

## 2 Conceptes bàsics

### 2.1 Detectores de semiconductor

Un detector ideal per espectrometria gamma ha de complir els següents requeriments:

- Una sortida de senyal proporcional a l'energia gamma.
- Una bona eficiència, és a dir, un coeficient d'absorció elevat, amb elevada Z.
- Un mecanisme simple per a la recol·lecció del senyal del detector.
- Una bona resolució energètica.
- Estabilitat en el temps, temperatura i paràmetres d'operació.
- Cost raonable.
- Mida raonable.

Els detectors de semiconductor proporcionen molts més portadors de càrrega per una radiació incident donada que qualssevol altre detector, de manera que s'aconsegueix una molt bona resolució energètica en haver-hi menys variació estadística. En aquest cas els portadors d'informació són les parelles electró-forat creades en el camí d'una partícula carregada, d'una forma similar a les parelles d'ions creades en els detectors de gas. A més de la seva bona resolució altres avantatges són una mida raonable, un temps de resposta força ràpid i uns gruixos variables en funció de la seva aplicació.

Com a inconvenients cal citar el seu límit inferior a mides excessivament petites, la seva susceptibilitat a la degradació, ja que són molt delicats, i a la temperatura, ja que com s'explica a continuació cal que es mantinguin a baixes temperatures. Tot plegat fa que tinguin un cost força elevat.

#### 2.1.1 La física dels semiconductors

Els estats energètics dels electrons en un grup d'àtoms del mateix tipus s'entén que seran iguals, sempre i quan aquests àtoms estiguin prou lluny per no interaccionar. Però si els àtoms s'apropen suficientment hi haurà una modificació ens els estats energètics dels electrons de valència, la capa més externa i la responsable de les interaccions químiques, de manera que es formaran unes bandes d'energia permesa com s'observa a la figura 2.1.

## 2. CONCEPTES BÀSICS

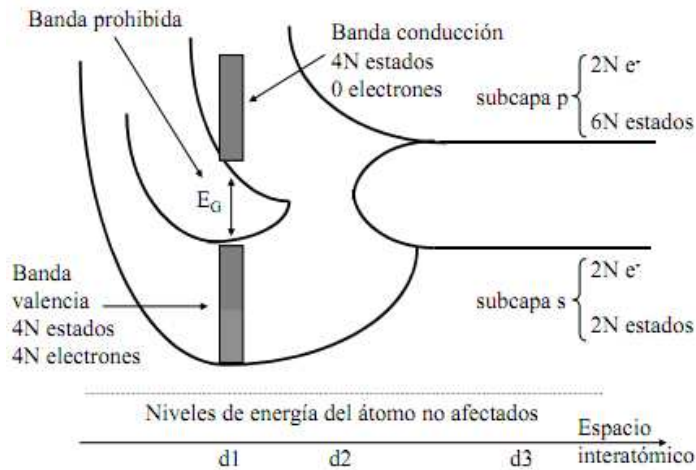


Figura 2.1

En la part dreta de la figura es pot veure el que correspondria a les capes electròniques per àtoms independents, amb els corresponents estats a la capa  $p$  i  $s$ . En apropar-los però, a l'esquerra de la figura, aquests estats es superposen formant bandes, cadascuna de les quals amb  $4N$  estats.

Imatge de <http://webs.uvigo.es/mdgomez/DEI/Guias/tema3.pdf>

Les bandes estaran separades per un *gap* o **banda prohibida**. La banda superior d'estats permesos es coneix com a **banda superior** i la banda inferior, com a **banda de valència**. Com que els electrons tendeixen a situar-se en la mínima energia, la banda de valència estarà plena i la banda de conducció quasi buida.

Aquest efecte però, és característic de tots els materials i no només dels semiconductors. El que diferencia uns materials dels altres és l'amplada de la banda prohibida. En els aïllants aquesta banda és molt ampla, mentre que en els conductors és molt estreta o inexistente; en els semiconductors en canvi, és un entremig.

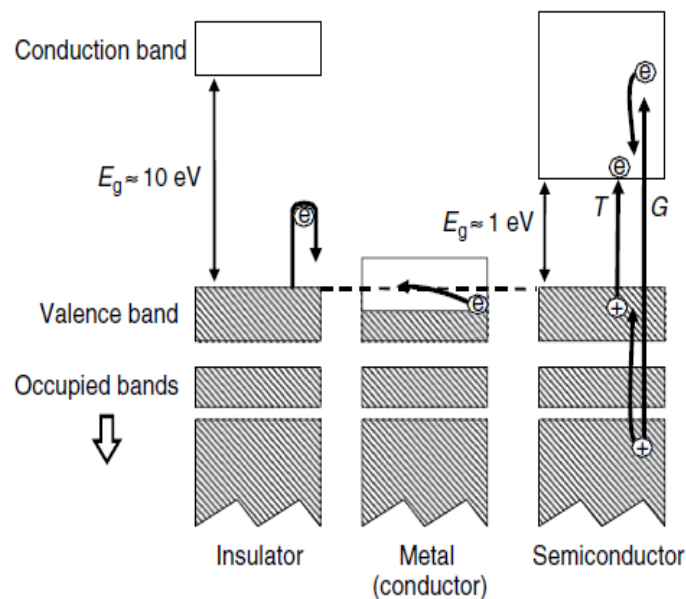


Figura 2.2: Esquema de l'estructura electrònica de bandes en aïllants, metalls i semiconductors

Perquè un electró pugui moure's a través del material i per tant ser conductor, és necessari que passi d'àtom en àtom. Això no es possible a la banda de valència, on els estats estan plens i, per tant haurà de ser capaç de passar a la banda de conducció saltant a través del gap. En el cas dels aïllants com que la banda prohibida es tan àmplia, els electrons no són capaços de saltar-la i per tant no hi ha conducció elèctrica. En els conductors és al contrari, la banda prohibida és molt estreta o directament no hi és, de manera que una mínima excitació tèrmica assegura que hi haurà prous electrons a la banda de conducció perquè hi hagi corrent elèctric en el moment que s'apliqui una diferència de potencial. Els semiconductors en canvi, que es troben enmig dels dos casos, tenen la banda de valència plena però com que el gap és més estret (de l'ordre d'1 eV), l'excitació tèrmica resulta suficient per promoure els electrons fins a la banda de conducció. La probabilitat d'un electró de saltar el gap ve donada per:

$$p(T) \propto T^{\frac{3}{2}} \exp\left(-\frac{E_g}{2kT}\right) \quad 2.2$$

Mantenint el material a baixes temperatures s'aconsegueix que quasi tots el electrons estiguin a la banda de valència en condicions normals i que només en cas d'una interacció exterior (que serà la radiació gamma), hi hagi aquesta promoció d'electrons.

Quan un electró salta de la banda de valència (o una altra) a la banda de conducció, queda un **forat** que es considera com si es tractés d'una càrrega positiva. Aquest forat serà omplert per un altre electró de la capa, que alhora deixarà un nou forat i així consecutivament. En presència d'un camp elèctric, s'observarà que el forat es mou cap al càtode. Com que tant electrons com forats porten càrrega, negativa i positiva respectivament, tots dos contribuiran a la conductivitat del material com es pot veure a la figura 2.3.

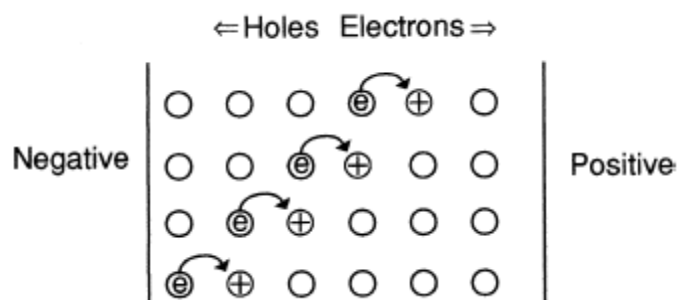


Figura 2.3: Model de mobilitat de forats en el sòlids [3]

Cal que els materials siguin d'elevada puresa per tal d'assegurar que electrons i forats tinguin una bona mobilitat, de tal manera que s'afavoreixi la seva recol·lecció.

### 2.1.2 Tipus de semiconductors

Es pot parlar de semiconductors **intrínsecs** o **extrínsecs**. En el primer cas el material és pur i l'estructura és completament cristal·lina, en el segon cas en canvi, hi ha àtoms d'*impureses* apart dels àtoms propis del material i es diu que el material està *dopat*. Aquestes impureses alhora, les es classifiquen en **donadores** i **acceptores**.

En els semiconductors intrínsecs l'estructura cristal·lina implica que, per exemple en el cas del germani, de valència 4, cada àtom estarà envoltat per quatre germanis més de manera que queda una configuració molt estable. En el moment en què un electró passi a la banda de conducció, quedarà un forat, de manera que sempre hi haurà el mateix nombre d'electrons i forats portadors.

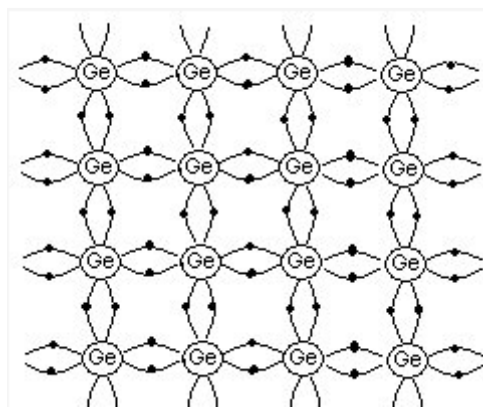


Figura 2.4: Imatge de <http://en2k6.blogspot.com/2008/02/free-electron-theory.html>

En els semiconductors extrínsecs en canvi, s'altera l'estructura del material pur, de tal manera que no hi haurà aquesta estabilitat entre electrons i forats. Si el dopatge produeix més electrons que forats, parlarem d'un **semiconductor tipus N**, mentre que en cas contrari serà un **semiconductor tipus P**. Per aconseguir els semiconductors tipus N, el que cal afegir són impureses donadores, és a dir, amb un nombre de valència superior al del material original de tal manera que, quan la impuresa s'insereixi en l'estructura quedi un electró lliure; en aquest cas es diu que es creen *estats donadors* just per sota de la banda de conducció ja que en no estar lligat, serà molt més fàcil que salti a la banda de conducció. Per contra, per aconseguir semiconductors tipus P, el que cal és afegir impureses acceptores, és a dir, amb un nombre de valència inferior; en aquest cas es diu que es creen *estats acceptors*, just per sobre de la banda de valència ja que aquest forat tendirà a ser ocupat per un electró d'un enllaç proper que deixarà un forat darrere seu.

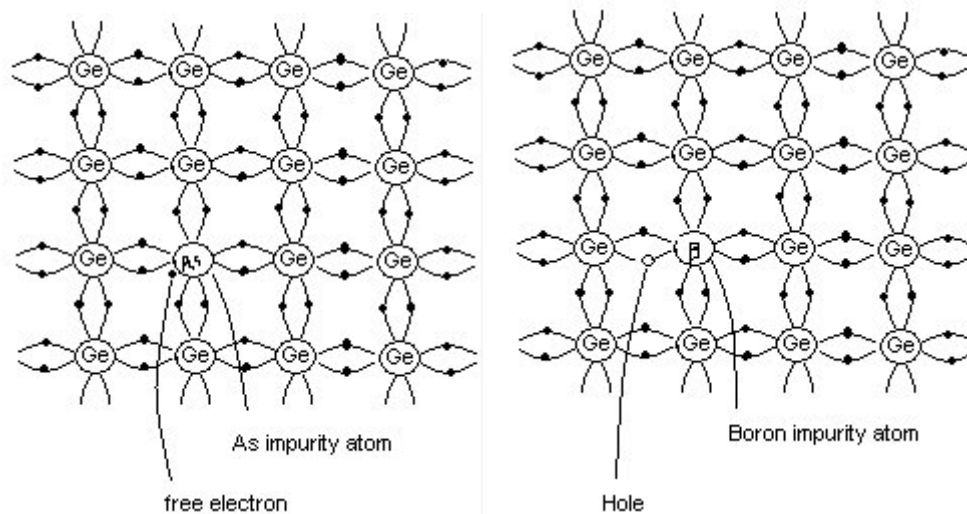


Figura 2.5: Impuresa donadora de As (esquerra). Impuresa acceptora de B(dreta).

Imatge de <http://en2k6.blogspot.com/2008/02/free-electron->

El fet de crear aquests estats extra, per sobre de la banda de valència o per sota de la banda de conducció, contribueix a fer més estreta la banda prohibida i com que la conductivitat del material depèn del nombre d'electrons a la banda de conducció, es pot dir que la conductivitat d'un material dopat serà superior a la d'un material intrínsec.

### 2.1.3 La unió P-N

La base dels detectors de semiconductor es basa en la **unió P-N** (el que es coneix com a díode de semiconductor), que consisteix en dopar dues parts d'un mateix cristall amb impureses donadores d'una banda, de tal manera que es comporti com a tipus N (abundància d'electrons), i acceptores per una altra, de manera que es comporti com a tipus P (abundància de forats). En aquestes condicions, tendirà a produir-se un efecte de difusió d'electrons de N cap a P i una difusió de forats de P cap a N, donant lloc a una intensitat de difusió ( $I_D$ ) en sentit  $P \rightarrow N$ . Com a conseqüència la zona N haurà guanyat forats i la zona P electrons, de manera que s'hauran carregat positiva i negativament, respectivament. Això genera una diferència de potencial que produirà una intensitat d'arrossegament ( $I_A$ ), en sentit  $N \rightarrow P$  ja que N està a un potencial més elevat que P. Com que  $I_A$  i  $I_D$  són corrents oposades hi haurà un moment que s'arribi a l'equilibri i la intensitat de corrent a través de la unió serà  $I_D + I_A = 0$ .

La difusió però, haurà deixat a P i a N una zona quasi buida de portadors al voltant de la unió. Anomenem  $W_N$  a la zona buida de portadors de la banda N i  $W_P$  a la zona en P, conjuntament formen la **zona de depleció** o de **càrrega espacial** d'amplada  $W_Z = W_N + W_P$ .

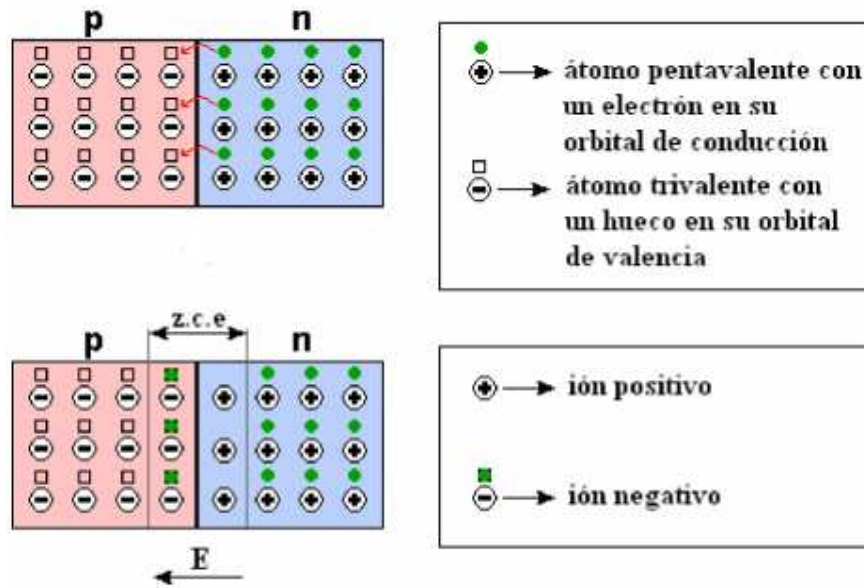


Figura 2.6: Imatge extreta de [http://ocwus.us.es/fisica-aplicada/copy\\_of\\_complementos-de-fisica/temas/TEMA4.pdf](http://ocwus.us.es/fisica-aplicada/copy_of_complementos-de-fisica/temas/TEMA4.pdf)

Si s'analitza la unió tenint en compte el potencial i les càrregues:

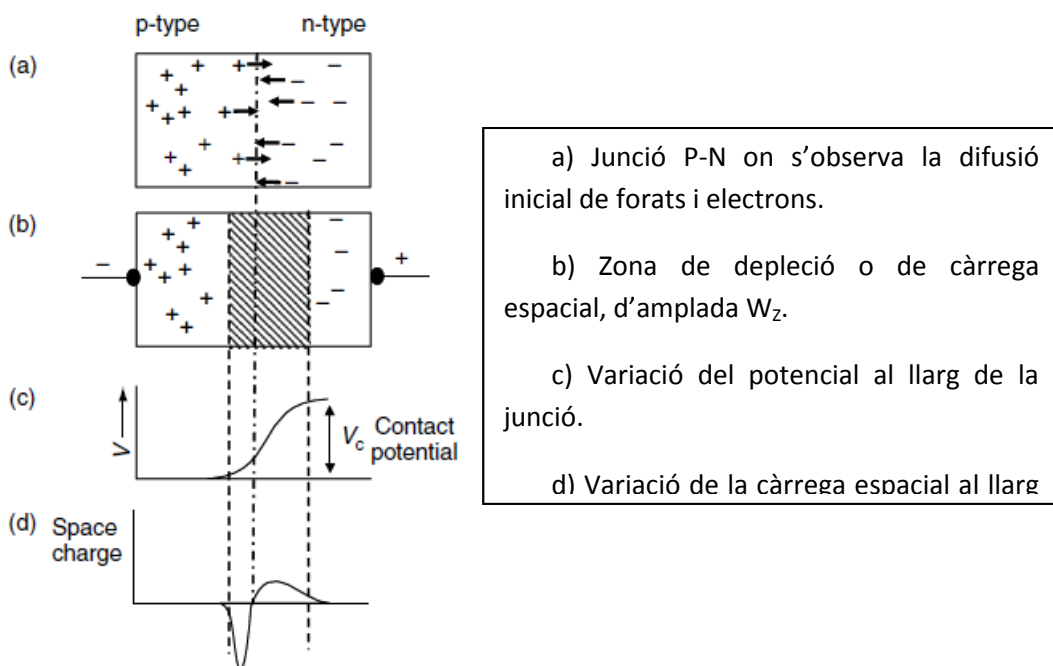


Figura 2.7: Relació entre les càrregues i el potencial que es crea a la zona de depleció [3]

## 2. CONCEPTES BÀSICS

En la figura 2.7 es pot veure que la  $W_p < W_n$ , això és perquè P tenia més impureses que N i es compleix la relació:

$$N_A x_{p0} = N_D x_{n0} \quad 2.2$$

On  $x_{p0}$  indica en 1D la distància de  $W_p$ , mentre que  $x_{n0}$  ho indica per  $W_n$ . I  $N_D$  i  $N_A$  és el número d'impureses donadores i acceptores respectivament.

Això és així perquè el díode en la seva totalitat és neutre, de manera que l'àrea de la càrrega espacial ha de ser la mateixa a ambdues bandes encara que la distribució de càrrega sigui diferent.

Un altre terme que apareix a la figura és el **potencial de contacte**  $V_C$ , degut a què com hem dit la zona N queda carregada positivament i la P negativament. Aquest potencial de contacte ve definit per:

$$V_C = \frac{kT}{e} \ln \left( \frac{N_a \cdot N_d}{n_i^2} \right) \quad 2.3.$$

On  $N_d$  i  $N_a$ , són el nombre de donadors i acceptors respectivament i  $n_i$  el nombre de parells intrínsec de forats i electrons ( $n_i = n = p$ , en el cas intrínsec).

Tal com s'ha descrit però no hi havia cap camp extern, però l'hi podem aplicar. Parlem de **polarització directa** quan el pol positiu s'aplica a P i el negatiu a N, mentre que en la **polarització inversa**, apliquem el pol positiu a N i el negatiu a P. En el primer cas, si diem  $V_b$  al potencial aplicat tindrem que  $V_T = V_C - V_b$ , de manera que  $V_T < V_b$ , això no afecta a la difusió però sí que influeix en el corrent d'arrossegament, la que "fa anar" els electrons de P cap a N (i els forats de N cap a P), en termes de càrregues es pot veure com que en haver connectat el pol positiu a P, tendiran a anar contra el corrent d'arrossegament i creixerà la intensitat en el sentit de la difusió. En aquest cas doncs, s'afavoreix el pas de portadors majoritaris d'un bloc cap al contrari. La zona de depleció tendirà a fer-se més estreta com més gran sigui el potencial aplicat, ja que la ionització a ambdues bandes serà més intensa al voltant de la unió.

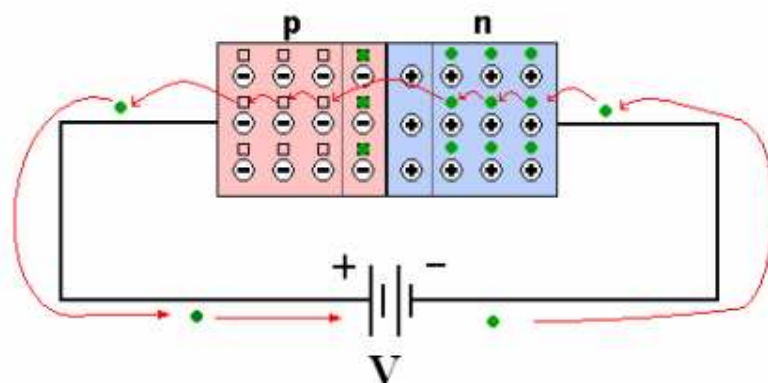


Figura 2.8: Imatge extreta de [http://ocwus.us.es/fisica-aplicada/copy\\_of\\_complementos-de-fisica/temas/TEMA4.pdf](http://ocwus.us.es/fisica-aplicada/copy_of_complementos-de-fisica/temas/TEMA4.pdf)

En la polarització inversa tenim just el contrari, el potencial total serà  $V_T = V_C + V_b$ , de manera que  $V_T > V_b$ . Tenir P connectat al pol negatiu i el positiu a N, afavorirà el corrent d'arrossegament ja que els electrons de la zona N tendiran a marxar cap al pol positiu de la bateria (adquirint càrrega positiva), mentre que els electrons procedents del pol negatiu cancel·laran els forats de la zona P (adquirint càrrega negativa). En aquest cas doncs, s'afavoreix el pas de portadors minoritaris d'un bloc cap a l'altre i la zona de càrrega espacial augmentarà.

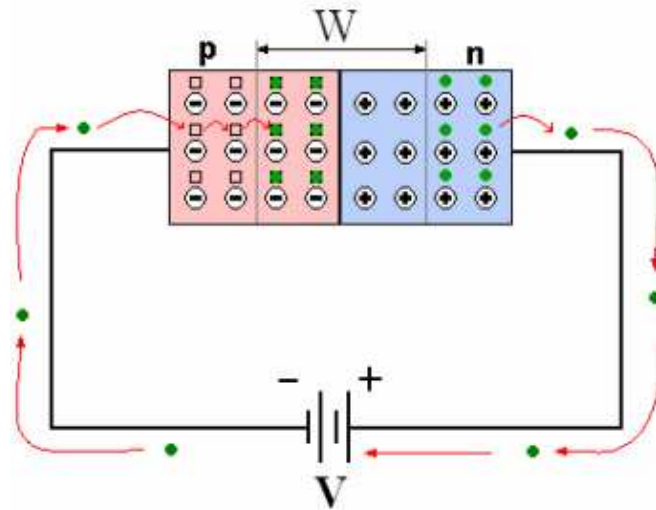


Figura 2.9: Imatge extreta de [http://ocwus.us.es/fisica-aplicada/copy\\_of\\_complementos-de-fisica/temas/TEMA4.pdf](http://ocwus.us.es/fisica-aplicada/copy_of_complementos-de-fisica/temas/TEMA4.pdf)

A partir d'aquí doncs podem trobar una relació entre l'amplada de la zona de depleció i el potencial aplicat:

$$W_z \approx [2\kappa\mu\rho(V_c + V_b)]^{1/2} \quad 2.4.$$

On  $\kappa$  és la constant dielèctrica,  $\rho$  la resistivitat del material i  $\mu$ , la mobilitat de la càrrega majoritària en el material.

La zona de depleció és l'element actiu en un detector, de manera que en l'espectrometria gamma ens interessarà maximitzar l'amplada d'aquesta zona ( $W_z$ ) i, per tant, s'utilitza la polarització inversa. L'objectiu és doncs, obtenir la màxima amplada de la zona de depleció amb el mínim voltatge  $V_b$ ; si ens fixem amb la definició de la resistivitat:

$$\rho = \frac{1}{(eN\mu)} \quad 2.5.$$

On  $N$  és la concentració de dopants en el material.



Es pot extreure que com menys quantitat de dopants s'utilitzin més gran serà la resistivitat, cosa que ja ens convé perquè, com es pot veure a l'equació (2.5), es maximitzi  $W_2$ . A més, a mesura que s'augmenta la mida del detector, més s'ha de reduir la concentració d'impureses per tal que el  $V_b$  requerit no sigui massa gran. Per això per a la detecció gamma s'utilitzen els HPGe (High-Purity Germanium).

## 2.2 Detecció gamma

Quan un raig gamma arriba al detector produirà una sèrie d'electrons primaris amb energies força per sobre de l'energia tèrmica. Aquests electrons poden provocar l'excitació necessària per arrencar electrons de bandes ocupades més fondes que la capa de valència fins a nivells, per sobre de la banda de conducció. Tant forats com electrons però, s'aniran recol·locant a les bandes d'energia disponibles fins a acabar, els forats a la part superior de la capa de valència i els electrons a la base de la capa de conducció, com es pot veure a la figura 2.2. Aquest procés de desexcitació pot provocar alhora, més excitacions, de tal manera que es produeix una cascada d'electrons i forats per cada interacció primària.

En absència d'un camp elèctric extern, l'electró acaba retornant per desexcitació a la banda de valència, de manera que es restauen les poblacions típiques d'una excitació tèrmica, a la capa de valència i a la capa de conducció. En aplicar un camp però, migraran seguint el gradient elèctric. El nombre de parelles electró-forat  $n$  produït estarà directament relacionat amb l'energia del raig gamma absorbit ( $E_{abs}$ ), de tal manera que si  $\epsilon$  és l'energia necessària per a la creació d'una parella electró forat:

$$n = \frac{E_{abs}}{\epsilon} \quad 2.6.$$

A partir d'aquesta expressió es pot veure que caldran materials amb baixes  $\epsilon$ , però hi ha altres factors determinants en l'elecció del material:

- Han de tenir un elevat coeficient d'absorció, per tant una elevada  $Z$ .
- Han de tenir baixa  $\epsilon$  per produir el màxim de parelles electró-forat.
- Permetre una bona mobilitat d'electrons i forats.
- Estar disponibles en un grau d'alta puresa.
- Estar disponibles en la quantitat suficient i a un preu raonable.

A partir d'aquí apareixen una sèrie de candidats que es mostren a la taula 2.1.

Material	Atomic number	Operating temperature	Band gap (eV) <sup>a</sup>	$\epsilon$ (eV) <sup>a,b</sup>	Density (g cm <sup>-3</sup> )	Mobility (cm <sup>2</sup> V <sup>-1</sup> s <sup>-1</sup> ) <sup>a</sup>	
						Electrons	Holes
Si	14	RT	1.106	3.62	2.33	1350	480
Ge	32	Liquid N <sub>2</sub> (77 K)	0.67	2.96	5.32	3.6 × 10 <sup>4</sup>	4.2 × 10 <sup>4</sup>
CdTe	48, 52	RT	1.47	4.43	6.06	1000	80
CdZnTe	48, 30, 52	RT	1.57	4.64	5.78	1000	50–80
HgI <sub>2</sub>	80, 53	RT	2.13	4.22	6.30	100	4
GaAs	31, 33	RT	1.45	4.51	5.35	8000	400
TlBr	81, 35	-20 °C	2.68	?	7.56	—	—
PbI <sub>2</sub>	82, 53	—	2.6	7.68	6.16	8	2
GaSe	31, 34	—	2.03	6.3	4.55	—	—
AlSb	13, 51	—	1.62	5.05	4.26	—	—
CdSe	48, 34	—	1.75	?	5.74	—	—

<sup>a</sup> Values are given at 77 K for Ge and 300 K otherwise.

<sup>b</sup> Electron-hole creation energy.

Taula 2.1: Paràmetres de materials candidats per als detectors [3]

A causa del baix nombre atòmic del Si, aquesta opció només resulta pràctica per fotons de baixes energies. De manera que el Ge és l'opció més estesa.

Els detectors de germani que s'utilitzen al laboratori LARA són de tipus coaxial, el que significa que a partir d'un cristall cilíndric de germani, un contacte se situa a la superfície exterior, mentre que per l'altra s'extreu una part del nucli d'aquest cilindre i es col·loca en la superfície interior del forat. Com es veu a continuació, quan el contacte exterior es la zona N (dopada amb donadors) diem que es tracta d'un semiconductor tipus *p*, mentre que quan el contacte exterior és la zona P (dopada amb acceptors) diem que és de tipus *n*.

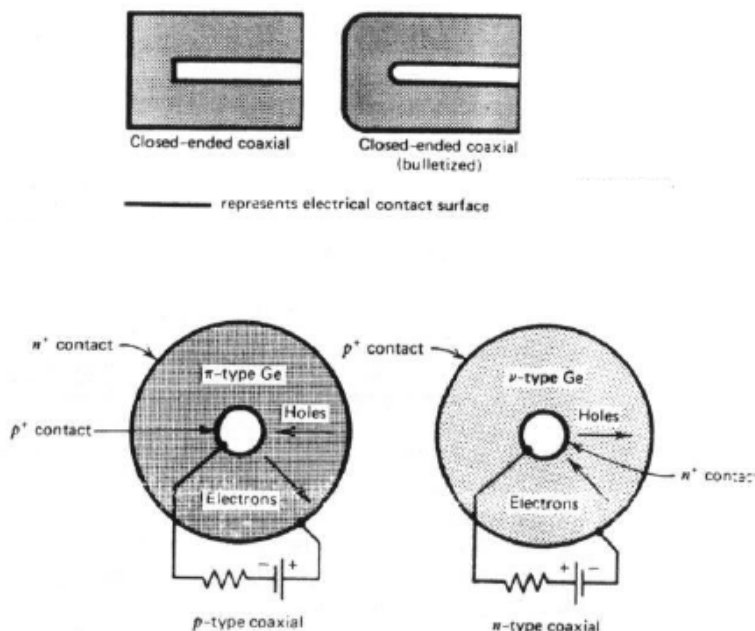


Figura 2.10: A la imatge superior es veuen talls en el sentit de l'eix z de cristalls cilíndrics. Mentre que a la imatge d'abaix apareixen seccions perpendiculars a l'eix z i les dues configuracions possibles, tipus *p* o tipus *n*. [12]

Es pot observar en la part superior de la figura 2.10 que una de les dues seccions apareixen “bulletitzada”, la qual cosa significa que s’han arrodonit les vores dels contactes. Aquest disseny s’utilitza per reduir les zones de baix camp elèctric que suposen les cantonades dels detectors sense bulletitzar, la qual cosa provoca que les interaccions que tinguin lloc en aquesta zona difícilment seran detectades, ja que el transport de càrrega serà molt més lent que a la resta del detector.

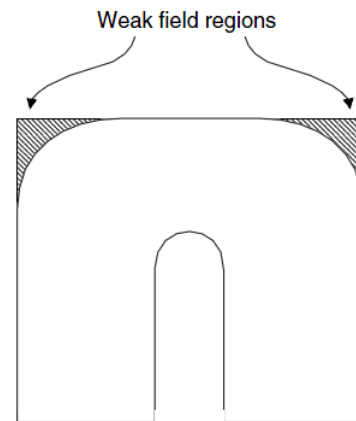


Figura 2.11: Bulletització del detector [3]

El camp aplicat en un detector de tipus coaxial compleix:

$$|E(x)| = \frac{eNr}{2\kappa} + \frac{V - (eN/4\kappa)(r_2^2 - r_1^2)}{r \ln(r_2/r_1)} \quad 2.7.$$

On  $r$  és la distància d’interacció des del centre del detector,  $N$  és la concentració d’impureses acceptores i  $\kappa$  és la constant dielèctrica.

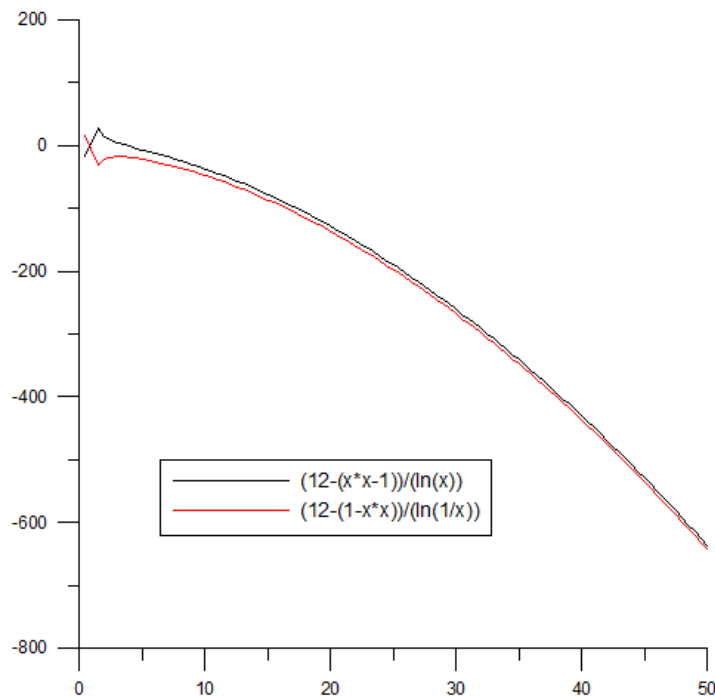


Figura 2.12: Gràfica del comportament del camp elèctric en funció de  $r_1$  i  $r_2$  per il·lustrar l’equació 2.7. S’ha donat un valor  $V=12V$  com a simple exemple numèric.

De l'equació es pot extreure que per una determinada mida del detector, més gran serà el camp com més petit sigui el forat central ( $r_1$ ). I d'altra banda per un mateix voltatge aplicat  $V$ , l'increment de la mida del detector fa decreixer el camp elèctric. Per tal que es vegi més clarament, a la figura 2.12 s'ha il·lustrat el comportament del segon terme de la funció 2.7 en la seva dependència en  $r_1$  i en  $r_2$ , com es pot veure fer créixer un o altre terme porta com a conseqüència que decreixi el camp. Això és de destacar perquè mides més grans podran recol·lectar més càrrega de partícules secundàries però s'hauran d'alimentar amb voltatges més elevats, ja que sinó un camp elèctric massa baix provocarà que els portadors de càrrega (electrons i forats) vagin a velocitats massa baixes per al correcte funcionament del detector.

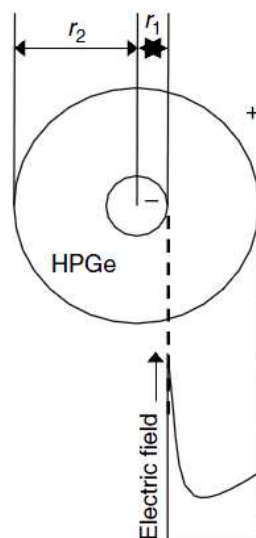


Figura 2.13: Comportament del camp elèctric per un detector coaxial [3]

Els nostres detectors però són de tipus "closed-end coaxial", és a dir, tal com es veu a la figura 2.11 la part superior del detector queda sense foradar. Aquesta forma complica més la variació del camp però la idea del detector coaxial serveix de referència.

### 2.2.1 Caracterització dels detectors HPGe

Els detectors de germani, pel fet de ser de tipus semiconductor, és necessari que estiguin ben refrigerats per evitar el pas d'electrons a la banda de conducció per la simple excitació tèrmica. Això fa necessària la presència d'un criòstat en la seva estructura:

- El detector s'ha de mantenir a una temperatura propera als 77 K (-196,15 °C).
- Cal que el detector es mantingui al buit per evitar la condensació, ja que per captar la senyal serà necessària la presència d'alimentadors elèctrics.
- La capa superior, que normalment es tractarà d'una finestra de carboni o beril·li, ha de ser prou prima per permetre el pas de la radiació gamma però prou resistent per aguantar el buit i proporcionar una protecció raonable del detector.

- El criòstat ha d'aïllar, tant com sigui possible, el detector de vibracions mecàniques.

Per aconseguir aquestes temperatures tant baixes el més comú és utilitzar la refrigeració per nitrogen líquid.

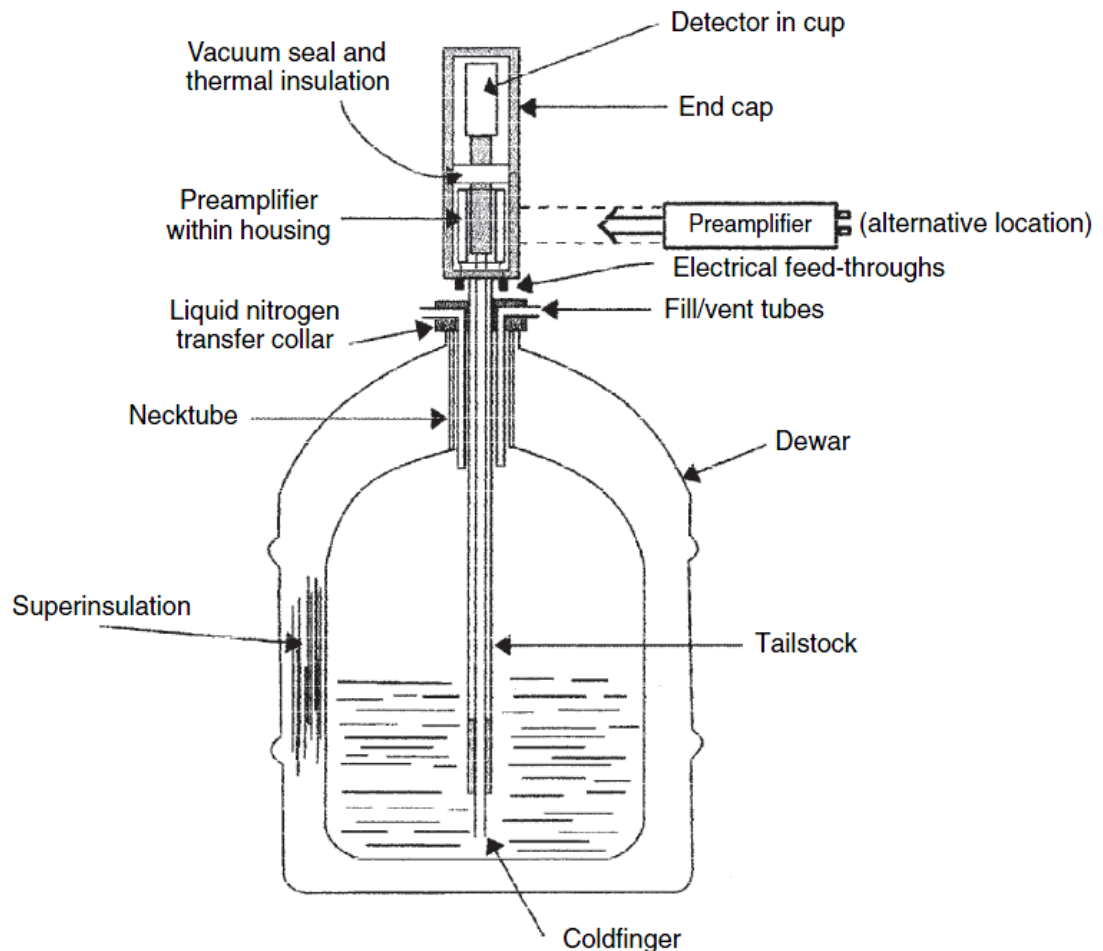


Figura 2.14: Detector de germani convencional, amb el criòstat i el dipòsit de nitrogen [3]

Dins el nucli foradat del detector se situa el “cold finger” (dit fred) de coure que entra fins al dipòsit de nitrogen. Aquests dipòsits normalment contenen al voltant de 30 l de nitrogen; tenint en compte que la taxa d’evaporació és d’uns 0,5 l al dia, les millors expectatives esperarien una durada de dues setmanes per un Dewar d’aquest tipus.

Al voltant del *cold finger* és on normalment es troba situat el preamplificador. En dissenys per a mesures de baixes energies, sovint es col·loca un blindatge de plom d’alta puresa entre la carcassa i el preamplificador, per tal de protegir el detector de les petites quantitats de radioactivitat present en els materials de construcció del preamplificador. Aquest preamplificador té la funció recollir la càrrega produïda per una interacció gamma, de manera que és una interfície entre el detector i l’amplificador.

A continuació s'enumeren una sèrie de paràmetres que són determinants en el comportament del detector i que, per tant, tindran una atenció especial en la simulació.

### 2.2.1.1 La capa morta

La capa morta d'un detector es deu als contactes  $p$  i  $n$ , de manera que la tindrem tant a la superfície més exterior com a la superfície del voltant del forat del nucli, tal com s'aprecia a la figura 2.10. Aquesta és una zona on no hi haurà detecció, de tal manera que el volum susceptible de detectar radiació serà inferior al volum del cristall de germani.

El liti s'utilitza sovint per al contacte  $n+$  (el símbol "+" indica un dopatge intens), ja que tendeix a cedir l'electró que té a la capa  $2s^1$ , la seva difusió produeix una capa morta d'uns  $700\mu\text{m}$  de gruix. En canvi, la capa morta per implantació iònica en un contacte  $p+$  és de només uns  $0.3\mu\text{m}$ . És per aquest motiu que per a detectors de baixes energies, el més habitual és trobar detector tipus  $n$ , és a dir, amb el contacte  $p+$  a la zona més exterior. Malgrat tot aquests no són els més comuns degut a certes desavantatges que es comentaran a continuació (sobretot el cost), l'habitual és parlar de detector tipus  $p$ , de manera que s'estableix un límit de  $40\text{ keV}$  per a la correcta detecció de gammes; per sota d'aquest valor, l'atenuació a la capa morta distorsiona massa el resultat.

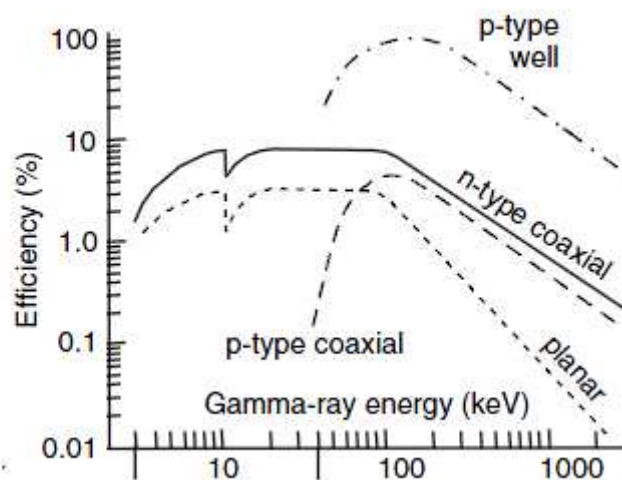


Figura 2.15: Eficiències en funció del tipus de detector utilitzat [3]

A la figura 2.15 apareixen les corbes de detectors tipus *well* i tipus *planar* que no es tracten perquè no són del tipus dels que hi ha disponibles en el laboratori LARA, però es tracta de configuracions alternatives als de tipus coaxial. En aquesta figura s'aprecia clarament com els detectors tipus  $n$  tenen un comportament molt millor que qualssevol altre a baixes energies, exceptuant un petit salt que hi ha al voltant dels  $11\text{ keV}$  i que es deu justament a l'energia de raigs X característics tipus K del Ge.

A part de l'eficiència, els detectors tipus  $n$  presenten l'avantatge de ser més resistents als possibles danys neutrònics. Com a desavantatge hi ha el seu elevat cost i el risc potencial de tenir més problemes de pics suma, ja que en permetre el pas de raig X que en un detector tipus  $p$  s'haurien absorbit, hi ha més possibilitats que es doni aquest fenomen que s'explicarà a continuació.

### 2.2.1.2 La finestra del detector

La finestra del detector compleix una funció de protecció de l'aparell, així com una zona excepcional en la carcassa d'alumini on situar la font i tenir una atenuació menor però malgrat tot present.

Habitualment el material d'aquestes finestres era d'alumini o magnesi però més actualment se n'han desenvolupat de fibres i compostos de carboni (com és el cas dels del laboratori LARA). El beril·li també és un material habitual. Aquests nous materials tenen l'avantatge de ser menys densos i per tant mostrar eficiències més altes a baixes energies ( $\rho_{Al}= 2,698 \text{ g/cm}^3$ ,  $\rho_{Be}= 1,848 \text{ g/cm}^3$  i  $\rho_{FC}= 1,750 \text{ g/cm}^3$ ). El fet que les baixes energies siguin més susceptibles a aquest efecte de la densitat s'analitza en el següent punt.

## 2.3 Desintegracions gamma i de raigs-X

Tant les desintegracions gamma com els RX són processos nuclears. Quan es produeix una desintegració, ja sigui per procés  $\alpha$ ,  $\beta$  o captura electrònica, el nucli fill queda en un estat excitat, la seva desexcitació és la que provocarà emissions gamma o de RX. En el primer cas, l'energia que resulta de la diferència entre nivells es detecta directament en forma de raig gamma; en el segon en canvi, aquesta energia provoca l'expulsió d'un electró de l'òrbita de l'àtom (**electró de conversió interna, CE**). La vacant que queda serà coberta per un electró d'una òrbita superior que, per tant, baixarà a un nivell energètic inferior, provocant l'emissió d'aquesta energia, que en aquest cas seran **raigs X**; alhora haurà quedat una vacant que caldrà cobrir per un electró d'una capa superior. Com en el cas anterior però, pot ser que aquesta energia sigui empleada per arrencar un segon electró (**electró Auger**).

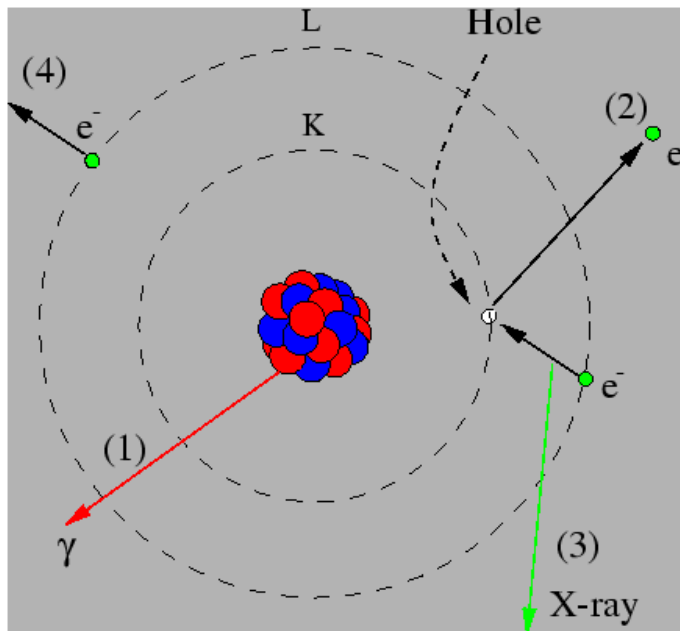


Figura que mostra les diferents formes de desexcitació del nucli. El nucli pot desexcitar-se per emissió gamma (1), però també pot provocar l'emissió d'un àtom de l'escorça (2). El forat que deixi aquest electró l'emplenarà un altre d'un nivell superior, l'excés energètic provocarà emissió de RX (3) o un electró Auger (4).

Imatge de <http://www.nuclear.kth.se/courses/lab/latex/internal/internal.html>

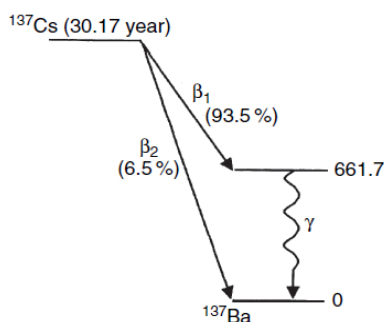
Figura 2.16: Possibles processos de desexcitació d'un nucli

Com es pot observar doncs el procés d'emissió gamma i de conversió interna són competitiu, així es defineix el **coeficient de conversió interna**:

$$\alpha = \frac{\text{nombre d'electrons IC creats}}{\text{nombre de raigs gamma emesos}} \quad 2.8.$$

A l'escorça dels àtoms els electrons se situen en diferents nivells (òrbites). Que siguin arrencats d'òrbites més internes o més externes dependrà de l'energia disponible, d'aquesta manera es parla de  $\alpha_K, \alpha_L, \dots$  segons l'electró de conversió interna sigui de la capa K, L, ... Aquest coeficient, que determina la probabilitat de que hi hagi conversió interna per davant de l'emissió gamma, depèn de cada desintegració i influeixen factors molt diversos, però a grans trets es pot dir que el coeficient  $\alpha$  creix quan el nombre atòmic Z creix i quan  $\Delta E$  decreix.

L'espectre del Cs-137 serveix d'exemple per il·lustrar aquesta forma alternativa de desexcitació.



A la figura 2.17 s'aprecia que un 93.5% de les vegades, la desintegració del Cs-137 porta a un nivell d'excitació de 661.7 keV. Tot i així la gamma d'aquesta energia, es coneix que té una abundància del 85.1%. Per tant això significa que un 8.4% de les vegades el nucli utilitza una manera alternativa de desexcitació: la conversió interna.

Figura 2.17: Esquema de desintegració del Cs-137. [3]



Per tant la figura 2.17 realment es pot reinterpretar com mostra la figura 2.18.

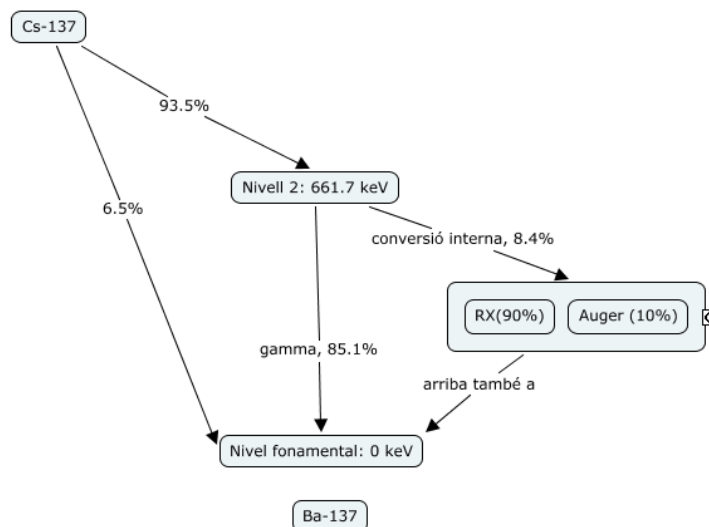


Figura 2.18: Esquema de desexcitació del Cs-137 tenint en compte gammes i RX

És important tenir en compte que en el cas que s'està il·lustrant, el Ba-137 (resultat de la desintegració del Cs-137) només s'ha tingut en compte el segon nivell de d'excitació (ja que el nivell 1 és molt poc probable i així l'exemple resulta més clar), però el més habitual és que els nivells siguin diversos i, en aquests casos, per cada decaïment s'han de tenir en compte les dues possibles opcions: gamma o conversió interna. És per aquest motiu que hi ha opcions de tenir pics suma (fenomen que s'explicarà a continuació en una secció) entre gammes, entre raigs X o entre gammes i raigs X.

Alhora d'interpretar les taules, com es veurà amb més detall en següents capítols, és important conèixer les nomenclatures més comunes per identificar les desexcitacions. Ja s'ha comentat que els coeficients de conversió interna indiquen amb un subíndex la capa de la qual s'ha arrencat l'electró. D'una forma similar, en el cas dels raigs X que procedeixen de la pèrdua energètica que pateix un electró en canviar d'òrbita, entre quins nivells ha estat la recol·locació.

La nomenclatura que s'utilitza és indicar en lletra majúscula l'òrbita de destí (on s'ha produït la vacant), acompanyada d'un subíndex de l'alfabet grec que identifica l'òrbita d'origen, on  $\alpha$  representa l'òrbita L,  $\beta$  representa la M,  $\gamma$  representa la N, és a dir, seguint l'ordre de l'alfabet grec. Així per exemple, un raig X procedent d'un electró que passa de la capa L a la capa K s'identifica com  $K_{\alpha}$ . S'ha de tenir en compte però, que les òrbites electròniques tenen sub-capes internes (es diu que les capes estan *degenerades*) en el que es coneix com a *estructura fina* de l'àtom, d'aquesta manera les possibilitats de moure's entre nivells augmenten tal com il·lustra la figura 2.19 b.

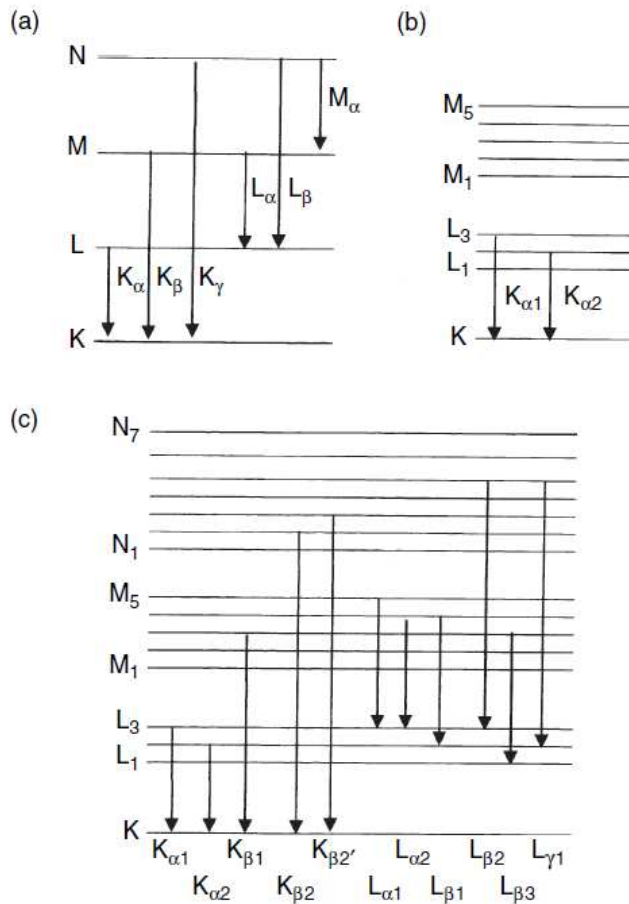


Figura 2.19: En l'apartat a) s'observa la nomenclatura dels raigs X de forma simple, en el b) tal com és en realitat, tenint en compte l'estructura fina i c) és una mostra més amplia de b) . [3]

Pel que fa a la nomenclatura dels electrons Auger la nomenclatura es fa tota amb lletres majúscules de l'alfabet llatí. La nomenclatura la formen tres lletres (ABC), on A indica la òrbita destí (on ha quedat la vacant deguda a l'electró de conversió interna), B l'òrbita origen (l'òrbita de la que baixa un electró per cobrir la vacant) i C l'òrbita de l'electró Auger. Així KLL indica que un electró de la capa L, ha cobert la vacant deixada a la capa K i, com a conseqüència de la diferència energètica ha sortit un electró Auger de la capa L; això és possible perquè tal com es mostra a la figura 2.19 l'òrbita L està degenerada.

A l'annex 2 on s'analitzen en detall les taules de l'Am-241 (d'espectre complex) es mostren més exemples d'aquesta nomenclatura, tant per als raigs X com per als electrons Auger.

## 2.4 Mecanismes d'interacció de la radiació gamma

El coeficient d'atenuació lineal és un paràmetre que mesura quina part de la radiació podrà travessar un material, aquest valor depèn tant de la composició del material com de l'energia d'aquesta radiació.

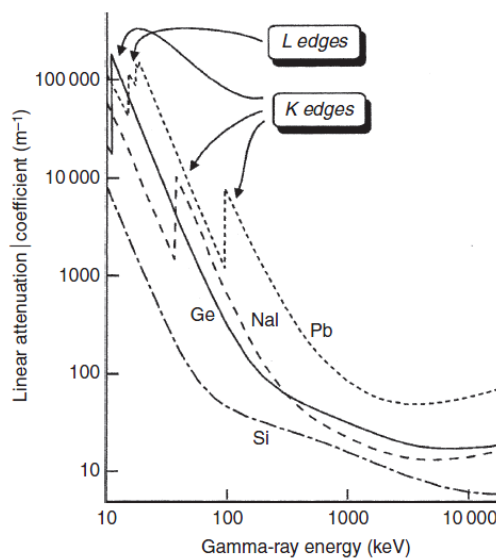


Figura 2.20: Variació del coeficient d'atenuació de diferents materials en funció de l'energia de la radiació [3]

A la figura 2.20 es posa de manifest tant la dependència en energia com del tipus de material. Així per nombres atòmics elevats, aquest coeficient es més alt que per nombres atòmics baixos. Conèixer aquests valors permet triar els materials en funció de la seva aplicació, el germani serà un material millor per detectar que el Si ja que absorbirà més energia; mentre que el plom serà millor blindatge que qualssevol de la resta que apareix a l'esquema.

L'explicació d'aquesta forma que pren la funció del coeficient lineal és una suma de contribucions.

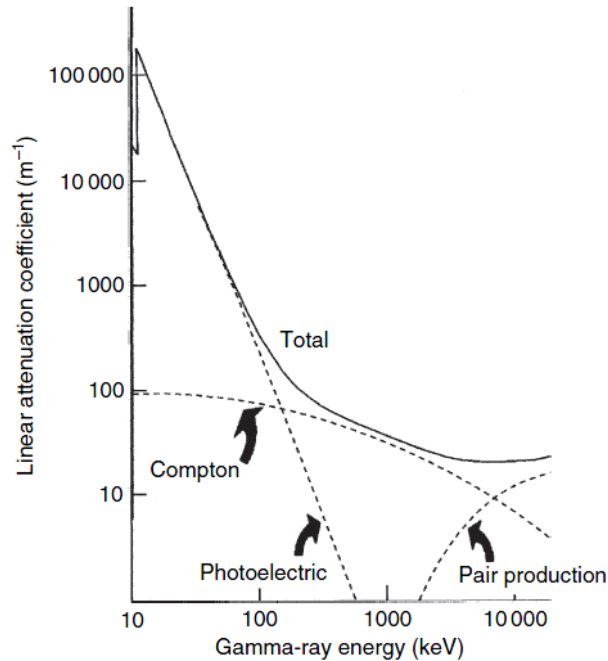


Figura 2.21: Contribucions al factor d'atenuació lineal [3]

La contribució de l'efecte fotoelèctric domina a baixes energies, l'efecte Compton en el rang intermig i a altes energies predomina la producció de parells. A més d'aquestes interaccions també es poden produir col·lisions elàstiques però, com que en aquest cas les gammes només canvien la seva direcció i no la seva energia, no transmeten cap energia al detector i no produeixen senyal. En canvi en les interaccions que suposen una pèrdua d'energia per part de les gammes, aquesta energia serà cedida als electrons del medi (germani en el nostre cas) i per tant contribuirà a la senyal de sortida.

#### 2.4.1 Absorció fotoelèctrica

L'absorció fotoelèctrica es deu a la interacció del fotó incident amb un dels electrons de l'escorça de l'àtom, de tal manera que l'arrenca amb una energia que serà:

$$E_e = E_\gamma - E_b \quad 2.9.$$

On  $E_\gamma$  és l'energia de la gamma incident,  $E_b$  és l'energia d'enllaç de l'electró i  $E_e$  és l'energia amb que surt l'electró arrencat.

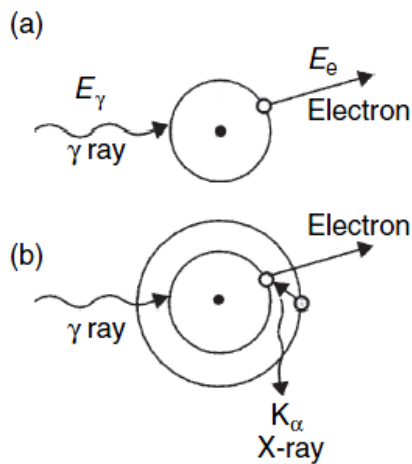


Figura 2.22: a) Efecte fotoelèctric i b) emissió de raigs X característics [3]

L'àtom que ha patit l'impacte de la gamma quedarà en un estat excitat i per retornar a l'equilibri, un electró d'una òrbita superior caurà a cobrir la vacant, patint una pèrdua energètica pel fet de baixar a un nivell inferior. Aquesta diferència energètica pot provocar que s'arrenquin altres electrons de capes superiors (cascada Auger) els quals cediran l'energia al detector. O bé una altra opció es que s'emeti aquesta energia, que estarà en el rang dels raigs X i per això aquesta emissió es coneix com a **emissió de raigs X característics**, els quals alhora poden provocar efectes fotoelèctrics.

L'òrbita de la qual s'arrenca l'electró depèn de l'energia de la radiació incident. Normalment és prou elevada, de manera que el més probable es que s'arrenqui de la capa K (la més interior), però si no té prou energia pot ser de la capa L o M. Aquesta és l'explicació dels pics que apareixen a la figura 2.20; aquestes vores d'absorció se situen just a l'energia d'enllaç dels electrons a la corresponent òrbita. A mida que l'energia augmenta baixa el coeficient d'atenuació (és més fàcil que passin sense interaccionar) però quan s'assoleix l'energia suficient per arrencar un electró, l'absorció creix de sobte, de nou tornarà a baixar fins que s'assoleixi la suficient per arrencar l'electró d'una altra òrbita; és per això que en aquesta figura 2.20 primer apareixen les **vores L** i després les **vores K**, perquè l'energia que cal per aquestes segones és més alta. Com es pot veure però s'està parlant d'un rang baix, així en el cas del germani per exemple, la vora K està a tan sols 11.1 keV i la vora L ni apareix, la qual cosa significa que una mínima energia és suficient per arrencar els electrons d'aquesta capa.

Si s'anomena  $\tau$  a la secció eficaç per l'absorció fotoelèctrica es pot dir:

$$\tau \propto Z^n / E_\gamma^m \quad 2.10.$$

On  $n$  i  $m$  són paràmetres semiempírics que varien entre 3 i 5. D'aquí s'extreu que materials d'elevada  $Z$  absorbiran millor en termes de l'efecte fotoelèctric.

El coeficient d'atenuació fotoelèctric ( $\mu_{FE}$ ) es relaciona de la següent manera amb la secció eficaç:

$$\mu_{FE} = \tau \times \rho \times N_A / A \quad 2.11.$$

On  $N_A$  és el número d'Avogadro i  $A$  la massa atòmica. La intervenció de la densitat en aquesta expressió posa de manifest que materials amb densitats més elevades, patiran més atenuació per efecte fotoelèctric i, com que aquest efecte és important a baixes energies, en aquest rang el fet d'augmentar la densitat tindrà més afectació que no pas per energies elevades.

En els espectres experimentals s'identifica el fòtòpic (pic fotoelèctric) amb l'energia de la gamma, la qual cosa implica tota l'energia al final s'ha dipositat al detector, ja sigui a través dels electrons Auger o perquè els raigs X han provocat nous efectes fotoelèctrics que alhora també han estat absorbits. Ara bé, pot donar-se el cas (sobretot en successos propers a la superfície) que raigs X escapin del detector, de manera que l'energia que llavors es detectarà serà:

$$E_e = E_\gamma - E_{K\alpha} \quad 2.12.$$

On els raigs X  $K\alpha$  són els que es donen quan cau un electró de la capa L a la K i, per tant dels més energètics i més susceptibles a escapar.

Aquest fenomen es coneix com a escapament de raigs X i origina en l'espectre el **pic d'escapament de raigs X**, el qual se situa a l'esquerra del fòtòpic (perquè és menys energètic) i també més baix ja que és no és tan probable.

#### 2.4.2 Efecte Compton

En aquesta interacció la radiació gamma impacta contra un electró però li cedeix, a diferència del cas anterior, només part de la seva energia.

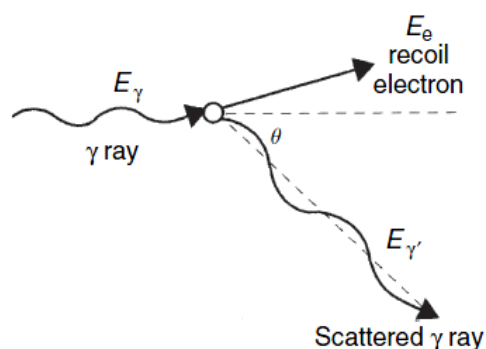


Figura 2.23: Efecte Compton [3]

De manera que l'energia de l'electró serà:

$$E_e = E_\gamma - E'_\gamma \quad 2.13.$$

On  $E_\gamma$  és l'energia de la gamma incident i  $E'_\gamma$  és l'energia després de l'impacte. En el cas que es tracti d'un electró lligat a un àtom, que és el més habitual, cal tenir en compte de treure l'energia corresponent a arrencar l'àtom però sovint, es tracta d'electrons molt externs on la seva energia d'enllaç és insignificant. Si s'aplica la conservació del moment i l'energia l'expressió 2.13 es transforma en:

$$E_e = E_\gamma \left\{ 1 - \frac{1}{\left[ 1 + E_\gamma(1 - \cos\theta)/m_0c^2 \right]} \right\} \quad 2.14.$$

On com s'observa a la figura 2.23  $\theta$  és l'angle de desviació de la gamma. Així per  $\theta=0^\circ$  no es transmet cap energia a l'electró ni per tant al detector, per contra si  $\theta=180^\circ$ , la gamma cedeix tota la seva energia.

La secció eficaç de l'efecte Compton, està relacionada tant amb l'energia de la gamma com amb el nombre atòmic del material:

$$\sigma \propto f(Z, E_\gamma) \quad 2.15.$$

Però com que la relació entre massa i nombre atòmic ( $A/Z$ ) és gairebé constant en gran part de la taula periòdica (al voltant de 2), la dependència està més en la densitat que no pas en el nombre atòmic del material. Com més dens sigui un material més s'afavorirà aquesta interacció. Des del punt de vista de la partícula es pot interpretar que en un material més dens hi haurà més concentració d'electrons per volum, de manera que serà més probable que la gamma hi interaccioni.

### 2.4.3 La producció de parells

En aquest cas la interacció es produeix amb tot l'àtom i no només amb els seus electrons. Es produeix quan la gamma interacciona amb el camp coulombià de l'àtom i es transforma en una parella electró-positró.

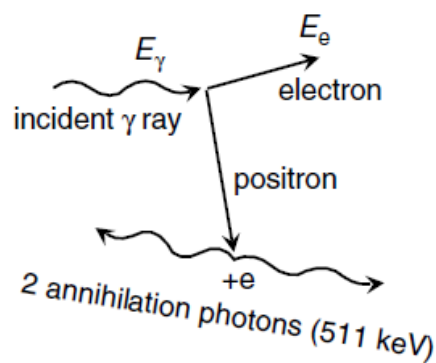


Figura 2.24: Producció de parells [3]

Aquesta parella creada aniran cedint l'energia al medi (el detector) i, en el cas del positró, acabarà aniquil·lant-se amb un electró del medi i donant lloc a dos fotons de 511 keV (ja que l'aniquil·lació es produeix quan el positró es troba ja gairebé frenat i s'ha de conservar la massa) cadascú que sortiran en direccions oposades per tal de conservar el moment, tal com es veu a la figura 2.24. Si aquests fotons s'absorbeixen en el detector, s'haurà cedit tota l'energia de la gamma incident i serà un recompte que anirà a parar al fotopic, ara bé si escapen llavors es produirà el que es coneix com a **escapament doble**:

$$E_e = E_\gamma - 1022 \quad 2.16.$$

O si només n'escapa un es produirà l'**escapament simple**:

$$E_e = E_\gamma - 511 \quad 2.17.$$

De manera que en l'espectre es produiran pics a 1022 keV a l'esquerra del fotopic representant l'escapament doble i a 511 keV representant l'escapament simple.

Com es pot extreure de les expressions, cal que la gamma incident sigui de com a mínim 1022 keV per poder donar lloc a electró i positró (d'energia en repòs 511 keV cadascun). És per aquest motiu que es tracta d'un efecte que predomina a altes energies.

## 2.5 Els coeficients d'atenuació

Les corbes que s'observen a la figura 2.20 són la suma de coeficients per cadascun dels processos d'interacció:

$$\mu_T = \mu_{PE} + \mu_{CS} + \mu_{PP} + \mu_{RS} \quad 2.18.$$

On el terme  $\mu_{RS}$  es refereix al coeficient d'atenuació per interacció Rayleigh, que es tracta d'una interacció elàstica i, com s'ha dit no diposita energia en el detector però, tot i així, la col·lisió provocarà que aquella gamma surti del feix principal.

En termes de seccions eficaces l'expressió 2.18 queda:

$$\mu_T = (\rho \times N_A/A)(\tau + \sigma + \kappa + \sigma_{RS}) \quad 2.19.$$

O bé:

$$\mu_T/\rho = (N_A/A)(\tau + \sigma + \kappa + \sigma_{RS}) \quad 2.20.$$

Per veure la forma en què aquest coeficient atenua un feix gamma, la llei de Beer-Lambert ens descriu l'atenuació lineal que pateixen els fotons al llarg d'un material:

$$I = I_0 e^{-\mu x} \quad 2.21.$$



## 2. CONCEPTES BÀSICS

On  $\mu$  és coneix com el factor d'atenuació lineal i té unitats inverses de longitud.

Sovint en comptes d'utilitzar-se aquest coeficient, es fa servir el coeficient d'atenuació màssic ( $\mu/\rho$ ), de manera que llavors l'expressió 2.21 es transforma en:

$$I = I_0 e^{-\frac{\mu}{\rho} \rho x} \quad 2.22$$

A continuació es mostren una sèrie de gràfiques com les de figura 2.20 però individualitzades per una sèrie d'elements, per tal d'apreciar amb més detall com aquest factor és característic de cada material i varia amb l'energia:

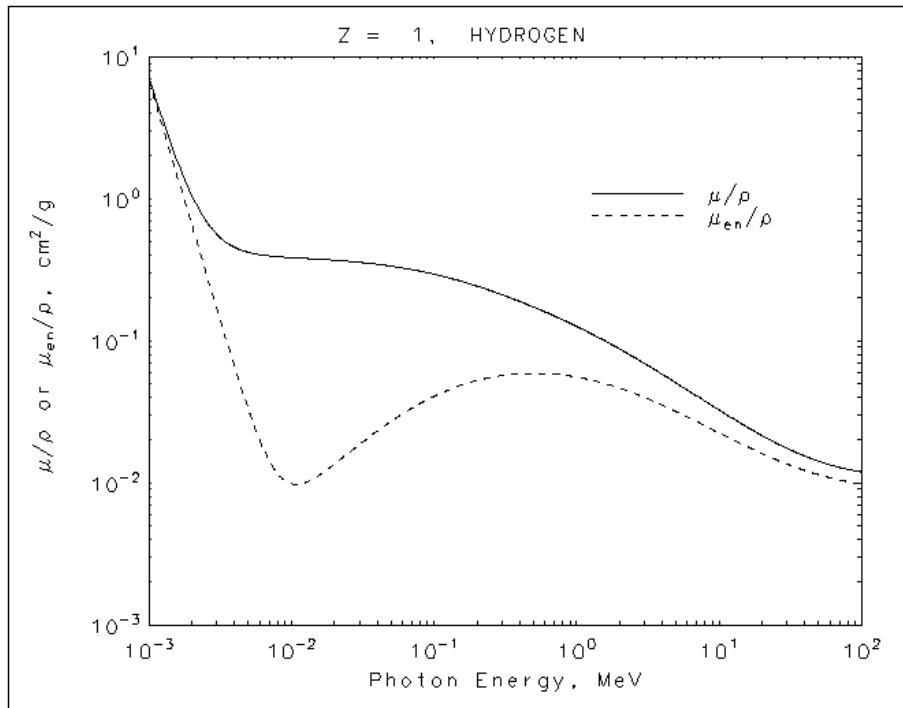


Figura 2.25: Coeficient d'atenuació lineal per al H [13]

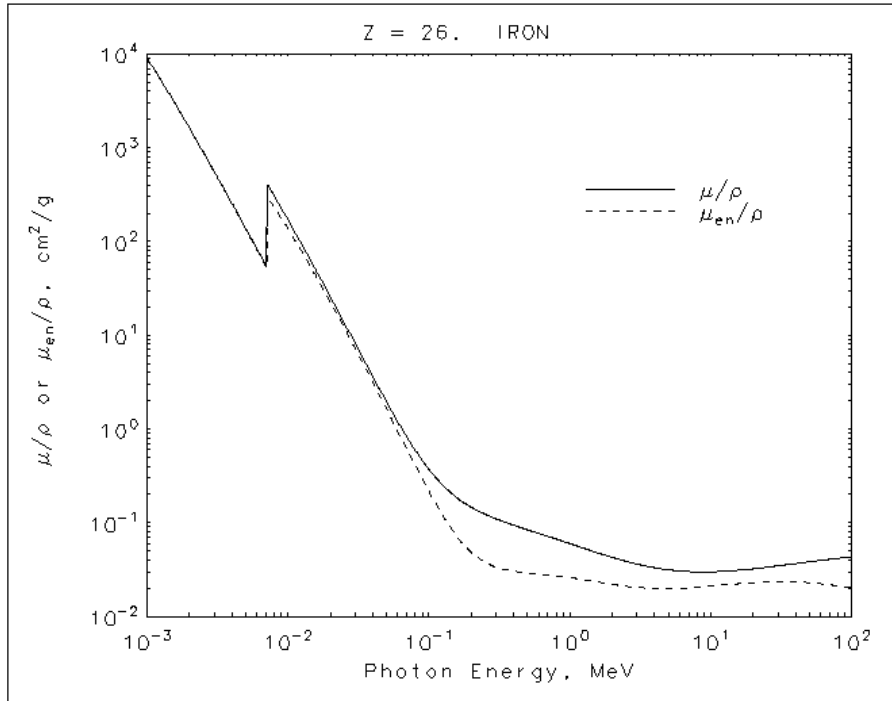


Figura 2.26: Coeficient d'atenuació lineal per al Fe [13]

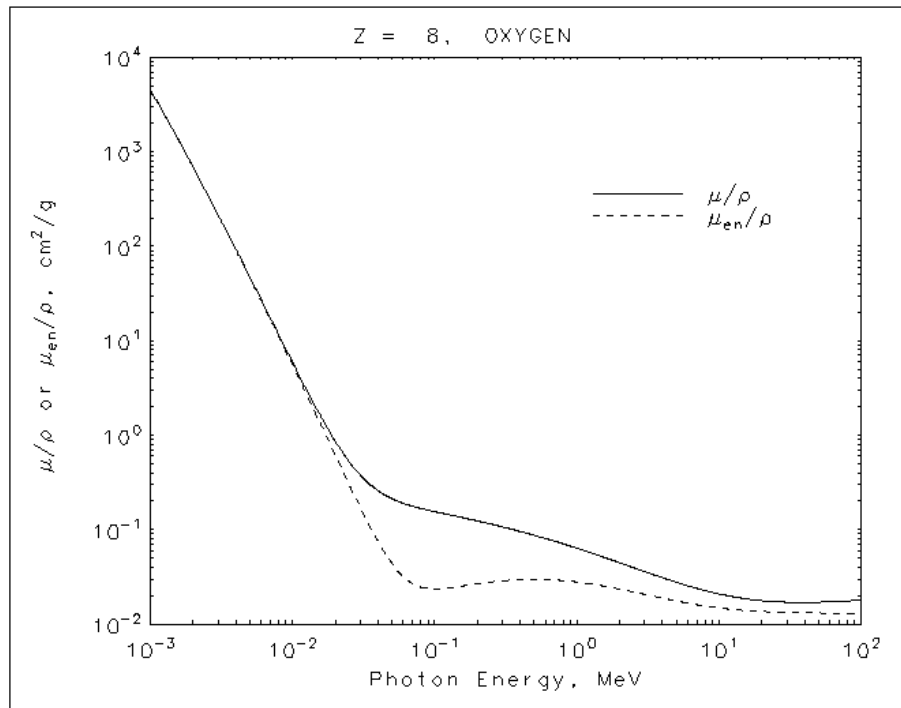


Figura 2.27: Coeficient d'atenuació lineal per al O [13]

## 2.6 L'efecte de pics suma

L'efecte de pics suma es produeix en aquells radioisòtops que no tenen un sol fotopic sinó que, en una desintegració, tenen diferents gammes amb yields elevats. Això provoca que es produeixin alhora dues (o més) emissions que el detector captarà com una de sola, produint-se un **pic suma**, a una energia que serà la suma de totes les que l'han originat, com s'observa a la figura 2.28.

A efectes pràctics del detector, això provoca que el número de comptes per un determinat fotopic sotmès a aquest efecte sigui inferior al real, ja que part de les gammes detectades estaran acumulades en el pic suma. D'aquesta manera les eficiències de detecció són inferiors a les reals.

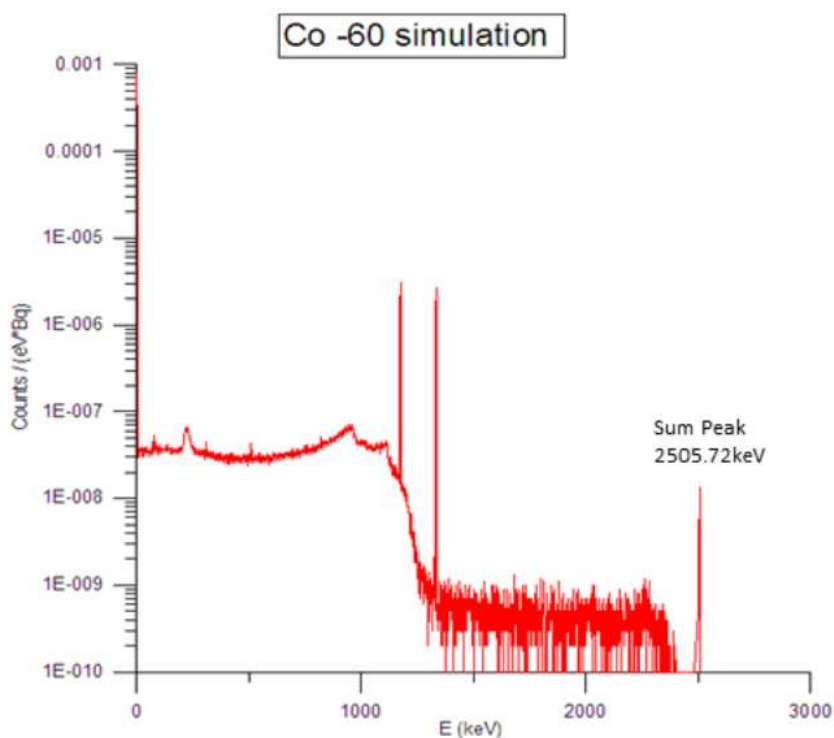


Figura 2.28: Mostra per al Co-60 del pic suma que es produeix per la suma de les gammes de 1173 keV i 1332 keV

Aquest efecte com resulta obvi, es produirà entre gammes, entre raigs X i entre gammes i raigs X. Si bé en el cas de les gammes, en ser més energètiques, l'efecte resulta molt més visible. En el cas dels raigs X molts seran absorbits abans d'arribar al detector.

## 2.7 El pile-up

El procés de pile-up es pot classificar en dos tipus, que tenen efectes diferents en la mesura de l'alçada dels polsos. El primer es coneix com "peak pile-up" i succeeix quan dos o

més polsos estan suficientment junts com perquè el sistema els tracti com un de sol. Aquest efecte provoca que no siguin comptats en la seva pròpia posició en l'espectre de polsos, de manera que l'àrea sota el fòtòpic ja no serà una mesura real del número total de successos que dipositen tota la seva energia. El segon tipus es coneix com "tail pile-up" i suposa la superposició de la cua d'un pols amb el següent. L'efecte d'aquest segon suposa un empitjorament de la resolució energètica, ja que afegeix vores a la forma dels pics registrats. [6]

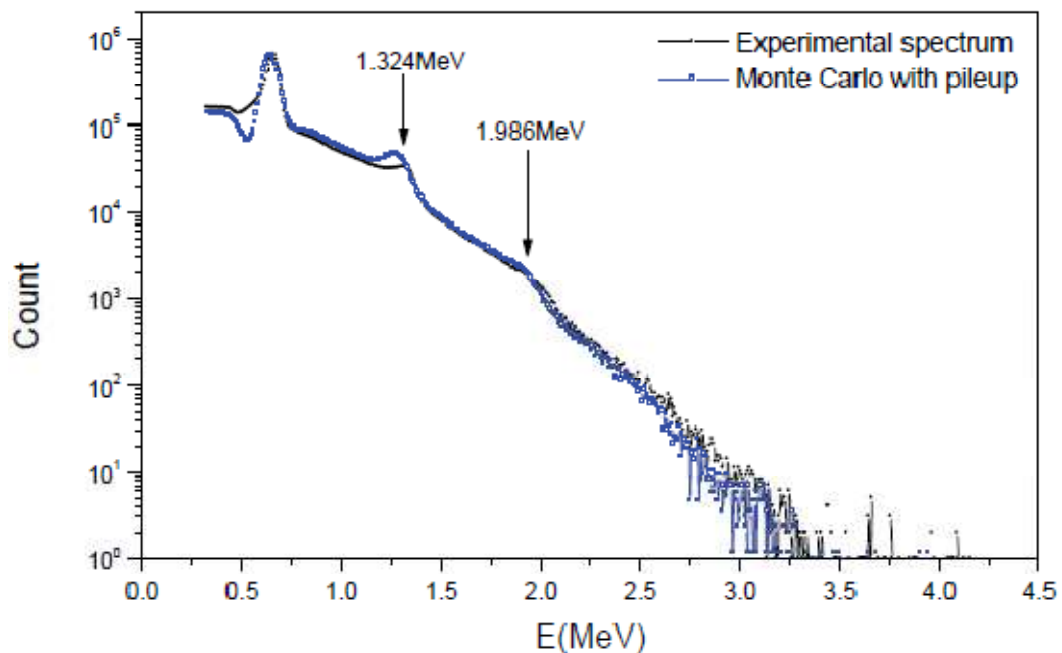


Figura 2.29: Anàlisi d'un espectre de Cs-137 [6]

A la figura 2.29 s'observa que el pic de 1.324 MeV correspon al pile-up de dos pics ( $2 \times 0.662$  MeV), mentre que el de 1.986 MeV correspon al pile-up de tres ( $3 \times 0.662$  MeV). Per tant, el fet de tenir pile-up provoca que aquests polsos desapareguin del fòtòpic i es registrin en energies superiors. Els fòtòpics és la forma més visible d'aquest efecte, ja que en els càlculs d'eficiència aquests comptes no es registren i fan baixar el seu valor. Tot i així es pot produir entre tot tipus de comptes i també es produirà amb els comptons, és per aquest motiu que en l'espectre simulat amb pile-up, desapareixen comptes a la zona anterior al fòtòpic de 662 KeV, corresponent a la zona multicompton.

### 2.7.1 La zona multicompton

Aquesta zona és posterior a la vora compton, delimitada per l'energia màxima que pot perdre un fotó en un únic impacte i, com s'ha vist, corresponent a un angle de desviació de  $180^\circ$ . Correspon al fenomen que, després del primer impacte el fotó segueixi patint altres col·lisions d'aquest tipus.

Tal com s'ha vist en l'apartat anterior, aquest fenomen està molt relacionat amb el material d'interacció, concretament amb la seva densitat. Així materials més densos que afavoreixen aquesta interacció tindran una zona multicompton més nombrosa, que no pas materials menys densos.

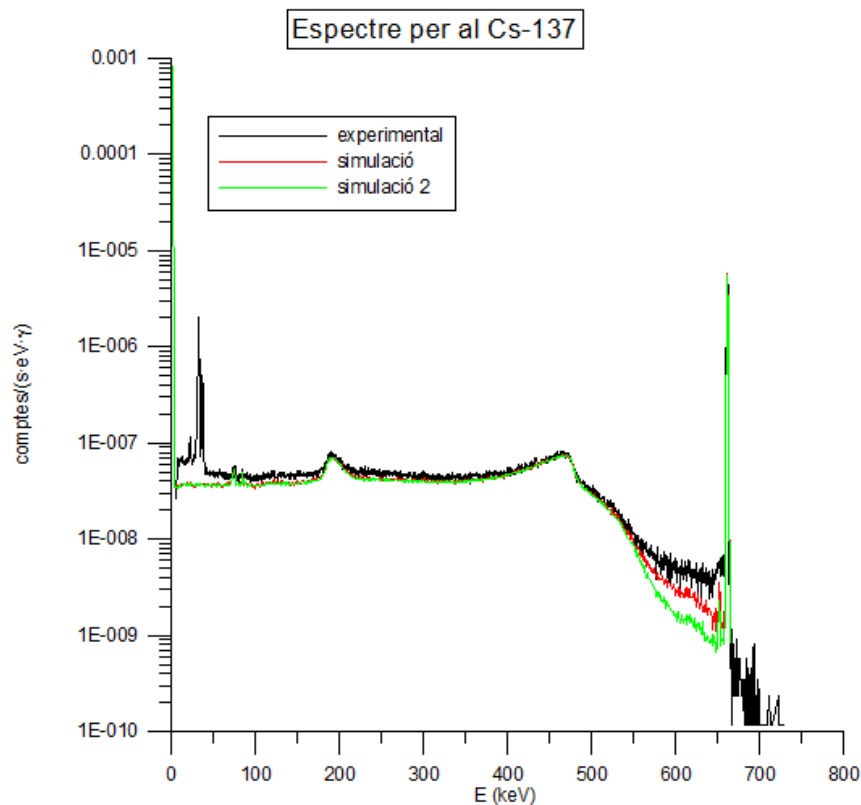


Figura 2.30: Simulacions per al Cs-137 amb materials de diferent densitat a la capa morta

A la figura 2.30 es pot observar de forma pràctica el que s'ha explicat. Es mostra la simulació d'una font puntual de Cs-137 on s'han utilitzat diferents materials per a la capa morta del detector. En tots dos casos s'utilitza el Li però en el cas de la gràfica "simulació" es tracta d'un liti amb la densitat del germani, en el capítol de metodologia s'explicarà el per què d'utilitzar aquest material.

La zona de la capa morta és la més superficial del detector, de tal manera que serà més probable que les gammes, després de patir una primera desviació compton escapin sense tornar a interaccionar. Això provoca que els canvis que puguin provocar que hi hagi més o menys deposició d'energia (interaccions) tinguin força efecte sobre la gràfica. En el cas de l'espectre "simulació 2" la densitat és la del liti ( $\rho = 0.535 \text{ g/cm}^3$ ), mentre que en el de "simulació" és la del germani ( $\rho = 5.32 \text{ g/cm}^3$ ); la diferència és molt gran de manera que els efectes són molt visibles. Succeeix que en el cas de la capa morta de Li, la gran majoria de gammes que pateixen una interacció compton a la capa morta escapen, mentre que en el cas de la capa morta de Li amb densitat de germani, moltes pateixen interaccions compton posteriors que incrementen aquesta zona multicompton.

És important doncs ajustar tant com es pugui el material per tal de no atribuir al pile-up efectes que poden no ser-ho. Malgrat tot en el cas de la figura 2.30, es tracta d'un estudi en el qual s'ha implementat l'efecte pile-up en un programa de simulació montecarlo [6], de manera que la diferència en la zona multicompton és realment deguda a aquest efecte.

## 2.8 Simulació Montecarlo - PENELOPE [7]

La simulació Montecarlo és una tècnica que combina conceptes estadístics (mostreig aleatori) amb la capacitat computacional de generar números pseudo-aleatoris i automatitzar els càlculs. És doncs un mètode probabilístic, en contraposició amb els mètodes deterministes. El seu àmbit de treball és molt extens i resulta una alternativa als models matemàtics exactes, així es troben aplicacions en àrees de la informàtica, de l'empresa, de l'economia o en estudis socials.

En la seva aplicació en l'àmbit científic consisteix en la generació numèrica d'històries aleatòries que succeeixen en un determinat experiment, per exemple, les històries dels electrons que conformen un feix electrònic que surt d'un accelerador. Per simular aquestes històries cal un model d'interacció, és a dir, un conjunt de seccions eficaces diferencials (que es denominen DCS, *differential cross sections*) per als mecanismes d'interacció rellevants. Aquestes DCSs determinen les funcions de distribució de probabilitat (PDF) de les variables aleatòries que conformen cada trajectòria, que són el recorregut lliure mig entre dues interaccions, el tipus d'interacció que s'està donant i l'energia perduda i la desviació angular en cada succés particular. A partir de la generació d'un gran nombre d'històries, es durà a terme un procés estocàstic en el qual es podrà extreure informació quantitativa del procés de transport a partir de fer el promig sobre les històries simulades.

El principal inconvenient de la simulació Montecarlo rau en la seva naturalesa aleatòria, tots els resultats estan afectats per incerteses estadístiques, que es poden reduir a partir d'incrementar el nombre de simulacions i, per tant, el temps de computació. Com a avantatge en canvi, ofereixen solució a problemes que d'altra manera serien molt complexes o impossible de resoldre numèricament, a causa de la complexitat de les equacions de transport amb què s'hauria de tractar.

PENELOPE (PENetration and Energy LOSS of Positrons and Electrons) porta a terme la simulació Monte Carlo en el transport acoblat d'electrons-fotons en materials arbitraris per un ampli marge energètic, que va des dels 50 eV fins a 1 GeV. La part principal de la simulació es fa mitjançant el paquet de subrutines de PENELOPE que realitza la simulació de feixos d'electrons i fotons, les quals són considerades rèpliques dels medis reals de varies composicions.

El contingut de PENELOPE s'estructura de la següent manera:

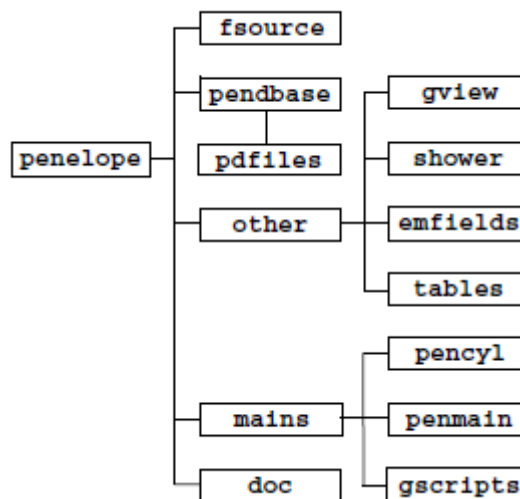


Figura 2.31: Diagrama organitzatiu del codi PENELOPE [14]

- A **fsource** és on trobem `penelope.f`, el paquet de simulació de transport acoblat de fotons i electrons; `pengeom.f`, la subrutina per traçar els camins de les partícules a través de geometries quàdriques modulars; `penvared.f`, les subrutines de reducció de variància; `timer.f`, les subrutines de control de temps i `material.f`, el programa principal per a la generació dels arxius de materials.

- Al directori **pendbase**, és on es troben la base de dades de PENELOPE.

- Al directori **other**, trobem el subdirectori `gview`, que ens permet visualitzar les geometries 2D i 3D; el `shower`, ; el `emfield` que conté la subrutina `penfield.f`, que simula el transport d'electrons/positrons sota camps magnètics i elèctrics estàtics externs; i el subdirectori `tables`, que conté el programa `tables.f`, el qual llegeix la informació dels arxius de materials i crea taules d'interacció, i `tables.gnu`, que grafica les quantitats més rellevants en funció de l'energia.

- Al directori **mains**, trobem el subdirectori `pencil`, on hi ha el programa `pencil.f` per al transport de partícules en estructures cilíndriques i el visor per a aquestes geometries `gviewc`. El subdirectori `penmain`, amb el programa `penmain.f`, que és el programa genèric per geometries quàdriques. I el subdirectori `gscripts`, que conté els scripts GNU PLOT que mostren les distribucions contínues generades pels programes `penmain` i `pencil`.

- Al directori **doc**, trobem el manual "PENELOPE, a code system for Monte Carlo simulation of electron and photon transport".

Com que el programa PENELOPE es tracta d'un paquet de subrutina que no opera per ell mateix, cal definir un programa que coordini la simulació per una finalitat específica. Aquest programa ha de controlar la simulació d'històries simulades per PENELOPE i mantenir les quantitats d'interès. Així, malgrat que PENELOPE realitza la part més llarga del treball de simulació, cal que l'usuari defineixi el propi programa, amb geometries concretes, magnituds i

quantitats d'interès. En aquest punt és on apareix penEasy, creat per evitar a l'usuari haver de definir un programa nou per cada experiment.

PenEasy és un programa estructurat desenvolupat pel doctor Sempau de la UPC, que ajuda a treballar amb PENELOPE. El seus objectius són dos:

- 1) Proporcionar un arxiu d'input que l'usuari ha de modificar per adaptar-lo al cas concret que es vol simular però de tal manera que no cal programar res.
- 2) Subministrar un codi estructurat i modular que, en cas de voler aplicar alguna modificació, facilita molt la programació.

De forma esquemàtica queda aglutinat de la següent manera:

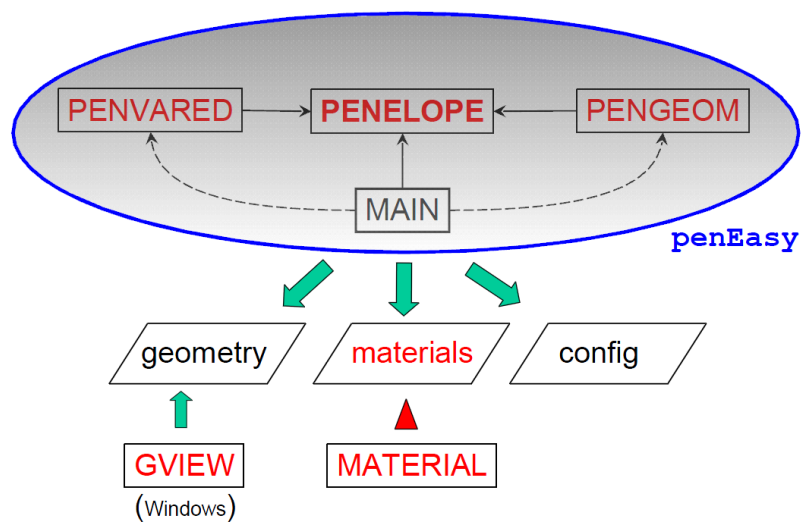


Figura 2.32: Esquema de l'estructura del programa [14]

A l'annex 1 s'explica detalladament el funcionament del programa penEasy.