que las incertidumbres experimentales resultaron ser mayores a 17cm que a 27cm del detector, resultado no esperado. Se analizó que por las distancias en que se realizaron las mediciones, se puede descartar la acción del efecto suma debido a esquemas de niveles en cascada. Las actividades de las fuentes puntuales utilizadas resultan ser bajas como para producir efectos no deseados (elevado tiempo muerto de medición).

Se está trabajando en revisar la posición del soporte respecto del detector y la posición de la fuente respecto del soporte. El objetivo es detectar el origen del aumento de la discrepancia en los datos experimentales observado a menor altura.

En lo que respecta al buen uso de los códigos de simulación, el haber logrado la reproducir de los resultados de la publicación, con el mismo nivel de discrepancias informado, aporta confianza respecto de la utilización de MCNP y PENELOPE para caracterización de matrices volumétricas.

El interés particular del laboratorio es trabajar con la generación de patrones de fuentes en volumen simulados con código Monte Carlo, por lo tanto se seguirá trabajando en mejorar el empleo de la técnica, debido a que el grado de discrepancia obtenido entre la simulación resultados experimentales está dentro del rango de aceptación.

Apéndice A

Generadores Congruenciales

Según se comenta en [19], fue Gauss en su obra *Disquisitiones Arithmeticae*, publicada en 1801, quien introdujo en las Matemáticas el concepto de congruencia.

Para comprender como funciona un generador congruencial, primero veremos algunas definiciones:

Definición 1

Sea m un entero positivo y a, b dos números enteros. Decimos que a y b son congruentes modulo m si m divide a $(a - b)$. La notación utilizada es:
 $a \equiv b(\text{mod } m)$.

Definición 2

Sea m cualquier número entero positivo. Entonces;

(a) Cualquier número entero es congruente modulo m exactamente con uno de los enteros $0, 1, \dots, m - 1$.

(b) Dos números enteros son congruentes entre si modulo m , si y solo si ambos dan el mismo resto al dividirlos por m .

Entonces decimos:

$$a \equiv b(\text{mod } m) \Leftrightarrow (a-b)/m$$

Ejemplo:

$80 \equiv 20(\text{mod } 15)$; porque 15, divide a 60.

Por supuesto que existe una amplia teoría desarrollada sobre el tema. Con esta simple introducción, intentaremos ensayar nuestro propio generador congruencial, y ver cuantos números aleatorios podemos generar.

Supongamos el siguiente generador:

$$x(i+1) = \text{mod}(A \cdot x(i), M); \quad i \geq 1$$

Con los valores iniciales:

$M=31$;
 $A=3$;
 $x(1)=9$;

Ahora supongamos que queremos generar unos 35 números, entonces ponemos nuestro generador en un programa para realizar la iteración, luego graficamos esos valores, según su orden de aparición, entonces tenemos, fig. 1;

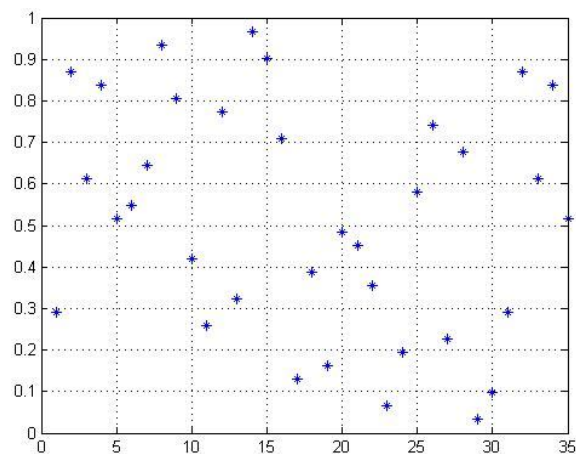


Figura 1

Aquí, tenemos una distribución de puntos que no presenta patrón alguno, en principio.

Aumentemos el número de valores generados a 62, entonces tendremos la figura 2.

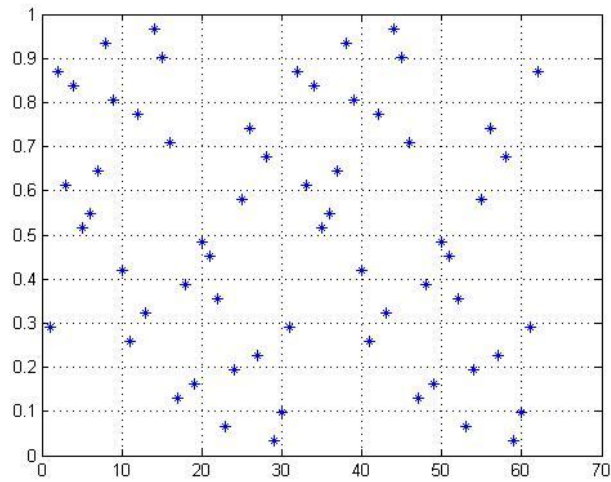


Figura 2

Aquí vemos que el generador está repitiendo la serie de números, pues se observa un patrón determinado. Si aumentamos a 160 números;

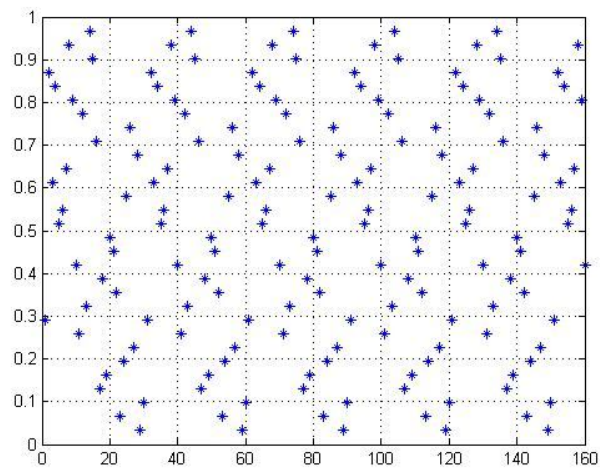


Figura 3

Aquí la periodicidad se hace más evidente. Por supuesto que este algoritmo está preparado para que falle rápidamente, pero es bien sabido que los generadores de números usados en la actualidad, resultan suficientes para las aplicaciones de la física de las radiaciones y otras disciplinas.

Apéndice B

Método de Box- Muller

Este método fue desarrollado para muestreo de distribuciones normales.

Sea una variable aleatoria (x) con distribución normal con una fdp como:

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}} \quad (1)$$

Si nosotros quisiéramos aplicar el método de la transformada inversa directamente sobre esta función, para extraer un conjunto de valores correspondientes con la distribución, encontraríamos el problema que esta función no es integrable, en el sentido que no tiene primitiva elemental. O sea, no encontraremos una función tal que podamos escribir:

$$F'(X) = f(x) \quad (2)$$

Sin embargo, gracias a la estrategia generada por Box y Muller, se puede aplicar el método de la función inversa, luego del siguiente procedimiento:

Supongamos otra variable aleatoria (y), independiente de (x), que responde a una fdp normal, entonces podríamos generar una nueva función producto de las fdp.

$$f(x, y) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-x^2/2} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-y^2/2}$$

$$f(x, y) = \frac{1}{2\pi} e^{-(x^2 + y^2)/2} \quad (3)$$

Ahora intentaremos resolver la integral de f(x,y), entonces para simplificar el problema, podríamos pasar a coordenadas cilíndricas, con las variables:

$$d = x^2 + y^2, \quad \theta = \operatorname{tg}^{-1}\left(\frac{y}{x}\right) \quad (4)$$

Hacemos el jacobiano de la transformación recordando la expresión:

$$\frac{\partial(x, y)}{\partial(u, v)} = \begin{vmatrix} \frac{\partial x}{\partial u} & \frac{\partial y}{\partial u} \\ \frac{\partial x}{\partial v} & \frac{\partial y}{\partial v} \end{vmatrix} = \left| \frac{\partial x}{\partial u} \cdot \frac{\partial y}{\partial v} - \frac{\partial x}{\partial v} \cdot \frac{\partial y}{\partial u} \right| \quad (5)$$

Aplicando a la transformación propuesta:

$$J_{xy}^f = 2x \cdot \frac{1}{1 + \left(\frac{y}{x}\right)^2} \cdot \left(\frac{1}{x}\right) - 2y \cdot \frac{1}{1 + \left(\frac{y}{x}\right)^2} \cdot \left(\frac{-y}{x^2}\right) = 2 \quad (6)$$

Teniendo el jacobiano ahora podemos integrar la $f(x, y)$, porque ahora si tenemos una $f(x, y)$ que posee primitiva.

Entonces, integrando como variables separables y calculando las inversas:

$$f(r) = r \exp\left\{-\frac{r^2}{2}\right\} \Rightarrow F(r) = 1 - \exp\left\{-\frac{r^2}{2}\right\} \Rightarrow R = \sqrt{-2 \ln U}$$

$$f(\theta) = \frac{1}{2\pi} \Rightarrow F(\theta) = \frac{\theta}{2\pi} \Rightarrow \theta = 2\pi U \quad (7)$$

Ahora la idea es generar números aleatorios U_1 y U_2 y recuperar las coordenadas cartesianas haciendo:

$$X = R \cos \theta$$

$$Y = R \sin \theta \quad (8)$$

Reemplazando R y θ

$$\begin{aligned} X &= R \cos \theta = \sqrt{-2 \log U_1} \cos(2\pi U_2) \\ Y &= R \sin \theta = \sqrt{-2 \log U_1} \sin(2\pi U_2) \end{aligned} \quad (9)$$

Ahora veamos el efecto de aplicar esta transformación a una distribución uniforme para generar una distribución gaussiana de puntos:

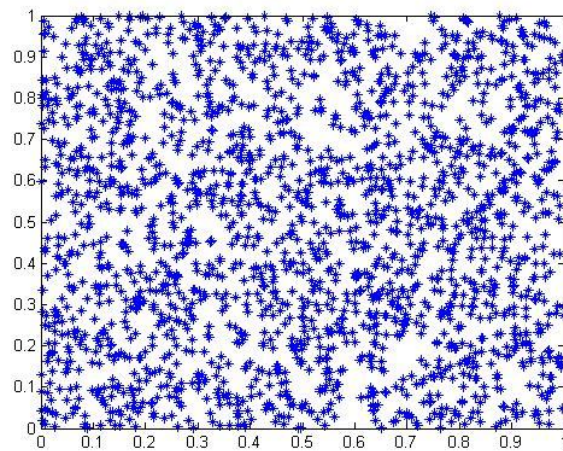


Figura 1. Distribución uniforme de puntos.

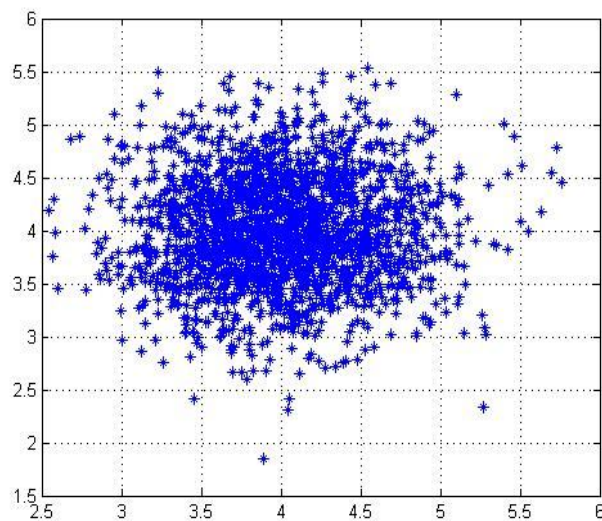


Figura 2. Distribución luego de aplicar la transformación.

Apéndice C

Semiconductores

Un material semiconductor es un material que puede actuar como aislador o como conductor. Los detectores pueden fabricarse de materiales elementales o compuestos, obteniendo monocristales con un “gap” (banda prohibida) de entre 1 y 5 keV aproximadamente. Los elementos del grupo IV, Silicio y Germanio, son por mucho, los semiconductores más ampliamente usados, aunque algunos compuestos encuentran uso en aplicaciones especiales a medida que continúa su desarrollo.

En los materiales en general se presentan bandas de conducción (BC) y de valencia (BV) separadas por un gap, que para aislantes es grande y para conductores es menor. Depende de la temperatura: a menor temperatura todos los electrones están en la banda de valencia. A mayor temperatura pasan a banda de conducción, dejando un agujero o vacancia en la banda.

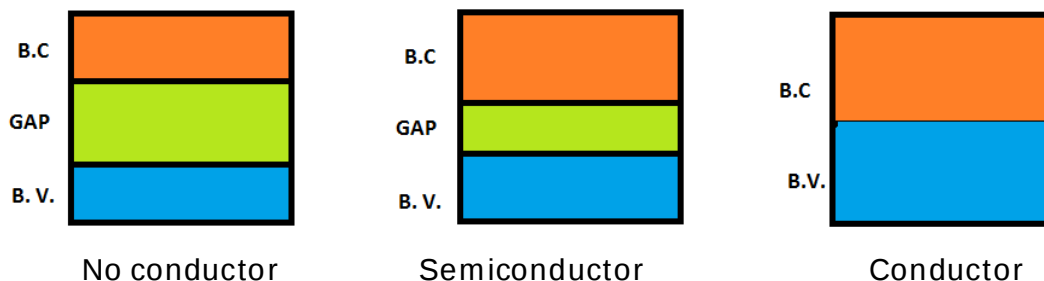


Figura 1. Esquema simplificado de bandas en los materiales.

Detectores Semiconductores

Un detector semiconductor es un diodo de Silicio Germanio de tipo P-N o PIN operado en polarización inversa. En estas condiciones un campo eléctrico se extiende a través de la región depletada haciéndola adecuada para detectar radiación, particularmente rayos X y rayos gamma.

Un material intrínseco es aquel que tiene igual cantidad de electrones que agujeros. Cuando los fotones interactúan con el material dentro de la región depletada, se producen portadores de carga (electrones y agujeros) que son atraídos por el campo eléctrico hacia los electrodos P y N.

Esta carga en movimiento, la cual es proporcional la energía depositada en el detector, se convierte en un pulso de tensión mediante un preamplificador sensible la carga.

Como el Ge tiene un gap relativamente pequeño, estos detectores se deben enfriar para reducir la generación térmica de portadores de carga y la corriente de fuga inversa, a un valor aceptable. De otra forma, el ruido inducido por las corrientes de fuga afecta la resolución en energía del detector. El nitrógeno líquido, con una temperatura de 77K, es el medio más común para enfriar tales detectores.

El detector está montado en una cámara de vacío la cual está inmersa dentro de un dewar con N_2 líquido adosada a un enfriador eléctrico. De esta manera la superficie del detector está protegida de la humedad y contaminantes condensables. El grado de ocupación en bandas depende de la temperatura y el tamaño del gap.

A temperatura ambiente el Ge no cambia demasiado la conductividad con la concentración de impurezas. Pero a la temperatura de nitrógeno líquido el cambio es significativo.

Esquema:

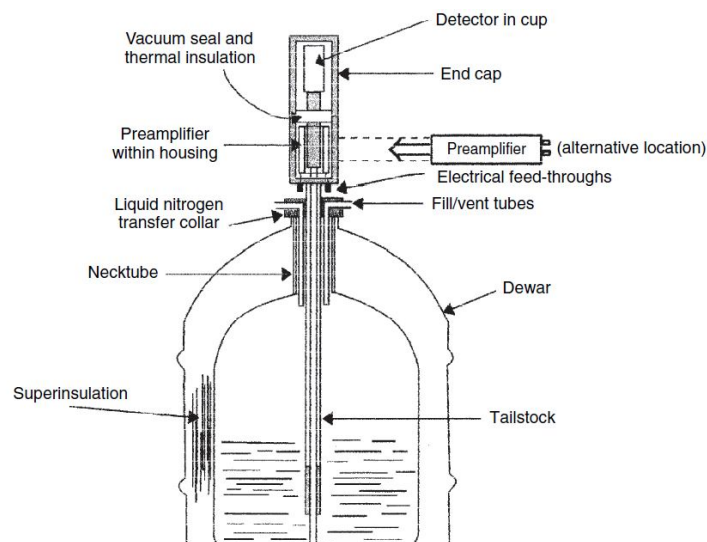


Fig. 2 . Esquema de detector en dewar con sus componentes. Ref.[14].

Dopaje del semiconductor

Si se altera la red cristalina (dopar), por ejemplo introduciendo elementos del grupo 5 de la tabla periódica, se está agregando un átomo “intruso” que aportará un electrón libre a la estructura cristalina. Debido a esto, al átomo intruso se lo llama “donor”. El nuevo electrón aportado, al no estar en ningún enlace covalente se ubicará en un nuevo nivel cercano a la banda de conducción (aproximadamente a los 0,05 eV de la banda de conducción).

Red cristalina:

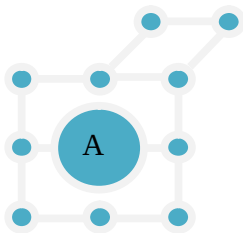
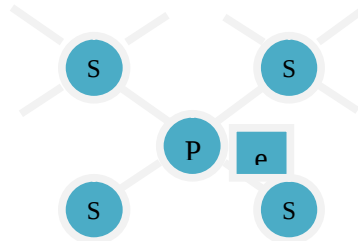


Figura 3



Si se agrega (dopa) elementos del grupo 3 se deja una vacancia o hueco, por ejemplo:

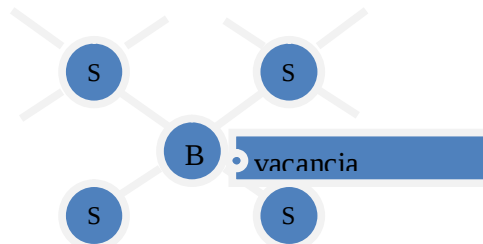


Figura 4

Se lo llama “aceptor” (se aproxima a la banda de valencia, acercándose aproximadamente a 0,08 eV).

Un electrón ocupa la vacancia y deja un agujero que es ocupado por otro electrón y así sucesivamente. Es como un portador de carga positiva que se mueve hacia la banda de valencia y los electrones hacia la de conducción. Si predominan los electrones como portadores de carga (donores), se denominan semiconductores tipo N.

Si predominan los agujeros como portadores de carga (aceptores), se los denomina semiconductor tipo P. Ref. [20].

5- Bibliografía

- [1] Kalos M. Whitlock P.; Monte Carlo Methods ; Wiley 2004. Germany.
- [2] George F. Fishman. Concepts, Algorithms, and Applications. Springer-Verlag New York inc. 1996.
- [3] N. Metropolis; The beginning of the Monte Carlo Method; Los Alamos science Special Issue 1987.
- [4] MCNP- A General Monte Carlo N Particle Transport Code, Version 5. Volumes I,II,III User's Guide. Authors; X-5 Monte Carlo Team, 2005.
- [5] Frances Salvat; José Fernandez; Josep Sempau; PENELOPE 2006 A Code System for Monte Carlo Simulation of electron and Photon Transport : NEA N° 6222; OECD 2006. U.B. España.
- [6] M. Lüscher, "A portable high-quality random number generator for lattice field theory calculations", *Computer Physics Communications*, 79 (1994) 100–110.
- [7] F. James, "RANLUX: A Fortran implementation of the high-quality pseudo-random number generator of Lüscher", *Computer Physics Communications*, 79 (1994) 111–114.
- [8] Makoto Matsumoto and Takuji Nishimura, "Mersenne Twister: A 623-dimensionally equidistributed uniform pseudorandom number generator". *ACM Transactions on Modeling and Computer Simulation*, Vol. 8, No. 1 (Jan. 1998), Pages 3–30.
- [9] J. Sempau, E. Acosta, J. Baró, J. M. Fernández-Varea and F. Salvat, *An algorithm for Monte Carlo simulation of coupled electron-photon transport*, Nucl. Instrum. Meth. B 132 (1997) 377-390.

[10] J. Baró, J. Sempau, J. M. Fernández-Varea and F. Salvat, PENELOPE: An algorithm for Monte Carlo simulation of the penetration and energy loss of electrons and positrons in matter, Nucl. Instr. And Meth. B 100 (1995) 31-46.

[11] Glenn Knoll; Radiation Detection and Measurement ; 3^o edition. Wiley.

[12] Alex F. Bielajew; Fundamentals of Radiation Dosimetry and Radiological Physics. University of Michigan, USA, 2005.

[13] Gordon Gilmore, John Hemingway; Gamma Ray Spectrometry; Ed. Wiley. England, 2008.

[14] Alex F Bielajew; Fundamentals of Radiation Dosimeter and Radiological Physics; The University of Michigan Department of Nuclear Engineering and Radiological Sciences. 2005.

[15] Doug Reilly, Norbert Ensslin and Hastings Smith Jr. Passive Nondestructive Assay of Nuclear Materials; Published: March 1991. Los Alamos N.L.

[16] Joel Gasparro, et al; Monte Carlo modelling of germanium crystals that are tilted and have rounded front edges; Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A 594 (2008) 196-201.

[17] S.I. Kafala et al; Simple Method for True Coincidence Summing Correction; Journal of Radioanalytical and Nuclear Chemistry; Vol. 191 ,Nº (1995), 105-114.

[18] T. Vidmar et al; Testing efficiency transfer codes for equivalence; Applied Radiation and Isotopes. 68(2010) 355-359.

[19] Francisco Jose Gonzalez Gutierrez; Apuntes de Matemática Discreta; Universidad de Cadiz. Octubre 2004.

[20] Pablo Arenillas; Sergio Strocovski. Apuntes de Clases de la Especialización en Radioquímica y Aplicaciones Nucleares. IDB – UNSAM – CNEA.

Referencias Complementarias

[21] Lepy, T. Altzitzogloub et al; Applied Radiation and Isotopes 55 (2001) 493–503.

[22] S. Ashafi, A. Likar, T Vidmar. Nuclear Istrument. A438 (1999) 421- 428.

[23] I.O.B. Ewa, D. Bodizs. Applied Radiation and Isotopes. 55 (2001) 103-108.

[24] O. Sima, D. Arnold. Applied Radiation and Isotopes. 56 (2002) 71 – 75.

[25] Gustavo Santa Cruz; Apuntes del curso “Métodos Monte Carlo”. Instituto Sabato. CAC. CNEA.

Agradecimientos

Gabriela Cerutti

Pablo Arenillas

Claudia Guardo

Manuel Szejnberg

Jorge Fernandez

Jorge Carrazana

Sandra Siri

Karina Socolovski

Christian Balpardo

Docentes y personal administrativo del Instituto Dan Beninson