

用蒙特卡罗方法模拟直接转换X射线探测器的响应特性*

桂建保^{1,2;1)} 郭金川² 杨勤劳² 牛憨笨²

1 (华中科技大学光电子科学与工程学院 武汉 430074)

2 (深圳大学光电子学研究所 深圳 518060)

摘要 采用 Monte Carlo 方法模拟了 HgI₂、非晶 Se 和 CdTe 几种直接 X 射线转换探测器在医用 X 射线范围 (10—100keV) 的透过谱、背向散射谱、吸收效率和光电灵敏度. 对 X 射线和 HgI₂ 的作用过程模拟采用了 EGSnrc Monte Carlo 代码系统, 对信号电荷的产生考虑了电荷产生的高斯噪声和材料深陷阱作用造成的部分电荷收集影响. 结果表明, 载流子平均自由程 (Schubweg) 在相对于探测材料厚度较小时, 陷阱作用能极大地影响探测灵敏度. HgI₂ 的灵敏度是非晶 Se 的 5 倍以上, CdTe 的灵敏度是非晶 Se 的 10 倍以上, 采用高 Z 序数材料可以大大提高探测灵敏度.

关键词 蒙特卡罗模拟 碘化汞 非晶硒 碲化镉 X 射线探测器

1 引言

近年来, 各种非晶或多晶半导体材料的探测器在医学成像和核医学上用得越来越多, 这些材料有非晶 Se, HgI₂, PbI₂, CdTe, CdZnTe, GaAs, TlBr 等, 而这些材料当中, 最适宜制作大面积探测器的有非晶 Se, 多晶 HgI₂ 和多晶 CdTe. 新材料的采用一方面来源于固体和微电子技术的进步, 一方面也来源于临床上对高效率、高能量分辨和高空间分辨探测器的迫切需求. 为了更好地知道各种材料对 X 射线的响应特性, Monte Carlo 方法提供了一种最为有效的工具, 随着计算机技术的进步, 出现了很多专用于高能粒子传输的 Monte Carlo 模拟软件, 这些软件有 MCNP/MCNPX, ITS, ANISN, TORT, EGS4/EGSnrc, PARTISN, SERA 和 PENELOPE 等^[1]. 它们的应用主要有辐射剂量分析、X 射线源发射谱的预测和辐射探测器性能模拟等^[2—6]. 本文采用 EGSnrc Monte Carlo 代码系统对多晶 HgI₂、非晶 Se 和多晶 CdTe 几种直接 X 射线转换材料的响应进行模拟.

EGS(Electron-Gamma-Shower)是专用于高能电子和光子在材料中混合传输的代码系统, 它可用于任意几何体中, 粒子能量范围在数 keV—数 GeV. 对单晶 HgI₂ 探测性能的模拟, 文献 [7—9] 中有一些结果. 本文采用 EGSnrc 代码系统模拟 3 种直接探测材料对医学诊断范围 X 射线的响应, 相对于 EGS4, 它在很多方面做了更为合理、完善的改进.

2 模拟方法与模型

模拟包括两个部分: (1) 光子与物质作用, 可获得每次作用发生的位置和每次作用的沉积能量; (2) 电荷的产生与收集, 考虑到电荷产生的噪声和深陷阱作用造成的电荷不完全收集.

2.1 X 射线与材料作用过程的模拟

采用 EGSnrc 代码系统模拟 X 射线与材料的作用过程, X 射线与物质作用可能发生 3 个过程: 光电效应, 非相干散射 (康普顿散射), 相干散射 (瑞利散射). 常用医学诊断 X 光子能量在 10—100keV 范围内, 在这

2006 - 12 - 05 收稿

* 国家自然科学基金 (60532090) 资助

1) E-mail: gjbstar@163.com, sbgjb@szu.edu.cn

个范围能量沉积又以光电吸收为主, 非相干散射过程可以产生少部分能量吸收, 相干散射过程不产生能量吸收, 只改变光子方向, 所以 HgI_2 与 X 射线的作用可用图 1 的流程图表示。

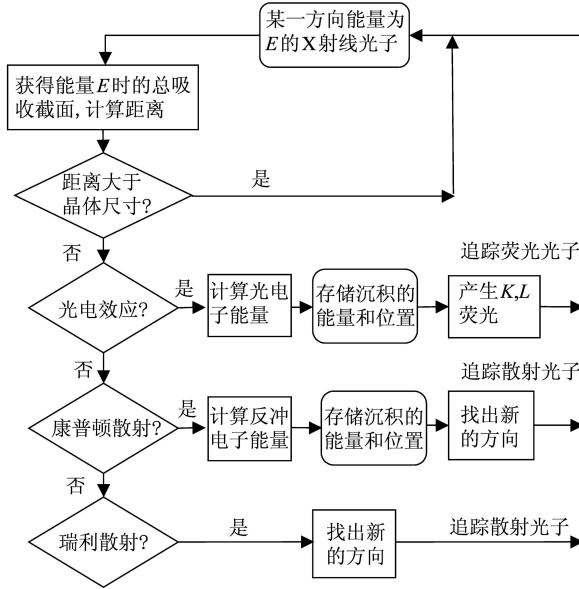


图 1 模拟每一个光子与探测器作用过程流程图

2.2 电荷产生的理论模型

电子模拟程序 (ESP) 利用上面 Monte Carlo 模拟 X 射线与 HgI_2 作用程序 (IP) 获得的各次作用能量沉积位置和大小数据, 追踪每个光子作用产生的电荷。

对于每次作用, X 射线光子给材料一个能量 E , 产生的平均电子空穴对数 \bar{N} 遵从线性关系

$$\bar{N} = E/W_{\pm}, \quad (1)$$

其中 W_{\pm} 是平均产生一个电子-空穴对的能量。而在

每次作用中真正产生的载流子数目 N 可以看作是服从高斯分布, 均值为 \bar{N} , 均方根为 $(\bar{N}F)^{1/2}$, 其中 F 是 Fano 因子^[10], 它描述了电离过程电荷产生统计波动的理论极限, 这里 F 取为 0.5。

X 射线作用产生的电子和空穴将分别朝着正、负电极漂移, 产生电流, 它的大小由 Ramo 理论决定^[11], 电荷收集效率由 Hecht 关系决定^[12], 外电路收集到的总电荷 Q 由 Ramo 理论产生电荷与电荷收集效率的乘积在材料厚度方向积分得到, 任一位置 z 处导致的电荷收集 $\Delta Q(z)$ 为

$$\Delta Q(z) = \frac{NeV}{L^2} \left\{ \mu_e \tau_e \left[1 - \exp\left(-\frac{zL}{\mu_e \tau_e V}\right) \right] + \mu_h \tau_h \left[1 - \exp\left(-\frac{(L-z)L}{\mu_h \tau_h V}\right) \right] \right\}, \quad (2)$$

其中 e 是电子电荷, V 是偏置电压, L 是材料厚度, z 是 X 射线作用能量沉积位置, $\mu_e \tau_e$, $\mu_h \tau_h$ 分别是电子和空穴的迁移率与寿命的乘积。公式 (2) 为电压负偏置情况, 正偏时只需将下标 e 和 h 对换。

显然收集电荷不仅依赖于作用能量 (N), 而且依赖于作用深度 (z)。然而, 如果 $\mu\tau V/L$ (载流子平均自由程) 远大于材料厚度 L , 则收集电荷接近于 Ne , 即作用位置处产生的电荷。

3 模拟结果与讨论

首先我们研究了 0.3mm 的无限大 HgI_2 薄片对 100keV 锥束入射 X 射线光子的透射和背向散射谱, 为了更好地理解谱分布图, 这里列出了 HgI_2 的 K , L 吸收限和荧光光子能量值, 见表 1。

表 1 HgI_2 的物性参数

密度/(g/cm ³)	平均电子-空穴对产生能/eV	元素	原子序数	K 吸收限/keV	K_{α} /keV	K_{β} /keV	L 吸收限/keV	$L_{\beta 1}$ /keV
6.36	5.0	Hg	80	83.10 ^a	70.10 ^a	80.66 ^a	14.2 ^b	11.5 ^b
		I	53	33.17 ^a	28.5 ^a	32.4 ^a	5.2 ^c	4.2 ^c

a, b, c 分别来源于参考文献 [13—15]。

图 2 为 100keV 的 X 射线光子 (E_0) 入射到 0.3mm 厚的 HgI_2 后, 透过的 X 射线谱 (a) 和背向散射谱 (b)。从图中可明显地看到谱线 E_0 , K_{α} , K_{β} 和 $L_{\beta 1}$ 线, 除了这些特征谱线和 E_0 谱线 (未和 HgI_2 作用而直接逃逸的光子) 外, 其余能量逸出光子很少。模拟获得的结果和文献 [2,3] 基本一致, 而且谱线更为丰富, 也说明了该模拟结果是合理的。根据这些特征谱线位置和相对强度, 可以确定吸收材料的元素种类和含量, 这也就是 X 射线光谱仪的原理。

模拟条件:

$AE=512\text{keV}$ (PEGS 数据的电子最低能量, 电子能量=电子动能+电子静止能量 511keV)。

$AP=1\text{keV}$ (PEGS 数据的光子最低能量)。

$ECUT=521\text{keV}$ (电子作用的截止能), $PCUT=1\text{keV}$ (光子作用的截止能)。

$NCASE=10^5$ (总的入射光子数)。

$EBIN=2\text{keV}$ (能量的步进值)。

$IRAYLR=1$ (考虑瑞利散射作用)。

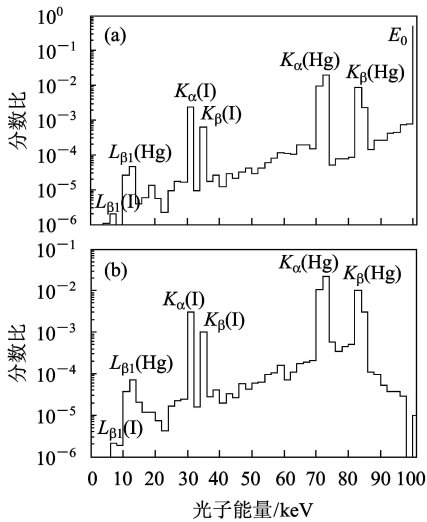


图 2 100keV 的 X 射线光子入射到 0.3mm 厚 HgI₂ 上的透射谱 (a) 和背向散射谱 (b)

在直接转换 X 射线探测器中, 总希望材料有较大的能量吸收, 以便提高探测灵敏度, 降低辐射剂量. 图 3 示出了 10—100keV 的光子分别入射到 0.3mm 的 HgI₂、非晶 Se 和 CdTe 探测材料上的能量吸收率、透过率和背散射率. 光子数目都是 10⁵ 个, 从图中可以看出, 3 种材料的背向散射率除几个 K 吸收限外, 都在 10% 以下. 随光子能量增大, 吸收率下降, 透过率增大, 在吸收限处, 能量吸收发生突变. HgI₂ 和 CdTe 特性曲线非常相近, 在大于 40keV 时, 吸收急剧下降, 而非晶 Se 在 30keV 时就开始急剧下降, 这是由于 I(53), Cd(48), Te(52) 的原子序数相当接近, 而 Se(34) 原子序数较小的缘故, 因此高能 X 射线探测时应选用高原子序数吸收材料, 或者增大探测材料的厚度.

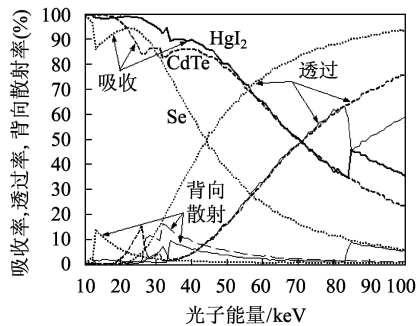


图 3 不同光子能量入射到 0.3mm 的 HgI₂、非晶 Se 和 CdTe 材料上的吸收率、透过率和背向散射率

图 4 给出了 0.3mm 的 HgI₂ 在不同的 X 射线入射光子能量 (10—100keV) 时, 是否考虑弛豫过程 (K, L 荧光发射) 吸收效率和量子效率的比较, 其中实线是代码默认情况下, 考虑弛豫作用下的吸收曲线, 点线

是不考虑弛豫作用下的吸收曲线, 虚线是量子效率 $\eta = 1 - e^{-\alpha L}$ 曲线, 可以看到, 不考虑荧光发射时的吸收效率很接近于量子效率曲线, 而考虑弛豫过程时的曲线有些偏离量子效率曲线, 这是由于 EGSnrc 程序在弛豫关闭时, 认为光子的能量在发生光电吸收时全部给了电子, 而弛豫过程发射的荧光有部分逃逸出晶体而造成了吸收效率的降低.

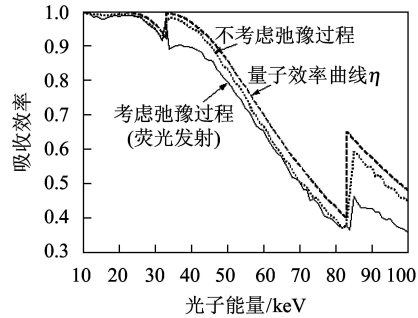


图 4 不同光子能量下, 0.3mm 的 HgI₂ 在是否考虑荧光发射时的吸收效率和量子效率曲线

在晶体材料中, 由于存在杂质和缺陷, 造成载流子的复合或陷阱俘获, 使得载流子有一定的寿命时间, 多晶和非晶材料的寿命时间比单晶还要小很多. 这就使得 X 射线作用产生的电子-空穴对不能完全被电极收集, 总的收集电荷不仅决定于每次作用沉积的能量, 还决定于每次能量沉积的位置. 对于直接转换成像, 最终可收集电荷的数目表明了这个探测器的探测灵敏度, 具有比能量吸收效率更为直接的意义. 下面将统计 10⁵ 个不同能量的 X 射线光子分别入射到 3 种材料上时, 平均每个光子能贡献的信号电荷数. 3 种材料的典型参数值见表 2.

表 2 HgI₂、非晶 Se 和 CdTe 在模拟中用到的典型参数值

材料	$F/$ (V/ μ m)	$W_{\pm}/$ eV	$\mu_e \tau_e /$ (cm ² /V)	$\mu_h \tau_h /$ (cm ² /V)
多晶 HgI ₂ ^[16]	0.7	5	6×10^{-6}	10^{-7}
非晶 Se ^[16]	10	43	10^{-6}	10^{-5}
多晶 CdTe	0.25	4.6	10^{-4} ^[17]	2×10^{-5} ^[18]

图 5 示出了 3 种半导体材料在 10—100keV 能量范围平均每个光子可产生的信号电荷数, 实线为考虑深陷阱作用导致的电荷不完全收集情况下的收集电荷数, 点线为不考虑陷阱作用而假设产生的电荷可以完全被电极收集的情况, CdTe 和 HgI₂ 采用负向偏置, 非晶 Se 采用正向偏置. 从图中可以看到对于多晶 CdTe 和非晶 Se 材料, 两种情况下的信号电荷差别很小, 而对于多晶 HgI₂ 材料, 两者差别非常大, 这是由于 HgI₂ 中空穴的平均自由程 (Schubweg) $\mu_h \tau_h F = 7 \mu$ m, 相对于材料厚度 L (300 μ m) 很小, 导致信号电荷的产生几

乎完全是靠电子贡献的, 所以部分电荷收集情况下的信号电荷骤减. 而对于 CdTe 和 Se, 可以算出两种载流子的 $\mu\tau F$ 值都和 L 值相当甚至远大于 L , 也就是陷阱作用导致的电荷损失很少. 然而, 对于 HgI_2 来说, 尽管陷阱作用影响很大, 但最终的收集信号电荷还是比非晶 Se 要大很多, 这一方面是由于非晶 Se 原子序数不高, 对 X 射线的吸收效率低, 另一方面是由于非晶 Se 平均产生一个电子空穴对所需能 $W_{\pm} \approx 43\text{eV}$, 相对其他两者 $W_{\pm} \approx 5\text{eV}$ 要大得多. CdTe 有相当高的灵敏度, 缺点是它的暗电流比较大.

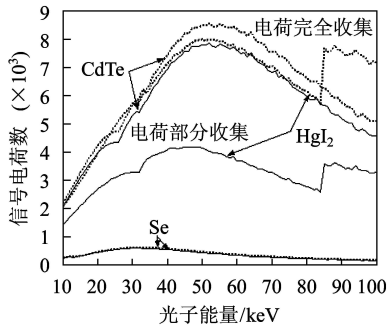


图 5 不同光子能量时, 10^5 个光子辐射到 CdTe, HgI_2 和非晶 Se 材料上, 平均每个光子能产生的信号电荷数

X 射线探测器灵敏度定义为单位面积单位辐射剂量下所收集到的电荷数. 根据上面模拟获得的不同入射能量下平均每个光子产生的信号电荷数和单位面积 (cm^2) 单位辐射剂量 (伦琴, R) 入射的光子数 Φ (辐射光子流密度, $\text{Photons}/\text{cm}^2 \cdot \text{R}$) 计算式^[18], 即可算出探测器灵敏度:

$$\Phi = \frac{5.45 \times 10^{13}}{(\alpha_{\text{air}}/\rho_{\text{air}}) \cdot E}, \quad (3)$$

其中 E 是入射光子能量 (eV), α_{air} 是空气线性能量吸收系数 ($1/\text{cm}$), ρ_{air} 是空气密度, $\alpha_{\text{air}}/\rho_{\text{air}}$ 是空气的质量能量吸收系数 (cm^2/g), 在给定温度和压力的情况下是 E 的函数, 数值可从美国国家标准与技术研究所 (NIST) 网上数据库查到.

图 6 为 3 种材料在 50keV 的光子能量入射, 不同膜厚时的探测灵敏度, 其中实线是采用 Monte Carlo 方法的模拟结果, 点线是根据 X 射线服从指数衰减吸收^[8] 和电荷产生的 Ramo 理论以及电荷收集的 Hecht 效率模型计算结果. 从图可以看到, 两者差别不是太大, 产生差别的原因可能是由于解析计算的方法不能考虑次级光子 (荧光光子和散射光子) 的多次作用, 应该说 Monte Carlo 模拟的作用过程更接近于实际情况.

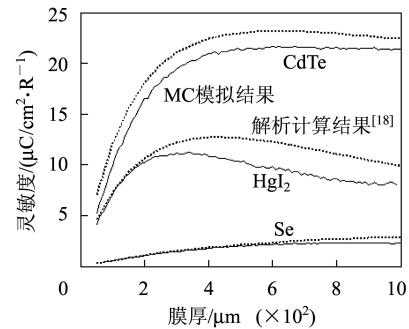


图 6 50keV 的 X 射线入射到 CdTe, HgI_2 和非晶 Se 探测器上不同膜厚时的探测灵敏度

4 结论

本文采用 EGSnrc Monte Carlo 代码系统模拟了 10—100keV 的 X 射线光子入射到 3 种大面积直接转换成成像材料非晶 Se, 多晶 HgI_2 和多晶 CdTe 上的吸收、透过和背向散射特性. 计算了它们在考虑载流子产生噪声和材料的陷阱作用下的 X 射线响应灵敏度. 模拟结果和由文献中用解释方法计算的结果进行了比较, 两者吻合较好. 模拟结果表明, 载流子平均自由程在相对于探测材料厚度较小时, 陷阱作用能极大地影响灵敏度. HgI_2 的灵敏度是非晶 Se 的 5 倍以上, CdTe 的灵敏度是非晶 Se 的 10 倍以上, 为了提高医学 X 射线探测器的灵敏度, 减小对人的辐射剂量, 采用高 Z 序数材料是必要的. 也可看出, Monte Carlo 模拟为探测器的优化设计提供了非常有效的一种方法.

参考文献 (References)

- Haghigat A, Jeraj R, Newhauser W et al. Med. Phys., 2006, **33**: 2132
- Strigari Lidia, Menghi Enrico, D'Andrea Marco et al. Med. Phys., 2006, **33**: 3383
- Kum. Med. Phys., 2006, **33**: 2122
- Ay M R, Sarkar S, Shahriari M et al. Med. Phys., 2005, **32**: 1660
- Korn Alexander, Giersch Juergen, Hoheisel Martin. Proc. SPIE, 2005, **5745**: 292
- Hoheisel Martin, Giersch Jurgun, Mitschke Michaela et al. Proc. SPIE, 2004, **5368**: 386
- Guerra Del, Nelson W R, Russso P. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research, 1991, **A306**: 378
- Conti M, Guerra A Del, Mazzei D et al. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research, 1992, **A322**: 591
- Olmos P, Perez J M, Garcia-Belmonte G et al. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research, 1991, **A302**: 91
- Fano U. Phys. Rev., 1947, **72**: 26

- 11 Cavalleri G, Gatti E, Fabri G et al. Nucl. Instrum. Methods, 1971, **92**: 137
- 12 Kasap S O. J. Phys. D: Appl. Phys., 2000, **33**: 2853
- 13 Lederer C M, Shirley V S. Table of Isotopes. 7th Edition. New York: Wiley, 1978, 4
- 14 Storm E, Israel H I. Atom. Data Nucl. Data Tables, 1970, **7**: 565
- 15 Winick Herman. X-ray Data Booklet. Lawrence Berkeley National Laboratory University of California, Berkeley, CA 94720, 2001
- 16 Kabir M Z, Kasap S O, ZHAO W et al. IEE Proc.-Circuits Devices Syst., 2003, **150**: 258
- 17 Yin Shi, Tumer Tumay O, Maeding Dale et al. IEEE Transactions on Nuclear Science, 2002, **49**(1): 176
- 18 Kolosov S A, Klevkov Yu V, Plotnikov A F. Semiconductors, 2004, **38**(4): 455

Use of Monte Carlo Method to Evaluate the Response of Direct Conversion X-Ray Detectors^{*}

GUI Jian-Bao^{1,2;1)} GUO Jin-Chuan² YANG Qin-Lao² NIU Han-Ben²

1 (Institute of Optoelectronics Science and Engineering, Huazhong University of Science and Technology, Wuhan 430074, China)

2 (Institute of Optoelectronics, Shenzhen University, Shenzhen 518060, China)

Abstract The response of three semiconductor materials, polycrystalline HgI₂, amorphous Se and polycrystalline CdTe, used for large area direct conversion detectors, is simulated by Monte Carlo method for X-ray photons in the diagnostic energy range (10—100keV). The simulation involves the transmission spectra, backscattering spectra, absorption efficiency and charge sensitivity. The interaction process between X-ray photons and the conversion materials is simulated by EGSnrc Monte Carlo code system and for the generation of signal charges Gaussian noise and the collection of partial charges are taken into account. The results show that deep traps in materials can affect largely detecting sensitivity when the mean free length (Schubweg) of carriers is less than the materials thickness. The sensitivity of HgI₂ is 5 times higher than that of amorphous Se and CdTe is 10 times higher than amorphous Se, it can be seen that a high Z material can improve the detecting sensitivity greatly.

Key words Monte Carlo simulation, mercuric iodide, amorphous Se, CdTe, X-ray detector

Received 5 December 2006

^{*} Supported by National Natural Science Foundation of China (60532090)

1) E-mail: gjbstar@163.com, sbgjb@szu.edu.cn