

CdZnTe 核探测器的蒙特卡罗模拟的初步研究*

任少军¹⁾ 桑文斌 金玮 李万万 张奇 闵嘉华

(上海大学材料科学与工程学院 上海 201800)

摘要 以 CdZnTe 核探测器的工作原理为依据,探测器内反应的随机性和反应产生的电子空穴对数目的统计规律为物理模型,应用 Visual C++ 自行编制了蒙特卡罗模拟软件.模拟了 γ 射线在 CdZnTe 探测器中的响应能谱,并将模拟结果与实际器件的测试结果进行了比较讨论.模拟能谱与实际测得的能谱的主峰符合较好.此外,通过分析 ^{57}Co 源辐照下探测效率与器件厚度的关系,可以推测探测效率达到最大时所对应 CdZnTe 探测器的理想厚度.

关键词 半导体核探测器 蒙特卡罗模拟 CdZnTe

1 引言

Si(Li)、高纯 Ge 等半导体探测器具有较高的探测效率和能量分辨率,长期以来用作 γ 和 X 射线能谱仪,但是它们必须在低温下工作,这样大大限制了应用范围. CdZnTe (CZT) 等化合物半导体探测材料由于具有较高的平均原子序数和较大的禁带宽度,所以这些材料所组成的探测器具有较大的吸收系数,较高的探测效率,体积小,使用方便,且能在室温工作等优点^[1-5]. 因此, CZT 探测器在 X 和 γ 射线成像、X 射线荧光分析^[6]、核废料监控、机场与港口安全检测^[7]、天体物理研究^[2]、以及高能工业 X 射线照相和层析 X 射线照相^[8] 等领域应用前景广阔.

然而,目前所能制备的 CZT 材料其空穴迁移率要比电子低 10 倍左右,它们的输运性质有很大差异,导致电荷的不完全收集,产生空穴低能“尾”. 因此在器件设计上如何探索新型的器件结构,提高 CZT 器件的探测效率和能量分辨率是国内外研究的前沿性课题^[9-11]. CZT 微条(或称共面栅)和小像元单极型探测器的设计与研究成为新的热点^[12-14]. 由于电子迁移率较高、寿命较长以及有效质量较小,所以只存在电子输运的单极型器件比一般的平面探

测器有较高的能量分辨率. 然而这些器件的结构比较复杂,它们的行为仍还没有充分了解,器件设计较为困难,必须借助计算机模拟的有力工具^[15-19].

众所周知,半导体探测器的性能是以其对某种光源的响应能谱来衡量的,而蒙特卡罗模拟恰恰能够比较逼真地描述光子在探测器的反应过程. 根据模拟结果可以进一步弄清器件中电荷的输运特性,了解材料特性与器件性能之间的关系,进而改进器件设计,提高器件的能量分辨率. 本文将根据探测器的工作原理和 γ 射线在探测器内反应的随机性和反应产生的电子空穴对数目的统计规律,自己设计并编制适合 CZT 探测器的蒙特卡罗模拟软件,并对 CZT 探测器进行模拟分析,为器件设计提供理论依据.

2 模拟的物理模型

当 γ 射线进入探测器时,通过与探测器物质的相互作用而损失能量, γ 射线与探测物质相互作用的方式最主要有 3 种:光电效应、康普顿散射和电子对效应. 这些作用的最终过程使得半导体介质的电子由禁带跃迁到导带,在禁带留下空穴,这就产生了

2003-04-30 收稿,2003-09-27 收修改稿

* 国家自然科学基金(10175040)资助

1) E-mail: shaojunren@vip.sina.com.cn, shaojun_ren@sohu.com

一个电子空穴对;而那些较高能量的电子很快地与另外的电子相互作用产生电子空穴对并经过一个很短的时间(为 10^{-12} s 数量级)之后,在它们到达导带底部时便到达了稳定的位置;在电场的作用下,这些电荷很快的穿过探测物质到达探测器的两个电极,得到一个电脉冲——其所携带的电荷量的大小与入射光子的能量(能量损耗)成正比. 脉冲幅度大小的分布反映了入射光子的能谱,这就是一般半导体探测器的工作原理.

通过蒙特卡罗方法模拟 MSM 平面探测器,直接计算 γ 射线与探测物质发生反应之后两个电极上收集的总电荷量,经过适当的处理,就可以得到 γ 射线的模拟能谱.

3 蒙特卡罗模拟软件设计

在用于研究半导体中载流子的输运性质和模拟器件特性时,蒙特卡罗方法按照输运过程的半经典图像,追踪模拟单个或多个粒子的无规则运动. 在此基础上通过适当的统计平均来得到所需要的性质.

本工作通过模拟大量的单个光子在半导体中的反应以及反应之后收集的电荷量的统计规律来得到半导体器件对光子的响应能谱,从而研究半导体器件的性能.

设定探测器为立方体,其半导体材料为均匀的,而且光源覆盖整个电极(光子垂直阴极入射)并均匀分布;产生的随机数随时间而变化. 这里忽略光源相对于探测器的张角对入射光子的能量以及其对光子与探测器晶体之间相互作用的影响. 由于当 γ 射线单个光子的能量小于电子静质量能的两倍($2m_0c^2$)时,电子对效应不可能发生,所以在本工作中只考虑光电效应和康普顿散射,其他发生概率太小的、对探测器性能没有根本性影响的反应如瑞利散射,壳层共振吸收都予以忽略. 目前,我们编制的软件可用于模拟所有光子能量小于 0.511MeV 的响应能谱.

蒙特卡罗模拟的基本思路:光子进入探测器后,与原子核发生作用时,如发生康普顿散射,计算散射光子的能量,计算收集电荷,并把散射光子作为入射光子重复计算;如发生的作用是光电效应,就直接计算收集电荷. 某一个光子与探测物质发生的作用类型是随机的,但其几率受它的作用截面的限制. 由于 CZT 有 3 种原子,还必须判断光子与哪一种原子

发生作用. 而这又与某种原子的宏观截面相关.

入射粒子能量 $h\nu < m_e c^2$ 时,光电效应的截面为

$$\sigma_{ph} = \frac{5}{4} (32)^{1/2} \alpha^4 \left(\frac{m_e c^2}{h\nu} \right)^{7/2} Z^5 \sigma_{Th}, \quad (1)$$

康普顿散射的截面:

$$\sigma_c = \frac{8\pi\gamma_0^2 Z}{3}, \quad (2)$$

式中 α 为精细结构常数, $\alpha = 1/137$; σ_{Th} 为汤姆逊散射截面, $\sigma_{Th} = 6.65 \times 10^{-25}$ cm; Z 为原子系数; γ_0 为经典电子半径, $\gamma_0 = 2.818 \times 10^{-13}$ cm.

某种原子的总截面:

$$\sigma = \sigma_{ph} + \sigma_c, \quad (3)$$

计算出了各原子的光电效应截面和康普顿散射截面,就可以计算各种作用概率.

对应于某种特定过程,某单位体积的给定物质的截面就是宏观截面. 对于一种核素,宏观截面是其截面与单位体积靶核数的乘积:

$$\Sigma = N\sigma, \quad (4)$$

对于多种核素,宏观截面就这些乘积之和:

$$\Sigma = \Sigma_1 + \Sigma_2 + \Sigma_3 + \dots, \quad (5)$$

对于 $Cd_{1-x}Zn_xTe$ 来说,

$$N = \frac{\rho}{M_{CdZnTe}} N_0, \quad (6)$$

式中 x 为 ZnTe 在 $Cd_{1-x}Zn_xTe$ 中所占的摩尔百分比, ρ 为 $Cd_{1-x}Zn_xTe$ 的密度, M_{CZT} 为其分子量, N_0 为阿佛加德罗常数. 将(6)式带入(4)得到某一种原子的宏观截面:

$$\Sigma_{Cd} = \frac{\rho}{M_{CdZnTe}} N_0 (1-x) \sigma_{Cd}, \quad (7)$$

$$\Sigma_{Zn} = \frac{\rho}{M_{CdZnTe}} N_0 x \sigma_{Zn}, \quad (8)$$

$$\Sigma_{Te} = \frac{\rho}{M_{CdZnTe}} N_0 \sigma_{Te}, \quad (9)$$

再将(7),(8),(9)带入(5)式得

$$\Sigma = \Sigma_{Cd} + \Sigma_{Zn} + \Sigma_{Te} = \frac{\rho}{M_{CdZnTe}} N_0 (1-x) \sigma_{Cd} + \frac{\rho}{M_{CdZnTe}} N_0 x \sigma_{Zn} + \frac{\rho}{M_{CdZnTe}} N_0 \sigma_{Te}, \quad (10)$$

入射粒子与某一种原子核反应的几率:

$$P(Cd) = \Sigma_{Cd} / \Sigma, P(Zn) = \Sigma_{Zn} / \Sigma, P(Te) = \Sigma_{Te} / \Sigma, \quad (11)$$

入射粒子与某种原子核发生某种反应的几率:

$$P_{Cd,Zn,Te}(\text{Photoelectric}) = \sigma_{ph}(Cd,Zn,Te) / \sigma_{Cd,Zn,Te}, \quad (12)$$

$$P_{Cd,Zn,Te}(Compton) = 1 - P_{Cd,Zn,Te}(Photoelectric), \quad (13)$$

电荷的效率与反应发生的深度有关, 而光子与物质发生第一次反应的深度是服从指数分布: $I(x) = I_0 \cdot e^{-\Sigma x}$ (I 为光的强度), 因此其随机抽样值为

$$x(u) = \frac{1}{\Sigma} \ln\left(\frac{1}{1-u}\right), \quad (14)$$

其中 u 是 $[0, 1]$ 区间内均匀分布的随机数. 至于散射光子与物质的第二次以后反应的深度, 则是前一次反应的深度加上以前一次反应点为起始点的射程在电场方向的分量. 然后在考虑电极与光子之间可能发生的背散射以及探测器噪音之后, 电极收集的电荷量可以根据 Hecht 关系计算^[19]:

$$Q(x_0) = \frac{qVN_0}{d^2} \left\{ (\mu\tau)_e \left[1 - \exp\left(-\frac{d-x_0}{(\mu\tau)_e V}\right) \right] + (\mu\tau)_h \left[1 - \exp\left(-\frac{x_0}{(\mu\tau)_h V}\right) \right] \right\}, \quad (15)$$

其中 V 为外加电压, $(\mu\tau)_{e,h}$ 为电子或空穴的迁移率寿命乘积, q 为电子电量, d 为探测器的厚度, N_0 为光子在探测器中产生的电子空穴对数.

模拟的主要流程如下(图 1 所示): (1) 输入各种参数(包括器件参数、材料参数、偏压和模拟的射线能量)并置模拟数 K 为 0; (2) 根据射线能量计算

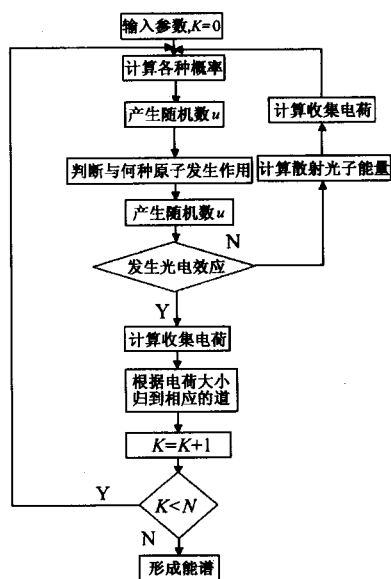


图 1 主要流程图

发生各种反应的概率(如与 3 种核发生反应的概率 $P1$, 发生何种反应的的概率 $P2$); (3) 产生随机数 $u1$, 比较随机数 $u1$ 与 $P1$, 判断与哪种原子发生反应, 再产生一个随机数 $u2$, 比较随机数 $u2$ 与 $P2$, 判断发

生哪种反应; (4) 如发生康普顿散射, 先计算反射光子的能量, 再根据入射光子与反射光子的能量差计算收集电荷, 并把反射光子看作入射光子, 返回(2), 否则就直接计算收集电荷, 总计所收集的电荷量; (5) 根据电荷量的大小在相应的道上加 1; (6) 一个光子模拟结束, 模拟数 K 加 1, 并比较 K 与模拟总数 N 的大小, 如果 $K < N$ 则返回(2), 否则模拟结束; (7) 以道(channel)的序号为横坐标, 以其计数为纵坐标作图即可得到模拟能谱.

4 CZT 探测器模拟结果与讨论

采用自行编写的蒙特卡罗模拟软件对 MSM CZT 探测器进行了模拟. 在模拟中, 设定器件的几何结构和主要的材料参数如表 1 所示.

表 1 器件参数表

器件参数 编号	尺寸 /mm	$(\mu\tau)_e$ /(cm ² /V)	$(\mu\tau)_h$ /(cm ² /V)	偏压 /V	分辨率 (%)	FWHM /keV	模拟光源
样品 1	3×3×5	6.0×10 ⁻³	3.0×10 ⁻⁴	200	2.8	3.43	⁵⁷ Co
样品 2	3×3×2	6.0×10 ⁻³	3.0×10 ⁻⁴	200	3.1	3.85	⁵⁷ Co

图 2(a), (b) 分别是样品 1 与样品 2 的模拟能谱, 其结果也列于表 1. 图 3 为 CZT 探测器的测试结果. 实际器件的参数及测试条件如表 2 所示.

表 2 实际器件参数与测试条件

尺寸 /mm ³	电阻率 /($\Omega \cdot$ cm)	偏置电压 /V	电极材料	测试温度 / $^{\circ}$ C	模拟光源
3×3×2	10 ¹⁰	200	Pt	23	⁵⁷ Co

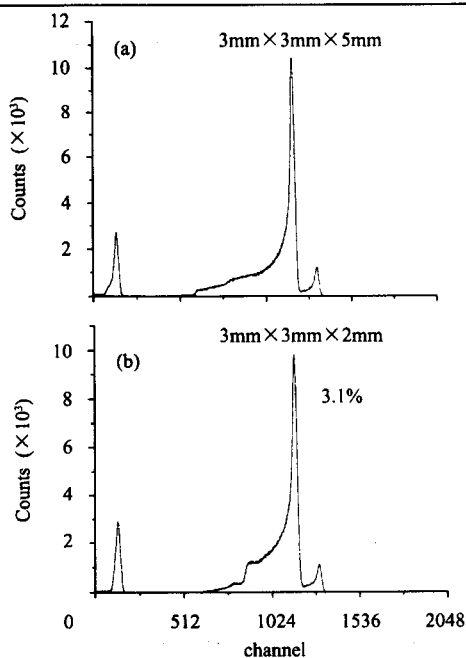


图 2 CZT 探测器蒙特卡罗模拟能谱

(a) ⁵⁷Co (Resolution: 2.8 %); (b) ⁵⁷Co (Resolution: 3.1 %).

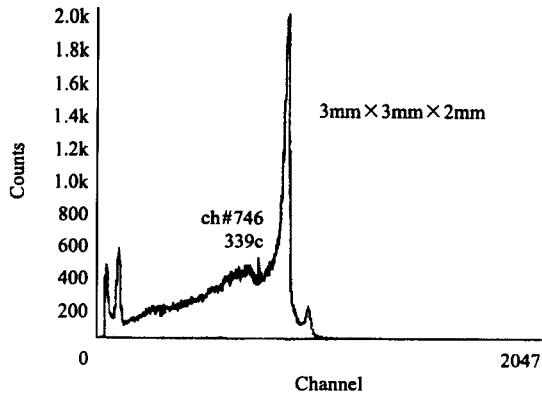


图 3 ^{57}Co 辐照下 CZT 探测器实测能谱 (Resolution: 3.7%)

从图 2(b) 和图 3 中可以看出, 模拟能谱与实际测得的能谱的主峰符合得相当好, 而且模拟能谱的分辨率 (3.1%) 比实际器件测试结果 (3.7%) 要高. 其差别的主要原因可能是由于所模拟的器件是假设 CZT 是理想晶体, $\mu\tau$ 乘积是理想值, 且忽略了电场的不均匀性及其边缘效应. 至于模拟所得的康普顿坪要比实际测得的低, 这可能是由于在实际探测器测试条件下, 当 γ 射线入射到源的衬托物、探头外壳 (包括封装晶体的外壳) 以及周围屏蔽物质上时, 都可能发生散射产生散射光子, 这些散射光子可能会进入晶体而被吸收, 致使康普顿坪区的计数增加.

同时, 对比图 2(a) 和 (b) 可以看出, 当探测器其他参数保持不变, 增加探测器的厚度, 其分辨率和 FWHM 随之提高.

除了能量分辨率以外, 探测器另一个重要的性能参数是探测效率. 当采用 ^{57}Co 源辐照时, 模拟所

得的探测效率与器件厚度 (单位为 cm) 的关系如图 4 所示. 从图中可以看出, 当厚度较小即为 0.05cm 时, 综合探测效率 (即探测器对 ^{57}Co 不同能量光子探测效率的加权平均) 只有 13%; 厚度为 0.1cm 时, 探测效率为 32%; 厚度为 0.2cm 时, 探测效率约为 55%; 探测效率随厚度的增加而增大, 而当厚度达到 1.87cm 时, 探测效率不再增加达到最大值, 器件的最佳厚度为 0.58cm, 此时探测效率为 90%.

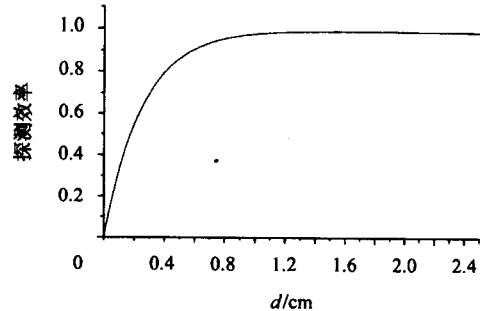


图 4 探测效率与器件厚度的关系图

5 结论

根据探测器的工作原理, 建立了模拟的物理模型, 应用 Visual C++ 自行编制了蒙特卡罗模拟软件. 利用所编制的蒙特卡罗模拟软件模拟分析 γ 射线在 CZT 探测器中的响应能谱, 并与实际器件的测试结果进行了比较与分析. 分析了 ^{57}Co 源辐照下探测效率与器件厚度的关系, 由此得到器件要获得最大探测效率时所需的理想厚度.

参考文献 (References)

- Eisen Y, Shor A. *Crystal Growth*, 1998, **184**:1302
- Eisen Y. *Nucl. Instrum. and Methods*, 1996, **A380**:431
- SANG Wen-Bin, QIAN Yong-Biao, SHI Wei-Ming et al. *Journal of Crystal Growth*, 2000, **214**:30—34
- WANG Lin-Jun, SANG Wen-Bin et al. *Nuclear Instruments in Physics Research*, 2000, **A448**:581—585
- LI Wan-Wan, SANG Wen-Bin et al. *Semiconductor Science And Technology*, 2002, **17**:L55—L58
- Eisen Y, Shor A, Mardor I. *Nucl. Instrum and Methods*, 1999, **A428**:1584
- Arlt R, Rundquist D. *Nucl. Instrum. and Methods*, 1996, **A380**:455
- Rossi M. *Nucl. Instrum. and Methods*, 1996, **A380**:419
- Amman M, Luke P. *Coplanar-grid Detector with Single-electrode Readout*. In: *Proceeding of SPIE*, 1997, **3115**:205—213
- Lee E Y, James B. *Nucl. Instrum. and Methods*, 1999, **A428**:66
- Luke P. *Nucl. Instr. Meth. Phys. Res.*, 1996, **A380**:232—237
- Schlesinger T E. *Materials Science and Engineering*, 2001, **32**:103—189
- Manfredotti C, Fizzotti F, Ongaro C et al. *Mat. Res. Soc. Symp. Proc.*, 1993, **302**:183—188
- Lee E Y, Lund J C, Hilton N et al. *Mat. Res. Soc. Proc.*, 1998, **487**:537—542
- HE Z, Knoll G F, Wehe D K et al. *Mat. Res. Symp. Proc.*, 1998, **487**:89—94
- Redus H, Pantazis J, Huber A et al. *Mat. Res. Symp. Proc.*, 1998, **487**:101—107
- Vizkelethy, Doyle D, Walsh D et al. *Nuclear Microprobe Studies of the Electronic Transport Properties of Cadmium Zinc Telluride (CZT) Radi-*

- ation Detectors. In: Proceeding of SPIE, 2000, 4141:178—185
- 18 WEN Wang-Xin, JIN Gen-Ming. HEP & NP, 2002, 26(11):1178—1183(in Chinese)
(文万信, 靳根明. 高能物理与核物理, 2002, 26(11):1178—1183)
- 19 James E. Uniformity and Defects in Cadmium Zinc Telluride X-Ray/

Gamma-Ray Spectrometers. A Dissertation Submitted to the Faculty of the Department of Physics in Partial Fulfillment of the Requirements for the Degree of Doctor of Philosophy in Applied Physics. Pittsburgh, Pennsylvania: April 1998

Primary Study of Monte Carlo Simulation on CdZnTe Nuclear Detector*

REN Shao-Jun¹⁾ SANG Wen-Bin JIN Wei LI Wan-Wan ZHANG Qi MIN Jia-Hua

(School of Materials Science and Engineering, Shanghai University, Shanghai 201800, China)

Abstract The Monte Carlo simulation software is developed based on the operating principle of CdZnTe detector, the randomness of γ ray reaction in the detector and the statistic rule of the amount of electron-hole pairs produced. First, the reaction depth of photons is calculated based on the disintegration rule. Secondly, the reaction section of every reaction is estimated and the reaction probability of the three atoms in CZT and the probability of every reaction of every atom are calculated. Based on these probabilities, the category of atoms and the type of reactions of a photon reacting with the detector are determined and the amount of electron-hole pairs produced by the photon is obtained. From the reaction depth and the amount of electron-hole pairs produced, the amount of charge collected can be calculated.

The response energy spectra of γ ray in the CdZnTe detector are simulated by using the Monte Carlo software developed. The simulation results are well comparable with the data of the real CdZnTe devices. In addition, the ideal thickness of the device, which is of maximum detecting efficiency, is also obtained based on the analysis over the relationship between the thickness and the efficiency, assuming the device to be under the radiation of ^{57}Co source.

Key words semi-conductor nuclear detector, Monte Carlo simulation, CdZnTe