

УДК 539.1.074:519.876.5; PACS 29.40.Wk, 85.30De, 07.85.-m

ВЕРИФІКАЦІЯ МОДЕЛЕЙ ПОЛУПРОВОДНИКОВИХ ДЕТЕКТОРОВ ГАММА-ІЗЛУЧЕННЯ

A.A. Захарченко

Національний науковий центр «Харківський фізико-технічний інститут»

ул. Академіческа 1, г. Харків, 61108, Україна

e-mail: aaz@kipt.kharkov.ua

Поступила в редакцию 16 мая 2011 г.

В работе рассмотрено применение критерия Колмогорова–Смирнова для оценки качества расчета амплитудных спектров при помощи ранее разработанной модели широкозонного полупроводникового детектора гамма-излучения. Показано, что основная часть амплитудных спектров от источников излучения ^{241}Am , ^{152}Eu и ^{137}Cs восстанавливается корректно. Основной причиной статистически значимых различий между теоретическими и экспериментальными функциями отклика являются упрощения геометрии измерительной установки. Для объяснения систематических различий на участке спектра, который соответствует комптоновскому рассеянию γ -квантов, необходимо отразить в модели неоднородность распределения дефектов по объему детектора.

КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА: детектор, функция отклика, критерий согласия Колмогорова–Смирнова, уровень значимости.

MODEL VERIFICATION OF THE SEMICONDUCTOR GAMMA-RAY DETECTORS

A.A. Zakharchenko

National Science Center "Kharkov Institute of Physics and Technology"

1, Akademicheskaya St., 61108 Kharkov, Ukraine

Kolmogorov-Smirnov test is used for evaluation of the goodness of fit of amplitude spectra calculated with the previously developed model of wide-gap semiconductor gamma-radiation detector. It was shown that the major part of the amplitude spectra from the ^{241}Am , ^{152}Eu and ^{137}Cs radiation sources are correctly reconstructed. Simplification of the measuring system geometry is a main reason of significant differences between theoretical and experimental response functions. The fluctuations of defect distribution in the detector volume should be included in the detector model to explain the systematic differences at the Compton section of spectrum.

KEY WORDS: detector, response function, Kolmogorov-Smirnov goodness-of-fit test, significance level.

ВЕРИФІКАЦІЯ МОДЕЛЕЙ НАПІВПРОВІДНИКОВИХ ДЕТЕКТОРІВ ГАММА-ВИПРОМІНЮВАННЯ

O.O. Захарченко

Національний науковий центр «Харківський фізико-технічний інститут»

бул. Академічна 1, м. Харків 61108, Україна

В роботі розглянуто використання критерію Колмогорова–Смірнова для оцінювання якості розрахунку амплітудних спектрів за допомогою раніше розробленої моделі широкозонного напівпровідникового детектора гамма-випромінювання. Показано, що основна частина амплітудних спектрів від джерел випромінювання ^{241}Am , ^{152}Eu та ^{137}Cs відновлюється коректно. Головною причиною статистично значимої різниці між теоретичними та експериментальними функціями відгуку є спрощення геометрії вимірювальної установки. Для пояснення систематичної різниці на відрізку спектру, що відповідає комптонівському розсіянню γ -квантів, необхідно відобразити в моделі неоднорідність розподілення дефектів в об'ємі детектора.

КЛЮЧОВІ СЛОВА: детектор, функція відгуку, критерій узгодженості Колмогорова–Смірнова, рівень значущості.

Широкое распространение радиационных технологий в промышленности, энергетике и медицине требует обеспечения оперативного контроля уровня облучения как отдельных индивидов, так и больших групп населения в целом. Для безопасного применения радиоактивных веществ и пучков заряженных частиц в медицинских целях необходимы приборы, измеряющие дозовые нагрузки с точностью лучше 10% [1]. При этом медицинский зонд-минидозиметр должен быть небольшого размера, работать при низких уровнях напряжения смещения, обладать хорошей чувствительностью при регистрации γ -излучения низкой интенсивности и обеспечивать заданную точность измерения поглощенной дозы при температуре $\approx 37^\circ\text{C}$ [2]. Отдельную проблему представляет неконтролируемое распространение радиоактивных материалов, что приводит к необходимости решения задачи удаленных измерений очень низких уровней излучений.

Разработка и исследование новых типов детекторов ядерных излучений остается актуальной задачей. Количество материалов, которые могут представлять интерес для спектрометрии и дозиметрии излучений, оказывается очень большим. В базу данных структур неорганических кристаллов (ICSD – Inorganic Crystal Structure Database) включены описания тысяч кристаллов, которые теоретически могут удовлетворять требованиям для детекторных материалов [3]. В настоящее время значительный интерес представляет исследование свойств ряда новых полупроводниковых материалов, которые могут использоваться в спектрометрии и дозиметрии ядерных излучений без криогенного охлаждения. Такие полупроводники обладают запрещенной зоной с шириной ≥ 2 эВ и значительным удельным сопротивлением ($> 10^9 \text{ Ом} \cdot \text{см}$).

В отличие от Si и Ge выращивание полупроводников, удовлетворяющих требованиям к неохлаждаемым детекторам ядерных излучений, невозможно без использования технологий и оборудования, которые доступны пока только сильно ограниченному кругу производителей. К примеру, CdTe и CdZnTe – это полупроводниковые соединения, технологии выращивания которых отработаны в наибольшей степени по сравнению с другими широкозонными полупроводниками. Однако значительные объемы CdTe, пригодного для использования в спектрометрии, могут предоставить всего 3 фирмы: Imarad (Израиль), Eurorad (Франция) и Acrorad (Япония) [4, 5]. Yinnel Tech и EI Detection & Imaging Systems (США), Imarad, Eurorad и Redlen Technologies (Канада) изготавливают CdZnTe детекторы для спектрометрических измерений [4]. Высококачественные алмазные детекторы производят PTW Freiburg GmbH (Германия) и Diamond Detectors Ltd (Великобритания). Другие широкозонные материалы (например, InP, TiBr, HgS, AlSb) до настоящего времени используются только в рамках отдельных исследовательских проектов.

Малочисленность поставщиков, высокая стоимость и недостаток материала, пригодного для спектрометрических исследований, – причины, по которым компьютерный эксперимент становится одним из основных инструментов исследований полупроводниковых детекторов (ППД) на основе широкозонных полупроводников [6]. Математическая модель является удобным и эффективным инструментом анализа характеристик исследуемого объекта. Хорошая модель, адекватно описывающая объект, позволяет изучить его поведение в различных ситуациях, что часто бывает невозможно сделать физически из-за необходимости разрушения объекта. Кроме того, наличие модели объекта позволяет легко варьировать его параметры, что в реальности может потребовать больших временных и материальных затрат.

Очевидным условием доверия к результатам компьютерного моделирования ППД есть верификация моделей детекторов. Проведенный анализ [7] показал, что во многих работах, использующих данные моделирования ППД, проверка надежности расчетных данных уделяется недостаточно внимания. В ряде случаев такая проверка отсутствует, поскольку наблюдается явное несовпадение между расчетом и экспериментальными измерениями как, например, в [8, 9]. В некоторых работах авторы приводят несопоставимые экспериментальные данные для разных диапазонов энергий γ -квантов (например, в [10]), что не позволяет выявить все недостатки модели.

Значительный прогресс в разработке универсальных пакетов программ для расчета транспорта фотонов и заряженных частиц по методу Монте-Карло (в частности, EGSnrc [11] и GEANT4 [12]) позволил существенно улучшить согласие между расчетными и экспериментальными спектрами, измеряемыми с помощью ППД [13, 14]. Универсальные пакеты настраиваются на любую геометрию задачи, имеют многократно проверенные библиотеки сечений различных процессов и прямо моделируют физические процессы, происходящие при прохождении частиц и фотонов через вещество. Архитектура EGSnrc и GEANT4 организована так, что модули расчета переноса излучения, могут быть объединены с пользовательскими подпрограммами, которые осуществляют расчет основной характеристики детекторов – функции отклика.

В данной работе критерий соответствия Колмогорова-Смирнова использован для оценки качества восстановления экспериментальных спектров при помощи модели [13], где для расчета транспорта γ -квантов и электронов используется пакет EGSnrc. Результаты моделирования сравниваются с амплитудными распределениями, полученными при исследовании CdZnTe детекторов в работе [15]. Установлено, что недостаточная детализация геометрии и химического состава элементов конструкции измерительной установки, на которых происходит рассеяние первичного пучка γ -излучения, приводит при расчете к систематическому занижению вклада от фотоэлектрического поглощения γ -квантов, рассеянных на углы более 135° за пределами активной зоны детекторов (спектры ^{152}Eu и ^{137}Cs). Различия на остальных участках других спектров носят преимущественно статистический характер.

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ ИЗМЕРЕНИЯ

Экспериментальные данные были получены при исследовании группы планарных CdZnTe детекторов в работе [15]. Измерялись спектры γ -излучения от источников ^{241}Am , ^{137}Cs и ^{152}Eu из набора образцовых спектрометрических источников γ -излучения (ОСГИ). Для регистрации распределений амплитуд импульсов использовался спектрометрический тракт, в состав которого входили: усилитель Canberra AFT 2025 с источником питания Canberra 3106D и спектрометрический аналогово-цифровой преобразователь (САЦП) 4К-САЦП-USB. Предварительно измерительный тракт был откалиброван в единицах заряда (т.е. цена канала САЦП определялась в единицах заряда e^-) при помощи кремниевого фотодиода, обладающего практически 100%-й эффективностью сортирования заряда.

Для дальнейшего анализа используются результаты измерений амплитудных распределений тремя CdZnTe детекторами при разных напряжениях смещения U_b [15]. Выбор экспериментальных данных для верификации модели, а также условий измерения, обусловлен необходимостью усовершенствования процедуры калибровки дозиметрических детекторов γ -излучения, разрабатываемых в ННЦ ХФТИ [16]. Условия эксплуатации этих детекторов допускают значительные колебания температуры ($-20^\circ\text{C}...+60^\circ\text{C}$) и, соответственно, существенное изменение уровня шумов. Одной из задач метрологической аттестации дозиметров является определение

границ изменений чувствительности дозиметрических приборов для сохранения допустимых пределов погрешности измерения дозы излучения. Для экспериментальных измерений основной характеристики детектора – зависимости чувствительности от энергии γ -квантов $\delta(E_\gamma)$ – необходим ряд дорогостоящих изотопов, большинство из которых являются короткоживущими. Верифицированная модель позволит рассчитать полную зависимость $\delta(E_\gamma)$ на основе данных измерений от 2–3-х реперных источников [17].

Размеры выбранных CdZnTe детекторов составляли приблизительно $5 \times 5 \times 3$ мм, их условные обозначения (№ 3, 4, 6) соответствуют работе [15]. Остальные характеристики детекторов: напряжение смещения U_b , длины свободного пробега носителей электронов и дырок $\lambda_{e,h}$ будут представлены при дальнейшем изложении. Значительный уровень шумов не позволил наблюдать линии 13,9 и 17,7 кэВ в спектрах ^{241}Am , поэтому порог дискриминации превышал уровень 30 кэВ для всех измерений.

РАСЧЕТ ФУНКЦИЙ ОТКЛИКА ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ ДЕТЕКТОРОВ

Для расчета амплитудных спектров исследованных планарных CdZnTe детекторов использована ранее разработанная модель, подробное описание которой приведено в [13]. Прохождение γ -квантов через детектор моделируется при помощи пакета расчета транспорта фотонов и электронов EGSnrc [11]. Программный код, который встраивается в EGSnrc, моделирует отклик детектора для каждого γ -кванта с учетом статистических эффектов генерации пар в объеме детектора, а также изменения амплитуды выходного импульса под влиянием шумов электроники и захвата носителей заряда. На первом этапе расчета программа запоминает для заданной энергии γ -кванта E_γ соответствующее значение энергии ионизации E_i , поглощенной в детекторе. На втором этапе вычисляется величина наведенного заряда на контактах детектора для каждого провзаимодействовавшего фотона, исходя из эффективности сортирования заряда, вклада шумов и вариаций захвата носителей заряда ловушками. Поглощенная энергия преобразуется в заряд с учетом средней энергии образования пары неравновесных носителей заряда ε . Расчет эффективности сбора заряда в планарных детекторах производится на основе модели Хехта [18]. Управляющими параметрами модели также являются основные параметры измерительного тракта: время формирования импульса, эквивалентный шумовой заряд и цена канала АЦП. Это позволяет получить распределение импульсов по амплитуде, которое в максимальной степени соответствует измеренному в конкретном эксперименте.

В общем случае на амплитуду заряда, наведенного на контактах ППД, влияют три фактора: 1) флуктуации количества образовавших электронно-дырочных пар (шум Фано); 2) флуктуации количества собранных электронов и дырок; 3) шумы электроники. Последний фактор зависит от темновых токов детектора I_d и токов сопротивления смещения и от тепловых шумов цепи усиления входного сигнала. В итоге, поглощение в ППД одинаковой энергии E_i приводит к появлению на выходе блока детектирования импульсов, вариации амплитуды которых в большинстве случаев могут быть удовлетворительно описаны распределением Гаусса со средним E_i/ε и дисперсией σ^2 [13, 15]

$$\sigma^2 = F \frac{E_i}{\varepsilon} + \sigma_d^2 + \sigma_{el}^2 + G(E_i) \left(\frac{E_i}{\varepsilon} \right)^2, \quad (1)$$

где F – фактор Фано, характеризующий отличие реальной статистики флуктуаций ионизации от статистики Пуассона; ε – средняя энергия образования пары электрон-дырка; $\sigma_d^2 \sim I_d \cdot \tau$ – дисперсия дробового шума, зависящего от тока утечки детектора I_d и времени формирования импульса τ ; $\sigma_{el}^2 \sim \frac{T}{\tau}$ – дисперсия тепловых шумов электроники, зависящая от температуры T и времени формирования импульса τ ; $G(E_i)$ – фактор захвата.

Флуктуации неравновесного заряда, создаваемого при поглощении энергии ионизации E_i , устанавливают теоретический предел точности определения энергии регистрируемого γ -кванта, поэтому фактор Фано является важной характеристикой детекторов излучений. Теоретический расчет величины фактора Фано F оказывается сложной задачей даже для одноэлементных полупроводников с простейшей кристаллической структурой (Si, Ge) и требует применения методов математического моделирования [19].

Дисперсия σ_{el}^2 измеряется экспериментально по уширению сигналов от генератора точной амплитуды, прошедших через усилительный тракт с заданным временем формирования импульса τ , а σ_d^2 можно рассчитать, определив темновой ток из вольтамперной характеристики (ВАХ).

Разброс пробегов носителей заряда, дрейфующих под действием электрического поля, обусловлен тем, что на их пути встречается различное количество центров захвата, а сам процесс захвата является вероятностным. Неоднородности материала влияют на распределение поля внутри ППД и на профиль времени жизни носителей заряда. По этим причинам флуктуаций сбора заряда невозможно избежать даже в идеализированном случае фиксированной глубины создания неравновесного заряда в детекторе.

Дисперсия флуктуаций сбора заряда $\sigma_\lambda^2 = G(E_i) \left(\frac{E_i}{\varepsilon} \right)^2$ пропорциональна количеству созданных $e-h$ пар и

отношению времени сбора носителей t_d к времени жизни $\tau_{e,h}$ [20]. Коэффициент пропорциональности называется фактором захвата [21]. Исходя из определения σ_λ^2 ясно, что влияние флюктуаций сбора сильнее проявляется в области достаточно высоких энергий γ -квантов (> 100 кэВ) [22]. Кроме того, для детекторов с почти полным сбором заряда разброс выходных амплитуд в гораздо большей степени зависит от флюктуаций ионизации. Так сравнение вкладов разброса пробегов носителей и флюктуаций ионизации, показывает, что для потерь заряда менее 6% в Ge детекторах определяющий вклад в разброс выходных амплитуд вносят именно ионизационные флюктуации [22, с. 66]. Для CdZnTe величина σ_λ^2 уравнивается с σ_F^2 при $E_\gamma \approx 40$ кэВ [23], в то время как, например, для InP вследствие очень плохого сбора дырок флюктуации сбора являются преобладающими, начиная уже с $E_\gamma \sim 10$ кэВ [24].

На рис. 1 – рис. 3 показаны экспериментальные и расчетные функции отклика (вероятность регистрации импульса, амплитуда которого соответствует энергии E) CdZnTe детекторов при измерении излучения от источников ^{241}Am , ^{137}Cs , ^{152}Eu . Как можно судить из представленных данных, модель [13] позволяет получить в целом удовлетворительное согласие с экспериментальными измерениями. Качественный ход расчетных спектров соответствует особенностям спектров, положение фотопиков их амплитуда и полная ширина на полувысоте также близки к экспериментальным данным.

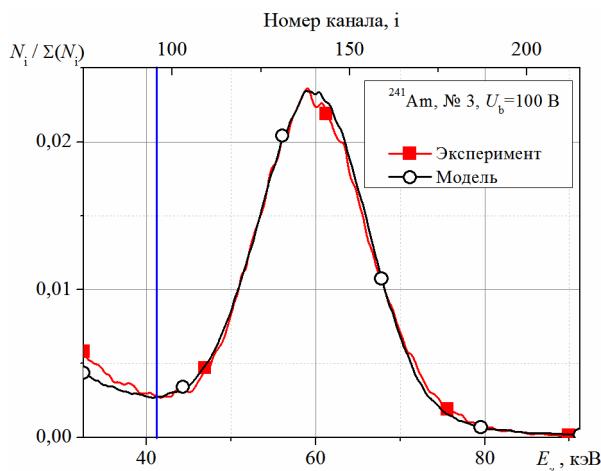


Рис. 1. Отклик CdZnTe детектора № 3 на γ -кванты с энергией 60 кэВ (^{241}Am).

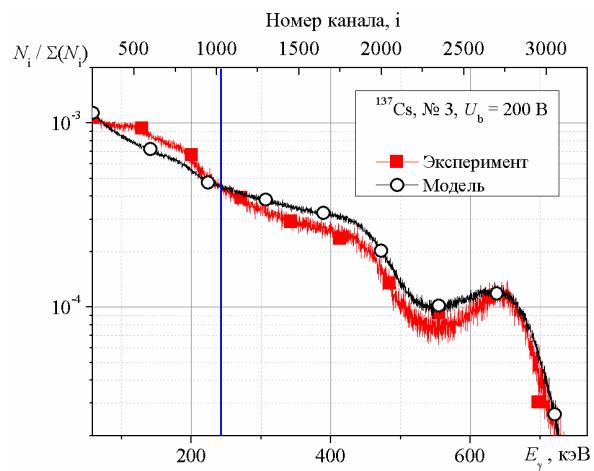


Рис. 2. Отклик CdZnTe детектора № 3 на γ -кванты с энергией 662 кэВ (^{137}Cs).

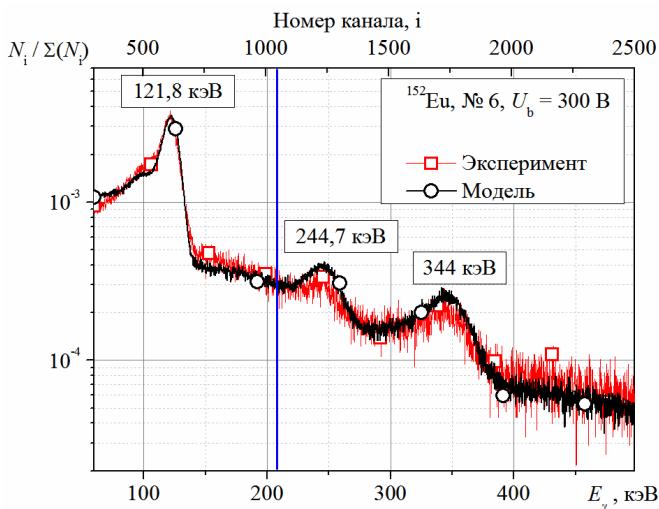


Рис. 3. Отклик CdZnTe детектора на γ -кванты от источника ^{152}Eu .

CdZnTe детекторах преобладает фотоэффект, максимальная относительная статистическая погрешность наблюдается на правом крае фотопика 60 кэВ ($E > 75$ кэВ), где наблюдается наложение (pile-up) импульсов от γ -квантов с энергиями 13,9 (или 17,7) и 60 кэВ. Приемлемая ошибка $\pm 10\%$ достигается при моделировании 5×10^7 траекторий γ -квантов. Относительная ошибка моделирования фотопика вблизи центра ($E = 50 \dots 70$ кэВ) на порядок лучше, чем на правом крае, и равна $\approx \pm 2\%$ уже при использовании в модели $5 \times (2 \times 10^5)$ траекторий.

Количество траекторий γ -квантов для расчета функций отклика выбрано исходя из анализа статистической ошибки метода Монте-Карло. На рис. 4 приведены зависимости относительной статистической погрешности расчета функции отклика одного из исследованных CdZnTe детекторов (№ 3) для исследованных источников излучения. Каждая зависимость получена усреднением 5 функций отклика, рассчитанных при различных начальных значениях генератора случайных чисел, который используется в модели для задания характеристик источника излучения. Величина относительной погрешности определена для каждого моделируемого канала АЦП как отношение среднеквадратичного отклонения σ_{rf} к среднему количеству импульсов M . Для удобства графического представления зависимости на рис. 4б были слажены по методу Savitzky–Golay [25].

Как видно из рис. 4а, для источника ^{241}Am в выбранном диапазоне энергий около 60 кэВ, где в

Энергия излучения источника ^{137}Cs соответствует диапазону, в котором основным процессом взаимодействия γ -квантов с CdZnTe является комптоновское рассеяние. В этом случае основная ошибка соответствует как раз области фотопика 662 кэВ (рис. 4б). При использовании 5×10^7 траекторий относительная погрешность для фотопика 662 кэВ составляет $\approx \pm 8\%$. В целом же статистическая погрешность метода Монте-Карло для расчетного спектра ^{137}Cs снижается гораздо медленнее, чем у ^{241}Am , поскольку эффективность взаимодействия высокоэнергетических γ -квантов с материалом детектора гораздо меньше, чем для $E_\gamma = 60$ кэВ.

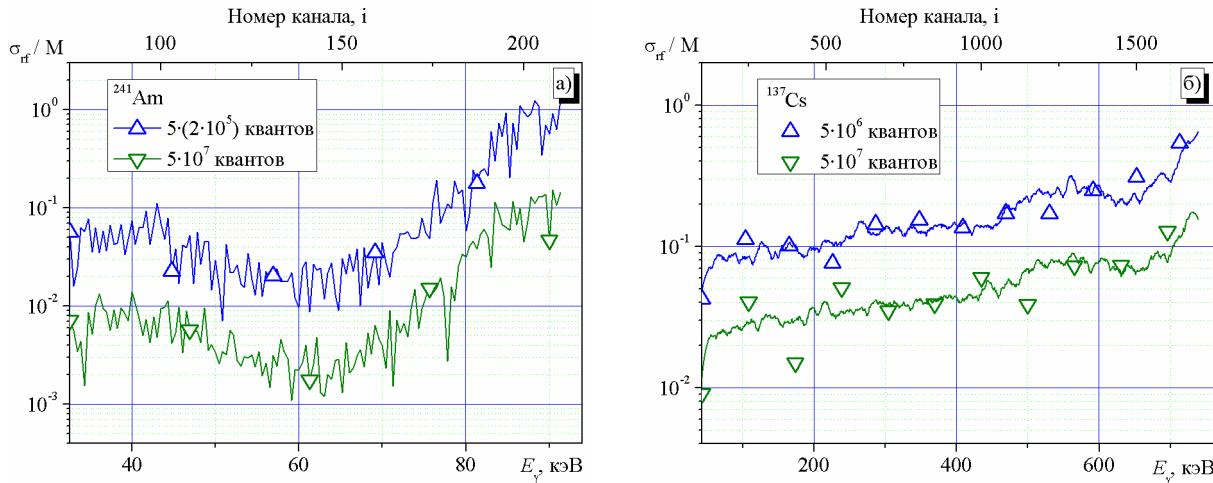


Рис. 4. Зависимости относительной статистической ошибки расчета функции отклика CdZnTe детектора от поглощенной энергии для источников излучения: а) ^{241}Am ; б) ^{137}Cs .

КРИТЕРИЙ СОГЛАСИЯ КОЛМОГОРОВА–СМИРНОВА

Критерий согласия Колмогорова–Смирнова (КС-тест) позволяет оценить вероятность, с которой совпадают экспериментальное и теоретическое распределение измеряемой величины. Предположение о равенстве функций распределения называется нулевой гипотезой, а предположение о неравенстве этих функций – альтернативной гипотезой. Для опровержения нулевой гипотезы необходимо показать, что различия между экспериментальной и теоретической функцией распределения являются статистически значимыми. Определение различий как статистически значимых подразумевает признание того факта, что обнаруженные в ходе исследования различия превосходят величину, которую ещё можно объяснить влиянием только случайных факторов. Вероятность ошибочно отвергнуть правильную нулевую гипотезу задается уровнем значимости α . При проверке гипотез чаще всего используются величины $\alpha = 0,1; 0,05$ и $0,01$ [26].

В случае верификации модели ППД КС-тест применяется для сравнения экспериментальных и теоретически рассчитанных амплитудных распределений, вид которых аналогичен примерам, приведенным на рис. 1 – рис. 3. Каждому спектру можно поставить в соответствие кумулятивную функцию распределения, представляющая собой вероятность регистрации импульса, амплитуда которого соответствует энергии меньше заданной [27]

$$P(E_k \leq E_i) = P(k \leq i) = \sum_{k=E_{\min}}^{E_i} N_{E_k} \Bigg/ \sum_{k=E_{\min}}^{E_{\max}} N_{E_k}, \quad (2)$$

где $E_{\min, \max}$ – нижняя и верхняя границы исследуемой области спектра, которым соответствуют номера канала АЦП $N_{\min, \max}$, N_{E_k} – количество импульсов в канале АЦП, который соответствует энергии E_k .

В данном исследовании экспериментальным измерениям соответствуют кумулятивные функции распределения, которые обозначены $X_j(E_k \leq E_i) = X_j(E)$, а расчетным – $H_j(E_k \leq E_i) = H_j(E)$, где j обозначает измеряемый источник гамма-квантов (^{241}Am , ^{137}Cs , ^{152}Eu). В качестве нулевой гипотезы принимается равенство $X_j(E) = H_j(E)$. Альтернативная гипотеза, соответственно, предполагает, что экспериментальные кумулятивные функции распределения не совпадают с теоретическими, т.е. $X_j(E) \neq H_j(E)$.

Для каждого измерения рассчитывается статистика $D_n = \text{Max}_i |X_j(E_i) - H_j(E_i)|$, где $n = N_{\max} - N_{\min} + 1$. Статистика D_n представляет собой максимальную разность кумулятивных вероятностей. Наблюдаемое различие измеренных и рассчитанных функций отклика, примеры которых приведены на рис. 1 – рис. 3, окажется статистически значимым, если при заданном уровне α величина $\sqrt{n}D_n$ превышает критическое значение K_α (квантиль распределения статистики Колмогорова), значение которого зависит от количества точек n в измерении и уровня значимости α . В этом случае нулевая гипотеза отвергается в пользу альтернативной, то есть принимается предположение, что теоретически рассчитанная функция распределения не соответствует

экспериментально измеренной. В дальнейших расчетах используется уровень значимости $\alpha = 0,05$, которому при $n > 100$ соответствует критическое значение $K_\alpha \approx 1,36$ [26, с. 262].

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

На рис. 5 – рис. 7 представлены кумулятивные функции распределения, соответствующие спектрам рис. 1 – рис. 3. Вертикальная линия обозначает энергию E_{diff} , в которой достигается максимум разности кумулятивных вероятностей – D_n . В табл. 1 приведены данные, на основе которых принимается решение о справедливости нулевой гипотезы. Условием принятия нулевой гипотезы является выполнение соотношения $\sqrt{n}D_n < 1,36$ (в табл. 1 такие ячейки выделены подчеркиванием).

Как свидетельствуют приводимые в табл. 1 результаты, теоретическое амплитудное распределение для фотопика 60 кэВ (^{241}Am), полученное на основе модели [13], согласуется с экспериментальным для всех исследованных детекторов и всех напряжений смещения. Это означает, что наблюдаемые в примерах на рис. 1 и рис. 5 различия не являются значимыми. Максимальная величина D_n достаточно равномерно распределена в диапазоне энергий 55...63 кэВ. Распределение $|X_{\text{Am}}(E_i) - H_{\text{Am}}(E_i)|$ (рис. 5) не имеет четко выраженной функциональной зависимости от энергии.

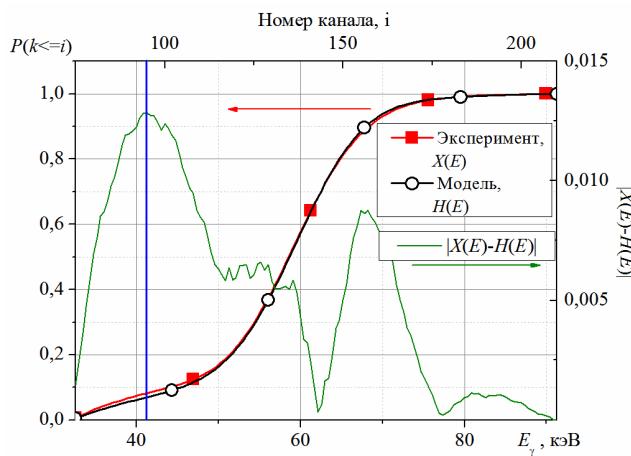


Рис. 5. Кумулятивные функции распределений для фотопика 60 кэВ спектра ^{241}Am (рис. 1).

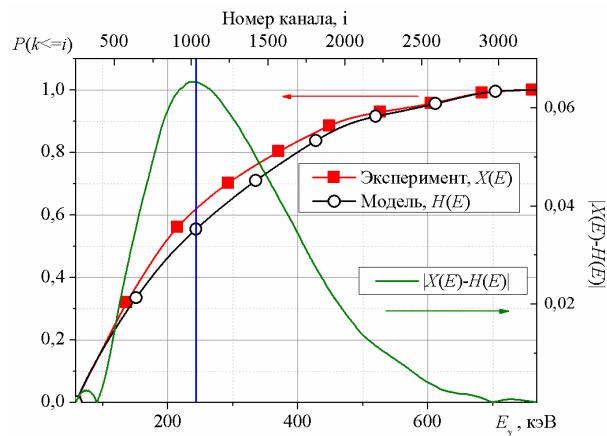


Рис. 6. Кумулятивные функции распределений для линии 662 кэВ источника ^{137}Cs (рис. 2).

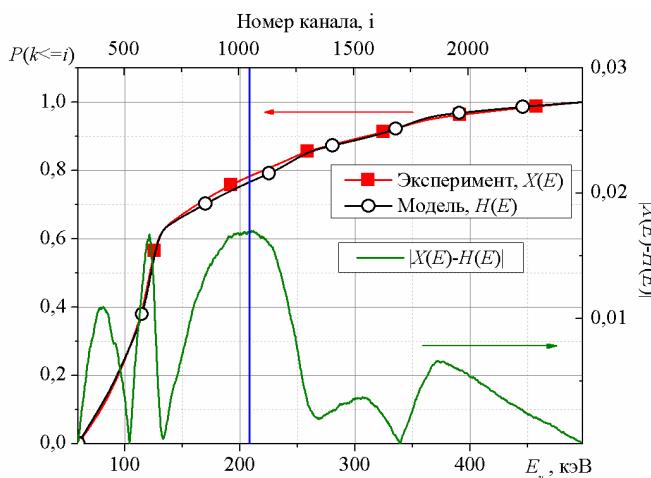


Рис. 7. Кумулятивные функции распределений для спектра ^{152}Eu (рис. 3).

$|X_{\text{Cs}}(E_i) - H_{\text{Cs}}(E_i)|$ имеет достаточно четко выраженную функциональную зависимость от энергии с главным максимумом около 250 кэВ. Это означает, что в используемой модели недостаточно детально отражены конструкция и химический состав элементов измерительной установки, в которых происходит рассеяние первичного пучка γ -квантов. Вследствие этого, при моделировании доля отраженных γ -квантов оказывается

Противоположная ситуация складывается для амплитудных распределений от источника ^{137}Cs , где основной сигнал находится в комптоновской области. Из табл. 1 видно, что за единственным исключением различие между экспериментальными и модельными спектрами (рис. 2 и рис. 6) являются статистически значимыми. Максимум величины D_n сосредоточен в области 240...300 кэВ. Этот диапазон соответствует импульсам от γ -квантов с начальной энергией 662 кэВ, которые сначала были рассеяны на угол более 135° вне детектора (комптоновское рассеяние), а затем кванты с остаточной энергией полностью поглощались (фотоэлектрический эффект) в активном объеме детектора.

Как видно из рис. 6, распределение

систематически заниженной, по сравнению с реально наблюдаемой величиной.

Таблица 1.

КС-тест для группы CdZnTe детекторов

Источник	№ детектора	U_b , В	λ_e , см	λ_h , см	D_n	$\sqrt{n}D_n < 1,36$	E_{diff} , кэВ
^{241}Am	3	100	0,064	0,0046	0,013	0,15	41,3
	3	200	0,127	0,0091	0,017	0,22	57,2
	4	200	0,073	0,0067	0,009	0,10	55,1
	4	250	0,092	0,0083	0,023	0,28	61,0
	6	300	0,14	0,018	0,019	0,22	62,9
^{137}Cs	3	100	0,064	0,0046	0,030	1,25	246,4
	3	200	0,127	0,0091	0,065	3,58	241,5
	4	200	0,073	0,0067	0,033	1,45	292,2
	4	250	0,092	0,0083	0,041	1,99	241,0
	6	300	0,14	0,018	0,057	3,40	262,7
^{152}Eu	3	100	0,064	0,0046	0,044	1,62	189,1
	3	200	0,127	0,0091	0,026	1,02	189,3
	4	200	0,073	0,0067	0,022	0,84	98,2
	4	250	0,092	0,0083	0,049	1,90	124,4
	6	300	0,14	0,018	0,017	0,80	208,3

Для спектров от источника ^{152}Eu (рис. 3 и рис. 7) несовпадение экспериментальных и расчетных функций отклика носит статистический характер. Максимум D_n разбросан по диапазону 90...210 кэВ, а распределение $|X_{\text{Eu}}(E_i) - H_{\text{Eu}}(E_i)|$ не имеет четко выраженной функциональной зависимости от энергии, но обладает множеством локальных максимумов. Локальные максимумы $|X_{\text{Eu}}(E_i) - H_{\text{Eu}}(E_i)|$ находятся преимущественно вблизи энергий, соответствующих линиям излучения источника ^{152}Eu . Полученные для ^{152}Eu результаты подтверждают, что, как и в случае ^{137}Cs , расчетный вклад γ -квантов, рассеянных на значительные углы, оказывается заниженным по сравнению с экспериментальными данными. В то же время наличие у источника ^{152}Eu интенсивной линии 121,8 кэВ, форма которой корректно восстанавливается при моделировании функции отклика (рис. 3), существенно уменьшает значимость этого расхождения. КС-тест показывает, что в ряде случаев для ^{152}Eu различиями между модельным и экспериментальным распределением можно пренебречь.

Таким образом, совокупные результаты анализа при помощи модели [13] экспериментальных данных, полученных в работе [15], дают основания утверждать, что недостатком использованной модели является упрощенное описание геометрии измерительной установки. КС-тест также показывает, что наблюдаемые различия в формах фотопиков в экспериментальных и расчетных спектрах не являются значимыми.

Однако, статистический тест не может объяснить природу этих различий, в частности причину, по которой в рассматриваемом случае расчетное значение функции отклика на γ -кванты с энергией 662 кэВ (^{137}Cs) в области комптоновского края ($E \approx 478$ кэВ) всегда превышает экспериментально измеренное. Комптоновский край соответствует импульсам от γ -квантов, которые были рассеяны в детекторе на угол $\approx 180^\circ$. Поскольку положения максимумов расчетных и экспериментально измеренных фотопиков достаточно хорошо совпадают [13], то можно утверждать, что средние длины свободного пробега электронов и дырок $\lambda_{e,h}$, используемые в модели, соответствуют реальным величинам для всех исследованных детекторов. В то же время уменьшение количества импульсов в области комптоновского края указывает на то, что в рассматриваемых измерениях доля носителей заряда, у которых пробег меньше среднего, превышает величину, предсказываемую моделью. Поэтому, несмотря на удовлетворительное согласие с экспериментальными данными в основной части амплитудных распределений, применяемая модель широкозонного ППД [13] все же требует усовершенствования, которые бы позволили устранить обнаруженные различия.

Анализ литературных данных позволяет предположить, что кроме детализации геометрии и химического состава элементов конструкции измерительной установки в модели следует учитывать также неравномерность распределения по объему детектора центров захвата. Влияние неравномерности распределения дефектов на отклик копланарных CdZnTe детекторов исследовано в [20, 28–30]. В детекторах с копланарным анодом (аналогом сетки Фриша) выходной сигнал формируется только за счет сбора электронов (так называемые унипольярные приборы). Исключение сигнала от плохо собираемых дырок позволяет улучшить разрешающую способность копланарного ППД до 1% на линии 662 кэВ источника излучения ^{137}Cs . Однако для обеспечения приемлемой эффективности регистрации фотонов желательно увеличение объема одиночного CdZnTe детектора до 1 см³ и более, что задает повышенные требования к качеству полупроводникового монокристалла.

Исследования качества CdZnTe показали [5, 30] наличие в этом материале значительного количества преципитатов Te. Размер одиночных включений колеблется в пределах 2...10 мкм, а их концентрация может достигать 10⁶ см⁻³. Кроме них могут формироваться протяженные структуры, достигающие в диаметре до 500 мкм. Наличие таких дефектов значительно увеличивает захват носителей заряда и величины темновых токов

детектора I_d . Моделирование отклика копланарного CdZnTe детектора показало ухудшение спектроскопических свойств при концентрации Te преципитатов на уровне 10^4 см^{-3} , если размер включений превышает $10 \mu\text{м}$ [28]. Концентрация более мелких преципитатов ($< 2 \mu\text{м}$) может достигать величины 10^6 см^{-3} , прежде чем произойдет существенное ухудшение спектроскопических характеристик детекторов. Очень крупные объемные дефекты ($> 100 \mu\text{м}$) являются причиной резкой деградации спектроскопических свойств CdZnTe детекторов уже при концентрациях $10^2\text{--}10^3 \text{ см}^{-3}$, что проявляется в снижении величины максимума фотопика на энергии 662 кэВ источника ^{137}Cs на порядок и более [30].

Как можно заключить из вышеприведенных данных, неоднородность распределения дефектов объясняет особенности отклика униполярных детекторов γ -излучения. В то же время остается неисследованной проблема влияния распределения дефектов на функцию отклика детекторов с планарными контактами, которые используются в дозиметрических измерениях. Перенос дырок вносит значительный вклад в сигнал планарных детекторов. Учитывая, что $\lambda_h \ll \lambda_e$ (табл. 1), можно допустить, что вариации распределения дефектов являются одной из основных причин более сильного «размытия» спектра выходных амплитуд по сравнению с предсказываемым по результатам моделирования.

Возвращаясь к необходимости использования в моделях более детального описания геометрии измерительной установки, необходимо отметить, что точный учет геометрии также имеет важное значение при калибровочных измерениях чувствительности детекторов. Широкозонные ППД гораздо более чувствительны к рассеянному излучению, чем, к примеру, газоразрядные счетчики Гейгера-Мюллера. Причина состоит в том, что зависимость чувствительности от энергии γ -излучения $\delta(E_\gamma)$ для широкозонных ППД имеет принципиально иной характер, чем у газоразрядных счетчиков [31]. Как видно из рис. 8, для широкозонных ППД характерна

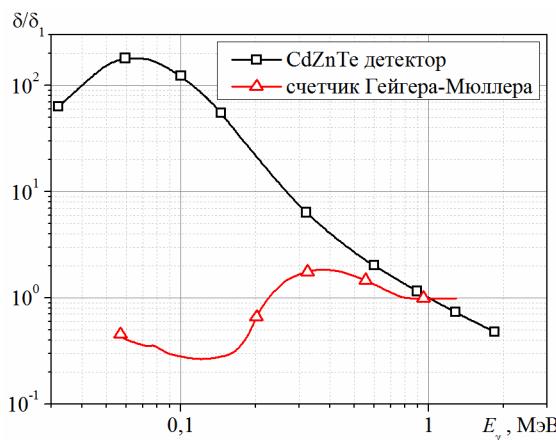


Рис. 8. Типичные зависимости чувствительности от энергии γ -квантов для широкозонного ППД [17] и газоразрядного счетчика [31]. δ_1 – чувствительность детектора при $E_\gamma = 1 \text{ МэВ}$.

очень сильная зависимость $\delta(E_\gamma)$: в диапазоне 0,1…1 МэВ $\delta(E_\gamma)$ монотонно уменьшается на 2 порядка. У газоразрядных счетчиков отклонения чувствительности не превышают 2-х раз и могут быть частично компенсированы при помощи металлических фильтров с перфорацией. Для широкозонных ППД такая компенсация невозможна [17].

Спектр многократно рассеянных γ -квантов от естественных радионуклидов обычно имеет наибольшую интенсивность в диапазоне 0,15…0,3 МэВ, поскольку фотоны более низких энергий эффективно поглощаются в твердых средах. Чувствительность широкозонных ППД в этом диапазоне в 5…10 раз превышает чувствительность этих детекторов в области энергий $E_\gamma > 0,6 \text{ МэВ}$. Поэтому, даже небольшая доля рассеянных γ -квантов в спектре регистрируемого γ -излучения может существенно исказить калибровочный отклик широкозонного ППД на участке низких энергий.

ВЫВОДЫ

Результаты верификации модели широкозонного полупроводникового детектора γ -излучения, которая применялась для восстановления функций отклика группы CdZnTe детекторов с планарными контактами, показывают, что практически все участки амплитудных распределений от источников излучения ^{241}Am , ^{152}Eu и ^{137}Cs моделируются корректно. Согласно критерию Колмогорова-Смирнова наблюдаемые различия в области фотопиков можно объяснить только влиянием случайных факторов. Основная причина наблюдаемых расхождений между теоретическими и экспериментальными спектрами ^{152}Eu и ^{137}Cs заключается в упрощенном описании геометрии и химического состава рассеивающих элементов измерительной установки, что приводит при моделировании к заметному занижению вклада в выходной сигнал от γ -квантов высоких энергий, рассеянных вне чувствительного объема детектора на углы более 135° .

Для объяснения систематических различий в форме комптоновских участков между теоретическими и экспериментальными распределениями необходима модификация модели планарного детектора γ -излучения, которая позволила бы учесть наличие в детекторах дефектов переменного размера, неравномерно распределенных по объему вещества.

Дальнейшая верификация модели широкозонных планарных ППД возможна на основе опубликованных результатов измерений для ряда полупроводниковых материалов (в частности, HgI_2 , InP , SiC). Усовершенствованная модель будет использована для поиска перспективных полупроводниковых материалов, обладающих значительным удельным сопротивлением ($> 10^{10} \text{ Ом} \cdot \text{см}$), которые могут использоваться в спектрометрии и дозиметрии γ -излучения.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Radiation oncology physics: a handbook for teachers and students / editor E. B. Podgorsak. Vienna: International Atomic Energy Agency, 2005. – 657 p.
2. Esther Bloemen-van Gurp. In vivo dosimetry using MOSFET detectors in radiotherapy / PhD thesis, Maastricht University. – 2009.
3. Derenzo S. Who needs better nuclear detector materials and how do we find them? [jelektronnyj resurs] / Interdisciplinary Instrumentation Colloquium LBNL. – Aug 24, 2005. – Rezhim dostupa: http://instrumentationcolloquium.lbl.gov/Derenzo_Nuclear_Detector_Materials.pdf
4. Del Sordo S., Abbene L., Caroli E. et al. Progress in the Development of CdTe and CdZnTe Semiconductor Radiation Detectors for Astrophysical and Medical Applications // Sensors. – 2009. – № 9. – P. 3491–3526.
5. Seller P. CdZnTe Energy Resolving Array Detectors [jelektronnyj resurs]. - Rezhim dostupa: http://hepwww.rl.ac.uk/PPDseminars/talks/2009/ppd_seminar_090318_talk_paul_seller_cdznte_imaging_detectors_and_their_applications.ppt
6. Zaidi H. Relevance of accurate Monte Carlo modeling in nuclear medical imaging // Med. Phys. – 1999. – Vol. 26, № 4. – P. 574–608.
7. Zaharchenko A.A., Hazhmuradov M.A. Verifikacija modelej detektorov gamma-izluchenija na osnove shirokozonnyh poluprovodnikov / Tezisy dokladov VIII konferencii po fizike vysokih jenergij, jadernoj fizike i uskoriteljam. 22–26 fevralja 2010 g. Har'kov. – 2010. – S.99.
8. Scannavini M., Chirco P., Baldazzi G. et al. Computer simulation of charge trapping and ballistic deficit effects on gamma-ray spectra from CdTe semiconductor detectors // Nucl. Instr. & Meth. A. – 1994. – Vol. 353. – P. 80–84.
9. Mathy F., Gliire A., d'Aillon E. et al. A Three-Dimensional Model of CdZnTe Gamma-Ray Detector and Its Experimental Validation // IEEE Trans. Nucl. Sci. – 2004. – Vol. 51. – P. 2419–2426.
10. Manfredotti C., Nastasi U. Simulation of HgI₂ semiconductor detectors by a Monte Carlo method // Nucl. Instr. & Meth. – 1984. – Vol. 225. – P. 138–144.
11. Kawrakow I., Mainegra-Hing E., Rogers D. EGSnrcMP, the new multi platform version of EGSnrc // Med. Phys. – 2004. – Vol. 31. – P. 1731.
12. Agostinelli S., Allison J., Amako K., et al. Geant4 – a simulation toolkit // Nucl. Instr. & Meth. A – 2003. – Vol. 506. – P. 250–303.
13. Zaharchenko A.A., Verevkin A.A., Kutnij V.E., Rybka A.V., Hazhmuradov M.A. Modelirovanie funkciy otklika CdZnTe detektorov dlja dozimetrii gamma-izluchenija // Visnik harkiv'skogo nacional'nogo universitetu. Serija fizichna «Jadra, chastinki, polja». – 2008. – № 832, Vyp. 4(40). – S. 71–76.
14. Steljić M., Milošević M., Beličev P. Monte Carlo simulations of the pulse-height response function of germanium detector / Proceedings 52nd ETRAN Conference, Palić, June 8-12, 2008. – NT2.4-1-4.
15. Nakonechnyj D.V., Zaharchenko A.A., Kutnij V.E., Rybka A.V., Hazhmuradov M.A. Issledovanie zahvata zarjada v CdZnTe detektorah dlja dozimetrii gamma-izluchenija // Vestnik HNU, serija fizicheskaja «Jadra, chasticy, polja». – 2010. – № 887, Vyp. 1(45). – S. 110 – 114.
16. Rybka A., Davydov L., Shlyakhov I. et al. Gamma-radiation dosimetry with semiconductor CdTe and CdZnTe detectors // Nucl. Instr. & Meth. A. – 2004. – Vol. 531. – P. 147–156.
17. Zaharchenko A.A., Nakonechnyj D.V., Shljahov I.N., Rybka A.V., Kutnij V.E., Hazhmuradov M.A. Modelirovanie jenergeticheskoy zavisimosti chuvstvitel'nosti CdTe (CdZnTe) detektorov gamma-izluchenija // Tehnologija i konstruirovaniye v jelektronnoj apparature. – 2007. – № 1. – S. 28–31.
18. Akutagawa W., Zanio K. Gamma response of semi-insulating material in the presence of trapping and detrapping // J. Appl. Phys. – 1969. – Vol. 40. – P. 3838–3854.
19. Alig R. Scattering by ionization and phonon emission in semiconductors. II. Monte Carlo calculations // Phys. Rev. B. – 1983. – Vol. 27. – P. 968–977.
20. Bolotnikov A., Camarda G., Wright G., James R. Factors limiting the performance of CdZnTe detectors // IEEE Trans. Nucl. Sci. – 2005. – Vol. 52, № 3. – P. 589–598.
21. Kozorezov A., Wigmore J., Owens A. et al. Resolution degradation of semiconductor detectors due to carrier trapping // Nucl. Instr. & Meth. A. – 2005. – Vol. 546. – P. 209–212.
22. Poluprovodnikovye detektory v jeksperimental'noj fizike / Pod red. Ju.K. Akimova. – M.: Jenergoatomizdat, 1989. – 344 s.
23. Owens A., Bavadz M., Andersson H. et al. The X-ray response of CdZnTe // Nucl. Instrum. & Meth. A. – 2002. – Vol. 484. – P. 242–250.
24. Owens A., Bavadz M., Gostilo V. et al. The X-ray response of InP // Nucl. Instr. & Meth. A. – 2002. – Vol. 487. – P. 435–440.
25. PeakFit v.4.12 [jelektronnyj resurs]. - Rezhim dostupa: <http://www.hearne.com.au/products/peakfit/>
26. Id'e V., Drajadri D., Dzhejms F. i dr. Statisticheskie metody v jeksperimental'noj fizike / per. s angl. V.S. Kurbatova; pod red. A.A. Tjapkina. – M.: Atomizdat, 1976. – 335 s.
27. Evans L., Andre K., De R. et al. Reconstruction of a radiation point source's radial location using goodness-of-fit test on spectra obtained from an HPGe detector // Nucl. Instr. & Meth. B. – 2009. – Vol. 267. – P. 3688–3693.
28. Bolotnikov A., Camarda G., Carini G. et al. Cumulative effects of Te precipitates in CdZnTe radiation detectors // Nucl. Instr. & Meth. A. – 2007. – Vol. 571. – P. 687–698.
29. Bolotnikov A., Camarda G., Carini G. et al. Modelling the effects of Te precipitates on the electron transport in CdZnTe radiation detectors // Nucl. Instr. & Meth. A. – 2007. – Vol. 579. – P. 125–129.
30. Hossain A., Bolotnikov A., Camarda G. et al. Extended defects in CdZnTe crystals: Effects on device performance // Journal of Crystal Growth. – 2010. – Vol. 312. – P. 1795–1799.
31. Introduction to Health Physics / Cember H., Johnson T. – 4th ed., McGraw-Hill. – 2009. – 731p.