

UNIVERSIDADE DE LISBOA

FACULDADE DE CIÊNCIAS

DEPARTAMENTO DE FÍSICA



**CONTRIBUTO PARA UM SISTEMA DE AUTOMAÇÃO E ROBÓTICA NA FONTE
EXPERIMENTAL DE ^{60}Co /ITN – DISTRIBUIÇÃO DE DOSE POR SIMULAÇÃO
MONTE CARLO E SUA VALIDAÇÃO POR DOSIMETRIA FÍSICA E QUÍMICA**

ANA LÚCIA VITAL BELCHIOR

TESE ORIENTADA POR: Professor Doutor Luís Filipe dos Santos Garcia Peralta
Professor Auxiliar com Agregação
Faculdade de Ciências da Universidade de Lisboa

Doutor José Pedro Vaz
Investigador Principal
Instituto Tecnológico e Nuclear

**MESTRADO EM ENGENHARIA FÍSICA
ESPECIALIZAÇÃO EM FÍSICA NUCLEAR APLICADA
(2007)**

Este trabalho inclui resultados apresentados em publicações, nomeadamente:

Artigos em revistas com arbitragem científica

Belchior, A. Vaz, P.; Botelho, M.L.. (2006) Monte Carlo Simulation and Dosimetric Studies of an Irradiation Facility. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A journal, volume 580, issue 1 pp. 70-72, 2006.

Trabalhos apresentados em conferências

Belchior, A. Vaz, P. Botelho, M.L.. Monte Carlo Simulation and Dosimetric Studies of an Irradiation Facility. Trabalho apresentado em painel no 10th International Symposium on Radiation Physics, 17-22 September, 2006, Coimbra, Portugal.

Comunicações orais por convite

“Status of Irradiation processes in Portugal” Regional Training Course on Economical and Social Benefit of Radiation Processing; Standardization and Legislation Issues Regarding Radiation Processing Implementation in Europe, **Eger, Hungary**, 27 August – 1 September 2006

“Technical Feasibility – Studies for applying a lab scale treatment of wastewater by gamma radiation: Monte Carlo simulation and dosimetric studies”, *Workshop* “The Plant Treatment Challenges of Wastewater From Agriculture and Industry”, **Santarém, Portugal** 11 and 12 May, 2006. Organização e Participação.

Para os efeitos do disposto no nº 2 do Art. 8º do Decreto de Lei 388/70, o autor da dissertação declara que interveio na concepção e execução do trabalho experimental, na interpretação dos resultados e na redacção dos manuscritos enviados para publicação.

Lisboa, Setembro de 2007

***Aos homens da minha vida,
Francisco e Pedro***

AGRADECIMENTOS

O homem sábio é aquele que não se entristece com as coisas que não tem, mas rejubila com as que tem. Epícteto.

O meu sincero agradecimento.

Aos meus orientadores, Prof. Luís Peralta e Prof. Pedro Vaz, por tudo o que me ensinaram, pelas críticas, sugestões e incondicional apoio.

À minha “chefe” Dra. Luísa Botelho, por todo o incondicional apoio durante a execução deste trabalho, presença nas horas boas e más, amizade, e sobretudo por cruzar sempre os dedos cientificamente, de modo a que todas nós alcancemos os nossos sonhos.

Às minhas *babes*, simplesmente por serem como são... e tornarem cada dia ainda mais especial que o anterior... Ana Luísa Alves, Carla Santos, Helena Marcos, Paula Matos, Sandra Cabo Verde, Rita Melo e Telma Silva.

Ao Dr. João Alves e à colega Ana Cardoso, pelo seu constante interesse, ensinamento e ajuda na leitura dos dosímetros TLD.

Aos meus pais, pela sua presença e inesgotável apoio ao longo de todos os anos da minha vida, e por me terem ensinado a lutar pelos meus objectivos. *Gosto de vocês até ao céu da rua...*

Finalmente, não sendo de forma alguma os menos importantes para mim, quero agradecer ao Pedro e ao Francisco todo o carinho, compreensão e inesgotável apoio. Embora o Francisco só vá conseguir entender o que está escrito nesta tese daqui a uns aninhos, e que diga que vai para a escola aprender a fazer *robots* (concorrência ☺) dedico-lhe cada palavra desta tese.

Índice

RESUMO.....	VII
ABSTRACT.....	IX
ÍNDICE DE FIGURAS.....	XI
ÍNDICE DE TABELAS.....	XV
CAPÍTULO I.....	1
INTRODUÇÃO.....	1
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....	5
CAPITULO II.....	9
II.1 Interacção da radiação electromagnética com a matéria.....	9
II.1.1 Dispersão de Rayleigh.....	10
II.1.2 - Efeito fotoeléctrico.....	10
II.1.3 - Dispersão de Compton.....	12
II.1.4 - Produção de Pares.....	14
II.2 - Atenuação de uma fonte de radiação.....	15
II.2.1 Coeficientes de Atenuação.....	17
II.3 - Interacção de um feixe de electrões com a matéria.....	19
II.3.1 - Colisões inelásticas com os electrões atómicos.....	19
II.3.2 Produção de electrões delta (δ).....	21
II.3.3 “Bremsstrahlung” – Colisões inelásticas com os núcleos.....	22
II.3.4 Dispersão elástica.....	23
II.4 Poder de paragem dos electrões e positrões.....	24
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....	29
III MÉTODOS DE MONTE CARLO.....	33
III.1 Modelos analógo e não – analógo.....	34
III.2 Transporte de fotões.....	36
III.3 O código MCNPX.....	38
III.3.1 Transporte de electrões.....	38
III.3.2 Passos e sub-passos dos electrões.....	38
III.3.3 Energia.....	39
III.3.4 Ângulos de deflexão.....	41
III.3.5 Radiação de travagem e raio delta (δ).....	42
III.4 Estrutura do programa MCNPX.....	43
III.4.1 Tallies.....	44
III.4.2 A Tally F6.....	45
III.5 Código PENELOPE.....	46
III.5.1 Dispersão elástica.....	47
III.5.2 Dispersão inelástica.....	47
III.5.3 Radiação de Travagem.....	48
III.5.4 Mecanismo de transporte.....	48
III.6 Estrutura do código PENELOPE.....	51
III.6.1 Programa principal – Penmain.....	52
III.7 Incertezas estatísticas no Monte Carlo.....	56
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....	58
IV SISTEMAS DOSIMÉTRICOS.....	63

IV.1	Descrição de um feixe de radiação.....	63
IV.1.1	Fluência de partículas (Φ)	63
IV.1.2	Taxa de fluência de partículas (ϕ) – “fluxo”	64
IV.1.3	Fluência energética (ψ).....	64
IV.1.4	Taxa de fluência energética (ϕ)	64
IV.2	Grandezas dosimétricas fundamentais	65
IV.2.1	KERMA (K).....	65
IV.2.2	Dose absorvida (D)	67
IV.2.3	Dose equivalente (H)	68
IV.2.4	Dose efectiva (E).....	69
IV.2.5	Exposição (X).....	69
IV.3	Sistemas dosimetricos	70
IV.3.1	Dosimetria química	72
IV.3.1.1	Solução de Fricke	72
IV.3.1.2	Mecanismo da reacção.....	73
IV.3.1.3	Cálculo da dose absorvida.....	73
IV.3.1.4	Vantagens / Desvantagens.....	74
IV.3.2	Dosímetro de termoluminescência (TLD)	75
IV.3.2.1	Fundamentos teóricos	75
IV.3.2.2	Luminescência	77
IV.3.2.3	Fosforescência.....	77
IV.3.3	Medida da luz termoluminescente	78
IV.3.3.1	Tipos de cristal	80
IV.3.3.1.1	O fluoreto de Lítio, LiF:Mg, Ti	80
IV.3.3.1.1.1	Linearidade	81
IV.3.3.1.1.2	Sensibilidade	82
IV.3.3.1.1.3	Tratamentos térmicos	82
IV.3.3.1.1.4	Fading.....	83
IV.3.3.1.1.5	Características específicas para a utilização dos TLD	84
IV.3.4	Vantagens em comparação com outros sistemas dosimétricos.....	84
	Referências Bibliográficas.....	87
	CAPITULO V.....	89
V	O DISPOSITIVO EXPERIMENTAL E SUA SIMULAÇÃO.....	89
V.1	O isótopo ^{60}Co	89
V.2	A unidade de irradiação (Precisa 22 ML)	90
V.3	Metodologia utilizada para o desenvolvimento da simulação	92
V.3.1	Parâmetros da simulação	93
V.3.1.1	Descrição da geometria	93
V.3.1.2	Descrição da fonte e Energia	94
V.3.1.3	Descrição dos materiais.....	94
V.4	Metodologia utilizada para a validação	95
V.4.1	Solução de Fricke.....	96
V.4.2	Dosímetros termoluminescentes (TLD)	97
	CAPITULO VI	99
VI	RESULTADOS EXPERIMENTAIS E COMPUTACIONAIS.....	99
VI.1	Cálculo da distribuição de dose	99
VI.2	Resultados obtidos com uma fonte.....	103

VI.2.1	Nível 1 (1 fonte).....	104
VI.2.2	Nível 2 (1 fonte)	105
VI.3	Resultados obtidos com duas fontes	107
VI.3.1	Nível 1 (2 fontes).....	108
VI.3.2	Nível 2 (2 fontes)	109
VI.3.3	Nível 3 (2 fontes)	111
VI.4	Intercomparação dos valores de débitos de dose obtidos com os três sistemas dosimétricos	113
VI.4.1	Análise dos resultados obtidos com uma fonte.....	113
VI.4.1.1	1º Nível (1 fonte)	114
VI.4.2	2º Nível (1 fonte).....	118
VI.4.3	Análise dos resultados obtidos com Duas Fontes.....	120
VI.4.3.1	1º Nível (2 fontes)	120
VI.4.3.2	2º Nível (2 fontes).....	123
VI.4.3.3	3º Nível (3 fontes).....	126
	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....	130
	CAPITULO VII.....	131
	CONSIDERAÇÕES FINAIS.....	131
	ANEXOS	135
	MATERIAL E EQUIPAMENTO	138
	PROCEDIMENTO EXPERIMENTAL.....	138

II

RESUMO

O objectivo do trabalho desenvolvido é a elaboração, utilizando métodos de Monte Carlo e dosimetria de referência para validação dos resultados obtidos por simulação, de um mapeamento de taxas de dose numa câmara de irradiação com duas fontes radioactivas de Cobalto-60, modelo *PRECISA 22 ML*, em operação no *campus* do ITN. Este trabalho está inserido e foi desenvolvido no âmbito de um projecto de re-equipamento (ref^a REEQ/996/BIO/2005) e pretende dar um contributo para o sistema de automação e robótica a implementar com o objectivo de se alcançar uma maior rentabilidade na utilização da unidade experimental de cobalto-60 e permitir a interacção por controlo remoto e em tempo real entre o utilizador e a amostra a irradiar, sendo esta interacção de grande utilidade em estudos de materiais e biológicos. Porém, todo este sistema não poderá funcionar sem o estudo prévio de geometrias de irradiação, e conseqüentemente da uniformidade da dose ao longo das diferentes geometrias. Como tal, o trabalho aqui apresentado irá permitir não só elaborar um estudo comparativo de três sistemas dosimétricos, como *inclusive* irá ser crucial no projecto em desenvolvimento, nomeadamente na determinação das taxas de dose dentro da câmara de irradiação. Os sistemas dosimétricos são os programas de simulação MCNPX e PENELOPE, a solução de Fricke e os dosímetros de termoluminescência.

Usando os programas de simulação por métodos de Monte Carlo MCNPX e PENELOPE, ambos representativos do estado da arte computacional em Física das Radiações, efectuou-se o mapeamento de taxas de dose da câmara de irradiação. Tendo em vista, a utilização futura da unidade experimental de cobalto-60, nomeadamente, em tratamento de efluentes utilizando radiação fotónica, dividiu-se a câmara de irradiação em três níveis, com o objectivo de se obterem diferentes valores de débitos de dose em cada nível.

A validação dos resultados obtidos utilizando simulação por métodos de Monte Carlo foi efectuada através de medições utilizando métodos de dosimetria química (solução de Fricke) e dosímetros de termoluminescência.

ABSTRACT

This dissertation presents a dose rate mapping of an irradiation facility using two Cobalt-60 sources, model *PRECISA 22 ML*. This irradiation facility is currently in operation at the ITN campus. The work described in this document was undertaken in the framework of an on-going project (ref. REEQ/996/BIO/2005) that aims at implementing in this irradiation facility an automation and robotics component which will allow its remote utilization in real time by an external user. This system will allow a better yield, and at the same time, a greater radiological protection for users. However, before implementing such a system, studies of the irradiation geometry, and consequently of the dose uniformity along the samples to be irradiated must be performed. The work here presented will allow not only to perform a comparative study of three different dosimetric systems but will also be crucial to the development of the project.

Using the Monte Carlo programs MCNPX and PENELOPE, representative of the state-of-the-art in Computational Radiation Physics, the mapping of the dose rate inside the irradiation chamber was performed. Having in mind future utilization of this facility for waste water treatment applications, the irradiation chamber was divided in three different levels in order to obtain, for each level, different values of dose rate.

The validation of the simulated results was performed using measurements performed using chemical dosimetry (Fricke solution) and thermo luminescence dosimeters (TLD).

Keywords: Monte Carlo methods, cobalt – 60 gamma irradiator, Dose mapping, Fricke solution

ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 1 – Efeito fotoeléctrico	11
Figura 2 – Efeito de Compton	12
Figura 3 – Efeito de produção de pares	15
Figura 4 – Feixe de fótons monoenergético que incide num material absorvente. O detector está suficientemente longe do material absorvente de modo a que somente os fótons primários sejam detectados [KHA84].....	16
Figura 5 – Coeficiente de atenuação mássico total e a contribuição dos diversos processos de interacção para água	18
Figura 6 – Relevância dos mecanismos de interacção da radiação com a matéria, de acordo com o número atómico Z do material e com a energia dos fótons incidentes.....	19
Figura 7 – Parâmetros para a descrição de uma colisão de um electrão com um átomo, a é o raio atómico e b é o parâmetro de impacto.....	20
Figura 8 – Poder de paragem de colisão em função da energia cinética dos electrões para o ar e água.....	26
Figura 9 – Poder de paragem mássico radiactivo na água	27
Figura 10 – Poder de paragem mássico total, de colisão e radiactivo para electrões na água.....	28
Figura 11 – Simulação do efeito global das colisões fracas entre duas colisões fortes consecutivas, tendo em conta o random-hinge method.....	49
Figura 12 – Inverso do livre percurso médio (probabilidade de interacção por unidade de comprimento) para colisões fortes de electrões em alumínio e ouro. As curvas foram determinadas utilizando $W_{cc}=W_{cr}=100$ eV. De notar que, fazendo variar os valores de C_1 e C_2 , o inverso do livre percurso médio não pode ser inferior às contribuições das colisões inelásticas fortes e de radiação de travagem. [SFS06]	51

Figura 13 – Ilustração da posição da fonte e da direcção da radiação primária. Figura retirada do manual PENELOPE – 2006 [SFS06]53

Figura 14 – Superfícies quadráticas e respectivos índices. Figura retirada do manual PENLOPE-2006 [SFS06].....55

Figura 15 – Esfera de volume dV , massa dm centrada no ponto P..... 63

Figura 16 – Processo de transferência de energia de um fóton para um meio material: no ponto P o fóton interage com electrões de átomos do meio material, dando origem à libertação de fótons secundários ($h\nu'$) e electrões em movimento; estes, ao sofrerem interações vão perder energia ao longo do trajecto (entre P e P') por colisões com outros electrões do meio ou por emissão de radiação de travagem $h\nu''$. A energia transferida por unidade de massa, em P, é designada por *kerma*. 66

Figura 17 – Processos envolvidos no fenómeno de luminescência.....76

Figura 18 – Processos envolvidos no fenómeno de fosforescência77

Figura 19 – Curva de brilho para o LiF. Quantidade de luz emitida em função do tempo de aquecimento. (adaptado de [Cun83]) 78

Figura 20 – Diagrama esquemático das componentes necessárias para a medição da luz emitida por um material termoluminescente (adaptado de [Cun83])79

Figura 21 – Resposta característica do LiF: Mg, Ti irradiado com ^{60}Co à temperatura ambiente em função do tempo (escala horizontal).....81

Figura 22 – Curva de temperatura em função do tempo e intensidade relativa da luz para o dosímetro Harshaw TLD-100 83

Figura 23 – Esquema das fases principais do declínio do ^{60}Co 90

Figura 24 – Câmara de irradiação da unidade experimental de ^{60}Co , Precisa 22 ML.91

Figura 25 – Dimensões da câmara de irradiação da unidade experimental de ^{60}Co91

Figura 26 – Ilustração da geometria de irradiação e dos locais de irradiação utilizados no desenvolvimento do trabalho. Neste esquema aparece ilustrada a fonte de irradiação de ambos os lados, correspondendo aos resultados obtidos com as duas fontes. 96

Figura 27 – Dosímetro de corpo inteiro (Harshaw 8814). À esquerda: invólucro ou porta-dosímetro; direita: cartão contendo os dosímetros de TLD-100..... 98

Figura 28 – Curvas de isodose para o 1º nível com uma fonte, obtidas com a solução de Fricke (a), os programas de Monte Carlo MCNPX (b) e PENELOPE (c) e com os TLD (d), respectivamente. Nas linhas de isodose estão inscritos os valores da taxa de dose em Gy/h. De notar que, o espaçamento entre as linhas de isodose é igual a 1. O eixo xx representa a largura da câmara de irradiação, e o eixo yy representa a profundidade da câmara de irradiação, em cm.105

Figura 29 – Curvas de isodose para o nível 2, utilizando a solução de Fricke (a), ambos os programas de simulação MCNPX (b) e PENELOPE (c) e os TLD (d). Nas linhas de isodose estão inscritos os valores da taxa de dose em Gy/h. De notar que, o espaçamento entre as linhas de isodose é igual a 0.5. O eixo xx representa a largura da câmara de irradiação, e o eixo yy representa a profundidade da câmara de irradiação, em cm.....107

Figura 30 – Curva de isodose para o nível 1 com duas fontes, utilizando a solução de Fricke (a) e ambos os programas de simulação Monte Carlo, MCNPX (b) e PENELOPE (c). Nas linhas de isodose estão inscritos os valores da taxa de dose em Gy/h. De notar que, o espaçamento entre as linhas de isodose é igual 1. O eixo xx representa a largura da câmara de irradiação, e o eixo yy representa a profundidade da câmara de irradiação, em cm.....109

Figura 31 – Curva de isodose para o nível 2 com duas fontes., utilizando a solução de Fricke (a) e ambos os programas de simulação Monte Carlo, MCNPX (b) e PENELOPE (c). Nas linhas de isodose estão inscritos os valores da taxa de dose em Gy/h. De notar que, o espaçamento entre as linhas de isodose é igual 0.5. O eixo xx representa a largura da câmara de irradiação, e o eixo yy representa a profundidade da câmara de irradiação, em cm.....111

Figura 32 – Curva de isodose para o nível 3 com duas fontes, utilizando a solução de Fricke (a) e ambos os programas de simulação Monte Carlo, MCNPX (b) e PENELOPE (c). Nas linhas de isodose estão inscritos os valores da taxa de dose em Gy/h. De notar que, o espaçamento entre as linhas de isodose é igual 0.1. O eixo xx representa a largura da câmara de irradiação, e o eixo yy representa a profundidade da câmara de irradiação, em cm..... 113

Figura 33 – Valores de débito de dose (Gy/h) para o 1º nível com uma fonte.... 114

Figura 34 – Razão (e respectiva incerteza estatística) entre os valores calculados pelos programas de simulação PENELOPE e MCNPX, entre o valor medido utilizando a solução de Fricke e os valores calculados utilizando ambos programas de simulação Monte Carlo e entre os valores medidos utilizando a solução de Fricke e os TLD. 117

Figura 35 -Valores de débito de dose para as 15 diferentes posições, no 2º nível e com 1 fonte. 118

Figura 36 – Razão (e respectiva incerteza estatística) entre os valores calculados pelos programas de simulação PENELOPE e MCNPX, entre o valor medido utilizando a solução de Fricke e os valores calculados utilizando ambos programas de simulação Monte Carlo e entre os valores medidos utilizando a solução de Fricke e os TLD.120

Figura 37 – Valores de débito de dose (Gy/h) para o 1º nível com 2 fontes. 121

Figura 38 – Razão (e respectiva incerteza estatística) entre os valores calculados pelos programas de simulação PENELOPE e MCNPX, entre o valor medido utilizando a solução de Fricke e os valores calculados utilizando ambos programas de simulação Monte Carlo e entre os valores medidos utilizando a solução de Fricke e os TLD.123

Figura 39 – Valores de débito de dose (Gy/h) para o 2º nível com 2 fontes.....124

Figura 40 – Razão (e respectiva incerteza estatística) entre os valores calculados pelos programas de simulação PENELOPE e MCNPX, entre o valor medido utilizando a solução de Fricke e os valores calculados utilizando ambos programas de simulação Monte Carlo e entre os valores medidos utilizando a solução de Fricke e os TLD.126

Figura 41 – Valores de débito de dose (Gy/h) para o nível 3 com duas fontes. ..127

Figura 42 – Razão (e respectiva incerteza estatística) entre os valores calculados pelos programas de simulação PENELOPE e MCNPX, entre o valor medido utilizando a solução de Fricke e os valores calculados utilizando ambos programas de simulação Monte Carlo e entre os valores medidos utilizando a solução de Fricke e os TLD.129

Figura 43 – Curva da dose absorvida em profundidade. A figura mostra que os electrões emitidos nada contribuem para a determinação da taxa de dose dentro da câmara de irradiação. De notar, que a esta profundidade só está representado o local onde a fonte está inserida.....132

ÍNDICE DE TABELAS

Tabela 1 – Identificação das <i>tallies</i> , pelo tipo e tipo de partículas	44
Tabela 2 – Valores dos factores de peso da radiação, W_r , para vários tipos de radiação. Estes valores são independentes da amostra irradiada e são válidos para irradiação interna ou externa.	68
Tabela 3 – Valores médios de débito de dose (Gy/h) e respectiva incerteza estatística para 15 posições de irradiação no nível 1 utilizando somente a fonte 2, obtidos com a solução de Fricke, com os programas de simulação Monte Carlo MCNPX e PENELOPE e com os dosímetros de termoluminescência (TLD).....	104
Tabela 4 – Valores médios de débito de dose (Gy/h) respectiva incerteza estatística para 15 posições de irradiação no nível 2 utilizando somente a fonte 2, obtidos com a solução de Fricke, com os programas de simulação MCNPX e PENELOPE, e com os dosímetros de termoluminescência (TLD).	106
Tabela 5 – Valores de débito de dose em Gy/h e respectiva incerteza estatística para 15 posições de irradiação no nível 1 obtidos com a solução de Fricke e com os programas de simulação MCNPX e PENELOPE.	108
Tabela 6 – Valores de débito de dose em Gy/h e respectiva incerteza estatística para 15 posições de irradiação no nível 2, para os 15 locais de irradiação, obtidos com a solução de Fricke e com os programas de simulação Monte Carlo, MCNPX e PENELOPE.	110
Tabela 7 – Valores de débito de dose em Gy/h e respectiva incerteza estatística para 15 posições de irradiação no nível 3 obtidos com a solução de Fricke e com os programas de simulação Monte Carlo, MCNPX e PENELOPE.	112
Tabela 8 – Para cada posição de irradiação no nível 1: razão (e respectiva incerteza) entre os valores calculados pelos programas de simulação PENELOPE e MCNPX, entre o valor medido utilizando a solução de Fricke e os valores calculados utilizando ambos programas de simulação Monte Carlo e entre os valores medidos utilizando a solução de Fricke e os TLD.....	116
Tabela 9 – Para cada posição de irradiação no nível 2: razão (e respectiva incerteza) entre os valores calculados pelos programas de simulação PENELOPE e MCNPX, entre o valor medido utilizando a solução de Fricke e os valores	

calculados utilizando ambos programas de simulação Monte Carlo e entre os valores medidos utilizando a solução de Fricke e os TLD..... 119

Tabela 10 – Para cada posição de irradiação no nível 1, com 2 fontes: razão (e respectiva incerteza) entre os valores calculados pelos programas de simulação PENELOPE e MCNPX, entre o valor medido utilizando a solução de Fricke e os valores calculados utilizando ambos programas de simulação Monte Carlo MCNPX e PENELOPE.122

Tabela 11 – Para cada posição de irradiação no nível 2, com 2 fontes: razão (e respectiva incerteza) entre os valores calculados pelos programas de simulação PENELOPE e MCNPX, entre o valor medido utilizando a solução de Fricke e os valores calculados utilizando ambos programas de simulação Monte Carlo MCNPX e PENELOPE.125

Tabela 12 – Para cada posição de irradiação no nível 3, com 2 fontes: razão (e respectiva incerteza) entre os valores calculados pelos programas de simulação PENELOPE e MCNPX, entre o valor medido utilizando a solução de Fricke e os valores calculados utilizando ambos programas de simulação Monte Carlo MCNPX e PENELOPE. 127

CAPÍTULO I

INTRODUÇÃO

O estudo das interacções entre a radiação e a matéria constitui, desde o início do século XX, uma das áreas da Física mais exploradas. O desenvolvimento da Mecânica Quântica permitiu que, ao nível da Física fundamental, fossem surgindo teorias e modelos cada vez mais adequados para efectuar a interpretação dos processos e mecanismos de interacção das partículas e radiação à escala sub-atómica. Por outro lado, o desenvolvimento tecnológico tornou possível o aparecimento de sistemas de detecção das radiações exibindo gradualmente maiores sensibilidades, fiabilidades e eficiências.

Existem inúmeras aplicações das radiações ionizantes, em particular a radiação gama, na indústria¹. As tecnologias de radiação oferecem várias vantagens, estando implementadas em diferentes áreas, tais como, esterilização [Beco2; NBT98; BoK87], preservação de alimentos [CTBo4; PCRo4; TF98] e química de polímeros [CLGo5], sendo a sua eficácia amplamente reconhecida.

Para que todas estas aplicações sejam exequíveis e eficazes (também do ponto de vista económico), é necessário e crucial a elaboração de testes dosimétricos que nos conferem o conhecimento acerca da distribuição de dose ao longo de uma dado volume. Nomeadamente, em estudos químicos e biológicos, em que uma pequena diferença na dose absorvida pode ser muito significativa. Idealmente, o produto deveria ser irradiado uniformemente, mas na prática

¹ Além de outros sectores tais como a Medicina, agricultura, investigação, ensino,

existe uma variação apreciável na dose absorvida em diversas localizações do volume irradiado. A dose mínima (D_{\min}) é aquela que é programada para atingir o efeito desejado no material sendo a dose máxima (D_{\max}) aquela que estabelece o limite a partir do qual se produz uma alteração indesejável para o material.

A dose absorvida pode ser aproximadamente assimilada à quantidade de energia depositada pela radiação ionizante por unidade de massa, num dado volume. É expressa em J/Kg, sendo a correspondente unidade no SI o Gray (Gy). A taxa ou débito de dose é a uma medida da dose absorvida por unidade de tempo. Consequentemente é expressa em múltiplos ou submúltiplos de Gy/h. Dado que o objectivo principal deste trabalho é o mapeamento de taxas de dose, e sendo este um processo complexo, composto por várias etapas, é necessário o conhecimento dos vários processos básicos de interacção da radiação ionizante com a matéria. Estes irão ser o objectivo do Capítulo II.

Os métodos e técnicas de Monte Carlo são reconhecidas como sendo um método de simulação numérica que permite a modelação e descrição detalhada das interacções das partículas durante o seu percurso num determinado material e da quantificação dos processos físicos que conduzem à deposição de energia. A sua exactidão deve-se sobretudo à excelente qualidade dos modelos, teorias que permitem descrever a simulação do transporte de partículas e das suas interacções com a matéria, tomando em conta os constrangimentos geométricos do sistema simulado. A qualidade dos dados experimentais disponíveis para cada material é também um factor preponderante na exactidão e precisão dos resultados obtidos por simulação Monte Carlo. Finalmente mas não de somenos importância, os métodos de amostragem e o recurso à Teoria das Probabilidades e Estatística bem como os métodos de geração de números (pseudo-) aleatórios, ambos associados à disponibilização gradual de processadores e arquitecturas de computação cada vez mais rápidos e sofisticados, contribuíram para uma rápida disseminação da utilização dos métodos de Monte Carlo para descrever, modelar e simular sistemas físicos envolvendo a manipulação de fontes de radiação e feixes de partículas.

Sendo um método de referência em dosimetria pelas razões apresentadas anteriormente, a simulação de Monte Carlo é actualmente utilizada para inúmeras aplicações, tais como, em medicina [ALP00; FCA99, OSB00], em Física do estado sólido [WVLO1], entre muitos outros domínios e tal como abundantemente documentado em “Proceedings” de conferências internacionais no domínio [KBN01].

No desenvolvimento do trabalho, os programas de simulação Monte Carlo utilizados para o mapeamento de taxas de dose foram o MCNPX e o PENELOPE, representativos do estado-da-arte computacional e utilizados por inúmeras comunidades de utilizadores em todo o Mundo. No capítulo III é apresentada uma breve descrição do transporte da radiação, incluindo o transporte de fótons e electrões em ambos os programas utilizados no desenvolvimento de trabalho.

A validação dos resultados *computacionais* é obrigatória, sempre que se possa dispor de *resultados experimentais* e de *medições* efectuadas por aparelhos e equipamentos no sistema **real** que foi modelado e simulado. Neste sentido, foram efectuadas na câmara de irradiação existente, *medições* de doses utilizando sistemas dosimétricos abaixo descritos. Este processo de validação e de comparação entre os resultados experimentais e computacionais requer que as condições experimentais sejam as mesmas que as especificadas na modelização utilizando a simulação por métodos de Monte Carlo e que se proceda a uma comparação dos resultados obtidos experimentalmente e por simulação, de modo a ser verificada a concordância entre os valores experimentais e computacionais. Os diferentes sistemas dosimétricos utilizados nas medições efectuadas, consistiram de métodos de referência de dosimetria física e química. O método de dosimetria química utilizado foi o dosímetro de Fricke que permite fazer determinações de dose absorvida com precisão, sendo usado como referência e aceite como padrão secundário [ICR69]. O dosímetro de Fricke é o mais utilizado dos dosímetros líquidos químicos existentes, devido à sua precisão, linearidade e reprodutibilidade na resposta [MN93]. O sistema de dosimetria física utilizado envolveu a utilização de dosímetros de termoluminescência (TLD). Devido à sua elevada versatilidade os TLD são largamente utilizados na determinação da dose

absorvida. A elevada variedade de materiais termoluminescentes e as suas propriedades físicas permitem cobrir um intervalo de dose absorvida que varia desde o micro-Gray (μGy) até aos kilo-Gray (kGy). Devido às suas variadas formas geométricas, os TLD são largamente utilizados na determinação da dose absorvida, por exemplo em medicina [Kro94], entre muitas outras aplicações.

O capítulo IV apresenta e descreve os métodos dosimétricos utilizados na verificação e validação dos valores simulados.

Tal como já foi mencionada anteriormente, com o objectivo de validar os resultados de simulação, procedeu-se ao cálculo da taxa de dose em vários locais na câmara de irradiação, tendo sido efectuadas, nas mesmas localizações medições utilizando os sistemas dosimétricos previamente referidos. A metodologia utilizada no desenvolvimento do trabalho está descrita no capítulo V. Os resultados experimentais e computacionais obtidos são descritos e analisados no capítulo VI.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

A

[ALP00] C. Alves, L. Lourenço, L. Peralta, M. C. Lopes, “MC calculations in External Radiotherapy – A Test Case For CT Slices Simulation” *Proceedings of BioEng2000, 5th Portuguese Conference on Biomedical Engineering*, Coimbra, 26-27 May, 2000.

B

[Bec02] N. Becker, “Sterilization of *Bacillus thuringiensis israelensis* products by gamma radiation”, *J. Am Mosq Control Assoc.* 18, 57-62, 2002.

[BoK87] M. L. Botelho and H. Kristensen, “Number and Radioresistence of Microorganisms on Cork Stoppers”, *Molecular and Cellular Biology*, 12, 109-120, 1987.

C

[CLG05] M. H. Casimiro, J. P. Leal, M. H. Gil, M. L. Botelho, “Study on chemical, UV, and gamma radiation induced grafting of 2-hydroxyethyl methacrylate onto chitosan”, *Radiation Physics and Chemistry* 72, 731-735, 2005.

[CTBo4] S. Cabo Verde, R. Tenreiro, M. L. Botelho, “Sanitation of chicken eggs by ionization radiation: HACCP and inactivation studies”, *Radiation Physics and Chemistry*, 71 (1-2): 29-33, 2004.

F

[FCA99] M. Fragoso, A. Chaves, C. Alves, C. Oliveira, J. Seco, L. Peralta, M. C. Lopes, “Monte Carlo simulation of a linear accelerator treatment head: EGS4

and MCNP-4b intercomparison”, *Proceedings of VIII International Conference on Calorimetry in High Energy Physics*, 13-19 Junho, Lisboa, 1999.

I

[ICR69] “Radiation Dosimetry: X Rays and Gamma Rays with Maximum Photon Energies Between 0.6 and 50 MeV”, ICRU Report 35, International Commission on Radiation Units and Measurements, Bethesda, MD, 1969.

K

[KBN01] “Advanced Monte Carlo for Radiation Physics and Particle Transport Simulation”, *Proceedings of the Monte Carlo 2000 Conference*, Lisbon 23-26 October 2000, eds. A. Kling, F. Barão, Nakagawa, L. Távora, P. Vaz, Springer Verlag, 2001.

[Kro94] T. Kron, T “Thermoluminescence dosimetry and its applications in medicine – part 1”, *Australas Phys Eng Sci Med*, December; 17 (4): 175:99, 1994.

M

[MN93] C. M. Ma and A. E. Nahum, “Dose conversion and wall correction factors for Fricke dosimetry in high-energy photon beams: analytical model and Monte Carlo calculations”, *Physical Medical Biology*, 38, 93-114, 1993.

N

[NBT98] F. Nogueira, M. L. Botelho, R. Tenreiro, “Radioresistances Studies in Methylobacterium spp.” *Radiat. Phys. Chem.* 42, 605-609, 1998.

O

[OSBoo] C. Oliveira, J. Salgado, M. L. Botelho, M. L. Ferreira, “Dose determination by Monte Carlo – A useful tool in gamma radiation processes” *Radiation Physics and Chemistry*, 57 (3-6), pp. 667, 2000.

P

[PRCo4] P. Pinto, R. Ribeiro, L. Sousa, S. Cabo Verde, M. G. Lima, M. Dinis, A. Santana, M. L. Botelho, “Sanitation of chicken eggs by ionization radiation: functional and nutritional assessment”, *Radiation Physics and Chemistry*, 71 (1-2):35-38, 2004.

T

[TF98] M. J. Trigo, M. J. Fraqueza, “Effect of gamma radiation on microbial population of natural casings”, *Radiation Physics and Chemistry*, 52, 125-128, 1998.

W

[WVLo1] U. Wahl, A. Vantomme, G. Langouche, J. P. Araújo, L. Peralta, J. G. Correia, “Emission chaneling studies of Pr in GaN”, *Journal of Applied Physics*, Vol. 88 No. 3, 1319-1324, 2001.

CAPITULO II

II. INTERACÇÃO DOS FOTÕES, ELECTRÕES E POSITRÕES COM A MATÉRIA

II.1 INTERACÇÃO DA RADIAÇÃO ELECTROMAGNÉTICA COM A MATÉRIA

Quando um feixe de fótons incide sobre ou percorre um meio material, vários são os mecanismos de interacção que podem ocorrer, dos quais os principais são: DISPERSÃO DE RAYLEIGH, EFEITO FOTOELÉCTRICO, DISPERSÃO DE COMPTON e PRODUÇÃO DE PARES.

Para a simulação do transporte das partículas emitidas por uma fonte de radiação e obviamente, das partículas secundárias formadas durante as suas sucessivas interacções, é essencial determinar, para cada interacção, qual a probabilidade de ocorrência de cada processo. Em reacções nucleares, designa-se por secção eficaz microscópica σ a probabilidade de uma dada reacção ocorrer entre uma dada partícula incidente com uma dada energia e um núcleo. A secção eficaz σ pode também ser interpretada como a área efectiva que um núcleo apresenta a essa partícula para uma dada reacção, daí ser expressa em cm^2 .

Como tal, dada a sua importância na descrição dos diferentes processos de interacção com a matéria, efectua-se seguidamente uma descrição detalhada das secções eficazes de cada um dos mecanismos de interacção de fótons previamente referidos.

II.1.1 Dispersão de Rayleigh

A DISPERSÃO DE RAYLEIGH ou também denominada dispersão coerente é uma interação elástica entre um fóton e um átomo. Este processo ocorre essencialmente com fótons de baixa energia em materiais de elevado número atómico Z . A secção eficaz diferencial, $d\sigma_R$, num ângulo sólido $d\Omega$, é dada pela seguinte expressão:

$$\frac{d\sigma_R}{d\Omega} = \frac{r_e^2}{2} (1 + \cos^2\theta) [F(q, Z)]^2 \quad [cm^2 sr^{-1} atomo^{-1}] \quad (II.1)$$

onde, $d\Omega = 2\pi \sin\theta d\theta$, $r_e = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 mc^2}$ é o raio clássico do electrão, $q = 2k\sin(\theta/2)$ com $k = h\nu/c$ é o momento transferido correspondente a um ângulo θ de dispersão do fóton relativamente à sua direcção inicial, h é a constante de Planck, c a velocidade da luz, ν é a frequência do fóton, m é a massa em repouso do electrão e $F(q, Z)$ é o factor de forma atómica [HØ79]. Quando $\theta \rightarrow 0$, então $q \rightarrow 0$, logo $F(q, Z) \rightarrow Z$.

II.1.2 - Efeito fotoeléctrico

Neste processo, o fóton incidente com energia k_0 é absorvido, verificando-se a emissão de um electrão e de fótons de baixa energia², tal como ilustra a figura 1. A energia cinética do electrão emitido, T_{e-} , é igual à energia do fóton incidente k_0 menos a energia de ligação E_b do electrão, ou seja, $T_{e-} = k_0 - E_b$.

² Devido ao processo de fluorescência

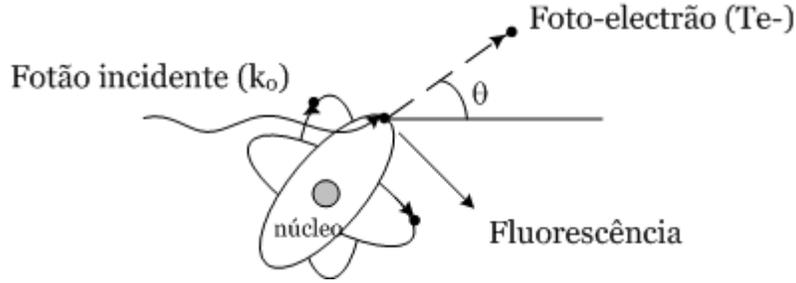


Figura 1 – Efeito fotoelétrico

Para este processo, a secção eficaz diferencial $d\sigma_R$, num ângulo sólido $d\Omega$ é descrita pela seguinte equação:

$$\frac{d\sigma_F}{d\Omega} \approx \beta^2 \sin^2\theta \left[\frac{\sqrt{1-\beta^2}}{(1-\beta\cos\theta)^4} - \frac{(1-\sqrt{1-\beta^2})}{2\sqrt{1-\beta^2}(1-\beta\cos\theta)^3} + \frac{(1-\sqrt{1-\beta^2})^2}{4(1-\beta^2)(1-\beta\cos\theta)^3} \right] \quad (\text{II.2})$$

na qual, β representa a razão entre a velocidade do electrão ejetado e a velocidade da luz e θ é ao ângulo de emissão do electrão ejetado relativamente à direcção de incidência do fóton.

Depois do electrão ser ejetado, surgem uma série de fenómenos relativos ao preenchimento da lacuna deixada pelo electrão. Durante este fenómeno, são emitidos fótons ou electrões de Auger, cujas energias e probabilidade de emissão dependem fortemente do material alvo. Em materiais de baixo número atómico Z , a energia dos fótons é menor que 1 keV, e para elevado número atómico a energia é cerca de 85 keV.

A necessidade de ter em conta o fenómeno descrito anteriormente na simulação por métodos de Monte Carlo³, depende sobretudo do problema que estamos a tratar e do número atómico do material. Para materiais em que o número atómico é baixo, a emissão de fótons ou de electrões de Auger, pode ser desprezada, uma vez que, a probabilidade de produção de fótons é desprezável e a

³ Descrita num próximo Capítulo desta tese

energia potencial dos electrões de Auger criados é menor que a energia de corte⁴ assumida pelo cálculo. Pelo contrário, em materiais de elevado número atómico, estes fenómenos são significativos e devem ser levados em conta.

No código PENELOPE, as secções eficazes descritas para o efeito fotoeléctrico são obtidas por interpolação de dados existentes numa tabela extraída do LLNL *Evaluated Photon Data Library* [CHK97], para elementos com número atómico entre 1 e 100, e energias entre 1 eV e 1000 GeV [SHS88; HGØ80; BHS87].

II.1.3 - Dispersão de Compton

Neste processo o fóton interage com os electrões da camada orbital mais externa do átomo, onde a energia de ligação dos electrões é menor que a energia do fóton incidente ($E_b \ll h\nu$). Nesta interacção, o fóton incidente é disperso, transferindo parte da sua energia inicial para um electrão que é ejectado, tal como ilustra a figura 2. Através da cinemática deste processo (conservação da energia e momento) deduz-se que a energia E'_γ do fóton disperso segundo um ângulo θ e a energia $E^{e_{cin}}$ do electrão ejectado segundo um ângulo θ_{el} , relativamente à direcção do fóton incidente, são determinadas através das equações II.3, II.4 e II.5:

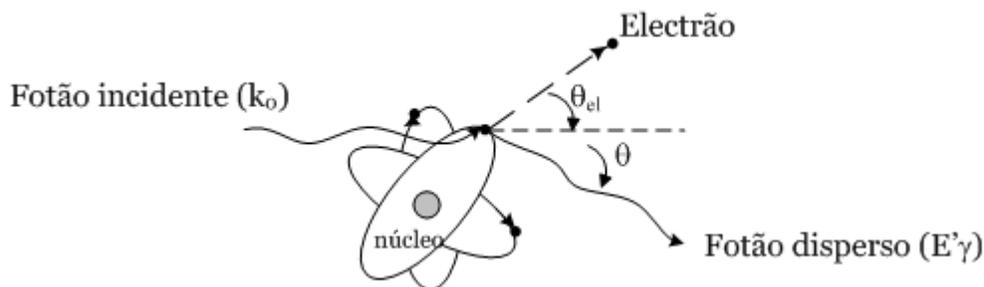


Figura 2 – Efeito de Compton

$$E'_\gamma = \frac{h\nu_0}{1 + \frac{h\nu_0}{m_e \cdot c^2} (1 - \cos\theta)} \quad (\text{II.3})$$

⁴ Energia abaixo da qual o programa de simulação não efectua o transporte de partículas

$$E_{\text{cin}}^e = h \cdot \nu_0 \left(1 - \frac{1}{1 + \frac{h \cdot \nu_0}{m_e \cdot c^2} (1 - \cos\theta)} \right) \quad (\text{II.4})$$

$$\tan\theta_{el} = \frac{1}{\left(1 + \frac{k_0}{mc^2}\right) \tan \frac{\theta}{2}} \quad (\text{II.5})$$

sendo h a constante de Planck

O ângulo de azimute φ do fóton após ter sido disperso está uniformemente distribuído entre 0 e 2π ; sendo assim o ângulo do electrão após ser ejectado é igual a $\varphi_{el} = \varphi + \pi$. A secção eficaz diferencial $d\sigma_c$ de Klein – Nishina num ângulo sólido $d\Omega$, é dada por[Kra88]:

$$\frac{d\sigma_c}{d\Omega} = r_0^2 \left[\frac{1}{1 + \alpha(1 - \cos\theta)} \right]^3 \left[\frac{1 + \cos\theta}{2} \right] \times \left[1 + \frac{\alpha^2 (1 - \cos\theta)^2}{(1 + \cos^2\theta)[1 + \alpha(1 - \cos\theta)]} \right] \quad (\text{II.6})$$

Sendo $\alpha = \frac{k_0}{mc^2}$.

A secção eficaz total por electrão, σ_c , é obtida integrando a equação II.6 para valores de θ no intervalo $[0, \pi]$ e φ no intervalo $[0, 2\pi]$:

$$\sigma_c = \frac{\pi r_0^2}{\alpha} \left\{ \left[1 - \frac{2(\alpha+1)}{\alpha^2} \right] \ln(2\alpha+1) + \frac{1}{2} + \frac{4}{\alpha} - \frac{1}{2(2\alpha+1)^2} \right\} \quad (\text{cm}^2 \text{ electrão}^{-1}) \quad (\text{II.7})$$

Para fótons incidentes com energia $h \nu \leq 0.01 \text{ MeV}$ (valor indicativo), a secção eficaz de Klein – Nishina é somente igual à secção eficaz de Thomson, descrita de seguida:

$$d\sigma_T = \left(\frac{e^2}{mc^2} \right)^2 \frac{1 + \cos^2\theta}{2} d\Omega \quad (\text{II.8})$$

Integrando ao longo de $\theta=0$ e $\theta=\pi$, e considerando $d\Omega=2\pi\sin\theta$, obtemos que a secção eficaz total de Thomson é dada pela seguinte equação:

$$\sigma_T = \frac{8\pi}{3} \left(\frac{e^2}{mc^2} \right)^2 = \frac{8\pi}{3} r_0^2 \quad (\text{II.9})$$

Nesta, o electrão não retém energia como resultado do evento elástico. Para fotões incidentes de energia muito baixa, a secção eficaz de Klein – Nishina deve ser corrigida de forma a ter em conta a energia de ligação dos electrões, tal como acontece no código PENELOPE [BSR96]. A secção eficaz atómica de Klein – Nishina, σ_c^a , é proporcional ao número atómico Z do material desde que se assuma que o electrão esteja livre. Então, $\sigma_c^a = Z \times \sigma_c$ (cm²/átomo).

II.1.4 - Produção de Pares

Quando a energia do fotão incidente é superior a 1.022 MeV, poderá haver uma interacção com o núcleo de um átomo com o desaparecimento do fotão e criação de um par electrão / positrão, tal como ilustra a figura 3. Devido à elevada massa nuclear, a energia transferida para este é desprezável, sendo parte da energia do fotão inicial convertida em energia de repouso do electrão e positrão (1.022 MeV), enquanto que a restante energia é partilhada pelas energias cinéticas do electrão e do positrão, T- e T+, respectivamente. A nuvem atómica em torno do núcleo é muito importante para o processo de produção de pares. Como tal, a secção eficaz para este processo está dependente de uma factor (ξ) definido por:

$$\xi = \frac{100m_0c^2h\nu_0}{E_+E_-Z^{1/3}} \quad (\text{II.10})$$

onde E_+ e E_- , são as energias do positrão e electrão, respectivamente, h é a constante de Planck, c a velocidade da luz, m_0 é a massa em repouso do electrão, ν_0 é a frequência do fotão e Z o número atómico do material. Para energias

superiores a $10 m_e c^2$, a secção eficaz diferencial por energia total do positrão $\frac{d\sigma}{dE_+}$, pode ser determinada através da aproximação de Born:

$$\frac{d\sigma_{pp}}{dE_+} = \frac{4Z^2 r_e^2}{137 (h\nu_0)^3} \left[(E_+^2 + E_-^2) \left[\frac{\phi_1(\xi)}{4} - \frac{1}{3} \ln Z - f(Z) \right] + \frac{2}{3} E_+ E_- \left[\frac{\phi_2(\xi)}{4} - \frac{1}{3} \ln Z - f(Z) \right] \right] \quad (\text{II.11})$$

onde $\phi_1(\xi)$ e $\phi_2(\xi)$ são funções dependentes do factor acima descrito e $f(Z)$ é uma função de correcção de Coulomb. A secção eficaz total é proporcional a Z^2 e aumenta com o logaritmo da energia do fóton incidente [Bieoo]:

$$\sigma_{pp} \propto Z^2 \ln \left(\frac{2k}{m_0 c^2} \right) \quad (\text{II.12})$$

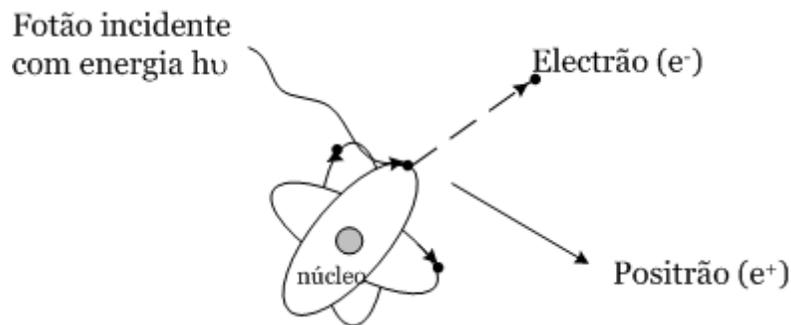


Figura 3 – Efeito de produção de pares

II.2 - ATENUAÇÃO DE UMA FONTE DE RADIAÇÃO

Para analisar a atenuação de um feixe monoenergético de N fótons, incidente num material absorvente de espessura infinitesimal dx , utiliza-se o arranjo experimental da **figura 4**:

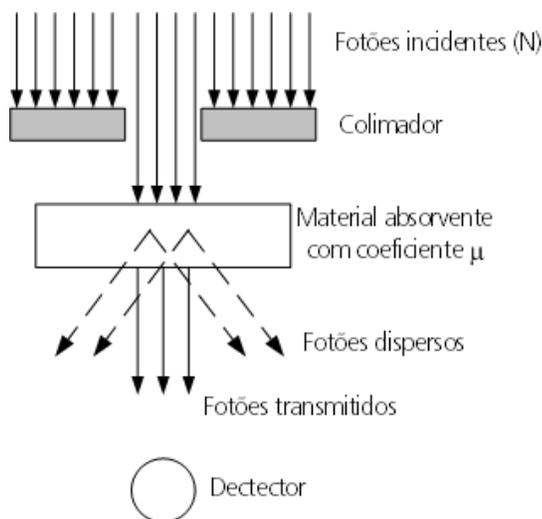


Figura 4 – Feixe de fótons monoenergético que incide num material absorvente. O detector está suficientemente longe do material absorvente de modo a que somente os fótons primários sejam detectados [KHA84].

É colocado um detector a uma distância fixa da fonte e suficientemente longe do material absorvente de modo a que somente os fótons primários (os fótons que atravessam o material sem sofrerem interacção) sejam medidos pelo detector.

Se n for a densidade numérica de átomos (número de átomos por unidade de volume) e se A for a área do material irradiado, então o número de átomos encontrados na espessura infinitesimal dx , é $n \cdot dx \cdot A$. Se σ for a secção eficaz⁵ atómica para que ocorra uma interacção com um fóton do feixe, então $n \cdot dx \cdot A \cdot \sigma$ é a área efectiva total apresentada ao fóton do feixe. Sendo N o número de partículas do feixe incidente, e dx a espessura infinitesimal do material, então o número de fótons que interagem no material obedece à relação:

$$-dN = \frac{(n \cdot dx \cdot A \cdot \sigma)}{A} = n \cdot dx \cdot N \cdot \sigma \Leftrightarrow \frac{-dN}{N} = n \cdot dx \cdot \sigma$$

resolvendo a equação anterior, temos :

$$N_{(x)} = N_0 \cdot e^{-n \cdot \sigma \cdot x} \tag{II.13}$$

sendo $N(x)$ o número de partículas que atravessam o material de espessura x . Se designarmos $(n \cdot \sigma)$ por μ , então a expressão anterior pode escrever-se da seguinte forma :

⁵ Secção eficaz é uma medida de probabilidade de ocorrência de um processo físico de colisão.

$$N = N_0 \cdot e^{-\mu x} \quad (\text{II.14})$$

onde μ é uma constante de proporcionalidade, denominada **coeficiente de atenuação linear**, expressa em m^{-1} .

II.2.1 Coeficientes de Atenuação

Sendo ρ a densidade do material percorrido pelos fótons, o coeficiente de atenuação mássico total, $\frac{\mu}{\rho}$, é a soma dos coeficientes de atenuação mássico de todos os processos descritos anteriormente, sendo portanto, obtido através da seguinte expressão:

$$\frac{\mu}{\rho} = \frac{\mu_p}{\rho} + \frac{\mu_c}{\rho} + \frac{\mu_r}{\rho} + \frac{\mu_{pp}}{\rho} \quad [\text{cm}^2 \text{g}^{-1}] \quad (\text{II.15})$$

Onde $\frac{\mu_p}{\rho}$, $\frac{\mu_c}{\rho}$, $\frac{\mu_r}{\rho}$ e $\frac{\mu_{pp}}{\rho}$ representam, respectivamente, os coeficientes de atenuação mássicos associados ao efeito fotoeléctrico, do efeito de Compton, da dispersão de Rayleigh e da produção de pares.

A figura 4 representa o coeficiente de atenuação mássico total ($\frac{\mu}{\rho}$) e a contribuição dos diferentes processos de interacção para a água. Estes dados experimentais foram retirados da biblioteca XCOM [BHS99].

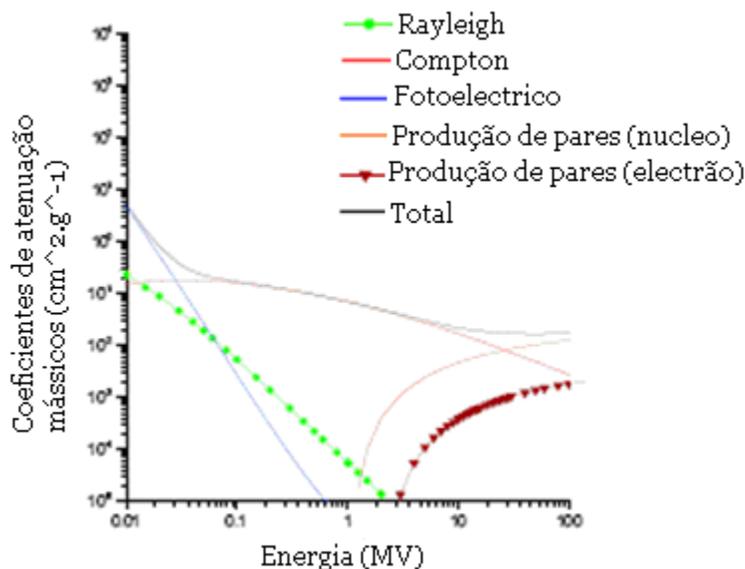


Figura 5 – Coeficiente de atenuação mássico total e a contribuição dos diversos processos de interação para água

O coeficiente de atenuação mássico total é elevado para fótons de baixas energias devido predominantemente ao efeito fotoelétrico. É de relevância salientar que, para fótons de baixa energia, $\frac{\mu_p}{\rho}$ é mais elevado devido à dependência com Z^3 do efeito fotoelétrico. Para energias mais elevadas, é claramente visível a predominância do efeito de produção de pares. Finalmente, no intervalo de energias emitidas pelo Cobalto-60 (fótons de energias 1.17 MeV e 1.33 MeV), verifica-se o predomínio da dispersão de Compton. De notar que neste efeito, não existem diferenças significativas entre os coeficientes de atenuação mássico devido à sua dependência com Z . A figura 6 mostra a ocorrência dos mecanismos de interação, mencionados anteriormente, de acordo com o número atômico Z do material e com a energia dos fótons incidentes.

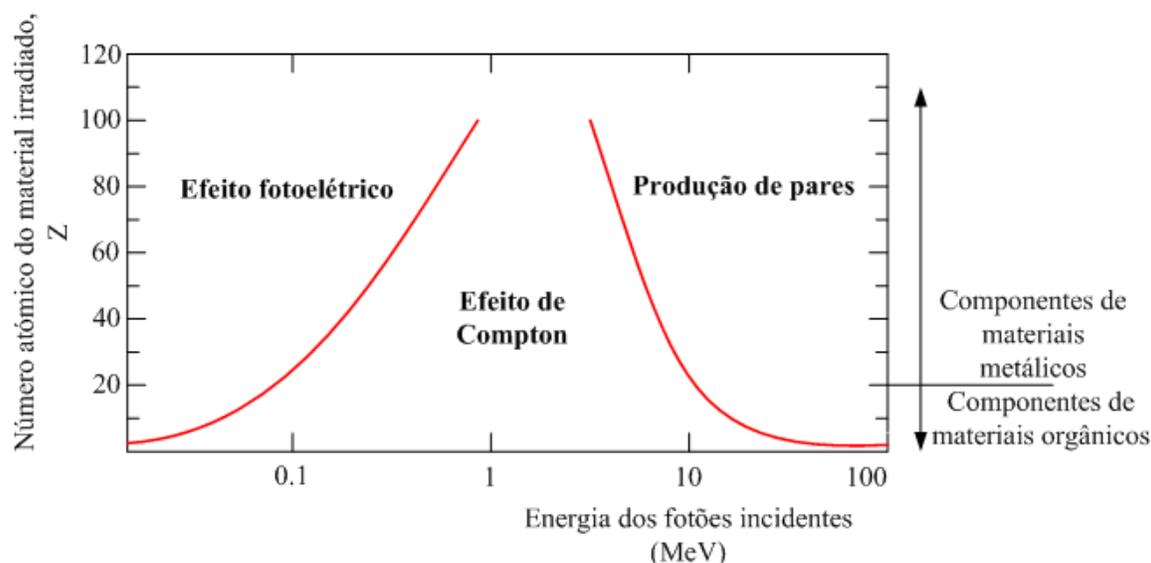


Figura 6 – Relevância dos mecanismos de interacção da radiação com a matéria, de acordo com o número atómico Z do material e com a energia dos fótons incidentes.

II.3 - INTERACÇÃO DE UM FEIXE DE ELECTRÕES COM A MATÉRIA

Os mecanismos que explicam a diminuição da energia cinética de electrões e positrões e as deflexões ao longo da trajectória dos mesmos num material são as colisões elásticas e inelásticas no campo de Coulomb e a emissão de radiação de travagem⁶ que se analisam seguidamente.

II.3.1 - Colisões inelásticas com os electrões atómicos

As interacções de Coulomb com os electrões atómicos são a principal forma de perda de energia cinética dos electrões ao longo da sua trajectória. Tais interacções coulombianas originam excitações ou ionizações ao longo da trajectória de um electrão ou positrão. Ocasionalmente, a energia transferida para um electrão atómico é tal que pode originar a sua libertação do átomo dando origem ao denominado electrão delta (δ). As forças de interacção de Coulomb entre o electrão (ou positrão) que percorre o material e o electrão atómico podem ser descritas em função do raio atómico a e do parâmetro de impacto b , descrito classicamente como a menor distância entre a trajectória do electrão (ou positrão) incidente e o centro do átomo, tal como ilustrado na figura 7.

⁶ Bremsstrahlung

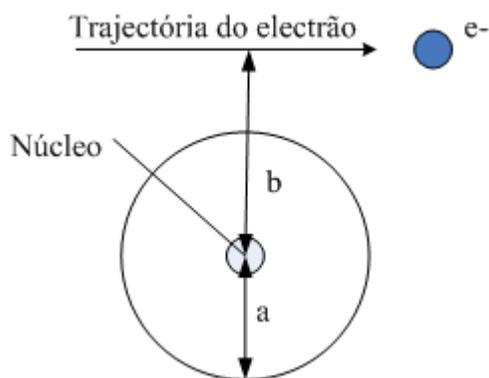


Figura 7 – Parâmetros para a descrição de uma colisão de um electrão com um átomo, a é o raio atómico e b é o parâmetro de impacto.

Durante o processo de excitação, um electrão de uma orbital mais interna adquire energia suficiente para transitar para uma orbital mais externa. A energia necessária varia no intervalo entre 10 eV e 100 eV. O átomo excitado dissipa a sua energia através da emissão de luz visível se o meio for um gás ou em forma de calor num material condensado. Este tipo de colisões, denominadas, colisões fracas, ocorrem quando o parâmetro de impacto b é muito maior que o raio do átomo. Este tipo de colisões são as mais prováveis de ocorrer, uma vez que existe uma grande probabilidade do parâmetro de impacto ser maior que o raio atómico. Quando o parâmetro b é da mesma ordem de grandeza do raio atómico a , dá-se uma interacção entre o electrão incidente e o electrão atómico transferindo-lhe parte substancial da sua energia cinética. Esta tipo de colisão é denominada, colisão forte. Se o electrão incidente, tem energia suficiente para remover um electrão de uma orbital, dá-se o processo de ionização do átomo. O electrão removido é denominado, electrão delta (δ), cuja energia pode ir até alguns keV.

Nas interacções electrão – electrão, o electrão primário transfere parte da sua energia (w) para o electrão do átomo considerado como estando em repouso. A energia transferida é definida pela seguinte equação [Leo86]:

$$w = \frac{2e^4}{m_0 b^4 v^2} \quad (\text{II.16})$$

onde e é a carga do electrão, b é o parâmetro de impacto e v é a velocidade do electrão primário e m_0 é a massa em repouso do electrão. Neste tipo de colisões, a secção eficaz diferencial $d\sigma_{\text{col}}$ no intervalo diferencial de energia cinética (T) designada por Moller, é dada pela seguinte equação:

$$\frac{d\sigma_{\text{col}}}{dT} = \frac{2\pi r_e^2 m_0}{\beta^2} \frac{1}{T^2} \left[1 + \frac{T^2}{(T_0 - T)^2} + \frac{\tau^2}{(\tau + 1)^2} \left(\frac{T}{T_0} \right)^2 - \frac{2\tau + 1}{(\tau + 1)^2} \frac{T}{T_0 - T} \right] \quad (\text{II.17})$$

onde, $\beta = v/c$, T_0 é a energia cinética do electrão incidente e $\tau = T_0/m_0 c^2$ a energia cinética do electrão em unidades de massa de electrão. Dado que, não se consegue distinguir os dois electrões, a equação II.17 é simétrica em relação à troca de energia das duas partículas dispersas, e a energia máxima transferida é $T_0/2$. Por definição, um electrão com elevada energia depois da colisão é considerado primário. A secção eficaz descrita pela equação II.17 é válida somente para electrões primários com energia cinética muito superior à energia de ligação, sendo necessária uma correcção quando as energias são próximas.

II.3.2 Produção de electrões delta (δ)

A produção de electrões delta (δ), a partir de partículas primárias com energia cinética T está relacionada com a probabilidade por unidade de comprimento, $\mu_\delta(T, \Delta)$, para a produção de partículas secundárias com energia superior a um valor limite Δ , definida por:

$$\mu_\delta(T, \Delta) = \frac{\rho N_A Z}{A} \int_{\Delta}^{T/2} \frac{d\sigma}{d\varepsilon} d\varepsilon \quad (\text{II.18})$$

Sendo;

$$\frac{d\sigma}{d\varepsilon} = \frac{2\pi r_0^2}{\beta^2} \left[\frac{1}{\varepsilon^2} + \frac{1}{(T-\varepsilon)^2} + \frac{1}{(T+mc^2)^2} - \frac{(2T+mc^2)mc^2}{\varepsilon(T-\varepsilon)(T+mc^2)^2} \right] \quad (\text{II.19})$$

Onde, ρ é a densidade do material com número atómico Z e massa atómica A , e N_A é a constante de Avogadro; $d\sigma/d\varepsilon$ é a secção eficaz diferencial para os electrões; r_0^2 é o raio clássico do electrão, e β é a velocidade inicial do electrão dividida por c , a velocidade da luz.

II.3.3 “Bremsstrahlung” – Colisões inelásticas com os núcleos

O processo de colisão inelástica é o resultado de uma interacção de um electrão com elevada velocidade com um núcleo. Sob a influência das forças de atracção de Coulomb o electrão é deflectido da sua trajectória perdendo energia. Esta perda de energia é emitida sob a forma de radiação⁷, sendo que, a energia dos fotões resultantes pode ser, assintoticamente, até 100% da energia cinética dos electrões. Isto significa, que as perdas de energia devido a colisões radiativas são mais significativas que as colisões electrão – electrão. A secção eficaz diferencial em energia k do fotão radiado, para um electrão incidente com energia total E_0 num átomo de número atómico Z , é dada pela equação de Koch e Motz:

$$\frac{d\sigma_b}{dk} = \frac{4r_e^4 Z^2}{137k} \left\{ (1+\varepsilon^2) \left[\frac{\Phi_1(\xi)}{4} - \frac{1}{3} \ln Z - f(Z) \right] - \frac{2}{3} \varepsilon \left[\frac{\Phi_2(\xi)}{4} - \frac{1}{3} \ln Z - f(Z) \right] \right\} \quad (\text{II.20})$$

Onde $\varepsilon = E/E_0$ representa a energia total dispersa pelo electrão, $f(Z)$ é o factor de correcção de Coulomb. A equação II.20 é o resultado da aproximação de Born, não sendo válida para electrões incidentes de baixa energia. A secção eficaz,

$\frac{d\sigma_b}{dk}$, varia aproximadamente com $1/k$ e devido à sua dependência com Z^2 , este

⁷ “Bremsstrahlung” ou radiação de travagem

efeito é mais relevante em materiais com elevado numero atómico. A distribuição angular dos fótons da radiação de travagem é importante.

II.3.4 Dispersão elástica

Quando ocorre uma interacção elástica, o electrão incidente é deflectido sem que ocorra excitação do núcleo, perdendo só uma pequena quantidade de energia cinética de modo a que haja conservação do momento e da energia cinética total entre as duas partículas [Eva55]. As colisões elásticas com o núcleo são significativas somente para o caso em que a energia dos electrões incidentes é baixa (< 100 eV). Dado que a massa do átomo é muito maior do que a massa do electrão incidente, a energia perdida por este é muito pequena comparando com a sua energia inicial sendo normalmente desprezada, o que é equivalente a assumir que o átomo tem uma massa infinita. Sendo assim, a secção eficaz diferencial angular, $d\sigma_R/d\Omega$, é descrita pela equação de Rutherford:

$$\frac{d\sigma_R}{d\Omega} = \frac{r_e^4 Z^2 e^4 m_0 c / \beta p}{4 \sin^4(\theta/2)} \quad (\text{II.21})$$

onde p é o momento do electrão incidente, θ é o ângulo de dispersão, β é a velocidade do electrão incidente em termos da velocidade da luz, Z é o número atómico do átomo dispersor, m_0 é a massa em repouso do electrão, c é a velocidade da luz e $r_e = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 mc^2}$ é o raio clássico do electrão. Devido, à

dependência com $\frac{1}{\sin^4(\theta/2)}$, a maior parte destas interacções resultam numa pequena deflexão angular por parte do electrão.

II.4 PODER DE PARAGEM⁸ DOS ELECTRÕES E POSITRÕES

Em dosimetria, é fundamental termos informação acerca da forma como as partículas carregadas, tal como os electrões perdem a sua energia ao longo da sua trajectória na matéria. Nesta secção, vou analisar a perda de energia de uma forma continua.

Macroscopicamente, pode afirmar-se que as colisões inelásticas ocorrem em elevado número, fomentando pequenas flutuações na energia total perdida pelos electrões na sua trajectória. A penetração de um electrão num dado meio, assumindo-se que as partículas perdem a sua energia de uma forma linear e contínua, pode ser avaliada pelo poder de paragem, $S = -dE/dx$, expresso em MeVcm⁻¹. Tendo em conta, a densidade do material, define-se o poder de paragem mássico (S/ρ) expresso em MeV.cm²g⁻¹, sendo que:

$$\left(\frac{S}{\rho}\right)_{\text{total}} = \left(\frac{S}{\rho}\right)_{\text{col}} + \left(\frac{S}{\rho}\right)_{\text{rad}} \quad (\text{II.22})$$

em que $(S/\rho)_{\text{col}}$ representa a perda de energia devido a interacções coulombianas (ionizações e excitações) e $(S/\rho)_{\text{rad}}$ representa a perda de energia devido a colisões radiativas. A distinção destas duas formas de perda de energia é muito importante, dado que: a energia é depositada no volume que envolve o campo de ionizações dos electrões devido a colisões inelásticas, ao contrário da energia irradiada devido à radiação de travagem, que não contribui localmente para o cálculo de dose absorvida.

⁸ “Stopping power”

O poder de paragem mássico de colisão $\left(\frac{S}{\rho}\right)_{col}$, é definido pela seguinte equação [Leo86]:

$$\left(\frac{S}{\rho}\right)_{col} = \frac{2\pi r_e^2 m_0 c^2}{\beta^2} \left(\frac{N_A Z}{A}\right) \left[\ln \frac{\tau^2 (\tau + 2)}{2 \left(\frac{I}{m_0 c^2}\right)} + F(\tau) - \delta - 2 \frac{C}{Z} \right] \quad (II.23)$$

com

$$F(\tau) = \frac{1 - \beta^2 + \left[\frac{\tau^2}{8} - (2\tau + 1) \ln 2 \right]}{(\tau + 1)^2} \quad (II.24)$$

onde $\beta = v_0/c$, v_0 é a velocidade do electrão, T_0 é a energia cinética inicial do electrão, $\tau = T_0/m_0 c^2$, I é a energia de excitação média, δ é o factor de correcção para a densidade e o parâmetro C/Z é a correcção da orbital. Os valores mais recentes para os valores de I estão publicados no relatório 37 da ICRU⁹ [ICR87]. A figura 8 mostra o comportamento do poder de paragem de colisão em função da energia cinética dos electrões no ar e na água. O comportamento para baixas energias é devido ao factor $(1/v^2)$. É simplesmente devido ao facto que os electrões mais lentos demoram mais tempo a passar ao longo da matéria que electrões rápidos, e como tal perdem mais energia. O factor de correcção da densidade, δ , surge do facto do campo eléctrico da partícula tender para polarizar os átomos ao longo do percurso. Este efeito torna-se mais importante com o aumento da energia da partícula e depende da densidade do material. O factor de correcção da densidade reduz o valor de $\left(\frac{S}{\rho}\right)_{col}$ para energias relativistas, num meio condensado [ICR84].

⁹ International Commission on Radiation Units and Measurements

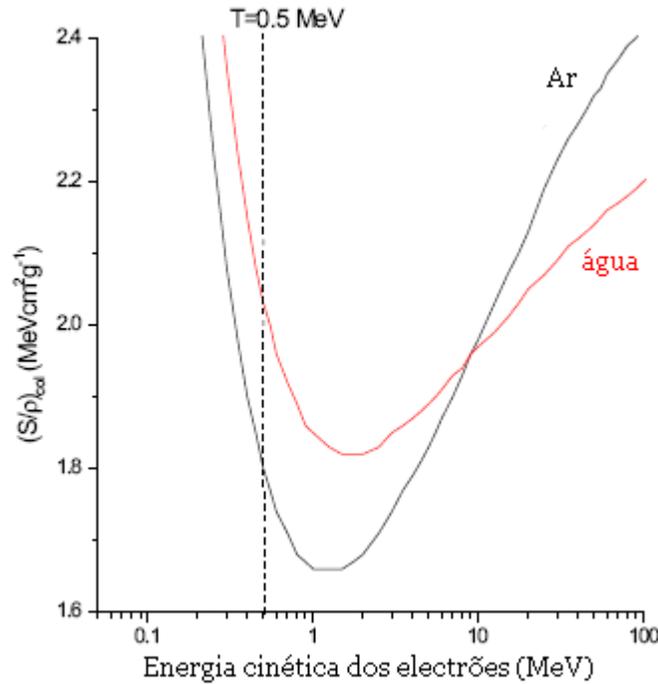


Figura 8 – Poder de paragem de colisão em função da energia cinética dos electrões para o ar e água

A diminuição do poder de paragem de colisão está relacionado com δ , e a figura 8 mostra que essa diminuição é menos pronunciada num meio condensado (água) em comparação com o ar. A correcção da orbital torna-se importante quando a velocidade da partícula incidente é comparável ou inferior à velocidade orbital dos electrões de ligação. Para essas energias, a assumpção que o electrão é estacionário em relação à partícula incidente já não é válida.

O poder de paragem mássico radiactivo $\left(\frac{S}{\rho}\right)_{rad}$ dá-nos informação acerca da radiação de travagem produzida pelos electrões, sendo determinado através da seguinte equação:

$$\left(\frac{S}{\rho}\right)_{rad} = \sigma_o \frac{N_A Z^2}{A} (T_o + m_o c^2) \overline{B}_r \quad (II.25)$$

Com $\sigma_0 = \left(\frac{1}{137}\right)\left(\frac{e^2}{m_0c^2}\right)$, onde T_0 é a energia cinética do electrão incidente e $\overline{B_r}$,

uma função que varia com T e Z_0 . Para $T \gg m_0c^2$ a equação II.25 fica:

$$\left(\frac{S}{\rho}\right)_{rad} \propto \frac{Z^2}{A} T_0 \overline{B_r} \quad (II.26)$$

O que implica um aumento quase linear do $\left(\frac{S}{\rho}\right)_{rad}$ com a energia cinética do electrão acima dos 0.5 MeV, tal como se pode verificar na figura seguinte.

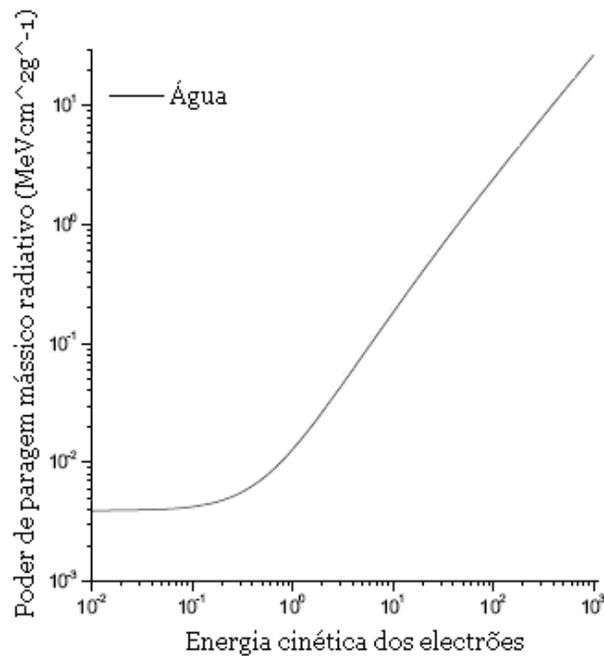


Figura 9 – Poder de paragem mássico radiactivo na água

A relação entre o poder de paragem radiactivo e o poder de paragem total é dada pela expressão [Wag95]:

$$\frac{\left(\frac{S}{\rho}\right)_{rad}}{\left(\frac{S}{\rho}\right)_{col}} = \frac{ZT_0}{1600m_0c^2} \quad (II.27)$$

onde Z é o número atômico do material e E a energia da partícula carregada em MeV. Da expressão anterior pode verificar-se que para electrões e positrões de baixa energia a perda de energia é fundamentalmente devida às interacções inelásticas coulombianas, enquanto que para energias mais elevadas a componente radiativa se torna gradualmente dominante.

Finalmente, a figura 8 mostra o poder de paragem mássico total, radiativo e de colisão para a água. Claramente se observa que, as perdas por colisão são dominantes na região de energias de interesse para o Cobalto – 60.

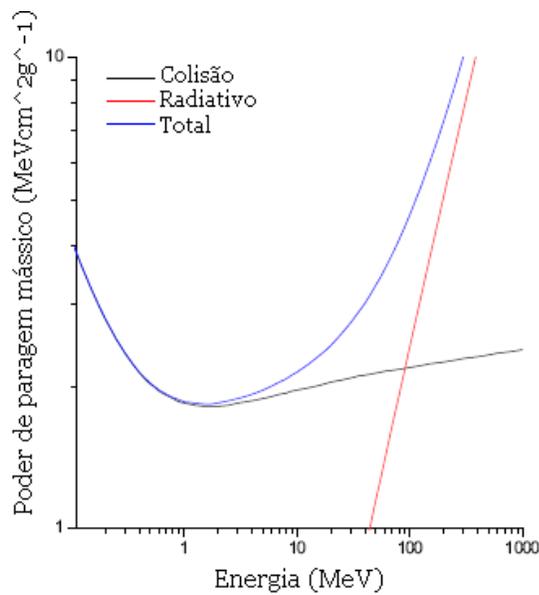


Figura 10 – Poder de paragem mássico total, de colisão e radiativo para electrões na água.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

B

- [BH87] M. J. Berger and J. H. Hubbell, “XCOM: Photon Cross Sections on a Personal Computer”, *Report NBSIR 87-3597* (National Bureau of Standards, Gaithersburg, MD), 1987.
- [BHS99] M.J.Berger, J.H.Hubbell, S.M. Seltzer, J.S. Coursey and D.S. Zucker, “XCOM: Photon Cross Sections Database - NIST Standard Reference Database 8 (XGAM)” *National Institute of Standards and Technology*, 1999.
- [Bie00] <http://physics.nist.gov/PhysRefData/Xcom/Text/XCOM.html>
A.F Bielajew, “Photon Monte Carlo Simulation”, *Chapter 12 in Fundamentals of the Monte Carlo Method for Neutral and Charged Particle Transport*, pp 161-178, University of Michigan, 2000.
- [BSR96] D. Brusa, G. Stutz, J. A. Riveros, J. M. Fernandez-Varea, F. Salvat, “Fast sampling algorithm for the simulation of photon Compton scattering”, *Nucl. Instrum. Meth. A* **379**, 167-175, 1996.

C

- [CHK97] D. E. Cullen, J. H. Hubbell and L. Kissel, “EPDL97 The evaluated data library 97 version”, *Report UCRL-50400* vol. 6, rev. 5 (Lawrence Livermore National Laboratory, Livermore, CA), 1997.

E

[Eva55] R. D. Evans, “The atomic nucleus”, *McGraw-Hill Book Company*, New York, 1955.

††

[HGØ80] J. H. Hubbell, H. A. Gimm and I. Overbo, “Pair, triplet, and total atomic cross sections (and mass attenuation coefficients) for 1 MeV-100 GeV photons in elements Z=1 to 100”, *J. Phys. Chem. Ref. Data* **9**, 1023-1147, 1980.

[HØ79] J.H. Hubbell and I. ØverbØ, “Relativistic atomic form factors and photon coherent scattering cross sections”, *J. Phys. Chem. Ref. Data* **9**: 69, 1979

|

[IAE87] “Absorbed dose Determination in Photon and Electron Beams: an international Code of Practice”, *Technical Report Series 277*, International Atomic Energy Agency, Vienna, 1987

[ICR84] “Radiation Dosimetry: Electron Beams with energies between 1 and 50 MeV”, ICRU Report 35, International Commission on Radiation Units and Measurements, Bethesda, MD, 1984.

K

[KHA84] Khan, F. *The Physics of Radiation Therapy*, 1984.

[Kra88] K. S. Krane, “Introductory Nuclear Physics”, *John Wiley & Sons*, New York, 1988.

L

[Leo86] W. R. Leo, “Passage of Radiation through Matter”, *Chapter 2 in Techniques for Nuclear and Particles Physics Experiments*, pp 17-63, Springer – Verlag, 1986.

S

- [SHS88] E. B. Saloman, J. H. Hubell, Scofield, “X-ray attenuation cross sections for energies 100 eV to 100 keV and elements Z=1 to Z=92.” *At. Data Nucl. Data Tables* **38**, 1-197, 1988.

W

- [Wag95] D. Wagenaar, “Radiation physics principles”, 1995.

Capítulo III

III MÉTODOS DE MONTE CARLO

Ao longo dos anos, os diferentes programas de simulação das interacções de partículas e do transporte da radiação utilizando métodos de Monte Carlo (MC) foram sendo gradualmente aperfeiçoados, nomeadamente ao nível das teorias e algoritmos que descrevem o transporte de electrões [SCB97, BS01], que tornaram estes códigos numa importante e crucial ferramenta para a compreensão de todos os fenómenos que envolvem a interacção da radiação ionizante com a matéria. Consequentemente, estes métodos são largamente utilizados em diversas áreas e aplicações, tais como; a Protecção Radiológica e Dosimetria [BVBo6, OS01, OSB99, OO05]. Diferentes métodos de simulação de transporte de radiação foram desenvolvidos. Os programas de simulação por métodos de Monte Carlo mais utilizados em Física das Radiações são o EGS4 [NR98, MHN90, RS93], o MCNP [Bri00] e o PENELOPE [SFS06]. A exactidão destes métodos depende do tipo e dos intervalos de energia das interacções físicas consideradas, da exactidão na descrição física e geométrica da fonte e exactidão na descrição da geometria e dos materiais constituintes do sistema físico considerado, entre outros.

Estes métodos diferem dos outros métodos de simulação por ser de carácter estocástico, normalmente utilizando números pseudo – aleatórios métodos de

amostragem de variáveis aleatórias recorrendo a conceitos da Teoria das Probabilidades e da Estatística, por oposição aos métodos determinísticos.

Os métodos de Monte Carlo utilizados neste trabalho são: o código MCNPX [Pelo5] e o código PENELOPE [SFS06]. O código MCNPX permite o transporte de fótons e electrões num intervalo de energias de 1 keV¹⁰ a 10 GeV¹¹, enquanto que o código PENELOPE permite o transporte de todos os tipos de partículas (excepto reacções nucleares) num intervalo de energias de 50 eV a 10⁹ eV.

III.1 MODELOS ANALÓGO E NÃO – ANALÓGO

Quando as partículas são transportadas e analisadas de interacção em interacção, utilizando as probabilidades naturais de ocorrência de uma dada interacção, o modelo representado é o **modelo analógo**. Este modelo é adequado para o transporte de partículas electricamente neutras tais como os fótons, cujo um livre percurso médio varia entre a fracção do mm e as dezenas de cm (na maior parte das aplicações e materiais considerados) permitindo a modelização de cada interacção ao longo do percurso da partícula no material.

Devido ao elevado alcance e características (atrações e repulsões entre cargas eléctricas) das interacções de Coulomb, o número de “colisões” de uma partícula carregada ao longo do seu percurso num dado material é muito elevado, considerando o enorme número de cargas eléctricas (electrões orbitais e prótons nos núcleos) existentes no material percorrido. Consequentemente, para o transporte de electrões o modelo analógo não é adequado, uma vez que este iria consumir muito tempo de simulação. Com o objectivo, de reduzir o tempo de simulação, Berger [Ber63] introduziu a metodologia consistindo na descrição condensada das interacções das partículas carregadas¹². Esta metodologia

¹⁰ 1 keV = 10³ eV

¹¹ 1 GeV = 10⁹ eV

¹² “Condensed history”

descreve o efeito agregado de múltiplas colisões que ocorrem quando um electrão viaja durante um determinado percurso. A descrição do transporte de partículas carregadas é efectuada “condensando” um elevadíssimo número de interacções de carácter coulombiano em variáveis (perda de energia e deflexão angular, entre outras) utilizadas para transportar a partícula no interior do material. A variação da direcção da partículas por inúmeras colisões elásticas é efectuada utilizando as *teorias de dispersão múltipla* de Molière e de Goudsmit-Saunderson [GS40a, GS40b Lew50] que permitem calcular analiticamente ou por amostragem aleatória os valores do ângulo de deflexão entre dois pontos consecutivos ao longo do trajecto das partículas.

Os algoritmos inicialmente implementados nas diversas versões dos códigos ETRAN e ITS¹³ utilizados para a simulação do transporte de electrões e desenvolvidos com base nas teorias desenvolvidas nomeadamente por Berger, foram posteriormente adoptados pelos programas da família MCNP para o transporte de fotões / electrões.

No presente capítulo, irá ser apresentada uma breve descrição do programa de simulação por métodos de Monte Carlo denominado PENELOPE (PENetration and Energy LOss of Positrons and Electrons), versão 2006. Os algoritmos de simulação implementados em linguagem de programação FORTRAN utilizam secções eficazes calculadas analiticamente para os diferentes mecanismos de interacção ou recorrem a bases de dados experimentais de secções eficazes, sendo aplicáveis num intervalo de energias que se estende desde as poucas centenas de eV até aproximadamente 1 GeV. O transporte de fotões é elaborado seguindo o método convencional, ou seja, todos os eventos são simulados numa sucessão cronológica, enquanto que o transporte dos electrões distingue entre colisões fortes e fracas. As colisões fortes, nas quais a energia e o ângulo de deflexão são superiores aos valores estabelecidos como “valores de

¹³ Integrated Tiger Series

corte”, são tratadas em detalhe. Pelo contrário, quando a energia e o ângulo de deflexão está abaixo do valor descrito como valor de corte, temos uma colisão fraca que é descrita recorrendo aos algoritmos e técnicas de amostragem de dispersão múltipla.

Foram definidas duas diferentes formas de implementação do modelo: a classes I e a classe II. Na classe I, utilizada no código MCNPX, todas as interacções dos electrões são agrupadas, usando um número predefinido de comprimento percorrido e de energia, sendo a amostragem aleatória das interacções computada no final de cada passo. A classe II, utilizada no PENELOPE, agrupa as colisões de baixa energia e baixos ângulos de deflexão, e trata separadamente os eventos que geram partículas secundárias.

Nas secções seguintes, irá ser apresentada uma breve descrição do transporte de fótons e com mais detalhe o transporte de electrões em ambos os métodos de simulação Monte Carlo utilizados.

III.2 TRANSPORTE DE FOTÕES

Os fótons sofrem diversos tipos de interacção, ao atravessarem um meio material, tal como foi descrito no capítulo II.

Em geral, a simulação do transporte dos fótons num material é estruturada em quatro passos principais, tanto no código MCNPX como no PENELOPE:

1. Determinação da distância $l(t)$ percorrida por um fóton entre duas interacções sucessivas, determinada através da seguinte equação:

$$l(t) = -\frac{1}{\mu(T)} \ln(\xi) = -\lambda \ln(\xi) = -\frac{A}{N_A \rho \sigma_{\text{total}}} \ln(\xi) \quad (\text{III. 1})$$

onde A , N_A e ρ são, respectivamente, a massa atômica, o número de Avogadro e a densidade do material, σ_{total} é a secção eficaz total, ξ é o número pseudo aleatório gerado entre $[0, 1]$ e λ é o livre percurso médio. Um número pseudo aleatório é um número que se aproxima de um número aleatório, contudo, é gerado por uma sequência determinista, ou seja, uma sequência finita e portanto cíclica.

Para um meio homogéneo de densidade ρ , constituído apenas por átomos de massa A , $\mu(T)$ é definido pela seguinte equação:

$$\frac{\mu(T)}{\rho} = \frac{N_A}{A} \sum_j \sigma_j(T) \quad (III.2)$$

onde N_A é o número de Avogadro, σ_j a secção eficaz parcial para cada tipo (j) de interacção. Para um meio heterogéneo,

$$\frac{\mu(T)}{\rho} = \sum_i w_i \left[\frac{\mu(T)}{\rho} \right]_i \quad (III.3)$$

onde, w_i é a fracção de peso de cada constituinte atômico i do meio heterogéneo.

2. Transporte das partículas, tendo em conta as restrições geométricas, definidas pelo utilizador aquando o desenvolvimento do trabalho.
3. Selecção do tipo de interacção que um fóton sofre depois de ter percorrido uma determinada distância, de acordo com a secção eficaz total (σ_{total}). Para cada processo de interacção existe uma probabilidade de ocorrência, designada por secção eficaz. Por conseguinte, a selecção do tipo de interacção é baseada na secção eficaz do fóton para cada processo de interacção (σ_j).
4. Escolha aleatória do resultado da interacção, por amostragem da energia e do ângulo de deflexão, de acordo com as respectivas secções eficazes diferenciais em energia e em ângulo.

III.3 O CÓDIGO MCNPX

O MCNPX [Br100] é um dos programas de simulação utilizando métodos de Monte Carlo mais utilizado para a simulação do transporte de partículas. O programa está escrito em Fortran 90 tendo sido desenvolvido pelo Laboratório Nacional de Los Alamos (LANL). É uma extensão do código MCNP, o qual é utilizado para o transporte de neutrões, electrões e fotões no intervalo de energias de 1 keV a 1 GeV para electrões, 1 keV a 100 GeV para fotões e de 10^{-11} MeV a 20 MeV para neutrões.

III.3.1 Transporte de electrões

Quando penetram na matéria, os electrões sofrem dispersões elásticas, transferindo uma parte desprezável da sua energia cinética para o átomo ou molécula, ou são dispersos inelásticamente, provocando a ionização ou excitação do átomo envolvido. Para energias iniciais elevadas, os electrões podem perder parte da sua energia pela produção de radiação de travagem.

III.3.2 Passos e sub-passos dos electrões

Para se avaliar a trajectória de um electrão, considera-se uma sequência de passos e sub-passos:

$$(0, E_0, t_0, \bar{\mathbf{u}}_0, \bar{\mathbf{r}}_0), (s_1, E_1, t_1, \bar{\mathbf{u}}_1, \bar{\mathbf{r}}_1), (s_2, E_2, t_2, \bar{\mathbf{u}}_2, \bar{\mathbf{r}}_2), \dots$$

onde s_n , E_n , t_n , \mathbf{u}_n e \mathbf{r}_n são o comprimento total percorrido, energia, tempo, direcção e posição do electrão no final dos n passos. A média entre a energia e o comprimento de cada passo estão relacionados pela seguinte expressão:

$$E_{n-1} - E_n = - \int_{s_{n-1}}^{s_n} \frac{dE}{ds} ds \quad (\text{III.4})$$

onde $-dE/ds$ é o poder de paragem total expresso em unidades de energia por unidade de comprimento. Esta quantidade depende da energia e do material no qual o electrão se está a movimentar.

Os passos dos electrões com trajectórias iguais a $s = s_{n-1} - s_n$, são denominados *passos de energia*. Os códigos ETRAN seleccionam o comprimento de cada passo $\{s_n\}$, tal que, a perda de energia média seja de 8,3 % em cada passo, ou seja, que se verifique a seguinte equação:

$$\frac{E_{n-1}}{E_n} = k \quad (\text{III.5})$$

com $k = 2^{-1/8}$. No código MCNPX para aumentar a precisão destes cálculos, os passos s são divididos em m sub – passos, cada um com comprimento igual a s/m . Os ângulos de deflexão e a produção de partículas secundárias são demonstrados a partir destes sub-passos. O número inteiro m depende somente do número atómico Z do material. Empiricamente, foi determinado um intervalo de valores de m , em que $m = 2$ para $Z < 6$ e $m = 15$ para $Z > 91$.

III.3.3 Energia

A equação de Bethe-Block descreve a energia média perdida pelos electrões durante a sua trajectória. Uma vez que, a energia perdida em cada passo é dada pela soma das variações de energia de todas as colisões individuais, a energia perdida pelo electrão é uma grandeza com carácter estocástico verificando-se flutuações no seu valor que são descritas pela distribuição de Landau [Lan65]. Esta distribuição é descrita por uma função de probabilidade $f(s, \Delta) d\Delta$, em que Δ é a energia perdida em cada passo s .

$$f(s, \Delta) = \frac{1}{\xi} \phi(\lambda) \quad (\text{III.6})$$

Sendo, λ definido por:

$$\lambda = \frac{\Delta - \Delta^{mp}}{\xi} \quad (\text{III.7})$$

onde, Δ^{mp} é o valor mais provável de energia perdida, definido por:

$$\Delta^{mp} = \xi \left\{ \ln \left[\frac{2m_e c^2 \beta^2 \gamma^2 \xi}{I^2} \right] - \beta^2 + 1 - \gamma_E \right\} \quad (\text{III.8})$$

onde, m_e é a massa do electrão, c é a velocidade da luz, $\beta = v/c$, sendo v a velocidade do electrão, I é a energia de excitação média, γ_E é a constante de Euler. O parâmetro ξ , é definido por;

$$\xi = \frac{2\pi e^4 NZ}{m_e v^2} s \quad (\text{III.9})$$

onde, e é a carga do electrão, NZ é o numero de densidade dos electrões atómicos, m_e e v são a massa e velocidade do electrão, respectivamente, e s é o passo de energia.

A função $\phi(\lambda)$ é definida pela seguinte expressão:

$$\phi(\lambda) = \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} e^{-u \ln u - \lambda u} \sin \pi u \, du \quad (\text{III.10})$$

Para alvos de espessura fina e com elevado número atómico, a teoria desenvolvida por Landau foi modificada por Blunck e Leisegang [BL50] de forma a ter em conta a energia de ressonância transferida entre os electrões e as camadas electrónicas dos átomos. Esta modificação, é a convolução entre a distribuição de Landau e a distribuição de Gauss, definida por:

$$f^*(s, \Delta) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma}} \int_{-\infty}^{+\infty} f(s, \Delta') \exp \left[-\frac{(\Delta - \Delta')^2}{2\sigma^2} \right] d\Delta' \quad (\text{III.11})$$

III.3.4 Ângulos de deflexão

No modelo não – analógico, o efeito do elevado número de dispersões elásticas que ocorrem enquanto um electrão percorre uma determinada trajectória na matéria, é determinado utilizando a teoria de dispersão múltipla. O código MCNPX utiliza a teoria de Goudsmit – Saunderson para determinar a distribuição de probabilidades dos ângulos de deflexão [GS40a,GS40b]. Esta teoria é uma solução exacta da distribuição angular das partículas carregadas que percorrem uma determinada distância num material, considerando uma secção eficaz constante ao longo da distância percorrida. A distribuição de Goudsmit – Saunderson para os ângulos de deflexão é dada por:

$$F_{GS}(s/m, \mu) = \sum_{l=0}^{\infty} \left(1 + \frac{1}{2}\right) e^{-s/mG_l} P_l(\mu) \quad (\text{III.12})$$

onde s/m é o comprimento de cada sub-passo, $\mu = \cos(\theta)$ é o ângulo de deflexão exactamente no início do sub-passo, $P_l(\mu)$ é o polinómio de Legendre e G_l é definido por:

$$G_l = 2\pi N \int_{-1}^{+1} \frac{d\sigma}{d\Omega} [1 - P_l(\mu)] d\mu \quad (\text{III.13})$$

em função da secção eficaz diferencial em ângulo ($d\sigma/d\Omega$) e da densidade atómica N do meio.

Para electrões com energias inferiores a 0.256 MeV, as secções eficazes são extraídas das tabelas numéricas desenvolvidas por Riley [RMB75]. Para electrões com elevadas energias a secção eficaz é uma combinação das secções eficazes desenvolvidas por Mott [Mot29] e Rutherford [Rut11].

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{Z^2 e^2}{p^2 v^2 (1 - \mu + 2\eta)^2} \left[\frac{\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\text{Mott}}}{\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\text{Rutherford}}} \right] \quad (\text{III.14})$$

sendo, e , p e v a carga, o momento e a velocidade do electrão, respectivamente, e Z o numero atómico. Com,

$$\eta = \frac{1}{4} \left(\frac{\alpha mc}{0.885p} \right)^2 Z^{2/3} \left[1.13 + 3.76 \left(\alpha Z / \beta \right)^2 \sqrt{\frac{4}{\tau + 1}} \right] \quad [\text{Sel88}] \quad (\text{III.15})$$

onde, α é a constante de estrutura fina, m é a massa de repouso do electrão, $\beta = v/c$ e τ é a energia do electrão em unidades de massa de repouso do electrão.

III.3.5 Radiação de travagem e raio delta (δ)

O código MCNPX utiliza o formalismo descrito por Bethe – Heitler e Born [BH34], para proceder à amostragem da radiação de travagem. Todos os dados referentes à probabilidade de ocorrência deste tipo de radiação, isto é, distribuição da energia e direcção dos fotões estão disponíveis em tabelas. Ao nível de cada sub-passo, e de acordo com as probabilidades de ocorrência de radiação de travagem, o código MCNPX determina se um fotão é criado ou não. Se houver a produção de um fotão, os valores da nova energia do fotão são obtidos a partir da tabela de distribuição de energia. A direcção do fotão criado tendo em conta a direcção do electrão incidente, também é obtida a partir de tabelas de dados. Relativamente, à direcção do electrão, esta não é alterada devido á produção de um fotão, uma vez que a deflexão angular do electrão é controlada pela teoria de dispersão múltipla. Contudo, no final de cada passo, é reduzida à energia do electrão a energia de cada fotão produzido, uma vez que a análise para o cálculo das novas energias é baseada em processos não-radiativos.

De acordo com a secção eficaz descrita por Moller [Mol32], a probabilidade de existir uma transferência de energia superior à energia de corte definida (ϵ_c), é dada pela equação:

$$\sigma(\varepsilon_c) = \int_{\varepsilon_c}^{\infty} \frac{d\sigma}{d\varepsilon} d\varepsilon \quad (\text{III.16})$$

Sendo assim, a distribuição de probabilidade normalizada para a criação de electrões secundários com $\varepsilon > \varepsilon_c$ é dada por:

$$g(\varepsilon, \varepsilon_c) d\varepsilon = \frac{1}{\sigma(\varepsilon_c)} \frac{d\sigma}{d\varepsilon} d\varepsilon \quad (\text{III.17})$$

Ao nível de cada sub-passo, o código MCNPX utiliza o valor de $\sigma(\varepsilon_c)$ para determinar se existe ou não a criação de um raio δ . Se sim, a equação (II.17) é utilizada para amostrar a energia de cada electrão secundário formado. Depois de obtida a energia, o ângulo a partícula primária e a direcção da partícula secundária criada é definido tendo em conta a conservação do momento. Neste caso, nem a energia nem a direcção da partícula primária sofrem alterações, porque mais uma vez e tal como acontecia para a radiação de travagem, o transporte de electrões é descrito pela teoria de dispersão múltipla.

III.4 ESTRUTURA DO PROGRAMA MCNPX

No programa MCNPX, toda a informação referente à simulação que se pretende desenvolver está inserida num único ficheiro. A terminologia específica do programa permite definir volumes (“cells”) a partir da intersecção de zonas do espaço delimitadas por superfícies ou através de formas geométricas tais como cubos, cilindros e esferas, entre outras. O ficheiro de entrada pode apresentar duas formas distintas; iniciar – correr e continuar – correr. No desenvolvimento deste trabalho foi utilizado somente o primeiro formato. A forma iniciar – correr é tipicamente utilizada para formular um problema de Monte Carlo (com descrição da geometria, materiais, *tallies*, entre outros), o qual pode ser

executado por uma linha de comandos. Este formato deve ser descrito da seguinte forma; inicialmente devem descrever-se as superfícies que definem geometricamente as células que descrevem o problema, de seguida, através da carta *SDEF* deve descrever-se a fonte de radiação, seguidamente os materiais das superfícies descritas e por último as *tallies*.

III.4.1 Tallies

A *tally* é um conceito utilizado no código MCNPX, que está associada ao tipo de informação (fluxos de partículas através de superfícies, energia depositada ou dose absorvida no interior de um volume, sinais originados num detector, etc.) que se pretende extrair da simulação efectuada e que aparece nos ficheiros de saída do programa para ser analisada, histogramada e visualizada. O código MCNPX permite especificar diferentes tipos de *tallies*, nomeadamente, seis *tallies* para fótons e quatro para electrões. Na tabela seguinte, estão representados os tipos de *tallies* bem como o resultado que se obtém da utilização de cada uma delas.

Tabela 1 – Identificação das *tallies*, pelo tipo e tipo de partículas

Fotões	Electrões	Descrição
F1: P	F1:E	Corrente numa superfície
F2: P	F2:E	Fluxo numa superfície
F4: P	F4:E	Fluxo numa célula
F5a: P		Fluxo num ponto ou num detector em forma de anel
F6:P		Energia depositada ao longo de um percurso
F8:P	F8:E	Energia depositada em pulsos num detector

Adicionalmente, as designadas “mesh tallies” permitem efectuar estudos e analisar dados a mais de uma variável,

Para o desenvolvimento deste trabalho, a *tally* utilizada foi a F6 que permite o cálculo da energia depositada num dado volume. Deste modo apresento de seguida uma descrição mais detalhada desta *tally*.

III.4.2 A Tally F6

A tally F6 descreve a deposição de energia ao longo de um percurso, sendo determinada através da seguinte equação:

$$F_6 = \frac{\rho_a}{\rho_g} \int_V \int_t \int_E H(E) \Phi(\vec{r}, E, t) dE dt \frac{dV}{V} \quad [\text{MeV/g}] \quad (\text{III.18})$$

onde,

ρ_a = densidade atómica (átomo/barn-cm)

ρ_g = densidade (g/cm³)

$H(E)$ = resposta térmica

Para fótons, a resposta térmica é determinada através da seguinte expressão:

$$H(E) = \sigma_T(E)H_{\text{média}}(E) \quad (\text{III.19})$$

onde

$$H_{\text{média}}(E) = \sum_{i=1}^3 p_i(E) * (E - \bar{E}_{\text{out}})$$

sendo,

$i=1$ dispersão de Compton

$i=2$ produção de pares ($\bar{E}_{\text{out}} = 1.022016 = 2m_0c^2$)

$i=3$ efeito fotoelétrico

III.5 CÓDIGO PENELOPE

O código PENELOPE implementa um esquema de simulação misto [Ber63; RK76; AB84], o qual combina a simulação detalhada das colisões fortes com a simulação condensada das colisões fracas. A simulação mista oferece vantagens em relação à simulação condensada uma vez que, as distribuições espaciais são simuladas com maior exactidão, os eventos nas interfaces são assegurados e a possível dependência dos resultados em função dos parâmetros definidos pelo utilizador é amplamente reduzida.

A velocidade da simulação é controlada pelos parâmetros C_1 e C_2 e pelos valores de corte de energia μ_c , W_{cc} e W_{cr} . O parâmetro C_1 determina o valor do livre percurso médio entre dois eventos elásticos fortes e C_2 especifica o valor máximo de perda de energia num só passo. Os valores μ_c , W_{cc} e W_{cr} representam os valores da energia de corte para colisões elásticas, inelásticas e radiação de travagem. As colisões fracas verificam-se quando se verificarem as seguintes condições $\mu \leq \mu_c$, $W \leq W_{cc}$ e $W \leq W_{cr}$.

III.5.1 Dispersão elástica

As colisões elásticas são descritas utilizando o modelo modificado de Wentzel (SFAO1), no qual a secção eficaz diferencial é descrita em função da distribuição de Wentzel e uma distribuição delta ou triangular. Os coeficientes deste modelo são determinados para que o livre percurso médio entre colisões elásticas e o primeiro e segundo momentos da deflexão angular, $\mu = \frac{(1 - \cos\theta)}{2}$ em cada colisão, coincidam com os resultados obtidos através da secção eficaz de onda parcial [SFAO1].

De notar, que este modelo facilita a simulação e os resultados obtidos não diferem significativamente dos resultados obtidos através da secção eficaz de onda parcial [SFAO1].

III.5.2 Dispersão inelástica

A dispersão inelástica é descrita utilizando a aproximação de Born também denominado modelo GOS). A principal característica desta aproximação é o facto da secção eficaz diferencial ser obtida através do produto de uma factor puramente cinemático por um factor estrutural, sendo independente da energia do electrão. As ionizações / excitações elementares são descritas através do modelo do oscilador de Sternheimer-Liljequist (SFAO1). Para energias de recuo elevadas (i.e. valor do momento transferido elevado) a resposta de cada oscilador é descrita tendo em conta as secções eficazes enunciadas por Moller. Este modelo determina respostas muito semelhantes á descritas pela ICRU¹⁴, e está descrito de forma a assegurar exactidão e ao mesmo tempo, permitir uma amostragem aleatória da energia perdida e da energia de recuo através de métodos puramente analíticos.

¹⁴ International Commission on Radiation Units and Measurements

III.5.3 Radiação de Travagem

A energia dos fotões resultantes da radiação de travagem é amostrada tendo em conta tabelas com valores de secção eficaz diferencial, obtidos analiticamente por Seltzer and Berger [SB85]. Para um dado material, a secção eficaz diferencial depende da energia do electrão e da energia do fotão emitido, sendo portanto, simples de se obter a energia do fotão através de técnicas de interpolação/amostragem [SFA01].

A distribuição angular intrínseca dos fotões de radiação de travagem (em relação á direcção do electrão) é amostrada tendo em conta os valores analíticos obtidos por Kissel, Quarles e Pratt [KQP83].

III.5.4 Mecanismo de transporte

Tal como foi mencionado anteriormente, o programa de simulação PENELOPE utiliza um método de simulação misto. A secção eficaz total (isto é, a soma das contribuições por parte da dispersão elástica, inelástica e radiação de travagem) é função da energia perdida e de uma variável que depende do ângulo de deflexão da seguinte forma, $\mu = \frac{(1 - \cos\theta)}{2}$.

A estratégia utilizada neste programa de simulação consiste em transportar o electrão em passos livres (onde a direcção e a energia se mantem constante) e simular os eventos de interacção no final de cada passo livre. O comprimento de cada passo (s) é definido em função do livre percurso médio para colisões fortes, ou seja;

$$s = -\lambda_{el}^h \ln \xi \tag{III.20}$$

onde, λ_{el}^h representa o livre percurso médio na dispersão elástica e numa colisão forte e ξ é o numero aleatório gerado.

Para se definir a nova direcção do electrão e o deslocamento realmente efectuado, é utilizado o *random-hinge method*, em que:

1. Inicialmente, o electrão percorre uma distância τ , gerada aleatoriamente entre $(0, s)$, na direcção inicial.
2. Em seguida, são analisadas as colisões fracas que aconteceram durante o passo s . A distribuição angular exacta produzida pelas colisões fracas ao longo de um passo s , é definida pela equação:

$$F^{(s)}(s; \chi) = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{4\pi} \exp(-s/\lambda_{el,l}^s) P_l(\cos \chi) \quad (\text{III.21})$$

onde, χ é o ângulo polar que define a direcção do electrão, $\lambda_{el,l}^s$ representa o livre percurso médio numa colisão fraca e dispersão elástica, com;

$$\frac{1}{\lambda_{el}^s} = N 2\pi \int_0^{\theta_c} [1 - P_l(\cos \theta)] \frac{d\sigma_{el}(\theta)}{d\Omega} \sin \theta d\theta \quad (\text{III.22})$$

sendo, θ o ângulo de dispersão.

3. Finalmente, o electrão move-se uma distância $s-\tau$ na nova direcção.

A Figura 11 ilustra os diversos parâmetros deste método e o seu significado no transporte do electrão.

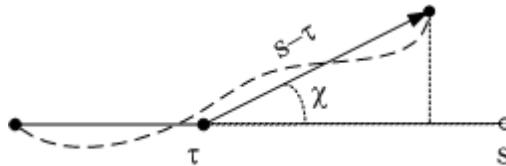


Figura 11 – Simulação do efeito global das colisões fracas entre duas colisões fortes consecutivas, tendo em conta o random-hinge method.

A secção eficaz total para colisões fortes é determinada pela seguinte equação:

$$\sigma^{(h)}(E) = \int_{\mu_c}^1 d\mu \int_{W_c}^E \frac{d\sigma^{(h)}}{(dWd\mu)}$$

Onde, $d\sigma^{(h)}/(dWd\mu)$ representa a secção eficaz diferencial total para colisões fortes (ou seja, $W < W_c$ e $\mu < \mu_c$).

O livre percurso médio, λ^h , entre eventos de colisões fortes é definido pela equação, $\lambda^h = N\sigma^{(h)}(E)$, onde N é o numero de átomos por unidade de volume.

De uma forma semelhante, as colisões fracas são igualmente descritas pela secção eficaz diferencial total, $d\sigma^{(s)}/(dWd\mu)$, com $W > W_c$ e $\mu > \mu_c$.

Os valores de corte utilizados neste método de simulação permitem-nos obter pequenas perdas de energia ao longo de cada passo. Ou seja, em primeiro lugar é possível estabelecer um limite máximo de perda de energia ao longo de cada passo com um comprimento específico e em segundo lugar, o inverso do livre percurso médio não tem um máximo (figura 9), dado que:

$$\lambda_{el}^h = \max \left\{ \lambda_{el}(E), \min \left[C_1 \lambda_{el,1}(E), C_2 \frac{E}{S(E)} \right] \right\} \quad (\text{III.23})$$

onde, C_1 e C_2 são constantes definidas no ficheiro de entrada (tipicamente, menor que 0.1). Isto implica que a dependência de energia pode ser tida em conta de uma forma eficiente. Empiricamente, verifica-se que os resultados de simulação são de uma maneira geral estáveis, para variações de C_1 e C_2 no intervalo (0, 0.1). [BSF95].

A Figura 12 ilustra a dependência com a energia do inverso do livre percurso médio (probabilidade de interacção por unidade de comprimento) para colisões

fortes de electrões em alumínio e ouro para diversos valores dos parâmetros C_1 e C_2 . As curvas foram determinadas utilizando $W_{cc}=W_{cr}=100$ eV.

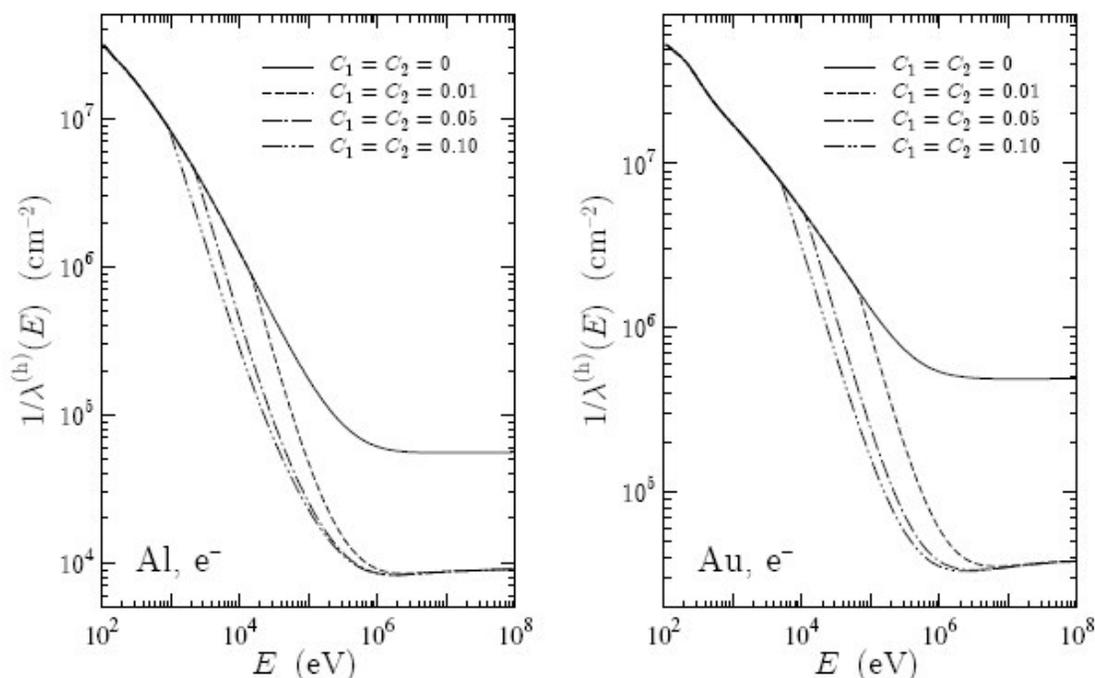


Figura 12 – Inverso do livre percurso médio (probabilidade de interacção por unidade de comprimento) para colisões fortes de electrões em alumínio e ouro. As curvas foram determinadas utilizando $W_{cc}=W_{cr}=100$ eV. De notar que, fazendo variar os valores de C_1 e C_2 , o inverso do livre percurso médio não pode ser inferior às contribuições das colisões inelásticas fortes e de radiação de travagem. [SFS06]

III.6 ESTRUTURA DO CÓDIGO PENELOPE

A base deste código são as subrotinas denominadas por, *penelope.f*, *penvared.f*, *pengeom.f* e *timer.f* implementadas em linguagem de programação *FORTRAN*, as quais necessitam de um programa principal para funcionarem.

A versão do código *PENELOPE* utilizada no desenvolvimento deste trabalho permite a utilização de três programas principais; o *Penslab*, o *Pencyl* e o *Penmain*. Estes programas permitem a simulação do transporte de fótons e electrões, sendo porém a descrição da geometria de irradiação diferente para

cada um deles. O Penslab permite a simulação do transporte de um feixe de fótons/electrões ao interagirem num bloco, o Pencyl em geometrias cilíndricas e o Penmain em superfícies quadráticas. Devido às características geométricas da unidade de irradiação, no desenvolvimento do trabalho foi utilizado o programa principal Penmain, uma vez que permitiu a modelação rectangular da câmara de irradiação, bem como de toda a unidade de irradiação.

III.6.1 Programa principal – Penmain

Sendo o Penmain um programa principal, necessita de subrotinas que permitem o seu funcionamento. Assim, existem 4 diferentes subrotinas essenciais para a simulação, são elas, *penelope.f*, *pengeom.f*, *timer.f* e *penvared.f*. O ficheiro *penelope.f* (contém cerca de 11000 linhas de código FORTRAN) consiste em quatro blocos de subprogramas, nomeadamente subrotinas para cálculos preliminares e interface com o utilizador, procedimentos para a simulação dos diferentes processos de interacção, subrotinas numéricas e ainda subrotinas de transporte. O ficheiro *Pengeom.f* elabora o transporte das partículas ao longo das superfícies quadráticas. Este inclui, um programa denominado GVIEW2D, o qual é essencial para visualizar a geometria e elaborar a depuração. O *Penvared.f* contém subrotinas que automaticamente elaboram a divisão das partículas (uma partícula é dividida em n partículas iguais, definindo a sua relevância), os mecanismos de roleta russa (a partícula deixa de ser seguida de acordo com uma determinada probabilidade) e os mecanismos de interacção da radiação com a matéria. E por ultimo, o ficheiro denominado *timer.f* contém subrotinas que permitem especificar o tempo da simulação.

O programa principal *penmain* permite a simulação do transporte de electrões e fótons em estruturas complexas. Tipicamente, este programa assume que as partículas são emitidas por uma fonte pontual, que se encontra numa da posição, $r_o = (x_o, y_o, z_o)$, tanto com um valor de energia fixo ou com uma

distribuição de energias. A direcção inicial das partículas primárias é amostrada uniformemente num cone com uma semi-abertura α e o eixo central na direcção (θ_0, ϕ_0) , tal como ilustra a figura seguinte.

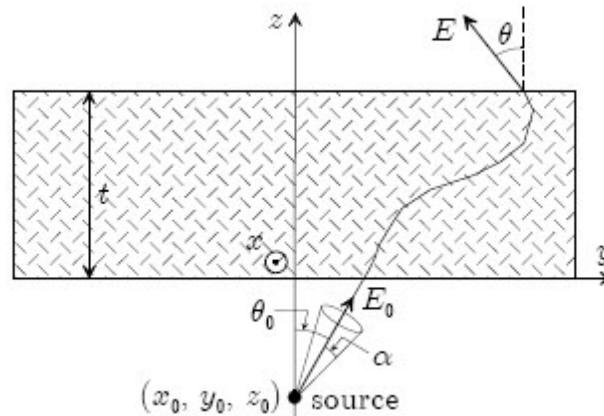


Figura 13 – Ilustração da posição da fonte e da direcção da radiação primária. Figura retirada do manual PENELOPE – 2006 [SFS06]

Os dados referentes à simulação, incluindo os dados de entrada mais relevantes, tais como, os materiais definidos e respectivas energias de corte, entre outros, estão disponíveis num ficheiro denominado por *penmain*. As distribuições que vão sendo obtidas ao longo da simulação (histogramas) são escritas em ficheiros separados.

A estrutura do ficheiro de entrada, o qual é suficiente para o funcionamento do programa *penmain*, deve conter a seguinte informação:

- Título do trabalho;
- Definições da fonte – neste item devem ser especificados os seguintes pontos:
 - Tipo de partículas – electrões, fotões ou neutrões
 - Energia emitida pela fonte – feixe monoenergético ou um espectro de energias.

- Posição inicial da fonte
- Distribuição angular do feixe emitido pela fonte – especificação do ângulo alfa e teta.

- Definição dos materiais – tal como já foi mencionado anteriormente, os materiais são especificados num ficheiro, que é invocado no programa principal. De notar, que o PENELOPE contém uma base de dados com cerca de 99 elementos que podem ser utilizados para a especificação dos materiais, além disso, podem ser acrescentados materiais ou compostos a esta base de dados. De salientar, que a ordem pela qual os materiais são colocados neste ficheiro é importante, dado que quando construimos uma superfície e dizemos de que material é constituída, vamos utilizar um número, que deverá corresponder ao número identificado no ficheiro mencionando inicialmente. Os parâmetros da simulação, tais como energias de corte para os diferentes materiais, devem ser igualmente especificados neste item.

- Definição da geometria – deverá ser invocado no programa principal, um ficheiro de geometria. Neste ficheiro, devem ser especificadas todos as volumes necessários para representar a geometria de irradiação. De notar, que inicialmente deverão ser definidos os volumes básicos, e de seguida os volumes nos quais os primeiros estão embebidos, neste ultimo caso, normalmente, utiliza-se um “módulo¹⁵”. O PENELOPE permite a utilização de várias superfícies quadráticas, tal como se pode verificar na figura seguinte.

¹⁵ Da tradução de *module*, que quando estamos a especificar a geometria significa que é o conjunto de todos os volumes nele embebidos.

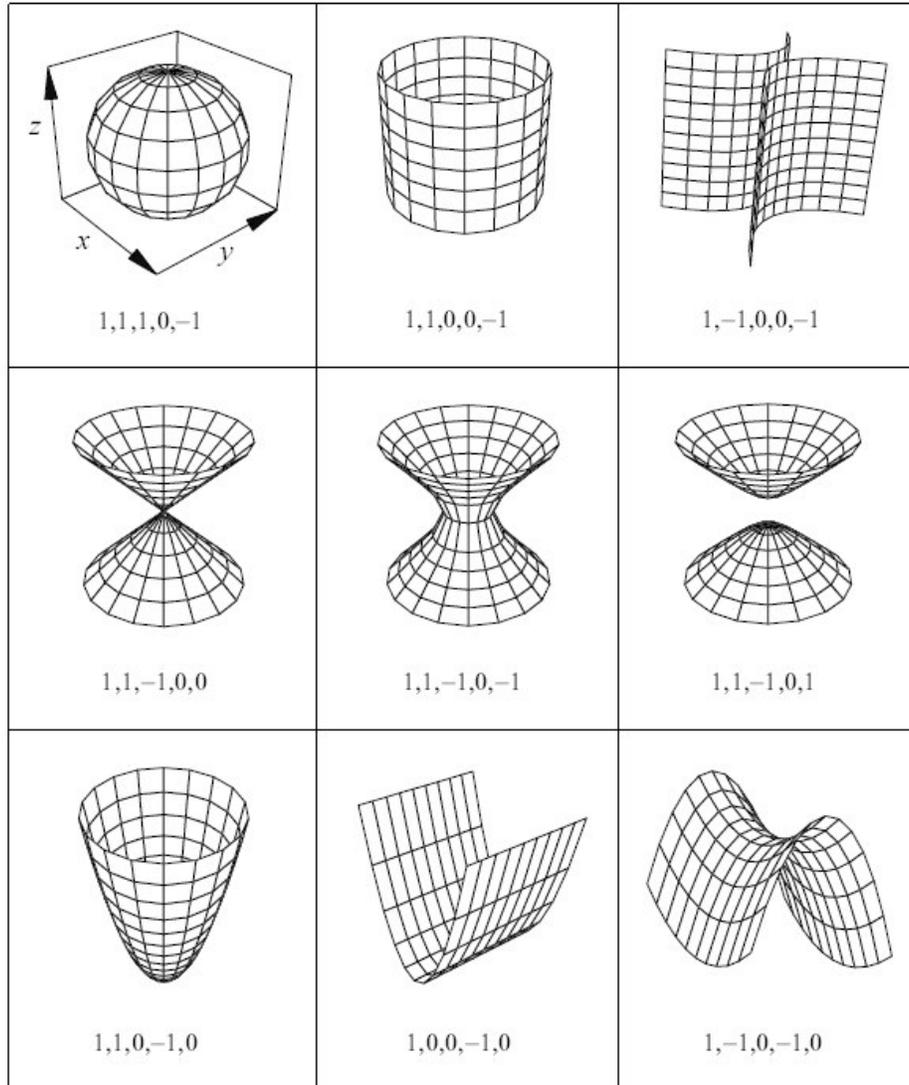


Figura 14 – Superfícies quadráticas e respectivos índices. Figura retirada do manual PENLOPE-2006 [SFS06].

- Distribuição das partículas emergentes – especificação da energia e do ângulo polar e de azimute.
- Propriedades da simulação, tais como o tempo de simulação e o número de eventos pretendidos.

III.7 INCERTEZAS ESTATÍSTICAS NO MONTE CARLO

Qualquer valor de interesse Q é determinado como sendo um valor médio obtido a partir de um elevado número de simulações N . Formalmente, pode ser determinado através da seguinte expressão:

$$Q = \int q p(q) dq \quad (\text{III.25})$$

onde a função de densidade de probabilidade $p(q)$ é normalmente desconhecida. A simulação de um evento individual providencia um método para amostrar o valor de q a partir de funções de densidade de probabilidade naturais $p(q)$: para cada evento gerado, obtém-se um valor aleatório q_i distribuído de acordo com $p(q)$.

A diferença entre o mencionado anteriormente e o Método de Monte Carlo, é que a função de densidade de probabilidade descreve uma cascata de eventos de interações aleatórias, cada uma com a sua função densidade de probabilidade característica. O Monte Carlo estima o valor de Q a partir da seguinte equação:

$$\bar{Q} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N q_i \quad (\text{III.26})$$

Sendo que, a energia depositada média E_{dep} por cada electrão incidente ao longo de uma amostra é determinada pela seguinte equação:

$$E_{\text{dep}} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N e_i \quad (\text{III.27})$$

Onde e_i representa a energia depositada por todas as partículas em cada evento i . A incerteza estatística (desvio padrão) utilizada no Monte Carlo é obtida pela expressão:

$$\sigma_Q = \sqrt{\frac{\text{var}(q)}{N}} = \sqrt{\frac{1}{N} \left[\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N q_i^2 - \bar{Q}^2 \right]} \quad (\text{III.28})$$

O resultado da simulação deve ser apresentado na seguinte forma; $\bar{Q} \pm 3\sigma_Q$, uma vez que desta forma o intervalo $(\bar{Q} - 3\sigma_Q, \bar{Q} + 3\sigma_Q)$ contem o valor de Q correcto com 99,7 % de probabilidade.

No caso do problema desenvolvido, foi determinado o valor de energia média depositada ao longo de uma célula de altura z . Seja $D(z) dz$ a energia média depositada ao longo do seguinte intervalo de profundidade $[z, z + dz]$ por cada electrão incidente, e $\int_0^{\infty} D(z) dz$ a energia média depositada, E_{dep} , (mais uma vez, por electrão incidente). Uma vez que parte da energia depositada é reflectida para trás quando interage com a amostra, E_{dep} é menor que a energia cinética E_{cin} do electrão incidente. Para determinar $D(z)$ dentro do intervalo definido inicialmente por $(z_{min}, z_{máx})$, divide-se em M diferentes sub-intervalos (z_{k-1}, z_k) , com $z_{min}=z_0 < z_1 < \dots < z_k = z_{máx}$. Seja $e_{ij,k}$ a quantidade de energia depositada em cada sub-intervalo k , por cada partícula j de cada evento i (cada electrão incidente pode produzir múltiplas partículas secundárias). A energia média depositada em cada sub-intervalo k (por electrão incidente) é obtida pela seguinte equação:

$$E_k = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N e_{i,k} \quad \text{com} \quad e_{i,k} = \sum_j e_{ij,k} \quad (\text{III.29})$$

Sendo afectada pela seguinte incerteza estatística:

$$\sigma_{z_k} = \sqrt{\frac{1}{N} \left[\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N e_{i,k}^2 - E_k^2 \right]} \quad (\text{III.30})$$

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

A

- [AB84] P. Andreo and A. Brahme, “Restricted energy-loss straggling and multiple scattering of electrons in mixed Monte Carlo procedures”, *Rad. Res.* **100**, 16-29, 1984.

B

- [Ber63] J. M. Berger, “Monte Carlo calculation of the penetration and diffusion of fast charged particles” *Methods of Computational Physics*, Vol. I, pp 135 – 215, Edited by B. Alder, S. Fernbach and M. Rotenberg, Academic Press, New York, 1963.
- [BH34] H. A. Bethe and W. Heitler, “On Stopping of Fast Particles and on the Creation of Positive Electrons”, *Proc. Roy. Soc. (London)* **A146**, 183, 1934.
- [BL50] O. Blunck and S. Leisegang, “Zum Energieverlust schneller Elektronen in d nnen Schichten”, *Z. Physik* **128**,500, 1950.
- [Bri00] J. Briesmeister, “MCNP – A general Monte Carlo N-Particle Transport Code version 4C”, Report LA 1265-M, Los Alamos National Laboratory, Los Alamos, New Mexico, USA, 2000.

- [BSF95] J. Baró, J. Sempau, J. M. Fernandez-Varea, F. Salvat, “PENELOPE: An algorithm for Monte Carlo simulation of the penetration and energy loss of electrons and positrons in matter”, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B*, 100 31-46, 1995.
- [BS01] A. F. Bielajew and F. Salvat, “Improved electron transport mechanics in PENELOPE Monte Carlo method” *Nucl. Instrum. Methods Physics B*, **173**:332-343, 2001.
- [BVB07] A. Belchior, P. Vaz, M. L. Botelho, “Monte Carlo simulation and dosimetric studies of an irradiation facility”, *Nucl. Instrum. Methods Physics A*, doi: 10.1016/j.nima.2077.05.040, 2007.

G

- [GS40a] S. A. Goudsmit and J. L. Saunderson, “Multiple scattering of electrons” *Phys. Rev.* **57**: 24-29 and *Phys. Rev.* **78**: 526-529, 1940.
- [GS40b] S. A. Goudsmit and J. L. Saunderson, “Multiple scattering of electrons II” *Phys. Rev.* **57**: 24-29 and *Phys. Rev.* **58**: 36-42, 1940.

K

- [KQP83] L. Kissel, C. A. Quarles and R. H. Pratt, *At. Data and Nucl. Data Tables* 28, 381, 1983.

L

- [Lew50] H. W. Lewis, “Multiple scattering in an infinite medium”, *Phys. Rev.* **78**: 526-529, 1950.

- [Lan65] L. Landau, *J. Physics (USSR)*, **8** (1994) 201. Also: *Collected Papers*, D. ter Haar ed., Pergamon Press, Oxford, 1965.

M

- [MHN90] R. McIntyre, C. J. Huntzinger, W. R. Nelson, “Applications of EGS4 to industrial irradiator design and use”, *Radiation Physics Chemistry*, 35 (4-6), 555-562, 1990.
- [Mol32] C. Moller, “Zur Theorie des Durchgang schneller Elektronen durch Materie”, *Ann. Physik.* **14**, 568, 1932.
- [Mot29] N. F. Mott, “The Scattering of Fast Electrons by Atomic Nuclei”, *Proc. Roy. Soc.*, **A124**,425, 1929.

N

- [NR98] W.R. Nelson, D. W. Rogers, “Structure and operation of the EGS4 code system”, *Plenum Press*, New York, pp. 287-305, 1998.

O

- [OO05] A. Oliveira, C. Oliveira, “Comparison of deterministic and Monte Carlo methods in shielding design”, *Radiation Protection Dosimetry*, volume 115, number 1-4, pp. 254-257, 2005.
- [OSO1] C. Oliveira, J. Salgado, “Isodose distributions and dose uniformity in the Portuguese gamma irradiation facility calculated using the MCNP code”, *Radiation Physics and Chemistry*, volume 61, Issues 3-6, Pages 791-793, 2001.
- [OSB99] C. Oliveira, J. Salgado, M. L. Botelho, L.M. Ferreira, “Dose determination by Monte Carlo-a useful tool in gamma irradiation process”, *Meeting on Radiation Processing*, IMRP 11, Melbourne, Australia, 1999.

P

- [Pel05] D. B. Pelonitz “MCNPX User’s Manual”, *Report LA – CP – 05 – 0369, versão 2.0.5*, Los Alamos International Laboratory, Los Álamos, 2005.

R

- [RK76] L. Reimer E. R. Krefting, “The effect of scattering models on the results of Monte Carlo calculations”, *National Bureau of Standards Special Publication 460*, pp. 45-60, 1976.
- [RMB75] M. E. Riley, C. J. MacCallum and F. Biggs, “Theoretical Electron-Atom Elastic Scattering Cross Sections Selected Elements, 1 KeV to 256 KeV”, *Atom. Data and Nucl. Data Tables* **15**, 443, 1975.
- [RS93] G. R. Raisali, M. Sohrabpour, “Applications of EGS4 computer code for determination of gamma ray spectrum and dose rate distribution in Gammacell 220”, *Radiation Physics and Chemistry*, 42 (4-6), 799-805, 1993.
- [Rut11] E. Rutherford, “The Scattering of α and β Particles by Matter and the Structure of the Atom”, *Philos. Mag.* **21**, 669, 1911.

S

- [SB85] S. M. Seltzer and M. J. Berger, “Bremsstrahlung spectra from electron interactions with screened atomic nuclei and orbital electrons”, *Nucl. Instrum, Methods Phys. B*, 12:95-134, 1985.
- [SCB97] J. Sempau, E. Costa, J. Baró, J. M. Fernandez-Varea and F. Salvat, “An algorithm for Monte Carlo simulation of coupled electron-photon transport”, *Nucl. Instrum. Methods Physics B*, **132**:377-390, 1997.
- [Sel88] S. M. Seltzer, “An overview of ETRAN Monte Carlo Methods”, *Monte Carlo Transport of Electrons and Photons*, edited by

Theodore M. Jenkins, Walter R. Nelson and Alessandro Rindi, Plenum Press, New York, 153, 1988.

[SFA01] F. Salvat, J. M. Fernandez-Varea, E. Acosta and J. Sempau, “The physics of electron/positron transport in Penelope”, *Proceedings of the Ninth EGS4 Users’ Meeting in Japan*, KEK Proceedings 2001 – 22, pp. 1-5, 2001.

[SFS06] F. Salvat, J. M. Fernandez-Varea and J. Sempau, “Penélope – 2006: A Code System for Monte Carlo Simulation of Electron and Photon Transport”, *Workshop proceedings*, Barcelona, Spain, 2006.

Capítulo IV

IV SISTEMAS DOSIMÉTRICOS

IV.1 DESCRIÇÃO DE UM FEIXE DE RADIAÇÃO

Para descrever as principais grandezas que definem um feixe de radiação ionizante, vamos considerar uma esfera de volume dV , massa dm e área da , centrada em P, atravessada por um feixe de radiação ionizante.

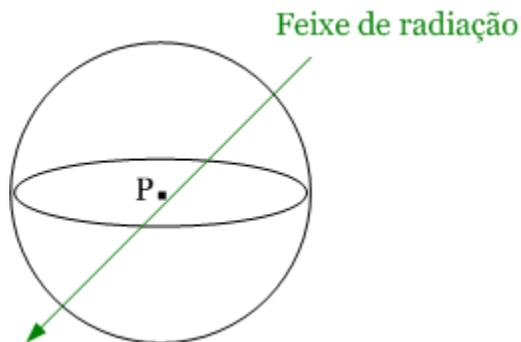


Figura 15 – Esfera de volume dV , massa dm centrada no ponto P

IV.1.1 Fluência de partículas (Φ)

A fluência de partículas (Φ) é o quociente dN/da , onde dN é o número de partículas incidentes sobre uma esfera que cruzam a secção transversa da , medida em m^{-2}

$$\Phi = \frac{dN}{da} \quad [\text{partículas } m^{-2}] \quad (\text{IV.1})$$

o número de partículas N pode corresponder a partículas emitidas, transferidas ou recebidas.

IV.1.2 Taxa de fluência de partículas (ϕ) – “fluxo”

A taxa de fluência de partículas (ϕ) é o quociente $d\Phi/dt$, ou seja, é a fluência de partículas por unidade de tempo, sendo dt um intervalo de tempo.

$$\phi = \frac{d\Phi}{dt} \quad [\text{partículas } m^{-2}s^{-1}] \quad (\text{IV.2})$$

IV.1.3 Fluência energética (ψ)

A fluência energética (ψ) é o quociente dE_{β}/da , onde dE_{β} é a soma das energias de todos os fótons que incidem numa esfera de secção transversa da

$$\Psi = \frac{dE_{\beta}}{da} \quad [J \ m^{-2}] \quad (\text{IV.3})$$

IV.1.4 Taxa de fluência energética (ϕ)

A taxa de fluência energética é o quociente $d\Psi/dt$, ou seja, é a fluência energética por unidade de tempo, sendo dt um intervalo de tempo.

$$\varphi = \frac{d\Psi}{dt} \quad [J \ s^{-1} \ m^{-2}] \quad (IV.4)$$

IV.2 GRANDEZAS DOSIMÉTRICAS FUNDAMENTAIS

IV.2.1 KERMA¹⁶ (K)

Tal como já foi mencionado anteriormente, a energia dos fótons é transferida para a matéria em duas etapas. A primeira quantifica a energia que é transferida dos fótons para os electrões através de diferentes interacções (efeito fotoeléctrico, efeito de Compton e produção de pares, entre outros) e a segunda quantifica a energia que os electrões transferem para o meio através de ionização e excitação atómicas ao longo do seu percurso.

A grandeza dosimétrica **KERMA** é uma grandeza aplicável a radiações ionizantes indirectas, tal como os fótons e neutrões, que quantifica a energia média transferida pelos fótons para os electrões quando um feixe de radiação incide num meio material, sem ter em conta o que se passa após essa transferência. É definida pela seguinte expressão:

$$K = \frac{d\overline{E}_{tr}}{dm} \quad (IV.5)$$

onde $d\overline{E}_{tr}$ é a energia média transferida para as partículas carregadas no meio, por unidade de massa dm . Esta grandeza, pode ser expressa em termos da fluência de partículas, pela seguinte equação:

$$K = \Phi \frac{\mu}{\rho} d\overline{E}_{tr} \quad (IV.6)$$

onde, $\Phi \frac{\mu}{\rho}$ representa o numero de interacções por unidade de massa.

¹⁶ Kinetic Energy Released per Mass

A figura 16, ilustra o conceito de *Kerma*.

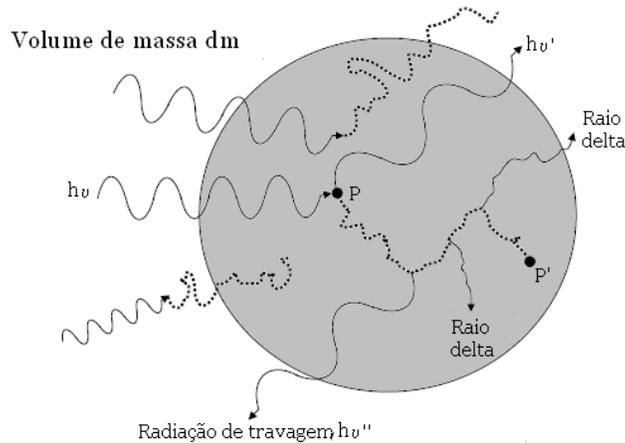


Figura 16 – Processo de transferência de energia de um fóton para um meio material: no ponto P o fóton interage com electrões de átomos do meio material, dando origem à libertação de fótons secundários ($h\nu'$) e electrões em movimento; estes, ao sofrerem interações vão perder energia ao longo do trajecto (entre P e P') por colisões com outros electrões do meio ou por emissão de radiação de travagem $h\nu''$. A energia transferida por unidade de massa, em P, é designada por *kerma*.

A energia pode ser transferida em duas formas distintas:

- Colisões fracas e fortes;
- Interações radiativas (radiação de travagem)

Sendo assim, o valor total da grandeza kerma é normalmente dividido em duas componentes: o **kerma de colisão K_c** e o **kerma radiativo K_r** , tal como está definido na expressão seguinte:

$$K = K_c + K_r \quad (IV.7)$$

onde o kerma de colisão quantifica a energia que é dissipada pelos electrões ao colidirem com outros electrões através de ionizações e excitações ao longo do seu

percurso e o kerma radiativo refere-se à radiação de travagem produzida enquanto as partículas secundárias são desaceleradas no meio.

A unidade da grandeza dosimétrica kerma é $J.Kg^{-1}$, ou Gy.

IV.2.2 Dose absorvida (D)

A grandeza dosimétrica **DOSE ABSORVIDA (D)** é uma grandeza aplicável tanto a radiação ionizante directa¹⁷ ou indirecta¹⁸. Esta grandeza é de importância fulcral em dosimetria, sendo definida por:

$$D = \frac{d\bar{\varepsilon}}{dm} \quad (\text{IV.8})$$

onde $d\bar{\varepsilon}$ é a energia média transferida pela radiação ionizante ao meio material por unidade de massa dm num volume finito V .

A energia cedida $\bar{\varepsilon}$ ao meio material é dada pela seguinte expressão:

$$\bar{\varepsilon} = E_{\text{in}} - E_{\text{out}} + \Sigma Q \quad (\text{IV.9})$$

onde E_{in} é a soma da energia cedida ao meio material pelas partículas ionizantes que penetram o volume V , E_{out} é a soma de energia das partículas ionizantes que saem do mesmo volume e ΣQ diz respeito às conversões massa - energia dentro do mesmo volume.

A unidade de medida desta grandeza dosimétrica é o J Kg^{-1} ou Gray [Gy].

¹⁷ Ionização directa (partículas carregadas tais como, electrões, prótons, etc.)

¹⁸ Ionização indirecta (partículas neutras tais como, neutrões, fótons, etc.)

IV.2.3 Dose equivalente (H)

Dado que, os efeitos biológicos da radiação dependem do tipo de radiação, define-se a grandeza dose equivalente (H):

$$H = \sum W_r \times D_{tr} \quad (IV.10)$$

onde D_{tr} é a dose absorvida média no tecido ou órgão t, para um dado tipo de radiação R e W_r é o factor de peso da radiação.

Os factores de peso da radiação, W_r , descritos pela ICRP¹⁹ são os seguintes:

Tabela 2 – Valores dos factores de peso da radiação, W_r , para vários tipos de radiação. Estes valores são independentes da amostra irradiada e são válidos para irradiação interna ou externa.

Tipo de radiação e energias		W_r
Fotões de todas as energias		1
Electrões e muões de todas as energias		1
Neutrões	< 10 eV	5
	=10 keV a 100 keV	10
	> 100 keV a 2 MeV	20
	> 2 MeV a 20 MeV	10
	> 20 MeV	5
Partículas alfa, frag. Fissão e núcleos pesados		20

¹⁹ *International Commission on Radiological Protection*

IV.2.4 Dose efectiva (E)

A relação entre a probabilidade de efeitos estocásticos e a dose equivalente depende da amostra irradiada, sendo necessário definir uma nova grandeza denominada dose efectiva, definida pela seguinte equação:

$$E = \sum W_t \times H \quad (\text{IV.11})$$

onde, H representa a dose equivalente média no tecido ou órgão e W_t é o factor de peso do tecido. Os factores de peso do tecido são independentes do tipo de radiação e da energia utilizada.

IV.2.5 Exposição (X)

A grandeza dosimétrica **EXPOSIÇÃO (X)**, é definida pela seguinte equação:

$$X = \left(\frac{dQ}{dm} \right)_{\text{ar}} \quad (\text{IV.12})$$

Onde dQ é o valor absoluto da carga eléctrica total dos iões de um só sinal produzidos pelas interacções dos fotões incidentes na massa de ar dm .

Esta grandeza exprime-se no sistema internacional em C.Kg^{-1} , no entanto, outra unidade muito utilizada é o roentgen (R), sendo $1\text{R} = 2.58 \times 10^{-4} \text{C.Kg}^{-1}$ ou equivalentemente $1 \text{C.Kg}^{-1} = 3876 \text{R}$.

Podemos relacionar a exposição com a fluência energética do feixe ψ através da expressão:

$$X = \Psi \left(\frac{\mu}{\rho} \right)_{\text{ar}} \left(\frac{e}{W_{\text{ar}}} \right) \quad (\text{IV.13})$$

onde (e/W_{ar}) corresponde ao quociente entre a carga do electrão e o valor médio da energia necessária à formação de um par de iões no ar $(33.97 \text{ J/C})^{20}$.

IV.3 SISTEMAS DOSIMETRICOS

Nas mais diversas aplicações da radiação ionizante, a **DOSIMETRIA** adquire um papel fundamental. Seja para o controlo do processo de irradiação, no apoio à construção de uma nova instalação de radiação e em estudos de investigação e desenvolvimento, existe necessidade de se quantificar a dose absorvida num dado meio material. Como tal, surgiu a necessidade de se desenvolverem dosímetros, que podem ser classificados como dosímetros primários de referência, de referência e de rotina [ICROO].

Dosímetro primário de referência

Devido à sua elevada precisão, exactidão e reprodutibilidade, os dosímetros primários de referência são utilizados para calibrar dosímetros de referência. Tipicamente, as incertezas associadas a este dosímetro são na ordem dos 2% (2σ) [ICROO]. Como exemplo, é utilizado como primário de referência a câmara de ionização.

Dosímetro de referência

Devido à sua elevada qualidade metrológica, um dosímetro de referência pode ser utilizado como dosímetro primário de referência e conseqüentemente ser utilizado para a calibração de outros dosímetros. A aplicabilidade desta função, só é possível, se estes dosímetros possuírem uma relação bem estabelecida entre o sinal mensurável de radiação e a dose absorvida. Os efeitos de diversos

²⁰ O valor descrito foi proposto por Boutillon e Perroche e pelo Comité Consultatif pour les Etalons de Mesure des rayonnements Ionizants [CCEM85] tendo sido aceite pela Agência Internacional de energia Atómica em 1987 [IAEA 87]

parâmetros, tais como, temperatura de irradiação, estabilidade após a irradiação, entre outros, devem ser facilmente caracterizados e superados utilizando factores de correcção. Normalmente, são utilizados como referência, o **dosímetro de Fricke** (na gama de doses de 40 a 400 Gy), de cérico – ceroso (no intervalo de doses de 5×10^2 a 5×10^4 Gy) e de alanina (de 2 a 200 kGy), entre outros. A precisão destes dosímetros é na ordem dos 3% (2σ) [ICROO].

Dosímetro de rotina

Devido ao seu fácil manuseamento e preço acessível, um dosímetro de rotina é utilizado no dia a dia, para o controlo dos processos de irradiação. Estes dosímetros apresentam uma menor exactidão que um dosímetro de referência, em parte devido à complexidade decorrente da utilização de factores de correcção para reduzir os efeitos dos parâmetros que caracterizam o ambiente de irradiação. Consequentemente, a precisão é na ordem dos 5% (2σ). De notar, que podem ser introduzidos erros sistemáticos elevados se não forem controladas as condições de irradiação. Idealmente, a calibração deve ser feita na mesma planta de irradiação na qual estes dosímetros vão ser utilizados. Como dosímetros de rotina são utilizados os de polimetilmetacrilato (PMMA), com gamas de dose absorvida variável, como exemplo, os *Red-Perspex (Harwell dosimeters)* utilizados numa gama de dose absorvida de 5 kGy a 50 kGy e os filmes radiográficos finos (0.5 a 4 Gy), entre outros.

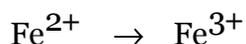
Existem métodos físicos e químicos para a determinação da dose absorvida. Os métodos físicos incluem a calorimetria, as câmaras de ionização e os semicondutores. Na dosimetria química são de salientar, os dosímetros de Fricke, de alanina, de dicromato, de cérico – ceroso, entre outros.

Na secção seguinte, irão ser descritos, o dosímetro de Fricke e de termoluminescência, utilizados no desenvolvimento do trabalho.

IV.3.1 Dosimetria química

IV.3.1.1 Solução de Fricke

O dosímetro de Fricke foi desenvolvido por Fricke e Morse em 1972, sendo baseado na oxidação da solução de sulfato ferroso, sendo a dose absorvida proporcional à concentração do íon férrico (Fe^{3+}) formado por oxidação do íon ferroso (Fe^{2+}), numa solução aquosa de ácido sulfúrico após irradiação:



O rendimento químico, $G(\text{Fe}^{3+})$ (FeIII), definido como o número de eventos químicos específicos que ocorrem numa substância irradiada, produzidos por 100 keV de energia absorvida, é bem conhecido e está reportado em [ICR84]. De notar, que este valor é independente da energia dos fótons e electrões para energias entre 0.5 e 30 MeV [MJ82]. Contudo, se a energia dos fótons for inferior a 0.5 MeV, o valor do rendimento diminui [ICR70].

Define-se **coeficiente de extinção molar**, ϵ , de uma substância ao valor da absorvância de uma substância de concentração **1 M**, medida num tubo com uma espessura de **1cm**. O coeficiente de extinção molar é específico da substância, para um dado comprimento de onda. Os valores do coeficiente de extinção molar estão bem estabelecidos para temperaturas de irradiação entre 10° e 60° C e reportados em [Mat82].

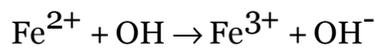
O dosímetro de Fricke é aceite como padrão e devido à sua precisão (1 - 2 %) e reprodutibilidade é também utilizado para calibração de outros dosímetros [ICR69]. É utilizado para a determinação da dose absorvida no intervalo de 40 a 400 kGy, utilizando-se um espectrofotómetro para medir a concentração do íon férrico a um comprimento de onda de 305 nm. A precisão do método não é

afectada quando o débito de dose utilizado varia entre 0.2 e 2×10^7 Gy/s [AST92] e a temperatura do sistema durante a irradiação entre 1 e 60°C.

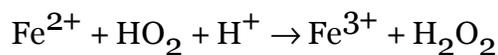
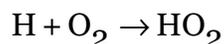
IV.3.1.2 Mecanismo da reacção

A interacção da radiação ionizante com a água desencadeia uma série de reacções químicas bem estabelecidas. As reacções primárias são de ionização e excitação. No dosímetro de Fricke são bem conhecidas as reacções químicas que levam à oxidação do ião ferroso a férrico, a baixas taxas de dose, a saber:

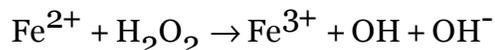
- Um radical hidroxilo oxida um ião ferroso, de acordo com a seguinte reacção:



- Cada radical hidroperóxido oxida três iões ferroso, de acordo com as seguintes reacções:



- Uma molécula de peróxido de hidrogénio oxida dois iões ferroso, de acordo com a seguinte reacção:



IV.3.1.3 Cálculo da dose absorvida

A taxa de reacções químicas descritas na secção anterior, depende da temperatura de irradiação. Consequentemente, quando a temperatura de irradiação não é igual a 25°C, deverá ser introduzido um factor de correcção.

Quando a luz incide sobre um objecto uma parte é absorvida e a restante pode atravessá-lo ou ser dispersa em maior ou menor grau. Qualquer que seja o efeito predominante interessa quantificá-lo, para o que se utiliza a noção de **densidade óptica**, que é definida pelo logaritmo decimal do quociente entre a

intensidade da luz incidente e a intensidade da luz emergente. No desenvolvimento do trabalho, a densidade óptica foi obtida directamente do espectrofotómetro.

O coeficiente de temperatura para o coeficiente de extinção molar a 25° C, ξ , é igual a:

$$\xi = 0.007 \text{ } ^\circ\text{C}^{-1} \qquad 15^\circ\text{C} < T < 35^\circ\text{C}$$

onde T é a temperatura da medição. Sendo assim, a dose absorvida pelo dosímetro de Fricke é determinada, através da seguinte expressão:

$$D(\text{Gy}) = \frac{275 D.O.^{305\text{nm}}}{1 + \xi (T - 25)} \qquad (\text{IV.14})$$

Onde:

D (Gy) – Dose absorvida medida em Gray

D.O – Densidade Óptica medida a 305 nm

T – Temperatura em graus Celsius

IV.3.1.4 Vantagens / Desvantagens

As vantagens de utilização, do dosímetro de Fricke são as seguintes:

- a. Serem bem conhecidos os mecanismos de reacção no soluto irradiado;
- b. Ser praticamente equivalente à água e tecidos biológicos, em relação às propriedades de absorção dos fotões e electrões, ao numero atómico efectivo e à densidade;
- c. Fazer determinações de dose absorvida com precisão, sendo usado como referencia e aceite como padrão secundário;
- d. Ser razoavelmente estável antes e após irradiação.

As desvantagens são:

- a. Ter um limite de leitura de dose absorvida entre os 40 e 400 Gy, o que limita bastante a sua utilização na elaboração do mapeamento de taxa de dose em unidades industriais, onde a actividade das fontes é elevada e os valores da dose absorvida são superiores ao valor máximo previamente referido;
- b. Ser sensível a qualquer interferência química nomeadamente provenientes dos reagentes (impurezas) e / ou do material utilizado, o que requer um cuidado acrescido aquando da elaboração da solução química;
- c. Não estar comercializado, o que implica a sua preparação sempre que seja necessário a execução de um estudo dosimétrico.

IV.3.2 Dosímetro de termoluminescência (TLD)

Certos cristais irradiados com radiação ionizante (alfa, beta ou gama) apenas emitem luz quando submetidos a aquecimento; esta propriedade denomina-se **TERMOLUMINESCÊNCIA**. Este fenómeno representa a emissão de luz termicamente estimulada, sendo que se o material após ser irradiado for aquecido à temperatura de 200 °C a 350 °C (sendo a temperatura dependente do material utilizado), emite luz visível, que é proporcional à dose recebida.

Embora, esta propriedade tivesse sido observada em 1663, por Robert Boyle, quando observou que um diamante emitia luz quando aquecido, a propriedade de termoluminescência só foi aceite por volta de 1945 para fins dosimétricos.

IV.3.2.1 Fundamentos teóricos

A radiação ionizante incidente transfere energia aos electrões, fazendo-os transitar da banda de valência (átomos do estado fundamental) para a banda de condução (átomos passam para um estado excitado).

A desexcitação dos átomos pode efectuar-se por regresso directo ao estado fundamental (emitindo radiação fotónica de energia igual á recebida) ou por transição dos electrões para vários níveis de energia intermédios com emissão de fótons com frequências inferiores, sendo este processo denominado **fluorescência** e ilustrado na figura 17.

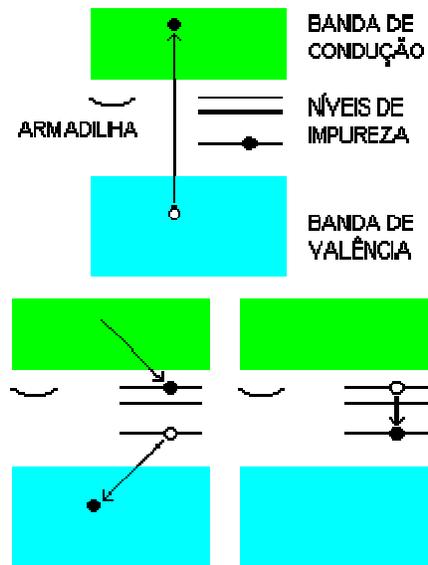


Figura 17 – Processos envolvidos no fenómeno de luminescência

Porém em outros materiais como o CaF e o LiF, os electrões decaem de um estado excitado (banda de condução) para o estado metastável (armadilhas) permanecendo nesse estado durante um tempo. Quando expostos ao aquecimento, vão para o estado excitado e quando decaem para o fundamental emitem luz por um processo denominado **fosforescência**²¹ e encontra-se ilustrado na Figura 18.

²¹ Fenómeno utilizado pela dosimetria termoluminescente

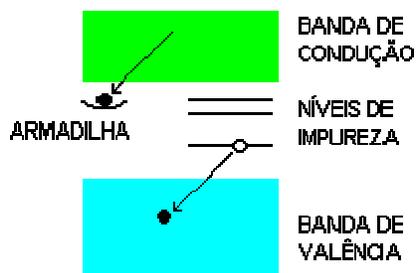


Figura 18 – Processos envolvidos no fenômeno de fosforescência

IV.3.2.2 Luminescência

Quando um electrão da banda de valência é transferido para a banda de condução, deixa naquela uma lacuna, ou seja, um nível incompleto. Se a estrutura cristalina em questão não possuir impurezas ou defeitos, o electrão volta à banda de valência com a emissão de radiação electromagnética. Se a rede contiver algumas impurezas que originem níveis de energia entre as bandas de valência e de condução, um electrão de um nível de energia de impureza inferior pode ocupar a lacuna na banda de valência e um electrão da banda de condução pode ocupar um dos níveis de energia de impureza superiores, com a emissão em ambos os casos de radiação electromagnética. Este processo designa-se **luminescência**.

IV.3.2.3 Fosforescência

Em certos casos, o electrão da banda de condução pode passar para um nível de energia denominado armadilha, do qual ele não pode passar ao nível de energia de impureza mais baixo por uma transição radiativa sem violar algumas leis da conservação. O electrão permanece então num estado metastável, e permanece nesse estado durante alguns segundos até que algum processo o faça regressar à banda de condução.

IV.3.3 Medida da luz termoluminescente

O cristal termoluminescente é colocado num aquecedor onde é feito o fornecimento de calor, tal como esquematizado na figura 20. O fotomultiplicador que está acoplado ao sistema de aquecimento do material, converte pequenas quantidades de luz emitidas pelo cristal termoluminescente em sinais eléctricos que posteriormente são ampliados e gravados. A emissão da luz termoluminescente é representada por uma curva que relaciona a luz emitida em função da temperatura de aquecimento e a partir desta determina-se a **dose absorvida**.

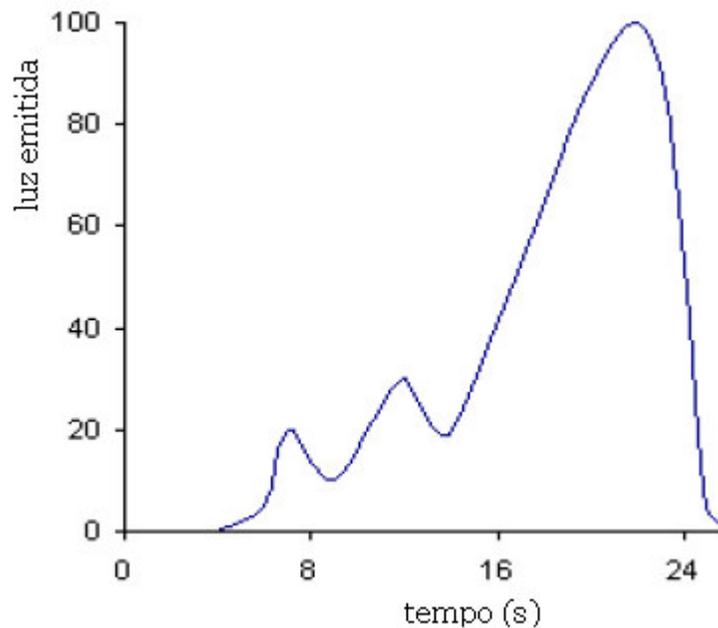


Figura 19 – Curva de brilho para o LiF. Quantidade de luz emitida em função do tempo de aquecimento. (adaptado de [Cun83])

Ao longo do aquecimento, verifica-se um aumento irregular de emissão de luz, que se pode ver no gráfico através do aparecimento de diferentes picos. Estes correspondem às diferentes transições dos electrões do cristal. A área abaixo da curva representada na figura 19 é directamente proporcional à energia absorvida pelo material termoluminescente.

Tal como foi mencionando anteriormente, podem ocorrer vários picos de intensidade. A forma da curva de emissão representada na figura 19 depende:

- Do tipo de cristal utilizado
- Da taxa de aquecimento

Para a medição da luz emitida por um material termoluminescente, é necessário proceder-se ao aquecimento deste. Logo após o sistema de aquecimento, encontra-se um filtro óptico, o qual permite a transmissão da luz com determinadas propriedades (tipicamente, com um comprimento de onda pretendido), bloqueando a gama de comprimentos de onda indesejáveis. De seguida, existe um fotomultiplicador, o qual é normalmente constituído por um fotocátodo, que por efeito fotoelétrico transforma fotões em electrões, e um conjunto de eléctrodos, polarizados com tensões sucessivamente crescentes, onde os electrões produzidos pelo fotocátodo se multiplicam em milhares de electrões, dando origem a um sinal eléctrico mensurável, que é posteriormente amplificado. Na figura seguinte estão representadas as componentes necessárias para a medição da luz emitida por um material termoluminescente.

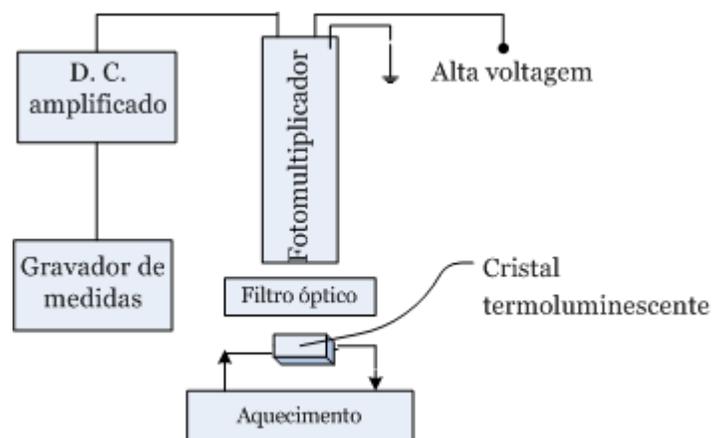


Figura 20 – Diagrama esquemático das componentes necessárias para a medição da luz emitida por um material termoluminescente (adaptado de [Cun83])

IV.3.3.1 Tipos de cristal

A escolha do material depende do tipo de radiação que se pretende medir, uma vez que os diferentes tipos de radiação (electromagnética, partículas pesadas, neutrões) interagem com a matéria de uma forma distinta.

Os principais materiais utilizados para a dosimetria por termoluminescência são:

- $\text{CaSO}_4:\text{Dy}$ (sulfato de cálcio dopado com disprósio)
- $\text{CaSO}_4:\text{Mn}$ (sulfato de cálcio dopado com manganês)
- $\text{LiF}:\text{Mg, Ti}$ (fluoreto de lítio dopado com 100 ppm de magnésio e 100 ppm de titânio): aplicações na dosimetria pessoal e ambiental, devido à sua elevada equivalência aos tecidos.
- CaF_2 (fluorita)

IV.3.3.1.1 O fluoreto de Lítio, $\text{LiF}:\text{Mg, Ti}$

No desenvolvimento deste trabalho, o dosímetro termoluminescente utilizado foi o fluoreto de lítio dopado com 100 ppm de magnésio e 100 ppm de titânio, $\text{LiF}:\text{Mg,Ti}$ (TLD-100), comercialmente denominado Harshaw TLD – 100²².

O fluoreto de Lítio é um composto de halogéneo de densidade igual a 2,6 g/cm³ com número atómico efectivo de 8,2 e não solúvel em água. Apresenta uma eficiência termoluminescente intrínseca de 0.04% [Att86].

O excesso de cargas positivas na rede cristalina de fluoreto de lítio, que implica a formação de novas armadilhas para electrões, é consequência da substituição de um ião de Lítio por outro de Magnésio. De todos os picos de emissão do $\text{LiF}:\text{Mg, Ti}$, só os picos 4 e 5 representados na Figura 21 são

²² Os dosímetros foram fornecidos pelo laboratório de dosimetria do Instituto Tecnológico e Nuclear.

utilizados, os quais ocorrem entre 190 e 250 °C [Ros01], uma vez que os outros dependem da temperatura ambiente, o que lhes confere uma desvantagem.

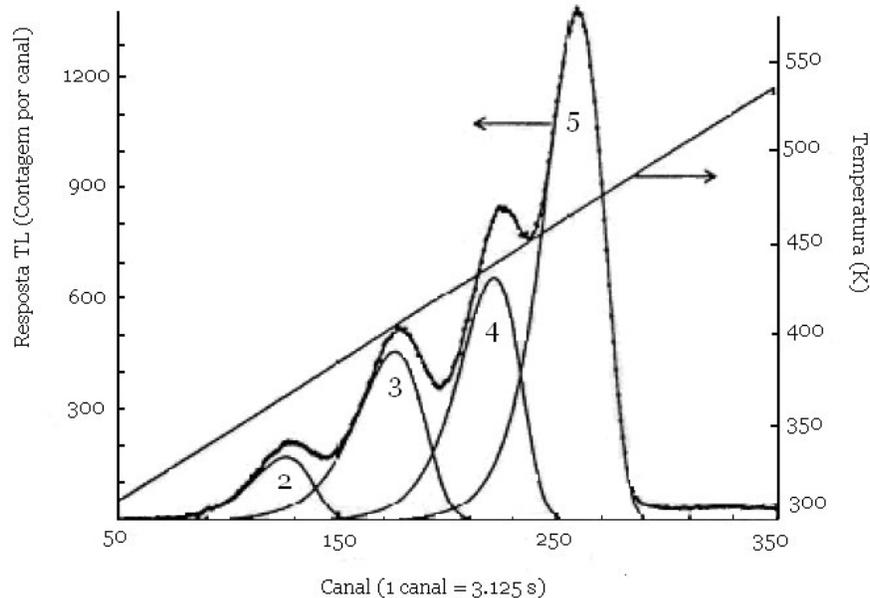


Figura 21 – Resposta característica do LiF: Mg, Ti irradiado com ^{60}Co à temperatura ambiente em função do tempo (escala horizontal).

IV.3.3.1.1.1 Linearidade

A curva da resposta de um TLD em função da dose compreende, tipicamente, três regiões: região linear, supralinear e de saturação. A primeira é a que apresenta um maior interesse em dosimetria, uma vez que permite uma maior exactidão nas medições. O dosímetro de LiF: Mg, Ti é linear para valores até 1 Gy, e logo de seguida inicia-se a faixa de supralinearidade, que vai até 3000 Gy, e a partir daí entra em saturação [McK95]. De notar, que na região de supralinearidade a resposta termoluminescente deixa de ser proporcional á dose, devendo ser feita uma correcção, $C_{\text{supralinear}}$, utilizando a equação seguinte:

$$C_{\text{supralinear}} = (1 + 0.0278D - 0.000265D^2)^{-1} \quad (\text{IV.15})$$

em que, D é a dose absorvida em Gy e $C_{\text{supralinear}}$ é o factor pelo qual se deve multiplicar o valor obtido após a leitura. A equação anterior é aplicável até 20 Gy [WT99].

IV.3.3.1.1.2 Sensibilidade

Embora a sensibilidade dependa de vários factores, apresentados de seguida, pode afirmar-se que o LiF:Mg, Ti apresenta uma elevada sensibilidade. Como exemplo disso, note-se que uma amostra de 50 mg de LiF:Mg, Ti quando exposta a radiação gama, com uma dose absorvida de 0.01 Gy, emite uma quantidade de luz que se torna visível a olho nu no escuro. A sensibilidade representa a quantidade de luz emitida pelo material termoluminescente por unidade de exposição. Os factores de que depende a sensibilidade são: o lote do material de termoluminescência, a dose absorvida pelo material, o tempo a que o material é sujeito ao tratamento térmico, a temperatura utilizada na leitura na região de interesse na curva e finalmente, a resposta do fotomultiplicador que está acoplado ao sistema de aquecimento.

IV.3.3.1.1.3 Tratamentos térmicos

A resposta do LiF:Mg, Ti é muito sensível aos diferentes procedimentos térmicos. A leitura dos dosímetros deve envolver uma técnica automática e rápida de aquecimento, de forma a garantir estabilidade durante todo o processo. O processo de leitura dos dosímetros é descrito numa curva de temperatura em função do tempo como se mostra na figura 22.

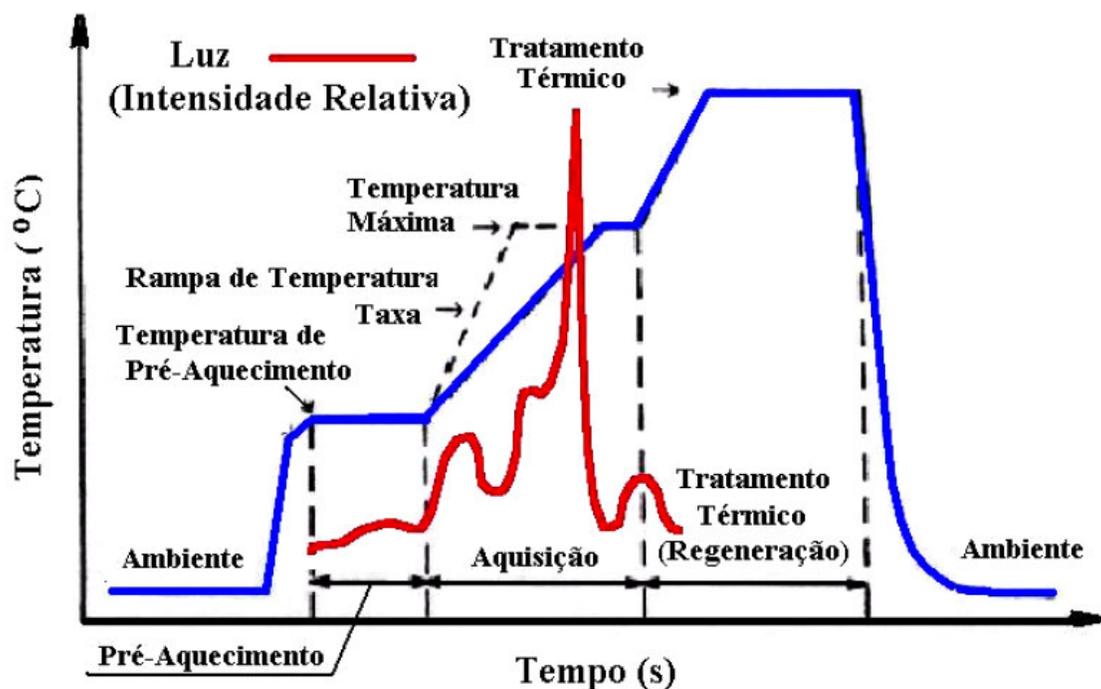


Figura 22 – Curva de temperatura em função do tempo e intensidade relativa da luz para o dosímetro Harshaw TLD-100

IV.3.3.1.1.4 Fading

Este processo é uma característica comum aos dosímetros termoluminescentes e consiste na libertação espontânea dos electrões das armadilhas. O parâmetro responsável por este facto, é fundamentalmente a temperatura, porém factores como o armazenamento, a luz e humidade também podem ser determinantes no comportamento deste tipo de dosímetros. Dados publicados apontam para um “fading” que pode variar entre 1% ao mês e 10% ao ano [Mas86], sendo que os picos 2, 3 e 4 (ver Figura 21) mais sensíveis a esta propriedade que o pico 5 [BMP90].

IV.3.3.1.1.5 Características específicas para a utilização dos TLD

De entre as diversas características específicas para a utilização dos TLD, destaca-se o facto deste material possuir uma elevada eficiência na emissão de luz, o que nos permite obter leituras com grande exactidão. Outros factores importantes em dosimetria e sistemas dosimétricos, são a estabilidade e resistência que estes dosímetros apresentam perante variações da temperatura de irradiação. Finalmente, uma outra característica que lhes confere um elevado grau de utilização é o facto da resposta obtida ser proporcional à dose absorvida, o que em termos práticos se traduz pela facilidade no seu manuseamento.

IV.3.4 Vantagens em comparação com outros sistemas dosimétricos

A utilização dos dosímetros de termoluminescência oferece diversas vantagens. Nomeadamente o facto de permitirem medir exposições entre 10^{-5} e 10^6 R, o que permite uma elevada aplicabilidade em diversas áreas, desde aplicações clínicas a mapeamento de taxas de dose em unidades industriais. Uma outra característica importante, é a sua sensibilidade a radiação gama, alfa, beta, raios X, UV e alguns a neutrões, o que aliado à facilidade de utilização destes dosímetros devido ao seu tamanho, permite uma elevada versatilidade nas aplicações. Embora, seja necessário esperar cerca de 24 horas para se proceder à leitura dos dosímetros, esta é claramente rápida, o que pode evidenciar um custo relativamente baixo na utilização dos TLD. Finalmente, e fazendo uso do que foi dito anteriormente relativamente ao custo, a reutilização dos dosímetros após tratamento térmico é sem duvida uma mais valia económica.

Este método de dosimetria é mais comum para doses baixas, mesmo para doses abaixo de 10^{-5} Gy no caso do $\text{CaSO}_4\text{:Mn}$.

A utilização deste método em aplicações a altas doses é mais complicado devido:

- a. Não linearidade de resposta, o que implica que seja necessário elaborar uma correcção dos valores obtidos. A equação IV.15 permite elaborar a correcção quando entramos na região supralinear.
- b. Saturação e diminuição da luminescência devido à radiação.
- c. Auto – absorção da luz emitida devido ao escurecimento a altas doses, ou seja, como as propriedades físico – químicas do material são alteradas, nomeadamente a cor, a dose absorvida que vamos determinar não é uma resposta linear mas é obtida através de uma equação tipicamente de 4º grau, a qual foi obtida por calibração com dosímetro de referência.

Para doses acima dos **10³ Gy**, podem ser utilizados os materiais LiF e CaF₂:Mn se utilizarmos uma análise do pico incandescente com temperaturas entre 110 e 260 °C.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

A

[AST92] “Practice for Using the Fricke Reference Standard Dosimetry System”, *E 1026-92, American Society for Testing and Materials*, 1992.

[Att86] F. H. Attix, “Introduction to Radiological Physics and Radiation Dosimetry”, *John Wiley & Sons, Inc.*, 1986.

B

[BMP90] J. Barthe, G. Marinello, J. Pollack and G. Portal, “New Automatic Fast Reader for Power and Sintered pellets in Medical Physics”, *Radiation Protection and Dosimetry*. Vol. 34 pp. 261-263, Nuclear Technology Publishing, 1990.

C

[Cun83] J. R. Cunningham, “The Physics of Radiology”, *Charles C Thomas Publisher, USA*, 1983.

I

[ICR00] “Dosimetry for Industrial Radiation Processing”, *International Commission On Radiation Units and Measurement*, Bethesda, MD, 2000.

[ICR69] “Radiation Dosimetry: X Rays and Gamma Rays with Maximum Photon Energies Between 0.6 and 50 MeV”, Report 14, *International Commission on Radiation Units and Measurements*, Bethesda, MD, 1969.

[ICR70] “Radiation Dosimetry: X-rays Generated at Potentials of 5 to 500 keV”, Report 17, *International Commission on Radiation Units and Measurements*, Bethesda, MD, 1970.

[ICR84] “Radiation Dosimetry: Electron Beams with energies between 1 and 50 MeV”, Report 133, *International Commission on Radiation Units and Measurements*, Bethesda, MD, 1984.

M

[Mas86] M. Mascovitch, “Radiation Protection and Dosimetry”, 17, pp. 165, 1986.

[Mat82] R. W. Mattheus, “Aqueous chemical dosimetry”, *Int. J. Appl. Radiat. Isotopes*, 33, 1159, 1982.

[McK95] S. W. S. McKeever, “Thermoluminescence Dosimetry Materials: Properties and Uses”, *Nuclear Technology Publishing*, Ashford, England, 1995.

[MJ82] L. O. Mattson and K. A. Johansson “Ferrous sulphate dosimeter for control of ionization chamber dosimetry of electron and ^{60}Co gamma beams”, *Acta. Radiol. Oncol.*, **21**, 139, 1982.

R

[Ros01] L. A. R. DA ROSA, “Dosimetria Termoluminescente Aplicada à Física Médica”, *Instituto de Radioproteção e Dosimetria – CNEN*, Rio de Janeiro, 2001.

W

[WT99] J. R. Williams and D.I. Thwaites, “Radiotherapy Physics in Practice”, Department of medical Physics and Medical Engineering, University of Edinburgh, UK, 1999.

CAPITULO V

V O DISPOSITIVO EXPERIMENTAL E SUA SIMULAÇÃO

Neste capítulo, está descrita a unidade de irradiação utilizada no desenvolvimento do trabalho, bem como as metodologias aplicadas no mapeamento de taxas de dose efectuando medições e através de simulação Monte Carlo.

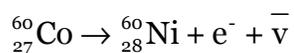
A simulação requer a construção e implementação de um modelo computacional que corresponda à situação real que se deseja simular. Neste trabalho, desenvolveu-se um modelo que permite simular o transporte de fótons primários emitidos por cada uma das fontes de Cobalto-60 bem como das partículas secundárias (fótons, electrões e positrões) geradas nas interacções ocorridas nos materiais, com o objectivo de se determinar a taxa de dose depositada em 15 locais dentro da câmara de irradiação.

Tal como foi dito na introdução, um dos objectivos deste trabalho é o desenvolvimento de um mapeamento de taxas de dose, utilizando métodos de simulação Monte Carlo. Para validar os resultados de simulação obtidos foram efectuadas medições experimentais utilizando métodos de dosimetria química e de dosimetria de termoluminescência descritos no capítulo anterior.

V.1 O ISÓTOPO ^{60}Co

O Cobalto é um metal duro, ferromagnético, cujo único isótopo estável é o cobalto-59. Os isótopos que apresentam um tempo de semi-vida maior são, o Co-60, o Co-57 e o Co-56, com semi – vidas de 5,2714 anos, 271,79 dias e 70, 86 dias,

respectivamente. Os restantes isótopos têm semi-vidas inferiores a 18 horas e alguns menores que 1 segundo. A unidade de irradiação – modelo Precisa 22 ML - contém duas fontes de cobalto-60. O processo de desintegração do Cobalto-60 é do tipo beta (β^-), no qual é emitido um electrão e um anti neutrino.



Este isótopo produz dois fotões no seu decaimento com energias de 1,17 MeV e de 1,33 MeV, tal como representado na figura seguinte.

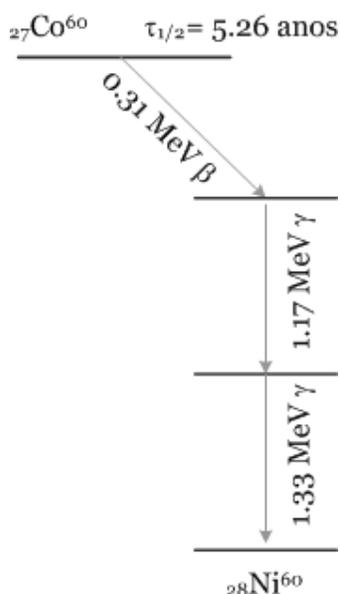


Figura 23 – Esquema das fases principais do declínio do ${}^{60}\text{Co}$.

V.2 A UNIDADE DE IRRADIAÇÃO (PRECISA 22 ML)

A câmara de irradiação é uma cavidade revestida por aço inoxidável, de forma aproximadamente paralelepípedica, cuja face superior é encurvada, com 65 cm de altura máxima, 50 cm de profundidade e 20 cm de largura. Na figura 24 estão apresentadas duas imagens da unidade experimental de ${}^{60}\text{Co}$, utilizado no desenvolvimento deste trabalho.



Figura 24 – Câmara de irradiação da unidade experimental de ^{60}Co , Precisa 22 ML.

Na figura seguinte, estão apresentadas as dimensões reais da câmara de irradiação.

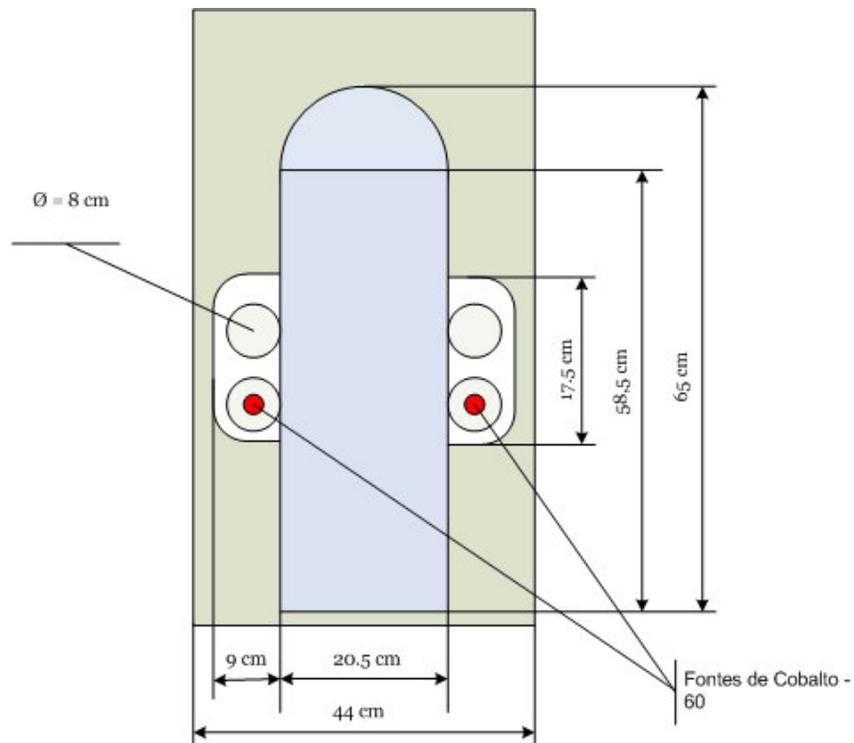


Figura 25 – Dimensões da câmara de irradiação da unidade experimental de ^{60}Co .

As duas fontes de ^{60}Co de geometria cilíndrica estão colocadas em dois canais de aço inoxidável soldados às paredes laterais da câmara de irradiação. Um dispositivo automático opera a sua deslocação, numa distância de 50 cm, ao longo destes canais. Na posição de recuo máximo a dose é mínima dentro da câmara de irradiação, o contrário acontece quando o dispositivo se encontra na posição correspondente ao seu máximo avanço, sendo neste caso a dose máxima dentro da câmara de irradiação. Vários centímetros de aço/chumbo separam as fontes da câmara de irradiação. Existem dois orifícios entre o canal onde se deslocam as fontes e a câmara de irradiação, obtendo-se nestas localizações a dose máxima no interior da câmara.

Em 1971, a actividade inicial era de 370 TBq (10 kCi), estando distribuída por duas fontes, cada uma com 185 TBq (5 kCi). Em Dezembro de 2006, a actividade de cada fonte é de 1,8 TBq (48,5 Ci).

V.3 METODOLOGIA UTILIZADA PARA O DESENVOLVIMENTO DA SIMULAÇÃO

Para o mapeamento de taxas de dose da unidade de irradiação descrita na secção anterior, utilizaram-se três metodologias distintas; a simulação de Monte Carlo, a dosimetria química e a dosimetria de termoluminescência. Os programas de simulação utilizados para efectuar o transporte de partículas foram o MCNPX e o PENELOPE, previamente descritos.

Tal como já foi mencionado anteriormente, a simulação com o PENELOPE requer a utilização de 4 parâmetros definidos pelo utilizador, ou seja, C_1 , C_2 , W_{cc} e W_{cr} . No desenvolvimento do trabalho descrito, a simulação foi efectuada utilizando os seguintes valores destes parâmetros: $C_1=C_2=0.1$, $W_{cc}= 1 \times 10^4$ eV e $W_{cr}= 1 \times 10^3$ eV. Os valores de C_1 e C_2 , devem estar entre 0 e 0.2, e devem ser pequenos o suficiente de modo a não influenciar o rigor da simulação, pelo que nas energias emitidas pelo ^{60}Co , o valor de $C_1=C_2=0.1$ representam o melhor compromisso.

O transporte de partículas executado pelo MCNPX é controlado pelas variáveis EMCPF, a qual representa o limite máximo de energia para o transporte dos fótons, EMAX, que representa o limite máximo de energia dos electrões a serem transportados e ainda pelas energias de corte. Foram utilizados os seguintes valores no decorrer da simulação efectuada com o MCNPX: 1 keV para a energia de corte tanto para fótons como para electrões, uma perda de cerca de 8,3 % para a energia média perdida em cada passo, EMCPF igual a 20 MeV e ainda EMAX igual a 20 MeV.

Na secção seguinte, estão apresentados os parâmetros utilizados em ambos os códigos.

V.3.1 Parâmetros da simulação

Do ponto de vista estrutural, os ficheiros de entrada dos códigos de simulação utilizados no desenvolvimento do trabalho são distintos (ver capítulo III). Contudo, dado que as especificações da geometria de irradiação, da fonte de irradiação, dos materiais, das energias envolvidas, e do tipo de resposta pretendida, são as mesmas em ambos os métodos de simulação, de seguida vou apresentá-los sem fazer a distinção entre códigos. A simulação efectuada tanto com o Penelope como com o MCNPX decorreu em função do número máximo de partículas emitidas especificado, 10^8 e 10^9 , respectivamente.

V.3.1.1 Descrição da geometria

Foi elaborada uma descrição detalhada de todos os elementos que compõem a unidade de irradiação, bem como uma descrição rigorosa em termos de dimensões geométricas e localizações das mesmas. Para além disso, foram igualmente descritos todos os *vials* de *pyrex*, tendo especial atenção com a sua localização, dado que foram utilizados na validação dos resultados computacionais obtidos.

No programa *penmain* do código PENELOPE esta descrição é elaborada num ficheiro de geometria, que é invocado pelo programa principal. Pelo contrário, no MCNPX, toda a descrição geométrica é elaborada no ficheiro de entrada.

V.3.1.2 Descrição da fonte e Energia

As fontes de ^{60}Co apresentam uma forma cilíndrica, com altura igual a 5 cm e um diâmetro igual a 0,8 cm. A energia dos fotões emitidos é de 1,17 MeV e de 1,33 MeV com uma fracção de decaimento²³ igual a 1. Em ambos os códigos de simulação, as energias emitidas pelo ^{60}Co estão descritas como um espectro de energia, ou seja, não é simulada uma fonte monoenergética, que emita somente ou 1,33 MeV ou 1,17 MeV.

Uma vez que, tipicamente, o programa *penmain* assume que as partículas estão a ser emitidas por uma fonte pontual, foram elaboradas modificações no programa *penelope.f*, de modo a simular fontes de geometria cilíndrica. As modificações elaboradas permitem que as partículas sejam emitidas, ao longo de um cilindro, correspondente à fonte de ^{60}Co , utilizada no desenvolvimento do trabalho. Para tal foram definidas duas variáveis, o *R* e o *phi*, que permitem a translação da partícula gerada num ponto para outra posição no interior do cilindro.

O programa MCNPX permite especificar o volume no interior do qual são geradas as partículas primárias.

V.3.1.3 Descrição dos materiais

Dado que a trajectória dos fotões/electrões é fortemente influenciada pelos materiais atravessados ao longo do seu percurso, a correcta descrição dos mesmos é fundamental para a obtenção de resultados fidedignos. Como foi descrito previamente, a câmara de irradiação é composta por ar, revestida por

²³ “branching ratio”

aço inoxidável e coberta de chumbo. As fontes de Cobalto – 60 estão inseridas numa cápsula de Polimetilmetacrilato (PMMA). Para a validação dos resultados de simulação, foi utilizada uma solução de Fricke colocada dentro de *vials* de pyrex. Ou seja, os materiais definidos no ficheiro de entrada foram os seguintes:

- Ar ($\rho= 1.2 \times 10^{-3} \text{ g/cm}^3$)
- Aço inoxidável ($\rho=7.8 \text{ g/cm}^3$)
- Chumbo ($\rho= 11.35 \text{ g/cm}^3$)
- Cobalto – 60 ($\rho=8.9 \text{ g/cm}^3$)
- PMMA ($\rho=1.19 \text{ g/cm}^3$)
- Solução de Fricke ($\rho=1.024 \text{ g/cm}^3$)
- Pyrex (PMMA ($\rho=2.23 \text{ g/cm}^3$))

Mais uma vez, no programa *penmain* do código PENELOPE a descrição dos materiais utilizados é elaborada num ficheiro de entrada separado, que é invocado pelo programa principal. Pelo contrário, no MCNPX, a descrição dos materiais utilizados é elaborada no ficheiro de entrada.

V.4 METODOLOGIA UTILIZADA PARA A VALIDAÇÃO

A validação dos resultados obtidos por simulação foi elaborada por medições utilizando métodos de dosimetria química com a solução de Fricke. Tal como referido no capítulo III, a solução de Fricke é um dosímetro químico de referência, o qual permite determinar a dose absorvida em função da concentração do ião férrico formado por oxidação do ião ferroso. O procedimento experimental utilizado para a sua preparação está descrito no anexo A.

V.4.1 Solução de Fricke

As irradiações foram elaboradas utilizando um suporte metálico, com as seguintes dimensões 59 x 43.3 x 19 cm³. Este dispositivo está dividido em, diferentes níveis de altura, permitindo assim o estudo da distribuição espacial da taxa de dose na câmara de irradiação.

Cada nível permite 27 locais de irradiação, tal como ilustra a Figura 26. No desenvolvimento deste trabalho, foram efectuadas medições utilizando somente 15 locais de irradiação indicados na figura, com o objectivo de validação dos resultados obtidos com ambos os códigos de simulação.

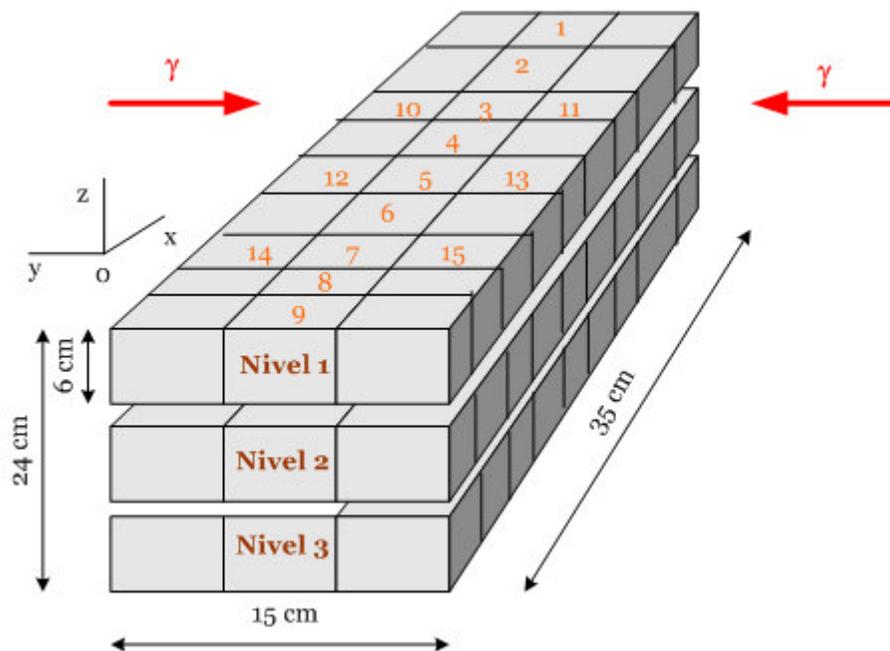


Figura 26 – Ilustração da geometria de irradiação e dos locais de irradiação utilizados no desenvolvimento do trabalho. Neste esquema aparece ilustrada a fonte de irradiação de ambos os lados, correspondendo aos resultados obtidos com as duas fontes.

Para cada nível de irradiação foram desenvolvidos três soluções de Fricke diferentes, de modo a garantir a reprodutibilidade dos resultados, tendo sido os tempos de exposição à radiação igualmente diferentes. Durante as irradiações,

verificou-se a necessidade de se proceder à medição da temperatura dentro da câmara de irradiação, o que foi efectuado utilizando um termopar da própria câmara de irradiação.

Em todas as irradiações foi utilizado o mesmo volume de solução, 50 ml, de forma a garantir a concordância dos diferentes resultados obtidos com os da simulação.

V.4.2 Dosímetros termoluminescentes (TLD)

Os TLD utilizados no desenvolvimento deste trabalho são utilizados no controlo da dosimetria individual no *campus* do ITN. Como tal, permitem a medição do $H_p(10)$, que representa o equivalente de dose individual a 10 mm de

profundidade e o $H_p(0.07)$ que representa o equivalente de dose individual a 0.07 mm de profundidade.

A metodologia de irradiação utilizada para os TLD foi a mesma que a utilizada na validação com a solução de Fricke. Ou seja, os dosímetros foram colocados nas mesmas posições (figura 26), e irradiados durante um determinado período tempo, de modo a não ser excedido o valor de 1 Gy para a dose absorvida. Após a irradiação, os TLD foram lidos no Departamento de Protecção Radiológica e Segurança Nuclear, do Instituto Tecnológico e Nuclear, num sistema automático de leitura Harshaw 6600, sendo a temperatura de pré – aquecimento igual a aproximadamente 130 °C e uma temperatura de aquecimento igual a 300 °C. A calibração do sistema de dosimetria individual é feita mensalmente no laboratório de metrologia das radiações ionizantes do ITN, num feixe de Cs-137 e com um fantoma de PMMA de dimensões 30x30x15, em termos de $H_p(10)$, o equivalente de dose individual.

O dosímetro utilizado no ITN é constituído por uma placa metálica (cartão), que contém dois detectores de fluoreto de lítio dopado com magnésio e titânio

(LiF:Mg,Ti), contidos num invólucro (porta-dosímetro) com filtração adequada à medida das grandezas operacionais usadas em protecção radiológica .



Figura 27 – Dosímetro de corpo inteiro (Harshaw 8814). À esquerda: invólucro ou porta-dosímetro; direita: cartão contendo os dosímetros de TLD-100.

O cartão contém dois detectores de fluoreto de lítio (TLD-100), com as dimensões de 3x3x0.38 mm³. Um é colocado sob um filtro combinado de PTFE / ABS (Politetrafluoretileno/copolímero de acrilonitrila, butadieno e estireno) de 100 mg/cm², sendo usado para a medida do equivalente de dose em profundidade. O outro encontra-se colocado sob um filtro de *mylar* aluminizado, correspondendo a uma filtração de 17 mg/cm², destinando-se à medida equivalente de dose em superfície.

A expressão utilizada para a avaliação das doses é a seguinte:

$$\text{dose} = \frac{\text{leitura} * \text{ecc}}{\text{RCF}} \quad (\text{V.1})$$

em que a leitura é o valor lido (nC), ecc o factor de correcção individual do dosímetro lido (adimensional), e RCF o factor de calibração do leitor (mSV/nC). O ecc é usado para corrigir a eficiência do dosímetro relativamente à população total de dosímetros em uso, e é determinado numa fase prévia à de utilização.

CAPITULO VI

VI RESULTADOS EXPERIMENTAIS E COMPUTACIONAIS

VI.1 CÁLCULO DA DISTRIBUIÇÃO DE DOSE

Tal como foi descrito nos dois capítulos anteriores, com o objectivo de validar os resultados da distribuição de dose no interior da câmara de irradiação obtidos por simulação Monte Carlo, foram efectuadas medições de dose utilizando dosimetria química (a solução de Fricke) e dosímetros de termoluminescência (TLD).

Em qualquer um dos métodos dosimétricos utilizados, os valores obtidos dizem respeito à dose absorvida. Por questões de simplicidade da leitura dos resultados nas curvas de isodose apresentadas, estes valores foram convertidos em valores de taxa de dose, através da seguinte equação:

$$\text{Taxa de dose} = \frac{\text{Dose Absorvida}}{\text{Tempo de exposição}} \quad (\text{VI.1})$$

Em cada um dos 15 locais de irradiação foi colocado sempre o mesmo volume de solução de Fricke e no final de cada irradiação, foram sempre medidos 6 valores de densidade óptica para cada amostra, obtidos por leitura sempre no mesmo espectrofotometro, Shimadzu mini UV 1240. Foram efectuadas 6 leituras para uma melhor e mais rigorosa análise estatística dos resultados obtidos. O

procedimento de irradiação da solução de Fricke está apresentado no anexo B. A taxa de dose de cada local de irradiação foi calculada com base no declive da recta de regressão ($y = mx+b$), considerando-se como variável independente (x) o tempo de irradiação (t) e como variável dependente (y) a dose absorvida (D). De modo, a verificar se poderia ser considerado um valor de taxa de dose médio, ou seja, se os declives estimados para cada posição de irradiação eram ou não significativamente diferentes, foi aplicado o teste de igualdade dos coeficientes de regressão, que constitui também um teste do paralelismo das rectas de regressão, que pode ser realizado devido às distribuições *t* de *student*.

Com este teste necessitamos de determinar t_{obs} através da seguinte equação:

$$t_{obs} = \frac{|b_1 - b_2|}{\sqrt{\sigma_{y.x}^2 \left[\frac{1}{(SDQ_x)_1} + \frac{1}{(SDQ_x)_2} \right]}} \quad (VI.2)$$

tal que:

$$\begin{aligned} \sigma_{y.x}^2 &= \frac{(SQD_{y.x})_1 + (SQD_{y.x})_2}{n_1 + n_2 - 4} \\ &= \frac{(SQD_y)_1 - SPD_1^2 / (SQD_x)_1 + (SQD_y)_2 - SPD_2^2 / (SQD_x)_2}{n_1 + n_2 - 4} \end{aligned} \quad (VI.3)$$

sendo os valores b_1 , $(SQD_x)_1$, $(SQD_y)_1$, SPD_1 , $(SQD_{y.x})_1$ e n_1 relativos à primeira amostra e os valores b_2 , $(SQD_x)_2$, $(SQD_y)_2$, SPD_2 , $(SQD_{y.x})_2$ e n_2 relativos à segunda amostra. A quantidade assim obtida deve em seguida ser comparada com o valor $t_{1-\alpha/2}$, relativo à distribuição *t* com n_1+n_2-4 graus de liberdade; e a hipótese nula deve ser rejeitada $t_{obs} \geq t_{1-\alpha/2}$. Antes de efectuar o teste de igualdade dos coeficientes de regressão, é importante controlar a validade da hipótese de igualdade das variâncias residuais, pelo teste F.

A comparação dos valores teóricos de F ($F_{0,975}$) com os valores observados F (F_{obs}) conduz à hipótese de aceitação do paralelismo das rectas de regressão, ou seja, os valores observados de F (por exemplo, para o nível 1, com 1 fonte e para a posição 1, os valores foram 1,23, 1,34 e 1,09) são sempre inferiores a 10,6, e conseqüentemente à confirmação da hipótese de igualdade dos coeficientes de regressão, para um nível de significância de 0,05, ou seja existe uma probabilidade de 5%, do valor determinado não corresponder ao valor correcto. Por comparação do valor t observado com o valor crítico de t , verifica-se a validação da hipótese nula, ou seja que as rectas são paralelas. Desta forma, pode-se determinar um valor médio para os diferentes 6 valores de débito de dose obtidos experimentalmente, obtidos para cada posição de irradiação e nível de irradiação.

Para o mesmo local de irradiação foram efectuadas três medições de dose absorvida com os dosímetros de TLD, de modo a fazer-se a análise estatística dos resultados obtidos. Nesta, foi elaborada a média simples dos três valores, e o cálculo do respectivo desvio padrão. Tal como já foi mencionado, estes dosímetros permitem medir o valor de $H_p(10)$, contudo, como no desenvolvimento do trabalho queremos obter a taxa de dose, temos de fazer a conversão. Como a simulação foi elaborada para medição de dose absorvida na água, e o mesmo acontece com a solução de Fricke, neste caso dos TLD tem de ser feita a conversão de $H_p(10)$ para dose absorvida na água. A equação que permite elaborar a conversão está descrita de seguida,

$$H_p(10) = K_{ar} \cdot CC \cdot F_{retrodispersão} \quad (VI.4)$$

onde K_{ar} , é o valor de kerma no ar, CC é o factor de conversão específico para ^{60}Co , e $F_{retrodispersão}$ é o valor do factor de retrodispersão. Este factor é importante na medida em que permite corrigir o valor de $H_p(10)$ devido à retrodispersão sofrida pela radiação ao atingir um dado meio material. Os valores utilizados foram os seguintes: $CC = 1.15 \text{ Sv/Gy}$ [ISO99] e $F_{retrodispersão} = 1.04$ [ISO99]. O valor de dose absorvida na água é determinado utilizando a seguinte equação:

$$D_{\text{agua}} = D_{\text{ar}} \cdot \frac{\left(\frac{\mu_e}{\rho}\right)_{\text{agua}}}{\left(\frac{\mu_e}{\rho}\right)_{\text{ar}}} \quad (\text{VI.5})$$

onde $\left(\frac{\mu_e}{\rho}\right)$ representa o valor do coeficiente de atenuação mássico de energia $\left(\frac{\mu_e}{\rho}\right)_{\text{agua}}$ é igual a $2.83 \times 10^{-3} \text{ cm}^2 \cdot \text{g}^{-1}$ e $\left(\frac{\mu_e}{\rho}\right)_{\text{ar}}$ é igual a $2.55 \times 10^{-3} \text{ cm}^2 \cdot \text{g}^{-1}$.

Tal como foi mencionado previamente, em ambos os métodos de simulação – MCNPX e PENELOPE – os resultados obtidos foram uma medição da dose absorvida em cada célula. As várias simulações foram sempre efectuadas com as mesmas condições, à excepção, obviamente da posição das células, nas quais se pretendia estimar o valor de débito de dose. No final de cada simulação foram obtidos valores médios da energia depositada em cada volume definido e o respectivo erro estatístico. Uma vez que foram utilizados dois métodos de simulação de Monte Carlo, procedeu-se à análise dos resultados computacionais obtidos. Ou seja, sendo C os valores calculados por simulação Monte Carlo e E os valores determinados experimentalmente, efectuou-se o quociente entre os valores médios obtidos por cada um dos métodos para uma dada posição e determinou-se a incerteza relativa do quociente entre as duas variáveis, através da seguinte expressão:

$$\frac{\sigma\left(\frac{C}{E}\right)}{\frac{C}{E}} = \sqrt{\left(\frac{\sigma_C}{C}\right)^2 + \left(\frac{\sigma_E}{E}\right)^2}, \quad (\text{VI.6})$$

sendo σ_C/C e σ_E/E as incertezas estatísticas relativas dos valores obtidos por simulação e medidos experimentalmente.

As curvas de isodose representam uma ferramenta importante para a representação dos valores de taxa de dose, devido sobretudo à fácil interpretação

dos resultados obtidos. Estas curvas unem todos os pontos num determinado plano com o mesmo valor de dose absorvida. São obtidas utilizando o método de interpolação de **Kriging** [Bee04], que é um estimador baseado no método linear dos mínimos quadráticos. O objectivo deste é estimar um valor não conhecido x^* , de uma função real f , tendo como base outros pontos conhecidos, $x_1 \dots x_n$. O estimador de *Kriging* é linear, uma vez que o valor determinado $\hat{f}(x^*)$ é uma combinação linear, representada pela seguinte equação:

$$\hat{f}(x^*) = \sum_{i=1}^n \lambda_i f(x_i) \quad (\text{VI.7})$$

Os valores de λ_i são soluções de um sistema de equações lineares, o qual é obtido assumindo que f é uma amostra de uma trajectória de um processo aleatório $F(x)$, sendo o erro dado pela equação seguinte:

$$\varepsilon(x) = F(x) - \sum_{i=1}^n \lambda_i F(x_i) \quad (\text{VI.8})$$

Nas secções seguintes, estão apresentados os diferentes valores de taxa de dose com uma e duas fontes, para os 3 níveis da câmara de irradiação mencionados no capítulo IV.

VI.2 RESULTADOS OBTIDOS COM UMA FONTE

Inicialmente, devido a um problema mecânico que impossibilitava a deslocação para a posição de irradiação da fonte 1 (posicionada no lado esquerdo da unidade de irradiação), começou-se por elaborar o mapeamento de dose utilizando somente a fonte 2 (posicionada no lado direito da câmara de irradiação). Neste caso, o mapeamento de débitos de dose foi somente elaborado para os níveis 1 e 2, uma vez que devido à baixa actividade da fonte, o nível 3 não é rentável do ponto de vista do utilizador. De seguida, estão apresentados os resultados obtidos para o nível 1 e 2. De salientar que, a dosimetria de

termoluminescência só foi elaborada para uma fonte. Dado que os dosímetros de termoluminescência disponíveis para a execução do trabalho são os utilizados na dosimetria de rotina, para protecção radiológica, a dose absorvida máxima é de cerca de 1 Gy. Logo, a utilização destes dosímetros com as duas fontes torna-se impraticável, devido sobretudo, ao tempo de exposição.

VI.2.1 Nível 1 (1 fonte)

Para o nível 1, os resultados de débito de dose obtidos, utilizando somente a fonte 2, para os 15 locais de irradiação, estão apresentados na tabela 2.

Tabela 3 – Valores médios de débito de dose (Gy/h) e respectiva incerteza estatística para 15 posições de irradiação no nível 1 utilizando somente a fonte 2, obtidos com a solução de Fricke, com os programas de simulação Monte Carlo MCNPX e PENELOPE e com os dosímetros de termoluminescência (TLD)

Posição	Débito de dose (Gy/h) Solução de Fricke	Débito de dose (Gy/h) MCNPX	Débito de dose (Gy/h) PENELOPE	Débito de dose (Gy/h) TLD
1	10.0 +/- 0.10	9.26 +/- 0.13	9.37 +/- 0.21	9.97 +/- 0.05
2	11.8 +/- 0.70	12.07 +/- 0.15	12.14 +/- 0.24	11.85 +/- 0.38
3	10.9 +/- 0.10	9.99 +/- 0.15	10.41 +/- 0.22	10.97 +/- 0.09
4	10.5 +/- 0.10	11.00 +/- 0.16	10.42 +/- 0.22	10.37 +/- 0.16
5	8.6 +/- 0.10	8.54 +/- 0.13	8.05 +/- 0.19	8.56 +/- 0.13
6	5.5 +/- 0.20	4.93 +/- 0.10	4.41 +/- 0.14	5.55 +/- 0.02
7	3.3 +/- 0.10	3.80 +/- 0.08	3.23 +/- 0.12	3.35 +/- 0.01
8	2.0 +/- 0.10	1.90 +/- 0.06	1.96 +/- 0.01	2.07 +/- 0.05
9	1.2 +/- 0.10	1.07 +/- 0.04	1.15 +/- 0.07	1.29 +/- 0.02
10	5.0 +/- 0.30	4.66 +/- 0.10	4.95 +/- 0.15	4.85 +/- 0.09
11	25.2 +/- 0.30	24.77 +/- 0.25	25.09 +/- 0.35	25.32 +/- 0.32
12	5.1 +/- 0.10	5.15 +/- 0.10	4.61 +/- 0.14	5.21 +/- 0.15
13	11.9 +/- 0.10	11.34 +/- 0.16	11.71 +/- 0.23	11.86 +/- 0.09
14	2.2 +/- 0.20	2.13 +/- 0.06	2.09 +/- 0.10	2.18 +/- 0.03
15	3.9 +/- 0.10	3.70 +/- 0.07	3.43 +/- 0.12	4.04 +/- 0.08

As curvas de isodose estão representadas na figura 28. Nesta, facilmente se observa que o valor mais elevado de débito de dose (25.2 Gy/h), se encontra no ponto mais próximo da fonte. Por outro lado, o valor mais baixo de débito de dose (1.2 Gy/h) representa o ponto mais afastado da fonte.

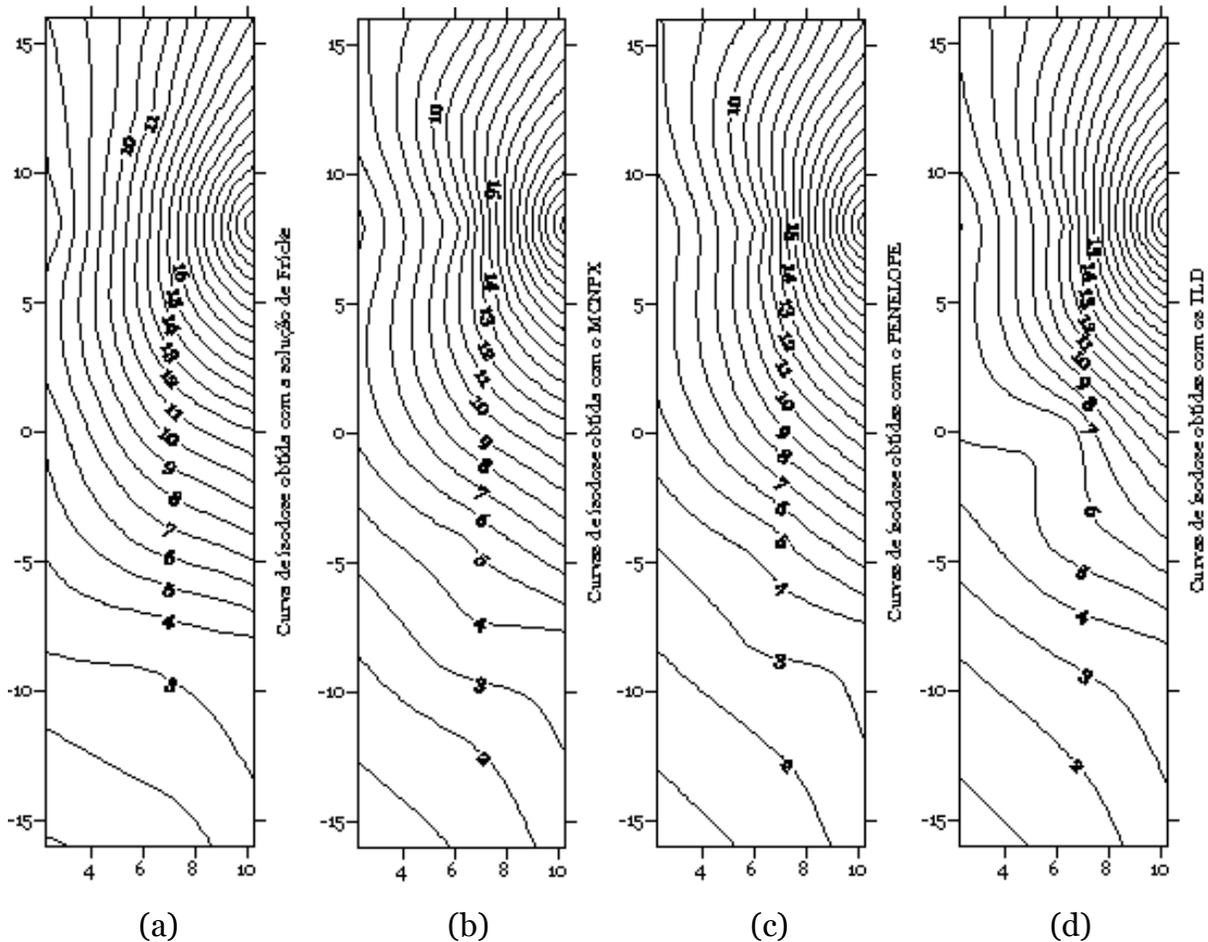


Figura 28 – Curvas de isodose para o 1º nível com uma fonte, obtidas com a solução de Fricke (a), os programas de Monte Carlo MCNPX (b) e PENELOPE (c) e com os TLD (d), respectivamente. Nas linhas de isodose estão inscritos os valores da taxa de dose em Gy/h. De notar que, o espaçamento entre as linhas de isodose é igual a 1. O eixo xx representa a largura da câmara de irradiação, e o eixo yy representa a profundidade da câmara de irradiação, em cm.

VI.2.2 Nível 2 (1 fonte)

Para o nível 2, os resultados de débito de dose obtidos, utilizando somente a fonte 2, para os 15 locais de irradiação, estão apresentados na tabela seguinte.

Tabela 4 – Valores médios de débito de dose (Gy/h) respectiva incerteza estatística para 15 posições de irradiação no nível 2 utilizando somente a fonte 2, obtidos com a solução de Fricke, com os programas de simulação MCNPX e PENELOPE, e com os dosímetros de termoluminescência (TLD).

Posição	Débito de dose (Gy/h) Solução de Fricke	Débito de dose (Gy/h) MCNPX	Débito de dose (Gy/h) PENELOPE	Débito de dose (Gy/h) TLD
1	5.90 +/- 0.10	5.90 +/- 0.20	6.05 +/- 0.18	5.98 +/- 0.03
2	7.80 +/- 0.20	7.34 +/- 0.23	7.76 +/- 0.20	7.77 +/- 0.08
3	6.80 +/- 0.20	6.59 +/- 0.22	6.97 +/- 0.19	6.78 +/- 0.10
4	7.00 +/- 0.20	7.14 +/- 0.22	6.79 +/- 0.19	7.05 +/- 0.03
5	5.10 +/- 0.20	5.38 +/- 0.19	5.22 +/- 0.17	5.09 +/- 0.09
6	2.90 +/- 0.20	2.64 +/- 0.14	3.18 +/- 0.13	2.95 +/- 0.04
7	2.10 +/- 0.10	2.04 +/- 0.12	2.21 +/- 0.11	2.13 +/- 0.03
8	1.10 +/- 0.10	1.17 +/- 0.09	1.34 +/- 0.09	1.07 +/- 0.04
9	1.00 +/- 0.10	0.70 +/- 0.07	0.82 +/- 0.06	0.99 +/- 0.05
10	4.21 +/- 0.20	3.99 +/- 0.17	4.26 +/- 0.15	4.11 +/- 0.17
11	11.31 +/- 0.10	11.55 +/- 0.29	11.63 +/- 0.25	11.00 +/- 0.40
12	4.62 +/- 0.20	4.54 +/- 0.20	3.51 +/- 0.14	4.84 +/- 0.13
13	5.51 +/- 0.10	5.54 +/- 0.20	5.65 +/- 0.20	5.30 +/- 0.14
14	1.81 +/- 0.10	1.53 +/- 0.10	1.80 +/- 0.10	1.79 +/- 0.04
15	1.21 +/- 0.10	1.53 +/- 0.09	1.82 +/- 0.09	1.74 +/- 0.05

As curvas de isodose obtidas com a solução de Fricke, com o MCNPX, o PENELOPE e os TLD, respectivamente, estão representadas na figura 29.

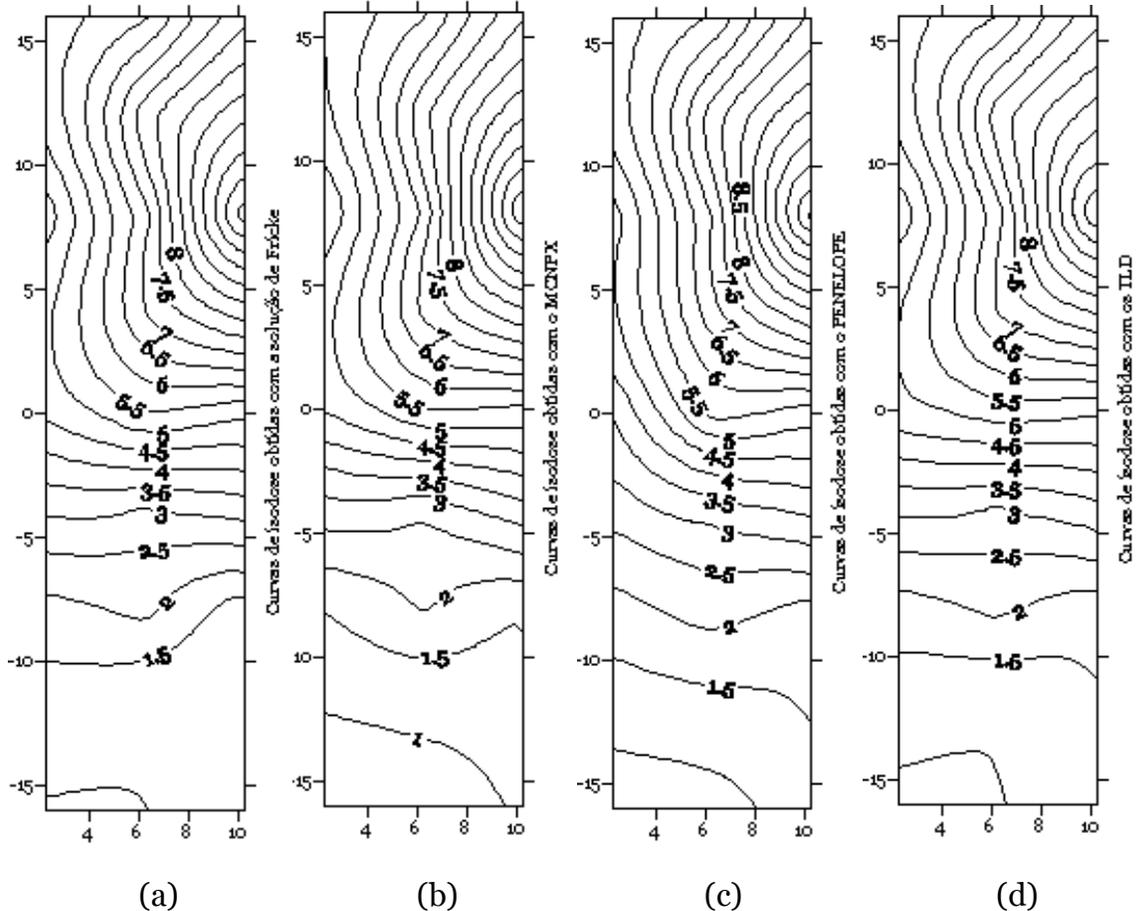


Figura 29 – Curvas de isodose para o nível 2, utilizando a solução de Fricke (a), ambos os programas de simulação MCNPX (b) e PENELOPE (c) e os TLD (d). Nas linhas de isodose estão inscritos os valores da taxa de dose em Gy/h. De notar que, o espaçamento entre as linhas de isodose é igual a 0.5. O eixo xx representa a largura da câmara de irradiação, e o eixo yy representa a profundidade da câmara de irradiação, em cm.

VI.3 RESULTADOS OBTIDOS COM DUAS FONTES

Resolvido o problema mecânico, procedeu-se à determinação dos débitos de dose para os diferentes níveis, utilizando ambas as fontes. Esta situação é a mais provável de acontecer nas diferentes aplicações da unidade de irradiação, uma vez que, para o mesmo valor de dose absorvida é necessário menos tempo de irradiação, com os consequentes benefícios económicos. De salientar que neste caso o mapeamento de débitos de dose já inclui o nível 3.

VI.3.1 Nível 1 (2 fontes)

Para o nível 1, os resultados de débito de dose obtidos para os 15 locais de irradiação apresentados no capítulo V, estão apresentados na tabela 8.

Tabela 5 – Valores de débito de dose em Gy/h e respectiva incerteza estatística para 15 posições de irradiação no nível 1 obtidos com a solução de Fricke e com os programas de simulação MCNPX e PENELOPE.

Posição	Débito de dose (Gy/h) Solução de Fricke	Débito de dose (Gy/h) MCNPX	Débito de dose (Gy/h) PENELOPE
1	18.50 +/- 0.10	18.53 +/- 0.26	18.65 +/- 0.21
2	24.50 +/- 0.30	24.14 +/- 0.32	24.34 +/- 0.44
3	20.40 +/- 0.60	19.98 +/- 0.31	20.92 +/- 0.22
4	21.88 +/- 0.40	21.99 +/- 0.33	21.53 +/- 0.22
5	17.20 +/- 0.50	17.07 +/- 0.27	17.19 +/- 0.19
6	9.80 +/- 0.10	9.85 +/- 0.19	9.87 +/- 0.14
7	6.20 +/- 0.40	6.61 +/- 0.16	6.38 +/- 0.12
8	3.80 +/- 0.20	3.81 +/- 0.12	3.94 +/- 0.09
9	2.20 +/- 0.20	2.14 +/- 0.08	2.21 +/- 0.07
10	30.40 +/- 0.20	30.44 +/- 0.37	30.88 +/- 0.35
11	30.50 +/- 0.10	30.44 +/- 0.37	30.88 +/- 0.35
12	16.50 +/- 0.10	16.49 +/- 0.27	16.24 +/- 0.14
13	16.60 +/- 0.30	16.49 +/- 0.27	16.24 +/- 0.23
14	5.60 +/- 0.19	5.84 +/- 0.14	5.50 +/- 0.10
15	5.70 +/- 0.10	5.84 +/- 0.14	5.50 +/- 0.12

As curvas de isodose obtidas com a solução de Fricke, e com ambos os programas de simulação Monte Carlo, MCNPX e PENELOPE, estão representadas na figura 30.

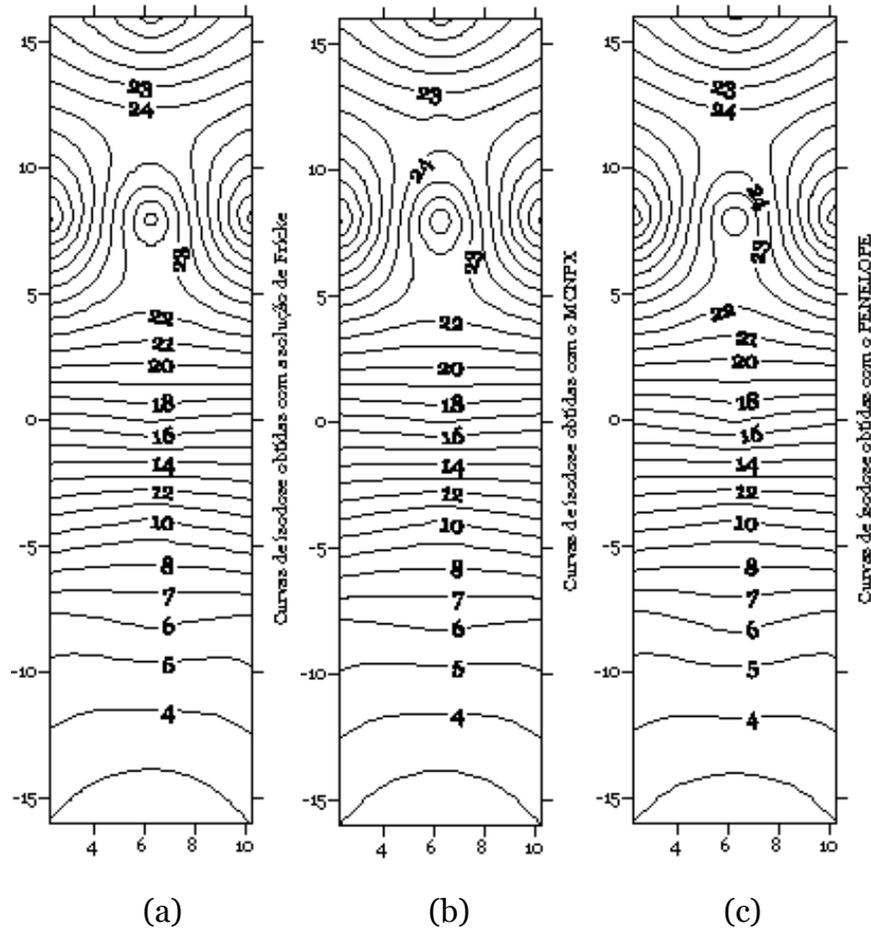


Figura 30 – Curva de isodose para o nível 1 com duas fontes, utilizando a solução de Fricke (a) e ambos os programas de simulação Monte Carlo, MCNPX (b) e PENELOPE (c). Nas linhas de isodose estão inscritos os valores da taxa de dose em Gy/h. De notar que, o espaçamento entre as linhas de isodose é igual 1. O eixo xx representa a largura da câmara de irradiação, e o eixo yy representa a profundidade da câmara de irradiação, em cm.

VI.3.2 Nível 2 (2 fontes)

Para o nível 2, os resultados de débito de dose obtidos para os 15 locais de irradiação apresentados no capítulo V, estão apresentados na tabela 11.

Tabela 6 – Valores de débito de dose em Gy/h e respectiva incerteza estatística para 15 posições de irradiação no nível 2, para os 15 locais de irradiação, obtidos com a solução de Fricke e com os programas de simulação Monte Carlo, MCNPX e PENELOPE.

Posição	Débito de dose (Gy/h) Solução de Fricke	Débito de dose (Gy/h) MCNPX	Débito de dose (Gy/h) PENELOPE
1	11.80+/- 0.21	11.80+/- 0.21	12.10+/- 0.21
2	15.60 +/- 0.10	15.68 +/- 0.24	15.52 +/- 0.24
3	13.60 +/- 0.22	13.18 +/- 0.24	13.94 +/- 0.24
4	14.00 +/- 0.30	14.28 +/- 0.25	13.58 +/- 0.25
5	10.40 +/- 0.30	10.76 +/- 0.20	10.44 +/- 0.20
6	5.80+/- 0.30	5.88+/- 0.17	6.06+/- 0.17
7	4.20 +/- 0.30	4.08 +/- 0.14	4.22 +/- 0.14
8	2.40 +/- 0.30	2.34 +/- 0.11	2.55 +/- 0.11
9	1.55 +/- 0.20	1.50 +/- 0.08	1.64 +/- 0.08
10	15.50 +/- 0.30	15.54 +/- 0.24	15.89 +/- 0.24
11	15.50 +/- 0.20	15.54 +/- 0.25	15.89 +/- 0.25
12	10.10 +/- 0.40	10.08 +/- 0.19	10.16 +/- 0.19
13	10.10 +/- 0.30	10.08 +/- 0.19	10.16 +/- 0.19
14	3.50 +/- 0.40	3.56 +/- 0.12	3.62 +/- 0.12
15	3.50 +/- 0.10	3.56 +/- 0.12	3.62 +/- 0.12

Na figura seguinte estão apresentadas as curvas de isodose obtidas com a solução de Fricke e com os programas de simulação Monte Carlo MCNPX e PENELOPE, para o nível 2 e com duas fontes de irradiação.

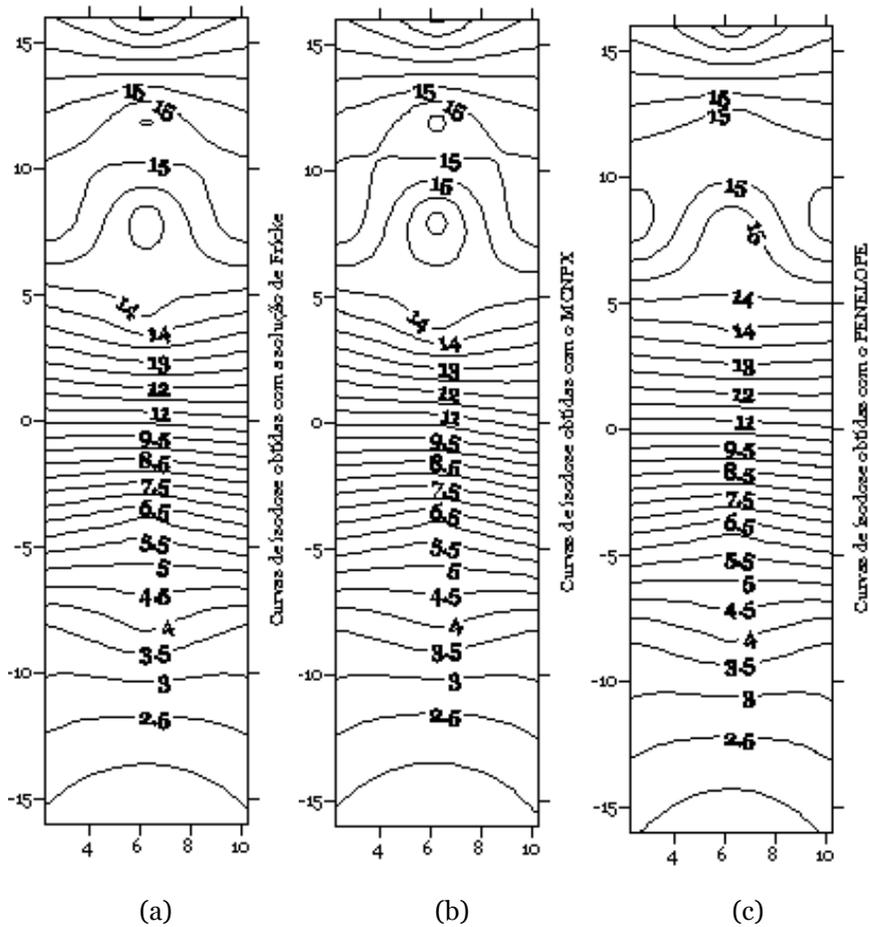


Figura 31 – Curva de isodose para o nível 2 com duas fontes., utilizando a solução de Fricke (a) e ambos os programas de simulação Monte Carlo, MCNPX (b) e PENELOPE (c). Nas linhas de isodose estão inscritos os valores da taxa de dose em Gy/h. De notar que, o espaçamento entre as linhas de isodose é igual 0.5. O eixo xx representa a largura da câmara de irradiação, e o eixo yy representa a profundidade da câmara de irradiação, em cm.

VI.3.3 Nível 3 (2 fontes)

Tal como mencionado anteriormente, o mapeamento de débitos de dose no nível 3, foi obtido somente para duas fontes. A razão pela qual foi tomada esta decisão, deve-se sobretudo ao facto da actividade de cada uma das fontes ser muito baixa originando para este nível valores de débito de dose reduzidos. Na tabela seguinte estão apresentados os resultados obtidos para os diferentes valores de débito de dose, obtidos para cada uma das posições.

Tabela 7 – Valores de débito de dose em Gy/h e respectiva incerteza estatística para 15 posições de irradiação no nível 3 obtidos com a solução de Fricke e com os programas de simulação Monte Carlo, MCNPX e PENELOPE.

Posição	Débito de dose (Gy/h) Solução de Fricke	Débito de dose (Gy/h) MCNPX	Débito de dose (Gy/h) PENELOPE
1	3.10 +/- 0.10	2.99 +/- 0.04	3.12 +/- 0.35
2	3.30 +/- 0.20	3.22 +/- 0.04	3.24 +/- 0.25
3	3.30 +/- 0.20	3.22 +/- 0.04	3.27 +/- 0.32
4	3.07 +/- 0.10	3.13 +/- 0.04	3.12 +/- 0.32
5	2.50 +/- 0.10	2.57 +/- 0.03	2.60 +/- 0.23
6	1.80 +/- 0.10	1.84 +/- 0.03	1.86 +/- 0.32
7	1.50 +/- 0.10	1.41 +/- 0.03	1.45 +/- 0.16
8	1.00 +/- 0.10	0.96 +/- 0.01	1.07 +/- 0.25
9	0.70 +/- 0.10	0.66 +/- 0.07	0.65 +/- 0.22
10	2.70 +/- 0.20	2.76 +/- 0.05	2.75 +/- 0.35
11	2.90 +/- 0.20	2.92 +/- 0.02	2.75 +/- 0.35
12	2.10 +/- 0.10	2.16 +/- 0.07	2.18 +/- 0.35
13	2.20 +/- 0.10	2.21 +/- 0.05	2.18 +/- 0.25
14	1.30 +/- 0.10	1.25 +/- 0.03	1.30 +/- 0.19
15	1.30 +/- 0.10	1.31 +/- 0.02	1.30 +/- 0.14

As curvas de isodose para o nível 3 e com duas fontes de irradiação, obtidas com a solução de Fricke e com os programas de simulação Monte Carlo MCNPX e PENELOPE estão apresentadas na figura 32.

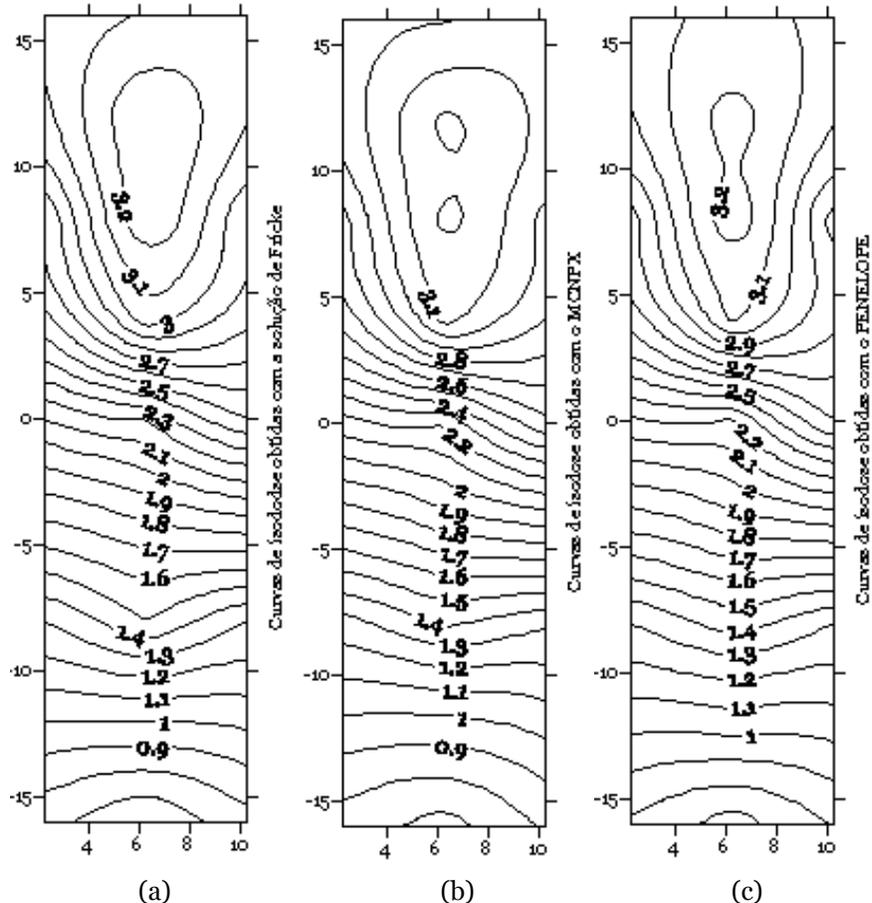


Figura 32 – Curva de isodose para o nível 3 com duas fontes, utilizando a solução de Fricke (a) e ambos os programas de simulação Monte Carlo, MCNPX (b) e PENELOPE (c). Nas linhas de isodose estão inscritos os valores da taxa de dose em Gy/h. De notar que, o espaçamento entre as linhas de isodose é igual 0.1. O eixo xx representa a largura da câmara de irradiação, e o eixo yy representa a profundidade da câmara de irradiação, em cm.

VI.4 INTERCOMPARAÇÃO DOS VALORES DE DÉBITOS DE DOSE OBTIDOS COM OS TRÊS SISTEMAS DOSIMÉTRICOS

VI.4.1 Análise dos resultados obtidos com uma fonte

A comparação dos resultados obtidos por cada um dos 4 métodos (2 sistemas dosimétricos e 2 programas de simulação Monte Carlo) utilizados para a determinação dos valores de débito de dose foi efectuada sobrepondo gráficamente os valores médios de débito de dose (Gy/h) e as respectivas incertezas associadas, obtidos por cada método para cada uma das 15 posições

utilizadas para cada sistema dosimétrico. Apresentam-se seguidamente os respectivos resultados.

VI.4.1.1 1º Nível (1 fonte)

Na figura 33, estão representados os valores de débitos de dose obtidos com a solução de Fricke, com o dosímetros de termoluminescência e por ambos os programas de simulação Monte Carlo, em cada uma das posições de irradiação.

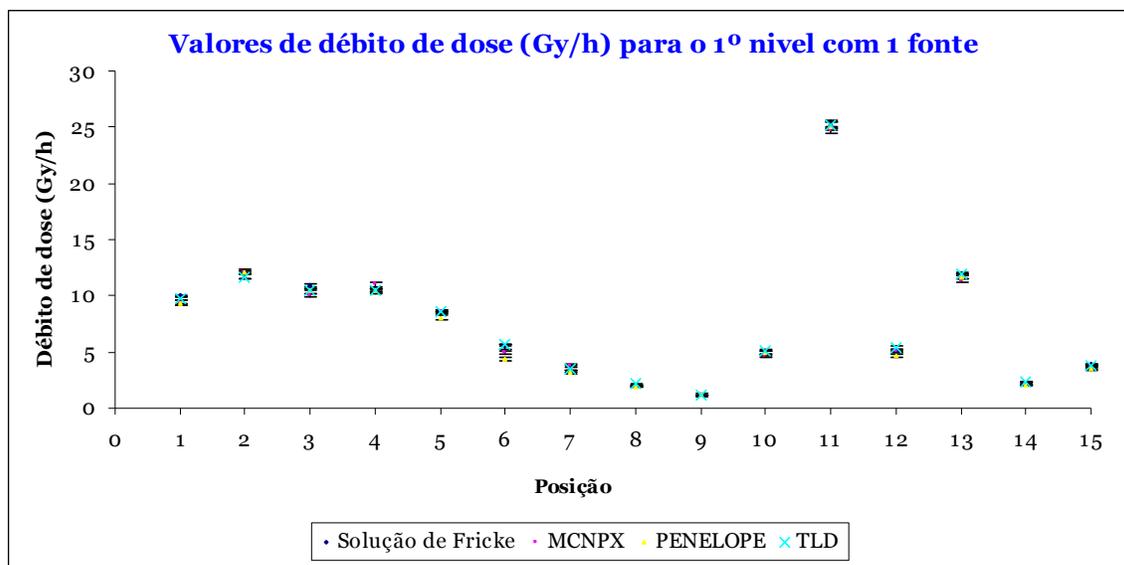


Figura 33 – Valores de débito de dose (Gy/h) para o 1º nível com uma fonte.

Os valores obtidos experimentalmente para o 1º nível com uma fonte estão de acordo com os valores esperados. De facto, por análise da Figura 33, facilmente se observa que a posição 11 é a mais próxima da fonte, uma vez que apresenta o valor mais elevado de débito de dose (Gy/h), ao contrário da posição 9 que apresenta o valor mais baixo. Verifica-se ainda, para a maioria das posições de irradiação que o acordo entre os valores experimentais e computacionais é razoável, considerando as incertezas correspondentes.

Embora tenham sido utilizados dois programas de simulação Monte Carlo distintos, mas ambos representativos do estado da arte em simulação do

transporte de fótons, electrões e positrões na matéria, seria expectável que os resultados obtidos por ambos deveriam ser concordantes. Ou seja, a razão entre os valores obtidos por ambos deverá ser próximo de 1 sendo os desvios compatíveis com as incertezas apresentadas.

Na Tabela 8 apresentam-se:

- A razão entre os valores *calculados* pelos 2 programas de simulação Monte Carlo,
- Os valores do quociente E/C (entre o valor experimental e computacional) entre os valores medidos por dosimetria química e os valores calculados por simulação Monte Carlo
- A razão entre os valores *medidos* por dosimetria química (solução de Fricke) e dosimetria de termoluminescência

bem como as respectivas incertezas, calculadas de acordo com a fórmula

Tabela 8 – Para cada posição de irradiação no nível 1: razão (e respectiva incerteza) entre os valores calculados pelos programas de simulação PENELOPE e MCNPX, entre o valor medido utilizando a solução de Fricke e os valores calculados utilizando ambos programas de simulação Monte Carlo e entre os valores medidos utilizando a solução de Fricke e os TLD.

Posições	$\frac{\text{MCNPX}}{\text{PENELOPE}}$	$\frac{\text{Fricke}}{\text{MCNPX}}$	$\frac{\text{Fricke}}{\text{PENELOPE}}$	$\frac{\text{Fricke}}{\text{TLD}}$
1	0.99 ± 0.03	1.08 ± 0.03	1.07 ± 0.03	1.02 ± 0.02
2	0.99 ± 0.02	0.98 ± 0.03	0.97 ± 0.03	1.01 ± 0.03
3	0.96 ± 0.03	1.09 ± 0.03	1.05 ± 0.03	1.03 ± 0.01
4	1.05 ± 0.03	0.95 ± 0.02	1.01 ± 0.01	0.99 ± 0.01
5	1.06 ± 0.03	1.01 ± 0.02	1.07 ± 0.01	1.01 ± 0.01
6	1.12 ± 0.09	1.12 ± 0.04	1.25 ± 0.04	0.98 ± 0.04
7	1.18 ± 0.09	0.87 ± 0.03	1.02 ± 0.03	0.94 ± 0.04
8	0.97 ± 0.05	1.05 ± 0.04	1.02 ± 0.04	0.94 ± 0.04
9	0.96 ± 0.09	1.09 ± 0.09	1.04 ± 0.08	1.03 ± 0.09
10	0.94 ± 0.04	1.07 ± 0.06	1.01 ± 0.06	1.00 ± 0.06
11	0.99 ± 0.02	1.02 ± 0.02	1.00 ± 0.01	1.03 ± 0.02
12	1.12 ± 0.09	0.99 ± 0.02	1.11 ± 0.02	0.96 ± 0.03
13	0.97 ± 0.02	1.05 ± 0.08	1.02 ± 0.01	1.01 ± 0.01
14	1.02 ± 0.05	1.03 ± 0.09	1.05 ± 0.09	0.97 ± 0.09
15	1.08 ± 0.04	1.05 ± 0.3	1.14 ± 0.03	0.97 ± 0.03

Analisando a razão entre os valores médios da taxa de dose obtidos com cada método de Monte Carlo, pode inferir-se que, os valores são compatíveis sendo os desvios do quociente relativamente à unidade estatisticamente consistentes com as incertezas associadas, tal como se pode analisar mais facilmente na figura seguinte.

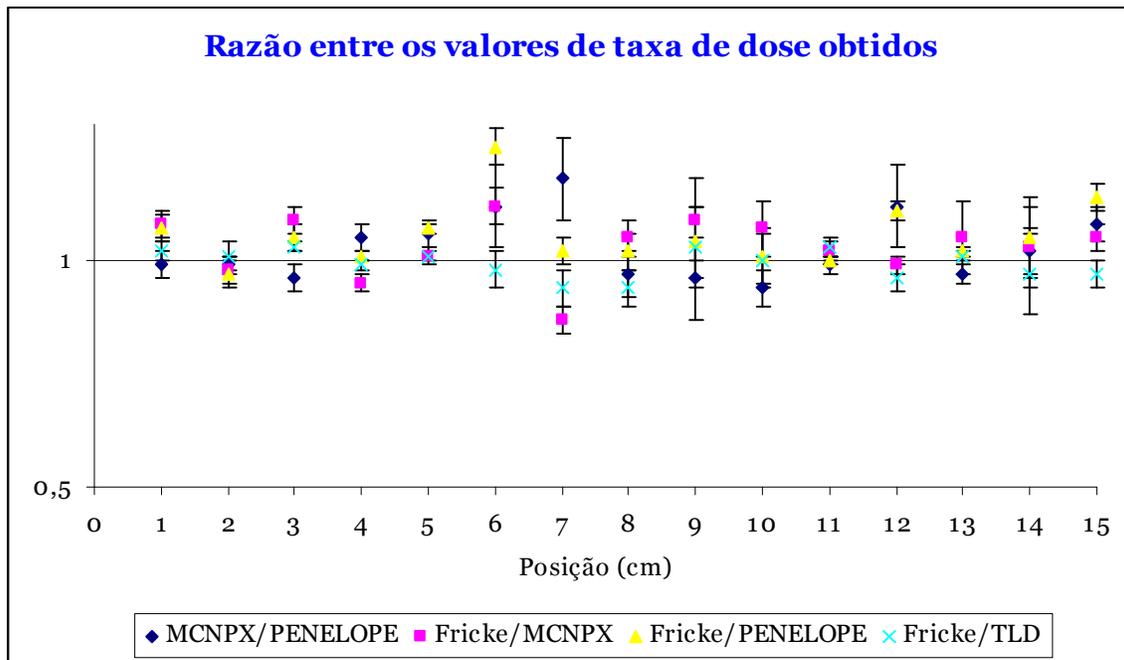


Figura 34 – Razão (e respectiva incerteza estatística) entre os valores calculados pelos programas de simulação PENELOPE e MCNPX, entre o valor medido utilizando a solução de Fricke e os valores calculados utilizando ambos programas de simulação Monte Carlo e entre os valores medidos utilizando a solução de Fricke e os TLD.

Ao efectuar a comparação entre o MCNPX e a solução de Fricke, verifica-se que a incerteza estatística associada a determinadas posições, tais como, 1, 3, 4, 5, 6, e 7 o desvio relativamente ao valor “ideal” (1) é significativo, quando expresso em termos do desvio padrão (σ), ou seja, chega a atingir o valor de 3σ no caso da posição 6 e de 5σ na posição 7. Nos outros locais de irradiação, o desvio relativamente à unidade, expresso em termos do desvio padrão, não excede 1σ . Comparando os valores da taxa de dose obtida com o dosímetro de termoluminescência, com os valores obtidos com a solução de Fricke, facilmente se verifica que os valores são compatíveis considerando as incertezas associadas. Dado que ambos os métodos dosimétricos são independentes, pode inferir-se que, o resultado apresentado anteriormente é robusto do ponto de vista da significância estatística

VI.4.2 2º Nível (1 fonte)

Na Figura 35, estão representados os valores de débito de dose (Gy/h) obtidos para os 15 locais de irradiação estudados, com uma fonte e para o 2º nível.

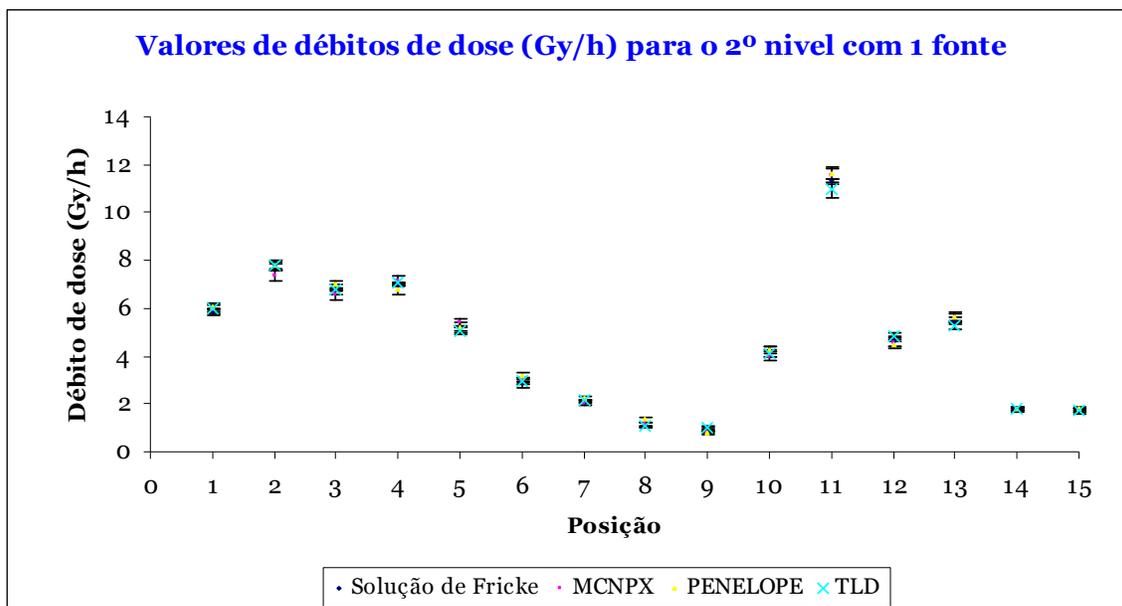


Figura 35 -Valores de débito de dose para as 15 diferentes posições, no 2º nível e com 1 fonte.

Os resultados obtidos experimentalmente para o 2º nível com uma fonte, estão de acordo com os valores esperados. Da análise do gráfico, mais uma vez se verifica que a posição 11, que é a mais próxima da fonte, apresenta, tal como esperado, o valor mais elevado de débito de dose (Gy/h), ao contrário da posição 9 que apresenta o valor mais baixo.

Mais uma vez, se procedeu à análise da razão entre os valores de débitos de dose obtidos com a solução de Fricke, com o dosímetros de termoluminescência e por ambos os programas de simulação Monte Carlo, em cada uma das posições de irradiação. A tabela 9 apresenta os respectivos valores bem como as incertezas associadas.

Tabela 9 – Para cada posição de irradiação no nível 2: razão (e respectiva incerteza) entre os valores calculados pelos programas de simulação PENELOPE e MCNPX, entre o valor medido utilizando a solução de Fricke e os valores calculados utilizando ambos programas de simulação Monte Carlo e entre os valores medidos utilizando a solução de Fricke e os TLD.

Posições	$\frac{\text{MCNPX}}{\text{PENELOPE}}$	$\frac{\text{Fricke}}{\text{MCNPX}}$	$\frac{\text{Fricke}}{\text{PENELOPE}}$	$\frac{\text{Fricke}}{\text{TLD}}$
1	0.98 ± 0.04	1.00 ± 0.02	0.97 ± 0.02	0.99 ± 0.02
2	0.95 ± 0.04	1.06 ± 0.03	1.00 ± 0.03	1.00 ± 0.03
3	0.95 ± 0.04	1.03 ± 0.03	0.97 ± 0.03	1.00 ± 0.03
4	1.05 ± 0.04	0.98 ± 0.02	1.03 ± 0.02	0.99 ± 0.01
5	1.03 ± 0.05	0.94 ± 0.04	0.98 ± 0.04	1.00 ± 0.04
6	0.92 ± 0.06	0.98 ± 0.07	0.92 ± 0.07	0.98 ± 0.07
7	0.92 ± 0.08	1.03 ± 0.05	0.95 ± 0.05	0.99 ± 0.05
8	0.87 ± 0.10	0.94 ± 0.10	0.82 ± 0.09	1.02 ± 0.10
9	0.98 ± 0.11	1.25 ± 0.11	1.22 ± 0.11	1.01 ± 0.11
10	0.94 ± 0.05	1.05 ± 0.05	0.99 ± 0.05	1.02 ± 0.06
11	0.99 ± 0.03	0.97 ± 0.01	0.97 ± 0.09	1.03 ± 0.04
12	1.01 ± 0.05	1.01 ± 0.04	1.02 ± 0.04	0.95 ± 0.05
13	0.98 ± 0.05	0.99 ± 0.02	0.97 ± 0.02	1.04 ± 0.03
14	0.96 ± 0.08	1.04 ± 0.06	1.00 ± 0.06	1.01 ± 0.06
15	0.95 ± 0.07	0.98 ± 0.06	0.94 ± 0.08	0.98 ± 0.06

Analisando a razão entre os valores médios da taxa de dose obtidos com os métodos de simulação para cada uma das posições, verifica-se que os valores obtidos com ambos são compatíveis com 1, considerando as incertezas associadas., tal como se pode analisar mais facilmente na figura seguinte.

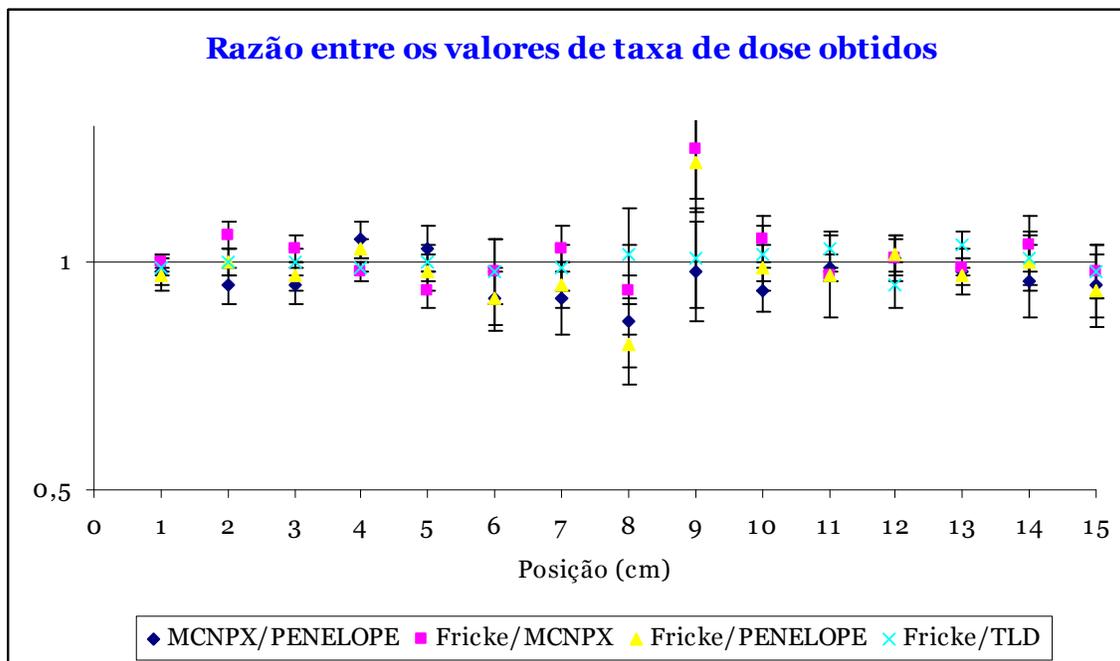


Figura 36 – Razão (e respectiva incerteza estatística) entre os valores calculados pelos programas de simulação PENELOPE e MCNPX, entre o valor medido utilizando a solução de Fricke e os valores calculados utilizando ambos programas de simulação Monte Carlo e entre os valores medidos utilizando a solução de Fricke e os TLD.

Analisando a razão entre a solução de Fricke e o MCNPX e entre a solução de Fricke e o PENELOPE verificam exceptuando a posição 9, no pior dos casos o desvio relativamente à unidade é inferior a 2σ .

Comparando os valores da taxa de dose obtida com o dosímetro de termoluminescência, com os valores obtidos com a solução de Fricke, facilmente se verifica que existe boa concordância entre os valores determinados experimentalmente.

VI.4.3 Análise dos resultados obtidos com Duas Fontes

VI.4.3.1 1º Nível (2 fontes)

Na Figura 37, estão representados os valores de débitos de dose (Gy/h) obtidos com a solução de Fricke e com ambos os programas de simulação, em cada uma das posições de irradiação.

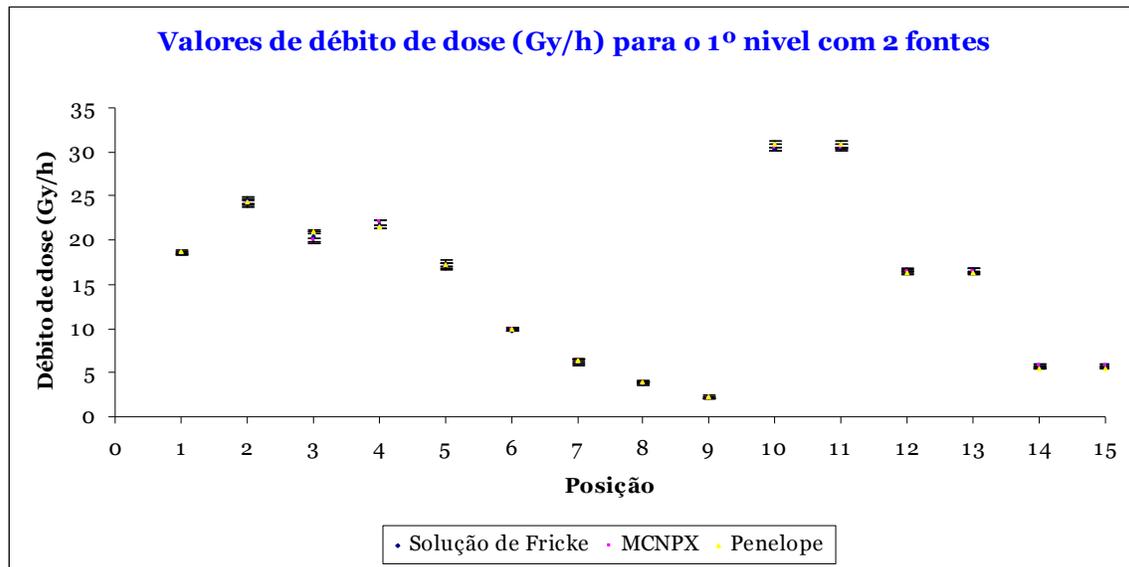


Figura 37 – Valores de débito de dose (Gy/h) para o 1º nível com 2 fontes.

Como se pode verificar, verifica-se uma boa concordância entre os valores medidos e os valores calculados por simulação Monte Carlo, sendo as diferenças compatíveis com as incertezas associadas aos valores experimentais e computacionais. De notar, que os valores de débito de dose obtidos para as 15 diferentes posições são mais elevados uma vez que temos duas fontes activas, sendo neste caso, o número total de partículas emitidas igual a 3.6×10^{12} desintegrações/segundo. De salientar ainda, que a segunda fonte está localizada exactamente no local oposto à localização da primeira fonte na câmara de irradiação, ou seja, tendo ambas as localizações nas mesmas coordenadas xx e zz , mas sendo as correspondentes coordenadas yy simétricas. Analisando a Figura 37, verifica-se que tal como esperado, sendo as posições 10 e 11 as mais próximas da fonte, apresentam os valores mais elevados de débito de dose, de aproximadamente 30 Gy/h.

Mais uma vez, se procedeu à análise da razão entre os valores de débitos de dose obtidos com a solução de Fricke e por ambos os programas de simulação Monte Carlo, em cada uma das posições de irradiação. A tabela 10 apresenta os respectivos valores bem como as incertezas associadas.

Tabela 10 – Para cada posição de irradiação no nível 1, com 2 fontes: razão (e respectiva incerteza) entre os valores calculados pelos programas de simulação PENELOPE e MCNPX, entre o valor medido utilizando a solução de Fricke e os valores calculados utilizando ambos programas de simulação Monte Carlo MCNPX e PENELOPE.

Posições	$\frac{\text{MCNPX}}{\text{PENELOPE}}$	$\frac{\text{Fricke}}{\text{MCNPX}}$	$\frac{\text{Fricke}}{\text{PENELOPE}}$
1	0.99 ± 0.03	1.00 ± 0.01	0.99 ± 0.01
2	0.99 ± 0.03	1.01 ± 0.02	1.01 ± 0.01
3	0.95 ± 0.03	1.02 ± 0.03	0.97 ± 0.03
4	1.02 ± 0.03	0.99 ± 0.02	1.01 ± 0.02
5	0.99 ± 0.03	1.01 ± 0.03	1.00 ± 0.03
6	1.00 ± 0.05	0.99 ± 0.02	0.99 ± 0.01
7	0.97 ± 0.07	1.00 ± 0.07	0.97 ± 0.06
8	0.97 ± 0.09	1.00 ± 0.06	0.96 ± 0.05
9	0.97 ± 0.14	1.03 ± 0.10	1.00 ± 0.09
10	0.99 ± 0.02	1.00 ± 0.01	0.98 ± 0.01
11	0.99 ± 0.02	1.00 ± 0.01	0.99 ± 0.01
12	1.02 ± 0.03	1.00 ± 0.02	1.02 ± 0.01
13	1.02 ± 0.03	1.01 ± 0.02	1.02 ± 0.02
14	1.06 ± 0.07	0.96 ± 0.04	1.02 ± 0.04
15	1.06 ± 0.07	0.98 ± 0.03	1.04 ± 0.02

Em todas as situações, verifica-se que o valor do quociente é compatível com 1 sendo os desvios em relação a este valor perfeitamente compatíveis do ponto de vista estatístico com as incertezas (σ) associadas, tal como pode ser facilmente observado na figura seguinte.

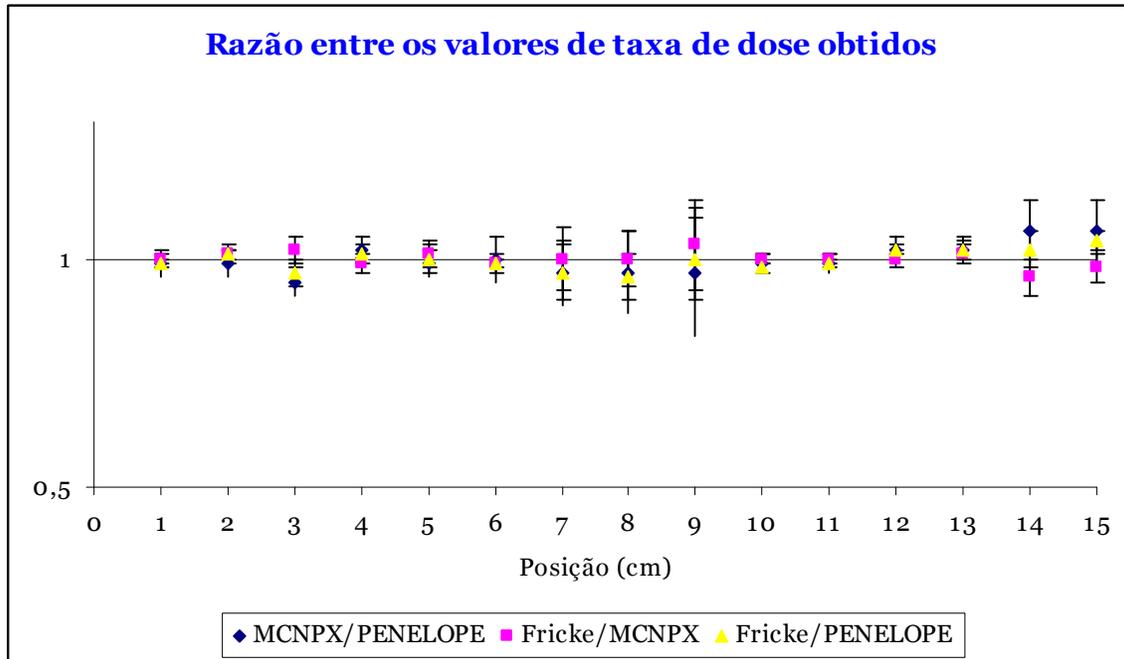


Figura 38 – Razão (e respectiva incerteza estatística) entre os valores calculados pelos programas de simulação PENELOPE e MCNPX, entre o valor medido utilizando a solução de Fricke e os valores calculados utilizando ambos programas de simulação Monte Carlo e entre os valores medidos utilizando a solução de Fricke e os TLD.

De facto a maioria dos valores estão compreendidas no intervalo $[1-2\sigma, 1+2\sigma]$. Pode pois concluir-se que existe uma boa concordância entre os valores experimentais obtidos com medições utilizando a solução de Fricke e os valores computacionais, existindo também uma boa concordância entre os valores obtidos pelos 2 programas de simulação Monte Carlo.

Conclui-se que, os valores obtidos computacionalmente são válidos, uma vez que foram corroborados por determinações experimentais utilizando um dosímetro de referência.

VI.4.3.2 2º Nível (2 fontes)

Na Figura 39, estão representados os valores de débitos de dose (Gy/h) obtidos com a solução de Fricke e com ambos os programas de simulação, em cada uma das posições de irradiação.

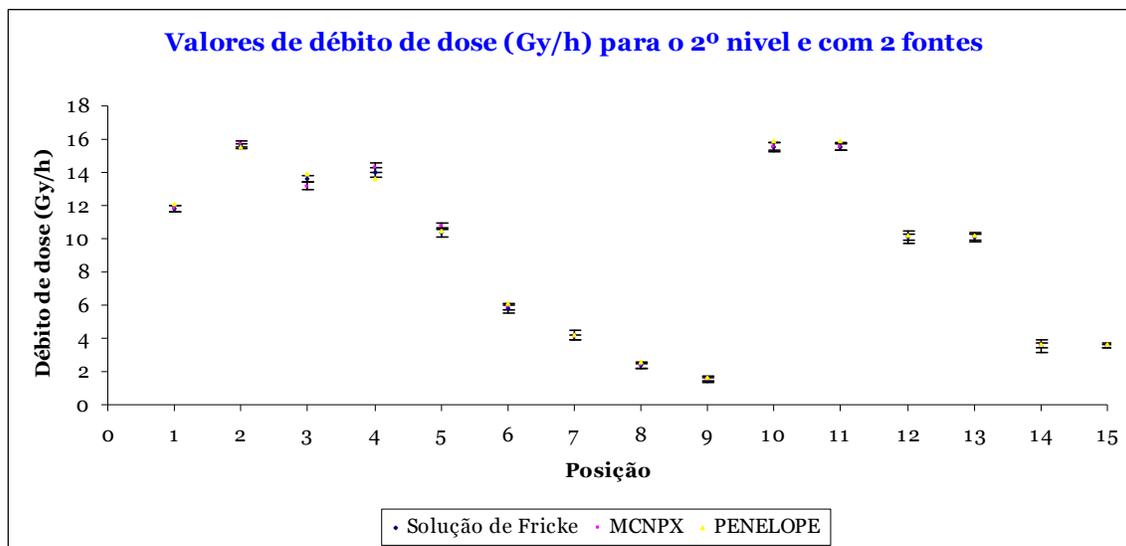


Figura 39 – Valores de débito de dose (Gy/h) para o 2º nível com 2 fontes

Como se pode verificar, verifica-se mais uma vez uma boa concordância entre os valores medidos e os valores calculados por simulação Monte Carlo, sendo as diferenças compatíveis com as incertezas associadas aos valores experimentais e computacionais. Por análise da Figura 39, verifica-se que tal como esperado, sendo as posições 10 e 11 as mais próximas da fonte, apresentam os valores mais elevados de débito de dose, de aproximadamente 18 Gy/h.

Na tabela 11, apresenta-se os valores do quociente entre os valores de débitos de dose obtidos com a solução de Fricke e por ambos os programas de simulação Monte Carlo, em cada uma das posições de irradiação, bem como as respectivas incertezas associadas.

Tabela 11 – Para cada posição de irradiação no nível 2, com 2 fontes: razão (e respectiva incerteza) entre os valores calculados pelos programas de simulação PENELOPE e MCNPX, entre o valor medido utilizando a solução de Fricke e os valores calculados utilizando ambos programas de simulação Monte Carlo MCNPX e PENELOPE.

Posições	$\frac{\text{MCNPX}}{\text{PENELOPE}}$	$\frac{\text{Fricke}}{\text{MCNPX}}$	$\frac{\text{Fricke}}{\text{PENELOPE}}$
1	0.98 ± 0.02	1.00 ± 0.02	0.98 ± 0.02
2	1.01 ± 0.02	0.99 ± 0.02	1.01 ± 0.02
3	0.95 ± 0.02	1.03 ± 0.02	0.98 ± 0.02
4	1.05 ± 0.02	0.98 ± 0.03	1.03 ± 0.03
5	1.03 ± 0.02	0.97 ± 0.03	1.00 ± 0.03
6	0.97 ± 0.04	0.99 ± 0.06	0.96 ± 0.06
7	0.97 ± 0.04	1.03 ± 0.08	1.00 ± 0.08
8	0.92 ± 0.06	1.03 ± 0.10	0.94 ± 0.10
9	0.94 ± 0.07	1.03 ± 0.14	0.97 ± 0.14
10	0.98 ± 0.02	1.00 ± 0.02	0.98 ± 0.02
11	0.98 ± 0.02	1.00 ± 0.02	0.98 ± 0.02
12	0.99 ± 0.02	1.00 ± 0.04	0.99 ± 0.04
13	0.99 ± 0.03	1.00 ± 0.04	0.99 ± 0.04
14	0.98 ± 0.04	0.98 ± 0.12	0.97 ± 0.12
15	0.98 ± 0.04	0.98 ± 0.04	0.97 ± 0.04

Em todas as situações, verifica-se que o valor do quociente é compatível com 1 sendo os desvios em relação a este valor compatíveis do ponto de vista estatístico com as incertezas (σ) associadas. De facto a maioria dos valores estão compreendidas no intervalo $[1-3\sigma, 1+3\sigma]$. Pode pois concluir-se que existe uma razoável concordância entre os valores experimentais obtidos com medições utilizando a solução de Fricke e os valores computacionais, existindo também

uma boa concordância entre os valores obtidos pelos 2 programas de simulação Monte Carlo, tal como se verifica mais facilmente na figura seguinte.

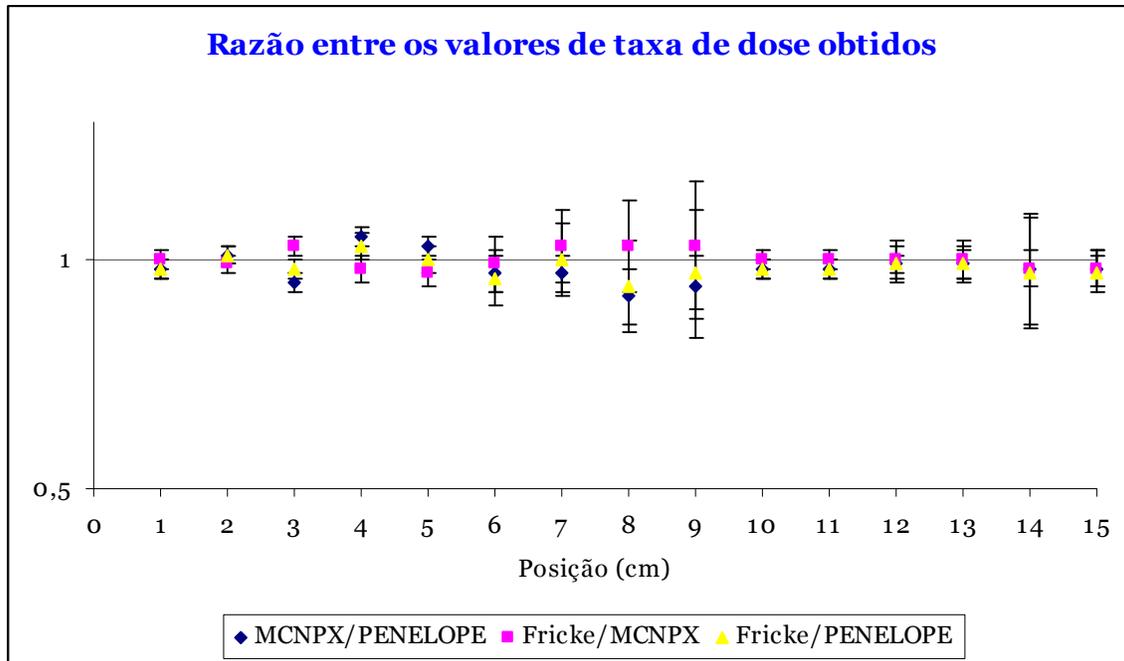


Figura 40 – Razão (e respectiva incerteza estatística) entre os valores calculados pelos programas de simulação PENELOPE e MCNPX, entre o valor medido utilizando a solução de Fricke e os valores calculados utilizando ambos programas de simulação Monte Carlo e entre os valores medidos utilizando a solução de Fricke e os TLD.

Pode mais uma vez concluir-se que os valores computacionais são validados por determinações experimentais utilizando um dosímetro de referência.

VI.4.3.3 3^o Nível (3 fontes)

Na Figura 41, estão representados os valores de débitos de dose (Gy/h) obtidos com a solução de Fricke e com ambos os programas de simulação Monte Carlo, em cada uma das posições de irradiação.

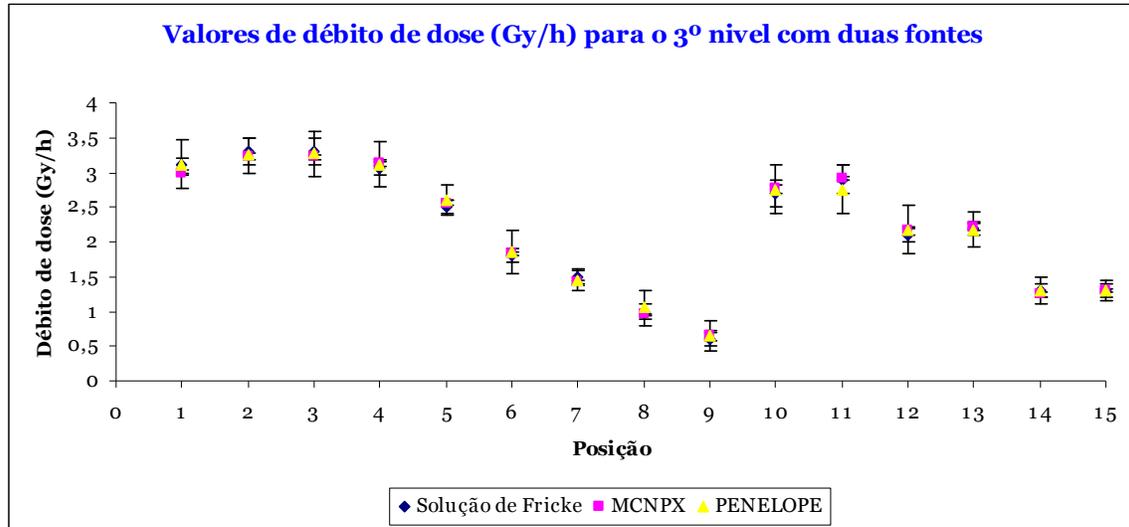


Figura 41 – Valores de débito de dose (Gy/h) para o nível 3 com duas fontes.

Como se pode verificar, verifica-se mais uma vez uma boa concordância entre os valores medidos e os valores calculados por simulação Monte Carlo, sendo as diferenças compatíveis com as incertezas associadas aos valores experimentais e computacionais. Verifica-se para este nível que as incertezas associadas são agora mais elevadas, dado que as posições de irradiação correspondem a zonas onde o débito de dose é mais reduzido (relativamente aos níveis 1 e 2) devido à maior distância das fontes. Analisando a Figura 41, verifica-se mais uma vez que, tal como esperado, as posições 10 e 11 correspondem os maiores valores de débito de dose, iguais a aproximadamente 3 Gy/h, dada a sua maior proximidade das fontes.

A tabela 12 apresenta-se os valores do quociente entre os valores de débitos de dose obtidos com a solução de Fricke e por ambos os programas de simulação Monte Carlo, em cada uma das posições de irradiação, bem como as respectivas incertezas estatísticas associadas.

Tabela 12 – Para cada posição de irradiação no nível 3, com 2 fontes: razão (e respectiva incerteza) entre os valores calculados pelos programas de simulação PENELOPE e MCNPX, entre o valor medido utilizando a solução de Fricke e os valores calculados utilizando ambos programas de simulação Monte Carlo MCNPX e PENELOPE.

Posições	$\frac{\text{MCNPX}}{\text{PENELOPE}}$	$\frac{\text{Fricke}}{\text{MCNPX}}$	$\frac{\text{Fricke}}{\text{PENELOPE}}$
1	0.96 ± 0.11	1.04 ± 0.04	0.99 ± 0.11
2	0.99 ± 0.08	1.02 ± 0.06	1.02 ± 0.09
3	0.98 ± 0.10	1.03 ± 0.06	1.01 ± 0.11
4	1.00 ± 0.10	0.98 ± 0.03	0.98 ± 0.10
5	0.99 ± 0.09	0.97 ± 0.04	0.96 ± 0.09
6	0.99 ± 0.17	0.98 ± 0.06	0.97 ± 0.18
7	0.98 ± 0.11	1.06 ± 0.08	1.04 ± 0.12
8	0.92 ± 0.22	1.04 ± 0.10	0.95 ± 0.24
9	1.02 ± 0.36	0.91 ± 0.18	0.93 ± 0.35
10	1.00 ± 0.13	0.98 ± 0.07	0.98 ± 0.14
11	1.06 ± 0.13	0.99 ± 0.07	1.05 ± 0.14
12	0.99 ± 0.16	0.97 ± 0.05	0.96 ± 0.16
13	1.01 ± 0.12	1.00 ± 0.05	1.01 ± 0.12
14	0.96 ± 0.14	1.04 ± 0.08	1.00 ± 0.16
15	1.01 ± 0.11	0.99 ± 0.08	1.00 ± 0.13

Em todas as situações, verifica-se que o valor do quociente é compatível com 1 sendo os desvios em relação a este valor compatíveis do ponto de vista estatístico com as incertezas (σ) associadas. Pode pois concluir-se que existe uma razoável concordância entre os valores experimentais obtidos com medições utilizando a solução de Fricke e os valores computacionais, existindo também uma boa concordância entre os valores obtidos pelos 2 programas de simulação Monte Carlo, tal como facilmente se pode verificar na figura seguinte.

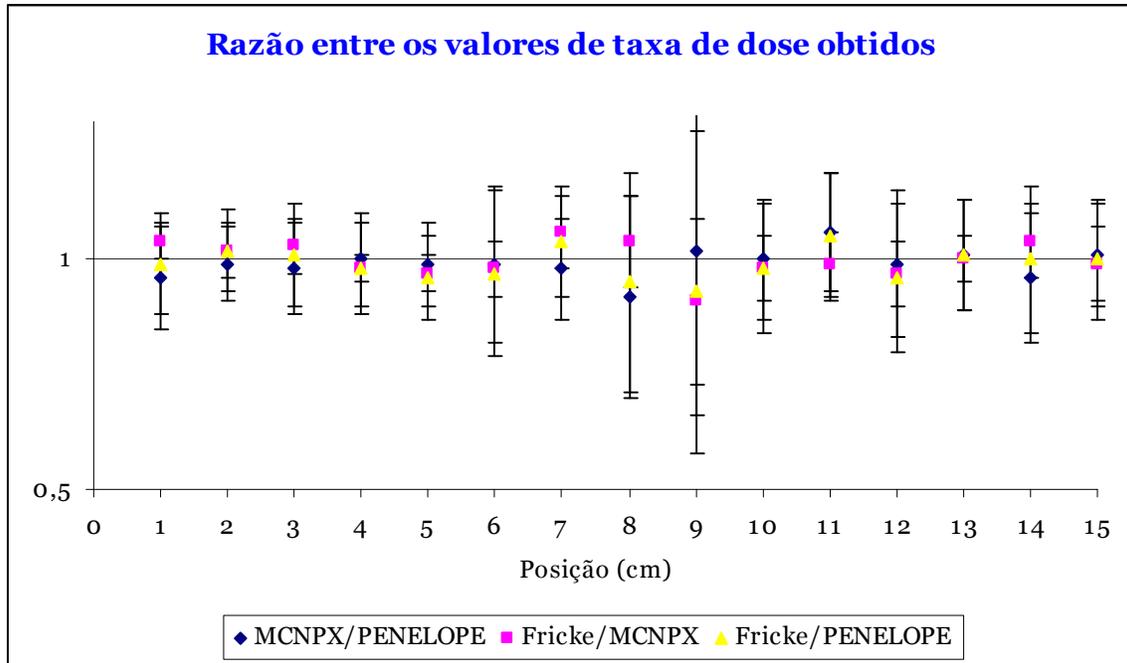


Figura 42 – Razão (e respectiva incerteza estatística) entre os valores calculados pelos programas de simulação PENELOPE e MCNPX, entre o valor medido utilizando a solução de Fricke e os valores calculados utilizando ambos programas de simulação Monte Carlo e entre os valores medidos utilizando a solução de Fricke e os TLD.

Face ao anteriormente exposto, também em relação a este nível se pode concluir que os valores computacionais são validados por determinações experimentais utilizando um dosímetro de referência.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

[Bee04] W. Beers and J. Kleijnen, “Kriging interpolation in simulation: a survey”, *Int. proceedings of the 2004 Winter Simulation Conference*, 2004.

[ISO99] International Organization for Standardization, “*X and gamma reference radiation for calibrating doseimeters and doserate meters and for determining their response as a function of photon energy – Part 3: Calibration of area and personal doseimeters and the measurement of their response as a function of energy and angle of incidence*”, ISO International Standard 4037 – 3, ISO, Geneva (1999).

CAPITULO VII

CONSIDERAÇÕES FINAIS

A presente dissertação pretende apresentar a metodologia utilizada para o mapeamento de taxas de dose de uma unidade experimental de Cobalto-60. O presente capítulo, tem como finalidade salientar os resultados obtidos, bem como apresentar propostas para o trabalho futuro, dado o enquadramento deste trabalho no projecto REEQ/996/BIO/2005.

A vasta e crescente aplicação da radiação ionizante nas mais diversas áreas, implica uma grande utilização dos diversos métodos dosimétricos, sejam eles, químicos, físicos, computacionais ou biológicos. Como ferramenta crucial, no desenvolvimento de novos detectores de radiação, ou para medições impossíveis de serem realizadas *in vivo*, entre outros, os métodos de simulação de Monte Carlo têm vindo a ser cada vez mais utilizados. Devido à crescente aplicabilidade, os métodos de monte Carlo têm sofrido aperfeiçoamentos, nomeadamente, no transporte de electrões. Tal como já foi referido anteriormente, no desenvolvimento deste trabalho, foram utilizados dois métodos de Monte Carlo, MCNPX e PENELOPE.

Nos métodos de Monte Carlo utilizados para a elaboração do mapeamento de taxas de dose, foram simulados somente os fotões emitidos pela fonte de Cobalto – 60, de energias iguais a 1,33 MeV e 1.17 MeV. As razões pelas quais não foram simulados os electrões emitidos, foi essencialmente duas. Em primeiro lugar, foi elaborada uma simulação utilizando o PENELOPE, no qual só eram

transportados os electrões emitidos pela fonte de cobalto-60, com o objectivo de se medir a dose absorvida nos locais de irradiação utilizados no desenvolvimento do trabalho. Concluiu-se que os electrões emitidos pela fonte de cobalto-60 não oferecem qualquer contributo para a taxa de dose determinada nos diferentes locais de irradiação, tal como mostra a figura seguinte.

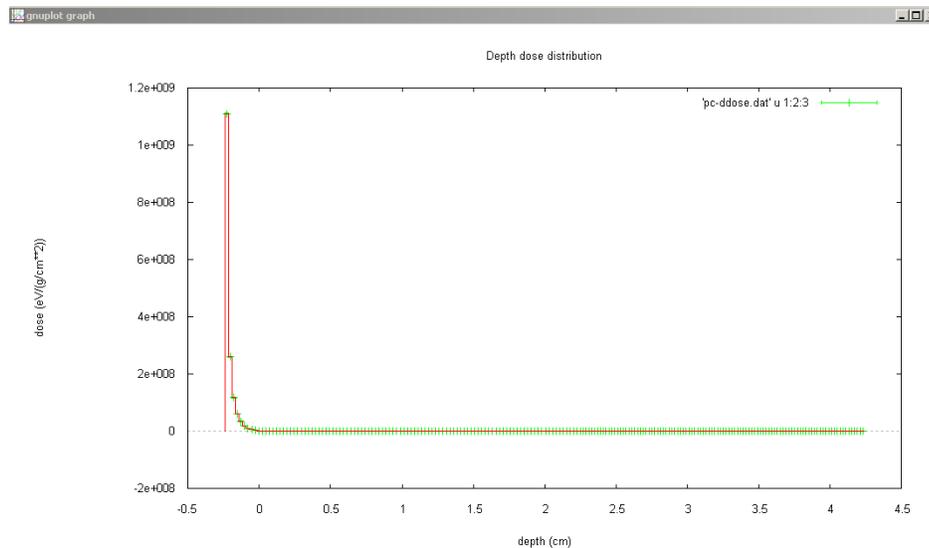


Figura 43 – Curva da dose absorvida em profundidade. A figura mostra que os electrões emitidos nada contribuem para a determinação da taxa de dose dentro da câmara de irradiação. De notar, que a esta profundidade só está representado o local onde a fonte está inserida.

A segunda razão pela qual não foram transportados os electrões emitidos, deve-se ao aumento do tempo de simulação, que se tornava injustificável, dado ao exposto anteriormente.

Dada a relevância científica da comparação entre dois ou mais métodos de simulação, não só para o utilizador, como também para os executores do código, elaborou-se no desenvolvimento deste trabalho uma comparação entre dois métodos de simulação, o MCNPX e o PENELOPE.

Devido à correspondência qualitativa dos resultados obtidos para as taxas de dose com o MCNPX, o PENELOPE, a solução de Fricke e os TLD, pode concluir-se que os métodos computacionais foram validados e por conseguinte são

métodos exactos para o mapeamento de taxa de dose da unidade experimental de ^{60}Co . As variações percentuais observadas entre os resultados computacionais e os medidos foram: para o 1º nível Fricke – MCNPX (2%), Fricke – PENELOPE (2%) e MCNPX – PENELOPE (2%); no 2º nível; Fricke – MCNPX (2%), Fricke – PENELOPE (2%) e MCNPX – PENELOPE (3%) e no 3º nível; Fricke – MCNPX (3%); Fricke – PENELOPE (3%) e MCNPX-PENELOPE (2%).

Conclui-se que, os métodos de simulação de Monte Carlo, MCNPX e PENELOPE são uma ferramenta importante e de elevada fiabilidade no cálculo de dose absorvida, e conseqüentemente da taxa de dose, de uma fonte de ^{60}Co , tal como já tem vindo a demonstrar-se em vários trabalhos científicos.

Como referido previamente, a unidade de cobalto – ^{60}Co utilizada para o desenvolvimento deste trabalho irá ser recarregada, ficando assim com 4 fontes disponíveis. Note-se que as fontes são independentes umas das outras, o que permite uma elevada rentabilidade, e uma larga diversidade de valores de débito de dose. Dado que a actividade total irá ser cerca de 10 kCi, como trabalho futuro prevê-se uma a utilização do trabalho desenvolvido para determinar os novos valores de taxa de dose.

Dado o enquadramento deste trabalho no projecto nacional de re-equipamento, prevê-se a disponibilização dos dados computacionais como *input* ao sistema de automação e robótica.

Durante a execução deste trabalho foram encontradas algumas limitações, uma das quais, a dificuldade da utilização de uma câmara de ionização para validar os resultados computacionais, tal como previsto inicialmente. Esta limitação foi devida, sobretudo, à difícil comunicação entre a câmara de irradiação e o exterior, não sendo possível a passagem dos cabos que ligam a câmara de irradiação ao electrómetro. Além disso, a câmara de irradiação disponível para a execução deste trabalho, era demasiado grande (em tamanho) o

que dificultava o seu manuseamento dentro da câmara de irradiação e também a intercomparação dos resultados obtidos com o outro sistema de validação. Com isto, dada a elevada precisão e exactidão nas medições elaboradas com as câmaras de ionização, seria uma óptima contribuição futura a utilização deste sistema dosimétrico para validação dos resultados computacionais.

ANEXOS

ANEXO A – PROCEDIMENTO PARA A ELABORAÇÃO DO FRICKE

Material:

- ✓ 2 Balões de vidro de 1000 ml aferidos
- ✓ 1 Balão de vidro de 50 ml aferido
- ✓ 1 Pipeta de vidro de 20 ml aferida
- ✓ 1 Pipeta de vidro de 5 ml aferida
- ✓ 2 Pipeta de vidro de 1 ml aferida
- ✓ 2 Copos de vidro de pesagem
- ✓ 2 Varetas de vidro
- ✓ Provetas de vidro
- ✓ Funis de vidro
- ✓ Espátulas

Reagentes:

- ✓ $(\text{SO}_4)_2\text{Fe}(\text{NH}_4)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$
- ✓ Cloreto de sódio (NaCl)
- ✓ Ácido Sulfúrico pró-análise (H_2SO_4 pa)
- ✓ Água desionizada
- ✓ Solução de RBS

Procedimento experimental:

1. Lavar todo o material de vidro com a solução de RPS e seguidamente várias vezes por água desionizada. Secar todo o material até não existirem vestígios de água.
2. Colocar no balão de 50 ml uma porção de água desionizada e seguidamente com uma pipeta aferida (1 ml) 1,126 ml de H_2SO_4 (Solução

- 0,4 M; Volume = 50 ml). Deixar arrefecer e perfazer o volume com água desionizada.
3. Colocar no balão de 1000 ml uma porção de água desionizada e seguidamente com pipetas aferidas (20 e 5 ml) 22,5 ml de H_2SO_4 (Solução a 0,4 M; Volume = 1000 ml). Deixar arrefecer e perfazer o volume com água desionizada.
 4. Pesar na balança analítica 0,05858 g de NaCl (Solução final a 10^{-3} M; Volume = 1000 ml) e 0,39205 g de $(\text{SO}_4)_2\text{Fe}(\text{NH}_4)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ (Solução final a 10^{-3} M; Volume = 1000 ml). Tapar com parafilme.
 5. Dissolver cada um dos sais com um pequeno volume da solução de H_2SO_4 0,4 M (50 ml) e misturar estas soluções no restante balão de 1000 ml, passando os copos de pesagem várias vezes pela solução sulfúrica de modo a garantir que toda a quantidade pesada esteja presente na solução final.
 6. Adicionar ao balão parte do volume da solução de H_2SO_4 0,4 M (1000 ml). Acertar o volume (1000 ml) após o arrefecimento, com a solução de H_2SO_4 0,4 M (1000 ml).
 7. Saturar a solução durante 5 minutos com oxigénio.
 8. Tapar o balão com papel de alumínio e armazenar num local protegido da luz.

ANEXO B – PROCEDIMENTO PARA A LEITURA DA SOLUÇÃO DE FRICKE

Objectivo

Determinação da taxa de dose nas 15 diferentes posições em cada nível da câmara de irradiação.

Material e Equipamento

- ✓ 4 Copos
- ✓ Pipetas aferidas
- ✓ 2 Células de quartzo
- ✓ Espectofotómetro
- ✓ Termopar

Reagentes

- ✓ Solução de Fricke
- ✓ Solução de RBS
- ✓ Água desionizada

Procedimento experimental

1. Lavar todo o material de vidro com a solução de RBS e em seguida passar várias vezes por água desionizada. Secar todo o material para não existirem vestígios de água.
2. Colocar 50 ml de solução de Fricke nos copos de leitura.
3. Colocar a solução a irradiar nas 15 posições de irradiação, em cada um dos três níveis.
4. Irradiar a solução de Fricke durante o tempo pretendido.

5. Após a irradiação, efectuar a leitura de densidade óptica (OD) para um comprimento de onda = 305 nm, tomando como branco a solução de Fricke não irradiada (o mesmo branco não deve ser utilizado por um período superior a 1h visto a solução ser sensível à luz). As células de quartzo foram lavadas com a solução a ler e monitorizou-se a temperatura da câmara de leitura do espectofotómetro antes de cada leitura.

6. Calcular a dose absorvida através da equação (1) e traçar o gráfico da dose Absorvida (kGy) em função do tempo (h). A taxa de dose pode ser determinado através do cálculo do declive da recta obtida.

$$D(\text{Gy}) = \frac{275 \times D.O.^{305\text{nm}}}{1 + 0.007 \times (T^{\circ}\text{C} - 25)}$$