

3 Metodologia:

3.1 Introducció

En aquest apartat s'explica el procediment que s'ha seguit per a la realització del present estudi que consta dels següents apartats:

1. Caracterització de la geometria del detector HPGe-5 del LARA.
2. Obtenció d'eficiències per a fonts puntuals per tal de comprovar la correcta caracterització geomètrica del detector.
 - a. Obtenció de l'eficiència experimental.
 - b. Tractament de les dades experimentals.
 - c. Obtenció de l'eficiència simulada.
 - d. Tractament de les dades simulades en penEasy mitjançant la convolució per obtenir un espectre comparable a l'experimental.
3. Obtenció d'eficiències per a fonts extenses característiques de matrius que rep el LARA alhora d'analitzar mostres ambientals. En aquest punt es posarà de manifest el problema de determinar l'eficiència per un determinat radioisòtop de baixes energies, en una matriu per la qual no es té un patró que contingui el nucli d'interès. La metodologia utilitzada per caracteritzar un material, mitjançant la simulació, que ens proporcioni el valor d'aquesta eficiència es desenvoluparà en el següent capítol.
4. Anàlisi del funcionament i millores aportades a PENELOPE/penEasy per la implementació de la desintegració en cascada i els raigs X.
 - a. Explicació detallada dels coeficients que cal tenir en compte per considerar totes les possibilitats en les vies de desintegració en PENELOPE/penEasy-eXtended (ús de les taules LHN/CEA).
5. Protocol d'implementació de PENELOPE/penEasy-eXtended on s'utilitza l'exemple de l'Am-241.

3.2 Caracterització geomètrica del detector

La correcta caracterització del detector és fonamental per obtenir uns resultats adequats. És per això que primer de tot cal introduir els paràmetres que definiran el nostre detector en PENELOPE/penEasy i després corroborar mitjançant fonts puntuals, pas que es veurà en el següent apartat, que les dades introduïdes en la caracterització són les adequades.

El detector del present treball és el HPGe-5 del laboratori LARA, un model tipus eXTended RAnge coaxial germanium detector (XTRA) tipus p, de la casa Canberra. Tal com s'ha indicat en l'apartat anterior, aquest tipus de detectors tenen la connexió *n* a l'exterior del detector. Si bé aquest gruix és més gran que la connexió *p*, aquest detector s'ha dissenyat per permetre la detecció a baixes energies gràcies al mínim gruix i la composició de carboni de la seva finestra d'entrada, que millora l'eficiència fins a nivells comparables als de un detector tipus *n* [8].

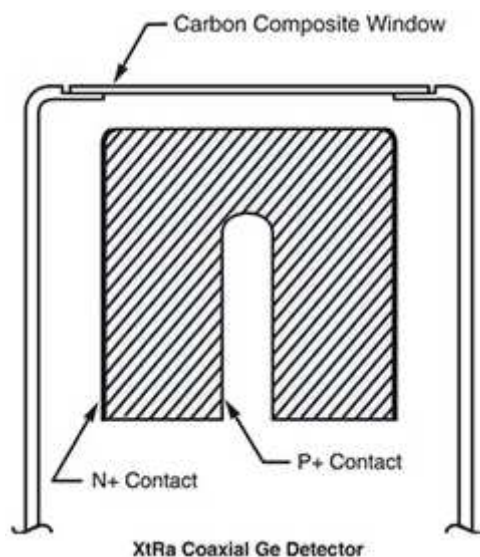


Figura 3.1: Esquema d'un detector HPGe-5 XTRA tipus p [8]

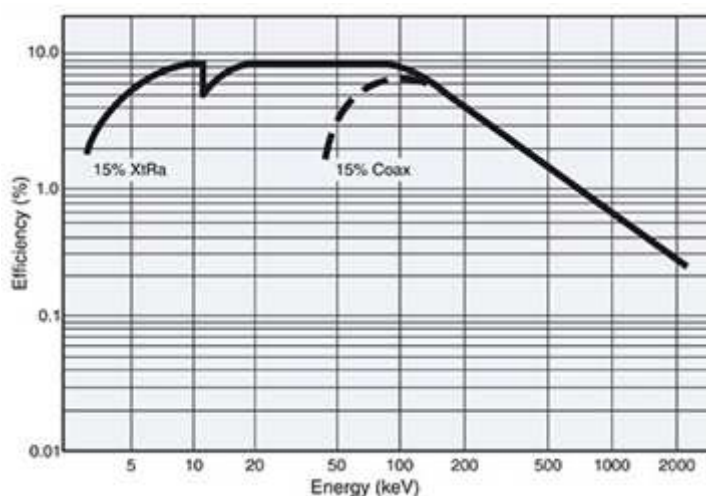


Figura 3.2: Comparació de la corba d'eficiències obtinguda amb un detector de Ge convencional i el model Xtra [8]

Cal tenir en compte que les distàncies i gruixos més importants per definir la geometria en el procés de simulació seran els que estan entre la finestra i la superfície del detector, ja que les mostres se situen sobre aquesta.

La majoria de paràmetres els proporciona el fabricant però d'altres cal consultar-los en la bibliografia i acabar-los d'ajustar a partir de l'experimentació. Com que el treball se centra en baixes energies, serà de gran importància introduir la bulletització i unes capes mortes adequades. A més de les qüestions que afecten a la detecció de gammes d'altres energies, a baixes energies l'absorció en els materials pren molta importància [3] i aquest aspecte complica en gran mesura el seu estudi. A continuació s'explica com treballar amb aquests dos paràmetres (bulletització i capes mortes), dels quals no se'n tenen dades tècniques i per tant cal aproximar-ne la seva caracterització mitjançant la bibliografia i les comprovacions experimentals.

Per a realitzar la bulletització s'utilitzarà el sistema de la superposició de cons truncats per tal d'aconseguir la curvatura corresponent a la bulletització. La definició d'aquesta corba dependrà del número de cons introduïts entre el diàmetre inicial i final que cal unir.

A la següent plantilla es mostra la definició de tres cons truncats que formen part del total que s'ha utilitzat en la definició de la nostra bulletització. Es pot observar que el radi inferior és de 3.05 cm, i cal unir-lo amb un radi superior de 2.65 cm.

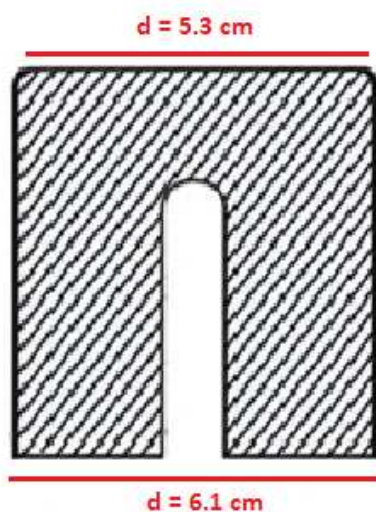


Figura 3.3: Detall de la diferència de radis degut a la bulletització

Com que en el detector hi ha una capa morta també cal definir aquesta zona. Per això per cada con que es defineix alhora té en el seu interior un "con interior", de radi 0.5 mm inferior (el gruix que s'ha determinat per la capa morta). Aquesta zona entre els dos cons constituirà la capa morta, zona que no detecta, mentre que la part més interior serà el material actiu de germani.

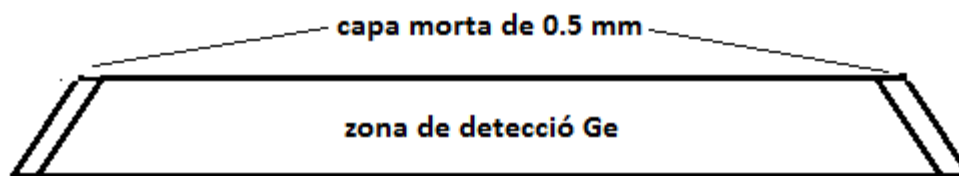


Figura 3.4: Detall d'un con truncat on s'aprecia la finalitat de definir un con exterior i un interior

La finalitat d'aquesta plantilla és proporcionar la informació requerida per caracteritzar la geometria de cons en PENELOPE/penEasy, per tal d'assegurar que tots encaixen entre si i no hi ha espais sense definir entre un cos i un altre.

Conos

Radio cono inferior	3,05
Radio cono superior	2,65
1	
Superficie superior	0
Superficie inferior	-0,01
Gruix	0,01
Gruix acumulat	0,01
Ángulo inicial (º)	70
	1,22173
Ángulo inicial (rad)	0476
	0,97452
z-scale	1121
	0,96452
z-shift	1121
	2,67747
x-y-scale	4774
2	
Superficie superior	-0,01
Superficie inferior	-0,02
Gruix	0,01
Gruix acumulat	0,02
Ángulo inicial (º)	67,5
	1,17809
Ángulo inicial (rad)	7245
	1,11904
z-scale	6364
	1,09904
z-shift	6364

Capa interior

Radio cono inferior	3
Radio cono superior	2,6
1	
Superficie superior	0
Superficie inferior	-0,01
Gruix	0,01
Gruix acumulat	0,01
Ángulo inicial (º)	70
	1,22173048
Ángulo inicial (rad)	1,22173048
z-scale	0,95632261
z-shift	0,94632261
x-y-scale	2,62747477
2	
Superficie superior	-0,01
Superficie inferior	-0,02
Gruix	0,01
Gruix acumulat	0,02
Ángulo inicial (º)	67,5
	1,17809725
Ángulo inicial (rad)	1,17809725
z-scale	1,09833569
z-shift	1,07833569

	2,70161				
x-y-scale	691		x-y-scale	2,65161691	
		3			3
Superficie superior	-0,02		Superficie superior	-0,02	
Superficie inferior	-0,03		Superficie inferior	-0,03	
Gruix	0,01		Gruix	0,01	
Gruix acumulat	0,03		Gruix acumulat	0,03	
Àngulo inicial (º)	65		Àngulo inicial (º)	65	
	1,13446				
Àngulo inicial (rad)	4014		Àngulo inicial (rad)	1,13446401	
	1,26978				
z-scale	4654		z-scale	1,24646927	
	1,23978				
z-shift	4654		z-shift	1,21646927	
x-y-scale	2,72306		x-y-scale	2,67306198	

Figura 3.5: Mostra de la plantilla utilitzada per a la bulletització

A continuació es mostra un detall de la bulletització realitzada:

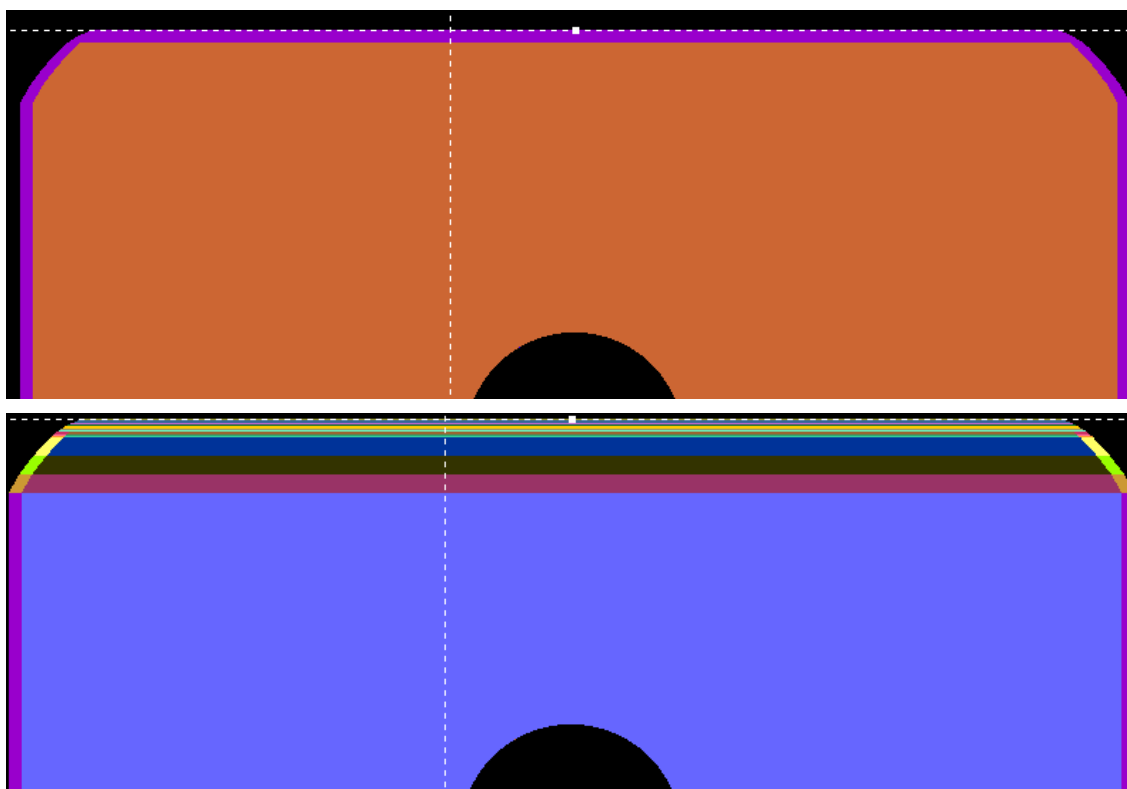


Figura 3.6: Detall de la bulletització en materials (dalt) i en bodies (baix). La vista està realitzada amb el programa gview 2D

A la figura 3.6 cal destacar que els cons més propers a la superfície, com que formen part de la capa morta frontal, no és necessari definir un con interior per al material actiu i un exterior per a la capa morta sinó que se'n definirà un de sol fet del material d'aquesta capa que no participa en la detecció.

La capa morta es deu al contacte n a l'exterior i el p a l'interior. A altes energies l'ús d'un o altre material és important fins a cert punt, però a baixes energies pren més importància ja que canvien més els coeficients d'absorció i una major o menor densitat pot fer variar força l'eficiència.

Segons les característiques de fabricació, el contacte de la capa externa s'aconsegueix per difusió del Li en el Ge, mentre que la interna per implantació iònica de B. Tenint en compte que es tracta d'un dopatge pesat ($n+$ i $p+$), que els coeficients d'absorció augmenten amb el nombre atòmic ($Z_{Li}=3$, $Z_{Ge}=32$ i $Z_B=5$) i els valors de la densitat ($\rho_{Li}=0.535$ g/cm³, $\rho_{Ge}=5.323$ g/cm³ i $\rho_B=2.46$ g/cm³), s'opta per definir directament la capa exterior amb Li i la interior amb B, però amb la densitat del germani, ja que no deixa de ser germani dopat i tal com s'ha explicat en el capítol de conceptes bàsics, la zona multicompton està molt relacionada amb la densitat que s'escolleixi per a la capa morta. La creació d'aquest material híbrid es fa amb `material.exe` (Annex 4) i s'anomenarà Ge-Li.mat.

El gruix de la capa, segons el fabricant [8] pot prendre valors entre els 0.5 i els 1.5 mm en el contacte n , ja que anirà augmentant amb el tems i ús de l'aparell. Tenint en compte aquest fet i la bibliografia [3], es dóna un valor promig de 500 μm per a la capa de Li i de 0.3 μm per a la capa de B. L'elecció d'aquest valor s'ha pres després de fer proves amb diferents valors i veure el comportament de les eficiències. Com ja passava alhora d'escollir el material, aquest gruix resultarà important bàsicament per energies baixes, de manera que s'ha triat el valor que proporcionava millors resultats sense sortir dels límits de la realitat.

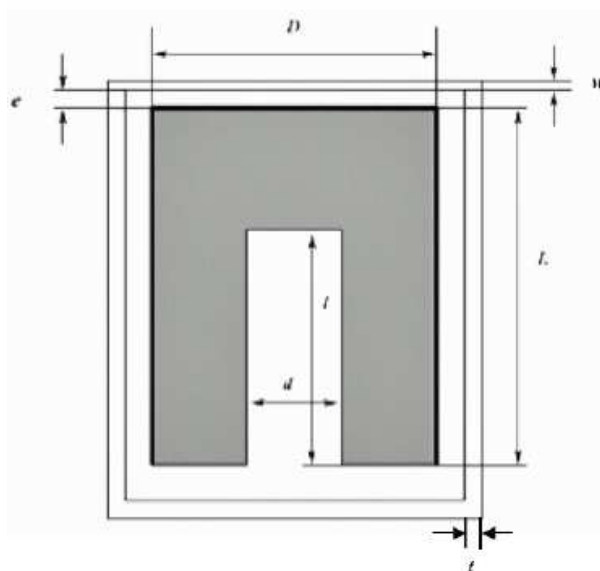
A la taula 3.1 se mostren les característiques finals del detector:

	Valor nominal (mm)	Valor utilitzat (mm)
ϕ cristall Ge (D) *	61 [5]	61
Longitud cristall Ge (L)	58.5 [5]	58.5
Capa morta frontal	0.7 [3]	0.5
Capa morta lateral	0.7 [3]	0.5
Capa morta interior	0.0003 [3]	0.0003
Distància cristall- exterior (e)	5 [5]	5
Gruix finestra carboni (w)	0.6 [8]	0.6
ϕ core (d)	12 [5]	12
Longitud core (l)	45 [5]	42
ϕ exterior	82.65 [5]	82.65
Longitud exterior	135.15 [5]	134.45

Gruix carcassa exterior (t)	1 [5]	1
--------------------------------	-------	---

Taula 3.1: Dimensions del detector HPGe-5

* Degut a la "bulletització" aquest és el diàmetre del cilindre inferior, el diàmetre del primer con que detecta és de 54.72 mm i anirà creixent progressivament.



En la figura 3.4 s'observa: el diàmetre del cristall (D), la longitud del cristall (L), la distància cristal-finestra (e), el diàmetre del core (d), la longitud del core (l), el gruix de la finestra (w) i el gruix de la carcassa exterior (t).

Figura 3.7: Esquema d'un detector HP-Ge

La diferència entre els valors nominals i els utilitzats en les simulacions són el gruix de la capa morta frontal i lateral, que ja s'ha justificat per les eficiències, la longitud del core i la longitud exterior. Aquestes dues últimes variacions, que a efectes de simulació no tenen gaires efectes ja que la font emissora se situa sobre la finestra, es deuen a petits errors comesos en el disseny de la geometria per tal que els diferents volums que la componen quedessin ben encaixats.

La definició de la geometria utilitzant les eines del codi PENELOPE/penEasy es mostra a la figura 3.8. A més de les dimensions bàsiques definides a la taula 3.1, s'han incorporat diferents peces específiques de l'equip de mesura del LARA fetes a mida per aquest detector, com són un tap de suport i una fina capa de film plàstic. En el cas del tap, consta d'un plàstic protector i a més té una conformació que permet col·locar peces suplementàries que continguin recipients de mostres de tal manera que la col·locació sigui la mateixa en totes les mesures. A la figura 3.9 es pot veure una imatge del detector on s'aprecia el tap de suport i un dels recipients de pvc utilitzats per a la mesura de mostres radioactives, aquest pot quedar encaixat en el suport i així les mesures resulten més homogènies.

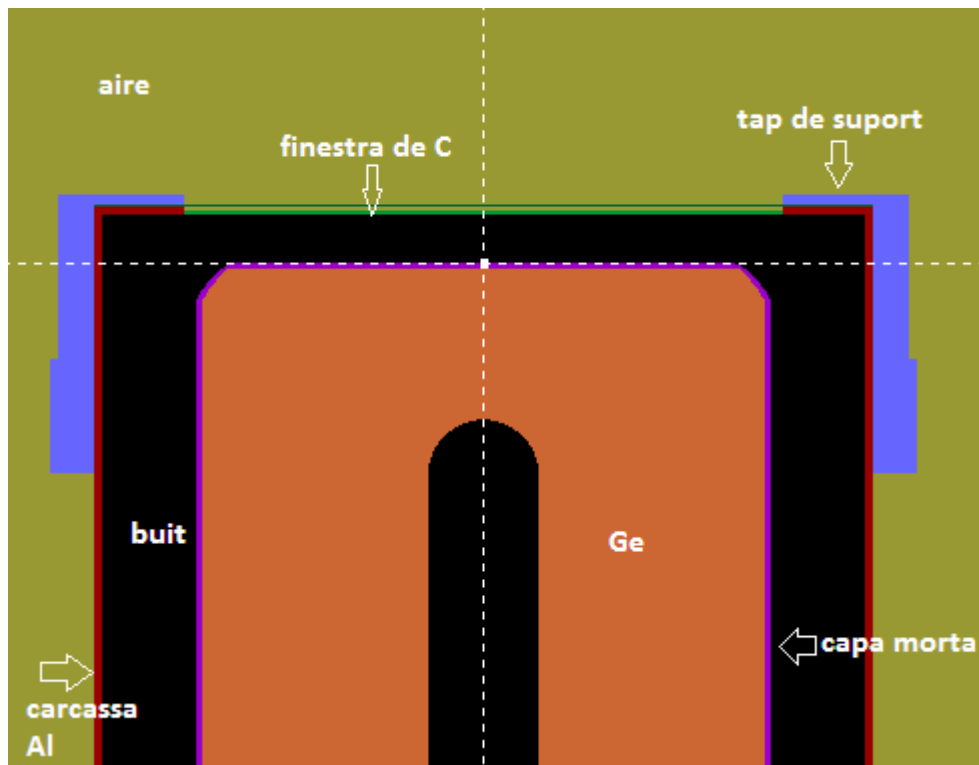


Figura 3.8: Geometria del detector enumerant les parts principals. La visualització s'ha fet amb el programa gview2D



Figura 3.9: Imatge del detector HPGe on s'aprecia el tap per col·locar suports, el pvc que el recobreix i, en aquest cas, un pot de pvc amb una mostra radioactiva

3.3 Càlcul d'eficiències per a fonts puntuals

Amb la geometria del detector definida cal comprovar si els resultats que s'obtenen concorden amb els resultats experimentals en el cas de geometries senzilles, per això es farà ús de fonts puntuals. En el cas que els resultats no siguin suficientment similars serà necessari revisar la geometria del detector.

Així, s'utilitzaran font puntuals i a una certa distància del detector que permetin disposar d'una geometria senzilla de definir i que permeti validar la geometria del detector amb el major grau de precisió possible. A més d'aquesta manera s'eviten problemes extra que es tindrien amb fonts extenses com poden ser l'autoabsorció i l'elecció dels materials.

Les fonts puntuals pertanyen a la casa *Amersham* i venen preparades en unes pastilles de PVC de dimensions 23.25 x 11.1 x 2.2 mm, amb la font d'emissió al centre de la geometria. Els radioisòtops que hi ha són diversos: Am-241, Ba-133, Cs-137, Co-57, Co-60, Mn-54, Hg-203, Na-22 i Y-88. Però els que s'utilitzaran per comparar la geometria són el Am-241 (E=59.54keV), el Cs-137 (E=661.65keV) i el Co-60 (amb els respectius pics de E=1173.2keV i 1332.5keV); la raó és que abracen un rang molt ampli de l'espectre i resulten suficients per poder veure si la geometria es comporta bé en tot l'espectre energètic.

Per fer les mesures es col·loca la font puntual en un suport a una distància de 4.97 cm del detector. La raó principal per la qual es fa això és que d'aquesta manera els possibles errors en les distàncies seran menors i, a més, perquè es tracta de fonts suficientment actives com perquè es puguin observar efectes de *pile-up* si es col·loquen molt properes al detector. Com s'ha vist en el capítol de conceptes bàsics, el *pile-up* es deu a la detecció simultània de dues gammes de manera que com més s'allunyi la font més disminuirà aquest efecte. De forma similar això també passa amb els pics suma, els quals en allunyar la font es van atenuant fins a quasi desaparèixer, com es veurà en el capítol de resultats. Com que la intensitat de partícules detectades es menor amb la distància, malgrat que la probabilitat que es doni el fenomen és la mateixa, la probabilitat que es detecti és inferior.

3.3.1 Obtenció de l'eficiència experimental:

Les dades experimentals que s'extreuen a partir del Genie 2000 (Annex 5) són el nombre de comptes de cadascun dels fotopics d'interès que s'han obtingut en un temps de mesura determinat.

L'eficiència de detecció experimental per una energia gamma determinada es defineix com:

$$\varepsilon_{exp} = \frac{n^{\circ} \text{ de comptes}}{A \cdot t \cdot Y} \quad 3.1$$

3. METODOLOGIA

On A és l'activitat de la font en el moment de la mesura, t és el temps de mesura i Y , la probabilitat d'emissió d'aquella gamma.

Per calcular l'activitat en el moment de la mesura, cal tenir en compte el comportament de decaïment exponencial que pateixen les mostres radioactives:

$$A = A_0 \exp^{-\lambda t} \quad 3.2$$

On A_0 és l'activitat inicial de la mostra, t és el temps que ha transcorregut entre el moment que es va determinar A_0 i el moment de la mesura i λ és la constant de desintegració radioactiva per a aquell radioisòtop concret.

3.3.2 Tractament de les dades experimentals

Per poder comparar l'espectre experimental amb el que s'obtingui de la simulació serà necessari fer una normalització. Així l'objectiu és determinar el número de comptes detectades per gamma emesa i normalitzat per l'ample d'energia. Per tant l'espectre experimental del número de comptes registrat per el Genie es modificarà seguint el següents passos:

- 1) A partir del fitxer del Genie obtenir el número de comptes per canal creant un arxiu .dat .
- 2) Obtenir l'energia corresponent a cada canal a partir del calibratge en energies que proporciona el Genie.
- 3) Amb un fons que també s'haurà obtingut experimental repetir el procés i restar-lo a les mesures de la font.
- 4) Dividir el número de comptes per l'amplada energètica del canal, pel temps de recompte, per l'activitat de la mostra i pel yield. D'aquesta manera les unitats que es representaran són [comptes/(eV·s·I_γ)] vs. keV. On I_γ representa la intensitat gamma; és a dir, comptes (1/eV) per gamma emesa.

3.3.3 Eficiència de la simulació en PENELOPE/penEasy

La simulació de PENELOPE/PenEasy proporciona unes dades en l'arxiu tallyPulseHeightSpectrum.dat que té el format de la figura 3.10:

També cal tenir en compte que quan es tracta amb radionúclids que presenten més d'una emissió gamma i es fa ús de PENELOPE/penEasy, aquestes energies es determinen a l'input i se'n pot determinar la seva probabilitat:

```
[SECTION SOURCE BOX ISOTROPIC GAUSS SPECTRUM v.2009-10-30]
ON                STATUS (ON or OFF)
2                PARTICLE TYPE (1=ELECTRON, 2=PHOTON, 3=POSITRON)
0                ACTIVATE PHOTON POLARISATION (1=YES, 0=NO)
0 0 0           STOKES PARAMETERS (UNUSED IF POLARISATION=0)
Energy(eV) Probability ENERGY SPECTRUM (see instructions in
~/documentation/)
1173.23e3       1
1173.23e3       0.0
1332.49e3       1
1332.49e3       -1
0.0            FWHM (eV) OF GAUSSIAN ENERGY DISTRIB.
0.0 0.0 2.596  CENTER COORDINATES OF THE BOX ENCLOSURE (cm)
6.0 6.0 3.5    BOX SIDES (cm)
0.0 0.0        FWHMs (cm) OF GAUSSIAN X,Y DISTRIBs.
0.0 0.0 0.0    EULER ANGLES [Rz,Ry,Rz](deg) TO ROTATE BOX
11            MATERIAL (0=DO NOT CARE)
0.0 0.0 -1.0   DIRECTION VECTOR, NO NEED TO NORMALIZE
180          ANGLE OF SEMI-APERTURE [0,180] (deg)
[END OF BIGS SECTION]
```

Però el programa sempre aplica una normalització sobre 100. De tal manera que si es defineixen dues gammes cadascuna es generarà un 50% de les vegades i si se'n defineixen 3, cadascuna un 33.3% de les vegades. Aquest fet cal tenir-lo en compte alhora d'interpretar les dades que proporciona PENELOPE/penEasy, ja que caldrà aplicar el yield correcte per a cada gamma.

Una metodologia ràpida per aplicar la correcció és donar a cada gamma una probabilitat de 100 en l'input, tal com s'observa en l'input d'exemple que s'acaba de veure, de tal manera que a les dades proporcionades per PENELOPE/penEasy s'aplicarà l'expressió 3.5.

$$\varepsilon = \varepsilon_{MC} \times n^{\circ} \text{ de gammes simulades} \times \text{yield} \quad 3.5$$

3.3.4 Convolució dels espectres proporcionats per PENELOPE/penEasy

Per poder fer la representació gràfica de les dades de la simulació i comparar-les amb l'espectre experimental, cal convolucionar-les, ja que els pics de l'espectre experimental són gaussianes amb una certa amplada degut a la dispersió de les dades. Per fer introduir aquest soroll gaussià en l'espectre simulat s'introdueix a cada un dels comptes detectades a cada canal una certa probabilitat d'acord amb la següent distribució:

$$p_G(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{x^2}{2}\right) \quad 3.6$$

El mètode que s'utilitzarà per sortejar el valor de la distribució gaussiana de l'equació 3.6 és el de Box-Müller [7], un mètode de generació de parelles de nombres aleatoris independents amb distribució normal.

En aquest mètode es prenen dues variables independents x_1 i x_2 , que determinaran un punt aleatori en la funció de distribució:

$$p_{2G}(x_1, x_2) = p_G(x_1)p_G(x_2) = \frac{1}{2\pi} \exp\left[-\frac{x_1^2 + x_2^2}{2}\right] \quad 3.7$$

En coordenades polars com que:

$$x_1 = r \cos \phi, \quad x_2 = r \sin \phi \quad 3.8$$

Llavors:

$$p_{2G}(x_1, x_2) = p_G(x_1)p_G(x_2) = \frac{1}{2\pi} \exp\left[-\frac{r^2}{2}\right] \quad 3.9$$

On r i ϕ són variables aleatòries independents. Com que r pot prendre valors entre $[0, \infty]$, la seva PDF serà $\exp(-r^2/2)r$, de manera que la funció de distribució acumulada serà $P(r) = 1 - \exp(-r^2/2)$. Per tant es pot generar r a partir del mètode de la transformada inversa com:

$$P(r) = \xi \quad \Rightarrow \quad r = \sqrt{-2 \ln(1 - \xi)} \cong \sqrt{-2 \ln \xi} \quad 3.10$$

Pel que fa al valor de ϕ , prendrà valors entre $[0, 2\pi]$ i per tant: $\phi = 2\pi\xi$. On ξ (variable aleatòria) sempre pren valors entre 0 i 1. Així recuperant les definicions de l'equació 3.8:

$$x_1 = \sqrt{-2 \ln \xi_1} \cos(2\pi \xi_2) \quad 3.11$$

$$x_2 = \sqrt{-2 \ln \xi_1} \sin(2\pi \xi_2)$$

Finalment però, la variància que surt de l'equació 3.7 és 1, perquè no sigui així:

$$x_1 = \sigma \sqrt{-2 \ln \xi_1} \cos(2\pi \xi_2) \quad 3.12$$

$$x_2 = \sigma \sqrt{-2 \ln \xi_1} \sin(2\pi \xi_2)$$

On la σ és la desviació estàndard que es defineix com:

$$\sigma = \frac{FWHM}{2.354} \quad 3.13$$

El valor de FWHM s'obté de forma experimental determinant l'ample del pic, aquest valor depèn de l'energia i es pot ajustar segons la següent expressió [3]:

$$FWHM = \sqrt{a + bE + cE^2} \quad [keV] \quad 3.14$$

El tractament de dades de l'espectre original per tal de convolucionar-lo es realitzarà mitjançant un programa escrit en llenguatge fortran. Aquest programa [5], retorna com a resultat el nombre de comptes total per energia (en keV).

3.4 Càlcul d'eficiències per a fonts extenses

Un cop validada la geometria del detector amb les fonts puntuals, cal passar a comprovar els resultats amb les matrius de fonts extenses. En aquests casos les matrius de sòls i aigua es col·loquen dins uns pots de plàstic de la casa José Mestre, S.A. amb les següents característiques per als dos tipus de matrius. En el cas de les matrius d'aigua són pots de 150 ml que s'omplen amb un contingut de 100 ml de la solució d'interès. En el cas dels sòls, són pots de 100ml de capacitat que s'omplen completament. El contingut radioactiu és de Pb-210, Am-241, Cd-109, Co-57, Ce-139, Hg-203, Sn-113, Sr-85, Cs-137, Y-88 i Co-60, de manera que es hi ha mostres d'un ampli ventall energètic. Aquestes matrius són les que serveixen al laboratori LARA per fer els calibratges dels detectors. El procediment que es realitza és el següent:

- 1) Preparació de la matriu patró, ja sigui sòls o aigua.
- 2) Obtenció de l'eficiència en energies a partir de l'activitat coneguda del patró i amb el número de comptes obtingut, amb l'expressió 3.1.
- 3) A partir d'aquestes eficiències es pot construir una corba de calibratge en energies (eficiència vs. energia), que ens doni el comportament de l'eficiència del detector, per aquell tipus de mostra, en tot el rang energètic.
- 4) Preparació de mostres amb activitat desconeguda.
- 5) A partir del calibratge en energies del detector, obtenció de l'activitat:

$$Activitat = \frac{n^{\circ} \text{ de comptes}}{\varepsilon \cdot t \cdot Y} \quad 3.15$$

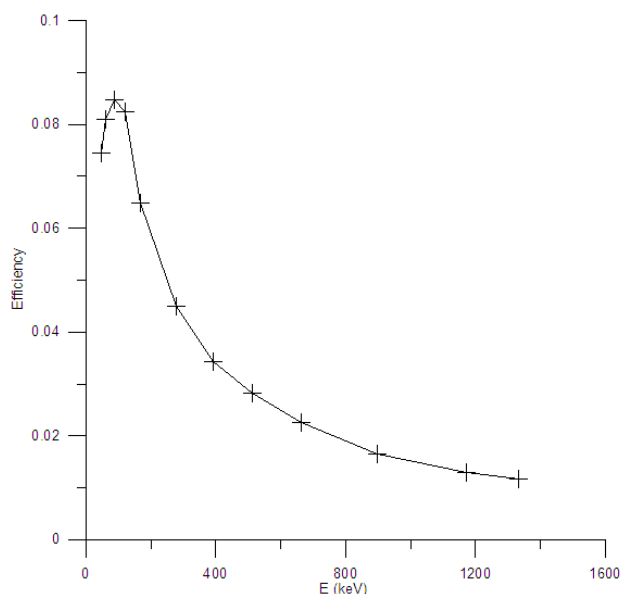


Figura 3.11 Gràfica en el cas d'una mostra d'aigua del calibratge d'eficiències en energia

Aquest procediment que per energies altes no presenta cap problema, per baixes energies té l'inconvenient de l'autoabsorció del material. Per baixes energies, el número de gammes que arriben al detector serà baix perquè moltes d'elles s'absorbeixen en el mateix medi, de tal manera la corba de calibratge de la figura 3.11 és molt sensible a la definició de la geometria i el material per a aquestes baixes energies. Aquest fet provocaria doncs, que s'hagués de tenir una mostra en el patró de tots els radionúclids de baixes energies (Pb, Am), fet que no sempre és possible. Per evitar-ho i tenint en compte que l'autoabsorció és un efecte conegut, cal trobar un procediment per poder obtenir la corba de calibratge a baixes energies sense disposar d'un patró.

Si la composició de la mostra fos coneguda, es pot realitzar la simulació de l'isòtop d'interès en el material per determinar-ne l'eficiència. El més habitual però és que la composició sigui desconeguda, de manera que hi haurà un segon procés per caracteritzar un material que es comporti com el real pel que fa a l'atenuació. Aquest procediment es descriu a l'apartat de resultats i es basa en l'ús de l'espectre de l'Am-241, completament definit mitjançant PENELOPE/penEasy-eXtended. Al laboratori LARA es disposa d'una font puntual d'Am-241, de manera que el procediment consistirà en veure l'atenuació que pateixen les gammes d'aquesta font puntual quan han de travessar el material de la matriu. A partir d'observar l'atenuació en la zona de baixes energies, es podrà determinar un material que es comporti com el de la matriu desconeguda i, a partir d'allà fer les simulacions oportunes amb el Pb-210 per trobar-ne l'eficiència.

3.4.1 Tractament de dades del PENELOPE/PenEasy

La simulació de còctels de radioisòtops cal fer-la amb cada radionúclid de forma individual. El càlcul d'eficiències es farà de forma idèntica al mètode seguit per fonts puntuals, però hi haurà una variació en la representació gràfica.

3. METODOLOGIA

A diferència del cas anterior, l'espectre experimental no es deu únicament a un sol fotopic sinó que són diversos i cadascun té una activitat determinada i un yield característic. Per fer la representació de l'espectre simulat caldrà fer la suma de totes les simulacions individuals i , com que es tracta de mostres patró d'activitat coneguda, normalitzant per l'activitat de cada radionúclid. En aquest cas les unitats seran [comptes/(eV·s)]:

$$\frac{\text{comptes}}{\text{eV}\cdot\text{s}} = \sum_i \text{comptes convolucionats}, i \times A_{i,\text{patró}} \times Y_i$$

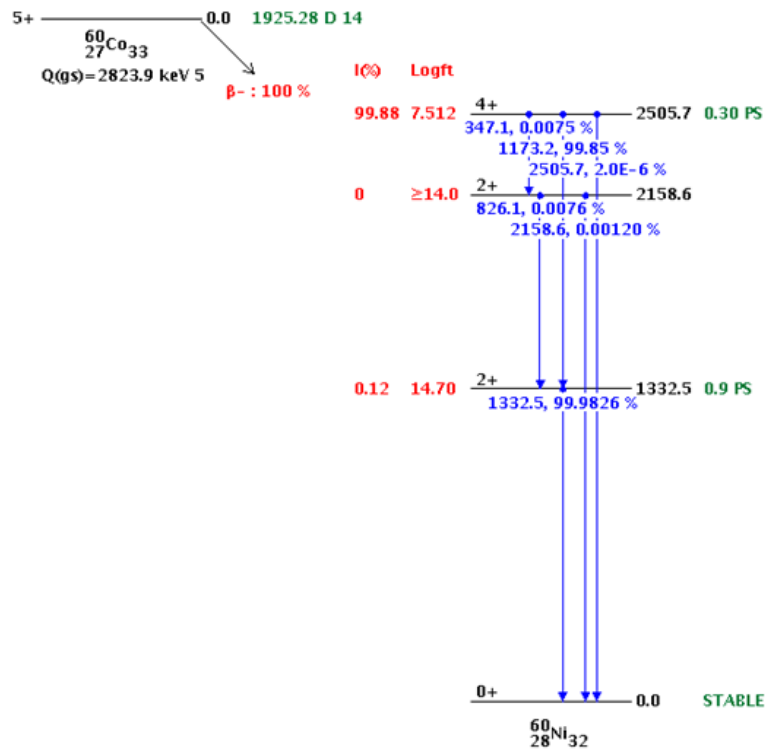
On i representa cada radionúclid que conté el sòl.

Si la simulació s'ha fet amb PENELOPE/penEasy

3.5 Incorporació dels raigs-X (PENELOPE/PenEasy-eXtended)

L'arxiu que cal modificar per introduir els RX i la desintegració en cascada és **sourceBoxIsotropicGaussSpectrum.f**, el que determina la generació de partícules per als càlculs de transport de radiació amb PENELOPE. En el programa original cada partícula emesa per la font és una història independent que finalitza amb el seu registre o el seu rebuig. En el programa PENELOPE/PenEasy-eXtended en canvi, es reproduïx l'esquema real de desintegració, de tal manera que energies diferents podran registrar-se a partir d'una mateixa història i , per tant, es podran considerar pics suma entre gammes, entre raigs X i entre gammes i raigs X.

Com s'ha dit en PENELOPE/penEasy hi ha l'opció de determinar diferents emissions gamma, però es tractarà sempre d'emissions independents. En el capítol de conceptes bàsics però, s'ha observat que l'efecte dels pics suma es deu justament a emissions que es produeixen de forma simultània degut a què les desexcitacions poden portar a nivells entremitjos i no només al fonamental. Cal doncs implementar aquests nivells que es poden observar en l'esquema 3.1 (exemple per al Co-60) en la generació de partícules que fa PENELOPE.



Esquema 3.1: Esquema de desintegració per al Co-60 [11]

Per tal d'implementar aquest espectre en la simulació cal que la partícula se sotmeti a diferents vies de desintegració. Per això es fa ús bàsicament de dues eines de la programació fortran, la rutina *Rand*, encarregada de generar números aleatoris, i la sentència *if*, que oferirà diferents opcions a seguir a la partícula generada.

Tal com es pot veure a la l'esquema 3.2, l'objectiu es reproduir l'espectre experimental. D'aquesta manera l'energia que s'emmagatzema es produeix en un canal concret i es pot produir efecte de pics suma, ja que la partícula no finalitza la seva història fins que no ha passat per tot el recorregut que estableix el programa.

Si es presta detall a la gamma de 1173.228 keV, es pot calcular que la seva probabilitat total és:

$$P = 0.9988 \times 0.999699 = 0.9985$$

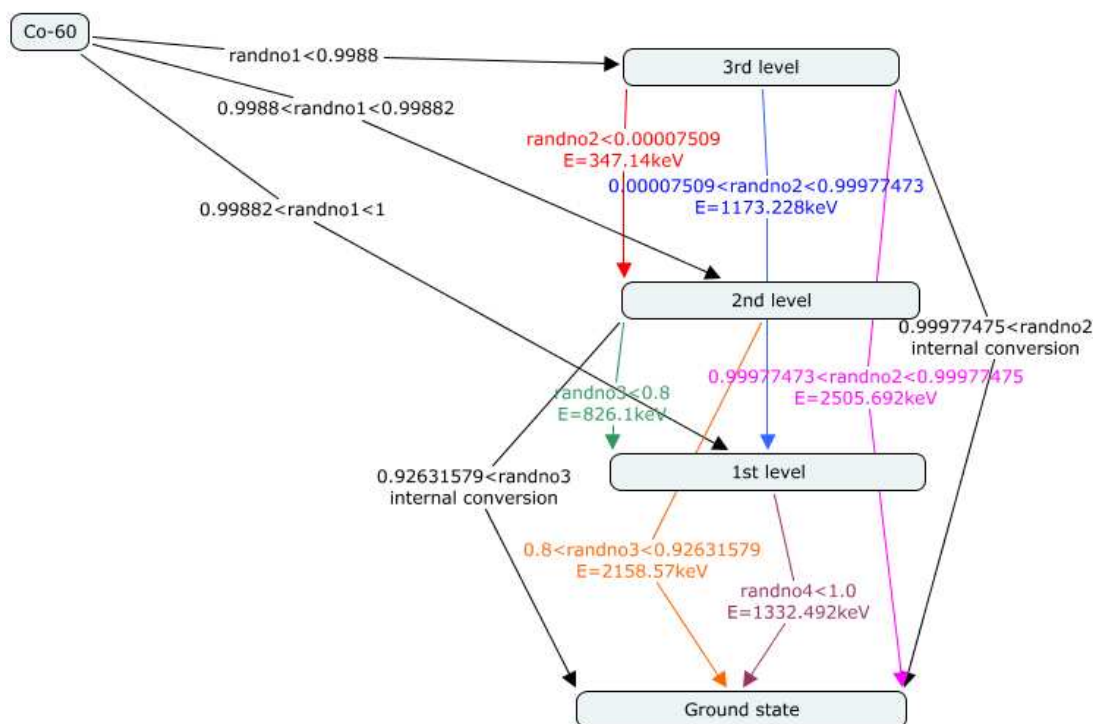
I per la de 1332.492 keV:

$$P = 0.00118 \times 1 + 0.9988 \times 0.999699 \times 1 = 0.9997$$

Que són justament els yields coneguts per aquestes gammes.

Aquest càlcul de probabilitats posa de manifest un fet observable a l'esquema 3.2 i és que, cada bloc de sentències *if*, ha d'estar normalitzat sobre 1, ja que la generació de nombres aleatoris mitjançant la rutina *RAND* els permet prendre valors compresos entre 0 i 1.

Com que la via més freqüent de desintegració connecta les dues gammes, de forma aleatòria un nombre determinat de vegades es produirà la suma d'aquestes energies, donant lloc al pic suma tal com passa en l'espectre real. En el cas anterior en canvi, es tracta d'històries independents de manera que no hi ha possibilitat de pic suma.



Esquema 3.2: Esquema de desintegració que segueixen les gammes simulades per al Co-60 en el programa PENELOPE/PenEasy-Cascade. La simbologia randno\$, és perquè les probabilitats estan en tant per 1.

A partir de la comparació entre l'eficiència obtinguda amb aquest nou sistema i la que proporcionava anteriorment PENELOPE/penEasy, que considerava un 50% de vegades cada gamma, es pot obtenir el factor de correcció.

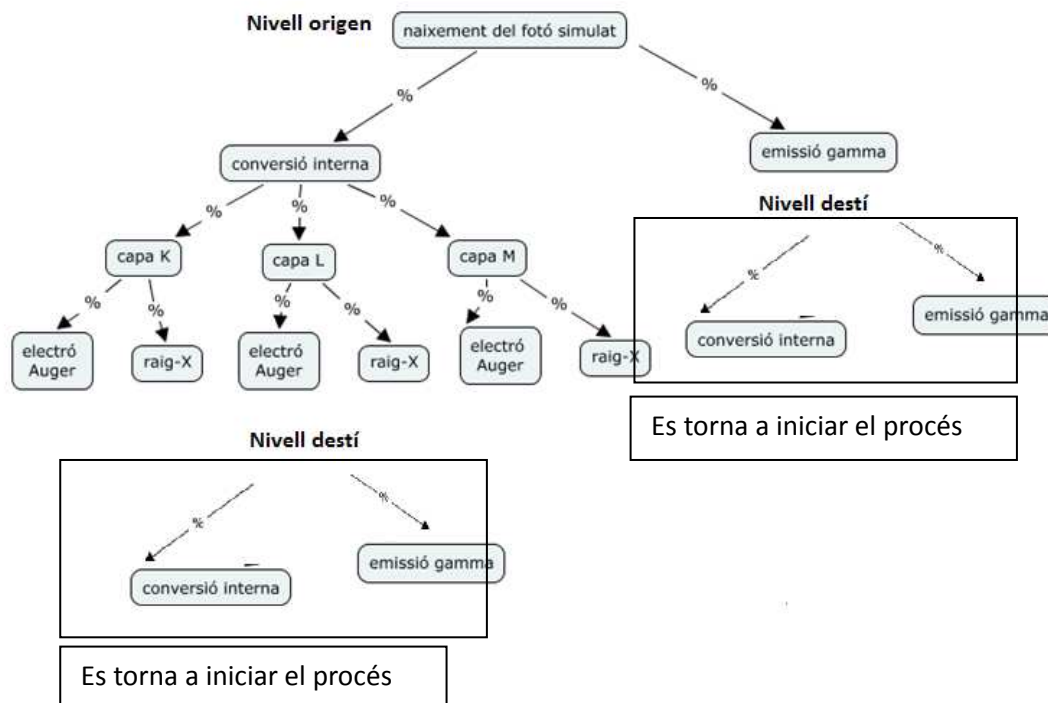
$$FC = \frac{\varepsilon_{MC, sense PS}}{\varepsilon_{MC, amb PS}} \quad 3.16$$

Aquest factor cal aplicar-lo en aquells radionúclids que pateixen desintegració en cascada com el Co-60, el Cs-134, etc. I, en aquests casos, l'activitat passa a ser:

$$A = \frac{n^{\circ} \text{ de comptes}}{\varepsilon \cdot t \cdot Y} \cdot FC \quad 3.17$$

A PENELOPE/PenEasy-eXtended també s'incorporen els raigs X i les opcions en les que es pot perdre energia són més variades perquè a més de tenir en compte el possible destí de la gamma, s'han de considerar els diferents camins de decaïment. La possibilitat a què es veurà

sotmesa una partícula des del seu origen en cada nivell de la simulació doncs és, de forma molt simplificada, la següent:



Esquema 3.1 Tries que ha de realitzar el fotó en caure d'un nivell a un altre

En aquest cas també es produiran pics suma entre raigs X i entre gammes i raigs X, però donat que són molt menys probables no es consideraran factors de correcció com en el cas gamma-gamma.

El fet que intervinguin diferents % provoca que hi hagi diferències considerables entre una font referencial i una altra. En aquest cas el millor és intentar utilitzar la mateixa font per a tots els coeficients i, per a això, la font més completa són les taules de la CEA-LNHB/CEA [4].

A continuació es mostren tots els paràmetres que cal tenir en compte per cada història simulada i la forma d'introduir-les en la simulació, ja que cal que estiguin normalitzades sobre 1 (l'accent " ' " indica aquesta normalització).

- Probabilitat d'emissió gamma entre els nivells X i Y:

$$P_Y'(X \rightarrow Y) = \frac{P_Y(\%)(X \rightarrow Y)}{P_{Y+CE}(\%)(tot X)} \tag{3.18}$$

On P_Y és la probabilitat que el decaïment sigui per via gamma i P_{Y+CE} és la probabilitat total de decaïment en aquell nivell.

- Probabilitat d'emissió per conversió interna entre els nivells X i Y:

$$P_{CE}'(X \rightarrow Y) = \frac{P_{CE}(\%)(X \rightarrow Y)}{P_{Y+CE}(\%)(tot X)} \quad 3.19$$

On P_{CE} és la probabilitat de decaïment per conversió interna.

- Probabilitat d'arribar a la capa K, L o M:

$$P_{K(L,M)}' = \frac{\text{probabilitat que l'electró de conversió sigui de la capa K, L o M}}{P_{CE}(\%)} \quad 3.20$$

$$= \frac{P_Y(\%) \cdot \alpha_{K(L,M)}}{P_{CE}(\%)}$$

On $\alpha_{K(L,M)}$ és el coeficient de conversió interna que s'ha vist en el capítol de conceptes bàsics.

- Probabilitat que es produeixi raig X característics:

$$P_{RX-K(L,M)}' = w_{K(L,M)} \quad 3.21$$

En aquest cas s'estableix directament la igualtat amb aquest coeficient, ja que aquest w_L ens dóna la possibilitat que a partir d'una vacant per l'emissió d'un electró de conversió interna, es produeixi un electró Auger o un raig X característic, per tant el coeficient ja és el tant per 1 necessari per al programa.

Aquí apareixen els raigs M perquè realment es produeixen però, a la pràctica, no hi ha dades d'aquest nivell ja que les energies serien molt baixes i per tant només se simularan els K i els L.

- Probabilitat que es produeixi un electró Auger:

$$P_{RX-K(L,M)}' = 1 - w_{K(L,M)} \quad 3.22$$

- Probabilitat que una vacant a la capa K, n'origini una altra a la capa L: aquest valor ve donat per n_{KL} , que s'obté de les taules i que ja es proporciona en tant per 1.

A l'annex 2 es pot veure un exemple per l'Am-241.

3.6 Protocol d'implementació del programa de PENELOPE/PenEasy-eXtended

El protocol descrit a continuació descriu la forma d'implementar el programa que caracteritza els raigs X en PENELOPE/PenEasy. El programa és molt més extens i disposa de molts més programes, molts dels quals s'han anat enumerant (materials.exe, tables.exe), aquí però es citen només les estrictament necessàries per a aquesta implementació.

La mostra és per al Am-241.

Distribució de carpetes:

- Compile:
 - ✓ penelope.f
 - ✓ penaux.f
 - ✓ pengeom.f
 - ✓ penpatch.f
 - ✓ penvox.f
 - ✓ penvr.f
 - ✓ timing.f
 - ✓ sourceBoxIsotropicGaussSpectrum.f
 - ✓ sourcePhaseSpaceFile.f
 - ✓ tallyVoxelDoseDistrib.f
 - ✓ tallySpatialDoseDistrib.f
 - ✓ tallyCylindricalDoseDistrib.f
 - ✓ tallySphericalDoseDistrib.f

 - ✓ tallyEnergyDepositionPulseHeightSpectrum_mod_Am241.f
 - ✓ tallyFluenceTrackLength.f
 - ✓ tallyPhaseSpaceFile.f
 - ✓ tallyParticleCurrentSpectrum.f
 - ✓ tallyParticleTrackStructure.f
 - ✓ penEasy_am241.f
- Am-241:
 - ✓ Air.mat
 - ✓ Al.mat

- ✓ Boron.mat
- ✓ Carbon.mat
- ✓ Coure.mat
- ✓ Ge-Li.mat
- ✓ Germani.mat
- ✓ Pb.mat
- ✓ Pvc.mat
- ✓ PenEasy.in
- ✓ peneasy_am241.x
- ✓ command.in
- ✓ script.sh
- ✓ germanio5.3.geo

Instruccions per a la modificació del programa:

1) Obrir el fortran sourceBoxIsotropicGaussSpectrum_mod_Am241.f de la carpeta Compile.

2) A la línia 187 introduir els possibles nivells del nucli fill (en aquest cas Np-237) en què pot quedar excitat i les corresponents probabilitats.

```
c draw of the primary energy level (5 possibilities)

randno1=rand(0.0d0)

If (randno1.le.0.00017) Then
  GoTo 1007
End If
If (randno1.gt.0.00017.and.randno1.le.0.01677) Then
  GoTo 1006
endif
If (randno1.gt.0.01677.and.randno1.le.0.01687) Then
  GoTo 1005
endif
If (randno1.gt.0.01687.and.randno1.le.0.14917) Then
  GoTo 1004
endif
If (randno1.gt.0.14917.and.randno1.le.0.14957) Then
  GoTo 1003
endif
If (randno1.gt.0.14957.and.randno1.le.0.99407) Then
  GoTo 1002
endif
If (randno1.gt.0.99407.and.randno1.le.0.99637) Then
  GoTo 1001
endif
If (randno1.gt.0.99637.and.randno1.le.1.0000) Then
  GoTo 1100
End If
```

3) A cada nivell introduir les desexcitacions possibles, en cas que la desintegració sigui per emissió gamma se'n determina l'energia:

3. METODOLOGIA

```

c 6th energy level (probability 0.0166)
1007 randno12=rand(0.0d0)
c 1st photon from 8th level To 6th level
    If (randno12.le.0.02283) Then
        e=67.5d3
    cps Select direction
        d(3) = cossrc+(1.0-cossrc)*rand(0.0d0)
        sintheta = (1.0-d(3)**2)**0.5
        phi = twopi*rand(0.0d0)
        d(2) = sintheta*Sin(phi)
        d(1) = sintheta*Cos(phi) ! Direction In Sv frame
        d = matmul(rotv,d) ! Rotate direction vector from Sv To Slab
        u = d(1) ! Transfer direction To PENELOPE common
        v = d(2)
        w = d(3)
        Call stores(e,x,y,z,u,v,w,wght,kpar,ilb) ! Push particle To stack
        Call tally(0,e) ! Deposit its kinetic E
        GoTo 1006
    End If
c CE from 8th level To 6th level
    If (randno12.gt.0.02283.and.randno12.le.0.65533) Then
        GoTo 1010
    End If

```

4) En el cas que es produeixi la desexcitació per conversió interna s'ha de veure a quina capa pertany l'electró arrencat:

```

c Landing Shell determination
1010 randno17=rand(0.0d0)
    If (randno17.le.0.79422) Then !L-Shell
        GoTo 1030
    End If
    If (randno17.gt.0.79422) Then !M-Shell
        GoTo 1006
    End If

```

5) El forat deixat per l'electró de conversió interna es cobrirà per un electró d'una capa superior, la diferència energètica pot manifestar-se com a raigs X o com un electró Auger:

```

c RX-L or Auger

```

3. METODOLOGIA



```
1030 randno31=rand(0.0d0)
      If (randno31.le.0.51100) then                !RX
          Goto 1050
      Endif
      If (randno31.gt.0.51100) then                !Auger
          Goto 1006
      Endif
```

6) Si el que es produeix és un raig X cal veure quin és:

```
c RX-L To level 6
```

```
1050      randno48=rand(0.0d0)
          If (randno48.le.0.02260) Then
              e=11.89d3
          cps Select direction
              d(3) = cossrc+(1.0-cossrc)*rand(0.0d0)
              sintheta = (1.0-d(3)**2)**0.5
              phi = twopi*rand(0.0d0)
              d(2) = sintheta*Sin(phi)
              d(1) = sintheta*Cos(phi) ! Direction In Sv frame
              d = matmul(rotv,d)      ! Rotate direction vector from Sv To Slab
              u = d(1)                ! Transfer direction To PENELOPE common
              v = d(2)
              w = d(3)
              Call stores(e,x,y,z,u,v,w,wght,kpar,ilb) ! Push particle To stack
              Call tally(0,e)         ! Deposit its kinetic E
              GoTo 1006
          End If
```

```
          If (randno48.gt.0.02260.and.randno48.le.0.36960) Then
```

```
              e=13.9d3
```

```
          cps Select direction
```

```
              d(3) = cossrc+(1.0-cossrc)*rand(0.0d0)
              sintheta = (1.0-d(3)**2)**0.5
              phi = twopi*rand(0.0d0)
              d(2) = sintheta*Sin(phi)
              d(1) = sintheta*Cos(phi) ! Direction In Sv frame
              d = matmul(rotv,d)      ! Rotate direction vector from Sv To Slab
              u = d(1)                ! Transfer direction To PENELOPE common
              v = d(2)
              w = d(3)
              Call stores(e,x,y,z,u,v,w,wght,kpar,ilb) ! Push particle To stack
              Call tally(0,e)         ! Deposit its kinetic E
              GoTo 1006
          endif
```


3. METODOLOGIA



```
If (randno48.gt.0.36960.and.randno48.le.0.87190) Then
```

```
e=17.81d3
```

```
cps Select direction
```

```
d(3) = cossrc+(1.0-cossrc)*rand(0.0d0)
sintheta = (1.0-d(3)**2)**0.5
phi = twopi*rand(0.0d0)
d(2) = sintheta*Sin(phi)
d(1) = sintheta*Cos(phi) ! Direction In Sv frame
d = matmul(rotv,d) ! Rotate direction vector from Sv To Slab
u = d(1) ! Transfer direction To PENELOPE common
v = d(2)
w = d(3)
```

```
Call stores(e,x,y,z,u,v,w,wght,kpar,ilb) ! Push particle To stack
Call tally(0,e) ! Deposit its kinetic E
```

```
GoTo 1006
```

```
End If
```

```
If (randno48.gt.0.87190) Then
```

```
e=20.82d3
```

```
cps Select direction
```

```
d(3) = cossrc+(1.0-cossrc)*rand(0.0d0)
sintheta = (1.0-d(3)**2)**0.5
phi = twopi*rand(0.0d0)
d(2) = sintheta*Sin(phi)
d(1) = sintheta*Cos(phi) ! Direction In Sv frame
d = matmul(rotv,d) ! Rotate direction vector from Sv To Slab
u = d(1) ! Transfer direction To PENELOPE common
v = d(2)
w = d(3)
```

```
Call stores(e,x,y,z,u,v,w,wght,kpar,ilb) ! Push particle To stack
Call tally(0,e) ! Deposit its kinetic E
```

```
GoTo 1006
```

```
End If
```

* En cas que l'electró que cau per tapar la vacant de l'electró de conversió interna sigui d'una capa de la qual hi ha dades, cal fer la següent ampliació:

4 bis)

```
c Landing Shell
```

```
1015 randno22=rand(0.0d0)
```

```
If (randno22.le.0.77288) Then !K-Shell
```

```
GoTo 1072
```

```
endif
```

3. METODOLOGIA

```

If (randno22.gt.0.77288.and.randno22.le.0.95525) then      !L-Shell
  GoTo 1038 en aquest cas 1038 equival a una nova elecció entre RX o Auger i per tant a
una
  emissió de RX-L.
endif
If (randno22.gt.0.95525) Then                               !M-Shell
  GoTo 1001
endif

```

5 bis)

```

c La vacant a K pot generar vacant a L
1072 randno54=rand(0.0d0)
If (randno54.le.0.791) then                                !genera vacant a L
  Goto 1082
Endif
If (randno54.gt.0.791) then                                !no genera vacant
a L
  Goto 1037 aquest cas 1037 equival a una nova elecció entre RX o Auger i per tant a
emissió
  de RX tipus K.
Endif

```

6 bis)

```

1082 randno57=rand(0.0d0)
If (randno57.le.0.971) then                                !RX
  GoTo 1092
Endif
If (randno57.gt.0.971) then                                !Auger
  GoTo 1038
Endif

```

7 bis)

```

c RX-K to L-vacancy
1092 randno58=rand(0.0d0)
If (randno58.le.0.38440) Then
  e=97.07d3
cps Select direction
  d(3) = cossrc+(1.0-cossrc)*rand(0.0d0)
  sintheta = (1.0-d(3)**2)**0.5

```

```

    phi = twopi*rand(0.0d0)
    d(2) = sintheta*Sin(phi)
    d(1) = sintheta*Cos(phi) ! Direction In Sv frame
    d = matmul(rotv,d) ! Rotate direction vector from Sv To Slab
    u = d(1) ! Transfer direction To PENELOPE common
    v = d(2)
    w = d(3)

    Call stores(e,x,y,z,u,v,w,wght,kpar,ilb) ! Push particle To stack
    Call tally(0,e) ! Deposit its kinetic E

    GoTo 1038
End If

If (randno58.gt.0.38440) Then
    e=101.06d3

cps Select direction

    d(3) = cossrc+(1.0-cossrc)*rand(0.0d0)
    sintheta = (1.0-d(3)**2)**0.5
    phi = twopi*rand(0.0d0)
    d(2) = sintheta*Sin(phi)
    d(1) = sintheta*Cos(phi) ! Direction In Sv frame
    d = matmul(rotv,d) ! Rotate direction vector from Sv To Slab
    u = d(1) ! Transfer direction To PENELOPE common
    v = d(2)
    w = d(3)

    Call stores(e,x,y,z,u,v,w,wght,kpar,ilb) ! Push particle To stack
    Call tally(0,e) ! Deposit its kinetic E

    GoTo 1038
End If

```

Instruccions per a l'execució del programa:

1) Es substitueix en el programa penEasy.f:

```
include 'sourceBoxIsotropicGaussSpectrum.f'
```

Per l'arxiu modificat:

```
include 'sourceBoxIsotropicGaussSpectrum_mod_Am241.f'
```

I guardem amb un altre nom com per exemple penEasy_am241.f

2) Amb la modificació del programa es compila el nou programa:

```
>gfortran -Os penEasy_am241.f -o peneasy_am241.x
```

3) Modificar l'input d'entrada de tal manera que ja no cal definir l'energia del fòton sinó la corresponent al tipus de desintegració, que en el cas de l'Am-241 és una alfa de 5637,82 keV. El tipus de partícula no és rellevant sinó la seva energia:

3. METODOLOGIA



```
[SECTION SOURCE BOX ISOTROPIC GAUSS SPECTRUM v.2009-10-30]
ON                               STATUS (ON or OFF)
2                                PARTICLE TYPE (1=ELECTRON, 2=PHOTON,
3=POSITRON)
0                                ACTIVATE PHOTON POLARISATION (1=YES, 0=NO)
0 0 0                            STOKES PARAMETERS (UNUSED IF POLARISATION=0)
Energy(eV)  Probability ENERGY SPECTRUM
5637.82e3   100
5637.82e3   -1
0.0                                FWHM (eV) OF GAUSSIAN ENERGY DISTRIB.
0.0  0.0  6.001                    CENTER COORDINATES OF THE BOX ENCLOSURE
(cm)
0.0  0.0  0.0                        BOX SIDES (cm)
0.0  0.0                                FWHMs (cm) OF GAUSSIAN X,Y DISTRIBs.
0.0  0.0  0.0                        EULER ANGLES [Rz,Ry,Rz](deg) TO ROTATE BOX
0                                        MATERIAL (0=DO NOT CARE)
0.0  0.0  -1.0                       DIRECTION VECTOR, NO NEED TO NORMALIZE
180                                    ANGLE OF SEMI-APERTURE [0,180] (deg)
[END OF BIGS SECTION]
```