

УДК 539.1.074

© Ю. А. Попов, И. В. Прозорова, А. А. Прозоров, Р. Р. Сабитова, 2019

УСОВЕРШЕНСТВОВАННАЯ ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ПОЛУПРОВОДНИКОВОГО ДЕТЕКТОРА ГАММА-ИЗЛУЧЕНИЯ НА ОСНОВЕ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ МЕТОДА СТАТИСТИЧЕСКИХ ИСПЫТАНИЙ

Актуальность исследований обусловлена тем, что нейтронно-активационный анализ (НАА) является одним из удобных способов определения состава образцов природного и техногенного происхождения. Среди таких объектов — уникальные образцы пород, минералов, конденсаты, пыль, "горячие" частицы и т.д. При этом результативность анализа зависит от применяемых методов и методик. НАА является высокочувствительным (до 10^{-14} г), мультиэлементным, неразрушающим, менее зависящим от массы и состава образца, от форм нахождения элементов.

Основной целью исследования являлось создание информативной имитационной модели полупроводникового детектора на основе кристаллов из особо чистого германия (ОЧГ-детектора) GC1518 как инструмента исследования методом Монте-Карло процессов взаимодействия гамма-квантов с кристаллом детектора.

Объекты исследований — отклик детектора, полученный экспериментально и с помощью модели, использующей метод Монте-Карло.

Основным инструментом, используемым для проведения инструментального нейтронно-активационного анализа, является полупроводниковый ОЧГ-детектор на основе кристаллов под общей маркировкой HPGe. Настоящая работа посвящена моделированию с помощью программы MCNP, реализующей метод Монте-Карло, процесса регистрации гамма-квантов одним из таких детекторов.

В ходе исследований выполнены: а) большое количество экспериментальных измерений с полупроводниковым детектором марки Canberra GC1518, используя набор стандартных источников на различных расстояниях и углах поворота; б) создание вариантных моделей; в) параметрическое моделирование; г) анализ толщины мертвого слоя и сделано заключение о чувствительном объеме кристалла детектора.

Разработана модель, повторяющая параметры реального гамма-спектрометра, которая позволяет рассчитывать эффективность регистрации гамма-квантов в широком диапазоне энергий до 1.5 МэВ.

Кл. сл.: полупроводниковый детектор, объем кристалла, эффективность регистрации, гамма-кванты, метод Монте-Карло

ВВЕДЕНИЕ

Для проведения гамма-спектрометрических измерений непосредственно на массиве горных пород необходимо дальнейшее совершенствование методов гамма-спектрометрии. Это позволит определять свойства и состояния пород в естественном залегании и открывает возможность для надежной характеристики выбранного расположения с точки зрения распределения радиоактивности. При этом использование полупроводниковых детекторов позволяет делать это быстро и качественно [1, 2]. В итоге результаты измерений гамма-спектрометрии *in situ* будут служить лучшей основой для принятия решений, например в случае радиологических чрезвычайных ситуаций.

Другое направление, где используются полупроводниковые детекторы — это определение

концентраций урана. Существуют различные методы оценки концентрации урана в образцах геологических пород, но ее невозможно провести точно бета-гамма методом, если торий имеет высокие концентрации в образцах. Концентрация урана в образцах монацита может быть оценена путем измерения пика гамма-лучей 1.001 МэВ Ra-234 (продукт распада урана с периодом полураспада 1.17 мин) с использованием полупроводникового детектора [3].

Основной целью наших исследований являлась разработка модели полупроводникового коаксиального детектора, при этом необходимо было получить разницу между экспериментальными и расчетными значениями эффективности регистрации гамма-квантов различных энергий не более, чем 5 %.

В целом, существует несколько причин для мо-

делирования отклика детектора, но основной причиной является отсутствие калибровочных источников, своей формой и составом повторяющих измеряемые радиоактивные образцы. В арсенале экспериментатора имеются, как правило, точечные (непоглощающие) образцовые источники с аттестованным значением активности. Ниже представлены некоторые частные случаи применения детектора и его расчетной модели.

1. Основным параметром для достоверных измерений, влияющим на анализ при обработке спектра, является калибровка по эффективности. Математический способ расчета позволяет избежать необходимости в калибровочных источниках. Однако этот метод требует создания определенных математических моделей.

2. Необходимость в калибровке детектора, используемого при измерении выгорания топливной сборки гамма-спектрометрическим методом [4]. Тепловыделяющую сборку (ТВС) перемещают перед коллиматором, спектры гамма-излучения измеряют в нескольких точках по высоте, определяя выгорание по массовой доле радионуклида Cs-137 в облученном уране.

3. Получение коэффициентов самопоглощения объемных источников или источников со сложной геометрией. При определенных размерах измеряемого образца начинает сказываться самопоглощение, когда не все гамма-кванты, испущенные источником, регистрируются кристаллом детектора и, следовательно, результаты измерений необходимо корректировать.

4. Оценка концентрации ядер урана при наличии высоких концентраций ядер тория.

5. Получение кривой вероятности регистрации в пике полного поглощения (FEPE — full energy peak efficiency) детектора на основе кристаллов из особо чистого германия (ОЧГ, HPGe), поскольку трудно измерить кривую FEPE экспериментально [5, 6].

6. Измерение интенсивности гамма излучения некоторых радионуклидов с низкой энергией, в том числе ^{33}Ba , в сравнении с табличными значениями [7] и т.д.

Используемый в нашей лаборатории полупроводниковый коаксиальный детектор из особо чистого германия (ППД ОЧГ) марки GC1518 (далее — детектор) имеет высокое энергетическое разрешение 1.8 кэВ по линии 1332 кэВ и высокое соотношение площади пика полного поглощения энергии и комптоновского континуума. Напомним, что качества детектора как спектрометра характеризуются тремя величинами: энергетическим разрешением, эффективностью детектирования и отношением пик/комптоновский континуум.

Конструктивно коаксиальный детектор (рис. 1) представляет собой кристалл с объемом чувствительной области от 20 до 100 см³, выполненный в виде цилиндра из сверхчистого германия. В нашем детекторе п-контакт находится на внешней поверхности, а соответственно р-контакт — на внутренней поверхности. Контакт п-типа — это слой лития, диффундированного в германий, толщиной ~ 0.6 мм, а контакт р-типа — слой бора толщиной ~ 0.3 мкм, созданный методом ионной имплантации на внутреннюю поверхность центрального отверстия [8].

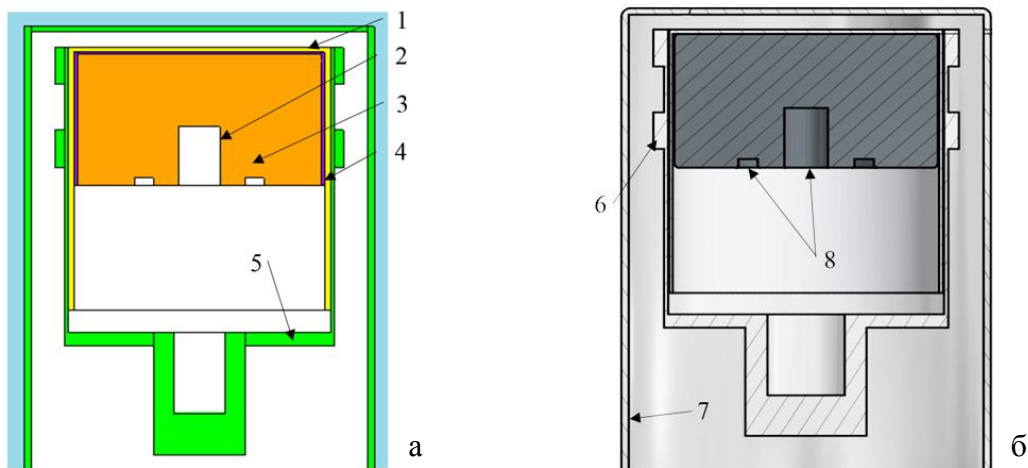


Рис. 1. ППД ОЧГ GC1518.

а — модель по программе MCNP, б — модель по данным разработчика; 1 — высокой плотности полиэтилен; 2 — слой р-типа из бора; 3 — кристалл Ge; 4 — слой п-типа из лития; 5 — держатель из алюминия; 6 — кольца держателя; 7 — корпус криостата из алюминия; 8 — отверстия

При моделировании детектора были учтены все параметры, предоставленные официальным поставщиком.

Основные процессы в детекторе такого типа и результирующий спектр достаточно хорошо описаны, например, в [9].

ФУНКЦИЯ ОТКЛИКА ДЕТЕКТОРА

Функция отклика — одна из важнейших характеристик любого спектрометра. В рассматриваемом случае это есть функция, которая описывает амплитудное распределение импульсов на выходе детектора для монохроматического γ -излучения, падающего на детектор. В полупроводниковых детекторах регистрация γ -излучения осуществляется по вторичным электронам, которые образуются при взаимодействии γ -квантов с кристаллом детекторов. Наличие трех процессов взаимодействия (фотоэффект, комптон-эффект, образование пар) приводит к тому, что наблюдаемое амплитудное распределение для реального γ -спектра имеет сложный характер и состоит из плавной части с отдельными пиками. В большинстве методов обработки амплитудных распределений информацию о γ -спектре извлекают лишь из параметров пиков, а непрерывную составляющую считают "фоном" независимо от ее происхождения.

Математически отклик детектора можно представить как функцию [10]:

$$R(E, E_i) = \varepsilon_{p, \text{tot}}(E_i) \cdot [P(E, E_i) + k_s S(E, E_i)], \quad (1)$$

где $\varepsilon_{p, \text{tot}}(E_i)$ — общая эффективность детектора для γ -квантов с энергией E_i .

Функция $P(E, E_i)$ описывает основную часть функции отклика детектора, возникающего в результате поглощения первичных γ -квантов, которые попадают напрямую от источника излучения в чувствительный объем детектора.

Функция $S(E, E_i)$ представляет дополнительный вклад в отклик детектора и общую эффективность, которая возникает при регистрации вторичных γ -квантов. Эти вторичные γ -кванты образуются при взаимодействиях первичных фотонов с материалом, окружающим чувствительный объем детектора: материалы элементов конструкции детектора, компоненты измерительной установки, экспериментальные комнатные объекты и т.д. Безразмерный фактор k_s определяет величину этого дополнительного вклада.

Саму вероятность обнаружения первичного излучения γ -квантов можно рассматривать, как состоящую из трех вероятностей:

- вероятности ε_d того, что γ -квант будет излучаться в направлении чувствительного объема детектора;
- вероятности ε_a того, что γ -квант избежит поглощения во всех слоях на своем пути от источника до чувствительного объема детектора;
- вероятности ε_i того, что γ -квант попадет в чувствительный объем и внесет вклад в отклик детектора (именно эту вероятность обычно обозначают термином эффективность регистрации частиц детектором).

Таким образом, для коллимированного или направленного пучка фотонов суммарную эффективность детектирования можно представить как произведение этих трех вероятностей, т.е. $\varepsilon_{p, \text{tot}}(E_i) = \varepsilon_d \times \varepsilon_a \times \varepsilon_i$, тогда как для неколлимированных источников и широких пучков фотонов требуется интегрирование в диапазоне телесных углов.

В настоящем подходе общая эффективность обнаружения $\varepsilon_{p, \text{tot}}$ рассматривается, исходя из того, что точечный изотропный источник расположен на оси цилиндрически симметричного чувствительного объема (кристалл детектора) и отделен от него несколькими поглощающими слоями (рис. 2).

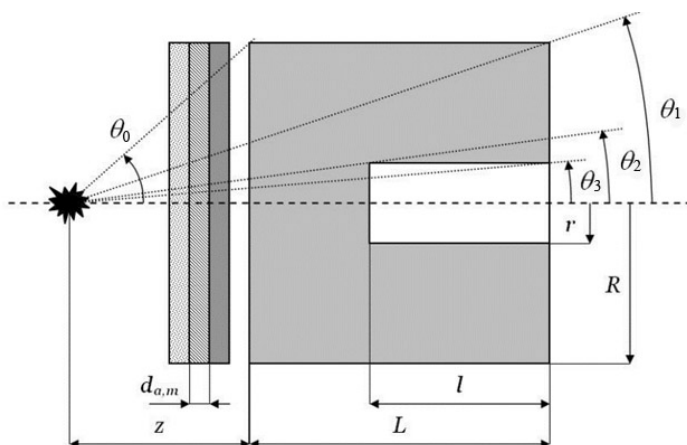


Рис. 2. Иллюстрация общей эффективности детектора.

z — расстояние от чувствительного объема до источника; $d_{a,m}$ — толщина m -го поглощающего слоя; θ_{0-3} , R , L , l , r — размеры чувствительного объема кристалла

Общая процедура оценки эффективности обнаружения реализуется через следующую формулу:

$$\varepsilon_{p,tot}(E_i) = \frac{1}{2} \cdot \sum_{n=0}^3 \int_{t_n}^{t_{n+1}} e^{-\sum_m \mu_{a,m}(E_i) d_{a,m}/t} \times \\ \times (-e^{-\mu_s(E_i) x_n(t)}) dt, \quad (2)$$

где $\mu_{a,m}$ — общий коэффициент затухания фотонов для материала m -го поглощающего слоя, $d_{a,m}$ — толщина m -го поглощающего слоя, μ_s — общий коэффициент затухания фотонов для материала чувствительного объема детектора, n — количество углов $\theta \equiv \theta_n$ ($n = 0, \dots, 3$), $x_n(t)$ — длина пути гамма-кванта в чувствительном объеме детектора для заданного значения косинуса полярного угла $t_n = \cos \theta_n$, определяющего размеры чувствительного объема кристалла (см. рис. 2).

Формулы для пределов угловых косинусных интервалов t_n и соответствующих длин релаксации фотонов $x_n(t)$ могут быть вычислены численным методом или вероятностным, используя метод Монте-Карло.

Рассмотрим функцию $P(E, E_i)$, описывающую первичное излучение γ -квантов как часть комптоновского континуума.

Функция $P(E, E_i)$ состоит из нескольких компонентов, представляющих основные особенности типичного отклика детектора, показанного на рис. 3. Этими характеристиками являются: пик аннигиляции (ПА), пик полного поглощения (ППП), пик рентгеновских лучей (ПРЛ), пик одиночного вылета (ПОВ), пик двойного вылета (ПДВ), комптоновский континуум (КК).

Математически первичный вклад фотонов может быть представлен формулой

$$P(E, E_i) = \varpi_{ппп,i} F_{ппп}(E, E_{ппп,i}) + \\ + \varpi_{пов,i} F_{пов}(E, E_{пов,i}) + \varpi_{пдв,i} F_{пдв}(E, E_{пдв,i}) +$$

$$+ \sum_j \varpi_{прл,j} F_{прл}(E, E_{прл,i}) + \\ + (1 - \varpi_{ппп,i} - \varpi_{пов,i} - \varpi_{пдв,i} - \\ - \sum_j \varpi_{прл,j}) F_{кк}(E, E_i). \quad (3)$$

Здесь $\varpi_{ппп,i} = \varepsilon_{ппп,i}/\varepsilon_{tot,i}$, $\varpi_{пов,i} = \varepsilon_{пов,i}/\varepsilon_{tot,i}$, $\varpi_{пдв,i} = \varepsilon_{пдв,i}/\varepsilon_{tot,i}$, $\varpi_{прл,j} = \varepsilon_{прл,j}/\varepsilon_{tot,i}$ — коэффициенты эффективности ППП, ПОВ, ПДВ и ПРЛ относительно общей эффективности обнаружения соответственно. Индекс i указывает, что коэффициенты должны быть оценены для энергии падающего фотона E_i . Индекс j означает, что соответствующее значение связано с выходом j -го характеристического рентгеновского излучения в чувствительном объеме детектора.

Функции распределения плотности вероятности $F_{ппп}$, $F_{пов}$, $F_{пдв}$ и $F_{прл}$ описывают профили ППП, ПОВ, ПДВ и ПРЛ соответственно. Пиковые центроиды рассчитываются как $E_{ппп,i} = E_i$, $E_{пов,i} = E_i - m_0 c^2$, $E_{пдв,i} = E_i - 2m_0 c^2$ и $E_{прл,j} = E_i - E_{x,j}$, где $m_0 c^2 = 511$ кэВ — масса остатка электрона и $E_{x,j}$ — энергия j -го характеристического рентгеновского излучения всех составляющих химических элементов чувствительного объема детектора. Функция распределения плотности вероятности $F_{кк}$ описывает профиль комптоновского континуума, созданного при взаимодействии первичных фотонов. Поскольку все профили нормированы на единицу, то первичный вклад фотонов

$$\int_0^\infty P(E, E_i) dE = 1. \quad (4)$$

Рассмотрим функцию $S(E, E_i)$, описывающую вторичное излучение γ -квантов, попадающих в детектор. Вторичные фотоны — это рассеянные фотоны, которые образуются в результате комптон-эффекта, когда вместо первичного фотона с энергией E_γ появляется рассеянный фотон с энергией $E_\gamma' < E_\gamma$.

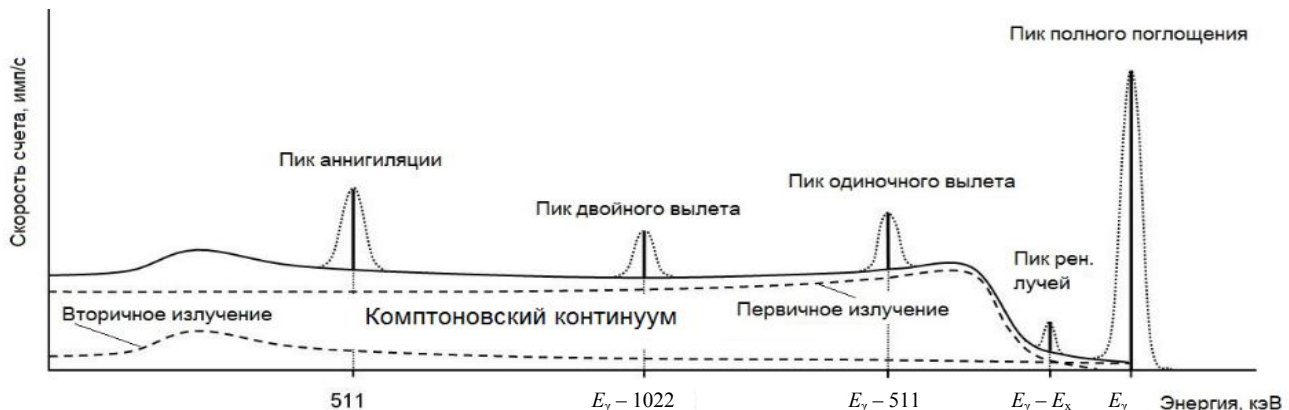


Рис. 3. Компоненты отклика детектора $R(E, E_i)$

Функция $S(E, E_i)$ включает вклады из двух источников:

$$S(E, E_i) = \varpi_{\text{анн},i} F_{\text{анн}}(E, m_0 c^2) + \varpi_{\text{КВ},i} F_{\text{КВ}}(E, E_i). \quad (5)$$

Первый член формулы описывает пик γ -излучения при 511 кэВ (ПА), что обусловлено полным поглощением фотонов 511 кэВ от аннигиляции позитронов. Эти позитроны создаются при взаимодействии высокоэнергетических фотонов ($E\gamma > 2 m_0 c^2$) и должны аннигилировать вне чувствительного объема детектора. Символ $\varpi_{\text{анн}}$ означает вклад от аннигиляционного пика $\varepsilon_{\text{анн}}$ в общую эффективность регистрации $\varepsilon_{\text{р, tot}}$. Функция распределения плотности вероятности $F_{\text{анн}}$ описывает профиль пика 511 кэВ. Второй член в формуле представляет собой часть континуума, связанного с детектированием вторичных фотонов (КВ). Символ $\varpi_{\text{КВ}}$ описывает величину этого вклада в общую эффективность регистрации $\varepsilon_{\text{р, tot}}$. Функция распределения плотности вероятности $F_{\text{КВ}}$ описывает профиль этого континуума.

Поскольку и аннигиляционные пики, и профили континуума нормированы на единицу, нормализация функции распределения вторичных фотонов $S(E, E_i)$:

$$\int_0^\infty S(E, E_i) dE = \varpi_{\text{анн},i} + \varpi_{\text{КВ},i}. \quad (6)$$

Принимая во внимание вышеупомянутые нормировки функций распределения первичных и вторичных фотонов, можно получить следующую формулу для общей эффективности обнаружения:

$$\varepsilon_{\text{р, tot}}(E_i) = \int_0^\infty R(E, E_i) dE = \varepsilon_{\text{р, tot}}(E_i) [1 + k_s (\varpi_{\text{анн},i} + \varpi_{\text{КВ},i})]. \quad (7)$$

В формуле (7) учтены как первичный, так и вторичный вклады от излучения фотонов. Используя коэффициент k_s можно масштабировать вклад от вторичных фотонов, таким образом адаптировать модель отклика детектора к различным условиям измерения, т.е. к другой среде детектирования.

При создании модели детектора была использована программа MCNP5. Расчеты по методу Монте-Карло дают оценку многократных интегралов в процессах переноса излучения, при этом они критически зависят от сечений взаимодействия, на основании которых проводятся. При выполнении расчетов были использованы библиотеки оцененных ядерных данных *ENDF/B-VI.8*.

Расчеты с фотонами были проведены с помощью обработки подробным методом, который включает когерентное рассеяние и отвечает за флуоресценцию фотонов после фотоэлектрического поглощения. Для учета электронных связей используются форм-факторы с когерентным и некогерентным рассеянием. Угловые распределения вторичных фотонов изотропны для фотоэлектрического эффекта, флуоресценции, и рождения пар; получены по хорошо известным формулам Томсона и Клейна—Нишины для когерентного и некогерентного рассеяния. При энергии 1407 кэВ использовались сечения рождения электронно-позитронных пар, причем при использовании приводимых в современной литературе сечений ошибку в расчетах, связанную с погрешностями вычисления сечений и составляющую около 20 %, можно считать нормальной.

Для каждого изотопа библиотеки взаимодействия фотонов представлены в виде энергетической сетки, содержащей 40–60 точек, с возможностью log-log интерполяции между ними, включая границы фотоэффекта и сечения образования пар. Логарифмы энергий отслеживаются по таблицам некогерентных и когерентных форм-факторов. Методика построения таблиц основана на численном интегрировании сеточных функций, построенных с помощью интерполяции экспериментальных данных.

При моделировании мы принимали во внимание наличие "мертвого слоя", задавая его как часть геометрии кристалла, но вклад от него в оценку эффективности детектора не учитывали. "Мертвый слой", согласно трактовке [11], — слой, в котором заряды собираются неполностью и регистрируются в "хвосте", связанном с неполным сбором заряда [9]. В работе [12] сделана оценка влияния мертвого слоя детектора на форму расчетной функции отклика Si-детектора и рассмотрены особенности формы функции отклика детектора.

Таким образом, модель детектора позволяет вычислять функцию отклика детектора, при этом были учтены все процессы и вероятности, такие как регистрация событий, связанных с:

- неполным сбором заряда электронов и дырок внутри мертвого слоя,
- выходом комптоновски рассеянного фотона,
- выходом фотона флуоресценции,
- формированием пика полного поглощения.

На рис. 4 показано полное эффективное сечение взаимодействия с веществом фотонов с энергиями от 10 эВ до 10^5 МэВ для поглощающего материала из ОЧГ. Выделены вклады различных физических процессов в полное сечение взаимодействия.

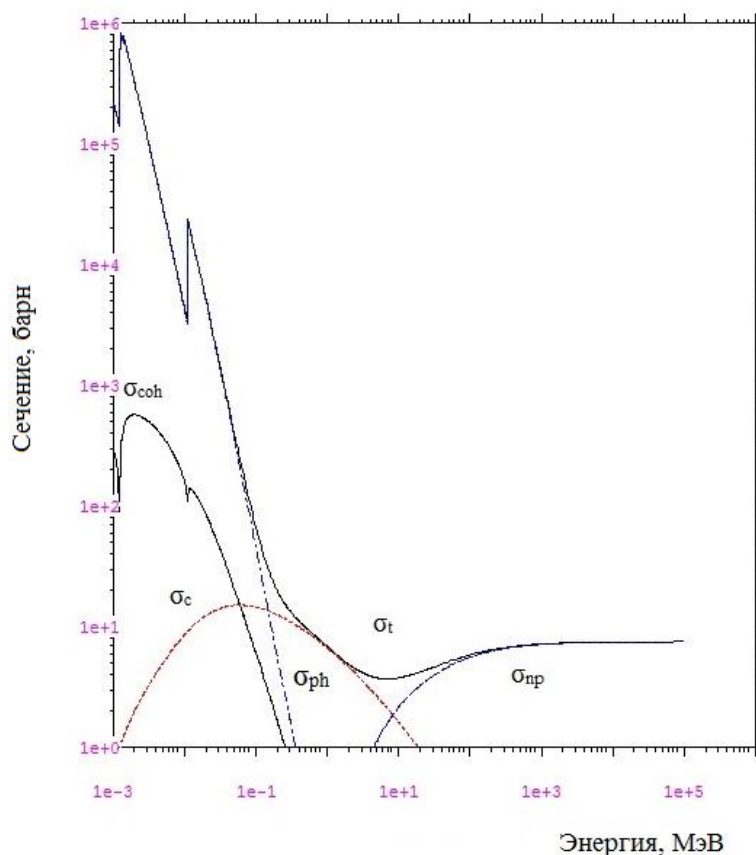


Рис. 4. Сечения взаимодействия фотонов с ОЧГ от 10 эВ до 100 ГэВ.

σ_t — общее сечение, σ_{ph} — сечение фотоэффекта, σ_{coh} — сечение когерентного рассеяния (Томсон + форм-фактор), σ_c — сечение некогерентного рассеяния (Комптон + форм-фактор), σ_{np} — сечение рождения пар

Конечно, существуют неточности и ошибки в сечениях. Неточности сечений фотопоглощения приведены, например, в работе [13] для рентгеновского диапазона излучения и оцениваются $\sim 2\%$. Очевидно, для больших энергий и для гамма-излучения они также имеются и имеют не меньшее значение.

В работе [14] были измерены дифференциальные сечения рассеяния при энергии 59.6 кэВ, при этом наблюдаются расхождения до 17 % с моделью [15], до 7 % с моделью [16].

Анализ литературных источников [1–7, 10–12] показывает, что модели детектора с такими характеристиками не существует. Во время исследования было создано несколько моделей нашего детектора, различающихся геометрией и в основном чувствительным объемом детектора из-за неясности толщины "мертвого слоя".

Предварительно для задач моделирования был выполнен ряд экспериментов по получению характеристик детектора [17]. Измерение эффективности регистрации детектора было проведено с помощью стандартного гамма-источника. Эффективность регистрации определяется как отношение числа импульсов, зарегистрированных в пике полного поглощения (ППП), к числу испущенных источником гамма-квантов.

Для получения зависимости эффективности регистрации гамма-квантов $\varepsilon(E_\gamma)$ от энергии были выполнены измерения спектров с источником ^{152}Eu из набора ОСГИ, и определены площади ППП для нескольких энергетических линий. Эффективность регистрации гамма-квантов с энергией E_γ была рассчитана по следующей формуле:

$$\varepsilon(E_\gamma) = \frac{S_{\text{ППП}}}{t_{\text{ж}}} \frac{e^{\lambda t}}{p \cdot A}, \quad (8)$$

где $S_{\text{ППП}}$ — площадь ППП (сумма числа отсчетов в пике); λ — постоянная распада, с^{-1} ; t — время, прошедшее с момента аттестации источника; $t_{\text{ж}}$ — "живое" время измерения, с; p — выход гамма-квантов на распад; A — активность источника на момент аттестации, Бк.

Сам источник ^{152}Eu представляет собой плоское кольцо из алюминия $\varnothing 25.4$ мм и толщиной 3 мм (набор образцовых спектрометрических гамма-источников ОСГИ-3-2). Между двумя полиамидными пленками с общей толщиной 100 ± 10 мкм термически загерметизирована активная часть. Диаметр активной части источника составляет не более 3 мм. Внешний вид источника представлен на рис. 5.

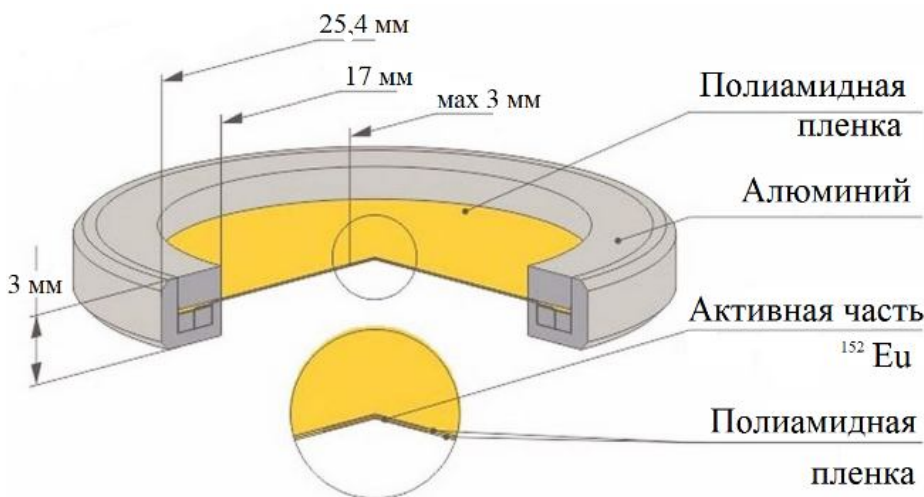


Рис. 5. Внешний вид источника

Значения эффективности регистрации гамма-квантов $\varepsilon(E_\gamma)$ (эксперимент)

Энергия гамма-квантов E_γ , кэВ	Расстояние от поверхности детектора до источника h , мм				
	80	100	150	200	250
121.78	$1.41 \cdot 10^{-2}$	$9.72 \cdot 10^{-3}$	$4.98 \cdot 10^{-3}$	$2.87 \cdot 10^{-3}$	$1.91 \cdot 10^{-3}$
244.70	$8.18 \cdot 10^{-3}$	$5.75 \cdot 10^{-3}$	$2.96 \cdot 10^{-3}$	$1.75 \cdot 10^{-3}$	$1.19 \cdot 10^{-3}$
344.28	$6.24 \cdot 10^{-2}$	$4.36 \cdot 10^{-2}$	$2.23 \cdot 10^{-2}$	$1.32 \cdot 10^{-2}$	$8.88 \cdot 10^{-3}$
443.98	$4.64 \cdot 10^{-3}$	$3.28 \cdot 10^{-3}$	$1.64 \cdot 10^{-3}$	$9.85 \cdot 10^{-4}$	$6.59 \cdot 10^{-4}$
778.9	$2.33 \cdot 10^{-3}$	$1.63 \cdot 10^{-3}$	$8.32 \cdot 10^{-4}$	$4.98 \cdot 10^{-4}$	$3.33 \cdot 10^{-3}$
867.38	$2.04 \cdot 10^{-3}$	$1.44 \cdot 10^{-3}$	$7.83 \cdot 10^{-4}$	$4.54 \cdot 10^{-4}$	$2.93 \cdot 10^{-3}$
964.13	$1.88 \cdot 10^{-3}$	$1.33 \cdot 10^{-3}$	$6.81 \cdot 10^{-4}$	$4.04 \cdot 10^{-4}$	$2.69 \cdot 10^{-3}$
1085.9	$1.88 \cdot 10^{-3}$	$1.29 \cdot 10^{-3}$	$6.78 \cdot 10^{-4}$	$4.00 \cdot 10^{-4}$	$2.64 \cdot 10^{-3}$
1112.1	$1.63 \cdot 10^{-3}$	$1.13 \cdot 10^{-3}$	$5.82 \cdot 10^{-4}$	$3.45 \cdot 10^{-4}$	$2.32 \cdot 10^{-3}$
1407.99	$1.30 \cdot 10^{-3}$	$9.22 \cdot 10^{-4}$	$4.69 \cdot 10^{-4}$	$2.84 \cdot 10^{-4}$	$1.87 \cdot 10^{-3}$

Результаты проведенных экспериментов представлены в таблице.

Для определения эффективности регистрации в интервале энергий гамма-квантов от 122 до 1408 кэВ построены градуировочные зависимости $\ln(\varepsilon)$ от $\ln(E_\gamma)$.

Экспериментальные значения были аппроксимированы полиномами четвертой степени. Результаты аппроксимации для расстояний 80, 100, 150, 200, 250 мм представлены формулами (9)–(13) соответственно

$$\ln \varepsilon^{(80)} = -0.07824(\ln E)^4 + 1.992(\ln E)^3 - 18.89(\ln E)^2 + 77.98(\ln E) - 122.2, \quad (9)$$

$$\ln \varepsilon^{(100)} = -0.07692(\ln E)^4 + 1.966(\ln E)^3 - 18.71(\ln E)^2 + 77.49(\ln E) - 122.2, \quad (10)$$

$$\ln \varepsilon^{(150)} = -0.1072(\ln E)^4 + 2.693(\ln E)^3 - 25.2(\ln E)^2 + 103.1(\ln E) - 160.4, \quad (11)$$

$$\ln \varepsilon^{(200)} = -0.07666(\ln E)^4 + 1.963(\ln E)^3 - 18.73(\ln E)^2 + 77.8(\ln E) - 124.3, \quad (12)$$

$$\ln \varepsilon^{(250)} = -0.1008(\ln E)^4 + 2.561(\ln E)^3 - 24.24(\ln E)^2 + 100.2(\ln E) - 158.6. \quad (13)$$

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ЭФФЕКТИВНОЙ ТОЛЩИНЫ НЕЧУВСТВИТЕЛЬНОГО (МЕРТВОГО) СЛОЯ

Для одного и того же типа детектора характерен большой разброс параметров (чувствительная область, толщина мертвого, или нечувствительного, слоя), поскольку на современном уровне технологий практически невозможно получить абсолютно идентичные по своей конфигурации детекторы, следовательно, для каждого конкретного типа детектора требуется индивидуальное определение характеристик [18, 19].

Оценка толщины мертвого слоя кристалла детектора важна для спектрометрии излучения и повышения точности измерений, поскольку этот слой не только ограничивает верхний и нижний пределы энергетического диапазона и ухудшает энергетическое разрешение детектирующих приборов, но и по-разному уменьшает энергию регистрируемых ионов в зависимости от структуры их атомных оболочек [20].

Была смоделирована система, состоящая из детектора и гамма-источника.

С целью определения зависимости эффективности регистрации от изменения толщины нечувствительного слоя кристалла объем кристалла геометрически был разделен на две области — так называемый мертвый слой и непосредственно чувствительный объем. Увеличивая или уменьшая толщину нечувствительного слоя с фронтальной или с боковой стороны мы влияли на величину чувствительного объема.

Хотя при этом корректировался мертвый слой, основные изменения касались именно чувстви-

тельного объема кристалла.

Для сравнения с имеющимися экспериментальными значениями [17] была задана серия энергий гамма-квантов и проведены необходимые расчеты эффективности регистрации гамма-излучения для различных вариантов. В смоделированной системе источник гамма-квантов ^{152}Eu размещался на расстояния 80, 100, 150, 200 и 250 мм от торцевой поверхности крышки детектора согласно условиям калибровки физического детектора.

Нейтронно-физические расчеты были выполнены с помощью программы MCNP [21] для 25 миллионов историй, что является вполне достаточным для получения удовлетворительной точности. При этом были выполнены отдельные боковое и фронтальное параметрирования мертвого слоя. Зависимость эффективности регистрации от изменения толщины слоя кристалла показана на рис. 6.

В целом видно, что с уменьшением объема кристалла (увеличением толщины нечувствительного слоя) эффективность регистрации падает. Было определено, что изменение толщины мертвого слоя с любой стороны на 0.2 мм изменяет эффективность регистрации примерно на $4 \cdot 10^{-5}$ отн. ед.

После анализа результатов расчетов и сравнения с экспериментальными значениями боковая и фронтальная толщина нечувствительного слоя была установлена 0.7 мм. Относительно небольшое значение толщины мертвого слоя соответствует тому факту, что используется ППД с малым сроком эксплуатации, когда процесс диффундирования ионов лития вглубь кристалла германия незначителен.

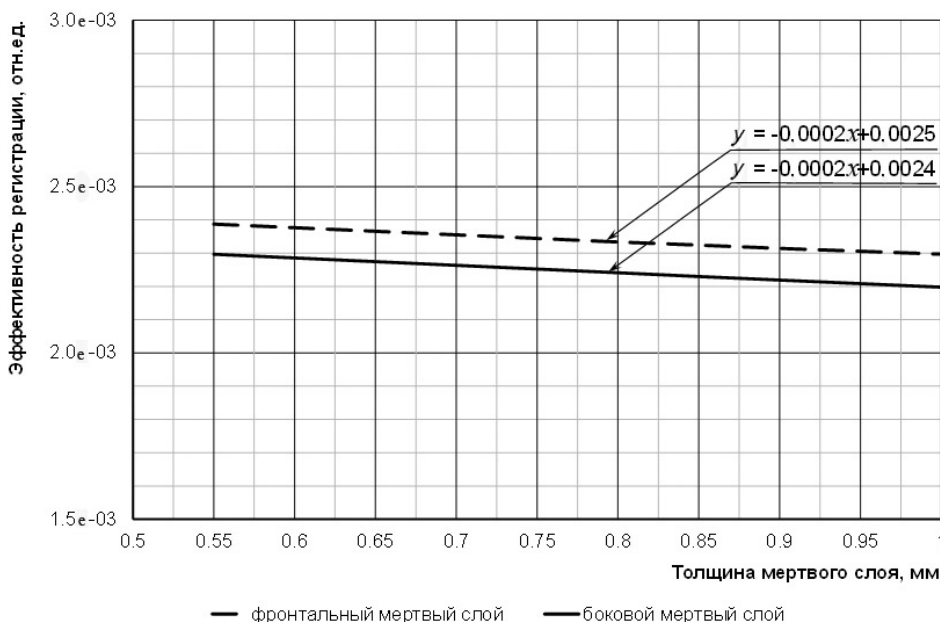


Рис. 6. Зависимость значений эффективности регистрации от толщины мертвого слоя

АНАЛИЗ ПОЛУЧЕННЫХ РАСЧЕТНЫХ ДАННЫХ И ИХ СРАВНЕНИЕ С ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫМИ ЗНАЧЕНИЯМИ

На рис. 7 представлены графики и аналитические зависимости полученных расчетных значений эффективности регистрации гамма-квантов от энергии излучения источника, расположенного на различных расстояниях от детектора. Для ближних расстояний характерно высокое падение эффективности регистрации при увеличении энергии излучения. С увеличением расстояния гамма-излучение низких энергий в результате взаимодействия со внешней средой не доходит до чувствительного объема детектора и численно регистрируется почти на уровне с излучением высоких энергий.

Для оценки отклонений расчетных значений от экспериментальных были построены графики (рис. 8) для расстояний 80 мм (ближнее), 250 мм (дальнее) и 100 мм (когда отклонения минимальны). Данные экспериментов на графике были установлены как единица (прямая линия). Наибольшие отклонения имеет эффективность регистрации для энергии 121.78 кэВ; это, возможно, связано с тем, что коаксиальные полупроводниковые

детекторы мало пригодны для измерений источников с низкой энергией гамма-квантов [20]. Для более точных измерений гамма-излучений низких энергий используются детекторы с планарной геометрией кристалла.

В итоге создана модель с чувствительным объемом кристалла 61.69 см^3 , которая позволяет с точностью $\sim 3 \%$ определять расчетный отклик детектора.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В ходе исследований:

а) выполнено большое количество экспериментальных измерений с полупроводниковым детектором марки Canberra GC1518, используя набор стандартных источников на различных расстояниях и углах поворота;

б) проведено математическое моделирование интегральной эффективности детектора с целью определения оптимальных размеров кристалла;

г) выполнен анализ толщин мертвого слоя и сделано заключение о чувствительном объеме кристалла детектора.

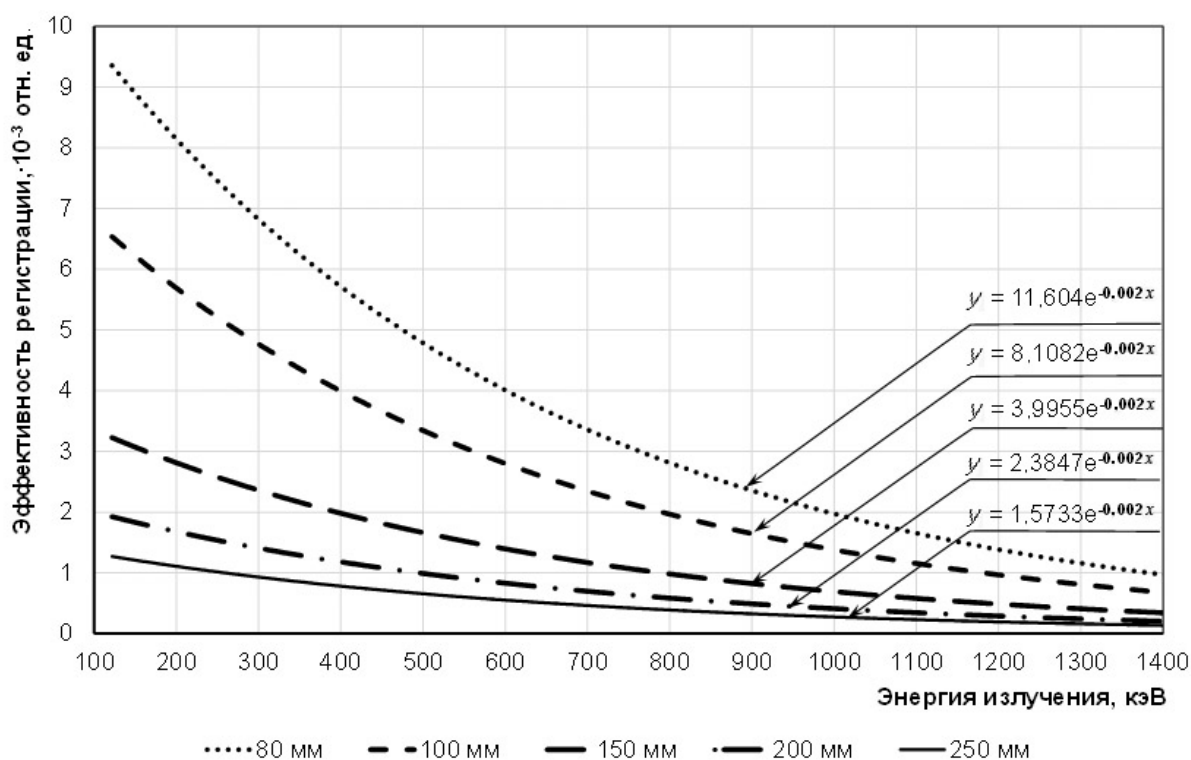


Рис. 7. Зависимости эффективности регистрации гамма-квантов от энергии излучения при разных расстояниях расположения источника до крышки детектора

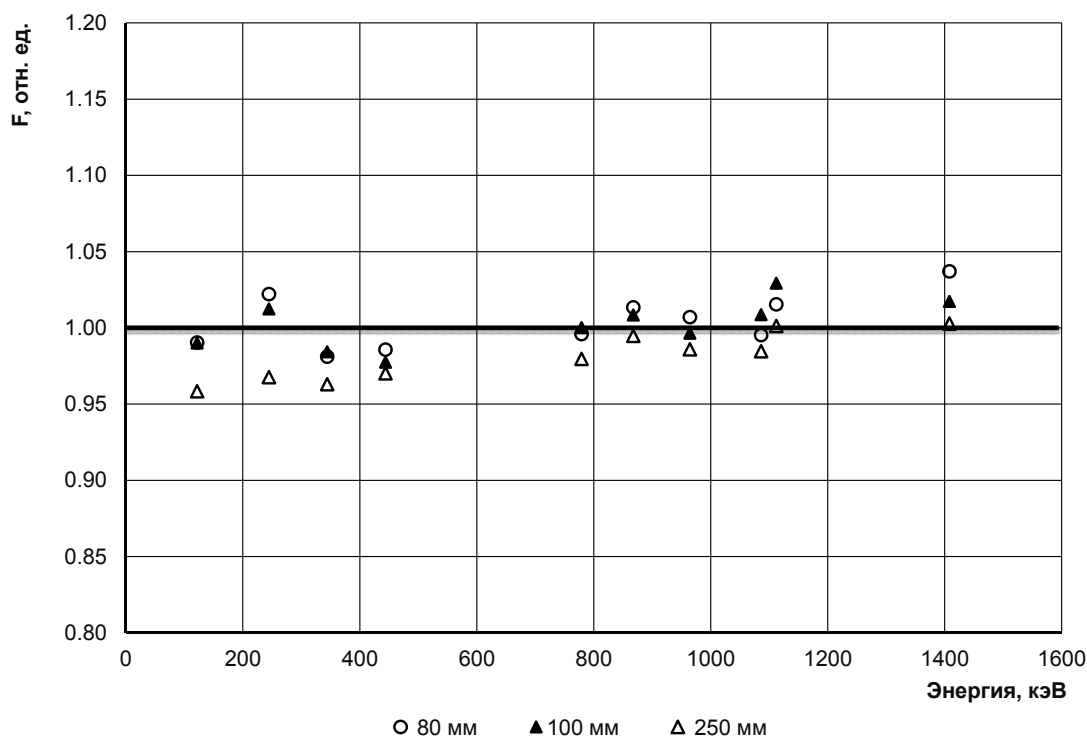


Рис. 8. Сравнение расчетных откликов с экспериментальными значениями

В итоге была разработана модель детектора GC1518, которая позволяет с точностью $\sim 3\%$ рассчитывать эффективность регистрации гамма-квантов в широком диапазоне энергий до 1.5 МэВ. Было определено, как толщина мертвого слоя и соответственно объем кристалла влияет на величину эффективности регистрации. Увеличение толщины мертвого слоя с торцевой и боковой поверхностей кристалла на 0.2 мм уменьшало эффективность регистрации примерно на $4 \cdot 10^{-5}$ отн. ед. В ходе расчетов было получено, что и для торцевого, и для бокового мертвых слоев эффективная толщина составила 0.7 мм. При этом чувствительный объем кристалла расчетной модели детектора GC1518 составил 61.69 см^3 .

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Modarresi S.M., Masoudi S.F. On the gamma spectrometry efficiency of reference materials and soil samples // *Journal of Environmental Radioactivity*. 2018. Vol. 183. P. 54–58. DOI: 10.1016/j.jenvrad.2017.12.012
2. Persson L., Boson J., Nylen T., Ramebacka'd H. Application of a Monte Carlo method to the uncertainty assessment in in situ gamma-ray spectrometry // *Journal of Environmental Radioactivity*. 2018. Vol. 187. P. 1–7. DOI: 10.1016/j.jenvrad.2018.02.003
3. Shrivastava H.B., Rita N.R., Rao V.K., Raghavender B., Sharma P.K. Estimation of uranium concentration in Indian monazite samples HPGe semiconductor detector // *Applied Radiation and Isotopes*. 2018. Vol. 141. P. 21–23. DOI: 10.1016/j.apradiso.2018.08.010
4. Бибичев Б.А., Круглов В.П., Майоров В.П., Протасенко Ю.М., Сунчугашев М.А., Федотов П.И., Швоев А.Ф. Измерение выгорания топлива в ТВС ВВЭР-365 и ВВЭР-440 гамма-спектрометрическим методом // *Атомная энергия*. 1982. Т. 53, вып. 4. С. 222–224.
5. Koleska M., Viererbl L., Marek M. Development of the MCNPX model for the portable HPGe detector // *Radiation Physics and Chemistry*. 2014. Vol. 104. P. 351–354. DOI: 10.1016/j.radphyschem.2014.03.035
6. Khan W., Zhang Q., He C., Saleh M. Monte Carlo simulation of the full energy peak efficiency of an HPGe detector // *Applied Radiation and Isotopes*. 2018. Vol. 131. P. 67–70. DOI: 10.1016/j.apradiso.2017.11.018
7. Lepy M.-C., Brondeau L., Menesguen Y., Pierre S., Riffaud J. Consistency of photon emission intensities for efficiency calibration of gamma-ray spectrometers in the energy range from 20 keV to 80 keV // *Applied Radiation and Isotopes*. 2018. Vol. 134. P. 131–136. DOI: 10.1016/j.apradiso.2017.07.006
8. Коаксиальные германиевые детекторы с реверсивными электродами (REGe). URL: http://www.canberra.ru/html/products/Gamma_High/detector_assemblies/detectors/C40436%20Russian%20REGe%20Super%20Spec_2.pdf
9. Жуковский А.Н., Пиеничный Г.А., Мейер А.В. Высоко-

- чувствительный рентгено-флуоресцентный анализ с полупроводниковыми детекторами. М.: Энергоатомиздат, 1991. 160 с.
10. *Berlizov A.N., Tryshyn V.V.* A Monte Carlo approach to true-coincidence summing correction factor calculation for gamma-ray spectrometry applications // *Journ. Radioanal. Nucl. Chem.* 2005. Vol. 264, no. 1. P. 169–174.
 11. *Дирнли Дж., Нортрон Д.* Полупроводниковые счетчики ядерных излучений. М.: Мир, 1966. 359 с.
 12. *Портной А.Ю., Павлинский Г.В., Горбунов М.С., Сударова Ю.И.* Об особенностях фона, обусловленных переносом и сбором электронов в Si-детекторе // *Научное приборостроение*. 2011. Т. 21, № 4. С. 145–150. URL: <http://iairas.ru/mag/2011/abst4.php#abst18>
 13. *Hubbell J.H.* Compilation of photon cross-sections: some historical remarks and current status // *X-ray spectrometry*. 1999. Vol. 28 P. 215–223. DOI: 10.1002/(SICI)1097-4539(199907/08)28:4<215::AID-XRS336>3.0.CO;2-5
 14. *Şimşek O., Ertuğrul M., Budak G., Karabulut A.* Inelastic and elastic scattering differential cross-sections of 59.6 keV photons for Cu and Zn targets // *X-ray spectrometry*. 2004. Vol. 33. P. 349–353. DOI: 10.1002/xrs.724
 15. *Hubbell J.H., Veigele W.J., Briggs E.A. et al.* Atomic form factors, incoherent scattering functions and photon scattering cross-sections // *J. Phys. Chem. Ref. Data*. 1975. Vol. 471, no. 4. P. 471–538. DOI: 10.1063/1.555523
 16. *Schaupp D., Schumacher M., Smend F., Rullhusen P., Hubbell J.H.* Small angle realign scattering of photons at high energies: Tabulation of relativistic HFS modified atomic form factors // *J. Phys. Chem. Ref. Data*. 1983. Vol. 12, is. 3. P. 467–512. DOI: 10.1063/1.555690
 17. Калибровки спектрометра: протокол № 13-240-02/88784 от 06.06.2016. Филиал Института атомной энергии Национального ядерного центра Республики Казахстан, Курчатов, 2016. 3 с.
 18. *Chuong H.D., Thanh T.T., Thang L.T.N., Nguen V.H., Tao C.T.* Estimating thickness of the inner dead-layer of n-type HPGe detector // *Applied Radiation and Isotopes*. 2016. Vol. 116. P. 174–177.
 19. *Modarresi S.M., Masoudi S.F., Karimi M.* A method for considering the spatial variations of dead layer thickness in HPGe detectors to improve the FEPE calculation of bulky samples // *Radiation Physics and Chemistry*. 2017. Vol. 130. P. 291–296. DOI: 10.1016/j.radphyschem.2016.08.020
 20. *Колеватов Ю.И., Семенов В.П., Трыков Л.А.* Спектрометрия нейтронов и гамма-излучений в радиационной физике. М.: Энергоатомиздат, 1991. 296 с.
 21. *Briesmeister J.F.* MCNP – a general Monte Carlo N-Particle transport code. Los Alamos, 2000. 790 p. URL: <https://permalink.lanl.gov/object/tr?what=info:lanl-repo/lareport/LA-13709-M>

Институт атомной энергии Национального ядерного центра Республики Казахстан, г. Курчатов, Республика Казахстан (Попов Ю.А., Прозорова И.В., Прозоров А.А.)

Национальный исследовательский Томский политехнический университет, г. Томск, Российская Федерация (Сабитова Р.Р.)

Контакты: Прозорова Ирина Валентиновна, prozorova@nnc.kz

Материал поступил в редакцию 27.02.2019

IMPROVED PHYSICAL AND MATHEMATICAL MODEL OF A SEMICONDUCTOR GAMMA RADIATION DETECTOR BASED ON THE USE OF THE STATISTICAL TESTS METHOD

Yu. A. Popov¹, I. V. Prozorova¹, A. A. Prozorov¹, R. R. Sabitova²

¹*Institute of Atomic Energy, National Nuclear Center of Republic of Kazakhstan,
Kurchatov, Republic of Kazakhstan*

²*Tomsk Polytechnic University, Tomsk, Russia*

Relevance of research. The relevance of the study is due to the fact that neutron activation analysis (NAA) is one of the convenient ways to determine the composition of samples of natural and man-made origin. Among such objects are unique samples of rocks, minerals, condensates, dust, "hot" particles, etc. In this case, the effectiveness of the analysis depends on the applied methods and techniques. NAA is highly sensitive (up to 10^{-14} g), multi-element, non-destructive, less dependent on the mass and composition of the sample, on the forms of finding the elements.

The main aim: the main purpose of the study was to obtain an HPG model of the detector using Monte Carlo simulation of the interaction of gamma-rays with the detector crystal.

Research objects: the detector response was obtained experimentally and with the help of a neutron-physical model.

Research Methods. The main tool used for instrumental neutron activation analysis is a semiconductor detector based on highly pure germanium crystals under the general label HPGe (HPG). This paper is devoted to modeling one of these detectors using the Monte Carlo method and the MCNP program that implements it.

Results. In the course of research, in particular: a) a large number of experimental measurements were made with a Canberra GC1518 semiconductor detector using a set of standard sources at various distances and angles of rotation, b) variant models were created, c) parametric modeling was performed, d) analysis was performed and conclusion was made on the sensitive crystal volume of the detector.

A model has been developed that repeats the parameters of a real gamma-spectrometer, which makes it possible to calculate the efficiency of recording gamma-rays in a wide range of energies up to 1.5 MeV.

Keywords: semiconductor detector, crystal volume, registration efficiency, gamma radiation, Monte Carlo method

Fig. 1. Germanium detector GC1518: a — model built in the MCNP program; b — developer's source data. 1) high density polyethylene; 2) boron contact layer; 3) germanium crystal; 4) lithium contact layer; 5) aluminum holder; 6) holder rings; 7) aluminum cryostat; 8) holes

Fig. 2. Illustration to the total detector efficiency $\varepsilon_{p,toi}$: z — source-to-detector sensitive volume distance; $d_{a,m}$ — the thickness of the m -th absorbing layer; θ_{0-3} , R , L , l and r — the dimensions of the sensitive volume

Fig. 3. Components of the detector response $R(E, E_i)$

Fig. 4. Cross section for the interaction of photons with GPG from 10 eV to 100 GeV. σ_t is the total cross section, σ_{ph} is the photoelectric cross section, σ_{coh} is the coherent scatter cross section (Thomson + form factor), σ_c is the incoherent scatter cross section (Compton + form factor), σ_{np} is the cross section of pair production

Fig. 5. Source geometry

Fig. 6. Dependence of registration efficiency values on the thickness of the lateral dead layer

Fig. 7. Dependences of the efficiency of gamma-quanta registration on the radiation energy at different distances of the source location to the detector cover

Fig. 8. Comparison of calculated response with experimental values

Table. Registration efficiency values of gamma-quantum $\varepsilon(E_\gamma)$ (experiment)

REFERENCES

1. Modarresi S.M., Masoudi S.F. On the gamma spectrometry efficiency of reference materials and soil samples. *Journal of Environmental Radioactivity*, 2018, vol. 183, pp. 54–58. DOI: 10.1016/j.jenvrad.2017.12.012
2. Persson L., Boson J., Nylen T., Ramebacka'd H. Application of a Monte Carlo method to the uncertainty assessment in in situ gamma-ray spectrometry. *Journal of Environmental Radioactivity*, 2018, vol. 187, pp. 1–7. DOI: 10.1016/j.jenvrad.2018.02.003
3. Shrivastava H.B., Rita N.R., Rao V.K., Raghavender B., Sharma P.K. Estimation of uranium concentration in Indian monazite samples HPGe semiconductor detector. *Applied Radiation and Isotopes*, 2018, vol. 141, pp. 21–23. DOI: 10.1016/j.apradiso.2018.08.010
4. Bibichev B.A., Kruglov V.P., Mayorov V.P., Protasenko Yu.M., Sunchugashev M.A., Fedotov P.I., Shvoev A.F. [Measurement of burning out of fuel in TVS VVER-365 and VVER-440 by a gamma and spectrometer method]. *Atomnaya energiya* [Atomic energy], 1982, vol. 53, is. 4, pp. 222–224. DOI: 10.1007/BF01122298 (In Russ.).
5. Koleska M., Viererbl L., Marek M. Development of the MCNPX model for the portable HPGe detector. *Radiation Physics and Chemistry*, 2014, vol. 104, pp. 351–354. DOI: 10.1016/j.radphyschem.2014.03.035
6. Khan W., Zhang Q., He C., Saleh M. Monte Carlo simulation of the full energy peak efficiency of an HPGe detector. *Applied Radiation and Isotopes*, 2018, vol. 131, pp. 67–70. DOI: 10.1016/j.apradiso.2017.11.018
7. Lepy M.-C., Brondeau L., Menesguen Y., Pierre S., Riffaud J. Consistency of photon emission intensities for efficiency calibration of gamma-ray spectrometers in the energy range from 20 keV to 80 keV. *Applied Radiation and Isotopes*, 2018, vol. 134, pp. 131–136. DOI: 10.1016/j.apradiso.2017.07.006
8. Mirion technologies. *Koaksial'nye germaniyeve detektory s reversivnymi elektrodami (REGe)* [Coaxial germanic detectors with reverse electrodes (REGe)]. URL: http://www.canberra.ru/html/products/Gamma_High/detector_assemblies/detectors/C40436%20Russian%20REGe%20Super%20Spec_2.pdf (In Russ.).
9. Zhukovskiy A.N., Pshenichnyy G.A., Meyer A.V. *Vysokochuvstvitel'nyy rentgeno-fluorescentnyy analiz s poluprovodnikovymi detektorami* [The highly sensitive X-ray fluorescent analysis with semiconductor detectors]. Moscow, Energoatomizdat Publ., 1991. 160 p. (In Russ.).
10. Berlizov A.N., Tryshyn V.V. A Monte Carlo approach to true-coincidence summing correction factor calculation for gamma-ray spectrometry applications. *J. Radioanal. Nucl. Chem.*, 2005, vol. 264, no. 1, pp. 169–174. DOI: 10.1007/s10967-005-0690-0
11. Dearnaley G., Northrop D.C. *Semiconductor counters for nuclear radiations*. New York, Wiley, 1963. 331 p. (Russ. ed.: Dirnli Dzh., Nortrop D. *Poluprovodnikovye schetchiki yadernyh izlucheniyy*. Moscow, Mir Publ., 1966. 359 p.). (In Russ.).
12. Portnoy A.Yu., Pavlinsky G.V., Gorbunov M.S., Sidorova Yu.I. [Background properties of si detector, due to electron transport and charge yield]. *Nauchnoe Priborostroenie* [Scientific Instrumentation], 2011, vol. 21, no. 4, pp. 145–150. URL: <http://iairas.ru/en/mag/2011/abst4.php#abst18> (In Russ.).
13. Hubbell J.H. Compilation of photon cross-sections: some historical remarks and current status. *X-ray spectrometry*, 1999, vol. 28, pp. 215–223. DOI: 10.1002/(SICI)1097-4539(199907/08)28:4<215::AID-XRS336>3.0.CO;2-5
14. Şimşek O., Ertuğrul M., Budak G., Karabulut A. Inelastic and elastic scattering differential cross-sections of 59.6 keV photons for Cu and Zn targets. *X-ray spectrometry*, 2004, vol. 33, pp. 349–353. DOI: 10.1002/xrs.724
15. Hubbell J.H., Veigele W.J., Briggs E.A., et al. Atomic form factors, incoherent scattering functions and photon scattering cross-sections. *J. Phys. Chem. Ref. Data*, 1975, vol. 471, no. 4, pp. 471–538. DOI: 10.1063/1.555523
16. Schaupp D., Schumacher M., Smend F., Rullhusen P., Hubbell J.H. Small angle realign scattering of photons at high energies: Tabulation of relativistic HFS modified atomic form factors. *J. Phys. Chem. Ref. Data*, 1983, vol. 12, is. 3, pp. 467–512. DOI: 10.1063/1.555690
17. Kalibrovki spektrometra: protokol № 13-240-02/88784 ot 06.06.2016 [Calibrations of a spectrometer: protocol no. 13-240-02/88784 of 06.06.2016]. Kazakhstan, Kurchatov, Branch of Institute of atomic energy of the National nuclear center of the Republic, 2016. 3 p. (In Russ.).
18. Chuong H.D., Thanh T.T., Thang L.T.N., Nguen V.H., Tao C.T. Estimating thickness of the inner dead-layer of n-type HPGe detector. *Applied Radiation and Isotopes*, 2016, vol. 116, pp. 174–177. DOI: 10.1016/j.apradiso.2016.08.010
19. Modarresi S.M., Masoudi S.F., Karimi M. A method for considering the spatial variations of dead layer thickness in HPGe detectors to improve the FEPE calculation of bulky samples. *Radiation Physics and Chemistry*, 2017, vol. 130, pp. 291–296. DOI: 10.1016/j.radphyschem.2016.08.020
20. Kolevatov Yu.I., Semenov V.P., Trykov L.A. *Spektrometriya neytronov i gamma-izlucheniyy v radiacionnoy fizike* [Spectrometry of neutrons and gamma-radiations in radiation physics]. Moscow, Energoatomizdat Publ., 1991. 296 p. (In Russ.).
21. Briesmeister J.F. *MCNP – a general Monte Carlo N-Particle transport code*. Los Alamos, 2000. 790 p. URL: <https://permalink.lanl.gov/object/tr?what=info:lanl-repo/lareport/LA-13709-M>

Contacts: Prozorova Irina Valentinovna,
prozorova@nnc.kz

Article received by editing board on 27.02.2019