

Direction des bibliothèques

AVIS

Ce document a été numérisé par la Division de la gestion des documents et des archives de l'Université de Montréal.

L'auteur a autorisé l'Université de Montréal à reproduire et diffuser, en totalité ou en partie, par quelque moyen que ce soit et sur quelque support que ce soit, et exclusivement à des fins non lucratives d'enseignement et de recherche, des copies de ce mémoire ou de cette thèse.

L'auteur et les coauteurs le cas échéant conservent la propriété du droit d'auteur et des droits moraux qui protègent ce document. Ni la thèse ou le mémoire, ni des extraits substantiels de ce document, ne doivent être imprimés ou autrement reproduits sans l'autorisation de l'auteur.

Afin de se conformer à la Loi canadienne sur la protection des renseignements personnels, quelques formulaires secondaires, coordonnées ou signatures intégrées au texte ont pu être enlevés de ce document. Bien que cela ait pu affecter la pagination, il n'y a aucun contenu manquant.

NOTICE

This document was digitized by the Records Management & Archives Division of Université de Montréal.

The author of this thesis or dissertation has granted a nonexclusive license allowing Université de Montréal to reproduce and publish the document, in part or in whole, and in any format, solely for noncommercial educational and research purposes.

The author and co-authors if applicable retain copyright ownership and moral rights in this document. Neither the whole thesis or dissertation, nor substantial extracts from it, may be printed or otherwise reproduced without the author's permission.

In compliance with the Canadian Privacy Act some supporting forms, contact information or signatures may have been removed from the document. While this may affect the document page count, it does not represent any loss of content from the document.

Université de Montréal

**Modélisation de détecteurs à base de semiconducteurs pour la
spectroscopie et l'imagerie des rayons- γ**

par
Mathieu Benoit

Département de Physique
Faculté des arts et des sciences

Mémoire présenté à la Faculté des études supérieures
en vue de l'obtention du grade de Maître ès sciences (M.Sc.)
en Physique

Janvier, 2008

© Mathieu Benoit, 2008.



Université de Montréal
Faculté des études supérieures

Ce mémoire intitulé:

**Modélisation de détecteurs à base de semiconducteurs pour la
spectroscopie et l'imagerie des rayons- γ**

présenté par:

Mathieu Benoit

a été évalué par un jury composé des personnes suivantes:

Claude Leroy
président-rapporteur

Louis-André Hamel
directeur de recherche

René Doyon
membre du jury

Mémoire accepté le

RÉSUMÉ

Un modèle et un algorithme de simulation pour la modélisation des dispositifs à base de semiconducteurs pour l'imagerie et la spectroscopie du rayonnement γ sont présentés, en donnant une description de l'ensemble des processus considérés. La déposition d'énergie par le rayonnement γ est simulé à l'aide de la librairie GEANT4. Ensuite, le transport et la génération du signal dans les dispositifs est obtenue à l'aide d'une simulation Monte-Carlo. Le transport dans le champ électrique, le piégeage, le dépiégeage, la diffusion, la répulsion et le couplage entre ces deux derniers sont inclus dans le modèle présenté. Une comparaison entre des résultats expérimentaux obtenues sur un détecteur à bandes orthogonales à une face à base de CdZnTe et la simulation de l'expérience est présenté et montre une bonne corrélation entre la simulation et les données expérimentales. Des prédictions sur les performances d'un nouveau prototype en cours de construction sont obtenues à l'aide de l'algorithme de simulation. Ces prédictions prédisent une nette amélioration de la performance du futur prototype par rapport au modèle précédent.

Mots clés: CdZnTe, Monte-Carlo, rayonnement γ , détecteur semiconducteur, GEANT4

ABSTRACT

We present a Monte-Carlo algorithm for the simulation of charge collection in semiconductor γ -ray detectors. The model takes into account electrical properties of the detectors, transport properties of the material, trapping induced by impurities, experimental setup characteristics and γ ray-matter interaction processes. We demonstrate how to include electrostatic repulsion as a correction to diffusion for Gaussian-shaped charge distribution. Comparison of simulated and measured data for different γ -ray sources for a CdZnTe Single-Sided Charge-Sharing Strip detector are presented to illustrate the charge sharing properties of small electrode-pitch detectors. Predictions are made for a prototype of detector currently in construction. Simulation predicts a net improvement of the detector efficiency in positioning events.

Keywords: CdZnTe, Monte-Carlo, solid state detector , γ ray, GEANT4

TABLE DES MATIÈRES

RÉSUMÉ	iii
ABSTRACT	iv
TABLE DES MATIÈRES	v
LISTE DES FIGURES	vii
LISTE DES APPENDICES	viii
DÉDICACE	ix
REMERCIEMENTS	x
INTRODUCTION	xi
CHAPITRE 1 : PRINCIPE DE BASE DE LA DÉTECTION DES RAYONS-γ AVEC UN SEMICONDUCTEUR	1
1.1 Propriétés d'un détecteur de rayonnement- γ	1
1.2 Interaction du rayonnement γ avec la matière	3
1.2.1 L'interaction photoélectrique	4
1.2.2 La diffusion Compton	4
1.2.3 La création de paire	5
1.2.4 Conclusion	6
CHAPITRE 2 : MODÉLISATION DES INTERACTIONS PHOTONS γ-MATIÈRE	7
2.1 Modèle géométrique et physique	7
2.2 Processus d'interaction	7
2.3 Assemblage d'une simulation	8

CHAPITRE 3 : PROCESSUS DE TRANSPORT DANS LES SEMI- CONDUCTEURS	9
3.1 L'équation de transport de Boltzmann	9
3.2 L'expression de la densité de charge	12
3.3 Transport dans le champ électrique externe	13
3.4 Diffusion et répulsion	14
3.5 Piégeage et dépiégeage	14
CHAPITRE 4 : RÉPULSION ET DIFFUSION	17
4.1 Répulsion-diffusion pour une distribution sphérique	17
4.2 Répulsion-diffusion pour une distribution ellipsoïdale	18
4.3 Intégration défini dans la simulation	19
CHAPITRE 5 : ALGORITHME DE SIMULATION	20
5.1 Modélisation du transport dans le champ externe	20
5.1.1 Modélisation du champ externe	20
5.1.2 Algorithme de Runge-Kutta-Felhberg	21
5.2 Modélisation de la charge induite	21
5.3 Assemblage d'une simulation et résultats	22
CHAPITRE 6 : ARTICLE : <i>SIMULATION OF CHARGE COLLEC- TION PROCESS IN SEMICONDUCTOR-BASED γ-RAY DETECTORS</i>	23
CHAPITRE 7 : CONCLUSION	43
BIBLIOGRAPHIE	45
I.1 Création du modèle géométrique	lii
I.2 Physique du problème	liv
I.3 Maillage	lv
I.4 Obtenir la solution au problème	lvii
I.5 Extraction de la solution	lviii

LISTE DES FIGURES

1.1	Importance relative des processus d'interaction γ -matière [Kno00]	3
1.2	Production de paires dans le champ coulombien d'un noyau atomique. [Hor07]	5
6.1	Prototype de détecteur à bandes croisées à une face à base de CdZnTe [DMM ⁺ 05], pixels de 225 μm	24
6.2	Prototype de détecteur à bandes orthogonales à une face à base de CdZnTe, pixels de 150 μm , 16x16 pixels logique	25
6.3	Simulated Charge Sharing scatter plots for the 150 μm model	26
6.4	Detection efficiency as a function of the energy threshold for the 225 μm model	27
I.1	Choix du type de modèle	lii
I.2	un bloc de CZT	lii
I.3	Création d'un plan de travail	liii
I.4	Ajout des électrodes au modèle 3D	liii
I.5	Paramètres du matériau	liv
I.6	Conditions frontière des électrodes	lv
I.7	Conditions frontière des autres surfaces	lv
I.8	Un maillage	lvi
I.9	Le choix des solveurs	lvii
I.10	Paramètres du solveur adaptatif	lviii
I.11	Problème résolu avec le solveur adaptatif	lix
I.12	Extraction de la solution	lx

LISTE DES APPENDICES

Annexe I :	Annexe 1 : Solution de l'équation de Poisson avec COMSOL Multiphysics	1
Annexe II :	Annexe 2 : Code Source	lxi

One for the money, two for the show ...

- Elvis Preysley

REMERCIEMENTS

Il y a de ces choses dans la vie que l'on ne peut pas prévoir. Je tiens tout d'abord à remercier mon directeur de thèse, Louis-André Hamel, en premier lieu pour avoir accepté de me donner ma chance et pour m'avoir soutenu tout au long de ces années. Ensuite, je le remercie de m'avoir fait confiance en me laissant une grande autonomie dans le travail tout en sachant entretenir mes travaux et stimuler nos discussions pour en arriver à ce résultat. J'ai appris beaucoup durant ces années et c'est en grande partie grâce au talent de pédagogue de M. Hamel.

Ensuite, je tiens à remercier mes parents et ma sœur pour leur support inconditionnel durant toutes ces années. Jamais je ne me serais rendu jusqu'à aujourd'hui sans leur soutien et leur amour. On ne peut jamais assez apprécier la valeur d'une famille qui nous entoure et nous supporte. Je tiens aussi à remercier Amélie, pour m'avoir supporté durant toutes ces années au baccalauréat. Bien sûr, je remercie et j'embrasse Maude pour avoir été à mes côtés durant ces deux années et durant les péripéties qui les ont marquées. Je remercie également tous les professeurs et membres du personnel que j'ai côtoyés durant mon parcours.

Finalement, je remercie Marc-Antoine Daneau pour avoir trouvé la dédicace de cette thèse. Le pari est tenu, à moi de choisir la tienne maintenant !

INTRODUCTION

Les semiconducteurs utilisés comme matériaux de spectroscopie γ représentent un champ d'étude large combinant plusieurs aspects de la physique moderne. La progression des connaissances en physique du solide, des particules, en électronique ou bien génie des matériaux a contribué à une meilleure connaissance de leurs comportements. Parallèlement, la puissance de calcul et la mémoire disponible des ordinateurs croissent à un rythme exponentiel. La puissance des ordinateurs disponibles pour la recherche rend enfin possible la simulation du fonctionnement des détecteurs à base de semiconducteurs avec une grande précision. En appliquant les connaissances acquises au fil des années par la communauté scientifique et en utilisant les plus récentes méthodes de physique numérique, on peut enfin obtenir des simulations réalistes pour un large éventail de détecteurs.

La simulation des détecteurs à base de semiconducteurs représente un outil supplémentaire pour la conception de nouveaux détecteurs. Je m'efforcerai ici de démontrer comment la simulation permet d'optimiser et de prédire le comportement de détecteurs réels afin de guider leur construction. Je ferai état des principes physiques utilisés dans le programme de simulation que j'ai écrit. J'expliquerai les principes de l'interaction du rayonnement γ avec la matière et aborderai la simulation de ceux-ci. Je discuterai ensuite des processus de transport, de diffusion, de répulsion et de piègeage qui influencent le fonctionnement des détecteurs à base de semiconducteurs. Une attention particulière sera portée au couplage entre la diffusion et la répulsion électrostatique et une nouvelle formule permettant l'évaluation numérique de ces processus sera présentée. J'expliquerai aussi l'utilisation du théorème de Ramo pour la simulation des détecteurs. Une bonne partie de ce travail sera présenté dans l'article *Simulation of charge collection process in semiconductor-based γ -ray detectors* présenté au chapitre 6.

Finalement, je présenterai les résultats de mes simulations pour deux modèles de détecteurs pour l'astrophysique conçus en collaboration avec l'université du New Hampshire. Je ferai la comparaison des résultats de mes simulations et des

résultats expérimentaux et montrerai comment la simulation permet la conception de modèles ayant des performances supérieures aux modèles conçus précédemment.

En annexe, je présenterai le fonctionnement du code de simulation que j'ai écrit, ainsi que des notes sur l'utilisation du logiciel Comsol utilisé pour la modélisation par la méthode des éléments finis des détecteurs présentés dans ce document.

CHAPITRE 1

PRINCIPE DE BASE DE LA DÉTECTION DES RAYONS- γ AVEC UN SEMICONDUCTEUR

Les propriétés à la fois conductrice et isolante des semiconducteurs font de cette catégorie de matériaux un choix avantageux pour la détection du rayonnement électromagnétique dans un large spectre d'énergie. Dans ce chapitre, je présenterai un bref survol du fonctionnement des détecteurs semiconducteurs et de leurs propriétés avantageuses pour cette tâche.

1.1 Propriétés d'un détecteur de rayonnement- γ

Un bon détecteur de rayonnement pour la spectroscopie doit absorber facilement le rayonnement pour lequel il fut conçu. Dans le cas du rayonnement γ , c'est l'interaction électromagnétique du photon γ avec les électrons et les noyaux atomiques du semiconducteur qui détermine l'efficacité d'absorption. La section efficace, σ_{eff} pour l'effet photoélectrique que nous désirons favoriser, est proportionnelle à la relation (1.1).

$$\sigma_{eff} \propto \frac{Z^5}{E^{3.5}} \quad (1.1)$$

Des semiconducteurs les plus denses possibles et ayant dans leurs compositions des éléments ayant un numéro atomique élevé seront donc favorisés pour la détection du rayonnement- γ . Le CdTe, le CdZnTe, le germanium sont autant de semiconducteurs utilisés à cet escient.

Un rayon- γ dépose son énergie dans un matériau en transmettant, selon des mécanismes qui seront décrits plus loin dans le chapitre, son énergie aux électrons présents dans la bande de valence, qui passent ainsi dans la bande de conduction, désertée, laissant derrière eux des trous dans la bande de valence. Comme ce processus est essentiellement aléatoire, le nombre de charges injectées dans la bande

de conduction est environ distribué selon une gaussienne de paramètre σ (1.2)

$$\sigma = \sqrt{F \frac{E_d}{\epsilon_p}} \quad (1.2)$$

où E_d est l'énergie déposée, ϵ_p l'énergie de création d'une paire et F le facteur de Fano, introduit pour tenir compte du fait que les paires ne sont pas créées de façon statistiquement indépendante et donc que ses paramètres diffèrent de ceux attendus pour une statistique de Poisson ($F < 1$).

La seconde propriété importante d'un détecteur de rayonnement pour la spectroscopie est la linéarité du signal obtenu pour une détection avec l'énergie de la particule incidente. Cette condition est remplie dans les semiconducteurs et le nombre de charges déposées en fonction de l'énergie est donné par la relation 1.3, où ϵ_p est une constante spécifique au matériau, de l'ordre de trois fois le gap, $\epsilon_p = 4.4eV$ pour le CdZnTe par exemple.

$$N = \frac{E_d}{\epsilon_p} \quad (1.3)$$

Pour obtenir un signal, on applique un champ électrique dans le volume du détecteur en imposant une différence de potentiel entre les différentes électrodes présentes à sa surface. Sous l'effet de ce champ électrique, les électrons dans la bande de conduction et les trous dans la bande de valence migrent et, sous l'effet d'un champ suffisamment puissant, parviennent à quitter le semiconducteur pour le circuit qui y est rattaché. Une zone désertée de porteurs où règne un champ électrique non nul est créé, les paires de porteurs déposées par un photon γ dans cette zone de désertion migreront dans le champ électrique, induisant un courant à travers les électrodes. Le courant induit par les paires dépend de la géométrie des électrodes. On doit donc connaître les processus d'induction pour modéliser correctement le comportement de différents patrons de détecteurs.

Finalement, une caractéristique fondamentale d'un détecteur pour l'imagerie est sa résolution spatiale. La taille des électrodes que l'on trouve sur les détecteurs représente une première limitation à la résolution spatiale d'un détecteur. Une

autre limitation majeure vient de la nature du processus de détection. L'ensemble d'électrons et de trous qui dérivent dans les détecteurs subit une expansion due à la diffusion, au piégeage et à la répulsion électrostatique. Le chapitre 4 traite de ces processus.

1.2 Interaction du rayonnement γ avec la matière

Le rayonnement γ interagit avec la matière selon trois processus : L'interaction photoélectrique, la diffusion Compton et la création de paire. La section efficace totale d'interaction γ -matière est donnée par la relation 1.4.

$$\sigma_{total} \approx \sigma_{photoelectrique} + \sigma_{Compton} + \sigma_{paires} \quad (1.4)$$

La figure (1.1) montre l'importance relative de chaque processus selon le numéro atomique Z du matériau et l'énergie du photon incident. Les processus d'interaction du rayonnement γ avec la matière déterminent notre capacité à intercepter le rayonnement et à localiser son point d'interaction. Il est donc important de bien modéliser ces processus afin de simuler correctement le fonctionnement des détecteurs.

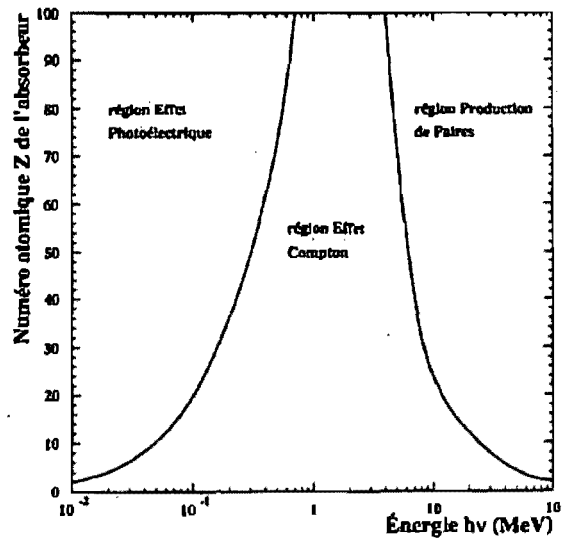


FIG. 1.1 – Importance relative des processus d'interaction γ -matière [Kno00]

Pour le CdZnTe, le numéro atomique Z moyen est d'environ 50, et la plage d'énergie visée pour la détection avec ce genre de détecteur est 0-2 MeV. Ainsi, on peut observer que ce sont l'interaction photoélectrique et la diffusion Compton qui seront les processus dominants de l'interaction.

1.2.1 L'interaction photoélectrique

L'interaction photoélectrique est le résultat du transfert de l'énergie d'un photon γ à un électron d'un atome du semiconducteur dont est composé le détecteur. Cet électron est ainsi libéré et dépose à son tour son énergie dans le matériau, créant un nuage d'électrons et de trous tel que décrit plus haut dans le chapitre. La section efficace d'interaction selon ce processus est donnée par l'équation (1.1). Le photon γ cesse d'exister après son interaction avec l'électron. L'électron perd rapidement son énergie et la déposition d'énergie est localisée autour du site de l'interaction.

1.2.2 La diffusion Compton

La diffusion Compton est le processus dominant pour les photons γ de plus haute énergie. Ce processus correspond à la diffusion inélastique du photon sur un électron libre ou faiblement lié au réseau. Cela entraîne le changement de direction du photon ainsi qu'une perte d'une partie de son énergie au profit de l'électron, qui perdra à son tour cette énergie localement dans le matériau. L'énergie du photon diffusé est donnée par la relation suivante :

$$E' = m_e c^2 / (1 - \cos\phi + m_e c^2 / E) \quad (1.5)$$

où ϕ est l'angle de diffusion entre la direction du γ incident et du γ diffusé, m_e la masse de l'électron et E l'énergie du photon incident. On remarque qu'il existe une quantité minimum d'énergie possible pour le photon diffusé ($\phi = \pi$). Ceci s'appelle le bord Compton, car le nombre de photons diffusés avec des énergies inférieures à cette valeur chute à zéro. La diffusion Compton nuit à la résolution spatiale et spectroscopique des détecteurs car le photon diffusé sort souvent du détecteur,

emportant avec lui une partie de l'énergie à mesurer, ou bien interagit à un autre endroit dans le détecteur rendant plus difficile la localisation de l'interaction initiale.

1.2.3 La création de paire

La création de paire est un processus au cours duquel un photon γ est converti en une paire électron-positron. La conservation de l'impulsion impose que ce phénomène se produise dans le voisinage d'un noyau atomique. La conservation de l'énergie impose quant à elle que l'énergie du photon γ soit supérieure à 1.022 MeV, soit l'énergie nécessaire à la création de la masse d'un positron et d'un électron. Comme on peut le constater dans la figure (1.1), cette interaction ne devient importante dans les détecteurs qui nous intéressent que pour des énergies plus élevées. Dans la plage d'énergie de fonctionnement des détecteurs semiconducteurs, très peu de photons γ entreront en interaction selon ce processus avec le matériau actif du dispositif. Cette interaction ne sera donc pas importante pour la modélisation des détecteurs de rayonnement γ .

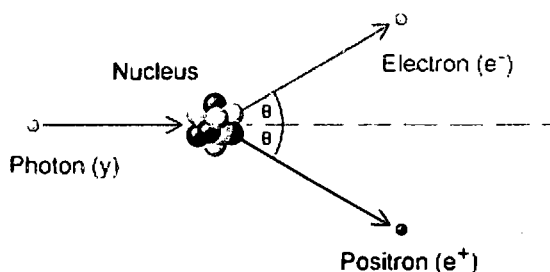


FIG. 1.2 – Production de paires dans le champ coulombien d'un noyau atomique. [Hor07]

1.2.4 Conclusion

Les détecteurs de photons γ que nous considérerons dans cet ouvrage visent la détection de photons γ dans une plage d'énergie se situant entre 0-2 MeV. L'effet photoélectrique représente le processus d'interaction majoritaire pour les photons γ de moins de 500 keV tandis que la diffusion Compton devient dominante pour des énergies supérieures. La création de paire est quant à elle négligeable dans la plage d'énergie qui nous intéresse.

CHAPITRE 2

MODÉLISATION DES INTERACTIONS γ -MATIÈRE

Dans le cadre de la modélisation des dispositifs de détection du rayonnement γ , nous avons besoin de simuler correctement le processus de déposition de l'énergie du rayonnement γ du détecteur. Au premier chapitre, nous avons abordé les différentes interactions possibles entre le rayonnement γ et la matière. Fort heureusement, il existe déjà dans la communauté scientifique une librairie, GEANT4 (GEometry ANd Tracking) [GAa03], permettant la simulation des processus de déposition d'énergie du rayonnement γ et des électrons, et plus encore, dans des modèles géométriques et physiques complexes.

2.1 Modèle géométrique et physique

Pour les besoins de notre simulation, un modèle de la déposition d'énergie des photons et des électrons à haute énergie est suffisant. Une description de la géométrie et des paramètres physiques de l'expérience que l'on désire simuler doit être construite à l'aide des objets de la librairie GEANT4. Pour une expérience de détection du rayonnement gamma, on doit y inclure la position de la source, la distribution des quadrivecteurs initiaux des photons γ , la distance entre la source et le détecteur, la taille du détecteur, sa composition atomique et la taille du hall expérimental, généralement rempli d'air, autour du montage de l'expérience simulé.

2.2 Processus d'interaction

On doit ensuite faire le choix des processus physiques simulés par la librairie GEANT4. Pour la simulation de la déposition d'énergie des photons γ dans un matériau, on doit généralement inclure l'interaction photoélectrique, la diffusion Compton et la diffusion des électrons produits par ces deux derniers processus. La création de paire peut être incluse dans le cas où on utilise des photons γ ayant

une énergie suffisante pour que le processus ne soit pas négligeable. On doit alors aussi inclure les interactions dues aux positrons générés lors de cette interaction. Finalement, on doit inclure une énergie minimum limite à la déposition d'énergie. Les particules qui sont dans le modèle déposent leur énergie totale lorsqu'ils atteignent cette énergie minimale. Dans le cadre de notre simulation, comme on désire représenter les distributions de charge générées par ces dépositions d'énergie comme des distributions sphériques gaussiennes isolées, on doit choisir une limite qui nous permet d'obtenir des points de déposition d'énergie suffisamment éloignés pour que la répulsion entre les distributions soit négligeable. Une énergie de coupure trop élevée ne révélera pas suffisamment de détails sur la déposition d'énergie et une coupure trop basse fera disparaître l'effet de la répulsion en considérant faussement que des points de déposition d'énergie très proches forment des distributions de charge indépendantes. Lors des simulations effectuées, j'ai utilisé comme énergie de coupure l'énergie de seuil des détecteurs simulés, généralement entre 2 et 15 keV.

2.3 Assemblage d'une simulation

En assemblant tous les objets de la librairie GEANT4 avec les spécifications de notre simulation, on obtient un programme de simulation qui nous retourne une liste de points d'interaction, avec l'énergie déposée à cet endroit, pour l'interaction d'un photon γ . Avec cette liste, on peut générer un ensemble de distributions de charge gaussiennes et sphériques que l'on utilisera pour simuler le processus de transport, piégeage-dépiégeage, répulsion-diffusion dans le dispositif. À l'annexe 2, je présente le code source de mon programme de simulation. Les objets dont le nom est précédé par CZT sont les objets de la partie GEANT4 de ma simulation. J'y présente les détails de la programmation d'une simulation pour le modèle présenté dans l'article de l'annexe 3.

CHAPITRE 3

PROCESSUS DE TRANSPORT DANS LES SEMICONDUCTEURS

L'étude des processus d'interaction des photons γ avec la matière nous a permis d'apprendre comment l'énergie des photons est déposée dans le matériau. Un nuage de paire électrons-trous est déposé dans le semiconducteur déserté de porteurs libres sous l'effet d'un champ électrique. Pour effectuer la mesure de la quantité d'énergie déposée, proportionnelle au nombre de paires créées (1.3), où ϵ est une constante propre au matériau, on doit collecter la charge à travers une électrode pour la quantifier à l'aide d'un circuit électronique.

Pour modéliser correctement ce processus dans les détecteurs semiconducteurs, nous devons comprendre comment se déroule le transport des charges vers les électrodes. Dans ce chapitre, je ferai un bref survol des différents processus intervenant dans le transport qui doivent être modélisés pour obtenir un modèle précis du fonctionnement de ces détecteurs. Je décrirai comment je transforme ces équations afin d'obtenir un modèle se prêtant facilement à la simulation par la méthode de Monte-Carlo.

3.1 L'équation de transport de Boltzmann

La physique des semiconducteurs fournit une panoplie d'équations pour modéliser le transport dans les semiconducteurs. L'équation de transport de Boltzmann représente la plus importante pour la modélisation des dispositifs.

L'équation de transport de Boltzmann [Lun02] :

$$\frac{\partial n_{\phi}(r, t)}{\partial t} = -\nabla \cdot \vec{F}_{\phi} + G_{\phi} - R_{\phi} + S_{\phi} \quad (3.1)$$

comprend les termes suivants : Terme de densité :

$$n_\phi(r, t) = \frac{1}{\Omega} \sum_p f\phi(p) \quad (3.2)$$

Terme de flux :

$$F_\phi(r, t) = \frac{1}{\Omega} \sum_p v f\phi(p) \quad (3.3)$$

Taux de génération dans le champ électrique :

$$G_\phi(r, t) = (-q)\vec{E} \cdot \frac{1}{\Omega} \sum_p f\nabla_p\phi(p) \quad (3.4)$$

Taux de recombinaison par diffusion (Scattering recombination rate) :

$$R_\phi(r, t) = \left\langle \left\langle \frac{1}{\tau_\phi} \right\rangle \right\rangle [n_\phi(r, t) - n_\phi^0(r, t)] \quad (3.5)$$

Taux de génération-recombinaison de particules :

$$S_\phi(r, t) = \frac{1}{\Omega} \sum_p \phi(p)s(r, p, t) \quad (3.6)$$

Taux de relaxation de l'ensemble

$$\left\langle \left\langle \frac{1}{\tau_\phi} \right\rangle \right\rangle = \frac{\frac{1}{\Omega} \sum_p \frac{f\phi(p)}{\tau_\phi(p)}}{[n_\phi(r, t) - n_\phi^0(r, t)]} \quad (3.7)$$

Taux de diffusion associé (Associated out-scattering rate) :

$$\frac{1}{\tau_\phi} = \sum_{p'} \left(1 - \frac{\phi(p')}{\phi(p)}\right) S(p \cdot p') \quad (3.8)$$

où p est la quantité de mouvement, Ω le volume de la zone de Brillouin du semiconducteur et f la distribution de Fermi-Dirac.

L'équation de transport de Boltzmann peut s'exprimer comme un ensemble in-

fini d'équations, correspondant aux différents moments de la distribution de charge à l'étude, selon le choix de la fonction $\phi(r, t)$.

Le premier moment ($\phi(r, t) = 1$) représente la conservation de la charge, le deuxième ($\phi(r, t) = p$), la conservation de l'impulsion, le troisième ($\phi(r, t) = E(p)$, l'énergie), la conservation de l'énergie et le quatrième moment ($\phi(r, t) = E(p) * p$), la conservation des flux d'énergie. Une infinité de moments existent et la solution à l'équation de transport de Boltzmann est la solution de toutes ces équations combinées. Toutefois, dans la majeure partie des cas, seule une ou deux de ces équations sont nécessaires à la modélisation de dispositifs. Dans le cas qui nous intéresse, seule la conservation de la charge jouera un rôle important. La justification de ce choix deviendra évidente plus tard dans cet ouvrage. L'équation se subdivise en deux équations : une équation de continuité pour les trous et une pour les électrons.

$$\frac{dp}{dt} = \nabla \cdot D_t \nabla p - \nabla \cdot (p \mu_t \vec{E}) + G_t - \tau_t \quad (3.9)$$

$$\frac{dn}{dt} = \nabla \cdot D_e \nabla n - \nabla \cdot (n \mu_e \vec{E}) + G_e - \tau_e \quad (3.10)$$

Les variables p et n représentent respectivement la densité de trous et d'électrons libres, D , leurs coefficients de diffusion respectifs, une mesure du taux de diffusion des porteurs dans un semiconducteur, μ leurs mobilités respectives, une masse apparente des porteurs dans le semiconducteur, G leur taux de génération et τ , le taux de recombinaison. Les indices t et e désignent respectivement les électrons et les trous. Une troisième équation, l'équation de Poisson, vient s'ajouter à celles-ci par le biais du champ électrique.

$$-\nabla^2 V = \nabla \cdot \vec{E} = \frac{\rho}{\epsilon} \quad (3.11)$$

Même en effectuant les simplifications menant à l'équation de transport de Boltzmann sous la forme des équations des moments, on obtient un système d'équations difficile à résoudre. Pour des fins de modélisation, on devra découper ces équations

afin de les décrire d'une manière nous permettant de les résoudre facilement par une méthode de Monte-Carlo.

3.2 L'expression de la densité de charge

Une première simplification sur le travail à faire pour résoudre ces équations est d'approximer la distribution de charge produite en un point d'interaction par une distribution normale. Cette approximation est tout à fait acceptable pour la raison suivante : la forme de la distribution produite par l'interaction d'un photon dans le matériau est influencée par un grand nombre de facteurs indépendants. Or, un théorème important de probabilité, le théorème de la limite centrale, nous apprend que la distribution générée par une somme de variables aléatoires indépendantes tend vers une distribution normale quand le nombre de distributions sommées augmente. On peut donc approximer notre distribution par une distribution normale.

$$\rho(r) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma} e^{-\frac{r^2}{2\sigma^2}} \quad (3.12)$$

Il reste à déterminer le paramètre σ de la distribution. Nous verrons plus loin dans cet ouvrage que la taille initiale de la distribution influence peu la taille finale de la distribution, après le transport. Toutefois, une bonne paramétrisation peut se faire en fixant σ comme le libre parcours moyen d'un électron dans un matériau. En effet, l'électron éjecté par effet photoélectrique ou par diffusion Compton déposera son énergie dans le matériau à l'intérieur de cette distance caractéristique donnée par l'expression (3.13) [PDG84], où A, B et C sont des constantes spécifiques au matériau.

$$R_p = AE \left(1 - \frac{B}{1 + CE} \right) \quad (3.13)$$

Je supposerai donc à partir de maintenant que la distribution de charge aux points d'interaction d'un photon γ est une distribution normale paramétrisée par (3.13).

3.3 Transport dans le champ électrique externe

Le champ électrique agissant sur les porteurs de charge peut s'exprimer en deux composantes 3.14.

$$\vec{E} = \vec{E}_{externe} + \vec{E}_{distribution} \quad (3.14)$$

Une composante $\vec{E}_{externe}$, provient du champ électrique externe imposé dans le semiconducteur par un circuit électrique maintenant la cathode et l'anode à une différence de potentiel constante. L'autre composante, $\vec{E}_{distribution}$, est le champ de la distribution de charge elle-même. On évite le couplage entre les équations de transport et l'équation de Poisson en faisant l'approximation que le champ externe n'est pas affecté par la distribution de charges libres à l'étude. On traite à part l'effet de la distribution de charge sur elle-même à l'aide de la composante de répulsion électrostatique du champ subi par les porteurs libres. Cette composante induit le processus de répulsion électrostatique. Pour ma simulation, j'ai fait le choix de traiter séparément ces deux composantes du champ. La composante répulsive sera traitée avec la diffusion. Je traiterai en détail ces processus dans le chapitre suivant.

Pour la simulation d'un détecteur par la méthode de Monte-Carlo, on désire découper la distribution de charge en éléments de charge que nous traiterons séparément. Le déplacement de ces éléments de charge peut être traité par la loi d'Ohm. L'équation du mouvement pour un élément de charge est donnée dans l'équation (3.15), où \vec{r} est la position du centroïde de l'élément de charge.

$$\frac{d\vec{r}}{dt} = \mu\vec{E} \quad (3.15)$$

À partir de cette équation, pour un champ électrique donné, on peut intégrer la trajectoire des éléments de charge dans celui-ci. Nous verrons plus loin comment mon algorithme de simulation utilisera cette équation pour combiner ce processus aux autres décrits dans ce chapitre.

3.4 Diffusion et répulsion

La diffusion et la répulsion électrostatique représentent les principaux processus influençant la taille finale de la distribution de charge. C'est ce paramètre qui est déterminant dans la détermination de la résolution spatiale d'un détecteur pour l'imagerie médicale. Le chapitre suivant traitera en détail de la manière dont j'ai procédé pour intégrer ces processus dans mon algorithme de simulation.

3.5 Piégeage et dépiégeage

Les semiconducteurs sont influencés par la présence de défauts dans leur structure. Plusieurs types de défauts peuvent être présents et la connaissance de leur influence sur le fonctionnement des dispositifs est importante pour la compréhension de celui-ci. On compte plusieurs types de défauts regroupés en différentes catégories [Car03] :

- Lacune (Absence d'un noyau dans un site)
- Interstitiel (Présence d'un noyau dans un interstice)
- Substitutionnel (Substitution d'un atome A par un atome C dans un site)
- Antisite (Défaut substitutionnel où un atome A est remplacé par un atome B du même composé)
- Paire de défauts de Frenkel (combinaison d'un défaut de vacance et un défaut interstitiel)

La présence de ces défauts dans le semiconducteur entraîne la formation de niveaux d'énergie supplémentaires dans la région du gap du semiconducteur. Ces niveaux d'énergie agissent comme des pièges pour les porteurs libres. Les porteurs qui atteignent ces niveaux voient leur mouvement momentanément arrêté. Ils sont piégés dans le site du défaut. On classe ces pièges en deux catégories : les pièges profonds et peu profonds. La différence entre ces deux catégories est le temps que passent les porteurs de charge dans le piège. Les charges qui sont prises dans un piège peu profond seront en général libérées dans un temps très court, de l'ordre de quelques nanosecondes. Les charges prises dans un piège profond y resteront pour

des temps beaucoup plus longs que les temps caractéristiques de mesure dans les détecteurs semiconducteurs. Les charges y restent donc figées pour la durée d'une mesure et ne contribuent donc plus au signal.

La présence de ces pièges se reflète dans l'équation de transport de Boltzmann dans les termes τ et G . Le terme de recombinaison décrit la capture des porteurs de charge libres par les pièges et le terme de génération décrit le dépiégeage des porteurs de charge. Dans le cadre d'une simulation Monte-Carlo où on décrit la distribution de charge comme une distribution d'éléments de charge, on peut traiter le piégeage de manière probabiliste. Chaque piège présent dans le semiconducteur peut être décrit par un temps caractéristique de piégeage et un temps caractéristique de dépiégeage [THC+98]. L'équation 3.16 décrit la probabilité qu'un élément de charge tombe dans un piège i , où les τ_i sont les temps caractéristiques de piégeage des différents pièges présents dans le semiconducteur.

$$P_i = \frac{\frac{1}{\tau_i}}{\sum 1/\tau_i} \quad (3.16)$$

Le temps de piégeage total est donné par la relation suivante :

$$\tau_t = \frac{1}{\sum 1/\tau_i} \quad (3.17)$$

On peut ensuite déterminer la distribution de probabilité décrivant le temps t restant avant qu'une charge ne tombe dans un piège, après sa génération ou sa sortie d'un piège. Cette relation est donnée par l'équation (3.18)

$$P(t) = \frac{1}{\tau_t} \exp \frac{-t}{\tau_t} \quad (3.18)$$

Une fois piégée, on peut déterminer la distribution de probabilité du temps qu'une charge reste dans un piège, qui est donnée par la relation suivante :

$$P(t) = \frac{1}{\tau_d} \exp \frac{-t}{\tau_d} \quad (3.19)$$

où τ_d est le temps caractéristique de dépiégeage associé au piège et $P(t)$ la probabilité associée à un temps de piégeage ou de dépiégeage t . On peut générer des nombres aléatoires t distribués selon les équations 3.18 et 3.19 à partir d'un nombre aléatoire R uniformément réparti sur $[0, 1]$ en utilisant la relation suivante :

$$t = -\tau_{t,d} \ln(1 - R) \quad (3.20)$$

À partir de ces équations, on peut décrire le transport d'un nuage de charges en présence de piégeage et de dépiégeage.

CHAPITRE 4

RÉPULSION ET DIFFUSION

La modélisation de la répulsion et de la diffusion durant le transport des porteurs libres détermine la configuration physique de la distribution de charges libres tout au long du transport dans le dispositif de détection. La taille de la distribution influence le courant qu'elle induit sur les électrodes des dispositifs et sur quelles électrodes elle induit du courant. Dans le cas des détecteurs utilisés pour l'imagerie, la taille de la distribution a une influence directe sur la résolution spatiale des détecteurs qu'il est possible de réaliser.

4.1 Répulsion-diffusion pour une distribution sphérique

Un modèle pour prédire le comportement d'une distribution de charges sphérique fut proposé par Gatti [GLRS87], qui suggère de considérer les processus de diffusion et de répulsion comme indépendants et de sommer quadratiquement leurs contributions pour obtenir la taille finale de la distribution :

$$r(t) = \sqrt{\frac{3}{5} \left(\sqrt[3]{\frac{3\mu N e t}{4\pi\epsilon_0\epsilon_r}} \right)^2 + 2Dt} \quad (4.1)$$

Cette méthode donne de bons résultats en première approximation, mais on omet de considérer que l'accroissement de la taille de la distribution de charges par diffusion entraîne une diminution de l'importance de la répulsion due à une répartition de la charge des porteurs dans un volume plus grand. L'article, *Simulation of charge collection process in semiconductor-based γ -ray detectors*, présenté au chapitre 6 démontre une méthode basée sur l'équation de répulsion-diffusion (3.9, 3.10) qui tient compte du couplage entre la diffusion et la répulsion dans la détermination de la taille de la distribution de charge . Cette méthode permet de simuler plus précisément le fonctionnement des dispositifs de spectroscopie et d'imagerie du rayonnement γ en obtenant la dérivée de la taille de la distribution

en fonction du temps et de la taille présente de la distribution $\sigma(t)$. Ce modèle nous permet aussi de traiter la répulsion comme une correction au coefficient de diffusion D , en introduisant un coefficient effectif de diffusion D' .

$$\frac{\partial \sigma(t)^2}{\partial t} = 2\left(D + \frac{\mu N e}{24\pi^{3/2}\epsilon_0\epsilon_r\sigma(t)}\right) = 2D' \quad (4.2)$$

où μ est la mobilité des porteurs, e la charge d'un trou, N le nombre de porteurs et $\epsilon_0\epsilon_r$ la permittivité du matériau.

4.2 Répulsion-diffusion pour une distribution ellipsoïdale

Un autre aspect du couplage entre la répulsion et la diffusion est traité dans l'article présenté au chapitre 6. Un modèle pour le couplage entre la diffusion et la répulsion pour une distribution de charge ellipsoïdale est démontré. Sous l'effet du piégeage et du champ externe présents dans les dispositifs de détection, les distributions de charges auront tendance à s'allonger dans le sens du champ externe. Ainsi, on doit corriger l'expression 4.2 pour inclure l'asymétrie entre les paramètres $(\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ de la distribution. On obtient un coefficient de diffusion vectoriel :

$$\vec{D}' = \left(D + \frac{\sigma_x e N \mu}{20\sqrt{5}\sigma_y\sigma_z\pi\epsilon_0\epsilon_r}, D + \frac{\sigma_y e N \mu}{20\sqrt{5}\sigma_x\sigma_z\pi\epsilon_0\epsilon_r}, D + \frac{\sigma_z e N \mu}{20\sqrt{5}\sigma_x\sigma_y\pi\epsilon_0\epsilon_r} \right) \quad (4.3)$$

L'équation 4.3 se simplifie pour donner l'équation 4.2 dans le cas d'une distribution à symétrie sphérique. Toutefois, dans les détecteurs, d'autres processus viennent s'ajouter à la répulsion et la diffusion. Le champ électrique externe peut modifier la taille de la distribution de charge et insérer une asymétrie dans la distribution. Les charges piégées lors du transport dans le champ prennent du retard sur le reste de la distribution qui demeure en mouvement, il se forme alors une queue traînant derrière la distribution. L'équation 4.3 décrit alors plus précisément le comportement de la distribution que ne le fait l'équation 4.2.

4.3 Intégration défini dans la simulation

La marche aléatoire est une méthode numérique efficace pour simuler la diffusion d'une distribution pour un coefficient de diffusion donné. En exprimant la contribution à la taille d'une distribution due à la répulsion comme une correction à la diffusion classique, on peut traiter la répulsion comme un processus de marche aléatoire. La marche aléatoire consiste à déplacer par pas aléatoire chaque particule de la distribution de charges. La longueur des pas est déterminée par une distribution gaussienne dont le paramètre σ est déterminé par le coefficient de diffusion modifié D' défini par l'équation 4.3 tel que :

$$\sigma^2(dt) = 2D' dt \quad (4.4)$$

où dt est le pas de temps de la marche aléatoire.

J'ai effectué des simulations qui vérifient bien que la marche aléatoire selon (4.4) d'un ensemble d'éléments de charge de distribution gaussienne, à l'aide de l'algorithme de l'annexe II, reproduit bien les résultats d'une intégration numérique des équations (4.2) et (4.3). Comme le coefficient de diffusion modifié ne dépend que de la taille de la distribution $\sigma(t)$, tous les processus qui influencent la taille de la distribution qui seront ajoutés à l'effet de la répulsion et la diffusion (piégeage-dépiégeage, transport dans le champ) seront pris en compte lors du calcul de la taille de la distribution à chaque pas de la marche aléatoire.

CHAPITRE 5

ALGORITHME DE SIMULATION

Avec en main les différents modèles nous permettant de simuler le transport des distributions de charge dans le dispositif, on a obtenu, à l'aide de GEANT4, la description des points d'interaction dus à l'interaction d'un photon γ avec la matière. On peut représenter ces distributions par un ensemble d'éléments de charge distribués selon des distributions gaussiennes et sphériques paramétrisées par 3.13. On peut ensuite simuler les différents processus agissant sur ces distributions en agissant sur ces éléments de charge ponctuels. Pour la répulsion et la diffusion, on utilisera le processus de marche aléatoire pour chaque élément de charge. Pour le piégeage-dépiégeage on attribuera des probabilités de piégeage et de dépiégeage à l'aide de 3.16 et 3.18. Plus de détails sur l'algorithme de simulation sont donnés dans l'article du chapitre 6.

5.1 Modélisation du transport dans le champ externe

Pour obtenir les trajectoires des éléments de charge que nous avons générées dans le champ externe, on doit obtenir la solution de l'équation de Poisson pour notre dispositif, puis effectuer l'intégration de la trajectoire 3.15 à l'aide d'une méthode numérique.

5.1.1 Modélisation du champ externe

Plusieurs méthodes peuvent être utilisées pour obtenir la solution de l'équation de Poisson dans notre dispositif. Si une solution analytique existe, cela reste la meilleure solution, mais dans la plupart des dispositifs modernes, on doit obtenir une solution numérique, car une solution analytique n'existe pas. Dans l'annexe I, je présente la méthode que j'ai utilisée, soit la méthode des éléments finis, qui nous permet d'obtenir des solutions de grande qualité pour des géométries complexes.

5.1.2 Algorithme de Runge-Kutta-Fehlberg

On doit faire le choix d'une méthode numérique pour l'intégration des trajectoires. Comme on doit intégrer un grand nombre de trajectoires, on doit s'assurer de minimiser le temps de calcul pour obtenir un algorithme de simulation efficace. L'algorithme d'intégration de Runge-Kutta-Fehlberg [Feh69] nous permet d'intégrer notre trajectoire avec une précision de l'ordre $O(dt)^5$ et d'ajuster le pas de temps en fonction de l'erreur sur notre pas d'intégration. La méthode consiste à comparer le pas d'intégration pour la méthode d'ordre 5 et celui pour une méthode d'ordre 4, obtenue avec un sous-ensemble des paramètres d'intégration de la méthode d'ordre 5, pour diminuer le temps de calcul. On diminue ou augmente le pas de temps selon la grandeur de l'erreur entre les deux méthodes.

On doit fixer un pas de temps maximum et minimum pour assurer la précision des autres processus (Marche aléatoire, piégeage-dépiégeage) et pour limiter le temps de simulation. Comme je désire intégrer chaque distribution de charge sur les mêmes pas de temps, j'utilise l'erreur moyenne sur tous les éléments de charge de la distribution plutôt que l'erreur sur chaque élément. Cette méthode d'intégration permet de concentrer le temps de simulation sur les parties de la trajectoire où le champ externe n'est pas uniforme tout en minimisant l'erreur.

5.2 Modélisation de la charge induite

La charge induite sur les électrodes peut être modélisée de manière simple en utilisant le théorème de Ramo [Ram39]. Ce théorème nous explique que la charge induite sur une électrode k , Q_k , peut être obtenue grâce à l'équation suivante :

$$Q_k = \sum_i q_i \phi_k(\vec{r}_{i\,final}) - \sum_i q_i \phi_k(\vec{r}_{i0}) \quad (5.1)$$

où $\phi_k(\vec{r})$ est le potentiel de pondération, un potentiel sans unités obtenu en résolvant l'équation de Poisson dans la géométrie de notre dispositif avec l'électrode où les électrodes considérées sont maintenues à un potentiel $\phi = 1$ et les autres

à $\phi = 0$ et i l'indice des éléments de charge. On peut obtenir ce potentiel de pondération par une méthode numérique, comme pour le champ externe, et se servir de cette solution pour calculer la charge induite le long des trajectoires de nos éléments de charge. Je présente dans l'annexe I et II la méthode que j'ai utilisée pour mes simulations.

5.3 Assemblage d'une simulation et résultats

L'article présenté au chapitre 6 donne les détails de l'algorithme de simulation final incluant tous les processus à considérer. Des résultats de simulation et la comparaison avec des résultats obtenus expérimentalement y sont aussi présentés. Le code source commenté est présenté dans l'annexe II.

CHAPITRE 6

ARTICLE : *SIMULATION OF CHARGE COLLECTION PROCESS IN SEMICONDUCTOR-BASED γ -RAY DETECTORS*

L'article présenté dans ce chapitre constitue ma contribution principale à cette thèse. J'y explique les détails de l'algorithme de simulation que j'ai assemblé. Le but recherché par ce projet était de simuler correctement le fonctionnement du prototype de détecteur à bandes orthogonales à une face à base de CdZnTe conçu en collaboration avec l'université du New Hampshire. Ce prototype est un détecteur pour l'imagerie et la spectroscopie du rayonnement γ en astrophysique conçu pour le fonctionnement dans l'espace. Dans ces conditions particulières, le détecteur doit être conçu avec un poids et une consommation électrique minimaux. Le choix du CdZnTe comme matériau de détection permet une réduction du poids du détecteur, car le CdZnTe ne nécessite pas d'équipement de refroidissement pour obtenir de bonnes performances de détection. Le choix d'un détecteur en bandes est dû à sa faible consommation électrique, le nombre de canaux de lecture, et de l'électronique qui y est associé, variant selon $2N$ au lieu de N^2 , où N est le nombre de divisions en x ou y du détecteur. Finalement, la faible mobilité des trous dans le CdZnTe impose le choix d'un détecteur à une face, qui met l'accent sur la détection du signal des électrons. Les patrons d'électrode de ces détecteurs sont illustrés sur les figures 6.1 et 6.2.

Sur le premier prototype, chaque pixel logique est constitué d'une grille de 4×4 pixels physiques entourés d'une grille de sculptage du champ électrique. Chaque moitié de ces pixels physiques sont connectés entre eux selon le patron de la figure 6.1. Ils sont ensuite connectés aux pixels correspondants les avoisinant dans les pixels logiques voisins, respectivement selon l'axe x et y . Cet ensemble de connexions forme un réseau de bandes entrecroisées en x et en y couvrant la surface du détecteur. Ceci permet de mettre les bandes en x et en y sur une seule face comme le requiert le CdZnTe. La bonne identification de la position d'un événement

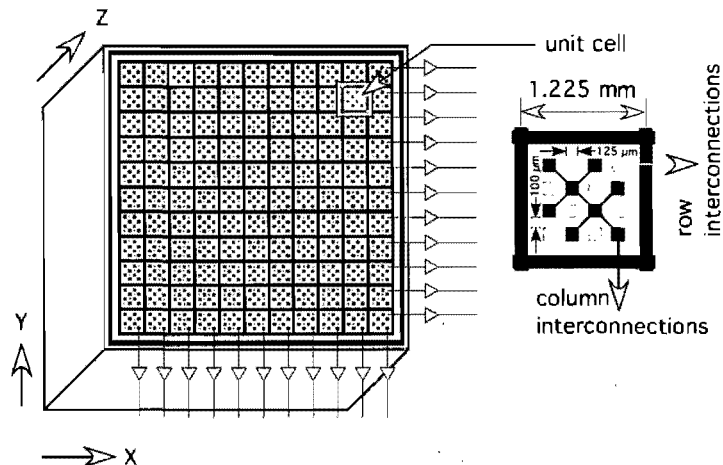


FIG. 6.1 – Prototype de détecteur à bandes croisées à une face à base de CdZnTe [DMM⁺05], pixels de 225 μm

dans le détecteur dépend du partage du signal généré entre les deux canaux d'un pixel logique, qui permet la localisation en x et en y de l'événement. La taille et le patron d'électrodes choisi influencent fortement le partage des signaux entre les canaux d'un pixel logique. Le prototype de la figure 6.1 fut obtenu après plusieurs itérations sur le patron d'électrodes du détecteur, tel que présenté dans [HMS⁺95] [MBC⁺96] [LBC⁺97] [THC⁺97] [THV98] [THV00] [MDH⁺01] [MDH⁺02] [MHJ⁺03] [MHJ⁺04] [DMM⁺05] [HBD⁺06]. Le but de mon algorithme de simulation est de prédire correctement le partage du signal entre les électrodes des modèles présentés aux figures 6.1 et 6.2. Le premier détecteur fut construit et des mesures furent effectuées. L'article présente les résultats de la simulation et la comparaison avec les résultats expérimentaux. J'y montre que mon algorithme de simulation prédit bien le comportement de partage de charge observé. Je présente dans les figures 6.3 et 6.4 les simulations effectuées pour le deuxième prototype, en construction, selon les mêmes conditions que celles des simulations présentées dans l'article pour le premier prototype. On observe que mon algorithme prédit une nette amélioration de l'efficacité de détection pour le prototype qui présente des pixels de 150 μm comparativement au modèle actuel présentant des pixels de 225 μm .

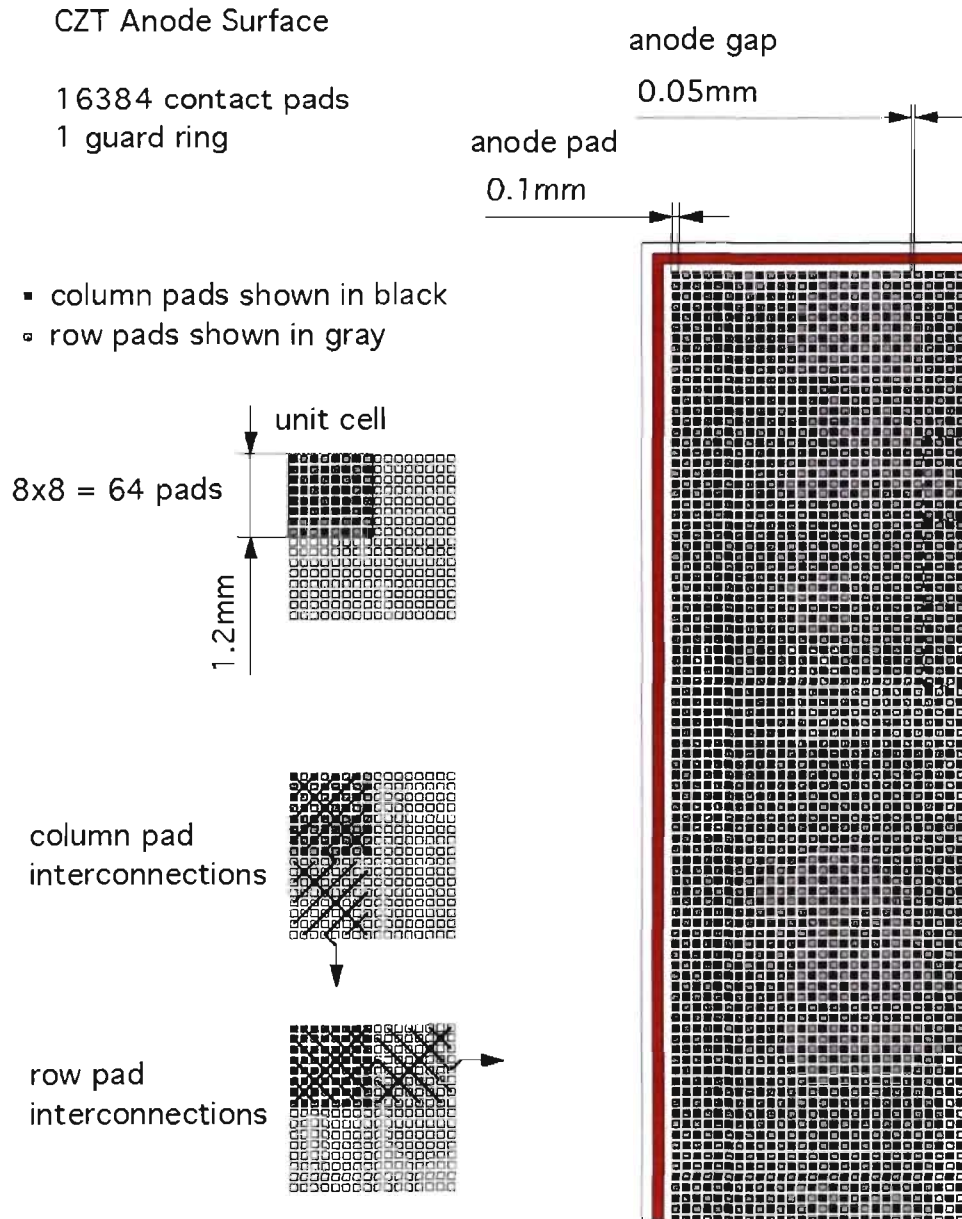
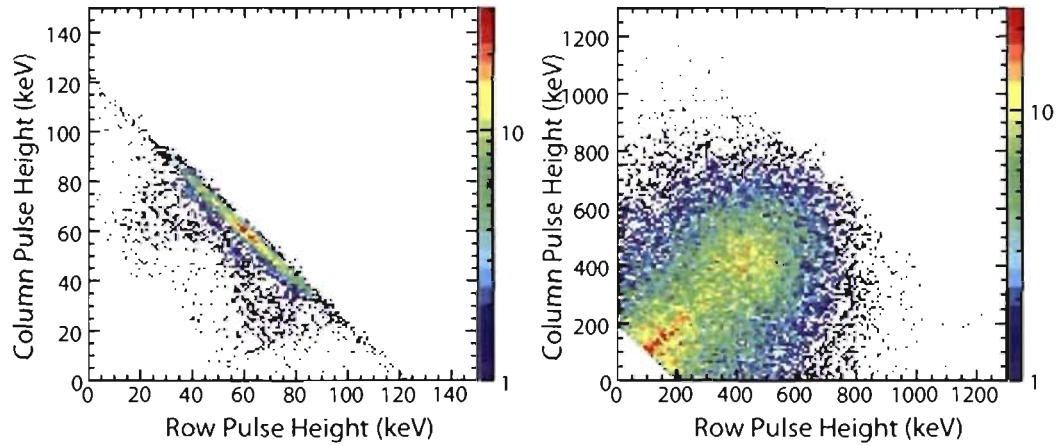
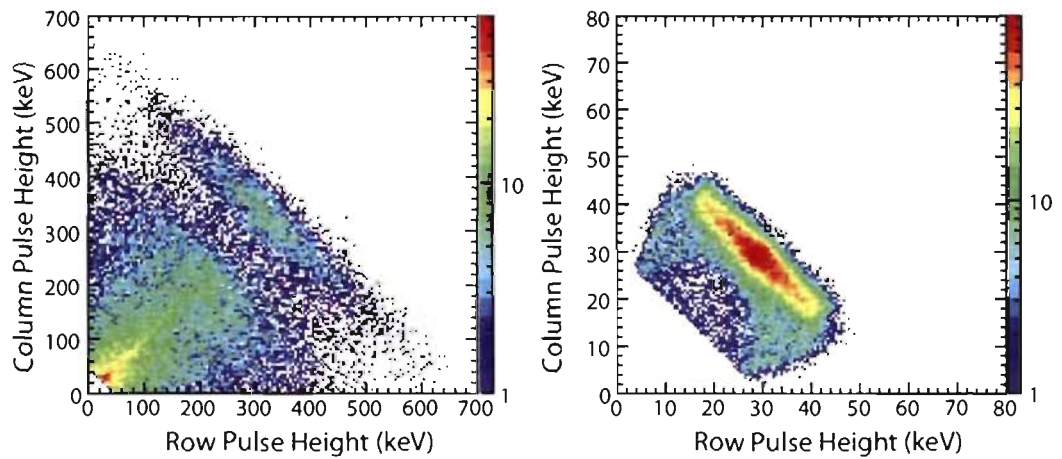


FIG. 6.2 – Prototype de détecteur à bandes orthogonales à une face à base de CdZnTe, pixels de $150\ \mu\text{m}$, 16×16 pixels logique



(a) Co57, simulated for the $150\mu\text{m}$ model (b) Co60, simulated for the $150\mu\text{m}$ model



(c) Cs137, simulated for the $150\mu\text{m}$ model (d) Am241, simulated for the $150\mu\text{m}$ model

FIG. 6.3 - Simulated Charge Sharing scatter plots for the $150\mu\text{m}$ model

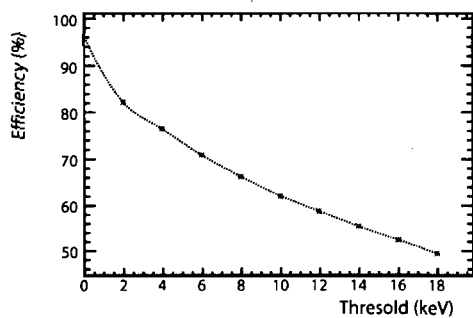
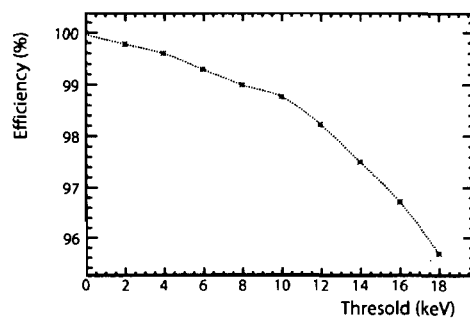
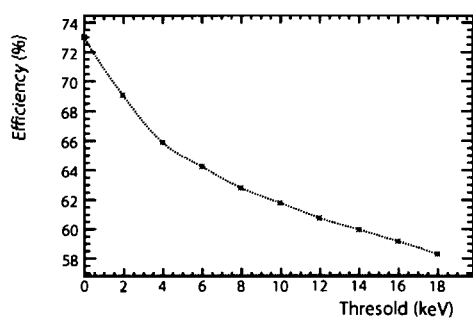
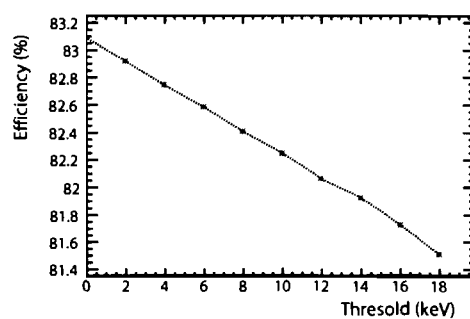
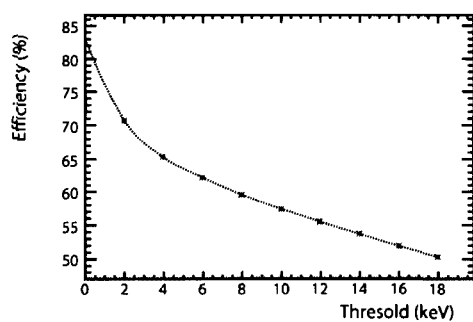
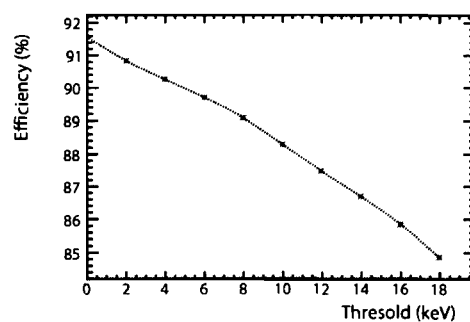
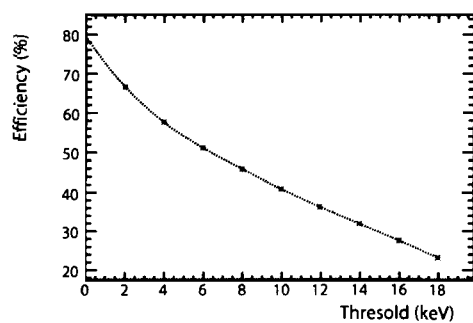
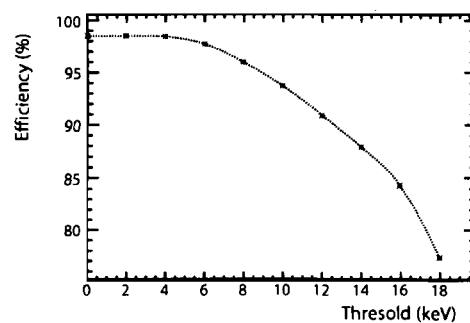
(a) Co57, simulated for the 225 μ m model(b) Co57, simulated for the 150 μ m model(c) Co60, simulated for the 225 μ m model(d) Co60, simulated for the 150 μ m model(e) Cs137, simulated for the 225 μ m model(f) Cs137, simulated for the 150 μ m model(g) Am241, simulated for the 225 μ m model(h) Am241, simulated for 150 μ m model

FIG. 6.4 – Detection efficiency as a function of the energy threshold for the 225 μ m model

Simulation of charge collection processes in semiconductor-based γ -ray detectors

Mathieu Benoit* and L.A. Hamel

Département de Physique, Université de Montréal, Montréal, Canada.

Abstract

We present a Monte-Carlo algorithm for the simulation of charge collection behavior of semiconductor γ -ray detectors. The model takes in accounts electrical properties of the detectors, transport properties of the material, trapping induced by impurities, experimental setup characteristics and γ ray-matter interaction processes. We demonstrate how to include electrostatic repulsion as a correction to diffusion coefficient for Gaussian-shaped charge distribution. Comparison of simulated and measured data for different γ -ray sources for a CdZnTe Single-Sided Charge-Sharing Strip detector are shown to demonstrate the efficiency of the model even for small electrode-pitch detector simulation.

Key words: Semiconductors, charge transport, Monte-Carlo simulation, γ ray detection.

PACS:

1. Introduction

The development of room-temperature semiconductor detectors for γ -ray imaging is limited by their space and energy resolution. To overcome the processes that deteriorate their resolution, we must understand and reproduce the physics from the initial γ -ray's interaction down to measurable signals. We present here a simulation model of the charge collection processes in semiconductor γ -ray detectors.

We begin with a summary of how the initial energy deposition data points are obtained using GEANT4 [1]. Then, we show how the deposited energy data points are transformed into charge distributions. The major transport processes that affect the

*

Email addresses: [REDACTED]

charge distribution in this type of detectors, i.e. transport in the electric field, trapping induced by defects and impurities, and signal induction on the electrodes, are considered. The problem of repulsion and its coupling with diffusion is discussed, and new solutions for spherical and ellipsoidal charge distributions are proposed.

Finally, experimental results obtained with a CdZnTe Single-Sided Charge-Sharing Strip detector [2] for various γ -ray sources are compared to simulations of the same experimental setup with our algorithm, showing good agreement between simulated and experimental data. In summary, we present here a fast, versatile, scalable, highly parallelizable simulation code, written in C++, for the simulation of charge collection in semiconductor γ -ray detectors.

2. GEANT4 simulation

Simulation of the initial interaction and of the subsequent sub-interactions in the detector was done using GEANT4 [1], in combination with its low energy electromagnetic extension [3], allowing valid simulation of processes down to 250 eV for elements with atomic numbers from 1 to 100. A geometrical and physical model of an experimental setup is built. The initial γ -ray and the secondary particles created in the detector are tracked by GEANT4. The physics taken into account includes Compton scattering and photoelectric effect for γ -rays and multiple scattering and ionization for electrons. An energy threshold is usually set so that particles with a kinetic energy lower than this limit will be considered to have deposited their energy locally. In most of our simulations, thresholds of 20 keV for γ -rays and 5 keV for electrons were used. Once an interaction has ended, the list of energy deposition points is transferred as a parameter to our charge transport code.

3. Electron-hole initial distribution

A particle depositing an energy E_d in the detector will create in average N electron-hole pairs

$$N = \frac{E_d}{\epsilon} \quad (1)$$

with $\epsilon = 4.6$ eV, the CdZnTe ionization energy. The distribution of electron-hole pairs at an interaction point can be quite complicated. In this algorithm, the initial pair distribution at an energy deposition point is taken as a spherically symmetric Gaussian distribution. The σ of this distribution is parameterized by

$$R_p = AE_d \left(1 - \frac{B}{1 + CE_d} \right) \quad (2)$$

where $A = 0.95 \mu\text{m}/\text{keV}$, $B = 0.98$ and $C = 0.003 \text{ keV}^{-1}$ are material specific constants [4].

To represent the charge distribution, a parameter $N_{elements}$ is chosen depending on the available computing power and needed accuracy. Each charge cloud, representing an energy deposition point, is broken down into $N_{elements}$ charge elements, distributed randomly in space following a normal distribution with the parameters mentioned earlier.

The electrostatic charge allocated to each cloud depends on (1) and the Fano factor, given as a parameter depending on the simulated semiconductor.

4. Transport

4.1. Transport in the electric field

Charges in semiconductors are subject to the equation of motion

$$\frac{d\vec{r}}{dt} = \mu\vec{E}. \quad (3)$$

where $\vec{r}(t)$ is the position of the carrier as a function of time, μ is the mobility and $\vec{E}(\vec{r})$ is the electric field. In our algorithm, we consider that the charge carriers (electrons or holes) contained in a single element of charge move together. The charge element center of mass position varies according to (3). Hence, we can consider each charge element as a point object, containing a certain number of real charges, depending on the value chosen for $N_{elements}$.

Equation (3) must be integrated numerically. This operation can be time consuming. In order to minimize the integration time and maximize the numerical accuracy, the Runge-Kutta-Fehlberg integration algorithm [5] is used. The numerical error is of the order of $(dt)^5$ and is quantified by a numerical factor evaluated by comparing two different orders of integration for the same time step. For a charge distribution, the integration time step is adjusted in order to provide an average error δ chosen according to our simulation needs. So, the time step length varies during the simulation, increasing (or decreasing) by some factor if the average error at the last step is lower (or higher) than δ . Also, we limit the maximum and minimum time step lengths to prevent infinite loops and to insure a minimal numerical error on other processes taken into account, like diffusion or trapping. Integration time depends mainly on the complexity of the electric field.

This method of integration allows us to work with any electric field. The integration engine works in the same way, whatever method is used to determine the field value at a given point in the detector. The electric field is given as a black box to our simulation algorithm. This allows to use any source for the electric field map.

4.2. Trapping and detrapping

Defects present in the lattice of a semiconductor affect its transport properties. A charge in motion in the detector can fall into a trap, hence leaving the conduction (or valence) band. The motion of the charge is then stopped. A characteristic trapping time, τ_{trap} , defines the average time before a charge encounters a trap. Hecht's equation is usually used to describe such phenomena. However, it has been shown [6] that trapping alone is not sufficient to account for the behavior of many semiconductor detectors. Detrapping of trapped carriers must also be considered. A characteristic detrapping time τ_d , the average time before a charge leaves a trap, is thus defined.

Furthermore, it has been shown [7] that more than one trapping states must be considered in CdZnTe. Hence, in our algorithm, an arbitrary number of traps can be defined, each trap state i being characterized by its trapping and detrapping times τ_i and τ_{di} . A

deep trap is thus a trap with $\tau_{di} \rightarrow \infty$. Traps are supposed to be uniformly distributed in the material. For each charge element, the type of the next trap to be met is randomly selected according to the various trapping times τ_i . The probability for a charge to fall in a trap i is

$$P_i = \frac{1/\tau_i}{\sum 1/\tau_i}. \quad (4)$$

Then, the time before the charge element falls in the trap is determined randomly, following an exponential distribution $P(t)$

$$P(t) = \frac{1}{\tau_i} \exp \frac{-t}{\tau_i} \quad (5)$$

with $\tau_{trap} = (\sum 1/\tau_i)^{-1}$ as parameter. In the same way, the detrapping time is determined from eq. (5) with τ_{di} as a parameter for the exponential distribution. This transport-trapping-detrapping cycle is repeated until charge collection or until a given t_{max} has elapsed. At each integration step, each charge element is monitored and its free/trapped status is revised.

Although traps were said to be considered uniform in the detector volume, additional traps are introduced close to the detector surface to simulate surface states. This is particular important for detectors with large unmetallized gaps between electrodes.

5. Diffusion and electrostatic repulsion

The presence of a density gradient induces diffusion which affects the size of the charge cloud. The electric field created by the charges themselves induces electrostatic repulsion. Diffusion and repulsion affect the charge distribution according to

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = D \nabla^2 \rho - \mu \nabla \cdot (\rho \vec{E}). \quad (6)$$

In the case of a spherical Gaussian charge distribution, the solution to the diffusion part of (6) is

$$\rho(r, t) = \frac{Ne}{8(\pi Dt)^{3/2}} \exp\left(-\frac{r^2}{4Dt}\right). \quad (7)$$

For the repulsion of a uniform spherical charge distribution, Gatti and al. [8] showed that the radius of the sphere increases as

$$R(t) = \sqrt[3]{\frac{3\mu Net}{4\pi\epsilon_0\epsilon_r}}. \quad (8)$$

A first approximation to the repulsion-diffusion problem would be found by assuming 1) that expression (8) remains valid for non uniform (Gaussian) density distributions and 2) that the two processes are decoupled. The size of the charge distribution would then be given by the quadratic sum of the RMS radii of the distributions described by eqs. (7) and (8). However, this is not the case. As repulsion depends on the charge density, it is coupled to the size of the distribution. As the initial distribution expands, its charge density decreases and the repulsion is slowed down. We propose here a simple numerical

method to evaluate the RMS size of a charge distribution that takes into account both diffusion and electrostatic repulsion and the coupling between these processes. This model is adequate for a distribution with an ellipsoidal shape which is appropriate because drift and trapping tends to deform an initially symmetric distribution.

5.1. Spherically symmetric Gaussian charge distribution

Let's consider a spherically symmetric Gaussian charge density

$$\rho(r, t) = \frac{Ne}{(2\pi\sigma(t)^2)^{3/2}} \exp\left(-\frac{r^2}{2\sigma(t)^2}\right). \quad (9)$$

This distribution, along with its resultant electric field are inserted in eq. (6). Multiplying by r^2 and integrating over the volume yields

$$\frac{\partial\sigma(t)^2}{\partial t} = 2D + \frac{\mu Ne}{12\pi^{3/2}\epsilon_0\epsilon_r\sigma(t)}. \quad (10)$$

Although no analytic solution is found, from an initial value $\sigma(0)$, it is straightforward to compute a numerical solution for $\sigma(t)$ at any time t .

In our algorithm, diffusion is treated as a random walk process. At each time step, each charge element is displaced in x , y and z directions by distances randomly selected from a Gaussian distribution with $\sigma = \sqrt{2Ddt}$. Repulsion is included in the simulation by rewriting eq. (10) as

$$\frac{\partial\sigma(t)^2}{\partial t} = 2\left(D + \frac{\mu Ne}{24\pi^{3/2}\epsilon_0\epsilon_r\sigma(t)}\right) = 2D' \quad (11)$$

where

$$D' = D + \frac{\mu Ne}{24\pi^{3/2}\epsilon_0\epsilon_r\sigma(t)} \quad (12)$$

is an effective diffusion coefficient that includes the effects of both diffusion and repulsion. Note that D' is a function of time and decreases as the distribution size increases.

In our simulation, we consider that at each energy deposition point, a spherical Gaussian distribution is created. At each time step, the new σ of each distribution is computed and used for setting the random walk parameter of the charge elements contained in the distribution. Repulsion between the different distributions created at different deposition points is neglected. Fig.1 shows the RMS radius of a 122 keV energy deposition with an initial $\sigma(0) = 10 \mu\text{m}$ in CdZnTe for diffusion only, for a quadratic sum of diffusion and repulsion as proposed in [8], and for eq. (11). It is observed that the quadratic sum of diffusion and repulsion slightly overestimates their combined effect. In the next section, we will show how this method can be extended to ellipsoidal charge distributions.

5.2. Repulsion in an ellipsoidally shaped uniform distribution

In more realistic situations, the charge distribution is not always spherical. Even when the initial distribution is supposed to be spherical, the electron-hole separation process

Repulsion and diffusion in CdZnTe, 122keV event, σ initial = 10 μ m

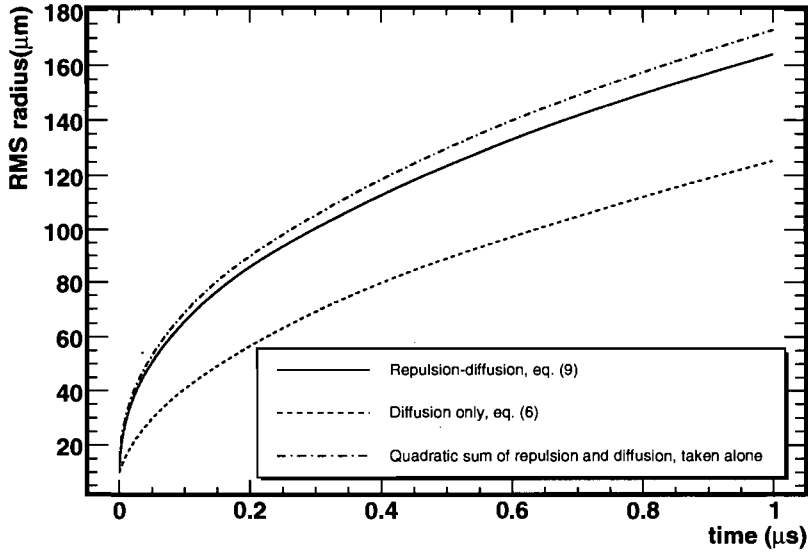


Fig. 1. RMS radius of a 122 keV energy deposition with $\sigma_0 = 10 \mu\text{m}$.

will dominate for the first nanoseconds, leaving a deformed charge distribution. Drift in the detector's electric field and trailing due to trapping will stretch the charge cloud approximately into an ellipsoid. In order to estimate the effect of electrostatic repulsion in a non spherically symmetric distribution, let's consider a uniformly charged ellipsoidal distribution with semiaxes $A(t)$, $B(t)$ and $C(t)$, oriented along the cartesian axes. The charge density is

$$\rho(r, t) = \frac{Ne}{V(t)} = \frac{3Ne}{4\pi A(t)B(t)C(t)} \quad (13)$$

for $\frac{x^2}{A(t)^2} + \frac{y^2}{B(t)^2} + \frac{z^2}{C(t)^2} \leq 1$ and where $V(t)$ is the volume of the ellipsoid. In the absence of diffusion, the charge continuity equation is

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\nabla \cdot \vec{J} = -\mu \nabla \cdot (\rho \vec{E}) = -\mu \vec{E} \cdot \nabla \rho - \mu \rho \nabla \cdot \vec{E} \quad (14)$$

where \vec{J} is the current density. Inside the uniform distribution, $\nabla \rho = 0$ and $\nabla \cdot \vec{E} = \rho / (\epsilon_0 \epsilon_r)$. Inserting (13) into (14) yields

$$\frac{\partial V(t)}{\partial t} = \frac{4\pi}{3} \frac{\partial (A(t)B(t)C(t))}{\partial t} = \frac{\mu Ne}{\epsilon_0 \epsilon_r} \quad (15)$$

For a spherically symmetric uniform distribution, i.e. for $A = B = C = R$, the solution is

$$R(t) = R_0 \sqrt[3]{1 + \frac{3}{4\pi R_0^3} \frac{\mu Ne}{\epsilon_0 \epsilon_r} t} \quad (16)$$

where R_0 is the initial radius at $t = 0$. This is essentially eq. (8) for a non-zero initial radius R_0 .

The most straightforward generalization of eq. (16) for an ellipsoidal shape is the isotropically expanding ellipsoid described by

$$(A(t), B(t), C(t)) = (A_0, B_0, C_0) \sqrt[3]{1 + \frac{3}{4\pi A_0 B_0 C_0} \frac{\mu N e}{\epsilon_0 \epsilon_r} t}. \quad (17)$$

It is easily seen that eq. (17) satisfies eq. (15). From eq. (17), we find that, along the x direction,

$$\frac{\partial A^2}{\partial t} = \frac{\mu N e}{2\pi \epsilon_0 \epsilon_r} \frac{A_0^2}{A B_0 C_0} = \frac{\mu N e}{2\pi \epsilon_0 \epsilon_r} \frac{A}{B C}. \quad (18)$$

For a uniformly charged ellipsoid,

$$\sigma_x^2(t) = \frac{1}{V} \int x^2 dV = \frac{A^2(t)}{5}. \quad (19)$$

Combining eqs. (18) and (19), we obtain $\partial \sigma_x^2 / \partial t$. Similar expressions are found for σ_y and σ_z . The differential equations for $\sigma_{x,y,z}$ can then be expressed as

$$\frac{\partial}{\partial t} (\sigma_x^2, \sigma_y^2, \sigma_z^2) = \frac{\mu N e}{10\sqrt{5}\pi \epsilon_0 \epsilon_r \sigma_x \sigma_y \sigma_z} (\sigma_x^2, \sigma_y^2, \sigma_z^2). \quad (20)$$

Although eq. (20) was obtained for a uniformly charged ellipsoid, we will assume that the time evolution of the RMS values is not too dependent on the details of the distribution. We will thus suppose that eq. (20) still holds for any ellipsoidally shaped distribution.

5.3. Repulsion and diffusion in an ellipsoidally shaped distribution

In section 5.1, it was shown that the combined effect of diffusion and electrostatic repulsion can be treated as a pure diffusion with an effective diffusion coefficient D' (see eq. (12)). In the case of a non-spherically symmetric distribution, the repulsive part of this coefficient depends on the direction, yielding a vectorial effective diffusion coefficient

$$\vec{D}' = \left(D + \frac{\sigma_x e N \mu}{20\sqrt{5}\sigma_y \sigma_z \pi \epsilon_0 \epsilon_r}, D + \frac{\sigma_y e N \mu}{20\sqrt{5}\sigma_x \sigma_z \pi \epsilon_0 \epsilon_r}, D + \frac{\sigma_z e N \mu}{20\sqrt{5}\sigma_x \sigma_y \pi \epsilon_0 \epsilon_r} \right). \quad (21)$$

Although eqs. (12) and (20) are similar, the numerical factors in the denominators of the repulsive term are seen to be different. This is due to the fact that eq. (12) was obtained for a Gaussian charge distribution while a uniform distribution was used for eq. (20). Those numerical factors differ by somewhat less than 5%, an indication that our assumption that eq. (20) remains approximately valid for different charge distributions is reasonable.

In our algorithm, diffusion and repulsion are thus treated together as a random walk process, with step probability parameters $(\partial \sigma_x^2, \partial \sigma_y^2, \partial \sigma_z^2)$ determined using (21) at each time step.

Fig.2 shows an example of how these equations can be used in a practical manner, in CdZnTe. By comparing with Fig.3, we can see how diffusion is coupled with repulsion, yielding an RMS radius somewhat smaller than predicted by the method proposed by [8].

6. Charge induction

The charge induced on the electrodes by the charge carriers is calculated at each time step using Ramo's theorem [9,10]. Solutions for the weighting potentials associated to each electrode must be computed prior to the simulation and given to our algorithm as a black box, as for the electric field.

7. Algorithm's summary

We present here a summarized schematic description of our algorithm. In Fig.4, the main event loop is presented. Dashed arrows represent data transfer, while black arrows represent the computation sequence. Square boxes represent logical objects and oval shaped boxes, processes. Fig.5 presents the stepping process inside an interaction. Finally, Fig.6 presents the algorithm for each charge element produced in an interaction.

8. Experimental validation

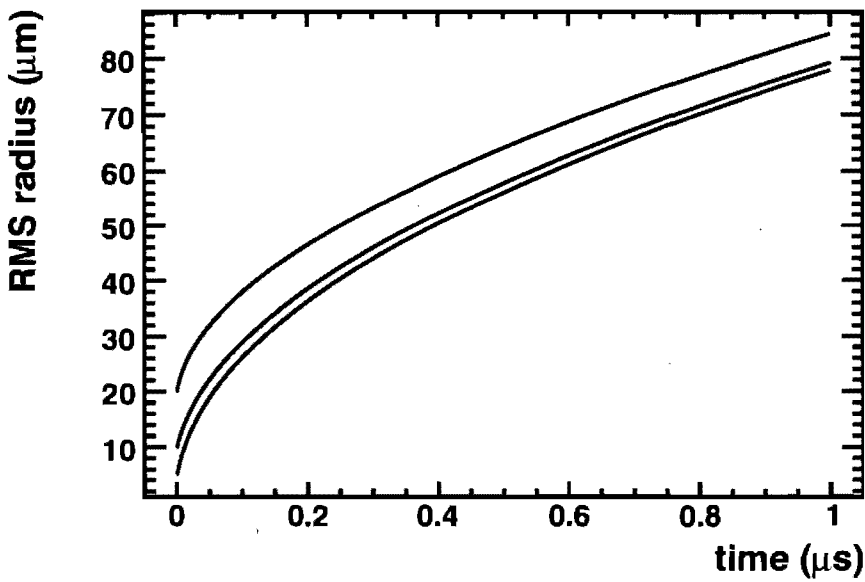
The purpose of developing this algorithm was to study the charge sharing behavior of Single-Sided Charge-Sharing Cross-Strip CdZnTe detectors in a more accurate way than previously achieved with GEANT4 alone [11]. The repulsion-diffusion model proposed by Gatti and al. [8] was not correctly predicting the charge-sharing behavior of our detector. The algorithm presented here takes into account the coupling between diffusion and repulsion, allowing us to predict correctly the charge-sharing for our detectors. Fig.7 shows the detector's geometry. An event is localized in the detector when sufficient charge is induced on the electrodes of the X and Y strips.

Fig.8 shows simulated and experimental scatter plots of X vs. Y pulse heights [11]. Normalized correlation coefficients were computed in order to compare simulated and experimental results and values of 0.93, 0.93, 0.82 and 0.90 were obtained for ^{241}Am , ^{57}Co , ^{137}Cs and ^{60}Co , respectively.

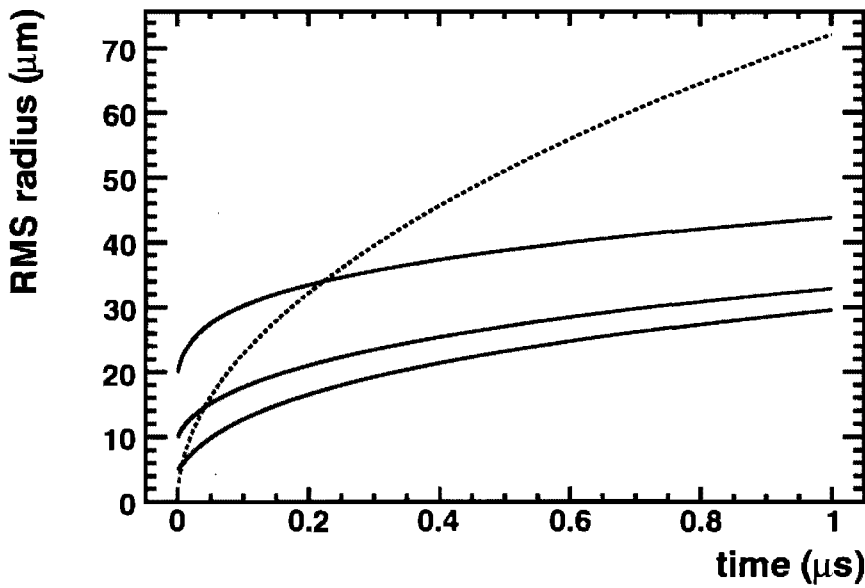
Figure 9 shows the simulated and experimental energy spectra and the charge sharing between X and Y channels. The charge sharing plots show the fraction of events with a given fraction of the event energy recorded in the X (or Y) channel. The correlation coefficient

$$r = \frac{Cov(A,B)}{\sqrt{Var(A)Var(B)}} \quad (22)$$

is also provided in each case as a numerical comparison of the simulations and the measurements. In eq. (22), A and B stand for the the experimental and simulated data that are being compared. The simulation was not optimized for spectroscopy, especially at high energy. Higher energies would require more computing time to achieve comparable precision. Also, many parameters used in the simulations were taken from the literature

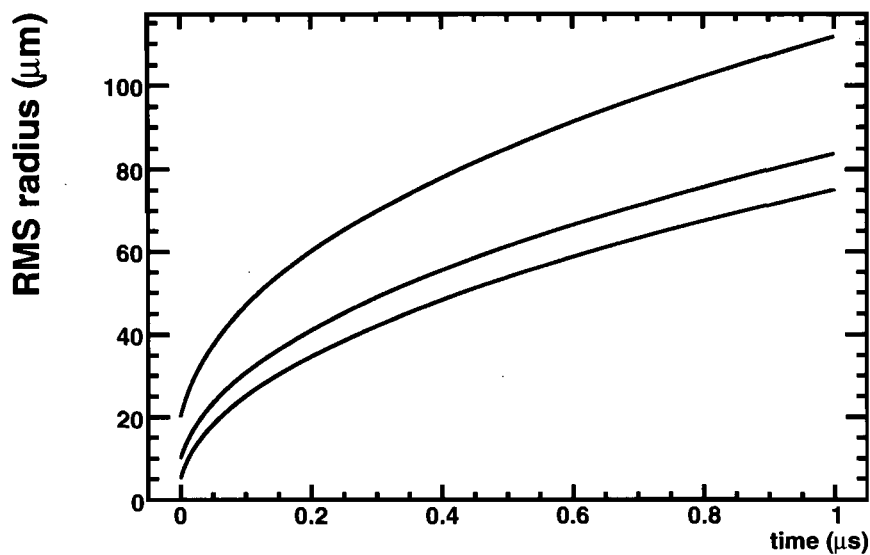


(a) RMS radius in x , y or z for repulsion-diffusion using (21), with $E_{deposited} = 122 \text{ keV}$, for $\sigma_x = 5 \mu\text{m}$, $\sigma_y = 10 \mu\text{m}$ and $\sigma_z = 20 \mu\text{m}$ at $t = 0$.

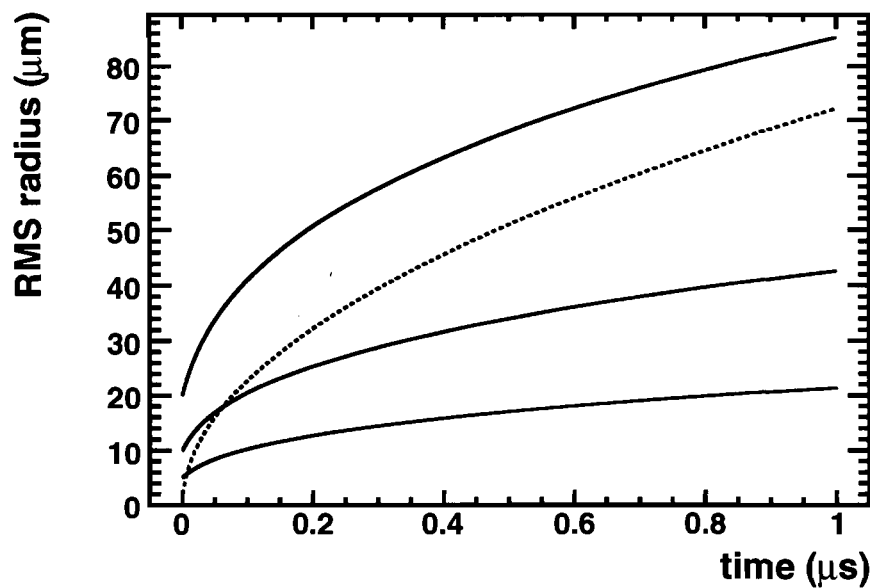


(b) Same as previous figure, with repulsion and diffusion (dashed line) contributions drawn separately (Quadratic sum of the diffusion curve to each other curves leads back to (a))

Fig. 2. Repulsion-diffusion coupling for an ellipsoidal charge distribution in CdZnTe



(a) RMS radius in x , y or z for repulsion-diffusion using the quadratic sum of eqs. (7) and (17), with $E_{deposited} = 122$ keV, for $\sigma_x = 5$ μm , $\sigma_y = 10$ μm and $\sigma_z = 20$ μm at $t = 0$.



(b) Same as previous figure, with repulsion and diffusion (dashed line) contributions drawn separately

Fig. 3. Quadratic sum of repulsion and diffusion for an ellipsoidal charge distribution in CdZnTe

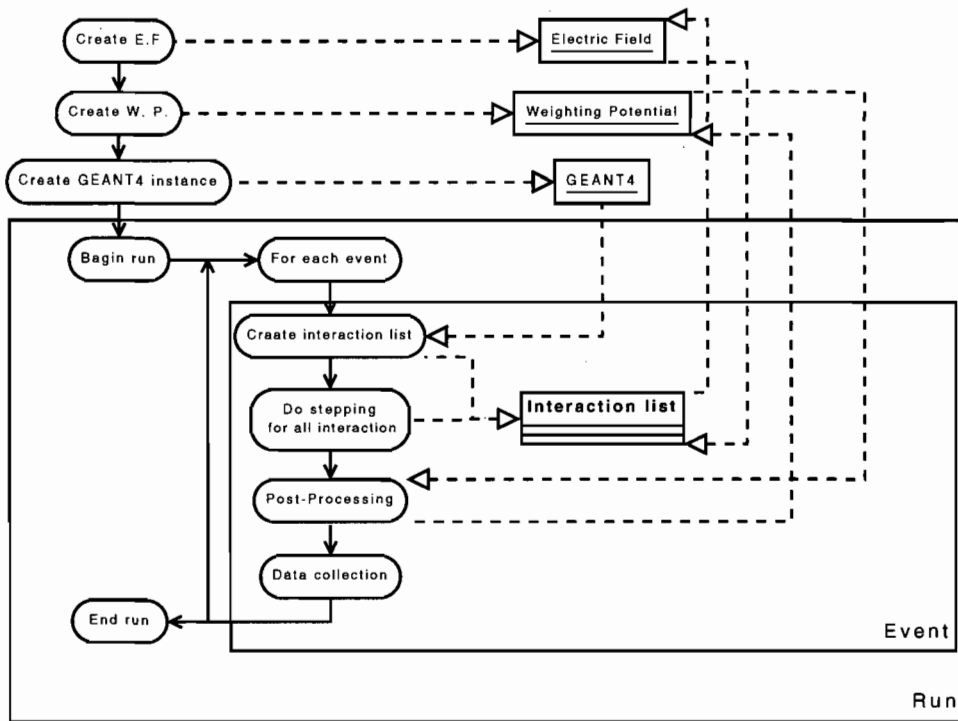


Fig. 4. Global simulation

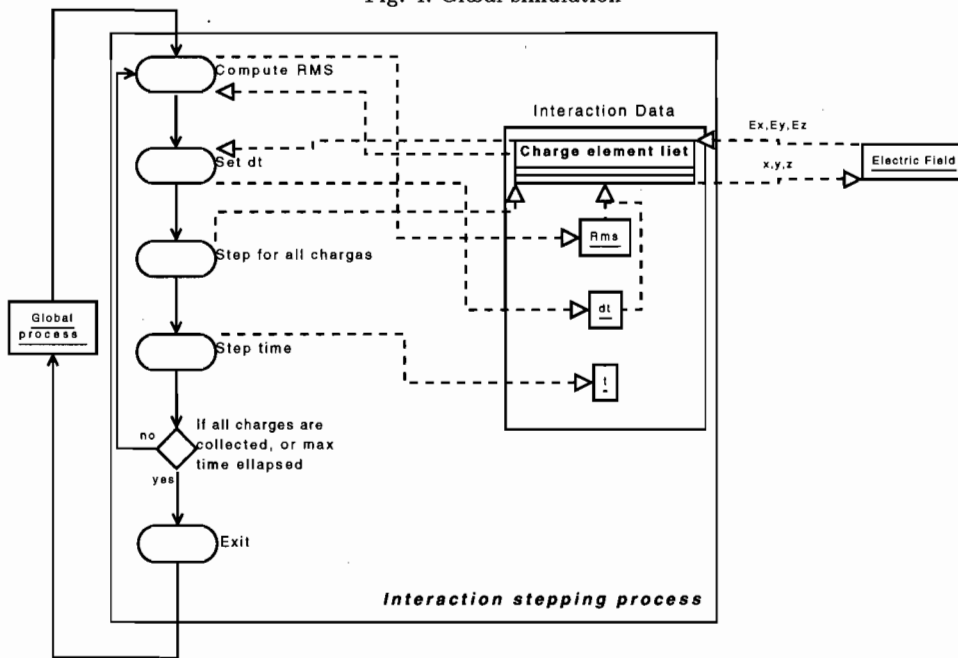


Fig. 5. Interaction stepping process

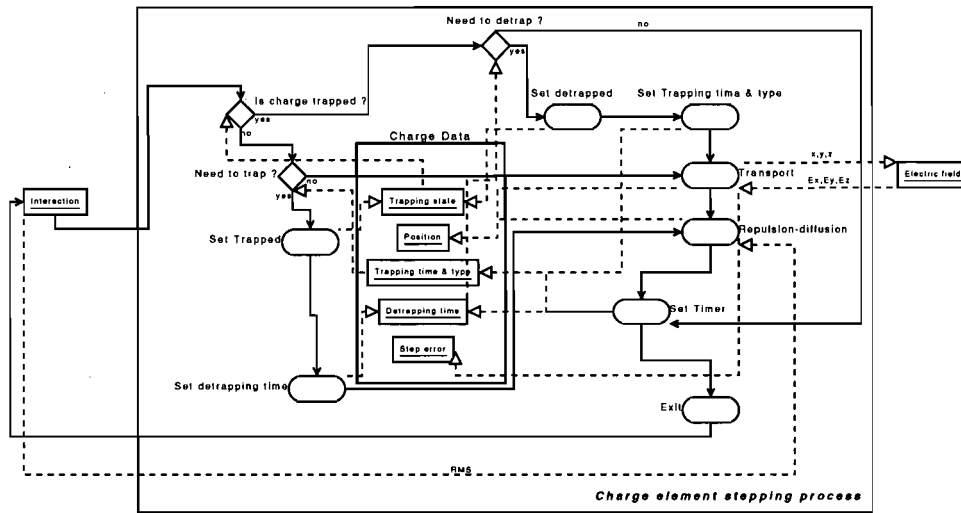


Fig. 6. Charge element stepping process

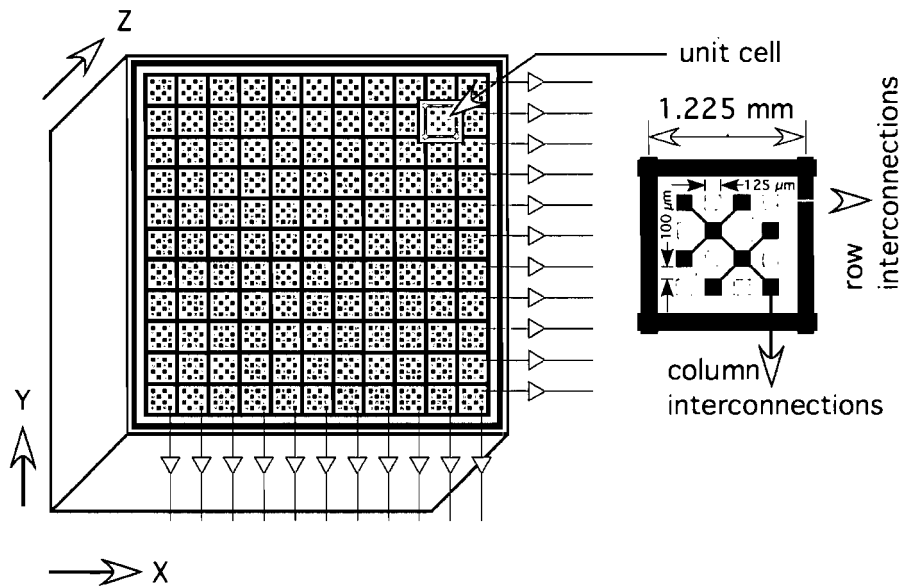
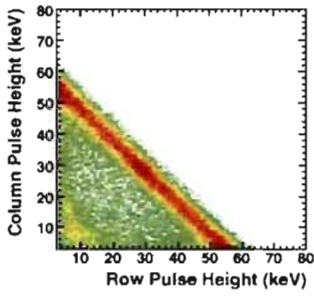
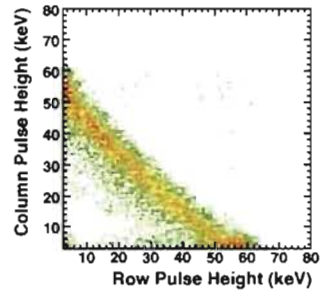


Fig. 7. 225µm Single-Sided Charge-Sharing Strip detector

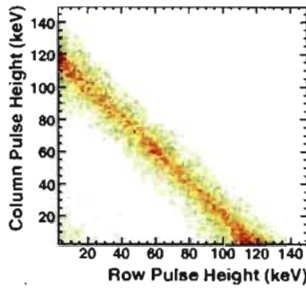
and were not measured with the detector used for the measurements. We conclude that there is a satisfactory agreement between the simulated and experimental data, given the computing time allotted to the simulation.



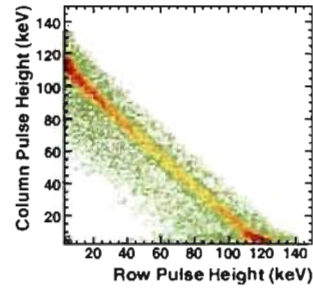
(a) ^{241}Am , simulated



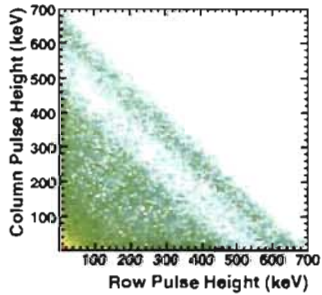
(b) ^{241}Am , experimental



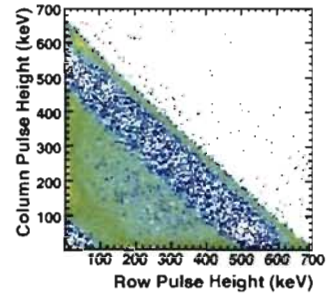
(c) ^{57}Co , simulated



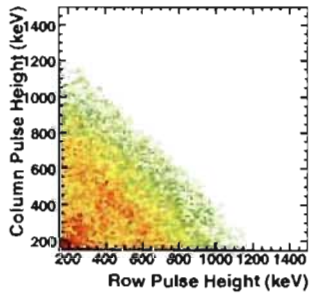
(d) ^{57}Co , experimental



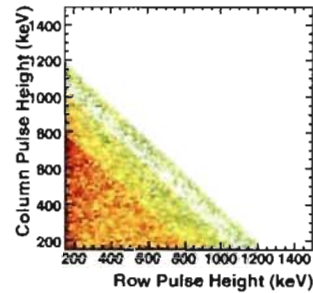
(e) ^{137}Cs , simulated



(f) ^{137}Cs , experimental

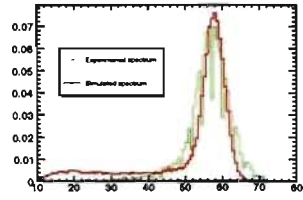


(g) ^{60}Co , simulated

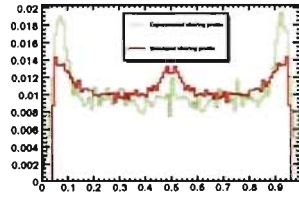


(h) ^{60}Co , experimental

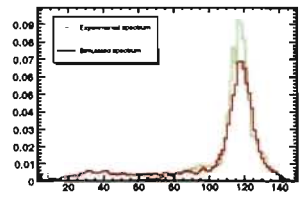
Fig. 8. Experimental (left) and simulated (right) charge-sharing scatter plots for the $225\mu\text{m}$ model



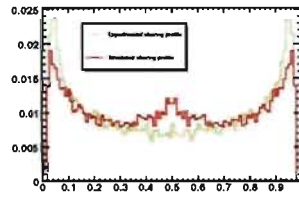
(a) ^{241}Am , simulated and experimental energy spectrum, $r = 0.90$



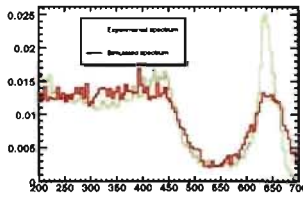
(b) ^{241}Am , simulated and experimental charge sharing, $r = 0.71$



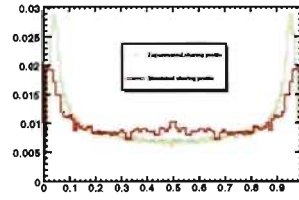
(c) ^{57}Co , simulated and experimental energy spectrum, $r = 0.97$



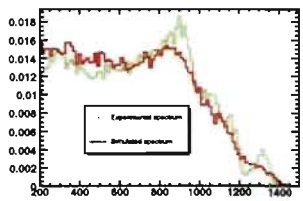
(d) ^{57}Co , simulated and experimental charge sharing, $r = 0.84$



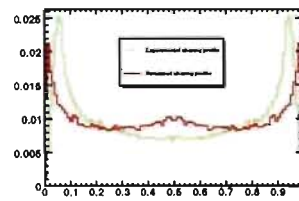
(e) ^{137}Cs , simulated and experimental energy spectrum, $r = 0.985$



(f) ^{137}Cs , simulated and experimental charge sharing, $r = 0.81$



(g) ^{60}Co , simulated and experimental energy spectrum, $r = 0.34$



(h) ^{60}Co , simulated and experimental charge sharing, $r = 0.37$

Fig. 9. Experimental and simulated energy spectra and charge sharing behavior for the $225\mu\text{m}$ model. The charge sharing plots show the fraction of events with a given fraction of the total signal in the X (Y) channel. The correlation coefficient r between the experimental and simulated data is provided in each case.

9. Conclusion

Our main motivation in the development of this algorithm was to explain inconsistencies between the charge sharing behavior of our 225 μm pitch CdZnTe detector prototype and predictions made from a simple model of diffusion and repulsion [11]. We built a versatile simulation package for the simulation of charge collection in semiconductor-based γ -ray detectors that takes into account γ -ray's interaction with matter, multiple trapping, detrapping, accurate electric field and weighting potential maps, diffusion and repulsion, using numerical methods that both minimize simulation time and maximize numerical accuracy. We developed a method to model the diffusion and repulsion of spherical and ellipsoidal charge distributions in semiconductors. The same model was also used to predict that the charge sharing behavior of our detector would improve markedly with a 150 μm pitch compared with the present pitch of 225 μm [12].

References

- [1] Geant4 Collaboration, S. Agostinelli, al., Geant4-a simulation toolkit, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A* 506 (2003) 250–303.
- [2] J. R. Macri, L. A. Hamel, M. Julien, R. S. Miller, B. Donmez, M. L. McConnell, J. M. Ryan, M. Widholm, *Single-sided CZT strip detectors* 51 (5) (2004) 2453–2460.
- [3] A. G. Maire, Geant4 low energy electromagnetic models for electrons and photons, *European Organization For Nuclear Research*.
- [4] PDG (Ed.), *Particle Data Group: Review of particle properties*, Vol. 56 of Part II, *Rev Mod Phys*, 1984.
- [5] E. Fehlberg, *Low-order classical Runge-Kutta formulas with stepsize control*, NASA Technical Report (1969) R-315.
- [6] M. Martini, T. McMath, *Trapping and detrapping effects in lithium drifted germanium and silicon detectors*, *Nucl. Instrum. Methods* 79 (1970) 259–76.
- [7] O. Tousignant, L. A. Hamel, J. F. Courville, J. R. Macri, M. Mayer, M. L. McConnell, J. M. Ryan, *Transport properties and performance of CdZnTe strip detectors* 45 (3) (1998) 413–416.
- [8] E. Gatti, A. Longoni, P. Rehak, M. Sampietro, *Dynamics of electrons in drift detectors*, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A* 253 (1987) 393–399.
- [9] S. Ramo, *Currents induced by electron motion*, *Proceedings of the I.R.E.* 27 (1939) 584.
- [10] G. Cavalleri, *Extension of Ramo's theorem as applied to induced charge in semiconductor detectors*, *Nucl. Instr. and Meth.* 33 (1971) 137–140.
- [11] B. Donmez, J. R. Macri, M. L. McConnell, J. M. Ryan, M. Widholm, T. Narita, L. A. Hamel, *Further studies of single-sided charge-sharing CZT strip detectors* 5922 (2005) 62–70.
- [12] L. A. Hamel, M. Benoit, B. Donmez, J. R. Macri, M. L. McConnell, T. Narita, J. M. Ryan, *Optimization of Single-sided Charge-sharing Strip Detectors*, in: *Nuclear Science Symposium Conference Record*, 2006. IEEE, Vol. 6, 2006, pp. 3759–3761.

CHAPITRE 7

CONCLUSION

Ce projet décrit l'élaboration d'un algorithme de simulation pour la modélisation du fonctionnement des dispositifs à base de semi-conducteurs pour la spectroscopie et l'imagerie du rayonnement γ .

En premier lieu, il fut montré comment utiliser la librairie GEANT4 pour simuler la déposition d'énergie par un photon γ dans les semi-conducteurs. À partir des données obtenues pour la déposition d'énergie, il fut expliqué comment générer la distribution de charge initiale dans le dispositif. Ensuite, il est expliqué comment traiter les problèmes du piégeage et du dépiégeage, du transport dans le champ électrique externe et du couplage entre la diffusion et la répulsion à l'aide d'un algorithme de Monte-Carlo. Nous expliquons aussi comment le signal généré est simulé grâce au théorème de Ramo.

Une attention particulière est portée sur le couplage entre la répulsion et la diffusion. Deux nouveaux modèles sont proposés pour traiter respectivement les distributions de charge sphériques et ellipsoïdales. Il est aussi montré comment traiter la répulsion comme une modification au coefficient de diffusion et comment inclure l'effet des autres processus comme le piégeage et le transport dans le champ électrique sur la répulsion

Une comparaison entre des résultats expérimentaux obtenus sur un prototype de détecteur à bandes orthogonales à une face à base de CdZnTe à pixels de 225 μm et des simulations montre une bonne corrélation entre le modèle et le détecteur réel. Des prédictions ont été effectuées pour un modèle à pixels de 150 μm et prédisent une nette amélioration dans la performance du détecteur. L'ensemble de ces travaux fut l'objet d'un article présenté au chapitre 6, *Simulation of charge collection process in semiconductor-based γ -ray detectors*, dont je suis le principal auteur.

L'algorithme de simulation et le code qui y est associé fut construit de manière

à pouvoir encore évoluer. Le choix de la programmation orientée objet permet une durabilité accrue du code source en permettant la mise à jour de chaque élément du code sans affecter le fonctionnement des autres. Le programme comme tel est construit de manière à pouvoir être utilisé pour plusieurs matériaux et pour plusieurs patrons d'électrode. Le potentiel de cet algorithme reste donc encore à être exploité.

BIBLIOGRAPHIE

- [Car03] Yu Y. Peter & M. Cardona. *Fundamentals of Semiconductors, 3rd Edition*. Springer, 2003.
- [DMM⁺05] B. Donmez, J. R. Macri, M. L. McConnell, J. M. Ryan, M. Widholm, L. A. Hamel, and T. Narita. Continued studies of single-sided charge-sharing CZT strip detectors. In *Nuclear Science Symposium Conference Record, 2005 IEEE*, volume 3, pages 1408–1411, October 23–29, 2005.
- [Feh69] Erwin Fehlberg. Low-order classical runge-kutta formulas with stepsize control. *NASA Technical Report*, pages R–315, 1969.
- [GAa03] Geant4 Collaboration, S. Agostinelli, and al. Geant4-a simulation toolkit. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A*, 506 :250–303, July 2003.
- [GLRS87] E. Gatti, A. Longoni, P. Rehak, and M. Sampietro. Dynamics of electrons in drift detectors. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A*, 253 :393–399, January 1987.
- [HBD⁺06] L. A. Hamel, M. Benoit, B. Donmez, J. R. Macri, M. L. McConnell, T. Narita, and J. M Ryan. Optimization of Single-sided Charge-sharing Strip Detectors. In *Nuclear Science Symposium Conference Record, 2006. IEEE*, volume 6, pages 3759–3761, October 2006.
- [HMS⁺95] L. A. Hamel, J. R. Macri, C. M. Stahle, J. Odom, F. Birsa, P. Shu, and F. P. Doty. Signal generation in CdZnTe strip detectors. In *Nuclear Science Symposium and Medical Imaging Conference Record, 1995., 1995 IEEE*, volume 1, pages 139–143, October 21–28, 1995.
- [Hor07] David Horman. Pair production. *Wikipedia*, 2007.
- [Kno00] Glen Knoll. *Radiation detection and measurement*. Wiley, 3rd edition edition, 2000.
- [LBC⁺97] K. Larson, D. V. Boykin, M. L. Cherry, J. F. Courville, F. P. Doty, A. Drake, T. G. Guzik, L. A. Hamel, J. R. Macri, M. Mayer, M. L.

- McConnell, J. M. Ryan, and O. Tousignant. CdZnTe strip detectors as sub-millimeter resolution imaging gamma radiation spectrometers. In *Bioengineering Conference, 1997., Proceedings of the IEEE 1997 23rd Northeast*, pages 59–60, May 21–22, 1997.
- [Lun02] Mark Lundstrom. *Fundamentals of Carrier Transport, 2nd edn*, volume 13. Meas. Sci. Technol., 2002.
- [MBC⁺96] M. Mayer, D. V. Boykin, M. L. Cherry, J. F. Courville, F. P. Doty, A. Drake, T. G. Guzik, L. A. Hamel, K. Larson, J. R. Macri, M. L. McConnell, J. M. Ryan, and O. Tousignant. Performance of CdZnTe strip detectors as sub-millimeter resolution imaging gamma radiation spectrometers. In *Nuclear Science Symposium, 1996. Conference Record., 1996 IEEE*, volume 2, pages 830–834, November 2–9, 1996.
- [MDH⁺01] J. R. Macri, P. Dufour, L. A. Hamel, M. Julien, M. L. McConnell, M. McClish, J. M. Ryan, and M. Widholm. Study of 5 and 10 mm thick CZT strip detectors. In *Nuclear Science Symposium Conference Record, 2001 IEEE*, volume 4, pages 2316–2320, November 4–10, 2001.
- [MDH⁺02] J. R. Macri, B. Donmez, L. A. Hamel, M. Julien, M. McClish, M. L. McConnell, R. S. Miller, J. M. Ryan, and M. Widholm. Readout and performance of thick CZT strip detectors with orthogonal coplanar anodes. In *Nuclear Science Symposium Conference Record, 2002 IEEE*, volume 1, pages 468–472, November 10–16, 2002.
- [MHJ⁺03] J. R. Macri, L. A. Hamel, M. Julien, R. S. Miller, B. Donmez, M. L. McConnell, J. M. Ryan, and M. Widholm. Single-sided CZT strip detectors. In *Nuclear Science Symposium Conference Record, 2003 IEEE*, volume 5, pages 3385–3389, October 19–25, 2003.
- [MHJ⁺04] J. R. Macri, L. A. Hamel, M. Julien, R. S. Miller, B. Donmez, M. L. McConnell, J. M. Ryan, and M. Widholm. Single-sided CZT strip detectors. *Transactions on Nuclear Science*, 51(5) :2453–2460, October 2004.

- [PDG84] PDG, editor. *Particle Data Group : Review of particle properties*, volume 56 of *Part II*. Rev Mod Phys, 1984.
- [Ram39] Simon Ramo. Currents induced by electron motion. *Proceedings of the I.R.E.*, 27 :584, 1939.
- [THC+97] O. Tousignant, L. A. Hamel, J. F. Courville, J. R. Macri, M. Mayer, M. L. McConnell, and J. M. Ryan. Transport properties and performance of CdZnTe strip detectors. In *Nuclear Science Symposium, 1997. IEEE*, pages 556–560, November 9–15, 1997.
- [THC+98] O. Tousignant, L. A. Hamel, J. F. Courville, J. R. Macri, M. Mayer, M. L. McConnell, and J. M. Ryan. Transport properties and performance of CdZnTe strip detectors. *IEEE Journal of Nuclear Science*, 45(3) :413–416, June 1998.
- [THV98] O. Tousignant, L. A. Hamel, and D. Vasilevski. Weighting potentials in CdZnTe gamma-ray detectors with segmented electrodes. In *Nuclear Science Symposium, 1998. Conference Record. 1998 IEEE*, volume 1, pages 176–181, November 8–14, 1998.
- [THV00] O. Tousignant, L. A. Hamel, and D. Vasilevski. Weighting potentials in CdZnTe gamma-ray detectors with segmented electrodes. *Transactions on Nuclear Science*, 47(6) :2084–2086, December 2000.

Annexe I

Annexe 1 : Solution de l'équation de Poisson avec COMSOL Multiphysics

La méthode des éléments finis permet de résoudre l'équation de Poisson dans des géométries complexes pour diverses conditions aux frontières. Soit l'équation de Poisson :

$$-\nabla\epsilon\nabla u = \rho \quad (\text{I.1})$$

$$u = g, \forall u \in \Gamma_0 \quad (\text{I.2})$$

$$\epsilon\nabla u \cdot \hat{n} = q, \forall u \in \Gamma_1 \quad (\text{I.3})$$

où ϵ est la constante diélectrique, ρ la densité de charge, u le potentiel, g et q des fonctions connues et Γ_i les bords de la géométrie tel que $\Gamma_0 \cup \Gamma_1 = \Gamma$, Γ étant l'ensemble des frontières du problème.

Si on multiplie l'équation I.1 par une fonction test $w(\vec{r})$ et que l'on fait une intégration par parties sur le volume Ω , on obtient :

$$\int_{\Omega} \epsilon\nabla u \cdot \nabla w dV = \int_{\Omega} \rho w dV + \int_{\Gamma} \epsilon\nabla u \cdot \hat{n} w dS \quad (\text{I.4})$$

On pose $u = u_g + \delta u$, où u_g est une fonction qui est égale à g sur Γ_0 et δu une fonction que l'on cherche qui est nulle sur Γ_0 . On pose aussi que la fonction test est choisie pour être nulle sur Γ_0 . On obtient alors :

$$\int_{\Omega} \epsilon\nabla \delta u \cdot \nabla w dV = \int_{\Omega} \rho w dV + \int_{\Gamma_1} q w dS - \int_{\Omega} \epsilon\nabla u_g \cdot \nabla w dV \quad (\text{I.5})$$

On pose ensuite que :

$$u_k = u_g + \sum_{j=1}^n u_j \phi_j \quad (\text{I.6})$$

où les j représentent les degrés de liberté de l'élément k d'une triangulation du domaine Ω . Le nombre de degrés de liberté dépend du degré du polynôme d'interpolation ϕ_j utilisé. La somme des u_k donne la solution approximée sur la triangulation couvrant Ω . On effectue ici la principale approximation de la méthode. Pour que la solution exacte de l'équation de Poisson puisse être égale à I.6, on doit avoir une somme infinie. En prenant une somme finie, on obtient une approximation de la solution.

En insérant cette expression dans l'équation I.5, on peut construire un système d'équations linéaires tel que $AX=B$, où X est le vecteur des u_j et :

$$A_{ij} = \int_{\Omega^K} \epsilon \nabla \delta \phi_i \cdot \nabla \phi_j dV \quad (\text{I.7})$$

$$B_j = \int_{\Omega^K} \rho \phi_j dV + \int_{\Gamma_1^K} q \phi_j dS - \int_{\Omega^K} \epsilon \nabla u_g \cdot \nabla \phi_j dV \quad (\text{I.8})$$

Où K est l'indice de l'élément de la triangulation où se trouvent les noeuds d'interpolation i et j . Si les noeuds ne sont pas dans le même élément, alors le terme A devient nul. En solutionnant ce système d'équations, on obtient la solution approximée de l'équation de Poisson construite par des fonctions d'interpolation polynomiales par morceaux sur la triangulation choisie pour le problème.

Dans la pratique, l'assemblage d'un code effectuant le calcul de la solution de l'équation de Poisson pour des géométries complexes en utilisant cette méthode peut devenir longue et complexe. Heureusement, des codes commerciaux existent pour résoudre ce problème et une foule d'autres, encore bien plus complexes dans leurs formulations que l'équation de Poisson. Pour mes simulations, j'ai utilisé le logiciel COMSOL multiphysics. Je présente ici les différentes étapes à suivre pour construire et résoudre l'équation de Poisson dans une géométrie à l'aide du logiciel.

I.1 Création du modèle géométrique

À l'ouverture du programme, on doit choisir le type de modèle que l'on veut créer. Pour les dispositifs que nous simulons, on choisit le module AC/DC, en mode électrostatique 3D.

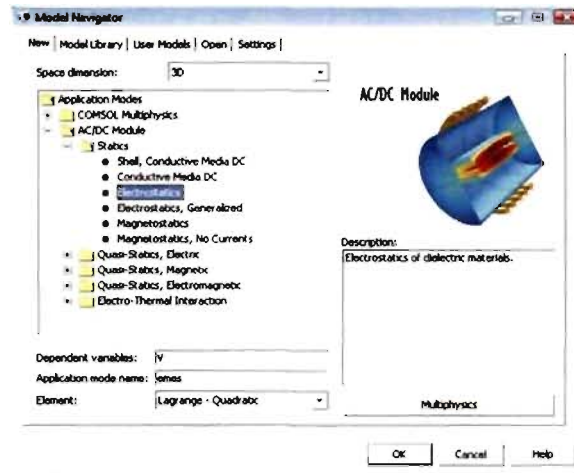


FIG. I.1 – Choix du type de modèle

On doit ensuite créer la géométrie du problème. On doit d'abord créer les volumes du modèle. Par exemple le corps du détecteur, un bloc de semiconducteur :

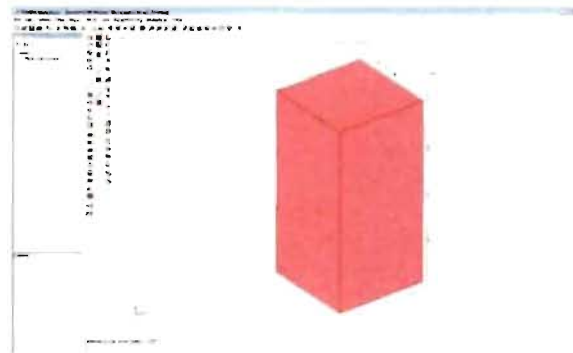


FIG. I.2 – un bloc de CZT

Une fois les volumes créés, on passe à la dimension inférieure. Si on veut par exemple, ajouter des électrodes bidimensionnelles à une surface, on utilise le menu *Draw* → *Work plane settings*, et on se crée un plan de travail sur la face où l'on

veut ajouter des électrodes :

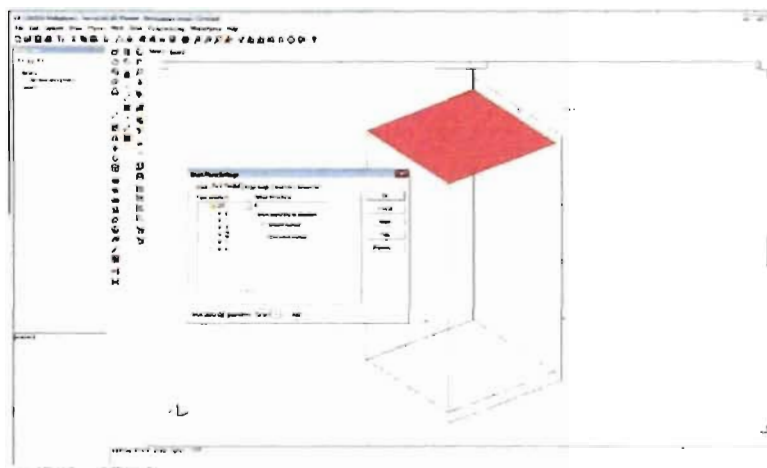


FIG. I.3 – Création d'un plan de travail

Le logiciel crée une deuxième fenêtre de travail parallèle à la face choisie, où on peut dessiner les électrodes. On peut voir les limites de la face choisie en bleu. Ici, j'ajoute une grille de 11x11 pixels à mon modèle. Une fois toutes les électrodes dessinées, on doit les sélectionner (Ctrl-A) et les inclure dans notre modèle 3D avec la commande *Draw* → *Embed* :

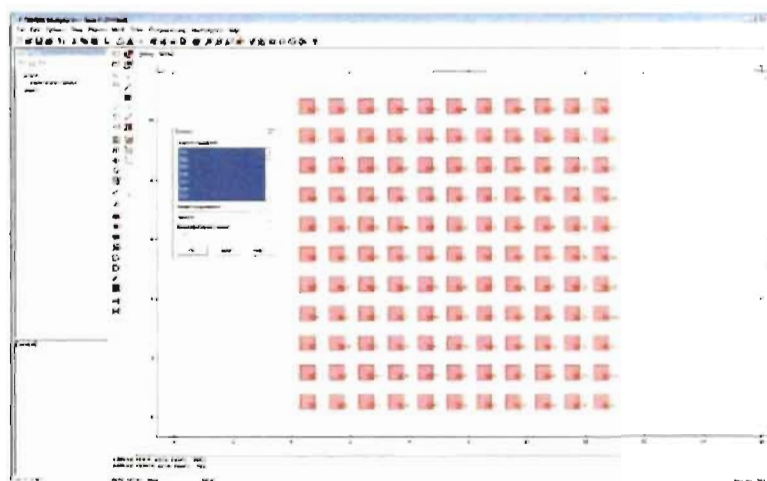


FIG. I.4 – Ajout des électrodes au modèle 3D

On procède ainsi jusqu'à ce que l'on obtienne le modèle voulu.

I.2 Physique du problème

La deuxième étape consiste à choisir les paramètres physiques et les conditions aux frontières pour notre problème. On choisit ces paramètres dans les menus *Physics* → *subdomain setting* et *physics* → *Boundary settings*. Pour le domaine, on a à choisir la permittivité relative et la charge de volume du matériau dans chaque domaine de la géométrie. Généralement, on peut mettre la charge de volume à 0, surtout dans le cas du CZT. Pour la permittivité, 12 est une valeur adéquate pour le CZT :

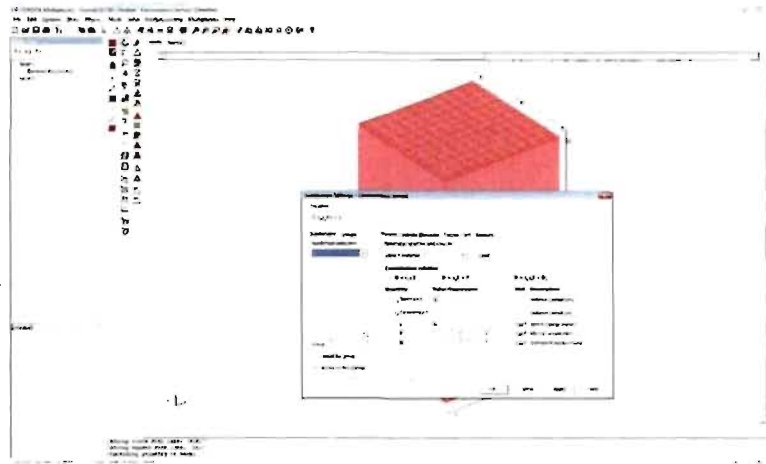


FIG. I.5 – Paramètres du matériau

Pour les conditions frontières, on distinguera 2 types de conditions. Sur les électrodes, on a une condition de Dirichlet, c'est-à-dire qu'on fixe le potentiel électrique :

Pour les autres surfaces, on a une interface entre deux matériaux. La condition peut s'exprimer comme $\hat{n} \cdot \epsilon \vec{E} = \rho_s$. Cette condition est traitée par le logiciel en ajoutant un terme à la matrice A_{ij} :

Dans certains cas, on aura besoin de conditions frontière périodiques. La condition de symétrie $\hat{n} \cdot \epsilon \vec{E} = 0$ sur les facettes opposées du bloc est suffisante pour assurer la périodicité de la solution dans la direction de la normale \hat{n} de ces faces.

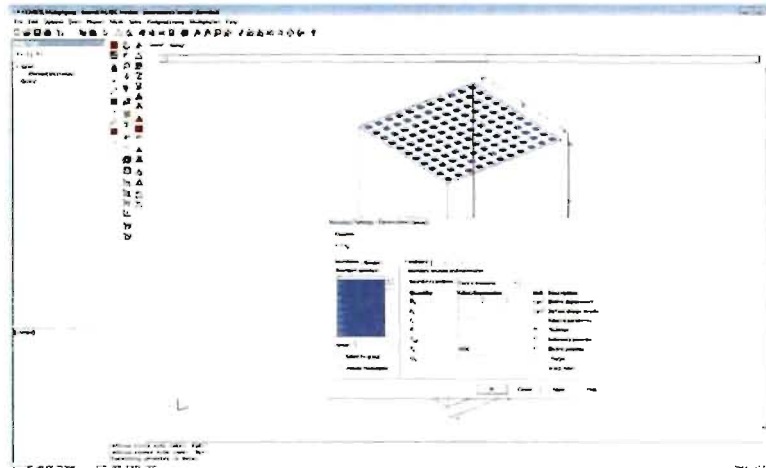


FIG. I.6 – Conditions frontière des électrodes

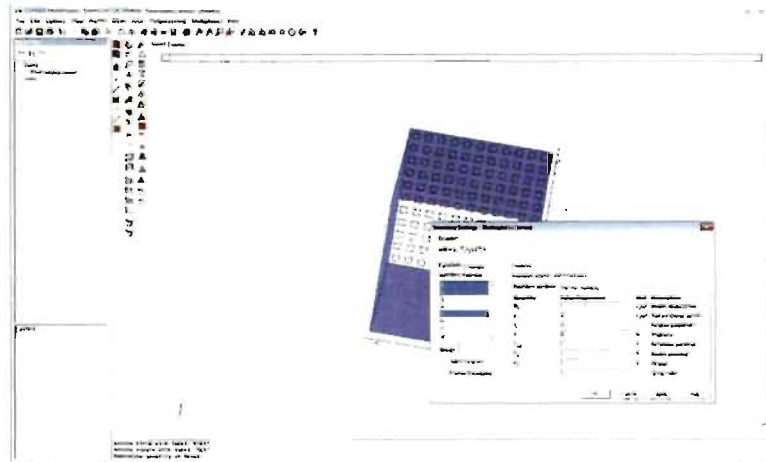


FIG. I.7 – Conditions frontière des autres surfaces

I.3 Maillage

Le maillage est un des points les plus importants pour obtenir une solution précise. On doit composer avec la puissance et la mémoire des ordinateurs sur lesquels on résout ces modèles. Cela limite le nombre d'éléments de maillage que l'on peut utiliser pour mailler un volume. Aussi, on ne désire pas concentrer le maillage là où la valeur de la fonction que l'on cherche ne varie pas beaucoup. Dans le cas d'un détecteur à pixels, on veut concentrer les éléments près des pixels, où le champ électrique varie rapidement, et mettre peu d'éléments près de la cathode où

le champ est constant. Le logiciel utilise par défaut des fonctions d'interpolation quadratiques. Il suffirait donc d'un élément pour obtenir la solution exacte sur un domaine où le potentiel varie linéairement. Dans la zone où le potentiel varie rapidement, on désire avoir des éléments suffisamment petits pour que la solution soit localement polynomiale sur le domaine des éléments. On doit aussi éviter d'augmenter la taille et le nombre de détails du modèle inutilement. Par exemple, pour obtenir le champ électrique d'une grille de pixels, il est préférable d'utiliser un modèle d'un seul pixel avec des conditions frontière de périodicité en supposant que le détecteur est infini.

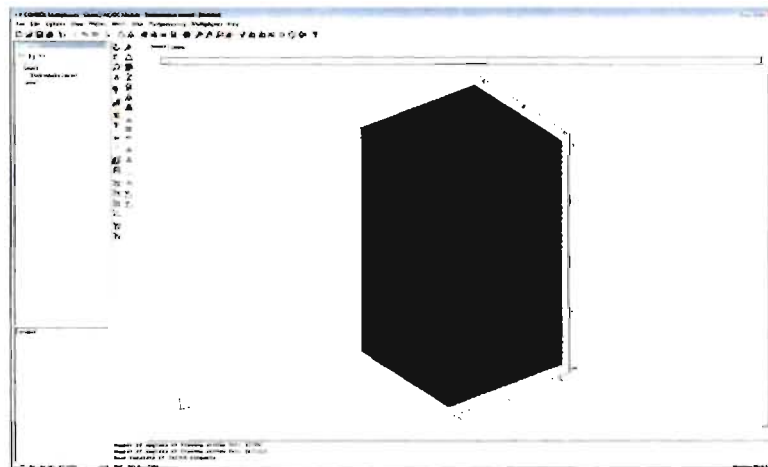


FIG. I.8 – Un maillage

Si la géométrie fut construite adéquatement et si les conditions du domaine et des frontières sont spécifiées, on peut généralement débiter avec le maillage que génère automatiquement le logiciel. Le programme ajoutera automatiquement plus d'éléments près des pixels. Ensuite, plusieurs méthodes s'offrent pour obtenir un meilleur maillage. On peut choisir de résoudre le problème à l'aide d'un solveur adaptatif, qui résoudra le problème plusieurs fois en raffinant le maillage là où l'erreur est la plus grande à chaque itération. On peut aussi utiliser le maillage manuel. Le Manuel de COMSOL donne tous les détails des maillages possibles pour cette technique. Généralement, toutefois, cela est inutile et n'améliore pas beaucoup le maillage obtenu automatiquement. Il est préférable d'utiliser le solveur

adaptatif décrit dans la prochaine section.

I.4 Obtenir la solution au problème

Une fois que le modèle est construit et maillé, on peut résoudre le système. Dans certains cas, simplement activer la commande *solve* sera suffisant. Toutefois, pour obtenir de belles solutions, on devra souvent modifier les paramètres du solveur. Premièrement, on doit faire le choix du solveur à utiliser pour résoudre le système.

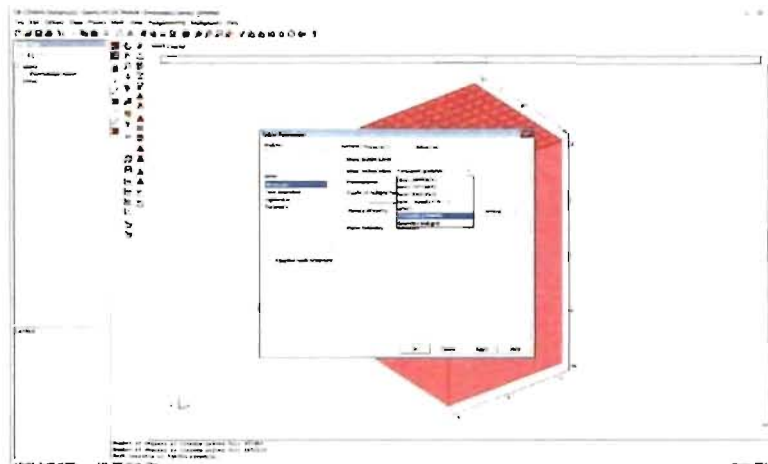


FIG. I.9 – Le choix des solveurs

Les deux choix qui s'imposent sont UMFPACK, pour les plus petits problèmes, et Conjugate Gradient, pour les problèmes de taille plus importante. Le premier est le plus robuste, mais le plus gourmand en mémoire vive. Si votre ordinateur ne possède pas suffisamment de mémoire pour résoudre le problème par cette méthode, on doit se rabattre sur le solveur Conjugate Gradient qui n'est pas gourmand en mémoire. Toutefois, cette méthode ne convergera pas toujours très rapidement, ce qui fait des temps de solution très longs. On peut toutefois traiter de très gros problèmes avec cette méthode. J'ai résolu des problèmes avec plus de 10^6 degrés de liberté avec cette méthode.

Pour obtenir de meilleurs maillages à l'aide du solveur, on doit activer l'option de solveur adaptatif. Ce solveur résout le problème sur le maillage initial, puis raffine le

maillage là où l'erreur sur la solution est la plus grande. Le problème est résolu dans le nouveau maillage. Ces étapes se répètent le nombre de fois que l'on désire. On peut paramétrer le solveur adaptatif dans le menu *Solve* → *Solverparameters...*

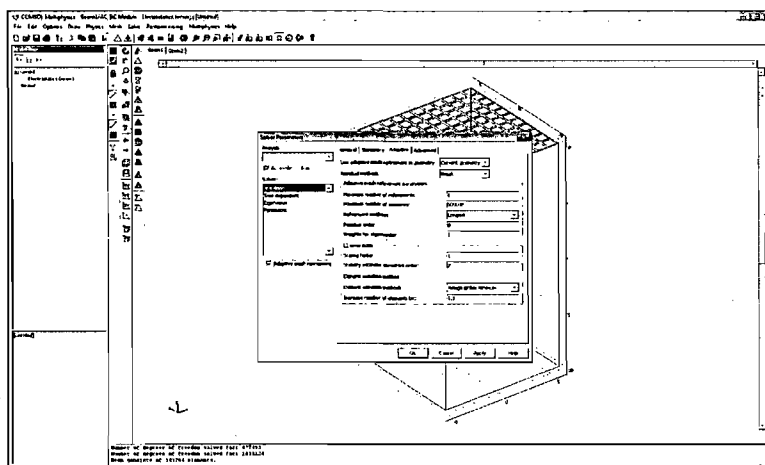
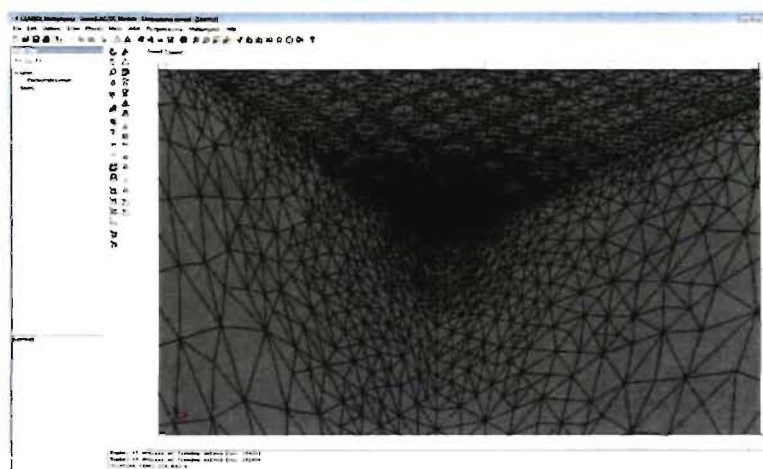


FIG. I.10 – Paramètres du solveur adaptatif

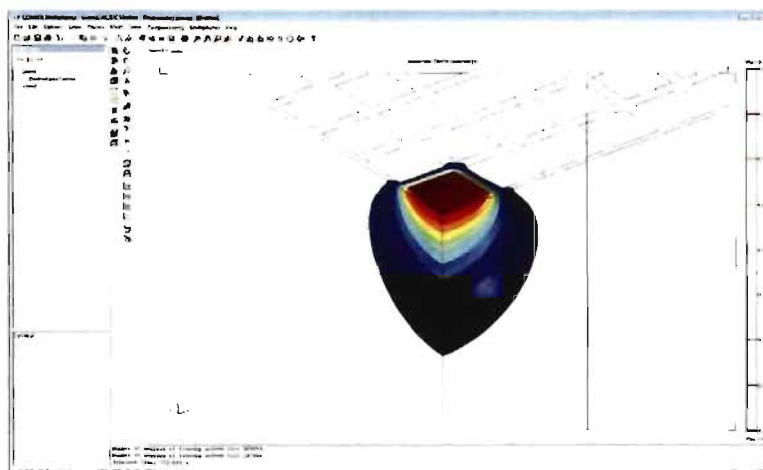
Maximum number of refinements est le nombre de répétitions du cycle mentionné plus haut. On peut aussi choisir le nombre d'éléments au maximum dans le modèle, et, dans la section *Element selection method*, on peut choisir le taux d'augmentation du nombre d'éléments par itération. On doit s'assurer que le problème ne devienne pas trop complexe alors on doit garder tous ces paramètres à des valeurs pas trop élevées, dépendant de la puissance de l'ordinateur sur lequel on résout le modèle. Les prochaines figures montrent le cas du potentiel de pondération d'un pixel de coin. On voit bien que le solveur a concentré les éléments dans la zone où le potentiel de pondération varie rapidement.

I.5 Extraction de la solution

Pour utiliser les solutions obtenues, on doit les extraire du logiciel pour les fournir à l'algorithme de simulation de la prochaine annexe. Ce code comporte un objet qui doit recevoir une liste de points, avec la valeur de la solution à ce point pour une grille tridimensionnelle de points dans le volume du modèle (prisme



(a) Maillage obtenu par le solveur adaptatif

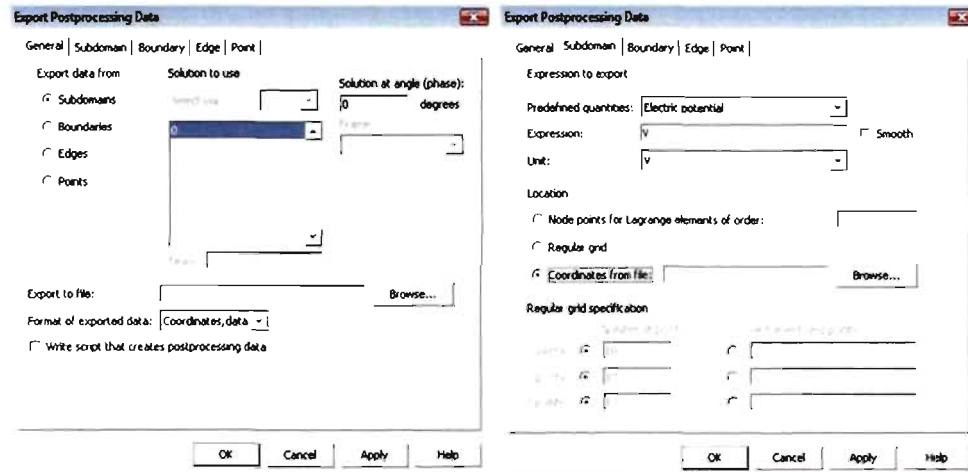


(b) Solution obtenue par le solveur adaptatif

FIG. I.11 – Problème résolu avec le solveur adaptatif

rectangulaire), pour fournir à l'algorithme des valeurs de champ et de potentiel. Les valeurs calculées par l'objet sont des interpolations trilineaires entre les valeurs fournies par la liste. On doit tout d'abord générer avec un code c++ simple, un fichier contenant à chaque ligne la coordonnée x,y,z de chaque point d'une grille uniforme en faisant varier tout d'abord les x , puis les y et les z . Ce fichier doit être fourni au logiciel, qui retournera un fichier contenant la même liste, mais avec la valeur de la solution ajoutée au bout de la ligne. On doit obtenir 3 fichiers solutions pour un champ électrique et un seul pour un potentiel de pondération. Ces fichiers

doivent être mis dans le répertoire de simulation de l'algorithme pour être lus par les objets du code présenté dans la prochaine annexe.



(a) Choix du nom de fichier d'exportation et du format (b) Choix du fichier de coordonnées et de la valeur à extraire

FIG. I.12 – Extraction de la solution

Annexe II

Annexe 2 : Code Source

Voici le coeur de ma simulation. Mon algorithme de simulation, tel que présenté dans l'article du chapitre suivant, s'assemble à partir d'objets, dans le sens informatique du terme, qui se connectent entre eux pour générer les résultats. On a tout d'abord l'ensemble des objets de GEANT4, qui servent à générer une liste de points d'interaction pour le passage d'un photon γ dans le détecteur. Ensuite viennent les classes de mon algorithme de simulation proprement dit. Un objet, CTDR Simulation, reçoit la liste de points d'interaction et génère des distributions de charge en conséquence, à l'aide de la classe CTDR Interaction. Chaque point d'interaction est un objet CTDR interaction qui est un regroupement d'éléments de charge distribuée selon une gaussienne autour du point d'interaction. La classe CTDR simulation contient aussi les objets CTDR field, qui est un objet représentant le champ électrique dans le détecteur, et un objet du genre CTDR CrossStrip qui représente le potentiel de pondération d'un ensemble d'électrodes. Ensuite, le transport des éléments de charge est effectué jusqu'à la collecte et la charge induite est calculée. Selon les besoins de la simulation, on peut collecter les informations nécessaires durant et après le transport.

Voici la première classe de mon algorithme de simulation. Cet objet représente un élément de charge. Il possède les fonctions nécessaires pour effectuer sa marche aléatoire, son piégeage et son transport dans le champ. La fonction d'itération permet de faire passer un pas de temps dt à tout les processus inclus dans l'objet.

– CTDR Electron.cc,.hh

Le second objet de mon algorithme est l'interaction. Cet objet renferme tous les éléments de charge d'une distribution. Il contient toutes les fonctions pour faire les itérations sur chaque élément qu'il contient et s'arrête lorsque les charges sont collectées.

– CTDR Interaction.cc,.hh

Pour effectuer le transport dans le champ externe des éléments de charge, on doit disposer d'un objet CTDR Field, qui représente ce champ externe. Cet objet retourne sur demande la valeur du champ électrique à un point (x, y, z) . On peut choisir plusieurs méthodes pour obtenir le champ externe. Ici, j'utilise une grille de valeurs du champ dans le modèle, qui doit être un prisme rectangulaire. Les valeurs pour des positions quelconques sont obtenues par interpolation trilinéaire à partir des points dans la grille avoisinant le point (x, y, z) où on désire obtenir la valeur du champ. Le même processus est utilisé pour obtenir le potentiel de pondération. C'est pourquoi ces objets sont des spécialisations de la classe abstraite CTDR Tree, qui contient les fonctions nécessaires pour trouver les points avoisinant le point (x, y, z) dans les listes de solutions. Voici le code source pour la fonction CTDR Tree et CTDR Field.

- CTDR Tree.cc,.hh
- CTDR Field.cc,.hh

Les objets suivants représentent le potentiel de pondération pour des bandes d'un détecteur à bandes orthogonales. L'objet CTDR Strip représente les bandes dans une direction, pour tous les canaux. L'objet CTDR CrossStrip représente l'ensemble des bandes en x et en y , et contient un objet CTDR Strip pour chacun d'eux.

- CTDR Strip.cc,.hh
- CTDR CrossStrip.cc,.hh

L'objet simulation représente la simulation du transport. Il contient les objets Field et CrossStrip, soit le champ externe et le potentiel de pondération du détecteur. Cet objet reçoit un objet CTDR IntList qui est la liste de points d'interaction générée par GEANT4, et construit les points d'interaction correspondants à l'aide de l'objet CTDR GammaGun. Il effectue ensuite le transport et la collecte de données, comme la charge induite finale.

- CTDR Simulation.cc,.hh
- CTDR IntList.cc,.hh
- CTDR GammaGun.cc,.hh

Voici l'ensemble des objets GEANT4. On a d'abord les objets définissant la géométrie, la physique, le générateur de particules, ensuite, nous avons les objets définissant les actions que GEANT4 entreprend à chaque simulation, à chaque événement, et à chaque pas de simulation de l'événement. Finalement, je présente le fichier principal de la simulation, où on construit les objets GEANT4 et on lance la simulation. La simulation de transport se fait à l'intérieur de la simulation GEANT4, après chaque événement.

- CZT Detector.cc,.hh
- CZT Physics.cc,.hh
- CZT Generator.cc,.hh
- CZT SteppingAction.cc,.hh
- CZT EventAction.cc,.hh
- CZT RunAction.cc,.hh
- g4 CZT.cc

Les codes source des objets donnés dans les listes sont trop volumineux pour être présentés ici. La version commentée du code est accessible pour téléchargement à l'adresse suivante : <http://www.lps.umontreal.ca/mbenoit/CTDR.zip>. Pour ceux qui se demandent pourquoi le nom CTDR, sachez que l'auteur lui-même ne se souvient plus pourquoi!