

AVALIAÇÃO DO PROGRAMA VISPECT NA ANÁLISE DE ESPECTROS DE RAIOS GAMA DE AMOSTRAS GEOLÓGICAS ATIVADAS COM NÊUTRONS

Luiz Roberto N. da Silva e Ana Maria G. Figueiredo

IPEN/CNEN-SP
Caixa Postal 11049
05422-970, São Paulo, SP, Brasil
e-mail: lrsilva@net.ipen.br
e-mail: grafigue@ih0.ipen.br

RESUMO

Foi feita uma avaliação do programa de análise de espectros de raios gama VISPECT com dois outros programas comerciais de análise, o OMNIGAM da EG&G ORTEC e o SAMPO 90 da CANBERRA. Com esse objetivo, foram criados espectros artificiais de raios gama, que apresentam picos de diferentes tamanhos em quatro regiões diferentes do espectro, além de dupletos com várias distâncias entre as centróides e dupletos formados por picos de diferentes intensidades. Além disso, analisou-se o material geológico de referência GS-N (IWG - GIT), também com o objetivo de avaliar por comparação o comportamento do programa na análise de amostras reais.

INTRODUÇÃO

Os espectros de raios gama gerados por ativação com nêutrons de material geológico são geralmente bastante complexos, devido à grande quantidade de elementos presentes neste tipo de matriz.

Existem, atualmente, programas de computação eficientes para a análise de espectros de raios gama, capazes de resolver esses espectros, localizando os picos e calculando suas áreas.

Um grande número de laboratórios envolvidos em medidas de radiação usam computadores pessoais e "softwares" comerciais para a análise de espectros gama, mas uma tendência que se tem observado ultimamente, é o uso de programas desenvolvidos nos próprios laboratórios para atender às suas próprias necessidades, considerando os equipamentos de medida disponíveis e o tipo de análise realizada.

Como exemplo desta tendência, podemos citar os programas CINA [1], o NADA [2] e mais, recentemente, o DECHAOS [3].

A maioria desses programas deve realizar funções parecidas, como: fazer a calibração em energia do espectro, detectar picos e resolver dupletos de diferentes intensidades, ou seja analisar espectros complexos, e fornecer um boletim de análises com os resultados. Nesse sentido, foi feita a comparação de vários programas comerciais de análise de espectros, mostrando as diferenças entre eles [4,5]. Outros autores, compararam seu programa

a um programa comercial, conhecido e utilizado, como forma de avaliar as suas qualidades e limitações [3].

A Supervisão de Radioquímica tem utilizado, para a análise de espectros, o programa VISPECT, em linguagem Turbo Basic, desenvolvido pelo Prof. Denis Piccot, do Laboratório Pierre Sue, do Centro de Estudos Nucleares de Saclay, em uma visita científica realizada ao IPEN em 1989.

O objetivo do presente trabalho foi realizar uma avaliação qualitativa deste programa, em relação aos "softwares" comerciais OMNIGAM (EG&G ORTEC) e SAMPO 90 (CANBERRA) por meio de seu desempenho na detecção de espectros artificiais criados especialmente para isso, e na análise de materiais geológicos.

Os Programas. O programa OMNIGAM analisa os espectros de raios gama, gerados no formato de estrutura de arquivo, padrão CHN. Este padrão de arquivo é gerado pelo programa de aquisição de dados MAESTRO II da EG&G ORTEC para equipamentos de espectrometria gama.

A filosofia do método de análise é baseado em um tipo orientado pela biblioteca. Esse método proporciona uma ótima sensibilidade do ponto de vista de se encontrar baixos níveis de atividade. Na análise de amostras desconhecidas usa-se o modo de procura de picos sem biblioteca, através do algoritmo de procura desenvolvido por Mariscotti e que utiliza o método da derivada segunda para localizar os picos [6].

O programa SAMPO 90 analisa arquivos de espectros no formato padrão MCA. Aqui, também, o padrão do arquivo se deve ao fornecedor do programa de aquisição de dados, que no caso foi o S100 da CANBERRA.

A localização dos picos é feita através de um algoritmo que analisa a derivada segunda dos dados [7].

O programa VISPECT, analisa tanto arquivos no formato CHN quanto no formato MCA, bastando para isso informar a origem do espectro. O formato do arquivo varia de acordo com a origem do programa de aquisição de dados

Na localização dos picos, este programa, utiliza um método de correlação onde um sinal desejado, no caso um pico, é selecionado a partir de uma outra forma complexa, que seria o próprio espectro. Quando o valor da correlação ultrapassa o valor da sensibilidade escolhida, encontra-se um pico [8].

Em todos os programas, a calibração em energia e em resolução pode ter seus parâmetros armazenados em arquivo, de forma que se pode ter calibrações para vários equipamentos e geometrias diferentes.

PARTE EXPERIMENTAL

Os Espectros Artificiais. Alguns autores discutem que não há um modo ideal de se gerar espectros de raios gama para avaliação de "softwares". A natureza estatística da localização dos picos, a forma, a área e o "background" (BG) devem ser levados em consideração [5].

Os espectros artificiais utilizados foram elaborados a partir de um BG real contado por 12 horas em um espectrômetro de raios gama. Esse espectro foi analisado pelos três programas, para se ter certeza de que as regiões onde os picos seriam adicionados não apresentavam picos já detectáveis devido às radiações de fundo, ou a flutuações do BG que pudessem indicar a presença de um falso pico. Caso houvesse a detecção, o BG seria alterado de forma a não conter picos válidos nas regiões de interesse.

O sistema foi calibrado em energia e em resolução com os espectros de fontes radioativas puntiformes de Am-241, Co-57, Cs-137 e Co-60.

Para o teste de detecção de picos simples de diferentes intensidades, foram escolhidas regiões de interesse tendo como base as energias de 59,6; 121,9; 661,6 e 1332,4 keV, que são emitidas pelos radioisótopos escolhidos para a elaboração da calibração. Os canais centrais correspondem às energias citadas e mais 6 canais de cada lado destes formam as 4 regiões de interesse, cada uma com um total de 13 canais.

A área da região formada por esses 13 canais é a soma de suas contagens, e a raiz quadrada deste valor corresponde aproximadamente ao desvio padrão dessa área. Como esta área faz parte de um espectro de BG, foi chamada de desvio padrão do BG. Esse valor foi utilizado como valor base para o cálculo das áreas dos picos com formato de gaussianas que foram adicionados ao espectro do BG. Essas áreas variaram de um mínimo de 1 a um máximo de 200 vezes o desvio padrão do BG. Esse cálculo foi feito para cada uma das quatro regiões escolhidas.

A detecção de dupletos de intensidades iguais, foi testada com separações entre suas centróides de um número de canais que variou de 2 a 20.

Foram criados também dupletos formados por picos com intensidades diferentes, com uma separação fixa de 8 canais, com o pico menos intenso, uma vez situado do lado de menor energia do pico predominante e outra do lado de maior energia. A razão das áreas entre os picos cobriram a faixa desde 1:1 até 1:20 e 20:1.

A adição artificial de picos ao espectro foi feita com o programa SIMSPEC [9]. Esse programa, que trabalha no formato MCA, elabora as gaussianas e já dá a opção de acrescentá-las ao espectro, bastando para isso, entrar os dados do espectro e os dados do pico que se deseja adicionar.

RESULTADOS E DISCUSSÃO

O BG e os espectros modificados foram analisados usando-se o nível de sensibilidade padrão dos programas.

As incertezas foram obtidas com o valor de um desvio padrão, isto é, com um nível de confiança de 68% nos três programas.

Utilizando a calibração em energia do sistema, determinaram-se os canais das regiões de interesse e a partir destes foram calculadas as áreas e os desvios do BG, como mostra a TABELA 1. Baseado nesses resultados escolheram-se as áreas que seriam adicionadas ao BG para o teste de detecção. Para a energia de 121,9 keV, aumentou-se o valor para 50 contagens porque este pico está numa região onde o BG é mais alto, isto quer dizer, que se levarmos em consideração um canal a mais ou a menos no cálculo da área, o desvio seria sensivelmente diferente. Nas demais energias os resultados foram apenas arredondados para o maior inteiro.

TABELA 1. Áreas e Respective Desvios das 4 Regiões Onde os Picos Foram Adicionados.

Energia (keV)	Canal		Área (contag.)	Des. Padrão σ (contagens)
	Inic.	Final		
59,6	230	242	1369	37
121,9	480	492	2265	47,6
661,6	2642	2654	251	15,8
1332,4	5322	5334	87	9,3

Com isso, foi possível elaborar todos os espectros para a comparação. Os resultados obtidos para o teste de detecção de picos estão na TABELA 2.

O erro nessas tabelas é a incerteza em porcentagem, que aparece nos resultados dos programas, multiplicada pela razão da área encontrada pela área esperada, conforme critério utilizado por Decker e Sanderson [5].

Os resultados do programa VISPECT mostram, que quando as áreas dos picos são iguais ou maiores que 3σ , os erros não são maiores que 0,5.

Os resultados com o uso do programa OMNIGAM mostram que, os menores picos detectáveis sem a

utilização da biblioteca começam a ocorrer quando os picos possuem uma área entre 4 e 5 σ . Entretanto, quando se utiliza a biblioteca, o programa tenta calcular a área líquida e a centróide do pico naquele canal que possui energia similar à encontrada na biblioteca.

Os valores dos erros pelo programa OMNIGAM deram sempre maiores que os dos demais programas, porque o modo do cálculo da incerteza é diferente, então mesmo quando os resultados deram mais próximos do esperado o erro deu maior.

Os resultados obtidos pelo programa SAMPO 90, apresentaram menores erros que os demais programas, em toda a faixa estudada.

Os resultados mostram que o programa VISPECT detecta com erros aceitáveis os picos com áreas maiores que 3 σ acima do BG e com energias maiores que 100 keV. Os resultados encontrados para as áreas dos picos de 59,6 keV foram acima das esperadas se comparados com os resultados obtidos na detecção dos demais picos, apesar desses resultados terem sido muito próximo aos alcançados pelo programa OMNIGAM, que dessa forma apresenta a mesma dificuldade. Essa dificuldade deve estar relacionada com o perfil do BG, nessa região, que é crescente.

Outro fato que nos mostra que o VISPECT atua melhor em energias mais altas, é o resultado deste se comparado com o SAMPO 90. O SAMPO 90 se destacou na baixa energia, onde os demais mostraram dificuldades para a análise. Quando o pico analisado foi o de 121,9 keV, o VISPECT passa a dar resultados comparáveis aos obtidos pelo SAMPO 90.

É importante ressaltar que um dos critérios utilizados na determinação do limite de detecção em medidas de radioatividade é considerar a menor concentração do elemento a ser determinado como o valor correspondente a 3 vezes o desvio padrão da área medida para a radiação de fundo (BG) na região de interesse no espectro de raios gama.

Isso demonstra que, na análise de picos de intensidade baixa (mesma ordem de grandeza do BG), o programa VISPECT se comporta melhor do que o OMNIGAM em todas as faixas de energia estudadas.

Comparando-o ao SAMPO 90, o VISPECT não vai bem na baixa energia, mas seu comportamento melhora com o aumento da energia e apresenta melhores resultados na análise do pico de maior energia.

Dupletos. Primeiramente os espectros de dupletos tinham intensidades iguais, a área utilizada em cada pico foi fixa e igual a 100 σ , o que significa áreas de 3700, 5000, 1600 e 1000 contagens, respectivamente para ambos os picos em cada duplete. Essa escolha ocorreu devido ao desempenho dos programas na detecção dos picos isolados e porque o que se quer testar é a detecção de picos bem definidos que formam os dupletos em função do número de canais que separam as centróides desses picos entre 0,5 e 5,0 keV.

Os erros, corresponderam ao erro relativo, que foi calculado como a diferença entre o valor esperado e o valor calculado, dividido pelo valor esperado e dado o resultado em porcentagem, por demonstrar mais claramente as diferenças na qualidade dos resultados.

TABELA 2. Resultados da Análise dos Espectros Artificiais Obtidos pelos Três Programas.

Ener. (keV)	Área Esp.	Visp.	Erro (%)	Omn.	Erro (%)	Sampo 90	Erro (%)
59,6	37	39	1,12	113#	2,83	50,19	0,25
121,9	50	-	-	27#	0,91	26,2	0,91
661,6	16	29	1,37	102#	2,61	33,09	1,03
1332,4	10	13	1,06	58#	2,49	44	0,45
59,6	74	63	0,60	150#	1,42	82,93	0,14
121,9	100	53	0,51	178#	1,25	89,58	0,24
661,6	32	41	0,70	118#	1,31	52,91	0,56
1332,4	20	23	0,68	55#	1,45	52,6	0,61
59,6	111	193	0,49	187#	0,95	137,1	0,33
121,9	150	151	0,38	228#	0,83	124,4	0,27
661,6	48	57	0,48	127#	0,89	67,18	0,38
1332,4	30	31	0,47	78#	0,84	54,53	0,46
59,6	148	228	0,37	224#	0,71	175,4	0,25
121,9	200	196	0,29	259	0,56	182,9	0,24
661,6	64	73	0,36	141#	0,67	85,18	0,30
1332,4	40	45	0,38	88#	0,64	61,03	0,35
59,6	185	265	0,30	261	0,57	213,7	0,21
121,9	250	178	0,27	309	0,45	237	0,20
661,6	80	87	0,30	157	0,54	103,7	0,25
1332,4	50	55	0,31	85#	0,59	70,55	0,29
59,6	370	447	0,15	446	0,29	385,1	0,05
121,9	500	516	0,14	556	0,23	491,9	0,11
661,6	160	193	0,17	226	0,28	181,4	0,13
1332,4	100	99	0,17	135#	0,30	125,5	0,17
59,6	740	817	0,08	816	0,15	768	0,03
121,9	1000	1019	0,08	1053	0,12	967,3	0,06
661,6	320	350	0,10	411	0,18	327,6	0,09
1332,4	200	243	0,10	241#	0,19	232,3	0,10

#. Picos não encontrados quando a procura foi feita sem o uso de biblioteca.

Os resultados obtidos estão na TABELA 3. Para uma separação de 0,5 keV, o programa SAMPO 90 detectou melhor os dois dupletos de menor energia, enquanto o OMNIGAM detectou melhor os dois dupletos de maior energia. Na situação com 1,0 keV de separação, o SAMPO 90 teve um rendimento similar ao do OMNIGAM para os dupletos de maior energia, enquanto o OMNIGAM não detectou tão bem os dupletos de energia mais baixa.

O VISPECT apenas encontrou os dois dupletos de menor energia, com a situação de 1,5 keV de separação.

Todos os dupletos com 2 keV de separação foram encontrados pelos três programas. Os dupletos detectados nessa situação apresentaram erros menores que 10% para os três programas.

Para as separações de 3,0 a 5,0 keV os programas não apresentaram dificuldades na detecção dos dupletos.

Os picos que formam os dupletos, nos testes de intensidades diferentes (TABELA 4), tinham inicialmente a mesma área (200 σ), depois foram usados as seguintes razões entre as áreas: 8:10; 6:10; 4:10; 2:10; 1:10; 0,5:10, no segundo teste e o inverso no terceiro.

O programa OMNIGAM utilizou bibliotecas com as 8 energias e conseguiu encontrar todos os dupletos independentemente da separação e das intensidades. O mesmo ocorreu para o SAMPO 90, sendo que em algumas situações foi necessário marcar manualmente a posição da centróide dos picos, para que este efetuasse os cálculos das áreas.

TABELA 3. Dupletos com Crescente Número de Canais de Separação entre as Centróides, Analisados pelos Três Programas.

Energia (keV)	Vispect	Erro (%)	Sampo 90	Erro (%)	Omnigam	Erro (%)
59,1	ND	-	4009*	8,35	2171	41,32
59,6			3516*	4,97	5261	42,19
121,4	ND	-	4738*	5,24	6513	30,26
121,9			5251*	5,02	3450	31,00
661,1	ND	-	1158*	27,63	1261	21,19
661,6			2041*	27,56	1921	20,06
1331,9	ND	-	1366*	36,60	1010	1,00
1332,4			683,7*	31,63	1059	5,90
58,6	ND	-	3853*	4,14	3317	10,35
59,6			3753*	1,43	4083	10,35
120,9	ND	-	5044*	0,88	5456	9,12
121,9			4916*	1,68	4526	9,48
660,6	ND	-	1532*	4,25	1488	7,00
661,6			1656*	3,50	1737	8,56
1331,4	ND	-	999,7*	0,03	1024	2,40
1332,4			1043	4,30	1028	2,80
58,1	3888	5,08	3741	1,11	3603	2,62
59,6	3776	2,05	3746	1,24	3756	1,51
120,4	5064	1,28	4993	0,14	5143	2,86
121,9	4916	1,68	4912	1,76	4889	2,22
660,1	ND	-	1587*	0,81	1575	1,56
661,6			1587*	0,81	1673	4,56
1330,9	ND	-	1031*	3,10	1027	2,70
1332,4			1021*	2,10	1019	1,90
57,6	3916	5,84	3750	1,35	3681	0,51
59,6	3765	1,76	3775	2,00	3708	0,22
119,9	5083	1,66	4952	0,96	5052	1,04
121,9	4976	0,48	4904	1,92	4978	0,44
659,6	1667	4,19	1588	0,75	1629	1,81
661,6	1581	1,19	1579	1,31	1656	3,50
1330,4	1092	9,20	1025*	2,50	1029	2,90
1332,4	934	6,60	1015*	1,50	1034	3,40

*. Picos adicionados manualmente.

ND. Detectou o duplete como um único pico ou não detectou nada.

Os três programas conseguiram detectar todos os dupletos até uma razão de 6:10 ou 10:6.

Quando o pico menos intenso estava do lado de maior energia no duplete, o programa OMNIGAM apresentou erros bem maiores do que na situação inversa para detectar o pico da região de 660 keV.

Já o VISPECT conseguiu um rendimento melhor nesta situação, para os picos do duplete da região de 59 keV, com erros menores do que a situação inversa na mesma razão, mas apresentou dificuldade para resolver os picos do duplete da região de 1332 keV, a partir de uma relação tanto de 10:4, como de 4:10.

O que ficou claro também, é que conforme o pico menos intenso diminuiu o VISPECT foi deixando de detectar os dupletos. Isto ocorreu a partir do duplete de maior para o duplete de menor energia, nos dois casos. Da mesma forma que no SAMPO 90, foi preciso colocar a posição da centróide.

O SAMPO 90 apresentou erros maiores que 10% apenas nas situações mais difíceis onde a razão era de 10:0,5 e 0,5:10. Mesmo nos casos em que as centróides

foram adicionadas manualmente, independentemente da energia em que se trabalhou, os erros foram sempre inferiores a 10%.

O programa OMNIGAM apresentou bons resultados com o uso da biblioteca, o que pode ser considerado uma limitação do programa, no caso de se analisar amostras desconhecidas.

Amostra Geológica. Utilizou-se nessa avaliação o material geológico de referência GS-N (IWG - GIT), como amostra. Foi realizada a análise de 16 elementos traço, utilizando-se o procedimento normalmente empregado na Supervisão de Radioquímica para a análise de material geológico [10], por meio da análise por ativação com nêutrons comparativa.

Os valores de concentração obtidos por meio dos três programas estão na Fig 1, onde a concentração dos elementos foi normalizada em relação aos valores certificados [11].

Foram apresentados primeiramente os elementos que fazem parte do grupo das terras raras, depois o tório e, na sequência, os outros elementos de interesse em ordem crescente de número atômico.

Pode-se perceber que o programa OMNIGAM apresentou os maiores desvios, enquanto o SAMPO 90 apresentou a menor dispersão dos dados.

No geral o comportamento dos três programas foi parecido. Observa-se que, os três programas apresentaram problemas na determinação do Lu, obtendo-se valores acima do esperado no caso do VISPECT e abaixo nos demais. Isso se deve às diferentes rotinas de solução para os diferentes problemas e a diferentes critérios de interpretação, que são inerentes a cada programa.

Pode-se destacar o comportamento do SAMPO 90 na avaliação do Tb, que foi excelente, já que este era um pico pequeno à esquerda de um pico muito grande de Sc, e do VISPECT na detecção do Cs, já que os outros programas tiveram dificuldades na sua quantificação.

CONCLUSÃO

O programa VISPECT detectou bem os picos simples a partir de uma área 3 vezes maior que o desvio padrão do BG, e também apresentou bom desempenho na detecção de dupletos, a partir de uma separação de 2,0 keV entre as centróides, com boa exatidão (erros relativos inferiores a 10%), demonstrando suas boas possibilidades na análise e espectros complexos.

Nos dupletos de intensidades diferentes o VISPECT mostrou que é inferior aos programas comerciais usados, o que é normal, devido ao seu menor desenvolvimento.

No tratamento de uma amostra real, o VISPECT se comportou bem e teve resultados semelhantes aos demais programas, indicando a obtenção de bons resultados analíticos. Isso mostra que ele tem qualidades, pois é o mais simples de utilizar dos três, mas precisa de melhoramentos nas rotinas de tratamento de dupletos.

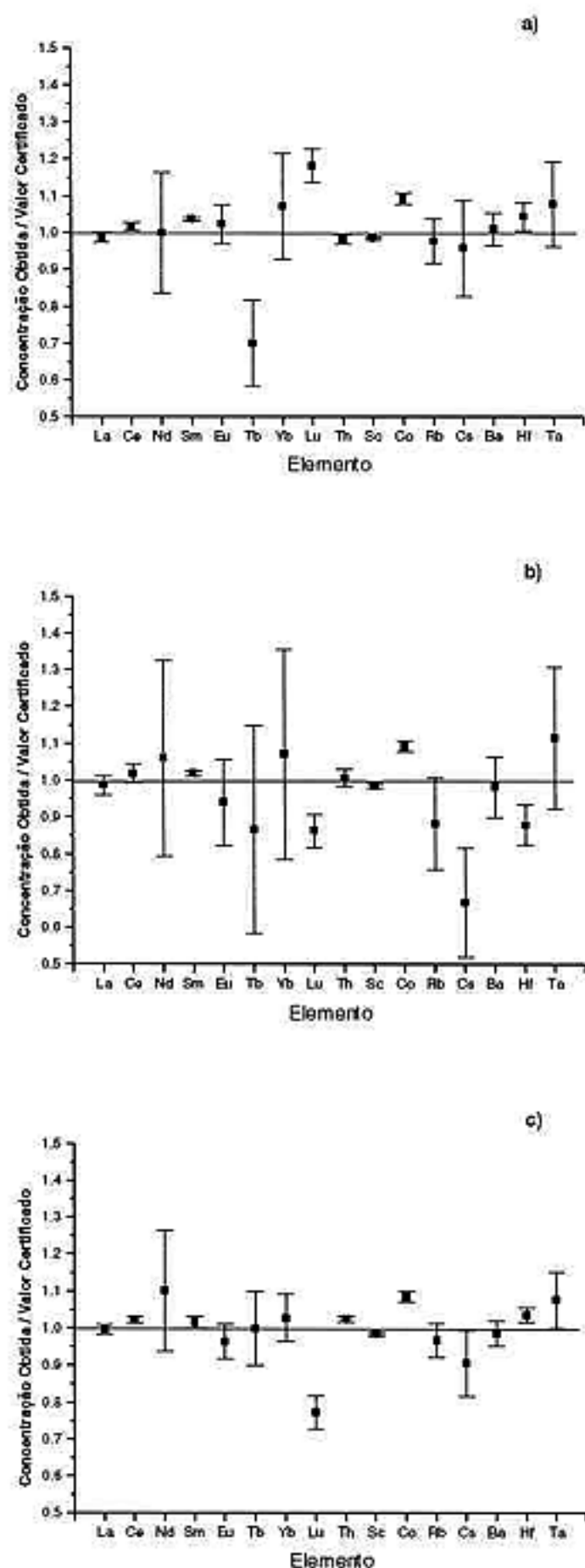
TABELA 4. Dupletos com o Pico Menos Intenso Localizado do Lado de Menor e de Maior Energia em Relação ao Pico Predominante, Analisados pelos Três Programas.

Energia	Razão	Área Esperada	Vispect	Erro Rel. (%)	Sampo 90	Erro Rel. (%)	Omnigam	Erro Rel. (%)
57,6	4:10	2960	3191	7,80	2988	0,95	2928	1,08
59,6		7400	7397	0,04	7509	1,47	7348	0,70
119,9		4000	4071	1,78	3942	1,45	4032	0,80
121,9		10000	9960	0,40	9895	1,05	9885	1,15
659,6		1280	1342	4,84	1266	1,09	1287	0,55
661,6		3200	3176	0,75	3194	0,19	3240	1,25
1330,4		800	ND	-	819,4*	2,42	820	2,50
1132,4		2000			2023*	1,15	2044	2,20
57,6	2:10	1480	1719	16,15	1485	0,34	1444	2,43
59,6		7400	7392	0,11	7502	1,38	7343	0,77
119,9		2000	2064	3,20	1964	1,80	2039	1,95
121,9		10000	9964	0,36	9908	0,92	9889	1,11
659,6		640	ND	-	643,5*	0,55	667	4,22
661,6		3200			3187*	0,41	3227	0,84
1330,4		400	ND	-	407*	1,75	404	1,00
1132,4		2000			2027*	1,35	2056	2,80
57,6	1:10	740	980	32,43	747,2	0,97	726	1,89
59,6		7400	7383	0,23	7507	1,45	7340	0,81
119,9		1000	1070	7,00	975,8	2,42	1049	4,90
121,9		10000	9961	0,39	9913	0,87	9894	1,06
659,6		320	ND	-	315,3*	1,47	355	10,94
661,6		3200			3193*	0,22	3232	1,00
1330,4		200	ND	-	212,4*	6,20	190	5,00
1132,4		2000			2063*	3,15	2066	3,30
57,6	0,5:10	370	ND	-	372,9	0,78	350	5,41
59,6		7400			7504	1,41	7339	0,82
119,9		500	ND	-	506,8	1,36	570	14,00
121,9		10000			9936	0,64	9901	0,99
659,6		160	ND	-	173*	8,13	195	21,88
661,6		3200			3218*	0,56	3230	0,94
1330,4		100	ND	-	111,5*	11,50	89	11,00
1132,4		2000			2054*	2,70	2069	3,45
57,6	10:4	7400	7638	3,22	7474	1,00	7325	1,01
59,6		2960	3024	2,16	3022	2,09	2973	0,44
119,9		10000	10093	0,93	9937	0,63	10004	0,04
121,9		4000	3976	0,60	3889	2,78	3970	0,75
659,6		3200	3224	0,75	3203	0,09	3207	0,22
661,6		1280	1302	1,72	1276	0,31	1366	6,72
1330,4		2000	1128	43,60	2016*	0,80	2054	2,70
1132,4		800	1682	110,25	812,3*	1,54	812	1,50
57,6	10:2	7400	7635	3,18	7476	1,03	7328	0,97
59,6		1480	1557	5,20	1512	2,16	1489	0,61
119,9		10000	10096	0,96	9945	0,55	10007	0,07
121,9		2000	2010	0,50	1911	4,45	1994	0,30
659,6		3200	ND	-	3185*	0,47	3205	0,16
661,6		640			636,1*	0,61	748	16,88
1330,4		2000	ND	-	2025*	1,25	2059	2,95
1132,4		400			401,2*	0,30	397	0,75
57,6	10:1	7400	7624	3,03	7475	1,01	7328	0,97
59,6		740	829	12,03	772,9	4,45	772	4,32
119,9		10000	10091	0,91	9938	0,62	10006	0,06
121,9		1000	1016	1,60	917,9	8,21	1007	0,70
659,6		3200	ND	-	3184*	0,50	3202	0,06
661,6		320			315,8*	1,31	419	30,94
1330,4		2000	ND	-	2038*	1,90	2061	3,05
1132,4		200			189,5*	5,25	185	7,50
57,6	10:0,5	7400	ND	-	7526*	1,70	7329	0,96
59,6		370			409,9*	10,78	396	7,03
119,9		10000	ND	-	9951*	0,49	10005	0,05
121,9		500			442*	11,60	518	3,60
659,6		3200	ND	-	3177*	0,72	3206	0,19
661,6		160			158,3*	1,06	264	65,00
1330,4		2000	ND	-	2020*	1,00	2058	2,90
1132,4		100			93,49*	6,51	85	15,00

*. Dupletos adicionados manualmente.

ND. Detectou o dupleto como um único pico.

Figura 1. Diagramas Normalizados das Concentrações Obtidas em Relação ao Valor Certificado. a) VISPECT, b) OMNIGAM, c) SAMPO 90.



REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] NELSON, G.W. CINA - A program for complete instrumental neutron activation analysis with a PC-type minicomputer. *J. Radioanal. Nucl. Chem., Articles*, v.114, n.2, p.231-236, 1987.
- [2] LANDSBERGER, S., CIZEK, W.D., DOMAGALA, P. NADA: A versatile PC based program for neutron

activation analysis. *J. Radioanal. Nucl. Chem., Articles*, v.160, n.1, p.277-287, 1992.

[3] ALEKLETT, J., LILJENZIN, O., LOVELAND, W. DECHAOS - A program for automatic or interactive analysis of gamma-ray spectra. *J. Radioanal. Nucl. Chem., Articles*, v.193, n.1, p.187-194, 1995.

[4] SANDERSON, C.G. An evaluation of commercial IBM PC software for the analysis of low-level environmental gamma-ray spectra. *Environment International*, v.14, p.379-384, 1988.

[5] DECKER, K.M., SANDERSON, C.G. A reevaluation of commercial IBM PC software for the analysis of low-level environmental gamma-ray spectra. *Appl. Radiat. Isot.*, v.43, n.1/2, p.323-337, 1992.

[6] MARISCOTTI, M.A. A method for automatic identification of peaks in the presence of background and its application to spectrum analysis. *Nucl. Instr. and Meth.*, v.50, p.309-320, 1967.

[7] ROUTTI, J.T., PRUSSIN, S.G. Photopeak method for the computer analysis of gamma-ray spectra from semiconductor detectors. *Nucl. Instr. and Meth.*, v.72, p.125-142, 1969.

[8] BLACK, W.W. Application of correlation techniques to isolate structure in experimental data. *Nucl. Instr. and Meth.*, v.71, p.317-327, 1969.

[9] BERNASCONI, G. Comunicação Pessoal, 1995.

[10] VASCONCELLOS, M.B.A. et. al. Neutron activation analysis applied to the study of the composition of brasilian geological samples. *Geochim. Brasil.*, v.4(2), p.125-137, 1990.

[11] GOVINDARAJU, K. 1995 Working values with confidence limits for twenty-six CRPG, ANRT and IWG - GIT geostandards. *Geostandards Newsletter*, v.19, 1995.

ABSTRACT

A comparative evaluation of gamma-ray analysis software VISPECT in relation to two commercial gamma-ray analysis software packages OMNIGAM (EG&G ORTEC) and SAMPO 90 (CANBERRA) was performed. For this evaluation, artificial gamma-ray spectra were created, presenting peaks of different intensities and located at different regions of the spectrum. Multiplet peaks with equal and different intensities, but with different channel separations were also created. Neutron activation analysis of the reference material GS-N (IWG-GIT) was also performed, aiming the evaluation of the program VISPECT in the analysis of a geological sample.