UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
FFCLRP - DEPARTAMENTO DE FÍSICA

MICHEL STEPHANI DA SILVA GOBO

**Métodos Analíticos e Experimentais para
Determinação do Número Atômico Efetivo**

Ribeirão Preto - SP
2017

MICHEL STEPHANI DA SILVA GOBO

**Métodos Analíticos e Experimentais para
Determinação do Número Atômico Efetivo**

Dissertação apresentada à Faculdade de Filosofia, Ciências e Letras de Ribeirão Preto da Universidade de São Paulo, como parte das exigências para a obtenção do título de Mestre em Ciências.

Área de Concentração:

Física aplicada à Medicina e Biologia.

Orientador:

Martin Eduardo Poletti.

Versão corrigida

Versão original disponível na FFCLRP-

Ribeirão Preto - SP

2017

Autorizo a reprodução e divulgação total ou parcial deste trabalho, por qualquer meio convencional ou eletrônico, para fins de estudo e pesquisa, desde que citada a fonte.

FICHA CATALOGRÁFICA

Gobo, Michel Stephani da Silva

Métodos Analíticos e Experimentais para Determinação do Número Atômico Efetivo / Michel Stephani da Silva Gobo; orientador Martin Eduardo Poletti. Ribeirão Preto - SP, 2017.

76 f.:il.

Dissertação (Mestrado - Programa de Pós-graduação em Física aplicada à Medicina e Biologia) - Faculdade de Filosofia, Ciências e Letras de Ribeirão Preto da Universidade de São Paulo, 2017.

1. Número Atômico Efetivo . 2. Coeficiente de atenuação mássico. 3. Razão Rayleigh/Compton.

Nome: GOBO, Michel Stephani da Silva

Título: Métodos Analíticos e Experimentais para Determinação do Número Atômico Efetivo

Dissertação apresentada à Faculdade de Filosofia, Ciências e Letras de Ribeirão Preto da Universidade de São Paulo, como parte das exigências para a obtenção do título de Mestre em Ciências.

Aprovado em: ____/____/____.

Banca Examinadora

Prof. Dr. : _____ Instituição: _____

Julgamento: _____ Assinatura: _____

Prof. Dr. : _____ Instituição: _____

Julgamento: _____ Assinatura: _____

Prof. Dr. : _____ Instituição: _____

Julgamento: _____ Assinatura: _____

Agradecimentos

A Deus,

Aos meus pais pelas oportunidades, condições e amor que me deram,

Ao Professor Dr. Martin Eduardo Poletti pela orientação neste trabalho,

Ao Técnico Eldereis, que contribuiu para que este trabalho fosse possível,

Ao Matheus que me ajudou com as medidas experimentais,

Aos amigos de laboratório Leonardo, Alex, Júlio, Jéssica, Beatriz, Pedro,

Guilherme, Rodrigo, Daiane e Marcela, pelo apoio

Aos funcionários da secretaria do Departamento de Física,

Resumo

GOBO, Michel S S **Métodos Analíticos e Experimentais para Determinação do Número Atômico Efetivo**. 2017. 76 f. Dissertação (Mestrado - Programa de Pós-graduação em Física aplicada à Medicina e Biologia) - Faculdade de Filosofia, Ciências e Letras de Ribeirão Preto, Universidade de São Paulo, Ribeirão Preto - SP, 2017.

Um material composto, formado pela mistura de muitos elementos, pode ser convenientemente descrito, a partir da forma com que a radiação interage com ele, como se fosse formado por um elemento fictício com um número atômico efetivo, Z_{ef} . Esse parâmetro não é constante com a energia, entretanto, pode ser considerado uma ferramenta útil na caracterização de tecidos biológicos, materiais tecido-equivalentes e dosímetros. Várias formas de determinação do Z_{ef} foram propostas na literatura, dentre elas, estão os métodos de atenuação que se baseiam no uso da seção de choque total (obtido a partir do coeficiente de atenuação linear massico (μ/ρ)) e os métodos de espalhamento que se baseiam na razão entre as seções de choque diferenciais Rayleigh e Compton. Neste trabalho, buscou-se estudar métodos de obter Z_{ef} de forma experimental e teórica, por dois métodos (atenuação e espalhamento) para completar lacunas existentes na literatura. No método de atenuação, foi utilizado o (μ/ρ) como grandeza de interação que, no conhecimento dos autores, ainda não foi utilizado. Para isso, arranjos experimentais que permitam determinar a densidade, ρ , e o coeficiente de atenuação linear, μ , foi construído. O μ (de materiais tecido-equivalentes e tecidos biológicos) foi determinado tanto para energia de 59.54 keV (fonte ^{241}Am) com detector CdTe, quanto para faixa de energia entre 15 e 45 keV (tubo de raios X com alvo de W) com detector SDD. Um novo programa computacional para determinar o número atômico efetivo a partir do μ/ρ foi implementado e validado. A sensibilidade do método foi estudada de forma a determinar Z_{ef} de forma adequada. No método de espalhamento, arranjo experimental para detectar os fótons espalhados Rayleigh e Compton (utilizando

fonte de ^{241}Am e detector CdTe) foi construído, otimizado e validado. Um programa computacional para determinação de Z_{ef} através da razão Rayleigh/Compton, R/C , foi elaborado e validado. A sensibilidade do método foi estudada e analisada de forma a determinar Z_{ef} de maneira adequada. No método de atenuação, o arranjo para determinação do μ/ρ possibilitaram determiná-lo com diferenças menores que 6% quando comparados com a literatura e incertezas de 3.8% para 59.54 keV e até 7% na faixa de 15 à 45 keV. Também foi verificado que o método é adequado para determinar Z_{ef} para energias de até 60 keV, pois a partir deste valor, as incertezas em Z_{ef} aumentam (para mais de 10%). No método de espalhamento, o arranjo para determinação da razão Rayleigh/Compton possibilitaram obter medidas de R/C com menos de 10% de diferença com a literatura e incertezas de 7% e foi verificado ainda, que a faixa de momento transferido entre $1 \text{ \AA}^{-1}$ e $2 \text{ \AA}^{-1}$ é adequada para determinar Z_{ef} (incertezas menores que 3% de incerteza).

Palavras-chave: 1. Número Atômico Efetivo. 2. Coeficiente de atenuação mássico. 3. Razão Rayleigh/Compton.

Abstract

GOBO, Michel S S **Analitic and Experimental Methods for Determination of Effective Atomic Number.** 2017. 76 f. Dissertation (M.Sc. - Postgraduate program in Physics applied to Medicine and Biology) - Faculty of Philosophy, Sciences and Literature, University of São Paulo, Ribeirão Preto - SP, 2017.

A composite material, formed by the mixture of several elements, can be conveniently described by, from the way the radiation interacts with it, as if it were formed by a factitious element with an effective atomic number (Z_{ef}). This parameter is not constant with the energy, however, can be considered as an useful tool for characterization of biological tissues, tissue-equivalent materials and dosimeters. Several ways for the determination of Z_{ef} were proposed by the literature, among them, are the attenuation methods which are based on the total cross section (derived form the mass attenuation coefficient (μ/ρ)) and the scatter methods which are based on the ratio between the Rayleigh and Compton differential cross sections. In this work, were study ways to obtain Z_{ef} experimentally and theoretically by two methods (attenuation and scattering) to fill the gaps in the literature. In the attenuation method μ/ρ was used as interaction coefficient which, in the author's knowledge, it hasn't been used. For this purpose, experimental arrangements to determine the density (ρ) and the linear attenuation coefficient (μ) were built. The μ (of tissue-equivalent material and biological tissues) were determined both for 59.54 keV (^{241}Am source) with a CdTe detector and for the energy rage between 15 and 45 keV (X ray tube, W target) with a SDD detector. A new computational program for determining Z_{ef} through μ/ρ was implemented and validated. The method sensibility was studied in the way to determine Z_{ef} properly. In the scattering method, an experimental arrangement to detect the Rayleigh and Compton scattered photons (with ^{241}Am source and a CdTe detector) was built, optimized and validated. A computational program

to determine Z_{ef} through Rayleigh to Compton ratio, R/C , was elaborated and validated. The method's sensibility was studied and analyzed to determine Z_{ef} properly. In the attenuation method, the arrangements for determining μ/ρ allowed to determine it with differences smaller than 6% when compared with the literature and uncertainties of 3.8% for 59.54 keV and up to 7% in the range of 15 to 45 keV. It has also been found that the method is suitable for determining Z_{ef} for energies of up to 60 keV, because above that energy, the uncertainties in Z_{ef} increases (more than 10%). In the scattering method, the arrangement for determining R/C made it possible to obtain measurements of R/C with less than 10% difference with the literature and uncertainties of 7% and it was verified that the momentum transfer range between $1 \text{ \AA}^{-1}$ and $2 \text{ \AA}^{-1}$ is suitable for determining Z_{ef} (uncertainties less than 3 % uncertainty).

Key-words: 1. Effective Atomic Number. 2. Mass attenuation Coefficient. 3. Rayleigh to Compton Ratio.

Lista de Figuras

2.1	Representação do efeito fotoelétrico	6
2.2	Representação do espalhamento (a) Thomson e (b) Rayleigh.	7
2.3	Fator de forma atômico para Hidrogênio, Carbono e Oxigênio em função do momento transferido.	9
2.4	Espalhamento Compton	10
2.5	Variação da seção de choque diferencial Klein-Nishina em função do ângulo de espalhamento.	11
2.6	Função espalhamento incoerente para Hidrogênio, Carbono e Oxigênio em função do momento transferido.	12
2.7	Tubo de raios X (retirado de http://radiologia.blog.br/ fisica-radiologica)	14
2.8	Ilustração dos processos de interação dos elétrons com um átomo do alvo. As energias $h\nu_1$, $h\nu_2$ e $h\nu_3$ são tais que $h\nu_1 < h\nu_2 < h\nu_3 = h\nu_{max}$.	15
2.9	Espectro de raios X (alvo de tungstênio)	16
2.10	Mapa de nuclídeos (modificado de https://en.wikipedia.org/ wiki/Stable_nuclide)	17
2.11	Diagrama de decaimento do ^{241}Am (modificado de https:// web-docs.gsi.de/~wolle/EB_at_GSI/STOPPED_BEAMS/ACTIVE_STOPPER/ active-stopper.html)	18
2.12	Estrutura de bandas de energia para materiais isolantes e semicondutores	19
2.13	Esquema mostrando os componentes básicos de um sistema de detecção	21
2.14	Esquema simplificado de um detector	22
3.1	Arranjo experimental para determinação da massa real e aparente . .	25
3.2	Arranjo experimental para determinação dos coeficientes de atenuação lineares em geometria de feixe estreito	26
3.3	Influência da espessura na medida de μ	30

3.4	Arranjo experimental para determinação dos fótons espalhados. . . .	31
3.5	Modelos geométricos para o número de fótons espalhados. (a) Completo e (b) Simplificado	32
3.6	(a) Razão entre os fatores de atenuação de cada processo e (b) Razão das eficiências do detector em função do angulo de espalhamento . . .	34
3.7	Espectros de espalhamento para vários ângulos	36
3.8	Arranjo experimental para determinação dos fótons espalhados. . . .	37
4.1	Coeficiente de atenuação linear mássico em função da energia.	39
4.2	Coeficiente de atenuação mássico em função da energia para (a) policarbonato e (b) nylon.	41
4.3	Número Atômico Efetivo em função da energia para (a) Água e (b) Acrílico	41
4.4	Coeficiente de atenuação mássico em função do número atômico para varias energias. As retas tracejadas horizontais indicam o μ/ρ teórico da água.	42
4.5	Comparação entre os $Z_{ef}^{\mu/\rho}$ teóricos (curvas continuas) e experimentais (círculos) em função da energia para (a) policarbonato e (b) nylon. .	44
4.6	Diagrama box-plot do $Z_{ef}^{\mu/\rho}$ de tecidos mamários	45
4.7	$Z_{ef}^{\mu/\rho}$ médios de tecidos mamários em função da energia.	45
4.8	Comparação entre a razão Rayleigh/Compton em 59.54 keV em função do momento transferido com a literatura para (a) Água e (b) Acrílico.	46
4.9	Graficos de (a) Variação de $Z_{ef}^{R/C}$ da água em função do momento transferidos e (b) Variação de $R/C_{água}$ em função do momento transferido.	47
4.10	Curvas de R/C vs Z para momentos transferidos distintos. As retas tracejadas horizontais indicam os R/C_{comp} da água.	49
4.11	(a) variação da sensibilidade das curvas de R/C vs Z em função do momento transferido. (b) Variação da incerteza em $Z_{ef}^{R/C}$ com o momento transferido	49

Lista de Tabelas

3.1	Condições experimentais dos arranjos utilizados em cada experimento.	27
4.1	Comparação entre valores de ρ determinado experimentalmente com os presentes na literatura.	38
4.2	Comparação entre os valores de μ (em 59.54 keV) determinados experimentalmente com os disponíveis na literatura	39
4.3	Comparação entre os valores de μ/ρ experimentais com a literatura em 59.54 keV	40
4.4	Comparação de $Z_{ef}^{\mu/\rho}$ experimentais e teóricos em 59.54 keV para materiais tecido-equivalentes	43
4.5	Comparação entre os valores de R/C experimentais com os da literatura.	46
4.6	Comparação entre valores de $Z_{ef}^{R/C}$ determinados através do nosso algoritmo com dados experimentais presentes na literatura.	48
4.7	Comparação entre os valores experimentais de R/C_{comp} e $Z_{ef}^{R/C}$ em $x = 1.64 \text{ \AA}^{-1}$	50
4.8	Comparação entre os valores experimentais de R/C_{comp} e $Z_{ef}^{R/C}$ de tecidos mamários em $x = 1.64 \text{ \AA}^{-1}$	50

Lista de Símbolos

h	Constante de Planck.
ν	Frequência da onda eletromagnética.
Z	Número Atômico.
$h\nu$	Energia do fóton.
Z_{ef}	Número Atômico Efetivo.
f_i	Fração eletrônica.
σ_a	Seção de choque atômica.
σ_e	Seção de choque eletrônica.
σ_{comp}	Seção de choque total do composto.
R/C	Razão Rayleigh/Compton.
μ/ρ	Coeficiente de atenuação mássico.
$Z_{ef}^{\mu/\rho}$	Número atômico efetivo determinado pela coeficiente de atenuação mássico.
$Z_{ef}^{R/C}$	Número atômico efetivo determinado pela razão R/C.
E_K	Energia cinética do elétron.
E_b	Energia de ligação do elétron.
τ	Seção de choque total para o efeito fotoelétrico.
λ	Comprimento de onda da onda eletromagnética.
θ	Ângulo de Espalhamento.
$d\Omega$	Diferencial de ângulo sólido.

$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{Th}$	Seção de choque diferencial Thomson.
r_0	Raio clássico do elétron livre.
$d\theta$	Diferencial de ângulo.
σ_{Th}	Seção de choque total Thomson.
$\mathbf{r}$	Vetor posição.
$\varrho(\mathbf{r})$	Densidade de carga na posição $\mathbf{r}$.
$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_R$	Seção de choque diferencial Rayleigh.
$\mathbf{Q}$	Vetor de onda transferido.
x	Momento transferido.
$F(x, Z)$	Fator de Forma.
σ_R	Seção de choque total Rayleigh.
F_{ef}	Fator de forma efetivo.
α_i^{at}	Fração atômica do i-ésimo elemento.
w_i	Fração de peso do i-ésimo elemento.
A_i	Massa atômica.
n_i	Abundância atômica.
$h\nu'$	Energia do fóton espalhado.
$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{KN}$	Seção de choque diferencial Klein-Nishina.
F_{KN}	Fator Klein-Nishina.
m_0	massa do elétron.
c	Velocidade da luz.
$S(x, Z)$	Função espalhamento incoerente.

$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_C$	Seção de choque diferencial Compton.
σ_C	Seção de choque total Compton atômica.
S_{ef}	Função espalhamento incoerente efetiva.
σ	Seção de choque total.
μ	Coefficiente de atenuação linear total.
n_v	Número de átomos por volume.
N_a	Número de Avogrado.
$\left(\frac{\mu}{\rho}\right)_{comp}$	Coefficiente de atenuação mássico do composto.
σ_{comp}	Seção de choque do composto.
N	Número de nêutrons.
$P(T)$	Probabilidade da criação de um par elétron-buraco.
T	Temperatura absoluta.
k	Constante de Boltzman.
ρ	Densidade do material.
m_r	Massa real da amostra.
m_{ap}	Massa aparente da amostra.
σ_ρ^2	Variância na mediada da densidade.
σ_{m_r}	Incerteza na medida da massa real.
$\sigma_{m_{ap}}$	Incerteza na medida da massa aparente.
$\sigma_{\rho_{H_2O}}$	Incerteza na densidade da água.
I_0	Intensidade do feixe incidente.
I	Intensidade do feixe transmitido.

$\sigma_{I_0}^2$	Variância na medida da intensidade incidente.
σ_I^2	Variância na medida da intensidade transmitida.
t	Espessura da amostra.
$t_{ótimo}$	Espessura ótima.
$\Delta(Z_{ef}^{\mu/\rho})$	Incerteza no número atômico efetivo determinado através de μ/ρ .
N_0	Número de fótons incidentes.
A_C	Fator de atenuação para os fótons Compton.
A_R	Fator de atenuação para os fótons Rayleigh.
$\Delta\Omega_{det}$	Ângulo sólido entre amostra e detector.
$\epsilon(E)$	Eficiência do detector na energia E .
N_R^d	Número de fótons espalhados Rayleigh detectados.
N_C^d	Número de fótons espalhados Compton detectados.
$N_{R,exp}^d$	Número de fótons espalhados Rayleigh detectados experimental.
$N_{C,exp}^d$	Número de fótons espalhados Compton detectados experimental.
A_1	Área total do espectro de espalhamento.
A_2	Metade da área do pico Rayleigh.
$\Delta(Z_{ef}^{R/C})$	Incerteza no número atômico efetivo determinado através de R/C .

Sumário

Lista de Figuras	ix
Lista de Tabelas	xi
Lista de Símbolos	xii
1 Introdução	1
2 Fundamentos Teóricos	6
2.1 Interação da Radiação com a Matéria	6
2.1.1 Efeito Fotoelétrico	6
2.1.2 Espalhamento Rayleigh	6
2.1.3 Espalhamento Compton	9
2.2 Coeficientes de atenuação total	13
2.2.1 Coeficientes de atenuação total para materiais compostos . . .	13
2.3 Produção de Raios X e γ	14
2.3.1 Tubo de Raios X	14
2.3.2 Núcleos Radioativos	16
2.3.2.1 Decaimento Radioativo	16
2.4 Detectores de Radiação	18
2.4.1 Semicondutores	18
2.4.2 Detecção da Radiação	20
2.4.2.1 Resposta em energia (Resolução e Eficiência)	21
2.4.2.2 Eficiência de Detecção	22
2.5 Número atômico efetivo - Z_{ef}	22
3 Métodos	24
3.1 Amostras Analisadas	24
3.1.1 Materiais Tecido-Equivalentes	24
3.1.2 Tecidos Biológicos	24

3.2	Determinação experimental da densidade	25
3.3	Z_{ef} - Método de Atenuação	26
3.3.1	Arranjos experimentais	26
3.3.2	Determinação experimental do coeficiente de atenuação linear	28
3.3.2.1	Otimização do método para determinação do coeficiente de atenuação linear	29
3.3.3	Determinação do Número atômico efetivo através do coeficiente de atenuação mássico: O Algoritmo	30
3.4	Z_{ef} - Método de Espalhamento	30
3.4.1	Arranjo experimental	30
3.4.2	Modelo analítico para o número de fótons espalhados Rayleigh e Compton	31
3.4.3	Otimização das medidas de espalhamento Rayleigh e Compton	35
3.4.4	Determinação experimental da razão Rayleigh/Compton	35
3.4.5	Determinação de um Número atômico efetivo através da Razão Rayleigh/Compton: O Algoritmo	36
4	Resultados e Discussões	38
4.1	Z_{ef} - Método de Atenuação	38
4.1.1	Validação do Método para determinar ρ	38
4.1.2	Validação dos Métodos para determinar μ	38
4.1.3	Comparação de μ/ρ experimentais com a literatura	39
4.1.4	Algoritmo para determinação de $Z_{ef}^{\mu/\rho}$	40
4.1.5	Sensibilidade no método para determinação de $Z_{ef}^{\mu/\rho}$	41
4.1.6	$Z_{ef}^{\mu/\rho}$ de materiais tecido-equivalentes e tecidos biológicos	43
4.2	Z_{ef} - Método de Espalhamento	45
4.2.1	Validação do Método para obter R/C	45
4.2.2	Algoritmo para determinação de $Z_{ef}^{R/C}$	46
4.2.3	Sensibilidade do método de espalhamento	48
4.2.4	$Z_{ef}^{R/C}$ de materiais tecido-equivalentes e tecidos biológicos	49
5	Conclusão e Perspectivas	51
5.1	Sobre a determinação de ρ , μ , e μ/ρ	51

5.2	Sobre o método de atenuação	51
5.3	Sobre o método de espalhamento	52
5.4	Perspectivas	52
Referências		54

1 *Introdução*

Os processos de interação (efeito fotoelétrico, espalhamento Rayleigh e Compton) da radiação ionizante (raios X e γ) com materiais monoelementares podem ser expressos em termos do número atômico do elemento, Z , e da energia do fóton incidente, $h\nu$. Um material composto, formado pela mistura de muitos elementos, pode ser convenientemente descrito, a partir da forma com que a radiação interage com ele, como se fosse formado por um elemento fictício com um número atômico efetivo, Z_{ef} [2]. Este parâmetro não é constante com a energia, entretanto, pode ser considerado uma ferramenta útil na caracterização de materiais tecido-equivalentes, tecidos biológicos e na escolha de dosímetros [3].

Muitas formas para determinar Z_{ef} foram propostas ao longo dos anos. As formas mais simples consideram leis de potência ($Z_{ef} = (\sum_i f_i Z_i^m)^{\frac{1}{m}}$, onde f_i é a fração eletrônica) limitadas às faixas de energia específicas [4]. Mayneord [5] utilizava $m = 2.94$, já Hine [6] propôs que o Z_{ef} é diferente para cada processo de absorção e estimou que $m = 3.1$ no caso da absorção fotoelétrica e $m = 1$ no caso da produção de pares. Murty [2], em 1965, a partir dos resultados de Hine e Mayneord, generaliza uma expressão válida para região onde o efeito Compton é predominante.

Outros autores, em anos posteriores, propuseram formas mais robustas para determinação do número atômico efetivo. Essas formas levam em conta a seção de choque total (obtido através do coeficiente de atenuação linear massico) e consideram sua variação com a energia, isto é, Z_{ef} pode ser determinado para qualquer energia. El-Kateb [7] utiliza o método no qual o número atômico efetivo pode ser obtido através da razão entre a seção de choque atômica, σ_a , e eletrônica, σ_e para determinar o número atômico efetivo de compostos formados por Hidrogênio, Carbono e Oxigênio, sempre que a composição do material seja conhecida.

Outro método extensivamente utilizado na literatura consiste em, determinar a seção de choque total de um composto, σ_{comp} e localizar o número atômico efetivo correspondente em um gráfico de seção de choque total de elementos puros em função

do número atômico desses elementos [8, 9, 10].

Recentemente, Taylor et al. [11], elaborou um programa (*Auto - Z_{eff}*) que determina o número atômico efetivo para qualquer energia. O programa coloca os dados de seção de choque total de 100 elementos para as energias de 10 keV à 1 GeV em uma matriz. Os valores de seção de choque total do material composto são calculados a partir do coeficiente de atenuação mássico do composto determinado através de uma aditividade linear. Esses valores, então são contrastados com a matriz de seções de choque como uma função de Z e um número atômico efetivo é obtido por interpolação cúbica dos valores de Z entre as seções de choque adjacentes.

Aden Un e Tanfer [12] desenvolveram outro programa (*Direct - Z_{eff}*) que determina diretamente o número atômico efetivo e a densidade eletrônica de qualquer material e para qualquer energia de 10 keV à 1 GeV pelo mesmo método utilizado por El-Kateb. O *Direct - Z_{eff}* também calcula o número atômico efetivo para as seções de choque individuais (fotoelétrica, de espalhamento Rayleigh e Compton, produção de pares e de tripletos) e aplicaram o programa na determinação de Z_{ef} de alguns aminoácidos.

Bonnin et al. [13], apresentaram uma revisão sobre número atômico efetivo e propõe um novo conceito, o qual permite extrair Z_{ef} a partir de qualquer grandeza de interação medida usando raios X. No trabalho, aplicou-se este novo conceito para determinar Z_{ef} a partir do coeficiente de atenuação linear obtidos através de CT em várias energias.

Embora a radiação espalhada não seja uma característica desejada no diagnóstico, trabalhos a tem reportado como uma boa ferramenta na caracterização de materiais quando ambas as contribuições dos espalhamentos Rayleigh e Compton são consideradas [14, 15]. A razão Rayleigh/Compton já foi utilizada por Puumalainen [16] para estimar o conteúdo de gordura no fígado. Posteriormente, Karellas et al.[17] realizaram estudos de sensibilidade do método da razão Rayleigh/Compton na caracterização de tecidos e verificou que a sensibilidade do método aumenta com o momento transferido, reduzindo a incerteza em Z_{ef} .

Como reportado por Kunzendorf [18] e Schatzler [19], a razão entre os espalhamentos Rayleigh e Compton (razão R/C) tem uma relação direta com o número atômico, ou seja, para um material composto é possível determinar o número

atômico efetivo através da sua razão R/C, sendo uma técnica essencialmente útil quando as variações no coeficiente de atenuação linear são pequenas e as do número atômico são mais significativas [20].

Duvauchelle e colaboradores[20] propõe uma nova forma de determinar o número atômico efetivo através da razão Rayleigh/Compton. Este trabalho supõe que para um momento transferido fixo, a razão R/C depende apenas do número atômico e que para cada momento transferido existe uma função discreta do número atômico em função de R/C. No caso de um composto pode-se ajustar um polinômio aos pontos discretos e obter uma função contínua em Z para determinar Z_{ef} .

Recentemente Eyecioglu et al.[21] desenvolveram um programa que determina Z_{ef} (ZXCOM) através da razão Rayleigh/Compton. O mesmo grupo em outro trabalho [22] comparam os valores de Z_{ef} preditos pelo programa ZXCOM com valores experimentais disponíveis na literatura. Eles observam que os valores do ZXCOM sobrestimam os valores experimentais de Z_{ef} .

Além disso, técnicas de difração de raios X também permitem determinar o número atômico efetivo. Como proposto por Harding [23], há uma relação entre a razão das funções de espalhamento, obtidas em momentos transferidos distintos, com o número atômico efetivo.

Portanto, são diversas as formas de obter o número atômico efetivo tanto por atenuação (seção de choque total) quanto por espalhamento (seção de choque diferenciais Rayleigh e Compton) e até o momento, não foram encontrados trabalhos que determinam o número atômico efetivo através do coeficiente de atenuação linear mássico ou que faça um estudo detalhado da sensibilidade destes métodos, bem como não foram apresentados na literatura, até o momento, trabalhos que apresentam um programa para determinação de Z_{ef} através da razão Rayleigh/Compton de forma adequada.

Neste trabalho busca-se estudar analiticamente e experimentalmente o método de atenuação e espalhamento aplicando-os ao estudo de materiais tecido-equivalentes e tecidos-biológicos. Os objetivos específicos são:

No método de Atenuação:

- Implementar e validar um sistema para medir o coeficiente de atenuação mássico

- Elaborar um algoritmo para determinação do número atômico efetivo através do coeficiente de atenuação linear mássico ($Z_{ef}^{\mu/\rho}$).
- Estudar a sensibilidade do método.
- Obter valores experimentais de $Z_{ef}^{\mu/\rho}$.

No método de espalhamento:

- Implementar e validar um sistema que possibilite determinar a razão Rayleigh/Compton.
- Elaborar um programa para determinação do número atômico efetivo através da razão Rayleigh/Compton ($Z_{ef}^{R/C}$).
- Estudar a sensibilidade do método.
- Obter valores experimentais de $Z_{ef}^{R/C}$.

Este trabalho está dividido da seguinte forma:

No capítulo 2 são apresentados os fundamentos teóricos através dos quais este trabalho foi embasado. Inicialmente, na primeira seção do capítulo, serão apresentados os efeitos de interação da radiação ionizante com a matéria predominantes na faixa de energia utilizada em radiodiagnóstico (efeito fotoelétrico, espalhamento Rayleigh e Compton). Para cada efeito será apresentada uma descrição física do fenômeno, seguida das respectivas descrições das seções de choque (diferenciais e totais). Na próxima seção serão apresentadas as definições dos coeficientes de atenuação total (seção de choque total, coeficiente de atenuação linear e coeficiente de atenuação linear mássico) e como calculá-los através da regra das misturas. Nas seções seguintes serão abordados a produção de raios X por um tubo de raios X, decaimento radioativo (decaimento (α, γ)), detectores semicondutores e o conceito de número atômico efetivo.

No capítulo 3 serão descritas as amostras utilizadas, os arranjos experimentais e as metodologias empregadas para determinar o coeficiente de atenuação linear, a razão Rayleigh/Compton e o número atômico efetivo.

No capítulo 4 encontram-se as validações dos métodos e os resultados obtidos. O capítulo está dividido em duas partes, segundo o método aplicado.

Na primeira parte, a validação dos métodos de medida da densidade e do coeficiente de atenuação linear é apresentada, seguido da comparação de valores de coeficiente de atenuação linear mássico de materiais tecido-equivalentes com a literatura. A sensibilidade do método para determinação do número atômico efetivo a partir do coeficiente de atenuação linear mássico é discutida e os seus valores para materiais tecido-equivalentes e tecidos biológicos são apresentados. A segunda parte apresenta a validação dos métodos relativos à determinação da razão Rayleigh/Compton, seguida da discussão da sensibilidade do método para obter o número atômico efetivo. Finalmente, são apresentados valores de número atômico efetivo experimentais para materiais tecido-equivalentes e tecidos.

O capítulo 5, por fim, apresenta as conclusões e as perspectivas de futuros trabalhos.

2 Fundamentos Teóricos

2.1 Interação da Radiação com a Matéria

2.1.1 Efeito Fotoelétrico

O efeito fotoelétrico (figura 2.1) ocorre quando um fóton de energia, $h\nu$, interage com um elétron fortemente ligado ($h\nu \gtrsim$ energia de ligação do elétron (E_b)), normalmente da camada K. Nessa interação, o fóton é completamente absorvido e o elétron é ejetado do átomo com energia cinética, $E_K = h\nu - E_b$. Após a interação, a vacância deixada pelo elétron será completado por outro elétron vindo de uma camada superior e a energia de transição será emitida ou por radiação característica ou por elétron Auger [24].

Figura 2.1: Representação do efeito fotoelétrico

Para fótons com energia menor que 100 keV, a seção de choque fotoelétrica, τ , é tal que[3]

$$\tau \propto \frac{Z^4}{h\nu^3} \quad (2.1)$$

onde Z é o número atômico.

2.1.2 Espalhamento Rayleigh

O espalhamento Thomson (figura 2.2 (a)), ou espalhamento clássico, pode ser entendido através do modelo ondulatório da luz. Quando uma onda eletromagnética com comprimento de onda, λ , e energia, $h\nu$, incide sobre um elétron livre (ou

fracamente ligado, isto é, a energia da onda incidente é ordens de grandeza acima da energia de ligação do elétron) em repouso no espaço, o mesmo começa a oscilar com uma certa aceleração devido a força que o campo elétrico exerce sobre ele fazendo com que irradie energia na forma de onda eletromagnética em uma direção diferente da incidente [8]. Neste processo, não há transferência de energia para o elétron e a frequência da onda espalhada é a mesma da incidente.

Figura 2.2: Representação do espalhamento (a) Thomson e (b) Rayleigh.

A probabilidade da onda eletromagnética ser espalhada sob um ângulo de espalhamento, θ , por unidade da ângulo sólido, $d\Omega$, para um elétron livre é dada por:

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{Th} = \frac{r_0^2}{2}(1 + \cos^2(\theta)) \quad (2.2)$$

onde $r_0 = 2.81794 \times 10^{-15}$ m é o raio clássico do elétron livre.

Sabendo que $d\Omega = 2\pi \sin\theta d\theta$, a seção de choque total Thomson pode ser obtida integrando sob todos os ângulos de espalhamento:

$$\sigma_{Th} = \int \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{Th} d\Omega = \frac{r_0^2}{2} \int_0^\pi (1 + \cos^2\theta) 2\pi \sin\theta d\theta = \frac{8\pi}{3} r_0^2 \quad (2.3)$$

No espalhamento Rayleigh (figura 2.2 (b)), os elétrons encontram-se ligados ao átomo e são vistos como uma nuvem eletrônica com densidade de carga, $\rho(\mathbf{r})$. Desta forma a seção de choque Rayleigh pode ser determinada contabilizando o espalhamento por cada diferencial de carga, $-e\rho(\mathbf{r})d^3\mathbf{r}$, na posição $\mathbf{r}$ da distribuição eletrônica ponderando essas contribuições por um fator de fase, $e^{i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{r}}$, [25] de forma

que:

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_R = \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{Th} \left[\int \varrho(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{r}} d^3\mathbf{r} \right]^2 = \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{Th} F^2(x, Z) \quad (2.4)$$

onde $F(x, Z)$ é o fator de forma atômico, $\mathbf{Q} \cdot \mathbf{r}$ é a diferença de fase entre a onda incidente e espalhada, $\mathbf{Q}$ é o vetor de onda transferido e x é o momento transferido dado por:

$$x = |\mathbf{Q}|/4\pi = \frac{1}{\lambda} \text{sen}(\theta/2) = \frac{hv}{12.398(keV.)} \text{sen}(\theta/2) \quad (2.5)$$

O fator de forma atômico é uma função difícil de calcular e uma vez que são baseadas nas funções de onda atômica, são realizadas de forma analítica apenas para o átomo de Hidrogênio. Aproximações como as dos modelos de Thomas-Fermi, Hartree ou Hartree-Fock permitem realizar o cálculo para outros átomos [24]. O gráfico na figura 2.3 mostra como o fator de forma atômico, calculados por Hubbell et al. [26], varia com o momento transferido. Para momento transferido baixo, o fator de fase tende a 1 e a integral da densidade de carga é o número de elétrons, de maneira que $F(x, Z) \xrightarrow{x \rightarrow 0} Z$. Quando o momento transferido é grande, o fator de fase relativo à qualquer elétron pode ser escrito como um ponto em um círculo unitário no plano complexo ($e^{i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{r}} = \cos(\mathbf{Q} \cdot \mathbf{r}) + i\text{sen}(\mathbf{Q} \cdot \mathbf{r})$) e oscila rapidamente dentro deste círculo. Assim, a integral mesmo ponderada pela densidade de carga, tenderá a zero, isto é, quando o comprimento de onda trona-se pequeno em relação ao átomo, ocorrerá interferência destrutiva das ondas espalhadas pelos diferentes elétrons do átomo e dessa forma $F(x, Z) \xrightarrow{x \rightarrow \infty} 0$.

A seção de choque Rayleigh atômica pode ser obtida através da integral a seguir [24]:

$$\sigma_R = \pi r_0^2 \int_0^\pi (1 + \cos^2\theta) F^2(x, Z) \text{sen}\theta d\theta \quad (2.6)$$

O espalhamento Rayleigh é proporcional ao quadrado do número atômico e inversamente proporcional ao quadrado da energia [3]:

$$\sigma_R \propto \frac{Z^2}{hv^2} \quad (2.7)$$

Figura 2.3: Fator de forma atômico para Hidrogênio, Carbono e Oxigênio em função do momento transferido.

As equações 2.4 e 2.6 são úteis para determinar a seção de choque diferencial e total Rayleigh de um elemento puro. Para um material composto cuja composição é conhecida, elas podem ser determinadas a partir do fator de forma efetivo, F_{ef} , dado pela equação 2.8 a qual considera, segundo o modelo atômico independente (MAI), que cada átomo espalha independentemente sem a influência dos átomos vizinhos:

$$F_{ef} = \sum_i \alpha_i^{at} F^2(x, Z_i) \quad (2.8)$$

onde α_i^{at} é a fração atômica do i-ésimo elemento que compõem o material, dada por:

$$\alpha_i^{at} = \frac{w_i/A_i}{\sum_i w_i/A_i} \quad (2.9)$$

O termo w_i é a fração de peso do i-ésimo elemento escrita como:

$$w_i = \frac{n_i A_i}{\sum_i n_i A_i} \quad (2.10)$$

em que n_i e A_i são, respectivamente, a abundância atômica e o peso atômico do i-ésimo elemento presente no material composto.

2.1.3 Espalhamento Compton

O espalhamento Compton (figura 2.4) é o efeito que ocorre quando um fóton com energia $h\nu$, interage com um elétron fracamente ligado, transfere parte de sua

energia como energia cinética para o elétron. Após a interação, como consequência da conservação de energia e momento, o fóton com energia, $h\nu'$, parte sob um ângulo de espalhamento, θ , e o elétron é ejetado sob um ângulo ϕ , com energia cinética, $E_c = h\nu - h\nu'$.

Compton, utilizando a conservação de energia e momento na colisão de um fóton com um elétron livre, obteve uma equação que relaciona a energia do fóton espalhado com a do incidente e com o ângulo de espalhamento [24]:

$$h\nu' = \frac{h\nu}{1 + \frac{h\nu}{m_0c^2}(1 - \cos\theta)} \quad (2.11)$$

A equação 2.11 mostra que a energia do fóton espalhado é sempre menor que a do incidente.

Figura 2.4: *Espalhamento Compton*

Em 1928, Oscar Klein e Yoshio Nishina [27], utilizando conceitos de mecânica quântica formuladas por Dirac, derivaram uma expressão para a probabilidade de interação de um fóton com um elétron livre por unidade de ângulo sólido. Eles mostraram que a seção de choque diferencial por ângulo sólido para esse evento, $(d\sigma/d\Omega)_{KN}$, é dado pelo produto entre a seção de choque Thomson (eq. 2.2) e o fator Klein-Nishina, F_{KN} :

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{KN} = \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{Th} F_{KN} \quad (2.12)$$

O fator Klein-Nishina é dado por [27]:

$$F_{KN} = \left[\frac{1}{1 + \alpha(1 - \cos\theta)} \right]^2 \times \left[1 + \frac{\alpha^2(1 - \cos\theta)^2}{(1 + \alpha(1 - \cos\theta))(1 + \cos^2\theta)} \right] \quad (2.13)$$

onde $\alpha = hv/m_0c^2$. O fator Klein-Nishina depende da energia e do ângulo de espalhamento, dessa maneira, para energias baixas ($\alpha \rightarrow 0$) ou ângulos de espalhamento pequenos ($\theta \rightarrow 0$) $F_{KN} \rightarrow 1$, e $(d\sigma/d\Omega)_{KN} \rightarrow (d\sigma/d\Omega)_{Th}$ como pode ser visto na figura 2.5.

Figura 2.5: Variação da seção de choque diferencial Klein-Nishina em função do ângulo de espalhamento.

Em um átomo, onde os elétrons encontram-se em movimento e ligados a ele, é necessário que a energia do fóton incidente seja maior que a de ligação do elétron para que o efeito Compton ocorra. A seção de choque diferencial será, portanto, modificada por um termo chamado de função espalhamento incoerente, $S(x, Z)$, que descreve a probabilidade de um elétron que recebeu um momento, Q , deixar o átomo [8]. Desta forma, a seção de choque diferencial Compton é dada por:

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_C = \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{KN} \times S(x, Z) \quad (2.14)$$

A função espalhamento incoerente pode ser obtida de forma não relativística através da seguinte expressão [26]:

$$S(x, Z) = \sum_{m=1}^Z \sum_{n=1}^Z \langle \psi_0 | e^{i\mathbf{Q} \cdot (\mathbf{r}_m - \mathbf{r}_n)} | \psi_0 \rangle - | \langle \psi_0 | e^{i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{r}_m} | \psi_0 \rangle |^2 \quad (2.15)$$

onde ψ_0 representa a função de onda do átomo no estado fundamental, $\mathbf{r}_n$ e $\mathbf{r}_m$ são, respectivamente, as posições do n-ésimo e do m-ésimo elétron em um átomo de Z elétrons. Valores de $S(x, Z)$ foram tabelados por Hubbell et al. [26]. O gráfico na figura 2.6 mostra como a função $S(x, Z)$ do Hidrogênio, Carbono e Oxigênio varia com o momento transferido. Em baixo momento transferido a influência da energia de ligação do elétron é significativa e a correção promovida por $S(x, Z)$ é maior de maneira que $S(x, Z) \rightarrow 0$ $x \rightarrow 0$. Por outro lado, quando o momento transferido é grande, os elétrons do átomo são vistos como livres e $S(x, Z) \rightarrow Z$ $x \rightarrow \infty$.

Figura 2.6: Função espalhamento incoerente para Hidrogênio, Carbono e Oxigênio em função do momento transferido.

A seção do choque Compton atômica é obtida integrando a equação 2.14 sob todos os ângulos de espalhamento:

$$\sigma_C = \pi r_0^2 \int_0^\pi (1 + \cos^2 \theta) \times F_{KN} \times S(x, Z) \sin \theta d\theta \quad (2.16)$$

Se a composição de um material composto é conhecida, a função espalhamento incoerente efetiva, S_{ef} , pode ser determinada através da expressão a seguir:

$$S_{ef} = \sum_i \alpha_i^{at} S(x, Z_i) \quad (2.17)$$

Com a expressão 2.17, tanto a seção de choque diferencial Compton quanto seção de choque Compton atômica de um composto podem ser determinadas.

2.2 Coeficientes de atenuação total

A seção de choque total representa a probabilidade de interação, dada pela contribuição individual das seções de choque de cada processo de interação dos fótons com a matéria. Na faixa de energia utilizada em radiodiagnóstico, como os efeitos predominantes são o efeito fotoelétrico, espalhamento Rayleigh e Compton, a seção de choque total pode ser escrita como:

$$\sigma = \tau + \sigma_R + \sigma_C \quad (2.18)$$

O coeficiente de atenuação linear é a probabilidade de interação por unidade de caminho e se relaciona com a seção de choque através do número de átomos por volume, n_v :

$$\mu = n_v \sigma = N_a \frac{\rho}{A} \sigma \quad (2.19)$$

onde $N_a = 6.022 \times 10^{23}$ é o número de Avogrado, ρ é a densidade e A é o peso atômico.

O coeficiente de atenuação linear muda de acordo com estado físico da matéria, pois depende do número de átomos presentes em uma camada de material. É conveniente, então, dividir essa grandeza pela densidade física para eliminar essa dependência, definindo assim o coeficiente de atenuação mássico, μ/ρ .

2.2.1 Coeficientes de atenuação total para materiais compostos

Dada a composição de um material, o coeficiente de atenuação mássico do mesmo, μ/ρ_{comp} , pode ser determinado através da regra das misturas [3]:

$$\left(\frac{\mu}{\rho}\right)_{comp} = \sum_i w_i \left(\frac{\mu}{\rho}\right)_i \quad (2.20)$$

onde $(\mu/\rho)_i$ é o coeficiente de atenuação linear mássico do i-ésimo elemento presente no material.

A seção de choque de um composto, σ_{comp} , pode ser determinada pela relação a seguir:

$$\sigma_{comp} = \frac{(\mu/\rho)_{comp}}{N_a \sum_i \left(\frac{w_i}{A_i} \right)} \quad (2.21)$$

2.3 Produção de Raios X e γ

2.3.1 Tubo de Raios X

Os raios X podem ser produzidos pela desaceleração de elétrons em trajetórias circulares (como nos ciclotrons) ou lineares (como nos aceleradores lineares e tubos de raios X), transições de elétrons entre níveis atômicos (radiação característica).

O tubo de raios X (figura 2.7) é formado basicamente por um cátodo e um ânodo dentro de um invólucro de vidro cujo interior é vácuo. No cátodo tem um filamento que, quando aquecido, emite elétrons, os quais são acelerados em direção ao ânodo em função de campo elétrico associado a uma diferença de potencial aplicada, ΔV , entre o cátodo e o ânodo, no qual se encontra um alvo feito de material de número atômico alto como tungstênio ou ouro onde os elétrons são freados.

Figura 2.7: *Tubo de raios X (retirado de <http://radiologia.blog.br/fisica-radiologica>)*

Como ilustrado na figura 2.8, os elétrons, ao penetrarem no alvo, serão atraídos pelo núcleo positivo e nesse processo são desacelerados emitindo radiação de freamento (*bremstrahlung*). A distância entre o elétron e o núcleo determina a perda de energia sofrida pelo elétron, uma vez que a atração coulombiana diminui com o quadrado da distância de interação de forma que, elétrons passando longe do núcleo (caminho 1) produzirão raios X de energia baixa se comparados aos

que passam perto (caminho 2) ou àqueles que colidem diretamente com o núcleo (caminho 3) e perdem toda sua energia cinética. Então, nessas interações a energia irradiada pelo elétron pode ter qualquer valor de forma que $h\nu < h\nu_{max} = e\Delta V$. Essas radiações compõem o espectro contínuo de raios X.

Figura 2.8: Ilustração dos processos de interação dos elétrons com um átomo do alvo. As energias $h\nu_1$, $h\nu_2$ e $h\nu_3$ são tais que $h\nu_1 < h\nu_2 < h\nu_3 = h\nu_{max}$

Quando um elétron colide com outro elétron ligado (caminho 4), com energia cinética suficiente para arrancá-lo do átomo (ionização), pode ocorrer a emissão de radiação com energias bem definidas como resultado das transições eletrônicas (desexcitações). Essas emissões compõem o espectro característico, pois as energias emitidas estão relacionadas ao material do alvo. Essas radiações possuem uma nomenclatura na qual as letras K, L, M e N, que se referem à camada para a qual o elétron transitou, seguida das letras gregas α , β e δ que dizem respeito à camada da qual veio o elétron, por exemplo, a radiação característica resultante da transição da camada K para L é chamada K_α enquanto a resultante da transição M para K é chamada K_β .

A figura 2.9 mostra um espectro de raios X com alvo de tungstênio no qual pode ser observado a região contínua e os picos das radiações características.

Figura 2.9: Espectro de raios X (alvo de tungstênio)

2.3.2 Núcleos Radioativos

2.3.2.1 Decaimento Radioativo

O núcleo de um átomo é caracterizado pelo seu número atômico (quantidade de prótons), Z , e pelo número de nêutrons, $N = A - Z$, onde A é o número de massa. Cada espécie atômica pode ser representada por um quadrado em uma mapa de nuclídeos como o mostrado na figura 2.10. A escala vertical deste mapa representa o número de nêutrons e a horizontal o número de prótons. A curva formada por quadrados pretos representa a linha de estabilidade, na qual se observa que para núcleos de baixo número atômico (até $Z \simeq 20$) temos $Z \simeq N$, enquanto para núcleos com número atômico mais elevado a estabilidade é alcançada quando $N \simeq 1.5Z$ [28]. Os núcleos acima dessa linha são deficientes em prótons enquanto os abaixo são deficientes em nêutrons [28]. Nos dois casos, os núcleos são instáveis e para atingir a estabilidade, eles se transformam emitindo partículas carregadas, fótons, ou ambos, liberando energia em um processo chamado Decaimento Radioativo.

Núcleos com número atômico alto ($Z > 82$), em geral, decaem pela emissão de uma partícula composta por 2 prótons e 2 nêutrons, chamada partícula α que é basicamente um núcleo de Hélio. A equação para esse tipo de decaimento é apresentada a seguir [28]:

Figura 2.10: Mapa de nuclídeos (modificado de https://en.wikipedia.org/wiki/Stable_nuclide)

A energia liberada corresponde a diferença de massa entre o átomo pai, X , e os produtos, He e Y , e aparece como energia cinética adquirida pelo núcleo de He e pelo átomo filho [29] ($Energia = [m(^4_2X) - m(^{A-4}_{Z-2}Y) - m(^4_2He)]c^2$, onde c é a velocidade da luz).

Pode ocorrer do núcleo instável decair para um átomo em um estado excitado, essa energia em excesso é perdida em forma de radiação γ . Esse tipo de reação é chamado de decaimento (α, γ). Um núcleo instável que decai por emissão de partículas α seguida de emissão γ é o ^{241}Am , o qual foi utilizado neste trabalho. O diagrama de decaimento na figura 2.11 mostra as emissões deste núcleo. Como pode ser visto, o decaimento mais frequente (84.4% das desintegrações) é por emissão de partículas α com energia de 5.474 MeV e em seguida ocorre a emissão de um fóton γ de 59.54 keV ou a emissão de dois fótons, um com 26.36 keV e o outro com 33.19keV [30].

Figura 2.11: Diagrama de decaimento do ^{241}Am (modificado de https://web-docs.gsi.de/~wolle/EB_at_GSI/STOPPED_BEAMS/ACTIVE_STOPPER/active-stopper.html)

2.4 Detectores de Radiação

Para que a radiação seja detectada é necessário que interaja com um material e este forneça um sinal em resposta àquela interação. Existem muitos tipos de detectores como câmaras de ionização, contadores proporcionais, cintiladores e diodos semicondutores [31]. Será abordado, brevemente nesta seção, algumas características importantes dos detectores fabricados com diodos semicondutores, pois corresponde ao tipo empregado neste trabalho.

2.4.1 Semicondutores

A estrutura cristalina de um material estabelece bandas de energia permitida para os elétrons em seu interior. A energia desses elétrons devem estar dentro de uma dessas bandas, as quais são separadas por uma lacuna de energias proibidas (figura 2.12). A banda inferior é chamada de banda de valência, nela estão os elétrons mais externos dos átomos ligados em sítios específicos da rede cristalina. Os elétrons que estão livres para se movimentar dentro do cristal têm as energias que compõem a banda de condução. Essas bandas estão separadas por uma lacuna chamada de banda proibida, pois os elétrons não podem adquirir energias dentro dessa faixa,

cujo tamanho define se o material é um isolante ou um semicondutor [31].

Figura 2.12: Estrutura de bandas de energia para materiais isolantes e semicondutores

Em um material isolante a banda de energia proibida é da ordem de 5 eV ou mais de modo que mesmo em temperatura ambiente o elétron não pode se mover para a banda de condução, por outro lado, para os semicondutores ela é menor que 1 eV possibilitando que essa migração ocorra, deixando a banda de valência com um buraco. A combinação entre o elétron na banda de condução e o buraco na banda de valência é chamado de par elétron-buraco.

A probabilidade de criação de um par elétron-buraco é dada em termos da temperatura absoluta, T , e da lacuna de energia, E_g [31]:

$$P(T) = CT^{3/2} \times e^{(-E_g/kT)} \quad (2.23)$$

onde k é a constante de Boltzman e C é uma constante de proporcionalidade característica do material.

Na ausência de um campo elétrico, os pares elétron-buraco criados por excitação térmica se recombinam e o equilíbrio é atingido. Para um semicondutor ser utilizado como um detector, é necessário que o sinal induzido pelo movimento das dos pares elétron-buraco criados seja coletado. Se aplicado um campo elétrico nas extremidades de um semicondutor, os elétrons na banda de condução migrarão em direção oposta ao campo elétrico aplicado. Assim, um elétron na banda de valência irá saltar para um buraco próximo a ele, deixando um buraco na posição original. A movimentação sucessiva das cargas e buracos configura uma corrente elétrica.

2.4.2 Detecção da Radiação

Quando a radiação interage com um material semicondutor, ela pode depositar parte ou toda sua energia dependendo do processo de interação. Essa energia cria pares elétron-buraco e a quantidade necessária para criação de um par, W , é constante e independe do tipo de radiação [31], de maneira que o número de pares criados será proporcional a energia, E , depositada pela radiação no material. Se um campo elétrico é aplicado ao detector os elétrons migrarão para o polo positivo, enquanto os buracos migrarão para o polo negativo. A capacitância do detector coleta as cargas gerando um pulso de amplitude, ΔV , proporcional à energia transferida ao detector, desde que nenhum elétron gerado deixe o volume sensível do detector:

$$\Delta V = \varepsilon \frac{Ee}{WC} \quad (2.24)$$

onde ε é a eficiência de coleta de cargas, e é a carga fundamental e C é a capacitância. A equação 2.24 nos permite supor que quanto menor for W , maior será a quantidade de cargas produzidas e maior será o pulso gerado. Entretanto, produzir muitas cargas não significa que todas serão coletadas. Dependendo do grau de impurezas do detector, as cargas podem ser aprisionadas ou se recombinarem dentro do volume sensível, resultando na coleta incompleta de carga. Pode ocorrer também, que parte da energia da radiação seja depositada fora do volume sensível produzindo, portanto, menos cargas. Esses efeitos reduzem a amplitude do sinal gerado e sua proporcionalidade com a energia da radiação incidente no detector é perdida.

A figura 2.13 mostra um esquema simplificado de um sistema de detecção. O pulso elétrico gerado pelas cargas coletadas no detector é amplificado em um pré-amplificador que converte os pulsos elétricos em um sinal de grau com amplitude ΔV proporcional à carga produzida [31]. Em seguida, a saída do pré-amplificador é direcionada para um conformador de pulso, no qual é convertida em pulsos de tensão com amplitude V_{pico} que, finalmente, são enviados para um analisador multicanal (MCA) o qual discrimina as amplitudes dos pulsos [31] e as disponibilizam em um histograma. O conjunto de todos os sinais produzidos forma o espectro para análise e interpretação.

Figura 2.13: Esquema mostrando os componentes básicos de um sistema de detecção

2.4.2.1 Resposta em energia (Resolução e Eficiência)

Uma propriedade importante dos detectores é sua resposta a uma fonte monoenergética. A resposta de um detector ideal a uma radiação de energia H_0 , seria uma função delta de Dirac centrada em H_0 . Entretanto, existem vários fatores como a coleta incompleta de carga, ruídos aleatórios do detector ou do sistema de instrumentação, ruídos estatísticos vindos da natureza discreta do sinal medido que sempre estarão presentes sem importar o quão perfeito for o sistema [31].

Os ruídos estatísticos surgem do fato da carga gerada no detector pela radiação não ser uma variável contínua, mas representa um número discreto de portadores de carga e nem sempre a mesma quantidade de energia depositada produzirá a mesma quantidade de carga [31].

Considerando que a formação dos portadores de carga é um processo de Poisson, pode-se estimar que para n_p portadores de carga gerados em média, as flutuações estatísticas serão caracterizadas pelo desvio padrão dessa medida, isto é, $\sqrt{n_p}$. Se esta for a única fonte de ruído do sistema e como n_p é tipicamente grande, a função resposta será uma função Gaussiana [31]:

$$G(H) = \frac{D}{\delta\sqrt{2\pi}} e^{-((H-H_0)^2/2\delta^2)} \quad (2.25)$$

onde H_0 é o centroide, D é a área abaixo da curva descrita por G e δ é o desvio padrão e está relacionado com a largura de meia altura (LMA) pela relação:

$$LMA = 2.35\delta \quad (2.26)$$

2.4.2.2 Eficiência de Detecção

Para que a radiação produza pares elétron-buraco, é necessário que interaja no material do detector. Considerando o esquema apresentado na figura 2.14, onde um feixe de fótons que incide em um detector com uma janela de espessura T_W e um cristal de espessura T_{det} , a eficiência de detecção na energia, E , pode ser obtida através da equação a seguir, que considera a fração de fótons que interagem no material:

$$\varepsilon(E) = e^{-\mu_W(E)T_W} [1 - e^{-\mu_{det}(E)T_{det}}] \quad (2.27)$$

onde, μ_W e μ_{det} são, respectivamente, os coeficientes de atenuação linear do material da janela e do detector.

Figura 2.14: Esquema simplificado de um detector

2.5 Número atômico efetivo - Z_{ef}

A literatura apresenta várias formas de determinar o número atômico efetivo de um material composto. Essas formas de cálculo podem ser, basicamente, separadas em duas categorias: (i) Aquelas que consideram apenas o número atômico do i -ésimo átomo do material composto, Z_i ponderadas por suas porcentagens correspondentes (fração de peso, porcentagem atômica, etc) [2, 5, 19] e (ii) Aquelas que são baseadas nas grandezas de interação (seção de choque totais ou diferenciais) [9, 32].

Dentro da segunda categoria, Monohara [33] supõe que o número atômico efetivo pode ser descrito através da razão entre a seção de choque atômica, σ_a e a seção de choque eletrônica, σ_e :

$$Z_{ef} = \frac{\sigma_a}{\sigma_e} \quad (2.28)$$

Nesta mesma categoria, Duavuchelle [20] utiliza a razão Rayleigh sobre Compton, dada pela razão entre a seção de choque diferencial Rayleigh (eq. 2.4) e a seção de choque diferencial Compton (eq. 2.14), que tem uma relação com o número atômico de forma que para um composto, o número atômico efetivo pode ser determinado.

Todos esses métodos fornecem valores de Z_{ef} diferentes para um mesmo material composto e uma definição mais geral mostra-se conveniente. Como apresentado por Bonnin [13], o número atômico efetivo de um composto está relacionado à uma medida particular dos raios X, denotada por Ψ , que pode ser a seção de choque, o coeficiente de atenuação mássico ou a razão Rayleigh/Compton por exemplo. Dessa maneira, dado um experimento com condições experimentais estabelecidas, qualquer material composto que fornece um sinal Ψ é equivalente a um composto químico cujo número atômico é $Z = Z_{ef}$ e fornece o mesmo sinal Ψ [13]. Portanto, o número atômico efetivo não é uma característica intrínseca do material composto mas sim um parâmetro que depende da grandeza de interação considerada em sua determinação.

3 *Métodos*

3.1 Amostras Analisadas

3.1.1 Materiais Tecido-Equivalentes

Neste trabalho foram utilizadas onze amostras de materiais tecido-equivalentes: Água (H_2O), Acrílico ($C_5H_8O_2$), Alumínio (Al), Nylon ($C_6H_{11}NO$), Teflon (C_2F_4), Poliacetal (CH_2O), Poliestireno (C_8H_8), Policarbonato ($C_{16}H_{18}O_5$), Etanol (C_5H_6O) e Álcool isopropílico (C_3H_8O). As amostras de água, alumínio e acrílico foram utilizadas para validação dos métodos utilizados para determinar a densidade, o coeficiente de atenuação linear e a razão Rayleigh/Compton, pois são materiais de referencia extensivamente utilizados por outros autores na literatura [34].

3.1.2 Tecidos Biológicos

As amostras biológicas de tecidos foram coletadas no Departamento de Patologia do Hospital das Clínicas da Faculdade de Medicina de Ribeirão Preto (HC - FMRP) que disponibilizou o material correspondente a parte dos tecidos retirados em procedimentos cirurgícos de mastectomia (retirada parcial ou total da mama invadida por tumores) ou mastoplastia redutora. Por inspeção visual, foram coletadas aquelas que apresentassem homogeneidade e quantidade suficiente para irradiação. Em seguida, as amostras foram armazenadas em recipientes plásticos contendo solução de formol tamponado (10%) com finalidade de manter a integridade dos tecidos [35, 36, 37]. Os tecidos foram classificados pelo Departamento de Patologia como tecido adiposo, glandular e neoplasia (carcinoma ductais invasivos de grau I, II e III, classificados assim pelo critério de Bloom e Richadison [38]). Um total de 30 amostras (10 de tecidos adiposo, 10 de tecido glandular e 10 carcinomas) foram utilizadas nas análises. Para reduzir erros randômicos, as medidas foram repetidas 3 vezes.

3.2 Determinação experimental da densidade

A densidade das amostras foram experimentalmente determinadas através do princípio de Arquimedes o qual relaciona a densidade de uma amostra, ρ , com a densidade de um líquido, ρ_l , através da relação:

$$\rho = \frac{m_r}{m_r - m_{ap}} \times \rho_l \quad (3.1)$$

onde m_r e m_{ap} são, respectivamente, a massa real (imersa no ar) e a aparente (imersa no líquido) da amostra. As massas foram medidas utilizando o arranjo representado na figura 3.1 que consiste de uma balança digital (Shimadzu modelo BL320H, com precisão de 0.001g), um porta amostras e um béquer com água ($\rho_l = 1g/cm^3$). As massas reais das amostras foram medidas colocando-as diretamente na balança, enquanto as aparentes foram medidas colocando-as no porta amostra de forma que ficassem imersas no líquido como ilustrado na figura 3.1. Quando a amostra era menos densa que a água, um objeto de chumbo de massa aparente conhecida foi utilizada para que a afundasse nesse líquido e posteriormente, para aplicar a equação 3.1, a massa aparente do chumbo foi descontada dessa medida.

Figura 3.1: Arranjo experimental para determinação da massa real e aparente

A incerteza de ρ foi determinada através da expressão mostrada a seguir,

obtida pela propagação de incertezas na equação 3.1.

$$\sigma_{\rho}^2 = \rho^2 \left(\left(\frac{\sigma_{m_r}}{m_r} \right)^2 + \left(\frac{\sigma_{m_{ap}}}{m_r + m_{ap}} \right)^2 + \sigma_{\rho_{H_2O}}^2 \right) \quad (3.2)$$

onde σ_{m_r} e $\sigma_{m_{ap}}$ são, respectivamente, as incertezas nas medidas da massa real e aparente e $\sigma_{\rho_{H_2O}}$ é a incerteza na densidade da água ($\pm 0.007 \text{ g/cm}^3$).

3.3 Z_{ef} - Método de Atenuação

3.3.1 Arranjos experimentais

Os coeficientes de atenuação lineares foram determinados através de um arranjo esquematizado na figura 3.2, construído com o intuito de medir a distribuição de energia dos fótons transmitidos através da amostra utilizando geometria de feixe estreito, a qual permite reduzir a detecção de partículas secundárias e fótons espalhados no detector através da utilização de colimadores e grandes distâncias [3].

Os componentes básicos do arranjo experimental são a fonte, sistema de colimação e detecção. A fonte pode ser qualquer emissor de raios X ou γ . Os colimadores posicionados na saída da fonte servem para conformar o tamanho do feixe, já os colocados na trajetória do feixe são utilizados para absorver os fótons espalhados, além disso, muitas vezes é necessário uma colimação adicional na entrada do sistema de detecção, para não saturar o detector em função da grande quantidade de fótons atingindo o seu volume sensível. O detector, por sua vez, permite discriminar a energia dos fótons que o atingem, dessa forma, foi envolvido com folhas de chumbo para reduzir a detecção de radiação de background.

Figura 3.2: Arranjo experimental para determinação dos coeficientes de atenuação lineares em geometria de feixe estreito

Neste trabalho as medidas de coeficiente de atenuação linear foram obtidas tanto em 59.54 keV (com fonte de ^{241}Am) quanto na faixa de energia de 15 à 45 keV

Tabela 3.1: Condições experimentais dos arranjos utilizados em cada experimento.

Arranjo I		Arranjo II	
Fonte: ^{241}Am (11mCi)		Fonte: Tubo de raios X com alvo de W (Philips PW 2215/20)	
Detector: XR - 100T - CdTe (Amptek)		Detector: XR-123 SSD (Amptek)	
Resolução de energia: 660 eV em 59.54 keV		Resolução de energia: 145 eV em 5.9 keV	
Distâncias	Diâmetro dos colimadores	Distâncias	Diâmetro dos colimadores
$\overline{FA} = 4.63 \text{ cm}$	$C1 = 0.2 \text{ cm}$	$\overline{FA} = 41 \text{ cm}$	$C1 = 0.1 \text{ cm}$
$\overline{AD} = 4 \text{ cm}$	$C2 = 0.2 \text{ cm}$	$\overline{AD} = 359 \text{ cm}$	$C2 = 0.2 \text{ cm}$
$\overline{C1C2} = 1.63 \text{ cm}$	$C3 = 0.1 \text{ cm}$	$\overline{C1C2} = 11 \text{ cm}$	$C3 = 0.2 \text{ cm}$
$\overline{C2A} = 3 \text{ cm}$	$C4 = 0.4 \text{ cm}$	$\overline{C2A} = 16 \text{ cm}$	$C4 = 0.2 \text{ cm}$
$\overline{AC3} = 3 \text{ cm}$		$\overline{AC3} = 267 \text{ cm}$	
$\overline{C3C4} = 1 \text{ cm}$		$\overline{C3C4} = 84 \text{ cm}$	

(com tubo de raios X com alvo de W). Em ambos os casos foi utilizado geometria como mostrada na figura 3.2, no entanto, em cada caso as distâncias indicadas na figura, fonte, sistema de colimação e detecção foram diferentes. A tabela 3.1 mostra as condições nas quais os experimentos foram realizados. O detector utilizado em cada arranjo foi escolhido de modo a oferecer maior eficiência de detecção na faixa de energia utilizada em cada experimento.

Ambos os arranjos experimentais foram montados no Laboratório de Física das Radiações e Dosimetria do Departamento de Física da Faculdade de Filosofia Ciências e Letras de Ribeirão Preto, Universidade de São Paulo (DF-FFCLRP, USP).

Com as distâncias $\overline{C2A}$, $\overline{AC3}$, $\overline{C3C4}$ junto com as aberturas dos colimadores C3 e C4 indicadas nesta tabela, pôde-se determinar o ângulo máximo de espalhamento que será detectado. Na configuração do arranjo I, o espalhamento máximo que pode ocorrer no sistema é de 0.86° enquanto na do arranjo II é de 1.16° satisfazendo a condição de feixe estreito.

Para ambos os arranjos, as amostras foram posicionadas dentro de recipientes

cilíndricos de acrílico com 14 mm de diâmetro e largura de 10 mm e 20 mm, escolhida de acordo com a espessura da amostra. O recipiente, então, foi fechado com filme PVC de $(1,5 \pm 0,2) \mu\text{m}$ de espessura para acomodar as amostras biológicas de modo a proporcionar uma superfície regular.

Nas condições do arranjo I, a radiação incidente (sem amostra) no detector proporcionou uma taxa de contagem de 500 contagens por segundo(c/s) e 200 c/s para o transmitido (com amostra). O tempo de aquisição de 1800 s foi suficiente para reduzir as incertezas estatísticas para valores menores que 1%.

Ainda que a distância da fonte até o detector na configuração do arranjo II fosse 400 cm ($\overline{AD} + \overline{FA}$), não foi possível utilizar apenas um kVp devido a alta fluência de fótons. As medidas foram realizadas utilizando 28 kVp e 60 kVp com filtragem (3mm de Al em 28 kVp e 3mm de Al + 1mm Cu em 60 kVp) para eliminar fótons de baixa energia e evitar a saturação do detector causando tempo morto que prejudica a medida do espectro. O tempo de aquisição foi configurado para 3600 segundos utilizando uma taxa de contagem de 500 c/s.

3.3.2 Determinação experimental do coeficiente de atenuação linear

Do ponto de vista experimental, o coeficiente de atenuação linear na energia E , é descrito pela lei de Lambert-Beer modificada [35]:

$$\mu(E) = \frac{1}{x} \ln \left(\frac{I_0(E) - I_b(E)}{I(E) - I_b(E)} \right) + \frac{1}{x} \ln(1 + SPR) + \mu_{ar}(E) \quad (3.3)$$

em que t é a espessura da amostra, I_b é a intensidade do background, SPR é a razão entre os fótons espalhados e primários e μ_{ar} é o coeficiente de atenuação linear do ar. Através da equação 3.3 nota-se que a determinação precisa de $\mu(E)$ depende de vários fatores como a intensidade da radiação de background, fótons espalhados que chegam no detector e a atenuação do ar. Como as influências desses termos somados são menores que 1% (0.3% do SPR, 0.25% da atenuação do ar e 0.1% do background) [39], essa equação pode ser reescrita como:

$$\mu(E) = \frac{1}{t} \ln \left(\frac{I_0(E)}{I(E)} \right) \quad (3.4)$$

Considerando que as intensidades seguem uma distribuição de Poisson [31], isto é, $\sigma_{I_0}^2 = I_0$ e $\sigma_I^2 = I$, a variância da medida do coeficiente de atenuação linear será dada por:

$$\sigma_\mu^2 = \frac{1}{t^2} (\sigma_t^2 \mu^2 + 1/I_0 + 1/I) \quad (3.5)$$

A partir da equação 3.5, determina-se o erro experimental de μ .

3.3.2.1 Otimização do método para determinação do coeficiente de atenuação linear

A otimização deste método baseia-se em encontrar a espessura que minimiza a variância de μ [40] dada pela equação 3.5, ou seja, a derivada de primeira ordem em relação a t da variância deve ser nula. Considerando que a incerteza na espessura é pequena em relação as incertezas estatísticas, essa expressão pode ser escrita como:

$$\sigma_\mu^2 = \frac{1}{I_0 t^2} (1 + e^{\mu t}) \quad (3.6)$$

A derivada parcial da equação 3.6 em relação a t é dada por :

$$\frac{\partial \sigma_\mu^2}{\partial t} = \frac{-2}{I_0 t^3} (1 + e^{\mu t} - \frac{1}{2} t \mu e^{\mu t}) \quad (3.7)$$

O valor mínimo de t ocorre quando o termo entre parenteses for nulo, isto é, quando $1 + e^{\mu t} = \frac{\mu t}{2} e^{\mu t}$. Dessa forma, numericamente encontra-se facilmente que a espessura ótima será aproximadamente dada por:

$$t_{ótimo} \simeq 2.2 \frac{1}{\mu} \quad (3.8)$$

A relação 3.8 diz que a espessura ótima não depende apenas do material, mas também apresenta dependência energética.

Para verificar a influência do uso de $t_{ótimo}$, medidas experimentais do μ em 59.54 keV do alumínio foram realizadas utilizando $0.26t_{ótimo}$, $0.53t_{ótimo}$ e $0.83t_{ótimo}$. O gráfico na figura 3.3 (b) mostra que o uso do $t_{ótimo}$ reduz consideravelmente a diferença relativa entre o valor experimental e teórico do XCOM [41].

Figura 3.3: *Influência da espessura na medida de μ*

3.3.3 Determinação do Número atômico efetivo através do coeficiente de atenuação mássico: O Algoritmo

O número atômico efetivo obtido a partir coeficiente de atenuação mássico, $Z_{ef}^{\mu/\rho}$, foi determinado seguindo o procedimento a seguir:

- Inicialmente, os coeficientes de atenuação mássico dos elementos puros ($1 < Z < 10$) foram obtidos da base de dados do XCOM [41] para as energias de 15 à 60 keV.
- Para cada energia, E , uma curva teórica de $\mu/\rho(E)$ em função do número atômico, Z , foi construída.
- Nessas condições, o $Z_{ef}^{\mu/\rho}(E)$ pode ser determinado a partir de valores experimentais ou teóricos (eq. 2.20) de $\mu/\rho_{comp}(E)$ através de uma interpolação linear deste valor na curva de μ/ρ vs Z na energia correspondente.

A incerteza em $Z_{ef}^{\mu/\rho}$ foi determinada a partir da máxima variação observada em μ/ρ ($\Delta(Z_{ef}^{\mu/\rho}) = Z_{ef}^{\mu/\rho \pm \sigma_{\mu/\rho}}$).

3.4 Z_{ef} - Método de Espalhamento

3.4.1 Arranjo experimental

Para determinação do razão Rayleigh/Compton, o arranjo I apresentado na seção 3.3.1 foi modificado como mostra o esquema na figura 3.4, o detector

e a amostra foram angulados que forma a satisfazer a geometria de reflexão, a qual permite taxas de contagens mais elevadas [42] e permite simplificações trigonométricas [43]. Pela taxa de contagem ser pequena ($\sim 5\text{c/s}$), o tempo de aquisição utilizado em cada medida foi aproximadamente 10 horas.

Figura 3.4: Arranjo experimental para determinação dos fótons espalhados.

3.4.2 Modelo analítico para o número de fótons espalhados Rayleigh e Compton

A elaboração de um modelo analítico real do número de fótons espalhados é complicada, pois é necessário considerar muitas variáveis em uma integral no volume de detecção dado pela intersecção do feixe com o ângulo sólido compreendido entre o detector e a amostra como indicado na figura 3.5(a). Esse cálculo é geralmente feito através de simulações computacionais [44]. Entretanto, a seguinte formulação analítica fornece resultados aceitáveis [43].

Considerando um feixe estreito incidindo em uma amostra de espessura t como mostrado na figura 3.5(b), o número de fótons que chega em um elemento de caminho, dl_1 , dentro da amostra será descrito por:

$$N_{l_1} = N_0 e^{-\mu_1 l_1} \quad (3.9)$$

onde N_0 é o número de fótons incidentes, μ_1 é o coeficiente de atenuação linear do material na energia E_1 e l_1 é o caminho percorrido pelos fótons até interagir. No

Figura 3.5: Modelos geométricos para o número de fótons espalhados. (a) Completo e (b) Simplificado

elemento espalhador, a fração de fótons que interagem é dada por:

$$dN = \mu N_{l_1} dl_1 \quad (3.10)$$

Dos fótons que interagem, a fração que espalha por efeito Compton em um ângulo θ será:

$$dN_{s,C} = \frac{n_v \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_c}{\mu} dN \quad (3.11)$$

onde n_v é o número de átomos por volume, $(d\sigma/d\Omega)_c$ é a seção de choque diferencial Compton. Substituindo 3.9 em 3.10 e depois na 3.11 temos que:

$$dN_{s,C} = \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_c N_0 e^{-\mu l_1} dl_1 \quad (3.12)$$

A fração de fótons espalhados detectada é obtida multiplicando a equação 3.12 pela atenuação dos fótons espalhados até saírem da amostra ($e^{-\mu_2 l_2}$), pela eficiência do detector na energia do fóton espalhado, $\varepsilon(E_2)$ e pelo ângulo sólido subtendido pelo detector, $\Delta\Omega_{det}$.

$$dN_{s,C}^d = \varepsilon(E_2)\Delta\Omega_{det} \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_c N_0 n_v e^{-\mu_1 l_1} e^{-\mu_2 l_2} dl_1 \quad (3.13)$$

Integrando sobre todo o caminho, $t' = t/\text{sen}(\theta/2)$, temos que o número de fótons detectados é dado por:

$$N_{s,C}^d = \varepsilon(E_2)N_0 n_v \int \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_c \Delta\Omega_{det} e^{-\mu_1 l_1} e^{-\mu_2 l_2} dl_1 \quad (3.14)$$

A geometria de reflexão permite fazer $l_1 = l_2 = l$, uma vez que os ângulos de incidência e reflexão são iguais. A consideração de feixes estreito paralelos, permite supor que os ângulos sólidos e de espalhamento são constantes ao longo do caminho de integração. Dessa forma a equação 3.14 pode ser escrita como:

$$N_{s,C}^d = \varepsilon(E_2)N_0 n_v \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_c \Delta\Omega_{det} \int_0^{t/\text{sen}(\theta/2)} e^{-(\mu_1 + \mu_2)l} dl \quad (3.15)$$

Resolvendo a integral temos que:

$$N_{s,C}^d = \varepsilon(E_2)N_0 n_v t \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_c \Delta\Omega_{det} A_C. \quad (3.16)$$

onde A_C é o fator de atenuação dado por:

$$A_C = \frac{1}{t} \left(\frac{1 - e^{-\frac{t}{\text{sen}(\theta/2)}(\mu_1 + \mu_2)}}{\mu_1 + \mu_2} \right) \quad (3.17)$$

A expressão 3.16, descreve uma aproximação para o número de fótons espalhados Compton detectados e a seção de choque Compton pode ser obtida isolando-a na equação:

$$C = \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_c = \frac{N_{s,C}^d}{\varepsilon(E_2)N_0 n_v t \Delta\Omega_{det} A_C} \quad (3.18)$$

Analogamente, a seção de choque Rayleigh pode ser escrita como:

$$R = \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_R = \frac{N_{s,R}^d}{\varepsilon(E_1)N_0 n_v t \Delta\Omega_{det} A_R} \quad (3.19)$$

onde A_R é o fator de atenuação para os fótons Rayleigh cuja a expressão é análoga a de 3.17, porém com $\mu_1 = \mu_2$.

Finalmente, com as expressões para o número de fótons espalhados por cada processo, a razão Rayleigh/Compton pode ser escrita como:

$$\frac{R}{C} = \frac{N_R^d \varepsilon(E_2) A_C}{N_C^d \varepsilon(E_1) A_R} \quad (3.20)$$

Da equação 3.20, a medida experimental da razão Rayleigh/Compton é influenciada por um termo relativo a atenuação na própria amostra e outro relativo a eficiência do detector nas energias dos fótons incidentes e espalhados. Os fatores de atenuação foram calculados considerando uma amostra de acrílico ($\rho = 1.19 \text{ g/cm}^3$). As eficiências foram determinadas a partir da equação 2.27. Segundo o fabricante o modelo de detector utilizado (XR-100T-CdTe da Amptek) possui uma janela de Berílio ($\rho = 1.85 \text{ g/cm}^3$) com espessura de 0.1 mm e um cristal de CdTe ($\rho = 5.85 \text{ g/cm}^3$) com 1 mm de espessura. Os coeficientes de atenuação mássicos necessários para os cálculos foram retirados do XCOM [41]. A partir dos gráficos mostrados na figura 3.6 observa-se que a alteração no valor de R/C provocada por esses fatores (A_R/A_C e $\varepsilon(E_2)/\varepsilon(E_1)$) é menor que 1% para ângulos de espalhamento menores que 40° e espessuras menores que 2 cm.

Figura 3.6: (a) Razão entre os fatores de atenuação de cada processo e (b) Razão das eficiências do detector em função do ângulo de espalhamento

3.4.3 Otimização das medidas de espalhamento Rayleigh e Compton

Umas das dificuldades encontradas na determinação da razão Rayleigh sobre Compton está na separação dos picos correspondentes aos fótons espalhados por cada processo. Se por um lado a separação entre os picos aumenta com o ângulo de espalhamento por outro as intensidades, principalmente a do pico Rayleigh, diminuem [45] necessitando tempos de medida ou fontes de alta taxa. No caso deste experimento, a otimização consistiu em encontrar um ângulo de espalhamento tal que fosse possível diferenciar os dois picos e ao mesmo tempo fornecesse contagens adequadas. Os espectros de espalhamento foram adquiridos para vários ângulos utilizando uma amostra de acrílico de 15 mm de espessura e o tempo de aquisição de 10 horas para verificar qual ângulo de espalhamento cumpre as condições de otimização.

Vários espectros foram coletados em ângulos de espalhamento diferentes (figura 3.7). Com a energia do fóton espalhado, determinado pelo centroide do pico Compton, o ângulo de espalhamento pôde ser confirmado aplicando a equação 3.21 obtida isolando θ na equação 2.11.

$$\theta = \cos^{-1} \left(1 - \frac{hv - hv'}{\frac{hvhv'}{m_0c^2}} \right) \quad (3.21)$$

A partir dos espectros mostrados nos gráficos da figura 3.7(a) observa-se que ângulos baixos como o de 15° não permitem separar os picos Rayleigh e Compton (pela resolução em energia do detector) e em ângulos muito altos o pico Rayleigh não é facilmente observado pela baixa intensidade. Na figura 3.7(b) são apresentados os espectros obtidos para ângulos de 34° à 42° a partir dos quais, levando em conta a separação dos picos e o tempo de aquisição, chegou-se à conclusão que ângulos de espalhamento de 40° fornecem uma separação adequada para realizar a determinação das áreas dos picos.

3.4.4 Determinação experimental da razão Rayleigh/Compton

A figura 3.8 mostra o espectro típico de coletado neste trabalho. Como pode ser visto, no ângulo escolhido (40°), é possível identificar os picos correspondentes à

Figura 3.7: Espectros de espalhamento para vários ângulos

cada processo de espalhamento. Como a distribuição em energia dos fótons Rayleigh segue em primeira aproximação uma distribuição normal com média centrada em 59.54 keV, o número de fótons espalhados por esse processo foi determinado a partir da relação:

$$N_{R,exp}^d \simeq 2 \times A_2 \quad (3.22)$$

onde A_2 é a área da metade direita do pico Rayleigh.

A forma do pico Compton é mais complexa [46], então, o número de fótons Compton foi determinado, subtraindo a área Rayleigh, $N_{R,exp}^d$, da área total do espectro, A_1 :

$$N_{C,exp}^d \simeq A_1 - 2 \times A_2 \quad (3.23)$$

3.4.5 Determinação de um Número atômico efetivo através da Razão Rayleigh/Compton: O Algoritmo

Para determinar o número atômico efetivo a partir da razão Rayleigh/Compton, $Z_{ef}^{R/C}$, o procedimento a seguir foi realizado:

- Os valores de $F(X, Z)$ e $S(X, Z)$ foram coletados da base de dados de Hubdell [26] para $0.8 \text{ \AA}^{-1} < X < 4 \text{ \AA}^{-1}$ e $1 < Z < 19$ e utilizados para calcular $(d\sigma/d\Omega)_R$ (eq. 2.4) e $(d\sigma/d\Omega)_C$ (eq. 2.14).

Figura 3.8: Arranjo experimental para determinação dos fótons espalhados.

- Uma curva teórica de $R/C(x)$ em função do número atômico, Z , foi construída, para cada x .
- $Z_{ef}^{R/C}(x)$ pode ser determinado a partir de valores experimentais ou teóricos de $R/C_{comp}(x)$ interpolando este valor na curva de R/C em função de Z no momento transferido correspondente.

4 *Resultados e Discussões*

4.1 Z_{ef} - Método de Atenuação

4.1.1 Validação do Método para determinar ρ

Na tabela 4.1 encontram-se os valores de densidade obtidos experimentalmente através do método apresentado na seção 3.2 juntamente com os valores teóricos extraídos da literatura [34, 47]. Como pode ser observado, as diferenças entre os valores experimentais e teóricos foram menores que 0.6%, dentro das incertezas experimentais (máxima de 0.9%) de modo que o método utilizado possibilitou determinar a densidade de forma adequada.

Tabela 4.1: Comparação entre valores de ρ determinado experimentalmente com os presentes na literatura.

Material	$\rho(g/cm^3)$		D(%)
	Este Trabalho	Literatura	
H_2O	$1.001 \pm 0.010 (0.9\%)$	1.000[34]	0.1%
$C_5H_8O_2$	$1.190 \pm 0.010 (0.8\%)$	1.190[34]	-
Al	$2.682 \pm 0.018 (0.7\%)$	2.699[47]	0.6%

4.1.2 Validação dos Métodos para determinar μ

Os valores experimentais de μ para os materiais escolhidos para validar o método, obtidos na energia de 59.54 keV, são apresentados na tabela 4.2. As diferenças encontradas com os valores experimentais (com incertezas de no máximo 3.8%) e presentes na literatura são menores que 3%, validando o método para obter μ através do arranjo I.

A figura 4.1 mostra o gráfico do coeficiente de atenuação linear da água em função da energia, junto com valores experimentais e teóricos encontrados na

Tabela 4.2: Comparação entre os valores de μ (em 59.54 keV) determinados experimentalmente com os disponíveis na literatura

Material	$\mu(cm^{-1})$		D(%)
	Este Trabalho	Literatura	
H_2O	$0.209 \pm 0.008 (3.8\%)$	0.204[45]	2.5%
$C_5H_8O_2$	$0.224 \pm 0.007 (3.1\%)$	0.227[48]	1.3%
Al	$0.756 \pm 0.016 (2.1\%)$	0.750[47]	0.8%

literatura [45, 41]. Como pode ser observado da figura, existe uma concordância entre os resultados deste trabalho com os apresentados na literatura dentro das incertezas experimentais (7% em baixa energia e 4% em alta energia) de modo que o método experimental utilizado para feixes polienergéticos (Arranjo II) permite determinar μ de forma acurada.

Figura 4.1: Coeficiente de atenuação linear mássico em função da energia.

4.1.3 Comparação de μ/ρ experimentais com a literatura

Os métodos para determinar μ e ρ foram validados e dessa forma pôde-se obter o coeficiente de atenuação linear mássico tanto para 59.54 keV quanto para o intervalo de energia (15 a 45 keV). A tabela 4.3 mostra os valores experimentais do

Tabela 4.3: Comparação entre os valores de μ/ρ experimentais com a literatura em 59.54 keV

Material	$\mu/\rho(g/cm^3)$		D(%)
	Este trabalho	Literatura[41]	
Nylon ($C_6H_{11}NO$)	$0.191 \pm 0.005(2.6\%)$	0.194	1.30%
Teflon (C_2F_4)	$0.186 \pm 0.003(1.6\%)$	0.189	1.50%
Polycarbonato ($C_{16}H_{14}O_3$)	$0.181 \pm 0.007(3.8\%)$	0.187	3.20%
Poliacetal (CH_2O)	$0.190 \pm 0.004(2.1\%)$	0.194	2.20%
Poliestireno (C_8H_8)	$0.184 \pm 0.008(4.3\%)$	0.187	1.60%
Etanol (C_2H_6O)	$0.204 \pm 0.011(5.4\%)$	0.201	1.50%
Alcool isopropílico (C_3H_8O)	$0.194 \pm 0.011(5.7\%)$	0.200	3.00%

μ/ρ de materiais tecido-equivalentes a tecidos junto com os teóricos correspondentes obtidos através do programa XCOM. Em uma breve análise, observa-se que além dos valores teóricos estarem dentro das incertezas experimentais, as diferenças encontradas entre os valores experimentais e teóricos foram menores que 5% para todos os materiais avaliados.

A figura 4.2 mostra os gráficos de μ/ρ experimentais e teóricos (também obtidos através do programa XCOM) em função da energia para o polycarbonato e nylon. A maior diferença encontrada foi de 5% para o polycarbonato e 7% para o nylon e além disso, existe concordância entre estes valores dentro das incertezas experimentais (7% em baixa energia e 4% em baixa energia).

4.1.4 Algoritmo para determinação de $Z_{ef}^{\mu/\rho}$.

Na literatura, a seção de choque do composto (eq. 2.21) é extensivamente utilizada para determinar um Z_{ef}^σ . Desta maneira, Taylor [11] desenvolveu um programa (*Auto-Z_{eff}*) que realiza esse cálculo utilizando valores de seção de choque dos elementos, presentes no composto, obtidos a partir do XCOM [41]. Para verificar se o algoritmo desenvolvido neste trabalho estima valores de Z_{ef}^σ condizentes com os daquele programa, modificamos o algoritmo para considerar as mesmas condições do programa *Auto-Z_{eff}* e comparamos nossas estimativas de Z_{ef}^σ com as do *Auto-Z_{eff}*.

Figura 4.2: Coeficiente de atenuação mássico em função da energia para (a) policarbonato e (b) nylon.

O gráfico da figura 4.3 mostra o comportamento de Z_{ef}^σ em função da energia para ambos os métodos. Esses resultados mostram que o procedimento de cálculo realizado pelo nosso algoritmo está adequado. Então, de maneira similar, pode-se determinar um número atômico efetivo a partir do coeficiente de atenuação mássico [13].

Figura 4.3: Número Atômico Efetivo em função da energia para (a) Água e (b) Acrílico

4.1.5 Sensibilidade no método para determinação de $Z_{ef}^{\mu/\rho}$.

A determinação de um número atômico efetivo através de μ/ρ , $Z_{ef}^{\mu/\rho}$, segue o mesmo raciocínio utilizado para obter Z_{ef}^σ , porém dispensa o conhecimento da

composição do material estudado, pois μ/ρ pode ser determinado experimentalmente de forma simples como visto anteriormente.

Para verificar as limitações deste método, as curvas teóricas de μ/ρ em função do número atômico foram avaliadas para várias energias dentro da faixa utilizada. A medida que a energia aumenta, a sensibilidade do método (inclinação da curva) diminui como pode ser observado nos gráficos da figura 4.4.

Figura 4.4: Coeficiente de atenuação mássico em função do número atômico para varias energias. As retas tracejadas horizontais indicam o μ/ρ teórico da água.

Em energias baixas ($\leq 30\text{keV}$, figura 4.4(a)), o método apresenta sensibilidade adequada para determinação experimental de um Z_{ef} . No entanto, conforme a energia aumenta ($\geq 30\text{keV}$, figura 4.4(b)), o método torna-se mais sensível à pequenas variações de μ/ρ (como as observadas em dados experimentais) gerando grandes perturbações nos valores de $Z_{ef}^{\mu/\rho}$ quando comparados aos obtidos através de μ/ρ teóricos.

Aparentemente, a diminuição da inclinação das curvas de μ/ρ em função de Z poderiam ser benéficas, pois materiais de μ/ρ muito próximos poderiam ser diferenciados através do $Z_{ef}^{\mu/\rho}$, no entanto, tratando-se de medidas experimentais, as variações em $Z_{ef}^{\mu/\rho}$ aumentam, por exemplo, dado um $\mu/\rho \pm \Delta(\mu/\rho)$, a variação observada no número atômico efetivo, $\Delta(Z_{ef}^{\mu/\rho})$, será igual a $\Delta(\mu/\rho)/\beta$ onde β é a inclinação da curva(figura 4.4).

Tabela 4.4: Comparação de $Z_{ef}^{\mu/\rho}$ experimentais e teóricos em 59.54 keV para materiais tecido-equivalentes

Material	$Z_{ef}^{\mu/\rho}$		D(%)
	Experimental	Teórico	
Nylon ($C_6H_{11}NO$)	$7.95 \pm 1.50 (18.8\%)$	8.60	7.6%
Teflon (C_2F_4)	$7.40 \pm 0.32 (4.3\%)$	7.70	3.9%
Poliacetal (CH_2O)	$7.84 \pm 1.21 (15.4\%)$	9.05	13.4%
Poliestireno (C_8H_8)	$7.18 \pm 1.15 (16.0\%)$	7.55	4.9%
Polícarbonato ($C_{16}H_{18}O_5$)	$6.80 \pm 0.97 (14.3\%)$	7.78	12.6%
Etanol (C_5H_6O)	$9.56 \pm 0.45 (4.7\%)$	9.40	2.0%
Álcool isopropílico (C_3H_8O)	$9.04 \pm 1.97 (21.8\%)$	9.37	11.1%

4.1.6 $Z_{ef}^{\mu/\rho}$ de materiais tecido-equivalentes e tecidos biológicos

Com os coeficientes de atenuação mássico mostrados na seção 4.1.3 pôde-se determinar $Z_{ef}^{\mu/\rho}$ dos materiais. Na tabela 4.4 estão os valores de $Z_{ef}^{\mu/\rho}$ em 59.54 keV, energia na qual a inclinação da curva de μ/ρ em função de Z é pequena (figura 4.4) e portanto mesmo com incertezas menores que 3% em μ/ρ , as encontradas em $Z_{ef}^{\mu/\rho}$ chegam a 15% como por exemplo no caso do poliacetal. Como foi visto na seção 3.3.2.1, existem condições que minimizam a incerteza quanto a de μ/ρ , sendo elas, a utilização da espessura ótima do material e tempo de aquisição longo para reduzir os erros estatísticos. Este último requisito é facilmente cumprido uma vez que a taxa de contagem na geometria de transmissão é alta (500 c/s) enquanto o primeiro é mais complicado, pois a espessura ótima de materiais como acrílico chegam a ser maiores que 10 cm dificultando a medida em função de limitações do arranjo utilizado. Portanto, como não foi possível utilizar a espessura ótima, as incertezas e diferenças observadas nos valores de $Z_{ef}^{\mu/\rho}$ já eram esperadas (figura 3.3(b)).

Na figura 4.7, estão os gráficos de $Z_{ef}^{\mu/\rho}$ experimentais e teóricos em função da energia. Neste caso, o uso de uma espessura ótima é complicado pois o mesmo muda com a energia uma vez que é derivado do coeficiente de atenuação linear do material de modo que é observado um afastamento dos valores experimentais dos teóricos, mas os valores teóricos se encontram dentro das incertezas experimentais de 5%.

É importante notar que a utilização de um feixe polienergético permite a obtenção de Z_{ef} em um intervalo mais amplo, inclusive, uma vez que as fontes utilizadas em radiodiagnóstico são polienergéticas, forneceria toda a informação necessária para avaliar Z_{ef} .

Figura 4.5: Comparação entre os $Z_{ef}^{\mu/\rho}$ teóricos (curvas contínuas) e experimentais (círculos) em função da energia para (a) policarbonato e (b) nylon.

Tecidos biológicos, em geral, não têm sua composição conhecida, a priori, e ainda um mesmo tipo de tecido pode ser afetado por fatores genéticos (espécie, doenças) e não genéticos (alimentação, idade, sexo e fatores do ambiente) [49], tornando a determinação de Z_{ef}^{σ} complicada ($Auto - Z_{eff}$). Então nesses casos, determinar Z_{ef} através de μ/ρ mostra-se conveniente.

A figura 4.6 exibe o digrama caixa do $Z_{ef}^{\mu/\rho}$ em 59.54 keV de alguns tecidos mamários (adiposo, glandular, tumor (CDI)). Na faixa de energia de 15 à 35 keV, para os mesmos tipos de tecidos, os valores de número atômico efetivo são mostrados no gráfico da figura 4.7. Em ambos os casos, tecidos tumorais apresentam valores médios de número atômico efetivo maiores que os de tecidos saudáveis, assim como predito no trabalho de Taylor [4]. Tecidos tumorais podem exibir concentrações alteradas de Hidrogênio, Carbono, Nitrogênio e Oxigênio e elementos traços (Cobre, Zinco, Ferro, Magnésio, etc), quando comparadas as concentrações em tecidos saudáveis em função das diferenças metabólicas entre os dois tipos de tecidos [49]. Essas alterações modificam as propriedades radiológicas dependentes do número atômico

e consequentemente fornecem valores de número atômico efetivo diferentes.

Figura 4.6: Diagrama box-plot do $Z_{ef}^{\mu/\rho}$ de tecidos mamários

Figura 4.7: $Z_{ef}^{\mu/\rho}$ médios de tecidos mamários em função da energia.

4.2 Z_{ef} - Método de Espalhamento

4.2.1 Validação do Método para obter R/C

A metodologia empregada para determinação da razão Rayleigh/Compton foi validada a partir de medidas de espalhamento em 56.7° e 59.54 keV, condições

Tabela 4.5: Comparação entre os valores de R/C experimentais com os da literatura.

Material	Determinado	Donativi et al.[50]	D(%)
H_2O	$0.024 \pm 0.005 (21.0\%)$	$0.025 \pm 0.004 (16\%)$	4.0%
$C_5H_8O_2$	$0.019 \pm 0.002 (11.0\%)$	$0.019 \pm 0.003 (16\%)$	-
Al	$0.086 \pm 0.005 (6.0\%)$	$0.095 \pm 0.013 (14\%)$	9.4%

que correspondem a um momento transferido de $2.28 \text{ \AA}^{-1}$, o mesmo utilizado por Donativi *et al.* [50]. Os valores de R/C de ambos os trabalhos estão apresentados na tabela 4.5. Como pode ser visto, há concordância entre os valores determinados experimentalmente neste trabalho e a literatura uma vez que as diferenças entre estes valores estão dentro das incertezas experimentais (máxima de 21%) e dessa forma validou-se o método.

4.2.2 Algoritmo para determinação de $Z_{ef}^{R/C}$

A figura 4.8 mostra os gráficos que comparam valores de R/C_{comp} para água e acrílico calculado pelo algoritmo proposto neste trabalho com os obtidos a partir do trabalho de Rao et al. [34] e através do programa ZXCOM [21].

Figura 4.8: Comparação entre a razão Rayleigh/Compton em 59.54 keV em função do momento transferido com a literatura para (a) Água e (b) Acrílico.

A forma mais conveniente de validar o algoritmo desenvolvido neste trabalho, seria comparar com valores teóricos de $Z_{ef}^{R/C}$ com os de outros autores. Embora o programa ZXCOM, desenvolvido concomitantemente a este trabalho, que realiza este

cálculo a partir dos valores teóricos de $F(x, Z)$ e $S(x, Z)$ do trabalho de Hubbell et al. [26], tanto os valores de R/C_{comp} quanto os de $Z_{ef}^{R/C}$ correspondentes, não condizem com os calculados pelo nosso algoritmo utilizando a mesma base de dados como pode ser visto nos gráficos da figura 4.8. É importante mencionar o resultado obtido por Eyecioglu [22], onde é mostrado que os valores de $Z_{ef}^{R/C}$ obtidos através do programa ZXCOM não condizem com dados experimentais disponíveis na literatura devido uma série de fatores. Infelizmente não foi possível verificar o processo de cálculo do ZXCOM, pois os autores disponibilizam apenas o arquivo executável. Então, a validação foi consolidada comparando valores de R/C_{comp} calculados de forma teórica através do nosso algoritmo com outros disponíveis na literatura (Rao et al. [34] 4.8. A partir da boa concordância com estes resultados nosso algoritmo foi validado.

Com o algoritmo validado pôde-se determinar valores de $Z_{ef}^{R/C}$ de compostos. Os gráficos da figura 4.9 mostram o comportamento desse parâmetro em 59.54 keV em função do momento transferido. Inicialmente há uma forte variação com x , porém, conforme este aumenta, os valores de $Z_{ef}^{R/C}$ atingem um limiar, pois a razão Rayleigh/Compton do composto decai exponencialmente conforme x aumenta (figura 4.8).

Figura 4.9: Gráficos de (a) Variação de $Z_{ef}^{R/C}$ da água em função do momento transferidos e (b) Variação de $R/C_{\text{água}}$ em função do momento transferido.

Na tabela 4.6, como pode ser observado, os valores teóricos de $Z_{ef}^{R/C}$

Tabela 4.6: Comparação entre valores de $Z_{ef}^{R/C}$ determinados através do nosso algoritmo com dados experimentais presentes na literatura.

Material	$x = 1.5 \text{ \AA}^{-1}$			$x = 0.99 \text{ \AA}^{-1}$		
	Este trabalho	Del Lama [51]	D(%)	Este trabalho	Antoniassi [52]	D(%)
Acrílico($C_5H_8O_2$)	6.17	6.16 ± 0.21	0.1%	5.52	5.53 ± 0.05	0.1%
Nylon($C_6H_{11}NO$)	5.91	5.91 ± 0.21	0.1%	5.32	5.34 ± 0.07	0.3%
Água(H_2O)	6.97	6.95 ± 0.25	0.3%	5.65	5.85 ± 0.05	3.5%
Etanol(C_2H_6O)	5.98	5.98 ± 0.25	0.1%	5.15	5.26 ± 0.06	2.0%
Glicerina($C_3H_8O_3$)	6.48	6.45 ± 0.18	0.4%	5.60	5.64 ± 0.04	0.7%

determinados a partir do algoritmo desenvolvido neste trabalho se aproximam de dados experimentais de outros autores [51, 52] indicando que o algoritmo desenvolvido nesse trabalho permite determinar $Z_{ef}^{R/C}$ de forma adequada.

4.2.3 Sensibilidade do método de espalhamento

As curvas de R/C em função do número atômico (figura 4.10) apresentam variações de sensibilidade conforme o momento transferido aumenta e de acordo com a faixa de Z considerada.

Na faixa de Z entre 4 e 8 (compostos formados basicamente por H, C, O), como pode ser observado no gráfico da figura 4.11(a), a sensibilidade do método aumenta com o momento transferido. Dessa forma, dado um $R/C \pm \Delta(R/C)$ a variação observada no número atômico efetivo, $\Delta(Z_{ef}^{R/C})$, será igual à $\Delta(R/C)/\beta$ onde β é a inclinação da curva que aumenta com o momento transferido, portanto, $\Delta(Z_{ef}^{R/C})$ diminui (figura 4.11(b)). Porém, na prática, é complicado determinar R/C_{comp}^{exp} devido à rápida queda da seção de choque Rayleigh com o ângulo de espalhamento (momento transferido alto) que reduz consideravelmente as contagens no detector necessitando de um tempo de medida longo ou uma fonte com alta taxa. Portanto, em nossas condições experimentais, momentos transferidos na faixa de $1 \text{ \AA}^{-1}$ à $2 \text{ \AA}^{-1}$ mostram-se adequados para a determinação de R/C_{comp}^{exp} e $Z_{ef}^{R/C}$.

Figura 4.10: Curvas de R/C vs Z para momentos transferidos distintos. As retas tracejadas horizontais indicam os R/C_{comp} da água.

Figura 4.11: (a) variação da sensibilidade das curvas de R/C vs Z em função do momento transferido. (b) Variação da incerteza em $Z_{ef}^{R/C}$ com o momento transferido

4.2.4 $Z_{ef}^{R/C}$ de materiais tecido-equivalentes e tecidos biológicos

A tabela 4.7 mostra os valores de R/C_{comp} e $Z_{ef}^{R/C}$ experimentais de materiais tecido-equivalentes, junto com os teóricos obtidos a partir do algoritmo desenvolvido neste trabalho. Como pode ser visto, os valores experimentais estão de acordo com os teóricos e dentro das incertezas experimentais. Adicionalmente, como resultado da variação da sensibilidade do método com x , as incertezas observadas nos valores de número atômico efetivo são reduzidas se comparadas às incertezas observadas em

Tabela 4.7: Comparação entre os valores experimentais de R/C_{comp} e $Z_{ef}^{R/C}$ em $x = 1.64 \text{ \AA}^{-1}$

Material	R/C_{comp}		D(%)	$Z_{ef}^{R/C}$		D(%)
	Experimental	Teórico		Experimental	Teórico	
Acrílico($C_5H_8O_2$)	$0.069 \pm 0.002(3.0\%)$	0.071	2.8%	$6.14 \pm 0.07(1.1\%)$	6.21	1.0%
Nylon($C_6H_{11}NO$)	$0.084 \pm 0.004(4.8\%)$	0.089	5.6%	$5.94 \pm 0.13(2.2\%)$	5.94	0.2%
Polycarbonato ($C_{16}H_{14}O_3$)	$0.061 \pm 0.004(6.6\%)$	0.061	-	$6.14 \pm 0.10(1.6\%)$	6.24	1.5%
Poliacetal (CH_2O)	$0.064 \pm 0.003(4.7\%)$	0.066	3.0%	$6.46 \pm 0.13(2.0\%)$	6.63	2.5%
Poliestireno(C_8H_8)	$0.049 \pm 0.003(6.1\%)$	0.050	2.0%	$5.63 \pm 0.07(1.2\%)$	5.67	0.7%

R/C_{comp} . Desta tabela, nota-se também, outro efeito causado pela sensibilidade da curva de R/C vs Z quanto a diferenciação dos materiais. Como dito anteriormente, a inclinação desta curva aumenta com x (vide figura 4.11(a)) e isso faz com que grandes variações em R/C reflitam em pequenas variações de $Z_{ef}^{R/C}$, por exemplo, o R/C_{nylon} difere em 18% do $R/C_{acrílico}$ enquanto a diferença observada entre os $Z_{ef}^{R/C}$ correspondentes é de 3.5%.

Na tabela 4.8 são apresentados os valores experimentais de R/C_{comp} e $Z_{ef}^{R/C}$ de tecidos biológicos (normal (adiposo e glandular) e tumor). Os resultados mostram que os tumores apresentam $Z_{ef}^{R/C}$ cerca de 5% maior que o $Z_{ef}^{R/C}$ do tecido glandular normal, enquanto a razão R/C do tecido tumoral é em torno de 10% maior que o R/C do tecido glandular normal. O tecido adiposo apresenta o menor valor de $Z_{ef}^{R/C}$ que o tecido glandular e tumor, pois o tecido adiposo é formado principalmente por adipócitos (células especializadas em armazenar lipídeos) ricas em Carbono, enquanto tecidos glandulares e tumores são tecidos conjuntivos ou de origem epitelial ricas em colágeno e água apresentando maior concentração de Oxigênio e consequentemente maior $Z_{ef}^{R/C}$ [52].

Tabela 4.8: Comparação entre os valores experimentais de R/C_{comp} e $Z_{ef}^{R/C}$ de tecidos mamários em $x = 1.64 \text{ \AA}^{-1}$

Tecido	R/C_{comp}^{exp}	$Z_{ef}^{R/C}$
Adiposo	$0.067 \pm 0.005(7.4\%)$	$5.87 \pm 0.18(2.8\%)$
Glandular(normal)	$0.090 \pm 0.005(5.6\%)$	$6.62 \pm 0.17(2.6\%)$
Tumor	$0.101 \pm 0.005(5.0\%)$	$6.94 \pm 0.18(2.6\%)$

5 *Conclusão e Perspectivas*

5.1 Sobre a determinação de ρ , μ , e μ/ρ

Neste trabalho, o arranjo utilizado para determinar ρ , permitiu determiná-lo com menos de 0.6% de diferença dos valores da literatura [34, 47] com incertezas experimentais de 1%.

O coeficiente de atenuação linear foi determinado através de dois arranjos, dentre eles, um para determiná-lo em 59.54 keV e outro para determiná-lo na faixa de energia de 15 à 45 keV. No primeiro caso foi possível determinar μ com menos de 3% de diferença dos valores disponíveis na literatura [45, 48, 47] com incertezas de 3.8%. No segundo caso, uma boa concordância entre os valores experimentais foi encontrada com incertezas de no máximo 7%.

Os valores de μ/ρ foram determinados experimentalmente em 59.54 keV com menos de 3% de diferença dos valores teóricos da literatura e com incertezas de 6%. Na faixa de energia de 15 à 45 keV, uma boa concordância foi observada entre os valores teóricos e experimentais com incertezas de no máximo 7%.

5.2 Sobre o método de atenuação

Foi desenvolvido, implementado e validado um novo programa computacional para determinar Z_{ef} a partir da grandeza de interação μ/ρ . A sensibilidade deste novo método foi estudada e verificou-se que ela diminui conforme a energia aumenta, de forma que até 60 keV o método se mostra adequado para determinar o número atômico efetivo, pois acima deste valor de energia, como foi discutido, as incertezas em Z_{ef} aumentam necessitando de medidas mais precisas de μ/ρ .

Novos resultados de número atômico efetivo foram obtidos utilizando os valores experimentais e teóricos de μ/ρ de materiais tecido-equivalentes e tecidos biológicos, com a vantagem de não necessitar do conhecimento prévio da composição do material em questão.

Por fim, a metodologia utilizada permitiu determinar $Z_{ef}^{\mu/\rho}$ com incertezas de até 20% em 59.54 keV devido a baixa sensibilidade nessa energia. Entretanto, na faixa de energia entre 15 e 45 keV foi possível obter $Z_{ef}^{\mu/\rho}$ com menos de 5% de incerteza.

5.3 Sobre o método de espalhamento

O sistema utilizado para obter os espectros de espalhamento possibilitou determinar a razão Rayleigh/Compton com diferenças menores que 10% com a literatura [50] e dentro das incertezas experimentais (máxima de 20% para momento transferido $2.28 \text{ \AA}^{-1}$), indicando que foi possível obter R/C de forma satisfatória para determinar $Z_{ef}^{R/C}$ experimentalmente.

Neste trabalho, um programa para determinar o número atômico efetivo através da razão Rayleigh/Compton foi implementado e validado. Uma boa concordância foi observada entre os valores teóricos preditos pelo nosso programa e valores experimentais disponíveis na literatura [52, 51].

A sensibilidade do método foi estudada na faixa de número atômico ($4 < Z < 8$) e foi constatado que ela aumenta com o momento transferido. Através da análise de uma situação experimental real (levando em conta as incertezas experimentais), conclui-se que momentos transferidos entre $1 \text{ \AA}^{-1}$ e $2 \text{ \AA}^{-1}$ são adequados para determinar $Z_{ef}^{R/C}$.

Finalmente, valores de número atômico efetivo foram determinados a partir dos valores experimentais de R/C com incertezas menores que 6% para o momento transferido de $1.64 \text{ \AA}^{-1}$.

5.4 Perspectivas

As medidas da razão Rayleigh/Compton ainda precisam ser melhoradas, então, é sugerido que seja dada continuidade ao trabalho utilizando um sistema que permita menos tempo de aquisição (utilizando uma fonte de alta taxa como a radiação característica gerada por um tubo de raios X) e um detector com melhor resolução em energia (detector de silício).

Também, mostra-se interessante a implementação de um algoritmo que

permita trabalhar com as intensidades Rayleigh e Compton ao invés das seções de choque diferenciais e realize as correções de atenuação e eficiência facilitando a utilização prática do usuário.

*Referências*¹

- [1] POLUDNIOWSKI, G. et al. SpekCalc : a program to calculate photon spectra from tungsten anode x-ray tubes. 2009.
- [2] MURTY, R. Effective atomic numbers of heterogeneous materials. *Nature*, v. 207, n. 4995, p. 398–99, 1965.
- [3] ATTIX, F. H. Introduction to Radiological Physics and Radiation Dosimetry. Wiley, Weinhein, Germany, p. 505, 1991.
- [4] TAYLOR, M. L. Quantification of differences in the effective atomic numbers of healthy and cancerous tissues : A discussion in the context of diagnostics and dosimetry. v. 5437, n. 2012, 2015.
- [5] MAYNEORD, W. The significance of the roentgen. *Acta Unio Internationalis contra Cancrum*, v. 2, p. 271–282, 1937.
- [6] HINE, G. J. Secondary electron emission and effective atomic numbers. *Nucleonics*, v. 10, 1952.
- [7] EL-KATEB, A. H.; ABDUL-HAMID, A. S. Photon Attenuation Coefficient Study of some Materials Containing Hydrogen , Carbon and Oxygen. *Annals of Nuclear Energy*, v. 42, n. 3, p. 303–307, 1991.
- [8] JHONS, H. E.; CUNNINGHAM, J. R. *The Physics of Radiology*. 4th ed.. ed. Springfield, Illinois, USA: Charles C. Thomas, 1983. 241–243 p.
- [9] PARTHASARADHI, K.; ESPOSITO, A.; PELLICCIONI, M. Photon attenuation equivalent coefficients in tissue compounds. *Applied radiation and isotopes*, v. 43, n. 12, p. 1481–1484, 1992.

¹De acordo com a Associação Brasileira de Normas Técnicas. NBR 6023.

-
- [10] Kiran Kumar, T.; Venkata Reddy, K. Effective atomic numbers for materials of dosimetric interest. *Radiation Physics and Chemistry*, v. 50, n. 6, p. 545–553, 1997.
- [11] TAYLOR, M. L. et al. Robust calculation of effective atomic numbers: The Auto-Zeff software. *Medical Physics*, 2012.
- [12] UN, A.; CANER, T. The Direct- Z eff software for direct calculation of mass attenuation coefficient , effective atomic number and effective electron number. *Annals of Nuclear Energy*, Elsevier Ltd, v. 65, p. 158–165, 2014.
- [13] BONNIN, A. et al. Concept of effective atomic number and effective mass density in dual-energy X-ray computed tomography. *Nuclear Inst. and Methods in Physics Research, B*, Elsevier B.V., v. 318, p. 223–231, 2014.
- [14] BRADLEY, D. A.; GHOSE, A. M. Photon scattering in biomedically important elements. *Physics in Medicine and Biology*, v. 1385, n. 11, p. 1385–1397, 1985.
- [15] CESAREO, R. et al. Interaction of keV photons with matter and new applications. *Physics Reports*, v. 213, n. 3, p. 117–178, 1992.
- [16] PUUMALAINEN, P.; OLKKONEN, H.; SIKANEN, P. Assessment of fat content of liver by a photon scattering technique. *International Journal of Applied Radiation and Isotopes*, v. 28, n. 9, p. 785–787, 1977.
- [17] KARELLAS, A. et al. Characterization of tissue via coherent to Compton scattering ratio : Sensitivity considerations. 1983.
- [18] KUNZENDORF, H. QUICK DETERMINATION OF THE AVERAGE ATOMIC NUMBER Z BY X-RAY SCATTERING. *Nuclear Instruments & Methods*, v. 99, p. 611–612, 1972.
- [19] SCHATZLER, H. P. Basic aspects on the use of elastic and inelastic scattered gamma radiation for the determination of binary systems with effective atomic numbers of less than 10. *The International Journal of Applied Radiation and Isotopes*, v. 30, n. 2, p. 115–121, 1979.

-
- [20] DUVAUCHELLE, P.; PEIX, G.; BABOT, D. Effective atomic number in the Rayleigh to Compton scattering ratio. *Nuclear Instruments & Methods in Physics Research Section B-Beam Interactions with Materials and Atoms*, v. 155, n. 3, p. 221–228, 1999.
- [21] EYECIOGLU, O.; KARABUL, Y.; ICELLI, O. ZXCOM : A software for computation of radiation sensing attributes. *Radiation Effects and Defects in Solids*, 2016.
- [22] EYECIOGLU, O.; ORHAN, I. A study on compatibility of experimental effective atomic numbers with those predicted by ZXCOM. *Nuclear Science and Techniques*, 2017.
- [23] HARDING, G. Effective density and atomic number determined from diffraction profiles. v. 6319, p. 1–9, 2006.
- [24] PODGORSK, E. B. *Radiation Physics for Medical Physicists*. Second. [S.l.]: Springer, 2010. 331 p.
- [25] ALS-NIELSEN, J.; MCMORROW, D. *Elements of Modern X-ray Physics*. Second ed. [S.l.]: Wiley, 2011. 118 p.
- [26] HUBBELL, J. H. et al. Atomic Form Factors, Incoherent Scattering Functions and Photon Scattering Cross Sections. *J Phys Chem Ref Data*, v. 4, p. 471–616, 1975.
- [27] KLEIN, O.; NISHINA, Y. The scattering of light by free electrons according to Dirac's new relativistic dynamics. *NATURE*, v. 122, p. 398–399, 1928.
- [28] CHERRY, S. R.; SORENSON, J. A.; PHELPS, M. E. *Physics in Nuclear Medicine*. Fourth. [S.l.]: Elsevier, 2012.
- [29] KHAN, F. M. *The Physics of Radiation Therapy*. Third. [S.l.]: Lippincott Williams & Wilkins, 2003.
- [30] JAFFE, H. et al. Gamma and X-Radiation in the Decay of Am-241. *Physical Review*, v. 277, n. 1950, 1954.

-
- [31] KNOLL, G. F. *Radiation Detection and Measurement*. 4th ed.. ed. [S.l.]: Wiley, 2010. 108 p.
- [32] MANOHARA, S. R.; HANAGODIMATH, S. M.; GERWARD, L. The effective atomic numbers of some biomolecules calculated by two methods: a comparative study. *Medical physics*, v. 36, n. 1, p. 137–141, 2009.
- [33] MANOHARA, S. R. et al. On the effective atomic number and electron density: A comprehensive set of formulas for all types of materials and energies above 1 keV. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B-Beam Interactions with Materials and Atoms*, v. 266, n. 18, p. 3906–3912, 2008.
- [34] RAO, D. V. et al. X-ray scattering cross sections for molecules, plastics, tissues, and few biological materials. *Journal of Trace and Microprobe Techniques*, 2002.
- [35] TOMAL, A. Experimental Detemination of linear attenuation coefficient of normal, benign and malignant breast tissues. *Radiation measurements*, Elsevier, 2010.
- [36] RAO, P. S.; GREGG, E. C. Attenuation of the γ -rays in tissues. *The Americam journal of roentgenology, radium therapy, and nuclear medicine*, v. 123, n. 3, p. 631–637, 1975.
- [37] CHENG, R. C. et al. Measurement of the linear attenuation coefficients of breast tissues by synchrotron radiation computed tomography. *Physics in medicine and biology*, v. 4993, 2010.
- [38] BLOOM, H. J.; RICHARDSON, W. W. Histologycal grading and prognosis in breast cancer. *Britsh Journal of Cancer*, v. 11, n. 3, p. 359–377, 1957.
- [39] SOARES, L. D. H. Biological Material Analisis using linear attenuation coefficients [Dissertation]. 2015.
- [40] FARQUHARSON, M. J. Low Energy Photon Attenuation Measurements of Hydrophilic Materials for Tissue Equivalent Phantoms. 1995.
- [41] BERGER, M.; HUBBELL, J. XCOM: Photon Cross Sections Database. 1998.

- [42] KLUG, H. P.; ALEXANDER, L. E. *X-Ray Difracion Procedures for polycrystalline and Amorphous Materials*. Second ed. [S.l.]: Wiley, 1974. 389–391 p.
- [43] ANTONIASSI, M. Determination of the eletronic densities of breast neoplasias using the Compton scattering of X-rays. [Dissertation] . 2008.
- [44] BRUNETTI, A. et al. Geometrical factor influence on Compton profile measurement for biological samples. v. 526, p. 584–592, 2004.
- [45] JOHNS, P. C.; YAFFE, M. J. X-ray characterisation of normal and neoplastic breast tissues. *Physics in medicine and biology*, 1987.
- [46] MANNINEN, S. et al. Study of the ratio of elastic to inelastic scattering of photons. *The International Journal of Applied Radiation and Isotopes*, v. 35, p. 93–98, 1984.
- [47] BYNG, J.; MAINPRIZE, J.; YAFFE, M. X-ray characterization of breast phantom materials. *Phys. Med. Biol.*, 1998.
- [48] SHIVARAMU et al. Effective atomic numbers for photon energy absorption of some low-Z substances of dosimetric interest. *Radiation Physics and Chemistry*, 2001.
- [49] DOYLE, J. J.; SBEEP, U. S.; STATION, E. Genetic and Nongenetic Factors Affecting the Elemental Compositions of Human and Others Animal tissues - A Review. *Journal of Animal Science*, v. 50, n. 6, 1980.
- [50] DONATIVI, M. et al. Rayleigh to Compton ratio with monochromatic radiation from an X-ray tube (preliminary results). 2007.
- [51] Del Lama, L. S. et al. Effective atomic numbers for materials of medical interest at low photon energy using the Rayleigh to Compton scattering ratio. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section - Accelerators Spectrometers Detectors and Associated Equipment*, 2015.

-
- [52] ANTONIASSI, M.; CONCEICAO, A. L. C.; POLETTI, M. E. Study of effective atomic number of breast tissues determined using the elastic to inelastic scattering ratio. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section - Accelerators Spectrometers Detectors and Associated Equipment*, 2011.