

METODOLOGIA DE OBTENÇÃO DO COEFICIENTE DE ATENUAÇÃO DE
MASSA EM MATRIZES BIOLÓGICAS

Marcelo Oliveira Pereira

Tese de Doutorado apresentada ao Programa de Pós-graduação em Engenharia Nuclear, COPPE, da Universidade Federal do Rio de Janeiro, como parte dos requisitos necessários à obtenção do título de Doutor em Engenharia Nuclear.

Orientadores: Ricardo Tadeu Lopes

Marcelino José dos Anjos

Rio de Janeiro
Dezembro de 2011

METODOLOGIA DE OBTENÇÃO DO COEFICIENTE DE ATENUAÇÃO DE
MASSA EM MATRIZES BIOLÓGICAS

Marcelo Oliveira Pereira

TESE SUBMETIDA AO CORPO DOCENTE DO INSTITUTO ALBERTO LUIZ
COIMBRA DE PÓS-GRADUAÇÃO E PESQUISA DE ENGENHARIA (COPPE) DA
UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO DE JANEIRO COMO PARTE DOS
REQUISITOS NECESSÁRIOS PARA A OBTENÇÃO DO GRAU DE DOUTOR EM
CIÊNCIAS EM ENGENHARIA NUCLEAR.

Examinada por:

Prof. Ricardo Tadeu Lopes, D.Sc.

Prof. Marcelino José dos Anjos, D.Sc.

Prof. Cláudio Carvalho Conti, D.Sc.

Prof. Alfredo Victor Bellido Bernedo, D.Sc.

Prof^a. Cristiane Ferreira Calza, D.Sc.

Prof. Joaquim Teixeira de Assis, D.Sc.

RIO DE JANEIRO, RJ – BRASIL

DEZEMBRO DE 2011

Pereira, Marcelo Oliveira

Metodologia de obtenção do coeficiente de atenuação de massa em matrizes biológicas/Marcelo Oliveira Pereira. – Rio de Janeiro: UFRJ/COPPE, 2011.

IX, 131p.: il.; 29,7 cm.

Orientador: Ricardo Tadeu Lopes

Marcelino José dos Anjos

Tese (doutorado) – UFRJ/ COPPE/ Programa de Engenharia Nuclear, 2011.

Referencias Bibliográficas: p. 91-96.

1. Coeficiente de atenuação de massa. 2. Espalhamento Rayleigh e Compton. 3. Número Atômico Efetivo. I. Lopes, Ricardo Tadeu *et al.* II. Universidade Federal do Rio de Janeiro, COPPE, Programa de Engenharia Nuclear. III. Título.

Aos meus pais Luiz Carlos e Beatriz
Pela dedicação a minha formação pessoal e profissional
Ao meu irmão Ricardo
Por seu companheirismo e amizade
A minha esposa Daniele
Pelo seu amor, carinho e compreensão
e as minhas filhas Maiara e Mariana
Pela minha grande motivação para a vida.

AGRADECIMENTOS

Ao Prof. Ricardo Tadeu Lopes pela orientação, confiança e a oportunidade de desenvolver este trabalho no Laboratório de Instrumentação Nuclear (LIN).

Ao Prof. Marcelino por sua colaboração, incentivo, orientação, amizade e boa vontade sempre que precisei de ajuda com a tese.

Ao prof. Cláudio Conti por sua colaboração na simulação Monte Carlo e revisão dos trabalhos desenvolvidos durante o doutorado.

A todos os amigos do Laboratório de Instrumentação Nuclear pela ajuda, participação, incentivo e amizade durante a minha trajetória acadêmica do doutorado.

Aos amigos do Departamento de Disciplinas Básicas do CEFET/RJ Uned Nova Iguaçu, em especial Sheila Cristina e Laércio, pela ajuda nas minhas eventuais ausências por conta do doutorado e pelos momentos de distração.

Aos funcionários do Programa de Engenharia Nuclear/COPPE pela colaboração e suporte.

Resumo da Tese apresentada à COPPE/UFRJ como parte dos requisitos necessários para a obtenção do grau de Doutor em Ciências (D.Sc.)

METODOLOGIA DE OBTENÇÃO DO COEFICIENTE DE ATENUAÇÃO DE MASSA EM MATRIZES BIOLÓGICAS

Marcelo Oliveira Pereira

Dezembro/2011

Orientadores: Ricardo Tadeu Lopes

Marcelino José dos Anjos

Programa: Engenharia Nuclear

Neste trabalho foi estudado o emprego da técnica de razão entre os picos de espalhamento Rayleigh e Compton (R/C) para o cálculo do coeficiente de atenuação de massa em amostras biológicas. De forma a produzir os picos de espalhamento Rayleigh e Compton, foi utilizada a radiação característica proveniente de minitubos de raios X com anodos de molibdênio, tungstênio e uma fonte gama de Am^{241} . Para caracterizar as amostras, foram utilizados seis métodos diferentes de cálculo do número atômico efetivo de forma a avaliar qual modelo era mais adequado ao método proposto. Foram realizadas medidas experimentais de espalhamento com fótons de 8,74 keV, 9,57 keV, 17,74 keV, 59,54 keV e medidas simuladas de espalhamento utilizando o método de Monte Carlo com o código MCNP5 para fótons de 10 keV, 15 keV, 20 keV, 25 keV, 30 keV, 35 keV, 40 keV, 45 keV e 50 keV. A técnica proposta foi aplicada em amostra de próstata humana, amostras certificadas de Leite em pó, fígado bovino, feno em pó e em amostras que simulavam tecido humano adiposo, mamário e pulmonar. Os resultados obtidos pelo método de espalhamento foram comparados com os valores gerados pelo XCOM e com medidas experimentais de transmissão da radiação. Os resultados apresentaram erro percentual médio menor que 5,0 % para fótons de 17,74 keV e 59,54 keV, mostrando a viabilidade da técnica.

Abstract of Thesis presented to COPPE/UFRJ as a partial fulfillment of the requirements for the degree of Doctor of Science (D.Sc.)

METHODOLOGY OF OBTAINING THE MASS ATTENUATION COEFFICIENT
IN BIOLOGICAL MATRICES

Marcelo Oliveira Pereira

December/2011

Advisors: Ricardo Tadeu Lopes

Marcelino José dos Anjos

Department: Nuclear Engineering

In this work was studied the use of Rayleigh to Compton (R/C) scattering peaks ratio technique for the calculation of the mass attenuation coefficient in biological matrices. In order to produce Rayleigh and Compton scattering peaks was used the characteristic radiation from x-ray minitubes with molybdenum and tungsten anodes and from an Am^{241} gamma source. To characterize the samples, were employed six different methods of calculation of the effective atomic number in order to evaluate which model was more suitable for the proposed method. Experimental measurements of scattering were performed using photons of 8.74 keV, 9.57 keV, 17.74 keV, 59.54 keV and simulated scattering measurements using the Monte Carlo method with MCNP5 code for photons of 10 keV, 15 keV, 20 keV, 25 keV, 30 keV, 35 keV, 40 keV, 45 keV and 50 keV. The proposed technique was applied to a sample of human prostate, certified samples of milk powder, bovine liver, hay powder and samples which simulated human adipose, mammary and pulmonary tissues. The results obtained by the scattering method were compared with the values generated by XCOM and, also, with experimental measurements of radiation transmission. The results presented an average percent error lower than 5.0 % to photons of 17.74 keV and 59.54 keV, demonstrating the feasibility of the technique.

ÍNDICE

	Página
<u>CAPÍTULO I</u>	01
<u>INTRODUÇÃO</u>	01
I.1 – Justificativas	01
I.2 – Objetivos do Trabalho	03
<u>CAPÍTULO II</u>	05
<u>REVISÃO BIBLIOGRÁFICA</u>	05
II.1 – O Coeficiente de atenuação de massa	05
II.2 – Razão entre os picos de espalhamentos Rayleigh e Compton	08
II.3 – Número Atômico Efetivo	09
<u>CAPÍTULO III</u>	11
<u>FUNDAMENTOS TEÓRICOS</u>	11
III.1 – Interação da Radiação Eletromagnética com a matéria	11
III.1.2 – Absorção Fotoelétrica	12
III.1.3 – Pico da Absorção K para o efeito Fotoelétrico	13
III.1.4 – Espalhamento Rayleigh ou Coerente	14
III.1.5 – Espalhamento Compton ou Incoerente	16
III.2 – Coeficiente de Atenuação de massa	19
III.3 – O método de transmissão	21
III.4 – O método de espalhamento	22
III.5 – Descrição teórica da razão entre os espalhamento Rayleigh e Compton	24
III.6 – Método para calcular o número atômico efetivo Z_{ef}	28
III.6.1 – Método I	28
III.6.2 – Método II	29
III.6.3 – Método III	30
III.6.4 – Método IV	30
III.6.5 – Método V	30
III.6.6 – Método VI	31
III.7 – Relação semi-empírica da curva de espalhamento	32
III.8 – Simulação da razão entre os picos de espalhamento R/C	32
III.8.1. O Método de Monte Carlo no código MCNP5	32

<u>CAPÍTULO IV</u>	<u>34</u>
<u>MATERIAIS E MÉTODOS</u>	<u>34</u>
IV.1 – O Arranjo Experimental	34
IV.1.1 – Etapa Experimental 1	35
IV.1.2 – Etapa Experimental 2	36
IV.1.3 – Etapa Experimental 3	37
IV.2 – Seleção das amostras	39
IV.2.1 – Preparação das amostras	40
IV.3 – Simulação Monte Carlo	40
<u>CAPÍTULO V</u>	<u>43</u>
<u>APRESENTAÇÃO E ANÁLISE DE RESULTADOS</u>	<u>43</u>
V.1 – Curva do coeficiente de atenuação de massa em função do Z_{ef}	43
V.2 – Resultados do espalhamento de fótons de 17,74 keV	45
V.3 – Resultados do espalhamento de fótons de 59,54 keV	50
V.3.1 – Resultados do método de transmissão com a fonte não-selada de Am^{241}	60
V.4 – Resultados do espalhamento de fótons de 8,74 keV e 9,57 keV	65
V.5 – Resultados do modelo teórico	75
V.6 – Resultados da simulação MCNP5	79
<u>CAPÍTULO VI</u>	<u>88</u>
<u>CONCLUSÕES E SUGESTÕES</u>	<u>88</u>
VI.1 – Conclusões	88
VI.2 – Sugestão para trabalhos futuros	90
<u>REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS</u>	<u>91</u>
<u>ANEXO I</u>	<u>97</u>
<u>ANEXO II</u>	<u>100</u>
<u>ANEXO III</u>	<u>103</u>
<u>ANEXO IV</u>	<u>105</u>

CAPÍTULO I

INTRODUÇÃO

I.1 - Justificativa

Na incidência da radiação eletromagnética em um meio material, três resultados são esperados segundo a teoria eletromagnética: absorção, espalhamento e transmissão da radiação. No entanto, quando essa radiação eletromagnética é ionizante, ou seja, ela é capaz de ionizar o meio material em questão, os fenômenos de interação atômica variam de acordo com a energia da radiação, embora ela continue a ser absorvida, espalhada ou transmitida.

A descoberta dos raios X por Röntgen em 1895 possibilitou grandes avanços tecnológicos na área médica, quando foi observado que a radiação emitida a partir da frenagem de elétrons em um alvo metálico, ao ser aplicada sobre o corpo humano, permitia a observação de estruturas internas do corpo, sem a necessidade de intervenção cirúrgica, devido à diferença de atenuação da radiação pelos tecidos e ossos, gerando diferenças no contraste da imagem obtida (MARTINS, 1998).

A quantificação desse processo de atenuação da radiação eletromagnética ionizante possibilitaria avanços tecnológicos ainda maiores, como o desenvolvimento da tomografia computadorizada, técnica não destrutiva bastante difundida na medicina e em outras áreas tecnológicas (CASTRO, 2006). Uma forma de quantificar o processo de interação da radiação com a matéria seria verificar a fração de intensidade de radiação atenuada pelo meio material. Esse parâmetro, que depende da energia da radiação eletromagnética e da natureza do meio material, é chamado de coeficiente de atenuação linear.

Todavia, o coeficiente de atenuação linear também depende do estado físico do meio material. Para eliminarmos esta dependência, podemos gerar um novo parâmetro através da razão do coeficiente de atenuação linear e da densidade do meio material, que apresenta uma relação direta com o estado físico do meio. Essa nova grandeza é chamada de coeficiente de atenuação em massa.

O coeficiente de atenuação em massa é um parâmetro fundamental no estudo da interação da radiação com a matéria. Ele fornece a medida da fração da intensidade de radiação dispersada ou absorvida pela matéria através dos diversos tipos de interação.

Portanto, as informações sobre o coeficiente de atenuação de massa em uma amostra analisada são de grande importância em diversos campos da ciência aplicada, tais como: diagnósticos nucleares, proteção radiológica, medicina nuclear, dosimetria de radiações, técnicas analíticas de medidas nucleares e atômicas.

Como exemplos de aplicações recentes podem ser citados a microfluorescência de raios X (μ -XRF), que é o mapeamento de distribuição elementar em uma amostra (SERPA, 2007) e a microtomografia por fluorescência de raios X (μ CT-XRF), que gera uma imagem tomográfica da distribuição elementar do corpo de prova (PEREIRA, 2010). As duas técnicas de distribuição elementar produzem imagens sem quantificar os elementos analisados, devido à impossibilidade de se obter o coeficiente de atenuação de massa em cada ponto de análise da amostra.

As técnicas de correção empregadas para determinar o coeficiente de atenuação de massa utilizam a radiação transmitida na amostra. Estas técnicas não conseguem determinar com precisão os coeficientes de atenuação de massa na faixa de baixas energias (1 a 15 keV). No caso das matrizes biológicas a determinação do coeficiente de absorção na faixa de baixas energias é um fator crítico (nas matrizes biológicas a composição básica é formada por H, C, Mg, Na, S, Cl, P e K). Portanto, o desenvolvimento de metodologias que possam fornecer o coeficiente de atenuação de massa usando técnicas de espalhamento da radiação é importante, principalmente, quando são analisados tecidos biológicos.

A radiação ionizante espalhada (raios X e radiação gama) geralmente resulta em dois picos de espalhamento: um estreito, por conta dos fótons espalhados elasticamente, e um mais largo de baixas energias representando os fótons que tiveram perdas de energias devido ao espalhamento incoerente no material. O pico estreito está associado ao espalhamento Rayleigh (elástico ou coerente) enquanto o pico mais largo corresponde ao espalhamento Compton (inelástico ou incoerente).

O espalhamento Compton e o espalhamento Rayleigh apresentam uma relação direta com a composição elementar do material espalhado. Portanto, a razão entre o espalhamento Rayleigh e Compton pode ser útil na avaliação do número atômico do material e quando as variações do coeficiente de atenuação de massa são pequenas para serem detectadas. Se a amostra a ser estudada é uma mistura de elementos, pode-se usar um parâmetro chamado de *número atômico efetivo* (Z_{ef}). Para uma determinada energia, podemos descrever o coeficiente de atenuação de massa em função do Z_{ef} .

Uma técnica utilizando a razão entre os espalhamentos Rayleigh e Compton é útil e pode ser aplicada quando as variações do coeficiente de atenuação de massa são tão grandes que não podem ser avaliadas com as técnicas de transmissão da radiação.

Nesse estudo, foram analisadas amostras de número atômico baixo, calculados seus coeficientes de atenuação de massa e comparados com os valores conhecidos. O desenvolvimento dessa técnica de correção do coeficiente de atenuação de massa usando a radiação espalhada é uma importante alternativa à técnica de transmissão.

I.2 - Objetivos deste Trabalho

O objetivo principal deste trabalho consiste no desenvolvimento de uma metodologia de correção do coeficiente de atenuação de amostras de tecidos biológicos, usando a razão entre os picos de espalhamento Compton e Rayleigh.

As etapas específicas desta tese consistem em:

- i. Avaliar os diferentes métodos encontrados na literatura para calcular o número atômico efetivo;
- ii. Verificar qual técnica de cálculo do número atômico efetivo apresenta um ajuste de curva adequado com os resultados do XCOM;
- iii. Correlacionar os resultados experimentais do método com os resultados obtidos pelo método de transmissão em amostras biológicas;
- iv. Estudar os casos em que não podemos separar os picos de espalhamento;
- v. Simulação dos picos de espalhamentos pelo método de Monte Carlo;
- vi. Correlacionar os resultados experimentais com a simulação Monte Carlo;
- vii. Estender a simulação para outras faixas de energias.

No próximo capítulo será apresentada uma revisão bibliográfica do coeficiente de atenuação de massa, o estado da arte das técnicas nucleares que utilizam a razão entre os picos de espalhamentos Rayleigh e Compton e os métodos para calcular o número atômico efetivo em amostras apresentando composição elementar conhecida.

No Capítulo 3 serão apresentados os fundamentos teóricos que descrevem a razão entre os picos de espalhamento Rayleigh e Compton e os métodos para calcular o número atômico efetivo Z_{ef} usados neste trabalho.

No Capítulo 4 serão descritos os materiais e as etapas experimentais, enquanto no Capítulo 5 serão apresentados os resultados e sua análise.

No último capítulo, serão descritas as conclusões dos resultados apresentados e sugestões para o desenvolvimento de trabalhos futuros.

CAPÍTULO II

REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Neste capítulo será apresentado o estado da arte no que diz respeito a medidas do coeficiente de atenuação de massa, aplicações da técnica de medida usando a razão entre os picos de espalhamento Rayleigh e Compton, os métodos e as aplicações das técnicas para determinar o número atômico efetivo de amostras com composição elementar conhecida.

II.1 – Coeficiente de Atenuação de massa

Existem diversos trabalhos na literatura que realizaram medidas do coeficiente de atenuação de massa em diferentes materiais e em variadas faixas de energia usando a equação de Beer-Lambert. Nos últimos 10 anos, os principais trabalhos encontrados na literatura são:

ALAM (2001) mensurou o coeficiente de atenuação de massa em diferentes tipos de amostra de solo, areia e materiais de construção de Bangladesh para as energias de 276,1 keV, 302,8 keV, 356,0 keV, 661,6 keV, 1173,2 keV e 1332,5 keV. O sistema experimental utilizado consistia em um detector HPGe e fontes radioativas de Ba¹³³, Cs¹³⁷ e Co⁶⁰. Os valores encontrados foram comparados com trabalhos utilizando materiais similares em outros países.

ANGELONE (2001A) realizou diversas medidas do coeficiente de atenuação de massa em 22 materiais ultra puros usando fontes de raios X com energia na faixa de 13 keV até 50 keV. Os elementos analisados foram C, Al, Ti, V, Mn, Fe, Co, Ni, Cu, Zn, Zr, Nb, Mo, Rh, Pd, Ag, Cd, In, Ta, Pt, Au e Pb. Uma fonte de raios X excitava as linhas K_α e K_β de alvos de Cu, Rb, Mo, Ag, Ba e Tb que funcionavam como uma fonte secundária de raios X transmitidos pela amostra. Os resultados experimentais encontrados foram comparados com o código XCOM e apresentaram uma discrepância máxima de 5%.

ANGELONE (2001B) realizou medidas do coeficiente de atenuação de massa em quatro componentes orgânicos relevantes para a saúde humana: (C₃H₄O₂)_n, (C₁₂H₁₈O₇)_n, (C₄₄H₂₀O₁₀)_n e (C₁₀H₈N₄O₄)_n. As medidas foram realizadas utilizando fontes de raios X na faixa de energia entre 13 keV até 40 keV e um detector HPGe com janela de Be.

CHANTLER (2001) realizou medidas do coeficiente de absorção de massa em folhas de alumínio, para verificar a validade do critério experimental de NORDFORS (1960) ($2 < \mu \cdot \rho \cdot D < 4$) usado no trabalho de CREATH (1987) e citado em diversos trabalhos da literatura. Os resultados experimentais deste trabalho indicam uma extensão do critério ($0,5 < \mu \cdot \rho \cdot D < 5$).

IÇELLI (2004) determinou as variações do coeficiente de atenuação de massa em amostras de ácido bórico (H_3BO_3), em diversas concentrações, usando o método de transmissão na faixa de energia de 15,746 keV até 40,930 keV. Foi utilizada uma fonte de radiação gama de Am^{241} (59,54 keV), cuja radiação atravessava as pastilhas de ácido bórico, excitando as linhas K_α e K_β de diferentes elementos (Zr, Mo, Ag, In, Sb, Ba e Pr) que, por sua vez eram detectadas por um detector de Si(Li) com alta resolução.

TURGUT (2004) investigou a validade da equação para mistura de elementos através da medida do coeficiente de atenuação de massa de amostras de Cu, Cr, $Cu_2C_2O_4$, Cu_2O , $CuCl_2 \cdot 2H_2O$, $Cu(C_2H_3O_2) \cdot H_2O$, Cr_2O_3 , $Cr(NO_3)_3$, $Cr_2(SO_4)_3$ e $Cr_3(CH_3CO_7)(OH)_2$ para as faixas de energia de 4,508 keV até 13,375 keV. O método utilizado foi a excitação secundária das linhas K_α e K_β em alvos de Ti, Mn, Fe, Ni, Zn, Ge, As e Rb com uma fonte gama anelar de Am^{241} (59,54 keV). Os resultados mostram que a equação para mistura de elementos não pode ser aplicada em energias próximas à borda da linha K da amostra.

MOREIRA (2006) usou referências da literatura com informações sobre a composição do solo da Terra, da Lua e de Marte para calcular os valores do coeficiente de atenuação de massa em cada solo com o auxílio do software WinXCOM. Os valores do coeficiente de absorção de massa foram calculados na faixa de 1 keV até 100 GeV.

AKAR (2006) realizou medidas do coeficiente de absorção de massa em amostras biológicas de osso, músculo, gordura e água para fontes gama de 140 keV, 364 keV e 662 keV usando o espectrômetro ATOMLAB-930. A radiação gama foi emitida por fontes de Tc^{99m} , I^{131} e Cs^{137} . Os valores encontrados foram comparados com outros autores.

SALINAS (2006) aferiu a densidade e o coeficiente de absorção de massa de materiais de construção usados no Brasil. Os valores foram simulados pelo código MCNP4B usando o método de transmissão. O coeficiente de absorção de massa foi determinado para uma fonte gama na faixa de energia de 50-3000 keV. Os resultados foram comparados com valores encontrados na literatura.

EKINCI (2007) mediu o coeficiente de atenuação de massa de córneas de pacientes com ceratite e de lentes de contato apresentando -1,75, -3,75, -4 dioptrias. As medidas foram realizadas pelo método de transmissão com um detector de Si(Li) e uma fonte anelar de Fe-55.

HAN (2008) mediu o coeficiente de absorção de massa para os elementos Cr, Fe, Ni e as ligas $\text{Fe}_x\text{Ni}_{1-x}$, $\text{Fe}_x\text{Cr}_y\text{Ni}_{1-(x+y)}$ e $\text{Ni}_x\text{Cr}_{1-x}$ para fótons com energia de 22,1 keV, 25,0 keV, 59,5 keV e 88,0keV. Em dois outros trabalhos, HAN (2009A e 2009B) o autor usa o mesmo arranjo experimental com amostras de Ti, Ni e suas respectivas ligas, $\text{Ti}_x\text{Ni}_{1-x}$, e em amostras minerais SiO_2 , KAlSi_3O_8 , $\text{CaSO}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$, FeS_2 e $\text{Mg}_2\text{Si}_2\text{O}_6$. As amostras foram irradiadas com fontes radiativas de Cd-109 e Am^{241} usando um arranjo de transmissão alinhado com um detector de Si(Li) com resolução de 160 eV a 5,9 keV. A seção de choque total atômica e eletrônica, assim com o número efetivo e o número de elétrons foram determinados experimentalmente e teoricamente usando os valores obtidos pelo coeficiente de absorção de massa da liga.

DEMIR (2009) determinou o coeficiente de absorção de massa em minério de boro usando uma fonte pontual gama de Am^{241} alinhado com um detector cintilador. Os resultados foram comparados com o WinXCOM e apresentaram um erro percentual máximo de 4,5%.

KERUR (2009) mediu o coeficiente de absorção de massa de amostras de monossacarídeos e dissacarídeos para fótons com energia de 8,136 keV, 13,596 keV, 22,581 keV e 32,890 keV. Os valores experimentais encontrados foram comparados com os valores do pacote computacional WinXCOM e apresentaram um erro percentual máximo de 5,3%.

MEDHAT (2009) mediu o coeficiente de absorção de massa de diversos materiais de construção usados no Egito na faixa de energia de 50-3000 keV. As amostras foram irradiadas com fontes de raios gama de Am^{241} , Ba^{133} , Co^{60} e Cs^{137} e os valores experimentais foram comparados com os valores teóricos do XCOM.

SHARANABASAPPA (2010) analisou o método de transmissão para determinação do coeficiente de absorção de massa em fótons de baixa energia usando um detector HPGe. O método incorporou as sugestões de CREAGH (1987) e comparou os resultados com aqueles obtidos por outros autores encontrados na literatura. Os elementos mensurados foram Mg, Ni, Cu, Mo e Ta.

KARUR (2012) calculou o coeficiente de atenuação de massa, o coeficiente de atenuação linear e o número atômico efetivo para sete tipos diferentes de concreto na faixa de energia de 0,015 a 15,0 MeV. Esses parâmetros foram calculados em função da composição química e da energia do fóton incidente.

II.2 – Razão entre os picos de espalhamento Rayleigh e Compton

A seguir vamos apresentar alguns trabalhos que usaram a razão entre os picos de espalhamento Rayleigh e Compton como técnica de medida.

LEICHTER (1983) mostrou que a razão entre os picos de espalhamento Rayleigh e Compton (R/C) dos fótons espalhados em amostras com número atômico no intervalo de $8 < Z < 11$ apresenta uma relação quase linear. Para isso realizou medidas da razão R/C em uma solução de K_2HPO_4 com três fontes radioativas de Am^{241} (59,5 keV), Xe^{133} (81 keV) e Tc^{99m} (140 keV) com ângulos de espalhamentos de 30°, 40°, 50°, 60° e 70°.

ARIKAN (1995) mostrou que a razão R/C pode ser usada para medir o teor de cinza em amostras de carvão mineral. Os resultados apresentam uma relação linear ou quadrática do teor de cinza com a razão R/C.

DUVAUCHELLE (2000) descreve um novo método de reconstrução de imagem em tomografia usando a razão R/C. O algoritmo compara duas imagens intermediárias, correspondentes às contribuições do espalhamento Rayleigh e do espalhamento Compton. No entanto, a imagem final usando a razão entre os picos R/C descreve melhor a amostra comparada à imagem gerada pela tomografia de transmissão.

CESAREO (2002) realizou medidas da razão R/C para obter uma imagem tomográfica do espalhamento e comparar com a tomografia por transmissão. O aparato experimental consistia em um tubo de raios X com anodo de W excitando a linha K_{α} (25,1 keV) de um alvo secundário de Sn. Um detector CZT formava uma geometria de espalhamento de 90° com a amostra. Os resultados das imagens mostraram que a imagem gerada pela razão entre os picos R/C fornece mais informações sobre a amostra que a imagem gerada pelo pico Rayleigh e pelo pico Compton separadamente. Os resultados comparados com a imagem da tomografia de transmissão mostraram a viabilidade da técnica.

IÇELLI (2002) realizou estudos experimentais da razão R/C em amostras com número atômico na faixa de $26 < Z < 82$ e raios gama de 59,5 keV em ângulos de espalhamentos 55° e 115°. Os elementos analisados foram Fe, Ni, Cu, Zn, Zr, Nb, Mo,

Ag, Sn, Ta, Au e Pb. Os resultados mostraram uma relação quadrática entre a razão R/C e o número atômico dos elementos medidos.

DONATIVI (2007) mediu a razão dos picos de espalhamento R/C em amostras com número atômico baixo ($5 < Z < 12$). Um tubo de raios X excitava as linhas K_{α} (40,12 keV) e K_{β} (45,41 keV) de um alvo secundário de Samário. A geometria de espalhamento foi de 90° . Os valores experimentais encontrados estão de acordo com o modelo teórico e mostram que a razão R/C é função do número atômico efetivo, para amostras com número atômico na região estudada.

IÇELLI (2007) mostrou um método prático para calcular o número atômico efetivo de uma amostra através da razão entre os picos R/C. Os resultados apresentados mostram uma relação quadrática entre a razão R/C e o número atômico efetivo, para amostra com número atômico $44 < Z < 55$ e momento transferido de $2,41 \text{ \AA}^{-1}$.

II.3 – O número atômico efetivo

Os trabalhos encontrados na literatura mostram que existe uma relação entre a razão dos picos de espalhamento Rayleigh e Compton (R/C) com o número atômico efetivo (Z_{ef}) da amostra. Conhecendo o número atômico efetivo de uma amostra e o momento transferido, podemos encontrar o coeficiente de atenuação de massa desta através de um banco de dados (XCOM ou WinXCOM, por exemplo). Sendo assim, compreender como pode ser obtido o número atômico efetivo de uma amostra da qual se conhece a composição é essencial para o desenvolvimento da técnica. A seguir são apresentados alguns dos principais trabalhos encontrados na literatura sobre métodos para cálculo do número atômico efetivo.

PARTHASARADHI (1992) calculou o número atômico efetivo de uma amostra com composição elementar conhecida a partir de um banco de dados de coeficiente de atenuação de massa. Para isso, realizou um ajuste de curva utilizando elementos químicos e seus coeficientes de atenuação de massa. Após calcular o coeficiente de atenuação de massa da amostra com o banco de dados, foi determinado o número atômico efetivo através do ajuste de curva. Esta técnica também foi usada nos trabalhos de KUMAR (1997) e SHIMAVARU (2001A) em amostras de interesse dosimétrico, e no trabalho de SHIMAVARU (2001B) em tecidos humanos. O trabalho de MURTY (2000) usa um método semelhante para determinar o número atômico efetivo em ligas

de W/Cu, no entanto, foi aplicado o método de transmissão para se obter o coeficiente de atenuação de massa em amostras de ligas de W/Cu.

SINGH (1996) propõe um novo método para calcular o número atômico efetivo através do coeficiente de absorção de massa e da seção de choque total em diversos tipos de amostras. Este método foi aperfeiçoado em SINGH (2002), que o utilizou para calcular o número atômico efetivo através da razão entre a seção de choque atômica efetiva e a seção de choque eletrônica efetiva. Este método também foi aplicado por MANOHARA (2007) no estudo de aminoácidos essenciais na faixa de energia de 1 keV a 100 GeV usando o WinXCOM, MANOHARA (2008) em amostras biológicas, vidros, minerais, líquidos e ligas, IÇELLI (2008) em amostras de HB_3O_3 e $\text{Na}_2\text{B}_4\text{O}_7$ na faixa de energia de 15,74 keV a 40,72 keV e KAEWKHAO (2008) em ligas de cobre e zinco.

DUVAUCHELLE (1999) descreve um método para determinar o número atômico efetivo através da razão entre o fator de forma ao quadrado e a função de espalhamento incoerente (F^2/S) para um valor definido de momento transferido. Compara seu método com os métodos de MANNINEM (1984), que supõe o espalhamento Rayleigh proporcional a Z^3 e o espalhamento Compton proporcional a Z para desenvolver a equação, e os métodos semi-empíricos dos trabalhos de SCHÄTZLER (1978), TSAI (1976) e PUUMALAINEN (1977).

CAPÍTULO III

FUNDAMENTOS TEÓRICOS

Neste capítulo serão abordados os processos de interação da radiação eletromagnética com a matéria, o método de transmissão e suas limitações, o método proposto neste trabalho e os métodos para calcular do número atômico efetivo de amostras conhecidas.

III.1. Interação da Radiação eletromagnética com a matéria

Na faixa de energia que inclui os raios X e gama, existem diversas interações possíveis com o átomo, elétrons atômicos ou com o núcleo e, ainda, a possibilidade de não-interação, ou seja, a radiação eletromagnética pode atravessar distâncias consideráveis em um meio material sem que ocorra interação. As probabilidades de interação (e de não-interação) dependem de características do meio e da radiação. A radiação eletromagnética ionizante é tratada, em boa parte dos casos, como um conjunto de partículas – os fótons. A cada energia de fóton $h.f$ corresponde um momento associado $(h.f)/c$, e, dessa forma, podem ocorrer ‘colisões’ em que o fóton transfere energia e momento para outras partículas ou apenas transfere momento (YOSHIMURA, 2009). As principais interações que ocorrem na matéria com fótons de energias na faixa de poucos keV até dezenas de MeV são:

- a) Atenuação Fotoelétrica;
- b) Espalhamento Coerente ou Rayleigh;
- c) Espalhamento Incoerente ou Compton;
- d) Produção de pares;
- e) Reação Fotonuclear.

A produção de pares e as reações fotonucleares só ocorrem acima de um limiar de energia. Na produção de pares é necessário que o fóton tenha no mínimo 1,022 MeV de energia (equivalente a duas massas de repouso do elétron) para que toda sua energia se converta em massa de repouso e energia cinética de um par elétron-pósitron. No caso das reações fotonucleares, a energia do fóton deve ser superior à energia de ligação dos

núcleons (ao menos alguns MeV, em geral mais de 10 MeV) para que um nêutron ou próton seja retirado do núcleo (YOSHIMURA, 2009).

Neste trabalho realizaremos o estudo nas regiões de baixa energia, no máximo 100 keV. Portanto, os processos de produção de pares e reações fotonucleares não serão considerados no processo de interação. A figura 3.1, mostra, esquematicamente, os possíveis processos de interação da radiação com a matéria.

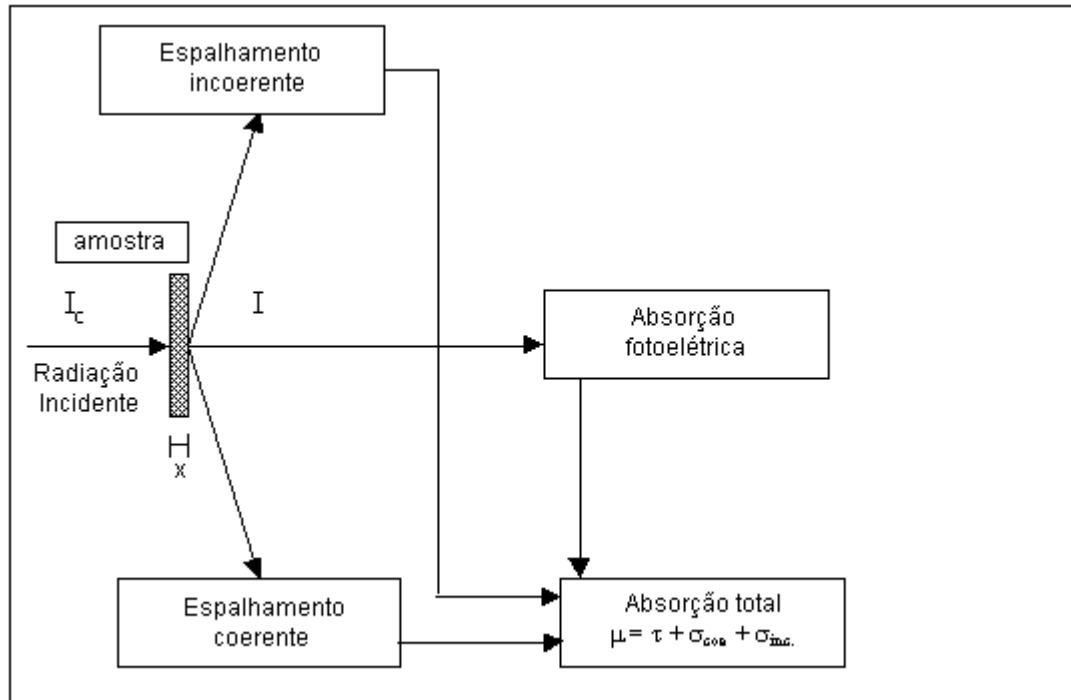


Figura 3.1. Processo de interação da radiação com a matéria.

III.1.2. Atenuação Fotoelétrica

No processo de atenuação fotoelétrica, um fóton sofre uma interação com um átomo absorvedor na qual o fóton desaparece completamente. Em seu lugar, um fotoelétron energético é ejetado pelo átomo (KNOLL, 2000). Este fotoelétron apresenta uma energia cinética dada por:

$$E_k = h \cdot \nu - E_b \quad (3.1)$$

onde h é a constante de Planck, ν é a frequência da radiação e E_b é a energia de ligação do elétron orbital.

A direção de saída do fotoelétron com relação à incidência do fóton varia com a energia deste. Assim, para altas energias (acima de 3 MeV), a probabilidade do fotoelétron ser ejetado para frente é alta; para baixas energias (abaixo de 20 keV) a maior probabilidade ocorre com um ângulo de 70°. Isto devido à ação dos campos elétricos e magnéticos que, variando na direção perpendicular do fóton, exercem força sobre o elétron na direção de 90°, e se compõe com o momento angular do elétron (JUNIOR, 2006). Não existe uma expressão analítica única para descrever a probabilidade de interação deste processo. Em uma primeira aproximação, podemos descrever essa probabilidade de interação em função da energia E e do número atômico Z do material absorvedor (KNOLL, 2000):

$$\tau \cong \text{constante} \times \frac{Z^n}{E^{3,5}} \quad (3.2)$$

onde o expoente n varia entre 4 e 5 na região de interesse da energia da radiação.

A figura 3.2 apresenta uma representação da atenuação fotoelétrica:

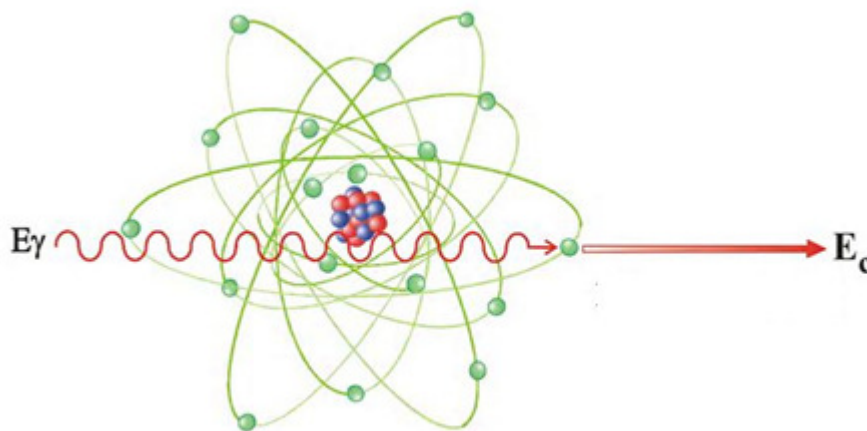


Figura 3.2. Representação esquemática do processo de interação fotoelétrica da radiação com a matéria usando um modelo atômico clássico (TAUHATA, 2003).

III.1.3. Pico da Atenuação K para o efeito fotoelétrico

Para que o processo de atenuação fotoelétrica ocorra, a energia do fóton não pode ser menor que a energia de ligação E_b do elétron no átomo. Para fótons com energia maior que E_b , a probabilidade decresce à medida que cresce essa energia, isto é, a

probabilidade de interação é máxima quando a energia do fóton for igual à energia de ligação E_b . Quando a energia do fóton atinge a energia de ligação da camada K, há então uma descontinuidade na curva que descreve a probabilidade de interação em função da energia, chamada de pico de atenuação K. A probabilidade de interação, que vinha decrescendo com o aumento da energia do fóton, sofre um acréscimo repentino, para depois decrescer novamente. Efeito similar ocorre com a camada L (TAUHATA, 2003).

A figura 3.3 mostra a seção de choque fotoelétrica em função da energia para uma amostra pura de Zinco e de uma amostra de tecido mamário (ICRU 44). Podem ser observadas as descontinuidades da atenuação fotoelétrica nas bordas K e L. No caso da curva de atenuação do tecido de mama as descontinuidades não estão presentes no intervalo de energia analisado, porque no tecido de mama os elementos majoritários são carbono e hidrogênio.

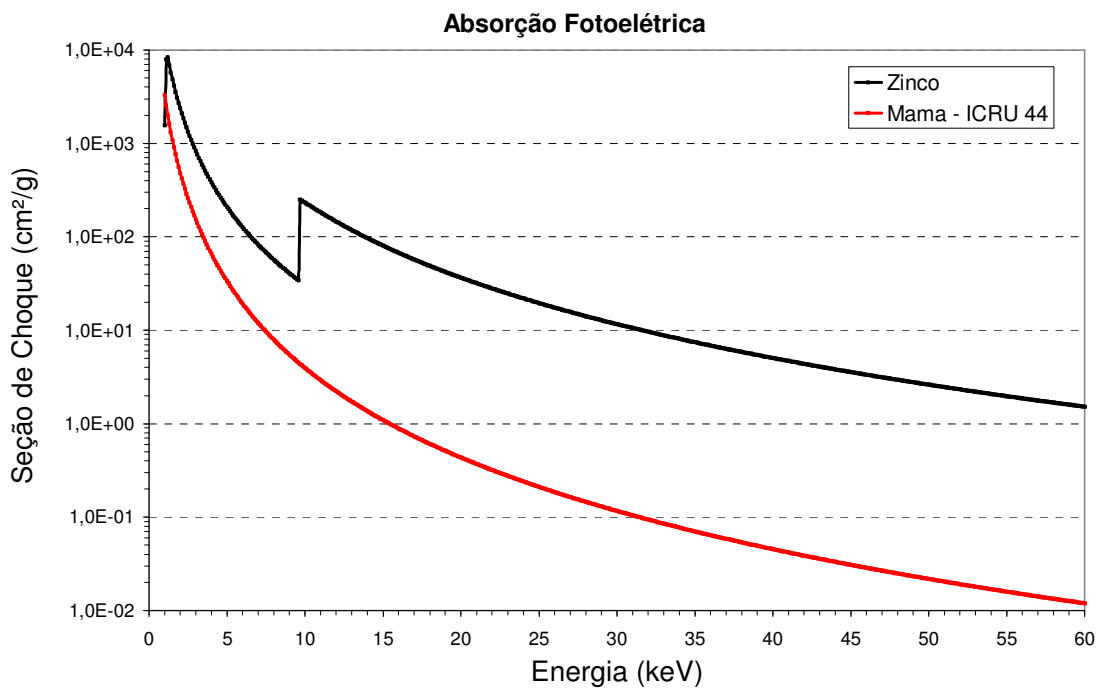


Figura 3.3. Seção de choque fotoelétrica do Zinco e de tecido mamário (ICRU 44) produzido no software XCOM.

III.1.4. Espalhamento Rayleigh ou Coerente

Em interações de fótons de baixa energia com elétrons muito ligados, pode ocorrer uma interação onde o átomo por inteiro absorve o recuo e o fóton praticamente não perde energia, mudando simplesmente sua direção. Esse tipo de interação é

denominado espalhamento Coerente, Elástico ou Rayleigh. A direção dos fótons espalhados após o processo de interação Rayleigh é predominante em baixos ângulos de espalhamento (para frente) (TAUHATA, 2003). O espalhamento de elétrons ligados ao átomo é feito corrigindo-se a seção de choque de Thomson para o elétron livre, considerando a possibilidade de interferência da radiação espalhada. Essa correção aparece na forma de transformada de Fourier da densidade de carga, conhecida como *fator de forma* (CASTRO, 2006).

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{Rayleigh} = \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{Thomson} \cdot F^2(x, Z) \quad (3.3)$$

onde

$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{Thomson}$ é a seção de choque Thomson

$F(x, Z)$ é o fator de forma, Z é o número atômico e x é o momento transferido.

O espalhamento Rayleigh tem maior probabilidade de ocorrência para fótons com baixa energia e para valores altos de Z . Para o carbono, o espalhamento Rayleigh ocorre na região de 20 keV e sua contribuição é de aproximadamente 15% na atenuação total. A figura 3.4 mostra uma representação do espalhamento Rayleigh.

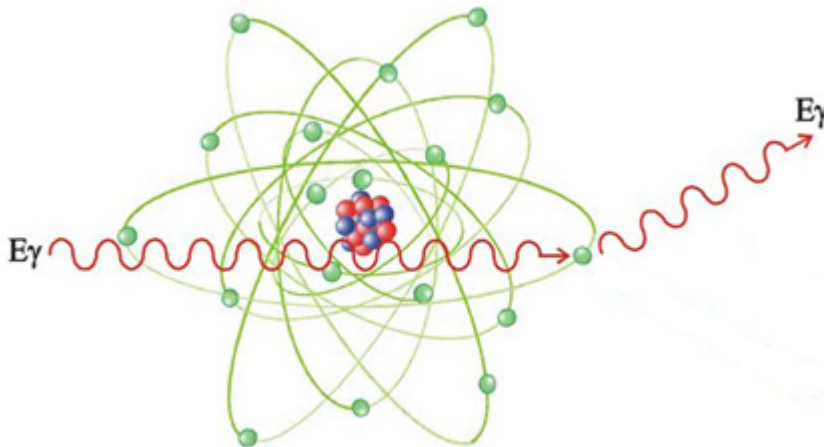


Figura 3.4. Representação esquemática do espalhamento Rayleigh usando um modelo atômico clássico (TAUHATA, 2003).

A figura 3.5 mostra a seção de choque do espalhamento Rayleigh em função da energia para uma amostra de zinco e de tecido de mama (ICRU 44).

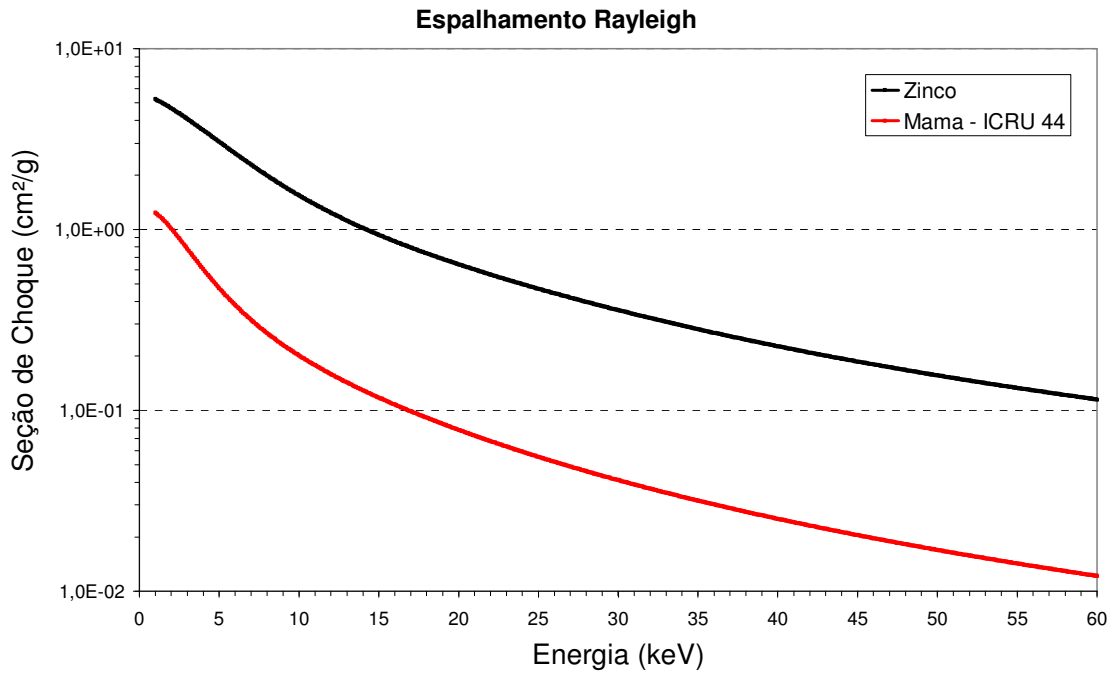


Figura 3.5 – Seção de choque do espalhamento Rayleigh para Zinco e de tecido mamário (ICRU 44).

III.1.5. Espalhamento Compton ou Incoerente

Ao contrário do Espalhamento Coerente, o Espalhamento Incoerente ou Espalhamento Compton ocorre a partir da interação entre um fóton de energia E_0 e um elétron livre. Neste processo o fóton é totalmente absorvido. O resultado desta interação é o aparecimento de outro fóton com energia E_c o qual é espalhado numa direção θ em relação à direção do fóton original. O fóton transfere energia e momento para o elétron, que recua de um ângulo ϕ em relação à direção do fóton incidente (EISBERG, 1988). A Figura 3.6 mostra, esquematicamente, este processo.

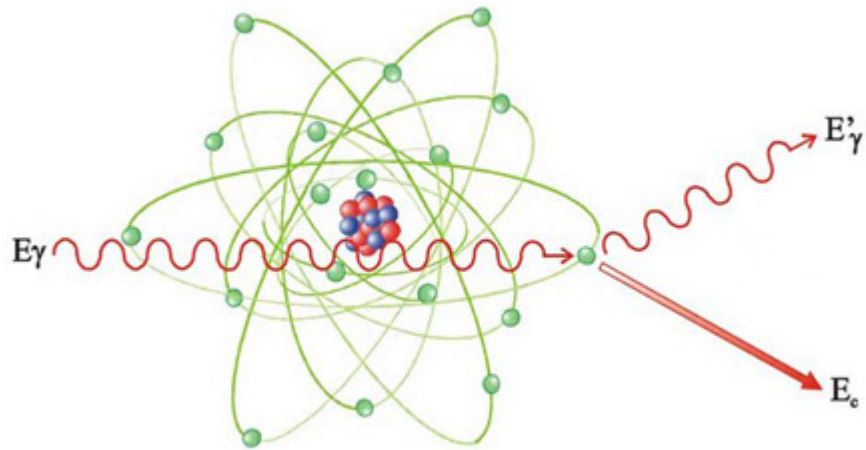


Figura 3.6 – Representação esquemática do espalhamento Compton usando um modelo atômico clássico (TAUHATA, 2003).

A conservação de energia durante o processo de interação estabelece que:

$$E_0 = E_c + E_{e^-} \quad (3.4)$$

onde:

E_{e^-} é a energia do elétron após o processo de interação.

E_c é a energia do fóton espalhado

A energia do fóton espalhado, em keV, é dada por:

$$E_c = \frac{E_0}{1 + \frac{E_0}{511}(1 - \cos \theta)} \quad (3.5)$$

A distribuição angular para espalhamento incoerente de fótons pode ser calculada através da fórmula de Klein-Nishina. A fórmula de Klein-Nishina representa a seção de choque diferencial que descreve a probabilidade do espalhamento incoerente por ângulo sólido, de fóton individual, por elétron livre.

$$\frac{d\sigma_{K-N}}{d\Omega} = \frac{r_0^2}{2} \left\{ \left[\frac{1}{(1 + \alpha(1 - \cos \theta)^2)} \right] \cdot \left[1 + \cos^2 \theta + \frac{\alpha^2 \cdot (1 - \cos \theta)^2}{(1 + \alpha(1 - \cos \theta))} \right] \right\} \quad (3.6)$$

onde $\alpha = E_0/511$

A seção de choque diferencial para espalhamento incoerente é:

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{Compton} = \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{K-N} \cdot S(x, Z) \quad (3.7)$$

onde $S(x, Z)$ é a função espalhamento incoerente.

A função de espalhamento incoerente $S(x, Z)$ é a primeira aproximação para calcular a seção de choque diferencial para o espalhamento incoerente por elétrons ligados.

A figura 3.7 mostra a seção de choque do espalhamento Compton em função da energia para uma amostra de zinco e uma de tecido de mama (ICRU 44).

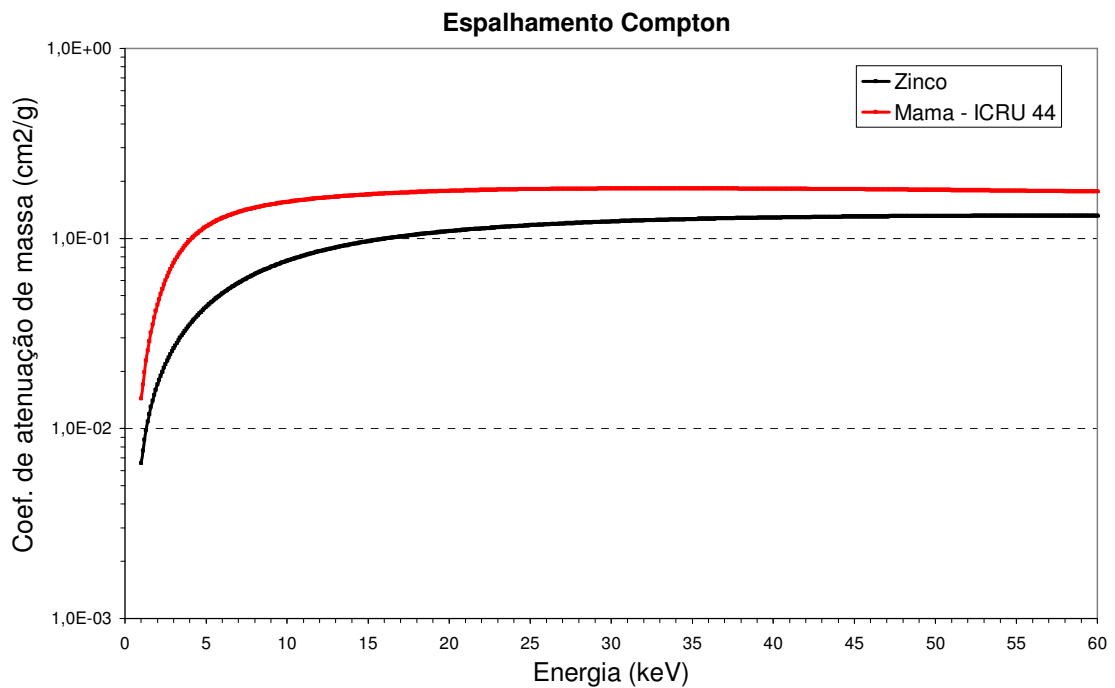


Figura 3.7– Seção de choque do espalhamento Compton para Zinco e para tecido mamário (ICRU 44) produzido no software XCOM.

III.2. Coeficiente de Atenuação de massa

Quando um feixe paralelo de fótons atravessa um determinado material, sofre atenuação, devido à interação dos fótons com os átomos do material. No caso de um feixe de raios X, esta interação ocorre, normalmente, por meio dos seguintes processos: efeito fotoelétrico, espalhamentos Rayleigh e Compton. Cada um desses processos tem uma certa probabilidade de ocorrência, que é dada pelo valor da seção de choque. Tal valor depende da energia do fóton incidente e do tipo de átomo (número atômico) constituinte do material. Assim, a seção de choque é, basicamente, uma maneira de expressar numericamente a probabilidade de que um tipo de átomo faça com que um fóton, com uma dada energia, sofra um determinado processo.

Na Figura 3.8, pode-se observar que existem I_0 fótons no feixe que incide no material cuja densidade é ρ . Devido aos processos de espalhamento e atenuação, o feixe paralelo passará a ter apenas um número $I(x)$ de fótons após penetrar x cm do material. Considerando uma placa fina deste material, de largura dx e localizada na posição x , o número de fótons do feixe que serão absorvidos ou espalhados pela placa será especificado pela seção de choque total, dado pela equação 3.8.

$$\sigma = I(x) \cdot \rho \cdot dx \quad (3.8)$$

Logo, o número de fótons do feixe que saem da placa, $I(x+dx)$, será igual ao número incidente menos o número removido:

$$I(x + dx) = I(x) - \mu(E) \cdot I(x) \cdot \rho \cdot dx \quad (3.9)$$

ou

$$dI(x) = I(x + dx) - I(x) = -\mu(E) \cdot I(x) \cdot \rho \cdot dx \quad (3.10)$$

onde $\mu(E)$ é o coeficiente de atenuação de massa do material para energia E e ρ é a densidade do material.

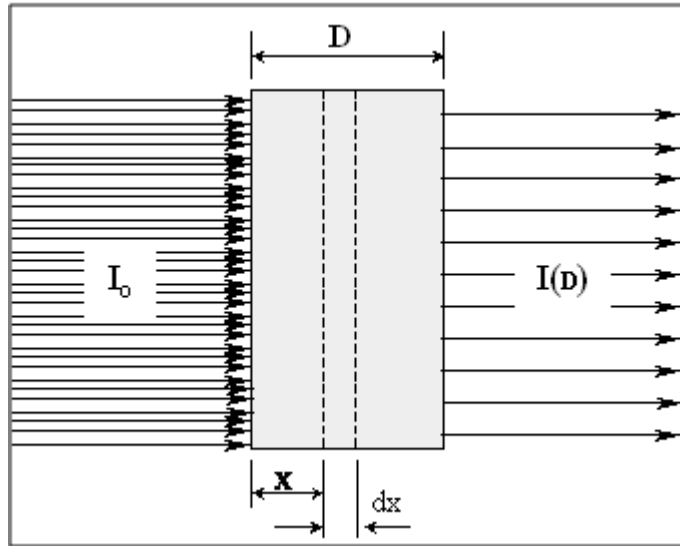


Figura 3.8 – Atenuação do feixe de radiação por um material de espessura S .

O número de fótons que saem da face posterior do material, $\mathbf{I(D)}$, pode ser encontrado calculando $d\mathbf{I(x)}/\mathbf{I(x)}$ e integrando em relação a \mathbf{x} :

$$\frac{dI(x)}{I(x)} = -\mu(E) \cdot \rho \cdot dx \quad (3.11)$$

Integrando a equação 3.11 em toda a espessura s do material, temos:

$$\int_0^D \frac{dI(x)}{I(x)} = -\mu(E) \cdot \rho \int_0^D dx \quad (3.12)$$

$$\ln \frac{I(s)}{I(0)} = -\mu(E) \cdot \rho \cdot D \quad (3.13)$$

$$I(D) = I(0) \cdot \exp[-\mu(E) \cdot \rho \cdot D] \quad (3.14)$$

A equação 3.14 mostra que a intensidade do feixe, medida pelo número \mathbf{I} de fótons que ele contém, decresce exponencialmente à medida que a espessura s do material aumenta.

O coeficiente de atenuação de massa é representado pelos três processos, de interação dos raios X com o material:

$$\mu_m(E) = \tau(E) + \sigma_{inc.}(E) + \sigma_{coe.}(E) \quad (3.15)$$

onde: $\tau(E)$ é o coeficiente de atenuação de massa fotoelétrico; $\sigma_{inc.}(E)$ é o coeficiente de atenuação de massa para espalhamento incoerente e $\sigma_{coe.}(E)$ é o coeficiente de atenuação de massa para espalhamento coerente.

Se o material absorvedor for um composto ou uma mistura, o coeficiente de atenuação de massa $\mu_m(E)$ pode ser avaliado como uma média ponderada de cada elemento da mistura.

$$\mu_m(E) = \sum_i^n w_i \cdot \mu_i(E) \quad (3.16)$$

$$\sum_i^n w_i = 1 \quad (3.17)$$

III.3 O Método de Transmissão da Radiação

O método de transmissão é a determinação experimental do coeficiente de atenuação de massa. Este método consiste em aplicar a lei de atenuação de Beer-Lambert (LEIGHTON, 1959) para um fotopico bem definido, feixe monoenergético, transmitido em uma amostra:

$$\mu_m = \frac{1}{\rho \cdot D} \cdot \ln\left(\frac{I_0}{I}\right) \quad (3.18)$$

O feixe monoenergético pode ser obtido através de uma fonte de radiação gama, como usado nos trabalhos de DEMIR (2009), EKINGIR (2007), AKAR (2006), ALAM (2001) e MEDHAT (2009). Este feixe monoenergético também pode ser obtido excitando um alvo secundário (produção de fluorescência) com uma fonte de raios X ou uma fonte gama. A fluorescência produzida pelas linhas K_α e K_β dos elementos que constituem o alvo secundário formam o feixe monoenergético que será atenuado pela amostra. Os trabalhos de ANGELONE (2001A e 2001B), IÇELLI (2004) e TURGUT (2004) são exemplos de aplicação desta técnica.

No entanto, a aplicação experimental deste método está condicionada ao critério de NORDFORS (1960), muitas vezes citado na literatura como o trabalho de CREATH (1987):

$$2 < \mu_m \cdot \rho \cdot D < 4 \quad (3.20)$$

Este critério estabelece um limite do erro estatístico da contagem de I_0 e I . O trabalho de CHANTLER(2002) estuda este critério e redefine seus limites para:

$$0,5 < \mu_m \cdot \rho \cdot D < 5 \quad (3.21)$$

Porém, o critério original ainda é fortemente citado em trabalhos recentes na literatura.

III.4. O método de espalhamento

O método de espalhamento, desenvolvido nesta tese, é uma alternativa para obtenção do coeficiente de atenuação de massa em amostras que não apresentam uma descontinuidade acentuada na curva de atenuação. Este método é baseado na suposição de que o coeficiente de atenuação de massa pode ser representado por uma função potência da energia do fóton incidente:

$$\mu_m = A \cdot E^B \quad (3.22)$$

onde A e B são constantes determinadas através de um ajuste de curva.

Aplicando as propriedades do logaritmo à função:

$$\ln \mu_m = \ln A + B \cdot \ln E \quad (3.23)$$

Esta equação representa uma função linear onde o termo $\ln(\mu_m)$ é função da energia E do fóton incidente. Os termos $\ln(A)$ e B representam, respectivamente, o coeficiente linear e o coeficiente angular da reta ajustada aos pontos da curva. A figura 3.9 mostra o coeficiente de atenuação de massa da água na região de energia de 1 a 100 keV.

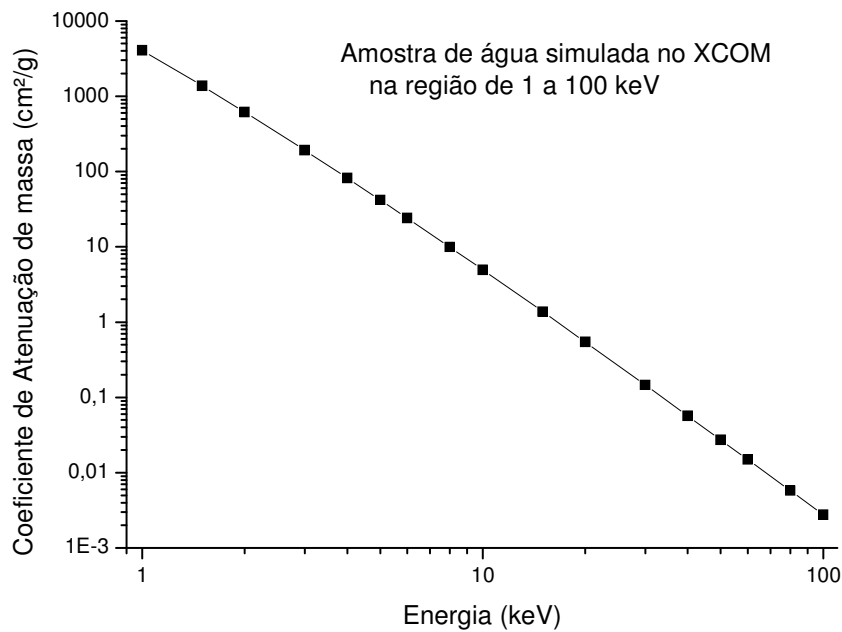


Figura 3.9 – O coeficiente de atenuação de massa da água na região de 1 a 100 keV simulado no programa XCOM.

Alguns testes do comportamento linear do termo $\ln(\mu_m)$ para amostras biológicas foram realizados com o programa XCOM e foi verificado que esta suposição é válida para fótons com energia incidente na região de 2 a 30 keV.

A aplicação desta técnica está condicionada ao conhecimento do coeficiente de atenuação de massa em diferentes energias para obtenção dos parâmetros A e B. Como não é conhecida a composição elementar da amostra, o número atômico efetivo (Z_{ef}) pode ser obtido da amostra através da razão entre os picos de espalhamento Rayleigh e Compton (R/C). Abaixo uma síntese do método de espalhamento separado em 7 etapas:

1° - Medir a razão entre os picos de espalhamento Rayleigh e Compton (R/C) de amostras padrões e da amostra biológica da qual se deseja obter o coeficiente de atenuação de massa;

2° - Calcular o número atômico efetivo (Z_{ef}) das amostras padrões;

3° - Realizar o ajuste de curva entre a razão R/C e o Z_{ef} ;

4° - Encontrar o número atômico efetivo da amostra biológica com o ajuste de curva e a razão R/C relativa à amostra;

5° - Obter o coeficiente de atenuação de massa da amostra através do número atômico efetivo para diferentes energias;

6° - Realizar o ajuste de curva entre o coeficiente de atenuação de massa e a energia do fóton incidente;

7° - Encontrar os parâmetros A e B com o ajuste de curva.

III.5. Descrição teórica da razão entre os espalhamentos Rayleigh e Compton

Quando um feixe de raios X ou raios gama, interage com uma amostra, o número de fótons espalhado em direção ao detector depende do número N_0 de fótons incidentes e do volume V interação da amostra (DONATIVI, 2007).

O volume V da amostra a ser estudada é geometricamente determinado pela intercessão entre o feixe incidente e o feixe espalhado. O número de fótons espalhados que chega ao detector é descrito pela equação clássica de Thomson (espalhamento Rayleigh) e pela equação de Klein-Nishina (espalhamento Compton), este último depende do ângulo incidente e da energia E_0 do feixe, enquanto o primeiro depende apenas do ângulo de espalhamento. Além disso, outros parâmetros, como a dimensão do detector, a forma ou a natureza do objeto, também influenciam no número de fótons espalhados em direção ao detector (DUVAUCHELE, 1999). Vamos exemplificar o estudo do espalhamento supondo um objeto de densidade ρ , irradiado por um feixe de fótons monoenergéticos contendo N_0 fótons de energia E_0 . A figura 3.9 mostra uma representação esquemática do espalhamento produzido em um elemento de volume V da amostra.

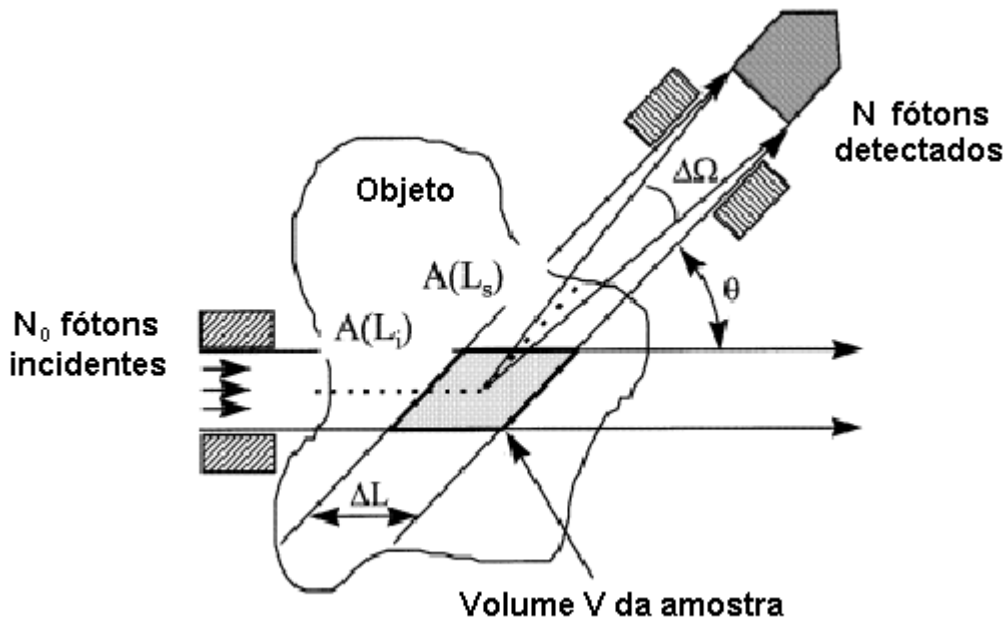


Figura 3.9 – Representação do princípio de espalhamento Rayleigh e Compton (DUVAUCHALE,1999)

O número de fótons que sofrem espalhamento Rayleigh N_R é dado por:

$$N_R = e^{-\mu(E_0) \cdot L_i} \cdot \left[\left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_R \cdot \Delta\Omega \cdot \Delta L \cdot N_0 \cdot n_{at} \right] \cdot e^{-\mu(E_0) \cdot L_f} \quad (3.24)$$

Enquanto o número de fótons espalhados pela interação Compton N_C é:

$$N_C = e^{-\mu(E_0) \cdot L_i} \cdot \left[\left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_C \cdot \Delta\Omega \cdot \Delta L \cdot N_0 \cdot n_{at} \right] \cdot e^{-\mu(E') \cdot L_f} \quad (3.25)$$

onde

L_i e L_f são as distâncias através da amostra percorridas pelos os feixes incidentes e o feixe,

ΔL é o comprimento na direção do feixe incidente,

$\Delta\Omega$ é o ângulo sólido visto pelo detector,

E_0 é a energia do fóton incidente,

E' é a energia do fóton após a interação Compton

n_{at} é o número de átomos por unidade de volume, dado por:

$$n_{at} = \frac{N_A \cdot \rho}{A} \quad (3.26)$$

Onde

N_A é o número de Avogadro,

A é a massa atômica e

ρ é a densidade da amostra

Para fótons de baixa energia, os fatores $e^{-\mu(E_0) \cdot L_f}$ na equação 3.24 e $e^{-\mu(E') \cdot L_f}$ na equação 3.25 são aproximadamente iguais. Sendo assim, a razão entre o número de fótons que sofrem espalhamento Rayleigh e o número de fótons que sofrem espalhamento Compton pode ser descrita por:

$$\frac{N_R}{N_C} \approx \frac{\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_R}{\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_C} \quad (3.27)$$

Substituindo as seções de choque Rayleigh e Compton pelas definições apresentadas nas equações 3.3 e 3.7:

$$\frac{N_R}{N_C} \approx \frac{\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{Thomson} \cdot F^2(x, Z)}{\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{KN} \cdot S(x, Z)} \quad (3.28)$$

O fator de forma $F(x, Z)$ e a função de espalhamento incoerente $S(x, Z)$ são funções do momento transferido x e do número atômico Z . Para um fóton com energia E_0 e ângulo de espalhamento θ , o momento transferido x é dado pela equação:

$$x = \frac{\sin(\theta/2)}{\lambda_0} = \frac{E_0}{h \cdot c} \cdot \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \quad (3.29)$$

Onde:

λ_0 é o comprimento de onda da radiação incidente,

h é a constante de Planck,

c é a velocidade da luz no vácuo.

No caso de um material solução contendo n elementos diferentes, é possível generalizar a equação 3.27. O fator de forma $F(x,Z)$ e a função do espalhamento incoerente $S(x,Z)$ são adicionados proporcionalmente à porcentagem atômica α_i^{at} de cada elemento presente na amostra.

$$\frac{N_R}{N_C}(Z_{ef}) \approx \frac{\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{Thomson} \cdot \sum \alpha_i^{at} \cdot F^2(x, Z_i)}{\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{KN} \cdot \sum \alpha_i^{at} \cdot S(x, Z_i)} \quad (3.30)$$

Onde

α_i^{at} é definido pela porcentagem de massa.

$$\alpha_i^{at} = \frac{Z_i/A_i}{\sum_i^n Z_i/A_i} \quad (3.31)$$

Z_i é o número atômico de cada elemento.

A equação 3.30 descreve o modelo teórico para a razão entre os espalhamentos Rayleigh e Compton.

Estes modelos mostram que para cada valor de momento transferido x , a razão entre os picos de espalhamentos Rayleigh e Compton depende somente do número atômico de uma amostra simples. Para uma amostra composta podemos associar a razão com o número atômico efetivo Z_{ef} . A seção de choque do espalhamento Rayleigh é proporcional a Z^2 ou a Z^3 , enquanto a seção de choque Compton apresenta uma relação linear com Z (MANOHARA, 2007). Os trabalhos experimentais encontrados na literatura mostram que a razão entre os espalhamentos Rayleigh e Compton (R/C) são funções quadráticas ou funções lineares (SINGH, 2007) do número atômico efetivo da amostra dependendo do momento transferido x .

Sendo assim, usando o banco de dados XCOM ou WinXCOM podemos relacionar o número atômico efetivo de amostras padrões com os coeficientes de

atenuação de massa de cada amostra. Conhecendo a razão entre os picos de espalhamento R/C destas amostras padrões, pode-se determinar o número atômico efetivo de uma amostra desconhecida e a seguir o seu coeficiente de atenuação de massa. No entanto, o número atômico efetivo Z_{ef} é uma complicada função do número atômico presente em cada composto. Trabalhos recentes (DUCHAVELLE, 1999; SINGH, 2007) mostram que não existe uma equação bem definida para calcular o número atômico efetivo Z_{ef} de uma amostra padrão. A seguir serão apresentados os principais métodos para calcular o número atômico efetivo de uma amostra padrão composta.

III.6. Métodos para calcular o número atômico efetivo Z_{ef}

Estabelecer o número atômico efetivo de uma amostra é essencial para um resultado preciso do método proposto. Como não existe uma única forma de calcular o número atômico efetivo serão avaliados os seis principais métodos citados na literatura, verificando os resultados mais expressivos quando comparados aos valores do banco de dados XCOM e/ou os valores encontrados pelo método de transmissão.

III.6.1. Método I

No primeiro método, (HARDING, 1995) supõe que a razão R entre o espalhamento Rayleigh e Compton seria uma função potência de Z_{ef} :

$$R = B \cdot Z_{ef}^A \quad (3.32)$$

onde B representa a razão entre a seção de choque de Thomson e Klein-Nishina e A é uma potência de Z_{ef} .

A equação 3.30 implica no fato das funções $F(x,Z)$ e $S(x,Z)$ serem funções potência de Z para um dado valor de momento transferido x, o que não é rigorosamente verdade (DUCHAVELLE, 1999). No entanto, para uma limitada faixa de valores de Z, esta aproximação é válida.

Comparando as equações 3.28 e 3.30, podemos obter:

$$Z_{ef} = \left[\frac{\sum \alpha_i^{at} \cdot Z_i^p}{\sum \alpha_i^{at} \cdot Z_i^m} \right]^{1/p-m} \quad (3.33)$$

Segundo MANNINEN(1984), podemos supor que o espalhamento Rayleigh e Compton é proporcional a Z^3 e Z , respectivamente. Sendo assim, obtemos a seguinte definição de Z_{ef} .

$$Z_{ef} = \left[\frac{\sum (w_i/A_i) \cdot Z_i^3}{\sum (w_i/A_i) \cdot Z_i^1} \right]^{1/2} \quad (3.34)$$

III.6.2. Método II

Outra possível metodologia seria supor que o valor de R depende fortemente das condições experimentais estabelecidas, não havendo apenas uma única função. Observando a equação 3.28, podemos verificar que a razão entre as seções de choque diferenciais de Klein-Nishina e Thomson referem-se a um único elétron, sendo assim torna-se lógico associar ao número atômico Z a razão F^2/S . Para cada valor do momento transferido, existe uma função discreta f_x^D que fornece o valor de Z como função de F^2/S .

$$Z = f_x^D \left[F^2/S \right] \quad (3.35)$$

Para uma amostra formada por um composto de vários elementos, podemos considerar que as funções f_x são contínuas e nos permitem calcular o valor de Z_{ef} .

$$Z_{ef} = f_x \left[\frac{\sum \alpha_i^{at} \cdot F^2(x,Z)}{\sum \alpha_i^{at} \cdot S(x,Z)} \right] \quad (3.36)$$

$$Z_{ef} = f_x \left[\left(F^2/S \right)_{ef} \right] \quad (3.37)$$

Podemos deduzir a equação f_x através de um ajuste de curva adequado. Dessa maneira é possível determinar o valor de Z_{ef} conhecendo o valor de $(F^2/S)_{ef}$ da amostra considerada. Este é o método proposto no trabalho de (DUVACHELLE,1999).

III.6.3. Método III

O trabalho de TSAÏ (1976) sugere uma relação semi-empírica fazendo uso da porcentagem eletrônica. De acordo com os autores, esta expressão é válida para energias abaixo de 150 keV.

$$Z_{ef} = \left(\sum_i \alpha_i^e \cdot Z_i^{3,4} \right)^{1/3,4} \quad (3.38)$$

onde

$$\alpha_i^e = \frac{\left(Z_i/A_i \right) \cdot Z_i}{\sum \left(Z_i/A_i \right) \cdot Z_i} \quad (3.39)$$

III.6.4. Método IV

No trabalho de PUUMALAINEN (1977), o número atômico efetivo é descrito com a média do número de elétrons por átomo. Usando a porcentagem atômica α_i^{at} , pode-se escrever a equação abaixo:

$$Z_{ef} = \sum_i \alpha_i^{at} \cdot Z_i \quad (3.40)$$

III.6.5. Método V

Neste método, podemos obter o número atômico efetivo usando a relação semi-empírica do trabalho de SINGH (2007):

$$Z_{ef} = \left(\sum_i f_i \cdot Z_i^{2,94} \right)^{1/2,94} \quad (3.41)$$

Onde f_i é a fração do número total de elétrons associado com cada elemento, e Z_i é o número atômico de cada elemento.

III.6.6. Método VI

Segundo o trabalho de MANOHARA (2007), o número atômico efetivo pode ser calculado como a razão entre a seção de choque atômica e a seção de choque eletrônica. Para isto, define-se a seção de choque molecular total:

$$\sigma_m = \frac{M}{N_A} \cdot \mu_m \quad (3.42)$$

Onde $M = \sum_i n_i A_i$ é a massa molecular do composto, N_A é o número de Avogadro, n_i é o número total de átomos na molécula e A_i é a massa atômica do elemento i .

A seção de choque atômica efetiva (σ_a) é facilmente determinada pela seguinte equação:

$$\sigma_a = \frac{1}{N_A} \sum f_i A_i (\mu_m)_i \quad (3.43)$$

Onde $(\mu_m)_i$ é o coeficiente de atenuação de massa do elemento i e f_i é a fração de abundância do elemento constituinte.

Similarmente, a seção de choque eletrônica (σ_e) efetiva é dada pela seguinte relação:

$$\sigma_e = \frac{1}{N_A} \sum \frac{A_i}{Z_i} f_i (\mu_m)_i = \frac{\sigma_a}{Z_{ef}} \quad (3.44)$$

Sendo assim, pode-se determinar o número atômico efetivo através da razão entre a seção de choque atômica efetiva e a seção de choque eletrônica efetiva:

$$Z_{ef} = \frac{\sigma_a}{\sigma_e} \quad (3.45)$$

III.7. Relação semi-empírica da curva de espalhamento.

O detector de Si(Li) não consegue resolver os picos de espalhamento Rayleigh e Compton para fótons com energia $E < 10$ keV, gerando, assim, uma curva de espalhamento que é a soma dos espalhamentos Rayleigh e Compton. Usando um mini tubo de raios X com anodo de tungstênio (W), estudou-se a razão entre os picos de espalhamento gerados pela radiação característica do tungstênio que compõe o anodo do mini tubo, linhas L_α e L_β . Procurou-se estabelecer uma relação semi-empírica entre a razão das curvas de espalhamento L_α/L_β e o número atômico efetivo. Novamente os resultados experimentais foram comparados com os resultados obtidos pelo método de transmissão.

III.8. Simulação da razão entre os picos de espalhamento R/C

Para testar a técnica proposta neste trabalho, seria necessário utilizar uma variedade de fontes de radiação monoenergética. No entanto, ao longo do trabalho, não havia disponível um grande variedade de fontes monoenergéticas na faixa de energia 10 a 50 keV. A solução encontrada foi realização de simulações computacionais pelo método de Monte Carlo no código MCNP5 nessa faixa de energia. A seguir uma breve apresentação do método de Monte Carlo.

III.8.1. O Método de Monte Carlo no código MCNP5

O método de Monte Carlo é um método numérico usado para representar teoricamente um processo estatístico, tal como a interação da radiação com a matéria, sendo particularmente útil em problemas complexos que não podem ser simulados por métodos determinísticos. Neste método, os eventos probabilísticos individuais são simulados sequencialmente. As distribuições de probabilidade que governam esses

eventos são amostradas estatisticamente para descrever o fenômeno que está sendo simulado. Este processo de amostragem estatística é baseado na seleção de números aleatórios para o cálculo do transporte de partícula que se pretende “seguir”. A técnica de Monte Carlo consiste em seguir cada partícula desde sua geração até a sua atenuação ou escape (PEREIRA, 2009).

Desenvolvido em *Los Alamos National Laboratory* (EUA), o Monte Carlo N-Particle (MCNP) é um código de propósito geral baseado no método de Monte Carlo e é um dos códigos computacionais mais utilizados na área de transporte de radiação envolvendo nêutrons, fótons e elétrons (X-5 MONTE, 2003). A capacidade de tratamento de geometrias complexas em três dimensões e uma variedade de opções de entrada faz deste código uma ferramenta muito útil nos campos de pesquisa em Física e Engenharia Nuclear.

A versão MCNP5 simula nêutrons, fótons e elétrons no intervalo de energia entre 10^{-11} a 100 MeV para nêutrons, 1 keV a 100 GeV para fótons e 1 keV a 1 GeV para elétrons. Para fótons, o código considera espalhamento coerente e incoerente, a possibilidade de ocorrer fluorescência após a atenuação fotoelétrica, atenuação em produção de pares com emissão local de radiação de aniquilação e de frenagem (*Bremsstrahlung*) (TEIXEIRA, 2009).

O arquivo de entrada do MCNP (INP) permite ao usuário especificar o tipo de fonte, a configuração geométrica, a geometria do detector desejado e as condições gerais do sistema desejado, como tamanho, forma, espectro de energia, composição da fonte de radiação bem como do meio que a radiação irá interagir.

CAPÍTULO IV

MATERIAIS E MÉTODOS

Neste capítulo apresenta-se o processo de preparação das amostras e as condições experimentais usadas neste trabalho, no Laboratório de Instrumentação Nuclear (LIN) do programa de Pós-graduação em Engenharia Nuclear da COPPE-UFRJ.

IV.1 – O Arranjo Experimental

O trabalho experimental foi dividido em três etapas distintas. Em cada etapa foram usadas fontes de radiação e detectores diferentes. No entanto, o arranjo experimental usado nas duas primeiras etapas foi o mesmo: um suporte de PVC para fixar as fontes e os detectores. O suporte permitiu trocar as fontes emissoras de radiação (o mini tubo de raios X e a fonte de Am^{241} selada) e os detectores mantendo sempre uma geometria fixa de espalhamento. Somente as medidas experimentais com a fonte não-selada apresentaram uma geometria diferente (método de transmissão). A amostra a ser analisada foi fixada no suporte de PVC, na frente do detector, de modo que sua superfície fique paralela à janela. O ângulo médio entre o feixe emergente que alcança o detector e a superfície da amostra é, aproximadamente, 90° (1°). O ângulo incidente médio é de 16° (1°), gerando um ângulo de espalhamento de 106° . A figura 4.1 mostra a geometria do arranjo experimental usado nas etapas 1 e 2.

Associado ao sistema fonte-detector existe o sistema eletrônico de detecção. O sistema é constituído por um amplificador que recebe os pulsos do pré-amplificador acoplado ao detector. Os pulsos de saída do amplificador são enviados à uma placa multicanal, inserida dentro de um microcomputador.

O programa AXIL (*Analysis of X-ray Spectra by Iterative Least Squares Fitting*) é foi usado neste trabalho, para calcular as áreas líquidas sob os fotopicos gerados pelos espalhamentos Rayleigh e Compton.

Na terceira etapa experimental, foi usado um sistema portátil de fluorescência de raios X com geometria de espalhamento fixa de 120° . Nesta etapa a fonte de radiação usada foi à curva de espalhamento gerada pelas linhas L_α e L_β do anodo de tungstênio que compõe o mini tubo de raios X.

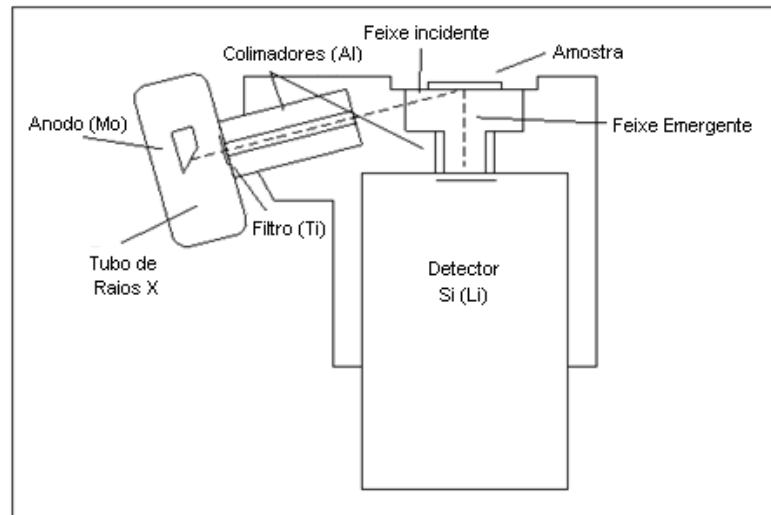


Figura 4.1 – A geometria do arranjo experimental da etapa experimental 1.

IV.1.1.- Etapa Experimental 1

Nesta etapa foram realizadas medidas de amostras, preparadas no Laboratório de Química do LIN, usando o espalhamento do pico K_{α} do anodo de Mo (17,74 keV) do mini tubo de raios X com o detector de Si(Li). A figura 4.2 apresenta uma foto do sistema fonte-detector com o mini tubo de raios X. A tabela 4.1 apresenta as condições experimentais das etapas 1.

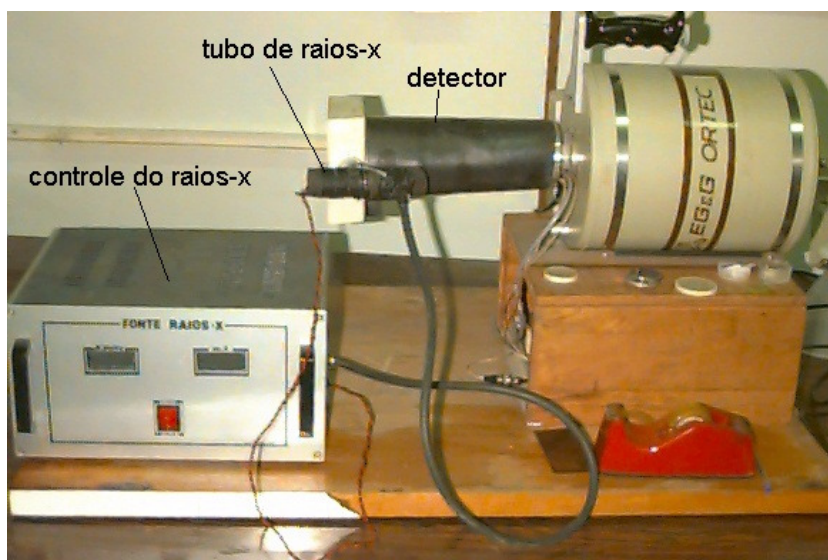


Figura 4.2 – A foto do sistema com o mini tubo de raios X com anodo de Mo.

Tabela 4.1. Condições experimentais da etapa 1.

ELEMENTO	CARACTERÍSTICA
Detector	Si(Li) (Ortec)
Tubo de raios X	Mini tubo(Oxford) com ânodo de Mo (30 kV e 750 μ A)
Ângulo de espalhamento	106°
Tempo de aquisição	4000 s

IV.1.2.- Etapa Experimental 2

O detector de Si(Li) apresenta uma ótima eficiência para o pico K_{α} do Mo (quase 100%), no entanto para os picos Rayleigh (59,54 keV) e Compton (51,82 keV) da fonte selada de Am^{241} a eficiência cai para 15% e 22%, respectivamente. Por este motivo, foi usado o detector CdTe XR-100T (conhecido como CZT) nas medidas experimentais da etapa 2, pois tem uma excelente eficiência para o pico de 59,54 keV da fonte selada de Am^{241} . A geometria (ângulo de incidência, ângulo emergente, distância amostra-fonte e distância amostra-detector) permaneceu inalterada devido à utilização do suporte de PVC.

A tabela 4.2 apresenta as condições experimentais das etapas 2. A figura 4.3 mostra o esquema experimental da medida de espalhamento e da medida de transmissão. A figura 4.4 mostra o sistema com a fonte selada de Am^{241} e o detector CZT.

Tabela 4.2. Condições experimentais da etapa 2.

ELEMENTO	CARACTERÍSTICA
Detector	CdTe XR-100T (Amptek)
Fonte γ não selada	Am^{241} com atividade de 185 kBq (5 μ Ci)
Fonte γ selada	Am^{241} com atividade de 3,7 GBq (100mCi)
Ângulo de espalhamento	106°
Tempo de aquisição	4000 s

As medidas de transmissão foram realizadas com uma fonte não selada, ou aberta, de Am^{241} , que apresenta energias de 13,95 keV, 17,76 keV, 22,12 keV, 26,33 keV e 59,54 keV. Usando a fonte selada, ou fechada, só podemos medir o pico de 59,54 keV. Como a técnica proposta é para fótons com energia menores de 30 keV, as medidas de transmissão com o pico de 59,54 keV foram descartadas.

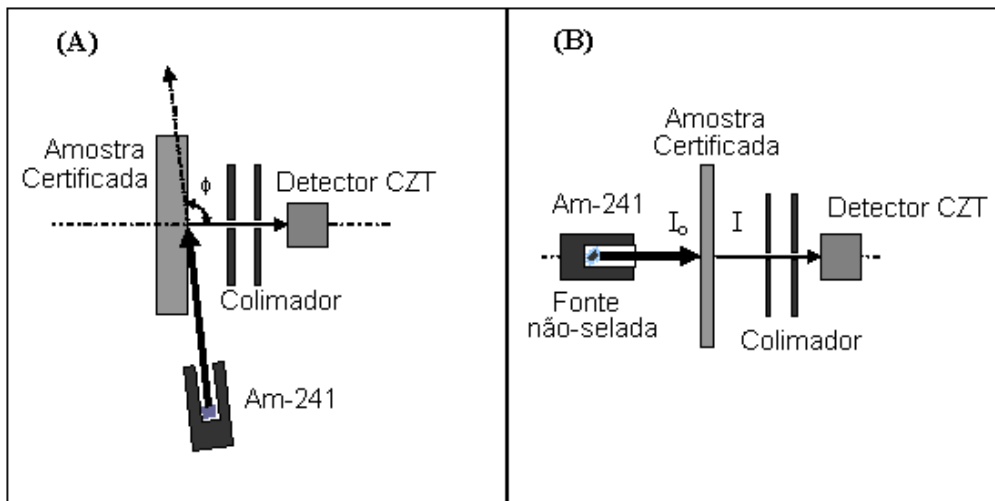


Figura 4.3 – A diagrama esquemático do sistema de espalhamento (A) e do sistema de transmissão (B) com a fonte de Am^{241} e o detector de CZT.

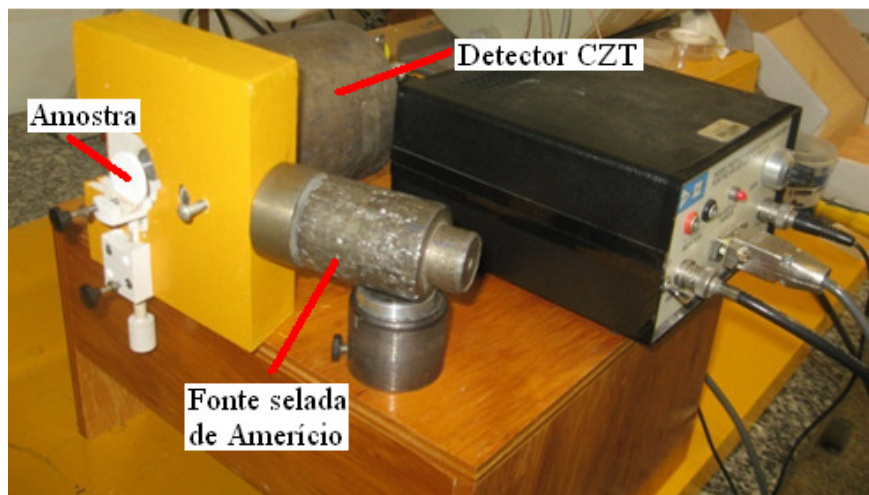


Figura 4.4 – Foto do sistema com a fonte de Am^{241} e o detector de CZT.

IV.1.3.- Etapa Experimental 3

Dependendo do ângulo de espalhamento e da energia do fóton, não é possível resolver os picos Rayleigh e Compton. No lugar de dois fotopicos distintos no espectro,

tem-se um único pico, chamado de curva de espalhamento, que é a superposição entre os picos Rayleigh e Compton. Além das medidas usando a razão entre os picos de espalhamento Rayleigh e Compton, procurou-se uma relação semi-empírica entre a curva de espalhamento e o coeficiente de atenuação de massa da amostra. Para este estudo, utilizou-se um sistema portátil de XRF desenvolvido no Laboratório de Instrumentação Nuclear. O sistema portátil é composto por um mini tubo de raios X modelo TF3005 da Oxford, detector Si-PIN modelo XR-100CR da Amptek (com uma área ativa de 6 mm² e janela de 25 μm de Be). O tubo tem um anodo de Tungstênio(W), uma janela de 127 μm de Be, corrente máxima de operação de 0,5 mA e tensão máxima de operação de 30 kV. O ângulo entre o tubo de raios X e a janela do detector é 60°, formando uma geometria de espalhamento de 120°. Na figura 4.5 é mostrado um esquema do sistema portátil e na figura 4.6 uma foto do sistema. A tabela 4.3 apresenta as condições experimentais das etapas 3.

As medidas de transmissão foram realizadas usando uma fonte secundária gerada pela excitação de um alvo multielementar. Direcionando o feixe de raios X do mini tubo para este alvo multielementar, composto por Ti, Mn, Cu e Br, as radiações características das linhas K_{α} e K_{β} dos elementos foram transmitidas pela amostra.

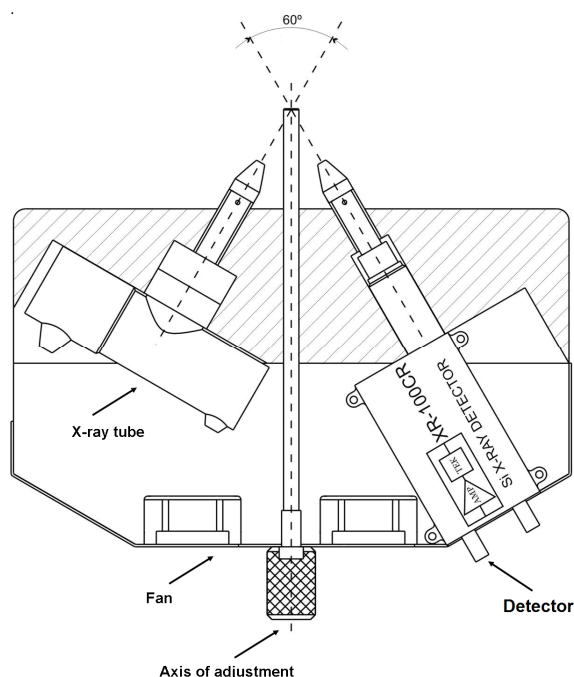


Figura 4.5 - Esquema do sistema portátil de XRF

Tabela 4.3. Condições experimentais da etapa 3.

ELEMENTO	CARACTERÍSTICA
Detector	Si-PIN modelo XR-100CR (Amptek)
Tubo de raios X	Mini tubo(Oxford) com ânodo de W (25 kV e 100 μ A)
Ângulo de espalhamento	120°
Tempo de aquisição	600 s



Figura 4.6 – Foto do sistema portátil

O estudo semi-empírico foi realizado nas curvas de espalhamento gerado pelas linhas L_{α} (8,99 keV) e L_{β} (9,76 keV) do anodo de W. Cada amostra foi medida três vezes em um intervalo de medida de 600 s. A razão entre as curvas de espalhamento L_{α} e L_{β} apresentou uma relação linear com o número atômico efetivo das amostras padrões.

IV.2 – Seleção das amostras

Como o objetivo deste trabalho é o estudo de amostras biológicas, procurou-se construir amostras com número atômico efetivo no intervalo esperado para este tipo de amostra, ou seja, entre $6 \leq Z_{ef} \leq 16$. Usando este critério, as amostras selecionadas foram: H_3BO_3 , Al_2O_3 , Na_2CO_3 , $Al_2(SO_3)_4$, $CaCO_3$, K_2SO_4 . Para comparar os resultados do método proposto com os resultados do método de transmissão, trabalhou-se com a amostra de MgO e amostras certificadas de fígado bovino, leite em pó e musgo. Foi

utilizado uma amostra de tecido de próstata humana do Departamento de Histologia e Embriologia do CCS/UFRJ.

IV.2.1 –Preparação das amostras

Os materiais selecionados para constituir as amostras foram macerados em mortar de ágata até a obtenção de uma granulometria de 325 mesh (44 μm). O processo de controle da granulometria foi realizado com a utilização de peneiras com malha de nylon. Cada amostra foi preparada com uma massa entre 1,0 e 2,0 g. Em seguida, o material foi colocado em um compactador e prensado em forma de pastilha a uma pressão de $2,32 \times 10^8$ Pa por aproximadamente 15 minutos. O produto final foi uma pastilha cilíndrica com diâmetro de 2,54 cm. Além deste procedimento, o tecido de próstata foi liofilizado para ficar seco e permitir a maceração.

IV.3. – Simulação Monte Carlo

Usando a simulação Monte Carlo, pode-se reproduzir o trabalho experimental com outras energias. Em um primeiro momento, alguns resultados experimentais da fonte gama de Am^{241} foram modelados para validar a simulação. Na etapa seguinte, reproduziu-se o trabalho experimental com uma geometria um pouco diferente: um ângulo de espalhamento de 90° que reproduz a geometria de espalhamento mais usual. A figura 4.7 mostra a geometria da simulação.

A geometria da simulação apresenta as seguintes características: amostra cilíndrica com diâmetro de 2,54 cm e altura de 0,245 cm; detector semi-esférico de raio 0,529 cm; fronteira da simulação esfera de raio 5,0 cm. O detector contava todos os fótons na faixa de 1,1 a 12 keV que passavam pela região da semi-esfera. A figura 4.8 apresenta uma cópia do arquivo de entrada para amostra de tecido adiposo (ICRU 44) interagindo com fótons de 10 keV.

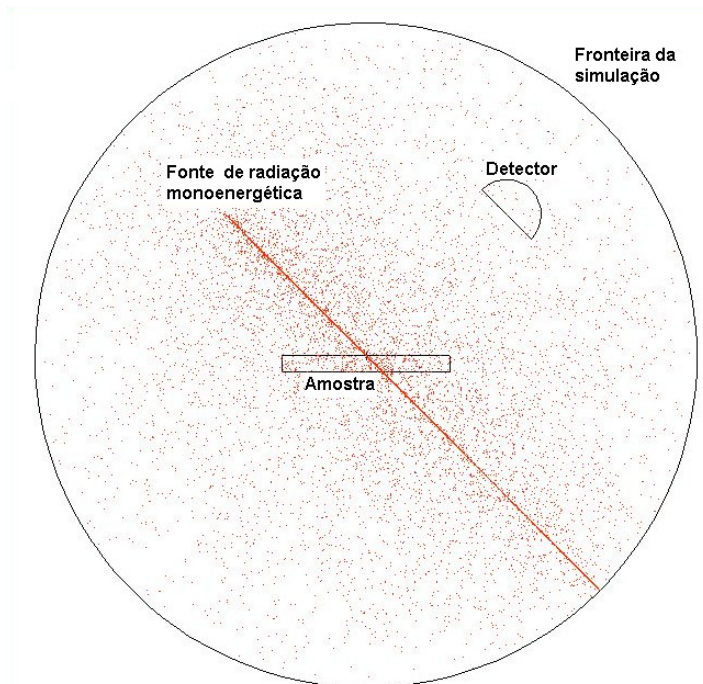


Figura 4.7 – Geometria da simulação.

```

C aluno->Marcelo COPPE ang=90 graus
C
1 0 -81 80 IMP:P=0
2 1 -0.95 -40 -50 60 IMP:P=1
3 0 -140 #2 #1 IMP:P=1
5 0 140 IMP:P=0

40 CZ 1.2725 $ diametro da amostra
50 pz 0 $ superficie superior da amostra
60 pz -0.245 $ superficie inferior da amostra
80 p 2.12 0 2.12 2.12 1 2.12 4.24 0 0
81 s 2.12 0 2.12 0.529
140 SO 5 $ (ESFERA DE RAI0=5cm)
C

MODE P $ Fótons
C
SDEF cel=3 pos=-2.12 0 2.12 VEC= 0.7071067811 0 -0.7071067811 DIR=1 ERG=0.010
C AMOSTRA
C tecido Adiposo
M1 001000 -0.114000 $ H
006000 -0.598000 $ C
007000 -0.007000 $ N
008000 -0.278000 $ O
011000 -0.001000 $ Na
016000 -0.001000 $ S
017000 -0.001000 $ Cl

C
F1:P 80
E1 1.1E-3 999i 12E-3 $ De 2 a 12 keV com 1000 canais
NPS 1e9

```

Figura 4.8 – Arquivo de entrada da simulação para amostra de tecido adiposo.

As amostras usadas na simulação para calibração da curva R/C versus Z_{ef} foram: H_3BO_3 , Al_2O_3 , Na_2CO_3 e MgO . Para testar o método em estudo, foram simuladas amostras biológicas ICRU-44 de tecido Adiposo, tecido Mamário e tecido Pulmonar. A simulação foi reproduzida para as amostras interagindo com fótons de energias 10 keV, 15 keV, 20 keV, 25 keV, 30 keV, 35 keV, 40 keV, 45 keV e 50 keV. Essa região de energia foi escolhida, pois para fótons com energias menores de 10 keV não é possível resolver os picos de espalhamento e acima de 50 keV foi reproduzido experimentalmente com a fonte de Am^{241} (59,54 keV).

O objetivo da simulação foi medir os picos de espalhamento Rayleigh e Compton produzidos por essas amostras para aplicação do método proposto.

CAPÍTULO V

APRESENTAÇÃO E ANÁLISE DOS RESULTADOS

Neste capítulo são apresentados os resultados obtidos no Laboratório de Instrumentação Nuclear da COPPE/UFRJ usando como fonte de espalhamento o pico de fluorescência de raios X da linha K_{α} do anodo de Mo (17,74 keV) de um mini tubo de raios X, a energia de 59,54 keV de uma fonte gama selada de Am^{241} e os picos de fluorescência de raios das linhas L_{α} (9,43 keV) e L_{β} (8,77 keV) do anodo de W de um mini tubo de raios X. Os resultados serão comparados com os valores obtidos a partir do software XCOM 3.1 e com os resultados obtidos experimentalmente usando o método de transmissão de radiação. Também são apresentados os resultados do modelo teórico da razão de espalhamento Rayleigh e Compton para discutir limitações do método de espalhamento.

V.1 – Curvas do Coeficiente de Atenuação de massa em função do Número atômico efetivo

Para determinar a curva que descreve o coeficiente de atenuação de massa em função do número atômico efetivo da amostra, foram simulados com o XCOM os valores do coeficiente de atenuação de massa dos seguintes elementos químicos de baixos números atômicos: C, N, O, F, Ne, Na, Mg, Al, Si, P e S nas energias 4,0 keV, 6,0 keV, 8,0 keV, 10 keV, 15 keV, 20 keV, 22 keV, 24 keV e 28 keV. Estes elementos foram escolhidos porque representam uma faixa de números atômicos de $Z=6$ até $Z=16$ e, em amostras biológicas, a contribuição de elementos de baixo Z é majoritária. A figura 5.1 mostra a relação entre o valor do coeficiente de atenuação de massa e o número atômico nas energias de 4,0 keV, 6,0 keV, 8,0 keV, 10 keV, 15 keV, 20 keV, 22 keV, 24 keV e 28 keV. As equações 5.1, 5.2, 5.3, 5.4, 5.5, 5.6, 5.7 e 5.8 representam curvas de ajuste polinomial de segundo grau para as curvas mostradas na figura 5.1 com $R^2=0,999$. Portanto, aplicando essas equações pode-se determinar a curva do coeficiente de atenuação de massa em função da energia, na região de 4,0 a 28 keV.

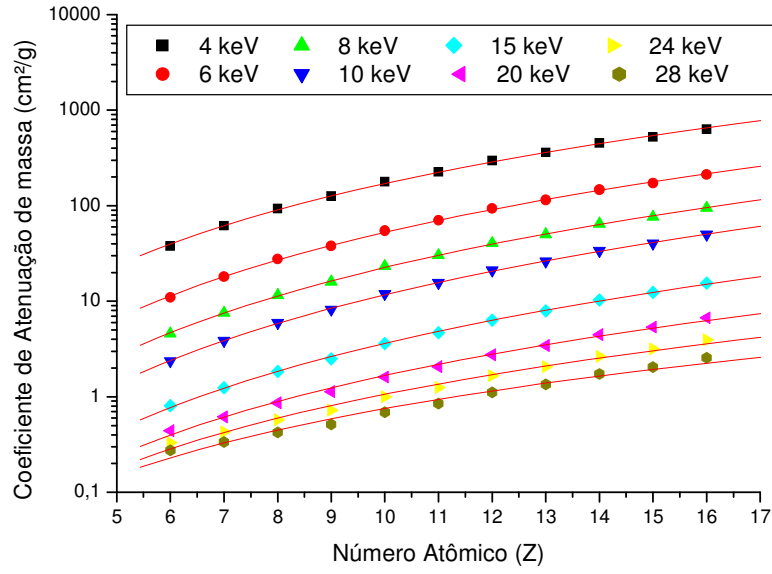


Figura 5.1 – Relação entre coeficiente de atenuação de massa e número atômico para fótons de 4 a 28 keV.

$$\mu_m(Z_{ef}) = 86,312 - 32,923 \cdot Z_{ef} + 4,4232 \cdot Z_{ef}^2, \quad \text{para } 4,0 \text{ keV} \quad (5.1)$$

$$\mu_m(Z_{ef}) = 45,681 - 15,110 \cdot Z_{ef} + 1,7852 \cdot Z_{ef}^2, \quad \text{para } 6,0 \text{ keV} \quad (5.2)$$

$$\mu_m(Z_{ef}) = 24,0251 - 7,616 \cdot Z_{ef} + 0,7877 \cdot Z_{ef}^2, \quad \text{para } 8,0 \text{ keV} \quad (5.3)$$

$$\mu_m(Z_{ef}) = 14,216 - 4,369 \cdot Z_{ef} + 0,4209 \cdot Z_{ef}^2, \quad \text{para } 10 \text{ keV} \quad (5.4)$$

$$\mu_m(Z_{ef}) = 5,274 - 1,519 \cdot Z_{ef} + 0,1441 \cdot Z_{ef}^2, \quad \text{para } 15 \text{ keV} \quad (5.5)$$

$$\mu_m(Z_{ef}) = 2,524 - 0,6852 \cdot Z_{ef} + 0,06276 \cdot Z_{ef}^2, \quad \text{para } 20 \text{ keV} \quad (5.6)$$

$$\mu_m(Z_{ef}) = 1,591 - 0,4085 \cdot Z_{ef} + 0,0391 \cdot Z_{ef}^2, \quad \text{para } 24 \text{ keV} \quad (5.7)$$

$$\mu_m(Z_{ef}) = 1,092 - 0,2621 \cdot Z_{ef} + 0,0231 \cdot Z_{ef}^2, \quad \text{para } 28 \text{ keV} \quad (5.8)$$

V.2 – Resultados do espalhamento de fótons de 17,74 keV

Nesta primeira etapa experimental, prepararam-se amostras de H_3BO_3 , Na_2CO_3 , CaCO_3 , $\text{Al}(\text{SO}_3)_4$ e MgO , realizando-se medidas dos picos de espalhamento produzidos pelo pico K_α do Molibdênio que compõe o anodo do mini tubo de raios X. A figura 5.2 mostra um espectro em energia no qual podem ser observados os picos espalhamentos Rayleigh e Compton do anodo de Mo.

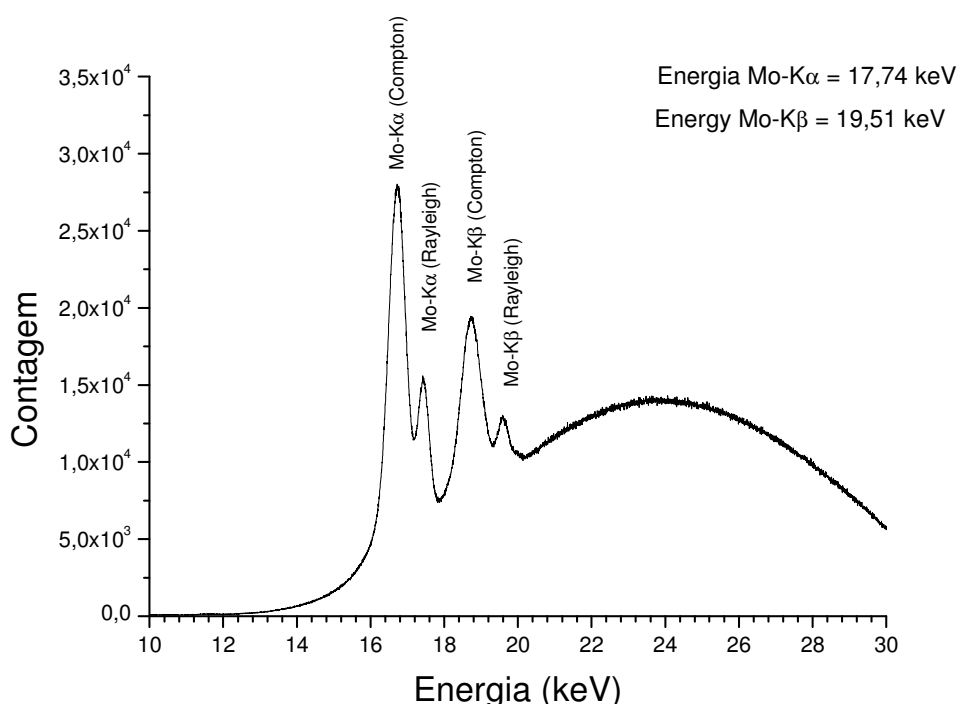


Figura 5.2 – Espectro dos picos de espalhamentos Rayleigh e Compton para fótons com energia de 17,74 keV.

Para validar o modelo teórico, comparou-se a razão entre os picos de espalhamento Rayleigh e Compton (R/C), obtidos experimentalmente, com os resultados esperados pelo modelo teórico (descrição apresentada no capítulo 3, equação 3.28). No entanto, para realizar esta comparação foi necessário corrigir os resultados teóricos a partir dos fatores de auto-absorção na amostra e a eficiência do detector (DONATIVI, 2007).

$$\frac{R}{C} = \left(\frac{\varepsilon_C}{\varepsilon_R}\right) \cdot \left(\frac{\beta_C}{\beta_R}\right) \cdot \left(\frac{N_R}{N_C}\right) \quad (5.9)$$

Onde:

N_R e N_C são as contagens dos picos Rayleigh e Compton;

β_R e β_C são os fatores de auto-absorção da amostra para as energias dos picos Rayleigh e Compton;

ε_R e ε_C são as eficiências do detector para as energias dos picos Rayleigh e Compton.

A tabela 5.1 apresenta os resultados experimentais e os resultados do modelo teórico corrigido para a razão R/C dos picos de espalhamentos para fótons com 17,74 keV e ângulo de espalhamento de 106°.

Tabelas 5.1 – Comparação dos Resultados experimentais e os resultados de modelo teórico corrigido

Amostra	R/C teórico	R/C experimental	Erro Experimental
H ₃ BO ₃	0,219	0,217	0,007
Na ₂ CO ₃	0,263	0,262	0,008
MgO	0,296	0,302	0,009
Al(SO ₃) ₄	0,307	0,305	0,008
Si	0,441	0,432	0,010
CaCO ₃	0,478	0,481	0,012

Como a amostra de MgO apresenta um valor intermediário para a razão R/C, ela foi escolhida como amostra de referência para a realização dos primeiros testes do método usando a razão do espalhamento R/C.

A próxima etapa do método proposto neste trabalho é determinar o número atômico efetivo (Z_{ef}) de cada amostra padrão. Na literatura foram encontrados seis métodos para o cálculo do Z_{ef} . Portanto, será avaliado qual dos métodos apresenta um resultado mais coerente com os resultados do XCOM. A tabela 5.2 mostra o número atômico efetivo de cada amostra padrão usando os seis métodos para calcular Z_{ef} como descrito no item III.5 do capítulo 3. A tabela 5.3 mostra a amplitude, o valor médio, o

desvio padrão e o coeficiente de variação do número atômico efetivo calculado por cada um dos métodos.

Tabelas 5.2 – Número Atômico Efetivo (Z_{ef}) de cada amostra padrão para fótons com energia de 17,74 keV

<i>Amostra</i>	<i>Método I</i>	<i>Método II</i>	<i>Método III</i>	<i>Método IV</i>	<i>Método V</i>	<i>Método VI</i>
H₃BO₃	6,91	6,82	7,31	7,13	7,41	6,90
Na₂CO₃	9,22	9,73	9,42	9,12	9,42	9,71
Al₂(SO₃)₄	12,0	11,8	12,7	11,5	12,5	13,7
Si	14,0	14,0	14,0	14,0	14,0	14,0
CaCO₃	13,9	13,6	15,5	12,6	15,1	17,8

Tabelas 5.3 – Dados estatísticos do número atômico efetivo (Z_{ef}) calculado por cada uma dos métodos.

<i>Amostra</i>	<i>Amplitude</i>	<i>Média</i>	<i>Desvio Padrão</i>	<i>CV^a</i>
H₃BO₃	6,82 – 7,41	7,08	0,24	0,03
Na₂CO₃	9,1 – 9,7	9,44	0,25	0,03
Al₂(SO₃)₄	11,5 – 13,7	12,4	0,79	0,06
Si	14,0	14,0	-	-
CaCO₃	12,6 – 17,8	14,8	1,83	0,12

a) coeficiente de variação (desvio padrão/média)

A amostra de CaCO₃ apresenta um número atômico efetivo diferente para cada método aplicado (entre 12,6 e 17,8). Por esta razão, esta amostra não foi utilizada em todos os ajustes de curva. As curvas ajustadas entre a razão R/C e o número atômico efetivo são apresentadas no anexo I. As equações 5.10, 5.11, 5.12, 5.13, 5.14 e 5.15 mostram as equações encontradas neste ajuste de curva de cada método.

$$\left(\frac{R}{C}\right) = 0,00393018 \cdot Z_{ef}^2 - 0,05411044 \cdot Z_{ef} + 0,40853919 \quad (\text{método I}) \quad (5.10)$$

$$\left(\frac{R}{C}\right) = 0,00425135 \cdot Z_{ef}^2 - 0,0575305 \cdot Z_{ef} + 0,41837465 \quad (\text{método II}) \quad (5.11)$$

$$(R/C) = 0,00145907 \cdot Z_{ef}^2 - 0,0001585888 \cdot Z_{ef} + 0,13626037 \quad (\text{método III}) \quad (5.12)$$

$$(R/C) = 0,00325691 \cdot Z_{ef}^2 - 0,03879962 \cdot Z_{ef} + 0,33220207 \quad (\text{método IV}) \quad (5.13)$$

$$(R/C) = 0,00201931 \cdot Z_{ef}^2 - 0,01083979 \cdot Z_{ef} + 0,18630573 \quad (\text{método V}) \quad (5.14)$$

$$(R/C) = 0,02520174 \cdot Z_{ef} + 0,03095893 \quad (\text{método VI}) \quad (5.15)$$

Aplicando nestas equações a razão entre os espalhamentos Rayleigh e Compton produzidos pela amostra de referência MgO, foram obtidos os seguintes valores do número atômico efetivo: 11,4 (método I), 11,0 (método II), 10,7 (métodos III e V), 11,1 (método IV) e 10,8 (método VI). A partir dos valores obtidos para o número atômico efetivo da amostra MgO e das equações 5.1, 5.2, 5.3, 5.4, 5.5, 5.6, 5.7 e 5.8 determinou-se a curva que descreve o coeficiente de atenuação de massa e comparou-se aos valores simulados no software XCOM. A figura 5.3 mostra as curvas do coeficiente de atenuação de massa obtidas para cada método.

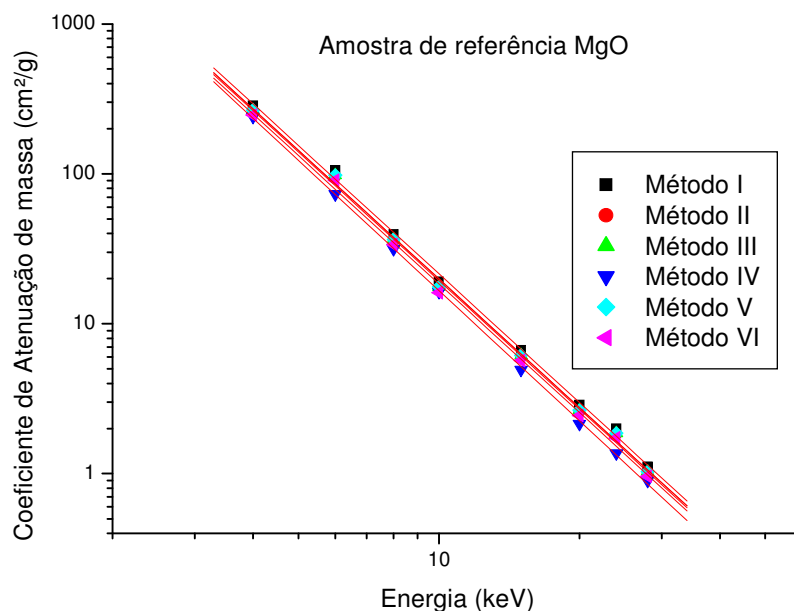


Figura 5.3 – Curvas do coeficiente de absorção de massa para fótons com energia na faixa de 4,0 a 28 keV.

Todas as curvas foram ajustadas com $R^2=0,999$. As equações 5.16, 5.17, 5.18, 5.19, 5.20 e 5.21 mostram as equações segundo os ajustes destas curvas.

$$\log [\mu_m(E)] = 4,18225857 - 2,9496 * \log(E), \text{ para o método I} \quad (5.16)$$

$$\log [\mu_m(E)] = 4,138580 - 2,9507 * \log(E), \text{ para o método II} \quad (5.17)$$

$$\log [\mu_m(E)] = 4,1493875 - 2,8901 * \log(E), \text{ para o método III} \quad (5.18)$$

$$\log [\mu_m(E)] = 4,107891 - 2,8863 * \log(E), \text{ para o método IV} \quad (5.19)$$

$$\log [\mu_m(E)] = 4,1493875 - 2,8901 * \log(E), \text{ para o método V} \quad (5.20)$$

$$\log [\mu_m(E)] = 4,113504 - 2,8584 * \log(E), \text{ para o método VI} \quad (5.21)$$

Aplicando as equações acima, pode-se obter o coeficiente de atenuação de massa para energias na região intermediária. A tabela 5.4 mostra os valores obtidos pelo método de espalhamento e simulados no programa XCOM para fótons com energias de 13,95 keV, 17,76 keV, 22,12keV e 26,36 keV interagindo com a amostra de MgO. A figura 5.4 mostra a comparação dos resultados com o simulado no XCOM.

Tabelas 5.4 – O coeficiente de atenuação de massa obtido para as energias 13,95 keV, 17,76 keV, 22,12 keV e 26,36 keV.

	$\mu_m(cm^2/g)$ 13,95 keV	$\mu_m(cm^2/g)$ 17,76 keV	$\mu_m(cm^2/g)$ 22,12 keV	$\mu_m(cm^2/g)$ 26,33 keV
Método I	6,40 ± 0,51	3,14 ± 0,26	1,64 ± 0,14	0,98 ± 0,09
Método II	6,08 ± 0,51	3,00 ± 0,26	1,58 ± 0,14	0,94 ± 0,09
Método III	6,94 ± 0,57	3,45 ± 0,30	1,83 ± 0,16	1,10 ± 0,10
Método IV	6,37 ± 0,22	3,17 ± 0,11	1,68 ± 0,06	1,02 ± 0,04
Método V	6,94 ± 0,57	3,45 ± 0,30	1,83 ± 0,16	1,10 ± 0,10
Método VI	6,95 ± 0,59	3,48 ± 0,31	1,86 ± 0,17	1,13 ± 0,11
XCOM	5,639	2,805	1,527	0,9717

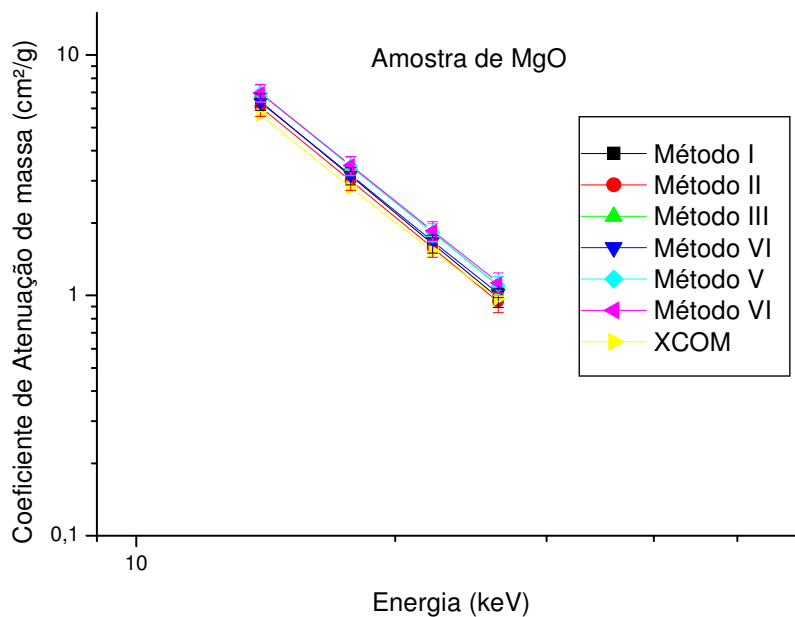


Figura 5.4 – Comparação entre os resultados do método de espalhamento e o resultado do software XCOM para a amostra de referência MgO.

Além da comparação gráfica dos resultados, as medidas do coeficiente de atenuação de massa encontrados através da técnica de espalhamento, foi calculado o erro percentual médio, a média dos erros percentuais para cada energia, em relação aos valores do XCOM. Os resultados dos erros percentuais médio foram 8,4% para o método I, 3,7% para o método II, 19,8% para o método III, 10,2% para o método IV, 19,8% para o método V e 21,4% para o método VI.

V.2 - Resultados do espalhamento de fótons de 59,54 keV

Usando a mesma geometria de espalhamento da fonte de raios X, o mini tubo de raios X foi trocado por uma fonte selada de Am^{241} (59,54keV). As amostras usadas foram H_3BO_3 , Na_2CO_3 , MgO, Al_2O_3 , CaCO_3 e K_2SO_4 . Além das amostras, também foram utilizadas amostras certificada de leite em pó (IAEA-153, Milk Powder), fígado bovino (SRM 1577b, Bovine Liver), feno em pó (IAEA-V-10, Hay Powder) e uma amostra de tecido sadio de próstata humana. Como não se conhece a composição destas amostras, os resultados da técnica de espalhamento R/C foram comparados com os resultados do método de transmissão para uma fonte não-selada de Am^{241} (13,95 keV, 17,76 keV, 22,12 keV e 26,36 keV). O fotopico de 59,54 keV não foi utilizado na

medida do método de transmissão, pois o método de espalhamento é aplicável para fótons com energia na faixa de 2 a 30 keV. A medida de razão entre os picos de espalhamentos Rayleigh e Compton não está restrita a essa região. Supondo que o número atômico efetivo de cada amostra seja constante para a faixa de energia considerada, foi realizado um ajuste de curva com o programa XCOM entre número atômico e o coeficiente de atenuação de massa para cada energia da fonte não-selada. As figuras 5.5 e 5.6 mostram exemplos de espectro do espalhamento de fótons da fonte selada e o espectro da fonte não-selada usada no método de transmissão.

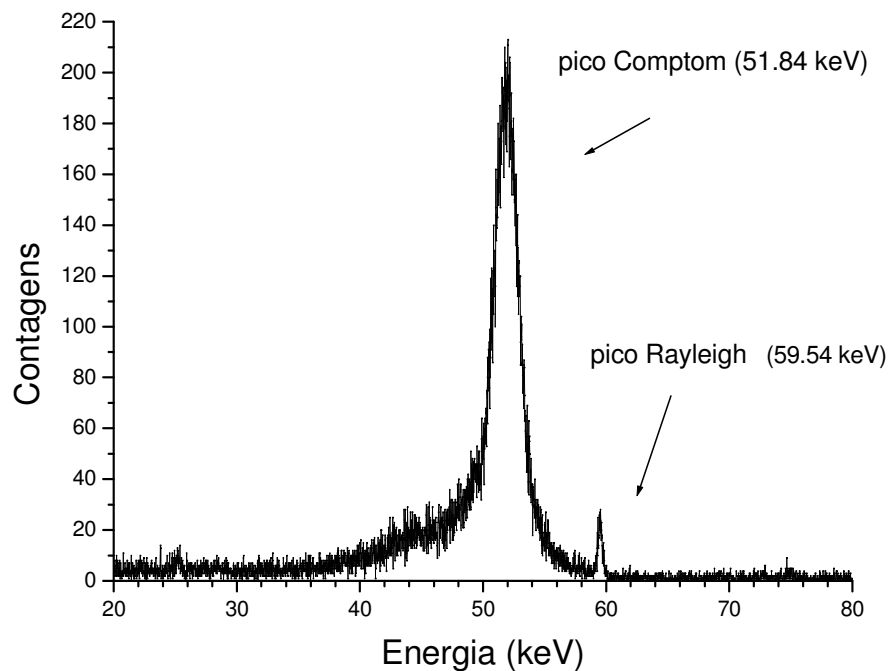


Figura 5.5 – Espectro dos picos de espalhamentos Rayleigh e Compton para fótons com energia de 59,54 keV.

A tabela 5.5 apresenta os resultados experimentais para a razão R/C dos picos de espalhamentos para fótons com 59,54 keV e ângulo de espalhamento de 106°.

A tabela 5.6 apresenta os valores calculados do número atômico efetivo de cada amostra padrão usando os seis métodos.

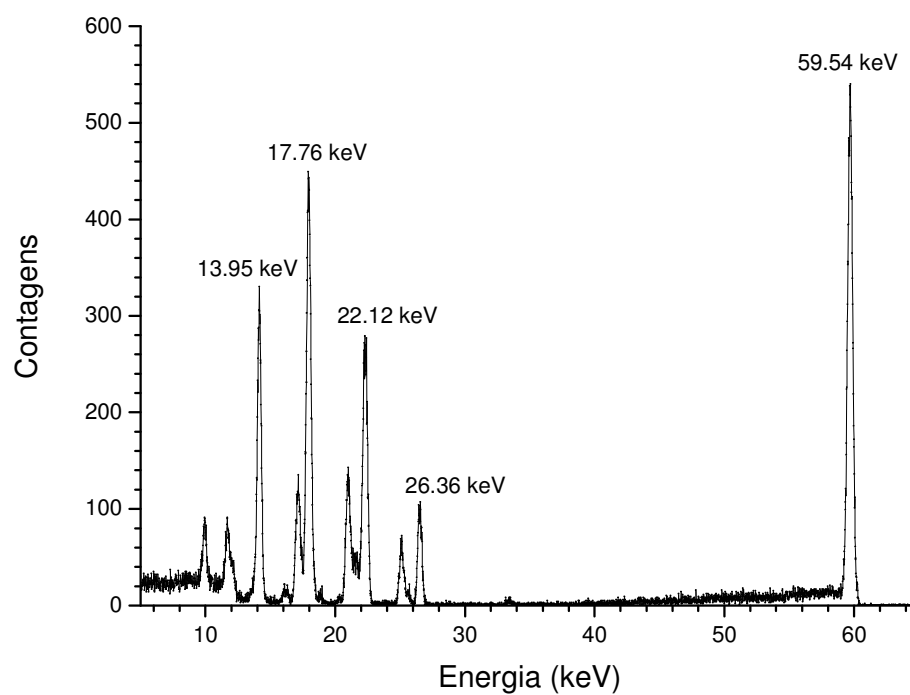


Figura 5.6 – Espectro da fonte não-selada de Am^{241} .

Tabelas 5.5 – Os resultados experimentais para a razão R/C usando fótons com energia de 59,54 keV.

Amostra	R/C experimental	Erro Experimental
H_3BO_3	0,0023	0,0006
Na_2CO_3	0,0061	0,0013
MgO	0,0114	0,0012
Al_2O_3	0,0123	0,0016
CaCO_3	0,0188	0,0019
K_2SO_4	0,0217	0,0020
Próstata	0,0033	0,0009
Fígado Bovino	0,0027	0,0010
Leite em pó	0,0035	0,0013
Feno em pó	0,0055	0,0012

Tabelas 5.6 – Número Atômico Efetivo (Z_{ef}) de cada amostra padrão para fótons com energia de 59,54 keV

<i>Amostra</i>	<i>Método I</i>	<i>Método II</i>	<i>Método III</i>	<i>Método IV</i>	<i>Método V</i>	<i>Método VI</i>
H₃BO₃	6,91	7,69	7,31	7,13	7,41	4,78
Na₂CO₃	9,22	9,53	9,42	9,12	9,42	8,91
Al₂O₃	10,8	11,1	11,2	10,6	11,1	10,5
CaCO₃	13,9	13,0	15,5	12,6	15,1	13,4
K₂SO₄	15,1	14,3	16,0	14,4	15,8	14,9

As colunas do método II e do método VI estão marcadas para lembrar que estes métodos de cálculo do número atômico efetivo dependem do momento transferido e do coeficiente de atenuação de massa de cada elemento, respectivamente.

A tabela 5.7 mostra a amplitude, o valor médio, o desvio padrão e o coeficiente de variação do número atômico efetivo calculado por cada um dos métodos.

Tabelas 5.7 – Dados estatísticos do número atômico efetivo (Z_{ef}) calculado por cada uma dos métodos.

<i>Amostra</i>	<i>Amplitude</i>	<i>Média</i>	<i>Desvio Padrão</i>	<i>CV</i>
H₃BO₃	4,78 – 7,69	6,87	1,06	0,15
Na₂CO₃	8,91 – 9,53	9,27	0,23	0,02
Al₂O₃	10,5 – 11,2	10,9	0,29	0,03
CaCO₃	12,6 – 15,5	13,9	1,16	0,08
K₂SO₄	14,3 – 16,0	15,1	0,70	0,05

A amostra de MgO novamente foi escolhida como amostra de referência por apresentar a razão entre os espalhamentos Rayleigh e Compton com valores intermediários em relação às amostras escolhidas. As curvas ajustadas entre a razão R/C e o número atômico efetivo são apresentadas no anexo II. As equações 5.22, 5.23, 5.24, 5.25, 5.26 e 5.27 mostram as equações encontradas neste ajuste de curva de cada método.

$$\left(\frac{R}{C}\right) = 0,00241 \cdot Z_{ef} - 0,01469 \quad (\text{método I}) \quad (5.22)$$

$$\left(\frac{R}{C}\right) = 0,00301 \cdot Z_{ef} - 0,02128 \quad (\text{método II}) \quad (5.23)$$

$$\left(\frac{R}{C}\right) = 0,0022 \cdot Z_{ef} - 0,01369 \quad (\text{método III}) \quad (5.24)$$

$$\left(\frac{R}{C}\right) = 0,00281 \cdot Z_{ef} - 0,01802 \quad (\text{método IV}) \quad (5.25)$$

$$\left(\frac{R}{C}\right) = 0,00231 \cdot Z_{ef} - 0,01474 \quad (\text{método V}) \quad (5.26)$$

$$\left(\frac{R}{C}\right) = 0,00187 \cdot Z_{ef} - 0,0068 \quad (\text{método VI}) \quad (5.27)$$

Após realizar o ajuste de curva entre o número atômico efetivo e a razão R/C das amostras padrões, foi obtido o número atômico efetivo relacionado às amostras de tecido de próstata liofilizado, as amostras certificadas de Fígado Bovino, Leite em Pó e Feno em pó e à amostra de referência de MgO. A tabela 5.8 apresenta o número atômico efetivo obtido para cada método.

Tabelas 5.8 – Número Atômico Efetivo (Z_{ef}) da amostra de Tecido de Próstata e das amostras certificadas de Fígado Bovino, Leite em pó e Feno em pó.

<i>Amostra</i>	<i>Método I</i>	<i>Método II</i>	<i>Método III</i>	<i>Método IV</i>	<i>Método V</i>	<i>Método VI</i>
MgO	10,8	10,9	11,4	10,5	11,3	9,73
Próstata	7,46	8,17	7,72	7,59	7,81	5,40
Fígado Bovino	7,22	7,96	7,72	7,58	7,81	5,41
Leite em pó	7,55	8,23	8,72	8,37	8,76	5,51
Feno em pó	8,38	8,90	8,72	8,37	8,76	6,58

A partir dos valores obtidos do número atômico efetivo na amostra de referência MgO, na amostra liofilizada de próstata humana, nas amostras certificadas de fígado bovino, leite em pó e feno em pó e das equações 5.1, 5.2, 5.3, 5.4, 5.5, 5.6, 5.7 e 5.8, determinou-se a curva que descreve o coeficiente de atenuação de massa. As figuras 5.7, 5.8, 5.9, 5.10 e 5.11 mostram as curvas do coeficiente de atenuação de massa obtidas para cada método.

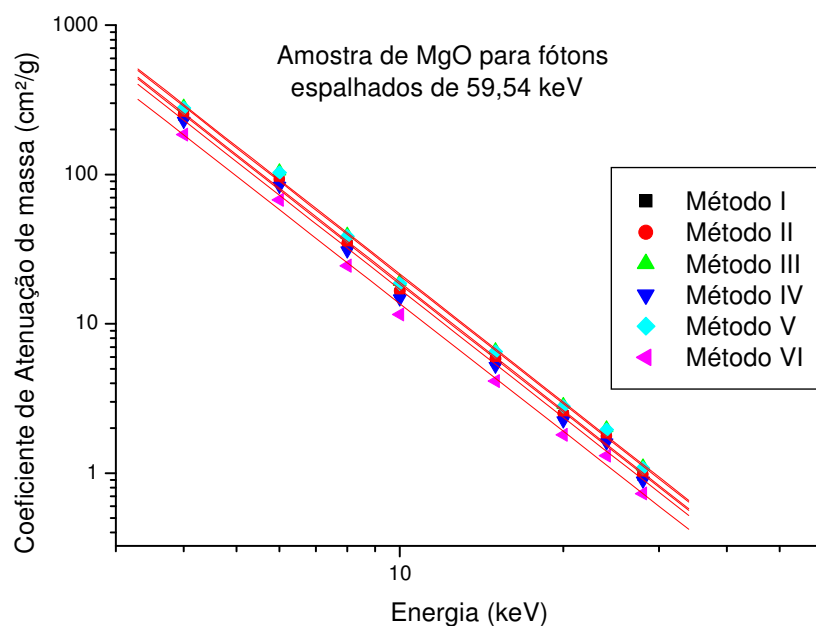


Figura 5.7 – Curvas do coeficiente de atenuação de massa da amostra de referência de MgO para fótons com energia na faixa de 4,0 a 28 keV.

As equações 5.28, 5.29, 5.30, 5.31, 5.32 e 5.33 mostram as equações segundo os ajustes destas curvas.

$$\log [\mu_m(E)] = 4,01350387 - 2,8484 * \log(E), \quad \text{para o método I} \quad (5.28)$$

$$\log [\mu_m(E)] = 4,0150113 - 2,85005 * \log(E), \quad \text{para o método II} \quad (5.29)$$

$$\log [\mu_m(E)] = 4,08225857 - 2,89495 * \log(E), \quad \text{para o método III} \quad (5.30)$$

$$\log [\mu_m(E)] = 4,0771761 - 2,84755 * \log(E), \quad \text{para o método IV} \quad (5.31)$$

$$\log [\mu_m(E)] = 4,0172085 - 2,85045 * \log(E), \quad \text{para o método V} \quad (5.32)$$

$$\log [\mu_m(E)] = 3,9740912 - 2,8402 * \log(E), \quad \text{para o método VI} \quad (5.33)$$

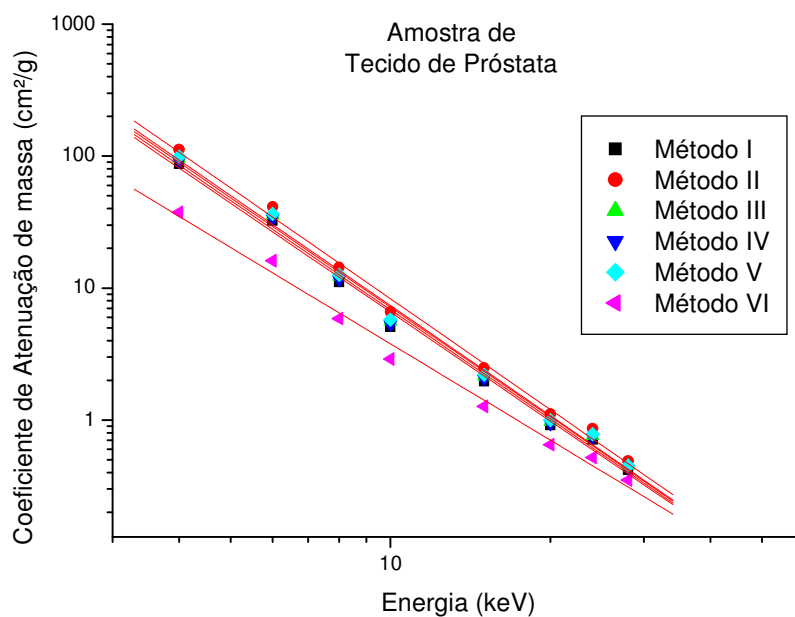


Figura 5.8 – Curvas do coeficiente de absorção de massa para fótons com energia na faixa de 4,0 a 28 keV.

As equações 5.34, 5.35, 5.36, 5.37, 5.38 e 5.39 mostram as equações segundo os ajustes destas curvas.

$$\log [\mu_m(E)] = 3,56067394 - 2,74362 * \log(E), \quad \text{para o método I} \quad (5.34)$$

$$\log [\mu_m(E)] = 3,61076433 - 2,792 * \log(E), \quad \text{para o método II} \quad (5.35)$$

$$\log [\mu_m(E)] = 3,61509391 - 2,7606 * \log(E), \quad \text{para o método III} \quad (5.36)$$

$$\log [\mu_m(E)] = 3,58823241 - 2,75274 * \log(E), \quad \text{para o método IV} \quad (5.37)$$

$$\log [\mu_m(E)] = 3,638061 - 2,77103 * \log(E), \quad \text{para o método V} \quad (5.38)$$

$$\log [\mu_m(E)] = 3,004168 - 2,4271 * \log(E), \quad \text{para o método VI} \quad (5.39)$$

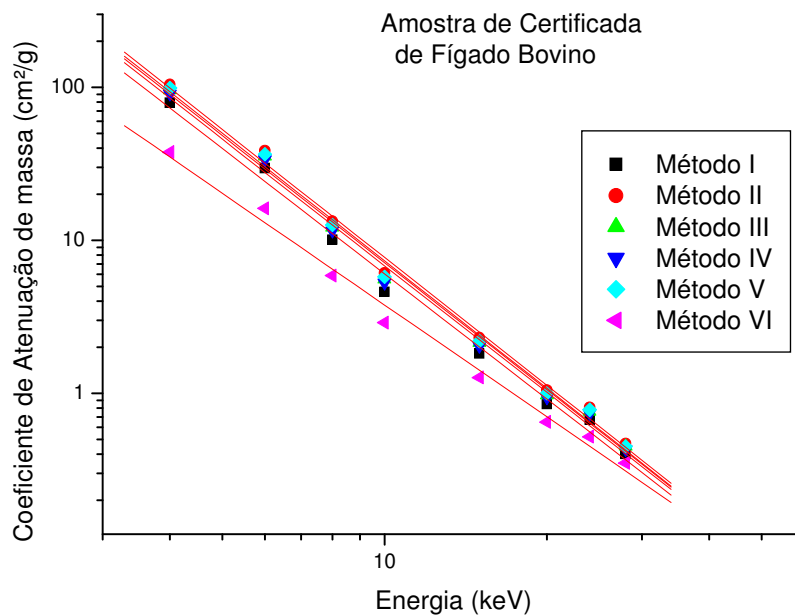


Figura 5.9 – Curvas do coeficiente de atenuação de massa para a amostra certificada de fígado bovino para fótons com energia na faixa de 4,0 a 28 keV.

As equações 5.40, 5.41, 5.42, 5.43, 5.44 e 5.45 mostram as equações segundo os ajustes destas curvas.

$$\log [\mu_m(E)] = 3,50272051 - 2,72078 * \log(E), \quad \text{para o método I} \quad (5.40)$$

$$\log [\mu_m(E)] = 3,46754791 - 2,77836 * \log(E), \quad \text{para o método II} \quad (5.41)$$

$$\log [\mu_m(E)] = 3,51509391 - 2,7606 * \log(E), \quad \text{para o método III} \quad (5.42)$$

$$\log [\mu_m(E)] = 3,4847122 - 2,75048 * \log(E), \quad \text{para o método IV} \quad (5.43)$$

$$\log [\mu_m(E)] = 3,5380608 - 2,77103 * \log(E), \quad \text{para o método V} \quad (5.44)$$

$$\log [\mu_m(E)] = 3,0068926 - 2,4292 * \log(E), \quad \text{para o método VI} \quad (5.45)$$

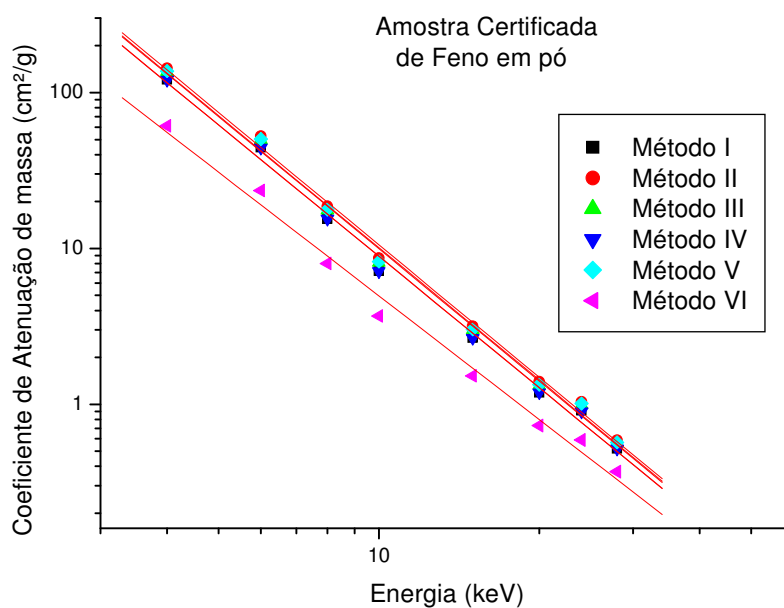


Figura 5.10 – Curvas do coeficiente de atenuação de massa para a amostra certificada de feno em pó para fótons com energia na faixa de 4,0 a 28 keV.

As equações 5.46, 5.47, 5.48, 5.49, 5.50 e 5.51 mostram as equações segundo os ajustes destas curvas.

$$\log [\mu_m(E)] = 3,75024803 - 2,80051 * \log(E), \quad \text{para o método I} \quad (5.46)$$

$$\log [\mu_m(E)] = 3,74550197 - 2,82285 * \log(E), \quad \text{para o método II} \quad (5.47)$$

$$\log [\mu_m(E)] = 3,71616896 - 2,8189 * \log(E), \quad \text{para o método III} \quad (5.48)$$

$$\log [\mu_m(E)] = 3,74877351 - 2,80044 * \log(E), \quad \text{para o método IV} \quad (5.49)$$

$$\log [\mu_m(E)] = 3,71969883 - 2,8161 * \log(E), \quad \text{para o método V} \quad (5.50)$$

$$\log [\mu_m(E)] = 3,33216633 - 2,63668 * \log(E), \quad \text{para o método VI} \quad (5.51)$$

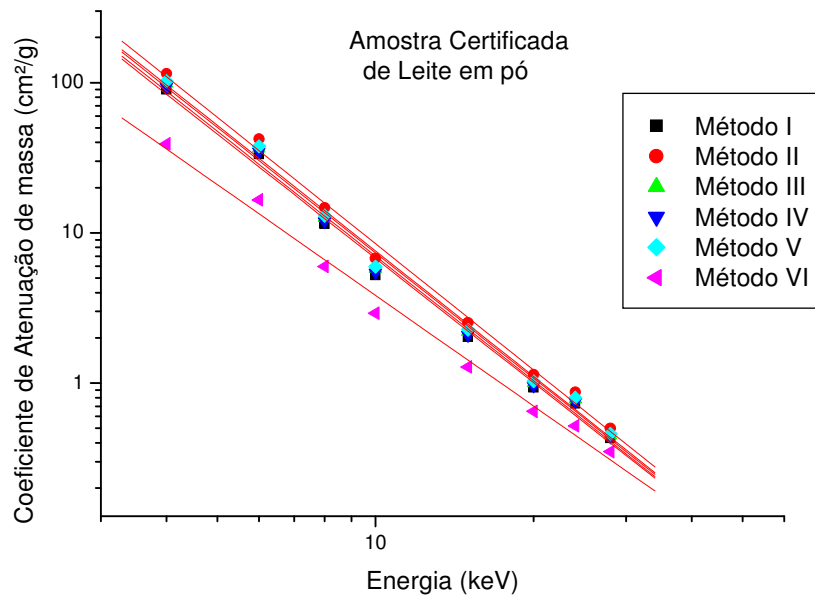


Figura 5.11 – Curvas do coeficiente de atenuação de massa da amostra certificada de leite em pó para fótons com energia na faixa de 4,0 a 28 keV.

As equações 5.52, 5.53, 5.54, 5.55, 5.56 e 5.57 mostram as equações segundo os ajustes destas curvas.

$$\log [\mu_m(E)] = 3,57793235 - 2,74811 * \log(E), \quad \text{para o método I} \quad (5.52)$$

$$\log [\mu_m(E)] = 3,62243146 - 2,79429 * \log(E), \quad \text{para o método II} \quad (5.53)$$

$$\log [\mu_m(E)] = 3,6380608 - 2,77103 * \log(E), \quad \text{para o método III} \quad (5.54)$$

$$\log [\mu_m(E)] = 3,60301817 - 2,7573 * \log(E), \quad \text{para o método IV} \quad (5.55)$$

$$\log [\mu_m(E)] = 3,6562086 - 2,77579 * \log(E), \quad \text{para o método V} \quad (5.56)$$

$$\log [\mu_m(E)] = 3,03348506 - 2,44902 * \log(E), \quad \text{para o método VI} \quad (5.57)$$

V.3.1 - Resultados do Método de transmissão com a fonte não-selada de Am²⁴¹.

Aplicando a Lei de Beer-Lambert, foram utilizados a técnica de transmissão de radiação com a fonte não-selada de Am²⁴¹ e o critério experimental de CHANTLER(2002), conforme a foto de figura 4.4, para a determinação do coeficiente de atenuação de massa das amostras certificadas e da amostra liofilizada de tecido de próstata para as energias de 13,95 keV, 17,76 keV, 22,12 keV e 26,36 keV. A tabela 5.9 apresenta os resultados encontrados pelo método de transmissão.

Tabelas 5.9 – Coeficiente de atenuação de massa obtido pelo método de transmissão para os fotopicos da fonte não-selada de Am²⁴¹.

<i>Amostra</i>	$\mu_m(\text{cm}^2/\text{g})$ <i>13,95 keV</i>	$\mu_m(\text{cm}^2/\text{g})$ <i>17,76 keV</i>	$\mu_m(\text{cm}^2/\text{g})$ <i>22,12 keV</i>	$\mu_m(\text{cm}^2/\text{g})$ <i>26,33 keV</i>
Próstata	2,55 ± 0,10	1,32 ± 0,08	0,90 ± 0,09	0,49 ± 0,15
Figado Bovino	2,06 ± 0,05	1,15 ± 0,04	0,62 ± 0,05	0,44 ± 0,08
Leite em pó	2,84 ± 0,06	1,57 ± 0,04	0,91 ± 0,05	0,58 ± 0,08
Feno em pó	3,10 ± 0,06	1,59 ± 0,04	0,83 ± 0,05	0,72 ± 0,09

Usando as equações das curvas de atenuação de massa para as energias de 13,95 keV, 17,76 keV, 22,12 keV e 26,36 keV, foi possível comparar os resultados obtidos pelo método de espalhamento com os resultados do método de transmissão. As tabelas 5.10, 5.11, 5.12, 5.13 e 5.14 mostram os coeficientes de atenuação de massa obtidos pelo método de espalhamento R/C para as amostras de MgO, tecido de próstata, fígado bovino, leite em pó e feno em pó, respectivamente.

Tabelas 5.10 – Coeficiente de atenuação de massa obtido pelo método de espalhamento R/C para a amostra de referência de MgO.

<i>Energia (keV)</i>	<i>Método I</i> $\mu_m(\text{cm}^2/\text{g})$	<i>Método II</i> $\mu_m(\text{cm}^2/\text{g})$	<i>Método III</i> $\mu_m(\text{cm}^2/\text{g})$	<i>Método IV</i> $\mu_m(\text{cm}^2/\text{g})$	<i>Método V</i> $\mu_m(\text{cm}^2/\text{g})$	<i>Método VI</i> $\mu_m(\text{cm}^2/\text{g})$
13,95	5,67 ± 0,48	5,66 ± 0,47	6,62 ± 0,52	6,58 ± 0,58	5,68 ± 0,45	5,29 ± 0,52
17,76	2,85 ± 0,25	2,84 ± 0,25	3,33 ± 0,28	3,31 ± 0,30	2,86 ± 0,24	2,66 ± 0,28
22,12	1,52 ± 0,14	1,52 ± 0,14	1,78 ± 0,15	1,77 ± 0,17	1,53 ± 0,13	1,43 ± 0,15
26,33	0,92 ± 0,09	0,92 ± 0,09	1,08 ± 0,10	1,07 ± 0,11	0,93 ± 0,08	0,87 ± 0,10

Tabelas 5.11 – Coeficiente de atenuação de massa obtido pelo método de espalhamento R/C para o tecido liofilizado de Próstata.

<i>Energia (keV)</i>	<i>Método I $\mu_m(cm^2/g)$</i>	<i>Método II $\mu_m(cm^2/g)$</i>	<i>Método III $\mu_m(cm^2/g)$</i>	<i>Método IV $\mu_m(cm^2/g)$</i>	<i>Método V $\mu_m(cm^2/g)$</i>	<i>Método VI $\mu_m(cm^2/g)$</i>
13,95	2,63 ±0,38	2,60 ±0,34	2,85 ±0,41	2,74 ±0,40	2,93 ±0,41	1,68 ±0,25
17,76	1,36 ±0,21	1,33 ±0,18	1,47 ±0,21	1,41 ±0,21	1,50 ±0,22	0,94 ±0,15
22,12	0,74 ±0,12	0,72 ±0,10	0,77 ±0,12	0,77 ±0,12	0,82 ±0,12	0,55 ±0,09
26,33	0,46 ±0,08	0,44 ±0,07	0,48 ±0,08	0,48 ±0,08	0,50 ±0,08	0,36 ±0,06

Tabelas 5.12 – Coeficiente de atenuação de massa obtido pelo método de espalhamento R/C para a amostra certificada de fígado bovino.

<i>Energia (keV)</i>	<i>Método I $\mu_m(cm^2/g)$</i>	<i>Método II $\mu_m(cm^2/g)$</i>	<i>Método III $\mu_m(cm^2/g)$</i>	<i>Método IV $\mu_m(cm^2/g)$</i>	<i>Método V $\mu_m(cm^2/g)$</i>	<i>Método VI $\mu_m(cm^2/g)$</i>
13,95	2,45 ±0,37	1,94 ±0,26	2,27 ±0,32	2,17 ±0,32	2,32 ±0,32	1,68 ±0,26
17,76	1,27 ±0,20	0,99 ±0,14	1,16 ±0,17	1,12 ±0,17	1,19 ±0,17	0,94 ±0,15
22,12	0,70 ±0,12	0,54 ±0,08	0,63 ±0,10	0,61 ±0,10	0,65 ±0,10	0,55 ±0,09
26,33	0,43 ±0,07	0,33 ±0,05	0,39 ±0,06	0,38 ±0,06	0,40 ±0,06	0,36 ±0,06

Tabelas 5.13 – Coeficiente de atenuação de massa obtido pelo método de espalhamento R/C para a mostra certificada de Leite em Pó.

<i>Energia (keV)</i>	<i>Método I $\mu_m(cm^2/g)$</i>	<i>Método II $\mu_m(cm^2/g)$</i>	<i>Método III $\mu_m(cm^2/g)$</i>	<i>Método IV $\mu_m(cm^2/g)$</i>	<i>Método V $\mu_m(cm^2/g)$</i>	<i>Método VI $\mu_m(cm^2/g)$</i>
13,95	2,71 ±0,39	2,66 ±0,34	2,93 ±0,41	2,80 ±0,40	3,01 ±0,41	1,70 ±0,26
17,76	1,39 ±0,21	1,35 ±0,18	1,50 ±0,22	1,44 ±0,21	1,54 ±0,22	0,94 ±0,15
22,12	0,76 ±0,12	0,73 ±0,10	0,82 ±0,12	0,79 ±0,12	0,84 ±0,13	0,55 ±0,09
26,33	0,47 ±0,08	0,45 ±0,07	0,50 ±0,08	0,48 ±0,08	0,52 ±0,08	0,36 ±0,06

Tabelas 5.14 – Coeficiente de atenuação de massa obtido pelo método de espalhamento R/C para a mostra certificada de feno em Pó.

<i>Energia (keV)</i>	<i>Método I $\mu_m(cm^2/g)$</i>	<i>Método II $\mu_m(cm^2/g)$</i>	<i>Método III $\mu_m(cm^2/g)$</i>	<i>Método IV $\mu_m(cm^2/g)$</i>	<i>Método V $\mu_m(cm^2/g)$</i>	<i>Método VI $\mu_m(cm^2/g)$</i>
13,95	3,51 ±0,44	3,27 ±0,37	3,09 ±0,36	3,50 ±0,44	3,14 ±0,37	2,06 ±0,34
17,76	1,78 ±0,24	1,65 ±0,20	1,56 ±0,19	1,78 ±0,23	1,59 ±0,20	1,09 ±0,19
22,12	0,96 ±0,13	0,89 ±0,11	0,84 ±0,11	0,96 ±0,13	0,86 ±0,11	0,61 ±0,11
26,33	0,59 ±0,08	0,54 ±0,07	0,51 ±0,07	0,59 ±0,08	0,52 ±0,07	0,39 ±0,07

As figuras 5.12, 5.13, 5.14, 5.15 e 5.16 apresentam uma comparação gráfica entre os coeficientes de atenuação de massa encontrados pelos métodos de espalhamento R/C e pelo método de transmissão para as amostras de MgO, tecido de próstata, fígado bovino, leite em pó e feno em pó, respectivamente.

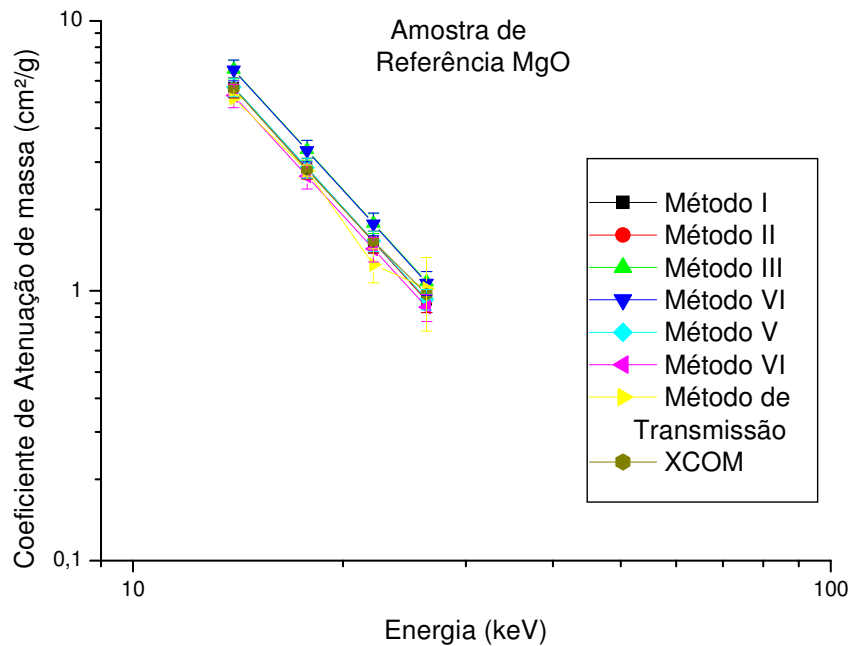


Figura 5.12 – Comparação entre os métodos de espalhamentos, o método de transmissão e o resultado do software XCOM para a amostra de referência MgO.

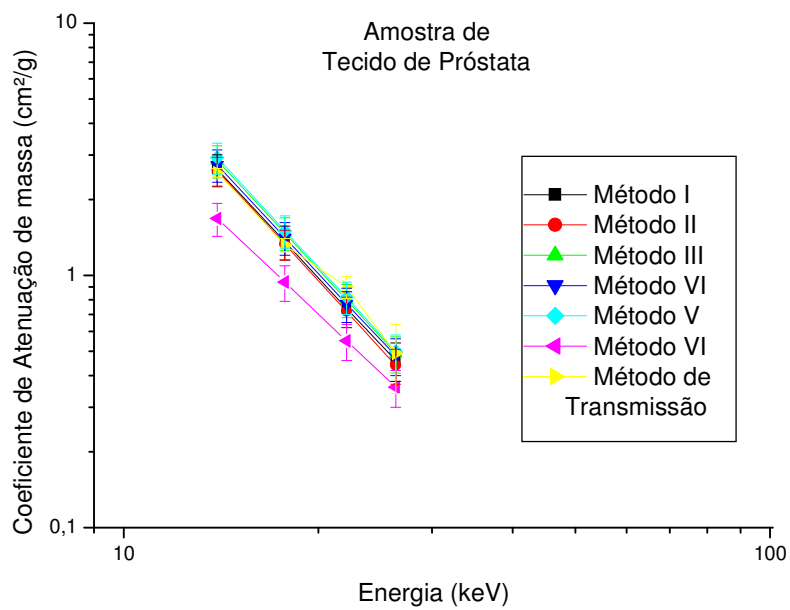


Figura 5.13 – Comparação entre os métodos de espalhamentos e o método de transmissão para amostra de tecido de próstata.

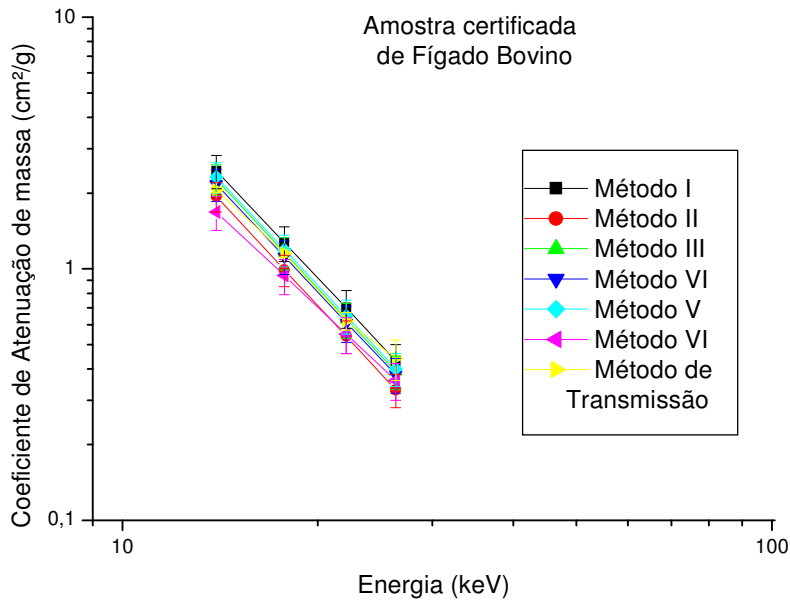


Figura 5.14 – Comparação entre os métodos de espalhamentos e o método de transmissão para a amostra certificada de Fígado bovino.

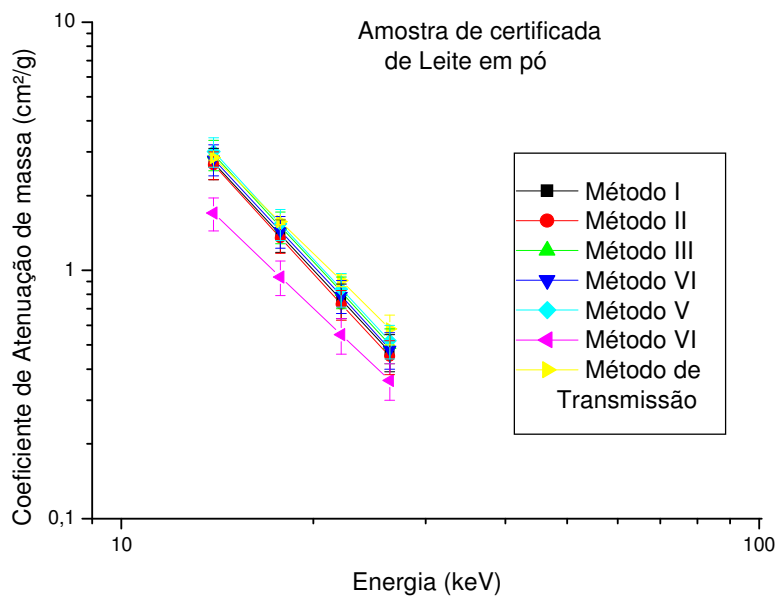


Figura 5.15 – Comparação entre os métodos de espalhamentos e o método de transmissão para a amostra certificada de Leite em pó.

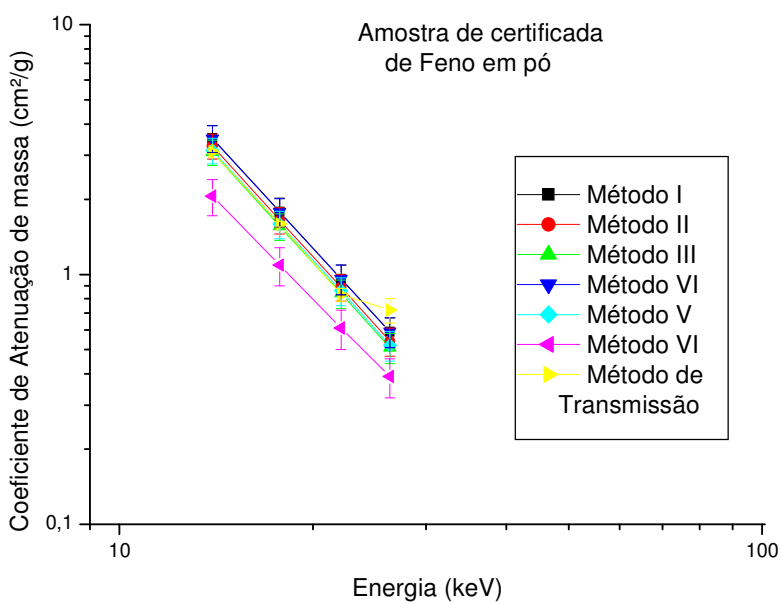


Figura 5.16 – Comparação entre os métodos de espalhamentos e o método de transmissão para a amostra certificada de Feno em pó.

Para comparar os resultados e validar a técnica de espalhamento, foi calculado o erro percentual médio em relação aos resultados do método de transmissão. No caso da amostra de referência de MgO, os resultados dos erros percentuais médio foram calculados em relação aos resultados do XCOM, pois também foram verificados os resultados do método de transmissão. Para essa amostra, os resultados foram 0,8% para o método I, 0,9% para o método II, 15,9% para o método III, 15,2% para o método IV, 0,5% para o método V, 7,1% para o método VI e 5,4 para o método de transmissão. Para a amostra tecido de próstata os resultados foram 4,4% para o método I, 7,0% para o método II, 3,1% para o método III, 0,8% para o método IV, 5,4% para o método V e 32,2% para o método VI. Para a amostra certificada de fígado bovino os resultados foram 10% para o método I, 14% para o método II, 0,6% para o método III, 3,3% para o método IV, 2,9% para o método V e 17% para o método VI. Para a amostra certificada de feno em pó os resultados foram 5,8% para o método I, 2,0% para o método II, 7,3% para o método III, 5,5% para o método IV, 5,8% para o método V e 34% para o método VI. Para a amostra certificada de leite em pó os resultados foram 13% para o método I, 6,5% para o método II, 6,3% para o método III, 10% para o método IV, 3,7% para o método V e 39% para o método VI. Considerando os erros percentuais médios menores que 10%, foi possível classificar os melhores resultados como os métodos de cálculo do número atômico efetivo. Sendo assim, para os melhores resultados foram: MgO (métodos I, II, IV, V e VI), tecido de próstata (métodos I, II, III, IV e V), fígado bovino (métodos III, IV e V), feno em pó (métodos I, II, III, IV e V) e leite em pó (métodos II, III e V).

V.4 - Resultados do espalhamento de fótons de 8,74 keV e 9,57 keV

Os resultados apresentados para fótons de 17,74 keV e 59,54 keV mostram a viabilidade da técnica usando a razão entre os picos de espalhamento Rayleigh e Compton. No entanto, os detectores de estado sólido não apresentam boa resolução em energia para fótons com energias abaixo de 12 keV. Dessa forma, não é possível separar os picos de espalhamento coerente e incoerente, ocorrendo a sobreposição entre os picos Rayleigh e Compton. Esta superposição produz um pico de espalhamento largo (curva de espalhamento) nos espectros de raios X. O trabalho de BAO (1997) sugeriu uma técnica para obtenção do coeficiente de atenuação de massa através desta curva de espalhamento, porém a aplicação desta técnica necessita de um elemento com

concentração conhecida na amostra (um padrão interno) para normalizar a curva de espalhamento em relação a esse padrão interno.

Nesta etapa, foi realizado um estudo semi-empírico entre a curva de espalhamento e o coeficiente de atenuação de massa. Para isto, foram usadas as curva de espalhamento produzido pelas linhas L_{α} e L_{β} do tungstênio, que compõe o anodo de mini tubo de raios X. A figura 5.17 mostra um espectro da curva de espalhamento.

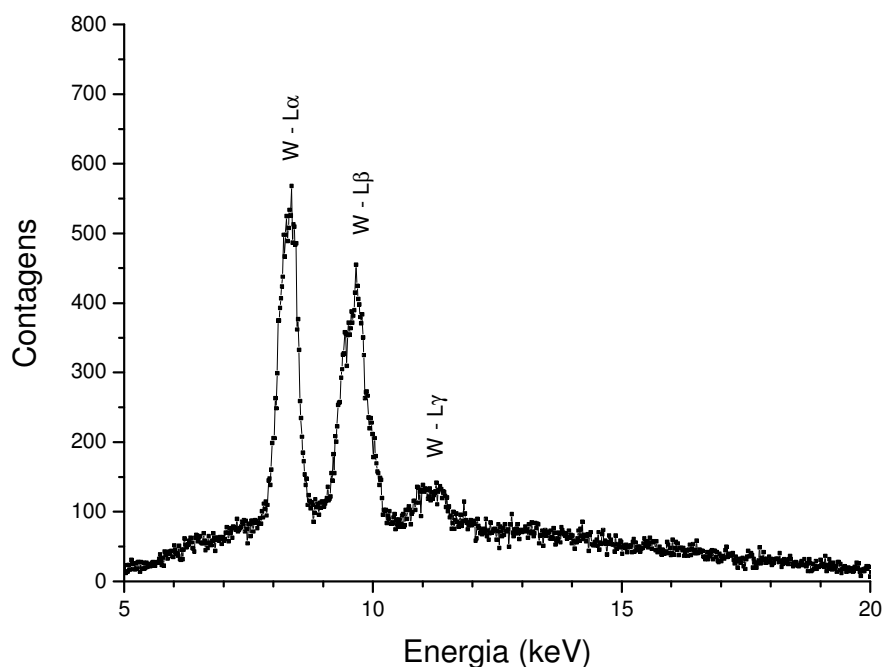


Figura 5.17 – Espectro das curvas de espalhamentos das linhas L_{α} (8,74 keV) e L_{β} (9,57 keV) do W.

A razão entre as curvas de espalhamento L_{α} e L_{β} foram relacionadas com o número atômico efetivo de cada amostra. Até o momento, não foi encontrado na literatura nenhum modelo teórico que descrevesse esta curva de espalhamento. Neste experimento utilizamos com amostras lucite, H_3BO_3 , Na_2CO_3 , Si e $CaCO_3$. As amostras de referência foram às amostras certificadas feno em pó, leite em pó e fígado bovino. Cada amostra foi medida três vezes em um intervalo de 600 s com o sistema portátil de XRF desenvolvido no LIN/COPPE, que apresenta uma geometria de espalhamento de 120° . A tabela 5.15 mostra a razão entre as curvas de espalhamentos das linhas L_{α} e L_{β} do tungstênio (W) que compõe o anodo do mini tubo.

Tabelas 5.15 – Razão entre as curvas de espalhamentos das linhas L_{α} e L_{β} do tungstênio.

Amostra	L_{α}/L_{β}	Erro
Lucite	1,02	0,05
H ₃ BO ₃	1,17	0,03
Na ₂ CO ₃	1,32	0,04
Si	2,19	0,04
CaCO ₃	2,42	0,05
Feno em pó	1,07	0,03
Fígado Bovino	1,17	0,03
Leite em Pó	1,16	0,04

Foram utilizados os métodos I, III, IV e V para calcular o número atômico efetivo de cada amostra padrão, pois estes métodos não dependem da energia do fóton incidente. Em seguida foi realizado um ajuste de curva entre o número atômico efetivo encontrado em cada método e a razão L_{α}/L_{β} . Conhecendo a curva que descreve o número atômico efetivo em função da razão L_{α}/L_{β} , é possível determinar o número atômico efetivo das amostras certificadas e, através deste, o coeficiente de atenuação de massa. Os resultados foram comparados com o método de transmissão, usando o mesmo sistema para excitar as linhas K_{α} e K_{β} de um alvo multielementar composto por Ti, Mn e Cu. A tabela 5.16 mostra o número atômico efetivo de cada amostra padrão pelos métodos I, III, IV e V.

Tabelas 5.16 – Número atômico efetivo de cada amostra padrão.

Amostra	Método I	Método III	Método IV	Método V
Lucite	5,82	6,33	6,24	6,48
H₃BO₃	6,91	7,31	7,13	7,41
Na₂CO₃	9,22	9,42	9,12	9,42
Si	14,0	14,0	14,0	14,0
CaCO₃	13,9	15,5	12,6	15,1

Os gráficos que descrevem o número atômico efetivo de cada amostra em função da razão L_α/L_β encontram-se no anexo III. As equações lineares 5.58, 5.59, 5.60 e 5.61 representam o ajuste de curva entre o número atômico efetivo e a razão L_α/L_β para cada método. A tabela 5.17 mostra os resultados do ajuste de curva para as amostras certificadas.

$$Z_{ef} = 6,83104632 \cdot \left(L_\alpha / L_\beta \right) - 0,75240995 \quad (\text{método I}) \quad (5.58)$$

$$Z_{ef} = 6,7712031 \cdot \left(L_\alpha / L_\beta \right) - 0,56476926 \quad (\text{método III}) \quad (5.59)$$

$$Z_{ef} = 6,58645546 \cdot \left(L_\alpha / L_\beta \right) - 0,27911257 \quad (\text{método IV}) \quad (5.60)$$

$$Z_{ef} = 6,06691292 \cdot \left(L_\alpha / L_\beta \right) + 0,63570576 \quad (\text{método V}) \quad (5.61)$$

Tabelas 5.17 – Número atômico efetivo das amostras certificadas segundo o ajuste de curva.

<i>Amostra</i>	<i>Método I</i>	<i>Método III</i>	<i>Método IV</i>	<i>Método V</i>
Feno em pó	6,52	6,65	6,74	7,10
Fígado Bovino	7,27	7,38	7,45	7,76
Leite em pó	7,15	7,27	7,34	7,66

Usando os dados da tabela 5.11 e as equações 5.1, 5.2, 5.3, 5.4, 5.5, 5.6, 5.7 e 5.8, foi encontrada a curva do coeficiente de atenuação de massa para a faixa de energia de 4 a 28 keV.

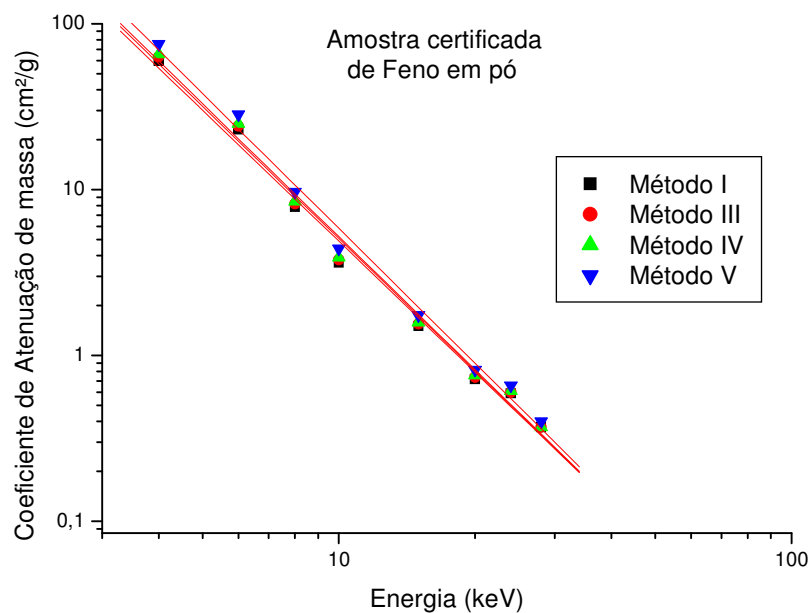


Figura 5.18 – Curvas do coeficiente de atenuação de massa da amostra certificada de feno em pó para fótons com energia na faixa de 4,0 a 28 keV.

As equações 5.62, 5.63, 5.64 e 5.65 mostram as equações segundo os ajustes destas curvas.

$$\log [\mu_m(E)] = 3,312434 - 2,62406 * \log(E), \quad \text{para o método I} \quad (5.62)$$

$$\log [\mu_m(E)] = 3,352428 - 2,64789 * \log(E), \quad \text{para o método III} \quad (5.63)$$

$$\log [\mu_m(E)] = 3,378497 - 2,66244 * \log(E), \quad \text{para o método IV} \quad (5.64)$$

$$\log [\mu_m(E)] = 3,466874 - 2,70102 * \log(E), \quad \text{para o método V} \quad (5.65)$$

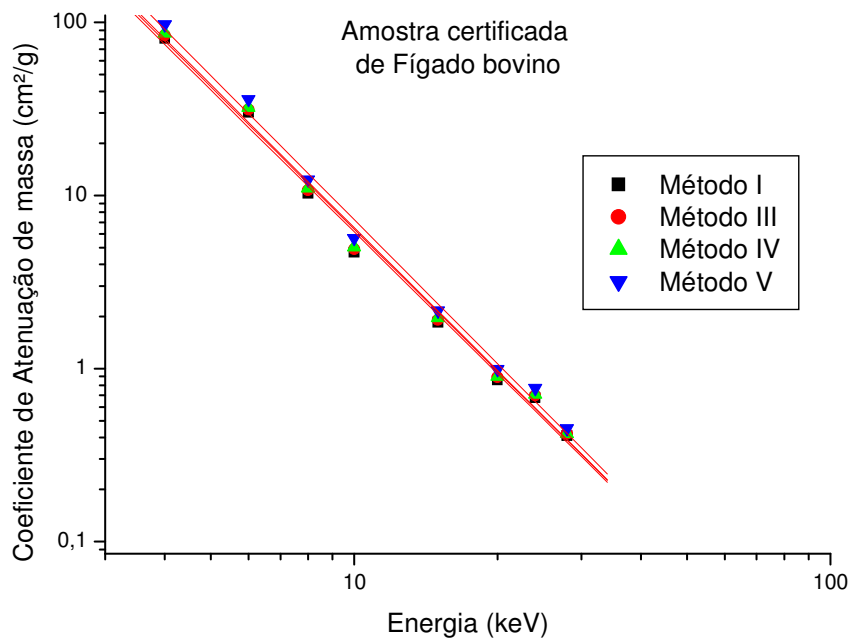


Figura 5.19 – Curvas do coeficiente de atenuação de massa da amostra certificada de fígado bovino para fótons com energia na faixa de 4,0 a 28 keV.

As equações 5.66, 5.67, 5.68 e 5.69 mostram as equações segundo os ajustes destas curvas.

$$\log [\mu_m(E)] = 3,411137 - 2,7214 * \log(E), \quad \text{para o método I} \quad (5.66)$$

$$\log [\mu_m(E)] = 3,435904 - 2,7301 * \log(E), \quad \text{para o método III} \quad (5.67)$$

$$\log [\mu_m(E)] = 3,45663 - 2,74154 * \log(E), \quad \text{para o método IV} \quad (5.68)$$

$$\log [\mu_m(E)] = 3,524392 - 2,7641 * \log(E), \quad \text{para o método V} \quad (5.69)$$

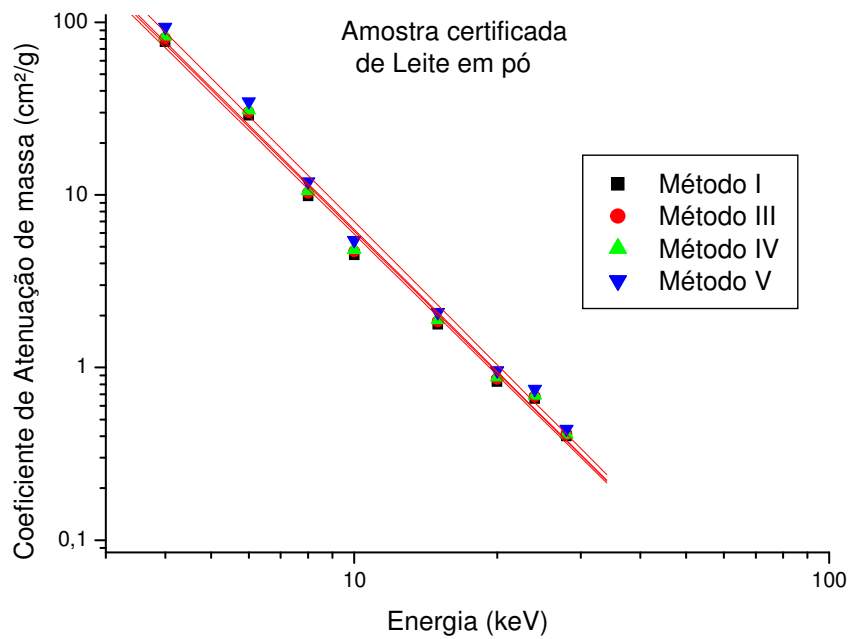


Figura 5.20 – Curvas do coeficiente de atenuação de massa da amostra certificada de leite em pó para fótons com energia na faixa de 4,0 a 28 keV.

As equações 5.70, 5.71, 5.72 e 5.73 mostram as equações segundo os ajustes destas curvas.

$$\log [\mu_m(E)] = 3,38341 - 2,71108 * \log(E), \quad \text{para o método I} \quad (5.70)$$

$$\log [\mu_m(E)] = 3,411137 - 2,7214 * \log(E), \quad \text{para o método III} \quad (5.71)$$

$$\log [\mu_m(E)] = 3,430581 - 2,7313 * \log(E), \quad \text{para o método IV} \quad (5.72)$$

$$\log [\mu_m(E)] = 3,503018 - 2,7573 * \log(E), \quad \text{para o método V} \quad (5.73)$$

As tabelas 5.18, 5.19 e 5.20 mostram os resultados do coeficiente de atenuação de massa, para cada método de cálculo do número atômico efetivo, comparados aos resultados do método de transmissão. As figuras 5.11, 5.12 e 5.13 apresentam os resultados comparados com o método de transmissão para cada amostra certificada.

Tabelas 5.18 – Coeficiente de Atenuação de massa da amostra certificada de feno em pó.

<i>Energia (keV)</i>	<i>Método I $\mu_m(cm^2/g)$</i>	<i>Método III $\mu_m(cm^2/g)$</i>	<i>Método IV $\mu_m(cm^2/g)$</i>	<i>Método V $\mu_m(cm^2/g)$</i>	<i>Mét. de Transm. $\mu_m(cm^2/g)$</i>
4,509	39 ± 5	42 ± 6	43 ± 6	50 ± 6	41,97 ± 0,13
4,932	31 ± 4	33 ± 4	34 ± 5	39 ± 5	33,22 ± 0,28
5,895	20 ± 3	21 ± 3	21 ± 3	24 ± 3	19,92 ± 0,09
6,491	15 ± 2	16 ± 2	16 ± 2	19 ± 3	15,51 ± 0,21
8,041	8,6 ± 1,3	9,0 ± 1,3	9,3 ± 1,4	10,5 ± 1,5	8,06 ± 0,08
8,905	6,6 ± 1,0	6,9 ± 1,0	7,1 ± 1,1	8,0 ± 1,2	5,96 ± 0,20

Tabelas 5.19 – Coeficiente de Atenuação de massa da amostra certificada de Leite em Pó.

<i>Energia (keV)</i>	<i>Método I $\mu_m(cm^2/g)$</i>	<i>Método III $\mu_m(cm^2/g)$</i>	<i>Método IV $\mu_m(cm^2/g)$</i>	<i>Método V $\mu_m(cm^2/g)$</i>	<i>Mét. de Transm. $\mu_m(cm^2/g)$</i>
4,509	41 ± 5	43 ± 5	44 ± 5	50 ± 6	40,86 ± 0,15
4,932	32 ± 4	34 ± 4	34 ± 4	39 ± 5	32,10 ± 0,22
5,895	20 ± 3	21 ± 3	21 ± 3	24 ± 3	19,54 ± 0,10
6,491	15 ± 2	16 ± 2	16 ± 2	18 ± 3	15,43 ± 0,23
8,041	8,5 ± 1,2	8,9 ± 1,2	9,1 ± 1,2	10,2 ± 1,5	7,55 ± 0,09
8,905	6,4 ± 0,9	6,7 ± 0,9	6,9 ± 1,1	7,7 ± 1,0	5,36 ± 0,22

Tabelas 5.20 – Coeficiente de Absorção em massa da amostra certificada de Fígado bovino.

<i>Energia (keV)</i>	<i>Método I $\mu_m(cm^2/g)$</i>	<i>Método III $\mu_m(cm^2/g)$</i>	<i>Método IV $\mu_m(cm^2/g)$</i>	<i>Método V $\mu_m(cm^2/g)$</i>	<i>Mét. de Transm. $\mu_m(cm^2/g)$</i>
4,509	43 ± 5	45 ± 5	46 ± 5	52 ± 6	31,77 ±0,10
4,932	34 ± 4	35 ± 4	36 ± 4	41 ± 5	25,02 ±0,19
5,895	21 ± 3	21 ± 3	22 ± 3	25 ± 3	14,63 ±0,05
6,491	16 ± 2	17 ± 2	17 ± 2	19 ± 2	11,18 ±0,12
8,041	8,9 ± 1,2	9,2 ± 1,2	9,4 ± 1,2	10,5 ± 1,3	5,82 ±0,04
8,905	6,7 ± 0,9	7,0 ± 0,9	7,1 ± 1,0	7,9 ± 1,0	4,19 ±0,11

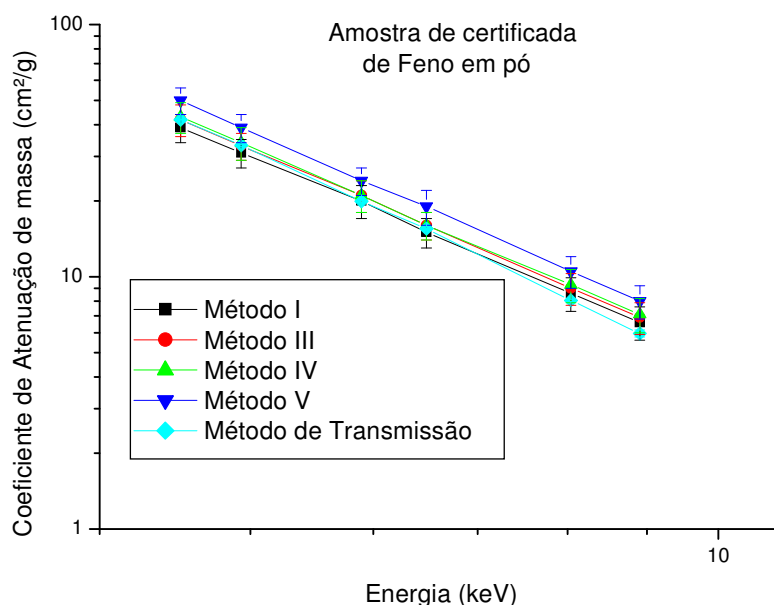


Figura 5.21 – Comparação entre o coeficiente de atenuação de massa da amostra certificada de feno em pó.

Para comparar os resultados, foram calculados os erros percentuais médios em relação aos resultados do método de transmissão. Para a amostra de fígado bovino apresentaram os piores resultados com 38% para o método I, 44% para o método III, 48% para o método IV e 67% para o método V. Para a amostra de feno em pó os resultados foram 4,1% para o método I, 1,0% para o método III, 4,7% para o método IV e 20% para o método V. Para a amostra de leite em pó os resultados foram 0,4% para o método I, 4,4% para o método III, 7,3% para o método IV e 21,4% para o método V.

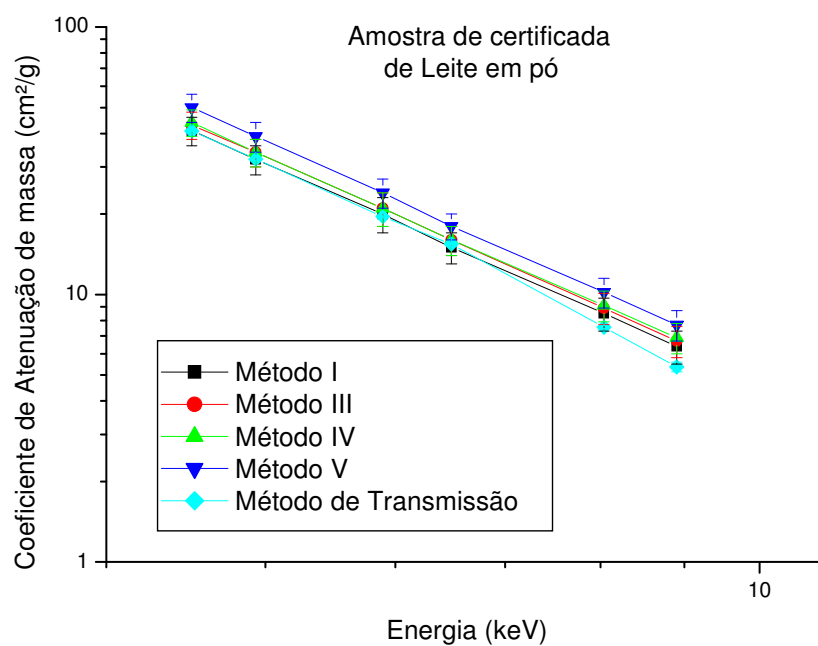


Figura 5.22 – Comparação entre o coeficiente de atenuação de massa da amostra certificada de Leite em pó.

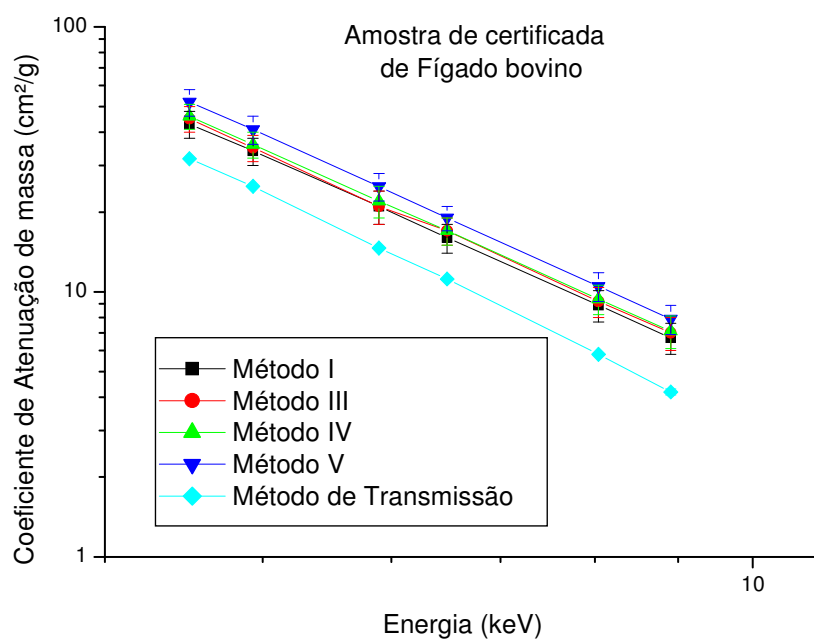


Figura 5.23 – Comparação entre o coeficiente de atenuação de massa da amostra certificada de Fígado Bovino.

V.5 – Resultados do modelo teórico

Segundo o trabalho de MANOHARA(2007) a seção de choque do espalhamento Rayleigh é proporcional à Z^2 ou à Z^3 , enquanto a seção de choque Compton apresenta uma relação linear com o número atômico Z . Sendo assim, a razão entre os espalhamentos Rayleigh e Compton (R/C) apresenta uma relação linear ou quadrática com o número atômico efetivo (Z_{ef}) de uma amostra composta. Os resultados encontrados com fótons de 17,74 keV apresentaram ajuste quadrático, enquanto os resultados experimentais com fótons de 59,54 keV mostram um ajuste de curva linear. Para melhor compreensão da relação entre o número atômico efetivo e da razão entre os espalhamentos Rayleigh e Compton (R/C) foi utilizado o modelo teórico na faixa de energia de 5 keV a 100 keV. Os resultados apresentados são uma aplicação direta de modelo teórico, conforme a equação 3.30. Para simplificar a equação de Klein-Nishina foi escolhido um ângulo de espalhamento de 90° e calculamos o fator de forma $F(x,Z)$ e a função espalhamento $S(x,Z)$ para o número atômico na faixa de 4 a 16. A partir dos resultados teóricos de R/C na faixa de $4 < Z < 16$ foram interpolados 50 pontos nesta região com o objetivo de esclarecer a relação entre a razão R/C e o número atômico efetivo Z_{ef} . A figura 5.24 mostra os resultados do modelo teórico para fótons com energia de 5, 7 e 10 keV com ângulo de espalhamento de 90° . A figura 5.25 mostra os resultados do modelo teórico para fótons com energia de 12, 15 e 20 keV com ângulo de espalhamento de 90° . A figura 5.26 mostra os resultados do modelo teórico para fótons com energia de 25, 30 e 35 keV com ângulo de espalhamento de 90° . A figura 5.27 mostra os resultados do modelo teórico para fótons com energia de 40, 45 e 50 keV com ângulo de espalhamento de 90° . A figura 5.28 mostra os resultados do modelo teórico para fótons com energia de 55, 60, 80 e 100 keV com ângulo de espalhamento de 90° .

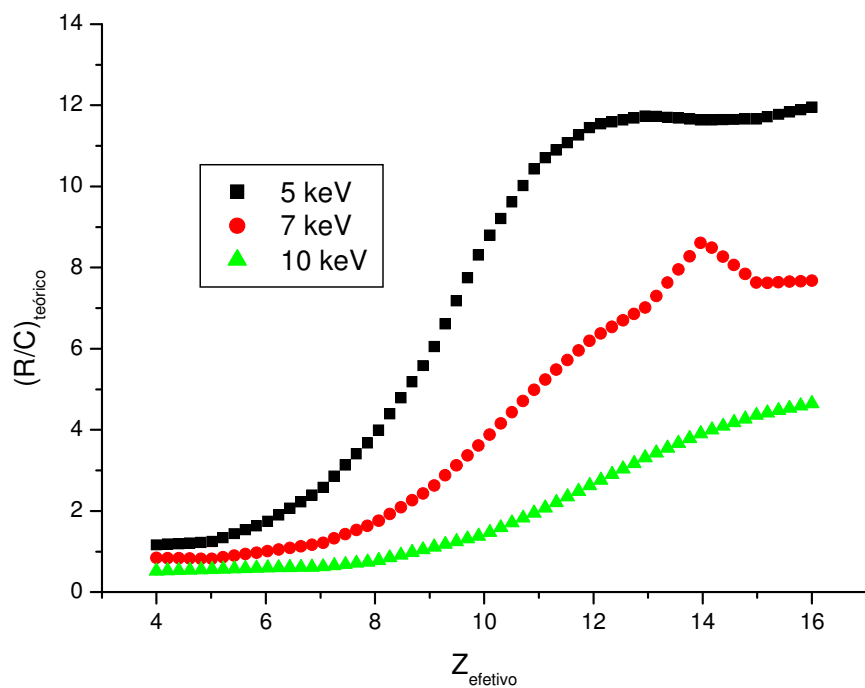


Figura 5.24 – Modelo teórico para fótons de 5, 7 e 10 keV com ângulo de espalhamento de 90° .

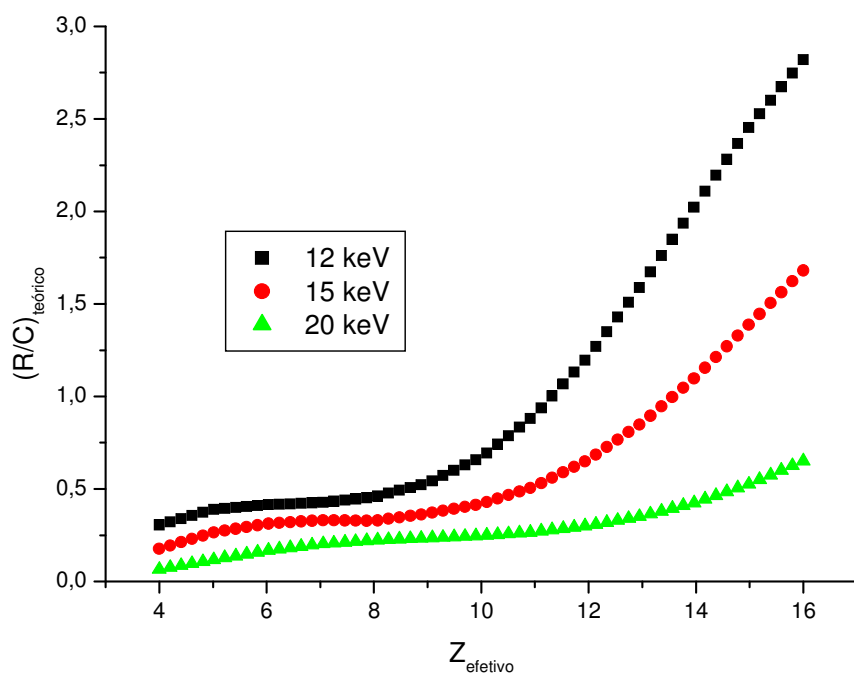


Figura 5.25 – Modelo teórico para fótons de 12, 15 e 20 keV com ângulo de espalhamento de 90° .

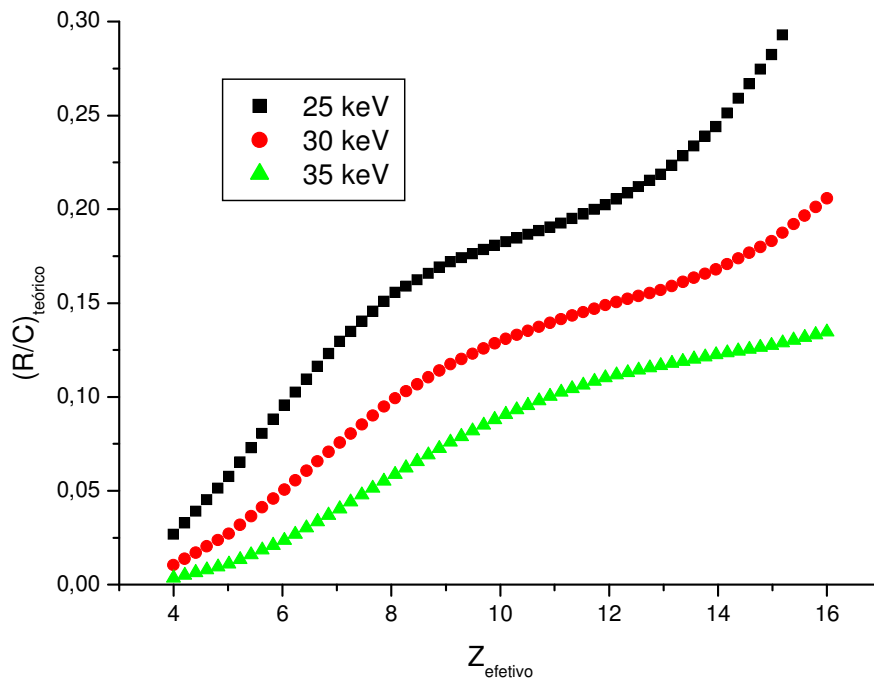


Figura 5.26 – Modelo teórico para fótons de 25, 30 e 35 keV com ângulo de espalhamento de 90°.

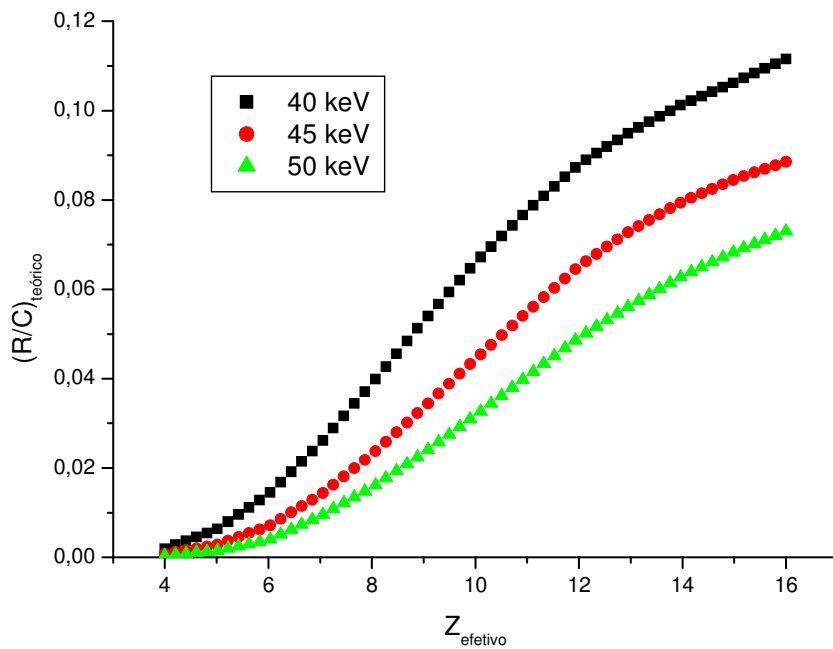


Figura 5.27 – Modelo teórico para fótons de 40, 45 e 50 keV com ângulo de espalhamento de 90°.

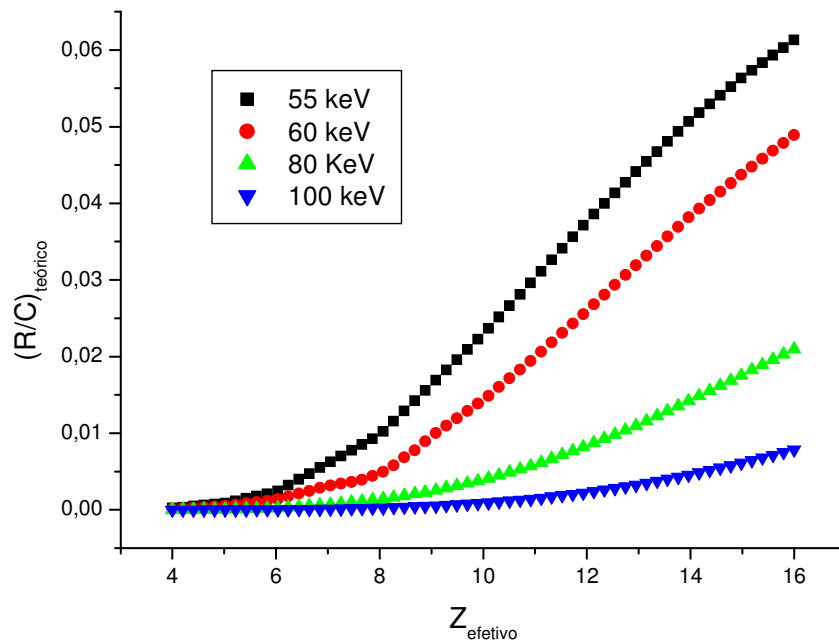


Figura 5.28 – Modelo teórico para fótons de 55, 60, 80 e 100 keV com ângulo de espalhamento de 90°.

Analisando as figuras 5.12, 5.13, 5.15 e 5.16 foi possível verificar que a relação entre a razão R/C e o número atômico efetivo apresenta descontinuidade na região de 7 keV, pontos de inflexão nas proximidades de $Z_{ef}=11$ para fótons entre 20 e 35 keV e uma linearidade na faixa de $7 < Z_{ef} < 12$ para fótons com energia entre 40 e 100 keV.

O resultado obtido para o modelo teórico está em pleno acordo com os resultados experimentais para fótons de 17,74 keV (relação quadrática), 59,54 keV (relação linear) e com o trabalho de DONATIVI(2007) com fótons de 40,12 keV (relação linear). Não foram encontrados trabalhos na literatura mostrando a relação entre razão R/C e o número atômico efetivo na região entre 20 e 35 keV com $6 < Z_{ef} < 10$ e $10 < Z_{ef} < 15$. Os resultados teóricos indicam uma relação quadrática, porém com concavidade negativa para $6 < Z_{ef} < 10$ e concavidade positiva para $10 < Z_{ef} < 15$.

Segundo os resultados do modelo teórico, podemos propor uma região ideal de aplicação do método de espalhamento: as amostras padrões para calibração da curva R/C com $6 < Z_{ef} < 11$, pois evitaria os pontos de inversão de concavidade.

V.6 – Resultados da simulação MCNP5

Para verificar os limites de aplicação da técnica usando a razão entre os picos de espalhamentos R/C, é necessário aplicar a técnica em uma extensa faixa de energia. A relação entre a razão R/C e o número atômico efetivo foi analisada pelo modelo teórico, mas não definimos qual método de cálculo do número atômico efetivo seria adequado para a aplicação do método de espalhamento. Uma alternativa viável para complementar os resultados experimentais e analisar a técnica ideal para determinação do número atômico efetivo é a simulação Monte Carlo com o código MCNP5.

Inicialmente procurou-se reproduzir as condições experimentais da fonte selada de Am²⁴¹: fótons com energia de 59,54 keV e ângulo de espalhamento de 106°. Os resultados iniciais do modelo foram comparados os resultados experimentais. A tabela 5.21 apresenta os resultados experimentais corrigidos, teórico e simulado da razão entre os picos R/C das amostras de MgO, Al₂O₃, CaCO₃ e Si.

Tabelas 5.21 – Resultado da razão entre os picos R/C simulado, experimental e teórico.

<i>Amostra</i>	<i>R/C experimental</i>	<i>R/C Teórico</i>	<i>R/C Simulado</i>
MgO	0,0239	0,0244	0,0256
Al₂O₃	0,0258	0,0252	0,0254
CaCO₃	0,0444	0,0441	0,0429
Si	0,0540	0,0520	0,0531

Após a validação dos resultados obtidos através da simulação Monte Carlo, modificou-se o ângulo de espalhamento para 90° e realizou-se uma simulação com fontes monoenergéticas de 10 keV, 15 keV, 20 keV, 25 keV, 30 keV, 35 keV, 40 keV, 45 keV e 50 keV em amostras de H₃BO₃, Na₂CO₃, Al₂O₃ e MgO. Os resultados da razão Rayleigh e Compton (R/C) obtidos na simulação são apresentados na tabela 5.22.

Tabelas 5.22 – Resultado da razão entre os picos R/C simulado para as amostras de H_3BO_3 , Al_2O_3 , Na_2CO_3 e MgO .

<i>Energia</i> (keV)	<i>H₃BO₃</i>		<i>Al₂O₃</i>		<i>Na₂CO₃</i>		<i>MgO</i>	
	<i>R/C</i>	<i>Erro</i>	<i>R/C</i>	<i>Erro</i>	<i>R/C</i>	<i>Erro</i>	<i>R/C</i>	<i>Erro</i>
10	0,43	0,02	2,41	0,61	1,51	0,18	2,37	0,45
15	0,153	0,009	0,70	0,08	0,55	0,05	0,75	0,11
20	0,09	0,01	0,39	0,05	0,31	0,03	0,38	0,04
25	0,056	0,004	0,285	0,015	0,229	0,019	0,266	0,023
30	0,038	0,002	0,200	0,015	0,139	0,011	0,192	0,013
35	0,020	0,002	0,129	0,008	0,091	0,008	0,121	0,010
40	0,014	0,001	0,088	0,007	0,063	0,005	0,094	0,007
45	0,008	0,001	0,057	0,005	0,043	0,004	0,062	0,005
50	0,0051	0,0005	0,048	0,003	0,032	0,003	0,046	0,003

Para relacionar os resultados simulados com a razão R/C, é necessário calcular o número atômico efetivo destas amostras utilizando cada método. As tabelas 5.23, 5.24, 5.25 e 5.26 apresentam os números atômicos efetivos para amostras usadas na simulação.

Tabelas 5.23 – Número atômico efetivo da amostra de H_3BO_3 para cada método.

Método	Energia (keV)								
	10	15	20	25	30	35	40	45	50
I	6,91	6,91	6,91	6,91	6,91	6,91	6,91	6,91	6,91
II	4,52	4,93	6,05	6,56	6,94	7,12	7,25	7,32	7,34
III	7,31	7,31	7,31	7,31	7,31	7,31	7,31	7,31	7,31
IV	7,13	7,13	7,13	7,13	7,13	7,13	7,13	7,13	7,13
V	7,41	7,41	7,41	7,41	7,41	7,41	7,41	7,41	7,41
VI	7,62	7,22	6,63	6,09	5,71	5,44	5,21	5,04	4,88

Tabelas 5.24 – Número atômico efetivo da amostra de Na₂CO₃ para cada método.

Método	Energia (keV)								
	10	15	20	25	30	35	40	45	50
I	9,22	9,22	9,22	9,22	9,22	9,22	9,22	9,22	9,22
II	9,62	9,64	8,91	8,52	8,64	8,76	8,94	9,11	9,15
III	9,42	9,42	9,42	9,42	9,42	9,42	9,42	9,42	9,42
IV	9,12	9,12	9,12	9,12	9,12	9,12	9,12	9,12	9,12
V	9,42	9,42	9,42	9,42	9,42	9,42	9,42	9,42	9,42
VI	9,84	9,76	9,63	9,52	9,43	9,33	9,16	9,12	9,04

Tabelas 5.25 – Número atômico efetivo da amostra de Al₂O₃ para cada método.

Método	Energia (keV)								
	10	15	20	25	30	35	40	45	50
I	10,8	10,8	10,8	10,8	10,8	10,8	10,8	10,8	10,8
II	11,1	11,5	11,6	10,5	9,8	9,9	10,1	10,4	10,5
III	11,2	11,2	11,2	11,2	11,2	11,2	11,2	11,2	11,2
IV	10,6	10,6	10,6	10,6	10,6	10,6	10,6	10,6	10,6
V	11,1	11,1	11,1	11,1	11,1	11,1	11,1	11,1	11,1
VI	11,8	11,7	11,7	11,5	11,4	11,2	11,0	10,9	10,7

Em todas essas tabelas, os valores do número atômico efetivo para os métodos I, III, IV e V sempre apresentam um valor constante, enquanto os métodos II e VI mostram valores variados. Esse resultado já era esperado, pois além da composição da amostra, o método VI também varia com a energia do fóton incidente. Para o método II, essa mudança ocorre não apenas para a energia do fóton, mas também com o ângulo de espalhamento, ou seja, ele é função do momento transferido.

Tabelas 5.26 – Número atômico efetivo da amostra de MgO para cada método.

Método	Energia (keV)								
	10	15	20	25	30	35	40	45	50
I	10,6	10,6	10,6	10,6	10,6	10,6	10,6	10,6	10,6
II	10,8	11,1	11,1	10,2	9,93	9,96	10,2	10,3	10,4
III	10,8	10,8	10,8	10,8	10,8	10,8	10,8	10,8	10,8
IV	10,4	10,4	10,4	10,4	10,4	10,4	10,4	10,4	10,4
V	10,7	10,7	10,7	10,7	10,7	10,7	10,7	10,7	10,7
VI	11,1	11,1	11,0	11,0	10,8	10,7	10,6	10,5	10,4

A partir dos dados das tabelas 5.22, 5.23, 5.24, 5.25 e 5.26 é possível obter as equações que descrevem a relação entre o número atômico efetivo e a razão entre os espalhamentos Rayleigh e Compton (R/C) através de um ajuste de curva. Os gráficos e as equações obtidos por estas tabelas são apresentados no anexo IV.

Para aplicação do método proposto neste trabalho, são necessárias de amostras de referência. Através da razão R/C destas amostras pode-se obter o número atômico efetivo a partir das equações do ajuste de curva. A tabela 5.27 mostra a composição elementar das amostras biológicas de tecido adiposo, tecido mamário e tecido pulmonar (ICRU 44) usadas na simulação. A tabela 5.28 mostra os valores encontrados na simulação da razão R/C para as amostras biológicas ICRU 44.

A partir das equações encontradas no ajuste de curva R/C versus Z_{ef} e dos valores apresentados na tabela 5.28, calculou-se o número atômico efetivo das amostras biológicas. A tabela 5.29 mostra o Z_{ef} de cada amostra para cada equação.

Tabelas 5.27 – Fração da composição elementar das amostras biológicas ICRU 44.

<i>Elemento</i>	<i>Tecido Adiposo</i>	<i>Tecido Mamário</i>	<i>Tecido Pulmonar</i>
H	0,11400	0,10600	0,10300
C	0,59800	0,33200	0,10500
N	0,00700	0,03000	0,03100
O	0,27800	0,52700	0,74900
Na	0,00100	0,00100	0,00200
P	-	0,00100	0,00200
S	0,00100	0,00200	0,00300
Cl	0,00100	0,00100	0,00300
K	0,00100	-	0,00200

Tabelas 5.28 – Resultado da razão entre os picos R/C simulado para as amostras biológicas ICRU 44.

<i>Energia (keV)</i>	<i>Tecido Adiposo</i>		<i>Tecido Mamário</i>		<i>Tecido Pulmonar</i>	
	<i>R/C</i>	<i>Erro</i>	<i>R/C</i>	<i>Erro</i>	<i>R/C</i>	<i>Erro</i>
10	0,60	0,05	0,69	0,06	0,77	0,07
15	0,322	0,020	0,353	0,022	0,384	0,027
20	0,214	0,014	0,242	0,020	0,269	0,023
25	0,126	0,010	0,152	0,031	0,178	0,014
30	0,060	0,008	0,076	0,008	0,091	0,007
35	0,036	0,004	0,048	0,006	0,060	0,007
40	0,022	0,002	0,029	0,002	0,037	0,002
45	0,010	0,003	0,014	0,004	0,018	0,005
50	0,007	0,002	0,010	0,002	0,013	0,003

Tabelas 5.29 – Número atômico efetivo da amostra ICRU 44 de tecido Adiposo.

Método	Energia (keV)								
	10	15	20	25	30	35	40	45	50
I	7,28	7,96	7,81	7,20	7,39	7,41	7,19	6,97	7,02
II	6,52	6,88	6,83	6,38	7,26	7,48	7,41	7,35	7,37
III	7,63	8,30	7,98	7,38	7,67	7,63	7,50	7,33	7,37
IV	7,42	8,03	7,84	7,30	7,48	7,46	7,33	7,15	7,19
V	7,71	8,35	8,06	7,49	7,75	7,72	7,60	7,43	7,47
VI	7,94	8,37	7,83	6,81	6,51	6,28	5,82	5,23	5,25

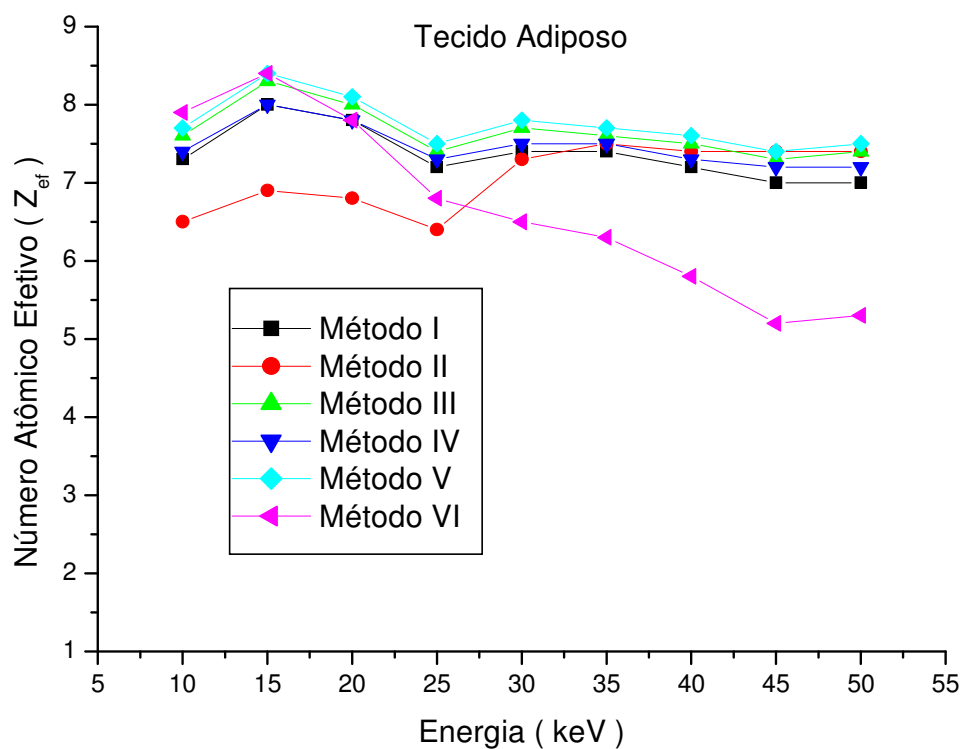


Figura 5.29 – Comparação gráfica entre os resultados do número atômico efetivo da amostra de tecido Adiposo para cada energia.

Tabelas 5.30 – Número atômico efetivo da amostra ICRU 44 de tecido Mamário.

Método	Energia (keV)								
	10	15	20	25	30	35	40	45	50
I	7,49	8,16	8,16	7,53	7,77	7,86	7,50	7,13	7,32
II	6,04	7,22	7,31	6,65	7,54	7,80	7,64	7,47	7,62
III	7,80	8,50	8,32	7,67	7,96	7,94	7,75	7,42	7,67
IV	7,60	8,21	8,15	7,58	7,78	7,78	7,59	7,27	7,46
V	7,88	8,54	8,38	7,76	8,03	8,02	7,83	7,52	7,75
VI	8,13	8,59	8,28	7,30	7,05	6,94	6,41	5,73	5,70

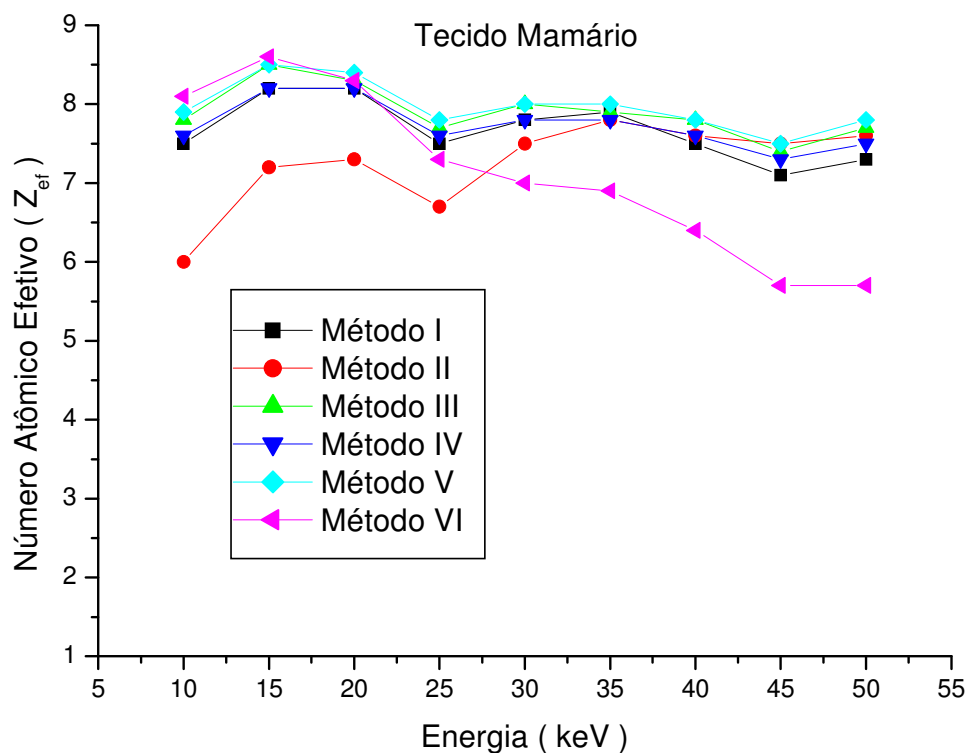


Figura 5.30 – Comparação gráfica entre os resultados do número atômico efetivo da amostra de tecido Mamário para cada energia.

Tabelas 5.31 – Número atômico efetivo da amostra ICRU 44 de tecido Pulmonar.

Método	Energia (keV)								
	10	15	20	25	30	35	40	45	50
I	7,68	8,37	8,53	7,97	8,15	8,28	7,85	7,32	7,61
II	6,53	7,57	7,86	7,09	7,82	8,09	7,90	7,61	7,86
III	7,98	8,70	8,69	8,10	8,27	8,28	8,06	7,56	7,95
IV	7,77	8,40	8,49	7,97	8,08	8,10	7,89	7,42	7,72
V	8,05	8,73	8,73	8,17	8,33	8,34	8,13	7,65	8,02
VI	8,31	8,82	8,74	7,91	7,58	7,55	7,03	6,20	6,14

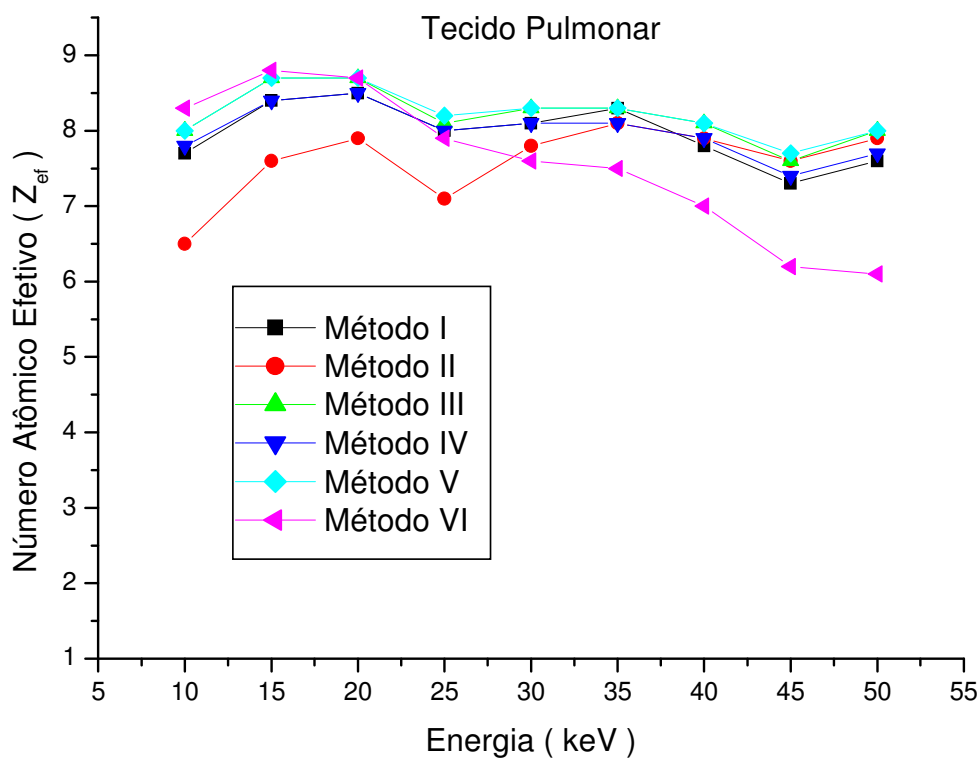


Figura 5.31 – Comparação gráfica entre os resultados do número atômico efetivo da amostra de tecido Pulmonar para cada energia.

Analisando os resultados experimentais e simulados, verificou-se que os métodos de cálculo do número atômico efetivo I, III, IV e V apresentam resultados semelhantes. O método VI de cálculo do Z_{ef} revelou um comportamento semelhante aos métodos I, III, IV e V na região de 10 a 20 keV e apresenta um decréscimo nos valores de Z_{ef} acima dessa faixa de energia. O método II de cálculo do número atômico efetivo mostrou ser o método mais adequado para o método de espalhamento proposto. No entanto, para fótons com energia acima de 30 keV os métodos I, III, IV e V podem substituir o método II, por apresentarem uma técnica de cálculo mais simples.

CAPÍTULO VI

CONCLUSÕES E SUGESTÕES

Neste capítulo serão discutidos os resultados obtidos no trabalho e as considerações importantes para o desenvolvimento da técnica de espalhamento. No final será apresentada uma sugestão de prosseguimento do trabalho.

VI.1. Conclusões

Todos os métodos para calcular o número atômico efetivo apresentaram resultados satisfatórios, porém alguns métodos de cálculo do número atômico efetivo se destacaram em relação a outros. Para fótons de 17,74 keV, o método II apresentou resultados do coeficiente de atenuação de massa idênticos aos valores obtido pelo XCOM para a amostra de MgO, considerando a incerteza da medida, e erro percentual médio de 3,7%. Enquanto o método I apresentou intercessão de valores apenas para as energias de 22,12 e 26,33 keV, e um erro percentual médio de 8,4%. Os outros métodos apresentaram resultados próximos aos valores do XCOM. As medidas de espalhamento com fótons de 59,54 keV foram comparadas aos resultados do método de transmissão, pois não é possível simular no XCOM amostra com composição elementar total desconhecida. Os resultados da fonte gama de Am²⁴¹ (fótons de 59,54 keV) mostram que o método I, II, III, IV e V atenderam satisfatoriamente, quando comparados aos resultados do método de transmissão. Os resultados do método VI mostram que esta técnica de cálculo do número atômico efetivo é inadequada para o método de espalhamento, com erros percentuais médios de 7,1% (MgO), 32% (tecido de próstata), 17% (fígado bovino), 34% (feno em pó) e 39% (leite em pó).

Os resultados da simulação confirmaram que a técnica de cálculo do número atômico efetivo pelo método II é o mais eficiente para aplicação da técnica de espalhamento, apresentando um comportamento diferenciado em relação às outras técnicas. No entanto, todos os métodos de cálculo do número atômico efetivo apresentaram ótimos resultados para fótons com energia $E \geq 20$ keV. O grande diferencial do método II é na região de 10 a 20 keV, uma vez que os outros métodos

apresentam resultados distantes dos valores obtidos no XCOM para a medida de 17,74 keV.

Os resultados do modelo teórico indicaram as melhores amostras e esclareceu a inversão de curva, concavidade negativa, encontrada na simulação na região de energia $E < 40$ keV.

Os resultados com fótons de 17,74 keV foram apresentados no trabalho aceito (poster) pelo Seminário Latino Americano de Análise por Raios X (SARX 2008), enquanto o trabalho contendo os resultados da fonte de Am^{241} foi aceito e apresentado no Congresso Brasileiro de Engenharia Mecânica (COBEM 2009) e no International Nuclear Atlantic Conference (INAC 2011). Este último foi submetido à revista Nuclear Instruments and Methods B (NIM B) com o título “*Correction of radiation absorption on biological samples using Rayleigh to Compton scattering ratio*”.

Os resultados da técnica usando a razão do espalhamento R/C, já eram esperados segundo o modelo teórico e os trabalhos encontrados na literatura. No entanto, não encontramos fundamentação teórica que mostre alguma relação entre as razões das curvas de espalhamento das linhas L_{α} e L_{β} com o número atômico da amostra. Porém, os resultados semi-empíricos deste estudo revelaram uma relação linear entre o número atômico efetivo da amostra e a razão entre as curvas de espalhamento L_{α}/L_{β} . Esta relação linear precisa ser mais aprofundada com outros tipos de amostras e outras fontes de energia, para, no futuro, estabelecermos um modelo teórico que descreva esta relação.

Quanto aos resultados do coeficiente de atenuação de massa, foi verificado que os métodos I, III e V apresentaram resultados mais próximos aos resultados do método de transmissão, com erros percentuais médio de 4,1%, 1,0% e 4,7%, respectivamente, para a amostra de feno em pó. Para a amostra de leite em pó os resultados foram 0,4%, 4,4% e 7,3%, respectivamente. No entanto, os resultados da amostra certificada de Fígado bovino foram insatisfatórios para todas as técnicas de cálculo do número atômico efetivo.

Os resultados obtidos por este método foram apresentados no International Nuclear Atlantic Conference (INAC 2009) em forma de poster.

VI.2. Sugestão para trabalhos futuros

- Realizar medidas experimentais pelo método de espalhamento e pelo método de transmissão na região de energia $E < 30$ keV com amostras na faixa de número atômico efetivo $6 < Z_{\text{ef}} < 11$ e $11 < Z_{\text{ef}} < 16$. Verificar a inversão de concavidade nessa região.
- Desenvolver um novo método de cálculo do número atômico efetivo com redes neurais, para melhorar os resultados da técnica de espalhamento.
- Realizar medidas experimentais ou simuladas de microfluorescência de raios X (μ -XRF) em amostras biológicas usando feixe monoenergético para aplicação da técnica de espalhamento e verificar se a imagem gerada apresenta resultados distintos dos resultados dos métodos atuais.
- Desenvolver um modelo teórico para a curva de espalhamento L_{α}/L_{β} e realizar várias medidas com a curva de espalhamento a fim de consolidar a técnica.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

AKAR, A. et al, 2006, “Measurement of attenuation coefficients for bone, muscle, fat and water at 140, 364 and 662 keV gamma-ray energies”, *Journal of Quantitative Spect. Radiation Transfer*, v.102, pp. 203-211

AKIRAN, P. *et al*, 1995, “Determination of high-Z material in low-Z medium by X-ray scattering techniques”, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B*, v.95, pp.82-86.

ALAM, M.N. et al, 2001, “Attenuation coefficients of soils and some building materials of Bangladesh in the energy range 276 – 1332 keV”, *Applied Radiation and Isotope*, v.54, pp. 973-976.

ANGELONE, M. , BUBBA, T. and ESPOSITO, A., 2001A, “Measurement of the mass attenuation coefficient for element material in the range $6 < Z < 82$ using X-rays from 13 up to 50 keV”, *Applied Radiation and Isotopes*, v. 55, pp. 505 - 511.

ANGELONE, M., ESPOSITO, A., CHITI, M. and GENTILE, A., 2001B, “Measurement of mass attenuation coefficients for four mixtures using X-rays from 13 keV up to 40 keV ”, *Radiation Physics and Chemistry*, v. 61, pp. 547 - 548.

BAO, S.X., 1998, “Absorption Correction Method Based on the Power Function of Continuous Scattered Radiation”, *X-ray Spectrometry*, v.27, pp. 332-336.

BONIFACIO, D.A.B., 2007, “Validação do Geant4 na produção e detecção de raios X na faixa de energia de radiodiagnóstico”. Tese de M. Sc., USP, São Paulo, SP, Brasil.

CASTRO, C.R.F., 2006, “Tomografia por Difração de raios X em tecidos biológicos utilizando Radiação Síncrotron”, Tese de D.Sc., COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil.

CESAREO, R., *et al*, 2001, “ 90° Compton and Rayleigh measurements and imaging”, *Radiation Physics and Chemistry*, v.61, pp.339-342.

CHANTLER, C.T. et al, 2001, “Measurement of the x-ray mass attenuation coefficient of copper using 8.85– 20 keV synchrotron radiation”, *Physical Review A*, v.64, pp.1-15.

CREAGH, D. C. and HUBBELL, J. H., 1987, “Problems Associated with the Measurement of X-Ray Attenuation Coefficients”. *Acta Crystallography ., Section A*, v.43, pp.102-112 .

DEMIR, F., 2010, “Determination of mass attenuation coefficients of some boron ores at 59.54 keV by using scintillation”, *Applied Radiation and Isotope*, v.68, pp.175-179.

DONATIVI, M., QUARTA, S., CESAREO, R. and CASTELLANO, A., 2007, “Rayleigh to Compton ratio with monochromatic radiation from na X-ray tube (preliminary results)”, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B*, v.264, pp. 189-193.

DUVAUCHELLE, P., PEIX, G., BABOT, D., 1999, “Effective atomic number in the Rayleigh to Compton scattering ratio”, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B*,v.155, pp.221-228.

DUVAUCHELLE, P., PEIX, G., BABOT, D., 2000, “Rayleigh to Compton ratio computed tomography using synchrotron radiation”, *NDT&E International* ,v.33, pp.23-31.

EISBERG, R., RESNIK, R., 1988, “Física Quântica: Átomos, Moléculas, Sólidos, Núcleos e Partículas”, 7 ed., Rio de Janeiro, Campus.

EKINCI, N. and ASTAM, N., 2007, “Measurement of mass attenuation coefficients of biological materials by energy dispersive X-ray fluorescence spectrometry”, *Radiation Measurements*, v.42, pp. 428-430.

HAN, I. and DEMIR, L., 2008, “Determination of mass attenuation coefficients, effective atomic and electron number of Cr, Fe and Ni alloy t different energies”, *Nuclear Instruments and Methods in Physic Research B*, v. 267, pp. 3-8.

HAN, I. and DEMIR, L., 2009A, "Mass attenuation coefficients, effective atomic and electron number of Ti and Ni alloy", *Radiation Measurements*, v. 44, pp. 289-294.

HAN, I., DEMIR, L. and SAHIN, M., 2009B, "Determination of mass attenuation coefficients, effective atomic and electron number for natural minerals", *Radiation Physics and Chemistry*, v. 78, pp. 760-764.

IÇELLI, O. and ERZENEGLU, S., 2002, "Experimental study on ratios of coherent scattering to Compton scattering for elements with atomic numbers $26 < Z < 82$ in 59.5 keV for 55° and 115° .", *Spectrochimica Acta Part B*, v.57, pp.1317-1323

IÇELLI, O. et al, 2004, "Experimental studies on measurements of mass attenuation coefficients of boric acid at different concentration", *Annals of Nuclear Energy*, v.31, pp. 97-106.

IÇELLI, O., 2006, "Practical method for experimental effective atomic number in the coherent to Compton scattering ratio", *Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer*, v. 101, pp.151-158.

IÇELLI, O. *et al* , 2008, "Determination of molecular, atomic, electronic cross-sections and effective atomic number of some born compounds and TSW", *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B*, v.266, pp.3226-3230.

KAEWKHAO, J. et al, 2008, "Determination of effective atomic number and effective electron densities for Cu/Zn alloy", *Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer* , v.109, pp. 1260-1265.

KAUR, U. et al, 2010, "Comparative studies of different concretes on the basic of some photon interaction parameters", *Applied Radiation and Isotope*, v.70, pp.233-240.

KERUR, B.R., MANJULA, V.T., LAGARE, M.T. and KUMAR, S.A., 2009, "Mass attenuation coefficient of saccharides for X-rays in the energy range from 8 keV to 32 keV", *Radiation Measurements*, v.44, pp. 63-67.

KNOLL, G.T., 2000, "Radiation Detection and Measurements", J.Wiley and Sons, 3^a edição, New York.

KUMAR, K.T. and REDDY, K.V., 1997, "Effective atomic number for materials of dosimetric interest", Radiation Physics and Chemistry, v.50, pp.545-553.

LEICHTER, I., KARELLAS, A., CRAVEN, J.D. and GREENFIELD, M.A., 1983, "The effect of momentum transfer on the sensitivity of a photon scattering method for the characterization of tissues", Med. Phys.,v.11, pp.31-36

MANNINEM, S. et al, 1984, "Determination of the effective atomic number using elastic and inelastic scattering of gamma-rays", The Journal of Applied Radiation and Isotopes, v.35, pp. 965-968.

MANOHARA, S.R. and HANAGODIMATH, S.M., 2007, " Studies on effective atomic number and electron densities of essential amino acids in the energy range 1 keV- 100 GeV", Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B, v.258, pp.321-328.

MANOHARA, S.R. et al, 2008, "On the effective atomic number and electron density: A comprehensive set of formulas for all types of materials and energy above 1 keV", Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B, v.266, pp.3906-3912.

MARTINS, R.A., 1998, "A descoberta dos raios X: o primeiro comunicado de Röntgen", Revista Brasileira de Ensino de Física, v.20, pp.373-391.

MEDHAT, M.E., 2009, "Gamma-ray attenuation coefficients of some building materials available in Egypt", Annals of Nuclear Energy, v.36, pp.849-852.

MOREIRA, A.C. and APPOLONI, C.R., 2006, "Mass attenuation coefficient of the Earth, Moon and Mars samples over 1 keV – 100 GeV energy range.", Applied Radiation and Isotopes, v.64, pp. 1065-1073.

MURTY, V.R.K., WINKOUN, D.P. and DEVAN, K.R.S., 2000, “Effective atomic number for W/Cu alloy using transmission experiments”, *Applied Radiation and Isotopes*, v.53, pp. 945-948.

PEREIRA, G.R., 2010, “Microtomografia por fluorescência de raios X por utilizando radiação síncrotron em amostras biológicas”, Tese de D.Sc., COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil

PEREIRA, L.O., 2009, “Estudo da influência do tamanho de campo de um feixe de nêutrons epitérmicos na distribuição de dose em BNCT”, Tese de M.Sc., COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil.

PUUMALAINEN, P. et al, 1977, “Assessment of fat content of liver by a photon scattering techniques”, *The International Journal of Applied Radiation and Isotopes*, v.28, pp.785-787.

SALINAS, I.C.P., C.C. CONTI and LOPES, R.T., 2006, “Effective density and attenuation coefficient for building material in Brazil”, *Applied Radiation and Isotope*, v.64, pp.13-18.

SCHÄTZLER, H.P., 1978, “Basic aspects on the use of elastic and inelastic scattered gamma radiation for the determination of binary systems with effective atomic number of less than 10” *The International Journal of Applied Radiation and Isotopes*, v.30, pp.115-121.

SERPA, R.F., 2007, “Análise multielementar de tecido cerebrais através da microfluorescência de raios X e fluorescência de raios X por Reflexão Total”, Tese de D.Sc., COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil

SHARANABASAPPA et al, 2010, “Determination of X-ray mass attenuation coefficients using HPGe detector.”, *Applied Radiation and Isotope*, v.68, pp.76-83.

SHIVARAMU *et al*, 2001a, “Effective atomic number for photon energy absorption of some low-Z substance of dosimetric interest”, *Radiation Physics and Chemistry*, v.62, pp. 371-377.

SHIVARAMU, 2001b, “Effective atomic numbers for photon energy absorption and photon attenuation of tissues from human organs”, *Medical Dosimetry*, v.27, pp.01-09.

SINGH, K. *et al*, 1996, “Study of effective atomic numbers and mass attenuation coefficients in some compounds”, *Radiation Physic Chemical*, v.47, pp.535 – 541.

SINGH, K. *et al*, 2002, “Gamma-ray attenuation coefficients in bismuth borate glasses”, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B*, v.194, pp.1-6.

TAUHATA, L. *et al*, 2003, “Radioproteção e Dosimetria: Fundamentos”, Instituto de Radioproteção e Dosimetria, CNEN, Rio de Janeiro.

TSAI, C.M. and CHO, Z.H., 1976, “Physics of contrast mechanism and averaging effect of linear attenuation coefficients in a computerized transverse axial tomography (CTAT transmission scanner”, *Physics in Medicine and Biology*, v.21 (4), pp.544-559.

TEIXEIRA, P.B., 2009, “Simulação por Monte Carlo de doses em radiografia industrial”, Tese de D.Sc., COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil.

TURGUT, Ü. *et al*, 2004, “X-ray attenuation coefficient measurements for photon energies 4.508 – 13.375 keV in Cu, Cr and their compounds and the validity of the mixture rule”, *Analytica Chimica Acta*, v.515, pp. 349-352.

YOSHIMURA, E.M., 2009, “Física das Radiações: interação da radiação com a matéria”, *Revista Brasileira de Física Médica*, v.3, pp.57-67.

X-5 MONTE CARLO TEAM, MCNP – *A General Monte Carlo N-Particle Transport Code, Version 5, Volume I: Overview and Theory*, LA-UR-03-1987, Los Alamos National Laboratory, California, 2003.

ANEXO I

AJUSTE DE CURVA DOS FÓTONS DE 17,74 keV

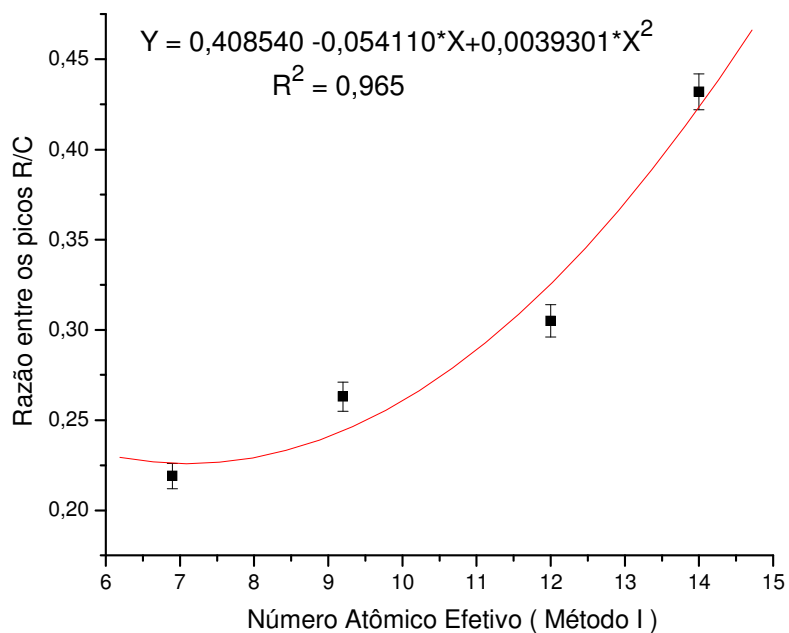


Figura A.1 – Ajuste de curva entre a razão R/C e o Z_{ef} (Método I).

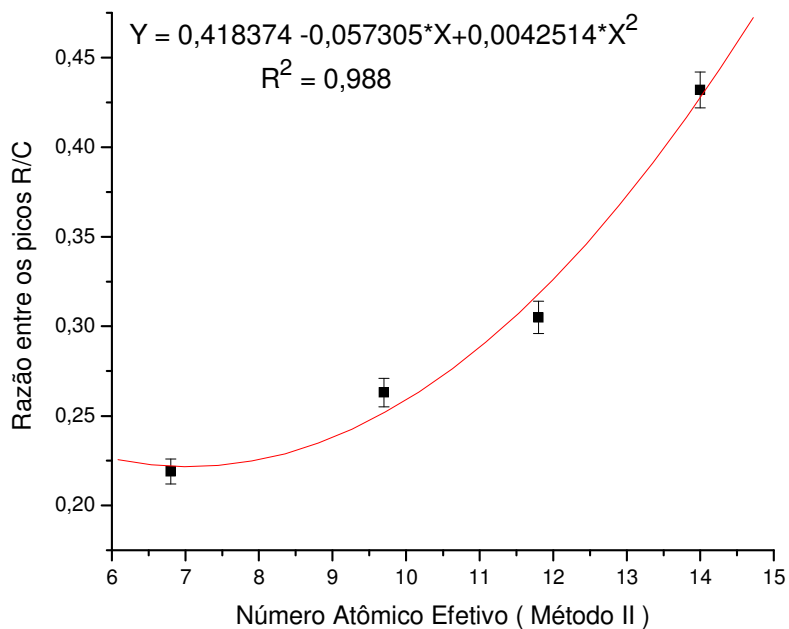


Figura A.2 – Ajuste de curva entre a razão R/C e o Z_{ef} (Método II).

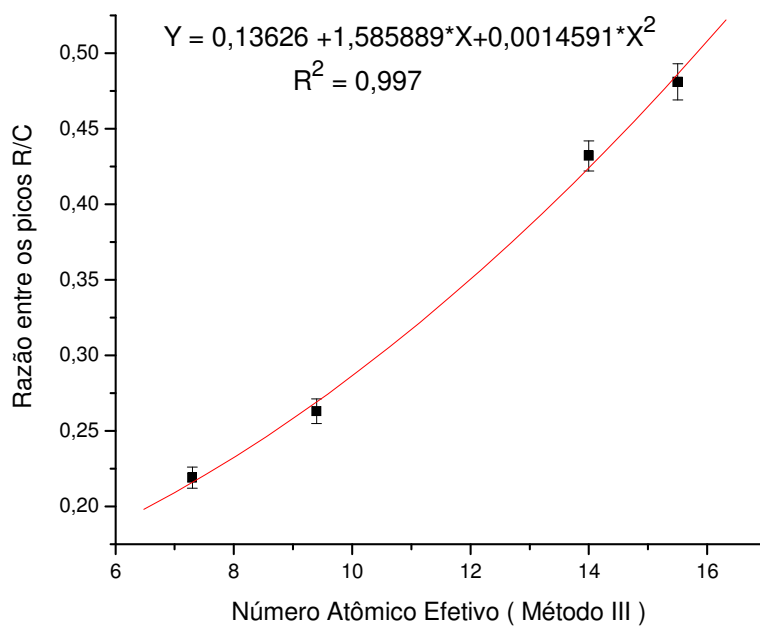


Figura A.3 – Ajuste de curva entre a razão R/C e o Z_{ef} (Método III).

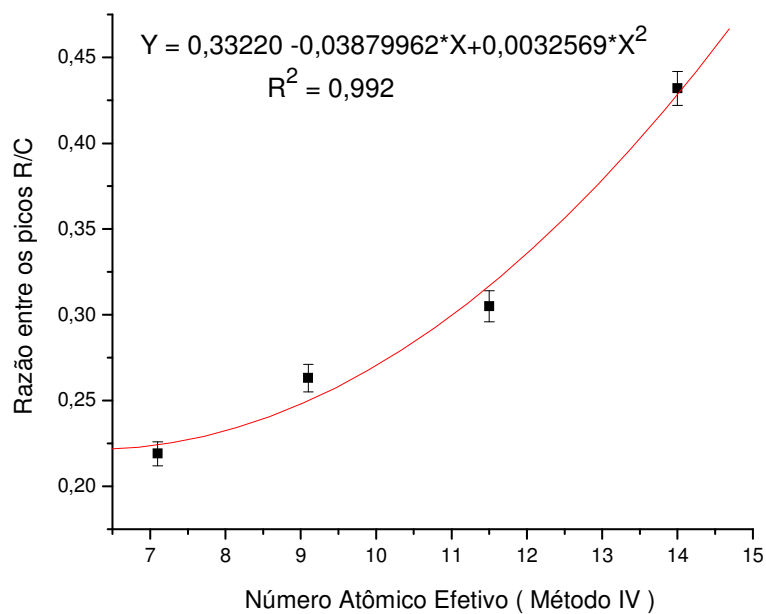


Figura A.4 – Ajuste de curva entre a razão R/C e o Z_{ef} (Método IV).

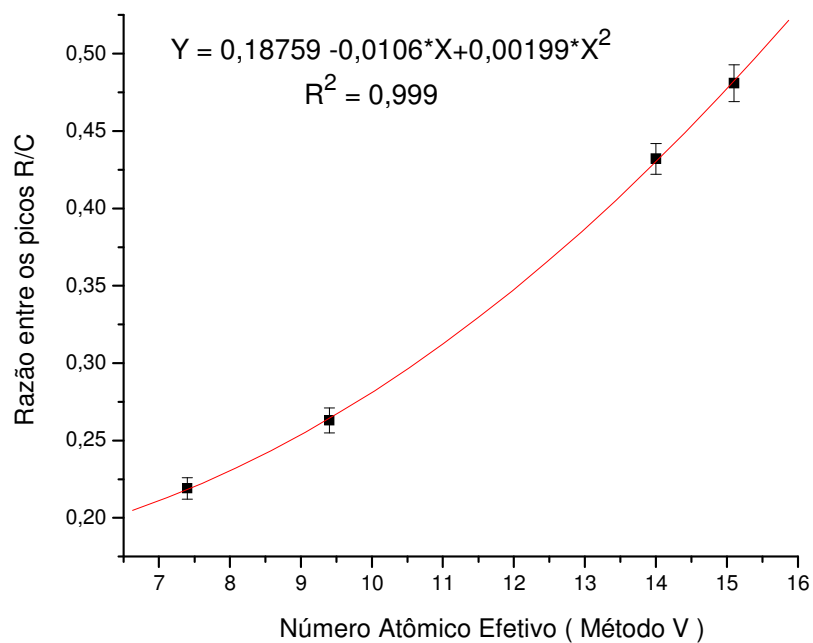


Figura A.5 – Ajuste de curva entre a razão R/C e o Z_{ef} (Método V).

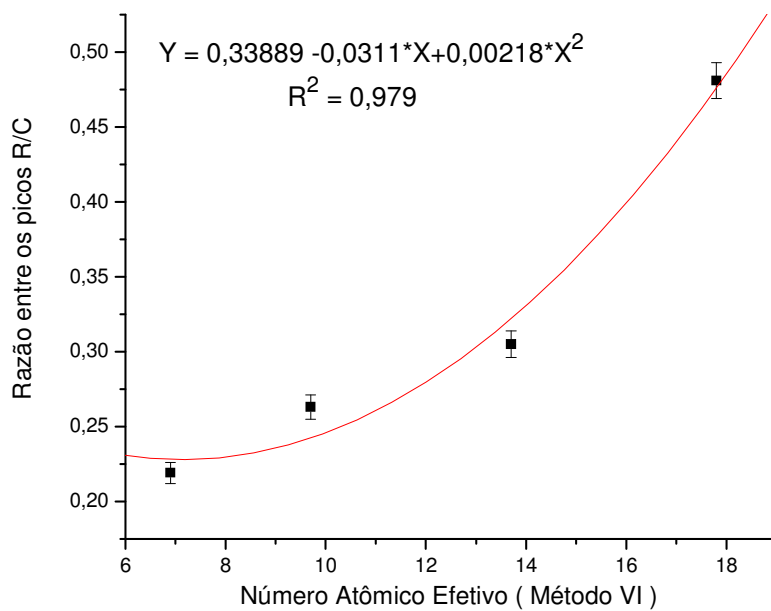


Figura A.6 – Ajuste de curva entre a razão R/C e o Z_{ef} (Método VI).

ANEXO II

AJUSTE DE CURVA DOS FÓTONS DE 59,54 keV

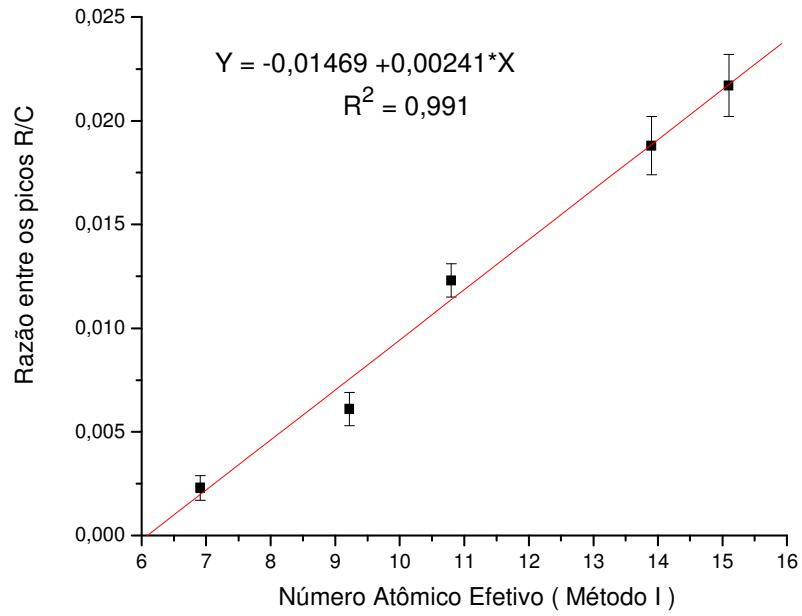


Figura A.6 – Ajuste de curva entre a razão R/C e o Z_{ef} (Método I).

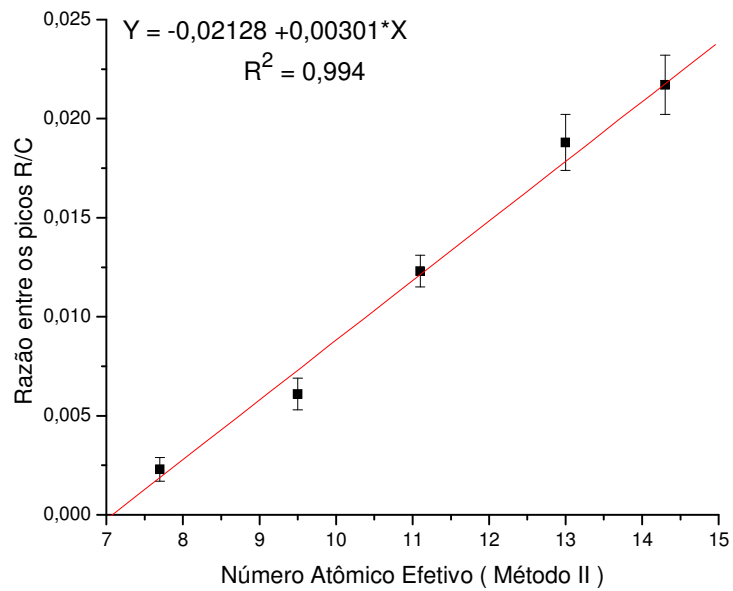


Figura A.7 – Ajuste de curva entre a razão R/C e o Z_{ef} (Método II).

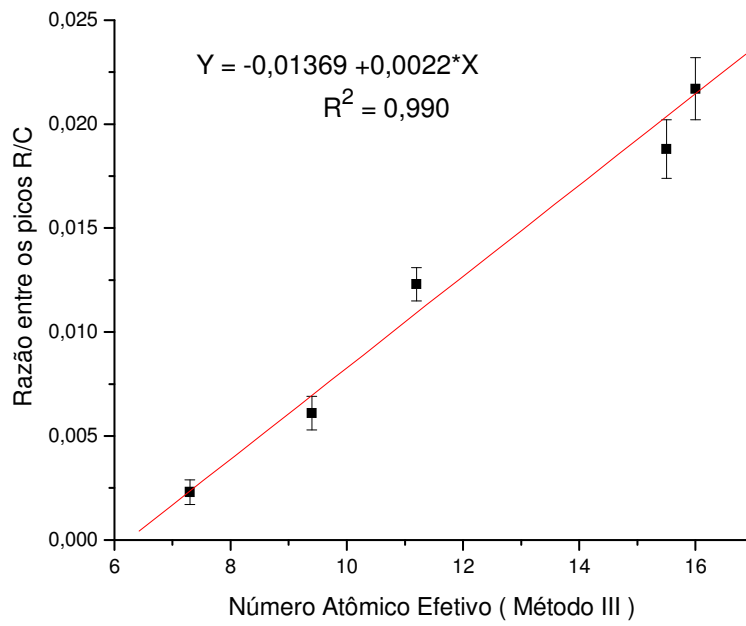


Figura A.8 – Ajuste de curva entre a razão R/C e o Z_{ef} (Método III).

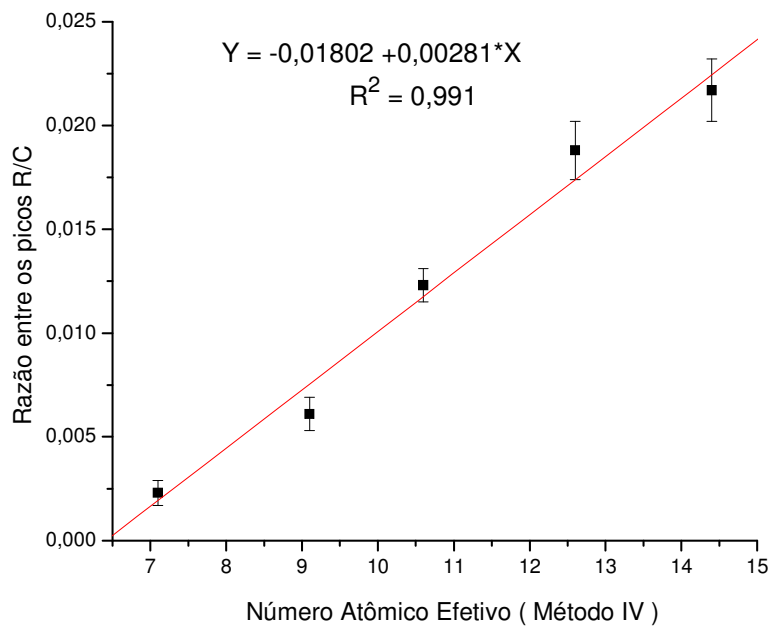


Figura A.9 – Ajuste de curva entre a razão R/C e o Z_{ef} (Método IV).

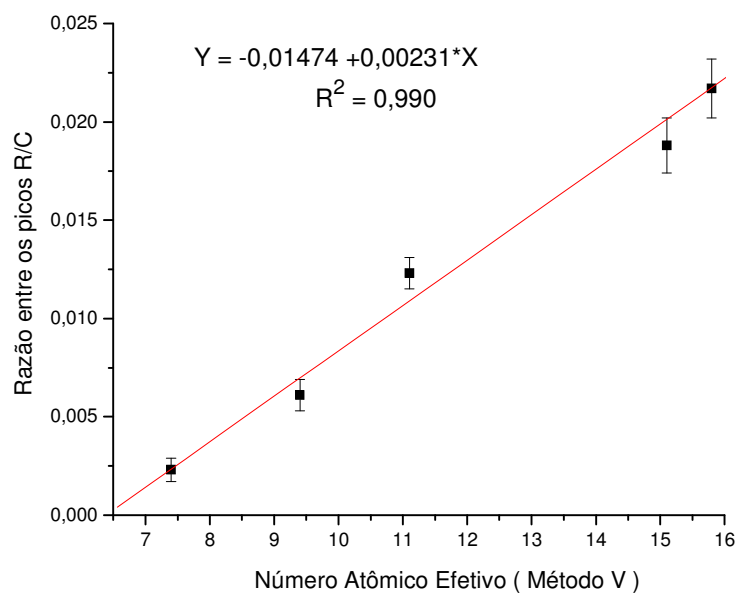


Figura A.10 – Ajuste de curva entre a razão R/C e o Z_{ef} (Método V).

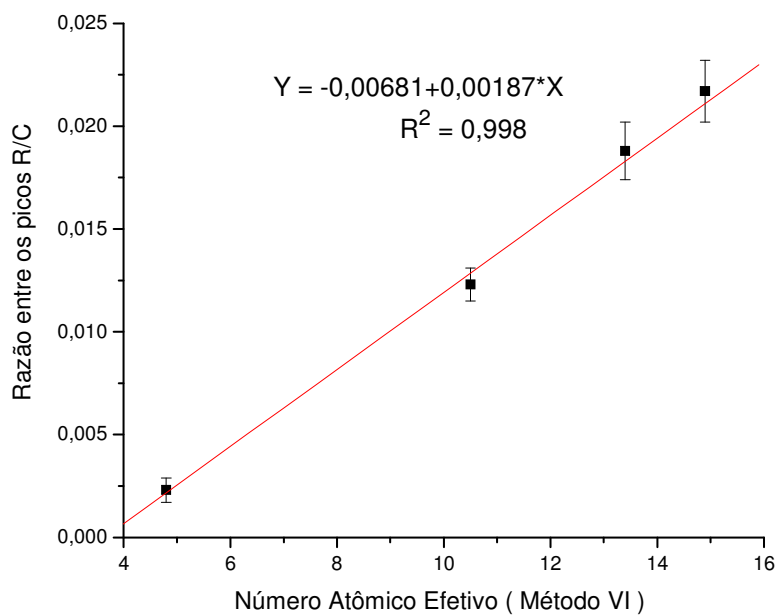


Figura A.11 – Ajuste de curva entre a razão R/C e o Z_{ef} (Método VI).

ANEXO III

AJUSTE DE CURVA DOS FÓTONS DE 8,74 keV e 9,57 keV

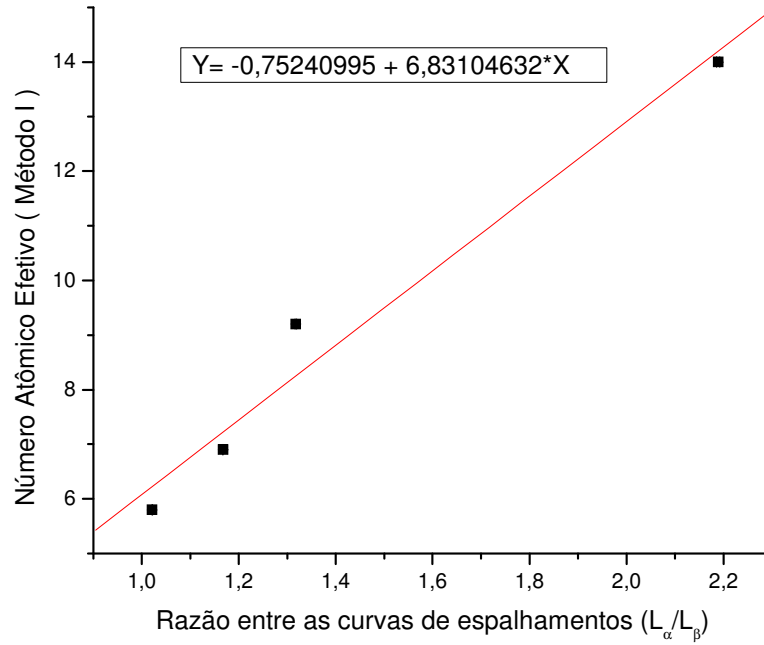


Figura A.12 – Ajuste de curva entre a razão L_α/L_β e o Z_{ef} (Método I).

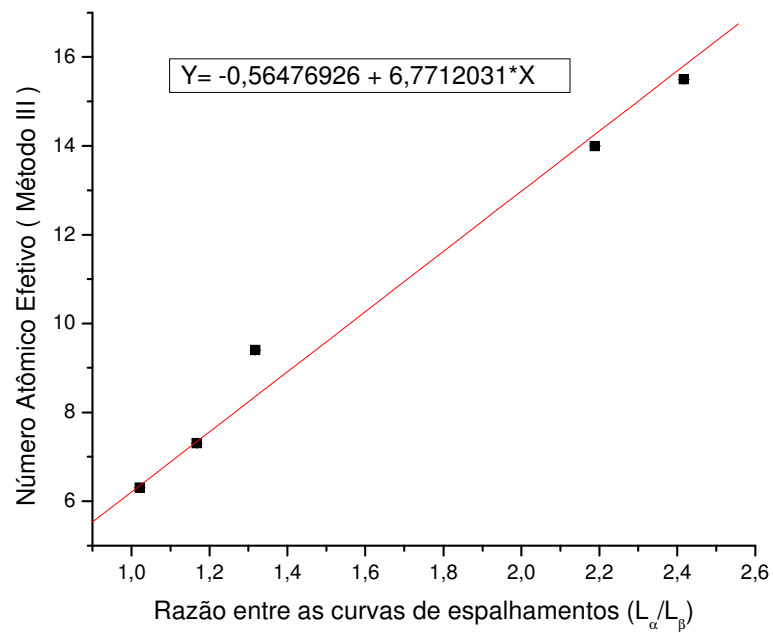


Figura A.13 – Ajuste de curva entre a razão L_α/L_β e o Z_{ef} (Método III).

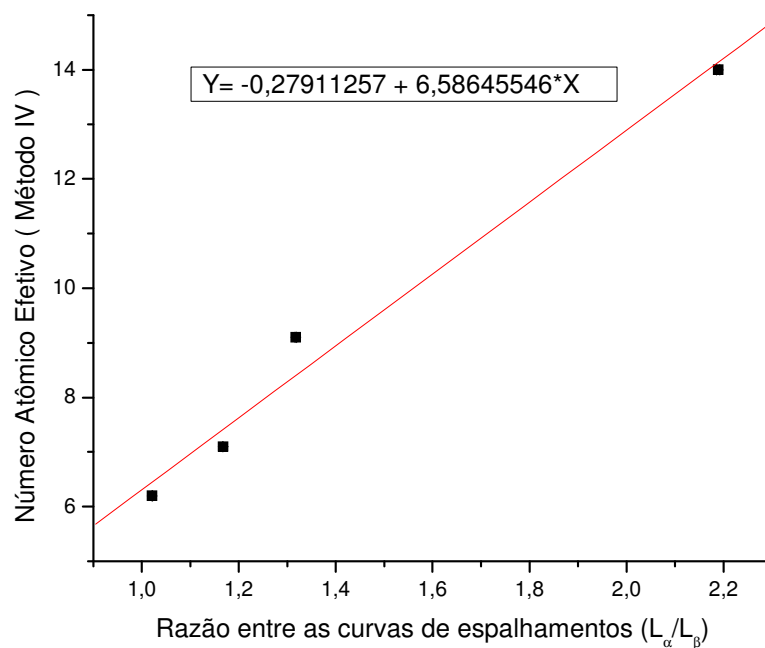


Figura A.14 – Ajuste de curva entre a razão L_α/L_β e o Z_{ef} (Método IV).

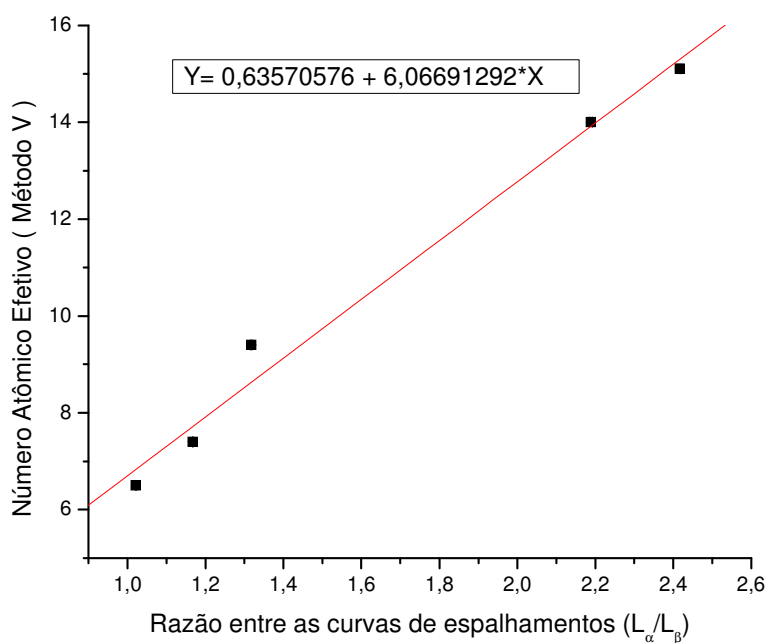


Figura A.15 – Ajuste de curva entre a razão L_α/L_β e o Z_{ef} (Método V).

ANEXO IV

AJUSTE DE CURVA DOS FÓTONS DOS SIMULADOS NO MCNP5.

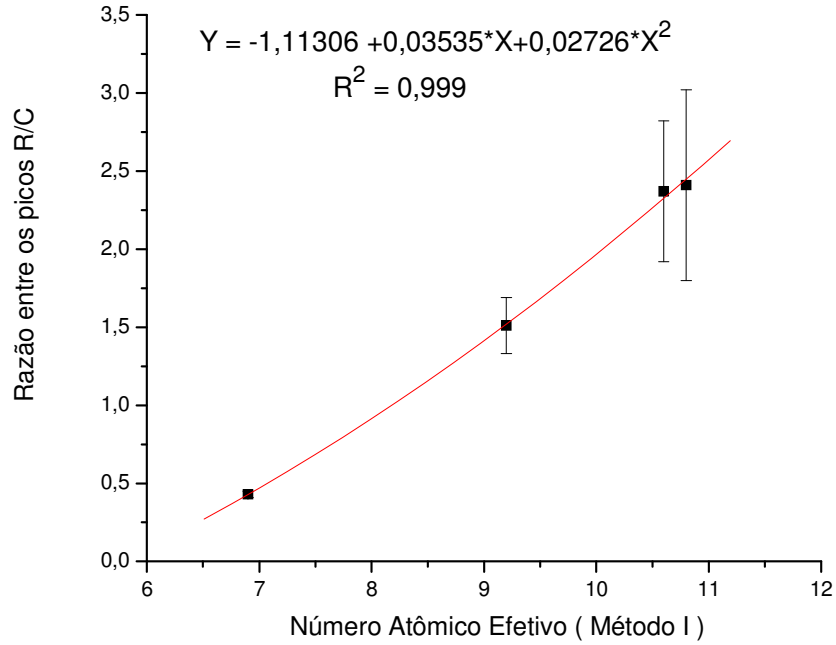


Figura A.16 – Ajuste de curva entre a razão R/C e o Z_{ef} (Método I – 10 keV).

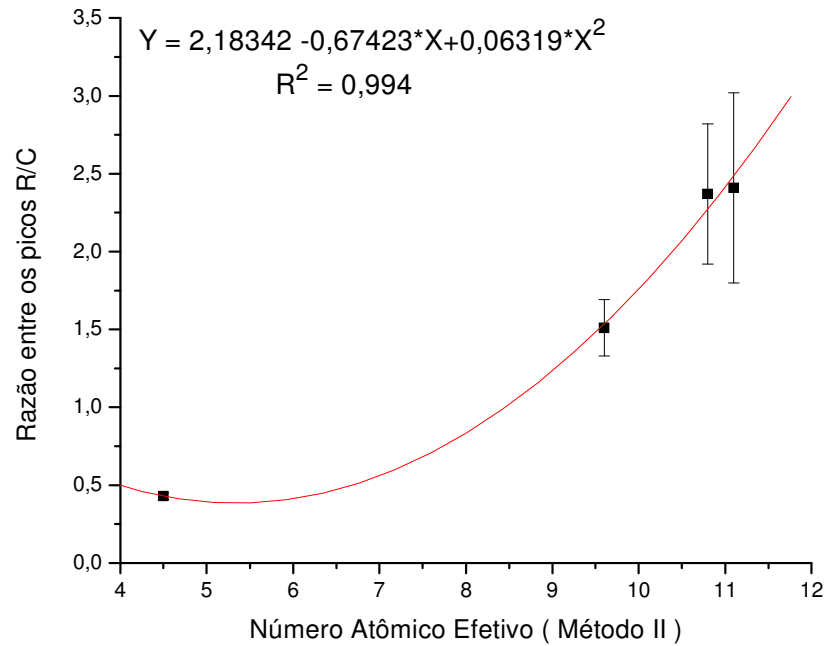


Figura A.17 – Ajuste de curva entre a razão R/C e o Z_{ef} (Método II – 10 keV).

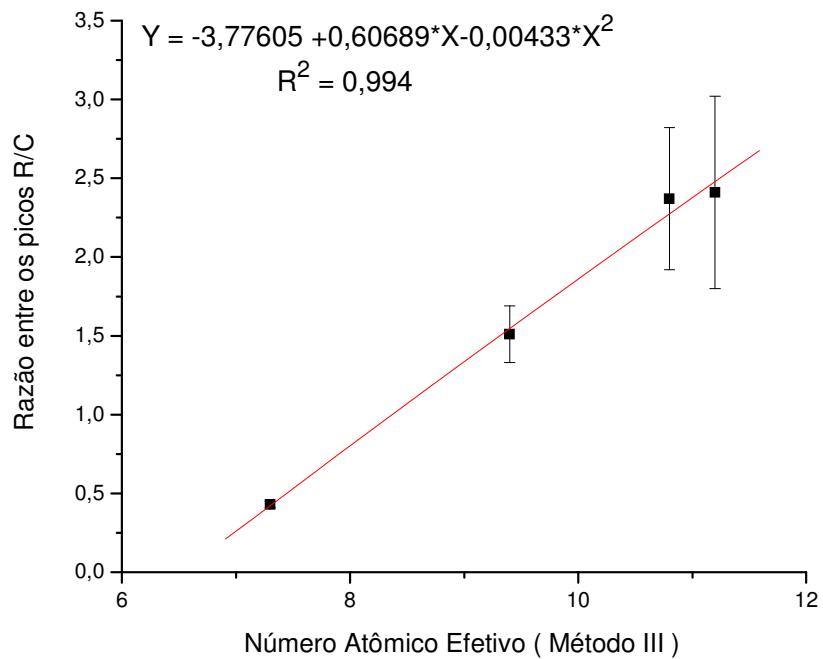


Figura A.18 – Ajuste de curva entre a razão R/C e o Z_{ef} (Método III – 10 keV).

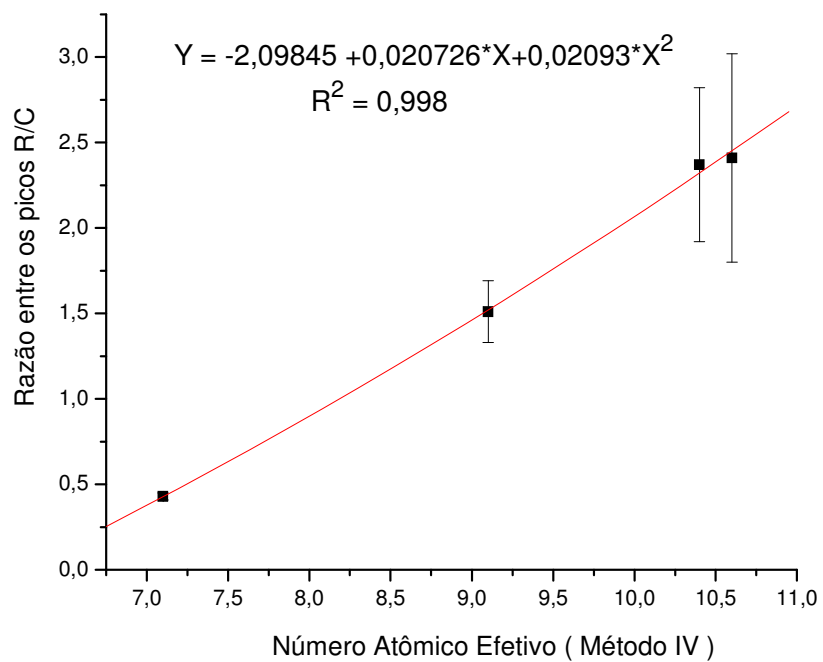


Figura A.19 – Ajuste de curva entre a razão R/C e o Z_{ef} (Método IV – 10 keV).

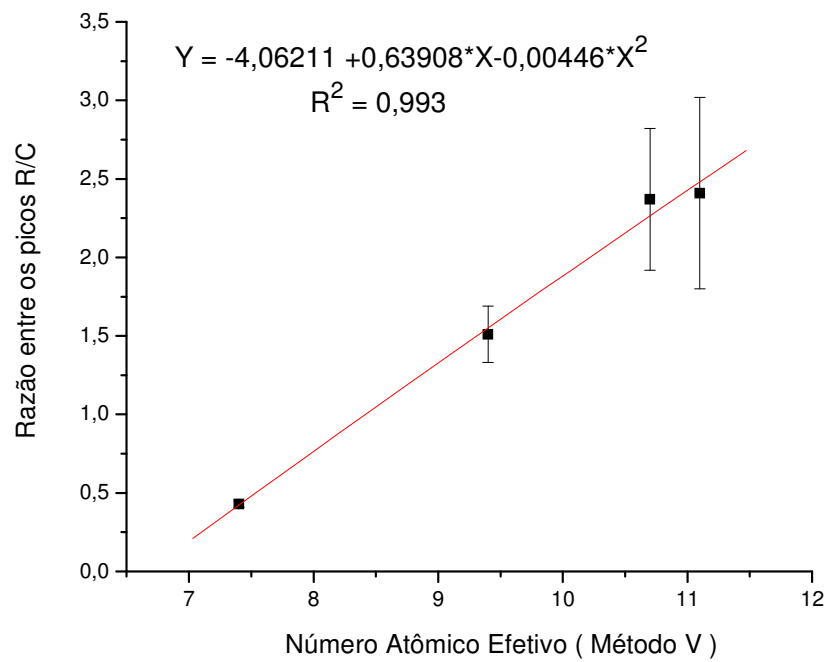


Figura A.20 – Ajuste de curva entre a razão R/C e o Z_{ef} (Método V – 10 keV).

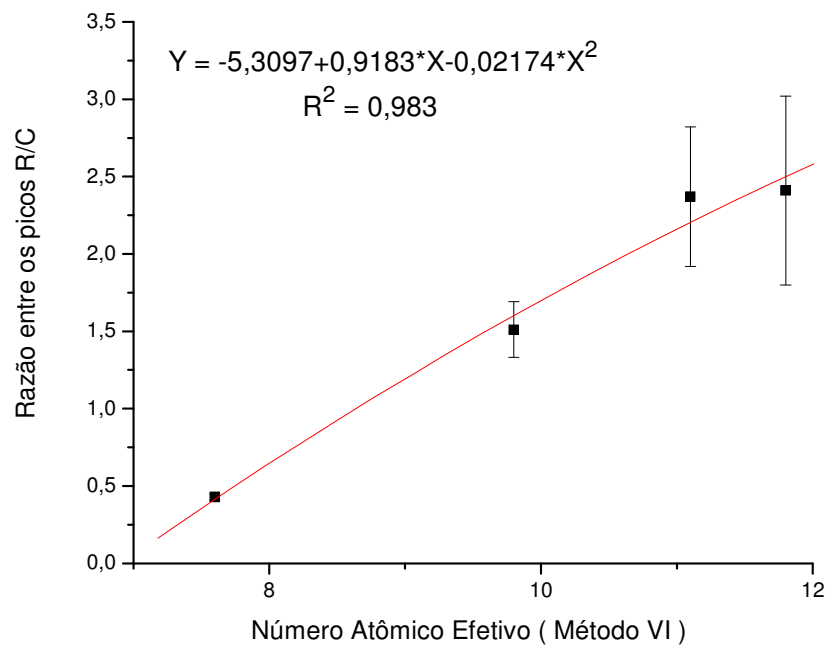


Figura A.21 – Ajuste de curva entre a razão R/C e o Z_{ef} (Método VI – 10 keV).

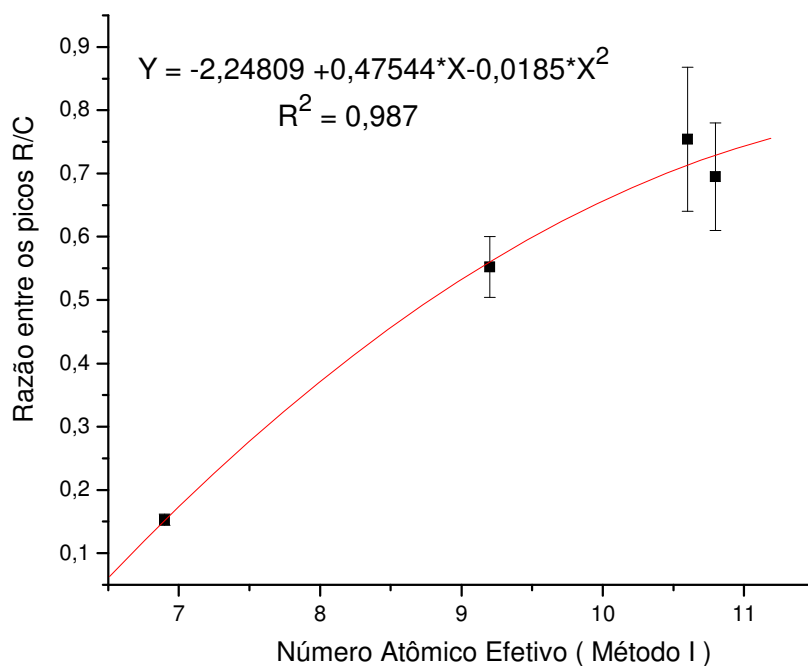


Figura A.22 – Ajuste de curva entre a razão R/C e o Z_{ef} (Método I – 15 keV).

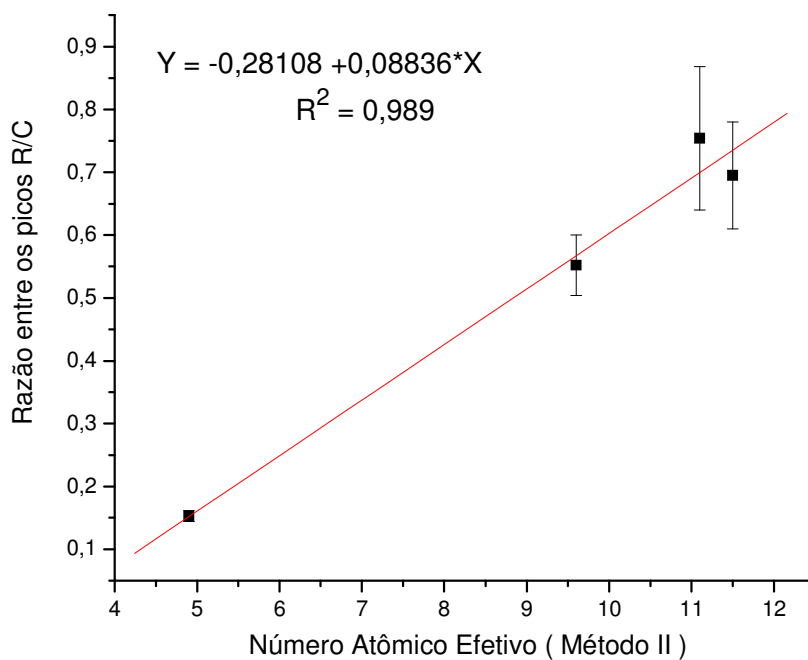


Figura A.23 – Ajuste de curva entre a razão R/C e o Z_{ef} (Método II – 15 keV).

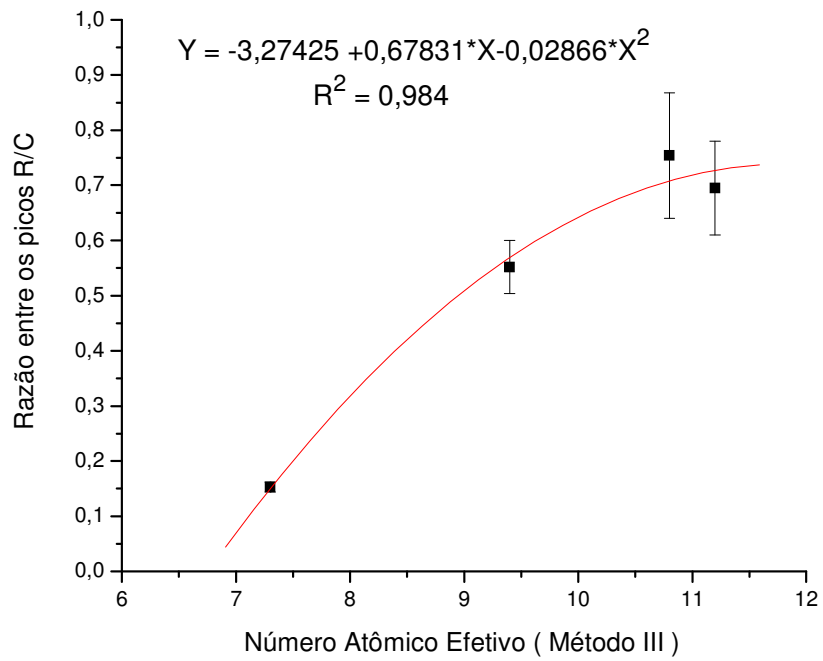


Figura A.24 – Ajuste de curva entre a razão R/C e o Z_{ef} (Método III – 15 keV).

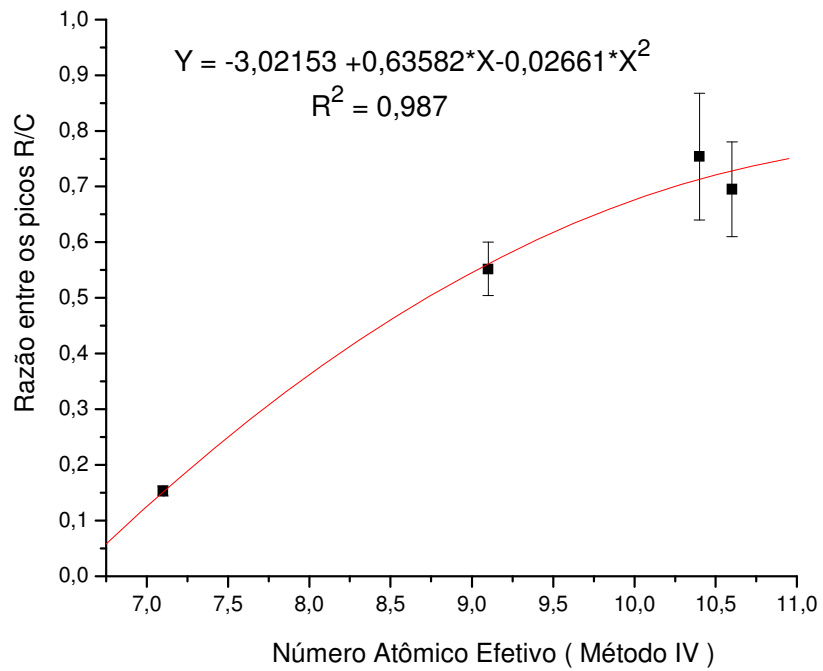


Figura A.25 – Ajuste de curva entre a razão R/C e o Z_{ef} (Método IV – 15 keV).

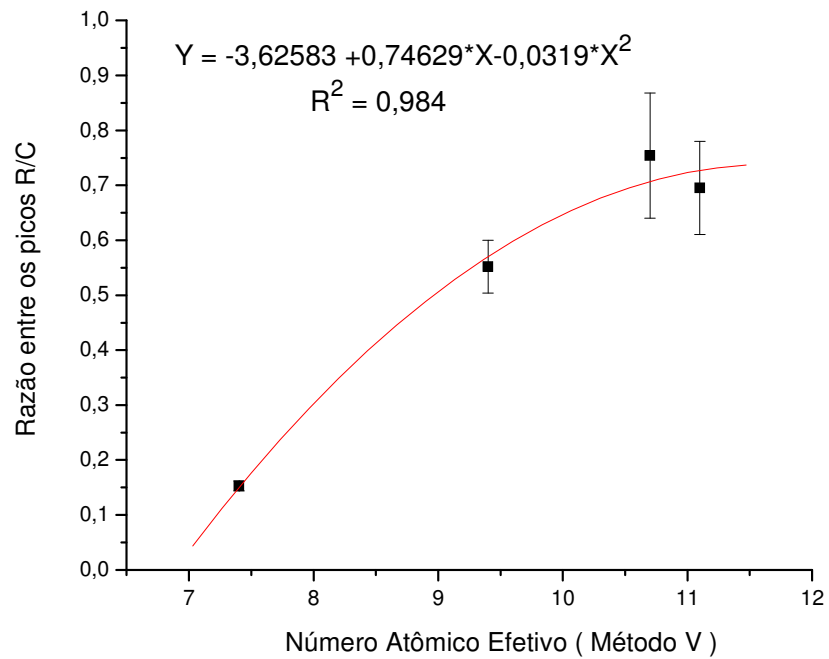


Figura A.26 – Ajuste de curva entre a razão R/C e o Z_{ef} (Método V – 15 keV).

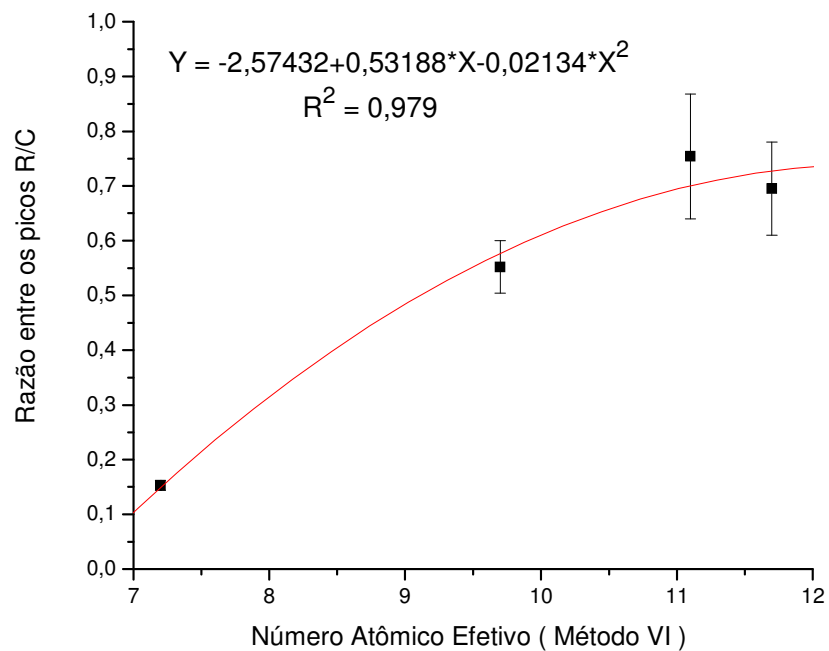


Figura A.27 – Ajuste de curva entre a razão R/C e o Z_{ef} (Método VI – 15 keV).

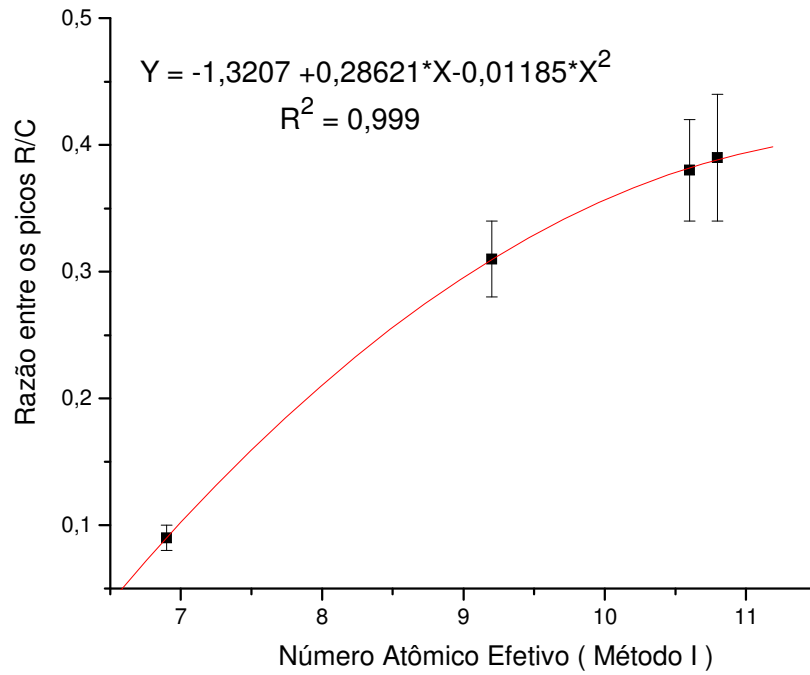


Figura A.28 – Ajuste de curva entre a razão R/C e o Z_{ef} (Método I – 20 keV).

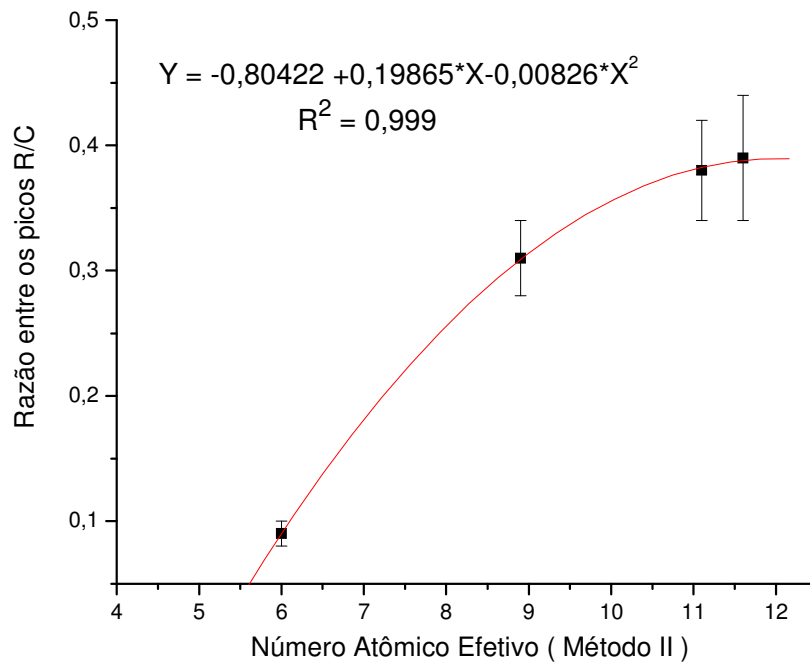


Figura A.29 – Ajuste de curva entre a razão R/C e o Z_{ef} (Método II – 20 keV).

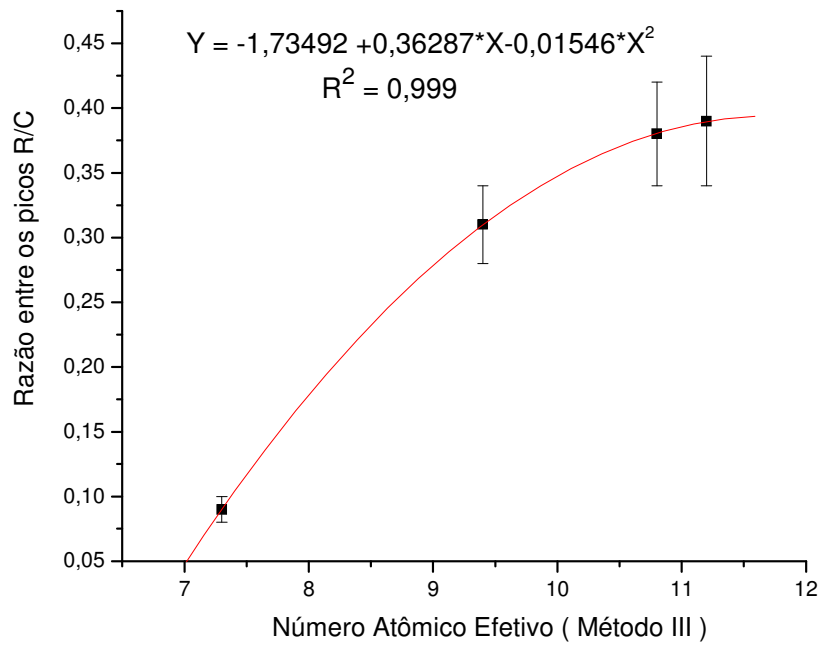


Figura A.30 – Ajuste de curva entre a razão R/C e o Z_{ef} (Método III – 20 keV).

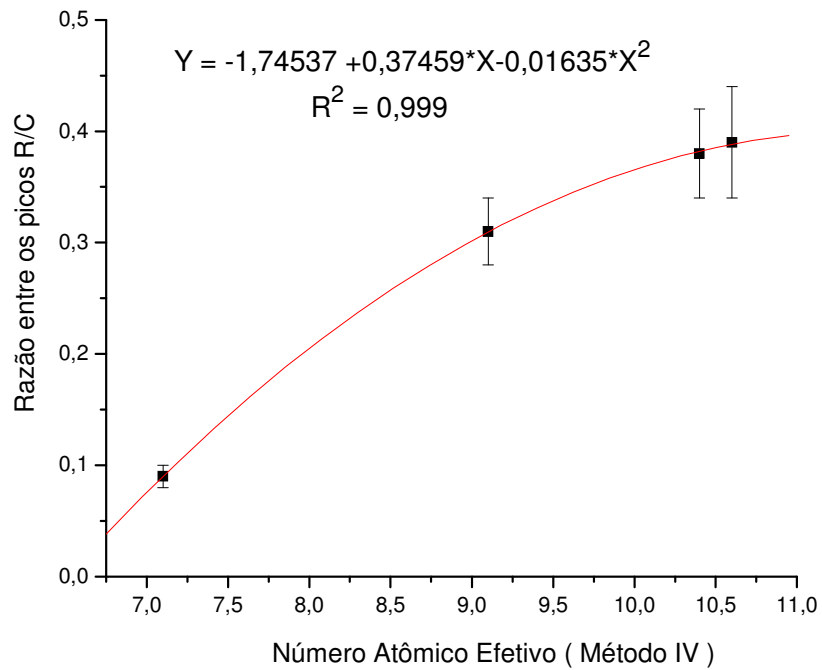


Figura A.31 – Ajuste de curva entre a razão R/C e o Z_{ef} (Método IV – 20 keV).

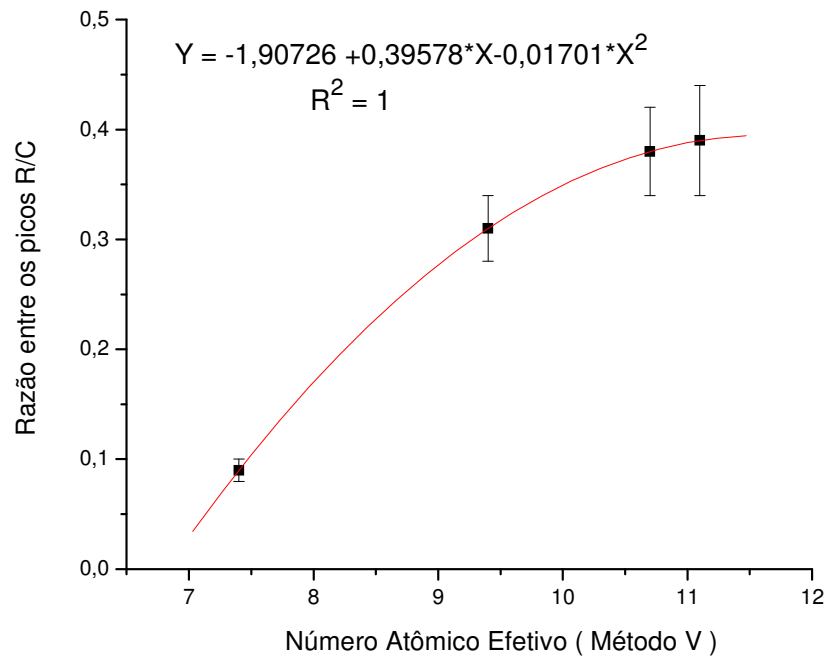


Figura A.32 – Ajuste de curva entre a razão R/C e o Z_{ef} (Método V – 20 keV).

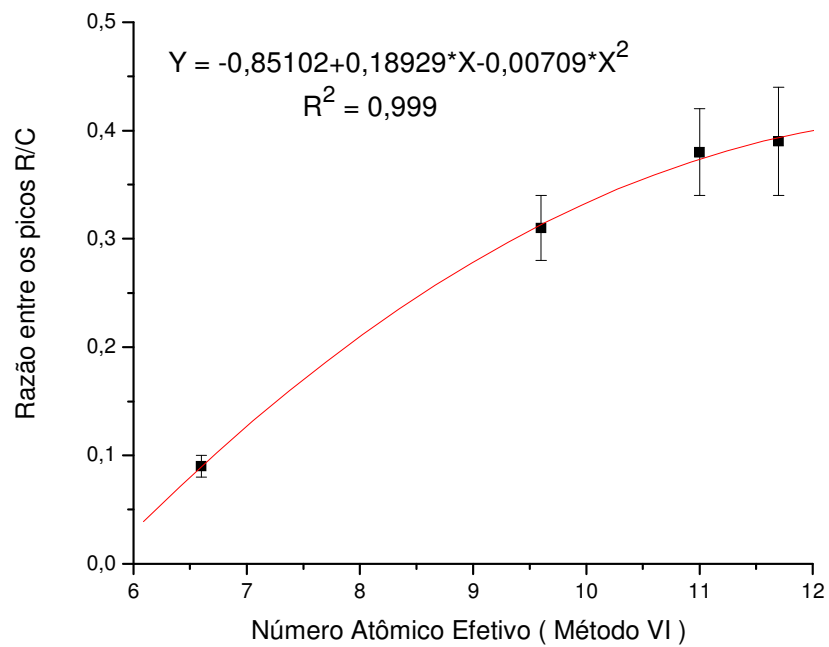


Figura A.33 – Ajuste de curva entre a razão R/C e o Z_{ef} (Método VI – 20 keV).

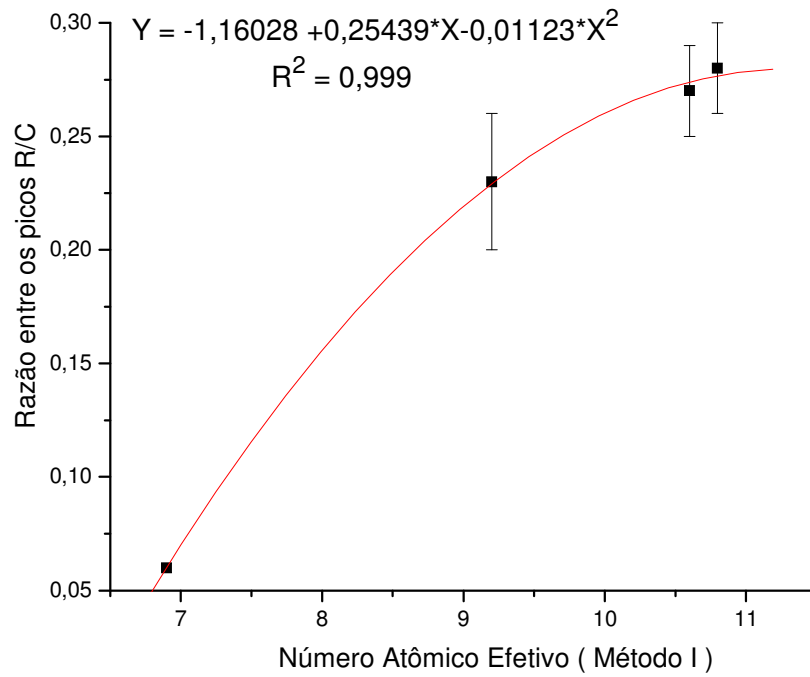


Figura A.34 – Ajuste de curva entre a razão R/C e o Z_{ef} (Método I – 25 keV).

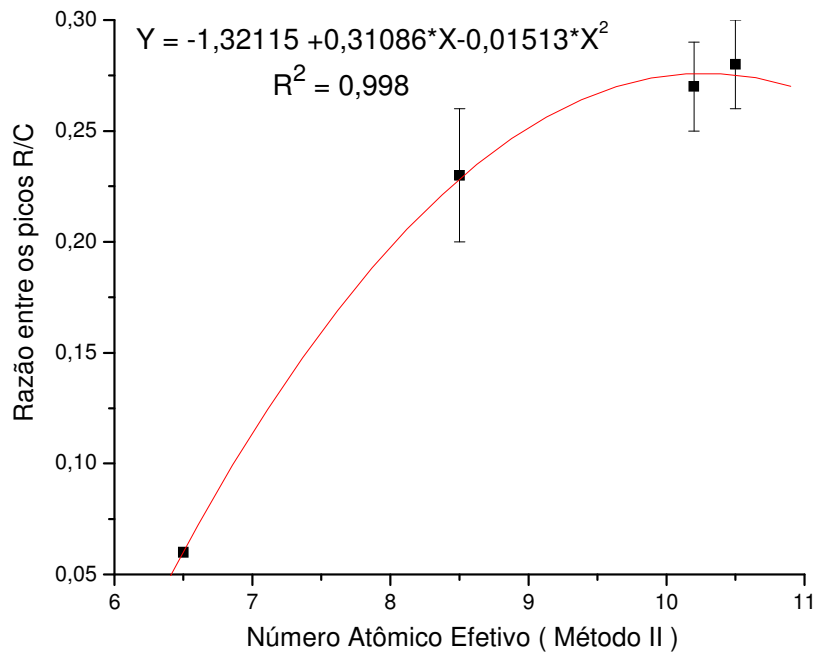


Figura A.35 – Ajuste de curva entre a razão R/C e o Z_{ef} (Método II – 25 keV).

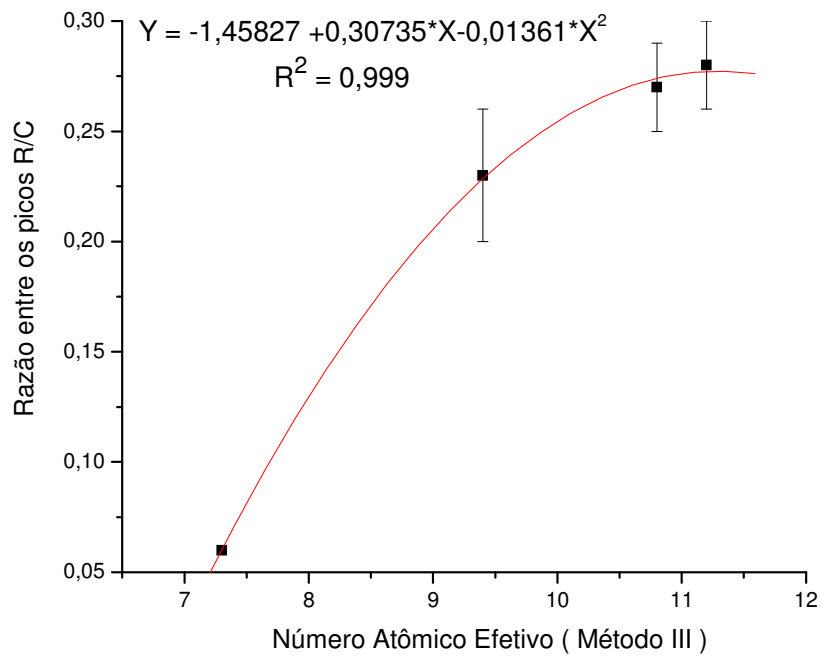


Figura A.36 – Ajuste de curva entre a razão R/C e o Z_{ef} (Método III – 25 keV).

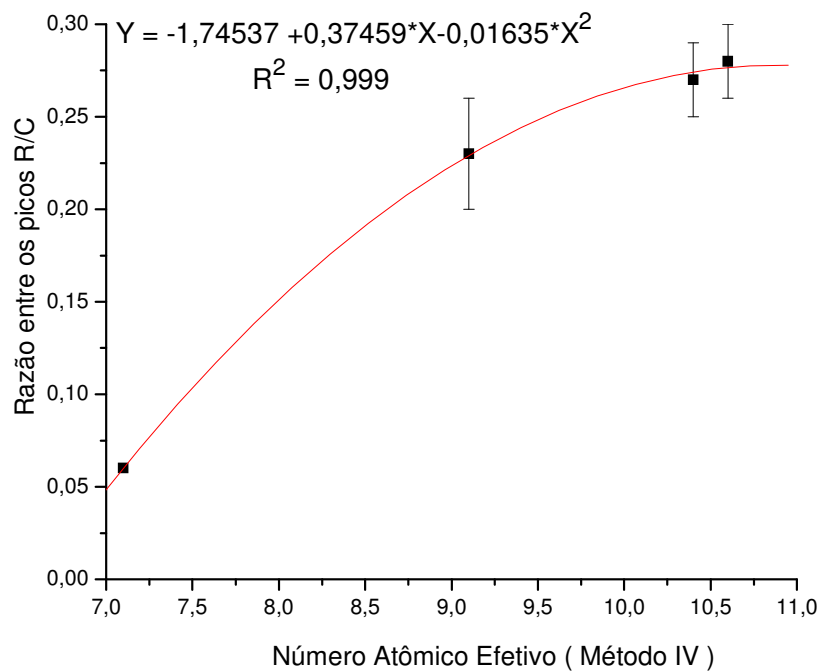


Figura A.37 – Ajuste de curva entre a razão R/C e o Z_{ef} (Método IV – 25 keV).

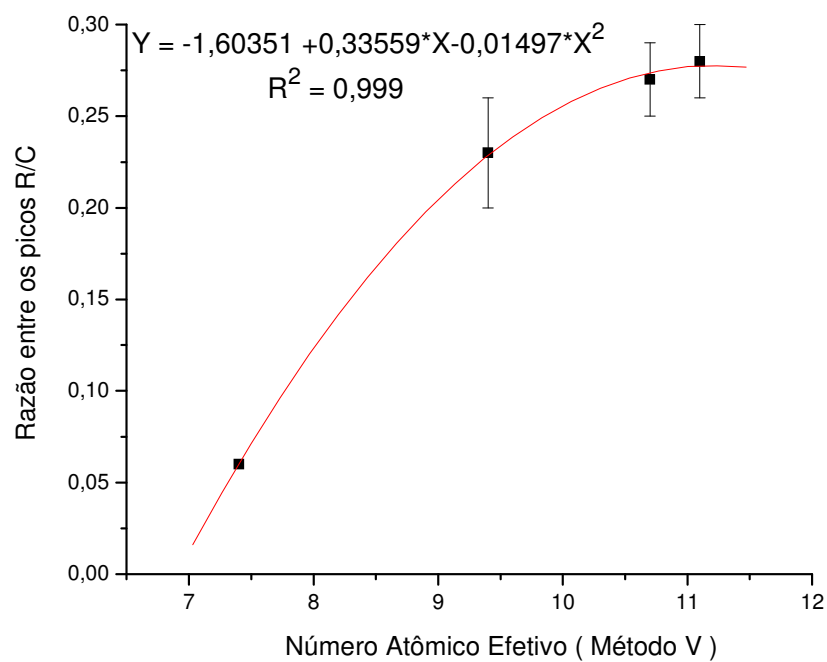


Figura A.38 – Ajuste de curva entre a razão R/C e o Z_{ef} (Método V – 25 keV).

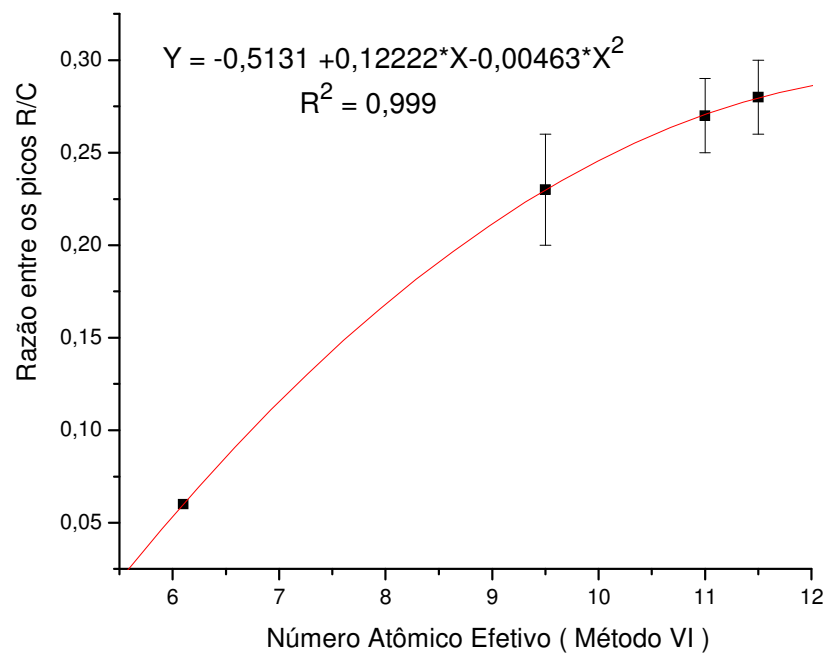


Figura A.39 – Ajuste de curva entre a razão R/C e o Z_{ef} (Método VI – 25 keV).

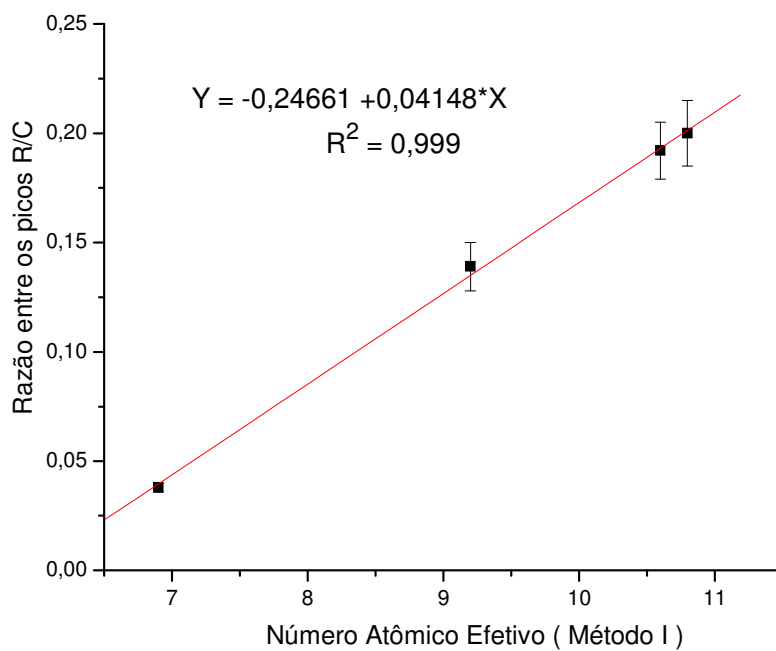


Figura A.40 – Ajuste de curva entre a razão R/C e o Z_{ef} (Método I – 30 keV).

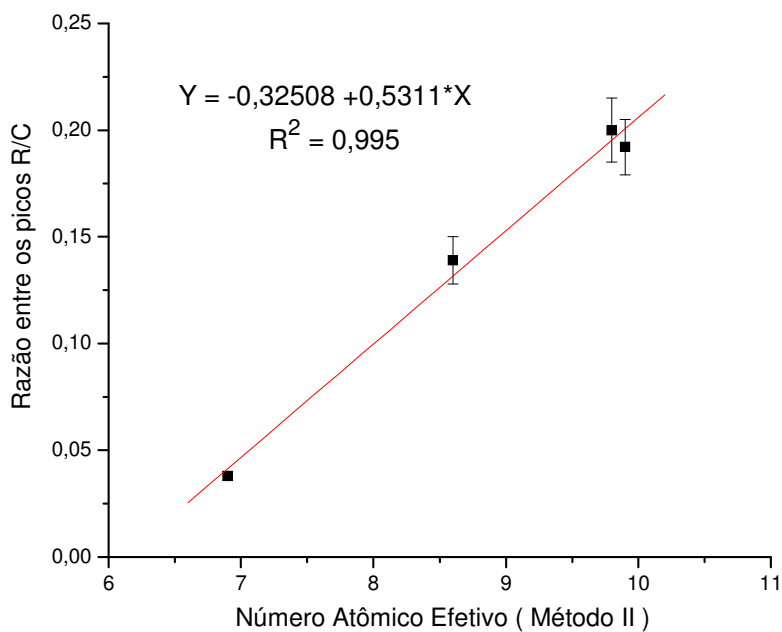


Figura A.41 – Ajuste de curva entre a razão R/C e o Z_{ef} (Método II – 30 keV).

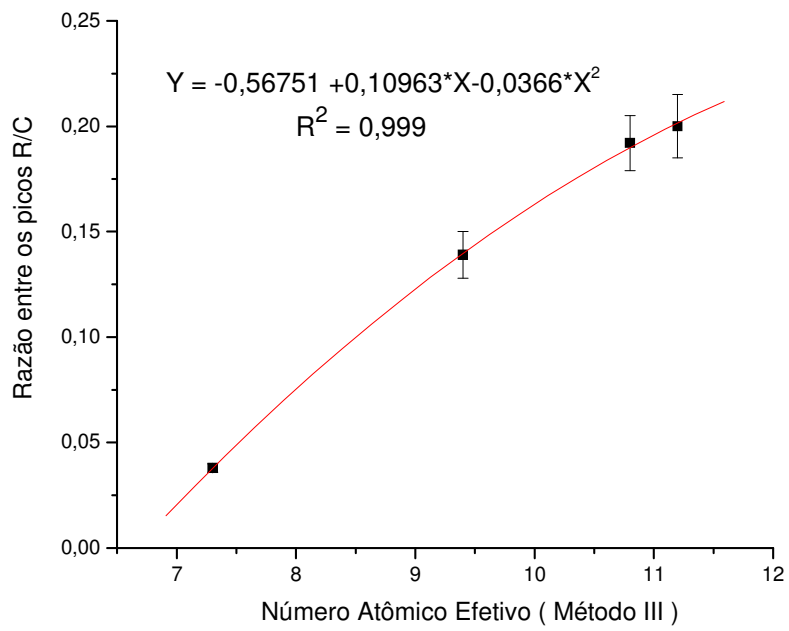


Figura A.42 – Ajuste de curva entre a razão R/C e o Z_{ef} (Método III – 30 keV).

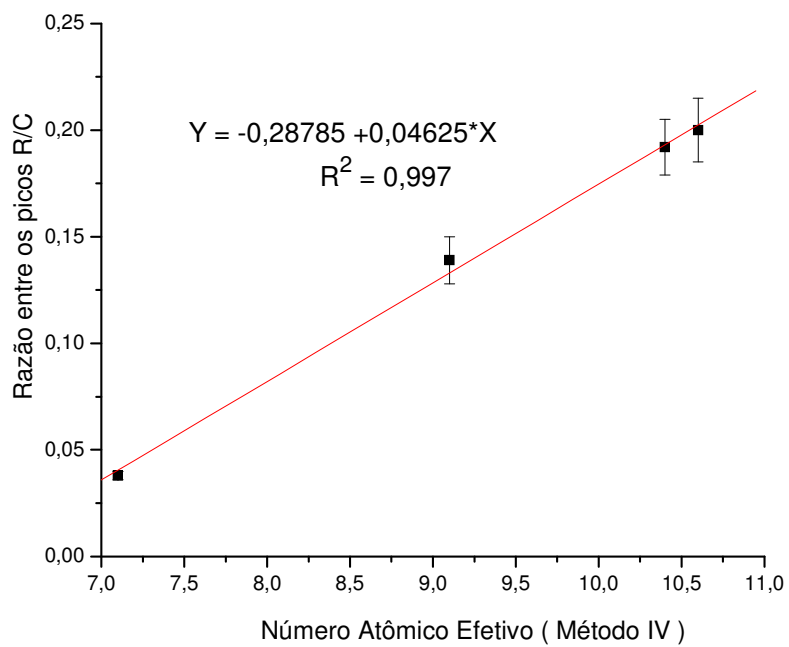


Figura A.43 – Ajuste de curva entre a razão R/C e o Z_{ef} (Método IV – 30 keV).

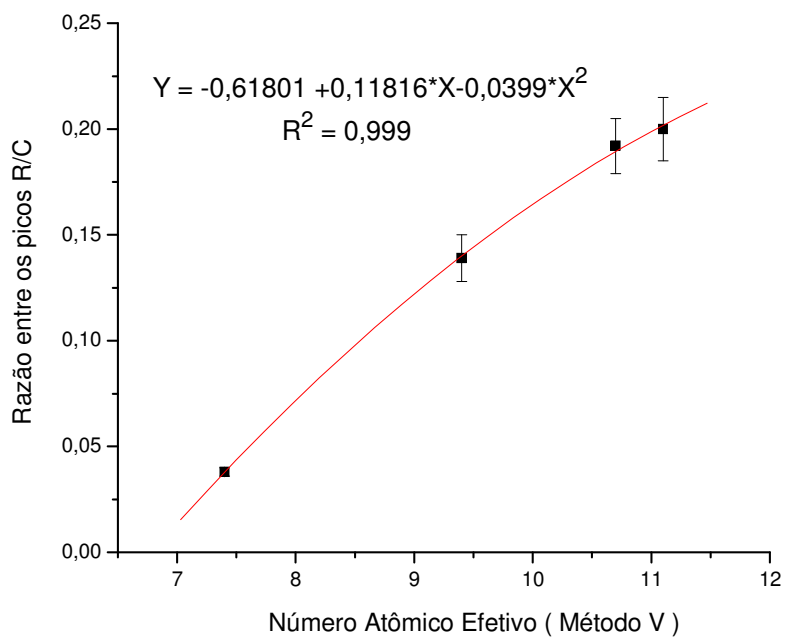


Figura A.44 – Ajuste de curva entre a razão R/C e o Z_{ef} (Método V – 30 keV).

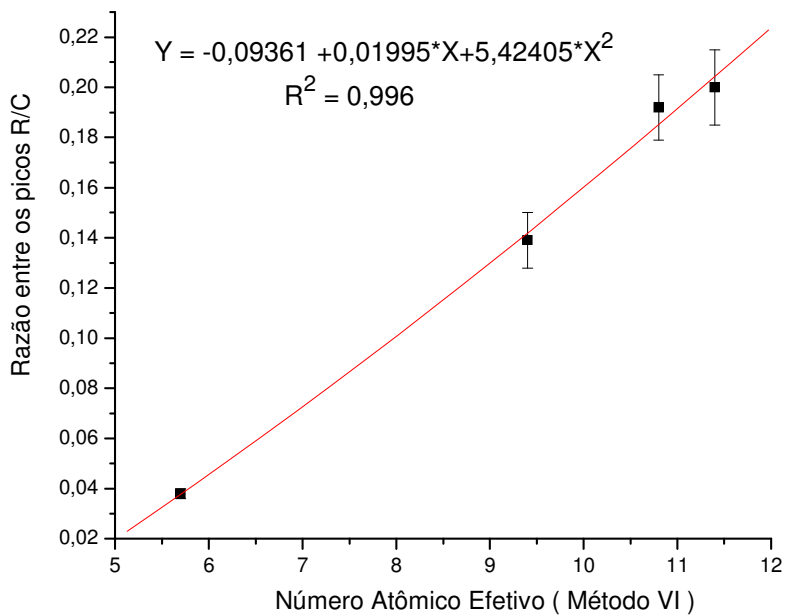


Figura A.45 – Ajuste de curva entre a razão R/C e o Z_{ef} (Método VI – 30 keV).

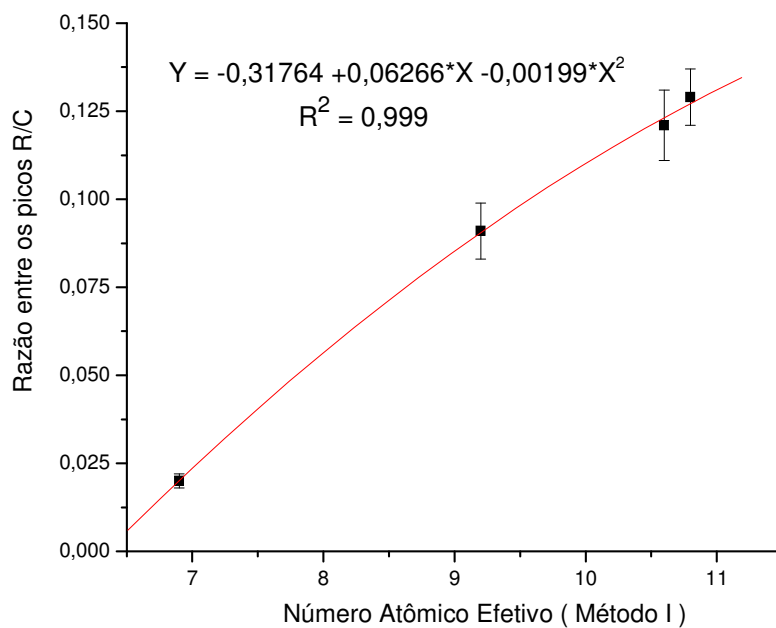


Figura A.46 – Ajuste de curva entre a razão R/C e o Z_{ef} (Método I – 35 keV).

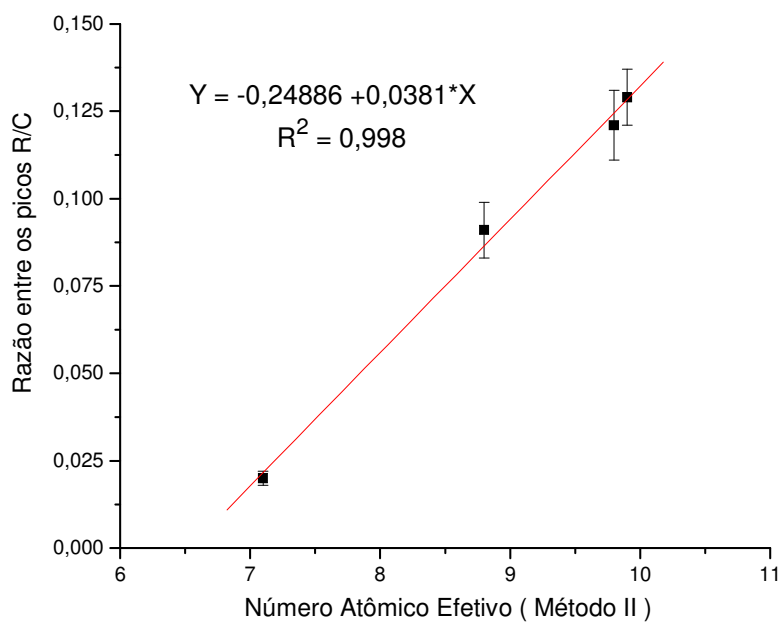


Figura A.47 – Ajuste de curva entre a razão R/C e o Z_{ef} (Método II – 35 keV).

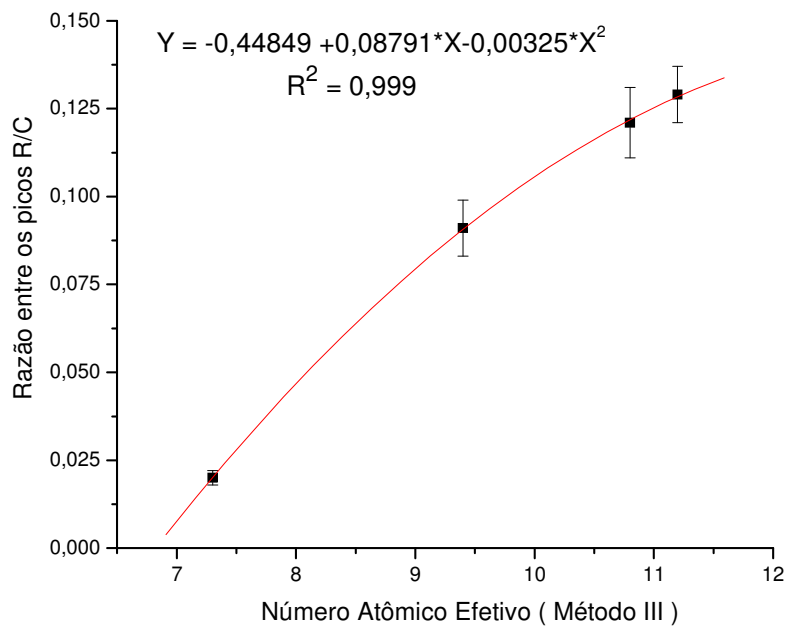


Figura A.48 – Ajuste de curva entre a razão R/C e o Z_{ef} (Método III – 35 keV).

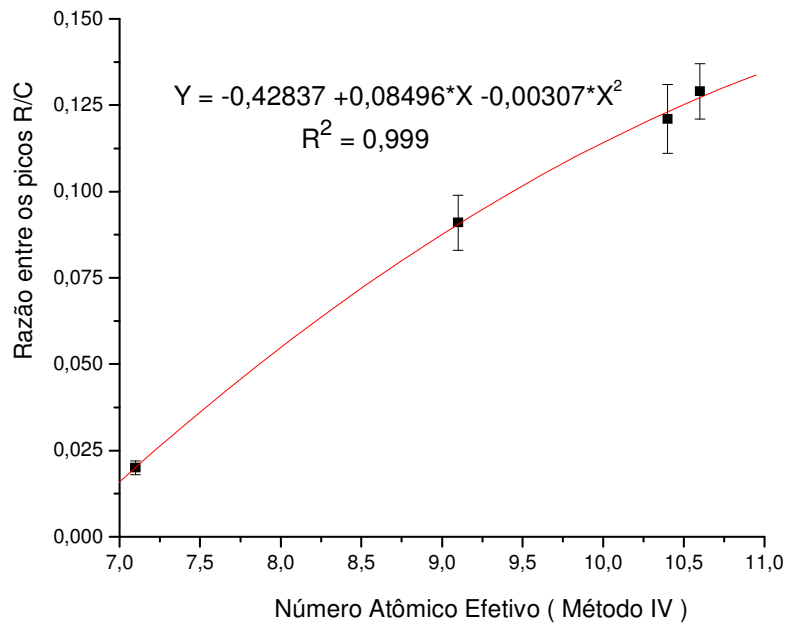


Figura A.49 – Ajuste de curva entre a razão R/C e o Z_{ef} (Método IV – 35 keV).

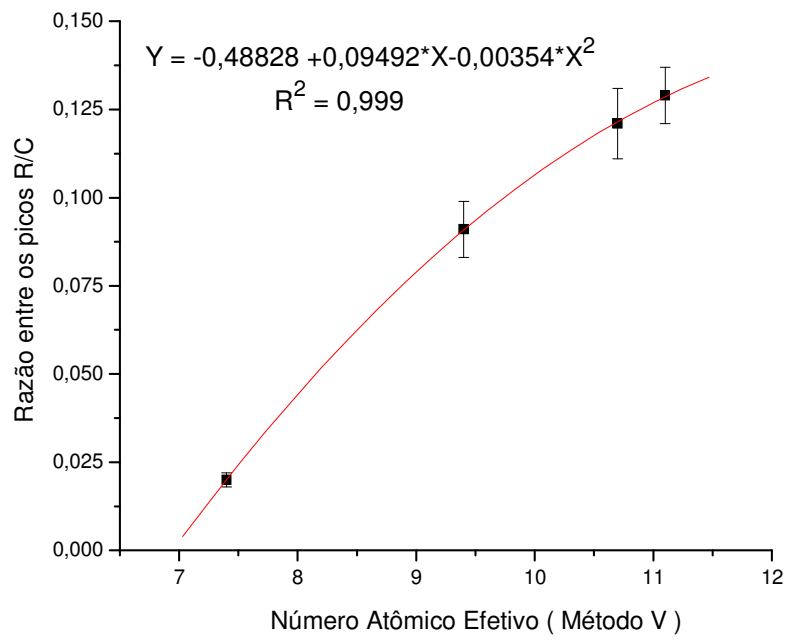


Figura A.50 – Ajuste de curva entre a razão R/C e o Z_{ef} (Método V – 35 keV).

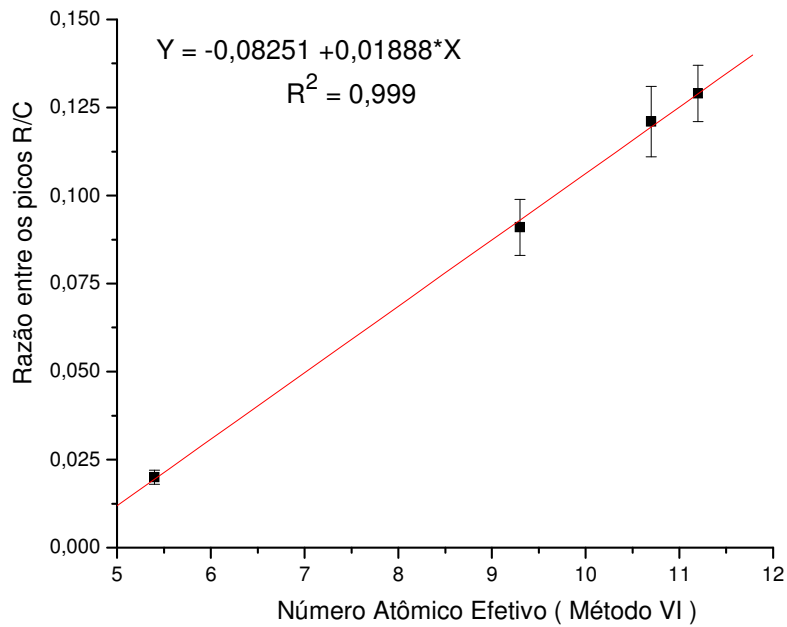


Figura A.51 – Ajuste de curva entre a razão R/C e o Z_{ef} (Método VI – 35 keV).

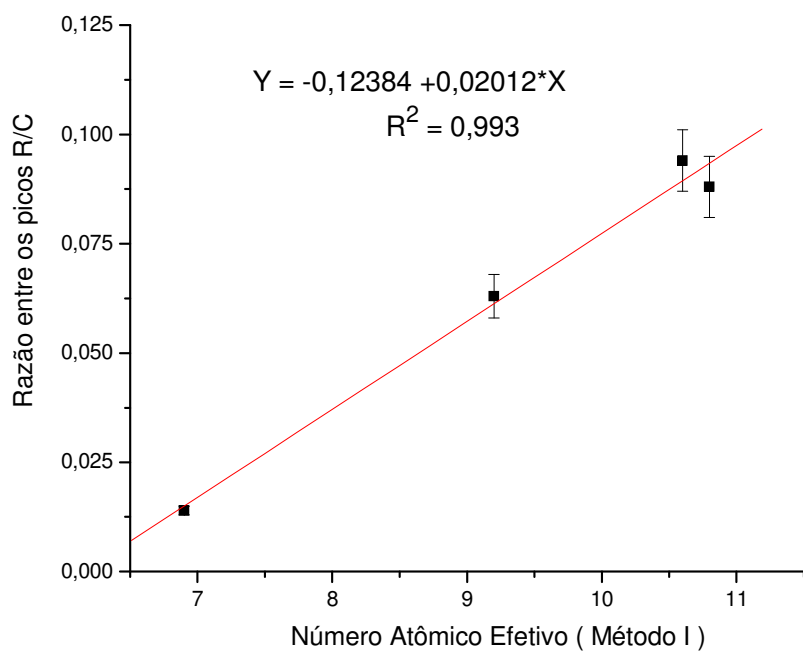


Figura A.52 – Ajuste de curva entre a razão R/C e o Z_{ef} (Método I – 40 keV).

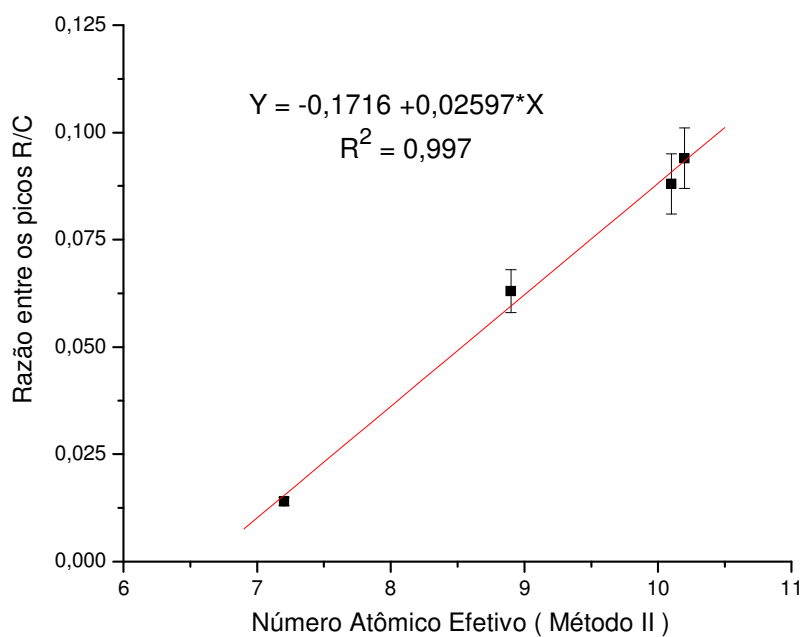


Figura A.53 – Ajuste de curva entre a razão R/C e o Z_{ef} (Método II – 40 keV).

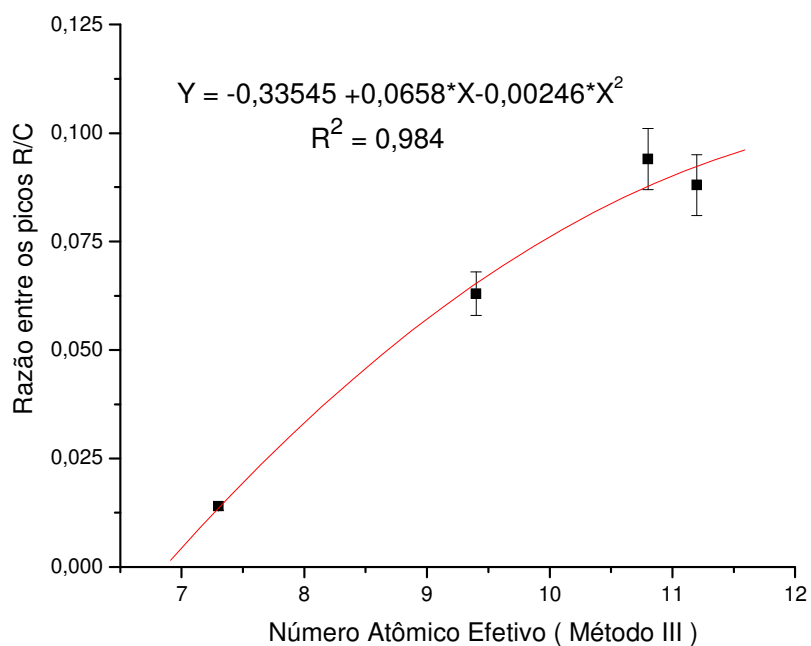


Figura A.54 – Ajuste de curva entre a razão R/C e o Z_{ef} (Método III – 40 keV).

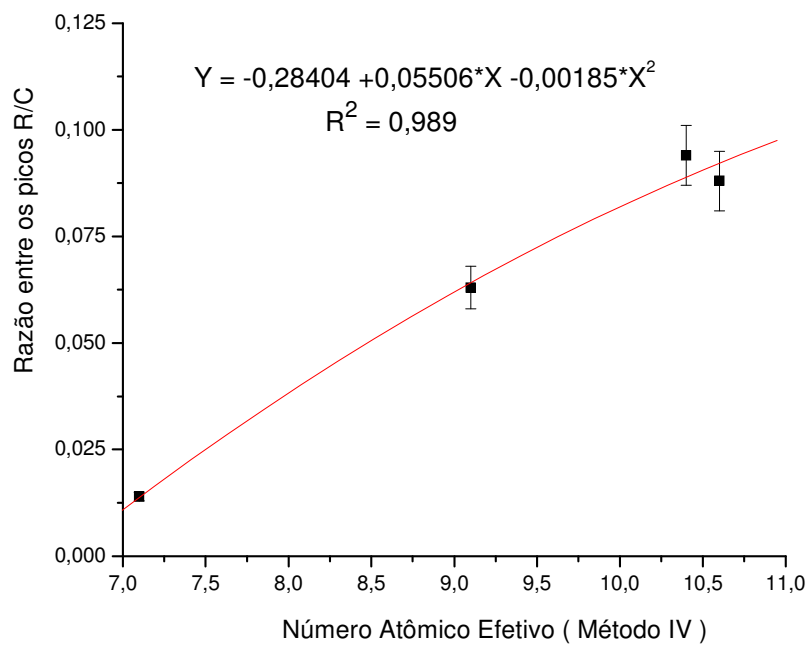


Figura A.55 – Ajuste de curva entre a razão R/C e o Z_{ef} (Método IV – 40 keV).

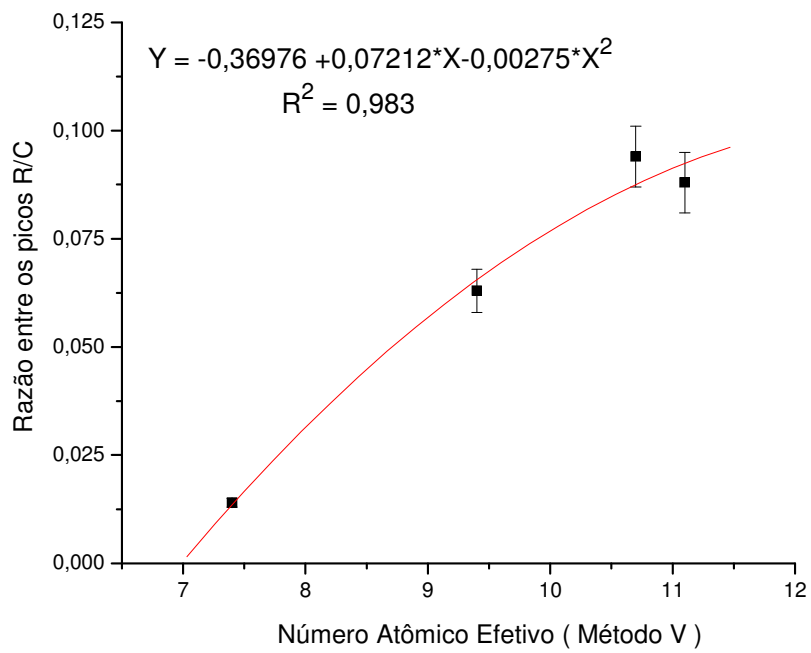


Figura A.56 – Ajuste de curva entre a razão R/C e o Z_{ef} (Método V – 40 keV).

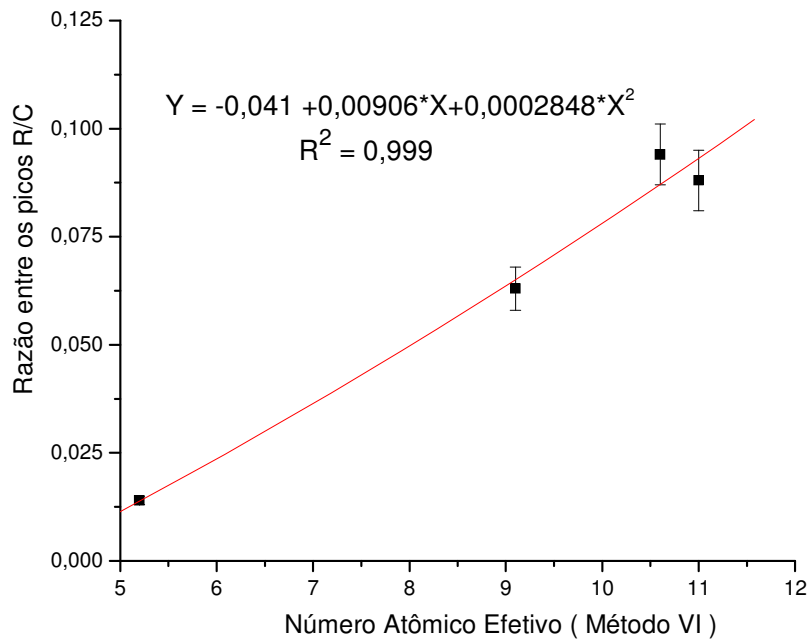


Figura A.57 – Ajuste de curva entre a razão R/C e o Z_{ef} (Método VI – 40 keV).

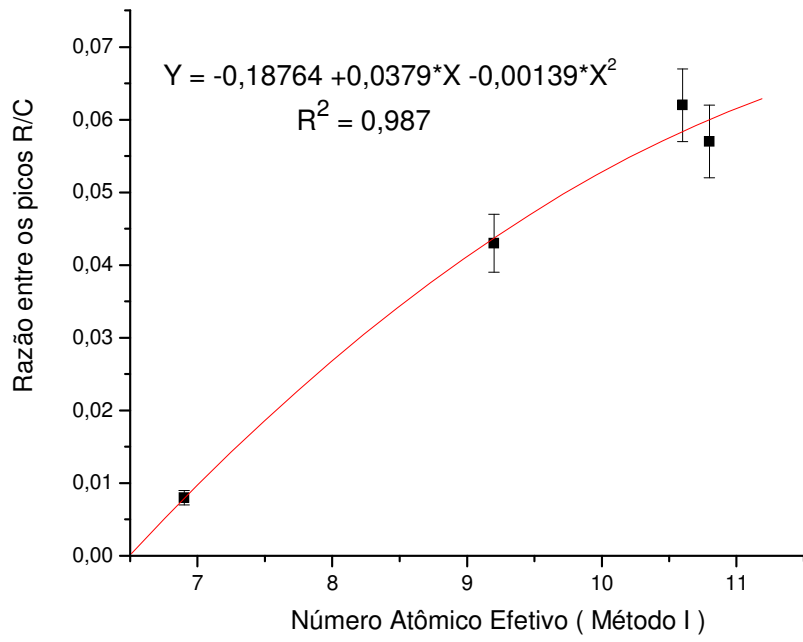


Figura A.58 – Ajuste de curva entre a razão R/C e o Z_{ef} (Método I – 45 keV).

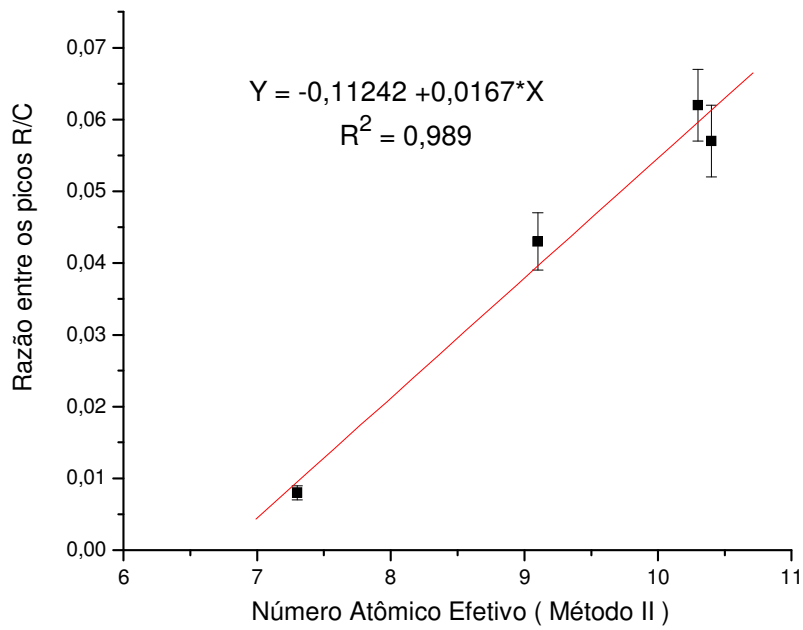


Figura A.59 – Ajuste de curva entre a razão R/C e o Z_{ef} (Método II – 45 keV).

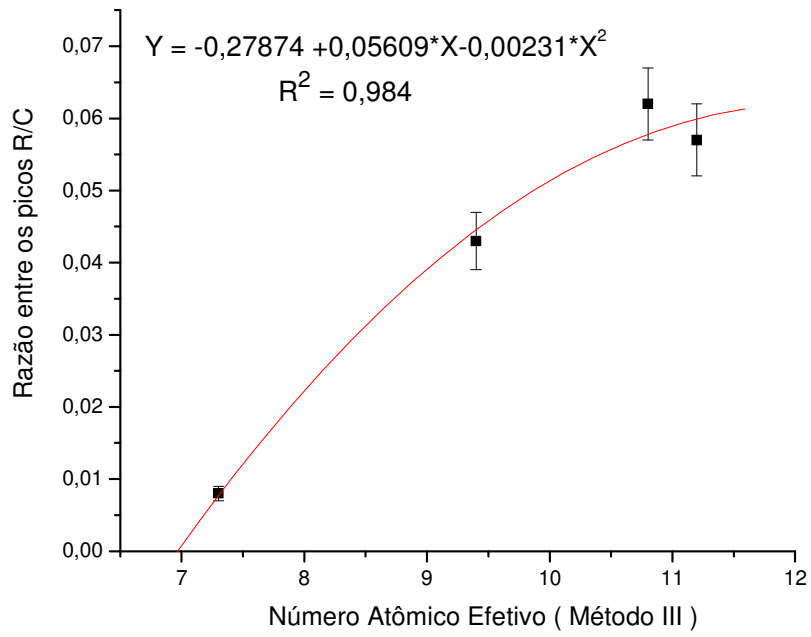


Figura A.60 – Ajuste de curva entre a razão R/C e o Z_{ef} (Método III – 45 keV).

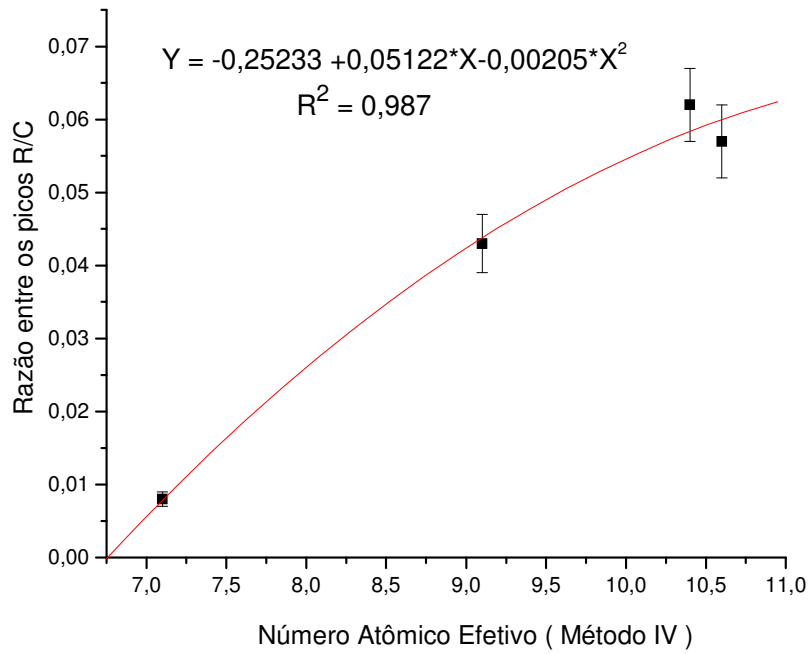


Figura A.61 – Ajuste de curva entre a razão R/C e o Z_{ef} (Método IV – 45 keV).

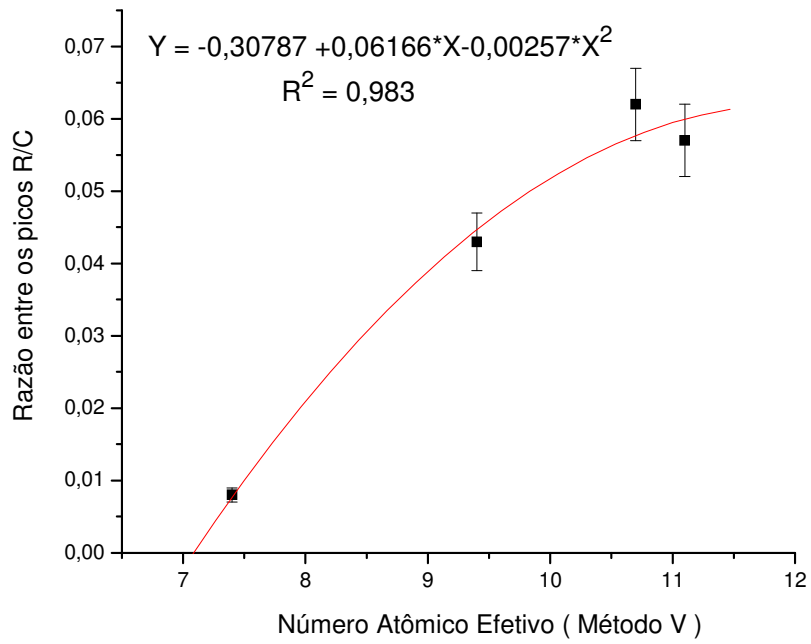


Figura A.62 – Ajuste de curva entre a razão R/C e o Z_{ef} (Método V – 45 keV).

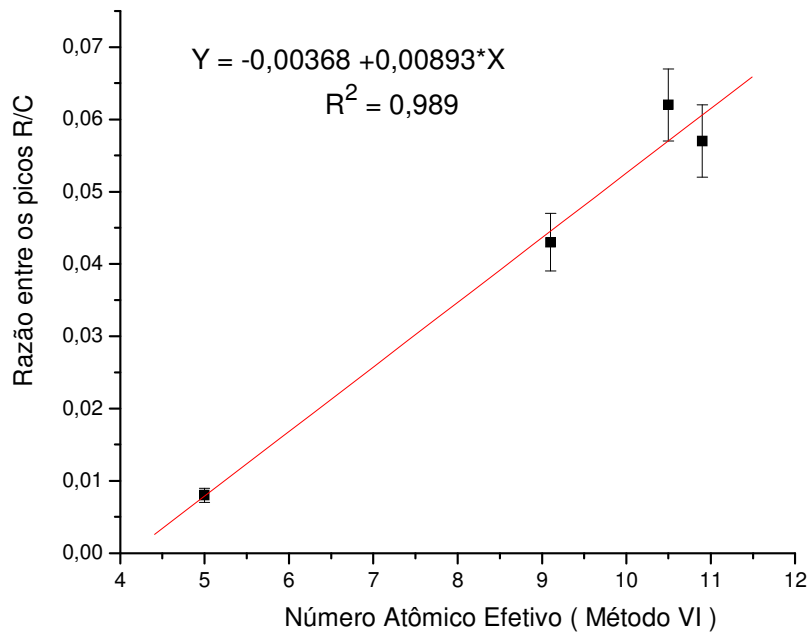


Figura A.63 – Ajuste de curva entre a razão R/C e o Z_{ef} (Método VI – 45 keV).

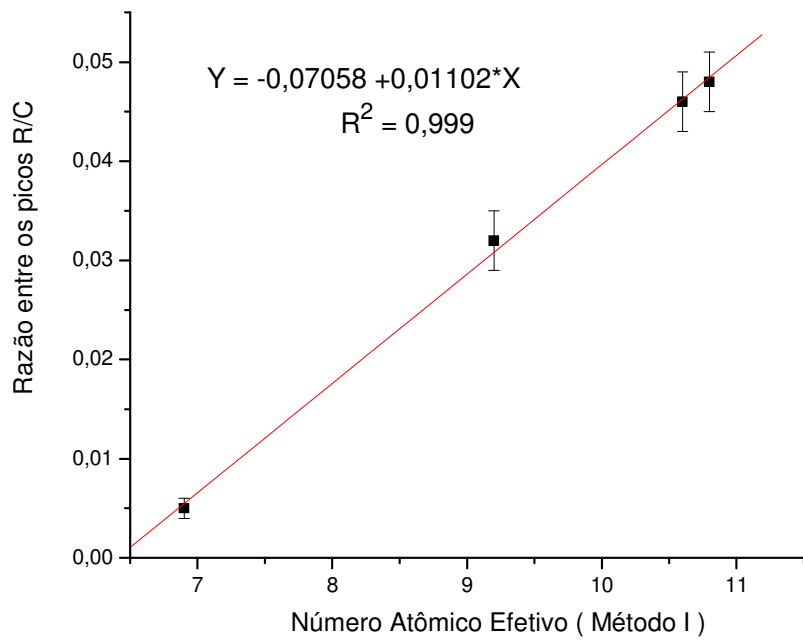


Figura A.64 – Ajuste de curva entre a razão R/C e o Z_{ef} (Método I – 50 keV).

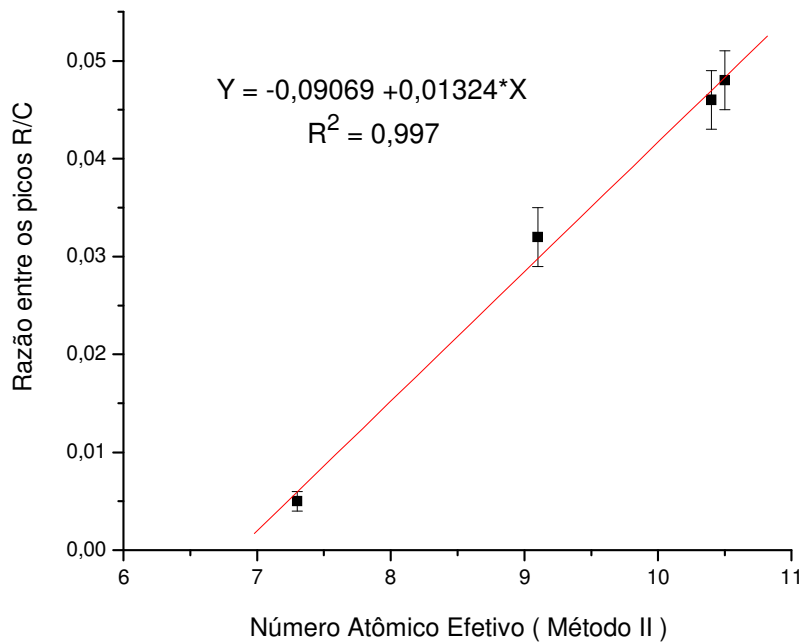


Figura A.65 – Ajuste de curva entre a razão R/C e o Z_{ef} (Método II – 50 keV).

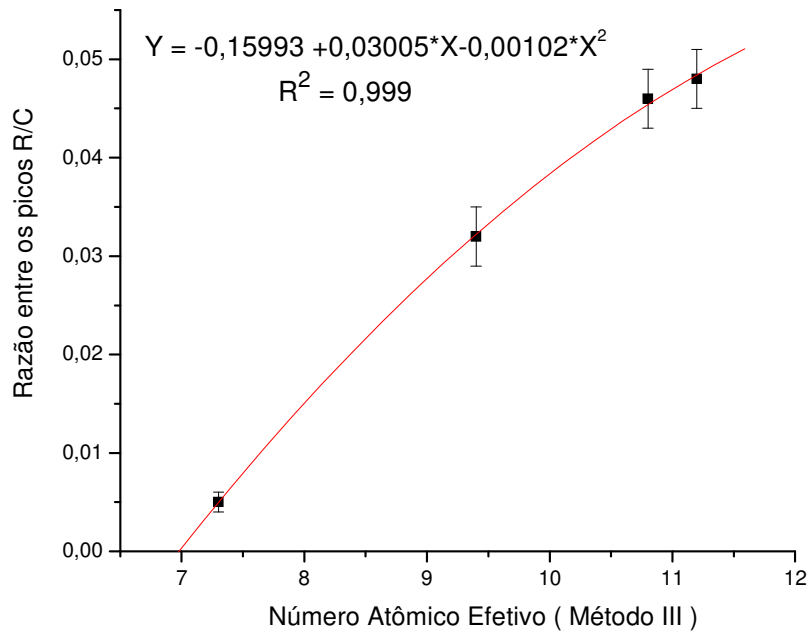


Figura A.66 – Ajuste de curva entre a razão R/C e o Z_{ef} (Método III – 50 keV).

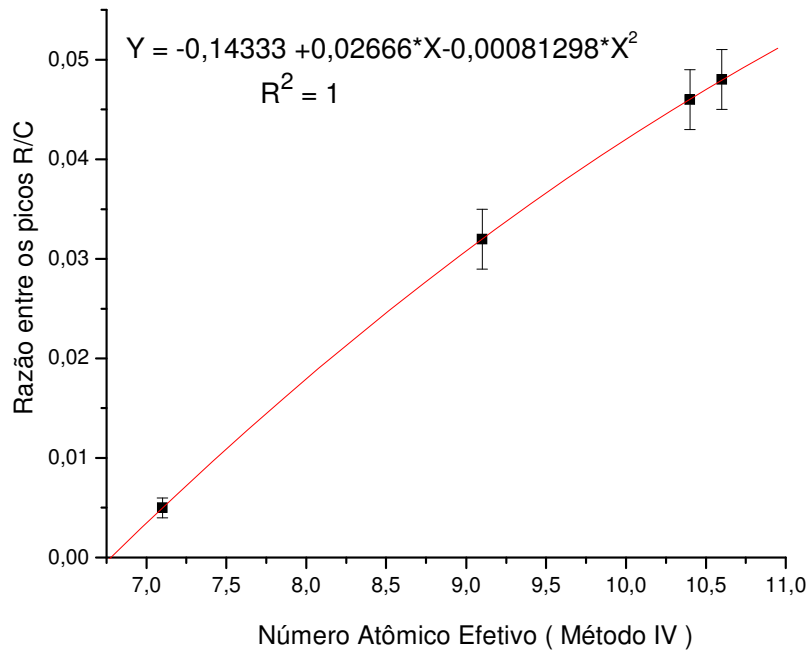


Figura A.67 – Ajuste de curva entre a razão R/C e o Z_{ef} (Método IV – 50 keV).

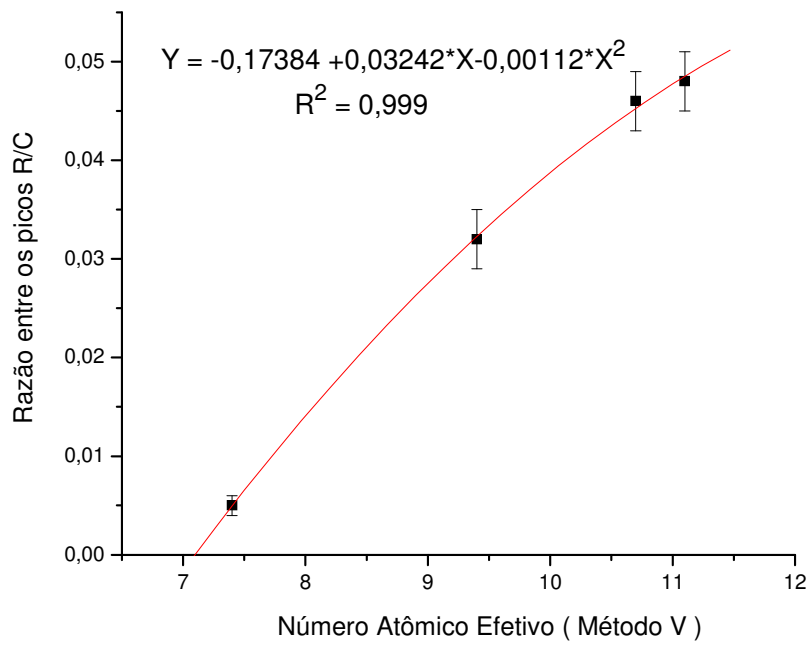


Figura A.68 – Ajuste de curva entre a razão R/C e o Z_{ef} (Método V – 50 keV).

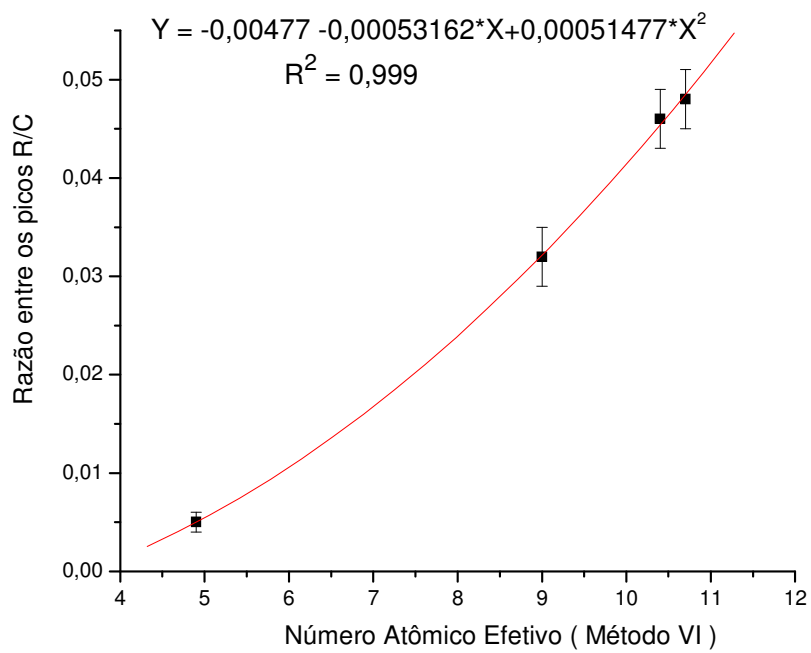


Figura A.69 – Ajuste de curva entre a razão R/C e o Z_{ef} (Método VI – 50 keV).