

# UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA DE MEXICO

POSGRADO EN CIENCIAS FISICAS



00362

Estudio de la respuesta de BGO y Csl (II) a electrones de baja energía

Ē 5 Î S QUE PARA OBTENER EL GRADO DE: MAESTRO EN CIENCIAS (FISICA) Ε S Ε N T A: P R JUAN MANUEL LOPEZ ROBLES

> DIRECTOR DE TESIS: DR. ARNULFO MARTINEZ DAVALOS



MEXICO, D. F.

2001



Universidad Nacional Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas Tesis Digitales Restricciones de uso

#### DERECHOS RESERVADOS © PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.





OFICIO: PCF/074/2001 ASUNTO: Designación de jurado

#### ING. LEOPOLDO SILVA GUTIÉRREZ DIRECTOR GENERAL DE LA ADMINISTRACIÓN ESCOLAR UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO P R E S E N T E

Attn: Biol. Francisco Javier Incera Ugalde Jefe de la Unidad de Administración del Posgrado

El Comité Académico del Posgrado en Ciencias Físicas en su sesión del 27 de febrero del presente año ha designado como Jurado del alumno JUAN MANUEL LÓPEZ ROBLES con número de cuenta 9251777-6 y número de expediente 70991003, para dictaminar si el trabajo desarrollado como tesis titulado: *"Estudio de la respuesta de BGO y CsI(T1) a electrones de baja energía"*, dirigido por el Dr. Arnulfo Martínez Dávalos, tiene los méritos para obtener el grado de Maestro en Ciencias (Física) conforme al plan de estudios 4009.

Presidente:	Dr. Arturo Menchaca Rocha
Secretario:	Dr. Arnulfo Martínez Dávalos
Vocal:	Dr. Elfego Guillermo Ruíz Schneider
Suplente:	Dr. Ernesto José María de la Salete Belmont Moreno
Suplente:	Dr. Fermín Castillo Mejía

A t e n t a m e n t e "POR MI RAZA HABLARÁ EL ESPÍRITU" Ciudad Universitaria, D.F., a 02 de marzo de 2001. La Coordinadora del Posgrado en Ciencias Físicas

Dra. Roció Jáuregui Renaud

c c.p.- Cada miembro del sínodo c c.p.- Estudiante

c.c p - Expediente.

A la memoria de mis abuelos María Luisa y Guillermo, siempre vivirán en mi corazón.

A la memoria de Ángeles M. Hacedora de sueños, soñadora omnipresente.

# Agradecimientos

Al Dr. Arnulfo Martínez por su apoyo, paciencia y amable guía durante toda la realización del presente trabajo.

Al Dr. Arturo Menchaca por su confianza y ayuda académica prestada al inicio de mis estudios de maestría.

A los Drs. Ernesto Belmont, Rubén Alfaro, Mercedes Rodríguez y Karo Michaelian por compartir conmigo su experiencia y conocimientos.

A los Drs. Daniel Sudarsky, Isabel Gamboa, Carlos Villarreal, Javier Miranda, Jacques Soullard, Juan Carlos D'Olivo y Luis De la Peña, con quienes tuve la fortuna de tomar mis cursos.

Al M. en C. Arcadio Huerta y al Dr. Rafael Macías por su enorme ayuda en la etapa de adquisición de datos.

A la Dirección General de Estudios de Posgrado por el periodo de beca concedido para concluir mis estudios.

A los M. en C. César Ruiz y Ana Elena Buenfil por sus continuas enseñanzas en todo lo referente al uso de fuentes radiactivas, física de radiaciones y seguridad radiológica.

A los físicos Edgar Vázquez, Marco Noguez y Huitzilin Yépez, con quienes compartí la mayor parte de mis cursos de maestría. Estoy en deuda con ustedes.

Al Ing. Mario Rangel por su asesoría durante el diseño y construcción de los elementos de blindaje para el dispositivo experimental.

A la Sra. Teresa Cázares por su amable apoyo en la mayoría de mis enredos burocráticos y trámites administrativos.

Al Dr. Eduardo Andrade por haberme permitido utilizar parte de su electrónica en varias etapas experimentales.

A Ericka Islas y Yunuhén Hernández por aguantarme todos estos años.

Al Fis. José Manuel Lárraga por su gran ayuda durante la programación y modificación del código de Monte Carlo utilizado.

A la Sra. Martha Alonso y Yanalté Herrero del Posgrado en Ciencias Físicas, por su infinita paciencia y asesoría para librar las distintas - y a veces complejas - etapas de tramitación de beca y requisitos administrativos diversos.

Al Sr. Karim López por su disposición de ayuda mostrada en las ocasiones que colaboré en el Peletrón, y por compartir su vasta experiencia en varias áreas de la física experimental.

A mis padres, por recibirme en su hogar y apoyarme en todos los sentidos cuando empecé la escritura de este trabajo, su ayuda fue invaluable para mí.

A mi hermana Vero, por su optimismo y enfoque crítico.

A mis compañeros y amigos del Instituto de Física: Vanesa Romo, Rubén Alfaro, Arcadio Huerta, Rafael Macías, Oscar Maya, Paola Castro, Lázaro Huerta, Oscar de Lucio, Armando Flores, Paola Palacios, Alejandra López, Gabriela Murguía, Alan García, Marco Noguez, Juan Gabriel, Manuelote, Ruth Herrera, José Manuel Lárraga, Adrián Huerta, Adolfo Zárate, Miguel Ángel Rodríguez, Hilda Mercado, Tania Reyes, Roberto Núñez, Silvia Hidalgo, Sergio Arzamendi, Fernando Huidobro, Luis de la Vega, Guerda Masillon. Me resulta muy difícil expresar la inmensa cantidad de experiencias y momentos gratos que he compartido en los últimos años en el instituto. He aprendido mucho de ustedes, mil gracias.

May the force be with you ...

御御御御 ふうのう うまってい 「「「「「「「「「「「「「」」」」」 and the second of the second

Estudio de la respuesta de BGO y CsI(TI) a electrones de baja energía

# CONTENIDO

Resumen	1
1. Introducción	2
<ul> <li>2. Marco Teórico</li> <li>2.1 Principios de detección por centelleo</li></ul>	5 6 9 15 16 19 19 20 21
<ul> <li>3. Equipo Experimental</li> <li>3.1 Características básicas de los centelleadores estudiados</li></ul>	23 23 24 25 27
<ul> <li>4. Medidas Experimentales y Análisis</li> <li>4.1 Resultados para BGO</li></ul>	30 35 37 . 38 . 39 42 . 47
5. Conclusiones	56
Apéndice	58
Bibliografía	59

#### RESUMEN

En este trabajo se presenta un estudio de las principales características del depósito de energía en detectores de centelleo inorgánicos ante electrones de baja energía.

Dentro de la fase experimental se implementó un dispositivo de coincidencia Compton para estudiar la respuesta de detectores de centelleo a electrones monoenergéticos. El método consistió en hacer incidir un haz colimado de rayos gamma monoenergéticos sobre el detector a estudiar. Al producirse la dispersión Compton de la radiación incidente, pudo obtenerse la respuesta a electrones usando un segundo centelleador, colocado a un cierto ángulo respecto al haz primario, de tal manera que sólo se registraban eventos en coincidencia entre ambos detectores. Esto permitía eliminar las complicaciones debidas a interacciones de tipo superficial presentes en otras técnicas, porque los electrones eran producidos internamente en el centelleador por los rayos gamma.

Siguiendo la misma línea de investigación, se empleó un algoritmo de Monte Carlo para estudiar las citadas características energéticas debidas a electrones y radiación gamma en diversos materiales. En este algoritmo, las secciones eficaces para los distintos mecanismos de interacción eran aproximadas por expresiones que permitían la generación de trayectorias aleatorias, usando métodos analíticos. El código mencionado permitía considerar diversas geometrías tanto para los detectores, como para las fuentes de radiación.

Los resultados obtenidos de las simulaciones fueron comparados con datos reportados en la literatura y con los registros experimentales obtenidos con la Técnica de Coincidencia Compton, obteniéndose un buen ajuste entre dichos valores cuando se incluía dentro de la información del código la energía de plasmón asociada con cada centelleador. Así mismo, los datos resultantes del experimento implementado fueron ajustados con funciones semi-empíricas, que incluían comportamientos asociados con las características luminiscentes de cada detector.

# 1. INTRODUCCIÓN

En este trabajo se presenta un estudio de la respuesta de detectores de centelleo inorgánicos ante electrones de baja energía, dentro del intervalo de 2 keV a 1 MeV. La investigación incluyó la implementación de una técnica experimental de coincidencia Compton, así como la utilización de un código de Monte Carlo que pudo reproducir en un amplio margen los resultados experimentales obtenidos.

A manera de breve introducción, diremos que cuando una partícula ionizada choca con ciertos materiales conocidos como centelleadores, dado que poseen la propiedad de la luminiscencia, parte de la energía es disipada en ionización y vibración mecánica de la red cristalina, y parte es reemitida como fotones en el intervalo del visible o ultravioleta. La observación y registro de los destellos de luz producidos en los centelleadores por cada una de las radiaciones ionizantes es la base del contador de centelleo. En un tubo fotomultiplicador, estos destellos del centelleador son convertidos en pulsos eléctricos, que son amplificados a la salida del mismo. Esos pulsos pueden ser llevados a circuitos electrónicos para su posterior análisis, obteniendo así información referente a su amplitud o características temporales.

La fluorescencia que presentan los centelleadores es una característica usada en la física nuclear experimental que sirve para registrar, entre otras propiedades, la energía de las partículas estudiadas con dicho dispositivo. Es decir, al chocar una partícula en el detector, el centelleador emite una cantidad de fotones que depende de la energía depositada por la partícula incidente. Esta intensidad de luz, al analizarse en instrumentos electrónicos subsecuentes en forma de pulso eléctrico, representa una medida de la energía depositada en el detector. El pulso o señal presentará por lo tanto una mayor magnitud entre mayor sea la energía depositada por la partícula en el detector. Bajo esta situación, estaríamos hablando de una respuesta proporcional en el centelleador, que en la mayoría de los casos resulta ser lineal.

Sin embargo, debido a fenómenos de recombinación y saturación propios de la estructura física de cada material, muchos cristales utilizados como centelleadores presentan respuestas carentes de proporcionalidad para diferentes tipos de partículas y en intervalos de energía muy específicos.

La falta de proporcionalidad en la respuesta de materiales centelleadores ante la incidencia de iones y electrones ha sido estudiada en las últimas 4 décadas, analizando la respuesta de estos detectores utilizando fuentes de rayos gamma de distintas energías, así como espectrómetros magnéticos. Esta última técnica experimental involucraba la incidencia directa del haz de electrones sobre el detector a estudiar. Dichas mediciones presentaban complicaciones en cuanto a sus resultados [1], debido a interacciones de tipo superficial para energías por debajo de 20 keV.

Para energías mayores a este valor, todavía existen problemas al utilizar fuentes externas. Los electrones son fáciles de atenuar y presentan longitudes de camino libre medio muy pequeñas en la mayoría de los materiales centelleadores. Por ejemplo, electrones con energías menores a 10 keV tienen longitudes de camino libre medio del orden de unas cuantas micras en NaI(Tl), que fue uno de los primeros detectores de centelleo inorgánicos en ser estudiado ampliamente [2]. Como resultado, la respuesta luminosa es fácilmente influenciada por efectos de superficie y escape de rayos X.

Dentro de los datos reportados en la literatura [1], los primeros estudios mostraban un máximo de la no-linealidad para NaI(Tl) alrededor de los 15 keV, valor que en recientes estudios ha sido aproximadamente de 10 keV [3], debido principalmente a la optimización experimental involucrada en la adquisición de datos. La falta de proporcionalidad citada, ha sido investigada también en detectores como el Antraceno y Plásticos centelleadores, los cuales no presentan el comportamiento del NaI(Tl) para energías menores a 1 MeV. Durante la última década ha existido un creciente interés por estudiar y entender las características básicas y los efectos principales que ocurren en procesos de depósito de energía para una gran cantidad de detectores y varios tipos de partículas incidentes. Específicamente, los iones pierden su energía ionizando el material en donde ha ocurrido la interacción. Este proceso está fuertemente influenciado por la manera en que los electrones depositan su energía en el detector. Aunque existen trabajos en donde se han estudiado estos fenómenos, aún prevalecen a bajas energías ciertas diferencias entre los modelos teóricos y los registros experimentales [4].

Debido a las discrepancias y falta de resultados concluyentes antes citados, uno de los principales objetivos de este estudio fue el análisis de las principales características del depósito de energía (E<1 MeV) por electrones en BGO y CsI(Tl), que son detectores de centelleo inorgánicos.

El plan de trabajo de la presente tesis comienza en el capítulo 2 con la explicación, en un marco teórico, de la interacción de radiación en los centelleadores estudiados y los principios físicos de la Técnica de Coincidencia Compton. También se describen las características generales y métodos analíticos del código de Monte Carlo que sirvió para generar los datos de las simulaciones. En el capítulo 3 se expone el dispositivo experimental utilizado en el laboratorio, es decir, el proceso experimental

involucrado en el montaje, ajuste y calibración del sistema de detección implementado.

En el capítulo 4 se describen los experimentos realizados utilizando la Técnica de Coincidencia Compton (TCC), así como el proceso de adquisición y análisis de los datos obtenidos. En este capítulo también se muestran los valores, ajustes y resultados generados a partir de las simulaciones, así como el comportamiento encontrado entre las características luminiscentes y la energía de plasmón, lo cual hizo posible predecir propiedades de la respuesta luminosa de los principales centelleadores inorgánicos utilizados hoy en día. Y por último, en el capítulo 5 aparecen las conclusiones del presente trabajo, seguidas por un apéndice donde se explica con detalle el cálculo de la energía de plasmón.

# 2. MARCO TEÓRICO

En este capítulo se presentan las bases teóricas necesarias para explicar los fenómenos y procesos involucrados en la técnica experimental empleada. Se incluyen también los principios físicos y métodos analíticos en los que se basa el código de Monte Carlo, con el cual se obtuvieron los datos de las simulaciones.

# 2.1 Principios de Detección por Centelleo

La detección de radiación ionizante a través de los destellos luminosos producidos en ciertos materiales es una de las técnicas más antiguas para registrar y estudiar interacciones en distintos medios. El proceso de fluorescencia es la emisión rápida de radiación visible por una substancia, seguida de una excitación a través de algún mecanismo específico. Existen varios procesos que también presentan la emisión de luz visible, aunque cada uno posee características particulares. La fosforescencia, por ejemplo, corresponde a la emisión de luz cuya longitud de onda es mayor que en la fluorescencia, y con un tiempo característico que es generalmente mucho más lento. La fluorescencia retardada presenta el mismo espectro de emisión que la fluorescencia rápida, pero ésta se caracteriza por un tiempo de emisión más largo seguido de la excitación. Para ser un buen centelleador, un material debe convertir la fracción más grande posible de energía de la radiación incidente en fluorescencia rápida, minimizando de esta forma las contribuciones espurias de la fosforescencia y fluorescencia retardada [5]. El proceso de centelleo sigue siendo uno de los métodos más usados para la detección y espectroscopía de una amplia variedad de radiaciones.

Un material centelleador ideal debería poseer las siguientes propiedades:

- Convertir la energía cinética de las partículas cargadas en luz detectable con una alta eficiencia de centelleo.
- Esta conversión debería ser lineal, es decir, la producción de luz debería ser proporcional a la energía depositada dentro de un amplio intervalo de energía.
- El medio debería ser transparente a la longitud de onda de su propia emisión, teniendo así una buena transmisión de luz.
- El tiempo de decaimiento de la luminiscencia inducida debería ser pequeño para permitir la generación de pulsos de señales rápidas.

- El material debe presentar una buena calidad óptica y tener la propiedad de ser producido en dimensiones de gran escala.
- Su índice de refracción debería ser muy similar al del vidrio (~1.5) para permitir un acoplamiento eficiente de la luz del centelleador respecto al tubo fotomultiplicador.

Por desgracia, ningún detector de centelleo cumple simultáneamente con todos los requisitos, y la elección de un centelleador en particular es casi siempre un compromiso entre estos y muchos otros factores. Los centelleadores usados más comúnmente incluyen a los cristales halogenuros alcalinos, entre los que se encuentra el Yoduro de Sodio dopado con Talio - NaI(Tl) -. Así mismo, los detectores de centelleo orgánicos, líquidos o plásticos también son muy populares. Los centelleadores inorgánicos suelen tener el mejor rendimiento luminoso al igual que linealidad, aunque con algunas excepciones son relativamente lentos en su respuesta temporal. Por otra parte, los detectores de centelleo orgánicos y una generalmente más rápidos pero presentan menor luminosidad [6]. El alto número atómico de los elementos que componen a los cristales inorgánicos y su alta densidad, los hace propicios para espectroscopía de radiación gamma, mientras que los cristales orgánicos son frecuentemente utilizados para espectroscopía de radiación beta y detección de neutrones rápidos.

# 2.2 Procesos de Centelleo en Cristales Inorgánicos

Los mecanismos de centelleo en detectores inorgánicos dependen de los estados de energía determinados por la estructura cristalina del material. Como se muestra en la figura 2.1, los electrones sólo tienen disponibles determinadas bandas discretas de energía en materiales clasificados como semiconductores. La banda inferior, llamada banda de valencia, representa a aquellos electrones que están ligados a la red cristalina, mientras que la banda de conducción representa a los electrones que tienen suficiente energía para liberarse y moverse a través del cristal. Existe una banda intermedia de energías llamada banda prohibida, en la cual no pueden encontrarse electrones tratándose de un cristal puro. La absorción de energía puede dar como resultado el salto de un electrón, desde su posición en la banda de valencia hasta la banda de conducción, dejando un hueco en el lugar que ocupaba dentro de la banda de valencia.



Figura 2.1 Estructura de bandas energéticas en un cristal centelleador activado.

En un cristal puro, el regreso de un electrón a la banda de valencia, asociado con la emisión de un fotón, se considera un fenómeno ineficaz para el proceso de centelleo en la mayoría de los casos. Esto se debe a que la separación típica entre las bandas es de tal magnitud que el fotón resultante se produce con una energía mayor a la asociada con el intervalo del visible.

Para aumentar la posibilidad de que este fotón tenga una energía que resulte dentro del intervalo de luz visible durante el proceso de desexcitación, es común agregar pequeñas cantidades de impurezas a los centelleadores inorgánicos. Estas impurezas, llamadas activadores, crean centros especiales en la red que modifican la estructura de bandas original del cristal. Como resultado de este dopaje, se introducen estados de energía dentro de la banda prohibida, desde donde los electrones pueden desexcitarse hasta llegar a la banda de valencia. Debido a que la diferencia en energía es menor que en el caso del cristal puro, esta transición produce un fotón en el visible, teniendo así un proceso eficiente de centelleo [7].

Cuando una partícula cargada incide en un detector de centelleo, dicha interacción produce una gran cantidad de pares electrón-hueco que son el resultado del desplazamiento de los electrones desde la banda de valencia hasta la de conducción. Los huecos positivos rápidamente se mueven hacia los centros activadores y los ionizan, debido a que la energía de ionización de la impureza es menor que la del centro activador. Entre tanto, el electrón se encuentra libre para viajar a través del cristal, y lo hará hasta que encuentre un activador ionizado. En esta etapa, el electrón puede caer en un centro del dopante, creando una estructura de impureza neutral que puede tener su propio conjunto de estados de energía excitados. Estos estados se muestran en la figura 2.1 como líneas dentro de la región prohibida. Si el estado del activador que se forme es una configuración excitada con una transición permitida hacia el estado base, su desexcitación ocurrirá muy rápido, teniendo así una alta probabilidad de emitir el fotón correspondiente. Si el activador se escoge de manera apropiada, esta transición puede darse en el intervalo del visible. Las

vidas medias típicas para tales estados excitados son del orden de 10<sup>-7</sup>s. Debido a que el tiempo de migración para el electrón es mucho más corto, todas las configuraciones de impurezas excitadas se forman esencialmente al mismo tiempo y presentan desexcitaciones con la vida media característica del estado excitado. Es precisamente el tiempo de decaimiento de esos estados lo que determina los tiempos característicos de la luz de centelleo emitida. Muchos centelleadores inorgánicos pueden caracterizarse por un solo tiempo de decaimiento o por una simple exponencial, aunque muchas veces se observan comportamientos más complejos incluyendo más de un tiempo característico.

Existen procesos que compiten con el descrito anteriormente. Por ejemplo, el electrón que llega al centro de la impureza puede crear una configuración excitada cuya transición al estado base sea prohibida. Tales estados requieren un incremento adicional de energía para llevarlos a un estado superior desde el cual sea posible la desexcitación hacia el estado base. Una fuente de esta energía es la excitación térmica, que presenta una componente luminosa lenta conocida como fosforescencia. Esta contribución puede ser en los centelleadores una fuente significativa de la llamada luz de fondo o remanente luminoso [8].

Una tercera posibilidad ocurre cuando un electrón es capturado en un centro activador. Aquí son posibles ciertas transiciones no radiativas entre algunos estados excitados formados por la captura del electrón y el estado base, y en este caso se emiten fotones cuya energía está fuera del intervalo del visible. Tal proceso es conocido como extinción o *quenching* y representa un mecanismo de pérdida durante la conversión de la energía de la partícula en luz de centelleo.

Como una alternativa a la migración independiente de los electrones y huecos descrita antes, el par electrón-hueco puede de hecho desplazarse bajo una configuración sin estructura bien definida conocida como excitón. En este caso el electrón y el hueco permanecen unidos para migrar a través del cristal hasta encontrar el centro de un átomo activador. De esta manera, pueden volverse a formar configuraciones de activadores excitados y emitir luz de centelleo en su desexcitación hacia la configuración del estado base.

Una medida de la eficiencia en el proceso de centelleo se obtiene con un simple cálculo de energías. Para una amplia variedad de materiales, la energía necesaria para crear un par electrón-hueco es aproximadamente 3 veces la diferencia en energía entre la banda de valencia y la de conducción. En Yoduro de Sodio (NaI), esto significa que la partícula cargada debe contribuir con unos 20 eV para crear un par electrón-hueco. Si la partícula depositara 1 MeV de energía en el centelleador, se crearían alrededor de 5x10<sup>4</sup> pares electrón-hueco. Varias determinaciones experimentales han mostrado que la eficiencia de centelleo absoluta del NaI(Tl) es cerca del 12% [5]. La absorción de 1 MeV produciría entonces  $1.2 \times 10^5$  eV de energía total luminosa, que significarían  $4 \times 10^4$  fotones, considerando una energía promedio de 3 eV. El rendimiento es aproximadamente de 1 fotón por cada par electrón-hueco formado originalmente, que se traduce en una transferencia de energía hacia los centros activadores con una alta eficiencia.

Una consecuencia importante de la luminiscencia con centros activadores es el hecho de que el cristal puede ser transparente a la luz de centelleo. En un cristal puro la energía que se requiere para excitar un par electrón-hueco es casi la misma que la energía liberada cuando el par se recombina. En consecuencia, los espectros de emisión y absorción se sobreponen y existe una considerable auto-absorción. Sin embargo, la emisión de un cristal dopado ocurre en un centro activador, donde la transición de energía es menor que la necesaria para crear un par electrón-hueco. Como resultado de esto, el espectro de emisión se recorre hacia longitudes de onda más grandes donde no será influido por la banda de absorción óptica propia del cristal.

### 2.3 Interacciones de Radiación Gamma

La detección de la radiación gamma depende de las interacciones y efectos que los fotones experimentan al transferir toda o parte de su energía a un electrón del medio. Estos procesos de interacción provocan considerables alteraciones de las propiedades cinemáticas del fotón, caso contrario a lo que ocurre con la atenuación de partículas cargadas o electrones a través de diversas interacciones simultáneas. Debido a que los fotones de la radiación primaria son "invisibles" para el detector, sólo los electrones rápidos creados en las interacciones a partir de los fotones iniciales dan indicios de la naturaleza y principales características de la radiación gamma incidente, donde la máxima energía de estos electrones es igual a la energía de los fotones incidentes. Dichas partículas secundarias se irán deteniendo y perdiendo energía de la misma forma que los electrones rápidos o partículas beta. De esta manera, la pérdida de energía se debe en gran medida a la ionización y excitación de los átomos del medio y también debido a la radiación de frenado o *bremsstrahlung*.

Para que un detector sirva como espectrómetro de rayos  $\gamma$  debe cumplir 2 funciones distintas. En la primera, debe actuar como un medio de conversión

en el que un rayo  $\gamma$  incidente tenga una alta probabilidad de interactuar para producir uno o más electrones rápidos; en la segunda, debe funcionar como un detector convencional para los electrones secundarios. Para rayos gamma incidentes de unos cuantos MeV, los electrones secundarios creados a mayor profundidad pueden tener algunos MeV de energía cinética. El alcance correspondiente en la mayoría de los detectores es de varios milímetros. Entonces, la absorción completa de electrones implica un detector cuyas dimensiones sean al menos de una decena de centímetros [8]. De esta manera, sólo una pequeña fracción de electrones secundarios, que son creados de forma aleatoria dentro del detector, llegarán a las proximidades de la superficie y podrán escapar.

De las distintas formas en que los rayos  $\gamma$  pueden interactuar con la materia, sólo 3 mecanismos son significativos en la espectroscopía de radiación gamma, estos son: la absorción fotoeléctrica, la dispersión Compton y la producción de pares. La absorción fotoeléctrica predomina en rayos  $\gamma$  de baja energía (algunos cientos de keV), la producción de pares se presenta mayoritariamente para radiación gamma de alta energía (superior a 2 MeV), y la dispersión de Compton es el proceso más probable en el intervalo de energías comprendido entre estos 2 últimos extremos. Es precisamente este último mecanismo de interacción el que constituye la base de la técnica experimental utilizada en la presente investigación.

El resultado de una interacción de dispersión Compton es un electrón de retroceso y un fotón de radiación gamma dispersado, con la división de energía entre ambas partículas dependiendo del ángulo de dispersión [9]. En la figura 2.2 se ilustra dicho efecto.



Figura 2.2 Fenómeno de dispersión Compton.

La energía del rayo gamma dispersado  $h\nu$  en términos de su ángulo de dispersión  $\theta$  y la energía  $h\nu$  del fotón incidente está dada por la expresión:

$$h\nu' = \frac{h\nu}{1 + (h\nu/m_{o}c^{2})(1 - \cos\theta)}$$
(2.1)

donde  $m_o c^2$  es la energía en reposo del electrón (0.511 MeV), *h* es la constante de Planck y  $\nu$  es la frecuencia. La energía cinética del electrón de retroceso  $(E_c)$  es entonces:

$$E_{c} = h\nu - h\nu' = \frac{(h^{2}\nu^{2}/m_{o}c^{2})(1 - \cos\theta)}{1 + (h\nu/m_{o}c^{2})(1 - \cos\theta)}$$
(2.2)

Podemos identificar 2 casos extremos:

- Ángulo rasante, θ ≅ 0. En este caso, las ecuaciones (2.1) y (2.2) predicen que hv'≅ hv y E<sub>c</sub> ≅ 0. Bajo esta situación, el electrón de retroceso Compton tiene muy poca energía y el rayo γ dispersado tiene casi la misma energía que el rayo γ incidente.
- 2. Colisión frontal,  $\theta=\pi$ . En este caso, el rayo  $\gamma$  incidente es retrodispersado en dirección opuesta a su dirección original, mientras que el electrón es dispersado a lo largo de la dirección de incidencia. Esta condición extrema representa la máxima energía que puede ser transferida a un electrón en una sola interacción Compton. Las ecuaciones (2.1) y (2.2) se convierten para este caso en:

$$hv'_{(\theta=\pi)} = \frac{hv}{1 + (2hv/m_oc^2)}$$
 (2.3)

$$E_{c\ (\theta=\pi)} = \frac{2h^2 v^2 / m_o c^2}{1 + (2hv/m_o c^2)}$$
(2.4)

Bajo condiciones normales, ocurrirán dispersiones en todos los ángulos posibles dentro del detector. Sin embargo, la sección eficaz diferencial del efecto Compton depende tanto del ángulo de dispersión, como del ángulo sólido que cubra la radiación gamma dispersada.

La sección eficaz diferencial del efecto Compton fue obtenida por Klein y Nishina, quienes analizaron el problema desde el punto de vista cuántico y utilizaron la ecuación de Dirac para el electrón libre relativista [10].

Tal sección eficaz por electrón en un medio viene dada por:

donde

$$d\sigma_{c}' = (r_{o}^{2}k^{2}/2k_{o}^{2})[(k_{o}/k)+(k/k_{o}) - sen^{2}\theta]d\Omega$$
(2.5)  

$$r_{o} = e^{2}/m_{o}c^{2} = 2.818 \times 10^{-13} \text{ cm} \text{ (radio de Bohr)}$$
  

$$k = hv'$$
  

$$k_{o} = hv$$

La ecuación (2.5), que se conoce como fórmula de Klein-Nishina, da la probabilidad ( $d\sigma_c'$ ) de que un fotón sea dispersado durante la colisión con un electrón libre según un ángulo sólido igual a  $d\Omega=2\pi$ sen $\theta$ d $\theta$  en la dirección  $\theta$ , con una energía k=hv'. La sección eficaz de interacción del efecto Compton por electrón se expresa en [cm<sup>2</sup>/electrón].

Para obtener la sección eficaz diferencial por átomo d $\sigma_c$ , se debe multiplicar la sección eficaz diferencial por electrón, ecuación (2.5), por el número atómico Z del elemento:

$$d\sigma_c = Z d\sigma_c'$$
 (2.6)

Para calcular la distribución angular de los fotones dispersados, se debe expresar su energía en función del ángulo de dispersión  $\theta$  y sustituir ésta en la fórmula de Klein-Nishina, de modo que la sección eficaz diferencial sólo quede en función de la energía del fotón incidente y del ángulo de dispersión  $\theta$ . Definiendo,

$$\alpha = hv/m_o c^2 = k_o/m_o c^2$$
 (2.7)

y utilizando las consideraciones cinemáticas del efecto Compton [10], se puede obtener la siguiente expresión:

$$(k/k_o) = \frac{1}{1 + \alpha(1 - \cos\theta)}$$
(2.8)

Sustituyendo la ecuación (2.8) en la fórmula de Klein-Nishina, ecuación (2.5), y operando matemáticamente se obtiene:

$$d\sigma_{c}' = \frac{r_{o}^{2}(1+\cos^{2}\theta)}{2[1+(1-\cos\theta)]^{2}} \left\{ 1 + \frac{\alpha^{2}(1-\cos\theta)^{2}}{(1+\cos^{2}\theta)[1+\alpha(1-\cos\theta)]} \right\} d\Omega$$
(2.9)

La expresión (2.9) da la probabilidad de que un fotón con energía hv sea dispersado según un ángulo sólido  $d\Omega$ , en la dirección  $\theta$ . A partir del cálculo de la sección eficaz diferencial por unidad de ángulo sólido, en función del ángulo de dispersión  $\theta$ , puede observarse la variación de la probabilidad para detectar fotones dispersados de acuerdo con el ángulo subtendido respecto a la dirección de incidencia. Este comportamiento se ilustra gráficamente para hv=662 keV en la figura 2.3, donde la probabilidad porcentual de detección está normalizada a la que se obtiene a 0°.



Figura 2.3 Gráfica de la probabilidad de detección de rayos  $\gamma$  respecto al ángulo de dispersión  $\theta$ .

De acuerdo a las interacciones presentes en el material de detección, para cualquier energía de rayo gamma incidente, la distribución energética de los electrones tiene el aspecto general mostrado en la figura 2.4.



Figura 2.4 Espectro de energías para la interacción de radiación gamma.

La diferencia entre el electrón de retroceso Compton con máxima energía y el rayo gamma incidente está dada por:

$$E_{M} = hv - E_{c(\theta=\pi)} = \frac{hv}{1 + 2hv/m_{o}c^{2}}$$
(2.10)

En el límite cuando la energía del rayo gamma incidente es grande, o  $hv >> m_o c^2/2$ , esta diferencia de energía tiende hacia un valor constante, que está expresado por:

$$E_M \simeq m_o c^2 / 2 \ (= 0.256 \text{ MeV})$$
 (2.11)

El presente análisis se basa en la suposición de que la dispersión Compton involucra electrones que inicialmente se encuentran libres o no ligados, aunque en algunos casos la energía de ligadura de los electrones del material centelleador puede alterar el proceso de dispersión, provocando efectos significativos en la sección del espectro correspondiente al continuo Compton. Estos efectos son particularmente notables para radiación gamma incidente de baja energía. Tales comportamientos incluyen un mínimo local de conteo en el continuo en su región de mayor energía, y la aparición de una pendiente en la zona del "hombro Compton". Dichos efectos comúnmente no se presentan con total claridad debido al límite de resolución en energía del detector, aunque pueden observarse en espectros de detectores con una alta resolución en energía [5].

En los registros experimentales no se obtienen formas geométricas como las que se ilustran en la figura 2.4, esto se debe a los procesos estadísticos involucrados en la adquisición de los datos, lo cual da al espectro una forma de distribución tipo gaussiana, además de la resolución total asociada a la serie de componentes electrónicos, que suministran al espectro pequeñas contribuciones espurias en la mayor parte del mismo [6].

Existen fenómenos posteriores al efecto Compton que son los responsables de la creación de partículas secundarias dentro del detector. Los fenómenos más significativos en este tipo de materiales centelleadores son: escape de rayos X característicos, escape de *bremsstrahlung*, y escape de electrones secundarios. Debido a las dimensiones y número atómico de los detectores estudiados [10], a la energía de la radiación gamma utilizada, y al dispositivo experimental escogido para esta investigación, el escape de electrones fue el fenómeno secundario sobre el cual se enfocaron las mediciones y análisis de los registros obtenidos, despreciando así cualquier contribución de los restantes fenómenos, los cuales no contribuyeron en forma considerable dentro de los datos analizados.

#### 2.4 Espectrómetro Compton

La combinación de 2 detectores de radiación gamma operados en coincidencia, como se muestra en la figura 2.5, es una configuración experimental que se utiliza para estudiar, entre otras propiedades, la función de respuesta para un detector de centelleo.



Figura 2.5 La geometría del espectrómetro Compton se ilustra en la parte superior. El espectro de los eventos del detector 1 que están en coincidencia con los pulsos del detector 2 se presenta en la curva de trazo continuo en la parte inferior. El espectro completo del detector 1 aparece como la curva punteada.

Un haz colimado de rayos  $\gamma$  se hace incidir en el primer detector, en el cual ocurrirá la dispersión Compton. Una fracción de los rayos gamma dispersados viajará hacia el segundo detector, donde podrán interactuar para producir un segundo pulso. Debido a que la distancia de separación normalmente no es mucho mayor a una decena de centímetros, los pulsos estarán esencialmente en coincidencia temporal. Al registrar selectivamente sólo aquellos pulsos del primer centelleador que estén en coincidencia con un pulso del segundo detector, el espectro resultante mostrará únicamente eventos de dispersión

Compton. Debido a que el ángulo de dispersión está fijo, se depositará un valor constante de energía por cada interacción de dispersión proveniente de un rayo gamma incidente monoenergético. Teniendo así la contribución energética ( $E_c$ ) de los pulsos producidos por los electrones Compton dentro del detector primario. La absorción fotoeléctrica y otros eventos que no se produzcan en coincidencia entre ambos detectores estarán excluidos de los registros [5]. La función de respuesta estará entonces reducida a un solo pico, que aparecerá en una posición dentro del continuo Compton original determinado por el ángulo de dispersión.

#### 2.5 Plasmones

La interacción de la radiación en materiales centelleadores ha sido tratada hasta ahora en términos de los procesos de ionización y excitación que ocurren en los átomos del material constituyente. Si bien la red cristalina del detector ha sido propuesta como la estructura básica en la cual se producen las transiciones entre bandas de conducción y de valencia, esta misma red cuenta entre sus elementos con portadores de energía que – de acuerdo con la presente investigación – juegan un papel importante en el estudio detallado de los procesos de interacción radiativa a bajas energías. Estos portadores son los llamados plasmones, junto con su energía asociada.



**Figura 2.6** Creación de un plasmón en un medio sólido por dispersión inelástica de un electrón. Si el electrón incidente tiene una energía de 1 a 10 keV, la energía del plasmón es del orden de 10 eV. También se muestra el caso en que se crean dos plasmones.

Un plasma es un medio con igual concentración de cargas positivas que negativas, de las cuales por lo menos un tipo de ellas es móvil. En un sólido, por ejemplo, las cargas negativas de los electrones de conducción están equilibradas por una concentración igual de carga positiva en los núcleos iónicos.

Una oscilación del plasma en un material es una excitación longitudinal colectiva del gas de electrones de conducción. Un plasmón es una oscilación cuantizada del plasma [11]. Podemos excitar un plasmón haciendo pasar un electrón por una lámina delgada (figura 2.6) o haciendo reflejar un electrón o un fotón de una película metálica. Existe un acoplamiento entre la carga del electrón y las fluctuaciones del campo electrostático de las oscilaciones del plasma. El electrón transmitido o reflejado pierde una energía igual a un múltiplo entero de la energía del plasmón. En un dieléctrico, la oscilación del plasma es físicamente la misma que en un metal. El mar de electrones de valencia oscila con respecto a los núcleos iónicos.

Para poder obtener una expresión de la energía asociada con un plasmón, debemos conocer la respuesta dieléctrica de un gas de electrones [12]. En ausencia de colisiones, la ecuación de movimiento de un electrón libre en un campo eléctrico es,

$$m\frac{d^2x}{dt^2} = -eE \tag{2.12}$$

donde *m* es la masa y *e* es la carga del electrón. Si *x* (posición) y *E* (campo eléctrico) dependen del tiempo exponencialmente, de la forma  $e^{-i\omega t}$ , la ecuación (2.12) tiene la forma:

$$-\omega^2 mx = -eE \implies x = \frac{eE}{m\omega^2}$$
 (2.13)

El momento dipolar del electrón es,

$$p = -ex = \frac{-e^2 E}{m\omega^2} \tag{2.14}$$

y la polarización, definida como momento dipolar por unidad de volumen es,

$$P = -nex = \frac{-ne^2 E}{m\omega^2}$$
(2.15)

siendo n la concentración de electrones.

La función dieléctrica a la frecuencia  $\omega$  se define [13] como,

$$\varepsilon(\omega) = \frac{D(\omega)}{\varepsilon_o E(\omega)} = 1 + \frac{P(\omega)}{\varepsilon_o E(\omega)}$$
(2.16)

donde *D* es la magnitud del vector desplazamiento ( $\mathbf{D} = \varepsilon_0 \mathbf{E} + \mathbf{P}$ ) y  $\varepsilon_o$  es la permitividad del vacío. La notación hace destacar en la ecuación anterior que *E*, *P* y *D* tienen la frecuencia común  $\omega$ . Aplicamos (2.15) y (2.16) para encontrar la función dieléctrica del gas de electrones libres:

$$\varepsilon(\omega) = 1 - \frac{ne^2}{\varepsilon_{o}m\omega^2}$$
(2.17)

Si definimos la frecuencia del plasma [11] por la relación,

$$\omega_p^2 = \frac{ne^2}{\varepsilon_o m} \tag{2.18}$$

entonces podemos expresar la función dieléctrica de la forma:

$$\varepsilon(\omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2} \tag{2.19}$$

La ecuación (2.18) representa la frecuencia de oscilación de una excitación longitudinal colectiva del gas de electrones. Es decir, la frecuencia de oscilación de un plasma en un medio material, ya sea conductor o dieléctrico [12]. Ahora bien, recordando que un plasmón es una oscilación cuantizada del plasma, la energía asociada a este modo de excitación longitudinal se expresa [14] de la siguiente forma,

$$E_{p} = \hbar \omega_{p} \qquad (2.20)$$

donde  $\hbar = h/2\pi$ . De esta manera, la energía de plasmón  $E_p$  incluye como información del material en particular, según la ecuación (2.18), sólo la concentración de electrones, que a su vez depende de la masa y número atómico totales del medio constituyente.

## 2.6 Código de Monte Carlo

#### 2.6.1 PENELOPE

Dentro de los principales objetivos de este trabajo se encontraba la utilización de un código de Monte Carlo que pudiera reproducir los resultados obtenidos durante la fase experimental, para así poder extrapolar y predecir resultados bajo las mismas o distintas configuraciones físicas. Dicho programa debía ser capaz de simular detalladamente el transporte y depósito de energía, para al menos radiación gamma y electrones, modificándolo para operar en distintos materiales y geometrías diversas. Además, el código debía tener la capacidad de simular eventos a bajas energías (al menos 2 keV).

El código encontrado que cumplió con tales características fue uno diseñado y previamente probado, llamado *PENELOPE* [15]. El acrónimo proviene de las palabras en inglés, **PEN**etration and Energy **LO**ss of Positrons and Electrons. El código utilizado en este trabajo era una modificación del original, donde los autores incluían algoritmos para simular también interacciones de fotones [16].

El método de Monte Carlo, que utiliza este código, consiste en la producción aleatoria de elementos que cumplan con una misma probabilidad de muestreo para cada una de las "corridas" o conjuntos sucesivos de eventos simulados. En el caso específico del programa usado, la probabilidad de eventos y direcciones posteriores para las interacciones presentes en los fenómenos simulados seguían los parámetros probabilísticos del citado método.

Este algoritmo está escrito en el lenguaje de computadora FORTRAN 77, y ejecuta simulaciones tipo Monte Carlo donde intervienen interacciones de electrones y fotones en distintos materiales. El modelo de dispersión adoptado proporciona una descripción completa del transporte de radiación dentro del intervalo de energías que incluye desde 1 keV hasta varios cientos de MeV. PENELOPE genera cascadas aleatorias de electrones y fotones en estructuras de materiales complejos, y geometrías que incluyan diferentes compuestos a lo largo de varias regiones.

La ventaja práctica de PENELOPE es que permite modificar el programa de simulación, alterando las condiciones físicas y geométricas del experimento, sin necesidad de revisar o cambiar los aspectos analíticos de las teorías de transporte y dispersión de radiación. Este algoritmo fue ideado para ejecutar la mayor parte de la simulación, por lo que el usuario al contribuir con las condiciones físicas y geométricas iniciales, deja en manos de la estructura principal del código el control de la evolución de las trayectorias y la evaluación de los valores necesarios para cada interacción.

# 2.6.2 Transporte de electrones

Las interacciones con el medio provocan que las partículas pierdan energía, cambien su dirección de movimiento, y ocasionalmente produzcan partículas secundarias. PENELOPE incorpora un modelo de dispersión que combina valores de secciones eficaces totales y funciones de secciones eficaces diferenciales para los distintos mecanismos de interacción. Las interacciones consideradas y sus respectivas secciones eficaces diferenciales para el caso de los electrones [15] son las siguientes:

- A) Dispersión elástica de electrones y positrones: Modelo de sección eficaz diferencial W2D [17] con parámetros determinados por la trayectoria libre media y las primeras dos trayectorias libres medias de transporte leídas desde el archivo de entrada (dichos archivos proporcionan los valores numéricos o las funciones correspondientes a cada sección eficaz).
- B) Colisiones inelásticas de electrones y positrones: Sección eficaz diferencial de Born, obtenida del modelo generalizado de oscilador de Sternheimer-Liljequist, incluyendo la corrección por efecto de densidad.
- C) Emisión de *bremsstrahlung* por electrones y positrones: Sección eficaz diferencial de Bethe-Heitler, con apantallamiento exponencial y corrección de Coulomb.
- D) Aniquilación de positrones: Sección eficaz diferencial de Heitler para aniquilación en dos fotones.

Los eventos e interacciones descritos anteriormente se apegan al proceso de generación de cascadas aleatorias de electrones. Donde el seguimiento detallado de las trayectorias y las probabilidades para cada tipo de interacción se ven interrumpidas en el momento en que el electrón pierde gran parte de su energía siendo así absorbido por el material, o bien cuando la trayectoria y energía son propicias para que el electrón salga del medio estudiado.

En la figura 2.7 se muestra esquemáticamente la evolución de los eventos y los tipos de interacción que ocurren al realizar el seguimiento en el caso de *e*lectrones.



Figura 2.7 Diagrama asociado a los mecanismos de interacción para electrones, según su energía.

# 2.6.3 Transporte de fotones

La simulación del transporte de fotones adopta el seguimiento detallado usual, es decir, todos los eventos de interacción en la historia de un fotón son simulados en sucesión cronológica, tomando en consideración la probabilidad de interacción con los distintos materiales. La cual depende en gran medida de las características físicas del medio en cuestión, así como de la energía del fotón en dicha trayectoria. A continuación se presentan las principales interacciones consideradas por PENELOPE en el caso de fotones.

A) Dispersión coherente (Rayleigh) de fotones: Sección eficaz diferencial de Born con ajuste analítico del factor de forma atómico.

- B) Dispersión incoherente (Compton) de fotones: Sección eficaz diferencial calculada a partir de la aproximación de impulso relativista con perfiles analíticos Compton de un solo electrón.
- C) Absorción fotoeléctrica de fotones: Secciones eficaces totales generadas con el programa XCOM de Berger y Hubbell. La dirección inicial de los fotoelectrones es muestreada a partir de la sección eficaz diferencial hidrogenoide de Sauter para la capa K.
- D) Producción de pares electrón-positrón: Las secciones eficaces totales son obtenidas del programa XCOM. Las energías cinéticas iniciales de las partículas producidas son muestreadas a partir de la sección eficaz diferencial de Bethe-Heitler, con apantallamiento exponencial y corrección de Coulomb.

La simulación de trayectorias para electrones y positrones se ejecuta a través de un algoritmo mixto. Los eventos elásticos, inelásticos y radiativos son simulados de manera detallada. El efecto combinado de todas las interacciones asociadas con colisiones elásticas y frenamientos (emisión de *bremsstrahlung*) que ocurren entre dos eventos elásticos consecutivos son descritos como un sólo evento 'artificial' suave en el que la partícula pierde energía y es desviada. La generación de eventos artificiales suaves se fundamenta en la aproximación de dispersiones múltiples que producen distribuciones angulares y de pérdida energética con sus respectivos promedios y variaciones [15]. La trayectoria de la partícula entre eventos sucesivos, o entre un evento y una interfase (i.e. una superficie que separa dos medios con diferente composición), es un segmento recto, conocido como *step*.

Las partículas secundarias emitidas con energía inicial mayor que la energía de absorción son almacenadas por el programa, para ser simuladas después de haber completado la traza primaria. Las partículas secundarias son producidas en interacciones directas (colisiones inelásticas, emisión de *bremsstrahlung*, aniquilación de positrones, dispersión Compton, absorción fotoeléctrica y producción de pares) como radiación fluorescente (rayos X característicos y electrones Auger). Sólo es considerada la radiación fluorescente que resulta directamente de la vacancia producida por dispersión Compton y absorción fotoeléctrica en la capa K [16].

# **3. EQUIPO EXPERIMENTAL**

#### 3.1 Características básicas de los centelleadores estudiados

Debido a la técnica experimental utilizada para estudiar la respuesta de electrones en cristales inorgánicos, era necesario elegir detectores cuyo coeficiente de absorción para radiación gamma garantizara un alto porcentaje de interacciones, produciendo así una cantidad de registros suficientes que permitieran analizar de manera óptima los eventos de interés.

Dichos cristales también debían presentar características físicas que facilitaran su manejo, acoplamiento y montaje respecto de las especificaciones experimentales de la técnica a utilizar. Las dimensiones tenían que coincidir con la geometría del arreglo experimental, así como con el tamaño de los dispositivos fotomultiplicadores. Los detectores elegidos para su estudio cumplían con las citadas características, además de que para ninguno de los dos había sido analizado o reportado en la literatura, el comportamiento de su respuesta ante electrones de baja energía. A continuación se presentan las principales características físicas del CsI(Tl) y BGO, que fueron los cristales inorgánicos estudiados experimentalmente en este trabajo.

### 3.1.1 Principales características del CsI(Tl)

Luego del NaI(Tl), el Yoduro de Cesio dopado con Talio - CsI(Tl) - es otro halogenuro alcalino que ha tenido gran popularidad como detector de centelleo. Dicho cristal, se caracteriza por un coeficiente de absorción de radiación gamma mayor que el del Yoduro de Sodio. Esta ventaja es de gran importancia para aplicaciones tales como instrumentación espacial, donde las dimensiones y peso de los detectores utilizados son una prioridad. Debido también a que es menos frágil que el Yoduro de Sodio y no es higroscópico, este centelleador puede ser expuesto a condiciones atmosféricas más severas, además de aplicaciones que incluyan translaciones y vibraciones mecánicas constantes. Cuando se le secciona en porciones delgadas, el Yoduro de Cesio puede doblarse en distintas geometrías sin sufrir fracturas, característica que lo hace un material muy práctico y maleable [5].

Una de las propiedades más utilizadas del CsI(Tl) es su tiempo de decaimiento variable para diferentes partículas. En este caso, pueden usarse técnicas de discriminación por forma de pulso para diferenciar entre varios

tipos de radiación. Con este detector pueden identificarse distintos tipos de partículas, por ejemplo diferenciar entre protones o partículas alfa y electrones.

El espectro de emisión del CsI(Tl) tiene su máximo en los 530 nm, cuyo valor es mayor al del Yoduro de Sodio (415 nm), esta característica da como resultado un rendimiento luminoso inferior que el de NaI(Tl). Sin embargo, al acoplar fotodiodos para las mediciones, los cuales tienen mayor sensibilidad hacia el rojo del espectro luminoso, el rendimiento del CsI(Tl) es mayor que el de la mayoría de los centelleadores inorgánicos [8].

#### 3.1.2 Principales características del BGO

El segundo detector de centelleo escogido para estudiar la respuesta luminosa a electrones de baja energía fue el Germanato de Bismuto,  $Bi_4Ge_3O_{12}$ , (usualmente llamado BGO). Una de las ventajas del BGO es su alta densidad (7.13 g/cm<sup>3</sup>) y el número atómico efectivo (83), debido su componente de Bismuto. Estas propiedades lo convierten en uno de los detectores con mayor probabilidad de absorción fotoeléctrica de radiación gamma. Sus propiedades mecánicas y químicas lo hacen un cristal de fácil manejo, debido a que no es higroscópico y presenta una estructura muy resistente. Desafortunadamente, el rendimiento luminoso del BGO es relativamente bajo, aproximadamente 15% respecto del NaI(Tl).

Para el BGO, la componente principal del tiempo de decaimiento es de 300 ns, precedida por una componente rápida de 60 ns que representa alrededor del 10% de la producción luminosa total. Este cristal es un ejemplo de centelleador inorgánico "puro" que no requiere la presencia de elementos activadores para incrementar el proceso de centelleo. En su lugar, la luminiscencia para BGO está asociada [18] con una transición óptica del ion Bi<sup>3+</sup> que es el principal constituyente del cristal. Existe un ligero corrimiento entre los espectros de absorción óptica y emisión (Ilamado el corrimiento de Stokes) en los estados asociados con el Bi<sup>3+</sup>, que provoca una auto-absorción pequeña de la luz de centelleo que permite al detector ser transparente a su propia emisión en trayectos del orden de varios centímetros. En la tabla 3.1 se muestran las principales características de CsI(Tl) y BGO en comparación [19] con las de NaI(Tl).

Centelleador	Rendimiento Luminoso % respecto del NaI(Tl)	Longitud de onda del Máximo de Emisión (nm)	Tiempo de Decaimiento (ns)	Indice de Refracción	Densidad (g/cm <sup>3</sup> )	Punto de Fusión
NaI(Tl)	100	415	230	1.85	3.67	651
CsI(Tl)	50	530	1000	1.80	4.51	621
BGO	15	460	300	2.15	7.13	1050

Tabla 3.1 Propiedades físicas de centelleadores inorgánicos.

#### 3.2 Implementación de la Técnica de Coincidencia Compton

El dispositivo experimental empleado para medir la respuesta luminosa de BGO y CsI(Tl) se basa principalmente en el espectrómetro Compton, que se encuentra explicado detalladamente en el capítulo 2. Cuando el arreglo experimental involucra la sincronización y coincidencia en la adquisición de los pulsos, este método recibe el nombre de Técnica de Coincidencia Compton (TCC), la cual ha sido utilizada para estudiar la respuesta de algunos materiales centelleadores, como el NaI(Tl) [2].

La ventaja de esta técnica reside en evitar los efectos secundarios presentes cuando el flujo de electrones se hace incidir sobre el detector [1]. En dichas situaciones, existen contribuciones espurias, debido principalmente a interacciones de tipo superficial ocasionadas por la incidencia de las partículas. Este método al estar basado en una variación del espectrómetro Compton, aprovecha los electrones energéticos producidos por la dispersión Compton de rayos gamma dentro del centelleador [20]. En esta técnica, el centelleador a estudiar es expuesto a un haz colimado de rayos gamma monoenergéticos de energía conocida hv. En la figura 3.1 se muestra un esquema del dispositivo experimental necesario para la utilización de la TCC. En este caso, algunos de los rayos gamma experimentarán dispersiones dentro del centelleador, transfiriendo la energía  $E_c$  a un electrón. El rayo gamma dispersado a un ángulo  $\theta$  y con energía hv' será registrado por el detector secundario (las expresiones para hv' y  $E_c$  se hallan en la sección 2.3).



Figura 3.1 Arreglo experimental para la implementación de la Técnica de Coincidencia Compton (TCC).

Durante la primera fase experimental se estudiaron las características luminiscentes del BGO, por tal razón, este detector era el responsable de producir tanto el rayo gamma dispersado como el electrón, productos ambos de la dispersión Compton, mientras que el cristal de CsI(Tl) era el detector secundario (fig. 3.1).

La característica básica de la TCC, que permite detectar la contribución energética de electrones, consiste en registrar selectivamente sólo aquellos pulsos del primer centelleador que estén en coincidencia con un pulso del segundo detector, el espectro resultante mostrará entonces únicamente eventos de dispersión Compton. Debido a que el ángulo de dispersión está fijo, se depositará un valor constante de energía por cada interacción de dispersión proveniente de un rayo gamma incidente monoenergético. Teniendo así la contribución energética ( $E_c$ ) de los pulsos producidos por los electrones Compton dentro del detector primario (ver sección 2.4).

Dentro de las características particulares del experimento, empezaremos por describir las fuentes radiactivas empleadas. Para cubrir el intervalo energético de interés, que comprendía desde unos cuantos keV hasta 1 MeV, se utilizaron separadamente 3 fuentes monoenergéticas de radiación gamma: <sup>60</sup>Co ( $E_{\gamma}$ =1.25 MeV), <sup>137</sup>Cs ( $E_{\gamma}$ =0.662 MeV) y <sup>133</sup>Ba ( $E_{\gamma}$ =0.356 MeV). Tales fuentes eran colocadas, en cada caso, a una distancia de 5 cm respecto al detector primario. Entre el detector primario y el secundario había una distancia de 10 cm. La fuente estaba blindada dentro de un contenedor de plomo, cuyas paredes tenían un grosor de 1.5 cm. Todas las secciones obscuras de la figura 3.1 representan secciones de plomo del mismo grosor. El diámetro de los colimadores era de 5 mm, utilizando dos para el detector primario y uno para el detector secundario.

Por lo que respecta a los detectores estudiados, el detector de BGO era un cilindro con dimensiones de  $2.54 \times 2.54$  cm. En tanto que el detector de CsI(Tl) era un cubo de  $1\times1\times1$  cm. Cabe recordar que en la segunda fase experimental, cuando se estudiaron las propiedades luminosas del CsI(Tl), éste último tomaba el lugar de detector primario y el BGO el de detector secundario. En esa segunda etapa las dimensiones del cristal de CsI(Tl) fueron de  $1.3\times1.3\times1.9$  cm. La parte de la figura 3.1 correspondiente a la electrónica de coincidencia se explica en la siguiente sección.

Aún cuando en teoría, la distribución energética de electrones Compton puede presentar valores muy cercanos a cero, la configuración experimental no permitió aplicar la TCC para ángulos muy pequeños, ni tampoco para ángulos muy grandes. El intervalo angular osciló desde 10°, hasta un máximo de 110°. De esta manera, con la emisión del <sup>133</sup>Ba (E<sub>γ</sub>=356 keV), la energía mínima para electrones que se pudo registrar fue de aproximadamente 4 keV.

#### 3.3 Electrónica Asociada

Dentro del dispositivo experimental mostrado en la sección anterior, se encontraba la parte correspondiente a los componentes y módulos electrónicos que sirvieron para adquirir, amplificar, filtrar y registrar los pulsos provenientes de cada uno de los detectores incluidos en la Técnica de Coincidencia Compton implementada.



Figura 3.2 Diagrama de la instrumentación electrónica utilizada para la Técnica de Coincidencia Compton.

Primeramente, para acoplar ambos detectores a cada uno de los tubos fotomultiplicadores (PMTs en la figura 3.2), se procedió a preparar las superficies de los centelleadores, incluidas las que tendrían contacto con las ventanas de los fotomultiplicadores, puliendo los cristales con papel *bond*. Cabe recordar que la función del tubo fotomultiplicador o PMT (del inglés PhotoMultiplier Tube) es la de convertir la salida de luz extremadamente débil de un pulso de centelleo en una señal eléctrica de intensidad considerable. Dichos dispositivos deben conectarse a circuitos divisores de voltaje compatibles, comúnmente llamados bases [5].

Para el acoplamiento entre los detectores y cada uno de los PMT, se usó grasa óptica Bicron BC-630. Esta unión se cubrió con cinta de teflón blanca para ambos casos, con el objetivo de minimizar el escape de luz en la interfase. Para el BGO se utilizó un fotomultiplicador Hamamatsu R1668 [21] que operaba a -1250 V, con la base alimentada por una fuente de alto voltaje ORTEC modelo 556. Mientras que el CsI(Tl) se acopló a un Hamamatsu R1450 [21] cuyo voltaje de operación era de -1500 V, y donde la base recibía suministro eléctrico a través de una fuente de alto voltaje *Keithley Instruments* modelo 246. El conjunto base-fotomultiplicador fue cubierto por completo con una funda paralelepípeda obscura, para evitar la incidencia de luz externa sobre la ventana de cada uno de los fotomultiplicadores utilizados.

Cabe señalar que todos los módulos empleados en el experimento, y descritos a continuación, eran del tipo NIM (*Nuclear Instrument Module*). El primero de estos dispositivos electrónicos con el cual interactuaban las señales originales era un Amplificador Dual (*Dual Spectroscopic Amplifier*) ORTEC modelo 855. Las señales primarias provenientes de cada PMT se caracterizan por ser rápidas ( $\approx$ 3 ns) y de algunas décimas de volt. La función de este módulo fue la de amplificar e invertir la polaridad (negativa) de las señales para posteriormente manejarlas en los analizadores monocanal. El tránsito de las señales primarias a través de este módulo modificó sus características temporales (*shaping*), por lo que las señales trabajadas de esta etapa en adelante ya no eran señales rápidas.

El siguiente paso era crear una señal lógica temporal utilizando dos Analizadores Monocanal (*Timing Single Channel Analyzer*) ORTEC modelo 551. Esto con la finalidad de generar disparos de inicio necesarios para el funcionamiento del siguiente módulo.

Después de su paso por los analizadores monocanal, ambas señales entraban en un módulo de Coincidencia (*Universal Coincidence*) ORTEC modelo 418A. La función de éste, era la de emitir un disparo (pulso analógico cuadrado) en caso de presentarse coincidencia en tiempo entre ambas señales. El tiempo de resolución en coincidencia se ajustó, para todas las mediciones, en 150 ns.

El siguiente módulo involucrado fue un Generador de Ventana y Retardo (*Gate & Delay Generator*) ORTEC modelo 416A. Este módulo amplificó las características de intensidad y tiempo del disparo de coincidencia, generando una ventana lógica de mayores dimensiones, la cual era necesaria debido a los límites de operación del ADC.

El último dispositivo en el que eran analizadas las señales fue un Convertidor Analógico-Digital o ADC (*Analogic to Digital Converter*) que no era ya un módulo tipo NIM, sino una tarjeta conectada a uno de los puertos de la computadora usada para la adquisición de datos. Al ADC entraban dos señales. Por un lado el pulso del detector primario, que después de su amplificación era desviado a través de una "T" coaxial antes de interactuar en el Analizador Monocanal. La segunda señal que llegaba al ADC era la del Generador de Ventana y Retardo en la modalidad de "compuerta" (*trigger*). De este modo, el ADC sólo registraba la señal del detector primario en caso de recibir un disparo proveniente del Generador de Ventana y Retardo, lo que significaba un evento en coincidencia. En la computadora destinada a la adquisición de datos se contaba con un Analizador Multicanal o MCA (*MultiChannel Analyzer*) ORTEC versión 4.06, con el cual se adquirieron y analizaron todos los espectros obtenidos.

# 4. MEDIDAS EXPERIMENTALES Y ANÁLISIS

#### 4.1 Resultados para BGO

En la primera fase experimental se estudiaron las principales características de la respuesta luminosa de BGO ante electrones, cuyo intervalo de energías comprendía desde 4 keV hasta 958 keV.

Antes del inicio formal de las mediciones, se estudió la estabilidad del conjunto completo de componentes electrónicos para saber la variación y tipo de cambios que el conglomerado modular presentaba. Por fortuna, el conjunto mostraba una buena estabilidad en periodos largos de tiempo ( $\approx 12$  horas), de no ser por el par de fotomultiplicadores escogidos, que requerían un tiempo de "calentamiento" previo de aproximadamente 2 horas, después de las cuales mostraban una estabilidad confiable.

Para la calibración del conjunto electrónico asociado, se utilizaron 4 fuentes de radiación gamma: <sup>60</sup>Co ( $E_{\gamma}$ =1250 keV), <sup>137</sup>Cs ( $E_{\gamma}$ =662 keV), <sup>133</sup>Ba ( $E_{\gamma}$ =356 keV) y <sup>241</sup>Am ( $E_{\gamma}$ =59 keV). Los valores correspondientes para las energías de cada fuente eran revisados y registrados cada 2 horas como mínimo, garantizando así una estabilidad completa de todo el arreglo experimental. Dicha calibración se realizó siguiendo la misma metodología también durante la segunda fase experimental, cuando se estudiaron las características luminiscentes del CsI(TI).

Los distintos valores de interés para las energías de los electrones (E<sub>c</sub>) fueron cubiertos con la utilización de las 3 fuentes de radiación gamma descritas en la sección 3.2, para dichas mediciones, el uso de las mismas comprendió los siguientes intervalos: <sup>133</sup>Ba desde 4 keV hasta 14 keV, <sup>137</sup>Cs desde 30 keV hasta 342 keV y <sup>60</sup>Co desde 374 keV hasta 958 keV. Con la electrónica empleada durante la investigación también se adquirieron los espectros de energía tanto para BGO como para CsI(Tl) por separado, y sin usar la TCC. Una muestra del espectro de energías para BGO utilizando directamente la fuente de <sup>137</sup>Cs y sin arreglos de coincidencia aparece en la figura 4.1, donde la resolución asociada es de 12.8%.

La adquisición de los datos para cada una de las energías seleccionadas para electrones, dependía del ángulo al cual era colocado el detector secundario. Como se explicó en la sección 3.2, las dimensiones físicas del experimento sólo permitieron realizar mediciones desde un ángulo mínimo de



Figura 4.1 Espectro de energías en BGO para radiación gamma de  $^{137}Cs$ .

10°, hasta un valor máximo de 110°. Tales registros se realizaron moviendo al detector secundario a intervalos angulares de 10°, para cada medición. Cabe recordar, que cada uno de los registros requería tiempos distintos de adquisición, debido a la probabilidad de detección de rayos  $\gamma$  respecto al ángulo de dispersión  $\theta$  (ver sección 2.3). Debido a esto, las mediciones obtenidas para 10° y 20° requirieron tiempos de adquisición de 2 horas para cada una, los registros de 30° a 60° necesitaron de 6 horas cada uno, para los de 70° a 90° bastaron con 12 horas, mientras que para las mediciones de 100° y 110° fueron necesarios tiempos de adquisición de 18 horas para cada caso.

Debe señalarse que todos los registros experimentales obtenidos y estudiados durante las dos fases experimentales, fueron analizados con el paquete *Microcal Origin*, del cual se utilizaron rutinas de graficación y ajuste de funciones, donde se obtuvieron los parámetros estadísticos correspondientes a las curvas gaussianas ajustadas a cada uno de los picos o centroides de los espectros obtenidos.

Debido a la aplicación de la TCC, y a la electrónica asociada con la misma, no sólo se registraron los espectros correspondientes a los eventos que ocurrían en coincidencia, sino que en cada etapa también fue posible adquirir los registros correspondientes a las señales provenientes del detector secundario, y del detector primario sin que sus señales tuvieran que cumplir con el requisito de coincidencia necesario para la TCC. Un ejemplo en el caso del detector primario se mostró en la figura 4.1, mientras que el correspondiente espectro de energías utilizando la misma fuente de radiación gamma y colocando el detector secundario a un ángulo de 20°, aparece en la figura 4.2, donde la resolución asociada es de 13.4%.



Figura 4.2 Espectro de energías en CsI(Tl) para radiación gamma de <sup>137</sup>Cs, dispersada a un ángulo de 20°.

Una vez implementada la Técnica de Coincidencia Compton fue necesario monitorear los disparos de coincidencia y revisar la sincronización junto con la señal proveniente del detector primario, que representaba la energía depositada por los electrones Compton generados ( $E_c$ ), y que debía ser recibida por el ADC, para así poder registrarse en el Analizador Multicanal. Dicho monitoreo se realizaba al inicio de cada nueva medición para asegurar la generación de la ventana lógica, dentro de cuya dimensión temporal tenía que estar incluida la señal del primer detector (BGO en este caso), una muestra de tales monitoreos registrados y digitalizados en el osciloscopio aparece en la figura 4.3.



**Figura 4.3** Señal de disparo y pulso del detector primario (BGO) en un evento de coincidencia. En el registro obtenido con el osciloscopio se muestran las dimensiones de la ventana lógica generada.

Cada uno de los centroides de los espectros en coincidencia obtenidos para un ángulo en particular, representaba la respuesta del BGO ante electrones, cuya energía dependía del ángulo de dispersión presentado por el rayo gamma que se registraba en el detector secundario y servía como *trigger* o señal de disparo. Los espectros de coincidencia mostraban un aspecto como el de la figura 4.4, en esta aparece el espectro de coincidencia en BGO correspondiente al ángulo de dispersión de 20°, para el cual se requirió un tiempo de adquisición de 2 horas y cuya resolución asociada es del 29%.



**Figura 4.4** Espectro de energías en BGO para electrones usando la TCC, a un ángulo de dispersión  $\theta=20^{\circ}$ .

Como la energía del electrón (E<sub>c</sub>) para cada ángulo, era la diferencia entre la energía del rayo gamma incidente y la del rayo gamma dispersado (sección 2.3), y cada uno de los espectros de coincidencia obtenidos tenía asociado un valor que representaba la respuesta luminosa a dicha energía (en base a la calibración realizada), se procedió a establecer de manera gráfica la relación analítica existente entre dichas cantidades (figura 4.5). Al comportamiento lineal obtenido se le ajustó una recta por el método de mínimos cuadrados, tomando en cuenta valores de energía mayores a 400 keV. Este límite resultó de la aplicación de un criterio analítico, en el cual se fijó un máximo para las diferencias numéricas respecto al comportamiento consecutivo del valor de la pendiente entre cada pareja de puntos [1], comportamiento que también puede observarse de manera gráfica, ya que los valores inferiores a 400 keV presentan una apreciable falta de linealidad. La zona de interés que mostraba mayor sublinealidad se muestra en un recuadro punteado en la figura 4.5, esta región aparece ampliada en la figura 4.6.



**Figuras 4.5 y 4.6** *Gráfica de la respuesta luminosa de BGO respecto a la energía de los electrones (E<sub>c</sub>), usando la TCC. Se muestra la expresión analítica de la recta ajustada, y la ampliación correspondiente en la región de mayor sublinealidad.* 

Teniendo en cuenta la falta de proporcionalidad que presentaban los resultados de la simulación para energías menores a 400 keV, se procedió a calcular el factor de no-linealidad para cada uno de los datos [1]. Para ello, obtuvimos el cociente del valor de la ordenada de la recta ajustada respecto al valor experimental de la respuesta luminosa, considerando la misma abscisa ( $E_c$ ). De esta forma, para datos que coincidían con la recta, el resultado del cociente era casi la unidad ( $E_c > 400$  keV). Dichos cálculos aparecen en la figura 4.7.



Figura 4.7 Respuesta normalizada para BGO respecto a la energía de los electrones (E<sub>c</sub>).

Cabe señalar que las barras de incertidumbre correspondientes a  $E_c$ , que se encuentran presentes en las 3 últimas gráficas (en la fig. 4.5 no se aprecian por el factor de escala) corresponden a la dispersión en el valor de energía para cada medición. Es decir, los factores geométricos del arreglo experimental utilizado, contribuían con una incertidumbre asociada con el ángulo sólido formado por el haz de rayos gamma a la salida del colimador. Dicho haz no tiene las características de un haz angosto (*pencil beam*), sino que más bien forma un cono, cuya abertura angular depende del diámetro del colimador y de la distancia de este último respecto al detector. Por lo que las incertidumbres se obtuvieron a partir de consideraciones geométricas, para después aplicar la expresión del efecto Compton (sección 2.3), y obtener así las variaciones en energía.

En el caso de las incertidumbres asociadas a la respuesta, estos valores corresponden a la dispersión estadística de cada espectro analizado. Es decir, el valor total de las barras de incertidumbre para cada medición, representa la semi-anchura (FWHM) del espectro obtenido en cada caso.

La respuesta normalizada de BGO, según se aprecia en la figura 4.7, presenta un máximo en la región de menor energía para electrones ( $E_c$ ). Esta característica debería estar asociada en realidad con un mínimo local, debido a que el comportamiento estudiado es de sublinealidad y no de supralinealidad, sin embargo en la literatura relacionada con este tema y publicada hasta ahora [1, 2, 3, 5, 22, 23], se ha adoptado el criterio de relacionar la sublinealidad con un máximo. Este comportamiento fue analizado ajustando una curva gaussiana, con lo cual se obtuvo como punto máximo de la no-linealidad para BGO, el valor de (16.9  $\pm$  2.3) keV.

### 4.2 Resultados para CsI(Tl)

En la segunda etapa experimental se utilizó la misma electrónica y metodología que para las mediciones del BGO. El único cambio necesario para estudiar la respuesta de CsI(Tl) a electrones, fue utilizar este último centelleador como detector primario, mientras que el BGO sirvió como detector secundario. El cristal de BGO fue el mismo que el utilizado en la primera etapa, no así el de CsI(Tl), porque en esta segunda fase se ocupó un cristal más grande, cuyas dimensiones eran de 1.3x1.3x1.9 cm.

Al igual que en la primera etapa experimental, los espectros de coincidencia correspondientes ahora al CsI(Tl) fueron analizados para obtener el valor

correspondiente de la respuesta luminosa en cada una de las energías de electrones estudiadas, dicho análisis se muestra en la figura 4.8.



**Figura 4.8** Respuesta luminosa de CsI(Tl) respecto a la energía de los electrones ( $E_c$ ), usando la TCC. Se muestra la ecuación de la recta ajustada.

El criterio seguido para ajustar la recta de la figura 4.8 fue el mismo que el explicado en la sección anterior. En este caso, los valores necesarios para dicho ajuste también involucraron energías de electrones mayores a 400 keV. A partir de esta información, fue posible evaluar la respuesta normalizada de CsI(Tl) obteniendo el cociente del valor de la ordenada de la recta ajustada respecto al valor experimental de la respuesta luminosa, considerando la misma abscisa ( $E_c$ ). La información resultante de dicho cálculo se presenta en la figura 4.9.



Figura 4.9 Respuesta normalizada para CsI(Tl) respecto a la energía de los electrones ( $E_c$ ).

El comportamiento observado de la respuesta normalizada para CsI(Tl) respecto a la energía de los electrones, se asemeja al obtenido anteriormente para BGO, en cuanto al máximo de la sublinealidad presente a bajas energías. Este comportamiento se analizó ajustando también una curva gaussiana, con lo cual se obtuvo la energía asociada al máximo de la no-linealidad para CsI(Tl), cuyo valor fue de  $(14.8 \pm 1.8)$  keV.

#### 4.3 Resultados de las Simulaciones Monte Carlo

Una vez elegido el código de Monte Carlo que serviría para simular, reproducir y predecir las principales características del transporte y depósito de energía en distintos materiales, se procedió a escoger los programas, rutinas y dimensiones estadísticas que cada simulación emplearía para obtener los resultados esperados.

El algoritmo presentaba una estructura modular, formada por varios códigos y archivos de datos que proveían la información necesaria para la ejecución completa de una simulación en particular. El código fuente llamado PENELOPE, era el encargado de la generación aleatoria de eventos, del seguimiento y registro de las trayectorias creadas, y además utilizaba las tablas de propiedades dependientes de la energía para calcular la probabilidad de interacciones en cada intervalo de energía presente durante la simulación y para cada material involucrado en la geometría propuesta. El programa MATERIAL, tenía como finalidad crear las tablas de datos para cada elemento o compuesto, que incluían las principales características relacionadas con el transporte y depósito de energía para fotones, electrones y positrones. PENLAYER era un programa principal, destinado para simular eventos en geometrías que incluyeran capas de materiales distintos, y donde el haz, de radiación escogida, fuera angosto (*pencil beam*) y perpendicular a las superficies irradiadas.

Otro programa principal ampliamente usado en este trabajo fue el de PENDOSES, cuyas características permitían simular varias geometrías arbitrarias y calcular la energía depositada por partículas primarias o secundarias generadas en regiones específicas dentro de las trayectorias simuladas. Cada uno de los programas principales eran complementados con archivos que contenían la información relacionada con el tipo de partículas, posición, dirección y energía del haz primario, además del número de eventos y límites energéticos de seguimiento para partículas secundarias. Estos límites establecían los valores mínimos hasta los cuales debían de seguirse las trayectorias y futuras historias de partículas secundarias, hasta considerarlas completamente absorbidas en el material de interés.

En el caso de PENDOSES, era necesario un archivo complementario más que en el caso de PENLAYER, dicho archivo contenía la geometría tridimensional y la posición de los detectores a estudiar en la simulación. El código fuente PENELOPE necesitaba también de un programa complementario llamado TIMER, que era una subrutina de conteo, basada en la subrutina GETTIM del FORTRAN de Microsoft (ver. 5.0), y que registraba el tiempo de ejecución de las simulaciones.

Cabe señalar, que todos los programas principales y complementarios fueron modificados para ajustarlos a las geometrías, condiciones físicas, modos de adquisición, y tiempos de conteo que previamente habíamos tenido durante las fases experimentales. Por lo que en algunos casos, a los programas principales les fueron adheridas subrutinas que proporcionaban los eventos y condiciones necesarias para reproducir las características experimentales más importantes de este trabajo.

Durante las primeras pruebas de evaluación realizadas al código, las simulaciones fueron compiladas y ejecutadas en una Estación de Trabajo (Corsario) del Instituto de Física, aunque al comparar los tiempos de simulación respecto a una computadora personal y notar el ligero cambio ( $\approx5\%$ ) en cuanto a las velocidades de procesamiento para las simulaciones ejecutadas, se decidió ejecutar la mayor parte de las simulaciones en una computadora Pentium III/500 MHz.

# 4.3.1 Validación del Código Monte Carlo

El código utilizado fue sometido a pruebas de comparación con diferentes datos publicados en la literatura. Esto con el fin de evaluar su confiabilidad respecto a resultados experimentales reportados.

Dicha comparación mostró que el código reproduce ampliamente varios comportamientos físicos medibles, donde las variables a modificar fueron el tipo de partícula, la energía incidente, el tipo de material y el espesor del mismo. Una muestra de ello se presenta en la figura 4.10.

Una vez evaluado el código respecto a datos experimentales de la literatura, y habiendo obtenido buenos ajustes entre los resultados de la simulación y los registros citados, se empezó a evaluar el código respecto a los resultados experimentales obtenidos durante las fases experimentales de esta investigación.



Figura 4.10 Comparación de la simulación (línea continua) respecto a datos experimentales [24]. Fracciones transmitidas vs. Espesor másico para electrones de 25 keV, en Aluminio (a) y Oro (b).

#### 4.3.2 Simulación del Espectrómetro Compton

Uno de los primeros resultados de la simulación que se comparó, fue el espectro de energías de los centelleadores estudiados. La figura 4.11 muestra el espectro experimental de BGO para radiación gamma de <sup>137</sup>Cs y el resultado de un espectro obtenido con PENELOPE, donde se simularon las condiciones físicas y geométricas presentes en el arreglo experimental. El resultado directo de tal simulación fue un espectro "teórico" (ver fig. 2.4), en el que el continuo Compton tenía una forma casi rectangular bien definida, y el pico correspondiente al efecto fotoeléctrico era una "delta" centrada en 662 keV.

Para obtener un espectro similar a los registrados en el experimento, era necesario hacer una convolución del espectro simulado con una curva gaussiana. De este modo se escribió un pequeño programa en FORTRAN que realizaba tal convolución, entre la simulación y una gaussiana con área unitaria (para no alterar las dimensiones de la simulación) cuya semianchura (FWHM) tenía un valor de 70. Este valor, fue tomado de la semianchura del registro experimental (70 keV), que representaba la distribución espectral debida a las fluctuaciones estadísticas del experimento. La línea continua de la figura 4.11 es el resultado de tal convolución.



**Figura 4.11** Espectro de energías en BGO para radiación gamma de <sup>137</sup>Cs. La línea continua representa la simulación, y los círculos corresponden al espectro experimental.



**Figura 4.12** Espectro de energías simulado en CsI(Tl) para radiación gamma de <sup>137</sup>Cs, dispersada a un ángulo de 20°.

En la figura 4.12 se muestra el espectro energético en CsI(Tl), simulado con PENELOPE, en el caso donde dicho detector era utilizado como detector secundario, y a un ángulo de 20° respecto a la dirección del haz original. Para este espectro no fue necesario realizar ninguna convolución, debido a que los eventos registrados eran resultado de más de una interacción. Primero, dentro de la simulación, el haz de radiación gamma incidía en el detector primario (BGO), donde después de interacciones Compton, se hacía el seguimiento de

los rayos  $\gamma$  desviados a 20°, para después registrar su detección en el detector secundario, que era el de CsI(Tl). El espectro simulado presenta fluctuaciones estadísticas por haber incluido un ángulo de dispersión cuyo valor variaba en la misma proporción (± 1°) que el ángulo sólido formado por el cono o haz dispersado del experimento. Por lo que la simulación presenta una similitud muy cercana al espectro experimental (ver fig. 4.2). Cabe señalar que el tiempo de máquina necesario para simular este conjunto de interacciones fue de aproximadamente 20 horas.

La etapa más importante dentro de la implementación de la Técnica de Coincidencia Compton, fue la que involucró la obtención de los espectros de coincidencia para los centelleadores estudiados. Esta etapa experimental también fue simulada con PENELOPE, y como muestra de ello, en la figura 4.13 aparece el espectro de coincidencia - simulado y experimental - para BGO cuando la TCC se aplicaba a 20°. El criterio seguido para ajustar la semianchura de la gaussiana involucrada en esta convolución fue el mismo que el utilizado en la figura 4.11. Sólo que en el caso de la gráfica 4.13 la semianchura tuvo el valor de 15, y el espectro simulado original no era una "delta", sino más bien una figura triangular escalonada.



**Figura 4.13** Espectro de energías en BGO usando la TCC, cuando  $\theta=20^{\circ}$ . Los círculos representan al espectro experimental y la línea continua a la simulación.

#### 4.3.3 Simulación de la Respuesta Luminosa

Habiendo reproducido en forma precisa los espectros registrados en la etapa experimental, el siguiente paso fue tratar de reproducir la respuesta luminosa de los centelleadores estudiados ante electrones. Para tal fin, en el código se simuló la producción de electrones dentro de los detectores, tal y como se producían con la implementación de la TCC. Es decir, el archivo que especificaba la posición de la fuente y la dirección del haz resultante, fue modificado para simular una fuente puntual de electrones localizada en el centro del detector, y que emitía su radiación de forma isotrópica.

En lo que respecta a la energía de los electrones ( $E_c$ ) en la simulación, esta fue variada en intervalos discretos desde 2 keV hasta 1 MeV. Los resultados estudiados en este caso corresponden a los valores de energía depositada en el material centelleador, que el código calcula para cada energía de electrones producidos en el interior del detector. Los resultados de la simulación para el detector de BGO presentan una amplia zona de comportamiento lineal – muy similar a los datos experimentales – al graficar Energía depositada vs Energía de los electrones (figura 4.14).



Figura 4.14 (a) Gráfica de Energía depositada vs Energía de los electrones producidos internamente en BGO. (b) Ampliación de la zona de mayor sublinealidad. En ambos casos la línea punteada representa al ajuste analítico, mientras que la simulación aparece como símbolos de cruz.

En la figura 4.14(a) puede apreciarse que la región de mayor sublinealidad (marcada en el recuadro punteado) aparece en la región de bajas energías, al igual que en los datos experimentales. El análisis realizado para obtener la respuesta normalizada se apegó al mismo criterio explicado en la sección 4.1. Los resultados de dicho cálculo se muestran en la figura 4.15. Las simulaciones relacionadas con la respuesta luminosa de los centelleadores, tuvieron que ser complementadas con la inclusión de un parámetro que resultó influir de manera considerable en los cálculos a bajas energías. El parámetro en cuestión era la energía de plasmón (sección 2.5) asociada con el centelleador estudiado.



**Figura 4.15** Respuesta normalizada para BGO como función de la energía de los electrones. Los puntos experimentales fueron los obtenidos con la TCC. Estos son comparados con la simulación que no incluye la energía de plasmón (línea punteada), y con la que sí incluye dicha corrección (símbolos de cruz).

Este valor se puede incluir de manera opcional en la simulación, durante la creación del archivo que contiene las principales características físicas del centelleador, relacionadas con el transporte y depósito de radiación en el mismo. Si el usuario no incluye tal información, el programa asigna un valor de cero para la energía de plasmón. Aún cuando la energía de plasmón es de unas cuantas decenas de eV para los materiales centelleadores estudiados, su influencia es apreciable en los resultados relacionados a la respuesta luminosa simulada para electrones de baja energía. Una muestra de tal diferencia, que en la región de bajas energías alcanza un valor hasta del 15%, se presenta en la figura 4.15, junto con los valores experimentales obtenidos. La energía de plasmón ( $E_p$ ) asociada al BGO y que fue incluida en la información del código, tiene un valor de 49.9 eV, la cual se obtuvo a partir de la ecuación 2.20 (ver Apéndice).

El conjunto de datos obtenidos con la simulación fue ajustado con una curva gaussiana, para calcular la energía correspondiente al máximo de sublinealidad. El valor encontrado fue  $(20\pm0.3)$  keV.

Para el caso del CsI(Tl), también se calculó la respuesta luminosa a electrones de baja energía, simulando las principales características físicas y geométricas presentes durante el experimento. Al igual que con el BGO, durante el proceso de simulación fue necesario incluir en la información del código la energía de plasmón para CsI(Tl) ( $E_p$ =39.4 eV) con la finalidad de obtener un mejor acuerdo entre los datos experimentales y la simulación. La figura 4.16 muestra la gráfica de la Energía depositada vs Energía de los electrones en CsI(Tl).



**Figura 4.16** Gráfica de Energía depositada vs Energía de los electrones producidos internamente en CsI(Tl). Los símbolos de cruz representan la simulación.

A través del mismo proceso que el empleado para el primer detector, se obtuvo la respuesta luminosa normalizada en CsI(Tl) para electrones. El resultado de tales cálculos aparece en la figura 4.17. Así mismo, los resultados para CsI(Tl) obtenidos con PENELOPE, fueron comparados con los datos experimentales correspondientes.

En la figura 4.17 se muestra dicha comparación, que incluye la simulación, con y sin la inclusión de la energía de plasmón, además de los registros experimentales asociados. La diferencia porcentual entre ambas simulaciones en la región de máxima sublinealidad presentó un valor de 6%.



**Figura 4.17** Respuesta normalizada para BGO como función de la energía de los electrones. Los puntos experimentales fueron los obtenidos con la TCC. Estos son comparados con la simulación que no incluye la energía de plasmón (línea punteada), y con la que sí incluye dicha corrección (símbolos de cruz).

Nuevamente fue ajustada una curva gaussiana a la simulación que incluía la energía de plasmón, por lo que el máximo de sublinealidad para CsI(Tl) tuvo asociada una energía de  $(13.7\pm0.4)$  keV.

Teniendo como precedente las comparaciones y buenos ajustes obtenidos entre los datos experimentales y las simulaciones, en el caso de la respuesta luminosa como función de la energía de electrones, se procedió a simular la respuesta luminosa para un detector que no fue estudiado experimentalmente en este trabajo, pero que ha sido uno de los centelleadores inorgánicos más utilizado y estudiado hasta la fecha, el NaI(Tl). En este caso, para la simulación consideramos un cristal cilíndrico de 2.54 x 2.54 cm, que eran las dimensiones del detector estudiado y reportado en el artículo, con cuyos datos compararíamos la simulación. En dicho trabajo [2] se estudió la respuesta luminosa del NaI(Tl) a electrones de baja energía, utilizando la TCC, y es sin duda uno de los registros más precisos para NaI(Tl) realizados hasta la fecha, en lo que concierne al estudio de su respuesta luminosa ante electrones.

La comparación de la simulación generada con PENELOPE y los datos experimentales citados anteriormente, se presenta en la figura 4.18. Para dicho cálculo fue incluida la energía de plasmón para NaI(Tl), cuyo valor es  $E_p=36$  eV. A los datos de la simulación les fue ajustada de nueva cuenta una curva gaussiana, con lo que pudo obtenerse la energía asociada con el máximo de sublinealidad para NaI(Tl), que resultó ser de (13.2±0.5) keV.



Figura 4.18 Respuesta normalizada para NaI(Tl) como función de la energía de los electrones. Los puntos experimentales (triángulos) son los reportados en la literatura [2]. Estos son comparados con la simulación que incluye la energía de plasmón (símbolos de cruz).

Dentro de la línea de investigación del presente trabajo, se consideró importante incluir al Fluoruro de Cerio (CeF<sub>3</sub>), un centelleador inorgánico que no ha sido ampliamente estudiado hasta ahora, y del cual no se conocía el comportamiento de su respuesta luminosa ante electrones de baja energía. De este modo, se generó en PENELOPE el conjunto de datos necesarios para conocer el comportamiento de la respuesta luminosa ante electrones de un cristal cúbico de CeF<sub>3</sub> con dimensiones de 1x1x1 cm. En esta simulación se consideró incluir nuevamente la energía de plasmón del detector ( $E_p$ =47.1 eV) debido a la optimización de resultados presentada con anterioridad. En la figura 4.19 aparece la gráfica de la respuesta normalizada simulada para CeF<sub>3</sub> ante electrones de baja energía.

El comportamiento observado para el CeF<sub>3</sub>, fue muy parecido al que presentan los tres centelleadores estudiados previamente. Es decir, las respuestas luminosas ante electrones, de cada uno de los detectores analizados, muestran una linealidad constante para energías mayores a 400 keV, y experimentan una notable sublinealidad entre los 10 y 20 keV. En el caso del CeF<sub>3</sub>, y de acuerdo con los datos de la simulación generada, este centelleador tiene para el máximo de sublinealidad, una energía asociada de (16.1±0.5) keV.



**Figura 4.19** Respuesta normalizada para CeF<sub>3</sub> como función de la energía de los electrones. La simulación fue obtenida con el código PENELOPE.

#### 4.4 Modelo Semi-empírico de Producción de Luz

Después de haber simulado y reproducido con un amplio margen de precisión, no sólo los resultados experimentales de este trabajo, sino también los reportados en la literatura, en lo que respecta a la respuesta luminosa de centelleadores inorgánicos ante electrones de baja energía, el siguiente paso dentro del proceso de análisis de datos, fue la parametrización de las principales características analíticas de las curvas asociadas a la respuesta luminosa.

Un comportamiento común en las citadas curvas de respuesta, era su apreciable sublinealidad para energías de electrones entre 10 y 20 keV. Cada centelleador mostraba un máximo para dicha curva a distintos valores, lo cual muy probablemente dependía de las características físicas de cada detector en particular. A partir de estos hechos, se procedió a construir para cada centelleador analizado, una función que describiera el comportamiento de la respuesta luminosa ante electrones dentro del intervalo de energías estudiado.

La función elegida para tal ajuste debía cumplir con dos características importantes. La primera, era la relacionada con la forma analítica de una de las primeras expresiones utilizadas para describir de manera semi-empírica la probabilidad de recombinación en centelleadores inorgánicos [25], la cual está relacionada con el rendimiento luminoso de un cristal de centelleo en función de la energía de la partícula incidente [7]. La forma de tal ecuación puede expresarse como sigue,

$$P(E) = \frac{\alpha e^{\beta L}}{1 + \alpha e^{\beta L}} \tag{4.1}$$

donde  $\beta < 0$ . Esta expresión al representar el rendimiento luminoso, pone de manifiesto la atenuación de la función conforme aumenta la energía, comportamiento que tiende a ser constante al igual que la respuesta normalizada de los detectores estudiados. De esta forma, el parámetro  $\beta$  está relacionado con la saturación de los centros luminosos a bajas energías, fenómeno preponderante en la zona de respuesta sublineal. En tanto que el parámetro  $\alpha$  ajusta la amplitud de la citada atenuación.

La segunda característica que debía cumplir la función elegida para describir la respuesta luminosa de los detectores estudiados, era el factor de máxima saturación. Dicha función incluiría la información asociada a la ubicación del punto donde la función presentaba su máximo local. Tal expresión tenía la siguiente forma [25],

$$S(E) = e^{\delta E}$$
(4.2)

donde  $\delta$  (< 0) representa el comportamiento de la respuesta luminosa a energías por debajo del máximo de saturación. Debe recordarse que, conforme la energía disminuye a partir del máximo, dicha respuesta decrece, por lo que  $\delta$  se relaciona con la recuperación de centros luminosos, lo cual se traduce en una tendencia hacia el comportamiento lineal.

De esta manera, la función necesaria para describir de forma semiempírica la respuesta luminosa de centelleadores inorgánicos ante electrones de baja energía, estaría formada por las dos ecuaciones explicadas anteriormente, en la siguiente forma,

$$R(E) = P(E) - S(E)$$
 (4.3)

donde R(E) representa la función asociada a la respuesta luminosa [25]. Esta expresión fue la utilizada para ajustar el citado comportamiento en cada centelleador estudiado, donde a manera de normalización, sólo le fue sumada una constante, que en todos los casos era muy cercana a la unidad.

Los detectores a los cuales les fueron ajustadas dichas funciones semiempíricas fueron: BGO, CsI(Tl), CeF<sub>3</sub> y NaI(Tl). Debe recordarse que para los 2 últimos detectores en cuestión, los puntos asociados a la respuesta fueron simulados y obtenidos con el código PENELOPE. En cada caso se utilizaron las rutinas analíticas del paquete *Microcal Origin*, que obtenían los parámetros correspondientes y graficaban el mejor ajuste. El resultado de tales cálculos aparece en la figura 4.20.



**Figura 4.20** Ajuste de la respuesta luminosa obtenida para BGO, CsI(Tl), CeF<sub>3</sub> y NaI(Tl) a través de la función semi-empírica propuesta (línea continua).

Debido a que el coeficiente  $\delta$  de la exponencial que aparece en la ecuación 4.2 es el responsable de la ubicación del máximo de sublinealidad, se decidió asociarle al inverso positivo de tal número la cantidad llamada Parámetro de Saturación, cuyo símbolo sería  $\phi$ . Dicho valor resulta tener unidades de energía, y debido a los intervalos estudiados en la investigación, su escala energética será reportada en keVs.

En la tabla 4.1 se presentan los valores de los parámetros  $\alpha$ ,  $\beta$  y  $\delta$ , encontrados para cada detector analizado al ajustárseles una función del tipo de la ecuación 4.3. Así mismo se reportan los valores obtenidos para el Parámetro de Saturación  $\phi$  en cada caso.

Detector	α	$\beta [\text{keV}^{-1}]$	$\delta[\text{keV}^{-1}]$	φ[keV]
BGO	3.079	-0.02427	-0.39	2.564
CsI(Tl)	0.4079	-0.02158	-0.70	1.428
CeF <sub>3</sub>	0.5388	-0.01196	-0.47	2.128
NaI(Tl)	0.3833	-0.01575	-1.08	0.926

**Tabla 4.1** Parámetros correspondientes a los ajustes analíticos de respuesta luminosa.

En vista de los resultados que se habían obtenido hasta esta etapa, fue ineludible buscar propiedades físicas o características luminiscentes propias de cada detector, que pudieran relacionar de manera directa los comportamientos dependientes de la energía registrados, reproducidos y simulados en este trabajo. El primer paso en este sentido, consistió en investigar la existencia de alguna relación entre la energía asociada a los máximos de sublinealidad encontrados, y la energía de plasmón propia de cada centelleador. La relación encontrada se muestra gráficamente en la figura 4.21.



Figura 4.21 Máximo de saturación vs Energía de plasmón, para los cuatro centelleadores estudiados.

Es necesario señalar que a partir de la gráfica de la figura 4.21, el máximo de sublinealidad también será referido como Máximo de Saturación, asignándole el símbolo  $\Omega$ . Tal designación, obedece a las características físicas inherentes del proceso de centelleo. Es decir, en la región de bajas energías, la respuesta luminosa de los centelleadores estudiados experimenta una falta de linealidad, respecto a su comportamiento para energías mayores. Dicha sublinealidad se

asocia con una saturación de los centros luminosos [25], encargados de convertir en luz, la energía de las partículas incidentes. La designación del Parámetro de Saturación  $\phi$ , definido anteriormente, se apegó al mismo criterio. La relación entre el máximo de saturación ( $\Omega$ ) y la energía de plasmón ( $E_p$ ), mostrada en la figura 4.21, se ajustó con una función lineal, cuya expresión analítica es la siguiente:

$$\Omega(E_p) = (0.244)E_p + 4.73 \tag{4.4}$$

De este modo, la variación del máximo de saturación resultó depender en forma lineal de la energía de plasmón. Dicha relación pone de manifiesto la importancia de las características físicas del centelleador dentro del proceso de saturación comentado. Es decir, la energía a la que un centelleador presenta el máximo de saturación luminosa, depende de la densidad de centros luminosos en cada detector, según la expresión para la energía de plasmón (ver sección 2.5).

Debido a que la definición propuesta para el parámetro de saturación está influenciada por el comportamiento de la respuesta luminosa a bajas energías, era esencial determinar una relación entre dicho parámetro y la energía de plasmón de cada centelleador. La relación, como era de esperar, también presentaba un comportamiento lineal, mismo que aparece en la figura 4.22.



Figura 4.22 Parámetro de saturación vs Energía de plasmón, para los cuatro centelleadores estudiados

Al comportamiento lineal encontrado entre el parámetro de saturación ( $\phi$ ) y la energía de plasmón ( $E_p$ ), le fue ajustada la siguiente recta:

$$\phi(\mathbf{E}_{p}) = (0.111)\mathbf{E}_{p} - 3.04 \tag{4.5}$$

En vista de los comportamientos analíticos encontrados, que relacionan el máximo de saturación y el parámetro de saturación, con la energía de plasmón característica de cada centelleador, se decidió calcular la citada energía (ecuación 2.20) para los centelleadores inorgánicos más comúnmente utilizados a nivel mundial [19]. Los detectores escogidos fueron los siguientes: Fluoruro de Calcio dopado con Europio -  $CaF_2(Eu)$  -, Yoduro de Litio dopado con Europio - LiI(Eu) -, Fluoruro de Cesio - CsF -, Sulfuro de Zinc dopado con Plata - ZnS(Ag) -, Fluoruro de Bario - BaF<sub>2</sub> -, y Tungstanato de Cadmio - CdWO<sub>4</sub> -.

Conociendo las energías de plasmón para los seis cristales escogidos, lo siguiente fue incluir la información de cada uno, en la ecuación 4.4, teniendo así un valor predictivo de la energía a la cual presentan el máximo de saturación, en base al estudio realizado para BGO, CsI(Tl), NaI(Tl) y CeF<sub>3</sub>. En la figura 4.23 aparece el resultado de la inclusión y cálculos citados.



Figura 4.23 Máximo de saturación vs Energía de plasmón, para los cuatro centelleadores estudiados (círculos) y los seis cristales elegidos (triángulos).

A los detectores de centelleo escogidos también les fue calculado su parámetro de saturación con ayuda de la ecuación 4.5, de esta forma, conociendo el máximo y parámetro de saturación para los diez centelleadores incluidos hasta este punto de la investigación, la única relación por conocer,

era la existente entre el máximo  $(\Omega)$  y el parámetro de saturación  $(\phi)$  de cada uno de los cristales, la cual se muestra en la figura 4.24. La ecuación de la recta ajustada para tal relación es la siguiente:

$$\phi = (0.445)\Omega - 5.03 \tag{4.6}$$

Debe señalarse, que los parámetros ajustados a las cantidades  $\phi$  y  $\Omega$  en las ecuaciones 4.4, 4.5 y 4.6 deben ser tales, que al ser sustituidos, asignen a tales valores las unidades de keV, tomando en cuenta que los valores para  $E_p$  poseen unidades de eV.



**Figura 4.24** *Parámetro de saturación vs Máximo de saturación, para los cuatro centelleadores estudiados (círculos) y los seis cristales elegidos (triángulos).* 

Cabe recodar, que los puntos correspondientes al NaI(Tl) y CeF<sub>3</sub>, que aparecen en las figuras 4.23 y 4.24 corresponden a las simulaciones generadas en PENELOPE para las respuestas luminosas de los respectivos detectores, mientras que los valores de BGO y CsI(Tl) corresponden a los registros experimentales obtenidos con la implementación de la TCC.

En la tabla 4.2 está incluida la densidad de los centelleadores estudiados y analizados, así como la energía de plasmón asociada para cada uno de ellos. En la misma, también se presentan el parámetro y el máximo de saturación ( $\phi$  y  $\Omega$ ) obtenidos en cada caso.

Detector	$\rho$ (g/cm <sup>3</sup> )	Ep (eV)	$\phi$ (keV)	$\Omega$ (keV)
NaI(Tl)	3.67	36.0	0.926	$13.2 \pm 0.5$
CsI(Tl)	4.51	39.4	1.428	$14.8 \pm 1.8$
CeF <sub>3</sub>	6.2	47.1	2.128	$16.1 \pm 0.5$
BGO	7.13	49.9	2.564	$16.9 \pm 2.3$
CaF <sub>2</sub> (Eu)	3.19	35.9	0.952	13.5
LiI(Eu)	4.08	37.6	1.134	13.9
CsF	4.11	37.9	1.180	14.0
ZnS(Ag)	4.09	40.0	1.407	14.5
BaF <sub>2</sub>	4.88	41.3	1.544	14.8
CdWO <sub>4</sub>	7.9	52.9	2.818	17.6

 Tabla 4.2 Principales características de los centelleadores inorgánicos estudiados y analizados en la presente investigación.

El conjunto de resultados obtenidos en este trabajo y resumidos en la tabla anterior, muestra una marcada dependencia con la energía de plasmón de cada centelleador. Debe recordarse que un plasmón es una oscilación cuantizada del plasma, que en este caso está formado por "paquetes", que a manera de vibraciones longitudinales transportan a los electrones de la banda de valencia a la banda de conducción dentro de la estructura del cristal (sección 2.2).

También se vio (sección 2.5), que la incidencia en un centelleador de un electrón, induce la creación de un portador de energía llamado plasmón, cuya energía cinética está dada por el valor de la  $E_p$  asociada con el material en cuestión. Recordemos además, que la inclusión de la energía de plasmón en el código PENELOPE para la simulación de la respuesta luminosa ante electrones para BGO y CsI(Tl), generaba datos cuyas discrepancias, respecto a la simulación sin corrección, sólo eran apreciables para energías menores a unos 100 keV (figs. 4.15 y 4.17). Esto quiere decir, que cuando el código generaba la simulación sin la corrección, asignaba una  $E_p=0$ , por lo que la contribución energética proveniente de la creación de plasmones se consideraba nula.

La dependencia de la energía del máximo de saturación respecto a la energía de plasmón, puede explicarse en términos de la definición de esta última cantidad. La ecuación para calcular la energía de plasmón  $(E_p = \hbar \omega_p)$  involucra la frecuencia de plasma del medio  $(\omega_p = (ne^2/\varepsilon_o m)^{1/2})$ , que incluye la concentración de electrones (n) del detector. Esta última cantidad está relacionada de manera directa con la masa atómica y número atómico totales del material, así como con la densidad física del mismo. De esta forma, entre mayor sea la densidad de centros activadores en el cristal, mayor será la

energía que se necesite para poder saturarlos. Recordando que a través de dicha saturación, se minimiza la eficiente conversión de luz.

Es interesante por otro lado, el hecho de que la energía asociada con el máximo de saturación  $\Omega$  para los centelleadores estudiados, se encuentre en el intervalo donde justamente la contribución de los plasmones es considerable. Se sabe que en los intervalos de energía donde un centelleador presenta una respuesta lineal eficiente, los portadores de la mayor contribución energética son los excitones [5, 25], que son los pares electrón-hueco con mayor posibilidad de migración hacia los centros activadores, y que en nuestro caso son los principales portadores para energías de electrones mayores a 100 keV. Otro posible portador dentro de un intervalo de energías distinto, es el asociado con los cuantos de energía de las vibraciones térmicas de la red cristalina, llamado comúnmente fonón [12], cuya fuente de energía es la excitación térmica de la estructura cristalina del centelleador, que induce la producción de una componente luminosa lenta, que es la fosforescencia (sección 2.2), cuya componente en el infrarrojo y energía asociada de unos cuantos eV, sitúa la contribución de los fonones en un intervalo energético al menos dos órdenes de magnitud menor, respecto a la energía mínima estudiada en este trabajo ( $\approx 2 \text{ keV}$ ).

Como resultado, de los tres portadores con mayor influencia en el proceso luminiscente, que son el fonón, el plasmón y el excitón, es precisamente el segundo portador el responsable de la mayoría de los envíos energéticos hacia los centros activadores, dentro de la región de mayor sublinealidad reportada en la investigación. De ahí la importancia de haber incluido en la información del código PENELOPE, la energía de plasmón asociada con cada centelleador.

El comportamiento de las funciones ajustadas a la respuesta luminosa de los centelleadores estudiados, muestra en todos los casos que conforme se disminuye la energía de los electrones hacia valores menores a 10 keV, la sublinealidad, y por ende la saturación de los centros activadores, disminuye de forma considerable, haciendo que la respuesta tienda hacia la linealidad nuevamente. Esto quizás se deba a la contribución de transporte de los plasmones, ya que al comportarse como una oscilación cuantizada, debe existir un modo de oscilación propio de tales portadores, en el cual experimenten interferencia de tipo destructiva, minimizando así el transporte de portadores dentro del cristal. La energía a la cual los plasmones experimentarían la citada interferencia corresponde al valor del máximo de saturación  $\Omega$  para cada material.

# **5. CONCLUSIONES**

Con la implementación de la Técnica de Coincidencia Compton fue posible la medición de la respuesta luminosa en BGO y CsI(Tl) a electrones de baja energía. El estudio realizado a los citados detectores de centelleo, mostró la falta de linealidad en su respuesta para electrones a bajas energías, comportamiento muy similar al que se presenta en NaI(Tl) [2].

El código de Monte Carlo empleado durante la investigación, fue modificado para incluir las variables presentes en el experimento, y reprodujo ampliamente lo registrado mediante la TCC. La comparación entre los datos experimentales y la simulación, ambos concernientes a la respuesta luminosa de BGO y CsI(Tl) a electrones, mostró un buen ajuste para la región lineal y sublineal. Los resultados de las simulaciones relacionados con la respuesta luminosa experimentales, debido a la inclusión en el código, de la energía de plasmón asociada con cada centelleador.

Dentro de la misma línea de investigación, se incluyeron para su estudio los detectores de  $CeF_3$  y NaI(Tl), obteniéndose a través de simulaciones, la respuesta luminosa a electrones de baja energía para cada uno de ellos. En el caso del NaI(Tl), los resultados de la simulación fueron comparados con registros experimentales reportados en la literatura, encontrándose un buen acuerdo entre ambos conjuntos de datos.

A través del análisis efectuado a los valores de la respuesta luminosa para los detectores estudiados, se realizaron ajustes de funciones semiempíricas, las cuales incluían los parámetros que dictaban el comportamiento analítico en el intervalo energético de interés. Estas funciones constituyen un elemento predictivo de gran importancia, ya que su evaluación contribuye con valores para la respuesta luminosa a energías menores de 2 keV, que es el límite experimental y de simulaciones, hasta el cual se han reportado resultados relacionados con este tema hasta ahora. Durante esta etapa, también se calcularon las energías de plasmón para los detectores de  $CaF_2(Eu)$ , LiI(Eu), CsF, ZnS(Ag), BaF<sub>2</sub>, y CdWO<sub>4</sub>, con el fin de incluirlos en el análisis de las características luminiscentes ante electrones.

Como resultado de tales ajustes se definió el parámetro de saturación  $\phi$ , que junto con el máximo de saturación  $\Omega$ , obtenido de las curvas de respuesta luminosa, presentaron una dependencia lineal respecto a la energía de plasmón en cada centelleador. La dependencia de  $\Phi$  y  $\Omega$  respecto a la energía de plasmón  $E_{p}$ , se explicó en términos de las características intrínsecas del material, tomadas en cuenta para el cálculo de dicha energía. Mientras que el comportamiento del máximo de saturación  $\Omega$ , se relacionó con una interferencia destructiva en los modos de oscilación propios de los plasmones, los cuales contribuyen de manera importante al transporte energético de portadores, dentro de la región de mayor sublinealidad.

En base a los resultados obtenidos, el presente trabajo constituye una aportación al estudio detallado de los procesos de interacción radiativa, relacionados con el proceso de detección de iones en cristales de centelleo inorgánicos.

# APÉNDICE

#### Cálculo de la Energía de Plasmón

En la sección 2.5 fueron expuestas las principales características de los plasmones, dentro de las cuales se presentó la energía asociada con tales portadores. Este apéndice tiene como objetivo presentar de manera detallada el cálculo necesario para obtener dicha cantidad física, que se encuentra relacionada con las características intrínsecas del material.

A manera de ejemplo, calculemos la energía de plasmón para el detector de BGO. Si recordamos, la fórmula química asociada al Germanato de Bismuto es,  $Bi_4Ge_3O_{12}$  y su densidad es de 7.13 g/cm<sup>3</sup>. La expresión para la energía de plasmón se expresa como,

$$E_p = \hbar \omega_p$$
 (A.1)  
donde la frecuencia de plasma se define en términos de:

$$\omega_{p} = \left(\frac{ne^{2}}{\varepsilon_{o}m}\right)^{1/2} \tag{A.2}$$

Para conocer la densidad de electrones *n*, es necesario conocer la masa atómica total ( $A_T$ ) y el número atómico total ( $Z_T$ ) del material en cuestión, sumando todas las contribuciones de los elementos que constituyen al BGO. Consideremos entonces para tales cantidades, 4 átomos de Bismuto, 3 de Germanio y 12 de Oxígeno, teniendo así,  $A_T$ =1245.68 uma y  $Z_T$ =524. Usando ahora la relación que existe entre  $A_T$ , el Número de Avogadro y la densidad, tenemos que, si:

$$\Rightarrow \qquad \begin{array}{l} 1245.68 \text{ g} \rightarrow 6.025 \text{x} 10^{23} \text{ moléculas} \\ \Rightarrow \qquad 7.13 \text{ g} \rightarrow 3.448 \text{x} 10^{21} \text{ moléculas/cm}^3 \end{array}$$

Multiplicando ahora  $Z_T$  por el número de moléculas/cm<sup>3</sup>, obtendremos el número de electrones por cm<sup>3</sup>:

$$n=(524)(3.448 \times 10^{21} \text{ moléculas/cm}^3)=1.807 \times 10^{24} \text{ e/cm}^3$$
  
 $\Rightarrow n = 1.807 \times 10^{30} \text{ e/m}^3$ 

Sustituyendo los valores correspondientes ( $e^2=2.566 \times 10^{-38} C^2$ ,  $\epsilon_0=8.854 \times 10^{-12} C^2/Nm^2$ , m=9.11x10<sup>-31</sup>kg,  $\hbar$ =1.0545x10<sup>-34</sup>Js) en la ecuación (A.1), finalmente tenemos:

$$E_p = 7.9951 \times 10^{-18} J = 49.9 eV.$$

#### Bibliografía

[1] F.T. Porter et. al., Nucl. Instr. and Meth. 39 (1966) 35.

[2] B.D. Rooney, J.D. Valentine, *IEEE Trans. on Nucl. Sci.*, Vol.43, No.3 (1996) 1271.

[3] T. Tojo, Nucl. Instr. and Meth. A241 (1985) 177.

[4] A. Martínez-Dávalos et. al., J. of Luminescence, 72-74 (1997) 769-771.

[5] G.F. Knoll, Radiation Detection and Measurement, Wiley, 1989.

[6] J.M. López Robles, *Estudio sobre un detector de centelleo sensible a la posición*, Tesis de Licenciatura en Física, Facultad de Ciencias, UNAM, 1998.

[7] J.B. Birks, Scintillation Counters, Mc. Graw-Hill, 1963.

[8] J.B.A. England, *Techniques in Nuclear Structure Physics*, Macmillan, 1974.

[9] F.H. Attix, Introduction to Radiological Physics and Radiation Dosimetry, Wiley, 1986.

[10] V. Freixas, Interacción de las partículas cargadas y la radiación gamma con la sustancia, Pueblo y Educación, 1987.

[11] C. Kittel, Introduction to Solid State Physics, Wiley, 1976.

[12] R.K. Pathria, Statistical Mechanics, Pergamon Press, 1980.

[13] J.D. Jackson, Classical Electrodynamics, Wiley, 1975.

[14] L.D. Landau y E.M. Lifshitz, *Quantum Mechanics*, Pergamon Press, 1977.

[15] J. Baró et. al., Nucl. Instr. and Meth. B 100 (1995) 31.

ESTA TESIS NO SALE DE LA BIBLIOTECA

- [16] J. Sempau et. al., Nucl. Instr. and Meth. B 132 (1997) 377.
- [17] J.M. Fernández-Varea et. al., Nucl. Instr. and Meth. B 82 (1993) 39.
- [18] M.J. Weber et. al., J. Appl. Phys. 44, 5495 (1973).
- [19] Technical Report, Bicron, Ohio 1993.
- [20] J.D. Valentine, B.D. Rooney, Nucl. Instr. and Meth. A 353 (1994) 37.
- [21] Catalog of Photomultipliers Tubes, Hamamatsu Photonics K.K., 1990.
- [22] C.D. Zerby et. al., Nucl. Instr. and Meth. 12 (1961) 115.
- [23] L.R. Wayne et. al., Nucl. Instr. and Meth. A 411 (1998) 351.
- [24] G. Neubert, S. Rogaschewski, J. Phys.D: Appl. Phys., 17 (1984) 2439.
- [25] R.B. Murray, A. Meyer, Phys. Rev. Vol.122 (1961) 815.