



**AUTARQUIA ASSOCIADA À UNIVERSIDADE
DE SÃO PAULO**

**DETERMINAÇÃO DA CORREÇÃO PARA O EFEITO DE SOMA
EM CASCATA PARA ESPECTRÔMETROS DE HPG_e
PELO MÉTODO DE MONTE CARLO**

MAURO NORIAKI TAKEDA

**Dissertação apresentada como parte
dos requisitos para obtenção do Grau
de Mestre em Ciências na Área de
Tecnologia Nuclear - Aplicações**

**Orientador:
Dr. Mauro da Silva Dias**

**São Paulo
2001**

INSTITUTO DE PESQUISAS ENERGÉTICAS E NUCLEARES

**AUTARQUIA ASSOCIADA À UNIVERSIDADE
DE SÃO PAULO**

**DETERMINAÇÃO DA CORREÇÃO PARA O EFEITO DE SOMA
EM CASCATA PARA ESPECTRÔMETROS DE HPGe
PELO MÉTODO DE MONTE CARLO**



MAURO NORIAKI TAKEDA

Dissertação apresentada como parte dos requisitos para obtenção do grau de Mestre em Ciências na Área de Tecnologia Nuclear - Aplicações.

Orientador:
Dr. Mauro da Silva Dias

São Paulo
2001

À minha esposa Fátima
Aos meus filhos Lucas e Artur
Aos meus pais

AGRADECIMENTOS:

Ao Dr. Mauro da Silva Dias, orientador deste trabalho, pelas sugestões, apoio, paciência e dedicação, durante o desenvolvimento desta dissertação;

À Dra. Marina Fallone Koskinas, pelas discussões, sugestões e apoio durante todo o desenvolvimento do trabalho;

Aos colegas Wilson de Oliveira Lavras, Vanderlei Cardoso e Franco Brancaccio, pela amizade, estímulo e colaboração constantes;

Às colegas Kátia Aparecida Fonseca, Cláudia Cristina Braga, Denise Simões Moreira, Aída M. Baccarelli e Nora Lia Maidana, pela amizade, estímulo e colaboração constantes;

Ao Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, na pessoa do Superintendente Dr. Cláudio Rodrigues, pela possibilidade oferecida para o desenvolvimento deste trabalho;

A todos os colegas do LMN pelo incentivo e apoio oferecido;

A minha esposa Fátima, pelo apoio, incentivo, compreensão e paciência oferecidos durante a realização deste trabalho;

Aos meus filhos Lucas e Artur que são a fonte de energia para a realização deste trabalho;

Aos meus pais que sempre apoiaram e incentivaram os meus estudos;

Ao pessoal da CPG pelo apoio oferecido;

A todos que direta ou indiretamente colaboraram na execução e realização deste trabalho.

DETERMINAÇÃO DA CORREÇÃO PARA O EFEITO DE SOMA EM CASCATA PARA ESPECTRÔMETROS DE HPGe PELO MÉTODO DE MONTE CARLO

Mauro Noriaki Takeda

RESUMO

O presente trabalho descreve a metodologia desenvolvida para calcular a correção para o efeito de soma em cascata para ser aplicada a curvas de eficiências obtidas por meio de espectrômetros de HPGe. As eficiências foram calculadas numericamente pelo Método de Monte Carlo, para fontes puntiformes. Outro algoritmo de Monte Carlo foi desenvolvido que acompanha o caminho no esquema de desintegração desde o estado inicial do radionuclídeo precursor, até o estado fundamental do núcleo filho. Cada etapa no esquema de desintegração é selecionada por meio de números aleatórios levando em conta as probabilidades de transição e coeficientes de conversão interna. As transições selecionadas são identificadas apropriadamente de acordo com o tipo de interação que tenha ocorrido, dando origem a eventos de absorção total ou parcial dentro do cristal do detector. Uma vez que o estado final tenha sido atingido, as transições selecionadas são contabilizadas para verificar quais pares de transições ocorreram simultaneamente. Com este procedimento foi possível calcular o efeito de soma em cascata para *todas* as transições gama presentes no esquema de desintegração. Diversos radionuclídeos, tais como ^{60}Co , ^{88}Y , ^{133}Ba , ^{131}I e ^{152}Eu e diferentes geometrias de detecção foram usadas para verificar o procedimento. Os resultados obtido tiveram bom acordo com a literatura.

DETERMINATION OF CASCADE SUMMING CORRECTION FOR HPG_e SPECTROMETERS BY THE MONTE CARLO METHOD

Mauro Noriaki Takeda

ABSTRACT

The present work describes the methodology developed for calculating the cascade sum correction to be applied to experimental efficiencies obtained by means of HPG_e spectrometers. The detection efficiencies have been numerically calculated by the Monte Carlo Method for point sources. Another Monte Carlo algorithm has been developed to follow the path in the decay scheme from the beginning state at the precursor radionuclide decay level, down to the ground state of the daughter radionuclide. Each step in the decay scheme is selected by random numbers taking into account the transition probabilities and internal transition coefficients. The selected transitions are properly tagged according to the type of interaction that has occurred, giving rise to a total or partial energy absorption event inside the detector crystal. Once the final state has been reached, the selected transitions were accounted for verifying each pair of transitions which occurred simultaneously. With this procedure it was possible to calculate the cascade summing correction for *all* the gamma ray transitions present in the decay scheme. Several radionuclides such as ⁶⁰Co, ⁸⁸Y, ¹³³Ba, ¹³¹I and ¹⁵²Eu and different detection geometries were used for testing the procedure. The results were in good agreement with the literature.

SUMÁRIO

1. INTRODUÇÃO	1
1.1 OBJETIVO	3
2. FUNDAMENTOS TEÓRICOS	5
2.1 TRANSIÇÕES GAMA	5
2.1.1 Emissão gama	5
2.1.2 Conversão Interna:	7
2.1.3 Emissão de um par elétron-pósitron	10
2.1.4 Multipolaridade	11
2.1.5 Vida média de níveis excitados	12
2.1.6 Rearranjo eletrônico	12
2.2 INTERAÇÃO DA RADIAÇÃO COM A MATÉRIA	15
2.2.1 Seção de choque	17
2.2.1.1 Efeito Fotoelétrico	18
2.2.1.2 Efeito Compton	20
2.2.1.3 Produção de pares	23
2.3 DETECTORES HPGE E GE(LI)	26
2.3.1 Resolução em Energia	27
2.3.2 Espectroscopia de raio gama com detectores de germânio	27
2.4 EFEITO DE SOMA EM CASCATA	30
2.4.1 Cálculo para um esquema de decaimento simples	31
2.4.2 Cálculo para esquemas de decaimento complexo	35
2.5 O MÉTODO DE MONTE CARLO	39
2.5.1 Introdução	39
2.5.2 Problemas que podem ser resolvidos pelo Método de Monte Carlo	41
2.5.3 Números aleatórios e pseudo-aleatórios	41
2.5.4 Princípio fundamental do método de monte carlo	44

3. CÁLCULO DAS CORREÇÕES PARA O EFEITO SOMA EM CASCATA E DE EFICIÊNCIAS DE DETECÇÃO.....	46
3.1 DESCRIÇÃO DO MÉTODO	46
3.2 CORREÇÃO PARA O EFEITO SOMA EM CASCATA	46
3.3 EFICIÊNCIAS TOTAL E DE PICO.....	52
4. RESULTADOS	62
5. CONCLUSÕES.....	74
APÊNDICE 1	77
APÊNDICE 2	83
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	93

3. CÁLCULO DAS CORREÇÕES PARA O EFEITO SOMA EM CASCATA E DE EFICIÊNCIAS DE DETECÇÃO.....	46
3.1 DESCRIÇÃO DO MÉTODO	46
3.2 CORREÇÃO PARA O EFEITO SOMA EM CASCATA	46
3.3 EFICIÊNCIAS TOTAL E DE PICO.....	52
4. RESULTADOS	62
5. CONCLUSÕES.....	74
APÊNDICE 1	77
APÊNDICE 2	83
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	93

1. INTRODUÇÃO

A técnica de espectrometria gama, utilizando detectores de HPGe ou Ge(Li), tem sido amplamente empregada em diversas áreas de pesquisa, em razão do excelente poder de resolução em energia apresentado por estes tipos de detectores. Em Metrologia Nuclear, esta técnica tem sido utilizada para a determinação da atividade de radionuclídeos, quando não se dispõe de um padrão adequado para a comparação direta. Neste caso, torna-se necessária a obtenção de uma curva de eficiência de detecção em função da energia gama, por meio da qual os valores de eficiência para as energias do radionuclídeo em questão são determinados por interpolação. Para esta determinação, normalmente utiliza-se a área sob o pico de absorção total, correspondente à energia gama considerada.

Um problema que se apresenta nesta calibração é a detecção simultânea de outras radiações que ocorrem em cascata com o gama a ser medido. Se estas radiações em cascata forem detectadas durante um intervalo de tempo menor que o tempo de resolução do espectrômetro, o pulso resultante corresponderá à soma dos pulsos individuais. Desta forma, o número de contagens sob o pico de absorção total será alterado, crescendo ou diminuindo, dependendo da localização da transição gama no esquema de desintegração considerado. Este efeito é geralmente denominado *soma em cascata* ou *soma em coincidência* ^[1-4].

Na literatura, para a calibração de espectrômetros de germânio usando diversos radionuclídeos, tais como: ^{60}Co , ^{88}Y e ^{152}Eu , o efeito de soma em cascata é determinado

empiricamente ^[2]. Para fontes com taxa de emissão de raios gama conhecida, faz-se uma medida a uma grande distância do detector, onde a ocorrência de coincidências é rara, tornando desprezível o efeito de soma em cascata ^[2,5,6]. Há também o cálculo usando expressões analíticas onde considera-se a detecção de todos os fótons e possíveis combinações. Porém, é considerado somente a detecção simultânea de duas radiações e apenas raios gama com probabilidades de emissão por decaimento maiores que 5%. O efeito soma para raios X da camada K normalmente é considerado, entretanto, raios X provenientes de outras camadas são ignorados ^[3].

A probabilidade do efeito de *soma em cascata* aumenta com a eficiência de detecção. Portanto, ela cresce para cristais com volumes maiores ou para distâncias pequenas entre fonte e detector. Este efeito não tem relação com a atividade da fonte radioativa, podendo ocorrer mesmo para baixíssimas taxas de contagens. Para alguns radionuclídeos de esquema de desintegração complexos, este efeito pode chegar a mais de 40% ^[2]. Assim, para atingir uma boa exatidão na atividade, este efeito deve ser levado em consideração.

A determinação desta correção requer o conhecimento das eficiências de detecção, tanto para o pico de absorção total como para o espectro integral, referentes a cada uma das energias gama que sejam detectadas em cascata ^[1-4]. A determinação experimental destas eficiências só pode ser efetuada para radionuclídeos com esquema de desintegração simples, onde este efeito torna-se desprezível. Uma vez obtidas estas curvas de eficiência em função da energia gama, a correção pode ser calculada aplicando-se algoritmos que levam em conta os parâmetros do esquema de desintegração.

O Laboratório de Metrologia Nuclear (LMN) do IPEN-CNEN/SP tem adquirido uma larga experiência nos campos de padronização de radionuclídeos e de espectrometria gama e X ^[7-14], com participação em diversas comparações internacionais patrocinadas pelo Bureau International des Poids et Mesures ^[15-18], o que confere ao LMN um excelente grau de confiabilidade em suas calibrações.

Com o presente trabalho, o LMN poderá melhorar a exatidão na calibração de radionuclídeos com esquema de desintegração complexos, empregando-se espectrômetros de HPGe ou Ge(Li), principalmente em geometrias que envolvem pequenas distâncias entre fonte e detector.

1.1 Objetivo

O objetivo do presente trabalho é desenvolver um novo método teórico/experimental para a determinação da correção para o efeito de soma em cascata para espectrômetros de HPGe e Ge(Li). O cálculo teórico das eficiências total e de pico em função da energia gama são efetuados aplicando a técnica de Monte Carlo. O programa inclui um algoritmo que leva em conta as características do esquema de desintegração do radionuclídeo considerado. Os resultados teóricos são comparados a resultados experimentais obtidos com radionuclídeos cujas atividades e características de esquemas de desintegração são bem conhecidas.

No capítulo 1, é feita uma introdução, colocando o trabalho dentro do contexto da Metrologia Nuclear e mostrando quais são as características do problema a que se propõe resolver.

O capítulo 2 apresenta os fundamentos teóricos, ressaltando as características principais das transições gama em um esquema de desintegração, os processos de interação dos fótons X e gama com a matéria, as características dos detectores de Ge(Li) e HPGe, o efeito de soma em cascata e os princípios básicos do método de Monte Carlo.

O capítulo 3 apresenta a metodologia desenvolvida no trabalho, detalhando os algoritmos utilizados para o cálculo da correção para o efeito soma em cascata e o cálculo das eficiências total e de pico utilizando o método de Monte Carlo.

Os resultados obtidos e comparações com os resultados publicados na literatura ou experimentais são apresentados no capítulo 4.

Finalmente no capítulo 5 tem-se a discussão dos resultados obtidos e as conclusões.

2. FUNDAMENTOS TEÓRICOS

2.1 Transições gama

Uma transição gama ocorre pela desexcitação de um núcleo atômico para um estado de energia mais baixo, podendo ou não ser o estado fundamental. Ela manifesta-se espontaneamente pela emissão de um fóton gama ou um elétron de conversão e, mais raramente quando condições de energia tornam possível, por um par elétron-pósitron.

A intensidade da transição gama é dada por^[19]:

$$T_{\gamma} = I_{\gamma} + I_{ce} + I_{e^{\pm}} \quad (2-1)$$

onde I_{γ} , I_{ce} e $I_{e^{\pm}}$ são as intensidades de emissão gama, elétron de conversão e par elétron-pósitron, respectivamente.

2.1.1 Emissão gama

A energia do raio gama emitido é^[20]:

$$E_{\gamma} = (E_i - E_f) - E_r \quad (2-2)$$

onde:

$E_i - E_f$ é a diferença de energia entre os níveis inicial e final da transição gama.

E_r é a energia de recuo do estado final do núcleo, dado por [20]

$$E_r = \frac{(E_\gamma)^2}{2M_N c^2} \quad (2-3)$$

onde:

M_N é a massa do núcleo de recuo

c é a velocidade da luz

A energia de recuo é usualmente desprezível, exceto para altas energias gama e baixos números atômicos. Por exemplo, para a emissão gama de 1369 keV do ^{24}Na , $E_r = 42$ eV.

Por exemplo, o ^{60}Co desintegra-se principalmente para um nível excitado de energia 2505,7 keV acima do nível fundamental do ^{60}Ni pela emissão de uma partícula β^- , com uma energia total de 317,9 keV. Os estados excitados do ^{60}Ni decai com a emissão de dois raios gama, um com energia igual a 1173,2 keV seguido por outro de 1332,5 keV (figura 2-1).

Se o núcleo filho não decai diretamente para o estado fundamental, ele pode permanecer em um estado meta-estável por um tempo considerável. Por exemplo, o radionuclídeo ^{99}Mo decai para um nível de 143 keV de ^{99}Tc no qual permanece por um tempo longo, várias horas, possibilitando que o tecnécio seja separado quimicamente do

seu pai, o ^{99}Mo . A transição retardada de um núcleo filho excitado para um nível de

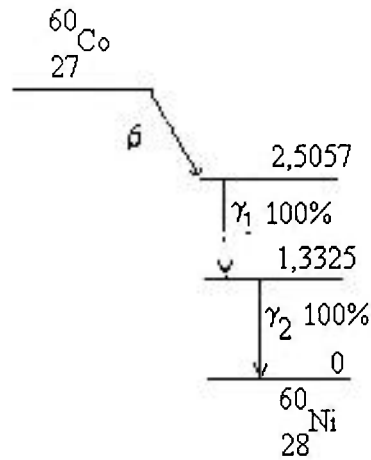


Figura 2-1 – Esquema de desintegração do ^{60}Co .

energia mais baixa do mesmo núcleo é chamada transição isomérica e tal isomerismo nuclear é indicado pela adição da letra m (de meta-estável) após o número de massa atômica do radionuclídeo, ou seja, ^{99m}Tc .

2.1.2 Conversão Interna:

O processo de conversão interna inicia-se com o núcleo em estado excitado, que pode ter sido formado por um processo precedente – frequentemente uma desintegração radioativa. A energia de desexcitação do núcleo é transferida diretamente a um elétron orbital (K, L etc) o qual é ejetado do átomo, carregando uma energia dada por ^[19]:

$$E_{ce_x} = E_\gamma - E_x \quad (2-4)$$

onde E_x é a energia de ligação do elétron na camada X ($X = K, L, M \dots$)

Para uma dada transição, o *coeficiente de conversão interna* do elétron na camada K é definido por^[19]:

$$\alpha_K = \frac{I_{ceK}}{I_\gamma} \quad (2-5)$$

onde I_{ceK} e I_γ são as probabilidades de emissão dos elétrons de conversão K e da radiação gama, respectivamente.

Os coeficientes de conversão interna para as outras camadas são definidos de modo análogo:

$$\alpha_L = \frac{I_{ceL}}{I_\gamma}, \quad \alpha_{L_i} = \frac{I_{ceL_i}}{I_\gamma} \quad (i = 1, 2, 3\dots) \quad (2-6)$$

onde $\alpha_L = \alpha_{L_1} + \alpha_{L_2} + \alpha_{L_3}$

$$\alpha_{M_i} = \frac{I_{ceM_i}}{I_\gamma} \quad (i = 1, 2, 3\dots) \quad (2-7)$$

O coeficiente de conversão total é dado por:

$$\alpha_t = \alpha_K + \alpha_L + \alpha_M + \dots = \frac{I_{ce}}{I_\gamma} \quad (2-8)$$

Onde I_{ce} é a intensidade total da emissão do elétron de conversão para a transição em questão.

A partir destas definições, tem-se as seguintes relações:

$$I_\gamma = \frac{I}{1 + \alpha_t} \quad I_{ce} = \frac{\alpha_t}{1 + \alpha_t} \cdot I_\gamma \quad I_{ce_x} = \frac{\alpha_x}{1 + \alpha_t} \cdot I_\gamma \quad (2-9)$$

As razões $\frac{K}{L}$, $\frac{K}{LM}$, $\frac{K}{LM\dots}$ são também usadas e definidas da seguinte maneira:

$$\frac{K}{L} = \frac{I_{ce_K}}{I_{ce_L}} = \frac{\alpha_K}{\alpha_L} \quad (2-10)$$

$$\frac{K}{LM} = \frac{I_{ce_K}}{I_{ce_L} + I_{ce_M} + \dots} = \frac{\alpha_K}{\alpha_L + \alpha_M + \dots} \quad (2-11)$$

O processo de conversão interna depende do estado inicial do elétron (camada atômica ou subcamada), do número atômico Z e da transição nuclear. O coeficiente de conversão aumenta com a multipolaridade e decresce com o aumento da energia gama, sendo insignificante para altas energias.

2.1.3 Emissão de um par elétron-pósitron

Este processo é possível somente se a energia de transição é maior do que $2m_0c^2 = 1022,0 \text{ keV}$, com o par elétron-pósitron carregando a energia dada por^[19]:

$$E(e^\pm) = E_\gamma - 2m_0c^2 \quad (2-12)$$

A energia de emissão segue uma distribuição compreendida entre 0 e $E(e^\pm)$ para cada uma das duas partículas do par.

O coeficiente de produção de pares interno é definido por^[19]:

$$\alpha_\pi = \frac{I(e^\pm)}{I_\gamma} \quad (2-13)$$

A intensidade desta emissão é sempre baixa. Como α_π é geralmente menor do que 10^{-4} , este processo foi desconsiderado no presente trabalho.

2.1.4 Multipolaridade

A teoria quântica permite uma classificação das transições gama em transições de multipolo, de acordo com o número quântico orbital L correspondente ao fóton na transição. Se $L = 0$, a transição é chamada monopolo, $L = 1$ dipolo, $L = 2$ quadrupolo etc.

Se J_i e J_f são os números quânticos do momento angular total dos níveis inicial e final da transição gama, a relação vetorial entre o momento angular impõe a restrição^[19]:

$$|J_i - J_f| \leq L \leq |J_i + J_f| \quad (2-14)$$

Com frequência tem-se: $L = |J_i - J_f|$, às vezes em competição com $L = |J_i - J_f| + 1$, e mais raramente com $L = |J_i - J_f| + 2$. Além disso, o momento angular carregado por um fóton não pode ser zero, conseqüentemente uma transição $0 \rightarrow 0$ não pode ocorrer, exceto por conversão interna ou criação de um par interno.

As radiações gama são classificadas em “elétricas” e “magnéticas”. Para radiação “elétrica”, a mudança de paridade é $(-1)^L$. Para radiação “magnética”, a mudança de paridade é $(-1)^{L+1}$.

A transição gama pode ser uma mistura de duas (ou mais raramente três) transições de multipolo. A fim de conservar a paridade, duas transições em competição serão de ordem 2^L ou 2^{L+1} , uma elétrica e outra magnética, ou inversamente (por exemplo, mistura de $M1 + E2$).

A expressão (2-14) sugere que uma transição com $J_i = 0$ ou $J_f = 0$ não possui mistura possível. Note-se também que para uma transição $I \rightarrow I$ sem paridade de carga, uma transição monopolo E0 pode ocorrer em competição com a mistura $M1 + E2$.

2.1.5 Vida média de níveis excitados

A vida média de transições gama são função da energia gama, do número atômico e da multipolaridade. Eles abrangem de 10^{-14} s até muitos anos para certas transições com baixa energia do tipo M4 e E5.

Com base ao modelo de camadas, Weisskopf ^[19] calculou a probabilidade λ por unidade de tempo para cada tipo de transição. A vida média $\tau = \frac{1}{\lambda}$ decresce com $(E_\gamma)^{2L+1}$.

2.1.6 Rearranjo eletrônico

Captura eletrônica e conversão interna são processos que dão origem a vacâncias na nuvem eletrônica. O preenchimento de uma vacância é acompanhado pela emissão de raio-X ou de um elétron Auger, criando novas vacâncias nas camadas eletrônicas internas. A vacância inicial é assim transferida por cascata para as camadas periféricas. A energia

liberada corresponde a energia de ligação do elétron na camada no qual a vacância inicial foi produzida.

- **Vacância na camada K**

O número de vacâncias K criadas durante uma transição por captura eletrônica com intensidade I_e é $I_e P_K$.

No caso de um elétron de conversão K, será: $I \frac{\alpha_K}{1 + \alpha_t}$ para uma transição gama de intensidade I ($I = I_\gamma + I_{ce}$).

Para um dado radionuclídeo, o número total de vacâncias K criadas é escrito como segue, considerando todas as transições:

$$n_K = \sum I_e P_K + \sum I \frac{\alpha_K}{1 + \alpha_t} \quad (2-15)$$

- **Fluorescência produzida pela camada K**

É a probabilidade de que o preenchimento de uma vacância na camada K seja acompanhado por radiação X_K :

$$\omega_K = \frac{I_{X_K}}{n_K} \quad (2-16)$$

onde I_{X_K} é a intensidade de fótons X_K emitidos.

A produção Auger é deduzida da produção de fluorescência:

$$a_K = 1 - \omega_K \quad (2-17)$$

Do mesmo modo, tem-se a intensidade dos elétrons Auger K:

$$I_{e_{AK}} = a_K n_K \quad (2-18)$$

A produção de fluorescência ω_K depende exclusivamente do número atômico Z , exceto para valores de baixo Z , onde ele pode ser influenciado pelo estado químico.

Para baixos números atômicos, $\omega_K \ll 1$. Este parâmetro aproxima-se de 1 para números atômicos elevados.

- **Raios- X_K**

A energia do raio X_K emitido para uma transição KX ($X = L, M, N, \dots$) é dada por:

$$E_{X_K} = E_K - E_X \quad (2-19)$$

Onde E_K e E_X são as energias de ligação dos elétrons nas camadas K e X , respectivamente.

Elétrons Auger-K

Uma vacância na camada K é preenchida por um elétron vindo de uma camada menos ligada X. A energia disponível é transferida para outro elétron, o qual é também pouco ligado.

A energia do elétron Auger-K é dada por:

$$E_{AK} = E_K - E_X - E_Y - \Delta E \quad (E_Y \leq E_X) \quad (2-20)$$

Onde E_K , E_X , E_Y , são as energias de ligação dos elétrons nas camadas K, X e Y (ou subcamadas). ΔE é um termo corretivo para o caso em que a energia de ligação do átomo excitado seja muito maior do que do átomo em seu estado fundamental.

2.2 Interação da radiação com a matéria

Quando partículas carregadas atravessam o ar, eles sofrem colisões elásticas e inelásticas com os átomos e moléculas. A elástica produz deflexões e a inelástica produz íons positivos e elétrons, usualmente chamados de par-de-íons. Em média, aproximadamente 35 eV de energia é necessário para formar cada par-de-íons. A produção dos pares-de-íons por partículas carregadas se dá por interações Coulombianas. Outras formas de transferência de energia podem ocorrer por meio de excitação dos átomos ou

moléculas do meio e pela produção de radiação de freiamto (“Bremsstrahlung”). Esta última ocorre preferencialmente pela interação dos elétrons com a matéria e é dominante em altas energias e materiais de alto número atômico.

A maior parte das fontes radioativas gama emissoras decaem pela emissão de radiação beta. Por esta razão, alguma radiação secundária na forma de raio-X (“Bremsstrahlung”) poderá ser gerada e contribuir para o espectro medido.

A energia dos fótons X ou gama pode ser expressa como $E = hv$, onde v é a frequência do fóton e h é a constante de Planck. Interações desses fótons com a matéria são consideradas independentes da origem do fóton e dependente somente de sua energia.

Diferentemente das partículas carregadas, um feixe de radiação gama bem colimado apresenta uma atenuação exponencial na matéria. Isto ocorre porque os fótons são absorvidos ou espalhados em um único evento. Há diversos tipos de interação que causam espalhamento ou absorção de raios gama:

Tipo de interação	Efeito da interação
1- Interação com elétrons atômicos	a) absorção completa
2- Interação com nucleons	b) espalhamento elástico (coerente)
3- Interação com o campo elétrico ao redor do núcleo ou elétron	c) espalhamento inelástico (incoerente)
4- Interação com o campo nuclear ao redor dos nucleons	

Há 12 maneiras de combinar a coluna 1 e 2; assim em teoria há 12 processos diferentes para cada raio gama poder ser absorvido ou espalhado. Vários desses processos são pouco freqüentes. Os processos principais de transferência de energia pelos raios X e gama na matéria são: (i) efeito Fotoelétrico, importante em baixas energias; (ii) efeito Compton, importante para energias intermediárias; e (iii) Produção-de-Pares (elétron-pósitron) que ocorre para radiação gama com energias acima de 1022,0 keV.

2.2.1 Seção de choque

A base de todas as medidas de absorção de raios X e raios gama é o fato de que a intensidade de radiação decresce ao passar através da matéria. Em tal passagem, para uma pequena espessura Δx , a variação na intensidade ΔI é proporcional à espessura e a intensidade incidente I . Isto é,

$$\Delta I = -\mu I \Delta x \quad (2-21)$$

onde μ é a constante de proporcionalidade e é chamada de coeficiente de absorção ou seção de choque macroscópica. Se a radiação é homogênea, μ é constante, e a integração dessa equação fornece

$$\frac{I}{I_0} = e^{-\mu x} \quad (2-22)$$

A equação fornece a intensidade de radiação I após uma partícula de intensidade inicial I_0 ter atravessado uma espessura x de um dado material.

Os três processos de interação de radiação gama com a matéria (efeito Compton, efeito fotoelétrico, e produção-de-pares) agem independentemente um do outro, assim, podemos separar o coeficiente de absorção em três partes que designaremos por σ para efeito Compton, τ para o efeito fotoelétrico, e κ para a produção de pares:

$$\mu = \sigma + \tau + \kappa \quad (2-23)$$

Um quarto processo que é o espalhamento coerente (σ_{coe}) também pode contribuir para atenuação do feixe de fótons, embora não transfira energia aos átomos do meio:

$$\mu = \sigma + \tau + \kappa + \sigma_{\text{coe}} \quad (2-24)$$

2.2.1.1 Efeito Fotoelétrico

Para energias abaixo de aproximadamente 100 keV, o modo predominante de interação de fótons gama ou X em materiais de alto Z é o efeito fotoelétrico. No efeito fotoelétrico, a energia total do fóton $h\nu$ é transferida para um elétron ligado, o qual abandona o átomo com uma energia igual à do fóton, menos a energia de ligação (E_b) da camada K, L, M, etc., do qual é ejetado:

$$E_{e^-} = h\nu - E_b \quad (2-25)$$

onde E_{e^-} é a energia cinética do elétron ejetado. O restante da energia aparece na forma de raio X característico ou elétrons Auger durante o preenchimento da vacância na camada interna. A figura 2-2 ilustra o processo.

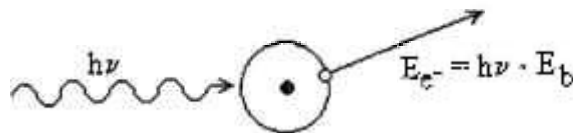


Figura 2-2 - Efeito Fotoelétrico.

Um fóton incidente não pode ser totalmente absorvido por um elétron livre. A absorção total somente pode ter lugar se o elétron estiver ligado ao átomo. Desse modo, o momento é conservado pelo recuo do átomo residual inteiro. Como pode ser esperado, os elétrons mais ligados tem a maior probabilidade de absorção por efeito fotoelétrico, sendo que 80% dos processos de absorção fotoelétrica ocorrem na camada K, desde que a energia do fóton incidente $h\nu$ exceda a energia de ligação correspondente. O efeito fotoelétrico possui uma forte dependência com o número atômico (Z^3 ou Z^4) e cai com $\frac{1}{(h\nu)^3}$.

Portanto, é um processo dominante em baixas energias.

A absorção fotoelétrica é o processo ideal se estamos interessados em medir a energia do raio gama original. Como a energia dissipada por emissão de raios X característicos e elétrons Auger normalmente é absorvida no meio, um único pico

aparecerá no espectro de energia absorvida, correspondendo a energia dos raios gama incidentes (figura 2-3).

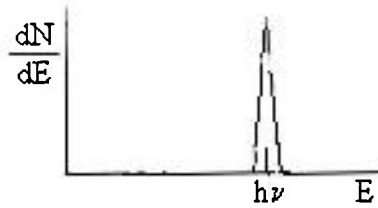


Figura 2-3 - Espectro de energia correspondente à absorção total de um feixe de radiação gama ou X monoenergético^[21].

2.2.1.2 Efeito Compton

No efeito Compton, o fóton é espalhado e comporta-se como uma partícula, com energia, $h\nu'$, e o momento $\frac{h\nu'}{c}$. A energia é transferida para um elétron livre que é defletido em uma nova direção, sendo o fóton espalhado com energia menor. A divisão da energia entre os dois depende do ângulo de espalhamento.

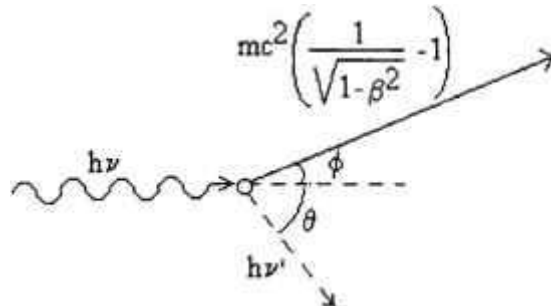


Figura 2-4 - Espalhamento Compton

A energia do raio gama espalhado $h\nu'$ em termos do ângulo de espalhamento θ é dada por^[22]:

$$h\nu' = \frac{h\nu}{1 + \alpha(1 - \cos \theta)} \quad (2-26)$$

onde $\alpha = \frac{h\nu}{m_0 c^2}$,

A energia cinética do elétron de recuo é então^[22]

$$E_{e^-} = h\nu - h\nu' = h\nu \left(1 - \frac{1}{1 + \alpha(1 - \cos \theta)} \right) \quad (2-27)$$

Podemos deduzir que para ângulo de espalhamento muito pequeno, ou seja $\theta \cong 0$, $h\nu' \cong h\nu$ e $E_{e^-} \cong 0$. O elétron de recuo Compton tem energia muito baixa e o raio gama espalhado tem aproximadamente a mesma energia do raio gama incidente. Para uma colisão frontal, ou seja $\theta = \pi$, o raio gama incidente é retro-espalhado voltando para sua direção de origem, enquanto o elétron de recuo tem direção incidente. Essa situação representa a energia máxima que pode ser transferida para um elétron em uma interação.

A seção de choque para o número de fótons espalhados por elétron e por unidade de ângulo sólido na direção θ , é dada por^[23]:

$$\frac{d_e \sigma(\theta)}{d\Omega} = \frac{r_0^2}{2} \left\{ \frac{1}{[1 + \alpha(1 - \cos \theta)]^2} \times \left[1 + \cos^2 \theta + \frac{\alpha^2 (1 - \cos \theta)^2}{[1 + \alpha(1 - \cos \theta)]} \right] \right\} \quad (2-28)$$

Aqui $r_0 = \frac{e^2}{mc^2}$

A seção de choque para o total de energia espalhada por elétron e por unidade de ângulo sólido é dada por^[23]:

$$\frac{d_e \sigma_s(\theta)}{d\Omega} = \frac{r_0^2}{2} \left[\frac{1}{[1 + \alpha(1 - \cos \theta)]^3} \left(1 + \cos^2 \theta + \frac{\alpha^2(1 - \cos \theta)^2}{[1 + \alpha(1 - \cos \theta)]} \right) \right] \quad (2-29)$$

A seção de choque total Compton $e\sigma$ é obtida pela integração da equação (2-28) no intervalo $[0, \pi]$ para θ e $[0, 2\pi]$ para ϕ ^[23]:

$$e\sigma = 2\pi r_0^2 \left[\frac{1 + \alpha}{\alpha^2} \left[\frac{2(1 + \alpha)}{1 + 2\alpha} - \frac{1}{\alpha} \ln(1 + 2\alpha) \right] + \frac{1}{2\alpha} \ln(1 + 2\alpha) - \frac{1 + 3\alpha}{(1 + 2\alpha)^2} \right] \quad (2-30)$$

Integrando a equação (2-29) entre os mesmos limites obtemos o coeficiente de espalhamento Compton, $e\sigma_s$, dado por^[23]:

$$e\sigma_s = \pi r_0^2 \left[\frac{1}{\alpha^3} \ln(1 + 2\alpha) + \frac{2(1 + \alpha)(2\alpha^2 - 2\alpha - 1)}{\alpha^2(1 + 2\alpha)^2} + \frac{8\alpha^2}{3(1 + 2\alpha)^3} \right] \quad (2-31)$$

As relações acima indicam que o espalhamento Compton é dominante em energias intermediárias de fótons X ou gama. Por outro lado, este processo está relacionado com a densidade de elétrons no meio. Como esta densidade é aproximadamente constante em diferentes materiais, resulta que a probabilidade de interação por efeito Compton praticamente independe do material absorvedor.

2.2.1.3 Produção de pares

Para um fóton incidente de energia maior do que duas vezes a energia de repouso do elétron, ou seja, maior do que 1022,0 keV, um terceiro tipo de interação, conhecido como produção de pares, torna-se importante. Nesta interação o fóton é completamente absorvido e em seu lugar aparece um par elétron-pósitron (figura 2-5).

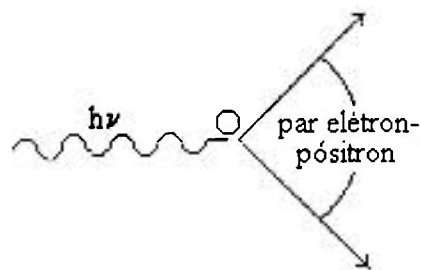


Figura 2-5 - Efeito de Produção de Pares.

O processo ocorre somente no campo de partículas carregadas, principalmente dentro do campo Coulombiano de um núcleo. A energia em excesso, acima de 1022,0 keV, é transferida na forma de energia cinética das partículas^[21]:

$$E_{e^-} + E_{e^+} = h\nu - 2m_0c^2 \quad (2-32)$$

Para energias típicas o elétron e o pósitron, penetram no máximo poucos milímetros antes de perder toda a energia cinética no meio absorvedor.

Na figura 2-6 temos a representação esquemática dos estados de energia positivo e negativo do elétron. Pares elétron-pósitron são criados pelas transições que somam uma energia maior do que $2m_0c^2$ para um elétron originalmente em um estado de energia negativa. A lacuna é então um pósitron de energia total $m_0c^2 + E_{e^+}$, e o estado excitado é simplesmente um elétron de energia total $m_0c^2 + E_{e^-}$.

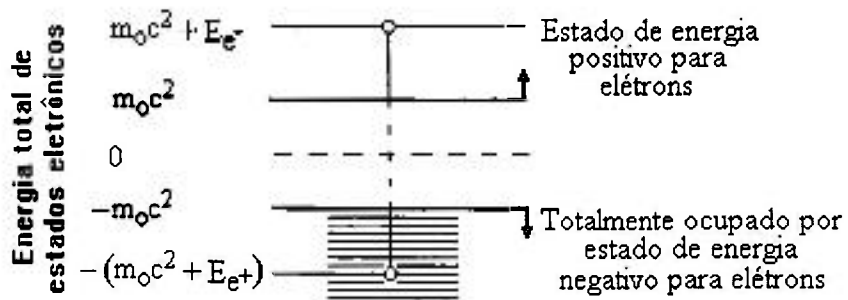


Figura 2-6 - Representação esquemática dos estados de energia positivo e negativo do elétron^[23].

O gráfico da energia cinética total das partículas carregadas (elétron-pósitron) criado pelo raio gama incidente está localizado $2m_0c^2$ abaixo da energia do raio gama incidente, como ilustrado na figura 2-7. Este espectro corresponde ao pico de duplo escape dos gamas de aniquilação.

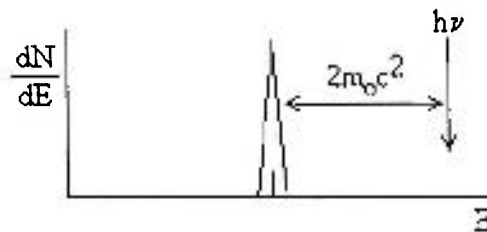


Figura 2-7 - Gráfico da energia cinética total das partículas carregadas (elétron-pósitron)

O pósitron subsequentemente aniquila-se com um elétron produzindo dois fótons de 0,511 MeV, ditos fótons de aniquilação. Os processos de produção de pares e aniquilação normalmente ocorrem dentro do tempo de resolução do detector, e os fótons de aniquilação propagam-se essencialmente em direções opostas, um em relação ao outro.

A detecção de radiação gama é possível pelas interações com a matéria dos elétrons secundários produzidos através dos processos descritos acima. Os raios gama, produzem elétrons dentro do volume sensível dos detectores, tais como cristais de Iodeto de Sódio, germânio e silício. No germânio e silício as interações produzem pares elétron-lacuna, que são coletados e dão origem a pulsos, cuja amplitude está relacionada com a energia depositada no cristal.

A importância relativa dos três processos descritos acima para diferentes materiais absorvedor e energias de raio gama são ilustrados na figura 2-8. A linha a esquerda representa a energia para o qual absorção fotoelétrica e espalhamento Compton são igualmente prováveis como uma função do número atômico do absorvedor. A linha à direita representa a energia para o qual o espalhamento Compton e produção de pares são igualmente prováveis. Três áreas estão assim definidas no gráfico dentro do qual absorção fotoelétrica, espalhamento Compton, e produção de pares cada um predomina.

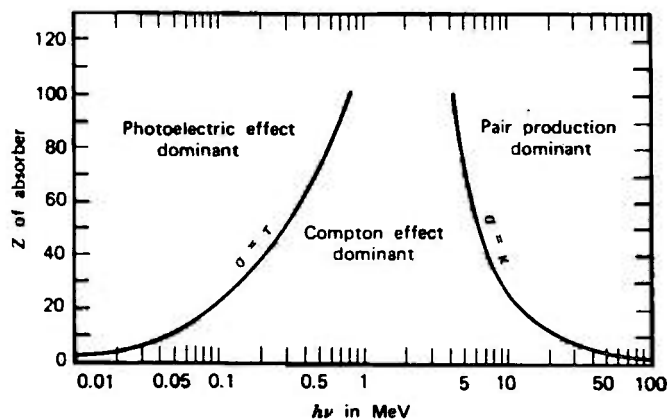


Figura 2-8 – Importância relativa dos três principais tipos de interação de raios gama^[21]

2.3 Detectores HPGe e Ge(Li)

Detectores de Germânio, produzidos pelo processo de difusão de lítio, são denominados Ge(Li). Eles tornaram-se comercialmente acessíveis na década de 60 e tornaram-se comuns durante duas décadas. O surgimento dos detectores de germânio hiperpuro (HPGe) ^[21] na década de 80 proporcionou uma alternativa vantajosa em relação aos detectores de Ge(Li), que deixaram de ser produzidos em favor do tipo HPGe.

Tanto os Ge(Li) e HPGe são detectores semicondutores e apresentam grande poder de resolução em energia. Possuem normalmente profundidades de depleção de 1 cm ou mais. Os detectores de germânio devem ser resfriados a fim de reduzir a corrente de fuga para não prejudicar a sua excelente resolução em energia. Normalmente a temperatura é reduzida a 77 K através do uso de um criostato onde nitrogênio líquido é armazenado em contato térmico com o detector. Para detectores de Ge(Li), esta baixa temperatura deve ser

mantida permanentemente a fim de evitar uma distribuição catastrófica do Lítio que pode ocorrer rapidamente à temperatura ambiente. Os detectores de HPGe eles podem ser mantidos a temperatura ambiente quando não estiver em operação, sem perder suas propriedades, o que também proporciona uma economia no consumo de nitrogênio líquido. Esta vantagem operacional é a maior razão que detectores de HPGe suplantaram Ge(Li). Normalmente coloca-se uma janela fina na capa protetora do detector, feita normalmente de alumínio ou berílio, para que a atenuação dos raios X e gama seja mínima

2.3.1 Resolução em Energia

A característica dominante de detectores de germânio é sua excelente resolução em energia para aplicações em espectroscopia gama ou X. A figura 2-9 apresenta um espectro comparativo da altura do pulso de um cintilador NaI(Tl) e um detector de germânio para espectros de raio gama incidentes idênticos. A maior superioridade do sistema de germânio em resolução de energia permite a separação de muitas energias de raio gama próximas, o qual permanecem não resolvidos no espectro de NaI(Tl).

2.3.2 Espectroscopia de raio gama com detectores de germânio

Como a concentração de dopante em detectores de Ge(Li) é muito pequena, as características de interação do raio gama são idênticas para detectores de Ge(Li) e HPGe.

Em baixas energias a absorção Fotoelétrica é a responsável pelos eventos que contribuem para o pico de absorção total em detectores de HPGe. Em energias mais elevadas eventos de interações múltiplas, tais como espalhamentos Compton seguidos por absorção fotoelétrica é que contribuem de modo predominante ao pico de absorção total, conforme mostra a figura 2-10. Para energias superiores a 1022,0 keV, o pico de absorção total passa a ter uma contribuição adicional pelo efeito de produção de pares, para as interações onde os fótons de aniquilação sejam totalmente absorvidos no volume sensível do detector. Para absorção parcial dos fótons de aniquilação, os eventos dão origem aos picos de primeiro e segundo escapes.

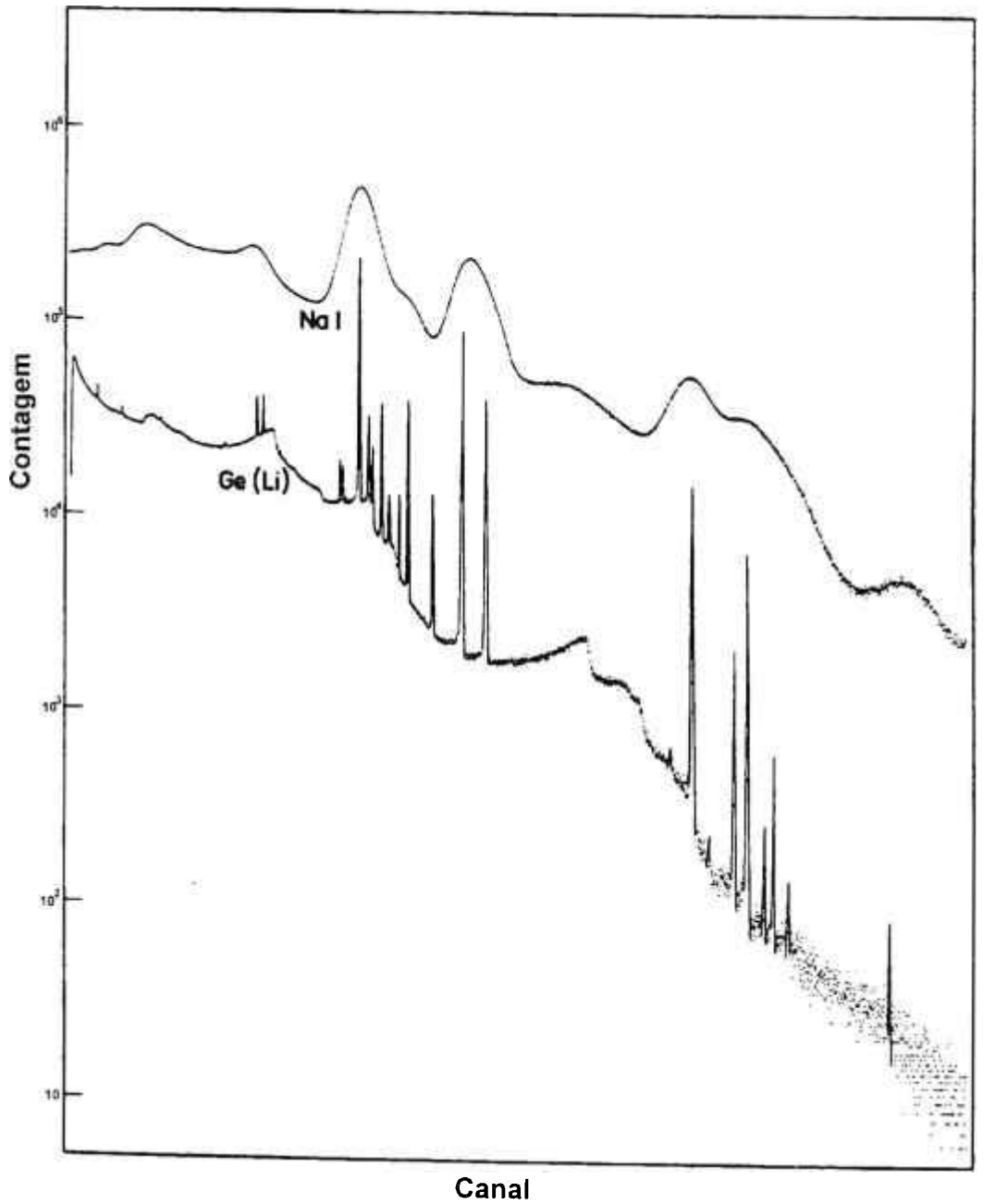


Figura 2-9 – Espectro de altura de pulso comparativo usando um cintilador de iodeto de sódio e um detector de Ge(Li) [21].

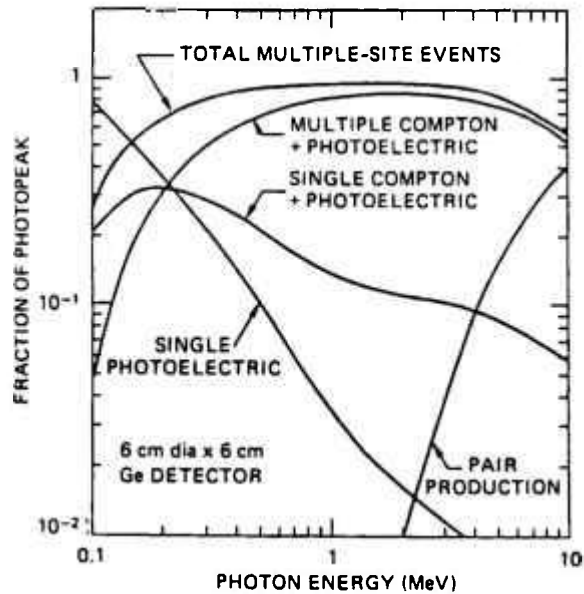


Figura 2-10 – Contribuição dos picos de energia total para diferentes mecanismos de perda de energia^[21].

2.4 Efeito de soma em cascata

Pulsos causados pela detecção coincidente de dois (ou mais) fótons de radiação gama podem ocorrer no espectro detectado. As situações mais comuns ocorrem em aplicações envolvendo um radionuclídeo que emite múltiplas radiações gama em cascata no seu decaimento, conforme ilustrado na figura 2-11.

Desconsiderando estados isoméricos, a duração do estado intermediário é geralmente tão curta (≤ 1 ns) que as duas radiações gama são, na prática, emitidas em coincidência. É então possível que ambos os fótons gama de um simples decaimento interajam com o detector e depositem toda a sua energia em um intervalo de tempo pequeno, comparado com o tempo de resolução do detector ou da eletrônica associada.

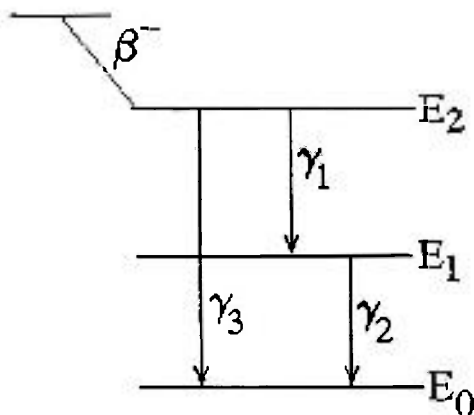


Figura 2-11 – Esquema simples de decaimento para ilustrar o exemplo para correção de soma em cascata.

Se o número de eventos coincidentes acumulados for suficiente, um pico-soma será observado no espectro, correspondendo à soma das energias dos dois gamas individuais. Eventos de soma contínuo (interação Compton) também ocorrerão para baixas amplitudes em razão das interações com perda parcial de energia.

A probabilidade do efeito de soma em cascata aumenta com o aumento da eficiência total, isto é, diminuindo a distância fonte detector ou para cristais com volumes maiores, mas é independente da atividade da fonte.

2.4.1 Cálculo para um esquema de decaimento simples

O número de eventos esperados no pico soma depende da relação entre os dois gamas no esquema de desintegração, da correlação angular que pode existir entre eles e das

eficiências de detecção para os gamas. Uma análise completa é usualmente complexa, entretanto, a derivação descrita a seguir ilustra uma aproximação que pode ser aplicada em casos simples, como do esquema de decaimento mostrado na figura 2-11.

Com o propósito de simplificação maior supõe-se que:

- Fonte puntiforme
- Radiação β absorvida na janela do detector
- Efeito “bremsstrahlung” desprezado
- γ_1 e γ_2 com energias E_1 e E_2 , em razão da meia-vida do nível intermediário são emitidos dentro do tempo de resolução do espectrômetro.
- Não há correlação angular entre eles, e
- As transições não são internamente convertidas

Desconsiderando-se a soma em coincidência (e outras correções), a área do pico de absorção total para a radiação gama (1), pode ser dada por ^[24]:

$$N_1 = \varepsilon_1 S p_1 \quad (2-33)$$

onde ε_1 é a eficiência de pico de absorção total, S é o número de desintegrações durante o período de observação e p_1 é a probabilidade de emissão do gama (1) por desintegração.

Aplicando-se a mesma definição para o gama (2), obtém-se:

$$N_2 = \varepsilon_2 S p_2 \quad (2-34)$$

O processo de soma em cascata dá origem não só ao pico soma mas também remove contagens do pico de absorção total de cada uma das radiações gama envolvidas. Um evento de coincidência de algum tipo (absorção total ou parcial) de γ_2 removerá uma contagem de N_1 . Desse modo, a probabilidade de contagem de γ_2 é igual a eficiência total ϵ_{t2} , assim obtemos o número resultante de eventos com absorção total de energia para γ_1 :

$$N_{1S} = \epsilon_1 S p_1 - \epsilon_1 S p_1 \epsilon_{t2} = \epsilon_1 S p_1 [1 - \epsilon_{t2}] \quad (2-35)$$

Das equações (2-33) e (2-35) podemos tirar o fator de correção que é:

$$C_1 = \frac{N_1}{N_{1S}} = \frac{1}{1 - \epsilon_{t2}} \quad (2-36)$$

A simulação para pico 2 é diferente, porque uma fração do γ_2 é precedido por um decaimento β antes do γ_1 . Tem-se:

$$N_{2S} = \epsilon_2 S p_2 - \epsilon_2 S p_2 \left(\frac{p_1}{p_2} \right) \epsilon_{t1} = \epsilon_2 S p_2 \left[1 - \left(\frac{p_1}{p_2} \right) \epsilon_{t1} \right] \quad (2-37)$$

A correção para o pico 2 será:

$$C_2 = \frac{1}{1 - \left(\frac{p_1}{p_2} \right) \epsilon_{t1}} \quad (2-38)$$

O fator $\frac{p_1}{p_2}$ é a fração do γ_2 que é precedido por γ_1 .

A correção para o pico 3 no esquema de decaimento da figura 1 é diferente. Neste caso, a soma de γ_1 e γ_2 acarreta um evento adicional neste pico quando ambos depositam toda sua energia no detector. Isto ocorre com probabilidade $p_1 \epsilon_1 \epsilon_2$. Sem o efeito soma, a taxa de contagem na energia de pico total de γ_3 é:

$$N_3 = \epsilon_3 S p_3 \quad (2-39)$$

e a taxa observada torna-se:

$$N_{3s} = \epsilon_3 S p_3 + p_1 S \epsilon_1 \epsilon_2 \quad (2-40)$$

A correção para o efeito soma é então:

$$C_3 = \frac{N_3}{N_{3s}} = \frac{1}{1 + \frac{p_1 \epsilon_1 \epsilon_2}{p_3 \epsilon_3}} \quad (2-41)$$

onde as eficiências de pico ϵ_1 e ϵ_2 , e não a eficiência total ϵ_t , entra na expressão para C_3 .

Para energias para o qual $\epsilon \ll \epsilon_i$, a correção com soma positiva (equação 2-41) é sempre menos significativo do que a correção com soma negativa (equações 2-36 e 2-38). No entanto, é significativo no caso de uma transição fraca na presença de transições fortes em cascata. Um exemplo é a transição do ^{88}Y com energia $E_3 = 2734$ keV e com $p = 0,0061$ e onde as duas transições em cascata tem $p \approx 1$. O pico para a energia da transição pode facilmente resultar principalmente do efeito soma mesmo para distâncias da fonte razoavelmente grandes. Assim para tais casos, desprezar o efeito soma pode levar a valores completamente errados para a taxa de emissão dos raios gama.

2.4.2 Cálculo para esquemas de decaimento complexo

Os fatores de correção tornam-se mais complicados quando mais do que dois fótons são emitidos em cascata. Na seqüência tem-se pelo exemplo da transição de 356 keV do decaimento do ^{133}Ba (γ_8 na Figura 2-12), como é calculado o fator de correção em tais casos. Em contraste com o exemplo anterior, incluímos a conversão interna da transição γ e soma com raios K e X, mas não com raios L e X. Para calcular o fator de correção para γ_8 necessitamos das seguintes quantidades:

P_i probabilidade de emissão do raio gama para transições $i = 1, \dots, 9$;

α_i coeficiente de conversão interna total;

α_{K3} coeficiente de conversão K para transição 3;

P_K probabilidade de captura eletron K;

ω_K produção de fluorescência na camada K;

ϵ_i eficiências de pico de energia total para $i = 1, 2, 6, 7, 8$;

ϵ_{γ} eficiência total para raios γ ; e

ϵ_{iX} eficiência total para raios X_K

O efeito com soma negativa são contribuições para a coincidência de γ_8 com

- Raios X_K de processos de captura eletrônica
- γ_3
- raios X_K de conversão interna da transição 3.

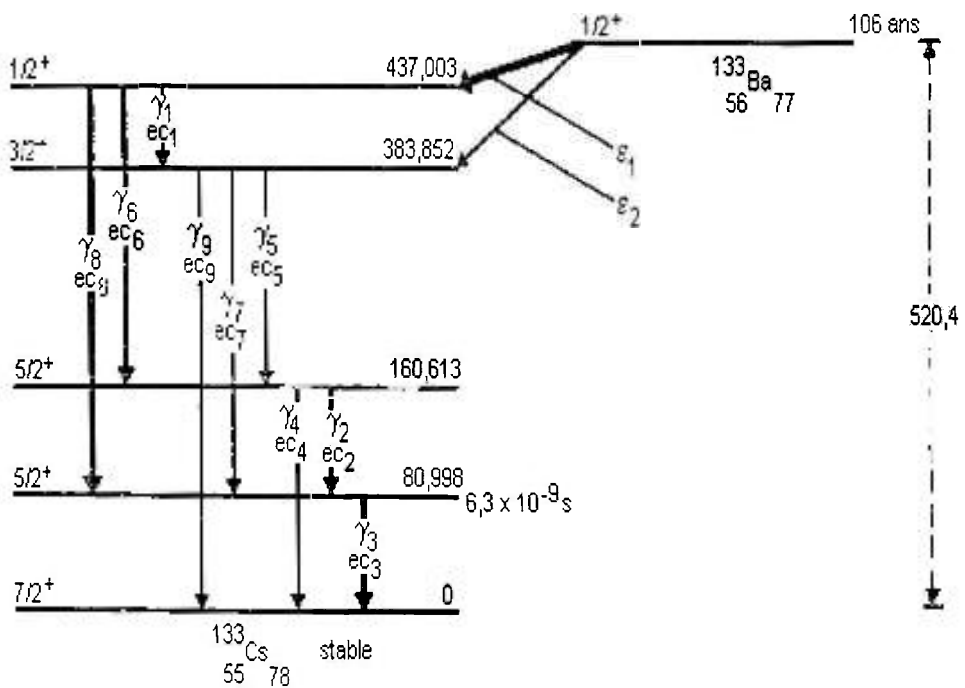


Figura 2-12 – Esquema de decaimento do ^{133}Ba .

A probabilidade que raios X_K são emitidos na captura eletrônica no decaimento é $p_K \omega_K$. Desde que cada γ_8 é precedido por tal decaimento nós temos na expressão para C_8

um termo $p_K \omega_K \epsilon_{iX}$ correspondendo a $\left(\frac{P_i}{P_j} \right) \epsilon_{i1}$ na equação 2-38. Além disso, cada γ_8 é

seguido por uma transição relacionada a γ_3 . A probabilidade de ter um raio gama nesta transição é $\frac{\alpha_{K3}\omega_K}{(1+\alpha_3)}$. Em analogia com a equação 2-38 esperamos portanto:

$$\frac{1}{C_8} = 1 - p_K \omega_K \varepsilon_{tX} - \frac{1}{1+\alpha_3} \varepsilon_{t3} - \frac{\alpha_{K3}\omega_K}{1+\alpha_3} \quad (2-42)$$

Isto não é entretanto completo porque há coincidências triplas entre γ_8 , raios X_K de captura eletrônica e fótons (γ ou X_K) da transição 3 o qual resulta na perda de somente um em vez de dois pulsos. Isto implica que a equação 2-42 compensa completamente as contagens perdidas e dois termos positivos devem de ser adicionados (veja equação 2-43 abaixo).

Efeitos de soma positiva são esperados devido a:

- a cascata γ_6 - γ_2 ,
- a cascata γ_1 - γ_7 e
- a cascata tripla γ_1 - γ_5 - γ_2

As probabilidades para a ocorrência dessas cascatas relativa a probabilidade de emissão de γ_8 devem ser calculadas a partir dos dados de esquema de desintegração. Por exemplo, a contribuição da primeira cascata para o pico γ_8 [veja equação (2-40)] é $Sp_6 f_{62} \varepsilon_6 \varepsilon_2$ onde f_{62} é definido abaixo. Desprezando a cascata tripla (o qual apresenta uma pequena contribuição visto que é proporcional a $\varepsilon_1 \varepsilon_5 \varepsilon_2$), chegamos a seguinte expressão para o inverso do fator de correção:

$$\frac{1}{C_3} = \left[1 - p_K \omega_K \varepsilon_{tX} - \frac{\varepsilon_{t3}}{1 + \alpha_3} - \frac{\alpha_{K3} \omega_K}{1 + \alpha_3} \varepsilon_{tX} - \frac{p_K \omega_K}{1 + \alpha_3} \varepsilon_{tX} \varepsilon_{t3} + \frac{\alpha_{K3} p_K \omega_K}{1 + \alpha_3} \varepsilon_{tX}^2 \right] \times \left[1 + \frac{p_6 f_{62} \varepsilon_2 \varepsilon_6 + p_1 f_{17} \varepsilon_1 \varepsilon_7}{p_8 \varepsilon_8} \right] \quad (2-43)$$

com

$$f_{62} = \frac{p_2}{p_2(1 - \alpha_3) + p_4(1 + \alpha_4)} ; \quad (2-44)$$

$$f_{17} = \frac{p_7}{p_5(1 + \alpha_5) + p_7(1 + \alpha_7) + p_9(1 + \alpha_9)} \quad (2-45)$$

Schima e Hoppes (1983) desenvolveram expressões explícitas semelhantes a equação (2-43) para os principais raios gama de 17 radionuclídeos freqüentemente usados na calibração de eficiências. Termos de segunda ordem, todavia, foram omitidos. Assim esses fatores de correção não devem ser aplicados para distâncias pequenas entre fonte-detector ^[24].

2.5 O método de monte carlo

2.5.1 Introdução

A velocidade de processamento e a capacidade de memória dos modernos computadores tornaram possível a simulação de complicados problemas matemáticos utilizando o Método de Monte Carlo. O Método de Monte Carlo ou de tentativas estatísticas é um método numérico que permite resolver problemas físicos ou matemáticos, através da simulação de processos aleatórios ou randômicos. O Método de Monte Carlo pode ser visto como uma simulação matemática de alguns fenômenos físicos, isto é, um ensaio matemático melhor do que uma solução para as equações (geralmente regidas por leis de probabilidade conhecidas), que tornam o problema tão complexo que não pode ser expresso de uma forma simples [25-28].

Considera-se como data de nascimento do Método de Monte Carlo o ano de 1949, em que apareceu o artigo com o título “The Monte Carlo methods” [25]. A criação deste método está ligado aos matemáticos norte-americanos J. von Neumann e S. Ulam, que foram os principais responsáveis pela grande utilização do método de Monte Carlo em Física e Engenharia modernas, sem a necessidade de fundamentos sofisticados da teoria estatística [25].

O nome Monte Carlo é uma referência ao principado de Mônaco, célebre por seus cassinos. Um dos aparelhos mecânicos mais sensíveis que permitem obter variáveis aleatórias é a roleta.

Uma peculiaridade do método de Monte Carlo é que seu algoritmo tem uma estrutura muito simples. Como regra, elabora-se primeiro um programa para a realização de um evento aleatório. Depois esse evento se repete N vezes de modo que cada experiência seja independente das outras e toma-se a média dos resultados de todas as histórias.

A outra peculiaridade é que o erro é, como regra, proporcional à $\sqrt{\frac{D}{N}}$, onde D é uma constante e N é o número de histórias. Esta fórmula permite observar-se que para diminuir o erro em 10 vezes é preciso aumentar N (ou seja, o volume de processamento) em 100 vezes.

Um mesmo problema pode ser resolvido aplicando variações distintas do método de Monte Carlo para que correspondam a diferentes valores de D. Em diversos problemas consegue-se elevar consideravelmente a precisão dos resultados escolhendo um procedimento de cálculo que utiliza um valor pequeno de D.

2.5.2 Problemas que podem ser resolvidos pelo Método de Monte Carlo

O método de Monte Carlo permite simular qualquer processo cuja seqüência depende de fatores aleatórios. Em muitos problemas matemáticos que não tem a menor relação com questões aleatórias, pode-se inventar um modelo probabilístico artificial (ou mais de um modelo) que permita resolver estes problemas. Por conseguinte, pode-se dizer que o método de Monte Carlo é um método universal para a solução de problemas matemáticos. Historicamente, o método de Monte Carlo tem sido uma ferramenta computacional rotineira para problemas de transporte de partículas, com maior ênfase ao nêutron e ao fóton.

2.5.3 Números aleatórios e pseudo-aleatórios

O ponto crítico da aplicação do método de Monte Carlo é a geração de números distribuídos uniformemente no intervalo $]0, 1[$. Existem vários métodos para a geração desses números e a escolha do método a ser adotado é de grande importância, pois de seu sucesso depende a correta solução do problema.

Números aleatórios podem ser obtidos utilizando tabelas construídas através de procedimentos experimentais, como por exemplo, uma roleta de números. Entretanto, para a utilização de tabelas é necessário uma grande área de memória para armazenamento destes números, o que constitui uma desvantagem. Tão pouco é conveniente introduzir a

tabela em uma memória externa e recorrer constantemente a ela já que isto afeta consideravelmente a velocidade de processamento. Usualmente utiliza-se fórmulas de recorrência que fornecem números chamados *pseudo-aleatórios*, uma vez que estes números são gerados deterministicamente.

O primeiro algoritmo destinado a construção de números pseudo-aleatórios foi proposto por J. von Neumann e é conhecida como a técnica do quadrado central. Para explicá-lo vamos tomar um exemplo [25].

Considere o número $v_0 = 0,9876$ formado por quatro algarismos. Ao elevarmos ao quadrado obtemos o número $v_0^2 = 0,97535376$ de oito algarismos. Tomemos os quatro algarismos que aparecem no centro deste número e consideramos o número $v_1 = 0,5353$.

Elevando agora v_1 ao quadrado ($v_1^2 = 0,28654609$), escolhemos de novo os quatro algarismos do centro e consideremos $v_2 = 0,6546$. Procedendo da mesma forma, obteremos $v_2^2 = 0,42850116$, $v_3 = 0,8501$; $v_3^2 = 0,72267001$, $v_4 = 0,2670$; $v_4^2 = 0,07128900$, $v_5 = 0,1289$, etc.

Podemos resumir este algoritmo na fórmula $v_{k+1} = F(v_k)$, onde F representa o conjunto de operações que devemos realizar com o número v_k para obtermos v_{k+1} . O número v_0 é um número dado.

As vantagens da utilização dos números pseudo-aleatórios são evidentes. Para obter um número basta realizar algumas operações simples, o que torna a velocidade de geração desses números aleatórios da mesma ordem de grandeza da velocidade dos computadores. O programa ocupa pouca memória e qualquer número v_k pode ser reproduzido facilmente. Basta comprovar somente uma vez a qualidade desta geração para poder aplicá-la depois reiteradamente e com segurança na solução de problemas semelhantes.

Hoje, muitos computadores estão equipados com programas para esta finalidade. No presente trabalho utilizou-se o gerador de números aleatórios do programa Microsoft QuickBASIC, versão 4.0. A eficácia do gerador foi verificada em simulações específicas, conforme descrito no capítulo 4.

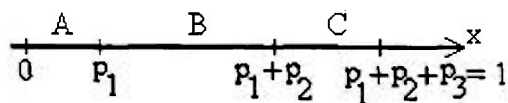
2.5.4 Princípio fundamental do método de monte carlo

Considere na interação da radiação gama com a matéria apenas três processos, ou sejam: o efeito fotoelétrico (A), o efeito Compton (B) e o efeito de formação de pares (C). Supondo que probabilidades de ocorrer o evento do tipo A é de 0,2 (p_1), do tipo B é 0,5 (p_2) e do tipo C é 0,3 (p_3)^[29], tem-se que para um grande número N de números aleatórios (r) gerados:

0,2N estarão no intervalo $0 < r < 0,2$

0,5N estarão no intervalo $0,2 \leq r < 0,7$

0,3N estarão no intervalo $0,7 \leq r < 1$



Cada vez que simulamos a experiência, geramos um número r. Se esse número está no intervalo correspondente ao evento A, então aceitamos como ocorrido o evento A. Se estiver no intervalo B, aceitamos B e assim sucessivamente.

O fluxograma do exemplo acima está esquematizado na figura 2-13 abaixo.

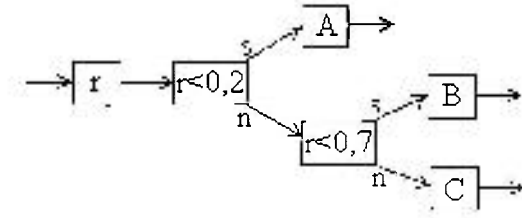


Figura 2-13 – Fluxograma para os eventos A, B e C.

Se $E_1, E_2 \dots E_n$ são eventos independentes mutuamente exclusivos, com probabilidades respectivamente $p_1, p_2 \dots p_n$, sendo $p_1 + \dots + p_n = 1$ e se r é um dos componentes de um conjunto de N números, o acontecimento do evento E_i é determinado pela relação $p_1 + \dots + p_{i-1} \leq r < p_1 + \dots + p_i$.

3. CÁLCULO DAS CORREÇÕES PARA O EFEITO SOMA EM CASCATA E DE EFICIÊNCIAS DE DETECÇÃO

3.1 Descrição do método

Os programas para o cálculo das eficiências total e de pico e para a correção do efeito soma em cascata foram desenvolvidos no presente trabalho em linguagem QB (Microsoft QuickBASIC), versão 4.0.

3.2 Correção para o efeito soma em cascata

O programa denominado COINCIG utiliza o método de Monte Carlo para determinar a correção do efeito soma em cascata a partir dos seguintes parâmetros que são lidos pelo programa e utilizados como dados de entrada:

- Número de histórias.
- Fator de otimização, utilizado para melhorar a estatística em relação ao número de histórias (F_{ot}).
- Número de níveis de energia de acordo com o esquema de decaimento para um dado radionuclídeo.
- Valor de $P_K \omega_K$ e ϵ_X (para o caso de captura eletrônica).
- Energia de cada nível no esquema de decaimento (E_i).
- Probabilidade de ocorrer um dado ramo beta $p(\beta_i)$.

- Probabilidade de ocorrer uma dada transição gama $p(\gamma_i)$.
- Probabilidade de ocorrer dada conversão interna $p(\alpha_i)$.
- Número de transições gama para dado radionuclídeo.
- Energia do fóton para cada transição gama E_{γ_i} .
- Eficiência total para cada transição gama ϵ_{Ti} .
- Eficiência de pico para cada transição gama ϵ_{Pi} .

O programa segue os seguintes passos para o cálculo da correção para o efeito de soma em cascata:

- 1) Incremento de uma unidade para o número de histórias.
- 2) Inicialização dos indicadores lógicos (“flags”), que assumem valor 0 ou 1 dependendo da condição de detecção ou não do gama pelo detector.
- 3) Verifica a condição $r < P_K \omega_K \epsilon_X$ para a emissão do raio X_K (raios X - L, M etc são desconsiderados)
- 4) Define o ramo beta a ser seguido através de um número aleatório r e da probabilidade para cada ramo beta, ou seja se $r < p(\beta_i)$.
 - i) Se a condição acima é satisfeita, o programa segue para o passo 5.
 - ii) Se a condição acima não é satisfeita, o programa volta ao passo 4.
- 5) Define a k -ésima transição gama através de um número aleatório r e a probabilidade de ocorrer a k -ésima transição, ou seja:

$$\sum_{i=1}^{k-1} p_{\gamma_i} < r \leq \sum_{i=1}^k p_{\gamma_i} \quad (3-1)$$

- i) Se a condição acima é satisfeita o programa segue para o passo 6.
 - ii) Se a condição acima não é satisfeita o programa volta ao passo 5.
- 6) Determina a energia do fóton da k-ésima transição gama, E_{γ_k} , pela diferença:

$$E_{\gamma_k} = E_{i_{inicial}} - E_{i_{final}} \quad (3-2)$$

- 7) A partir da energia determinada no passo 6, o programa determina as eficiências total e de pico para essa energia.
- 8) Verifica-se através de um outro número aleatório r se o fóton sofreu absorção através da relação

$$r < f_{OT} \frac{\epsilon_{T_i}}{1 + p(\alpha_i)} \quad (3-3)$$

- i) Se a condição for verdadeira é incrementado uma unidade ao contador de eventos de absorção, e o “flag” correspondente é atualizado assumindo valor 1, que é a condição de absorção.
 - ii) Se a condição for falsa, passa ao item 10.
- 9) Através de outro número aleatório r verifica-se a condição para absorção total pela relação

$$r < \frac{\epsilon_p}{\epsilon_T} \quad (3-4)$$

- i) Se a condição for verdadeira, incrementa-se uma unidade ao contador de eventos de pico, e atualiza-se o “flag” correspondente, ou seja o “flag” assume valor 1, que é a condição de absorção total.
 - ii) Se a condição for falsa o programa executa o passo 9.
- 10) programa verifica se há possibilidade de existir outra transição gama abaixo do nível de energia atual.
- i) Se for possível, a seqüência volta a ser executada a partir do passo 5.
 - ii) Se não for possível, é executado o passo 11.
- 11) É feita a contabilidade dos “flas” e atualizados os contadores para cada transição gama.
- 12) É verificado a última história.
- i) Se for verdadeiro segue para o passo 13.
 - ii) Se for falso volta a executar a seqüência a partir do passo 1.
- 13) Calcula-se as correções necessárias para cada energia.

Após a emissão de todos os gamas para uma dada desintegração, é feita a contabilidade dos indicadores correspondentes a absorção total e parcial de cada gama, para o cálculo da correção. Esta contabilidade é feita pelas seguintes equações:

$$\eta_{ij} = -\sum_k \vartheta_{ijk} \nu_{mlk} \quad (3-5)$$

$$\eta_{ml} = -\sum_k \vartheta_{mlk} \nu_{ijk} \quad (3-6)$$

$$\eta_{il} = \sum_k \vartheta_{ijk} \vartheta_{mlk} \quad (3-7)$$

onde:

η = soma dos gamas emitidos em cascata para uma dada desintegração;

ϑ = “flag” de absorção total para uma dada transição (igual a 0 ou 1);

υ = “flag” de absorção parcial para uma dada transição (igual a 0 ou 1).

A correção é dada por:

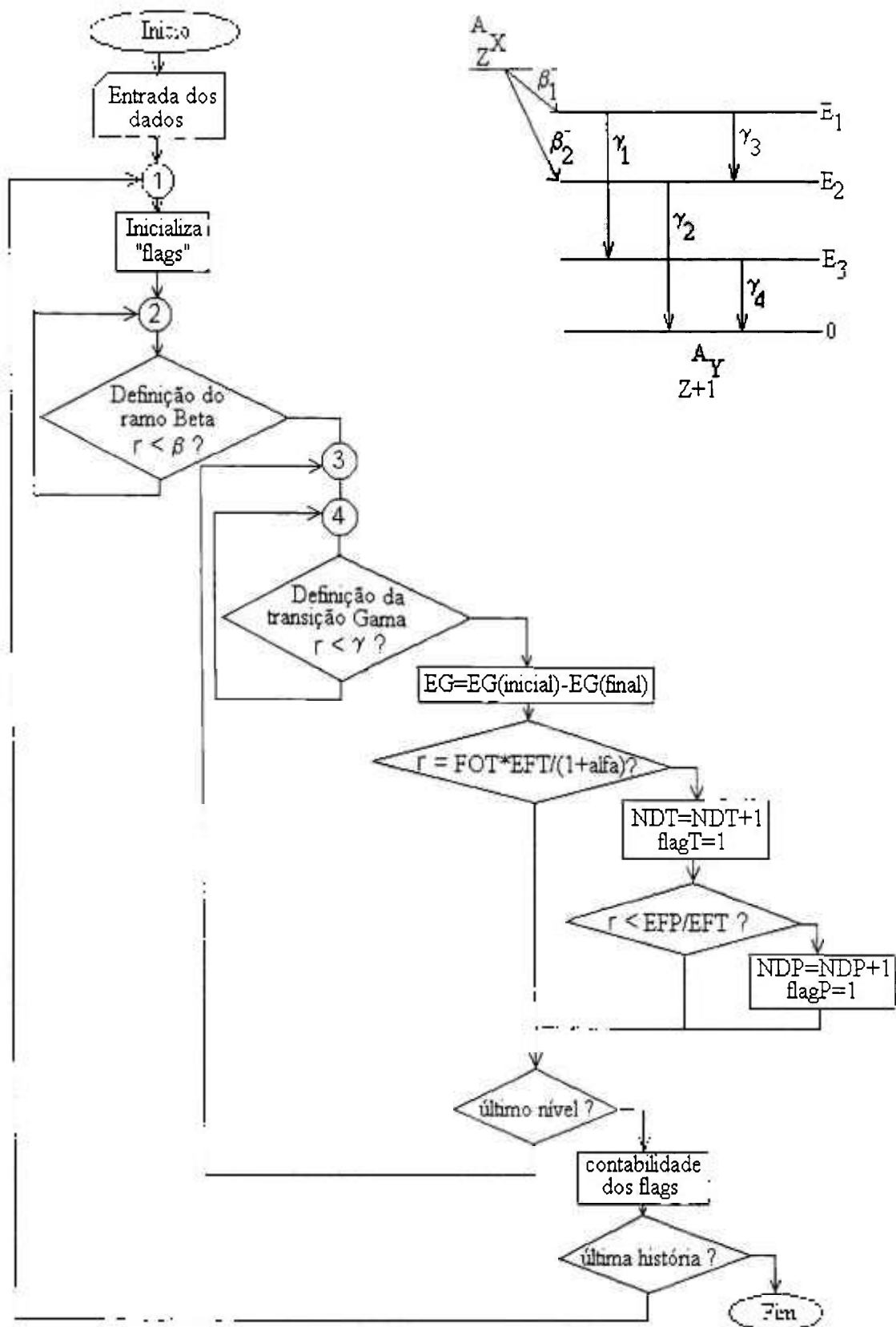
$$C_{ij} = 1 + \frac{\eta_{ij}}{N_{ij}} \quad (3-8)$$

C_{ij} = correção para o efeito de soma para uma dada energia;

N_{ij} = número de contagens de absorção total para uma dada energia.

O fluxograma do programa COINCIG é apresentado na Figura 3-1.

Figura 3-1 – Fluxograma do programa COINCIG.



3.3 Eficiências total e de pico

Também foi desenvolvido um outro programa, denominado MCEFIC para o cálculo teórico das eficiências total e de pico em função da energia gama aplicando a técnica de Monte Carlo. O algoritmo utilizado no programa leva em conta as energias do gama e do fóton espalhado, a geometria do detector e a distância fonte-detector. O fluxograma do programa MCEFIC é apresentado na Figura 3-2.

Essa versão do programa considera a fonte puntiforme e posicionada coaxialmente com o detector. O sistema considerado no programa é apresentado de modo esquemático na Figura 3-3, e as dimensões do detector estão esquematizadas na Figura 3-4.

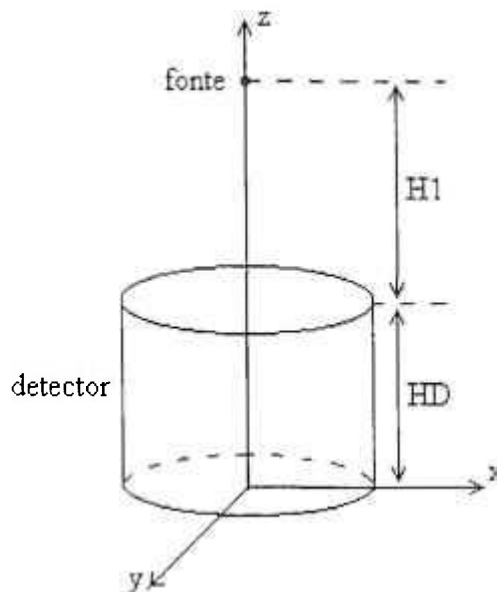
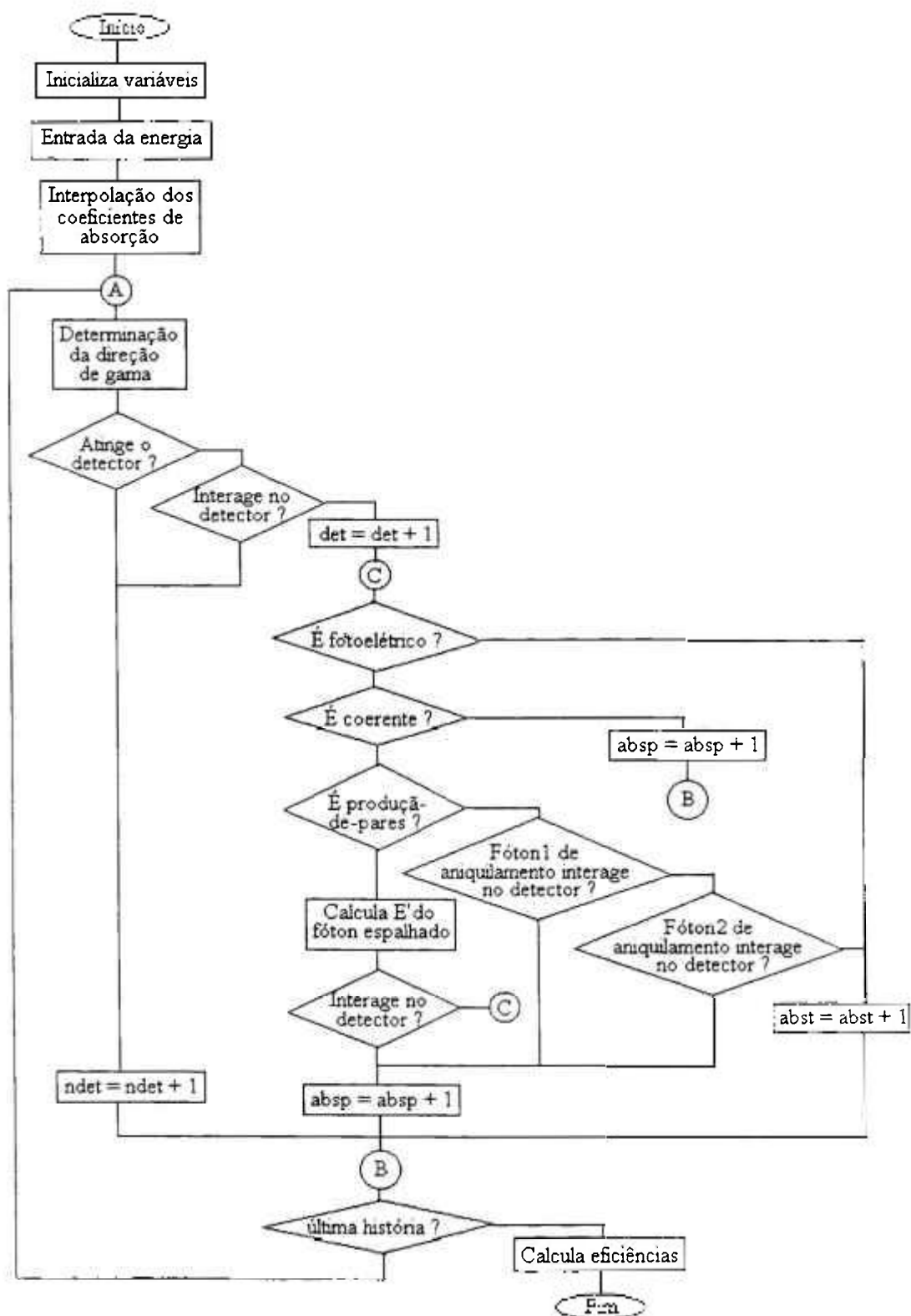


Figura 3-3 – Esquema do sistema considerado no programa MCEFIC

Figura 3-2 – Fluxograma do programa MCEFIC.



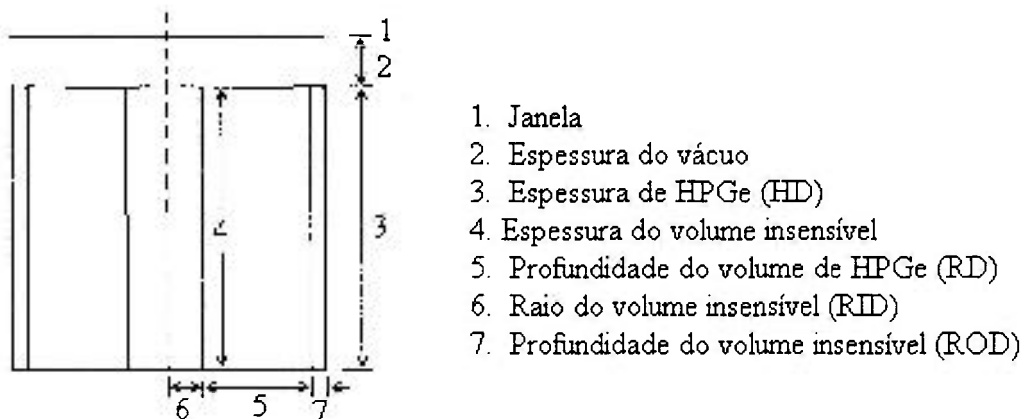


Figura 3-4 – Dimensões do detector HPGe (ou Ge(Li))

O programa denominado MCEFIC utiliza o método de Monte Carlo para determinar as eficiências total e de pico a partir dos seguintes parâmetros que são lidos pelo programa e utilizados como dados de entrada.

- Número de histórias
- Energia do raio gama inicial (EGI)
- Distância fonte-detector (H_1)
- Altura do detector (HD)
- Raio do detector (RD)
- Raio do volume insensível (RID)
- Espessura do volume insensível (ROD)
- Energia do fóton
- Coeficiente de absorção total.
- Coeficiente de absorção fotoelétrico.
- Coeficiente de absorção produção de pares.
- Coeficiente de absorção coerente.

O programa segue os seguintes passos para calcular as eficiências total e de pico.

- 1) Determina os valores dos coeficientes de absorção total (μ), para efeito Compton (σ), para o efeito fotoelétrico (τ), para a produção de pares (κ), e para o espalhamento coerente (σ_{coe}), para a energia inicial do fóton incidente.
- 2) Incrementa de uma unidade o número de histórias.
- 3) Geração da direção isotrópica para o raio gama dado pela equação

$$w = 2r - 1 \quad (3-9)$$

onde r é um número aleatório, e w obtido por meio do valor de r , estando compreendido no intervalo $]-1, 1[$.

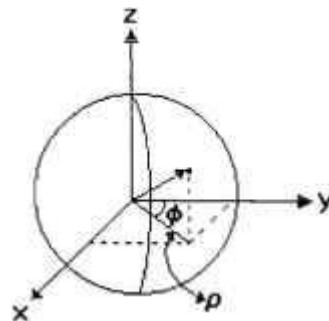


Figura 3-5

- 4) Determinação de ρ (Figura 3-5) que dá a projeção no plano u e v , pela relação:

$$\rho = \sqrt{1 - w^2} \quad (3-10)$$

e do ângulo ϕ (Figura 3-5) que dá a direção no plano uv , através de um número aleatório r , através da equação:

$$\phi = \pi(2r - 1) \quad (3-11)$$

e os valores de u e v são dados por:

$$u = \rho \cdot \cos \phi \quad (3-12)$$

$$v = \rho \cdot \sin \phi \quad (3-13)$$

5) Após a seleção da direção isotrópica, passa-se à determinação se a partícula incidente é emitida dentro do ângulo sólido do detector, de maneira a ser detectada, isto é, se $(w > w_{\min})$ e se $(w \leq w_{\max})$, Figura 3-6.

i) Se a condição acima for falsa é acrescentado uma unidade ao contador de fótons não detectados e o programa executa o passo 14.

ii) A condição sendo verdadeira é verificada a condição $(w > -1)$ e $(w \leq w_{\max})$.

a) Se for falso a condição, o contador de fótons não detectados é acrescentado uma unidade, e é executado o passo 14.

b) Se for verdadeira é calculado as coordenadas x e y no detector, isto é, em $Z = H_1$, sendo $x_0 = 0$, $y_0 = 0$, $z_0 = HD + H_1$ as coordenadas na fonte, e é executado o passo 6.

O ponto no detector é dado por:

$$x = x_0 + u \ell \quad (3-14)$$

$$y = y_0 + v \ell \quad (3-15)$$

onde $\ell = \frac{H_1}{w}$

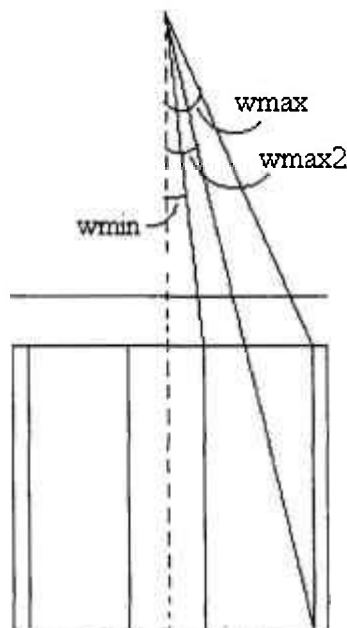


Figura 3-6 – Ângulos entre fonte e detector

- 6) Determina-se o alcance do fóton por $\ell = -\frac{\log(r)}{\mu}$, onde r é um número aleatório.
- 7) Calcula-se as novas coordenadas x e y através das relações:

$$x = x + u \cdot \ell \quad (3-16)$$

$$y = y + v \cdot \ell \quad (3-17)$$

- 8) Faz-se a verificação se o gama pode ser detectado ou não. Para poder ser considerado detectado o ponto no plano do detector, deverá estar dentro do raio do detector de modo que a condição de detecção é dada por

$$x^2 + y^2 \leq RD^2 \quad (\text{detectado}) \quad (3-18)$$

$$x^2 + y^2 > RD^2 \quad (\text{não detectado}) \quad (3-19)$$

- i) Se pode ser detectado o programa executa o passo 9.
 - ii) Se não pode ser detectado o contador de absorção parcial é incrementado de uma unidade, e executa-se o passo 14.
- 9) Determina-se a posição em z pela expressão:

$$z = z_0 - H_1 + \ell \cdot w \quad (3-20)$$

e verifica-se a condição de detecção pela desigualdade $z < 0$.

- i) Se verdadeiro o contador de não detectados é acrescentado de uma unidade.
- ii) Se for falso o contador de detectados é acrescentado de uma unidade, e executa-se o passo 10.

10) Havendo a interação, o programa sorteia um número aleatório r e compara com a

probabilidade de ocorrer o efeito Fotoelétrico pela relação $r < \frac{\tau}{\mu}$.

i) Se for fotoelétrico, é incrementado de uma unidade o contador de absorção total e o programa executa o passo 14.

11) Não sendo Fotoelétrico, o programa compara o número com a probabilidade do

Espalhamento Coerente, ou seja, $r < \frac{(\sigma_{\text{coe}} + \tau)}{\mu}$.

i) Se for colisão elástica é adicionado uma unidade ao contador de absorção parcial e executa-se o passo 14.

12) Se não for colisão elástica, e se a energia for maior que 1022,0 keV, compara-se o número com a probabilidade do processo de Produção de Pares pela desigualdade

$$r < \frac{\tau + \kappa}{\mu}.$$

i) Se for produção de pares, o programa verifica as condições de absorção do elétron e do pósitron, seguindo os passos 3, 4 e 6, e comparando se $l <$ distância máxima possível, e se é fotoelétrico ou não.

13) Se não ocorreu os processos acima, ocorre interação do gama no detector por Compton, e a energia do fóton espalhado é calculada de acordo com a seção de choque diferencial de Klein-Nishina (eq. 2-28), e o ângulo de espalhamento é calculado por:

$$\cos \theta = 1 + \frac{1}{E} - \frac{1}{E'} \quad (3-21)$$

onde

E é a energia do fóton incidente (em unidades de m_0c^2)

E' a energia do fóton espalhado.

A equação utilizada para determinar E' a partir de E relaciona-se com um número aleatório r , no intervalo $]0, 1[$, sendo dada por^[29]:

$$E' = \frac{E}{1 + sr + (2E - s)r^3} \quad (3-22)$$

onde s é calculado por:

$$s = \frac{E}{1 + 0,5625E} \quad (3-23)$$

sendo $E \leq 4$ (~ 2 MeV).

No intervalo $4 < E \leq 10$ deve ser adicionado o termo:

$$\frac{1}{2}(E - 4)r^2(1 - r)^2 \quad (3-24)$$

aumentando a energia do fóton espalhado. Este aumento reduz a probabilidade de que a nova interação seja por absorção fotoelétrica, que é um processo que diminui com a energia do fóton.

A direção é calculada através do passo 4, e em seguida são executados os passos 6, 7, 8, 10 e 11. O passo 13 é executado até que o fóton seja absorvido, ou escape do sistema ou a sua energia caia abaixo de 15 keV, situação em que o fóton é considerado totalmente absorvido.

14) É verificado se é a última história.

- i) Se for verdadeiro segue para o passo 15.
- ii) Se for falso volta a executar a sequência a partir do passo 2.

15) A eficiência é determinada por:

$$\varepsilon = \frac{\text{número de fótons detectados}}{\text{número de histórias}} \quad (3-25)$$

Foi efetuada uma comparação entre a distribuição de energias do fóton espalhado obtida por meio da expressão (3-22) e a obtida por meio da secção de choque diferencial dada pela relação (2-28). Houve bom acordo, dentro do intervalo de energias de interesse (0 a 3000 keV).

4. Resultados

Inicialmente, foi feita uma análise da qualidade do gerador de números aleatórios do QuickBASIC, fazendo-se a verificação da uniformidade na geração de números aleatórios. A relação entre o número de interações fotoelétricas (cont) e número total de interações detectadas por Compton ou fotoelétrica (det1) é fornecidas pelo programa. Esta relação deve ser próxima da relação $\frac{\tau}{\mu}$ [34], onde τ é o coeficiente de absorção fotoelétrica e μ o coeficiente de absorção total, tabelado, para o germânio. Os resultados obtidos estão na Tabela 4-1. Em outra simulação, foi verificado que o período do gerador (o número de números gerados até a primeira repetição) é da ordem de $1,5 \times 10^7$, valor considerado suficiente para os propósitos do presente trabalho.

Tabela 4-1– Resultado para a relação $\frac{\tau}{\mu}$ obtida por meio de números aleatórios.

Energia (MeV)	$\frac{\text{cont}}{\text{det1}}$	$\frac{\tau}{\mu}$
0,2	0,2832	0,2850
0,3	0,1265	0,1274
0,4	0,0668	0,0680
0,5	0,0421	0,0426
0,6	0,0290	0,0300
0,8	0,0174	0,0176
1,0	0,0123	0,0125
1,5	0,0068	0,0070
2,0	0,0053	0,0050
3,0	0,0031	0,0031

Experimentalmente foi utilizada uma fonte de ^{60}Co , com atividade conhecida, para determinar a eficiência total para cada energia e comparar com os resultados obtidos pelo programa, para a mesma geometria utilizada experimentalmente. O detector utilizado foi de HPGe com diâmetro de 2,60 cm, altura de 5,02 cm e eficiência, em relação ao NaI(Tl) de 20%. Foram geradas 10^5 histórias para determinar as eficiências e para calcular as correções. Foram obtidos os valores apresentados na Tabela 4-2.

Tabela 4-2– Eficiências teórica, experimental e correção para efeito de soma em cascata para o ^{60}Co . Os números entre parênteses correspondem à incerteza nos últimos dígitos.

Energia (keV)	Eficiência total		Correção
	Experimental	Teórica	
1173	0,0529	0,0466	1,0488 (32)
1332	0,0493	0,0450	1,0471 (32)

Também foram feitas simulações para o ^{88}Y , ^{131}I , ^{33}Ba e ^{152}Eu . Os resultados estão apresentados nas Tabelas 4-3, 4-4, 4-5, 4-6, 4-7 e comparados com os da literatura ^[3].

A comparação das eficiências de pico experimental e calculadas por Monte Carlo indicaram um valor sobre estimado no valor calculado em cerca de 40% para energias acima de 1 MeV. Esta diferença foi reduzida para valor um inferior a 15% alterando-se a equação (3-22) para:

$$E' = \frac{E}{1 + sr^4 + (2E - s)r^3} \quad (4-1)$$

A equação acima foi aplicada nos cálculos da correção para efeito soma descritos a seguir.

A primeira simulação apresentada é a do ^{88}Y , que desintegra por captura eletrônica, cujo esquema está representado na figura 4-1^[30].

Figura 4-1 – Esquema de decaimento do ^{88}Y .

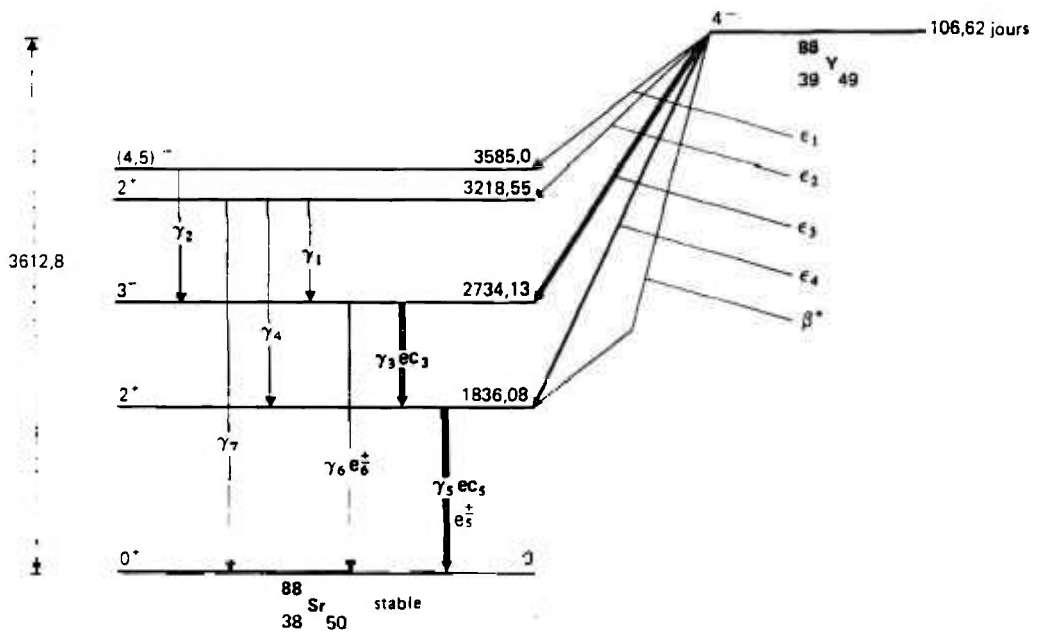


Tabela 4-3 – Eficiências total e de pico calculadas por Monte Carlo e correção para efeito de soma em cascata para o ^{88}Y . Os números entre parênteses correspondem à incerteza nos últimos dígitos.

Energia (keV)	Eficiência Total	Eficiência de Pico	Correção para Soma em Cascata				
			Coincidência dupla				Coincidência Tripla
			Sem Raio X		Com Raio X		Com Raio X
			Presente Trabalho	Literatura ^[3]	Presente Trabalho	Literatura ^[3]	Presente Trabalho
898,0499	0,13648	0,0386	0,8623(28)	0,8892	0,8114(32)	0,7856	0,8110(23)
913,0499	0,1108	0,02358			1,532(11)		1,5241(77)
1836,08	0,10046	0,01795	0,8638(27)	0,87062	0,7895(31)	0,76719	0,8412(19)

Outra situação é a simulação do ^{131}I que desintegra por β^- e tem conversão interna, cujo esquema de desintegração está ilustrado na figura 4-2 ^[30].

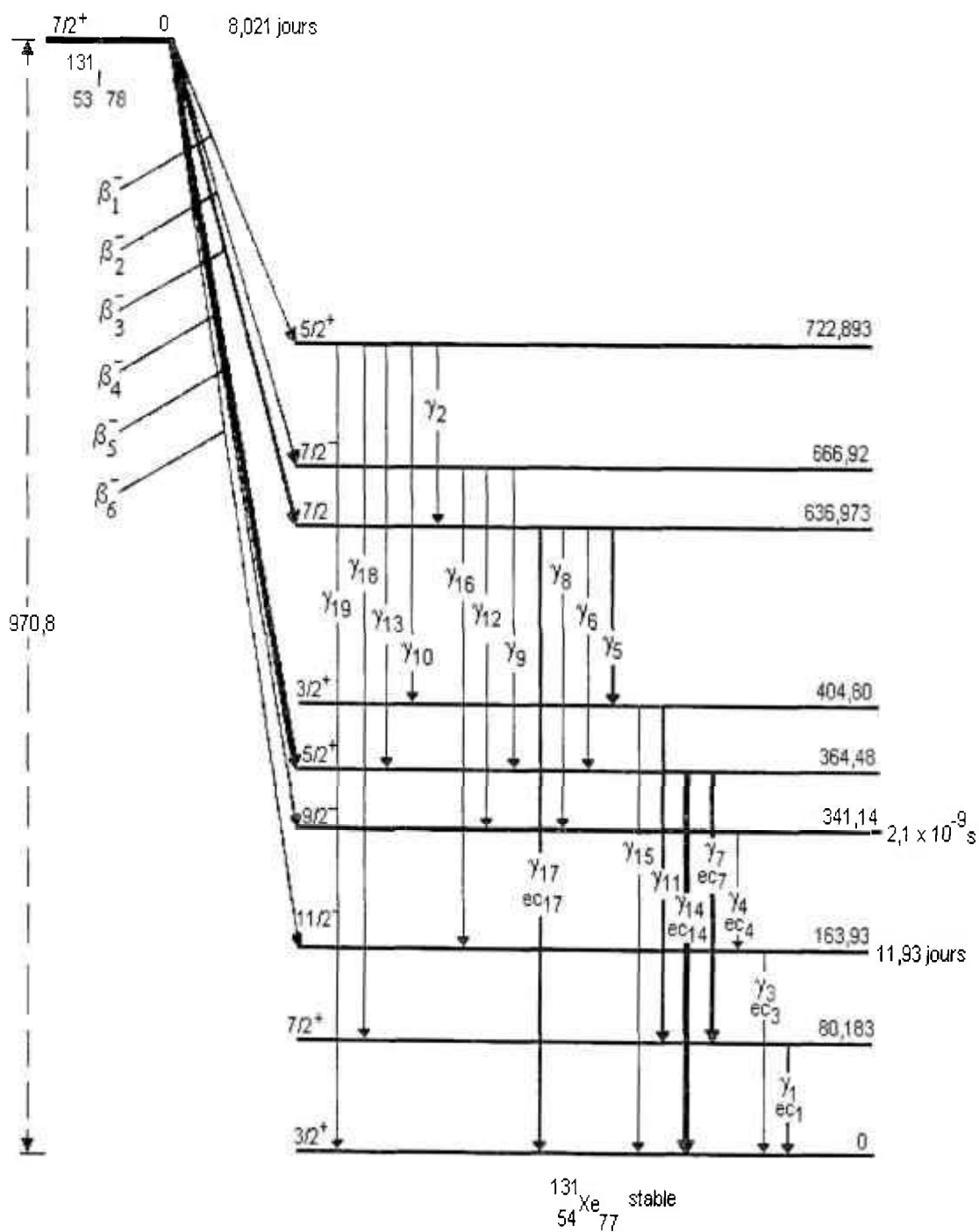
Figura 4-2 – Esquema de decaimento do ^{131}I .

Tabela 4-4– Eficiências total e de pico calculadas por Monte Carlo e correção para efeito de soma em cascata para o ^{131}I . Os números entre parênteses correspondem à incerteza nos últimos dígitos.

Energia (keV)	Eficiência Total	Eficiência de Pico	Correção para Soma em Cascata				
			Coincidência dupla				Coincidência Tripla
			Sem Raio X		Com Raio X		Com Raio X
			Presente Trabalho	Literatura ^[3]	Presente Trabalho	Literatura ^[3]	Presente Trabalho
80,193	0,1545	0,1299	0,9018 (24)		0,8943(56)		0,8950(79)
177,21	0,1220	0,0615	0,9223 (98)		0,805(36)		0,840(45)
284,287	0,1042	0,0271	0,9398 (27)	0,9399	0,8520(94)	0,8720	0,851(13)
325,78	0,1004	0,0205	0,900 (20)		0,758(68)		0,810(97)
364,48	0,0969	0,0153	1,00642(32)	1,0067	1,00673(74)	1,0067	1,0065(10)
502,99	0,0882	0,0090	1,074 (21)		0,957(39)		0,900(75)
636,973	0,0833	0,0061	1,00065 (55)	1,0005	1,0010(15)	1,0005	1,0010(22)
722,893	0,0817	0,0051	1,0085 (43)		1,009(11)		1,016(21)

Outra simulação é para o ^{133}Ba que desintegra por captura eletrônica e tem conversão interna, cujo esquema de desintegração foi representado na figura 2-12 ^[30].

Tabela 4-5– Eficiências total e de pico calculadas por Monte Carlo e correção para efeito de soma em cascata para o ^{133}Ba . Os números entre parênteses correspondem à incerteza nos últimos dígitos.

Energia (keV)	Eficiência Total	Eficiência Pico	Correção para Soma em Cascata				
			Coincidência dupla				Coincidência Tripla
			Sem Raio X		Com Raio X		Com Raio X
			Presente Trabalho	Literatura ^[3]	Presente Trabalho	Literatura ^[3]	Presente Trabalho
53,151	0,1607	0,1484	0,8639 (29)		0,812(11)		0,832(10)
79,615	0,1543	0,1294	0,8425 (28)		0,773(11)		0,8227(99)
80,998	0,1523	0,1268	0,89580 (63)	0,8961	0,8246(29)	0,8161	0,8542(26)
160,613	0,1261	0,0705	1,2889 (73)		1,026(11)		1,0031(40)
223,239	0,1124	0,0411	0,8727 (70)		0,772(47)		0,807(47)
276,39	0,1059	0,0284	0,8902 (33)	0,8861	0,798(15)	0,7311	0,818(13)
302,854	0,1013	0,0233	0,93196 (86)	0,9307	0,8047(95)	0,7805	0,8308(90)
356,005	0,0987	0,0176	0,95437 (91)	0,9404	0,8464(53)	0,8290	0,8453(53)
383,852	0,0951	0,0146	1,1457 (17)	1,1474	0,932(10)	1,0269	0,9440(93)

A simulação para o ^{152}Eu , leva em consideração o decaimento por β^- , captura eletrônica e conversão interna, cujos esquemas de desintegração estão ilustrados nas figuras 4-4 e 4-5 [30].

Figura 4-4 – Esquema de decaimento por β^- do ^{152}Eu .

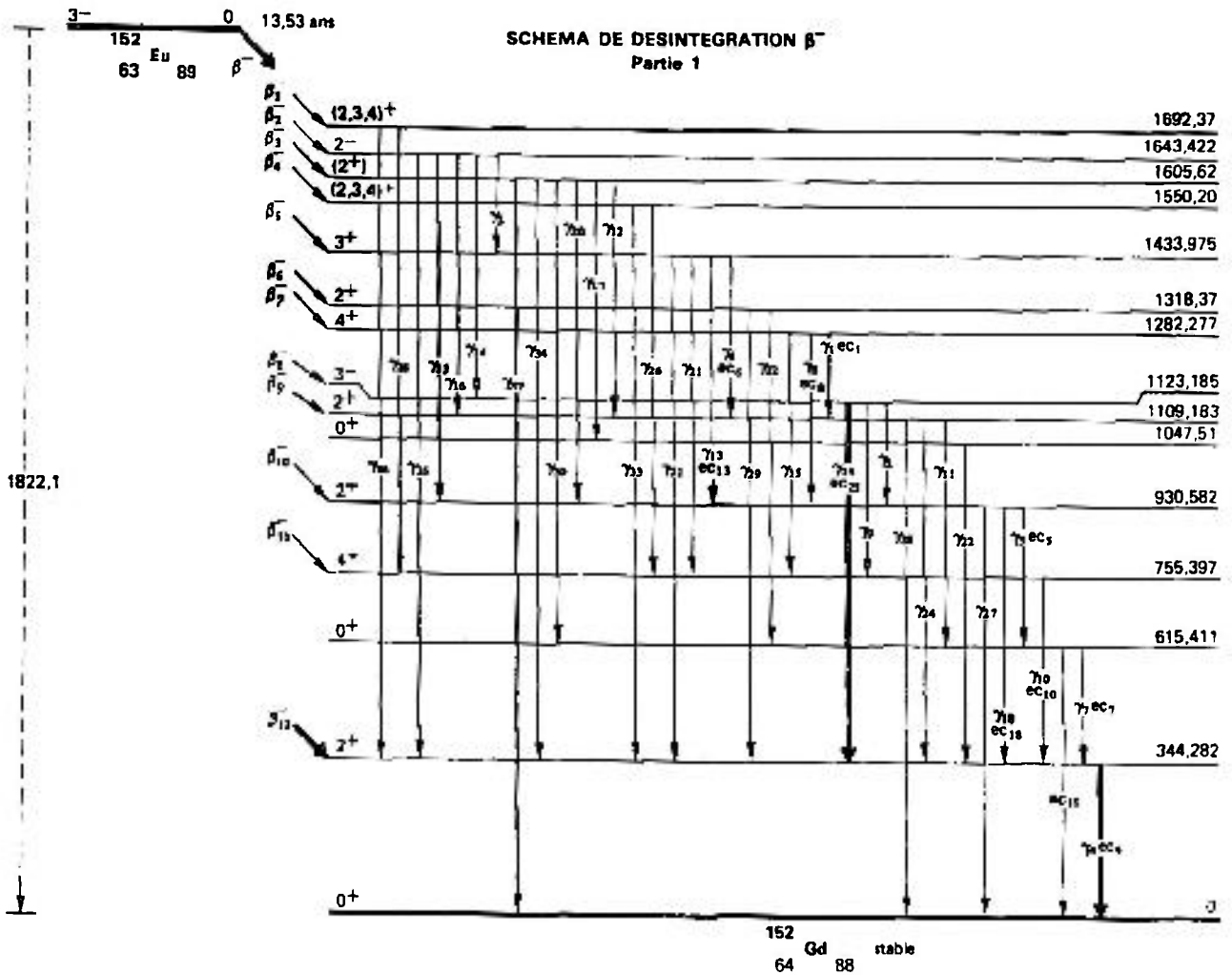


Tabela 4-6– Eficiências total e de pico calculadas por Monte Carlo e correção para efeito de soma em cascata para o ^{152}Eu , decaimento β^- . Os números entre parênteses correspondem à incerteza nos últimos dígitos.

Energia (keV)	Eficiência Total	Eficiência de Pico	Correção para Soma em Cascata				
			Coincidência dupla				Coincidência Tripla
			Sem Raio X		Com Raio X		Com Raio X
			Presente Trabalho	Literatura ^[3]	Presente Trabalho	Literatura ^[3]	Presente Trabalho
315,171	0,1869	0,1003	0,642(61)		0,636(61)		0,728(49)
324,792	0,1805	0,0944	0,807(41)		0,770(43)		0,792(40)
344,282	0,1771	0,0888	0,8892(17)	0,8924	0,8885(60)	0,8924	0,8932(17)
367,7881	0,1707	0,0804	0,713(16)		0,688(15)		0,744(15)
411,115	0,1673	0,0732	0,7532(97)		0,742(13)		0,7804(90)
503,393	0,1629	0,0628	0,740(42)		0,678(39)		0,744(40)
520,2369	0,1549	0,0556	0,727(74)		0,632(80)		0,746(82)
534,239	0,1592	0,0577	0,792(72)		0,786(64)		0,833(65)
586,2999	0,1525	0,0558	0,785(21)		0,761(29)		0,795(21)
678,578	0,1418	0,0442	0,724(30)		0,683(28)		0,731(28)
712,84	0,1453	0,047	0,722(49)		0,696(42)		0,770(47)
764,901	0,1413	0,0451	0,797(40)		0,754(55)		0,782(40)
778,9031	0,1447	0,0435	0,8375(42)	0,8363	0,8253(38)	0,8292	0,8309(43)
1089,693	0,1243	0,0328	0,863(12)		0,850(11)		0,866(12)
1109,183	0,1273	0,0351	1,0062(76)		1,073(44)		1,015(11)
1299,14	0,1195	0,0294	0,843(14)		0,833(13)		0,823(16)

Figura 4-5 – Esquema de decaimento por captura eletrônica do ¹⁵²Eu.

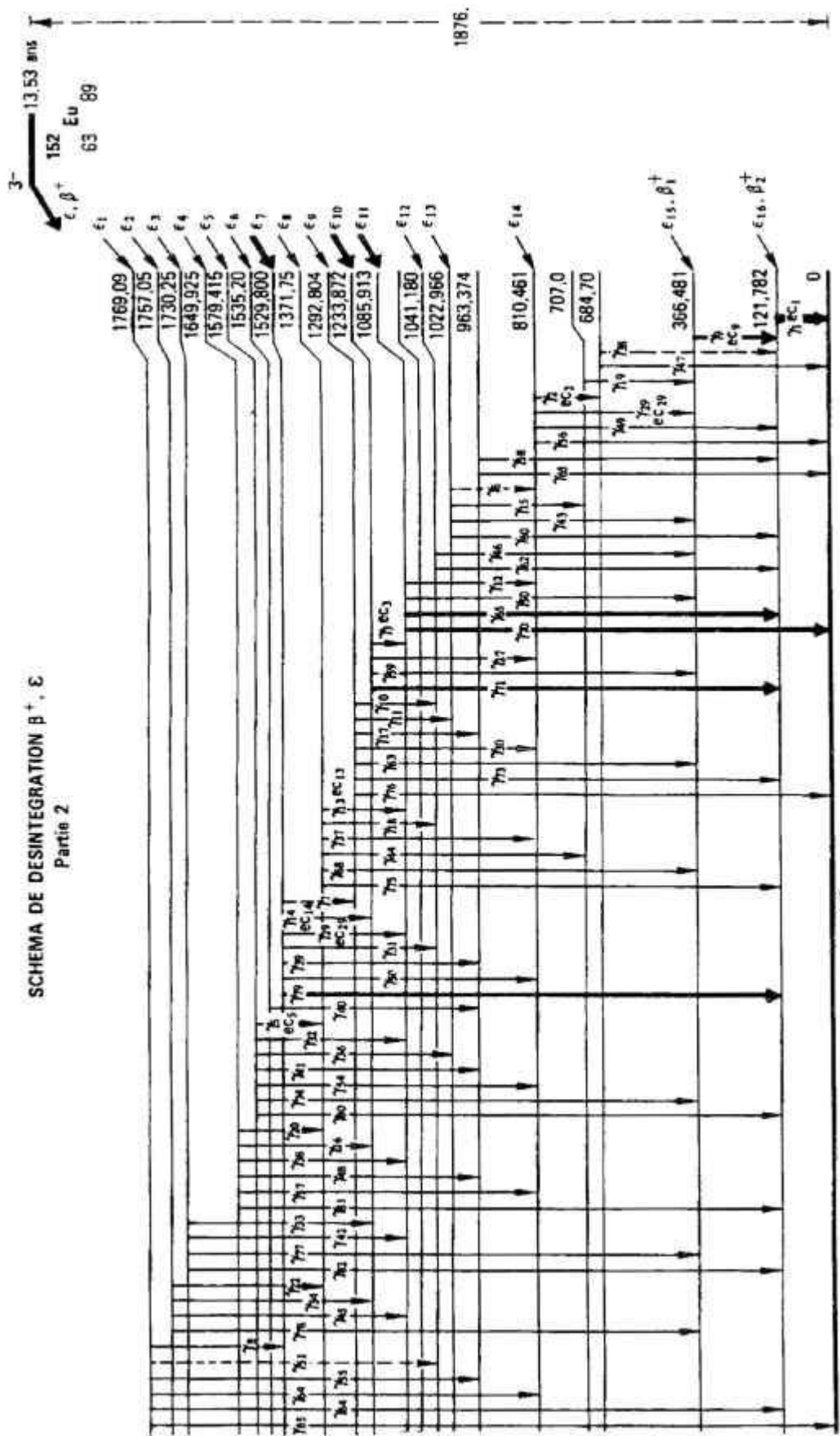


Tabela 4-7– Eficiências total e de pico calculadas por Monte Carlo e correção para efeito de soma em cascata para o ^{152}Eu , decaimento por captura eletrônica. Os números entre parênteses correspondem à incerteza nos últimos dígitos.

Energia (keV)	Eficiência Total	Eficiência de Pico	Correção para Soma em Cascata				
			Coincidência dupla				Coincidência Tripla
			Sem Raio X		Com Raio X		Com Raio X
			Presente Trabalho	Literatura ^[3]	Presente Trabalho	Literatura ^[3]	Presente Trabalho
121,782	0,2400	0,2124	0,8438(18)	0,8513	0,7154(29)	0,6944	0,7984(20)
147,959	0,2273	0,1873	0,778(64)		0,750(66)		0,768(65)
244,699	0,1892	0,1174	0,7723(52)	0,7672	0,6724(61)	0,5517	0,7562(54)
251,6239	0,1856	0,1080	0,754(62)		0,718(63)		0,755(71)
295,9281	0,1769	0,0968	0,764(26)		0,734(28)		0,752(28)
329,4299	0,1748	0,0893	0,875(34)		0,762(48)		0,770(48)
330,5699	0,1723	0,0868	0,718(63)		0,733(68)		0,754(66)
443,8871	0,1631	0,0686	0,809(11)		0,752(13)		0,760(12)
488,62	0,1546	0,063	0,743(34)		0,730(37)		0,753(35)
564,0121	0,1515	0,0534	0,802(32)		0,760(35)		0,761(35)
566,426	0,1552	0,0532	0,882(48)		0,790(58)		0,758(63)
656,485	0,1471	0,0471	0,775(61)		0,723(32)		0,754(62)
674,6991	0,1478	0,0489	0,707(64)		0,643(69)		0,753(56)
688,679	0,1446	0,0468	1,331(51)		0,831(35)		0,851(33)
719,3391	0,1424	0,0473	0,719(47)		0,730(46)		0,750(44)
719,432	0,1428	0,0456	0,782(37)		0,708(52)		0,752(44)
768,954	0,1424	0,0473	0,739(77)		0,725(96)		0,750(81)
810,461	0,1440	0,0454	1,175(57)		0,888(32)		0,859(55)
867,391	0,1375	0,0388	0,764(13)		0,735(14)		0,752(13)
919,3981	0,1343	0,0404	0,792(36)		0,593(53)		0,780(38)
926,323	0,1332	0,0372	0,789(50)		0,738(56)		0,753(57)

Tabela 4-7– Continuação

Energia (keV)	Eficiência Total	Eficiência de Pico	Correção para Soma em Cascata				
			Coincidência dupla				Coincidência Tripla
			Sem Raio X		Com Raio X		Com Raio X
			Presente Trabalho	Literatura ^[3]	Presente Trabalho	Literatura ^[3]	Presente Trabalho
963,374	0,1346	0,0338	0,848(43)		0,730(40)		0,826(43)
964,131	0,1325	0,0326	0,8774(55)	0,8704	0,7392(81)	0,6541	0,7572(79)
1005,269	0,1301	0,0347	0,773(35)		0,729(40)		0,751(37)
1085,913	0,1311	0,0349	1,1068(60)	1,1123	0,8813(82)	0,9346	0,8269(76)
1112,09	0,1286	0,0344	0,9223(44)	0,9177	0,7562(79)	0,6936	0,7627(79)
1212,934	0,1299	0,0354	0,774(24)		0,741(24)		0,752(25)
1408,018	0,1231	0,0279	0,8977(46)	0,8929	0,7566(72)	0,6794	0,7575(71)
1528,143	0,1153	0,0249	1,018(21)		0,791(59)		0,764(67)

Os resultados apresentados nas tabelas 4-3, 4-4, 4-5, 4-6 e 4-7 indicam excelente acordo com a literatura, quando não é considerado o raio-X. Os resultados considerando o raio-X divergem com os da literatura com diferenças da ordem de até 15%. As expressões apresentadas na literatura apresentam resultados satisfatórios para baixas eficiências de raio-X, e consideram somente coincidências duplas. Estas correções são válidas para as geometrias onde a eficiência de detecção para raio-X seja baixa.

5. CONCLUSÕES

A Tabela 4-1 indica que o gerador de números aleatórios do QuickBasic apresentou resultados satisfatórios para a utilização no presente trabalho.

Pelos resultados da Tabela 4-2 podemos verificar que a eficiência total fornecida pelo programa está coerente com a eficiência total experimental, dentro de aproximadamente 10%. Além disso, o algoritmo utilizado e o programa estão coerentes para a finalidade a que se destinam. Para o caso da eficiência para o pico de absorção total, é necessário um refinamento para aproximar mais os resultados da eficiência experimentais. Porém, os casos em que há absorção total dos dois gamas em cascata são raros e apenas nestes casos, um refinamento no cálculo torna-se necessário. Para os casos estudados, este efeito foi considerado pequeno.

Os resultados para o Y-88, I-131, Ba-133, e o Eu-152, apresentados nas Tabelas 4-3, 4-4, 4-5, 4-6 e 4-7, estão em excelente acordo com as expressões apresentadas na literatura, para os casos onde a eficiência para raio-X seja pequena. Para eficiências maiores, o presente trabalho apresenta correções mais confiáveis, pois possibilita a inclusão de coincidências triplas. Em casos especiais, onde ocorra captura eletrônica e gamas de baixa energia e onde as eficiências totais sejam muito elevadas ($\geq 40\%$), deve-se incluir coincidências quádruplas ou superiores, que podem ser facilmente incorporadas no algoritmo desenvolvido no presente trabalho. Entretanto, os tempos de processamento tornam-se substancialmente maiores. Apenas como referência, para esquemas de desintegração simples, o tempo de processamento em um computador do tipo Pentium II

400 é da ordem de alguns segundos. Para o caso do ^{152}Eu este tempo é da ordem de 10 a 20 horas.

Para radionuclídeos que decaem por emissão β^+ o cálculo da eficiência para o gama de aniquilação depende do ponto onde ocorre este processo. Para fontes radioativas onde possa ser colocado um absorvedor, de modo que a aniquilação ocorra em uma pequena região da fonte, o programa MCEFIC desenvolvido no presente trabalho poderá ser usado para o cálculo da eficiência. Para o cálculo da correção do efeito de soma em cascata, o gama de aniquilação é introduzido no programa COINCIG de modo semelhante ao Raio-X produzido no processo de captura eletrônica.

Para estados isoméricos, o trecho da cascata envolvido poderá ser calculado pelo programa COINCIG, como se fosse um outro radionuclídeo independente.

O método apresentado no presente trabalho calcula o efeito da correção de soma em cascata, simulando todo o processo de desintegração, desde sua origem no decaimento do núcleo-pai até a sua absorção parcial ou completa no interior do detector de HPGe ou Ge(Li).

Esta simulação, feita pelo Método de Monte Carlo, leva em conta todas as características do esquema de desintegração, calculando esta correção para *todos* os gamas envolvidos nas transições. Esta é uma característica que não ocorre com os métodos da literatura, os quais calculam esta correção para cada par de transições em particular, tornando o processo muito mais trabalhoso e difícil.

Os resultados obtidos no presente trabalho indicam que a exatidão na obtenção da correção está limitada apenas na incerteza nos valores das eficiências total e de pico, e na consideração de coincidências múltiplas. Os valores de eficiência total calculados teoricamente, na presente versão do programa, possuem uma incerteza da ordem de 10%, que é suficiente para maioria dos casos. A incerteza na eficiência de pico teórica, está variando de 10% (50 keV) a 15% (3 MeV). Este valor é suficiente para o cálculo da correção, uma vez que os eventos onde dois gamas em cascata sejam totalmente absorvidos são raros, principalmente em altas energias, onde a incerteza no cálculo é maior. Por outro lado, nos casos onde seja necessário uma exatidão maior, as eficiências poderão ser obtidas experimentalmente e incorporadas no programa COINCIG.

APÊNDICE 1

```

PROGRAMA COINCIG.BAS
DIM EG(80), AT(80), AP(80), G(30, 30), B(30), EGG(80)
DIM NE(30, 30), NDT(30, 30), NDP(30, 30), IG(80), EFT(80), EFP(80)
DIM FT(30, 30), FP(30, 30), ST(30, 30), SP(30, 30), CS(30, 30)
DIM ALFA(30, 30), EGL(80), ERROCS(30, 30), NDG(30, 30)
DIM EEG(80), CSS(80), ERRO(80), EEG2(80), CSS2(80), ERRO2(80)
VARIAVEIS
NG = NUMERO DE GAMAS

NUC$ = "C:\takeda2\MONTEC\NUCLY.DAT"
PAR$ = "C:\takeda2\MONTEC\PARAMETR.DAT"
EFIS$ = "C:\takeda2\MONTEC\EFICY.DAT"
OUT$ = "C:\takeda2\MONTEC\ESQUEMAY.OUT"
OPEN "I", #1, NUC$
OPEN "I", #3, PAR$
OPEN "I", #4, EFIS$
OPEN "O", #2, OUT$
RANDOMIZE TIMER
CLS
PRINT #2, DATE$, TIME$

REM
REM  LEITURA DE PARAMETROS
REM

INPUT #3, NPART
FOR I = 1 TO NPART
INPUT #3, AT(I)
PRINT #2, AT(I);
NEXT I
PRINT #2,
INPUT #3, NPARP
FOR I = 1 TO NPARP
INPUT #3, AP(I)
PRINT #2, AP(I);
NEXT I
PRINT #2,
INPUT #1, NIV, NHIST, FOT, ICAP, ITRIP
PRINT #2, NIV; NHIST, FOT, ICAP, ITRIP
NG = 30
FOR I = 1 TO NIV
INPUT #1, EG(I)
PRINT #2, EG(I);
NEXT I

```

```

PRINT #2,
FOR I = 1 TO NIV
FOR J = 1 TO NIV
NE(I, J) = 0
NDT(I, J) = 0
NDG(I, J) = 0
NDP(I, J) = 0
INPUT #1, G(I, J)
PRINT #2, G(I, J);
NEXT J
PRINT #2,
NEXT I
PRINT #2,

```

```

FOR I = 1 TO NIV
FOR J = 1 TO NIV
INPUT #1, ALFA(I, J)
PRINT #2, ALFA(I, J);
NEXT J
PRINT #2,
NEXT I
PRINT #2,
INPUT #4, NEGL
FOR I = 1 TO NEGL
INPUT #4, EGL(I), EFT(I), EFP(I)
EGL(I) = EGL(I) * 1000
PRINT #2, EGL(I); EFT(I); EFP(I)
NEXT I
PRINT #2,

```

```

FOR IH = 1 TO NHIST

```

```

INICIALIZA FLAGS

```

```

FOR I = 1 TO NIV
FOR J = 1 TO NIV
FT(I, J) = 0
FP(I, J) = 0
NEXT J
NEXT I

```

```

REM
REM  DEFINICAO DO K-ESIMO RAMO GAMA
REM

```

```

IGKI = 1
FOR K = 1 TO NG
GRAN = RND(1)
SG = 0
IGKI1 = IGKI + 1

```

```

FOR I = IGKI1 TO NIV
SG = SG + G(IGKI, I)
IF GRAN < SG THEN GOTO 200
NEXT I
200 IG(K) = I
    IGK = IG(K)
    EGG(K) = EG(IGKI) - EG(IGK)
    IF IGKI = 1 THEN EGG(K) = EG(1) - EG(2)
    EGGK = EGG(K)
    PEX = EFT(1)

    FOR IGG = 1 TO NEGL
    IF ABS(EGGK - EGL(IGG)) <= .001 THEN
    EFKT = EFT(IGG)
    EFKP = EFP(IGG)
    END IF
    NEXT IGG

    NE(IGKI, IGK) = NE(IGKI, IGK) + 1
    RRND = RND(1)
    IF RRND < FOT * (EFKT + PEX * ALFA(IGKI, IGK)) / (1 + ALFA(IGKI, IGK))
THEN
    FT(IGKI, IGK) = 1
    IF ICAP = 0 THEN FT(1, IGK) = 0
    NDT(IGKI, IGK) = NDT(IGKI, IGK) + 1
    END IF
    IF RRND < FOT * EFKT / (1 + ALFA(IGKI, IGK)) THEN
    NDG(IGKI, IGK) = NDG(IGKI, IGK) + 1

    IF RND(1) < EFKP / EFKT THEN
    NDP(IGKI, IGK) = NDP(IGKI, IGK) + 1
    FP(IGKI, IGK) = 1
    IF ICAP = 0 THEN FP(1, IGK) = 0
    ELSE GOTO 1000
    END IF
    ELSE GOTO 1000
    END IF
1000
    NIV1 = NIV - 1
    IF IGK > NIV1 THEN GOTO 2000
    IGKI = IGK
    NEXT K
2000
CONTABILIDADE DE FLAGS

FOR I = 1 TO NIV1
FOR J = 2 TO NIV

```



```

J1 = J + 1
FOR M = J TO NIV1
FOR L = J1 TO NIV
ST(I, J) = ST(I, J) - FT(I, J) * FT(M, L) / FOT
ST(M, L) = ST(M, L) - FT(I, J) * FT(M, L) / FOT
IF J = M THEN
  ST(I, L) = ST(I, L) + FT(I, J) * FT(M, L) / FOT
END IF
NEXT L
NEXT M
NEXT J
NEXT I

```

```

FOR I = 1 TO NIV1
FOR J = 2 TO NIV
J1 = J + 1
FOR M = J TO NIV1
FOR L = J1 TO NIV
SP(I, J) = SP(I, J) - (FP(I, J) * FT(M, L)) / FOT
SP(M, L) = SP(M, L) - (FT(I, J) * FP(M, L)) / FOT
IF J = M THEN
  SP(I, L) = SP(I, L) + (FP(I, J) * FP(M, L)) / FOT
END IF
IF ITRIP <> 1 THEN GOTO 5000
IF (FP(M, L) * FT(I, J)) = 1 THEN
  FP(M, L) = 0
  FT(I, J) = 0
END IF
IF (FP(I, J) * FT(M, L)) = 1 THEN
  FP(I, J) = 0
  FT(M, L) = 0
END IF

```

5000

```

IF (FP(I, J) * FP(M, L)) = 1 THEN
  FP(I, J) = 0
  FP(M, L) = 0
END IF
NEXT L
NEXT M
NEXT J
NEXT I

```

```

NEXT IH

```

```

PRINT #2,
FOR I = 1 TO NIV
FOR J = 1 TO NIV
PRINT #2, NE(I, J);

```

```
NEXT J
PRINT #2,
NEXT I
PRINT #2,
FOR I = 1 TO NIV
FOR J = 1 TO NIV
PRINT #2, NDT(I, J);
NEXT J
PRINT #2,
NEXT I
PRINT #2,
FOR I = 1 TO NIV
FOR J = 1 TO NIV
PRINT #2, NDG(I, J);
NEXT J
PRINT #2,
NEXT I
PRINT #2,
FOR I = 1 TO NIV
FOR J = 1 TO NIV
PRINT #2, NDP(I, J);
NEXT J
PRINT #2,
NEXT I
PRINT #2,
FOR I = 1 TO NIV
FOR J = 1 TO NIV
PRINT #2, ST(I, J);
NEXT J
PRINT #2,
NEXT I
PRINT #2,

FOR I = 1 TO NIV
FOR J = 1 TO NIV
PRINT #2, SP(I, J);
NEXT J
PRINT #2,
NEXT I

PRINT #2,
FOR I = 1 TO NIV
FOR J = 1 TO NIV
NS = NDP(I, J) + SP(I, J)
IF NDP(I, J) = 0 THEN
    CS(I, J) = 0
ELSE
    CS(I, J) = NS / NDP(I, J)
```

```

END IF
PRINT #2, CS(I, J);
NEXT J
PRINT #2,
NEXT I

PRINT #2,
K = 0
FOR I = 1 TO NIV
I1 = I + 1
FOR J = I1 TO NIV
IF G(I, J) > 0 THEN
  K = K + 1
  EEG(K) = EG(I) - EG(J)
  CSS(K) = CS(I, J)
  IF CSS = 0 THEN CSS = 1
  IF NDP(I, J) = 0 THEN
    ERROCS(I, J) = 0
  ELSE
    ERROCS(I, J) = SQR(ABS(SP(I, J))) / (NDP(I, J))
    ERRO(K) = ERROCS(I, J)
  END IF
  PRINT #2, "I="; I; "J="; J; "K="; K; "ENERGIA="; EEG(K); "CORRECAO=";
CS(I, J); "ERRO="; ERROCS(I, J)
END IF
NEXT J
NEXT I
PRINT #2, DATE$, TIME$,
CLOSE (1)
CLOSE (2)
CLOSE (4)
END

```

APÊNDICE 2

```

REM
REM  PROGRAMA MCEFIC.BAS
REM
CLEAR
CLS
DIM EG(23), MID(23), TAUD(23), PID(23), MIAL(23), NINT(75), COE(23)
DIM EGIN(75), LIN(75), KINT(75), FFOT(75), MINT(75)
DIM A(75), RR(75, 75), EGI(75)
PI = 3.14159265#
MOC2 = .5108

entr$ = "C:\takeda\montec\entrada2.dat"
coef$ = "C:\takeda\montec\72getabp.dat"
saida$ = "C:\takeda\montec\saida.out"
saida2$ = "C:\takeda\montec\saida2.out"

OPEN "I", #1, entr$
OPEN "I", #2, coef$
OPEN "O", #3, saida$
OPEN "O", #5, saida2$

PRINT #3, TIMES$
INPUT #1, NHIST, H1, HD, RD, RID, ROD, XAL
INPUT #1, NEG
PRINT #5, NEG
PRINT #5,
FOR IEGI = 1 TO NEG
INPUT #1, EGI(IEGI)
EGI(IEGI) = EGI(IEGI) / 1000
NEXT IEGI

PRINT #3, NHIST, H1, HD, RD, RID, ROD, XAL
FOR K = 1 TO 23
INPUT #2, EG(K), MID(K), TAUD(K), PID(K), MIAL(K), COE(K)
NEXT K

definicao de geometria de deteccao

IF H1 = 0 THEN H1 = .00001
wmax = -COS(ATN(RD / H1))
wmin = -COS(ATN(RID / H1))
wmax2 = -COS(ATN(RD / (H1 + HD)))

```

```

PRINT #3, "wmax = "; wmax; "wmin = "; wmin; "wmax2 = "; wmax2
R2MAX = (RD - ROD) * (RD - ROD)
R2MIN = RID * RID

```

```

FOR IEGI = 1 TO NEG

```

```

RANDOMIZE TIMER

```

```

Zera contadores

```

```

det = 0
nedt = 0
absp = 0
abst = 0
ID = 0
IDOUT = 0
par = 0
pp1 = 0
pp2 = 0
FOR h = 0 TO 30
  NINT(h) = 0
  EGIN(h) = 0
  LIN(h) = 0
  KINT(h) = 0
  MINT(h) = 0
NEXT h
abstP = 0
abspP = 0
total = 0
SLL = 0
LLCONT = 0

```

```

Interpola coeficientes para energia inicial

```

```

EG1 = EGI(IEGI)
PRINT #5, EG1,
EGIN(0) = EGIN(0) + EG1
PIDI = 0
GOSUB 1000
TAUDI1 = TAUDI
MIDI1 = MIDI
PIDI1 = PIDI
MIALI1 = MIALI
COEI1 = COEI
FFOTO1 = (TAUDI1 / MIDI1) * 1.1
FCOE1 = (COEI1 + TAUDI1) / MIDI1
PPAR1 = (TAUDI1 + PIDI1) / MIDI1
PRINT #3, "TAUDI1 = "; TAUDI1; "MIDI1 = "; MIDI1; "PIDI1 = "; PIDI1;
"MIALI1 = "; MIALI1

```

Posicao na fonte

```
X0 = 0
Y0 = 0
Z0 = H1 + HD
```

Geracao de historias

```
FOR J = 1 TO NHIST
```

```
  IINT = 2
  EG1 = EGI(IEGI)
```

Geracao de direcao isotropica

```
GOSUB 2000
W1 = W
u1 = U
v1 = V
```

Condicao de deteccao

```
IF (W1 > wmin AND W1 <= wmax) THEN
  IF (W1 > -1 AND W1 <= wmax) THEN
    ALCAL = -LOG(RND(1)) / MIALI1
    IF ALCAL < (XAL / W1) THEN GOTO 500
    ID = ID + 1
    X1 = X0 - (H1 / W1) * u1
    Y1 = Y0 - (H1 / W1) * v1
    ALC = -LOG(RND(1)) / MIDI1
    total = total + 1
    EGIN(1) = EGIN(1) + EG1
    LIN(1) = LIN(1) + ALC
    NINT(1) = NINT(1) + 1
    X1 = X1 + ALC * u1
    Y1 = Y1 + ALC * v1
    RR1 = X1 * X1 + Y1 * Y1
    IF (RR1 < RD * RD) THEN
      Z1 = Z0 - H1 + ALC * W1
      IF Z1 < 0 THEN
        nedt = nedt + 1
        GOTO 500
      END IF
      X11 = X1
      Y11 = Y1
      Z11 = Z1
      det = det + 1
```

Verifica condicao de espalhamento

```

r = RND(1)
total = total + 1
IF r < FFOTO1 THEN
  IF (RR1 > R2MIN) AND (RR1 < R2MAX) THEN
    abst = abst + 1
    FFOT(1) = FFOT(1) + FFOTO1
    KINT(1) = KINT(1) + 1
    GOTO 500
  ELSE
    absp = absp + 1
    GOTO 500
  END IF
END IF
IF r < FCOE1 THEN
  absp = absp + 1
  GOTO 500
END IF
IF r < PPAR1 THEN
  GOSUB 10000
  GOTO 500
END IF

```

Calcula energia e direcao espalhada

```

WHILE EG1 >= .015
  IF (RR1 < R2MIN) OR (RR1 > R2MAX) THEN
    absp = absp + 1
    GOTO 500
  END IF
  GOSUB 5000
  U = u2
  V = v2
  W = w2
  EEL = EG1 - EG2
  IF EEL > .01 THEN
    NEL = 1.265 - .0954 * LOG(EEL)
    REL = .412 * EEL ^ NEL
    REL = REL / 5.32
  ELSE
    REL = 0
  END IF
  R2MAX = (RD - REL) * (RD - REL)
  IF EG2 < .015 THEN EG2 = .015
  EG1 = EG2
  GOSUB 1000

```

```

FFOTO2 = (TAUDI / MIDI)
FCOE2 = (COEI + TAUDI) / MIDI
EGIN(IINT) = EGIN(IINT) + EG2
MINT(IINT) = MINT(IINT) + 1
NINT(IINT) = NINT(IINT) + 1
ALC = -LOG(RND(1)) / MIDI
LIN(IINT) = LIN(IINT) + ALC
total = total + 1
X1 = X1 + ALC * U
Y1 = Y1 + ALC * V
Z1 = Z1 + ALC * W
RR1 = X1 * X1 + Y1 * Y1
IF (RR1 < R2MIN) OR (RR1 > R2MAX) THEN
  absp = absp + 1
  GOTO 500
END IF
IF (RR1 > R2MIN) AND (RR1 < R2MAX) THEN
  IF Z1 < REL THEN
    absp = absp + 1
    GOTO 500
  END IF
  IF Z1 > HD - REL THEN
    absp = absp + 1
    GOTO 500
  END IF
  r = RND(1)
  IF r < FFOTO2 THEN
    total = total + 1
    abst = abst + 1
    KINT(IINT) = KINT(IINT) + 1
    FFOT(IINT) = FFOT(IINT) + FFOTO2
    GOTO 500
  END IF
  IF r < FCOE2 THEN
    absp = absp + 1
    GOTO 500
  END IF
  IINT = IINT + 1
ELSE
  absp = absp + 1
  GOTO 500
END IF
WEND
ELSE
  nedt = nedt + 1
  NINT(0) = NINT(0) + 1
END IF
ELSE

```



```

nedt = nedt + 1
IDOUT = IDOUT + 1
NINT(0) = NINT(0) + 1
END IF
500 NEXT J

PRINT #3, "EGI("; IEGI; ") = "; EGI(IEGI)
eficT = det / NHIST
seficT = SQR(det * (1 - det / NHIST)) / NHIST
efipico = (abst + abstP) / NHIST
seficP = SQR((abst + abstP) * (1 - (absp + abspP) / NHIST)) / NHIST
PRINT #3, "H1 = "; H1
PRINT #3, "RD = "; RD
PRINT #3, "HD = "; HD
PRINT #3, "eficiencia total = "; eficT
PRINT #3, "eficiencia de pico = "; efipico
PRINT #3, "desvio padrao total = "; seficT
PRINT #3, "desvio padrao pico = "; seficP
PRINT #3, "efipc = "; efipc, "aleatorios = "; total
PRINT #3, "abst = ", abst; "abstP = "; abstP; "pp1 = "; pp1
PRINT #3, "absp = ", absp; "abspP = "; abspP; "pp2 = "; pp2
PRINT #3, "det = ", det
PRINT #3, "nedt = ", nedt
PRINT #3, "ID = "; ID; "IDOUT = "; IDOUT; "par = "; par
PRINT #3, "LLCONT = "; LLCONT
FOR h = 0 TO 30
PRINT #3, "NINT("; h; ") = "; NINT(h)
PRINT #3, "KINT("; h; ") = "; KINT(h)
PRINT #3, "MINT("; h; ") = "; MINT(h)
IF NINT(h) = 0 THEN NINT(h) = 1
IF KINT(h) = 0 THEN KINT(h) = 1
IF MINT(h) = 0 THEN MINT(h) = 1
EGM = EGIN(h) / MINT(h)
IF h = 0 THEN EGM = EGIN(0)
IF h = 1 THEN EGM = EGIN(1) / NINT(1)
PRINT #3, "EGIN("; h; ") = "; EGM
PRINT #3, "LIN("; h; ") = "; LIN(h) / NINT(h)
PRINT #3, "FFOT("; h; ") = "; FFOT(h) / KINT(h)
NEXT h
PRINT #3,
PRINT #5, eficT, efipico
PRINT #5,
NEXT IEGI
PRINT #3, TIMES$
CLOSE #1, #2
CLOSE #3
CLOSE #5

END

```

```
1000 REM Interpolacao dos coeficientes de absorcao
```

```

FOR I = 1 TO 23
  IF EG(I) = EG1 THEN
    IEG = I
    MIDI = MID(I)
    TAUDI = TAUD(I)
    PIDI = PID(I)
    MIALI = MIAL(I)
    COEI = COE(I)
    RETURN
  ELSE
    IF EG(I) > EG1 AND EG(I - 1) < EG1 THEN
      IF (EG(I) - EG1) < (EG1 - EG(I - 1)) THEN
        IEG = I
      ELSE
        IEG = I - 1
      END IF
      MIDI = EXP(LOG(MID(I - 1)) + (((LOG(MID(I) / MID(I - 1))) /
(LOG(EG(I) / EG(I - 1))) * LOG(EG1 / EG(I - 1))))))
      TAUDI = EXP(LOG(TAUD(I - 1)) + (((LOG(TAUD(I) / TAUD(I - 1))) /
(LOG(EG(I) / EG(I - 1))) * LOG(EG1 / EG(I - 1))))))
      MIALI = EXP(LOG(MIAL(I - 1)) + (((LOG(MIAL(I) / MIAL(I - 1))) /
(LOG(EG(I) / EG(I - 1))) * LOG(EG1 / EG(I - 1))))))
      COEI = EXP(LOG(COE(I - 1)) + (((LOG(COE(I) / COE(I - 1))) /
(LOG(EG(I) / EG(I - 1))) * LOG(EG1 / EG(I - 1))))))
      IF EG1 > 1.0216 THEN
        PIDI = EXP(LOG(PID(I - 1)) + (((LOG(PID(I) / PID(I - 1))) / (LOG(EG(I)
/ EG(I - 1))) * LOG(EG1 / EG(I - 1))))))
      END IF
      RETURN
    END IF
  END IF
NEXT I

```

```
2000 REM Gera direcao isotropica
```

```

W = 2 * RND(1) - 1
total = total + 1
RO = SQR(1 - W * W)
IF RO = 0 THEN RO = .00001
FIP = PI * (2 * RND(1) - 1)
total = total + 1
U = RO * COS(FIP)
V = RO * SIN(FIP)
RETURN

```

5000 REM Calcula energia e direcao espalhada

```

EDL = EG1
ED = EDL / M0C2
s = ED / (1 + .5625 * ED)
r = RND(1)
total = total + 1
EL = ED / (1 + (s * r * r * r * r) + (2 * ED - s) * r * r * r)
IF ED > 4 THEN EL = EL + (ED - 4) * r * r * (1 - r) * (1 - r) / 2
A = 1 + (1 / ED) - (1 / EL)
IF A = 1 THEN A = .9999
PRINT A
delta = PI * (2 * RND(1) - 1)
PRINT delta
b = SQR(1 - A * A)
PRINT b
c = COS(delta)
IF delta < 0 THEN
  d = -SQR(1 - c * c)
ELSE
  d = SQR(1 - c * c)
END IF
u2 = b * c
v2 = b * d
w2 = A * W
EG2 = EL * M0C2
RETURN

```

10000 REM producao -de - pares

```

par = par + 1
EG1 = .5108
GOSUB 1000
FFOTOP = TAUDI / MIDI
ALC = -(1 / MIDI * LOG(RND(1)))
total = total + 1
GOSUB 2000
wp1 = W
wp2 = -W
up1 = U
vp1 = V
FIP2 = FIP + PI
up2 = RO * COS(FIP2)
vp2 = RO * SIN(FIP2)

```

Calcula distancia do Par1

W = wp1

```

U = up1
V = vp1
X1 = X11 + ALC * U
Y1 = Y11 + ALC * V
Z1 = Z11 + ALC * W
RR1 = X1 * X1 + Y1 * Y1

```

```

Condicoes de absorcao de Par1

```

```

IF (RR1 > R2MIN) AND (RR1 < R2MAX) THEN
  IF Z1 < 0 THEN
    absp = absp + 1
    GOTO 500
  END IF
  IF Z1 > HD THEN
    absp = absp + 1
    GOTO 500
  END IF
  r = RND(1)
  IF r < FFOTOP THEN

```

```

REM Vai Para Par2

```

```

  END IF
  IF r < FCOE2 THEN
    absp = absp + 1
    GOTO 500
  END IF

```

```

Verifica coordenadas de Par2

```

```

  W = wp2
  U = up2
  V = vp2

```

```

Condicoes de absorcao de Par2

```

```

  ALC = -(1 / MIDI * LOG(RND(1)))
  total = total + 1
  IF LL > ALC THEN
    IF RND(1) < FFOTOP THEN
      total = total + 1
      abstP = abstP + 1
      RETURN
    ELSE
      abspP = abspP + 1
      pp2 = pp2 + 1
      RETURN
    END IF
  END IF

```

```
        END IF
    ELSE
        abspP = abspP + 1
        pp2 = pp2 + 1
        RETURN
    END IF
ELSE
    abspP = abspP + 1
    pp1 = pp1 + 1
    RETURN
END IF
abspP = abspP + 1
pp1 = pp1 + 1
RETURN
```

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

1. LÉPY, M.C.; MOREL, J.; CHAUVENET, B. Correction des Partes de Comptage dues aux Coincidences gamma-gamma, gamma-X et X-X dans un Spectre de Photons. **Rapport CEA-R-5356**, 1986.
2. DEBERTIN, K; SCHÖTZIG, U. Coincidence Summing Corrections in Ge(Li)-Spectrometry at low Source-to-Detector Distances. **Nucl. Instrum. and Meth.**, Vol. 158, 471-477, 1979.
3. SCHIMA, F. J.; HOPPES, D. D. Tables for Cascade-Summing Corrections in Gamma-Ray Spectrometry. **Intern. J. Appl. Radiat. Isot.** Vol. 34:8 ,1109-1114, 1983.
4. MOREL, J.; CHAUVENET, B.; KADACHI, A. Coincidence-Summing Corrections in Gamma-Ray Spectrometry for Normalized Geometries. **Intern. J. Appl. Radiat. Isot.** Vol. 34:8 ,1115-1122, 1983.
5. McCALLUM, G. J.; COOTE, G. E. Influence of Source-Detector Distance on Relative Intensity and Angular Correlation Measurements with Ge(Li) Spectrometers. **Nucl. Instrum. and Methods**, Vol. 130, 189-197, 1975.
6. GEHRKE, R. J.; HELMER, R. G.; GREENWOOD, R. C. Precise Relative γ -Ray Intensities for Calibration of Ge Semiconductor Detectors. **Nucl. Instrum. and Methods**, Vol. 147, 405-423, 1977.
7. DIAS, M. S.; RENNER, C. Si(Li) Efficiency Curve for X-Ray Parallel Beam. **Nucl. Instrum. and Methods**, Vol. 193:91, 1982.

8. KOSKINAS, M. F.; DIAS, M. S. Coincidence System for Radionuclide Standardization using Surface Barrier Detectors. **Nuclear Instrum. and Methods in Phys. Research**, A280:327-331, 1989.
9. KOSKINAS, M. F.; DIAS, M. S. Measurement of the Gamma-Ray Probability per Decay of ^{31}Si . **Applied Radiat. Isot.** 44, 1209-1211 (1993).
10. DIAS, M. S.; KOSKINAS, M. F. Activity determination of ^{75}Se Radioactive Solution by Absolute Method. **Phys. Med. Biol.** 39a, 798 (1994).
11. DIAS, M. S.; KOSKINAS, M. F. Accidental Summing Correction in ^{125}I Activity Determination by the Sum-Peak Method. **Applied Radiat. Isot.** 46(9), 945-948 (1995).
12. FONSECA, K. A. KOSKINAS, M. F.; DIAS, M. S. Covariance methodology applied to uncertainties in ^{126}I disintegration rate measurements. **Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. A** 369, 437-440 (1996).
13. ATTIE, M. R. P.; KOSKINAS, M. F.; DIAS, M. S.; FONSECA, K. A. Disintegration rate measurements of Ga-67. **Applied Radiat. Isot.** ,vol. 49, n° 9-11, p 1175-1177, 1998.
14. FONSECA, K. A. KOSKINAS, M. F.; DIAS, M. S. Measurement of the gamma-ray probability per decay of I-126. **Applied Radiat. Isot.** ,vol. 49, n° 9-11, p 1373-1376, 1998.
15. RATEL, G. Activity concentration of a solution of ^{133}Ba : results on an international comparison. **Nucl. Instrum. and Methods in Phys. Research - A** 316, 318 (1992).
16. RATEL, G. International comparison of activity measurements of a solution of ^{109}Cd . **Nucl. Instrum. and Methods in Phys. Research - A** 345, 289 (1994).

17. RATEL, G. Activity concentration of a solution of ^{125}I : results on an international comparison. **Nucl. Instrum. and Methods in Phys. Research - A** 366, 183 (1995).
18. RATEL, G. Measurement of the activity concentration of a solution of ^{75}Se . **Nucl. Instrum. and Methods in Phys. Research - A** 339, 408 (1994).
19. LAGOUTINE, F.; COURSOL, N.; LEGRAND, J. **Table de Radionucléides**, Laboratoire de Métrologie des Rayonnements Ionisants, France, Commissariat à l'Énergie Atomique, 1984.
20. FONSECA, K. A. *Medida Absoluta da Atividade e Determinação da Taxa de Emissão Gama por Decaimento do ^{126}I* . São Paulo, 1997. Dissertação Mestrado – Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares.
21. KNOLL, G. F. **Radiation Detection and Measurement**. Second Edition. Singapore, Wiley, 1989.
22. EVANS, R. D.; DAVISSON, C. M. **The Atomic Nucleus**. New York, McGraw-Hill, 1955.
23. EVANS, R. D.; DAVISSON, C. M. **Gamma-Ray Absorption Coefficients. Review of Modern Physics**, vol. 24:2, april 1952.
24. DEBERTIN, K.; HELMER R. G. **Gamma and X-Ray Spectrometry with Semiconductor Detectors**. New York, Elsevier. 1988.
25. SÓBOL, I. M. *Método de Monte Carlo*. Moscou, Mir, 1976.
26. CARTER, L. L.; CASHWELL, E. D. *Particle Transport Simulation with the Monte Carlo Method*. U. S. Energy Research and Development Administration, U.S.A., 1975.

27. FOSHINA, M. *Uma Aplicação do Método de Monte Carlo à Física de Nêutrons*. São Paulo, 1970. Dissertação Mestrado – Escola Politécnica da Universidade de São Paulo.
28. VIEIRA, W. J. *Simulação do Espectro de Deposição de Energia de Raios Gama em Detectores de NaI utilizando o Método de Monte Carlo*. São Paulo, 1982. Dissertação Mestrado – Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares.
29. CASHWELL, E. D.; EVERETT, C. J. *A Practical Manual on the Monte Carlo Method for random walk problems*. New York, Pergamon, 1959.
30. BÉ, M. M.; COURSOL, N.; DUCHEMIN, B.; LAMÉ, J.; MORILLON, F. P.; BROWNE, E.; CHECHEV, V.; HELMER, R.; SCHÖNFELD, E.. **Table de Radionucléides**, Centre d'Etudes de Saclay, France, Commissariat à l'Énergie Atomique, 1999.
31. SIMÕES, D.; KOSKINAS, M. F.; DIAS, M. S. Measurement of the gamma-ray probability per decay of ^{42}K . **Applied Radiat. Isot.**, vol. 54, p 443-446, 2001.
32. FONSECA, K. A.; KOSKINAS, M. F.; DIAS, M. S. Desintegration rate measurement of a ^{192}Ir solution. **Applied Radiat. Isot.**, vol. 54, p 14-145, 2001.
33. RUBEN, S. **Manual de Elementos Químicos**. São Paulo, Edgard Blücher, 1970.
34. BERGER, M. J.; HUBELL, J. H.; SELTZER, S. M.; COURSEY, J. S.; ZUCKER, D. S. **XCOM, Photon Cross Section Database (version 1.2)**, (NBSIR 87-3597). [Online]. Available from Internet: <<http://physics.nist.gov/xcom>>. National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, 1987.
35. RODRIGUES, E. C.; PIERONI, R. R. *Física*. São Paulo, Clássico-Científica, 1957.
36. NATIONAL COUNCIL ON RADIATION PROTECTION AND MEASUREMENTS. **Handbook of radioactivity measurements procedures**. Report nº 58, nov. 1978.